

使用RADIANT™ ASAP进行查获药物筛查

Emily Lee, Nayan S. Mistry, Lisa J. Calton

Waters Corporation

仅适用于法医毒理学应用。

摘要

违禁药物的使用和贩运会造成危害、不稳定和暴力事件的发生；对查获样品的分析可为控制违禁药物的使用、贩运和分销的计划提供重要支持¹。随着需要分析的查获样品数量日益增加，法医毒物鉴证实验室面临着快速提供可靠结果的巨大压力。

这些实验室传统的工作流程包括推定性筛查和之后的确认分析。常用的筛查分析可能会导致样品通量瓶颈和积压，因为这类方法耗时较长、选择性不足或容易产生大量假阳性结果。因此，稳健、快速且高效的筛查技术备受法医毒物鉴证实验室的关注。

RADIANT ASAP在查获药物样品的快速、准确初步筛查方面已经展现出巨大的潜力²。本研究进一步评估了使用RADIANT ASAP对查获药物样品进行筛查分析的适用性。

优势

- 简单易用，大幅减少样品前处理操作
- 直接分析（无需色谱分离）
- 结合碎片离子数据，提高特异性
- 使用LiveID™ 2.0进行实时谱库匹配，实现快速分析

- 紧凑型台式仪器

简介

查获药物样品分析对于国家和国际计划能否有效控制违禁药物的使用、贩运和分销发挥着关键作用。警方和边境管控部门可能会在许多场所（包括夜间场所、音乐活动和监狱）查获药物。随着查获并提交分析的样品数量不断增加，再加上毒品种类的多样性及其潜在毒性，这对毒品管控部门和法医化学实验室快速出具结果造成了巨大压力。

行业指南（例如，由缴获毒品分析科学工作组(Scientific Working Group for the Analysis of Seized Drugs, SWGDRUG)制定的标准）提供了关于实验室最低分析要求的建议，以便对查获样品中的毒品进行可靠、有科学依据的鉴定³。分析工作流程应包含至少两种独立的技术。这些技术根据选择性水平进行分类，其中A类表示最高选择性水平，C类表示最低选择性水平（图1）。传统工作流程通常包括推定性筛查分析，例如TLC、FTIR或比色检测；然后使用选择性更高的方法进行确证分析，例如气相色谱-质谱联用(GC-MS)。然而，TLC分析可能非常耗时，FTIR结果对混合物的选择性不足，而比色检测并不适用于所有药物，或者假阳性率较高。这些问题可能导致更多样品需要通过GC-MS进行分析，从而引发样品通量瓶颈和积压。因此，那些操作简便、稳定可靠、快速高效且能够迅速更新的筛查技术，正受到法医毒物鉴证实验室的高度关注。

A类 (通过结构信息实现选择性)	红外光谱
	质谱
	核磁共振波谱
	拉曼光谱
	X射线衍射分析
B类 (通过化学和物理特性实现选择性)	毛细管电泳
	气相色谱
	离子淌度谱
	液相色谱
	微晶测试
	超临界流体色谱
	薄层色谱
	紫外/可见光光谱
	宏观检查 (仅限大麻)
	显微镜检查 (仅限大麻)
C类 (通过一般或类别信息实现选择性)	颜色测试
	荧光光谱
	免疫分析
	熔点
	制药标识符

图1.用于查获药物分析的分析技术示例，包括仪器检测和非仪器检测。A类技术具有最高的选择性；如果不使用A类技术，则必须应用至少三种检测方法，其中两种检测方法必须属于B类技术。

沃特世的RADIAN ASAP系统体积小巧，集大气压固相分析探头(ASAP)的简便性与MS的特异性于一身，已被证明有望作为一种分析查获药物样品的快速筛查技术。本研究的目的是进一步评估RADIAN ASAP质谱检测器作为一种简单而快速的查获物质筛查工具的应用潜力。研究中分析了229份由警方在音乐活动/夜间场所没收的未知样品。利用成熟的法医毒理学高分辨率质谱(HRMS)筛查解决方案进行后续的确证分析；该方法包括15分钟的色谱分离与Xevo™ G3 QTof质谱分析⁴。

实验

材料和样品前处理

英国警方提供了一批在音乐活动/夜间场所没收的未知/可疑物质(n=229)。这些样品根据查获情况和外观被分为23组，如表1所示。样品组中有两组粉末和一组胶囊，其余样品均为各种类型的药丸。

组	材料类型	样品数量	外观
642	药丸	13	蓝色球形药丸
124	药丸	6	黄色卡通人物
170	药丸	7	棕色/红色方块
516	药丸	2	浅粉色长方体
517	药丸	2	橙色车标
537	药丸	3	荧光粉红色饮料徽标
665	药丸	7	白色长方体
663	药丸	24	白色长方体
734	药丸	7	粉白相间的手机徽标
146	药丸	9	粉色电影角色
717	药丸	8	灰色，一侧是骷髅图案，一侧是“双P”标志
147	药丸	15	米色，一侧是骷髅图案，一侧是“双P”标志
257	药丸	8	米色电影徽标
728	药丸	3	红白相间的苏打水徽标
686	粉末	1	米黄色粉末
252	药丸	4	紫粉相间的手机徽标
615	药丸	6	橙色电影徽标
641	胶囊	9	红黄相间的胶囊
657	药丸	11	白色，一侧是骷髅图案，一侧是“双P”标志
662	粉末	9	独立袋装的白色粉末
616	药丸	16	粉色“100”徽标
148	药丸	17	粉色“100”徽标
716	药丸	42	黄色章鱼图案

表1. 分析的样品组，包括材料类型、样品数量和外观。

将查获的药丸/材料加入装有5 mL甲醇的玻璃样品瓶中，超声处理10分钟。在分析前，每个样品进一步用甲醇以1:20的比例稀释。如果需要额外稀释，则同样使用甲醇。

对于胶囊状物质，先将内容物倒出，加入到装有5 mL甲醇的玻璃样品瓶中，超声处理10分钟。在分析前，每个样品进一步用甲醇以1:20的比例稀释。如果需要额外稀释，则同样使用甲醇。

对于查获的粉末/晶体状物质，将其加入到装有5 mL甲醇的玻璃样品瓶中，超声处理10分钟。在分析前，每个样品用甲醇以1:20的比例稀释。如果需要额外稀释，则同样使用甲醇。

RADIAN ASAP分析

采样程序 – “浸取” 法

对于每个样品，选择一个新的玻璃毛细管，并使用软件自带的自动RADIAN ASAP烘烤程序进行清洁。每个样品都使用“浸取”法采样，就是将清洁后的毛细管置于液体样品表面下方约1 cm处，保持5 s，然后将毛细管放入支架并插入RADIAN ASAP离子源。采集数据所用的分析方法参数见下方表2。在这项研究中，每个样品重复分析三次（使用同一根玻璃毛细管反复进行三次“浸取和检测”操作）。

参数	设置
电离模式	ASAP +
电晕针	3 μ A
脱溶剂气及其温度	氮气，600 °C
锥孔电压	15、25、35、50 V
采集模式	m/z 50~600范围内的全扫描MS - 连续模式
扫描速度	5 Hz

表2.使用RADIAN ASAP采集数据所用的分析参数。

使用LiveID 2.0进行数据处理

使用LiveID 2.0谱库匹配软件处理数据，该软件能够对数据文件进行实时谱库匹配或采集后处理。LiveID软件使用反向拟合模型将采集的质谱数据与制作的查获药物参比数据库进行比较。LiveID会考虑所有四种锥孔电压，计算出一个平均匹配得分（最大值为1000），在本研究中，达到或超过850的匹配得分会用作指示阳性鉴定结果的阈值。

法医毒理学HRMS筛查解决方案分析

在分析前，样品以5 mM、pH值为3的甲酸铵溶液按1:1000的比例进一步稀释，筛查采用了一种成熟的HRMS方法，使用15分钟的色谱分离并使用了Xevo G3 QTof进行质谱分析。鉴定基于参比保留时间(RT)、母离子精确质量数以及碎片离子信息（使用MS^E通过数据非依赖型分析(DIA)生成）。

结果与讨论

ASAP-MS是一种直接分析技术，通过ASAP电离过程即可获得质谱数据，无需进行色谱分离。该过程使用加热的氮气使加载到玻璃毛细管的样品挥发，然后通过电晕放电进行电离。

本研究评估的所有分析物均在电离作用下发生了 $[M+H]^+$ 质子化。使用全扫描在 m/z 50~600的范围内进行质谱检测。施加四种锥孔电压（15、25、35、50 V），通过源内碰撞诱导解离(CID)生成碎片离子。母离子与生成的碎片离子一起，构成了每种分析物的质谱指纹图谱，从而提高了药物鉴定的特异性和准确度。图2展示了MDMA CRM的分析数据，说明使用该技术可以获得质谱信息。

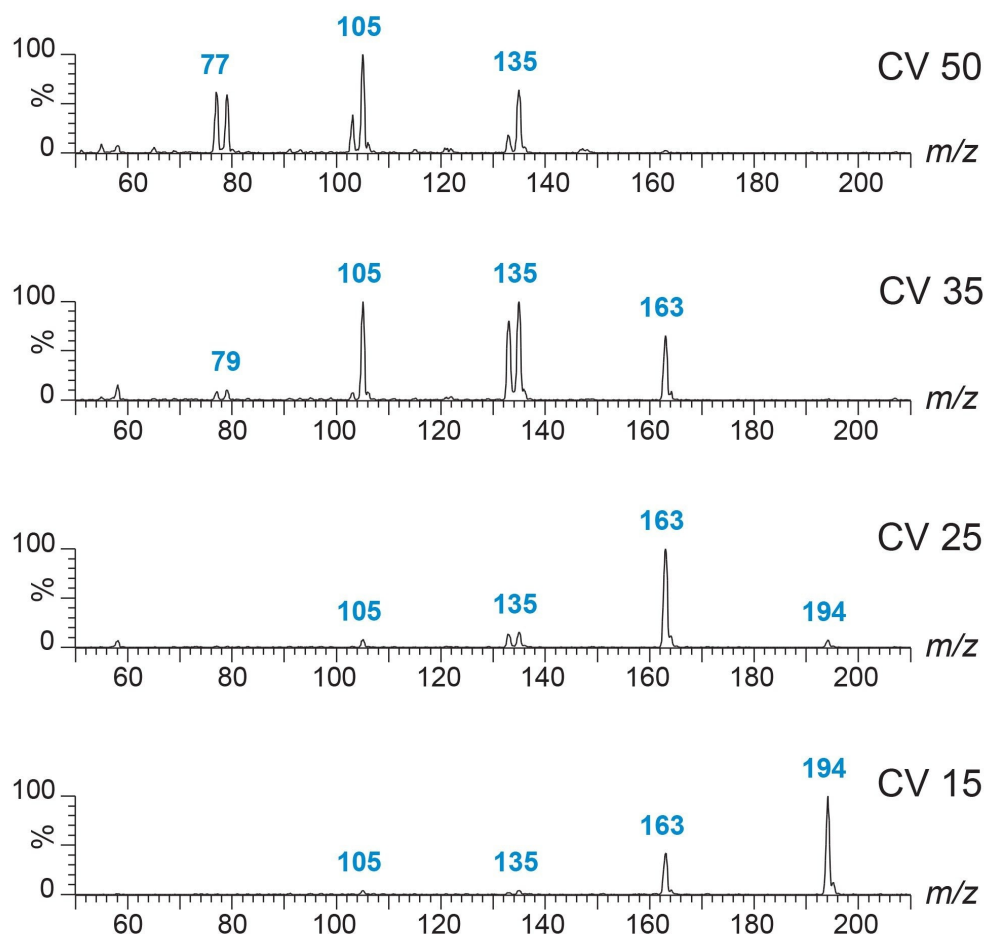


图2.MDMA CRM的RADIANT ASAP分析。在四种锥孔电压下采集数据以生成质谱指纹图谱。在最低的锥孔电压(15 V)下，通常包含母体化合物的分子离子，在本例中，ASAP电离生成 m/z 194处的 $[M+H]^+$ 。

对所有229个查获样品的分析结果显示，这些样品中有一种或多种化合物与查获药物参比数据库中的化合物匹配阳性(>850)，表明检测的真阳性灵敏度达到100%。在所有样品组中，共鉴定出252种阳性结果，仅涉及七种物质：MDMA (73.9%)、咖啡因(4.3%)、依替唑仑(4.3%)、氟阿普唑仑(4.3%)、安非他命(4.3%)、对乙酰氨基酚(4.3%)和可卡因(4.3%)。MDMA在一半以上的样品中检出，并且在大多数情况下是唯一检出的化合物；这可能与这些样品的查获地点及相关事件有关。

RADIANT ASAP的筛查结果与法医毒理学HRMS筛查解决方案显示出良好的定性一致性。结果之间的任何差异可能归因于分析灵敏度和数据库内容的不同。有两组样品的RADIANT ASAP分析额外鉴定出了阳性化合物，但HRMS鉴

定出的主要化合物也被RADIANT ASAP成功鉴定出。对于170组，HRMS分析鉴定出的主要成分未被RADIANT ASAP分析鉴定出。图3显示了该组中一个样品的LiveID结果示例；咖啡因鉴定结果为阳性。HRMS分析额外鉴定出4种化合物，包括：methoxetamine、TFMPP、MDMA和4-甲基乙卡西酮。在RADIANT ASAP上鉴定出的MDMA和TFMPP，其匹配得分低于截止值850，表明这些化合物在样品中的含量较低。此外，两种筛查方法数据库含量的差异也对改组样品的结果产生了影响，因为4-甲基乙卡西酮和methoxetamine目前尚未纳入RADIANT ASAP的查获药物参比数据库。我们之前已经介绍了快速更新RADIANT数据库的过程，该过程可以帮助实验室及时将新兴化合物添加到参比数据库中以保持更新⁵。

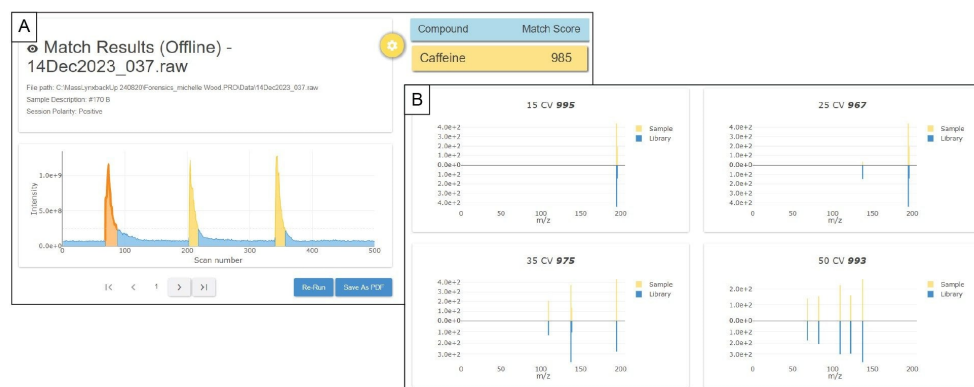


图3.查获样品的LiveID分析。A图展示了样品重复三次“浸取和检测”的结果，第一个重复样的匹配得分为985（最大值为1000）。B图展示了谱图匹配的详细信息；在鉴定过程中使用了所有四种锥孔电压，并使用了加权平均值（锥孔电压最低，权重最高）。

229份没收样品被分为23组，不同组的样品数量各不相同（见表1）；HRMS分析表明，同一组内不同样品之间，或不同组中鉴定为相同化合物的样品之间，响应强度差异很小。RADIANT ASAP分析的结果与此一致，样品间三次重复分析、组间样品或组内化合物样品分析之间的阳性匹配得分没有显著差异（图4）。这表明，RADIANT ASAP是一种可靠、稳健的筛查技术，能够提供可重现的数据。

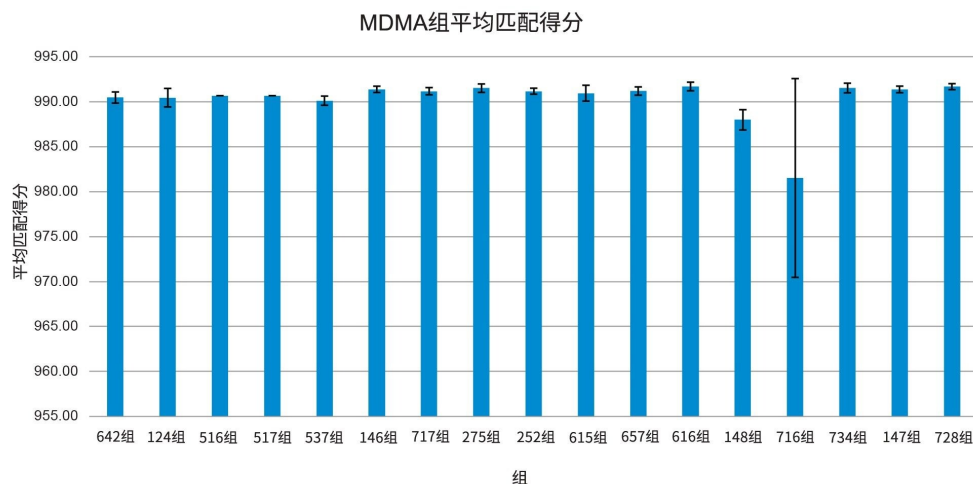


图4.多组MDMA阳性鉴定的查获药物样品组中的平均匹配得分及标准偏差。

结论

RADIAN ASAP是一种简便易用、快速且准确的直接质谱筛查技术，无需进行色谱分离即可直接提供质谱数据。这种技术已被证明适用于对查获的可疑物质（包括药丸、粉末和胶囊物质）中的常见违禁药物进行简单筛查。

其样品前处理方法既快速又简便。RADIAN ASAP分析和LiveID 2.0谱库匹配的速度也非常快，每个查获药物样品的检测用时不到两分钟。RADIAN ASAP数据的重现性良好，证明它能够可靠地筛查药物样品，并有望减少法医毒物鉴定实验室的积压问题。

参考资料

1. UNODC, World Drug Report 2023 (United Nations publication, 2023) https://www.unodc.org/res/WDR-2023/WDR23_Exsum_fin_SP.pdf <https://www.unodc.org/res/WDR-2023/WDR23_Exsum_fin_SP.pdf>
2. Wood M. 搭载LiveID的RADIAN ASAP - 实现快速、特异、简便的药物筛查. 沃特世应用纪要, 库编号 720007125ZH, 2021年.

3. Scientific Working Group for the Analysis of Seized Drugs (Recommendations)–Edition 8.1, 19 August 2022 <https://www.swgdrug.org/approved.htm> <<https://www.swgdrug.org/approved.htm>>
4. Mistry N, Calton LJ, Cooper J. 法医毒理学筛查的理想搭档 - Xevo™ G3 QTof MS^E在毒理学筛查中的应用. 沃特世应用简报, 库编号720008033ZH <https://www.waters.com/content/dam/waters/en/app-notes/2023/720008033/720008033-zh_tw.pdf> , 2023年
5. Lee E, Cooper J, Martin N, Wood M. 更新RADIANT ASAP查获药物参比数据库. 沃特世白皮书, 720007838ZH <<https://www.waters.com/webassets/cms/library/docs/720007838en.pdf>> , 2023年.

特色产品

RADIANT™ ASAP <https://www.waters.com/waters/en_US/RADIANT-ASAP-Direct-Mass-Detector/nav.htm?cid=135073413>

Xevo™ G3 QTof质谱仪 <<https://www.waters.com/nextgen/global/products/mass-spectrometry-systems/xevo-g3-qtof.html>>

LiveID <<https://www.waters.com/nextgen/en/products/informatics-and-software/mass-spectrometry-software/liveid-software.html>>

720008231ZH, 2024年2月



© 2025 Waters Corporation. All Rights Reserved.

[使用条款](#) [隐私策略](#) [商标](#) [招聘](#) [法律和隐私声明](#) [危险化学品生产经营许可证](#) [Cookie](#) [Cookie 设置](#)

沪ICP备06003546号-2 京公网安备 31011502007476号