

SCIEX QTRAP®质谱系统测定19种尼秦类化合物

Determination of 19 Nitazenes Compounds by SCIEX QTRAP® Mass Spectrometry

何锡超¹, 梁舒婷¹, 李承虎¹, 程龙², 杨总², 刘冰洁²

He xichao¹, Liang shuting¹, Li chenghu¹, Cheng long², Yang zong², Liu bingjie²

¹ 广西壮族自治区公安厅; ² SCIEX中国;

¹ Department of Public Security of Guangxi Zhuang Autonomous Region; ² SCIEX China;

Key words: LC-MS/MS; Nitazenes;

引言

新精神活性物质 (New Psychoactive Substances, NPS) 的滥用已成为全球公共卫生与安全的重大挑战。其中, 尼秦类 (Nitazenes) NPS 作为合成大麻素受体激动剂的结构变体, 因其隐蔽性强、毒性高、代谢复杂等特点, 对传统检测方法提出了严峻考验。为应对该类物质的快速衍生与低剂量滥用趋势, 建立高灵敏度、高特异性的筛查与确证方法至关重要。

为了加强对地区滥用药物的监控和针对性地开展新型毒品打

击的整治工作, 针对尼秦类化合物的监管迫在眉睫。本实验基于 SCIEX QTRAP®液质联用系统的超高灵敏度和超强抗污染优势, 建立了19种尼秦类物质的高通量检测方法。不仅为尼秦类NPS的监管与风险评估提供技术支撑, 更彰显了QTRAP平台在应对新型毒品快速迭代中的方法通用性与技术前瞻性。

SCIEX QTRAP®液质联用系统 (LC-MS/MS) 凭借其独特的三重四极杆-线性离子阱复合技术, 成为复杂生物基质中痕量NPS分析的理想平台。运用独有的MRM-IDA-EPI扫描模式 (如图1), 建立了19种尼秦类物质的高通量检测方法, 可在单次进样中同步完成目标物的定量分析与未知物结构确证。

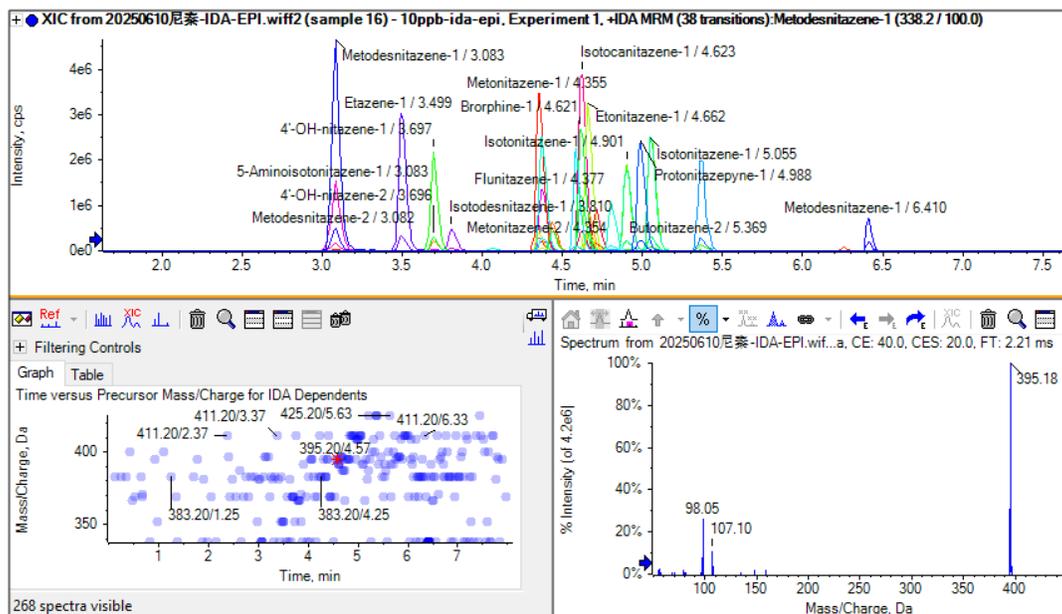


图1. MRM-IDA-EPI扫描模式下的19种尼秦类化合物的色谱图以及二级EPI质谱图

实验方法

1. 液相方法:

色谱柱: Phenomenex Kinetex Biphenyl (100×2.1 mm, 1.7μm)

流动相: A相: H₂O (0.1%甲酸) B相: 乙腈

流速: 0.4 mL/min;

洗脱程序:

Time(min)	A (%)	B (%)
0.0	85	15
0.5	85	15
5.0	35	65
5.1	5	95
6.5	5	95
6.6	85	15
8.0	85	15

2. 质谱方法:

离子源: ESI源, 正离子模式

扫描模式: MRM (离子对见附表1)

源气参数:

Curtain gas (psi): 35

CAD gas: 7

Ionspray voltage (V): 5500

Temperature(°C): 550

Ion source gas1 (psi): 50

Ion source gas2 (psi): 55

结果与讨论

1. 定性实验结果

1.1 尼秦类新精神活性物质的标准谱库建立

QTRAP®质谱的EPI扫描模式, 利用碰撞池的多能量碎裂功能以及离子阱质量分析器的阱集功能, 可得到更高灵敏度的二级碎片谱图, 根据其二级碎片全谱信息, 建立19种尼秦类标准谱库。样本实测二级全谱与标准品谱库的自动比对, 可帮助更好的排判别假阳性和假阴性, 保证定性结果的准确无误, 可用于新型毒品打击的快速筛查以及定性确证。

1.2 定性实验结果

SCIEX系统搭载全新OS软件, 提供强大的数据分析和结果报告功能。其快捷的数据处理功能, 可以自动根据化合物的保留时间和二级碎片谱图进行目标化合物筛查和定性。如图2, 根据软件结果显示, 在毛发样本中检测出美托尼秦, 其保留时间和二级碎片离子比率满足要求, 且实测二级谱图与数据库匹配Purity得分为99.2分, 即便在复杂基质中的低浓度化合物仍可得到高灵敏度的二级碎片全谱, 基于样本实测二级全谱与标准品谱库的自动比对, 可帮助更好的排判别假阳性和假阴性, 保证定性结果的准确无误。

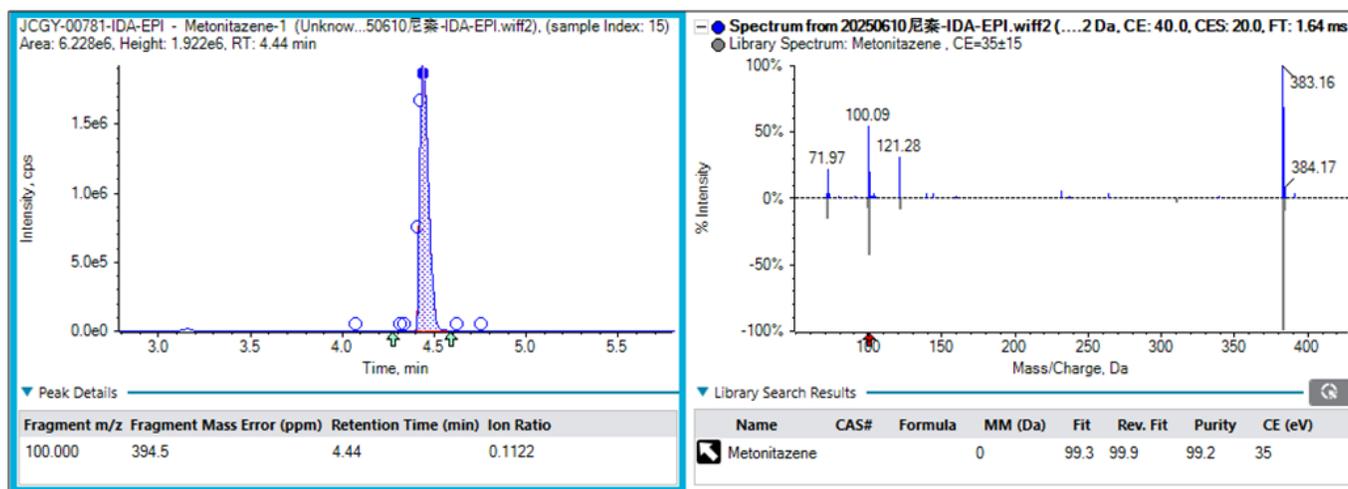


图2. 阳性检出样品的美托尼秦色谱图及实测二级谱图与数据库匹配情况

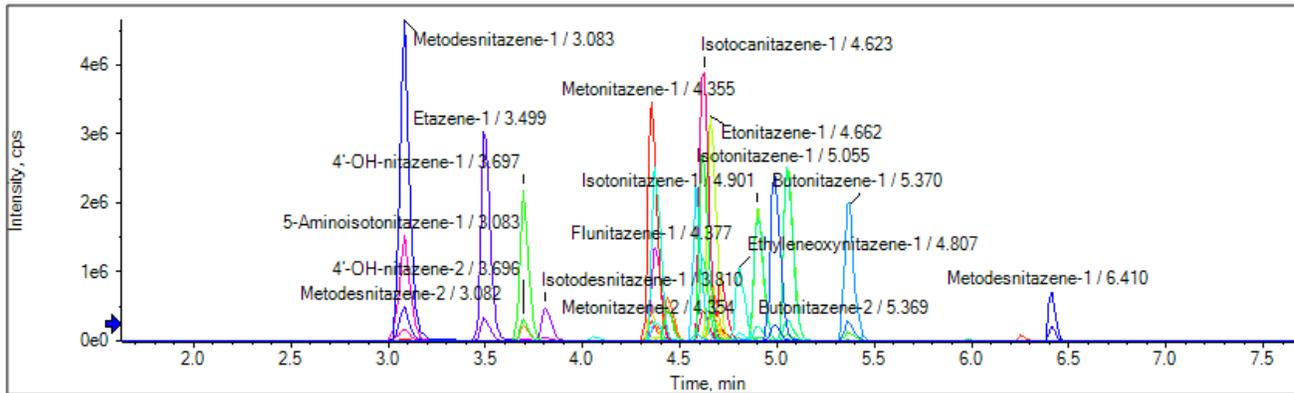


图3. 19种尼秦类化合物的提取离子流色谱图

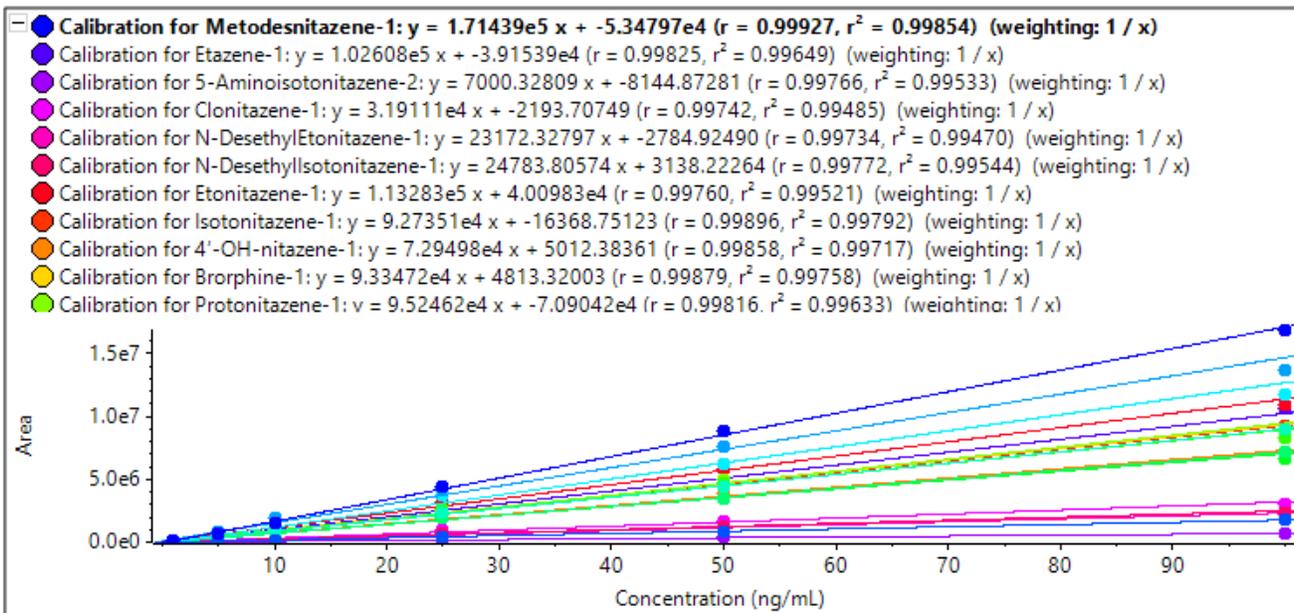


图4. 19种尼秦类化合物的线性关系

2. 定量实验结果

2.1 提取离子流色谱图:

本文涉及到的19种尼秦类化合物色谱图（见图3），所有化合物都有较好的保留。优越的灵敏度和抗污染能力，提供了准确可靠的测定结果。

2.2 灵敏度及线性

所有化合物的灵敏度均达到pg级别以下，灵敏度高，满足检

测需求。采用空白基质样本配置标准曲线，所有化合物具有良好的线性关系，如图4。针对本文涉及到的19种尼秦类化合物，在高、中、低三个浓度点下进行加标回收率实验，实际加标回收率在88.5%-109.5%范围内，符合方法学要求。同时，在三个浓度点下，连续进样（ $n=6$ ）考察方法的重复性，所有化合物6次进样峰面积RSD%均在0.71%~2.33%范围内，展现了方法的可靠性以及仪器的耐受性。

总结

基于SCIEX QTRAP® LC-MS/MS系统建立的19种尼秦类化合物检测方法，是一个高度灵敏、高度特异、高通量且经过充分验证的解决方案。该方案可以用于毛发或污水等检材中多种尼秦类化合物痕量

检测，适用于司法鉴定、药物滥用监测中心、临床毒理学实验室及研究机构，为相关领域的决策和研究提供关键的科学依据。

附表1 化合物MRM质谱参数

编号	化合物名称	CAS号	ID	Q1	Q3	DP	CE
1	去硝基美托尼秦	14030-77-4	Metodesnitazene-1	338.2	100	70	24
			Metodesnitazene-2	338.2	72	70	58
2	去硝基依托尼秦	14030-76-3	Etazene-1	352.2	100	70	24
			Etazene-2	352.2	72	70	59
3	去硝基异丙托尼秦	2732926-27-9	Isotodesnitazene-1	366.2	100	70	24
			Isotodesnitazene-2	366.2	72	70	58
4	氟尼他秦	2249-36-7	Flunitazene-1	371.2	100	70	30
			Flunitazene-2	371.2	72	70	58
5	5-胺基异丙托尼秦/ 5-胺基依替氮卓	2732926-25-7	5-Aminoisotonitazene-1	381.2	100	70	25
			5-Aminoisotonitazene-2	381.2	72	70	65
6	异丙托卡尼秦/ 5-氰基异丙托尼秦	/	Isotocanitazene-1	391.2	100	70	25
			Isotocanitazene-2	391.2	72	70	58
7	氯尼他秦	3861-76-5	Clonitazene-1	387.2	100	60	25
			Clonitazene-2	387.2	72	60	60
8	美托尼秦	14680-51-4	Metonitazene-1	383.2	100	70	25
			Metonitazene-2	383.2	121	70	34
9	N-去乙基依托尼秦	2732926-26-8	N-DesethylEtonitazene-1	369.2	298	65	25
			N-DesethylEtonitazene-2	369.2	72	65	46
10	N-去乙基异丙托尼秦	2732926-24-6	N-DesethylIsotonitazene-1	383.2	312.2	70	25
			N-DesethylIsotonitazene-2	383.2	72	70	55
11	依托尼秦	2053-25-0	Etonitazene-1	397.2	100	40	24
			Etonitazene-2	397.2	72	40	62
12	异丙托尼秦/依替氮卓	14188-81-9	Isotonitazene-1	411.2	100	30	24
			Isotonitazene-2	411.2	72	30	60
13	4'-羟基尼秦	94758-81-3	4'-OH-nitazene-1	369.2	100	50	25
			4'-OH-nitazene-2	369.2	72	50	55
14	溴啡	2244737-98-0	Brorphine-1	400.1	218.1	60	29
			Brorphine-2	400.1	183.1	60	34

附表1 化合物MRM质谱参数 (续)

编号	化合物名称	CAS号	ID	Q1	Q3	DP	CE
15	丙托尼秦	95958-84-2	Protonitazene-1	411.2	100	30	24
			Protonitazene-2	411.2	72	30	60
16	亚乙氧尼秦	/	Ethyleneoxynitazene-1	395.2	100	85	24
			Ethyleneoxynitazene-2	395.2	72	85	65
17	依托吡尼秦	2785346-75-8	Etonitazepyne-1	395.2	98	85	23
			Etonitazepyne-2	395.2	107	85	75
18	丁托尼秦	95810-54-1	Butonitazene-1	425.2	100	85	25
			Butonitazene-2	425.2	72	85	65
19	丙托吡尼秦	/	Protonitazepyne-1	409.2	98	80	26
			Protonitazepyne-2	409.2	56	80	85

SCIEX临床诊断产品线仅用于体外诊断。仅凭处方销售。这些产品并非在所有国家地区都提供销售。获取有关具体可用信息，请联系当地销售代表或查阅<https://sciex.com.cn/diagnostics>。所有其他产品仅用于研究。不用于临床诊断。本文提及的商标和/或注册商标，也包括相关的标识、标志的所有权，归属于AB Sciex Pte. Ltd. 或在美国和/或某些其他国家地区的各权利所有人。

© 2025 DH Tech. Dev. Pte. Ltd. MKT-36121-A



SCIEX中国

北京分公司
北京市昌平区生命科学园科学园路
18号院A座一层
电话: 010-5808-1388
传真: 010-5808-1390

全国咨询电话: 800-820-3488, 400-821-3897

上海公司及中国区应用支持中心
上海市长宁区福泉北路518号
1座502室
电话: 021-2419-7201
传真: 021-2419-7333

官网: sciex.com.cn

广州办公室
广州国际生物岛星岛环北路1号
B2栋501、502单元
电话: 020-8842-4017

官方微信: [SCIEX-China](https://www.sciex.com.cn)