

# Application News

## No. B81

MALDI-TOF 质谱分析

# 使用 MALDI-8020 检测尿液中的处方药和可卡因

## 背景

临床药物检测用于分析尿液、头发、血液、呼吸、汗液、唾液等生物样本，以确定是否存在某些药物或相关代谢物。药物检测适用于以下方面：

- 运动员药物检测。
- 入职前药物筛查或随机药物测试以识别在职期间药物滥用。
- 安全性相关的药物测试 - 药物使用会导致安全性问题（精神或身体上的障碍）。
- 事故后的药物检查 - 药物使用或滥用可能导致事故。这包括车辆事故和工伤事故，有可能造成人员伤亡和财产损失。

MALDI-TOF MS 具有通过检测少量尿液样品实现快速检测尿液中的药物化合物的能力。

Michael Nairn

## MALDI-8020

岛津开发的 MALDI-8020 是一种线性 MALDI-TOF MS 台式机，占地面积小，具备 200 Hz 固态激光器、样品加载时间小于 90 秒、自动离子源清洗模式等高级性能。

表 1 样本信息

	Formula	[M+H] <sup>+</sup>
Sample 1		
Mirtazapine	C <sub>17</sub> H <sub>19</sub> N <sub>3</sub>	266.165
Promazine	C <sub>17</sub> H <sub>20</sub> N <sub>2</sub> S	285.142
Trimipramine	C <sub>20</sub> H <sub>26</sub> N <sub>2</sub>	295.217
Zolpidem	C <sub>19</sub> H <sub>21</sub> N <sub>3</sub> O	308.176
Quetiapine	C <sub>21</sub> H <sub>25</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub> S	384.174
Sample 2		
Cocaine	C <sub>17</sub> H <sub>21</sub> NO <sub>4</sub>	304.154
Cocaethylene	C <sub>18</sub> H <sub>23</sub> NO <sub>4</sub> (注)	318.170



图 1 MALDI-8020 台式线性 MALDI-TOF 质谱仪

## 样品和方法

Velona 大学（意大利）的 Franco Tagliaro 教授慷慨地提供了掺有药物化合物和代谢物的尿样，用于分析。这些化合物掺入浓度与服药者尿液中产生相对浓度较类似。样本 1 包括镇静剂、抗精神病药及抗抑郁药。样本 2 包括可卡因和可卡因的代谢物。

尿液中含有多种盐类，在 MALDI-TOF MS 上机前以液液萃取法 (LLE) 进行脱盐、提取和浓缩。

以 α- 氰基 -4- 羟基肉桂酸 (CHCA) 为 MALDI 基质，按照 5 mg/mL 的浓度溶于 ACN/0.1% TFA 的等体积混合液中，再与十六烷基三甲基溴化铵 (CTAB) 以 13250:1 CHCA:CTAB<sup>†</sup> 的摩尔比混合。CTAB 用作淬灭剂以降低 CHCA 基质峰的强度。样品和基质以 1:1 的比例点在岛津 FlexiMass-SR48 靶板上。

\*1Gottardo, R. (2012). Direct screening of herbal blends for new synthetic cannabinoids by MALDI-TOF MS <https://doi.org/10.1002/jms.2036>

## 结果

MALDI-8020 能够以良好的质量准确度检测样品 1 和 2 中所有药物化合物（图 2 和 3）。此外，数据显示，MALDI-8020 能够区分比 CTAB 的碳 13 峰小 0.2 Da 的 Promazine。

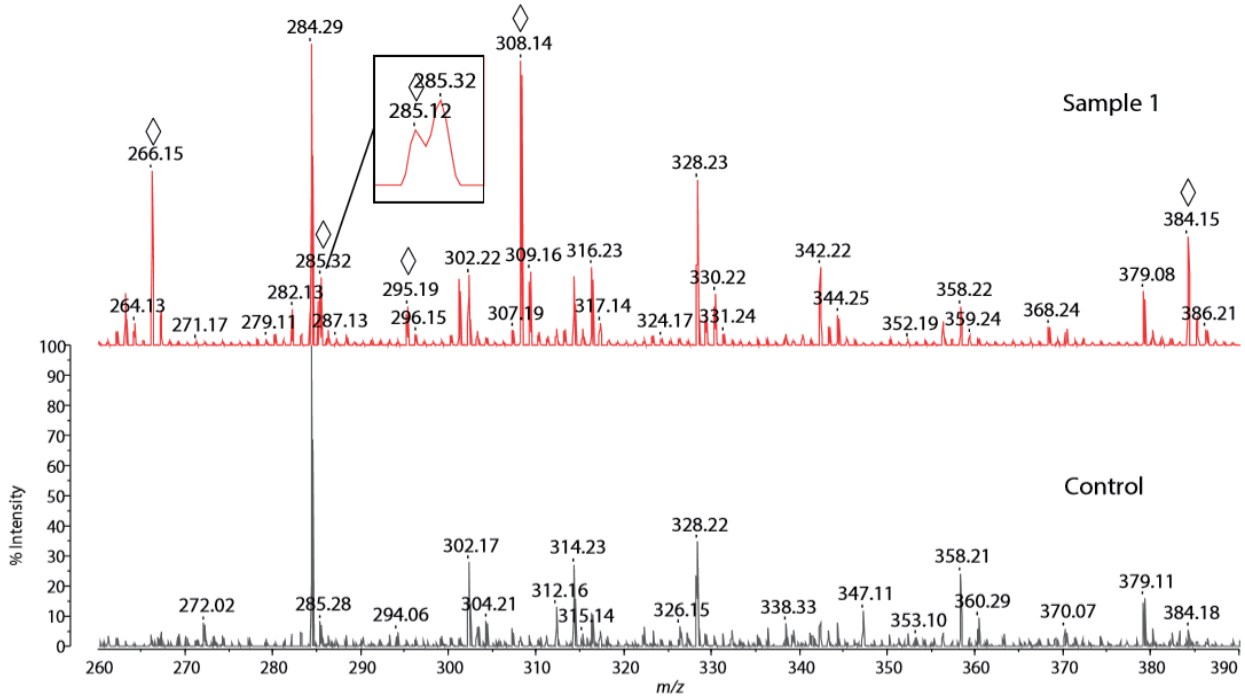


图 2 与掺入的药物分子一致的峰以菱形标记  
MALDI-8020 能够区分比 CTAB 的碳 13 峰小 0.2 Da 的 Promazine

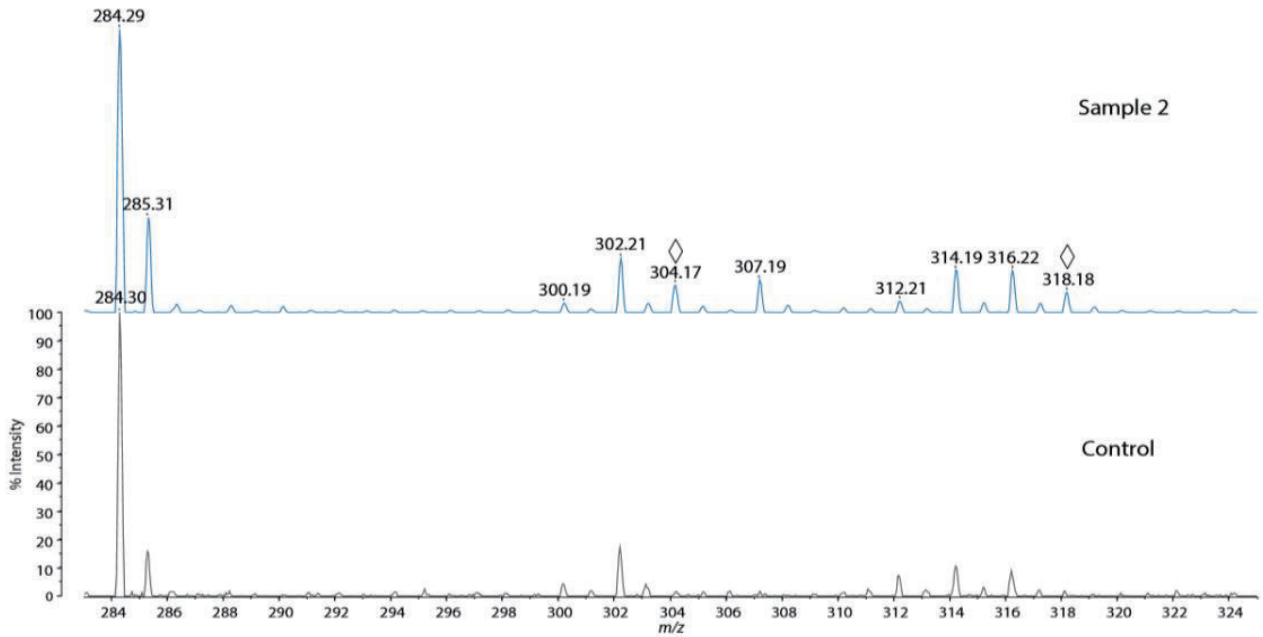


图 3 与掺入的药物分子一致的峰以菱形标记  
MALDI-8020 能够检测可卡因 [M+H]<sup>+</sup> 及其代谢物

岛津应用云



岛津企业管理（中国）有限公司  
岛津（香港）有限公司

<http://www.shimadzu.com.cn>

用户服务热线电话： 800-810-0439  
400-650-0439

免责声明：

※本资料未经许可不得擅自修改、转载、销售；  
※本资料中的所有信息仅供参考，不予任何保证。  
如有变动，恕不另行通知。

第一版发行日：2018年5月