

## 安全监测

## 基于 GC-Q TOF MS 和 LC-Q Orbitrap MS 的依托咪酯及其类似物质谱裂解规律研究\*

范一雷<sup>1</sup>, 赵森<sup>1</sup>, 杨奕轩<sup>1</sup>, 柯星<sup>1</sup>, 徐雨<sup>2\*\*</sup>, 陈显鑫<sup>2\*\*</sup>

(1. 浙江省毒品防控技术研究重点实验室 浙江警察学院, 杭州 310053;

2. 浙江省禁毒和毒情监测关键技术研究重点实验室 国家毒品实验室浙江分中心, 杭州 310053)

**摘要** 目的: 探讨依托咪酯及其类似物在质谱下的裂解规律, 为该类物质的鉴定及结构分析提供参考。方法: 基于气相色谱-四极杆飞行时间质谱(GC-Q TOF MS)联用技术和液相色谱-静电场轨道阱质谱(LC-Q Orbitrap MS)技术在EI和ESI正电离模式下对依托咪酯、美托咪酯、丙帕酯和异丙帕酯进行质谱分析, 推测该类物质的EI-MS以及ESI-MS/MS裂解规律。结果: 依托咪酯及其类似物具有相似的裂解途径, 在EI-MS模式下断裂过程主要集中在碳氮键的断裂, 形成特定的离子碎片( $m/z$  105和 $m/z$  77)。在ESI-MS/MS正离子模式下断裂过程主要集中在碳氮键的断裂, 形成以苯乙烯为中性丢失的特征碎片离子, 接着依次丢失中性碎片 $R_1$ 及 $H_2O$ , 形成特定的离子碎片( $m/z$  113和 $m/z$  95)。此外, 在ESI-MS/MS正离子模式中丢失的中性碎片 $R_1$ 可以较直观地反映母核上的取代基, 从而进一步确定依托咪酯及其类似物结构。结论: 依托咪酯及其类似物质谱裂解规律有助于对该类物质的结构进行解析与推断, 为法庭科学实验室该类物质的鉴定及结构分析提供参考。关键词: 依托咪酯及其类似物; 质谱裂解规律; 快速筛查; 电子轰击质谱; 电喷雾质谱; 毒品替代物; 新精神活性物质

中图分类号: R 917 文献标识码: A 文章编号: 0254-1793(2025)01-116-09  
doi: 10.16155/j.0254-1793.2024-0289

## Fragmentation patterns of etomidate analogues based on GC-Q TOF MS and LC-Q Orbitrap MS\*

FAN Yi-lei<sup>1</sup>, ZHAO Sen<sup>1</sup>, YANG Yi-xuan<sup>1</sup>, KE Xing<sup>1</sup>, XU Yu<sup>2\*\*</sup>, CHEN Xian-xin<sup>2\*\*</sup>

(1. Key Laboratory of Drug Prevention and Control Technology of Zhejiang Province, Zhejiang Police College, Hangzhou 310053, China; 2. Key Laboratory of Drug Monitoring and Control of Zhejiang Province, National Narcotics Laboratory Zhejiang Regional Center, Hangzhou 310053, China)

**Abstract Objective:** To explore the fragmentation patterns of etomidate analogues by mass spectrometry to

\* 国家重点研发计划项目(2023YFC3303903-3); 浙江省自然科学基金资助项目(LTGC23H230001、LTGC23B050003); 毒品监测管控与禁毒关键技术公安部重点实验室开放基金资助项目(2022-KLDMC-06); 全省毒品防控技术研究重点实验室, 国家毒品实验室浙江分中心资助项目(NNLZRC-2024-005); 上海市现场物证重点实验室开放课题基金资助项目(2024XCWZK11)

\*\* 通信作者 徐雨 Tel:(0571)87180358; E-mail: 81140875@qq.com

陈显鑫 Tel:(0571)87180358; E-mail: 849285915@qq.com

第一作者 Tel:(0571)87180358; E-mail: fanyilei@zjjcxy.cn

provide reference for the identification and structural analysis of these substances. **Methods:** Etomidate, metomidate, propaxate and isopropaxate were analyzed by gas chromatography–quadrupole time–of–flight mass spectrometry (GC–Q TOF MS) and liquid chromatography high–resolution mass spectrometry (LC–Q Orbitrap MS) under EI and ESI positive ionization modes. And the EI–MS and ESI–MS/MS fragmentation patterns of etomidate analogues were deduced. **Results:** Etomidate and its analogues had similar fragmentation pathways. In EI–MS mode, the fragmentation pathway was mainly focused on the breaking of carbon–nitrogen bonds, and the specific fragment ions ( $m/z$  105 and  $m/z$  77) were formed. In ESI–MS/MS positive ion mode, the fragmentation pathway was mainly focused on the fracture of carbon–nitrogen bond, resulting in the formation of the characteristic fragment ion with styrene as neutral loss, Subsequently, the neutral fragments  $R_1$  and  $H_2O$  were lost in turn, and the specific fragment ions ( $m/z$  113 and  $m/z$  95) was formed. Moreover, the neutral loss of  $R_1$  in ESI–MS/MS positive ion mode could more intuitively indicate the substituents on the parent nucleus and further determine the structure of etomidate and its analogues. **Conclusion:** The fragmentation patterns of etomidate and its analogues are helpful to analyze and infer the structure of these substances, and provide reference for the identification and structural analysis of these substances in forensic laboratory.

**Keywords:** etomidate analogues; fragmentation patterns; rapid screen; EI–MS; ESI–MS/MS; drug substitutes; new psychoactive substances

依托咪酯是一类非巴比妥类静脉短效催眠药,具有起效时间短,维持时间短,药理活性高及循环稳定等多种优势,自 1974 年以来一直作为静脉麻醉剂使用,广泛应用于全麻诱导及短时手术麻醉<sup>[1-3]</sup>。根据《2021 年中国毒情形势报告》,我国部分地区已有将依托咪酯作为毒品替代物吸食的情况<sup>[4]</sup>。随着我国禁毒打击力度不断加大,传统毒品的制造、贩卖及吸食均受到极大的打压,依托咪酯作为毒品替代物的滥用情况日益加剧。一些不法分子利用依托咪酯的麻醉效果,将其添加进电子烟中进行销售。吸食依托咪酯后,会出现一系列不良反应,包括颤抖、头晕,甚至产生幻觉等严重精神障碍。长期或过量吸食依托咪酯可能会对脑部神经造成不可逆的损害,严重影响身体健康<sup>[5-6]</sup>。为应对依托咪酯滥用和非法制售所造成的危害,2023 年 9 月 6 日,国家药品监督管理局、公安部、国家卫生健康委员联合发文,调整麻醉药品和精神药品目录,将依托咪酯(在中国境内批准上市的含依托咪酯的药品制剂除外)列入第二类精神药品目录。

自依托咪酯列管以来,依托咪酯的滥用情况受到

有效遏制。但与此同时,一些通过对依托咪酯化学结构的细微修饰改造而成的类似物(图 1),如:1-(1-苯基乙基)-1*H*-咪唑-5-羧酸甲酯(美托咪酯)、1-(1-苯基乙基)-1*H*-咪唑-5-羧酸丙酯(丙帕酯)、1-(1-苯基乙基)-1*H*-咪唑-5-羧酸异丙酯(异丙帕酯),在躲避法律法规的同时也保留了其药理活性,有极大的滥用风险隐患。这类物质往往具有结构相似、管制不完善等特点,已经引起了广泛的关注。目前,主要的检测方法包括红外光谱法、拉曼光谱法、气相色谱质谱和液相色谱质谱法、核磁共振波谱法等<sup>[6-11]</sup>。红外光谱法和拉曼光谱法适用于纯度较高化合物的检测,而依托咪酯及其类似物主要以混入电子烟等产品进行销售和滥用。刘雪燕等<sup>[11]</sup>建立了缴获可疑固体和电子烟油样品中依托咪酯的定量核磁共振氢谱方法,但核磁共振波谱仪可及性有限。色谱-质谱联用仪由于其具有高特异性和灵敏性,普遍存在于法庭科学实验室,并一直被作为检测不同基质中痕量化合物的首选技术<sup>[12-16]</sup>,获得的新精神活性物质质谱碎裂规律,有助于在法庭科学实验室中新精神活性物质的快速检测与鉴定。

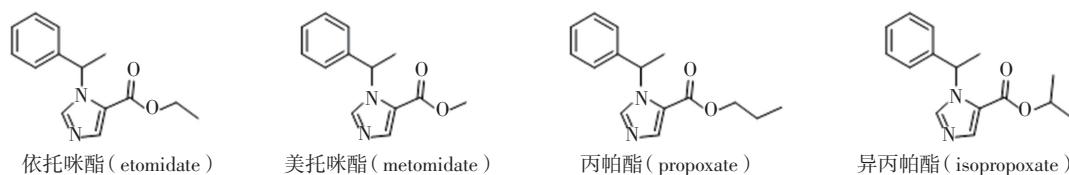


图 1 依托咪酯及其类似物的化学结构式

Fig. 1 Chemical structures of etomidate and its analogues

因此,本文采用气相色谱-四极杆飞行时间质谱(GC-Q TOF MS)联用技术和液相色谱-静电场轨道阱质谱(LC-Q Orbitrap MS)技术分析研究依托咪酯及其类似物的质谱特征及裂解规律,对于法庭科学实验室在案件工作中鉴定该类物质具有十分重要的意义。

## 1 仪器与试剂

### 1.1 仪器

Agilent 8890-7250 气相色谱质谱联用仪(GC-EI-Q TOF MS,安捷伦科技有限公司);Dionex Ultimate 3000 液相色谱仪,Thermo Q Extractive 四极杆-静电场轨道阱高分辨质谱仪,Xcalibur 4.0 工作站(LC-ESI-Q Orbitrap/MS;赛默飞公司)。

### 1.2 试验材料

1-(1-苯基乙基)-1*H*-咪唑-5-羧酸甲酯(美托咪酯,批号 030007095OT09320231103)、1-(1-苯基乙基)-1*H*-咪唑-5-羧酸乙酯(依托咪酯,批号 028008009OT07120230814)、1-(1-苯基乙基)-1*H*-咪唑-5-羧酸丙酯(丙帕酯,批号 028008065OT09920240131)、1-(1-苯基乙基)-1*H*-咪唑-5-羧酸异丙酯(异丙帕酯,批号 024008062OT10020240228)对照品(上海原思标物公司);甲醇和乙腈(HPLC级,Merck公司);甲酸(HPLC级,ROE Scientific INC公司)。试验中所用含依托咪酯类似物的缴获样品由公安部门提供。

## 2 方法与结果

### 2.1 GC-EI Q TOF MS 条件

采用安捷伦 DB-5MS 石英毛细管柱(30 m × 0.25 mm × 0.25 μm);柱温程序:起始温度 140 °C,保持 3 min,以 20 °C · min<sup>-1</sup> 升至 320 °C,保持 13 min;进样口温度 280 °C;He 为载气;流速 1.0 mL · min<sup>-1</sup>;分流进样,分流比 20 : 1;进样量 1 μL。

采用 EI 离子源,电子能量 70 eV,传输线温度 250 °C,离子源温度 230 °C,质量范围  $m/z$  35~500,扫描方式为全扫模式(SCAN),溶剂延迟 2 min。

### 2.2 LC-ESI Q Orbitrap MS 条件

采用 Waters T3 (100 mm × 2.1 mm, 1.8 μm) 色谱柱,以 0.1% 甲酸水溶液(A)-乙腈溶液(B)为流动相,梯度洗脱(0~3 min, 2%B; 3~15 min, 2%B → 100%B; 15~17 min, 100%B; 17~17.5 min, 100%B → 2%B; 17.5~20 min, 2%B),柱温 35 °C,流速 0.3 mL · min<sup>-1</sup>,进样量 1 μL。

采用 ESI<sup>+</sup> 电离源,喷射电压 3 500 V,碰撞气 N<sub>2</sub>,

雾化温度 350 °C,雾化气压力 0.7 MPa,辅助气压力 0.7 MPa,毛细管温度 350 °C。采用 Full MS-ddMS<sup>2</sup> 扫描模式采集数据;全扫描数据采集参数,Full MS 分辨率 70 000,最大注射时间(maximum IT) 100 ms,扫描范围  $m/z$  60~900;二级质谱数据采集参数,分辨率 17 500,碰撞能量为 35 eV。

### 2.3 溶液的制备

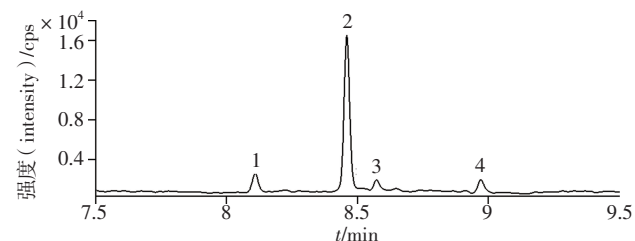
**2.3.1 对照品溶液** 精密称取依托咪酯及其类似物对照品适量,用甲醇配制成每 1 mL 含各对照品 10 mg 的单一对照品溶液,即得。

**2.3.2 供试品溶液** 精密量取烟油 100 μL,加入甲醇 900 μL,涡旋混匀,超声(500 W, 40 kHz) 5 min,滤过,滤液作为供试品溶液。

### 2.4 依托咪酯 EI-MS 裂解研究

依托咪酯及其类似物的 GC-EI Q TOF MS 的提取离子流图见图 2。依托咪酯、美托咪酯、丙帕酯和异丙帕酯基本实现了基线分离。依托咪酯及其类似物的 EI 质谱图以及主要碎片离子分别见图 3 和表 1。

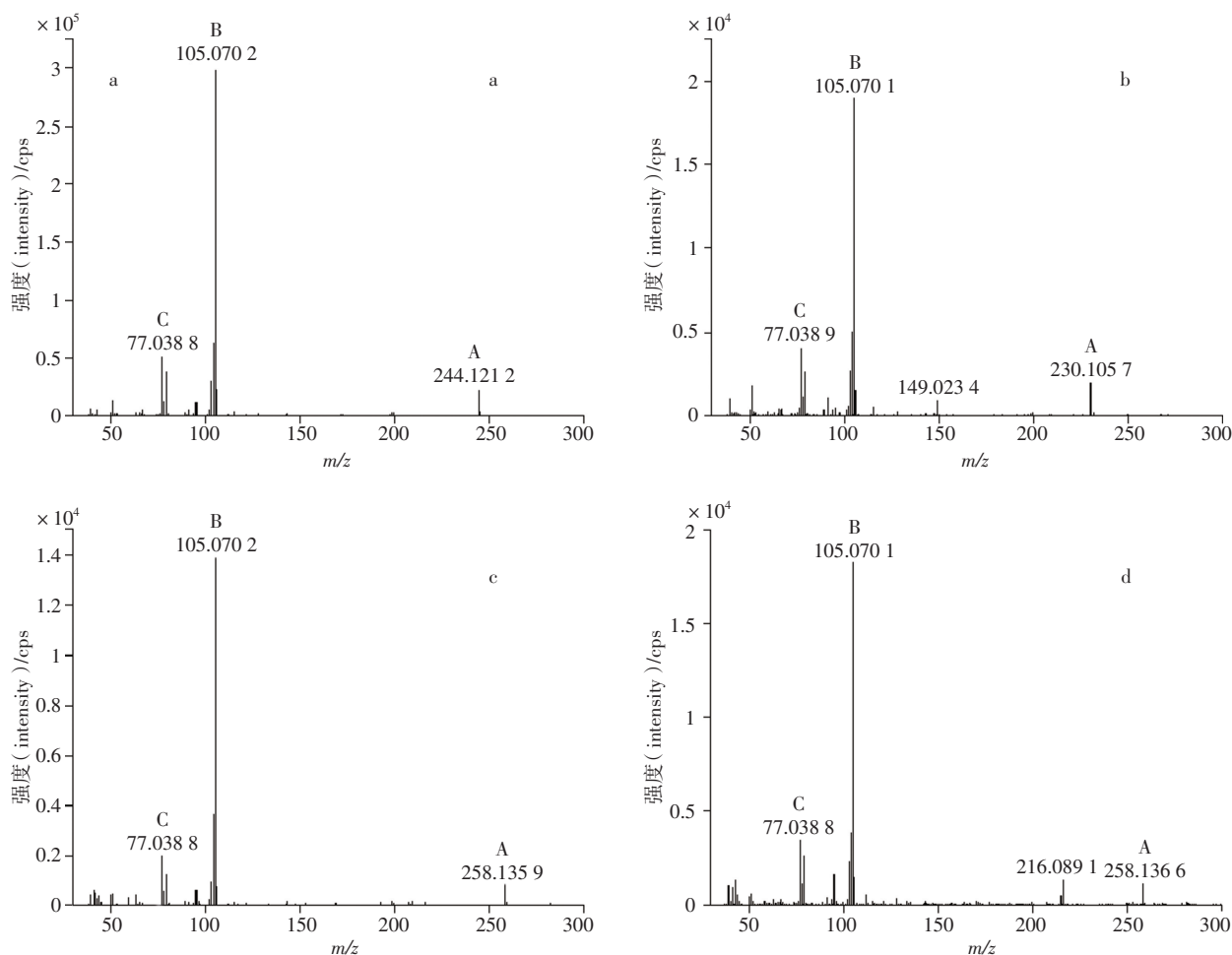
4 个物质的裂解途径具有高度的相似性,依托咪酯及其类似物均存在分子离子峰。并且分子离子 A 经 N 游离基中心诱导的  $\alpha$  断裂生成碎片离子 B ( $m/z$  105),且碎片离子 B 的丰度最强,为基峰。碎片离子 B 进一步发生  $\alpha$  断裂并失去一分子 C<sub>2</sub>H<sub>4</sub> 生成碎片离子 C ( $m/z$  77)。图 4 为依托咪酯及其类似物的 EI 源质谱裂解规律。其中,异丙帕酯的碎片离子  $m/z$  258 可通过麦氏重排并失去一分子 C<sub>3</sub>H<sub>6</sub> 生成特征碎片离子 ( $m/z$  216)<sup>[13]</sup>。而美托咪酯因不具有  $\gamma$ H,无法完成麦氏重排,无法生成相应的特征碎片离子。此外,相较于依托咪酯和丙帕酯,异丙帕酯的异丙基具备 6 个  $\gamma$ H,更易发生 H 迁移,同时酯键断裂形成双键时具备 2 个成键位置,对于中性分子的形成和离去更为有利,易生成特征碎片离子  $m/z$  216。



1. 美托咪酯 (metomidate) 2. 依托咪酯 (etomidate)  
3. 异丙帕酯 (isopropoxate) 4. 丙帕酯 (propoxate)

图 2 依托咪酯及其类似物的 GC-EI Q TOF MS 的提取离子流图

Fig. 2 EIC chromatogram of etomidate and its analogues by GC-EI Q TOF MS



a. 依托咪酯 (etomidate) b. 美托咪酯 (metomidate) c. 丙帕酯 (propoxate) d. 异丙帕酯 (isopropoxate)

图3 依托咪酯及其类似物的EI质谱图

Fig. 3 EI mass spectra of etomidate and its analogues

表1 EI-MS模式下依托咪酯及其类似物的主要碎片离子

Tab. 1 Main fragment ion of etomidate and its analogues in EI-MS mode

化合物 (compound)	保留时间 (retention time)/min	离子 (ion)	化学式 (chemical formula)	理论值 (theoretical mass) m/z	实测值 (experimental mass) m/z	误差 (error) × 10 <sup>-6</sup>
依托咪酯 (etomidate)	8.457	A	C <sub>14</sub> H <sub>16</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub> <sup>+</sup>	244.120 6	244.121 2	-2.46
		B	C <sub>8</sub> H <sub>9</sub> <sup>+</sup>	105.069 9	105.070 2	-2.86
		C	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> <sup>+</sup>	77.038 6	77.038 8	-2.60
美托咪酯 (metomidate)	8.112	A	C <sub>13</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub> <sup>+</sup>	230.105 0	230.105 7	-3.04
		B	C <sub>8</sub> H <sub>9</sub> <sup>+</sup>	105.069 9	105.070 1	-1.90
		C	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> <sup>+</sup>	77.038 6	77.038 9	-3.89
丙帕酯 (propoxate)	8.972	A	C <sub>15</sub> H <sub>18</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub> <sup>+</sup>	258.136 3	258.135 9	1.55
		B	C <sub>8</sub> H <sub>9</sub> <sup>+</sup>	105.069 9	105.070 1	-1.90
		C	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> <sup>+</sup>	77.038 6	77.038 8	-2.60
异丙帕酯 (isopropoxate)	8.574	A	C <sub>15</sub> H <sub>18</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub> <sup>+</sup>	258.136 3	258.136 6	-1.16
		B	C <sub>8</sub> H <sub>9</sub> <sup>+</sup>	105.069 9	105.070 1	-1.90
		C	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> <sup>+</sup>	77.038 6	77.038 8	-2.60

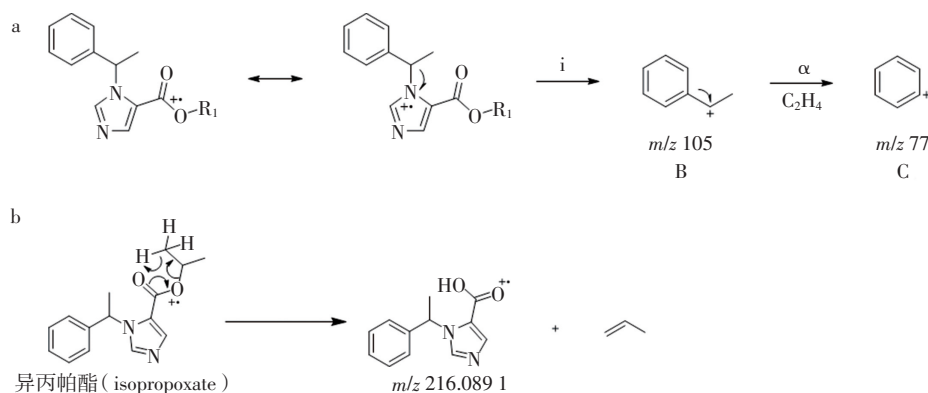
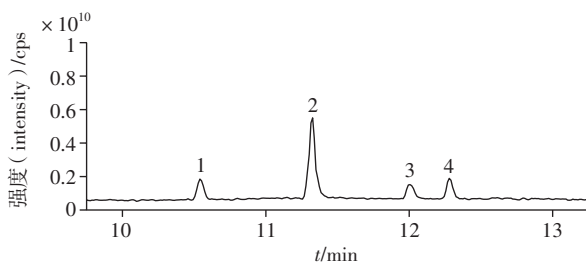


图4 依托咪酯及其类似物的 EI 源质谱裂解规律 (a) 及异丙帕酯中碎片离子  $m/z$  216.089 1 裂解途径 (b)  
 Fig. 4 The EI-MS fragmentation patterns of etomidate and its analogues (a) and the fragmentation pathway of the ion at  $m/z$  216.089 1 in isopropoxate

### 2.5 依托咪酯及其类似物 ESI-MS/MS 裂解研究

依托咪酯及其类似物的 LC-ESI Q Orbitrap MS 的提取离子流图见图 5。依托咪酯、美托咪酯、丙帕酯和异丙帕酯在图谱中也基本实现了基线分离。依托咪酯及其类似物的 ESI-MS/MS 质谱图以及主要碎片离子分别见图 6 和表 2。依托咪酯、美托咪酯、丙帕酯和异丙帕酯的 ESI-MS/MS 的碎裂途径基本

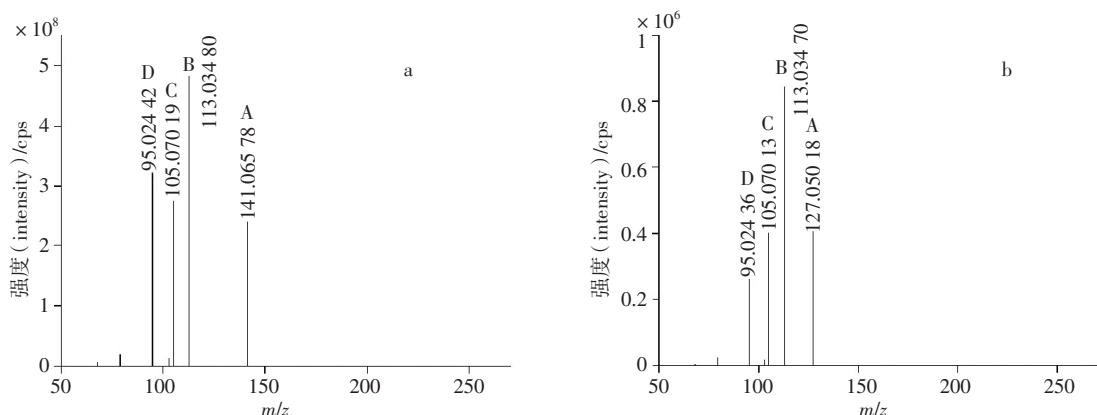
一致。[M+H]<sup>+</sup> 离子通过碳氮键的断裂并失去一分子 C<sub>8</sub>H<sub>8</sub> 生成碎片离子 A, 进一步发生键断裂并失去一分子 R<sub>1</sub> 生成碎片离子 B ( $m/z$  113)。碎片离子 B 失去一分子 H<sub>2</sub>O 生成碎片离子 D ( $m/z$  95)。[M+H]<sup>+</sup> 离子另一条裂解路径是经碳氮键的断裂生成碎片离子 C ( $m/z$  105)。图 7 为依托咪酯及其类似物的 ESI 源质谱裂解规律。



1. 美托咪酯 (metomidate) 2. 依托咪酯 (etomidate) 3. 异丙帕酯 (isopropoxate) 4. 丙帕酯 (propoxate)

图5 依托咪酯及其类似物的 LC-Q Orbitrap MS 的提取离子流图

Fig. 5 Extraction ion chromatogram of etomidate and its analogues by LC-Q Orbitrap MS



a. 依托咪酯 (etomidate) b. 美托咪酯 (metomidate) c. 丙帕酯 (propoxate) d. 异丙帕酯 (isopropoxate)

图6 依托咪酯及其类似物的 ESI 二级质谱图

Fig. 6 ESI secondary mass spectra of etomidate and its analogues

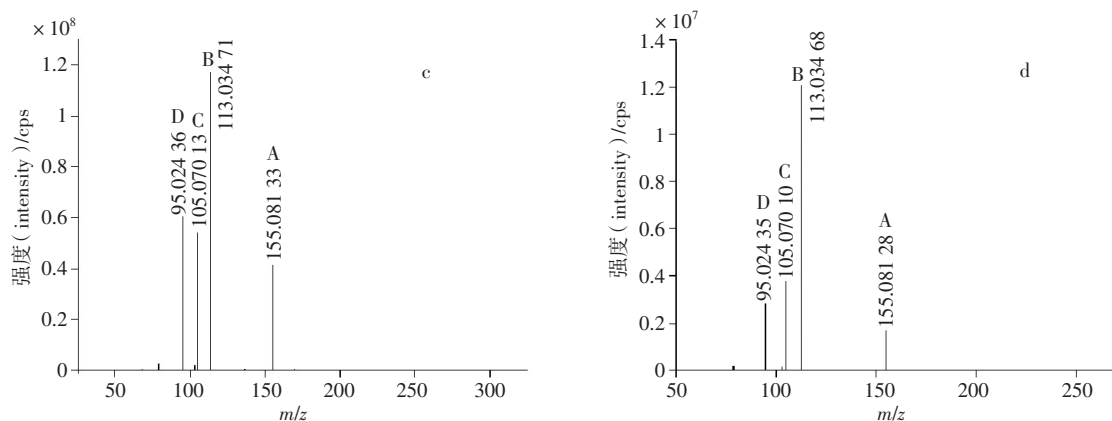


图 6 (续)

Fig. 6 (continued)

表 2 ESI-MS/MS 模式下依托咪酯及其类似物的主要碎片离子

Tab. 2 Main fragment ion of etomidate and its analogues in ESI-MS/MS mode

化合物 (compound)	保留时间 (retention time)/min	离子 (ion)	化学式 (chemical formula)	理论值 (theoretical mass) $m/z$	实测值 (experimental mass) $m/z$	误差 (error) $\times 10^{-6}$
依托咪酯 (etomidate)	11.31		$C_{14}H_{17}N_2O_2^+$	245.128 45	245.127 85	2.45
		A	$C_6H_9N_2O_2^+$	141.065 85	141.055 51	1.91
		B	$C_4H_5N_2O_2^+$	113.034 55	113.034 61	-0.53
		C	$C_8H_9^+$	105.069 88	105.070 19	-2.95
美托咪酯 (metomidate)	10.53		$C_{13}H_{15}N_2O_2^+$	231.112 80	231.112 23	2.47
		A	$C_5H_7N_2O_2^+$	127.050 20	127.050 18	0.16
		B	$C_4H_5N_2O_2^+$	113.034 55	113.034 67	-1.06
		C	$C_8H_9^+$	105.069 88	105.070 11	-2.19
丙帕酯 (propoxate)	12.28		$C_{15}H_{19}N_2O_2^+$	259.144 10	259.143 55	2.12
		A	$C_7H_{11}N_2O_2^+$	155.081 50	155.081 33	1.10
		B	$C_4H_5N_2O_2^+$	113.034 55	113.034 71	-1.42
		C	$C_8H_9^+$	105.069 88	105.070 13	-2.38
异丙帕酯 (isopropoxate)	12.00		$C_{15}H_{19}N_2O_2^+$	259.144 10	259.143 52	2.24
		A	$C_7H_{11}N_2O_2^+$	155.081 50	155.081 28	1.42
		B	$C_4H_5N_2O_2^+$	113.034 55	113.034 68	-1.15
		C	$C_8H_9^+$	105.069 88	105.070 10	-2.09
		D	$C_4H_3N_2O^+$	95.023 99	95.024 35	-3.79

2.6 可疑物中依托咪酯及其类似物鉴定

高分辨质谱显示可疑物质的元素组成为  $C_{13}H_{14}N_2O_2$ 。图 8 为电子烟油中可疑物质的 GC-Q TOF MS 和 LC-Q Orbitrap MS 总离子流图及其质谱图。在 EI-MS 模式下, 分子离子 ( $m/z$  230.105 8) 经 N 游离基中心诱导的 i 断裂生成碎片离子 ( $m/z$  105.071 9), 进一步发生  $\alpha$  断裂并失去一分子  $C_2H_4$  生成碎片离子 ( $m/z$  77.038 7)。在 ESI-MS/MS 正离子

模式下, 一级质谱图中 ( $m/z$  231.112 50) 为  $[M+H]^+$  离子。二级质谱显示  $[M+H]^+$  离子通过碳氮键的断裂并失去一分子  $C_8H_8$  生成碎片离子 ( $m/z$  127.050 20), 进一步发生键断裂并失去 1 个  $CH_2$  生成碎片离子 ( $m/z$  113.035 15), 接着失去一分子  $H_2O$  生成碎片离子 ( $m/z$  95.024 45)。  $[M+H]^+$  离子另一条裂解路径是经碳氮键的断裂生成碎片离子 ( $m/z$  105.070 19)。碎片离子 ( $m/z$  105.071 9、77.038 7、113.035 15、105.070 19

以及 95.024 45) 与依托咪酯类似物的质谱特征碎片相一致,可推测该可疑物质为依托咪酯类似物,且该可疑物质的元素组成为  $C_{13}H_{14}N_2O_2$ , 相对依托咪酯少 1 个  $CH_2$ 。此外,通过 ESI-MS/MS 正离子模式下碎片离子 ( $m/z$  127.050 20) 失去 1 个  $CH_2$

生成碎片离子 ( $m/z$  113.035 15) 的特征裂解途径,推测可疑物质的结构为 1-(1-苯基乙基)-1H-咪唑-5-羧酸甲酯(美托咪酯)。图 9 为电子烟油中可疑物质的 EI-MS 和 ESI-MS/MS 质谱裂解途径。

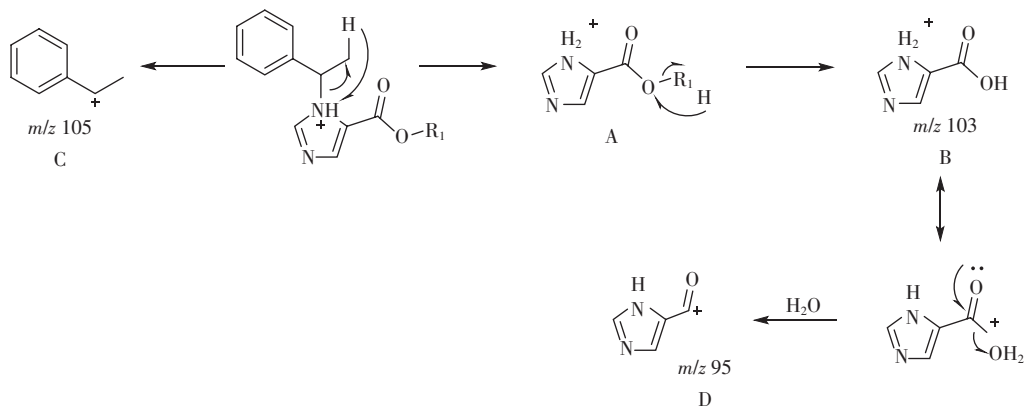
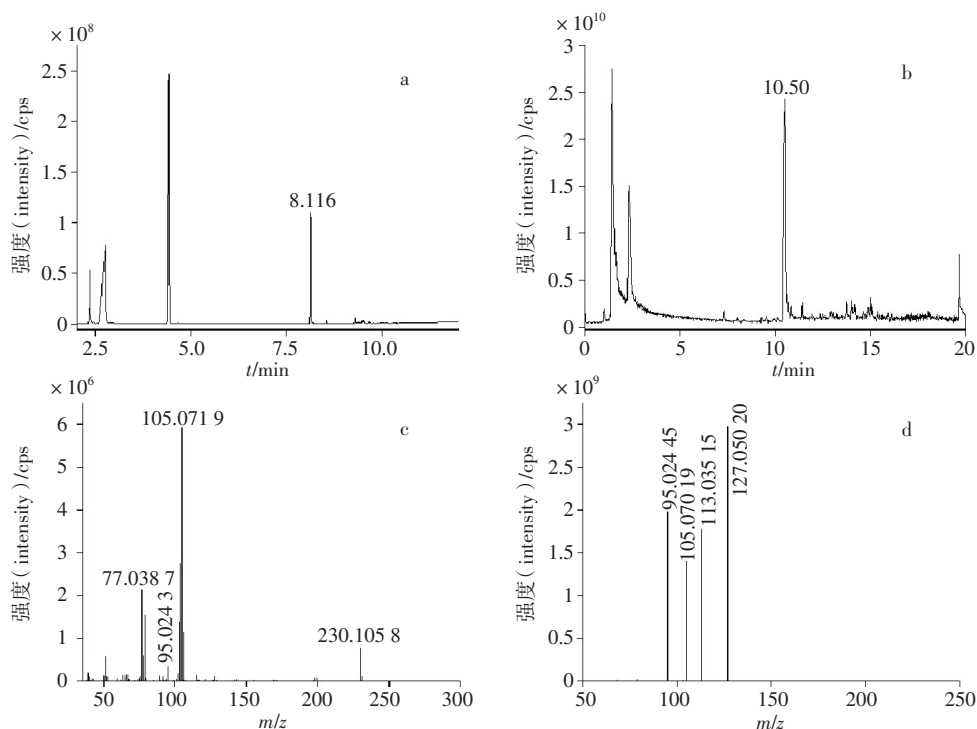


图 7 依托咪酯及其类似物的 ESI 源质谱裂解规律

Fig. 7 The ESI-MS fragmentation patterns of etomidate and its analogues



a. GC-Q TOF MS 总离子流图 (GC-Q TOF MS total ion chromatogram) b. LC-Q Orbitrap MS 总离子流图 (LC-Q Orbitrap MS total ion chromatogram)  
c. EI-MS d. ESI-MS/MS

图 8 电子烟油中可疑物质的离子流色谱图及质谱图

Fig. 8 TIC chromatograms and mass spectra of suspected sample in electronic cigarette oil

采用 JD/Y JY01.07-2024《疑似毒品中 2-氟苯丙胺等 388 种麻醉药品和精神药品的定性检验 气相色谱-质谱法》对疑似物进行定性检验,该可疑物

质的保留时间 (8.302 min) 与美托咪酯标准物质的保留时间 (8.303 min) 基本一致,相对误差为 0.01 %。可疑物质与美托咪酯标准物质具有相同的特征离子

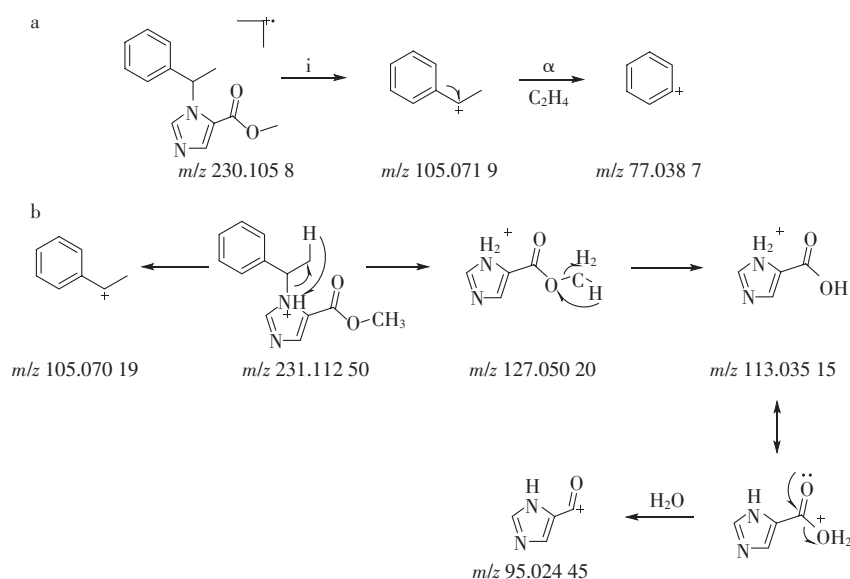


图9 电子烟油中可疑物质的 EI-MS (a) 和 ESI-MS/MS (b) 质谱裂解途径

Fig.9 EI-MS (a) and ESI-MS/MS (b) mass spectrometry fragmentation pathways of suspected sample in electronic cigarette oil

( $m/z$  230、105 和 77),且各离子丰度比的最大允许相对偏差范围不超过标准规定,证明该可疑物质为美托咪酯,与采用质谱裂解规律推断依托咪酯及其类似物的结果相一致。

### 3 讨论

采用 GC-Q TOF MS 和 LC-Q Orbitrap MS 对依托咪酯、美托咪酯、丙帕酯和异丙帕酯进行分析,从中发现依托咪酯及其类似物质谱裂解途径均在 EI 模式下,发生  $i$  断裂和  $\alpha$  断裂生成共性碎片离子 ( $m/z$  105 和  $m/z$  77)。而在 ESI 正离子模式下,发生 C-N 和 C-O 断裂生成共性碎片离子 ( $m/z$  113、105 和 95),且因四者母核结构差异可以产生相应的特征碎片。本研究对依托咪酯及其类似物质谱裂解规律的总结,可为其快速鉴定提供依据。

### 参考文献

- [1] DOENICKE A, KUGLER J, PENZEL G, *et al.* Cerebral function under etomidate, a new non-barbiturate i.v. hypnotic (author's transl) [J]. *Anaesthesist*, 1973, 22(8): 357
- [2] 王太云,刘宜平,李恩有. 依托咪酯常见不良反应及预防新策略研究进展[J]. *中国医药*, 2021, 16(9): 1411  
WANG TY, LIU YP, LI EY. Research progress on common adverse reactions of etomidate and new prevention strategies [J]. *China Med*, 2021, 16(9): 1411
- [3] YU KJ, SOO YY, SEON YK, *et al.* Simultaneous determination of etomidate and its major metabolite, etomidate acid, in urine using dilute and shoot liquid chromatography-tandem mass spectrometry [J]. *Molecules*, 2019, 24(24): 4459
- [4] 二〇二一年中国毒情形势报告 [N]. *中国禁毒报*, 2022-06-28 (003)  
China Drug Situation Report 2021 [N]. *China Narcotics Control News*, 2022-06-28(003)
- [5] 吴永富,王燕军,代勇,等. 毛发、尿液中依托咪酯及代谢物 HPLC-MS/MS 检测 [J/OL]. *刑事技术*, 2024 [2024-11-18]. <https://doi.org/10.16467/j.1008-3650.2024.0011>  
WU YF, WANG YJ, DAI Y, *et al.* Determination of etomidate and its metabolite in hair and urine by HPLC-MS/MS [J/OL]. *Forensic Sci Technol*, 2024 [2024-11-18]. <https://doi.org/10.16467/j.1008-3650.2024.0011>
- [6] 黄楚舒,胡庆坤,高伟杰,等. 新型毒品替代物丙帕酯和异丙帕酯的结构表征与分析 [J/OL]. *刑事技术*, 2024 [2024-11-18]. <https://doi.org/10.16467/j.1008-3650.2024.0080>  
HUANG CS, HU QK, GAO WJ, *et al.* Structural characterization and comparative analysis of new drug substitutes propoxate and isopropoxate [J/OL]. *Forensic Sci Technol*, 2024 [2024-11-18]. <https://doi.org/10.16467/j.1008-3650.2024.0080>
- [7] YUM H, JEONG S, JANG M, *et al.* Fast and reliable analysis of veterinary metomidate and etomidate in human blood samples by liquid chromatography-tandem mass spectrometry (LC-MS/MS) in a postmortem case [J]. *J Forensic Sci*, 2021, 66(6): 2532
- [8] 范一雷,陈显鑫,吴昊,等. 合成大麻素类新精神活性物质 EI 质谱特征研究 [J]. *药物分析杂志*, 2024, 44(9): 1463  
FAN YL, CHEN XX, WU H, *et al.* Fragmentation patterns of synthetic cannabinoids based on electron impact ionization mass spectrometry [J]. *Chin J Pharm Anal*, 2024, 44(9): 1463
- [9] 马俊,闫昕,张腾,等. 高效液相色谱-串联质谱法测定电子烟油中的替来他明和依托咪酯 [J]. *中国司法鉴定*, 2024(3): 55

- MA J, YAN X, ZHANG T, *et al.* Determination of tiletamine and etomidate in e-cigarette oil by HPLC-MS/MS [J]. *Chin J Forensic Sci*, 2024(3): 55
- [ 10 ] SONG CH, JIA W, LIU CM, *et al.* New trends of new psychoactive substances(NPS)-infused chocolate: identification and quantification of trace level of NPS in complex matrix by GC-MS and NMR [J]. *Talanta*, 2023, 255: 124257
- [ 11 ] 刘雪燕,贾薇,刘翠梅,等. 核磁共振波谱用于可疑样品中依托咪酯的定量研究 [J/OL]. *分析试验室*, 2024 [ 2024-11-18 ]. <https://link.cnki.net/urlid/11.2017.TF.20240321.1105.013>
- LIU XY, JIA W, LIU CM, *et al.* <sup>1</sup>H-qNMR for the quantification of etomidate in suspicious samples [J/OL]. *Chin J Anal Lab*, 2024 [ 2024-11-18 ]. <https://link.cnki.net/urlid/11.2017.TF.20240321.1105.013>
- [ 12 ] 范一雷,陈显鑫,张宏建,等. 质谱识别新型合成苯环己哌啶类物质氟胺酮异构体 [J]. *分析试验室*, 2023, 42( 3 ): 338
- FAN YL, CHEN XX, ZHANG HJ, *et al.* Differentiation of novel synthetic phenylcyclohexyl piperidines fluamine isomers by mass spectrometry [J]. *Chin J Anal Lab*, 2023, 42(3): 338
- [ 13 ] NAN Q, HEJIAN W, PING X, *et al.* Investigation of fragmentation pathways of fentanyl analogues and novel synthetic opioids by electron ionization high-resolution mass spectrometry and electrospray ionization high-resolution tandem mass spectrometry [J]. *J Am Soc Mass Spectrom*, 2020, 31(2): 277
- [ 14 ] 刘翠梅,花镇东,黄钰,等. 氯胺酮结构类似物的质谱特征研究 [J]. *质谱学报*, 2023, 44( 4 ): 508
- LIU CM, HUA ZD, HUANG Y, *et al.* Mass fragmentation characteristic of ketamine analogues [J]. *J Chin Mass Spectrom Soc*, 2023, 44(4): 508
- [ 15 ] 范一雷,陈显鑫,薛锦锋,等. 新型红棕类合成大麻素质谱裂解规律研究 [J]. *分析试验室*, 2024, 43( 1 ): 57
- FAN YL, CHEN XX, XUE JF, *et al.* Investigation of mass spectrometry-based fragmentation patterns of new “OXIZZID” synthetic cannabinoids [J]. *Chin J Anal Lab*, 2024, 43(1): 57
- [ 16 ] 赵永信,陈关喜,柯颖芬,等. 气相色谱-质谱法研究 3-氧代戊酸酯烯醇-酮互变体质谱断裂途径 [J]. *分析化学*, 2008, 36( 10 ): 1375
- ZHAO YX, CHEN GX, KE YF, *et al.* Analysis of mass spectral fragmentation of enol-keto tautomers of some 3-oxo pentanoate esters by gas chromatography-mass spectrometry [J]. *Chin J Anal Chem*, 2008, 36(10): 1375

(本文于 2024 年 4 月 30 日收到)