

SF

中华人民共和国司法行政行业标准

SF/T 0093—2021

血液中卡西酮等 37 种卡西酮类新精神活性物质及其代谢物的液相色谱-串联质谱检验方法

Determination of 37 synthetic cathinones and their metabolites including cathinone in blood by liquid chromatography- tandem mass spectrometry

2021 - 11 - 17 发布

2021 - 11 - 17 实施

中华人民共和国司法部 发布

目 次

前言	II
1 范围	1
2 规范性引用文件	1
3 术语和定义	1
4 原理	1
5 试剂、仪器和材料	1
6 操作方法	2
7 分析结果评价	7
附录 A（资料性） 血液中 37 种卡西酮类新精神活性物质及其代谢物的线性范围、线性方程、相关系数、检出限及定量限	9

前 言

本文件按照GB/T 1.1—2020《标准化工作导则 第1部分：标准化文件的结构和起草规则》的规定起草。

请注意本文件的某些内容可能涉及专利。本文件的发布机构不承担识别专利的责任。

本文件由司法鉴定科学研究院提出。

本文件由司法部信息中心归口。

本文件起草单位：司法鉴定科学研究院、河北医科大学。

本文件主要起草人：施妍、向平、刘伟、沈保华、严慧、卓先义、沈敏、吴何坚、文迪。

血液中卡西酮等 37 种卡西酮类新精神活性物质及其代谢物的液相色谱-串联质谱检验方法

1 范围

本文件描述了血液中37种卡西酮类新精神活性物质及其代谢物的液相色谱-串联质谱（LC-MS/MS）检验方法，包括原理、试剂、仪器和材料、操作方法以及分析结果评价。

本文件适用于血液中37种卡西酮类新精神活性物质及其代谢物的定性与定量分析，其它检材中卡西酮类新精神活性物质及其代谢物的定性及定量分析参照使用。

2 规范性引用文件

下列文件中的内容通过文中的规范性引用而构成本文件必不可少的条款。其中，注日期的引用文件，仅该日期对应的版本适用于本文件；不注日期的引用文件，其最新版本（包括所有的修改单）适用于本文件。

GB/T 6682 分析实验室用水规格和试验方法

GA/T 122 毒物分析名词术语

3 术语和定义

GA/T 122界定的术语和定义适用于本文件。

4 原理

血液中的37种卡西酮类新精神活性物质及其代谢物，经有机溶剂提取后，用液相色谱-串联质谱法（LC-MS/MS）进行检测，经与平行操作的空白样品和添加样品比较，以保留时间、特征离子对和离子对丰度比进行定性分析；以定量离子对峰面积为依据，采用内标法进行定量分析。

5 试剂、仪器和材料

5.1 试剂

试验用水应为符合 GB/T 6682 中规定的一级水，所用试剂和要求如下：

- a) 甲醇：HPLC 级；
- b) 乙腈：HPLC 级；
- c) 乙酸乙酯：分析纯；
- d) 50%甲酸溶液：优级纯；
- e) 乙酸铵：色谱纯；
- f) pH9.2 硼砂缓冲液；
- g) 20mmol/L 乙酸铵和 0.1%甲酸溶液：分别称取乙酸铵 1.54g 和 50%甲酸溶液 2mL 置于 1000mL 容量瓶中，加水定容至刻度，pH 值约为 4；
- h) 标准物质溶液：
 - 1) 标准物质储备溶液：卡西酮，甲卡西酮，2-甲基甲卡西酮，4-甲基甲卡西酮，N-乙基卡西酮，1-苯基-2-甲氨基-1-丁酮，1-苯基-2-甲氨基-1-丁醇，N-乙基卡西酮麻黄碱代谢物，1-苯基-2-甲氨基-1-戊酮去甲麻黄碱代谢物，4-甲基麻黄碱，3,4-二甲基甲卡西酮去甲麻黄碱代谢物，4-甲氧基甲卡西酮去甲伪麻黄碱代谢物，4-氟甲卡西酮，3-氟甲卡西酮，3-氟甲卡西酮麻黄碱代谢物，1-苯基-2-甲氨基-1-戊酮，3,4-二甲基甲卡西酮，4-乙基甲卡

西酮, 4-甲基乙卡西酮, 4-甲基-N-乙基-去甲麻黄碱(4-MEC代谢物), 4-甲氧基甲卡西酮, 1-苯基-2-(N-吡咯烷基)-1-丙酮, 3,4-亚甲二氧基甲卡西酮, 1-苯基-2-(N-吡咯烷基)-1-丁酮, 2-二甲氨基-1-[3,4-(亚甲二氧基)苯基]-1-丙酮, 2-甲氨基-1-[3,4-(亚甲二氧基)苯基]-1-丁酮, 3,4-亚甲二氧基乙卡西酮, 1-苯基-2-(N-吡咯烷基)-1-戊酮, 1-(1,3-苯并二恶英-5-基)-2-(甲氨基)-1-戊酮, 2-乙氨基-1-[3,4-(亚甲二氧基)苯基]-1-丁酮, 1-(4-甲基苯基)-2-(N-吡咯烷基)-1-戊酮, 1-[3,4-(亚甲二氧基)苯基]-2-(N-吡咯烷基)-1-丙酮, 1-[3,4-(亚甲二氧基)苯基]-2-(N-吡咯烷基)-1-丁酮, 1-(2,3-二氢苯并咪喃-5-基)-2-(吡咯烷-1-基)戊烷-1-酮, MDPBP, 亚甲基二氧吡咯戊酮, 1-萘基-2-(N-吡咯烷基)-1-戊酮, 1-(4-氟苯基)-2-(N-吡咯烷基)-1-辛酮标准品溶液, 质量浓度均为1mg/mL; 置于冰箱中冷冻保存, 有效期为12个月;

- 2) 标准物质工作溶液: 试验中所用其它浓度的标准物质工作溶液均从符合5.1 h) 1)的标准物质储备溶液用甲醇稀释而得。密封, 置于冰箱中冷藏保存, 有效期3个月。
 - i) 内标溶液:
 - 1) 内标储备溶液: 100 μ g/mL 甲卡西酮-d₃, 4-甲基甲卡西酮-d₃, 4-甲基麻黄碱-d₃, 3,4-亚甲二氧基甲卡西酮-d₃, 3,4-亚甲二氧基乙卡西酮-d₅, 1-苯基-2-(N-吡咯烷基)-1-戊酮-d₈标准品溶液(或其他性质相近物), 置于冰箱中冷冻保存, 有效期12个月;
 - 2) 内标工作溶液: 试验中所用其它浓度的内标工作溶液均从符合5.1 i) 1)的内标储备溶液用甲醇稀释而得。密封, 置于冰箱中冷藏保存, 有效期3个月。

5.2 仪器和材料

仪器和材料包括:

- a) 液相色谱-串联质谱仪: 配有电喷雾离子源(ESI);
- b) 电子天平: 分度值 \leq 0.1mg;
- c) 涡旋混合器;
- d) 高速离心机;
- e) 超声波清洗仪;
- f) 离心管;
- g) 微量移液器;
- h) 微孔滤膜: 0.22 μ m。

6 操作方法

6.1 定性分析

6.1.1 样品前处理

6.1.1.1 案件样品

取血液样品100 μ L于2mL离心管中, 加入内标工作溶液10 μ L(100ng/mL甲卡西酮-d₃或3,4-亚甲二氧基乙卡西酮-d₅或4-甲基甲卡西酮-d₃或3,4-亚甲二氧基甲卡西酮-d₃或4-甲基麻黄碱-d₃或1-苯基-2-(N-吡咯烷基)-1-戊酮-d₈或其他性质相近物), 混合10s, 加入硼砂缓冲液(pH9.2)100 μ L, 乙酸乙酯1mL, 涡旋30s, 13,000r/min离心5min。取上层有机相置于5mL离心管中, 40 $^{\circ}$ C下氮气或空气流吹干。加入20mmol/L乙酸铵和0.1%甲酸溶液200 μ L复溶, 取上清液过0.22 μ m微孔滤膜后直接供仪器分析。

6.1.1.2 空白样品

取空白血液100 μ L, 然后按照6.1.1.1的方法操作。

6.1.1.3 添加样品

若案件样品中出现表2中可疑卡西酮类新精神活性物质, 则取空白血液100 μ L, 添加案件样品中出现的可疑卡西酮类新精神活性物质, 然后按照6.1.1.1的方法操作。

6.1.2 仪器分析

6.1.2.1 仪器条件

6.1.2.1.1 液相色谱参考条件

液相色谱参考条件如下，应用时可根据不同品牌仪器的实际情况进行调整。

a) 色谱柱：Acquity™ UPLC HSS T₃ (100mm×2.1mm×1.8μm) 或其他等效柱；

注：Acquity™ UPLC HSS T₃柱为美国waters公司产品的商品名称，给出这一信息是为了方便本文件的使用者，并不是表示对该产品的认可。如果其它等效产品具有相同的效果，则可使用这些等效产品。

b) 流动相：流动相 A 为 20mmol/L 乙酸铵溶液（含 0.1%甲酸和 5%乙腈），流动相 B 为乙腈；采用梯度洗脱，梯度洗脱程序见表 1；

c) 流速：250μL/min；

d) 柱温：室温；

e) 进样量：5μL。

表1 梯度洗脱程序

时间 min	流动相 A %	流动相 B %
0	90	10
1.0	90	10
10.0	30	70
10.1	90	10
12.0	90	10

6.1.2.1.2 质谱参考条件

质谱参考条件如下，应用时可根据不同品牌仪器的实际情况进行调整。

a) 离子源：电喷雾电离-正离子模式 (ESI+)；

b) 检测方式：多反应监测 (MRM)；

c) 离子源电压 (IS)：5500V；

d) 碰撞气 (CAD)、气帘气 (CUR)、雾化气 (GS1) 和辅助气 (GS2) 均为高纯氮气，使用前调节各气流流量以使质谱灵敏度达到检测要求；

e) 去簇电压 (DP) 和碰撞能量 (CE) 应优化至最佳灵敏度。

在符合 6.1.2.1.1 和 6.1.2.1.2 规定的液相色谱和质谱参考条件下，37 种卡西酮类新精神活性物质及其代谢物和内标的定性离子对、定量离子对和保留时间见表 2。

表2 37 种卡西酮类新精神活性物质及其代谢物、内标的质谱参数和保留时间

中文名/CAS 号	英文名	简称	母离子 m/z	子离子 m/z	去簇 电压 V	碰撞 能量 eV	保留 时间 min
卡西酮 71031-15-7	Cathinone	-	150.2	116.9 ^a	44	18	2.49
				131.8	44	30	
甲卡西酮 5650-44-2 (右旋 体), 112117-24-5 (左旋体)	Methcathinone	-	164.2	130.9 ^a	62	20	2.74
				145.9	62	27	
2-甲基甲卡西酮 1246911-71-6	1-(2-Methylphenyl)-2- methylaminopropan-1-one	2-MMC	178.0	160.4 ^a	56	19	4.10
				145.4	56	28	
4-甲基甲卡西酮 5650-44-2	4-Methylmethcathinone	mephedrone	178.0	160.4 ^a	56	19	4.23
				145.4	56	28	

表 2 (续)

N-乙基卡西酮 51553-17-4	N-ethylcathinone	-	178.1	160.3 ^a	75	19	3.56
				132.1	75	26	
1-苯基-2-甲氨基-1-丁酮 408332-79-6	1-Phenyl-2-methylaminobutan-1-one	buphedrone	178.2	132.1 ^a	80	27	3.70
				91.1	80	28	
1-苯基-2-甲氨基-1-丁醇 63991-28-6	Buphedrone ephedrine metabolite	-	180.1	162.1 ^a	60	19	3.23
				133.2	60	30	
N-乙基卡西酮麻黄碱代谢物 63401-08-1	N-ethylcathinone ephedrine metabolite	-	180.1	162.0 ^a	60	21	3.29
				147.2	60	29	
1-苯基-2-甲氨基-1-戊酮去甲麻黄碱代谢物	Pentedrone norephedrine metabolite	-	180.1	162.3 ^a	40	14	3.88
				91.3	40	35	
4-甲基麻黄碱 552-79-4	4-Methylephedrine	-	180.3	162.1 ^a	55	18	3.94
				147.3	55	29	
3,4-二甲基甲卡西酮去甲麻黄碱代谢物	3,4-Dimethylmethcathinone norephedrine metabolite	-	180.3	104.9 ^a	50	36	4.33
				114.9	50	48	
4-甲氧基甲卡西酮去甲伪麻黄碱代谢物	Methedrone norpseudoephedrine metabolite	-	182.0	164.2 ^b	50	15	2.36
				147.1	50	26	
4-氟甲卡西酮 447-40-5	1-(4-Fluorophenyl)-2-methylaminopropan-1-one	4-FMC	182.2	164.0 ^a	70	20	3.23
				149.0	70	30	
3-氟甲卡西酮 1346600-40-5	3-Fluoromethcathinone	3-FMC	182.2	164.0 ^a	63	30	3.34
				149.1	63	28	
3-氟甲卡西酮麻黄碱代谢物	3-Fluoroephedrine ephedrine metabolite	-	184.3	166.1 ^a	57	19	3.42
				151.1	57	29	
1-苯基-2-甲氨基-1-戊酮 879722-57-3	1-Phenyl-2-methylaminopentan-1-one	pentedrone	192.1	132.1 ^a	70	27	4.43
				161.2	70	20	
3,4-二甲基甲卡西酮 1082110-00-6	1-(3,4-Dimethylphenyl)-2-methylaminopropan-1-one	3,4-DMMC	192.1	159.4 ^a	75	32	4.90
				174.0	75	20	
4-乙基甲卡西酮 1391053-87-4	4-Ethylmethcathinone	-	192.2	146.0 ^a	65	25	5.03
				159.0	65	28	
4-甲基乙卡西酮 1225617-18-4	4-Methylethcathinone	4-MEC	192.2	174.0 ^a	75	21	4.26
				146.0	75	26	
4-甲基-N-乙基-去甲麻黄碱 1340234-30-1	4-Methyl-N-ethyl-norephedrine	-	194.1	176.1 ^a	65	18	4.24
				146.9	65	31	
4-甲氧基甲卡西酮 530-54-1	1-(4-Methoxyphenyl)-2-methylaminopropan-1-one	methedrone	194.2	176.2 ^b	69	17	3.51
				161.1	69	30	
1-苯基-2-(N-吡咯烷基)-1-丙酮 92040-10-3	1-Phenyl-2-(n-pyrrolidinyl)-1-propanone	α -PPP	204.2	105.2 ^b	70	33	3.63
				97.9	70	36	
3,4-亚甲二氧基甲卡西酮 186028-79-5	3,4-Methylenedioxy-N-methylcathinone	methylone	208.2	160.0 ^a	63	24	3.13
				190.2	63	18	
1-苯基-2-(N-吡咯烷基)-1-丁酮 13415-82-2	1-Phenyl-2-(1-pyrrolidinyl)butan-1-one	α -PBP	218.4	91.0 ^a	75	37	4.25
				112.0	75	39	

表 2 (续)

2-二甲氨基-1-[3,4-(亚甲二氧基)苯基]-1-丙酮 132367-76-1	1-(3,4-Methylenedioxyphenyl)-2-dimethylaminopropan-1-one	dimethylone	222.1	147.0 ^a	60	25	5.04
				72.1	60	30	
2-甲氨基-1-[3,4-(亚甲二氧基)苯基]-1-丁酮 802575-11-7	1-(3,4-Methylenedioxyphenyl)-2-methylaminobutan-1-one	butylone	222.3	174.1 ^a	86	27	3.87
				204.3	86	18	
3,4-亚甲二氧基乙卡西酮 1112937-64-0	1-(3,4-Methylenedioxyphenyl)-2-ethylaminopropan-1-one	ethylone	222.3	174.1 ^a	78	27	3.63
				204.3	78	19	
1-苯基-2-(N-吡咯烷基)-1-戊酮 14530-33-7	1-Phenyl-2-(1-pyrrolidinyl)pentan-1-one	α -PVP	232.3	91.1 ^a	90	35	5.02
				161.3	90	26	
1-(1,3-苯并二恶英-5-基)-2-(甲氨基)-1-戊酮 17763-01-8	Pentylone	-	236.4	218.1 ^a	60	19	4.66
				188.2	60	24	
2-乙氨基-1-[3,4-(亚甲二氧基)苯基]-1-丁酮 17764-18-0	Eutylone	-	236.4	188.1 ^a	70	28	4.18
				161.0	70	30	
1-(4-甲基苯基)-2-(N-吡咯烷基)-1-戊酮 1147-62-2	Pyrovalerone	-	246.2	175.2 ^a	60	26	5.95
				119.0	60	37	
1-[3,4-(亚甲二氧基)苯基]-2-(N-吡咯烷基)-1-丙酮 783241-66-7	1-(3,4-Methylenedioxyphenyl)-2-(1-pyrrolidinyl)propan-1-one	MDPPP	248.4	147.3 ^a	90	33	3.80
				177.2	90	27	
1-[3,4-(亚甲二氧基)苯基]-2-(N-吡咯烷基)-1-丁酮 784985-33-7	1-(3,4-Methylenedioxyphenyl)-2-(1-pyrrolidinyl)butan-1-one	MDPBP	262.1	161.3 ^a	100	33	4.37
				112.1	100	36	
1-(2,3-二氢苯并呋喃-5-基)-2-(吡咯烷基)-1-戊酮 872621-92-3	1-(2,3-Dihydrobenzofuran-5-yl)-2-(pyrrolidin-1-yl)pentan-1-one	5-DBFPV	274.2	126.4 ^a	95	31	5.49
				133.2	95	44	
亚甲基二氧吡咯戊酮 687603-66-3	Methylenedioxyprovalerone	MDPV	276.0	135.1 ^a	100	35	5.32
				126.3	100	36	
1-萘基-2-(N-吡咯烷基)-1-戊酮 850352-11-3	Naphyrone	-	282.3	141.4 ^a	65	37	7.05
				126.1	65	44	
1-(4-氟苯基)-2-(N-吡咯烷基)-1-辛酮	4-Fluoro- α -pop	-	292.3	109.0 ^a	80	35	7.97
				168.4	80	37	
甲卡西酮-d ₃	Methcathinone-d ₃	-	167.3	131.1	58	30	2.85
4-甲基甲卡西酮-d ₃	Mephedrone-d ₃	-	181.2	163.1	65	19	4.02
4-甲基麻黄碱-d ₃	4-Methylephedrine-d ₃	-	183.3	165.4	40	16	3.94
3,4-亚甲二氧基甲卡西酮-d ₃	Methylone-d ₃	-	211.2	163.3	65	27	3.23

表 2 (续)

3,4-亚甲二氧基乙卡西酮-d ₅	Ethylone-d ₅	-	227.3	151.4	81	39	3.59
1-苯基-2-(N-吡咯烷基)-1-戊酮-d ₈	α -Pyrrolidinovalerophenone-d ₈	-	240.4	91.0	85	32	5.12
°为定量离子对。							

6.1.2.2 进样

分别吸取案件样品、空白样品和添加样品提取液，按照6.1.2.1规定的条件进样分析。

6.1.2.3 记录

记录各样品中目标物可疑色谱峰的保留时间和离子对丰度比。方法检出限参见附录A。

6.1.2.4 定性判断依据

以保留时间、质谱特征碎片离子峰和相对丰度比作为定性判断依据。

如果案件样品中出现目标物的两对定性离子对的色谱峰，保留时间与添加样品中相应标准物质的色谱峰保留时间比较，相对误差在 $\pm 2.5\%$ 内，且定性离子对丰度比与浓度相近添加样品的离子对丰度比之相对误差不超过表3规定的范围，则可判定案件样品中存在该种目标物。

表3 相对离子对丰度比的最大允许相对误差

单位为百分数 (%)

相对离子对丰度比	>50	>20~50	>10~20	≤ 10
允许的相对误差	± 20	± 25	± 30	± 50

6.2 定量分析

6.2.1 分析方法

采用内标-工作曲线法或内标-单点校正法定量分析。

6.2.2 样品前处理

取案件样品血液100 μ L两份，然后按照6.1.1.1的方法操作。

另取相同基质空白血液若干份，添加适量目标物，制得系列质量浓度或单点质量浓度的添加样品，与案件样品平行操作。

案件样品中目标物的质量浓度应在工作曲线的线性范围内。配制单点质量浓度的添加样品时，案件样品中目标物质量浓度需在该质量浓度的 $\pm 50\%$ 内。

6.2.3 仪器分析

6.2.3.1 仪器条件

仪器条件应符合6.1.2.1的规定。

6.2.3.2 进样

分别将案件样品、系列质量浓度的添加样品或单点质量浓度添加样品，按照6.1.2.1规定的条件进样分析。

6.2.4 记录与计算

6.2.4.1 记录

记录案件样品、系列质量浓度的添加样品或单点质量浓度添加样品中目标物及内标的峰面积值，然后计算含量。

6.2.4.2 内标-工作曲线法

在系列质量浓度的添加样品中，以目标物与内标的峰面积比(Y)为纵坐标、目标物质量浓度(C)为横坐标进行线性回归，得线性方程。

根据案件样品中目标物及内标的峰面积比，按公式(1)计算出案件样品中目标物的质量浓度。

$$C = \frac{Y - a}{b} \dots\dots\dots (1)$$

式中：

C ——案件样品中目标物的质量浓度，单位为纳克每毫升(ng/mL)；

Y ——案件样品中目标物与内标的峰面积比；

a ——线性方程的截距；

b ——线性方程的斜率。

6.2.4.3 内标-单点校正法

根据案件样品和添加样品中目标物与内标的峰面积比，按公式(2)计算出案件样品中目标物的质量浓度。

$$C = \frac{A \times c}{A'} \dots\dots\dots (1)$$

式中：

C ——案件样品中目标物的质量浓度，单位为纳克每毫升(ng/mL)；

A ——案件样品中目标物与内标的峰面积比；

A' ——添加样品中目标物与内标的峰面积比；

c ——添加样品中目标物的质量浓度，单位为纳克每毫升(ng/mL)。

6.2.5 计算相对相差

案件样品同时平行测定两份，双样相对相差按公式(3)计算：

$$RD = \frac{|C_1 - C_2|}{\bar{C}} \times 100\% \dots\dots\dots (2)$$

式中：

RD ——相对相差(%)；

C_1 、 C_2 ——两份案件样品平行定量测定的质量浓度，单位为纳克每毫升(ng/mL)；

\bar{C} ——两份案件样品中平行定量测定质量浓度的平均值 $(C_1 + C_2)/2$ ，单位为纳克每毫升(ng/mL)。

7 分析结果评价

7.1 定性分析结果评价

7.1.1 阴性结果评价

阴性结果评价包括：

- a) 如果案件样品中仅检出内标，未检出 37 种卡西酮类新精神活性物质及其代谢物成分，则阴性结果可靠；
- b) 如果案件样品中未检出内标，则阴性结果不可靠，应按照 6.1 的规定重新检验。

7.1.2 阳性结果评价

阳性结果评价包括：

- a) 如果案件样品中检出卡西酮类新精神活性物质及其代谢物成分且空白样品无干扰，则阳性结果可靠；
- b) 如果案件样品中检出卡西酮类新精神活性物质及其代谢物成分且空白样品亦呈阳性，则阳性结果不可靠，应按照 6.1 的规定重新检验。

7.2 定量分析结果评价

两份案件样品的相对相差不超过20%(腐败检材不超过30%)时，结果按两份案件样品的平均值计算，否则应重新测定。

附 录 A
(资料性)

血液中 37 种卡西酮类新精神活性物质及其代谢物的线性范围、线性方程、相关系数、检出限及定量限

血液中 37 种卡西酮类新精神活性物质及其代谢物的线性范围、线性方程、相关系数、检出限及定量限见表 A.1。

表 A.1 血液中 37 种卡西酮类新精神活性物质及其代谢物的线性范围、线性方程、相关系数、检出限及定量限

目标物	线性范围 ng/mL	线性方程	相关系数 r	检出限 ng/mL	定量限 ng/mL
卡西酮	1-200	$y = 0.0011x + 0.0017$	0.9996	0.5	1
甲卡西酮	1-200	$y = 0.0022x + 0.0114$	0.9978	0.5	1
2-氨基-1-[3,4-(亚甲二氧基)苯基]-1-丁酮	1-200	$y = 0.0157x + 0.0142$	0.9997	0.5	1
1-苯基-2-氨基-1-丁酮	1-200	$y = 0.0029x + 0.0022$	0.9999	0.5	1
1-苯基-2-氨基-1-丁醇	2-200	$y = 0.051x + 0.0478$	0.9983	0.5	2
3,4-二甲基甲卡西酮	1-200	$y = 0.0087x - 0.0109$	0.9986	0.5	1
3,4-二甲基甲卡西酮去甲麻黄碱代谢物	2-200	$y = 0.0019x + 9E-05$	0.9990	0.5	2
3,4-亚甲二氧基甲卡西酮	1-200	$y = 0.0159x - 0.0477$	0.9974	0.5	1
3,4-亚甲二氧基乙卡西酮	1-200	$y = 0.0138x + 0.0055$	0.9980	0.5	1
N-乙基卡西酮	1-200	$y = 0.0082x + 0.0299$	0.9981	0.5	1
N-乙基卡西酮麻黄碱代谢物	2-200	$y = 0.0474x + 0.0131$	0.9968	0.5	2
2-乙氨基-1-[3,4-(亚甲二氧基)苯基]-1-丁酮	1-200	$y = 0.0141x - 0.0172$	0.9988	0.5	1
4-乙基甲卡西酮	1-200	$y = 0.0057x + 0.004$	0.9997	0.5	1
4-氟甲卡西酮	1-200	$y = 0.0037x + 0.0222$	0.9982	0.5	1
3-氟甲卡西酮	1-200	$y = 0.0427x + 0.016$	0.9973	0.5	1
3-氟甲卡西酮麻黄碱代谢物	2-200	$y = 0.0421x - 0.0026$	0.9972	0.5	2
4-甲氧基甲卡西酮	1-200	$y = 0.0153x + 0.0044$	0.9994	0.5	1
4-甲氧基甲卡西酮去甲伪麻黄碱代谢物	2-200	$y = 0.003x + 0.0102$	0.9984	0.5	2
4-甲基麻黄碱	2-200	$y = 0.0512x + 0.0305$	0.9982	0.5	2
1-(4-氟苯基)-2-(N-吡咯烷基)-1-辛酮	1-200	$y = 0.004x + 0.0073$	0.9996	0.5	1
2-二甲氨基-1-[3,4-(亚甲二氧基)苯基]-1-丙酮	1-200	$y = 0.0028x + 0.0026$	0.9996	0.5	1
4-甲基甲卡西酮	1-200	$y = 0.0108x - 0.0171$	0.9992	0.5	1
1-萘基-2-(N-吡咯烷基)-1-戊酮	1-200	$y = 0.0057x - 0.0009$	0.9976	0.5	1
1-(4-甲基苯基)-2-(N-吡咯烷基)-1-戊酮	1-200	$y = 0.0028x + 0.0083$	0.9975	0.5	1
1-(1,3-苯并二恶英-5-基)-2-(甲基)-1-戊酮	1-200	$y = 0.0024x + 0.0033$	0.9981	0.5	1
1-苯基-2-氨基-1-戊酮	1-200	$y = 0.0056x - 0.0102$	0.9991	0.5	1
1-苯基-2-氨基-1-戊酮去甲麻黄碱代谢物	2-200	$y = 0.0402x + 9E-05$	0.9981	0.5	2
1-苯基-2-(N-吡咯烷基)-1-戊酮	1-200	$y = 0.0103x + 0.0113$	0.9987	0.5	1
1-苯基-2-(N-吡咯烷基)-1-丙酮	1-200	$y = 0.0117x + 0.0077$	0.9986	0.5	1
1-苯基-2-(N-吡咯烷基)-1-丁酮	1-200	$y = 0.003x + 0.0023$	0.9974	0.5	1
1-(2,3-二氢苯并呋喃-5-基)-2-(吡咯烷-1-基)戊烷-1-酮	1-200	$y = 0.0171x + 0.0194$	0.998	0.5	1
4-甲基乙卡西酮	1-200	$y = 0.022x - 0.0473$	0.9979	0.5	1

表 A.1 (续)

4-甲基-N-乙基-去甲麻黄碱	2-200	$y = 0.0407x - 0.0206$	0.9986	0.5	2
1-[3,4-(亚甲二氧基)苯基]-2-(N-吡咯烷基)-1-丁酮	1-200	$y = 0.0067x + 0.0049$	0.9988	0.5	1
1-[3,4-(亚甲二氧基)苯基]-2-(N-吡咯烷基)-1-丙酮	1-200	$y = 0.007x - 0.0061$	0.9992	0.5	1
2-甲基甲卡西酮	1-200	$y = 0.0054x + 0.0136$	0.9988	0.5	1
亚甲基二氧吡咯戊酮	1-200	$y = 0.0022x + 0.0036$	0.9989	0.5	1