



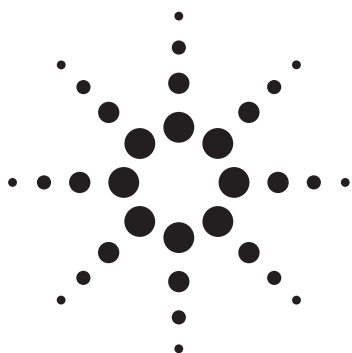
采用 GC/MS 鉴定熏香混合物中的 合成大麻素

应用文集

The Measure of Confidence

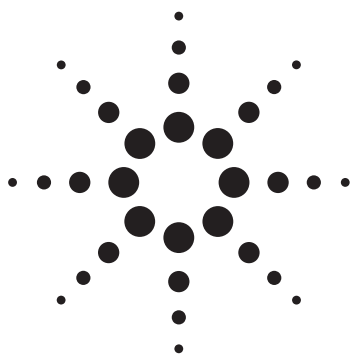


Agilent Technologies



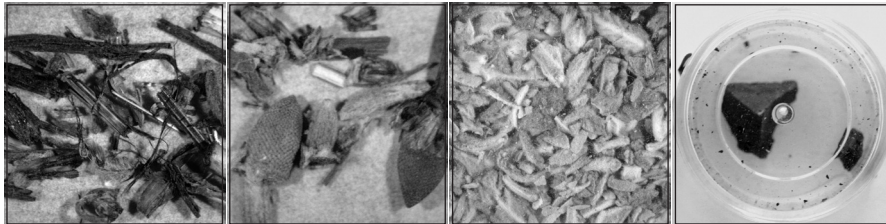
目录

前言	3
样品前处理	4
气相色谱及质谱条件	5
评估用合成大麻素的 GC/MS 总离子流图	6
JWH-007	7
JWH-015	8
JWH-018	9
JWH-018 1-甲基己基同系物	10
JWH-018 6-甲氧基吡啶类似物	11
JWH-019	12
JWH-073	13
JWH-073 2-甲基丁基同系物	14
JWH-081	15
JWH-098	16
JWH-122	17
JWH-133	18
JWH-200	19
JWH-201	20
JWH-203	21
JWH-210	22
JWH-250	23
JWH-251	24
JWH-302	25
JWH-398	26
HU-210	27
HU-210-二甲基硅衍生物	28
HU-211	29
HU-211-二甲基硅衍生物	30
HU-308	31
HU-308-一甲基硅衍生物	32
HU-331	33
HU-331-三甲基硅衍生物	34
CB-25	35
CB-25-二甲基硅衍生物	36
CB-52	37
CB-52-二甲基硅衍生物	38
CP47,497 (C7 类似物)	39
CP47,497 (C7 类似物)-二甲基硅衍生物	40
CP47,497 (C8 类似物)	41
CP47,497 (C8 类似物)-二甲基硅衍生物	42
CP55,940	43
CP55,940-三甲基硅衍生物	44
AM-694	45
AM-2201	46
RCS-4	47
RCS-8	48
WIN55,212-2	49
WIN55-212-3	50



采用 GC/MS 鉴定熏香混合物中的合成大麻素

应用文集



前言

作者：Fran Diamond，NMS 实验室化学技术主管

新近出现的合成大麻素为法律的实施和测试实验室带来一系列挑战，需要有合适的测试方法来检测这些新物质。这些新兴物质目前主要由中国加工并销往世界各地，但是仅有少数法规认证合成实验室能够不断研究这些大量使用的类似物质和同系物。分析实验室在获取用于阳性鉴定的纯净参比物质时面临困难。不同化学物质的庞大数量也成为执法部门阻止其分销和使用的障碍。这些都是合法药物。即使法规刚通过禁止某些药物使用的规定，另一些毒品又会层出不穷。我们知道现在大约有 30 种不同的化合物在使用和销售。这些化合物拥有不同化学性质的官能团，而这些官能团需要一种样品提取流程来提取所有的化学功能团。其中的一些新化合物具有极为有效的剂量，因此可能只是以痕量形式存在。这就需要有在大量共萃取物中分析复杂的色谱数据的能力。这些物质具有类似的色谱保留时间和质谱峰等结构信息。数据分析需要能够鉴定这类物质的细微差异，并能从复杂混合物中检测出这些物质。

安捷伦与 NMS 实验室的刑侦部门合作完成测试方法的开发和验证。40 年来，NMS 实验室一直以最先进的测试能力为临床毒理学和法医学测试树立标准典范，而这些是其他实验室没有或没能提供的。NMS 实验室作为国家参考实验室，其在测试、结果准确性、客户服务、科学专业技能和创新性方面的表现都是无法超越的。

样品前处理

均质化

这些合成大麻素的前处理首先需要制备纯化学品的丙酮溶液。接着将丙酮溶液喷射到用作模拟熏香材料的植物基质表面。然后将该材料风干。“香料”制造中最常用的材料是达米阿那。这种植物类材料柔软轻盈。其特性使其很难被碾压成均质材料来进行适当的代表性取样。我们曾经测试了多种方法，如使用研钵和研杵、草本磨床，甚至电动磨床和磨粉机进行碾压。这些方法都无法获得满意的结果。我们最终开发了一种研磨方法才获得满意的结果，即将 500 mg 的样品放在两张 5 英寸 x 5 英寸的砂纸片（100 目）中间，然后摩擦两张砂纸直到获得微小的研磨粉末。

萃取

这类化学品有各种不同的官能团，因此需要使用一种通用的萃取方法。我们采用了两个基本策略：一种酸/碱结合的萃取方法，甲醇处理后进行离心。酸/碱结合萃取法中，首先向 50-100 mg 的研磨样品中加入 1 mL 去离子水，然后加入 3 滴 10% HCl 进行酸化。接着加入 1 mL 萃取溶剂（95% 二氯甲烷/5% 异丙醇，v/v）并简单混合。离心样品，移出底部溶剂层，备用。向剩下的含水混合物中滴加了 2 滴浓缩的氢氧化铵溶液，再加入 1 mL 上述混合溶剂。在离心管中混合并离心，移出底层溶剂层，再与起始溶剂混合。然后将混合萃取物简单混合，并转移到自动进样器样品瓶中加盖密封。此时该混合物即可进行仪器分析。

衍生化

一些用作“K2/香料”的化学品包含活性极性官能团，如醇类、酚类、酰胺类和酮类，以天然形态存在的这些基团会对 GC/MS 法分析带来不利影响。为了提高灵敏度和检测能力，我们采用了一种保护这类极性基团的衍生化方法。

使用含 1% TMCS 的 BSTFA 进行衍生化。该方法操作流程如下：在室温下缓慢通入氮气以吹干上述萃取物。这些萃取物需要完全被吹干，任何残留的水或酒精都会中和衍生化试剂，影响衍生效果。接着加入 50 μ L SELECTRA-SIL[®]（含 1% TMCS 的 BSTFA）并加盖密封。该离心管在 70 °C 保温 30 分钟。冷却后，衍生化混合物转移至带 200 μ L 内插管的自动进样器样品瓶中加盖密封。此时该样品即可进行仪器分析。

气相色谱和质谱条件

气相色谱

Agilent 6890 气相色谱，带快速升温柱箱、自动进样器和样品盘

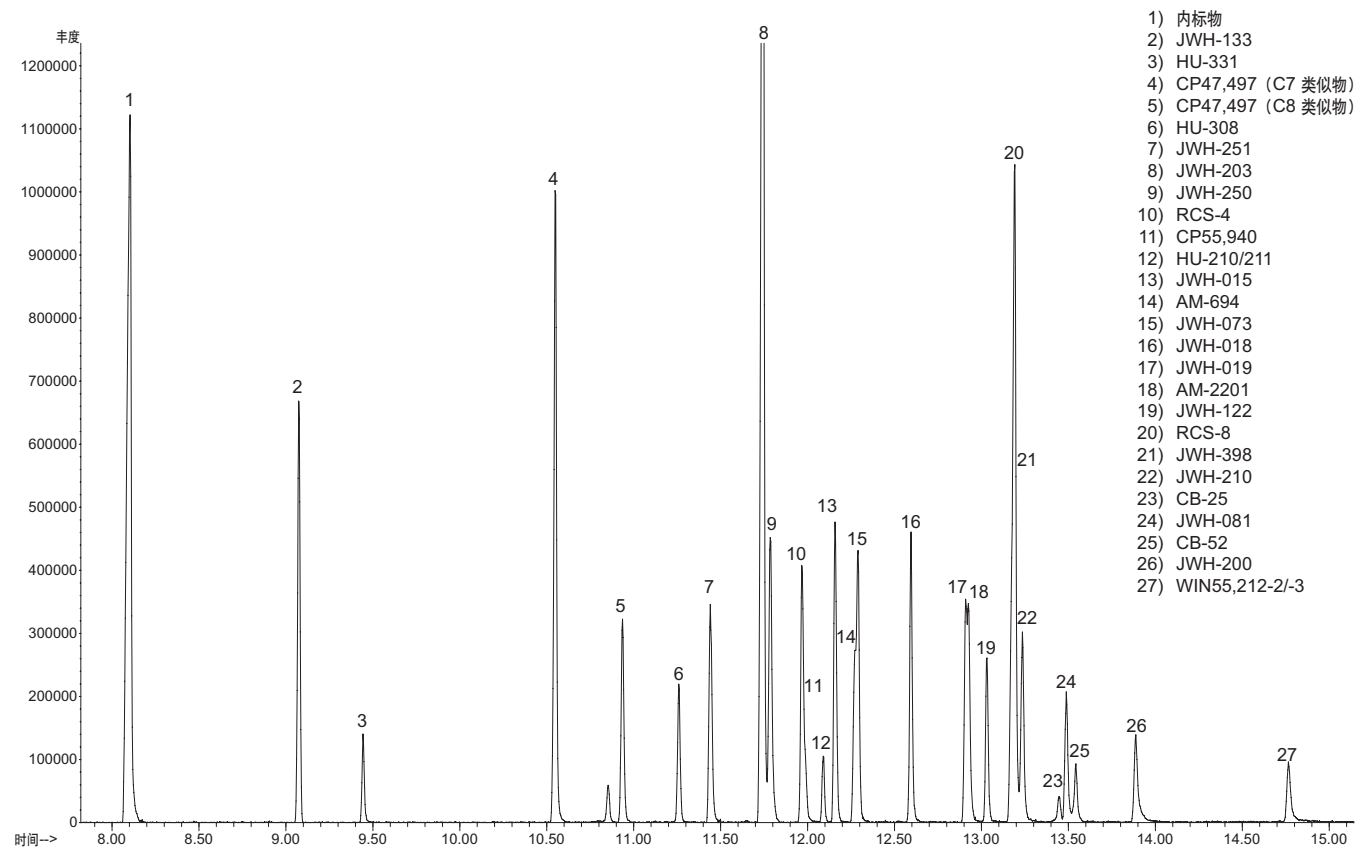
进样口	EPC 分流/不分流
模式	恒压
进样类型	不分流
进样量 (uL)	1.0
进样口温度 (°C)	265
进样口压力 (psig)	20.70
吹扫流量 (mL/min)	50
吹扫时间 (min)	0.30
载气类型	氦气

柱温箱	
电压 (VAC)	240
初始柱温 (°C)	50
初始柱箱保持时间 (min)	0
升温速率 (°C/min)	20
最终温度 (°C)	340
最终保持时间 (min)	2.0
总分析时间 (min)	16.50
平衡时间 (min)	0.1

色谱柱	
类型	DB-1
安捷伦部件号	128-1012
长度 (m)	12
直径 (mm)	0.200
膜厚 (um)	0.33
初始流量 (mL/min)	2.6

MSD	
安捷伦科技公司 5973 网络版	
真空泵	分子涡轮泵
调谐文件	Atune.U
模式	全扫描
溶剂延迟 (min)	1.5
EM 电压	Atune 电压
低质量数 (amu)	40
高质量数 (amu)	620
阈值	250
采样	1
四极杆温度 (°C)	150
离子源温度 (°C)	230
传输线温度 (°C)	300

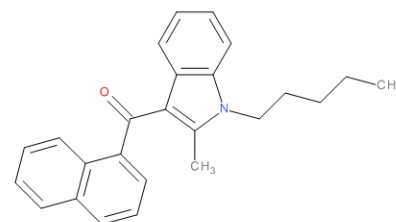
评估用合成大麻素的 GC/MS 总离子流图



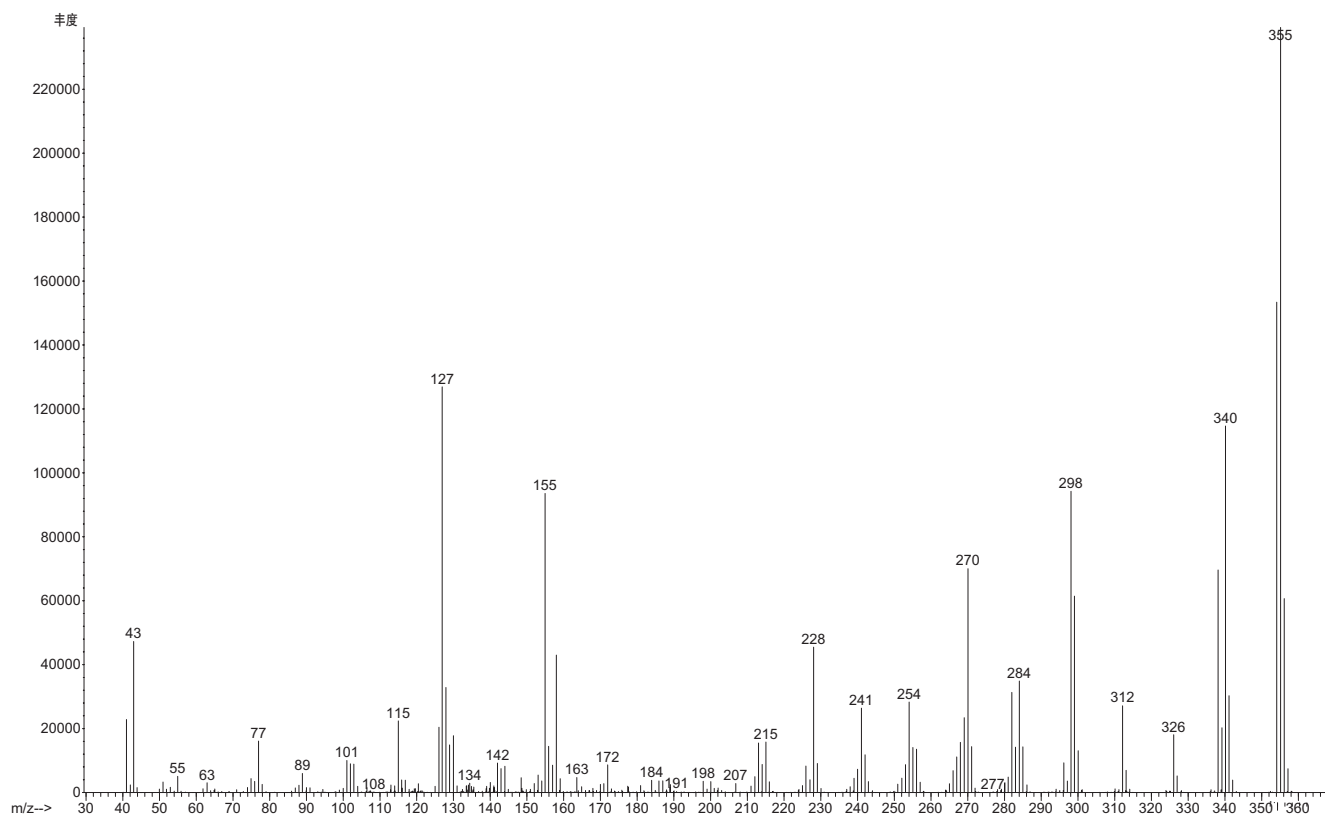
JWH-007

化学名称	1-戊基-2-甲基-3-(1-萘甲酰基)吲哚	
分子式	C ₂₅ H ₂₅ NO	
分子量	355.471	
主要的 GC/MS 离子	355.2, 354.2, 127.0, 340.1, 298.1	
分析用离子	目标离子	355
	定性离子-1	340
	定性离子-2	127
保留时间	12.97 min	
LOD	尚未确定	

分子结构:



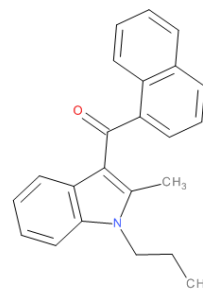
质谱图:



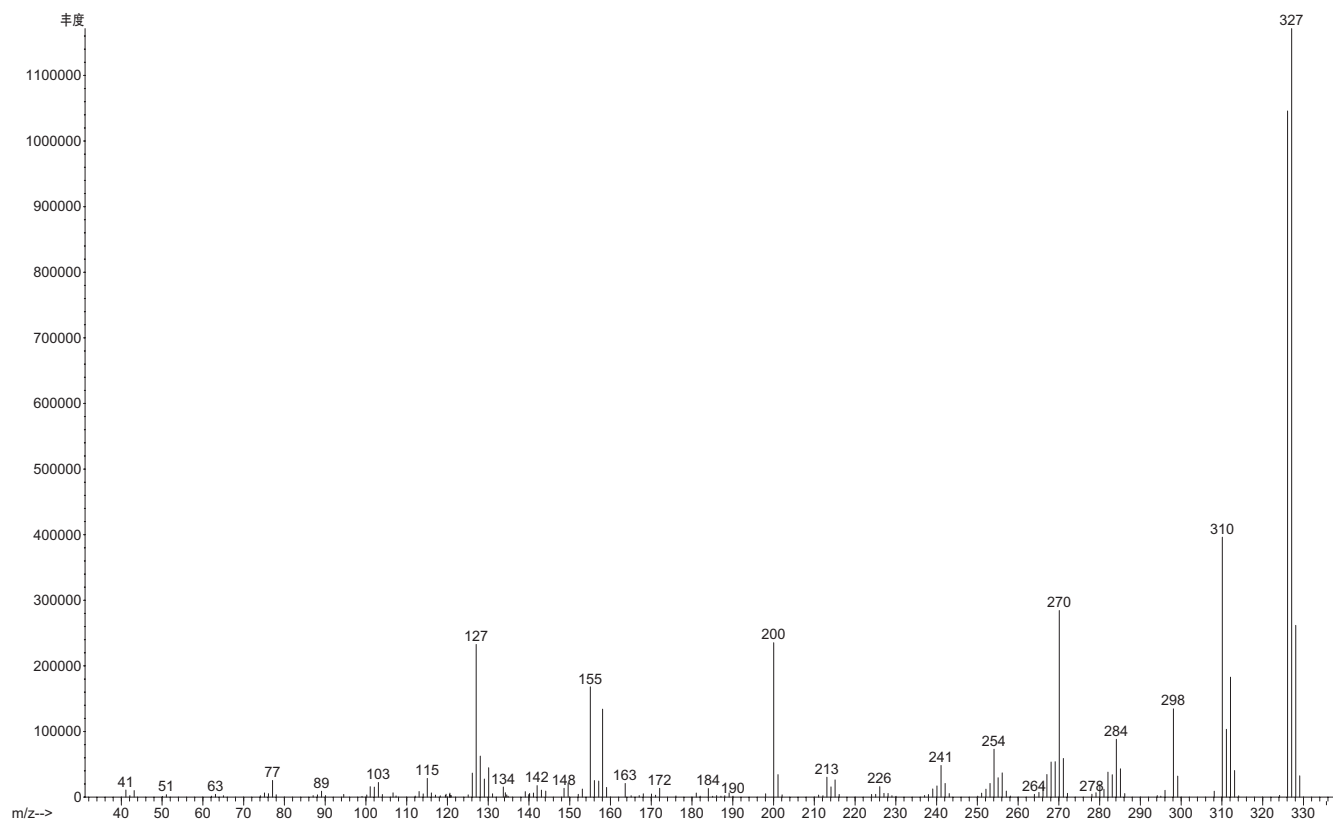
JWH-015

化学名称	(2-甲基-1-丙基-1H-吲哚-3-基)-1-萘甲酮	
分子式	C ₂₃ H ₂₁ NO	
分子量	327.16	
主要的 GC/MS 离子	327.3, 326.3, 310.3, 270.2, 200.2, 127.1	
分析用离子	目标离子	327.3
	定性离子-1	310.3
	定性离子-2	270.2
保留时间	12.62 min	
LOD	尚未确定	
其他说明	JWH-015 不进行衍生化。 JWH-015 和 JWH-073 是同分异构体。它们具有相似的 碎裂模式，只是保留时间略有不同。	

分子结构:



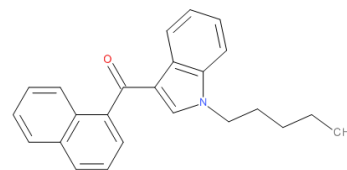
质谱图:



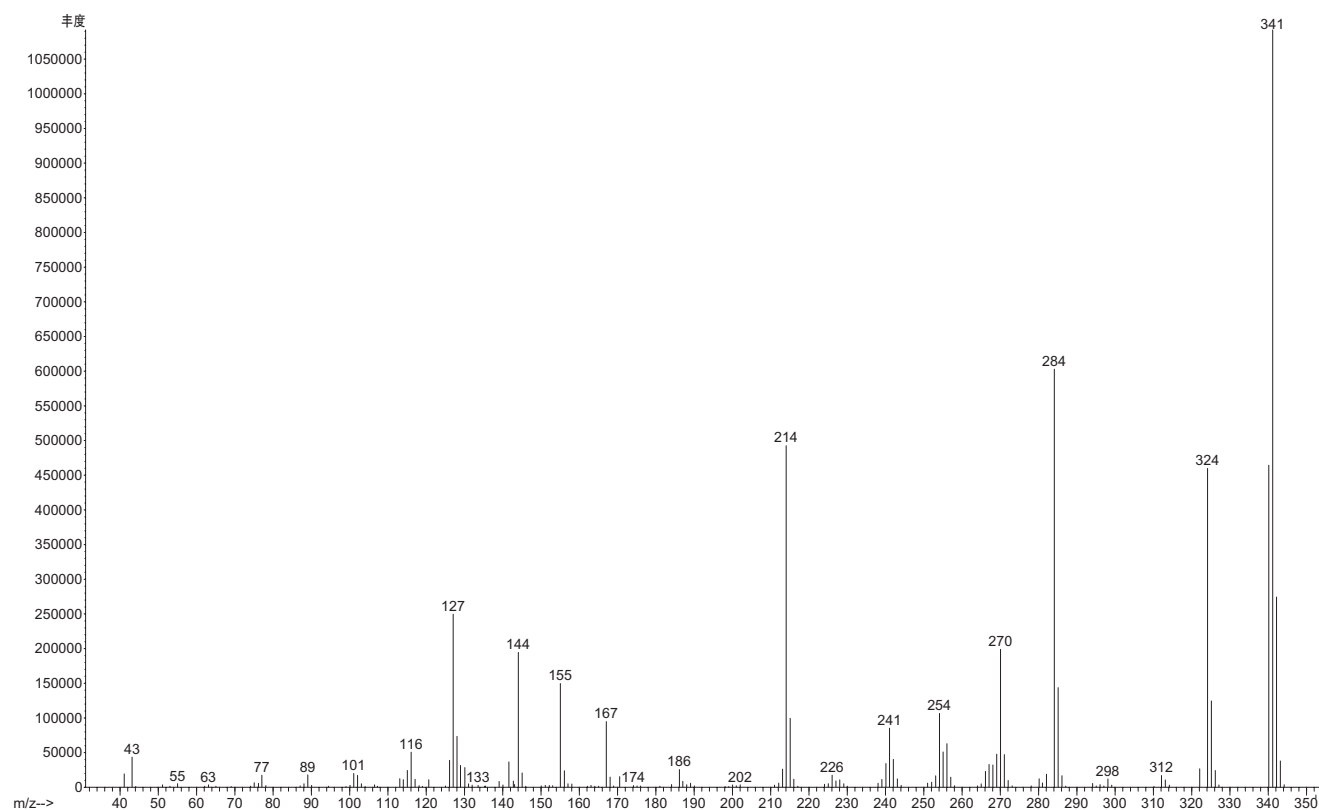
JWH-018

化学名称	萘-1-基-(1-戊基吡啶-3-基)甲酮	
分子式	C ₂₄ H ₂₃ NO	
分子量	341.18	
主要的 GC/MS 离子	341.3, 324.3, 284.2, 270.2, 214.2, 127.1	
分析用离子	目标离子	341.3
	定性离子-1	324.3
	定性离子-2	284.2
保留时间	13.05 min	
LOD	0.02 mg/g	
其他说明	JWH-018 不进行衍生化	

分子结构:



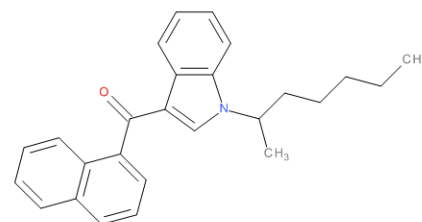
质谱图:



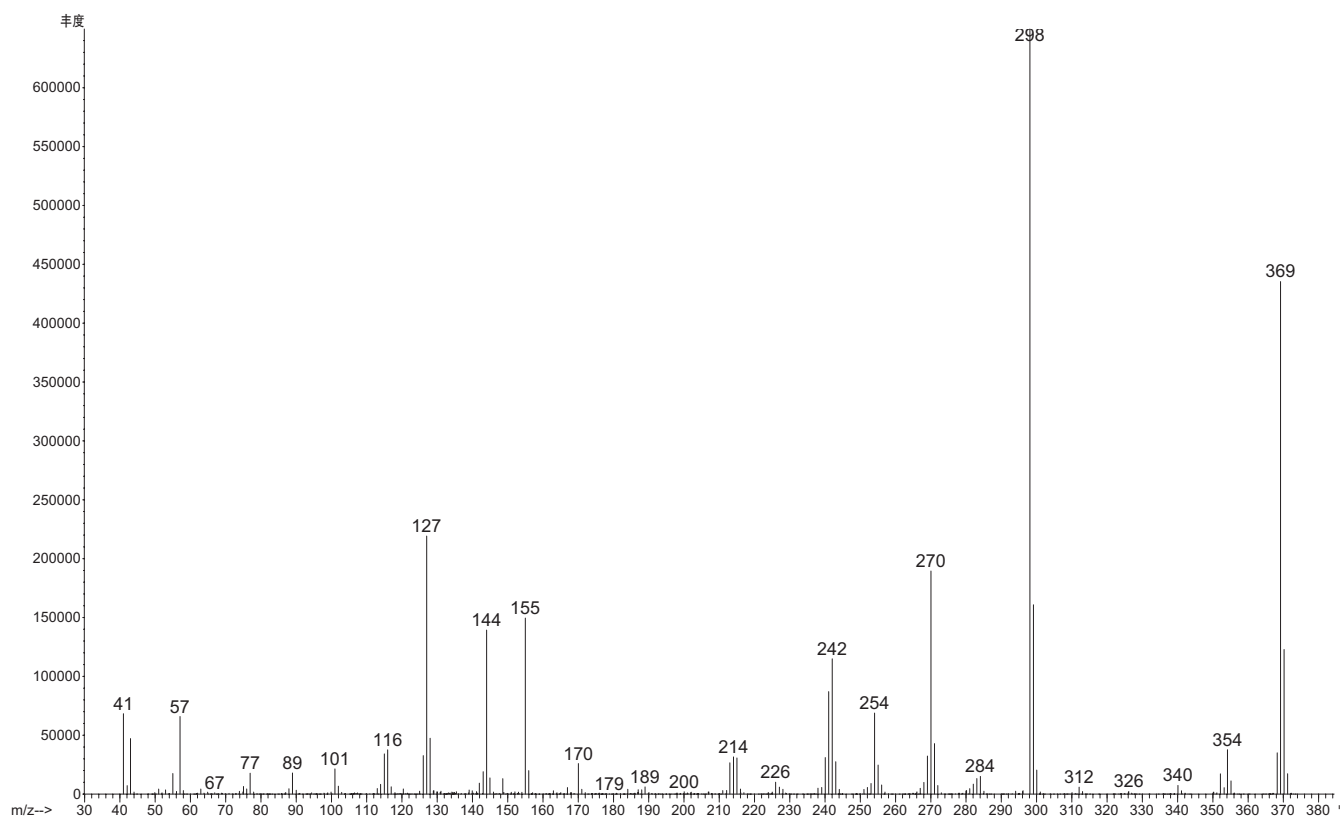
JWH-018 1-甲基己基同系物

化学名称	(1-(庚烷-2-基)-1H-吡啶-3-基)(萘-1-基)甲酮 (外消旋体)	
分子式	$C_{26}H_{27}NO$	
分子量	369.50	
主要的 GC/MS 离子	298.1, 369.2, 127.0, 270.1, 299.1	
分析用离子	目标离子	298
	定性离子-1	369
	定性离子-2	127
保留时间	12.94 min	
LOD	尚未确定	

分子结构:



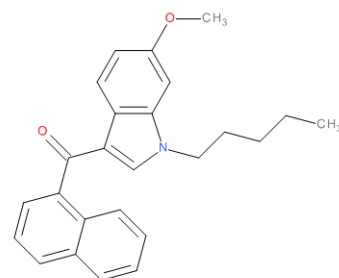
质谱图:



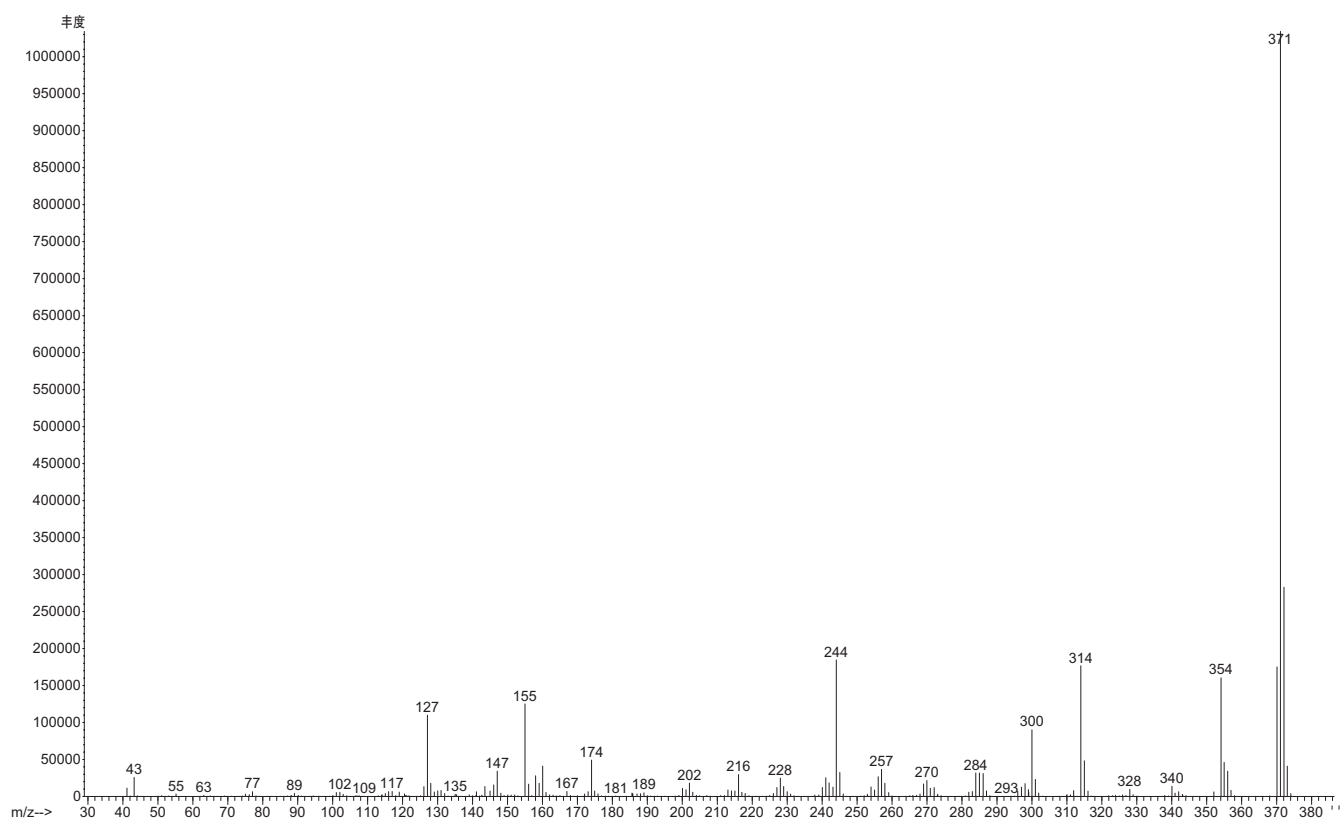
JWH-018 6-甲氧基吲哚类似物

化学名称	(6-甲氧基-1-戊基-1H-吲哚-3-基)(萘-1-基)-甲酮	
分子式	$C_{25}H_{25}NO_2$	
分子量	371.5	
主要的 GC/MS 离子	371.1, 372.1, 244.1, 370.1, 314.0	
分析用离子	目标离子	371
	定性离子-1	244
	定性离子-2	314
保留时间	13.68 min	
LOD	尚未确定	

分子结构:



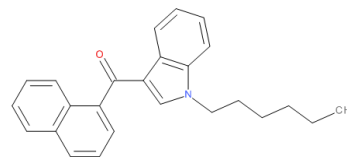
质谱图:



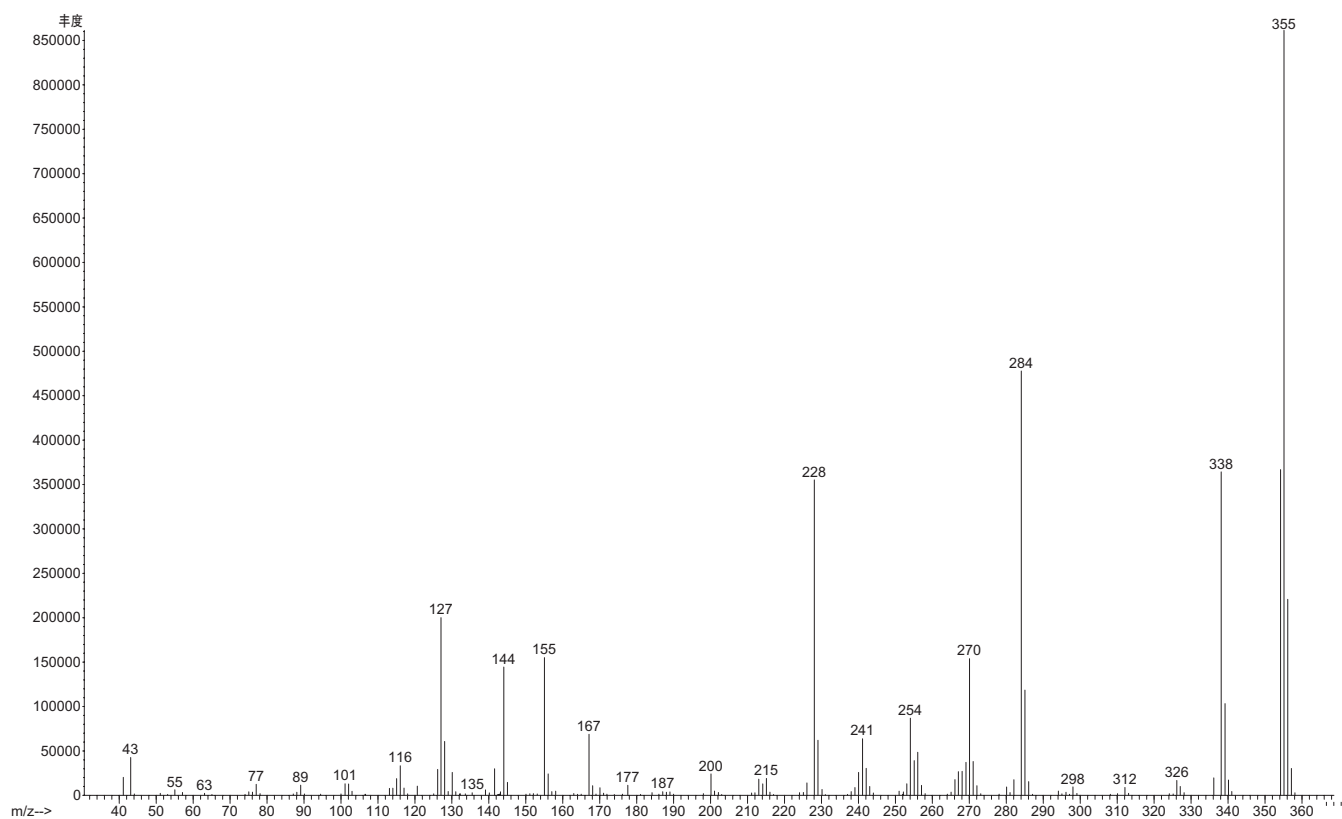
JWH-019

化学名称	萘-1-基-(1-戊基吡啶-3-基)甲酮	
分子式	C ₂₅ H ₂₅ NO	
分子量	355.19	
主要的 GC/MS 离子	355.3, 338.3, 284.2, 228.2, 127.1, 155.1	
分析用离子	目标离子	355.3
	定性离子-1	284.2
	定性离子-2	338.3
保留时间	13.37 min	
LOD	0.02 mg/g	
其他说明	JWH-019 不进行衍生化。JWH-019 与 JWH-122 是同分异构体，碎裂方式相似，只是保留时间略有不同。	

分子结构:



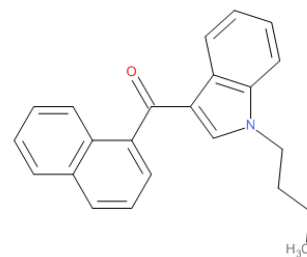
质谱图:



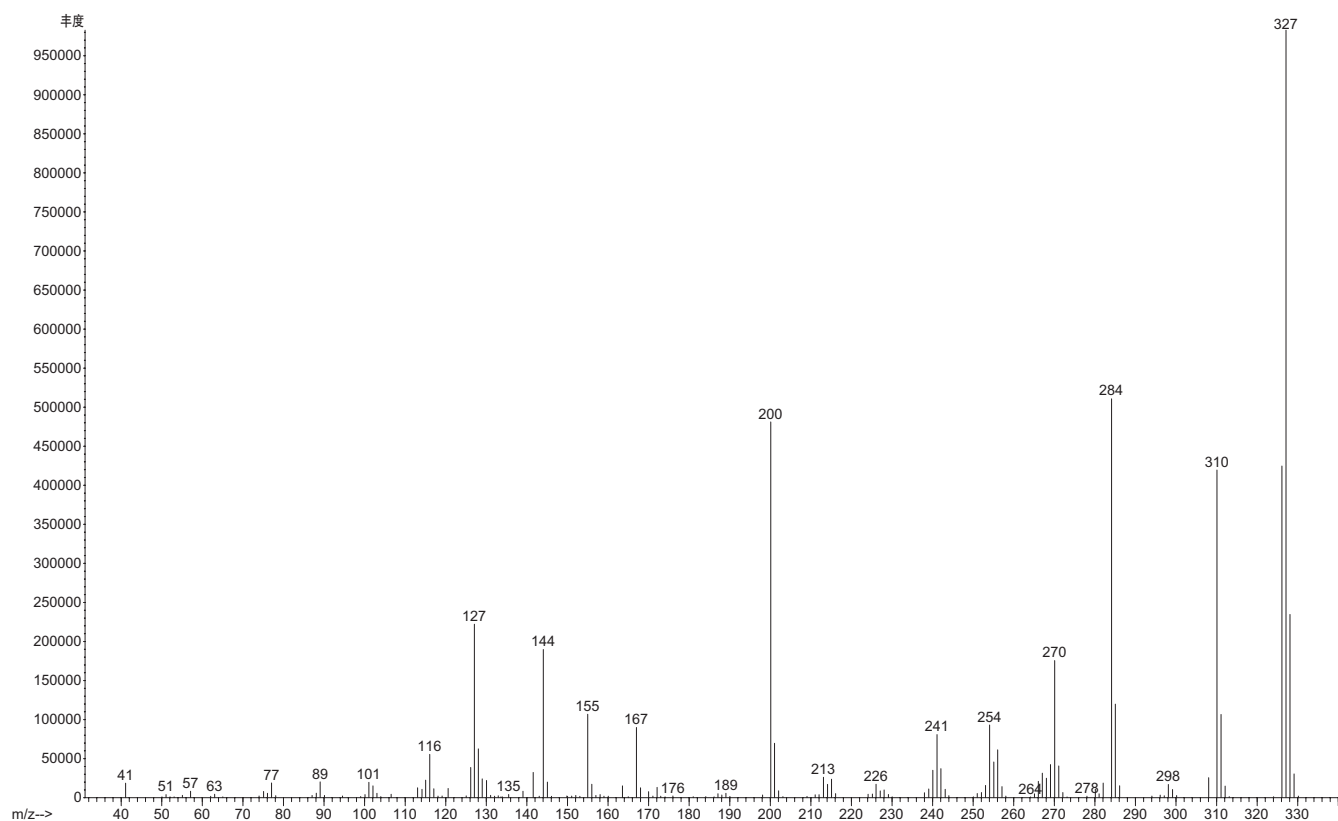
JWH-073

化学名称	1-丁基-3-(1-萘甲酰基)吲哚	
分子式	C ₂₃ H ₂₁ NO	
分子量	327.16	
主要的 GC/MS 离子	327.3, 310.3, 284.2, 200.2, 127.1, 144.1	
分析用离子	目标离子	327.3
	定性离子-1	310.3
	定性离子-2	284.2
保留时间	12.75 min	
LOD	0.02 mg/g	
其他说明	JWH-073 不进行衍生化。JWH-073 与 JWH-015 是结构异构体，碎裂方式相似，只是保留时间略有不同。	

分子结构:



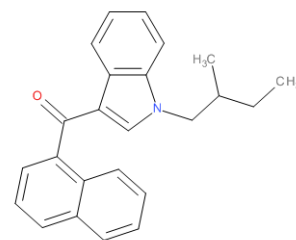
质谱图:



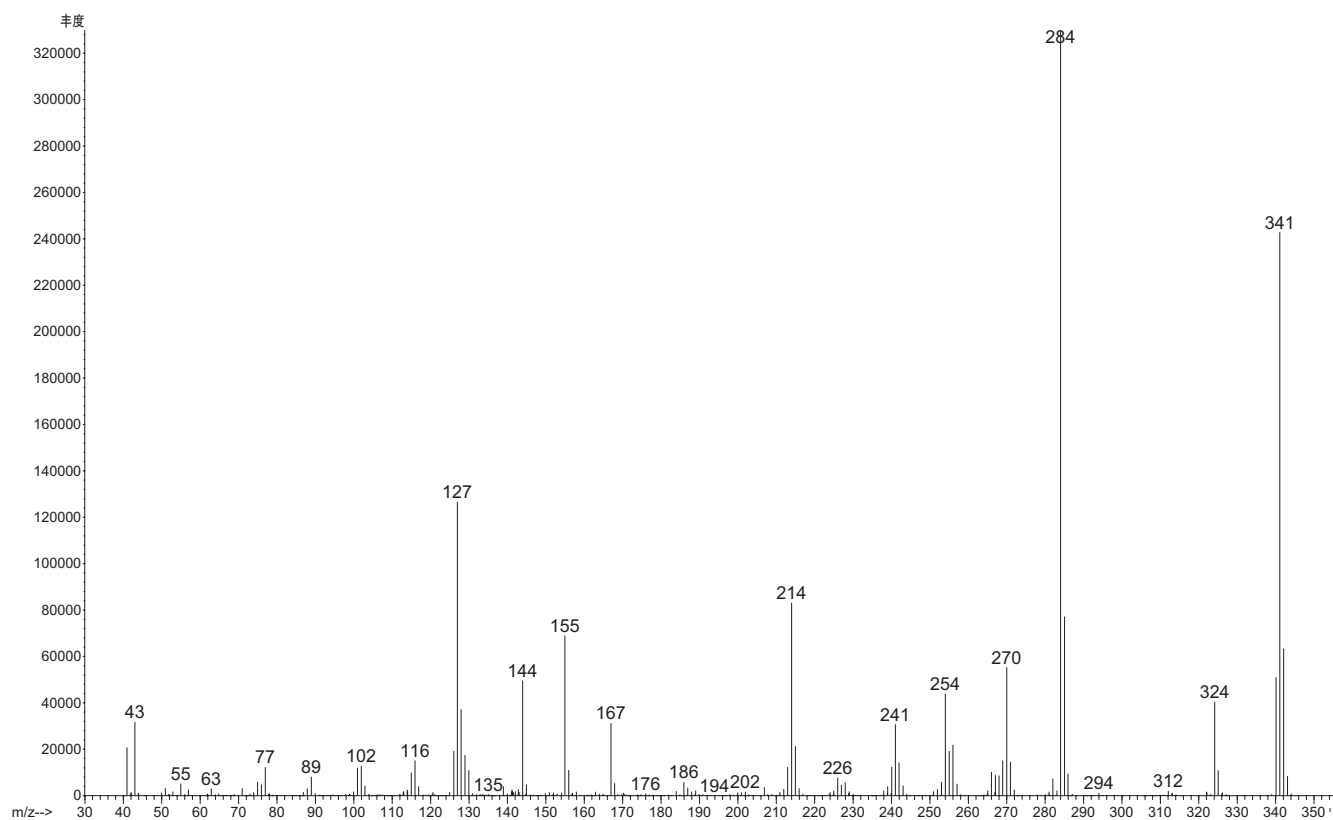
JWH-073 2-甲基丁基同系物

化学名称	N-(2-甲基丁基)-3-(1-萘甲酰基)-吡咯	
分子式	C ₂₄ H ₂₃ NO	
分子量	341.5	
主要的 GC/MS 离子	284.0, 341.1, 127.0, 214.0, 285.0	
分析用离子	目标离子	284
	定性离子-1	341
	定性离子-2	127
保留时间	12.65 min	
LOD	尚未确定	

分子结构:



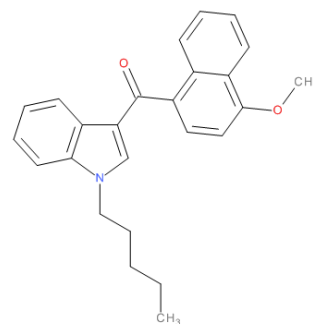
质谱图:



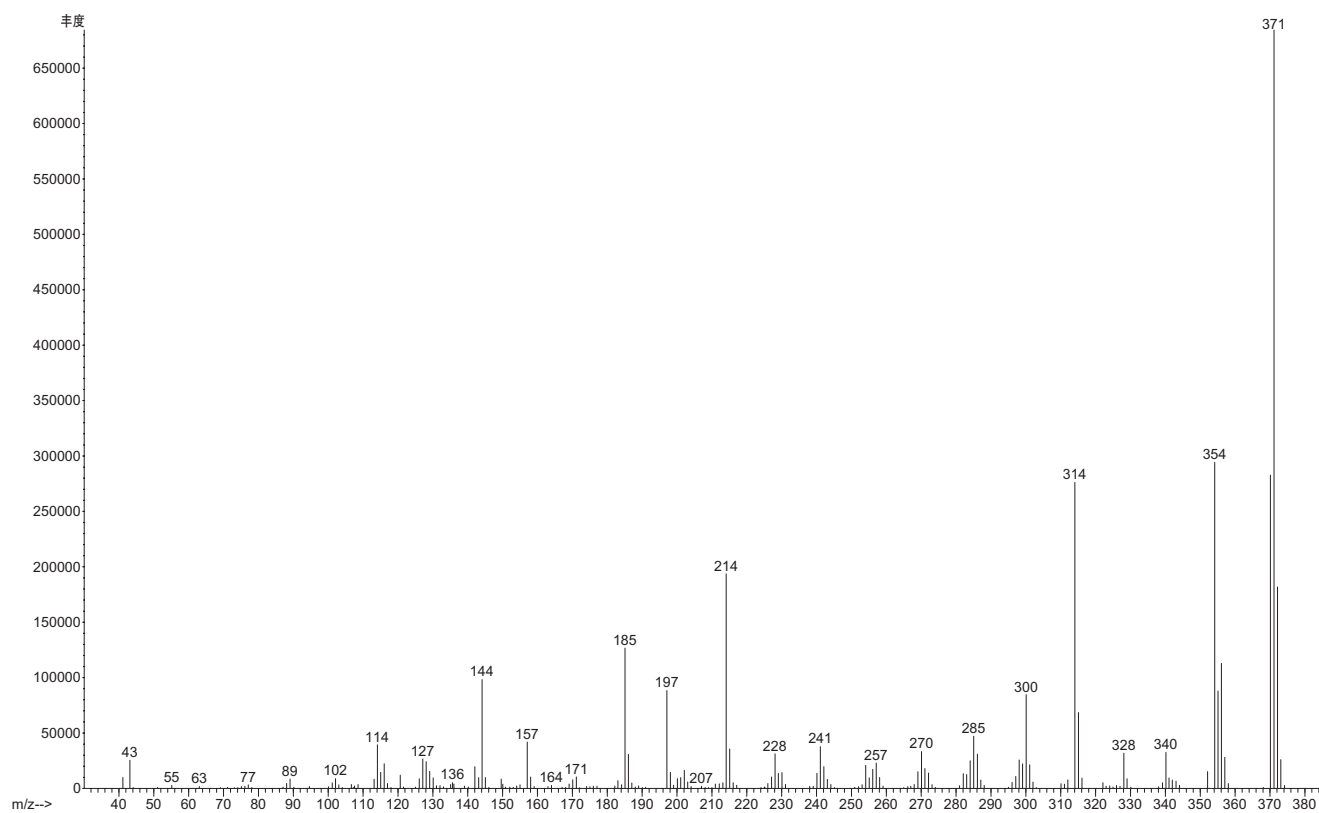
JWH-081

化学名称	1-戊基-3-(4-甲氧基苯甲酰基)吲哚	
分子式	$C_{25}H_{25}NO_2$	
分子量	371.19	
主要的 GC/MS 离子	371.3, 354.3, 314.3, 370.3, 214.2, 185.1	
分析用离子	目标离子	371.3
	定性离子-1	354.3
	定性离子-2	314.3
保留时间	13.99 min	
LOD	0.02 mg/g	
其他说明	JWH-081 不进行衍生化	

分子结构:



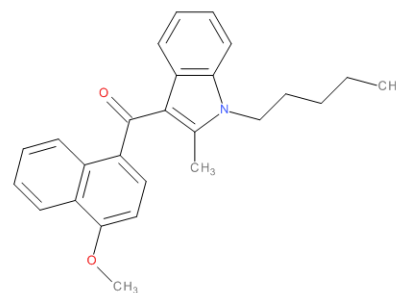
质谱图:



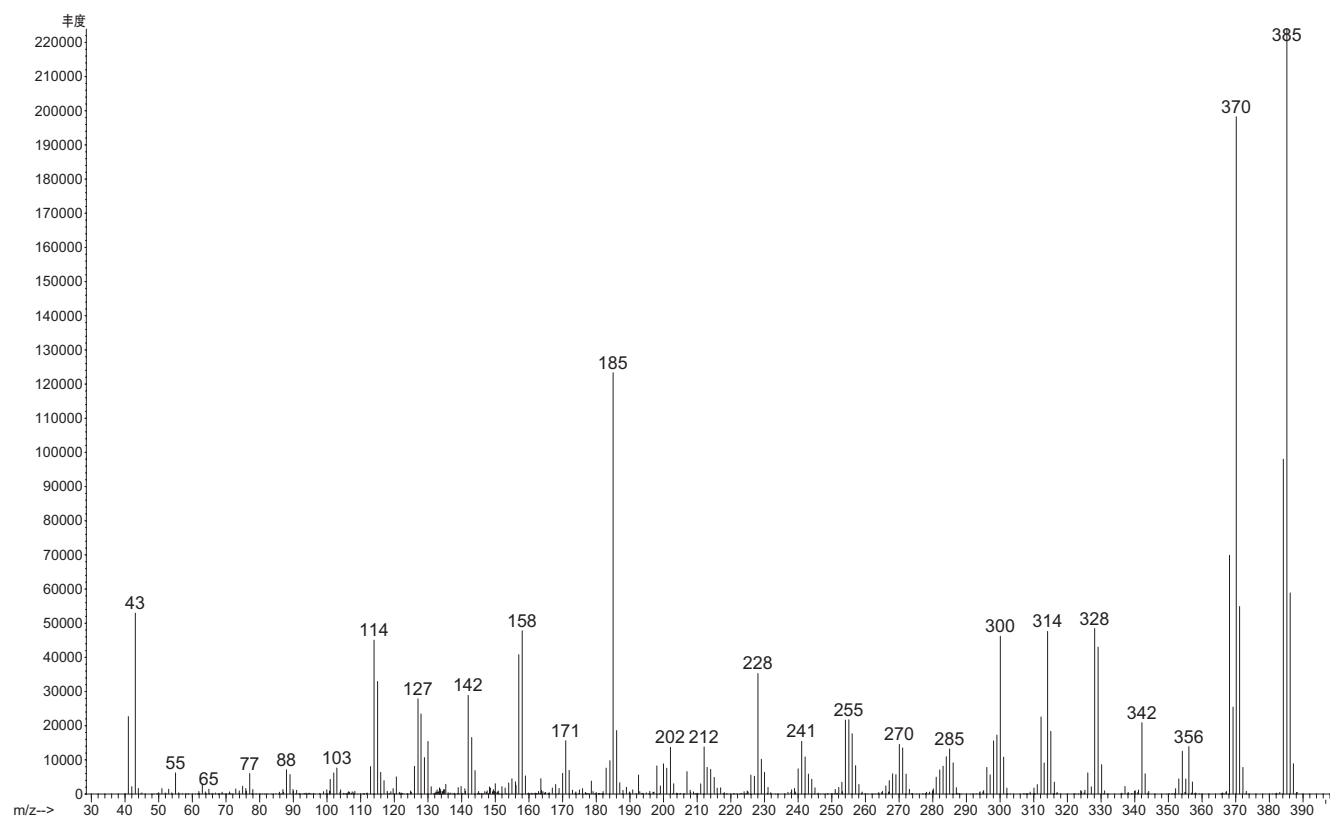
JWH-098

化学名称	4-甲氧基萘-1-基-(1-戊基-2-甲基吡咯-3-基) 甲酮	
分子式	$C_{26}H_{27}NO_2$	
分子量	385.497	
主要的 GC/MS 离子	385.2, 370.2, 185.0, 384.2, 368.2	
分析用离子	目标离子	385
	定性离子-1	370
	定性离子-2	185
保留时间	13.82 min	
LOD	尚未确定	

分子结构:



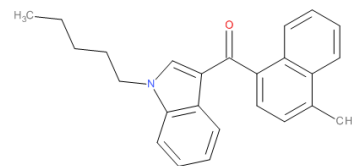
质谱图:



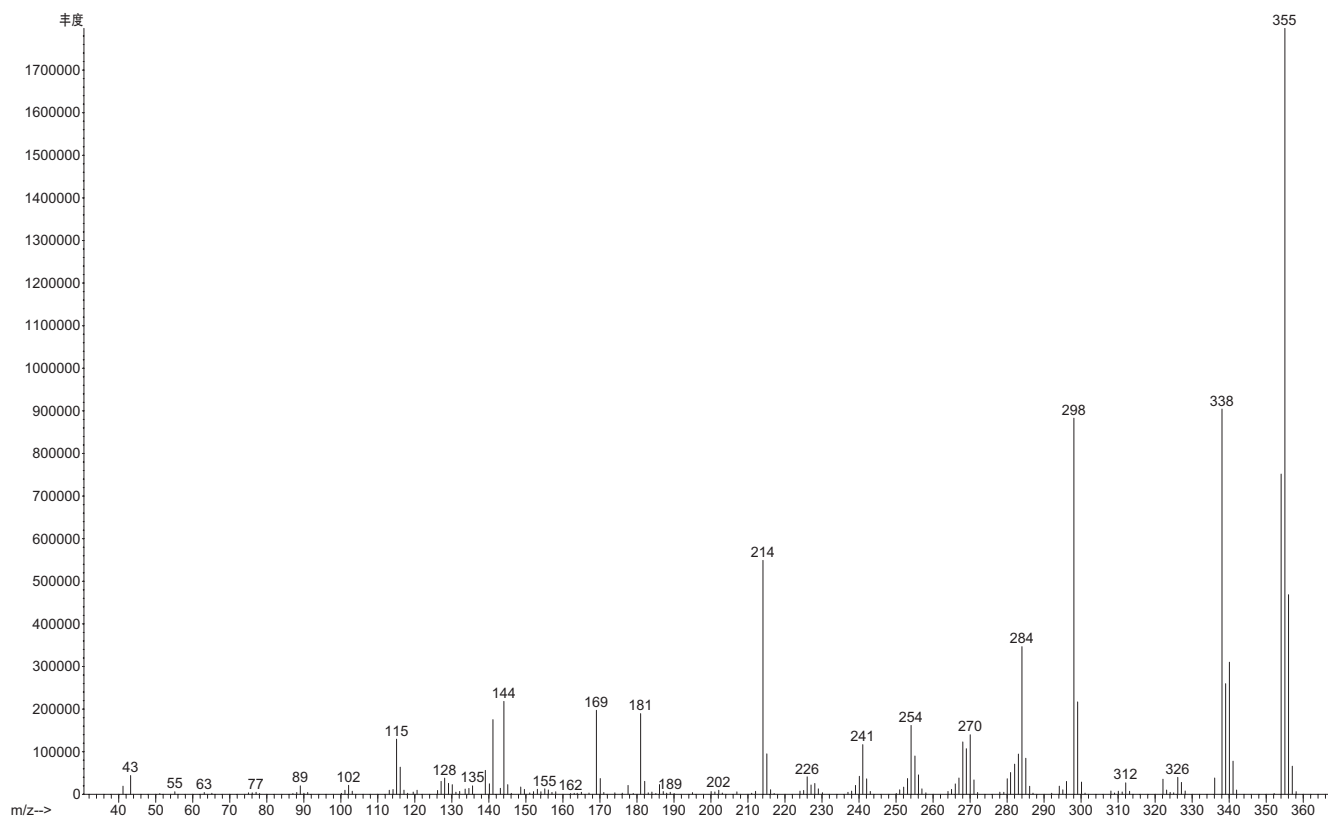
JWH-122

化学名称	(4-甲基-1-萘基)(1-戊基-1H-吲哚-3-基)甲酮	
分子式	C ₂₅ H ₂₅ NO	
分子量	355.19	
主要的 GC/MS 离子	355.3, 338.3, 298.2, 284.2, 214.2, 144.1	
分析用离子	目标离子	355.3
	定性离子-1	338.3
	定性离子-2	298.2
保留时间	13.46 min	
LOD	尚未确定	
其他说明	JWH-122 不进行衍生化。JWH-122 与 JWH-019 是结构异构体，碎裂方式相似，只是保留时间略有不同。	

分子结构:



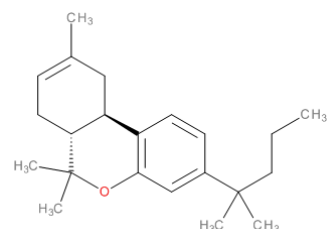
质谱图:



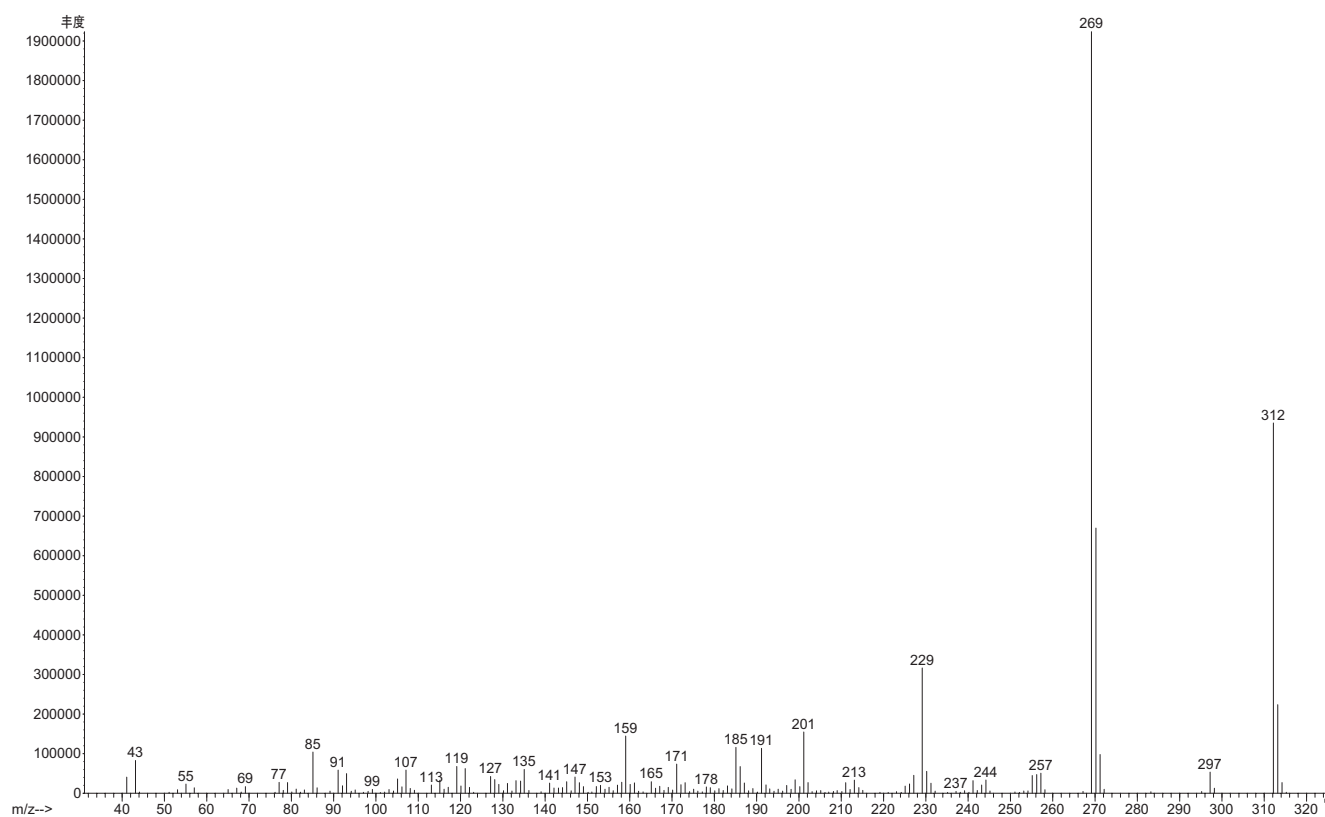
JWH-133

化学名称	(6aR,10aR)-3-(1,1-二甲基丁基)-6a,7,10,10a-四氢基-6,6,9-三甲基-6H-二苯并[b,d]吡喃	
分子式	$C_{22}H_{32}O$	
分子量	312.24	
主要的 GC/MS 离子	312.3, 269.2, 229.2, 270.2, 201.2, 159.1	
分析用离子	目标离子	312.3
	定性离子-1	269.2
	定性离子-2	229.2
保留时间	9.47 min	
LOD	0.02 mg/g	
其他说明	JWH-133 不进行衍生化	

分子结构:



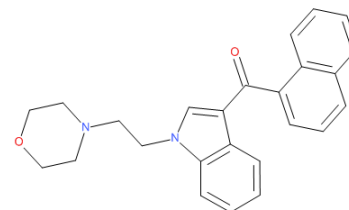
质谱图:



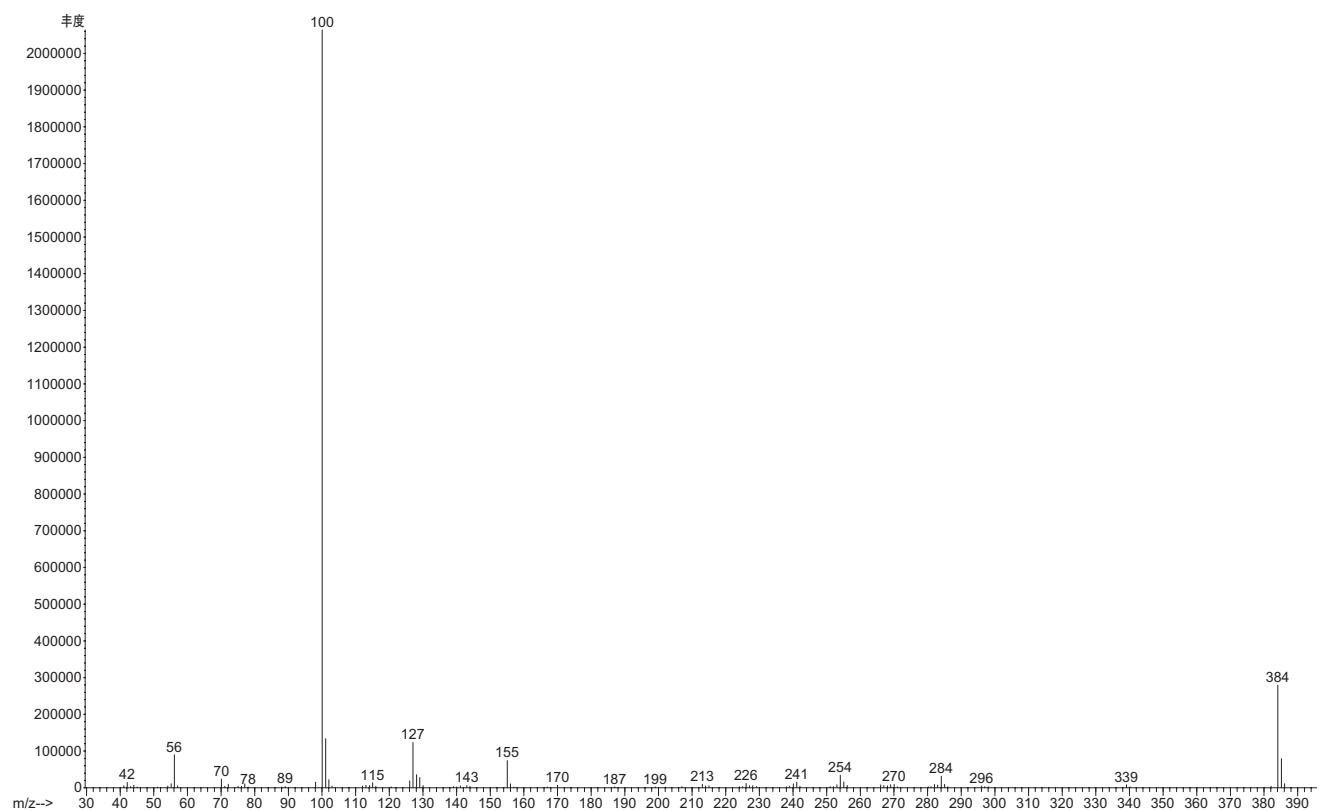
JWH-200

化学名称	[1-[2-(4-吗啉基)乙基]-1H-吲哚-3-基]-1-萘基甲酮	
分子式	C ₂₅ H ₂₄ N ₂ O ₂	
分子量	384.18	
主要的 GC/MS 离子	100.0, 384.3, 127.1, 155.1, 56	
分析用离子	目标离子	384.3
	定性离子-1	100.0
	定性离子-2	127.1
保留时间	14.38 min	
LOD	0.05 mg/g	
其他说明	JWH-200 不进行衍生化	

分子结构:



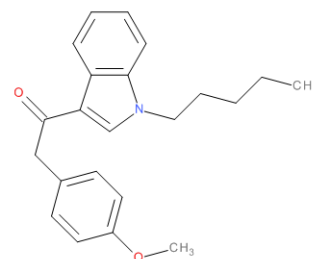
质谱图:



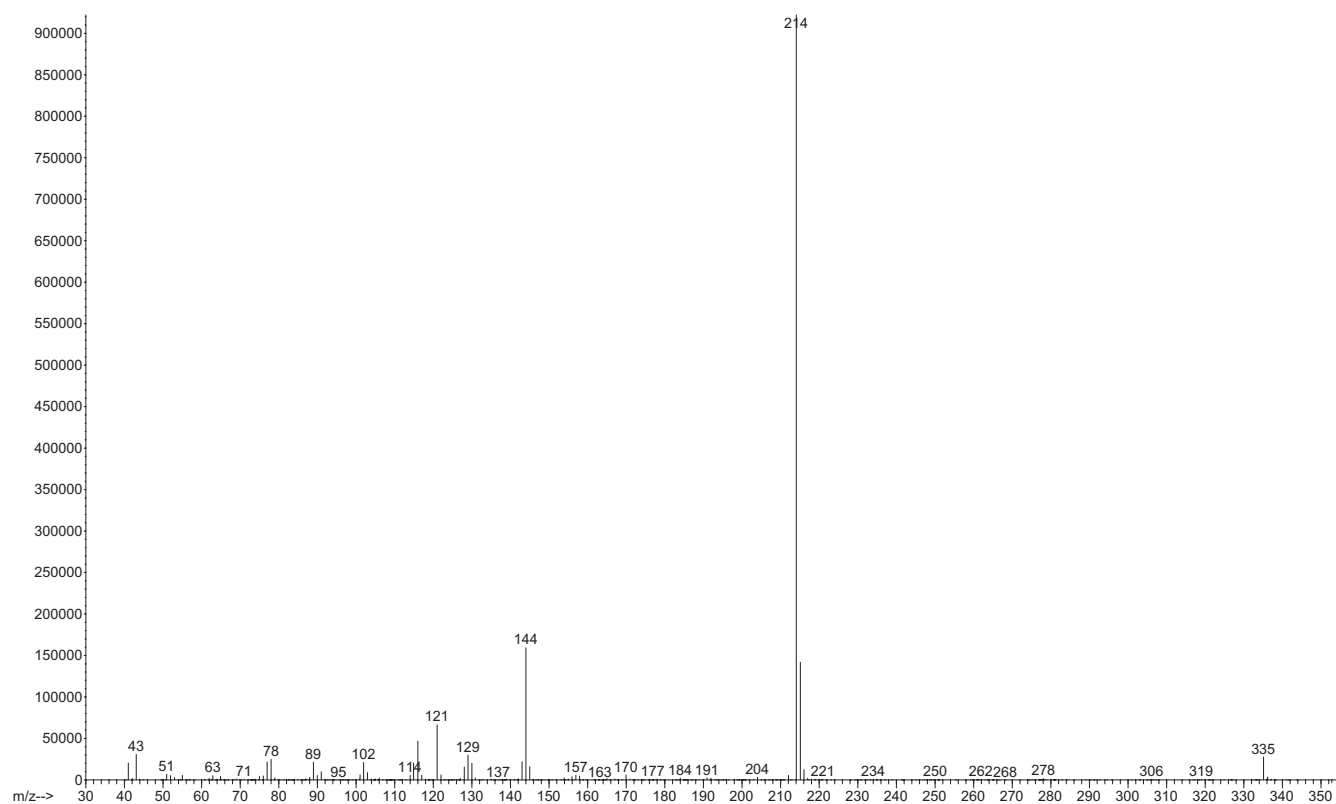
JWH-201

化学名称	2-(4-甲氧基苯基)-1-(1-戊基-1H-吡咯-3-基)乙酮	
分子式	$C_{22}H_{25}NO_2$	
分子量	335.4	
主要的 GC/MS 离子	214.1, 144.0, 215.1, 121.0, 116.0	
分析用离子	目标离子	214
	定性离子-1	144
	定性离子-2	335
保留时间	12.27 min	
LOD	尚未确定	

分子结构:



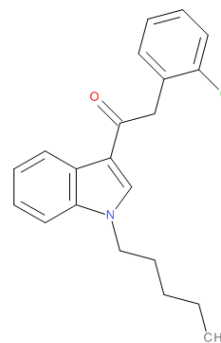
质谱图:



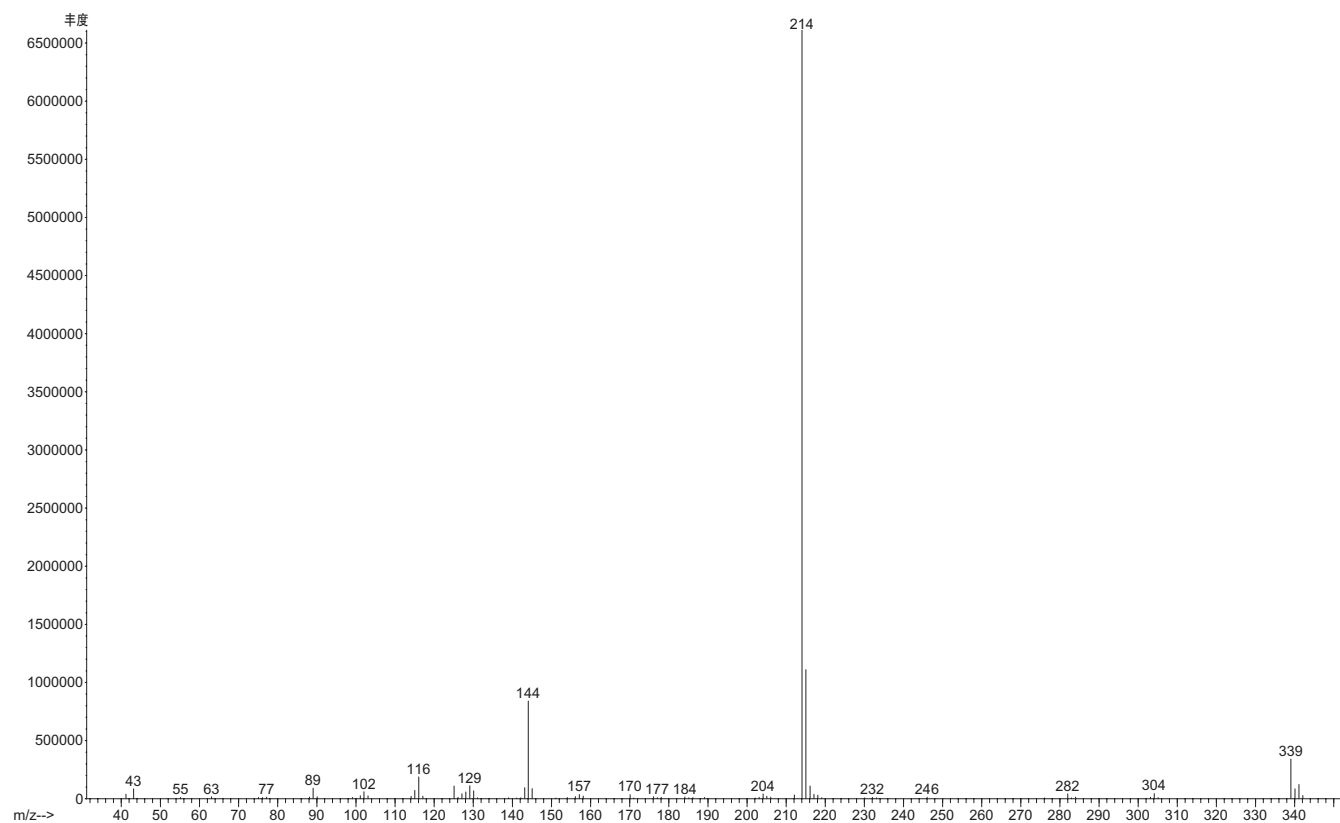
JWH-203

化学名称	1-戊基-3-(2-氯苯乙酰基)吲哚	
分子式	C ₂₁ H ₂₂ ClNO	
分子量	339.14	
主要的 GC/MS 离子	214.2, 144.1, 339.3	
分析用离子	目标离子	214.2
	定性离子-1	144.1
	定性离子-2	339.3
保留时间	12.15 min	
LOD	尚未确定	
其他说明	JWH-203 不进行衍生化	

分子结构:



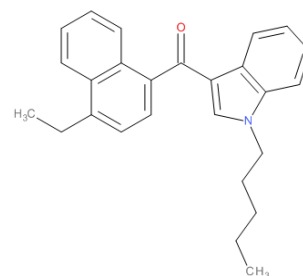
质谱图:



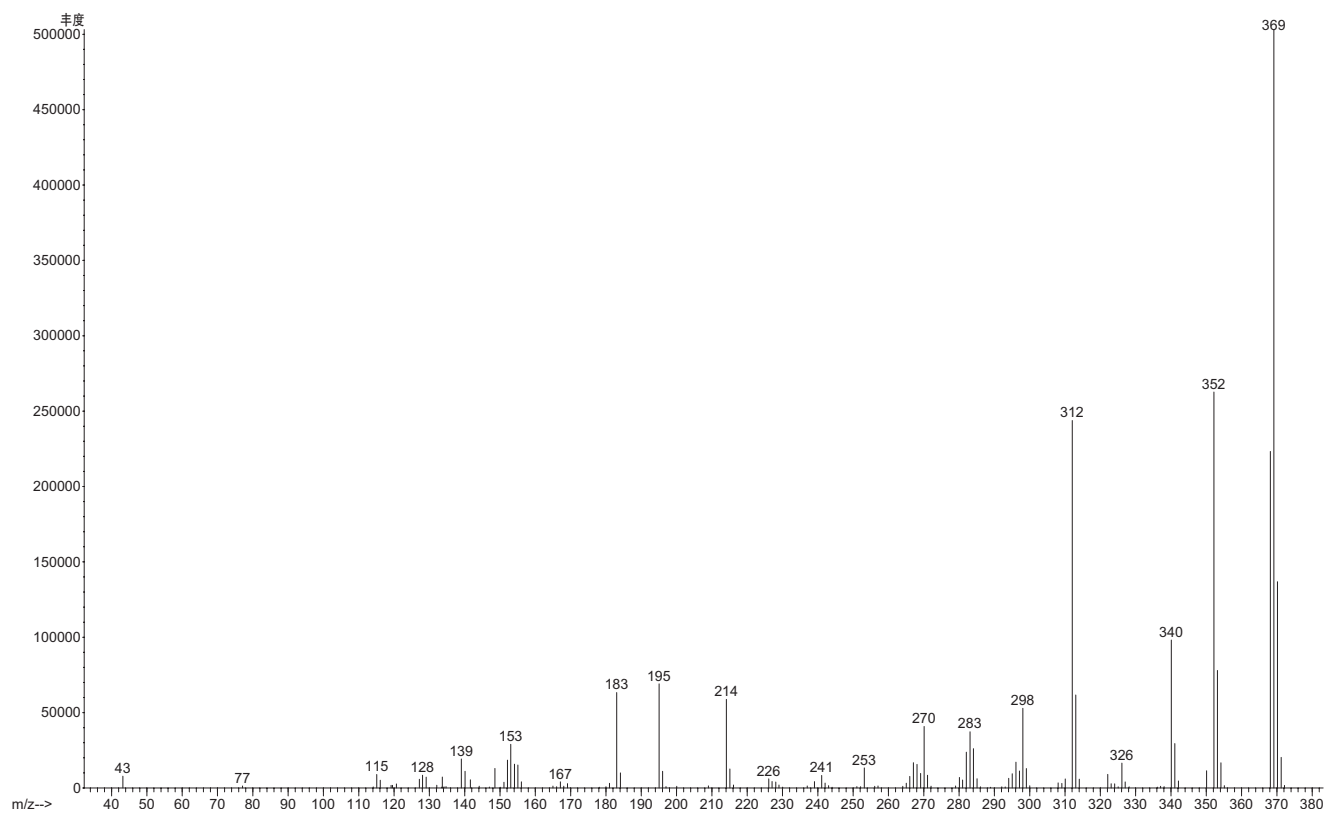
JWH-210

化学名称	(4-乙基萘-1-基)(1-戊基-1H-吡啶-3-基)甲酮	
分子式	C ₂₆ H ₂₇ NO	
分子量	369.21	
主要的 GC/MS 离子	369.3, 352.3, 340.3, 312.3, 183.1, 195.1	
分析用离子	目标离子	369.3
	定性离子-1	352.3
	定性离子-2	312.3
保留时间	13.72 min	
LOD	尚未确定	
其他说明	JWH-210 不进行衍生化	

分子结构:



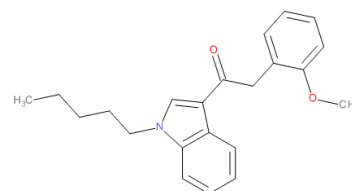
质谱图:



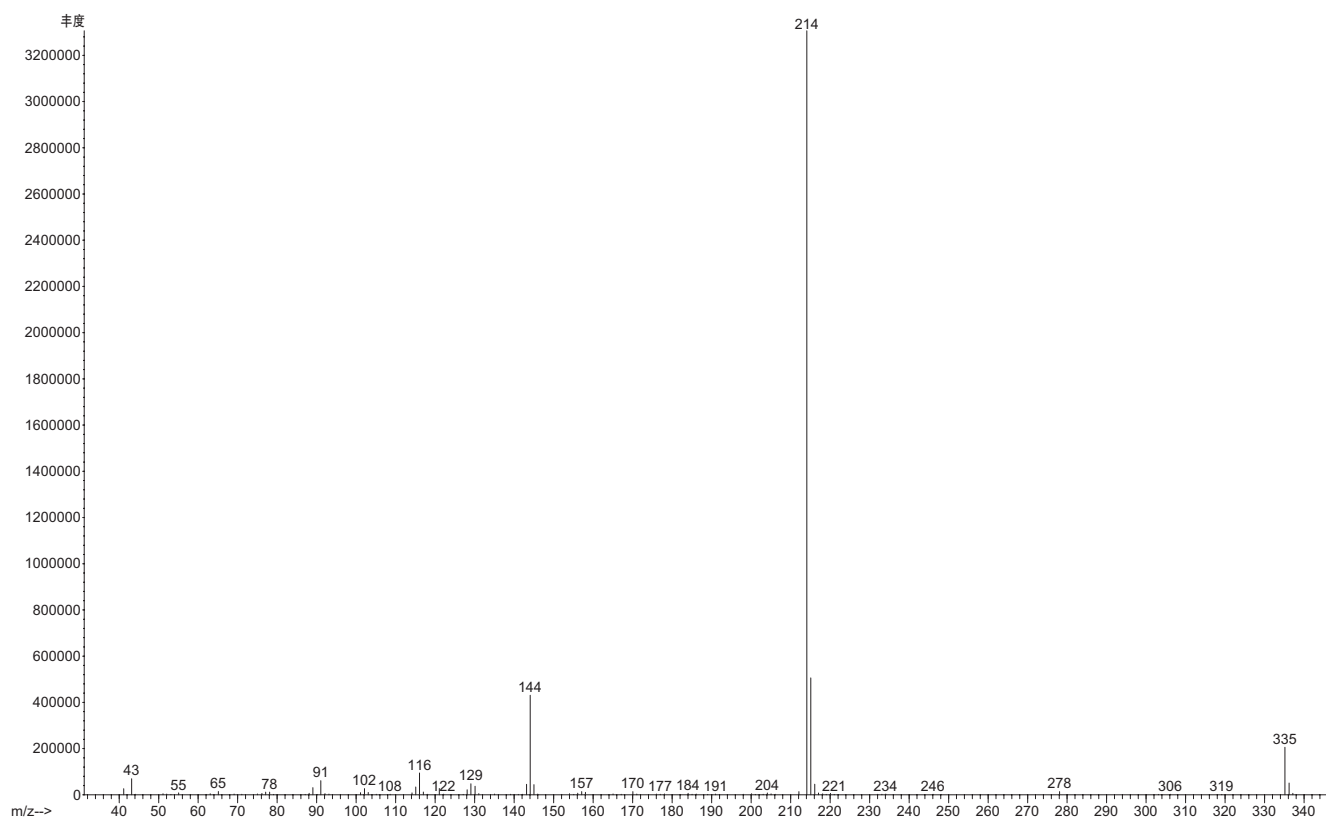
JWH-250

化学名称	2-(2-甲氧基苯基)-1-(1-戊基-1H-吡咯-3-基)乙酮	
分子式	C ₂₂ H ₂₅ NO ₂	
分子量	335.19	
主要的 GC/MS 离子	214.2, 144.1, 335.3	
分析用离子	目标离子	214.2
	定性离子-1	144.1
	定性离子-2	335.3
保留时间	12.22 min	
LOD	0.02 mg/g	
其他说明	JWH-250 不进行衍生化	

分子结构:



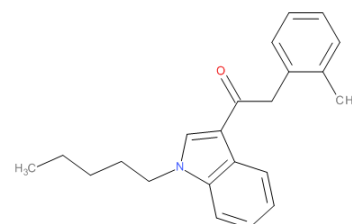
质谱图:



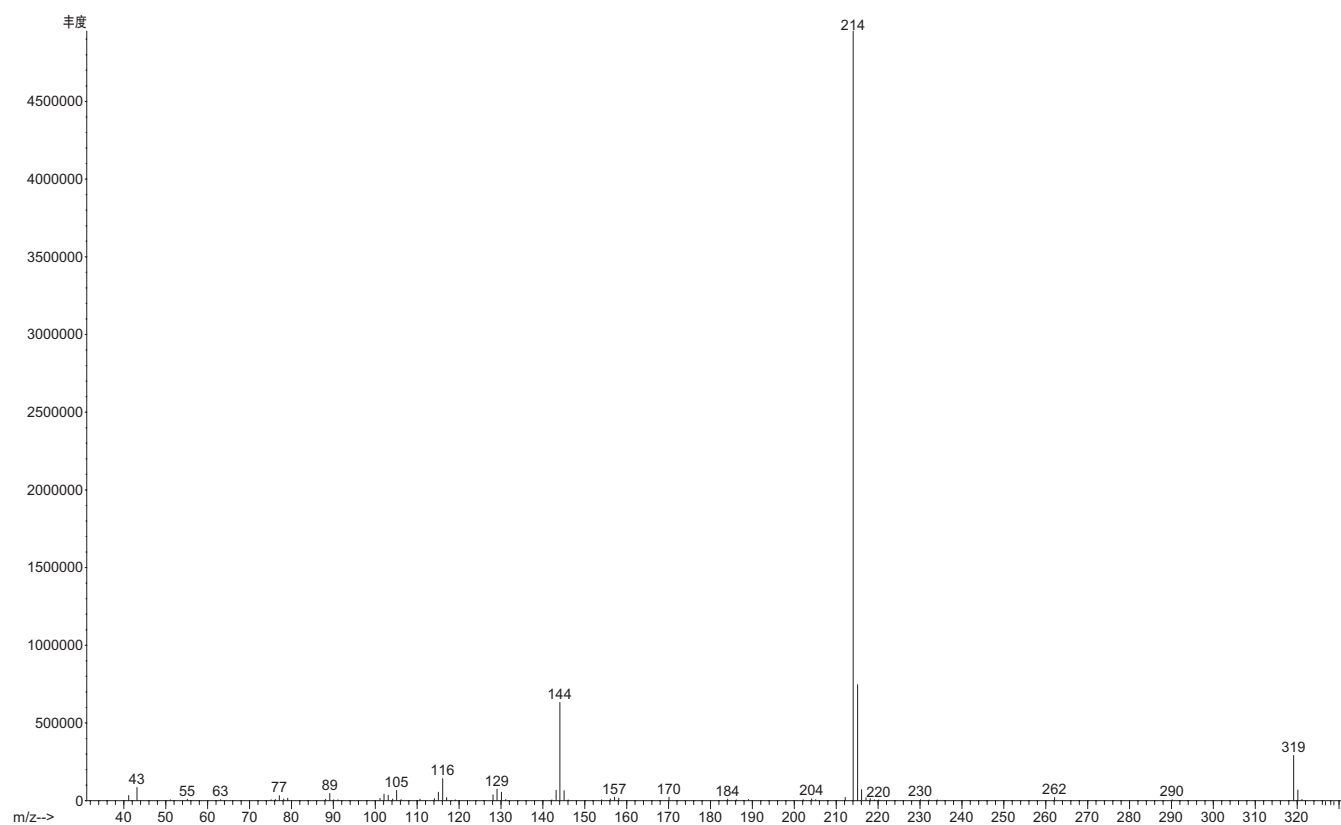
JWH-251

化学名称	1-戊基-3-(2-甲基苯乙酰基)吲哚	
分子式	C ₂₂ H ₂₅ NO	
分子量	319.19	
主要的 GC/MS 离子	214.2, 319.3, 144.1	
分析用离子	目标离子	214.2
	定性离子-1	319.3
	定性离子-2	144.1
保留时间	11.92 min	
LOD	0.02 mg/g	
其他说明	JWH-251 不进行衍生化	

分子结构:



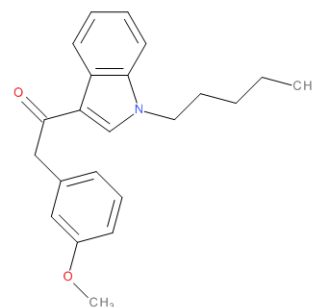
质谱图:



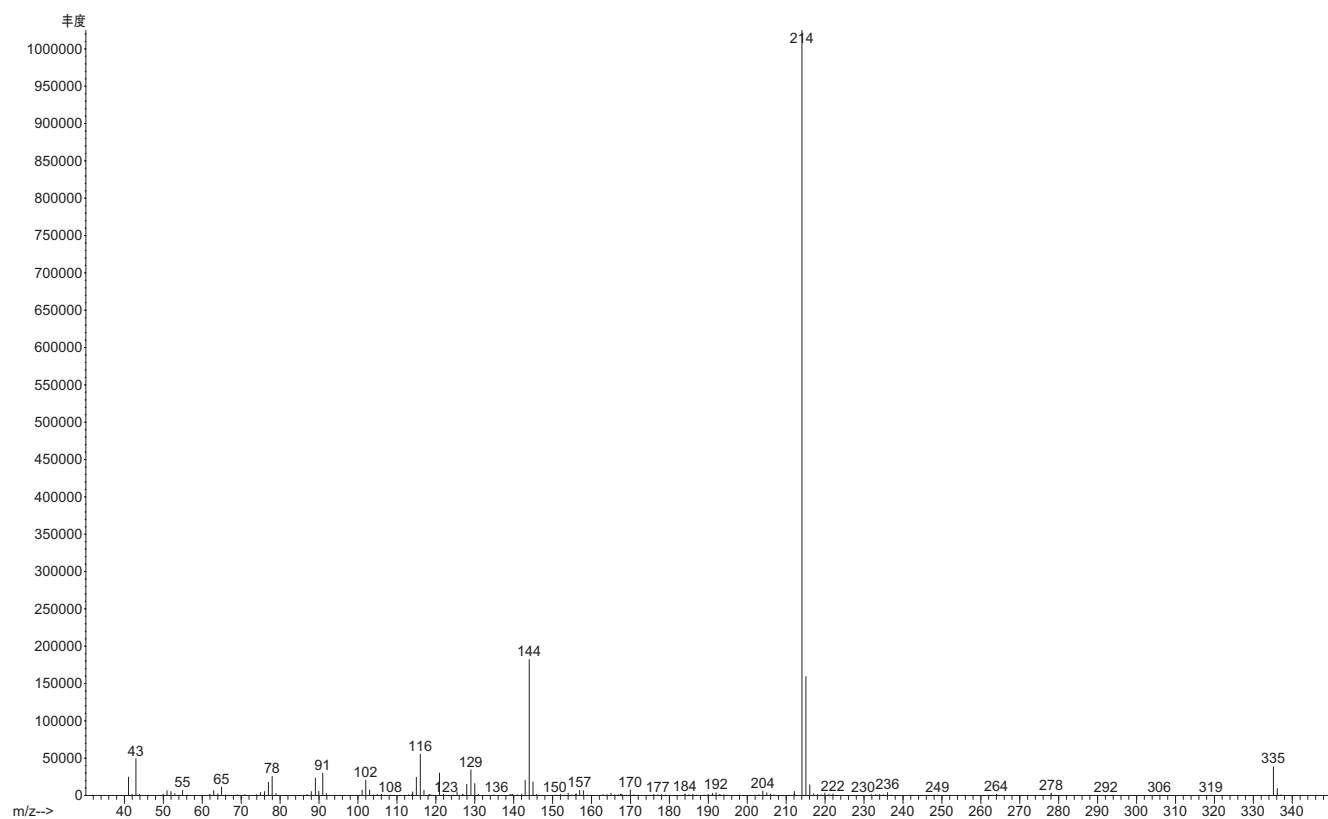
JWH-302

化学名称	2-(3-甲氧基苯基)-1-(1-戊基-1H-吡咯-3-基)乙酮	
分子式	C ₂₂ H ₂₅ NO ₂	
分子量	335.4	
主要的 GC/MS 离子	214.1, 144.0, 215.1, 116.0, 335	
分析用离子	目标离子	214
	定性离子-1	144
	定性离子-2	335
保留时间	12.09 min	
LOD	尚未确定	

分子结构:



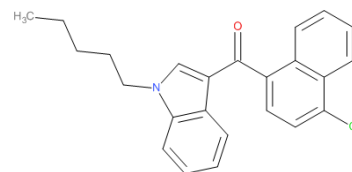
质谱图:



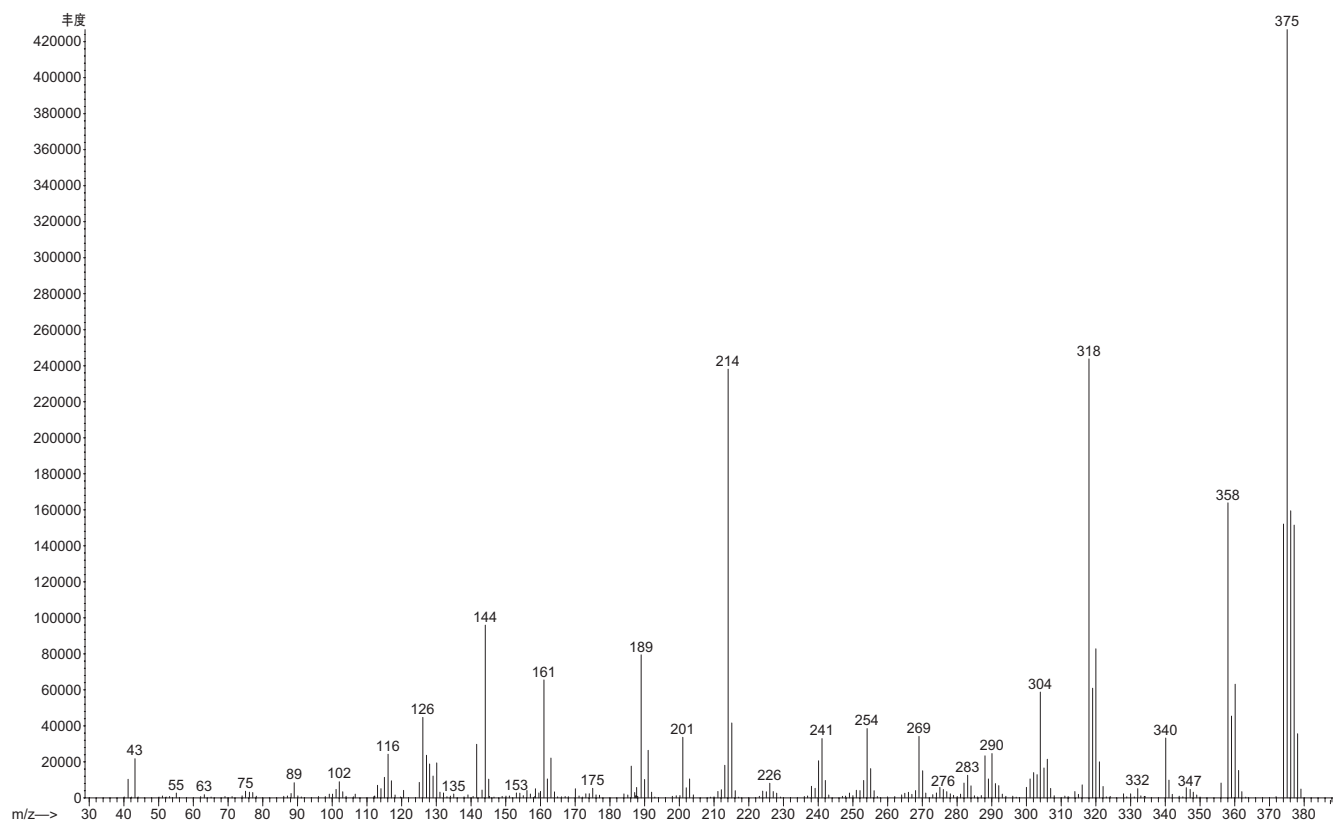
JWH-398

化学名称	1-戊基-3-(4-氯-1-萘甲酰基)吲哚	
分子式	C ₂₄ H ₂₂ ClNO	
分子量	375.14	
主要的 GC/MS 离子	375.3, 358.3, 318.3, 214.2, 189.1, 144.1	
分析用离子	目标离子	375.3
	定性离子-1	358.3
	定性离子-2	318.3
保留时间	13.69 min	
LOD	0.02 mg/g	
其他说明	JWH-398 不进行衍生化	

分子结构:



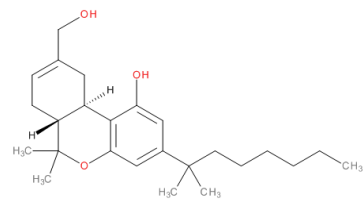
质谱图:



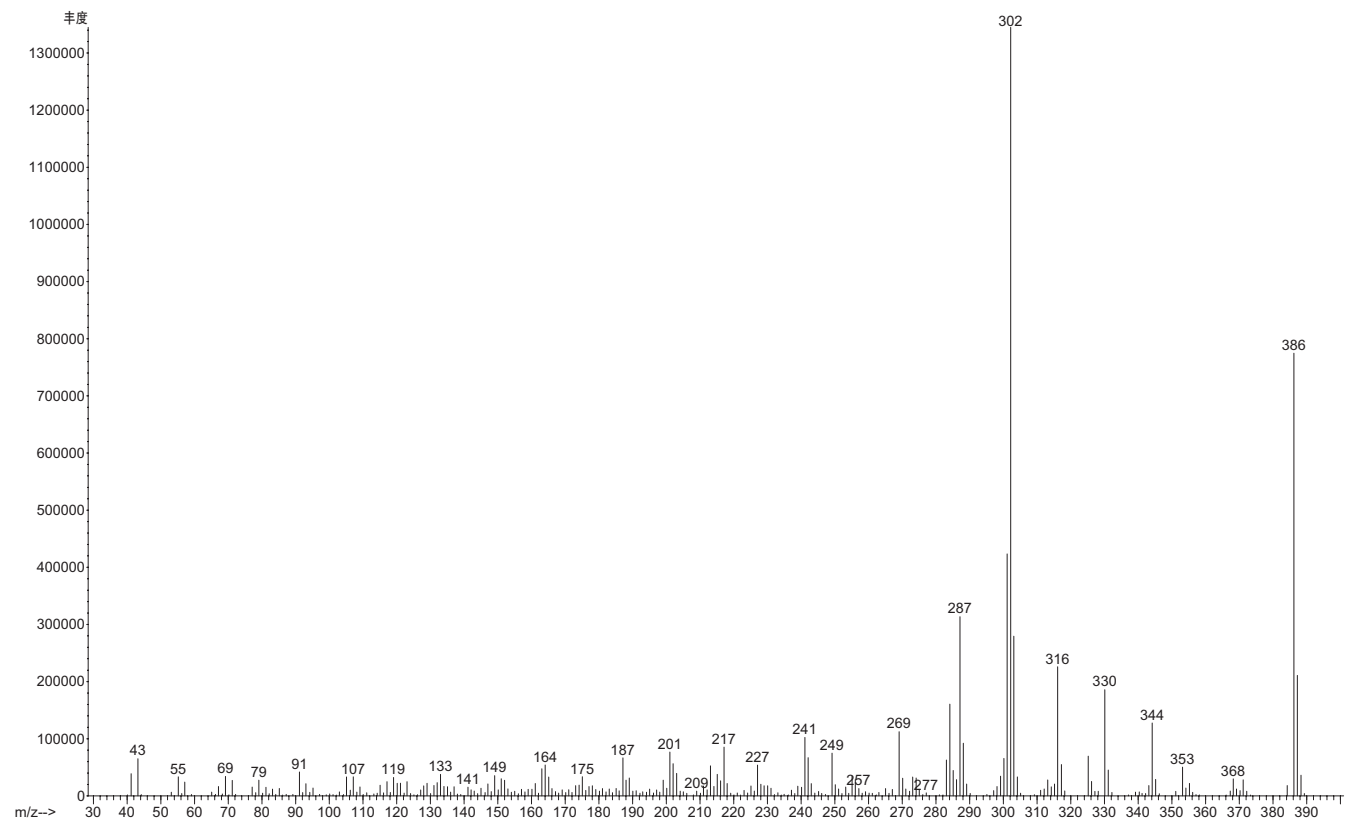
HU-210

化学名称	(6aR,10aR)-9-(羟甲基)-6,6-二甲基-3-(2-甲基辛-2-基)-6a,7,10,10a-四氢苯并[c]吡喃-1-醇	
分子式	C ₂₅ H ₃₈ O ₃	
分子量	386.28	
主要的 GC/MS 离子	386.3, 302.3, 287.2, 316.3, 330.3, 344.3	
分析用离子	目标离子	386.3
	定性离子-1	302.3
	定性离子-2	287.2
保留时间	12.56 min	
LOD	0.02 mg/g	
其他说明	采用 BSTFA 生成二甲基硅衍生物	

分子结构:



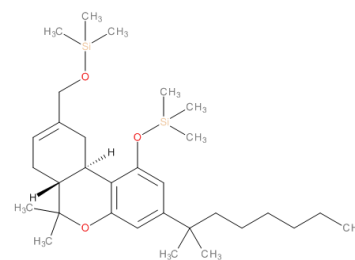
质谱图:



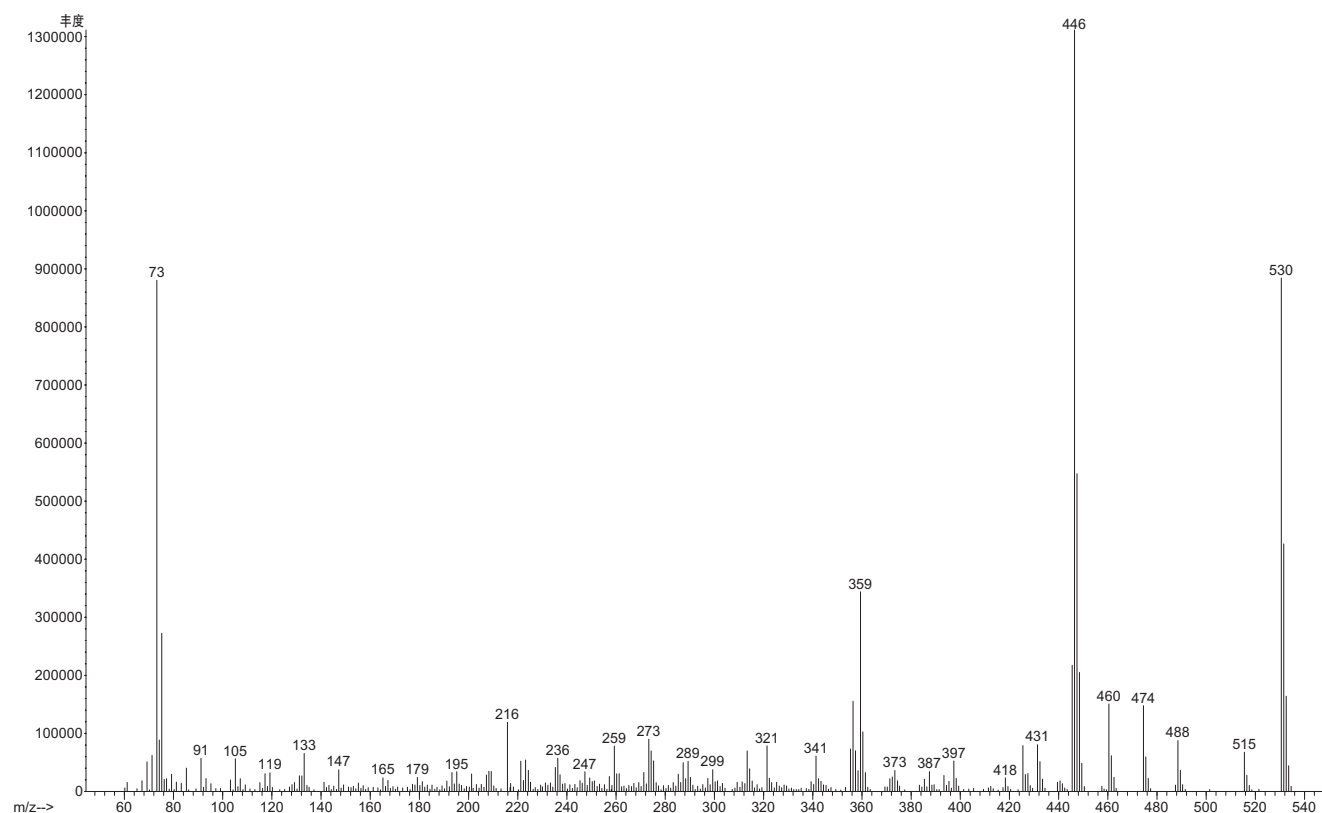
HU-210 二甲基硅生物

化学名称	(6aR,10aR)- 9-(羟甲基)-6,6-二甲基-3-(2-甲基辛-2-基)-6a,7,10,10a-四氢苯并[c]吡喃-1-醇-二甲基硅生物	
分子式	C ₃₁ H ₅₄ O ₃ Si ₂	
分子量	530.36	
主要的 GC/MS 离子	530.5, 446.4, 531.5, 359.3, 460.4, 474.4	
分析用离子	目标离子	530.5
	定性离子-1	446.4
	定性离子-2	359.3
保留时间	8.35 min	
LOD	0.004 mg/g	
其他说明	不能区分 HU-210 和 HU-211	

分子结构:



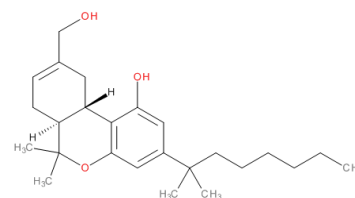
质谱图:



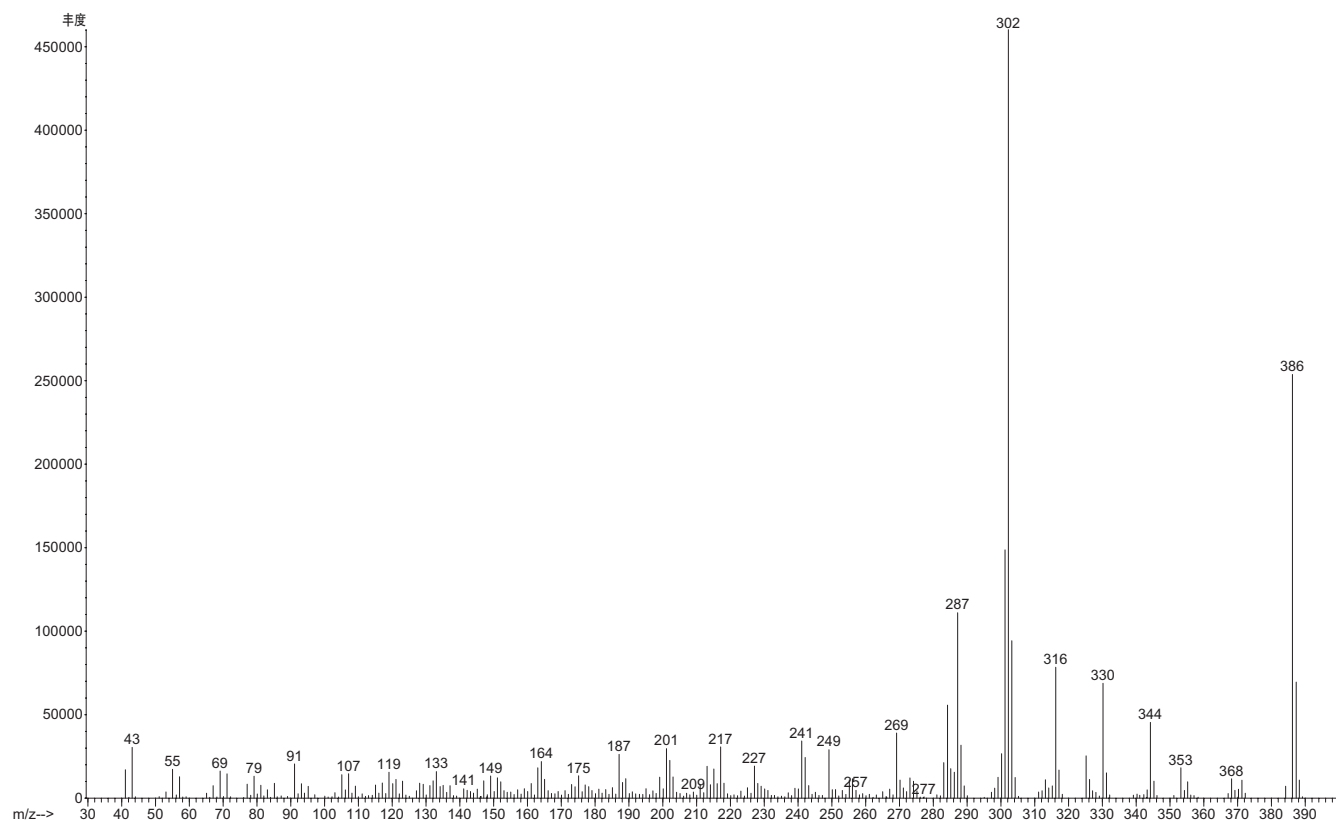
HU-211

化学名称	(6aS,10aS)-9-(羟甲基)-6,6-二甲基-3-(2-甲基辛-2-基)-6a,7,10,10a-四氢苯并[c]吡喃-1-醇	
分子式	$C_{25}H_{38}O_3$	
分子量	386.28	
主要的 GC/MS 离子	386.3, 302.3, 287.2, 316.3, 330.3, 344.3	
分析用离子	目标离子	386.3
	定性离子-1	302.3
	定性离子-2	287.2
保留时间	12.56 min	
LOD	0.02 mg/g	
其他说明	采用 BSTFA 生成二甲基硅衍生物 不能区分 HU-211 和 HU-210	

分子结构:



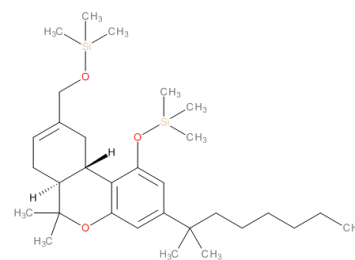
质谱图:



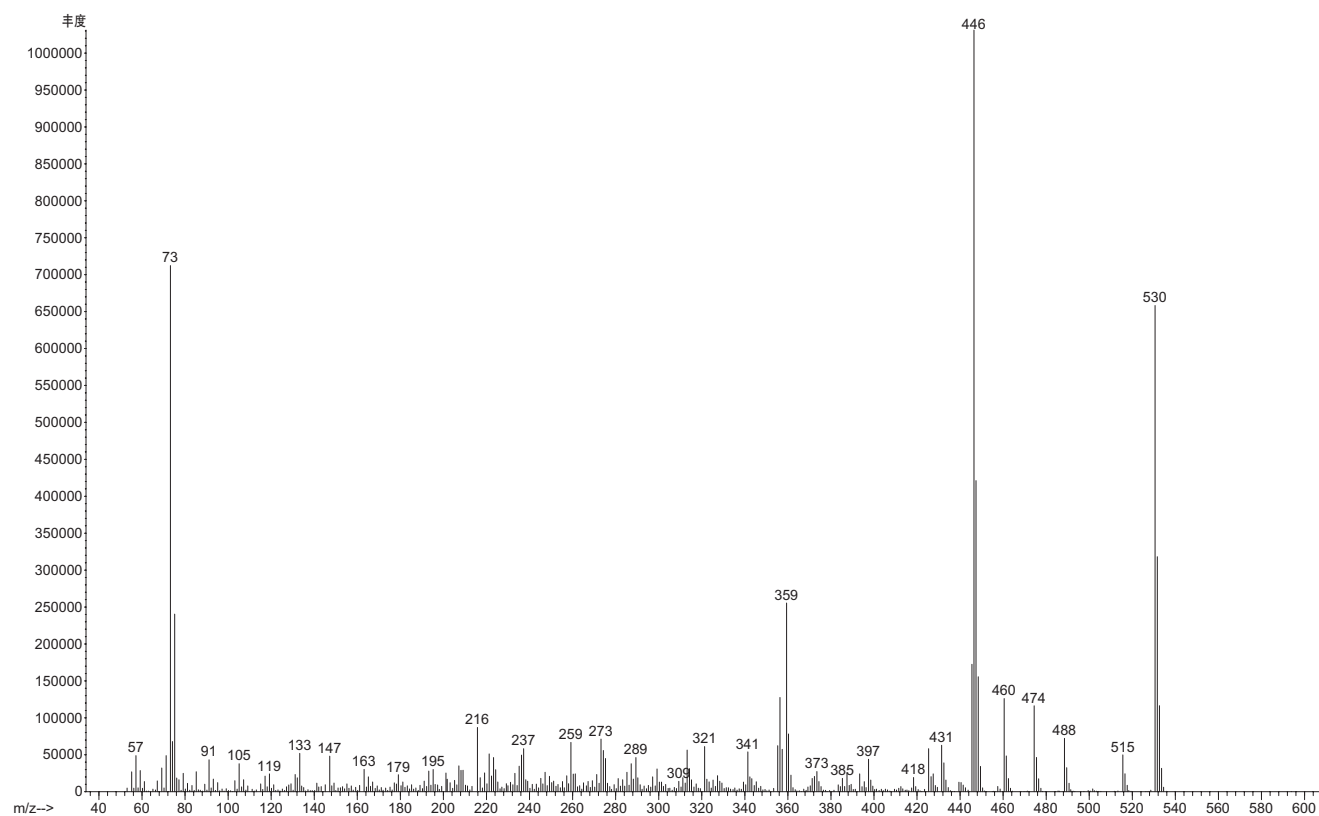
HU-211- 二甲基硅衍生物

化学名称	(6aS,10aS)-9-(羟甲基)-6,6-二甲基-3-(2-甲基辛-2-基)-6a,7,10,10a-四氢苯并[c]吡喃-1-醇-二甲基硅衍生物	
分子式	$C_{31}H_{54}O_3Si_2$	
分子量	530.36	
主要的 GC/MS 离子	530.5, 446.4, 531.5, 359.3, 460.4, 474.4	
分析用离子	目标离子	530.5
	定性离子-1	446.4
	定性离子-2	359.3
保留时间	8.35 min	
LOD	0.004 mg/g	
其他说明	不能区分 HU-211 和 HU-210	

分子结构:



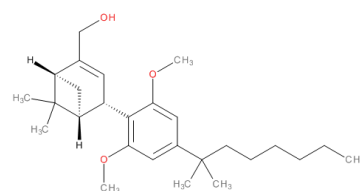
质谱图:



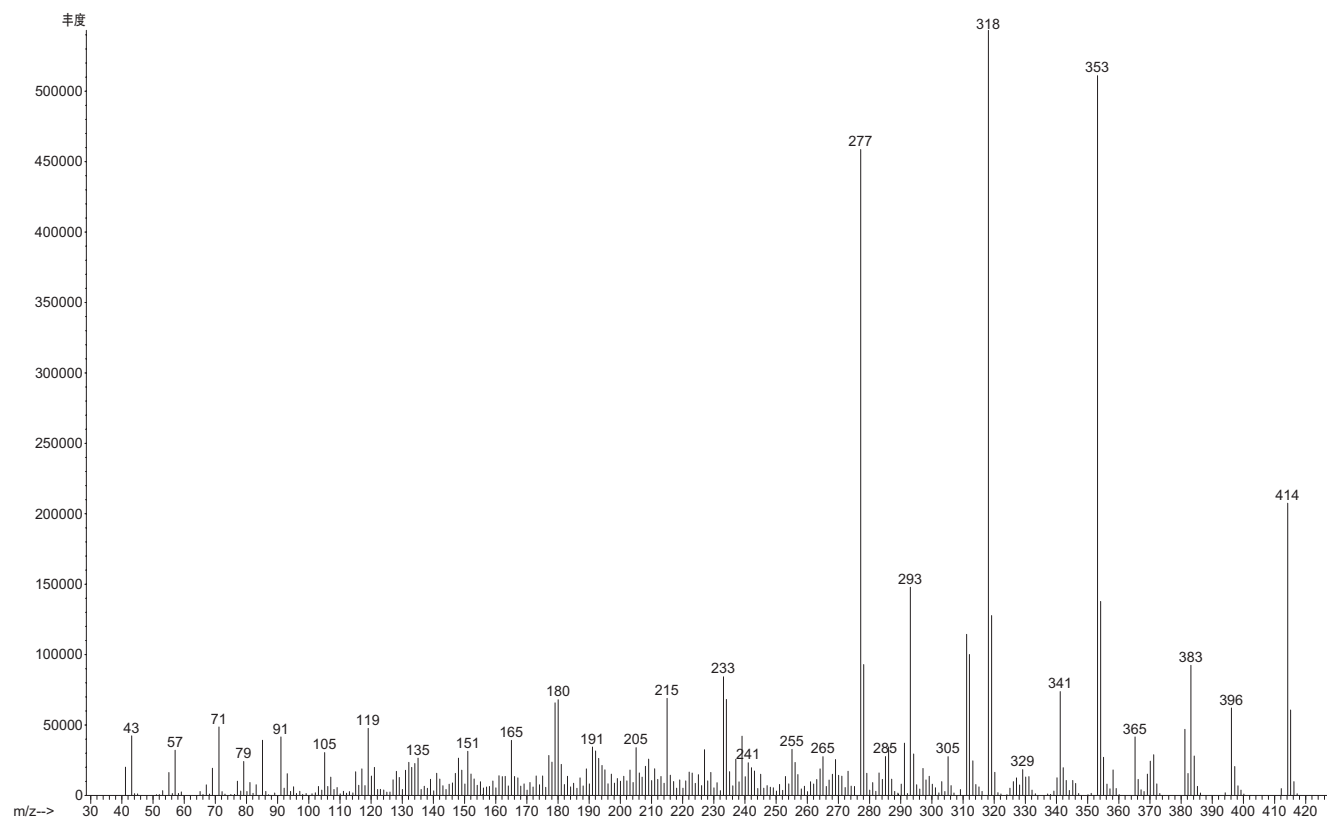
HU-308

化学名称	[(1R,2R,5R)-2-[2,6-二甲氧基-4-(2-甲基辛-2-基)苯基]-7,7-二甲基-4-二环[3.1.1]庚-3-烯]甲醇	
分子式	C ₂₇ H ₄₂ O ₃	
分子量	414.31	
主要的 GC/MS 离子	277.2, 318.3, 353.3, 414.4, 293.2, 383.3	
分析用离子	目标离子	414.4
	定性离子-1	318.3
	定性离子-2	353.3
保留时间	11.69 min	
LOD	尚未确定	
其他说明	采用 BSTFA 生成一甲基硅衍生物	

分子结构:



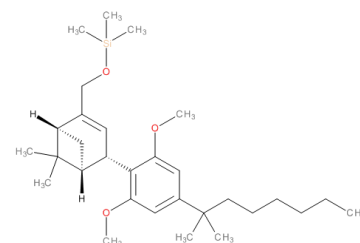
质谱图:



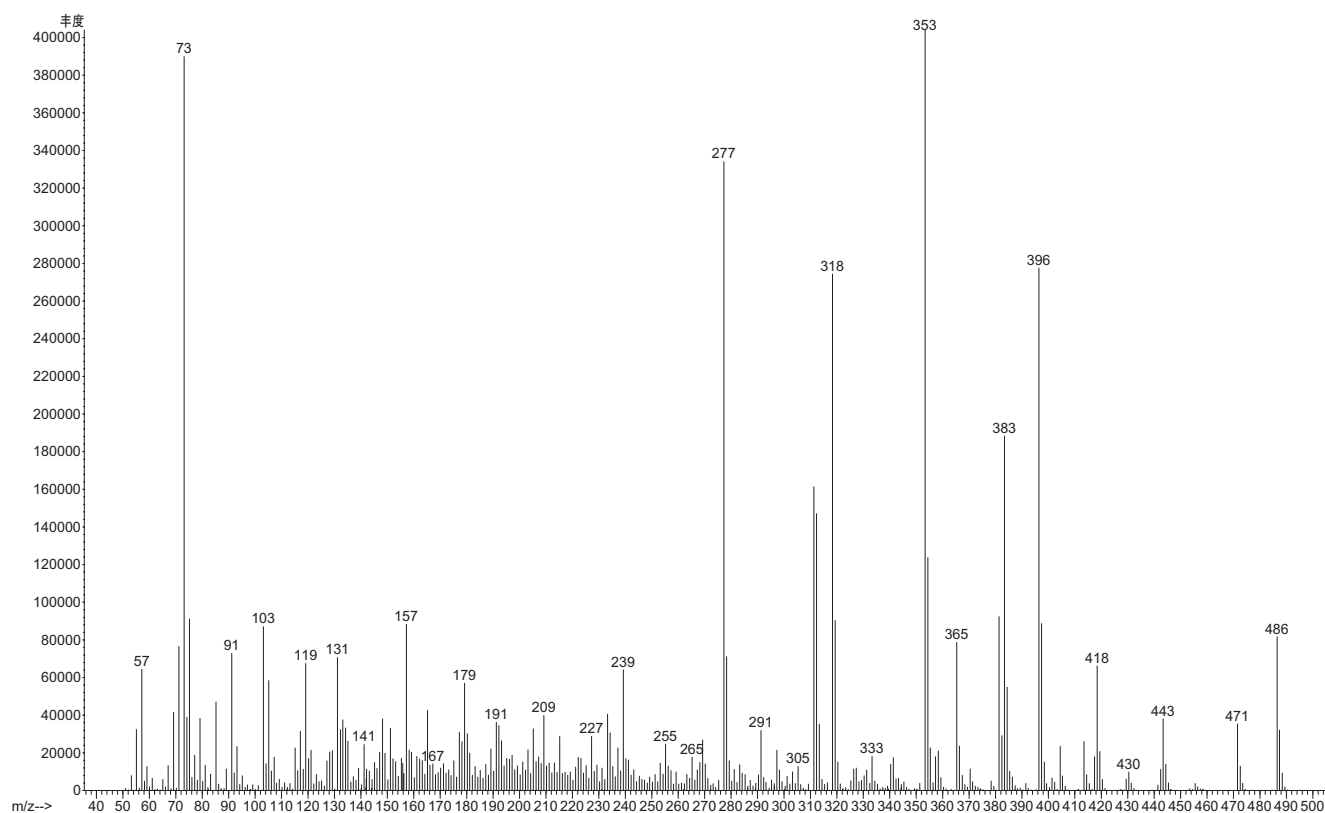
HU-308-一甲基硅衍生物

化学名称	[(1R,2R,5R)-2-[2,6-二甲氧基-4-(2-甲基辛-2-基)苯基]-7,7-二甲基-4-二环[3.1.1]庚-3-烯]甲醇-一甲基硅衍生物	
分子式	C ₃₀ H ₅₀ O ₃ Si	
分子量	486.35	
主要的 GC/MS 离子	277.2, 318.3, 353.3, 383.3, 396.3, 486.4	
分析用离子	目标离子	486.4
	定性离子-1	396.3
	定性离子-2	353.3
保留时间	8.20 min	
LOD	尚未确定	

分子结构:



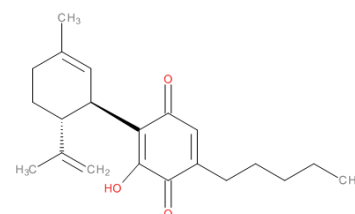
质谱图:



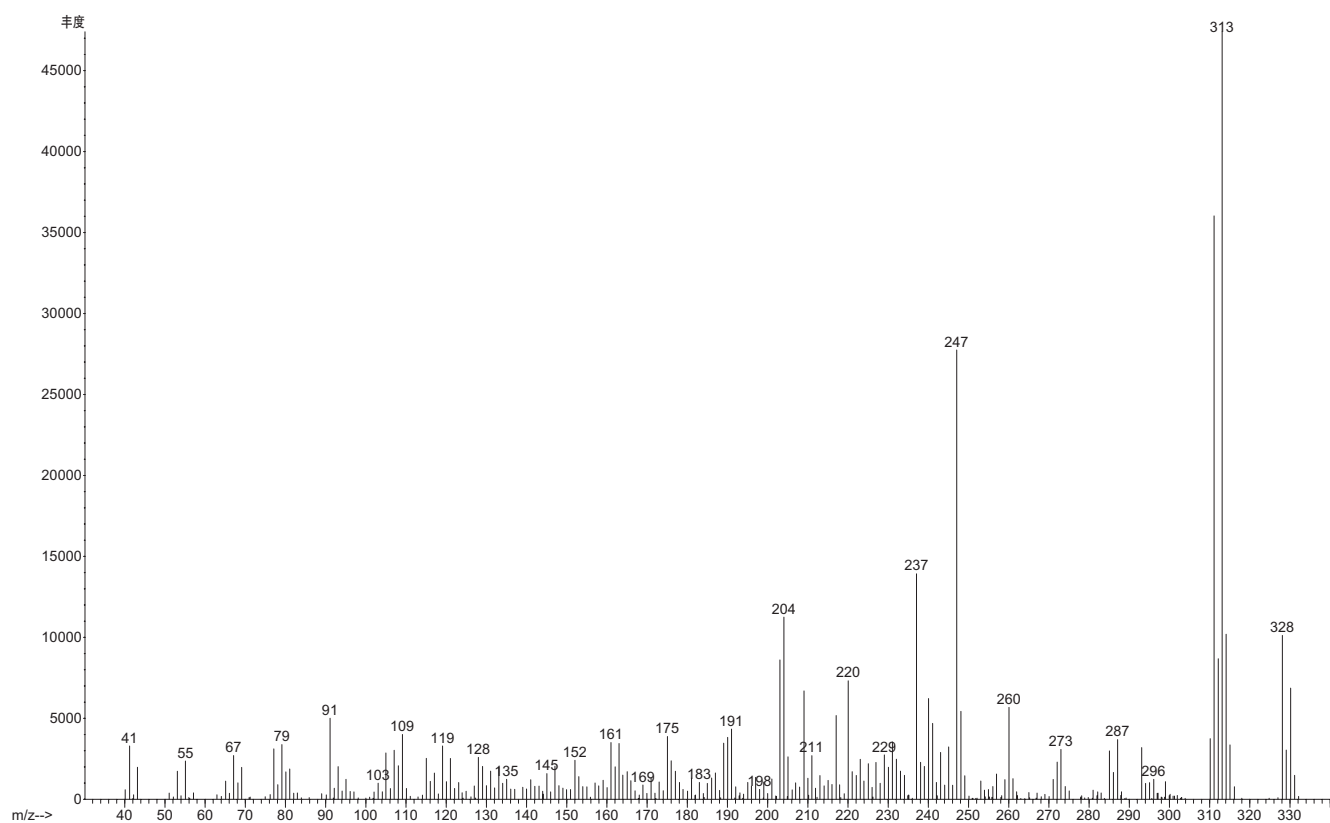
HU-331

化学名称	3-羟基-2-[(1R,6R)-3-甲基-6-(1-甲基乙烯基)-2-环己烯-1-基]-5-戊基-2,5-环己二烯-1,4-二酮	
分子式	C ₂₁ H ₂₈ O ₃	
分子量	328.203	
主要的 GC/MS 离子	313.3, 311.3, 328.3, 247.2, 237.2, 204.2	
分析用离子	目标离子	328.3
	定性离子-1	313.3
	定性离子-2	247.2
保留时间	9.84 min	
LOD	尚未确定	
其他说明	采用 BSTFA 生成三甲基硅衍生物	

分子结构:



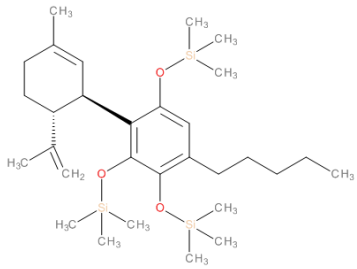
质谱图:



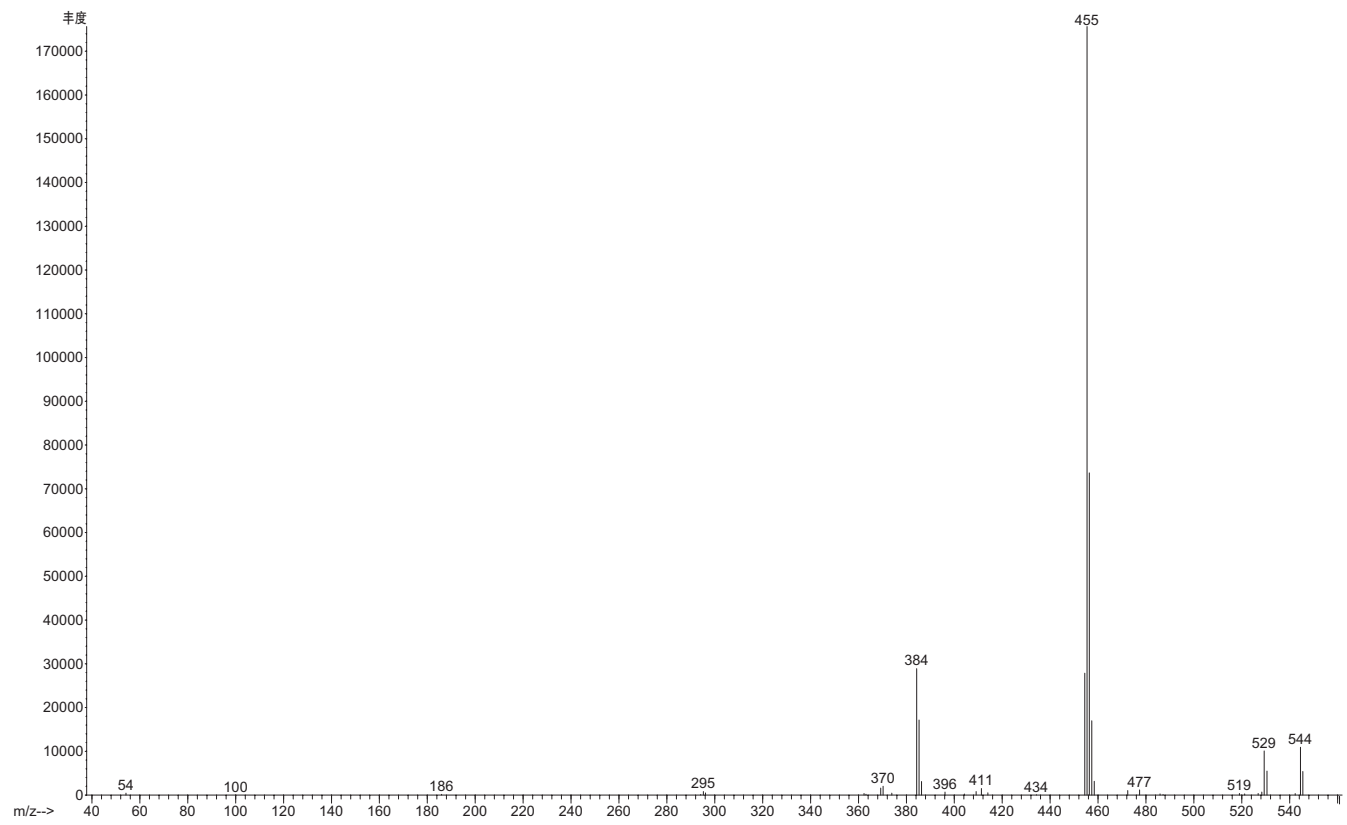
HU-331-三甲基硅生物

化学名称	3-羟基-2-[(1R,6R)-3-甲基-6-(1-甲基乙烯基)-2-环己烯-1-基]-5-戊基-2,5-环己二烯-1,4-二酮-三甲基硅生物	
分子式	C ₃₀ H ₅₂ O ₃ Si ₃	
分子量	544.32	
主要的 GC/MS 离子	455.4, 384.3, 529.5, 544.4	
分析用离子	目标离子	455.4
	定性离子-1	384.3
	定性离子-2	544.5
保留时间	7.18 min	
LOD	尚未确定	

分子结构:



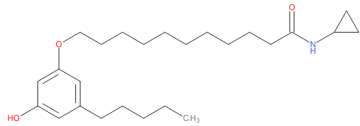
质谱图:



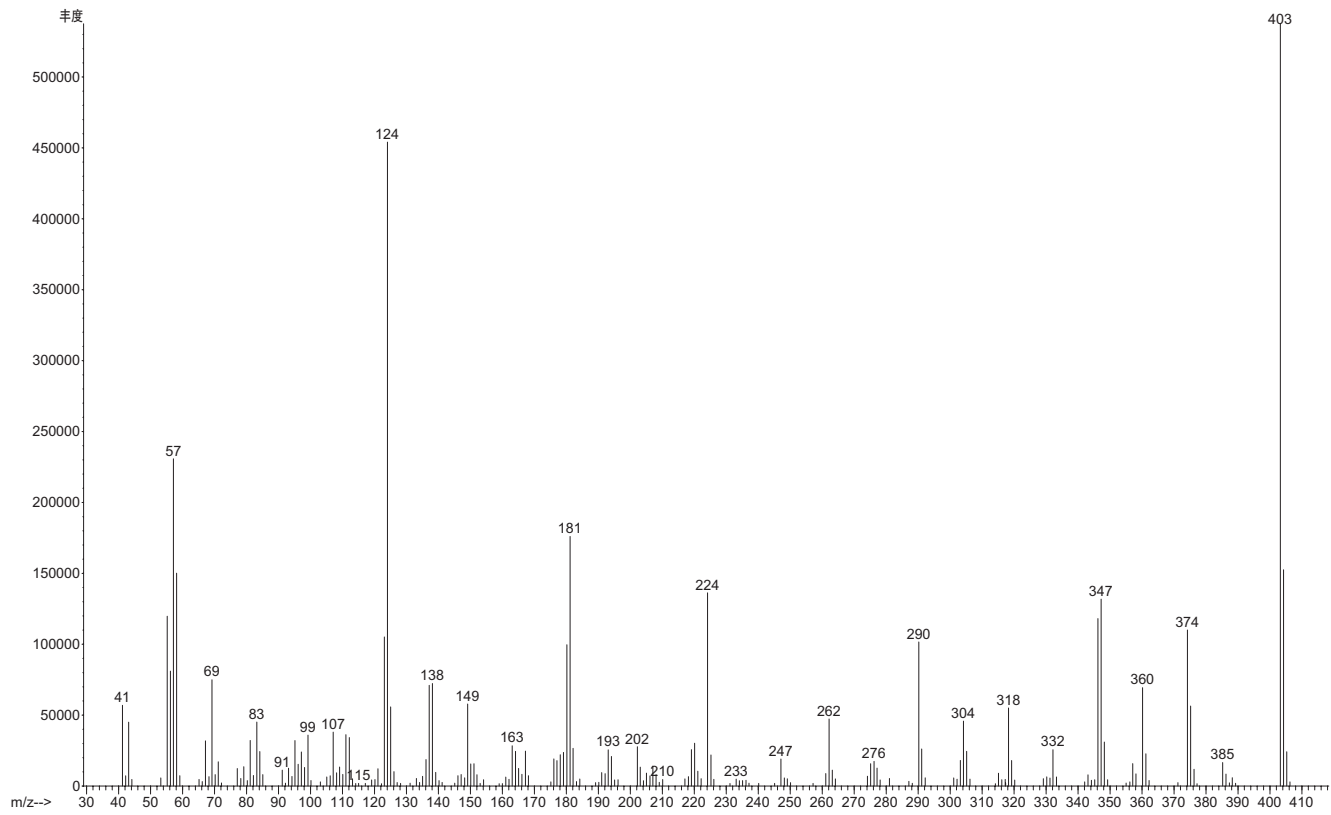
CB-25

化学名称	N-环丙基-11-(3-羟基-5-戊基苯氧基)-十一碳酰胺	
分子式	C ₂₅ H ₄₁ NO ₃	
分子量	403.31	
主要的 GC/MS 离子	403.4, 124.1, 57.0, 181.1, 347.3, 374.3	
分析用离子	目标离子	403.4
	定性离子-1	124.1
	定性离子-2	57.0
保留时间	13.88 min	
LOD	尚未确定	
其他说明	采用 BSTFA 生成二甲基硅衍生物	

分子结构:



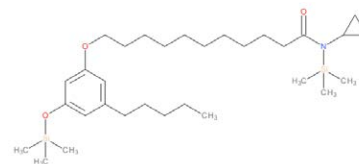
质谱图:



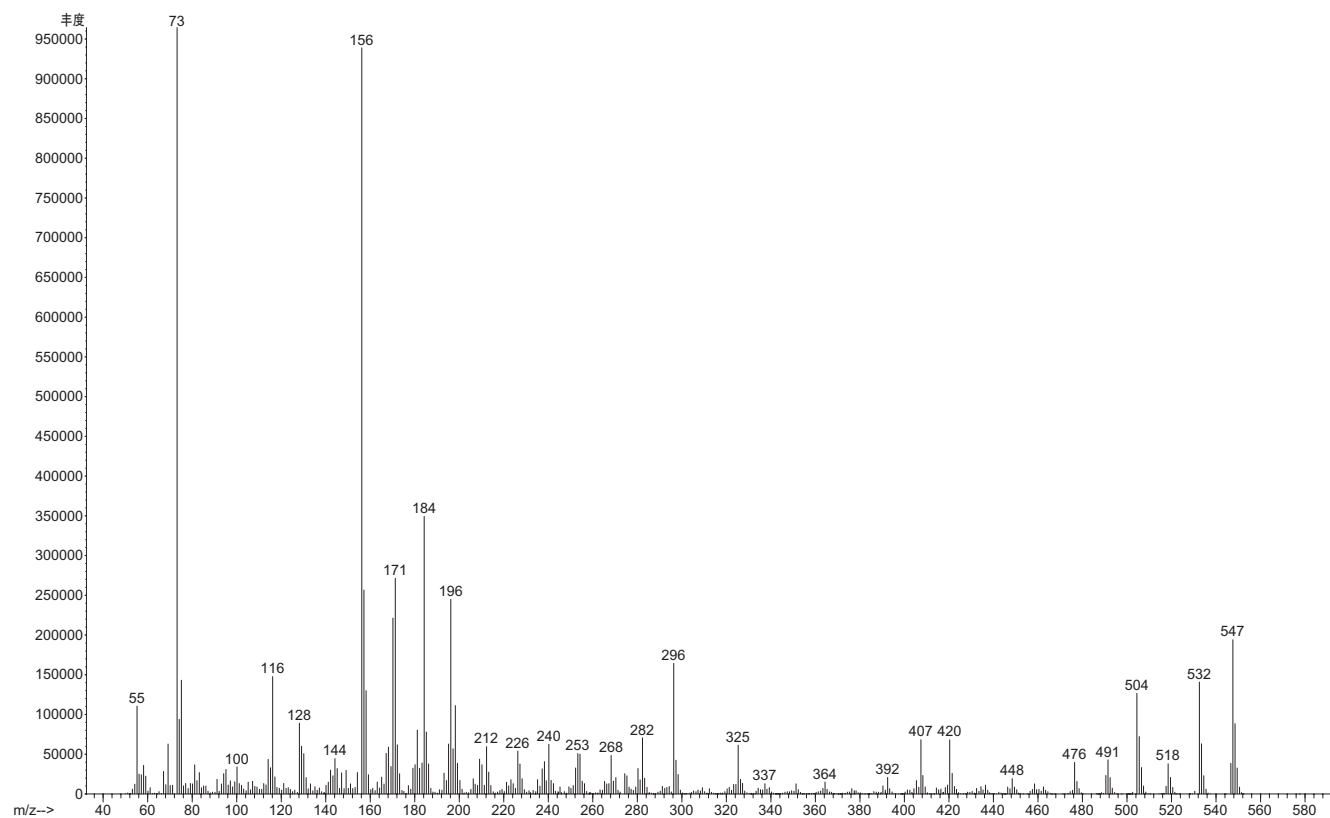
CB-25-二甲基硅生物

化学名称	N-环丙基-11-(3-羟基-5-戊基苯氧基)-十一碳酰胺二甲基硅生物	
分子式	$C_{31}H_{57}NO_3Si_2$	
分子量	547.39	
主要的 GC/MS 离子	547, 532, 504, 156, 184, 196	
分析用离子	目标离子	547.5
	定性离子-1	532.5
	定性离子-2	504.5
保留时间	9.22 min	
LOD	尚未确定	

分子结构:



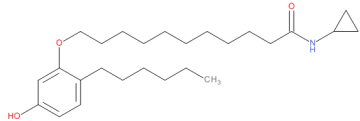
质谱图:



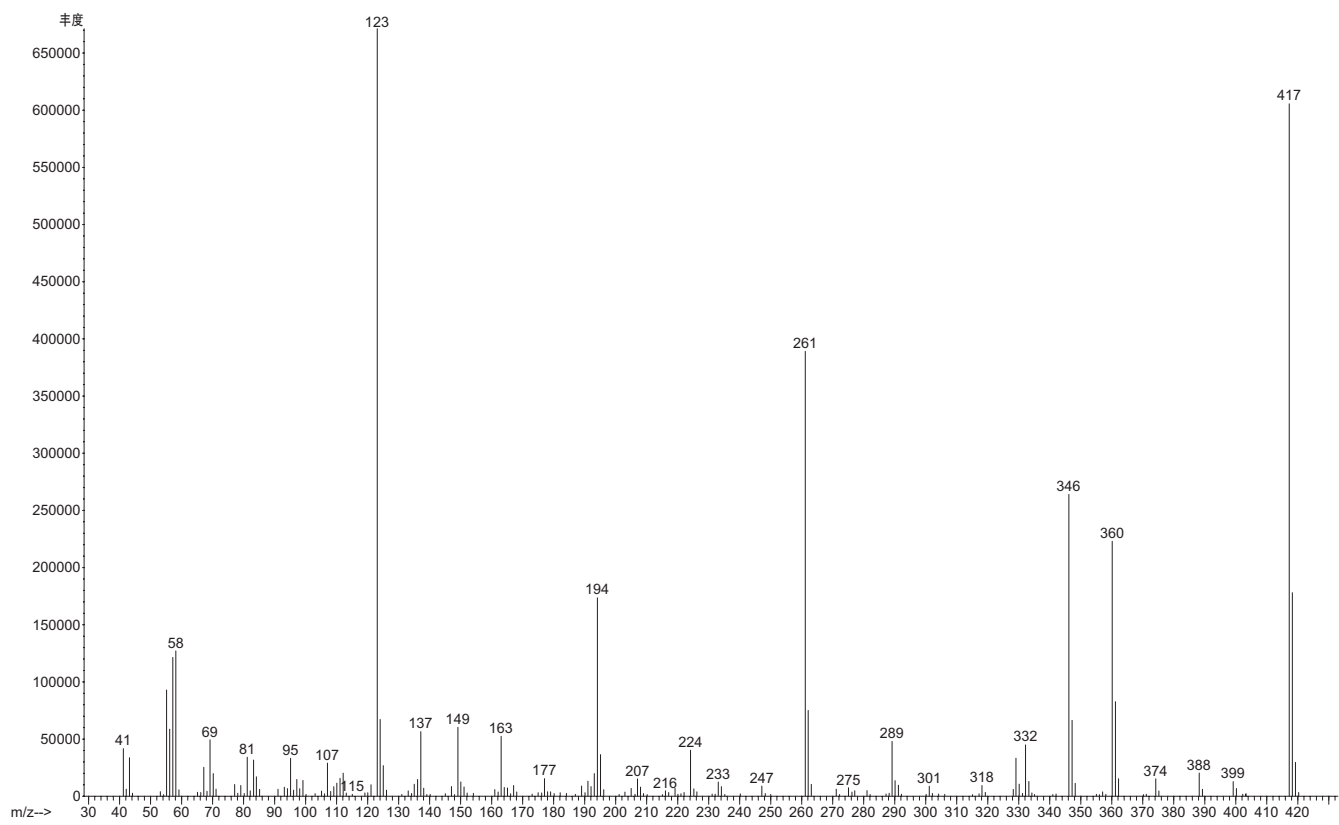
CB-52

化学名称	N-环丙基-11-(2-己基-5-羟基苯氧基)-十一碳酰胺	
分子式	C ₂₆ H ₄₃ NO ₃	
分子量	417.32	
主要的 GC/MS 离子	417.4, 123.1, 261.2, 346.3, 360.3, 194.1	
分析用离子	目标离子	417.4
	定性离子-1	261.2
	定性离子-2	346.3
保留时间	13.88 min	
LOD	尚未确定	
其他说明	采用 BSTFA 生成二甲基硅衍生物	

分子结构:



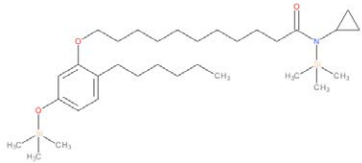
质谱图:



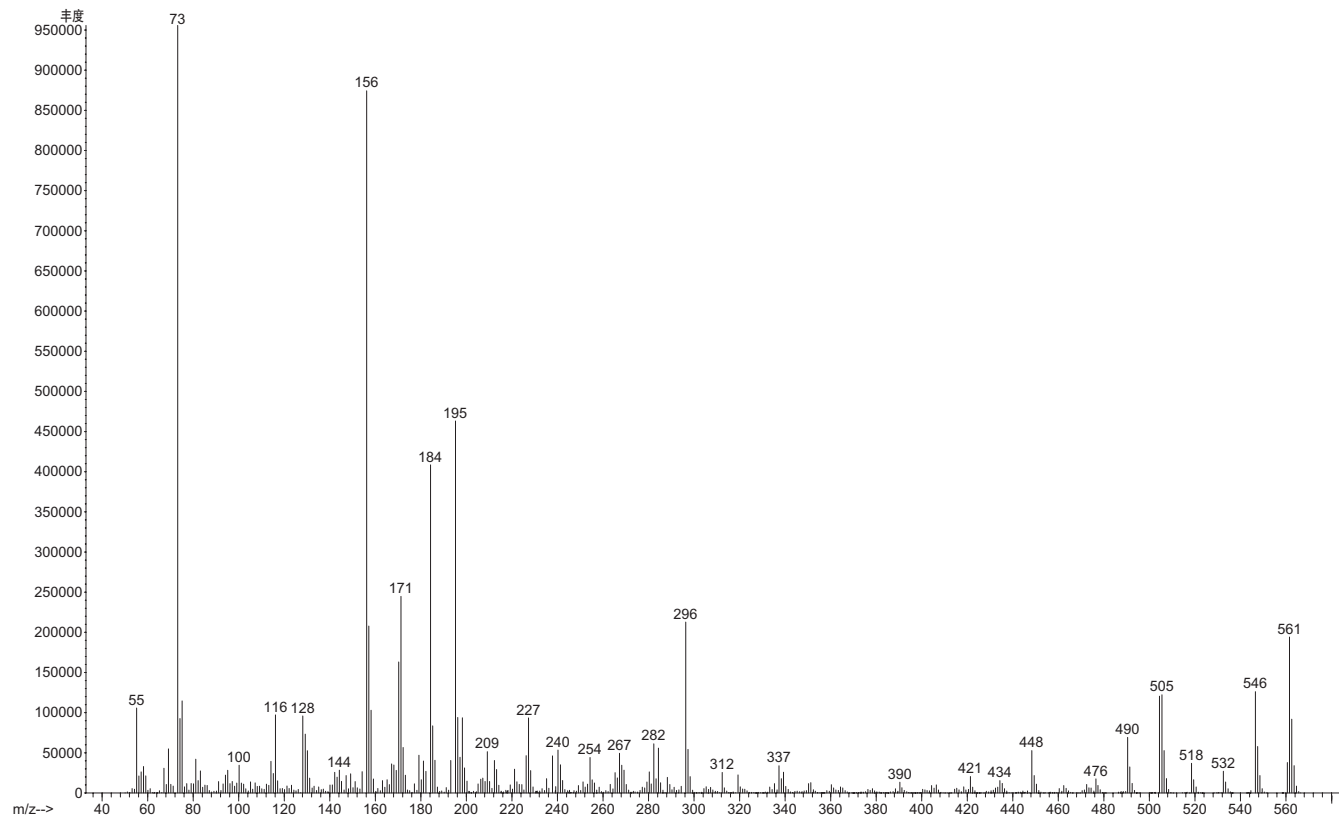
CB-52-二甲基硅生物

化学名称	N-环丙基-11-(2-己基-5-羟基苯氧基)-十一碳酰胺二甲基硅生物	
分子式	C ₃₂ H ₅₉ NO ₃ Si ₂	
分子量	561.4	
主要的 GC/MS 离子	561.5, 546.5, 505.5, 296.2, 195.1, 156.1	
分析用离子	目标离子	561.5
	定性离子-1	546.5
	定性离子-2	505.5
保留时间	9.31 min	
LOD	尚未确定	

分子结构:



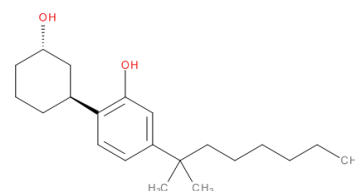
质谱图:



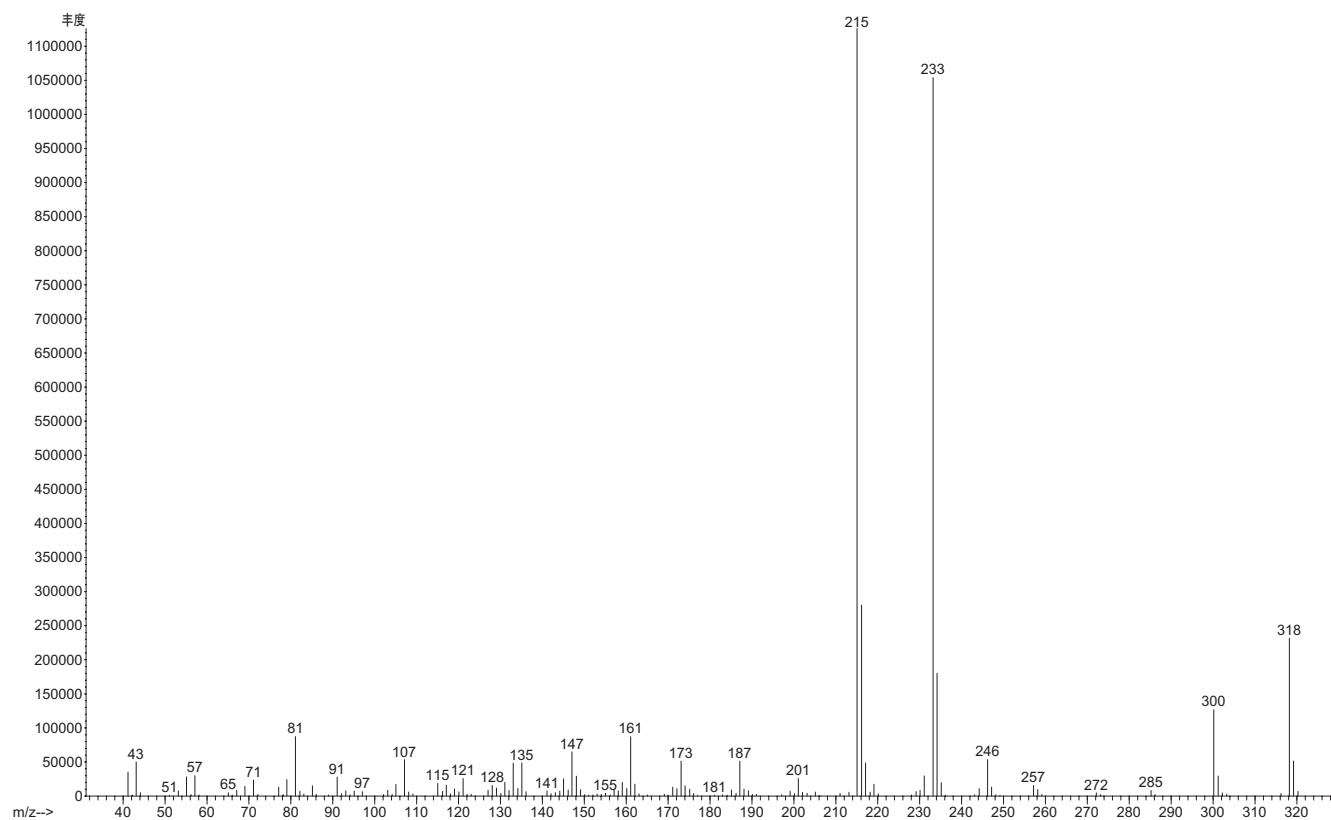
CP47,497 (C7 类似物)

化学名称	2-[(1R,3S)-3-羟基环己基]-5-(2-甲基辛-2-基)苯酚	
分子式	$C_{21}H_{34}O_2$	
分子量	318.26	
主要的 GC/MS 离子	215.2, 233.2, 318.3, 300.3	
分析用离子	目标离子	318.3
	定性离子-1	215.2
	定性离子-2	233.2
保留时间	10.96 min	
LOD	0.01 mg/g	
其他说明	采用 BSTFA 生成二甲基硅衍生物 化合物与 C8 类似物有一些共同的常见离子。	

分子结构:



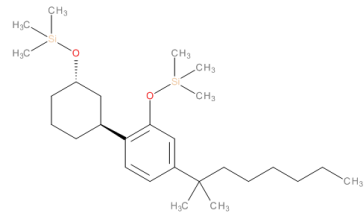
质谱图:



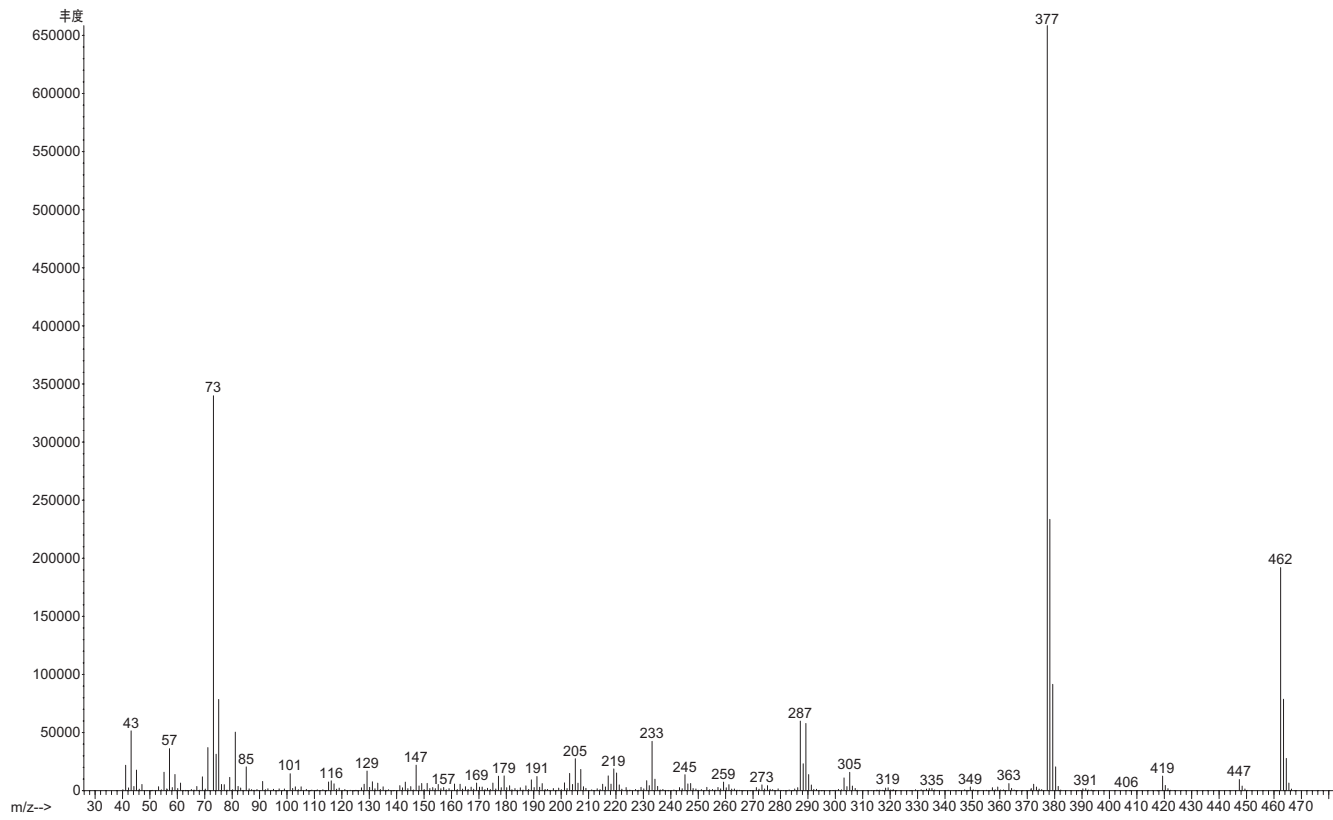
CP47,497 (C7 类似物) -二甲基硅衍生物

化学名称	2-[(1R,3S)-3-羟基环己基]-5-(2-甲基辛-2-基)苯酚-二甲基硅衍生物	
分子式	C ₂₇ H ₅₀ O ₂ Si ₂	
分子量	462.33	
主要的 GC/MS 离子	377, 462, 378, 463	
分析用离子	目标离子	377.3
	定性离子-1	462.4
	定性离子-2	378.3
保留时间	7.43 min	
LOD	0.002 mg/g	
其他说明	化合物与 C8 类似物有一些共同的常见离子。	

分子结构:



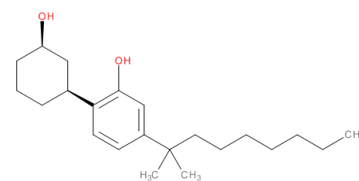
质谱图:



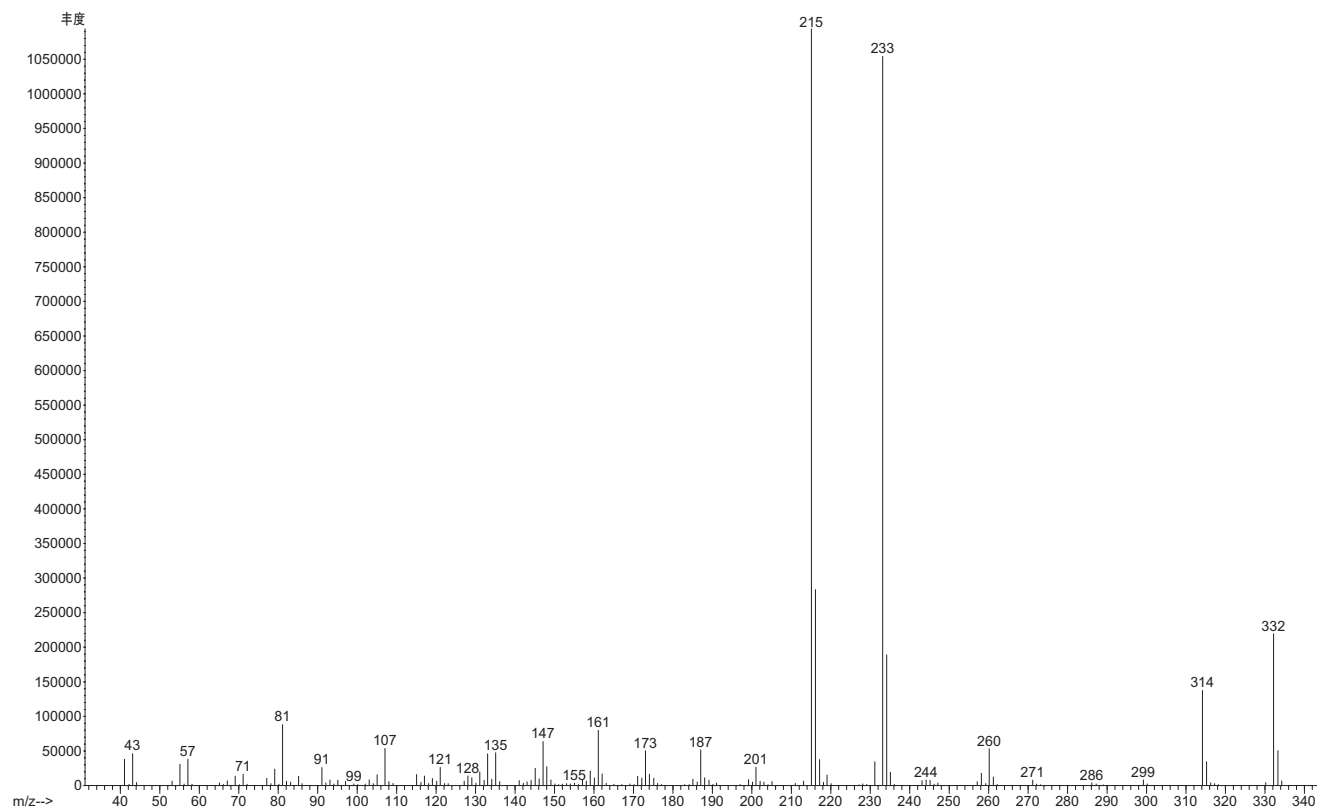
CP47,497 (C8 类似物)

化学名称	2-[(1R,3S)-3-羟基环己基]-5-(2-甲基壬-2-基)苯酚	
分子式	$C_{22}H_{36}O_2$	
分子量	332.27	
主要的 GC/MS 离子	215.2, 233.2, 314.3, 332.3	
分析用离子	目标离子	332.3
	定性离子-1	215.2
	定性离子-2	233.2
保留时间	11.35 min	
LOD	0.02 mg/g	
其他说明	采用 BSTFA 生成二甲基硅衍生物 化合物与 C7 类似物有一些共同的常见离子	

分子结构:



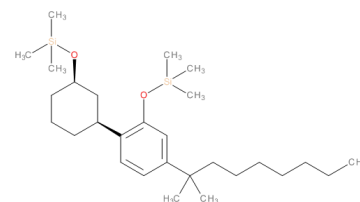
质谱图:



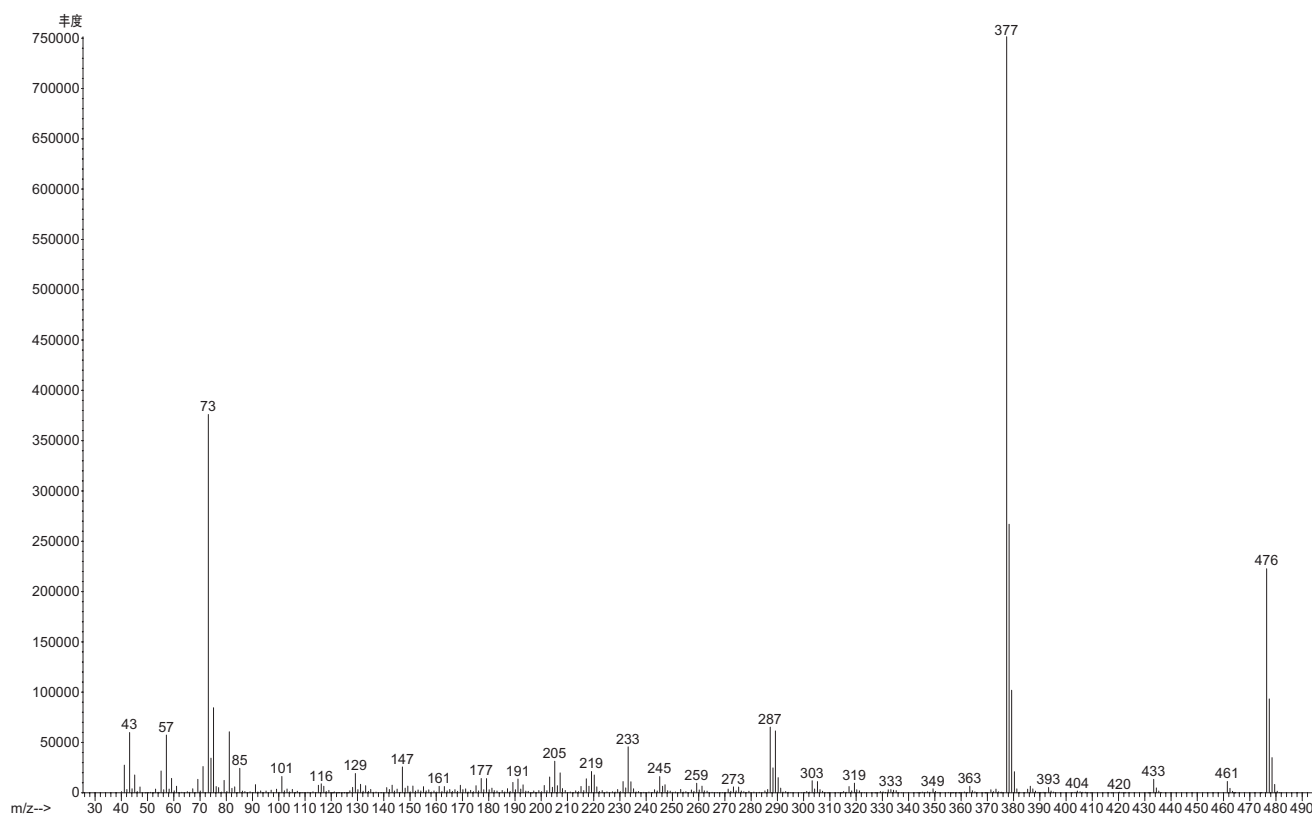
CP47,497 (C8 类似物) -二甲基硅衍生物

化学名称	2-[(1R,3S)-3-羟基环己基]-5-(2-甲基壬-2-基)苯酚-二甲基硅衍生物	
分子式	$C_{28}H_{52}O_2Si_2$	
分子量	476.35	
主要的 GC/MS 离子	377.3, 476.4, 378.3, 477.4	
分析用离子	目标离子	476.4
	定性离子-1	377.3
	定性离子-2	378.3
保留时间	7.67 min	
LOD	0.004 mg/g	
其他说明	化合物与 C7 类似物有一些共同的常见离子。	

分子结构:



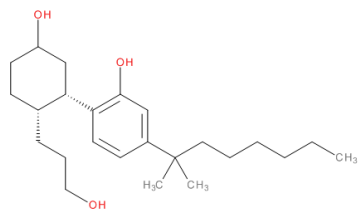
质谱图:



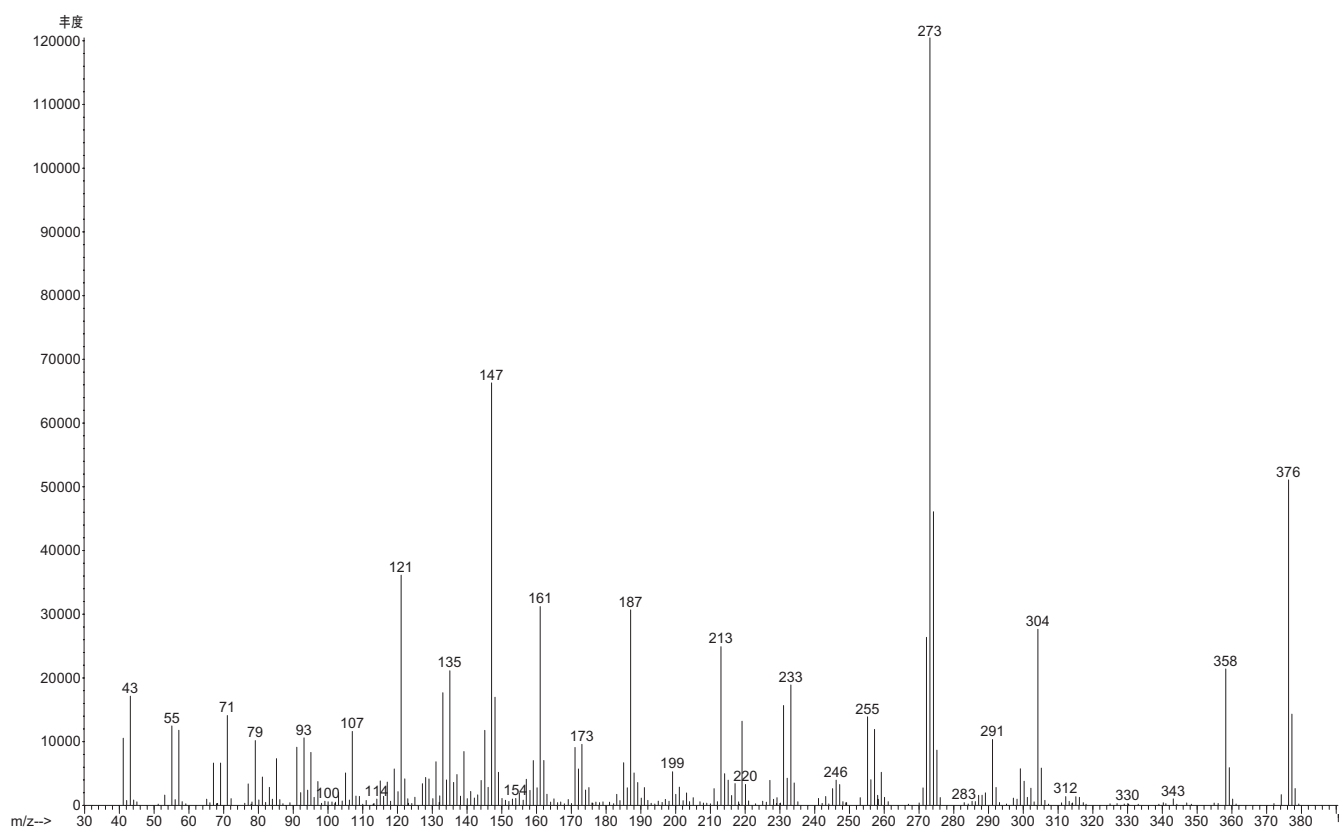
CP55,940

化学名称	2-[[[(1R,2R,5R)-5-羟基-2-(3-羟丙基)环己基]-5-(2-甲基辛-2-基)苯酚	
分子式	C ₂₄ H ₄₀ O ₃	
分子量	376.3	
主要的 GC/MS 离子	273.2, 147.1, 376.3, 121.1, 304.3, 358.3	
分析用离子	目标离子	376.3
	定性离子-1	273.2
	定性离子-2	358.3
保留时间	12.43 min	
LOD	0.05 mg/g	
其他说明	采用 BSTFA 生成三甲基硅衍生物	

分子结构:



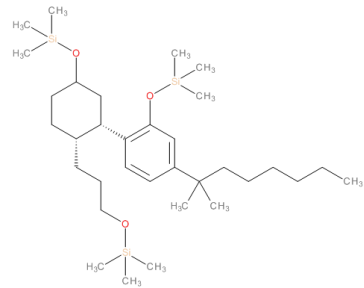
质谱图:



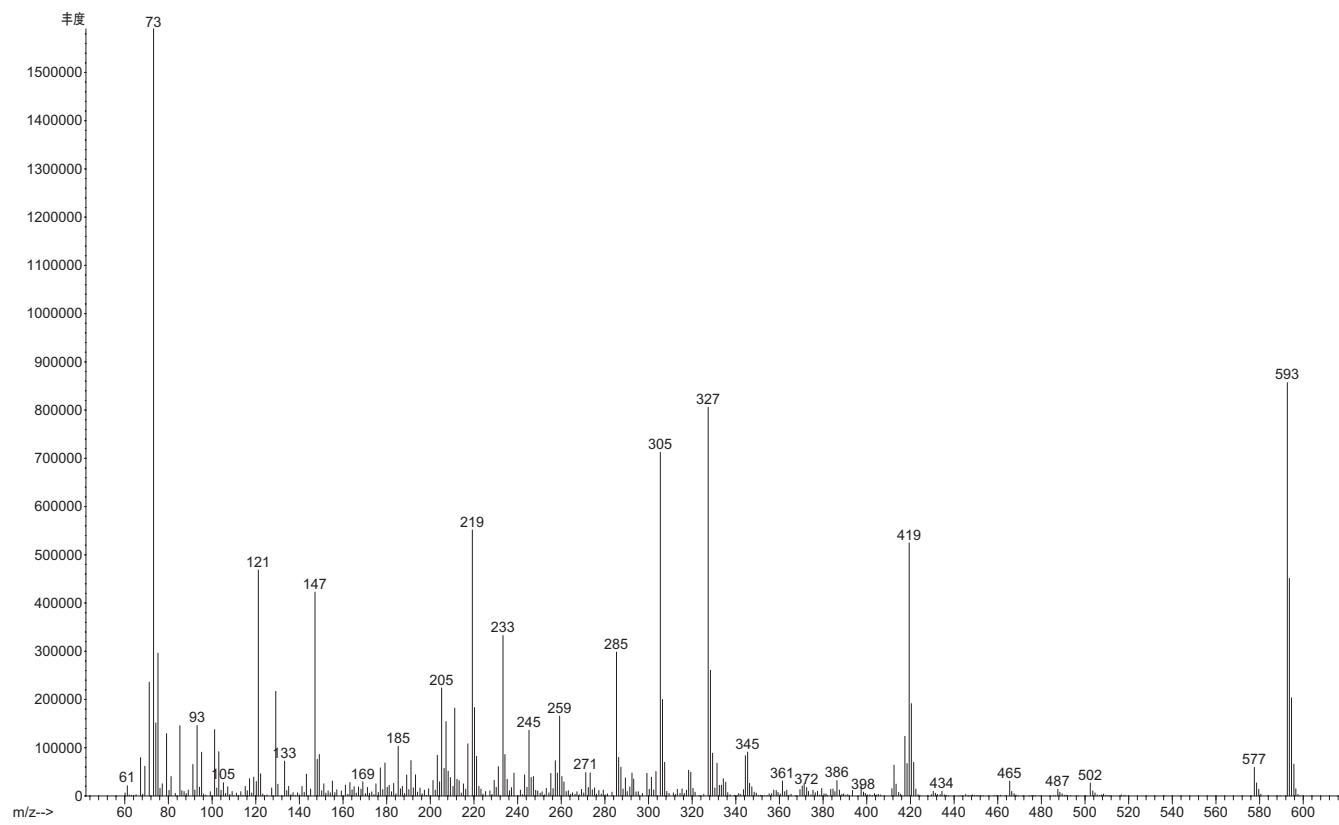
CP55,940-三甲基硅衍生物

化学名称	2-[(1R,2R,5R)-5-羟基-2-(3-羟丙基)环己基]-5-(2-甲基辛-2-基)苯酚-三甲基硅衍生物		
分子式	C ₃₃ H ₆₄ O ₃ Si ₃		
分子量	592.41		
主要的 GC/MS 离子	593.5, 419.4, 327.3, 305.3, 219.2, 121.1		
分析用离子	目标离子	593.5	
	定性离子-1	419.4	
	定性离子-2	327.3	
保留时间	8.27 min		
LOD	0.01 mg/g		

分子结构:



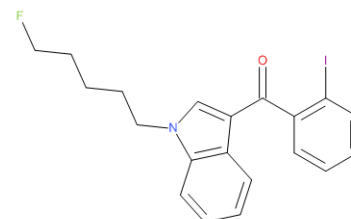
质谱图:



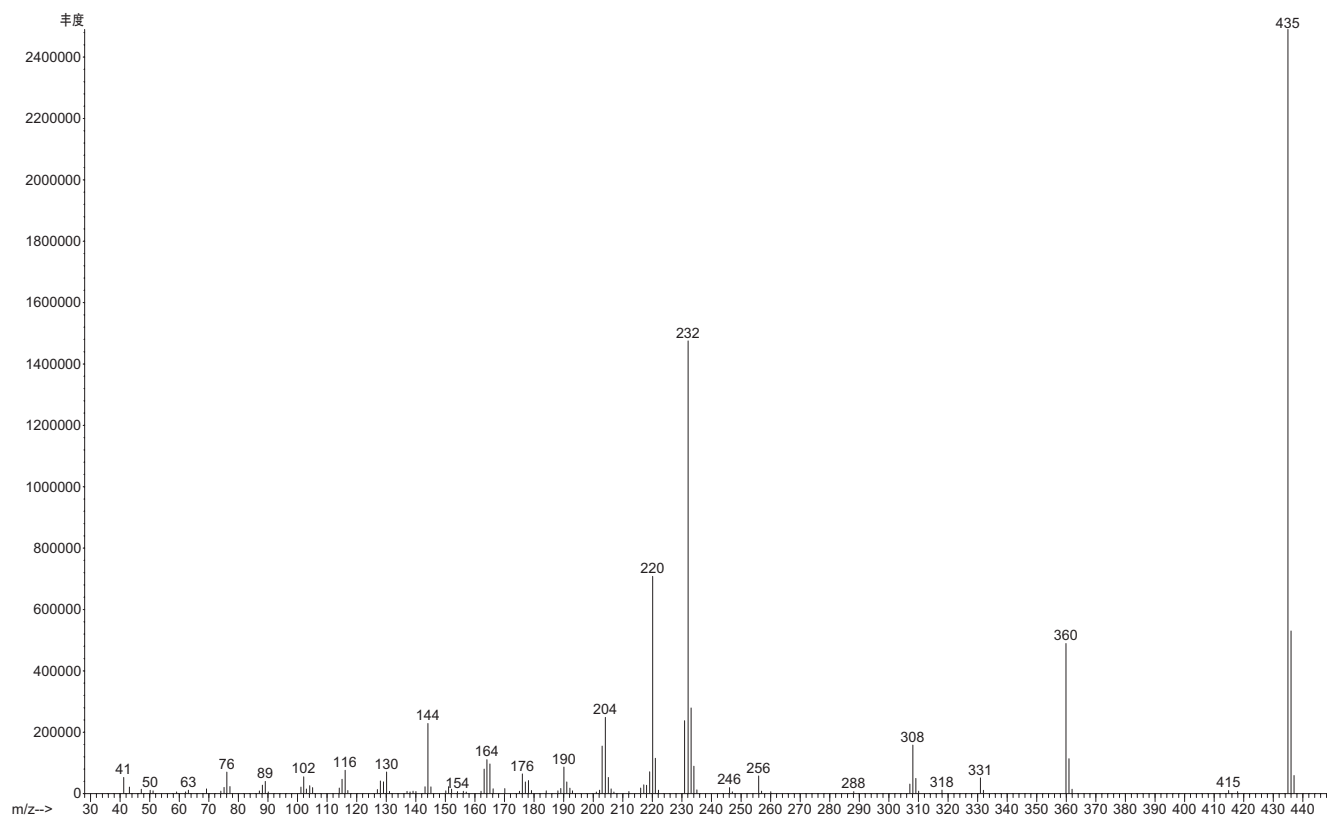
AM-694

化学名称	1-[(5-氟戊基)-1H-吲哚-3-基]-(2-碘苯基)甲酮	
分子式	C ₂₀ H ₁₉ FI	
分子量	435.05	
主要的 GC/MS 离子	435.3, 232.1, 220.1, 360.2	
分析用离子	目标离子	435.3
	定性离子-1	232.1
	定性离子-2	220.1
保留时间	12.66 min	
LOD	尚未确定	
其他说明	没有生成衍生物	

分子结构:



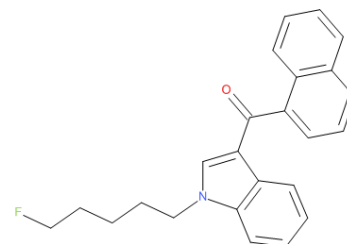
质谱图:



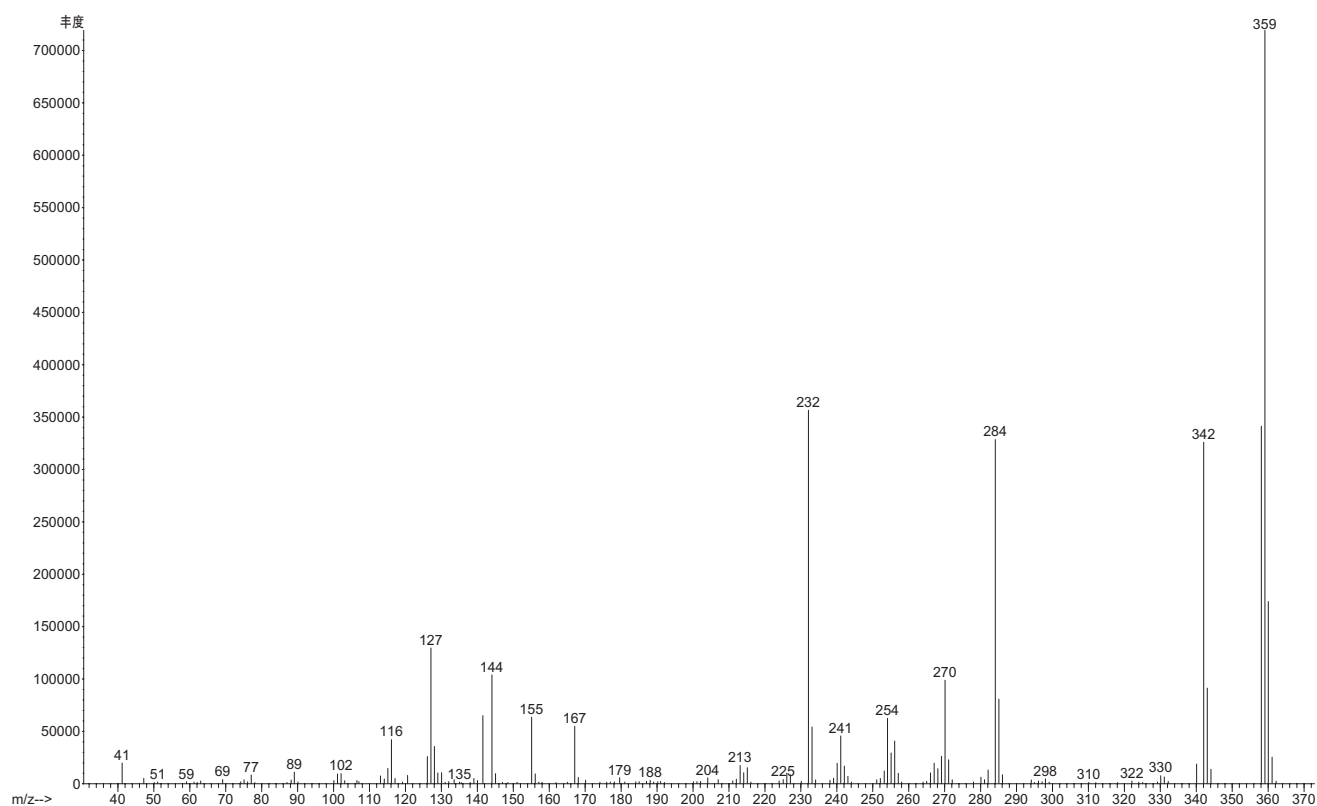
AM-2201

化学名称	1-[(5-氟戊基)-1H-吡啶-3-基]-(萘-1-基)甲酮	
分子式	C ₂₄ H ₂₂ FO	
分子量	359.17	
主要的 GC/MS 离子	127.1, 232.2, 284.2, 359.3	
分析用离子	目标离子	359.3
	定性离子-1	232.2
	定性离子-2	284.2
保留时间	13.41 min	
LOD	尚未确定	
其他说明	没有生成衍生物	
	AM-2201 是 JWH-018 的氟代类似物	

分子结构:



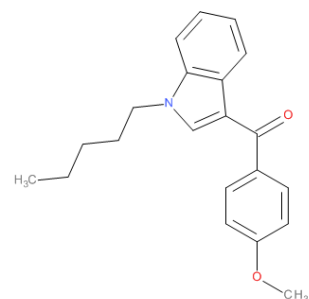
质谱图:



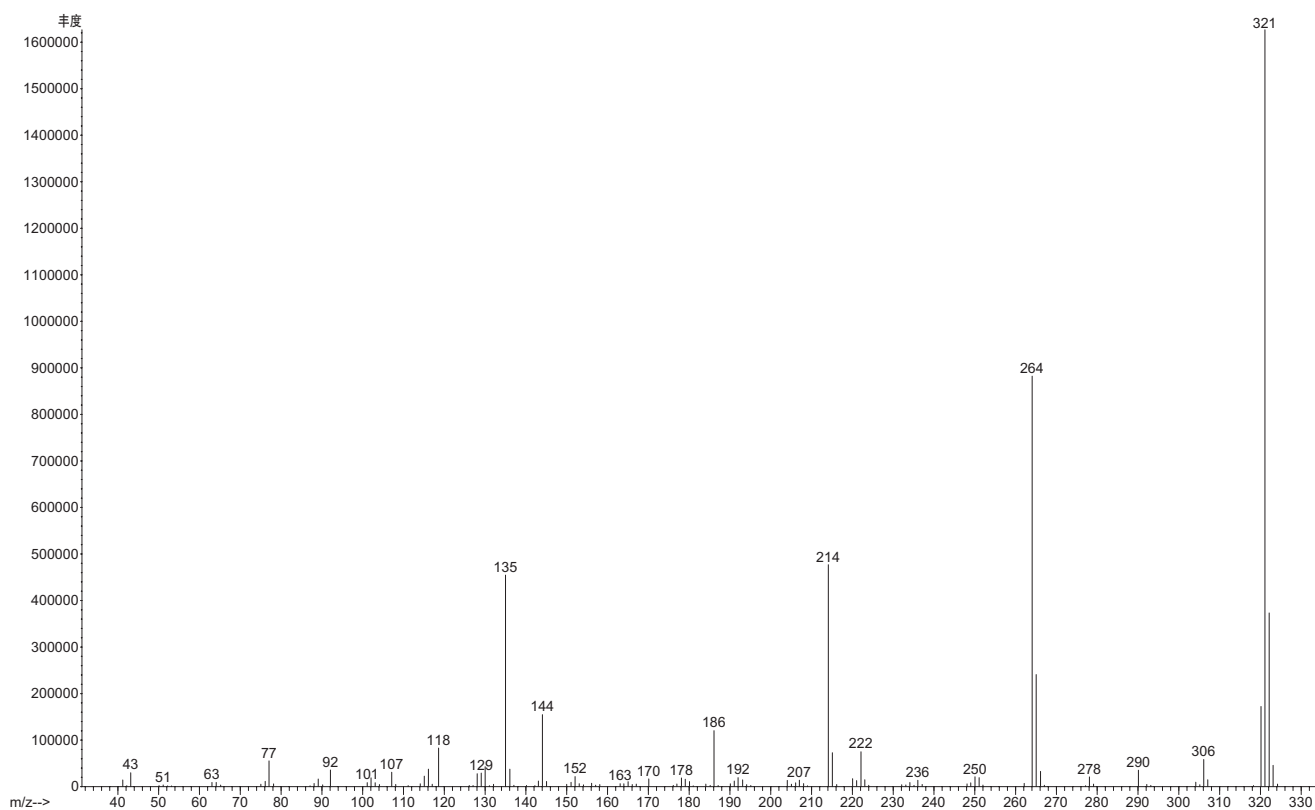
RCS-4

化学名称	((4-甲氧基苯基)(1-戊基-1H-吲哚-3-基)甲酮)	
分子式	C ₂₁ H ₂₃ NO ₂	
分子量	321.17	
主要的 GC/MS 离子	321.3, 264.2, 214.2, 135.1, 144.1, 186.1	
分析用离子	目标离子	321.3
	定性离子-1	264.2
	定性离子-2	214.2
保留时间	12.43 min	
LOD	尚未确定	
其他说明	RCS-4 不进行衍生化	

分子结构:



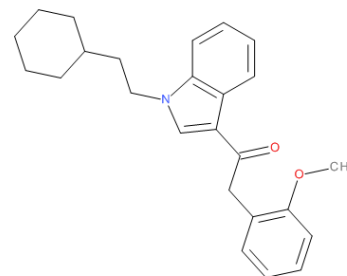
质谱图:



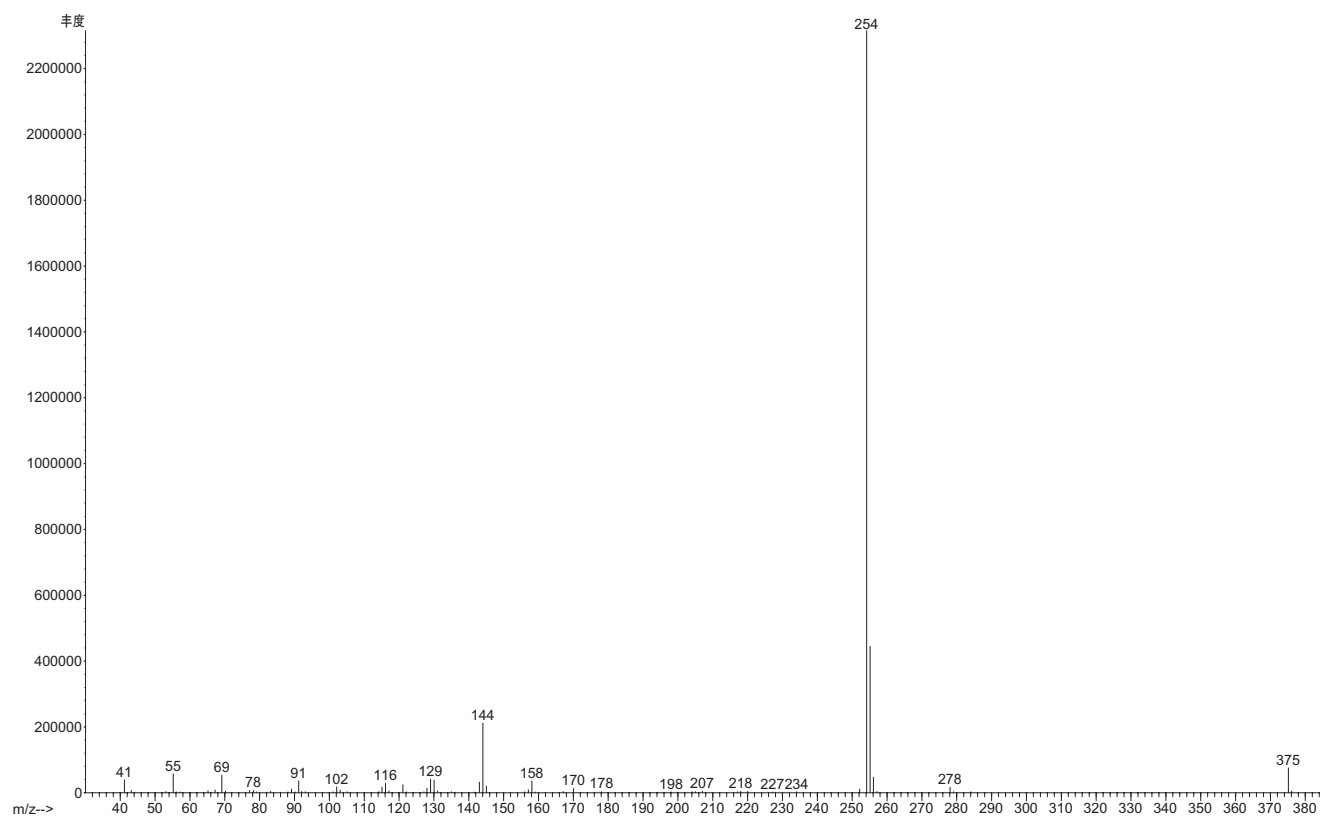
RCS-8

化学名称	1-(1-(2-环己基乙基)-1H-吲哚-3-基)-2-(2-甲氧基苯基)乙酮	
分子式	$C_{25}H_{29}NO_2$	
分子量	375.22	
主要的 GC/MS 离子	254.2, 144.1, 375.3	
分析用离子	目标离子	254.2
	定性离子-1	144.1
	定性离子-2	375.3
保留时间	13.66 min	
LOD	尚未确定	
其他说明	RCS-8 不进行衍生化	

分子结构:



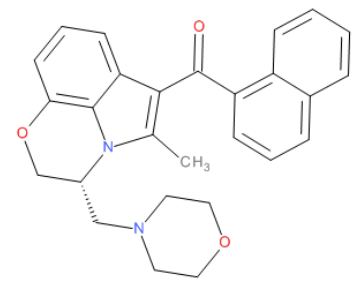
质谱图:



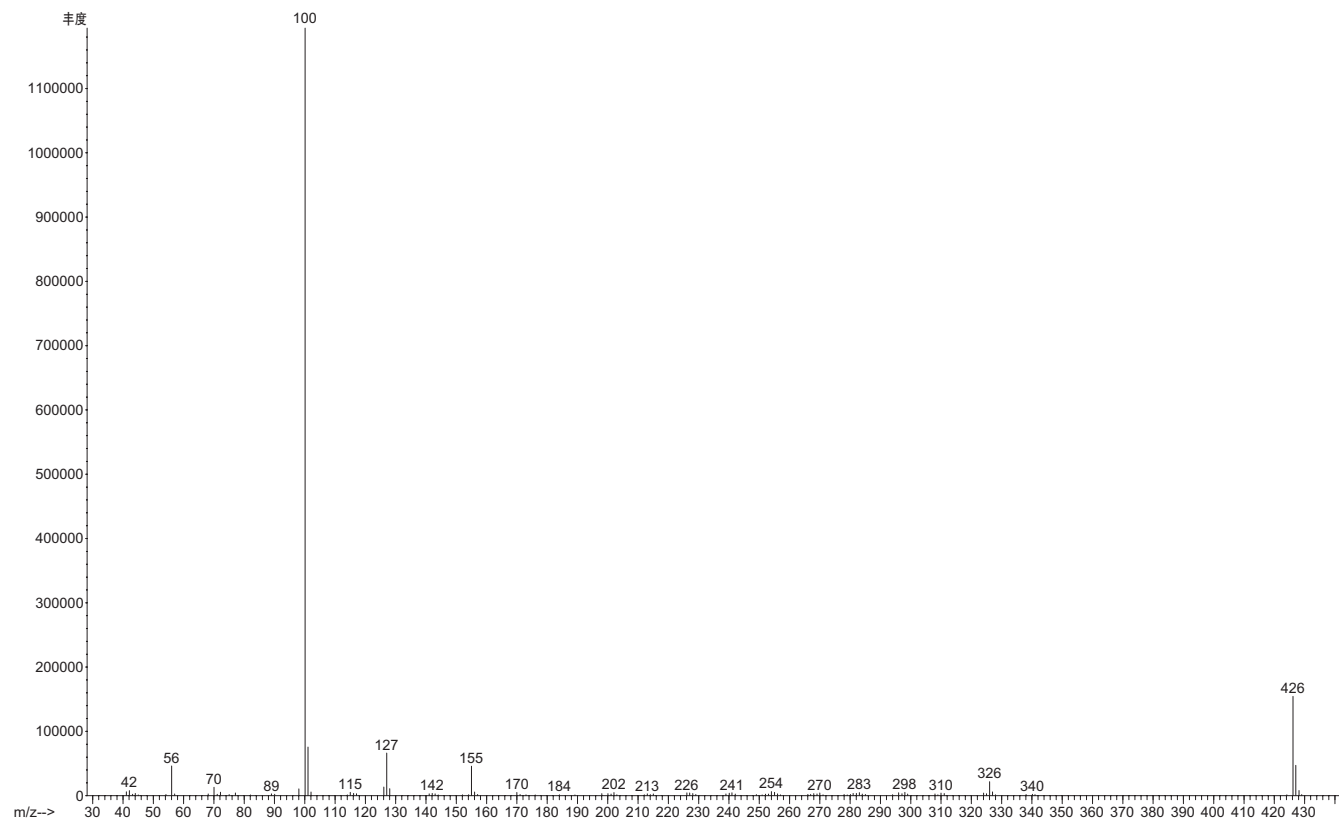
WIN55,212-2

化学名称	(R)-(+)-[2,3-二氢-5-甲基-3-(4-吗啉甲基)吡咯[1,2,3-de]-1,4-苯并恶嗪-6-基]-1-萘基甲酮	
分子式	C ₂₇ H ₂₆ N ₂ O ₃	
分子量	426.19	
主要的 GC/MS 离子	100.0, 127.1, 155.1, 326.3, 426.4, 56.0	
分析用离子	目标离子	100.0
	定性离子-1	426.4
	定性离子-2	127.1
保留时间	15.38 min	
LOD	0.12 mg/g	
其他说明	WIN55,212-2 不进行衍生化。WIN55,212-2 和 WIN55,212-3 是同分异构体，很难对其进行区分	

分子结构:



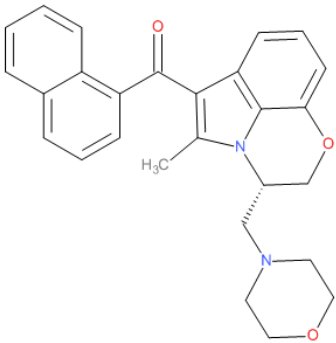
质谱图:



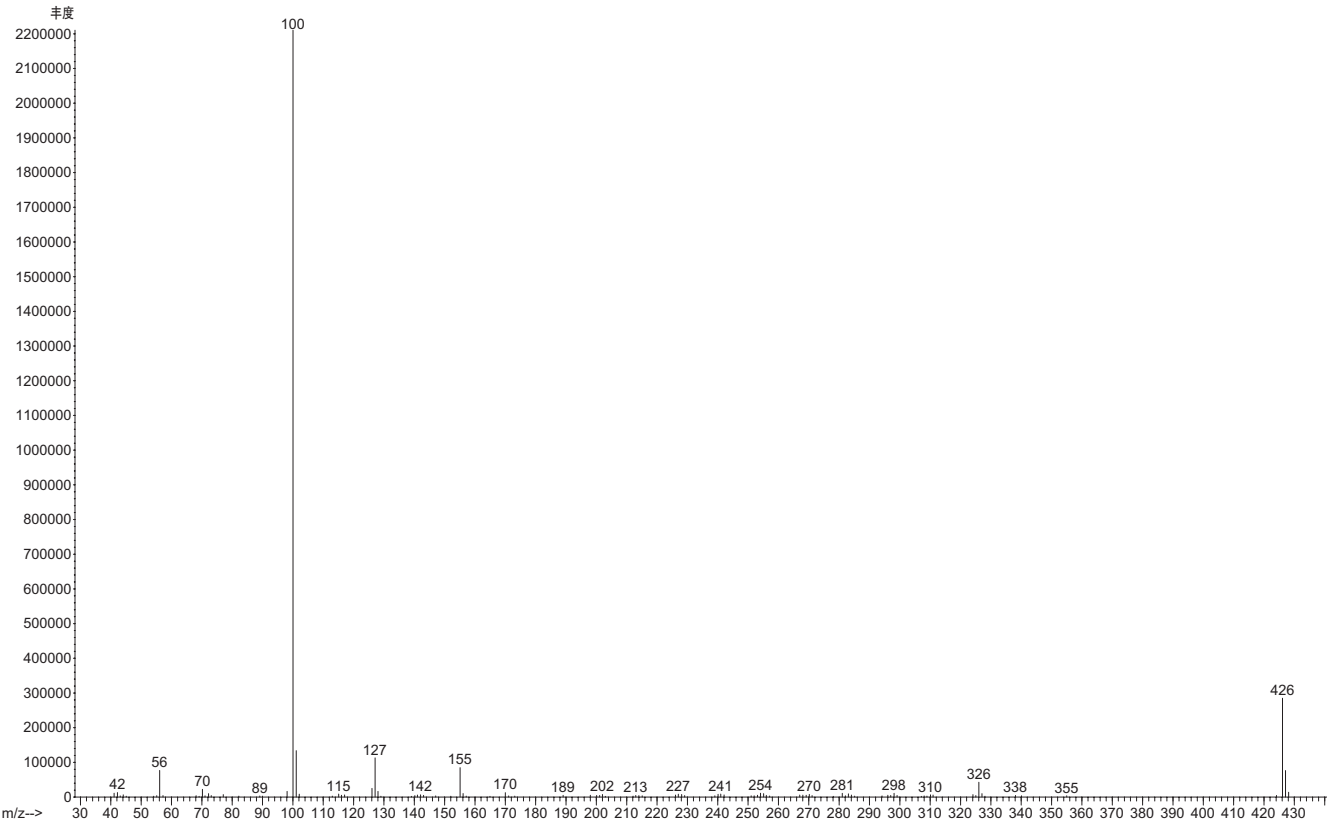
WIN55,212-3

化学名称	[(3S)-2,3-二氢-5-甲基-3-(4-吗啉甲基)吡咯[1,2,3-de]-1,4-苯并恶唞-6-基]-1-萘基-甲酮	
分子式	C ₂₇ H ₂₆ N ₂ O ₃	
分子量	426.19	
主要的 GC/MS 离子	100.0, 127.1, 155.1, 326.3, 426.4, 56.0	
分析用离子	目标离子	100.0
	定性离子-1	426.4
	定性离子-2	127.1
保留时间	15.38 min	
LOD	0.12 mg/g	
其他说明	WIN55,212-2 不进行衍生化。WIN55,212-2 和 WIN55,212-3 是同分异构体，很难对其进行区分	

分子结构:



质谱图:



更多信息:

www.agilent.com.cn

查找当地的安捷伦客户中心:

www.agilent.com/chem/contactus-cn

安捷伦客户服务中心:

免费专线: 800-820-3278

400-820-3278 (手机用户)

联系我们:

LSCA-China_800@agilent.com

在线询价:

www.agilent.com/chem/erfq-cn

本资料中的信息,说明和指标如有变更,恕不另行通知。

© 安捷伦科技(中国)有限公司, 2012

2012年12月3日, 中国印刷

5990-7967CHCN



Agilent Technologies