

소변 내 아편제, 마약성 진통제, 벤조디아제핀, 암페타민, 불법 약물 및 대사체에 대한 종합 LC/MS 분석

응용 자료

법독성학

개요

이 응용 자료에서는 Agilent 6420 QQQ LC/MS 시스템을 사용하여 시료 전처리는 최소화하면서도 충분한 감도, 정량 직선성 및 정확성을 제공하는 동시에 소변 내 다양한 약물을 동시에 분석할 수 있음을 설명합니다. 65가지 약물 및 대사체가 포함된 종합 패널의 정량 분석법을 애질런트 다이내믹 MRM 접근방식을 활용하여 개발하였습니다.

다양한 분석물질에 대한 정량 한계 및 정확성을 포함하는 성능 측정에 대해 설명합니다. 장비에 대한 광범위한 시험을 통해 분석법 견고성을 입증합니다. 이 응용 자료에서 설명하는 모든 분석물질에 대한 직선성은 $R^2 \geq 0.980$ 입니다. 이 분석법은 쉽게 사용자 정의하여 다양한 분석물질을 포함하거나 대상 분석물질 패널을 좁히거나 넓혀 시료 처리량을 향상할 수 있습니다.



Agilent Technologies

서론

법독성학에 대한 이 응용 자료는 LC/MS/MS를 사용하여 표 1에 명시된 65가지 이상의 약물 화합물을 동시에 정량하는 방법을 설명합니다. 이 분석법을 사용하여 분석한 화합물은 기타 약물과 특정 대사체 뿐만 아니라 암페타민, 진통제, 벤조디아제핀 및 아편제가 포함됩니다.

LC/MS/MS를 사용하여 소변 시료 내 다양한 화합물을 신속하게 표적 정량하기 위한 법의학적 분석법을 설명합니다. 일반적으로 이 분석법은 법독성학 감도 요건을 초과하며, 필요한 정량 하한(LLOQ)의 10%까지 감소하는 동시에 직선성 및 재현성이 매우 뛰어납니다. 이 분석법의 핵심 구성요소 중 하나는 다이나믹 multiple reaction monitoring(dMRM)¹을 사용한다는 것으로, 이를 통해 LC/MS/MS 기기가 데이터 무결성을 훼손하지 않고 주어진 시간 내에 더 많은 수의 분석물질을 분석할 수 있습니다. 덕분에 기존의 MRM 분석법을 사용할 때보다 처리량이 더 많은 매우 종합적인 분석물질 분석법을 개발할 수 있었습니다.

실험

분석물질

표 1. 분석 대상 약물 및 대사체

Opiates/Opioids	Benzodiazepines	흥분제(Stimulants)
6-Monoacetyl morphine	2-Hydroxyethylflurazepam	Benzoyllecgonine
Buprenorphine	7-Aminoclonazepam	Cocaethylene
Codeine	7-Aminoflunitrazepam	Cocaine
Dihydrocodeine	α -Hydroxymidazolam	Methylphenidate
EDDP	Alprazolam	<i>m</i> -Hydroxybenzoyllecgonine
Fentanyl	α -Hydroxyalprazolam	Ritalinic acid
Heroin	α -Hydroxytriazolam	Amphetamine
Hydrocodone	Chlordiazepoxide	Fenfluramine
Hydromorphone	Clonazepam	MDA
Meperidine	Desalkylflurazepam	MDEA
Methadone	Diazepam	MDMA
Morphine	Flunitrazepam	Meprobamate
Naloxone	Flurazepam	Methamphetamine
Naltrexone	Lorazepam	Phentermine
N-desmethyltramadol	Midazolam	Zopiclone
Norbuprenorphine	Nitrazepam	
Norfentanyl	Nordiazepam	
Normeperidine	Oxazepam	기타
Norpropoxyphene	Temazepam	Carisoprodol
<i>o</i> -Desmethyltramadol	Triazolam	PCP
Oxycodone		Trazodone
Oxymorphone		Verapamil
Propoxyphene		Zolpidem
Tapentadol		
Tramadol		

LC/MS/MS 구성 및 조건

이 연구에서 사용한 LC/MS/MS 시스템은 Agilent 1260 Infinity Binary 펌프, Agilent 1260 Infinity Thermostatted Column Compartment, Agilent 1260 Infinity Thermostatted Autosampler, 표준 ESI 소스가 장착된 Agilent 6420 QQQ LC/MS 및 MassHunter Quantitative Analysis Software B.05.00 등의 모듈로 구성되어 있습니다. LC와 MS/MS 조건은 표2에 정리되어 있습니다.

표 2. LC 및 MS/MS 조건

LC 조건		
컬럼	Agilent Poroshell 120 EC C18, 2.1 × 100mm, 2.7µm	
컬럼 온도	55°C	
주입량	5µL	
니들 세척	flush port, 100% methanol, 5초	
완충액 A	5mM ammonium formate + 0.01% formic acid in water	
완충액 B	methanol 내 0.01% formic acid	
유속	0.5mL/분	
정지 시간	6.0분	
평형 시간	1.5분	
그레디언트	시간(분)	%B
	0.00	10
	0.50	15
	3.00	50
	4.00	95
	6.00	95
총 분석 시간	7.5분(Agilent 1290 Infinity LC 시스템을 사용하면 이 분석 시간을 크게 줄일 수 있습니다)	
MS/MS 조건		
이온 모드	전자분무, 양이온	
가스 온도	350°C	
가스 유량	12L/분	
분무기	50psi	
캐필러리 전압	2,000V	
Δ EMV	0V	
측정 시간(Dwell time)	변수(다이내믹 MRM)	

dMRM을 이용한 분석법 개발

이렇게 다양한 표적 성분을 분석하는 경우 기존의 MRM 분석법을 개발하는 것은 쉽지 않은 문제입니다. 동시에 모니터링하는 MRM transition의 수가 증가하기 때문에 측정 시간 (dwell time) 한계에 부딪히고, 이로 인해 데이터 품질에 부정적인 영향을 미칩니다. dMRM 분석법은 각 transition에 대해 개별적인 시간 범위를 할당하고 화합물의 용리 범위 동안 화합물에 대한 transition만 모니터링하기 때문에 이러한 문제를 해결할 수 있는 이상적인 솔루션이 될 수 있습니다. dMRM 접근방식에서 또 다른 중요한 측면은 MS 주기 시간이 일정하게 유지되어 최적화된 샘플링 및 일관되고 정확한 정량이 가능하다는 것입니다.¹

200개 이상의 화합물에 대한 여러 MRM transitions에 대해 최적화된 파라미터가 포함된 Agilent Forensic Toxicology 데이터베이스에서 MRM

transitions을 가져와 사용자 정의 dMRM 분석법을 신속하게 생성할 수 있습니다. 표 3은 생성된 dMRM 표를 발췌한 것입니다.

화학물질 및 시약

모든 표준물질 및 표지 내부 표준물질은 Cerilliant(Round Rock, TX)에서 구입하였습니다. 약물에 오염되지 않은 인체 소변은 Golden West Biologicals(Temecula, CA)에서 구입하였습니다. 다른 모든 LC/MS 등급 용매 및 시약은 Sigma-Aldrich, St.(Louis, MO)에서 구입하였습니다.

시료 전처리

표 1에 나열된 65개의 모든 화합물 1,000ng/mL를 약물에 오염되지 않은 인체 소변에 첨가해 검량 표준물질을 준비하였습니다. 표준 검량 농도를 유지하기 위해 연속 2배 희석하였습니다.

표지 내부 표준물질 혼합물을 모든 시료에 첨가하였습니다. 시료를 효소가수분해한 후 물을 첨가해 10배로 희석하였습니다. 시료를 96-well plate에 옮겨 담아 6420 QQQ LC/MS/MS 시스템에 주입하였습니다.

데이터 분석

데이터 분석에는 MassHunter Quantitative Analysis software (B.05.00)를 사용하였습니다. 검량선 직선회귀 과정에서 가중치 $1/x^2$ 를 적용했습니다. 내부 표준물질의 알려진 농도에 대한 MRM 피크 면적 비로 Agilent MassHunter Quantative Analysis 소프트웨어를 사용하여 정량하였습니다.

표 3. dMRM 표에서 발췌

화합물명	Prec ion	MS1 res	Prod ion	MS2 res	Frag (V)	CE (V)	RT	RT 범위
Oxymorphone	302.1	Unit	284.0	Unit	117	17	0.80	0.5
Oxymorphone	302.1	Unit	227.0	Unit	117	29	0.80	0.5
Morphine	286.2	Unit	165.1	Unit	158	41	0.85	0.7
Morphine	286.2	Unit	152.0	Unit	158	60	0.85	0.7
Hydromorphone	286.2	Unit	185.0	Unit	159	29	1.04	0.7
Hydromorphone	286.2	Unit	157.0	Unit	159	45	1.04	0.7
Codeine	300.2	Unit	165.1	Unit	158	45	1.77	0.5
Codeine	300.2	Unit	58.1	Unit	158	29	1.77	0.5
Naloxone	328.2	Unit	310.0	Unit	91	17	1.81	0.5
Naloxone	328.2	Unit	211.9	Unit	91	41	1.81	0.5
Oxycodone	316.2	Unit	298.1	Unit	143	17	1.91	0.5
Oxycodone	316.2	Unit	256.1	Unit	143	25	1.91	0.5
Naltrexone	342.2	Unit	324.0	Unit	117	21	1.99	0.5
Naltrexone	342.2	Unit	55.0	Unit	117	41	1.99	0.5
Hydrocodone	300.2	Unit	199.0	Unit	159	29	2.05	0.5
Hydrocodone	300.2	Unit	128.0	Unit	159	65	2.05	0.5
6-Monoacetyl morphine	328.2	Unit	165.1	Unit	158	41	2.07	0.5
6-Monoacetyl morphine	328.2	Unit	43.1	Unit	158	60	2.07	0.5
d-Amphetamine	136.1	Unit	119.1	Unit	66	5	2.18	0.5
d-Amphetamine	136.1	Unit	91.0	Unit	66	17	2.18	0.5
Methamphetamine	150.1	Unit	119.0	Unit	92	5	2.27	0.5
Methamphetamine	150.1	Unit	91.0	Unit	92	17	2.27	0.5
MDMA	194.1	Unit	163.0	Unit	97	9	2.28	0.5
MDMA	194.1	Unit	105.0	Unit	97	25	2.28	0.5

결과 및 토의

실험 부분에서 설명한 크로마토그래피 조건을 사용하면 크로마토그래피 피크 모양이 우수하고 총 분석 시간 6분 이내에 모든 분석물질이 분리됩니다. 중요한 크로마토그래피 인자로 이 다양한 시료에서 동중원소 분석물질에 대한 우수한 베이스라인 분리를 획득할 수 있습니다. 이는 표 2에 나열된 크로마토그래피 조건을 사용하여 morphine/hydromorphone, codeine/hydrocodone 및 methamphetamine/phentermine에 대해 수행하였습니다. 그림 1은 동위원소 표지 내부 표준물질과 함께 모든 분석물질이 첨가된 매트릭스 시료를 사용하여 이를 설명하는 오버레이한 크로마토그램을 보여줍니다.

약물에 오염되지 않은 인체 소변에 표 1에 나열된 65가지 화합물의 원액을 1~10,000ng/mL의 농도로 첨가해 검량 표준물질을 준비하였습니다. 별도로 원액을 사용해 품질 관리(QC) 시료를 만들었으며, 5, 100 및 750ng/mL의 세 가지 농도를 준비하였습니다. 검량 및 QC 표준물질은 3일 동안 세 번 분석하여 정확성 및 재현성을 평가하였습니다. 모든 화합물의 정확성은 90~110% 사이로 나타났으며, 변동 계수(CV) 값은 10% 미만입니다(표 4). 검량선은 광범위한 농도 범위에서 뛰어난 직선성을 나타냈습니다(그림 2). 분석한 각 화합물에 대한 정량 하한(LLOQ)은 표 5에서 확인할 수 있습니다.

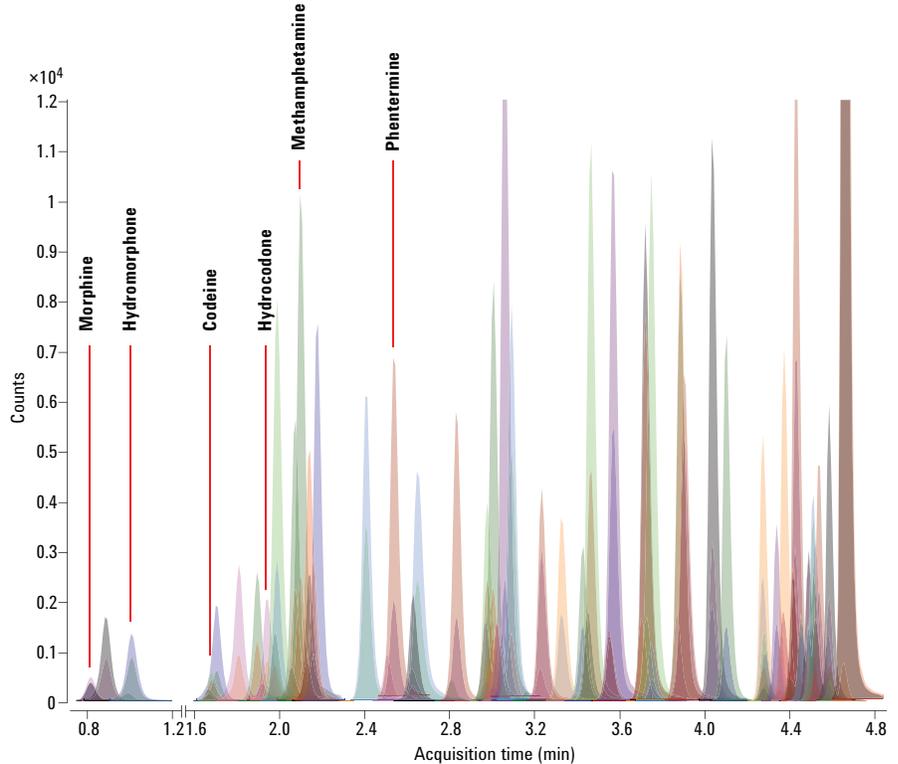


그림 1. 단일 분석에서 65개 약물 및 대사체에 대한 크로마토그램

표 4. 소변 내 다양한 분석 대상 화합물에 대한 대표 일중 및 일간 정확성 및 정밀도, 분석물질의 농도는 100ng/mL였습니다.

	일중(n = 3)		일간(n = 9)	
	평균 정확도(%)	CV(%)	평균 정확도(%)	CV(%)
Buprenorphine	95.9	3.7	97.9	5.7
Carisoprodol	92.5	5.4	97.6	4.8
EDDP	97.3	2.9	96.2	3.0
Hydrocodone	96.8	3.5	98.4	7.5
Hydromorphone	96.8	1.9	96.6	4.9
Methadone	94.3	2.1	90.4	3.3
Morphine	101.2	3.8	99.9	3.1
Oxycodone	100.8	3.1	95.3	7.8
Oxymorphone	95.3	7.0	98.4	2.6
Propoxyphene	95.6	5.5	91.9	2.8

3,000회 연속 주입 후 전체 크로마토그래피 분석 전반에서 여러 가지 분석물질의 머무름 시간을 모니터링해 분석법의 견고성을 시험하였습니다. 모든 분석물질의 편차는 1% 미만이었습니다(표 6).

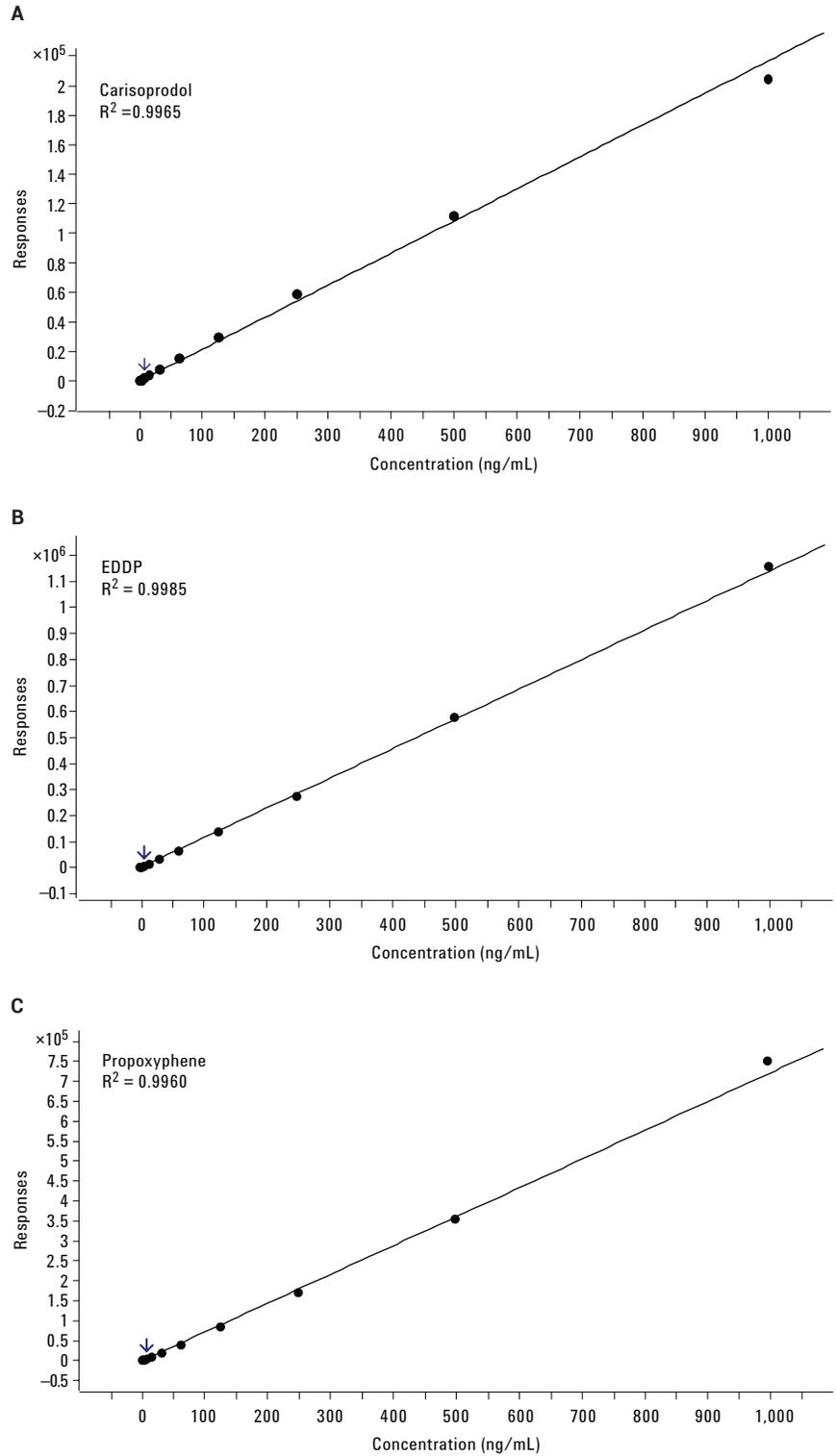


그림 2. carisoprodol (A), EDDP (B) 및 propoxyphene (C)에 대한 대표 검량선

표 5. 다양한 약물 및 대사체에 대한 정량 하한(LLOQ)

Opiates/Opioids		Benzodiazepines		흥분제(Stimulants)	
화합물	LLOQ	화합물	LLOQ	화합물	LLOQ
6-Monoacetyl morphine	10	2-OH-Ethylflurazepam	200	Amphetamine	5
Buprenorphine	10	7-Aminoclonazepam	10	Benzoylecgonine	5
Codeine	25	7-Aminoflunitrazepam	5	Cocaethylene	5
Dihydrocodeine	25	<i>alpha</i> -OH-Midazolam	10	Cocaine	5
EDDP	10	Alprazolam	10	Fenfluramine	1
Fentanyl	1	<i>a</i> -OH-alprazolam	20	MDA	5
Heroin	10	<i>a</i> -OH-triazolam	50	MDEA	1
Hydrocodone	10	Chlordiazepoxide	10	MDMA	5
Hydromorphone	5	Clonazepam	25	Meprobamate	10
Meperidine	5	Desalkylflurazepam	20	Methamphetamine	1
Methadone	10	Diazepam	10	Methylphenidate	5
Morphine	5	Flunitrazepam	10	<i>m</i> -Hydroxybenzoylecgonine	10
Naloxone	5	Flurazepam	5	Phentermine	1
Naltrexone	10	Lorazepam	50	Ritalinic acid	5
N-Desmethyltramadol	10	Midazolam	10	Zopiclone	5
Norbuprenorphine	25	Nitrazepam	25	기타	
Norfentanyl	1	Nordiazepam	25	화합물	LLOQ
Normeperidine	5	Oxazepam	50	Carisoprodol	5
Norpropoxyphene	5	Temazepam	25	PCP	1
<i>o</i> -Desmethyltramadol	5	Triazolam	5	Trazodone	1
Oxycodone	10			Verapamil	2
Oxymorphone	5			Zolpidem	5
Propoxyphene	5				
Tapentadol	5				
Tramadol	1				

표 6. 단일 컬럼에서 3,000회 이상의 주입 동안 머무름 시간 재현성 스냅샷

분석물질	% CV	분석물질	% CV	분석물질	% CV
Morphine	0.7	Meperidine	0.4	Triazolam	0.0
Codeine	0.4	Zolpidem	0.3	Naltrexone	0.1
Hydrocodone	0.4	Fentanyl	0.1	Chlordiazepoxide	0.1
MDMA	0.3	EDDP	0.1	Desmethyl diazepam	0.1
Norfentanyl	0.2	Nitrazepam	0.1	Buprenorphine	0.3
Heroin	0.2	Propoxephine	0.1	Cocaethylene	0.2
Methylphenidate	0.2	Buprenorphine	0.3	11-nor-9-carboxy- Δ 9-THC	0.0

결론

인체 소변 내 65가지 약물 및 대사체 정량을 위한 분석법을 Agilent 6420 QQQ LC/MS를 이용하여 개발하였습니다. Agilent 법독성학 데이터베이스를 사용하여 사용자 정의 분석법부터 종합 분석법까지 분석법을 신속하고 손쉽게 개발합니다. 이러한 유형의 분석은 Agilent 다이나믹 MRM 접근방법으로 정확하고 재현성 있는 정량을 보장합니다.

이 응용 자료에서는 여러 가지 화합물 패널을 사용하여 Agilent 시스템의 다이나믹 MRM 및 작동 품질의 최적화된 기능을 입증하였습니다.

다양한 분석물질과 분석물질의 동위원소 표지 내부 표준물질을 6분 이내에 분석할 수 있습니다. 분석물질 패널을 좁히거나 넓혀 분석 시간을 줄이고 시료 처리량을 크게 향상할 수 있습니다.

이러한 극단적인 수집 조건에서 모든 일반적인 검출 한계가 충족되었습니다. 각 직선 범위에 대한 모든 분석물질의 정확성은 98% 이상인 것으로 나타났습니다. 각 분석물질과 관련된 더 작은 존재비를 가진 정성 이온에 대한 %CV 정밀성 데이터와 함께 신호대 잡음비를 측정하여 검출 한계를 보수적으로 측정하였습니다.

이후 조사에서는 희석 시료 전처리 기법을 비교 및 대조하고 SPE와 같은 다른 기법을 사용할 것입니다.

참고 문헌

1. New Dynamic MRM Mode Improves Data Quality and Triple Quad Quantification in Complex Analyses. Agilent Publication 5990-3595EN.

부록 A - 모든 분석물질 및 내부표준물질(ISTD)에 대한 MRM transition

Cpd name	ISTD?	Prec ion MS1 res	Prod ion MS2 res	Frag (V)	CE (V)	Cell acc (V)	머무름 시간 (분)	머무름 범위	극성
11-nor-9-carboxy- Δ 9-THC	아니요	345.2, Unit/Enh (6490)	327.2 Unit/Enh (6490)	140	18	7	5.01	0.5	양이온
11-nor-9-carboxy- Δ 9-THC	아니요	345.2 Unit/Enh (6490)	299 Unit/Enh (6490)	140	18	7	5.01	0.5	양이온
11-nor-9-carboxy- Δ 9-THC-d9	예	354.1 Unit/Enh (6490)	336.1 Unit/Enh (6490)	136	13	7	5	0.5	양이온
11-nor-9-carboxy- Δ 9-THC-d9	예	354.1 Unit/Enh (6490)	308.2 Unit/Enh (6490)	136	17	7	5	0.5	양이온
2-OH-Ethylflurazepam	아니요	333.1 Unit/Enh (6490)	211 Unit/Enh (6490)	126	37	7	4.44	0.5	양이온
2-OH-Ethylflurazepam	아니요	333.1 Unit/Enh (6490)	109.1 Unit/Enh (6490)	126	29	7	4.44	0.5	양이온
6-Acetylmorphine-d6	예	334.2 Unit/Enh (6490)	211 Unit/Enh (6490)	168	25	7	1.9	0.5	양이온
6-Monoacetyl morphine	아니요	328.2 Unit/Enh (6490)	165.1 Unit/Enh (6490)	158	41	7	1.95	0.5	양이온
6-Monoacetyl morphine	아니요	328.2 Unit/Enh (6490)	43.1 Unit/Enh (6490)	158	60	7	1.95	0.5	양이온
7-Aminoclonazepam	아니요	286.1 Unit/Enh (6490)	222.1 Unit/Enh (6490)	141	25	7	3.01	0.5	양이온
7-Aminoclonazepam	아니요	286.1 Unit/Enh (6490)	121.1 Unit/Enh (6490)	141	29	7	3.01	0.5	양이온
7-Aminoclonazepam-d4	예	290.1 Unit/Enh (6490)	121.1 Unit/Enh (6490)	151	33	7	2.98	0.5	양이온
7-Aminoflunitrazepam	아니요	284.1 Unit/Enh (6490)	227 Unit/Enh (6490)	151	25	7	3.42	0.5	양이온
7-Aminoflunitrazepam	아니요	284.1 Unit/Enh (6490)	135.1 Unit/Enh (6490)	151	25	7	3.42	0.5	양이온
<i>alpha</i> -Hydroxyalprazolam	아니요	325.1 Unit/Enh (6490)	297 Unit/Enh (6490)	150	28	7	4.38	0.5	양이온
<i>alpha</i> -Hydroxyalprazolam	아니요	325.1 Unit/Enh (6490)	216 Unit/Enh (6490)	150	41	7	4.38	0.5	양이온
<i>alpha</i> -Hydroxyethylflurazepam	아니요	333.1 Unit/Enh (6490)	211 Unit/Enh (6490)	155	37	7	4.44	0.5	양이온
<i>alpha</i> -Hydroxyethylflurazepam	아니요	333.1 Unit/Enh (6490)	109 Unit/Enh (6490)	155	29	7	4.44	0.5	양이온
<i>alpha</i> -Hydroxymidazolam	아니요	342.1 Unit/Enh (6490)	324.1 Unit/Enh (6490)	148	21	7	4.51	0.5	양이온
<i>alpha</i> -Hydroxymidazolam	아니요	342.1 Unit/Enh (6490)	168.1 Unit/Enh (6490)	148	45	7	4.51	0.5	양이온
<i>alpha</i> -Hydroxytriazolam	아니요	359.1 Unit/Enh (6490)	331 Unit/Enh (6490)	169	29	7	4.34	0.5	양이온
<i>alpha</i> -Hydroxytriazolam	아니요	359.1 Unit/Enh (6490)	176 Unit/Enh (6490)	169	29	7	4.34	0.5	양이온
Alprazolam	아니요	309.1 Unit/Enh (6490)	281 Unit/Enh (6490)	179	25	7	4.5	0.5	양이온
Alprazolam	아니요	309.1 Unit/Enh (6490)	205 Unit/Enh (6490)	179	49	7	4.5	0.5	양이온
Alprazolam-d5	예	314.1 Unit/Enh (6490)	286.1 Unit/Enh (6490)	166	25	7	4.48	0.5	양이온
Benzoylcegonine	아니요	290.1 Unit/Enh (6490)	168.1 Unit/Enh (6490)	118	17	7	2.64	0.5	양이온
Benzoylcegonine	아니요	290.1 Unit/Enh (6490)	77 Unit/Enh (6490)	118	60	7	2.64	0.5	양이온
Benzoylcegonine-d8	예	298.2 Unit/Enh (6490)	171.1 Unit/Enh (6490)	124	17	7	2.59	0.5	양이온
Buprenorphine	아니요	468.3 Unit/Enh (6490)	396.2 Unit/Enh (6490)	200	41	7	4.51	0.5	양이온

Cpd name	ISTD?	Prec ion MS1 res	Prod ion MS2 res	Frag (V)	CE (V)	Cell acc (V)	머무름 시간 (분)	머무름 범위	극성
Buprenorphine	아니요	468.3 Unit/Enh (6490)	55.1 Unit/Enh (6490)	200	60	7	4.51	0.5	양이온
Buprenorphine-d4	예	472.3 Unit/Enh (6490)	59.2 Unit/Enh (6490)	198	57	7	4.39	0.5	양이온
Carisoprodol	아니요	261.2 Unit/Enh (6490)	176.1 Unit/Enh (6490)	67	5	7	4.4	0.5	양이온
Carisoprodol	아니요	261.2 Unit/Enh (6490)	55.1 Unit/Enh (6490)	67	29	7	4.4	0.5	양이온
Carisoprodol-d7	예	268.2 Unit/Enh (6490)	183.1 Unit/Enh (6490)	72	5	7	4.39	0.5	양이온
Chlordiazepoxide	아니요	300.1 Unit/Enh (6490)	282.1 Unit/Enh (6490)	117	21	7	4.53	0.5	양이온
Chlordiazepoxide	아니요	300.1 Unit/Enh (6490)	227 Unit/Enh (6490)	117	21	7	4.53	0.5	양이온
Chlordiazepoxide-d5	예	305.1 Unit/Enh (6490)	286.1 Unit/Enh (6490)	124	25	7	4.51	0.5	양이온
Clonazepam	아니요	316.1 Unit/Enh (6490)	270.1 Unit/Enh (6490)	158	25	7	4.27	0.5	양이온
Clonazepam	아니요	316.1 Unit/Enh (6490)	214 Unit/Enh (6490)	158	41	7	4.27	0.5	양이온
Clonazepam-d4	예	320.1 Unit/Enh (6490)	274 Unit/Enh (6490)	136	25	7	4.26	0.5	양이온
Cocaethylene	아니요	318.2 Unit/Enh (6490)	196.1 Unit/Enh (6490)	123	17	7	3.45	0.5	양이온
Cocaethylene	아니요	318.2 Unit/Enh (6490)	82.1 Unit/Enh (6490)	123	33	7	3.45	0.5	양이온
Cocaethylene-d8	예	326.2 Unit/Enh (6490)	204.1 Unit/Enh (6490)	126	17	7	3.38	0.5	양이온
Cocaine	아니요	304.2 Unit/Enh (6490)	182.1 Unit/Enh (6490)	138	17	7	2.98	0.5	양이온
Cocaine	아니요	304.2 Unit/Enh (6490)	77 Unit/Enh (6490)	138	61	7	2.99	0.5	양이온
Cocaine-d3	예	307.2 Unit/Enh (6490)	185.1 Unit/Enh (6490)	129	17	7	2.93	0.5	양이온
Codeine	아니요	300.2 Unit/Enh (6490)	165.1 Unit/Enh (6490)	158	45	7	1.67	0.5	양이온
Codeine	아니요	300.2 Unit/Enh (6490)	128 Unit/Enh (6490)	158	60	7	1.67	0.5	양이온
Codeine-d6	예	306.2 Unit/Enh (6490)	218.1 Unit/Enh (6490)	151	25	7	1.58	0.5	양이온
d-Amphetamine	아니요	136.1 Unit/Enh (6490)	119.1 Unit/Enh (6490)	66	5	7	1.96	0.5	양이온
d-Amphetamine	아니요	136.1 Unit/Enh (6490)	91 Unit/Enh (6490)	66	17	7	1.96	0.5	양이온
Desalkylflurazepam	아니요	289.1 Unit/Enh (6490)	226 Unit/Enh (6490)	131	29	7	4.48	0.5	양이온
Desalkylflurazepam	아니요	289.1 Unit/Enh (6490)	140 Unit/Enh (6490)	131	29	7	4.48	0.5	양이온
Desmethyl diazepam	아니요	271.1 Unit/Enh (6490)	165 Unit/Enh (6490)	189	29	7	4.58	0.5	양이온
Desmethyl diazepam	아니요	271.1 Unit/Enh (6490)	140 Unit/Enh (6490)	189	29	7	4.58	0.5	양이온
Diazepam	아니요	285.1 Unit/Enh (6490)	193.1 Unit/Enh (6490)	131	33	7	4.65	0.5	양이온
Diazepam	아니요	285.1 Unit/Enh (6490)	154 Unit/Enh (6490)	131	25	7	4.65	0.5	양이온
Diazepam-d5	예	290.1 Unit/Enh (6490)	198.1 Unit/Enh (6490)	131	33	7	4.64	0.5	양이온
Dihydrocodeine	아니요	303.2 Unit/Enh (6490)	200.1 Unit/Enh (6490)	136	33	7	1.64	0.5	양이온
Dihydrocodeine	아니요	303.2 Unit/Enh (6490)	129.1 Unit/Enh (6490)	136	65	7	1.64	0.5	양이온

Cpd name	ISTD?	Prec ion MS1 res	Prod ion MS2 res	Frag (V)	CE (V)	Cell acc (V)	머무름 시간 (분)	머무름 범위	극성
EDDP	아니요	278.2 Unit/Enh (6490)	234.1 Unit/Enh (6490)	158	33	7	4.02	0.5	양이온
EDDP	아니요	278.2 Unit/Enh (6490)	219.1 Unit/Enh (6490)	158	45	7	4.02	0.5	양이온
EDDP-d3	예	281.2 Unit/Enh (6490)	234.1 Unit/Enh (6490)	168	29	7	3.96	0.5	양이온
Fenfluramine	아니요	232.1 Unit/Enh (6490)	159 Unit/Enh (6490)	104	21	7	3.55	0.5	양이온
Fenfluramine	아니요	232.1 Unit/Enh (6490)	109 Unit/Enh (6490)	104	45	7	3.55	0.5	양이온
Fenfluramine-d10	예	242.2 Unit/Enh (6490)	161 Unit/Enh (6490)	114	25	7	3.48	0.5	양이온
Fentanyl	아니요	337.2 Unit/Enh (6490)	188.1 Unit/Enh (6490)	143	21	7	3.86	0.5	양이온
Fentanyl	아니요	337.2 Unit/Enh (6490)	105.1 Unit/Enh (6490)	143	41	7	3.86	0.5	양이온
Fentanyl-d5	예	342.3 Unit/Enh (6490)	188.1 Unit/Enh (6490)	146	21	7	3.78	0.5	양이온
Flunitrazepam	아니요	314.1 Unit/Enh (6490)	268.1 Unit/Enh (6490)	153	25	7	4.33	0.5	양이온
Flunitrazepam	아니요	314.1 Unit/Enh (6490)	239.1 Unit/Enh (6490)	153	37	7	4.33	0.5	양이온
Flurazepam	아니요	388.2 Unit/Enh (6490)	317.1 Unit/Enh (6490)	158	17	7	4.08	0.5	양이온
Flurazepam	아니요	388.2 Unit/Enh (6490)	315 Unit/Enh (6490)	158	21	7	4.08	0.5	양이온
Heroin	아니요	370.2 Unit/Enh (6490)	268.1 Unit/Enh (6490)	149	37	7	2.97	0.5	양이온
Heroin	아니요	370.2 Unit/Enh (6490)	165 Unit/Enh (6490)	149	61	7	2.97	0.5	양이온
Heroin-d9	예	379.2 Unit/Enh (6490)	61.2 Unit/Enh (6490)	168	29	7	2.9	0.5	양이온
Hydrocodone	아니요	300.2 Unit/Enh (6490)	199 Unit/Enh (6490)	159	29	7	1.92	0.5	양이온
Hydrocodone	아니요	300.2 Unit/Enh (6490)	128 Unit/Enh (6490)	159	65	7	1.92	0.5	양이온
Hydrocodone-d6	예	306.2 Unit/Enh (6490)	202.1 Unit/Enh (6490)	161	29	7	1.85	0.5	양이온
Hydromorphone	아니요	286.2 Unit/Enh (6490)	185 Unit/Enh (6490)	159	29	7	0.97	0.5	양이온
Hydromorphone	아니요	286.2 Unit/Enh (6490)	157 Unit/Enh (6490)	159	45	7	0.98	0.5	양이온
hydromorphone-d6	예	292.2 Unit/Enh (6490)	185 Unit/Enh (6490)	166	33	7	0.95	0.5	양이온
Lorazepam	아니요	321 Unit/Enh (6490)	303 Unit/Enh (6490)	124	9	7	4.43	0.5	양이온
Lorazepam	아니요	321 Unit/Enh (6490)	275 Unit/Enh (6490)	124	17	7	4.43	0.5	양이온
MDA	아니요	180.1 Unit/Enh (6490)	163 Unit/Enh (6490)	61	5	7	2.04	0.5	양이온
MDA	아니요	180.1 Unit/Enh (6490)	105 Unit/Enh (6490)	61	21	7	2.04	0.5	양이온
MDA-d5	예	185.1 Unit/Enh (6490)	168.1 Unit/Enh (6490)	87	5	7	1.98	0.5	양이온
MDEA	아니요	208.1 Unit/Enh (6490)	163 Unit/Enh (6490)	107	9	7	2.39	0.5	양이온
MDEA	아니요	208.1 Unit/Enh (6490)	105 Unit/Enh (6490)	107	25	7	2.39	0.5	양이온
MDMA	아니요	194.1 Unit/Enh (6490)	163 Unit/Enh (6490)	97	9	7	2.12	0.5	양이온
MDMA	아니요	194.1 Unit/Enh (6490)	105 Unit/Enh (6490)	97	25	7	2.12	0.5	양이온

Cpd name	ISTD?	Prec ion MS1 res	Prod ion MS2 res	Frag (V)	CE (V)	Cell acc (V)	머무름 시간 (분)	머무름 범위	극성
MDMA-d5	예	199.1 Unit/Enh (6490)	165 Unit/Enh (6490)	82	9	7	2.06	0.5	양이온
Meperidine	아니요	248.2 Unit/Enh (6490)	220.1 Unit/Enh (6490)	128	21	7	3.21	0.5	양이온
Meperidine	아니요	248.2 Unit/Enh (6490)	174.1 Unit/Enh (6490)	128	17	7	3.21	0.5	양이온
Meperidine-d4	예	252.2 Unit/Enh (6490)	224.1 Unit/Enh (6490)	141	17	7	3.15	0.5	양이온
Meprobamate	아니요	219.1 Unit/Enh (6490)	158.1 Unit/Enh (6490)	65	5	7	3.54	0.5	양이온
Meprobamate	아니요	219.1 Unit/Enh (6490)	55.1 Unit/Enh (6490)	65	21	7	3.54	0.5	양이온
Methadone	아니요	310.2 Unit/Enh (6490)	265.1 Unit/Enh (6490)	112	9	7	4.42	0.5	양이온
Methadone	아니요	310.2 Unit/Enh (6490)	105 Unit/Enh (6490)	112	29	7	4.42	0.5	양이온
Methadone-d9	예	319.3 Unit/Enh (6490)	268.1 Unit/Enh (6490)	89	13	7	4.39	0.5	양이온
Methamphetamine	아니요	150.1 Unit/Enh (6490)	91 Unit/Enh (6490)	92	17	7	2.07	0.5	양이온
Methamphetamine	아니요	150.1 Unit/Enh (6490)	65.1 Unit/Enh (6490)	92	45	7	2.07	0.5	양이온
Methylphenidate	아니요	234.1 Unit/Enh (6490)	84.1 Unit/Enh (6490)	112	21	7	3.04	0.5	양이온
Methylphenidate	아니요	234.1 Unit/Enh (6490)	56.1 Unit/Enh (6490)	112	53	7	3.04	0.5	양이온
Methylphenidate-d9	예	243.2 Unit/Enh (6490)	93.2 Unit/Enh (6490)	109	21	7	2.97	0.5	양이온
m-Hydroxybenzoylecgonine	아니요	306.1 Unit/Enh (6490)	168 Unit/Enh (6490)	124	17	7	2.14	0.5	양이온
m-Hydroxybenzoylecgonine	아니요	306.1 Unit/Enh (6490)	121 Unit/Enh (6490)	124	33	7	2.14	0.5	양이온
Midazolam	아니요	326.1 Unit/Enh (6490)	291.1 Unit/Enh (6490)	194	29	7	4.57	0.5	양이온
Midazolam	아니요	326.1 Unit/Enh (6490)	249.1 Unit/Enh (6490)	194	41	7	4.57	0.5	양이온
Midazolam-d4	예	330.1 Unit/Enh (6490)	295.1 Unit/Enh (6490)	156	29	7	4.54	0.5	양이온
Morphine	아니요	286.2 Unit/Enh (6490)	165.1 Unit/Enh (6490)	158	41	7	0.79	0.5	양이온
Morphine	아니요	286.2 Unit/Enh (6490)	152 Unit/Enh (6490)	158	60	7	0.79	0.5	양이온
Morphine-d6	예	292.2 Unit/Enh (6490)	152 Unit/Enh (6490)	173	65	7	0.72	0.5	양이온
Naloxone	아니요	328.2 Unit/Enh (6490)	310.1 Unit/Enh (6490)	129	17	7	1.68	0.5	양이온
Naloxone	아니요	328.2 Unit/Enh (6490)	212 Unit/Enh (6490)	129	41	7	1.68	0.5	양이온
Naltrexone	아니요	342.2 Unit/Enh (6490)	324.1 Unit/Enh (6490)	126	17	7	1.87	0.5	양이온
Naltrexone	아니요	342.2 Unit/Enh (6490)	55.1 Unit/Enh (6490)	126	41	7	1.87	0.5	양이온
N-Desmethyltramadol	아니요	250.2 Unit/Enh (6490)	232.1 Unit/Enh (6490)	92	5	7	3.14	0.5	양이온
N-Desmethyltramadol	아니요	250.2 Unit/Enh (6490)	121 Unit/Enh (6490)	92	33	7	3.14	0.5	양이온
Nitrazepam	아니요	282.1 Unit/Enh (6490)	236.1 Unit/Enh (6490)	148	25	7	4.27	0.5	양이온
Nitrazepam	아니요	282.1 Unit/Enh (6490)	180 Unit/Enh (6490)	148	41	7	4.27	0.5	양이온
Nitrazepam-d5	예	287.1 Unit/Enh (6490)	241.1 Unit/Enh (6490)	151	25	7	4.24	0.5	양이온

Cpd name	ISTD?	Prec ion MS1 res	Prod ion MS2 res	Frag (V)	CE (V)	Cell acc (V)	머무름 시간 (분)	머무름 범위	극성
Norbuprenorphine	아니요	414.3 Unit/Enh (6490)	101.1 Unit/Enh (6490)	188	41	7	3.74	0.5	양이온
Norbuprenorphine	아니요	414.3 Unit/Enh (6490)	83.1 Unit/Enh (6490)	188	53	7	3.74	0.5	양이온
Norcodeine	아니요	286.2 Unit/Enh (6490)	268.1 Unit/Enh (6490)	143	17	7	0.79	0.5	양이온
Norcodeine	아니요	286.2 Unit/Enh (6490)	165.1 Unit/Enh (6490)	143	45	7	0.79	0.5	양이온
Nordiazepam	아니요	271.1 Unit/Enh (6490)	165 Unit/Enh (6490)	138	25	7	4.58	0.5	양이온
Nordiazepam	아니요	271.1 Unit/Enh (6490)	140 Unit/Enh (6490)	138	29	7	4.58	0.5	양이온
Norfentanyl	아니요	233.2 Unit/Enh (6490)	84.1 Unit/Enh (6490)	97	13	7	2.82	0.5	양이온
Norfentanyl	아니요	233.2 Unit/Enh (6490)	55.1 Unit/Enh (6490)	97	37	7	2.81	0.5	양이온
Norfentanyl-d5	예	238.2 Unit/Enh (6490)	84.1 Unit/Enh (6490)	114	17	7	2.74	0.5	양이온
Norfludiazepam	아니요	289.1 Unit/Enh (6490)	226.1 Unit/Enh (6490)	117	25	7	4.48	0.5	양이온
Norfludiazepam	아니요	289.1 Unit/Enh (6490)	140.1 Unit/Enh (6490)	117	29	7	4.48	0.5	양이온
Normeperidine	아니요	234 Unit/Enh (6490)	160 Unit/Enh (6490)	81	13	7	3.29	0.5	양이온
Normeperidine	아니요	234 Unit/Enh (6490)	56 Unit/Enh (6490)	81	21	7	3.29	0.5	양이온
Norpropoxyphene	아니요	326.2 Unit/Enh (6490)	252.2 Unit/Enh (6490)	87	5	7	4.4	0.5	양이온
Norpropoxyphene	아니요	326.2 Unit/Enh (6490)	91 Unit/Enh (6490)	87	49	7	4.4	0.5	양이온
o-Desmethyltramadol	아니요	250.2 Unit/Enh (6490)	232.1 Unit/Enh (6490)	97	9	7	2.16	0.5	양이온
o-Desmethyltramadol	아니요	250.2 Unit/Enh (6490)	58.1 Unit/Enh (6490)	97	17	7	2.16	0.5	양이온
Oxazepam	아니요	287.1 Unit/Enh (6490)	269 Unit/Enh (6490)	114	21	7	4.43	0.5	양이온
Oxazepam	아니요	287.1 Unit/Enh (6490)	241 Unit/Enh (6490)	114	9	7	4.43	0.5	양이온
Oxycodone	아니요	316.2 Unit/Enh (6490)	298.1 Unit/Enh (6490)	143	17	7	1.8	0.5	양이온
Oxycodone	아니요	316.2 Unit/Enh (6490)	241.1 Unit/Enh (6490)	143	29	7	1.8	0.5	양이온
Oxymorphone	아니요	302.1 Unit/Enh (6490)	284 Unit/Enh (6490)	117	17	7	0.87	0.5	양이온
Oxymorphone	아니요	302.1 Unit/Enh (6490)	227 Unit/Enh (6490)	117	29	7	0.86	0.5	양이온
PCP	아니요	244.2 Unit/Enh (6490)	91 Unit/Enh (6490)	86	41	7	3.71	0.5	양이온
PCP	아니요	244.2 Unit/Enh (6490)	86.1 Unit/Enh (6490)	86	9	7	3.71	0.5	양이온
PCP-d5	예	249.2 Unit/Enh (6490)	86.1 Unit/Enh (6490)	87	9	7	3.63	0.5	양이온
Phentermine	아니요	150.1 Unit/Enh (6490)	91.1 Unit/Enh (6490)	70	21	7	2.53	0.5	양이온
Phentermine	아니요	150.1 Unit/Enh (6490)	65.1 Unit/Enh (6490)	70	45	7	2.53	0.5	양이온
Phentermine-d5	예	155.2 Unit/Enh (6490)	96.1 Unit/Enh (6490)	72	21	7	2.43	0.5	양이온
Propoxyphene	아니요	340.2 Unit/Enh (6490)	266.2 Unit/Enh (6490)	92	5	7	4.37	0.5	양이온
Propoxyphene	아니요	340.2 Unit/Enh (6490)	58.1 Unit/Enh (6490)	92	25	7	4.37	0.5	양이온

Cpd name	ISTD?	Prec ion MS1 res	Prod ion MS2 res	Frag (V)	CE (V)	Cell acc (V)	머무름 시간 (분)	머무름 범위	극성
propoxyphene-d5	예	345.3 Unit/Enh (6490)	58.1 Unit/Enh (6490)	87	17	7	4.32	0.5	양이온
Ritalinic acid	아니요	220.1 Unit/Enh (6490)	84.1 Unit/Enh (6490)	95	20	7	2.63	0.5	양이온
Ritalinic acid	아니요	220.1 Unit/Enh (6490)	56.1 Unit/Enh (6490)	95	41	7	2.63	0.5	양이온
Tapentadol	아니요	222.2 Unit/Enh (6490)	107.1 Unit/Enh (6490)	119	25	7	3.08	0.5	양이온
Tapentadol	아니요	222.2 Unit/Enh (6490)	77.1 Unit/Enh (6490)	119	57	7	3.08	0.5	양이온
Tapentadol-d3	예	225.2 Unit/Enh (6490)	107.1 Unit/Enh (6490)	129	25	7	3.02	0.5	양이온
Temazepam	아니요	301.1 Unit/Enh (6490)	255.1 Unit/Enh (6490)	117	29	7	4.51	0.5	양이온
Temazepam	아니요	301.1 Unit/Enh (6490)	177 Unit/Enh (6490)	117	45	7	4.51	0.5	양이온
tramadol- ¹³ C-d3	예	268.2 Unit/Enh (6490)	58.2 Unit/Enh (6490)	104	17	7	2.9	0.5	양이온
Trazodone	아니요	372.2 Unit/Enh (6490)	176 Unit/Enh (6490)	159	25	7	3.89	0.5	양이온
Trazodone	아니요	372.2 Unit/Enh (6490)	148 Unit/Enh (6490)	159	37	7	3.89	0.5	양이온
Triazolam	아니요	343.1 Unit/Enh (6490)	308.1 Unit/Enh (6490)	140	25	7	4.48	0.5	양이온
Triazolam	아니요	343.1 Unit/Enh (6490)	239 Unit/Enh (6490)	140	45	7	4.48	0.5	양이온
Verapamil	아니요	455.3 Unit/Enh (6490)	165 Unit/Enh (6490)	158	37	7	4.26	0.5	양이온
Verapamil	아니요	455.3 Unit/Enh (6490)	150 Unit/Enh (6490)	158	45	7	4.27	0.5	양이온
Zolpidem	아니요	308.2 Unit/Enh (6490)	235.6 Unit/Enh (6490)	156	25	7	3.74	0.5	양이온
Zolpidem	아니요	308.2 Unit/Enh (6490)	235.1 Unit/Enh (6490)	156	37	7	3.74	0.5	양이온
Zolpidem-d6	예	314.2 Unit/Enh (6490)	235.1 Unit/Enh (6490)	168	37	7	3.61	0.5	양이온
Zopiclone	아니요	389.1 Unit/Enh (6490)	245 Unit/Enh (6490)	82	13	7	2.96	0.5	양이온
Zopiclone	아니요	389.1 Unit/Enh (6490)	217 Unit/Enh (6490)	82	33	7	2.96	0.5	양이온
Zopiclone-d4	예	393.1 Unit/Enh (6490)	217 Unit/Enh (6490)	97	33	7	2.88	0.5	양이온

www.agilent.com/chem/QQQ

법의학 용도

이 정보는 사전 고지 없이 변경될 수 있습니다.

© Agilent Technologies, Inc., 2014, 2017
2017년 1월 25일, 한국에서 인쇄
5991-1667KO

서울시 용산구 한남대로 98, 일신빌딩 4층 우)04418
한국애질런트테크놀로지스(주) 생명과학/화학분석 사업부
고객지원센터 080-004-5090 www.agilent.co.kr



Agilent Technologies