

SF

中华人民共和国司法行政行业标准

SF/T 0167—2024

血液和尿液中 239 种合成大麻素及代谢物
的液相色谱-高分辨质谱检验方法

Detection of 239 synthetic cannabinoids and their metabolites in blood and urine by
liquid chromatography-high-resolution mass spectrometry

2024 - 12 - 30 发布

2025 - 06 - 01 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 定性分析	2
7 分析结果评价	3
附录 A（资料性） 目标物的相关信息、质谱参数、保留时间和检出限	5

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、公安部禁毒情报技术中心、河北医科大学。

本文件主要起草人：施妍、向平、王鑫、花镇东、张婷婷、严慧、沈敏、吴何坚、沈保华、原帅、赵君博、马春玲。

血液和尿液中 239 种合成大麻素及代谢物的液相色谱-高分辨质谱检验方法

1 范围

本文件描述了血液和尿液中239种合成大麻素及代谢物的液相色谱-高分辨质谱检验方法，包括原理，试剂、仪器和设备，定性分析以及分析结果评价。

本文件适用于血液和尿液中239种合成大麻素及代谢物的定性分析。

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

血液和尿液（酶解后）经乙腈沉淀蛋白提取后，采用液相色谱-高分辨质谱仪进行检测，经与平行操作的空白样品和添加样品作对照，以保留时间、前体离子、碎片离子和离子丰度比进行定性判定。

5 试剂、仪器和材料

5.1 试剂

试验用水应为符合GB/T 6682规定的一级水。所用试剂及要求如下。

- a) 甲醇：色谱纯。
- b) 乙腈：色谱纯。
- c) β -葡萄糖醛苷酸酶（ $>100,000$ units/mL，芳基硫酸酯酶 $<20,000$ units/mL）。
- d) 标准物质溶液：
 - 1) 标准物质储备溶液：分别精密称取 239 种合成大麻素及代谢物标准物质适量，用甲醇配制成 1.0 mg/mL 的标准物质储备溶液。密封，置于冰箱中冷冻保存，有效期 12 个月，或采用市售标准溶液；
 - 2) 标准物质工作溶液：试验中所用其他浓度的标准物质工作溶液均由符合 5.1 d) 1) 的标准物质储备溶液用甲醇稀释得到。密封，置于冰箱中冷藏保存，有效期 3 个月；
 - 3) 质控标准工作溶液：0.5 $\mu\text{g/mL}$ 的 AM-2233 和 MDMB-4en-PINACA 的质控标准工作溶液由符合 5.1 d) 1) 的标准物质储备溶液用甲醇稀释得到。密封，置于冰箱中冷藏保存，有效期 3 个月。

注：根据实际情况适当调整质控标准工作溶液中化合物的种类。

- e) 内标溶液：
 - 1) 内标储备溶液：分别精密称取 AKB48-d₉ 和 JWH-018 N-(4-hydroxypentyl)metabolite-d₅ 标准物质（或其他合适内标物），用甲醇配制成 1.0 mg/mL 的内标储备溶液。密封，置于冰箱中冷冻保存，有效期 12 个月，或采用市售标准溶液；

- 2) 内标工作溶液：1 $\mu\text{g}/\text{mL}$ 的 AKB48- d_9 和 JWH-018 N-(4-hydroxypentyl)metabolite- d_5 混合内标溶液由符合 5.1 e) 1) 的内标储备溶液用甲醇稀释得到，50 ng/mL 的内标工作溶液用乙腈稀释得到。密封，置于冰箱中冷冻保存，有效期 3 个月。

5.2 仪器和设备

仪器和设备及要求如下。

- a) 液相色谱-高分辨质谱仪：配有电喷雾离子源（ESI）。
- b) 电子天平：分度值 ≤ 0.1 mg 。
- c) 旋涡混合器。
- d) 聚四氟乙烯滤膜：0.22 μm 。
- e) 离心机。
- f) 移液器。

6 定性分析

6.1 样品前处理

6.1.1 检材样品

6.1.1.1 血液样品

取血液 100 μL ，加入内标工作溶液 900 μL ，涡旋混匀，12000 r/min 离心 5 min ，取上清液，经滤膜过滤，滤液直接供液相色谱-高分辨质谱仪分析。

6.1.1.2 尿液样品

取尿液 100 μL ，加入 β -葡萄糖醛苷酸酶 10 μL ，涡旋混匀，在 55 $^{\circ}\text{C}$ 下孵育 30 min ，酶解后的样品取出冷却，加入内标工作溶液 900 μL ，涡旋混匀，12000 r/min 离心 5 min 。取上清液，经滤膜过滤，滤液直接供液相色谱-高分辨质谱仪分析。

6.1.2 空白样品

取空白血液（或尿液）100 μL 作为空白样品，按 6.1.1 的方法，与检材样品平行操作。

6.1.3 质控样品

取空白血液（或尿液）100 μL ，添加质控标准工作溶液 10 μL ，配制成 50 ng/mL 的质控样品，然后按 6.1.1 的方法，与检材样品平行操作。

6.1.4 添加样品

取空白血液（或尿液）100 μL ，添加标准物质工作溶液，配制成浓度相近的检材样品中出现的可疑合成大麻素及代谢物的添加样品，然后按 6.1.1 的方法，与检材样品平行操作。

6.2 仪器检测

6.2.1 仪器条件

6.2.1.1 液相色谱条件

以下为参考条件，可根据不同品牌仪器等实际情况进行调整。

- a) 色谱柱：C18 柱（100 $\text{mm} \times 2.1$ mm ，1.7 μm ）或其他等效柱。
- b) 流动相：流动相 A 为水（含 0.1% 甲酸），流动相 B 为甲醇（含 0.1% 甲酸）；采用梯度洗脱，梯度洗脱程序见表 1。
- c) 流速：0.4 mL/min 。
- d) 柱温：35 $^{\circ}\text{C}$ 。
- e) 自动进样器温度：4 $^{\circ}\text{C}$ 。
- f) 进样量：5 μL 。

表1 流动相梯度洗脱程序

时间 min	流动相 A	流动相 B
0	95%	5%
1.0	95%	5%
2.0	40%	60%
14.0	5%	95%
18.0	5%	95%
18.1	95%	5%
20.0	95%	5%

6.2.1.2 质谱条件

6.2.1.2.1 以下为参考条件，可根据不同品牌仪器等实际情况进行调整。

- a) 离子源：电喷雾电离-正离子模式（ESI+）。
- b) 喷雾电压：3500 V。
- c) 辅助气流速：10 Arb。
- d) 鞘气流速：40 Arb。
- e) 加热器温度：300 °C。
- f) 毛细管温度：350 °C。
- g) 一级扫描分辨率：60000。
- h) 二级扫描分辨率：17500。
- i) 扫描范围：m/z 100~1000。
- j) 碰撞能量：20 eV、25 eV、30 eV、35 eV、40 eV。

6.2.1.2.2 在符合 6.2.1.1 和 6.2.1.2 的液相色谱条件和质谱条件下，目标物的相关信息、质谱参数、保留时间和检出限参见附录 A。

6.2.2 进样

分别吸取空白样品提取液、检材样品提取液和添加样品提取液，按 6.2.1 的条件进样分析。

6.3 记录

记录空白样品、检材样品和添加样品中目标物可疑色谱峰的保留时间、前体离子、碎片离子和离子丰度比。

6.4 定性判断依据

以保留时间、前体离子、碎片离子和离子丰度比作为定性判断依据。应满足以下要求。

- a) 在相同试验条件下，检材样品中出现前体离子与单同位素峰的理论值质量精度至少在 5×10^{-6} 以内。
- b) 色谱峰保留时间与添加样品的色谱峰保留时间相比较，相对误差在 $\pm 2.5\%$ 内。
- c) 检材样品中包含至少 1 个前体离子和 1 个碎片离子，与添加样品中对应目标物的前体离子和碎片离子的质量精度相一致，质荷比大于等于 200 时，相对误差至少在 5×10^{-6} 以内，质荷比小于 200 时，绝对误差小于 1 mDa。
- d) 检材样品与相同基质添加样品中目标物比较，离子丰度比与添加样品的离子丰度比之相对误差不超过表 2 规定的范围，则判断检材样品中检出该化合物。

表2 特征离子丰度比的最大允许相对误差

特征离子丰度比	>50%	>20~50%	>10~20%	≤10%
允许的相对误差	±20%	±25%	±30%	±50%

7 分析结果评价

7.1 阴性结果评价

阴性结果评价包括：

- a) 若检材样品中检出内标物，未检出目标物，且质控样品中检出添加物，则阴性结果可靠；
- b) 若检材样品中未检出内标物，或质控样品中未检出添加物，则阴性结果不可靠，应按第 6 章的规定重新检验。

7.2 阳性结果评价

阳性结果评价包括：

- a) 若检材样品中检出目标物，且空白样品无干扰，则阳性结果可靠；
- b) 若检材样品中检出目标物，空白样品亦呈阳性，则阳性结果不可靠，应按第 6 章的规定重新检验。

附录 A

(资料性)

目标物的相关信息、质谱参数、保留时间和检出限

A.1 目标物的相关信息

目标物的相关信息见表A.1。

表A.1 目标物的相关信息

序号	化合物	中文名称	分子式	CAS 号
1	2-fluoro NNEI	1-(2-氟戊基)-N-(1-萘基)-1H-吡啶-3-甲酰胺	C ₂₄ H ₂₃ FN ₂ O	—
2	2-Fluoropentylindole	1-(5-氟戊基)-1H-吡啶	C ₁₃ H ₁₆ FN	2385473-07-2
3	3,5-AB-CHMFUPPYCA	N-(1-氨基-3-甲基-1-氧代丁-2-基)-1-(环己基甲基)-3-(4-氟苯基)-1H-吡啶-5-甲酰胺	C ₂₂ H ₂₉ FN ₄ O ₂	1870799-79-3
4	3-CAF	1-(1,3-苯并二氧戊环-5-基)-2-(1-吡咯烷基)-1-丁酮盐酸盐	C ₂₄ H ₁₅ FN ₂ O ₂	2219324-25-9
5	3-fluoro AMB	(1-(3-氟戊基)-1H-吡啶-3-羰基)-L-缬氨酸甲酯	C ₁₉ H ₂₆ FN ₃ O ₃	—
6	3-Fluoropentylindole	1-(3-氟戊基)-1H-吡啶	C ₁₃ H ₁₆ FN	—
7	4-chloro CUMYL-PINACA	N-[1-(4-氯苯基)-1-甲基乙基]-1-戊基-1H-吡啶-3-甲酰胺	C ₂₂ H ₂₆ ClN ₃ O	1631074-65-1
8	4-cyano CUMYL-BUT7AICA	1-(4-氰基丁基)-N-(1-甲基-1-苯基乙基)-1H-吡啶并[2,3-b]吡啶-3-甲酰胺	C ₂₂ H ₂₄ N ₄ O	2160555-53-1
9	4-cyano MDMB-BUTINACA	3,3-二甲基-2-[1-(4-氰基丁基)吡啶-3-甲酰氨基]丁酸甲酯	C ₂₀ H ₂₆ N ₄ O ₃	1185888-30-5
10	4-fluoro MDMB-BUTINACA butanoic acid metabolite	(S)-4-(3-((1-甲氧基-3,3-二甲基-1-氧代-2-丁基)氨基甲酰基)-1H-1-吡啶基)丁酸	C ₁₈ H ₂₄ FN ₃ O ₃	—
11	4-fluoro ADB	N-[[1-(4-氟戊基)-1H-3-吡啶基]羰基]-3-甲基-L-缬氨酸甲酯	C ₂₀ H ₂₈ FN ₃ O ₃	2365471-11-8
12	4-fluoro AMB	(1-(4-氟戊基)-1H-吡啶-3-羰基)-L-缬氨酸甲酯	C ₁₉ H ₂₆ FN ₃ O ₃	—
13	4-fluoro MDMB-BUTICA	3,3-二甲基-2-[1-(4-氟丁基)吡啶-3-甲酰氨基]丁酸甲酯	C ₂₀ H ₂₇ FN ₂ O ₃	2682867-53-2
14	4-fluoro MDMB-BUTINACA	2-[1-(4-氟丁基)-1H-吡啶-3-甲酰氨基]-3,3-二甲基丁酸甲酯	C ₁₉ H ₂₆ FN ₃ O ₃	2390036-46-9

表 A.1 目标物的相关信息 (续)

序号	化合物	中文名称	分子式	CAS 号
15	4-fluoro MDMB-BUTINACA 2'-indazole isomer	N-[[1-(4-氟丁基)-1H-3-吡唑基]羰基]-3-甲基 -L-缬氨酸甲酯	C ₁₉ H ₂₆ FN ₃ O ₃	2706356-20-7
16	4-fluoro MDMB-BUTINACA 3-carboxyindazole metabolite	1-(4-氟丁基)-1H-吡唑-3-羧酸	C ₁₂ H ₁₃ FN ₂ O ₂	2027536-90-7
17	4-fluoro-CUMYL-5- fluoro-PICA	1-(5-氟戊基)-N-[1-(4-氟苯基)-1-甲基乙基]- 1H-吡唑-3-甲酰胺	C ₂₃ H ₂₆ F ₂ N ₂ O	1631074-52-6
18	4-fluoro-CUMYL-5- fluoro-PINACA	1-(5-氟戊基)-N-[1-(4-氟苯基)-1-甲基乙基]- 1H-吡唑-3-甲酰胺	C ₂₂ H ₂₅ F ₂ N ₃ O	1631074-53-7
19	5,3-AB-CHMFUPPYCA	N-(1-氨基酰基-2-甲基丙基)-1-(环己基甲基)- 5-(4-氟苯基)-吡唑-3-甲酰胺	C ₂₂ H ₂₉ FN ₄ O ₂	2170550-38-4
20	5-bromo APINACA	1-(5-溴戊基)-N-三环[3.3.1.1 ^{3,7}]-1-癸基- 1H-吡唑-3-甲酰胺	C ₂₃ H ₃₀ BrN ₃ O	2160555-51-9
21	5-bromo THJ 018	[1-(5-溴戊基)-1H-3-吡唑基]-1-萘基甲酮	C ₂₃ H ₂₁ BrN ₂ O	2365471-13-0
22	5-chloro AB-PINACA	N-(1-氨基-3-甲基-1-氧代丁-2-基)-1-(5-氯戊 基)-1H-吡唑-3-甲酰胺	C ₁₈ H ₂₅ ClN ₄ O ₂	1801552-02-2
23	5-chloro AKB48	N-(金刚烷-1-基)-1-(5-氯戊基)-1H-吡唑-3-甲 酰胺	C ₂₃ H ₃₀ ClN ₃ O	2160555-52-0
24	5-chloro NNEI	1-(5-氯戊基)-N-1-萘基-1H-吡唑-3-甲酰胺	C ₂₄ H ₂₃ ClN ₂ O	1800101-23-8
25	5-chloro THJ 018	[1-(5-氯戊基)-1H-3-吡唑基]-1-萘基甲酮	C ₂₃ H ₂₁ ClN ₂ O	2365471-28-7
26	5-fluoro ABICA	N-(1-氨基酰基-2-甲基丙基)-1-(5-氟戊基)吡 唑-3-甲酰胺	C ₁₉ H ₂₆ FN ₃ O ₂	1801338-26-0
27	5-fluoro AB-PINACA	N-(1-氨基酰基-2-甲基丙基)-1-(5-氟戊基)吡 唑-3-甲酰胺	C ₁₈ H ₂₅ FN ₄ O ₂	1800101-60-3
28	5-fluoro ADBICA	N-(1-氨基酰基-2,2-二甲基丙基)-1-(5-氟戊 基)吡唑-3-甲酰胺	C ₂₀ H ₂₈ FN ₃ O ₂	1863065-82-0
29	5-fluoro AMB	N-(1-甲氧基羰基-2-甲基丙基)-1-(5-氟戊基) 吡唑-3-甲酰胺	C ₁₉ H ₂₆ FN ₃ O ₃	1715016-74-2
30	5-fluoro APINACA	N-(1-金刚烷基)-1-(5-氟戊基)吡唑-3-甲酰胺	C ₂₃ H ₃₀ FN ₃ O	1400742-13-3
31	5-fluoro CUMYL-PICA	1-(5-氟戊基)-N-(2-苯基丙-2-基)-1H-吡唑-3- 甲酰胺	C ₂₃ H ₂₇ FN ₂ O	1400742-18-8

表 A.1 目标物的相关信息 (续)

序号	化合物	中文名称	分子式	CAS 号
32	5-fluoro CUMYL-PINACA	1-(5-氟戊基)-N-(2-苯基丙-2-基)-1H-吡啶-3-甲酰胺	C ₂₂ H ₂₆ FN ₃ O	1400742-16-6
33	5-fluoro MDMB-PICA	2-[1-(5-氟戊基)-1H-吡啶-3-甲酰氨基]-3,3-二甲基丁酸甲酯	C ₂₁ H ₂₉ FN ₂ O ₃	1971007-88-1
34	5-fluoro MDMB-PICA metabolite 4	N-[[1-(5-氟-4-羟基戊基)-1H-3-吡啶基]羰基]-3-甲基-L-缬氨酸	C ₂₀ H ₂₇ FN ₂ O ₄	—
35	5-fluoro MDMB-PICA metabolite 7	2-[1-(5-氟戊基)-1H-吡啶-3-甲酰氨基]-3,3-二甲基丁酸甲酯	C ₂₀ H ₂₇ FN ₂ O ₃	2569223-22-7
36	5-fluoro MDMB-PICA metabolite 8	3,3-二甲基-2-[1-(3-丙酸)吡啶-3-甲酰氨基]丁酸甲酯	C ₁₉ H ₂₄ N ₂ O ₅	—
37	5-fluoro MDMB-PICA metabolite 9	3,3-二甲基-2-[6-羟基-1-(5-氟戊基)吡啶-3-甲酰氨基]丁酸甲酯	C ₂₁ H ₂₉ FN ₂ O ₄	—
38	5-fluoro phenyl-PICA	1-(5-氟戊基)-N-苯基-1H-吡啶-3-甲酰胺	C ₂₀ H ₂₁ FN ₂ O	1776086-01-1
39	5-fluoro 7-APAICA	1-(5-氟戊基)-N-三环[3.3.1.1 ^{3,7}]-1-癸基-1H-吡咯并[2,3-b]吡啶-3-甲酰胺	C ₂₃ H ₃₀ FN ₃ O	2682867-58-7
40	5-fluoro 7-QUPAIC	8-喹啉基酯-1-(5-氟戊基)-1H-吡咯并[2,3-b]吡啶-3-羧酸	C ₂₂ H ₂₀ FN ₃ O ₂	2748300-92-5
41	5-fluoro AB-PINACA 3-carboxyindazole metabolite	1-(5-氟戊基)-1H-吡啶-3-羧酸	C ₁₃ H ₁₅ FN ₂ O ₂	1535166-43-8
42	5-fluoro AB-PINACA N-(4-hydroxypentyl) metabolite	N-[1-(氨基羰基)-2-甲基丙基]-1-(5-氟-4-羟基戊基)-1H-吡啶-3-甲酰胺	C ₁₈ H ₂₅ FN ₄ O ₃	2460433-23-0
43	5-fluoro ADB	3,3-二甲基-2-[1-(5-氟戊基)吡啶-3-甲酰氨基]丁酸甲酯	C ₂₀ H ₂₈ FN ₃ O ₃	1838134-16-9
44	5-fluoro ADB metabolite 2	N-[[1-(5-羟基戊基)-1H-3-吡啶基]羰基]-3-甲基-L-缬氨酸甲酯	C ₂₀ H ₂₉ N ₃ O ₄	2642091-65-2
45	5-fluoro ADB-PINACA	N-(1-氨基-3,3-二甲基-1-氧代丁-2-基)-1-(5-氟戊基)-1H-吡啶-3-甲酰胺	C ₁₉ H ₂₇ FN ₄ O ₂	1863065-90-0
46	5-fluoro AEB	N-(1-乙氧基羰基-2-甲基丙基)-1-(5-氟戊基)吡啶-3-甲酰胺	C ₂₀ H ₂₈ FN ₃ O ₃	2365471-51-6
47	5-fluoro AMB metabolite 2	N-[[1-(5-羟基戊基)-1H-3-吡啶基]羰基]-L-缬氨酸甲酯	C ₁₉ H ₂₇ N ₃ O ₄	1890250-14-2

表 A.1 目标物的相关信息 (续)

序号	化合物	中文名称	分子式	CAS 号
48	5-fluoro AMB metabolite 3	N-[[1-(4-羧基丁基)-1H-3-吡啶基]羰基]-L-缬氨酸 1-甲酯	C ₁₉ H ₂₅ N ₃ O ₅	1890250-21-1
49	5-fluoro AMB metabolite 7	N-[[1-(5-氟戊基)-1H-3-吡啶基]羰基]-L-缬氨酸	C ₁₈ H ₂₄ FN ₃ O ₃	1890250-19-7
50	5-fluoro BEPIRAPIM (hydrochloride)	[1-(5-氟戊基)-1H-3-吡啶基][4-(苯甲基)-1-哌嗪基]-甲酮盐酸盐	C ₂₅ H ₃₀ FN ₃ O	2365471-74-3
51	5-fluoro CUMYL-PeGACLONE	5-(5-氟戊基)-2,5-二氢-2-(1-甲基-1-苯乙基)-1H-吡啶并[4,3-b]吡啶-1-酮	C ₂₅ H ₂₇ FN ₂ O	2377403-49-9
52	5-fluoro CYPICA	N-(环丙基甲基)-1-(5-氟戊基)-吡啶-3-甲酰胺	C ₁₈ H ₂₃ FN ₂ O	2365471-87-8
53	5-fluoro ethylbenzyl-PICA	1-(5-氟戊基)-N-(1-苯基丙基)-1H-吡啶-3-甲酰胺	C ₂₃ H ₂₇ FN ₂ O	2749433-43-8
54	5-fluoro MDMB-7-PAICA	3,3-二甲基-2-[1-(5-氟戊基)-1H-吡啶并[2,3-b]吡啶-3-甲酰氨基]丁酸甲酯	C ₂₀ H ₂₈ FN ₃ O ₃	2377403-81-9
55	5-fluoro MDMB-7-PAICA butanoic acid metabolite	N-((1-(5-氟戊基)-1H-吡啶并[2,3-b]吡啶-3-基)羰基)-3-甲基-L-缬氨酸	C ₁₉ H ₂₆ FN ₃ O ₃	2712863-53-9
56	5-fluoro MDMB-PICA metabolite 2	3,3-二甲基-2-[1-(5-戊醇)吡啶-3-甲酰氨基]丁酸甲酯	C ₂₁ H ₃₀ N ₂ O ₄	—
57	5-fluoro MN-18	1-(5-氟戊基)-N-(萘-1-基)-1H-吡啶-3-甲酰胺	C ₂₃ H ₂₃ FN ₂ O	1445581-91-8
58	5-fluoro MPP-PICA	2-[1-(5-氟戊基)-1H-吡啶-3-甲酰氨基]-3-苯丙酸甲酯	C ₂₄ H ₂₇ FN ₂ O ₃	2682867-54-3
59	5-fluoro NNEI	1-(5-氟戊基)-N-(萘-1-基)-1H-吡啶-3-甲酰胺	C ₂₄ H ₂₃ FN ₂ O	1445580-60-8
60	5-Fluoro PB-22	1-(5-氟戊基)吡啶-3-甲酸-8-喹啉酯	C ₂₃ H ₂₁ FN ₂ O ₂	1400742-41-7
61	5-fluoro PB-22 3-carboxyindole metabolite	1-(5-氟戊基)-1H-吡啶-3-羧酸	C ₁₄ H ₁₆ FNO ₂	1432794-98-3
62	5-fluoro PY-PICA	[1-(5-氟戊基)-1H-吡啶-3-基]-1-吡咯烷基-甲基酮	C ₁₈ H ₂₃ FN ₂ O	2166085-89-6
63	5-fluoro SDB-005	1-(5-氟戊基)-1H-吡啶-3-甲酸-1-萘酯	C ₂₃ H ₂₁ FN ₂ O ₂	2185863-14-1
64	5-fluoro-3,5-AB-PFUPPYCA	N-((1S)-1-(氨基羰基)-2-甲基丙基)-1-(5-氟戊基)-3-(4-氟苯基)-1H-吡啶-5-甲酰胺	C ₂₀ H ₂₆ F ₂ N ₄ O ₂	2365471-73-2
65	5-fluoro-3,5-ADB-PFUPPYCA	N-(1-(氨基羰基)-2,2-二甲基丙基)-1-(5-氟戊基)-3-(4-氟苯基)-1H-吡啶-5-甲酰胺	C ₂₁ H ₂₈ F ₂ N ₄ O ₂	1969261-68-4

表 A.1 目标物的相关信息 (续)

序号	化合物	中文名称	分子式	CAS 号
66	5-Fluoropentyl-3-pyridinoylindole (hydrochloride)	(1-(5-氟戊基)-1H-吲哚-3-基)-3-吡啶基-甲酰胺(盐酸盐)	C ₁₉ H ₁₉ FN ₂ O	2365471-19-6
67	5-Fluoropentylindole	1-(5-氟戊基)-1H-吲哚	C ₁₃ H ₁₆ FN	1859218-30-6
68	5-fluoro-tert-Butylbenzyl-PINACA	N-(2,2-二甲基-1-苯基丙基)-1-(5-氟戊基)-1H-吲唑-3-甲酰胺	C ₂₄ H ₃₀ FN ₃ O	2749299-04-3
69	5F-UR-144	1-(5-氟戊基)-3-(2,2,3,3-四甲基环丙甲酰基)吲哚	C ₂₁ H ₂₈ FNO	1364933-54-9
70	7'-methoxy NABUTIE	1-(1-丁基-7-甲氧基-1H-吲哚-3-基)-2-(1-萘基)-乙酮	C ₂₅ H ₂₅ NO ₂	1438278-55-7
71	A-796260	[1-(2-吗啉-4-基乙基)-1H-吲哚-3-基]- (2,2,3,3-四甲基环丙基)甲酰胺	C ₂₂ H ₃₀ N ₂ O ₂	895155-26-7
72	A-834735	1-(4-四氢吡喃基甲基)-3-(2,2,3,3-四甲基环丙甲酰基)吲哚	C ₂₂ H ₂₉ NO ₂	895155-57-4
73	A-836339	[N(Z)]-N-[3-(2-甲氧基乙基)-4,5-二甲基-2(3H)-噻唑亚基]-2,2,3,3-四甲基-环丙烷甲酰胺	C ₁₆ H ₂₆ N ₂ O ₂ S	959746-77-1
74	AB-005	[1-[(1-甲基-2-哌啶基)甲基]-1H-吲哚-3-基](2,2,3,3-四甲基环丙基)-甲酰胺	C ₂₃ H ₃₂ N ₂ O	895155-25-6
75	AB-7-FUBAICA	(S)-N-(1-氨基-3-甲基-1-氧代丁-2-基)-1-(4-氟苄基)-1H-吡咯并[2,3-b]吡啶-3-甲酰胺	C ₂₀ H ₂₁ FN ₄ O ₂	2704018-56-2
76	AB-BICA	N-(1-氨基-3-甲基-1-氧代丁-2-基)-1-苄基-1H-吲哚-3-甲酰胺	C ₂₁ H ₂₃ N ₃ O ₂	1969264-37-6
77	AB-CHMINACA	N-(1-氨甲酰基-2-甲基丙基)-1-(环己基甲基)吲唑-3-甲酰胺	C ₂₀ H ₂₈ N ₄ O ₂	1805788-79-7
78	AB-CHMICA	N-[(1S)-1-(氨基羰基)-2-甲基丙基]-1-(环己基甲基)-1H-吲哚-3-甲酰胺	C ₂₁ H ₂₉ N ₃ O ₂	2219330-90-0
79	AB-CHMINACA metabolite M7	2-(1-(环己基甲基)-1H-吲唑-3-甲酰胺)-3-甲基琥珀酸	C ₂₀ H ₂₅ N ₃ O ₅	2748157-34-6
80	AB-CHMINACA metabolite M3A	N-[[1-[(4-羟基环己基)甲基]-1H-吲唑-3-基]羰基]-L-缬氨酸	C ₂₀ H ₂₇ N ₃ O ₄	2131173-58-3

表 A.1 目标物的相关信息 (续)

序号	化合物	中文名称	分子式	CAS 号
81	AB-CHMINACA metabolite M6	4-氨基-3-[[1-(环己基甲基)-1H-吡啶-3-基]羰基]氨基]-2-甲基-4-氧代丁酸	C ₂₀ H ₂₆ N ₄ O ₄	2748161-80-8
82	AB-FUBICA	N-(1-氨基-3-甲基-1-氧代丁-2-基)-1-(4-氟苄基)-1H-吡啶-3-甲酰胺	C ₂₁ H ₂₂ FN ₃ O ₂	1801338-22-6
83	AB-FUBINACA	N-(1-氨甲酰基-2-甲基丙基)-1-(4-氟苄基)吡啶-3-甲酰胺	C ₂₀ H ₂₁ FN ₃ O ₂	1629062-56-1
84	AB-FUBINACA metabolite 2A	4-氨基-3-[[1-(4-氟苄基)甲基]-1H-吡啶-3-基]羰基]氨基]-2-甲基-4-氧代丁酸	C ₂₀ H ₁₉ FN ₄ O ₄	2460433-24-1
85	AB-FUBINACA metabolite 3	N-[[1-(4-氟苄基)甲基]-1H-吡啶-3-基]羰基]-L-缬氨酸	C ₂₀ H ₂₀ FN ₃ O ₃	1877243-60-1
86	AB-FUBINACA metabolite 4	1-(4-氟苄基)甲基]-1H-吡啶-3-羧酸	C ₁₅ H ₁₁ FN ₂ O ₂	50264-63-6
87	AB-PINACA	N-(1-氨甲酰基-2-甲基丙基)-1-戊基吡啶-3-甲酰胺	C ₁₈ H ₂₆ N ₄ O ₂	1445583-20-9
88	AB-PINACA N-(4-hydroxypentyl) metabolite	N-[1-(氨基羰基)-2-甲基丙基]-1-(4-羟基戊基)-1H-吡啶-3-甲酰胺	C ₁₈ H ₂₆ N ₄ O ₃	2460433-25-2
89	AB-PINACA N-pentanoic acid metabolite	3-[[1-(氨基羰基)-2-甲基丙基]氨基]羰基]-1H-吡啶-1-戊酸	C ₁₈ H ₂₄ N ₄ O ₄	1879029-93-2
90	ACHMINACA	N-(金刚烷-1-基)-1-(环己基甲基)-1H-吡啶-3-甲酰胺	C ₂₅ H ₃₃ N ₃ O	1400742-33-7
91	ADB-BICA	N-(1-氨基-3,3-二甲基-1-氧代丁-2-基)-1-苄基-1H-吡啶-3-甲酰胺	C ₂₂ H ₂₅ N ₃ O ₂	2219319-40-9
92	ADB-4en-PINACA	N-(1-氨甲酰基-2,2-二甲基丙基)-1-(4-戊烯基)吡啶-3-甲酰胺	C ₁₉ H ₂₆ N ₄ O ₂	2666932-44-9
93	ADB-BINACA	N-(1-氨基-3,3-二甲基-1-氧代丁-2-基)-1-苄基-1H-吡啶-3-甲酰胺	C ₂₁ H ₂₄ N ₄ O ₂	1185282-27-2
94	ADB-BUTINACA	N-(1-氨甲酰基-2,2-二甲基丙基)-1-丁基吡啶-3-甲酰胺	C ₁₈ H ₂₆ N ₄ O ₂	2682867-55-4
95	ADB-CHMICA	N-(1-氨基-3,3-二甲基-1-氧代丁-2-基)-1-环己基甲基-1H-吡啶-3-甲酰胺	C ₂₂ H ₃₁ N ₃ O ₂	2221100-70-3
96	ADB-FUBINACA	N-(1-氨甲酰基-2,2-二甲基丙基)-1-(4-氟苄基)吡啶-3-甲酰胺	C ₂₁ H ₂₃ FN ₄ O ₂	1445583-51-6

表 A.1 目标物的相关信息 (续)

序号	化合物	中文名称	分子式	CAS 号
97	ADB-FUBICA	N-(1-氨基-3,3-二甲基-1-氧代丁-2-基)-1-(4-氟苄基)-1H-吡啶-3-甲酰胺	C ₂₂ H ₂₄ FN ₃ O ₂	1801338-23-7
98	ADBICA	N-(1-氨甲酰基-2,2-二甲基丙基)-1-戊基吡啶-3-甲酰胺	C ₂₀ H ₂₉ N ₃ O ₂	1445583-48-1
99	ADBICA N-(4-hydroxypentyl) metabolite	N-[1-(氨基羰基)-2,2-二甲基丙基]-1-(4-羟基戊基)-1H-吡啶-3-甲酰胺	C ₂₀ H ₂₉ N ₃ O ₃	2460433-26-3
100	ADBICA N-pentanoic acid metabolite	3-[[1-(氨基羰基)-2,2-二甲基丙基]氨基]羰基]-1H-吡啶-1-戊酸	C ₂₀ H ₂₇ N ₃ O ₄	2460433-28-5
101	ADB-PINACA	N-(1-氨甲酰基-2,2-二甲基丙基)-1-戊基吡啶-3-甲酰胺	C ₁₉ H ₂₈ N ₃ O ₂	1633766-73-0
102	ADB-PINACA N-(4-hydroxypentyl) metabolite	N-[1-(氨基羰基)-2,2-二甲基丙基]-1-(4-羟基戊基)-1H-吡啶-3-甲酰胺	C ₁₉ H ₂₈ N ₃ O ₃	2748155-91-9
103	ADB-PINACA pentanoic acid metabolite	3-[[1-(氨基羰基)-2,2-二甲基丙基]氨基]羰基]-1H-吡啶-1-戊酸	C ₁₉ H ₂₆ N ₃ O ₄	2460433-29-6
104	AH-7921	3,4-二氯-N-[(1-二甲氨基环己基)甲基]苯甲酰胺	C ₁₆ H ₂₂ Cl ₂ N ₂ O	55154-30-8
105	AKB48 N-pentanoic acid metabolite	3-[(三环[3.3.1.1.3,7]癸-1-基氨基)羰基]-1H-吡啶-1-戊酸	C ₂₃ H ₂₉ N ₃ O ₃	1630022-94-4
106	AM-1220	1-[(N-甲基-2-哌啶基)甲基]-3-(1-萘甲酰基)吡啶	C ₂₆ H ₂₆ N ₂ O	137642-54-7
107	AM-1235	[1-(5-氟戊基)-6-硝基吡啶-3-基]-萘-1-基甲酮	C ₂₄ H ₂₁ FN ₂ O ₃	335161-27-8
108	AM-1248	1-[(N-甲基-2-哌啶基)甲基]-3-(1-金刚烷基甲酰基)吡啶	C ₂₆ H ₃₄ N ₂ O	335160-66-2
109	AM-2201	1-(5-氟戊基)-3-(1-萘甲酰基)-1H-吡啶	C ₂₄ H ₂₂ FNO	335161-24-5
110	AM2201 N-(4-hydroxypentyl) metabolite	(1-(5-氟-4-羟基戊基)-1H-吡啶-3-基)(萘-1-基)甲酮	C ₂₄ H ₂₂ FNO ₂	1427521-34-3
111	AM-2232	3-(1-萘羰基)-1H-吡啶-1-戊腈	C ₂₄ H ₂₀ N ₂ O	335161-19-8
112	AM-2233	1-[(N-甲基-2-哌啶基)甲基]-3-(2-碘苯甲酰基)吡啶	C ₂₂ H ₂₃ IN ₂ O	444912-75-8

表 A.1 目标物的相关信息 (续)

序号	化合物	中文名称	分子式	CAS 号
113	AM-694	[1-(5-氟戊基)-1H-吡啶-3-基](2-碘苯基)甲酮	C ₂₀ H ₁₉ FINO	335161-03-0
114	AM-694 N-(5-hydroxypentyl) metabolite	[1-(5-羟基戊基)-1H-吡啶-3-基](2-碘代苯基)-甲酮	C ₂₀ H ₂₀ INO ₂	335160-94-6
115	AM-694 N-pentanoic acid metabolite	3-(2-碘苯甲酰基)-1H-吡啶-1-戊酸	C ₂₀ H ₁₈ INO ₃	1432900-96-3
116	AMB	N-[(1-戊基-1H-吡啶-3-基)羰基]-L-缬氨酸甲酯	C ₁₉ H ₂₇ N ₃ O ₃	1890250-13-1
117	AMB-CHMICA	3-甲基-2-[1-(环己基甲基)吡啶-3-甲酰氨基]丁酸甲酯	C ₂₂ H ₃₀ N ₂ O ₃	1971007-94-9
118	AMB-FUBICA	2-[1-(4-氟苄基)-1H-吡啶-3-甲酰氨基]-3-甲基丁酸甲酯	C ₂₂ H ₂₃ FN ₂ O ₃	1971007-90-5
119	AMB-FUBINACA	3-甲基-2-[1-(4-氟苄基)吡啶-3-甲酰氨基]丁酸甲酯	C ₂₁ H ₂₂ FN ₃ O ₃	1715016-76-4
120	APICA	N-(1-金刚烷基)-1-戊基吡啶-3-甲酰胺	C ₂₄ H ₃₂ N ₂ O	1345973-50-3
121	APINACA (AKB48)	N-(1-金刚烷基)-1-戊基吡啶-3-甲酰胺	C ₂₃ H ₃₁ N ₃ O	1345973-53-6
122	APINACA (AKB48) N-(5-hydroxypentyl) metabolite	N-(1-金刚烷基)-1-(5-羟基戊基)吡啶-3-甲酰胺	C ₂₃ H ₃₁ N ₃ O ₂	1778734-77-2
123	APP-CHMINACA	N-[(1S)-2-氨基-2-氧代-1-(苯基甲基)乙基]-1-(环己基甲基)-1H-吡啶-3-甲酰胺	C ₂₄ H ₂₈ N ₄ O ₂	1185887-14-2
124	APP-FUBINACA	N-[(1S)-2-氨基-2-氧代-1-(苯基甲基)乙基]-1-[4-氟苄基]甲基]-1H-吡啶-3-甲酰胺	C ₂₄ H ₂₁ FN ₄ O ₂	1185282-03-4
125	APP-PICA	N-[(1S)-2-氨基-2-氧代-1-(苯基甲基)乙基]-1-戊基-1H-吡啶-3-甲酰胺	C ₂₃ H ₂₇ N ₃ O ₂	2365471-53-8
126	AZEFUBIM	1-氮杂环丁烷[1-[4-氟苄基]甲基]-1H-吡啶-3-基]甲酮	C ₁₉ H ₁₇ FN ₂ O	2748592-03-0
127	Azidoindolene 1	2, 2, 3, 3-四甲基环丙烷羧酸(2Z)-2-[1-(5-氟戊基)-1, 2-二氢-2-氧代-3H-吡啶-3-亚基]酰肼	C ₂₁ H ₂₈ FN ₃ O ₂	1364933-69-6
128	BB-22	1-(环己基甲基)-1H-吡啶-3-羧酸 8-喹啉酯	C ₂₅ H ₂₄ N ₂ O ₂	1400742-42-8
129	BB-22 3-carboxyindole metabolite	1-(环己基甲基)-1H-吡啶-3-羧酸	C ₁₆ H ₁₉ NO ₂	858515-71-6
130	CB-13	1-(1-萘甲酰基)-4-戊氧基萘	C ₂₆ H ₂₄ O ₂	432047-72-8

表 A.1 目标物的相关信息 (续)

序号	化合物	中文名称	分子式	CAS 号
131	C12201	(4-氟-1-萘基)[1-(5-氟戊基)-1H-吡啶-3-基]- 甲酮	C ₂₄ H ₂₁ ClFNO	1391486-12-6
132	CUMYL-4CN-BINACA	N-(1-甲基-1-苯基乙基)-1-(4-氰基丁基)吡啶- 3-甲酰胺	C ₂₂ H ₂₄ N ₄ O	1631074-54-8
133	CUMYL-PeGACLONE	5-戊基-2-(2-苯基丙-2-基)-2,5-二氢-1H-吡啶 [4,3-b]吡啶-1-酮	C ₂₅ H ₂₈ N ₂ O	2160555-55-3
134	CUMYL-PICA	N-(1-甲基-1-苯乙基)-1-戊基-1H-吡啶-3-甲酰 胺	C ₂₃ H ₂₈ N ₂ O	1400742-32-6
135	CUMYL-PICA N-pentanoic acid metabolite	3-[[1-(1-甲基-1-苯乙基)氨基]羰基]-1H-吡啶- 1-戊酸	C ₂₈ H ₂₈ N ₂ O ₃	2748623-20-1
136	CUMYL-THPINACA	N-(1-甲基-1-苯基乙基)-1-(4-四氢吡喃基甲 基)吡啶-3-甲酰胺	C ₂₈ H ₂₇ N ₃ O ₂	1400742-50-8
137	EADB-FUBINACA	N-[(1S)-1-[(乙氨基)羰基]-2,2-二甲基丙 基]-1-[(4-氟苯基)甲基]-1H-吡啶-3-甲酰胺	C ₂₃ H ₂₇ FN ₃ O ₂	2749394-81-6
138	EAM2201	(4-乙基-1-萘基)[1-(5-氟戊基)-1H-吡啶-3- 基]-甲酮	C ₂₆ H ₂₆ FNO	1364933-60-7
139	EDMB-CHMICA	2-[1-(环己基甲基)-1H-吡啶-3-甲酰氨基]- 3,3-二甲基丁酸乙酯	C ₂₄ H ₃₄ N ₂ O ₃	—
140	EG 018	萘-1-基(9-戊基-9H-吡啶-3-基)甲酮	C ₂₈ H ₂₅ NO	2219320-91-7
141	EG2201	[9-(5-氟戊基)-9H-吡啶-3-基]-1-萘基甲酮	C ₂₈ H ₂₄ FNO	2365471-72-1
142	EMB-FUBINACA	2-[1-(4-氟苄基)-1H-吡啶-3-甲酰氨基]-3-甲 基丁酸乙酯	C ₂₂ H ₂₄ FN ₃ O ₃	2365470-94-4
143	Ethylphenethyl-FUBICA	1-[(4-氟苄基)甲基]-N-[1-(苯基甲基)丙基]- 1H-吡啶-3-甲酰胺	C ₂₆ H ₂₅ FN ₂ O	2749394-77-0
144	F2201	(4-氟-1-萘基)[1-(5-氟戊基)-1H-吡啶-3-基]- 甲酮	C ₂₄ H ₂₁ F ₂ NO	1391485-39-4
145	FAB-144	[1-(5-氟戊基)-1H-吡啶-3-基](2,2,3,3-四 甲基环丙基)-甲酮	C ₂₆ H ₂₇ FN ₂ O	2180935-79-7
146	FDU-NNEI	1-[(4-氟苄基)甲基]-N-1-萘基-1H-吡啶-3-甲 酰胺	C ₂₆ H ₁₉ FN ₂ O	2365471-76-5
147	FUBIMINA	1-(5-氟戊基)-2-(1-萘甲酰基)苯并咪唑	C ₂₃ H ₂₁ FN ₂ O	1984789-90-3

表 A.1 目标物的相关信息 (续)

序号	化合物	中文名称	分子式	CAS 号
148	FUBIMINA N-(5-hydroxypentyl) metabolite	(1-(5-羟基戊基)-1H-苯并[d]咪唑-2-基)(萘-1-基)甲酮	C ₂₃ H ₂₂ N ₂ O ₂	2748343-95-3
149	FUB-JWH-018	1-(4-氟苄基)-3-(1-萘甲酰基)吲哚	C ₂₆ H ₁₈ FNO	2365471-45-8
150	FUB-NPB-22	1-[(4-氟苄基)甲基]-1H-吲哚-3-羧酸 8-喹啉酯	C ₂₄ H ₁₆ FN ₃ O ₂	2244864-90-0
151	FUB-PB-22	1-(4-氟苄基)吲哚-3-甲酸-8-喹啉酯	C ₂₅ H ₁₇ FN ₂ O ₂	1800098-36-5
152	FUB-PB-22 3-carboxyindole metabolite	1-(4-氟苄基)-1H-吲哚-3-羧酸	C ₁₆ H ₁₂ FNO ₂	226883-79-0
153	HU-210	(6aR, 10aR)-3-(1,1-二甲基庚基)-6a, 7, 10, 10a-四氢-1-羟基-6, 6-二甲基-6H-二苯并(b, d)吡喃-9-甲醇	C ₂₅ H ₃₈ O ₃	112830-95-2
154	Isobutyl 1-pentyl-1H-indazole-3-carboxylate	1-戊基-1H-吲哚-3-羧酸异丁酯	C ₁₇ H ₂₄ N ₂ O ₂	2748624-88-4
155	JWH-031	(1-己基-1H-吡咯-3-基)(萘-1-基)甲酮	C ₂₁ H ₂₃ NO	162934-74-9
156	JWH-071	(1-乙基-1H-吲哚-3-基)(萘-1-基)甲酮	C ₂₁ H ₁₇ NO	209414-05-1
157	JWH-072	萘-1-基(1-丙基-1H-吲哚-3-基)甲酮	C ₂₂ H ₁₉ NO	209414-06-2
158	JWH-080	(1-丁基-1H-吲哚-3-基)(4-甲氧基萘-1-基)甲酮	C ₂₄ H ₂₃ NO ₂	210179-44-5
159	JWH-098	2-甲基-1-戊基-3-(4-甲氧基-1-萘甲酰基)吲哚	C ₂₆ H ₂₇ NO ₂	316189-74-9
160	JWH-116	(2-乙基-1-戊基-1H-吲哚-3-基)(萘-1-基)甲酮	C ₂₆ H ₂₇ NO	619294-64-3
161	JWH-147	(1-己基-5-苯基-1H-吡咯-3-基)(萘-1-基)甲酮	C ₂₇ H ₂₇ NO	914458-20-1
162	JWH-175	3-(萘-1-基甲基)-1-戊基-1H-吲哚	C ₂₄ H ₂₅ N	619294-35-8
163	JWH-180	1-丙基-3-(4-丙基-1-萘甲酰基)吲哚	C ₂₅ H ₂₅ NO	824959-87-7
164	JWH-182	1-戊基-3-(4-丙基-1-萘甲酰基)吲哚	C ₂₇ H ₂₉ NO	824960-02-3
165	JWH-193	1-(2-(N-吗啉基)乙基)-3-(4-甲基-1-萘甲酰基)吲哚	C ₂₆ H ₂₆ N ₂ O ₂	133438-58-1
166	JWH-203 N-pentanoic acid metabolite	5-(3-(2-(2-氯苄基)乙酰基)-1H-吲哚-1-基)戊酸	C ₂₁ H ₂₀ ClNO ₃	1449675-70-0
167	JWH-213	(4-乙基萘-1-基)(2-甲基-1-戊基-1H-吲哚-3-基)甲酮	C ₂₇ H ₂₉ NO	824959-83-3
168	JWH-249	2-(2-溴苄基)-1-(1-戊基-1H-吲哚-3-基)乙-1-酮	C ₂₁ H ₂₂ BrNO	864445-60-3

表 A.1 目标物的相关信息 (续)

序号	化合物	中文名称	分子式	CAS 号
169	JWH-309	萘-1-基(5-(萘-1-基)-1-戊基-1H-吡咯-3-基)甲酮	C ₃₀ H ₂₇ NO	914458-42-7
170	JWH-369	(5-(2-氯苯基)-1-戊基-1H-吡咯-3-基)(萘-1-基)甲酮	C ₂₆ H ₂₄ ClNO	914458-27-8
171	JWH-398	(4-氯萘-1-基)(1-戊基-1H-吡咯-3-基)甲酮	C ₂₄ H ₂₂ ClNO	1292765-18-4
172	JWH-398 N-(4-hydroxypentyl) metabolite	(4-氯萘-1-基)(1-(4-羟基戊基)-1H-吡咯-3-基)甲酮	C ₂₄ H ₂₂ ClNO ₂	1537889-06-7
173	JWH-412	(4-氟萘-1-基)(1-戊基-1H-吡咯-3-基)甲酮	C ₂₄ H ₂₂ FNO	1364933-59-4
174	JWH-412 N-(5-hydroxypentyl) metabolite	(4-氟萘-1-基)(1-(5-羟基戊基)-1H-吡咯-3-基)甲酮	C ₂₄ H ₂₂ FNO ₂	2748591-83-3
175	JWH-007	2-甲基-1-戊基-3-(1-萘甲酰基)吡咯	C ₂₅ H ₂₅ NO	155471-10-6
176	JWH-015	2-甲基-1-丙基-3-(1-萘甲酰基)吡咯	C ₂₃ H ₂₁ NO	155471-08-2
177	JWH-018	1-戊基-3-(1-萘甲酰基)吡咯	C ₂₄ H ₂₃ NO	209414-07-3
178	JWH-018 N-(5-hydroxypentyl) metabolite	(1-(5-羟基戊基)-1H-吡咯-3-基)(萘-1-基)甲酮	C ₂₄ H ₂₃ NO ₂	335161-21-2
179	JWH-018 N-pentanoic acid metabolite	1-(5-戊酸)-3-(1-萘甲酰基)吡咯	C ₂₄ H ₂₁ NO ₃	1254475-87-0
180	JWH-019	1-己基-3-(1-萘甲酰基)吡咯	C ₂₅ H ₂₅ NO	209414-08-4
181	JWH-019 N-(6-hydroxyhexyl) metabolite	(1-(6-羟基己基)-1H-吡咯-3-基)-1-萘基甲酮	C ₂₅ H ₂₅ NO ₂	1435934-29-4
182	JWH-073	1-丁基-3-(1-萘甲酰基)吡咯	C ₂₃ H ₂₁ NO	208987-48-8
183	JWH-073 N-(3-hydroxybutyl) metabolite	(1-(3-羟基丁基)-1H-吡咯-3-基)(萘-1-基)-甲酮	C ₂₃ H ₂₁ NO ₂	1320363-48-1
184	JWH-073 N-butanoic acid metabolite	3-(1-萘基)-1H-吡咯-1-丁酸	C ₂₃ H ₁₉ NO ₃	1307803-52-6
185	JWH-073 N-(4-hydroxybutyl) metabolite	(1-(4-羟基丁基)-1H-吡咯-3-基)-1-萘基甲酮	C ₂₃ H ₂₁ NO ₂	335161-14-3
186	JWH-081	1-戊基-3-(4-甲氧基-1-萘甲酰基)吡咯	C ₂₅ H ₂₅ NO ₂	210179-46-7
187	JWH-122	1-戊基-3-(4-甲基-1-萘甲酰基)吡咯	C ₂₅ H ₂₅ NO	619294-47-2
188	JWH-122 N-(5-hydroxypentyl) metabolite	(1-(5-羟基戊基)-1H-吡咯-3-基)(4-甲基-1-萘基)-甲酮	C ₂₅ H ₂₅ NO ₂	1379604-68-8
189	JWH-203	1-戊基-3-(2-氯苯乙酰基)吡咯	C ₂₁ H ₂₂ ClNO	864445-54-5

表 A.1 目标物的相关信息 (续)

序号	化合物	中文名称	分子式	CAS 号
190	JWH-210	1-戊基-3-(4-乙基-1-萘甲酰基)吲哚	C ₂₆ H ₂₇ NO	824959-81-1
191	JWH-210 N-(4-hydroxypentyl) metabolite	(4-乙基萘-1-基)(1-(4-羟基戊基)-1H-吲哚-3-基)甲酮	C ₂₆ H ₂₇ NO ₂	1427521-37-6
192	JWH-250	2-(2-甲氧基苯基)-1-(1-戊基-1H-吲哚-3-基)乙酮	C ₂₂ H ₂₅ NO ₂	864445-43-2
193	JWH-250 N-(4-hydroxypentyl) metabolite	1-(1-(4-羟基戊基)-1H-吲哚-3-基)-2-(2-甲氧基苯基)乙酮	C ₂₂ H ₂₅ NO ₃	1427521-38-7
194	JWH-307	(5-(2-氟苯基)-1-戊基-1H-吡咯-3-基)(萘-1-基)甲酮	C ₂₆ H ₂₄ FNO	914458-26-7
195	JWH-370	1-戊基-2-(2-甲基苯基)-4-(1-萘甲酰基)吡咯	C ₂₇ H ₂₇ NO	914458-22-3
196	M-144	(1-(5-氟戊基)-2-甲基-1H-吲哚-3-基)(2,2,3,3-四甲基环丙基)-甲酮	C ₂₂ H ₃₀ FNO	2180924-19-8
197	MA-CHMINACA	(1-(环己基甲基)-1H-吲哚-3-羰基)-L-缬氨酸甲酯	C ₂₁ H ₂₉ N ₃ O ₃	1971007-96-1
198	MAM2201	1-(5-氟戊基)-3-(4-甲基-1-萘甲酰基)吲哚	C ₂₅ H ₂₄ FNO	1354631-24-5
199	MAM2201 N-(4-hydroxypentyl) metabolite	(1-(5-氟-4-羟基戊基)-1H-吲哚-3-基)(4-甲基-1-萘基)-甲酮	C ₂₅ H ₂₄ FNO ₂	1537889-05-6
200	MDMB-3en-BUTINACA	(S)-2-(1-(丁-3-烯-1-基)-1H-吲哚-3-甲酰胺基)-3,3-二甲基丁酸甲酯	C ₁₉ H ₂₅ N ₃ O ₃	—
201	MDMB-4en-PINACA	3,3-二甲基-2-[1-(4-戊烯-1-基)-1H-吲哚-3-甲酰胺基]丁酸甲酯	C ₂₀ H ₂₇ N ₃ O ₃	2504100—70-1
202	MDMB-4en-PINACA butanoic acid metabolite	(S)-3,3-二甲基-2-(1-(戊-4-烯-1-基)-1H-吲哚-3-甲酰胺基)丁酸	C ₁₉ H ₂₅ N ₃ O ₃	—
203	MDMB-BUTINACA	(S)-2-(1-丁基-1H-吲哚-3-甲酰胺基)-3,3-二甲基丁酸甲酯	C ₁₉ H ₂₇ N ₃ O ₃	3039541-81-3
204	MDMB-BUTINACA butanoic acid metabolite	(S)-2-(1-丁基-1H-吲哚-3-甲酰胺基)-3,3-二甲基丁酸	C ₁₈ H ₂₅ N ₃ O ₃	3039541-82-4
205	MDMB-CHMCZCA	N-[[9-(环己基甲基)-9H-吡啶-3-基]羰基]-3-甲基-L-缬氨酸甲酯	C ₂₇ H ₃₄ N ₂ O ₃	2219324-32-8
206	MDMB-CHMCZCA metabolite M3	9-(环己基甲基)-9H-吡啶-3-羧酸	C ₂₀ H ₂₁ NO ₂	2225886-49-5

表 A.1 目标物的相关信息 (续)

序号	化合物	中文名称	分子式	CAS 号
207	MDMB-CHMICA	N-(1-甲氧基羰基-2,2-二甲基丙基)-1-(环己基甲基)吡啶-3-甲酰胺	C ₂₃ H ₃₂ N ₂ O ₃	1863065-84-2
208	MDMB-CHMICA metabolite M2	(S)-2-(1-(环己基甲基)-1H-吡啶-3-甲酰胺基)-3,3-二甲基丁酸	C ₂₂ H ₃₀ N ₂ O ₃	2460730-12-3
209	MDMB-CHMINACA	2-[1-(环己基甲基)-1H-吡啶-3-甲酰胺基]-3,3-二甲基丁酸甲酯	C ₂₂ H ₃₁ N ₂ O ₃	1715016-78-6
210	MDMB-FUBICA	2-[1-(4-氟苄基)-1H-吡啶-3-甲酰胺基]-3,3-二甲基丁酸甲酯	C ₂₃ H ₂₅ FN ₂ O ₃	1971007-91-6
211	MDMB-FUBICA metabolite 3	N-[[1-[(4-氟苄基)甲基]-1H-吡啶-3-基]羰基]-3-甲基-L-缬氨酸	C ₂₂ H ₂₃ FN ₂ O ₃	2693397-46-3
212	MDMB-FUBINACA	N-(1-甲氧基羰基-2,2-二甲基丙基)-1-(4-氟苄基)吡啶-3-甲酰胺	C ₂₂ H ₂₄ FN ₂ O ₃	1715016-77-5
213	MMB018	N-[(1-戊基-1H-吡啶-3-基)羰基]-L-缬氨酸甲酯	C ₂₀ H ₂₈ N ₂ O ₃	1971007-97-2
214	MMB022	N-[[1-(4-戊烯-1-基)-1H-吡啶-3-基]羰基]-L-缬氨酸甲酯	C ₂₀ H ₂₆ N ₂ O ₃	2659308-31-1
215	MMB2201	N-[[1-(5-氟戊基)-1H-吡啶-3-基]羰基]-L-缬氨酸甲酯	C ₂₀ H ₂₇ FN ₂ O ₃	1971007-87-0
216	MMB-FUBICA metabolite 3	N-[[1-[(4-氟苄基)甲基]-1H-吡啶-3-基]羰基]-L-缬氨酸	C ₂₁ H ₂₁ FN ₂ O ₃	2693397-44-1
217	MN-18	N-(萘-1-基)-1-戊基-1H-吡啶-3-甲酰胺	C ₂₃ H ₂₃ N ₃ O	1391484-80-2
218	MN-25	7-甲氧基-1-[2-(4-吗啉基)乙基]-N-[(1S,2S,4R)-1,3,3-三甲基双环[2.2.1]庚-2-基]-1H-吡啶-3-甲酰胺	C ₂₆ H ₃₇ N ₅ O ₃	501926-82-5
219	MO-CHMINACA	1-(环己基甲基)-1H-吡啶-3-羧酸 1-(甲氧羰基)-2,2-二甲基丙酯	C ₂₂ H ₃₀ N ₂ O ₄	2365471-04-9
220	NAMIE	1-(1-甲基-1H-吡啶-3-基)-2-(1-萘基)-乙酮	C ₂₁ H ₁₇ NO	1638677-49-2
221	NAPIE	2-(1-萘基)-1-(1-戊基-1H-吡啶-3-基)-乙酮	C ₂₅ H ₂₉ NO	2748289-69-0
222	NNEI	N-1-萘基-1-戊基-1H-吡啶-3-甲酰胺	C ₂₄ H ₂₄ N ₂ O	1338925-11-3
223	PB-22	1-戊基吡啶-3-甲酸-8-喹啉酯	C ₂₃ H ₂₂ N ₂ O ₂	1400742-17-7

表 A.1 目标物的相关信息 (续)

序号	化合物	中文名称	分子式	CAS 号
224	PB-22 N-(4-hydroxypentyl) metabolite	1-(4-羟基戊基)-1H-吡啶-3-羧酸 8-喹啉酯	C ₂₃ H ₂₂ N ₂ O ₃	2071636-79-6
225	PB-22 N-pentanoic acid metabolite	3-[(8-喹啉氧基)羰基]-1H-吡啶-1-戊酸	C ₂₃ H ₂₀ N ₂ O ₄	2071638-22-5
226	PF-03550096	N-[(1S)-1-(氨基羰基)-2, 2-二甲丙基]-2, 3-二氢-3-(3-羟基-3-甲基丁基)-2-氧代-1H-苯并咪唑-1-甲酰胺	C ₁₉ H ₂₈ N ₄ O ₄	910376-39-5
227	PTI-2 (hydrochloride)	N-(2-甲氧基乙基)-N-[[2-(1-戊基吡啶-3-基)-1, 3-噻唑-4-基]甲基]丙-2-胺	C ₂₃ H ₃₃ N ₃ OS	1400742-45-1
228	PX 1	n-[(1S)-2-氨基-2-氧代-1-(苯基甲基)乙基]-1-(5-氟戊基)-1H-吡啶-3-甲酰胺	C ₂₃ H ₂₆ FN ₃ O ₂	2221100-71-4
229	PX 2	N-(1-氨甲酰基-2-苯基乙基)-1-(5-氟戊基)吡啶-3-甲酰胺	C ₂₂ H ₂₅ FN ₃ O ₂	2205029-76-9
230	RCS-4	1-戊基-3-(4-甲氧基苯甲酰基)吡啶	C ₂₁ H ₂₃ NO ₂	1345966-78-0
231	RCS-4 N-(4-hydroxypentyl) metabolite	(1-(4-羟基戊基)-1H-吡啶-3-基)(4-甲氧基苯基)甲酮	C ₂₁ H ₂₃ NO ₃	1448893-03-5
232	RCS-8	1-[1-(2-环己基乙基)-1H-吡啶-3-基]-2-(2-甲氧基苯基)-乙酮	C ₂₅ H ₂₉ NO ₂	1345970-42-4
233	SDB-005	1-戊基-1H-吡啶-3-甲酸-1-萘酯	C ₂₃ H ₂₂ N ₂ O ₂	2180934-13-6
234	STS-135	N-(1-金刚烷基)-1-(5-氟戊基)吡啶-3-甲酰胺	C ₂₄ H ₃₁ FN ₂ O	1354631-26-7
235	THJ2201	[1-(5-氟戊基)-1H-吡啶-3-基](萘-1-基)甲酮	C ₂₃ H ₂₁ FN ₂ O	1801552-01-1
236	UR-144	1-戊基-3-(2, 2, 3, 3-四甲基环丙甲酰基)吡啶	C ₂₁ H ₂₉ NO	1199943-44-6
237	UR-144 N-(4-hydroxypentyl) metabolite	(1-(4-羟基戊基)-1H-吡啶-3-基)(2, 2, 3, 3-四甲基环丙基)甲酮	C ₂₁ H ₂₉ NO ₂	1537889-04-5
238	UR-144 N-pentanoic acid metabolite	1-(5-戊酸)-3-(2, 2, 3, 3-四甲基环丙甲酰基)吡啶	C ₂₁ H ₂₇ NO ₃	1451369-33-7
239	XLR-11 N-(4-hydroxypentyl) metabolite	[1-(5-氟-4-羟基戊基)-1H-吡啶-3-基](2, 2, 3, 3-四甲基环丙基)-甲酮	C ₂₁ H ₂₈ FN ₂ O ₂	1782099-36-8
240	AKB48-d ₉ (内标物)	1-戊基-2, 2, 3, 3, 4, 4, 5, 5-d ₉ -N-三环[3.3.1.1 ^{3,7}]癸-1-基-1H-吡啶-3-甲酰胺	C ₂₃ H ₂₂ D ₉ N ₃ O	2484976-99-8
241	JWH-018 N-(4-hydroxypentyl) metabolite-d ₅ (内标物)	(1-(4-羟基戊基)-1H-吡啶-3-基-d ₅)(萘-1-基)-甲酮	C ₂₄ H ₁₈ D ₅ NO ₂	1413427-49-2

A.2 目标物的质谱参数、保留时间和检出限

目标物的质谱参数、保留时间和检出限见表A.2。

表A.2 目标物的质谱参数、保留时间和检出限

序号	化合物	前体离子 <i>m/z</i>	碎片离子 1 <i>m/z</i>	碎片离子 2 <i>m/z</i>	保留 时间 min	血液检 出限 ng/mL	尿液检 出限 ng/mL
1	2-fluoro NNEI	375.18672	232.11322	130.06513	8.7	5	5
2	2-Fluoropentylindole	206.13395	130.06513	118.06513	8.2	5	5
3	3,5-AB-CHMFUPPYCA	401.23473	260.11937	356.21327	10.7	30	30
4	3-CAF	383.11903	239.06152	257.07208	13.0	5	5
5	3-fluoro AMB	364.20309	233.10847	304.18197	8.4	5	5
6	3-Fluoropentylindole	206.13395	130.06513	132.08078	8.3	5	5
7	4-chloro CUMYL-PINACA	384.18372	215.11789	232.14444	13.6	5	5
8	4-cyano CUMYL-BUT7AICA	361.20229	243.12404	119.08553	4.7	5	5
9	4-cyano MDMB-BUTINACA	371.20777	311.18664	226.09749	5.6	50	50
10	4-fluoro MDMB-BUTINACA butanoic acid metabolite	350.18745	304.18197	219.09282	6.3	5	5
11	4-fluoro ADB	378.21875	318.19762	233.10847	8.9	5	5
12	4-fluoro AMB	364.20310	233.10847	304.18197	7.4	5	5
13	4-fluoro MDMB-BUTICA	363.20785	218.09757	176.04948	6.9	10	10
14	4-fluoro MDMB-BUTINACA	364.20310	304.18197	219.09282	7.5	5	5
15	4-fluoro MDMB-BUTINACA 2'-indazole isomer	364.20310	230.12879	304.18197	6.6	5	5
16	4-fluoro MDMB-BUTINACA 3-carboxyindazole metabolite	237.10338	219.09282	145.03964	4.0	5	5
17	4-fluoro-CUMYL-5-fluoro-PICA	385.20860	249.13977	137.07611	8.3	5	5
18	4-fluoro-CUMYL-5-fluoro-PINACA	386.20385	233.10847	251.11789	9.4	5	5
19	5,3-AB-CHMFUPPYCA	401.23473	356.21327	384.20818	10.0	5	5
20	5-bromo APINACA	444.16450	135.11683	107.08553	14.4	5	5
21	5-bromo THJ 018	421.09100	293.02600	311.03657	12.9	5	5
22	5-chloro AB-PINACA	365.17388	320.15242	249.07892	6.4	5	5
23	5-chloro AKB48	400.21502	135.11683	107.08553	14.2	10	10
24	5-chloro NNEI	391.15717	248.08367	212.10699	9.4	5	5
25	5-chloro THJ 018	377.14152	249.07892	267.09167	12.5	10	5
26	5-fluoro ABICA	348.20818	232.11322	331.18163	5.1	5	5
27	5-fluoro AB-PINACA	349.20343	304.18197	233.10847	5.2	5	5
28	5-fluoro ADBICA	362.22383	232.11322	345.19728	6.1	5	5
29	5-fluoro AMB	364.20310	304.18197	233.10847	7.2	5	5
30	5-fluoro APINACA	384.24457	135.11663	107.08553	13.2	5	5
31	5-fluoro CUMYL-PICA	367.21802	249.13977	119.08553	8.2	5	5
32	5-fluoro CUMYL-PINACA	368.21327	250.13522	233.10847	9.4	30	30
33	5-fluoro MDMB-PICA	377.22350	232.11322	212.10699	8.0	5	5
34	5-fluoro MDMB-PICA metabolite 4	379.20276	248.10813	144.04439	4.6	5	5
35	5-fluoro MDMB-PICA metabolite 7	363.20785	232.11322	212.10813	6.8	5	5
36	5-fluoro MDMB-PICA metabolite 8	361.17580	216.06552	174.05496	4.9	5	5
37	5-fluoro MDMB-PICA metabolite 9	393.21841	248.10813	174.05496	5.2	5	5
38	5-fluoro phenyl-PICA	325.17107	232.11322	206.13395	6.5	5	5
39	5-fluoro 7-APAICA	384.24457	135.11683	107.08533	10.0	5	5
40	5-fluoro 7-QUPAIC	378.16123	233.10847	205.22547	6.1	5	5
41	5-fluoro AB-PINACA 3-carboxyindazole metabolite	251.11903	213.10224	233.10847	4.4	5	5
42	5-fluoro AB-PINACA N-(4-hydroxypentyl) metabolite	365.19835	320.17688	348.17180	3.8	5	5

表 A.2 目标物的质谱参数、保留时间和检出限 (续)

序号	化合物	前体离子 <i>m/z</i>	碎片离子 1 <i>m/z</i>	碎片离子 2 <i>m/z</i>	保留时间 min	血液检 出限 ng/mL	尿液检 出限 ng/mL
43	5-fluoro ADB	378.21875	318.19762	233.10847	8.7	10	10
44	5-fluoro ADB metabolite 2	376.22308	316.20195	231.11280	6.2	5	5
45	5-fluoro ADB-PINACA	363.21908	318.19762	233.10847	6.2	5	5
46	5-fluoro AEB	378.21875	304.18197	233.10847	8.6	5	5
47	5-fluoro AMB metabolite 2	362.20743	302.18630	231.11280	5.2	5	5
48	5-fluoro AMB metabolite 3	376.18670	316.16557	358.17613	5.0	5	5
49	5-fluoro AMB metabolite 7	350.18745	304.18197	233.10847	6.1	5	5
50	5-fluoro BEPIRAPIM (hydrochloride)	408.24457	232.11322	212.10699	3.7	5	5
51	5-fluoro CUMYL-PeGACLONE	391.21802	273.13977	119.08553	8.2	10	5
52	5-fluoro CYPPICA	303.18672	232.11322	206.13395	5.5	5	5
53	5-fluoro ethylbenzyl-PICA	367.21802	249.13977	119.08553	8.0	5	5
54	5-fluoro MDMB-7-PAICA	378.21875	233.10847	206.12138	6.1	5	5
55	5-fluoro MDMB-7-PAICA butanoic acid metabolite	364.20310	233.10847	206.12138	5.3	10	10
56	5-fluoro MDMB-PICA metabolite 2	375.22783	230.11756	144.04439	5.9	30	10
57	5-fluoro MN-18	376.18197	233.10847	251.11789	10.7	5	5
58	5-fluoro MPP-PICA	411.20785	232.11322	212.10699	7.4	5	5
59	5-fluoro NNEI	375.18672	232.11322	212.10699	7.7	10	10
60	5-Fluoro PB-22	377.16598	232.11322	212.10699	7.5	10	5
61	5-fluoro PB-22 3-carboxyindole metabolite	250.12378	206.13395	118.06513	4.8	5	5
62	5-fluoro PY-PICA	303.18672	98.06004	232.11322	5.4	30	30
63	5-fluoro SDB-005	377.16598	233.10847	251.11903	11.6	5	5
64	5-fluoro-3,5-AB-PFUPPYCA	393.20966	348.18820	260.11937	6.8	5	5
65	5-fluoro-3,5-ADB-PFUPPYCA	407.22531	362.20385	277.11470	8.2	5	5
66	5-Fluoropentyl-3- pyridinoylindole (hydrochloride)	311.15542	291.14919	194.08385	4.9	5	5
67	5-Fluoropentylindole	206.13395	132.08078	118.06513	7.2	10	10
68	5-fluoro-tert-Butylbenzyl-PINACA	396.24457	250.13502	233.10847	12.0	5	5
69	5F-UR-144	330.22277	125.09609	232.11322	11.0	5	5
70	7'-methoxy NABUTIE	372.19581	230.11756	141.06988	12.6	5	5
71	A-796260	355.23800	125.09609	114.09134	4.4	5	5
72	A-834735	340.22711	125.09609	242.11756	9.3	5	5
73	A-836339	311.17878	187.08996	125.09609	4.7	5	5
74	AB-005	353.25874	112.11208	98.09643	4.7	5	5
75	AB-7-FUBAICA	369.17213	227.09790	324.15067	4.8	5	5
76	AB-BICA	350.18630	234.09134	333.15975	5.6	5	5
77	AB-CHMINACA	357.22850	241.13354	312.20704	9.3	30	30
78	AB-CHMICA	356.23325	240.13829	339.20670	9.0	5	5
79	AB-CHMINACA metabolite M7	388.18670	241.13354	259.14410	7.2	5	5
80	AB-CHMINACA metabolite M3A	374.20743	257.12845	328.20195	4.9	5	5
81	AB-CHMINACA metabolite M6	387.20268	342.18122	241.13354	6.7	5	5
82	AB-FUBICA	368.17688	252.08192	351.15033	5.7	5	5
83	AB-FUBINACA	369.17213	324.15067	253.07717	5.8	5	5
84	AB-FUBINACA metabolite 2A	399.14631	253.07717	84.04439	4.5	5	5
85	AB-FUBINACA metabolite 3	370.15615	324.15067	253.07717	7.0	10	10
86	AB-FUBINACA metabolite 4	271.08773	109.04480	253.07717	4.9	5	5
87	AB-PINACA	331.21285	286.19139	215.11789	7.5	5	5
88	AB-PINACA N-(4-hydroxypentyl) metabolite	347.20777	302.18630	231.11280	4.0	10	10

表 A.2 目标物的质谱参数、保留时间和检出限 (续)

序号	化合物	前体离子 <i>m/z</i>	碎片离子 1 <i>m/z</i>	碎片离子 2 <i>m/z</i>	保留 时间 min	血液检 出限 ng/mL	尿液检 出限 ng/mL
89	AB-PINACA N-pentanoic acid metabolite	361.18703	245.09207	316.16557	3.9	5	5
90	ACHMINACA	392.26964	135.11683	107.08553	15.3	50	50
91	ADB-BICA	364.20195	234.09134	347.17540	6.8	10	10
92	ADB-4en-PINACA	343.21285	213.10201	298.19139	7.6	5	5
93	ADB-BINACA	365.19720	320.17574	348.17065	7.0	5	5
94	ADB-BUTINACA	331.21285	286.19139	314.18630	7.4	10	10
95	ADB-CHMICA	370.24890	240.13829	353.22235	10.7	5	5
96	ADB-FUBINACA	383.18778	253.07717	338.16632	7.1	5	5
97	ADB-FUBICA	382.19253	252.08192	365.16598	6.9	5	5
98	ADBICA	344.23325	214.12264	327.20670	8.9	5	5
99	ADBICA N-(4-hydroxypentyl) metabolite	360.22817	230.11756	343.20162	4.6	5	5
100	ADBICA N-pentanoic acid metabolite	374.20743	244.09682	357.18088	4.5	5	5
101	ADB-PINACA	345.22850	300.20704	215.11789	9.1	5	5
102	ADB-PINACA N-(4-hydroxypentyl) metabolite	361.22342	316.20195	230.11756	4.6	5	5
103	ADB-PINACA pentanoic acid metabolite	375.20268	245.09207	330.18122	4.4	5	5
104	AH-7921	329.11820	284.06035	172.95555	3.7	5	5
105	AKB48 N-pentanoic acid metabolite	396.22817	135.11683	107.08553	10.3	5	5
106	AM-1220	383.21179	112.11208	98.09643	3.9	5	5
107	AM-1235	405.16090	155.04914	277.09830	10.5	30	30
108	AM-1248	391.27439	135.11683	112.11208	5.5	5	5
109	AM-2201	360.17582	155.04914	232.11322	9.4	5	5
110	AM2201 N-(4-hydroxypentyl) metabolite	376.17073	155.04914	248.10813	6.1	5	5
111	AM-2232	353.16484	155.04914	225.10224	6.0	10	10
112	AM-2233	459.09278	98.09643	112.11208	3.6	5	5
113	AM-694	436.05681	230.93013	309.15234	7.5	5	5
114	AM-694 N-(5-hydroxypentyl) metabolite	434.06115	230.93013	186.12773	5.4	5	5
115	AM-694 N-pentanoic acid metabolite	448.04041	230.93013	321.13594	5.3	5	5
116	AMB	346.21252	286.19139	215.11789	10.5	5	5
117	AMB-CHMICA	371.23292	240.13829	97.10118	11.0	5	5
118	AMB-FUBICA	383.17655	252.08192	109.04480	7.4	5	5
119	AMB-FUBINACA	384.17180	324.15067	253.07717	8.2	10	5
120	APICA	365.25874	135.11683	214.12264	14.0	5	5
121	APINACA (AKB48)	366.25399	135.11683	107.08553	14.8	10	10
122	APINACA (AKB48) N-(5- hydroxypentyl) metabolite	382.24890	135.11683	107.08553	10.6	5	10
123	APP-CHMINACA	405.22850	360.20704	241.13354	10.4	5	5
124	APP-FUBINACA	417.17213	372.15067	253.07717	6.8	5	5
125	APP-PICA	378.21760	214.12264	361.19105	8.4	10	10
126	AZEFUBIM	309.13977	252.08192	84.04439	5.3	5	5
127	Azidoindolene 1	374.22383	125.09609	97.10118	9.0	5	5
128	BB-22	385.19105	240.13829	168.96556	12.2	5	5
129	BB-22 3-carboxyindole metabolite	258.14886	118.06513	132.08078	8.9	10	30

表 A.2 目标物的质谱参数、保留时间和检出限 (续)

序号	化合物	前体离子 <i>m/z</i>	碎片离子 1 <i>m/z</i>	碎片离子 2 <i>m/z</i>	保留时间 min	血液检 出限 ng/mL	尿液检 出限 ng/mL
130	CB-13	369.18491	155.04914	299.10666	15.3	5	5
131	C12201	394.13685	189.01017	161.01525	12.3	5	10
132	CUMYL-4CN-BINACA	361.20229	226.09749	243.12404	9.2	5	5
133	CUMYL-PeGACLONE	373.22744	255.14919	119.08553	11.6	30	10
134	CUMYL-PICA	349.22744	231.14919	119.08553	11.0	10	10
135	CUMYL-PICA N-pentanoic acid metabolite	379.20162	261.12337	244.09682	5.9	5	5
136	CUMYL-THPINACA	378.21760	260.13935	243.11280	7.4	5	5
137	EADB-FUBINACA	411.21908	338.16632	253.07717	8.6	5	5
138	EAM2201	388.20712	183.08044	232.11322	12.0	5	5
139	EDMB-CHMICA	399.26422	240.13829	97.10118	13.4	5	5
140	EG 018	392.20089	155.04914	264.13829	15.1	5	5
141	EG2201	410.19147	155.04914	282.12887	14.0	5	5
142	EMB-FUBINACA	398.18745	324.15067	253.07717	9.6	5	5
143	Ethylphenethyl-FUBICA	401.20237	252.08192	109.04480	9.8	10	10
144	F2201	378.16640	173.03972	232.11322	10.6	5	5
145	FAB-144	331.21802	233.10847	251.11789	12.9	5	5
146	FDU-NNEI	395.15542	252.08192	109.04480	8.6	5	5
147	FUBIMINA	361.17107	155.04914	177.04587	10.0	5	5
148	FUBIMINA N-(5-hydroxypentyl) metabolite	359.17540	273.10224	155.04914	6.9	5	5
149	FUB-JWH-018	380.14452	155.04914	252.08192	10.6	5	5
150	FUB-NPB-22	398.12993	253.07717	285.10338	7.9	5	5
151	FUB-PB-22	397.13468	252.08192	109.04480	8.6	5	10
152	FUB-PB-22 3-carboxyindole metabolite	270.09248	109.04480	252.08192	5.5	5	5
153	HU-210	387.28937	71.08553	243.13796	14.7	5	5
154	Isobutyl 1-pentyl-1H-indazole-3- carboxylate	289.19105	215.11789	233.12845	12.5	5	5
155	JWH-031	306.18524	155.04914	127.05423	11.7	5	5
156	JWH-071	300.13829	155.04914	172.07569	7.7	5	5
157	JWH-072	314.15394	155.04914	186.09134	9.2	5	5
158	JWH-080	358.18016	185.05971	157.06479	11.9	5	5
159	JWH-098	386.21146	185.05971	228.13829	13.6	5	5
160	JWH-116	370.21654	155.04914	242.15394	13.9	5	5
161	JWH-147	382.21654	155.04914	254.15394	14.4	5	5
162	JWH-175	328.20598	141.06988	264.72178	15.5	5	5
163	JWH-180	356.20089	197.09609	186.09134	13.2	5	5
164	JWH-182	384.23219	197.09609	214.12264	14.7	5	5
165	JWH-193	399.20670	169.06479	114.09134	4.3	10	5
166	JWH-203 N-pentanoic acid metabolite	370.12045	125.01525	218.11756	6.0	5	5
167	JWH-213	384.23219	183.08044	228.13829	14.4	5	5
168	JWH-249	384.09575	168.96466	214.12264	12.3	5	5
169	JWH-309	418.21654	155.04914	127.05423	14.9	5	5
170	JWH-369	402.16192	155.04914	127.05423	14.0	5	5
171	JWH-398	376.14627	189.01017	214.12264	14.2	5	5
172	JWH-398 N-(4-hydroxypentyl) metabolite	392.14118	189.01017	161.01525	9.5	5	5
173	JWH-412	360.17582	173.03972	214.12264	13.3	5	5

表 A.2 目标物的质谱参数、保留时间和检出限 (续)

序号	化合物	前体离子 <i>m/z</i>	碎片离子 1 <i>m/z</i>	碎片离子 2 <i>m/z</i>	保留 时间 min	血液检 出限 ng/mL	尿液检 出限 ng/mL
174	JWH-412 N-(5-hydroxypentyl) metabolite	376.17073	173.03972	144.04439	7.9	5	5
175	JWH-007	356.20089	91.05759	197.09609	13.1	5	5
176	JWH-015	328.16959	155.04914	200.10699	10.0	5	5
177	JWH-018	342.18524	155.04914	214.12264	12.6	5	5
178	JWH-018 N-(5-hydroxypentyl) metabolite	358.18016	155.04914	230.11756	6.8	5	5
179	JWH-018 N-pentanoic acid metabolite	372.15942	155.04914	244.09682	6.5	5	5
180	JWH-019	356.20089	155.04914	228.13829	13.7	5	5
181	JWH-019 N-(6-hydroxyhexyl) metabolite	372.19581	155.04914	127.05423	7.8	5	5
182	JWH-073	328.16959	155.04914	127.05423	11.0	5	5
183	JWH-073 N-(3-hydroxybutyl) metabolite	344.16451	155.04914	216.10191	6.5	5	5
184	JWH-073 N-butanoic acid metabolite	358.14377	155.04914	230.08117	6.0	10	10
185	JWH-073 N-(4-hydroxybutyl) metabolite	344.16451	155.04914	216.10191	5.9	5	5
186	JWH-081	372.19581	185.05971	157.06479	13.2	10	5
187	JWH-122	356.20089	169.06479	214.12264	13.6	5	5
188	JWH-122 N-(5-hydroxypentyl) metabolite	372.19581	169.06479	230.11756	8.0	5	5
189	JWH-203	340.14627	125.01525	188.14338	11.9	5	5
190	JWH-210	370.21654	183.08044	214.12264	14.2	5	5
191	JWH-210 N-(4-hydroxypentyl) metabolite	386.21146	183.08044	230.11756	9.3	5	5
192	JWH 250	336.19581	121.06479	188.14338	10.9	5	5
193	JWH-250 N-(4-hydroxypentyl) metabolite	352.19072	121.06479	186.12773	5.6	5	5
194	JWH-307	386.19147	155.04914	258.12887	13.5	5	5
195	JWH-370	382.21654	155.04914	254.15394	14.2	5	5
196	M-144	344.23842	125.09609	246.12887	13.4	5	30
197	MA-CHMINACA	372.22817	241.13354	312.20704	12.2	5	5
198	MAM2201	374.19147	169.06479	232.11322	10.8	5	5
199	MAM2201 N-(4-hydroxypentyl) metabolite	390.18638	169.06479	248.10813	7.2	5	5
200	MDMB-3en-BUTINACA	344.19686	284.17574	199.08659	8.7	10	10
201	MDMB-4en-PINACA	358.21252	298.19139	213.10224	10.6	5	5
202	MDMB-4en-PINACA butanoic acid metabolite	344.19687	298.19139	213.10224	8.9	5	5
203	MDMB-BUTINACA	346.21252	286.19139	201.10224	10.2	10	10
204	MDMB-BUTINACA butanoic acid metabolite	332.19687	286.19139	201.10224	8.6	10	10
205	MDMB-CHMCZCA	435.26422	290.15394	194.06004	14.3	5	5
206	MDMB-CHMCZCA metabolite M3	308.16451	264.17468	168.08078	13.4	10	10
207	MDMB-CHMICA	385.24857	240.13829	97.10118	12.5	5	5
208	MDMB-CHMICA metabolite M2	371.23292	240.13829	97.10118	11.3	5	5
209	MDMB-CHMINACA	386.24382	326.22269	241.13354	13.3	5	5
210	MDMB-FUBICA	397.19220	252.08192	109.04480	8.9	5	5
211	MDMB-FUBICA metabolite 3	383.17655	252.08192	109.04480	7.7	5	5

表 A.2 目标物的质谱参数、保留时间和检出限 (续)

序号	化合物	前体离子 <i>m/z</i>	碎片离子 1 <i>m/z</i>	碎片离子 2 <i>m/z</i>	保留时间 min	血液检出限 ng/mL	尿液检出限 ng/mL
212	MDMB-FUBINACA	398.18745	338.16632	253.07717	9.8	5	5
213	MMB018	345.21727	214.12264	158.06004	9.3	5	5
214	MMB022	343.20162	212.10699	158.06004	7.9	10	10
215	MMB2201	363.20785	232.11322	212.10699	6.5	10	10
216	MMB-FUBICA metabolite 3	369.16090	252.08192	109.04709	6.4	5	5
217	MN-18	358.19139	215.11789	247.14813	13.5	5	5
218	MN-25	440.29077	114.09134	261.15975	6.0	10	10
219	MO-CHMINACA	387.22783	241.13354	273.15975	13.4	5	5
220	NAMIE	300.13829	158.06004	141.06988	7.0	5	5
221	NAPIE	356.20089	214.12264	141.06988	12.7	30	10
222	NNEI	357.19614	214.12264	188.14338	10.6	5	5
223	PB-22	359.17540	214.12264	196.71214	10.5	5	5
224	PB-22 N-(4-hydroxypentyl) metabolite	375.17032	230.11756	144.04439	5.5	30	30
225	PB-22 N-pentanoic acid metabolite	389.14958	244.09682	172.11208	5.2	5	5
226	PF-03550096	377.21833	332.19687	203.11789	5.0	5	5
227	PTI-2 (hydrochloride)	400.24171	283.12635	227.06375	6.7	5	5
228	PX 1	396.20818	232.11322	379.18163	5.8	30	10
229	PX 2	397.20343	352.18197	233.10847	6.0	5	5
230	RCS-4	322.18016	135.04406	107.04914	10.7	5	5
231	RCS-4 N-(4-hydroxypentyl) metabolite	338.17507	135.04406	95.04914	5.3	10	10
232	RCS-8	376.22711	121.06479	228.17468	13.8	5	5
233	SDB-005	359.17540	215.11789	247.14410	13.7	5	5
234	STS-135	383.24932	135.11683	232.11322	12.1	5	5
235	THJ2201	361.17107	233.10847	251.11789	10.8	5	5
236	UR-144	312.23219	125.09609	214.12264	13.6	50	50
237	UR-144 N-(4-hydroxypentyl) metabolite	328.22711	125.09609	230.11756	8.3	10	5
238	UR-144 N-pentanoic acid metabolite	342.20637	125.09609	244.09653	8.0	10	10
239	XLR-11 N-(4-hydroxypentyl) metabolite	346.21768	125.09609	248.10813	7.5	5	5
240	AKB48-d ₅ (内标物)	375.31048	135.11683	91.05723	14.9	10	10
241	JWH-018 N-(4-hydroxypentyl) metabolite-d ₅ (内标物)	363.21154	155.04914	127.05423	6.7	5	5

注：前体离子为理论值。