

质谱技术用于生物样本中新精神活性物质分析的研究进展

李克新, 许海山, 王伟, 乔 湜, 徐唯哲, 吴立涛, 李清艳*

(中国民用航空局民用航空医学中心(民航总医院), 北京 100123)

摘要: 新精神活性物质(NPS)作为一类新兴毒品, 具有种类繁多、结构更新迅速及隐蔽性强等特征, 严重威胁全球公共卫生安全。质谱技术凭借其卓越的灵敏度、选择性与结构解析能力, 已成为复杂基质中NPS分析的核心技术手段。该文基于文献计量学方法, 系统剖析了近10年相关研究的发展趋势, 全面梳理了复杂生物基质的样本前处理方法, 并重点探讨了主流质谱技术在NPS靶向定量、非靶向筛查、同分异构体区分及新型NPS结构确证等方面的前沿应用。特别针对无标准品情况下未知NPS鉴定难题, 深入阐释了人工智能在辅助质谱数据挖掘、虚拟谱图预测、从头结构解析及可解释性推理方面的最新突破。质谱技术与智能算法的深度融合正推动NPS分析由“被动响应”向智能化“主动预警”跨越, 软硬件技术协同发展将为NPS防控提供更具有前瞻性的技术支撑。

关键词: 新精神活性物质; 质谱; 靶向定量; 非靶向筛查; 人工智能

中图分类号: O657.63; R991 **文献标识码:** A **文章编号:** 1004-4957(2026)11-0001-11

Research Progress of Mass Spectrometry in the Analysis of Novel Psychoactive Substances

LI Ke-xin, XU Hai-shan, WANG Wei, QIAO Shi, XU Wei-zhe, WU Li-tao, LI Qing-yan*

(Civil Aviation Medical Center(Civil Aviation General Hospital), Civil Aviation Administration of China, Beijing 100123, China)

Abstract: Novel psychoactive substances (NPSs), a class of emerging drugs, are characterized by their diverse types, rapid structural updates, and strong concealment, thus threatening the security of global public health. Mass spectrometry has become a core technique for analyzing NPSs in complex matrices, owing to its superior sensitivity, selectivity, and structural resolution capabilities. This paper analyzes the relevant research trends from the past decade using bibliometric methods, reviews sample-pretreatment methods for complex biological matrices, and focuses on the most recent applications of mainstream mass spectrometry techniques in targeted quantification, nontargeted screening, isomer differentiation, and confirmation of novel NPS structures. It also examines the latest breakthroughs in artificial-intelligence-assisted mining of mass spectrometry data, virtual spectral prediction, de novo structure analysis, and interpretable reasoning to address the challenge of identifying unknown NPSs in the absence of standards. The deep integration of mass spectrometry and intelligent algorithms is transforming NPS analysis from a passive response to an intelligent, proactive early warning approach. Moreover, the synergistic development of hardware and software technologies will enable more comprehensive technical support for preventing and controlling NPSs.

Key words: novel psychoactive substances; mass spectrometry; targeted quantification; nontargeted screening; artificial intelligence

新精神活性物质(NPS)是近年来在全球范围内迅速涌现并广泛传播的一类具有精神活性作用的化学物质^[1]。根据联合国毒品和犯罪问题办公室(UNODC)定义, NPS是指以纯品或制剂形式存在、未被1961年《麻醉品单一公约》或1971年《精神药物公约》管制, 但可能对公共健康构成威胁的滥用物

收稿日期: 2026-05-18; 修回日期: 2026-07-08

基金项目: 民航安全能力建设基金项目(ASSA2024/99)

* 通讯作者: 李清艳, 博士, 研究员, 研究方向: 毒物药物分析、航空毒理学, E-mail: qingyan.ye.li@gmail.com

#该文为2025分析测试青年创新大赛优秀参赛成果

质^[2]。为规避药物管制政策, NPS 通常由对受管制物质的化学结构进行细微修饰而合成, 具有较强的隐蔽性和时效性, 因此又被称为“策划药”。近年来, 全球范围内与 NPS 滥用相关的严重中毒甚至死亡案例显著增加, 已成为国际禁毒领域面临的重大挑战^[3]。发展针对 NPS 的准确、灵敏检测技术, 对于临床救治、法医鉴定及公共卫生监测等具有重要意义。

与传统毒品相比, NPS 存在结构多样和更新速度快等特点, 标准品缺乏是 NPS 分析领域的常见问题。在生物体内, NPS 活性极高、用药剂量极小, 且代谢途径复杂、代谢产物多样^[4-5], 其通常以痕量甚至超痕量水平($\text{ng/L} \sim \mu\text{g/L}$)存在于血液、尿液、毛发等生物基质中。受酶促降解、离子抑制、内源性干扰等基质效应影响, 目标物信号极易被背景噪声掩盖^[6]。如何精准识别 NPS 原型及 I/II 相代谢物并筛选出可靠生物标志物, 是实现回溯性确证的关键^[1]。

尽管免疫学分析、薄层色谱、傅里叶变换红外光谱、拉曼光谱、核磁共振波谱(NMR)等方法提供了多维度的检测手段^[1,7], 质谱技术因具有高灵敏度、高选择性以及结构解析能力, 已成为复杂基质中 NPS 分析不可替代的核心技术手段。本文针对质谱技术在生物样本中 NPS 分析领域的研究, 基于文献计量学方法剖析了近 10 年相关研究趋势, 系统梳理了复杂生物基质的样本前处理方法, 重点探讨了多种质谱技术在 NPS 靶向定量、非靶向筛查、同分异构体区分及新型 NPS 结构确证等方面的最新应用, 并深入剖析了人工智能(AI)在辅助质谱数据挖掘与未知物质识别方面的前沿发展, 最后展望未来的技术发展趋势, 以期对法医毒理学领域的实战应用提供系统性参考。

1 NPS 分类

鉴于 NPS 种类繁多、结构多变且作用机制复杂, 目前国际上主要从药理作用和化学结构两个维度对其进行系统分类。NPS 在低剂量下即可产生显著的中枢神经系统效应, 过量或混合使用甚至可能引发严重毒性反应^[8]。从药理学角度来看, NPS 靶向人体内的多种受体和转运体, 例如大麻素受体(CB1/CB2)、单胺转运体(多巴胺转运体、5-羟色胺转运体、去甲肾上腺素转运体)、阿片受体(μ 、 κ)、谷氨酸受体(N-甲基-D-天冬氨酸受体)等^[9]。根据人体使用后的药理作用进行分类, UNODC 将其分为 6 类: 合成大麻素受体激动剂、兴奋剂、致幻剂、解离剂、阿片受体激动剂、镇静或催眠药物^[2]。

从化学结构来看, NPS 具有结构更新速度快、衍生物种类繁多的特点, 可在既有毒品结构基础上仅通过简单化学修饰合成新化合物^[10]。根据化学结构进行分类, UNODC 将其分为 17 类: 合成卡西酮类、合成大麻素类、芬太尼类似物、尼塔泽类、Orphine 类似物、苯乙胺类、色胺类、苯二氮草类、氨基茛菪类、哌嗪类、依托咪酯类似物、麦角酰胺类、苯环利定类物质、苯尼酯类、苯甲吗啉类、植物源性物质、其他物质^[2]。代表性 NPS 的基本骨架结构见图 1。虽然大部分 NPS 基于化学结构分类, 但仍存在基于药理作用或来源分类的类别, 例如合成大麻素类、植物源物质和其他物质。

2 文献计量学分析

本研究以 Web of Science 数据库为数据来源, 检索式为 $\text{TS}=(\text{"new psychoactive substances"} \text{ OR "novel psychoactive substances"} \text{ OR "designer drugs"}) \text{ AND TS}=(\text{"mass spectrometry"} \text{ OR "LC-MS"} \text{ OR "LC-MS/MS"} \text{ OR "GC-MS"} \text{ OR "high resolution mass spectrometry"} \text{ OR HRMS}) \text{ AND TS}=(\text{detect* OR analys* OR identification OR screening})$, 时间设置为 2015~2026 年, 检索时间为 2026 年 3 月 20 日, 去除重复文献后得到 1 440 篇文献。使用文献计量分析软件 VOSviewer 1.6.20^[11] 对文献数据进行国家、机构、关键词聚类分析, 根据研究需求选择关键词聚类年谱视图进行可视化展示(图 2)。

近 10 年来, NPS 的质谱分析检测领域文献从 2005~2014 年的 (35.7 ± 25.9) 篇/年上涨到 2015~2025 年的 (128.7 ± 20.9) 篇/年, 这与全球范围内 NPS 的不断涌现密切相关。从国家分布来看, 有 69 个国家参与本领域的合作研究, 发文量排名前 5 的国家分别是美国、德国、意大利、英国、中国; 篇均被引频次排名前 5 的国家是美国、德国、意大利、英国、西班牙, 我国位列第 12 名。我国虽在发文总量上位居前列, 但篇均被引频次与欧美国家存在断层, 提示国内研究多集中于应用型检测方法的优化, 在底层核心技术上略显薄弱; 在国际协作深度上, 北美和欧洲国家较为活跃, 已形成稳定且密集的研究与合作网络, 而我国在主导核心谱库建设与国际多中心协作方面仍有较大提升空间。

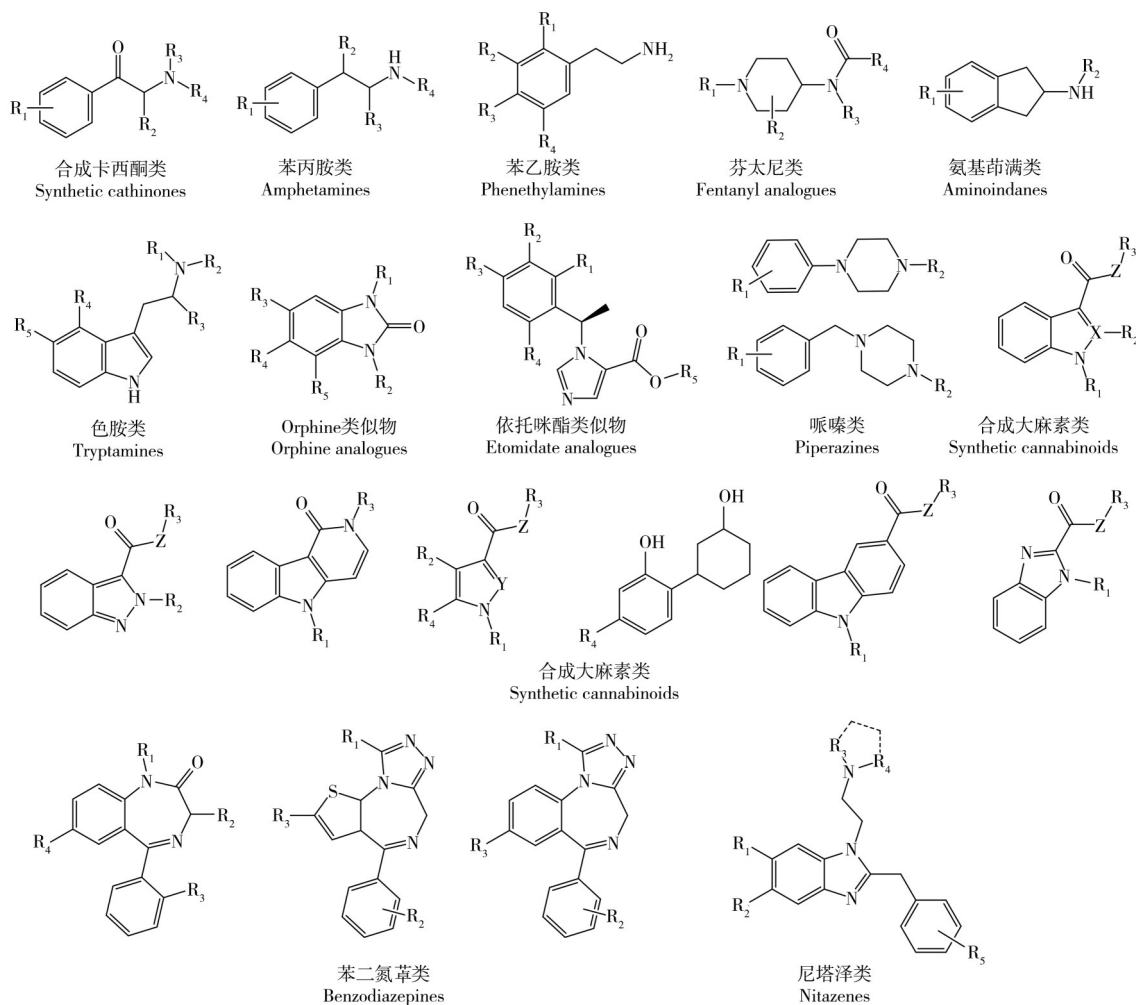


图 1 代表性新精神活性物质(NPS)的基本骨架结构

Fig. 1 General structures of representative novel psychoactive substances (NPSs)

设置关键词共现最小频次为 15, 清洗合并后得到 109 个关键词, 关键词共现图谱形成 5 种聚类, 且呈现出明显的交叉趋势。聚类 I 以 NPS 和气相色谱-质谱技术(GC-MS)为核心关键词, 聚焦于 NPS 的基础检测技术与毒理研究, 为后续新技术与新物质研究奠定了方法学基础; 聚类 II 以合成卡西酮类物质为核心, 围绕其毒理学、药理学、体外代谢、体内药代动力学等方面开展研究, 体现了对合成卡西酮类物质滥用的高度关注; 聚类 III 以代谢物和滥用药物为核心, 聚焦生物和环境等复杂基质与样本前处理技术, 同时延伸至流行病学, 提示生物样本分析和环境监测是 NPS 检测的重要应用场景; 聚类 IV 以液相色谱-串联质谱技术(LC-MS/MS)为核心, 重点关注不同生物基质中的定量分析与法医毒理学应用; 聚类 V 以质谱和鉴定为核心, 体现了对不断涌现的新型 NPS 的快速鉴定与代谢机制研究, 是应对 NPS 市场快速变化的关键研究方向。关键词聚类分析结果显示, 该领域呈现出由靶向检测向非靶向筛查、由单一分析向多维数据整合发展的趋势, 以高分辨质谱(HRMS)为核心的非靶向筛查与新型 NPS 识别技术成为当前研究热点。然而, 对缺乏标准品情况下的未知 NPS 精准确证以及复杂生物基质中高度相似同分异构体的有效区分, 仍存在一定挑战。

3 NPS 的生物样本前处理与质谱分析技术

3.1 生物基质样本前处理策略

由于生物样本基质复杂且 NPS 多以痕量甚至超痕量水平($\text{ng/L} \sim \mu\text{g/L}$)存在, 针对多类别 NPS 及不同分析目的, 前处理方法选择需综合考虑化合物理化性质、样本基质特点及使用场景(表 1)。不同生物样本与 NPS 类别之间存在显著的匹配差异。例如, 合成大麻素类亲脂性较高, 在血液中代谢迅速, 实际检案通常重点检测尿液中的羟基化或羧基化代谢物^[12]。中枢兴奋剂与致幻剂类 NPS(如合成卡西酮

类、苯乙胺类、哌嗪类、氨基茛满类、色胺类等)水溶性较好,多以原型及 I 相代谢物形式存在于血液或尿液样本中,且浓度较高^[13-14]。苯二氮草类和苯环利定类通常直接检测血液、毛发等样本中的原型化合物^[15-17],或尿液中的原型与 I/II 相代谢物^[18-20]。对于高强效的阿片类(芬太尼类、尼塔泽类、Orphine 类似物)及麦角酰胺类,其在体液中浓度处于超痕量水平,极易受血液高蛋白和脂质的基质效应影响,通常需采取高效富集净化手段以保障回收率^[21]。

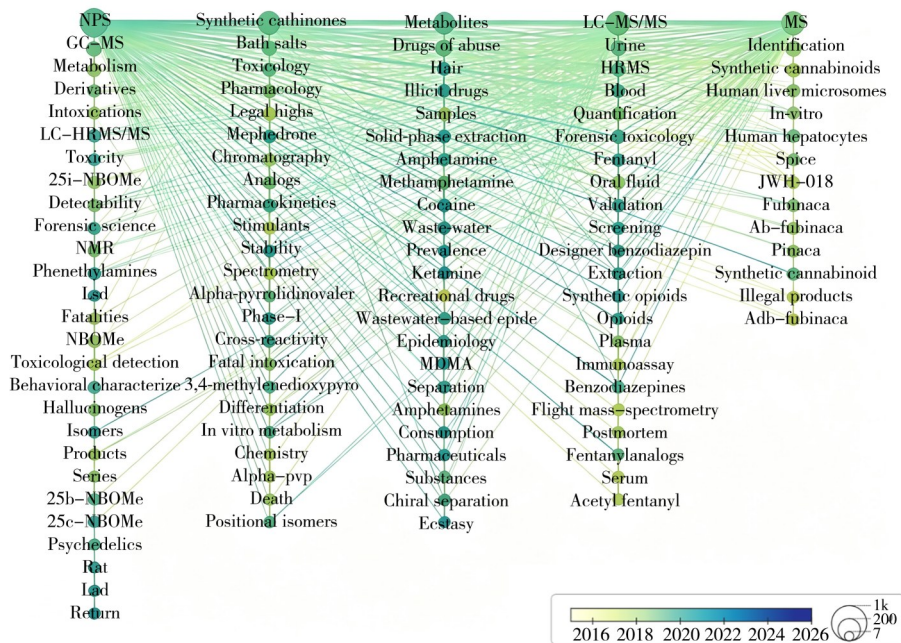


图2 基于VOSviewer软件生成的关键词聚类年谱图

Fig. 2 Keyword clustering chronology view generated using the VOSviewer software

The size of the nodes in the graph represents the frequency of the keyword; the larger the node, the more popular the research direction. The node color maps to the average year of publication; the closer the color is to a cool blue-green, the more recent the relevant research. The lines between the nodes represent the co-occurrence relationship of keywords in the literature (图中节点大小代表关键词出现的频次, 节点越大表示该研究方向热度越高; 节点颜色映射文献发表的平均年份, 颜色越趋近冷色/蓝绿色代表相关研究的年份越新; 节点间的连线代表关键词在文献中的共现关系)

表1 NPS检测常用生物样本特征及前处理方法

Table 1 Common biological sample characteristics and pretreatment methods for NPS detection

Biological samples	Detection window	NPS category	Matrix characteristic	Pretreatment method	Applicability to actual cases
血液	短	合成卡西酮类、苯乙胺类、苯尼	蛋白质及脂质丰富, 易产生离子抑制	PPT、SPE、SLE、法医死因鉴定、反映	药效学状态及体内实
		酯类、依托咪酯类似物、芬太尼		LLE、Online SPE	时浓度的临床定量
干血斑	短	合成卡西酮类、芬太尼类、苯二	样本量微小, 稳定性高; 局部均一性	溶剂提取、SPME	现场便携采样、远程
		氮草类	差; 低浓度回收率受限		筛查及长期储存运输
尿液	中等	合成大麻素类、多数中枢兴奋剂	盐类及尿素干扰多; 药物及代谢物浓	稀释进样、酶解、滥用人群大规模普	查、戒毒监测及流行
		与致幻剂、苯二氮草类与苯环利	度较高, 回收率较好	SPE、QuECh-ERS、LLE	病学调查
毛发	长	合成大麻素类、合成卡西酮类、	固体复杂基质, 前处理繁琐; 外源性	溶剂提取、SPE、	用药史溯源、时序司
		合成阿片类、苯乙胺类、哌嗪类	污染风险; 回收率受提取溶剂影响	LPME	法鉴定
口腔液	短	合成卡西酮类、苯乙胺类、氨基	无创易采集; 绝对浓度较低; 样本稳	稀释进样、PPT、	无创采样、公安现场
		茛满类、色胺类、苯甲吗啡类	定性较差	SPME、LLE	即时检测
汗液	短	苯乙胺类、合成卡西酮类等兴奋	长期无创暴露监测; 样本量极其微	简单溶剂洗脱、	动态连续监测、特殊
		剂	小; 个体差异影响大	SPME、LPME	人群的长期暴露评估
玻璃体液	较长	芬太尼类、麦角酰胺类、合成卡	基质干扰低; 死后不易再分布, 稳定	SPE、LLE、SLE	高度腐败尸体的法医
		西酮类、苯二氮草类	性好; 绝对浓度较低, 样本量有限		毒物确证与死因分析

SPE: solid phase extraction; SLE: solid phase supported liquid-liquid extraction; LLE: liquid-liquid extraction; Online SPE: online solid phase extraction; SPME: solid phase microextraction; LPME: liquid phase microextraction; PPT: protein precipitation (SPE: 固相萃取; SLE: 固相支持液液萃取; LLE: 液液萃取; Online SPE: 在线固相萃取; SPME: 固相微萃取; LPME: 液相微萃取; PPT: 蛋白沉淀)

生物样本前处理技术主要包括快速简单前处理、富集净化、信息增强型等。快速简单前处理主要包括蛋白沉淀、稀释进样、离心或过滤等，操作简便、成本较低，适用于血浆、尿液、口腔液等液态基质的快速处理，是常规 NPS 定性初筛的首选方法^[13]。QuEChERS 法结合盐析与分散固相萃取，在血液、毛发、组织匀浆等复杂基质的快速提取中展现出潜力，但选择性和净化能力相对有限^[22]。

富集净化技术是提高检测灵敏度与准确性的关键。固相萃取(SPE)通过不同填料可实现对多极性 NPS 的选择性富集，在各类样本中均表现出良好回收率和重复性^[23]；通过在线联用可实现自动化和高通量分析^[24]。固相微萃取(SPME)集采样、萃取、富集于一体，无需或仅需少量溶剂，适用于微量样本、现场快速检测或原位分析^[23,25-26]。相较于 SPE，液液萃取(LLE)及固相支持液液萃取在去除极性干扰、降低电喷雾离子抑制方面更具优势，适用于死后全血、组织脏器复杂法医毒理学样本^[27-28]。液相微萃取作为 LLE 的微型化形式，通过减少有机溶剂用量实现高效富集^[23,25]。近年来，基于新型功能材料和新分离机制的前处理技术不断出现。磁固相萃取引入磁性纳米材料，具有富集倍数高、溶剂消耗少、易于自动化等优势，适用于大体积尿液中痕量 NPS 的快速富集^[29]。金属/共价有机框架^[30-31]及分子印迹材料^[32]凭借高比表面积及特异性识别能力，可显著提升 NPS 的富集选择性。电膜萃取通过电场驱动，具有选择性高、净化效果好、有机溶剂消耗极低等优势，尤其适用于碱性 NPS 的提取^[33]。

信息增强型前处理方法主要用于改善质谱响应或释放代谢信息。化学衍生化法可提高难电离物质的离子化效率并增加特征碎片，有助于同分异构体区分，在合成卡西酮类、合成阿片类等物质分析中发挥重要作用^[34-35]。对于结合态 NPS 或其代谢物，酶解法可将其转化为游离态，从而提高检测覆盖率与灵敏度，并辅助阐释 NPS 的体内代谢行为^[21,36]。

3.2 气相色谱-质谱技术

GC-MS 技术对于易挥发及热稳定化合物具有良好适应性^[37]，其采用电子轰击(EI)离子化方式产生稳定碎片离子，进而通过与美国国家标准与技术研究院(NIST)等标准谱库匹配实现定性分析^[38]。由于其对复杂基质的稳健性、可重复的 EI 谱图以及完善的标准数据库，GC-MS 至今仍是分离和鉴定 NPS 的重要工具。在实际检案中，GC-MS 已广泛应用于血液、尿液、毛发等多种生物样本中半合成与合成大麻素类、合成卡西酮类、阿片类、苯二氮草类及苯乙胺类等物质的快速鉴定和定量分析^[39]。

然而，许多 NPS 仅在取代基位置或侧链结构上存在微小差异，其色谱保留行为和 EI 质谱碎片高度相似，且部分新物质缺少标准品，这使得 NPS 分离和鉴定难度大大增加。针对这一挑战，通过优化 GC 柱固定相极性、程序升温条件与载气流速，可在一定程度上实现结构类似物或异构体的色谱基线分离；当特征碎片离子相同时，可依据相对离子丰度、碎片强度比等参数辅助鉴定^[39-40]。此外，合适的化学衍生化前处理能改善色谱选择性和峰形、提高离子化效率、增加特征碎片离子，从而为基于相对离子丰度、碎片强度比等参数鉴定提供更丰富的质谱信息^[41]。

近年来，主成分分析、层次聚类、典型和线性判别分析等化学计量学算法被开发出来应用于 NPS 同分异构体的鉴定，有效弥补了传统谱库检索依赖单一匹配度的不足^[42-44]。这些算法通过对 EI-MS 数据的多变量统计分析，挖掘特征碎片离子及其相对丰度间的细微差异，并将这些差异转化为客观判别标准，从而为同分异构体的鉴定提供辅助依据。目前，该策略已实现芬太尼类、卡西酮类、氟苯丙胺类等 NPS 同分异构体的有效区分^[42-45]。

对于结构高度相似的复杂 NPS 同分异构体，GC-MS 常联合液相色谱-高分辨串联质谱(LC-HRMS/MS)、NMR、傅里叶变换红外光谱、拉曼光谱等技术进行多维度的结构鉴定与化学表征。这种联用策略在新合成大麻素类^[46-47]、合成卡西酮类^[48-49]、阿片类物质^[50]、氯胺酮类似物^[51]等新型 NPS 鉴定中发挥了重要作用。此外，气相色谱-高分辨质谱技术在保留 GC 抗基质干扰和分离能力的基础上引入轨道阱(Orbitrap)和四极杆-飞行时间(Q-TOF)等高分辨质量分析器，显著提升了 GC 平台在异构体结构鉴定和非靶向筛查中的应用潜力^[52-53]。

3.3 液相色谱-串联质谱技术

LC-MS/MS 技术通常无需衍生化前处理，对热不稳定性及极性化合物具有更强适用性，可同时覆盖目标物原型及其极性代谢物，在 NPS 的体内暴露评估与毒物代谢分析中具有显著优势^[54]。基于电喷雾电离与多反应监测(MRM)模式，LC-MS/MS 技术依托特征母、子离子对实现高选择性检测，在复杂

生物基质中仍有较高灵敏度和定量准确性,已成为NPS及其代谢物分析的核心技术手段^[55]。例如,本课题组前期基于超高效液相色谱(UPLC)-MS/MS技术,采用正、负离子切换分段扫描与MRM模式,成功建立了毛发中14种毒品及代谢物的高灵敏靶向检测平台,检测限低至pg/mg级^[56]。

在靶向检测方面,多项基于高效液相色谱-三重四极杆串联质谱(HPLC-QqQ MS/MS)的研究成功建立了覆盖数百种NPS的高通量定量平台。其检测限与定量限通常可达ng/mL甚至pg/mL水平,能够满足痕量分析要求,已在法医毒理学、临床毒理学以及滥用药物筛查等场景中得到广泛应用^[18,57]。例如, Giorgetti等^[58]针对包含合成大麻素类(132种)、合成阿片类(22种)、合成卡西酮类和其他化合物(28种)在内的182种NPS建立了多目标物检测方法; Czarny等^[59]则将范围进一步扩大,针对包含合成大麻素类、合成卡西酮类、合成阿片类、色胺类、苯二氮草类等在内的520种NPS开发了高灵敏靶向定量方法,为中毒患者生前临床救治与死后法医确证提供了重要工具。

此外,由于多数NPS进入生物体后会经肝脏快速代谢,生成具有药理活性、毒性或具有较长检测窗口期的代谢物^[5,60]。通过对代谢物的系统检测与定量分析,不仅可为NPS毒理学研究提供关键数据,还可筛选出具有代表性的生物标志物,提高NPS体内暴露评估的准确性与可靠性^[61]。例如,对于合成大麻素类物质,由于其原型化合物在体内快速消除且浓度较低,在实际检案中LC-MS/MS通常以羟基化或羧化代谢物作为主要检出目标^[62]。

3.4 液相色谱-高分辨串联质谱

传统靶向LC-MS/MS方法本质上仍依赖于预设目标化合物的母、子离子对信息,难以满足法医与临床对不断涌现的新型NPS的筛查需求。LC-HRMS/MS技术具有高分辨率和高质量精度,兼具化合物鉴定、非靶向筛查以及回顾性数据分析能力,已成为近年来NPS分析领域的重要技术方向^[63]。基于HRMS获取的精确分子质量、同位素峰分布模式及碎片离子的精确质量,研究人员能够准确推算目标物的元素组成并解析其碎裂途径,实现未知NPS及其代谢物的结构推定与部分同分异构体的有效区分^[64-65]。HRMS通常采用的碰撞诱导解离(CID)碎裂过程遵循“最低能量路径”,获取碎片信息可能不足以对结构高度相似的NPS衍生物进行完整表征。电子激活解离(EAD)可通过自由基驱动机制诱导断裂反应为化合物提供补充结构信息,在复杂骨架解析或异构体鉴别中展现出独特优势,显著提升了从头结构解析的成功率^[66]。例如, Huang等^[67]采用EAD技术分析了181种合成大麻素类物质的化学结构,并开发了质谱智能解析软件,实现合成大麻素类物质的非靶向筛查和自动结构解析。

在筛查策略上,LC-HRMS/MS技术主要依赖HRMS数据库,通过设定严格的质量误差范围及碎片离子匹配规则,可实现复杂基质中NPS及其代谢物的快速识别。当前,公开数据库以mzCloud、MassBank、NPS Data Hub等为代表,但其NPS覆盖范围各异,且难以兼容多品牌质谱厂商的筛查工作流程^[68]。Mardal等开发了NPS专项数据库HighResNPS,该库支持基于精确母离子与特征产物离子进行筛查,且能导出适配主流质谱厂商的文件格式,并保持实时更新,但目前仅限授权内部人员使用^[69-70]。各实验室基于标准品实测数据构建的自建数据库,主要包括精确分子质量、特征碎片离子、多级质谱图、碰撞能量、保留时间等信息,数据与本地实验条件更为适配,适用于特定类型或区域高发型NPS的精准筛查^[13,71]。

在数据采集方面, Kleis等^[72]依托包含492种NPS的自建数据库,采用数据依赖型采集(DDA)模式对血清样本进行非靶向筛查,在10、1 ng/mL样品中NPS的检出率分别为96%和88%。Sarkisian等^[73]依托包含35类946种药物及其代谢物的自建数据库,采用数据非依赖型采集(DIA)中的所有理论质谱的顺序窗口采集(SWATH)模式对血液和尿液样本进行非靶向筛查,检测限低至0.1 ng/mL^[13]。DDA和DIA模式均支持数据回顾性分析,即使某些NPS在初次分析时未被关注,后续仍可通过更新数据库的方式对原始数据进行重新检索,尤其是DIA模式^[74]。

除数据库检索外,基于特征诊断离子的筛查策略正逐渐成为非靶向分析的重要手段^[71]。不同类别的NPS在碰撞裂解时,其核心骨架往往产生高度保守的特征碎片离子,这为NPS同系物快速筛查和结构推断提供了重要依据。例如,由于合成大麻素类物质侧链结构极易变化,利用其保守的吲哚或吲唑环特征诊断离子进行中性丢失或子离子扫描,是发现新型同系物的有效策略^[75]。此外,将特征碎片离子筛查与质量亏损过滤方法相结合,辅以计算机辅助代谢物预测与数据挖掘工具,已成为NPS代谢物

筛查与鉴定的核心手段^[76-78]。该策略能够有效剔除基质背景干扰，促进研究人员破译NPS的体内代谢途径，为实际检案中的暴露回溯提供具有指示意义的生物标志物^[79]。

3.5 质谱联用和原位电离技术

为了应对NPS日益复杂的结构衍生化挑战及现场快速筛查的迫切需求，多种新型质谱联用与原位检测技术展现出巨大应用潜力。毛细管电泳(CE)凭借分离效率高、分析时间短、样本消耗低等优势，可提供有效的替代分离机制^[68]，可实现多种NPS及其对映异构体的分离与筛查检测^[80-81]。离子迁移谱(IMS)能够根据离子在电场中穿过缓冲气体时的体积、形状及电荷差异实现气相分离，其碰撞截面参数具有极高的物理稳定性和结构特异性，构成了除精确质量数、特征碎片、保留时间之外的“第四维度”定性依据，为NPS位置和对映同分异构体分离和鉴定提供了新途径^[82-83]。

在提升时效性与现场适用性方面，原位电离质谱(AIMS)技术无需复杂样本前处理，可在常压、开放环境下对样品进行直接快速分析，已成为生物样本高通量快速筛查的热点^[84]。诸如实时直接分析^[85]、纸喷雾电离^[86]、探针电喷雾电离^[87]及沟槽式刀片喷雾电离^[88]等技术，已成功应用于血液、尿液、毛发甚至离体组织中痕量NPS的秒级筛查与定量分析。这些分离和检测技术的协同应用，不仅增强了对NPS结构的鉴定能力，也为NPS高通量、现场化筛查提供了创新解决方案。综合上述各类质谱分析技术的优缺点、实际应用限制及多维确证能力，其在NPS分析中的系统比较详见表2。

表2 各类质谱技术在NPS分析中的对比
Table 2 Comparison of mass spectrometry (MS) techniques in NPS analysis

MS	Sensitivity/ Quantification performance	Qualitative performance/ Unknown-compound dis- covery	Analytical throughput/ Field-deployable suit- ability	Database dependence	Advantages and disadvantages	Application
GC-MS	中高/优良	良/较弱	较低/差	极高	稳健性强，标准库完善；适用 于易挥发性/热稳定性化合物	已知常见NPS的 常规初筛与确证
LC-MS/MS	极高/极佳	良/极弱	中等/差	高	痕量靶向定量极佳；无法发现 未知物	已知NPS及代谢 物精准定量
LC-HRMS/ MS	高/良好	极佳/极强	中等/差	中等	支持回顾挖掘与从头解析；数 据庞大	未知NPS挖掘及 结构确证
IMS-MS	高/良好	优良/较强	中等/差	中等	独立CCS参数抗干扰；仪器成 本高	复杂同分异构体 深度区分
AIMS	中等/较弱	中等/较弱	极高/极佳	中等	免前处理，秒级分析；基质干 扰大	现场高通量初筛

CCS: collision cross section(CCS: 碰撞截面)

3.6 AI辅助数据挖掘与物质识别

AI在法医毒理学领域的应用，正逐步拓展NPS的筛查检测方式，有效填补了质谱技术在NPS标准品和谱库数据缺乏时的鉴定空白。在质谱数据挖掘与非靶向筛查方面，机器学习(ML)模型能够从复杂的背景信号中自动提取特定NPS类别的诊断特征与空间联系，提升非靶向分析的自动化程度与准确率。例如，Yang等^[89]基于LC-MS和GC-MS谱图构建的ML分类模型，可对合成大麻素类、合成卡西酮类和芬太尼类物质发出预警信号，并已成功应用于6份实际缉获样品的早期预警筛查。Cohen等^[90]开发的图神经网络分类模型成功检测出人血浆样本中添加的苯丙胺衍生物，假阳性率为1%。Su等^[88]将线性回归ML模型应用于真实阳性毛发样品中依托咪酯等物质的分类与鉴定，准确率高达97.88%。此外，ML模型应用已拓展至临床急诊前端。Lu等^[91]基于患者人口学、体格检查结果、临床症状和诊疗指标等数据构建的CatBoost模型，在测试集中表现出优异的预测性能(AUC=0.846)，已转化为网页端和移动端应用辅助预测急诊患者的非法药物使用情况。

当前的深度学习模型NPS-MS能够凭借化学结构直接预测NPS的MS/MS谱图，并提升识别NPS的准确性，已应用于无标准品情况下丹麦缴获未知粉末中苯环利定新型衍生物的鉴定^[92]。深度生成模型DarkNPS可利用质谱数据进行未知NPS的从头结构解析，前10名NPS的解析准确率可达86%^[93]。此外，PS²MS预测系统可生成化合物的质谱和化学指纹图谱，并通过构建虚拟数据库来辅助识别未知NPS，其在20个阳性样本中成功鉴定出17个样本为卡西酮类衍生物^[94]。AI-SNPS2平台则通过谱图相似性与色谱合理性过滤，将识别能力拓展至传统谱库检索之外。该平台对NPS分类的准确度为94.3%，预测

保留时间的平均绝对偏差为 0.217 min; 可从尿液和饮料等复杂基质中精准识别合成大麻素类化合物, 其中尿液基质中的检测限低至 0.2 ng/mL^[95]。此外, AI 模型在 NPS 检测领域的“可解释性”成为近年来的研究焦点。Liu 等^[96]提出的 NPS-EDR 可解释深度推理模型, 包含 2 900 余种 NPS 与药物分子的思维链数据集, 可基于集成化学先验知识实现对 NPS 的精准结构-功能解析, 使得预警信号逐渐脱离“黑箱”结果。Liu 等^[97]进一步提出的 NPS-FACL 模型, 通过片段感知分词技术和不确定性量化方法, 提升了 NPS 检测准确率与结构相关的偏差可解释性, 为法医毒理学提供 AI 驱动的可解释性辅助预警方案。

尽管质谱技术与智能算法的深度融合展现出广阔前景, 但对其在实际检案中的应用仍需秉持审慎态度。现阶段 AI 模型更多应作为辅助质谱筛查与候选结构推荐工具, 最终鉴定结果仍需依托标准品比对、保留时间、MS/MS 特征碎片、同位素分布模式等参数, 必要时结合 NMR 或红外光谱、拉曼光谱等技术进行多证据链确证支撑。从生物样本前处理、质谱检测、数据挖掘到最终结果确证的 NPS 全流程分析策略如图 3 所示。

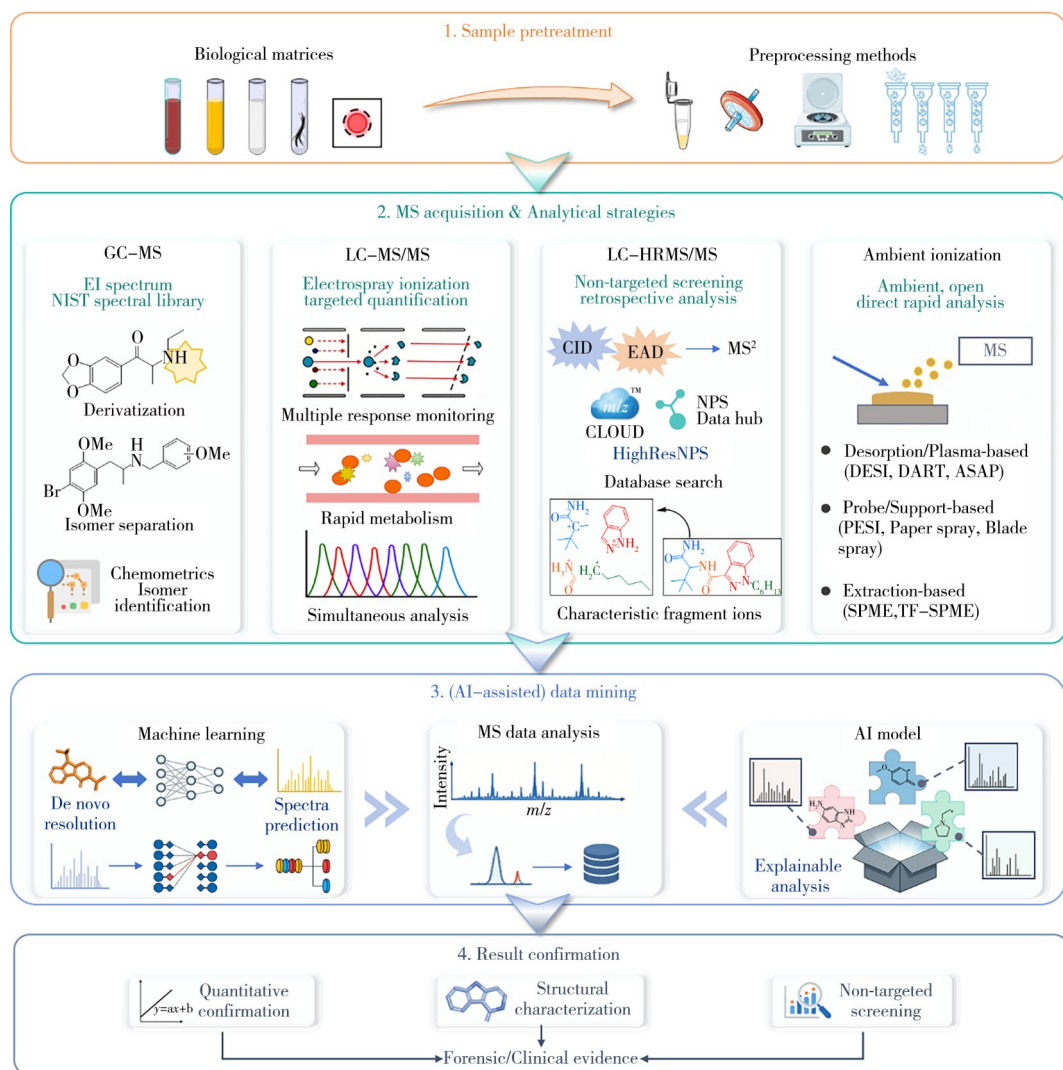


图 3 生物样本中 NPS 质谱分析流程图

Fig. 3 Flowchart of MS analysis of NPS in biological samples

4 总结与展望

近年来, 质谱技术凭借其卓越的选择性、灵敏度与结构解析能力, 始终处于 NPS 分析领域核心支撑地位。从传统 GC-MS 建立的稳健谱库数据与筛查基础, 到 LC-MS/MS 在复杂生物基质中的高灵敏度靶向定量, 再到 HRMS 引领的非靶向筛查与回顾性数据挖掘, 质谱技术的发展正驱动 NPS 检测由“被动响应”向“主动识别”模式的转变。近年来, AI 算法的介入, 为无标准品情况下 NPS 色谱和质谱行为预测以及化学结构的从头解析, 开辟了智能化预警的新范式。尽管非靶向筛查与 AI 辅助数据解析发

展迅速, 当前技术在实际检案中的应用仍面临一定局限性。质谱联用设备成本高昂且体积庞大, 限制了其现场即时检测能力; AI在真实复杂检案中的跨仪器平台泛化能力依然较弱, 其“黑箱”特性导致结果可解释性不足, 仍存在不确定性与假阳性风险。

针对上述挑战, 未来质谱硬件应向低成本、小型化、便携式原位电离及高通量自动化方向发展, 以提升其在基层实验室和现场检测的应用。在软件与数据层面, 克服数据孤岛难题、构建能够兼容不同厂商和实验室的标准化众包谱库, 仍是提升非靶向筛查效能的关键。同时, AI模型需深度融合化学先验知识, 进一步向具备生化逻辑的可解释性推理演进, 增强AI结果在法医毒理学及司法鉴定中的证据价值。软硬件技术互相赋能、协同发展, 将为全球NPS的精准防控提供更具韧性的前瞻性技术支撑。

参考文献:

- [1] Jousselin E, Griffeuille P, Petit I, Saint-Marcoux F, El Balkhi S, Védrenne N. *Ther. Drug Monit.*, **2026**, 48(2): 160–171.
- [2] The United Nations Office on Drugs and Crime. What are NPS?[2026-03-16]. <https://www.unodc.org/LSS/Page/NPS>.
- [3] Lin C, Chen J, Chan C. *J. Clin. Psychopharmacol.*, **2023**, 43(2): 122–130.
- [4] Azuma Y, Asada A, Tanaka M, Doi T. *Drug Test. Anal.*, **2026**, 18(4): 490–500.
- [5] Yeh Y, Hsieh C, Huang Y, Chang Y, Wang S. *J. Food Drug Anal.*, **2025**, 33(2): 132–149.
- [6] Ferrari Júnior E, Leite B H M, Gomes E B, Vieira T M, Sepulveda P, Caldas E D. *Front. Toxicol.*, **2022**, 4: 1033733.
- [7] Ristivojevic P, Otasevic B, Todorovic P, Radosavljevic-Stevanovic N. *Processes*, **2025**, 13(8): 2371.
- [8] Frisoni P, Bacchio E, Bilel S, Talarico A, Gaudio R, Barbieri M, Neri M, Marti M. *Brain Sci.*, **2018**, 8(9): 170.
- [9] Luethi D, Liechti M E. *Arch. Toxicol.*, **2020**, 94(4): 1085–1133.
- [10] Marandiuc I, Docea A, Hirjau A, Avram O, Matei C, Tsatsakis A, Arsene A. *Daru J. Pharm. Sci.*, **2025**, 33(2): 29.
- [11] van Eck N J, Waltman L. *Scientometrics*, **2010**, 84(2): 523–538.
- [12] Wu J, Zhang F, Ke X, Jia W, Wan X, Zhang L, Fan Y, Zhou J. *Separations*, **2023**, 10(3): 203.
- [13] Sarkisian M, Rodda L. *J. Anal. Toxicol.*, **2025**, 49(6): 407–416.
- [14] Wagmann L, Jacobs C, Meyer M. *Ther. Drug Monit.*, **2022**, 44(5): 599–605.
- [15] Vaiano F, Bertol E, Mineo M, Pietrosemoli L, Rubicondo J, Supuran C, Carta F. *Separations*, **2021**, 8(11): 221.
- [16] Simao A, Tokuyama P, Zampieri G, Rocha V, Madruga C, Isicawa K, Cidade L, Almeida K, da Silva N, Barroso M, Andraus M, Gallardo E. *Forensic Sci. Int.*, **2025**, 371: 112493.
- [17] Li Z, Li Z, Xie W, Liu J, Li B, Liu W, Shi Y. *J. Pharm. Biomed. Anal.*, **2023**, 234: 115577.
- [18] Wachelko O, Szpot P, Tusiewicz K, Nowak K, Chlopas-Konowalek A, Zawadzki M. *Talanta*, **2023**, 251: 123816.
- [19] Wagmann L, Gampfer T, Meyer M. *Anal. Bioanal. Chem.*, **2021**, 413(22): 5551–5559.
- [20] Pelletier R, Le Daré B, Grandin L, Couette A, Ferron P, Morel I, Gicquel T. *Clin. Toxicol.*, **2022**, 60(1): 122–125.
- [21] Avram M, Ritter I, Muslin O, Parikh S, Ahmed Y, Gosselin M, Fantegrossi W, James L, Endres G, Reed J, Moran J. *Chem. Res. Toxicol.*, **2026**, 39(2): 216–228.
- [22] Júnior E F, Bitencourt V S, deSouza Á B M, Caldas E D. *J. Pharm. Biomed. Anal.*, **2024**, 244: 116139.
- [23] Ma J, Zhang Y, Bian Y, Liu S, Feng X. *Microchem. J.*, **2024**, 207: 112251.
- [24] Jiang L W, Yang Z, Wu Y D, Yang S Y, Li J Y, Lü J X. *J. Instrum. Anal.* (蒋力维, 杨哲, 吴一荻, 杨思瑶, 李佳益, 吕建霞. 分析测试学报), **2024**, 43(12): 1873–1882.
- [25] Ahmad S, Gonçalves O, Oliveira M, Neng N, Nogueira J. *Molecules*, **2021**, 26(8): 2168.
- [26] Esteve-Turrillas F, Armenta S, de la Guardia M. *J. Chromatogr. A*, **2020**, 1633: 461615.
- [27] Ayala J, Kerrigan S. *J. Anal. Toxicol.*, **2023**, 47(8): 656–667.
- [28] Yang C, Liu H, Liu R, Lin D, Wu S. *J. Anal. Toxicol.*, **2022**, 46(3): 246–256.
- [29] Hwang J, Han M, An S, Moon J, Shim G, Chung H. *Forensic Sci. Int.*, **2022**, 332: 111176.
- [30] Zhang Y, Zhao Y G, Zhu Y, Shi J W, Cai T, Zhang S. *J. Chromatogr. A*, **2022**, 1671: 463022.
- [31] Taghviimi A, Tabrizi A B, Dastmalchi S, Javadzadeh Y. *J. Chromatogr. B*, **2019**, 1109: 149–154.
- [32] Tan D Q, Han C, Yu Z L, Sun X L, Chen J W, Dhanjai, Shao X T, Wang D G. *J. Chromatogr. A*, **2022**, 1663: 462759.
- [33] Schüller M, Lucic I, Øiestad Å M L, Pedersen-Bjergaard S, Øiestad E L. *J. Anal. Toxicol.*, **2023**, 47(9): 787–796.
- [34] Shamai-Yamin T, Shifrovich A, Madmon M, Belay C, Prihed H, Blanca M, Hindi A, Zafrani Y, Berliner A, Weissberg A. *Forensic Chem.*, **2022**, 29: 100422.
- [35] Rosales C, Lepinsky N, Gebeyehu W, Wasslen K, Colquhoun F, Warnes B, Chihabi J, Manthorpe J, Smith J. *J. Am. Soc. Mass Spectrom.*, **2025**, 36(3): 514–523.
- [36] Matsuo T, Ogawa T, Iwai M, Kubo K, Kondo F, Seno H. *Forensic Toxicol.*, **2024**, 42(2): 181–190.

- [37] Tseng L, Lan Y, Lee Y, Lee Y, Chou Y, Lee H, Chang M, Liang S, Lin Y. *Anal. Sci.*, **2024**, 40(8): 1397–1407.
- [38] Wallace W, Moorthy A. *J. Forensic Sci.*, **2023**, 68(5): 1484–1493.
- [39] Dimic D. *Chemosensors*, **2025**, 13(12): 426.
- [40] Abiedalla Y, Almalki A, DeRuiter J, Clark C. *Forensic Chem.*, **2021**, 24: 100326.
- [41] Kranenburg R, Verduin J, Stuyver L, de Ridder R, van Beek A, Colmsee E, van Asten A. *Forensic Chem.*, **2020**, 20: 100273.
- [42] Kranenburg R F, Peroni D, Affourtit S, Westerhuis J A, Smilde A K, van Asten A C. *Forensic Chem.*, **2020**, 18: 100225.
- [43] Gilbert N, Mewis R E, Sutcliffe O B. *Forensic Chem.*, **2020**, 21: 100287.
- [44] Liliedahl R E, Davidson J T. *Forensic Chem.*, **2021**, 26: 100349.
- [45] Stuhmer E L, McGuffin V L, Waddell Smith R. *Forensic Chem.*, **2020**, 20: 100261.
- [46] Cao F, Yu S, Chen X, Xiao L, Qiu T, Wang X, Zhang D, Yuan X, Shi P. *J. Pharm. Biomed. Anal.*, **2025**, 255: 116566.
- [47] de Campos E, Farrar D, Krotulski A. *J. Pharm. Biomed. Anal.*, **2024**, 247: 116254.
- [48] Li Z, Shi Y, Li Z, Zhao J, Wang X, Wang K, Su M, Xiang P. *Forensic Chem.*, **2024**, 37: 100551.
- [49] Júlio S, Ferro R, Santos S, Alexandre A, Caldeira M, Franco J, Barroso M, Gaspar H. *Anal. Bioanal. Chem.*, **2023**, 415(4): 571–589.
- [50] Pereira M, Familia C, Martins D, Cunha M, Dias M, Neng N, Gaspar H, Quintas A. *Int. J. Mol. Sci.*, **2025**, 26(5): 2219.
- [51] Song C H, Jia W, Liu C M, Hua Z D, Meng X, Zhao Y B, Li T, Cai L S, Zhao X. *Talanta*, **2023**, 255: 124257.
- [52] Ke X, Chen X, Chen X X, Wu H, Fan Y L, Xu Y, Xu J W. *Rapid Commun. Mass Spectrom.*, **2025**, 40(5): e70011.
- [53] Magny R, Le Seigle M, Schiestel T. *Talanta*, **2026**, 304: 129533.
- [54] Di Gaudio F, Giaccone V, Cucina A, Indelicato S, Raso M, Brunacci G, Lundari A, Rotolo M, Busardò F, La Rocca M. *J. Pharm. Biomed. Anal.*, **2024**, 245: 116175.
- [55] Boscolo-Berto R. *Adv. Clin. Exp. Med.*, **2024**, 33(5): 423–425.
- [56] Wang W, Liu G R, Xu W Z, Xu H S, Zhang W F, Qiao S, Li Q Y. *Global Adv. Pharm. Res.* (王伟, 刘国如, 徐唯哲, 许海山, 张文芳, 乔湜, 李清艳. 国际药学研究杂志), **2020**, 47(4): 304–311.
- [57] Florou D, Di Rago M, Orfanidis A, Gerostamoulos D, Boumba V. *J. Chromatogr. B*, **2024**, 1247: 124323.
- [58] Giorgetti A, Barone R, Pelletti G, Garagnani M, Pascali J, Haschimi B, Auwärter V. *Drug Test. Anal.*, **2022**, 14(2): 202–223.
- [59] Czarny J, Musial J, Powierska-Czarny J, Galant N, Raczkowski M, Buszewski B, Gadzala-Kopciuch R. *Microchem. J.*, **2022**, 182: 107922.
- [60] Almeida A, de Pinho P, Remiao F, Fernandes C. *Molecules*, **2025**, 30(2): 290.
- [61] Wagmann L, Brandt S, Kavanagh P, Meyer M. *Toxicology*, **2026**, 521: 154402.
- [62] Luo X, Huang Z, Huang K, Liu X, Yang N, Luo Q. *J. Pharm. Biomed. Anal.*, **2024**, 250: 116385.
- [63] Krotulski A, Mata D, Smith C, Palmquist-Orlando K, Modell C, Vikingsson S, Truver M. *J. Anal. Toxicol.*, **2025**, 49(3): 152–169.
- [64] Marder D, Gutman O, Bretler U, Katz Y, Yishai-Aviram L, Drug E. *Rapid Commun. Mass Spectrom.*, **2024**, 38(19): e9883.
- [65] Kupriyanova O, Shevyrin V, Sadykova R, Shafran Y. *Drug Test. Anal.*, **2024**, 16(11): 1271–1284.
- [66] Che P, Davidson J, Kool J, Kohler I. *Anal. Chim. Acta*, **2023**, 1283: 341962.
- [67] Huang Y, Du Y, Hua Z, Liu C, Jia W, Di B, Su M. *Anal. Chem.*, **2025**, 97(31): 16841–16850.
- [68] Klingberg J, Keen B, Cawley A, Pasin D, Fu S. *Arch. Toxicol.*, **2022**, 96(4): 949–967.
- [69] Mardal M, Andreasen M F, Mollerup C B, Stockham P, Telving R, Thomaidis N S, Diamanti K S, Linnet K, Dalsgaard P W. *J. Anal. Toxicol.*, **2019**, 43(7): 520–527.
- [70] Matey J, Menéndez-Quintanal L, Zapata F, Montalvo G, García-Ruiz C. *Forensic Chem.*, **2025**, 42: 100630.
- [71] Wu W L, Xia B, Liu S Y, Huang X, Guo T R, Shi P Y, Chen X Q, Xiao Q W, Zhang M, Wan Y P, Zhou Y. *Food Chem.*, **2025**, 476: 143278.
- [72] Kleis J, Hess C, Germerott T, Roehrich J. *J. Anal. Toxicol.*, **2022**, 46(6): 592–599.
- [73] Sarkisian M, Rodda L N. *Drug Test. Anal.*, **2025**, 17(2): 300–310.
- [74] Ayala J, Kerrigan S. *J. Anal. Toxicol.*, **2025**, 49(9): 655–663.
- [75] Sekula K, Stanaszek R, Wysokinska Z, Zuba D. *J. Am. Soc. Mass Spectrom.*, **2025**, 36(5): 1084–1092.
- [76] Menéndez-Quintanal L, Matey J, Perretti M, Paz N. *Int. J. Mass Spectrom.*, **2026**, 519: 117549.
- [77] Zhang M, Feng J, Chen H, Xiang P, Yan H, Zhao J. *J. Anal. Toxicol.*, **2026**, 50(2): bkaf099.
- [78] Esteve-Turrillas F, Trigueros-Sancho A, Jover R, Pérez-Guaita D, Quintás G. *Microchem. J.*, **2025**, 214: 113908.

- [79] Qiao S, Xu H, Zhang W, Yang W, Guo D, Wang W, Xu W, Liu Y, Liu G, Cui Y, Yu H, Li Q. *J. Chromatogr. B*, **2020**, 1152: 122251.
- [80] Gottardo R, Sorio D, Soldati G, Ballotari M, Porpiglia N, Tagliaro F. *Electrophoresis*, **2021**, 42(4): 450–459.
- [81] Seibert E, Hubner E, Schmid M. *Separations*, **2025**, 12(2): 44.
- [82] Nytko M, Wan J, Turecek F, Lemr K. *J. Am. Soc. Mass Spectrom.*, **2024**, 35(8): 1733–1742.
- [83] Majeed H, Bos T, Voeten R, Kranenburg R, van Asten A, Somsen G, Kohler I. *Anal. Chim. Acta*, **2023**, 1264: 341276.
- [84] Boronat Ena M D M, Cowan D A, Abbate V. *Mass Spectrom. Rev.*, **2023**, 42(1): 3–34.
- [85] Ji J H, Zhang Y F, Zhang Y, Chang J, Wang A H, Zhou H, Liu Y, Wang J F. *Rapid Commun. Mass Spectrom.*, **2023**, 37: e9515.
- [86] Bills B, Manicke N. *J. Am. Soc. Mass Spectrom.*, **2020**, 31(3): 675–684.
- [87] Usui K, Murata T, Fujita Y, Kamijo Y, Hanazawa T, Yoshizawa T, Funayama M. *Drug Test. Anal.*, **2018**, 10(6): 1033–1038.
- [88] Su H, Yu D X, Deng Y X, Zeng H P, Chen A Q, Hu S D, Ge M X, Wang X Y, Xiong W, Jin J B, Wen L H. *Microchem. J.*, **2025**, 219: 115985.
- [89] Yang Y Q, Liu D P, Hua Z D, Xu P, Wang Y M, Di B, Liao J, Su M X. *J. Chem. Inf. Model.*, **2023**, 63(3): 815–825.
- [90] Cohen N, Kendler S, Yishai-Aviram L, Tzanani N. *J. Chem. Inf. Model.*, **2025**, 65(21): 11521–11531.
- [91] Lu T, Lin C, Weng T, Chou F, Fang C, Grp T R. *Int. J. Med. Inform.*, **2025**, 203: 106031.
- [92] Wang F, Pasin D, Skinnider M, Liigand J, Kleis J, Brown D, Oler E, Sajed T, Gautam V, Harrison S, Greiner R, Foster L, Dalsgaard P, Wishart D. *Anal. Chem.*, **2023**, 95(50): 18326–18334.
- [93] Skinnider M, Wang F, Pasin D, Greiner R, Foster L. *Nat. Mach. Intell.*, **2021**, 3(11): 973–984.
- [94] Lin Y, Chien W, Wang Y, Wang Y, Yang F, Tseng L, Hung J. *Anal. Chem.*, **2024**, 96(12): 4835–4844.
- [95] Lee S, Lee J, Song J, Lee M, Ok H, Han E, Hong Y, Oh H. *Anal. Chem.*, **2025**, 97(44): 24306–24316.
- [96] Liu P, Liu C, Li L, Tao J. *J. Chem. Inf. Model.*, **2025**, 65(21): 11672–11685.
- [97] Liu P F, Guo J, Xie J, Li L, Tao J. *J. Pharm. Biomed. Anal.*, **2026**, 267: 117132.

(责任编辑：丁 岩)

大赛获奖选手介绍：

李克新，硕士与博士均毕业于军事科学院军事医学研究院药物分析学专业，主要从事神经性毒剂的靶酶动力学、暴露溯源、毒代动力学、毒性作用机制、蛋白质组学等方面研究；现任职于民航总医学航空医学研究所研究实习员，主要从事航空人员的毒药物筛查鉴定方面研究。以第一作者身份在 *Chemico-Biological Interactions*、*Chemical Research in Toxicology* 等期刊发表 SCI 论文 4 篇、中文核心期刊 2 篇、国际学术会议论文 4 篇；多次参加国内外学术会议，并做青年论坛报告。曾获国际学术会议优秀海报奖 1 次、国内学术会议优秀青年报告奖 2 次，2025 年获得分析测试青年创新大赛三等奖。

