

拉曼光谱法用于卡西酮类新精神活性物质的定性研究

马星宇¹, 王佳慧², 陈光宇², 赵韞慧², 贾鹏丞³, 李博繁³, 牟涛涛⁴, 张勋^{*2}

(1. 吉林大学 公共卫生学院, 吉林 长春 130000; 2. 长春海关技术中心, 吉林 长春 130062; 3. 长春工业大学 化学与生命科学学院, 吉林 长春 130012; 4. 北京信息科技大学, 北京 100192)

摘要: 近年来, 新精神活性物质已成为继传统第一、二代毒品后危害较为严重的“第三代毒品”。其中, 卡西酮作为新精神活性物质的一类, 其滥用程度和影响范围仅次于位居首位的合成大麻素。滥用卡西酮类新精神活性物质会产生极强的兴奋作用, 对家庭和社会带来不可估量的严重后果。拉曼光谱法具有简便、快速及稳定的特性, 采用一步法即可完成对多种物质的同时测定。建立了一种快速、高灵敏性和可靠的拉曼光谱法, 用于卡西酮类物质的定性识别和筛查。设置便携式拉曼光谱仪的激光光源为 785 nm, 激光功率为 300 mW, 光谱扫描范围 150~3000 cm⁻¹, 对 20 种卡西酮类物质进行了检测。通过系统分析卡西酮类物质的专属特征峰, 实现了该类物质与其他类别物质的准确分类和有效区别。重点考察拉曼光谱法对卡西酮类物质中存在的同分异构体的区分。建立 20 种卡西酮类物质的拉曼光谱数据库, 并对该方法的可靠性进行探究。结果表明, 拉曼光谱法特异性强、稳定性好, 能够快速且准确的鉴定卡西酮类物质, 为基层执法、毒品现场筛查和司法鉴定提供可靠的技术手段, 并为保障公共安全和稳定提供坚实的技术支撑。

关键词: 新精神活性物质; 卡西酮类; 拉曼光谱法; 定性; 便携式拉曼光谱仪

中图分类号: O65 **文献标识码:** A **文章编号:** 0258-3283 (2026) --

DOI: 10.13822/j.cnki.hxsj.2026.0159

Raman Spectroscopy for the Qualitative Study of Cathinone-Type New Psychoactive Substances MA Xing-yu¹, WANG Jia-hui², CHEN Guang-yu², ZHAO Yun-hui², JIA Peng-cheng³, LI Bo-fan³, MOU Tao-tao⁴, ZHANG Xun^{*2} (1. School of Public Health, Jilin University, Changchun 130000, China; 2. Changchun Customs Technology Center, Changchun 130062, China; 3. School of Chemistry and Life Sciences, Changchun University of Technology, Changchun 130012, China; 4. Beijing Information Science Technology University, Beijing 100192, China)

Abstract: In recent years, new psychoactive substances (NPS) have spread rapidly worldwide and evolved into severely hazardous “third-generation drugs”, following traditional first- and second-generation illicit drugs that have long threatened public security. Cathinone derivatives are among the most prevalent classes of new psychoactive substances. In terms of abuse frequency, affected population, and social harm, they rank second only to synthetic cannabinoids, which are currently the most rampant NPS. Long-term or excessive abuse of cathinone-type substances induces intense excitation of the central nervous system, causing mental agitation, behavioral disorders, and physical dysfunction. Such substance misuse leads to family breakdowns, social conflicts, and even criminal acts, posing enormous hidden risks and immeasurable adverse effects on social governance and public safety. Raman spectroscopy outperforms conventional analytical methods owing to its simple operation, ultrafast detection, and superior stability. It enables the simultaneous qualitative analysis of multiple targets via a one-step procedure, making it highly applicable to rapid on-site drug identification. In this study, a rapid, highly sensitive, and reliable Raman spectroscopy method was established for the qualitative identification and screening of new cathinone-type psychoactive substances. A portable Raman spectrometer was adopted for detection, and the instrumental parameters were optimized to a laser wavelength of 785 nm, laser power of 300 mW, and spectral scanning range of 150 ~ 3000 cm⁻¹. Systematic detection and spectral analysis were conducted on 20 common cathinones under optimized conditions. Accurate classification and effective differentiation between cathinone derivatives and other psychoactive substances were achieved by summarizing and comparing the unique characteristic spectral peaks of cathinone compounds. Targeting the technical challenge of structural-similarity recognition, we investigated the ability of this method to distinguish cathinone isomers with highly analogous molecular structures. A standardized Raman spectral database for the 20 tested cathinones was established, and multiple parallel experiments were performed to validate the stability of the proposed method. The experimental results demonstrate that the established

收稿日期: 2026-07-01; **修回日期:** 2026-08-25; **接受日期:** 2026-08-31

基金项目: 吉林省科技发展计划项目(20240304117SF); 长春海关科研项目(CCHG2023KY04)。

作者简介: 马星宇(2002-), 女, 山西晋中人, 硕士生, 主要研究方向为分析化学。

通讯作者: 张勋, E-mail: 50874724@qq.com。

Raman spectroscopic method possesses high specificity and excellent stability. It enables efficient, rapid, and accurate identification of new cathinone-type psychoactive substances; provides a robust technical tool for grassroots law enforcement, on-site drug screening, and judicial identification; and offers solid technical support for maintaining social order and safeguarding public security and stability.

Key words: new psychoactive substances; cathinones; Raman spectroscopy; qualitative analysis; portable Raman spectrometer

联合国毒品和犯罪问题办公室（UNODC）分别于 1961 年、1971 年出台了《麻醉品单一公约》与《精神药品公约》这两项管制毒品的国际公约，至此传统精神活性物质被正式纳入国际管制范畴^[1]。根据 UNODC 的定义，新精神活性物质（New Psychoactive Substances, 简称 NPS）是指“不受 1961 年《麻醉品单一公约》与 1971 年《精神药品公约》的管制，但具有滥用潜力并且可能对公众健康构成威胁的单一或混合形式的成瘾性物质”^[2, 3]。NPS 也被称为“策划药”或“实验室毒品”，是不法分子为规避法律打击，在受管制精神活性物质的化学结构基础上进行细微修饰后制得的具有合成特征的物质。NPS 的作用与第一代、第二代毒品类似，但成分、结构和作用机制往往更为复杂且具有不确定性。因此，NPS 也被认为是继传统毒品之后的“第三代毒品”^[4]。NPS 种类繁多且结构复杂，截至 2024 年 7 月，UNODC 已收录 142 个国家和地区报告的 1245 种 NPS^[5]。依据 NPS 的药理学特性与化学结构，UNODC 将其分为九大类：合成大麻素类、卡西酮类、苯乙胺类、氨基茛菪满类、色胺类、哌嗪类、氯胺酮类、苯环利定类、植物类及其他类^[6]。

卡西酮类物质（Synthetic Cathinones）的原型是存在于恰特草中的一种生物碱—卡西酮，其被视为苯丙胺的 β -酮类似物，与苯丙胺和可卡因具有相似的药理作用^[7]。不法分子为了规避法律打击，在卡西酮化学结构的基础上加以细微修饰，制得了具有合成特征且危害更大的卡西酮类 NPS。卡西酮已成为 NPS 中第二类最具代表性的物质，其规模和滥用程度仅次于位居首位的合成大麻素类物质^[8]。截至 2021 年，欧盟成员国报告查获的 NPS 总量中，卡西酮类约占 50%；此外，UNODC 的数据显示，迄今为止已报告的该类物质共计 209 种^[9]。

卡西酮类物质常以“浴盐”、“喵喵”、“植物肥料”等名称伪装出售，或以毒品咖啡包、奶茶包等形式出现，极易在青少年中传播。该类物质属于中枢神经系统兴奋剂，吸食的危害极大，能够使人体产生极强的兴奋作用，会对神经系统、心血管系统产生严重的损害。典型表现为精神异常、偏执、失

眠、焦虑、被害妄想、呼吸困难、恶心呕吐、发汗、瞳孔扩大、血压急剧升高、心率加快等，严重者甚至出现自残、自伤或攻击他人的极端行为^[10]。这种不可估量的后果严重威胁公共安全，极易造成社会恐慌，破坏社会良好秩序，给家庭和社会造成巨大的心理创伤和财产损失。因此，进一步加强对卡西酮类 NPS 的管控力度，对于海关、禁毒部门等相关执法机构而言，具有极其重要的现实意义和战略必要性。

目前，针对卡西酮类 NPS 的检测方法有气相色谱—质谱联用技术^[11]、液相色谱—质谱联用技术^[12]、高效液相色谱-四极杆/飞行时间质谱法^[13]、电化学法^[14]、酶联免疫吸附技术^[15]等。虽然这些方法具有灵敏度高、特异性好的优点，但往往需要复杂的前处理技术、数据分析步骤繁琐、仪器购置与维护成本高。同时，这些方法对操作人员的要求较高且人员培训周期长，不适用于样品的现场快速分析测定。因此，有必要开发一种简单、高效的检测技术，以实现快速对卡西酮类 NPS 的快速鉴定。拉曼光谱是一种基于分子非弹性散射的振动光谱技术。当单色激光照射样品时，绝大多数光子发生弹性散射，即瑞利散射，而极少部分光子与分子化学键发生能量交换，致使散射光频率产生偏移，形成拉曼散射^[16]。这一频率偏移量对应于分子特定的振动、转动能级，与激发光波长无关，具有唯一的特性。通过采集并解析拉曼位移，即可获取表征物质化学结构的分子特征指纹信息，进而实现对不同组分的快速定性与初步识别。该技术具有快速、简便、安全无损的优点，无需复杂的前处理步骤，能克服荧光背景的干扰，隔着塑料袋、塑料瓶等样品包装物直接实现对内容物的检测，同时该操作仅在较短的时间内便可完成对 NPS 的快速定性分析与研究^[17]。

本研究开发出一种快速鉴定 20 种卡西酮类 NPS 的拉曼光谱技术，并建立相应的拉曼光谱数据库。通过分析 20 种卡西酮类 NPS 的拉曼光谱图，系统整合了该类物质的光谱特征峰，实现了该类物质与其他类别 NPS 的有效区别。重点考察该方法对 20 种卡西酮类 NPS 中存在的同分异构体的整体区分能力。通过连续性测试来探究该方法

的可行性与稳定性。结果表明，拉曼检测技术稳定可靠并具备现场快速分析优势，采用一步法即可同时测定多种物质，能够实现对卡西酮类物质的快速甄别、初步筛查及类别区分。同时，该方法对于提升该类相关案件现场执法工作效率具有重要的理论基础与现实意义。

1 实验部分

1.1 主要仪器与试剂

云智 M1 型手持面扫拉曼光谱仪(Cloudoptek, 北京云端光科技有限公司)，主要参数为设置激光光源为 785 nm，激光功率为 300 mW，积分时间为 5 s，光谱扫描范围 150~3000 cm⁻¹。

20 种卡西酮类标准品（上海原思科技有限公司），样品为粉末状，1 mg，纯度均大于 99%。所有标准品的中文名称、英文简称、分子式、分子量及 CAS 号等具体信息详见表 1。

表 1 20 种卡西酮类 NPS 标准品信息

Tab.1 Information on 20 types of cathinone NPS reference substances						
序号	中文名称	英文简称	CAS 号	分子式	分子量	纯度
1	2-甲基甲卡西酮盐酸盐	2-MMC	1246815-51-9	C ₁₁ H ₁₅ NO·HCl	213.71	≥99%
2	3-甲基甲卡西酮盐酸盐	3-MMC	1246816-62-5	C ₁₁ H ₁₅ NO·HCl	213.71	≥99%
3	4-甲基甲卡西酮盐酸盐	4-MMC	1189726-22-4	C ₁₁ H ₁₅ NO·HCl	213.71	≥99%
4	3-氯甲卡西酮盐酸盐	3-CMC	1607439-32-6	C ₁₀ H ₁₂ ClNO·HCl	234.12	≥99%
5	4-氯甲卡西酮盐酸盐	4-CMC	2319878-22-1	C ₁₀ H ₁₂ ClNO·HCl	234.12	≥99%
6	4-氟甲卡西酮盐酸盐	4-FMC	7589-35-7	C ₁₀ H ₁₂ FNO·HCl	217.67	≥99%
7	4-溴甲卡西酮盐酸盐	4-BMC	135333-27-6	C ₁₀ H ₁₂ BrNO·HCl	278.57	≥99%
8	乙卡西酮盐酸盐	Ethcathinone	51553-17-4	C ₁₁ H ₁₅ NO·HCl	213.71	≥99%
9	4-甲基乙卡西酮盐酸盐	4-MEC	1266688-86-1	C ₁₂ H ₁₇ NO·HCl	227.73	≥99%
10	4-氯乙卡西酮盐酸盐	4-CEC	22198-75-0	C ₁₁ H ₁₄ ClNO·HCl	248.15	≥99%
11	3-甲氧基甲卡西酮盐酸盐	3-MeOMC	1435933-70-2	C ₁₁ H ₁₅ NO ₂ ·HCl	229.70	≥99%
12	4-甲氧基甲卡西酮盐酸盐	4-MeOMC	879665-92-6	C ₁₁ H ₁₅ NO ₂ ·HCl	229.70	≥99%
13	3,4-二甲基甲卡西酮盐酸盐	3,4-DMMC	1081772-06-6	C ₁₂ H ₁₇ NO·HCl	227.73	≥99%
14	3,4-亚甲二氧基甲卡西酮盐酸盐	Methylone	186028-80-8	C ₁₁ H ₁₃ NO ₃ ·HCl	243.69	≥99%
15	3,4-亚甲二氧基乙卡西酮盐酸盐	Ethylone	1454266-19-3	C ₁₂ H ₁₅ NO ₃ ·HCl	257.71	≥99%
16	1-苯基-2-氨基-1-丁酮盐酸盐	Buphedrone	166593-10-8	C ₁₁ H ₁₅ NO·HCl	213.71	≥99%
17	1-苯基-2-乙氨基-1-丁酮盐酸盐	NEB	2731709-73-0	C ₁₂ H ₁₇ NO·HCl	227.73	≥99%
18	1-苯基-2-氨基-1-戊酮盐酸盐	Pentedrone	879669-95-1	C ₁₂ H ₁₇ NO·HCl	227.73	≥99%
19	1-(4-甲基苯基)-2-氨基-1-丁酮盐酸盐	4-McBP	1336911-98-8	C ₁₂ H ₁₇ NO·HCl	227.73	≥99%
20	1-(2-噻吩基)-2-(N-吡咯烷基)-1-戊酮盐酸盐	α-PVT	2748622-52-6	C ₁₃ H ₁₉ NOS·HCl	273.82	≥99%

1.2 实验方法

使用手持式拉曼光谱仪进行光谱采集。每次测量前，仪器预热 30 min，并使用高锰酸钾标准品进行波数校准。将置于透明玻璃瓶中的粉末样品充分混匀，采用逐点检测模式，扫描面积≥3 mm×3 mm，使光纤探头紧贴瓶壁进行测量。

1.3 稳定性实验

为了检验仪器的稳定性及方法的可靠性，在相同的实验条件下对样品进行连续测试。按照连续 3 天，每天 3 次的数据采集方案，用手持式拉曼光谱仪重复测定每种样品 9 次。

1.4 数据处理

仪器测得数据在设备中自动进行基线校正以扣除荧光背景。将处理后的数据导出至 Origin 2024 软件进行分析再处理。记录每条光谱的名称、特征峰位置及相对强度等关键信息，最终建立包含 20 种卡西酮类 NPS 稳定可靠的拉曼光谱数据库。

2 结果与讨论

2.1 卡西酮类 NPS 的拉曼光谱特征

便携式拉曼光谱仪的原理是拉曼散射效应，由于不同物质的化学组分存在差异，拉曼散射会形成具有指纹特征的专属位移峰。因此，可通过解析拉曼光谱特征峰，实现对物质分子结构的表征

与分析。本研究共采集了 20 种卡西酮类 NPS 的拉曼光谱图。如图 1 所示，20 种卡西酮类物质均在 1586~1610 cm^{-1} 与 1680~1706 cm^{-1} 这两处范围内存在很强的特征峰。其中，1586~1610 cm^{-1} 处对应的是母核 C=C 键的骨架伸缩振动 1680~1706 cm^{-1} 处对应的是羰基 C=O 键的伸缩振动^[18, 19]。在所获的拉曼全谱图中，这两组特征峰的其中之一位居第一或第二，为谱图的主峰或次强峰。因此，这两处的拉曼峰可作为卡西酮类 NPS 的特征指纹峰，实现该类物质与其他类别 NPS 的定性鉴别与分类区分。

此外，除上述所述卡西酮类物质的特征标志性峰外，此类物质也在 1236~1252、1150~1200、986~1015、712~830、600~650 cm^{-1} 处存在主要拉曼特征峰。其中，1236~1252 cm^{-1} 范围内的特征峰对应亚甲二氧基的 C-O 键伸缩振动，1150~1200 cm^{-1} 处的特征峰对应氨基结构的 C-N 键伸缩振动，986~1015 cm^{-1} 区域内的特征峰对应苯环 C-H 键的面内变形振动，712~830 cm^{-1} 范围内的特征峰对应苯环 C-H 键的面外弯曲振动，600~650 cm^{-1} 处的拉曼特征峰则对应苯环的 C-C 键骨架弯曲振动，汇总信息见表 2。通过对卡西酮类物质主要拉曼特征峰振动模式归属的解析，能够实现对这类物质更深度的鉴定与区分。

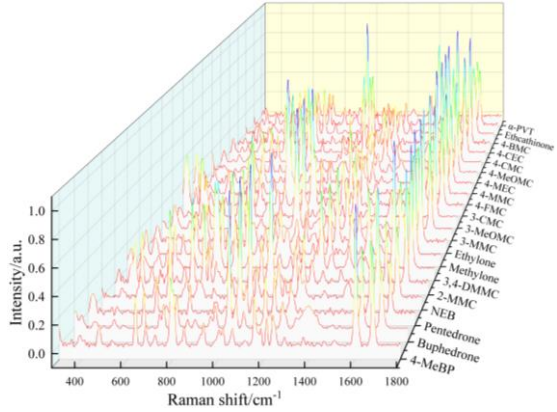


图 1 20 种卡西酮类 NPS 的拉曼光谱图

Fig.1 Raman Spectra of 20 Cathinone-Type NPS

表 2 20 种卡西酮类 NPS 主要拉曼特征峰振动模式归属

Tab.2 Assignment of the main Raman characteristic peak vibration modes of 20 types of cathinone NPS

拉曼位移/ cm^{-1}	振动模式归属
1680~1706	C=O 伸缩振动
1586~1610	C=C 骨架伸缩振动
1236~1252	C-O 伸缩振动
1150~1200	C-N 伸缩振动

986~1015	C-H 面内变形振动
712~830	C-H 面外弯曲振动
600~650	C-C 骨架弯曲振动

2.2 拉曼光谱法对同分异构体的区分

同分异构体的分子式相同，但原子空间排布与化学键振动模式存在较大差异，拉曼光谱法可抑制荧光背景干扰，放大微弱结构差异信号，依据特征振动峰的位移与强度特征，实现对同分异构体的精准区分。本研究所检测的 20 种卡西酮类 NPS 中存在多组同分异构体，具体包括 2-MMC、3-MMC、4-MMC、Ethcathinone 与 Buphedrone；3-MeOMC 与 4-MeOMC；3-CMC 与 4-CMC；4-MEC、3,4-DMMC、NEB、Pentadron 与 4-MeBP 共 4 组。此处，将各物质间存在明显差异的、相对强度变化较大的拉曼峰归属为每种物质的主要差异特征峰。

第 1 组 5 种化合物的分子式均为 $\text{C}_{11}\text{H}_{15}\text{NO}$ ，区别在于 2-MMC、3-MMC 与 4-MMC 的苯环上存在甲基取代基且位置不同，氮原子与侧链均与甲基相连，而 Ethcathinone 与 Buphedrone 的苯环上无取代基，前者氮原子的取代基为乙基，且侧链基团为甲基；后者氮原子与甲基相连，侧链与乙基相连。从图 2 中可以看出，拉曼光谱法能够很好的将这 5 种化合物区分开来。2-MMC 在 430、672、846、1050 和 1204 cm^{-1} 处；3-MMC 在 364、512、896 和 1260 cm^{-1} 处；4-MMC 在 476、636、802 和 1246 cm^{-1} 处；Ethcathinone 在 536、768 和 1126 cm^{-1} 处；Buphedrone 在 704、936、1028 和 1238 cm^{-1} 处分别存在专属的拉曼特征峰强度。

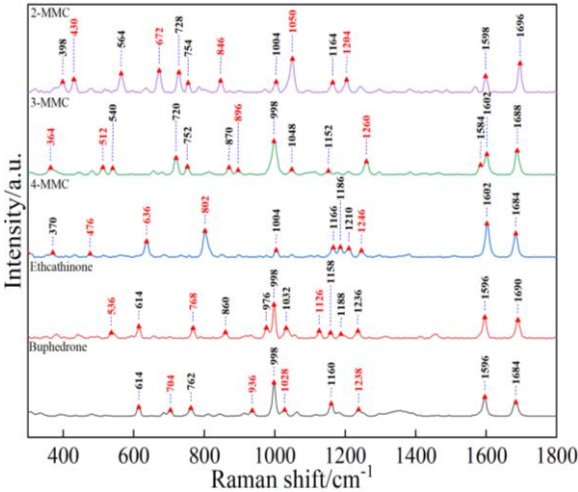


图 2 5 种卡西酮类 NPS 的拉曼光谱图

Fig.2 Raman spectra of 5 types of cathinone NPS

第 2 组 3-MeOMC 与 4-MeOMC 的分子式均为 $\text{C}_{11}\text{H}_{15}\text{NO}_2$ ，二者母核结构相同，核心区别为甲

氧基在苯环上的连接位置不同。分析图 3 中的数据可以发现, 3-MeOMC 在 564、718、1262 和 1450 cm^{-1} 处; 4-MeOMC 在 600、1174 和 1314 cm^{-1} 处均存在不同的拉曼特征峰。

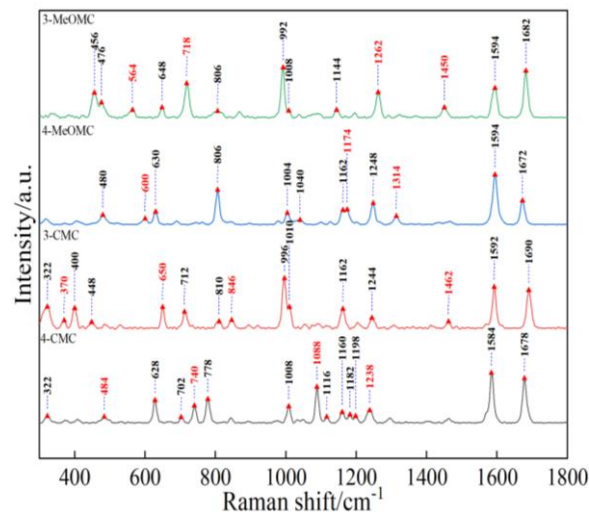


图 3 4 种卡西酮类 NPS 的拉曼光谱图

Fig.3 Raman spectra of 4 types of cathinone NPS

第 3 组 3-CMC 与 4-CMC 这两种化合物的分子式为 $\text{C}_{10}\text{H}_{12}\text{ClNO}$, 苯环上的取代基均为氯原子, 不同之处在于取代基的位置不同。从图 3 中可得, 3-CMC 在 370、650、846、1462 cm^{-1} 处; 4-CMC 在 484、740、1088、1238 cm^{-1} 处存在明显的特征指纹峰。

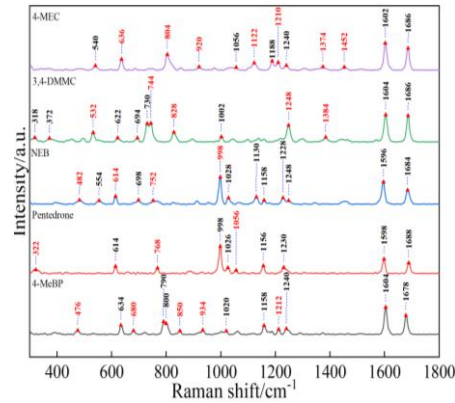


图 4 5 种卡西酮类 NPS 的拉曼光谱图

Fig.4 Raman spectra of 5 types of cathinone NPS

第 4 组 4-MEC、3,4-DMMC、NEB、Pentadrone 与 4-MeBP 的分子式为 $\text{C}_{12}\text{H}_{17}\text{NO}$, 这 4 种化合物的核心结构相同, 均为 2-(甲氨基)-1-苯基-1-丙酮, 区别在于苯环上的取代基和烷基侧链的不同。分析图 4 发现, 4-MEC 在 636、804、920、1122、1210、1374 和 1452 cm^{-1} 处; 3,4-DMMC 在 532、744、828、1248 和 1384 cm^{-1} 处; NEB 在 482、614、752 和 998 cm^{-1} 处; Pentadrone 在 322、768 和 1056

cm^{-1} 处; 4-MeBP 在 476、680、850、934 和 1212 cm^{-1} 处均有各自的特征峰。

除同组物质用于彼此区分的主要差异特征峰外, 本研究将各组化合物中峰形与相对强度均无明显变化的共有峰, 统一归属为相似峰。表 3 中汇总了上述 4 组同分异构体的相似峰及各目标物的主要差异特征峰, 两者结合实现了对各组同分异构体的深度解析。结果表明, 拉曼光谱法能够实现 对卡西酮类 NPS 中同分异构体的有效区分, 这也是该方法相比于气质、液质所具备的关键优势。

表 3 4 组同分异构体的峰位表

Tab.3 Peak Positions of Four Groups of Isomers

名称	相似峰/ cm^{-1}	主要差异特征峰/ cm^{-1}
2-MMC		430、672、846、1050、1204
3-MMC	998~1004	364、512、896、1260
4-MMC	1152~1162 1596~1620	476、636、802、1246
Ethcathinone	1684~1696	536、768、1126
Buphedrone		704、936、1028、1238
3-MeOMC	806 992~1004 1594	564、718、1262、1450
4-MeOMC	1672~1682	600、1174、1314
4-MEC		636、804、920、1122、1210、 1374、1452
3,4-DMMC		532、744、828、1248、1384
NEB	1596~1604 1678~1688	482、614、752、998
Pentadrone		322、768、1056
4-MeBP		476、680、850、934、1212
3-CMC	702~712 1008~1010	370、650、846、1462
4-CMC	1584~1592 1678~1690	484、740、1088、1238

2.3 拉曼数据库的建立

按照设置好的仪器参数, 使用便携式拉曼光谱仪对 20 种卡西酮类标准品进行光谱采集, 采集的拉曼光谱图经设备自动检索匹配。当采集的光谱数据与设备自带库的匹配结果 $>95\%$ 时, 完善各

物质的名称、CAS 号等具体信息，建立相应的拉曼个人数据库。设备自带库与个人自建库的核心区别在于：设备自带库是一个类似于标准答案的参考工具，仅能够用于提供匹配结果，其内部数据对用户不可见且不可用；而个人自建库则是在此实验条件下，对经确证的标准品进行实测采集获得的原始光谱数据，具有真实且详细、可分析、可导出、可追溯的特点，能够直接用于卡西酮类物质的精细对比和结构解析。本研究所建立的拉曼光谱数据库以样品识别为核心目的，通过对经确证的标准品实测光谱的系统保存，建立可供精细对比的指纹档案，以实现对比卡西酮类物质中不同化合物之间的准确区分。

如图 5 为本研究建立的 20 种卡西酮类 NPS 的个人数据库。利用该数据库进行盲样现场测试。测试结果显示，该方法可在 30 s 内完成单个标准品的检测，并能对 20 种卡西酮类物质实现准确定性，充分体现了该方法的简便性与可靠性。

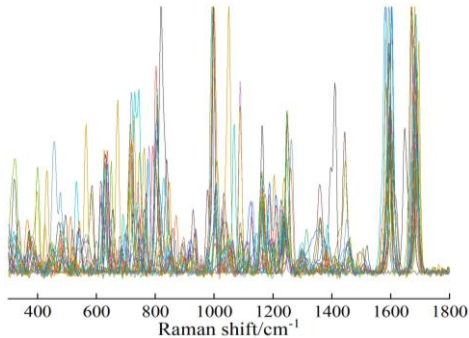


图 5 20 种卡西酮类 NPS 的拉曼光谱数据库

Fig.5 Raman Spectral Database of 20 Cathinone-type NPS

2.4 稳定性检测结果

按照每天 3 次，连续测试 3 d 的实验方案，对每种样品进行了 9 次测试。此处以 2-MMC 为代表，稳定性实验结果如图 6 所示。在连续 9 次的测试中，不同时间间隔条件下所采集的谱图整体保持一致，2-MMC 的主要特征峰的数量相同，并未有特征峰减弱或消失的现象，谱图的整体峰形未发生明显改变，从定性层面说明样品在该测试条件内具有良好的稳定性。

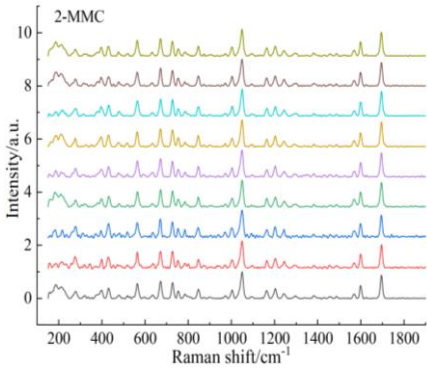


图 6 2-MMC 稳定性结果

Fig.6 2-MMC Stability Results

除对谱图开展定性稳定性考察外，同时采用精密度相关指标实现对方法稳定性的定量评估。本研究使用的便携式拉曼光谱仪输出的光谱数据自动进行归一化处理，即将每张谱图的全谱最高峰强制归一化为 1，其余所有特征峰按与该最高峰的比例同步缩放，输出 0~1 之间的相对峰强度，该比值代表该特征峰相对于同一张谱图最大峰的占比，而非原始光子计数。全谱最高峰的相对强度固定为 1，无法进行定量评价。因此，此处选取信噪比良好、9 次重复测定中均未成为全谱最高峰的次强特征峰，读取对应拉曼位移处的相对强度，对该比值的变化范围及相对标准偏差（RSD）进行评估，从定量层面探究方法的可行性。表 4 中的结果表明，20 种卡西酮类物质的相对强度变化较为稳定，均未超过 0.2 a.u.。所有物质相对强度的 RSD 在 1.56%~6.91% 范围内，均小于 7%。

综上所述，结合谱图定性观察及归一化相对强度的 RSD 等定量评价结果可知，拉曼光谱技术对卡西酮类物质具备良好的检测可靠性，能够满足该类化合物现场快速筛查与分析的实际应用需求。

表 4 20 种卡西酮类 NPS 的精密度结果

Tab.4 Precision results of 20 types of cathinone NPS			
名称	特征峰/cm ⁻¹	相对强度变化/a.u.	RSD/%
2-MMC	1696	0.786~0.916	4.54
3-MMC	1688	0.670~0.725	3.01
4-MMC	802	0.712~0.863	5.49
3-CMC	1690	0.716~0.778	2.79
4-CMC	1678	0.742~0.926	6.91
4-FMC	1596	0.818~0.916	3.44
4-BMC	1676	0.548~0.670	6.46
Ethcathinone	1596	0.600~0.683	3.77
4-MEC	1686	0.805~0.846	1.56

4-CEC	1586	0.693~0.765	3.99
3-MeOMC	1682	0.881~0.953	2.18
4-MeOMC	806	0.661~0.802	6.65
3,4-DMMC	730	0.640~0.689	2.44
Methylone	1604	0.520~0.565	2.78
Ethylone	1250	0.571~0.603	1.67
Buphedrone	1596	0.544~0.579	1.90
NEB	1596	0.775~0.852	2.96
Pentedrone	1598	0.531~0.637	6.15
4-MeBP	1678	0.674~0.730	2.89
α -PVT	1648	0.644~0.807	6.28

3 结论

拉曼光谱技术具有简便、快速的优点，能够克服荧光背景干扰，隔着样品包装直接对内容物进行检测。本研究利用拉曼光谱法，对 20 种卡西酮类 NPS 进行了考察研究。系统分析卡西酮类 NPS 的特征峰，实现了该类物质与其他类别 NPS 的有效区分。同时，利用该方法对同分异构体进行了细致的考察研究。建立相应的拉曼光谱数据库，并对该方法的可靠性进行了探究。结果表明，该方法具有良好的特异性和稳定性，能够实现对各种卡西酮类 NPS 的检测。

拉曼技术日趋完善，本研究能够充分对口岸涉毒、涉恐等高风险因子进行全面监测和分析，从而提高执法效率和实现智慧化的程序监管，为保障公共安全和社会稳定提供有力支持。

参考文献:

[1]Zhou Y Y, Cui W, Zhang X, Du H, Cai Y J, Wang F M, Zhou W H. *Chin. J. Drug Abuse Prev. Treat.*, 2020, **26(6)**:311-7.
周漪颖, 崔巍, 张鑫, 杜晗, 蔡雨佳, 王方敏, 周文华. 中国药物滥用防治杂志, 2020, **26(6)**: 311-7.

[2] Klingberg J, Keen B, Cawley A, Pasin D, Fu S L. *Arch. Toxicol.*, 2022, **96(4)**: 949-967.

[3] Zhao D, Teng J, Chen X G. *Fujian Anal. Test.*, 2018, **27(3)**:26-31.
赵丹, 滕姣, 陈学国. 福建分析测试, 2018, **27(3)**: 26-31.

[4] Tong C R, Zhou W J. *Chin. J. Drug Depend.*, 2023, **32(3)**: 254-6.
童春荣, 周文静. 中国药物依赖性杂志, 2023, **32(3)**: 254-6.

[5] Wu J L, Zhang Q, Wang X H, Liu L Y, Chen L L, Wang R H, Xu F M. *J. Mass Spectrom.*, 2025, **46(5)**: 658-64.
吴佳蕾, 张强, 王学虎, 刘凌云, 陈立麒, 王瑞花, 徐仿敏. 质谱学报, 2025, **46(5)**: 658-64.

[6] Chen T W. *J. Fuzhou Univ. Nat. Sci.*, 2024, **52(1)**:105-11.
陈天文. 福州大学学报(自然科学版), 2024, **52(1)**: 105-11.

[7] Wang S D, Wang Y, Ouyang J H, Zhang L, Zheng X, Zhang Y X. *J. Atomic Mol. Phys.*, 2025, **42(5)**:49-55.
王树栋, 王椰, 欧阳佳慧, 张琳, 郑璇, 张艳新. 原子与分子物理学报, 2025, **42(5)**: 49-55.

[8] Núñez-montero M, Pérez-mañá C, Hladun O, Poyatos L, Caicedo D A, Rosa G D L, Argote M C, Martín S, Ventura M, Maida N L, Trana A D, Graziano S, Pichini S, Farré M, Papaseit E. *Pharmaceuticals*, 2025, **18(5)**: 721.

[9] Nadal-gratacós N, Pazos M D, Pubill D, Camarasa J, Escubedo E, Berzosa X, López-arnau R. *ACS Pharmacol. Transl. Sci.*, 2024, **7(9)**: 2588-2603.

[10] Wu J S, Cai J, Rong Y T, Weng F L, Huang Y T, Xu R W, Yao L F. *Chem. Anal. Metrol.*, 2024, **33(7)**: 29-35.
吴洁珊, 蔡杰, 容裕棠, 翁福良, 黄宇腾, 徐日文, 姚丽锋. 化学分析计量, 2024, **33(7)**: 29-35.

[11]Tang Q Q, Wang J, Zhang H Q, Wang Q X, Cao X G, Wu C D, Yang F. *Food Sci.*, 2024, **45(16)**:262-267.
唐庆强, 王君, 张惠琴, 王巧霞, 曹晓钢, 吴春灯, 杨方. 食品科学, 2024, **45(16)**: 262-267.

[12] Birk L, Santos B P, Eller S, Oliveira T F. *Anal. Bioanal. Chem.*, 2025, **417(17)**: 3845-3855.

[13] Shi H F, Xu B P, Quan Y K, Xu C X, Zhou X Q. *J. Mass Spectrom.*, 2024, **45(2)**: 301-314.
史洪飞, 徐伯芑, 权养科, 徐成鑫, 周修齐. 质谱学报, 2024, **45(2)**: 301-14.

[14] Melo L M A, Aranha L M S, Costa L M F. *Electrochimica Acta*, 2025, **529**: 146394.

[15] Ling J. Research on the Analysis of Cathinone New Psychoactive Substances Using Molecular Imprinting Technology. Hunan: Central South University, 2023.
凌江. 分子印迹技术用于卡西酮类新精神活性物质的分析研究. 湖南: 中南大学, 2023.

[16]Chen X, Ou S X, Xie L, Liu Y, Zhang H Y, Jiang Y, Fu J J, Zhang M. *Chem. Reag.*, 2026, **48(4)**: 1-11.
陈萱, 欧书欣, 谢亮, 刘岩, 章弘扬, 江珣, 付建军, 张敏. 化学试剂, 2026, **48(4)**: 1-11.

[17]Liang C W, Su L L, Qin R. *Shandong Chem. Ind.*, 2023, **52(2)**: 135-138.
梁辰玮, 苏乐乐, 秦睿. 山东化工, 2023, **52(2)**: 135-138.

[18]Hu S, Liu C M, Xu L, Jia W, Hua Z D. *Spectrosc. Spect. Anal.*, 2023, **43(6)**: 1821-1828.
胡爽, 刘翠梅, 徐琳, 贾薇, 花镇东. 光谱学与光谱分析, 2023, **43(6)**: 1821-1828.

023, **43(6)**: 1821182-8.

[19]Li J, Jiang H, Zhang X Y, Pei L L, Wang J W. *Chem. Bull.*, 2022, **85(6)**: 759-761.

李锦, 姜红, 张馨艺, 裴琳琳, 王建威. 化学通报, 2022, **85(6)**: 759-761.