

NICI 와 Tandem Mass Spectrometry 를 이용한 몇 가지 약물들의 검출방법 개선에 관한 연구

최 만호¹, 이 정애¹, 최 정은¹, 이 원², 김 연제^{1*}

한국과학기술연구원 생체대사연구센터
경희대학교 화학과

근육강화제로 오용되고 있는 clenbuterol 과 몇 가지 anabolic steroid 들을 negative ion chemical ionisation (NICI)에 활성이 큰 trifluoroacetic anhydride (TFAA), pentafluoropropionic anhydride (PFPA) 그리고 heptafluorobutylic anhydride (HFBA) 를 사용하여 유도체화 한 후 GC/MS 를 사용하여 검출하였다. Clenbuterol 은 fluorine 한개를 함유하고 있는 fluorophenyl boronic acid 를 사용하여 80 °C 에서 10 분간 반응시켜 -NH 기 와 -OH 기를 boronation 한 후 잔류하고 있는 -NH₂ 기에 TFAA 를 사용하여 alkylation 시켰다. 이렇게 생성된 유도체화물을 GC/MS 에 시료 주입하고 우선 NICI 로 screening 한 후 parent ion 을 precursor ion 으로 하여 MS/MS 로 검출하였다. 이와 같은 방법을 사용하여 S/N 비 10 에서 25 fg 의 clenbuterol 을 검출할 수 있었다. Anabolic steroid 중 dromostanolone, boldenone, methenolone 그리고 nandrolone 의 대사체들을 PFPA 로 50 °C 에서 30 분 동안 반응시켜 유도체화 시켰으며 이들 역시 NICI 로 검출한 후 precursor ion 을 선정하고 MS/MS 로 full scan spectra 를 구하였다. 이 방법을 사용하여 이들 대사체를 뇨 시료 내의 농도로써 2 ppb 까지 검출 가능하였다. Nandrolone, dromostanolone, methenolone, mesterolone 그리고 boldenone 의 대사체 및 parent drug 들을 HFBA 를 사용하여 50 °C 에서 30 분간 반응시켜 유도체화 하였다. 이들 역시 NICI 로 검출한 후 precursor ion 을 선정하고 MS/MS 로 full scan spectra 를 구하였다. 이 방법을 사용하여 이들 대사체를 뇨 시료 내의 농도로써 1 ~ 20 ppb 까지 검출 가능하였다.