

“金三角”来源海洛因样品的关联性判别及来源推断

段正萍¹, 廉洁², 杨发震³, 李虹^{4,*}, 李彬⁵

(1. 昆明医科大学法医学院, 昆明 650500; 2. 中国人民公安大学侦查与刑事科学技术学院, 北京 100038;
3. 玉溪市公安局, 云南 玉溪 653100; 4. 毒品分析及禁毒技术公安部重点实验室, 昆明 650228;
5. 北京中天锋安全技术防护有限公司, 北京 100044)

摘要: **目的** 海洛因是最常被广泛滥用的毒品之一, 具有高度成瘾性、难以戒断性和严重的社会危害性。本文建立“金三角”海洛因样品 Pearson 相关性数学模型, 对云南 6 个边境州市公安机关缴获的海洛因样品进行了关联性判别及样品来源推断。**方法** 实验将海洛因样品溶于酸性溶剂中并用有机溶剂进行萃取富集, 采用超高效液相色谱-串联质谱法 (UPLC-MS/MS) 对海洛因样品中 15 种中性/酸性特征杂质进行检测分析, 结合数理统计分析方法完成样品分析。**结果** 通过计算, 选定 0.965 为关联性阈值, 并筛选出关联性极强的样品组。同时, 采用主成分分析法 (PCA) 初步将样品划分为 I、II、III 三个区域。**结论** 结合案件信息、关联性分组及主成分分析结果, 实现了对 489 份“金三角”来源海洛因样品的特征分析。

关键词: 法医毒理学; 海洛因; 海洛因特征分析; 超高效液相色谱-串联质谱; 来源推断

中图分类号: DF795.1 文献标识码: A 文章编号: 1008-3650(2022)01-0043-06

Correlativity Determination and Origin Deduction about Heroin Drugs from “Golden Triangle”

DUAN Zhengping¹, LIAN Jie², YANG Fazhen³, LI Hong^{4,*}, LI Bin⁵

(1. Institute of Forensic Medicine, Kunming Medical University, Kunming 650500, China; 2. College of Investigation and Criminal Science and Technology, People's Public Security University of China, Beijing 100038, China; 3. Yuxi Public Security Bureau, Yuxi 653100, Yunnan, China; 4. Key Laboratory (Ministry of Public Security) of Narcotics Assay and Control Technology, Kunming 650228, China; 5. Beijing Zhongtianfeng Safety Technology & Protection Co. Ltd, Beijing 100044, China)

ABSTRACT: Objective To establish a Pearson's mathematical correlation model about heroin samples from “Golden Triangle” for differentiating the correlativity and deducing the original source of the heroin samples seized by the public departments of 6 border prefectures and cities in Yunnan province. **Methods** The seized 489 heroin samples (originated from “Golden Triangle”) were dissolved with acidic solvents and extracted through organic solvents, successively having them detected via ultra high performance liquid chromatography triple quadrupole tandem mass spectrometry (UPLC-TQ-MS/MS) under the electrospray-ionization positive ion source (ESI+) plus multi reaction monitoring (MRM) mode. 15 sorts of neutral/acidic impurity were selected as target analytes of the heroin samples. With processing into the data received from peak areas of relevant samples, both Pearson's correlation coefficient calculation and principal component analysis (PCA) were undertaken to differentiate the correlativity among the heroin samples so that the heroin samples were one another to uncover their hidden information of origin. **Results** On the correlation threshold defined as 0.965, the heroin samples were sorted into correlativity-linked groups under Pearson correlation coefficient handling. There were 46 groups of strong correlation,

基金项目: 公安部技术行动计划(2019JSYJA13)

第一作者简介: 段正萍, 女, 云南保山人, 硕士研究生, 研究方向为法医毒物分析。E-mail: 2894987952@qq.com

* 通信作者简介: 李虹, 女, 云南个旧人, 学士, 主任法医师, 研究方向为毒物毒品检验。E-mail: yngalh@163.com

网络首发时间: 2021-05-16; 网络首发地址: <https://doi.org/10.16467/j.1008-3650.2021.0081>

with each group containing 2-22 samples. The relative standard deviation (RSD) of all the impurity-characteristic data in each group was less than 20%, indicating the small difference present with impurity-characteristic data among the samples of strong correlation, therewith having also verified the reliability of the approach adopted here. Principal component scoring and its consecutive mapping of heroin samples further had all the heroin samples divided into 3 categories: I, II and III. Thus, Dehong-seized heroin samples were mostly distributed in category I, with those of the Lincang-seized mainly in category II.

Conclusions In coalescence of case information with threshold-based correlation grouping and principal component analysis, the 489 heroin samples from “Golden Triangle” were successfully analyzed. It was manifested that the heroin samples had both the same raw/processed materials and manufacturing process if they were from correlativity-same group, and the similarity was very high of the same batch. The approach adopted here should be of both strategic and tactical information references/services for law enforcement against drug abusing, assistant to establishment of drug-sample database.

KEY WORDS: forensic toxicology; heroin; signature analysis of heroin; UPLC-MS/MS; origin deduction

海洛因, 化学名称“二乙酰吗啡”, 俗称“白粉”, 具有高度的成瘾性, 是最常被滥用的毒品之一。罂粟种植地域、海洛因非法生产工艺以及掺杂物等的不同, 均会使海洛因在各方面表现出显著差异, 有利于进行其地理来源地、贩运路径等的推断^[1]。从 20 世纪 70 年代开始, 毒品原产地判别及样品间关联性的分析一直是国际上毒品分析领域最关注的前沿和热点。目前, 关于海洛因溯源及关联性的研究, 有采用气相色谱法 (GC)^[2-3]、气相色谱串联质谱法 (GC/MS-MS)^[4-5]、超高效液相色谱-四级杆-飞行时间质谱法 (UPLC-Q-TOF)^[6]、超高效液相色谱串联质谱法 (UHPLC-MS/MS)^[7-8]、毛细管凝胶电泳法 (CE)^[9]、红外光谱法 (IR)^[10]、电感耦合等离子体质谱法 (ICP-MS)^[11-12] 等技术手段, 对海洛因的盐型、纯度以及样品中的主要生物碱、掺杂物、微量杂质、无机元素^[13-14] 等进行分析, 结合统计、数字、图形等多种计量分析方法^[15-16], 判别来自“金三角”“金新月”等毒源地的海洛因样品, 建立海洛因数据库, 为禁毒执法部门提供法律服务和战略、战术情报服务。

云南与“金三角”相毗邻, 是境外毒品走私入境渗透内流的重要通道, 也是受毒品危害的重灾区。通过云南边境地区所破获大宗毒品案件缴获样品, 开展“金三角”来源毒品特征分析, 为串并案件、深挖毒品犯罪提供科学依据, 具有重要的现实意义。海洛因生产, 即乙酰化过程中乙酸酐与吗啡、罂粟碱、去甲孕甾素等生物碱发生反应产生杂质成分, 在不同非法生产厂或不同生产批次下, 其具体量存在差异。公安部国家毒品实验室经过多年的研究积累, 形成了海洛因的产地溯源及特征分析技术规范, 在全国禁毒实战中发挥了关键性作用, 为一批批毒品案件的成功侦破提供了强有力的科学依据。Liu 等^[6,8,17] 通过中性/酸性杂质开展的海洛因溯源研究中对该方法的理

论依据和参数依据进行了明确阐述。本研究主要参考该方法, 应用检测灵敏度高、结果稳定性好、检测周期短的 UPLC-MS/MS 法, 检测海洛因样品中普遍存在且稳定性和显著性较好的 15 种中性/酸性特征杂质, 结合数理统计法对样品数据进行分析, 完成对“金三角”来源海洛因样品的特征分析。

1 材料与方法

1.1 仪器、试剂与材料

Waters Acquity I UPLC 和 Xevo TQ-S 超高效液相色谱-串联质谱系统 (美国 Waters 公司), HS-501 水平振荡器 (德国 IKA 公司), XS105 电子天平 (瑞士 METTLER TOLEDO 公司), H2050R 台式高速冷冻离心机 (湖南湘仪仪器有限公司), Dispensette® Organic 有机瓶口分液器 (0.5~5 mL, 德国普兰德上海贸易有限公司), 0.22 μm GHP 双相微孔滤膜 (德国 PALL 公司)。

乙腈和甲醇 (色谱级, 美国 Fisher Scientific 公司), 二氯甲烷 (分析纯, 美国 J.T.Baker 公司), 石油醚 (分析纯, 低沸程 30~60 °C, 美国 J.T.Baker 公司), 浓硫酸 (浓度大于等于 98%, 分析纯, 北京化工厂), 甲酸铵盐 (分析纯, 瑞士 Fluka 公司), Milli-Q 纯水系统 (美国密理博公司)。

1.2 实验方法

1.2.1 样品

海洛因样品为云南省边境州市公安机关 2019—2020 年缴获的千克以上毒品案件的样品, 共计 489 份。选取两份特征杂质典型的海洛因样品, 各称取 15 g 研磨混匀后制备成一份具有代表性的对照样品, 用于 UPLC-MS/MS 系统检查。

1.2.2 样品前处理

称取 120 mg 研磨混匀的海洛因样品置于玻璃离心管中, 加入 2 mL 稀硫酸溶液 (0.25 mol/L) 超声溶解,

再加入 2.5 mL 石油醚和二氯甲烷混合溶液 (体积比为 3 : 2), 水平振荡 30 min 后离心 5 min, 取有机层自然挥干, 取 1 mL 甲醇复溶后过 0.22 μm 微孔滤膜, 供 UPLC-MS/MS 分析。对照样品同上述步骤处理, 空白样品为甲醇溶液。

1.2.3 仪器条件

色谱条件: ACQUITY UPLC® BEH C18 色谱柱 (2.1 mm × 100 mm, 1.7 μm), 柱温: 35 ℃, 进样室温度: 10 ℃。流动相 A: 10 mmol/L 甲酸铵缓冲液, 流动相 B: 乙腈。洗脱梯度程序: 0~1 min, 25% B ;

1~2 min, 25%~33% B ; 2~6 min, 33% B ; 6~8 min, 33%~55% B ; 8~8.5 min, 55%~100% B ; 8.5~10 min, 100% B ; 10~10.5 min, 100%~25% B ; 10.5~13 min, 25% B。流速为 0.4 mL/min, 进样量为 2 μL。

质谱条件: 电喷雾正离子源 (ESI⁺), 多反应监测 (MRM) 模式; 毛细管电压 3.50 kV; 锥孔电压 20 V; 脱溶剂气温度 500 ℃; 脱溶剂气流速 1 000 L/h; 锥孔气 150 L/h; 碰撞气: 氩气, 流速 0.12 mL/min; 采集时间 0~9.2 min; 15 种目标杂质的质谱采集参数和保留时间见表 1。

表1 15种目标杂质的质谱参数和保留时间
Table 1 Mass spectrometric parameters and retention time of the selected 15 target impurities from heroin samples

序号	目标物名称	分子式	母离子/(m/z)	子离子/(m/z)	碰撞能/eV	保留时间/min
1	Hydrocotarnine	C ₁₂ H ₁₅ NO ₃	222.1	165.1*/150.1	18/24	1.56
2	4-O-acetylthebaol(4-acetoxy-3,6-dimethoxyphenanthrene)	C ₁₈ H ₁₆ O ₄	297.1	255.1*/223.1	8/16	2.85
3	Papaveraldine	C ₂₀ H ₁₉ NO ₅	354.1	188.1*/216.1	14/11	3.02
4	O6,N-diacetylnormorphine	C ₂₀ H ₂₁ NO ₅	356.2	297.1*/223.1	8/24	3.32
5	N,O6-diacetylnorcodeine	C ₂₁ H ₂₃ NO ₅	370.2	86.1*/251.1	22/20	3.50
6	Reticuline monoacetate	C ₂₁ H ₂₅ NO ₅	372.2	299.2*/137.1	14/32	4.80
7	N-acetylnorlaudanosiine	C ₂₂ H ₂₇ NO ₅	386.2	313.2*/344.2	14/16	4.90
8	3,6-Dimethoxy-5-(2-(N-methylacetamido)ethyl)phenanthren-4-ylacetate	C ₂₃ H ₂₅ NO ₅	396.2	281.1*/221.1	22/36	5.30
9	N,O3,O6-triacetylnormorphine	C ₂₂ H ₂₃ NO ₆	398.2	86.1*/237.1	28/28	6.20
10	Reticuline diacetate	C ₂₃ H ₂₇ NO ₆	414.2	372.2*/234.1	18/24	6.40
11	4,6-Diacetoxy-3-methoxy-5-[2-(N-methyl-acetamido)]ethylphenanthrene	C ₂₄ H ₂₅ NO ₆	424.2	100.1*/364.2	28/18	6.35
12	N-acetylnornoscapine	C ₂₃ H ₂₃ NO ₈	442.1	262.1*/220.1	14/30	6.80
13	N-acetylanhydronorcodeine	C ₂₄ H ₂₅ NO ₈	456.2	414.2*/383.2	13/15	7.16
14	1-Acetoxy-N-acetyl-1,9-dihydro-anhydronorcodeine	C ₂₆ H ₂₉ NO ₁₀	516.2	456.2*/414.2	8/20	7.84
15	1-Acetoxy-N-acetyl-1,9-dihydro-anhydronorcodeine	C ₂₆ H ₂₉ NO ₁₀	516.2	220.1*/383.2	14/22	9.03

注: *表示定量离子对; 表格中各目标物名称均引用Liu等^[6]的研究

1.2.4 数据处理

数据处理时, 先对实验样品的峰面积进行归一化和开平方处理后再进行 Pearson 相关性分析和主成分分析。对于样品中未定性检出的目标物, 峰面积均以 200 计算。

2 结果与讨论

2.1 方法稳定性评估

取对照样品按 1.2.2 处理, 单样平行测定 6 次, 一天进样 1 次, 连续 4 d, 进行日内、日间稳定性测试, 以 15 种目标杂质的相对标准偏差 (RSD%) 考察方法的稳定性。结果日内数据 RSD 在 0.3%~9.3% 之间, 日间数据 RSD 在 1.7%~10.9% 之间。

2.2 Pearson相关性数学模型

挑选出 103 份案件信息明确的海洛因样品构建关联性数学模型。“关联” 组包含 25 个样品组, 每组为 2~5 份海洛因样品。另外, 从单个样品案件中挑选出

明确不具有相关性的案件样品 37 份。

参考 Lociciro^[18]、Durourdy^[19] 和樊颖锋等^[9] 的研究, 本文以 15 种中性 / 酸性目标杂质参数计算模型样品间的关联系数 (*r*)。实验矩阵中可得到 10 506 个表示两两样品间关联性的有效数据, 其中, 表示 25 组样品具有关联性的有效数据有 132 个, 无关联性的有效数据有 10 374 个。以不同关联系数的 1- 特异度 (1-Spe) 为横坐标, 灵敏度 (Sen) 为纵坐标, 绘制 ROC 曲线, 确定模型的关联性阈值, 图 1 为 ROC 曲线图。灵敏度为具有关联性的样品数据被正确检出的百分率, 特异度为无关联数据被正确检出的百分率。当关联系数取 0.965 时, Youden 指数最大 (为 0.997), 模型的灵敏度和特异度都较高。因此, 实验选定 0.965 为海洛因样品的关联性阈值, 即当 *r* 大于等于 0.965 时确定两样品间具有关联性, 小于 0.965 则表示两样品间不具有关联性。

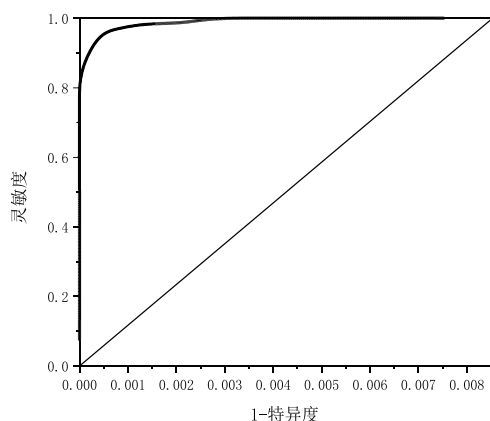


图1 Pearson相关性数学模型ROC曲线

Fig.1 ROC curve of Pearson's mathematical correlation model

2.3 Pearson关联性分析

依据上述模型分析 489 份“金三角”海洛因样品间的关联性。当 r 大于等于 0.965 时, 有 433 份与其他样品具有关联性的海洛因样品, 并从中筛选出了

46 个关联性极强的样品组, 每组包含了 2~22 份海洛因样品。其中, 含有 2~5 份样品的组有 22 个, 含有 6~10 份样品的组有 17 个, 含有 11~22 份样品的组有 7 个。

计算上述 46 个关联组中各目标杂质数据的平均值和 RSD 值, 对关联组进行分析, 表 2 为其中某个关联性组的数据及结果。各组内目标杂质数据 RSD 值均小于 20%, 表明该关联性阈值能够较好地区分实验样品间的关联性, 判别结果可靠。根据实验结果, 本文推测同一组份海洛因样品的生产原料及工艺相同, 为同一批次的相似度极高。其次, 还发现氢化可他宁 (T1)、O6,N-二乙酰吗啡 (T4)、N,O6-二乙酰可待因 (T5) 和 4,6-二乙酰氧基-3-甲氧基-5-[2-(N-甲基-乙酰氨基)]乙基菲 (T11) 4 种特征杂质平均值组间差距较明显, 此结果对样品来源推断具有重要意义。

表2 某个关联性组内样品各目标杂质具体数据、平均值、SD和RSD值

Table 2 The average, SD and RSD values of each target impurity in a certain correlativity group

样品号	T1	T2	T3	T4	T5	T6	T7	T8	T9	T10	T11	T12	T13	T14	T15
1	19.01	31.57	34.12	21.91	29.68	7.34	47.51	36.88	4.60	11.15	35.95	1.60	25.10	11.86	15.31
2	17.97	30.84	28.71	26.55	30.79	7.95	43.23	37.33	4.62	11.01	40.95	1.53	26.81	12.93	14.68
3	19.21	31.45	32.53	22.75	28.93	7.41	47.08	38.49	4.68	11.12	36.59	1.45	25.18	11.72	14.75
4	18.78	30.82	33.53	23.12	30.10	8.23	46.35	37.76	4.59	11.61	33.90	1.69	27.67	13.43	15.37
平均值	18.74	31.17	32.22	23.58	29.87	7.73	46.04	37.62	4.62	11.22	36.85	1.57	26.19	12.48	15.03
SD	0.54	0.39	2.43	2.04	0.78	0.43	1.93	0.68	0.04	0.27	2.96	0.10	1.27	0.83	0.36
RSD%	2.90	1.26	7.55	8.67	2.60	5.55	4.20	1.82	0.89	2.36	8.04	6.59	4.83	6.66	2.43

注: T1~T15代表目标物1~15; 表格中样品数据为峰面积归一化和开平方后再乘以100所得

2.4 主成分分析

主成分分析 (PCA) 为多元统计中的一种数据挖掘技术, 其优点在于可消除评价指标间的相关影响, 能保证评价的客观性^[20]。采用 PCA 将样品中 15 种目标杂质变量参数降维, 提取出 2 个主成分, PC1 和 PC2 累计贡献率达 76.478%, 图 2 为碎石图。

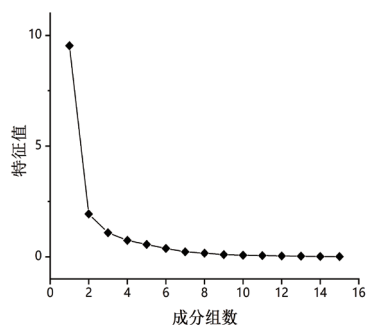


图2 碎石图

Fig.2 Scree plotting

根据图 3 海洛因样品的 PCA 分布图中不同样品的主成分得分及分布聚集情况, 将样品数据初步划分在 I、II、III 三个区域内。如分布在 I 区域的样品主成分得分范围 PC1 为 -0.9~0.4, PC2 为 -0.9~0.9; III 区域 PC1 为 2.0~3.3, PC2 为 -4.5~-2.1。

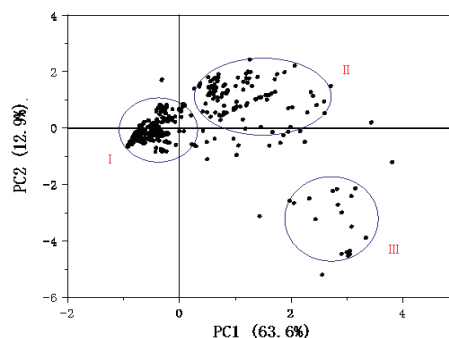


图3 海洛因样品的PCA分布图

Fig.3 Distribution of 489 heroin samples based on PCA scoring plot

结合案件缴获信息分析不同区域的海洛因样品,我们发现在德宏缴获的200多份海洛因样品集中分布在I区域,且出现不同案件样品间相互关联的情况较多;在临沧缴获的140多份样品绝大多数分布在II区域,少数分布在I和III区域;保山、普洱等其余边境州市缴获的海洛因样品在PCA分布图中无明显特征。因此,推测由德宏、临沧两地缴获的海洛因样品来源或加工工艺可能不同。

3 结论

本文采用UPLC-MS/MS法,以海洛因中的15种中性/酸性杂质峰面积建立Pearson关联性数学模型,确定0.965为海洛因样品关联性阈值。对489份“金三角”海洛因样品进行特征分析,筛选出46个关联性极强的样品组,每组包含了2~22份样品,推测同一组份海洛因样品的生产原料及工艺相同,为同一批次的相似度极高。同时,结合案件信息、关联性分组及主成分分析结果,推测在德宏、临沧两地缴获的海洛因样品来源或加工工艺可能不同。

致谢

衷心感谢公安部禁毒情报技术中心国家毒品实验室对本项目研究给予的大力支持与帮助,感谢花镇东、孟鑫两位博士给予的技术支持与指导!

参考文献

- [1] 汪聪慧, 张大明, 石学军, 等. 质谱法测定缴获的海洛因来源[J]. 现代科学仪器, 2006(4): 26-29.
(WANG Conghui, ZHANG Daming, SHI Xuejun, et al. Mass spectrometry in determining the origin of seized heroin samples [J]. Modern Scientific Instruments, 2006(4): 26-29.)
- [2] 张春水, 郑琰, 钱振华. 气相色谱/氢火焰检测器快速检测海洛因毒品及其来源推测[J]. 化学分析计量, 2007, 16(5): 39-41.
(ZHAN Chunshui, ZHENG Hui, QIAN Zhenhua. Rapid test and source determination of heroin samples by GC/FID [J]. Chemical Analysis and Meterage, 2007, 16(5): 39-41.)
- [3] DUFEY V, DUJOURDY L, BESACIER F. A quick and automated method for profiling heroin samples for tactical intelligence purposes [J]. Forensic Science International, 2007, 169(2-3): 108-117.
- [4] 燕瑾, 樊颖锋, 刘翠梅, 等. 海洛因特征分析在缴获样品产地溯源中的应用[J]. 警察技术, 2013(4): 7-10.
(YAN Jin, FAN Yingfeng, LIU Cuimei. Application of heroin characterization analysis in tracing the origin of captured samples [J]. Police Technology, 2013(4): 7-10.)
- [5] 曹槐, 郭晨, 李虹, 等. 一种新的海洛因毒源判别方法及其

- 软件使用[J]. 计算机与应用化学, 2008, 25(11): 1329-1333.
(CAO Huai, GUO Chen, LI Hong, et al. A new method to differentiate heroin source and the use of software [J]. Computers and Applied Chemistry, 2008, 25(11): 1329-1333.)
- [6] LIU C M, HUA Z D, BAI Y P. Classification of illicit heroin by UPLC-Q-TOF analysis of acidic and neutral manufacturing impurities [J]. Forensic Science International, 2015, 257: 196-202.
- [7] DEBRUS D, BROSEÚSJ, GUILLARME D, et al. Innovative methodology to transfer conventional GC-MS heroin profiling to UHPLC-MS/MS [J]. Analytical and Bioanalytical Chemistry, 2011, 399(8): 2719-2730.
- [8] 刘翠梅, 花镇东, 白燕平. UPLC-MS/MS和主成分分析法判别海洛因原产地[J]. 分析试验室, 2013, 32(8): 35-39.
(LIU Cuimei, HUA Zhendong, BAI Yanping. Classification of heroin by UPLC-MS/MS and principal component analysis [J]. Chinese Journal of Analysis Laboratory, 2013, 32(8): 35-39.)
- [9] 樊颖锋, 孟鑫, 刘培培, 等. 主成分分析和Pearson距离分析在判别“金三角”海洛因样品关联性中的应用研究[J]. 警察技术, 2013(4): 11-14.
(FAN Yingfeng, MENG Xin, LIU Peipei, et al. Application of principal component analysis and Pearson distance analysis in identifying the association of “Golden Triangle” heroin samples [J]. Police Technology, 2013(4): 11-14.)
- [10] 徐鹏, 曹珍年, 钱振华, 等. 海洛因及其盐型的红外光谱分析[J]. 中国药物依赖性杂志, 2010, 19(6): 493-496.
(XU Peng, CAO Zhennian, QIAN Zhenhua, et al. Infrared spectroscopic analysis of heroin and its salt forms [J]. Chinese Journal of Drug Dependence, 2010, 19(6): 493-496.)
- [11] 王虹, 王军. 电感耦合等离子体原子发射光谱法测定海洛因中19种痕量无机元素[J]. 理化检验(化学分册), 2018, 54(2): 226-229.
(WANG Hong, WANG Jun. Determination of 19 trace inorganic elements in heroin by inductively coupled plasma atomic emission spectrometry [J]. Physical Testing and Chemical Analysis Part B: Chemical Analysis, 2018, 54(2): 226-229.)
- [12] LIU C M, HUA Z D, BAI Y P, et al. Profiling and classification of illicit heroin by ICP-MS analysis of inorganic elements [J]. Forensic Science International, 2014, 239: 37-43.
- [13] DAMS R, BENIJTS T, LAMBERT W E, et al. Heroin impurity profiling: trends throughout a decade of experimenting [J]. Forensic Science International, 2001, 123(5): 81-88.
- [14] 崔雪子, 陈永生, 陈桂良, 等. 基于电感耦合等离子体质谱法的海洛因检材的关联性判别研究[J]. 刑事技术, 2020, 45(6): 551-558.
(CUI Xuezi, CHEN Yongsheng, CHEN Guiliang, et al. Correlative discrimination into sorting heroin based on inductively coupled plasma mass spectrometry [J]. Forensic Science and Technology, 2020, 45(6): 551-558.)

- [15] CASALE J, CASALE E, COLLINS M, et al. Stable isotope analyses of heroin seized from the merchant vessel Pong Su [J]. *Journal of Forensic Sciences*, 2006, 51(3): 603–606.
- [16] ESSEIVA P, ANGLADA F, DUJOURDY L, et al. Chemical profiling and classification of illicit heroin by principal component analysis, calculation of inter-sample correlation and artificial neural networks [J]. *Talanta*, 2005, 67(2): 360–367.
- [17] 刘翠梅, 花镇东, 白燕平. UPLC/Q-TOF-MS 和 PLS-DA 在鸦片生物碱检测及分类判别中的应用 [J]. *中国司法鉴定*, 2014(2): 25–28, 38.
(LIU Cuimei, HUA Zhendong, BAI Yanping. Determination of opium alkaloids and discrimination of sample origins by UPLC/Q-TOF and PLS-DA [J]. *Chinese Journal of Forensic Science*, 2014(2): 25–28, 38.)
- [18] LOCICIRO P, ESSEIVA P, HAYOZ P, et al. Cocaine profiling for strategic intelligence, a cross-border project between France and Switzerland: part II. Validation of the statistical methodology for the profiling of cocaine [J]. *Forensic Science International*, 2008, 177(2–3): 199–206.
- [19] DUJOURDY L, BESACIER F. Headspace profiling of cocaine samples for intelligence purposes [J]. *Forensic Science International*, 2008, 179(2–3): 111–122.
- [20] 兴丽, 赵凤敏, 曹有福, 等. 不同产地亚麻籽矿物质元素及脂肪酸组成的主成分分析 [J]. *光谱学与光谱分析*, 2014, 34(9): 2538–2543.
(XING Li, ZHAO Fengmin, CAO Youfu, et al. Principal component analysis of mineral elements and fatty acids composition in flaxseed from ten different regions [J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 2014, 34(9): 2538–2543.)

收稿日期: 2021-02-01; 修回日期: 2021-05-12