
芬太尼类新精神活性物质整类非靶向筛查研究获进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/31853.html>

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

芬太尼类新精神活性物质整类非靶向筛查研究获进展。

近日，中国科学院成都生物研究所研究员周燕团队在芬太尼类新精神活性物质（FTNs）整类非靶向筛查研究方面取得进展。该团队开发出全面的非靶向筛查策略。这一策略通过结合特征性碎片数据库和计算机辅助程序，使筛查

覆盖度可达约 1.25×10^{15}

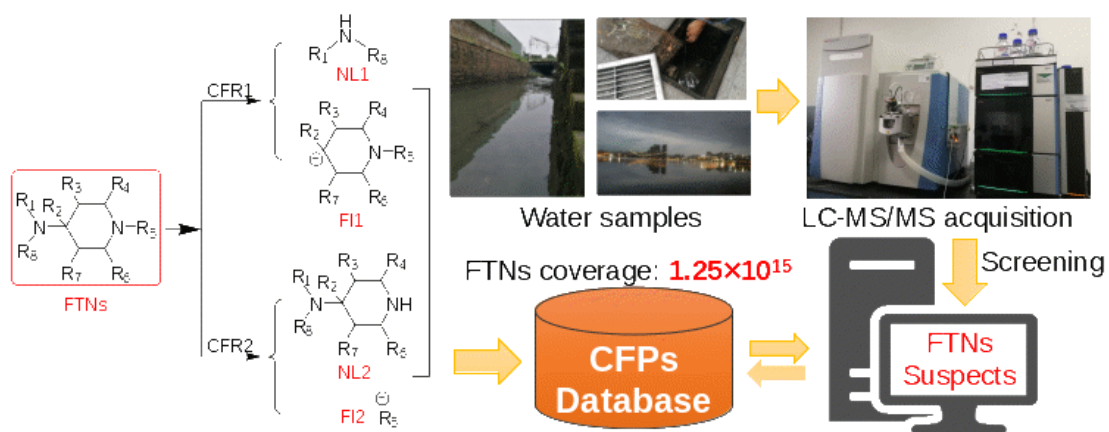
种芬太尼类新精神活性物质，提升了对已知与未知的芬太尼类新精神活性物质的检测能力。

该研究基于特征性碎片路线的非靶向筛查策略，收集了已知与潜在的芬太尼类新精神活性物质结构，并通过分子生成AI模型MolGPT预测了大量可能的未知结构，获得了数十万种可能的芬太尼类新精神活性物质。研究分析了这些芬太尼类新精神活性物质的取代模式和特征碎片路线，构建了包括特征碎裂产物的数据库。同时，研究通过数据库匹配测得的特征性碎片，初步筛查了潜在的芬太尼类新精神活性物质候选物，并结合同位素分布相似性和色谱峰特征，验证了候选物为芬太尼类新精神活性物质的可能性。进一步，研究开发了FTNs_Finder程序，实现了特征碎片的预测、数据库匹配以及同位素分布分析的自动化，提升了筛查效率。研究通过假阴性评估、假阳性评估、环境水样应用等实验验证了这一策略的有效性。其中，假阴性率为0%、假阳性率为0.62%。

上述成果能够高效检测已知芬太尼类新精神活性物质，并可以发现结构不断变化的未知芬太尼类新精神活性物质，有望为芬太尼类新精神活性物质整类管制提供技术支持。同时，这一策略的成功应用或可为其他危险物质的筛查和监管提供参考。

相关研究成果以Development and Application of a Comprehensive Non-targeted Screening Strategy for Fentanyl Analogues为题，发表在《危险材料杂志》（Journal of Hazardous Materials）上。

[论文链接](#)



研究工作流程示意图

研究团队单位：成都生物研究所

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](http://www.iikx.com)转发