

出國報告（出國類別：開會）

2025 年第 50 屆世界化學大會

服務機關：法務部調查局

姓名職稱：顏堯德調查專員

派赴國家/地區：馬來西亞吉隆坡

出國期間：114 年 7 月 13 日至 114 年 7 月 20 日

報告日期：114 年 8 月 27 日

摘要

赴馬來西亞吉隆坡於 114 年 7 月 14 日至 7 月 19 日參加 2025 年第 50 屆世界化學大會 (IUPAC 2025)，並發表「Screening Synthetic Cathinones Mixed with Instant Coffee and Fruit Juice Powder Using Hydrophobic Carbon Dot Probes (中譯：使用疏水性碳點探針篩檢摻混於即溶咖啡與果汁粉中的合成卡西酮)」(作者：顏堯德*、張淮瀚、王鈺媿、陳維廷、林子晴、關山仲、陳建甫)」論文 1 篇。本次會議議程聚焦於全球化學領域的最新研究方向與成果報告，涵蓋「物理與生物物理」、「無機與生物無機」、「有機與生物分子」、「聚合物與材料」、「分析與刑事化學」、「環境」、「人類健康與福祉」、「綠色化學」、「教育與大眾理解」及「化學資訊學」等多個領域。議程中聆聽各國專家學者對研究方向與成果的分享，並藉此反思自身工作及規劃後續可行之發展方向。由於科學技術與相關應用設備持續進步，持續精進專業知識並關注應用設備的發展趨勢，已成為鑑識單位同仁必須努力的重點目標。

目次

| | |
|-----------------------|----|
| 一、前言(包含背景說明、緣起) | 1 |
| 二、目的(考察目的) | 2 |
| 三、過程(考察內容) | 3 |
| 四、心得 | 11 |
| 五、建議事項 | 16 |
| 六、附錄 | 17 |

一、前言

依據「新世代反毒策略」第三階段（114 - 116 年），政府推動以「緝毒、驗毒、戒毒、識毒」四大核心方向，採取更周延的措施以徹底打擊毒品犯罪。其中，「緝毒」面向著重於優化科技緝毒設備，「驗毒」面向則聚焦於強化查獲新興毒品的檢驗量能。本研究即以「優化科技緝毒設備」為核心方向。國內生產或販售濫用藥物快篩試劑公司目前提供之快篩商品項目，包含愷他命、嗎啡、苯二氮平類、大麻、安非他命、甲基安非他命、搖頭丸、MDPV 及甲基卡西酮等快速檢驗試劑，其中 4-甲基甲基卡西酮（喵喵）及其類緣物等卡西酮類毒品在臺灣嚴重氾濫，已流入國中、小校園販售並常添加於咖啡包或果汁包進行偽裝。實際進行篩驗時，由於卡西酮毒品含量極少且嚴重受咖啡或果汁粉複雜基質影響，快篩結果常出現偽陽性或偽陰性情況，因此快速篩驗技術之開發有其必要。

本次出國計畫係依據本局 114 年度科技概算項下因公派員出國計畫表編號第 1 項「參加 2025 年第 50 屆世界化學大會（IUPAC 2025）」案辦理。參與國際會議可掌握最新研究成果與檢驗技術。近年來新興毒品及其類緣物層出不窮，從事法醫毒理檢驗之研究人員更須不斷吸收最新技術與趨勢，並提升專業語文與國際交流能力，方能維持專業水準，確保檢驗結果與研究能量與國際接軌。

二、目的

國際純粹與應用化學聯合會（International Union of Pure and Applied Chemistry, IUPAC）成立於 1919 年，總部設於瑞士蘇黎世。IUPAC 的成立宗旨是透過國際合作推動化學科學的發展，建立統一的化學命名、符號與標準，促進化學知識的全球共享與應用。IUPAC 世界化學大會是由該聯合會主辦之國際性大型學術會議，每兩年舉辦一次，是全球化學領域規模最大、學術水準最高的國際會議之一。大會邀請來自世界各地的頂尖專家學者發表最新研究成果與技術發展，並透過專題演講、分組討論與海報展示，促進跨領域合作與知識共享。除了學術交流，會議也關注化學在解決全球挑戰（如能源、環境、永續發展與公共健康）中的應用與貢獻，對於化學研究人員、教育者及產業界專業人士而言，是掌握國際最新動態與拓展國際合作的重要平台。

此行赴馬來西亞吉隆坡參加 2025 年第 50 屆世界化學大會，主要係發表「Screening Synthetic Cathinones Mixed with Instant Coffee and Fruit Juice Powder Using Hydrophobic Carbon Dot Probes（中譯：使用疏水性碳點探針篩檢摻混於即溶咖啡與果汁粉中的合成卡西酮）」海報論文 1 篇，且在議程中聆聽各國專家學者對研究方向與成果的分享，並藉此反思自身工作及規劃後續可行之發展方向。

三、過程

7月13日

由桃園啟程搭乘飛機至馬來西亞吉隆坡國際機場。

7月14至7月19日

赴2025年第50屆世界化學大會辦理報到，並參與會議議程，包括主題演講、論文發表及海報展示等活動。

（本局海報論文發表及展示時間為7月17至7月18日，共2日）

7月20日

由馬來西亞吉隆坡國際機場返回至桃園機場。

會議紀要

一、舉行場地介紹及註冊報到

本次會議於馬來西亞吉隆坡國際會議廳（Kuala Lumpur Convention Centre, KLCC）舉行，坐落於吉隆坡核心的城市發展區（Kuala Lumpur City Centre），正對知名的雙子塔（Petronas Twin Towers）及KLCC公園，交通與周遭設施極為便捷。馬來西亞吉隆坡國際會議廳，總面積約為120,000平方公尺，具有超過18,300平方公尺的無柱展覽空間，適合舉辦講座、研討會、工作坊與海報展示等各類活動。本屆大會所包含之各項大會演講、專題演講及論文海報等，均在該會場不同之各會議廳舉行，參加者自行選定有興趣之主題前往參與。

二、會議安排與學術論文發表

本次會議共有約3,000名與會者，會議主題涵蓋「物理與生物物理」、「無機與生物無機」、「有機與生物分子」、「聚合物與材料」、「分析與刑事化學」、「環境」、「人類健康與福祉」、「綠色化學」、「教育與大眾理解」及「化學資訊學」等多個領域。與會者包括來自世界各地的化學領域專家學者，以及化學相關研究與應用之專業人員。該會議屬於涵蓋面向廣泛的國際化學盛會，對於從事毒品鑑驗技術的研發

與實務人員而言，能夠提供全方位的最新知識與資訊，對專業能力的精進及技術開發具有重要助益。

三、本局發表論文內容概述

| 發表日期 | 發表方式 | 發表人 | 發表時間 | 論 文 題 目 |
|-------------------|------------|-----------------|----------------|---|
| 7/17 - 7/18 | 論文海報 發表 | 調查 專員 顏堯德 | 9:00– 16:00 | Screening Synthetic Cathinones Mixed with Instant Coffee and Fruit Juice Powder Using Hydrophobic Carbon Dot Probes |

依據「新世代反毒策略」第三階段（114–116 年），政府推動以「緝毒、驗毒、戒毒、識毒」四大核心方向，採取更周延的措施以徹底打擊毒品犯罪。其中，「緝毒」面向著重於優化科技緝毒設備，「驗毒」面向則聚焦於強化查獲新興毒品的檢驗量能。本研究即以「優化科技緝毒設備」為核心方向，研究動機源自實務觀察：許多合成卡西酮類毒品常混摻於咖啡包或果汁包中，以吸引年輕族群使用。然而，由於此類產品基質複雜，現行尚缺乏對毒咖啡包及毒果汁包具有高效檢測能力的快速篩檢試劑，致使整體查緝效能受到限制。因此，開發能有效應對此類複雜基質的新型快篩工具，對提升緝毒效能具關鍵意義。本研究取得之研究重點如下：

(一)疏水性碳點合成

透過自行開發的有機溶劑高溫高壓合成法，可成功以色胺酸（Tryptophan）合成疏水性碳點。圖 1(A)所示之高解析穿透電子顯微鏡（HRTEM）影像顯示，所得碳量子點呈球形，平均直徑為 $5.9 \pm 1.7 \text{ nm}$ ($n = 38$)，並具有 0.22 nm 晶格間距。該碳點可穩定分散於甲苯中，但不溶於水，顯示其具備顯著疏水性。由圖 1(B)之X光光電子能譜（XPS）可觀察到三個主要訊號峰，分別位於 284 eV (C 1s)、 400 eV (N 1s) 與 532 eV (O 1s)，其原子百分比分別為 71.9%、7.6% 與 14.0%。此外，傅立葉轉換紅外線光譜（FTIR）顯示，色胺酸與碳點在吸收峰位置與強度上呈現差異。色胺酸於 3400 cm^{-1} 處具有高強度的 O–H/N–H 伸縮振動吸收峰，於 1665 cm^{-1} 處出現中強度的 C=O 伸縮吸收峰，於 1600 cm^{-1} 處為芳香環 C=C 伸縮吸收峰，而 1354 cm^{-1} 處則為吡啶

環C=C伸縮吸收峰。當碳點形成後，上述特徵吸收峰強度均明顯減弱且峰形變寬，顯示其化學環境已發生改變。圖1(C)的 UV-Vis 光譜顯示碳點於 290 nm 有明顯吸收，並在 300–450 nm 間有一寬吸收訊號，分別對應 $\pi-\pi^*$ 與 $n-\pi^*$ 躍遷。插圖中螢光光譜顯示，在激發波長300–340 nm下，約於395 nm 處有穩定發光；當以365–450 nm 激發時則產生激發波長相關光激發放光 (Excitation-dependent photoluminescence)現象，屬於外層電子 $n-\pi^*$ 躍遷。該碳量子點於302 nm光激發下量子產率為17.5%，並根據圖1(D)的Tauc圖推算，其帶隙(E_g)估計為3.30 eV。插圖中也顯示了的 E_u 值，該 值估計為277 meV。

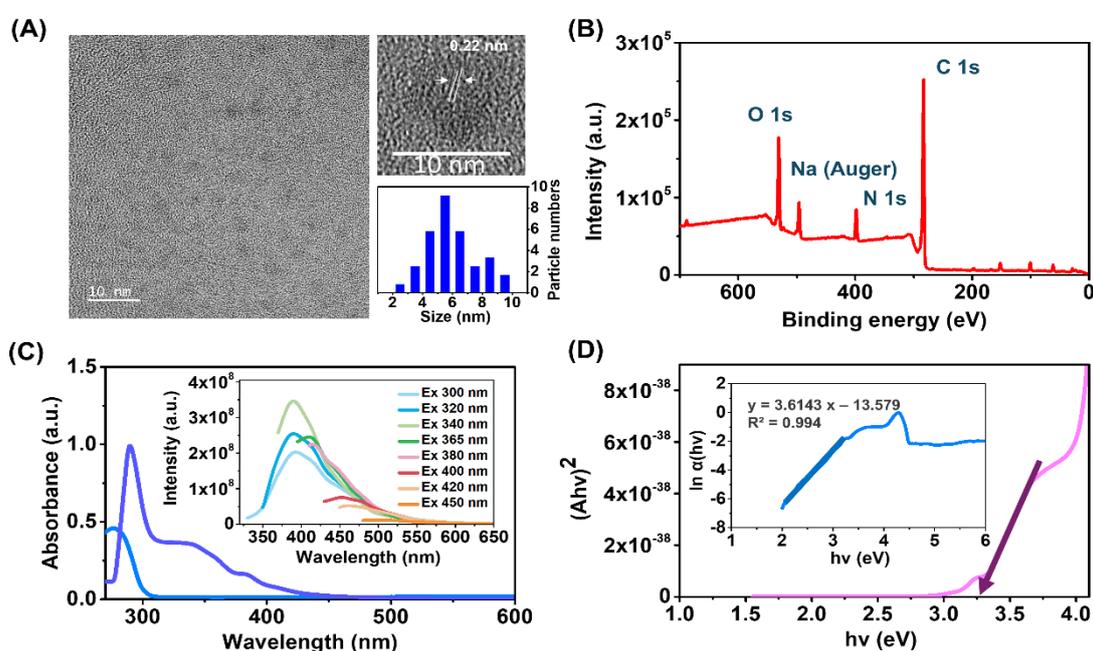


圖1、碳點之(A)HRTEM圖像及(B)XPS圖譜。(C)碳點與前驅物色胺酸之吸收光譜及(D)其Tauc圖。圖1(C)內插圖為不同激發波長時之螢光光譜；圖1(D)內插圖為Urbach能量圖。

(二)靈敏度與選擇性實驗

圖2(A)顯示於300–500 nm光激發下，4-氯甲基卡西酮 (4-CMC) 所引起的碳點螢光淬滅，其效率隨激發波長減少而增加，最大約達77.5%。考量攜帶式紫外燈為302 nm 激發光源，因此選擇此波長進行後續分析。靈敏度實驗顯示，4-CMC於0.125–0.75 mM濃度範圍內與碳點螢光淬滅效率 $[(F_0-F)/F_0]$ 呈現良好線性關係 ($R^2 = 0.996$)，

檢測極限 (LOD) 為0.08 mM。選擇性測試中，4-CMC及其他合成卡西酮 (4-CEC、eutylone等) 均造成60%以上淬滅；常見毒品 (如海洛因、愷他命) 與糖類添加物則未引起明顯螢光變化，顯示碳量子點對卡西酮類具有高選擇性。

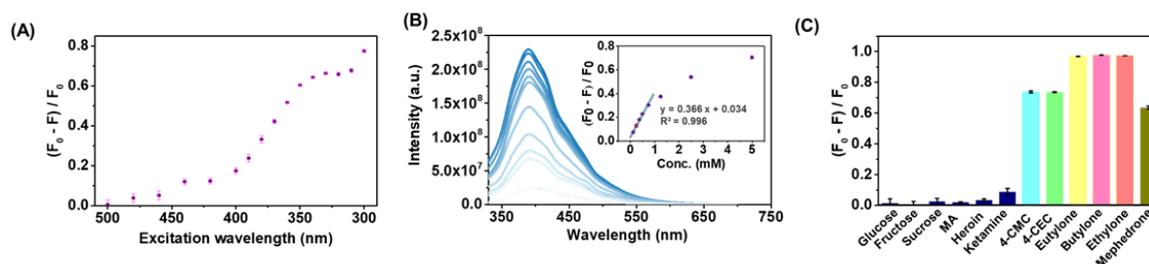


圖2、(A) 4-CMC引起的碳量子點螢光淬滅效率vs.激發波長圖。(B)碳量子點檢測試劑對4-CMC的靈敏度及其(C)對常見毒品選擇性測試。

(三)感測機制

咖啡和果汁樣品經液-液分離後，卡西酮被萃取至甲苯層中與碳點反應。為探討碳量子點的淬滅機制，以4-CMC為代表進行探討。圖3(A) Stern-Volmer常數(K_{SV})隨著溫度升高而增加，顯示碳點與4-CMC之間發生了動態淬滅。圖3(B)顯示，4-CMC之吸收光譜與碳點的螢光光譜並不重疊，所以排除了螢光共振能量轉移的可能性。圖3(C)所示，碳量子點和4-CMC的氧化電位分別為0.59和1.69 eV。通過公式計算，碳量子點和4-CMC的HOMO值分別為-4.81和-5.91 eV，LUMO值分別為-1.51和-1.78 eV， E_g 值係透過Tauc圖和吸收光譜估算分別為3.30和4.13 eV。碳量子點的LUMO能階較4-CMC高，顯示電子轉移可從碳量子點到4-CMC。圖3(D)顯示加入4-CMC後，螢光生命週期由1.7 ns (τ_1 , 84.4%) 和4.6 ns (τ_2 , 15.6%)，降為1.6 ns (τ_1 , 80.0%)和3.8 ns (τ_2 , 20.0%)，顯示碳點的LUMO參與了與4-CMC之間的電子轉移。另，圖3(E)顯示，激發光能量增加會使螢光淬滅效率提升，這表示了熱電子轉移的存在。當碳點受到3.3–3.75 eV光源激發時，螢光淬滅效率由0.35增加至0.65，然後在光源能量於3.75 eV增加到4.00 eV時保持螢光淬滅效率穩定，但當光源能量超過4.00 eV並達到4.13 eV時，螢光淬滅效率達到0.77，顯示碳點中的電子可以被激發到LUMO+N，再直接跳躍到4-CMC的LUMO，形成所謂的熱電子轉移，該機制如圖3(F)所示。

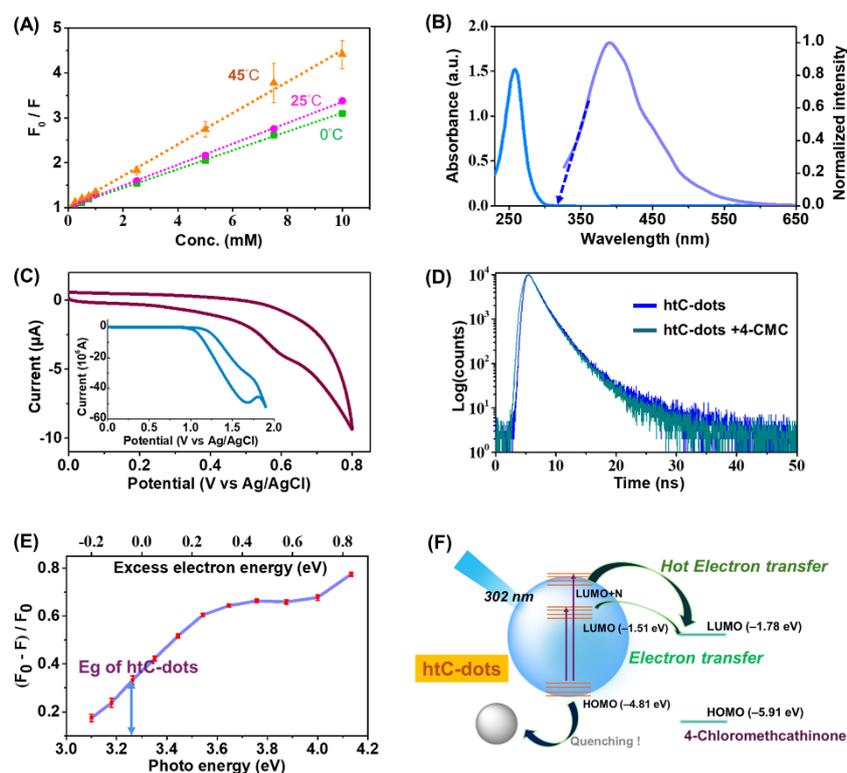


圖3、(A)含有4-CMC的碳點溶液Stern–Volmer圖。(B) 4-CMC的吸收光譜(左)與碳點的螢光光譜(右)。(C)碳點和4-CMC(插圖)之循環伏安圖。(D)碳點溶液之螢光生命週期曲線。(E)在不同能量激發下，4-CMC引起的碳點螢光淬滅效率。(F)碳點和4-CMC之間電子及熱電子轉移的示意圖。

(四)自製螢光儀

圖4(A)展示自製螢光儀組件，測試時把碳點溶液的樣品瓶分別插入測試樣品架和對照樣品架中。分別使用甲苯和碳點溶液(0.08 mg/mL)校正 F_B 值為0和100。圖4(B)顯示8批次中，測試架與參考架內碳點樣品的 F_B 值皆約為100，誤差分別為-5.5%至2.3%與-4.6%至1.7%，顯示螢光量測系統穩定。圖4(C)顯示，兩者於0.02至0.1 mM濃度範圍內的 F_B 值呈線性關係($R^2 = 0.996$)，且斜率相當一致。圖4(D)顯示碳點對4-CMC濃度於0.625–5 mM範圍之靈敏度，LOD經計算後為0.42 mM，該數據與使用微量盤分析儀測量所得之LOD (0.08 mM)差，應是源自於自製設備光源及光路品質限制。另，選擇性測試[圖4(E)]中，4-CMC、4-CEC、eutylone、butylone、ethylone及mephedrone均造成超過60%的碳點螢光淬熄效能，而海洛因、愷他命、麻黃鹼和醣

類則未引起螢光淬熄。這些結果與使用微量盤分析儀測量所得到的結果一致。

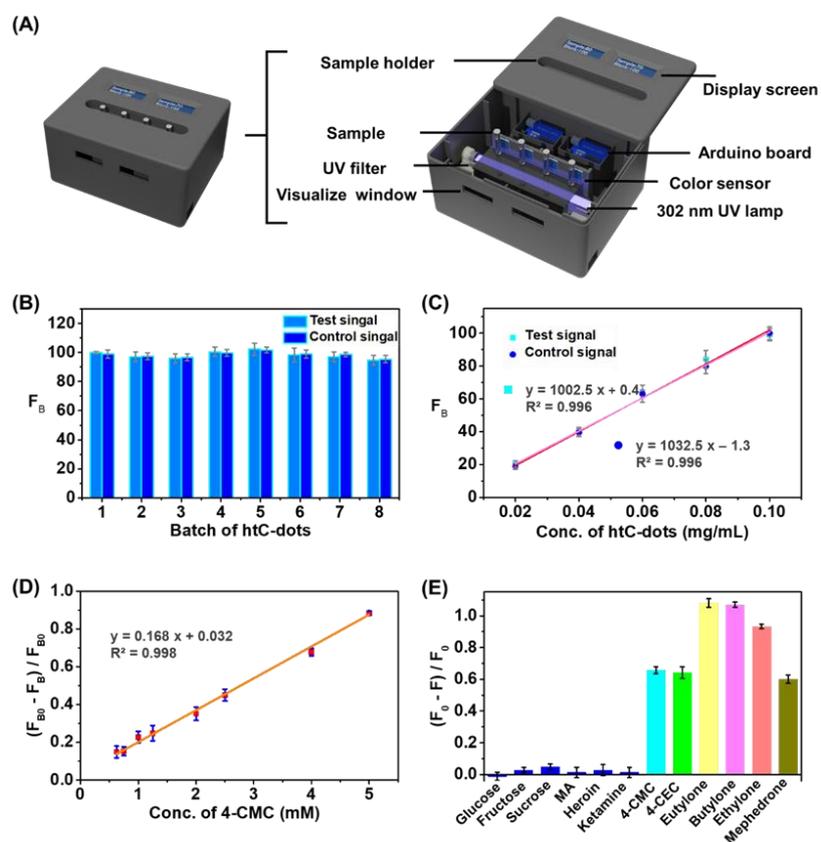


圖4、(A)自製螢光儀的主要組件。(B)螢光偵測穩定性測試。(C)碳點F_B值與濃度間之關係。(D)碳點對4-CMC的靈敏度。(E)選擇性測試。

(五)真實樣品檢測

1.即溶咖啡與果汁粉基質干擾

圖5(A)顯示5種咖啡和果汁粉每200 mg樣品對碳點螢光強度的影響，這些樣品導致不同程度螢光淬熄。經液-液萃取後，上層甲苯感測層液體轉移到樣品瓶中觀察，如圖5(B)影像所示，碳點樣品瓶在UV光激發下肉眼並無明顯區別，主要是複雜基質多被保留在水相中，並且只有部分可見光螢光淬熄可被肉眼所見。基於即溶咖啡粉及果汁粉樣品所造成的最大基質效應(約19.4%)，後續以F_B值約80的碳點(0.08 mg/mL)溶液作為對照組進行測量。

2.偵測摻入即溶咖啡與果汁粉中的4-CMC

將4-CMC(w/w : 1%)摻入上述樣品中，使用便攜式紫外燈與自製螢光儀檢測[圖

5(C)]。螢光強度均明顯低於對照，判定為合成卡西酮陽性。拉曼分析儀則因基質干擾，有1組未能辨識，其他4組誤判為糖類，結果顯示這5種咖啡和果汁粉樣品內的複雜基質會干擾手持式拉曼儀訊號，而碳點檢測溶液相對具有更好的篩檢能力。

3.實案樣品檢測

流程圖1為使用碳點檢測組篩驗真實檢品的流程。為評估檢測方法的實用性和準確性，對24件真實檢品採用手提式拉曼儀與碳點檢測液篩驗並比較結果。圖6為代表性檢品(1至4)篩驗結果，使用手持式拉曼儀為樣品1無檢出、樣品2為4-甲基甲基卡西酮(相似度 0.94)、樣品3為六甲基硅硫烷(相似度0.51)、樣品4為葡萄糖單水合物(相似度 0.97)，這顯示只有樣品2對合成卡西酮呈陽性反應；以自製螢光儀檢測，其 F_B 值結果如下(分別為對照組和測試組)：樣品1為77和8、樣品2為79和14、樣品3為79和23、樣品4為82和29，顯示該4件樣品均為合成卡西酮陽性。為了確認這些結果，再篩檢後對各碳點檢測液探針溶液進行了GC-MS分析，均證實含有合成卡西酮。另外20個實際樣品經以碳點檢測液及手持式拉曼儀篩驗，再以GC-MS確認後，均篩驗含有合成卡西酮，但使用手持式拉曼儀篩驗時，僅樣品21被檢出含有Methylone。整體而言，碳點檢測組測試24個實際樣品中之篩驗正確率為100% (24/24)，高於手持式拉曼分析儀的8.3% (2/24)正確率。

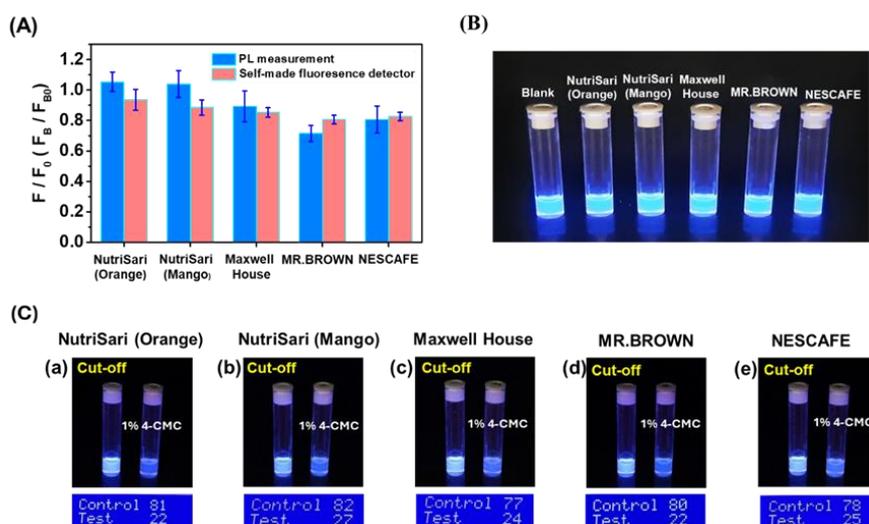


圖5、(A)基質效應。(B)紫外燈激發下，碳點檢測基質後的影像。(C)篩驗摻有4-CMC(w/w: 1%)與碳點參考溶液進行對比。

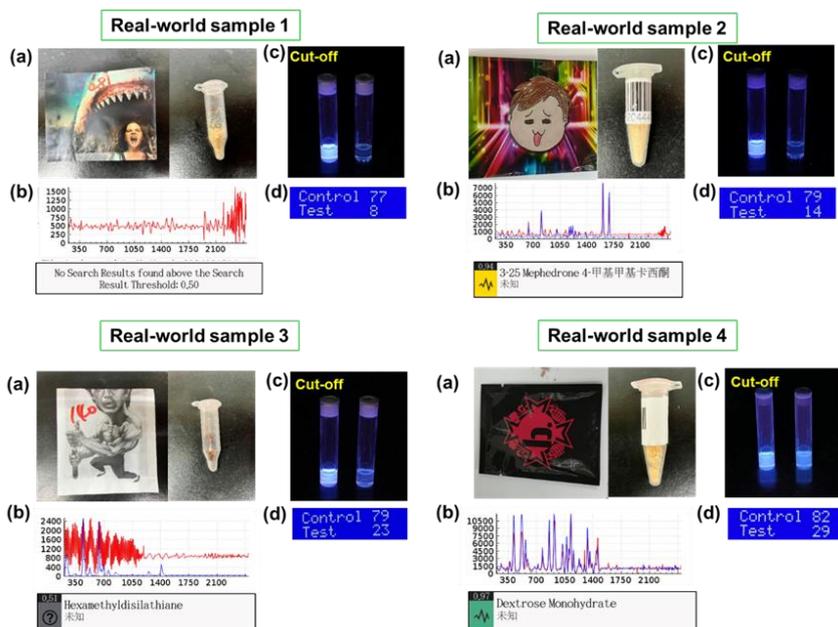
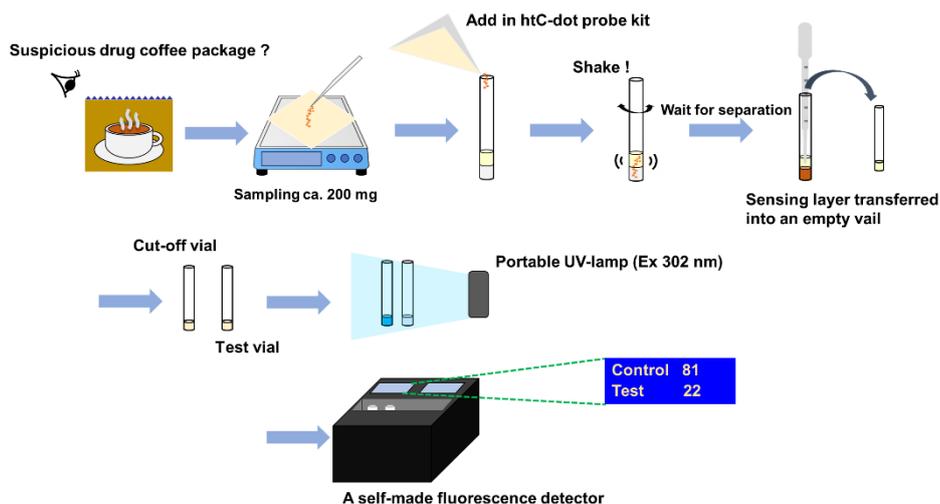


圖6、實案四種代表性檢測結果。樣品1至4的影像包括：(a)樣品照片，(b)拉曼檢測結果，以及(c)和(d)使用便攜式紫外燈和自製螢光檢測器之觀測結果



流程圖1、使用碳點檢測試劑組篩驗真實樣品之操作步驟。

四、心得

2025 年第 50 屆世界化學大會係國際純粹與應用化學聯合會 (IUPAC) 主辦之國際性大型學術會議，每兩年舉辦一次，是全球化學領域規模最大、學術水準最高的國際會議之一。主要成員來自世界各國之化學界研究人員及化學從業人員等，講題領域屬較全面的化學科學，主題多元，可學習之面向亦較廣泛。本次出國除進行論文海報發表外，另觀摩學習各國目前最新之化學領域方向及研究成果，具參考價值，可做為本局鑑識科學處化學鑑識科未來發展相關檢驗技術發展之參考，茲介紹如下：

(1) 「The Existing potential of AI for Drug and Therapeutic Discover」

澳洲拉籌伯大學生物化學與化學系教授 David A. Winkler 談及小分子與材料在實際上應用上幾乎是無限的；若能加以探索，將提供源源不絕的潛在藥物與具有價值特性的材料小分子。這認知推動了自動化與機器人技術的快速進展，使得新分子與材料的合成與性質測量更為快速，並生成龐大的複雜資料庫，涵蓋結構、化學、性質及生物相關資訊。藉由訓練模型預測新分子或材料的合成方法、能從序列準確預測蛋白質結構的 AlphaFold 等工具及初步具備通用人工智慧特徵的 ChatGPT 等，以及逐漸崛起的演化式人工智慧方法，將更多應用於分子與材料的探索及實驗室運作等。

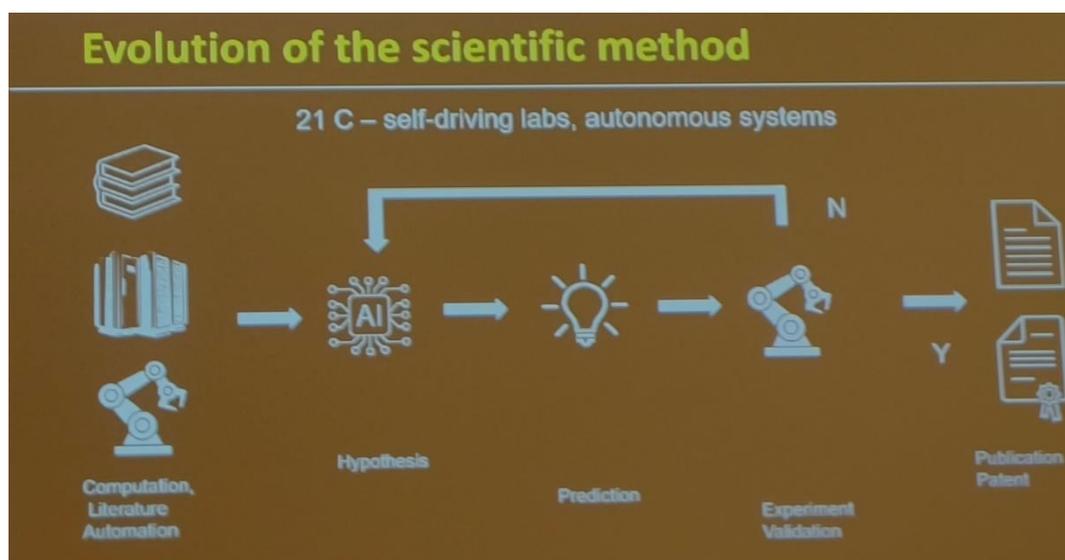


圖 7、David A. Winkler 談及 AI 於未來可能在實驗室扮探索及開發之腳色

(2) 「Raman Spectroscopy: A Powerful Tool in Identification of Drugs for High Workload Laboratory」

拉曼光譜 (Raman Spectroscopy) 已成為一種強大的分析技術，能快速且非破壞性地鑑定藥物。特別是手持式拉曼光譜儀的出現，進一步提升了其應用價值。講者 Harlisa 研究評估手持式拉曼光譜在毒品案件中檢測非法藥物的正確度。取樣 50 件不同類型的毒品樣本，已先利用氣相層析質譜檢測後，再以手持式拉曼光譜重新分析。研究結果顯示，粉末檢體正確度 21%(5/24)、晶體檢體正確度 83%(15/18)，液體 (0/4)、植物(0/2)及藥錠(0/2)則無法辨識。手持式拉曼光譜雖然能比傳統質譜分析更快地檢測毒品，然而，在分析低純度粉末、液體、植物及藥錠等樣本時，因光譜訊號複雜、峰值重疊，增加解析困難。

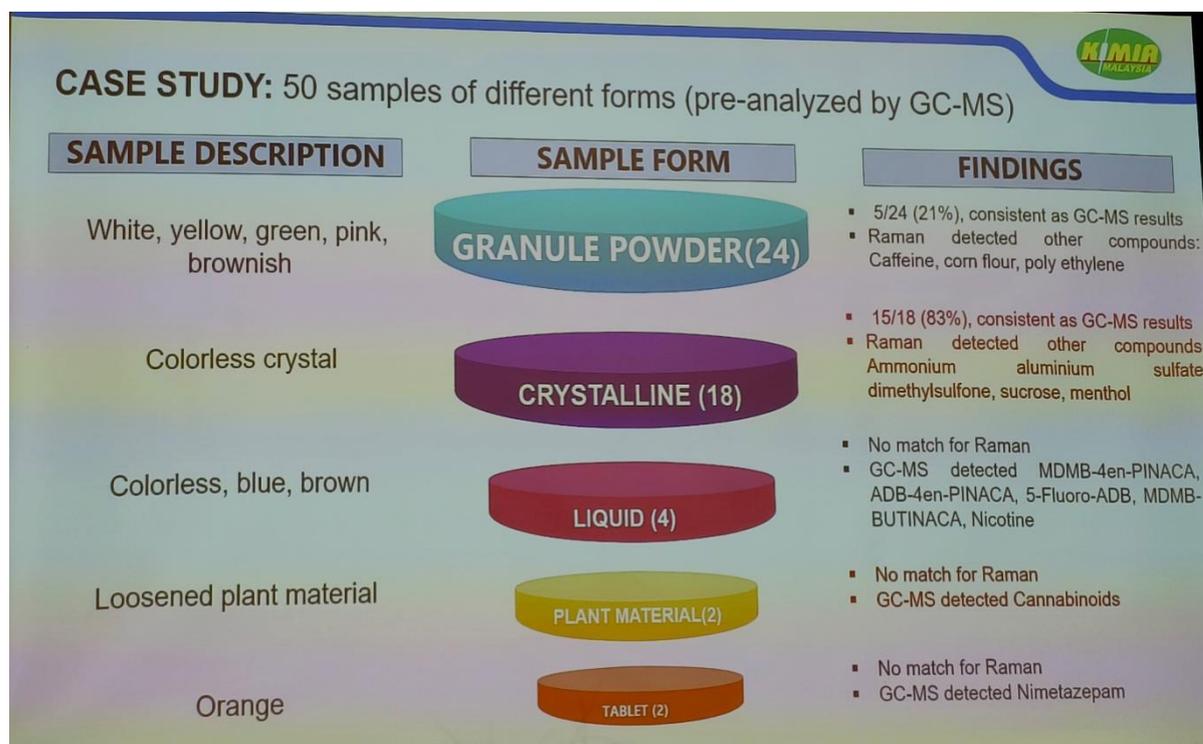


圖 8、講者 Harlisa 提供各類型樣品之正確度。

(3) 「Enhancing Forensic Analysis: The Role of NIR (Near-Infrared) Technology in Illicit Drug Analysis in Narcotics Division, Kimia Malaysia」

近紅外光譜 (Near-Infrared, NIR) 已成為一種強大、非破壞性且快速的分析技術，可用於非法藥物的檢測與特徵分析。講者 Saravana Jayaram 介紹一款手持式 NIR 光譜儀，操作範圍為 780–2500 nm，可透過物質獨特的振動泛頻與組合帶來鑑別化合物。該款攜帶式光譜儀，體積小輕便，可搭配手機使用，能於查緝現場在無需複雜樣品前處理的情況下提供分子資訊，更能提供藥物純度、區分相似物質，以及檢測摻雜物或稀釋劑等優勢，是目前手提式拉曼光譜儀無法具有的特點。

NIR DEVICE-THE HARDWARE

THE HARDWARE

NIRLight

- + **Wireless, compact, rugged and ergonomic**
Designed for use in the field as well as in the laboratory.
- + **IP65 and IP67 rated**
Made for wet and dusty environments.
- + **Destruction-free analysis**
Little or no sample preparation is needed. No special training required.
- + **No maintenance**
No maintenance is required. The glass and lamp are replaceable if broken.
- + **Long battery life**
USB charging and 10 hours of continuous use.
- + **Bluetooth and USB**
Simple and fast connectivity to tablet or PC.



NIR DEVICE-THE SOFTWARE

THE SOFTWARE

What can be Measured

- + **Identify and quantify more than 250 substances**
Scan results are shown on mobile app within seconds.
- + **Analyze substances in various forms**
Powders (e.g. Cocaine), pills (e.g. MDMA), crystals (e.g. Methamphetamine) or plant-based material (e.g. Cannabis).
- + **Identify cutting agents and precursors**
Analyze up to 3 substances in a mixture.

The result in the NIRLAB app shows:

1. The measured spectrum of questioned substance
2. Identification of the substance
3. Quantification of the substance
4. Cutting agent (if applicable)
5. Confidence level



圖 8、講者 Saravana Jayaram 介紹手持式 NIR 光譜儀。

(4) 「DNA Extraction from Skeletal Human Remains Using Magnetic Bead-Based Extraction and Organic Extraction」

從骨骼遺骸中萃取核酸(DNA extraction)對於法醫案例至關重要，特別是在涉及降解生物證據的情況下。講者 Ru;Mahzan Md Taba 研究有機萃取法（苯酚-氯仿法）與磁珠法萃取(EZ1 與 EZ2 DNA Investigator 試劑盒)，並透過 EZ2 Connect Fx 全自動儀器進行操作。經檢測多種類型的骨骼，包括股骨、岩骨（顛骨錐體部）、胸骨、牙齒及肋骨，並在不同萃取時間下進行比較，結果顯示：

- (1) 有機萃取法的 DNA 產量較高
- (2) 兩種方法所取得的 DNA 品質相當
- (3) 使用 EZ2 Connect Fx protocol 磁珠法萃取 2 小時，即可產生最佳且可靠的實驗結果。
- (4) EZ2 Connect Fx 具全自動儀器能大幅提升 DNA 案件鑑驗效能。

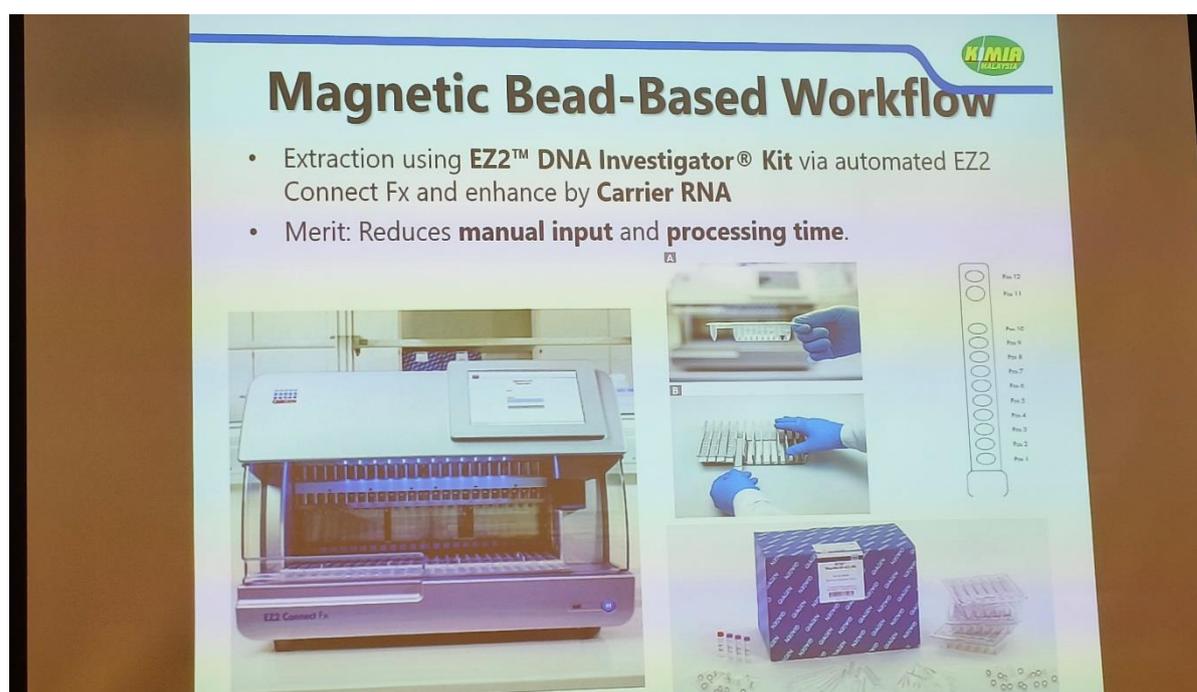


圖 9、講者 Ru;Mahzan Md Taba 提供 EZ2 DNA Investigator kit 及 EZ2 Connect Fx 機台。

(5) 「Transforming Synthetic Chemistry With An Integrated Hardware-Software Ai Chemist System」

自動化、數據科學與人工智慧 (AI) 的快速發展，正在重塑合成化學的面貌，透過解決效率、成功率與安全性等傳統挑戰來推動進步。廣州國家實驗室廖廣標教授於本次報告介紹一套整合式的硬體－軟體 AI 系統，目標係執行自動化合成規劃、實驗設計、執行、數據分析與模型建構。透過開發模組化、標準化的高通量實驗平台(THE)，用於快速數據收集與實驗最佳化。結合 AI 化學語言模型 SynAsk，優化反應路徑、條件並預測產率。HTE 與 AI 驅動模型的結合，提升了數據收集效率並標準化反應條件。該系統已成功發現並最佳化多項關鍵化學反應。

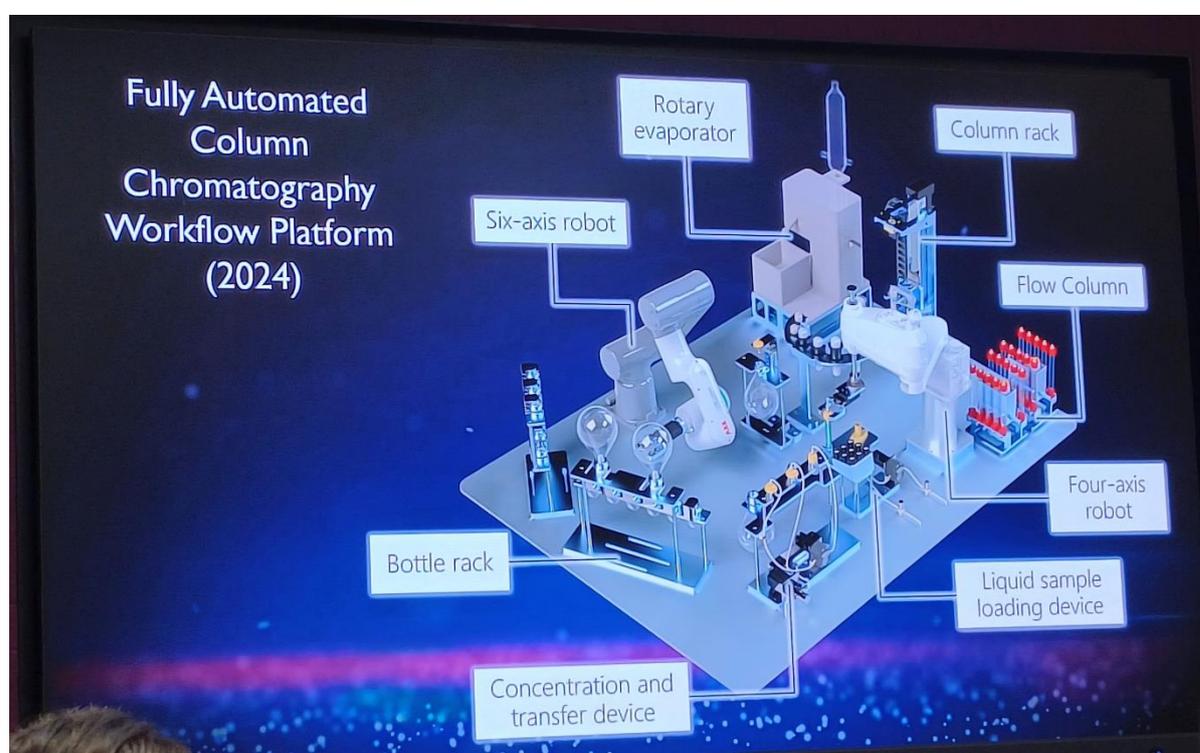


圖 10、講者廖廣標開發的標準化的高通量實驗平台。

五、建議事項

- 一、本局濫用藥物實驗室目前配置有氣相層析質譜儀、氣相串聯層析質譜儀、液相層析串聯質譜儀、液相層析飛行時間質譜儀、液相層析高解析度軌道阱質譜儀、氣相層析同位素比值質譜儀、元素分析同位素比值質譜儀及核磁共振儀等精密設備，其儀器水準不遜於國際先進毒藥品實驗室，可充分支援同仁投入最新檢驗技術之應用與研發。另觀察當前研究趨勢，人工智慧與自動化設備已成為提升實驗室效能與研究能量之重要方向。
- 二、人工智能發展快速，導入施政及業務也是趨勢之一。本局去(113)年底接收本局嘉義縣調查站查獲疑似偽藥案件，經實驗室鑑驗所得之質譜數據，再輔以人工智能 ChatGPT 分析，經確認數據為新型壯陽藥物 KD-027。相關鑑驗數據經整理後撰寫成研究論文，已投稿至國際知名刑事鑑識期刊 *Journal of Forensic Science*，目前正處審查階段。該研究為國內首例以人工智慧輔助藥物化學結構鑑定之案例，可作為本局日後導入人工智慧於檢驗業務之重要參考範例。
- 三、參與國際會議可掌握最新研究成果與檢驗技術。近年來新興毒品及其類緣物層出不窮，從事法醫毒理檢驗之研究人員更須不斷吸收最新技術與趨勢，並提升專業語文與國際交流能力，方能維持專業水準，確保檢驗結果與研究能量與國際接軌。

六、附錄

(會議手冊論文摘要)

Abstract Reference: 1478
Category: Poster
Cluster I – Analytical & Forensic - Sensors, Diagnostics, and
Micro/Nano-Scale Analytical Systems



SCREENING SYNTHETIC CATHINONES MIXED WITH INSTANT COFFEE AND FRUIT JUICE POWDER USING HYDROPHOBIC CARBON DOT PROBES

Yao-Te Yen^{a*}, Huai-Han Chang^b, Yu-Ti Wang^a, Wei-Ting Chen^b, Yuh-Lin Liu^a, San-Chong Chyueh^a,
and Chien-Fu Chen^b

^aDepartment of Forensic Science, Investigation Bureau, Ministry of Justice, Xindian Dist, New Taipei City 231209,
Taiwan

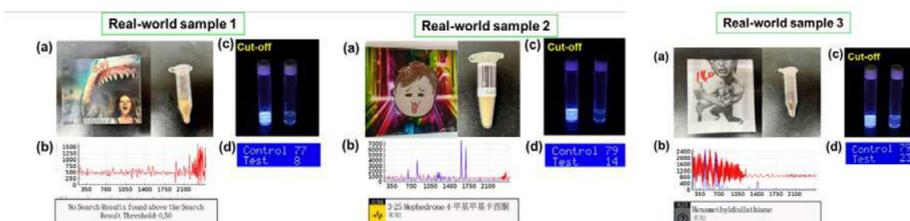
^bInstitute of Applied Mechanics, National Taiwan University, Taipei 10617, Taiwan

*Corresponding author: D05223113@ntu.edu.tw

Abstract

Synthetic cathinones, a category of new psychoactive substance (NPS) with diverse structures and appearances in forms such as powder, tablets, and pills, have caused severe social problems¹⁻². To make them attractive to teenagers, synthetic cathinones may be mixed with instant coffee and fruit juice powders. Difficulties in detecting these drugs in complex matrices complicate seizure of synthetic cathinones. Herein, a novel probe kit comprising hydrophobic tryptophan-carbon dots (htC-dots) with a liquid-liquid extraction procedure was used to detect 4-chloromethcathinone (4-CMC) and other synthetic cathinones mixed into instant coffee and fruit juice powder. Additionally, a self-made fluorescence detector controlled with an Arduino system was developed for the htC-dot probe kits. For 4-CMC, the dynamic ranges and detection limits were assessed as 0.125–0.75 mM and 0.08, respectively, for the microplate reader and as 0.625–5 mM and 0.42 mM, respectively for the self-made fluorescence detector. The sensory mechanism of the probe kit involved photoluminescence (PL) quenching of htC-dots through electron and hot electron transfer under an excitation wavelength of 302 nm. The matrix effects of five brands of instant coffee and fruit juice powder were evaluated, and a cut-off htC-dot solution was prepared to assess htC-dot probe kit accuracy. Finally, 24 real-world samples were tested using the htC-dot probe kits, and the results were confirmed using gas chromatography–mass spectrometry (GC–MS). The results suggested that the htC-dot probe kits have considerable potential for on-site screening of synthetic cathinones mixed into instant coffee and fruit juice powder.

Keywords: hydrophobic carbon dots, synthetic cathinones, fluorescence detectors, instant coffee and fruit juice powders



References

1. Chou, H.; Hsieh, C.; Chaou, C.; Chen, C.; Yen, T.; Liao, S.; et al. *Hum. Exp. Toxicol.*, **2021**, *40*, 1403-1412.
2. Shafi, A.; Berry, A.J.; Sumnall, H.; Wood, D.M.; Tracy, D.K. *Adv. Psychopharmacol.* 2020, *10*, 2045125320967197.



Investigation Bureau
Ministry of Justice, ROC
(Taiwan)

Screening Synthetic Cathinones Mixed with Instant Coffee and Fruit Juice Powder Using Hydrophobic Carbon Dot Probes

Yao-Te Yen^{a,*}, Huai-Han Chang^b, Yu-Ti Wang^a, Wei-Ting Chen^b, Tzu-Ching Lin^a, San-Chong Chyueh^a, and Chien-Fu Chen^{b,*}

^a Department of Forensic Science, Investigation Bureau, Ministry of Justice, Xindian Dist, New Taipei City 231209, ROC ROC (Taiwan)
^b Institute of Applied Mechanics, National Taiwan University, Taipei 10617, ROC (Taiwan)

Email: d05221313@ntu.edu.tw

Introduction

Cathinone and its derivatives have β -ketone phenethylamine structures with similar neurophysiological functions to those of amphetamine, interacting with catecholamine neurotransmitters, particularly dopaminergic (DA) and norepinephrine systems [1-2]. Synthetic cathinones, such as 4-chloromethcathinone (4-CMC), 4-chloroethcathinone (4-CEC), eutylone, butylone, ethylone, and mephedrone, commonly appear as white or yellow powder or crystals in HCl form and are administered through smoking, mucosal delivery, or intramuscular injection. Synthetic cathinones mixed with instant coffee powder, general called as "toxic coffee packets," have been popular in Taiwan since 2017 [3-4]. Mixtures of these drugs with instant fruit juice powder have also emerged. On-site screening of synthetic cathinones at crime scenes is a critical procedure for law enforcement officers.

Aim

In the present study, hydrophobic C-dot (htC-dot) probe kits were developed for detection of synthetic cathinones mixed with instant coffee or fruit powder. In addition, a self-made fluorescence detector was validated and then employed with the C-dot probe kits for automated identification.

Results and discussion

Characterization of htC-dots

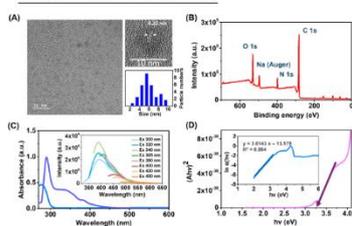


Figure 1. (A) HRTEM images and size distribution and (B) XPS spectrum of htC-dots. (C) Absorption spectra of htC-dots in toluene (0.2 mg mL⁻¹, blue line) and tryptophan (0.1 mM, purple-blue line) in ultrapure water. Inset presents emission spectra of htC-dots (0.05 mg mL⁻¹) in toluene when excited at various wavelengths. (D) Tauc plot of htC-dots in toluene (0.2 mg mL⁻¹). Inset presents Urbach energy plot of htC-dots.

Sensitivity and selectivity

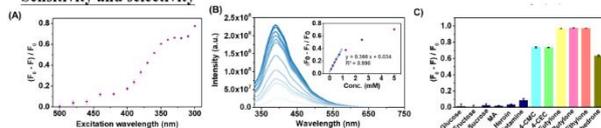


Figure 2. (A) HtC-dot PL quenching efficiencies induced by 4-CMC at excitation wavelengths ranging from 300 to 500 nm. (B) Sensitivity to 4-CMC and (C) selectivity of htC-dot probe kits. All PL measurements were conducted using a microplate reader. Line colors in (B) from blue to pale blue indicate PL intensities as 4-CMC concentrations increased.

Sensing mechanism

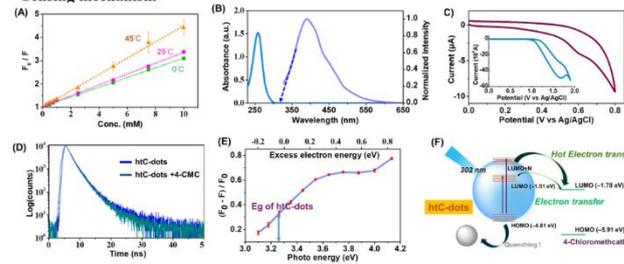


Figure 3. (A) Stern-Volmer plots of htC-dots in solutions containing 4-CMC at 0 °C, 25 °C, and 45 °C, respectively. (B) Absorption spectrum of 4-CMC (left) and PL spectrum of htC-dots (right) when excited at 302 nm. Blue arrow indicates spectral signals predicted by prolonging the original spectrum. (C) Cyclic voltammograms of htC-dots (10 mg mL⁻¹) and 4-CMC (10 mM, inset) in DMSO solution at a sweep rate of 0.1 V s⁻¹ under ambient conditions. (D) Lifetime decay curves of htC-dot solutions with and without 4-CMC (1 mM) at emission and excitation wavelengths of 395 and 313 nm, respectively. (E) HtC-dot PL quenching efficiencies induced by 4-CMC (1 mM) plotted as a function of photo energy (eV). (F) Illustration of electron and hot electron transfer between htC-dots and 4-CMC when excited at a 302-nm wavelength.

Self-made fluorescence detector

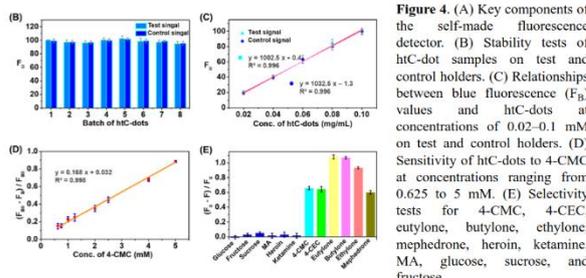
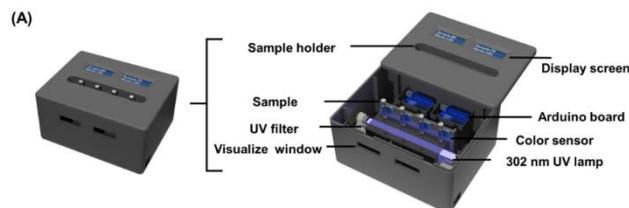


Figure 4. (A) Key components of the self-made fluorescence detector. (B) Stability tests of htC-dot samples on test and control holders. (C) Relationships between blue fluorescence (F_B) values and htC-dots at concentrations of 0.02-0.1 mM on test and control holders. (D) Sensitivity of htC-dots to 4-CMC at concentrations ranging from 0.625 to 5 mM. (E) Selectivity tests for 4-CMC, 4-CEC, eutylone, butylone, ethylone, mephedrone, heroin, ketamine, MA, glucose, sucrose, and fructose.

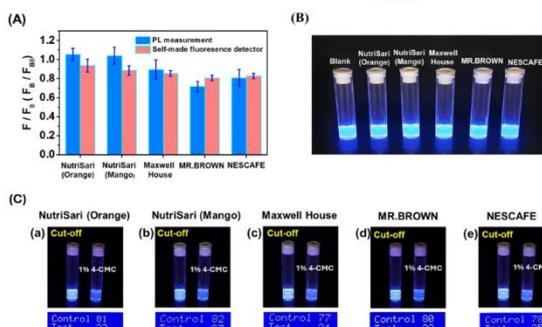


Figure 5. (A) Matrix effect per 200 mg of five instant coffee and fruit juice powder samples detected by a PL spectrometer (blue) and self-made fluorescence detector (pink). (B) PL images of htC-dot probe kits irradiated with a portable UV lamp at an excitation wavelength of 302 nm. (C) PL images of each htC-dot probe kit after screening for 4-CMC-doping in coffee and fruit juice powder (w/w: 1%) and corresponding cut-off htC-dot solutions excited using a portable 302-nm UV lamp. Numbers displayed on the self-made fluorescence detector represent blue fluorescence (F_B) values for each htC-dot probe (test) after screening and the corresponding cut-off htC-dot solution (control).

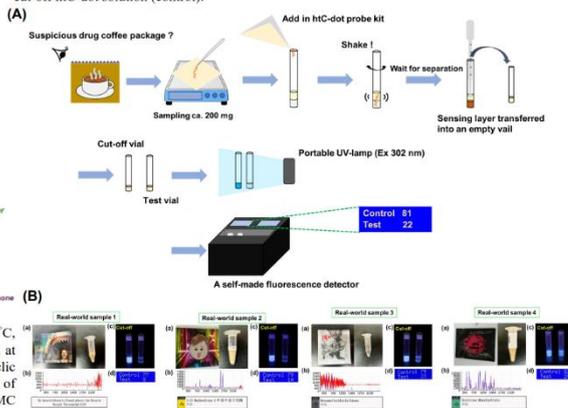


Figure 6. (A) Process for screening real-world samples using htC-dot probe kits and (B) practicality tests of four representative samples and detection results. Images for samples 1-4 include (a) sample photograph, (b) Raman detection results, and (c) and (d) screening results of htC-dot probe (test) and corresponding cut-off htC-dot solution (control) using a portable UV lamp at an excitation wavelength of 302 and the self-made fluorescence detector, respectively.

Funding sources and References

We are grateful to the Ministry of Justice of Taiwan (MOJ) for providing financial support for this study under MOJ contracts 113-1301-10-28-02.

References

- [1] A. Shafi, A.J. Berry, H. Sunnall, D.M. Wood, D.K. Tracy, New psychoactive substances: a review and updates, *Ther. Adv. Psychopharmacol.* 10 (2020) 2045123520967197.
- [2] J.L. Gonçalves, V.L. Alves, J. Aguiar, H.M. Teixeira, J.S. Coimbra, Synthetic cathinones: an evolving class of new psychoactive substances, *Crit. Rev. Toxicol.* 49 (2019) 549-566.
- [3] H. Chou, C. Hsieh, C. Chau, C. Chen, T. Yen, S. Liao, et al., Synthetic cathinone poisoning from ingestion of drug-laced "instant coffee packets" in Taiwan, *Hum. Exp. Toxicol.* 40 (2021) 1403-1412.
- [4] H.-Y. Lin, D.S. Saputri, S. Yanti, G.-L. Cheng, W.-G. Yang, W.-J. Chen, Simultaneous and rapid determination of 20 illegal drugs by LC-MS/MS in instant coffee packaging bag, *Appl. Conf. Proc.* 2685 (2023) 060013.

(會議現場照片)

