

# 畜禽血液和尿液中150种兽药及其他化合物鉴别和确认

液相色谱-高分辨串联质谱法

## Synchronous detection of 150 veterinary drugs and other compounds in blood and urine of livestock and poultry Liquid chromatography high resolution mass spectrometry

孙小杰<sup>1</sup>, 刘冰洁<sup>1</sup>, 李立军<sup>1</sup>, 郭立海<sup>1</sup>

Sun Xiaojie<sup>1</sup>, Liu Bingjie<sup>1</sup>, Li Lijun<sup>1</sup>, Guo Lihai<sup>1</sup>

<sup>1</sup> SCIEX应用支持中心, 上海

**Keywords:** Veterinary; Liquid chromatography-high resolution mass spectrometry; livestock; blood; urine

### 引言

随着兽药残留越来越受到国家和地方的重视, 加强兽药的监控措施是有效防止动物兽药残留超标, 提高动物产品质量, 提升国家竞争力的根本措施。

完善兽药残留的分析方法。兽药残留的检测方法有很多种, 主要的兽药残留检测方法包括免疫分析法、气相色谱法、高效液相色谱法、毛细管电泳法、超临界流体色谱、液质联用技术和生物传感器等, 完善兽药残留的检测方法, 特别是快速筛选和确认的方法。筛选方法常用于养殖场中尿、血等的兽药残留, 筛选出阳性结果, 要求该方法的灵敏度高、分析过程简单、分析速度快等。常用的确认方法有气相色谱串联质谱法、液相色谱串联质谱法、气相色谱串联红外光谱分析法等, 要求确认方法具有准确的定性分析能力和定量分析能力。

本文利用X500R QTOF系统建立了以SWATH®采集技术为基础的针对畜禽血液尿液兽药残留快速筛查验证的方法, 实现了一针进样, 同时对150种兽药进行筛查分析、定量、定性。

### 该方案的特点和优势

#### 1. 目标筛查, 准确快速

方法覆盖面广, 一次进样完成150种兽药类化合物的检测, 一针分析时间为25 min, 提高了分析通量; SCIEX OS软件可同时分析



SCIEX ExionLC™ 系统和 X500R QTOF 系统

数据的一级信息、同位素丰度比、保留时间、二级信息;

#### 2. 数据采集, 完整丰富

本方法采用SWATH采集技术, 在获得定性数据的同时能够获得更好的定量分析数据;

#### 3. 高分辨二级谱库

本方法提供了150种兽药类化合物的标准二级谱库, 方便客户在没有标准品的前提下进行目标物质的筛查工作, 保证结果的准确;

### 1 实验方法

#### 1.1 液相色谱条件

色谱柱: C18 1.7 μm 100 Å 100 × 2.1 mm

流动相：水相（水中含有1 mmol/L甲酸铵+0.1%甲酸），有机相为甲醇（0.1%甲酸），流速为0.25 ml/min梯度洗脱

时间 (min)	A (%)	B (%)
0	95	5
0.5	95	5
3	85	15
10	60	40
18	0	100
22	0	100

## 1.2 质谱条件

扫描模式：可变窗口SWATH采集

扫描范围：m/z 50-1000

气帘气 CUR: 30 psi

碰撞气 CAD: 8

IS电压: 5500 V

辅助加热气 TEM: 500°C

DP电压: 80 V

碰撞能量: 35 ± 15

## 1.3 样品前处理过程

移取2 ml试样到50 ml离心管中，加入3 ml EDTA-McIlvaine缓冲液，混匀，再加入10 ml乙腈，涡旋1 min后加入1份萃取盐包，静置10 min盐析分层，离心10 min，准确量取8 ml上层溶液于15 ml离心管中，氮气吹扫至2 ml，待净化用。

称取含0.5 g除脂分散净化剂于净化管中，加入2 ml水，混匀活化，将净化剂加入到上述2 ml试样中，旋涡1 min，高速离心5 min，取上清液过膜，待液质分析。

注：EDTA-McIlvaine（无水磷酸氢二钠10.9 g，乙二胺四乙酸钠3 g，柠檬酸12.9 g，加水定容至1 L）；萃取盐包为4 g硫酸钠及1 g氯化钠；除脂分散净化剂为QuEChERS dSPE EMR-Lipid（5982-1010）。

## 2 结果与讨论

### 2.1 高分辨谱库的建立

针对150种兽药类化合物（详细信息见表1），配置10 ng/ml的混合标准工作溶液，采用SWATH采集模式，一针进样，得到每个

化合物的保留时间，母离子的精确质量数，二级碎片离子谱图，结合每个化合物的CAS号以及分子式，进行标准谱库的建立，方便后续实际样品测定时进行确证分析。如图1

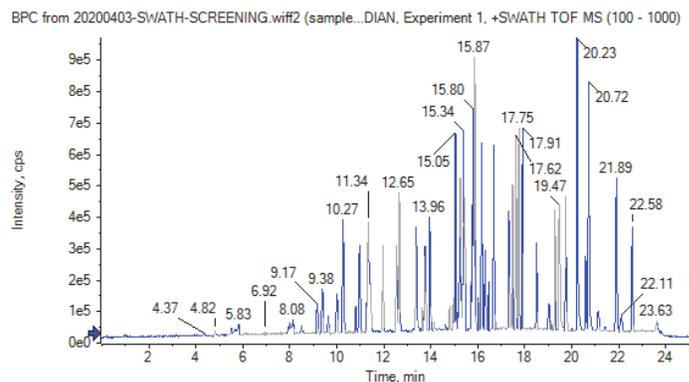


图1. 150种兽药典型色质谱图（进样浓度：10 ng/ml）。

### 2.2. 目标化合物的快速鉴定分析

X500R QTOF系统一针同时采集得到化合物的以及二级质谱图，SCIEX OS软件自动对化合物的质量偏差、同位素分布和二级碎片进行有目标的匹配，根据相关标准要求，色谱峰保留时间偏差在2.5%之内，母离子精确质量与理论质量数的偏差小于等于5ppm，初步判断样品中含有此类化合物，同时对于这类化合物，进一步的通过二级碎片的信息，碎片离子跟谱库中的碎片离子偏差不能超过10ppm，且碎片的相对丰度要一致，从而可以确证这类化合物。X500R QTOF质谱系统提供很好的质量准确度和二级匹配结果，如图2。化合物质量相对误差均在1ppm以内，二级碎片匹配度均大于90，同位素偏差小于5，显示优异的定性筛查性能，大大满足标准的要求。

### 2.3 同时进行二级定量分析

X500R QTOF系统拥有非常快的扫描速度，加上非数据依赖型SWATH采集技术得到全面的信息，因此可以同时一级二级的定量分析研究。可随时采用任意二级碎片离子进行定量分析，能够很好的避免基质干扰的特性，提高这个方法的定量的能力。SCIEX OS软件可以直接从谱库中获得化合物的二级碎片，不需要手动的再次输入，在建立处理方法时，非常的便利快速，同时每个化合物的碎片离子的丰度也能自动计算，并且自动进行合规判定。部分化合物的线性关系如图3，SWATH数据库导入定量流程如图4，离子丰度比自动合规判定如图5。

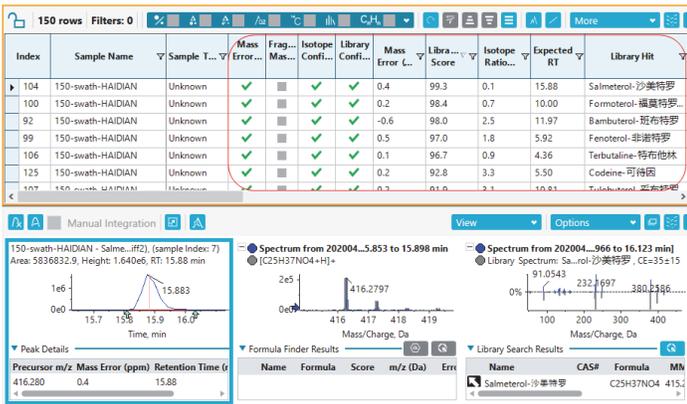


图2. 目标筛查化合物处理结果, 包括一级质量偏差, 同位素分布, 库匹配信息。

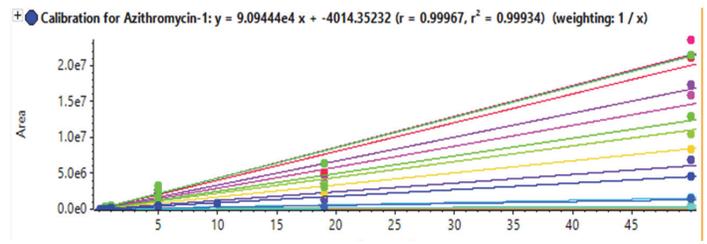


图3. 部分化合物的线性关系 (浓度0.5 ng/ml-50 ng/ml)。

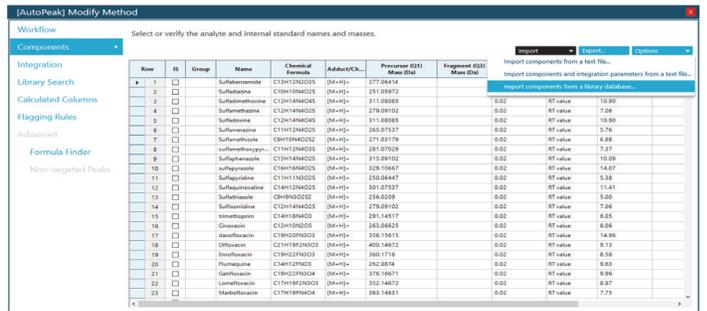


图4. 数据库导入进行一级二级定量分析流程。

### 3 小结

本文建立了一种基于SWATH采集技术的150种兽药类化合物的快速筛查方法, 该方法可以一针进样同时完成已知物有目标的筛查以及高选择的一级二级的定量分析研究。

本方法基于国标<sup>[1]</sup>, 进行优化, 每针采集时间为25 min, 数据处理简单直观, 大大的提高了工作效率, 同时SWATH采集技术数据的全面性, 为后续的数据定量, 数据溯源提供了保证。

针对该方案, 能够给客户id提供高质量的150种兽药残留的谱库, 包括每种化合物的基本信息, 色谱保留时间, 一级二级质谱图, 在给客户提供方便的同时, 保证您在没有标准品的同时, 顺利的开展工作, 对目标化合物进行定性以及半定量。

### 4 参考文献

[1] 中华人民共和国标准 农业农村部公告第197号-9-2019



图5. 通过化合物的碎片丰度比自动进行合规判定分析。

表1. 150种化合物详细信息。

化合物中文名	化合物英文名	分子式	CAS号	母离子
苯甲酰磺胺	Sulfabenzamide	C <sub>13</sub> H <sub>12</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub> S	127-71-9	277.0641
磺胺嘧啶	Sulfadiazine	C <sub>10</sub> H <sub>10</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub> S	68-35-9	251.0597
磺胺间二甲氧嘧啶	Sulfadimethoxine	C <sub>12</sub> H <sub>14</sub> N <sub>4</sub> O <sub>4</sub> S	122-11-2	311.0809
磺胺二甲基嘧啶	Sulfamethazine	C <sub>12</sub> H <sub>14</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub> S	57-68-1	279.091
磺胺邻二甲氧嘧啶	Sulfadoxine	C <sub>12</sub> H <sub>14</sub> N <sub>4</sub> O <sub>4</sub> S	2447-57-6	311.0809
磺胺甲基嘧啶	Sulfamerazine	C <sub>11</sub> H <sub>12</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub> S	127-79-7	265.0754
磺胺甲噻二唑	Sulfamethizole	C <sub>9</sub> H <sub>10</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub> S <sub>2</sub>	144-82-1	271.0318
磺胺甲氧哒嗪	sulfamethoxypyridazine	C <sub>11</sub> H <sub>12</sub> N <sub>4</sub> O <sub>3</sub> S	80-35-3	281.0703
磺胺苯吡唑	Sulfaphenazole	C <sub>15</sub> H <sub>14</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub> S	526-08-9	315.091
磺胺吡唑	sulfapyrazole	C <sub>16</sub> H <sub>16</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub> S	852-19-7	329.1069
磺胺吡啶	Sulfapyridine	C <sub>11</sub> H <sub>11</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub> S	144-83-2	250.0645
磺胺喹恶啉	Sulfaquinoxaline	C <sub>14</sub> H <sub>12</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub> S	59-40-5	301.0754
磺胺噻唑	Sulfathiazole	C <sub>9</sub> H <sub>9</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub> S <sub>2</sub>	72-14-0	256.0209
磺胺二甲异嘧啶	Sulfisomidine	C <sub>12</sub> H <sub>14</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub> S	515-64-0	279.091
甲氧苄胺嘧啶	trimethoprim	C <sub>14</sub> H <sub>18</sub> N <sub>4</sub> O <sub>3</sub>	738-70-5	291.1452
西诺沙星	Cinoxacin	C <sub>12</sub> H <sub>10</sub> N <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	28657-80-9	263.0663
达氟沙星（单诺沙星）	danofloxacin	C <sub>19</sub> H <sub>20</sub> FN <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	112398-08-0	358.1562
双氟沙星	Difloxacin	C <sub>21</sub> H <sub>19</sub> F <sub>2</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	98106-17-3	400.1467
恩氟沙星（恩诺沙星）	Enrofloxacin	C <sub>19</sub> H <sub>22</sub> FN <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	93106-60-6	360.1718
氟甲喹	Flumequine	C <sub>14</sub> H <sub>12</sub> FNO <sub>3</sub>	42835-25-6	262.0874
加替沙星	Gatifloxacin	C <sub>19</sub> H <sub>22</sub> FN <sub>3</sub> O <sub>4</sub>	112811-59-3	376.1673
洛美沙星	Lomefloxacin	C <sub>17</sub> H <sub>19</sub> F <sub>2</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	98079-51-7	352.1467
麻保沙星	Marbofloxacin	C <sub>17</sub> H <sub>19</sub> FN <sub>4</sub> O <sub>4</sub>	115550-35-1	363.1463
莫西沙星	Moxifloxacin	C <sub>21</sub> H <sub>24</sub> FN <sub>3</sub> O <sub>4</sub>	151096-09-2	402.1824
萘啶酸	Nalidixic acid	C <sub>12</sub> H <sub>12</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	389-08-2	233.0921
氧氟沙星	ofloxacin	C <sub>18</sub> H <sub>20</sub> FN <sub>3</sub> O <sub>4</sub>	82419-36-1	362.1011
奥比沙星	Orbifloxacin	C <sub>19</sub> H <sub>20</sub> F <sub>3</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	113617-63-3	396.153
恶喹酸	oxolinic acid	C <sub>13</sub> H <sub>11</sub> NO <sub>5</sub>	14698-29-4	262.071
沙拉沙星	Sarafloxacin	C <sub>20</sub> H <sub>17</sub> F <sub>2</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	98105-99-8	386.1311
司帕沙星	Sparfloxacin	C <sub>19</sub> H <sub>22</sub> F <sub>2</sub> N <sub>4</sub> O <sub>3</sub>	110871-86-8	393.1733
妥舒沙星	Tosufloxacin	C <sub>19</sub> H <sub>15</sub> F <sub>3</sub> N <sub>4</sub> O <sub>3</sub>	108138-46-1	404.3426
阿苯达唑（丙硫咪唑）	Albendazole	C <sub>12</sub> H <sub>15</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub> S	54965-21-8	266.0958
阿苯达唑-2-氨基磺	Albendazole-2-aminosulfone	C <sub>10</sub> H <sub>13</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub> S	80983-34-2	240.0801
阿苯达唑亚砷	Albendazole Sulfoxide	C <sub>12</sub> H <sub>15</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub> S	54029-12-8	282.0911
氨基甲苯咪唑	Mebendazole amine	C <sub>14</sub> H <sub>11</sub> N <sub>3</sub> O	52329-60-9	238.0975
噻苯达唑（噻苯咪唑）	Thiabendazole	C <sub>10</sub> H <sub>7</sub> N <sub>3</sub> S	148-79-8	202.0433
二甲硝咪唑（地美硝唑）	Dimetridazole	C <sub>5</sub> H <sub>7</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	551-92-8	142.0611
芬苯达唑（苯硫苯咪唑）	Fenbendazole	C <sub>15</sub> H <sub>13</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub> S	43210-67-9	300.0801
氟苯达唑（氟苯咪唑）	Flubendazole	C <sub>16</sub> H <sub>12</sub> FN <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	31430-15-6	314.0936
羟基异丙硝唑	Hydroxy ipronidazole	C <sub>7</sub> H <sub>11</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	35175-14-5	185.08

表1. 150种化合物详细信息。(续)

化合物中文名	化合物英文名	分子式	CAS号	母离子
异丙硝唑	Iprnidazole	C <sub>7</sub> H <sub>11</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	14885-29-1	170.0924
甲苯咪唑	Mebendazole	C <sub>16</sub> H <sub>13</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	31431-39-7	296.103
噻苯咪唑酯(坎苯达唑)	Cambendazole	C <sub>14</sub> H <sub>14</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub> S	26097-80-3	303.091
5-羟基噻苯咪唑	5-Hydroxythiabendazole	C <sub>10</sub> H <sub>7</sub> N <sub>3</sub> OS	948-71-0	218.0383
左旋咪唑	Levamisole	C <sub>11</sub> H <sub>12</sub> N <sub>2</sub> S	14769-73-4	205.0794
甲硝唑	Metronidazole	C <sub>6</sub> H <sub>9</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	443-48-1	172.0717
奥芬达唑	Oxfendazole	C <sub>15</sub> H <sub>13</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub> S	53716-50-0	316.075
丙氧苯咪唑	Oxibendazole	C <sub>12</sub> H <sub>15</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	20559-55-1	250.1186
罗硝唑(洛硝达唑)	Ronidazole	C <sub>6</sub> H <sub>8</sub> N <sub>4</sub> O <sub>4</sub>	7681-76-7	201.0618
塞克硝唑	Secnidazole	C <sub>7</sub> H <sub>11</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	3366-95-8	186.0885
替硝唑	Tinidazole	C <sub>8</sub> H <sub>13</sub> N <sub>3</sub> O <sub>4</sub> S	19387-91-8	248.07
三氯苯达唑	Triclabendazole	C <sub>14</sub> H <sub>9</sub> Cl <sub>3</sub> N <sub>2</sub> OS	68786-66-3	358.9574
尼日利亚菌素	Nigericin	C <sub>40</sub> H <sub>68</sub> O <sub>11</sub>	28380-24-7	747.4661
甲基盐霉素	Narasin	C <sub>43</sub> H <sub>72</sub> O <sub>11</sub>	55134-13-9	787.4982
克林霉素	Clindamycin	C <sub>18</sub> H <sub>33</sub> ClN <sub>2</sub> O <sub>5</sub> S	18323-44-9	425.1872
多拉菌素	Doramectin	C <sub>50</sub> H <sub>74</sub> O <sub>14</sub>	117704-25-3	921.4963
依普菌素	Eprinomectin	C <sub>50</sub> H <sub>75</sub> NO <sub>14</sub>	123997-26-2	936.509
伊维菌素	Ivermectin	C <sub>48</sub> H <sub>74</sub> O <sub>14</sub>	70288-86-7	897.4963
柱晶白霉素	Sineptina	C <sub>35</sub> H <sub>59</sub> NO <sub>13</sub>	1392-21-8	786.4633
螺旋霉素	Spiramycin	C <sub>43</sub> H <sub>74</sub> N <sub>2</sub> O <sub>14</sub>	8025-81-8	843.5213
替米考星	Tilmicosin	C <sub>46</sub> H <sub>80</sub> N <sub>2</sub> O <sub>13</sub>	108050-54-0	869.5733
泰乐菌素	Tylosin	C <sub>46</sub> H <sub>77</sub> NO <sub>17</sub>	1401-69-0	916.5264
维吉尼霉素M1	Virginiamycin M1	C <sub>28</sub> H <sub>35</sub> N <sub>3</sub> O <sub>7</sub>	21411-53-0	526.2551
倍氯米松	Beclomethasone	C <sub>22</sub> H <sub>29</sub> ClO <sub>5</sub>	4419-39-0	409.1778
倍氯米松双丙酸酯	Beclomethasone dipropionate	C <sub>28</sub> H <sub>37</sub> ClO <sub>7</sub>	9/8/5534	521.2315
倍他米松双丙酸酯	Betamethasone dipropionate	C <sub>28</sub> H <sub>37</sub> FO <sub>7</sub>	5593-20-4	505.2596
倍他米松戊酸酯	Betamethasone valerate	C <sub>27</sub> H <sub>37</sub> FO <sub>6</sub>	2152-44-5	477.2647
醋酸氯地孕酮	Chlormadinone acetate	C <sub>23</sub> H <sub>29</sub> ClO <sub>4</sub>	302-22-7	405.1837
氯倍他索丙酸酯	Clobetasol 17- propionate	C <sub>25</sub> H <sub>32</sub> ClFO <sub>5</sub>	25122-46-7	467.1995
氯倍他松丁酸酯	Clobetasone butyrate	C <sub>26</sub> H <sub>32</sub> ClFO <sub>5</sub>	25122-57-0	479.1995
可的松	Cortisone	C <sub>21</sub> H <sub>28</sub> O <sub>5</sub>	53-06-5	361.201
地夫可特	Deflazacort	C <sub>25</sub> H <sub>31</sub> NO <sub>6</sub>	14484-47-0	442.2224
地塞米松	Dexamethasone	C <sub>22</sub> H <sub>29</sub> FO <sub>5</sub>	50-02-2	393.2072
二氟拉松双醋酸酯	Diflorasone diacetate	C <sub>26</sub> H <sub>32</sub> F <sub>2</sub> O <sub>7</sub>	33564-31-7	495.2189
表睾酮	Epitestosterone	C <sub>19</sub> H <sub>28</sub> O <sub>2</sub>	481-30-1	289.2173
氟氢可的松	Fludrocortisone	C <sub>21</sub> H <sub>29</sub> FO <sub>5</sub>	127-31-1	423.2177
氟米松	Flumethasone	C <sub>22</sub> H <sub>28</sub> F <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	2135-17-3	411.1978
特戊酸氟米松	Flumethasone pivalate	C <sub>27</sub> H <sub>36</sub> F <sub>2</sub> O <sub>6</sub>	2002-29-1	495.2553
氟轻松	Fluocinolonone acetonide	C <sub>24</sub> H <sub>30</sub> F <sub>2</sub> O <sub>6</sub>	67-73-2	453.2083
氟氢缩松	Flurandrenolide	C <sub>24</sub> H <sub>33</sub> FO <sub>6</sub>	1524-88-5	437.2334

表1. 150种化合物详细信息。(续)

化合物中文名	化合物英文名	分子式	CAS号	母离子
氟米龙	Fluorometholone	C <sub>22</sub> H <sub>29</sub> FO <sub>4</sub>	426-13-1	377.2123
氟替卡松丙酸酯	Fluticasone propionate	C <sub>25</sub> H <sub>31</sub> F <sub>3</sub> O <sub>5</sub> S	80474-14-2	501.1917
哈西奈德	Halcinonide	C <sub>24</sub> H <sub>32</sub> ClFO <sub>5</sub>	3093-35-4	455.1995
氢化可的松	Hydrocortisone	C <sub>21</sub> H <sub>30</sub> O <sub>5</sub>	50-23-7	363.2166
甲地孕酮	Megestrol	C <sub>24</sub> H <sub>32</sub> O <sub>4</sub>	3562-63-8	385.2373
醋酸美仑孕酮	Melengestrol Acetate	C <sub>25</sub> H <sub>32</sub> O <sub>4</sub>	2919-66-6	397.2377
甲基泼尼松龙	Methylprednisolone	C <sub>22</sub> H <sub>30</sub> O <sub>5</sub>	83-43-2	375.2166
莫米他松糠酸酯	Mometasone furoate	C <sub>27</sub> H <sub>30</sub> Cl <sub>2</sub> O <sub>6</sub>	83919-23-7	521.1492
泼尼卡酯	Prednicarbate	C <sub>27</sub> H <sub>36</sub> O <sub>8</sub>	73771-04-7	489.2483
睾丸酮	Testosterone	C <sub>19</sub> H <sub>28</sub> O <sub>2</sub>	58-22-0	289.2162
曲安奈德	Triamcinolone acetonide	C <sub>24</sub> H <sub>31</sub> FO <sub>6</sub>	76-25-5	435.2177
班布特罗	Bambuterol	C <sub>18</sub> H <sub>29</sub> N <sub>3</sub> O <sub>5</sub>	81732-65-2	368.218
羟甲基克伦特罗	Hydroxymethyl Clenbuterol	C <sub>12</sub> H <sub>18</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub> Cl <sub>2</sub>	38339-18-3	293.0818
克伦塞罗	Clencyclohexerol	C <sub>14</sub> H <sub>20</sub> Cl <sub>2</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	157877-79-7	319.0975
clenhexerol	Clenhexerol	C <sub>14</sub> H <sub>22</sub> Cl <sub>2</sub> N <sub>2</sub> O	38339-23-0	305.1183
异克伦番特	Clenisopenterol	C <sub>13</sub> H <sub>20</sub> Cl <sub>2</sub> N <sub>2</sub> O	157664-68-1	291.1027
克伦潘特	Clenpenterol	C <sub>13</sub> H <sub>20</sub> Cl <sub>2</sub> N <sub>2</sub> O	38339-21-8	291.1026
克伦普罗	Clenproperol	C <sub>11</sub> H <sub>16</sub> Cl <sub>2</sub> N <sub>2</sub> O	38339-11-6	263.0713
非诺特罗	Fenoterol	C <sub>17</sub> H <sub>21</sub> NO <sub>4</sub>	13392-18-2	304.1543
福莫特罗(洛)	Formoterol	C <sub>19</sub> H <sub>24</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	73573-87-2	345.1809
保泰松乙酸酯	Pirbuterol Acetate	C <sub>12</sub> H <sub>20</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	65652-44-0	241.1546
莱克多巴胺	Ractopamine	C <sub>18</sub> H <sub>23</sub> NO <sub>3</sub>	97825-25-7	302.1751
利托君	Ritodrine	C <sub>17</sub> H <sub>21</sub> NO <sub>3</sub>	26652-09-5	288.1594
沙美特罗	Salmeterol	C <sub>25</sub> H <sub>37</sub> NO <sub>4</sub>	89365-50-4	416.2795
索他洛尔	sotalol	C <sub>12</sub> H <sub>20</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub> S	3930-20-9	273.1267
特布他林	Terbutaline	C <sub>12</sub> H <sub>19</sub> NO <sub>3</sub>	23031-25-6	226.1438
妥布特罗	Tulobuterol	C <sub>12</sub> H <sub>18</sub> ClNO	41570-61-0	228.115
对乙酰氨基酚	4-acetamidophenol	C <sub>8</sub> H <sub>9</sub> NO <sub>2</sub>	103-90-2	152.0706
氯丙嗪	Chlorpromazine	C <sub>17</sub> H <sub>19</sub> ClN <sub>2</sub> S	50-53-3	319.103
氯羟吡啶	Clopidol	C <sub>7</sub> H <sub>7</sub> Cl <sub>2</sub> NO	2971-90-6	191.9978
氨苯砜	Dapsone	C <sub>12</sub> H <sub>12</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub> S	80-08-0	249.0692
卡巴氧	Carbadox	C <sub>11</sub> H <sub>10</sub> N <sub>4</sub> O <sub>4</sub>	7/5/6804	263.0775
氟哌啶醇	Haloperidol	C <sub>21</sub> H <sub>23</sub> ClFNO <sub>2</sub>	52-86-8	376.1474
氮哌醇(阿扎哌醇)	Azaperol	C <sub>19</sub> H <sub>24</sub> FN <sub>3</sub> O	5/9/2804	330.1987
氮哌酮(阿扎哌隆)	Azaperone	C <sub>19</sub> H <sub>22</sub> FN <sub>3</sub> O	1649-18-9	328.182
丙酰丙嗪	Propionylpromazin	C <sub>20</sub> H <sub>24</sub> N <sub>2</sub> OS	3568-24-9	341.1686
甲苯噻嗪	Xylazine	C <sub>12</sub> H <sub>16</sub> N <sub>2</sub> S	7361-61-7	221.1107
卡马西平	Carbamazepine	C <sub>15</sub> H <sub>12</sub> N <sub>2</sub> O	298-46-4	237.1022
苯海拉明	Diphenhydramine	C <sub>17</sub> H <sub>21</sub> NO	58-73-1	256.1696
氟西汀	Fluoxetine	C <sub>17</sub> H <sub>18</sub> F <sub>3</sub> NO	54910-89-3	310.1413

表1. 150种化合物详细信息。(续)

化合物中文名	化合物英文名	分子式	CAS号	母离子
丙咪嗪	Imipramine	C <sub>19</sub> H <sub>24</sub> N <sub>2</sub>	50-49-7	281.2012
舒必利	Sulpiride	C <sub>15</sub> H <sub>23</sub> N <sub>3</sub> O <sub>4</sub> S	15676-16-1	342.1482
唑吡坦	Zolpidem	C <sub>19</sub> H <sub>21</sub> N <sub>3</sub> O	82626-48-0	308.1757
咖啡因	Caffeine	C <sub>8</sub> H <sub>10</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	58-08-2	195.0877
可待因	Codeine	C <sub>18</sub> H <sub>21</sub> NO <sub>3</sub>	76-57-3	300.1594
1,7-二甲基黄嘌呤	1,7-Dimethylxanthine	C <sub>7</sub> H <sub>8</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	611-59-6	181.072
氯普鲁卡因	chloroprocaine	C <sub>13</sub> H <sub>19</sub> ClN <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	133-16-4	271.121
辛可卡因	Cinchocaine	C <sub>20</sub> H <sub>29</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	85-79-0	344.2333
利多卡因	Lidocaine	C <sub>14</sub> H <sub>22</sub> N <sub>2</sub> O	137-58-6	235.1805
普鲁卡因胺	Procainamide	C <sub>13</sub> H <sub>21</sub> N <sub>3</sub> O	51-06-9	236.1757
普鲁卡因	procaine	C <sub>13</sub> H <sub>20</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	59-46-1	237.1598
丁卡因	tetracaine	C <sub>15</sub> H <sub>24</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	94-24-6	265.1911
溴苯那敏	Brompheniramine	C <sub>16</sub> H <sub>19</sub> BrN <sub>2</sub>	86-22-6	319.0804
西替利嗪	Cetirizine	C <sub>21</sub> H <sub>25</sub> ClN <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	83881-51-0	389.1627
氯苯那敏	Chlorpheniramine	C <sub>16</sub> H <sub>19</sub> ClN <sub>2</sub>	132-22-9	275.1313
氟奋乃静	Fluphenazine	C <sub>22</sub> H <sub>26</sub> N <sub>3</sub> OSF <sub>3</sub>	69-23-8	438.1821
羟嗪	Hydroxyzine	C <sub>21</sub> H <sub>27</sub> ClN <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	68-88-2	375.1834
异丙嗪	Promethazine	C <sub>17</sub> H <sub>20</sub> N <sub>2</sub> S	60-87-7	285.142
特非那定	Terfenadine	C <sub>32</sub> H <sub>41</sub> NO <sub>2</sub>	50679-08-8	472.321
联苯苄唑	Bifonazole	C <sub>22</sub> H <sub>18</sub> N <sub>2</sub>	60628-96-8	311.1543
益康唑	Econazole	C <sub>18</sub> H <sub>15</sub> Cl <sub>3</sub> N <sub>2</sub> O	27220-47-9	381.0323
灰黄霉素	Griseofulvin	C <sub>17</sub> H <sub>17</sub> ClO <sub>6</sub>	126-07-8	353.0786
酮康唑	Ketoconazole	C <sub>26</sub> H <sub>28</sub> Cl <sub>2</sub> N <sub>4</sub> O <sub>4</sub>	65277-42-1	531.156
萘替芬	Naftifine	C <sub>21</sub> H <sub>21</sub> N	65472-88-0	288.1747
氟尼辛	Flunixin	C <sub>14</sub> H <sub>11</sub> F <sub>3</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	42461-84-7	297.0845
酮替芬	Ketotifen	C <sub>19</sub> H <sub>19</sub> NOS	34580-13-7	310.126
氯诺昔康	Lornoxicam	C <sub>13</sub> H <sub>10</sub> ClN <sub>3</sub> O <sub>4</sub> S <sub>2</sub>	70374-39-9	371.9874
美利曲辛	Melitracen	C <sub>21</sub> H <sub>25</sub> N	5118-29-6	292.206
奥沙普秦	Oxaprozin	C <sub>18</sub> H <sub>15</sub> NO <sub>3</sub>	21256-18-8	294.1125
安替比林	Antipyrine	C <sub>11</sub> H <sub>12</sub> N <sub>2</sub> O	60-80-0	189.1022

SCIEX临床诊断产品线仅用于体外诊断。仅凭处方销售。这些产品并非在所有国家地区都提供销售。获取有关具体可用信息，请联系当地销售代表或查阅<https://sciex.com.cn/diagnostics>。所有其他产品仅用于研究。不用于临床诊断。本文提及的商标和/或注册商标，也包括相关的标识、标志的所有权，归属于AB Sciex Pte. Ltd. 或在美国和/或某些其他国家地区的各权利所有人。© 2020 DH Tech. Dev. Pte. Ltd.

RUO-MKT-02-12087-ZH-A



#### SCIEX中国

北京分公司  
北京市朝阳区酒仙桥中路24号院  
1号楼5层  
电话: 010-5808-1388  
传真: 010-5808-1390  
全国咨询电话: 800-820-3488, 400-821-3897

上海公司及中国区应用支持中心  
上海市长宁区福泉北路518号  
1座502室  
电话: 021-2419-7200  
传真: 021-2419-7333  
官网: [sciex.com.cn](http://sciex.com.cn)

广州分公司  
广州市天河区珠江西路15号  
珠江城1907室  
电话: 020-8510-0200  
传真: 020-3876-0835  
官方微信: [ABSciex-China](https://www.absciex.com.cn)