

采用ZenoTOF™ 7600系统建立血液和尿液中的803种毒（药）物的筛查定性和定量方法

Establish Qualitative and Quantitative Methods for 803 Poisons in Blood and Urine by ZenoTOF™ 7600 System

郭琳琳, 孙小杰, 刘冰洁, 郭立海

Guo Linlin, Sun Xiaojie, Liu Bingjie, Guo Lihai

SCIEX 中国

英文关键词: Blood and Urine; Zeno™ trap; EAD; Drug; Qualitative and Quantitative

1、前言

在法医毒（药）物分析工作中，由于样品的复杂性、毒（药）物种类的广泛性、分析目标物的不确定性、检验方法的局限性，使得毒（药）物筛查技术一直备受分析工作者的重视^[1]。常见的毒品、农药、鼠药、治疗药物、催眠镇静类药物等，化合物种类多，标准品收集难度较大，检测流程繁琐。传统的三重四极杆方法，依赖于已有标准品建立采集方法，且只能在已有方法的化合物列表中筛查，受到了很大的局限性。高分辨质谱可以实现数百种化合物的同时检测，并且可以根据化合物的一级和二级质谱，结合数据库匹配，进行化合物定性工作，大大提高了筛查工作的效率。血液和尿液是在日常案件中常见检材，选用血液和尿液作为毒（药）物筛查的基质，更有实际应用意义。

本文采用ZenoTOF™ 7600系统建立了快速检测血液和尿液中的803种毒（药）物的方法，采用Zeno™ trap（Zeno阱）采集技术，确定了方法的线性范围、回收率和精密密度。

本实验优势和特点

- **化合物种类多、覆盖全:** 803种毒（药）物，包含常见毒品、麻醉和精神活性药物、治疗药物、生物碱、常见农药、催眠镇静类和常见鼠药；
- **Zeno™ trap采集技术:** 使用Zeno™ trap技术的ZenoTOF™ 7600系

统，显著提高化合物的二级离子响应强度，提高定量下限化合物的二级质谱质量，化合物定性定量更准确；

- **EAD技术:** 采用电子活化解离（EAD）技术，得到比传统碰撞诱导解离（CID）技术得到更加丰富的二级碎片信息，更有利于化合物的结构解析和确证；
- **前处理简便:** 采用蛋白沉淀法，处理血液和尿液样本，操作简单，耗时短；
- **回收率和重现性好:** 三个不同浓度下的多份添加质控样本，分析方法的回收率为65-130%，相对标准偏差为1.1-4.8%。

2、实验部分

2.1 样品前处理

- **血液:** 取100 μl血液样本，加入200 μl蛋白沉淀剂（甲醇:乙腈=1:1），涡旋1 min，冷冻离心10 min，取上清液上机待测。
- **尿液:** 取100 μl尿液样本，加入200 μl蛋白沉淀剂（甲醇:乙腈=1:1），涡旋1 min，冷冻离心10 min，取上清液上机待测。

2.2 液相方法

采用Excel LC AD液相系统，通过色谱柱Luna® Omega, Polar C18, 1.6 μm, 2.1 × 100mm进行分离，正模式流动相A相为水（2mmol/L甲酸铵+0.1%甲酸），B相为甲醇（2mmol/L甲酸铵+0.1%甲酸），负模式流动相A相为水，B相为乙腈。流速为0.3 mL/min，进样量为5 μL。洗脱程序如表1和表2。

表1. 液相梯度设置 (正模式)

Time/min	A/%	B/%
0.00	95	5
0.50	95	5
1.00	70	30
12.00	40	60
19.00	2	98
22.00	2	98
22.10	95	5
25.00	95	5

表2. 液相梯度设置 (负模式)

Time/min	A/%	B/%
0.00	95	5
1.00	95	5
7.00	30	70
10.00	2	98
12.00	2	98
12.10	95	5
15.00	95	5

2.3 质谱方法

采用SCIEX ZenoTOF™ 7600系统, 质谱参数如下所示:

离子源: ESI源正离子/负离子模式

离子源参数:

离子化电压: 5500 V / -4500V 源温度 TEM: 550°C

气帘气 CUR: 30 psi 碰撞气 CAD: 8

雾化气 GS1: 55 psi 辅助气 GS2: 60 psi

TOF MS质核比扫描范围: m/z 80-1000;

803种化合物的离子信息见附表1。

3、结果与讨论

3.1 提取离子流图。

正离子模式下, 768种化合物的提取离子流图, 如图1所示。

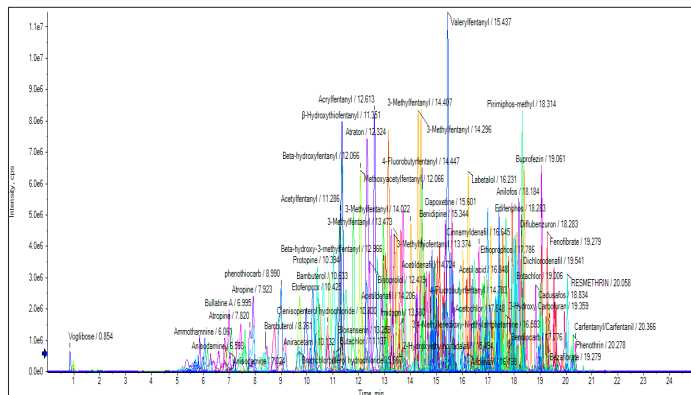


图1. 768种毒(药)物的提取离子流图

负离子模式下, 35种化合物的提取离子流图, 如图2所示。

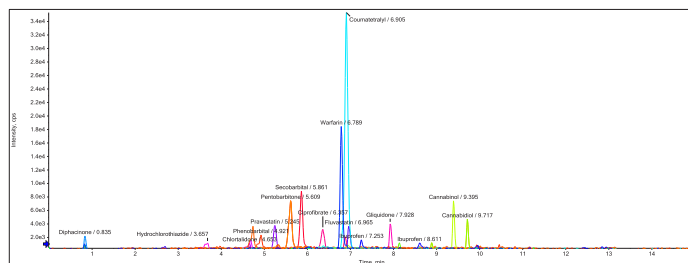


图2. 35种毒(药)物的提取离子流图

3.2 Zeno™ trap ON和Zeno™ trap OFF数据对比

Zeno™ trap具有更高的灵敏度, 在传统的飞行时间质谱中, 由于速度不同, 来自碰撞池的碎片通常会在TOF脉冲中间的传输中丢失。因此, 对于常规的飞行时间质谱, MS/MS的占空比范围大约在5-25%之间, 而离子传输损失, 会降低MS/MS的响应强度。Zeno™ trap通过控制从碰撞池到TOF加速器的离子束, 离子在被快速脉冲推进TOF之前, 在Zeno™ trap中富集, 提供更好的离子传输、更高的占空比, 提高了MS/MS的响应强度。如图3所示, Zeno™ trap OFF时, 茶碱化合物的MS/MS响应强度为518.9 cps, 而Zeno™ trap ON后, 响应强度提高约25倍, 达到12738cps。以26种生物碱类化合物为例, 在Zeno™ trap ON和Zeno™ trap OFF时的响应强度对比, 平均响应强度提高数十倍。采用Zeno™ trap ON采集模式, 还可以保证在定量限附近依然可以得到高质量的二级图谱信息, 如图4所示, 浓度为定量下限的茶碱样品在Zeno™ trap OFF

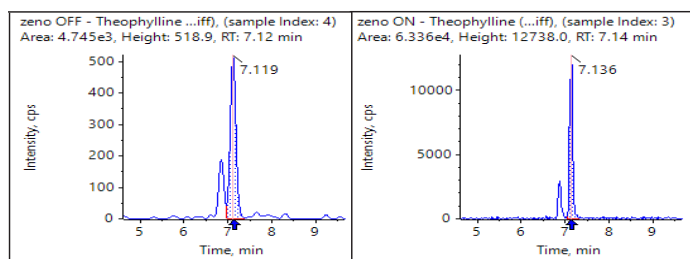


图3. Zeno OFF (左)和Zeno ON (右)的二级离子响应强度对比

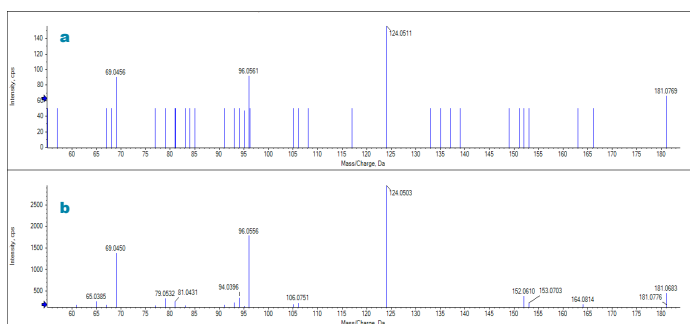


图4. Zeno OFF (a)和Zeno ON (b)的二级图谱对比

时，二级碎片较少，而Zeno™ trap ON时，得到高质量的丰富的二级质谱信息，更有利于化合物二级图谱的分析，提高化合物定性准确度。

3.3 EAD技术与CID技术数据对比

目前，最广泛采用的是CID技术，采用CID技术，是化合物在能量比较大的环境中，获得相应的二级质谱碎片信息，从而进行化合物的结构解析和推断。然而，部分化合物在这种传统的碰撞模式下只能得到单一的碎片，或者碎片响应强度低，因此，对下一步的化合物结构解析和确证带来一定挑战。SCIEX ZenoTOF™ 7600引入了EAD技术，灵活可调的电子活化解离能量，允许在一个系统中使用一系列基于自由电子的碎裂机制，使得化合物在新的碎裂模式下产生不同的二级质谱碎片。与Zeno™ trap结合使用，可以获得全面的碎片覆盖范围，实现准确的化合物结构确认。以4-氟丁酰芬太尼为例，在CID碰撞模式下，只产生了105.0699、188.1436、248.1445几个明显碎片，如图5中的a图所示；而在EAD碰撞模式下，除了这几个碎片外，还生成了164.0900、207.1327、277.1746、298.1880等碎片，如图5中的b图所示，根据这些碎片信

息，进一步增强了化合物定性的准确性，尤其对新精神活性物质的结构解析和确证，提供了强有力的工具。

3.4 803种毒(药)物在血液和尿液中的线性、回收率和重复性

该方法中，803种毒(药)物在血液和尿液基质中的线性关系良好，相关系数R均大于0.995，保证了不同浓度样品的定量准确性。

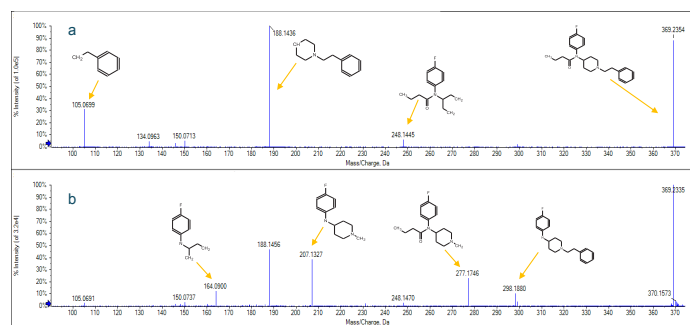


图5. CID模式 (a)和EAD模式 (b)下4-氟丁酰芬太尼的二级质谱图

取空白血液和尿液基质，分别添加三个浓度水平，每水平6个平行样。按照2.1进行前处理，按照2.2和2.3进行仪器测定。结果表明，分析方法的回收率为65-130%，相对标准偏差为1.1-4.8%。说明方法的回收率高，稳定性好，完全可以满足血液和尿液样本中803种毒(药)物检测的需要。

4、总结

本文使用ZenoTOF™ 7600系统，采用Zeno™ trap采集模式，建立了测定血液和尿液中803种毒(药)物的定性定量方法。化合物涵盖了常见毒品、治疗药物、生物碱、常见农药、安眠镇静类和常见鼠药等，化合物种类多，覆盖全；采用Zeno™ trap采集技术，化合物的二级响应强度显著提高，其中，生物碱类化合物平均提高数十倍，尤其在定量下限得到的二级图谱的质量明显提升，提高化合物的定性定量准确度；采用EAD技术，化合物在新的碎裂模式下，得到不同的二级碎片信息，实现准确的化合物定性和碎片结构确证。本实验验证了血液和尿液在三个浓度范围的添加回收率，结果表明，分析方法的回收率为65-130%，相对标准偏差为1.1-4.8%。该方法快速、准确、全面的完成了血液和尿液中的803种毒(药)物的准确定性和定量测定。

参考文献

[1] 石银涛, 王俊伟, 郭璟琦, 等. 血液中18种常见毒物的气相色谱-质谱同时检测[J]. 分析试验室, 2016, 35(4): 443-337.

附表1

803种毒(药)物的化合物信息

中文名	CAS号	英文名	分子式	加合离子形式	精确离子质量	实测离子质量	质量偏差(ppm)	峰面积	保留时间
石山碱甲	102518-79-6	(-)-Huperzine A	C ₁₅ H ₁₈ N ₂ O	[M+H] ⁺	243.1492	243.1489	-1.0	3.70E+04	6.77
喜树碱	7689-03-4	(+)-Camptothecin	C ₂₀ H ₁₆ N ₂ O ₄	[M+H] ⁺	349.1183	349.1181	-0.5	1.10E+04	15.17
(S)-普拉克索	104632-26-0	(S)-Pramipexole	C ₁₀ H ₁₇ N ₃ S	[M+H] ⁺	212.1216	212.1213	-1.3	2.90E+04	1.06
安妥	86-88-4	1-(1-Naphthyl)-2-Thiourea	C ₁₁ H ₁₀ N ₂ S	[M+H] ⁺	203.0638	203.0634	-1.9	1.00E+05	10.99
MCPD	13078-15-4	1-(3-Chlorophenyl)piperazine hydrochloride	C ₁₀ H ₁₃ ClN ₂	[M+H] ⁺	197.0840	197.0838	-1.0	1.30E+05	8.63
甲基睾丸酮	58-18-4	17-Methyltestosterone	C ₂₀ H ₃₀ O ₂	[M+H] ⁺	303.2319	303.2319	0.1	2.50E+06	18.06
BZP	5321-63-1	1-Benzylpiperazine dihydrochloride	C ₁₁ H ₁₆ N ₂	[M+H] ⁺	177.1386	177.1384	-1.2	1.10E+05	4.79
乙卡西酮	18259-37-5	1-Phenyl-2-Ethylaminopropan-1-One	C ₁₁ H ₁₅ NO	[M+H] ⁺	178.1226	178.1225	-1.1	8.40E+04	7.73
2-羟乙基去甲他达拉非	385769-94-8	2-Hydroxyethylnortadalafil	C ₂₃ H ₂₁ N ₃ O ₅	[M+H] ⁺	420.1554	420.1557	0.8	2.50E+05	15.41
2-羟丙基去甲他达拉非	1353020-85-5	2-Hydroxypropylnortadalafil	C ₂₄ H ₂₃ N ₃ O ₅	[M+H] ⁺	434.1711	434.1712	0.4	1.70E+05	16.03
乙酰可待因	5466-90-0	2-Phthalimidoethyl Acetate	C ₂₀ H ₂₃ NO ₄	[M+H] ⁺	342.1700	342.1703	0.8	1.30E+05	8.94
MDEA	82801-81-8	3,4-Methylenedioxy-N-ethylamphetamine	C ₁₇ H ₁₇ NO ₂	[M+H] ⁺	208.1332	208.1331	-0.4	1.20E+05	7.63
3-羟基克百威	16655-82-6	3-Hydroxy Carbofuran	C ₁₂ H ₁₅ NO ₄	[M+H] ⁺	238.1074	238.1074	0.1	3.80E+05	9.84
3-甲氧酰胺	395-28-8	3-Methoxytyramine	C ₉ H ₁₃ NO ₂	[M+H] ⁺	168.1019	168.1014	-3.0	5.80E+04	4.83
3-甲基芬太尼	42045-86-3	3-Methylfentanyl	C ₂₃ H ₃₀ N ₂ O	[M+H] ⁺	351.2431	351.2433	0.7	1.10E+07	13.92
3-甲基硫代芬太尼	86052-04-2	3-Methylthiofentanyl	C ₂₁ H ₂₈ N ₂ OS	[M+H] ⁺	357.1995	357.1997	0.5	1.20E+07	13.25
4-氟丁酰芬太尼	244195-31-1	4-Fluorobutyrfentanyl	C ₂₃ H ₂₉ FN ₂ O	[M+H] ⁺	369.2337	369.2340	1.0	2.00E+07	14.38
4-甲基乙卡西酮	1225617-18-4	4-Methylethcathinone	C ₁₂ H ₁₇ NO	[M+H] ⁺	192.1383	192.1380	-1.4	6.20E+05	8.71
6-单乙酰吗啡	2784-73-8	6-Monoacetylmorphine	C ₁₉ H ₂₁ NO ₄	[M+H] ⁺	328.1543	328.1545	0.5	7.30E+05	6.72
7-氨基氯硝西洋	4959-17-5	7-aminoclonazepam	C ₁₅ H ₁₂ ClN ₃ O	[M+H] ⁺	286.0742	286.0742	0.2	8.20E+05	8.97
7-氨基氟硝西洋	34084-50-9	7-Aminoflunitrazepam	C ₁₆ H ₁₄ FN ₃ O	[M+H] ⁺	284.1194	284.1196	0.9	2.70E+05	10.43
阿卡波糖	56180-94-0	Acarbose	C ₂₅ H ₄₃ NO ₁₈	[M+H] ⁺	646.2553	646.2559	0.9	1.80E+05	0.94
乙酰甲胺磷	30560-19-1	Acephate	C ₇ H ₉ O ₃ PS	[M+H] ⁺	142.9926	142.9925	-0.8	5.20E+05	5.29
N-乙酰对氨基酚	103-90-2	Acetaminophen	C ₈ H ₉ NO ₂	[M+H] ⁺	152.0706	152.0703	-1.7	4.60E+04	5.68
乙酰胺基他达拉非	1446144-71-3	Acetaminotadalafil	C ₂₃ H ₂₀ N ₄ O ₅	[M+H] ⁺	433.1507	433.1511	1.1	1.00E+05	15.26
那非乙酰胺	147676-78-6	Acetil acid	C ₁₈ H ₂₀ N ₄ O ₄	[M+H] ⁺	357.1557	357.1559	0.6	6.70E+05	17.02
红地那非	831217-01-7	Acetildenafil	C ₂₅ H ₃₄ N ₆ O ₃	[M+H] ⁺	467.2765	467.2770	0.9	1.80E+06	14.64
乙草胺	34256-82-1	Acetochlor	C ₁₄ H ₂₀ ClNO ₂	[M+H] ⁺	270.1255	270.1256	0.4	4.70E+05	17.69
乙酰芬太尼	3258-84-2	Acetyl fentanyl	C ₂₁ H ₂₆ N ₂ O	[M+H] ⁺	323.2118	323.2119	0.2	2.50E+07	11.09
乙酰伐地那非	1261351-28-3	Acetyl vardenafil	C ₂₅ H ₃₄ N ₆ O ₃	[M+H] ⁺	467.2765	467.2768	0.6	1.30E+06	14.10
乌头碱	302-27-2	Aconitine	C ₃₄ H ₄₇ NO ₁₁	[M+H] ⁺	646.3222	646.3224	0.4	4.80E+04	15.26
杀螨菊酯	101007-06-1	Acrinathrin	C ₂₆ H ₂₇ FN ₃ O ₅	[M+NH ₄] ⁺	559.1662	559.1667	0.9	6.10E+05	19.80
丙烯酰芬太尼	82003-75-6	Acrylfentanyl	C ₂₂ H ₂₆ N ₂ O	[M+H] ⁺	335.2118	335.2121	0.9	3.40E+07	12.46
艾地那非	496835-35-9	Aildenafil	C ₂₃ H ₃₂ N ₆ O ₄ S	[M+H] ⁺	489.2279	489.2285	1.4	1.70E+06	15.22
甲草胺	15972-60-8	Alachlor	C ₁₃ H ₁₆ ClNO	[M+H] ⁺	238.0993	238.0995	0.6	1.70E+06	17.73
涕灭威	116-06-3	Aldicarb	C ₇ H ₉ NS	[M+H] ⁺	116.0529	116.0524	-4.0	1.20E+05	11.88
涕灭威砜	1646-88-4	Aldicarb-sulfone	C ₇ H ₁₄ N ₂ O ₂ S	[M+NH ₄] ⁺	240.1013	240.1011	-0.8	1.40E+05	6.38
涕灭威亚砜	1646-87-3	Aldicarb-Sulfoxide	C ₇ H ₁₄ N ₂ O ₂ S	[M+H] ⁺	207.0798	207.0793	-2.3	5.70E+04	6.03
阿芬太尼	71195-58-9	Alfentanil	C ₂₁ H ₃₂ N ₆ O ₃	[M+H] ⁺	417.2609	417.2611	0.7	1.70E+07	13.46
烯丙菊酯	584-79-2	Allethrin	C ₁₉ H ₂₆ O ₃	[M+H] ⁺	303.1955	303.1953	-0.5	1.70E+05	19.23
α-羟基阿普唑仑	37115-43-8	Alpha-Hydroxyalprazolam	C ₁₇ H ₁₃ ClN ₄ O	[M+H] ⁺	325.0851	325.0850	-0.3	1.40E+05	15.50
α-羟基咪达唑仑	59468-90-5	Alpha-Hydroxy-Midazolam	C ₁₈ H ₁₃ ClFN ₃ O	[M+H] ⁺	342.0804	342.0805	0.2	8.00E+05	14.26

中文名	CAS号	英文名	分子式	加合离子形式	精确离子质量	实测离子质量	质量偏差 (ppm)	峰面积	保留时间
阿法甲基芬太尼	79704-88-4	Alpha-methylfentanyl	C ₂₃ H ₃₀ N ₂ O	[M+H] ⁺	351.2431	351.2433	0.7	1.00E+07	13.35
阿普唑仑	28981-97-7	Alprazolam	C ₁₇ H ₁₃ ClN ₄	[M+H] ⁺	309.0902	309.0902	0.2	7.30E+05	16.03
金刚烷胺	768-94-5	Amantadine	C ₁₀ H ₁₇ N	[M+H] ⁺	152.1434	152.1431	-1.6	1.20E+05	8.43
氨基比林	58-15-1	Aminophenazone	C ₁₃ H ₁₇ N ₃ O	[M+H] ⁺	232.1444	232.1442	-0.9	6.50E+05	6.43
氨基西地那非	319491-68-4	Aminosildenafil	C ₁₈ H ₂₃ N ₅ O ₄ S	[M+H] ⁺	406.1544	406.1546	0.6	5.50E+05	16.27
氨基他达拉非	385769-84-6	Aminotadalafil	C ₂₁ H ₁₈ N ₄ O ₄	[M+H] ⁺	391.1401	391.1402	0.3	2.00E+05	15.11
阿米替林	50-48-6	Amitriptylin	C ₂₀ H ₂₃ N	[M+H] ⁺	278.1903	278.1904	0.2	1.60E+06	15.51
氟氯地平	88150-42-9	Amlodipine	C ₂₀ H ₂₅ ClN ₂ O ₅	[M+H] ⁺	409.1525	409.1526	0.4	4.00E+05	15.79
氧化苦参碱	16837-52-8	Ammodiamine	C ₁₅ H ₂₄ N ₂ O ₂	[M+H] ⁺	265.1911	265.1908	-0.9	1.50E+05	5.63
异戊巴比妥	57-43-2	Amobarbital	C ₁₁ H ₁₈ N ₂ O ₃	[M-H] ⁻	225.1245	225.1242	-1.0	5.40E+05	5.59
苯丙胺	300-62-9	Amphetamine	C ₉ H ₁₃ N	[M+H] ⁺	136.1121	136.1120	-0.6	9.20E+03	6.49
安乃近	68-89-3	Analgin	C ₁₃ H ₁₇ N ₃ O ₂ S	[M-H] ⁻	310.0867	310.0864	-0.9	1.70E+05	3.25
莎稗磷	64249-01-0	Anilofos	C ₁₃ H ₁₉ ClNO ₂ PS ₂	[M+H] ⁺	368.0305	368.0310	1.2	2.50E+05	18.11
阿尼西坦	72432-10-1	Aniracetam	C ₁₂ H ₁₃ NO ₃	[M+H] ⁺	220.0968	220.0967	-0.6	3.80E+04	11.53
消旋山莨菪碱	17659-49-3	Anisodamine	C ₁₇ H ₂₃ NO ₄	[M+H] ⁺	306.1700	306.1695	-1.4	2.90E+05	6.17
安替比林	60-80-0	Antipyrine	C ₁₁ H ₁₂ N ₂ O	[M+H] ⁺	189.1022	189.1023	0.1	1.60E+06	9.49
烯丙异丙巴比妥	77-02-1	Aprobarbital	C ₁₆ H ₁₄ N ₂ O ₃	[M-H] ⁻	209.0932	209.0930	-0.6	1.60E+05	4.74
阿立哌唑	129722-12-9	Aripiprazole	C ₂₃ H ₂₇ Cl ₂ N ₃ O ₂	[M+H] ⁺	448.1553	448.1554	0.3	7.30E+05	15.45
阿替洛尔	29122-68-7	Atenolol	C ₁₄ H ₂₂ N ₂ O ₃	[M+H] ⁺	267.1703	267.1704	0.1	1.30E+06	5.33
阿托伐他汀	134523-00-5	Atorvastatin	C ₃₃ H ₃₅ FN ₂ O ₅	[M+H] ⁺	559.2603	559.2594	-1.5	2.30E+04	17.65
莠去通	1610-17-9	Atraton	C ₉ H ₁₇ N ₃ O	[M+H] ⁺	212.1506	212.1507	0.7	5.50E+06	12.13
莠去津	102029-43-6	Atrazine	C ₆ H ₁₄ ClN ₅	[M+H] ⁺	216.1011	216.1011	0.1	2.10E+05	15.61
阿托品	51-55-8	Atropine	C ₁₇ H ₂₃ NO ₃	[M+H] ⁺	290.1751	290.1750	-0.3	2.20E+05	7.56
阿伐那非	330784-47-9	Avanafil	C ₂₃ H ₂₆ ClN ₇ O ₃	[M+H] ⁺	484.1858	484.1862	0.7	2.40E+06	14.51
阿维菌素	65195-55-3	Avermectin B1a	C ₄₈ H ₇₂ O ₁₄	[M+NH ₄] ⁺	890.5260	890.5262	0.2	1.90E+04	20.36
甲基谷硫磷	86-50-0	Azinphos-methyl	C ₆ H ₃ NO	[M+H] ⁺	132.0444	132.0441	-1.9	2.60E+04	16.38
阿奇霉素	83905-01-5	Azithromycin	C ₃₈ H ₇₂ N ₂ O ₁₂	[M+2H] ²⁺	375.2615	375.2621	1.6	6.40E+05	12.42
班布特罗	81732-65-2	Bambuterol	C ₁₈ H ₂₉ N ₃ O ₅	[M+H] ⁺	368.2180	368.2182	0.5	3.90E+06	11.50
氯灭杀威	671-04-5	Banol	C ₁₀ H ₁₂ ClNO ₂	[M+H] ⁺	214.0629	214.0629	-0.2	4.40E+05	15.72
巴比妥	57-44-3	Barbital	C ₈ H ₁₂ N ₂ O ₃	[M-H] ⁻	183.0775	183.0776	0.2	3.50E+05	3.76
贝那普利	86541-75-5	Benazepril	C ₂₄ H ₂₈ N ₂ O ₅	[M+H] ⁺	425.2071	425.2073	0.4	1.50E+06	15.72
恶虫威	22781-23-3	Bendiocarb	C ₁₁ H ₁₃ NO ₄	[M+H] ⁺	224.0917	224.0910	-3.3	1.10E+05	13.96
贝尼地平	105979-17-7	Benidipine	C ₂₈ H ₃₁ N ₃ O ₆	[M+H] ⁺	506.2286	506.2293	1.4	5.40E+06	15.37
苄噻磺隆	83055-99-6	Bensulfuron-Methyl	C ₁₆ H ₁₈ N ₄ O ₇ S	[M+H] ⁺	411.0969	411.0972	0.6	5.60E+05	16.62
苯唑卡因	94-09-7	Benzocaine	C ₉ H ₁₁ NO ₂	[M+H] ⁺	166.0863	166.0861	-0.9	4.70E+04	11.50
吡草酮	82692-44-2	Benzofenap	C ₂₂ H ₂₀ Cl ₂ N ₂ O ₃	[M+H] ⁺	431.0924	431.0925	0.4	6.70E+05	18.93
苯甲酰爱康宁	519-09-5	Benzoylcegonine	C ₁₆ H ₁₉ NO ₄	[M+H] ⁺	290.1387	290.1389	0.7	3.60E+05	8.42
苄西地那非	1446089-82-2	Benzylsildenafil	C ₂₈ H ₃₄ N ₆ O ₄ S	[M+H] ⁺	551.2435	551.2441	1.1	1.40E+06	16.59
小檗碱	633-65-8	Berberine	C ₃₀ H ₁₇ NO ₄	[M+H] ⁺	336.1230	336.1231	0.2	1.30E+05	12.96
倍他羟基-3-甲基芬太尼	78995-14-9	Beta-hydroxy-3-methylfentanyl	C ₂₃ H ₃₀ N ₂ O ₂	[M+H] ⁺	367.2380	367.2383	0.7	1.20E+07	13.14
倍他羟基芬太尼	78995-10-5	Beta-hydroxyfentanyl	C ₂₂ H ₂₈ N ₂ O ₂	[M+H] ⁺	353.2224	353.2226	0.7	2.10E+07	11.90
倍他洛尔	63659-18-7	Betaxolol	C ₁₈ H ₂₉ NO ₃	[M+H] ⁺	308.2220	308.2219	-0.2	4.00E+06	13.40
贝凡洛尔	59170-23-9	Bevantolol	C ₂₀ H ₂₇ NO ₄	[M+H] ⁺	346.2013	346.2013	0.2	6.70E+05	13.47
苯扎贝特	41859-67-0	Bezafibrate	C ₁₉ H ₂₀ ClNO ₄	[M+H] ⁺	362.1154	362.1154	0.1	1.10E+06	17.01
联苯菊酯	82657-04-3	Bifenthrin	C ₂₃ H ₂₂ ClF ₃ O ₂	[M+NH ₄] ⁺	440.1599	440.1603	1.0	3.10E+05	20.33
比索洛尔	66722-44-9	Bisoprolol	C ₁₈ H ₃₁ NO ₄	[M+H] ⁺	326.2326	326.2326	0.1	2.30E+05	12.24
布南色林	132810-10-7	Blonanserin	C ₂₃ H ₃₀ FN ₃	[M+H] ⁺	368.2497	368.2500	0.9	3.90E+05	16.94
溴鼠灵	56073-10-0	Brodifacoum	C ₃₁ H ₂₃ O ₃ Br	[M-H] ⁻	521.0758	521.0755	-0.5	6.30E+05	9.32
布苯丙胺	64638-07-9	Brolamfetamine	C ₁₁ H ₁₆ BrNO ₂	[M+H] ⁺	274.0437	274.0434	-1.0	1.50E+05	11.39
溴敌隆	28772-56-7	Bromadiolone	C ₃₀ H ₂₃ BrO ₄	[M-H] ⁻	525.0707	525.0702	-0.9	7.40E+05	7.70
溴西洋	1812-30-2	Bromazepam	C ₁₄ H ₁₀ BrN ₃ O	[M+H] ⁺	316.0080	316.0080	0.1	1.10E+05	14.41
溴布特罗	41937-02-4	Brombuterol	C ₁₂ H ₁₈ Br ₂ N ₂ O	[M+H] ⁺	364.9859	364.9858	-0.1	5.00E+05	9.88
溴氯布特罗	78982-84-0	Bromchlorbuterol hydrochloride	C ₁₂ H ₁₈ BrClN ₂ O	[M+H] ⁺	321.0364	321.0364	0.1	7.20E+05	9.31
溴哌利多	10457-90-6	Bromperidol	C ₂₁ H ₂₃ BrFNO ₂	[M+H] ⁺	420.0969	420.0973	1.0	1.60E+05	14.58
马钱子碱	357-57-3	Brucine	C ₂₃ H ₂₆ N ₂ O ₄	[M+H] ⁺	395.1965	395.1961	-1.0	6.40E+04	8.12
雪山一支蒿甲素	1354-84-3	Bullatine A	C ₂₂ H ₃₃ NO ₂	[M+H] ⁺	344.2584	344.2584	-0.1	1.90E+05	6.57

中文名	CAS号	英文名	分子式	加合离子形式	精确离子质量	实测离子质量	质量偏差 (ppm)	峰面积	保留时间
草乌甲素	107668-79-1	Bulleyaconitine A	C ₃₅ H ₄₉ NO ₉	[M+H] ⁺	628.3480	628.3480	0.0	4.40E+03	16.24
布比卡因	18010-40-7	Bupivacaine hydrochloride	C ₁₈ H ₂₈ N ₂ O	[M+H] ⁺	289.2274	289.2277	0.8	3.20E+05	12.07
丁丙诺菲	52485-79-7	Buprenorphine	C ₂₉ H ₄₁ NO ₄	[M+H] ⁺	468.3108	468.3114	1.2	2.00E+05	14.45
噻嗪酮	69327-76-0	Bupropion	C ₁₆ H ₂₃ N ₃ OS	[M+H] ⁺	306.1635	306.1639	1.5	3.70E+06	19.00
丁草胺	23184-66-9	Butachlor	C ₁₇ H ₂₆ ClNO ₂	[M+H] ⁺	312.1725	312.1727	0.7	2.30E+06	19.25
丁酰芬太尼	1169-70-6	Butyrylfentanyl	C ₂₃ H ₃₀ N ₂ O	[M+H] ⁺	351.2431	351.2434	0.8	2.20E+07	14.34
硫线磷	95465-99-9	Cadusafos	C ₁₀ H ₂₃ O ₂ PS ₂	[M+H] ⁺	271.0950	271.0952	1.0	1.20E+06	18.77
咖啡因	58-08-2	Caffeine	C ₈ H ₁₀ N ₄ O ₂	[M+H] ⁺	195.0877	195.0876	-0.3	3.50E+05	8.19
坎地沙坦	139481-59-7	Candesartan	C ₂₄ H ₃₀ N ₆ O ₃	[M+H] ⁺	441.1670	441.1671	0.3	9.60E+05	16.60
大麻二酚	13956-29-1	Cannabidiol	C ₂₁ H ₃₀ O ₂	[M-H] ⁻	313.2173	313.2170	-0.8	4.10E+04	8.89
大麻酚	521-35-7	Cannabinol	C ₂₁ H ₂₆ O ₂	[M-H] ⁻	309.1860	309.1857	-1.0	3.00E+05	9.39
天然辣椒素	404-86-4	Capsaicin	C ₁₈ H ₂₇ NO ₃	[M+H] ⁺	306.2064	306.2060	-1.3	8.20E+04	17.39
卡巴氧	6804-07-5	Carbadox	C ₁₁ H ₁₀ N ₂ O ₄	[M+H] ⁺	263.0775	263.0775	0.1	5.10E+05	9.27
卡马西平	298-46-4	Carbamazepine	C ₁₅ H ₁₂ N ₂ O	[M+H] ⁺	237.1022	237.1023	0.2	1.60E+06	15.06
甲萘威	63-25-2	Carbaryl	C ₁₂ H ₁₁ NO ₂	[M+H] ⁺	202.0863	202.0855	-3.5	1.90E+06	13.89
多菌灵	10605-21-7	Carbendazim	C ₉ H ₉ N ₃ O ₂	[M+H] ⁺	192.0768	192.0768	0.4	2.20E+06	7.04
卡巴地那非	944241-52-5	Carbodenafil	C ₂₄ H ₃₂ N ₆ O ₃	[M+H] ⁺	453.2609	453.2613	0.9	1.90E+06	13.55
克百威	1563-66-2	Carbofuran	C ₁₂ H ₁₅ NO ₃	[M+H] ⁺	222.1125	222.1126	0.8	2.40E+06	14.08
氯沙坦	124750-92-1	Carboxylosartan	C ₂₂ H ₂₁ ClN ₆ O ₂	[M+H] ⁺	437.1487	437.1491	0.9	7.40E+05	16.66
卡芬太尼	59708-52-0	Carfentanyl	C ₂₄ H ₃₀ N ₂ O ₃	[M+H] ⁺	395.2329	395.2333	0.9	2.70E+07	13.60
卡维地洛	72956-09-3	Carvedilol	C ₂₄ H ₂₆ N ₂ O ₄	[M+H] ⁺	407.1965	407.1969	0.9	3.80E+06	14.66
卡西酮	5265-18-9	Cathinone	C ₉ H ₁₁ NO	[M+H] ⁺	150.0913	150.0910	-2.0	1.10E+04	5.64
利眠宁	58-25-3	Chlordiazepoxide	C ₁₆ H ₁₄ ClN ₃ O	[M+H] ⁺	300.0898	300.0898	-1.5	3.60E+06	14.57
毒虫畏	470-90-6	Chlorfenvinphos	C ₁₂ H ₁₄ Cl ₃ O ₄ P	[M+H] ⁺	358.9768	358.9771	0.9	4.50E+05	18.27
氯地那非	1058653-74-9	Chlorodenafil	C ₁₉ H ₂₁ ClN ₄ O ₃	[M+H] ⁺	389.1375	389.1377	0.4	4.30E+05	17.64
氯鼠酮	3691-35-8	Chlorphacinone	C ₂₃ H ₁₅ ClO ₃	[M-H] ⁻	373.0637	373.0633	-1.0	7.80E+05	6.16
他达拉非甲基氯化物	171489-59-1	Chloropretadafil	C ₂₂ H ₁₉ ClN ₂ O ₅	[M+H] ⁺	427.1055	427.1059	1.0	4.50E+05	16.75
氯苯那敏	113-92-8	Chlorphenamine	C ₁₆ H ₁₉ ClN ₂	[M+H] ⁺	275.1310	275.1309	-0.3	6.40E+05	11.52
氯丙嗪	50-53-3	Chlorpromazine	C ₁₇ H ₁₉ ClN ₂ S	[M+H] ⁺	319.1030	319.1031	0.3	1.00E+06	16.12
泰尔登	113-59-7	Chlorprothixene	C ₁₈ H ₁₈ ClNS	[M+H] ⁺	316.0921	316.0923	0.4	9.90E+05	16.28
毒死蜱	2921-88-2	Chlorpyrifos	C ₉ H ₁₁ Cl ₃ NO ₃ PS	[M+H] ⁺	349.9336	349.9341	1.5	8.20E+05	19.25
甲基毒死蜱	5598-13-0	Chlorpyrifos-Methyl	C ₇ H ₇ Cl ₃ NO ₃ PS	[M+H] ⁺	321.9023	321.9026	1.0	4.20E+05	18.43
氯噻酮	77-36-1	Chlortalidone	C ₁₄ H ₁₁ ClN ₂ O ₄ S	[M-H] ⁻	337.0055	337.0046	-2.7	4.40E+04	4.66
西马特罗	54239-37-1	Cimaterol	C ₁₂ H ₁₇ N ₃ O	[M+H] ⁺	220.1444	220.1443	-0.8	1.70E+05	5.16
塞布特罗	54239-39-3	Cimbuterol	C ₁₃ H ₁₉ N ₃ O	[M+H] ⁺	234.1601	234.1599	-0.6	7.90E+05	5.72
西咪替丁	51481-61-9	Cimetidine	C ₁₀ H ₁₆ N ₆ S	[M+H] ⁺	253.1230	253.1237	2.6	3.90E+04	15.84
辛可尼丁	485-71-2	Cinchonidine	C ₁₉ H ₂₂ N ₂ O	[M+H] ⁺	295.1805	295.1805	-0.1	9.60E+05	9.17
桂地那非	1446089-83-3	Cinnamylidenafil	C ₃₂ H ₃₈ N ₆ O ₃	[M+H] ⁺	555.3078	555.3084	1.0	2.80E+06	16.59
噻磺隆	94593-91-6	Cinosulfuron	C ₁₅ H ₁₉ N ₅ O ₇ S	[M+H] ⁺	414.1078	414.1080	0.4	3.60E+05	14.02
西诺沙星	28657-80-9	Cinoxacin	C ₁₂ H ₁₀ N ₂ O ₅	[M+H] ⁺	263.0663	263.0663	0.1	8.40E+05	11.49
环丙贝特	52214-84-3	Ciprofibrate	C ₁₃ H ₁₄ Cl ₂ O ₃	[M-H] ⁻	287.0247	287.0246	-0.5	8.40E+04	6.18
环丙沙星	85721-33-1	Ciprofloxacin	C ₁₇ H ₁₈ FN ₃ O ₃	[M+H] ⁺	332.1405	332.1403	-0.5	1.70E+05	8.55
甲红霉素	81103-11-9	Clarithromycin	C ₃₈ H ₆₉ NO ₁₃	[M+H] ⁺	748.4842	748.4847	0.7	2.80E+06	16.73
克仑特罗	37148-27-9	Clenbuterol	C ₁₂ H ₁₈ Cl ₂ N ₂ O	[M+H] ⁺	277.0869	277.0869	0.0	8.30E+04	8.83
克仑赛罗	157877-79-7	Clencyclohexerol	C ₁₄ H ₂₀ Cl ₂ N ₂ O ₂	[M+H] ⁺	319.0975	319.0974	-0.2	4.90E+05	6.68
克仑潘特	1435935-00-4	Clenisopenterol hydrochloride	C ₁₃ H ₂₀ Cl ₂ N ₂ O	[M+H] ⁺	291.1026	291.1026	0.2	1.40E+06	10.48
克仑丙罗	38339-11-6	Clenproperol	C ₁₁ H ₁₆ Cl ₂ N ₂ O	[M+H] ⁺	263.0712	263.0711	-0.4	4.40E+05	7.40
甘宝素	38038-17-9	Climbazole	C ₁₅ H ₁₃ ClN ₂ O ₂	[M+H] ⁺	293.1051	293.1052	0.2	3.40E+06	15.53
克林沙星	105956-97-6	Clinafloxacin	C ₁₇ H ₁₇ ClFN ₃ O ₃	[M+H] ⁺	366.1015	366.1017	0.6	4.80E+05	10.41
克林霉素	18323-44-9	Clindamycin	C ₁₈ H ₃₃ ClN ₂ O ₅ S	[M+H] ⁺	425.1872	425.1872	0.2	7.60E+05	13.37
氯巴占	22316-47-8	Clobazam	C ₁₆ H ₁₃ ClN ₂ O ₂	[M+H] ⁺	301.0738	301.0739	0.1	6.10E+05	15.73
氯贝特	637-07-0	Clofibrate	C ₁₃ H ₁₅ ClO ₃	[M+H] ⁺	243.0783	243.0778	-1.6	2.20E+05	18.02
氯丙咪嗪	303-49-1	Clomipramine	C ₁₉ H ₂₃ ClN ₂	[M+H] ⁺	315.1623	315.1604	0.4	3.40E+06	16.26
氯硝西洋	1622-61-3	Clonazepam	C ₁₅ H ₁₀ ClN ₃ O ₃	[M+H] ⁺	316.0484	316.0484	0.2	4.90E+05	15.05
可乐定	4205-90-7	Clonidine	C ₉ H ₉ Cl ₂ N ₃	[M+H] ⁺	230.0246	230.0245	-0.5	6.10E+05	6.64
氯尼他素	3861-76-5	Clonitazene	C ₂₀ H ₂₃ ClN ₄ O ₂	[M+H] ⁺	387.1582	387.1582	0.0	3.00E+05	13.66

中文名	CAS号	英文名	分子式	加合离子形式	精确离子质量	实测离子质量	质量偏差 (ppm)	峰面积	保留时间
氯丙那林	3811-25-4	Clorprenaline	C ₁₁ H ₁₆ ClNO	[M+H] ⁺	214.0993	214.0992	-0.5	1.40E+06	8.33
氯氮平	5786-21-0	Clozapine	C ₁₈ H ₁₉ ClN ₄	[M+H] ⁺	327.1371	327.1371	-0.1	9.40E+05	12.83
可卡因	50-36-2	Cocaine	C ₁₇ H ₂₁ NO ₄	[M+H] ⁺	304.1543	304.1543	0.0	3.50E+04	9.28
可待因	76-57-3	Codeine	C ₁₈ H ₂₁ NO ₃	[M+H] ⁺	300.1594	300.1595	0.4	2.10E+06	5.65
秋水仙碱	64-86-8	Colchicine	C ₂₂ H ₂₅ NO ₆	[M+H] ⁺	400.1755	400.1754	-0.1	1.60E+05	14.26
可的松	53-06-5	Cortisone	C ₂₁ H ₂₈ O ₅	[M+H] ⁺	361.2010	361.2010	0.1	7.80E+05	15.24
可替宁	486-56-6	Cotinine	C ₁₀ H ₁₂ N ₂ O	[M+H] ⁺	177.1022	177.1022	-0.4	2.50E+06	4.79
氯灭鼠灵	81-82-3	Coumachlor	C ₁₉ H ₁₅ ClO ₄	[M-H] ⁻	341.0586	341.0583	-1.0	2.60E+06	7.15
克鼠灵	117-52-2	Coumafuryl	C ₁₇ H ₁₄ O ₅	[M-H] ⁻	297.0769	297.0767	-0.4	1.10E+06	5.63
蝇毒磷	56-72-4	Coumaphos	C ₁₄ H ₁₆ ClO ₅ PS	[M+H] ⁺	363.0217	363.0220	0.6	1.70E+06	18.31
杀鼠醚	5836-29-3	Coumatetralyl	C ₁₉ H ₁₆ O ₃	[M-H] ⁻	291.1027	291.1022	-1.5	3.30E+06	6.73
环戊那非	1173706-34-7	Cyclopentynafil	C ₂₆ H ₃₆ N ₆ O ₅ S	[M+H] ⁺	529.2592	529.2595	0.7	1.40E+06	15.20
氟氯氰菊酯	68359-37-5	Cyfluthrin	C ₂₂ H ₁₈ Cl ₂ FNO ₃	[M+NH ₄] ⁺	451.0986	451.0987	0.3	7.50E+04	19.58
氯氰菊酯	52315-07-8	Cypermethrin	C ₂₂ H ₁₉ Cl ₂ NO ₃	[M+NH ₄] ⁺	433.1080	433.1083	0.6	2.70E+04	19.67
苯氰菊酯	39515-40-7	Cyphenothrin	C ₂₄ H ₂₅ NO ₃	[M+H] ⁺	376.1907	376.1909	0.5	4.40E+05	19.87
赛庚啶	969-33-5	Cyproheptadine hydrochloride	C ₂₁ H ₂₁ N	[M+H] ⁺	288.1747	288.1749	0.9	3.50E+05	15.21
甲基炔酮	797-63-7	D-(-)-norgestrel	C ₂₁ H ₂₆ O ₂	[M+H] ⁺	313.2162	313.2162	0.1	2.30E+06	17.86
杀草隆	42609-52-9	Daimuron	C ₁₇ H ₂₀ N ₂ O	[M+H] ⁺	269.1648	269.1648	-0.1	8.20E+05	17.24
达泊西汀	119356-77-3	Dapoxetine	C ₂₁ H ₂₃ NO	[M+H] ⁺	306.1852	306.1855	0.9	3.40E+06	15.55
脱氢硝苯地平	67035-22-7	Dehydronifedipine	C ₁₇ H ₁₆ N ₂ O ₆	[M+H] ⁺	345.1081	345.1085	1.1	2.90E+05	15.49
四氢大麻酚	1972-08-3	Delta9-Tetrahydrocannabinolthc	C ₂₁ H ₃₀ O ₂	[M-H] ⁻	313.2173	313.2171	-0.5	3.00E+05	9.72
溴氰菊酯	52918-63-5	Deltamethrin	C ₂₂ H ₁₉ Br ₂ NO ₃	[M+NH ₄] ⁺	521.0070	521.0075	0.9	1.80E+05	19.74
去甲基哌嗪基西地那非磺酸	1357931-55-5	Demethylpiperaziny sildenafil sulfonic acid	C ₁₇ H ₂₀ N ₄ O ₅ S	[M+H] ⁺	393.1227	393.1229	0.6	3.40E+05	13.72
地莫西洋	963-39-3	Demoxepam	C ₁₅ H ₁₁ ClN ₂ O ₂	[M+H] ⁺	287.0582	287.0581	-0.4	1.40E+06	14.49
脱哌嗪基硫代西地那非	1353018-10-6	Depiperazinthiosildenafil	C ₁₇ H ₂₀ N ₄ O ₄ S ₂	[M+H] ⁺	409.0999	409.1001	0.6	1.70E+05	16.43
去碳西地那非	1393816-99-3	Descarbonsildenafil	C ₂₁ H ₃₀ N ₆ O ₄ S	[M+H] ⁺	463.2122	463.2126	0.9	1.70E+06	14.44
去乙基卡巴地那非	1027192-92-2	Desethylcarbodenafil	C ₂₂ H ₂₈ N ₆ O ₃	[M+H] ⁺	425.2296	425.2297	0.3	6.80E+05	13.38
去甲基卡巴地那非	147676-79-7	Desmethylcarbodenafil	C ₂₃ H ₃₀ N ₆ O ₃	[M+H] ⁺	439.2452	439.2455	0.5	1.40E+06	13.33
去甲基硫代西地那非	479073-86-4	Desmethylthiosildenafil	C ₂₁ H ₂₈ N ₆ O ₃ S ₂	[M+H] ⁺	477.1737	477.1743	1.3	4.80E+05	16.84
右美托咪定	145108-58-3	Dexmedetomidine hydrochloride	C ₁₃ H ₁₆ N ₂	[M+H] ⁺	201.1386	201.1386	0.0	2.90E+05	12.16
右美沙芬	125-71-3	Dextromethorphan	C ₁₈ H ₂₅ NO	[M+H] ⁺	272.2009	272.2008	-0.2	1.50E+06	13.35
地西洋	439-14-5	Diazepam	C ₁₆ H ₁₃ ClN ₂ O	[M+H] ⁺	285.0789	285.0790	0.2	1.30E+06	16.93
二嗪磷	333-41-5	Diazinon	C ₁₂ H ₂₁ N ₂ O ₃ PS	[M+H] ⁺	305.1083	305.1079	-1.4	7.90E+04	18.25
双氯地那非	1446089-84-4	Dichlorodenafil	C ₁₉ H ₂₀ Cl ₂ N ₄ O ₂	[M+H] ⁺	407.1036	407.1040	1.0	1.30E+06	19.48
敌敌畏	62-73-7	Dichlorvos	C ₄ H ₇ Cl ₂ O ₄ P	[M+H] ⁺	220.9532	220.9532	0.1	6.40E+05	13.47
二氯地西洋	2894-68-0	Diclazepam	C ₁₆ H ₁₂ Cl ₂ N ₂ O	[M+H] ⁺	319.0399	319.0400	0.2	2.30E+06	16.96
双氯芬酸	15307-86-5	Diclofenac acid	C ₁₄ H ₉ Cl ₂ NO	[M+H] ⁺	278.0134	278.0135	0.4	1.80E+04	18.63
禾草灵-甲基	51338-27-3	Diclofop-Methyl	C ₁₆ H ₁₄ Cl ₂ O ₄	[M+H] ⁺	341.0342	341.0340	-0.6	4.70E+04	18.95
双氯磺草胺	145701-21-9	Diclosulam	C ₁₃ H ₁₀ Cl ₂ FN ₃ O ₃ S	[M+H] ⁺	405.9938	405.9940	0.5	1.00E+05	15.43
双去碳西地那非	466684-88-8	Didescarbonsildenafil	C ₂₀ H ₂₈ N ₆ O ₄ S	[M+H] ⁺	449.1966	449.1970	1.0	7.50E+05	14.38
鼠得克	56073-07-5	Difenacoum	C ₃₁ H ₂₄ O ₃	[M-H] ⁻	443.1653	443.1653	0.0	1.40E+06	8.70
地芬尼多	972-02-1	Difenidol	C ₂₃ H ₂₇ NO	[M+H] ⁺	310.2165	310.2166	0.2	1.50E+06	13.44
噻鼠灵	104653-34-1	Difethialone	C ₃₁ H ₂₃ BrO ₂ S	[M-H] ⁻	537.0529	537.0526	-0.6	6.50E+05	9.88
双氟沙星	98106-17-3	Difloxacin	C ₂₁ H ₁₉ F ₂ N ₃ O ₃	[M+H] ⁺	400.1467	400.1469	0.4	5.90E+05	9.41
除虫脲	35367-38-5	Diflubenzuron	C ₁₄ H ₉ ClF ₂ N ₂ O ₂	[M+H] ⁺	311.0393	311.0393	-0.2	1.20E+05	17.64
异羟基洋地黄毒甙元	1672-46-4	Digoxigenin	C ₂₃ H ₃₄ O ₅	[M+H] ⁺	391.2479	391.2481	0.6	4.80E+05	12.12
地高辛	20830-75-5	Digoxin	C ₄₁ H ₆₄ O ₁₄	[M+H] ⁺	781.4369	781.4360	-1.1	1.80E+04	16.61
二氢辣椒素	19408-84-5	Dihydrocapsaicin	C ₁₈ H ₂₉ NO ₃	[M+H] ⁺	308.2220	308.2217	-0.9	7.00E+04	17.90
双氢可待因	125-28-0	Dihydrocodeine	C ₁₈ H ₂₃ NO ₃	[M+H] ⁺	302.1751	302.1752	0.4	8.60E+05	6.10
地尔硫卓	42399-41-7	Diltiazem	C ₂₂ H ₂₆ N ₂ O ₄ S	[M+H] ⁺	415.1686	415.1691	1.2	3.20E+05	14.70
乐果	60-51-5	Dimethoate	C ₅ H ₁₂ NO ₃ PS ₂	[M+H] ⁺	230.0069	230.0070	0.4	3.40E+05	9.55
二甲基红地那非	1290041-88-1	Dimethylacetildenafil	C ₂₅ H ₃₄ N ₆ O ₃	[M+H] ⁺	467.2765	467.2770	1.0	2.50E+06	15.23
双酮红地那非	1609405-33-5	Dioxohongdenafil	C ₂₅ H ₃₀ N ₆ O ₅	[M+H] ⁺	495.2350	495.2357	1.3	1.70E+06	16.20
敌鼠	82-66-6	Diphacinone	C ₂₃ H ₁₆ O ₃	[M-H] ⁻	339.1027	339.1026	-0.2	2.80E+05	5.76
苯海拉明	58-73-1	Diphenhydramine	C ₁₇ H ₂₁ NO	[M+H] ⁺	256.1696	256.1695	-0.5	4.20E+04	13.16
地芬诺酯	915-30-0	Diphenoxylate	C ₃₀ H ₃₂ N ₂ O ₂	[M+H] ⁺	453.2537	453.2534	-0.6	5.00E+03	16.47

中文名	CAS号	英文名	分子式	加合离子形式	精确离子质量	实测离子质量	质量偏差 (ppm)	峰面积	保留时间
双苯拉林	147-20-6	Diphenylpyraline	C ₁₉ H ₂₃ NO	[M+H] ⁺	282.1852	282.1854	0.7	2.40E+05	14.27
二羟丙茶碱	497-18-5	Diprophylline	C ₁₀ H ₁₄ N ₄ O ₄	[M+H] ⁺	255.1088	255.1087	-0.5	2.30E+05	6.52
乙拌磷	298-04-4	Disulfoton	C ₄ H ₈ S	[M+H] ⁺	89.0420	89.0416	-3.9	5.70E+04	18.41
乙拌磷砒	2497-06-5	Disyston sulfone	C ₈ H ₁₉ O ₄ PS ₃	[M+H] ⁺	307.0256	307.0259	1.0	8.00E+05	15.56
二硫代去乙基卡巴地那非	1610830-81-3	Dithio-desethyl carbodenafil	C ₂₂ H ₂₈ N ₆ O ₂	[M+H] ⁺	457.1839	457.1843	0.9	5.90E+05	16.95
二硫代去甲基卡巴地那非	1333233-46-7	Dithio-desmethylcarbodenafil	C ₂₃ H ₃₀ N ₆ O ₂	[M+H] ⁺	471.1995	471.1998	0.5	9.70E+05	17.10
多奈哌齐	120011-70-3	Donepezil Hydrochloride	C ₂₄ H ₂₉ NO ₃	[M+H] ⁺	380.2220	380.2223	0.9	3.20E+05	13.19
多巴胺	554-52-9	Dopamine	C ₈ H ₁₁ NO ₂	[M+H] ⁺	154.0863	154.0857	-3.6	1.80E+04	1.07
沙美特罗	62-31-7	Salmeterol	C ₂₅ H ₃₇ NO ₄	[M+H] ⁺	416.2795	416.2796	0.2	2.40E+06	16.08
多拉菌素	117704-25-3	Doramectin	C ₅₀ H ₇₄ O ₁₄	[M+NH ₄] ⁺	916.5417	916.5413	-0.5	1.40E+04	20.66
度硫平	113-53-1	Dothiepin	C ₁₉ H ₂₁ NS	[M+H] ⁺	296.1468	296.1470	0.8	2.90E+05	14.56
多虑平	1668-19-5	Doxepin	C ₁₉ H ₂₁ NO	[M+H] ⁺	280.1696	280.1694	-0.7	2.50E+05	13.48
粉防己碱	518-34-3	D-Tetrandrine	C ₃₈ H ₄₂ N ₂ O ₆	[M+H] ⁺	623.3116	623.3119	0.5	2.10E+03	11.00
敌瘟磷	17109-49-8	Edifenphos	C ₁₄ H ₁₅ O ₂ PS ₂	[M+H] ⁺	311.0324	311.0327	1.0	2.90E+06	18.22
依诺沙星	74011-58-8	Enoxacin	C ₁₅ H ₁₇ FN ₄ O ₃	[M+H] ⁺	321.1358	321.1357	0.0	2.10E+05	8.05
恩诺沙星	93106-60-6	Enrofloxacin	C ₁₉ H ₂₂ FN ₃ O ₃	[M+H] ⁺	360.1718	360.1718	0.0	5.00E+05	8.78
乙哌立松	56839-43-1	Eperisone hydrochloride	C ₁₇ H ₂₅ NO	[M+H] ⁺	260.2009	260.2008	-0.3	1.60E+05	12.99
麻黄碱	299-42-3	Ephedrine	C ₁₀ H ₁₅ NO	[M+H] ⁺	166.1226	166.1223	-2.3	2.30E+05	6.16
依普利酮	107724-20-9	Eplerenone	C ₂₄ H ₃₀ O ₆	[M+H] ⁺	415.2115	415.2117	0.3	1.40E+06	15.00
依普菌素	123997-26-2	Eprinomectin	C ₅₀ H ₇₅ NO ₁₄	[M+H] ⁺	914.5260	914.5259	-0.1	2.10E+04	20.21
红霉素	59319-72-1	Erythromycin	C ₃₇ H ₆₇ NO ₁₃	[M+H] ⁺	734.4685	734.4691	0.8	2.90E+04	15.77
艾司西酞普兰	128196-01-0	Escitalopram	C ₂₀ H ₂₁ FN ₂ O	[M+H] ⁺	325.1711	325.1714	0.9	3.10E+05	13.05
舒乐安定	29975-16-4	Estazolam	C ₁₆ H ₁₁ ClN ₄	[M+H] ⁺	295.0745	295.0747	0.6	7.30E+05	15.63
乙硫磷	563-12-2	Ethion	C ₈ H ₂₂ O ₄ P ₂ S ₄	[M+H] ⁺	384.9949	384.9954	1.4	7.60E+05	19.17
灭线磷	13194-48-4	Ethionophos	C ₈ H ₁₉ O ₂ P ₂ S ₃	[M+H] ⁺	243.0637	243.0639	0.9	2.20E+06	17.71
乙非他明	457-87-4	Ethylamphetamine	C ₁₁ H ₁₇ N	[M+H] ⁺	164.1434	164.1431	-1.7	4.20E+05	7.75
醚菊酯	80844-07-1	Etofenprox	C ₂₅ H ₂₈ O ₃	[M+NH ₄] ⁺	394.2377	394.2380	1.0	1.80E+06	20.30
依替米贝	163222-33-1	Ezetimibe	C ₂₄ H ₂₁ F ₂ NO ₃	[M-] ⁻	408.1417	408.1415	-0.4	1.30E+05	6.88
伐灭磷	52-85-7	Famphur	C ₁₀ H ₁₆ NO ₅ PS ₂	[M+H] ⁺	326.0280	326.0283	0.9	7.50E+05	15.72
非洛地平	119945-59-4	Felodipine	C ₁₈ H ₁₅ Cl ₂ NO ₄	[M+H] ⁺	384.0764	384.0764	0.0	3.90E+05	18.24
苯线磷	22224-92-6	Fenamiphos	C ₁₃ H ₂₂ NO ₃ PS	[M+H] ⁺	304.1131	304.1133	0.8	3.60E+06	17.86
苯线磷砒	31972-44-8	Fenamiphos sulfone	C ₁₃ H ₂₂ NO ₃ PS ₂	[M+H] ⁺	336.1029	336.1032	0.8	1.70E+05	15.03
苯线磷亚砒	31972-43-7	Fenamiphos-sulfoxide	C ₁₃ H ₂₂ NO ₃ PS	[M+H] ⁺	320.1080	320.1081	0.2	2.30E+06	14.88
芬纳西泮	51753-57-2	Fenazepam	C ₁₅ H ₁₀ BrClN ₂ O	[M+H] ⁺	348.9738	348.9736	-0.5	9.30E+04	16.61
芬氟拉明	458-24-2	Fenfluramine	C ₁₇ H ₁₆ F ₃ N	[M+H] ⁺	232.1308	232.1307	-0.3	9.60E+05	11.42
杀螟硫磷	2255-17-6	Fenitrothion	C ₉ H ₁₂ NO ₅ PS	[M+H] ⁺	278.0247	278.0246	-0.1	8.30E+04	17.15
仲丁威	3766-81-2	Fenobucarb	C ₁₂ H ₁₇ NO ₂	[M+H] ⁺	208.1332	208.1333	0.5	6.70E+05	16.52
非诺贝特	49562-28-9	Fenofibrate	C ₂₀ H ₂₁ ClO ₄	[M+H] ⁺	361.1201	361.1203	0.4	5.30E+06	19.26
非诺特罗	13392-18-2	Fenoterol	C ₁₇ H ₂₁ NO ₄	[M+H] ⁺	304.1543	304.1544	0.1	9.10E+05	5.95
甲氰菊酯	39515-41-8	Fenpropathrin	C ₂₂ H ₂₃ NO ₃	[M+H] ⁺	350.1751	350.1754	0.8	5.80E+05	19.54
芬太尼	437-38-7	Fentanyl	C ₂₂ H ₂₈ N ₂ O	[M+H] ⁺	337.2274	337.2278	0.9	2.20E+07	12.89
倍硫磷	55-38-9	Fenthion	C ₁₀ H ₁₅ O ₃ PS ₂	[M+H] ⁺	279.0273	279.0275	0.7	1.20E+06	17.97
倍硫磷砒	3761-42-0	Fenthion-sulfon	C ₁₀ H ₁₅ O ₃ PS ₃	[M+H] ⁺	311.0171	311.0174	0.9	1.30E+05	15.16
倍硫磷亚砒	3761-41-9	Fenthion-sulfoxide	C ₁₀ H ₁₅ O ₄ PS ₂	[M+H] ⁺	295.0222	295.0225	0.9	2.70E+06	14.92
氰戊菊酯	51630-58-1	Fenvalerate	C ₂₅ H ₂₂ ClNO ₃	[M+NH ₄] ⁺	437.1627	437.1627	0.0	2.10E+05	19.84
啶嘧磺隆	104040-78-0	Flazasulfuron	C ₁₃ H ₁₂ F ₃ N ₅ O ₅ S	[M+H] ⁺	408.0584	408.0586	0.4	2.30E+05	16.40
氟鼠灵	90035-08-8	Flocoumafen	C ₃₃ H ₂₅ O ₄ F ₃	[M-] ⁻	541.1632	541.1631	-0.2	1.40E+06	9.00
氟阿尼酮	1480-19-9	Fluanisone	C ₂₁ H ₂₅ FN ₂ O ₂	[M+H] ⁺	357.1973	357.1975	0.7	2.80E+05	13.38
吡氟禾草隆	69806-50-4	Fluazifop-butyl	C ₁₉ H ₂₀ F ₃ NO ₄	[M+H] ⁺	384.1417	384.1423	1.5	4.00E+06	18.99
吡氟禾草灵	83066-88-0	Fluazifop-P	C ₁₅ H ₁₂ F ₃ NO ₄	[M+H] ⁺	328.0791	328.0794	0.8	3.50E+05	16.89
氟康唑	86386-73-4	Fluconazole	C ₁₃ H ₁₂ F ₂ N ₆ O	[M+H] ⁺	307.1113	307.1115	0.4	6.40E+05	10.02
氟氰戊菊酯	70124-77-5	Flucythrinate	C ₂₆ H ₂₃ F ₃ NO ₄	[M+NH ₄] ⁺	469.1933	469.1938	1.0	5.00E+05	19.39
氟马西尼	78755-81-4	Flumazenil	C ₁₅ H ₁₄ FN ₂ O ₃	[M+H] ⁺	304.1092	304.1094	0.6	1.20E+05	13.50
氟甲喹	42835-25-6	Flumequin	C ₁₄ H ₁₂ FNO ₃	[M+H] ⁺	262.0874	262.0875	0.5	1.10E+06	14.63
氟硝西洋	1622-62-4	Flunitrazepam	C ₁₆ H ₁₂ FN ₃ O ₃	[M+H] ⁺	314.0936	314.0936	0.3	5.70E+05	15.41
氟西汀	54910-89-3	Fluoxetine	C ₁₇ H ₁₈ F ₃ NO	[M+H] ⁺	310.1413	310.1414	0.3	2.50E+05	15.62

中文名	CAS号	英文名	分子式	加合离子形式	精确离子质量	实测离子质量	质量偏差 (ppm)	峰面积	保留时间
氟奋乃静	69-23-8	Fluphenazine	C ₂₂ H ₂₆ F ₃ N ₂ OS	[M+H] ⁺	438.1821	438.1823	0.4	1.60E+06	16.88
氟拉西洋	17617-23-1	Flurazepam	C ₂₁ H ₂₃ ClFN ₃ O	[M+H] ⁺	388.1586	388.1584	-0.6	2.30E+05	13.43
氟西洋杂质 F	2886-65-9	Flurazepam Related Compound F	C ₁₅ H ₁₀ ClFN ₂ O	[M+H] ⁺	289.0539	289.0539	0.1	6.50E+04	16.10
氟伐他汀钠	93957-54-1	Fluvastatin	C ₂₄ H ₂₆ FNO ₄	[M-H] ⁻	410.1773	410.1766	-1.8	4.70E+05	6.89
氟伏沙明	54739-18-3	Fluvoxamine	C ₁₅ H ₂₁ F ₃ N ₂ O ₂	[M+H] ⁺	319.1628	319.1629	0.4	1.40E+05	15.57
地虫硫磷	944-22-9	Fonofos	C ₁₀ H ₁₅ OPS ₂	[M+H] ⁺	247.0375	247.0374	-0.2	3.70E+05	18.08
福莫特罗	73573-87-2	Formoterol	C ₁₉ H ₂₄ N ₂ O ₄	[M+H] ⁺	345.1809	345.1810	0.3	3.70E+05	9.14
福辛普利	88889-14-9	Fosinopril	C ₃₀ H ₄₆ NO ₇ P	[M+Na] ⁺	586.2904	586.2911	1.2	1.50E+04	19.61
噻唑磷	98886-44-3	Fosthiazate	C ₉ H ₁₈ NO ₃ PS ₂	[M+H] ⁺	284.0539	284.0532	-2.2	8.00E+04	15.36
呋喃芬太尼	101345-66-8	Furanyl fentanyl	C ₂₄ H ₂₆ N ₂ O ₂	[M+H] ⁺	375.2067	375.2070	0.9	3.30E+07	13.02
呋塞米	54-31-9	Furosemide	C ₁₂ H ₁₁ ClN ₂ O ₅ S	[M-H] ⁻	329.0004	328.9999	-1.6	1.50E+05	4.65
加巴喷丁	60142-96-3	Gabapentin	C ₉ H ₁₇ NO ₂	[M+H] ⁺	172.1332	172.1330	-1.3	3.50E+04	6.42
吉非罗齐	25812-30-0	Gemfibrozil	C ₁₅ H ₂₂ O ₃	[M-H] ⁻	249.1496	249.1494	-1.0	2.30E+05	7.78
庆地那非	147676-66-2	Gildenafil	C ₁₉ H ₂₂ N ₄ O ₃	[M+H] ⁺	355.1765	355.1768	1.0	2.30E+06	17.48
格列本脲	10238-21-8	Glibenclamide	C ₂₃ H ₂₈ ClN ₃ O ₅ S	[M+H] ⁺	494.1511	494.1516	0.9	2.30E+06	17.72
格列齐特	21187-98-4	Gliclazide	C ₁₅ H ₂₁ N ₃ O ₃ S	[M+H] ⁺	324.1376	324.1378	0.5	5.40E+06	16.45
格列美脲	93479-97-1	Glimepiride	C ₂₄ H ₃₂ N ₄ O ₅ S	[M+H] ⁺	491.2323	491.2325	0.4	2.30E+06	18.12
格列吡嗪	29094-61-9	Glipizide	C ₂₁ H ₂₇ N ₅ O ₄ S	[M+H] ⁺	446.1857	446.1860	0.8	1.70E+06	16.36
格列喹酮	33342-05-1	Gliquidone	C ₂₇ H ₃₃ N ₃ O ₆ S	[M-H] ⁻	526.2017	526.2011	-1.2	2.30E+05	7.92
格鲁米特	77-21-4	Glutethimide	C ₁₃ H ₁₅ NO ₂	[M+H] ⁺	218.1176	218.1176	-1.0	2.60E+05	14.59
氟哌啶醇	52-86-8	Haloperidol	C ₂₁ H ₂₃ ClFNO ₂	[M+H] ⁺	376.1474	376.1474	0.0	1.10E+06	14.30
海洛因	561-27-3	Heroin	C ₂₁ H ₂₃ NO ₅	[M+H] ⁺	370.1649	370.1650	0.1	7.50E+05	9.37
高三尖杉酯碱	26833-87-4	Homoharringtonine	C ₂₆ H ₃₉ NO ₉	[M+H] ⁺	546.2698	546.2700	0.4	1.90E+05	10.29
豪莫西地那非	642928-07-2	Homosildenafil	C ₂₃ H ₃₂ N ₆ O ₄ S	[M+H] ⁺	489.2279	489.2284	1.1	1.80E+06	14.94
氢氯噻嗪	58-93-5	Hydrochlorothiazide	C ₇ H ₈ ClN ₃ O ₄ S ₂	[M-H] ⁻	295.9572	295.9569	-1.1	1.10E+05	3.67
二氢可待因酮	125-29-1	Hydrocodone	C ₁₈ H ₂₁ NO ₃	[M+H] ⁺	300.1594	300.1594	-0.2	5.90E+05	6.57
氢化可的松	50-23-7	Hydrocortisone	C ₂₁ H ₃₀ O ₅	[M+H] ⁺	363.2166	363.2167	0.4	8.30E+05	15.56
羟基红地那非	147676-56-0	Hydroxyacildenafil	C ₂₅ H ₃₄ N ₆ O ₄	[M+H] ⁺	483.2714	483.2720	1.2	1.70E+06	14.37
羟基氯地那非	1391054-00-4	Hydroxychlorildenafil	C ₁₉ H ₂₃ ClN ₄ O ₃	[M+H] ⁺	391.1531	391.1535	0.9	1.10E+06	17.47
羟基豪莫西地那非	139755-85-4	Hydroxyhomosildenafil	C ₂₃ H ₃₂ N ₆ O ₄ S	[M+H] ⁺	505.2228	505.2233	1.0	9.40E+05	15.00
羟基硫代红地那非	1159977-47-5	Hydroxythioacildenafil	C ₂₅ H ₃₄ N ₆ O ₃ S	[M+H] ⁺	499.2486	499.2491	1.0	7.60E+05	16.60
羟基硫代豪莫西地那非	479073-82-0	Hydroxythiohomosildenafil	C ₂₃ H ₃₂ N ₆ O ₄ S ₂	[M+H] ⁺	521.1999	521.2006	1.2	5.70E+05	16.87
羟基硫代伐地那非	912576-30-8	Hydroxythiovardildenafil	C ₂₃ H ₃₂ N ₆ O ₄ S ₂	[M+H] ⁺	521.1999	521.2004	0.9	1.40E+06	16.47
羟基伐地那非	224785-98-2	Hydroxyvardildenafil	C ₂₃ H ₃₂ N ₆ O ₃ S	[M+H] ⁺	505.2228	505.2231	0.7	9.20E+05	14.71
羟嗪	68-88-2	Hydroxyzine	C ₂₁ H ₂₇ ClN ₂ O ₂	[M+H] ⁺	375.1834	375.1834	0.0	9.40E+05	15.41
次乌头碱	6900-87-4	Hypaconitine	C ₃₃ H ₄₅ NO ₁₀	[M+H] ⁺	616.3116	616.3118	0.3	6.50E+04	15.13
布洛芬	15687-27-1	Ibuprofen	C ₁₃ H ₁₈ O ₂	[M-H] ⁻	205.1234	205.1234	0.1	6.50E+04	7.21
咪达普利	89371-37-9	Imidapril	C ₂₀ H ₂₇ N ₃ O ₆	[M+H] ⁺	406.1973	406.1973	0.1	9.60E+05	13.64
脱硫伐地那非	139756-21-1	Imidazosagatriazinone	C ₁₇ H ₂₀ N ₄ O ₂	[M+H] ⁺	313.1659	313.1661	0.6	3.60E+06	18.32
丙咪嗪	113-52-0	Imipramine	C ₁₉ H ₂₄ N ₂	[M+H] ⁺	281.2012	281.2012	-0.1	1.10E+06	15.17
吗啉美辛	53-86-1	Indomethacin	C ₁₉ H ₁₆ ClNO ₄	[M+H] ⁺	358.0841	358.0835	-1.7	1.10E+05	17.95
伊贝沙坦	138402-11-6	Irbesartan	C ₂₅ H ₂₈ N ₆ O	[M+H] ⁺	429.2397	429.2402	1.1	2.20E+05	16.90
氯唑磷	42509-80-8	Isazofos	C ₉ H ₁₇ ClN ₃ O ₃ PS	[M+H] ⁺	314.0490	314.0491	0.4	1.20E+06	17.39
异丁基西地那非	1391053-95-4	Isobutylsildenafil	C ₂₃ H ₃₂ N ₆ O ₄ S	[M+H] ⁺	489.2279	489.2283	0.9	2.30E+06	15.58
异丁酰芬太尼	119618-70-1	Isobutyrfentanyl	C ₂₃ H ₃₀ N ₂ O	[M+H] ⁺	351.2431	351.2432	0.4	2.90E+07	14.21
水胺硫磷	24353-61-5	Isocarbophos	C ₁₁ H ₁₃ O ₄ PS	[M+H] ⁺	273.0345	273.0344	-0.3	1.20E+05	18.06
甲基异柳磷	99675-03-3	Isofenphos-Methyl	C ₈ H ₇ O ₄ PS	[M+H] ⁺	230.9875	230.9878	1.1	2.40E+06	15.95
异丙威	2631-40-5	Isoprocarb	C ₁₁ H ₁₅ NO ₂	[M+H] ⁺	194.1176	194.1174	-1.0	4.30E+05	15.48
稻瘟灵	50512-35-1	Isoprothiolane	C ₁₂ H ₁₈ O ₄ S ₂	[M+H] ⁺	291.0719	291.0722	1.0	9.90E+05	17.17
苯氧丙酰胺	579-56-6	Isoxuprine	C ₁₈ H ₂₃ NO ₃	[M+H] ⁺	302.1751	302.1751	0.2	2.70E+06	10.31
伊维菌素	70288-86-7	Ivermectin	C ₄₈ H ₇₄ O ₁₄	[M+NH ₄] ⁺	892.5417	892.5411	-0.6	2.30E+04	20.95
盐酸药根碱	960383-96-4	Jatromizine	C ₃₀ H ₂₀ NO ₄	[M] ⁺	338.1390	338.1386	-0.2	2.00E+07	12.02
氯胺酮	6740-88-1	Ketamine	C ₁₃ H ₁₆ ClNO	[M+H] ⁺	238.0993	238.0993	-0.3	6.20E+05	8.86
拉贝洛尔	36894-69-6	Labetalol	C ₁₉ H ₂₄ N ₂ O ₃	[M+H] ⁺	329.1860	329.1861	0.5	1.20E+06	11.49
拉西地平	103890-78-4	Lacidipine	C ₂₆ H ₃₃ NO ₆	[M+H] ⁺	456.2381	456.2382	0.4	1.20E+06	19.09
氯氟氰菊酯	91465-08-6	Lambda-Cyhalothrin	C ₂₃ H ₁₉ ClF ₃ NO ₃	[M+NH ₄] ⁺	467.1344	467.1350	1.2	1.10E+06	19.58

中文名	CAS号	英文名	分子式	加合离子形式	精确离子质量	实测离子质量	质量偏差 (ppm)	峰面积	保留时间
拉莫三嗪	84057-84-1	Lamotrigine	C ₉ H ₇ Cl ₂ N ₅	[M+H] ⁺	256.0151	256.0152	0.3	5.70E+05	9.45
乐卡地平	100427-26-7	Lercanidipine	C ₃₆ H ₄₁ N ₃ O ₆	[M+H] ⁺	612.3068	612.3070	0.3	5.30E+06	17.10
左乙拉西坦	102767-28-2	Levetiracetam	C ₈ H ₁₄ N ₂ O ₂	[M+H] ⁺	171.1128	171.1128	0.6	6.00E+04	6.25
左美沙芬	125-70-2	Levomethorphan	C ₁₈ H ₂₅ NO	[M+H] ⁺	272.2009	272.2008	-0.5	4.70E+06	13.29
利多卡因	137-58-6	Lidocaine	C ₁₄ H ₂₂ N ₂ O	[M+H] ⁺	235.1805	235.1801	-1.5	8.30E+05	7.84
林可霉素	154-21-2	Lincomycin	C ₁₈ H ₃₄ N ₂ O ₆ S	[M+H] ⁺	407.2210	407.2211	0.1	9.70E+05	6.70
赖诺普利	76547-98-3	Lisinopril	C ₂₁ H ₃₁ N ₃ O ₅	[M+H] ⁺	406.2337	406.2336	0.0	2.70E+05	7.85
罗地那非碳酸酯	398507-55-6	Lodenafil carbonate	C ₄₇ H ₆₂ N ₁₂ O ₁₁ S ₂	[M+2H] ²⁺	518.2124	518.2134	1.9	2.90E+05	18.45
洛非西定	31036-80-3	Lofexidine	C ₁₁ H ₁₂ Cl ₂ N ₂ O	[M+H] ⁺	259.0399	259.0398	-0.7	3.40E+05	9.65
洛美沙星	98079-51-7	Lomefloxacin	C ₁₇ H ₁₉ F ₂ N ₃ O ₃	[M+H] ⁺	352.1467	352.1468	0.4	1.50E+06	8.74
劳拉西泮	846-49-1	Lorazepam	C ₁₅ H ₁₀ Cl ₂ N ₂ O ₂	[M+H] ⁺	321.0192	321.0191	-0.5	7.30E+04	15.83
氯甲西泮	848-75-9	Lormetazepam	C ₁₆ H ₁₂ Cl ₂ N ₂ O ₂	[M+H] ⁺	335.0349	335.0350	0.5	4.30E+04	16.41
洛沙坦	114798-26-4	Losartan	C ₂₂ H ₂₃ ClN ₆ O	[M+H] ⁺	423.1695	423.1697	0.4	7.00E+05	16.25
洛伐他汀	75330-75-5	Lovastatin	C ₂₄ H ₃₆ O ₅	[M+H] ⁺	405.2636	405.2635	-0.1	2.50E+05	19.16
洛沙平	1977-10-2	Loxapine	C ₁₈ H ₁₈ ClN ₃ O	[M+H] ⁺	328.1211	328.1212	0.1	1.10E+06	14.71
马布特罗	56341-08-3	Mabuterol	C ₁₃ H ₁₈ ClF ₃ N ₂ O	[M+H] ⁺	311.1133	311.1134	0.6	1.80E+06	10.14
马拉硫磷	121-75-5	Malathion	C ₁₀ H ₁₉ O ₆ PS ₂	[M+H] ⁺	331.0433	331.0435	0.6	6.70E+05	17.13
马喷特罗	54238-51-6	Mapenterol	C ₁₄ H ₂₀ ClF ₃ N ₂ O	[M+H] ⁺	325.1289	325.1290	0.4	2.30E+06	11.83
MDA	4764-17-4	MDA	C ₁₀ H ₁₃ NO ₂	[M+H] ⁺	180.1019	180.1020	0.7	2.70E+06	11.51
MDMA	81262-70-6	MDMA	C ₁₁ H ₁₅ NO ₂	[M+H] ⁺	194.1176	194.1172	-1.6	5.50E+05	7.08
美克洛嗪	1104-22-9	Meclizine dihydrochloride	C ₂₅ H ₂₇ ClN ₂	[M+H] ⁺	391.1936	391.1939	0.8	2.50E+05	17.10
醋酸甲羟孕酮	71-58-9	Medroxyprogesterone 17-acetate	C ₂₄ H ₃₄ O ₄	[M+H] ⁺	387.2530	387.2532	0.5	3.10E+06	18.53
甲地孕酮	3562-63-8	Megestrol	C ₂₂ H ₃₀ O ₃	[M+H] ⁺	343.2268	343.2269	0.3	1.40E+06	18.07
褪黑素	73-31-4	Melatonin	C ₁₃ H ₁₆ N ₂ O ₂	[M+H] ⁺	233.1285	233.1284	-0.4	4.20E+05	10.95
敌鼠灵	66-76-2	Melitoxin	C ₁₉ H ₁₂ O ₆	[M-H] ⁻	335.0561	335.0558	-0.8	5.30E+04	5.48
美洛昔康	71125-38-7	Meloxicam	C ₁₄ H ₁₃ N ₃ O ₄ S ₂	[M+H] ⁺	352.0420	352.0422	0.4	5.00E+05	16.44
哌替啶	57-42-1	Meperidine	C ₁₅ H ₂₁ NO ₂	[M+H] ⁺	248.1645	248.1647	0.9	2.80E+05	10.02
4-甲基甲卡西酮	1189805-46-6	Mephedrone	C ₁₁ H ₁₅ NO	[M+H] ⁺	178.1226	178.1226	-0.1	2.00E+06	6.38
眠尔通	57-53-4	Meprobamate	C ₉ H ₁₈ N ₂ O ₄	[M+H] ⁺	219.1339	219.1342	1.0	1.20E+04	12.03
甲喹吩嗪	29216-28-2	Mequitazine	C ₂₀ H ₂₂ N ₂ S	[M+H] ⁺	323.1577	323.1578	0.6	2.90E+05	15.56
甲硫威	2032-65-7	Mercaptodimethur	C ₁₁ H ₁₅ NO ₂ S	[M+H] ⁺	226.0896	226.0898	0.8	4.20E+05	16.68
新乌头碱	2752-64-9	Mesaconitine	C ₃₃ H ₄₅ NO ₁₁	[M+H] ⁺	632.3065	632.3068	0.5	1.20E+05	14.76
奥西那林	586-06-1	Metaproterenol	C ₁₁ H ₁₇ NO ₃	[M+H] ⁺	212.1281	212.1279	-1.2	2.30E+05	4.78
二甲双胍	657-24-9	Metformin	C ₄ H ₁₁ N ₅	[M+H] ⁺	130.1087	130.1084	-2.4	3.40E+05	0.94
美沙酮	76-99-3	Methadone	C ₂₁ H ₂₇ NO	[M+H] ⁺	310.2165	310.2163	-0.7	1.20E+06	15.66
甲胺磷	10265-92-6	Methamidophos	C ₂ H ₈ NO ₂ PS	[M+H] ⁺	142.0086	142.0083	-2.3	1.10E+05	4.60
甲基苯丙胺	33817-09-3	Methamphetamine	C ₁₀ H ₁₅ N	[M+H] ⁺	150.1277	150.1274	-1.9	5.20E+04	6.75
安眠酮	72-44-6	Methaqualone	C ₁₆ H ₁₄ N ₂ O	[M+H] ⁺	251.1179	251.1179	0.1	2.00E+06	15.84
甲卡西酮	5650-44-2	Methcathinone	C ₁₀ H ₁₃ NO	[M+H] ⁺	164.1070	164.1068	-1.0	6.30E+04	5.89
杀扑磷	950-37-8	Methidathion	C ₆ H ₁₁ N ₂ O ₄ PS ₃	[M+H] ⁺	302.9691	302.9694	0.9	2.20E+05	16.18
灭多威	16752-77-5	Methomyl	C ₃ H ₇ NOS	[M+H] ⁺	106.0321	106.0317	-3.8	6.00E+04	7.20
甲氧基乙酰芬太尼	101345-67-9	Methoxyacetylfentanyl	C ₂₂ H ₂₈ N ₂ O ₂	[M+H] ⁺	353.2224	353.2225	0.4	2.00E+06	11.97
3,4-亚甲二氧基甲卡西酮	186028-79-5	Methylone	C ₁₁ H ₁₃ NO ₃	[M+H] ⁺	208.0968	208.0966	-1.1	3.70E+05	6.61
速灭威	1129-41-5	Metolcarb	C ₉ H ₁₁ NO ₂	[M+H] ⁺	166.0863	166.0861	-1.0	2.80E+05	12.00
美托洛尔	37350-58-6	Metoprolol	C ₁₅ H ₂₅ NO ₃	[M+H] ⁺	268.1907	268.1906	-0.5	3.70E+06	9.87
甲磺隆	74223-64-6	Metsulfuron-Methyl	C ₁₄ H ₁₅ N ₃ O ₆ S	[M+H] ⁺	382.0816	382.0816	0.1	2.10E+05	14.74
米安色林	21535-47-7	Mianserin hydrochloride	C ₁₈ H ₂₀ N ₂	[M+H] ⁺	265.1699	265.1701	0.5	3.10E+05	13.12
霉可唑(咪康唑)	22916-47-8	Miconazole	C ₁₈ H ₁₃ Cl ₂ N ₂ O	[M+H] ⁺	414.9933	414.9935	0.6	1.90E+06	17.73
咪达唑仑	59467-64-0	Midazolam	C ₁₈ H ₁₃ ClFN ₃	[M+H] ⁺	326.0855	326.0856	0.3	9.70E+05	13.36
米罗那非	862189-95-5	Mirodenafil	C ₂₆ H ₃₇ N ₃ O ₅ S	[M+H] ⁺	532.2588	532.2595	1.2	2.00E+06	16.44
米氮平	61337-67-5	Mirtazapine	C ₁₇ H ₁₉ N ₃	[M+H] ⁺	266.1652	266.1651	-0.1	1.20E+06	9.61
吗氯贝胺	71320-77-9	Moclobemide	C ₁₃ H ₁₃ ClN ₂ O ₂	[M+H] ⁺	269.1051	269.1051	0.0	1.60E+05	7.68
久效磷	6923-22-4	Monocrotophos	C ₇ H ₁₄ NO ₅ P	[M+H] ⁺	224.0682	224.0677	-2.4	3.50E+05	7.95
吗啡	57-27-2	Morphine	C ₁₇ H ₁₉ NO ₃	[M+H] ⁺	286.1438	286.1438	0.0	2.90E+05	5.23
亚硝地那非	1387577-30-1	Mutaprodrenafil	C ₂₇ H ₃₅ N ₃ O ₅ S ₂	[M+H] ⁺	630.2275	630.2280	0.7	5.80E+03	16.13
纳多洛尔	42200-33-9	Nadolol	C ₁₇ H ₂₇ NO ₄	[M+H] ⁺	310.2013	310.2013	-0.1	9.40E+05	7.33

中文名	CAS号	英文名	分子式	加合离子形式	精确离子质量	实测离子质量	质量偏差 (ppm)	峰面积	保留时间
萘啶酸	389-08-2	Nalidixic acid	C ₁₂ H ₁₂ N ₂ O ₃	[M+H] ⁺	233.0921	233.0920	-0.1	8.70E+05	14.52
纳洛酮	465-65-6	Naloxone	C ₁₉ H ₂₁ NO ₄	[M+H] ⁺	328.1543	328.1546	0.9	4.40E+05	5.24
敌草胺	15299-99-7	Napropamide	C ₁₇ H ₂₁ NO ₂	[M+H] ⁺	272.1645	272.1643	-0.6	1.60E+04	19.04
萘普生	22204-53-1	Naproxen	C ₁₄ H ₁₄ O ₃	[M+H] ⁺	231.1016	231.1014	-0.7	2.50E+05	16.51
那格列奈	105816-04-4	Nateglinide	C ₁₉ H ₂₇ NO ₃	[M+H] ⁺	318.2064	318.2063	-0.4	8.40E+05	18.23
N-叔丁氧羰基-N-去乙基红地那非	1246820-46-1	N-Boc-N-desethyl acetildenafil	C ₂₈ H ₃₈ N ₆ O ₅	[M+H] ⁺	539.2976	539.2981	0.8	5.20E+05	16.97
N-丁基他达拉非	171596-31-9	N-Butyltadalafil	C ₂₅ H ₂₅ N ₃ O ₄	[M+H] ⁺	432.1918	432.1923	1.1	4.30E+05	17.52
N-去乙基红地那非	147676-55-9	N-Desethylacetildenafil	C ₂₃ H ₃₀ N ₆ O ₃	[M+H] ⁺	439.2452	439.2457	1.2	5.50E+05	14.45
N-去乙基-N-甲基伐地那非	224785-87-9	N-Desethyl-N-methylvaridenafil	C ₂₂ H ₂₆ N ₆ O ₄ S	[M+H] ⁺	475.2122	475.2126	0.8	1.20E+06	14.71
N-去乙基伐地那非	448184-46-1	N-Desethylvaridenafil	C ₂₁ H ₂₆ N ₆ O ₄ S	[M+H] ⁺	461.1966	461.1969	0.8	8.60E+05	14.71
去甲基氟西洋	2558-30-7	N-Desmethylflunitrazepam	C ₁₅ H ₁₀ FN ₃ O ₃	[M+H] ⁺	300.0779	300.0781	0.8	2.80E+05	14.62
N-去甲基西地那非	139755-82-1	N-Desmethylsildenafil	C ₂₁ H ₂₈ N ₆ O ₄ S	[M+H] ⁺	461.1966	461.1970	0.9	6.90E+05	14.91
萘福泮	13669-70-0	Nefopam	C ₁₇ H ₁₉ NO	[M+H] ⁺	254.1539	254.1539	-0.2	7.90E+05	11.22
N-乙基他达拉非	1609405-34-6	N-Ethyltadalafil	C ₂₃ H ₂₁ N ₃ O ₄	[M+H] ⁺	404.1605	404.1607	0.5	3.60E+05	16.39
烟酰胺	98-92-0	Niacinamide	C ₆ H ₆ N ₂ O	[M+H] ⁺	123.0553	123.0547	-4.6	2.50E+04	2.92
尼卡地平	337376-15-5	Nicardipine	C ₂₆ H ₂₉ N ₃ O ₆	[M+H] ⁺	480.2129	480.2133	0.7	4.40E+06	14.99
烟酸	59-67-6	Nicotinic Acid	C ₆ H ₅ NO ₂	[M+H] ⁺	124.0393	124.0391	-1.9	2.40E+05	1.08
硝苯地平	21829-25-4	Nifedipine	C ₁₇ H ₁₈ N ₂ O ₆	[M+H] ⁺	347.1238	347.1224	-3.9	7.80E+04	16.45
尼莫地平	66085-59-4	Nimodipine	C ₂₁ H ₂₆ N ₂ O ₇	[M+H] ⁺	419.1813	419.1813	0.1	1.20E+05	17.55
硝西洋	146-22-5	Nitrazepam	C ₁₅ H ₁₁ N ₃ O ₃	[M+H] ⁺	282.0873	282.0864	-3.2	2.10E+05	14.92
尼群地平	39562-70-4	Nitrendipine	C ₁₈ H ₂₀ N ₂ O ₆	[M+H] ⁺	361.1394	361.1397	0.7	2.00E+06	17.28
硝地那非	147676-99-1	Nitrodenafil	C ₁₇ H ₁₉ N ₅ O ₄	[M+H] ⁺	358.1510	358.1513	0.9	1.10E+06	17.89
N-辛基去甲他达拉非	1173706-35-8	N-Octylnortadalafil	C ₂₉ H ₃₃ N ₃ O ₄	[M+H] ⁺	488.2544	488.2547	0.7	5.80E+05	19.18
合成辣椒素	2444-46-4	Nonivamide	C ₁₇ H ₂₇ NO ₃	[M+H] ⁺	294.2064	294.2060	-1.2	5.60E+04	17.40
那红地那非	949091-38-7	Noracetildenafil	C ₂₄ H ₃₂ N ₆ O ₃	[M+H] ⁺	453.2609	453.2614	1.2	2.30E+06	14.44
去甲西洋	1088-11-5	Nordiazepam	C ₁₅ H ₁₃ ClN ₂ O	[M+H] ⁺	271.0633	271.0630	-1.0	2.00E+04	14.71
快诺酮	68-22-4	Norethindrone	C ₂₀ H ₂₆ O ₂	[M+H] ⁺	299.2006	299.2005	-0.3	2.40E+06	17.25
诺氟沙星	70458-9	Norfloxacin	C ₁₆ H ₁₈ FN ₃ O ₃	[M+H] ⁺	320.1405	320.1406	0.3	7.60E+05	7.90
去甲氟西汀	83891-03-6	Norfluoxetine	C ₁₆ H ₁₆ F ₃ NO	[M+H] ⁺	296.1257	296.1249	-2.6	4.10E+04	15.65
诺孕酯	35189-28-7	Norgestimate	C ₂₃ H ₃₁ NO ₃	[M+H] ⁺	370.2377	370.2379	0.5	1.20E+06	19.10
去甲氯胺酮	35211-10-0	Norketamine	C ₁₂ H ₁₄ ClNO	[M+H] ⁺	224.0837	224.0829	-3.4	5.40E+05	17.71
那莫西地那非	371959-09-0	Nomeosildenafil	C ₂₂ H ₂₉ N ₅ O ₄ S	[M+H] ⁺	460.2013	460.2015	0.4	1.20E+06	18.29
那莫伐地那非	358390-39-3	Nomeovardenafil	C ₁₈ H ₂₀ N ₄ O ₄	[M+H] ⁺	357.1557	357.1561	1.0	1.90E+06	16.78
去甲基他达拉非	171596-36-4	Nortadalafil	C ₂₁ H ₁₇ N ₃ O ₄	[M+H] ⁺	376.1292	376.1296	1.0	1.10E+05	15.34
诺龙	434-22-0	Nortestosterone	C ₁₈ H ₂₆ O ₂	[M+H] ⁺	275.2006	275.2005	0.0	2.20E+06	17.25
去甲替林	72-69-5	Nortriptyline	C ₁₉ H ₂₁ N	[M+H] ⁺	264.1747	264.1746	-0.2	1.20E+06	15.65
那可丁	128-62-1	Noscapine	C ₂₂ H ₂₃ NO ₇	[M+H] ⁺	414.1547	414.1549	0.5	1.30E+06	11.15
N-苯丙烯基他达拉非	2064212-00-4	N-Phenylpropenyltadalafil	C ₃₀ H ₂₄ N ₄ O ₄	[M+H] ⁺	505.1870	505.1874	0.7	2.40E+04	18.14
奥芬太尼	101343-69-5	Ocfentanyl	C ₂₂ H ₂₇ FN ₂ O ₂	[M+H] ⁺	371.2129	371.2132	0.7	2.50E+07	11.07
O-去乙基西地那非	139755-91-2	O-Desethylsildenafil	C ₂₀ H ₂₆ N ₆ O ₄ S	[M+H] ⁺	447.1809	447.1811	0.4	6.70E+05	15.57
氧氟沙星	82419-36-1	Ofloxacin	C ₁₈ H ₂₀ FN ₃ O ₄	[M+H] ⁺	362.1511	362.1510	-0.3	3.80E+05	8.00
奥氮平	132539-06-1	Olanzapine	C ₁₇ H ₂₀ N ₄ S	[M+H] ⁺	313.1481	313.1479	-0.6	5.70E+05	6.63
奥拉多司	23696-28-8	Olaquinox	C ₁₂ H ₁₃ N ₃ O ₄	[M+H] ⁺	264.0979	264.0975	-1.3	4.40E+05	5.74
竹桃霉素	7060-74-4	Oleandomycin	C ₃₅ H ₆₁ NO ₁₂	[M+H] ⁺	688.4267	688.4273	0.9	2.00E+06	14.62
奥美沙坦	144689-24-7	Olmesartan	C ₂₄ H ₂₆ N ₆ O ₃	[M+H] ⁺	447.2139	447.2139	0.0	8.50E+05	13.10
氧乐果	1113-02-6	Omethoate	C ₉ H ₁₂ NO ₄ PS	[M+H] ⁺	214.0297	214.0298	0.4	7.90E+05	5.73
奥比沙星	113617-63-3	Orbifloxacin	C ₁₉ H ₂₀ F ₃ N ₃ O ₃	[M+H] ⁺	396.1530	396.1533	0.8	2.60E+06	8.99
奥美普林	6981-18-6	Ometoprim	C ₁₄ H ₁₈ N ₄ O ₂	[M+H] ⁺	275.1503	275.1503	0.3	3.30E+06	7.73
杀线威(草膦威)	23135-22-0	Oxamyl	C ₃ H ₇ NO ₂	[M+H] ⁺	90.0550	90.0545	-4.7	3.50E+04	6.77
奥沙西洋	604-75-1	Oxazepam	C ₁₅ H ₁₁ ClN ₂ O ₂	[M+H] ⁺	287.0582	287.0581	-0.4	3.20E+05	15.67
奥卡西平	28721-07-5	Oxcarbazepine	C ₁₅ H ₁₂ N ₂ O ₂	[M+H] ⁺	253.0972	253.0971	-0.1	3.00E+05	13.54
酮红地那非	1446144-70-2	Oxohongdenafil	C ₂₅ H ₃₂ N ₆ O ₄	[M+H] ⁺	481.2558	481.2562	0.9	1.20E+06	16.74
恶喹酸	14698-29-4	Oxolinic acid	C ₁₃ H ₁₁ NO ₅	[M+H] ⁺	262.0710	262.0711	0.3	2.90E+06	12.17
亚砷磷	301-12-2	Oxydemeton-methyl	C ₆ H ₁₅ O ₄ PS ₂	[M+H] ⁺	247.0222	247.0224	0.6	6.10E+05	7.18
砒拌磷	2497-07-5	Oxydisulfoton	C ₈ H ₁₉ O ₃ PS ₃	[M+H] ⁺	291.0307	291.0309	0.6	7.00E+05	15.44
羟吗啡酮	76-41-5	Oxymorphone	C ₁₇ H ₁₉ NO ₄	[M+H] ⁺	302.1387	302.1387	-0.1	2.00E+05	5.35

中文名	CAS号	英文名	分子式	加合离子形式	精确离子质量	实测离子质量	质量偏差 (ppm)	峰面积	保留时间
巴马汀	10605-02-4	Palmitine	C ₂₁ H ₂₁ NO ₄	[M+H] ⁺	352.1543	352.1541	-0.7	2.10E+05	12.88
罂粟碱	58-74-2	Papaverine	C ₂₀ H ₂₁ NO ₄	[M+H] ⁺	340.1543	340.1544	0.2	1.60E+06	11.22
对氟芬太尼	90736-23-5	Para-fluorofentanyl	C ₂₂ H ₂₇ FN ₂ O	[M+H] ⁺	355.2180	355.2183	0.9	1.70E+07	12.94
对硫磷	56-38-2	Parathion	C ₁₀ H ₁₄ NO ₂ PS	[M+H] ⁺	292.0403	292.0402	-0.5	5.10E+04	17.83
甲基对硫磷	298-00-0	Parathion-Methyl	C ₈ H ₁₀ NO ₂ PS	[M+H] ⁺	264.0090	264.0088	-0.7	4.50E+04	17.82
培氟沙星	70458-92-3	Pefloxacin	C ₁₇ H ₂₀ FN ₃ O ₃	[M+H] ⁺	334.1562	334.1561	-0.2	3.30E+05	8.01
喷布特罗	36507-48-9	Penbutolol	C ₁₈ H ₂₉ NO ₂	[M+H] ⁺	292.2271	292.2272	0.3	5.00E+05	16.14
喷他佐辛	359-83-1	Pentazocine	C ₁₉ H ₂₇ NO	[M+H] ⁺	286.2165	286.2167	0.6	3.10E+05	11.66
戊巴比妥	76-74-4	Pentobarbitone	C ₁₁ H ₁₈ N ₂ O ₃	[M-H] ⁻	225.1245	225.1242	-1.0	5.40E+05	5.59
培哚普利	82834-16-0	Perindopril	C ₁₉ H ₃₂ N ₂ O ₅	[M+H] ⁺	369.2384	369.2384	0.1	3.00E+06	14.84
氯菊酯	52645-53-1	Permethrin	C ₂₁ H ₂₀ Cl ₂ O ₃	[M+NH ₄] ⁺	408.1128	408.1128	0.0	7.70E+04	20.17
哌罗匹隆	129273-38-7	Perospirone hydrochloride	C ₂₃ H ₃₀ N ₄ O ₂ S	[M+H] ⁺	427.2162	427.2166	0.9	2.80E+05	14.33
奋乃静	58-39-9	Perphenazine	C ₂₁ H ₂₆ ClN ₂ OS	[M+H] ⁺	404.1558	404.1561	0.8	1.40E+06	16.48
硝甲西洋	2011-67-8	Pethoxamid	C ₁₆ H ₁₃ N ₃ O ₃	[M+H] ⁺	296.1030	296.1030	0.1	5.90E+05	15.48
非那西丁	62-44-2	Phenacetin	C ₁₀ H ₁₃ NO ₂	[M+H] ⁺	180.1019	180.1018	-0.4	1.00E+05	11.67
苯环利定	77-10-1	Phencyclidine	C ₁₇ H ₂₅ N	[M+H] ⁺	244.2060	244.2058	-0.7	2.60E+05	12.25
苯乙双胍	114-86-3	Phenformin	C ₁₀ H ₁₅ N ₅	[M+H] ⁺	206.1400	206.1401	0.5	3.00E+06	7.29
苯巴比妥	50-06-6	Phenobarbital	C ₁₂ H ₁₂ N ₂ O ₃	[M-H] ⁻	231.0775	231.0775	0.0	1.90E+05	4.93
苯硫威	62850-32-2	phenothiocarb	C ₁₃ H ₁₉ NO ₂ S	[M+H] ⁺	254.1209	254.1210	0.5	1.00E+06	17.86
苯醚菊酯	26002-80-2	Phenothrin	C ₂₃ H ₂₆ O ₃	[M+H] ⁺	351.1955	351.1956	0.5	3.40E+05	20.21
苯乙醇胺A	1346746-81-3	Phenylethanolamine A	C ₁₉ H ₂₄ N ₂ O ₄	[M+H] ⁺	345.1809	345.1809	0.2	1.60E+06	12.92
甲拌磷	298-02-2	Phorate	C ₇ H ₁₁ O ₇ PS ₃	[M+H] ⁺	261.0201	261.0200	-0.4	2.60E+04	18.27
甲拌磷砒	2588-04-7	Phorate Sulfone	C ₇ H ₁₁ O ₄ PS ₃	[M+H] ⁺	293.0099	293.0100	0.3	3.10E+05	15.55
甲拌磷亚砒	2588-03-6	Phorate Sulfoxide	C ₇ H ₁₁ O ₃ PS ₃	[M+H] ⁺	277.0150	277.0153	0.9	5.20E+05	15.42
伏杀硫磷	2310-17-0	Phosalone	C ₁₂ H ₁₅ ClNO ₄ PS ₂	[M+H] ⁺	367.9941	367.9946	1.4	9.40E+05	18.33
硫环磷	947-02-4	Phosfolan	C ₇ H ₁₃ NO ₂ PS ₂	[M+H] ⁺	256.0226	256.0228	1.0	1.70E+06	12.06
甲基硫环磷	5120-23-0	Phosfolan methyl	C ₅ H ₁₀ NO ₃ PS ₂	[M+H] ⁺	227.9913	227.9914	0.7	1.50E+06	7.96
亚胺硫磷	732-11-6	Phosmet	C ₁₁ H ₁₂ NO ₄ PS ₂	[M+H] ⁺	318.0018	318.0021	1.0	3.40E+05	16.44
磷胺	13171-21-6	Phosphamidon	C ₁₀ H ₁₉ ClNO ₅ P	[M+H] ⁺	300.0762	300.0766	1.3	1.80E+06	13.58
辛硫磷	14816-18-3	Phoxim	C ₂₁ H ₁₅ N ₂ O ₃ PS	[M+H] ⁺	299.0614	299.0615	0.4	4.70E+05	18.26
毒扁豆碱	57-47-6	Physostigmine	C ₁₅ H ₂₁ N ₃ O ₂	[M+H] ⁺	276.1707	276.1704	-0.9	1.10E+05	7.22
毛茛菪香碱	92-13-7	Pilocarpine	C ₁₁ H ₁₆ N ₂ O ₂	[M+H] ⁺	209.1285	209.1284	-0.1	2.30E+05	5.37
匹莫齐特	2062-78-4	Pimozide	C ₂₈ H ₂₉ F ₂ N ₃ O	[M+H] ⁺	462.2352	462.2354	0.6	2.30E+05	16.06
鼠完	83-26-1	Pindone	C ₁₄ H ₁₄ O ₃	[M-H] ⁻	229.0870	229.0868	-1.0	2.60E+05	5.43
吡格列酮	111025-46-8	Pioglitazone	C ₁₉ H ₂₀ N ₂ O ₃ S	[M+H] ⁺	357.1267	357.1270	0.6	4.90E+06	13.11
TFMPP	76835-14-8	Piperazine, 1-[3-(trifluoromethyl)phenyl]-, dihydrochloride	C ₁₁ H ₁₃ F ₃ N ₂	[M+H] ⁺	231.1104	231.1104	0.3	2.00E+05	10.39
哌嗪那非	1335201-04-1	Piperazonifil	C ₂₅ H ₃₄ N ₆ O ₄	[M+H] ⁺	483.2714	483.2719	0.9	1.10E+06	15.29
苯噻啉红地那非	147676-50-4	Piperiacetildenafilil	C ₂₄ H ₃₁ N ₅ O ₃	[M+H] ⁺	438.2500	438.2503	0.7	3.70E+06	14.74
胡椒碱	7780-20-3	Piperine	C ₁₇ H ₁₉ NO ₃	[M+H] ⁺	286.1438	286.1437	-0.2	3.80E+05	17.62
抗蚜威	23103-98-2	Pirimicarb	C ₁₄ H ₁₈ N ₄ O ₂	[M+H] ⁺	239.1503	239.1505	1.2	3.00E+05	11.26
甲基噻啉磷	29232-93-7	Pirimiphos-methyl	C ₁₁ H ₂₀ N ₃ O ₃ PS	[M+H] ⁺	306.1036	306.1039	0.9	4.30E+06	18.25
4-甲氧基甲基苯丙胺	22331-70-0	PMMA	C ₁₁ H ₁₇ NO	[M+H] ⁺	180.1383	180.1380	-1.7	2.80E+05	7.56
鬼臼毒素	518-28-5	Podophyllotoxin	C ₂₂ H ₂₂ O ₈	[M+H] ⁺	415.1387	415.1390	0.6	1.00E+06	15.44
普伐他汀钠	81131-70-6	Pravastatin	C ₂₃ H ₃₆ O ₇	[M-H] ⁻	423.2388	423.2380	-2.1	1.10E+05	5.17
普拉西泮	2955-38-6	Prazepam	C ₁₉ H ₁₇ ClN ₂ O	[M+H] ⁺	325.1102	325.1105	1.0	2.70E+05	18.01
吡嗪酮	55268-74-1	Praziquantel	C ₁₉ H ₂₄ N ₂ O ₂	[M+H] ⁺	313.1911	313.1911	0.1	7.40E+05	17.11
泼尼松	53-03-2	Prednisone	C ₂₁ H ₂₆ O ₅	[M+H] ⁺	359.1853	359.1853	0.1	6.50E+05	15.07
孕烯醇酮	145-13-1	pregnenolone	C ₂₁ H ₃₂ O ₂	[M+H] ⁺	317.2475	317.2477	0.5	9.70E+03	18.86
丙草胺	51218-49-6	Pretilachlor	C ₁₇ H ₂₆ ClNO ₂	[M+H] ⁺	312.1725	312.1727	0.8	2.40E+06	18.94
扑米酮	125-33-7	Primidone	C ₁₂ H ₁₄ N ₂ O ₂	[M+H] ⁺	219.1128	219.1128	0.0	7.30E+05	7.48
普罗地芬	302-33-0	Proadifen	C ₂₃ H ₃₁ NO ₂	[M+H] ⁺	354.2428	354.2425	-0.6	6.60E+05	16.72
普鲁卡因	59-46-1	Procaine	C ₁₃ H ₂₀ N ₂ O ₂	[M+H] ⁺	237.1598	237.1597	-0.2	4.90E+05	5.97
丙卡特罗	81262-93-3	Procaterol	C ₁₆ H ₂₂ N ₂ O ₃	[M+H] ⁺	291.1703	291.1702	-0.5	6.10E+05	6.68
丙溴磷	41198-08-7	Profenofos	C ₁₁ H ₁₅ BrClO ₃ PS	[M+H] ⁺	372.9424	372.9431	1.9	6.60E+05	18.94
异丙嗪	60-87-7	Promethazine	C ₁₇ H ₂₀ N ₂ S	[M+H] ⁺	285.1420	285.1419	-0.4	3.50E+05	14.59

中文名	CAS号	英文名	分子式	加合离子形式	精确离子质量	实测离子质量	质量偏差 (ppm)	峰面积	保留时间
毒草安	1918-16-7	Propachlor	C ₁₁ H ₁₄ ClNO	[M+H] ⁺	212.0837	212.0836	-0.1	7.60E+05	15.92
丙虫磷	7292-16-2	Propaphos	C ₁₃ H ₂₁ O ₄ PS	[M+H] ⁺	305.0971	305.0971	0.0	7.20E+05	18.16
氰噻嗪	2622-26-6	Propericyazine	C ₂₁ H ₂₃ N ₃ OS	[M+H] ⁺	366.1635	366.1638	1.0	3.10E+05	14.69
残杀威	114-26-1	Propoxur	C ₁₁ H ₁₅ NO ₃	[M+H] ⁺	210.1125	210.1123	-0.7	1.50E+05	13.88
丙氧苯基艾地那非	1391053-82-9	Propoxyphenyl aildenafil	C ₂₄ H ₃₄ N ₆ O ₄ S	[M+H] ⁺	503.2435	503.2439	0.9	3.70E+06	16.40
丙氧苯基羟基豪莫西地那非	139755-87-6	Propoxyphenyl hydroxyhomosildenafil	C ₂₄ H ₃₄ N ₆ O ₅ S	[M+H] ⁺	519.2384	519.2389	1.0	8.40E+05	15.59
丙氧苯基硫代艾地那非	856190-49-3	Propoxyphenyl thioaildenafil	C ₂₄ H ₃₄ N ₆ O ₃ S ₂	[M+H] ⁺	519.2207	519.2214	1.5	1.50E+06	17.47
丙氧苯基硫代豪莫西地那非	479073-88-6	Propoxyphenyl thiohomosildenafil	C ₂₄ H ₃₄ N ₆ O ₃ S ₂	[M+H] ⁺	519.2207	519.2212	1.0	1.30E+06	17.37
丙氧苯基硫代羟基豪莫西地那非	479073-90-0	Propoxyphenyl thiohydroxyhomosildenafil	C ₂₄ H ₃₄ N ₆ O ₄ S ₂	[M+H] ⁺	535.2156	535.2161	1.0	6.70E+05	17.35
丙氧苯基硫代西地那非	479073-87-5	Propoxyphenyl thiosildenafil	C ₂₃ H ₃₂ N ₆ O ₃ S ₂	[M+H] ⁺	505.2050	505.2056	1.1	1.00E+06	17.36
丙氧苯基异丁基艾地那非	1621873-33-3	Propoxyphenylisobutyl aildenafil	C ₂₅ H ₃₆ N ₆ O ₄ S	[M+H] ⁺	517.2592	517.2596	0.9	1.90E+06	16.32
丙氧苯基西地那非	877777-10-1	Propoxyphenylsildenafil	C ₂₃ H ₃₂ N ₆ O ₄ S	[M+H] ⁺	489.2279	489.2283	0.9	7.00E+05	16.14
普萘洛尔	525-66-6	Propranolol	C ₁₆ H ₂₁ NO ₂	[M+H] ⁺	260.1645	260.1647	0.9	9.00E+06	12.82
异丙安替比林	479-92-5	Propyphenazone	C ₁₄ H ₁₈ N ₂ O	[M+H] ⁺	231.1492	231.1492	0.0	1.70E+06	15.37
原阿片碱	130-86-9	Protopine	C ₂₀ H ₁₉ NO ₅	[M+H] ⁺	354.1336	354.1336	0.0	2.30E+05	10.19
伪麻黄碱	90-82-4	Psephedrine	C ₁₀ H ₁₅ NO	[M+H] ⁺	166.1226	166.1223	-2.3	2.30E+05	6.16
伪伐地那非	224788-34-5	Pseudovardenafil	C ₂₂ H ₂₉ N ₃ O ₂ S	[M+H] ⁺	460.2013	460.2016	0.7	2.40E+06	18.05
吡唑N-去甲基西地那非	139755-95-6	Pyrazole N-desmethylsildenafil	C ₂₁ H ₂₈ N ₆ O ₄ S	[M+H] ⁺	461.1966	461.1970	1.0	7.80E+05	12.93
稗草丹	88678-67-5	Pyributicarb	C ₁₈ H ₂₂ N ₂ O ₂ S	[M+H] ⁺	331.1475	331.1475	0.0	1.80E+06	19.21
吡嗪硫磷	119-12-0	Pyridaphenthion	C ₁₄ H ₁₇ N ₃ O ₄ PS	[M+H] ⁺	341.0719	341.0724	1.3	2.40E+06	17.37
喹硫平	111974-69-7	Quetiapine	C ₂₁ H ₂₅ N ₃ O ₂ S	[M+H] ⁺	384.1740	384.1742	0.4	1.00E+06	13.63
喹硫磷	13593-03-8	Quinalphos	C ₁₂ H ₁₅ N ₃ O ₂ PS	[M+H] ⁺	299.0614	299.0619	1.6	2.30E+06	17.98
硫酸奎宁	130-95-0	Quinine	C ₂₀ H ₂₄ N ₂ O ₂	[M+H] ⁺	325.1911	325.1911	0.0	7.40E+05	10.25
喹禾灵	76578-14-8	Quizalofop-ethyl	C ₁₉ H ₁₇ ClN ₂ O ₄	[M+H] ⁺	373.0950	373.0960	2.7	2.40E+06	18.97
盖草灵	94051-08-8	Quizalofop-p-ethyl	C ₁₇ H ₁₃ ClN ₂ O ₄	[M+H] ⁺	345.0637	345.0638	0.5	2.00E+05	17.82
莱克多巴胺	97825-25-7	Ractopamine	C ₁₆ H ₂₃ NO ₃	[M+H] ⁺	302.1751	302.1750	-0.2	1.40E+06	7.93
雷米普利	87333-19-5	Ramipril	C ₂₃ H ₃₂ N ₂ O ₅	[M+H] ⁺	417.2384	417.2387	0.7	5.50E+06	15.96
雷尼替丁	66357-35-5	Ranitidine	C ₁₃ H ₂₂ N ₄ O ₃ S	[M+H] ⁺	315.1485	315.1486	0.3	7.60E+05	5.34
瑞芬太尼	132875-61-7	Remifentanyl	C ₂₀ H ₂₈ N ₂ O ₃	[M+H] ⁺	377.2071	377.2074	0.9	2.10E+07	10.21
瑞格列奈	135062-02-1	Repaglinide	C ₂₇ H ₃₆ N ₂ O ₄	[M+H] ⁺	453.2748	453.2747	-0.2	1.10E+07	18.02
利血平	50-55-5	Reserpine	C ₃₃ H ₄₀ N ₂ O ₉	[M+H] ⁺	609.2807	609.2802	-0.8	1.50E+04	15.90
苜蓿菊酯	10453-86-8	Resmethrin	C ₂₂ H ₂₆ O ₃	[M+H] ⁺	339.1955	339.1957	0.7	1.50E+06	19.99
利培酮	106266-06-2	Risperidone	C ₂₃ H ₂₇ FN ₄ O ₂	[M+H] ⁺	411.2191	411.2191	-0.1	1.20E+06	11.77
利太林酸	19395-41-6	Ritalinic acid	C ₁₃ H ₁₇ NO ₂	[M+H] ⁺	220.1332	220.1332	0.2	8.20E+05	8.32
利托君	26652-09-5	Ritodrine	C ₁₇ H ₂₁ NO ₃	[M+H] ⁺	288.1594	288.1592	-0.8	1.49E+06	6.42
罗格列酮	122320-73-4	Rosiglitazone	C ₁₈ H ₁₉ N ₃ O ₃ S	[M+H] ⁺	358.1220	358.1223	0.9	3.90E+06	10.37
瑞舒伐他汀	147098-20-2	Rosuvastatin	C ₂₂ H ₂₈ FN ₃ O ₆ S	[M+H] ⁺	482.1756	482.1752	-0.8	6.80E+04	16.32
鱼藤酮	83-79-4	Rotenone	C ₂₃ H ₂₂ O ₆	[M+H] ⁺	395.1489	395.1492	0.7	1.60E+06	17.83
罗通定	10097-84-4	Rotundine	C ₂₁ H ₂₅ NO ₄	[M+H] ⁺	356.1856	356.1858	0.3	2.20E+06	10.92
罗红霉素	80214-83-1	Roxithromycin	C ₄₁ H ₇₆ N ₂ O ₁₅	[M+H] ⁺	837.5319	837.5325	0.7	2.50E+05	16.96
沙丁胺醇	18559-94-9	Salbutamol	C ₁₃ H ₂₁ NO ₃	[M+H] ⁺	240.1594	240.1594	-0.2	8.80E+05	5.27
水杨酰胺	65-45-2	Salicylamide	C ₇ H ₇ NO ₂	[M+H] ⁺	138.0550	138.0546	-2.6	8.20E+04	12.14
沙拉沙星	98105-99-8	Sarafloxacin	C ₂₀ H ₁₇ F ₂ N ₃ O ₃	[M+H] ⁺	386.1311	386.1313	0.5	1.60E+06	9.46
沙格列汀	361442-04-8	Saxagliptin	C ₁₈ H ₂₅ N ₃ O ₂	[M+H] ⁺	316.2020	316.2020	0.1	4.30E+05	8.70
东莨菪碱	51-34-3	Scopolamine	C ₁₇ H ₂₁ NO ₄	[M+H] ⁺	304.1543	304.1545	0.7	3.50E+06	6.18
丁溴东莨菪碱	149-64-4	Scopolamine Butylbromide	C ₂₁ H ₂₉ NO ₄	[M+H] ⁺	360.2169	360.2170	0.2	8.90E+05	10.36
司可巴比妥	76-73-3	Secobarbital	C ₁₂ H ₁₈ N ₂ O ₃	[M-H] ⁻	237.1245	237.1241	-1.4	4.30E+05	5.87
司替替林	57262-94-9	Setiptiline	C ₁₉ H ₁₉ N	[M+H] ⁺	262.1590	262.1591	0.2	2.30E+05	12.77
氟硅菊酯	105024-66-6	Silafluofen	C ₂₅ H ₂₉ FO ₂ Si	[M+NH ₄] ⁺	426.2259	426.2258	-0.2	2.50E+04	20.86
西地那非	139755-83-2	Sildenafil	C ₂₂ H ₃₀ N ₆ O ₄ S	[M+H] ⁺	475.2122	475.2126	0.7	2.50E+06	14.87
西地那非二聚体杂质	1346602-67-2	Sildenafil dimer impurity	C ₃₈ H ₄₆ N ₁₀ O ₈ S ₂	[M+H] ⁺	835.3014	835.3023	1.0	3.30E+05	18.89
西地那非杂质12	暂无	Sildenafil impurity 12	C ₂₅ H ₃₄ N ₆ O ₂	[M+H] ⁺	499.2308	499.2312	0.8	1.80E+06	17.31
西地那非杂质14	2146091-79-2	Sildenafil impurity 14	C ₂₄ H ₃₂ N ₆ O ₂	[M+H] ⁺	485.2152	485.2153	0.2	1.50E+06	17.26
西地那非N-氧化物	1094598-75-0	Sildenafil N-oxide	C ₂₂ H ₃₀ N ₆ O ₅ S	[M+H] ⁺	491.2071	491.2077	1.2	1.50E+06	15.17
西玛津	122-34-9	Simazine	C ₇ H ₁₂ ClN ₅	[M+H] ⁺	202.0854	202.0855	0.7	1.90E+06	13.89

中文名	CAS号	英文名	分子式	加合离子形式	精确离子质量	实测离子质量	质量偏差 (ppm)	峰面积	保留时间
辛伐他汀	79902-63-9	Simvastatin	C ₂₅ H ₃₈ O ₅	[M+H] ⁺	419.2792	419.2793	0.3	5.50E+05	19.42
青藤碱	115-53-7	Sinomenine	C ₁₉ H ₂₃ NO ₄	[M+H] ⁺	330.1700	330.1700	0.0	1.50E+06	6.01
西格列汀	486460-32-6	Sitagliptin	C ₁₆ H ₁₅ F ₆ N ₃ O	[M+H] ⁺	408.1254	408.1257	1.0	6.80E+05	9.95
槐定碱	6882-68-4	Sophoridine	C ₁₅ H ₂₄ N ₂ O	[M+H] ⁺	249.1961	249.1959	-1.0	3.10E+05	5.19
索他洛尔	3930-20-9	Sotalol	C ₁₂ H ₂₀ N ₂ O ₃ S	[M+H] ⁺	273.1267	273.1267	-0.1	4.80E+05	5.12
司帕沙星	111542-93-9	Sparfloxacin	C ₁₉ H ₂₂ F ₂ N ₄ O ₃	[M+H] ⁺	393.1733	393.1734	0.4	8.30E+05	10.93
螺环哌替啶	749-02-0	Spiperone	C ₂₃ H ₂₆ FN ₃ O ₂	[M+H] ⁺	396.2082	396.2086	1.1	2.80E+05	13.34
螺内酯	52-01-7	Spironolactone	C ₂₄ H ₃₂ O ₄ S	[M+Na] ⁺	439.1914	439.1909	-0.9	1.80E+05	17.36
土的宁	57-24-9	Strychnine	C ₂₁ H ₂₂ N ₂ O ₂	[M+H] ⁺	335.1754	335.1754	0.1	1.50E+05	7.59
舒芬太尼	56030-54-7	Sufentanil	C ₂₂ H ₃₀ N ₂ O ₂ S	[M+H] ⁺	387.2101	387.2103	0.7	2.60E+07	14.78
苯酰胺	127-71-9	Sulfabenzamide	C ₁₃ H ₁₂ N ₂ O ₃ S	[M+H] ⁺	277.0641	277.0641	-0.2	3.30E+05	9.71
磺胺氯吡嗪	80-32-0	Sulfachloropyridazine	C ₁₀ H ₉ ClN ₄ O ₂ S	[M+H] ⁺	285.0208	285.0207	-0.2	2.40E+05	8.27
磺胺嘧啶	68-35-9	Sulfadiazine	C ₁₀ H ₁₀ N ₂ O ₂ S	[M+H] ⁺	251.0597	251.0597	-0.1	5.70E+05	5.94
磺胺间二甲氧嘧啶	122-11-2	Sulfadimethoxine	C ₁₂ H ₁₄ N ₄ O ₄ S	[M+H] ⁺	311.0809	311.0809	0.2	1.60E+06	9.22
磺胺邻二甲氧嘧啶	2447-57-6	Sulfadoxine	C ₁₂ H ₁₄ N ₄ O ₄ S	[M+H] ⁺	311.0809	311.0809	0.2	1.10E+06	11.26
磺胺甲基噻唑	127-79-7	Sulfamerazine	C ₁₁ H ₁₂ N ₄ O ₂ S	[M+H] ⁺	265.0754	265.0754	0.1	8.20E+05	6.87
磺胺二甲(基)嘧啶	57-68-1	Sulfamethazine	C ₁₂ H ₁₄ N ₄ O ₂ S	[M+H] ⁺	279.0910	279.0910	-0.1	1.20E+06	7.82
磺胺甲噻二唑	144-82-1	Sulfamethizole	C ₉ H ₁₀ N ₄ O ₂ S ₂	[M+H] ⁺	271.0318	271.0318	-0.2	2.40E+05	7.55
磺胺甲基异恶唑(新诺明)	723-46-6	Sulfamethoxazole	C ₁₀ H ₁₁ N ₃ O ₃ S	[M+H] ⁺	254.0594	254.0593	-0.3	6.00E+05	8.43
磺胺	63-74-1	Sulfanilamide	C ₆ H ₈ N ₂ O ₂ S	[M+H] ⁺	173.0379	173.0374	-3.2	1.90E+04	3.35
磺胺苯吡唑	526-08-9	Sulfaphenazole	C ₁₅ H ₁₁ N ₄ O ₂ S	[M+H] ⁺	315.0910	315.0911	0.3	1.10E+06	10.59
磺胺吡啶	144-83-2	Sulfapyridine	C ₁₁ H ₁₁ N ₃ O ₂ S	[M+H] ⁺	250.0645	250.0646	0.4	9.50E+05	6.40
磺胺喹恶琳	59-40-5	Sulfaquinoxaline	C ₁₄ H ₁₂ N ₄ O ₂ S	[M+H] ⁺	301.0754	301.0753	-0.2	4.20E+05	11.84
甲噻磺隆	74222-97-2	Sulfasulfuron	C ₁₅ H ₁₆ N ₄ O ₅ S	[M+H] ⁺	365.0914	365.0918	1.1	1.70E+06	14.73
磺胺噻唑	72-14-0	Sulfathiazole	C ₉ H ₉ N ₃ O ₂ S ₂	[M+H] ⁺	256.0209	256.0209	0.0	3.30E+05	6.16
磺胺二甲异恶唑	127-69-5	Sulfisoxazole	C ₁₁ H ₁₃ N ₃ O ₂ S	[M+H] ⁺	268.0750	268.0749	-0.6	5.10E+05	9.02
治螟磷	3689-24-5	Sulfotep	C ₈ H ₂₀ O ₅ P ₂ S ₂	[M+H] ⁺	323.0300	323.0304	1.1	2.20E+06	17.98
磺胺醋酰	144-80-9	Sulphacetamide	C ₈ H ₁₀ N ₂ O ₃ S	[M+H] ⁺	215.0485	215.0483	-1.0	1.00E+05	5.33
舒必利	15676-16-1	Sulpiride	C ₁₅ H ₂₃ N ₃ O ₄ S	[M+H] ⁺	342.1482	342.1483	0.2	5.70E+05	5.66
他达拉非	171596-29-5	Tadalafil	C ₂₂ H ₁₉ N ₃ O ₄	[M+H] ⁺	390.1448	390.1452	1.0	6.10E+05	15.92
他达拉非二氯代杂质	1598416-08-0	Tadalafil dichloro impurity	C ₂₂ H ₁₈ Cl ₂ N ₃ O ₅	[M+H] ⁺	461.0666	461.0669	0.8	4.00E+05	17.28
氟胺氟菊酯	102851-06-9	Tau – fluralinate	C ₂₆ H ₂₂ ClF ₃ N ₂ O ₃	[M+H] ⁺	503.1344	503.1350	1.3	2.30E+04	19.98
替米沙坦	144701-48-4	Telmisartan	C ₃₃ H ₃₀ N ₄ O ₂	[M+H] ⁺	515.2442	515.2443	0.4	5.90E+06	17.00
替马西泮	846-50-4	Temazepam	C ₁₆ H ₁₃ ClN ₂ O ₂	[M+H] ⁺	301.0738	301.0742	1.1	3.60E+06	16.16
特丁硫磷	13071-79-9	Terbufos	C ₉ H ₂₁ O ₃ PS ₃	[M+H] ⁺	289.0514	289.0511	-1.2	6.50E+03	19.01
特丁磷磺	56070-16-7	Terbufos sulfone	C ₉ H ₂₁ O ₄ PS ₃	[M+H] ⁺	321.0412	321.0415	0.9	9.70E+05	16.65
特布他林	23031-25-6	Terbutaline	C ₁₂ H ₁₉ NO ₃	[M+H] ⁺	226.1438	226.1435	-1.2	3.20E+05	5.20
特丁草净	886-50-0	Terbutryn	C ₁₀ H ₁₉ N ₃ S	[M+H] ⁺	242.1434	242.1434	0.0	2.10E+06	16.63
睾酮	58-22-0	Testosterone	C ₁₉ H ₂₈ O ₂	[M+H] ⁺	289.2162	289.2163	0.4	2.00E+06	17.64
丙酸睾丸素	57-85-2	Testosterone propionate	C ₂₂ H ₃₂ O ₃	[M+H] ⁺	345.2424	345.2424	-0.2	1.90E+06	19.65
丁卡因	94-24-6	Tetracaine	C ₁₅ H ₂₄ N ₂ O ₂	[M+H] ⁺	265.1911	265.1909	-0.5	1.00E+06	12.65
杀虫畏	961-11-5	Tetrachlorvinphos	C ₁₀ H ₉ Cl ₄ O ₄ P	[M+H] ⁺	364.9065	364.9070	1.4	8.10E+05	17.91
延胡索乙素	483-14-7	Tetrahydropalmatine	C ₂₁ H ₂₅ NO ₄	[M+H] ⁺	356.1856	356.1859	0.8	2.40E+07	10.74
胺菊酯	7696-12-0	Tetramethrin	C ₁₃ H ₂₅ NO ₄	[M+H] ⁺	332.1856	332.1857	0.1	3.90E+05	19.04
四氢大麻酸	56354-06-4	Thc-cooh	C ₂₁ H ₂₈ O ₄	[M-] ⁻	343.1915	343.1912	-0.9	7.00E+04	8.12
蒂巴因	115-37-7	Thebaine	C ₁₉ H ₂₁ NO ₃	[M+H] ⁺	312.1594	312.1594	-0.2	6.30E+05	8.84
可可碱	83-67-0	Theobromine	C ₇ H ₈ N ₄ O ₂	[M+H] ⁺	181.0720	181.0715	-2.9	3.80E+04	6.83
茶碱	58-55-9	Theophylline	C ₇ H ₈ N ₂ O ₂	[M+H] ⁺	181.0720	181.0716	-2.3	5.10E+04	7.14
噻苯咪唑	148-79-8	Thiabendazole	C ₁₀ H ₇ N ₃ S	[M+H] ⁺	202.0433	202.0433	-0.2	3.50E+06	8.11
噻苯隆	51707-55-2	Thidiazuron	C ₉ H ₈ N ₄ OS	[M+H] ⁺	221.0492	221.0490	-0.9	1.10E+05	13.82
硫代艾地那非	856190-47-1	Thioaldenafil	C ₂₃ H ₃₂ N ₆ O ₃ S ₂	[M+H] ⁺	505.2050	505.2055	1.1	1.30E+06	17.03
硫代芬太尼	1165-22-6	Thiofentanyl	C ₂₀ H ₂₆ N ₂ OS	[M+H] ⁺	343.1839	343.1841	0.8	1.80E+07	12.16
硫代豪莫西地那非	479073-80-8	Thiohomosildenafil	C ₂₃ H ₃₂ N ₆ O ₃ S ₂	[M+H] ⁺	505.2050	505.2056	1.2	1.10E+06	16.90
硫喹那非	220060-39-9	Thioquinapiperil	C ₂₄ H ₂₈ N ₆ OS	[M+H] ⁺	449.2118	449.2121	0.7	1.80E+06	15.37
硫代西地那非	479073-79-5	Thiosildenafil	C ₂₂ H ₃₀ N ₆ O ₃ S ₂	[M+H] ⁺	491.1894	491.1900	1.2	8.00E+05	16.87
替米考星	108050-54-0	Tilmicosin	C ₄₆ H ₈₀ N ₂ O ₁₃	[M+H] ⁺	869.5733	869.5732	-0.1	2.20E+05	14.05

中文名	CAS号	英文名	分子式	加合离子形式	精确离子质量	实测离子质量	质量偏差 (ppm)	峰面积	保留时间
甲苯磺丁脲	64-77-7	Tolbutamide	C ₁₂ H ₁₈ N ₂ O ₃ S	[M+H] ⁺	271.1111	271.1110	-0.3	5.20E+05	15.38
甲基立枯磷	57018-04-9	Tolclofos-methyl	C ₉ H ₁₁ Cl ₂ O ₃ PS	[M+H] ⁺	300.9616	300.9618	0.7	6.20E+05	18.30
四溴菊酯	66841-25-6	Tralomethrin	C ₂₂ H ₁₉ Br ₂ [Br] ₂ NO ₃	[M+NH ₄] ⁺	682.8396	682.8407	1.6	6.10E+04	19.92
曲马多	27203-92-5	Tramadol	C ₁₆ H ₂₅ NO ₂	[M+H] ⁺	264.1958	264.1955	-1.1	9.60E+04	9.39
曲唑酮	25332-39-2	Trazodone	C ₁₉ H ₂₂ ClN ₃ O	[M+H] ⁺	372.1586	372.1571	-3.9	5.30E+05	11.42
群勃龙	10161-33-8	Trenbolone	C ₁₈ H ₂₂ O ₂	[M+H] ⁺	271.1693	271.1692	-0.1	2.70E+06	16.84
三唑酮	43121-43-3	Triadimefon	C ₁₄ H ₁₆ ClN ₃ O ₂	[M+H] ⁺	294.1004	294.1007	1.0	1.10E+06	17.31
氨苯蝶啶	396-01-0	Triamterene	C ₁₂ H ₁₁ N ₇	[M+H] ⁺	254.1149	254.1150	0.7	4.20E+06	9.16
三唑磷	24017-47-8	Triazophos	C ₁₃ H ₁₆ N ₂ O ₃ PS	[M+H] ⁺	314.0723	314.0718	-1.5	3.80E+06	17.35
敌百虫	52-68-6	Trichlorfon	C ₄ H ₈ Cl ₃ O ₄ P	[M+H] ⁺	256.9299	256.9301	0.9	1.00E+06	9.26
三氯卡巴	101-20-2	Triclocarban	C ₁₃ H ₉ Cl ₃ N ₂ O	[M+H] ⁺	314.9853	314.9853	-0.2	2.40E+05	18.56
三氟拉嗪	117-89-5	Trifluoperazine	C ₂₁ H ₂₄ F ₃ N ₃ S	[M+H] ⁺	408.1716	408.1719	0.8	1.40E+06	17.04
苯海索	144-11-6	Trihexyphenidyl	C ₂₀ H ₃₁ NO	[M+H] ⁺	302.2478	302.2481	0.7	3.80E+05	15.32
甲氧苄啶	738-70-5	Trimethoprim	C ₁₄ H ₁₈ N ₄ O ₃	[M+H] ⁺	291.1452	291.1452	0.1	3.10E+06	6.96
雷公藤甲素	38748-32-2	Triptolide	C ₂₀ H ₂₄ O ₆	[M+H] ⁺	361.1646	361.1647	0.3	1.30E+06	13.25
妥布特罗	41570-61-0	Tulobuterol	C ₁₂ H ₁₈ ClNO	[M+H] ⁺	228.1150	228.1150	-0.1	3.10E+06	9.89
乌地那非	268203-93-6	Udenafil	C ₂₅ H ₃₆ N ₆ O ₄ S	[M+H] ⁺	517.2592	517.2596	0.9	3.10E+06	15.51
戊酰芬太尼	122882-90-0	Valeryl fentanyl	C ₂₄ H ₃₂ N ₂ O	[M+H] ⁺	365.2587	365.2588	0.3	4.10E+07	15.38
缬沙坦	137862-53-4	Valsartan	C ₂₄ H ₂₉ N ₅ O ₃	[M+H] ⁺	436.2343	436.2345	0.4	1.10E+06	17.31
蚜灭多	2275-23-2	Vamidothion	C ₈ H ₁₈ NO ₄ PS ₂	[M+H] ⁺	288.0488	288.0490	0.7	1.00E+06	10.00
伐地那非	224785-90-4	Vardenafil	C ₂₃ H ₃₂ N ₆ O ₄ S	[M+H] ⁺	489.2279	489.2283	0.9	2.70E+06	14.76
伐地那非乙酰基类似物	暂无	Vardenafil acetyl analogue	C ₂₄ H ₃₁ N ₅ O ₃	[M+H] ⁺	438.2500	438.2502	0.4	2.40E+06	14.12
伐地那非二聚体	1255919-03-9	Vardenafil dimer	C ₃₈ H ₄₆ N ₁₀ O ₈ S ₂	[M+H] ⁺	835.3014	835.3021	0.8	6.10E+04	18.64
伐地那非N-氧化物	448184-48-3	Vardenafil N-oxide	C ₂₃ H ₃₂ N ₆ O ₅ S	[M+H] ⁺	505.2228	505.2231	0.7	9.10E+05	14.88
伐地那非哌嗪酮	448184-58-5	Vardenafil oxopiperazine	C ₂₁ H ₂₆ N ₆ O ₅ S	[M+H] ⁺	475.1758	475.1759	0.1	3.60E+04	15.97
文拉法辛	93413-69-5	Venlafaxine	C ₁₇ H ₂₇ NO ₂	[M+H] ⁺	278.2115	278.2114	-0.2	1.20E+06	12.19
维拉帕米	52-53-9	Verapamil	C ₂₇ H ₃₈ N ₂ O ₄	[M+H] ⁺	455.2904	455.2906	0.3	9.00E+06	14.95
维格列汀	274901-16-5	Vildagliptin	C ₁₇ H ₂₅ N ₃ O ₂	[M+H] ⁺	304.2020	304.2020	0.2	9.70E+05	6.21
长春西汀	42971-09-5	Vinpocetine	C ₂₂ H ₂₆ N ₂ O ₂	[M+H] ⁺	351.2067	351.2071	1.0	3.70E+05	14.98
维吉尼霉素 M1	21411-53-0	Virginiamycin M1	C ₂₈ H ₃₅ N ₃ O ₇	[M+H] ⁺	526.2548	526.2551	0.5	8.60E+05	16.66
维吉尼霉素 S1	23152-29-6	Virginiamycin S1	C ₄₃ H ₄₈ N ₇ O ₁₀	[M+H] ⁺	824.3614	824.3618	0.6	6.30E+05	17.46
伏格列波糖	83480-29-9	Voglibose	C ₁₀ H ₂₁ NO ₇	[M+H] ⁺	268.1391	268.1393	0.9	9.10E+05	0.90
杀鼠灵	81-81-2	Warfarin	C ₁₉ H ₁₆ O ₄	[M-] ⁻	307.0976	307.0971	-1.5	3.10E+06	6.73
苯酰胺那非	1020251-53-9	Xanthoantrafil	C ₁₉ H ₂₃ N ₃ O ₆	[M+H] ⁺	390.1660	390.1661	0.2	2.70E+05	15.59
育亨宾	65-19-0	Yohimbine hydrochloride	C ₂₁ H ₂₆ N ₂ O ₃	[M+H] ⁺	355.2016	355.2020	1.0	3.10E+06	9.70
扎来普隆	151319-34-5	Zaleplon	C ₁₇ H ₁₅ N ₃ O	[M+H] ⁺	306.1349	306.1351	0.5	1.90E+05	14.68
齐帕特罗	119520-05-7	Zilpaterol	C ₁₄ H ₁₉ N ₃ O ₂	[M+H] ⁺	262.1550	262.1548	-0.7	2.50E+05	5.30
唑吡坦	82626-48-0	Zolpidem	C ₁₉ H ₂₁ N ₃ O	[M+H] ⁺	308.1757	308.1758	0.1	1.40E+06	10.99
唑尼沙胺	68291-97-4	Zonisamide	C ₈ H ₈ N ₂ O ₃ S	[M+H] ⁺	213.0328	213.0326	-0.9	1.50E+04	7.95
佐匹克隆	43200-80-2	Zopiclone	C ₁₇ H ₁₇ ClN ₂ O ₃	[M+H] ⁺	389.1123	389.1128	1.0	1.50E+05	8.92
α-羟基三唑仑	37115-45-0	α-Hydroxytriazolam	C ₁₇ H ₁₂ Cl ₂ N ₄ O	[M+H] ⁺	359.0461	359.0464	0.7	3.80E+04	15.32
β-羟基硫代芬太尼	1474-34-6	β-Hydroxythiofentanyl	C ₂₀ H ₂₆ N ₂ O ₂ S	[M+H] ⁺	359.1788	359.1791	0.8	2.70E+07	11.17
[1-(5-氟戊基)-1H-咪唑-3-基](2-碘苯基)甲酮	335161-03-0	AM-694	C ₂₀ H ₁₉ FINO	[M+H] ⁺	436.0568	436.0575	1.5	2.83E+07	16.28
亚甲基二氧吡咯戊酮盐酸盐	24622-62-6	MDPV	C ₁₆ H ₂₁ NO ₃	[M+H] ⁺	276.1594	276.1596	0.6	3.83E+07	5.91
去甲西洋	1088-11-5	Nordazepam	C ₁₅ H ₁₁ ClN ₂ O	[M+H] ⁺	271.0633	271.0634	0.5	1.34E+07	13.50
1-(2-噻吩基)-2-(N-吡咯烷基)-1-戊酮盐酸盐	暂无	α-PVT	C ₁₃ H ₁₉ NOS	[M+H] ⁺	238.1260	238.1261	0.3	2.92E+07	4.44
1-[3,4-(亚甲二氧基)苯基]-2-(N-吡咯烷基)-1-丙酮盐酸盐	24698-57-5	MDPPP	C ₁₄ H ₁₇ NO ₃	[M+H] ⁺	248.1281	248.1282	0.3	3.14E+07	3.69
1-[3,4-(亚甲二氧基)苯基]-2-(N-吡咯烷基)-1-丁酮盐酸盐	24622-60-4	MDPBP	C ₁₅ H ₁₉ NO ₃	[M+H] ⁺	262.1438	262.1439	0.6	3.19E+07	4.50
1-(3-氯苯基)哌嗪盐酸盐	13078-15-4	mCPP	C ₁₀ H ₁₃ ClN ₂	[M+H] ⁺	197.0840	197.0841	0.5	1.44E+07	4.72
1-(3-三氟甲基苯基)哌嗪二盐酸盐	76835-14-8	TFMPP	C ₁₁ H ₁₃ F ₃ N ₂	[M+H] ⁺	231.1104	231.1105	0.6	2.01E+07	6.03
1,4-二苄基哌嗪	1034-11-3	DBZP	C ₁₈ H ₂₂ N ₂	[M+H] ⁺	267.1856	267.1857	0.6	3.96E+07	6.29
1-(4-甲基苯基)-2-甲氨基-1-丁酮盐酸盐	1336911-98-8	4-MeBP	C ₁₂ H ₁₇ NO	[M+H] ⁺	192.1383	192.1382	-0.4	1.90E+07	5.21
1-(4-氟苯基)-2-(N-吡咯烷基)-1-戊酮盐酸盐	850352-31-7	4-F-α-PVP	C ₁₅ H ₂₀ FNO	[M+H] ⁺	250.1602	250.1604	0.7	1.67E+07	5.88
1-(4-氟苯基)-3-(1-萘甲酰基)哌嗪	暂无	FUB-JWH-018	C ₂₆ H ₁₈ FNO	[M+H] ⁺	380.1445	380.1447	0.4	2.91E+07	17.54
1-(4-氟苯基)咪唑-3-甲酸-8-噻啉酯	1800098-36-5	FUB-PB-22	C ₂₅ H ₁₇ FN ₂ O ₂	[M+H] ⁺	397.1347	397.1348	0.2	5.80E+06	17.00

中文名	CAS号	英文名	分子式	加合离子形式	精确离子质量	实测离子质量	质量偏差 (ppm)	峰面积	保留时间
4-甲基甲卡西酮盐酸盐	1189726-22-4	4-MMC	C ₁₁ H ₁₅ NO	[M+H] ⁺	178.1226	178.1226	-0.1	1.51E+07	4.05
1-(2-苯并咪唑基)-N-甲基-2-丙胺盐酸盐	100389-74-0	2-MAPB	C ₁₂ H ₁₅ NO	[M+H] ⁺	190.1226	190.1226	0.0	1.41E+07	4.62
1-(4-甲氧基苯基)-2-(N-吡咯烷基)-1-戊酮盐酸盐	5537-19-9	4-MeO- α -PVP	C ₁₆ H ₂₃ NO ₂	[M+H] ⁺	262.1802	262.1804	0.9	3.81E+07	6.61
1-(5-苯并咪唑基)-N-甲基-2-丙胺盐酸盐	1823925-53-6	5-MAPB	C ₁₂ H ₁₅ NO	[M+H] ⁺	190.1226	190.1226	0.0	1.41E+07	4.62
1-(5-氟戊基)-3-(2,2,3,3-四甲基环丙甲酰基)吡啶	1364933-54-9	5F-UR-144	C ₂₁ H ₂₈ FNO	[M+H] ⁺	330.2228	330.2227	-0.2	4.79E+07	17.88
1-(5-氟戊基)-3-(4-甲基-1-萘甲酰基)吡啶	1354631-24-5	MAM-2201	C ₂₅ H ₂₄ FNO	[M+H] ⁺	374.1915	374.1915	0.1	4.14E+07	17.78
1-(5-氟戊基)-3-(4-乙基-1-萘甲酰基)吡啶	1364933-60-7	EAM-2201	C ₂₆ H ₂₆ FNO	[M+H] ⁺	388.2071	388.2068	-0.8	4.40E+07	18.17
1-(5-氟戊基)吡啶-3-甲酸-8-喹啉酯	1400742-41-7	5F-PB-22	C ₂₃ H ₂₁ FN ₂ O ₂	[M+H] ⁺	377.1660	377.1662	0.7	2.95E+07	16.65
1-苯基-2-(N-吡咯烷基)-1-丁酮盐酸盐	13415-54-8	α -PBP	C ₁₄ H ₁₉ NO	[M+H] ⁺	218.1539	218.1540	0.2	3.50E+07	4.14
1-苯基-2-(N-吡咯烷基)-1-庚酮盐酸盐	13415-55-9	α -PHPP	C ₁₇ H ₂₅ NO	[M+H] ⁺	260.2009	260.2009	0.1	4.02E+07	9.67
1-苯基-2-(N-吡咯烷基)-1-戊酮盐酸盐	5485-65-4	α -PVP	C ₁₅ H ₂₁ NO	[M+H] ⁺	232.1696	232.1696	0.1	3.24E+07	5.45
1-苯基-2-甲氧基-1-丁酮盐酸盐	166593-10-8	Buphedrone	C ₁₁ H ₁₅ NO	[M+H] ⁺	178.1226	178.1226	-0.2	1.45E+07	3.66
1-苯基-2-甲氧基-1-戊酮盐酸盐	879669-95-1	Pentadrone	C ₁₂ H ₁₇ NO	[M+H] ⁺	192.1383	192.1382	-0.3	2.09E+07	4.96
1-己基-3-(1-萘甲酰基)吡啶	209414-08-4	JWH-019	C ₂₅ H ₂₅ NO	[M+H] ⁺	356.2009	356.2009	0.0	3.75E+07	18.81
1-戊基-3-(2,2,3,3-四甲基环丙甲酰基)吡啶	1199943-44-6	UR-144	C ₂₁ H ₂₉ NO	[M+H] ⁺	312.2322	312.2322	0.0	4.77E+07	18.85
1-戊基-3-(4-甲氧基-1-萘甲酰基)吡啶	210179-46-7	JWH-081	C ₂₅ H ₂₅ NO ₂	[M+H] ⁺	372.1958	372.1958	0.0	4.19E+07	18.62
1-戊基-3-(4-甲氧基萘甲酰基)吡啶	1345966-78-0	RCS-4	C ₂₅ H ₂₃ NO ₂	[M+H] ⁺	322.1802	322.1802	0.1	3.67E+07	17.83
1-戊基吡啶-3-甲酸-8-喹啉酯	1400742-17-7	PB-22	C ₂₃ H ₂₂ N ₂ O ₂	[M+H] ⁺	359.1754	359.1754	-0.1	2.46E+07	17.83
2-氨基苄满盐酸盐	2338-18-3	2-AI	C ₉ H ₁₁ N	[M+H] ⁺	134.0964	134.0963	-0.9	1.42E+06	2.93
2-二甲氨基-1-[3,4-(亚二甲氧基)苯基]-1-丙酮盐酸盐	109367-07-9	Dimethylone	C ₁₂ H ₁₅ NO ₃	[M+H] ⁺	222.1125	222.1126	0.5	3.14E+07	3.20
3-甲氧基甲卡西酮盐酸盐	1435933-70-2	3-MeOMC	C ₁₁ H ₁₅ NO ₂	[M+H] ⁺	194.1176	194.1176	0.0	1.71E+07	3.55
1-戊基-3-(4-甲基-1-萘甲酰基)吡啶	619294-47-2	JWH-122	C ₂₅ H ₂₅ NO	[M+H] ⁺	356.2009	356.2009	0.0	3.75E+07	18.81
2-甲氧基-1-[3,4-(亚二甲氧基)苯基]-1-丁酮盐酸盐	17762-90-2	Butylone	C ₁₂ H ₁₅ NO ₃	[M+H] ⁺	222.1125	222.1126	0.5	3.14E+07	3.20
3,4-二甲基甲卡西酮盐酸盐	1081772-06-6	3,4-DMMC	C ₁₂ H ₁₇ NO	[M+H] ⁺	192.1383	192.1382	-0.3	2.09E+07	4.96
1-苯基-2-乙氧基-1-丁酮盐酸盐	暂无	NEB	C ₁₂ H ₁₇ NO	[M+H] ⁺	192.1383	192.1382	-0.3	2.09E+07	4.96
3,4-亚二甲氧基乙卡西酮盐酸盐	1454266-19-3	Ethylone	C ₁₂ H ₁₅ NO ₃	[M+H] ⁺	222.1125	222.1126	0.5	3.14E+07	3.20
4-甲氧基甲卡西酮盐酸盐	879665-92-6	Methedrone	C ₁₁ H ₁₅ NO ₂	[M+H] ⁺	194.1176	194.1176	0.0	1.71E+07	3.55
1-丁基-3-(1-萘甲酰基)吡啶	208987-48-8	JWH-073	C ₂₃ H ₂₁ NO	[M+H] ⁺	328.1696	328.1695	-0.4	4.68E+07	17.57
2-甲基-1-丙基-3-(1-萘甲酰基)吡啶	155471-08-2	JWH-015	C ₂₃ H ₂₁ NO	[M+H] ⁺	328.1696	328.1695	-0.4	4.68E+07	17.57
3,4-二氧-N-[1-(二甲氨基环己基)甲基]苯甲酰胺	55154-30-8	AH-7921	C ₁₆ H ₂₂ Cl ₂ N ₂ O	[M+H] ⁺	329.1182	329.1180	-0.7	1.23E+07	9.51
3-氟甲基苯丙胺盐酸盐	1324717-74-9	3-FMA	C ₁₀ H ₁₄ FN	[M+H] ⁺	168.1183	168.1182	-0.9	1.35E+07	3.63
4-氟甲基苯丙胺盐酸盐	52063-62-4	4-FMA	C ₁₀ H ₁₄ FN	[M+H] ⁺	168.1183	168.1182	-0.9	1.35E+07	3.63
4-甲基乙卡西酮盐酸盐	1266688-86-1	4-MEC	C ₁₂ H ₁₇ NO	[M+H] ⁺	192.1383	192.1383	-0.1	2.26E+07	4.54
4-氟甲卡西酮盐酸盐	7589-35-7	4-FMC	C ₁₀ H ₁₂ FNO	[M+H] ⁺	182.0976	182.0973	-1.3	3.71E+05	3.09
4-氯苯丙胺盐酸盐	25356-95-0	4-CA	C ₉ H ₁₂ ClN	[M+H] ⁺	170.0731	170.0728	-1.9	7.21E+04	4.92
4-氯甲卡西酮盐酸盐	暂无	4-CMC	C ₁₀ H ₁₂ ClNO	[M+H] ⁺	198.0680	198.0677	-1.6	2.46E+05	4.25
6-溴-3,4-亚二甲氧基甲基苯丙胺盐酸盐	暂无	6-Br-MDMA	C ₁₁ H ₁₄ BrNO ₂	[M+H] ⁺	272.0281	272.0278	-0.9	2.21E+05	5.73
N-(1-氨基酰基-2-甲基丙基)-1-(环己基甲基)吡啶-3-甲酰胺	1185887-21-1	AB-CHMINACA	C ₂₀ H ₂₈ N ₄ O ₂	[M+H] ⁺	357.2285	357.2284	-0.2	2.29E+07	17.24
N-(1-氨基酰基-2-甲基丙基)-1-(4-氟苄基)吡啶-3-甲酰胺	1629062-56-1	AB-FUBINACA	C ₂₀ H ₂₁ FN ₄ O ₂	[M+H] ⁺	369.1721	369.1719	-0.6	1.47E+07	15.28
N-(1-氨基酰基-2-甲基丙基)-1-(5-氟戊基)吡啶-3-甲酰胺	1800101-60-3	5F-AB-PINACA	C ₁₈ H ₂₅ FN ₄ O ₂	[M+H] ⁺	349.2034	349.2035	0.2	2.26E+07	14.75
N-(1-金刚烷基)-1-(5-氟戊基)吡啶-3-甲酰胺	1354631-26-7	STS-135	C ₂₄ H ₃₁ FN ₂ O	[M+H] ⁺	383.2493	383.2494	0.2	4.84E+07	18.34
N-(1-金刚烷基)-1-戊基吡啶-3-甲酰胺	1345973-53-6	APINACA	C ₂₃ H ₃₁ N ₃ O	[M+H] ⁺	366.2540	366.2537	-0.8	4.21E+07	19.65
N-(1-甲基-1-苯基乙基)-1-(4-四氢吡喃基甲基)吡啶-3-甲酰胺	1400742-50-8	CUMYL-THPINACA	C ₂₃ H ₂₇ N ₃ O ₂	[M+H] ⁺	378.2176	378.2174	-0.5	4.05E+07	16.74
N-(1-甲氧基羰基-2,2-二甲基丙基)-1-(4-氟苄基)吡啶-3-甲酰胺	1715016-77-5	MDMB-FUBINACA	C ₂₂ H ₂₄ FN ₃ O ₃	[M+H] ⁺	398.1874	398.1873	-0.2	3.97E+07	17.46
N-(1-甲氧基羰基-2-甲基丙基)-1-(5-氟戊基)吡啶-3-甲酰胺	1715016-74-2	5F-AMB	C ₁₉ H ₂₆ FN ₃ O ₃	[M+H] ⁺	364.2031	364.2029	-0.6	5.97E+07	16.55
N,N-二烯丙基-5-甲氧基色胺	928822-98-4	5-MeO-DALT	C ₁₇ H ₂₂ N ₂ O	[M+H] ⁺	271.1805	271.1804	-0.4	1.24E+07	5.33
芬纳西洋	51753-57-2	Phenazepam	C ₁₅ H ₁₀ BrClN ₂ O	[M+H] ⁺	348.9738	348.9740	0.5	4.40E+06	14.15

中文名	CAS号	英文名	分子式	加合离子形式	精确离子质量	实测离子质量	质量偏差 (ppm)	峰面积	保留时间
3-氟苯丙胺盐酸盐	1716-59-2	3-FA	C ₉ H ₁₂ FN	[M+H] ⁺	154.1027	154.1025	-1.2	9.20E+05	3.51
3-甲基甲卡西酮盐酸盐	1246816-62-5	3-MMC	C ₁₁ H ₁₅ NO	[M+H] ⁺	178.1226	178.1225	-1.0	3.06E+06	3.96
苄基呱嗪二盐酸盐	5321-63-1	BZP	C ₁₁ H ₁₆ N ₂	[M+H] ⁺	177.1386	177.1386	0.0	1.07E+07	2.38
布苯丙胺盐酸盐	29705-96-2	DOB	C ₁₁ H ₁₆ BrNO ₂	[M+H] ⁺	274.0437	274.0438	0.2	5.91E+06	6.73
二甲基安非他明盐酸盐	33286-27-0	DMA	C ₁₁ H ₁₇ N	[M+H] ⁺	164.1434	164.1434	-0.1	1.38E+07	3.34
二甲氧安非他明盐酸盐	24973-25-9	2,5-DMA	C ₁₁ H ₁₇ NO ₂	[M+H] ⁺	196.1332	196.1331	-0.4	7.68E+06	4.67
乙卡西酮盐酸盐	51553-17-4	Ethcathinone	C ₁₁ H ₁₅ NO	[M+H] ⁺	178.1226	178.1226	-0.2	1.45E+07	3.66
2-甲基甲卡西酮盐酸盐	1246815-51-9	2-MMC	C ₁₁ H ₁₅ NO	[M+H] ⁺	178.1226	178.1226	-0.2	1.45E+07	3.66
4-氟苯丙胺盐酸盐	64609-06-9	4-FA	C ₉ H ₁₂ FN	[M+H] ⁺	154.1027	154.1025	-1.2	2.37E+06	3.55
3-氯甲卡西酮盐酸盐	1607439-32-6	3-CMC	C ₁₀ H ₁₂ ClNO	[M+H] ⁺	198.0680	198.0678	-1.3	2.26E+04	4.14
N-(1-氨基甲基-2-甲基丙基)-1-戊基吡啶-3-甲酰胺	1445583-20-9	AB-PINACA	C ₁₈ H ₂₆ N ₄ O ₂	[M+H] ⁺	331.2129	331.2126	-0.9	9.19E+06	16.45
1-[3,4-(亚甲二氧基)苯基]-2-二甲氨基-1-丁酮盐酸盐	17763-12-1	Dibutylone	C ₁₃ H ₁₇ NO ₃	[M+H] ⁺	236.1281	236.1279	-1.0	1.39E+07	4.03
1-[2-(5,6,7,8-四氢萘基)]-2-(N-吡咯烷基)-1-戊酮盐酸盐	暂无	β-TH-Naphyrone	C ₁₉ H ₂₇ NO	[M+H] ⁺	286.2165	286.2163	-0.9	2.45E+07	12.46
4-氯乙卡西酮盐酸盐	22198-75-0	4-CEC	C ₁₁ H ₁₄ ClNO	[M+H] ⁺	212.0837	212.0835	-0.7	1.49E+06	4.75
3-甲基-2-[1-(4-氟苄基)吡啶-3-甲酰氨基]丁酸甲酯	1715016-76-4	AMB-FUBINACA	C ₂₁ H ₂₇ FN ₃ O ₃	[M+H] ⁺	384.1718	384.1718	0.0	2.61E+07	16.85
1-[3,4-(亚甲二氧基)苯基]-2-乙氨基-1-戊酮盐酸盐	17763-02-9	N-Ethylpentylone	C ₁₄ H ₁₉ NO ₃	[M+H] ⁺	250.1438	250.1436	-0.8	1.51E+07	5.80
氟阿普唑仑	28910-91-0	Flualprazolam	C ₁₇ H ₁₂ ClFN ₄	[M+H] ⁺	327.0807	327.0806	-0.3	1.59E+07	12.51
2-甲基-1-戊基-3-(1-萘甲酰基)吡啶	155471-10-6	JWH-007	C ₂₅ H ₂₅ NO	[M+H] ⁺	356.2009	356.2009	-0.1	9.18E+06	18.61
1-戊基-3-(1-萘甲酰基)吡啶	209414-07-3	JWH-018	C ₂₄ H ₂₃ NO	[M+H] ⁺	342.1852	342.1853	0.3	4.67E+06	18.38
1-戊基-3-(4-乙基-1-萘甲酰基)吡啶	824959-81-1	JWH-210	C ₂₆ H ₂₇ NO	[M+H] ⁺	370.2165	370.2165	-0.1	4.51E+06	19.09
2-(2-甲氧基苯基)-1-(1-戊基-1H-吡啶-3-基)乙酮	864445-43-2	JWH-250	C ₂₂ H ₂₅ NO ₂	[M+H] ⁺	336.1958	336.1957	-0.4	4.68E+06	17.90
1-戊基-2-(2-甲基苯基)-4-(1-萘甲酰基)吡啶	914458-22-3	JWH-370	C ₂₇ H ₂₇ NO	[M+H] ⁺	382.2165	382.2165	-0.1	3.53E+06	19.11
1-[(N-甲基-2-哌啶基)甲基]-3-(1-萘甲酰基)吡啶	137642-54-7	AM-1220	C ₂₆ H ₂₆ N ₂ O	[M+H] ⁺	383.2118	383.2120	0.6	2.90E+06	11.58
1-(5-氟戊基)-3-(1-萘甲酰基)-1H-吡啶	335161-24-5	AM-2201	C ₂₄ H ₂₂ FNO	[M+H] ⁺	360.1758	360.1759	0.4	2.60E+06	17.27
1-[(N-甲基-2-哌啶基)甲基]-3-(2-碘苯甲酰基)吡啶	444912-75-8	AM-2233	C ₂₂ H ₂₃ IN ₂ O	[M+H] ⁺	459.0928	459.0932	0.8	2.07E+06	9.73
1-(4-四氢吡喃基甲基)-3-(2,2,3,3-四甲基环丙甲酰基)吡啶	895155-57-4	A-834,735	C ₂₂ H ₂₉ NO ₂	[M+H] ⁺	340.2271	340.2270	-0.3	2.80E+06	17.38
1-[2-(N-吗啉基)乙基]-3-(2,2,3,3-四甲基环丙甲酰基)吡啶	895155-26-7	A-796,260	C ₂₂ H ₃₀ N ₂ O ₂	[M+H] ⁺	355.2380	355.2381	0.2	2.69E+06	13.51
N-(1-金刚烷基)-1-戊基吡啶-3-甲酰胺	1345973-50-3	APICA	C ₂₄ H ₃₂ N ₂ O	[M+H] ⁺	365.2587	365.2587	-0.2	4.66E+06	19.11
1-(1-萘甲酰基)-4-戊氧基萘	432047-72-8	CB-13	C ₂₆ H ₂₄ O ₂	[M+H] ⁺	369.1849	369.1848	-0.4	3.66E+06	19.76
N-(1-金刚烷基)-1-(5-氟戊基)吡啶-3-甲酰胺	1400742-13-3	5F-APINACA	C ₂₃ H ₃₀ FN ₃ O	[M+H] ⁺	384.2446	384.2446	0.2	3.35E+06	17.74
N-(1-氨基甲基-2-苯基乙基)-1-(5-氟戊基)吡啶-3-甲酰胺	2205029-76-9	PX-2	C ₂₂ H ₂₅ FN ₄ O ₂	[M+H] ⁺	397.2034	397.2037	0.8	1.16E+06	15.56
1-[(N-甲基-2-哌啶基)甲基]-3-(1-金刚烷基甲酰基)吡啶	335160-66-2	AM-1248	C ₂₆ H ₃₄ N ₂ O	[M+H] ⁺	391.2744	391.2746	0.6	3.36E+06	14.75
N-(1-氨基甲基-2,2-二甲基丙基)-1-戊基吡啶-3-甲酰胺	1445583-48-1	ADBICA	C ₂₀ H ₂₉ N ₃ O ₂	[M+H] ⁺	344.2333	344.2332	-0.2	9.81E+05	17.05
N-(1-氨基甲基-2-甲基丙基)-1-(5-氟戊基)吡啶-3-甲酰胺	1863065-86-4	5F-ABICA	C ₁₉ H ₂₆ FN ₃ O ₂	[M+H] ⁺	348.2082	348.2081	-0.2	8.50E+05	14.47
N-(1-氨基甲基-2,2-二甲基丙基)-1-(5-氟戊基)吡啶-3-甲酰胺	1863065-82-0	5F-ADBICA	C ₂₀ H ₂₈ FN ₃ O ₂	[M+H] ⁺	362.2238	362.2236	-0.5	1.12E+06	15.63
N-(1-氨基甲基-2,2-二甲基丙基)-1-戊基吡啶-3-甲酰胺	1633766-73-0	ADB-PINACA	C ₁₉ H ₂₈ N ₄ O ₂	[M+H] ⁺	345.2285	345.2286	0.2	1.22E+06	17.18
[1-(5-氟戊基)-1H-吡啶-3-基](吡啶-3-基)甲酮	1445579-30-5	5-Fluoropentyl-3-pyridinoylindole	C ₁₉ H ₁₉ FN ₂ O	[M+H] ⁺	311.1554	311.1554	-0.1	3.61E+06	14.59
N-(1-氨基-1-氧代丁-2-基)-1-(5-氟戊基)-1H-吡啶[2,3-b]吡啶-3-甲酰胺	2205029-26-9	5F-AMP-P7AICA	C ₁₇ H ₂₃ FN ₄ O ₂	[M+H] ⁺	335.1878	335.1878	0.1	5.09E+05	10.60
3,3-二甲基-2-[1-(5-氟戊基)吡啶-3-甲酰氨基]丁酸甲酯	1715016-75-3	5F-ADB	C ₂₀ H ₂₈ FN ₃ O ₃	[M+H] ⁺	378.2187	378.2189	0.3	4.24E+06	17.20
N-(1-氨基-3,3-二甲基-1-氧代丁-2-基)-1-(5-氟戊基)-1H-吡啶-3-甲酰胺	1863065-90-0	5F-ADB-PINACA	C ₁₉ H ₂₇ FN ₄ O ₂	[M+H] ⁺	363.2191	363.2191	0.1	1.54E+06	15.78

中文名	CAS号	英文名	分子式	加合离子形式	精确离子质量	实测离子质量	质量偏差 (ppm)	峰面积	保留时间
N-(金刚烷-1-基)-1-(5-氟戊基)-4-甲基-5-苯基-1H-吡啶-3-甲酰胺	335196-76-4	5F-AMPPPCA	C ₂₆ H ₃₄ FN ₃ O	[M+H] ⁺	424.2759	424.2758	-0.1	5.35E+06	19.29
(4-苄基咪唑-1-基)[1-(5-氟戊基)-1H-咪唑-3-基]甲酮	2205044-69-3	5F-BEPIRAPIM	C ₂₅ H ₃₀ FN ₃ O	[M+H] ⁺	408.2446	408.2446	0.1	2.38E+06	11.27
1-(5-氟戊基)-1H-吡咯并[2,3-b]吡啶-3-甲酸-8-喹啉酯	暂无	5F-QUP7AIC	C ₂₂ H ₂₀ FN ₃ O ₂	[M+H] ⁺	378.1612	378.1616	0.9	2.12E+06	16.06
N-(1-氨基-3-甲基-1-氧代丁-2-基)-1-苄基-1H-咪唑-3-甲酰胺	1969264-37-6 (S构型)	AB-BICA	C ₂₁ H ₂₃ N ₃ O ₂	[M+H] ⁺	350.1863	350.1864	0.3	6.76E+05	15.06
N-(1-氨基-3-甲基-1-氧代丁-2-基)-1-(4-氟苄基)-1H-咪唑-3-甲酰胺	1801338-22-6	AB-FUBICA	C ₂₁ H ₂₂ FN ₃ O ₂	[M+H] ⁺	368.1769	368.1769	0.0	5.56E+05	15.08
N-(1-氨基-3,3-二甲基-1-氧代丁-2-基)-1-苄基-1H-咪唑-3-甲酰胺	2219319-40-9	ADB-BICA	C ₂₂ H ₂₅ N ₃ O ₂	[M+H] ⁺	364.2020	364.2031	3.3	4.24E+06	16.55
N-(1-氨基-3,3-二甲基-1-氧代丁-2-基)-1-苄基-1H-咪唑-3-甲酰胺	1185282-27-2	ADB-BINACA	C ₂₁ H ₂₄ N ₄ O ₂	[M+H] ⁺	365.1972	365.1973	0.2	1.14E+06	16.20
N-(1-氨基-3,3-二甲基-1-氧代丁-2-基)-1-(4-氟苄基)-1H-咪唑-3-甲酰胺	1801338-23-7 (S构型)	ADB-FUBICA	C ₂₂ H ₂₄ FN ₃ O ₂	[M+H] ⁺	382.1925	382.1928	0.7	5.18E+05	16.02
N-(1-氨基-3,3-二甲基-1-氧代丁-2-基)-1-(4-氟苄基)咪唑-3-甲酰胺	1445583-51-6	ADB-FUBINACA	C ₂₁ H ₂₃ FN ₄ O ₂	[M+H] ⁺	383.1878	383.1879	0.4	7.46E+05	16.15
N-(金刚烷-1-基)-4-甲基-1-戊基-5-苯基-1H-吡啶-3-甲酰胺	2170562-03-3	AMPPPCA	C ₂₆ H ₃₅ N ₃ O	[M+H] ⁺	406.2853	406.2853	0.0	5.77E+06	20.04
N-(金刚烷-1-基)-2-戊基-2H-咪唑-3-甲酰胺	2170885-58-0	APINACA-2H	C ₂₃ H ₃₁ N ₃ O	[M+H] ⁺	366.2540	366.2540	-0.1	4.77E+06	19.65
萘-1-基[1-(戊基-1H-苯并[d]咪唑-2-基)甲酮	2316839-70-8	BIM-018	C ₂₃ H ₂₂ N ₂ O	[M+H] ⁺	343.1805	343.1806	0.4	2.98E+06	18.68
1-(5-氟戊基)-2-(1-萘甲酰基)苯并咪唑	1984789-90-3	BIM-2201	C ₂₃ H ₂₁ FN ₂ O	[M+H] ⁺	361.1711	361.1711	0.2	2.17E+06	17.60
N-(1-氨基-3-甲基-1-氧代丁-2-基)-1-(5-氯戊基)-1H-咪唑-3-甲酰胺	1863066-01-6	5Cl-AB-PINACA	C ₁₈ H ₂₅ ClN ₄ O ₂	[M+H] ⁺	365.1739	365.1741	0.7	9.09E+05	15.80
1-戊基-1H-咪唑-3-甲酸-1-萘酯	2180934-13-6	SDB-005	C ₂₃ H ₂₂ N ₂ O ₂	[M+H] ⁺	359.1754	359.1757	0.7	2.40E+06	17.83
1-(5-氟戊基)-N-(萘-1-基)-1H-咪唑-3-甲酰胺	1445581-91-8	5F-MN-18	C ₂₃ H ₂₂ FN ₃ O	[M+H] ⁺	376.1820	376.1821	0.3	3.43E+06	17.74
N-(1-氨基-3,3-二甲基-1-氧代丁-2-基)-1-(环己基甲基)咪唑-3-甲酰胺	1863065-92-2	ADB-CHMINACA	C ₂₁ H ₃₀ N ₄ O ₂	[M+H] ⁺	371.2442	371.2439	-0.8	4.36E+05	17.82
1-(4-氟苄基)-N-(1-金刚烷基)咪唑-3-甲酰胺	2180933-90-6	FUB-APINACA	C ₂₅ H ₂₆ FN ₃ O	[M+H] ⁺	404.2133	404.2133	0.1	3.21E+06	18.91
1-(5-氟戊基)咪唑-3-甲酸-1-萘酯	2042201-16-9	NM-2201	C ₂₄ H ₂₂ FNO ₂	[M+H] ⁺	376.1707	376.1710	0.8	1.05E+06	18.14
萘-1-基(9-戊基-9H-咪唑-3-基)甲酮	2219320-91-7	EG-018	C ₂₈ H ₂₅ NO	[M+H] ⁺	392.2009	392.2009	-0.1	3.70E+06	19.71
2-[1-(4-氟苄基)-1H-咪唑-3-甲酰氨基]-3-甲基丁酸乙酯	2243815-22-5	EMB-FUBINACA	C ₂₂ H ₂₄ FN ₃ O ₃	[M+H] ⁺	398.1874	398.1875	0.2	3.72E+06	17.45
2-[1-(4-氟苄基)-1H-咪唑-3-甲酰氨基]-3,3-二甲基丁酸甲酯	1971007-91-6 (S构型)	MDMB-FUBICA	C ₂₃ H ₂₅ FN ₃ O ₃	[M+H] ⁺	397.1922	397.1922	-0.1	2.62E+06	17.09
1-(5-氟戊基)-1H-咪唑-3-甲酸-1-萘酯	2185863-14-1	5F-SDB-005	C ₂₃ H ₂₁ FN ₂ O ₂	[M+H] ⁺	377.1660	377.1663	0.9	2.35E+06	16.66
3-甲基-2-[1-(环己基甲基)咪唑-3-甲酰氨基]丁酸甲酯	1971007-94-9 (S构型)	AMB-CHMICA	C ₂₂ H ₃₀ N ₂ O ₃	[M+H] ⁺	371.2329	371.2327	-0.5	2.21E+06	17.94
N-(1-氨基-3,3-二甲基-1-氧代丁-2-基)-1-环己基甲基-1H-咪唑-3-甲酰胺	2221100-70-3	ADB-CHMICA	C ₂₂ H ₃₁ N ₃ O ₂	[M+H] ⁺	370.2489	370.2489	0.0	1.16E+06	17.70
2-[1-(环己基甲基)-1H-咪唑-3-甲酰氨基]-3,3-二甲基丁酸乙酯	暂无	EDMB-CHMICA	C ₂₄ H ₃₄ N ₂ O ₃	[M+H] ⁺	399.2642	399.2641	-0.3	3.48E+06	18.82
2-[1-(5-氟戊基)-1H-咪唑-3-甲酰氨基]-3,3-二甲基丁酸乙酯	2504100-69-8 (S构型)	5F-EDMB-PINACA	C ₂₁ H ₃₀ FN ₃ O ₃	[M+H] ⁺	392.2344	392.2342	-0.4	4.78E+06	17.70
[1-(5-氟戊基)-1H-咪唑-3-基](萘-1-基)甲酮	1801552-01-1	THJ-2201	C ₂₃ H ₂₁ FN ₂ O	[M+H] ⁺	361.1711	361.1714	0.8	2.99E+06	17.72
N-苄基-1-戊基-1H-咪唑-3-甲酰胺	695213-59-3	SDB-006	C ₂₁ H ₂₄ N ₂ O	[M+H] ⁺	321.1961	321.1960	-0.4	4.22E+06	17.17
2-[1-(5-氟戊基)-1H-咪唑-3-甲酰氨基]-3,3-二甲基丁酸甲酯	2482776-65-6	5F-MDMB-PICA	C ₂₁ H ₂₅ FN ₃ O ₃	[M+H] ⁺	377.2235	377.2237	0.4	3.31E+06	16.84
1-(5-氟戊基)-N-(萘-1-基)-1H-咪唑-3-甲酰胺	1445580-60-8	5F-MN-24	C ₂₄ H ₂₃ FN ₂ O	[M+H] ⁺	375.1867	375.1867	0.0	2.89E+06	16.57
[9-(5-氟戊基)-9H-咪唑-3-基](萘-1-基)甲酮	2365471-72-1	EG-2201	C ₂₈ H ₂₄ FNO	[M+H] ⁺	410.1915	410.1915	0.0	2.46E+06	18.88
1-戊基-2-(2-氯苯乙酰基)咪唑	864445-54-5	JWH-203	C ₂₁ H ₂₂ ClNO	[M+H] ⁺	340.1463	340.1464	0.2	3.42E+06	18.16
2-[1-(5-氟戊基)-1H-咪唑-3-甲酰氨基]-3-甲基丁酸甲酯	1616253-26-9	5F-AMB-PICA	C ₂₀ H ₂₇ FN ₃ O ₃	[M+H] ⁺	363.2078	363.2081	0.6	2.86E+06	16.04
1-(4-氟苄基)-1H-咪唑-3-甲酸-1-萘酯	1883284-94-3	FDU-PB-22	C ₂₆ H ₁₈ FNO ₂	[M+H] ⁺	396.1394	396.1393	-0.4	6.81E+05	18.32
1-(5-氟戊基)-1H-咪唑-3-甲酸-1-金刚烷酯	2365471-88-9	5F-APINAC	C ₂₃ H ₂₅ FN ₂ O ₂	[M+H] ⁺	385.2286	385.2289	0.8	2.62E+06	19.22
N-(金刚烷-1-基)-1-(5-氟戊基)-1H-吡咯并[2,3-b]吡啶-3-甲酰胺	暂无	5F-APTICA	C ₂₃ H ₃₀ FN ₃ O	[M+H] ⁺	384.2446	384.2447	0.3	3.97E+06	18.79
[5-(2-氟苄基)-1-戊基-1H-吡咯-3-基](萘-1-基)甲酮	914458-26-7	JWH-307	C ₂₆ H ₂₄ FNO	[M+H] ⁺	386.1915	386.1916	0.4	3.88E+06	18.73

中文名	CAS号	英文名	分子式	加合离子形式	精确离子质量	实测离子质量	质量偏差 (ppm)	峰面积	保留时间
2-[9-(环己基甲基)-9H-吡唑-3-甲酰氨基]-3,3-二甲基丁酸甲酯	2254407-04-8	MDMB-CHMCZCA	C ₂₇ H ₃₄ N ₂ O ₃	[M+H] ⁺	435.2642	435.2642	0.0	2.65E+06	19.25
5-戊基-2-(2-苯基丙-2-基)-2,5-二氢-1H-吡啶[4,3-b]吡啶-1-酮	2160555-55-3	CUMYL-PEGACLONE	C ₂₅ H ₂₈ N ₂ O	[M+H] ⁺	373.2274	373.2273	-0.4	2.98E+06	18.28
1-(5-氟戊基)-N-(2-苯基丙-2-基)-1H-吡啶-3-甲酰胺	1400742-16-6	5F-CUMYL-PINACA	C ₂₂ H ₂₆ FN ₃ O	[M+H] ⁺	368.2133	368.2132	-0.2	5.87E+06	17.43
2-[1-(环己基甲基)-1H-吡唑-3-甲酰氨基]-3,3-二甲基丁酸甲酯	1715016-78-6	MDMB-CHMINACA	C ₂₂ H ₃₁ N ₃ O ₃	[M+H] ⁺	386.2438	386.2439	0.2	3.99E+06	18.81
[1-(4-氟苄基)-1H-吡啶-3-基](2,2,3,3-四甲基环丙基)甲酯	2185863-15-2	FUB-144	C ₂₃ H ₂₄ FNO	[M+H] ⁺	350.1915	350.1915	0.1	3.50E+06	18.09
2-[1-(4-氟苄基)-1H-吡啶-3-甲酰氨基]-3-甲基丁酸甲酯	1971007-90-5 (S构型)	AMB-FUBICA	C ₂₂ H ₂₃ FN ₂ O ₃	[M+H] ⁺	383.1765	383.1767	0.3	4.43E+06	16.36
2-[1-(4-氟丁基)-1H-吡啶-3-甲酰氨基]-3,3-二甲基丁酸甲酯	2390036-46-9 (S构型)	4F-MDMB-BUTINACA	C ₁₉ H ₂₆ FN ₃ O ₃	[M+H] ⁺	364.2031	364.2032	0.2	4.26E+06	16.55
3-甲基-2-[1-(4-戊烯-1-基)-1H-吡啶-3-甲酰氨基]丁酸甲酯	暂无	AMB-4en-PICA	C ₂₀ H ₂₆ N ₂ O ₃	[M+H] ⁺	343.2016	343.2018	0.4	2.57E+06	16.76
2-[1-(5-氟戊基)-1H-吡啶-3-甲酰氨基]-3-苯丙酸甲酯	暂无	5F-MPP-PICA	C ₂₄ H ₂₇ FN ₂ O ₃	[M+H] ⁺	411.2078	411.2081	0.6	2.70E+06	16.49
1-(4-氰基丁基)-N-(2-苯基丙-2-基)-1H-吡啶-3-甲酰胺	1631074-54-8	4CN-CUMYL-BUTINACA	C ₂₂ H ₂₄ N ₄ O	[M+H] ⁺	361.2023	361.2024	0.3	3.37E+06	15.71
N-(金刚烷-1-基)-1-(5-氟戊基)-1H-吡啶-3-甲酰胺	2160555-52-0	5Cl-APINACA	C ₂₃ H ₃₀ ClN ₃ O	[M+H] ⁺	400.2150	400.2151	0.3	2.96E+06	19.19
1-(5-氟戊基)-N-(2-苯基丙-2-基)-1H-吡啶-3-甲酰胺	1400742-18-8	5F-CUMYL-PICA	C ₂₃ H ₂₇ FN ₂ O	[M+H] ⁺	367.2180	367.2182	0.5	4.11E+06	16.88
2-[1-(4-氟苄基)-1H-吡啶-3-甲酰氨基]戊酸甲酯	暂无	MEP-FUBICA	C ₂₂ H ₂₃ FN ₂ O ₃	[M+H] ⁺	383.1765	383.1767	0.3	4.43E+06	16.36
3,3-二甲基-2-[1-(4-戊烯-1-基)-1H-吡啶-3-甲酰氨基]丁酸甲酯	2504100-70-1 (S构型)	MDMB-4en-PINACA	C ₂₀ H ₂₇ N ₃ O ₃	[M+H] ⁺	358.2125	358.2125	-0.1	3.78E+06	17.86
2-[1-(4-氟丁基)-1H-吡啶-3-甲酰氨基]-3,3-二甲基丁酸甲酯	暂无	4F-MDMB-BUTICA	C ₂₀ H ₂₇ FN ₂ O ₃	[M+H] ⁺	363.2078	363.2078	-0.2	3.25E+06	16.30
2-[1-(5-氟戊基)-1H-吡啶-3-甲酰氨基]-3,3-二甲基丁酸乙酯	暂无	5F-EDMB-PICA	C ₂₂ H ₃₁ FN ₂ O ₃	[M+H] ⁺	391.2391	391.2393	0.5	3.84E+06	17.39
N-(金刚烷-1-基)-1-(4-氟苄基)-1H-吡啶-3-甲酰胺	1445580-39-1	4F-ABUTINACA	C ₂₂ H ₂₈ FN ₃ O	[M+H] ⁺	370.2289	370.2291	0.5	1.04E+07	18.46
N-(金刚烷-1-基)-1-(环己基甲基)-1H-吡啶-3-甲酰胺	1400742-33-7	ACHMINACA	C ₂₅ H ₃₃ N ₃ O	[M+H] ⁺	392.2696	392.2698	0.4	4.50E+06	20.05
N-(1-氨基-3,3-二甲基-1-氧代丁-2-基)-1-丁基-1H-吡啶-3-甲酰胺	暂无	ADB-BUTINACA	C ₁₈ H ₂₆ N ₄ O ₂	[M+H] ⁺	331.2129	331.2128	0.0	2.40E+06	16.46
2-[1-(5-氟戊基)-1H-吡啶-3-甲酰氨基]-3-甲基丁酸乙酯	2648861-83-8 (S构型)	5F-EMB-PICA	C ₂₁ H ₂₉ FN ₂ O ₃	[M+H] ⁺	377.2235	377.2232	-0.9	3.07E+06	16.70
N-(1-氨基-3,3-二甲基-1-氧代丁-2-基)-1-(4-戊烯-1-基)-1H-吡啶-3-甲酰胺	暂无	ADB-4en-PINACA	C ₁₉ H ₂₆ N ₄ O ₂	[M+H] ⁺	343.2129	343.2130	0.5	9.69E+05	16.60
2-[1-戊基-1H-吡啶-3-甲酰氨基]-3,3-二甲基丁酸乙酯	暂无	EDMB-PINACA	C ₂₁ H ₃₁ N ₃ O ₃	[M+H] ⁺	374.2438	374.2439	0.1	4.91E+06	18.67
2-(1-丁基-1H-吡啶-3-甲酰氨基)-3,3-二甲基丁酸甲酯	暂无	MDMB-BUTINACA	C ₁₉ H ₂₇ N ₃ O ₃	[M+H] ⁺	346.2125	346.2125	-0.2	4.65E+06	17.79

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. 或在英国和/或某些其他国家地区的各权利所有人。

© 2021 DH Tech. Dev. Pte. Ltd. RUO-MKT-02-14066-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

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: [SCIEX-China](https://www.sciex.com.cn)