

利用 LCMS-QTOF 和 Insight Discovery 软件快速筛查保健品中非法添加的违禁成分

LCMS-QTOF-107

摘要： 本文利用岛津超高效液相色谱 - 四极杆飞行时间串联质谱仪，结合《保健食品违禁成分 QTOF 质谱库》和便捷数据处理软件 Insight Discovery，建立了一种对保健品中非法添加成分的快速筛查方法。对 10 个加标样品中的 289 种非法添加成分进行测试，其结果显示：连续分析，其重复性和质量偏差均良好，二级碎片与数据库匹配度高。此外，对两种类型保健品样本进行加标回收测试，其结果显示保健饮品、保健胶囊样品回收率在 50-120% 之间的化合物数量在 208~262 个范围内，回收率测试效果良好。使用该方法 and Insight Discovery 软件，可通过一针进样，快速完成目标物的定性筛查，结果准确可靠。

关键词： 四极杆飞行时间串联质谱仪 保健品 非法添加成分 Insight Discovery

技术特点：

- ❖ 利用《保健食品违禁成分 QTOF 质谱库》对 26 类功效的 289 种化合物分析测试效果良好。
- ❖ 基于 Insight Discovery 快速筛查分析，操作简单便捷。

保健品种类繁多，其化学成分复杂，对于该类产品的检测难度大大增加。质谱及相关联用技术作为对复杂基质中小分子化合物检测的主要手段，在保健品中小分子非法添加物检测也具有重要作用。本文增加对 26 类功效的非法添加成分，289 种化合物进行相关分析方法测试。参考标准 BJS 201710《保健食品中 75 种非法添加化学药物的检测》，使用岛

津 LCMS-9050 超高效液相色谱 - 四极杆飞行时间串联质谱仪，对其准确性、回收率等进行了测试，其结果显示分析测试结果良好，可用于保健品中种类繁多及化学成分复杂的检测。基于 Insight Discovery 软件进行快速筛查分析，其操作便捷，适用于保健品非法添加成分的筛查分析实验，该方法准确可靠，可为保健品中风险物质筛查提供帮助。

■ 实验部分

1.1 仪器

岛津 LCMS-9050 超高效液相色谱四极杆飞行时间质谱联用仪，具体配置为：

输 液 泵：	LC-40D XS×2	系 统 控 制 器：	CBM-40
自动进样器：	SIL-40C XS	飞行时间质谱仪：	LCMS-9050
柱 温 箱：	CTO-40C	在 线 脱 气 机：	DGU-405
色 谱 工 作 站：	LabSolutions Ver. 5.128; LabSolutions Insight Ver. 4.2SP1 LabSolutions Insight Discovery		

1.2 分析条件

液相色谱条件

色 谱 柱：	C18 (100 mm×2.1 mm, 2.0 μm)	柱 温：	40°C
流 动 相：	A 相 - 乙酸铵盐溶液; B 相 - 乙腈		
流 速：	0.3 mL/min		
进 样 体 积：	5 μL		
洗 脱 方 式：	梯度洗脱		

质谱条件

离子源 : ESI(+/-)	加热模块温度 : 400°C
接口电压 : +4.0 kV / -3.0 kV	碰撞电压 : 30±25 V
雾化气流速 : 3.0 L/min	DL 温度 : 250°C
加热气流速 : 10.0 L/min	接口温度 : 300°C
干燥气流速 : 10.0 L/min	扫描模式 : MS Scan(m/z 100 -1000)
	DDA MS/MS (m/z 50 -1000)

1.3 样品前处理

精密称取样品 1 g, 置于 50 mL 容量瓶中, 加甲醇适量, 超声提取 15 min, 放冷至室温, 用甲醇定容 (若样品中含有油脂, 则将样品提取液在 -20 °C 条件下放置 24~48 h, 时间可视样品是否澄清而定), 5000 r/min 离心 5 min, 上清液经 0.22 μm 微孔滤膜过滤, 取滤液作为待测液。

■ 结果与讨论

2.1 色谱图

对 289 种保健品中非法添加进行测试, 其中包含 26 类功效的化合物, 化合物分类如图 1 所示, 100 ng/mL 一级 MS 色谱图如图 2 所示。

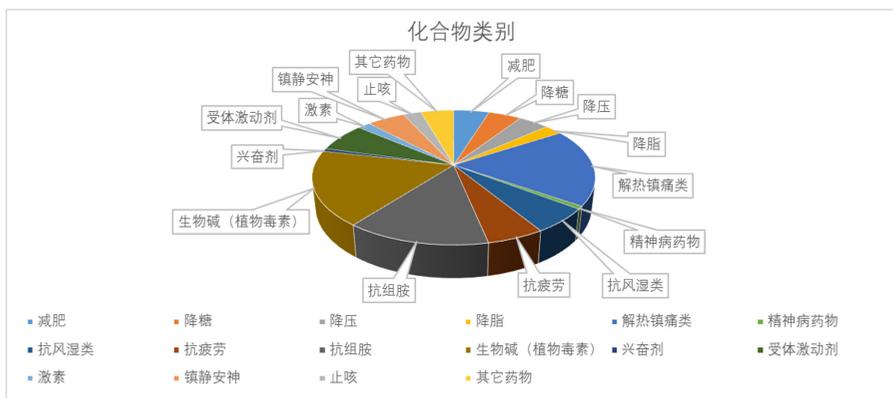
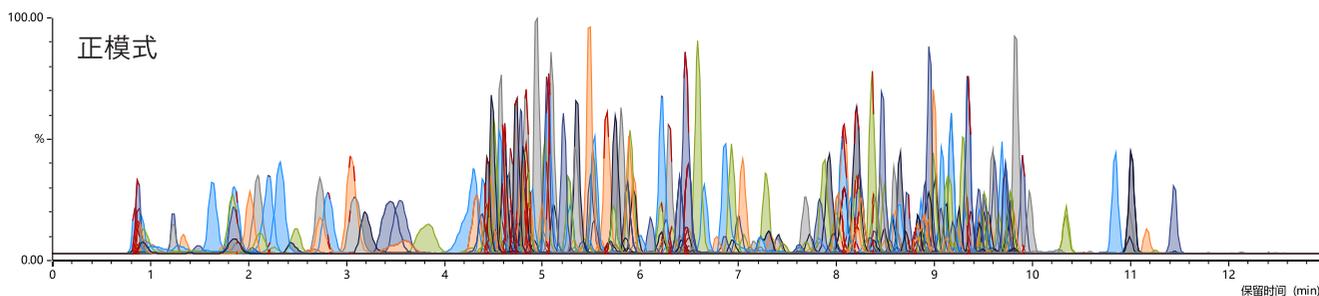


图 1 289 种非法添加成分化合物分类图



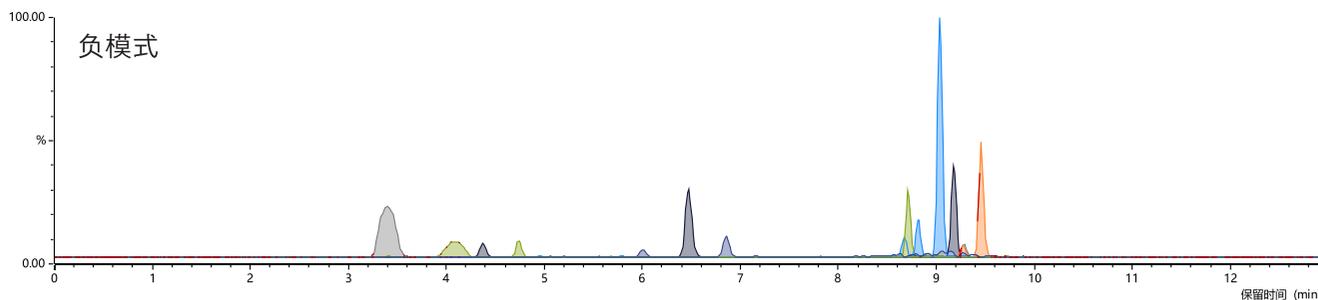


图2 289种非法添加成分一级MS色谱图(100 ng/mL)

2.2 筛查流程

分别使用 DDA(+/-) 模式对每个样品上机溶液进行采集, 结合《保健食品违禁成分 QTOF 质谱库》, 使用 Insight Discovery 软件的分析功能, 对每个样品中的非法添加成分进行快速筛查。数据处理步骤如下:



1> 峰提取参数设置

将 DDA 采集数据导入 Insight Discovery 软件, 在“设置参数”选项下的“Analyze”列中对峰提取参数进行设定。

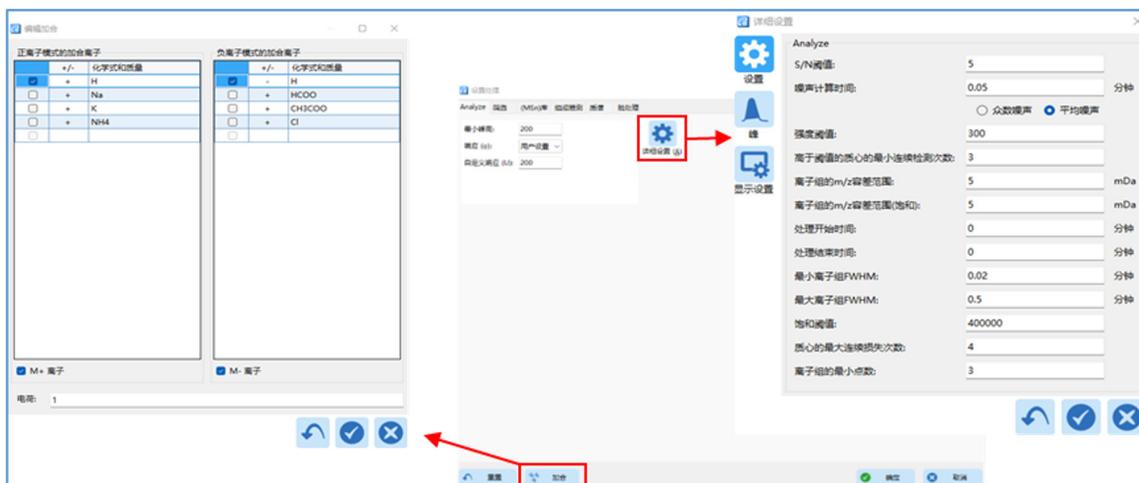


图3 Insight Discovery 软件 Analyze 界面截图

2> 导入化合物信息表，设置“筛选”参数

在“设置参数”项下的“筛选”标签页中添加保健品非法添加成分信息表。如图 3 所示，添加保健品非法添加成分信息表，同时设置显示识别参数、容差参数等条件。

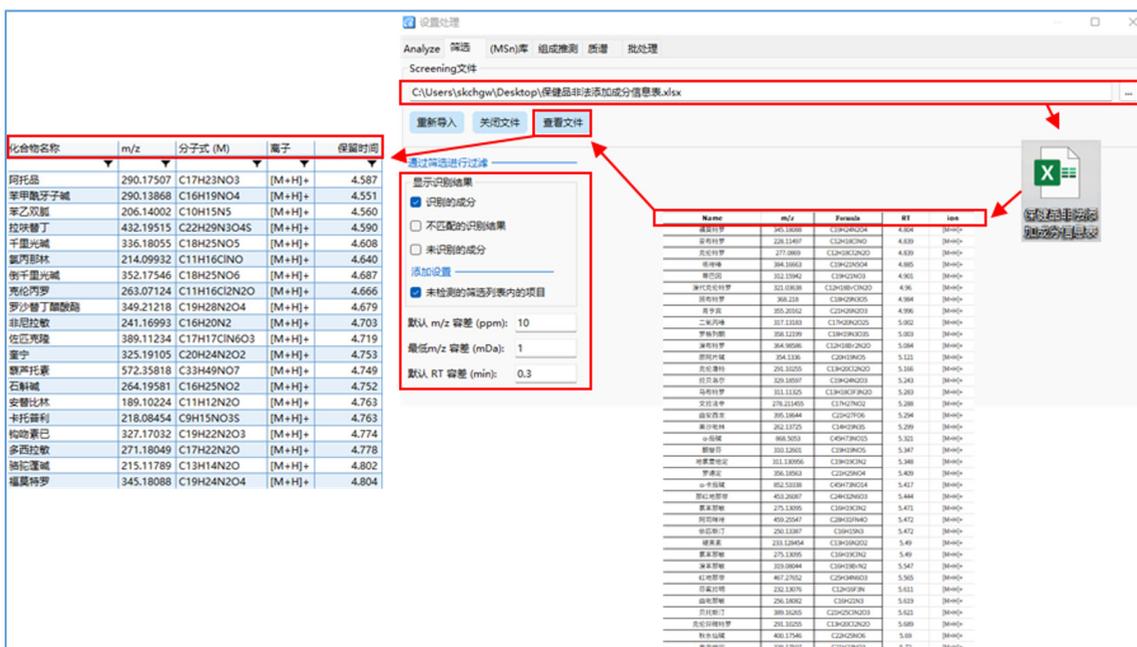


图 4 导入保健品非法添加成分信息表的软件截图

3> “(MSn) 库” 参数设置

在“设置参数”项下的“(MSn) 库”标签页中添加《保健食品违禁成分 QTOF 质谱库》。如图 4 所示，添加了保健品非法添加的二级数据库，同时设置了搜索相同的前体离子、搜索匹配数、搜索相同极性条件。



图 5 导入二级质谱库的软件截图

4> 设定批处理，执行分析流程及结果说明

在“设置参数”项下的“(MSn)库”标签页中勾选“化合物筛选”和“库搜索”选项，对导入的数据使用“执行流程”。如图 5 所示，可对导入的数据进行批量搜索。



图 6 设定批处理，执行分析流程软件截图

搜索结果如下图所示 7 所示，“多西拉敏”二级碎片与数据库中质谱图匹配良好，匹配度大于 90，且与数据库中名称一致。通过软件在筛查结果中选择，可查看该组分结果相关详细离子信息。



图 7 搜库结果软件截图

2.3 准确性及重复性

分别取十份阴性样本，添加 289 种目标成分标准品，经前处理后，配置成 20 ng/mL 和 50 ng/mL 的加标样品，其保留时间 RSD 在 0.03 %~0.85 % 之间，质量偏差平均值在 0.2 ppm~5.3 ppm 之间，如图 8、图 9 所示。

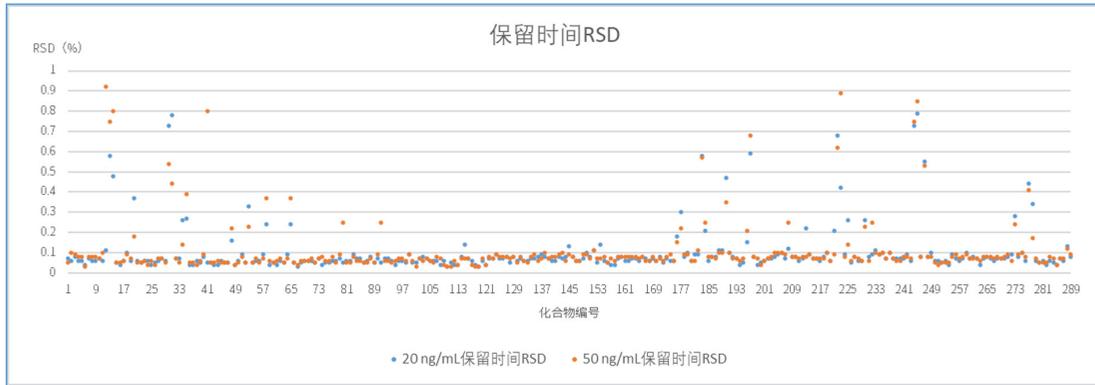


图 8 289 种非法添加成分加标样品保留时间 RSD (编号详见附录)

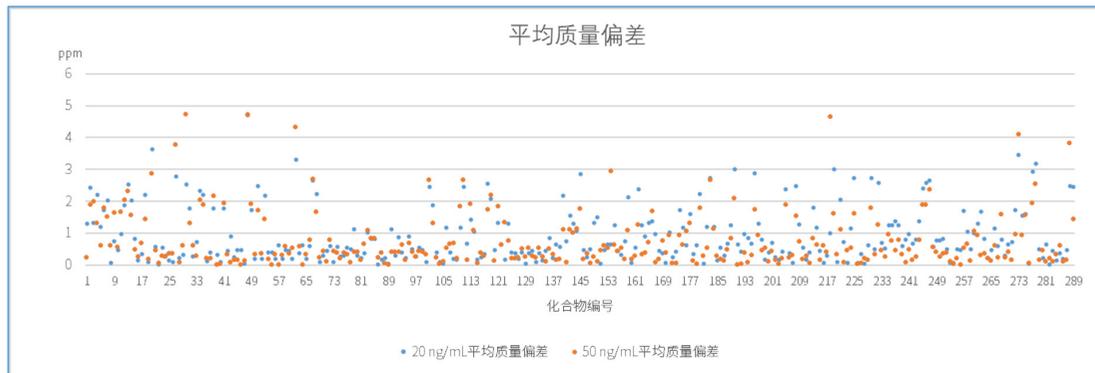


图 9 289 种非法添加成分加标样品质量偏差平均值 (编号详见附录)

2.4 回收率

分别取 1.0 g 的市售保健品、保健胶囊样品，参照 4.2.1 中样品前处理条件和 2.2 中样品分析条件，加入 289 种风险物质标准溶液，测试加标回收率，考察方法准确度。在加标实验中，各组化合物在样品中的理论浓度为：20.0 ng/mL 和 50.0 ng/mL，平行进行五组添加。以乙腈为溶剂配置校准曲线计算样品加标回收率，统计结果如图 10 所示。

结果显示：加标 289 个化合物，以溶剂标液定量分析，20.0 ng/mL 保健品、保健胶囊样品回收率在 50-120% 之间的化合物数量分别为：201 个、196 个。50.0 ng/mL 保健品、保健胶囊样品回收率在 50-120% 之间的化合物数量分别为：237 个、228 个。

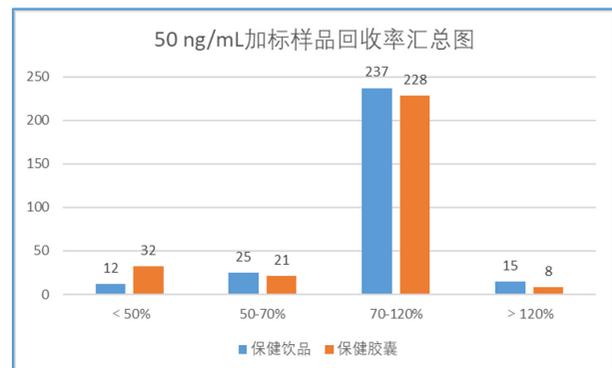
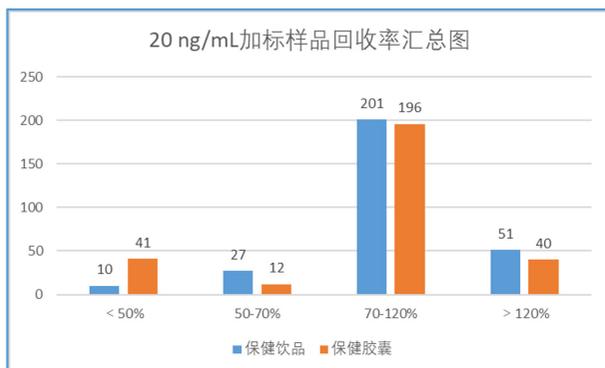


图 10 20.0 ng/mL 和 50.0 ng/mL 保健品、保健胶囊样品回收率结果统计图

■ 结论

本文利用岛津公司 LCMS-9050 超高效液相色谱四极杆飞行时间质谱联用仪，结合《保健食品违禁成分 QTOF 质谱库》和便捷数据处理软件 Insight Discovery 建立保健品中非法添加成分的筛查方法，并对 10 个加标样品中目标成分进行筛查，结果显示：20 ng/mL 和 50 ng/mL 的加标样品，其保留时间 RSD 在 0.03%~0.85% 之间，质量偏差平均值在 0.2 ppm~5.3 ppm 之间，所有定性出的化合物的二级碎片与质谱库匹配良好。进行相关回收率测试实验，结果显示，20.0 ng/mL 保健饮品、保健胶囊样品回收率在 50-120% 之间的化合物数量分别为：228 个、208 个；50.0 ng/mL 保健饮品、保健胶囊样品回收率在 50-120% 之间的化合物数量分别为：262 个、249 个。该方案可以实现一针进样，快速完成目标物的定性筛查，判定保健品中可能存在的风险物质，具有一定的实际应用价值，供相关人员参考。

附录 化合物信息表

ID	化合物名称	CAS	化学式	前体离子 (m/z)	保留时间 (min)	加合方式	检出限 (ng/mL)
1	宝藿苷I	113558-15-9	C ₂₇ H ₃₀ O ₁₀	515.1912	8.9	[M+H] ⁺	20
2	补骨脂素	66-97-7	C ₁₁ H ₆ O ₃	187.039	7.62	[M+H] ⁺	20
3	淫羊藿苷	489-32-7	C ₃₃ H ₄₀ O ₁₅	721.2349	6.04	[M+HCOO] ⁻	20
4	N,N- 双去甲基西布曲明	84467-54-9	C ₁₅ H ₂₂ ClN	252.1514	7.66	[M+H] ⁺	20
5	N- 单去甲基西布曲明	168835-59-4	C ₁₆ H ₂₄ ClN	266.167	8.07	[M+H] ⁺	20
6	布美他尼	28395-03-1	C ₁₇ H ₂₀ N ₂ O ₅ S	363.102	8.86	[M-H] ⁻	20
7	芬氟拉明	458-24-2	C ₁₂ H ₁₆ F ₃ N	232.1308	5.61	[M+H] ⁺	20
8	酚酞	28376	C ₂₀ H ₁₄ O ₄	319.0965	7.83	[M+H] ⁺	20
9	呋塞米	54-31-9	C ₁₂ H ₁₁ ClN ₂ O ₅ S	329.0004	6.89	[M-H] ⁻	20
10	氟西汀	54910-89-3	C ₁₇ H ₁₈ F ₃ NO	310.1413	8.03	[M+H] ⁺	20
11	甲氯噻嗪	135-07-9	C ₉ H ₁₁ Cl ₂ N ₃ O ₄ S ₂	357.9495	6.5	[M-H] ⁻	20
12	氯噻嗪	58-94-6	C ₇ H ₆ ClN ₃ O ₄ S ₂	293.9416	4.2	[M-H] ⁻	20
13	麻黄碱	299-42-3	C ₁₀ H ₁₅ NO	166.1226	3.37	[M+H] ⁺	20
14	沙丁胺醇	18559-94-9	C ₁₃ H ₂₁ NO ₃	240.1594	1.74	[M+H] ⁺	20
15	西布曲明	106650-56-0	C ₁₇ H ₂₆ Cl	280.1827	8.44	[M+H] ⁺	20
16	盐酸利莫那班	158681-13-1	C ₂₂ H ₂₁ Cl ₃ N ₄ O	463.0854	10.82	[M+H] ⁺	20
17	吲达帕胺	26807-65-8	C ₁₆ H ₁₆ ClN ₃ O ₃ S	366.0674	7.75	[M+H] ⁺	20
18	苯乙双胍	834-28-6	C ₁₀ H ₁₅ N ₅	206.14	4.56	[M+H] ⁺	20
19	吡格列酮	112529-15-4	C ₁₉ H ₂₀ N ₂ O ₃ S	357.1267	6.27	[M+H] ⁺	20
20	丁二胍	692-13-7	C ₆ H ₁₅ N ₅	158.14	1.9	[M+H] ⁺	20
21	格列苯脲	10238-21-8	C ₂₃ H ₂₈ ClN ₃ O ₅ S	494.1511	9.28	[M+H] ⁺	20
22	格列吡嗪	29094-61-9	C ₂₁ H ₂₇ N ₅ O ₄ S	446.1857	8.51	[M+H] ⁺	20
23	格列波脲	26944-48-9	C ₁₈ H ₂₆ N ₂ O ₄ S	367.1686	9.14	[M+H] ⁺	20
24	格列喹酮	33342-05-1	C ₂₇ H ₃₃ N ₃ O ₆ S	528.2163	9.64	[M+H] ⁺	20
25	格列美脲	93479-97-1	C ₂₄ H ₃₄ N ₄ O ₅ S	491.2323	9.36	[M+H] ⁺	20
26	格列齐特	21187-98-4	C ₁₅ H ₂₁ N ₃ O ₃ S	324.1376	9	[M+H] ⁺	20
27	甲苯磺丁脲	64-77-7	C ₁₂ H ₁₈ N ₂ O ₃ S	271.1111	8.59	[M+H] ⁺	20
28	罗格列酮	155141-29-0	C ₁₈ H ₁₉ N ₃ O ₃ S	358.122	5	[M+H] ⁺	20
29	瑞格列奈	135062-02-1	C ₂₇ H ₃₆ N ₂ O ₄	453.2748	9.77	[M+H] ⁺	20
30	盐酸二甲双胍	1115-70-4	C ₄ H ₁₁ N ₅ ·HCl	130.1087	0.89	[M+H] ⁺	20
31	阿替洛尔	29122-68-7	C ₁₄ H ₂₂ N ₂ O ₃	267.1703	1.74	[M+H] ⁺	20
32	氨氯地平	88150-42-9	C ₂₀ H ₂₅ ClN ₂ O ₅	409.1525	7.02	[M+H] ⁺	20
33	非洛地平	72509-76-3	C ₁₈ H ₁₉ Cl ₂ NO ₄	384.0764	9.73	[M+H] ⁺	20

34	卡托普利	62571-86-2	C ₉ H ₁₅ NO ₃ S	218.0845	4.76	[M+H] ⁺	20
35	可乐定	4205-90-7	C ₉ H ₉ Cl ₂ N ₃	230.0246	4.16	[M+H] ⁺	20
36	利血平	50-55-5	C ₃₃ H ₄₀ N ₂ O ₉	609.2807	8.44	[M+H] ⁺	20
37	尼莫地平	66085-59-4	C ₂₁ H ₂₆ N ₂ O ₇	419.1813	9.44	[M+H] ⁺	20
38	尼群地平	39562-70-4	C ₁₈ H ₂₀ N ₂ O ₆	361.1394	9.43	[M+H] ⁺	20
39	尼索地平	63675-72-9	C ₂₀ H ₂₄ N ₂ O ₆	389.1707	9.52	[M+H] ⁺	20
40	哌唑嗪	19216-56-9	C ₁₉ H ₂₁ N ₅ O ₄	384.1666	4.89	[M+H] ⁺	20
41	氢氯噻嗪	58-93-5	C ₇ H ₈ ClN ₃ O ₄ S ₂	295.9572	4.5	[M-H] ⁻	20
42	硝苯地平	21829-25-4	C ₁₇ H ₁₈ N ₂ O ₆	347.1238	8.88	[M+H] ⁺	20
43	洛伐他汀	75330-75-5	C ₂₄ H ₃₆ O ₅	405.2636	9.44	[M+H] ⁺	20
44	洛伐他汀羟酸钠盐	75225-50-2	C ₂₄ H ₃₇ NaO ₆	445.2561	9.49	[M+H] ⁺	20
45	美伐他汀	73573-88-3	C ₂₃ H ₃₄ O ₅	391.2479	9.73	[M+H] ⁺	20
46	脱羟基洛伐他汀	109273-98-5	C ₂₄ H ₃₄ O ₄	387.253	10.98	[M+H] ⁺	20
47	辛伐他汀	79902-63-9	C ₂₅ H ₃₈ O ₅	419.2792	10.33	[M+H] ⁺	20
48	烟酸	59-67-6	C ₆ H ₅ NO ₂	124.0393	1.05	[M+H] ⁺	20
49	橙黄决明素	67979-25-3	C ₁₇ H ₁₄ O ₇	329.0667	8.66	[M-H] ⁻	20
50	阿氯米松双丙酸酯	66734-13-2	C ₂₈ H ₃₇ ClO ₇	521.2301	9.76	[M+H] ⁺	20
51	安替比林	60-80-0	C ₁₁ H ₁₂ N ₂ O	189.1022	4.76	[M+H] ⁺	20
52	安西奈德	51022-69-6	C ₂₈ H ₃₅ FO ₇	503.244	9.51	[M+H] ⁺	20
53	氨基比林	58-15-1	C ₁₃ H ₁₇ N ₃ O	232.1444	3.51	[M+H] ⁺	20
54	保泰松	50-33-9	C ₁₉ H ₂₀ N ₂ O ₂	309.1598	9.49	[M+H] ⁺	20
55	倍氯米松	4419-39-0	C ₂₂ H ₂₉ ClO ₅	409.1776	7.55	[M+H] ⁺	20
56	倍氯米松双丙酸酯	5534/9/8	C ₂₈ H ₃₇ ClO ₇	521.2301	9.48	[M+H] ⁺	20
57	倍他米松	378-44-9	C ₂₂ H ₂₉ FO ₅	393.2072	7.18	[M+H] ⁺	20
58	倍他米松醋酸酯	987-24-6	C ₂₄ H ₃₁ FO ₆	435.2177	8.78	[M+H] ⁺	20
59	倍他米松双丙酸酯	5593-20-4	C ₂₈ H ₃₇ FO ₇	505.2596	9.56	[M+H] ⁺	20
60	倍他米松戊酸酯	2152-44-5	C ₂₇ H ₃₇ FO ₆	477.2647	9.33	[M+H] ⁺	20
61	布地奈德	51333-22-3	C ₂₅ H ₃₄ O ₆	431.2428	8.91	[M+H] ⁺	20
62	布洛芬	15687-27-1	C ₁₃ H ₁₈ O ₂	205.1234	8.93	[M-H] ⁻	20
63	地夫可特	14484-47-0	C ₂₅ H ₃₁ NO ₆	442.2224	8.62	[M+H] ⁺	20
64	地塞米松	1950/2/2	C ₂₂ H ₂₉ FO ₅	393.2072	7.08	[M+H] ⁺	20
65	地塞米松醋酸酯	1177-87-3	C ₂₄ H ₃₁ FO ₆	435.2177	8.86	[M+H] ⁺	20
66	二氟拉松双醋酸酯	33564-31-7	C ₂₆ H ₃₂ F ₂ O ₇	495.2189	9.18	[M+H] ⁺	20
67	二氟尼柳	22494-42-4	C ₁₃ H ₈ F ₂ O ₃	249.0369	8.73	[M-H] ⁻	20
68	非那西丁	62-44-2	C ₁₀ H ₁₃ NO ₂	180.1019	5.89	[M+H] ⁺	20
69	氟米龙	426-13-1	C ₂₂ H ₂₉ FO ₄	377.2123	8.48	[M+H] ⁺	20

70	氟米龙醋酸酯	3801/6/7	C ₂₄ H ₃₁ FO ₅	419.2228	8.99	[M+H] ⁺	20
71	氟米松	2135-17-3	C ₂₂ H ₂₈ F ₂ O ₅	411.1978	7.23	[M+H] ⁺	20
72	氟轻松醋酸酯	356-12-7	C ₂₆ H ₃₂ F ₂ O ₇	495.2189	9.16	[M+H] ⁺	20
73	氟氢可的松醋酸酯	514-36-3	C ₂₃ H ₃₁ FO ₆	423.2177	8.54	[M+H] ⁺	20
74	氟氢缩松	1524-88-5	C ₂₄ H ₃₃ FO ₆	437.2334	8.32	[M+H] ⁺	20
75	氟替卡松丙酸酯	80474-14-2	C ₂₅ H ₃₁ F ₃ O ₅ S	501.1917	9.51	[M+H] ⁺	20
76	哈西奈德	3093-35-4	C ₂₄ H ₃₂ ClFO ₅	455.1995	9.43	[M+H] ⁺	20
77	甲基泼尼松龙	83-43-2	C ₂₂ H ₃₀ O ₅	375.2166	6.94	[M+H] ⁺	20
78	甲基泼尼松龙醋酸酯	53-36-1	C ₂₄ H ₃₂ O ₆	417.2272	8.79	[M+H] ⁺	20
79	可的松	1953/6/5	C ₂₁ H ₂₈ O ₅	361.201	6.37	[M+H] ⁺	20
80	可的松醋酸酯	1950/4/4	C ₂₃ H ₃₀ O ₆	403.2115	8.67	[M+H] ⁺	20
81	卤倍他索丙酸酯	66852-54-8	C ₂₅ H ₃₁ ClF ₂ O ₅	485.1901	9.46	[M+H] ⁺	20
82	氯倍他松丁酸酯	25122-57-0	C ₂₆ H ₃₂ ClFO ₅	479.1995	9.88	[M+H] ⁺	20
83	氯倍他索丙酸酯	25122-46-7	C ₂₅ H ₃₂ ClFO ₅	467.1995	9.48	[M+H] ⁺	20
84	氯苯那敏	132-22-9	C ₁₆ H ₁₉ ClN ₂	275.131	5.47	[M+H] ⁺	20
85	氯苯那敏	132-22-9	C ₁₆ H ₁₉ ClN ₂	275.131	5.49	[M+H] ⁺	20
86	莫米他松糠酸酯	83919-23-7	C ₂₇ H ₃₀ Cl ₂ O ₆	521.1492	9.55	[M+H] ⁺	20
87	泼尼卡酯	73771-04-7	C ₂₇ H ₃₆ O ₈	489.2483	9.41	[M+H] ⁺	20
88	泼尼松	1247-42-3	C ₂₁ H ₂₆ O ₅	359.1853	6.19	[M+H] ⁺	20
89	泼尼松醋酸酯	125-10-0	C ₂₃ H ₂₈ O ₆	401.1959	8.61	[M+H] ⁺	20
90	泼尼松龙	50-24-8	C ₂₁ H ₂₈ O ₅	361.201	6.11	[M+H] ⁺	20
91	泼尼松龙醋酸酯	52-21-1	C ₂₃ H ₃₀ O ₆	403.2115	8.39	[M+H] ⁺	20
92	青藤碱	C ₁₉ H ₂₃ NO ₄	C ₁₉ H ₂₃ NO ₄	330.17	4.36	[M+H] ⁺	20
93	氢化可的松	50-23-7	C ₂₁ H ₃₀ O ₅	363.2166	6.27	[M+H] ⁺	20
94	氢化可的松醋酸酯	1950/3/3	C ₂₃ H ₃₂ O ₆	405.2272	8.49	[M+H] ⁺	20
95	氢化可的松丁酸酯	13609-67-1	C ₂₅ H ₃₆ O ₆	433.2585	8.86	[M+H] ⁺	20
96	氢化可的松戊酸酯	57524-89-7	C ₂₆ H ₃₈ O ₆	447.2741	9.14	[M+H] ⁺	20
97	曲安奈德	76-25-5	C ₂₄ H ₃₁ FO ₆	435.2177	7.82	[M+H] ⁺	20
98	曲安奈德醋酸酯	3870/7/3	C ₂₆ H ₃₃ FO ₇	477.2283	9.14	[M+H] ⁺	20
99	曲安西龙	124-94-7	C ₂₁ H ₂₇ FO ₆	395.1864	5.29	[M+H] ⁺	20
100	曲安西龙双醋酸酯	67-78-7	C ₂₅ H ₃₁ FO ₈	479.2076	8.37	[M+H] ⁺	20
101	酮洛芬	22071-15-4	C ₁₆ H ₁₄ O ₃	253.087	8.73	[M-H] ⁻	20
102	异丙安替比林	479-92-5	C ₁₄ H ₁₈ N ₂ O	231.1492	7.95	[M+H] ⁺	20
103	异氟泼尼松	338-95-4	C ₂₁ H ₂₇ FO ₅	379.1915	6.12	[M+H] ⁺	20
104	吡啶美辛	53-86-1	C ₁₉ H ₁₆ ClNO ₄	356.0695	9.29	[M-H] ⁻	20
105	艾瑞昔布	395683-14-4	C ₂₁ H ₂₃ NO ₃ S	370.1471	8.96	[M+H] ⁺	20

106	奥沙普秦	21256-18-8	C ₁₈ H ₁₅ NO ₃	294.1125	9.12	[M+H] ⁺	20
107	贝诺酯	5003-48-5	C ₁₇ H ₁₅ NO ₅	314.1023	8.24	[M+H] ⁺	20
108	吡罗昔康	36322-90-4	C ₁₅ H ₁₃ N ₃ O ₄ S	332.07	7.83	[M+H] ⁺	20
109	醋氯芬酸	89796-99-6	C ₁₆ H ₁₃ Cl ₂ NO ₄	354.0294	9.12	[M+H] ⁺	20
110	非普拉宗	30748-29-9	C ₂₀ H ₂₀ N ₂ O ₂	319.1452	9.48	[M-H] ⁻	20
111	芬布芬	36330-85-5	C ₁₆ H ₁₄ O ₃	253.087	8.76	[M-H] ⁻	20
112	美洛昔康	71125-38-7	C ₁₄ H ₁₃ N ₃ O ₄ S ₂	352.042	8.79	[M+H] ⁺	20
113	尼美舒利	51803-78-2	C ₁₃ H ₁₂ N ₂ O ₅ S	307.0394	9.06	[M-H] ⁻	20
114	普拉洛芬	52549-17-4	C ₁₅ H ₁₃ NO ₃	256.0968	6.9	[M+H] ⁺	20
115	塞来昔布	169590-42-5	C ₁₇ H ₁₄ F ₃ N ₃ O ₂ S	382.0832	9.45	[M+H] ⁺	20
116	舒林酸	38194-50-2	C ₂₀ H ₁₇ FO ₃ S	357.0955	8.27	[M+H] ⁺	20
117	双氟可龙戊酸酯	59198-70-8	C ₂₇ H ₃₆ F ₂ O ₅	479.2604	9.78	[M+H] ⁺	20
118	双氯芬酸钠	15307-79-6	C ₁₄ H ₁₀ Cl ₂ NNaO ₂	294.0094	9.29	[M-H] ⁻	20
119	依托度酸	41340-25-4	C ₁₇ H ₂₁ NO ₃	286.1449	9.16	[M-H] ⁻	20
120	依托考昔	202409-33-4	C ₁₈ H ₁₅ ClN ₂ O ₂ S	359.0616	6.9	[M+H] ⁺	20
121	氟奋乃静	69-23-8	C ₂₂ H ₂₆ F ₃ N ₃ OS	438.1821	8.62	[M+H] ⁺	20
122	奋乃静	58-39-9	C ₂₁ H ₂₆ ClN ₃ OS	404.1558	8.17	[M+H] ⁺	20
123	金丝桃苷	482-36-0	C ₂₁ H ₂₀ O ₁₂	463.0882	4.79	[M-H] ⁻	20
124	氨基他达拉非	385769-84-6	C ₂₁ H ₁₈ N ₄ O ₄	391.1401	7.19	[M+H] ⁺	20
125	伐地那非	224785-90-4	C ₂₃ H ₃₂ N ₆ O ₄ S	489.2279	5.77	[M+H] ⁺	20
126	豪莫西地那非	642928-07-2	C ₂₃ H ₃₂ N ₆ O ₄ S	489.2279	6.25	[M+H] ⁺	20
127	红地那非	831217-01-7	C ₂₅ H ₃₄ N ₆ O ₃	467.2765	5.57	[M+H] ⁺	20
128	硫代艾地那非	856190-47-1	C ₂₃ H ₃₂ N ₆ O ₃ S ₂	505.205	8.71	[M+H] ⁺	20
129	那红地那非	949091-38-7	C ₂₄ H ₃₂ N ₆ O ₃	453.2609	5.44	[M+H] ⁺	20
130	那莫西地那非	371959-09-0	C ₂₂ H ₂₉ N ₅ O ₄ S	460.2013	9.76	[M+H] ⁺	20
131	羟基豪莫西地那非	139755-85-4	C ₂₃ H ₃₂ N ₆ O ₅ S	505.2228	5.93	[M+H] ⁺	20
132	他达拉非	171596-29-5	C ₂₂ H ₁₉ N ₃ O ₄	390.1448	8.43	[M+H] ⁺	20
133	伪伐地那非	224788-34-5	C ₂₂ H ₂₉ N ₅ O ₄ S	460.2013	9.28	[M+H] ⁺	20
134	西地那非	139755-83-2	C ₂₂ H ₃₀ N ₆ O ₄ S	475.2122	6.05	[M+H] ⁺	20
135	育亨宾	146-48-5	C ₂₁ H ₂₆ N ₂ O ₃	355.2016	5	[M+H] ⁺	20
136	阿伐斯汀	87848-99-5	C ₂₂ H ₂₄ N ₂ O ₂	349.1911	6.39	[M+H] ⁺	20
137	阿司咪唑	68844-77-9	C ₂₈ H ₃₁ FN ₄ O	459.2555	5.47	[M+H] ⁺	20
138	奥洛他定	113806-05-6	C ₂₁ H ₂₃ NO ₃	338.1751	5.72	[M+H] ⁺	20
139	贝托斯汀	125602-71-3	C ₂₁ H ₂₅ ClN ₂ O ₃	389.1627	5.62	[M+H] ⁺	20
140	苯海拉明	58-73-1	C ₁₇ H ₂₁ NO	256.1696	6.19	[M+H] ⁺	20
141	氮卓斯汀	58581-89-8	C ₂₂ H ₂₄ ClN ₃ O	382.1681	7.12	[M+H] ⁺	20

142	地氯雷他定	100643-71-8	C ₁₉ H ₁₉ ClN ₂	311.131	5.35	[M+H] ⁺	20
143	多西拉敏	469-21-6	C ₁₇ H ₂₂ N ₂ O	271.1805	4.78	[M+H] ⁺	20
144	二苯拉林	147-20-6	C ₁₉ H ₂₃ NO	282.1852	6.74	[M+H] ⁺	20
145	非尼拉敏	86-21-5	C ₁₆ H ₂₀ N ₂	241.1699	4.7	[M+H] ⁺	20
146	非索非那定	83799-24-0	C ₃₂ H ₃₉ NO ₄	502.2952	7.45	[M+H] ⁺	20
147	氟桂利嗪	52468-60-7	C ₂₆ H ₂₆ F ₂ N ₂	405.2137	8.91	[M+H] ⁺	20
148	桂利嗪	298-57-7	C ₂₆ H ₂₈ N ₂	369.2325	8.85	[M+H] ⁺	20
149	克立咪唑	442-52-4	C ₁₉ H ₂₀ ClN ₃	326.1419	6.81	[M+H] ⁺	20
150	拉呋替丁	118288-08-7	C ₂₂ H ₂₉ N ₃ O ₄ S	432.1952	4.59	[M+H] ⁺	20
151	卢帕他定	158876-82-5	C ₂₆ H ₂₆ ClN ₃	416.1888	6.31	[M+H] ⁺	20
152	罗沙替丁醋酸酯	78628-28-1	C ₁₉ H ₂₈ N ₂ O ₄	349.2122	4.68	[M+H] ⁺	20
153	洛美利嗪	101477-55-8	C ₂₇ H ₃₀ F ₂ N ₂ O ₃	469.2297	8.86	[M+H] ⁺	20
154	氯苯沙明	77-38-3	C ₁₈ H ₂₂ ClNO	304.1463	8.05	[M+H] ⁺	20
155	氯环利嗪	82-93-9	C ₁₈ H ₂₁ ClN ₂	301.1466	7.43	[M+H] ⁺	20
156	氯雷他定	79794-75-5	C ₂₂ H ₂₃ ClN ₂ O ₂	383.1521	9.53	[M+H] ⁺	20
157	氯马斯汀	15686-51-8	C ₂₁ H ₂₆ ClNO	344.1776	8.72	[M+H] ⁺	20
158	美克洛嗪	163837-49-8	C ₂₅ H ₂₇ ClN ₂	391.1936	8.96	[M+H] ⁺	20
159	美沙吡林	91-80-5	C ₁₄ H ₁₉ N ₃ S	262.1373	5.3	[M+H] ⁺	20
160	咪唑斯汀	108612-45-9	C ₂₄ H ₂₅ FN ₆ O	433.2147	5.82	[M+H] ⁺	20
161	羟嗪	68-88-2	C ₂₁ H ₂₇ ClN ₂ O ₂	375.1834	7.27	[M+H] ⁺	20
162	曲吡那敏	91-81-6	C ₁₆ H ₂₁ N ₃	256.1808	5.62	[M+H] ⁺	20
163	曲普利啶	486-12-4	C ₁₉ H ₂₂ N ₂	279.1856	5.82	[M+H] ⁺	20
164	去氯羟嗪	3733-63-9	C ₂₁ H ₂₈ N ₂ O ₂	341.2224	6.11	[M+H] ⁺	20
165	赛庚啶	129-03-3	C ₂₁ H ₂₁ N	288.1747	7.13	[M+H] ⁺	20
166	赛克利嗪	82-92-8	C ₁₈ H ₂₂ N ₂	267.1856	6.25	[M+H] ⁺	20
167	司他斯汀	64294-95-7	C ₂₂ H ₂₈ ClNO	358.1932	8.79	[M+H] ⁺	20
168	特非那定	50679-08-8	C ₃₂ H ₄₁ NO ₂	472.321	8.89	[M+H] ⁺	20
169	酮替芬	34580-13-7	C ₁₉ H ₁₉ NOS	310.126	5.35	[M+H] ⁺	20
170	西替利嗪	83881-52-1	C ₂₁ H ₂₅ ClN ₂ O ₃ ·2HCl	389.1627	7.28	[M+H] ⁺	20
171	溴苯那敏	86-22-6	C ₁₆ H ₁₉ BrN ₂	319.0804	5.55	[M+H] ⁺	20
172	依巴斯汀	90729-43-4	C ₃₂ H ₃₉ NO ₂	470.3054	9.24	[M+H] ⁺	20
173	依美斯汀	87233-61-2	C ₁₇ H ₂₆ N ₄ O	303.2179	4.43	[M+H] ⁺	20
174	依匹斯汀	80012-43-7	C ₁₆ H ₁₅ N ₃	250.1339	5.47	[M+H] ⁺	20
175	异丙嗪	60-87-7	C ₁₇ H ₂₀ N ₂ S	285.142	6.66	[M+H] ⁺	20
176	雷公藤甲素	38748-32-2	C ₂₀ H ₂₄ O ₆	361.1646	6.76	[M+H] ⁺	20
177	N- 甲基野啶碱	486-86-2	C ₁₂ H ₁₆ N ₂ O	205.1335	0.89	[M+H] ⁺	20

178	α- 卡茄碱	20562-03-2	C ₄₅ H ₇₃ NO ₁₄	852.5104	5.42	[M+H] ⁺	20
179	α- 茄碱	20562-02-1	C ₄₅ H ₇₃ NO ₁₅	868.5053	5.32	[M+H] ⁺	20
180	白屈菜红碱	34316-15-9	C ₂₁ H ₁₈ NO ₄ ⁺	348.1236	6.75	[M+H] ⁺	20
181	苯甲酰乌头碱	466-24-0	C ₃₂ H ₄₅ NO ₁₀	604.3116	6.36	[M+H] ⁺	20
182	苯甲酰牙子碱	519-09-5	C ₁₆ H ₁₉ NO ₄	290.1387	4.55	[M+H] ⁺	20
183	蓖麻碱	524-40-3	C ₈ H ₈ N ₂ O ₂	165.0659	3.7	[M+H] ⁺	20
184	常山乙素	24159-07-7	C ₁₆ H ₁₉ N ₃ O ₃	302.1499	4.18	[M+H] ⁺	20
185	次乌头碱	6900-87-4	C ₃₃ H ₄₅ NO ₁₀	616.3116	7.72	[M+H] ⁺	20
186	倒千里光碱	480-54-6	C ₁₈ H ₂₅ NO ₆	352.1755	4.69	[M+H] ⁺	20
187	倒千里光碱 -N- 氧化物	15503-86-3	C ₁₈ H ₂₅ NO ₇	368.1704	4.46	[M+H] ⁺	20
188	东莨菪碱	51-34-3	C ₁₇ H ₂₁ NO ₄	304.1543	4.39	[M+H] ⁺	20
189	毒扁豆碱	57-47-6	C ₁₅ H ₂₁ N ₃ O ₂	276.1707	4.49	[M+H] ⁺	20
190	毒黄素	84-82-2	C ₇ H ₇ N ₅ O ₂	194.0673	1.31	[M+H] ⁺	20
191	钩吻素甲	509-15-9	C ₂₀ H ₂₂ N ₂ O ₂	323.1754	4.43	[M+H] ⁺	20
192	钩吻素已	82354-38-9	C ₁₉ H ₂₂ N ₂ O ₃	327.1703	4.77	[M+H] ⁺	20
193	钩吻素子	1358-76-5	C ₂₀ H ₂₂ N ₂ O	307.1805	4.55	[M+H] ⁺	20
194	葫芦素 B	6199-67-3	C ₃₂ H ₄₆ O ₈	576.3531	8.96	[M+H] ⁺	20
195	葫芦素 E	18444-66-1	C ₃₂ H ₄₄ O ₈	574.3374	9.13	[M+H] ⁺	20
196	金雀花碱	485-35-8	C ₁₁ H ₁₄ N ₂ O	191.1179	0.89	[M+H] ⁺	20
197	苦参碱	519-02-8	C ₁₅ H ₂₄ N ₂ O	249.1961	0.92	[M+H] ⁺	20
198	奎宁	130-95-0	C ₂₀ H ₂₄ N ₂ O ₂	325.1911	4.75	[M+H] ⁺	20
199	雷公藤次碱	11088-09-8	C ₄₃ H ₄₉ NO ₁₈	868.3022	9.51	[M+H] ⁺	20
200	雷公藤红素	34157-83-0	C ₂₉ H ₃₈ O ₄	451.2843	11.12	[M+H] ⁺	20
201	雷公藤吉碱	37239-47-7	C ₄₁ H ₄₇ NO ₁₉	858.2815	9.28	[M+H] ⁺	20
202	藜芦定	71-62-5	C ₃₆ H ₅₁ NO ₁₁	674.3535	6.51	[M+H] ⁺	20
203	藜芦碱	60-70-8	C ₂₇ H ₃₉ NO ₂	410.3054	6.08	[M+H] ⁺	20
204	藜芦托素	475-00-3	C ₃₃ H ₄₉ NO ₇	572.3582	4.75	[M+H] ⁺	20
205	骆驼蓬碱	304-21-2	C ₁₃ H ₁₄ N ₂ O	215.1179	4.8	[M+H] ⁺	20
206	马钱子碱	357-57-3	C ₂₃ H ₂₆ N ₂ O ₄	395.1965	4.53	[M+H] ⁺	20
207	麦角柯宁碱	564-36-3	C ₃₁ H ₃₉ N ₅ O ₅	562.3024	6.56	[M+H] ⁺	20
208	欧夹竹桃苷	465-16-7	C ₃₂ H ₄₈ O ₉	577.3371	8.91	[M+H] ⁺	20
209	千里光碱	130-01-8	C ₁₈ H ₂₅ NO ₅	336.1806	4.61	[M+H] ⁺	20
210	千里光碱 -N- 氧化物	13268-67-2	C ₁₈ H ₂₅ NO ₆	352.1755	4.41	[M+H] ⁺	20
211	茄次碱	80-78-4	C ₂₇ H ₄₃ NO	398.3417	8.23	[M+H] ⁺	20
212	秋水仙碱	64-86-8	C ₂₂ H ₂₅ NO ₆	400.1755	5.69	[M+H] ⁺	20
213	山莨菪碱	17659-49-3	C ₁₇ H ₂₃ NO ₄	306.17	4.36	[M+H] ⁺	20

214	石斛碱	2115-91-5	C ₁₆ H ₂₅ NO ₂	264.1958	4.75	[M+H] ⁺	20
215	士的宁	57-24-9	C ₂₁ H ₂₂ N ₂ O ₂	335.1754	4.53	[M+H] ⁺	20
216	文多灵	2182-14-1	C ₂₅ H ₃₂ N ₂ O ₆	457.2333	6.46	[M+H] ⁺	20
217	乌头碱	302-27-2	C ₃₄ H ₄₇ NO ₁₁	646.3222	7.67	[M+H] ⁺	20
218	喜树碱	7689/3/4	C ₂₀ H ₁₆ N ₂ O ₄	349.1183	6.27	[M+H] ⁺	20
219	相思子碱	526-31-8	C ₁₂ H ₁₄ N ₂ O ₂	219.1128	4.51	[M+H] ⁺	20
220	新乌头碱	2752-64-9	C ₃₃ H ₄₅ NO ₁₁	632.3065	6.75	[M+H] ⁺	20
221	氧化苦参碱	16837-52-8	C ₁₅ H ₂₄ N ₂ O ₂	265.1911	2.03	[M+H] ⁺	20
222	野百合碱	315-22-0	C ₁₆ H ₂₃ NO ₆	326.1598	1.39	[M+H] ⁺	20
223	野百合碱 -N- 氧化物	35337-98-5	C ₁₆ H ₂₃ NO ₇	342.1547	2.8	[M+H] ⁺	20
224	异常山碱	32434-44-9	C ₁₆ H ₁₉ N ₃ O ₃	302.1499	4.41	[M+H] ⁺	20
225	鹰爪豆碱	90-39-1	C ₁₅ H ₂₆ N ₂	235.2169	3.8	[M+H] ⁺	20
226	鱼藤酮	83-79-4	C ₂₃ H ₂₂ O ₆	395.1489	9.53	[M+H] ⁺	20
227	原阿片碱	130-86-9	C ₂₀ H ₁₉ NO ₅	354.1336	5.12	[M+H] ⁺	20
228	氟尼缩松	77326-96-6	C ₂₄ H ₃₁ FO ₆	435.2177	8.07	[M+H] ⁺	20
229	鞣酮	58-22-0	C ₁₉ H ₂₈ O ₂	289.2162	8.84	[M+H] ⁺	20
230	奥西那林	586-06-1	C ₁₁ H ₁₇ NO ₃	212.1281	1.21	[M+H] ⁺	20
231	苯乙醇胺 A	1346746-81-3	C ₁₉ H ₂₄ N ₂ O ₄	345.1809	6.42	[M+H] ⁺	20
232	丙卡特罗	72332-33-3	C ₁₆ H ₂₂ N ₂ O ₃	291.1703	3.15	[M+H] ⁺	20
233	非诺特罗	13392-18-2	C ₁₇ H ₂₁ NO ₄	304.1543	4.21	[M+H] ⁺	20
234	福莫特罗	73573-87-2	C ₁₉ H ₂₄ N ₂ O ₄	345.1809	4.8	[M+H] ⁺	20
235	克伦丙罗	38339-11-6	C ₁₁ H ₁₆ Cl ₂ N ₂ O	263.0712	4.67	[M+H] ⁺	20
236	克伦潘特	37158-47-7	C ₁₃ H ₂₀ Cl ₂ N ₂ O	291.1026	5.17	[M+H] ⁺	20
237	克伦塞罗	157877-79-7	C ₁₄ H ₂₀ Cl ₂ N ₂ O ₂	319.0975	4.48	[M+H] ⁺	20
238	克伦异磅特罗	1435935-00-4	C ₁₃ H ₂₀ Cl ₂ N ₂ O	291.1026	5.69	[M+H] ⁺	20
239	拉贝洛尔	36894-69-6	C ₁₉ H ₂₄ N ₂ O ₃	329.186	5.24	[M+H] ⁺	20
240	利托君	26652-09-5	C ₁₇ H ₂₁ NO ₃	288.1594	4.38	[M+H] ⁺	20
241	马布特罗	56341-08-3	C ₁₃ H ₁₈ ClF ₃ N ₂ O	311.1133	5.28	[M+H] ⁺	20
242	马喷特罗	54238-51-6	C ₁₄ H ₂₀ ClF ₃ N ₂ O	325.1289	5.77	[M+H] ⁺	20
243	喷布洛尔	38363-40-5	C ₁₈ H ₂₉ NO ₂	292.2271	7.87	[M+H] ⁺	20
244	齐帕特罗	117827-79-9	C ₁₄ H ₁₉ N ₃ O ₂	262.155	1.78	[M+H] ⁺	20
245	特布他林	23031-25-6	C ₁₂ H ₁₉ NO ₃	226.1438	1.86	[M+H] ⁺	20
246	妥布特罗	41570-61-0	C ₁₂ H ₁₈ ClNO	228.115	4.84	[M+H] ⁺	20
247	西马特罗	54239-37-1	C ₁₂ H ₁₇ N ₃ O	220.1444	2.5	[M+H] ⁺	20
248	溴布特罗	41937-02-4	C ₁₂ H ₁₈ Br ₂ N ₂ O	364.9859	5.08	[M+H] ⁺	20
249	溴代克伦特罗	78982-84-0	C ₁₂ H ₁₈ BrClN ₂ O	321.0364	4.96	[M+H] ⁺	20

250	甲基睾丸酮	58-18-4	C ₂₀ H ₃₀ O ₂	303.2319	9.01	[M+H] ⁺	20
251	黄体酮	57-83-0	C ₂₁ H ₃₀ O ₂	315.2319	9.71	[M+H] ⁺	20
252	己酸羟孕酮	630-56-8	C ₂₇ H ₄₀ O ₄	429.2999	10.94	[M+H] ⁺	20
253	炔诺孕酮	6533-00-2	C ₂₁ H ₂₈ O ₂	313.2162	9.23	[M+H] ⁺	20
254	孕三烯酮	16320-04-0	C ₂₁ H ₂₄ O ₂	309.1849	8.94	[M+H] ⁺	20
255	二氧丙嗪	13754-56-8	C ₁₇ H ₂₀ N ₂ O ₂ S	317.1318	5	[M+H] ⁺	20
256	罗通定	2934-97-6	C ₂₁ H ₂₅ NO ₄	356.1856	5.41	[M+H] ⁺	20
257	氯丙嗪	50-53-3	C ₁₇ H ₁₉ ClN ₂ S	319.103	8.22	[M+H] ⁺	20
258	文拉法辛	93413-69-5	C ₁₇ H ₂₇ NO ₂	278.2115	5.29	[M+H] ⁺	20
259	佐匹克隆	43200-80-2	C ₁₇ H ₁₇ ClN ₆ O ₃	389.1123	4.72	[M+H] ⁺	20
260	阿普唑仑	28981-97-7	C ₁₇ H ₁₃ N ₄ Cl	309.0902	8.03	[M+H] ⁺	20
261	艾司唑仑	29975-16-4	C ₁₆ H ₁₁ N ₄ Cl	295.0745	7.51	[M+H] ⁺	20
262	奥沙西洋	604-75-1	C ₁₅ H ₁₁ N ₂ O ₂ Cl	287.0582	7.47	[M+H] ⁺	20
263	地西洋	439-14-5	C ₁₆ H ₁₃ N ₂ OCl	285.0789	9.08	[M+H] ⁺	20
264	劳拉西洋	846-49-1	C ₁₅ H ₁₀ N ₂ O ₂ Cl ₂	321.0192	7.87	[M+H] ⁺	20
265	氯氮卓	58-25-3	C ₁₆ H ₁₄ ClN ₃ O	300.0898	5.85	[M+H] ⁺	20
266	氯硝西洋	1622-61-3	C ₁₅ H ₁₀ ClN ₃ O ₃	316.0484	8.19	[M+H] ⁺	20
267	三唑仑	28911-01-5	C ₁₇ H ₁₂ N ₄ Cl ₂	343.0512	8.32	[M+H] ⁺	20
268	硝西洋	146-22-5	C ₁₅ H ₁₁ N ₃ O ₃	282.0873	7.71	[M+H] ⁺	20
269	扎来普隆	151319-34-5	C ₁₇ H ₁₅ N ₅ O	306.1349	7.19	[M+H] ⁺	20
270	阿托品	51-55-8	C ₁₇ H ₂₃ NO ₃	290.1751	4.59	[M+H] ⁺	20
271	班布特罗	81732-65-2	C ₁₈ H ₂₉ N ₃ O ₅	368.218	4.98	[M+H] ⁺	20
272	蒂巴因	115-37-7	C ₁₉ H ₂₁ NO ₃	312.1594	4.9	[M+H] ⁺	20
273	对乙酰氨基酚	103-90-2	C ₈ H ₉ NO ₂	152.0706	2.99	[M+H] ⁺	20
274	克伦特罗	37148-27-9	C ₁₂ H ₁₈ Cl ₂ N ₂ O	277.0869	4.84	[M+H] ⁺	20
275	氯丙那林	3811-25-4	C ₁₁ H ₁₆ ClNO	214.0993	4.64	[M+H] ⁺	20
276	沙美特罗	89365-50-4	C ₂₅ H ₃₇ NO ₄	416.2795	8.03	[M+H] ⁺	20
277	4- 甲氨基安替比林	519-98-2	C ₁₂ H ₁₅ N ₃ O	218.1288	3.23	[M+H] ⁺	20
278	氨甲环酸 (凝血酸)	701-54-2	C ₈ H ₁₅ NO ₂	158.1176	0.9	[M+H] ⁺	20
279	咪达唑仑	59467-70-8	C ₁₈ H ₁₃ ClFN ₃	326.0855	6.22	[M+H] ⁺	20
280	醋酸甲地孕酮	595-33-5	C ₂₄ H ₃₂ O ₄	385.2373	9.68	[M+H] ⁺	20
281	醋酸甲羟孕酮	71-58-9	C ₂₄ H ₃₄ O ₄	387.253	9.78	[M+H] ⁺	20
282	醋酸氯地孕酮	302-22-7	C ₂₃ H ₂₉ ClO ₄	405.1827	9.71	[M+H] ⁺	20
283	地索奈德	638-94-8	C ₂₄ H ₃₂ O ₆	417.2272	7.87	[M+H] ⁺	20
284	氟轻松	67-73-2	C ₂₄ H ₃₀ F ₂ O ₆	453.2083	8.22	[M+H] ⁺	20
285	环索奈德	126544-47-6	C ₃₂ H ₄₄ O ₇	541.316	11.36	[M+H] ⁺	20

286	芥藜芦胺 (芥芬胺)	469-59-0	$C_{27}H_{39}NO_3$	426.3003	5.74	$[M+H]^+$	20
287	卤美他松	50629-82-8	$C_{22}H_{27}ClF_2O_5$	445.1588	8.61	$[M+H]^+$	20
288	氯替泼诺	82034-46-6	$C_{24}H_{31}ClO_7$	467.1831	9.46	$[M+H]^+$	20
289	褪黑素	73-31-4	$C_{13}H_{16}N_2O_2$	233.1285	5.49	$[M+H]^+$	20

岛津应用云

