

LC-MS/MS 测定化妆品中二甲硝咪唑等 120 种抗感染类药物

LCMSMS-1031

摘要： 本文建立了岛津超高效液相色谱三重四极杆质谱联用测定化妆品中 120 种抗感染类药物的方法，参考国家药检局发布的《化妆品中二甲硝咪唑等 120 种原料的测定方法》，化妆品经乙腈提取后，离心、过滤后上机测定。120 种抗感染类药物使用外标法定量，在 0.2~100 ng/mL 浓度范围内线性良好；在 2 和 20 ng/mL 两个浓度下连续 6 针进样，化合物的保留时间和峰面积的 RSD 分别在 0.02~0.32% 和 1.79~8.70%，仪器精密度良好；2 mg/kg 浓度加标实验，其平均回收率在 72.1~129.3% 之间，RSD 在 0.72~8.31% 之间。该方法灵敏度高，分析时间快，通量高，供相关人员参考。

关键词： 三重四极杆液质联用仪 化妆品 抗感染类药物 120 种

技术特点：

- ❖ 应对国家药检局发布的《化妆品中二甲硝咪唑等 120 种原料的测定方法》
- ❖ 该方法能有效分离同分异构体，较标准方法更加节省时间。
- ❖ Peakintelligence 智能积分功能，提高实际样品分析效率。

抗感染药物属于处方药，主要指用来治疗各种病原体所致感染的各类药物，这类药物大多具有抑制或杀灭细菌、病毒等功效。化妆品为了实现某些功效，在利益驱使下就会违规添加抗感染药物。当抗感染类药物散布在人体皮肤表面时，尤其是面部或口唇等部位，这些地方的皮肤通常比较柔嫩、膜血管丰富，药物很快就会被微血管或黏膜吸收，这时候皮肤表面的菌群就会被破坏，进而出现皮疹、速发性过敏等不良反应，长期使用可能还会导致癌变、皮肤耐药性增加，造成后期治疗困难。《化妆品安全技术规范》中明确规定，抗感染类药物在化妆品中属于禁用组分。

2024 年 3 月 21 日，国家药品监督管理局发布了《化妆品中二甲硝咪唑等 120 种原料的测定方法》，

并将其纳入《化妆品安全技术规范（2015 年版）》；该方法中 120 种抗感染化合物包括《化妆品中 36 种抗感染类药物的检测方法》、《化妆品安全技术规范（2015 年版）》中收载的 4 个抗感染类药物检测方法、化妆品补充检验方法“BJH 202202 化妆品中新康唑等 8 种组分的测定”以及化妆品补充检验方法“BJH 202201 化妆品中莫匹罗星等 5 种组分的测定”中所有抗感染类药物，一针快速检测方法提高化妆品抗感染类药物的检测效率。

本文参考《化妆品中二甲硝咪唑等 120 种原料的测定方法》方法，使用岛津 LCMS-8050 建立了化妆品中 120 种抗感染类药物检测方法，该方法快速、高效、灵敏度高，可为相关从业人员提供参考。

■ 实验部分

1.1 仪器

岛津三重四极杆液质联用仪 LCMS-8050，配置信息如下：

系统控制器：CBM-40

脱气机：DGU-40 5R

输液泵：LC-40B X3

柱温箱：CTO-40C

自动进样器：SIL-40C X3

色谱工作站：Labsolutions Ver. 5.120

1.2 分析条件

液相色谱条件

色 谱 柱 : Shim-pack Scepter HD-C18 (1.9 μ m, 2.1 \times 100 mm) ;
岛津 (上海) 实验器材有限公司, P/N: 227-31026-05)

流 动 相 : 正离子模式, A-0.1% 甲酸水溶液; B- 乙腈 (含 0.1% 甲酸)
负离子模式, A- 水; B- 乙腈

进 样 体 积 : 5 μ L 柱 温 : 40 $^{\circ}$ C

流 速 : 0.3 mL/min 洗 针 液 : 甲醇 / 水 =1:1 (v:v)

洗 脱 方 式 : 梯度洗脱, B 相起始浓度为 5%, 时间程序如表 1 所示

表 1 梯度洗脱时间程序 (正、负离子模式)

时间 (min)	单元	处理命令	值
1.00	泵	B Conc	5
4.00	泵	B Conc	20
12.00	泵	B Conc	48
15.00	泵	B Conc	95
17.00	泵	B Conc	95
17.10	泵	B Conc	5
20.00	控制器	STOP	

质谱条件

离子化模式 : ESI (+&-) 雾化气流速 : 3.0 L/min

接口电压 : 1 kV 干燥气流速 : 5.0 L/min

接口温度 : 350 $^{\circ}$ C 加热气流速 : 15.0 L/min

D L 温度 : 280 $^{\circ}$ C 加热模块温度 : 400 $^{\circ}$ C

喷雾针位置 : +3 扫描模式 : 多反应监测 (MRM)

MRM 参数 : 见附录 1

■ 标样与样品的制备

2.1 样品溶液的制备

① 二甲硝咪唑等 119 种原料: 准确称取样品 0.5 g, 置于 10 mL 比色管中, 加乙腈 2 mL, 振摇。加乙腈至 10 mL, 超声 20 min, 取出, 以 10000 r/min 转速 4 $^{\circ}$ C 离心 10 min, 吸取乙腈提取液。准确量取 1 mL 乙腈提取液, 至 5 mL 容量瓶中, 加 0.4% 甲酸溶液至刻度, 定容。以 10000 r/min 转速 4 $^{\circ}$ C 离心 10 min, 吸取上清液, 过 0.22 μ m 滤膜后, 上机。

② 环吡酮胺的测定: 准确吸取上述乙腈提取液 1 mL, 加入氢氧化钠溶液 0.5 mL, 再准确加入硫酸二甲酯 50 μ L, 置于 37 $^{\circ}$ C 水浴 15 min, 准确加入三乙胺 50 μ L, 过滤后上机。

2.2 标准品溶液的制备

① 二甲硝咪唑等 119 种原料: 取空白化妆品, 按 2.1 前处理方式①制备, 获得基质空白溶液。以基质空白溶液为溶剂, 将混合标准溶液稀释成 0.2、0.5、1、2、5、10、20、50、100 ng/mL 标准曲线系列溶液。

② 环吡酮胺标准溶液：称取 10 mg 环吡酮胺至 10 mL 量瓶中，加甲醇溶解并定容，获得 1 mg/mL 环吡酮胺单标储备液。量取单标储备液 100 μ L，置于 50 mL 量瓶，用乙腈稀释，获得 2 μ g/mL 中间液。分别准确量取中间液 20、50、100、200、300、400、500 μ L 中间液，加乙腈至 1 mL，照 2.1 前处理方式②制备，获得环吡酮胺标准曲线系列溶液。

■ 结果与讨论

3.1 标准样品谱图

在本实验条件下，磺胺间甲氧嘧啶和磺胺林（编号 55 和 59）、磺胺曲沙唑和磺胺异噁唑（编号 71 和 74）分离良好。

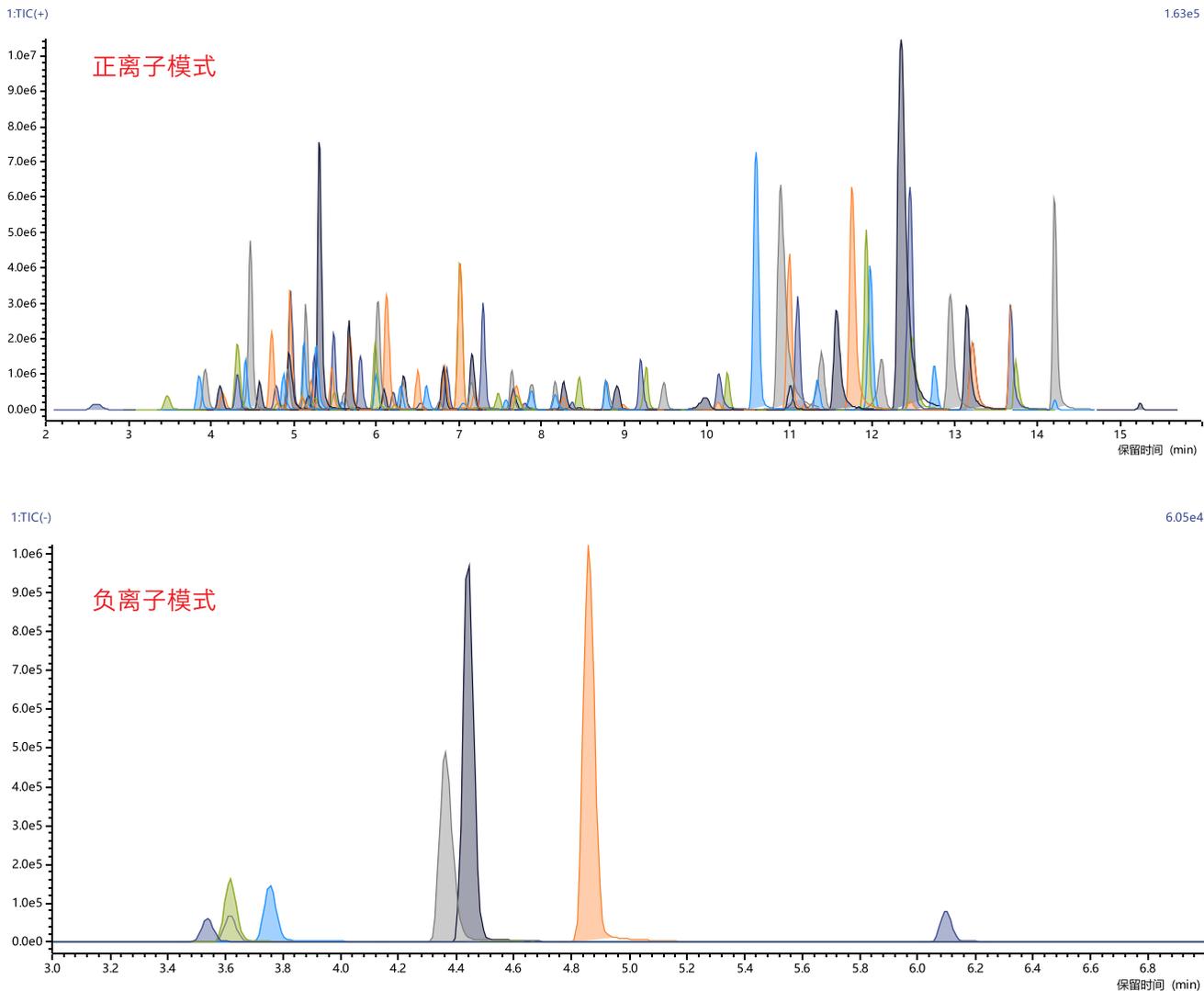
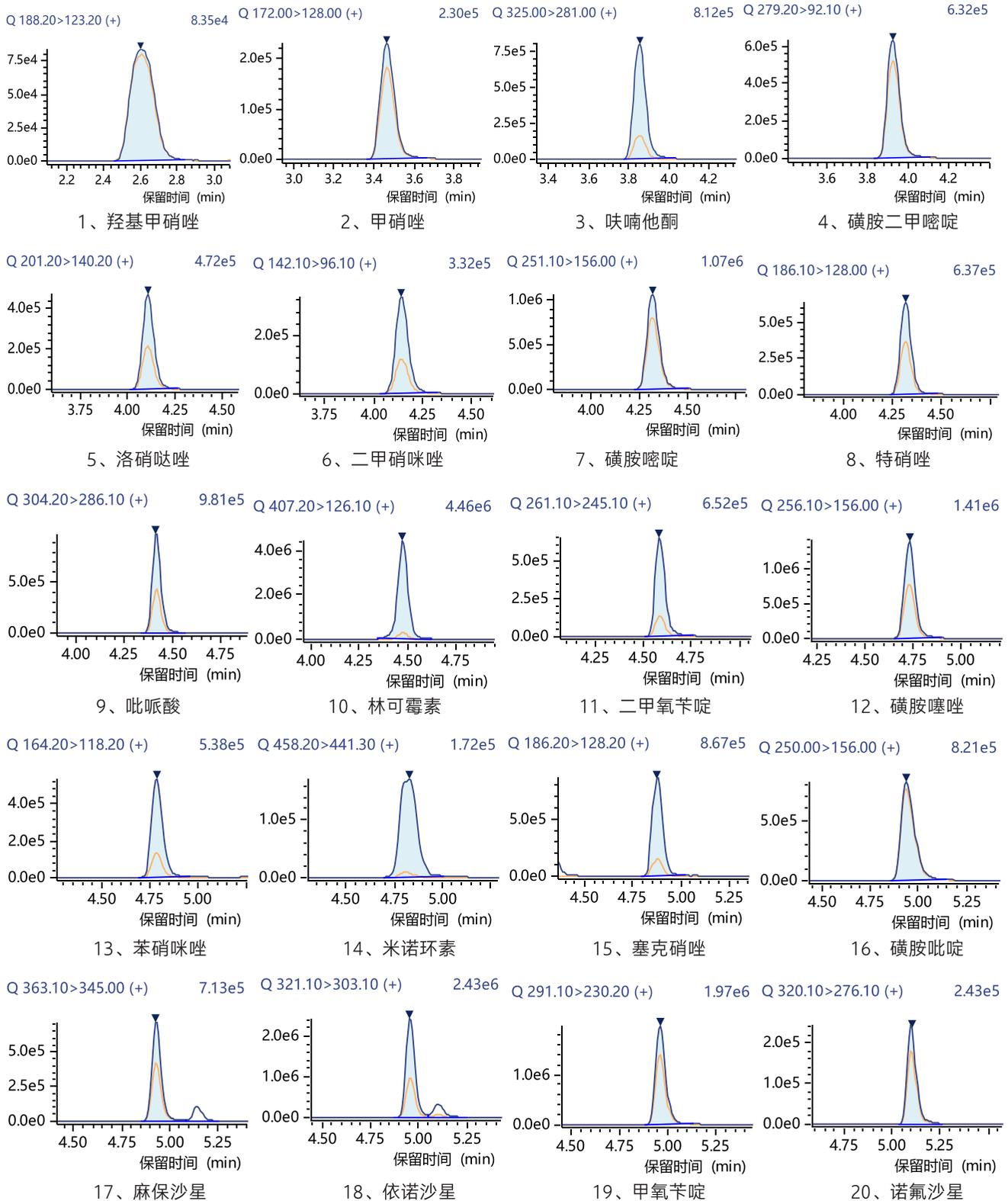
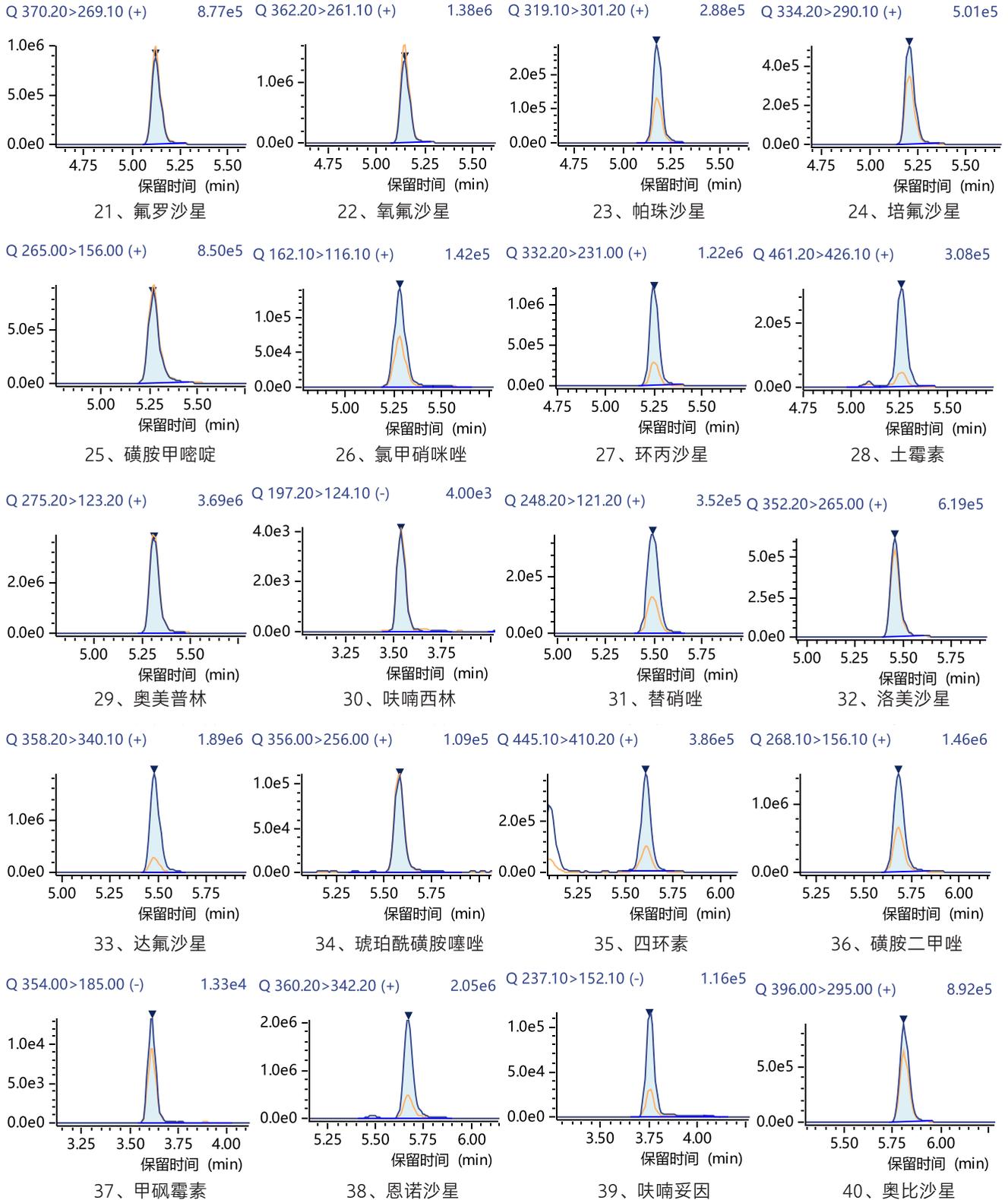
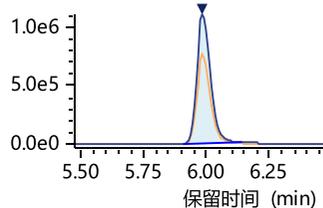


图 1 护肤水中 120 种抗感染类药物 MRM 色谱图 (20 ng/mL)

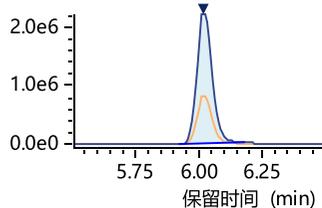




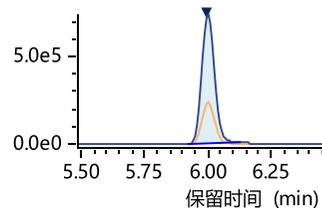
Q 271.10>156.00 (+) 1.11e6 Q 279.00>186.00 (+) 2.23e6 Q 376.20>261.20 (+) 7.39e5 Q 281.10>156.00 (+) 1.88e6



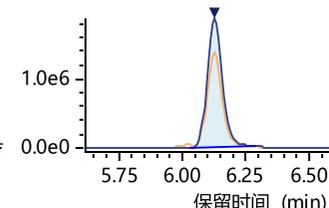
41、磺胺甲二唑



42、磺胺索嘧啶

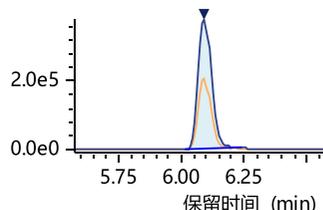


43、加替沙星



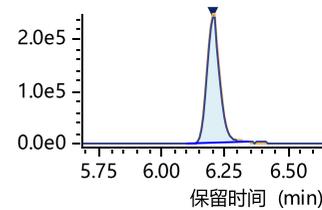
44、磺胺甲氧嗪

Q 366.10>305.10 (+) 3.80e5



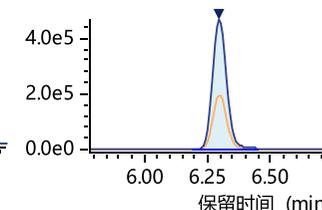
45、克林沙星

Q 386.20>299.10 (+) 2.43e5



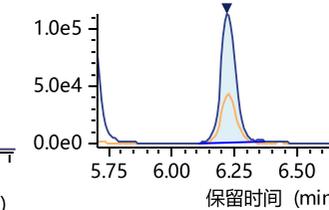
46、沙拉沙星

Q 220.20>128.20 (+) 4.67e5



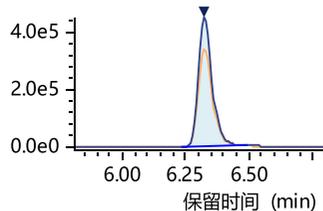
47、奥硝唑

Q 465.10>448.00 (+) 1.13e5



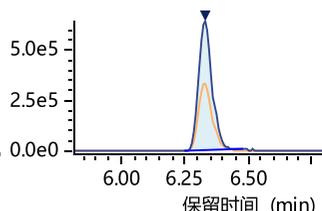
48、去甲基霉素

Q 400.20>299.10 (+) 4.50e5



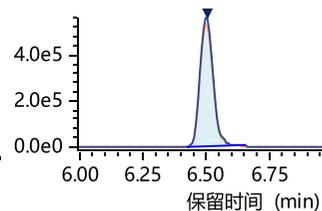
49、双氟沙星

Q 393.00>349.00 (+) 6.45e5



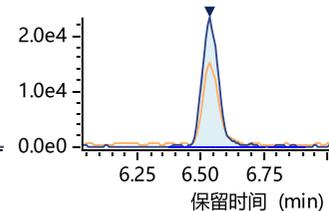
50、司帕沙星

Q 307.10>238.10 (+) 5.64e5



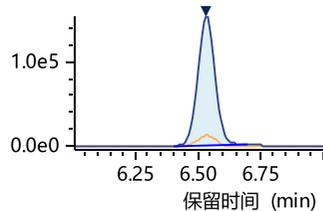
51、氟康唑

Q 226.10>122.10 (+) 2.34e4



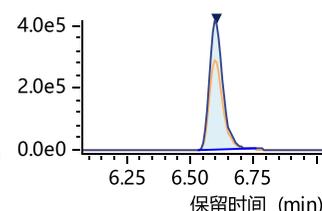
52、呋喃唑酮

Q 843.50>174.10 (+) 1.54e5



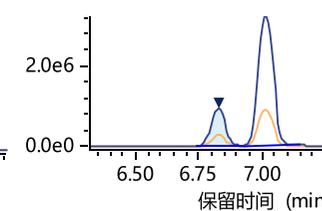
53、螺旋霉素

Q 749.60>591.50 (+) 4.17e5



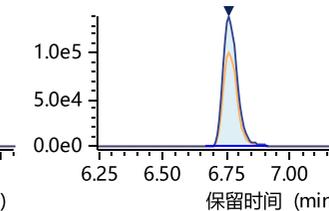
54、阿奇霉素

Q 281.00>156.00 (+) 3.23e6



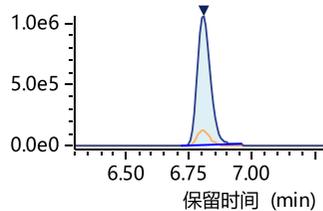
55、磺胺间甲氧嘧啶

Q 402.20>261.10 (+) 1.39e5



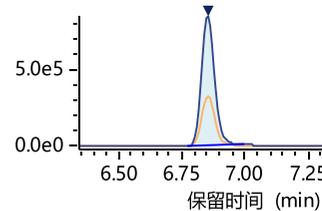
56、莫西沙星

Q 405.10>387.10 (+) 1.06e6



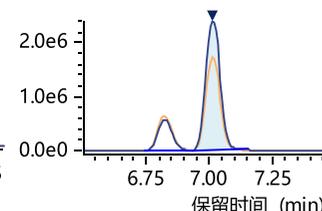
57、妥舒沙星

Q 390.20>359.10 (+) 8.51e5



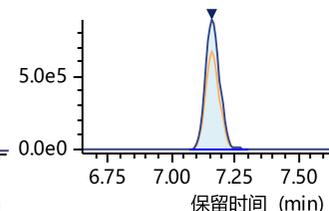
58、巴洛沙星

Q 281.10>156.00 (+) 2.40e6

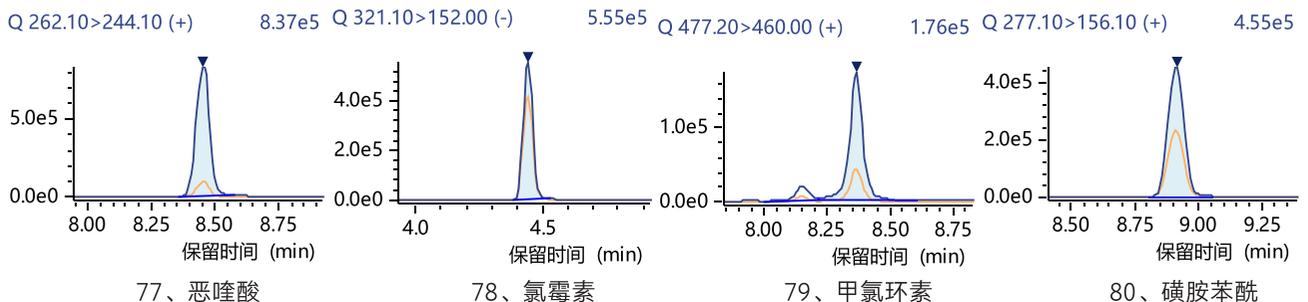
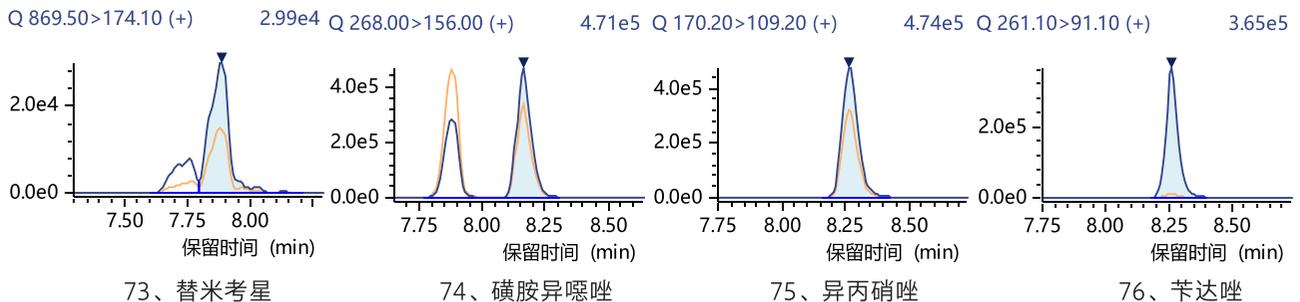
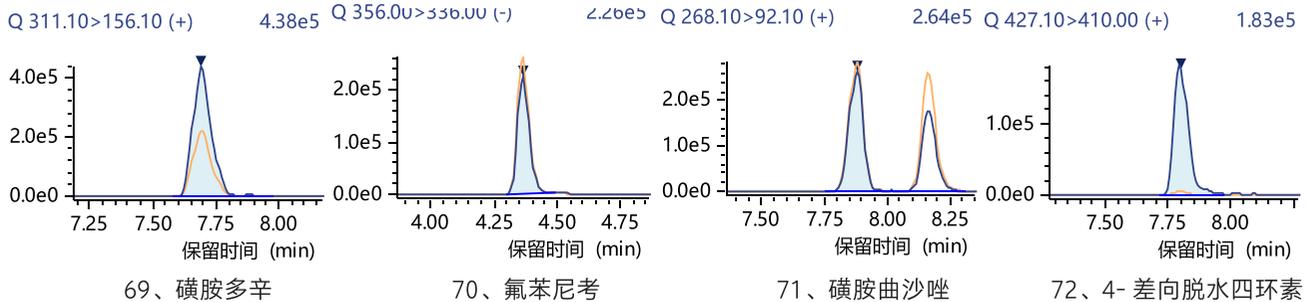
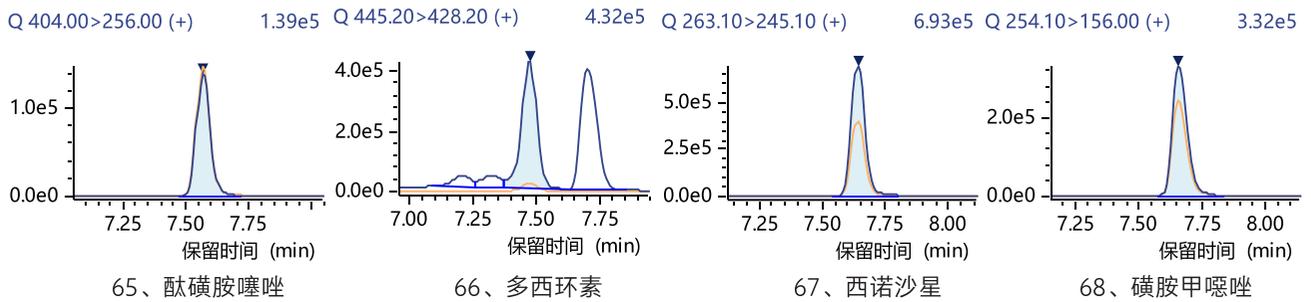
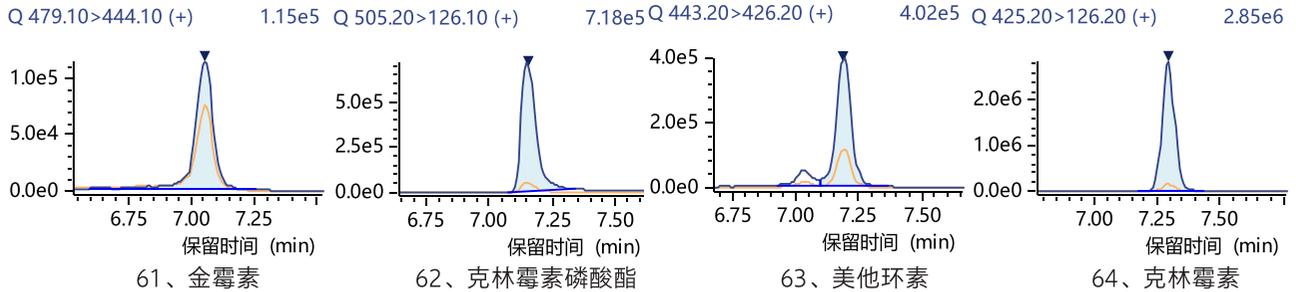


59、磺胺林

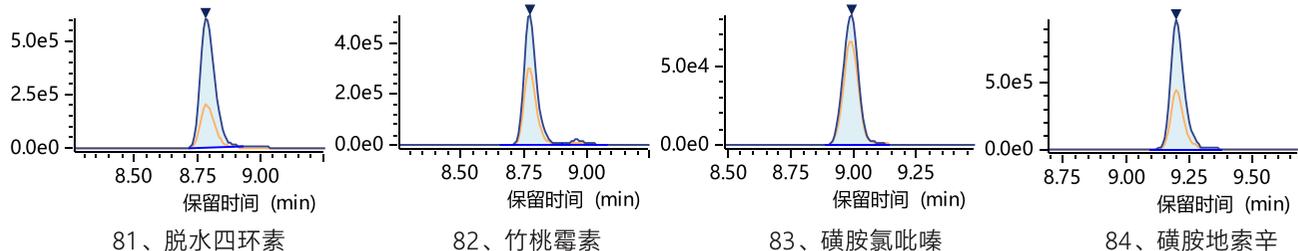
Q 285.00>155.90 (+) 8.90e5



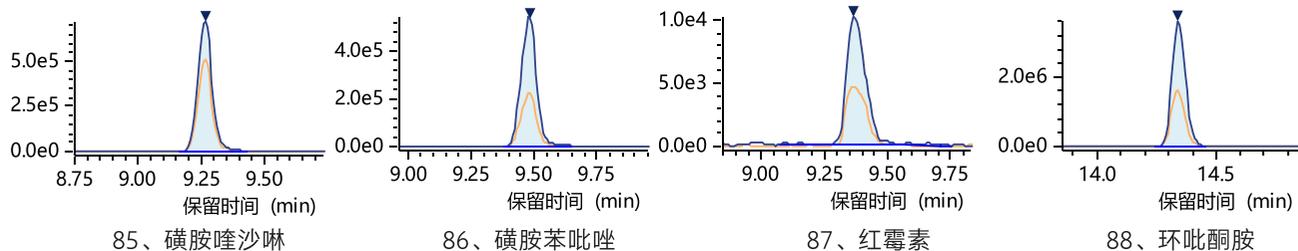
60、磺胺氯哒嗪



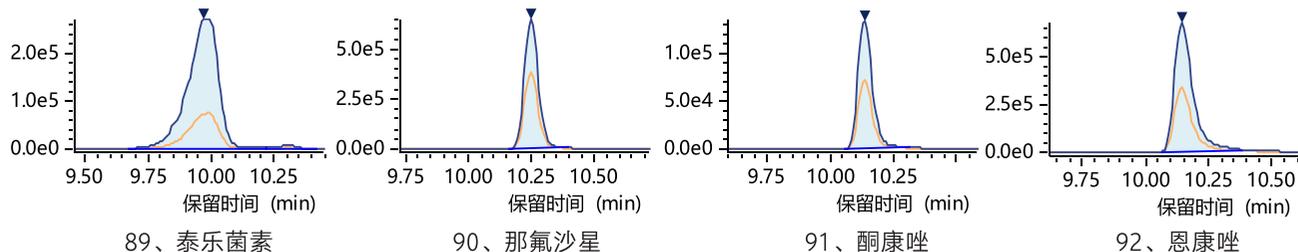
Q 427.10>410.10 (+) 6.05e5 Q 688.40>158.20 (+) 5.11e5 Q 285.00>108.10 (+) 8.21e4 Q 311.00>156.00 (+) 9.73e5



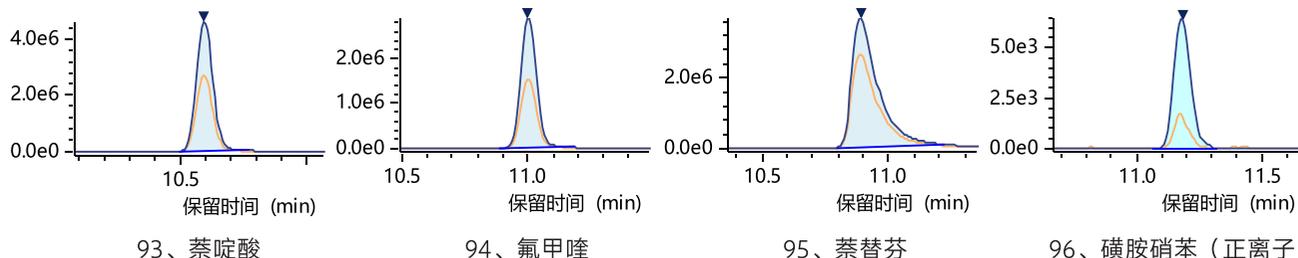
Q 301.00>156.00 (+) 7.23e5 Q 315.10>158.10 (+) 5.41e5 Q 734.30>158.20 (+) 1.03e4 Q 222.20>136.10 (+) 3.62e6



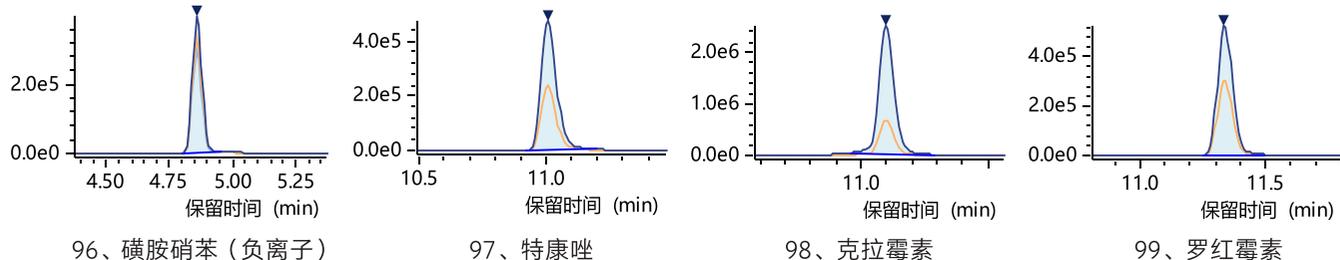
Q 916.50>174.20 (+) 2.71e5 Q 361.20>283.20 (+) 6.52e5 Q 531.20>489.30 (+) 1.36e5 Q 297.00>159.00 (+) 6.83e5

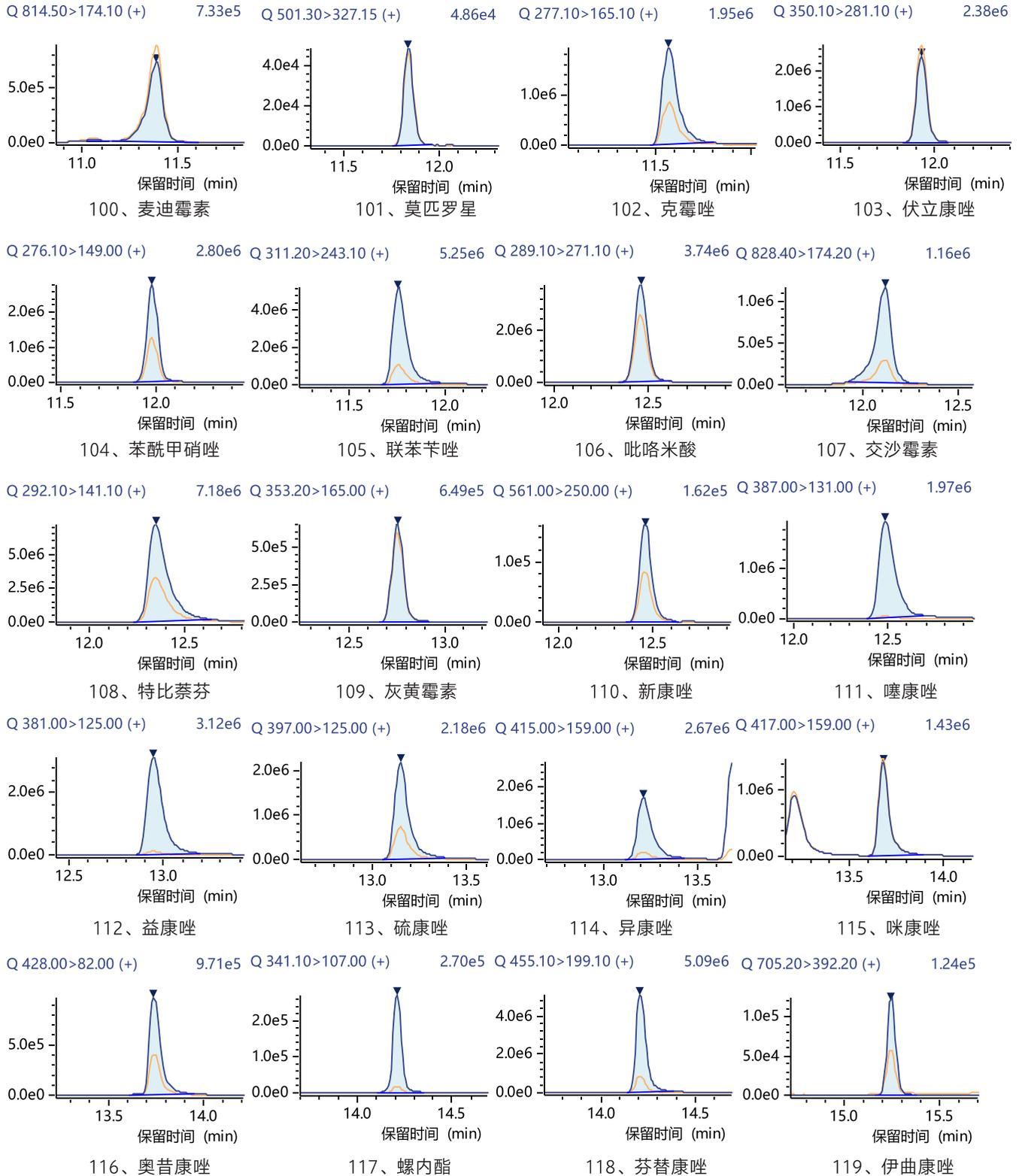


Q 233.10>215.10 (+) 4.59e6 Q 262.10>244.10 (+) 2.89e6 Q 288.15>117.05 (+) 3.69e6 Q 336.10>198.20 (+) 6.46e3



Q 334.05>136.25 (-) 3.97e5 Q 532.20>219.10 (+) 4.74e5 Q 748.60>158.10 (+) 2.52e6 Q 837.60>158.10 (+) 5.25e5





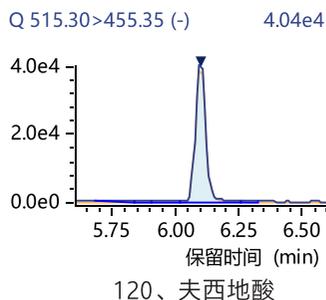


图 2 120 种抗感染类药物 MRM 色谱图 (20 ng/mL, 各化合物采集其保留时间 ±0.5 min)

3.2 校准曲线和灵敏度

按 2.2 中方式配制标准曲线，外标法定量。以浓度为横坐标，峰面积为纵坐标，绘制校准曲线。根据曲线最低点标样数据，以 3 倍信噪比计算检出限。化合物校准曲线信息如表 2 所示。

表 2 化合物校准曲线信息

序号	化合物	线性范围 (ng/mL)	相关系数 r^2	检出限 (ng/mL)	序号	化合物	线性范围 (ng/mL)	相关系数 r^2	检出限 (ng/mL)
1	羟基甲硝唑	0.5~100	0.998	0.2	61	金霉素	1~100	0.998	0.5
2	甲硝唑	0.5~100	0.999	0.2	62	克林霉素磷酸酯	0.5~100	0.999	0.2
3	呋喃他酮	0.5~100	0.999	0.2	63	美他环素	0.5~100	0.999	0.2
4	磺胺二甲嘧啶	0.5~100	0.998	0.2	64	克林霉素	0.5~100	0.999	0.2
5	洛硝哒唑	0.5~100	0.999	0.2	65	酞磺胺噻唑	0.5~100	0.998	0.2
6	二甲基咪唑	0.5~100	0.997	0.2	66	多西环素	1~100	0.996	0.5
7	磺胺嘧啶	0.2~100	0.997	0.1	67	西诺沙星	0.5~100	0.998	0.2
8	特硝唑	0.2~100	0.998	0.1	68	磺胺甲噁唑	0.5~100	0.999	0.2
9	吡哌酸	0.2~100	0.999	0.1	69	磺胺多辛	0.5~100	0.999	0.2
10	林可霉素	0.2~100	0.999	0.02	70	氟苯尼考	0.5~100	0.997	0.2
11	二甲氧苄啶	0.2~100	0.997	0.05	71	磺胺曲沙唑	0.2~100	0.998	0.1
12	磺胺噻唑	0.5~100	0.997	0.2	72	4- 差向脱水四环素	0.5~100	0.999	0.2
13	苯硝咪唑	0.5~100	0.998	0.2	73	替米考星	1~100	0.997	0.5
14	米诺环素	0.2~100	0.998	0.05	74	磺胺异噁唑	0.2~100	0.997	0.1
15	塞克硝唑	0.2~100	0.999	0.1	75	异丙硝唑	0.5~100	0.996	0.2
16	磺胺吡啶	0.2~100	0.997	0.05	76	苄达唑	0.2~100	0.999	0.02
17	麻保沙星	0.2~100	0.997	0.1	77	恶喹酸	0.5~100	0.995	0.2
18	依诺沙星	0.5~100	0.996	0.2	78	氯霉素	0.5~100	0.997	0.2
19	甲氧苄啶	0.2~100	0.998	0.05	79	甲氯环素	0.5~100	0.999	0.2
20	诺氟沙星	0.5~100	0.997	0.2	80	磺胺苯酰	0.5~100	0.999	0.2
21	氟罗沙星	0.2~100	0.996	0.1	81	脱水四环素	0.2~100	0.999	0.1
22	氧氟沙星	0.5~100	0.996	0.2	82	竹桃霉素	0.2~100	0.999	0.1
23	帕珠沙星	1~100	0.999	0.5	83	磺胺氯吡嗪	0.5~100	0.998	0.2

24	培氟沙星	0.2~100	0.998	0.1	84	磺胺地索辛	0.5~100	0.998	0.2
25	磺胺甲噁啉	0.5~100	0.996	0.2	85	磺胺喹沙啉	0.5~100	0.997	0.2
26	氯甲硝咪唑	1~100	0.997	0.5	86	磺胺苯吡唑	0.5~100	0.997	0.2
27	环丙沙星	0.5~100	0.998	0.2	87	红霉素	1~100	0.996	0.5
28	土霉素	1~100	0.997	0.5	88	环吡酮胺	1~500	0.995	0.5
29	奥美普林	0.2~100	0.998	0.05	89	泰乐菌素	0.5~100	0.997	0.2
30	呋喃西林	0.5~100	0.999	0.2	90	那氟沙星	0.2~100	0.999	0.1
31	替硝唑	0.5~100	0.998	0.2	91	酮康唑	1~100	0.997	0.5
32	洛美沙星	0.5~100	0.999	0.2	92	恩康唑	0.5~100	0.997	0.2
33	达氟沙星	0.5~100	0.999	0.2	93	萘啶酸	0.2~100	0.999	0.1
34	琥珀酰磺胺噻唑	2~100	0.999	1	94	氟甲喹	0.2~100	0.999	0.1
35	四环素	0.5~100	0.999	0.2	95	萘替芬	0.5~100	0.998	0.2
36	磺胺二甲唑	0.5~100	0.996	0.2	96	磺胺硝苯	0.5~100	0.997	0.2
37	甲矾霉素	0.5~100	0.999	0.2	97	特康唑	0.2~100	0.999	0.1
38	恩诺沙星	0.5~100	0.999	0.2	98	克拉霉素	0.2~100	0.999	0.1
39	呋喃妥因	1~100	0.996	0.5	99	罗红霉素	0.5~100	0.998	0.2
40	奥比沙星	0.2~100	0.999	0.02	100	麦迪霉素	0.5~100	0.997	0.2
41	磺胺甲二唑	0.5~100	0.999	0.2	101	莫匹罗星	1~100	0.996	0.5
42	磺胺索噁啉	0.5~100	0.997	0.2	102	克霉唑	0.2~100	0.999	0.1
43	加替沙星	0.5~100	0.999	0.2	103	伏立康唑	0.2~100	0.999	0.1
44	磺胺甲氧嗪	0.5~100	0.999	0.2	104	苯酰甲硝唑	0.2~100	0.999	0.1
45	克林沙星	0.5~100	0.997	0.2	105	联苯苄唑	0.2~100	0.997	0.1
46	沙拉沙星	0.5~100	0.999	0.2	106	吡咯米酸	0.2~100	0.999	0.1
47	奥硝唑	0.5~100	0.999	0.2	107	交沙霉素	0.5~100	0.996	0.2
48	去甲基金霉素	1~100	0.999	0.5	108	特比萘芬	0.2~100	0.997	0.1
49	双氟沙星	0.5~100	0.999	0.2	109	灰黄霉素	0.5~100	0.999	0.2
50	司帕沙星	0.2~100	0.998	0.1	110	新康唑	0.5~100	0.999	0.2
51	氟康唑	0.2~100	0.999	0.1	111	噻康唑	0.5~100	0.997	0.2
52	呋喃唑酮	1~100	0.999	0.5	112	益康唑	0.5~100	0.998	0.2
53	螺旋霉素	0.2~100	0.999	0.1	113	硫康唑	0.5~100	0.999	0.2
54	阿奇霉素	0.2~100	0.998	0.1	114	异康唑	0.5~100	0.997	0.2
55	磺胺间甲氧噁啉	0.2~100	0.996	0.1	115	咪康唑	0.2~100	0.998	0.1
56	莫西沙星	0.2~100	0.999	0.1	116	奥昔康唑	0.5~100	0.999	0.2
57	妥舒沙星	0.2~100	0.999	0.05	117	螺内酯	0.5~100	0.999	0.2
58	巴洛沙星	0.2~100	0.999	0.05	118	芬替康唑	0.2~100	0.999	0.1
59	磺胺林	0.2~100	0.997	0.1	119	伊曲康唑	1~100	0.997	0.5
60	磺胺氯哒嗪	0.2~100	0.997	0.1	120	夫西地酸	0.5~100	0.997	0.2

3.3 重复性实验

取 2.0 和 20 ng/mL 连续进样 6 次，考察仪器的重复性，测定结果如图 3-4 所示：各目标物的保留时间和峰面积的 RSD 分别在 0.02~0.32% 和 1.79~8.70% 之间。

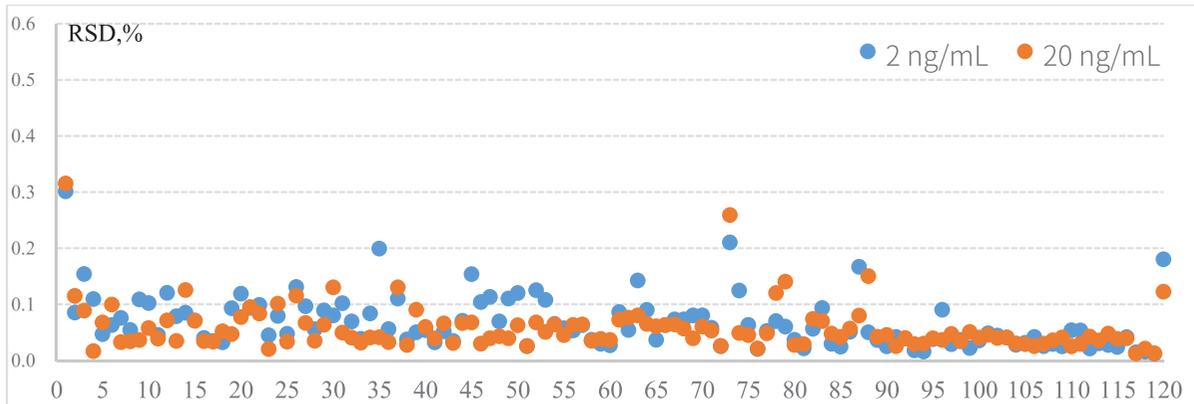


图 3 保留时间重复性结果 (n=6)

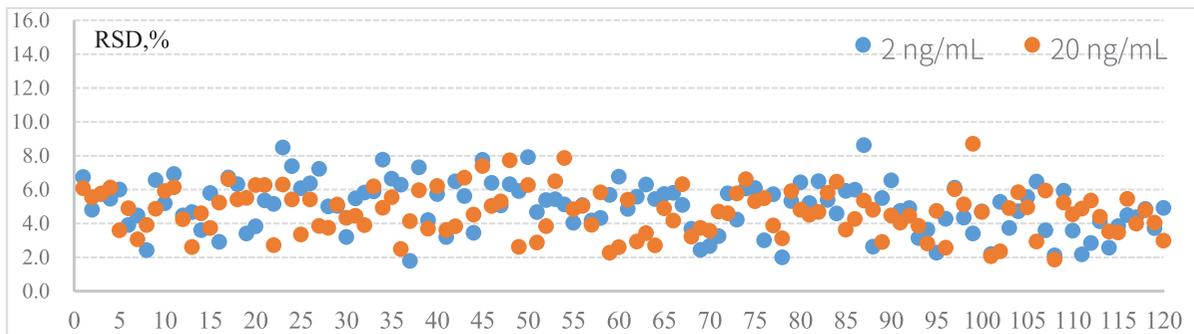


图 4 峰面积重复性结果 (n=6)

3.4 加标回收率

在护肤水空白样品上进行 2 mg/kg 浓度加标，前处理后上机，重复 3 次，测定平均回收率，结果如图 5 所示：120 种抗感染类药物的回收率在 72.1~129.3% 之间，RSD 在 0.72~8.31% 之间。

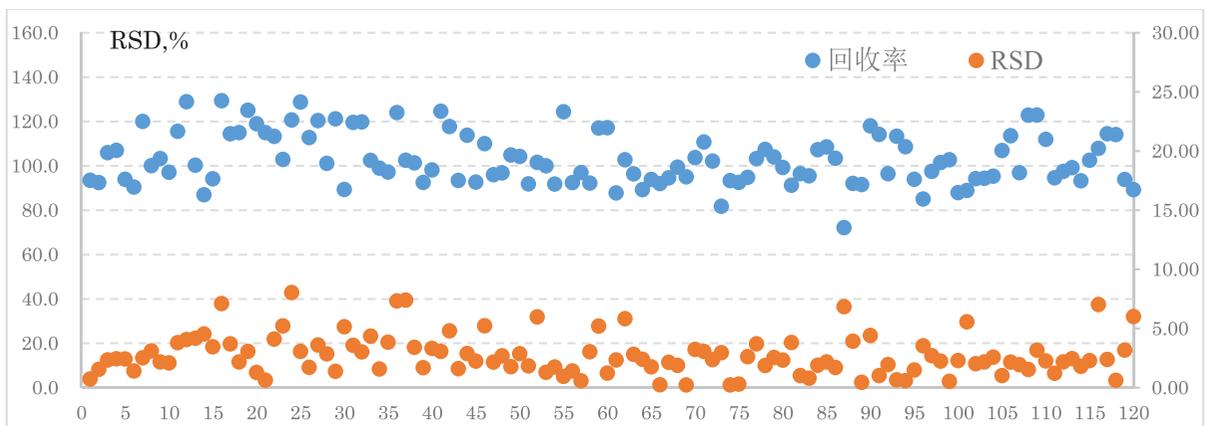


图 5 添加回收率结果 (n=3)

3.5 智能积分软件的使用

本次实验过程使用了岛津 Peakintelligence 智能积分功能。如图 6.1 和 6.2 所示，对于未检出的化合物，传统的积分方式仍会对噪音进行积分，需要实验人员手动取消该样品积分；而智能积分方式判断正确不进行积分。智能积分无需设置任何参数，较传统积分方式更加正确的对样品进行积分，减少实验人员重复校正积分的次数，提高工作效率。

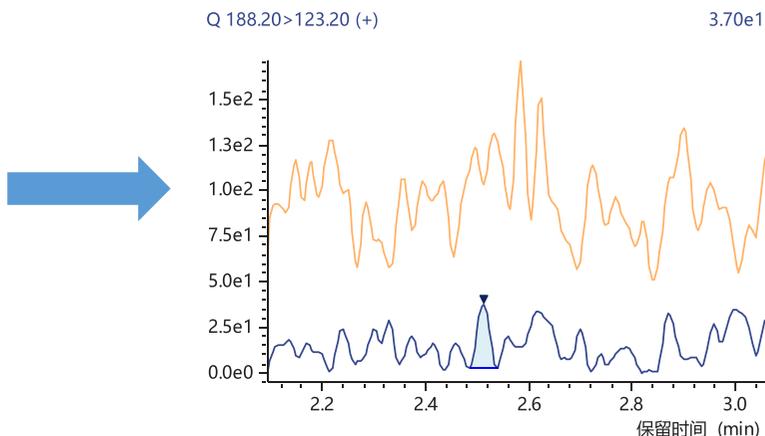
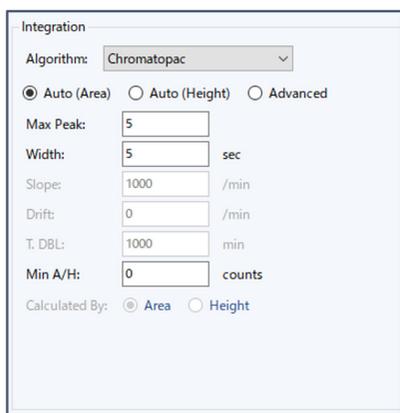


图 6.1 传统积分方式

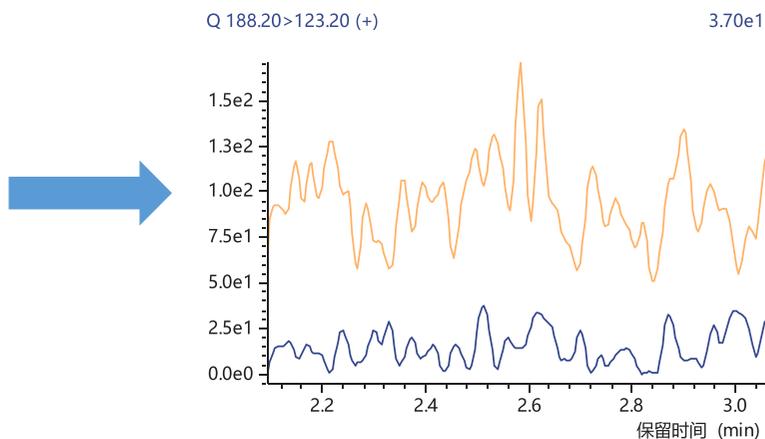
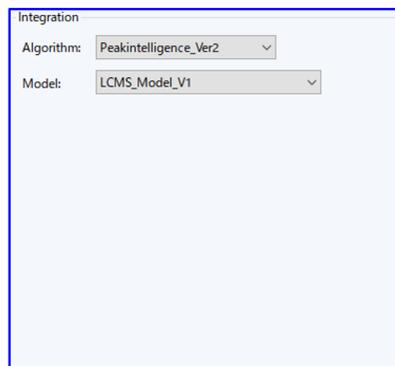


图 6.2 智能积分方式

■ 结论

本文参考国家药检局发布《化妆品中二甲硝咪唑等 120 种原料的测定方法》方法，建立了使用岛津三重四极杆液质联用仪测定化妆品中 120 种抗感染类药物的方法。120 种化合物在 0.2 ~100 ng/mL 浓度范围内线性良好，相关系数 r^2 在 0.995 以上。方法的重复性、回收率等指标均满足标准规定要求。该方法灵敏度高，分析时间短，通量高，可为化妆品中抗感染类药物的日常监测提供依据。

附录 1 120 种抗感染药物 MRM 参数

No.	中文名	电离方式	保留时间 (min)	前体离子	定量离子	Q1 Pre Bias	CE	Q3 Pre Bias	定性离子	Q1 Pre Bias	CE	Q3 Pre Bias
1	羟基甲硝唑	+	2.579	188.2	123.2	-11	-15	-22	126.2	-12	-16	-23
2	甲硝唑	+	3.433	172	82	-11	-24	-15	128	-11	-14	-14
3	呋喃它酮	+	3.845	325	100	-12	-15	-17	281	-12	-12	-20
4	磺胺二甲嘧啶	+	3.909	279.2	186.1	-19	-22	-19	92.1	-19	-30	-18
5	洛硝哒唑	+	4.092	201.2	140.2	-10	-13	-30	55.2	-11	-22	-22
6	二甲硝咪唑	+	4.091	142.1	96.1	-30	-16	-17	81.1	-30	-27	-14
7	磺胺嘧啶	+	4.294	251.1	156	-17	-14	-16	108.1	-17	-23	-20
8	特硝唑	+	4.279	186.1	128	-21	-16	-22	82.1	-21	-28	-30
9	吡哌酸	+	4.420	304.2	286.1	-30	-18	-22	215.1	-30	-38	-24
10	林可霉素	+	4.48	407.2	359.4	-20	-20	-20	126.1	-20	-30	-20
11	二甲氧苄啶	+	4.591	261.1	245.1	-30	-40	-24	123.1	-14	-12	-10
12	磺胺噻唑	+	4.706	256.1	156	-17	-14	-16	108.2	-17	-24	-21
13	苯硝咪唑	+	4.708	164.2	118.2	-10	-22	-20	91.1	-10	-39	-15
14	米诺环素	+	4.752	458.2	441.3	-10	-19	-17	283.1	-10	-30	-20
15	塞克硝唑	+	4.838	186.2	128.2	-10	-14	-25	59.2	-13	-19	-22
16	磺胺吡啶	+	4.917	250	156	-12	-15	-17	92	-12	-27	-17
17	麻保沙星	+	4.940	363.1	320	-14	-15	-22	345	-14	-20	-24
18	依诺沙星	+	4.962	321.1	232	-16	-35	-26	303.1	-11	-22	-22
19	甲氧苄啶	+	4.975	291.1	230.2	-20	-22	-25	123.2	-20	-23	-13
20	诺氟沙星	+	5.119	320.1	233.1	-16	-24	-17	276.1	-12	-18	-20
21	氟罗沙星	+	5.136	370.2	269.1	-11	-27	-19	326	-11	-20	-23
22	氧氟沙星	+	5.156	362.2	261.1	-10	-28	-19	318.2	-10	-20	-23
23	帕珠沙星	+	5.183	319.1	301.2	-15	-15	-15	281.1	-15	-25	-15
24	培氟沙星	+	5.222	334.2	233.1	-12	-26	-17	290.1	-12	-19	-21
25	磺胺甲噁啶	+	5.247	265	156	-10	-17	-17	92	-10	-29	-18
26	氯甲硝咪唑	+	5.276	162.1	145.1	-19	-16	-26	116.1	-19	-16	-11
27	环丙沙星	+	5.262	332.2	231	-12	-36	-16	288.1	-10	-18	-21
28	土霉素	+	5.263	461.2	426.1	-13	-19	-22	444.2	-10	-17	-22
29	奥美普林	+	5.327	275.2	123.2	-14	-23	-24	259.1	-14	-28	-29
30	呋喃西林	-	3.537	197.2	124.1	21	10	23	80.1	21	9	30
31	替硝唑	+	5.471	248.2	121.2	-13	-17	-20	128.2	-13	-22	-13
32	洛美沙星	+	5.473	352.2	265	-18	-22	-20	308.2	-18	-16	-23
33	达氟沙星	+	5.492	358.2	340.1	-14	-20	-26	255	-14	-42	-29
34	琥珀酰磺胺噻唑	+	5.572	356	256	-15	-15	-15	192.1	-15	-25	-15

35	四环素	+	5.615	445.1	410.2	-12	-20	-21	427.3	-10	-13	-16
36	磺胺二甲唑	+	5.653	268.1	156.1	-30	-15	-29	113.1	-30	-22	-21
37	甲矾霉素	-	3.618	354	185	27	22	19	289.9	27	12	20
38	恩诺沙星	+	5.688	360.2	245.1	-10	-27	-17	342.2	-10	-22	-25
39	呋喃妥因	-	3.759	237.1	152.1	19	13	16	124	19	15	25
40	奥比沙星	+	5.829	396	352	-17	-19	-24	295	-16	-25	-20
41	磺胺甲二唑	+	5.969	271.1	156	-10	-14	-17	92	-10	-27	-17
42	磺胺索嘧啶	+	5.982	279	156	-27	-19	-16	186	-30	-17	-19
43	加替沙星	+	6.020	376.2	261.2	-14	-33	-18	245.1	-19	-53	-28
44	磺胺甲氧嗪	+	6.099	281.1	156	-10	-17	-16	92	-10	-28	-18
45	克林沙星	+	6.114	366.1	305.1	-15	-20	-15	236.1	-15	-40	-15
46	沙拉沙星	+	6.229	386.2	299.1	-11	-29	-22	342.1	-11	-20	-17
47	奥硝唑	+	6.267	220.2	82.1	-12	-30	-16	128.2	-12	-15	-13
48	去甲基金霉素	+	6.247	465.1	448	-12	-16	-24	154.2	-12	-32	-18
49	双氟沙星	+	6.353	400.2	299.1	-11	-29	-21	356	-11	-21	-26
50	司帕沙星	+	6.357	393	349	-30	-21	-24	292	-30	-21	-24
51	氟康唑	+	6.488	307.1	238.1	-11	-16	-17	220	-11	-18	-15
52	呋喃唑酮	+	6.519	226.1	122.1	-13	-21	-22	139.1	-13	-15	-24
53	螺旋霉素	+	6.579	843.5	174.1	-26	-45	-19	540.3	-26	-26	-20
54	阿奇霉素	+	6.648	749.6	591.5	-20	-30	-22	116.1	-22	-47	-23
55	磺胺间甲氧嘧啶	+	6.803	281	156	-12	-18	-16	108	-23	-18	-22
56	莫西沙星	+	6.798	402.2	261.1	-11	-25	-19	364.5	-11	-27	-27
57	妥舒沙星	+	6.840	405.1	387.1	-15	-25	-15	344.1	-15	-15	-15
58	巴洛沙星	+	6.890	390.2	359.1	-15	-15	-15	315.1	-15	-25	-15
59	磺胺林	+	6.993	281.1	156	-10	-15	-30	92.1	-10	-29	-16
60	磺胺氯吡嗪	+	7.133	285	155.9	-11	-15	-17	92	-11	-29	-18
61	金霉素	+	7.085	479.1	444.1	-13	-20	-23	462.2	-13	-16	-23
62	克林霉素磷酸酯	+	7.151	505.2	126.1	-20	-32	-24	457.2	-26	-21	-17
63	美他环素	+	7.23	443.2	426.2	-11	-20	-23	201.2	-11	-30	-22
64	克林霉素	+	7.329	425.2	377.2	-12	-20	-14	126.2	-12	-27	-26
65	酞磺胺噻唑	+	7.565	404	256	-15	-15	-15	156	-15	-25	-15
66	多西环素	+	7.524	445.2	428.2	-12	-17	-22	154	-12	-26	-16
67	西诺沙星	+	7.633	263.1	245.1	-21	-16	-19	189	-21	-30	-22
68	磺胺甲噻唑	+	7.644	254.1	156	-13	-15	-17	107.9	-10	-23	-20
69	磺胺多辛	+	7.676	311.1	156.1	-22	-18	-30	108.1	-22	-26	-20
70	氟苯尼考	-	4.366	356	336	13	10	23	185	13	20	19
71	磺胺曲沙唑	+	7.848	268.1	92.1	-17	-28	-30	156	-17	-16	-29

72	4- 差向脱水四环素	+	7.848	427.1	410	-15	-12	-15	269	-15	-25	-15
73	替米考星	+	7.906	869.5	174.1	-28	-50	-20	696.6	-28	-40	-28
74	磺胺异噁唑	+	8.148	268	156	-30	-13	-16	92.1	-30	-27	-17
75	异丙硝唑	+	8.192	170.2	109.2	-22	-25	-21	124.2	-22	-20	-20
76	苄达唑	+	8.250	261.1	91.1	-15	-35	-15	107	-15	-35	-15
77	恶喹酸	+	8.435	262.1	244.1	-30	-18	-30	216	-30	-32	-26
78	氯霉素	-	4.444	321.1	152	12	17	14	257.2	12	12	17
79	甲氧环素	+	8.423	477.2	460	-15	-15	-15	235	-15	-35	-15
80	磺胺苯酰	+	8.894	277.1	156.1	-15	-13	-29	108.1	-15	-23	-20
81	脱水四环素	+	8.766	427.1	410.1	-25	-17	-28	154.1	-25	-28	-28
82	竹桃霉素	+	8.843	688.4	158.2	-22	-30	-18	544.4	-22	-15	-30
83	磺胺氯吡嗪	+	8.963	285	156.1	-15	-17	-30	108.1	-15	-26	-20
84	磺胺地索辛	+	9.183	311	156	-23	-22	-29	92.1	-23	-35	-17
85	磺胺喹沙琳	+	9.238	301	156	-23	-17	-29	92.1	-23	-30	-17
86	磺胺苯吡唑	+	9.454	315.1	158.1	-30	-28	-30	156.1	-30	-21	-30
87	红霉素	+	9.448	734.3	158.2	-40	-35	-18	576.4	-40	-20	-32
88	环吡酮胺	+	14.322	222.2	136.1	-25	-26	-26	162.1	-24	-23	-17
89	泰乐菌素	+	10.038	916.5	174.2	-30	-45	-20	101.1	-20	-52	-19
90	那氟沙星	+	10.235	361.2	283.2	-11	-38	-20	257.2	-13	-37	-12
91	酮康唑	+	10.127	531.2	244	-20	-34	-18	489.3	-20	-31	-18
92	恩康唑	+	10.237	297	159	-15	-25	-15	201	-15	-18	-15
93	萘啶酸	+	10.580	233.1	215.1	-30	-14	-26	187	-30	-28	-22
94	氟甲喹	+	10.988	262.1	244.1	-30	-16	-18	202	-30	-36	-23
95	萘替芬	+	11.013	288.15	117.05	-20	-15	-20	115.1	-20	-50	-23
96	磺胺硝苯	+	11.125	336.1	198.2	-23	-9	-14	294.1	-23	-12	-30
		-	4.863	334.1	136.2	11	29	13	270.2	11	23	12
97	特康唑	+	11.132	532.2	219.1	-15	-35	-15	192.1	-15	-45	-15
98	克拉霉素	+	11.225	748.6	158.1	-22	-28	-17	590.6	-20	-20	-22
99	罗红霉素	+	11.473	837.6	158.1	-20	-34	-17	679.6	-20	-23	-26
100	麦迪霉素	+	11.517	814.5	174.1	-15	-32	-15	109.1	-15	-48	-15
101	莫匹罗星	+	11.836	501.3	327.15	-36	-13	-12	309.05	-26	-16	-21
102	克霉唑	+	11.642	277.1	165.1	-20	-30	-20	241	-10	-28	-17
103	伏立康唑	+	11.923	350.1	281.1	-10	-17	-19	127.1	-10	-35	-23
104	苯酰甲硝唑	+	11.955	276.1	149	-15	-15	-15	105	-15	-35	-15
105	联苯苄唑	+	11.882	311.2	243.1	-12	-16	-12	165	-12	-34	-18
106	吡咯米酸	+	12.450	289.1	271.1	-15	-15	-15	243.1	-15	-30	-15
107	交沙霉素	+	12.274	828.4	174.2	-26	-35	-20	229.2	-26	-30	-17

108	特比萘芬	+	12.502	292.1	141.1	-15	-23	-14	115.05	-15	-54	-21
109	灰黄霉素	+	12.751	353.2	165	-11	-21	-18	215	-10	-21	-15
110	新康唑	+	12.500	561.0	250	-28	-35	-26	515	-28	-31	-26
111	噻康唑	+	12.661	387.0	131	-15	-31	-15	199	-15	-20	-15
112	益康唑	+	13.132	381.0	125	-30	-30	-12	193.1	-30	-19	-13
113	硫康唑	+	13.302	397.0	125	-15	-25	-15	183	-15	-16	-15
114	异康唑	+	13.381	415.0	159	-15	-30	-15	123	-15	-50	-15
115	咪康唑	+	13.781	417.0	159	-30	-38	-29	161	-30	-35	-30
116	奥昔康唑	+	13.811	428.0	234	-15	-31	-15	82	-15	-35	-15
117	螺内酯	+	14.201	341.1	107	-12	-29	-11	165	-17	-55	-17
118	芬替康唑	+	14.304	455.1	199.1	-15	-30	-15	167.1	-15	-48	-15
119	伊曲康唑	+	15.117	705.2	392.2	-15	-35	-15	432.2	-15	-30	-15
120	夫西地酸	-	6.105	515.3	455.35	38	20	20	393.35	24	24	17

岛津应用云

