

# 超高效液相色谱 - 三重四极杆质谱联用法 同时筛查生物检材中 200 种药（毒）物

## LCMSMS-696

**摘要：**使用岛津超高效液相色谱 - 三重四极杆质谱联用仪建立了生物检材中 200 种药（毒）物同时测定的方法。使用基质加标样品进行了方法的线性考察和 0.05 mg/L 浓度水平的加标考察。结果显示，校准曲线相关系数均大于 0.995，加标浓度水平下 200 种药（毒）物均有效检出，6 针重复进样峰面积精密度良好，可满足公安司法领域日常检验需求。

**关键词：**超高效液相色谱 - 三重四极杆质谱仪 200 种药（毒）物 生物检材

当今社会，各种化学物质造成的中毒、吸毒事件时有发生，严重威胁着公共安全。且随着国内毒物和毒品种类、数量的大幅加，对涉毒案件的侦查检验要求也越来越高。

现代毒物分析技术在仪器分析技术的基础上飞速发展，已经应用的毒物检验技术有光谱法、色谱法和色谱 - 质谱联用技术等。其中，液相色谱 - 串联质谱（LC-MS/MS）就是一种法医毒品毒物检测的新技术。

对于生物检材（血液、尿液）而言，组成复杂，干扰物多，筛查目标物不明确，筛查难度大。公安

行业标准《GA/T 1530-2018 法庭科学 230 种药（毒）物液相色谱 - 串联质谱筛查方法》，为快速筛查提供了可靠的理论依据。

本文使用岛津超高效液相色谱仪 LC-30 和三重四极杆质谱 LCMS-8050 联用，参考标准前处理方法，建立了包含：催眠镇静类药物、抗精神失常药、麻醉药品、精神药品、生物碱类毒物、农药、鼠药以及其他药物在内的 200 种毒品、毒物的筛查方法。本方法分析速度快，筛查结果可靠，可供相关人员参考。

## ■ 实验部分

### 1.1 仪器

本实验采用岛津 Nexera LC-30A 与三重四极杆质谱仪 LCMS-8050 联用系统。具体配置为：

系统控制器：CBM-20 A

自动进样器：SIL-30AC

输液泵：LC-30AD

柱温箱：CTO-30A

质谱检测器：LCMS-8050

色谱工作站：LabSolutions Ver. 5.99

### 1.2 分析条件

液相色谱条件：

色谱柱：Shim-pack GIST C18 (100 mm×2.1 mm I.D., 2 μm)

P/N: 227-30001-04, 岛津（上海）实验器材有限公司

流动相：A 相为 2 mmol/L 甲酸铵 -0.05% 甲酸水溶液

B 相为 2 mmol/L 甲酸铵 -0.05% 甲酸甲醇

流速：0.3 mL/min

进样量：2 μL

柱温：40℃

SIL 预处理：Co-injection 模式，同时注入 30 μL 水

洗脱方式：梯度洗脱，B 相初始浓度为 5%，时间程序见表 1。

表 1 梯度洗脱时间程序

Time	Module	Command	Value
7.50	Pumps	Pump B Conc.	95
10.00	Pumps	Pump B Conc.	95
10.01	Pumps	Pump B Conc.	5
15	Controller	Stop	

质谱条件:

离子源: ESI (±)

雾化气流速: 3.0 L/min

加热气流速: 10.0 L/min

干燥气流速: 10.0 L/min

DL 温度: 250°C

加热模块温度: 400°C

接口温度: 300°C

扫描模式: 多反应监测 (MRM)

### 1.3 标准品及样品制备

混合标准储备溶液 (10 mg/L): 购于天津阿尔塔科技有限公司, 共 20 组。避光 -18°C 及以下条件保存, 有效期 12 个月。

混合标准溶液 (0.5 mg/L): 分别吸取等体积 20 组标准储备液混合均匀, 得到 0.5 mg/L 混合标准溶液, 避光 -18°C 及以下条件保存, 有效期 1 个月。

校准工作曲线: 精确吸取一定量的混合标准溶液, 逐级用甲醇溶液稀释成质量浓度为 0.005、0.01、0.02、0.05 和 0.1 mg/L 的空白标准品工作溶液, 供液相色谱 - 质谱联用仪测定。以定量离子离子的质量色谱图峰面积为纵坐标, 相对应的空白校准工作溶液质量浓度为横坐标, 绘制基质匹配校准工作曲线。

样品制备: 参照行业标准《GA/T 1530-2018 法庭科学 230 种药 (毒) 物液相色谱 - 串联质谱筛查方法》

### 1.4 溶解效应的解决方案

标准中规定标准品及样品须采用初始流动相溶剂进行溶解, 主要为避免进样过程中纯溶剂标液产生的溶剂效应导致峰展宽或双头峰现象, 影响检测灵敏度及定量准确性, 但增加了前处理步骤, 过程中还可能会造成样品的损失。岛津 SIL-30AC 自动进样器可以通过预处理功能在进样时同时吸入一定的水, 从而减小或消除溶剂效应对峰形的影响。下图为阿昔洛韦在纯甲醇溶剂下使用预处理功能后峰形明显得到了改善。

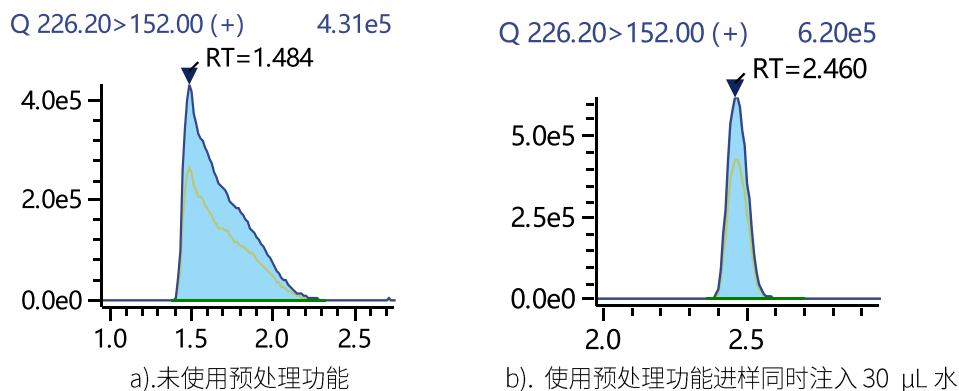


图 1 阿昔洛韦 MRM 色谱图

## ■ 结果讨论

### 2.1 标准溶液 MRM 色谱图

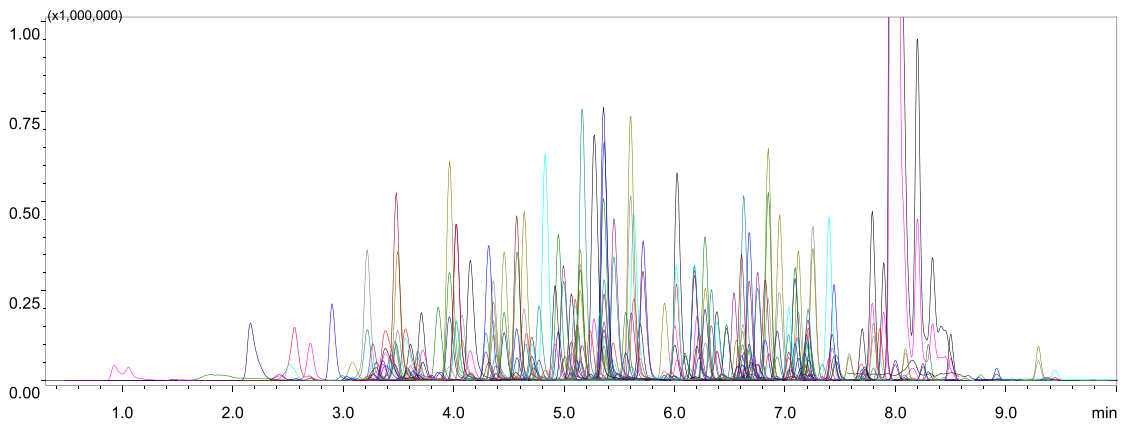
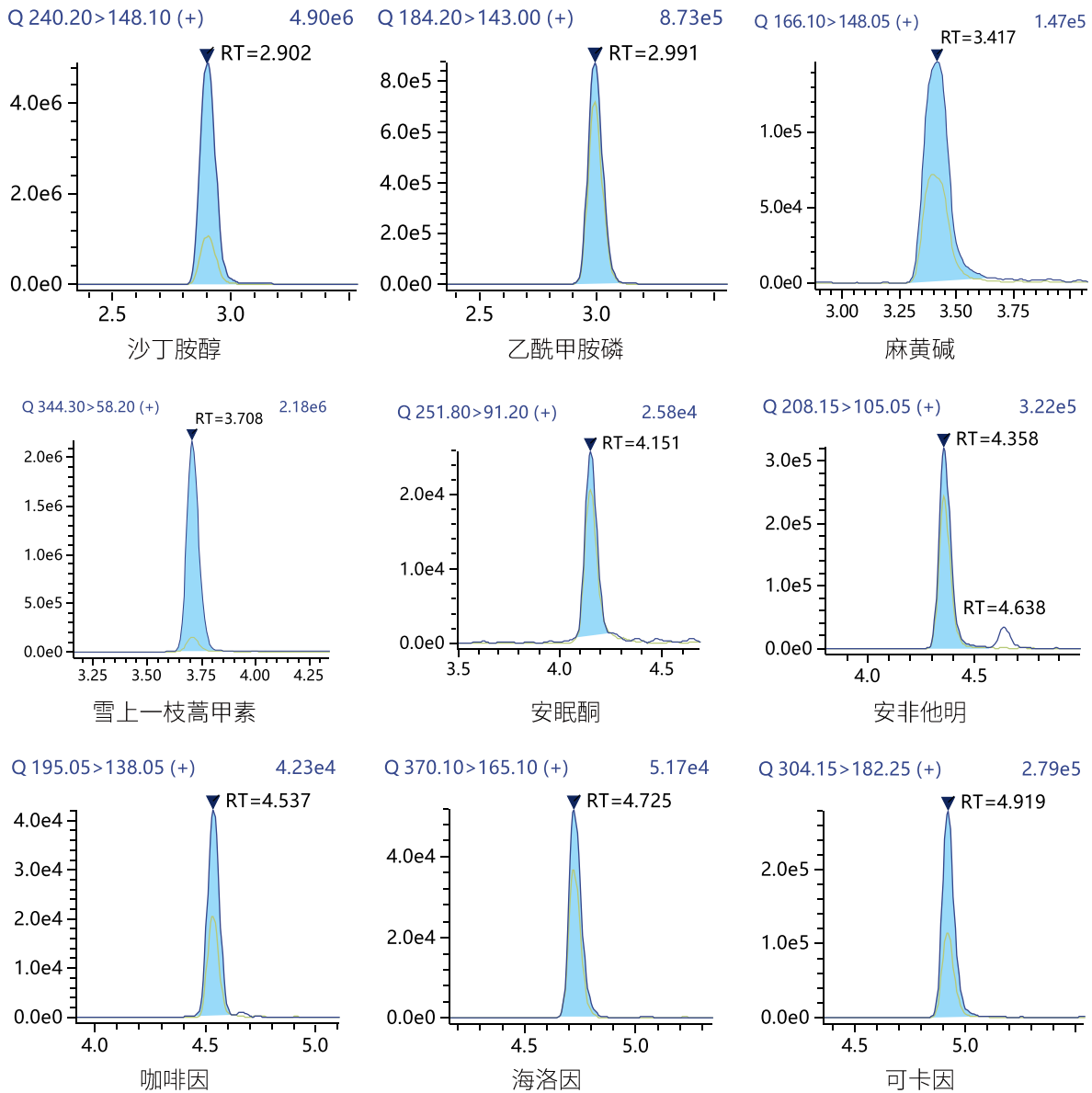


图2 尿液基质中200种毒品毒物MRM色谱图(加标浓度0.01 mg/L)



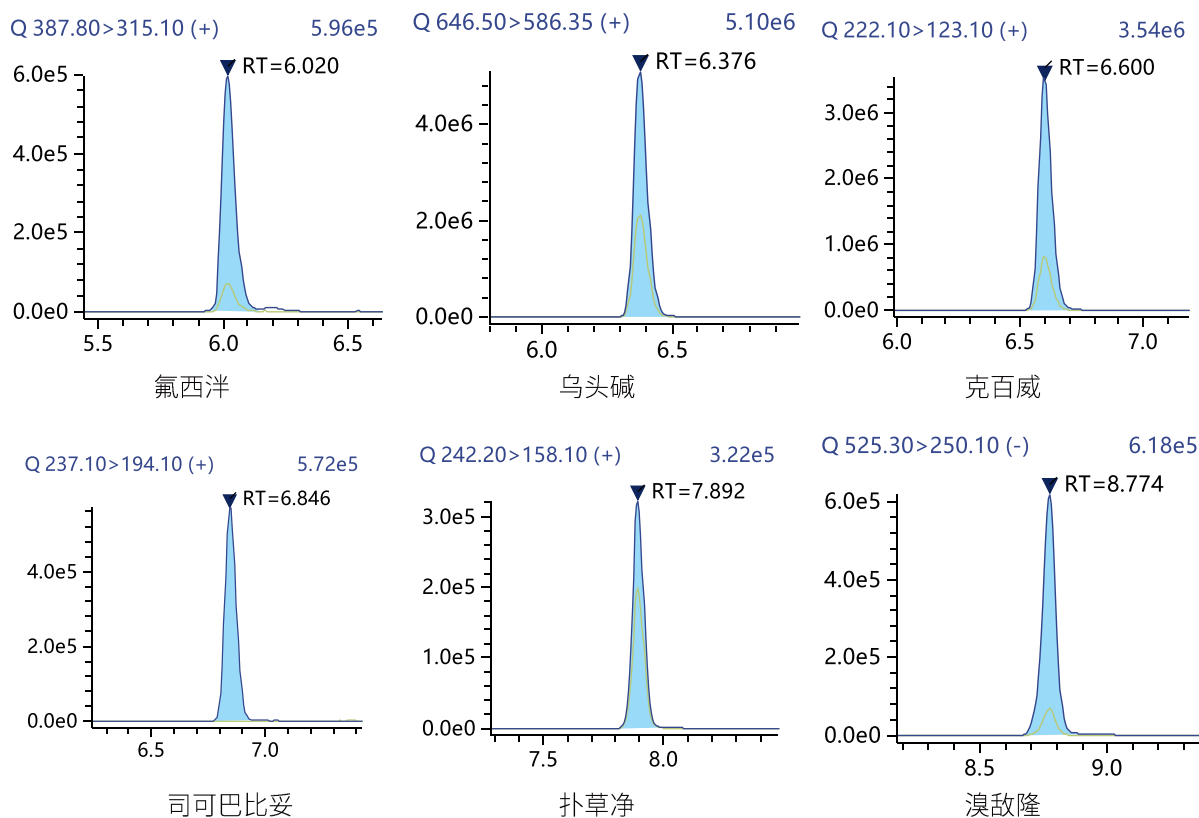


图3 部分毒品毒物 MRM 色谱图 (浓度 0.01 mg/L)

## 2.2 线性测定结果

对标准品按 1.2 中的分析条件进行分析，外标法制作标准曲线。部分标准曲线结果见表 2，200 种毒品毒物校准曲线线性相关系数均大于 0.995。

表 2 标准曲线参数 (部分)

名称	线性方程	相关系数	准确度 (%)	线性范围 (mg/L)
沙丁胺醇	$Y = (148525.8)X + (196326.1)$	0.9983	90.5~105.9	0.005~0.1
乙酰甲胺磷	$Y = (22161.09)X + (-7138.349)$	0.9995	95.4~103.0	0.005~0.1
麻黄碱	$Y = (103813.0)X + (86140.25)$	0.9984	95.7~106.8	0.005~0.1
雪上一枝蒿甲素	$Y = (88296.53)X + (2656.517)$	0.9998	95.5~106.9	0.005~0.1
安眠酮	$Y = (11851.13)X + (-12408.77)$	0.9997	94.9~103.9	0.005~0.1
安非他明	$Y = (166906.7)X + (19627.78)$	0.9997	95.8~103.3	0.005~0.1
咖啡因	$Y = (20698.34)X + (60772.49)$	0.9991	93.3~108.1	0.005~0.1
海洛因	$Y = (32169.04)X + (82260.07)$	0.9981	84.0~109.6	0.005~0.1
可卡因	$Y = (125362.3)X + (-19741.73)$	0.9997	95.7~101.6	0.005~0.1

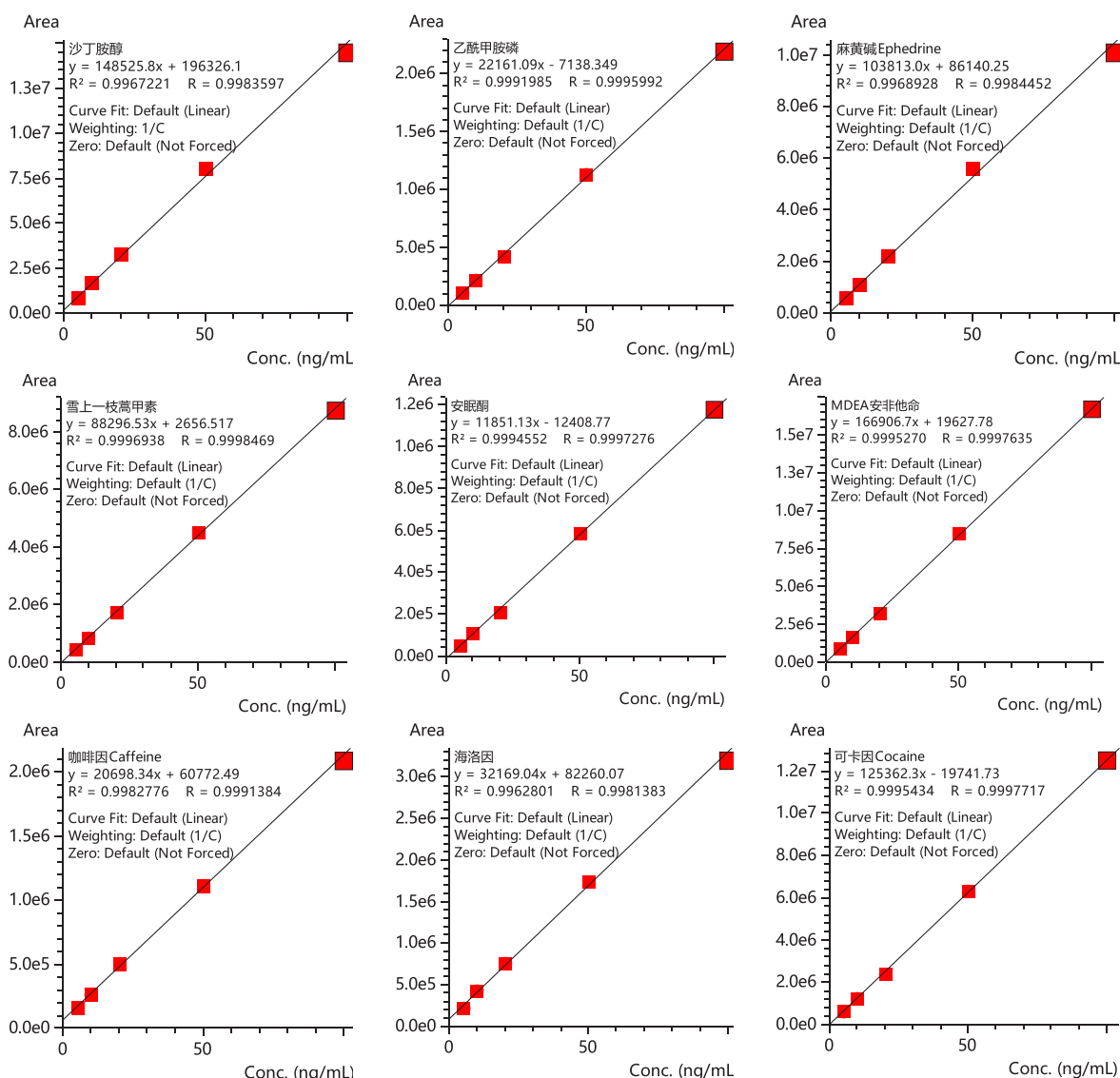


图 4 标准品校准曲线 (部分)

### 2.3 精密度测定结果

对 0.02 mg/L 混合标准溶液连续分析 6 次，计算重复性。结果见图 5，保留时间 RSD 为 0.01%~0.79%，除 5 个化合物外其余化合物峰面积 RSD < 10%，重复性良好。

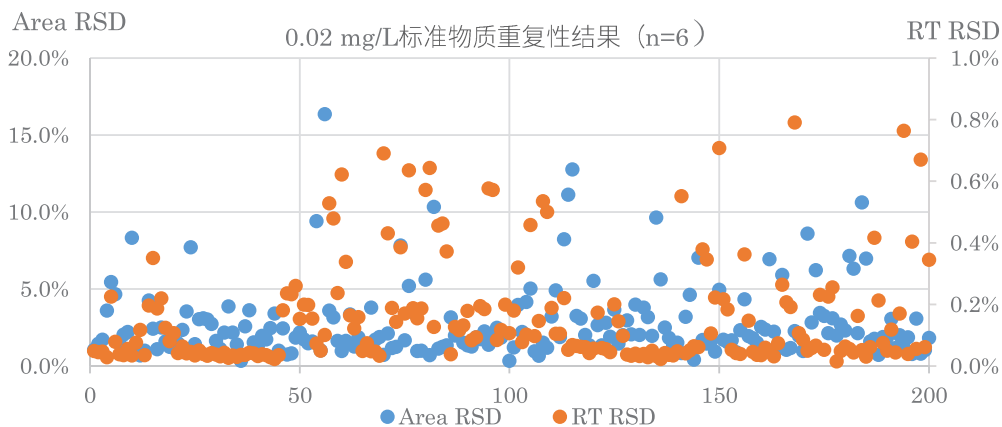


图 5 0.02 mg/L 标准品精密度统计结果 (n=6)

#### 2.4 空白尿液添加实验结果

在尿液空白样品中加入混标，添加量为 0.05 mg/kg 浓度水平，按照 1.3 样品前处理流程分别平行处理 3 份后上机，考察筛查结果。空白尿液样品中，未出现与标准工作溶液中目标物保留时间相同（偏差小于等于  $\pm 2.5\%$ ）的两对母离子 / 子离子对的色谱峰，无基质干扰信号。空白尿液添加检材样品提取液中出现与标准工作溶液中目标物保留时间相同（偏差小于等于  $\pm 2.5\%$ ）的两对母离子 / 子离子对的色谱峰，且添加样品提取液中两个离子对相对丰度比与标准工作溶液中目标物比较的最大允许相对误差在允许的范围内，200 种目标化合物均被检出，检出阳性结果可靠，平行样品峰面积精密度  $RSD < 20\%$ 。

#### ■ 结论

使用岛津液相色谱 - 三重四极杆质谱联用仪 LCMS-8050 建立了生物检材基质中 200 种药（毒）物同时筛查的方法。结果表明，该方法操作简单、分析速度快、重现性好、准确度高，可供相关人员参考。

## ■ 附录

表 3 MRM 参数

No.	中文名	英文名	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	氟西洋	Flurazepam	+	6.044	388.1	315.1	-20	-26	-21	288.1	-11	-27	-19
2	普拉西泮	Prazepam	+	8.296	325.7	271.8	-12	-26	-27	140.0	-23	-42	-24
3	4-羟基去甲安定	4-hydroxynordiazepam	+	7.792	287.1	165.1	-17	-55	-15	140.0	-18	-53	-27
4	2-羟基乙基氟安定	2-hydroxyethyl flurazepam	+	7.180	333.1	109.1	-11	-27	-18	211.2	-12	-37	-21
5	安眠酮	Methaqualone	+	4.096	251.8	91.2	-14	-39	-15	132.1	-14	-27	-24
6	眠尔通	Meprobamate	+	5.889	219.1	97.1	-27	-14	-15	158.1	-11	-10	-15
7	泰尔登	Tardan	+	7.124	316.1	231.0	-11	-32	-23	221.1	-11	-42	-22
8	氟奋乃静	Fluphenazine	+	7.473	438.2	171.2	-15	-25	-17	143.1	-15	-29	-13
9	多塞平	Doxepin	+	6.150	280.3	107.1	-15	-24	-18	84.2	-15	-25	-30
10	氟西汀	Fluoxetine	+	6.871	310.1	148.2	-17	-9	-28	117.1	-16	-46	-24
11	氟哌利多	Droperidol	+	5.654	380.2	165.0	-13	-28	-16	194.1	-13	-19	-19
12	延胡索乙素	Tetrahydropalmatine	+	5.185	356.2	192.1	-12	-29	-19	165.1	-12	-26	-16
13	司可巴比妥	Secobarbital	+	6.832	237.1	194.1	-19	-22	-19	84.9	-28	-31	-30
14	硫喷妥	Thiopental	+	4.729	241.2	100.9	-30	-53	-21	58.1	-18	-20	-10
15	去甲氯胺酮	Norketamine	+	4.608	224.1	125.0	-14	-27	-22	207.2	-14	-13	-20
16	7-氨基硝基安定	7-aminonitrazepam	+	4.092	252.1	121.1	-30	-28	-27	94.1	-30	-40	-21
17	7-氨基氯硝安定	7-aminoclonazepam	+	5.070	286.1	121.1	-15	-30	-23	222.1	-15	-23	-24
18	7-氨基氟硝安定	7-aminoflunitrazepam	+	5.532	284.1	135.1	-30	-27	-30	226.2	-30	-33	-18
19	唑吡坦	Zolpidem	+	5.296	308.2	235.2	-30	-37	-26	236.2	-30	-29	-19
20	氟哌啶醇	Haloperidol	+	6.240	376.2	165.2	-18	-25	-12	123.1	-18	-42	-26
21	咪达唑仑	Midazolam	+	6.377	326.1	291.1	-12	-28	-22	223.0	-12	-38	-18
22	帕罗西汀	Paroxetine	+	6.585	330.2	70.3	-16	-33	-26	44.2	-16	-25	-17
23	$\alpha$ -羟基三唑仑	$\alpha$ -Hydroxytriazolam	+	6.909	359.1	176.2	-30	-27	-15	341.2	-30	-18	-28
24	氟硝西洋	Flunitrazepam	+	7.021	314.1	268.2	-12	-27	-21	239.3	-12	-39	-18
25	氯氮卓	Chlordiazepoxide	+	6.790	300.1	283.0	-30	-14	-30	227.0	-30	-23	-24
26	丙咪嗪	Imipramine	+	6.634	281.2	86.1	-14	-17	-18	58.1	-14	-50	-23
27	$\alpha$ -羟基阿普唑仑	$\alpha$ -Hydroxyalprazolam	+	7.017	325.1	297.0	-17	-26	-21	216.1	-17	-41	-23
28	马普替林	Maprotiline	+	6.692	278.2	250.2	-14	-20	-19	191.0	-14	-35	-21
29	苯海索	Trihexyphenidyl	+	6.645	302.3	98.2	-14	-24	-20	55.2	-14	-50	-21
30	氯巴占	Clobazam	+	7.106	301.1	259.0	-16	-19	-28	224.1	-16	-32	-23
31	$\alpha$ -羟基咪达唑仑	$\alpha$ -Hydroxymidazolam	+	6.928	342.1	324.1	-20	-21	-23	203.0	-20	-28	-21

32	奥沙西洋	Oxazepam	+	7.204	287.2	241.2	-11	-24	-19	269.1	-11	-15	-22
33	阿米替林	Amitriptyline	+	6.767	278.2	91.1	-13	-27	-19	105.1	-13	-25	-21
34	阿普唑仑	Alprazolam	+	7.238	309.1	281.1	-16	-26	-22	205.1	-16	-40	-23
35	替马西洋	Temazepam	+	7.385	301.1	255.1	-11	-25	-30	283.2	-11	-13	-23
36	溴西洋	Bromazepam	+	6.679	316.0	209.1	-12	-29	-24	182.2	-12	-39	-11
37	硝西洋	Nitrazepam	+	6.911	282.1	180.2	-11	-40	-20	236.1	-11	-28	-30
38	卡马西平	Carbamazepine	+	6.832	237.1	194.0	-12	-20	-23	192.1	-12	-25	-22
39	氯甲西洋	Lormetazepam	+	7.431	335.1	289.0	-13	-23	-23	177.1	-13	-39	-11
40	氯丙嗪	Chlorpromazine	+	7.057	319.1	86.1	-16	-22	-18	58.1	-16	-35	-23
41	艾司唑仑	Estazolam	+	7.078	295.1	267.2	-11	-24	-21	205.3	-11	-35	-25
42	三唑仑	Triazolam	+	7.194	343.1	308.2	-10	-24	-22	315.0	-10	-27	-18
43	劳拉西洋	Lorazepam	+	7.183	321.1	274.9	-12	-22	-22	303.0	-12	-10	-24
44	地西洋	Diazepam	+	7.792	285.1	193.1	-11	-29	-23	154.1	-11	-28	-18
45	吗啡	Morphine	+	2.440	286.2	165.1	-14	-44	-12	153.1	-14	-45	-29
46	替苯丙胺	Tenamphetamine	+	4.101	180.1	105.1	-12	-23	-12	77.0	-12	-40	-29
47	亚甲基双氧苯丙胺	MDMA	+	4.188	194.1	163.1	-10	-13	-12	105.1	-10	-25	-22
48	甲基苯丙胺	Methamphetamine	+	4.013	150.1	91.1	-11	-22	-15	119.1	-11	-16	-20
49	可卡因	Cocaine	+	4.952	304.2	182.3	-11	-21	-14	82.1	-11	-35	-17
50	3, 4-亚甲基二氧乙基苯丙胺	MDEA	+	4.401	208.2	163.2	-15	-14	-16	105.1	-15	-26	-19
51	氯胺酮	Ketamine	+	4.612	238.1	125.0	-17	-26	-12	207.0	-16	-15	-22
52	苯甲酰爱康宁	Benzoylcegonine	+	4.802	290.1	168.1	-20	-20	-16	105.1	-11	-28	-18
53	四氢大麻酚	tetrahydrocannabinol (THC)	+	6.680	315.7	193.1	-23	-33	-20	259.2	-21	-19	-30
54	氯氮平	Clozapine	+	6.194	327.2	270.1	-17	-23	-29	192.0	-17	-44	-20
55	异戊巴比妥	Amobarbital	-	6.832	225.2	42.0	16	18	14	182.0	18	10	19
56	卡西酮	Cathinone	+	3.309	150.2	117.0	-11	-24	-20	132.1	-21	-18	-27
57	甲卡西酮	Methcathinone	+	3.477	164.1	131.2	-12	-24	-24	146.1	-12	-17	-28
58	可待因	Codeine	+	3.336	300.2	165.1	-21	-45	-16	44.1	-23	-35	-17
59	O6-单乙酰吗啡	O6-monoacetylmorphine	+	3.711	328.2	165.1	-12	-38	-17	43.0	-24	-47	-15
60	海洛因	Heroin	+	4.756	370.1	165.1	-14	-44	-16	268.1	-27	-30	-29
61	曲马多	Tramadol	+	4.865	264.2	58.2	-10	-23	-22	42.0	-10	-55	-15
62	芬太尼	Fentanyl	+	5.740	337.1	105.1	-24	-39	-19	188.1	-24	-23	-19
63	丁丙诺啡	Buprenorphine	+	6.108	468.0	55.1	-18	-55	-20	396.2	-18	-41	-28
64	美沙酮	Methadone	+	6.692	310.1	265.2	-22	-16	-29	105.1	-22	-28	-19
65	地芬诺酯	Diphenoxylate	+	7.178	453.2	57.1	-17	-38	-21	187.1	-17	-33	-19
66	麻黄碱	Ephedrine	+	3.482	166.1	148.1	-11	-14	-17	117.1	-11	-20	-24
67	甲基麻黄碱	Methylephedrine	+	3.518	180.2	162.1	-12	-16	-19	-	-	-	-
68	咖啡因	Caffeine	+	4.511	195.1	138.1	-21	-20	-28	42.1	-21	-40	-17

69	哌醋甲酯	Methylphenidate	+	4.983	234.2	84.1	-11	-20	-17	56.1	-11	-45	-22
70	O3-单乙酰吗啡	O3-monoacetylmorphine	+	3.699	328.3	286.2	-16	-26	-28	58.2	-22	-27	-22
71	乙酰可待因	Acetylcodeine	+	4.740	342.2	165.1	-10	-50	-16	225.1	-10	-29	-23
72	去甲吗啡	Normorphine	+	2.393	272.1	165.0	-16	-40	-16	121.1	-14	-25	-20
73	去甲羟吗啡酮	Noroxymorphone	+	2.601	288.3	270.1	-10	-18	-29	213.1	-10	-32	-22
74	羟吗啡酮	Oxymorphone	+	2.580	302.1	284.1	-16	-20	-18	227.1	-16	-29	-22
75	氢吗啡酮	Hydromorphone	+	2.726	286.2	185.1	-10	-32	-18	157.0	-10	-43	-28
76	去甲可待因	Norcodeine	+	3.411	286.2	268.1	-10	-20	-29	165.1	-10	-44	-28
77	双氢可待因	Dihydrocodeine	+	3.304	302.2	199.1	-16	-34	-20	171.1	-16	-42	-16
78	二氢埃托啡	Dihydroetorphine	+	5.369	414.2	187.6	-21	-55	-17	87.0	-23	-25	-22
79	羟考酮	Oxycodone	+	3.532	316.1	298.2	-17	-20	-20	241.1	-17	-30	-25
80	纳曲酮	Naltrexone	+	3.517	342.2	324.2	-12	-22	-22	267.2	-12	-30	-17
81	氢可酮	Hydrocodone	+	3.649	300.2	199.2	-10	-29	-19	171.2	-10	-39	-16
82	右丙氧芬	Dextropropoxyphene	+	6.553	340.3	58.2	-12	-16	-22	266.2	-17	-11	-27
83	哌替啶	Pethidine	+	5.150	248.2	174.1	-15	-19	-17	220.2	-16	-22	-22
84	去甲哌替啶	Norpethidine	+	5.271	234.3	91.2	-17	-45	-16	160.2	-16	-16	-15
85	原阿片碱	Protopine	+	5.093	354.1	189.0	-12	-32	-18	149.0	-12	-27	-27
86	蒂巴因	Thebaine	+	4.692	312.2	251.2	-11	-29	-16	58.2	-11	-13	-22
87	罂粟碱	Papaverine	+	5.373	340.2	202.1	-12	-28	-20	324.2	-12	-32	-22
88	那可丁	Noscapine	+	5.373	414.2	220.2	-14	-24	-22	205.1	-15	-45	-20
89	苯丁胺	2-Amino-4-phenylbutane	+	4.503	150.1	91.1	-11	-21	-15	65.2	-11	-37	-25
90	N-甲基-1-(3,4-甲基双氧苯基)-2-丁胺	MBDB	+	4.681	208.4	135.3	-16	-21	-24	77.3	-12	-43	-29
91	伪麻黄碱	Pseudoephedrine	+	3.479	166.0	148.0	-11	-15	-26	114.9	-11	-28	-19
92	苯丙醇胺	Phenylpropanolamine	+	3.136	152.2	134.1	-10	-16	-26	91.1	-10	-29	-17
93	芬氟拉明	Fenfluramine	+	5.635	232.2	159.1	-15	-24	-29	109.1	-15	-42	-18
94	去甲可卡因	Norcocaine	+	5.179	290.2	168.1	-10	-17	-16	136.1	-10	-22	-23
95	甲基爱康宁	Methylecgonine	+	1.072	200.1	182.1	-12	-19	-18	82.1	-12	-25	-30
96	爱康宁	Ecgonine	+	1.078	186.1	168.1	-12	-18	-17	82.1	-12	-26	-13
97	去甲芬太尼	Norfentanyl	+	4.689	233.4	84.3	-17	-17	-30	177.3	-16	-15	-17
98	麦司卡林	Mescaline	+	3.834	212.2	195.2	-14	-11	-19	165.1	-14	-23	-15
99	苯环利定	PCP	+	5.641	244.4	159.3	-19	-14	-30	91.3	-19	-33	-16
100	异麦角酸二乙基酰胺	iso - LSD	+	5.513	325.3	282.2	-11	-21	-18	181.1	-10	-40	-17
101	阿米雷司	Aminorex	+	3.585	164.2	121.1	-10	-16	-22	104.1	-10	-24	-18
102	喷他佐辛	Pentazocine	+	5.419	286.3	218.2	-10	-21	-14	159.1	-20	-29	-15
103	甲胺磷	Methamidophos	+	2.488	142.1	94.0	-16	-15	-17	125.1	-16	-16	-23
104	乙酰甲胺磷	Acephate	+	2.959	184.2	143.0	-20	-8	-15	95.0	-20	-23	-16

105	氧乐果	Omethoate	+	3.334	214.1	183.0	-23	-10	-19	155.0	-23	-14	-28
106	久效磷	Monocrotophos	+	4.549	224.1	127.1	-18	-20	-15	193.0	-15	-9	-22
107	敌百虫	Dylox	+	5.274	257.0	109.0	-10	-34	-22	220.8	-29	-11	-24
108	乐果	Dimethoate	+	5.343	230.0	199.0	-26	-15	-21	125.0	-26	-30	-22
109	磷胺	Phosphamidon	+	4.598	224.0	39.0	-11	-55	-17	41.0	-16	-42	-18
110	敌敌畏	Dichlorvos	+	6.561	238.0	109.1	-12	-21	-20	220.9	-12	-11	-15
111	对硫磷	Parathion	+	8.487	292.1	236.0	-30	-14	-25	264.0	-30	-10	-29
112	倍硫磷	Fenthion	+	8.526	279.2	169.1	-30	-17	-18	247.1	-30	-12	-18
113	甲拌磷	Phorate	+	8.659	261.0	75.0	-29	-10	-30	47.0	-17	-55	-11
114	二嗪磷	Diazinon	+	8.497	305.0	169.1	-30	-19	-18	153.1	-30	-20	-16
115	马拉硫磷	Malathion	+	7.849	331.0	99.0	-17	-23	-18	127.1	-17	-12	-13
116	胺菊酯	Tetramethrin	+	8.909	332.2	164.2	-16	-22	-30	135.2	-16	-19	-24
117	灭多威	Methomyl	+	4.349	163.1	88.0	-18	-8	-16	106.1	-18	-10	-19
118	抗蚜威	Pirimicarb	+	6.422	239.2	72.1	-30	-25	-30	182.2	-30	-19	-30
119	残杀威	Propoxur	+	6.542	210.1	111.1	-23	-13	-20	168.1	-23	-7	-18
120	克百威	Carbofuran	+	6.590	222.1	165.1	-25	-11	-17	123.1	-25	-21	-22
121	杀虫脒	Chlordimeform	+	4.429	197.1	46.2	-21	-23	-19	117.3	-22	-30	-24
122	吡虫啉	Inidacloprid	+	4.994	256.1	175.1	-29	-17	-18	209.1	-29	-14	-22
123	啶虫脒	Acetamiprid	+	5.345	223.1	126.1	-30	-22	-30	56.1	-30	-15	-23
124	鱼藤酮	Rotenone	+	8.247	395.1	213.1	-14	-22	-23	192.1	-14	-22	-18
125	绿麦隆	Chlortoluron	+	7.076	213.1	72.0	-23	-21	-28	140.1	-24	-23	-24
126	甲萘威	Carbaryl	+	6.836	202.1	127.1	-22	-27	-22	145.1	-22	-9	-26
127	异丙隆	Isoproturon	+	7.217	207.1	72.0	-23	-21	-28	165.1	-23	-13	-17
128	敌草隆	Diuron	+	7.322	233.0	72.0	-26	-21	-27	160.1	-26	-26	-29
129	苄嘧磺隆	Bensulfuron-methyl	+	7.401	411.1	149.2	-20	-19	-28	182.2	-20	-20	-19
130	扑草净	Prometryne	+	7.882	242.2	158.1	-30	-23	-29	200.2	-30	-17	-22
131	乙草胺	Acetochlor	+	8.121	270.1	148.2	-30	-19	-16	133.1	-30	-33	-23
132	甲草胺	Alachlor	+	8.154	270.1	238.1	-30	-10	-26	162.2	-30	-19	-30
133	利谷隆	Linuron	+	7.709	249.0	160.1	-27	-17	-17	182.1	-28	-14	-19
134	甲霜灵	Metalaxyl	+	7.199	280.1	220.2	-30	-13	-24	192.2	-30	-18	-20
135	异丙威	Isoprocarb	+	7.130	194.1	95.0	-21	-14	-17	137.1	-22	-10	-14
136	多效唑	Paclobutrazol	+	7.688	294.1	70.1	-15	-21	-28	125.1	-15	-40	-22
137	啞霉胺	Pyrimethanil	+	7.715	200.1	107.0	-30	-25	-19	168.1	-30	-29	-30
138	灭草松	Bentazon	-	6.404	239.1	132.1	11	26	22	197.0	11	19	19
139	消旋山莨菪碱	Raceanisodamine	+	3.674	306.2	140.1	-10	-25	-13	91.0	-11	-41	-15
140	雪上一枝蒿甲素	Bullatine A	+	3.751	344.3	58.2	-12	-38	-21	105.1	-12	-49	-17
141	东莨菪内酯	Scopoletin	+	5.339	193.0	133.0	-14	-21	-12	178.0	-11	-20	-30
142	溴甲阿托品	Methatropine	+	4.070	304.2	138.1	-10	-27	-13	93.0	-10	-35	-15

143	尼古丁	S-(-) Nicotine	+	1.776	163.3	130.2	-11	-20	-23	117.2	-12	-27	-21
144	东莨菪碱	Scopolamine	+	4.070	304.2	138.1	-15	-20	-14	156.1	-16	-16	-15
145	阿托品	Atropine	+	4.328	290.3	124.2	-15	-26	-23	93.1	-15	-33	-17
146	新乌头碱	Mesaconitine	+	6.219	632.5	572.4	-20	-35	-38	105.0	-20	-55	-19
147	次乌头碱	Hypaconitine	+	6.348	616.4	556.4	-32	-35	-38	524.3	-20	-39	-34
148	乌头碱	Aconitine	+	6.395	646.5	586.4	-20	-37	-40	105.1	-20	-55	-19
149	可乐定	Clonidine	+	3.732	230.0	213.0	-15	-24	-22	160.0	-14	-35	-28
150	洛非西定	Lofexidine	+	5.029	259.1	98.1	-17	-18	-17	97.1	-16	-34	-16
151	普罗帕酮	Propafenone	+	6.632	342.2	116.1	-12	-22	-21	72.2	-22	-27	-28
152	维拉帕米	Verapamil	+	6.293	455.3	165.1	-16	-28	-16	150.1	-16	-42	-14
153	利血平	Reserpine	+	6.712	609.3	397.2	-20	-28	-18	195.1	-20	-40	-12
154	尼莫地平	Nimodipine	+	7.986	419.2	301.1	-14	-27	-20	343.1	-14	-16	-16
155	苯丙氨酯	Phenprobamate	+	6.769	180.2	91.0	-19	-22	-15	119.0	-11	-9	-27
156	赛庚啶	Cyproheptadine	+	6.650	288.2	191.1	-10	-31	-18	96.0	-10	-25	-16
157	哌唑嗪	Prazosin	+	5.470	384.1	247.1	-13	-29	-16	95.0	-13	-48	-16
158	异烟肼	Isoniazide	+	1.428	138.0	121.0	-26	-17	-24	79.0	-10	-27	-28
159	阿昔洛韦	Acyclovir	+	2.408	226.2	152.0	-14	-14	-25	135.0	-14	-28	-22
160	烟酰胺	Nicotinamide	+	2.063	123.0	80.0	-22	-22	-30	-	-	-	-
161	西米替丁	Cimetidine	+	3.062	253.2	159.0	-16	-15	-15	95.0	-17	-26	-17
162	多沙普仑	Doxapram	+	5.351	379.2	292.2	-23	-22	-19	97.0	-23	-30	-16
163	奈福泮	Nefopam	+	5.474	254.2	181.1	-16	-20	-18	166.1	-16	-29	-16
164	异杀鼠酮	2-Isovaleryl-1,3-Indane-dione	-	8.506	229.3	145.0	28	23	15	116.0	28	35	12
165	氯灭鼠灵	Coumaphlor	-	8.084	341.2	284.0	27	25	20	161.0	27	22	17
166	氯鼠酮	Chlorophacinone	-	8.440	373.1	201.1	30	22	22	145.0	29	25	15
167	溴鼠灵	Brodifacoum	-	9.814	521.3	135.1	34	39	14	187.1	32	37	20
168	溴敌隆	Brodifacoum	-	8.775	525.3	250.1	36	36	17	273.0	20	37	19
169	鼠得克	Difenacoum	-	9.385	443.2	135.1	17	36	14	293.2	17	35	21
170	氟鼠灵	Flocoumafen	-	9.324	541.2	382.2	20	27	14	161.0	20	38	17
171	克鼠灵	Coumafuryl	-	7.211	297.2	161.0	21	19	17	240.1	21	21	17
172	杀鼠灵	Warfarin	-	7.685	307.2	161.0	23	20	17	250.1	22	23	26
173	杀鼠醚	Coumatetralyl	-	8.070	291.2	141.1	16	27	14	106.0	22	26	11
174	敌鼠灵	Dicumarol	-	8.093	335.2	161.1	23	17	17	117.0	22	40	21
175	敌鼠	Diphacinone	-	8.344	339.2	167.1	25	24	18	145.0	19	22	15
176	噻鼠灵	Difethialone	-	10.304	537.2	151.0	20	39	16	203.0	20	40	21
177	杀鼠酮	Pindone	-	9.076	229.1	116.0	18	37	12	172.0	18	21	19
178	倍他米松	Betamethasone	+	7.112	393.2	373.2	-15	-9	-26	355.1	-15	-13	-24
179	丁卡因	Tetracaine	+	5.933	265.0	176.1	-20	-20	-20	220.1	-17	-20	-21
180	左旋咪唑	Levamisole	+	3.600	205.1	178.1	-11	-21	-12	91.1	-10	-40	-17

181	利多卡因	Lidocaine	+	4.365	235.0	86.1	-26	-19	-18	58.1	-26	-45	-12
182	布比卡因	Bupivacaine	+	5.718	289.2	140.2	-30	-20	-30	84.3	-30	-45	-17
183	苯海拉明	Diphenhydramine	+	6.026	256.0	167.1	-30	-11	-12	152.0	-30	-40	-17
184	美西律	Mexiletine	+	5.329	180.2	58.1	-19	-13	-25	41.1	-19	-20	-15
185	羟嗪	Hydroxyzine	+	6.765	375.0	201.1	-11	-19	-24	166.1	-11	-45	-18
186	克伦特罗	Clenbuterol	+	4.811	277.1	203.0	-11	-15	-16	259.1	-11	-10	-20
187	舒必利	Sulpiride	+	2.923	342.2	112.2	-10	-28	-22	58.1	-10	-30	-22
188	地尔硫卓	Diltiazem	+	6.291	415.1	178.1	-30	-25	-20	150.0	-30	-45	-17
189	对乙酰氨基酚	Acetaminophen	+	3.446	152.0	110.0	-10	-18	-23	65.1	-10	-30	-13
190	右美沙芬	Dextromethorphan	+	6.060	272.0	171.0	-30	-40	-19	215.1	-13	-24	-16
191	沙丁胺醇	Salbutamol	+	2.947	240.2	148.1	-16	-20	-14	166.1	-15	-15	-16
192	非那西丁	Phenacetine	+	6.023	179.8	110.1	-10	-21	-18	65.1	-22	-35	-24
193	氨基比林	Aminopyrine	+	3.656	231.8	113.2	-29	-13	-10	97.0	-30	-29	-16
194	安替比林	Antipyrine	+	4.954	189.1	104.0	-10	-24	-17	77.1	-28	-40	-29
195	地塞米松	Dexamethasone	-	7.126	437.2	361.2	16	20	23	391.3	16	15	27
196	去甲西泮	Nordazepam	+	7.500	271.2	140.2	-20	-29	-13	208.1	-19	-28	-21
197	纳洛酮	Naloxone	+	3.295	328.1	310.1	-11	-21	-21	212.0	-11	-39	-22
198	大麻二酚	Cannabidiol	+	8.869	315.2	193.2	-16	-23	-12	259.3	-38	-19	-28
199	大麻酚	Cannabinol	+	9.412	311.2	223.2	-16	-22	-14	179.3	-16	-44	-34
200	安非他明	Amphetamine	+	3.915	136.1	91.1	-14	-17	-19	119.1	-14	-15	-25

岛津应用云



**岛津企业管理(中国)有限公司 – 分析中心**  
 Shimadzu (China) Co., LTD. – Analytical Applications Center