

全谱二维液相色谱 - 质谱联用快速分析化妆品中 195 种禁用物质

LCMSMS-726

摘要： 本文利用岛津全谱二维液相与三重四级杆质谱联用系统建立了快速分析化妆品中 195 种禁用物质的方法。通过将亲水性色谱 (HILIC) 与反相色谱 (C18) 组合, 可以实现一次进样覆盖适用两种分离模式的化合物快速分析。利用该系统同时分析 195 种化妆品风险物质, 其目标物线性良好, 相关系数 $R \geq 0.994$ 。不同浓度水平的样品连续 6 针重复进样, 保留时间 $RSD < 0.6\%$, 峰面积 $RSD < 6\%$ 。相较于普通一维液相方法, 该方法可显著改善死时间附近的共洗脱现象及峰形问题, 不在显著增加分析时间和不损失灵敏度的情况下扩大分析覆盖范围。

关键词： 化妆品 禁用物质 全谱二维液相 三重四级杆质谱

技术特点：

- ❖ 全谱二维液相可将亲水色谱与反相色谱组合, 实现极性、弱极性化合物的同时分析。
- ❖ 与质谱联用解决了化妆品中不同极性物质同时分析的难点, 满足快速筛查需求。
- ❖ 与普通液相系统相比, 解决了部分物质共洗脱或峰型不好的问题。

随着化妆品质量安全问题频繁发生, 监管部门加大了化妆品中禁用物质的监控力度, 但是化妆品中禁用物质种类繁多, 缺少多物质同时快速筛查的方法。目前, 化妆品中禁用物质快速检测多是使用液相色谱-质谱法, 然而传统一维液相色谱无法为复杂的化妆品样品分析提供足够的分离度和峰容量, 故现有的化妆品禁用物质检测方法大多仅针对 1-2 类化合物, 检测种类受限。全谱二维液相色谱是将不同分离模式如亲水作用色谱模式 (HILIC) 和反相液相色谱模式 (C18)

的组合起来, 提高分离效果和峰容量, 可以实现一针进样同时分析高、中、低极性物质; 因此, 该系统的应用可扩大化妆品禁用物质的筛查种类, 具有实际意义。

本文采用岛津全谱二维液相与三重四级杆质谱联用成功建立了快速分析 195 种化妆品中禁用物质方法。该方法解决不同极性物质同时分析的问题, 而且还改善了部分物质的共洗脱或峰型不好的现象, 经过方法学验证可以满足化妆品禁用物质快速筛查的需求, 供相关人员参考。

■ 实验部分

1.1 仪器

岛津全谱二维液相系统 +LCMS-8050。具体配置为

输 液 泵 : LC-30AD×4
自动进样器 : SIL-30ACMP
系统控制器 : CBM-20A
质 谱 仪 : LCMS-8050

在线脱气机 : DGU-20A_{5R}
柱 箱 : CTO-20AC
切 换 阀 : FCV-36AH
色谱工作站 : LabSolutions Ver. 5.99

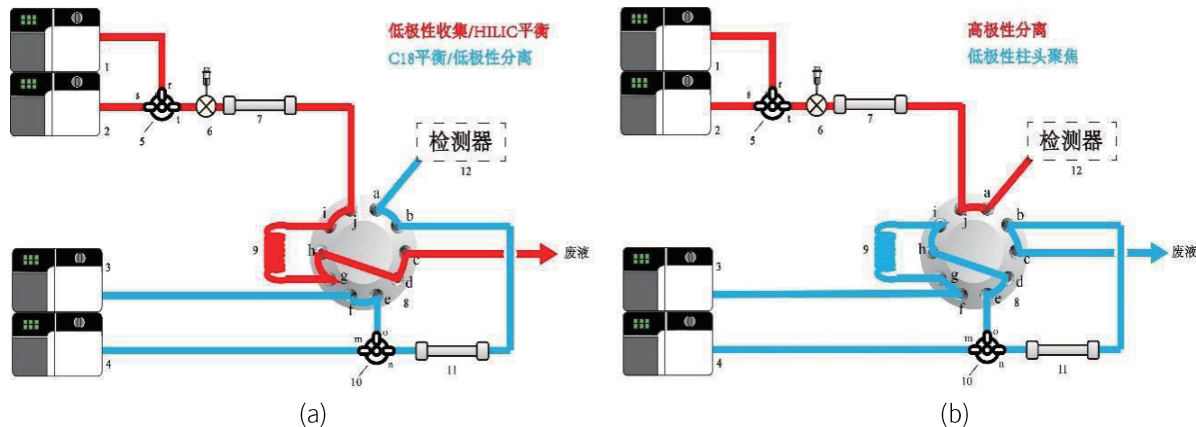


图 1 全谱二维液相色谱系统示意图

(1: 色谱泵 A; 2: 色谱泵 B; 3: 色谱泵 D; 4: 色谱泵 C; 5: 三通混合器; 6: 自动进样器; 7: 亲水作用色谱柱; 8: 高压十通阀; 9: 500 µL 样品环; 10: 三通混合器; 11: 反相色谱柱; 12: 质谱检测器)

1.2 分析条件

液相条件

色 谱 柱 : 第一维: BEH Amide column (150 mm×3.0 mm I.D., 1.7 µm)
第二维: Shim-pack XR-ODS II (100 mm×3.0 mm I.D., 2.2 µm)
(P/N: 228-41624-92 岛津(上海)实验器材有限公司)

流 动 相 : 第一维: A 相 - 5 mM 乙酸铵水溶液; B 相 - 乙腈
第二维: A 相 - 0.1% 甲酸水溶液; B 相 - 乙腈

柱 温 : 40°C

进样体积 : 1 µL

洗脱方式 : 梯度洗脱, 时间程序见表 1- 表 3

分析流速 : 0.5 mL/min

质谱参数

离 子 源 : ESI

脱溶剂管温度 : 250°C

雾 化 气 : 氮气 3.0 L/min

加热模块温度 : 400°C

干 燥 气 : 氮气 10 L/min

接 口 温 度 : 300°C

加 热 气 : 空气 10 L/min

检 测 模 式 : MRM, 具体参数见附表

表 1 一维液相色谱的时间程序 (初始流动相 B 为 95%)

时间 (min)	单元	处理命令	值
0.01	泵	B.Conc	95
2.00	泵	B.Conc	95
10.00	泵	B.Conc	80
13.00	泵	B.Conc	65
15.00	泵	B.Conc	65
15.01	泵	B.Conc	95
28.00	泵	B.Conc	95

表 2 二维液相的时间程序 (初始流动相 B 为 10%)

时间 (min)	单元	处理命令	值
0.01	泵	T.Flow3	0.5
2.10	泵	T.Flow3	0.5
2.20	泵	T.Flow3	0.6
10.00	泵	B.Conc3	10
13.90	泵	T.Flow3	0.6
14.00	泵	T.Flow3	0.5
22.00	泵	B.Conc3	75
23.00	泵	B.Conc3	90
25.00	泵	B.Conc3	90
25.50	泵	B.Conc3	10
28.00	泵	B.Conc3	10

表 3 其他时间程序

时间 (min)	单元	处理命令	值
2.10	柱温箱	CTO.RVR	1
14.00	柱温箱	CTO.RVR	0
28.00	控制器	Stop	

■ 样品前处理

称取化妆品 0.5±0.01 g 至 15 mL 离心管, 加入 9 mL 乙腈, 涡旋 2 min, 超声提取 10 min, 用乙腈定容至 10 mL, 摇匀; 在 15 °C 下以 4000 r/min 的转速离心 5 min, 取 1 mL 上清液过 0.22 μm 滤膜, 滤液作待测液。

■ 结果与讨论

3.1 标准溶液的色谱图

全谱二维液相系统通过组合 Amide 柱 (一维) 与 C18 柱 (二维), 在 26 min 内完成对 195 种化妆品禁用物质的良好分离, 色谱图见图 2, 具体化合物信息参考附表。对比单独使用传统一维液相 Amide 柱法, 全谱二维液相法可显著改善共洗脱现象; 单独使用传统一维液相 C18 柱法, 全谱二维液相法可改善由于固定相或样品溶剂不匹配导致的弱保留、峰形差的问题 (图 3)。

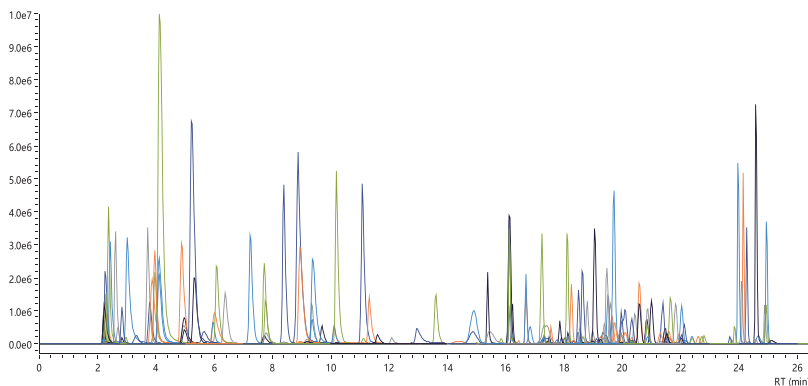


图 2 全谱二维液相系统的标准溶液 MRM 色谱图

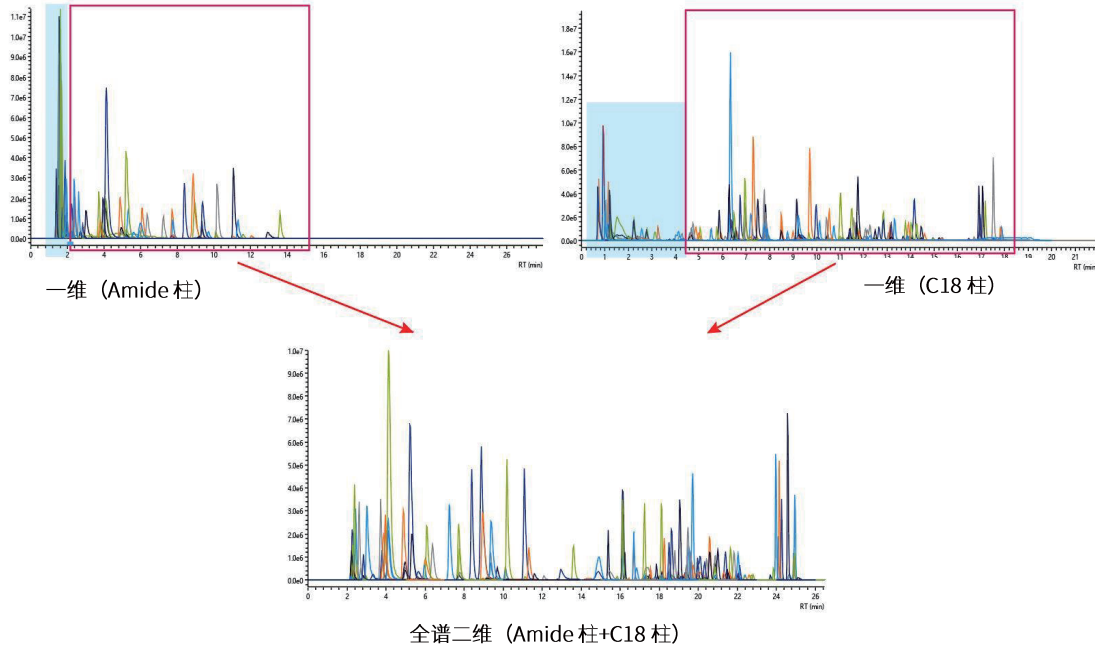


图 3 传统一维液相与全谱二维液相系统的色谱图对比

3.2 覆盖率对比

将全谱二维液相系统 (Amide 柱 +C18 柱) 与传统的一维系统 (C18 柱) 进行对比; 在部分化合物分离上优势突出。在 195 种化合物中, 约有 30 种化合物由于 C18 柱保留差或溶剂效应等原因导致在死时间附近流出或峰形异常 (双峰、裂峰、肩峰) 的问题; 但是在全谱二维液相系统上得到了改善, 具体结果如图 4 所示。

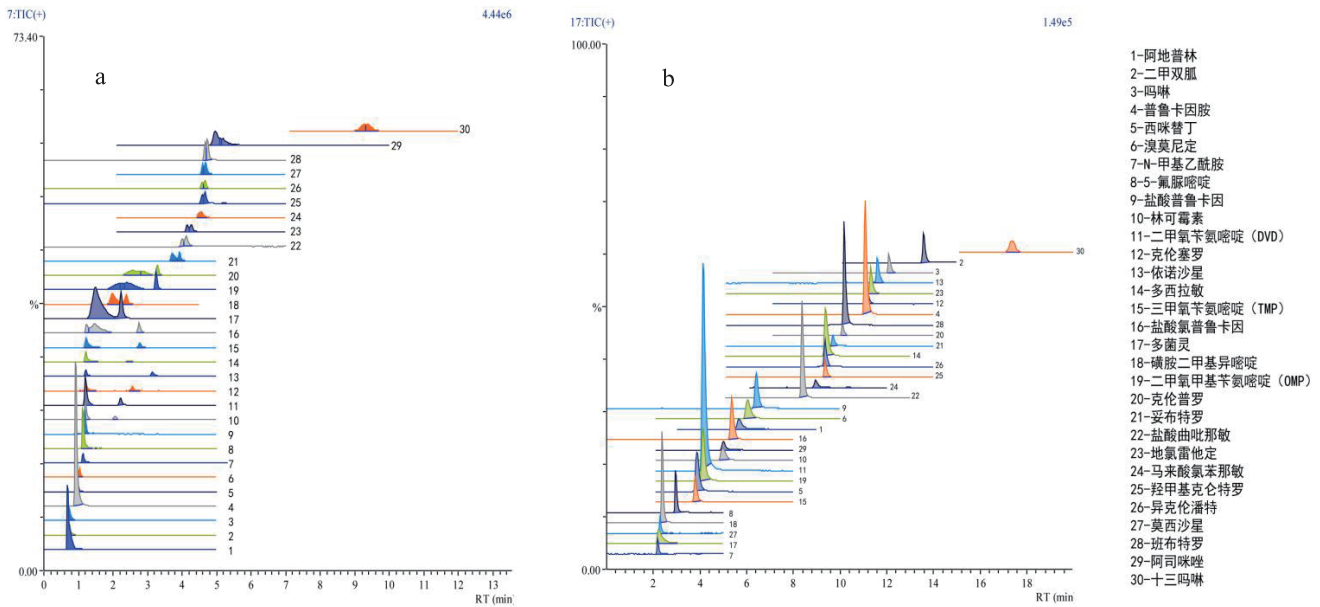


图 4 30 种化合物在传统一维液相 (图 a) 和全谱二维液相系统 (图 b) 的峰型对比图

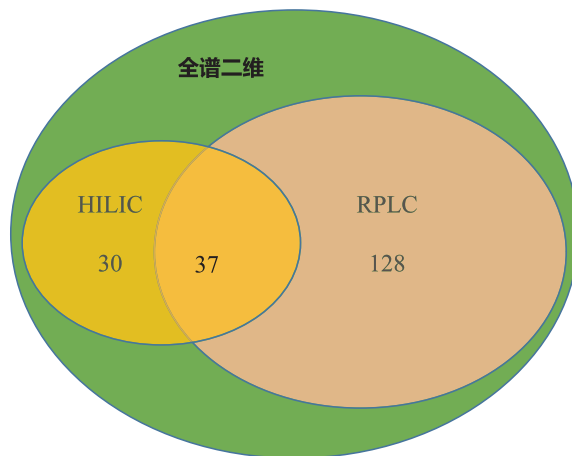


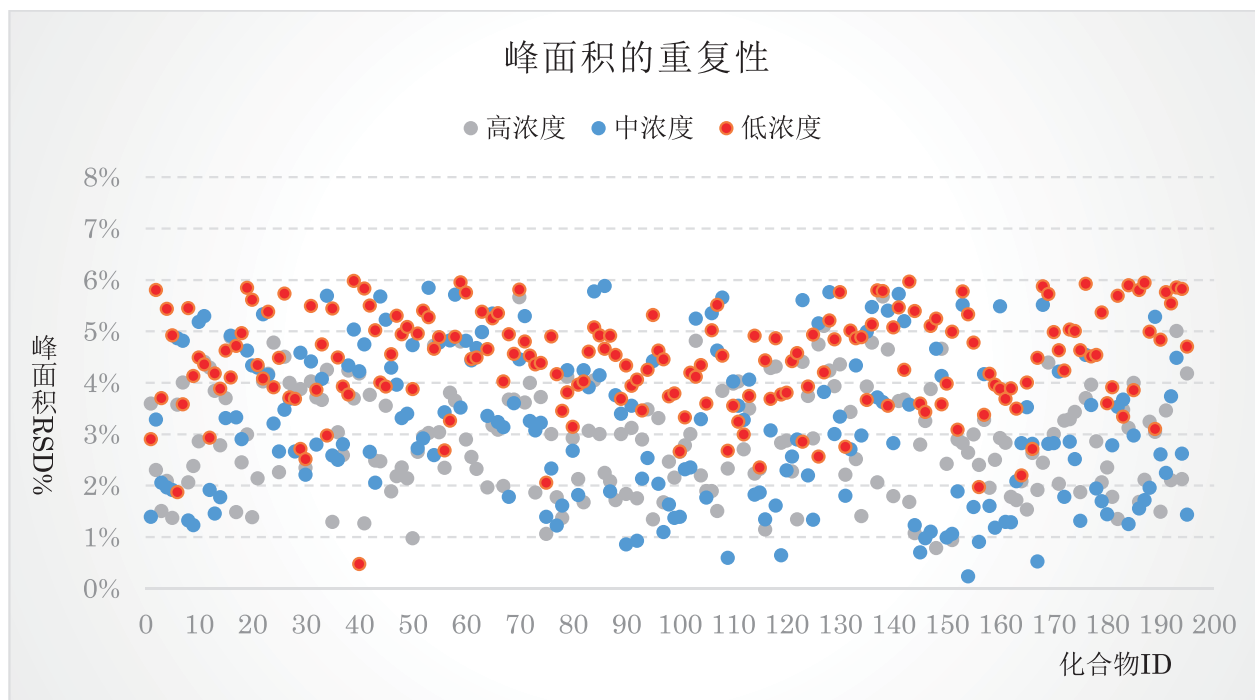
图5 对比传统一维液相与全谱二维液相系统覆盖的化合物数目

3.3 线性考察

配制不同浓度的标准溶液建立校准曲线,使用外标法定量,195种化合物校准曲线的线性相关系数 $R \geq 0.994$,准确度在 80%~120%。可用于定量与定性分析。

3.4 重复性

选取高、中、低浓度点三个浓度水平进行重复性考察;连续进样6针,保留时间 $RSD < 0.6\%$,峰面积 $RSD < 6\%$;具体数据见下图6



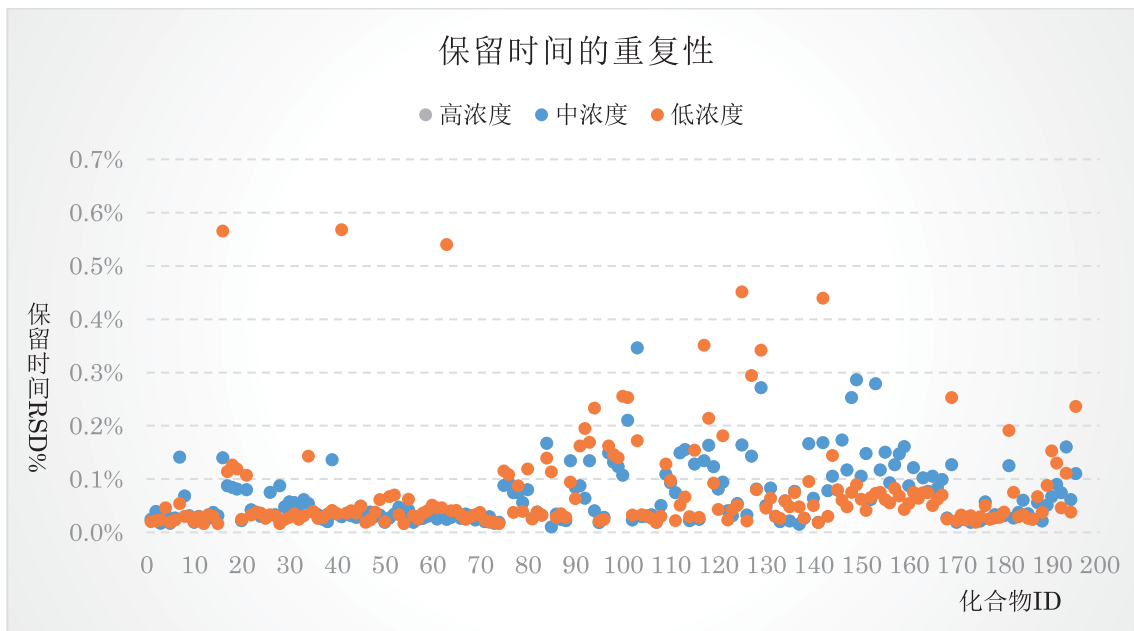


图 6 峰面积和保留时间的重复性结果

3.5 基质效应考察

考察水液 (solution)、乳液 (lotion)、粉末 (powder) 三种基质化妆品中 195 种化合物的基质效应。水液及粉末产品中基质效应较低，乳液产品中目标物基质干扰较强；水液、乳液、粉末的基质效应因子在 80%-120% 的分别占 76.8%，72.0% 和 56.2%。具体见图 7 所示。

3.6 回收率

在两种空白基质样品中添加高、低浓度标准品，平行测定三次，回收率在 86.2%-109.9%。回收率的分布如图 8 所示。

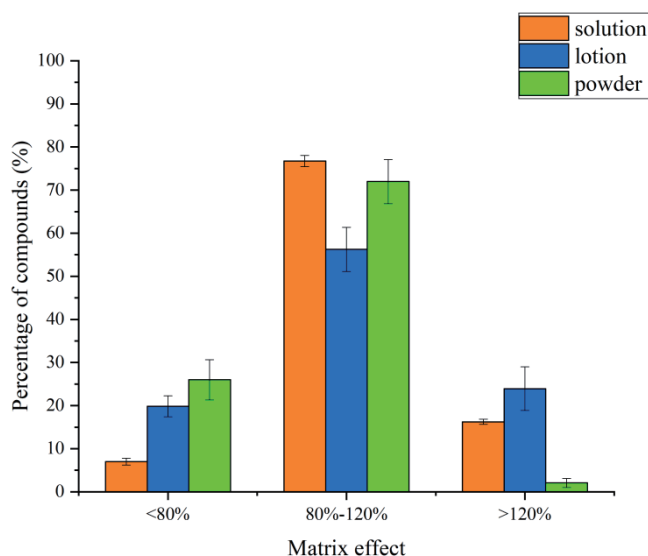


图 7 195 种化合物在不同基质中的基质效应因子

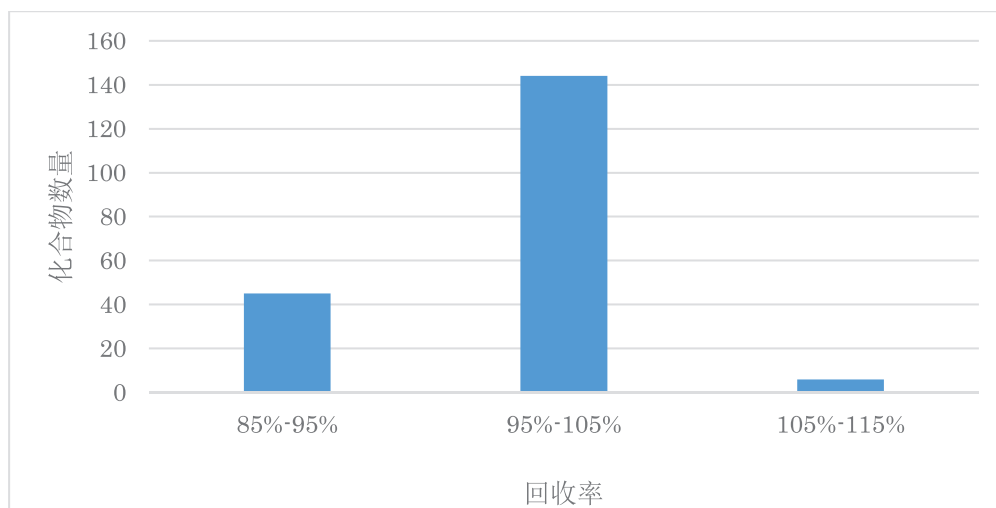


图 8 195 种化合物的回收率结果分布

■ 结论

本文建立了全谱二维液相与 LCMS-8050 联用系统测定化妆品中禁用物质组。该方法组合了亲水相互作用色谱及反相色谱，实现一针进样同时分离适用于不同分离模式的化合物，在 26 min 以内完成 195 种目标物的检测（包括 74 种激素、64 种抗感染药物、22 种农残、18 种抗组胺药、5 种麻醉药、6 种拟交感胺以及 6 种其它禁用物质）。各物质线性良好，相关系数 $R \geq 0.994$ 。不同浓度水平的重复性考察，其保留时间 $RSD < 0.6\%$ ，峰面积 $RSD < 6\%$ ；基质样品的加标回收率在 86.2%–109.9% 之间。全谱二维液相与质谱联用，在不显著增加分析时间的情况下，实现了不同极性化合物的一针分析，可满足化妆品风险物质的快速筛查的需要。

附表

195 种化合物的基本信息与 MRM 参数

序号	类别	中文名称	英文名称	CAS 号	分子式	logP	离子类型	前体离子	产物离子 1	产物离子 2	CE 1	CE 2
1	激素	坎利酮	Canrenone	976-71-6	$C_{22}H_{28}O_3$	2.99	[M+H] ⁺	341.25	299.9	258.9	-8	-13
2	激素	表睾酮	Epitestosterone	481-30-1	$C_{19}H_{28}O_2$	3.48	[M+H] ⁺	289.25	97.2	109.3	-24	-26
3	激素	康力龙	Stanozolol	10418-03-8	$C_{21}H_{32}N_2O$	5.53	[M+H] ⁺	329.25	81.2	95.1	-48	-41
4	激素	四烯雌酮	Altrenogest	850-52-2	$C_{21}H_{26}O_2$	3.49	[M+H] ⁺	311.25	269.15	227.15	-15	-23
5	激素	丙酸睾酮	Testosterone propionate	57-85-2	$C_{22}H_{32}O_3$	4.9	[M+H] ⁺	345.3	97.2	109.1	-27	-26
6	激素	醋酸环丙孕酮	Cyproterone acetate	427-51-0	$C_{24}H_{29}ClO_4$	3.28	[M+H] ⁺	417.25	357.15	376.2	-18	-10
7	激素	醋酸优力司特	Ulipristal Acetate	126784-99-4	$C_{30}H_{37}NO_4$	4.48	[M+H] ⁺	476.3	416.15	134.2	-20	-26
8	激素	17 α -羟基黄体酮	Hydroxyprogesterone	68-96-2	$C_{21}H_{30}O_3$	2.89	[M+H] ⁺	331.3	109.2	97.15	-27	-23

9	激素	宝丹酮	Boldenone	846-48-0	C ₁₉ H ₂₆ O ₂	3.5	[M+H] ⁺	287.2	121.25	135.15	-22	-15
10	激素	苯丙酸诺龙	Nandrolone phenylpropionate	62-90-8	C ₂₇ H ₃₄ O ₃	5.97	[M+H] ⁺	407.3	105.1	366.15	-29	-15
11	激素	去氧皮质酮	Desoxycorticosterone	64-85-7	C ₂₁ H ₃₀ O ₃	3.41	[M+H] ⁺	331.2	97.2	290	-22	-9
12	激素	醋酸去氧皮质酮	Deoxycorticosterone acetate	56-47-3	C ₂₃ H ₃₂ O ₄	4.53	[M+H] ⁺	373.3	97.1	332.9	-27	-8
13	激素	群勃龙醋酸酯	Trenbolone acetate	10161-34-9	C ₂₀ H ₂₄ O ₃	3.16	[M+H] ⁺	313.2	253.15	91.15	-21	-50
14	激素	美雄酮	Metandienone	72-63-9	C ₂₀ H ₂₈ O ₂	4.04	[M+H] ⁺	301.25	121.1	149.15	-27	-16
15	激素	丙酸诺龙	Nandrolone 17-propionate	7207-92-3	C ₂₁ H ₃₀ O ₃	4.42	[M+H] ⁺	331.25	257.15	290.1	-16	-10
16	激素	曲安西龙	Triamcinolone	124-94-7	C ₂₁ H ₂₇ FO ₆	0.83	[M+H] ⁺	395.15	225.15	357.2	-20	-14
17	激素	泼尼松龙	Prednisolone	50-24-8	C ₂₁ H ₂₈ O ₅	1.49	[M+H] ⁺	361.15	343.25	147.15	-12	-24
18	激素	异氟泼尼松	9-fluoroprednisolone	338-95-4	C ₂₁ H ₂₇ FO ₅	1.38	[M+H] ⁺	379.2	359.25	341.2	-9	-12
19	激素	氢化可的松	Hydrocortisone	50-23-7	C ₂₁ H ₃₀ O ₅	1.43	[M+H] ⁺	363.2	121.2	105.15	-24	-46
20	激素	可的松	Cortisone	53-06-5	C ₂₁ H ₂₈ O ₅	1.44	[M+H] ⁺	361.15	121.2	163.25	-30	-23
21	激素	甲基泼尼松龙	Methylprednisolone	83-43-2	C ₂₂ H ₃₀ O ₅	1.99	[M+H] ⁺	375.2	357.25	161.2	-11	-20
22	激素	倍他米松	Betamethasone	378-44-9	C ₂₂ H ₂₉ FO ₅	1.87	[M+H] ⁺	393.2	355.25	373.25	-13	-9
23	激素	地塞米松	Dexamethasone	50-02-2	C ₂₂ H ₂₉ FO ₅	1.87	[M+H] ⁺	393.2	355.2	373.2	-13	-10
24	激素	氟米松	Flumetasone	2135-17-3	C ₂₂ H ₂₈ F ₂ O ₅	1.61	[M+H] ⁺	411.15	253.2	121.15	-17	-35
25	激素	倍氯米松	Beclomethasone	4419-39-0	C ₂₂ H ₂₉ ClO ₅	2.04	[M+H] ⁺	409.15	391.2	279.2	-12	-19
26	激素	曲安奈德	Triamcinolone acetonide	76-25-5	C ₂₄ H ₃₁ FO ₆	2.5	[M+H] ⁺	435.15	415.25	339.2	-11	-15
27	激素	地索奈德	Desonide	638-94-8	C ₂₄ H ₃₂ O ₆	2.62	[M+H] ⁺	417.2	399.3	225.15	-13	-25
28	激素	氟尼缩松	Flunisolide	77326-96-6	C ₂₄ H ₃₁ FO ₆	2.16	[M+H] ⁺	435.15	321.2	397.2	-14	-11
29	激素	氟轻松	Fluocinolone acetonide	67-73-2	C ₂₄ H ₃₀ F ₂ O ₆	2.24	[M+H] ⁺	453.15	121.2	337.2	-34	-15

30	激素	曲安西龙双醋酸酯	Triamcinolone diacetate	67-78-7	$C_{25}H_{31}FO_8$	2.16	[M+H] ⁺	479.15	441.15	321.2	-12	-17
31	激素	氟氢缩松	Fludroxycortide	1524-88-5	$C_{24}H_{33}FO_6$	2.05	[M+H] ⁺	437.2	361.2	285.15	-19	-25
32	激素	泼尼松龙醋酸酯	Prednisolone 21-acetate	52-21-1	$C_{23}H_{30}O_6$	2.58	[M+H] ⁺	403.2	147.2	307.2	-25	-14
33	激素	氟米龙	Fluorometholone	426-13-1	$C_{22}H_{29}FO_4$	2.02	[M+H] ⁺	377.2	279.3	321.3	-17	-14
34	激素	氢化可的松醋酸酯	Hydrocortisone 21-acetate	50-03-3	$C_{23}H_{32}O_6$	2.51	[M+H] ⁺	405.2	121.15	309.25	-28	-18
35	激素	氟氢可的松醋酸酯	Fludrocortisone 21-acetate	514-36-3	$C_{23}H_{31}FO_6$	2.32	[M+H] ⁺	423.2	239.3	121.1	-25	-33
36	激素	地夫可特	Deflazacort	14484-47-0	$C_{25}H_{31}NO_6$	2.02	[M+H] ⁺	442.2	142.2	124.1	-35	-47
37	激素	泼尼松醋酸酯	Prednisone 21-acetate	125-10-0	$C_{23}H_{28}O_6$	2.66	[M+H] ⁺	401.15	295.2	147.15	-16	-14
38	激素	可的松醋酸酯	Cortisone 21-acetate	50-04-4	$C_{23}H_{30}O_6$	2.53	[M+H] ⁺	403.2	163.2	343.2	-26	-20
39	激素	卤美他松	Halometasone	50629-82-8	$C_{22}H_{27}ClF_2O_5$	2.33	[M+H] ⁺	445.1	155.1	287.15	-32	-15
40	激素	甲基泼尼松龙醋酸酯	Methylprednisolone 21-acetate	53-36-1	$C_{24}H_{32}O_6$	3.07	[M+H] ⁺	417.2	253.3	399.25	-22	-11
41	激素	倍他米松醋酸酯	Betamethasone 21-acetate	987-24-6	$C_{24}H_{31}FO_6$	2.96	[M+H] ⁺	435.2	309.2	415.25	-14	-9
42	激素	睾酮	Testosterone	58-22-0	$C_{19}H_{28}O_2$	3.48	[M+H] ⁺	289.15	97	109.05	-23	-24
43	激素	地塞米松醋酸酯	Dexamethasone 21-acetate	1177-87-3	$C_{24}H_{31}FO_6$	2.96	[M+H] ⁺	435.2	309.25	415.25	-14	-10
44	激素	布地奈德	Budesonide	51333-22-3	$C_{25}H_{34}O_6$	3.14	[M+H] ⁺	431.2	413.25	147.2	-12	-30
45	激素	氢化可的松丁酸酯	Hydrocortisone 17-butyrate	13609-67-1	$C_{25}H_{36}O_6$	2.81	[M+H] ⁺	433.2	345.25	121.15	-13	-28
46	激素	孕三烯酮	Gestrinone	16320-04-0	$C_{21}H_{24}O_2$	3.27	[M+H] ⁺	309.1	241.2	199.15	-23	-33

47	激素	氟米龙 醋酸酯	Fluorometho- lone 17-ace- tate	3801-06- 7	$C_{24}H_{31}FO_5$	2.57	[M+H] ⁺	419.2	279.25	321.25	-16	-14
48	激素	甲睾酮	Methyltestos- terone	58-18-4	$C_{20}H_{30}O_2$	4.02	[M+H] ⁺	303.2	109.1	97.1	-27	-26
49	激素	氢化可 的松戊 酸酯	Hydrocorti- sone 17-valer- ate	57524- 89-7	$C_{26}H_{38}O_6$	3.34	[M+H] ⁺	447.25	345.3	121.2	-13	-25
50	激素	曲安奈 德醋酸 酯	Triamcinolone acetone acetate	3870 -07-3	$C_{26}H_{33}FO_7$	3.61	[M+H] ⁺	477.2	339.15	457.2	-16	-10
51	激素	二氟拉 松双醋 酸酯	Diflorasone diacetate	33564- 31-7	$C_{26}H_{32}F_2O_7$	3.1	[M+H] ⁺	495.15	317.15	279.2	-14	-16
52	激素	氟轻松 醋酸酯	Fluocinonide	356-12-7	$C_{26}H_{32}F_2O_7$	3.36	[M+H] ⁺	495.15	337.15	121.15	-18	-41
53	激素	炔诺 孕酮	Norgestrel	6533-00- 2	$C_{21}H_{28}O_2$	3.92	[M+H] ⁺	313.2	245.25	109.15	-18	-27
54	激素	倍他米 松戊酸 酯	Betametha- sone 17-valer- ate	2152 -44-5	$C_{27}H_{37}FO_6$	3.78	[M+H] ⁺	477.2	355.2	279.2	-12	-18
55	激素	哈西 奈德	Halcinonide	3093 -35-4	$C_{24}H_{32}ClFO_5$	3.31	[M+H] ⁺	455.15	105.2	121.2	-53	-45
56	激素	泼尼 卡酯	Prednicarbate	73771- 04-7	$C_{27}H_{36}O_8$	4.02	[M+H] ⁺	489.3	381.2	115.1	-12	-15
57	激素	氯替 泼诺	Loteprednol etabonate	82034- 46-6	$C_{24}H_{31}ClO_7$	3.17	[M+H] ⁺	467.15	265.25	359.2	-21	-13
58	激素	阿氯米 松双丙 酸酯	Alclometasone dipropionate	66734- 13-2	$C_{28}H_{37}ClO_7$	4.38	[M+H] ⁺	521.2	301.2	279.2	-21	-19
59	激素	安西 奈德	Amcinonide	51022- 69-6	$C_{28}H_{35}FO_7$	4.09	[M+H] ⁺	503.2	339.15	321.2	-17	-20
60	激素	卤倍他 索丙酸 酯	Halobetasol Propionate	66852- 54-8	$C_{25}H_{31}ClF_2O_5$	3.73	[M+H] ⁺	485.15	391.05	353.15	-13	-16
61	激素	氯倍他 索丙酸 酯	Clobetasol 17-propionate	25122- 46-7	$C_{25}H_{32}ClFO_5$	3.98	[M+H] ⁺	467.15	373.2	355.25	-12	-15
62	激素	氟替卡 松丙酸 酯	Fluticasone propionate	80474- 14-2	$C_{25}H_{31}F_3O_5S$	3.73	[M+H] ⁺	501.15	313.25	293.2	-15	-18
63	激素	莫米他 松糠酸 酯	Mometasone furoate	83919- 23-7	$C_{27}H_{30}Cl_2O_6$	5.84	[M+H] ⁺	521.1	263.25	503.15	-25	-13

64	激素	醋酸甲地孕酮	Megestrol acetate	595-33-5	$C_{24}H_{32}O_4$	3.82	[M+H] ⁺	385.25	325.25	267.25	-15	-18
65	激素	醋酸氯地孕酮	Chlormadinone acetate	302-22-7	$C_{23}H_{29}ClO_4$	3.42	[M+H] ⁺	405.15	309.2	267.2	-17	-22
66	激素	倍他米松双丙酸酯	Betamethasone dipropionate	5593-20-4	$C_{28}H_{37}FO_7$	4.42	[M+H] ⁺	505.2	319.2	411.25	-16	-12
67	激素	黄体酮	Progesterone	57-83-0	$C_{21}H_{30}O_2$	4.04	[M+H] ⁺	315.25	97.15	109.15	-23	-26
68	激素	醋酸甲羟孕酮	Medroxyprogesterone 17-acetate	71-58-9	$C_{24}H_{34}O_4$	3.78	[M+H] ⁺	387.2	327.25	123.15	-15	-29
69	激素	甲羟孕酮	Medroxyprogesterone	520-85-4	$C_{22}H_{32}O_3$	3.38	[M+H] ⁺	345.3	123.2	97.1	-25	-25
70	激素	倍氯米松双丙酸酯	Beclometasone dipropionate	5534-09-8	$C_{28}H_{37}ClO_7$	4.59	[M+H] ⁺	521.2	503.2	319.2	-13	-17
71	激素	双氟可龙戊酸酯	Diflucortolone valerate	59198-70-8	$C_{27}H_{36}F_2O_5$	4.65	[M+H] ⁺	479.25	375.25	439.25	-14	-13
72	激素	氯倍他松丁酸酯	Clobetasone 17-butyrate	25122-57-0	$C_{26}H_{32}ClFO_5$	4.82	[M+H] ⁺	479.2	343.15	279.15	-17	-18
73	激素	己酸羟孕酮	Hydroxyprogesterone caproate	630-56-8	$C_{27}H_{40}O_4$	5.74	[M+H] ⁺	429.25	313.3	271.25	-15	-21
74	激素	环索奈德	Ciclesonide	126544-47-6	$C_{32}H_{44}O_7$	6.13	[M+H] ⁺	541.3	523.3	323.2	-13	-18
75	抗感染药物	磺胺胍	Sulfaguanidine monohydrate	6190-55-2	$C_7H_{12}N_4O_3S$	-2.6	[M-H ₂ O+H] ⁺	215.1	92.15	156.05	-25	-14
76	抗感染药物	磺胺醋酰	Sulfacetamide	144-80-9	$C_8H_{10}N_2O_3S$	-0.96	[M-H] ⁻	213	171.1	195.05	19	18
77	抗感染药物	磺胺多辛	Sulfadoxine	2447-57-6	$C_{12}H_{14}N_4O_4S$	0.3	[M+H] ⁺	311.1	156.2	92.05	-19	-29
78	抗感染药物	磺胺二甲异噻啉	Sulfisomidine	515-64-0	$C_{12}H_{14}N_4O_2S$	-0.43	[M+H] ⁺	279.1	124.15	149.15	-22	-18
79	抗感染药物	琥珀酰磺胺噻唑	Succinylsulfathiazole	116-43-8	$C_{13}H_{13}N_3O_5S_2$	0.68	[M+H] ⁺	356.1	315.05	256	-11	-19
80	抗感染药物	磺胺二甲异恶唑	Sulfisoxazole	127-69-5	$C_{11}H_{13}N_3O_3S$	1.01	[M+H] ⁺	268.1	156.15	113.15	-14	-16
81	抗感染药物	磺胺二甲氧嗪	Sulfadimethoxine	122-11-2	$C_{12}H_{14}N_4O_4S$	1.48	[M+H] ⁺	311.1	156.1	92.1	-21	-32

82	抗感染 药物	磺胺喹 恶啉	Sulfaquinoxal- ine	59-40-5	C ₁₄ H ₁₂ N ₄ O ₂ S	1.3	[M+H] ⁺	301.1	156	92.1	-17	-31
83	抗感染 药物	磺胺硝 苯	Sulfantran	122-16-7	C ₁₄ H ₁₃ N ₃ O ₅ S	2.98	[M-H] ⁻	333.95	136.05	270.1	30	23
84	抗感染 药物	吲哚美 辛	Indometacin	53-86-1	C ₁₉ H ₁₆ ClNO ₄	3.1	[M+H] ⁺	358.1	139.15	317.1	-21	-9
85	抗感染 药物	保泰松	Phenylbuta- zone	50-33-9	C ₁₉ H ₂₀ N ₂ O ₂	3.16	[M+H] ⁺	309.2	160.15	77.15	-21	-55
86	抗感染 药物	硝酸咪 康唑	Miconazole nitrate	22832- 87-7	C ₁₈ H ₁₅ Cl ₄ N ₃ O ₄	5.8	[M-HNO ₃ +H] ⁺	415	159	123.05	-29	-55
87	抗感染 药物	盐酸萘 替芬	Naftifine hydrochloride	65473- 14-5	C ₂₁ H ₂₂ ClN	5.8	[M-HCl+H] ⁺	288.15	117.05	115.1	-15	-50
88	抗感染 药物	硝酸益 康唑	Econazole nitrate	24169- 02-6	C ₁₈ H ₁₆ Cl ₃ N ₃ O ₄	5.2	[M-HNO ₃ +H] ⁺	381.05	125.15	89.2	-28	-55
89	抗感染 药物	地红 霉素	Dirithromycin	62013- 04-1	C ₄₂ H ₇₈ N ₂ O ₁₄	2.84	[M+H] ⁺	835.55	677.4	158.15	-25	-38
90	抗感染 药物	红霉素	Erythromycin	114 -07-8	C ₃₇ H ₆₇ NO ₁₃	2.83	[M+H] ⁺	734.3	158.15	576.35	-35	-20
91	抗感染 药物	琥乙红 霉素	Erythromycin ethylsuccinate	1264- 62-6	C ₄₃ H ₇₅ NO ₁₆	4.1	[M+H] ⁺	862.5	286.15	129.2	-31	-44
92	抗感染 药物	西咪 替丁	Cimetidine	51481- 61-9	C ₁₀ H ₁₆ N ₆ S	0.07	[M+H] ⁺	253.15	159.2	95.1	-14	-26
93	抗感染 药物	溴莫 尼定	Brimonidine	59803- 98-4	C ₁₁ H ₁₀ BrN ₅	0.97	[M+H] ⁺	292	212.1	249	-28	-28
94	抗感染 药物	莫匹 罗星	Mupirocin	12650- 69-0	C ₂₆ H ₄₄ O ₉	3.44	[M-H] ⁻	499.2	173.15	325.1	30	23
95	抗感染 药物	他扎罗 汀	Tazarotene	118292- 40-3	C ₂₁ H ₂₁ NO ₂ S	6.22	[M+H] ⁺	352.15	324.1	294.05	-28	-41
96	抗感染 药物	克罗 米通	Crotamiton	483 -63-6	C ₁₃ H ₁₇ NO	3.1	[M+H] ⁺	204.15	69.1	136.3	-22	-20
97	抗感染 药物	三甲氧 苄氨嘧 啶	Trimethoprim	738 -70-5	C ₁₄ H ₁₈ N ₄ O ₃	0.79	[M+H] ⁺	291.1	230.15	261.1	-25	-25
98	抗感染 药物	二甲氧 苄氨嘧 啶	Diaveridine	5355 -16-8	C ₁₃ H ₁₆ N ₄ O ₂	1.09	[M+H] ⁺	261.15	123.1	233.15	-29	-17
99	抗感染 药物	二甲氧 甲基苄 氨嘧啶	Ormethoprim	6981 -18-6	C ₁₄ H ₁₈ N ₄ O ₂	1.55	[M+H] ⁺	275.2	259.15	123.25	-28	-26
100	抗感染 药物	他唑巴 坦酸	Tazobactam acid	89786- 04-9	C ₁₀ H ₁₂ N ₄ O ₅ S	-1.7	[M-H] ⁻	299	138.1	255.05	13	8
101	抗感染 药物	舒巴坦 钠	Sulbactam sodium	69388- 84-7	C ₈ H ₇ ONNaO ₅ S	-1.39	[M-Na] ⁻	232	188.1	140.1	10	12
102	抗感染 药物	丙磺舒	Probenecid	57-66-9	C ₁₃ H ₁₉ NO ₄ S	3.3	[M-H] ⁻	284	240.05	140.05	15	23

103	抗感染 药物	阿地 普林	Aditoprim	56066- 63-8	$C_{15}H_{21}N_5O_2$	0.97	[M+H] ⁺	304.2	289.1	274.15	-23	-29
104	抗感染 药物	盐酸布 替萘酚	Butenafine hydrochloride	101827- 46-7	$C_{23}H_{28}ClN$	6.77	[M-HCl+H] ⁺	318.25	141.1	147.25	-21	-21
105	抗感染 药物	卢立 康唑	Luliconazole	187164- 19-8	$C_{14}H_9Cl_2N_3S_2$	3.98	[M+H] ⁺	354	150.2	123.1	-23	-42
106	抗感染 药物	伏立 康唑	Voriconazole	137234- 62-9	$C_{16}H_{14}F_3N_5O$	0.93	[M+H] ⁺	350.1	281.1	127.1	-17	-35
107	抗感染 药物	利拉 萘酯	Liranaftate	88678- 31-3	$C_{18}H_{20}N_2O_2S$	5.21	[M+H] ⁺	329.15	181.05	131.1	-16	-27
108	抗感染 药物	阿达 帕林	Adapalene	106685- 40-9	$C_{28}H_{28}O_3$	8.04	[M-H] ⁻	411.15	367.2	352.25	24	42
109	抗感染 药物	克林 霉素	Clindamycin	18323- 44-9	$C_{18}H_{33}ClN_2O_5S$	1.83	[M+H] ⁺	425.2	377.2	126.2	-20	-27
110	抗感染 药物	林可 霉素	Lincomycin	154-21-2	$C_{18}H_{34}N_2O_6S$	0.91	[M+H] ⁺	407.2	359.4	126.1	-20	-30
111	抗感染 药物	阿奇 霉素	Azithromycin	83905- 01-5	$C_{38}H_{72}N_2O_{12}$	3.33	[M+H] ⁺	749.6	591.5	116.1	-30	-47
112	抗感染 药物	克拉 霉素	Clarithromycin	81103- 11-9	$C_{38}H_{69}NO_{13}$	3.16	[M+H] ⁺	748.6	158.1	590.6	-28	-20
113	抗感染 药物	罗红 霉素	Roxithromycin	80214- 83-1	$C_{41}H_{76}N_2O_{15}$	3.73	[M+H] ⁺	837.6	158.1	679.6	-34	-23
114	抗感染 药物	克霉唑	Clotrimazole	23593- 75-1	$C_{22}H_{17}ClN_2$	5.44	[M-C ₃ N ₂ H ₃] ⁺	277.1	165.1	241	-30	-28
115	抗感染 药物	氟康唑	Fluconazole	86386- 73-4	$C_{13}H_{12}F_2N_6O$	0.5	[M+H] ⁺	307.1	238.1	220	-16	-18
116	抗感染 药物	联苯 苄唑	Bifonazole	60628- 96-8	$C_{22}H_{18}N_2$	4.84	[M+H] ⁺	311.2	243.1	165	-16	-34
117	抗感染 药物	磺胺甲 二唑	Sulfamethizole	144-82-1	$C_9H_{10}N_4O_2S_2$	0.51	[M+H] ⁺	271.1	156	92	-14	-27
118	抗感染 药物	磺胺氯 吡嗪	Sulfachloropy- ridazine	80-32-0	$C_{10}H_9ClN_4O_2S$	1.02	[M+H] ⁺	285	155.9	92	-15	-29
119	抗感染 药物	磺胺甲 基异噁 唑	Sulfamethox- azole	723-46-6	$C_{10}H_{11}N_3O_3S$	0.89	[M+H] ⁺	254.1	156	107.9	-15	-23
120	抗感染 药物	依诺 沙星	Enoxacin	74011- 58-8	$C_{15}H_{17}FN_4O_3$	0.55	[M+H] ⁺	321.1	232	303.1	-35	-22
121	抗感染 药物	莫西 沙星	Moxifloxacin	151096- 09-2	$C_{21}H_{24}FN_3O_4$	1.6	[M+H] ⁺	402.2	261.1	364.5	-25	-27
122	抗感染 药物	螺内酯	Spiro-nolac- tone	52-01-7	$C_{24}H_{32}O_4S$	3.12	[M-C ₂ H ₃ OS] ⁺	341.1	107	165	-29	-55
123	抗感染 药物	灰黄 霉素	Griseofulvin	126-07-8	$C_{17}H_{17}ClO_6$	3.53	[M+H] ⁺	353.2	165	215	-21	-21
124	抗感染 药物	氯霉素	Chloramphen- icol	56-75-7	$C_{11}H_{12}Cl_2N_2O_5$	1.02	[M-H] ⁻	321.1	152	257.2	17	12

125	抗感染 药物	青霉素 G 钾盐	Penicillin G potassium salt	113-98-4	$C_{16}H_{17}N_2O_4SK$	1.67	$[M-K+2H]^+$	334.85	160.05	176.1	-12	-11
126	抗感染 药物	青霉素 V 钾盐	Penicillin V potassium salt	132-98-9	$C_{16}H_{17}N_2O_5SK$	1.88	$[M-K+H]^+$	349.9	309	267.85	-5	-12
127	抗感染 药物	苯唑西 林钠	Oxacillin sodium mono- hydrate	7240-38- 2	$C_{19}H_{18}N-_3NaO_5S \cdot H_2O$	1.8	$[M-Na-H_2O+2H]^+$	401.85	243	160.05	-13	-13
128	抗感染 药物	氯唑西 林钠	Cloxacillin sodium hy- drate	7081-44- 9	$C_{19}H_{19}ClN-_3NaO_6S \cdot H_2O$	1.8	$[M-Na-H_2O+H]^+$	453.1	294.1	371.15	-22	-16
129	抗感染 药物	萘夫西 林钠	Nafcillin sodium hy- drate	7177-50- 6	$C_{21}H_{23}N-_2NaO_6S \cdot H_2O$	3.52	$[M-Na-2H_2O+2H]^+$	415.1	199.1	171.05	-13	-37
130	抗感染 药物	双氯西 林钠	Dicloxacillin sodium hy- drate	13412- 64-1	$C_{19}H_{16}Cl_2N-_3NaO_5S \cdot H_2O$	3.02	$[M-Na-H_2O+2H]^+$	469.75	310.95	160.05	-15	-14
131	抗感染 药物	西诺 沙星	Cinoxacin	28657- 80-9	$C_{12}H_{10}N_2O_5$	0.36	$[M+H]^+$	263.1	245.05	217.05	-16	-22
132	抗感染 药物	恶喹酸	Oxolinicacid	14698- 29-4	$C_{13}H_{11}NO_5$	1.43	$[M+H]^+$	262.1	244.05	202	-18	-32
133	抗感染 药物	司帕 沙星	Sparfloxacin	110871- 86-8	$C_{19}H_{22}F_2N_4O_3$	1.2	$[M+H]^+$	393.2	352.1	349.2	-14	-20
134	抗感染 药物	甲基盐 霉素	Narasin	55134- 13-9	$C_{43}H_{72}O_{11}$	6.59	$[M+Na]^+$	787.35	431.1	531.2	-52	-47
135	抗感染 药物	依普 菌素	Eprinomectin	123997- 26-2	$C_{50}H_{75}NO_{14}$	6.22	$[M+Na]^+$	936.35	490.1	352.1	-55	-55
136	抗感染 药物	伊维 菌素	Ivermectin	70288- 86-7	$C_{48}H_{74}O_{14}$	6.61	$[M+Na]^+$	897.3	753.25	449.2	-47	-47
137	抗感染 药物	柱晶白 霉素	Smeptina	1392-21- 8	$C_{40}H_{67}NO_{14}$	1.99	$[M+H]^+$	786.35	174.15	109.2	-31	-42
138	抗感染 药物	维吉尼 霉素 M1	Virgmiamy- cinM1	21411- 53-0	$C_{28}H_{35}N_3O_7$	-1.02	$[M+H]^+$	526.2	508.15	337.1	-14	-22
139	抗组胺	阿司 咪唑	Astemizole	68844- 77-9	$C_{28}H_{31}FN_4O$	5.8	$[M+H]^+$	459.3	218.1	135.1	-26	-38
140	抗组胺	地氯雷 他定	Desloratadine	100643- 71-8	$C_{19}H_{19}ClN_2$	6.77	$[M+H]^+$	311.1	259.1	294.1	-22	-18
141	抗组胺	吩噻嗪	Phenothiazine	92-84-2	$C_{12}H_9NS$	4.15	$[M+H]^+$	199.05	167.1	118.15	-27	-13
142	抗组胺	奋乃静	Desloratadine	58-39-9	$C_{21}H_{26}ClN_3OS$	4.34	$[M+H]^+$	404.2	171.1	143.2	-24	-29
143	抗组胺	氯雷 他定	Loratadine	79794- 75-5	$C_{22}H_{23}ClN_2O_2$	5.94	$[M+H]^+$	383.1	337	267	-22	-36
144	抗组胺	马来酸 氯苯那 敏	Chlorpheni- ramine	113-92-8	$C_{16}H_{19}Cl-N_2 \cdot C_4H_4O_4$	3.38	$[M-C_4H_4O_4+H]^+$	275.1	230.1	167.1	-15	-42

145	抗组胺	马来酸 溴苯那 敏	Brompheni- ramine	980-71-2	$C_{16}H_{19}Br-N_2 \cdot C_4H_4O_4$	3.56	[M-C ₄ H ₄ O ₄ +H] ⁺	319.1	273.9	167	-18	-43
146	抗组胺	特非 那定	Terfenadine	50679- 08-8	$C_{32}H_{41}NO_2$	6.51	[M+H] ⁺	472.3	436.3	454.3	-26	-20
147	抗组胺	盐酸苯 海拉明	Diphenhydr- amine	147-24-0	$C_{17}H_{21}NO \cdot HCl$	3.66	[M-HCl+H] ⁺	256.2	167.1	165	-13	-45
148	抗组胺	盐酸氟 奋乃静	Fluphenazine	146-56-5	$C_{22}H_{26}F-_3N_3OS \cdot 2HCl$	4.84	[M-2HCl+H] ⁺	438.2	143.1	171.1	-31	-25
149	抗组胺	盐酸氯 丙嗪	Chlorproma- zine	69-09-0	$C_{17}H_{19}ClN_2S \cdotHCl$	5.2	[M-HCl+H] ⁺	319.1	86.2	58	-21	-41
150	抗组胺	盐酸曲 吡那敏	Tripelen- namine	154-69-8	$C_{16}H_{21}N_3 \cdot HCl$	2.84	[M-HCl+H] ⁺	256.2	211.1	91.1	-14	-35
151	抗组胺	盐酸赛 庚啶	Cyprohepta- dine	41354- 29-4	$C_{21}H_{21}N \cdot H-Cl \cdot H_2O$	5.03	[M-HCl- H ₂ O+H] ⁺	288.2	96.2	191	-27	-27
152	抗组胺	盐酸西 替利嗪	Cetirizine	83881- 52-1	$C_{21}H_{25}Cl-N_2O_3 \cdot 2HCl$	2.17	[M-2HCl+H] ⁺	389.1	201	166.1	-20	-41
153	抗组胺	盐酸异 丙嗪	Promethazine	58-33-3	$C_{17}H_{20}N_2S \cdot HCl$	4.78	[M-HCl+H] ⁺	285.1	86.2	198	-20	-22
154	抗组胺	赛克利 嗪	Cyclizine Hydrochloride	303-25-3	$C_{18}H_{23}ClN_2$	2.41	[M-HCl+H] ⁺	267.2	167	165.1	-20	-40
155	抗组胺	二苯 拉林	Diphenylpyra- line	147-20-6	$C_{19}H_{23}NO$	4.54	[M+H] ⁺	282.2	167.1	165.1	-25	-45
156	抗组胺	多西 拉敏	Doxylamine	469-21-6	$C_{17}H_{22}N_2O$	2.52	[M+H] ⁺	271.2	182.05	167.1	-15	-30
157	麻醉剂	盐酸丁 卡因	Tetracaine hydrochloride	136-47-0	$C_{15}H_{25}ClN_2O_2$	3.65	[M-HCl+H] ⁺	265.2	176.05	72.15	-20	-25
158	麻醉剂	盐酸氯 普鲁卡 因	Chloropro- caine hydro- chloride	3858-89- 7	$C_{13}H_{20}Cl_2N_2O_2$	3.78	[M-HCl+H] ⁺	271.15	154.05	100.25	-25	-15
159	麻醉剂	盐酸普 鲁卡因	Procaine hydrochloride	51-05-8	$C_{13}H_{21}ClN_2O_2$	2.36	[M-HCl+H] ⁺	237.15	100.25	120.1	-15	-25
160	麻醉剂	普鲁卡 因胺	procainamide	51-06-9	$C_{13}H_{21}N_3O$	1.1	[M+H] ⁺	236.15	163.1	120.1	-16	-28
161	麻醉剂	辛可 卡因	Cinchocaine	85-79-0	$C_{20}H_{29}N_3O_2$	3.87	[M+H] ⁺	344.25	271.05	215.1	-21	-31
162	拟交 感胺	班布 特罗	Bambuterol- hydrochloride	81732- 46-9	$C_{18}H_{30}ClN_3O_5$	0.5	[M-HCl+H] ⁺	368.2	294.15	72.1	-20	-32
163	拟交 感胺	羟甲基 克仑特 罗	Hydroxymeth- ylclenbuterol	38339- 18-3	$C_{12}H_{18}Cl_2N_2O_2$	1.54	[M+H] ⁺	293.15	205	203	-17	-19
164	拟交 感胺	克仑 塞罗	Clencyclohex- erolhydrochlo- ride	1435934- 75-0	$C_{14}H_{21}Cl_3N_2O_2$	1.74	[M-HCl+H] ⁺	319.05	301.1	203	-14	-20

165	拟交感胺	异克伦潘特	Clenisopenterolhydrochloride	1435935-00-4	$C_{13}H_{21}Cl_3N_2O$	3.32	[M-HCl+H] ⁺	291.1	203	273.1	-17	-12
166	拟交感胺	克伦普罗	Clenproperol	38339-11-6	$C_{11}H_{16}Cl_2N_2O$	2.26	[M+H] ⁺	263.1	132.2	203	-26	-18
167	拟交感胺	妥布特罗	Tulobuterol	41570-61-0	$C_{12}H_{18}ClNO$	2.53	[M+H] ⁺	228.15	154.05	119.1	-17	-30
168	农残	甲萘威	Carbaryl	63-25-2	$C_{12}H_{11}NO_2$	2.4	[M+H] ⁺	202.1	145.15	127.1	-11	-27
169	农残	多菌灵	Carbendazim	10605-21-7	$C_9H_9N_3O_2$	1.52	[M+H] ⁺	192.05	160.1	132.1	-18	-29
170	农残	丁变敌	Di-allate	2303-16-4	$C_{10}H_{17}Cl_2NOS$	5.13	[M+H] ⁺	270	86	128.1	-16	-13
171	农残	敌草隆	Diuron	330-54-1	$C_9H_{10}Cl_2N_2O$	2.78	[M+H] ⁺	233	72.1	46.1	-22	-17
172	农残	氟环唑	Epoxiconazole	106325-08-0	$C_{17}H_{13}ClFN_3O$	3.44	[M+H] ⁺	330	121.05	101	-22	-49
173	农残	丁苯吗啉	Fenpropimorph	67306-03-0	$C_{20}H_{33}NO$	5.2	[M+H] ⁺	304.2	147.1	177.05	-28	-54
174	农残	精吡氟禾草灵	Fluazifop-p-butyl	79241-46-6	$C_{19}H_{20}F_3NO_4$	3.64	[M+H] ⁺	384.1	282.1	328.1	-20	-18
175	农残	异菌脲	Iprodione	36734-19-7	$C_{13}H_{13}Cl_2N_3O_3$	2.8	[M+H] ⁺	330.05	121.1	289.1	-21	-11
176	农残	异恶唑草酮	Isoxaflutole	141112-29-0	$C_{15}H_{12}F_3NO_4S$	1.67	[M+H] ⁺	360	251.05	220	-17	-41
177	农残	亚胺菌	Kresoxim-methyl	143390-89-0	$C_{18}H_{19}NO_4$	4.34	[M+H] ⁺	314.15	222	267.05	-16	-9
178	农残	禾草敌	Molinate	2212-67-1	$C_9H_{17}NOS$	3.21	[M+H] ⁺	188.3	126.15	55.2	-13	-25
179	农残	扑灭津	Propazine	139-40-2	$C_9H_{16}ClN_5$	2.98	[M+H] ⁺	230.05	146.05	188.05	-23	-17
180	农残	西玛津	Simazine	122-34-9	$C_7H_{12}ClN_5$	2.28	[M+H] ⁺	202.05	104	96.15	-26	-23
181	农残	十三吗啉	Tridemorph	24602-86-6	$C_{19}H_{39}NO$	7.03	[M+H] ⁺	298.25	130.2	98.05	-27	-30
182	农残	二苯胺	Diphenylamine	122-39-4	$C_{12}H_{11}N$	2.97	[M+H] ⁺	170.2	93.25	92.2	-24	-22
183	农残	炔苯酰草胺	Propyzamide	23950-58-5	$C_{12}H_{11}Cl_2NO$	3.64	[M+H] ⁺	256.1	190.1	173.1	-13	-21
184	农残	甲草胺	Alachlor	15972-60-8	$C_{14}H_{20}ClNO_2$	2.92	[M+H] ⁺	270.15	238.2	162.3	-11	-20
185	农残	腈菌唑	Myclobutanil	88671-89-0	$C_{15}H_{17}ClN_4$	2.82	[M+H] ⁺	289.15	70.2	125.2	-18	-31
186	农残	氟硅唑	Flusilazole	85509-19-9	$C_{16}H_{15}F_2N_3Si$	3.84	[M+H] ⁺	316.15	247.2	165.2	-20	-25
187	农残	氟苯嘧啶醇	Fenarimol	60168-88-9	$C_{17}H_{12}Cl_2N_2O$	3.23	[M+H] ⁺	331.05	268.15	259.1	-24	-24

188	农残	特乐酚	Dinoterb	1420 -07-1	C ₁₀ H ₁₂ N ₂ O ₅	3.42	[M-H]-	239.1	207.1	176.1	25	39
189	农残	碘苯腈	loxynil	1689-83- 4	C ₇ H ₃ I ₂ NO	3.6	[M-H]-	369.8	126.9	215	14	33
190	其它	5-氟尿嘧啶	5-Fluorouracil	51-21-8	C ₄ H ₃ FN ₂ O ₂	-0.78	[M-H]-	129.05	42	85	18	10
191	其它	1,3,5-三缩水甘油-S-三嗪三酮	Teroxirone	2451 -62-9	C ₁₂ H ₁₅ N ₃ O ₆	-2.77	[M+H] ⁺	298.3	130.25			-18
192	其它	卡巴多司	Carbadox	6804 -07-5	C ₁₁ H ₁₀ N ₄ O ₄	-1.22	[M+H] ⁺	263.25	231.2	129.2	-13	-30
193	其它	吗啉	Morpholine	110-91-8	C ₄ H ₉ NO	-1.08	[M+H] ⁺	88.2	70.25			-17
194	其它	N-甲基乙酰胺	Methyl acetamide	79-16-3	C ₃ H ₇ NO	-1.05	[M+H] ⁺	74.15	43.2	56.25	-18	-22
195	其它	二甲双胍	Metformin	657-24-9	C ₄ H ₁₁ N ₅	-2.31	[M+H] ⁺	130.2	60.25	71.25	-15	-23

注：第一对离子为定量离子对

岛津应用云

