

LCMS-IT-TOF

兽药残留分析整体解决方案

快速筛查 准确定性

LCMS-IT-TOF 兽药残留分析整体解决方案

前 言	2
一、兽药标准品定量分析参数和结果	4
1. 孕激素	4
2. 雄激素	7
3. 皮质激素	10
4. 雌激素	13
5. β -受体激动剂	16
6. 磺胺类	20
7. 喹诺酮类	24
8. 阿维菌素类	28
9. 硝基咪唑类	30
10. 苏丹红类	32
11. 镇静剂类	34
12. 喹恶啉类	36
13. 大环内酯类	39
14. β -内酰胺类	42
15. 四环素类	45
二、禽肉及饲料样品中兽药多残留快速筛查	48
1. 兽药基本信息	48
2. 兽药混标分析条件	50
3. 兽药混标样品提取离子流色谱图	51
4. 禽肉和饲料样品前处理方法	53
5. 禽肉样品中兽药分析图谱	53
6. 饲料样品中兽药分析图谱	55
三、多级高分辨质谱库的建立和检索	57
1. 概述	57
2. 质谱库的存储结构及信息	57
3. 质谱库的建立	59
4. 质谱库的检索	65
5. 兽药的多级质谱图	68
附 录. 兽药化合物列表	201

前 言

随着经济的发展，人民生活水平的提高，膳食结构也不断改善，肉、蛋、乳等动物性食品的需求量也不断增加。为满足人们对动物性产品不断增长的需要，就要大幅度、快速地提高动物性食品的产量。在这一过程中，畜牧业朝着现代化、集约化、规模化发展，兽药在降低动物发病率与死亡率，提高饲料利用率，促进生长和改善产品品质等方面起着非常重要的作用。但是，由于管理不当和受经济利益的驱使，兽药违法违规添加的现象日益严重。长期食用含药物残留的动物性食品，会在体内逐渐蓄积，引起各种组织器官发生病变，从而严重损害人体的健康。其主要表现为毒性作用、诱导病原菌产生耐药性、过敏反应、“三致”作用。世界各国包括我国已经注意该问题的严重性，采取各种有效措施控制兽药残留。我国农业部第 235 号公告中已明确规定了《动物性食品中兽药最高残留限量》。该公告中农明确详细规定了动物性食品允许使用，但不需要制定残留限量的药物；已批准的动物性食品中最高残留限量规定；允许作治疗用，但不得在动物性食品中检出的药物；禁止使用的药物，在动物性食品中不得检出。动物性食品中不同程度的兽药残留不仅对消费者的食品安全带来危害，同时影响了整个动物源性食品行业的形象，制约了我国动物源性食品的出口等。因此对动物源性食品中兽药残留量进行检测和控制十分必要。解决并控制好动物源性食品中兽药残留量，对保护人们的身体健康、发展我国动物源性食品行业等方面都具有重要的意义。

近期，与动物源性食品中兽药残留有关的食物安全问题频发，各食品安全检测部门和监管部门都加大了对兽药残留的检测监察力度。在日常的检测过程中必检的兽药违法添加，同时也存在一些未知的兽药添加。在对未知兽药残留不了解的情况下，检测的难度就大大增加了。岛津的 LCMS-IT-TOF 是独特的离子阱和飞行时间质谱的杂交质谱仪，它攻克了一般质谱仪不能同时实现快速多级质谱功能和精确质量测定的现状，使得对未知物和低浓度样品的定性检测能力大大提高。此外，岛津的 LCMS-IT-TOF 配合 MetID 筛查软件，可以快速地对兽药添加进行筛查；配合 ACD MS Manager 软件还可以建立兽药多级质谱库，使用质谱库检索的方式快速对兽药添加进行准确性。LCMS-IT-TOF 除了在兽药残留定性分析方面性能卓越，在定量分析方面也发挥了质谱高灵敏度的特点。LCMS-IT-TOF 在兽药残留的检测上有很大的应用优势。

在整体解决方案数据集中建立了使用 LCMS-IT-TOF 检测兽药残留的分析方法，详细收录了 15 类（包括激素类、 β -受体激动剂类、磺胺类、喹诺酮类、阿维菌素类、硝基咪唑类、大环内酯类、 β -内酰胺类、四环素类等）110 种兽药分组的液质联用分析方法，并给出了兽药标准样品液质分析的提取离子流色谱图，标准曲线，线性相关系数，定量限等基本信息；我们还建立了同时分析 100 种兽药混标的液质联用分析方法，对禽肉和饲料样品分别进行了前处理并进行了基质加标分析。此外，使用 LCMS-IT-TOF 独特功能得到大量的兽药多级高分辨质谱数据并编辑了 132 种兽药标准品的高分辨多级质谱库，并且这 132 个兽药均利用 ACD/MS Manager 软件对数据文件进行分析和处理，提取质谱图来制作各化合物的多级质谱，创建了高分辨多级质谱库。在该多级质谱库中化合物的各类信息（化合物结构、中文名称、英文名称、CAS 号、化合物种类、分子量、分子式、多级质谱采集信息等）一目了然。这样的一个高分辨多级质谱库为用户提供了极大便捷，可进行多样化的结构和质谱

图参数检索，通过检索化合物各类信息可以快速得到兽药的多级质谱图。ACD/MS Manager可用于处理各种格式的质谱数据，用户还可自行对兽药质谱库进行扩展。

岛津一直关注食品安全行业相关的法规及社会热点，及时开发相关方法应对最新的检测需求。经过持续的努力，岛津分析中心推出了 LCMS-IT-TOF 检测禽肉和饲料中兽药残留全面解决方案，本数据集为在兽药残留分析或相关领域从事分析和研究工作的人员提供了便利，供相关检测单位和分析测试人员参考。

岛津企业管理（中国）有限公司

分析中心

2013年1月17日

一、兽药标准品定量分析参数和结果

本次实验用兽药标品共 110 种, 分为 15 类, 分别为孕激素、雄激素、皮质激素、雌激素、 β -受体激动剂、磺胺类、喹诺酮类、阿维菌素类、硝基咪唑类、苏丹红类、镇静剂类、喹恶啉类、大环内酯类、 β -内酰胺类和四环素类。按照分类分别做了标准曲线及定量限的测定。样品信息、分析条件、标准曲线及定量限数据如下:

1. 孕激素

1.1 样品信息

孕激素样品共 4 种(如表 1-1-1 所示), 浓度均为 1000 $\mu\text{g/mL}$ 左右, 溶剂为甲醇, 配制得到 1 $\mu\text{g/mL}$ 的标样, 进行多级质谱检测。将 1 $\mu\text{g/mL}$ 的标样用甲醇逐级稀释, 配得 500、200、100、50、20、10、5、2、1 $\mu\text{g/L}$ 的稀释液, 制作校准曲线。

表 1-1-1. 孕激素样品信息

No.	中文名称	英文名称	分子式	检测离子	理论值 m/z
1	醋酸甲地孕酮	Megestrol-17- acetate	$\text{C}_{24}\text{H}_{32}\text{O}_4$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	385.2373
2	醋酸氢地孕酮	Chloromadinon 17-acetate	$\text{C}_{23}\text{H}_{29}\text{ClO}_4$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	405.1827
3	17-醋酸甲地孕酮	Megestrol-17- acetate	$\text{C}_{24}\text{H}_{34}\text{O}_4$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	387.2530
4	孕酮	Progesterone	$\text{C}_{21}\text{H}_{30}\text{O}_2$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	315.2319

1.2 分析条件

1.2.1 液相条件

流动相: A 相-1% 甲酸水溶液; B 相-甲醇

色谱柱: Shim-pack XR-ODS II (2.0 mm I.D \times 75 mm L., 2.2 μm)

流速: 0.3 mL/min

柱温: 40 $^{\circ}\text{C}$

进样量: 10 μL

洗脱方式: 梯度洗脱

LC 时间程序:

表 1-1-2. 梯度洗脱时间程序

Time (min)	Module	Action	Value(%)
0.01	Pumps	B.Conc	50
8.00	Pumps	B.Conc	64
11.00	Pumps	B.Conc	84
12.50	Pumps	B.Conc	100
14.50	Pumps	B.Conc	100
15.00	Pumps	B.Conc	50
17.00	Controller	Stop	

1.2.2 质谱条件

离子源: ESI, 正离子扫描

扫描范围: MS^1 : m/z 150-600; MS^2, MS^3 : 100-600

加热模块温度: 200 $^{\circ}\text{C}$

脱溶剂管温度: 200 $^{\circ}\text{C}$

雾化气流速: 1.5 L/min

干燥气流速： 10 L/min
 离子源电压： 4.5 kV
 检测器电压： 1.70 kV
 离子累积时间： 10 ms
 校准方法： 自动调谐优化电压，外标法校准质量数。

1.3 EIC 图

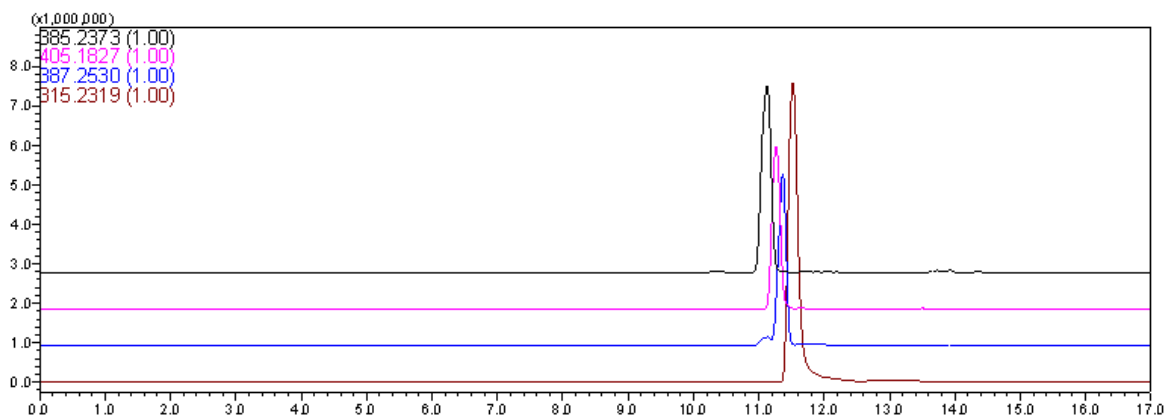


图 1-1. 正离子模式下孕激素样品的提取离子流图 (50 µg/L)

1.4 标准曲线

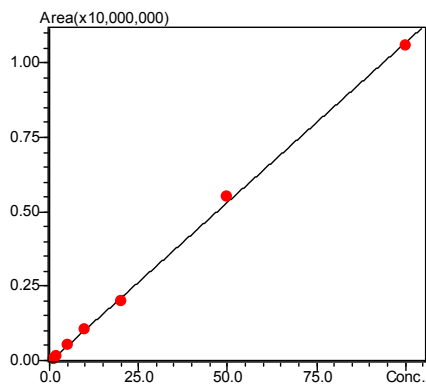
1.4.1 标样校准曲线信息

表 1-1-3. 孕激素样品标样校准曲线信息

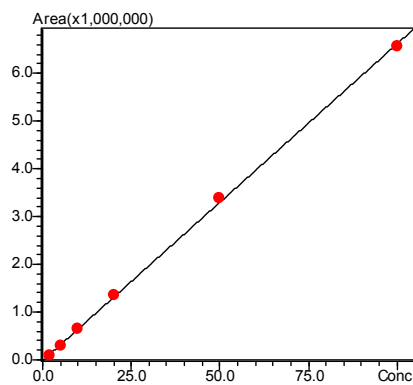
No.	中文名称	英文名称	保留时间 (min)	线性方程	线性范围 (µg/L)	相关系数 r	定量限 (µg/L)
1	醋酸甲地孕酮	Megestrol acetate	11.128	$Y = 107,282.8X - 45,908.06$	2-100	0.9997	1.47
2	醋酸氢地孕酮	Chloromadinon 17-acetate	11.273	$Y = 66,335.62X - 16,346.07$	2-100	0.9998	1.43
3	17-醋酸甲地孕酮	Megestrol-17- acetate	11.361	$Y = 93,113.66X - 28,905.68$	2-100	0.9999	1.22
4	孕酮	Progesterone	11.509	$Y = 188,796.6X + 110,703.1$	1-100	0.9997	1.00

1.4.2 校准曲线

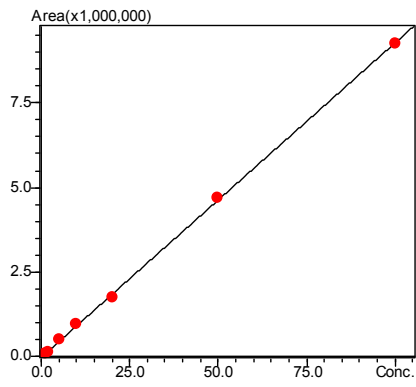
醋酸甲地孕酮



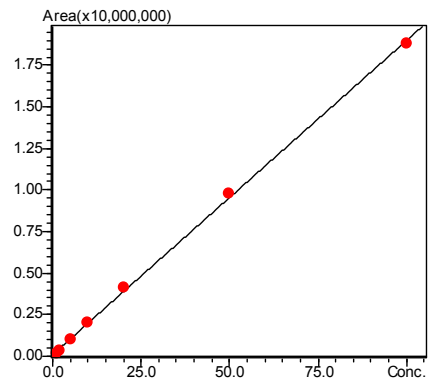
醋酸氢地孕酮



17-醋酸甲地孕酮



孕酮



2. 雄激素

2.1 样品信息

雄激素样品共 10 种(如表 1-2-1 所示),浓度均为 1000 $\mu\text{g/mL}$ 左右,溶剂为甲醇,配制得到 1 $\mu\text{g/mL}$ 的标样,进行多级质谱检测。将 1 $\mu\text{g/mL}$ 的标样用甲醇逐级稀释,配得 500、200、100、50、20、10、5、2、1 $\mu\text{g/L}$ 的稀释液,制作校准曲线。

表 1-2-1. 雄激素样品信息

No.	中文名称	英文名称	分子式	检测离子	理论值 m/z
1	群勃龙	trenbolone	$\text{C}_{18}\text{H}_{22}\text{O}_2$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	271.1693
2	勃地酮	Boldenone	$\text{C}_{19}\text{H}_{26}\text{O}_2$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	287.2006
3	19-去甲基(诺龙)	19-nortestosterone	$\text{C}_{18}\text{H}_{26}\text{O}_2$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	275.2006
4	睾酮/睾丸素	Testosteron	$\text{C}_{19}\text{H}_{28}\text{O}_2$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	289.2162
5	甲睾酮	Methyltestosterone	$\text{C}_{20}\text{H}_{30}\text{O}_2$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	303.2319
6	司坦唑醇	Stanozolol	$\text{C}_{21}\text{H}_{32}\text{N}_2\text{O}$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	329.2587
7	丙酸诺龙	19-Nortestosterone 17-propionate	$\text{C}_{21}\text{H}_{30}\text{O}_3$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	331.2268
8	17-丙酸睾酮	Testosterone 17-propionate	$\text{C}_{22}\text{H}_{32}\text{O}_3$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	345.2424
9	苯丙酸诺龙	Nandrolone Phenylpropionate	$\text{C}_{27}\text{H}_{34}\text{O}_3$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	407.2581
10	17-苯甲酸睾酮	Testosterone 17-benzoate	$\text{C}_{26}\text{H}_{32}\text{O}_3$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	393.2424

2.2 分析条件

2.2.1 液相条件

流动相: A 相-1% 甲酸水溶液; B 相-甲醇

色谱柱: Shim-pack XR-ODS II (2.0 mm I.D \times 75 mm L., 2.2 μm)

流速: 0.3 mL/min

柱温: 40 $^{\circ}\text{C}$

进样量: 10 μL

洗脱方式: 梯度洗脱

LC 时间程序:

表 1-2-2. 梯度洗脱时间程序

Time(min)	Module	Action	Value(%)
0.01	Pumps	B.Conc	50
8.00	Pumps	B.Conc	64
11.00	Pumps	B.Conc	84
12.50	Pumps	B.Conc	100
14.50	Pumps	B.Conc	100
15.00	Pumps	B.Conc	50
17.00	Controller	Stop	

2.2.2 质谱条件

离子源: ESI, 正离子扫描

扫描范围: MS^1 : m/z 150-600; MS^2, MS^3 : 100-600

加热模块温度: 200 $^{\circ}\text{C}$

脱溶剂管温度: 200 $^{\circ}\text{C}$

雾化气流速: 1.5 L/min

干燥气流速: 10 L/min

离子源电压: 4.5 kV

检测器电压： 1.70 kV
 离子累积时间： 10 ms
 校准方法： 自动调谐优化电压，外标法校准质量数。

2.3 EIC 图

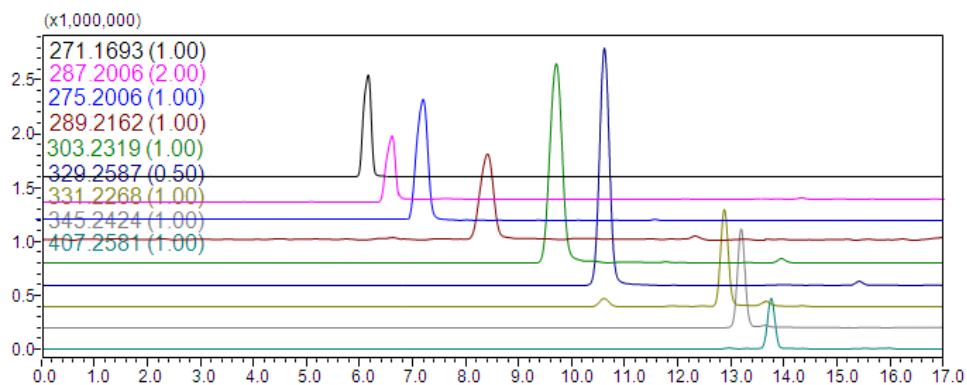


图 1-2. 正离子模式下雄激素样品的提取离子流图 (50 µg/L)

2.4 校准曲线

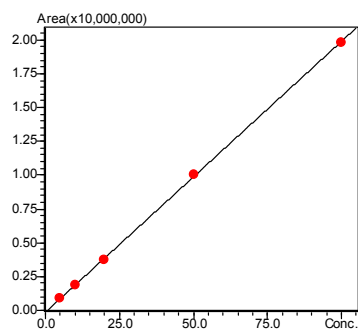
2.4.1 标样校准曲线信息

表 1-2-3. 雄激素样品标样校准曲线信息

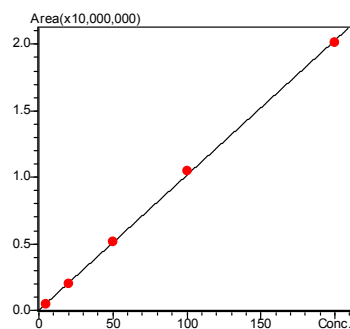
No.	中文名称	英文名称	保留时间 (min)	线性方程	线性范围 (µg/L)	相关系数 r	定量限 (µg/L)
1	群勃龙	trenbolone	6.191	$Y = 200,386.8X - 142,410.7$	5-100	0.9998	4.19
2	勃地酮	Boldenone	6.663	$Y = 101,345.9X + 29,245.83$	10-200	0.9997	8.87
3	19-去甲基睾酮 (诺龙)	19-nortestosterone	7.242	$Y = 212,249.4X - 104,354.8$	5-100	0.9998	2.57
4	睾酮/睾丸素	Testosterone	8.450	$Y = 130,951.8X + 197,603.4$	10-200	0.9999	8.75
5	甲睾酮	Methyltestosterone	9.752	$Y = 296,331.8X + 211,423.4$	2-100	0.9991	1.83
6	司坦唑醇	Stanozolol	10.653	$Y = 632,674.2X + 275,053.4$	1-50	0.9992	0.59
7	丙酸诺龙	19-Nortestosterone 17-propionate	12.891	$Y = 88,624.46X + 160,548.0$	5-100	0.9996	4.62
8	17-丙酸睾酮	Testosterone 17-propionate	13.202	$Y = 90,714.08X + 94,156.00$	2-100	0.9994	1.73
9	苯丙酸诺龙	Nandrolone Phenylpropionate	13.772	$Y = 42,539.90X + 41,584.65$	10-100	0.9998	6.25
10	17-苯甲酸睾酮	Testosterone 17-benzoate	13.891	$Y = 88,798.23X + 814.4244$	2-50	0.9998	1.27

2.4.2 校准曲线

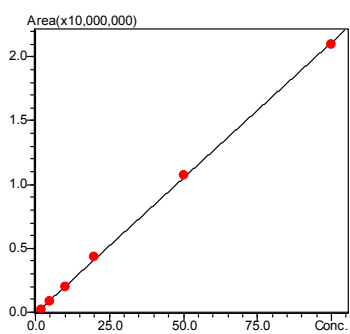
群勃龙



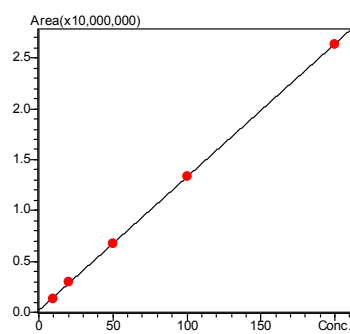
勃地酮



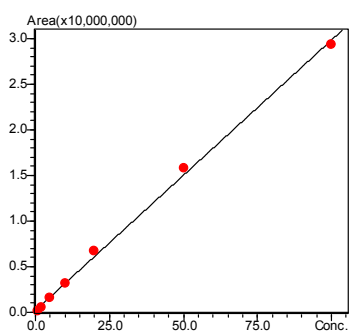
19-去甲基睾酮 (诺龙)



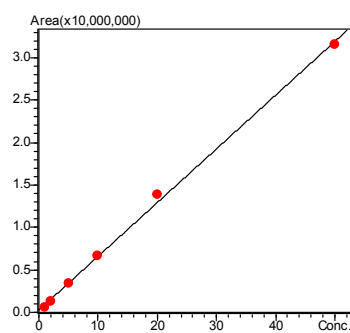
睾酮/睾丸素



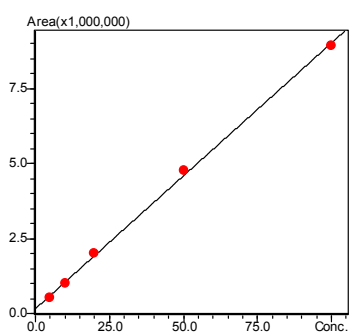
甲睾酮



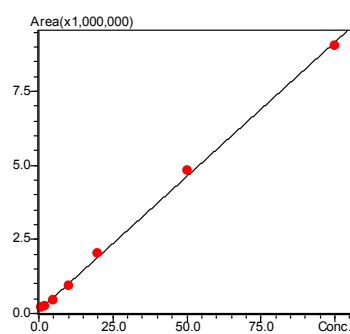
司坦唑醇



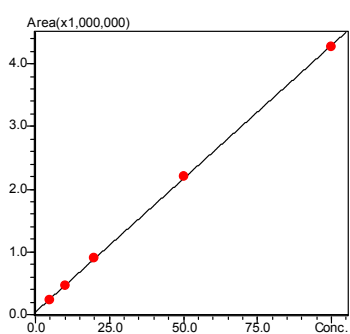
丙酸诺龙



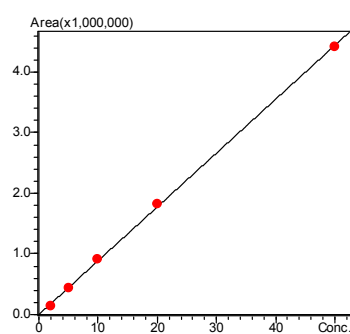
17-丙酸睾酮



苯丙酸诺龙



17-苯甲酸睾酮



3. 皮质激素

3.1 样品信息

皮质激素样品共 8 种（如表 1-3-1 所示），浓度均为 1000 $\mu\text{g/mL}$ 左右，溶剂为甲醇，配制得到 1 $\mu\text{g/mL}$ 的标样，进行多级质谱检测。将 1 $\mu\text{g/mL}$ 的标样用甲醇逐级稀释，配得 500、200、100、50、20、10、5、2、1 $\mu\text{g/L}$ 的稀释液，制作校准曲线。

表 1-3-1. 皮质激素样品信息

No.	中文名称	英文名称	分子式	检测离子	理论值 m/z
1	强的松龙	Prednisone	$\text{C}_{21}\text{H}_{26}\text{O}_5$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	359.1858
2	氢化可的松	Hydrocortisone	$\text{C}_{21}\text{H}_{30}\text{O}_5$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	363.2171
3	甲基泼尼松	Meprednisone	$\text{C}_{22}\text{H}_{28}\text{O}_5$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	373.2015
4	倍它米松	Betamethasone	$\text{C}_{22}\text{H}_{29}\text{FO}_5$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	393.2077
5	醋酸氢氟可的松	Fludrocortisone Acetate	$\text{C}_{23}\text{H}_{31}\text{FO}_6$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	423.2183
6	醋酸氢化可的松	Hydrocortisone acetate	$\text{C}_{23}\text{H}_{32}\text{O}_6$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	405.2277
7	倍可松	Betamethasone Dipropionate	$\text{C}_{28}\text{H}_{37}\text{FO}_7$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	505.2602

3.2 分析条件

3.2.1 液相条件

流动相：A 相-1% 甲酸水溶液；B 相-甲醇

色谱柱：Shim-pack XR-ODS II (2.0 mm I.D×75 mm L., 2.2 μm)

流速：0.3 mL/min

柱温：40 $^{\circ}\text{C}$

进样量：10 μL

洗脱方式：梯度洗脱

LC 时间程序：

表 1-3-2. 梯度洗脱时间程序

Time(min)	Module	Action	Value(%)
0.01	Pumps	B.Conc	50
8.00	Pumps	B.Conc	64
11.00	Pumps	B.Conc	84
12.50	Pumps	B.Conc	100
14.50	Pumps	B.Conc	100
15.00	Pumps	B.Conc	50
17.00	Controller	Stop	

3.2.2 质谱条件

离子源：ESI，正离子扫描

扫描范围： MS^1 : m/z 150-600; MS^2, MS^3 : 100-600

加热模块温度：200 $^{\circ}\text{C}$

脱溶剂管温度：200 $^{\circ}\text{C}$

雾化气流速：1.5 L/min

干燥气流速：10 L/min

离子源电压：4.5 kV

检测器电压：1.70 kV

离子累积时间：10 ms

校准方法：自动调谐优化电压，外标法校准质量数。

3.3 EIC 图

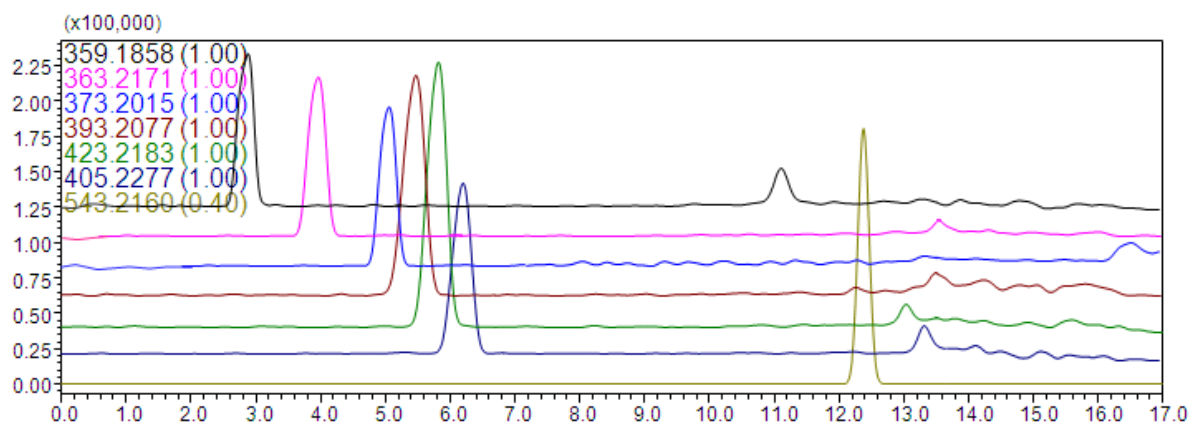


图 1-3. 正离子模式下皮质醇激素样品的提取离子流图 (10 μg/L)

3.4 标准曲线

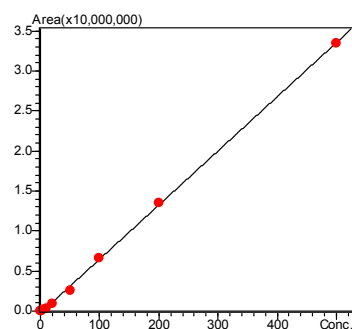
3.4.1 标样校准曲线信息

表 1-3-3. 皮质激素标样校准曲线信息

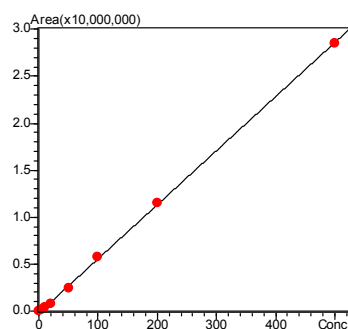
No.	中文名称	英文名称	保留时间 (min)	线性方程	线性范围 (μg/L)	相关系数 r	定量限 (μg/L)
1	强的松龙	Prednisone	3.258	$Y = 67,605.27X - 268,795.3$	10-500	0.9999	9.45
2	氢化可的松	Hydrocortisone	4.201	$Y = 57,766.40X - 249,113.5$	10-500	0.9997	6.83
3	甲基泼尼松	Meprednisone	5.282	$Y = 63,108.15X - 495,772.0$	10-500	0.9999	9.92
4	倍它米松	Betamethasone	5.637	$Y = 111,519.3X + 205,547.9$	10-500	0.9994	9.40
5	醋酸氢氟可的松	Fludrocortisone Acetate	5.960	$Y = 56,973.65X - 87,269.56$	5-500	0.9996	4.37
6	醋酸氢化可的松	Hydrocortisone acetate	6.211	$Y = 92,267.23X - 159,133.1$	10-500	0.9995	8.89
7	倍可松	Betamethasone Dipropionate	12.404	$Y = 102,980.5X + 124,109.6$	1-100	0.9995	0.48

3.4.2 校准曲线

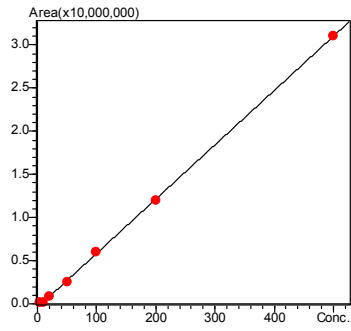
强的松龙



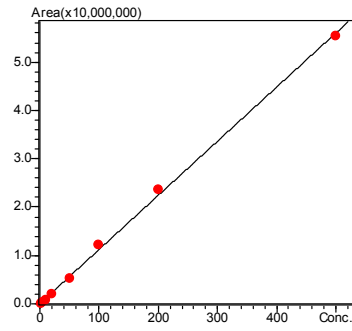
氢化可的松



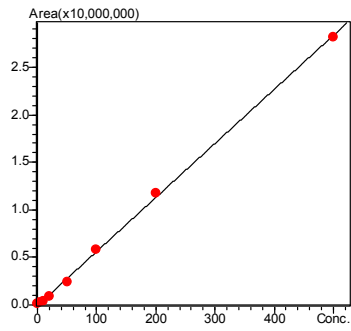
甲基泼尼松



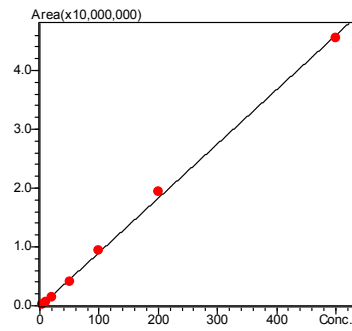
倍它米松



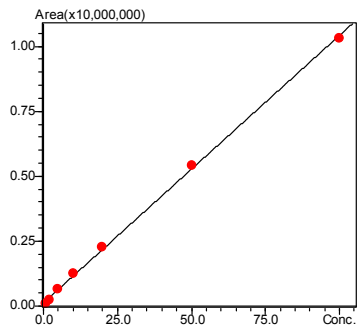
醋酸氢氟可的松



醋酸氢化可的松



倍可松



4. 雌激素

4.1 样品信息

雌激素样品共 5 种(如表 1-4-1 所示),浓度均为 1000 $\mu\text{g/mL}$ 左右,溶剂为甲醇,配制得到 1 $\mu\text{g/mL}$ 的标样,进行多级质谱检测。将 1 $\mu\text{g/mL}$ 的标样用甲醇逐级稀释,配得 500、200、100、50、20、10、5、2、1 $\mu\text{g/L}$ 的稀释液,制作校准曲线。

表 1-4-1. 雌激素样品信息

No.	中文名称	英文名称	分子式	检测离子	理论值 m/z
1	雌三醇	Estriol	$\text{C}_{18}\text{H}_{24}\text{O}_3$	$[\text{M}-\text{H}]^-$	287.1653
2	17-a-乙炔雌二醇	17-a-Etheinyloestradiol	$\text{C}_{20}\text{H}_{24}\text{O}_2$	$[\text{M}-\text{H}]^-$	295.1704
3	己烯雌酚	Diethylstilbestrol	$\text{C}_{18}\text{H}_{20}\text{O}_2$	$[\text{M}-\text{H}]^-$	267.1391
4	己烷雌酚	Hexestrol	$\text{C}_{18}\text{H}_{22}\text{O}_2$	$[\text{M}-\text{H}]^-$	269.1547
5	17- β 雌二醇	17-beta-estradiol	$\text{C}_{18}\text{H}_{24}\text{O}_2$	$[\text{M}-\text{H}]^-$	271.1704

4.2 分析条件

4.2.1 液相条件

流动相: A 相-水; B 相-甲醇

色谱柱: Shim-pack XR-ODS II (2.0 mm I.D \times 75 mm L., 2.2 μm)

流速: 0.3 mL/min

柱温: 40 $^{\circ}\text{C}$

进样量: 10 μL

洗脱方式: 梯度洗脱

LC 时间程序:

表 1-4-2. 梯度洗脱时间程序

Time(min)	Module	Action	Value(%)
0.01	Pumps	B.Conc	35
4.00	Pumps	B.Conc	50
4.50	Pumps	B.Conc	100
5.50	Pumps	B.Conc	100
5.60	Pumps	B.Conc	35
9.00	Controller	Stop	

4.2.2 质谱条件

离子源: ESI, 负离子扫描

扫描范围: MS^1 : m/z 150-600

加热模块温度: 200 $^{\circ}\text{C}$

脱溶剂管温度: 200 $^{\circ}\text{C}$

雾化气流速: 1.5 L/min

干燥气流速: 10 L/min

离子源电压: -3.5 kV

检测器电压: 1.70 kV

离子累积时间: 10 ms

校准方法: 自动调谐优化电压, 外标法校准质量数。

4.3 EIC 图

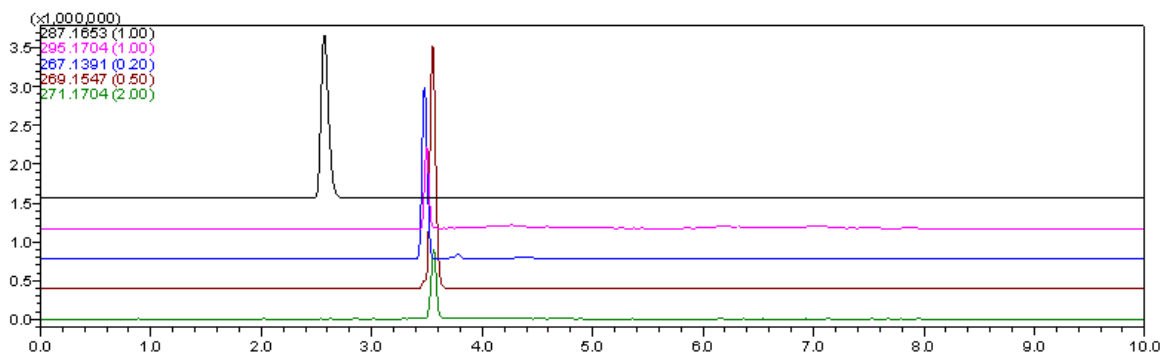


图 1-4. 负离子模式下雌激素样品的提取离子流图 (100 µg/L)

4.4 标准曲线

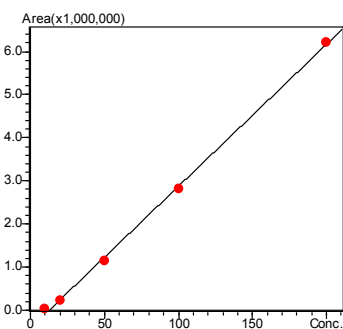
4.4.1 标样校准曲线信息

表 1-4-3. 雌激素标样校准曲线信息

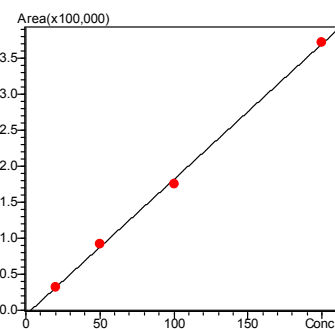
No.	中文名称	英文名称	保留时间 (min)	线性方程	线性范围 (µg/L)	相关系数 r	定量限 (µg/L)
1	雌三醇	Estriol	5.412	$Y = 32,917.88X - 415,946.4$	10-200	0.9995	8.97
2	17-a-乙炔雌二醇	17-a-Etheinyloestradiol	6.081	$Y = 1,879.822X - 6,386.080$	20-200	0.9995	18.08
3	己烯雌酚	Diethylstilbestrol	6.094	$Y = 18,790.26X - 163,399.8$	10-200	0.9995	5.45
4	己烷雌酚	Hexestrol	6.101	$Y = 20,157.59X - 202,086.2$	10-200	0.9994	4.49
5	17-β 雌二醇	17-beta-estradiol	6.118	$Y = 2,151.047X + 1,475.166$	20-200	0.9992	16.47

4.4.2 校准曲线

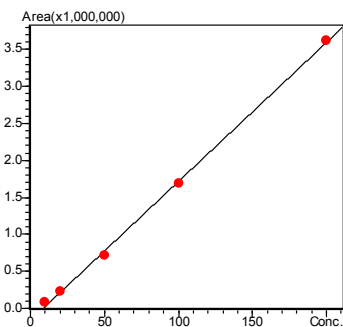
雌三醇



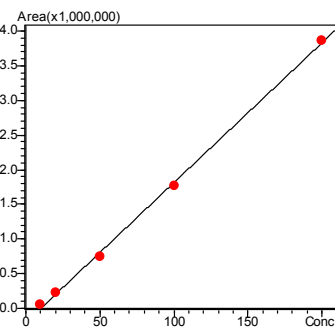
17-a-乙炔雌二醇 (炔雌醇)



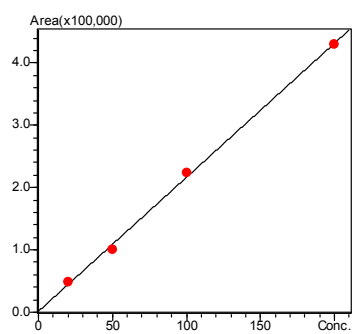
己烯雌酚



己烷雌酚



17-β 雌二醇



5. β -受体激动剂

5.1 样品信息

β -受体激动剂样品共 14 种（如表 1-5-1 所示），浓度均为 1000 $\mu\text{g mL}$ 左右，溶剂为甲醇，配制得到 1 $\mu\text{g/mL}$ 的标样，进行多级质谱检测。将 1 $\mu\text{g/mL}$ 的标样用甲醇逐级稀释，配得 500、200、100、50、20、10、5、2、1 $\mu\text{g/L}$ 的稀释液，制作校准曲线。

表 1-5-1. β -受体激动剂样品信息

No.	中文名称	英文名称	分子式	检测离子	理论值 m/z
1	奥西那林半硫酸盐	Metaproterenol hemisulfate salt	$\text{C}_{11}\text{H}_{17}\text{NO}_3$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	212.1281
2	西马特罗	Cimaterol	$\text{C}_{12}\text{H}_{17}\text{N}_3\text{O}$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	220.1444
3	硫酸特布他林	Terbutalin Sulfate	$\text{C}_{24}\text{H}_{38}\text{N}_2\text{O}_6\cdot\text{H}_2\text{SO}_4$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	226.1438
4	沙丁胺醇	Salbutamol	$\text{C}_{13}\text{H}_{21}\text{NO}_3$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	240.1594
5	氢溴酸非诺特罗	Fenoterol hydrobromide	$\text{C}_{17}\text{H}_{21}\text{NO}_4\cdot\text{HBr}$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	304.1543
6	利托君/利安特灵	Ritodrine	$\text{C}_{17}\text{H}_{21}\text{NO}_3\cdot\text{HCl}$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	288.1600
7	盐酸莱克多巴胺	Ractopamine hydrochloride	$\text{C}_{18}\text{H}_{23}\text{NO}_3\cdot\text{HCl}$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	302.1751
8	盐酸克伦特罗	clenbuterol hydrochloride	$\text{C}_{12}\text{H}_{18}\text{Cl}_2\text{N}_2\text{O}\cdot\text{HCl}$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	277.0869
9	美托洛尔	Metoprolol tartrate	$\text{C}_{15}\text{H}_{25}\text{NO}_3$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	268.1907
10	妥洛特罗	Tulobuterol	$\text{C}_{12}\text{H}_{18}\text{ClNO}$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	228.1151
11	盐酸溴布特罗	Brombuterol hydrochloride	$\text{C}_{12}\text{H}_{18}\text{Br}_2\text{N}_2\text{O}\cdot\text{HCl}$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	364.9856
12	盐酸马布特罗	Mabuterol hydrochloride	$\text{C}_{13}\text{H}_{18}\text{ClF}_3\text{N}_2\text{O}\cdot\text{HCl}$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	311.1133
13	盐酸苯氧丙酚胺	Isoxsuprine	$\text{C}_{18}\text{H}_{23}\text{NO}_3\cdot\text{HCl}$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	302.1751
14	喷布特罗硫酸盐	Penbutolol Sulfate	$\text{C}_{18}\text{H}_{29}\text{NO}_2\cdot\text{H}_2\text{SO}_4$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	292.2271

5.2 分析条件

5.2.1 液相条件

流动相：A 相-1% 甲酸水溶液；B 相-甲醇

色谱柱：Shim-pack XR-ODS II (2.0 mm I.D \times 75 mm L., 2.2 μm)

流速：0.3 mL/min

柱温：40 $^{\circ}\text{C}$

进样量：10 μL

洗脱方式：梯度洗脱

LC 时间程序：

表 1-5-2. 梯度洗脱时间程序

Time(min)	Module	Action	Value(%)
0.01	Pumps	B.Conc	5
11.00	Pumps	B.Conc	60
11.01	Pumps	B.Conc	5
17.00	Controller	Stop	

5.2.2 质谱条件

离子源：ESI，正离子扫描

扫描范围： MS^1 : m/z 150-600; MS^2, MS^3 : 100-600

加热模块温度：200 $^{\circ}\text{C}$

脱溶剂管温度：200 $^{\circ}\text{C}$

雾化气流速：1.5 L/min

干燥气流速：10 L/min

离子源电压： 4.5 kV
 检测器电压： 1.70 kV
 离子累积时间： 10 ms
 校准方法： 自动调谐优化电压，外标法校准质量数。

5.3 EIC 图

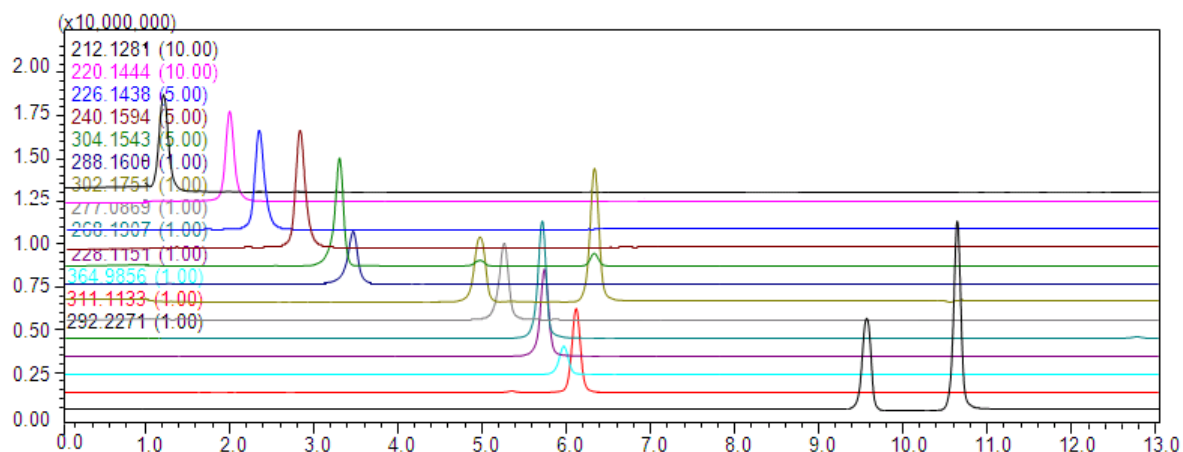


图 1-5. 正离子模式下 β -受体激动剂类样品的提取离子流图 (100 $\mu\text{g/L}$)

5.4 标准曲线

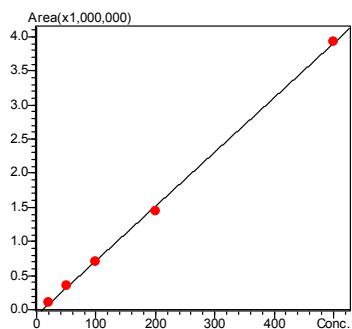
5.4.1 标样校准曲线信息

表 1-5-3. B-受体激动剂标样校准曲线信息

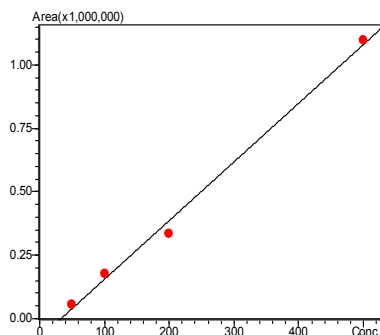
No.	中文名称	英文名称	保留时间 (min)	线性方程	线性范围 ($\mu\text{g/L}$)	相关系数 r	定量限 ($\mu\text{g/L}$)
1	奥西那林半硫酸盐	Metaproterenol hemisulfate salt	1.182	$Y = 7,965.481X - 78,738.04$	20-500	0.9996	17.70
2	西马特罗	Cimaterol	1.895	$Y = 2,312.973X - 75,590.54$	50-500	0.9973	46.31
3	硫酸特布他林	Terbutalin Sulfate	2.260	$Y = 12,454.96X - 108,829.4$	20-500	0.9998	18.76
4	沙丁胺醇	Salbutamol	2.442	$Y = 44,855.16X - 14,800.30$	5-200	0.9999	4.51
5	氢溴酸非诺特罗	Fenoterol hydrobromide	3.277	$Y = 22,487.51X - 93,082.84$	5-200	0.9997	4.40
6	利托君/利安特灵	Ritodrine	3.437	$Y = 64,016.96X - 8,062.417$	5-200	0.9997	2.04
7	盐酸莱克多巴胺	Ractopamine hydrochloride	4.908	$Y = 64,869.02X + 27,197.70$	10-200	0.9997	8.37
8	盐酸克伦特罗	clenbuterol hydrochloride	5.185	$Y = 63,983.34X + 66,151.77$	5-200	0.9995	3.03
9	美托洛尔	Metoprolol tartrate	5.635	$Y = 143,227.3X + 32,058.13$	2-100	0.9996	1.36
10	妥洛特罗	Tulobuterol	5.703	$Y = 51,206.17X + 85,945.03$	5-200	0.9997	2.99
11	盐酸溴布特罗	Brombuterol hydrochloride	5.943	$Y = 80,718.47X + 65,050.70$	2-100	0.9992	1.57
12	盐酸马布特罗	Mabuterol hydrochloride	6.072	$Y = 105,475.1X + 3,581.957$	2-100	0.9998	1.23
13	盐酸茶氧丙酚胺	Isoxsuprine	6.305	$Y = 64,869.02X + 27,197.70$	10-200	0.9997	8.50
14	喷布特罗硫酸盐	Penbutolol Sulfate	10.532	$Y = 275,870.4X - 10,018.20$	1-50	0.9997	0.99

5.4.2 校准曲线

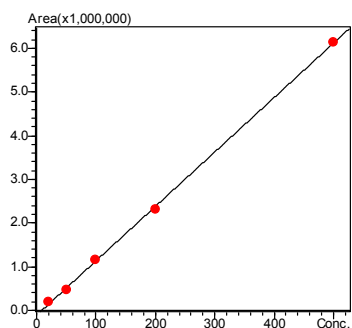
奥西那林半硫酸盐



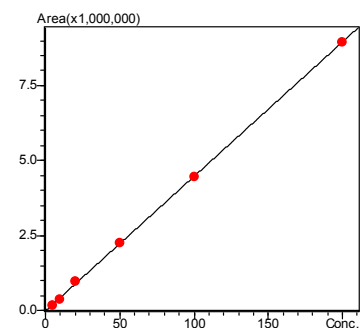
西马特罗



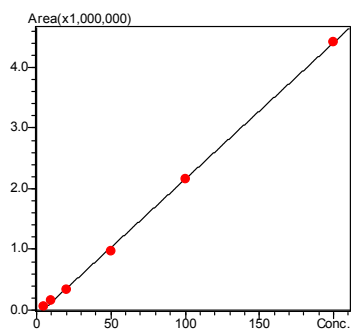
硫酸特布他林



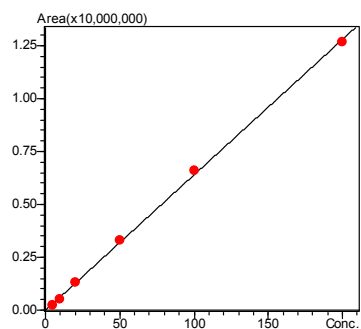
沙丁胺醇



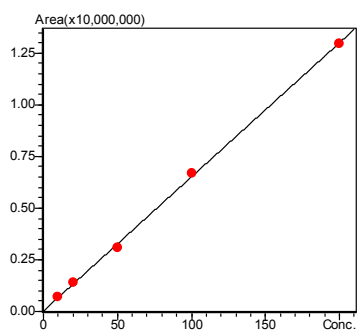
氢溴酸非诺特罗



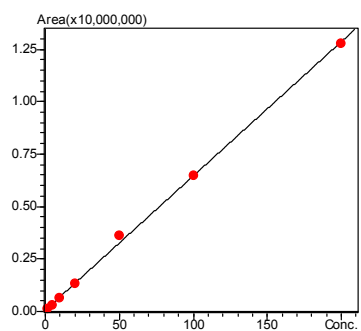
利托君/利安特灵



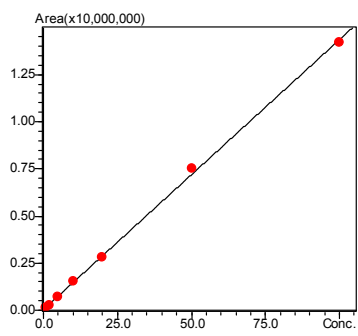
盐酸莱克多巴胺



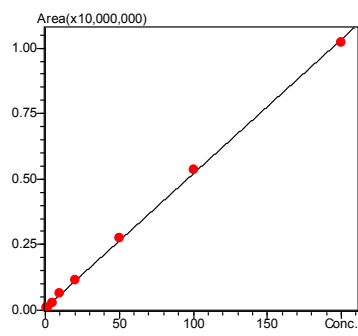
盐酸克伦特罗



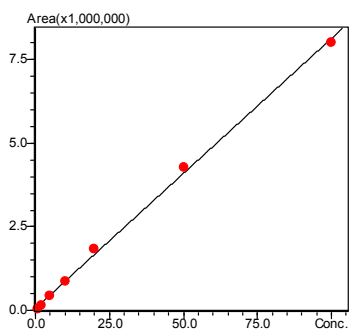
美托洛尔



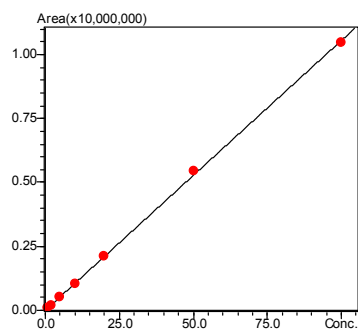
妥洛特罗



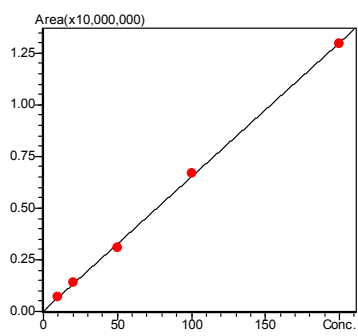
盐酸溴布特罗



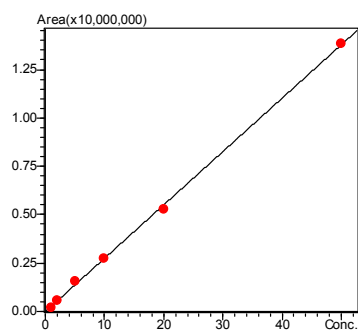
盐酸马布特罗



盐酸苯氧丙胺



喷布特罗硫酸盐



6. 磺胺类

6.1 样品信息

磺胺类样品共 16 种(如表 1-6-1 所示),浓度均为 1000 $\mu\text{g/mL}$ 左右,溶剂为乙腈,配制得到 1 $\mu\text{g/mL}$ 的标样,进行多级质谱检测。将 1 $\mu\text{g/mL}$ 的标样用甲醇逐级稀释,配得 500、200、100、50、20、10、5、2 $\mu\text{g/L}$ 的稀释液,制作校准曲线。

表 1-6-1. 磺胺类样品信息

No.	中文名称	英文名称	分子式	检测离子	理论值 m/z
1	磺胺甲恶唑 SMZ	Sulfamethoxazole	$\text{C}_{10}\text{H}_{11}\text{N}_3\text{O}_3\text{S}$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	254.0594
2	磺胺间甲氧钠 SMM	Sulfamonomethoxine sodium	$\text{C}_{11}\text{H}_{12}\text{N}_4\text{O}_3\text{S}$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	281.0703
3	磺胺二甲基嘧啶 SM2	Sulfamethazine	$\text{C}_{12}\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_2\text{S}$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	279.0910
4	磺胺间二甲氧 SDM	Sulfadimethoxine	$\text{C}_{12}\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_4\text{S}$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	311.0786
5	磺胺噻恶啉 SQX	Sulfachinoxalin	$\text{C}_{14}\text{H}_{12}\text{N}_4\text{O}_2\text{S}$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	301.0754
6	苯酰磺胺	sulfabenzamide	$\text{C}_{13}\text{H}_{12}\text{N}_2\text{O}_3\text{S}$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	277.0641
7	磺氯吡嗪	sulfachloropyridazine	$\text{C}_{10}\text{H}_9\text{ClN}_4\text{O}_2\text{S}$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	285.0208
8	磺胺醋酰	Sulfacetamide	$\text{C}_8\text{H}_{10}\text{N}_2\text{O}_3\text{S}$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	215.0485
9	磺胺嘧啶	Sulfadiazine	$\text{C}_{10}\text{H}_{10}\text{N}_4\text{O}_2\text{S}$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	251.0597
10	磺胺甲基嘧啶	Sulfamerazine	$\text{C}_{11}\text{H}_{12}\text{N}_4\text{O}_2\text{S}$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	265.0754
11	磺胺对甲氧嘧啶	sulfameter	$\text{C}_{11}\text{H}_{12}\text{N}_4\text{O}_3\text{S}$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	281.0703
12	磺胺甲噻二唑	sulfamethizole	$\text{C}_9\text{H}_{10}\text{N}_4\text{O}_2\text{S}_2$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	271.0318
13	磺胺甲氧吡嗪	sulfamethoxypridazine	$\text{C}_{11}\text{H}_{12}\text{N}_4\text{O}_3\text{S}$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	281.0703
14	磺胺二甲唑	sulfamoxol	$\text{C}_{11}\text{H}_{13}\text{N}_3\text{O}_3\text{S}$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	268.0750
15	磺胺吡啶	sulfapyridine	$\text{C}_{11}\text{H}_{11}\text{N}_3\text{O}_2\text{S}$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	250.0645
16	磺胺噻唑	sulfathiazole	$\text{C}_9\text{H}_9\text{N}_3\text{O}_2\text{S}_2$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	256.0209

6.2 分析条件

6.2.1 液相条件

液相条件:

流动相: A 相-5 mM 醋酸铵-0.1%甲酸水溶液; B 相-乙腈

色谱柱: Shimadzu Shim-pack XR-ODS II (2.0 mm \times 100 mm, 2.2 μm)

流速: 0.2 mL/min

柱温: 40 $^{\circ}\text{C}$

进样体积: 20 μL

洗脱方式: 梯度洗脱

LC 时间程序:

表 1-6-2. 梯度洗脱时间程序

Time(min)	Module	Action	Value(%)
0.01	Pumps	B.Conc	10
8.00	Pumps	B.Conc	40
11.00	Pumps	B.Conc	30
11.10	Pumps	B.Conc	10
15.00	Controller	Stop	

2.2.2 质谱条件

离子源: ESI, 正离子扫描

扫描范围: MS¹: m/z 100-400
 加热模块温度: 200℃
 脱溶剂管温度: 200℃
 雾化气流速: 1.5 L/min
 干燥气流速: 10 L/min
 离子源电压: 4.5 kV
 检测器电压: 1.70 kV
 离子累积时间: 30 ms
 校准方法: 自动调谐优化电压, 外标法校准质量数。

6.3 EIC 图

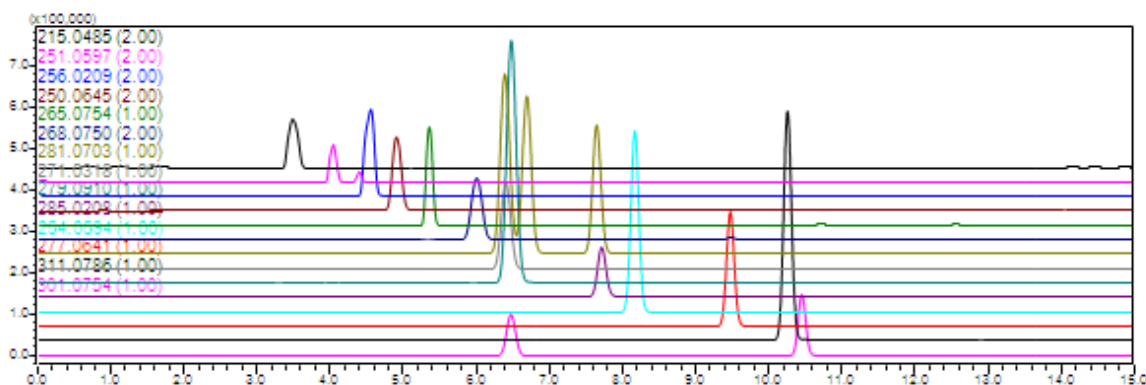


图 1-6. 正离子模式下磺胺类样品的提取离子流图 (50 μg/L)

6.4 标准曲线

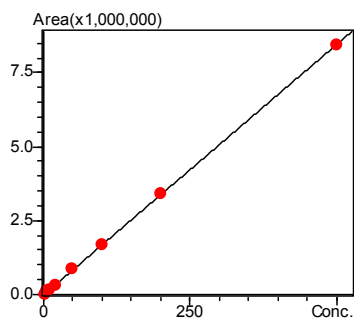
6.4.1 标样校准曲线信息

表 1-6-3. 磺胺类标样校准曲线信息

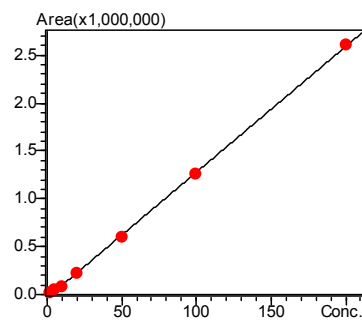
No.	中文名称	英文名称	保留时间 (min)	线性方程	线性范围 (μg/L)	相关系数 r	定量限 (μg/L)
1	磺胺甲恶唑	Sulfamethoxazole	8.168	Y = 16,933.100X - 10,006.72	5-500	0.9999	2.78
2	磺胺间甲氧钠	Sulfamonomethoxine sodium	7.661	Y = 13,140.47X - 35,676.38	5-200	0.9998	4.47
3	磺胺二甲基嘧啶	Sulfamethazine	6.547	Y = 27,904.79X - 95,578.03	5-500	0.9999	4.06
4	磺胺间二甲氧	Sulfadimethoxine	10.252	Y = 22,908.43X - 7,276.674	2-200	0.9995	1.40
5	磺胺喹恶啉	Sulfachinoxalin	10.444	Y = 5,978.019X - 75,410.42	10-1000	0.9998	5.01
6	苯酰磺胺	sulfabenzamide	9.461	Y = 6,082.694X + 26,698.60	5-500	0.9992	5.10
7	磺氯吡嗪	Sulfachloropyridazine	7.719	Y = 5,542.816X - 58,684.32	5-500	0.9992	4.47
8	磺胺醋酰	Sulfacetamide	3.521	Y = 5,640.045X - 1,905.858	5-1000	0.9993	4.82
9	磺胺嘧啶	Sulfadiazine	4.032	Y = 4,330.053X - 118,217.5	10-1000	0.9987	9.18
10	磺胺甲基嘧啶	Sulfamerazine	5.401	Y = 15,958.47X - 160,611.4	2-1000	0.9997	1.89
11	磺胺对甲氧嘧啶	sulfameter	6.718	Y = 17,082.43X - 45,999.01	2-200	0.9995	0.86
12	磺胺甲噻二唑	sulfamethizole	6.447	Y = 11,279.76X - 31,676.06	2-200	0.9997	1.42
13	磺胺甲氧吡嗪	sulfamethoxypridazine	6.421	Y = 20,575.30X - 54,257.47	2-500	0.9999	0.92
14	磺胺恶唑	sulfamoxol	6.071	Y = 3,187.514X - 3.361974	2-200	0.9983	1.87
15	磺胺吡啶	sulfapyridine	5.039	Y = 7,043.918X - 89,945.16	10-1000	0.9999	5.06
16	磺胺噻唑	sulfathiazole	4.581	Y = 10,253.37X - 164,776.6	5-1000	0.9993	4.21

6.4.2 校准曲线

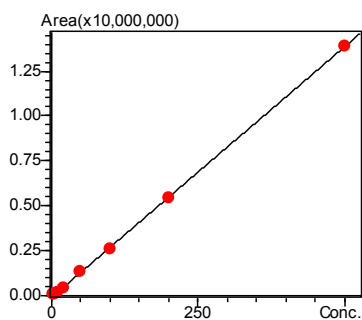
磺胺甲恶唑 SMZ



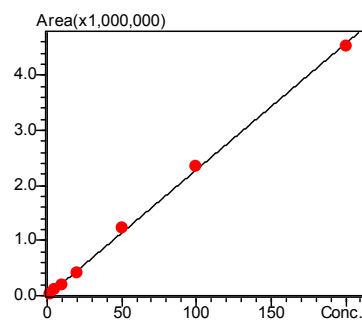
磺胺间甲氧钠 SMM



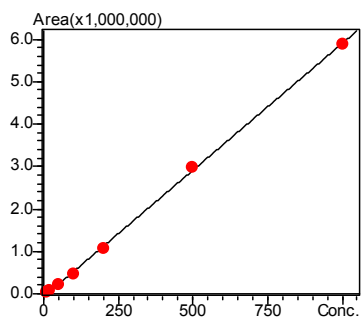
磺胺二甲基嘧啶 SM2



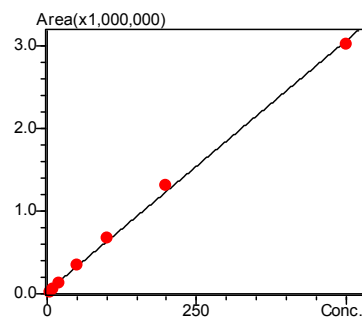
磺胺间二甲氧 (磺胺地索辛) SDM



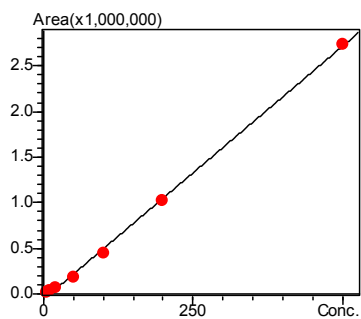
磺胺喹恶啉 SQX



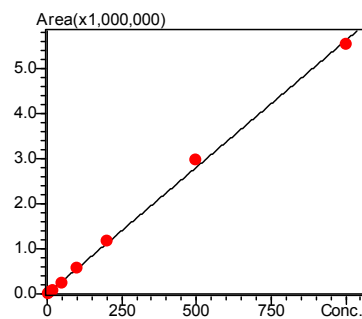
苯酰磺胺



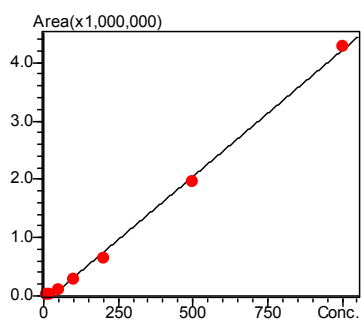
磺氯哒嗪



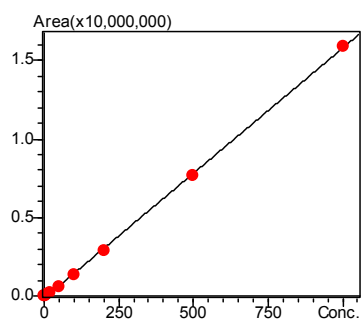
磺胺醋酰



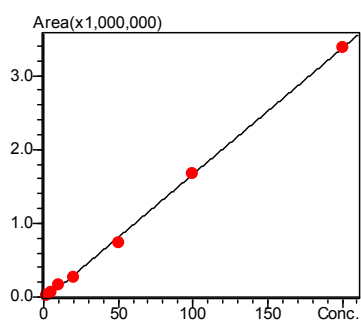
磺胺嘧啶



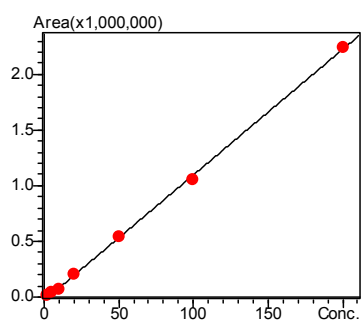
磺胺甲基嘧啶



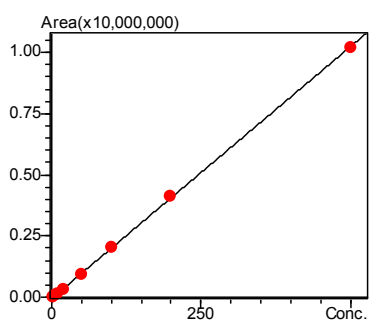
磺胺对甲氧嘧啶



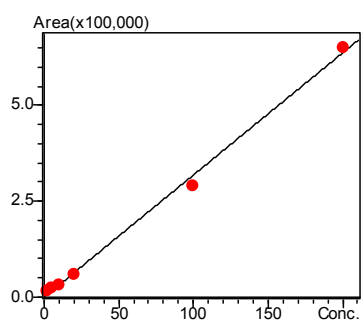
磺胺甲噻二唑



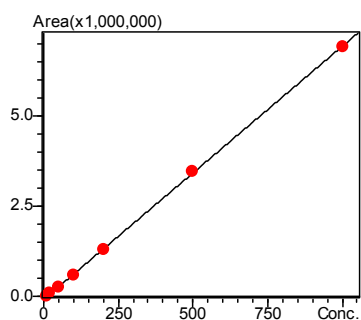
磺胺甲氧哒嗪



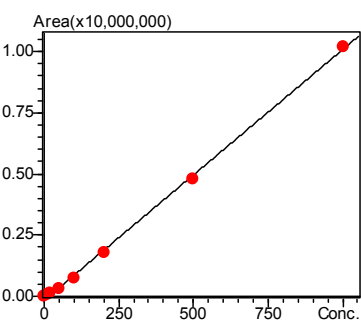
磺胺二甲唑



磺胺吡啶



磺胺噻唑



7. 喹诺酮类

7.1 样品信息

喹诺酮类样品共 14 种 (如表 1-7-1 所示), 浓度均为 1000 $\mu\text{g/mL}$ 左右, 溶剂为甲醇, 配制得到 1 $\mu\text{g/mL}$ 的标样, 进行多级质谱检测。将 1 $\mu\text{g/mL}$ 的标样用甲醇逐级稀释, 配得 500、200、100、50、20、10、5、2 $\mu\text{g/L}$ 的稀释液, 制作校准曲线。

表 1-7-1. 喹诺酮类样品信息

No.	中文名称	英文名称	分子式	检测离子	理论值 m/z
1	甲磺酸达氟沙星	Danofloxacin mesylate	$\text{C}_{20}\text{H}_{24}\text{FN}_3\text{O}_6\text{S}$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	358.1925
2	司帕沙星	Sparfloxacin	$\text{C}_{19}\text{H}_{22}\text{F}_2\text{N}_4\text{O}_3$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	393.1733
3	二氟沙星	Difloxacin hydrochloride	$\text{C}_{21}\text{H}_{19}\text{F}_2\text{N}_3\text{O}_3 \cdot \text{HCl}$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	400.1467
4	培氟沙星	Pefloxacin methane sulfonate	$\text{C}_{17}\text{H}_{20}\text{FN}_3\text{O}_3$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	334.1561
5	恩诺沙星	Enrofloxacin	$\text{C}_{19}\text{H}_{22}\text{FN}_3\text{O}_3$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	360.1718
6	氧氟沙星	Ofloxacin	$\text{C}_{18}\text{H}_{20}\text{FN}_3\text{O}_4$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	362.1511
7	环氧氟沙星	Orbifloxacin	$\text{C}_{19}\text{H}_{20}\text{F}_3\text{N}_3\text{O}_3$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	396.1530
8	麻保沙星	Marbofloxacin	$\text{C}_{17}\text{H}_{19}\text{FN}_4\text{O}_4$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	363.1416
9	环丙沙星	Ciprofloxacin hydrochloride	$\text{C}_{17}\text{H}_{18}\text{FN}_3\text{O}_3 \cdot \text{HCl}$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	332.1405
10	沙拉沙星	Sarafloxacin hydrochloride	$\text{C}_{20}\text{H}_{17}\text{F}_2\text{N}_3\text{O}_3 \cdot \text{HCl}$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	386.1311
11	氟甲喹	Flumequine	$\text{C}_{14}\text{H}_{12}\text{FNO}_3$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	262.0874
12	吡喹酮	Praziquantel	$\text{C}_{19}\text{H}_{24}\text{N}_2\text{O}_2$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	313.1911
13	恶喹酸	Oxolinic acid	$\text{C}_{13}\text{H}_{11}\text{NO}_5$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	262.0710
14	洛美沙星盐酸盐	Lomefloxacin, Hydrochloride	$\text{C}_{17}\text{H}_{19}\text{F}_2\text{N}_3\text{O}_3 \cdot \text{HCl}$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	352.1467

7.2 分析条件

7.2.1 液相条件

流动相: A 相-5 mM 醋酸铵-0.1%甲酸水溶液; B 相-乙腈

色谱柱: Shimadzu Shim-pack XR-ODS II (2.0 mm \times 100 mm, 2.2 μm)

流速: 0.2 mL/min

柱温: 40 $^{\circ}\text{C}$

进样体积: 20 μL

洗脱方式: 梯度洗脱

LC 时间程序:

表 1-7-2. 梯度洗脱时间程序

Time(min)	Module	Action	Value(%)
0.01	Pumps	B.Conc	10
8.00	Pumps	B.Conc	40
11.00	Pumps	B.Conc	30
11.10	Pumps	B.Conc	10
15.00	Controller	Stop	

7.2.2 质谱条件

离子源: ESI, 正离子扫描

扫描范围: MS^1 : m/z 150-500

加热模块温度: 200 $^{\circ}\text{C}$

脱溶剂管温度: 200℃
 雾化气流速: 1.5 L/min
 干燥气流速: 10 L/min
 离子源电压: 4.5 kV
 检测器电压: 1.70 kV
 离子累积时间: 10 ms
 校准方法: 自动调谐优化电压, 外标法校准质量数。

7.3 EIC 图

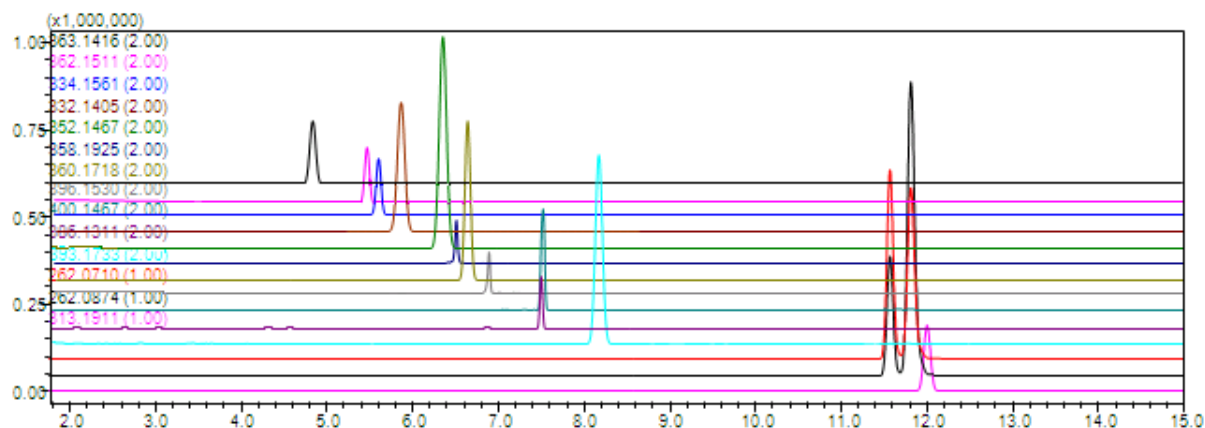


图 1-7. 正离子模式下喹诺酮类样品的提取离子流图 (50 µg/L)

7.4 校准曲线

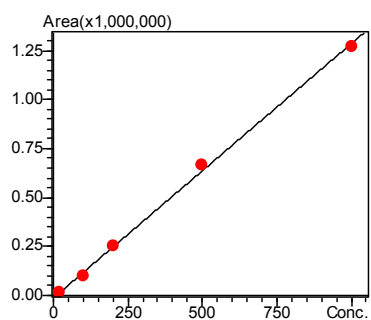
7.4.1 标样校准曲线信息

表 1-7-3. 喹诺酮类标样校准曲线信息

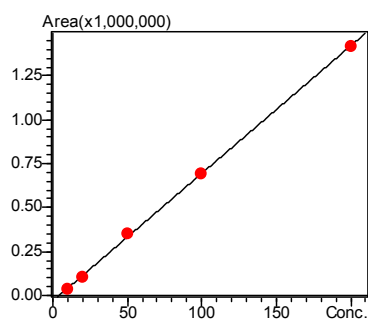
No.	中文名称	英文名称	保留时间 (min)	线性方程	线性范围 (µg/L)	相关系数 r	定量限 (µg/L)
1	甲磺酸达氟沙星	Danofloxacin mesylate	6.488	$Y = 1,297.013X - 11,735.90$	20-1000	0.9993	10.56
2	司帕沙星	Sparfloxacin	8.193	$Y = 7,255.748X - 31,043.66$	10-200	0.9998	4.28
3	二氟沙星	Difloxacin hydrochloride	7.503	$Y = 1,855.297X - 34,468.01$	50-1000	0.9992	11.37
4	培氟沙星	Pefloxacin methane sulfonate	5.590	$Y = 2,953.583X - 45,448.12$	20-1000	0.9991	10.77
5	恩诺沙星	Enrofloxacin	6.623	$Y = 4,521.182X - 47,406.59$	20-500	0.9999	8.98
6	氧氟沙星	Ofloxacin	5.457	$Y = 1,191.411X - 47,138.92$	50-1000	0.9998	20.37
7	环氧氟沙星	Orbifloxacin	6.913	$Y = 836.4078X - 21,392.87$	50-1000	0.9990	20.09
8	麻保沙星	Marbofloxacin	4.802	$Y = 1,562.165X - 78,716.49$	50-1000	0.9993	32.64
9	环丙沙星	Ciprofloxacin hydrochloride	5.878	$Y = 3,321.588X - 71,822.76$	20-500	0.9990	15.71
10	沙拉沙星	Sarafloxacin hydrochloride	7.532	$Y = 1,358.597X - 14,821.50$	50-1000	0.9992	17.65
11	氟甲喹	Flumequine	11.830	$Y = 43,655.91X - 5,443.207$	2-20	0.9989	1.42
12	吡喹酮	Praziqua ntel	12.017	$Y = 1,984.602X + 54,377.74$	10-500	0.9998	2.23
13	恶喹酸	Oxolinic acid	11.582	$Y = 7,483.181X + 15,798.30$	2-200	0.9992	1.29
14	洛美沙星盐酸盐	Lomefloxacin, Hydrochloride	6.347	$Y = 6,760.800X - 17,981.46$	10-500	0.9992	5.74

7.4.2 校准曲线

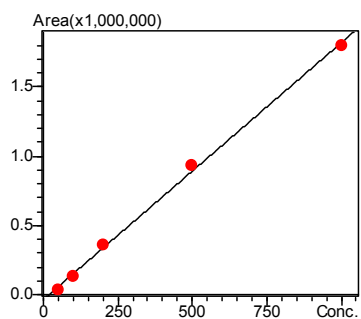
甲磺酸达氟沙星



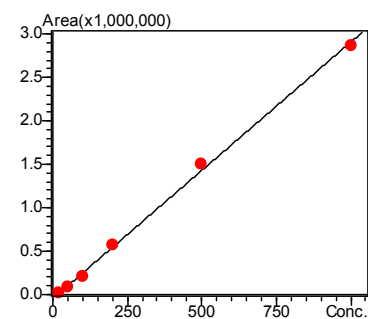
司帕沙星



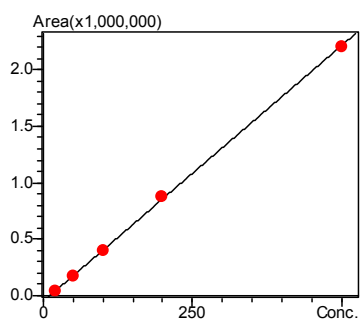
二氟沙星



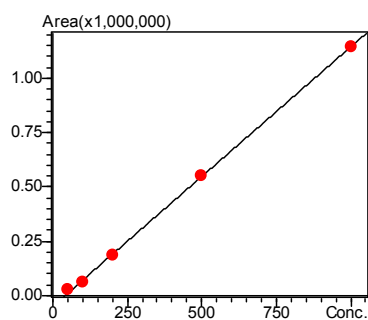
培氟沙星



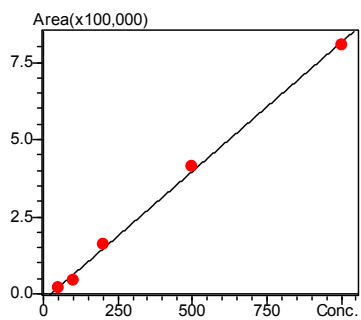
恩诺沙星



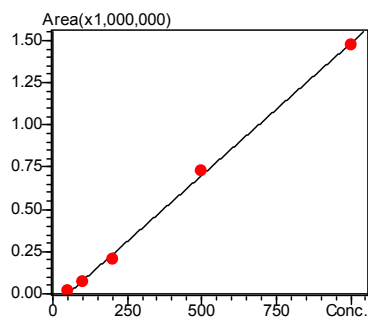
氧氟沙星



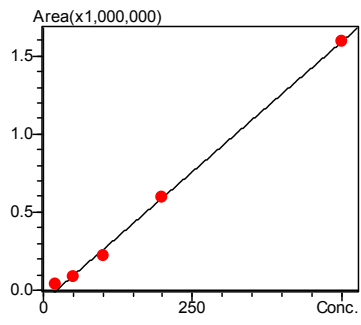
环氧氟沙星



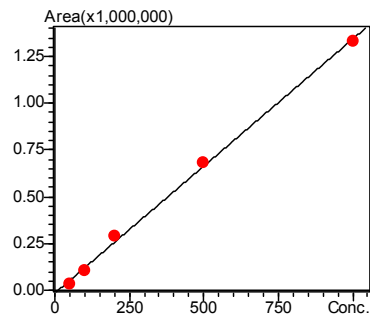
麻保沙星



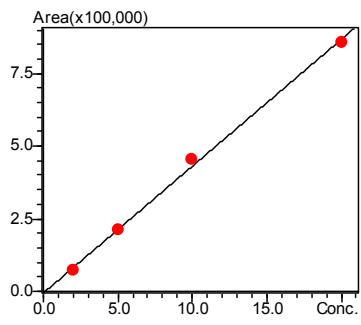
环丙沙星



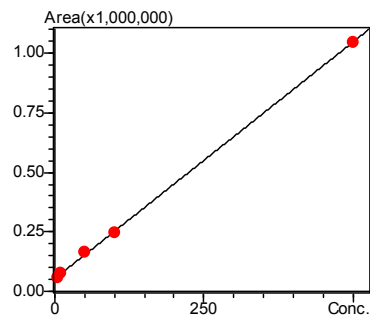
沙拉沙星



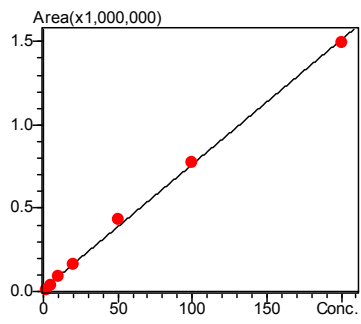
氟甲喹



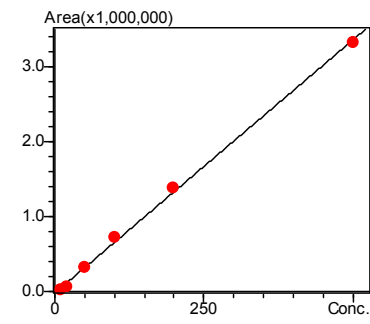
吡喹酮



恶喹酸



洛美沙星盐酸盐



8. 阿维菌素类

8.1 样品信息

阿维菌素样品共 4 种（如表 1-8-1 所示），浓度均为 1000 $\mu\text{g/mL}$ 左右，溶剂为甲醇，配制得到 1 $\mu\text{g/mL}$ 的标样，进行多级质谱检测。将 1 $\mu\text{g/mL}$ 的标样用甲醇逐级稀释，配得 500、200、100、50、20、10、5、2 $\mu\text{g/L}$ 的稀释液，制作校准曲线。

表 1-8-1. 阿维菌素类样品信息

No.	中文名称	英文名称	分子式	检测离子	理论值 m/z
1	依维菌素	Ivermectine	$\text{C}_{48}\text{H}_{74}\text{O}_{14}$	$[\text{M}+\text{Na}]^+$	897.4971
2	阿维菌素	Abamectin	$\text{C}_{48}\text{H}_{72}\text{O}_{14}$	$[\text{M}+\text{Na}]^+$	895.4814
3	多拉菌素	Doramectin	$\text{C}_{50}\text{H}_{74}\text{O}_{14}$	$[\text{M}+\text{Na}]^+$	921.4971
4	爱普瑞菌素	Eprinomectin	$\text{C}_{50}\text{H}_{75}\text{NO}_{14}$	$[\text{M}+\text{Na}]^+$	936.5080

8.2 分析条件

8.2.1 液相条件

流动相：0.2%甲酸水溶液/乙腈 = 5/95，(V/V)
色谱柱：Shimadzu Shim-pack XR-ODS II (2.0 mm \times 100 mm, 2.2 μm)
流速：0.2 mL/min
柱温：40 $^{\circ}\text{C}$
进样体积：20 μL
洗脱方式：等度洗脱

8.2.2 质谱条件

离子源：ESI，正离子扫描
扫描范围： MS^1 ：m/z 700-1000
加热模块温度：200 $^{\circ}\text{C}$
脱溶剂管温度：200 $^{\circ}\text{C}$
雾化气流速：1.5 L/min
干燥气流速：10 L/min
离子源电压：4.5 kV
检测器电压：1.70 kV
离子累积时间：10 ms
校准方法：自动调谐优化电压，外标法校准质量数。

8.3 EIC 图

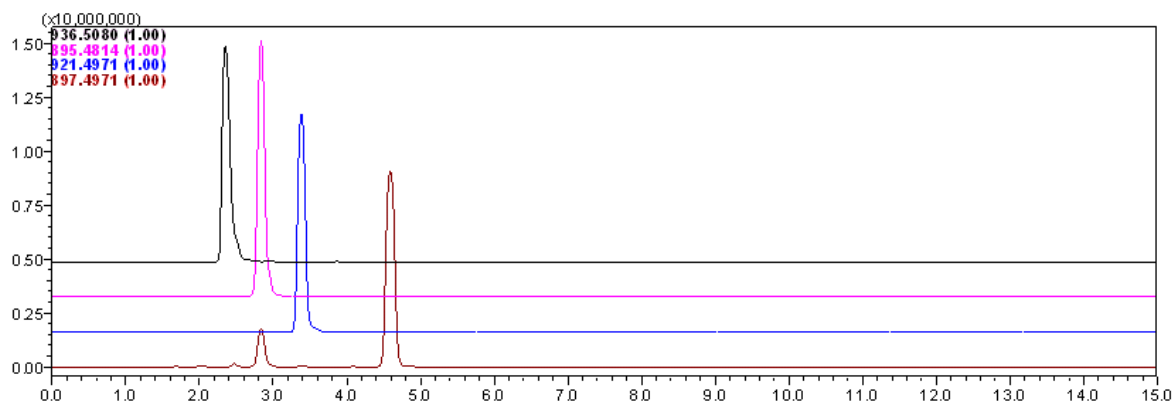


图 1-8. 正离子模式下阿维菌素类样品的提取离子流图 (50 $\mu\text{g/L}$)

8.4 标准曲线

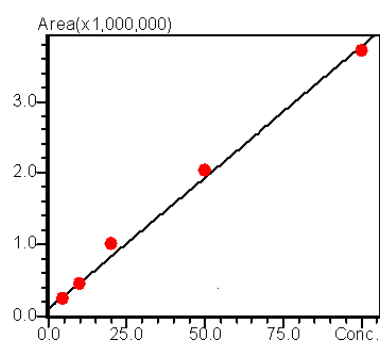
8.4.1 标样校准曲线信息

表 1-8-2. 阿维菌素类标样校准曲线信息

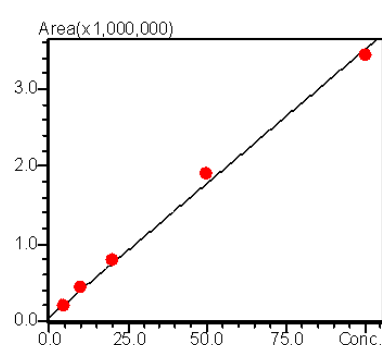
No.	中文名称	英文名称	保留时间 (min)	线性方程	线性范围 ($\mu\text{g/L}$)	相关系数 r	定量限 ($\mu\text{g/L}$)
1	依维菌素	Ivermectine	4.604	$Y = 36,835.08X + 93,876.52$	5-100	0.9954	4.82
2	阿维菌素	abamectin	2.847	$Y = 34,576.87X + 53,121.91$	5-100	0.9970	3.36
3	多拉菌素	Doramectin	3.391	$Y = 24,103.86X + 16,313.54$	5-100	0.9982	4.54
4	爱普瑞菌素	Eprinomectin	2.363	$Y = 60,315.66X + 96,410.79$	2-200	0.9996	1.86

8.4.2 校准曲线

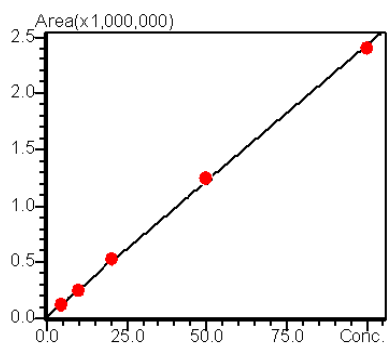
依维菌素



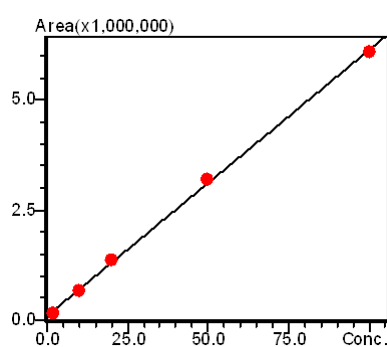
阿维菌素



多拉菌素



爱普瑞菌素



9. 硝基咪唑类

9.1 样品信息

硝基咪唑类样品共 4 种（如表 1-9-1 所示），浓度均为 1000 $\mu\text{g/mL}$ 左右，溶剂为甲醇，配制得到 1 $\mu\text{g/mL}$ 的标样，进行多级质谱检测。将 1 $\mu\text{g/mL}$ 的标样用甲醇逐级稀释，配得 500、200、100、50、20、10、5、2 $\mu\text{g/L}$ 的稀释液，制作校准曲线。

表 1-9-1. 硝基咪唑类样品信息

No.	中文名称	英文名称	分子式	检测离子	理论值 m/z
1	羟甲基硝唑	Metronidazole-OH	$\text{C}_6\text{H}_9\text{N}_3\text{O}_4$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	188.0666
2	甲硝达唑	Metronidazole	$\text{C}_6\text{H}_9\text{N}_3\text{O}_3$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	172.0717
3	洛硝达唑	Ronidazole	$\text{C}_6\text{H}_8\text{N}_4\text{O}_4$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	201.0618
4	二甲硝达唑	dimetridazole	$\text{C}_5\text{H}_7\text{N}_3\text{O}_2$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	142.0611

9.2 分析条件

9.2.1 液相条件

流动相：A 相-0.2%甲酸水溶液；B 相-乙腈
色谱柱：Shimadzu Shim-pack XR-ODS II (2.0 mm \times 100 mm, 2.2 μm)
流速：0.2 mL/min
柱温：40 $^\circ\text{C}$
进样体积：20 μL
洗脱方式：梯度洗脱
LC 时间程序：

表 1-9-2. 梯度洗脱时间程序

Time(min)	Module	Action	Value(%)
0.01	Pumps	B.Conc	10
9.00	Pumps	B.Conc	30
9.50	Pumps	B.Conc	100
10.50	Pumps	B.Conc	100
11.00	Pumps	B.Conc	10
15.00	Controller	Stop	

9.2.2 质谱条件

离子源：ESI，负离子扫描
扫描范围： MS^1 ：m/z 100-300
加热模块温度：200 $^\circ\text{C}$
脱溶剂管温度：200 $^\circ\text{C}$
雾化气流速：1.5 L/min
干燥气流速：10 L/min
离子源电压：-3.5 kV
检测器电压：1.70 kV
离子累积时间：10 ms
校准方法：自动调谐优化电压，外标法校准质量数。

9.3 EIC 图

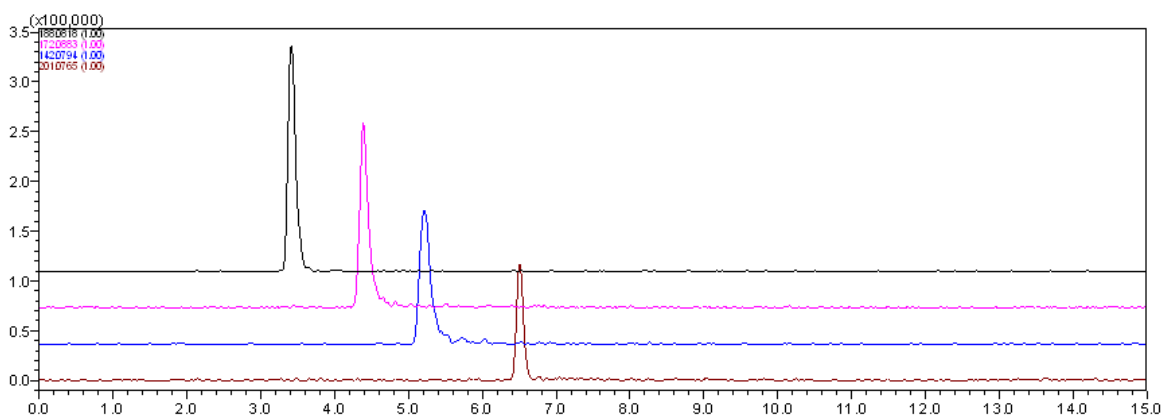


图 1-9. 正离子模式下硝基咪唑类样品的提取离子流图 (100 µg/L)

9.4 标准曲线

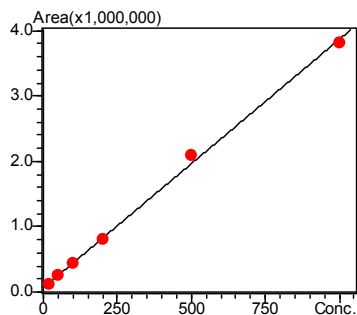
9.4.1 标样校准曲线信息及浓度范围

表 1-9-3. 硝基咪唑类标样校准曲线信息

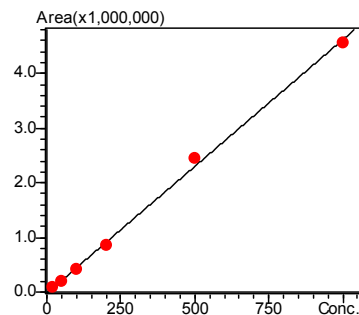
No.	中文名称	英文名称	保留时间 (min)	线性方程	线性范围 (µg/L)	相关系数 r	定量限 (µg/L)
1	羟甲基硝唑	Metronidazole-OH	3.421	$Y = 3,806.439X + 63,666.25$	20-1000	0.9991	16.24
2	甲硝达唑	Metronidazole	4.398	$Y = 4,640.555X - 18,023.19$	20-1000	0.9991	11.42
3	洛硝达唑	Ronidazole	6.520	$Y = 1,959.966X - 20,040.00$	20-1000	0.9991	10.43
4	二甲硝达唑	dimetridazole	5.224	$Y = 3,198.165X - 9,971.708$	20-1000	0.9998	12.89

9.4.2 校准曲线

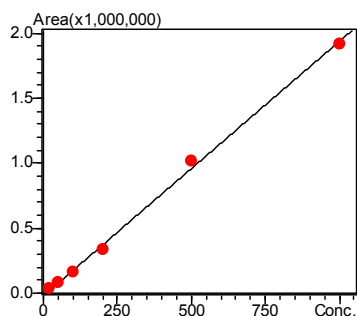
羟甲基硝唑



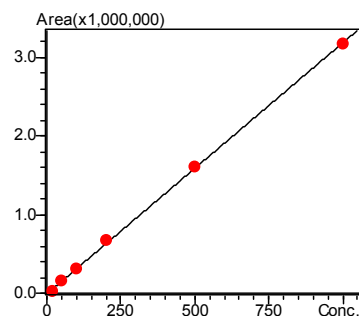
甲硝达唑



洛硝达唑



二甲硝达唑



10. 苏丹红类

10.1 样品信息

苏丹红类样品共 4 种（如表 1-10-1 所示），浓度均为 1000 $\mu\text{g/mL}$ 左右，溶剂为甲醇，配制得到 1 $\mu\text{g/mL}$ 的标样，进行多级质谱检测。将 1 $\mu\text{g/mL}$ 的标样用甲醇逐级稀释，配得 500、200、100、50、20、10、5 $\mu\text{g/L}$ 的稀释液，制作校准曲线。

表 1-10-1. 苏丹红类样品信息

No.	中文名称	英文名称	分子式	检测离子	理论值 m/z
1	苏丹红 1	Sudan 1	$\text{C}_{16}\text{H}_{12}\text{N}_2\text{O}$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	249.1022
2	苏丹红 2	Sudan 2	$\text{C}_{12}\text{H}_{17}\text{N}_3\text{O}$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	277.1335
3	苏丹红 3	Sudan 3	$\text{C}_{22}\text{H}_{16}\text{N}_4\text{O}$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	353.1397
4	苏丹红 4	Sudan 4	$\text{C}_{24}\text{H}_{20}\text{N}_4\text{O}$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	381.1710

10.2 分析条件

10.2.1 液相条件

流动相：A 相-5 mM 醋酸铵-0.1%甲酸水溶液；B 相-乙腈
色谱柱：Shimadzu Shim-pack XR-ODS II (2.0 mm \times 100 mm, 2.2 μm)
流速：0.2 mL/min
柱温：40 $^{\circ}\text{C}$
进样体积：20 μL
洗脱方式：梯度洗脱
LC 时间程序：

表 1-10-2. 梯度洗脱时间程序

Time(min)	Module	Action	Value(%)
0.01	Pumps	B.Conc	75
5.00	Pumps	B.Conc	100
12.00	Pumps	B.Conc	100
15.00	Pumps	B.Conc	100
15.10	Pumps	B.Conc	75
20.00	Controller	Stop	

10.2.2 质谱条件

离子源：ESI，正离子扫描
扫描范围： MS^1 ：m/z 200-400
加热模块温度：200 $^{\circ}\text{C}$
脱溶剂管温度：200 $^{\circ}\text{C}$
雾化气流速：1.5 L/min
干燥气流速：10 L/min
离子源电压：4.5 kV
检测器电压：1.70 kV
离子累积时间：10 ms
校准方法：自动调谐优化电压，外标法校准质量数。

10.3 EIC 图

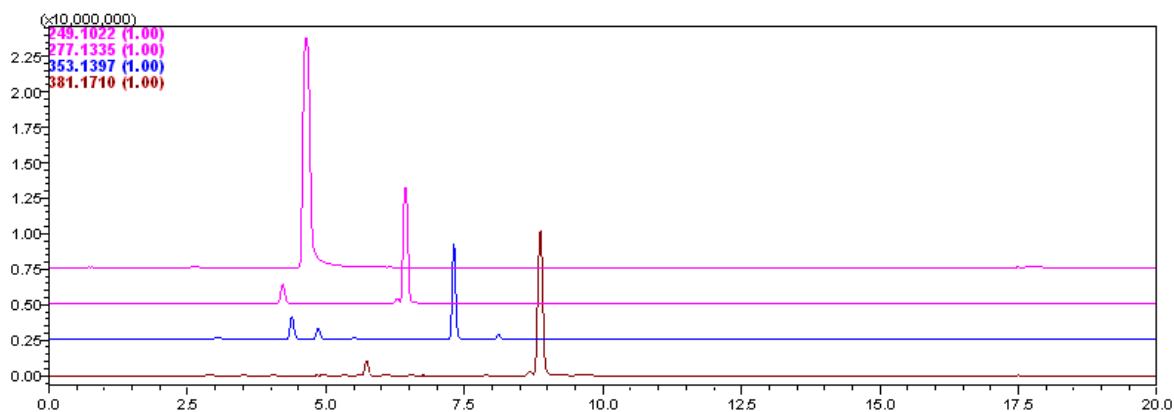


图 1-10. 正离子模式下苏丹红类样品的提取离子流图 (50 µg/L)

10.4 标准曲线

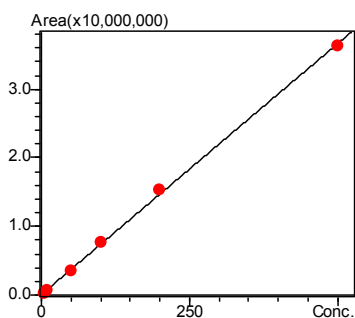
10.4.1 标样校准曲线信息

表 1-10-3. 苏丹红类标样校准曲线信息

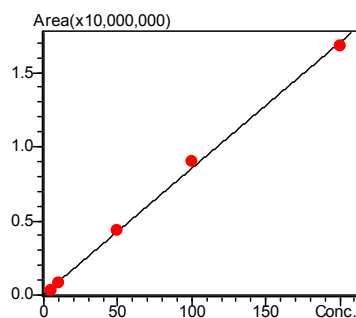
No.	中文名称	英文名称	保留时间 (min)	线性方程	线性范围 (µg/L)	相关系数 r	定量限 (µg/L)
1	苏丹红 1	Sudan 1	3.985	$Y = 73,018.73X + 90,111.41$	5-500	0.9996	2.39
2	苏丹红 2	Sudan 2	5.708	$Y = 84,802.74X + 64,358.72$	5-200	0.9993	4.55
3	苏丹红 3	Sudan 3	6.617	$Y = 166,828.6X + 833,555.1$	1-500	0.9992	0.67
4	苏丹红 4	Sudan 4	8.045	$Y = 252,545.5X - 560,482.2$	1-100	0.9994	0.49

10.4.2 校准曲线

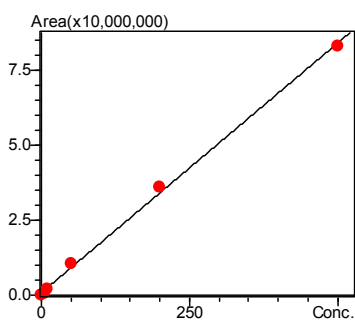
苏丹红 1



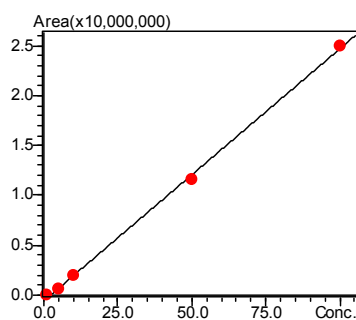
苏丹红 2



苏丹红 3



苏丹红 4



11. 镇静剂类

11.1 样品信息

镇静剂类样品共 4 种（如表 1-11-1 所示），浓度均为 1000 $\mu\text{g/mL}$ 左右，溶剂为甲醇，配制得到 1 $\mu\text{g/mL}$ 的标样，进行多级质谱检测。将 1 $\mu\text{g/mL}$ 的标样用甲醇逐级稀释，配得 500、200、100、50、20、10、5 $\mu\text{g/L}$ 的稀释液，制作校准曲线。

表 1-11-1. 镇静剂类样品信息

No.	中文名称	英文名称	分子式	检测离子	理论值 m/z
1	氯丙嗪	Chlorpromazine	$\text{C}_{17}\text{H}_{19}\text{ClN}_2\text{S}$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	319.1030
2	氯丙嗪-D6	Chlorpromazine-D6	$\text{C}_{17}\text{H}_{13}\text{D}_6\text{ClN}_2\text{S}$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	325.1500
3	氯羟吡啶	clopidol	$\text{C}_7\text{H}_7\text{Cl}_2\text{NO}$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	191.9977
4	地西洋	Diazepam	$\text{C}_{16}\text{H}_{13}\text{ClN}_2\text{O}$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	285.0789

11.2 分析条件

11.2.1 液相条件

流动相：A 相-5 mM 醋酸铵水溶液；B 相-乙腈

色谱柱：Shimadzu Shim-pack XR-ODS II (2.0 mm \times 100 mm, 2.2 μm)

流速：0.2 mL/min

柱温：40 $^{\circ}\text{C}$

进样体积：20 μL

洗脱方式：梯度洗脱

LC 时间程序：

表 1-11-2. 梯度洗脱时间程序

Time(min)	Module	Action	Value(%)
0.01	Pumps	B.Conc	50
5.00	Pumps	B.Conc	90
9.00	Pumps	B.Conc	90
10.00	Pumps	B.Conc	50
15.00	Controller	Stop	

11.2.2 质谱条件

离子源：ESI, 正离子扫描

扫描范围： MS^1 : m/z 150-400

加热模块温度：200 $^{\circ}\text{C}$

脱溶剂管温度：200 $^{\circ}\text{C}$

雾化气流速：1.5 L/min

干燥气流速：10 L/min

离子源电压：4.5 kV

检测器电压：1.70 kV

离子累积时间：10 ms

校准方法：自动调谐优化电压，外标法校准质量数。

11.3 EIC 图

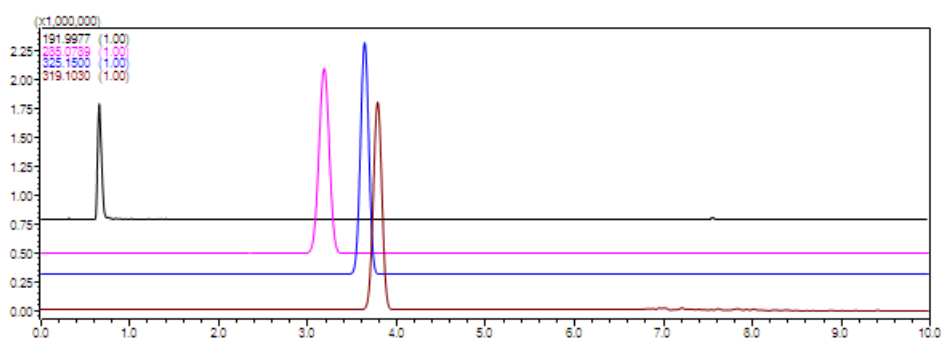


图 1-11. 正离子模式下镇静剂类样品的提取离子流图 (20 μg/L)

11.4 标准曲线

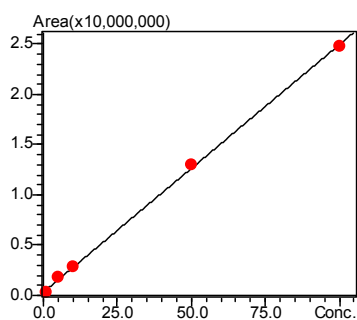
11.4.1 标样校准曲线信息

表 1-11-3. 镇静剂类标样校准曲线信息

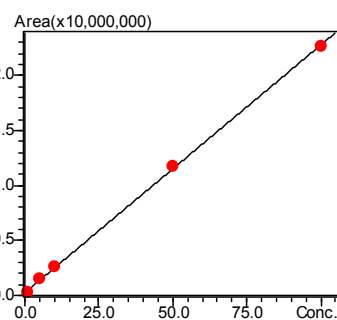
No.	中文名称	英文名称	保留时间 (min)	线性方程	线性范围 (μg/L)	相关系数 r	定量限 (μg/L)
1	氯丙嗪	Chlorpromazine	3.801	$Y = 245,456.8X + 403,070.6$	1-100	0.9997	0.87
2	氯丙嗪-D6	Chlorpromazine-D6	3.627	$Y = 224,268.6X + 330,628.8$	1-100	0.9998	1.00
3	氯羟吡啶	clodipol	0.633	$Y = 49,615.02X + 407,945.8$	5-200	0.9982	2.40
4	地西洋	Diazepam	3.194	$Y = 550,370.3X + 262,495.9$	1-20	0.9998	0.44

11.4.2 校准曲线

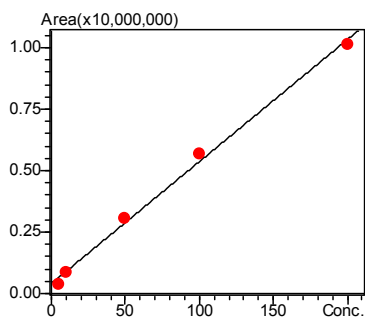
氯丙嗪



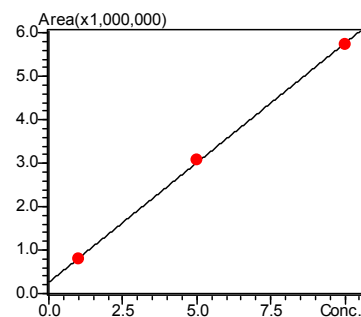
氯丙嗪-D6



氯羟吡啶



地西洋



12. 喹恶啉类

12.1 样品信息

喹恶啉类样品共 6 种（如表 1-12-1 所示），浓度均为 1000 $\mu\text{g/mL}$ 左右，溶剂为甲醇，配制得到 1 $\mu\text{g/mL}$ 的标样，进行多级质谱检测。将 1 $\mu\text{g/mL}$ 的标样用甲醇逐级稀释，配得 500、200、100、50、20、10、5 $\mu\text{g/L}$ 的稀释液，制作校准曲线。

表 1-12-1. 喹恶啉类样品信息

No.	中文名称	英文名称	分子式	检测离子	理论值 m/z
1	卡巴氧	carbadox	$\text{C}_{11}\text{H}_{10}\text{N}_4\text{O}_4$	$[\text{M}+\text{Na}]^+$	285.0594
2	喹乙醇	Olaquinox	$\text{C}_{12}\text{H}_{13}\text{N}_3\text{O}_4$	$[\text{M}+\text{Na}]^+$	286.0798
3	MQCA	Quinoxaline-2-carboxylic acid methyl	$\text{C}_{10}\text{H}_8\text{N}_2\text{O}_2$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	189.0659
4	QCA	2-Quinoxaline-carboxylic acid	$\text{C}_9\text{H}_6\text{N}_4\text{O}_2$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	175.0502
5	MQCA-D4	Quinoxaline-2-carboxylic acid methyl ester-D4	$\text{C}_{10}\text{H}_4\text{D}_4\text{N}_2\text{O}_2$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	193.0972
6	QCA-D4	Quinoxaline-2-carboxylic acid-D4	$\text{C}_9\text{H}_2\text{D}_4\text{N}_4\text{O}_2$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	179.0815

12.2 分析条件

12.2.1 液相条件

流动相：A 相-0.2%甲酸水溶液；B 相-乙腈

色谱柱：Shimadzu Shim-pack XR-ODS II（2.0 mm \times 100 mm，2.2 μm ）

流速：0.2 mL/min

柱温：40 $^{\circ}\text{C}$

进样体积：20 μL

洗脱方式：梯度洗脱

LC 时间程序：

表 1-12-2. 梯度洗脱时间程序

Time(min)	Module	Action	Value(%)
0.01	Pumps	B.Conc	20
10.00	Pumps	B.Conc	60
10.10	Pumps	B.Conc	20
15.00	Controller	Stop	

12.2.2 质谱条件

离子源：ESI，正离子扫描

扫描范围：MS1: m/z 150-300

加热模块温度：200 $^{\circ}\text{C}$

脱溶剂管温度：200 $^{\circ}\text{C}$

雾化气流速：1.5 L/min

干燥气流速：10 L/min

离子源电压：4.5 kV

检测器电压：1.70 kV

离子累积时间：10 ms

校准方法：自动调谐优化电压，外标法校准质量数。

12.3 EIC 图

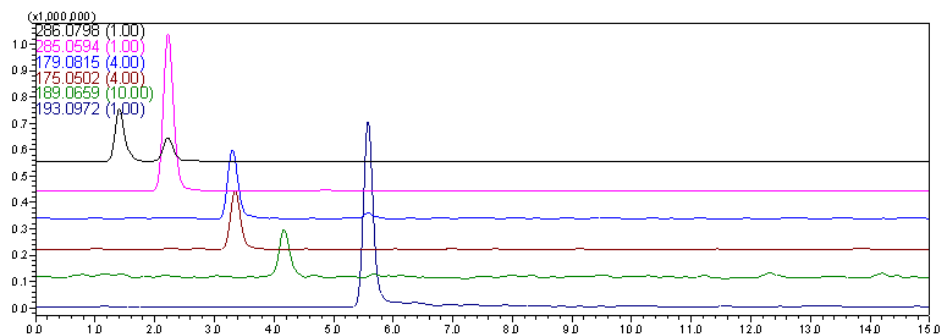


图 1-12. 正离子模式下喹恶啉类样品的提取离子流图 (20 μg/L)

12.4 标准曲线

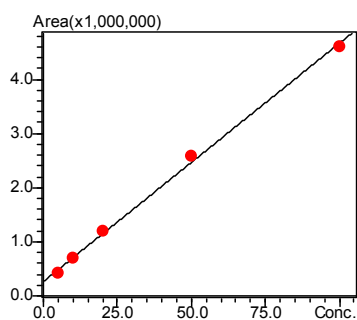
12.4.1 标样校准曲线信息

表 1-12-3. 喹恶啉类标样校准曲线信息

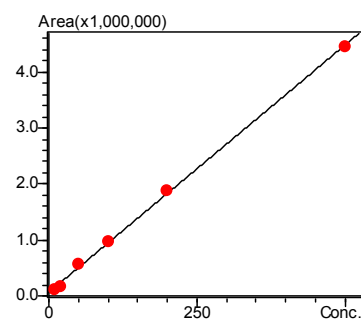
No.	中文名称	英文名称	保留时间 (min)	线性方程	线性范围 (μg/L)	相关系数 r	定量限 (μg/L)
1	卡巴氧	carbadox	2.161	$Y = 43,981.23X + 266,074.9$	5-100	0.9989	3.39
2	喹乙醇	Olaquinox	1.354	$Y = 8,831.640X + 63,884.66$	10-500	0.9994	7.48
3	MQCA	Quinoxaline-2-carboxylic acid methyl	4.130	$Y = 496.5350X - 10,978.00$	100-1000	0.9998	66.21
4	QCA	2-Quinoxaline-carboxylic acid	3.298	$Y = 3,078.405X + 5,384.478$	50-1000	0.9996	30.45
5	MQCA-D4	Quinoxaline-2-carboxylic acid methyl ester-D4	5.544	$Y = 22,959.32X + 148,078.6$	5-500	0.9991	4.22
6	QCA-D4	Quinoxaline-2-carboxylic acid-D4	3.351	$Y = 3,526.026X + 45,470.84$	50-1000	0.9992	41.58

12.4.2 校准曲线

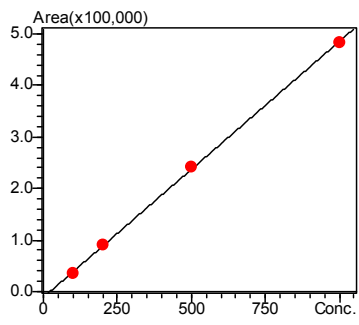
卡巴氧



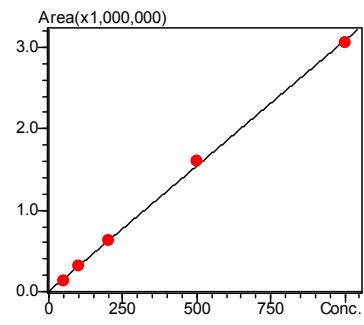
喹乙醇



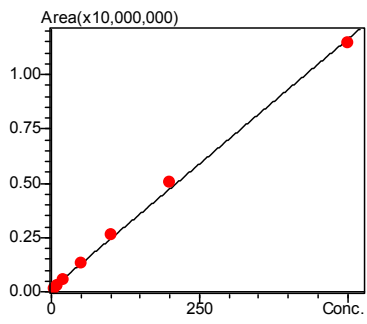
MQCA



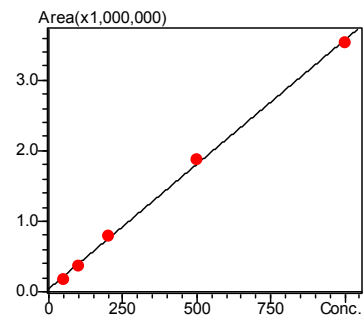
QCA



MQCA-D4



QCA-D4



13. 大环内酯类

13.1 样品信息

大环内酯类样品共 5 种（如表 1-13-1 所示），浓度均为 1000 $\mu\text{g/mL}$ 左右，溶剂为甲醇，配制得到 1 $\mu\text{g/mL}$ 的标样，进行多级质谱检测。将 1 $\mu\text{g/mL}$ 的标样用甲醇逐级稀释，配得 500、200、100、50、20、10、5、2、1 $\mu\text{g/L}$ 的稀释液，制作校准曲线。

表 1-13-1. 大环内酯类样品信息

No.	中文名称	英文名称	分子式	检测离子	理论值 m/z
1	替米考星	Tilmicosin	$\text{C}_{46}\text{H}_{80}\text{N}_2\text{O}_{13}$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	869.5733
2	红霉素	Erythromycin	$\text{C}_{37}\text{H}_{67}\text{NO}_{13}$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	734.4685
3	泰乐菌素	Tylosin	$\text{C}_{46}\text{H}_{77}\text{NO}_{17}$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	916.5264
4	罗红霉素	Roxithromycin	$\text{C}_{41}\text{H}_{76}\text{N}_2\text{O}_{15}$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	837.5318
5	交沙霉素	Josamycin	$\text{C}_{42}\text{H}_{69}\text{NO}_{15}$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	828.474

13.2 分析条件

13.2.1 液相条件

流动相：A 相-0.1%甲酸水溶液；B 相-乙腈

色谱柱：Shimadzu Shim-pack XR-ODS II（2.0 mm \times 150 mm，2.2 μm ）

流速：0.2 mL/min

柱温：40 $^{\circ}\text{C}$

进样体积：20 μL

洗脱方式：梯度洗脱

LC 时间程序：

表 1-13-2. 梯度洗脱时间程序

Time(min)	Module	Action	Value(%)
0.01	Pumps	B.Conc	15
4.00	Pumps	B.Conc	40
4.50	Pumps	B.Conc	80
5.00	Pumps	B.Conc	80
5.51	Pumps	B.Conc	15
8.00	Controller	Stop	

13.2.2 质谱条件

离子源：ESI，正离子扫描

扫描范围： MS^1 ：m/z 700-1000

加热模块温度：200 $^{\circ}\text{C}$

脱溶剂管温度：200 $^{\circ}\text{C}$

雾化气流速：1.5 L/min

干燥气流速：10 L/min

离子源电压：4.5 kV

检测器电压：1.70 kV

离子累积时间：50 ms

校准方法：自动调谐优化电压，外标法校准质量数。

13.3 EIC 图

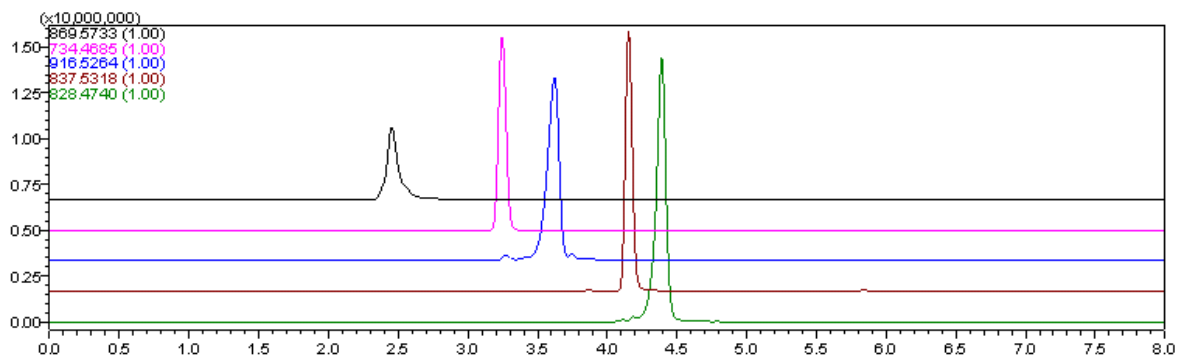


图 1-13. 正离子模式下大环内酯类样品的提取离子流图 (50 µg/L)

13.4 标准曲线

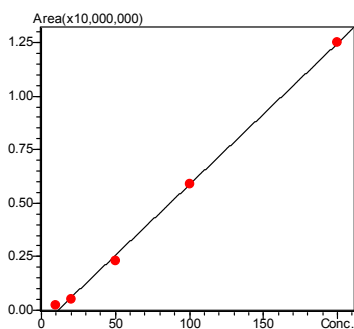
13.4.1 标样校准曲线信息

表 1-13-3. 大环内酯类标样校准曲线信息

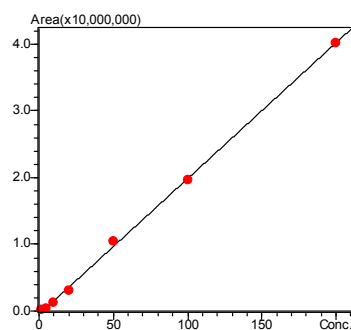
No.	中文名称	英文名称	保留时间 (min)	线性方程	线性范围 (µg/L)	相关系数 r	定量限 (µg/L)
1	替米考星	Tilmicosin	2.464	$Y = 65,932.02X - 726,032.1$	10-200	0.9991	5.59
2	红霉素	Erythromycin	3.254	$Y = 203,472.1X - 498,636.1$	2-200	0.9996	1.25
3	泰乐菌素	Tylosin	3.631	$Y = 400,020.5X - 207,063.8$	2-100	0.9997	1.23
4	罗红霉素	Roxithromycin	4.163	$Y = 325,014.4X - 661,759.5$	2-100	0.9995	1.23
5	交沙霉素	Josamycin	4.401	$Y = 412,556.9X - 303,083.0$	2-100	0.9998	1.16

13.4.2 校准曲线

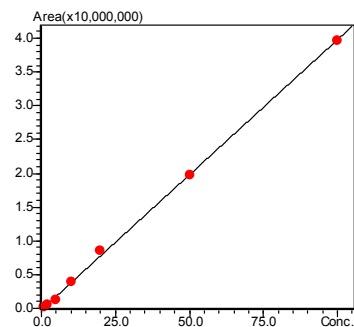
替米考星



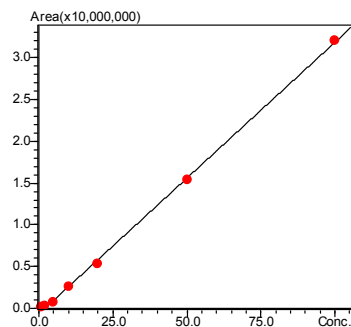
红霉素



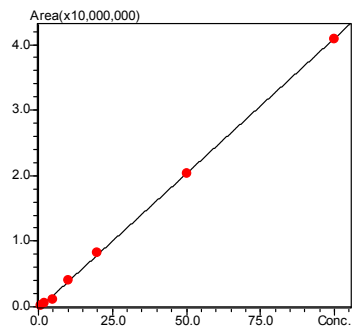
泰乐菌素



罗红霉素



交沙霉素



14. β -内酰胺类

14.1 样品信息

β -内酰胺类内酰胺类样品共 6 种（如表 1-14-1 所示），浓度均为 1000 $\mu\text{g/mL}$ 左右，溶剂为甲醇，配制得到 1 $\mu\text{g/mL}$ 的标样，进行多级质谱检测。将 1 $\mu\text{g/mL}$ 的标样用甲醇逐级稀释，配得 500、200、100、50、20、10、5、2、1 $\mu\text{g/L}$ 的稀释液，制作校准曲线。

表 1-14-1. β -内酰胺类样品信息

No.	中文名称	英文名称	分子式	检测离子	理论值 m/z
1	青霉素 G	Penicillin G	$\text{C}_{16}\text{H}_{18}\text{N}_2\text{O}_4\text{S}$	[M-H] ⁻	333.0915
2	青霉素 V	Penicillin V	$\text{C}_{16}\text{H}_{18}\text{N}_2\text{O}_5\text{S}$	[M-H] ⁻	349.0936
3	苯唑青霉素	Oxacillin	$\text{C}_{19}\text{H}_{19}\text{N}_3\text{O}_5\text{S}$	[M-H] ⁻	400.0973
4	邻氯青霉素	Cloxacillin	$\text{C}_{19}\text{H}_{18}\text{ClN}_3\text{O}_5\text{S}$	[M-H] ⁻	434.0583
5	乙氧萘青霉素	Nafcillin	$\text{C}_{21}\text{H}_{22}\text{N}_2\text{O}_5\text{S}$	[M-H] ⁻	413.1177
6	双氯青霉素	Dicloxacillin	$\text{C}_{19}\text{H}_{17}\text{Cl}_2\text{N}_3\text{O}_5\text{S}$	[M-H] ⁻	468.0193

14.2 分析条件

14.2.1 液相条件

流动相：A 相-水；B 相-乙腈

色谱柱：Shimadzu Shim-pack XR-ODS II（2.0 mm \times 150 mm，2.2 μm ）

流速：0.2 mL/min

柱温：40 $^{\circ}\text{C}$

进样体积：20 μL

洗脱方式：梯度洗脱

LC 时间程序：

表 1-14-2. 梯度洗脱时间程序

Time(min)	Module	Action	Value(%)
0.01	Pumps	B.Conc	40
4.00	Pumps	B.Conc	65
5.00	Pumps	B.Conc	90
5.50	Pumps	B.Conc	90
5.51	Pumps	B.Conc	40
8.00	Controller	Stop	

14.2.2 质谱条件

离子源：ESI，负离子扫描

扫描范围： MS^1 ：m/z 200-500

加热模块温度：200 $^{\circ}\text{C}$

脱溶剂管温度：200 $^{\circ}\text{C}$

雾化气流速：1.5 L/min

干燥气流速：10 L/min

离子源电压：-3.5 kV

检测器电压：1.70 kV

离子累积时间：30 ms

校准方法：自动调谐优化电压，外标法校准质量数。

14.3 EIC 图

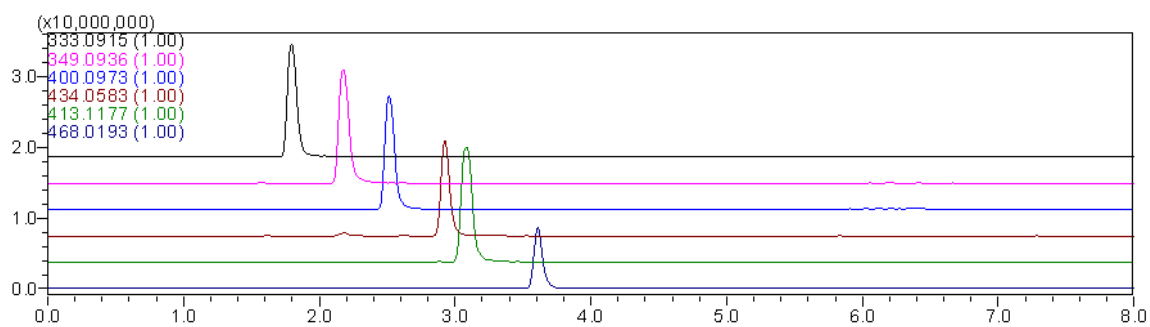


图 1-14. 负离子模式下 β -内酰胺类样品的提取离子流图 (20 $\mu\text{g/L}$)

14.4 标准曲线

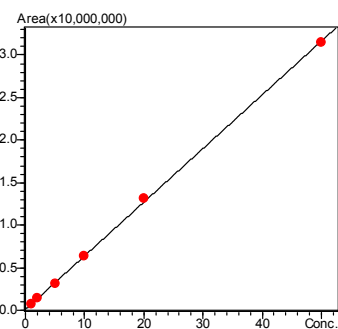
14.4.1 标样校准曲线信息

表 1-14-3. β -内酰胺类标样校准曲线信息

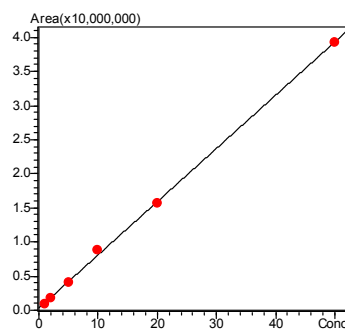
No.	中文名称	英文名称	保留时间 (min)	线性方程	线性范围 ($\mu\text{g/L}$)	相关系数 r	定量限 ($\mu\text{g/L}$)
1	青霉素 G	Penicillin G	1.801	$Y = 631,139.6X + 89,749.91$	1-50	0.9998	0.94
2	青霉素 V	Penicillin V	2.189	$Y = 780,527.8X + 310,542.1$	1-50	0.9997	0.64
3	苯唑青霉素	Oxacillin	2.521	$Y = 555,284.3X + 265,229.1$	1-50	0.9997	0.66
4	邻氯青霉素	Cloxacillin	2.931	$Y = 421,015.10X + 372,507.3$	1-50	0.9994	0.87
5	乙氧萘青霉素	Nafcillin	3.090	$Y = 764,517.9X + 275,480.3$	1-50	0.9996	0.58
6	双氯青霉素	Dicloxacillin	3.616	$Y = 274,825.8X + 127,421.3$	1-50	0.9992	0.87

14.4.2 校准曲线

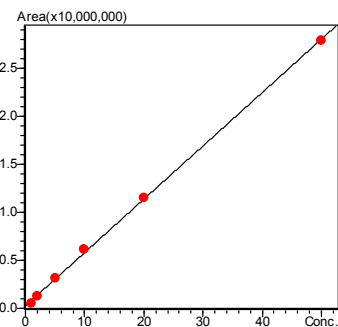
青霉素 G



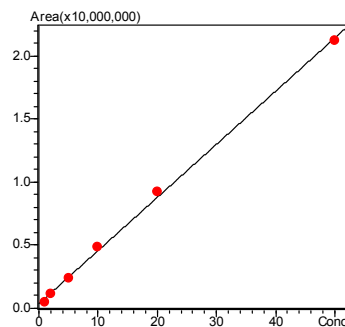
青霉素 V



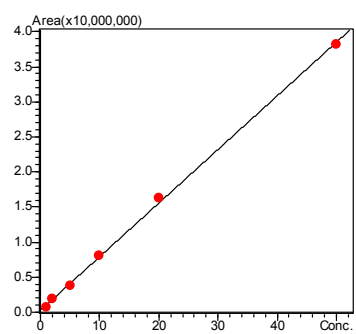
苯唑青霉素



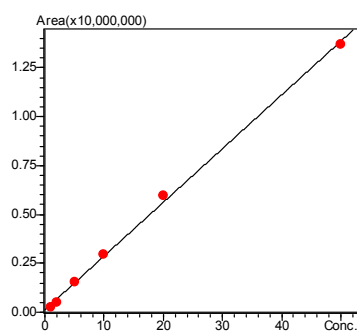
邻氯青霉素



乙氧萘青霉素



双氯青霉素



15. 四环素类

15.1 样品信息

四环素类样品共 7 种（如表 1-15-1 所示），浓度均为 1000 $\mu\text{g/mL}$ 左右，溶剂为甲醇，配制得到 1 $\mu\text{g/mL}$ 的标样，进行多级质谱检测。将 1 $\mu\text{g/mL}$ 的标样用甲醇逐级稀释，配得 500、200、100、50、20、10、5、2、1 $\mu\text{g/L}$ 的稀释液，制作校准曲线。

表 1-15-1. 四环素类样品信息

No.	中文名称	英文名称	分子式	检测离子	理论值 m/z
1	二甲胺四环素	Minocycline	$\text{C}_{23}\text{H}_{27}\text{N}_3\text{O}_7$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	458.1922
2	土霉素	Oxytetracycline	$\text{C}_{22}\text{H}_{24}\text{N}_2\text{O}_9$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	461.1555
3	四环素	Tetracycline	$\text{C}_{22}\text{H}_{24}\text{N}_2\text{O}_8$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	445.1605
4	去甲基金霉素	Demeclocycline	$\text{C}_{21}\text{H}_{21}\text{ClN}_2\text{O}_8$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	465.1059
5	金霉素	Chlortetracycline	$\text{C}_{22}\text{H}_{23}\text{ClN}_2\text{O}_8$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	479.1216
6	甲烯土霉素	Methacycline	$\text{C}_{22}\text{H}_{22}\text{N}_2\text{O}_8$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	443.1449
7	强力霉素	Doxycycline	$\text{C}_{22}\text{H}_{24}\text{N}_2\text{O}_8$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	445.1605

15.2 分析条件

15.2.1 液相条件

流动相：A 相-0.1%甲酸水溶液；B 相-乙腈

色谱柱：Shimadzu Shim-pack XR-ODS II（2.0 mm \times 150 mm，2.2 μm ）

流速：0.2 mL/min

柱温：40 $^{\circ}\text{C}$

进样体积：20 μL

洗脱方式：梯度洗脱

LC 时间程序：

表 1-15-2. 梯度洗脱时间程序

Time(min)	Module	Action	Value(%)
0.01	Pumps	B.Conc	5
4.00	Pumps	B.Conc	40
4.50	Pumps	B.Conc	65
5.00	Pumps	B.Conc	65
5.51	Pumps	B.Conc	5
8.00	Controller	Stop	

15.2.2 质谱条件

离子源：ESI，正离子扫描

扫描范围： MS^1 ：m/z 300-600

加热模块温度：200 $^{\circ}\text{C}$

脱溶剂管温度：200 $^{\circ}\text{C}$

雾化气流速：1.5 L/min

干燥气流速：10 L/min

离子源电压：4.5 kV

检测器电压：1.70 kV

离子累积时间：30 ms

校准方法：自动调谐优化电压，外标法校准质量数。

15.3 EIC 图

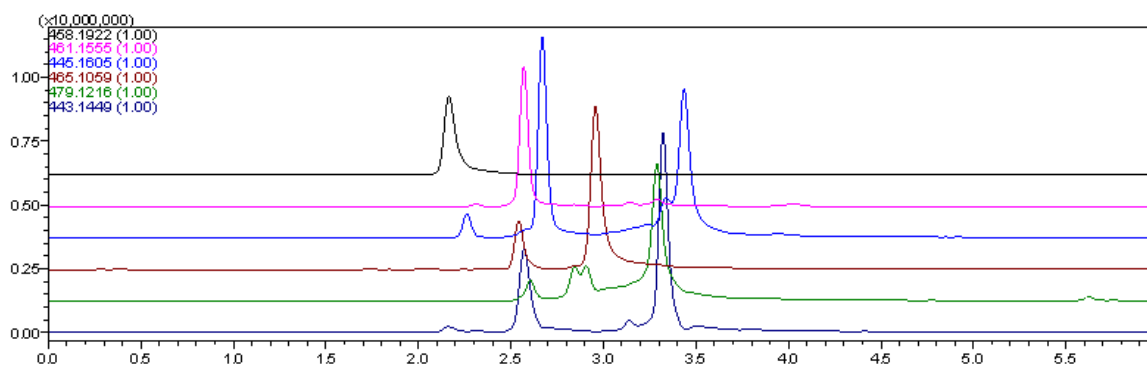


图 1-15. 正离子模式下四环素类样品的提取离子流图 (50 μg/L)

15.4 标准曲线

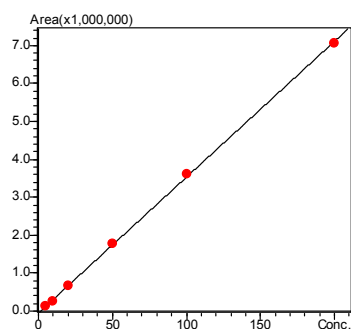
15.4.1 标样校准曲线信息

表 1-15-3. 四环素类标样校准曲线信息

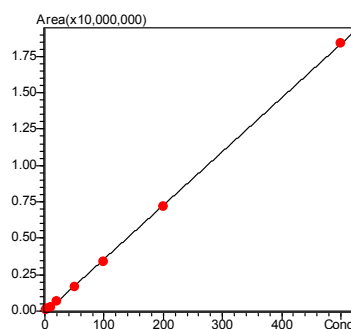
No.	中文名称	英文名称	保留时间 (min)	线性方程	线性范围 (μg/L)	相关系数 r	定量限 (μg/L)
1	二甲胺四环素	Minocycline	2.170	$Y = 35,797.04X - 48,371.04$	5-200	0.9998	3.26
2	土霉素	Oxytetracycline	2.573	$Y = 36,927.17X - 119,504.9$	2-500	0.9999	3.07
3	四环素	Tetracycline	2.668	$Y = 49,611.45X - 127,949.8$	5-200	0.9996	4.33
4	去甲基金霉素	Demeclocycline	2.964	$Y = 74,768.28X + 154,412.5$	2-200	0.9995	1.15
5	金霉素	Chlortetracycline	3.290	$Y = 35,981.32X - 57,917.91$	5-100	0.9996	3.83
6	甲烯土霉素	Methacycline	3.332	$Y = 51,643.14X + 106,289.2$	5-200	0.9997	3.70
7	强力霉素	Doxycycline	3.441	$Y = 59,402.23X + 16,329.71$	5-500	0.9997	3.82

15.4.2 校准曲线

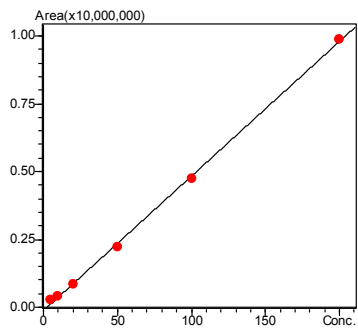
二甲胺四环素



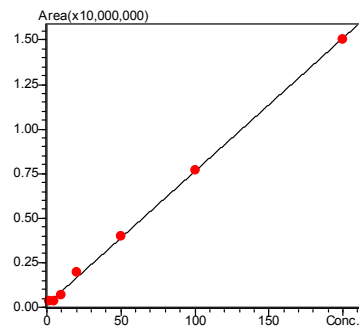
土霉素



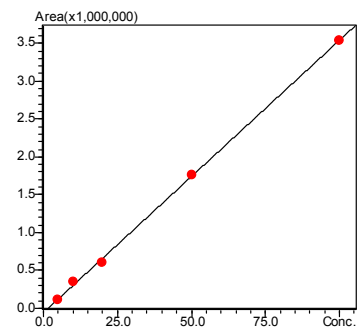
四环素



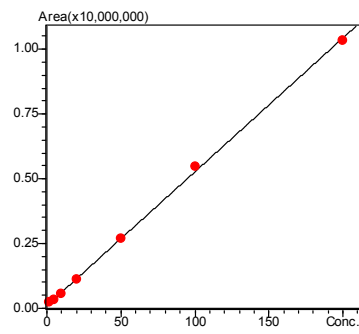
去甲基金霉素



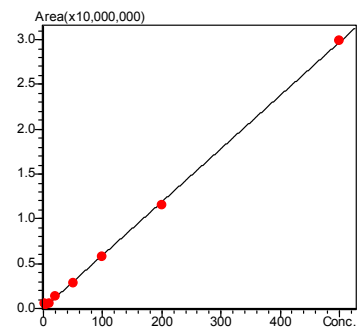
金霉素



甲烯土霉素



强力霉素



二、禽肉及饲料样品中兽药多残留快速筛查

1. 兽药基本信息

表 2-1. 100 种兽药基本信息

No.	兽药种类	中文名称	英文名称	分子式	检测离子	理论值 m/z	保留时间 (min)
1	β-受体激动剂	特布他林	Terbutaline	C ₁₂ H ₁₉ NO ₃	[M+H] ⁺	226.1438	1.15
2	β-受体激动剂	沙丁胺醇	Salbutamol	C ₁₃ H ₂₁ NO ₃	[M+H] ⁺	240.1594	1.15
3	β-受体激动剂	西马特罗	Cimeterol	C ₁₂ H ₁₇ N ₃ O	[M+H] ⁺	220.1444	1.22
4	β-受体激动剂	西布特罗	Cimbuterol	C ₁₃ H ₁₉ N ₃ O	[M+H] ⁺	234.1601	1.74
5	噻唑类	左旋咪唑	Levamisole	C ₁₁ H ₁₂ N ₂ S	[M+H] ⁺	205.0794	1.88
6	解热镇痛药	4-甲基氨基安替比林	4-methylaminoantipyrine	C ₁₂ H ₁₅ N ₃ O	[M+H] ⁺	218.1288	2.37
7	硝基咪唑类	羟甲基甲硝唑	Hydroxymethyl metronidazole	C ₆ H ₉ N ₃ O ₄	[M+H] ⁺	188.0666	2.52
8	喹恶啉类	喹乙醇	Olaquinox	C ₁₂ H ₁₃ N ₃ O ₄	[M+H] ⁺	264.0979	2.54
9	喹诺酮类	麻保沙星	Marbofloxacin	C ₁₇ H ₁₉ N ₄ O ₄ F	[M+H] ⁺	363.1463	2.94
10	喹诺酮类	依诺沙星	Enoxacin	C ₁₅ H ₁₇ FN ₄ O ₃	[M+H] ⁺	321.1357	3.23
11	硝基咪唑类	羟基甲硝唑	Hydroxy metronidazole	C ₅ H ₇ N ₃ O ₃	[M+H] ⁺	158.0560	3.39
12	喹诺酮类	氟罗沙星	Fleroxacin	C ₁₇ H ₁₈ F ₃ N ₃ O ₃	[M+H] ⁺	370.1373	3.54
13	硝基咪唑类	甲硝唑	Metronidazole	C ₆ H ₉ N ₃ O ₃	[M+H] ⁺	172.0717	3.55
14	磺胺类	磺胺醋酰	Sulfacetamide	C ₈ H ₁₀ N ₂ O ₃ S	[M+H] ⁺	215.0485	3.66
15	磺胺类	SGD	SGD	C ₇ H ₁₀ N ₄ O ₂ S	[M+H] ⁺	215.0597	3.66
16	喹诺酮类	诺氟沙星	Norfloxacin	C ₁₆ H ₁₈ FN ₃ O ₃	[M+H] ⁺	320.1405	3.72
17	喹诺酮类	氧氟沙星	Ofloxacin	C ₁₈ H ₂₀ FN ₃ O ₄	[M+H] ⁺	362.1511	3.78
18	β-受体激动剂	莱克多巴胺	Ractopamine	C ₁₈ H ₂₃ NO ₃	[M+H] ⁺	302.1751	4.06
19	喹诺酮类	培氟沙星	pefloxacin methane sulfonate dihydrate	C ₁₇ H ₂₀ FN ₃ O ₃	[M+H] ⁺	334.1561	4.07
20	硝基咪唑类	罗硝唑	Ronidazole	C ₆ H ₈ N ₄ O ₄	[M+H] ⁺	201.0618	4.10
21	喹诺酮类	环丙沙星	Ciprofloxacin hydrochloride	C ₁₇ H ₁₈ FN ₃ O ₃	[M+H] ⁺	332.1405	4.11
22	抗虫药	克球酚	Clopidol	C ₇ H ₇ Cl ₂ NO	[M+H] ⁺	191.9977	4.13
23	喹诺酮类	洛美沙星	Lomefloxacin hydrochloride	C ₁₇ H ₁₉ F ₂ N ₃ O ₃	[M+H] ⁺	352.1467	4.35
24	磺胺类	磺胺嘧啶	Sulfadiazine	C ₁₀ H ₁₀ N ₄ O ₂ S	[M+H] ⁺	251.0597	4.38
25	解热镇痛药	4-氨基安替比林	4-aminoantipyrine	C ₁₁ H ₁₃ N ₃ O	[M+H] ⁺	204.1131	4.39
26	β-受体激动剂	克伦特罗	Clenbuterol	C ₁₂ H ₁₆ N ₂ O	[M+H] ⁺	205.1335	4.41
27	喹诺酮类	丹诺沙星	Danofloxacin mesylate	C ₁₉ H ₂₀ FN ₃ O ₃	[M+H] ⁺	358.1561	4.44
28	喹诺酮类	恩诺沙星	Enrofloxacin	C ₁₉ H ₂₂ FN ₃ O ₃	[M+H] ⁺	360.1718	4.57
29	磺胺类	磺胺甲氧吡啶	Sulfamethoxypyridazine	C ₁₁ H ₁₂ N ₄ O ₃ S	[M+H] ⁺	281.0703	4.59
30	喹诺酮类	奥比沙星	Orbifloxacin	C ₁₉ H ₂₀ F ₃ N ₃ O ₃	[M+H] ⁺	396.1530	4.61
31	磺胺类	磺胺噻唑	Sulfathiazole	C ₉ H ₉ N ₃ O ₂ S ₂	[M+H] ⁺	256.0209	4.80
32	硝基咪唑类	二甲硝咪唑	Dimetridazole	C ₅ H ₇ N ₃ O ₂	[M+H] ⁺	142.0611	4.84
33	β-受体激动剂	溴代克伦特罗	Bromchlorbuterol	C ₁₂ H ₁₈ ClBrN ₂ O	[M+H] ⁺	321.0364	4.85

34	喹诺酮类	沙拉沙星	Sarafloxacin hydrochloride	C ₂₀ H ₁₇ F ₂ N ₃ O ₃	[M+H] ⁺	386.1311	4.87
35	解热镇痛药	4-乙酰氨基安替比林	4-acetamidoantipyrine	C ₁₃ H ₁₅ N ₃ O ₂	[M+H] ⁺	246.1237	4.91
36	解热镇痛药	4-甲酰氨基安替比林	4-formylaminoantipyrine	C ₁₂ H ₁₃ N ₃ O ₂	[M+H] ⁺	232.1081	4.92
37	四环素类	土霉素	Oxytetracycline hydrochloride	C ₂₂ H ₂₄ N ₂ O ₉	[M+H] ⁺	461.1555	4.97
38	喹诺酮类	双氟沙星	Diflocacin hydrachloride	C ₂₁ H ₁₉ F ₂ N ₃ O ₃	[M+H] ⁺	400.1467	4.98
39	喹诺酮类	司帕沙星	Saparfloxacine	C ₁₉ H ₂₂ F ₂ N ₄ O ₃	[M+H] ⁺	393.1733	4.99
40	β-受体激动剂	溴布特罗	Brombuterol	C ₁₂ H ₁₈ Br ₂ N ₂ O	[M+H] ⁺	364.9859	5.06
41	磺胺类	磺胺吡啶	Sulfapyridine	C ₁₁ H ₁₁ N ₃ O ₂ S	[M+H] ⁺	250.0645	5.07
42	磺胺类	N-Ac-SDZ	N-Ac-SDZ	C ₁₂ H ₁₂ N ₄ O ₃ S	[M+H] ⁺	293.0703	5.12
43	四环素类	四环素	Tetracycline hydrochloride	C ₂₂ H ₂₄ N ₂ O ₈	[M+H] ⁺	445.1605	5.18
44	β-受体激动剂	马布特罗	Mabuterol	C ₁₃ H ₁₈ ClF ₃ N ₂ O	[M+H] ⁺	311.1133	5.30
45	β-受体激动剂	班布特罗	Bambuterol	C ₁₈ H ₂₉ N ₃ O ₅	[M+H] ⁺	368.218	5.35
46	磺胺类	磺胺甲基嘧啶	Sulfamerazine	C ₁₁ H ₁₂ N ₄ O ₂ S	[M+H] ⁺	265.0754	5.37
47	磺胺类	磺胺甲噻二唑	Sulfamethizol	C ₉ H ₁₀ N ₄ O ₂ S ₂	[M+H] ⁺	271.0318	5.97
48	磺胺类	磺胺二甲嘧啶	Sulfamethazine	C ₁₂ H ₁₄ N ₄ O ₂ S	[M+H] ⁺	279.0910	6.05
49	磺胺类	磺胺对甲氧嘧啶	Sulfamer	C ₁₁ H ₁₂ N ₄ O ₃ S	[M+H] ⁺	281.0703	6.06
50	四环素类	金霉素	Chlorotetracycline hydrochloride	C ₂₂ H ₂₃ ClN ₂ O ₈	[M+H] ⁺	479.1216	6.18
51	四环素类	盐酸多西环素(强力霉素)	Doxycycline hydrochloride	C ₂₂ H ₂₄ N ₂ O ₈	[M+H] ⁺	445.1605	6.30
52	大环内酯类	红霉素	Erythromycin	C ₃₇ H ₆₇ NO ₁₃	[M+H] ⁺	734.4685	6.46
53	解热镇痛药	氨基酚	Aminophenol	C ₁₂ H ₁₂ N ₂ O ₂ S	[M+H] ⁺	249.0692	6.67
54	大环内酯类	泰乐菌素	Tylocin tartrate	C ₄₆ H ₇₇ NO ₁₇	[M+H] ⁺	916.5264	6.81
55	磺胺类	磺胺二甲嘧啶	Sulfachloropyridazine	C ₁₀ H ₉ ClN ₄ O ₂ S	[M+H] ⁺	285.0208	6.83
56	解热镇痛药	乙酰氨基酚	Acetylphenol	C ₁₄ H ₁₄ N ₂ O ₃ S	[M+H] ⁺	291.0798	7.07
57	β-受体激动剂	喷布特罗	Penbutolol	C ₁₈ H ₂₉ NO ₂	[M+H] ⁺	292.2271	7.09
58	磺胺类	磺胺二甲氧嘧	Sulfadimethoxine	C ₁₂ H ₁₄ N ₄ O ₄ S	[M+H] ⁺	311.0809	7.14
59	镇静剂类	氯丙嗪	Chlorpromazine	C ₁₇ H ₁₉ ClN ₂ S	[M+H] ⁺	319.1030	7.16
60	磺胺类	磺胺甲恶唑	Sulfamethoxazole	C ₁₀ H ₁₁ N ₃ O ₃ S	[M+H] ⁺	254.0594	7.18
61	大环内酯类	柱晶白霉素	Leucomycin hydtrate	C ₄₀ H ₆₇ NO ₁₄	[M+H] ⁺	786.4634	7.39
62	磺胺类	N-Ac-SMT	N-Ac-SMT	C ₁₂ H ₁₃ N ₃ O ₄ S	[M+H] ⁺	296.0700	7.43
63	磺胺类	磺胺二甲异唑	Sulfisoxazole	C ₁₁ H ₁₃ N ₃ O ₃ S	[M+H] ⁺	268.0750	7.50
64	磺胺类	N-Ac-SMX	N-Ac-SMX	C ₁₀ H ₁₁ N ₃ O ₄ S	[M+H] ⁺	270.0543	7.50
65	三苯甲烷类	孔雀石绿	Leucomalachite green	C ₂₃ H ₂₄ N ₂	[M+H] ⁺	329.2012	7.67
66	喹诺酮类	恶喹酸	Oxolinic acid	C ₁₃ H ₁₁ NO ₅	[M+H] ⁺	262.0710	7.69
67	磺胺类	周效磺胺	Sulfadoxine	C ₁₂ H ₁₄ N ₄ O ₄ S	[M+H] ⁺	311.0809	8.11
68	磺胺类	磺胺喹恶啉	Sulfaquinoxalin	C ₁₄ H ₁₂ N ₄ O ₂ S	[M+H] ⁺	301.0754	8.12
69	三苯甲烷类	结晶紫	Crystal violet	C ₂₅ H ₂₉ N ₃	[M+H] ⁺	372.2434	8.47
70	喹诺酮类	氟甲喹	Flumequine	C ₁₄ H ₁₂ FNO ₃	[M+H] ⁺	262.0874	9.21
71	雄激素	群勃龙	Trenbolone	C ₁₈ H ₂₂ O ₂	[M+H] ⁺	271.1693	9.56
72	大环内酯类	维吉霉素	Virginiamcin M1	C ₂₈ H ₃₅ N ₃ O ₇	[M+H] ⁺	526.2548	9.75
73	雄激素	睾酮	Testosterone	C ₁₉ H ₂₈ O ₂	[M+H] ⁺	289.2162	10.51
74	雄激素	甲基睾酮	Methyl testosterone	C ₂₀ H ₃₀ O ₂	[M+H] ⁺	303.2319	11.03

75	镇静剂类	地西洋	Diazepam	C ₁₆ H ₁₃ ClN ₂ O	[M+H] ⁺	285.0789	11.12
76	林可霉素类	盐酸林可霉素	Lincomycin hydrochloride	C ₁₈ H ₃₄ N ₂ O ₆ S·HCl	[M+H] ⁺	443.1977	11.85
77	孕激素	黄体酮	Progesterone	C ₂₁ H ₃₀ O ₂	[M+H] ⁺	315.2319	12.90
78	三苯甲烷类	隐性结晶紫	LeucoCrystal violet	C ₂₅ H ₃₁ N ₃	[M+H] ⁺	374.2591	14.46
79	雄激素	丙酸睾酮	Testosterone propionate	C ₂₂ H ₃₂ O ₃	[M+H] ⁺	345.2424	14.87
80	三苯甲烷类	隐性孔雀石绿	Leucomalachite green	C ₂₃ H ₂₆ N ₂	[M+H] ⁺	331.2169	15.21
81	雄激素	苯丙酸诺龙	Nandrolone	C ₂₇ H ₃₄ O ₃	[M+H] ⁺	407.2581	15.78
82	酰胺醇类	甲砒霉素	Thiamphenicol	C ₁₂ H ₁₅ Cl ₂ NO ₅ S	[M-H] ⁻	353.9975	5.65
83	酰胺醇类	氟苯尼考	Florfenicol	C ₁₂ H ₁₄ Cl ₂ FNO ₄ S	[M-H] ⁻	355.9932	7.23
84	酰胺醇类	氯霉素	Chloramphenicol	C ₁₁ H ₁₂ Cl ₂ N ₂ O ₅	[M-H] ⁻	321.0051	7.69
85	皮质激素类	泼尼松龙	Prednisolone	C ₂₁ H ₂₈ O ₅	[M+CH ₃ COO] ⁻	419.2075	8.07
86	皮质激素类	泼尼松	Prednisone	C ₂₁ H ₂₆ O ₅	[M+CH ₃ COO] ⁻	417.1919	8.11
87	皮质激素类	氟氢可的松	Fludrocortisone	C ₂₁ H ₂₉ FO ₅	[M+CH ₃ COO] ⁻	439.2138	8.22
88	皮质激素类	地塞米松	Dexamethasone	C ₂₂ H ₂₉ FO ₅	[M+CH ₃ COO] ⁻	451.2138	8.90
89	皮质激素类	倍他米松	Betamethasone	C ₂₂ H ₂₉ FO ₅	[M+CH ₃ COO] ⁻	451.2138	9.00
90	皮质激素类	倍氯米松	Beclomethasone	C ₂₂ H ₂₉ ClO ₅	[M+CH ₃ COO] ⁻	467.1842	9.20
91	解热镇痛药	安乃近	Dipyron	C ₁₃ H ₁₆ N ₃ NaO ₄ S	[M-H] ⁻	310.0867	9.51
92	玉米赤霉醇类	β-玉米赤霉醇	β-Zeranol	C ₁₈ H ₂₆ O ₅	[M-H] ⁻	321.1707	9.61
93	玉米赤霉醇类	β-玉米赤霉烯醇	β-Zearalenol	C ₁₈ H ₂₄ O ₅	[M-H] ⁻	319.1551	9.72
94	玉米赤霉醇类	α-玉米赤霉醇	α-Zeranol	C ₁₈ H ₂₆ O ₅	[M-H] ⁻	321.1707	10.12
95	玉米赤霉醇类	α-玉米赤霉烯醇	α-Zearalenol	C ₁₈ H ₂₄ O ₅	[M-H] ⁻	319.1551	10.30
96	玉米赤霉醇类	玉米赤霉酮	Zearalanone	C ₁₈ H ₂₄ O ₅	[M-H] ⁻	319.1551	11.25
97	玉米赤霉醇类	玉米赤霉烯酮	Zearalenone	C ₁₈ H ₂₂ O ₅	[M-H] ⁻	317.1394	11.34
98	雌激素类	己二烯雌酚	Dienstrol	C ₁₈ H ₁₈ O ₂	[M-H] ⁻	265.1234	11.35
99	雌激素类	己烷雌酚	Hexestrol minimum	C ₁₈ H ₂₂ O ₂	[M-H] ⁻	269.1547	11.40
100	雌激素类	己烯雌酚	Diethylstilbesterol	C ₁₈ H ₂₀ O ₂	[M-H] ⁻	267.1391	12.48

2. 兽药混标分析条件

2.1 液相条件

流动相：A相-0.1%甲酸水溶液；B相-乙腈

色谱柱：Phenomenex ODS 柱（2.0 mm×150 mm，3 μm）

流速：0.3 mL/min

柱温：40℃

进样体积：4 μL

洗脱方式：梯度洗脱

LC 时间程序：

表 2-2. 梯度洗脱时间程序

Time(min)	Module	Action	Value(%)
0.01	Pumps	B.Conc	10
1.00	Pumps	B.Conc	10
15.00	Pumps	B.Conc	100
17.00	Pumps	B.Conc	100
17.10	Pumps	B.Conc	10

2.2 质谱条件

离子源: ESI, 正负离子扫描
 扫描范围: 正离子: m/z 130-1000; 负离子: m/z 200-600
 加热模块温度: 200℃
 脱溶剂管温度: 200℃
 雾化气流速: 1.5 L/min
 干燥气流速: 10 L/min
 离子源电压: 正离子模式: 4.5 kV; 负离子模式: -3.5 kV
 检测器电压: 1.60 kV
 离子累积时间: 56 ms
 校准方法: 自动调谐优化电压, 外标法校准质量数。

3. 兽药混标样品提取离子流色谱图

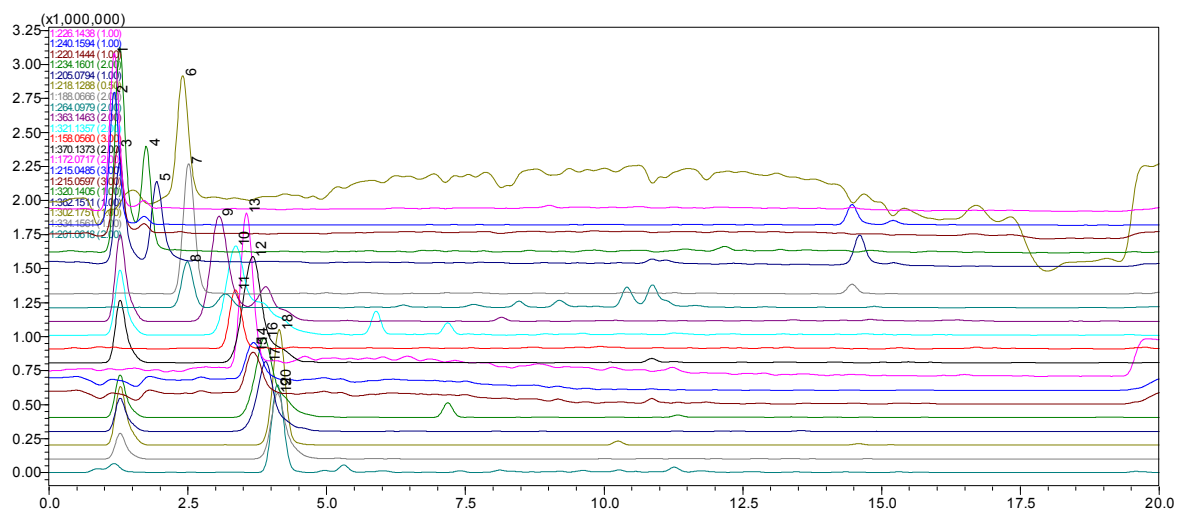


图 2-1. 正离子模式下 1-20 号兽药样品提取离子流色谱图 (100 $\mu\text{g/L}$)

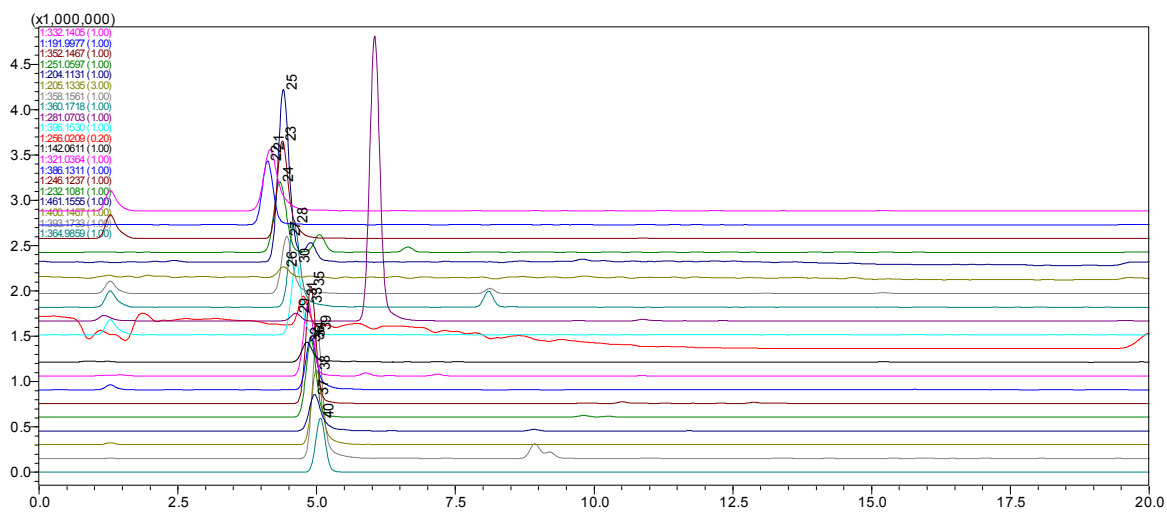


图 2-2. 正离子模式下 21-40 号兽药样品提取离子流色谱图 (100 $\mu\text{g/L}$)

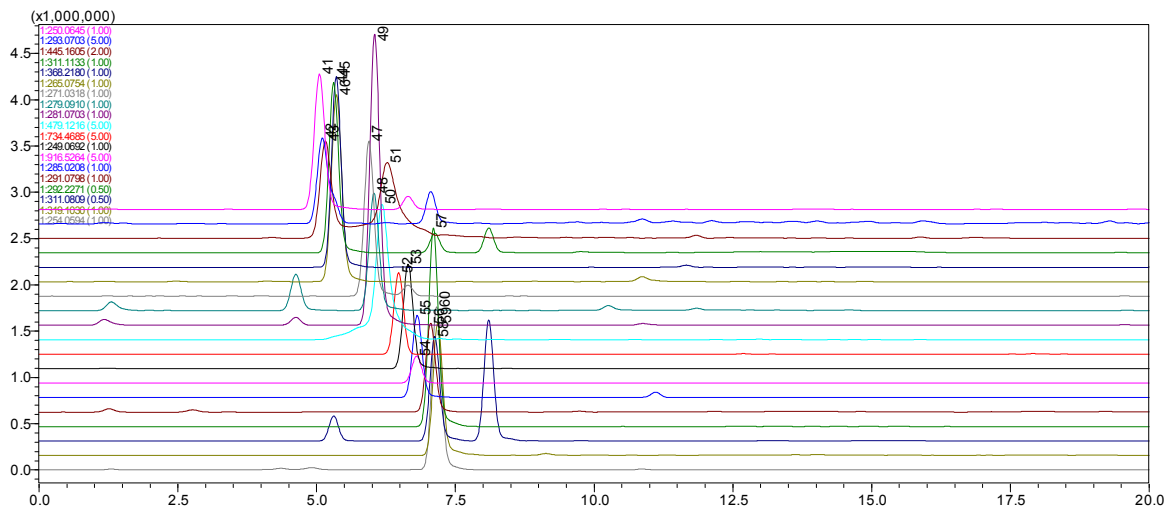


图 2-3. 正离子模式下 41-60 号兽药样品提取离子流色谱图 (100 $\mu\text{g/L}$)

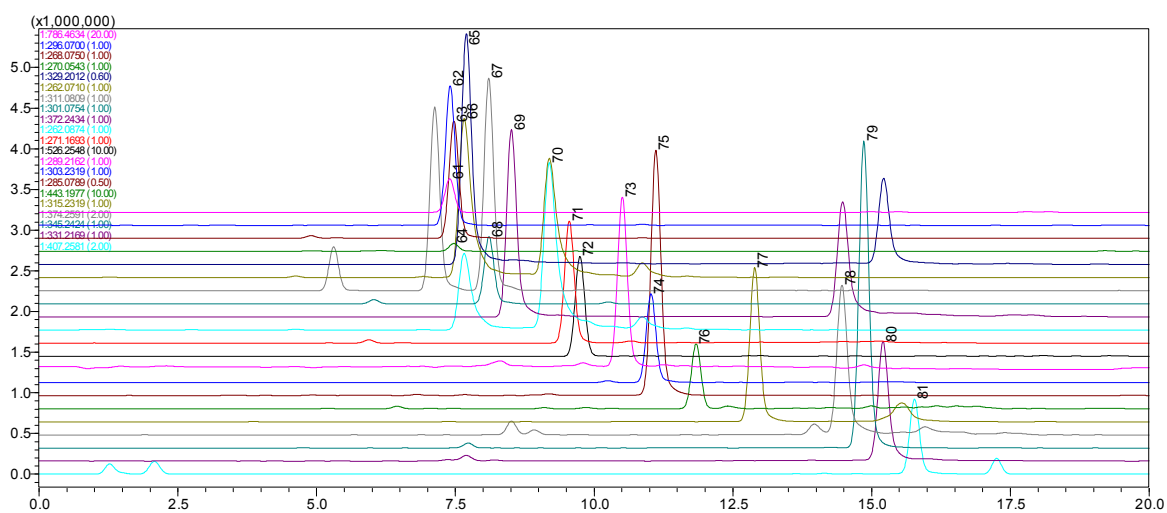


图 2-4. 正离子模式下 61-81 号兽药样品提取离子流色谱图 (100 $\mu\text{g/L}$)

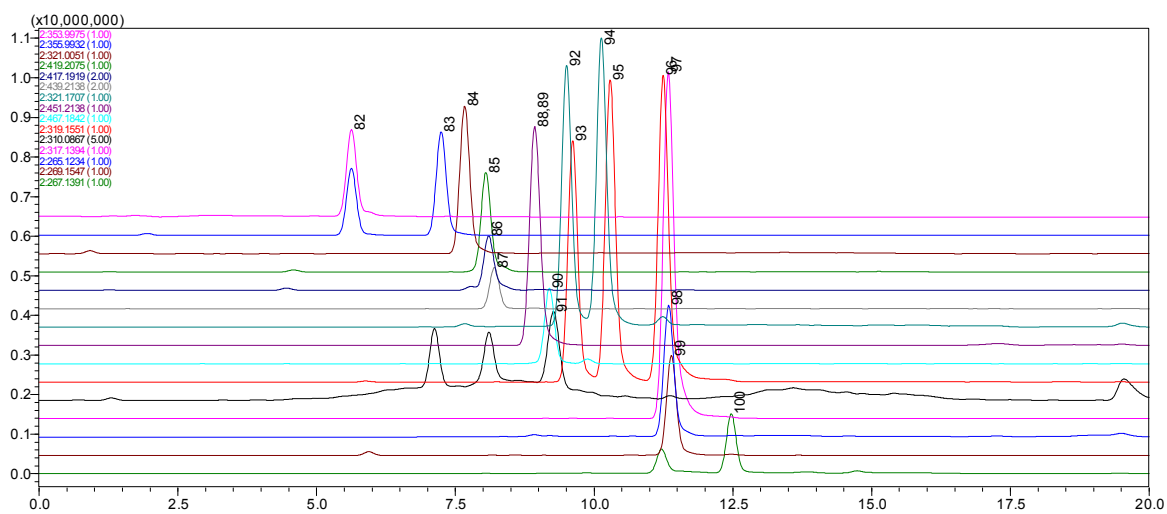
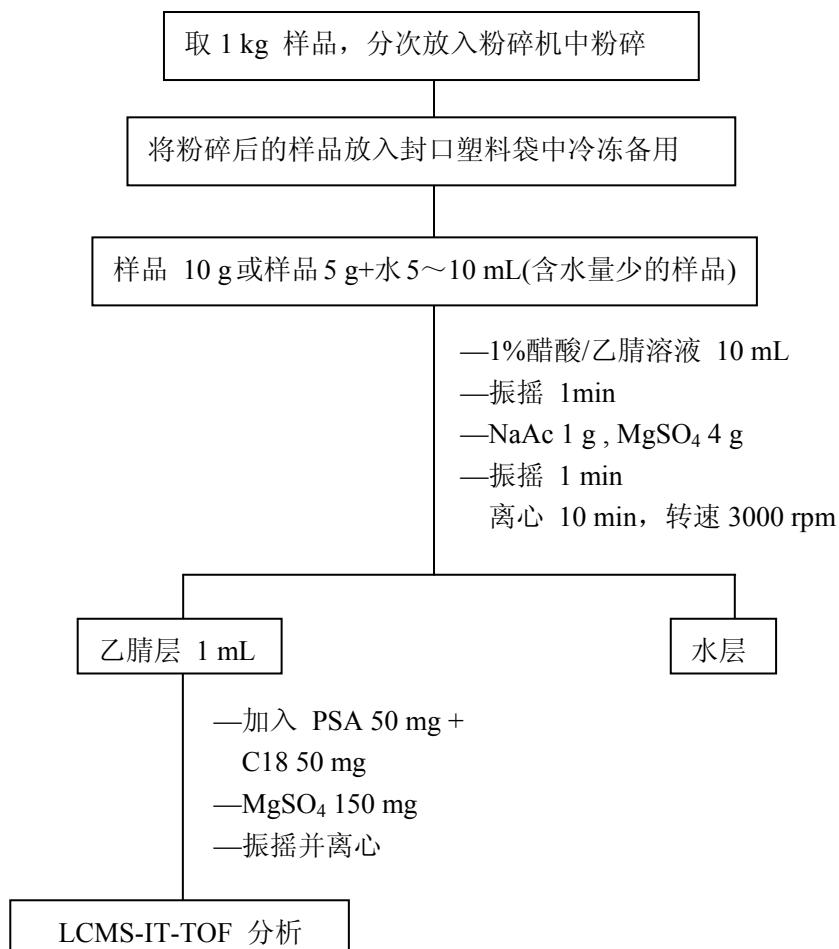


图 2-5. 负离子模式下 82-100 号兽药样品提取离子流色谱图 (100 $\mu\text{g/L}$)

4. 禽肉和饲料样品前处理方法

使用 QuEChERS 方法测定禽肉和饲料样品中兽药残留：使用 QuEChERS 方法测定禽肉和饲料样品中兽药残留：



5. 禽肉样品中兽药分析图谱

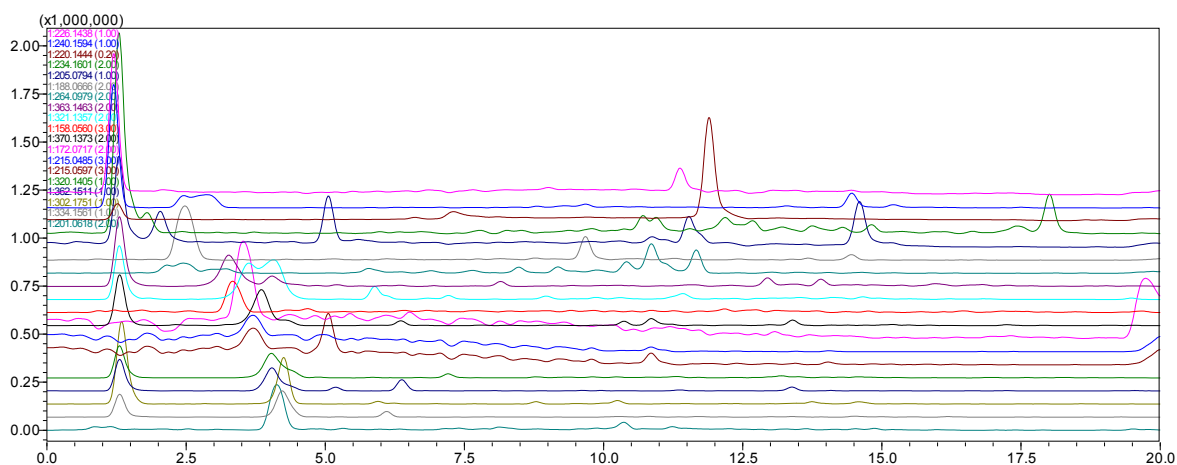


图 2-6. 禽肉基质加标样品正离子模式下 1-20 号兽药提取离子流色谱图 (50 µg/L)

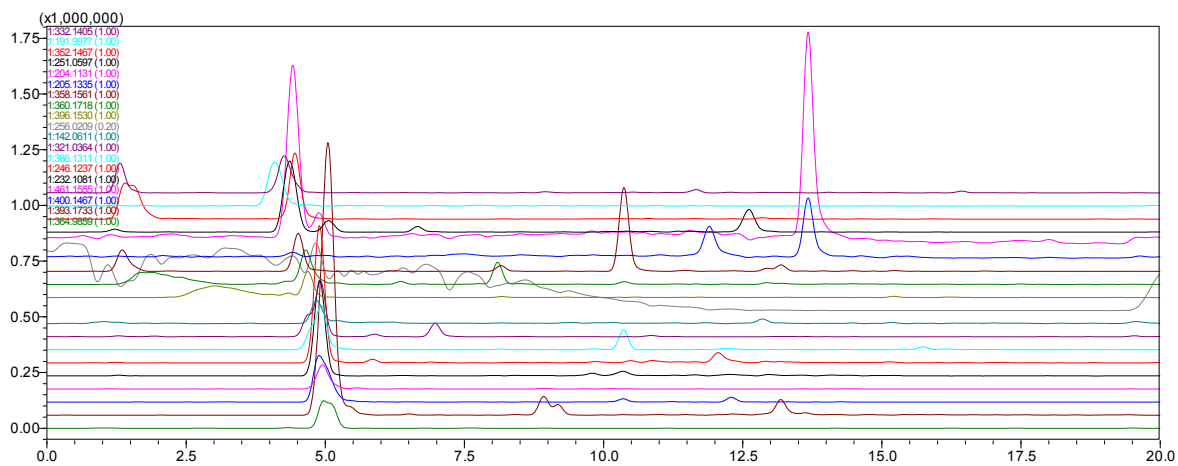


图 2-7. 禽肉基质加标样品正离子模式下 21-40 号兽药提取离子流色谱图 (50 μg/L)

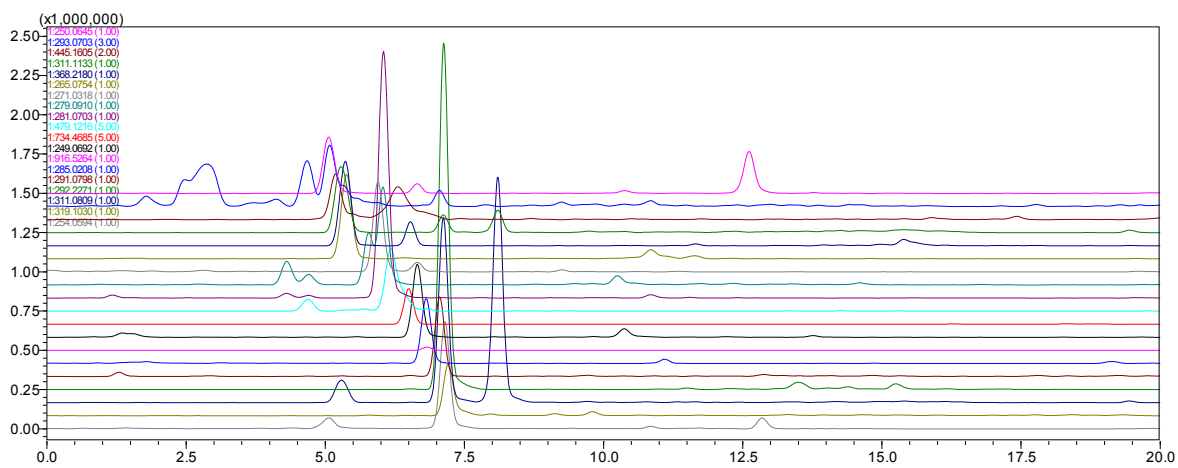


图 2-8. 禽肉基质加标样品正离子模式下 41-60 号兽药提取离子流色谱图 (50 μg/L)

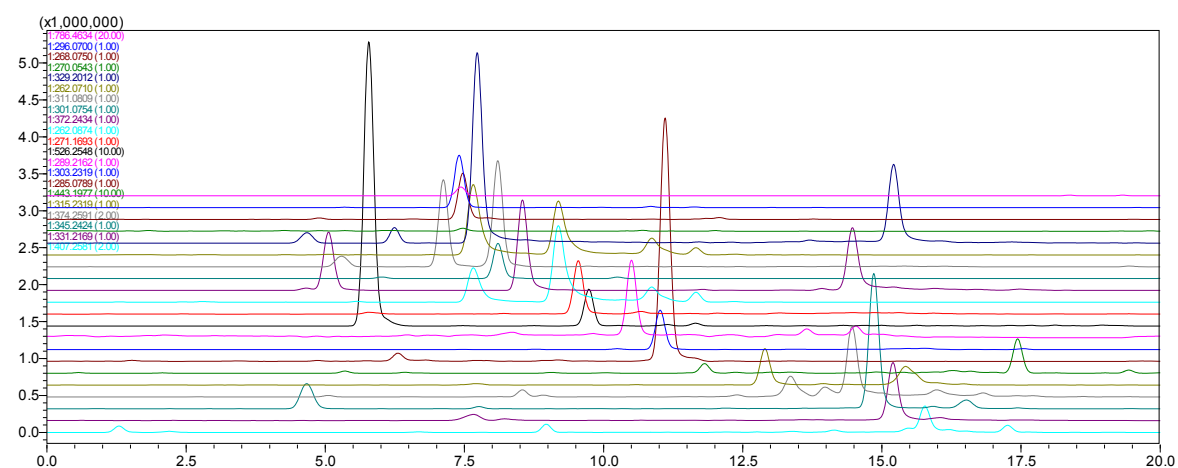


图 2-9. 禽肉基质加标样品正离子模式下 61-81 号兽药提取离子流色谱图 (50 μg/L)

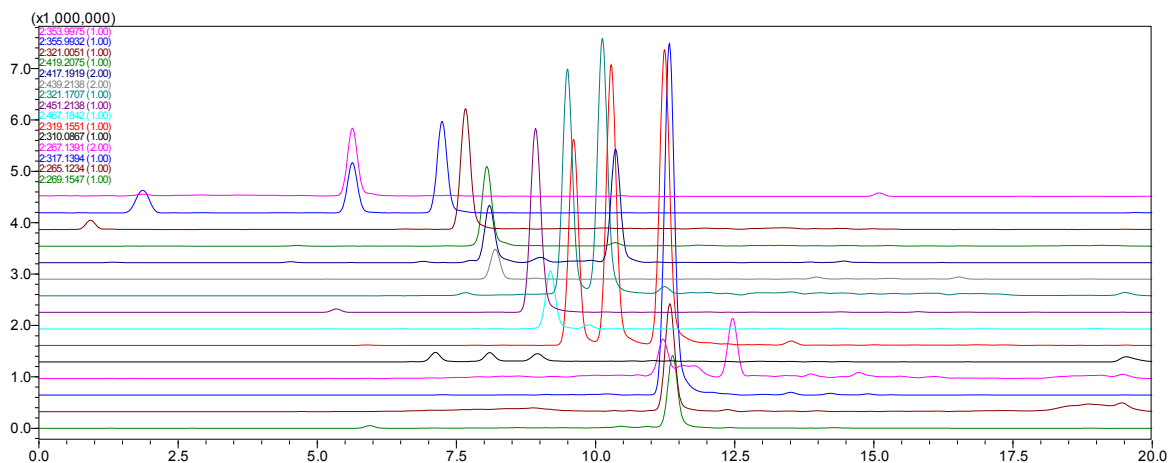


图 2-10. 禽肉基质加标样品负离子模式下 82-100 号兽药提取离子流色谱图 (50 $\mu\text{g/L}$)

6. 饲料样品中兽药分析图谱

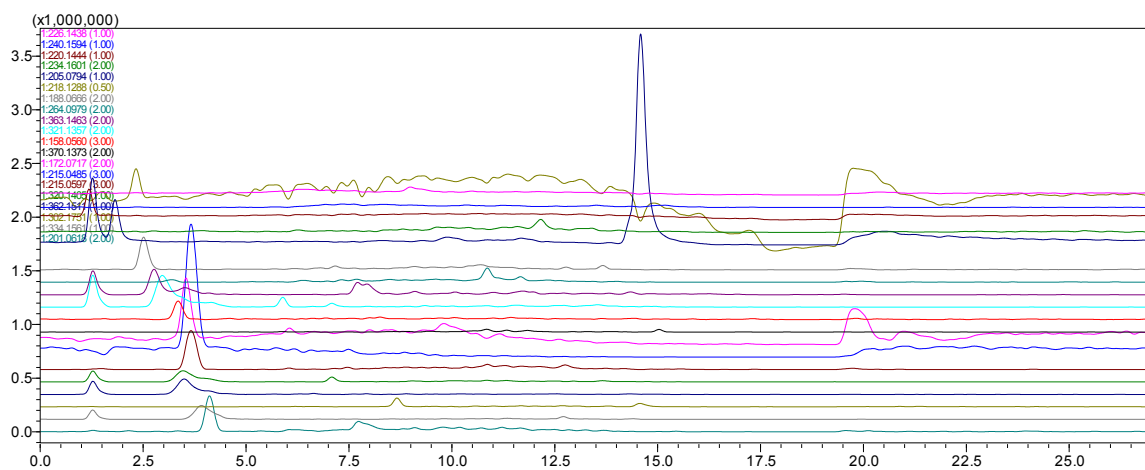


图 2-11. 饲料基质加标样品正离子模式下 1-20 号兽药提取离子流色谱图 (50 $\mu\text{g/L}$)

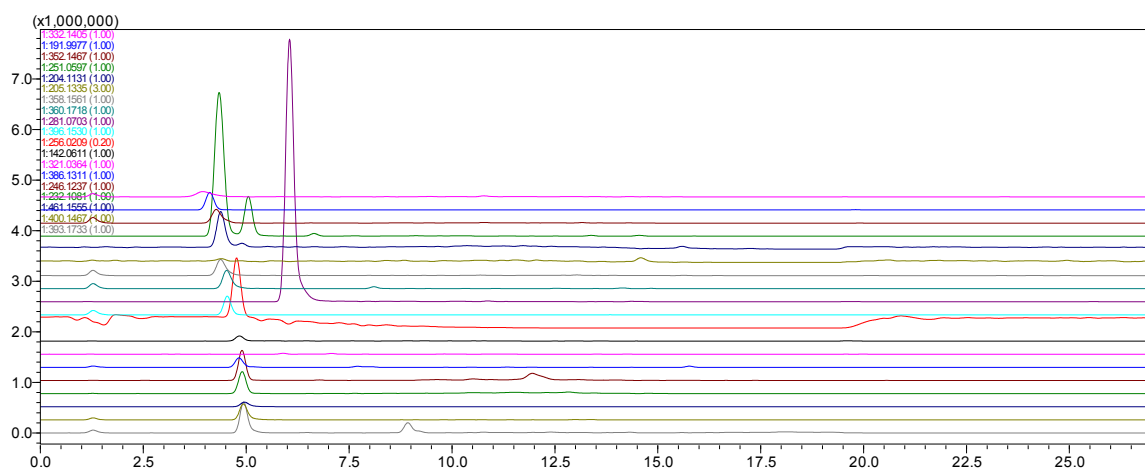


图 2-12. 饲料基质加标样品正离子模式下 21-40 号兽药提取离子流色谱图 (50 $\mu\text{g/L}$)

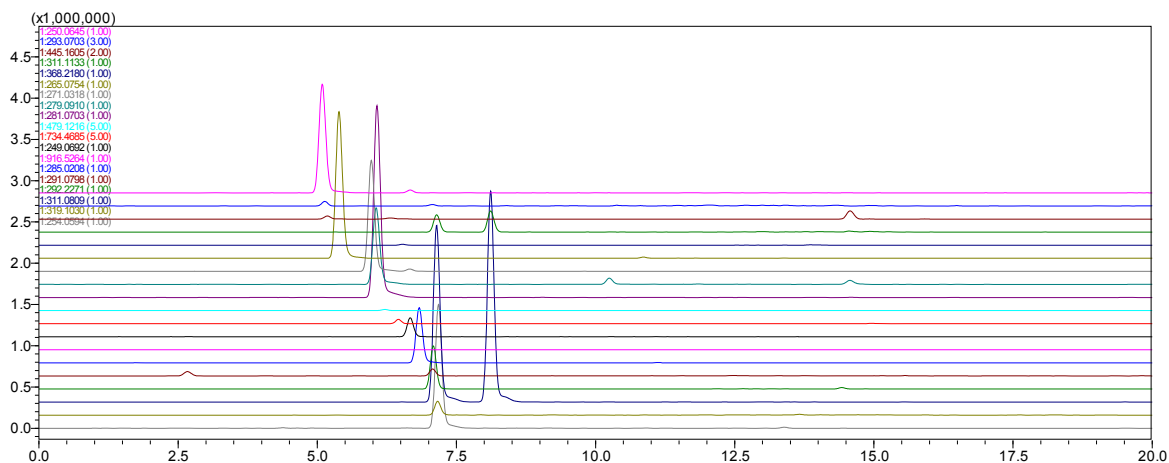


图 2-13. 饲料基质加标样品正离子模式下 41-60 号兽药提取离子流色谱图 (50 μg/L)

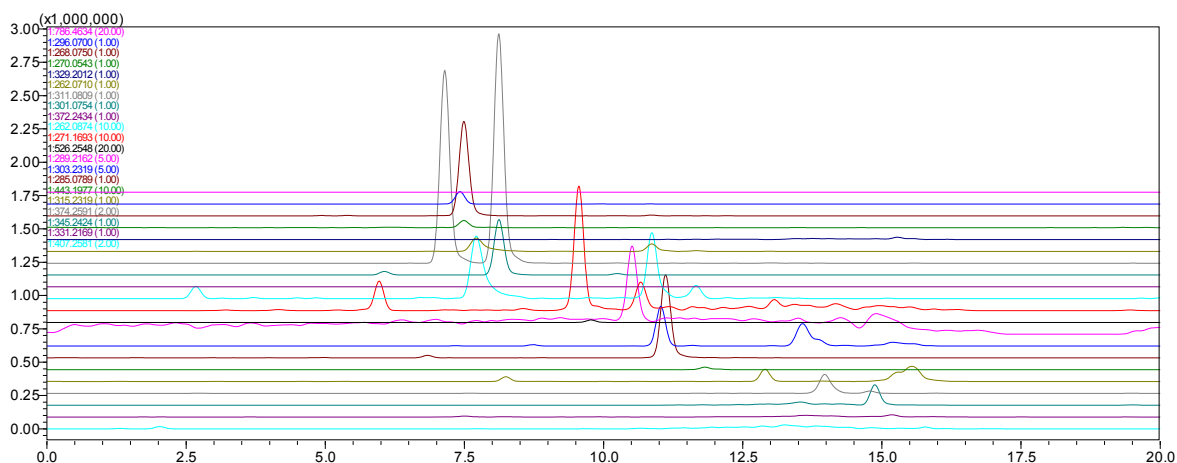


图 2-14. 饲料基质加标样品正离子模式下 61-81 号兽药提取离子流色谱图 (50 μg/L)

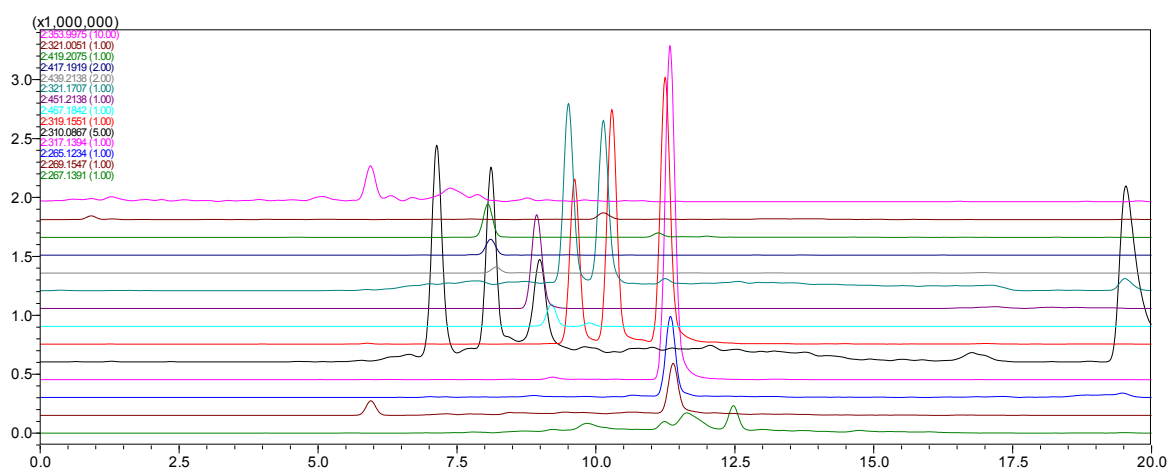


图 2-15. 饲料基质加标样品负离子模式下 82-100 号兽药提取离子流色谱图 (50 μg/L)

对于兽药多残留的分析，可以通过岛津 Met ID solution 筛查软件实现自动快速定性分析。使用该软件只需建立兽药的化合物清单（名称和分子式），得到兽药高分辨质谱信息，将对照组和样品组数据进行快速比对，即使在无标准品的情况下也可对兽药残留样品进行快速准确定性。

三、多级高分辨质谱库的建立和检索

1. 概述

质谱库检索技术是自上世纪七十年代以来逐渐兴起的一门新技术。对于分析人员来说，它具有操作便捷，快速的优点，得到了迅速的推广应用。这是化学分析与计算机技术结合的产物，它给化学分析人员带来了极大便利，极大提高了工作效率。随着未知分析对象的剧增，仅用光谱或者色谱等技术无法解决海量样品中未知组分的快速筛选及定性问题，长期以来，气相色谱与质谱联用技术由于具有强大的质谱库功能，能够为未知物的快速定性和筛选提供强有力的手段而被广泛应用。液相色谱和质谱联用技术没有气质联用技术一样的通用标准谱库，使得液相色谱质谱联用技术的应用受到限制。通过质谱库检索技术对完全未知的化合物进行定性是一种简单的解决方法，但是实现该技术，首先需要建立已知化合物的质谱标准数据库。在对样品中未知化合物进行定性时，将其谱图与质谱库中标准物质的谱图相比较，以谱图匹配度来衡量相似性，作为定性参考。

液相色谱电喷雾离子阱飞行时间质谱（LCMS-IT-TOF）是杂交质谱的一种，它将离子阱与飞行时间两种不同类型的质谱仪进行联用，综合二者优点进行样品分析。离子阱作为碰撞室进行离子碎裂，获得超过二级质谱的多级质谱数据，使用飞行时间质谱作为质量分析器从而获得高灵敏度、高质量精度的数据。因此，LCMS-IT-TOF 可以实现全谱模式下的超高灵敏度、高精度分析，同时根据多级质谱数据（ MS^n , $n>2$ ），提高定性分析的准确程度。

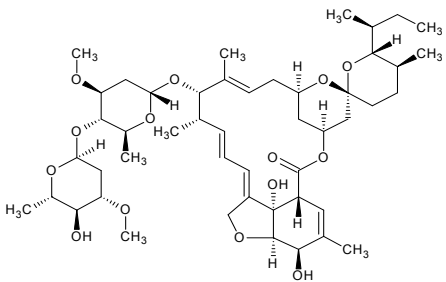
本项目利用 LCMS-IT-TOF 技术和 ACD LABS 12.0 MS Manager 软件，将 132 种兽药的质谱碎片信息建立相对标准的质谱谱库，提高了对目标化合物鉴定的效率和可靠性，为进行快速筛选、定性和监管管理提供一种简便、快速、实用性强的多兽药残留检测方法和质谱谱库，利于实际应用中的快速筛选和检索等应急反应。

2. 质谱库的存储结构及信息

各化合物建库详细信息见第三部分。

谱库将与化合物有关的所有参数和质谱信息存储到同一个文件中，每一个文件的存储结构包括四部分：第一部分化合物的化学结构式，第二部分化合物的分子量和分子式信息，第三部分用户记录信息（加合模式、电离模式、化合物类型、中文名、英文名、CAS 登记号等），第四部分为该级质谱图信息及质谱图。以依维菌素为例，多级标准质谱库的存储结构及信息如下表所示。

表 4-1 建立多级标准质谱库的存储结构

Compound	依维菌素
Structrural Formula	 The image shows the chemical structure of Ivermectin, a complex macrocyclic lactone. It features a large 14-membered lactone ring with several methyl groups and hydroxyl groups. Attached to this ring are two side chains: one is a 2,6-dimethyl-1,3-dioxane ring, and the other is a 2,6-dimethyl-1,3-dioxane ring with a methyl group. The structure is drawn with stereochemistry indicated by wedges and dashes.

Structure	FW	875.09
User Data	Formula	C ₄₈ H ₇₄ O ₁₄
Record User Data	Adduct Ion	[M+Na] ⁺
	Ion Source	ESI+
	Instrument	LCMS-IT-TOF
	Compound	阿维菌素类
	CAS No.	71827-03-7
	Chinese	依维菌素
	English Name	Ivermectin B _{1a}
Document User Data	Scan Type MS ¹	
	Scan Type MS ²	
	Scan Type MS ³	

3. 质谱库的建立

3.1 将质谱图保存为*.jdx 格式

打开要处理的数据文件，使用选取平均背景工具，如图 3-1。将得到的各级质谱图分别保存为*.jdx 格式，鼠标右键单击，先选择 File Convert-Convert to JCMP，如图 3-2，然后取文件名称保存。依次保存好每一级的质谱数据。

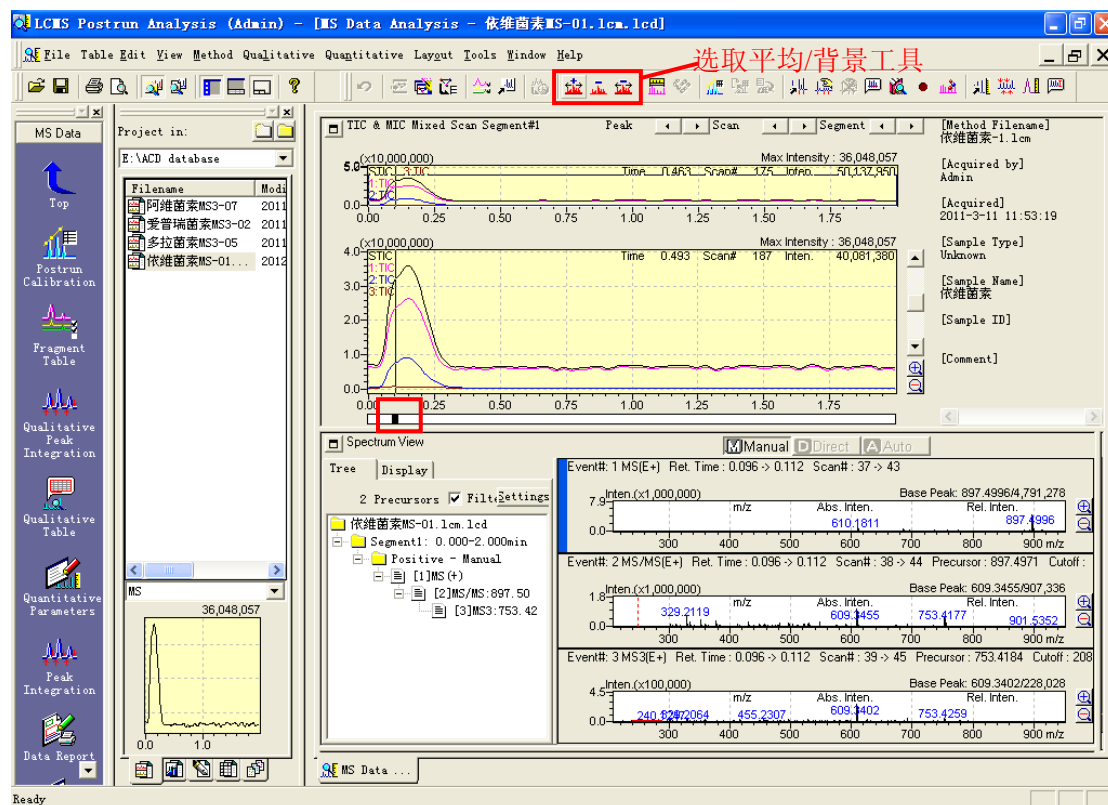


图 3-1

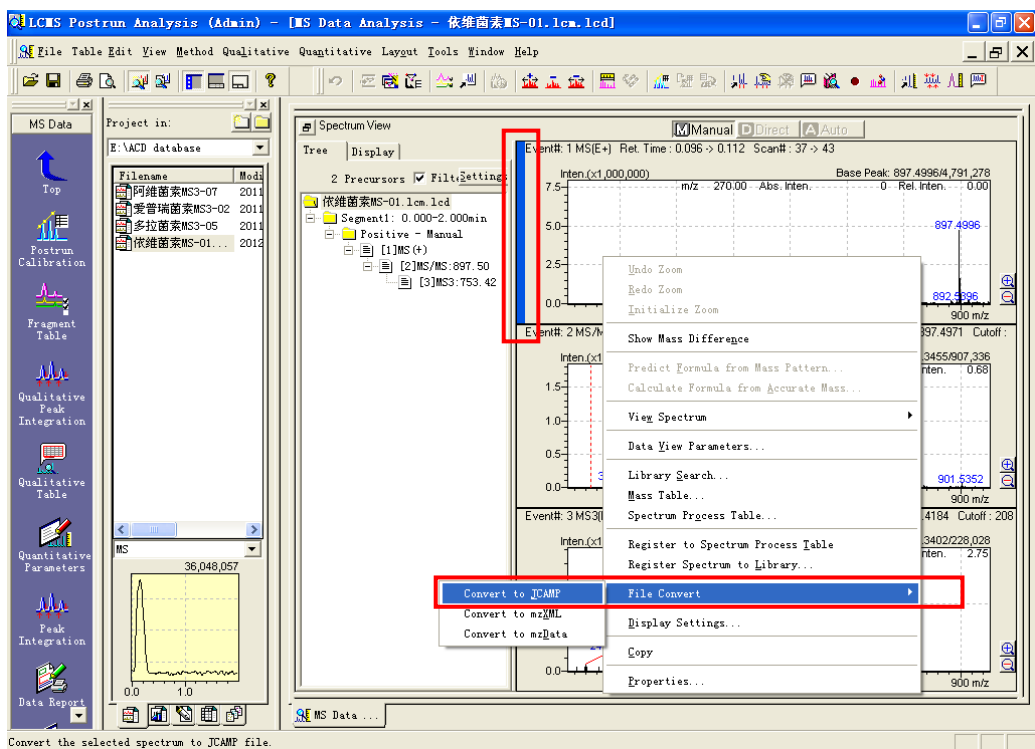


图 3-2

3.2 创建 ACD\MS Manager 数据库

打开 ACD\MS Manager 软件，如图 3-3。单击左下角 3-Database 图标，切换至数据库界面，单击左上角 Database-New 创建新数据库，如图 3-4。编辑新数据库名称，如图 3-5。设置数据库编辑/检索权限密码，如图 3-6。

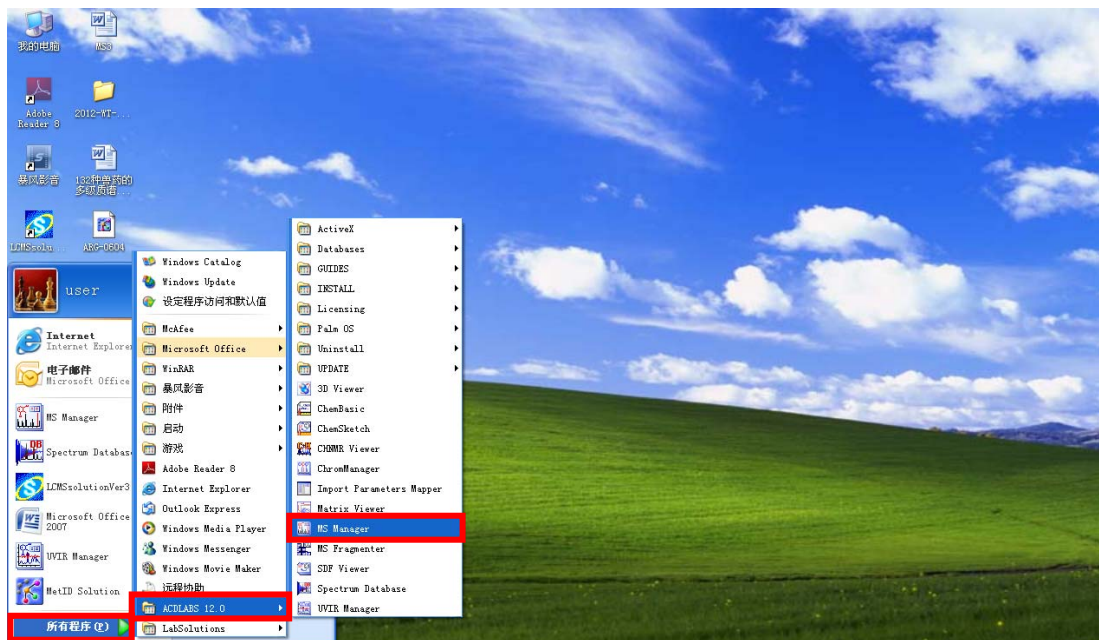


图 3-3

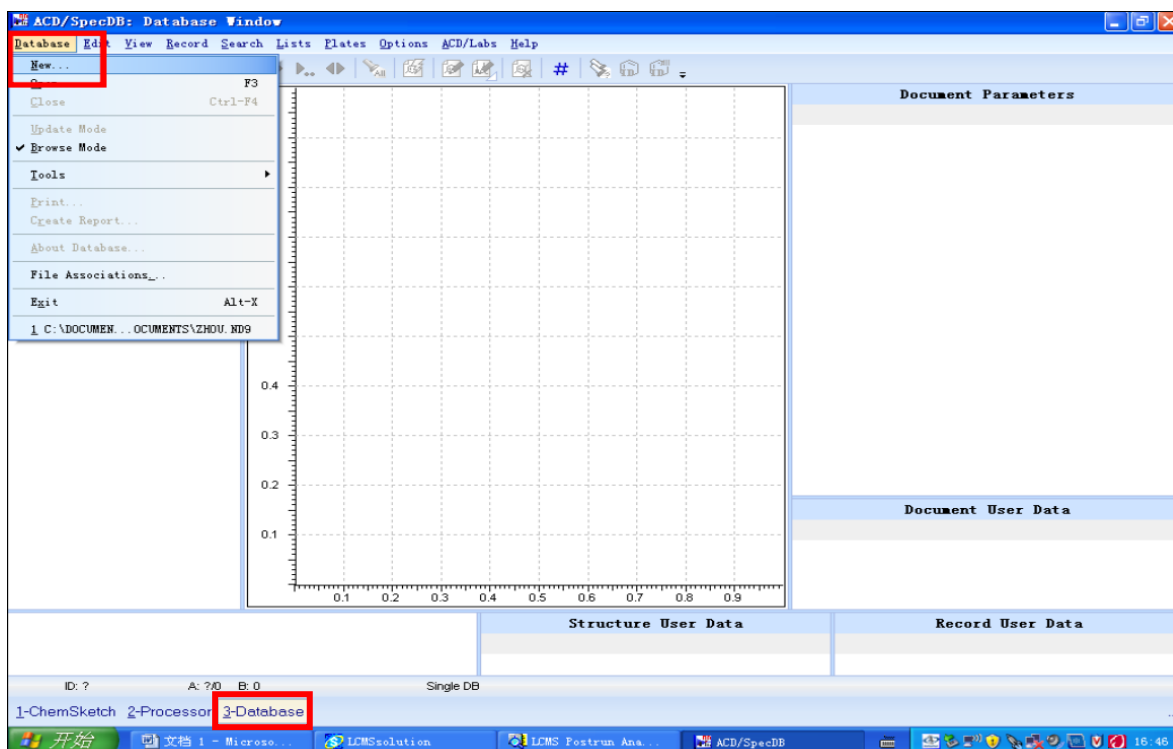


图 3-4

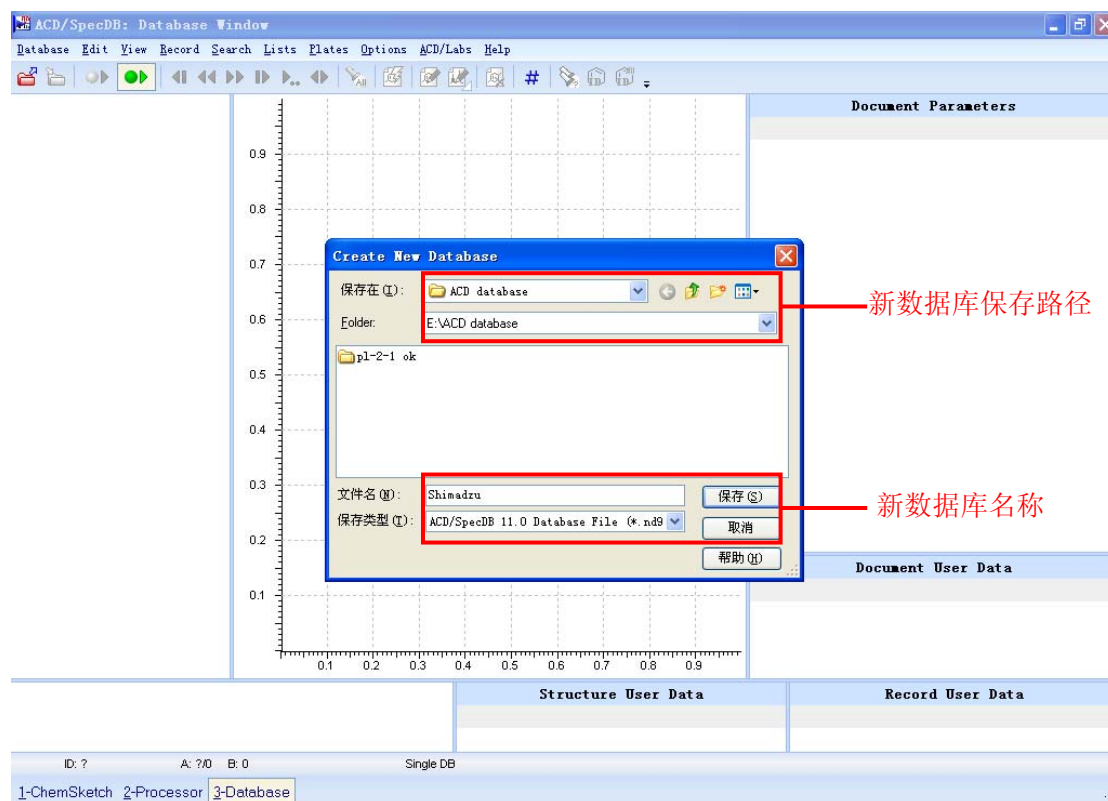


图 3-5

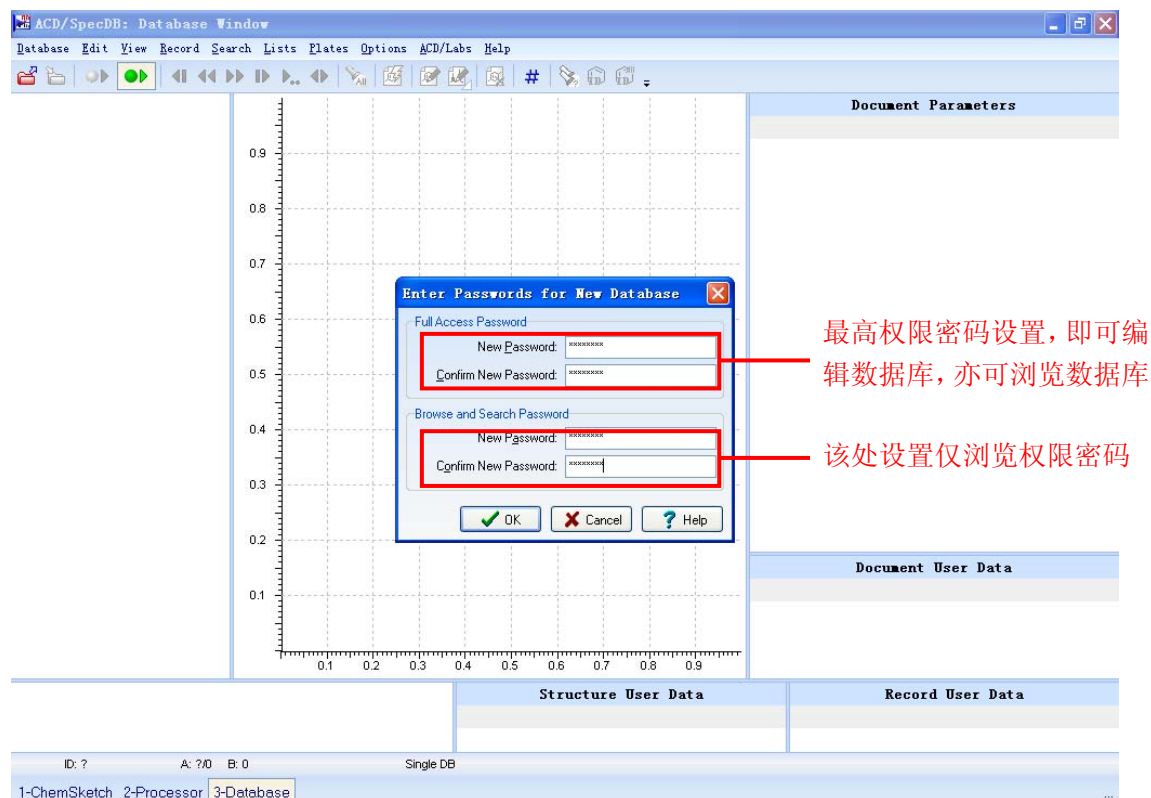


图 3-6

切换至数据处理窗口，单击左下角 2-Processor，切换界面至数据处理窗口。单击 Import 图标，将建数据库所需要的数据导入编辑，如图 3-7。

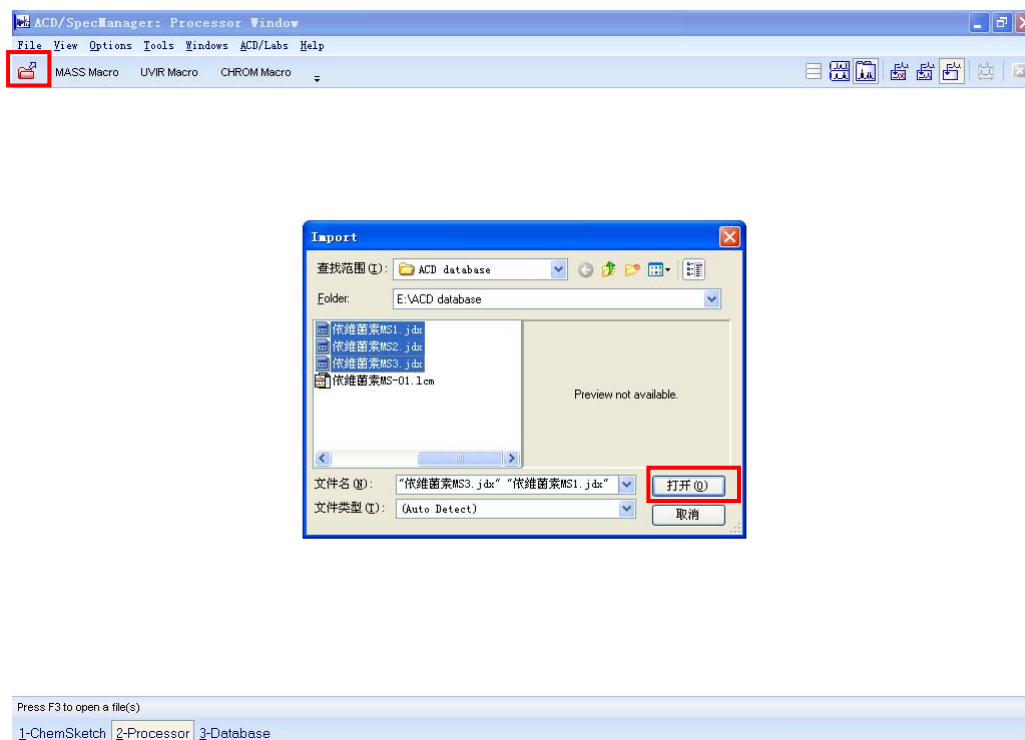


图 3-7

切换窗口至结构式绘图界面，将结构式导入质谱图。单击左下角 1-ChemSketch，单击右上角 dictionary 图标，在 Quick Search 中输入化合物名称或 CAS 号等，等到结构式，或者也可以自己画结构式，如图 3-8。

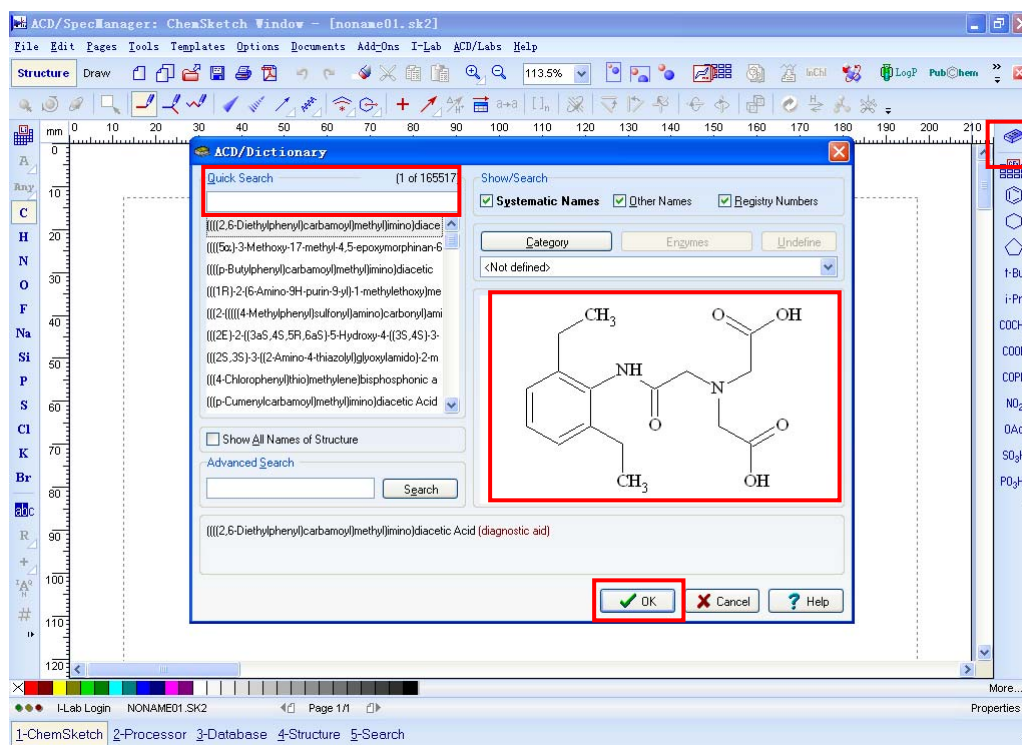


图 3-8

将处理好的一级质谱图导入数据库，选择 MS¹ 质谱图，单击左上角 up to Database 图标，弹出 Record Type for Structure 窗口，选择 One Structure For All Document，单击 OK，如图 3-9。导入二级质谱图，选择 MS² 质谱图，单击左上角 up to Database 图标，弹出窗口 Mass Spectrum，选择 Attach Spectrum to Current Record，单击 OK，然后在弹出的窗口“Structures Are Not Equal”中，选择 Keep Current Structure，单击 OK。导入三到多级质谱图的过程同导入二级质谱图 MS² 一样。

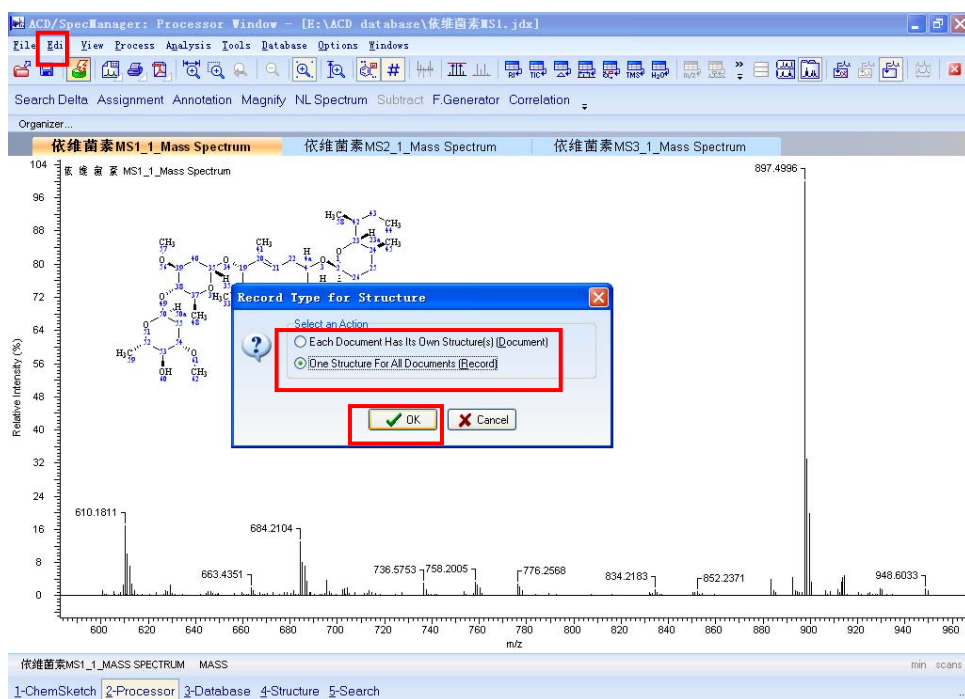


图 3-9

3.3 编辑数据补充信息

质谱图、结构式、数据文件信息等随着数据的导入自动添加到了数据库中，除此之外也可以自行将所需要的信息编辑到数据库中。

在“Document User Data”/“Record User Data”/“Structure User Data”中双击“double click to enter new data items”，弹出“select data name”对话框可手动录入所需要的信息（中文名称、英文名称、cas号、离子种类、前体离子、多级质谱等）点击“OK”后可对具体内容进行编辑，以便将来信息检索。

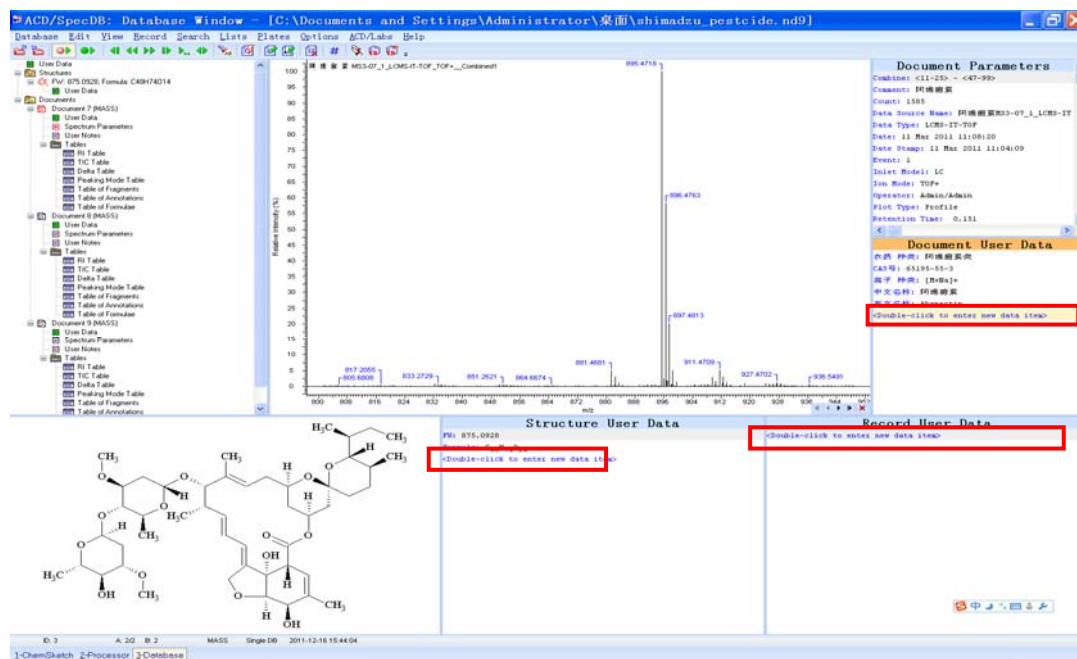


图 3-10

4. 质谱库的检索

本兽药残留全面解决方案采用 ACD LABS 12.0 软件提供的 MS Manager 模块, 将符合质量精度要求的图谱加入质谱库中, 并编辑相关属性, 共收集了 132 种兽药标准品的标准质谱图。在库搜索方法中指定一个或多个库, 用库搜索方法将得到的质谱图与所建立的图谱库进行检索, 进行各级质谱图比对, 通过主要碎片离子峰的 m/z 与标准谱图的对比, 最后得到的结果用各级谱图匹配度(MS similarity)来衡量相似性, 匹配度的程度可作为定性参考。

打开 ACD MS Manager 软件, 打开数据库, 选择搜索库文件, 输入质谱数据库浏览密码, 如图 3-11。

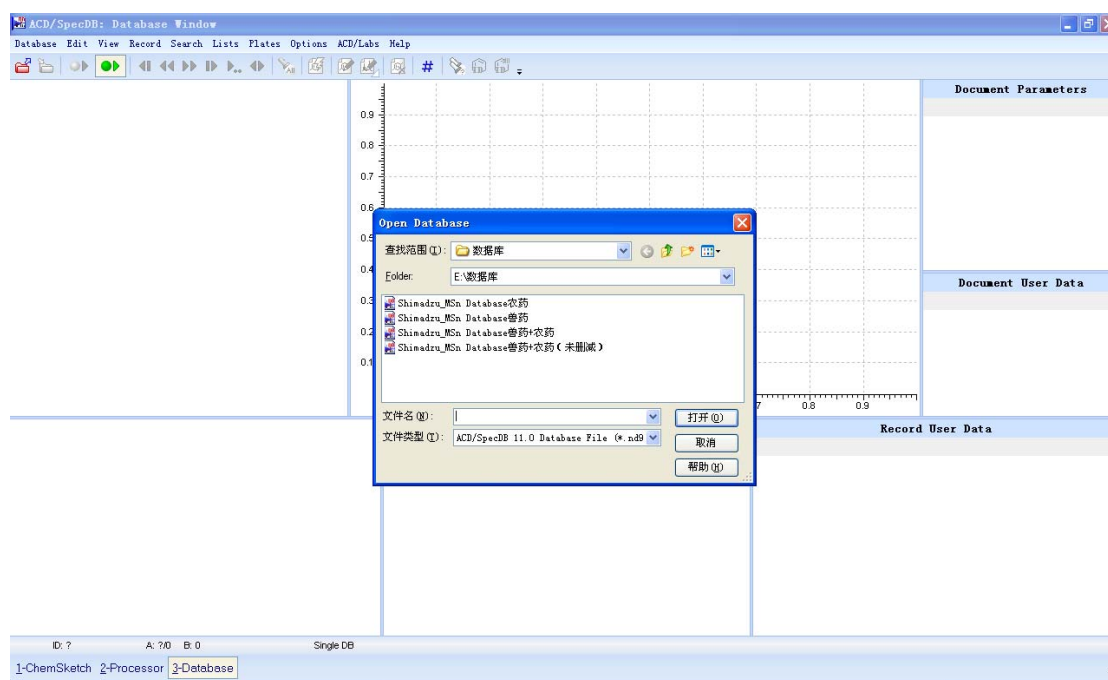


图 3-11

打开待检索的数据文件。将*.lcd 格式文件转换为 JCAMP 文件。进入数据库处理窗口, 打开要处理的数据文件, 使用选取平均/背景工具, 将得到的质谱图分别保存为*.jdx 格式, 鼠标右键, 选择 File Convert-Convert to JCAMP, 然后取文件名称保存。在 Processor 下打开被保存为 JCAMP 格式的待检索文件, 在左上角 File 中选择 Open, 选择要待检索的数据文件, 如图 3-12。在 Database 中选择 Search Spectrum, 如图 3-13。



在左上角 File 中选择 Open，选择要待检索的数据文件

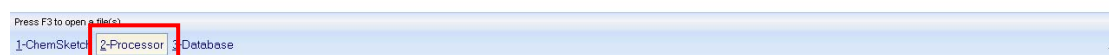
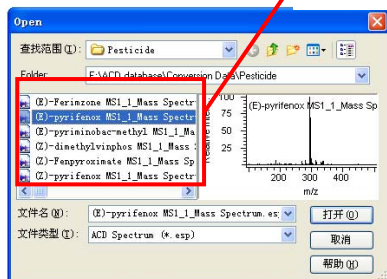
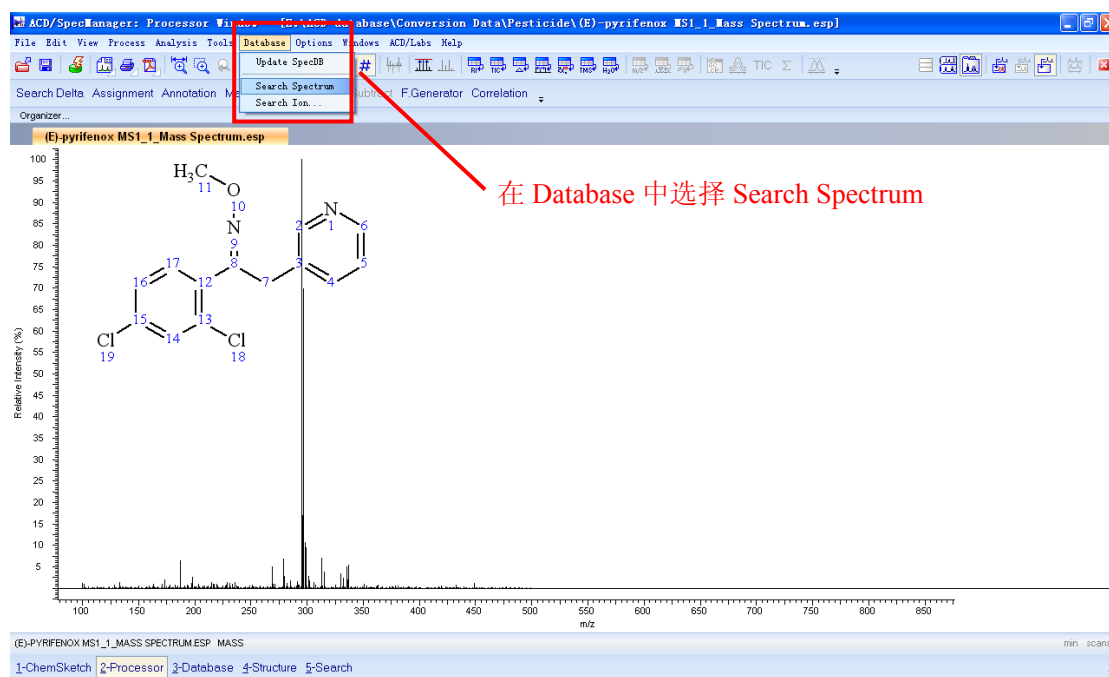


图 3-12



在 Database 中选择 Search Spectrum

图 3-13

在打开的数据库中检索到 1 个匹配的结果，如图 3-14。点击 OK 后自动跳转至 Database 界面，如图 3-15。在进行下一个检索之前点击 Retrieve All Records。

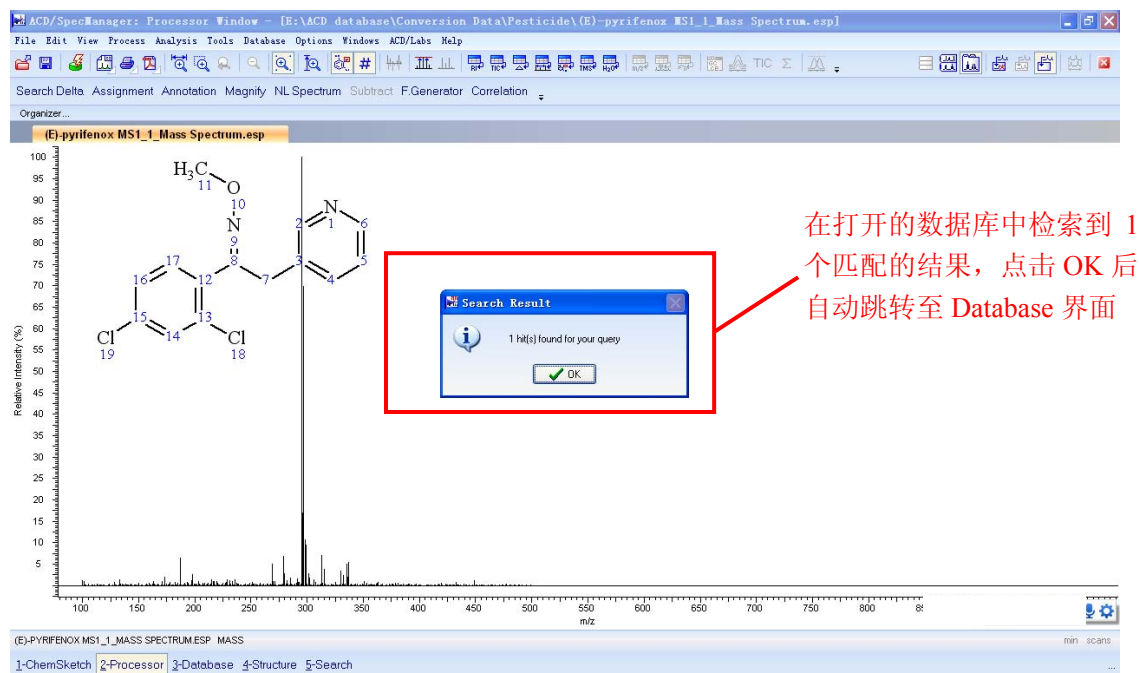


图 3-14

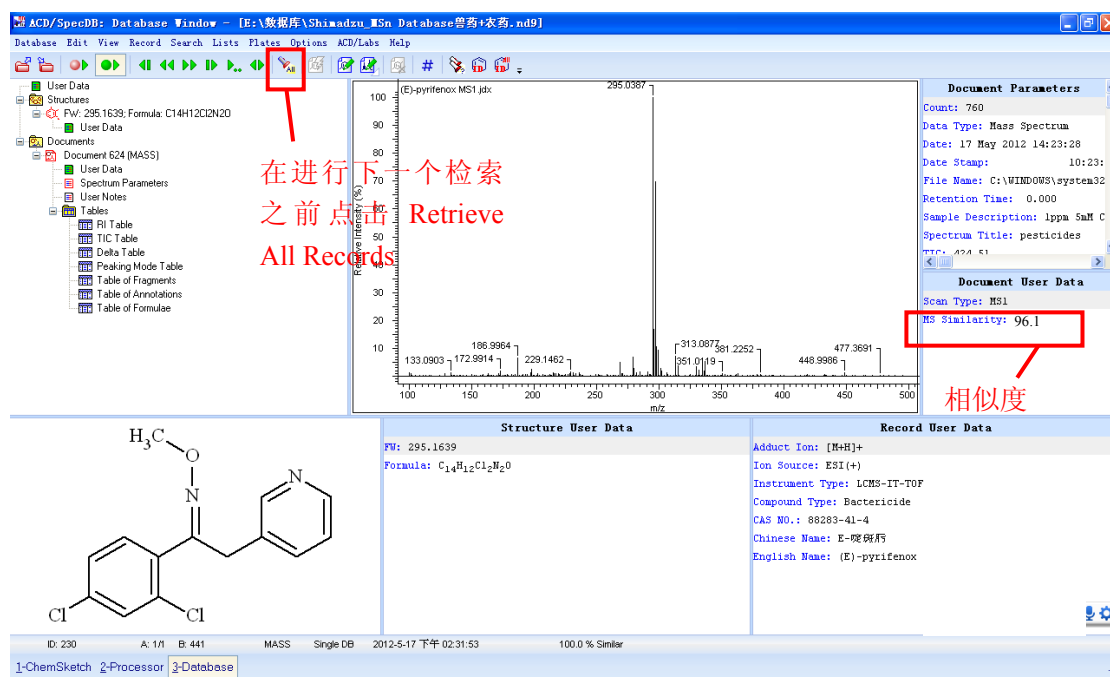


图 3-15

本解决方案建立了 15 类兽药分类检测，和 100 种兽药同时检测的 LCMS-IT-TOF 法，完成对目标分析物的有效分离检测。加上本质谱库获得的 132 种兽药标准物质的 LCMS-IT-TOF 标准质谱库，创建了筛查和鉴定禽肉和饲料中兽药残留的流程。

此数据库操作简单，针对性较强，用于兽药快速检测，简便快捷，可大大提高兽药残留的分析速度。目前收录的化合物数量相对还较少，可根据实际情况，随时补充完善，继续丰富完善此库。

5. 兽药的多级质谱图

数据库中收录了 132 种兽药的信息和多级质谱图。每页显示一个化合物的相关信息、结构式、三级质谱图和每级质谱图前体离子或最高丰度离子的分子式预测结果。所有化合物的列表见附录。

1. 磺胺甲恶唑

英文名称: Sulfamethoxazole

结构式:

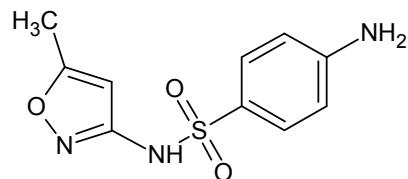
CAS#: 723-46-6

分子式: C₁₀H₁₁N₃O₃S

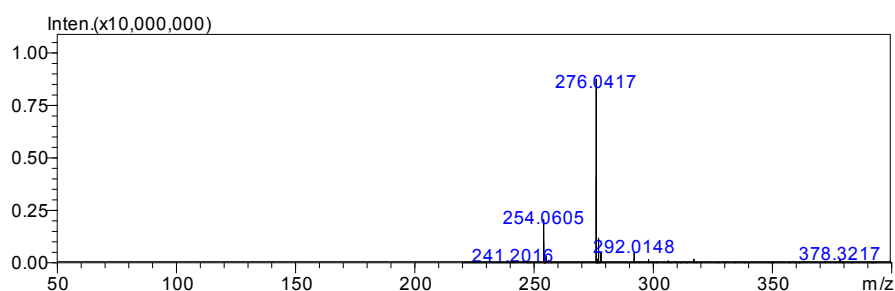
MW: 253.28

离子: [M+H]⁺

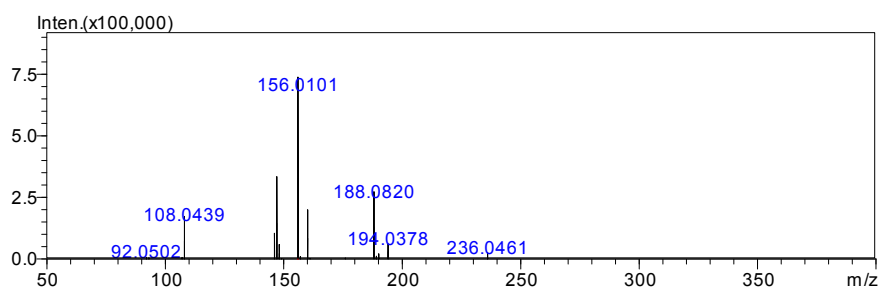
质谱图:



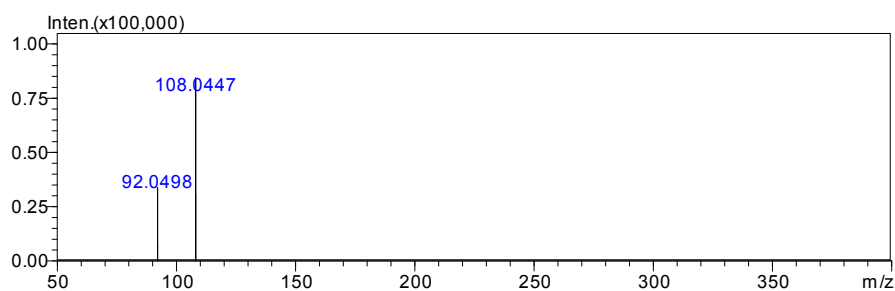
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	C ₁₀ H ₁₁ N ₃ O ₃ S	[M+H] ⁺	254.0605	254.0594	4.33 ppm
MS ²	C ₆ H ₅ NO ₂ S	[M+H] ⁺	156.0101	156.0114	-1.3 mDa
MS ³	C ₆ H ₅ NO	[M+H] ⁺	108.0447	108.0444	0.3 mDa

2. 磺胺间甲氧嘧啶

英文名称: Sulfamonomethoxine 结构式:

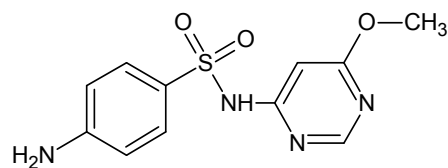
CAS#: 1220-83-3

分子式: $C_{11}H_{12}N_4O_3S$

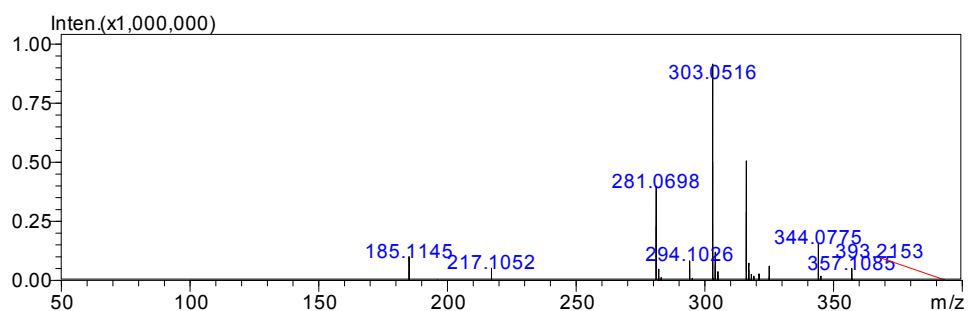
MW: 280.3

离子: $[M+H]^+$

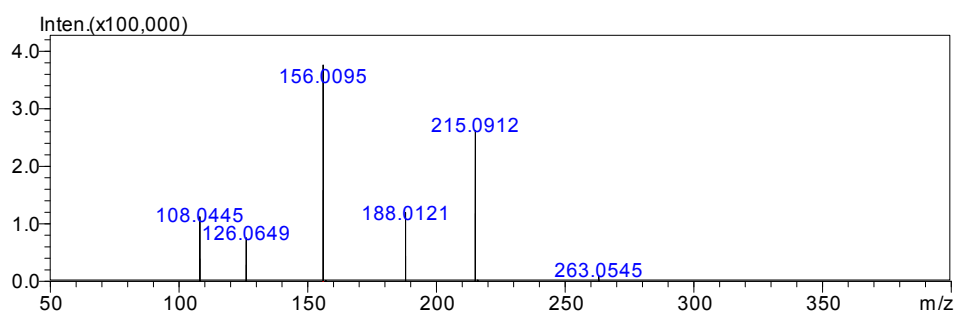
质谱图:



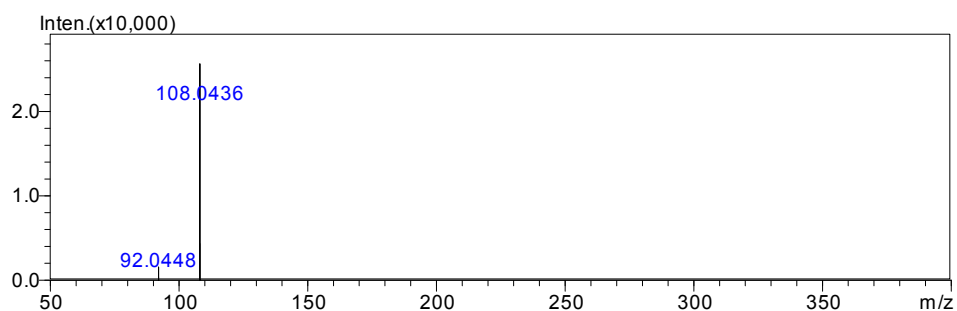
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_{11}H_{12}N_4O_3S$	$[M+H]^+$	281.0698	281.0703	-1.78 ppm
MS ²	$C_6H_5NO_2S$	$[M+H]^+$	156.0095	156.0114	-1.9 mDa
MS ³	C_6H_5NO	$[M+H]^+$	108.0436	108.0444	-0.8 mDa

3. 磺胺二甲基嘧啶

英文名称: Sulfamethazine

结构式:

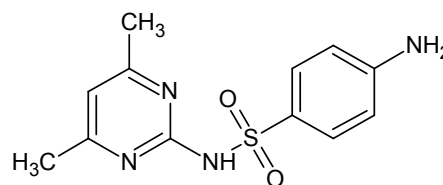
CAS#: 57-68-1

分子式: C₁₂H₁₄N₄O₂S

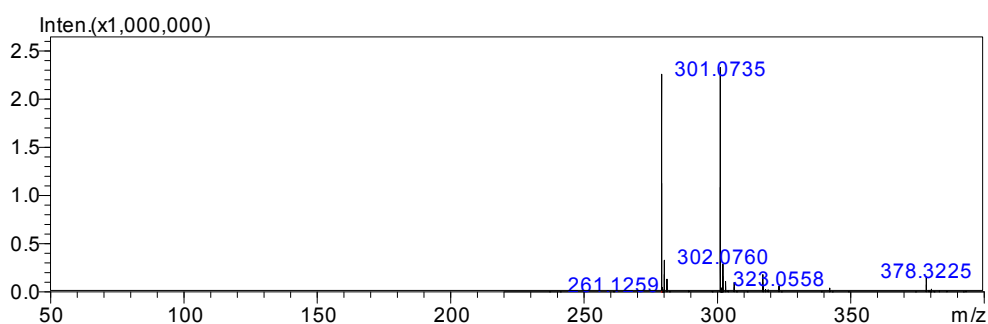
MW: 278.33

离子: [M+H]⁺

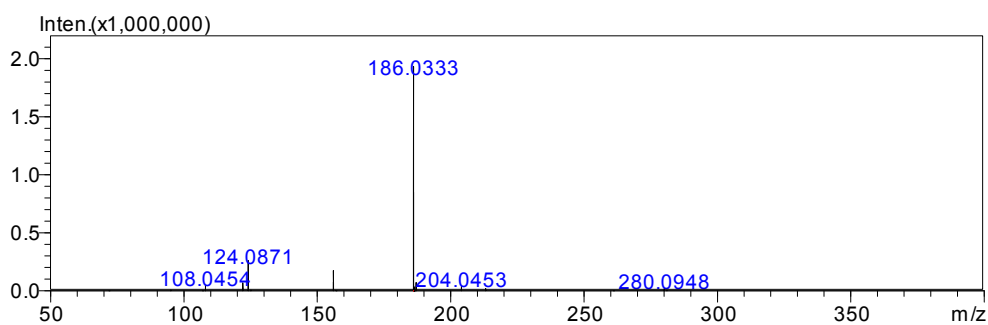
质谱图:



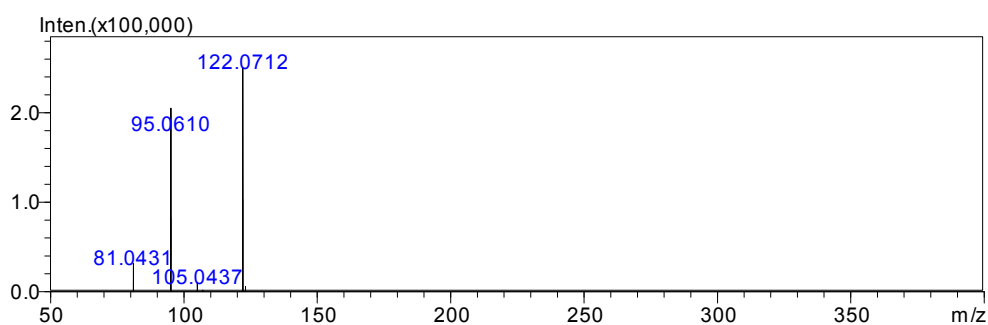
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	C ₁₂ H ₁₄ N ₄ O ₂ S	[M+H] ⁺	279.0916	279.0910	2.15 ppm
MS ²	C ₆ H ₇ N ₃ O ₂ S	[M+H] ⁺	186.0333	186.0332	0.1 mDa
MS ³	C ₆ H ₇ N ₃	[M+H] ⁺	122.0712	122.0713	-0.1 mDa

4. 磺胺间二甲氧嘧啶

英文名称: Sulfadimethoxine

结构式:

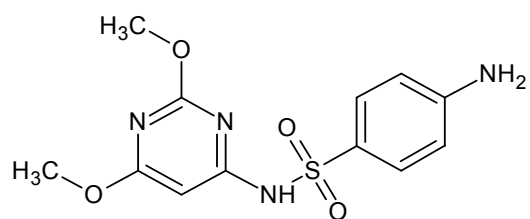
CAS#: 122-11-2

分子式: C₁₂H₁₄N₄O₄S

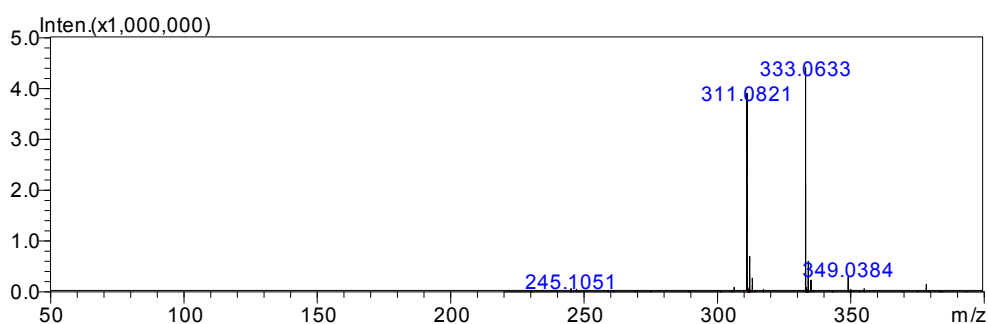
MW: 310.33

离子: [M+H]⁺

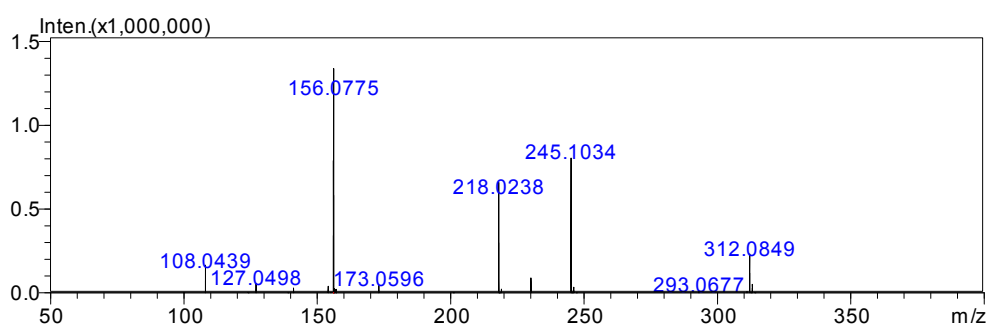
质谱图:



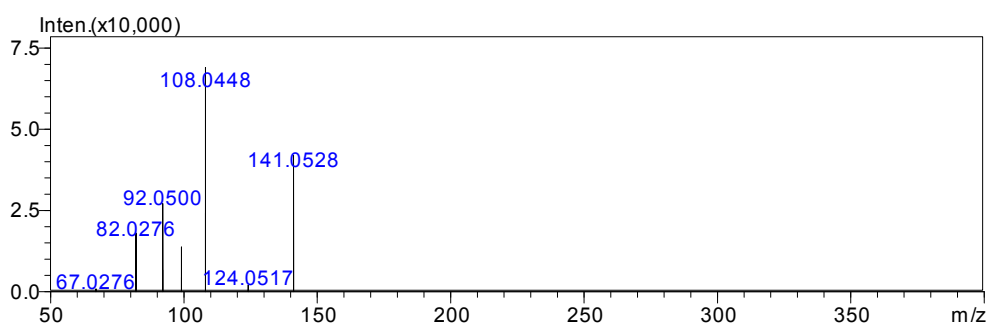
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	C ₁₂ H ₁₄ N ₄ O ₄ S	[M+H] ⁺	311.0821	311.0809	3.86 ppm
MS ²	C ₆ H ₉ N ₃ O ₂	[M+H] ⁺	156.0775	156.0768	0.7 mDa
MS ³	C ₆ H ₅ NO	[M+H] ⁺	108.0448	108.0444	0.4 mDa

5. 磺胺喹恶啉

英文名称: Sulfaquinolone

结构式:

CAS#: 59-40-5

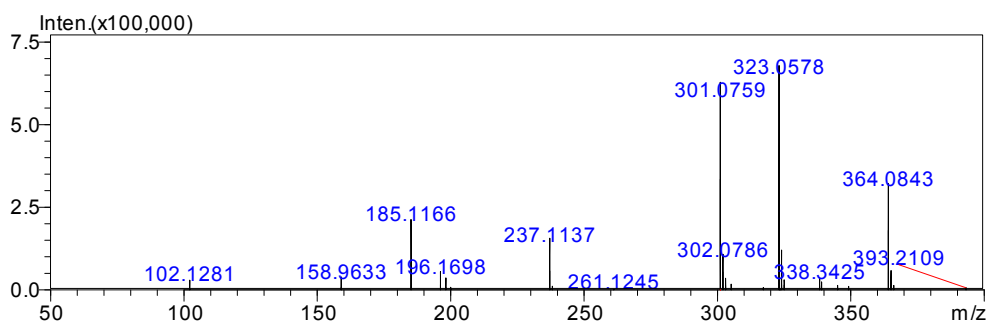
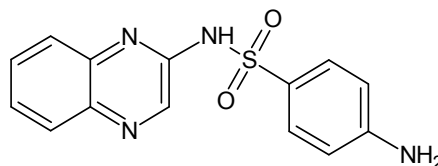
分子式: $C_{14}H_{12}N_4O_2S$

MW: 300.34

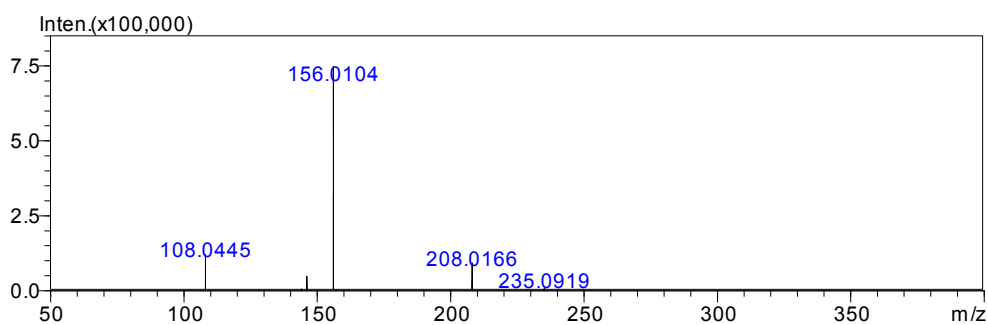
离子: $[M+H]^+$

质谱图:

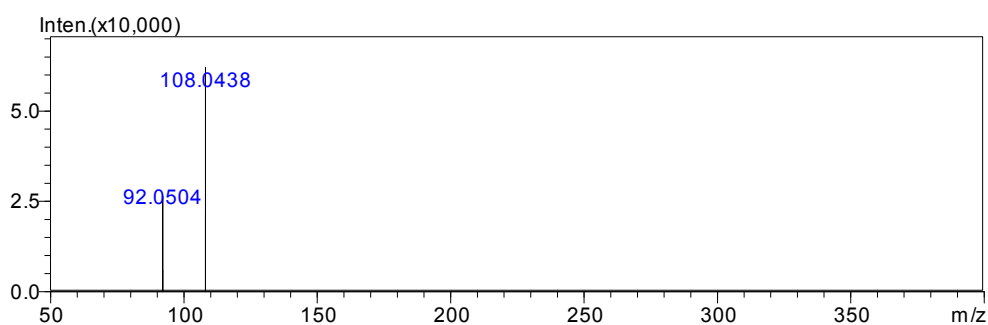
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_{14}H_{12}N_4O_2S$	$[M+H]^+$	301.0759	301.0754	1.66 ppm
MS ²	$C_6H_5NO_2S$	$[M+H]^+$	156.0114	156.0114	-1.0 mDa
MS ³	C_6H_5NO	$[M+H]^+$	108.0438	108.0444	-0.6 mDa

6. 苯酰磺胺

英文名称: Sulfabenzamide

结构式:

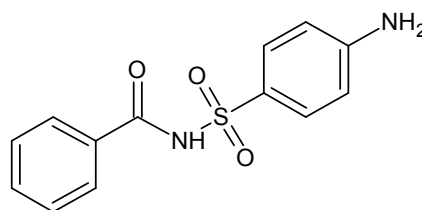
CAS#: 127-71-9

分子式: $C_{13}H_{12}N_2O_3S$

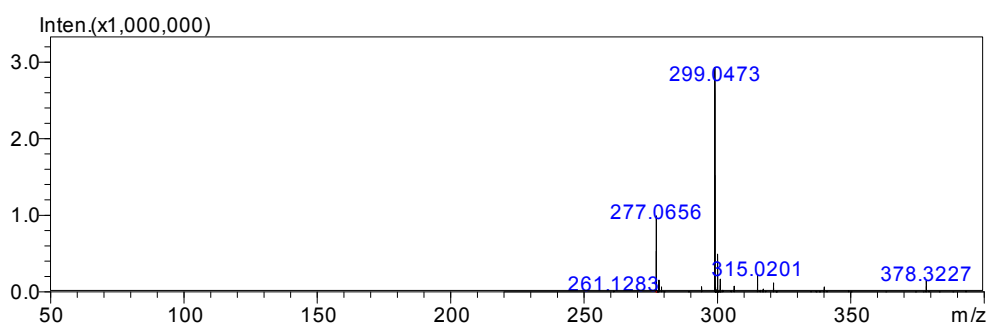
MW: 276.31

离子: $[M+H]^+$

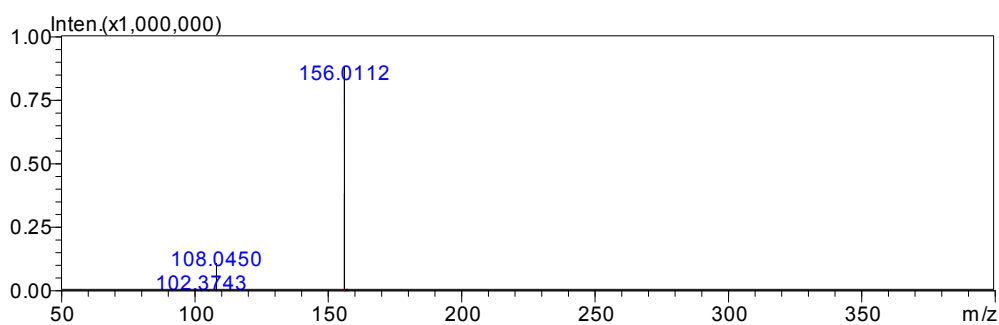
质谱图:



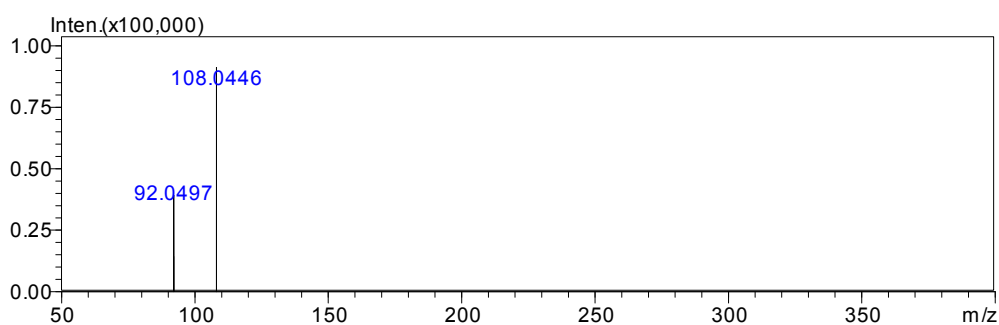
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_{13}H_{12}N_2O_3S$	$[M+H]^+$	277.0656	277.0641	5.41 ppm
MS ²	$C_6H_5NO_2S$	$[M+H]^+$	156.0112	156.0114	-0.2 mDa
MS ³	C_6H_5NO	$[M+H]^+$	108.0446	108.0444	0.2 mDa

7. 磺氯吡啶

英文名称: Sulfachloropyridazine 结构式:

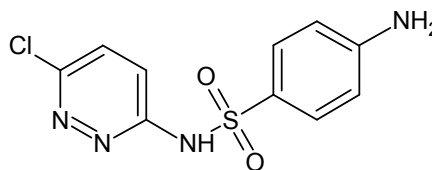
CAS#: 80-32-0

分子式: $C_{10}H_9ClN_4O_2S$

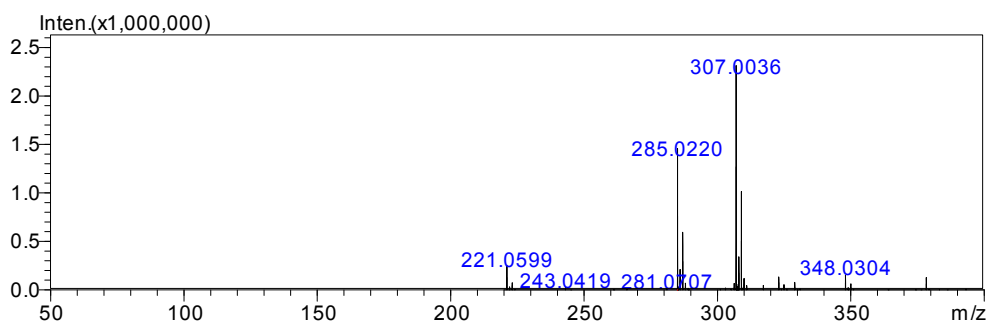
MW: 284.72

离子: $[M+H]^+$

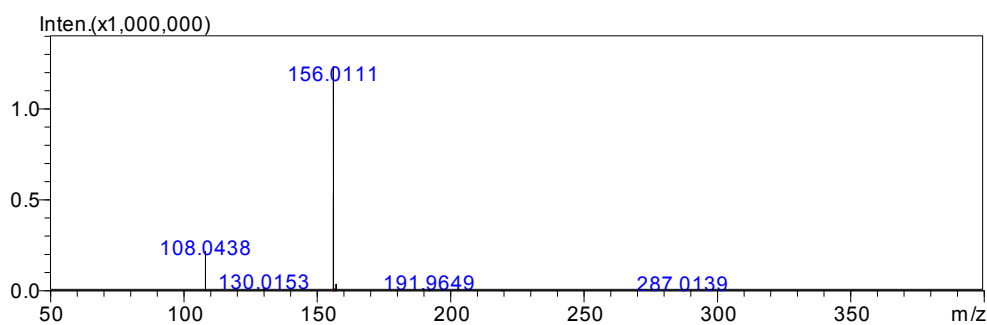
质谱图:



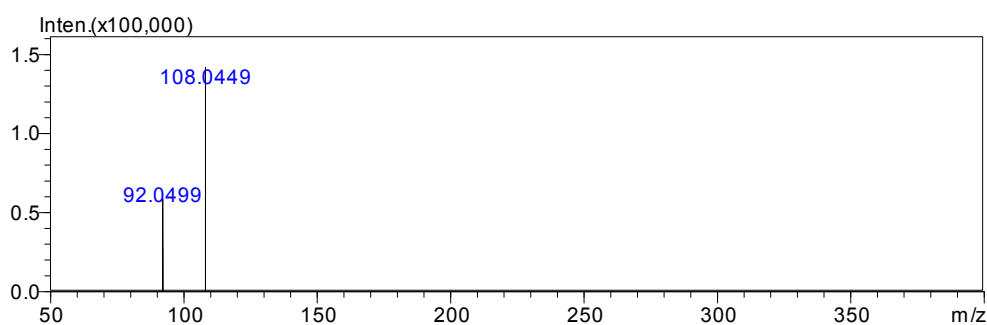
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_{10}H_9N_4O_2S$	$[M+H]^+$	285.0220	285.0208	4.21 ppm
MS ²	$C_6H_5NO_2S$	$[M+H]^+$	156.0111	156.0114	-0.3 mDa
MS ³	C_6H_5NO	$[M+H]^+$	108.0449	108.0444	0.5 mDa

8. 磺胺醋酰

英文名称: Sulfacetamide

结构式:

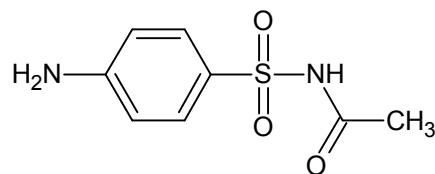
CAS#: 144-80-9

分子式: $C_8H_{10}N_2O_3S$

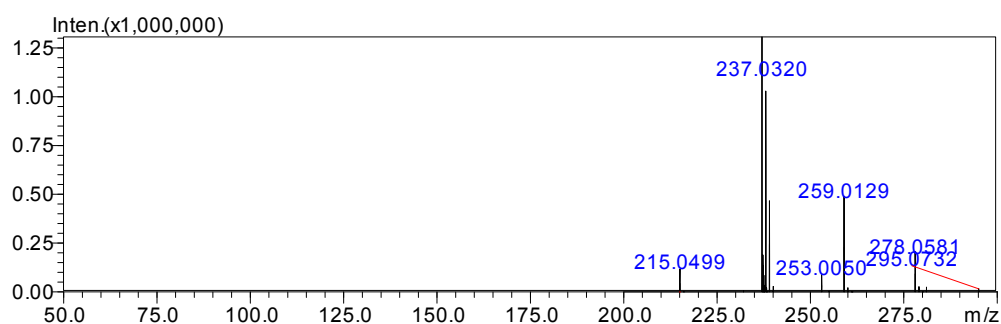
MW: 214.24

离子: $[M+H]^+$

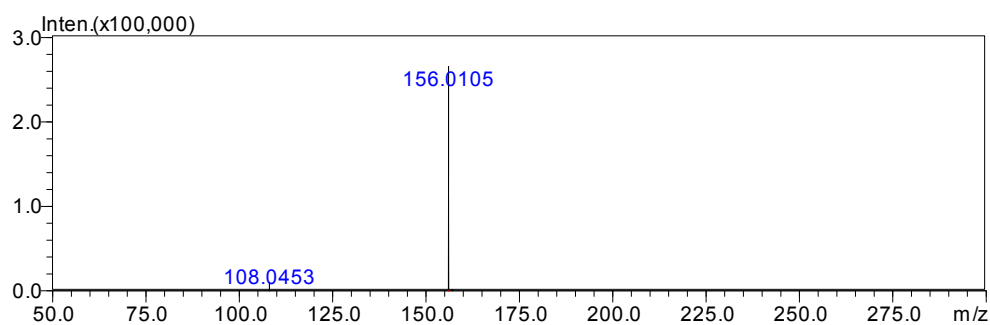
质谱图:



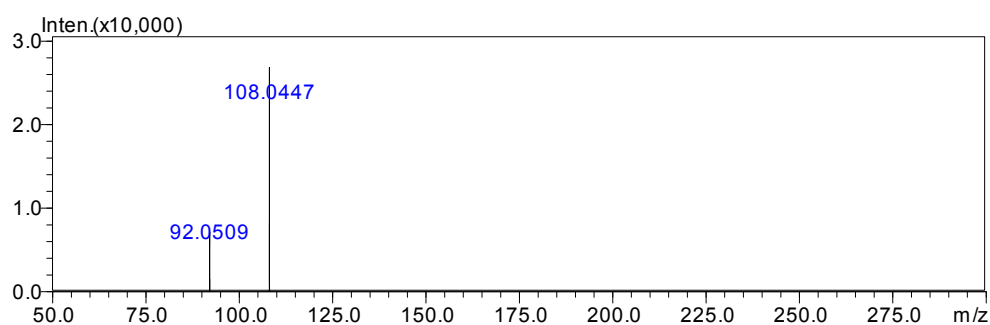
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_8H_{10}N_2O_3S$	$[M+H]^+$	215.0499	215.0485	6.51 ppm
MS ²	$C_6H_5NO_2S$	$[M+H]^+$	156.0105	156.0114	-0.9 mDa
MS ³	C_6H_5NO	$[M+H]^+$	108.0447	108.0444	0.3 mDa

9. 磺胺嘧啶

英文名称: Sulfadiazine

结构式:

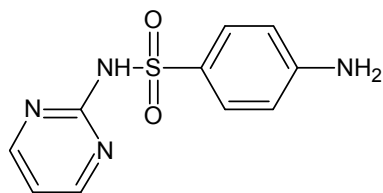
CAS#: 68-35-9

分子式: C₁₀H₁₀N₄O₂S

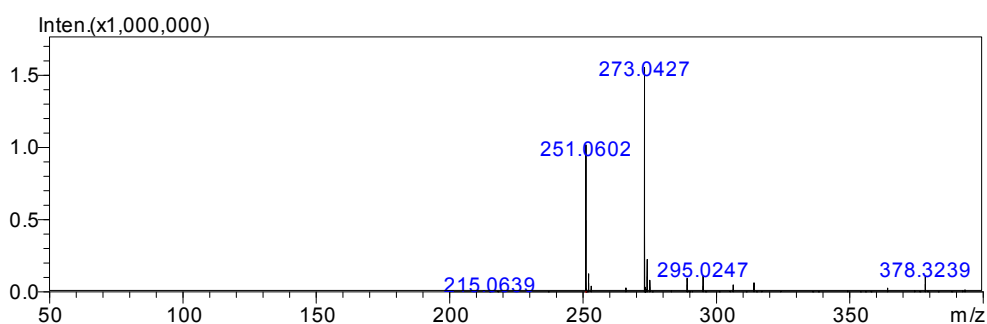
MW: 250.2

离子: [M+H]⁺

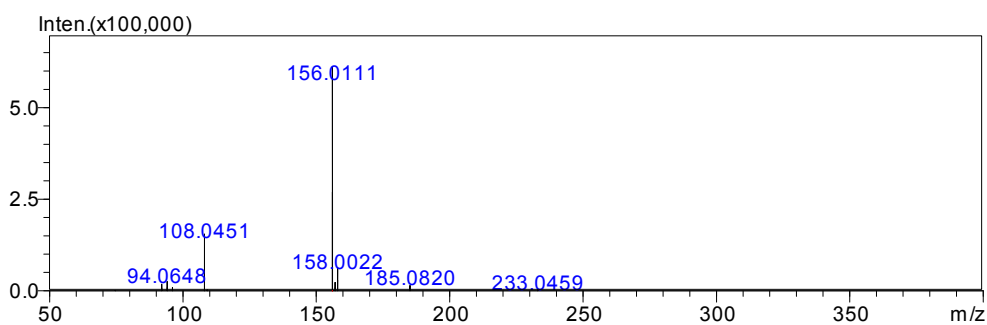
质谱图:



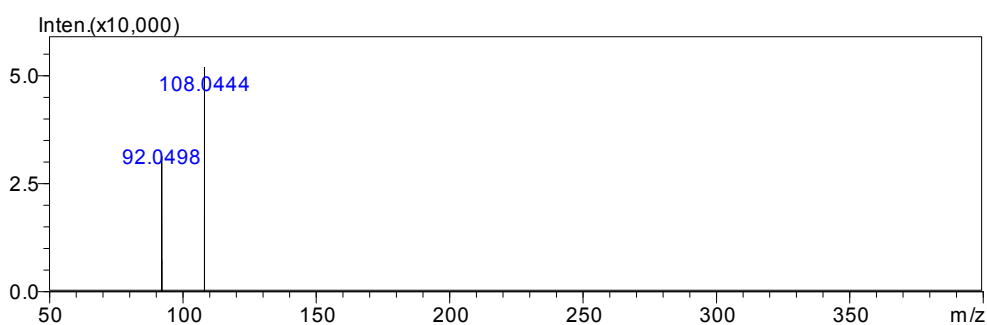
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	C ₁₀ H ₁₀ N ₄ O ₂ S	[M+H] ⁺	251.0602	251.0597	1.99 ppm
MS ²	C ₆ H ₅ NO ₂ S	[M+H] ⁺	156.0111	156.0114	-0.3 mDa
MS ³	C ₆ H ₅ NO	[M+H] ⁺	108.0444	108.0444	0.0 mDa

10. 磺胺甲基嘧啶

英文名称: Sulfamerazine

结构式:

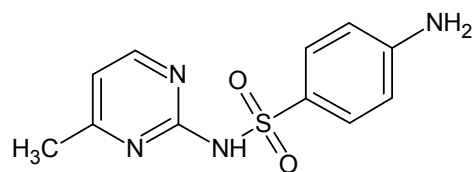
CAS#: 127-79-7

分子式: $C_{11}H_{12}N_4O_2S$

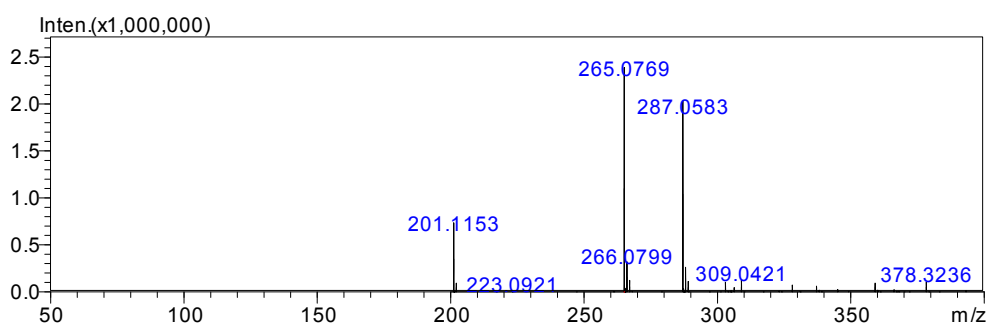
MW: 264.3

离子: $[M+H]^+$

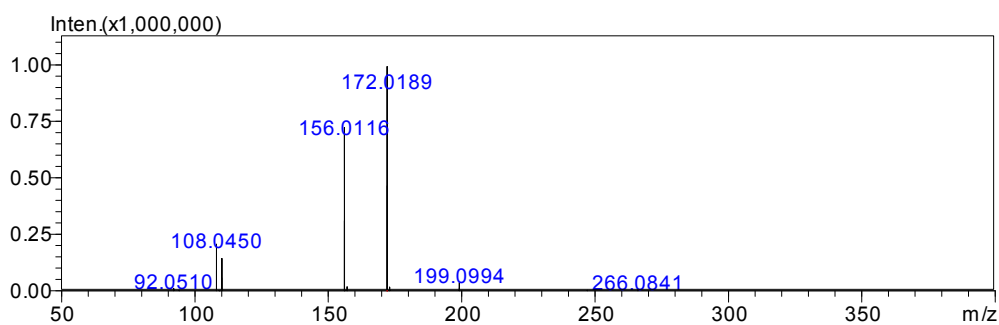
质谱图:



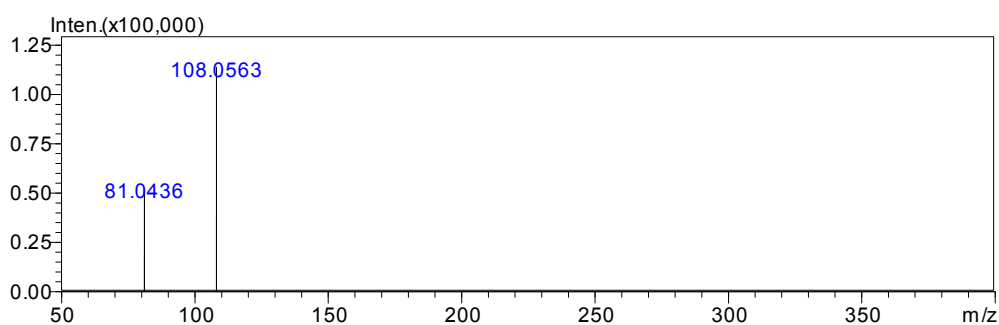
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_{11}H_{12}N_4O_2S$	$[M+H]^+$	265.0769	265.0754	5.66 ppm
MS ²	$C_5H_5N_3O_2S$	$[M+H]^+$	172.0189	172.0175	1.4 mDa
MS ³	$C_5H_5N_3$	$[M+H]^+$	108.0563	108.0556	0.7 mDa

11. 磺胺对甲氧嘧啶

英文名称: Sulfamer

结构式:

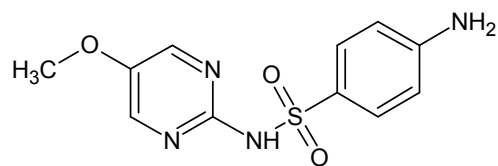
CAS#: 651-06-9

分子式: $C_{11}H_{12}N_4O_3S$

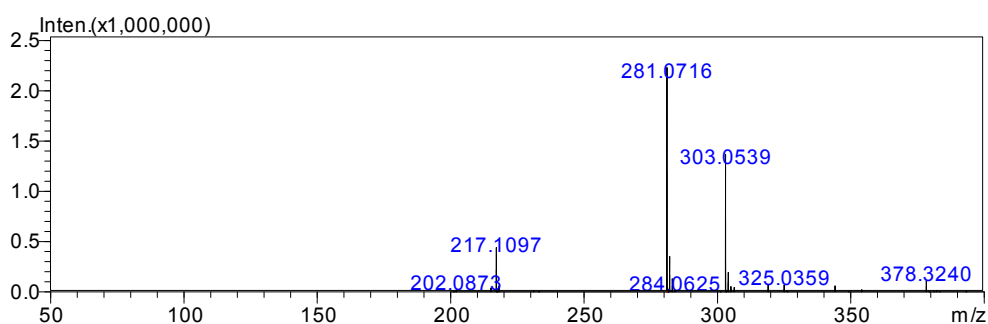
MW: 280.31

离子: $[M+H]^+$

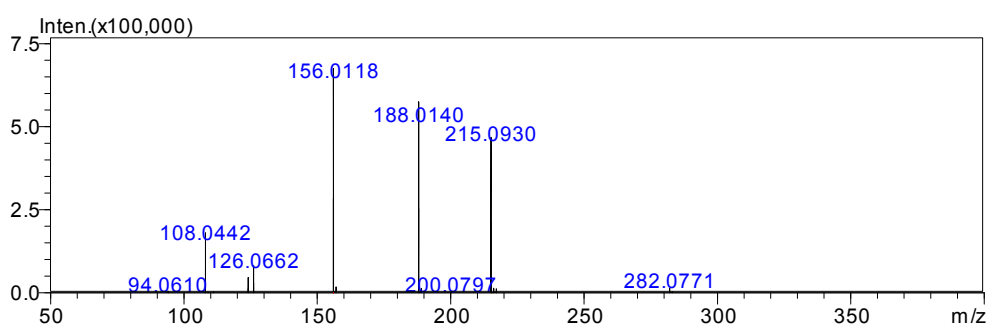
质谱图:



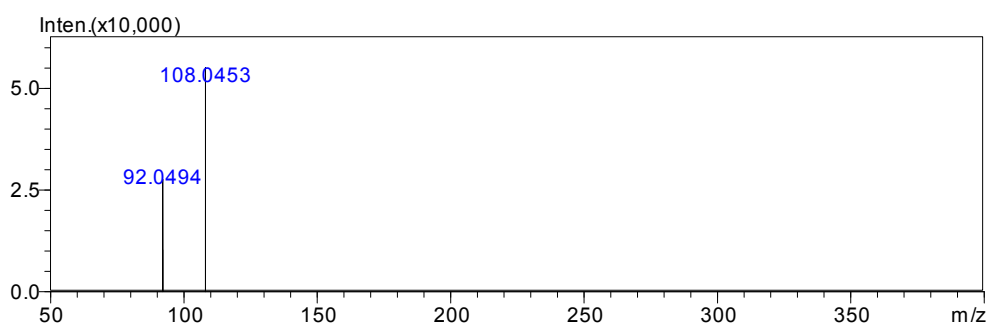
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_{11}H_{12}N_4O_3S$	$[M+H]^+$	281.0716	281.0703	4.63 ppm
MS ²	$C_6H_5NO_2S$	$[M+H]^+$	156.0118	156.0114	0.4 mDa
MS ³	C_6H_5NO	$[M+H]^+$	108.0453	108.0444	0.9 mDa

12. 磺胺甲噻二唑

英文名称: Sulfamethizole

结构式:

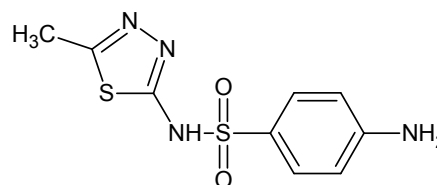
CAS#: 144-82-1

分子式: $C_9H_{10}N_4O_2S$

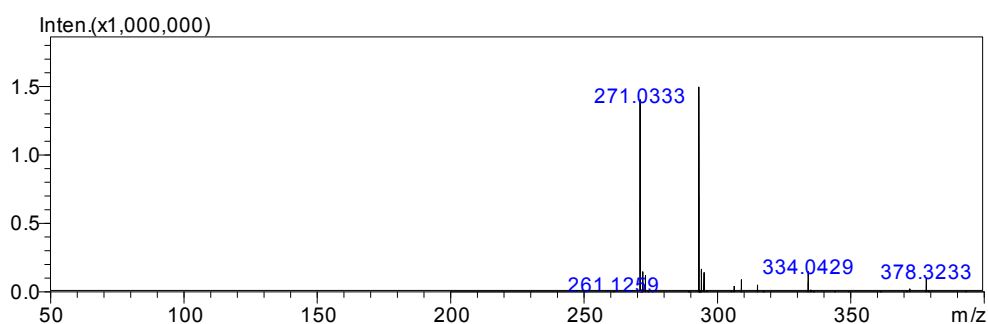
MW: 270.33

离子: $[M+H]^+$

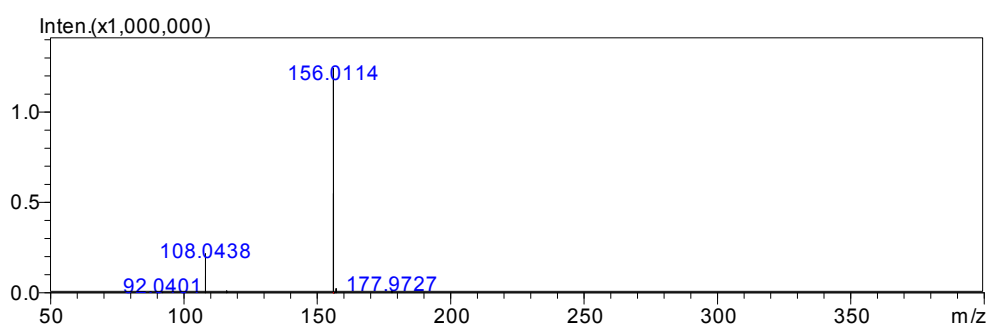
质谱图:



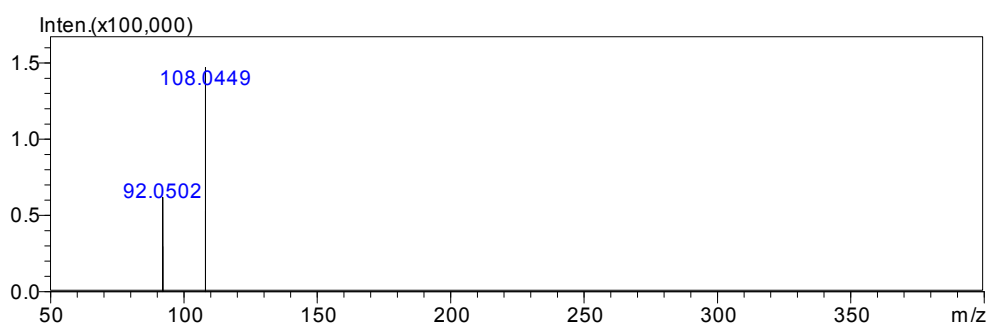
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_9H_{10}N_4O_2S_2$	$[M+H]^+$	271.0333	271.0318	5.53 ppm
MS ²	$C_6H_5NO_2S$	$[M+H]^+$	156.0114	156.0114	0.0 mDa
MS ³	C_6H_5NO	$[M+H]^+$	108.0449	108.0444	0.5 mDa

13. 磺胺甲氧吡嗪

英文名称: Sulfamethoxypyridazine 结构式:

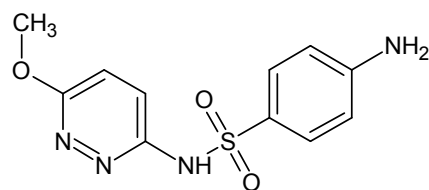
CAS#: 80-35-3

分子式: $C_{11}H_{12}N_4O_3S$

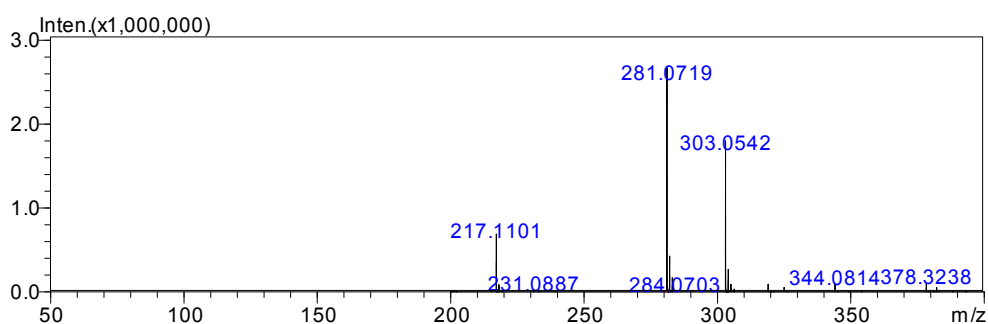
MW: 280.3

离子: $[M+H]^+$

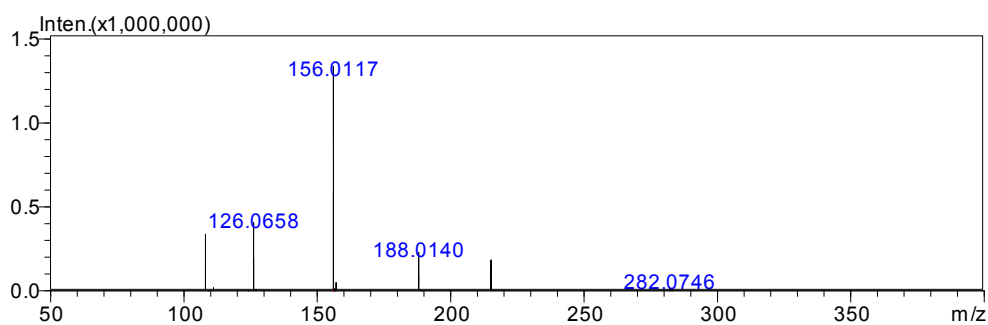
质谱图:



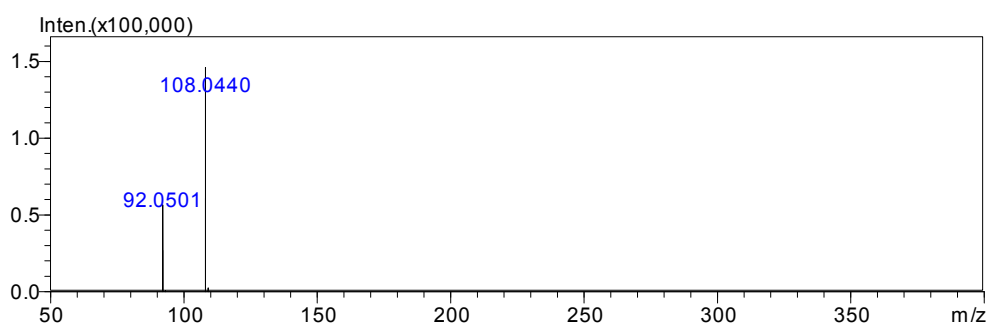
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_{11}H_{12}N_4O_3S$	$[M+H]^+$	281.0719	281.0703	5.69 ppm
MS ²	$C_6H_5NO_2S$	$[M+H]^+$	156.0117	156.0114	0.3 mDa
MS ³	C_6H_5NO	$[M+H]^+$	108.0440	108.0444	-0.4 mDa

14. 磺胺恶唑

英文名称: Sulfamoxol

结构式:

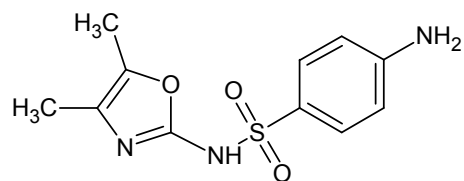
CAS#: 729-99-7

分子式: C₁₁H₁₃N₃O₃S

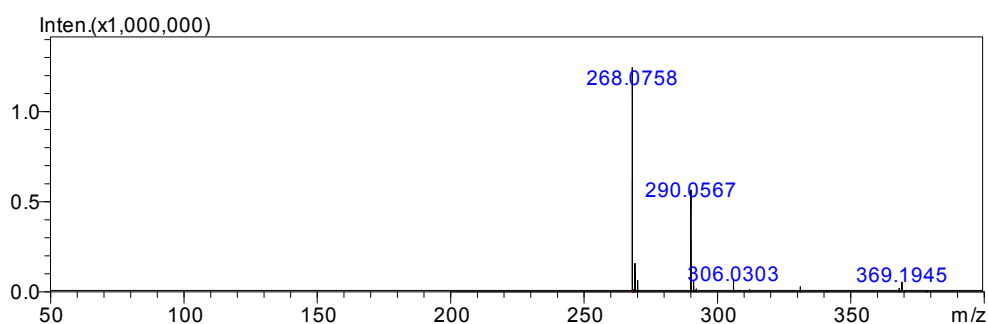
MW: 267.3

离子: [M+H]⁺

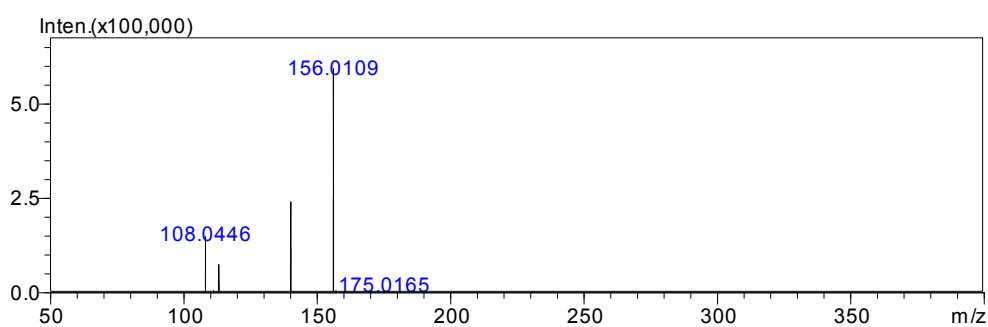
质谱图:



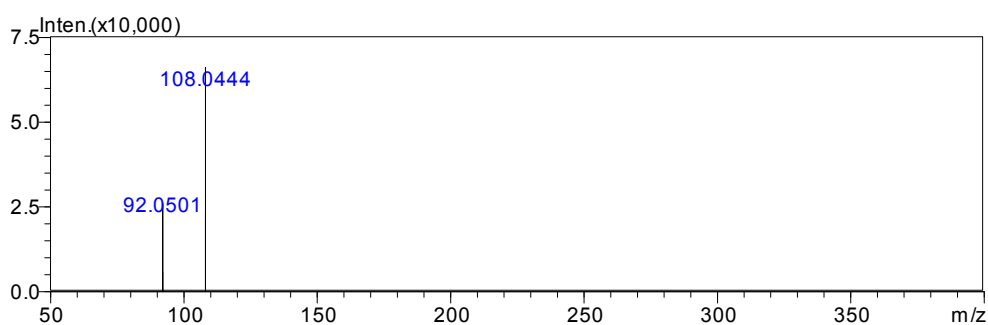
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	C ₁₁ H ₁₃ N ₃ O ₃ S	[M+H] ⁺	268.0758	268.0750	2.98 ppm
MS ²	C ₆ H ₅ NO ₂ S	[M+H] ⁺	156.0109	158.0114	-0.5 mDa
MS ³	C ₆ H ₅ NO	[M+H] ⁺	108.0444	108.0444	0.0 mDa

15. 磺胺吡啶

英文名称: Sulfapyridine

结构式:

CAS#: 144-83-2

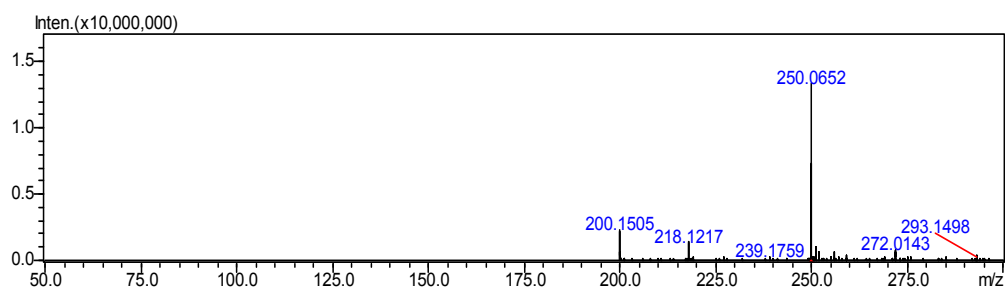
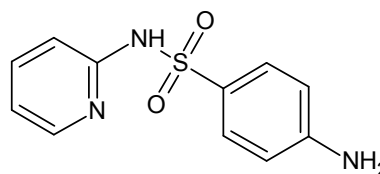
分子式: $C_{11}H_{11}N_3O_2S$

MW: 249.29

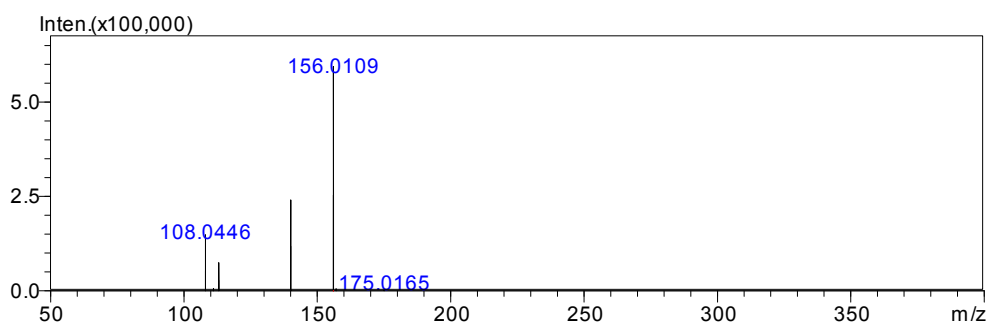
离子: $[M+H]^+$

质谱图:

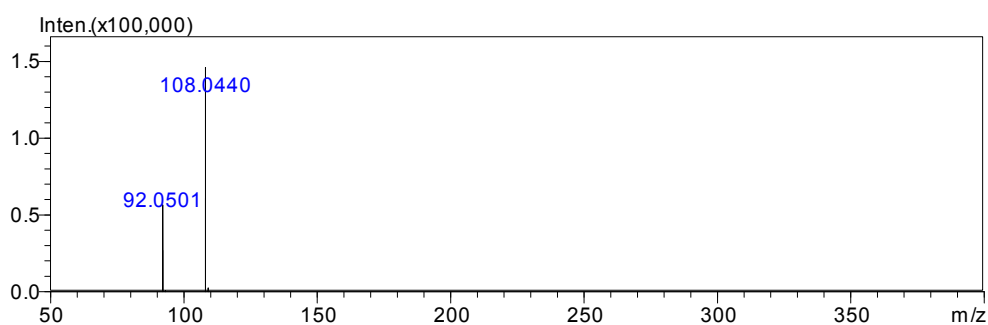
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_{11}H_{11}N_3O_2S$	$[M+H]^+$	250.0652	250.0645	2.80 ppm
MS ²	$C_6H_5NO_2S$	$[M+H]^+$	156.0109	158.0114	-0.5 mDa
MS ³	C_6H_5NO	$[M+H]^+$	108.0440	108.0444	-0.4 mDa

16. 磺胺噻唑

英文名称: Sulfathiazole

结构式:

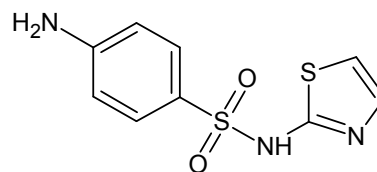
CAS#: 72-14-0

分子式: $C_9H_9N_3O_2S_2$

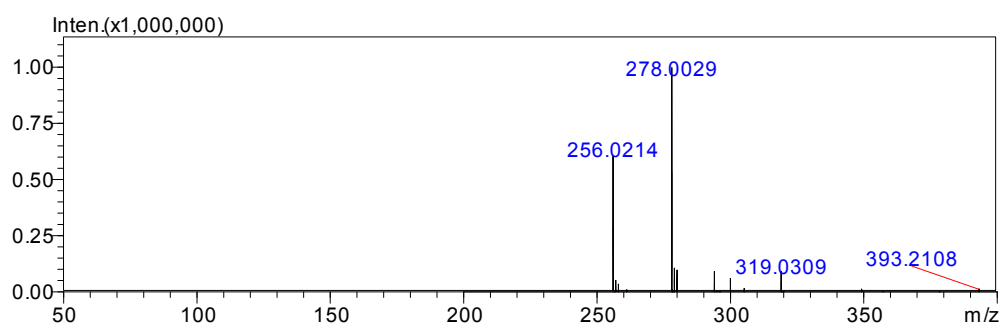
MW: 255.32

离子: $[M+H]^+$

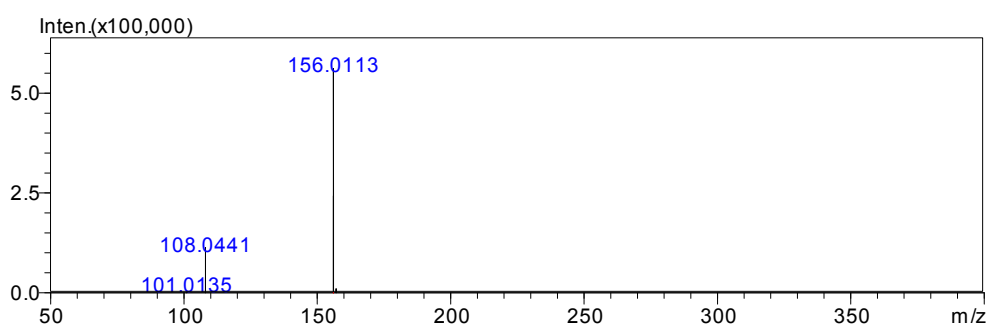
质谱图:



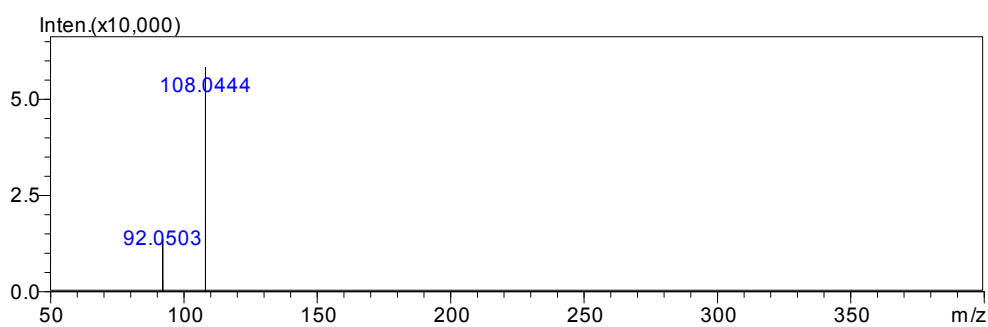
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_9H_9N_3O_2S_2$	$[M+H]^+$	256.0214	256.0209	1.95 ppm
MS ²	$C_6H_5NO_2S$	$[M+H]^+$	156.0113	156.0114	-0.1 mDa
MS ³	C_6H_5NO	$[M+H]^+$	108.0444	108.0444	0.0 mDa

17. 磺胺异恶唑

英文名称: Sulfisoxazole

结构式:

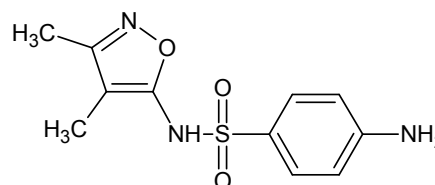
CAS#: 127-69-5

分子式: $C_{11}H_{13}N_3O_3S$

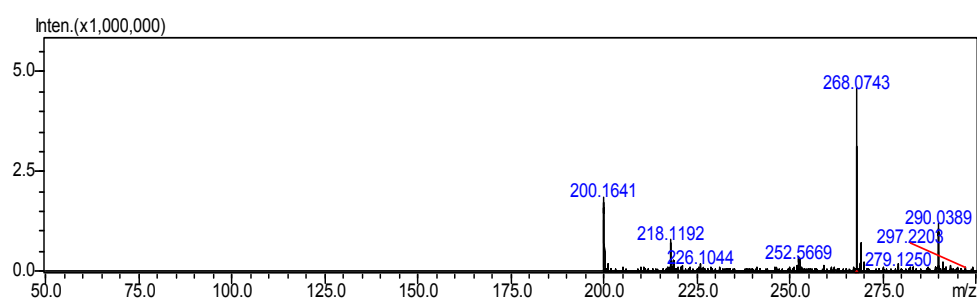
MW: 267.3

离子: $[M+H]^+$

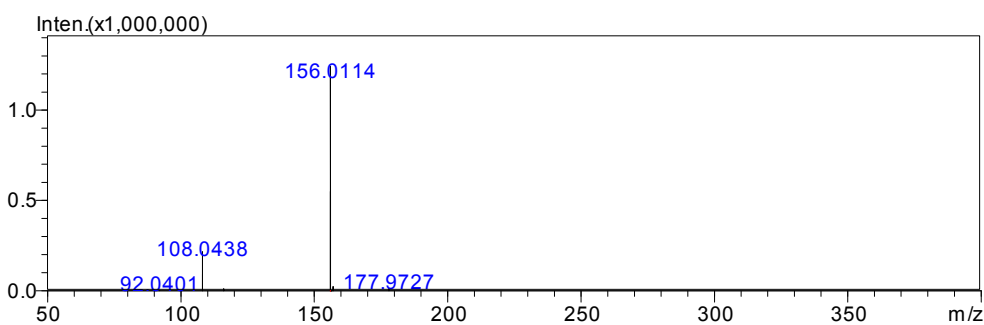
质谱图:



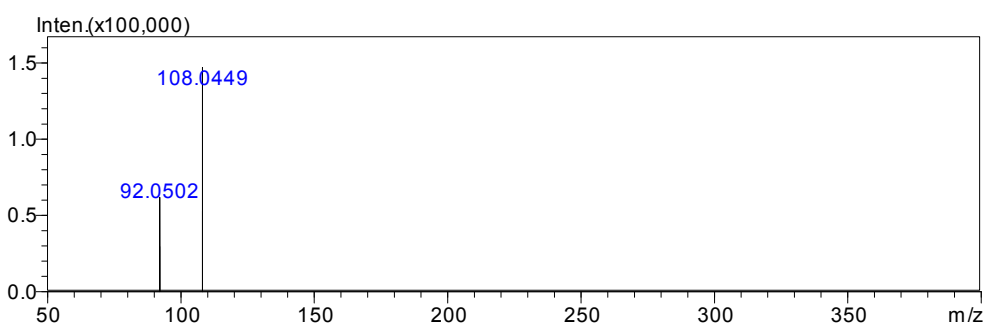
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_{11}H_{13}N_3O_3S$	$[M+H]^+$	268.0743	268.0750	-2.61 ppm
MS ²	$C_6H_5NO_2S$	$[M+H]^+$	156.0114	156.0114	0.0 mDa
MS ³	C_6H_5NO	$[M+H]^+$	108.0449	108.0444	0.5 mDa

18. 甲磺酸达氟沙星

英文名称: Danofloxacin Mesylate 结构式:

CAS#: 119478-55-6

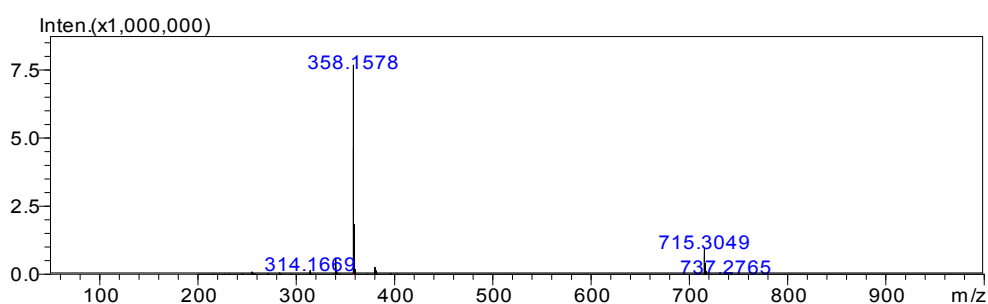
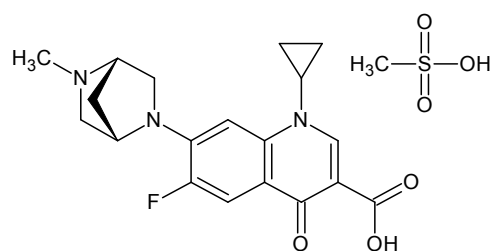
分子式: C₂₀H₂₄FN₃O₆S

MW: 453.48

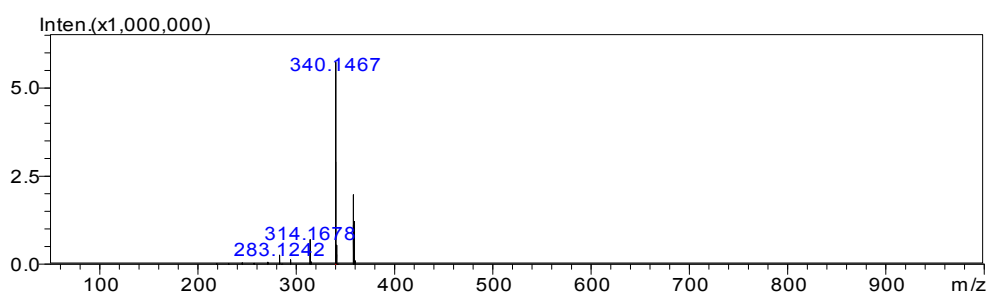
离子: [M+H]⁺

质谱图:

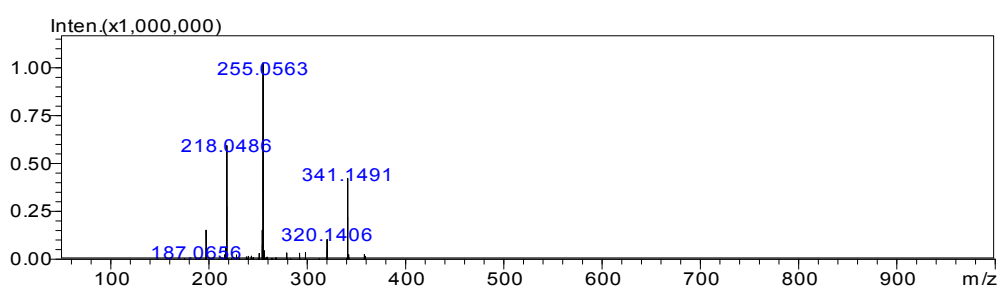
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	C ₁₉ H ₂₀ N ₃ O ₃ F	[M+H] ⁺	358.1578	358.1561	4.75 ppm
MS ²	C ₁₉ H ₁₈ N ₃ O ₂ F	[M+H] ⁺	340.1467	340.1456	3.23 ppm
MS ³	C ₁₄ H ₇ N ₂ O ₂ F	[M+H] ⁺	255.0563	255.0564	-0.39 ppm

19. 司帕沙星

英文名称: Sparfloxacin

结构式:

CAS#: 110871-86-8

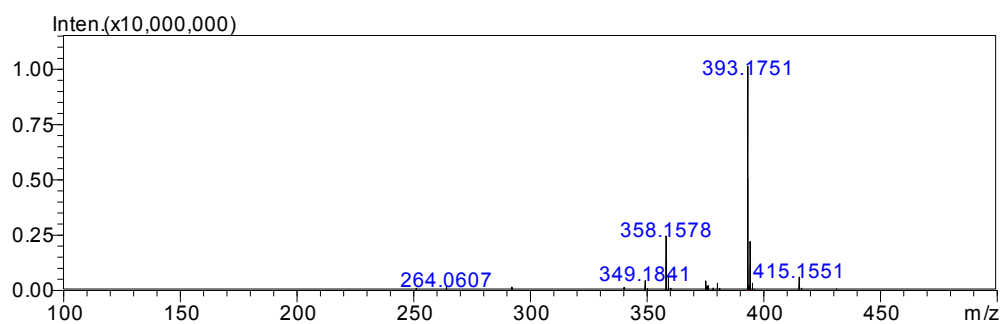
分子式: $C_{19}H_{22}F_2N_4O_3$

MW: 392.4

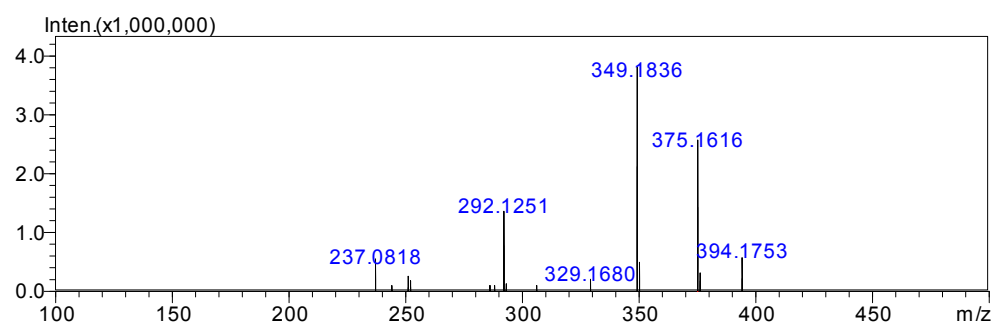
英文名称: Sparfloxacin

质谱图:

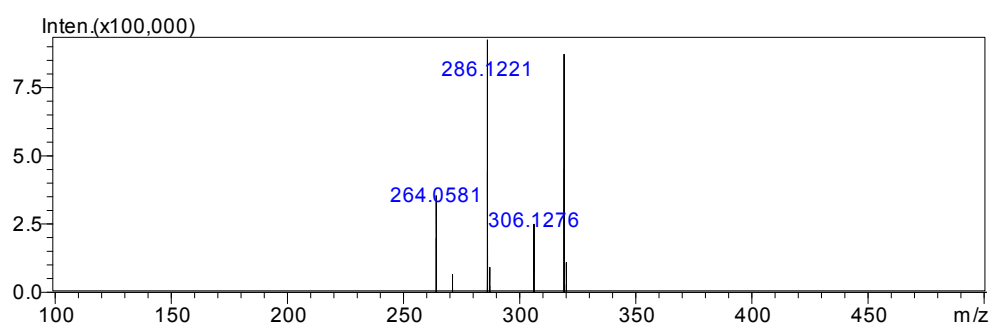
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_{19}H_{22}N_4O_3 F_2$	$[M+H]^+$	393.1751	393.1733	4.58 ppm
MS ²	$C_{19}H_{20}N_4O_2 F_2$	$[M+H]^+$	375.1616	375.1627	-2.93 ppm
MS ³	$C_{15}H_{12}N_4O_2 F_2$	$[M+H]^+$	319.1013	319.1001	3.76 ppm

20. 二氟沙星

英文名称: Difloxacin

结构式:

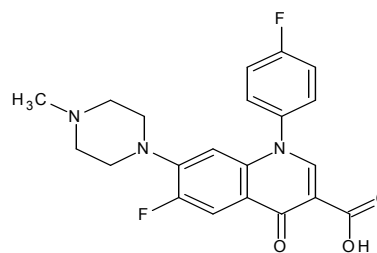
CAS#: 98106-17-3

分子式: C₂₁H₁₉F₂N₃O₃

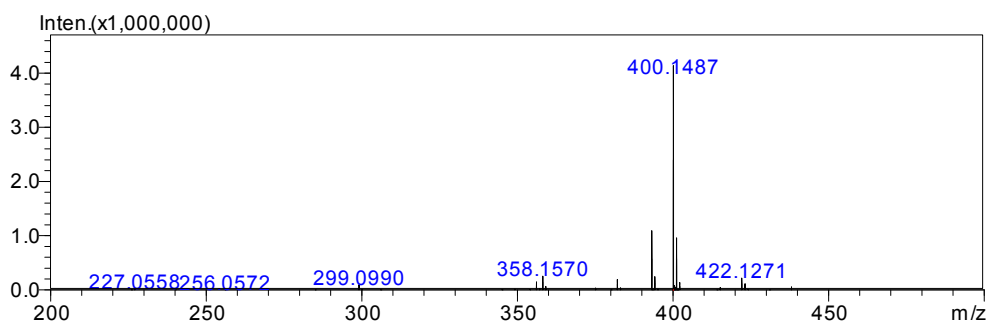
MW: 399.39

离子: [M+H]⁺

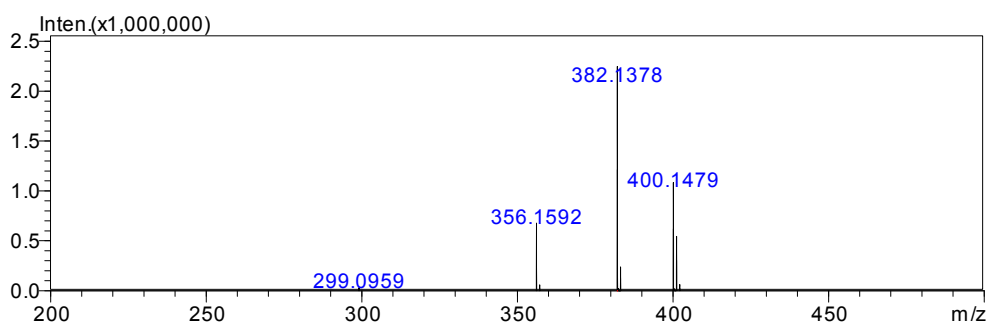
质谱图:



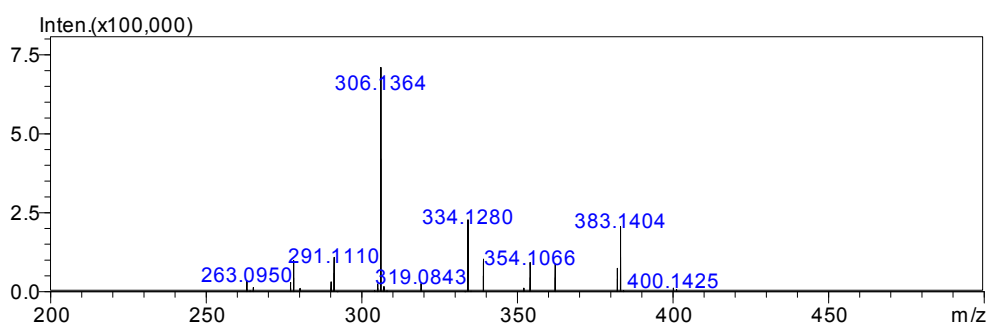
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	C ₂₁ H ₁₉ N ₃ O ₃ F ₂	[M+H] ⁺	400.1487	400.1467	5.00 ppm
MS ²	C ₂₁ H ₁₇ N ₃ O ₂ F ₂	[M+H] ⁺	382.1378	382.1362	4.19 ppm
MS ³	C ₁₉ H ₁₆ N ₃ F	[M+H] ⁺	306.1364	306.1401	-12.09 ppm

21. 培氟沙星

英文名称: Pefloxacin

CAS#: 70458-92-3

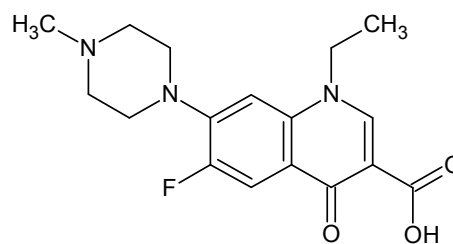
分子式: $C_{17}H_{20}FN_3O_3$

MW: 333.36

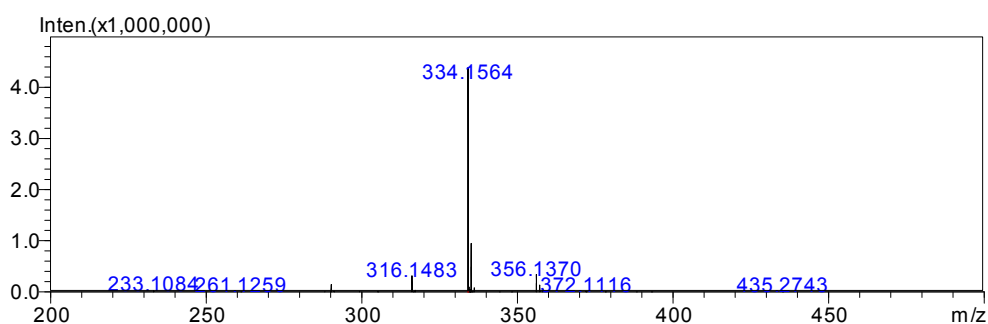
离子: $[M+H]^+$

质谱图:

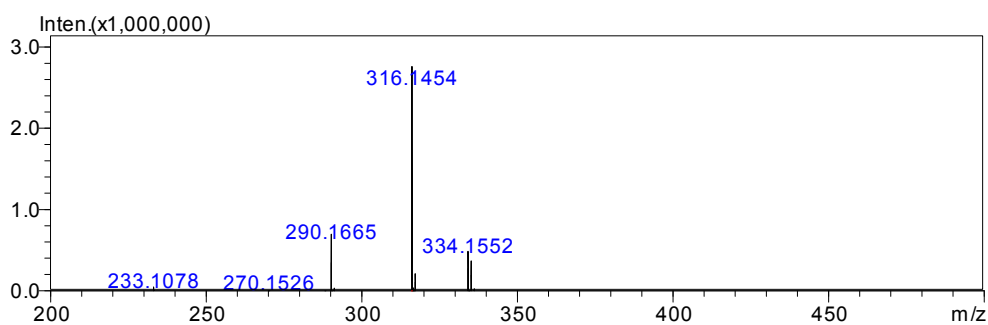
结构式:



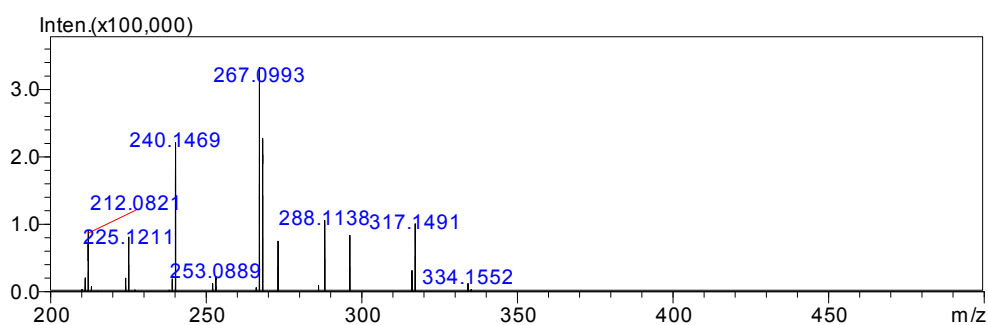
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_{17}H_{20}N_3O_3F$	$[M+H]^+$	334.1564	334.1561	0.90 ppm
MS ²	$C_{17}H_{18}N_3O_2F$	$[M+H]^+$	316.1454	316.1456	-0.63 ppm
MS ³	$C_{15}H_{14}N_3O_2F$	$[M+H]^+$	288.1138	288.1143	-1.74 ppm

22. 恩诺沙星

英文名称: Enrofloxacin

CAS#: 93106-60-6

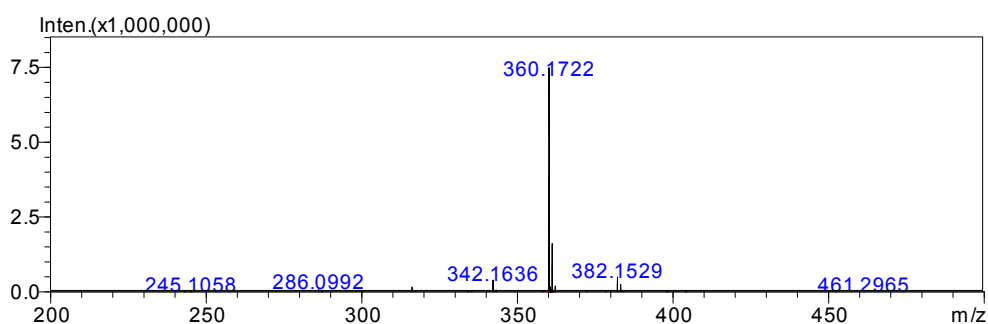
分子式: $C_{19}H_{22}FN_3O_3$

MW: 359.4

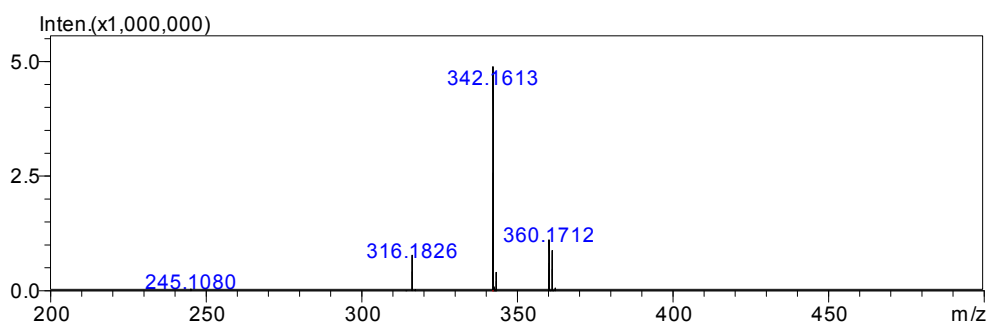
离子: $[M+H]^+$

质谱图:

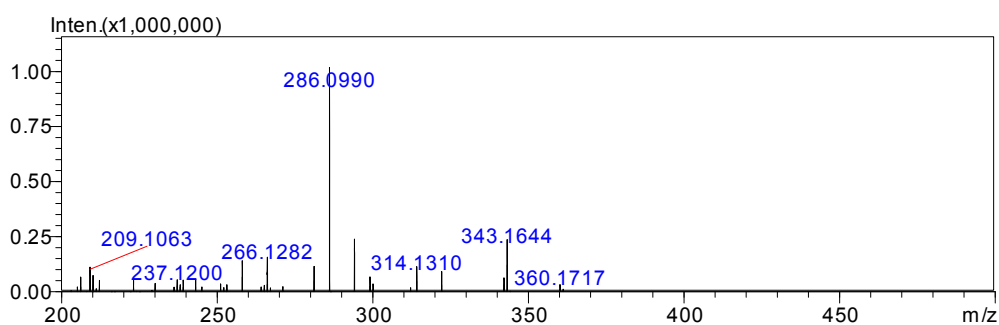
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_{19}H_{22}N_3O_3F$	$[M+H]^+$	360.1722	360.1718	1.11 ppm
MS ²	$C_{19}H_{20}N_3O_2F$	$[M+H]^+$	342.1613	342.1612	0.29 ppm
MS ³	$C_{15}H_{12}N_3O_2F$	$[M+H]^+$	286.0990	286.0986	1.40 ppm

23. 氧氟沙星

英文名称: Ofloxacin

CAS#: 82419-36-1

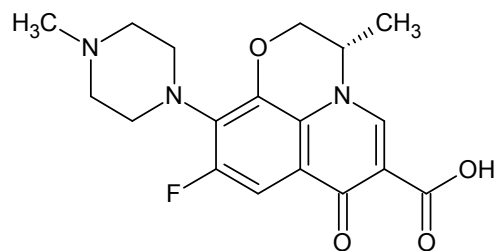
分子式: $C_{18}H_{20}FN_3O_4$

MW: 361.37

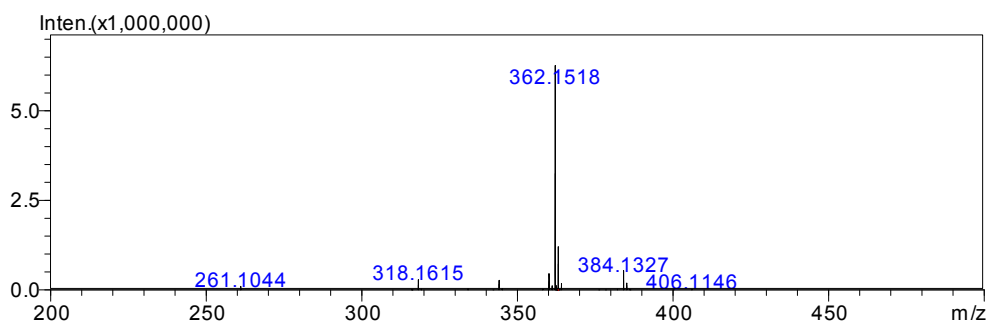
离子: $[M+H]^+$

质谱图:

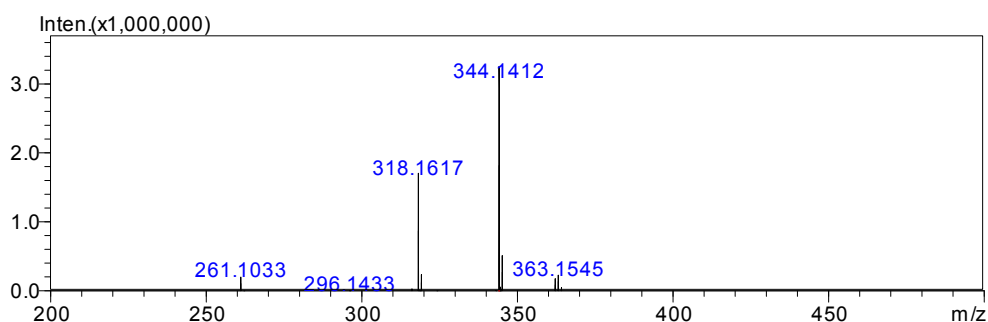
结构式:



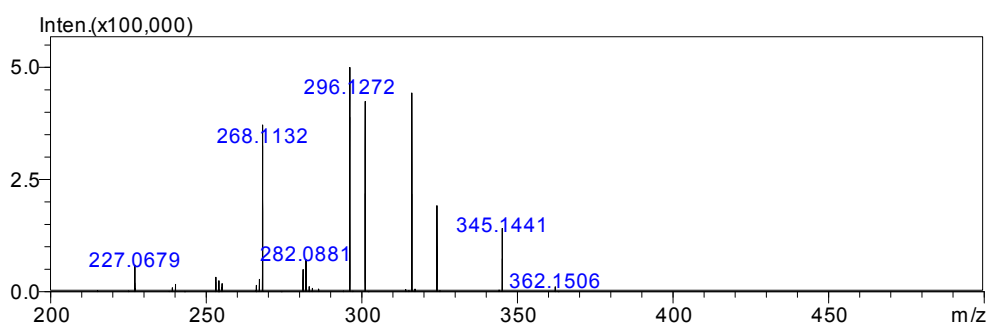
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_{18}H_{20}N_3O_4F$	$[M+H]^+$	362.1518	362.1511	1.93 ppm
MS ²	$C_{18}H_{18}N_3O_3F$	$[M+H]^+$	344.1412	344.1405	2.03 ppm
MS ³	$C_{16}H_{14}N_3O_3F$	$[M+H]^+$	316.1094	316.1092	0.63 ppm

24. 环氧氟沙星

英文名称: Orbifloxacin

结构式:

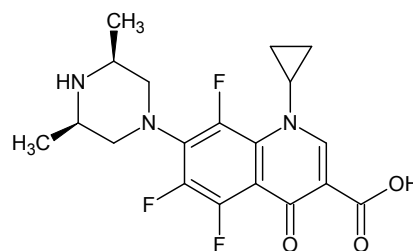
CAS#: 113617-63-3

分子式: $C_{19}H_{20}F_3N_3O_3$

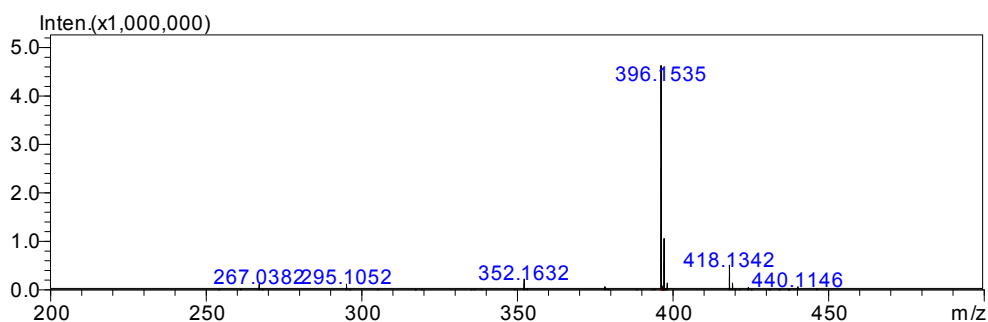
MW: 395.38

离子: $[M+H]^+$

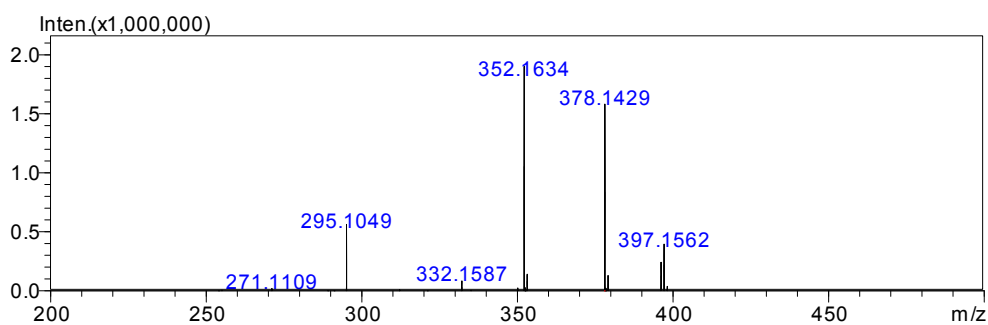
质谱图:



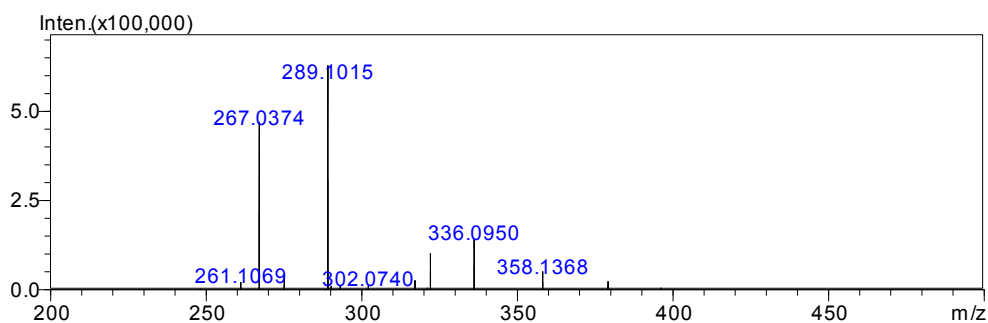
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_{19}H_{20}N_3O_3F_3$	$[M+H]^+$	396.1535	396.1530	1.26 ppm
MS ²	$C_{19}H_{18}N_3O_2F_3$	$[M+H]^+$	378.1429	378.1424	1.32 ppm
MS ³	$C_{15}H_{12}N_3OF_2$	$[M+H]^+$	289.1015	289.1021	-2.08 ppm

25. 麻保沙星

英文名称: Marbofloxacin

结构式:

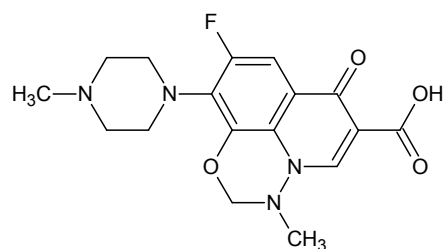
CAS#: 115550-35-1

分子式: $C_{17}H_{19}FN_4O_4$

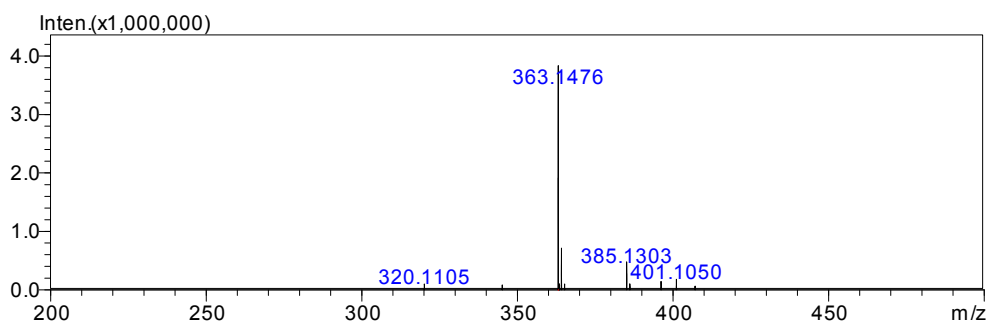
MW: 362.36

离子: $[M+H]^+$

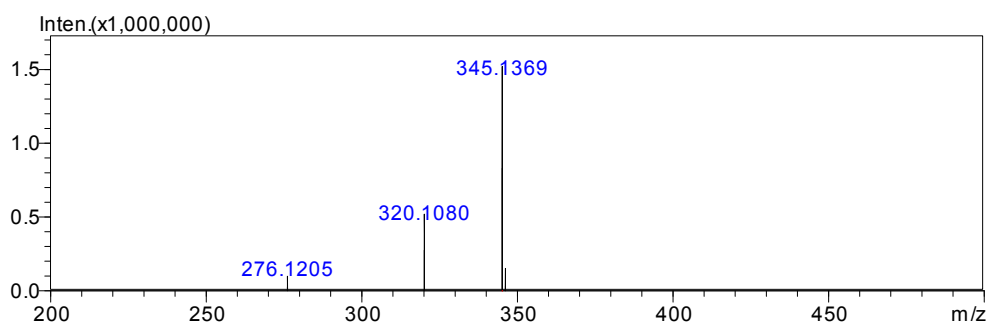
质谱图:



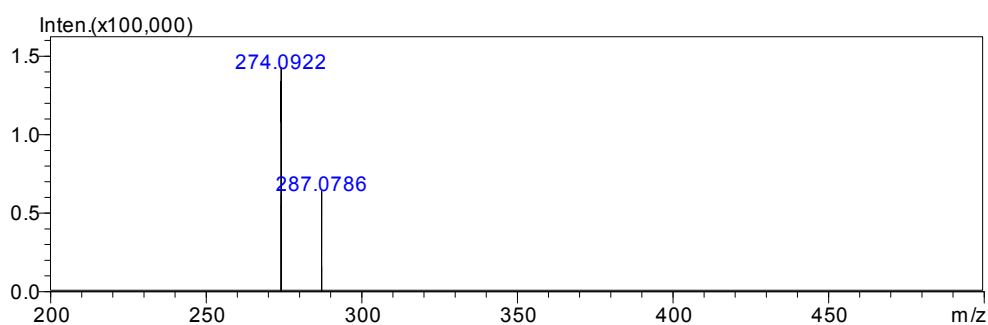
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_{17}H_{19}N_4O_4F$	$[M+H]^+$	363.1476	363.1463	3.58 ppm
MS ²	$C_{17}H_{17}N_4O_3F$	$[M+H]^+$	345.1369	345.1357	3.48 ppm
MS ³	$C_{15}H_{11}N_2O_3F$	$[M+H]^+$	287.0786	287.0826	-13.93 ppm

26. 环丙沙星

英文名称: Ciprofloxacin

CAS#: 85721-33-1

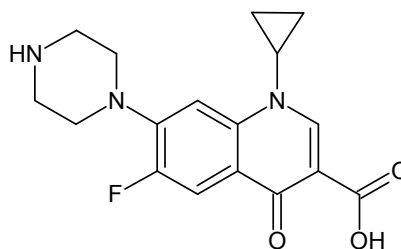
分子式: $C_{17}H_{18}FN_3O_3$

MW: 331.34

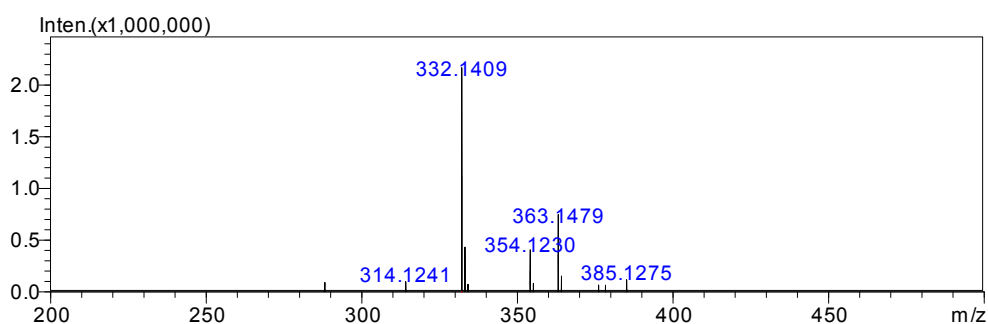
离子: $[M+H]^+$

质谱图:

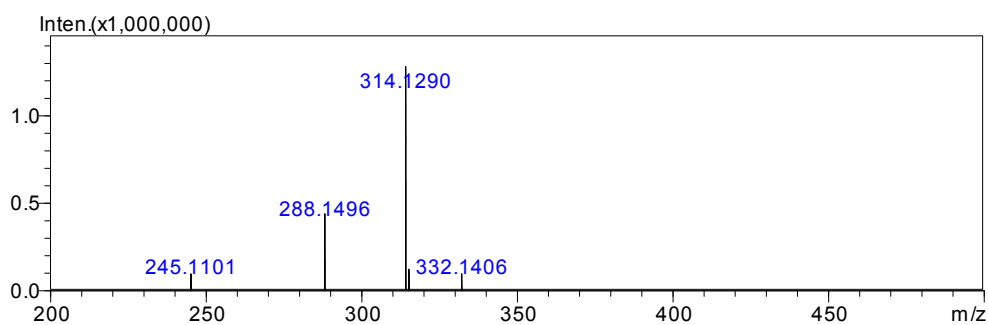
结构式:



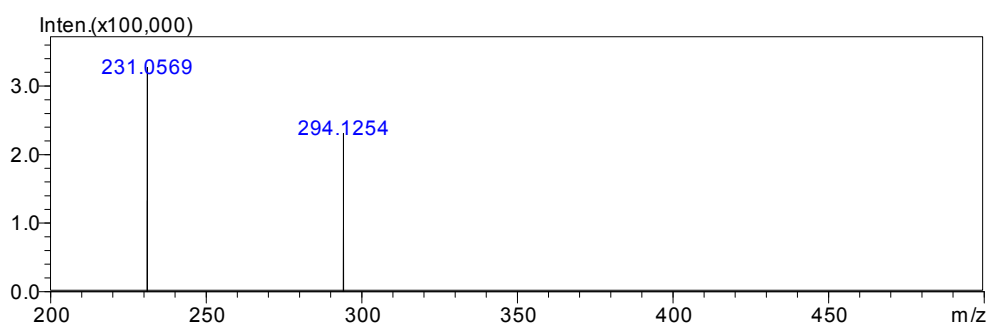
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_{17}H_{18}N_3O_3F$	$[M+H]^+$	332.1411	332.1405	1.81 ppm
MS ²	$C_{17}H_{16}N_3O_2F$	$[M+H]^+$	314.1305	314.1299	1.91 ppm
MS ³	$C_{12}H_7N_2O_2F$	$[M+H]^+$	231.0553	231.0564	-1.1 mDa

27. 沙拉沙星

英文名称: Sarafloxacin

结构式:

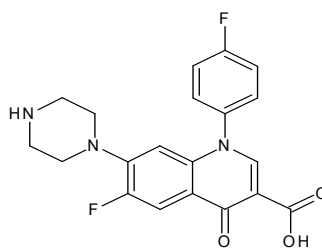
CAS#: 98105-99-8

分子式: $C_{20}H_{17}F_2N_3O_3$

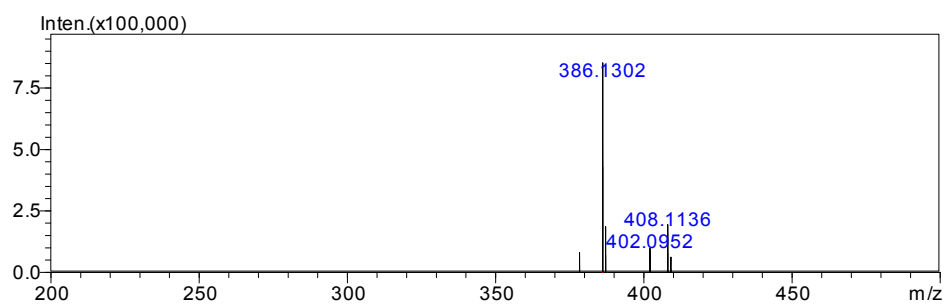
MW: 385.36

离子: $[M+H]^+$

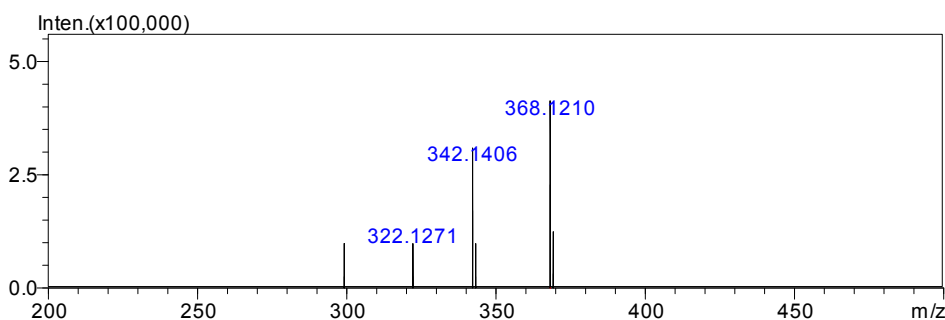
质谱图:



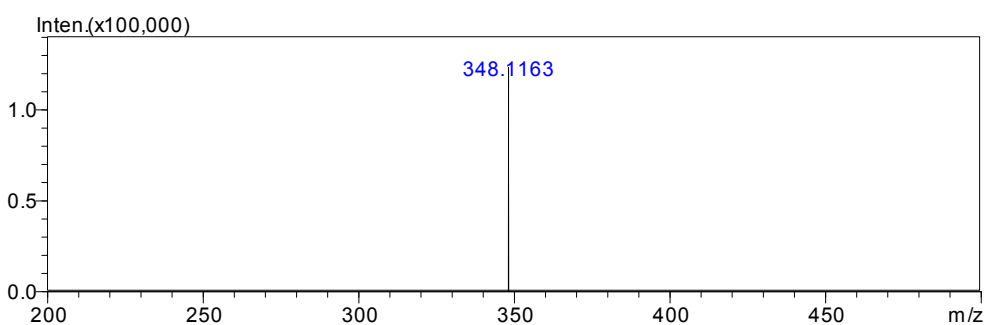
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_{20}H_{17}N_3O_3F_2$	$[M+H]^+$	386.1302	386.1311	-2.33 ppm
MS ²	$C_{20}H_{15}N_3O_2F_2$	$[M+H]^+$	368.1210	368.1205	1.36 ppm
MS ³	$C_{20}H_{14}N_3O_2F$	$[M+H]^+$	348.1163	348.1143	5.75 ppm

28. 氟甲喹

英文名称: Flumequine

结构式:

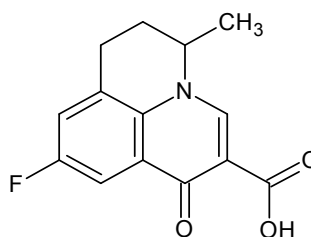
CAS#: 42835-25-6

分子式: C₁₄H₁₂FNO₃

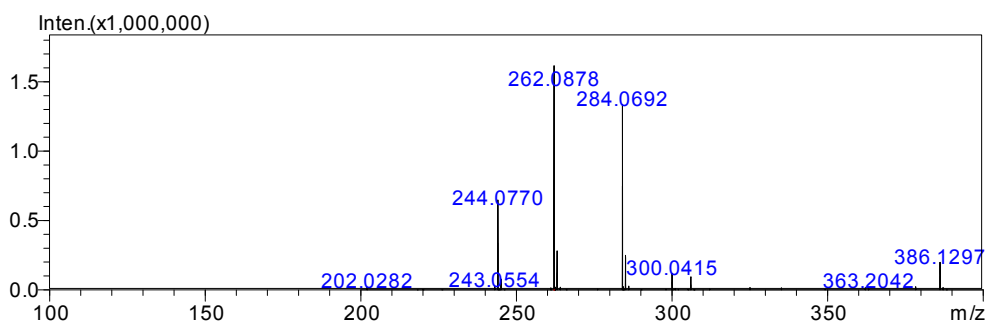
MW: 261.25

离子: [M+H]⁺

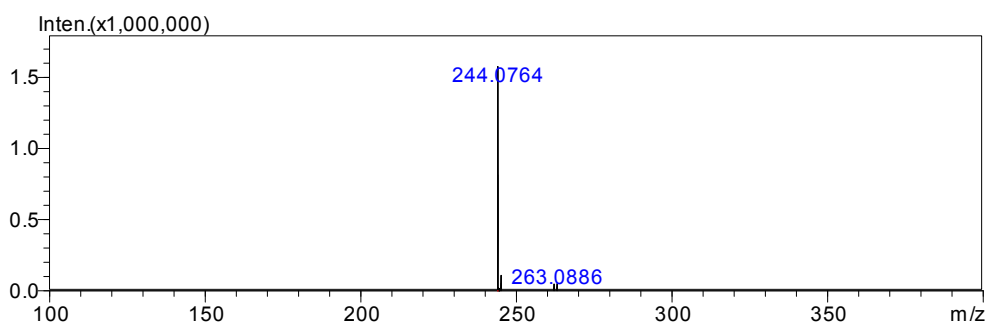
质谱图:



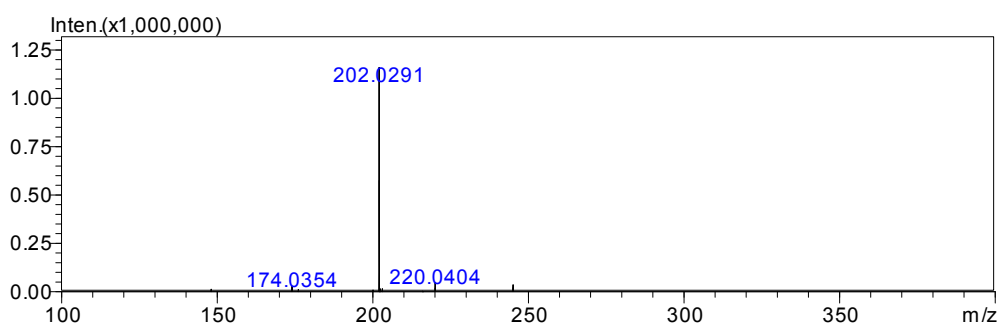
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	C ₁₄ H ₁₂ NO ₃ F	[M+H] ⁺	262.0878	262.0874	1.53 ppm
MS ²	C ₁₄ H ₁₀ NO ₂ F	[M+H] ⁺	244.0764	244.0768	-0.4 mDa
MS ³	C ₁₁ H ₄ NO ₂ F	[M+H] ⁺	202.0291	202.0299	-0.8 mDa

29. 吡喹酮

英文名称: Praziquantel

结构式:

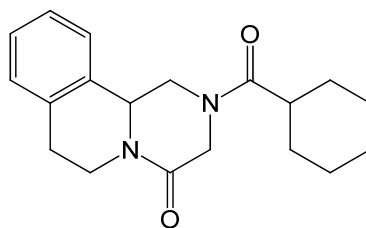
CAS#: 55268-74-1

分子式: C₁₉H₂₄N₂O₂

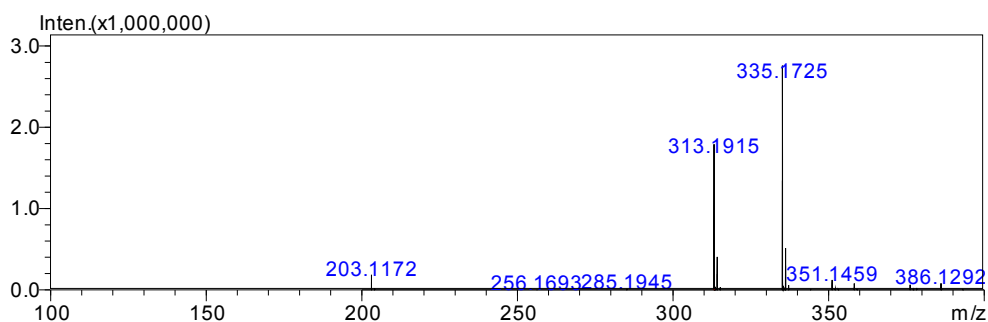
MW: 312.41

离子: [M+H]⁺

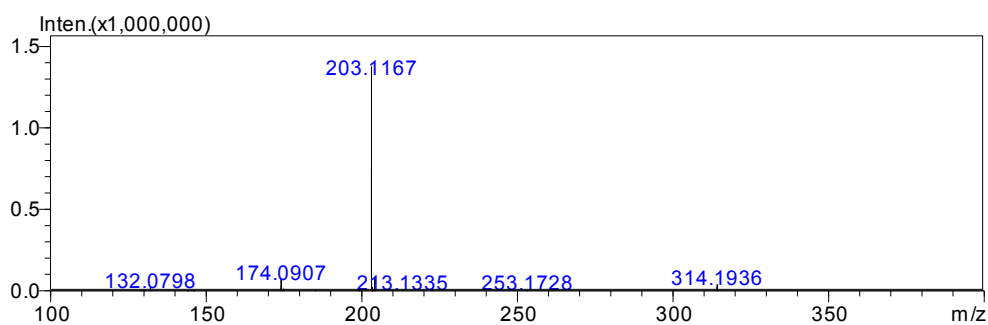
质谱图:



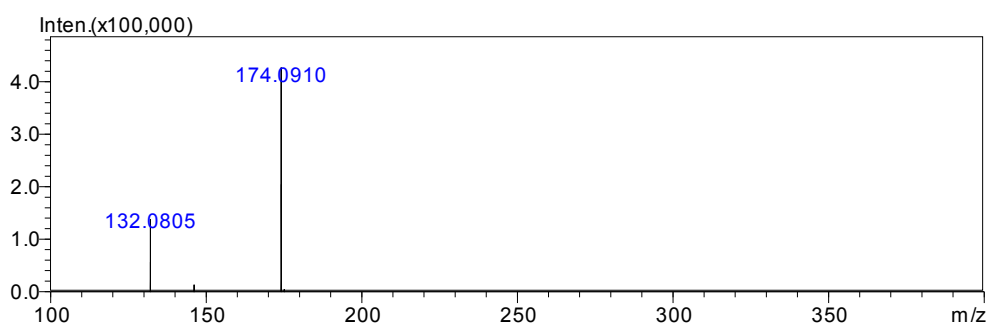
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	C ₁₉ H ₂₄ N ₂ O ₂	[M+H] ⁺	313.1915	313.1911	1.28 ppm
MS ²	C ₁₂ H ₁₄ N ₂ O	[M+H] ⁺	203.1167	203.1179	-1.2 mDa
MS ³	C ₁₁ H ₁₁ NO	[M+H] ⁺	174.0910	174.0913	-0.3 mDa

30. 洛美沙星盐酸盐

英文名称: Lomefloxacin Hydrochloride 结构式:

CAS#: 98079-52-8

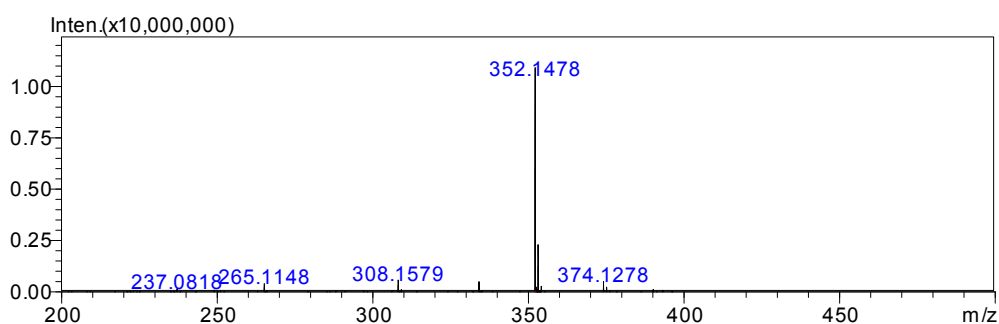
分子式: $C_{17}H_{20}ClF_2N_3O_3$

MW: 387.81

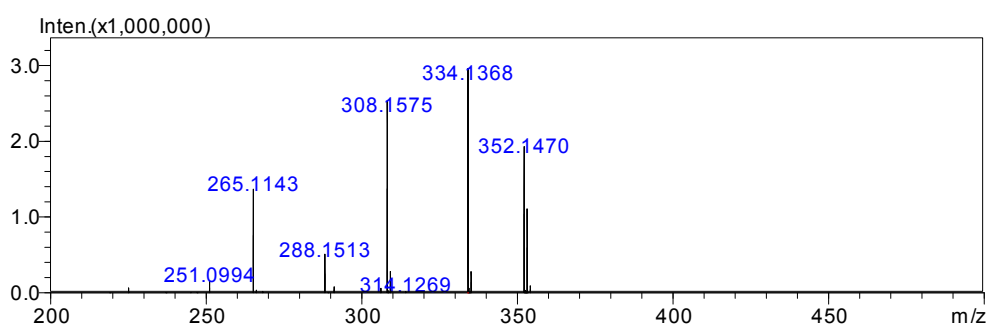
离子: $[M+H]^+$

质谱图:

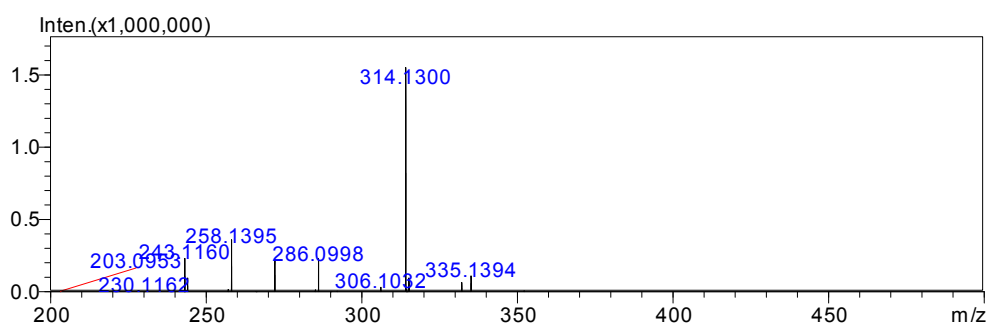
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_{17}H_{19}N_3O_3F_2$	$[M+H]^+$	352.1478	352.1467	3.12 ppm
MS ²	$C_{17}H_{17}N_3O_2F_2$	$[M+H]^+$	334.1368	334.1362	1.80 ppm
MS ³	$C_{17}H_{16}N_3O_2F$	$[M+H]^+$	314.1300	314.1299	0.32 ppm

31. 恶唑酸

英文名称: Oxolinic acid

结构式:

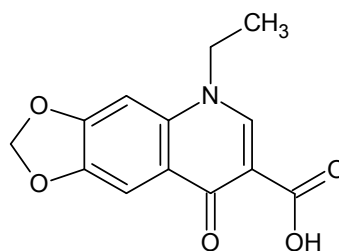
CAS#: 14698-29-4

分子式: $C_{13}H_{11}NO_5$

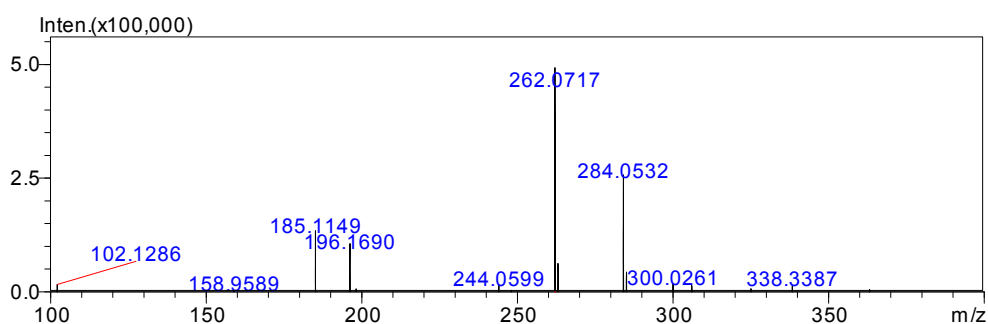
MW: 261.23

离子: $[M+H]^+$

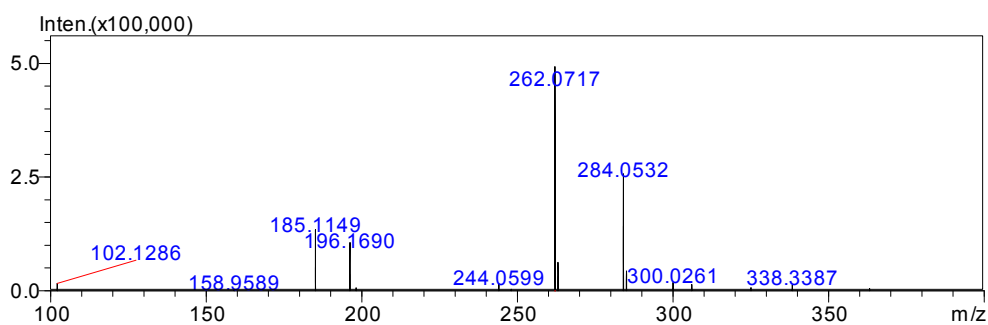
质谱图:



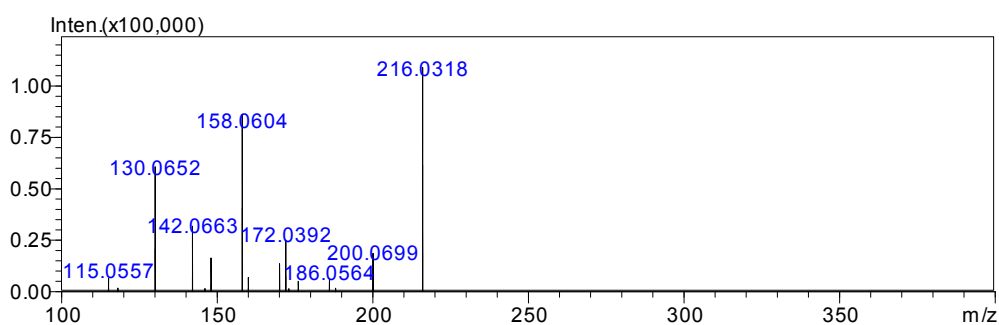
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_{13}H_{11}NO_5$	$[M+H]^+$	262.0717	262.0710	2.67 ppm
MS ²	$C_{13}H_9NO_4$	$[M+H]^+$	244.0604	244.0604	0.0 mDa
MS ³	$C_{11}H_5NO_4$	$[M+H]^+$	216.0318	216.0291	2.7 mDa

32. 依诺沙星

英文名称: Enoxacin

CAS#: 74011-58-8

分子式: $C_{15}H_{17}FN_4O_3$

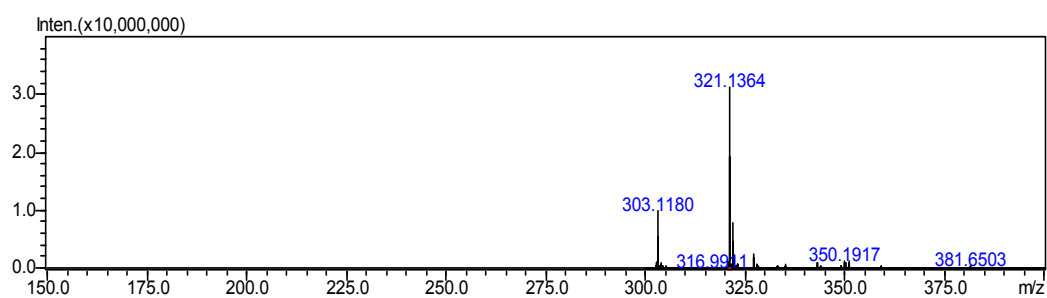
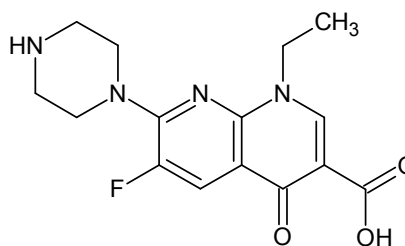
MW: 320.32

离子: $[M+H]^+$

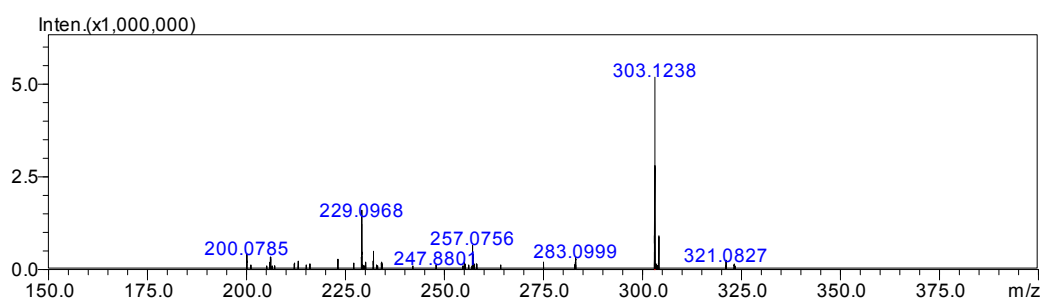
质谱图:

MS¹

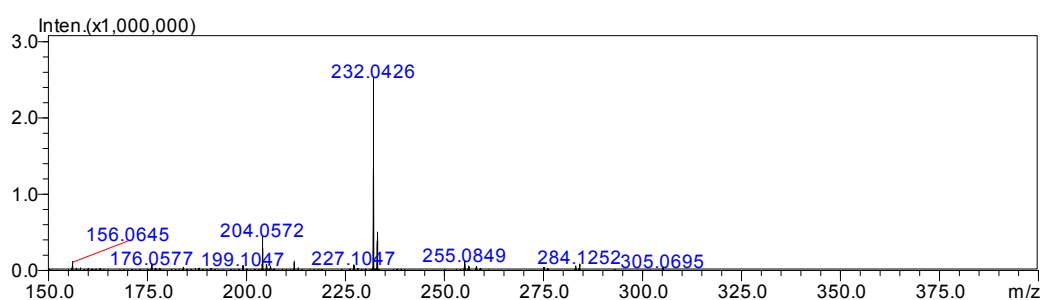
结构式:



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_{15}H_{17}N_4O_3F$	$[M+H]^+$	321.1364	321.1357	2.18 ppm
MS ²	$C_{15}H_{15}N_4O_2F$	$[M+H]^+$	303.1238	303.1252	-4.62 ppm
MS ³	$C_{10}H_4N_4O_2F$	$[M+H]^+$	232.0426	232.0391	3.5 mDa

33. 西诺沙星

英文名称: Cinoxacin

结构式:

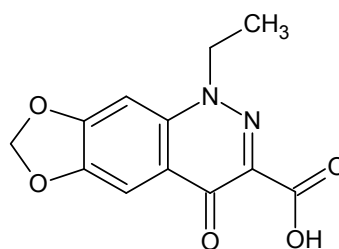
CAS#: 28657-80-9

分子式: $C_{12}H_{10}N_2O_5$

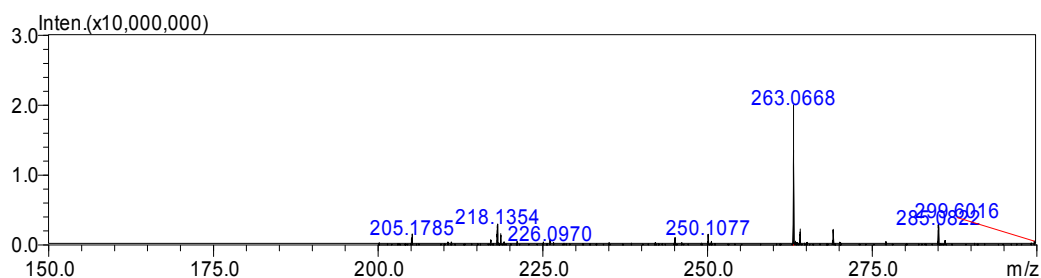
MW: 262.22

离子: $[M+H]^+$

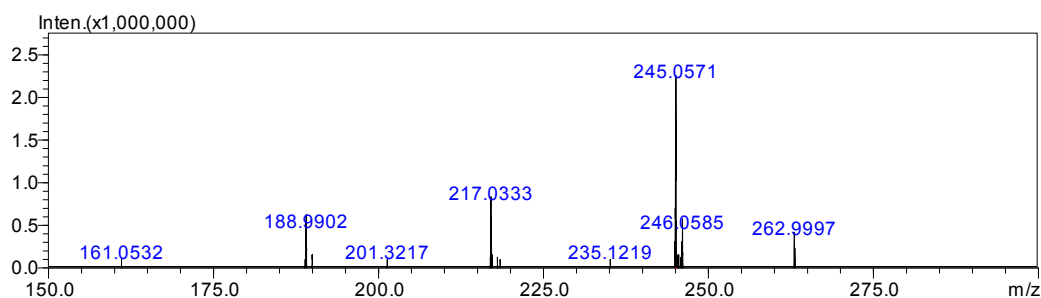
质谱图:



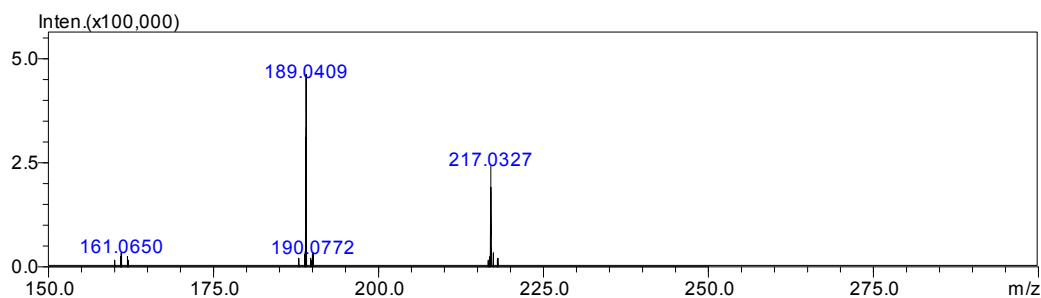
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_{12}H_{10}N_2O_5$	$[M+H]^+$	263.0668	263.0662	2.28 ppm
MS ²	$C_{12}H_8N_2O_4$	$[M+H]^+$	245.0571	245.0557	1.4 mDa
MS ³	$C_{10}H_3NO_3$	$[M+H]^+$	189.0409	189.0420	-1.1 mDa

34. 洛美沙星

英文名称: Lomefloxacin

CAS#: 98079051-7

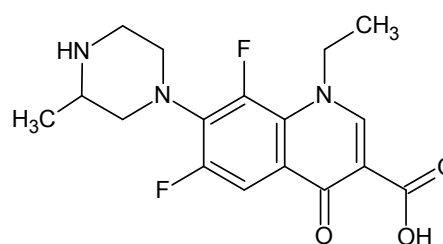
分子式: $C_{17}H_{19}F_2N_3O_3$

MW: 351.35

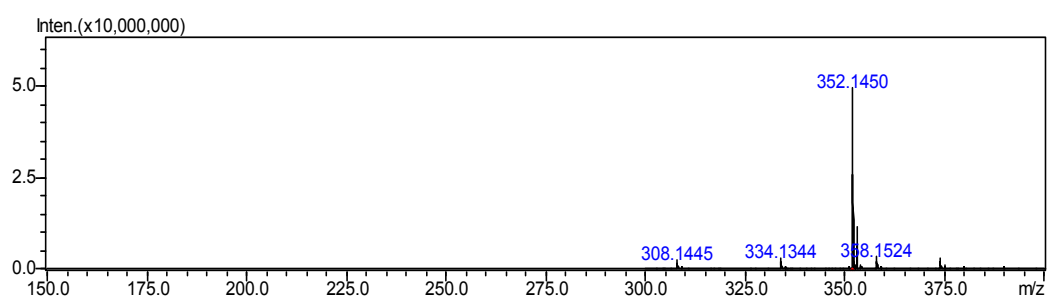
离子: $[M+H]^+$

质谱图:

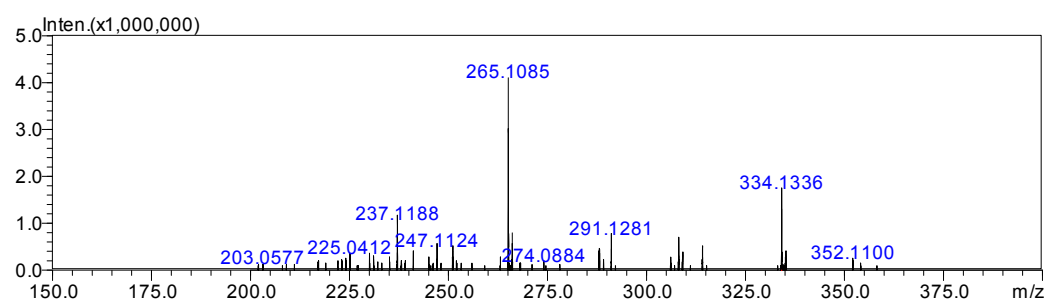
结构式:



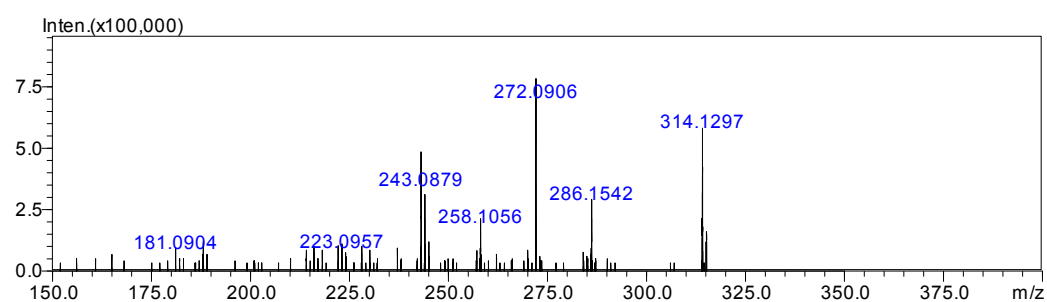
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_{17}H_{19}N_3O_3F_2$	$[M+H]^+$	352.1450	352.1467	-4.83 ppm
MS ²	$C_{17}H_{17}N_3O_2F_2$	$[M+H]^+$	334.1336	334.1362	-7.78 ppm
MS ³	$C_{17}H_{16}N_3O_2F$	$[M+H]^+$	314.1297	314.1299	-0.64 ppm

35. 萘啶酸

英文名称: Nalidixi Acid

结构式:

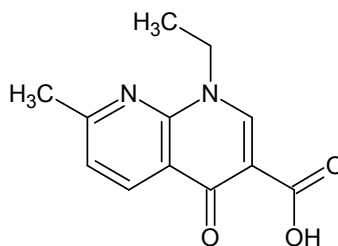
CAS#: 389-08-2

分子式: $C_{12}H_{12}N_2O_3$

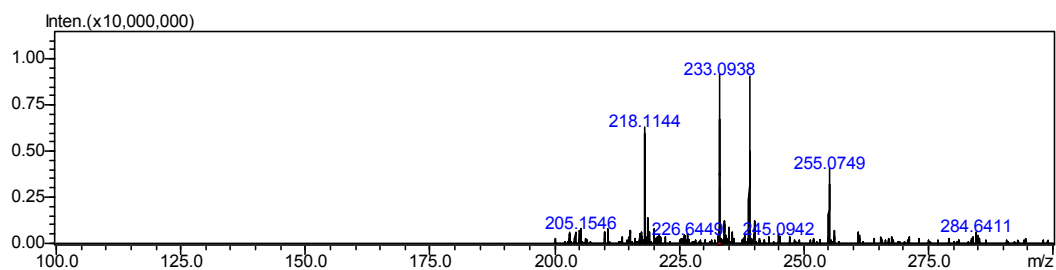
MW: 232.24

离子: $[M+H]^+$

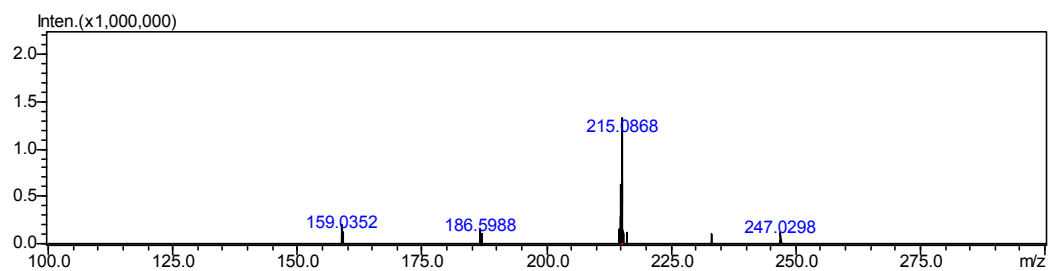
质谱图:



MS¹



MS²



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_{12}H_{12}N_2O_3$	$[M+H]^+$	233.0938	233.0921	1.7 mDa
MS ²	$C_{12}H_{10}N_2O_2$	$[M+H]^+$	215.0868	215.0815	5.3 mDa

36. 依维菌素

英文名称: Ivermectin B_{1a}

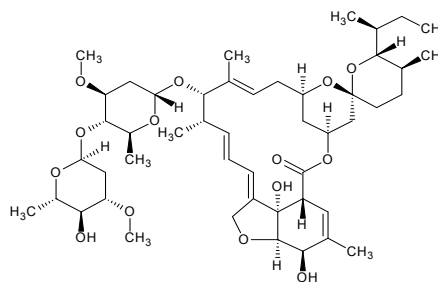
结构式:

CAS#: 71827-03-7

分子式: C₄₈H₇₄O₁₄

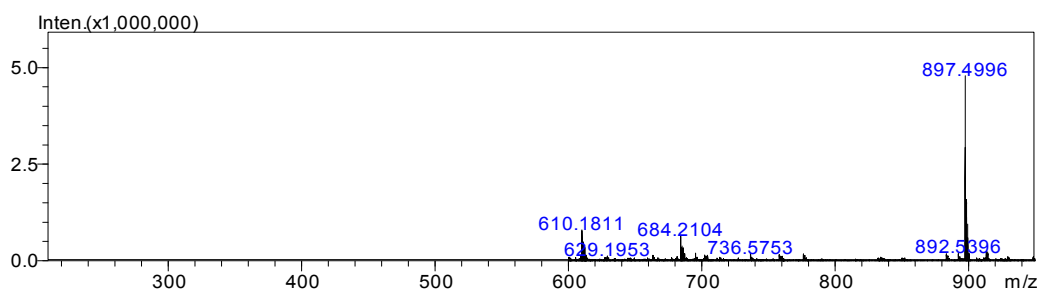
MW: 875.09

离子: [M+Na]⁺

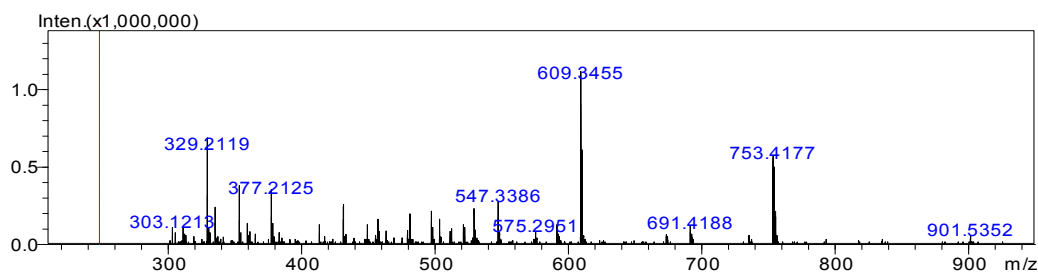


质谱图:

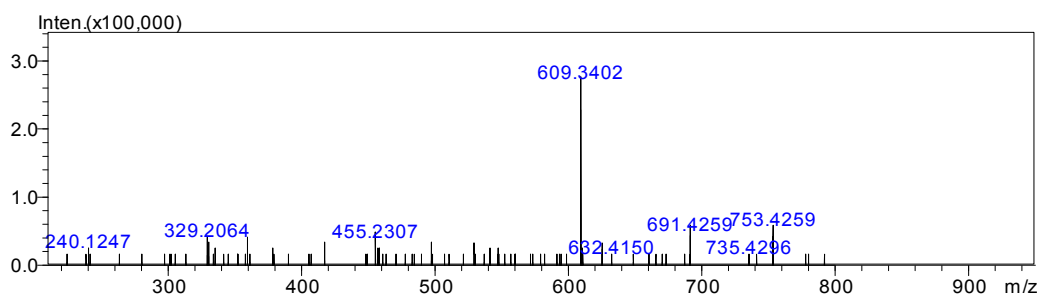
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	C ₄₈ H ₇₄ O ₁₄	[M+Na] ⁺	897.4996	897.4971	2.79 ppm
MS ²	C ₄₁ H ₆₂ O ₁₁	[M+Na] ⁺	753.4177	753.4184	-0.93 ppm
MS ³	C ₃₄ H ₅₀ O ₈	[M+Na] ⁺	609.3402	609.3398	0.66 ppm

37. 阿维菌素

文名称: Avermectin B_{1a}

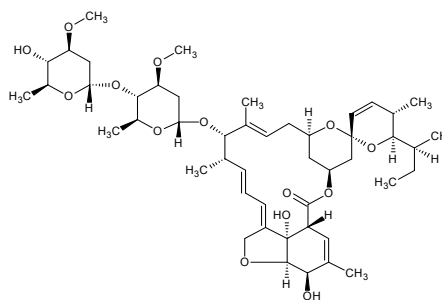
结构式:

CAS#: 65195-55-3

分子式: C₄₈H₇₂O₁₄

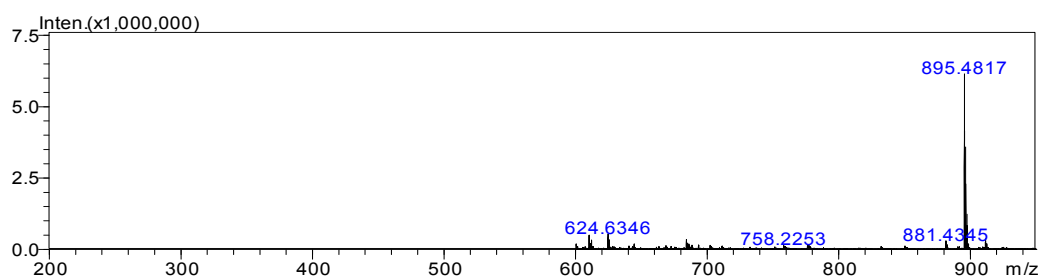
MW: 873.09

离子: [M+Na]⁺

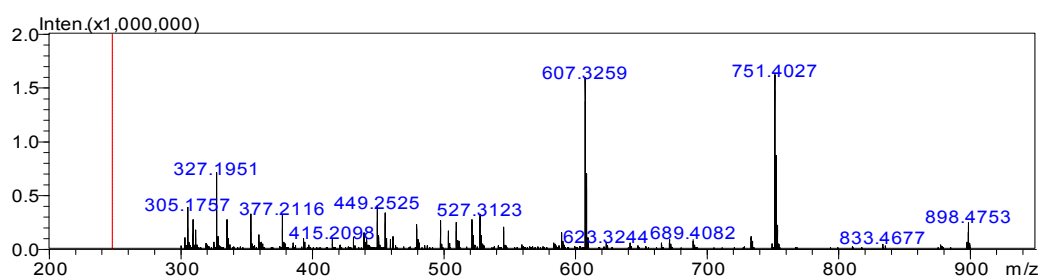


质谱图:

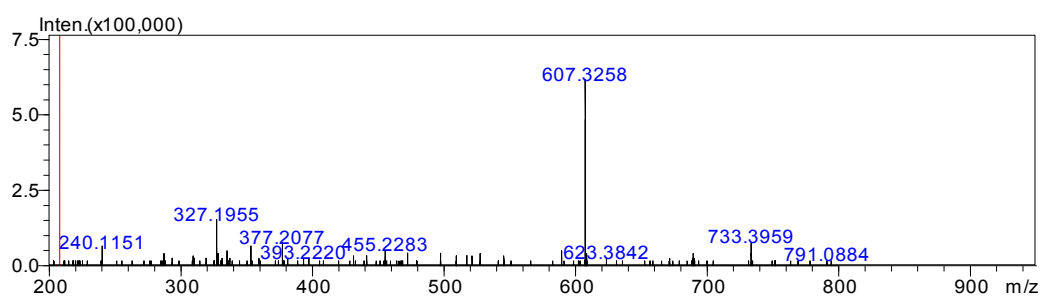
M^{S1}



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	C ₄₈ H ₇₂ O ₁₄	[M+Na] ⁺	895.4817	895.4814	0.34 ppm
MS ²	C ₄₁ H ₆₀ O ₁₁	[M+Na] ⁺	751.4027	751.4028	-0.13 ppm
MS ³	C ₃₄ H ₄₈ O ₈	[M+Na] ⁺	607.3258	607.3241	2.80 ppm

38. 多拉菌素

英文名称: Doramectin

CAS#: 117704-25-3

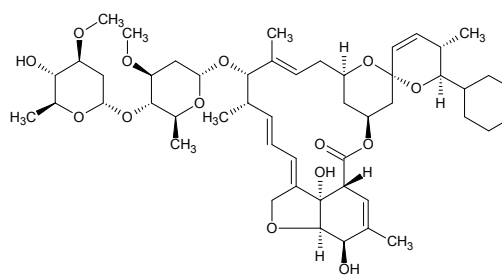
分子式: $C_{50}H_{74}O_{14}$

MW: 899.11

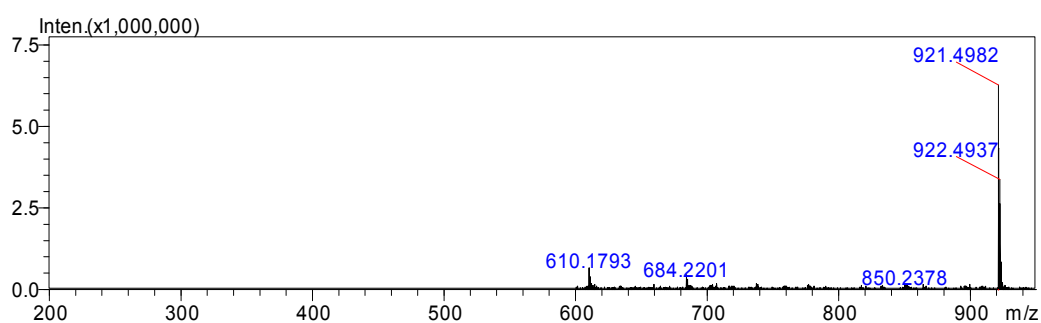
离子: $[M+Na]^+$

质谱图:

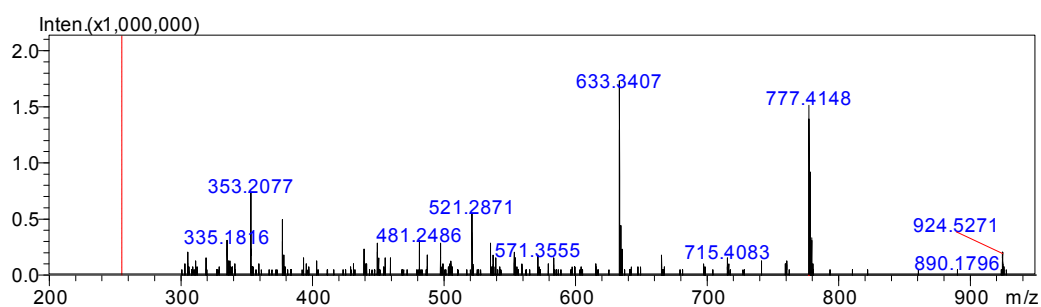
结构式:



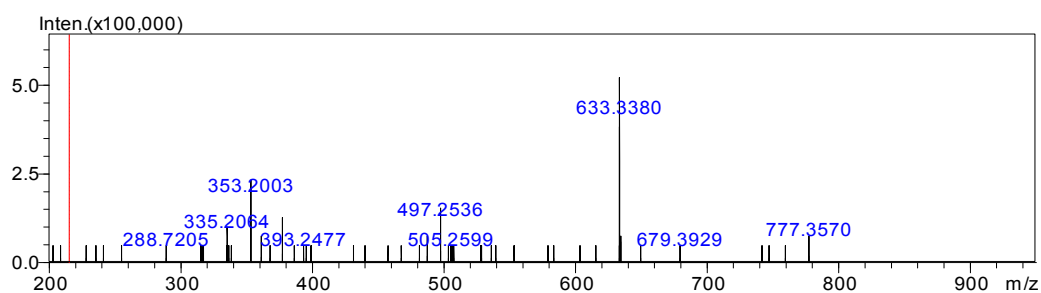
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_{50}H_{74}O_{14}$	$[M+Na]^+$	921.4982	921.4971	1.19 ppm
MS ²	$C_{43}H_{62}O_{11}$	$[M+Na]^+$	777.4148	777.4184	-4.63 ppm
MS ³	$C_{36}H_{50}O_8$	$[M+Na]^+$	633.3380	633.3398	-2.84 ppm

39. 爱普瑞菌素

英文名称: Eprinomectin B_{1a}

CAS#: 133305-88-1

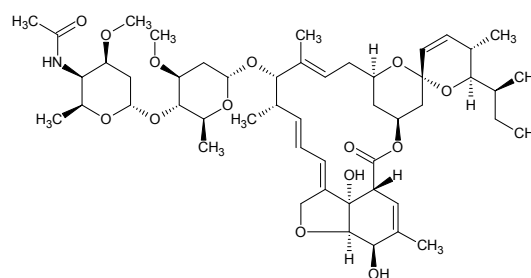
分子式: C₅₀H₇₅NO₁₄

MW: 914.14

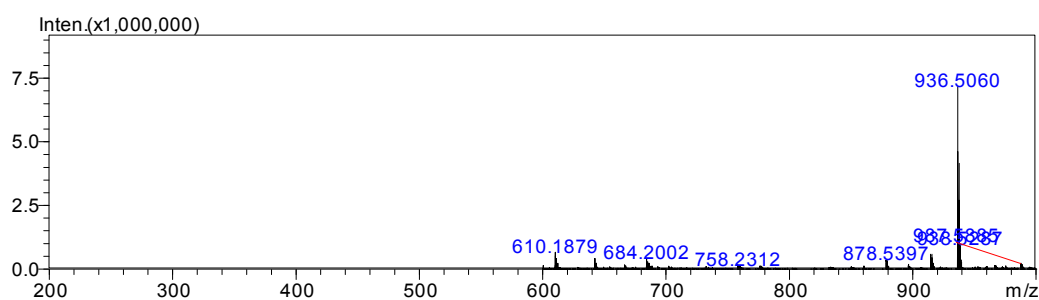
离子: [M+Na]⁺

质谱图:

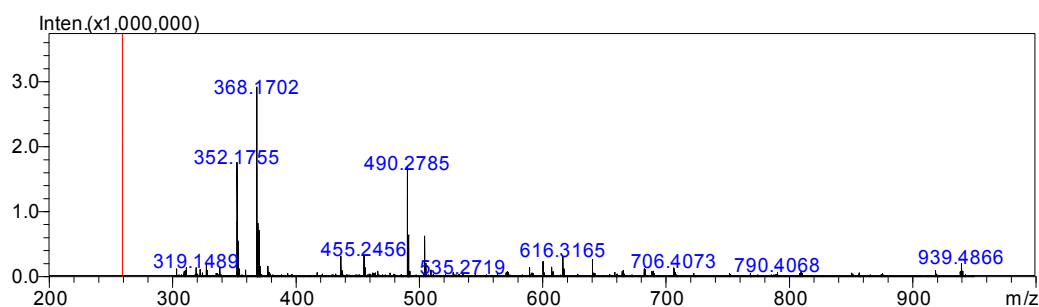
结构式:



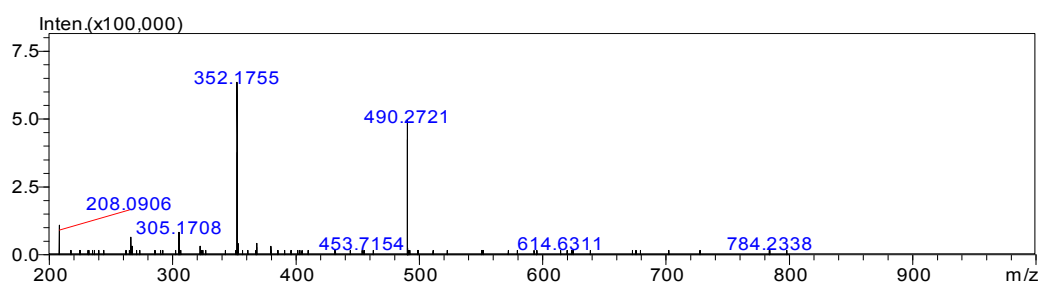
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	C ₅₀ H ₇₅ NO ₁₄	[M+Na] ⁺	936.5060	936.5080	-2.14 ppm
MS ²	C ₂₅ H ₄₁ NO ₇	[M+Na] ⁺	490.2785	490.2775	2.04 ppm
MS ³	C ₁₆ H ₂₇ NO ₆	[M+Na] ⁺	352.1755	352.1731	6.81 ppm

40. 羟甲基硝唑

英文名称: Metronidazole-OH

结构式:

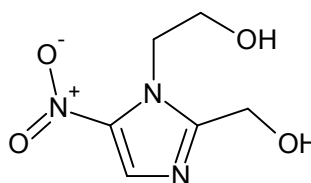
CAS#: 4812-40-2

分子式: C₆H₉N₃O₄

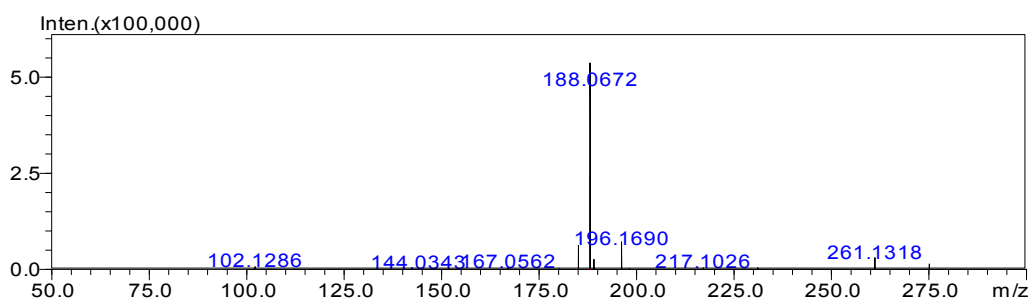
MW: 187.15

离子: [M+H]⁺

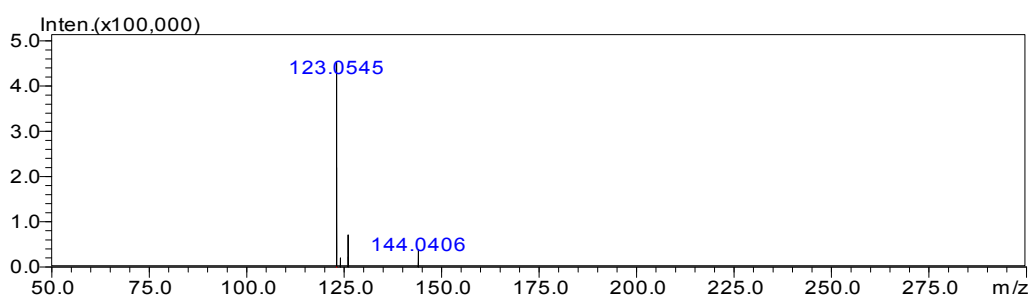
质谱图:



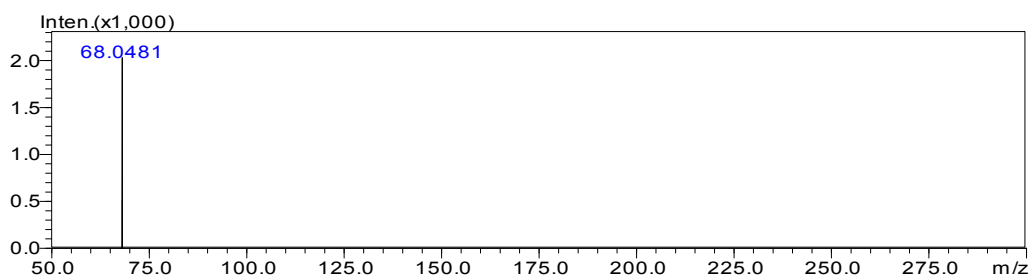
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	C ₆ H ₉ N ₃ O ₄	[M+H] ⁺	188.0672	188.0666	0.6 mDa
MS ²	C ₆ H ₆ N ₂ O	[M+H] ⁺	123.0545	123.0553	-0.8 mDa
MS ³	C ₄ H ₅ N	[M+H] ⁺	68.0481	68.0495	-1.4 mDa

41. 甲硝达唑

英文名称: Metronidazole

结构式:

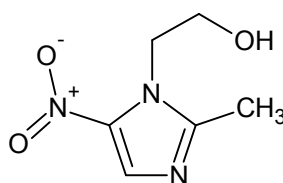
CAS#: 443-48-1

分子式: C₆H₉N₃O₃

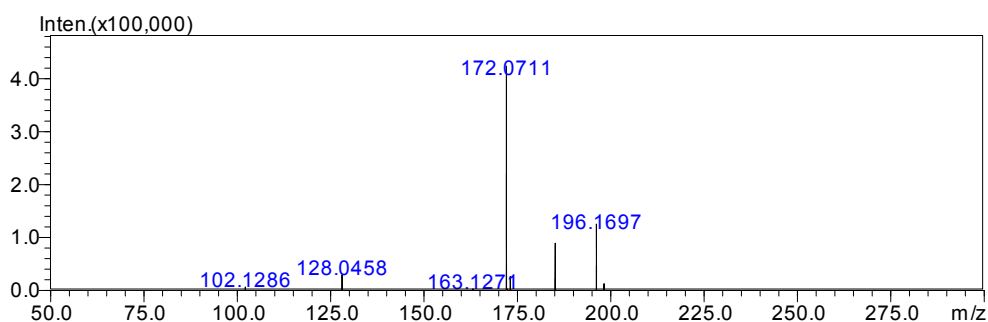
MW: 171.15

离子: [M+H]⁺

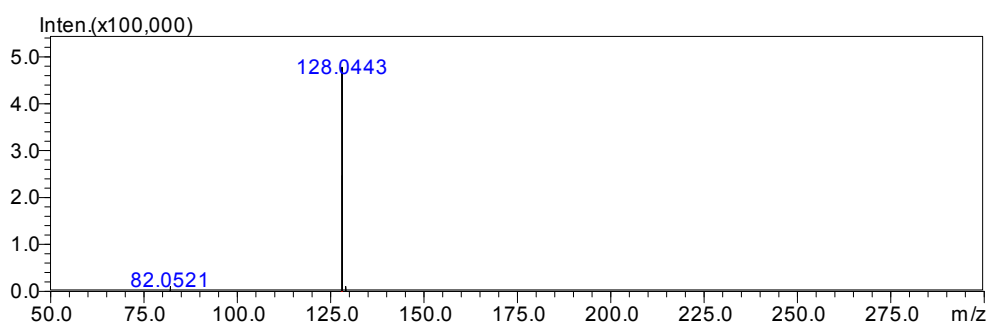
质谱图:



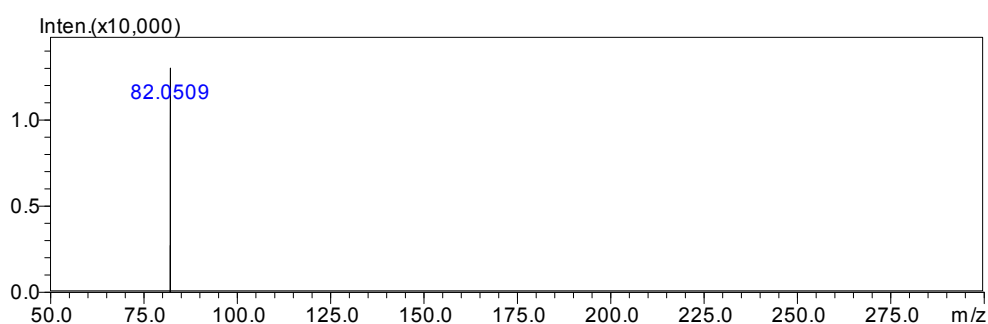
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	C ₆ H ₉ N ₃ O ₃	[M+H] ⁺	172.0711	172.0717	-0.6 mDa
MS ²	C ₄ H ₅ N ₃ O ₂	[M+H] ⁺	128.0443	128.0455	-1.2 mDa
MS ³	C ₄ H ₅ N ₂	[M+H] ⁺	82.0509	82.0525	-1.6 mDa

42. 洛硝达唑

英文名称: Ronidazole

结构式:

CAS#: 7681-76-7

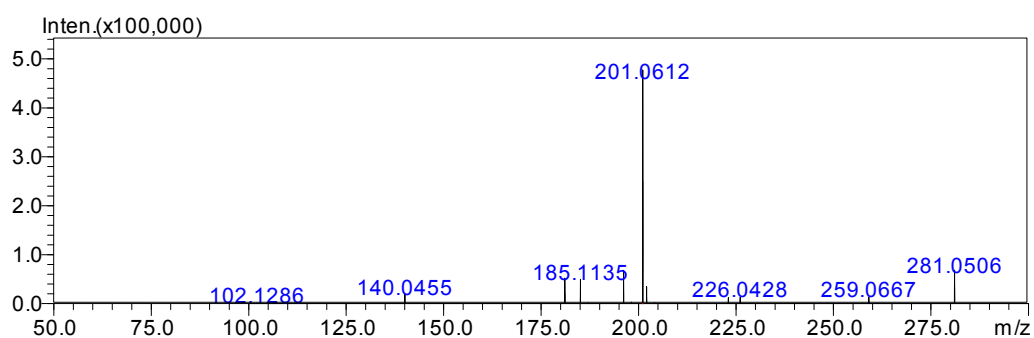
分子式: $C_6H_8N_4O_4$

MW: 200.15

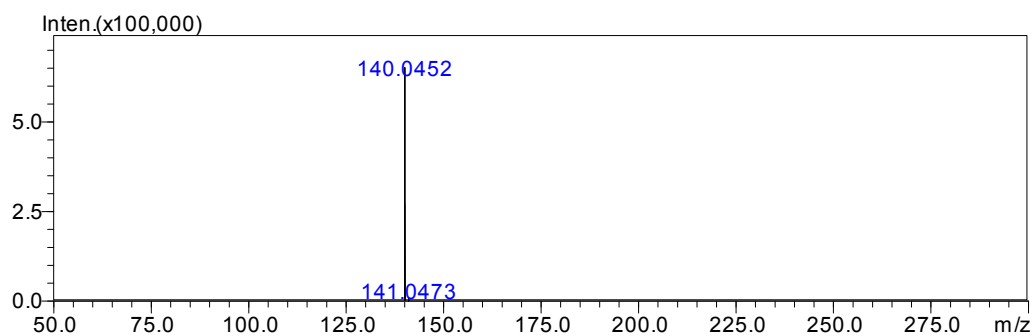
离子: $[M+H]^+$

质谱图:

MS¹



MS²



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_6H_8N_4O_4$	$[M+H]^+$	201.0612	201.0618	-0.6 mDa
MS ²	$C_5H_5N_3O_2$	$[M+H]^+$	140.0452	140.0455	-0.3 mDa

43. 二甲硝咪唑

英文名称: Dimetridazole

结构式:

CAS#: 551-92-8

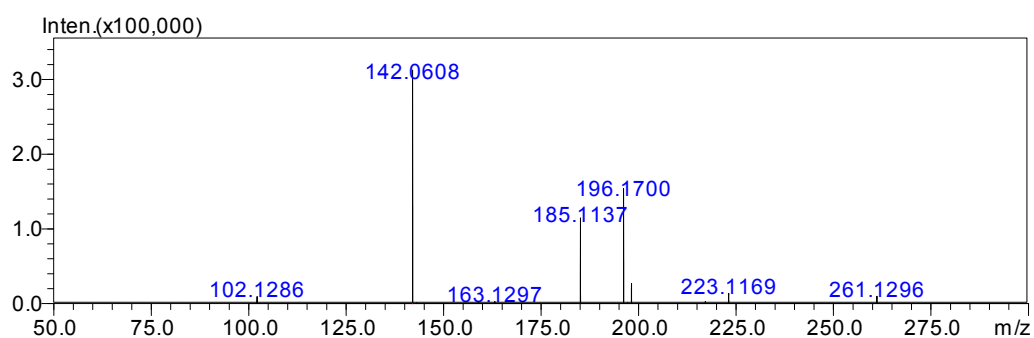
分子式: $C_5H_7N_3O_2$

MW: 141.13

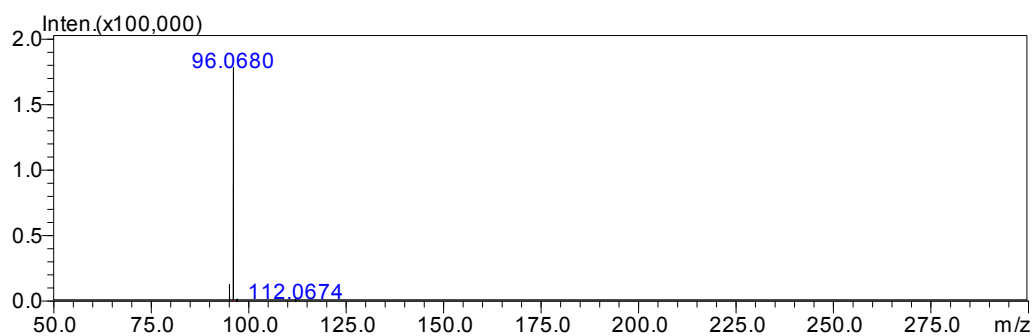
离子: $[M+H]^+$

质谱图:

MS¹



MS²



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_5H_7N_3O_2$	$[M+H]^+$	142.0608	142.0611	-0.3 mDa
MS ²	$C_5H_7N_2$	$[M+H]^+$	96.0680	96.0682	-0.2 mDa

44. 苏丹红 1

英文名称: Sudan I

结构式:

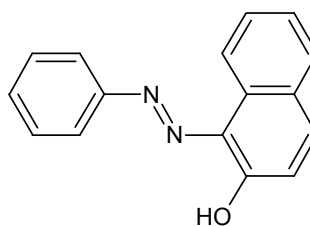
CAS#: 842-07-9

分子式: C₁₆H₁₂N₂O

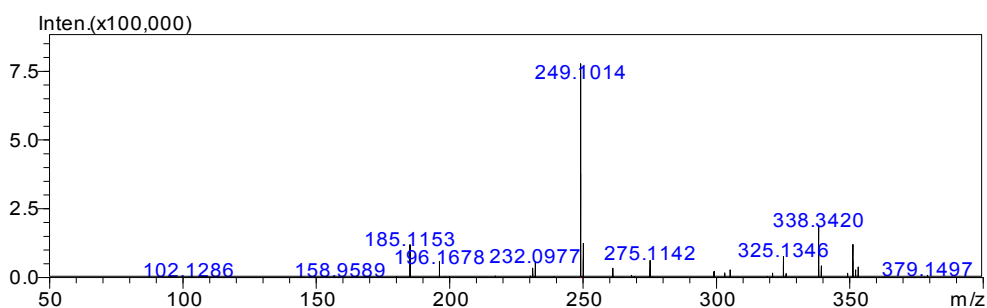
MW: 248.28

离子: [M+H]⁺

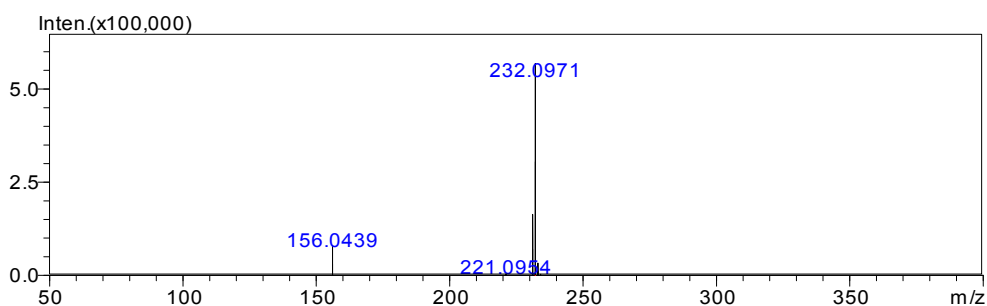
质谱图:



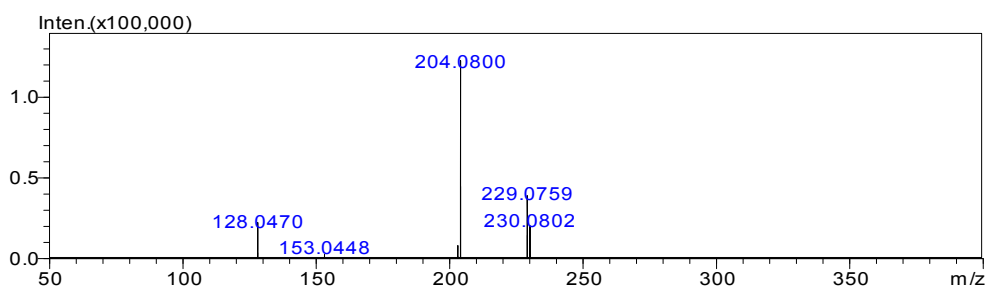
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	C ₁₆ H ₁₂ N ₂ O	[M+H] ⁺	249.1014	249.1022	-0.8 mDa
MS ²	C ₁₆ H ₁₁ N ₂	[M+H] ⁺	232.0971	232.0995	-2.4 mDa
MS ³	C ₁₅ H ₉ N	[M+H] ⁺	204.0800	204.0808	-0.8 mDa

45. 苏丹红 2

英文名称: Sudan II

结构式:

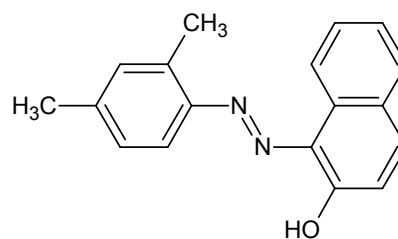
CAS#: 3118-97-6

分子式: $C_{18}H_{16}N_2O$

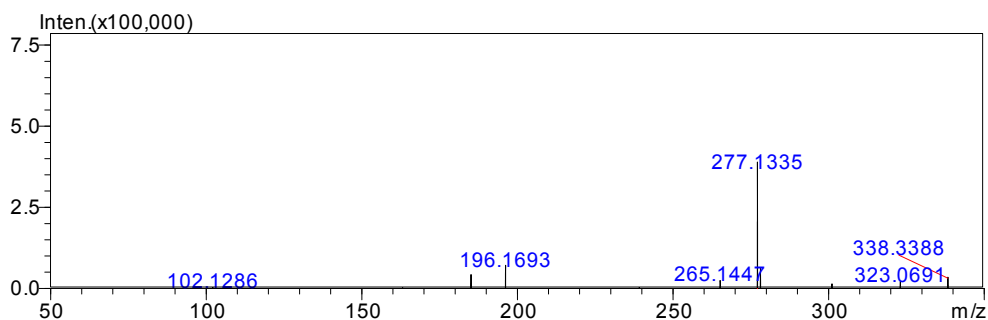
MW: 276.33

离子: $[M+H]^+$

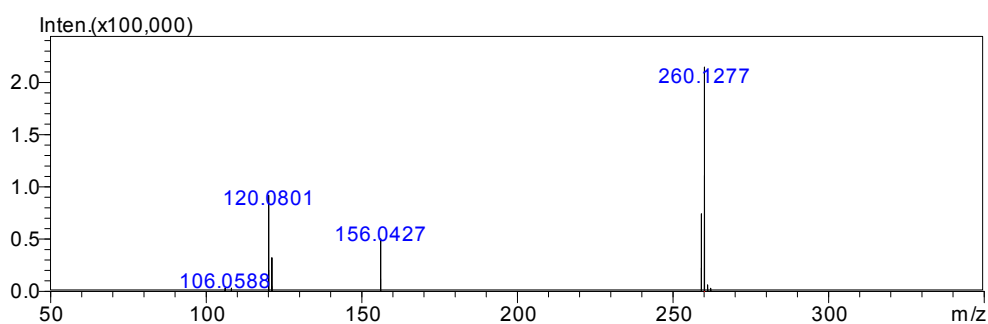
质谱图:



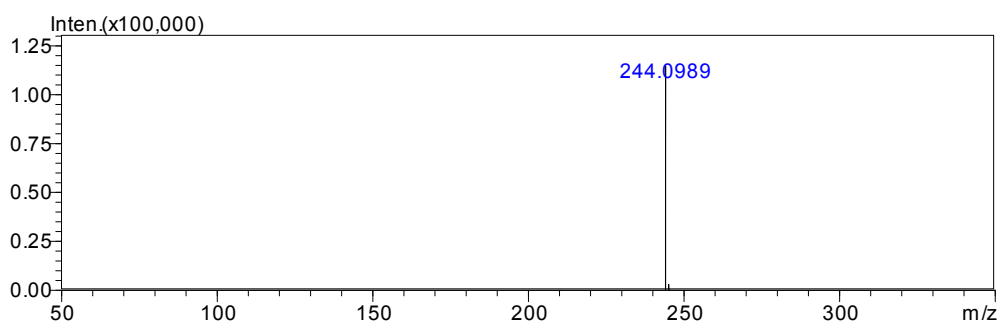
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_{18}H_{16}N_2O$	$[M+H]^+$	277.1335	277.1335	0.00 ppm
MS ²	$C_{18}H_{15}N_2$	$[M+H]^+$	260.1277	260.1308	-11.92 ppm
MS ³	$C_{17}H_{11}N_2$	$[M+H]^+$	244.0989	244.0995	-0.6 mDa

46. 苏丹红 3

英文名称: Sudan III

CAS#: 85-86-9

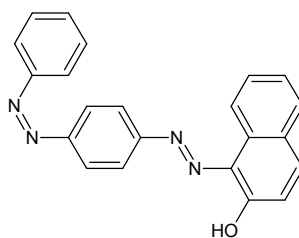
分子式: $C_{22}H_{16}N_4O$

MW: 352.39

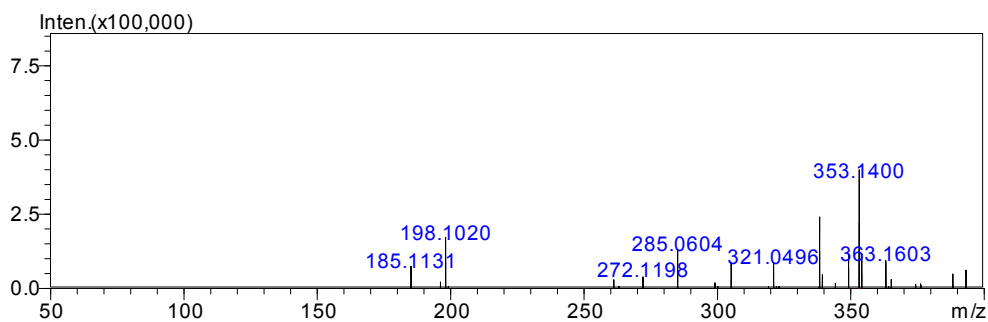
离子: $[M+H]^+$

质谱图:

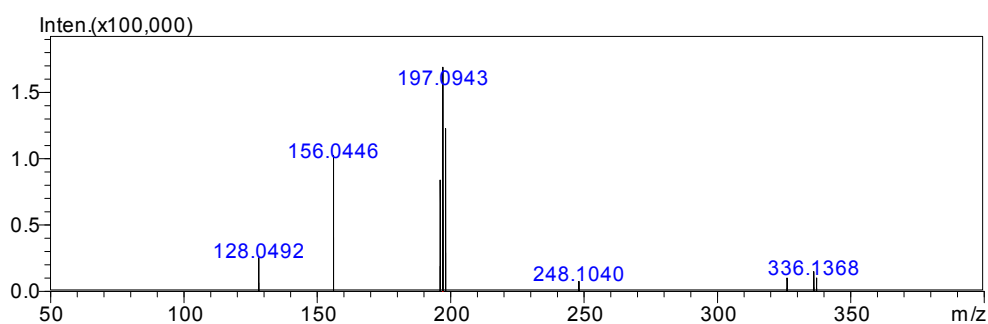
结构式:



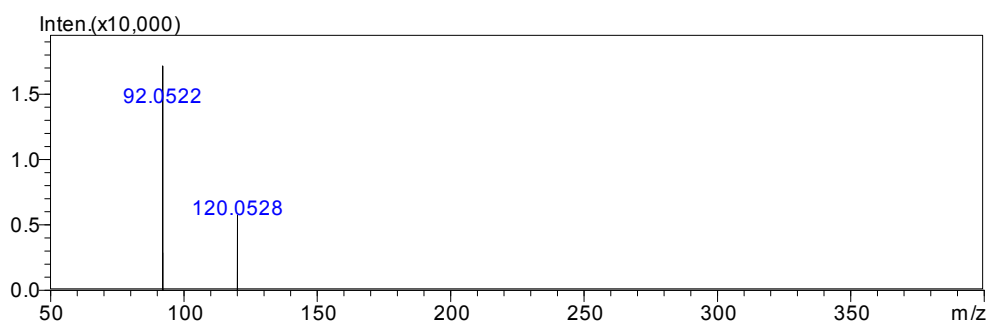
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_{22}H_{16}N_4O$	$[M+H]^+$	353.1400	353.1397	0.85 ppm
MS ²	$C_{12}H_{10}N_3$	$[M+H]^+$	197.0943	197.0947	-0.4 mDa
MS ³	$C_6H_5N_3$	$[M+H]^+$	120.0528	120.0556	-2.8 mDa

47. 苏丹红 4

英文名称: Sudan IV

CAS#: 85-83-6

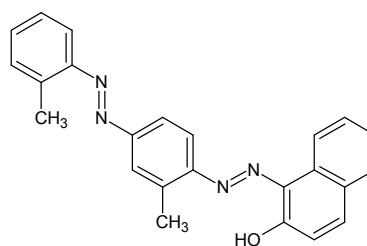
分子式: $C_{24}H_{20}N_4O$

MW: 380.44

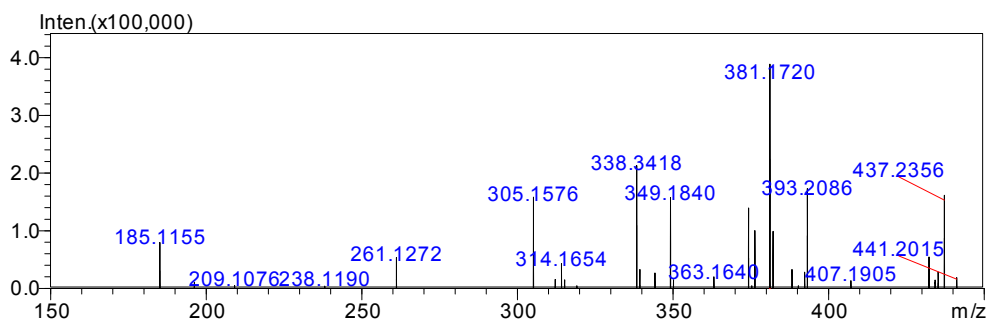
离子: $[M+H]^+$

质谱图:

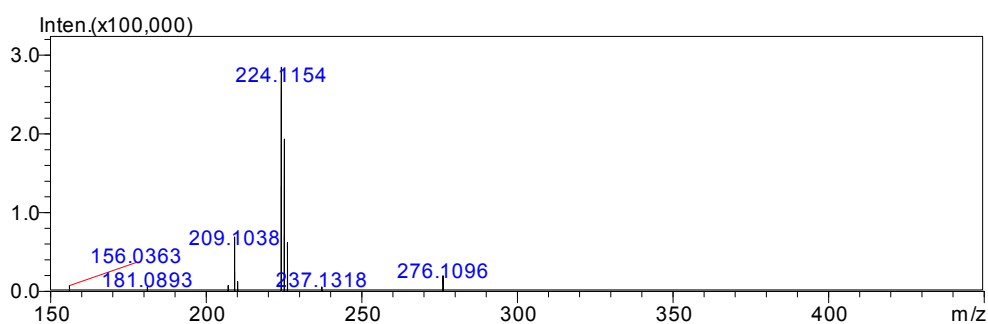
结构式:



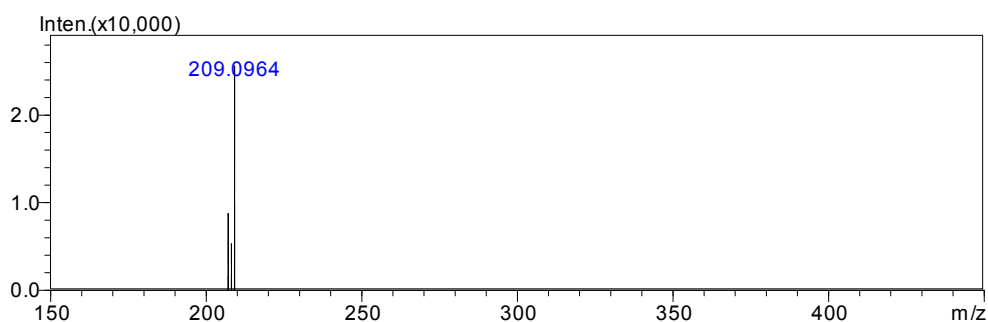
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_{24}H_{20}N_4O$	$[M+H]^+$	381.1720	381.1710	2.62 ppm
MS ²	$C_{14}H_{13}N_3$	$[M+H]^+$	224.1154	224.1182	-2.8 mDa
MS ³	$C_{13}H_{10}N_3$	$[M+H]^+$	209.0964	209.0947	1.7 mDa

48. 三聚氰胺

英文名称: Melamine

CAS#: 108-78-1

分子式: $C_3H_6N_6$

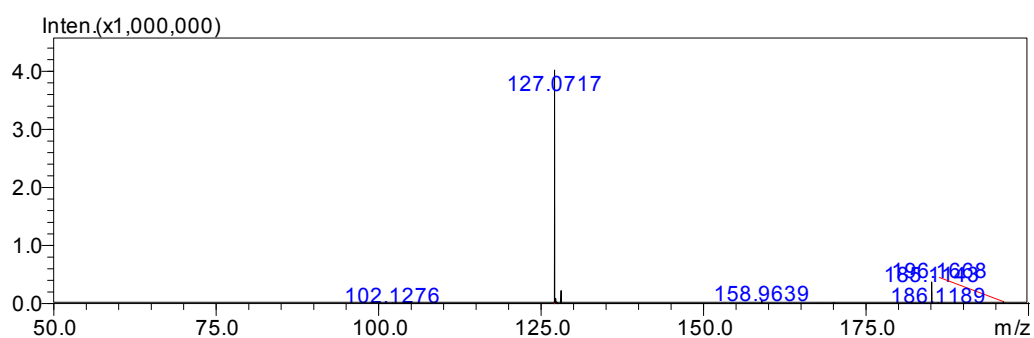
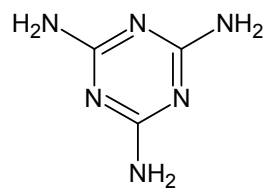
MW: 126.12

离子: $[M+H]^+$

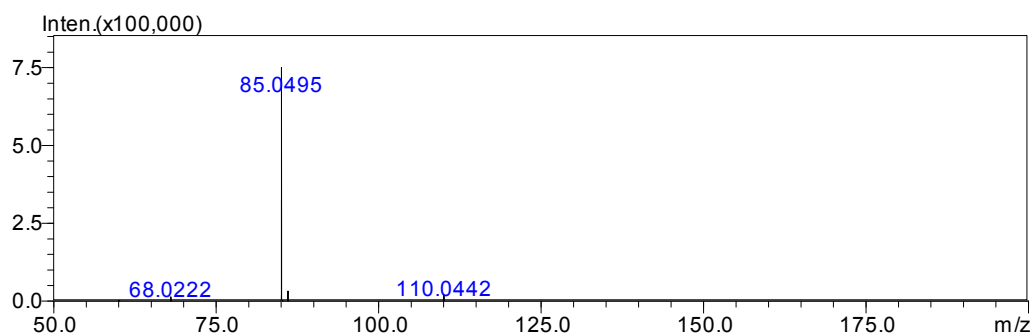
质谱图:

MS¹

结构式:



MS²



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_3H_6N_6$	$[M+H]^+$	127.0717	127.0727	-1.0 mDa
MS ²	$C_2H_4N_4$	$[M+H]^+$	85.0495	85.0509	-1.4 mDa

49. 三聚氰酸

英文名称: Cyanuric Acid

CAS#: 108-80-5

分子式: $C_3H_3N_3O_3$

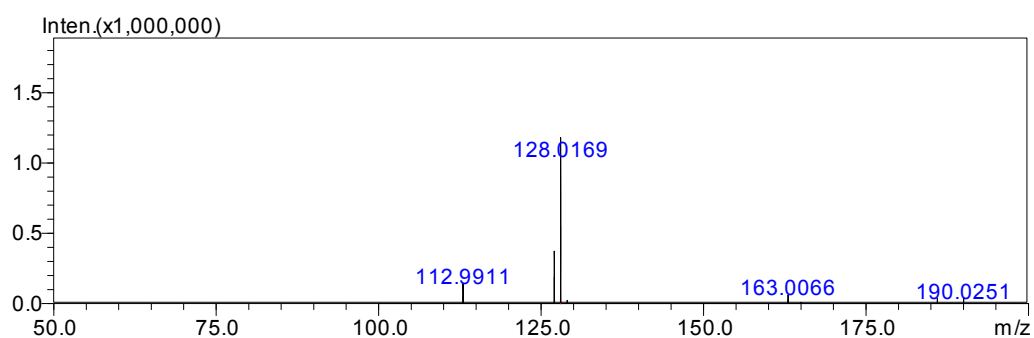
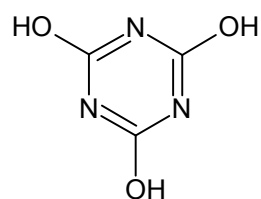
MW: 129.07

离子: $[M-H]^-$

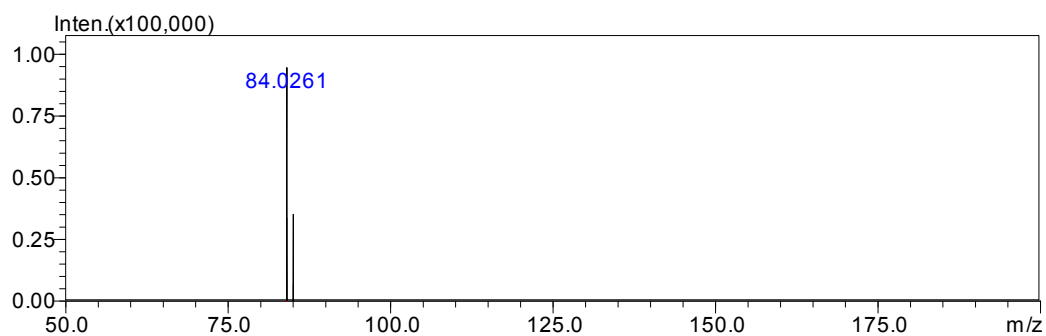
质谱图:

MS^1

结构式:



MS^2



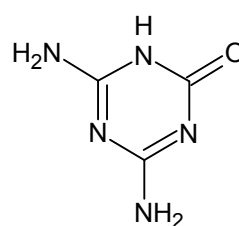
可能的多级质谱预测信息

MS^n	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS^1	$C_3H_3N_3O_3$	$[M-H]^-$	128.0169	128.0102	6.7 mDa
MS^2	$C_2H_3N_3O$	$[M-H]^-$	84.0261	84.0203	5.8 mDa

50. 三聚氰胺二酰胺

英文名称: Ammeline

结构式:



CAS#: 645-92-1

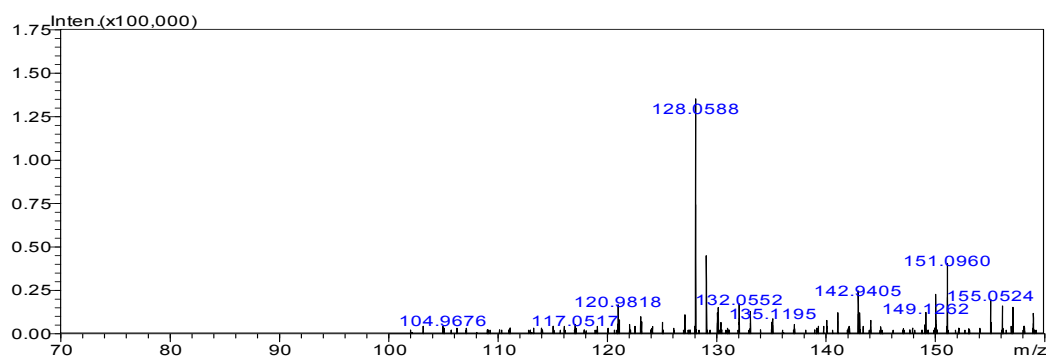
分子式: $C_3H_5N_5O$

MW: 127.1

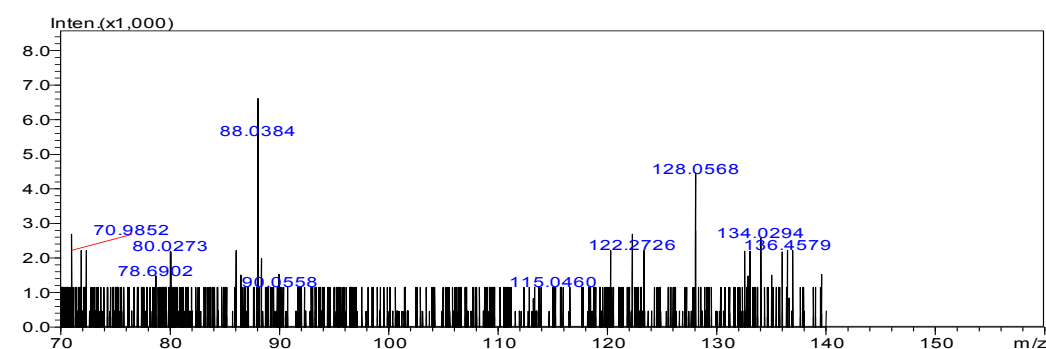
离子: $[M+H]^+$

质谱图:

MS¹



MS²



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_3H_5N_5O$	$[M+H]^+$	128.0588	128.0567	2.1 mDa
MS ²	CH_3N_4O	$[M+H]^+$	88.0384	88.0380	0.4 mDa

51. 三聚氰胺一酰胺

英文名称: Ammelide

结构式:

CAS#: 645-93-2

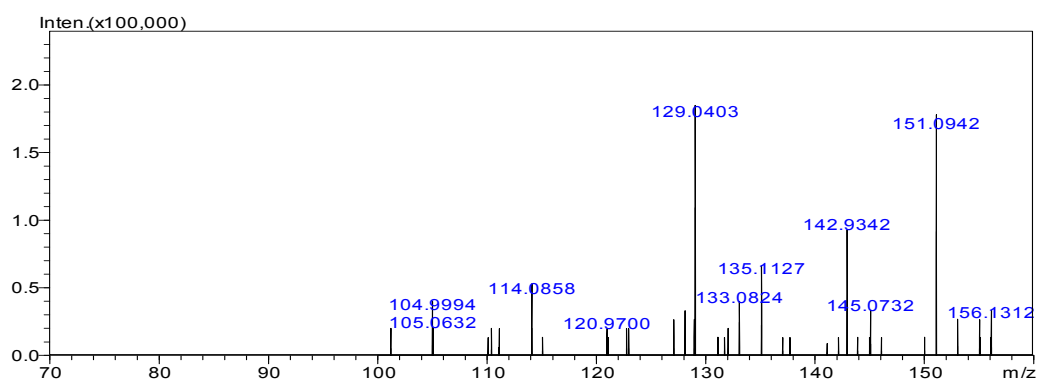
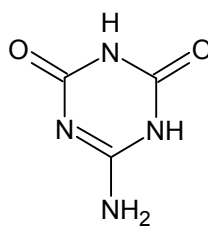
分子式: $C_3H_4N_4O_2$

MW: 128.09

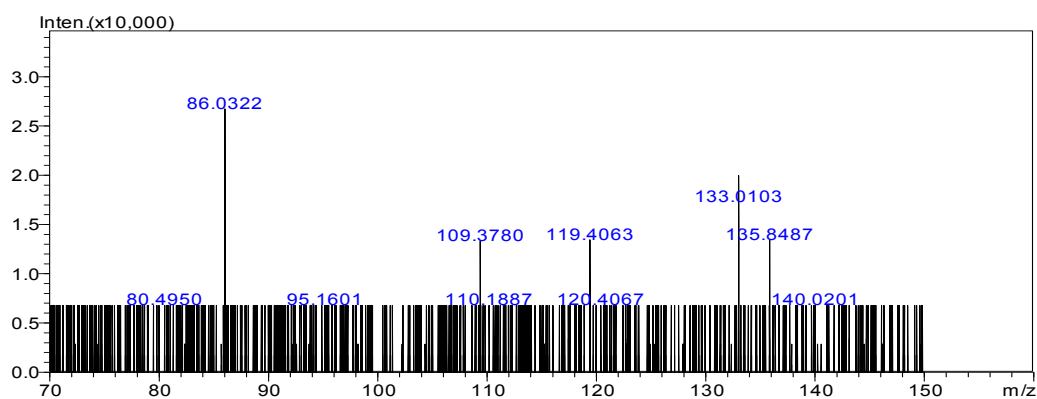
离子: $[M+H]^+$

质谱图:

MS¹



MS²



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_3H_4N_4O_2$	$[M+H]^+$	129.0403	129.0407	-0.4 mDa
MS ²	$C_2H_3N_3O$	$[M+H]^+$	86.0322	86.0349	-2.7 mDa

52. 氯丙嗪

英文名称: Chlorpromazine

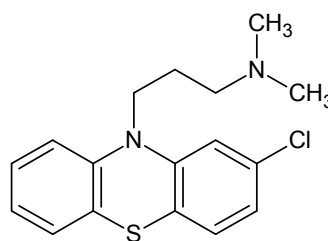
结构式:

CAS#: 50-53-3

分子式: C₁₇H₁₉ClN₂S

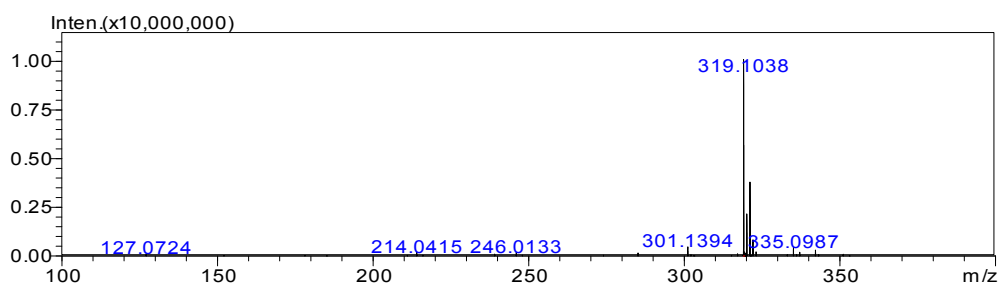
MW: 318.86

离子: [M+H]⁺

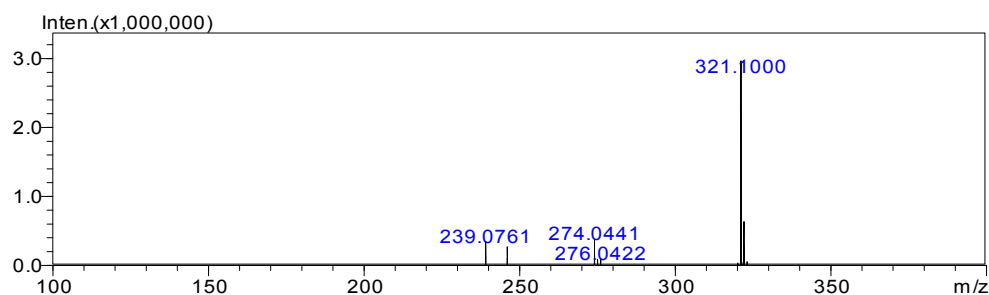


质谱图:

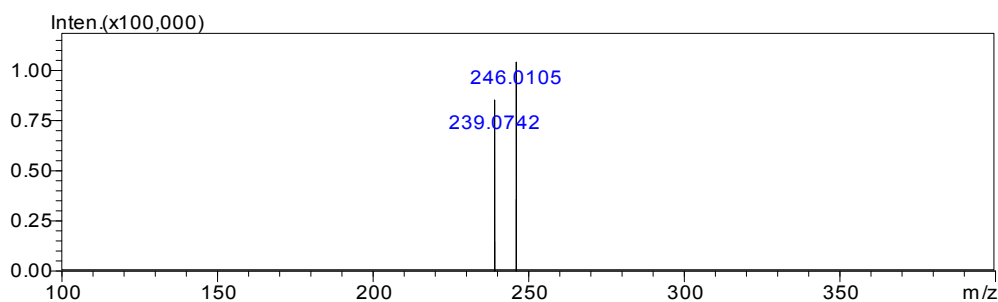
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	C ₁₇ H ₁₉ N ₂ SCl	[M+H] ⁺	319.1038	319.1030	2.51 ppm
MS ²	C ₁₅ H ₁₂ NSCl	[M+H] ⁺	274.0441	274.0452	-4.01 ppm
MS ³	C ₁₃ H ₈ NSCl	[M+H] ⁺	246.0105	246.0139	-3.4 mDa

53. 氯羟吡啶

英文名称: Clopidol

CAS#: 2971-90-6

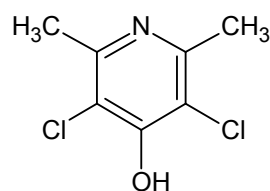
分子式: $C_7H_7Cl_2NO$

MW: 192.04

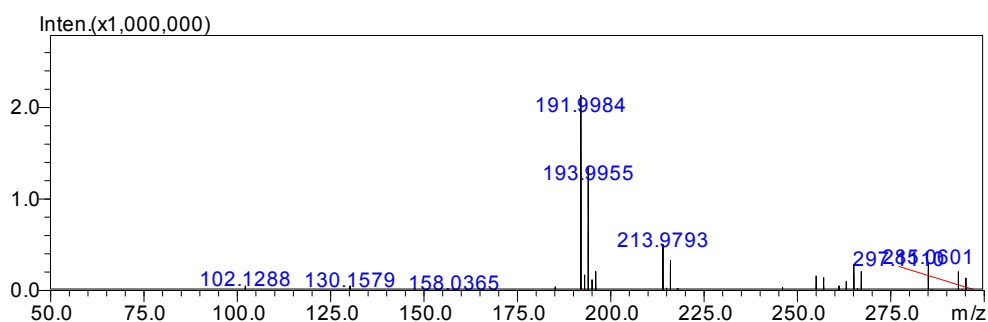
离子: $[M+H]^+$

质谱图:

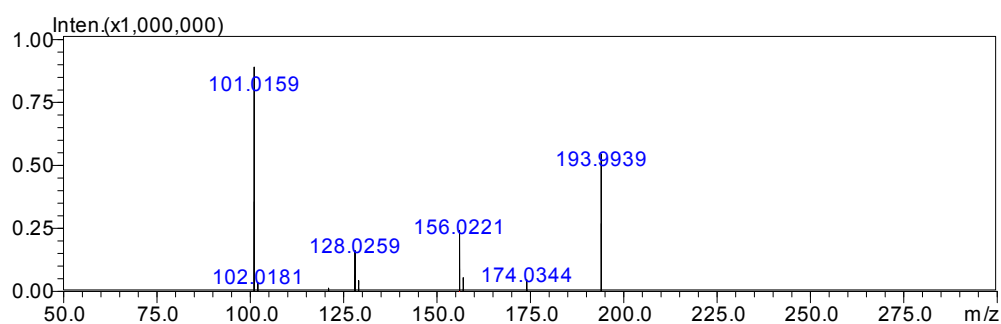
结构式:



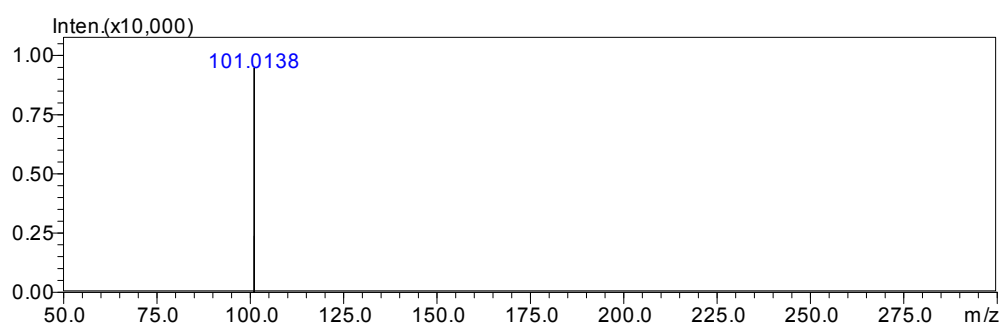
MS¹



MS²



MS³



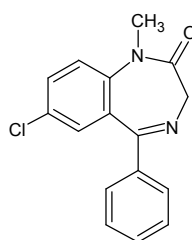
可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_7H_7NOCl_2$	$[M+H]^+$	191.9984	191.9977	0.7 mDa
MS ²	C_7H_6NOCl	$[M+H]^+$	156.0221	156.0211	1.0 mDa
MS ³	C_5H_5Cl	$[M+H]^+$	101.0138	101.0153	-1.5 mDa

54. 地西洋

英文名称: Diazepam

结构式:



CAS#: 439-14-5

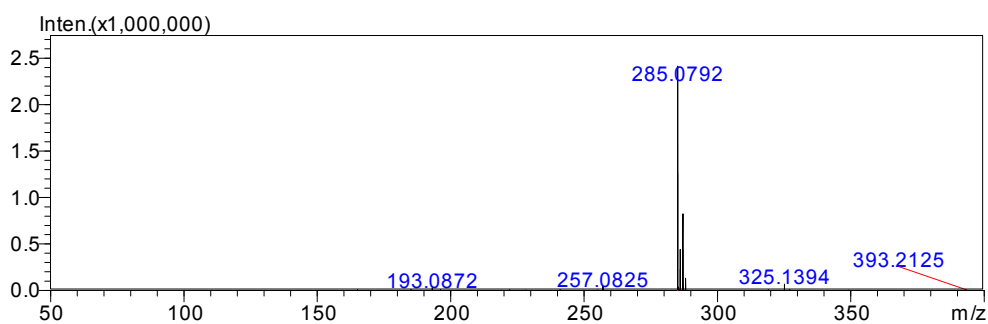
分子式: C₁₆H₁₃ClN₂O

MW: 284.74

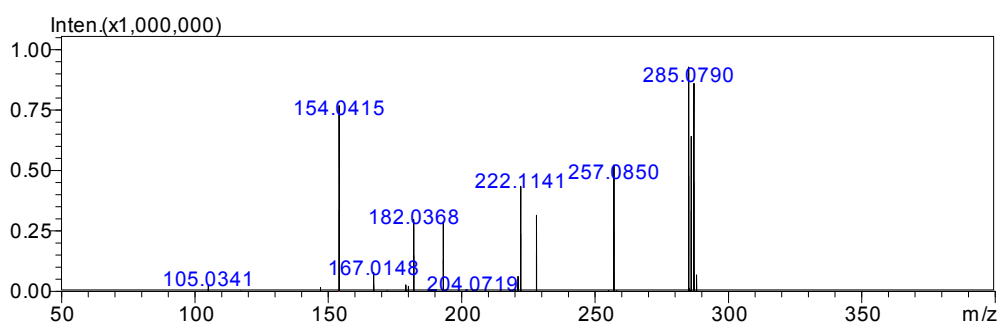
离子: [M+H]⁺

质谱图:

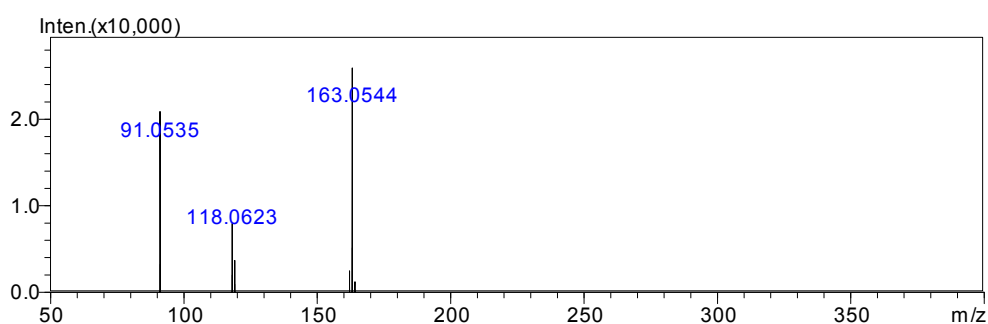
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	C ₁₆ H ₁₃ N ₂ OCl	[M+H] ⁺	285.0792	285.0789	1.05 ppm
MS ²	C ₈ H ₈ NCl	[M+H] ⁺	154.0415	154.0418	-0.3 mDa
MS ³	C ₇ H ₆	[M+H] ⁺	91.0535	91.0542	-0.7 mDa

55. 卡巴氧

英文名称: Carbadox

结构式:

CAS#: 6804-07-5

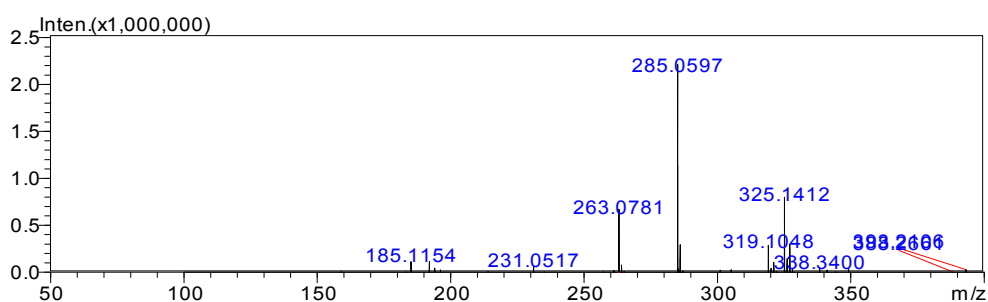
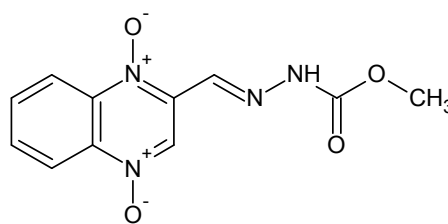
分子式: $C_{11}H_{10}N_4O_4$

MW: 262.22

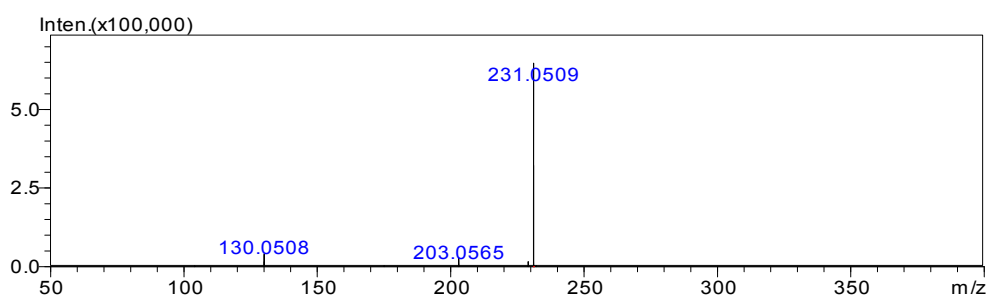
离子: $[M+H]^+$

质谱图:

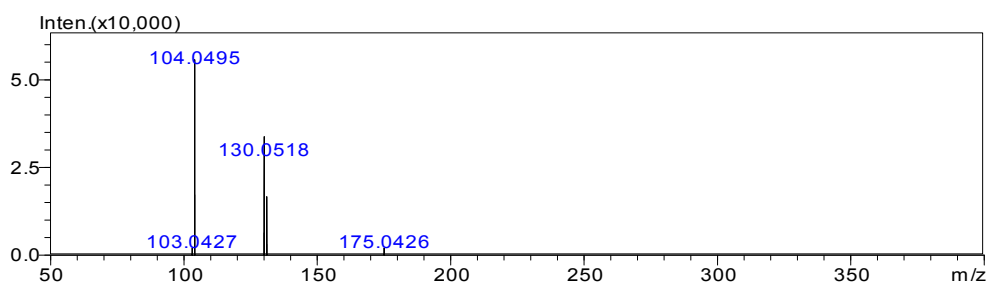
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_{11}H_{10}N_4O_4$	$[M+H]^+$	263.0781	263.0775	2.28 ppm
MS ²	$C_{10}H_6N_4O_3$	$[M+H]^+$	231.0509	231.0513	-0.4 mDa
MS ³	C_7H_5N	$[M+H]^+$	104.0495	104.0495	0.0 mDa

56. 喹乙醇

英文名称: Olaquinox

结构式:

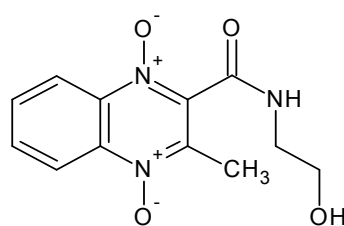
CAS#: 23696-28-8

分子式: C₁₂H₁₃N₃O₄

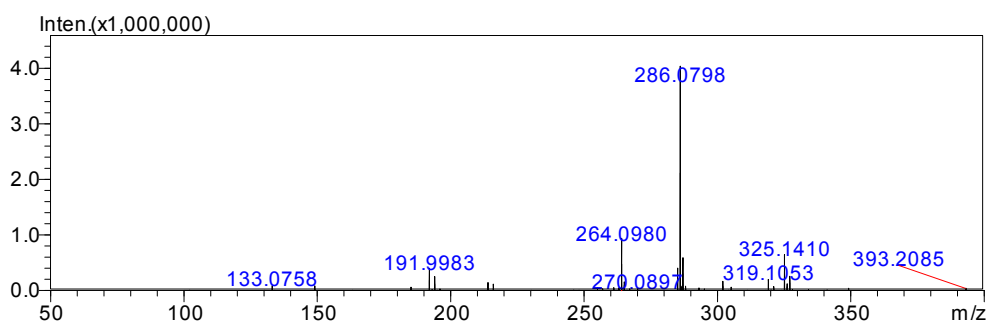
MW: 263.25

离子: [M+H]⁺

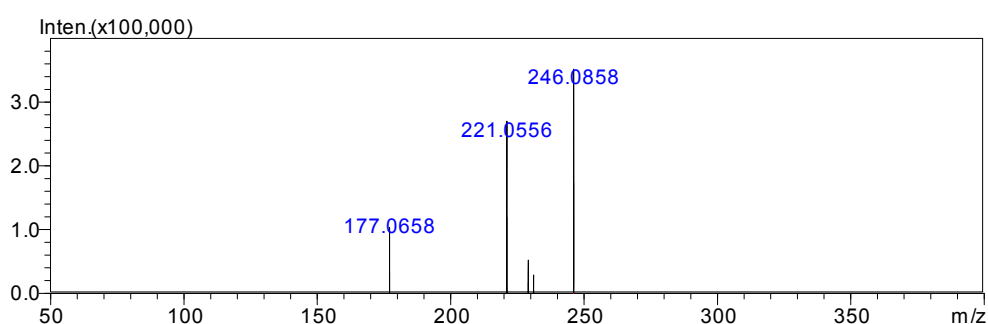
质谱图:



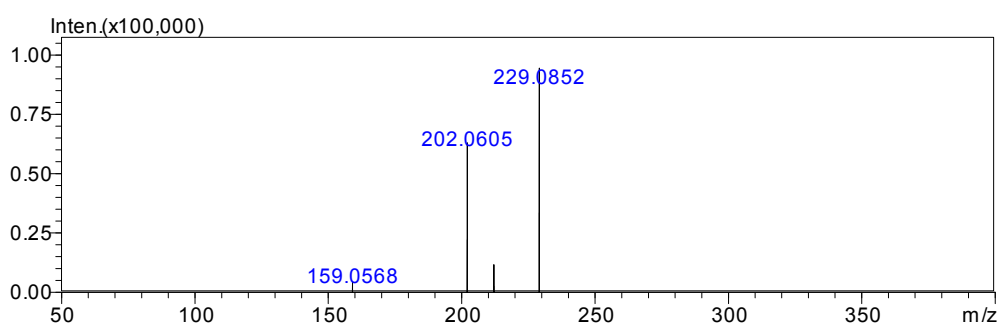
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	C ₁₂ H ₁₃ N ₃ O ₄	[M+H] ⁺	264.0980	264.0979	0.38 ppm
MS ²	C ₁₂ H ₁₁ N ₃ O ₃	[M+H] ⁺	246.0858	246.0873	-1.5 mDa
MS ³	C ₁₂ H ₁₀ N ₃ O ₂	[M+H] ⁺	229.0852	229.0846	0.6 mDa

57. MQCA

英文名称: Quinoxaline-2-Carboxylic Acid Methyl 结构式:

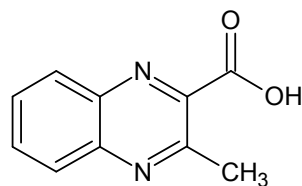
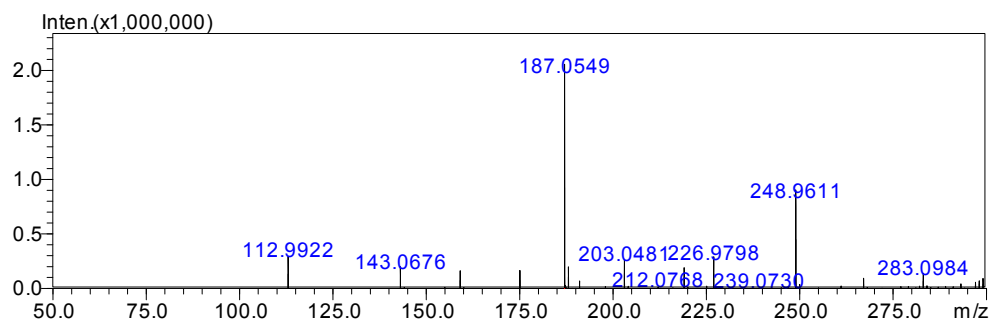
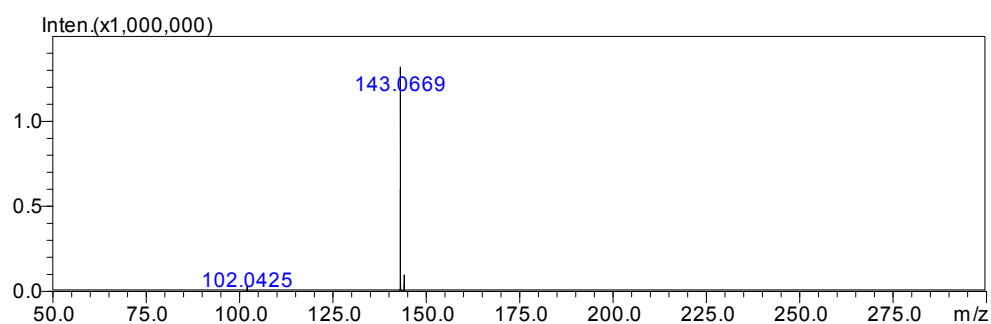
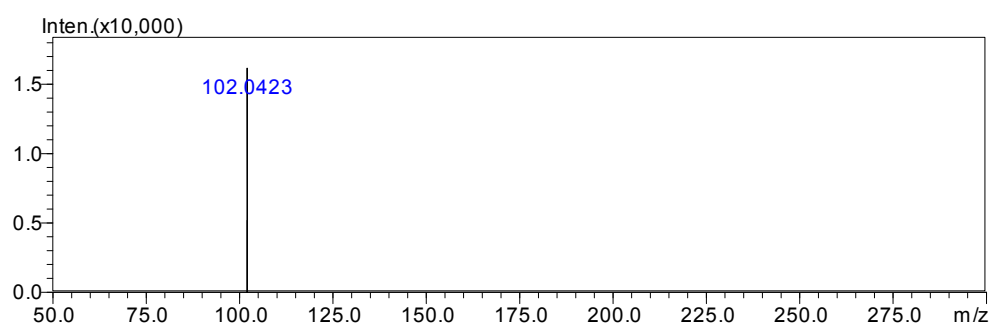
CAS#: 74003-63-7

分子式: $C_{10}H_8N_2O_2$

MW: 188.18

离子: $[M-H]^-$

质谱图:

MS¹MS²MS³

可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_{10}H_8N_2O_2$	$[M-H]^-$	187.0549	187.0513	3.6 mDa
MS ²	$C_9H_8N_2$	$[M-H]^-$	143.0669	143.0615	5.4 mDa
MS ³	C_7H_5N	$[M-H]^-$	102.0423	102.0349	7.4 mDa

58. QAC

英文名称: 2-Quinoxalinecarboxylic Acid 结构式:

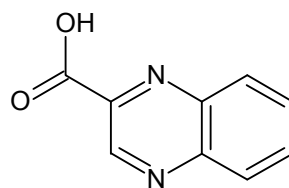
CAS#: 879-65-2

分子式: $C_9H_6N_2O_2$

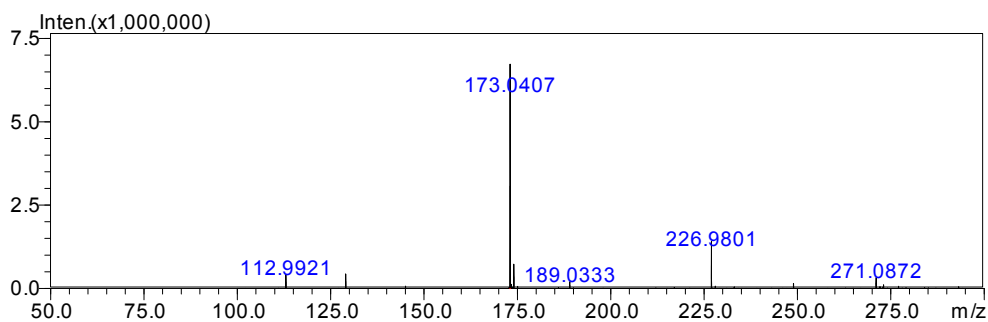
MW: 174.16

离子: $[M-H]^-$

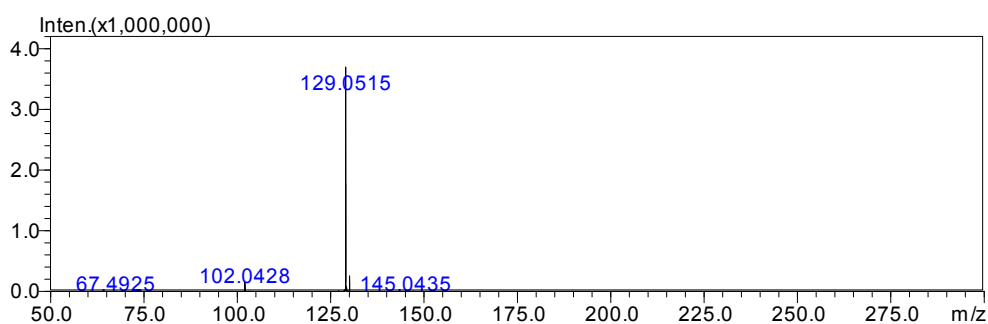
质谱图:



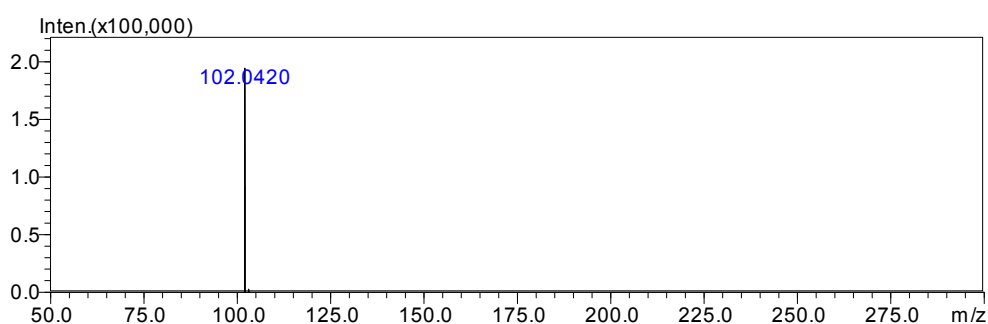
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_9H_6N_2O_2$	$[M-H]^-$	173.0407	173.0357	5.0 mDa
MS ²	$C_8H_6N_2$	$[M-H]^-$	129.0515	129.0458	5.7 mDa
MS ³	C_7H_5N	$[M-H]^-$	102.0420	102.0349	7.1 mDa

59. 罗红霉素

英文名称: Roxithromycin

结构式:

CAS#: 80214-83-1

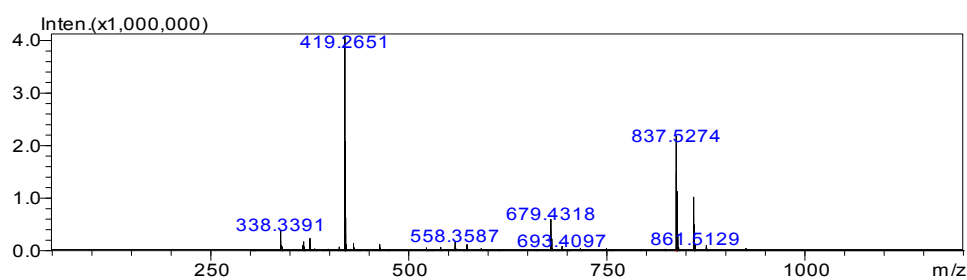
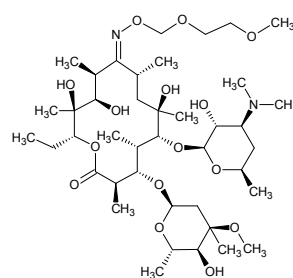
分子式: $C_{41}H_{76}N_2O_{15}$

MW: 837.05

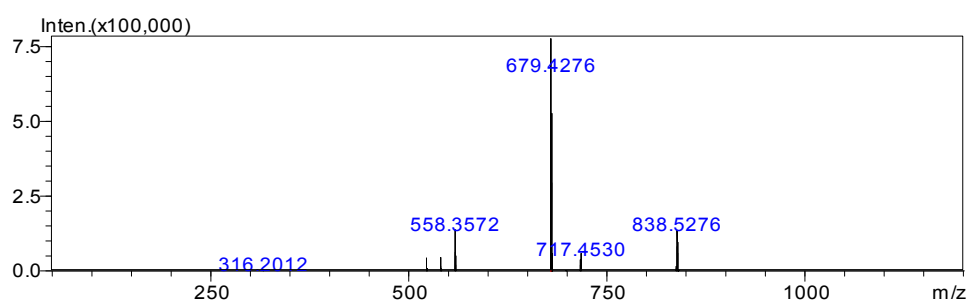
离子: $[M+H]^+$

质谱图:

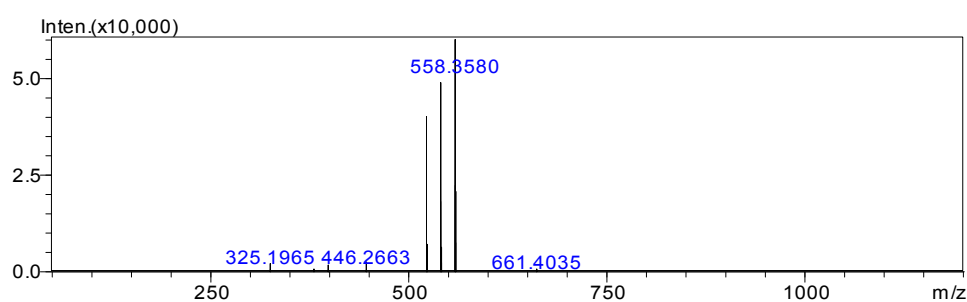
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_{41}H_{76}N_2O_{15}$	$[M+H]^+$	837.5274	837.5318	-5.25 ppm
MS ²	$C_{34}H_{62}O_{13}$	$[M+H]^+$	679.4276	679.4263	1.91 ppm
MS ³	$C_{26}H_{53}O_{12}$	$[M+H]^+$	558.3580	558.3610	-5.37 ppm

60. 竹桃霉素

英文名称: Oleandomycin

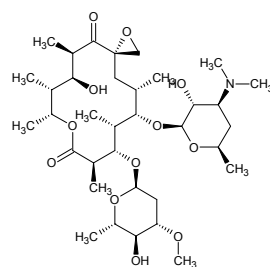
结构式:

CAS#: 7060-74-4

分子式: $C_{35}H_{61}NO_{12}$

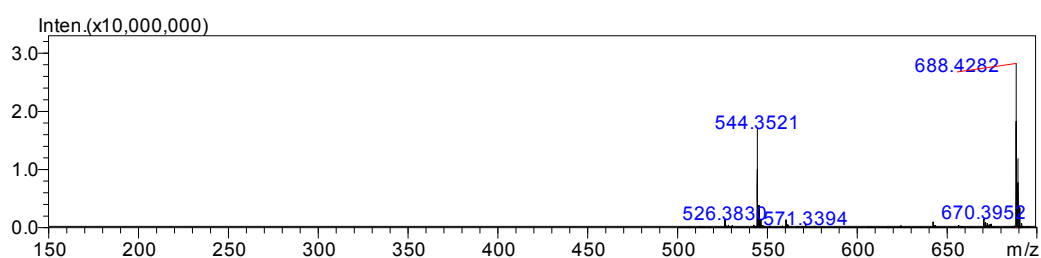
MW: 687.86

离子: $[M+H]^+$

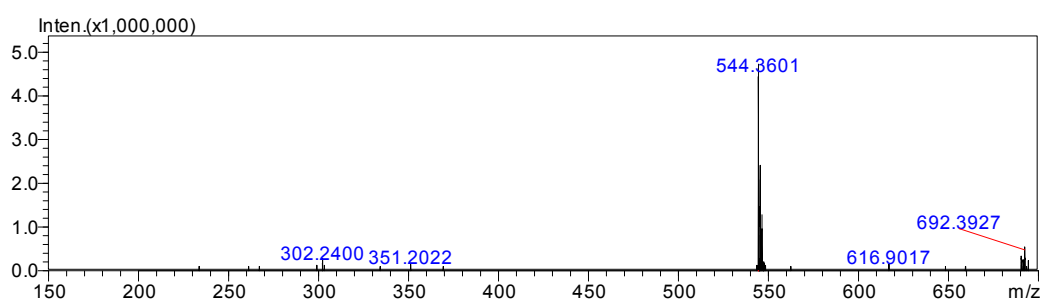


质谱图:

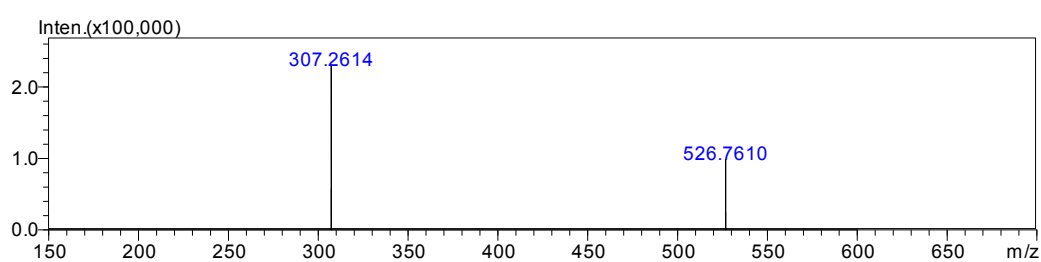
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_{35}H_{61}NO_{12}$	$[M+H]^+$	688.4282	688.4267	2.18 ppm
MS ²	$C_{29}H_{51}O_9$	$[M+H]^+$	544.3601	544.3606	-0.92 ppm

61. 盐霉素

英文名称: Salinomycin 结构式:

CAS#: 53003-10-4

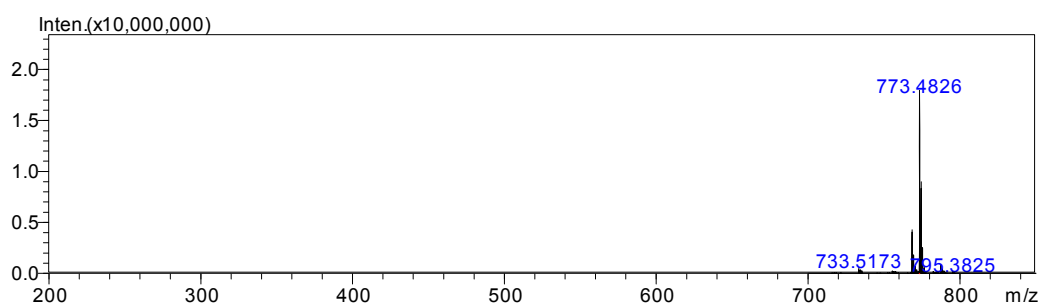
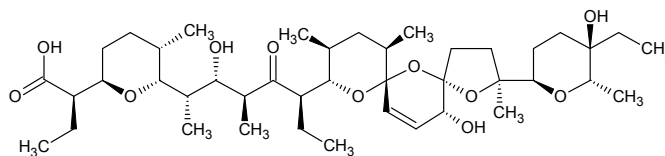
分子式: $C_{42}H_{70}O_{11}$

MW: 772.98

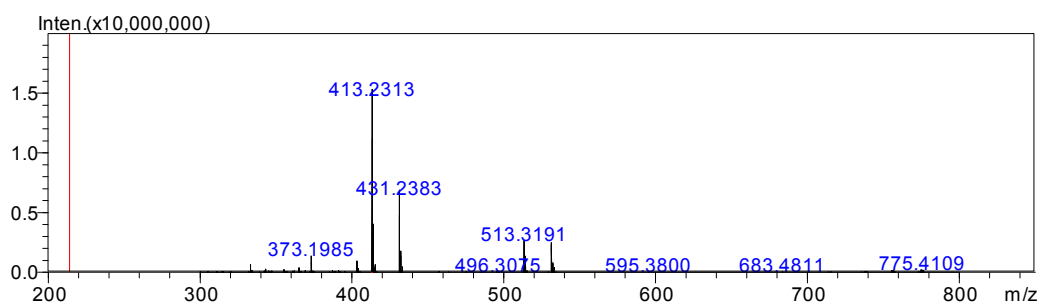
离子: $[M+Na]^+$

质谱图:

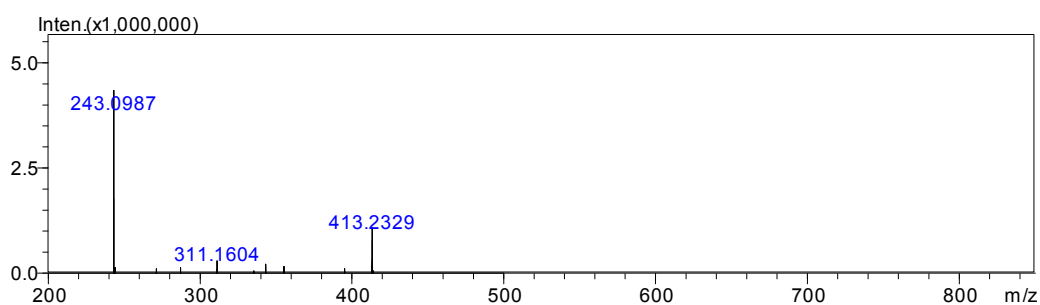
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_{42}H_{70}O_{11}$	$[M+Na]^+$	773.4826	773.4810	2.07 ppm
MS ²	$C_{23}H_{34}O_5$	$[M+Na]^+$	413.2313	413.2298	3.63 ppm
MS ³	$C_{13}H_{16}O_3$	$[M+Na]^+$	243.0987	243.0992	-0.5 mDa

62. 罗沙霉素

英文名称: Rosamicin

结构式:

CAS#: 35834-26-5

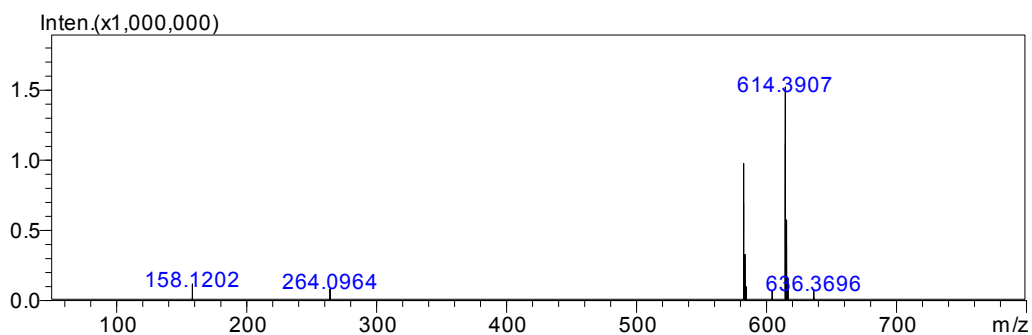
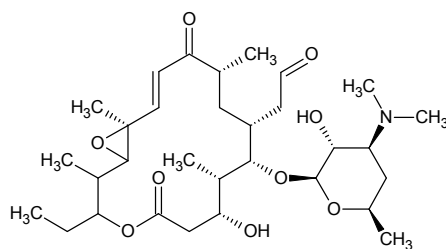
分子式: $C_{31}H_{51}NO_9$

MW: 581.74

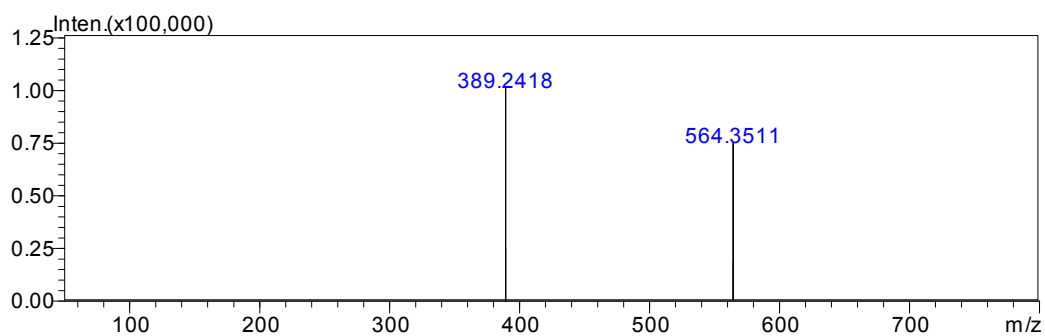
离子: $[M+H]^+$

质谱图:

MS¹



MS²



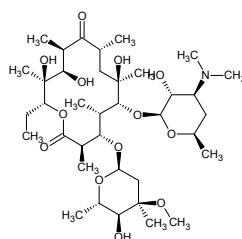
可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_{31}H_{51}NO_9$	$[M+H]^+$	582.3668	582.3637	5.32 ppm
MS ²	$C_{31}H_{49}NO_8$	$[M+H]^+$	564.3511	564.1531	-3.54 ppm

63. 红霉素

英文名称: Erythromycin

结构式:



CAS#: 114-07-8

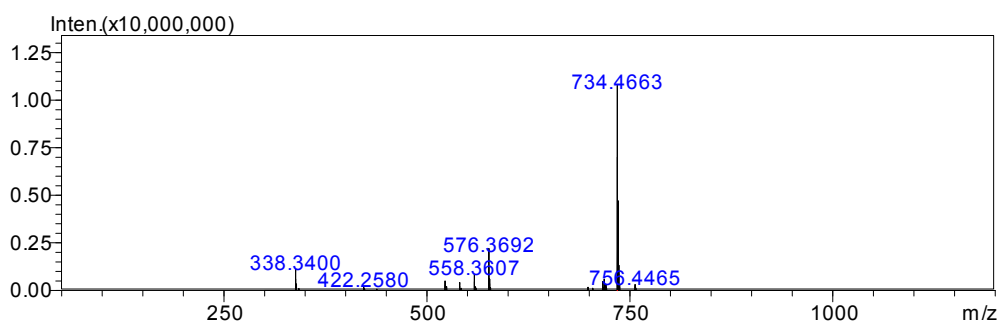
分子式: $C_{37}H_{67}NO_{13}$

MW: 733.93

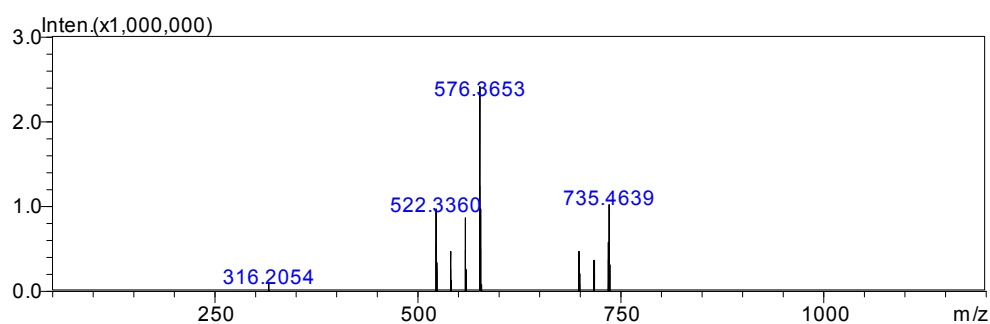
离子: $[M+H]^+$

质谱图:

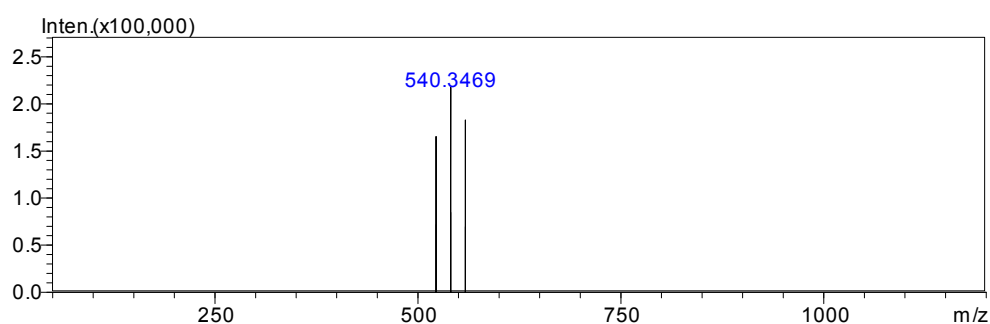
MS¹



MS²



MS³



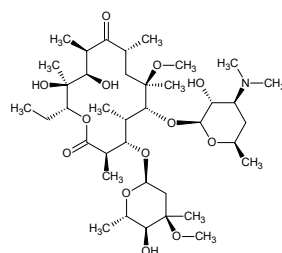
可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_{37}H_{67}NO_{13}$	$[M+H]^+$	734.4663	734.4685	-3.00 ppm
MS ²	$C_{36}H_{49}NO_5$	$[M+H]^+$	576.3653	576.3684	-5.38 ppm
MS ³	$C_{36}H_{47}NO_4$	$[M+H]^+$	558.3565	558.3578	-2.33 ppm

64. 克拉霉素

英文名称: Clarithromycin

结构式:



CAS#: 81103-11-9

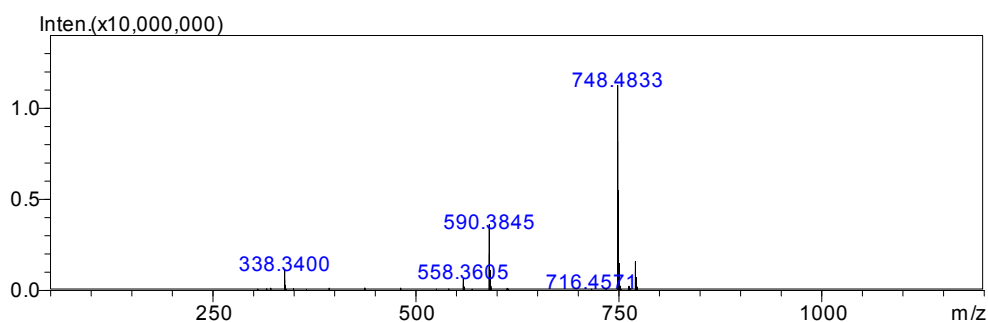
分子式: $C_{38}H_{69}NO_{13}$

MW: 747.95

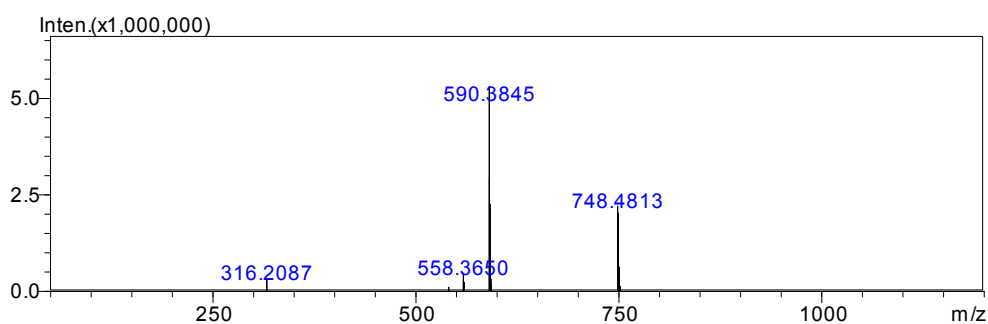
离子: $[M+H]^+$

质谱图:

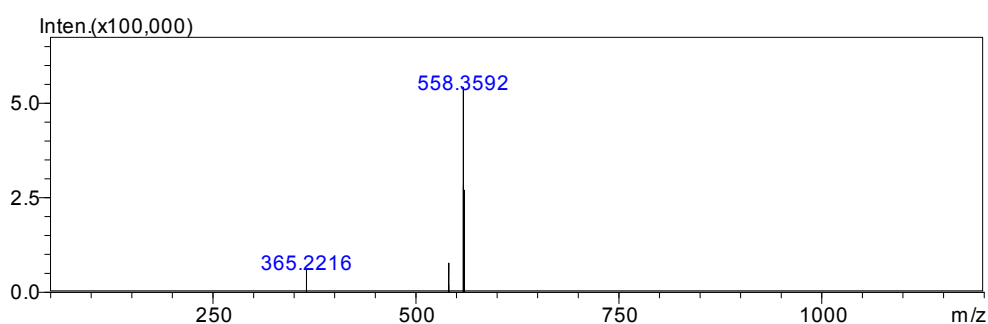
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_{38}H_{69}NO_{13}$	$[M+H]^+$	748.4833	748.4842	-1.20 ppm
MS ²	$C_{30}H_{55}NO_{10}$	$[M+H]^+$	590.3845	590.3899	-9.15 ppm
MS ³	$C_{29}H_{51}NO_9$	$[M+H]^+$	558.3592	558.3637	-8.06 ppm

65. 泰乐菌素

英文名称: Tylosin

CAS#: 1401-69-0

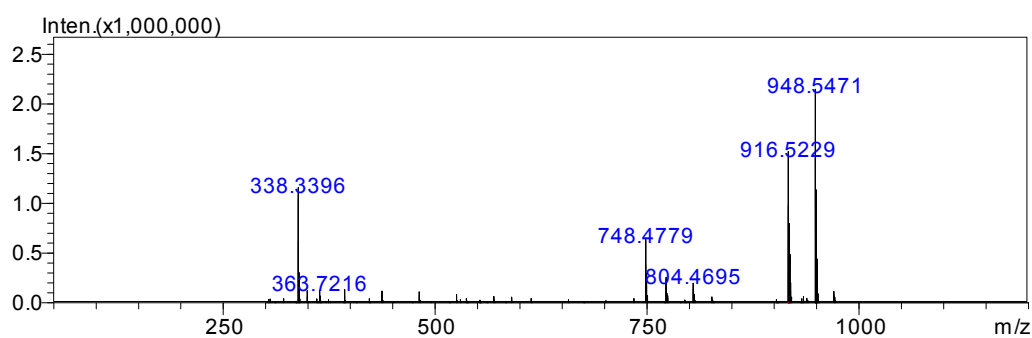
分子式: $C_{46}H_{77}NO_{17}$

MW: 916.10

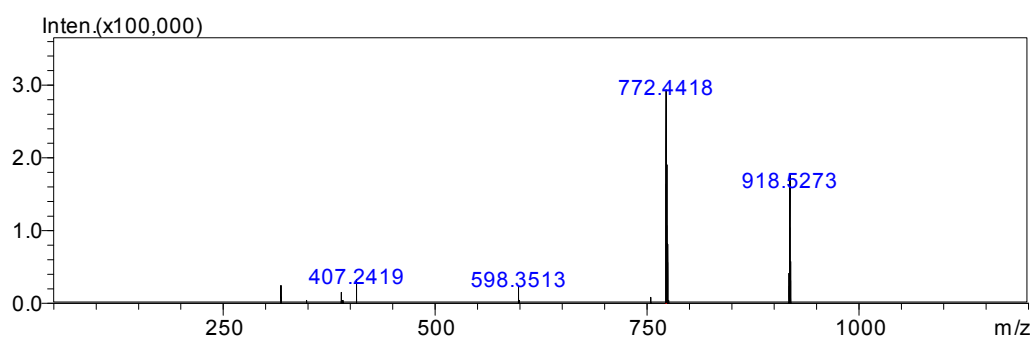
离子: $[M+H]^+$

质谱图:

MS¹

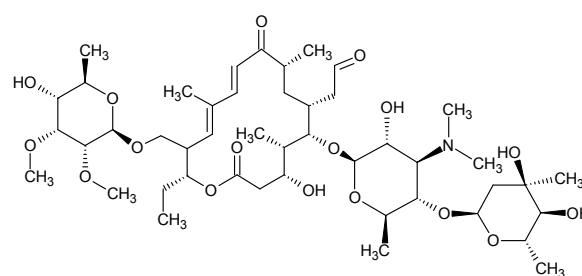


MS²



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_{46}H_{77}NO_{17}$	$[M+H]^+$	916.5229	916.5264	-3.82 ppm
MS ²	$C_{39}H_{65}NO_{14}$	$[M+H]^+$	772.4418	772.4478	-7.77 ppm



66. 交沙霉素

英文名称: Josamycin

结构式:

CAS#: 16846-24-5

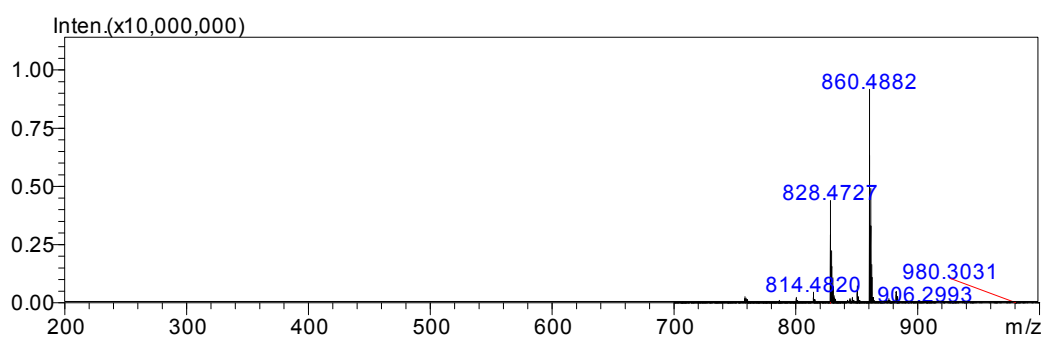
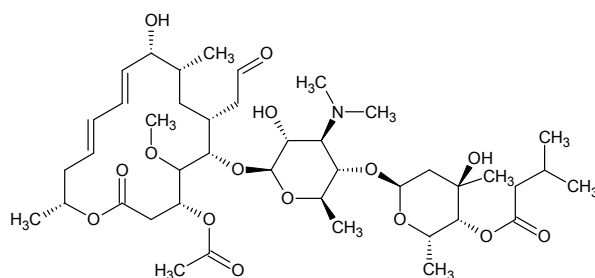
分子式: $C_{42}H_{69}NO_{15}$

MW: 827.99

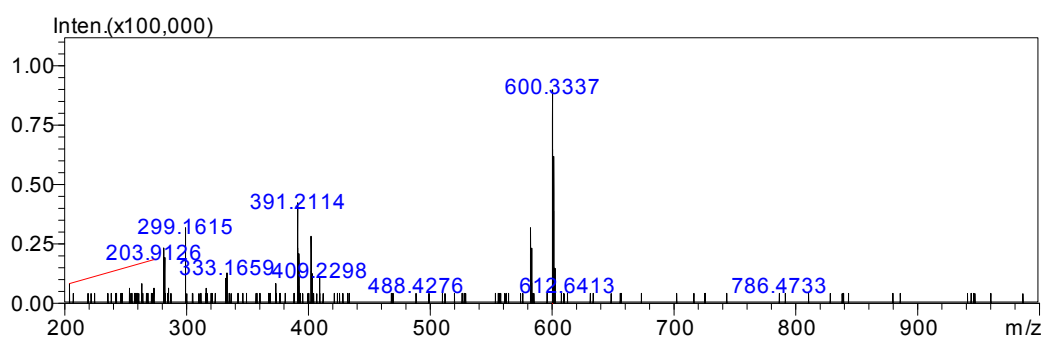
离子: $[M+H]^+$

质谱图:

MS^1



MS^2



可能的多级质谱预测信息

MS^n	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS^1	$C_{42}H_{69}NO_{15}$	$[M+H]^+$	828.4727	828.4740	-1.57 ppm
MS^2	$C_{30}H_{49}NO_{11}$	$[M+H]^+$	600.3337	600.3378	-6.83 ppm

67. 阿奇霉素

英文名称: Azithromycin

CAS#: 83905-01-5

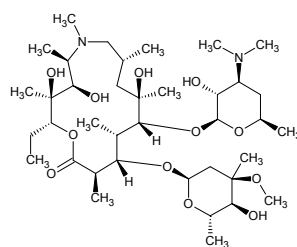
分子式: $C_{38}H_{72}N_2O_{12}$

MW: 748.98

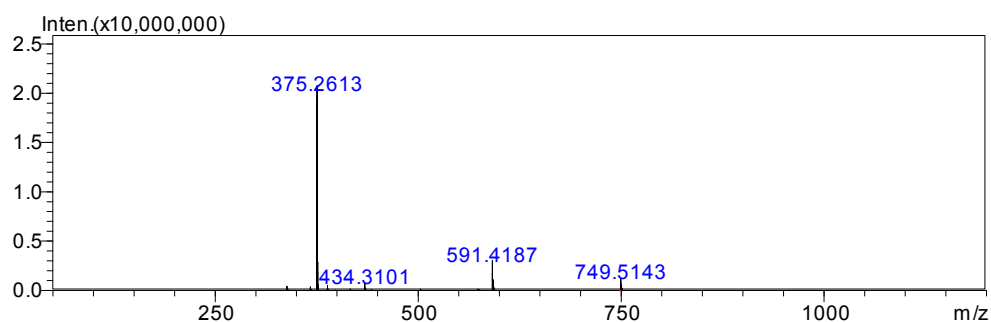
离子: $[M+H]^+$

质谱图:

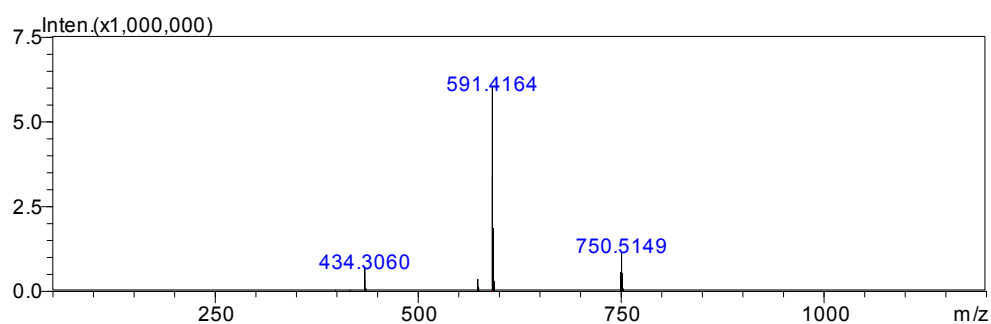
结构式:



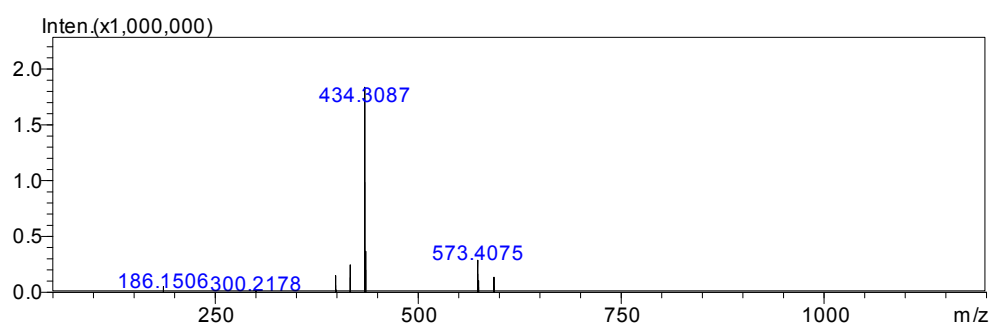
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_{38}H_{72}N_2O_{12}$	$[M+H]^+$	749.5143	749.5158	-2.00 ppm
MS ²	$C_{30}H_{58}N_2O_9$	$[M+H]^+$	591.4164	591.4215	-8.62 ppm
MS ³	$C_{30}H_{58}N_2O_9$	$[M+H]^+$	591.4164	591.4215	-8.62 ppm

68. 替米考星

英文名称: Tilmicosin

CAS#: 108050-54-0

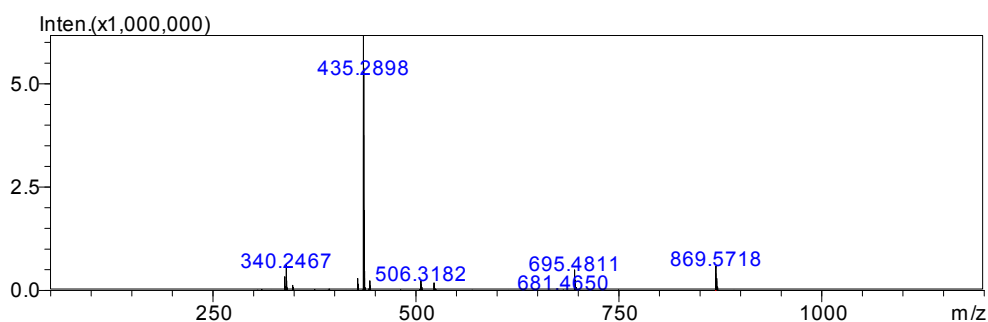
分子式: $C_{46}H_{80}N_2O_{13}$

MW: 869.13

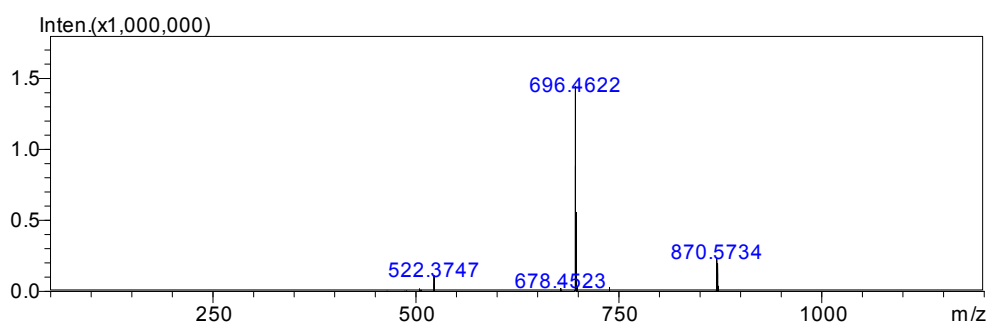
离子: $[M+H]^+$

质谱图:

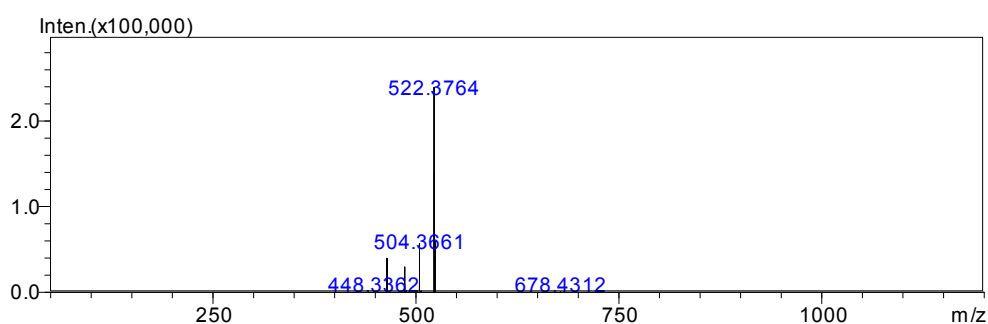
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_{46}H_{80}N_2O_{13}$	$[M+H]^+$	869.5718	869.5733	-1.72 ppm
MS ²	$C_{38}H_{65}NO_{10}$	$[M+H]^+$	696.4622	696.4681	-8.47 ppm
MS ³	$C_{30}H_{51}NO_6$	$[M+H]^+$	522.3764	522.3789	-4.79 ppm

69. 金霉素

英文名称: Chlorotetracycline

结构式:

CAS#: 57-62-5

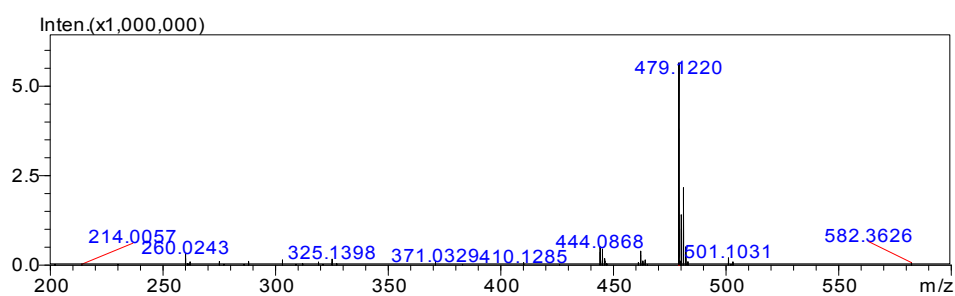
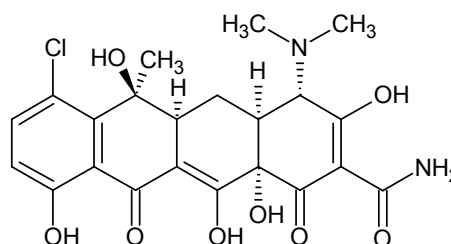
分子式: $C_{22}H_{23}ClN_2O_8$

MW: 478.88

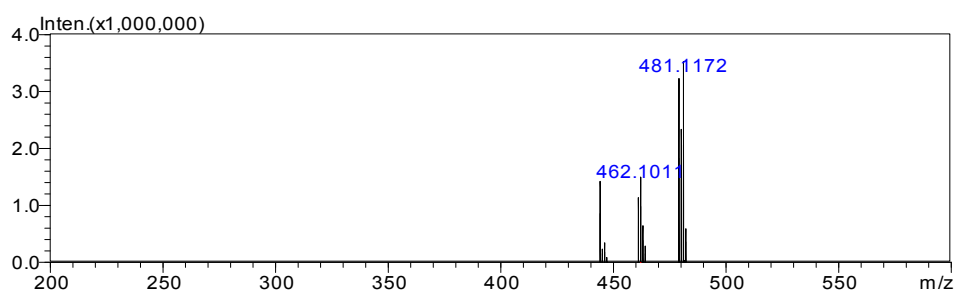
离子: $[M+H]^+$

质谱图:

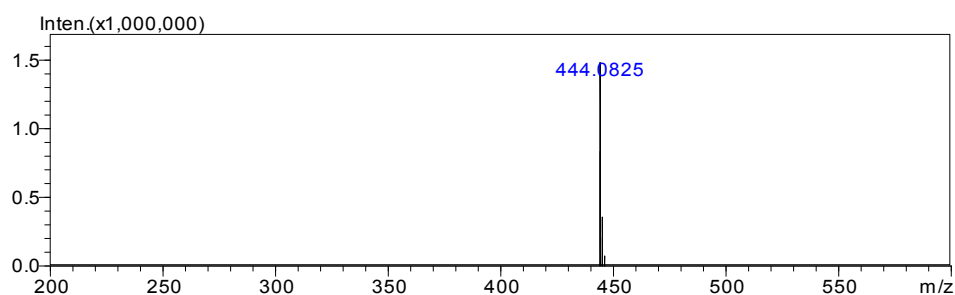
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_{22}H_{23}N_2O_8Cl$	$[M+H]^+$	479.1220	479.1216	0.83 ppm
MS ²	$C_{22}H_{20}NO_8Cl$	$[M+H]^+$	462.1011	462.0950	13.20 ppm
MS ³	$C_{22}H_{18}NO_7Cl$	$[M+H]^+$	444.0825	444.0845	-4.5 ppm

70. 土霉素

英文名称: Oxytetracycline

结构式:

CAS#: 79-57-2

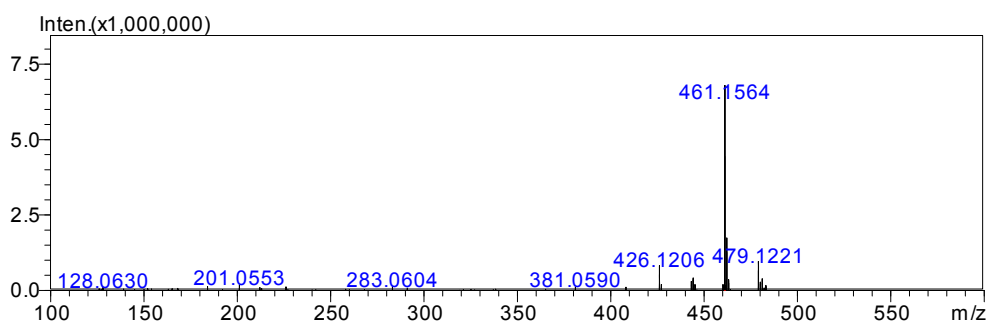
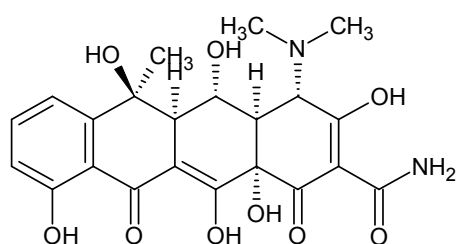
分子式: C₂₂H₂₄N₂O₉

MW: 460.43

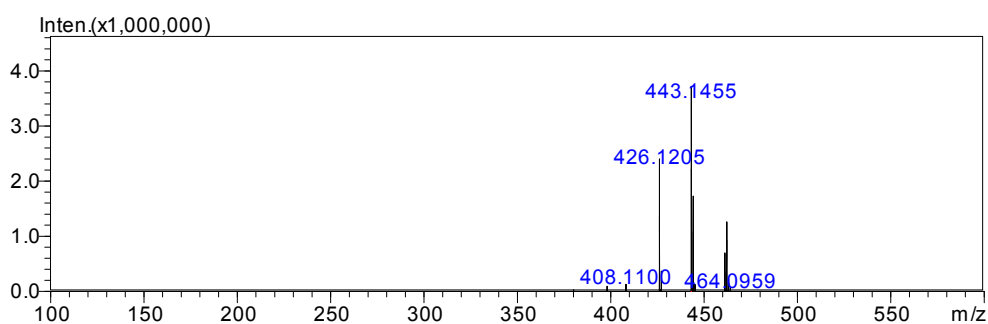
离子: [M+H]⁺

质谱图:

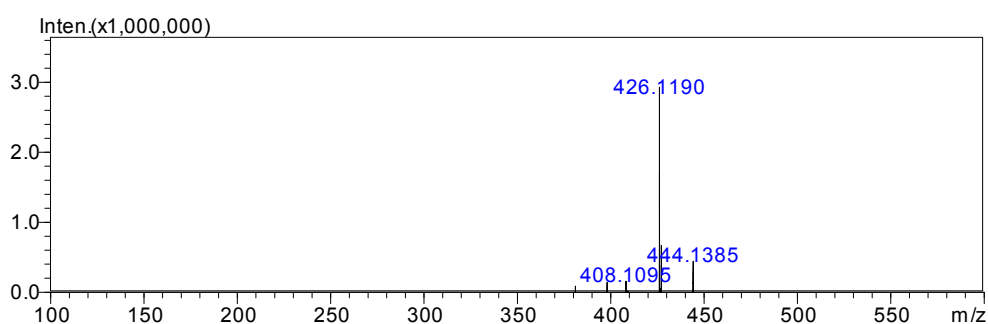
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	C ₂₂ H ₂₄ N ₂ O ₉	[M+H] ⁺	461.1564	461.1555	1.95 ppm
MS ²	C ₂₂ H ₂₂ N ₂ O ₈	[M+H] ⁺	443.1455	443.1449	1.35 ppm
MS ³	C ₂₂ H ₁₉ NO ₈	[M+H] ⁺	426.1190	426.1183	1.64 ppm

71. 四环素

英文名称: Tetracycline

结构式:

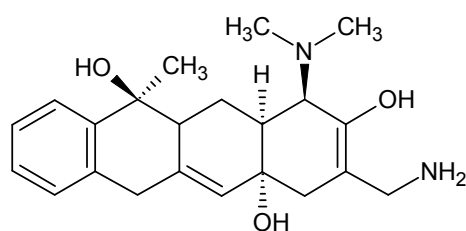
CAS#: 60-54-8

分子式: $C_{22}H_{24}N_2O_8$

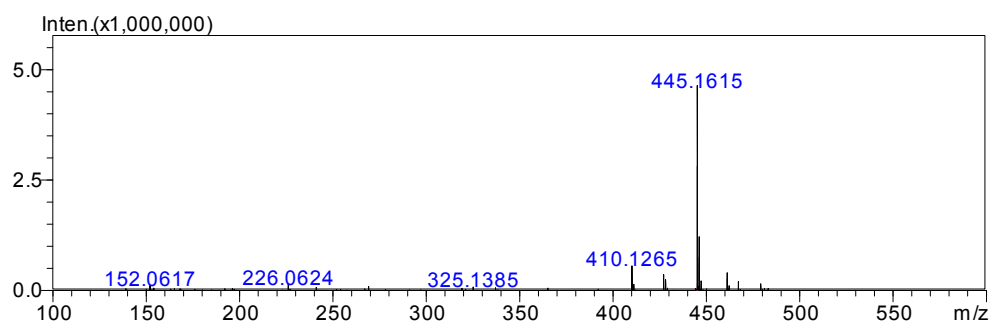
MW: 444.44

离子: $[M+H]^+$

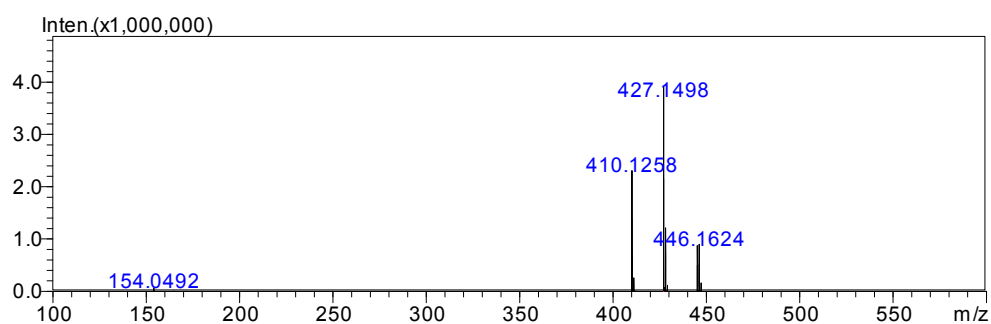
质谱图:



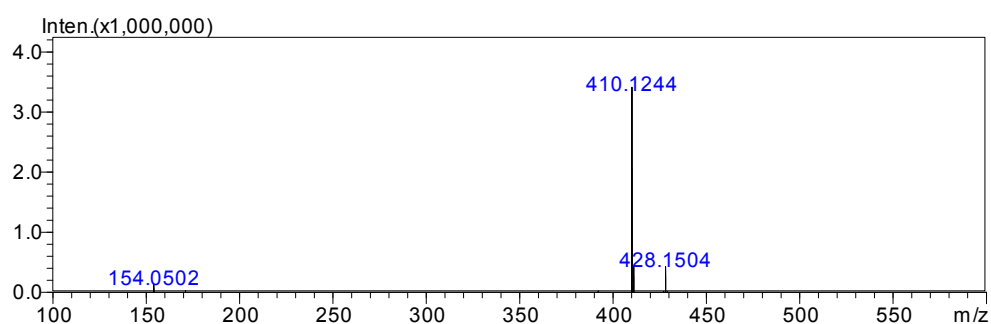
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_{22}H_{24}N_2O_8$	$[M+H]^+$	445.1615	445.1605	2.25 ppm
MS ²	$C_{22}H_{22}N_2O_7$	$[M+H]^+$	427.1498	427.1500	-0.47 ppm
MS ³	$C_{22}H_{19}NO_7$	$[M+H]^+$	410.1244	410.1234	2.44 ppm

72. 强力霉素

英文名称: Doxycycline

结构式:

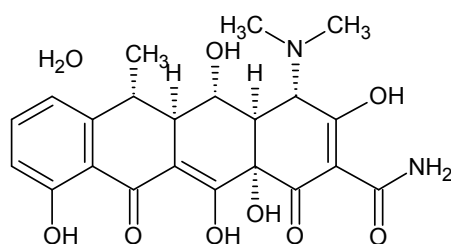
CAS#: 564-25-0

分子式: $C_{22}H_{24}N_2O_8$

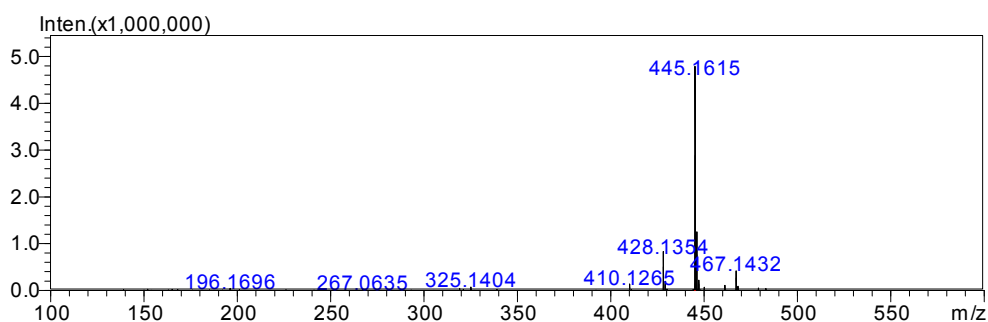
MW: 444.44

离子: $[M+H]^+$

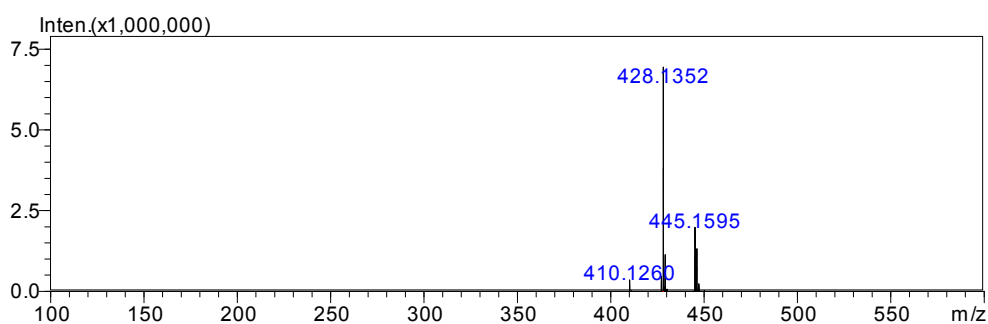
质谱图:



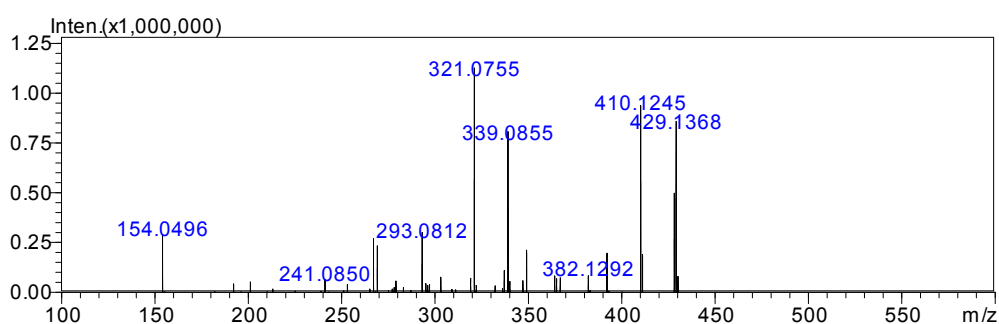
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_{22}H_{24}N_2O_8$	$[M+H]^+$	445.1615	445.1605	2.25 ppm
MS ²	$C_{22}H_{21}NO_8$	$[M+H]^+$	428.1352	428.1340	2.80 ppm
MS ³	$C_{22}H_{19}NO_7$	$[M+H]^+$	410.1245	410.1234	2.68 ppm

73. 二甲胺四环素

英文名称: Minocycline

CAS#: 10118-90-8

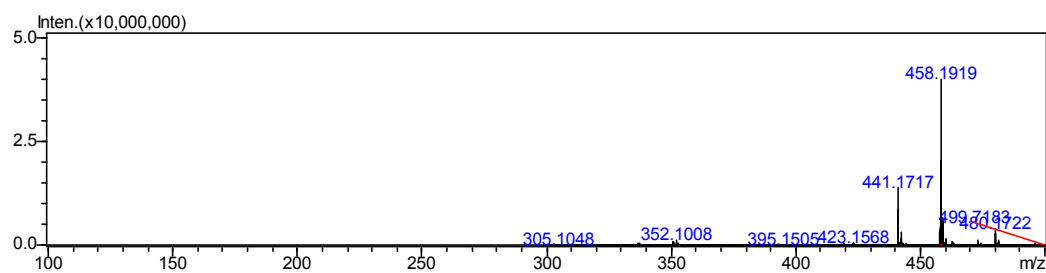
分子式: $C_{23}H_{27}N_3O_7$

MW: 457.48

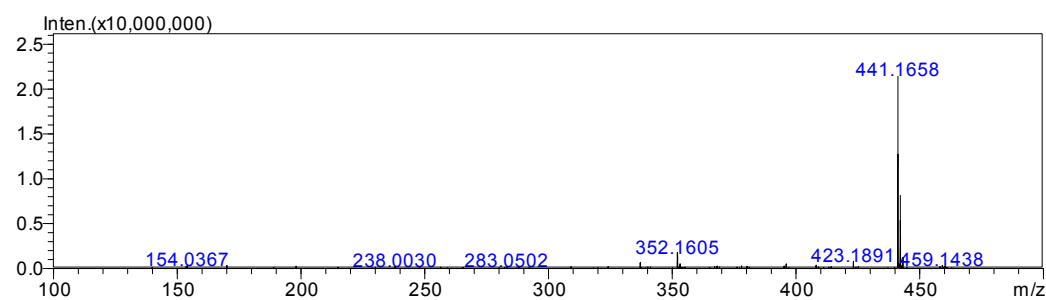
离子: $[M+H]^+$

质谱图:

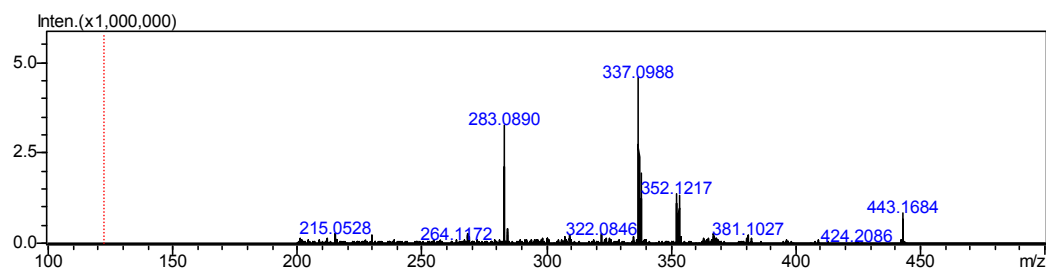
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_{23}H_{27}N_3O_7$	$[M+H]^+$	458.1919	458.1922	-0.65 ppm
MS ²	$C_{23}H_{24}N_2O_7$	$[M+H]^+$	411.1658	441.1656	0.45 ppm
MS ³	$C_{22}H_{12}N_2O_2$	$[M+H]^+$	337.0988	337.0972	4.75 ppm

74. 去甲基金霉素

英文名称: Demeclocycline Hydrochloride 结构式:

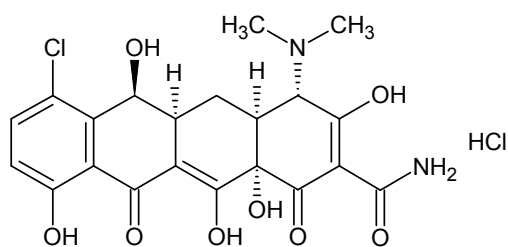
CAS#: 64-73-3

分子式: $C_{21}H_{21}ClN_2O_8 \cdot HCl$

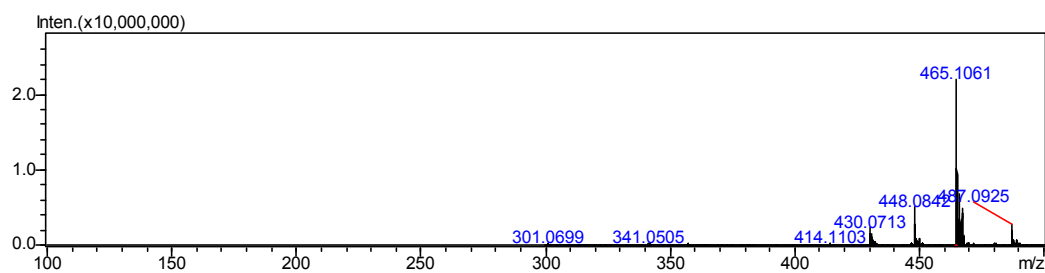
MW: 501.32

离子: $[M+H]^+$

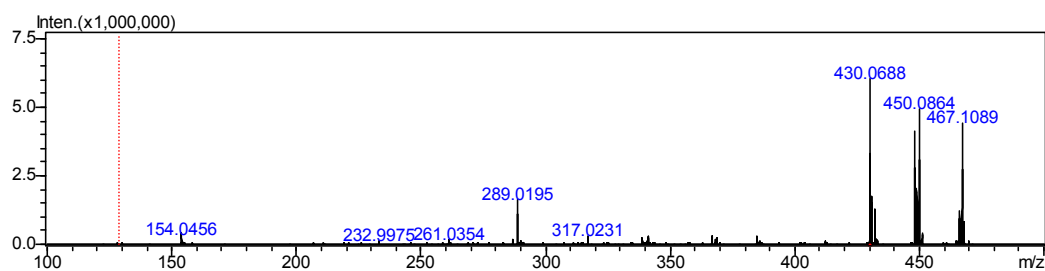
质谱图:



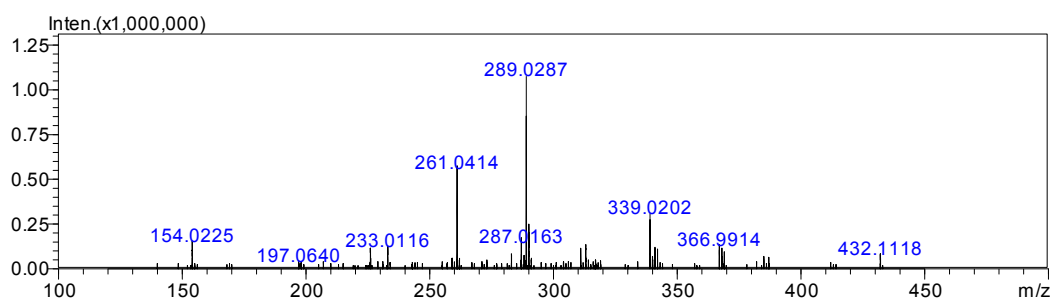
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_{21}H_{21}N_2O_8Cl$	$[M+H]^+$	465.1061	465.1059	0.43 ppm
MS ²	$C_{21}H_{15}NO_7Cl$	$[M+H]^+$	430.0688	430.0688	0.00 ppm
MS ³	$C_{15}H_9O_4Cl$	$[M+H]^+$	289.0287	289.0262	8.65 ppm

75. 甲烯土霉素

英文名称: Methacycline

结构式:

CAS#: 914-00-1

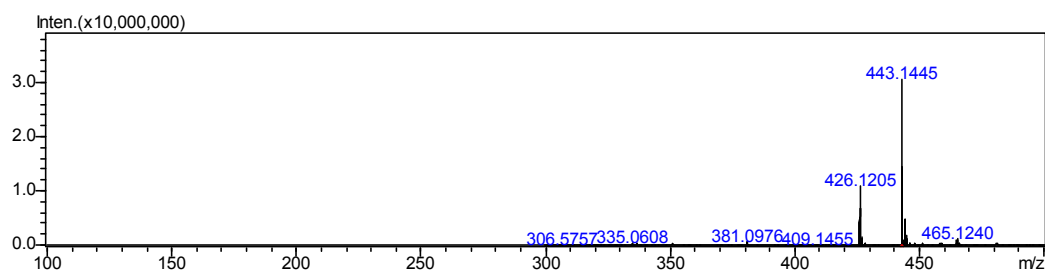
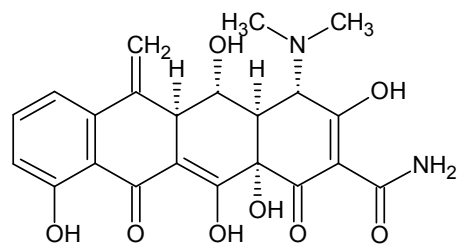
分子式: $C_{22}H_{22}N_2O_8$

MW: 442.42

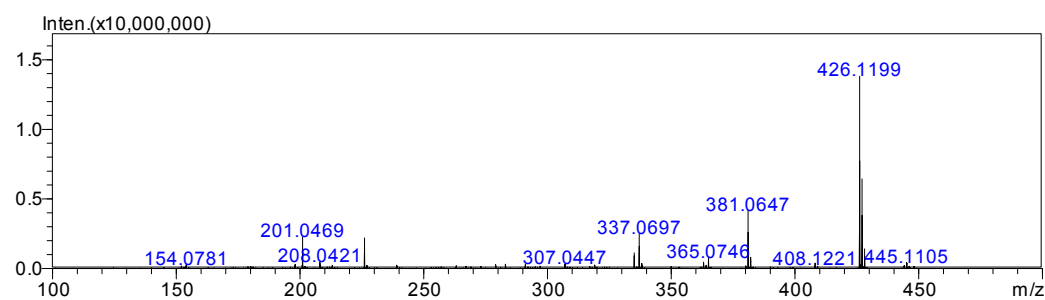
离子: $[M+H]^+$

质谱图:

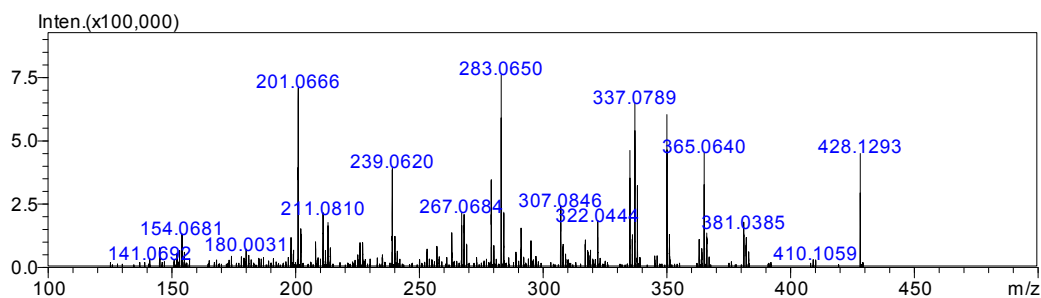
MS^1



MS^2



MS_3



可能的多级质谱预测信息

MS^n	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS^1	$C_{22}H_{22}N_2O_8$	$[M+H]^+$	443.1445	443.1449	-0.90 ppm
MS^2	$C_{22}H_{19}NO_8$	$[M+H]^+$	426.1199	426.1183	3.75 ppm

76. AMOZ

英文名称:

结构式:

3-amino-5-morpholinomethyl-oxazolidin-2-one

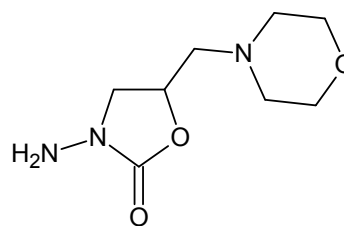
CAS#: 43056-63-9

分子式: $C_8H_{15}N_3O_3$

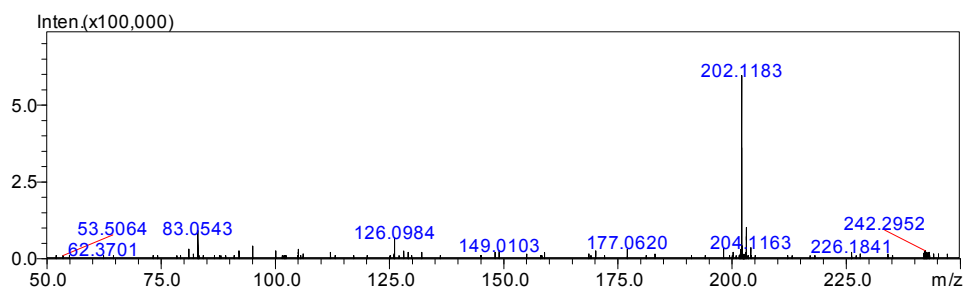
MW: 201.22

离子: $[M+H]^+$

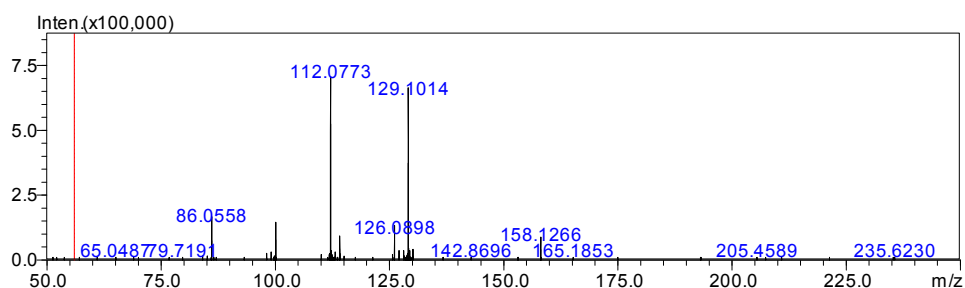
质谱图:



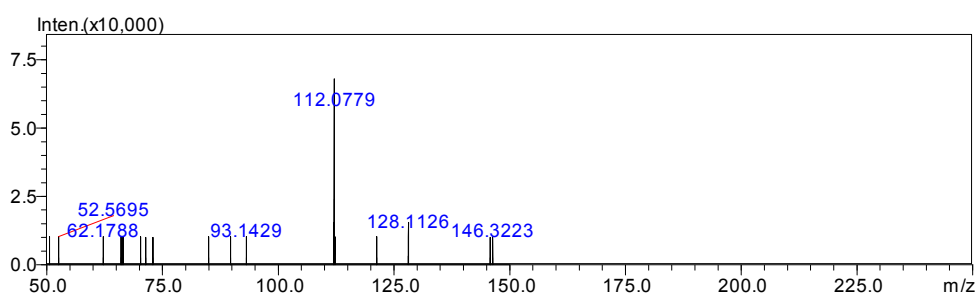
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_8H_{15}N_3O_3$	$[M+H]^+$	201.1183	201.1186	-0.3 mDa
MS ²	$C_6H_{12}N_2O$	$[M+H]^+$	129.1014	129.1022	-0.8 mDa
MS ³	$C_8H_{15}N_3O_3$	$[M+H]^+$	202.1183	201.1186	-0.3 mDa

77. AOZ

英文名称: 3-amino-oxazolidin-2-one

结构式:

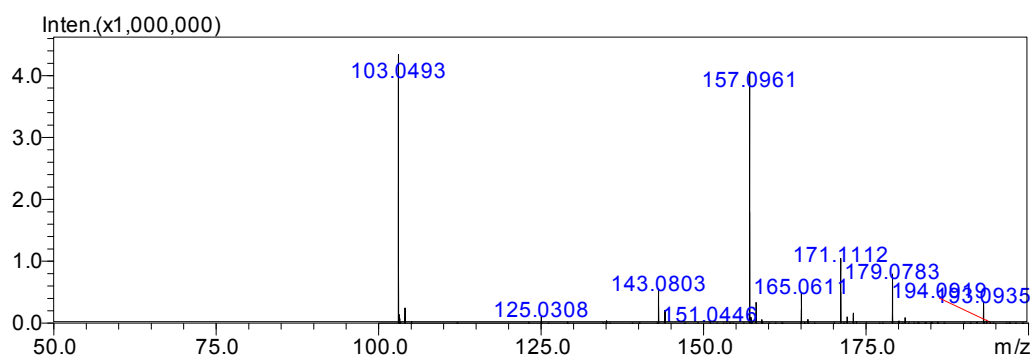
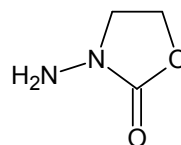
CAS#: 80-65-9

分子式: $C_3H_6N_2O_2$

MW: 102.09

离子: $[M+H]^+$

质谱图:

MS¹

可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_3H_6N_2O_2$	$[M+H]^+$	103.0493	103.0502	-0.9 mDa

78. 盐酸氨基脒

英文名称: Semicarbazide Hydrochloride 结构式:

CAS#: 563-41-7

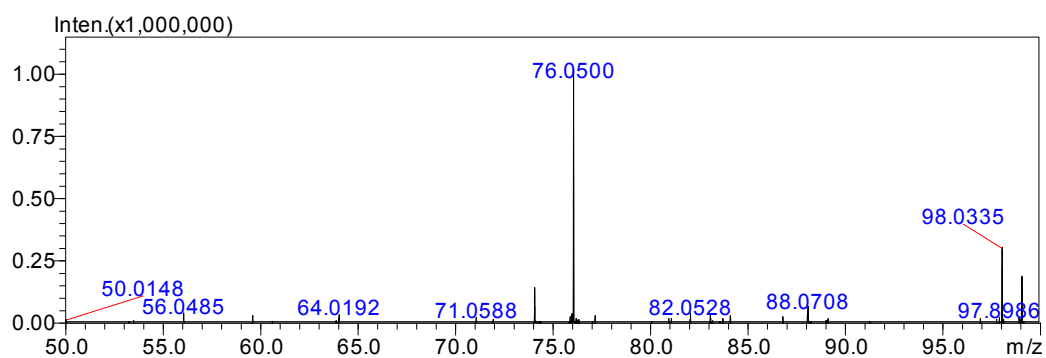
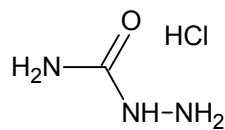
分子式: $\text{CH}_5\text{N}_3\text{O}\cdot\text{HCl}$

MW: 111.53

离子: $[\text{M}+\text{H}]^+$

质谱图:

MS^1



可能的多级质谱预测信息

MS^n	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS^1	$\text{CH}_5\text{N}_3\text{O}$	$[\text{M}+\text{H}]^+$	76.0500	76.0505	-0.5 mDa

79. 17-醋酸甲地孕酮

英文名称: Medroxyprogesterone 17-Acetate 结构式:

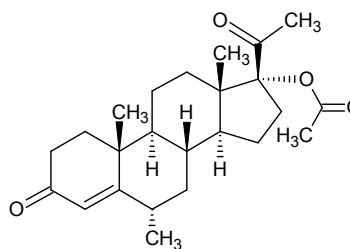
CAS#: 71-58-9

分子式: $C_{24}H_{34}O_4$

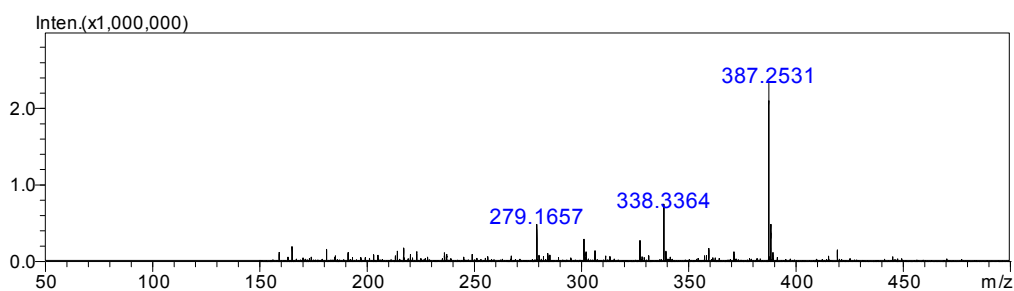
MW: 386.5

离子: $[M+H]^+$

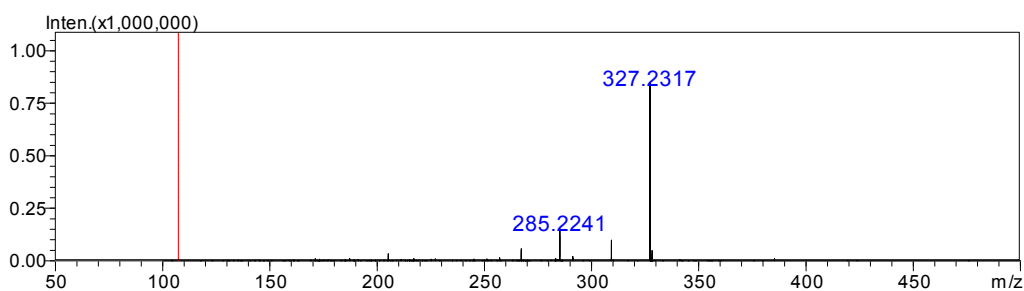
质谱图:



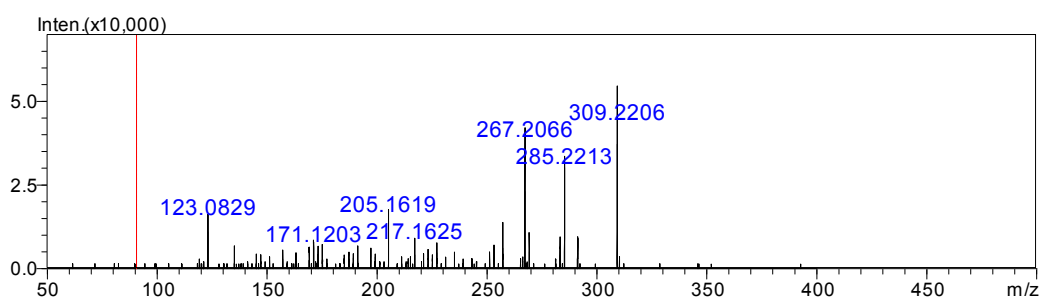
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_{24}H_{34}O_4$	$[M+H]^+$	387.2531	387.2530	0.26 ppm
MS ²	$C_{22}H_{30}O_2$	$[M+H]^+$	327.2317	327.2319	-0.61 ppm
MS ³	$C_{22}H_{28}O$	$[M+H]^+$	309.2206	309.2213	-2.26 ppm

80. 醋酸氢地孕酮

英文名称: Chloromadinone Acetate

结构式:

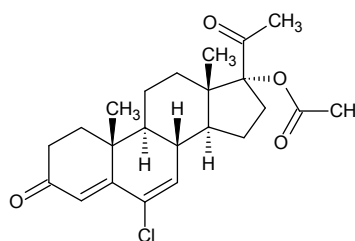
CAS#: 302-22-7

分子式: $C_{23}H_{29}ClO_4$

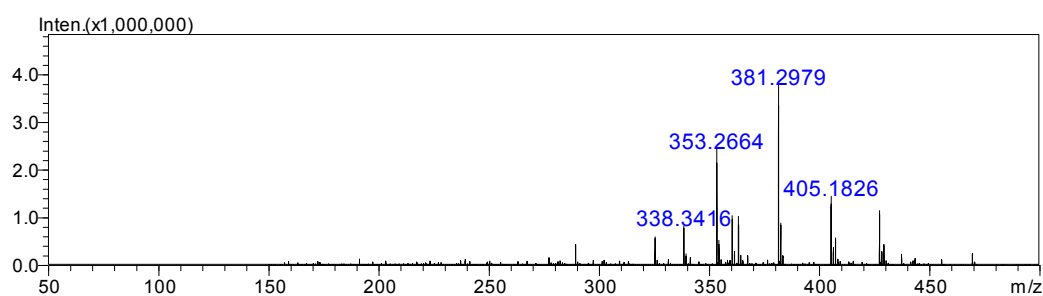
MW: 404.93

离子: $[M+H]^+$

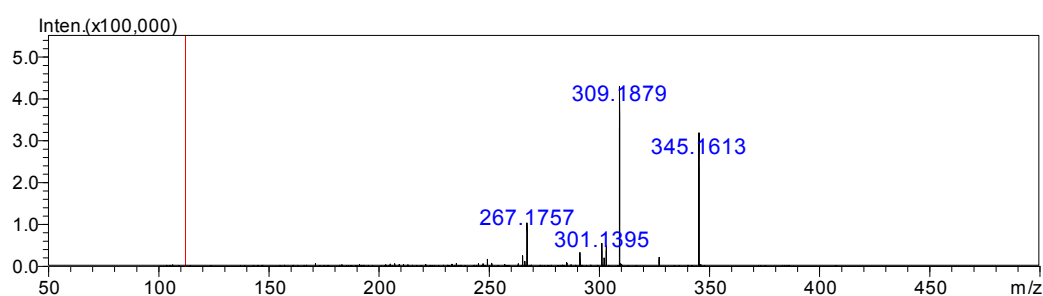
质谱图:



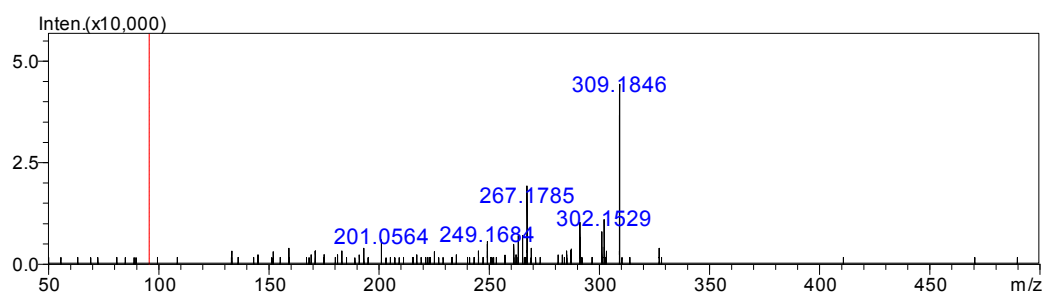
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_{23}H_{29}O_4Cl$	$[M+H]^+$	405.1826	405.1827	-0.25 ppm
MS ²	$C_{21}H_{25}O_2Cl$	$[M+H]^+$	345.1613	345.1616	-0.87 ppm
MS ³	$C_{21}H_{24}O_2$	$[M+H]^+$	309.1846	309.1849	-0.97 ppm

81. 醋酸甲地孕酮

英文名称: Megestrol Acetate

结构式:

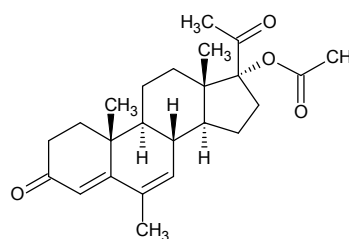
CAS#: 595-33-5

分子式: $C_{24}H_{32}O_4$

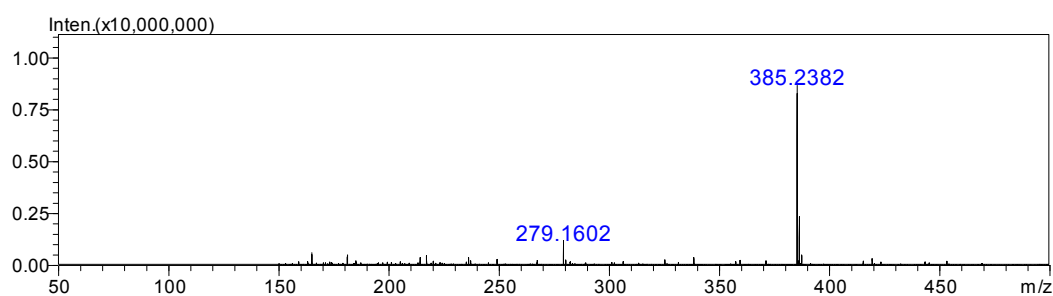
MW: 384.51

离子: $[M+H]^+$

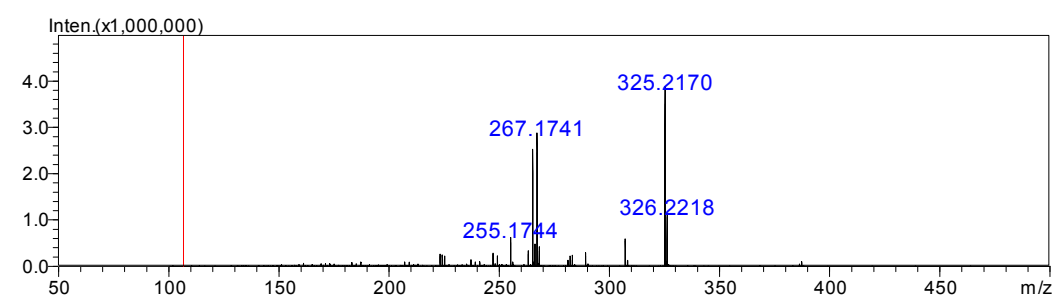
质谱图:



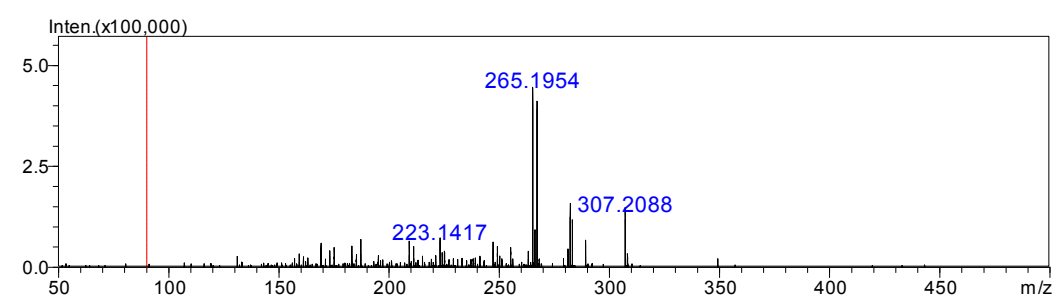
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_{24}H_{32}O_4$	$[M+H]^+$	385.2382	385.2373	2.34 ppm
MS ²	$C_{22}H_{28}O_2$	$[M+H]^+$	325.2170	325.2162	2.46 ppm
MS ³	$C_{20}H_{24}$	$[M+H]^+$	265.1954	265.1951	1.13 ppm

82. 孕酮

英文名称: Progesterone

结构式:

CAS#: 57-83-0

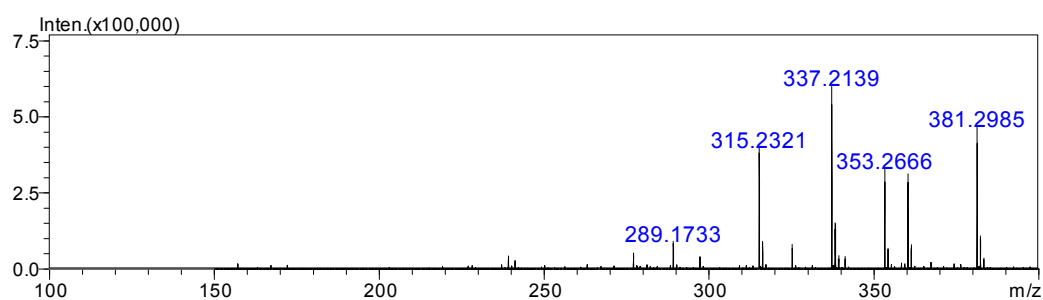
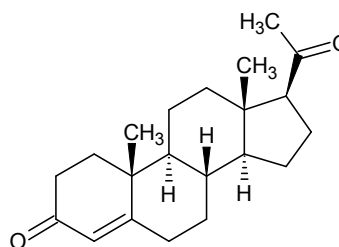
分子式: $C_{21}H_{30}O_2$

MW: 314.46

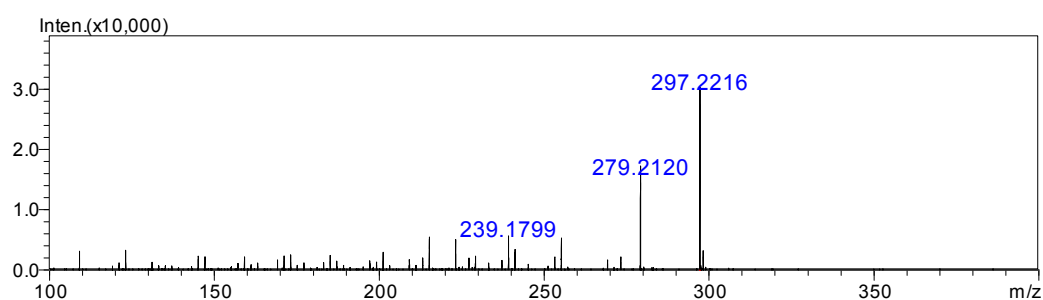
离子: $[M+H]^+$

质谱图:

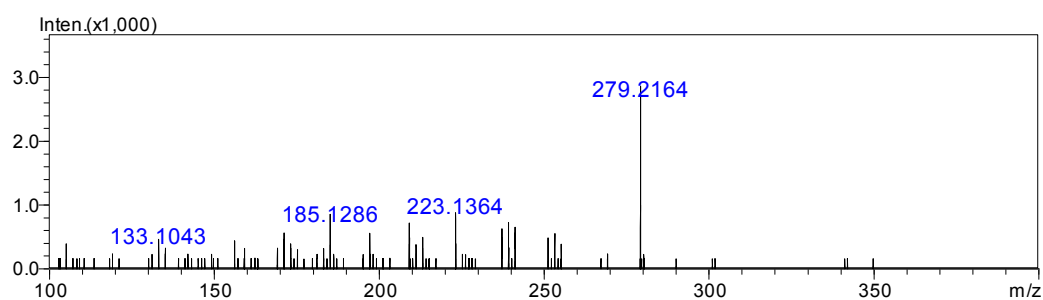
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_{21}H_{30}O_2$	$[M+H]^+$	315.2321	315.2319	0.63 ppm
MS ²	$C_{21}H_{28}O$	$[M+H]^+$	297.2216	297.2213	1.01 ppm
MS ³	$C_{21}H_{26}$	$[M+H]^+$	279.2164	279.2107	20.41 ppm

83. 黄体酮

英文名称: Gesterol

结构式:

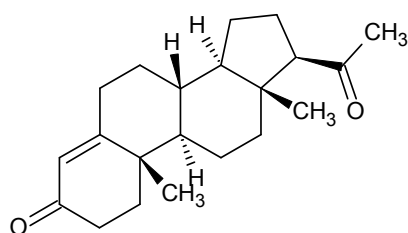
CAS#: 57-83-0

分子式: $C_{21}H_{30}O_2$

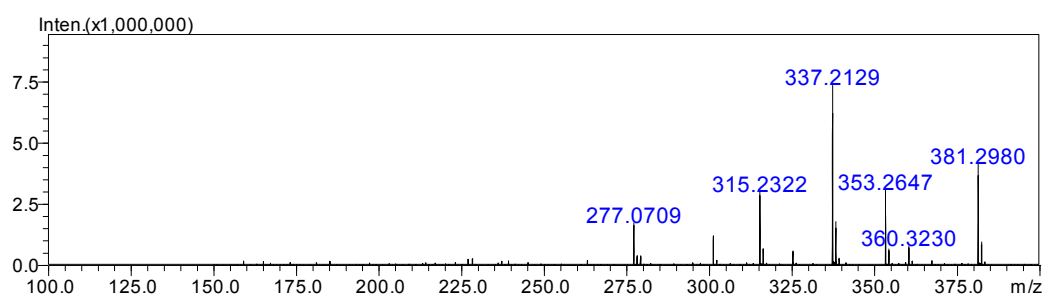
MW: 314.46

离子: $[M+H]^+$

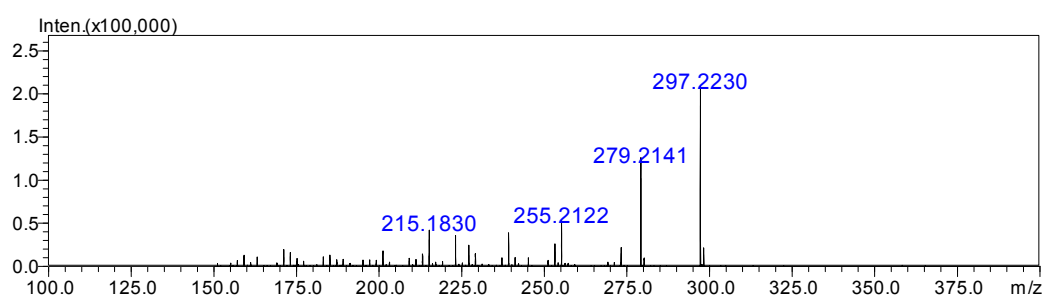
质谱图:



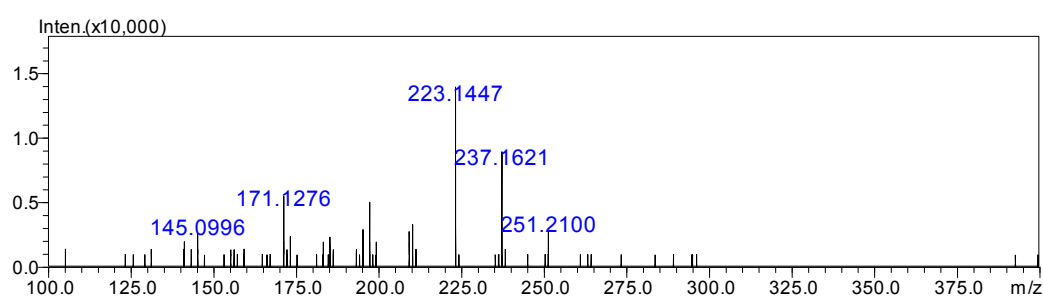
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_{21}H_{30}O_2$	$[M+H]^+$	315.2322	315.2319	0.95 ppm
MS ²	$C_{21}H_{28}O$	$[M+H]^+$	297.2230	297.2213	5.72 ppm
MS ³	$C_{17}H_{18}$	$[M+H]^+$	223.1447	223.1481	-3.4 mDa

84. 群勃龙

英文名称: Trenbolone

结构式:

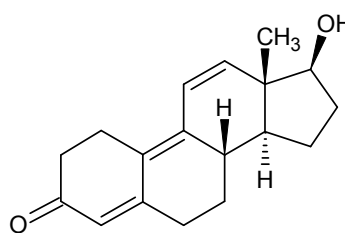
CAS#: 10161-33-8

分子式: $C_{18}H_{22}O_2$

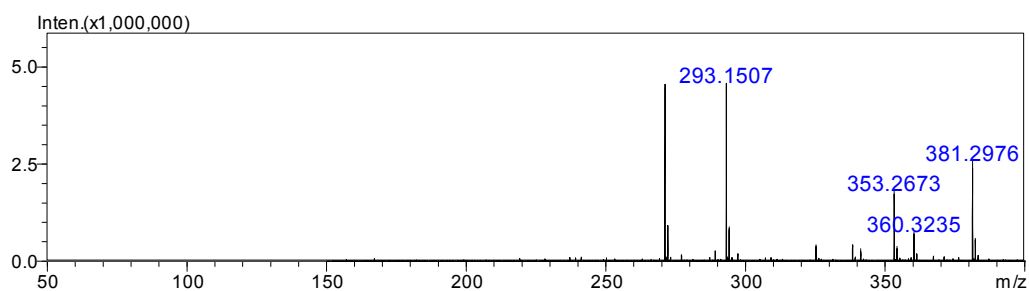
MW: 270.37

离子: $[M+H]^+$

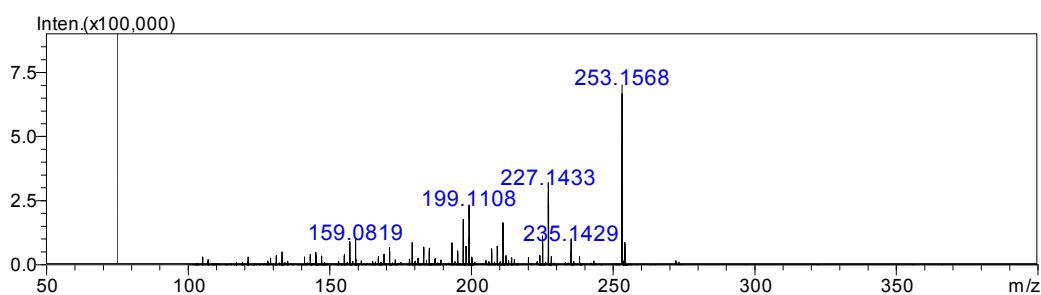
质谱图:



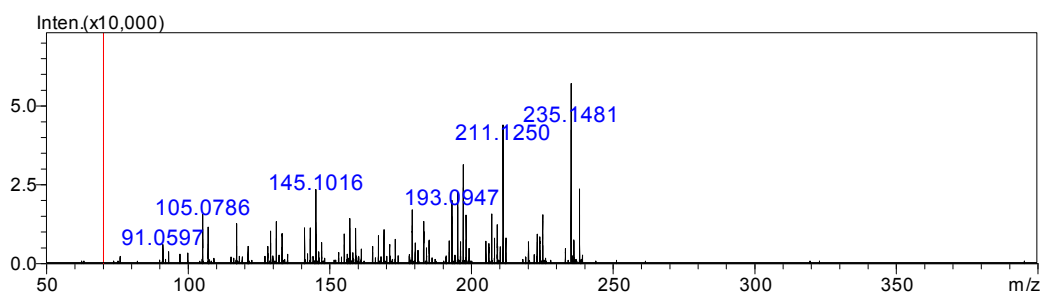
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_{18}H_{22}O_2$	$[M+H]^+$	271.1691	271.1693	-0.74 ppm
MS ²	$C_{18}H_{20}O$	$[M+H]^+$	253.1568	253.1587	-7.51 ppm
MS ³	$C_{18}H_{18}$	$[M+H]^+$	235.1481	235.1481	0.0 mDa

85. 勃地酮

英文名称: Boldenone

结构式:

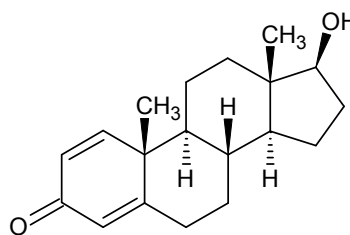
CAS#: 846-48-0

分子式: $C_{19}H_{26}O_2$

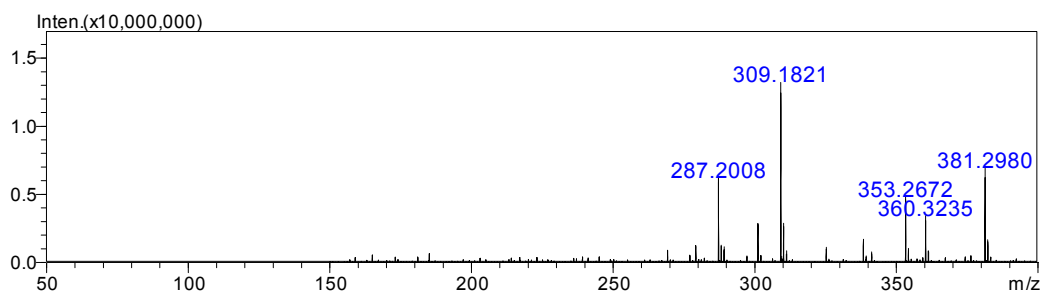
MW: 286.41

离子: $[M+H]^+$

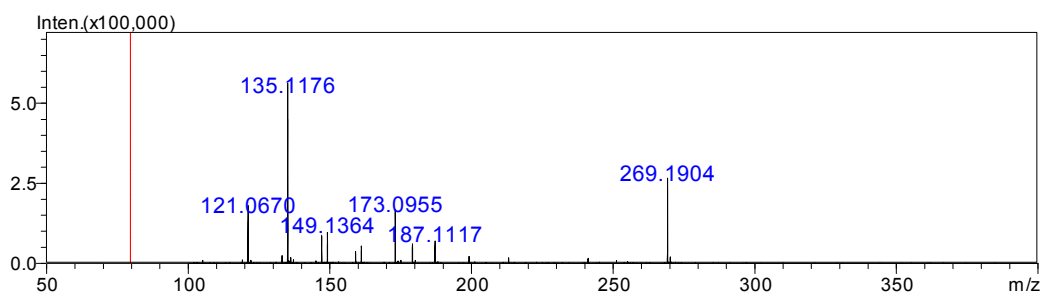
质谱图:



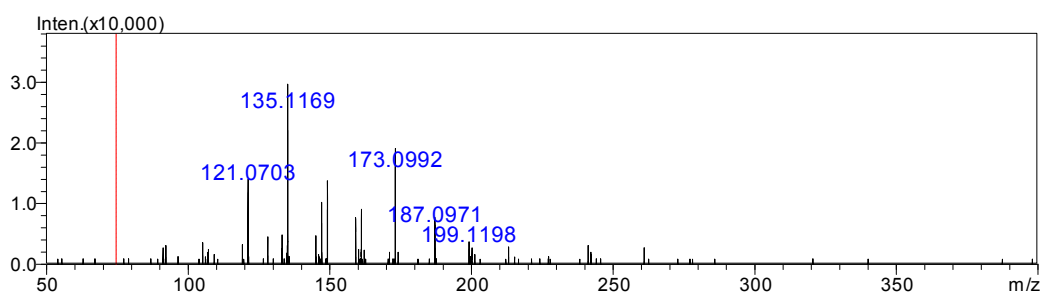
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_{19}H_{26}O_2$	$[M+H]^+$	287.2008	287.2006	0.70 ppm
MS ²	$C_{19}H_{24}O$	$[M+H]^+$	269.1904	269.1900	1.49 ppm
MS ³	$C_{10}H_{14}$	$[M+H]^+$	135.1169	135.1168	0.1 mDa

86. 19-去甲基睾酮（诺龙）

英文名称： 19-Nortestosterone

结构式：

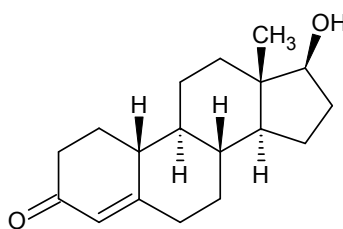
CAS#: 434-22-0

分子式： C₁₈H₂₆O₂

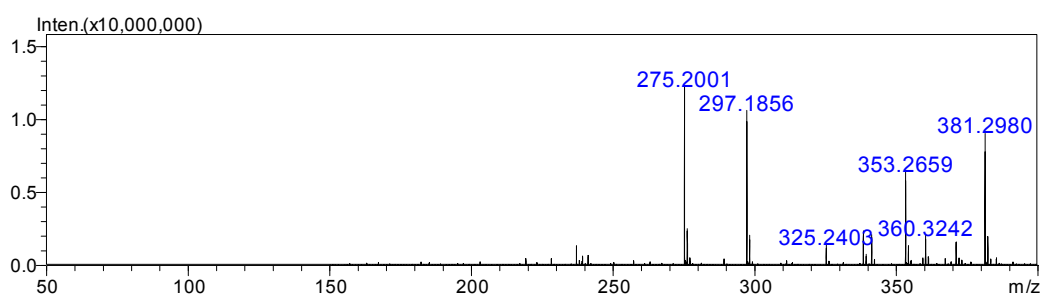
MW: 274.4

离子： [M+H]⁺

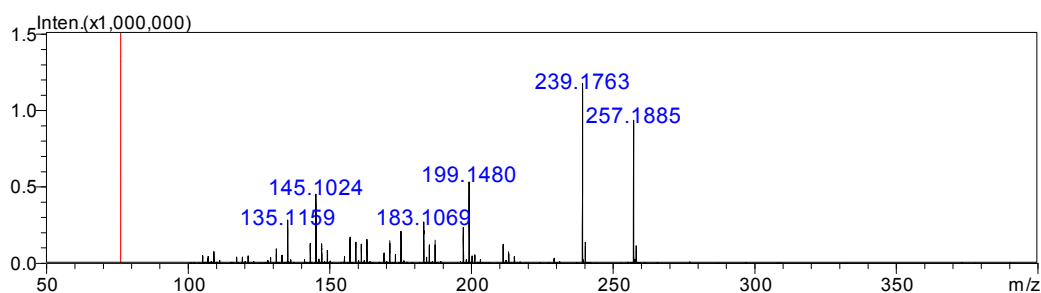
质谱图：



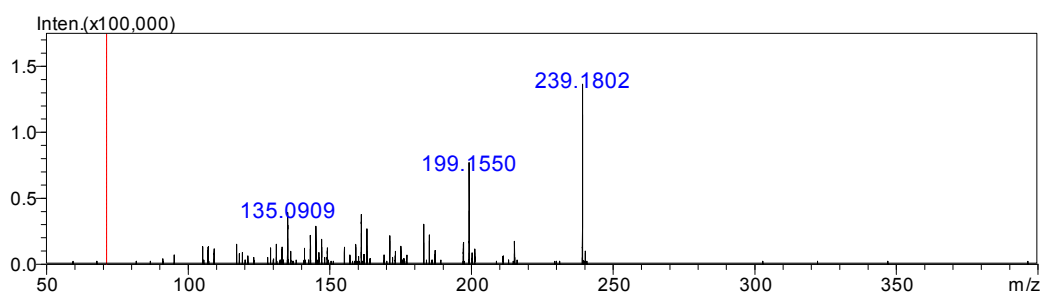
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	C ₁₈ H ₂₆ O ₂	[M+H] ⁺	275.2001	275.2006	-1.82 ppm
MS ²	C ₁₈ H ₂₄ O	[M+H] ⁺	257.1885	257.1900	-5.83 ppm
MS ³	C ₁₈ H ₂₂	[M+H] ⁺	239.1802	239.1794	0.8 mDa

87. 睾酮

英文名称: Testosterone

结构式:

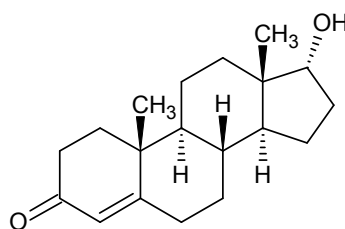
CAS#: 58-22-0

分子式: $C_{19}H_{28}O_2$

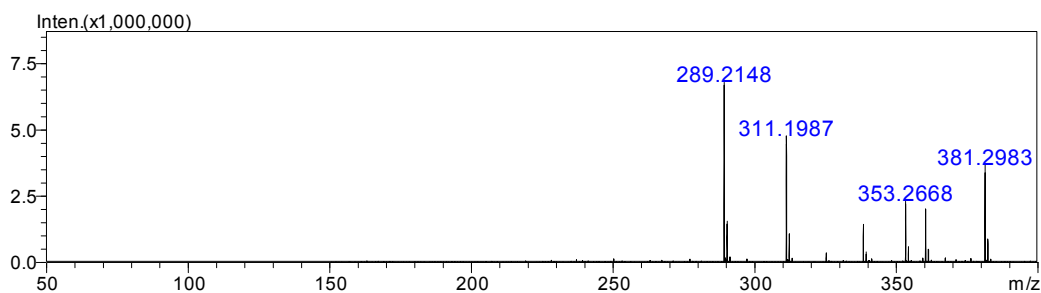
MW: 288.42

离子: $[M+H]^+$

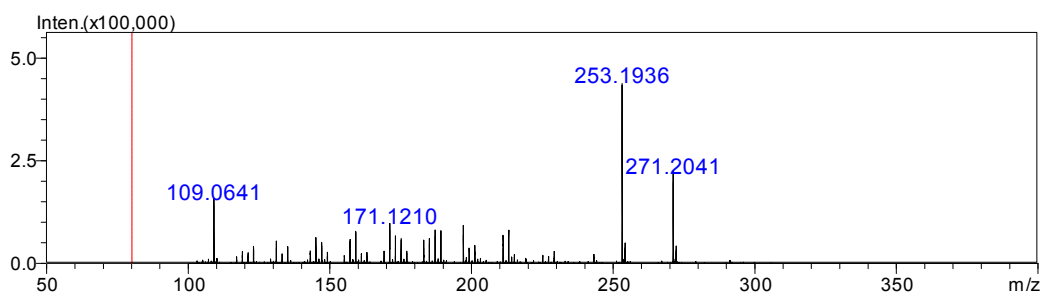
质谱图:



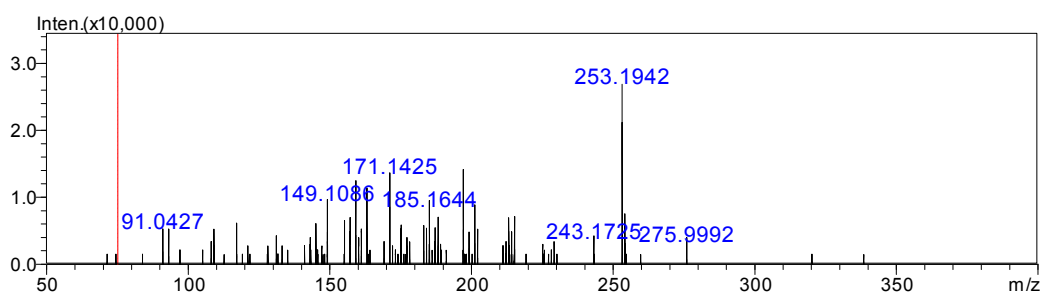
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_{19}H_{28}O_2$	$[M+H]^+$	289.2148	289.2162	-4.84 ppm
MS ²	$C_{19}H_{26}O$	$[M+H]^+$	271.2041	271.2056	-5.53 ppm
MS ³	$C_{19}H_{24}$	$[M+H]^+$	253.1942	253.1951	-3.55 ppm

88. 17- α -甲基睾丸酮

英文名称: 17-alpha-methyltestosterone

结构式:

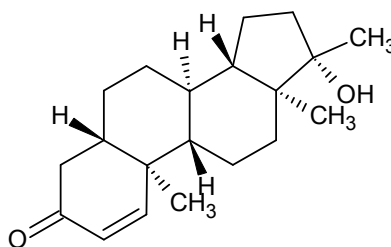
CAS#: 65-04-3

分子式: $C_{20}H_{30}O_2$

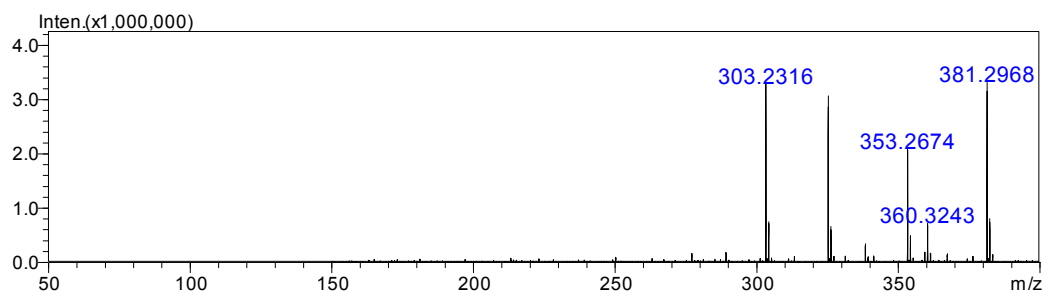
MW: 302.45

离子: $[M+H]^+$

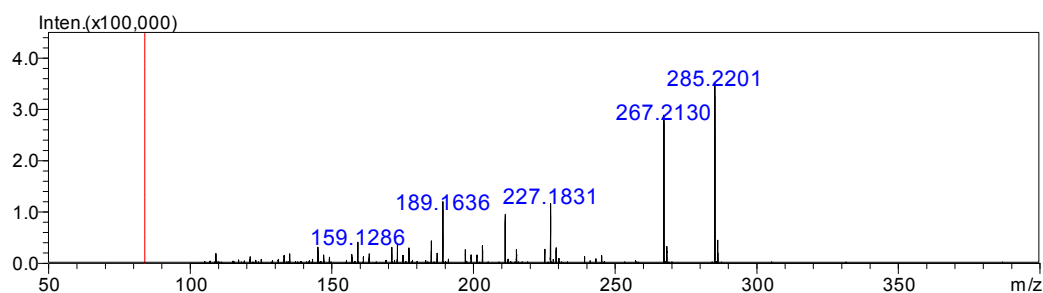
质谱图:



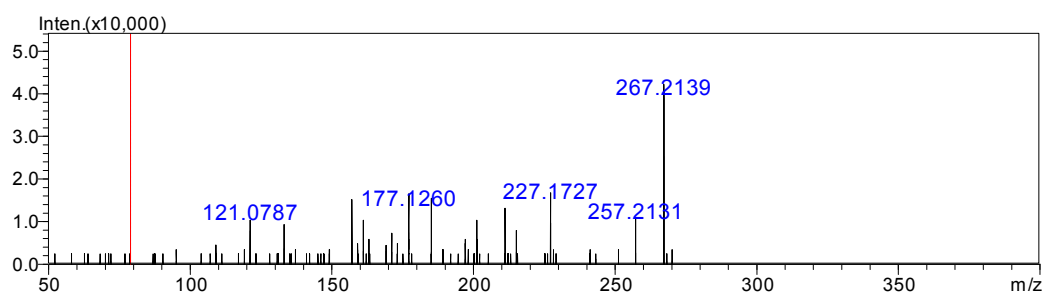
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_{20}H_{30}O_2$	$[M+H]^+$	303.2316	303.2319	-0.99 ppm
MS ²	$C_{20}H_{30}O_2$	$[M+H]^+$	303.2316	303.2319	-0.99 ppm
MS ³	$C_{20}H_{26}$	$[M+H]^+$	267.2139	267.2107	11.98 ppm

89. 甲睾酮

英文名称: Methyltestosterone

结构式:

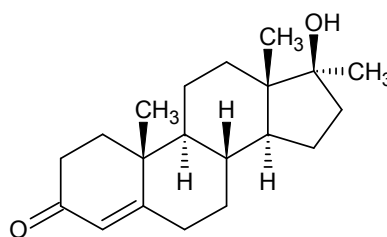
CAS#: 58-18-4

分子式: $C_{20}H_{30}O_2$

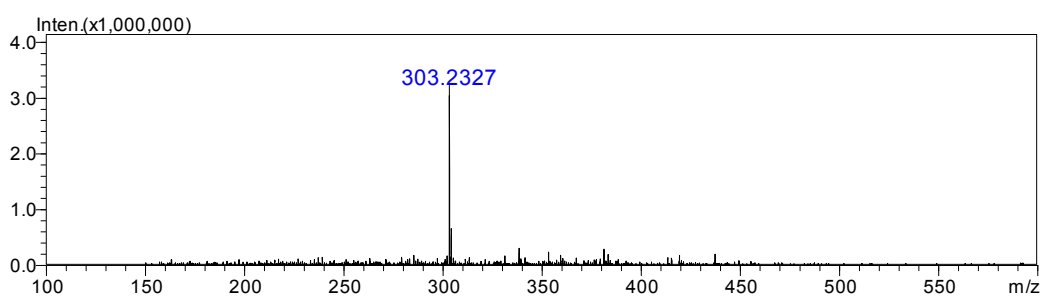
MW: 302.45

离子: $[M+H]^+$

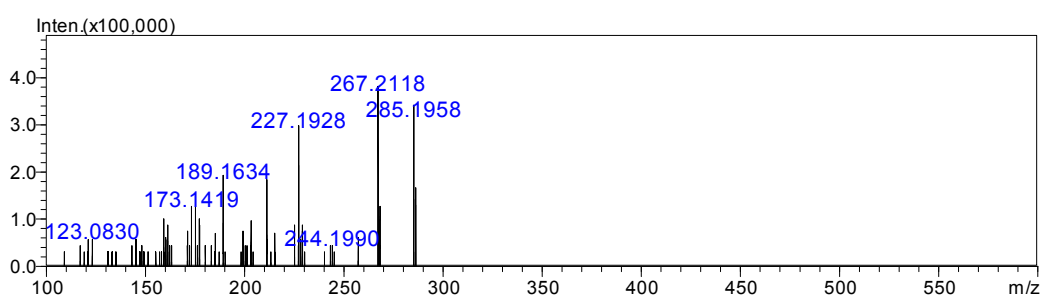
质谱图:



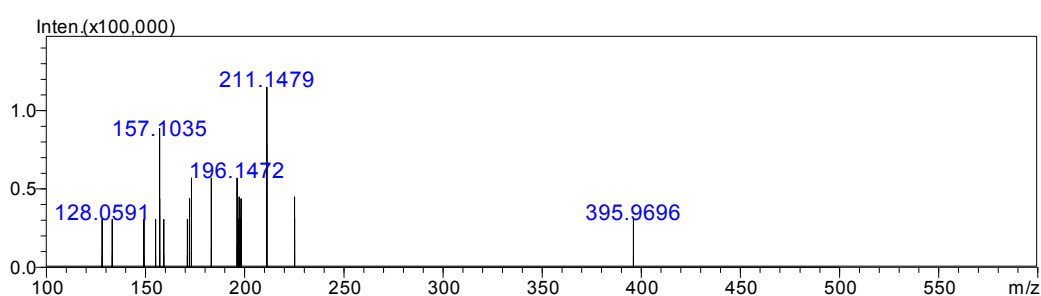
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_{20}H_{30}O_2$	$[M+H]^+$	303.2327	303.2319	2.64 ppm
MS ²	$C_{20}H_{26}$	$[M+H]^+$	267.2118	267.2107	4.12 ppm
MS ³	$C_{16}H_{18}$	$[M+H]^+$	211.1479	211.1481	-0.2 mDa

90. 司坦唑醇

英文名称: Stanozolol

结构式:

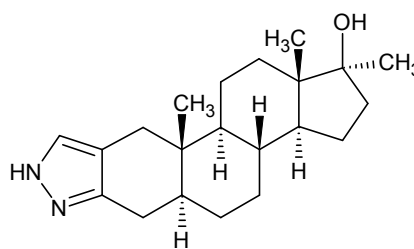
CAS#: 10418-03-8

分子式: $C_{21}H_{32}N_2O$

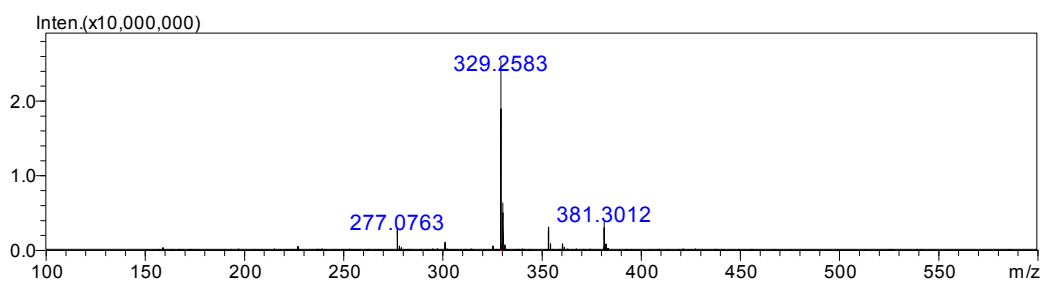
MW: 328.49

离子: $[M+H]^+$

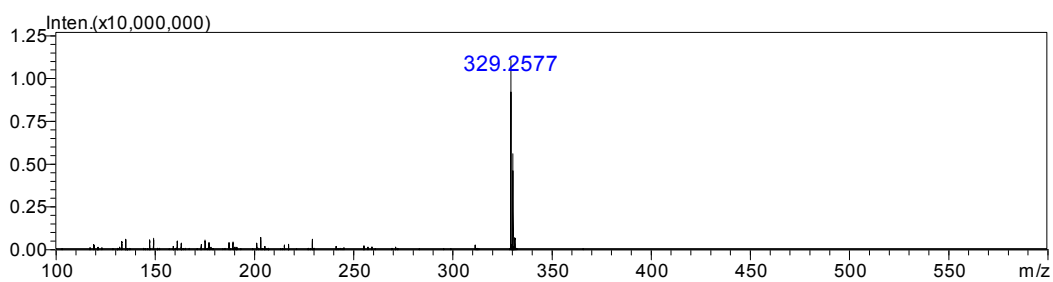
质谱图:



MS^1



MS^2



可能的多级质谱预测信息

MS^n	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS^1	$C_{21}H_{32}N_2O$	$[M+H]^+$	329.2583	329.2587	-1.21 ppm
MS^2	$C_{21}H_{32}N_2O$	$[M+H]^+$	329.2577	329.2587	-3.04 ppm

91. 丙酸诺龙

英文名称: Nortestosterone Propionate

结构式:

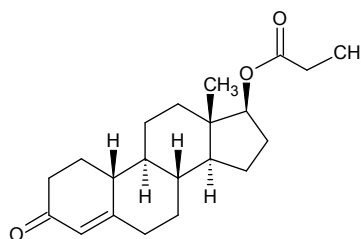
CAS#: 7207-92-3

分子式: $C_{21}H_{30}O_3$

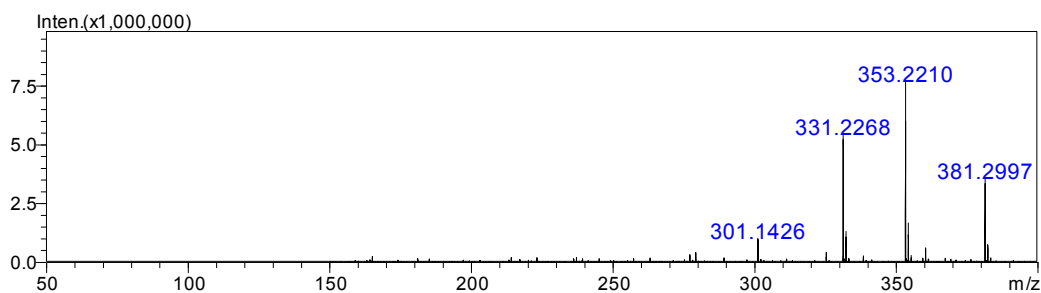
MW: 330.46

离子: $[M+H]^+$

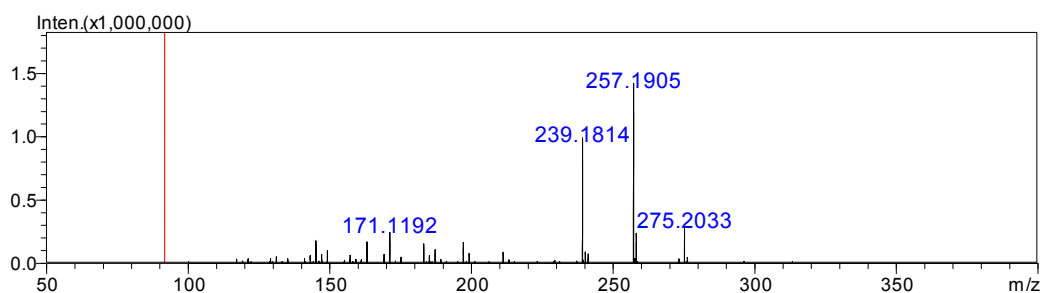
质谱图:



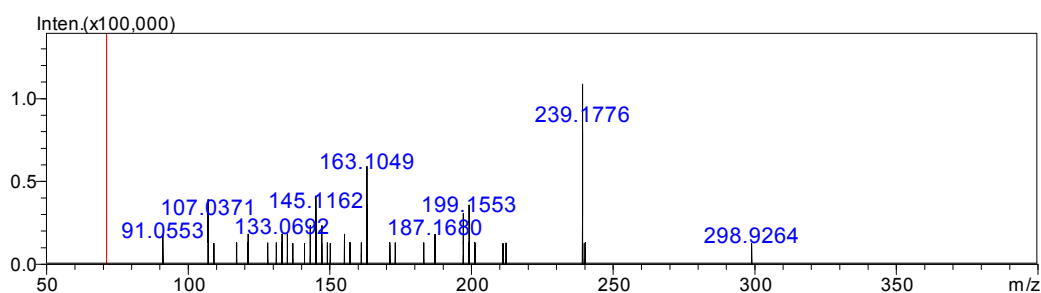
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_{21}H_{30}O_3$	$[M+H]^+$	331.2268	331.2268	0.00 ppm
MS ²	$C_{18}H_{24}O$	$[M+H]^+$	257.1905	257.1900	1.94 ppm
MS ³	$C_{18}H_{22}$	$[M+H]^+$	239.1776	239.1794	-1.8 mDa

92. 17-丙酸睾酮

英文名称: Testosterone Propionate

结构式:

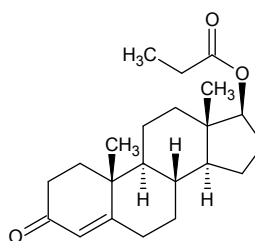
CAS#: 57-85-2

分子式: $C_{22}H_{32}O_3$

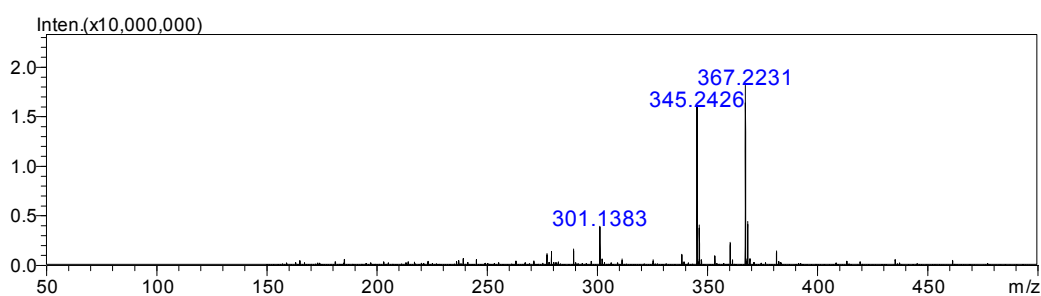
MW: 344.49

离子: $[M+H]^+$

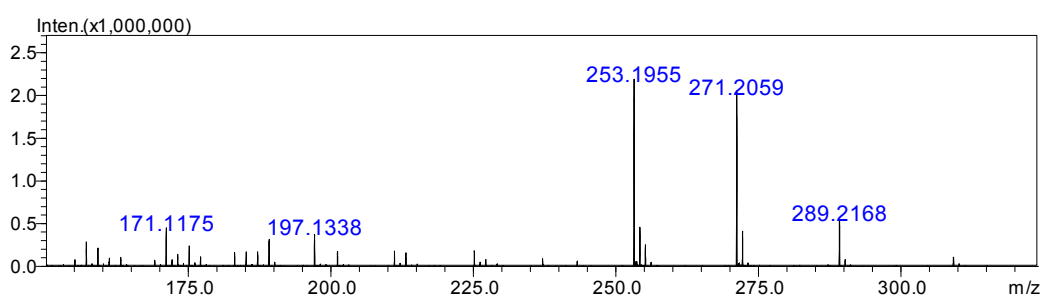
质谱图:



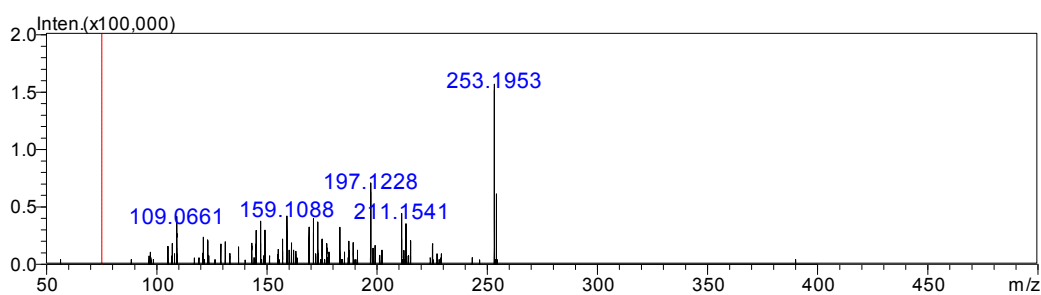
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_{22}H_{32}O_3$	$[M+H]^+$	345.2426	345.2424	0.58 ppm
MS ²	$C_{19}H_{26}O$	$[M+H]^+$	271.2059	271.2056	1.11 ppm
MS ³	$C_{19}H_{24}$	$[M+H]^+$	253.1953	253.1951	0.79 ppm

93. 苯丙酸诺龙

英文名称: Nandrolone Phenylpropionate 结构式:

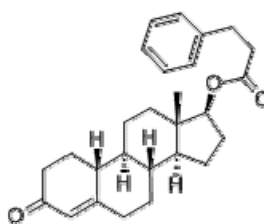
CAS#: 62-90-8

分子式: $C_{27}H_{34}O_3$

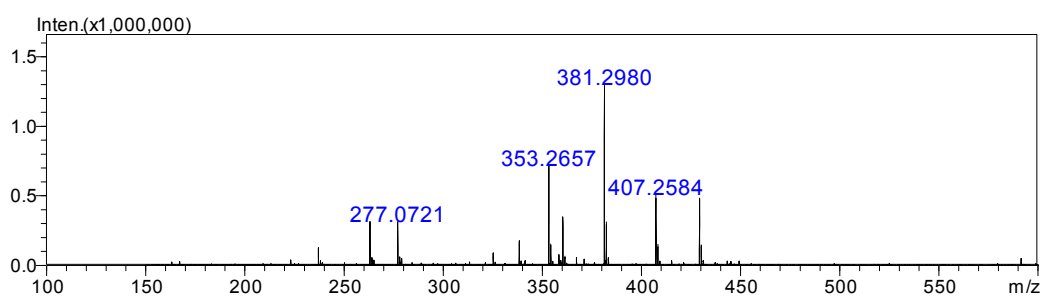
MW: 406.56

离子: $[M+H]^+$

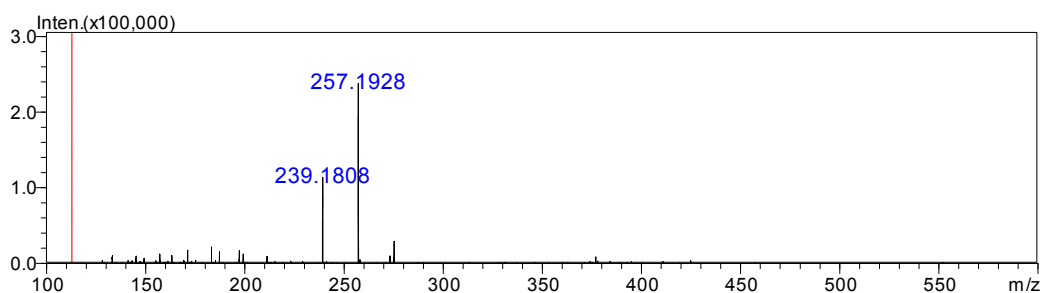
质谱图:



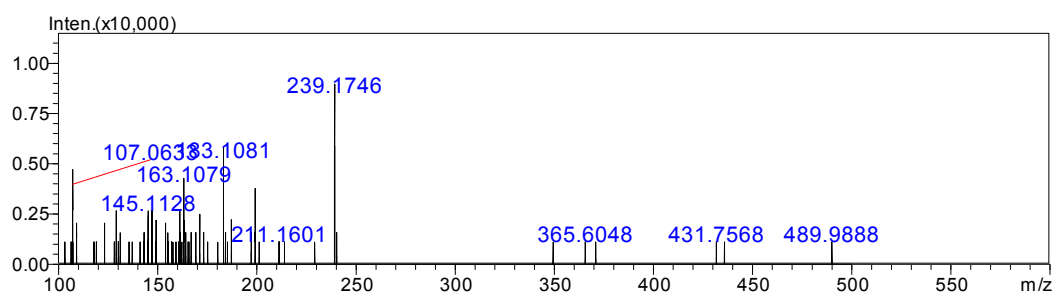
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_{27}H_{34}O_3$	$[M+H]^+$	407.2584	407.2581	0.74 ppm
MS ²	$C_{18}H_{24}O$	$[M+H]^+$	257.1928	257.1900	10.89 ppm
MS ³	$C_{18}H_{22}$	$[M+H]^+$	239.1746	239.1794	-4.8 mDa

94. 17-苯甲酸睾酮

英文名称: Testosterone 17-benzoate

结构式:

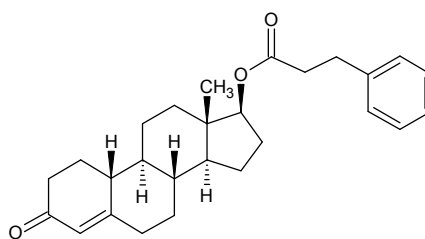
CAS#: 2088-71-3

分子式: $C_{26}H_{32}O_3$

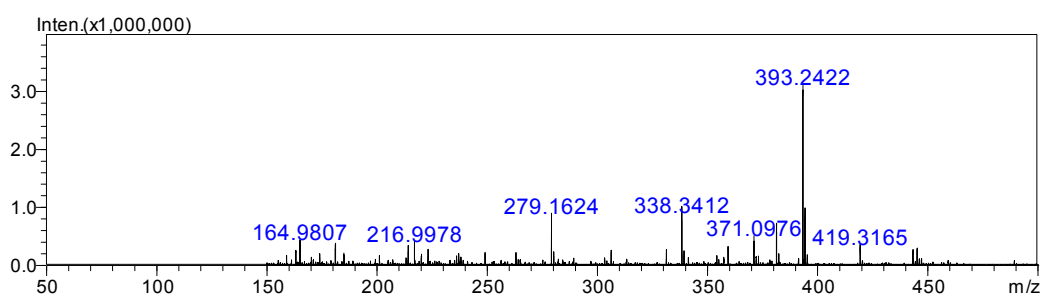
MW: 392.53

离子: $[M+H]^+$

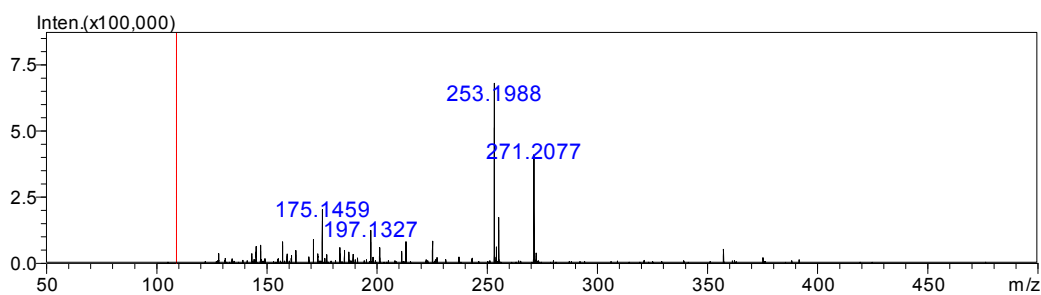
质谱图:



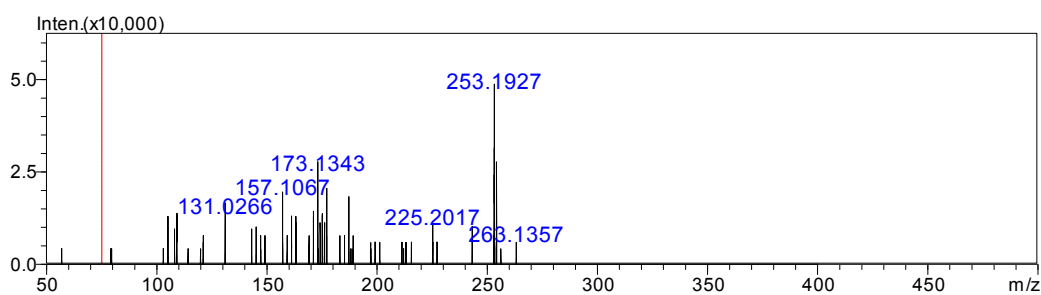
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_{26}H_{32}O_3$	$[M+H]^+$	393.2422	393.2424	-0.51 ppm
MS ²	$C_{19}H_{26}O$	$[M+H]^+$	271.2077	271.2056	7.74 ppm
MS ³	$C_{19}H_{24}$	$[M+H]^+$	253.1927	253.1951	-9.48 ppm

95. 强的松龙

英文名称: Prednisone

结构式:

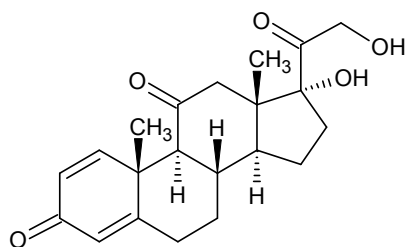
CAS#: 53-03-2

分子式: $C_{21}H_{26}O_5$

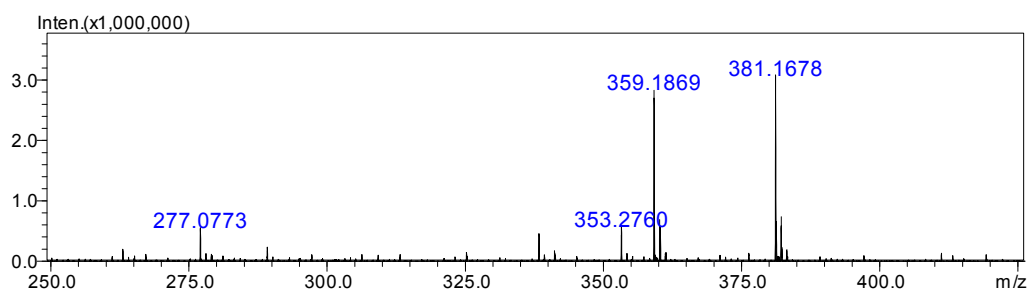
MW: 358.43

离子: $[M+H]^+$

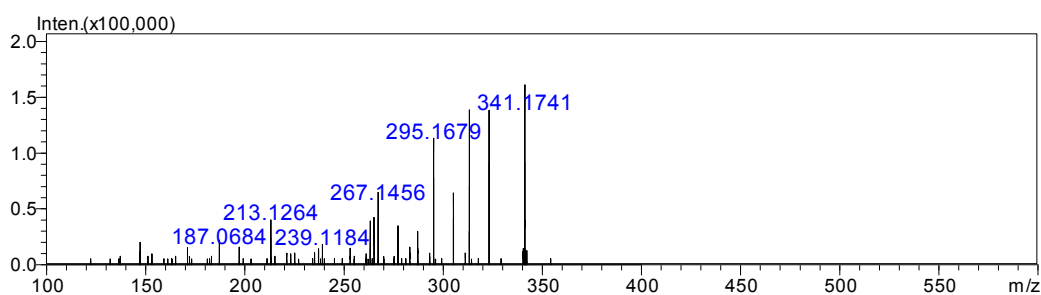
质谱图:



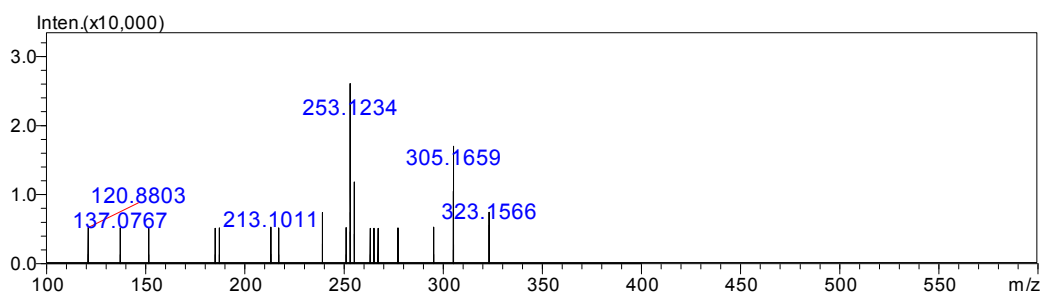
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_{21}H_{26}O_5$	$[M+H]^+$	359.1869	359.1853	4.45 ppm
MS ²	$C_{21}H_{24}O_4$	$[M+H]^+$	341.1741	341.1747	-1.76 ppm
MS ³	$C_{17}H_{16}O_2$	$[M+H]^+$	253.1234	253.1223	4.35 ppm

96. 氢化可的松

英文名称: Hydrocortisone

结构式:

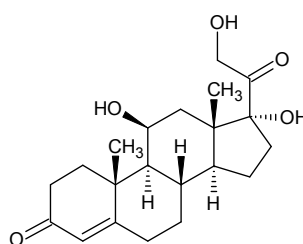
CAS#: 50-23-7

分子式: $C_{21}H_{30}O_5$

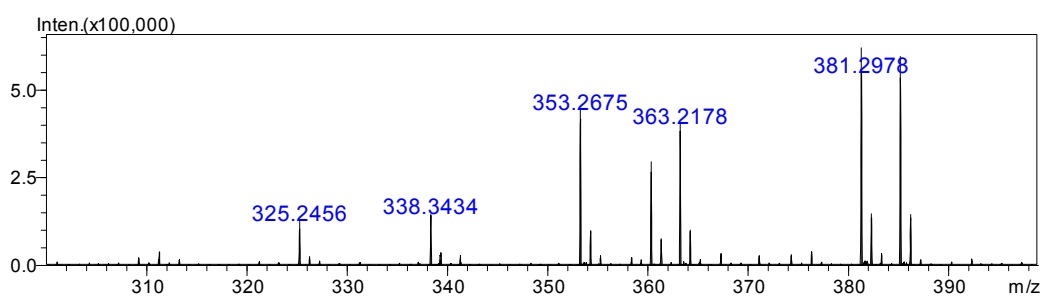
MW: 362.46

离子: $[M+H]^+$

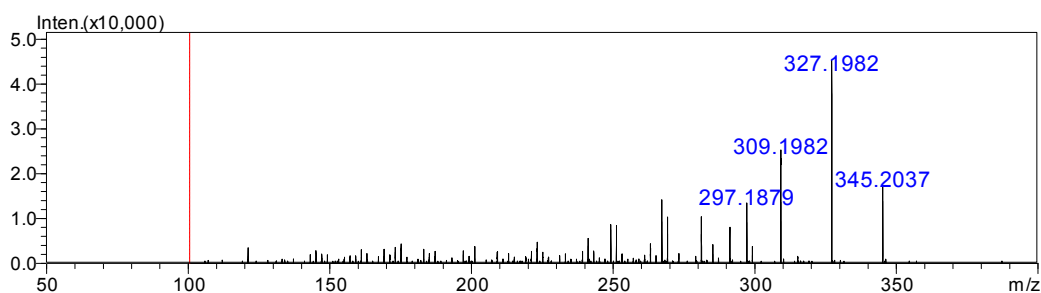
质谱图:



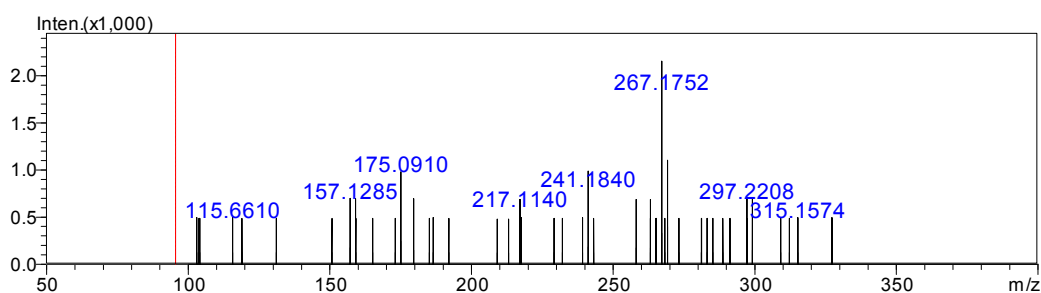
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_{21}H_{30}O_5$	$[M+H]^+$	363.2178	363.2166	3.30 ppm
MS ²	$C_{21}H_{28}O_4$	$[M+H]^+$	345.2037	345.2060	-6.66 ppm
MS ³	$C_{19}H_{22}O$	$[M+H]^+$	267.1752	267.1743	3.37 ppm

97. 甲基泼尼松

英文名称: Meprednisone

结构式:

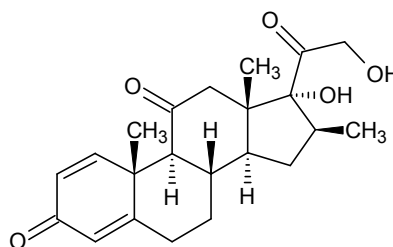
CAS#: 1247-42-3

分子式: $C_{22}H_{28}O_5$

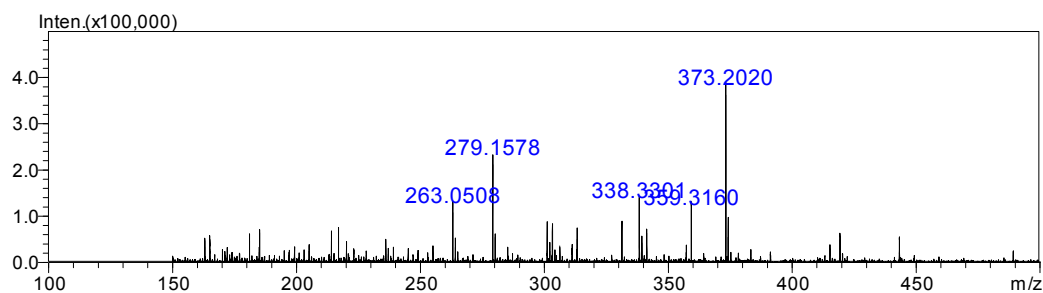
MW: 372.45

离子: $[M+H]^+$

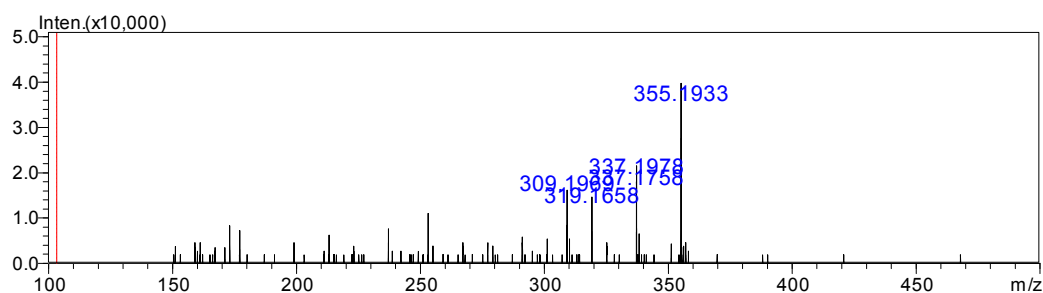
质谱图:



MS¹



MS²



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_{22}H_{28}O_5$	$[M+H]^+$	373.2020	373.2010	2.68 ppm
MS ²	$C_{22}H_{26}O_4$	$[M+H]^+$	355.1933	355.1904	8.16 ppm

98. 倍它米松

英文名称: Betamethasone

结构式:

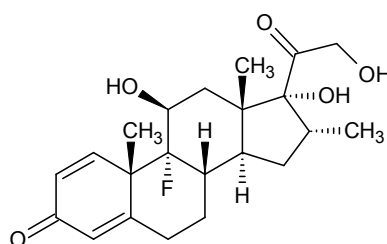
CAS#: 378-44-9

分子式: $C_{22}H_{29}FO_5$

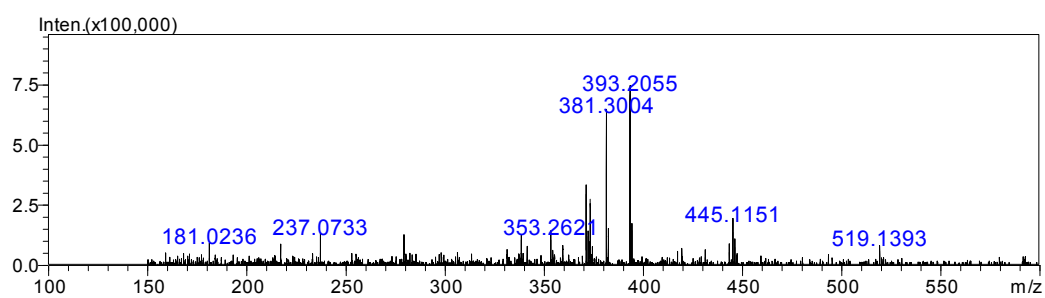
MW: 392.46

离子: $[M+H]^+$

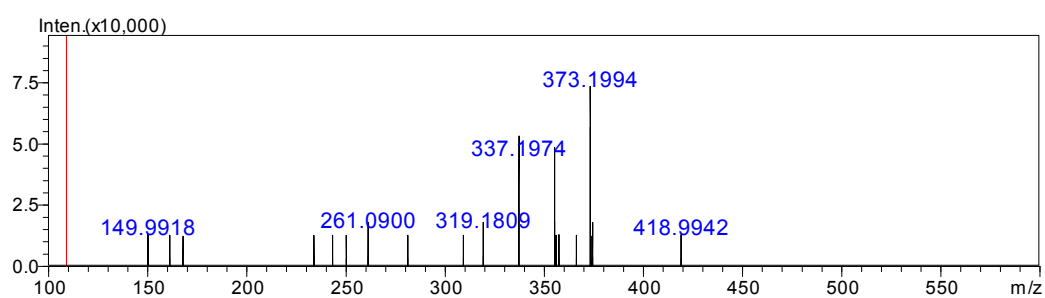
质谱图:



MS^1



MS^2



可能的多级质谱预测信息

MS^n	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS^1	$C_{22}H_{29}O_5F$	$[M+H]^+$	393.2055	393.2072	-4.32 ppm
MS^2	$C_{22}H_{28}O_5$	$[M+H]^+$	373.1994	373.2010	-4.29 ppm

99. 地塞米松

英文名称: Dexamethasone

结构式:

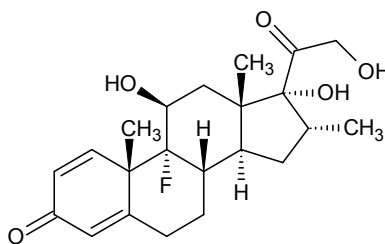
CAS#: 50-02-2

分子式: $C_{22}H_{29}FO_5$

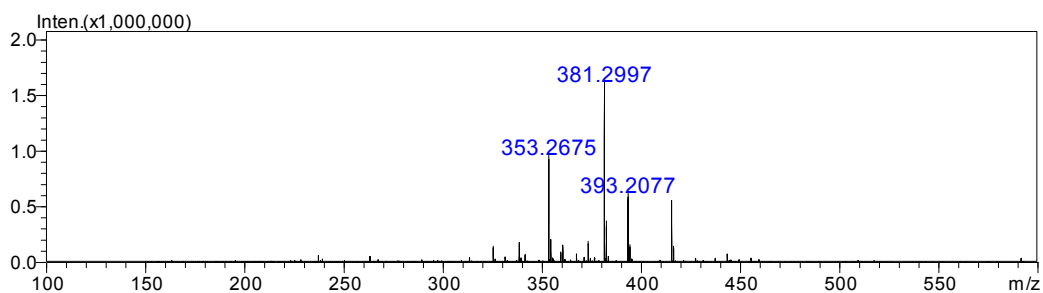
MW: 392.46

离子: $[M+H]^+$

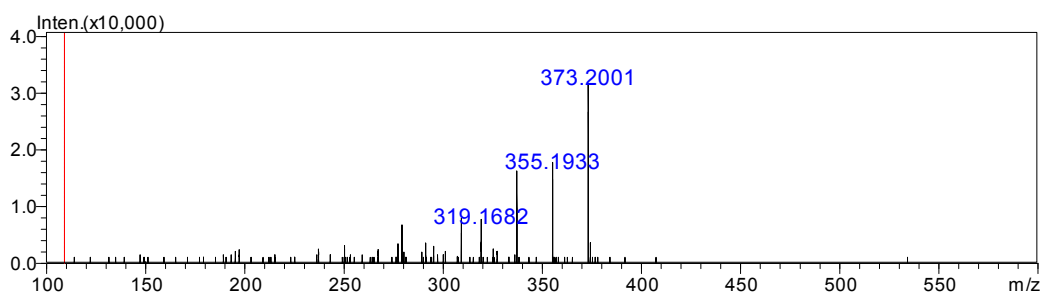
质谱图:



MS^1



MS^2



可能的多级质谱预测信息

MS^n	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS^1	$C_{22}H_{29}O_5F$	$[M+H]^+$	393.2077	393.2072	1.27 ppm
MS^2	$C_{22}H_{28}O_5$	$[M+H]^+$	373.2001	373.2010	-2.41 ppm

100. 醋酸氢氟可的松

英文名称: Fludrocortisone Acetate

结构式:

CAS#: 514-36-3

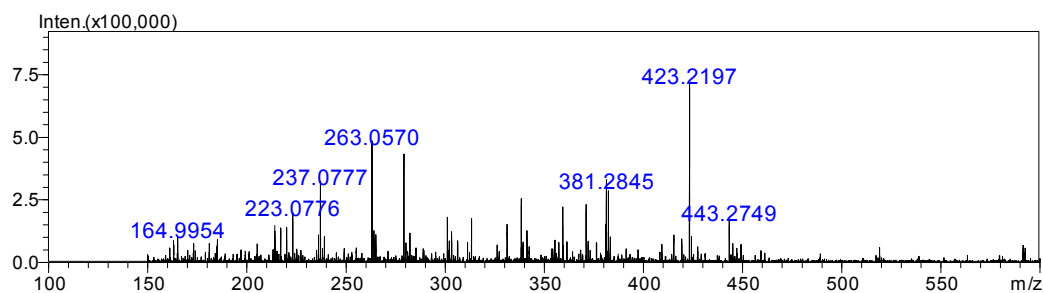
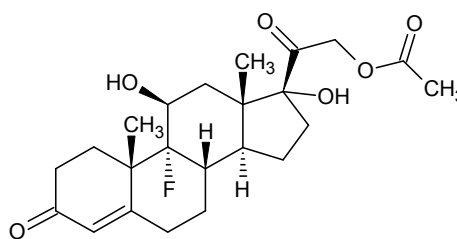
分子式: $C_{23}H_{31}FO_6$

MW: 422.49

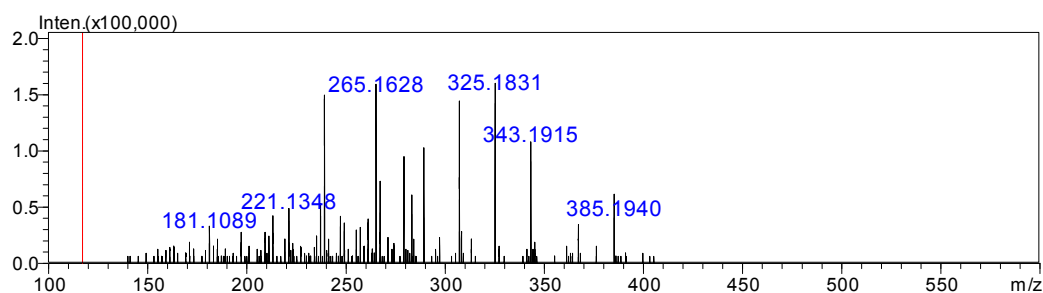
离子: $[M+H]^+$

质谱图:

MS¹



MS²



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_{26}H_{30}O_5$	$[M+H]^+$	423.2197	423.2166	7.32 ppm
MS ²	$C_{21}H_{26}O_4$	$[M+H]^+$	343.1915	343.1904	3.21 ppm

101. 醋酸氢化可的松

英文名称: Hydrocortisone Acetate

结构式:

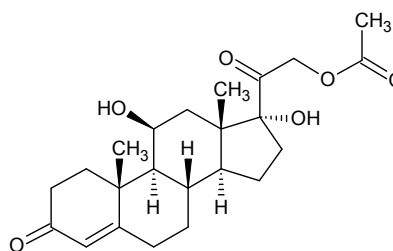
CAS#: 50-03-3

分子式: $C_{23}H_{32}O_6$

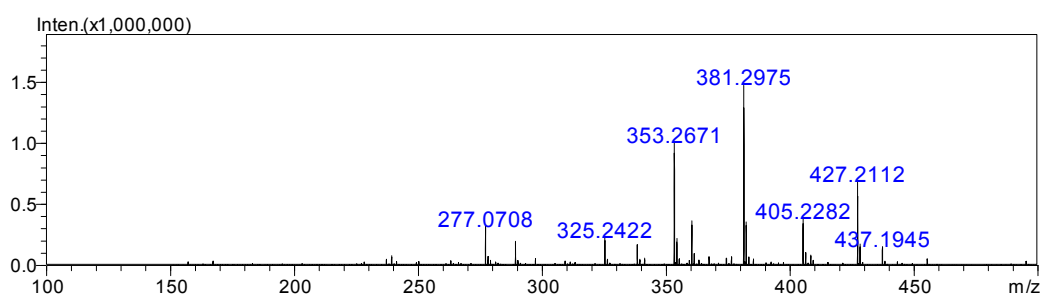
MW: 404.5

离子: $[M+H]^+$

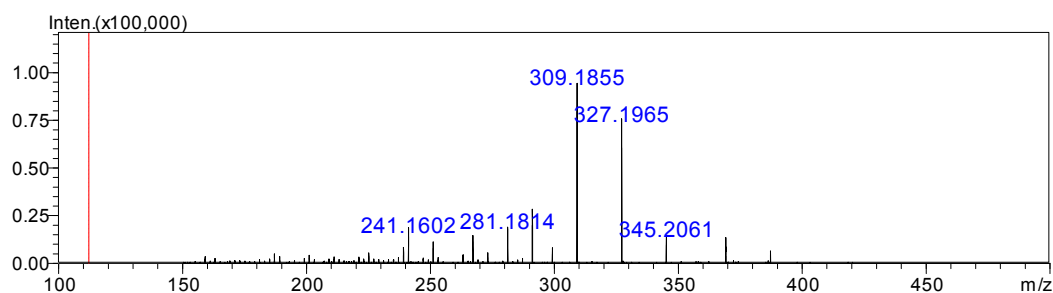
质谱图:



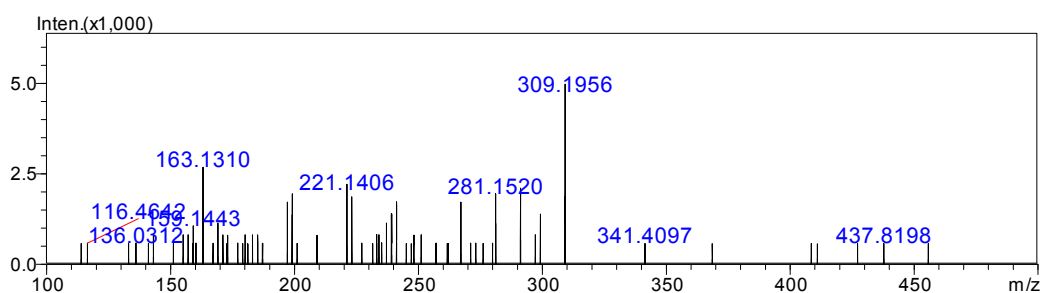
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_{23}H_{32}O_6$	$[M+H]^+$	405.2282	405.2272	2.47 ppm
MS ²	$C_{21}H_{26}O_3$	$[M+H]^+$	327.1965	327.1955	3.06 ppm
MS ³	$C_{21}H_{24}O_2$	$[M+H]^+$	309.1956	309.1849	34.61 ppm

102. 倍可松

英文名称: Betamethasone Dipropionate

结构式:

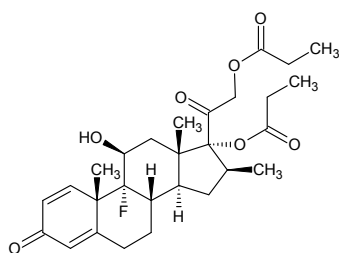
CAS#: 5593-20-4

分子式: $C_{28}H_{37}FO_7$

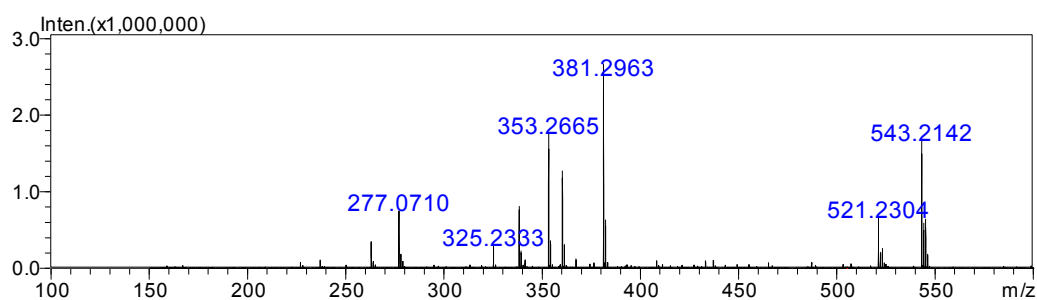
MW: 504.59

离子: $[M+K]^+$

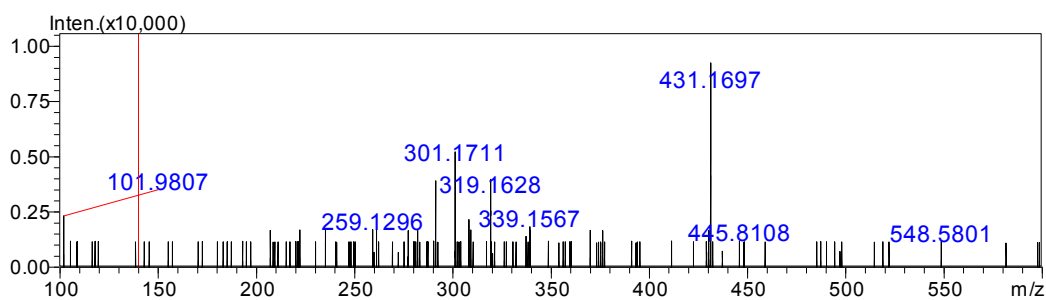
质谱图:



MS¹



MS²



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_{28}H_{37}O_7F$	$[M+K]^+$	543.2142	543.2155	-2.39 ppm
MS ²	$C_{22}H_{29}O_5F$	$[M+K]^+$	431.1697	431.1631	15.31 ppm

103. 雌三醇

英文名称: Estriol

结构式:

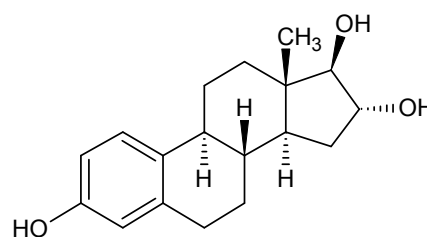
CAS#: 50-27-1

分子式: $C_{18}H_{24}O_3$

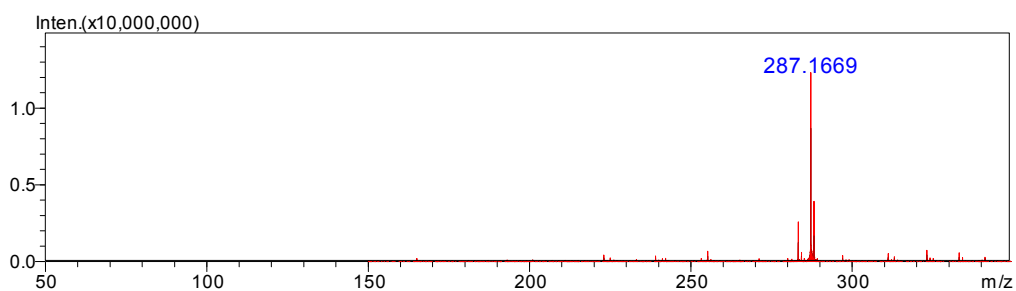
MW: 288.4

离子: $[M-H]^-$

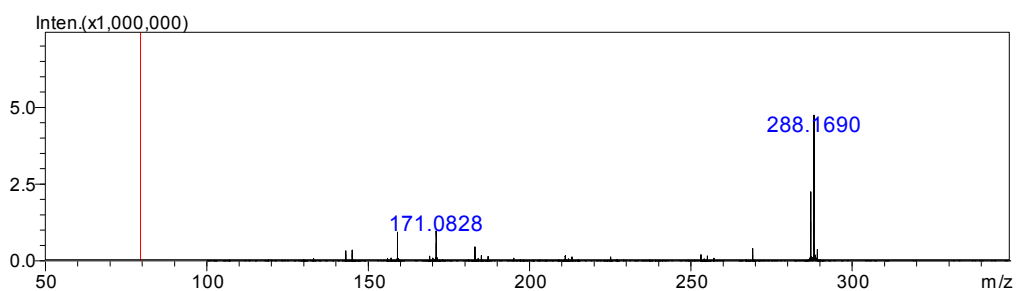
质谱图:



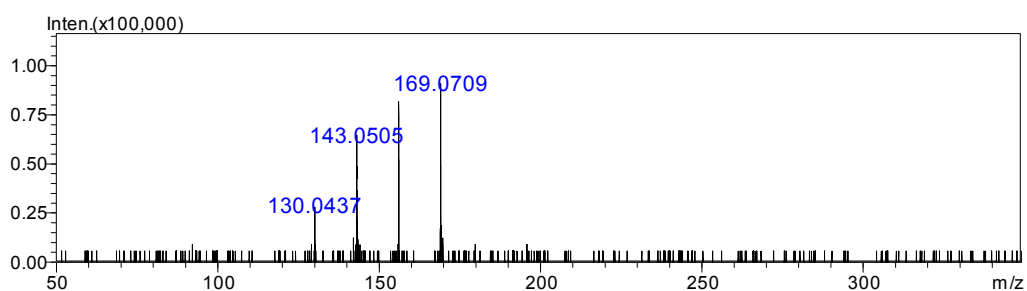
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_{18}H_{24}O_3$	$[M-H]^-$	287.1669	287.1653	5.57 ppm
MS ²	$C_{12}H_{12}O$	$[M-H]^-$	171.0828	171.0815	1.3 mDa
MS ³	$C_{10}H_8O$	$[M-H]^-$	143.0505	143.0502	0.3 mDa

104. 17- α -乙炔雌二醇

英文名称: 17- α -Ethinylestradiol

结构式:

CAS#: 57-63-6

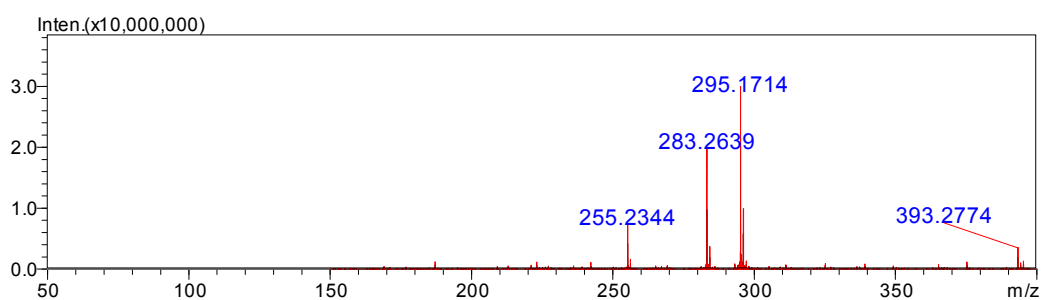
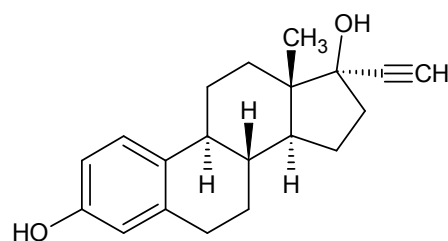
分子式: C₂₀H₂₄O₂

MW: 296.4

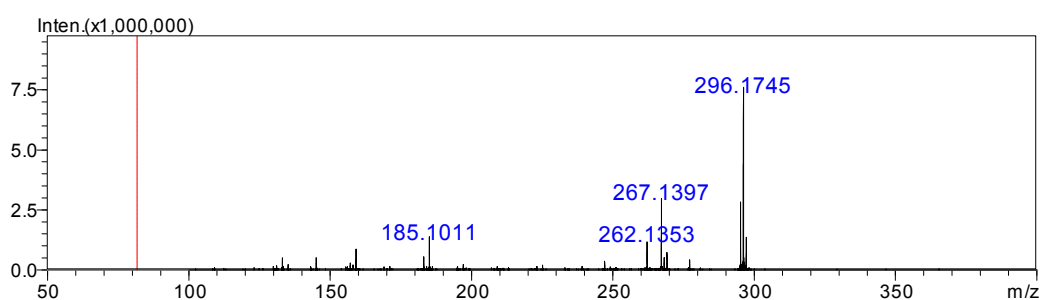
离子: [M-H]⁻

质谱图:

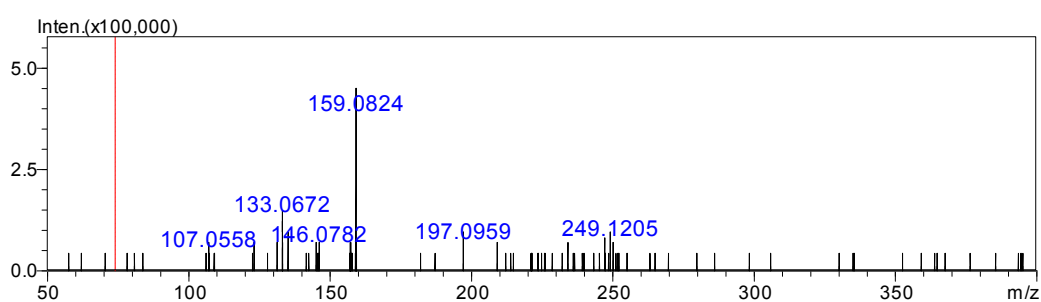
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	C ₂₀ H ₂₄ O ₂	[M-H] ⁻	295.1714	295.1704	3.39 ppm
MS ²	C ₁₈ H ₂₀ O ₂	[M-H] ⁻	267.1397	267.1391	2.25 ppm
MS ³	C ₁₁ H ₁₂ O	[M-H] ⁻	159.0824	159.0815	0.9 mDa

105. 己烯雌酚

英文名称: Diethylstilbestrol

CAS#: 56-53-1

分子式: $C_{18}H_{20}O_2$

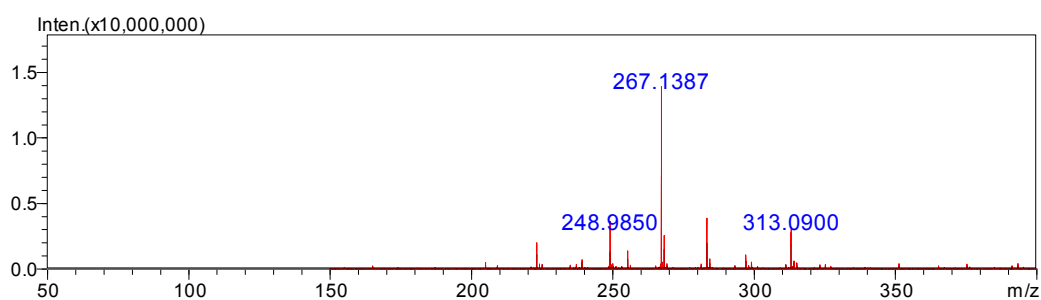
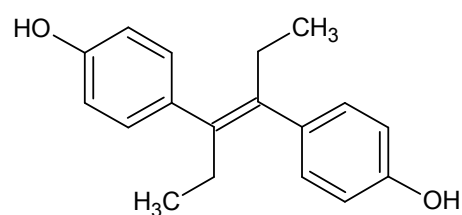
MW: 268.35

离子: $[M-H]^-$

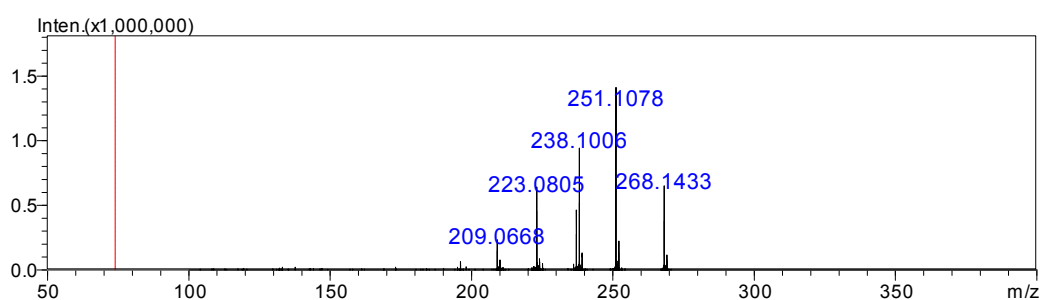
质谱图:

MS¹

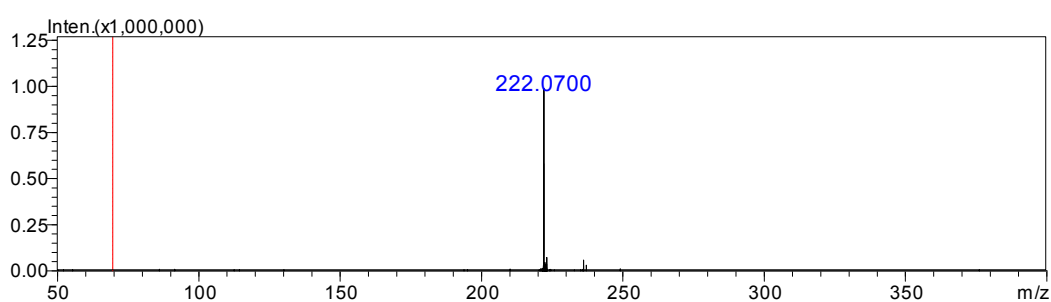
结构式:



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_{18}H_{20}O_2$	$[M-H]^-$	267.1387	267.1391	-1.50 ppm
MS ²	$C_{17}H_{16}O_2$	$[M-H]^-$	251.1078	251.1078	0.00 ppm
MS ³	$C_{15}H_{11}O_2$	$[M-H]^-$	222.0700	222.0686	1.4 mDa

106. 己烷雌酚

英文名称: Hexestrol

结构式:

CAS#: 84-16-2

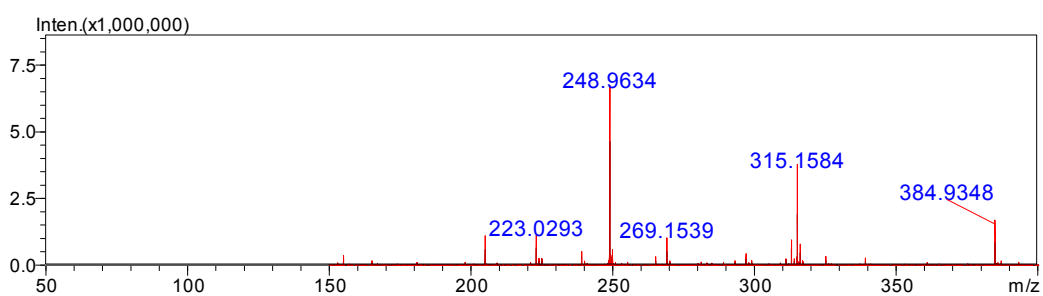
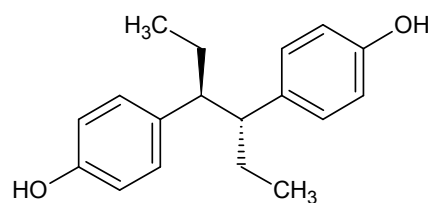
分子式: $C_{18}H_{22}O_2$

MW: 270.37

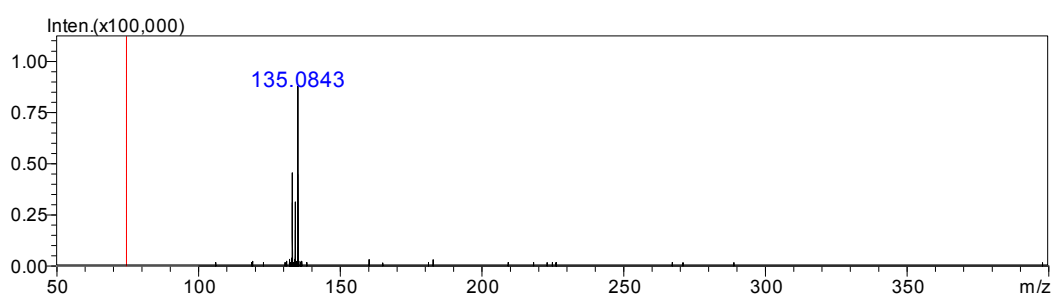
离子: $[M-H]^-$

质谱图:

MS^1



MS^2



可能的多级质谱预测信息

MS^n	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS^1	$C_{18}H_{22}O_2$	$[M-H]^-$	269.1539	269.1547	-2.97 ppm
MS^2	$C_9H_{12}O$	$[M-H]^-$	135.0843	135.0815	2.8 mDa

107. 17-β 雌二醇

英文名称: 17-β-estradiol

结构式:

CAS#: 50-28-2

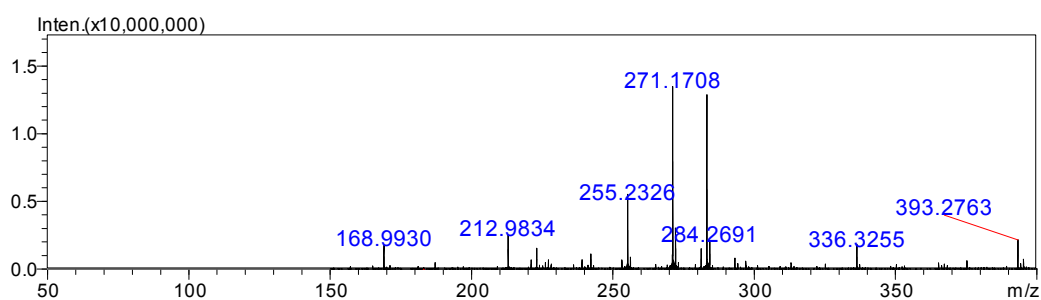
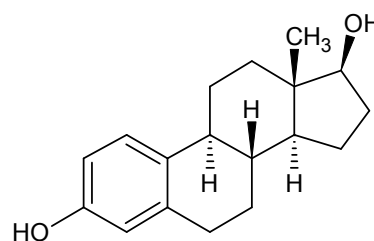
分子式: C₁₈H₂₄O₃

MW: 272.38

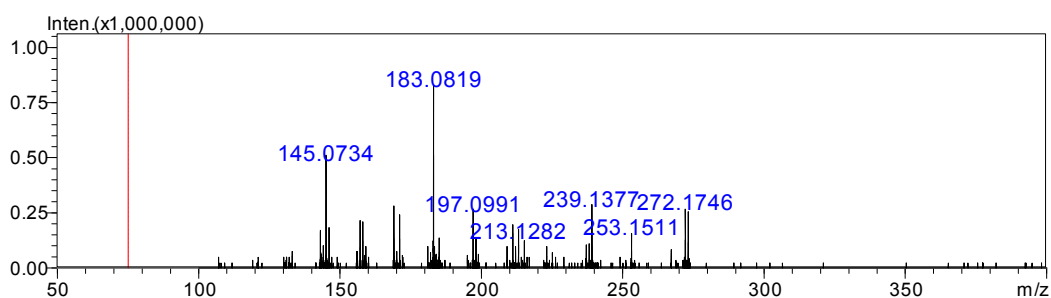
离子: [M-H]⁻

质谱图:

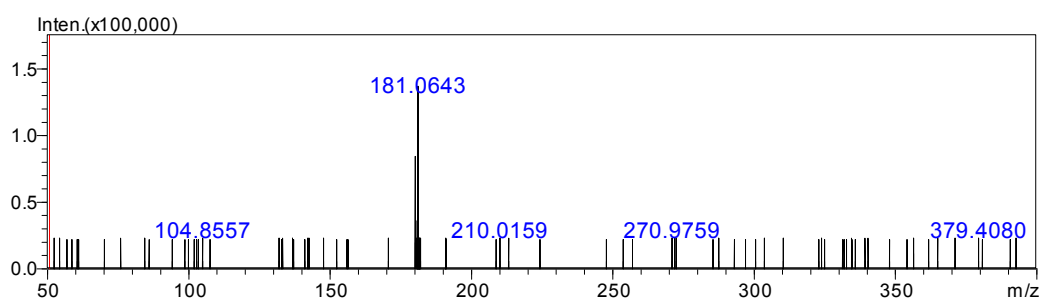
MS¹



MS²



MS³



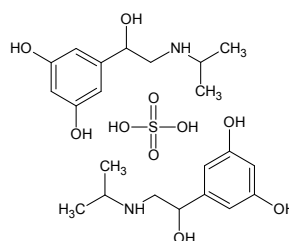
可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	C ₁₈ H ₂₄ O ₂	[M-H] ⁻	271.1708	271.1704	1.48 ppm
MS ²	C ₁₃ H ₁₂ O	[M-H] ⁻	183.0819	183.0815	0.4 mDa
MS ³	C ₁₃ H ₁₀ O	[M-H] ⁻	181.0643	181.0659	-1.6 mDa

108. 奥西那林半硫酸盐

英文名称: Metaproterenol hemisulfate salt

结构式:



CAS#: 5874-97-5

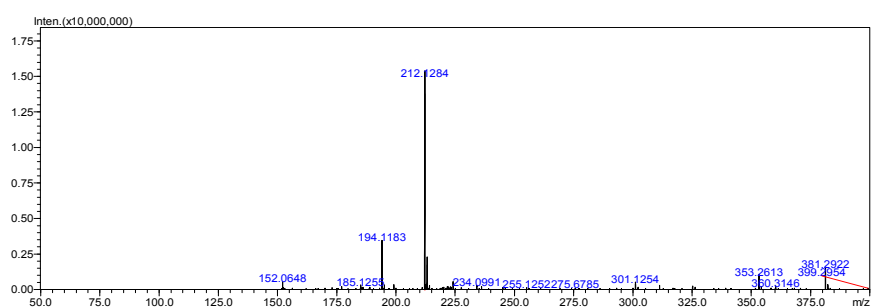
分子式: $C_{22}H_{36}N_2O_{10}S$

MW: 520.59

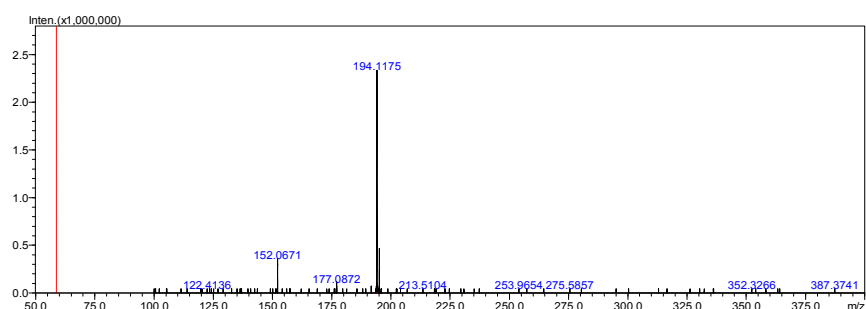
离子: $[M+H]^+$

质谱图:

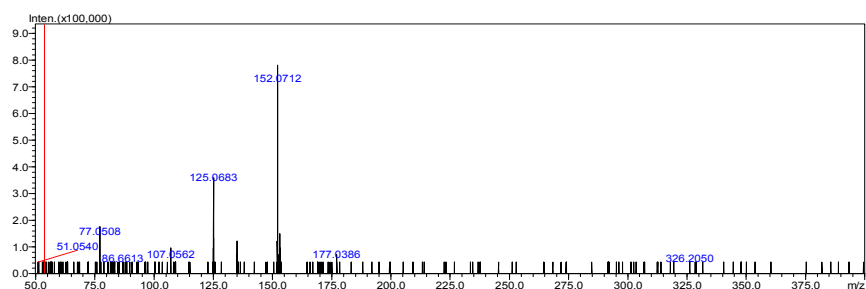
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	C ₁₁ H ₁₇ NO ₃	$[M+H]^+$	212.1284	212.1281	0.3 mDa
MS ²	C ₁₁ H ₁₅ NO ₂	$[M+H]^+$	194.1175	194.1176	-0.1 mDa
MS ³	C ₈ H ₉ NO ₂	$[M+H]^+$	152.0712	152.0706	0.6 mDa

109. 西马特罗

英文名称: Cimaterol

结构式:

CAS#: 54239-37-1

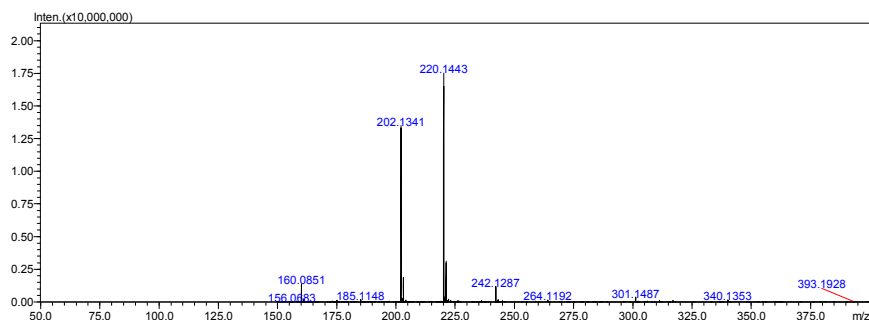
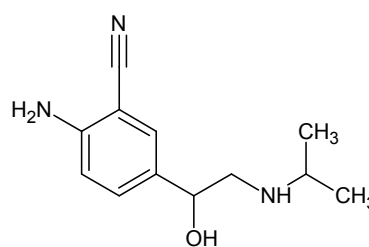
分子式: $C_{12}H_{17}N_3O$

MW: 219.29

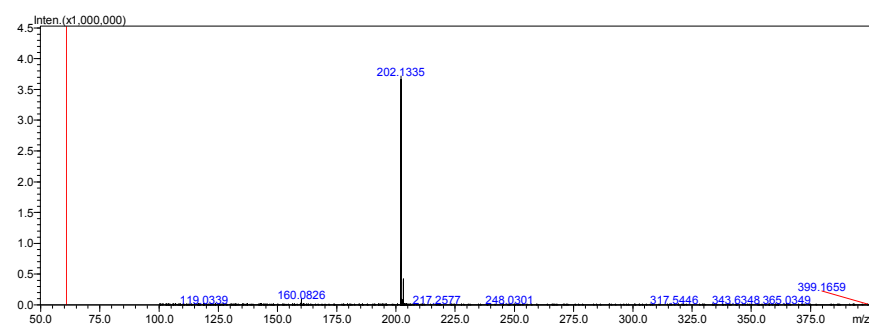
离子: $[M+H]^+$

质谱图:

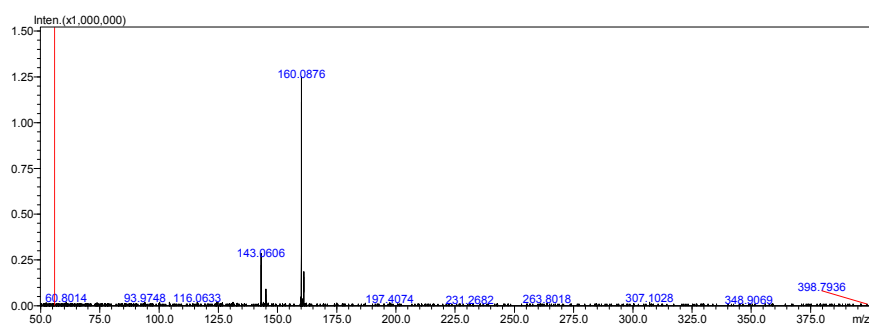
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_{12}H_{17}N_3O$	$[M+H]^+$	220.1443	220.1444	-0.1 mDa
MS ²	$C_{12}H_{15}N_3$	$[M+H]^+$	202.1335	202.1339	-0.4 mDa
MS ³	$C_9H_9N_3$	$[M+H]^+$	160.0876	160.0869	0.7 mDa

110. 硫酸特布他林

英文名称: Terbutalin Sulfate 结构式:

CAS#: 23031-32-5

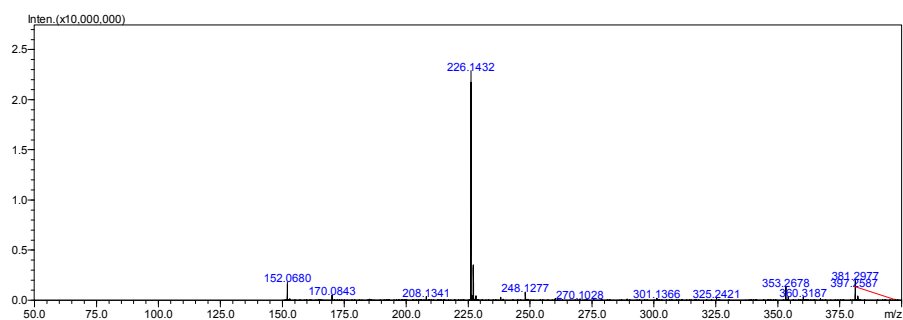
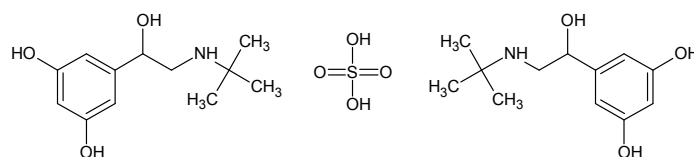
分子式: $(C_{12}H_{19}NO_3)_2 \cdot H_2SO_4$

MW: 548.65

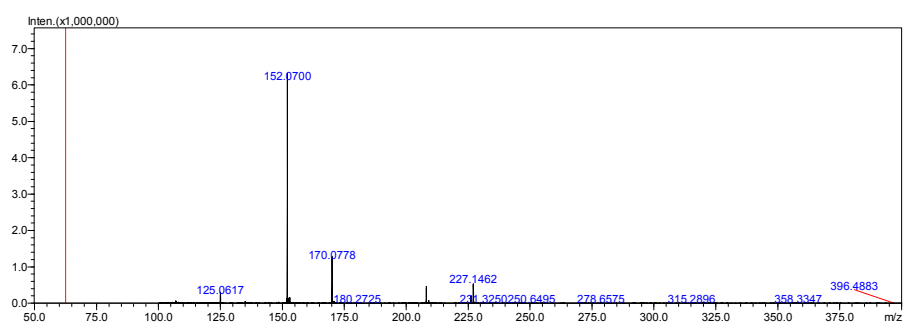
离子: $[M+H]^+$

质谱图:

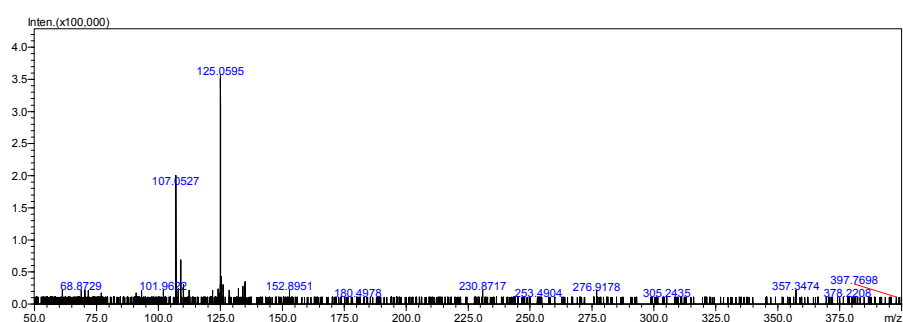
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	C ₁₂ H ₁₉ NO ₃	$[M+H]^+$	226.1432	226.1438	-0.6 mDa
MS ²	C ₈ H ₉ NO ₂	$[M+H]^+$	152.0700	152.0706	-0.6 mDa
MS ³	C ₇ H ₈ O ₂	$[M+H]^+$	125.0595	125.0597	-0.2 mDa

111. 沙丁胺醇

英文名称: Salbutamol

结构式:

CAS#: 18559-94-9

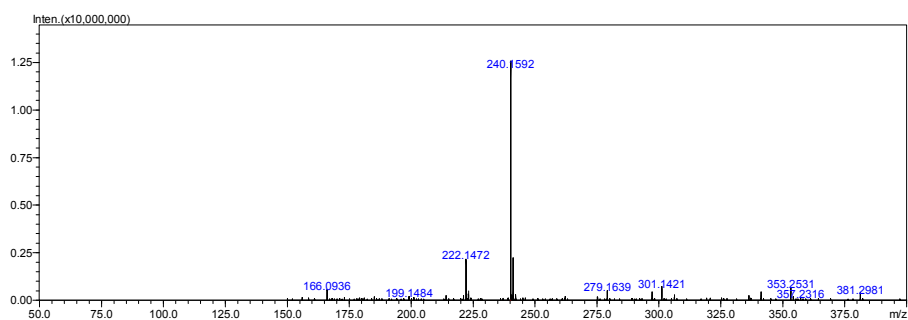
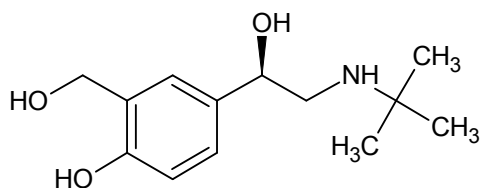
分子式: $C_{13}H_{21}NO_3$

MW: 239.3

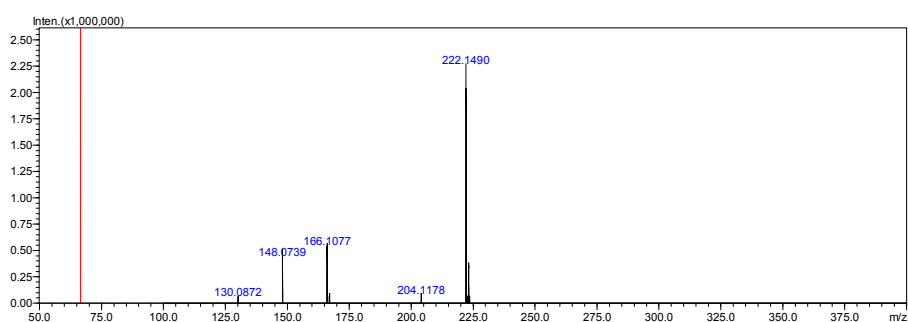
离子: $[M+H]^+$

质谱图:

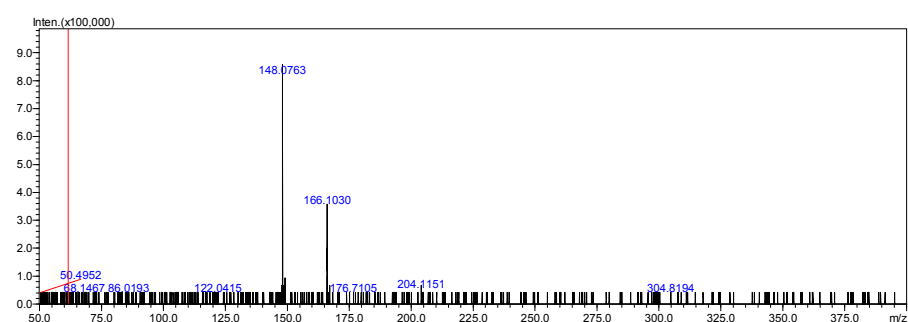
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_{13}H_{21}NO_3$	$[M+H]^+$	240.1592	240.1594	-0.2 mDa
MS ²	$C_{13}H_{19}NO_2$	$[M+H]^+$	222.1490	222.1489	0.1 mDa
MS ³	C_9H_9NO	$[M+H]^+$	148.0763	148.0757	0.6 mDa

112. 氢溴酸非诺特罗

英文名称: Fenoterol hydrobromide 结构式:

CAS#: 1944-12-3

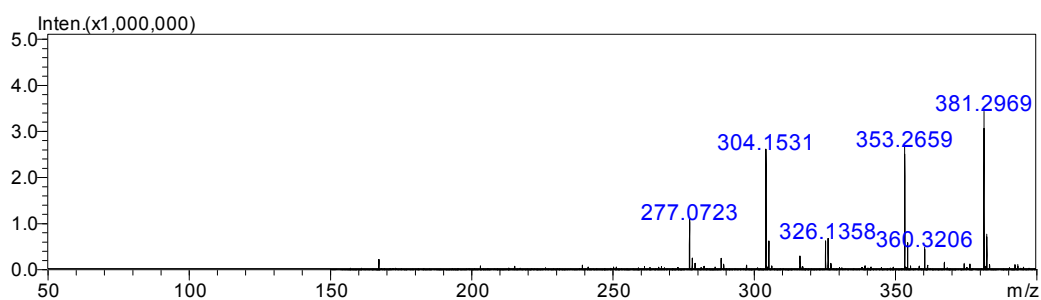
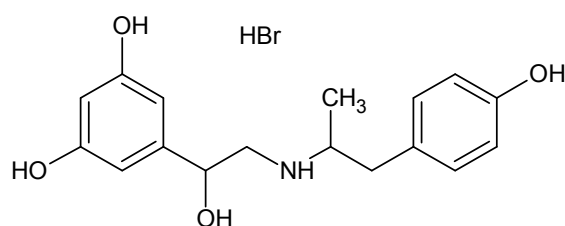
分子式: $C_{17}H_{22}BrNO_4$

MW: 384.26

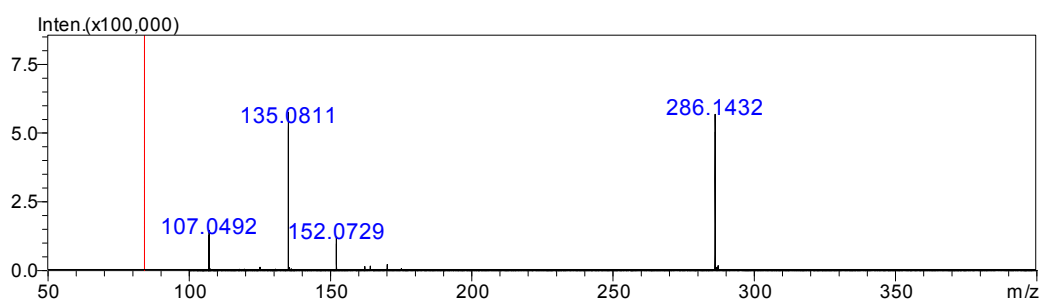
离子: $[M+H]^+$

质谱图:

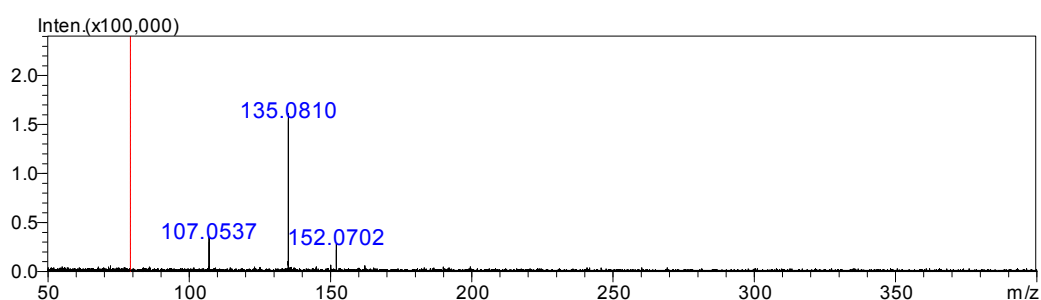
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_{17}H_{21}NO_4$	$[M+H]^+$	304.1531	304.1543	-3.95 ppm
MS ²	$C_{17}H_{19}NO_3$	$[M+H]^+$	286.1432	286.1438	-2.10 ppm
MS ³	$C_9H_{10}O$	$[M+H]^+$	135.0810	135.0804	0.6 mDa

113. 利托君/利安特灵

英文名称: Ritodrine

结构式:

CAS#: 26652-09-5

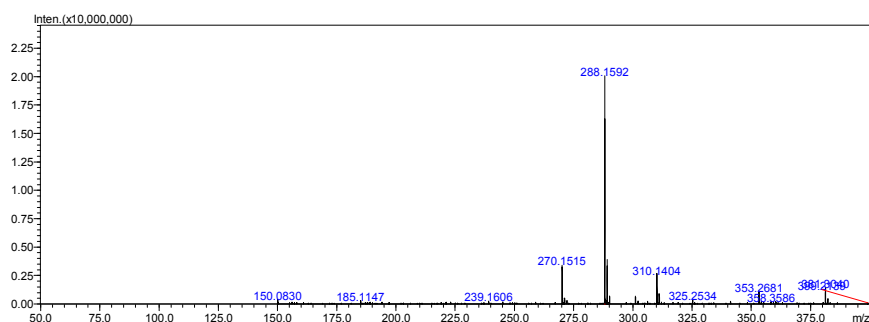
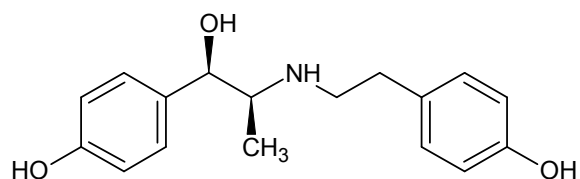
分子式: $C_{17}H_{21}NO_3$

MW: 287.35

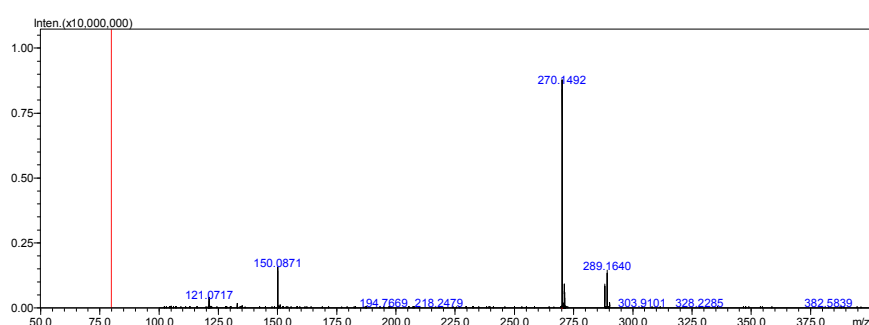
离子: $[M+H]^+$

质谱图:

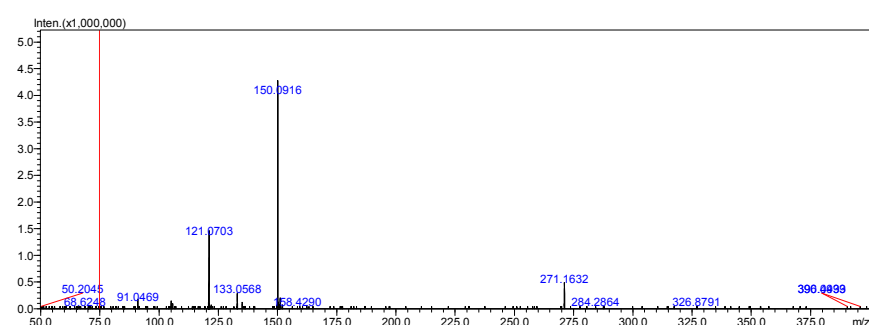
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_{17}H_{21}NO_3$	$[M+H]^+$	288.1592	288.1594	-0.69 ppm
MS ²	$C_{17}H_{19}NO_2$	$[M+H]^+$	270.1492	270.1489	1.11 ppm
MS ³	$C_9H_{11}NO$	$[M+H]^+$	150.0916	150.0913	0.3 mDa

114. 盐酸莱克多巴胺

英文名称: Ractopamine Hydrochloride 结构式:

CAS#: 90274-24-1

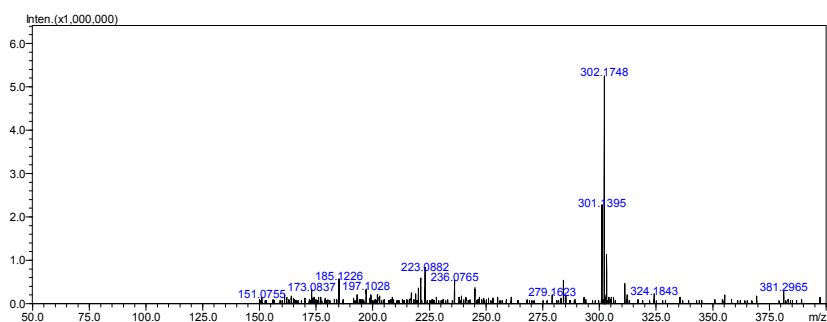
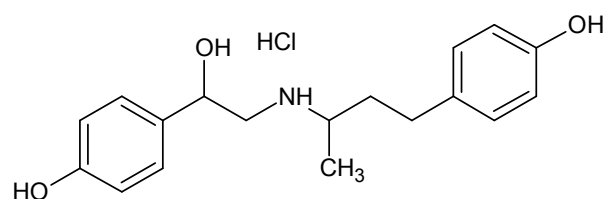
分子式: $C_{18}H_{23}NO_3 \cdot HCl$

MW: 337.8

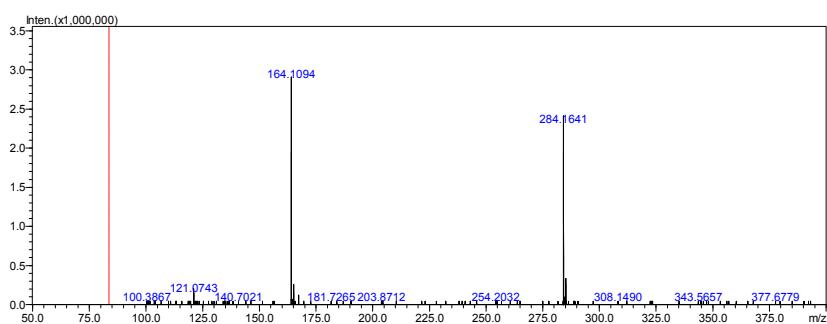
离子: $[M+H]^+$

质谱图:

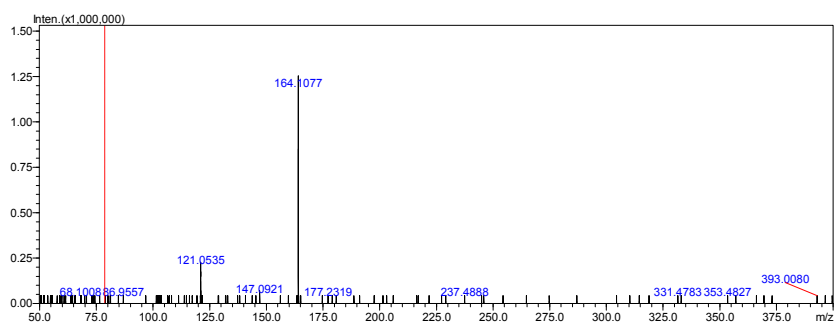
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_{18}H_{23}NO_3$	$[M+H]^+$	302.1748	302.1751	-0.99 ppm
MS ²	$C_{18}H_{21}NO_2$	$[M+H]^+$	284.1641	284.1645	-1.41 ppm
MS ³	$C_{10}H_{13}NO$	$[M+H]^+$	164.1077	164.1070	0.7 mDa

115. 盐酸克伦特罗

英文名称: Clenbuterol Hydrochloride

结构式:

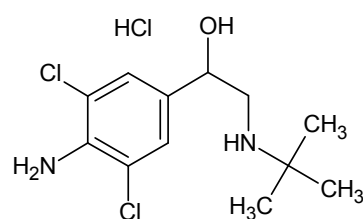
CAS#: 21898-19-1

分子式: $C_{12}H_{18}Cl_2N_2O \cdot HCl$

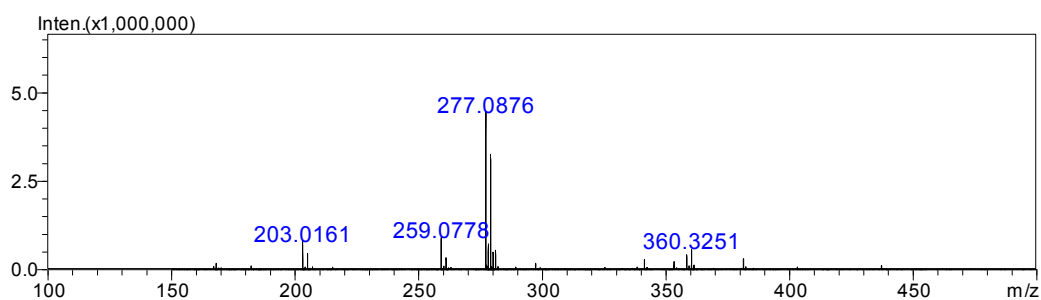
MW: 313.65

离子: $[M+H]^+$

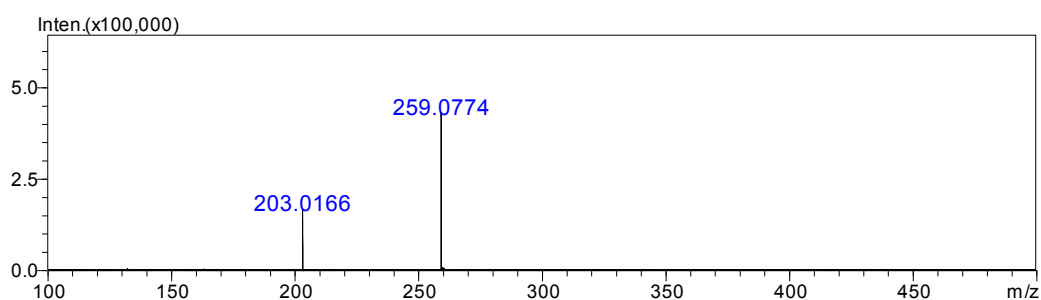
质谱图:



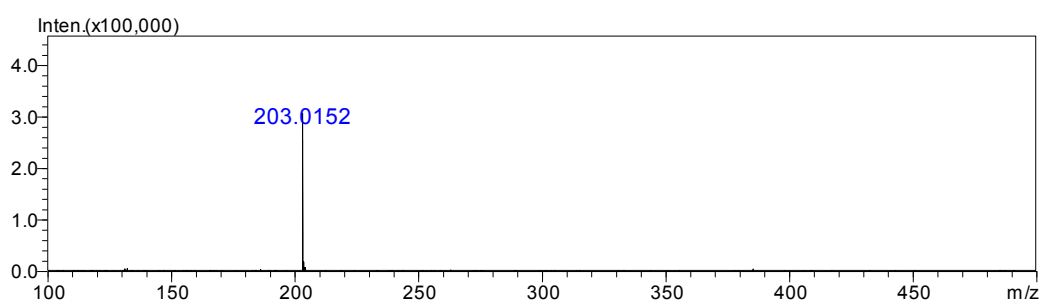
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_{12}H_{18}N_2OCl_2$	$[M+H]^+$	277.0876	277.0869	2.53 ppm
MS ²	$C_{12}H_{16}N_2Cl_2$	$[M+H]^+$	259.0774	259.0763	4.25 ppm
MS ³	$C_8H_8N_2Cl_2$	$[M+H]^+$	203.0152	203.0137	1.5 mDa

116. 妥洛特罗

英文名称: Tulobuterol

结构式:

CAS#: 41570-61-0

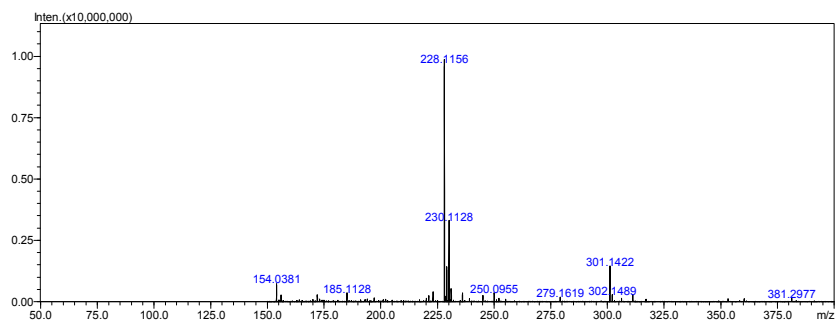
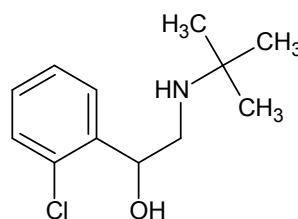
分子式: $C_{12}H_{18}ClNO$

MW: 227.73

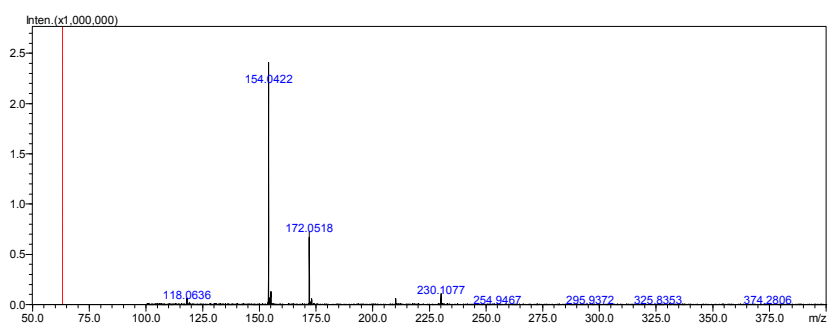
离子: $[M+H]^+$

质谱图:

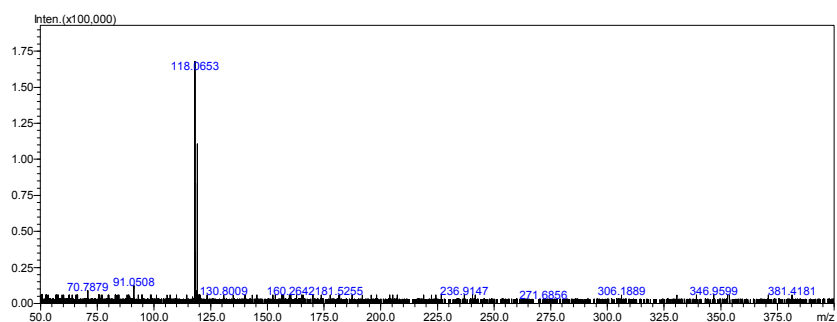
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_{12}H_{18}NOCl$	$[M+H]^+$	228.1156	228.1150	0.6 mDa
MS ²	C_8H_8NCl	$[M+H]^+$	154.0422	154.0418	0.4 mDa
MS ³	C_8H_7N	$[M+H]^+$	118.0653	118.0651	0.2 mDa

117. 盐酸溴布特罗

英文名称: Brombuterol Hydrochloride 结构式:

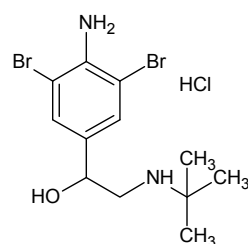
CAS#: 21912-49-2

分子式: $C_{12}H_{18}Br_2N_2O \cdot HCl$

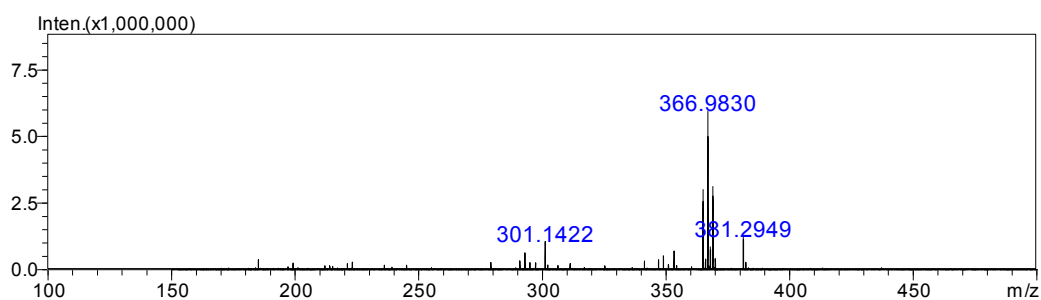
MW: 402.6

离子: $[M+H]^+$

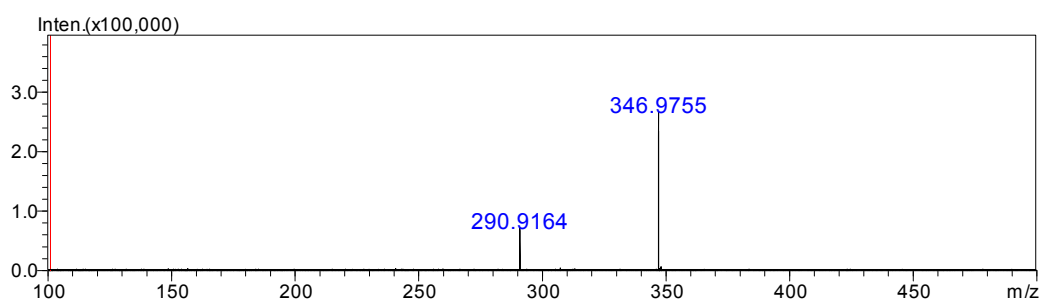
质谱图:



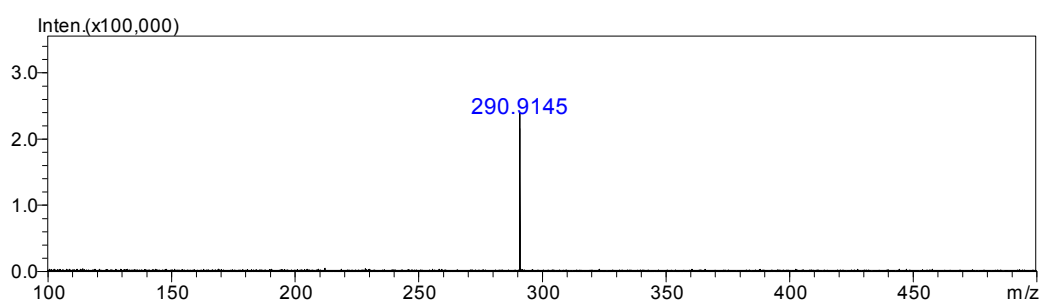
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_{12}H_{18}N_2OBr_2$	$[M+H]^+$	364.9872	364.9859	3.56 ppm
MS ²	$C_{12}H_{16}N_2Br_2$	$[M+H]^+$	346.9755	346.9753	0.58 ppm
MS ³	$C_8H_8N_2Br_2$	$[M+H]^+$	290.9145	290.9127	1.8 mDa

118. 盐酸马布特罗

英文名称: Mabuterol Hydrochloride

结构式:

CAS#: 54240-36-7

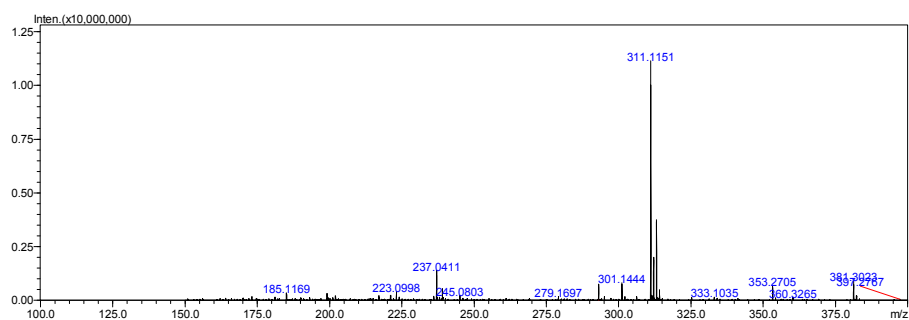
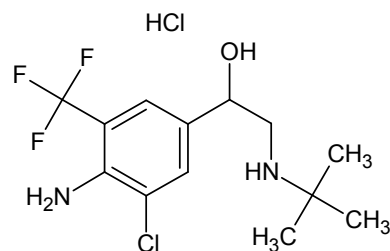
分子式: $C_{14}H_{19}N_3O_2 \cdot HCl$

MW: 347.21

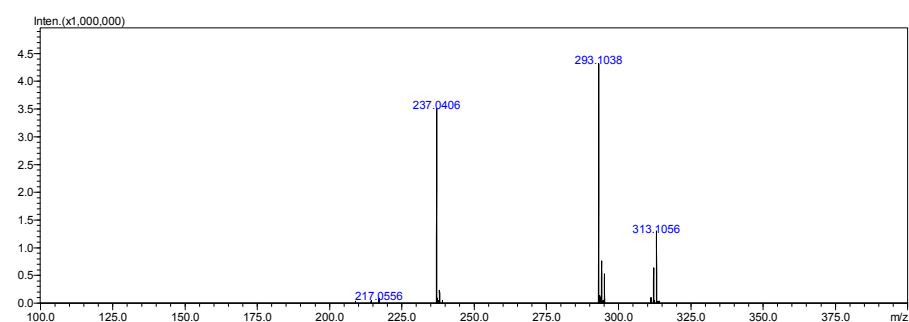
离子: $[M+H]^+$

质谱图:

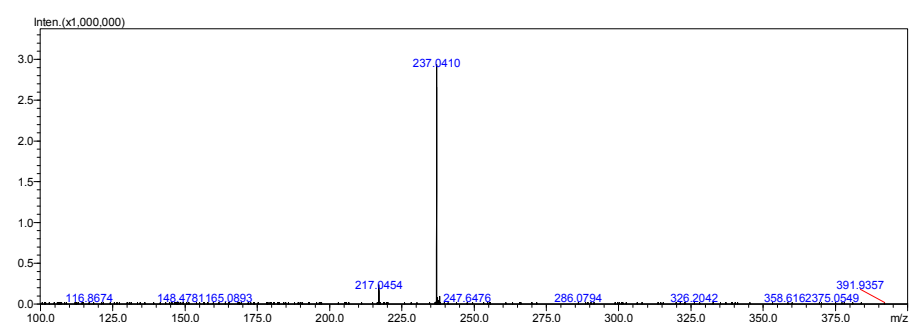
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_{13}H_{18}N_2OF_3Cl$	$[M+H]^+$	311.1151	311.1133	5.79 ppm
MS ²	$C_{13}H_{16}N_2F_3Cl$	$[M+H]^+$	293.1038	293.1027	3.75 ppm
MS ³	$C_9H_8N_2F_3Cl$	$[M+H]^+$	237.0410	237.0401	0.9 mDa

119. 喷布特罗硫酸盐

英文名称: Penbutolol Sulfate

结构式:

CAS#: 523-44-4

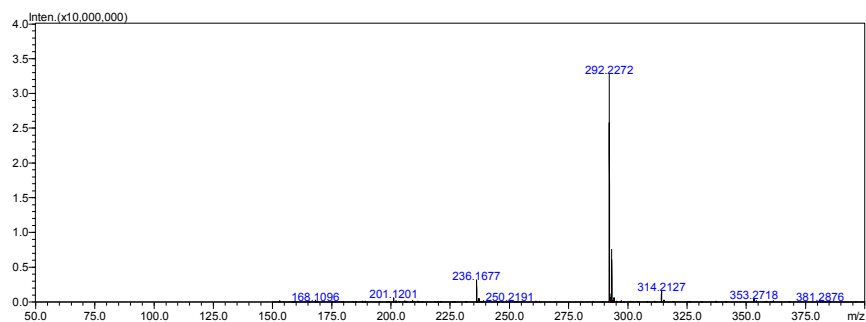
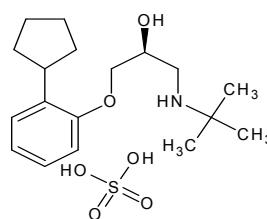
分子式: $C_{18}H_{31}NO_6S$

MW: 389.5068

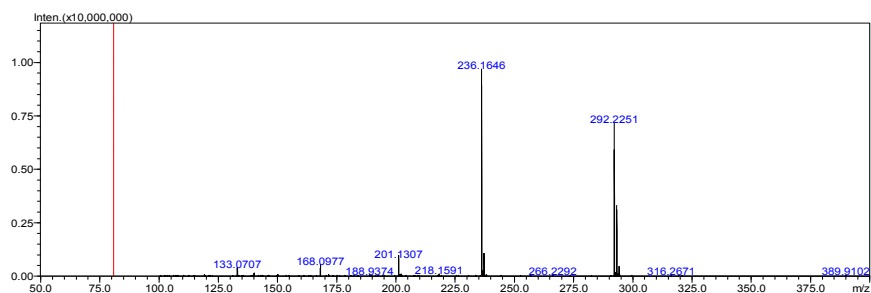
离子: $[M+H]^+$

质谱图:

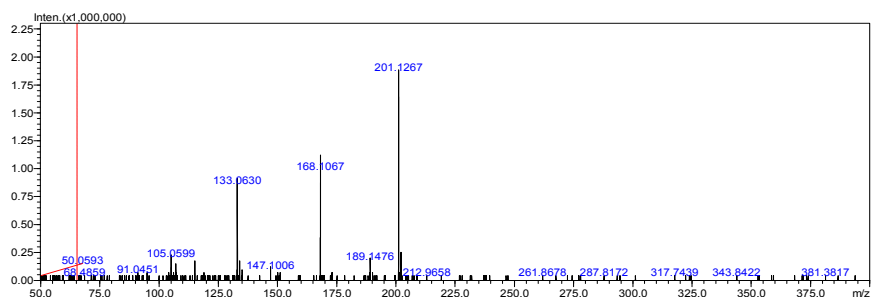
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_{18}H_{29}NO_2$	$[M+H]^+$	292.2272	292.2271	0.34 ppm
MS ²	$C_{14}H_{21}NO_2$	$[M+H]^+$	236.1646	236.1645	0.1 mDa
MS ³	$C_{14}H_{16}O$	$[M+H]^+$	201.1267	201.1274	-0.7 mDa

120. 双氯青霉素

英文名称: Dicloxacillin

CAS#: 3116-76-5

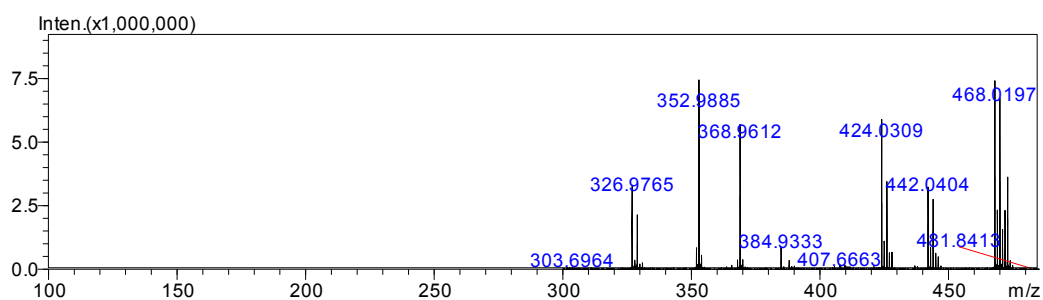
分子式: $C_{19}H_{17}Cl_2N_3O_5S$

MW: 470.33

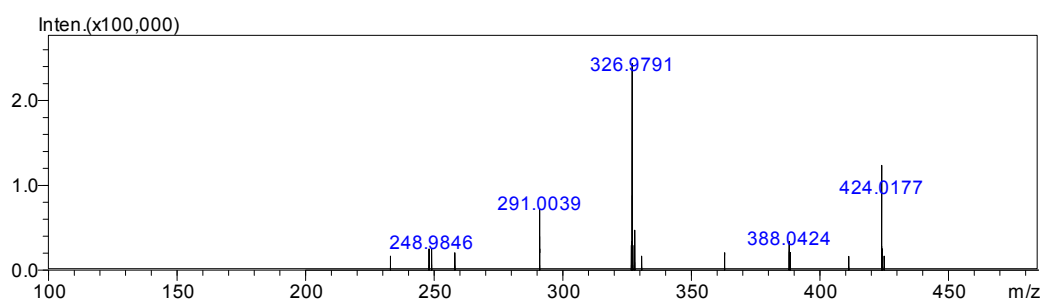
离子: $[M-H]^-$

质谱图:

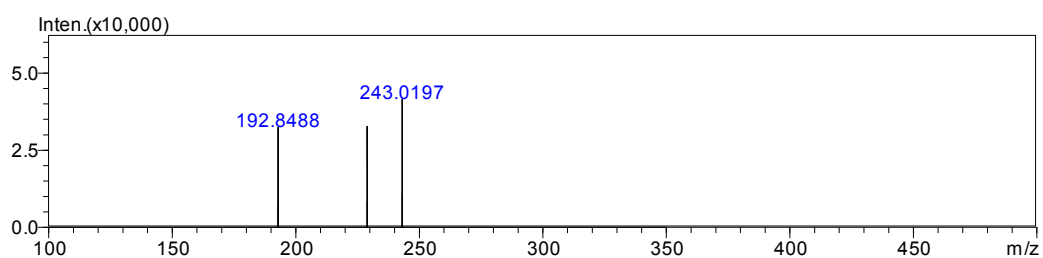
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_{19}H_{17}N_3O_5SCl_2$	$[M-H]^-$	468.0197	468.0193	0.85 ppm
MS ²	$C_{13}H_{10}N_2O_2SCl_2$	$[M-H]^-$	326.9791	326.9767	7.34 ppm

121. 乙氧萘青霉素

英文名称: Nafcillin

CAS#: 147-52-4

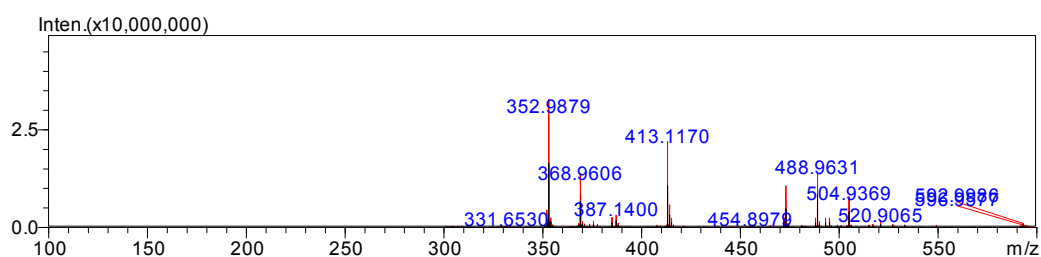
分子式: $C_{21}H_{22}N_2O_5S$

MW: 414.47

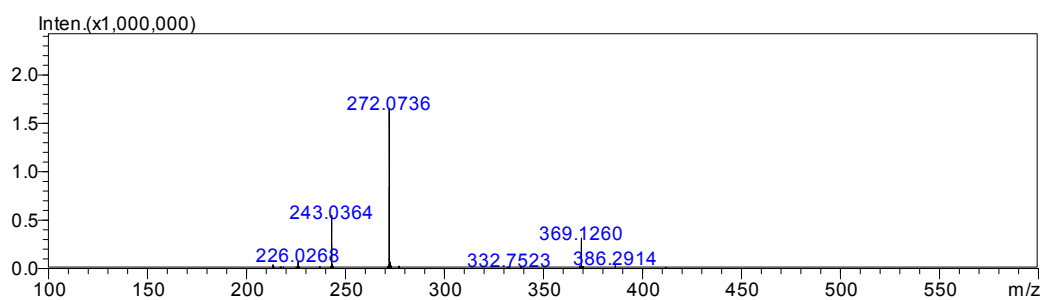
离子: $[M-H]^-$

质谱图:

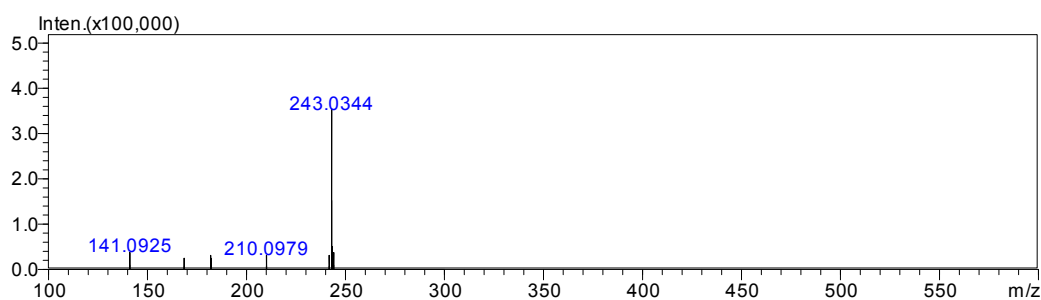
MS¹



MS²



MS³



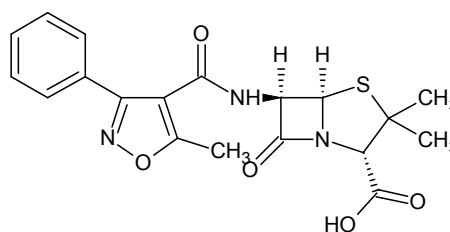
可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_{21}H_{22}N_2O_5S$	$[M-H]^-$	413.1170	413.1177	-1.69 ppm
MS ²	$C_{15}H_{15}NO_2S$	$[M-H]^-$	272.0736	272.0751	-5.51 ppm
MS ³	$C_{13}H_{10}NO_2S$	$[M-H]^-$	243.0344	243.0359	-1.5 mDa

122. 苯唑青霉素

英文名称: Oxacillin Sodium

结构式:



CAS#: 7240-38-2

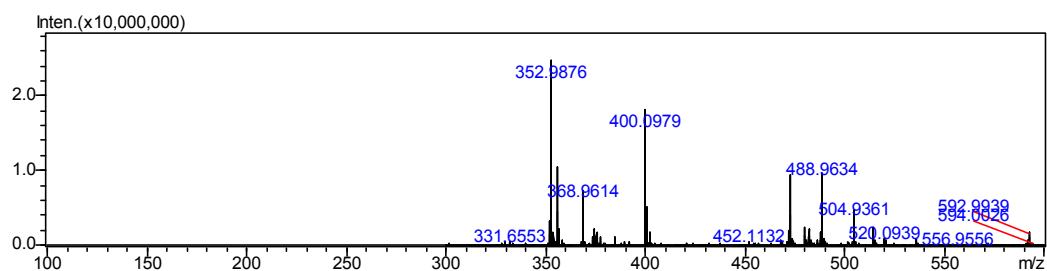
分子式: C₁₉H₁₉N₃O₅S

MW: 401.44

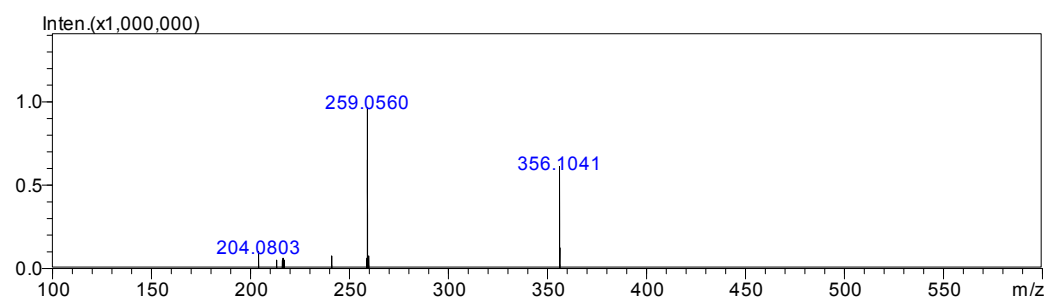
离子: [M-H]⁻

质谱图:

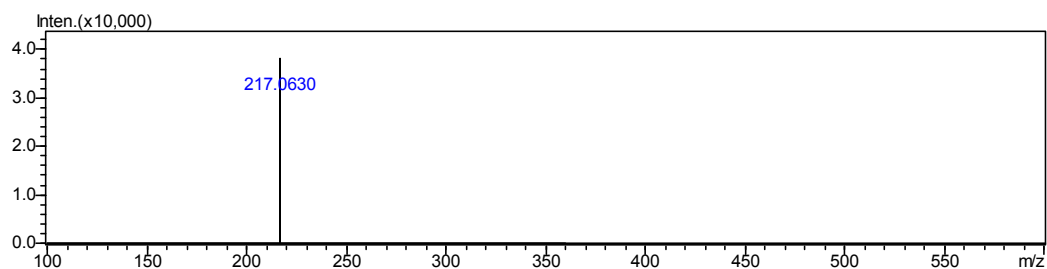
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	C ₁₉ H ₁₉ N ₃ O ₅ S	[M-H] ⁻	400.0979	400.0973	1.50 ppm
MS ²	C ₁₈ H ₁₉ N ₃ O ₃ S	[M-H] ⁻	356.1041	356.1074	-9.27 ppm
MS ³	C ₁₁ H ₁₀ N ₂ O ₃	[M-H] ⁻	217.0630	217.0619	1.1 mDa

123. 青霉素 V

英文名称: Penicillin V

结构式:

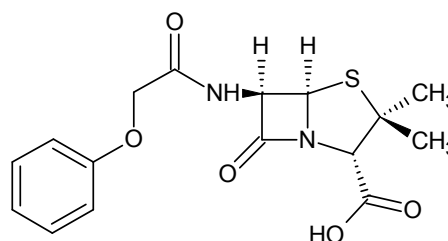
CAS#: 87-08-1

分子式: $C_{16}H_{18}N_2O_5S$

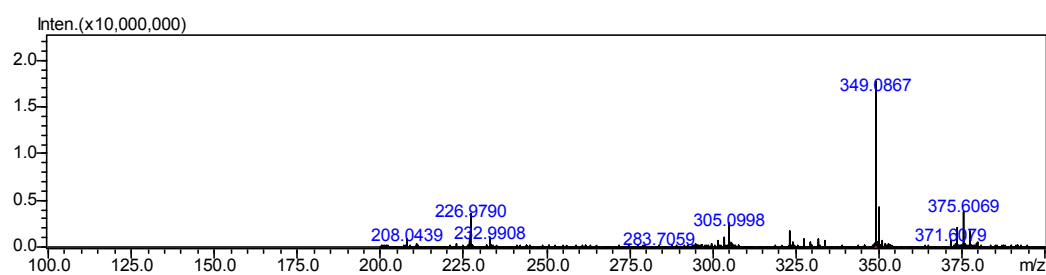
MW: 350.40

离子: $[M-H]^-$

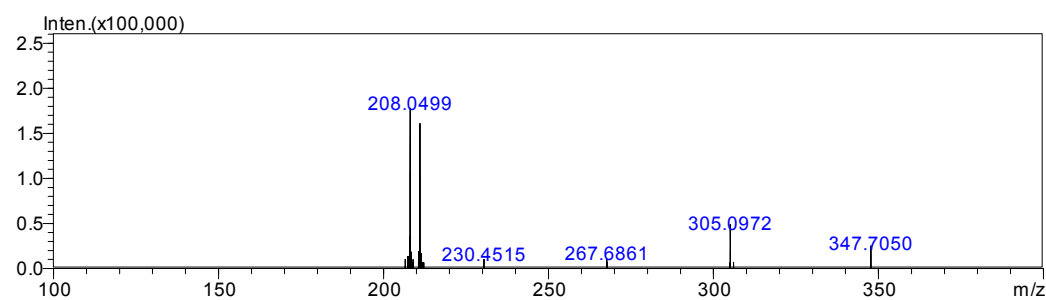
质谱图:



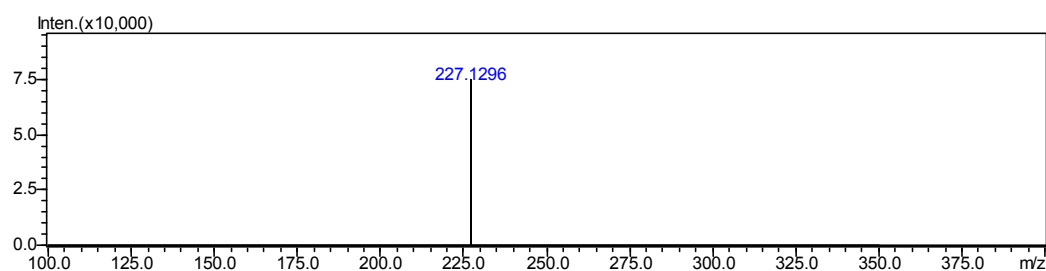
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_{16}H_{18}N_2O_5S$	$[M-H]^-$	349.0867	349.0864	0.86 ppm
MS ²	$C_{15}H_{18}N_2O_3S$	$[M-H]^-$	305.0972	305.0965	2.29 ppm

124. 青霉素 G

英文名称: Penicillin G

结构式:

CAS#: 61-33-6

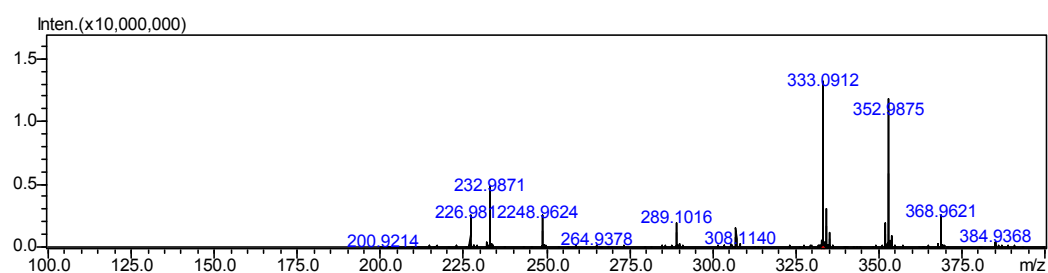
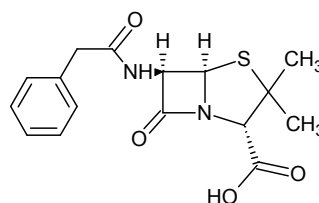
分子式: $C_{16}H_{18}N_2O_4S$

MW: 334.39

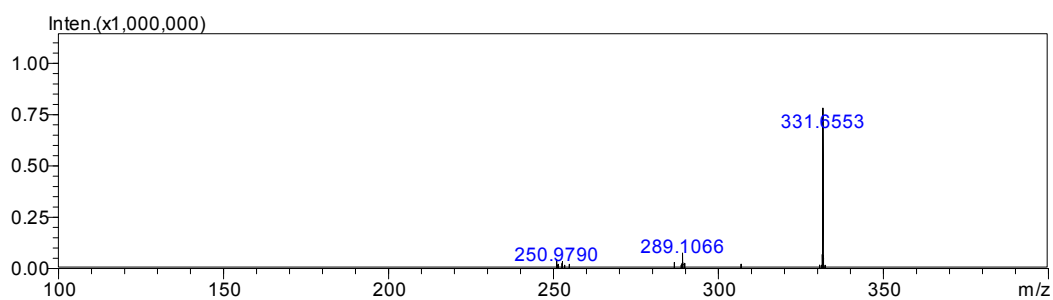
离子: $[M-H]^-$

质谱图:

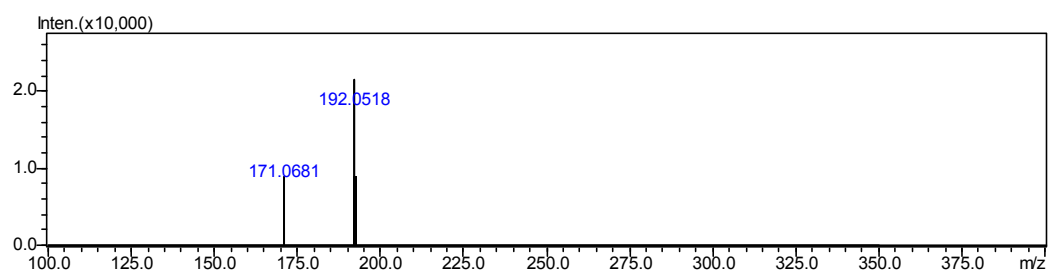
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_{16}H_{18}N_2O_4S$	$[M-H]^-$	333.0912	333.0915	-0.90 ppm
MS ²	$C_{15}H_{18}N_2O_2S$	$[M-H]^-$	289.1066	289.1016	5 mDa
MS ³	$C_{10}H_{11}NOS$	$[M-H]^-$	192.0518	192.0489	-2.9 mDa

125. 邻氯青霉素

英文名称: Cloxacillin Sodium

结构式:

CAS#: 7081-44-9

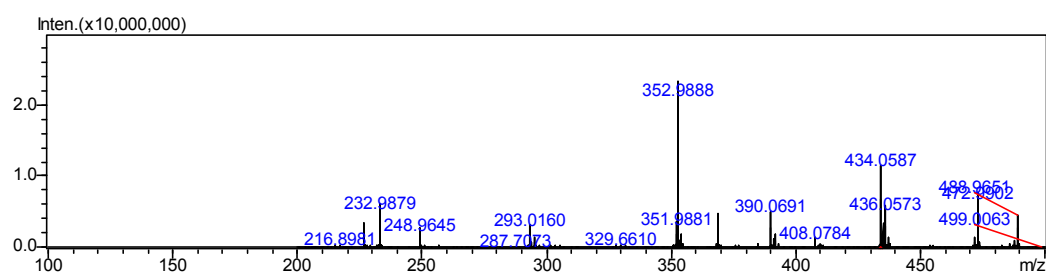
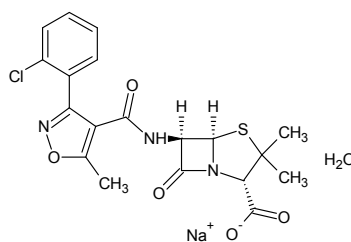
分子式: $C_{19}H_{19}ClN_3NaO_6S$

MW: 475.88

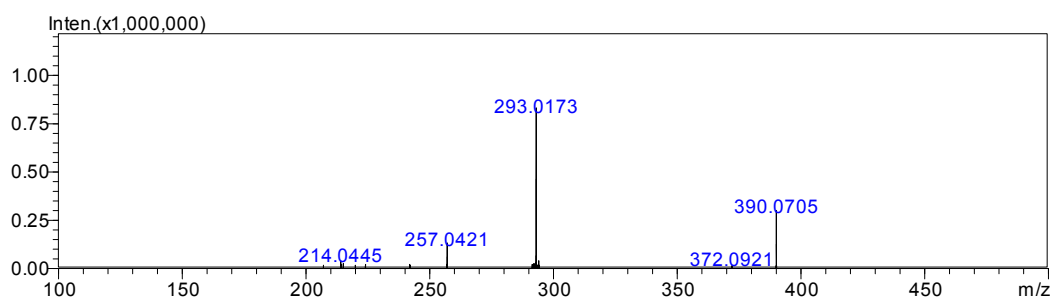
离子: $[M-H]^-$

质谱图:

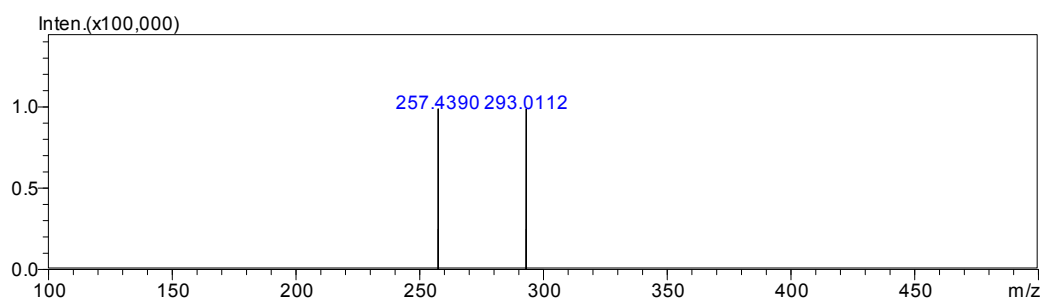
MS¹



MS²



MS³



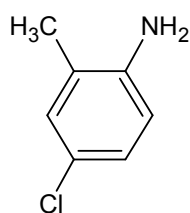
可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_{19}H_{18}N_3O_5SCl$	$[M-H]^-$	434.0587	434.0583	0.92 ppm
MS ²	$C_{18}H_{18}N_3O_3SCl$	$[M-H]^-$	390.0705	390.0685	5.13 ppm
MS ³	$C_{13}H_{11}N_2O_2SCl$	$[M-H]^-$	293.0112	293.0157	-15.36 ppm

126. 4-氯-2-甲基苯胺

英文名称: 4-Chloro-2-methylaniline

结构式:



CAS#: 95-69-2

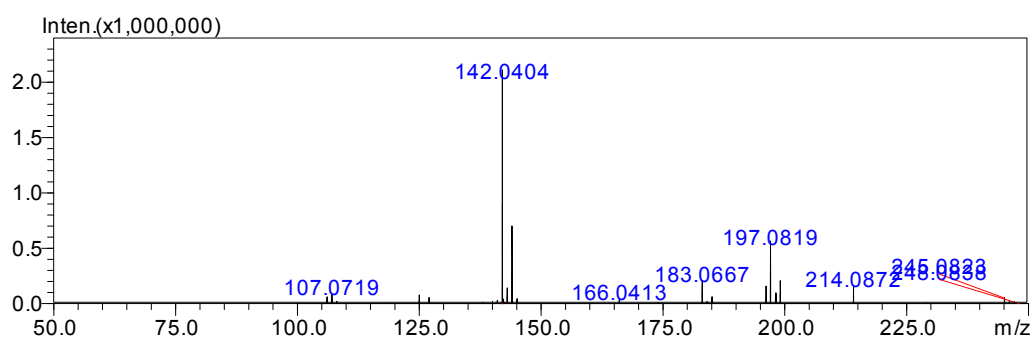
分子式: C₇H₈ClN

MW: 141.6

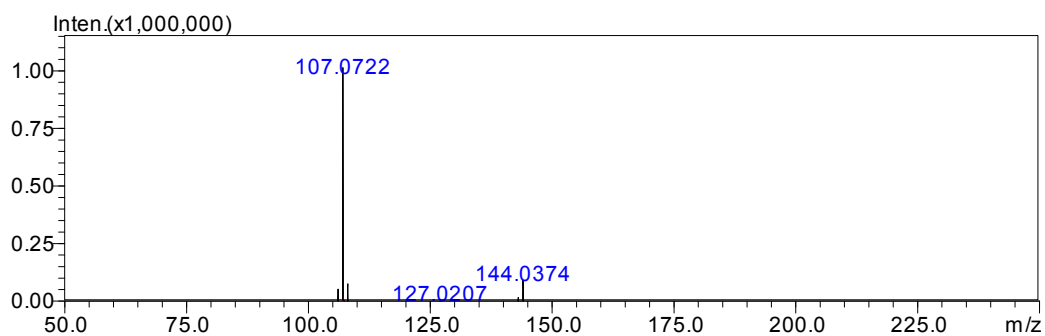
离子: [M+H]⁺

质谱图:

MS¹



MS²



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	C ₇ H ₈ ClN	[M+H] ⁺	142.0404	142.0418	-1.4 mDa
MS ²	C ₇ H ₈ N	[M+H] ⁺	107.0722	107.0730	-0.8 mDa

127. 盐酸苯氧丙酰胺

英文名称: Isoxsuprine

结构式:

CAS#: 579-56-6

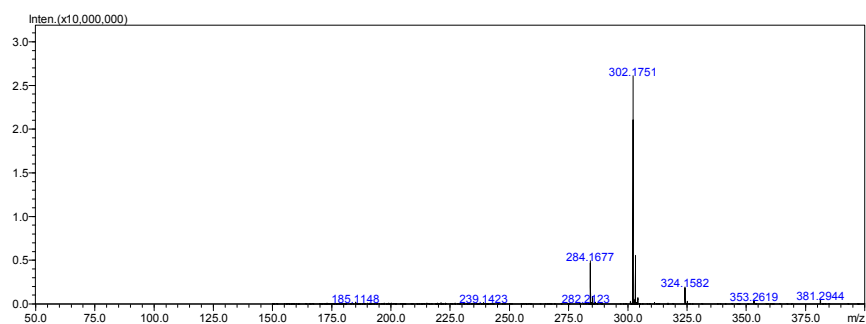
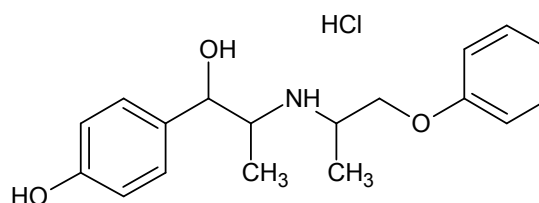
分子式: $C_{18}H_{23}NO_3 \cdot HCl$

MW: 337.8

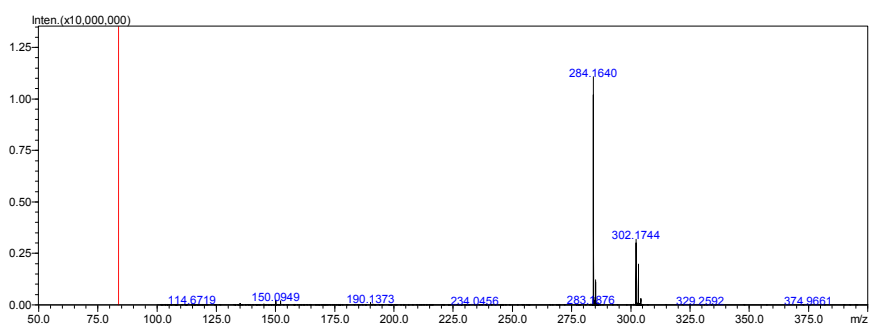
离子: $[M+H]^+$

质谱图:

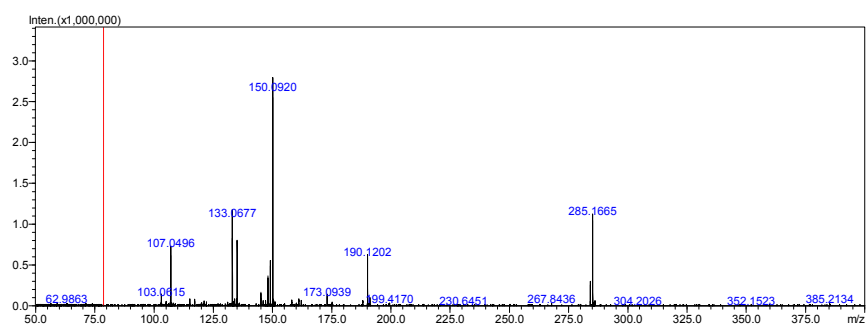
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_{18}H_{23}NO_3$	$[M+H]^+$	302.1751	302.1751	0.00 ppm
MS ²	$C_{18}H_{21}NO_2$	$[M+H]^+$	284.1640	284.1645	-1.76 ppm
MS ³	$C_9H_{11}NO$	$[M+H]^+$	150.0920	150.0913	0.7 mDa

128. 美托洛尔

英文名称: Metoprolol Tartrate

结构式:

CAS#: 56392-17-7

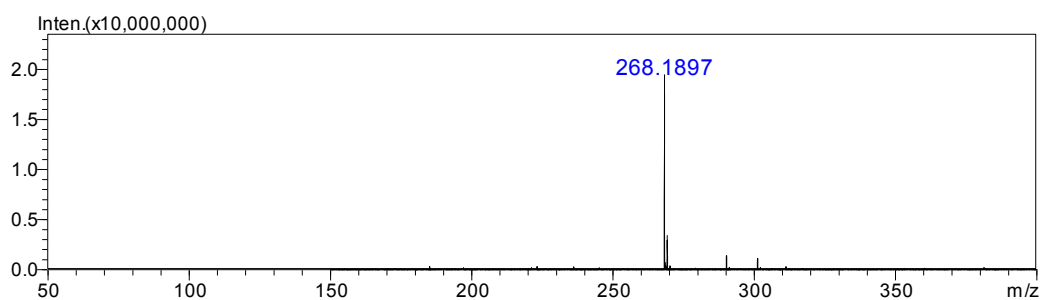
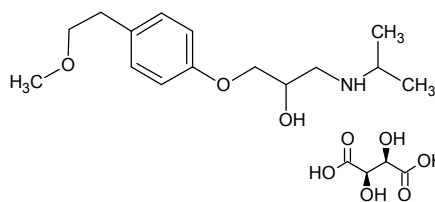
分子式: $(C_{15}H_{25}NO_3)_2 \cdot C_4H_6O_6$

MW: 417.45

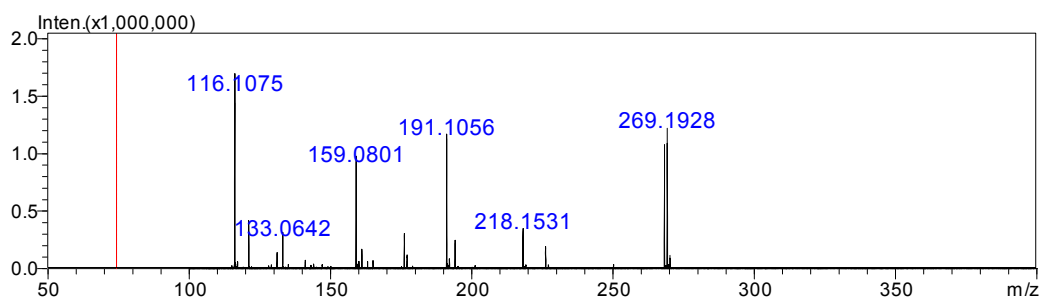
离子: $[M+H]^+$

质谱图:

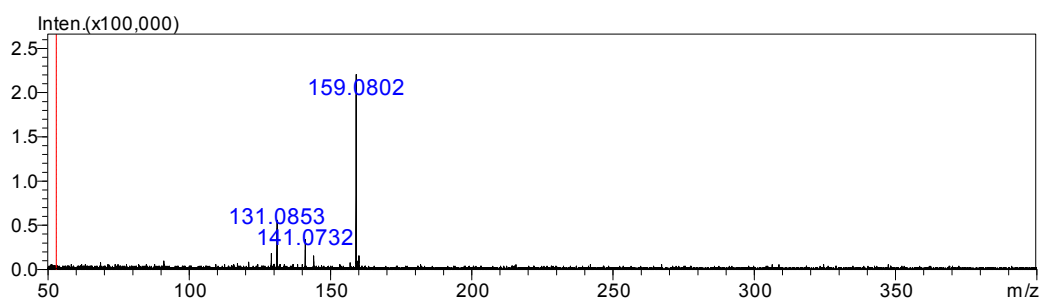
MS¹



MS²



MS³



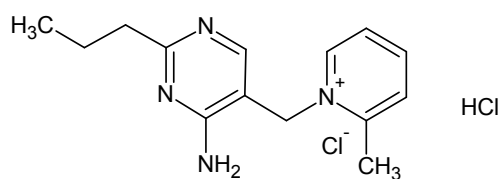
可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_{15}H_{25}NO_3$	$[M+H]^+$	268.1897	268.1907	-3.73 ppm
MS ²	$C_{12}H_{14}O_2$	$[M+H]^+$	191.1056	191.1067	-1.1 mDa
MS ³	$C_{11}H_{10}O$	$[M+H]^+$	159.0802	159.0804	-0.2 mDa

129. 安普罗铵盐酸盐

英文名称: Amprolium Hydrochloride

结构式:



CAS#: 137-88-2

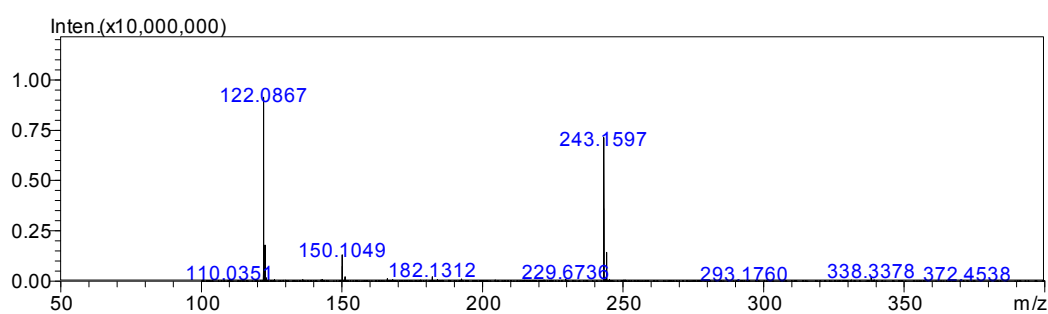
分子式: $C_{14}H_{19}ClN_4 \cdot HCl$

MW: 315.24

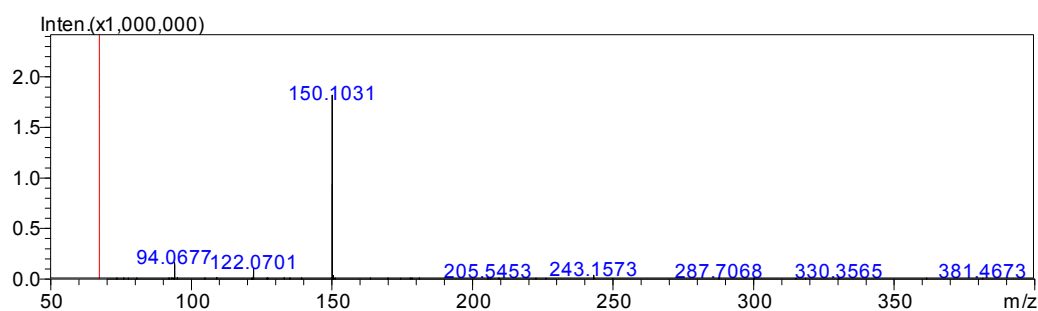
离子: $[M+H]^+$

质谱图:

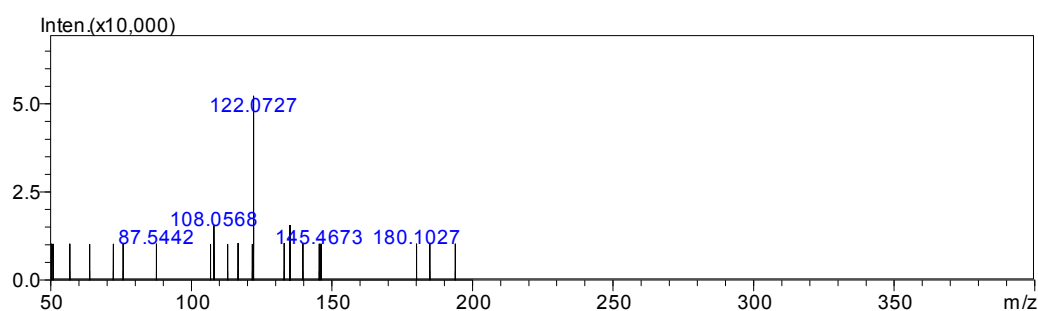
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_{14}H_{18}N_4$	$[M+H]^+$	243.1597	243.1604	-0.7 mDa
MS ²	$C_8H_{11}N_3$	$[M+H]^+$	150.1031	150.1026	0.5 mDa
MS ³	$C_6H_7N_3$	$[M+H]^+$	122.0727	122.0713	1.4 mDa

130. 莫能菌素

英文名称: Monensin

CAS#: 17090-79-8

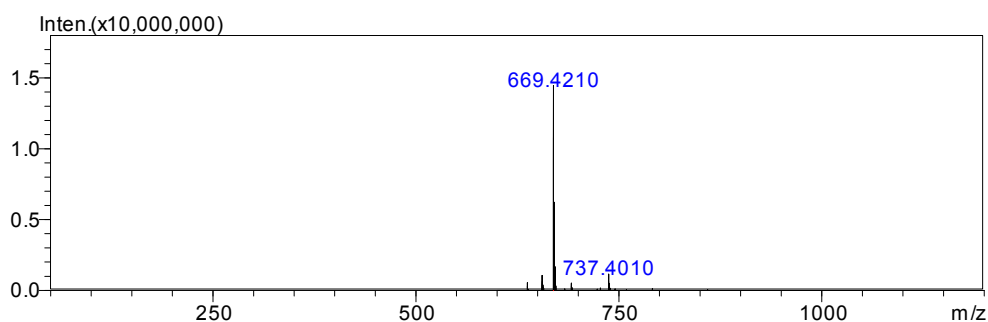
分子式: $C_{36}H_{61}NaO_{11}$

MW: 692.85

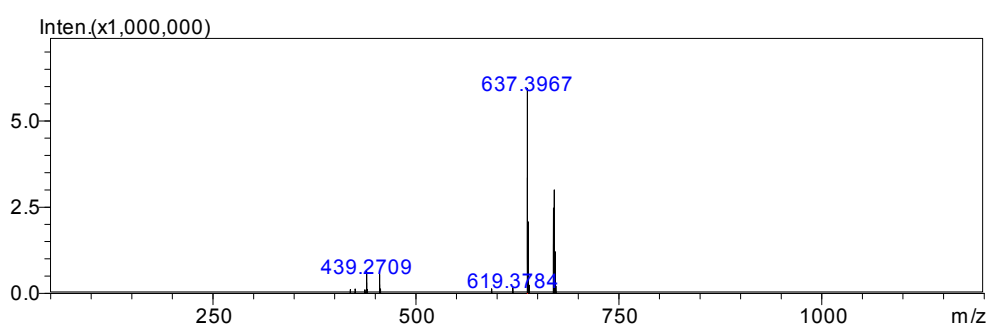
离子: $[M-H]^-$

质谱图:

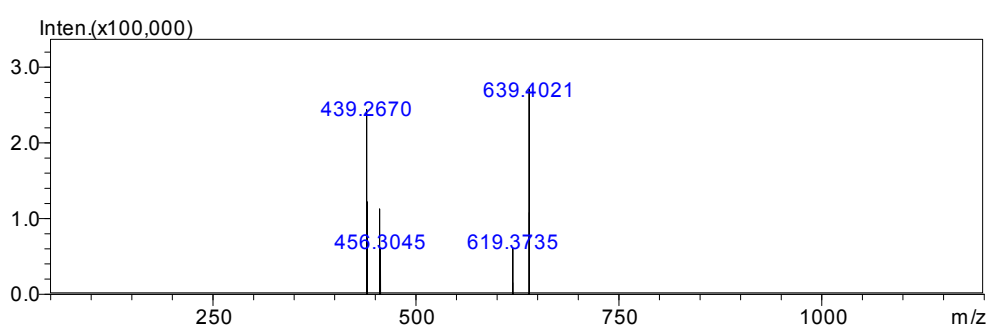
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_{36}H_{62}O_{11}$	$[M-H]^-$	669.4210	669.4219	-1.34 ppm
MS ²	$C_{35}H_{58}O_{10}$	$[M-H]^-$	637.3967	637.3957	1.57 ppm
MS ³	$C_{24}H_{40}O_7$	$[M-H]^-$	439.2670	439.2701	-7.06 ppm

131. 杀虫脒

英文名称: Chlordimeform

结构式:

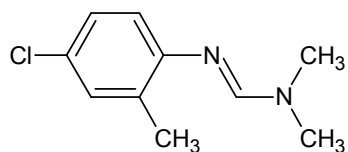
CAS#: 6164-98-3

分子式: $C_{10}H_{13}ClN_2$

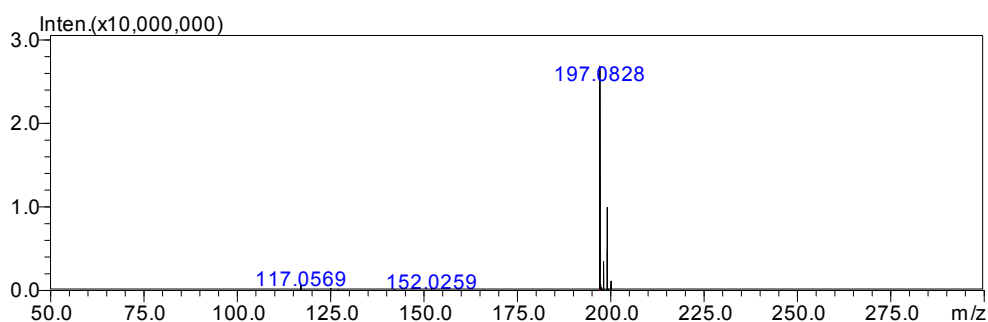
MW: 196.68

离子: $[M+H]^+$

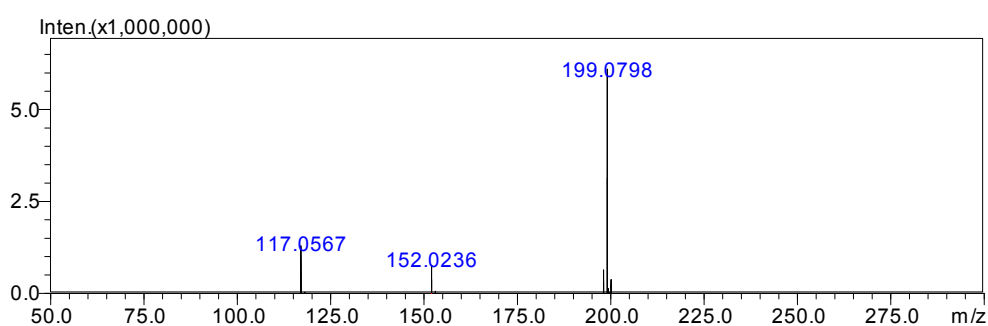
质谱图:



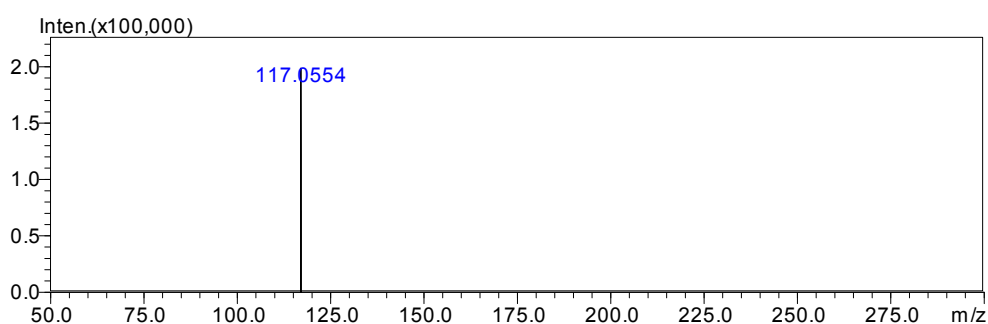
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_{10}H_{13}N_2Cl$	$[M+H]^+$	197.0828	197.0840	-1.2 mDa
MS ²	C_8H_6NCl	$[M+H]^+$	152.0236	152.0262	-2.6 mDa
MS ³	C_8H_6N	$[M+H]^+$	117.0554	117.0573	-1.9 mDa

132. 氟苯尼考

英文名称: Florfenicol

结构式:

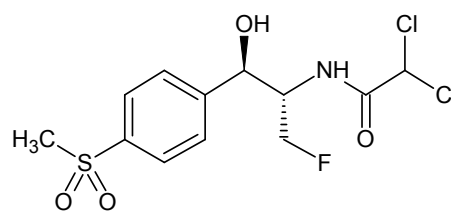
CAS#: 73231-34-2

分子式: $C_{12}H_{14}Cl_2FNO_4S$

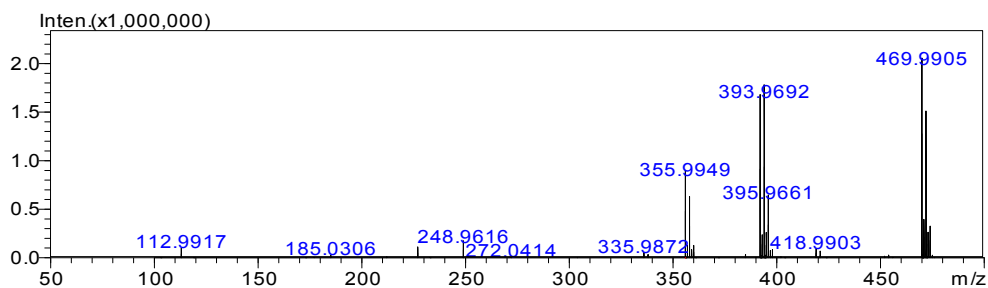
MW: 358.21

离子: $[M-H]^-$

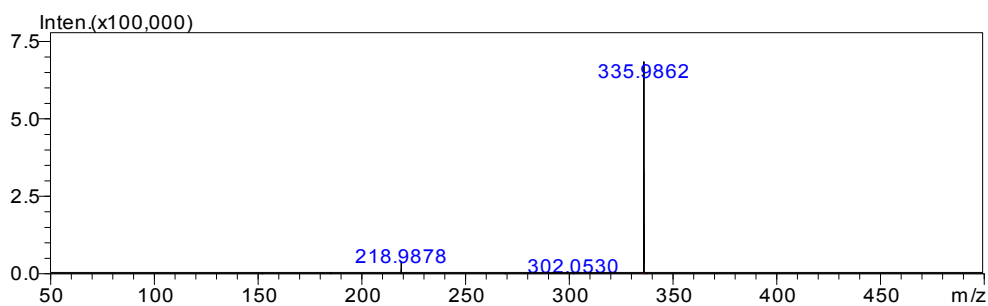
质谱图:



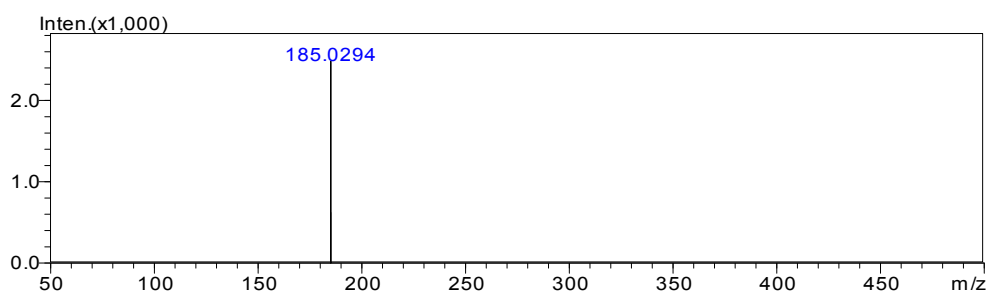
MS¹



MS²



MS³



可能的多级质谱预测信息

MS ⁿ	分子式	检测离子	实测 m/z	理论 m/z	质量数偏差
MS ¹	$C_{12}H_{14}NO_4FSCl_2$	$[M-H]^-$	355.9949	355.9932	4.78 ppm
MS ²	$C_{12}H_{13}NO_4SCl_2$	$[M-H]^-$	335.9862	335.9870	-2.38 ppm
MS ³	$C_8H_{10}O_3S$	$[M-H]^-$	185.0294	185.0278	1.6 mDa

附 录

附录表 1. 132 种兽药信息和检测离子

No.	兽药种类	中文名称	英文名称	分子式	检测离子	理论值 m/z	测量值 m/z	质量数偏差 (ppm)
1	磺胺类	磺胺甲恶唑	Sulfamethoxazole	C ₁₀ H ₁₁ N ₃ O ₃ S	[M+H] ⁺	254.0594	254.0605	4.33
2		磺胺间甲氧嘧啶	Sulfamonomethoxine	C ₁₁ H ₁₂ N ₄ O ₃ S	[M+H] ⁺	281.0703	281.0698	-1.78
3		磺胺二甲噻啶	Sulfamethazine	C ₁₂ H ₁₄ N ₄ O ₂ S	[M+H] ⁺	279.0910	279.0916	2.15
4		磺胺间二甲氧嘧啶	Sulfadimethoxine	C ₁₂ H ₁₄ N ₄ O ₄ S	[M+H] ⁺	311.0809	311.0821	3.86
5		磺胺喹恶琳	Sulfaquinolaxine	C ₁₄ H ₁₂ N ₄ O ₂ S	[M+H] ⁺	301.0754	301.0759	1.66
6		苯酰磺胺	Sulfabenzamide	C ₁₃ H ₁₂ N ₂ O ₃ S	[M+H] ⁺	277.0641	277.0656	5.41
7		磺氯吡嗪	Sulfachloropyridazine	C ₁₀ H ₉ ClN ₄ O ₂ S	[M+H] ⁺	285.0208	285.0220	4.21
8		磺胺醋酰*	Sulfacetamide	C ₈ H ₁₀ N ₂ O ₃ S	[M+H] ⁺	215.0485	215.0499	1.4 mDa
9		磺胺嘧啶	Sulfadiazine	C ₁₀ H ₁₀ N ₄ O ₂ S	[M+H] ⁺	251.0597	251.0602	1.99
10		磺胺甲基嘧啶	Sulfamerazine	C ₁₁ H ₁₂ N ₄ O ₂ S	[M+H] ⁺	265.0754	265.0769	5.66
11		磺胺对甲氧嘧啶	Sulfameter	C ₁₁ H ₁₂ N ₄ O ₃ S	[M+H] ⁺	281.0703	281.0716	4.63
12		磺胺甲噻二唑	Sulfamethizole	C ₉ H ₁₀ N ₄ O ₂ S ₂	[M+H] ⁺	271.0318	271.0333	5.53
13		磺胺甲氧吡嗪	Sulfamethoxy-pyridazine	C ₁₁ H ₁₂ N ₄ O ₃ S	[M+H] ⁺	281.0703	281.0719	5.69
14		磺胺恶唑	Sulfamoxol	C ₁₁ H ₁₃ N ₃ O ₃ S	[M+H] ⁺	268.0750	268.0758	2.98
15		磺胺吡啶	Sulfapyridine	C ₁₁ H ₁₁ N ₃ O ₂ S	[M+H] ⁺	250.0645	250.0652	2.80
16		磺胺噻唑	Sulfathiazole	C ₉ H ₉ N ₃ O ₂ S ₂	[M+H] ⁺	256.0209	256.0214	1.95
17		磺胺异恶唑	Sulfisoxazole	C ₁₁ H ₁₃ N ₃ O ₃ S	[M+H] ⁺	268.0750	268.0743	-2.61
18	喹诺酮类	甲磺酸达氟沙星	Danofloxacin Mesylate	C ₂₀ H ₂₄ FN ₃ O ₆ S	[M+H] ⁺	358.1561	358.1578	4.75
19		司帕沙星	Sparfloxacin	C ₁₉ H ₂₂ F ₂ N ₄ O ₃	[M+H] ⁺	393.1733	393.1751	4.58
20		二氟沙星	Difloxacin	C ₂₁ H ₁₉ F ₂ N ₃ O ₃	[M+H] ⁺	400.1467	400.1487	5.00
21		培氟沙星	Pefloxacin	C ₁₇ H ₂₀ FN ₃ O ₃	[M+H] ⁺	334.1561	334.1564	0.90
22		恩诺沙星	Enrofloxacin	C ₁₉ H ₂₂ FN ₃ O ₃	[M+H] ⁺	360.1718	360.1722	1.11
23		氧氟沙星	Ofloxacin	C ₁₈ H ₂₀ FN ₃ O ₄	[M+H] ⁺	362.1511	362.1518	1.93
24		环氧氟沙星	Orbifloxacin	C ₁₉ H ₂₀ F ₃ N ₃ O ₃	[M+H] ⁺	396.1530	396.1535	1.26
25		麻保沙星	Marbofloxacin	C ₁₇ H ₁₉ FN ₄ O ₄	[M+H] ⁺	363.1463	363.1476	3.58
26		环丙沙星	Ciprofloxacin	C ₁₇ H ₁₈ FN ₃ O ₃	[M+H] ⁺	332.1405	332.1411	1.81
27		沙拉沙星	Sarafloxacin	C ₂₀ H ₁₇ F ₂ N ₃ O ₃	[M+H] ⁺	386.1311	386.1302	-2.33
28		氟甲喹	Flumequine	C ₁₄ H ₁₂ FNO ₃	[M+H] ⁺	262.0874	262.0878	1.53
29		吡喹酮	Praziquantel	C ₁₉ H ₂₄ N ₂ O ₂	[M+H] ⁺	313.1911	313.1915	-2.24

30		洛美沙星盐酸盐	Lomefloxacin Hydrochloride	C ₁₇ H ₂₀ ClF ₂ N ₃ O ₃	[M+H] ⁺	352.1467	352.1478	3.12
31		恶唑酸	Oxolinic acid	C ₁₃ H ₁₁ NO ₅	[M+H] ⁺	262.0710	262.0717	2.67
32		依诺沙星	Enoxacin	C ₁₅ H ₁₇ FN ₄ O ₃	[M+H] ⁺	321.1357	321.1364	2.18
33		西诺沙星*	Cinoxacin	C ₁₂ H ₁₀ N ₂ O ₅	[M+H] ⁺	263.0662	263.0638	-2.28
34		洛美沙星	Lomefloxacin	C ₁₇ H ₁₉ F ₂ N ₃ O ₃	[M+H] ⁺	352.1467	352.1450	-4.83
35		萘啶酸*	Nalidixi Acid	C ₁₂ H ₁₂ N ₂ O ₃	[M+H] ⁺	233.0921	233.0938	1.7 mDa
36	阿维菌素类	依维菌素	Ivermectin B _{1a}	C ₄₈ H ₇₄ O ₁₄	[M+Na] ⁺	897.4971	897.4996	2.79
37		阿维菌素	Avermectin B _{1a}	C ₄₈ H ₇₂ O ₁₄	[M+Na] ⁺	895.4814	895.4817	0.34
38		多拉菌素	Doramectin	C ₅₀ H ₇₄ O ₁₄	[M+Na] ⁺	921.4971	921.4982	1.19
39		爱普瑞菌素	Eprinomectin B _{1a}	C ₅₀ H ₇₅ NO ₁₄	[M+Na] ⁺	936.5080	936.5060	-2.14
40	硝基咪唑类	羟甲基硝唑	Metronidazole-OH	C ₆ H ₉ N ₃ O ₄	[M+H] ⁺	188.0666	188.0672	3.19
41		甲硝达唑*	Metronidazole	C ₆ H ₉ N ₃ O ₃	[M+H] ⁺	172.0717	172.0711	-0.6 mDa
42		洛硝达唑*	Ronidazole	C ₆ H ₈ N ₄ O ₄	[M+H] ⁺	201.0618	201.0612	-0.6 mDa
43		二甲硝咪唑*	Dimetridazole	C ₅ H ₇ N ₃ O ₂	[M+H] ⁺	142.0611	142.0608	-0.3 mDa
44	苏丹红类	苏丹红 1*	Sudan I	C ₁₆ H ₁₂ N ₂ O	[M+H] ⁺	249.1022	249.1014	-0.8 mDa
45		苏丹红 2	Sudan II	C ₁₈ H ₁₆ N ₂ O	[M+H] ⁺	277.1335	277.1335	0.00
46		苏丹红 3	Sudan III	C ₂₂ H ₁₆ N ₄ O	[M+H] ⁺	353.1397	353.1400	0.85
47		苏丹红 4	Sudan IV	C ₂₄ H ₂₀ N ₄ O	[M+H] ⁺	381.1710	381.1720	2.62
48	三聚氰胺类	三聚氰胺*	Melamine	C ₃ H ₆ N ₆	[M+H] ⁺	127.0727	127.0717	-1.0 mDa
49		三聚氰酸*	Cyanuric Acid	C ₃ H ₃ N ₃ O ₃	[M-H] ⁻	128.0102	128.0169	6.7 mDa
50		三聚氰胺二酰胺*	Ammeline	C ₃ H ₅ N ₅ O	[M+H] ⁺	128.0567	128.0588	2.1 mDa
51		三聚氰胺一酰胺	Ammelide	C ₃ H ₄ N ₄ O ₂	[M+H] ⁺	129.0407	129.0403	-0.4 mDa
52	镇静剂类	氯丙嗪	Chlorpromazine	C ₁₇ H ₁₉ ClN ₂ S	[M+H] ⁺	319.1030	319.1038	2.51
53		氯羟吡啶	Clopidol	C ₇ H ₇ Cl ₂ NO	[M+H] ⁺	191.9977	191.9984	3.65
54		地西洋	Diazepam	C ₁₆ H ₁₃ ClN ₂ O	[M+H] ⁺	285.0789	285.0792	1.05
55	喹恶啉类	卡巴氧	Carbadox	C ₁₁ H ₁₀ N ₄ O ₄	[M+H] ⁺	263.0775	263.0781	2.28
56		喹乙醇	Olaquindo	C ₁₂ H ₁₃ N ₃ O ₄	[M+H] ⁺	264.0979	264.0980	0.38
57		MQCA*	Quinoxaline-2-Carboxylic Acid Methyl	C ₁₀ H ₈ N ₂ O ₂	[M-H] ⁻	187.0513	187.0549	3.6 mDa
58		QAC*	2-Quinoxalinecarboxylic Acid	C ₉ H ₆ N ₂ O ₂	[M-H] ⁻	173.0357	173.0407	5.0 mDa
59	大环内酯类	罗红霉素	Roxithromycin	C ₄₁ H ₇₆ N ₂ O ₁₅	[M+H] ⁺	837.5318	837.5274	5.52
60		竹桃霉素	Oleandomycin	C ₃₅ H ₆₁ NO ₁₂	[M+H] ⁺	688.4267	688.4282	2.18
61		盐霉素	Salinomycin	C ₄₂ H ₇₀ O ₁₁	[M+H] ⁺	773.4810	773.4826	2.07
62		罗沙霉素	Rosamicin	C ₃₁ H ₅₁ NO ₉	[M+H] ⁺	582.3637	582.3668	5.32

63		红霉素	Erythromycin	C ₃₇ H ₆₇ NO ₁₃	[M+H] ⁺	734.4685	734.4663	-3.00
64		克拉霉素	Clarithromycin	C ₃₈ H ₆₉ NO ₁₃	[M+H] ⁺	748.4842	748.4833	-1.20
65		泰乐菌素	Tylosin	C ₄₆ H ₇₇ NO ₁₇	[M+H] ⁺	916.5264	916.5229	-3.82
66		交沙霉素	Josamycin	C ₄₂ H ₆₉ NO ₁₅	[M+H] ⁺	828.4740	828.4727	-1.57
67		阿奇霉素	Azithromycin	C ₃₈ H ₇₂ N ₂ O ₁₂	[M+H] ⁺	749.5158	749.5143	-2.00
68		替米考星	Tilmicosin	C ₄₆ H ₈₀ N ₂ O ₁₃	[M+H] ⁺	869.5733	869.5718	-1.72
69	四环素类	金霉素	Chlortetracycline	C ₂₂ H ₂₃ ClN ₂ O ₈	[M+H] ⁺	479.1216	479.1220	0.83
70		土霉素	Oxytetracycline	C ₂₂ H ₂₄ N ₂ O ₉	[M+H] ⁺	46.1555	415.1564	1.95
71		四环素	Tetracycline	C ₂₂ H ₂₄ N ₂ O ₈	[M+H] ⁺	445.1605	445.1615	2.25
72		强力霉素	Doxycycline	C ₂₂ H ₂₄ N ₂ O ₈	[M+H] ⁺	445.1605	445.1615	2.25
73		二甲胺四环素	Minocycline	C ₂₃ H ₂₇ N ₃ O ₇	[M+H] ⁺	458.1922	458.1919	-0.65
74		去甲基金霉素	Demeclocycline	C ₂₁ H ₂₁ ClN ₂ O ₈	[M+H] ⁺	463.1059	463.1061	0.43
75		甲烯土霉素	Methacycline	C ₂₂ H ₂₂ N ₂ O ₈	[M+H] ⁺	443.1449	443.1445	-0.90
76		硝基呋喃类	AMOZ [*]	3-amino-5-morpholinomethyl-oxazolidin-2-one	C ₈ H ₁₅ N ₃ O ₃	[M+H] ⁺	202.1186	202.1183
77	AOZ [*]		3-amino-oxazolidin-2-one	C ₃ H ₆ N ₂ O ₂	[M+H] ⁺	103.0502	103.0493	-0.9 mDa
78	盐酸氨基胍 [*]		Semicarbazide Hydrochloride	CH ₅ N ₃ O·HCl	[M+H] ⁺	76.0505	76.0500	-0.5 mDa
79	孕激素	17-醋酸甲地孕酮	Medroxyprogesterone 17-Acetate	C ₂₄ H ₃₄ O ₄	[M+H] ⁺	387.2530	387.2531	0.26
80		醋酸氢地孕酮	Chloromadinone Acetate	C ₂₃ H ₂₉ ClO ₄	[M+H] ⁺	405.1827	405.1826	-0.25
81		醋酸甲地孕酮	Megestrol Acetate	C ₂₄ H ₃₂ O ₄	[M+H] ⁺	385.2373	385.2382	2.34
82		孕酮	Progesterone	C ₂₁ H ₃₀ O ₂	[M+H] ⁺	315.2319	315.2321	0.63
83		黄体酮	Gesterol	C ₂₁ H ₃₀ O ₂	[M+H] ⁺	315.2319	315.2322	0.95
84	雄激素	群勃龙	Trenbolone	C ₁₈ H ₂₂ O ₂	[M+H] ⁺	271.1693	271.1691	-0.74
85		勃地酮	Boldenone	C ₁₉ H ₂₆ O ₂	[M+H] ⁺	287.2006	287.2008	0.70
86		19-去甲基睾酮	19-Nortestosterone	C ₁₈ H ₂₆ O ₂	[M+H] ⁺	275.2006	275.2001	-1.82
87		睾酮	Testosterone	C ₁₉ H ₂₈ O ₂	[M+H] ⁺	289.2162	289.2148	-4.84
88		17-α-甲基睾酮	17-α-methyltestosterone	C ₂₀ H ₃₀ O ₂	[M+H] ⁺	303.2319	303.2316	-0.99
89		甲睾酮	Methyltestosterone	C ₂₀ H ₃₀ O ₂	[M+H] ⁺	303.2319	303.2327	2.64
90		司坦唑醇	Stanozolol	C ₂₁ H ₃₂ N ₂ O	[M+H] ⁺	329.2587	329.2583	-1.21
91		丙酸诺龙	Nortestosterone Propionate	C ₂₁ H ₃₀ O ₃	[M+H] ⁺	331.2268	331.2268	0.00
92		17-丙酸睾酮	Testosterone Propionate	C ₂₂ H ₃₂ O ₃	[M+H] ⁺	345.2424	345.2426	0.58
93		苯丙酸诺龙	Nandrolone Phenylpropionate	C ₂₇ H ₃₄ O ₃	[M+H] ⁺	407.2581	407.2584	0.74
94		17-苯甲酸睾酮	Testosterone 17-benzoate	C ₂₆ H ₃₂ O ₃	[M+H] ⁺	393.2424	393.2422	-0.51

95	皮质激素	强的松龙	Prednisone	C ₂₁ H ₂₆ O ₅	[M+H] ⁺	359.1853	369.1869	4.45
96		氢化可的松	Hydrocortisone	C ₂₁ H ₃₀ O ₅	[M+H] ⁺	363.2166	363.2178	3.30
97		甲基泼尼松	Meprednisone	C ₂₂ H ₂₈ O ₅	[M+H] ⁺	373.2010	373.2020	2.68
98		倍它米松	Betamethasone	C ₂₂ H ₂₉ FO ₅	[M+H] ⁺	393.2072	393.2065	-4.32
99		地塞米松	Dexamethasone	C ₂₂ H ₂₉ FO ₅	[M+H] ⁺	393.2072	393.2077	1.27
100		醋酸氢氟可的松	Fludrocortisone Acetate	C ₂₃ H ₃₁ FO ₆	[M+H] ⁺	423.2166	423.2187	4.32
101		醋酸氢化可的松	Hydrocortisone Acetate	C ₂₃ H ₃₂ O ₆	[M+H] ⁺	405.2272	405.2282	2.47
102		倍可松	Betamethasone Dipropionate	C ₂₈ H ₃₇ FO ₇	[M+K] ⁺	543.2155	543.2142	-2.39
103		雌激素	雌三醇	Estriol	C ₁₈ H ₂₄ O ₃	[M-H] ⁻	287.1653	287.1669
104	17-α-乙炔雌二醇		17-α-Ethinylestradiol	C ₂₀ H ₂₄ O ₂	[M-H] ⁻	295.1704	295.1714	3.39
105	己烯雌酚		Diethylstilbestrol	C ₁₈ H ₂₀ O ₂	[M-H] ⁻	267.1391	267.1387	-1.50
106	己烷雌酚		Hexestrol	C ₁₈ H ₂₂ O ₂	[M-H] ⁻	269.1547	269.1539	-2.97
107	17-β 雌二醇		17-β-estradiol	C ₁₈ H ₂₄ O ₃	[M-H] ⁻	271.1704	271.1708	1.48
108	β-受体激动剂	奥西那林半硫酸盐	Metaproterenol hemisulfate	C ₂₂ H ₃₆ N ₂ O ₁₀ S	[M+H] ⁺	212.1281	212/1284	1.41
109		西马特罗*	Cimaterol	C ₁₂ H ₁₇ N ₃ O	[M+H] ⁺	220.1444	220.1443	-0.1 mDa
110		硫酸特布他林*	Terbutalin Sulfate	(C ₁₂ H ₁₉ NO ₃) ₂ ·H ₂ SO ₄	[M+H] ⁺	226.1438	226.1432	-0.6 mDa
111		沙丁胺醇*	Salbutamol	C ₁₃ H ₂₁ NO ₃	[M+H] ⁺	240.1594	240.1592	-0.2 mDa
112		氢溴酸非诺特罗	Fenoterol hydrobromide	C ₁₇ H ₂₂ BrNO ₄	[M+H] ⁺	304.1543	304.1531	-3.95
113		利托君/利安特灵	Ritodrine	C ₁₇ H ₂₁ NO ₃	[M+H] ⁺	286.1594	286.1592	-0.69
114		盐酸莱克多巴胺	Ractopamine Hydrochloride	C ₁₈ H ₂₃ NO ₃ ·HCl	[M+H] ⁺	302.1751	302.1748	-0.99
115		盐酸克伦特罗	Clenbuterol Hydrochloride	C ₁₂ H ₁₈ C ₁₂ N ₂ O·HCl	[M+H] ⁺	277.0869	277.0876	2.53
116		妥洛特罗*	Tulobuterol	C ₁₂ H ₁₈ ClNO	[M+H] ⁺	228.1150	228.1158	0.6 mDa
117		盐酸溴布特罗	Brombuterol Hydrochloride	C ₁₂ H ₁₈ Br ₂ N ₂ O·HCl	[M+H] ⁺	364.9859	364.9872	3.56
118		盐酸马布特罗	Mabuterol Hydrochloride	C ₁₄ H ₁₉ N ₃ O ₂ ·HCl	[M+H] ⁺	311.1133	311.1151	5.79
119		喷布特罗硫酸盐	Penbutolol Sulfate	C ₁₈ H ₃₁ NO ₆ S	[M+H] ⁺	292.2271	292.2272	0.34
120	β-内酰胺类	双氯青霉素	Dicloxacillin	C ₁₉ H ₁₇ Cl ₂ N ₃ O ₅ S	[M-H] ⁻	468.0193	468.0201	1.71
121		乙氧萘青霉素	Nafcillin	C ₂₁ H ₂₂ N ₂ O ₅ S	[M-H] ⁻	413.1177	413.1170	-1.69
122		苯唑青霉素	Oxacillin Sodium	C ₁₉ H ₁₉ N ₃ O ₅ S	[M-H] ⁻	400.0973	400.0979	1.50
123		青霉素 V	Penicillin V	C ₁₆ H ₁₈ N ₂ O ₅ S	[M-H] ⁻	349.0864	349.0867	0.86
124		青霉素 G	Penicillin G	C ₁₆ H ₁₈ N ₂ O ₄ S	[M-H] ⁻	333.0915	333.0912	-0.90
125		邻氯青霉素	Cloxacillin Sodium	C ₁₉ H ₁₉ ClN ₃ NaO ₆ S	[M-H] ⁻	434.0587	434.0583	0.92
126	解热镇痛药	4-氯-2 甲基苯胺*	4-Chloro-2-methylaniline	C ₇ H ₈ ClN	[M+H] ⁺	142.0418	142.0404	-1.4 mDa
127		盐酸苯氧丙酚胺	Isoxsuprine	C ₁₈ H ₂₃ NO ₃ ·HCl	[M+H] ⁺	302.1751	302.1751	0.00

128	β-受体阻断剂	美托洛尔	Metoprolol Tartrate	(C ₁₅ H ₂₅ NO ₃) ₂ ·C ₄ H ₆ O ₆	[M+H] ⁺	268.1907	268.1897	-3.73
129	抗球虫药	安普罗铵盐酸盐*	Amprolium Hydrochloride	C ₁₄ H ₁₉ ClN ₄ ·HCl	[M+H] ⁺	243.1604	243.1597	-0.7 mDa
130		莫能菌素	Monensin	C ₃₆ H ₆₁ NaO ₁₁	[M+H] ⁺	669.4219	669.4210	-1.34
131	杀螨虫药	杀虫脒*	Chlordimeform	C ₁₀ H ₁₃ ClN ₂	[M+H] ⁺	197.0828	197.0840	-1.2 mDa
132	酰胺醇类	氟苯尼考	Florfenicol	C ₁₂ H ₁₄ Cl ₂ FNO ₄ S	[M-H] ⁻	355.9932	355.9949	4.78

* m/z 为 250 以下的化合物质量数偏差以 mDa 表示