

# 岛津高分辨液质联用仪快速筛查化妆品中 214 种风险物质

## LCMS-QTOF-038

**摘要：** 本文利用岛津超高效液相色谱 - 四极杆飞行时间串联质谱仪，建立了化妆品中 214 种风险物质的鉴别和确认方法。使用 LabSolutions insight 建立了 200 余种风险物质的高分辨二级质谱库，根据保留时间及精确质量数进行鉴别，并使用二级质谱库及典型二级碎片离子丰度比进行确认。10 ng/mL 浓度的两种基质加标样品（柔肤水、护肤霜），以溶剂标液进行定量计算，超过 70% 的化合物回收率在 50-120% 之间。该方法可用于化妆品中风险物质的快速筛查。

**关键词：** LCMS-Q-TOF 化妆品 风险物质

作为一种直接作用于人体的化学工业产品，化妆品给我们带来美丽的同时，健康安全必须得到保障，然而，我国化妆品行业一些不健康的现象，例如：不法厂家给化妆品中添加可能危害健康的禁用物质等行为给爱美人士的健康带来隐患。

备受关注的《化妆品监督管理条例》正式出台，于 2021 年 1 月 1 日起施行。《条例》共 6 章 80 条，

从四个方面对化妆品生产经营活动及其监督管理予以规范。

本文参考相关标准，建立了基于岛津超高效液相色谱 - 四极杆飞行时间质谱的化妆品中风险物质物质的筛查方法，MS1 一级高质量准确度数据快速筛查，MS2 二级特征碎片离子匹配精准定性。为化妆品中风险物质物筛查方法建立提供参考。

## ■ 实验部分

### 1.1 仪器

岛津 LCMS-9030 超高效液相色谱四极杆飞行时间质谱联用仪，具体配置为

输液泵：LC-30AD×2

系统控制器：CBM-20Alite

自动进样器：SIL-30AC

飞行时间质谱仪：LCMS-9030

柱温箱：CTO-20AC

色谱工作站：LabSolutions Ver. 5.98

在线脱气机：DGU-20A5R

LabSolutions Insight Ver. 3.7

### 1.2 分析条件

液相色谱条件

色谱柱：Shim-pack GIST-HP C18 100 mm I.D.× 2.1 mm I.D., 1.9 μm (岛津 (上海) 实验器材有限公司, P/N: 227-30807-02)

流动相：A 相 -0.1% 甲酸水 +2 mM 甲酸铵；B 相 - 乙腈

洗针模式：进样前后洗针，External only (进样针外壁清洗)，Rinse Port

流速：0.25 mL/min

柱温：40°C

进样体积：5 μL

洗针液：甲醇 / 水 = 1:1 (v:v)

洗脱方式：梯度洗脱，B 相初始浓度为 5%，时间程序见表 1。

表 1 梯度洗脱时间程序

Time(min)	Module	Command	Value
0.50	泵	B.Conc	5
5.00	泵	B.Conc	30
13.00	泵	B.Conc	60
16.00	泵	B.Conc	98
18.00	泵	B.Conc	98
18.50	泵	B.Conc	5
22.00	控制器	Stop	

### 质谱条件

离子源: ESI+/ ESI-                      加热模块温度: 400°C  
 雾化气流速: 3.0 L/min                  DL 温度: 250°C  
 加热气流速: 10.0 L/min                接口温度: 300°C  
 干燥气流速: 10.0 L/min                扫描模式: MS Scan(m/z 50 -1000)& DDA MS/MS (m/z 50 -1000)

### 1.3 试剂

乙腈: 色谱级, 室温保存。  
 实验用水: 由 Milli-Q Plus 水净化系统经去离子与二次净化制得。  
 甲酸: 色谱级, 纯度 98 %, 室温保存。  
 甲酸铵: 色谱级, 纯度 99 %, 室温保存。

### 1.4 样品前处理

精密称量 0.5 g 柔肤水、护肤霜样品置于 15 mL 离心管中, 加入 2 mL 乙腈, 充分涡旋 2 min, 使其充分与样品混合均匀, 再加入 7 mL 乙腈, 超声提取 10 min, 静置至室温, 乙腈定容 10 mL, 充分摇匀, 4000 r/min 离心 5 min, 取 1 mL 上清液过 0.22 μm 滤膜后上机分析。

## ■ 结果与讨论

### 2.1 准确质量数提取结果

214 种风险物质提取离子流色谱图 EIC 图 (10 ng/mL) 如图 1 所示。

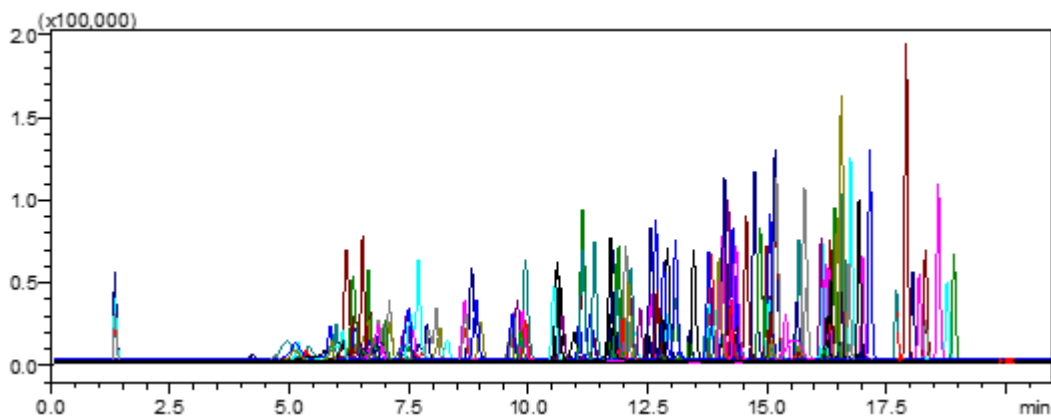


图 1 214 种风险物质提取离子流色谱图 EIC 图 (10 ng/mL)

### 2.2 方法检出限

配制浓度 10 ng/mL 的 214 种风险物质混合标准样品, 上机进行测定, 214 种风险物质品种信息、中文名、CAS、一级离子、保留时间、定量限 (ASTM, S/N=10) 等结果见表 2。

表 2 214 种风险物质化合物信息

类型	序号	中文名称	英文名称	CAS 号	分子式	离子类型	一级离子	保留时间 (min)
	1	磺胺醋酰	Sulfacetamide	144-80-9	C <sub>8</sub> H <sub>10</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub> S	[M+H] <sup>+</sup>	215.04849	5.8
	2	磺胺多辛	Sulfadoxine	2447-57-6	C <sub>12</sub> H <sub>14</sub> N <sub>4</sub> O <sub>4</sub> S	[M+H] <sup>+</sup>	311.08085	8.7
	3	磺胺二甲基异噁唑	Sulfisomidine	515-64-0	C <sub>12</sub> H <sub>14</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub> S	[M+H] <sup>+</sup>	279.09102	5.3
	4	磺胺嘧啶	Sulfadiazine	68-35-9	C <sub>10</sub> H <sub>10</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub> S	[M+H] <sup>+</sup>	251.05972	6.3
	5	磺胺二甲嘧啶	Sulfamethazine	57-68-1	C <sub>12</sub> H <sub>14</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub> S	[M+H] <sup>+</sup>	279.09102	7.5
	6	琥珀酰磺胺噻唑	Succinylsulfathiazole	116-43-8	C <sub>13</sub> H <sub>13</sub> N <sub>3</sub> O <sub>5</sub> S <sub>2</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	356.03694	6.9
	7	磺胺二甲异恶唑	Sulfisoxazole	127-69-5	C <sub>11</sub> H <sub>13</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub> S	[M+H] <sup>+</sup>	268.07504	9.0
	8	磺胺二甲氧嗪	Sulfadimethoxine	122-11-2	C <sub>12</sub> H <sub>14</sub> N <sub>4</sub> O <sub>4</sub> S	[M+H] <sup>+</sup>	311.08085	9.9
	9	磺胺喹恶琳	Sulfaquinolaxine	59-40-5	C <sub>14</sub> H <sub>12</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub> S	[M+H] <sup>+</sup>	301.07537	9.9
	10	磺胺硝苯	Sulfantran	122-16-7	C <sub>14</sub> H <sub>13</sub> N <sub>3</sub> O <sub>5</sub> S	[M-H] <sup>-</sup>	334.05032	11.5
	11	盐酸二氟沙星	Difluoxacin hydrochloride	91296-86-5	C <sub>21</sub> H <sub>20</sub> ClF <sub>2</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	400.14673	7.7
	12	吲哚美辛	Indometacin	53-86-1	C <sub>19</sub> H <sub>16</sub> ClNO <sub>4</sub>	[M-HCl+H] <sup>+</sup>	358.08406	15.6
	13	保泰松	Phenylbutazone	50-33-9	C <sub>19</sub> H <sub>20</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	309.15975	16.2
	14	盐酸洛美沙星	Lomefloxacin hydrochloride	98079-52-8	C <sub>17</sub> H <sub>20</sub> ClF <sub>2</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	[M-HCl+H] <sup>+</sup>	352.14673	6.7
	15	氟甲喹	Flumequine	42835-25-6	C <sub>14</sub> H <sub>12</sub> FNO <sub>3</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	262.08740	11.3
	16	硝酸咪康唑	Miconazole nitrate	22832-87-7	C <sub>18</sub> H <sub>15</sub> Cl <sub>4</sub> N <sub>3</sub> O <sub>4</sub>	[M-HNO <sub>3</sub> +H] <sup>+</sup>	414.99330	15.0
	17	盐酸萘替芬	Naftifine hydrochloride	65473-14-5	C <sub>21</sub> H <sub>22</sub> ClN	[M-HCl+H] <sup>+</sup>	288.17468	11.8
抗菌药	18	替硝唑	Tinidazole	19387-91-8	C <sub>8</sub> H <sub>13</sub> N <sub>3</sub> O <sub>4</sub> S	[M+H] <sup>+</sup>	248.06995	7.0
	19	硝酸益康唑	Econazole nitrate	24169-02-6	C <sub>18</sub> H <sub>16</sub> Cl <sub>3</sub> N <sub>3</sub> O <sub>4</sub>	[M-HNO <sub>3</sub> +H] <sup>+</sup>	381.03227	13.9
	20	地红霉素	Dirithromycin	62013-04-1	C <sub>42</sub> H <sub>78</sub> N <sub>2</sub> O <sub>14</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	835.55258	8.5
	21	红霉素	Erythromycin	114-07-8	C <sub>37</sub> H <sub>67</sub> NO <sub>13</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	734.46852	9.9
	22	琥乙红霉素	Erythromycin ethylsuccinate	1264-62-6	C <sub>43</sub> H <sub>75</sub> NO <sub>16</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	862.51586	12.5
	23	西咪替丁	Cimetidine	51481-61-9	C <sub>10</sub> H <sub>16</sub> N <sub>6</sub> S	[M+H] <sup>+</sup>	253.12299	5.2
	24	溴莫尼定	Brimonidine	59803-98-4	C <sub>11</sub> H <sub>10</sub> BrN <sub>5</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	292.01923	5.4
	25	莫匹罗星	Mupirocin	12650-69-0	C <sub>26</sub> H <sub>44</sub> O <sub>9</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	501.30581	11.7
	26	他扎罗汀	Tazarotene	118292-40-3	C <sub>21</sub> H <sub>21</sub> NO <sub>2</sub> S	[M+H] <sup>+</sup>	352.13658	18.6
	27	克罗米通	Crotamiton	483-63-6	C <sub>13</sub> H <sub>17</sub> NO	[M+H] <sup>+</sup>	204.13829	13.7
	28	三甲氧苄氨嘧	Trimethoprim	738-70-5	C <sub>14</sub> H <sub>18</sub> N <sub>4</sub> O <sub>3</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	291.14517	6.6
	29	二甲氧甲基苄氨嘧啶	Ormethoprim	6981-18-6	C <sub>14</sub> H <sub>18</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	275.15025	6.9
	30	巴喹普林	Baquiloprim	102280-35-3	C <sub>17</sub> H <sub>20</sub> N <sub>6</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	309.18222	1.3
	31	舒巴坦钠	Sulbactam sodium	69388-84-7	C <sub>8</sub> H <sub>10</sub> NNaO <sub>5</sub> S	[M+H] <sup>+</sup>	256.02502	15.6
	32	丙磺舒	Probenecid	57-66-9	C <sub>13</sub> H <sub>19</sub> NO <sub>4</sub> S	[M-H] <sup>-</sup>	284.09620	13.8
	33	阿地普林	Aditoprim	56066-63-8	C <sub>15</sub> H <sub>21</sub> N <sub>5</sub> O <sub>2</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	304.17680	1.4
	34	盐酸布替萘酚	Butenafine hydrochloride	101827-46-7	C <sub>23</sub> H <sub>28</sub> ClN	[M-HCl+H] <sup>+</sup>	318.22163	14.1
	35	卢立康唑	Luliconazole	187164-19-8	C <sub>14</sub> H <sub>9</sub> Cl <sub>2</sub> N <sub>3</sub> S <sub>2</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	353.96877	15.0
	36	伏立康唑	Voriconazole	137234-62-9	<sup>16</sup> H <sub>14</sub> F <sub>3</sub> N <sub>5</sub> O	[M+H] <sup>+</sup>	350.12232	11.9

	37	那氟沙星	Nadifloxacin	124858-35-1	C <sub>19</sub> H <sub>21</sub> FN <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	361.15581	10.6
	38	利拉萘酯	Liranaftate	88678-31-3	C <sub>18</sub> H <sub>20</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub> S	[M+H] <sup>+</sup>	329.13183	18.2
	39	磺胺二甲唑	Sulfamoxol	729-99-7	C <sub>11</sub> H <sub>13</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub> S	[M+H] <sup>+</sup>	268.07504	7.1
	40	甲硝唑	Metronidazole	443-48-1	C <sub>6</sub> H <sub>9</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	172.07167	5.4
	41	氧氟沙星	Ofloxacin	82419-36-1	C <sub>18</sub> H <sub>20</sub> FN <sub>3</sub> O <sub>4</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	362.15106	6.4
	42	左氧氟沙星	Levofloxacin hydrochloride	100986-85-4	C <sub>18</sub> H <sub>20</sub> FN <sub>3</sub> O <sub>4</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	362.15106	6.4
	43	环丙沙星	Ciprofloxacin	85721-33-1	C <sub>17</sub> H <sub>18</sub> FN <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	332.14050	6.5
	44	克林霉素	Clindamycin	18323-44-9	C <sub>18</sub> H <sub>33</sub> ClN <sub>2</sub> O <sub>5</sub> S	[M+H] <sup>+</sup>	425.18715	8.1
	45	林可霉素	Lincomycin	154-21-2	C <sub>18</sub> H <sub>34</sub> N <sub>2</sub> O <sub>6</sub> S	[M+H] <sup>+</sup>	407.22104	5.3
	46	多西环素	Doxycycline	564-25-0	C <sub>22</sub> H <sub>24</sub> N <sub>2</sub> O <sub>8</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	445.16055	8.4
	47	米诺环素	Minocycline	10118-90-8	C <sub>23</sub> H <sub>27</sub> N <sub>3</sub> O <sub>7</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	458.19218	6.6
	48	阿奇霉素	Azithromycin	83905-01-5	C <sub>38</sub> H <sub>72</sub> N <sub>2</sub> O <sub>12</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	749.51581	7.8
	49	克拉霉素	Clarithromycin	81103-11-9	C <sub>38</sub> H <sub>69</sub> NO <sub>13</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	748.48417	11.6
	50	罗红霉素	Roxithromycin	80214-83-1	C <sub>41</sub> H <sub>76</sub> N <sub>2</sub> O <sub>15</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	837.53185	11.9
	51	克霉唑	Clotrimazole	23593-75-1	C <sub>22</sub> H <sub>17</sub> ClN <sub>2</sub>	[M-C <sub>3</sub> N <sub>2</sub> H <sub>3</sub> ] <sup>+</sup>	277.07785	12.8
	52	酮康唑	Ketoconazole	65277-42-1	C <sub>26</sub> H <sub>28</sub> Cl <sub>2</sub> N <sub>4</sub> O <sub>4</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	531.15604	11.1
	53	氟康唑	Fluconazole	86386-73-4	C <sub>13</sub> H <sub>12</sub> F <sub>2</sub> N <sub>6</sub> O	[M+H] <sup>+</sup>	307.11135	7.5
	54	联苯苄唑	Bifonazole	60628-96-8	C <sub>22</sub> H <sub>18</sub> N <sub>2</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	311.15428	12.7
抗菌药	55	磺胺吡啶	Sulfapyridine	144-83-2	C <sub>11</sub> H <sub>11</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub> S	[M+H] <sup>+</sup>	250.06447	6.7
	56	磺胺甲噁唑	Sulfamerazine	127-79-7	C <sub>11</sub> H <sub>12</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub> S	[M+H] <sup>+</sup>	265.07537	7.0
	57	磺胺甲二唑	Sulfamethizole	144-82-1	C <sub>9</sub> H <sub>10</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub> S <sub>2</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	271.03179	7.4
	58	磺胺甲氧嗪	Sulfamethoxy pyridazine	80-35-3	C <sub>11</sub> H <sub>12</sub> N <sub>4</sub> O <sub>3</sub> S	[M+H] <sup>+</sup>	281.07029	7.5
	59	磺胺氯吡嗪	Sulfachloropyridazine	80-32-0	C <sub>10</sub> H <sub>9</sub> ClN <sub>4</sub> O <sub>2</sub> S	[M+H] <sup>+</sup>	285.02075	8.3
	60	磺胺甲异噁唑	Sulfamethoxazole	723-46-6	C <sub>10</sub> H <sub>11</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub> S	[M+H] <sup>+</sup>	254.05939	8.7
	61	依诺沙星	Enoxacin	74011-58-8	C <sub>15</sub> H <sub>17</sub> FN <sub>4</sub> O <sub>3</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	321.13575	6.2
	62	沙拉沙星	Sarafloxacin	98105-99-8	C <sub>20</sub> H <sub>17</sub> F <sub>2</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	386.13108	7.6
	63	培氟沙星	Pefloxacin	70458-92-3	C <sub>17</sub> H <sub>20</sub> FN <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	334.15615	6.7
	64	氟罗沙星	Fleroxacin	79660-72-3	C <sub>17</sub> H <sub>18</sub> F <sub>3</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	370.13731	6.4
	65	双氟沙星	Difloxacin	98106-17-3	C <sub>21</sub> H <sub>19</sub> F <sub>2</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	400.14673	7.7
	66	莫西沙星	Moxifloxacin	151096-09-2	C <sub>21</sub> H <sub>24</sub> FN <sub>3</sub> O <sub>4</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	402.18237	7.9
	67	诺氟沙星	Norfloxacin	70458-96-7	C <sub>16</sub> H <sub>18</sub> FN <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	320.14050	6.3
	68	恩诺沙星	Enrofloxacin	93106-60-6	C <sub>19</sub> H <sub>22</sub> FN <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	360.17180	7.1
	69	呋喃它酮	Furaltadone	139-91-3	C <sub>13</sub> H <sub>16</sub> N <sub>4</sub> O <sub>6</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	325.11426	6.0
	70	四环素	Tetracycline	60-54-8	C <sub>22</sub> H <sub>24</sub> N <sub>2</sub> O <sub>8</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	445.16055	7.1
	71	土霉素	Oxytetracyclin	79-57-2	C <sub>22</sub> H <sub>24</sub> N <sub>2</sub> O <sub>9</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	461.15546	6.7
	72	螺内酯	Spironolactone	52-01-7	C <sub>24</sub> H <sub>32</sub> O <sub>4</sub> S	[M+H] <sup>+</sup>	417.20941	11.9
	73	灰黄霉素	Griseofulvin	126-07-8	C <sub>17</sub> H <sub>17</sub> ClO <sub>6</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	353.07865	12.9
	74	氯霉素	Chloramphenicol	56-75-7	C <sub>11</sub> H <sub>12</sub> Cl <sub>2</sub> N <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	[M-H] <sup>-</sup>	321.00505	9.1
	75	氯霉素二醇物	1-p-nitropheny-2-amino-1.3-propanediol	CB13962449	C <sub>9</sub> H <sub>12</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	213.08698	1.5

76	诺龙	Nandrolone	434-22-0	C <sub>18</sub> H <sub>26</sub> O <sub>2</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	275.20056	12.6
77	坎利酮	Canrenone	976-71-6	C <sub>22</sub> H <sub>28</sub> O <sub>3</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	341.21112	14.8
78	屈螺酮	Drospirenone	67392-87-4	C <sub>24</sub> H <sub>30</sub> O <sub>3</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	367.22677	14.7
79	炔雌醚	Quinestrol	152-43-2	C <sub>25</sub> H <sub>32</sub> O <sub>2</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	365.24751	19.0
80	炔诺酮	Norethindrone	68-22-4	C <sub>20</sub> H <sub>26</sub> O <sub>2</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	299.20056	13.6
81	表睾酮	Epitestosterone	481-30-1	C <sub>19</sub> H <sub>28</sub> O <sub>2</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	289.21621	14.4
82	康力龙	Stanozolol	10418-03-8	C <sub>21</sub> H <sub>32</sub> N <sub>2</sub> O	[M+H] <sup>+</sup>	329.25874	14.0
83	孕二烯酮	Gestodene	60282-87-3	C <sub>21</sub> H <sub>26</sub> O <sub>2</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	311.20056	14.3
84	马烯雌酮	Equilin	474-86-2	C <sub>18</sub> H <sub>20</sub> O <sub>2</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	269.15361	15.0
85	四烯雌酮	Altrenogest	850-52-2	C <sub>21</sub> H <sub>26</sub> O <sub>2</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	311.20056	15.0
86	丙酸睾酮	Testosterone propionate	57-85-2	C <sub>22</sub> H <sub>32</sub> O <sub>3</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	345.24242	18.0
87	醋酸环丙孕酮	Cyproterone acetate	427-51-0	C <sub>24</sub> H <sub>29</sub> ClO <sub>4</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	417.18271	16.4
88	醋酸优力司特	Ulipristal Acetate	126784-99-4	C <sub>30</sub> H <sub>37</sub> NO <sub>4</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	476.27954	15.7
89	17a- 羟基黄体酮	Hydroxyprogesterone	68-96-2	C <sub>21</sub> H <sub>30</sub> O <sub>3</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	331.22677	14.5
90	宝丹酮	Boldenone	846-48-0	C <sub>19</sub> H <sub>26</sub> O <sub>2</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	287.20056	12.3
91	苯丙酸诺龙	Nandrolone phenylpropionate	62-90-8	C <sub>27</sub> H <sub>34</sub> O <sub>3</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	407.25807	18.7
92	苯甲酸雌二醇	Estradiol benzoate	50-50-0	C <sub>25</sub> H <sub>28</sub> O <sub>3</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	377.21112	18.3
93	去氧皮质酮	Desoxycorticosterone	64-85-7	C <sub>21</sub> H <sub>30</sub> O <sub>3</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	331.22677	13.7
94	醋酸去氧皮质酮	Deoxycorticosterone acetate	56-47-3	C <sub>23</sub> H <sub>32</sub> O <sub>4</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	373.23734	16.2
95	雌酮硫酸酯哌嗪	Estropipate	7280-37-7	C <sub>22</sub> H <sub>32</sub> N <sub>2</sub> O <sub>5</sub> S	[M-C <sub>4</sub> H <sub>10</sub> N <sub>2</sub> ]H <sup>+</sup>	349.11152	9.8
96	左炔诺孕酮	Levonorgestrel	797-63-7	C <sub>21</sub> H <sub>28</sub> O <sub>2</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	313.21676	15.1
97	美雄酮	Metandienone	72-63-9	C <sub>20</sub> H <sub>28</sub> O <sub>2</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	301.21621	13.0
98	丙酸诺龙	Nandrolone 17-propionate	7207-92-3	C <sub>21</sub> H <sub>30</sub> O <sub>3</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	331.22677	17.7
99	泼尼松龙	Prednisolone	50-24-8	C <sub>21</sub> H <sub>28</sub> O <sub>5</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	361.20095	9.6
100	泼尼松	Prednisone	53-03-2	C <sub>21</sub> H <sub>26</sub> O <sub>5</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	359.18530	9.7
101	异氟泼尼松	9-fluoroprednisolone	338-95-4	C <sub>21</sub> H <sub>27</sub> FO <sub>5</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	379.19153	9.6
102	氢化可的松	Hydrocortisone	50-23-7	C <sub>21</sub> H <sub>30</sub> O <sub>5</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	363.21660	9.7
103	可的松	Cortisone	53-06-5	C <sub>21</sub> H <sub>28</sub> O <sub>5</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	361.20095	9.6
104	甲基泼尼松龙	Methylprednisolone	83-43-2	C <sub>22</sub> H <sub>30</sub> O <sub>5</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	375.21660	10.6
105	倍他米松	Betamethasone	378-44-9	C <sub>22</sub> H <sub>29</sub> FO <sub>5</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	393.20718	10.9
106	地塞米松	Dexamethasone	50-02-2	C <sub>22</sub> H <sub>29</sub> FO <sub>5</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	393.20718	10.9
107	氟米松	Flumethasone	2135-17-3	C <sub>22</sub> H <sub>28</sub> F <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	411.19776	11.0
108	倍氯米松	Beclomethasone	4419-39-0	C <sub>22</sub> H <sub>29</sub> ClO <sub>5</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	409.17763	11.3
109	曲安奈德	Triamcinolone acetone	76-25-5	C <sub>24</sub> H <sub>31</sub> FO <sub>6</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	435.21775	11.8
110	地索奈德	Desonide	638-94-8	C <sub>24</sub> H <sub>32</sub> O <sub>6</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	417.22717	11.7
111	氟尼缩松	Flunisolide	77326-96-6	C <sub>24</sub> H <sub>31</sub> FO <sub>6</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	435.21775	11.8
112	氟轻松	Fluocinolone acetone	67-73-2	C <sub>24</sub> H <sub>30</sub> F <sub>2</sub> O <sub>6</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	453.20833	12.0
113	曲安西龙双醋酸酯	Triamcinolone diacetate	67-78-7	C <sub>25</sub> H <sub>31</sub> FO <sub>8</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	479.20758	12.1
114	氟氢缩松	Fludrocortide	1524-88-5	C <sub>24</sub> H <sub>33</sub> FO <sub>6</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	437.23340	12.1
115	泼尼松龙醋酸酯	Prednisolone 21-acetate	52-21-1	C <sub>23</sub> H <sub>30</sub> O <sub>6</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	403.21152	12.3

激素

116	氟米龙	Fluorometholone	426-13-1	C <sub>22</sub> H <sub>29</sub> FO <sub>4</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	377.21227	12.4
117	氢化可的松醋酸酯	Hydrocortisone 21-acetate	50-03-3	C <sub>23</sub> H <sub>32</sub> O <sub>6</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	405.22717	12.4
118	氟氢可的松醋酸酯	Fludrocortisone 21-acetate	514-36-3	C <sub>23</sub> H <sub>31</sub> FO <sub>6</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	423.21775	12.5
119	地夫可特	Deflazacort	14484-47-0	C <sub>25</sub> H <sub>31</sub> NO <sub>6</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	442.22242	12.6
120	泼尼松醋酸酯	Prednisone 21-acetate	125-10-0	C <sub>23</sub> H <sub>28</sub> O <sub>6</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	401.19587	12.6
121	可的松醋酸酯	Cortisone 21-acetate	50-04-4	C <sub>23</sub> H <sub>30</sub> O <sub>6</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	403.21152	13.0
122	卤美他松	Halometasone	50629-82-8	C <sub>22</sub> H <sub>27</sub> ClF <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	445.15879	12.8
123	甲基泼尼松龙醋酸酯	Methylprednisolone 21-acetate	53-36-1	C <sub>24</sub> H <sub>32</sub> O <sub>6</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	417.22717	13.4
124	倍他米松醋酸酯	Betamethasone 21-acetate	987-24-6	C <sub>24</sub> H <sub>31</sub> FO <sub>6</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	435.21775	11.8
125	睾酮	Testosterone	58-22-0	C <sub>19</sub> H <sub>28</sub> O <sub>2</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	289.21621	13.4
126	地塞米松醋酸酯	Dexamethasone 21-acetate	1177-87-3	C <sub>24</sub> H <sub>31</sub> FO <sub>6</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	435.21775	11.8
127	布地奈德	Budesonide	51333-22-3	C <sub>25</sub> H <sub>34</sub> O <sub>6</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	431.24282	13.7
128	氢化可的松丁酸酯	Hydrocortisone 17-butyrate	13609-67-1	C <sub>25</sub> H <sub>36</sub> O <sub>6</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	433.25847	13.8
129	孕三烯酮	Gestrinone	16320-04-0	C <sub>21</sub> H <sub>24</sub> O <sub>2</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	309.18491	14.1
130	氟米龙醋酸酯	Fluorometholone 17-acetate	3801-06-7	C <sub>24</sub> H <sub>31</sub> FO <sub>5</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	419.22283	14.1
131	甲睾酮	Methyltestosterone	58-18-4	C <sub>20</sub> H <sub>30</sub> O <sub>2</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	303.23186	14.2
132	氢化可的松戊酸酯	Hydrocortisone 17-valerate	57524-89-7	C <sub>26</sub> H <sub>38</sub> O <sub>6</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	447.27412	14.9
133	曲安奈德醋酸酯	Triamcinolone acetonide acetate	3870-07-3	C <sub>26</sub> H <sub>33</sub> FO <sub>7</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	477.22831	14.9
134	二氟拉松双醋酸酯	Diflorasone diacetate	33564-31-7	C <sub>26</sub> H <sub>32</sub> F <sub>2</sub> O <sub>7</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	495.21889	15.1
135	氟轻松醋酸酯	Fluocinonide	356-12-7	C <sub>26</sub> H <sub>32</sub> F <sub>2</sub> O <sub>7</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	495.21889	15.1
136	炔诺孕酮	Norgestrel	6533-00-2	C <sub>21</sub> H <sub>28</sub> O <sub>2</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	313.21621	15.1
137	倍他米松戊酸酯	Betamethasone 17-valerate	2152-44-5	C <sub>27</sub> H <sub>37</sub> FO <sub>6</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	477.26470	15.6
138	哈西奈德	Halcinonide	3093-35-4	C <sub>24</sub> H <sub>32</sub> ClFO <sub>5</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	455.19951	16.1
139	泼尼卡酯	Prednicarbate	73771-04-7	C <sub>27</sub> H <sub>36</sub> O <sub>8</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	489.24830	16.1
140	氯替泼诺	Loteprednol etabonate	82034-46-6	C <sub>24</sub> H <sub>31</sub> ClO <sub>7</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	467.18311	16.2
141	阿氯米松双丙酸酯	Alclometasone dipropionate	66734-13-2	C <sub>28</sub> H <sub>37</sub> ClO <sub>7</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	521.23006	16.9
142	安西奈德	Amcinonide	51022-69-6	C <sub>28</sub> H <sub>35</sub> FO <sub>7</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	503.24396	16.2
143	卤倍他素丙酸酯	Halobetasol Propionate	66852-54-8	C <sub>25</sub> H <sub>31</sub> ClF <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	485.19009	16.2
144	氯倍他素丙酸酯	Clobetasol 17-propionate	25122-46-7	C <sub>25</sub> H <sub>32</sub> ClFO <sub>5</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	467.19951	16.3
145	氟替卡松丙酸酯	Fluticasone propionate	80474-14-2	C <sub>25</sub> H <sub>31</sub> F <sub>3</sub> O <sub>5</sub> S	[M+H] <sup>+</sup>	501.19171	16.4
146	莫米他松糠酸酯	Mometasone furoate	83919-23-7	C <sub>27</sub> H <sub>30</sub> Cl <sub>2</sub> O <sub>6</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	521.14922	16.5
147	醋酸甲地孕酮	Megestrol acetate	595-33-5	C <sub>24</sub> H <sub>32</sub> O <sub>4</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	385.23734	16.5
148	醋酸氯地孕酮	Chlormadinone acetate	302-22-7	C <sub>23</sub> H <sub>29</sub> ClO <sub>4</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	405.18272	16.7
149	倍他米松双丙酸酯	Betamethasone dipropionate	5593-20-4	C <sub>28</sub> H <sub>37</sub> FO <sub>7</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	505.25961	16.6
150	黄体酮	Progesterone	57-83-0	C <sub>21</sub> H <sub>30</sub> O <sub>2</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	315.23186	16.5
151	醋酸甲羟孕酮	Medroxyprogesterone 17-acetate	71-58-9	C <sub>24</sub> H <sub>34</sub> O <sub>4</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	387.25299	16.7
152	甲羟孕酮	Medroxyprogesterone	520-85-4	C <sub>22</sub> H <sub>32</sub> O <sub>3</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	345.24242	15.6
153	倍氯米松双丙酸酯	Beclometasone dipropionate	5534-09-8	C <sub>28</sub> H <sub>37</sub> ClO <sub>7</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	521.23006	16.9
154	双氟可龙戊酸酯	Diflucortolone valerate	59198-70-8	C <sub>27</sub> H <sub>36</sub> F <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	479.26036	17.0
155	氯倍他松丁酸酯	Clobetasone 17-butyrate	25122-57-0	C <sub>26</sub> H <sub>32</sub> ClFO <sub>5</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	479.19951	17.2
156	己酸羟孕酮	Hydroxyprogesterone caproate	630-56-8	C <sub>27</sub> H <sub>40</sub> O <sub>4</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	429.29994	18.3
157	环索奈德	Ciclesonide	126544-47-6	C <sub>32</sub> H <sub>44</sub> O <sub>7</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	541.31598	18.9

激素

	158	阿司咪唑	Astemizole	68844-77-9	C <sub>28</sub> H <sub>31</sub> FN <sub>4</sub> O	[M+H] <sup>+</sup>	459.25547	8.8
	159	地氯雷他定	Desloratadine	100643-71-8	C <sub>19</sub> H <sub>19</sub> ClN <sub>2</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	311.13096	8.1
	160	吩噻嗪	Phenothiazine	92-84-2	C <sub>12</sub> H <sub>9</sub> NS	[M+H] <sup>+</sup>	200.05285	16.5
	161	奋乃静	Desloratadine	58-39-9	C <sub>21</sub> H <sub>26</sub> ClN <sub>3</sub> OS	[M+H] <sup>+</sup>	404.15579	11.7
	162	氯雷他定	Loratadine	79794-75-5	C <sub>22</sub> H <sub>23</sub> ClN <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	383.15209	14.3
	163	马来酸溴苯那敏	Brompheniramine	980-71-2	C <sub>16</sub> H <sub>19</sub> BrN <sub>2</sub> •C <sub>4</sub> H <sub>4</sub> O <sub>4</sub>	[M-C <sub>4</sub> H <sub>4</sub> O <sub>4</sub> +H] <sup>+</sup>	319.08044	8.9
	164	特非那定	Terfenadine	50679-08-8	C <sub>32</sub> H <sub>41</sub> NO <sub>2</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	472.32101	14.5
抗组胺	165	盐酸苯海拉明	Diphenhydramine	147-24-0	C <sub>17</sub> H <sub>21</sub> NO•HCl	[M-HCl+H] <sup>+</sup>	256.16959	9.8
	166	盐酸氟奋乃静	Fluphenazine	146-56-5	C <sub>22</sub> H <sub>26</sub> F <sub>3</sub> N <sub>3</sub> OS•2HCl	[M-2HCl+H] <sup>+</sup>	438.18214	12.5
	167	盐酸氯丙嗪	Chlorpromazine	69-09-0	C <sub>17</sub> H <sub>19</sub> ClN <sub>2</sub> S•HCl	[M-HCl+H] <sup>+</sup>	319.10302	12.0
	168	盐酸曲吡那敏	Tripelennamine	154-69-8	C <sub>16</sub> H <sub>21</sub> N <sub>3</sub> •HCl	[M-HCl+H] <sup>+</sup>	256.18082	8.7
	169	盐酸赛庚啉	Cyproheptadine	41354-29-4	C <sub>21</sub> H <sub>21</sub> N•HCl•H <sub>2</sub> O	[M-HCl•H <sub>2</sub> O+H] <sup>+</sup>	288.17468	11.1
	170	盐酸西替利嗪	Cetirizine	83881-52-1	C <sub>21</sub> H <sub>25</sub> ClN <sub>2</sub> O <sub>3</sub> •2HCl	[M-2HCl+H] <sup>+</sup>	389.16265	11.1
	171	盐酸异丙嗪	Promethazine	58-33-3	C <sub>17</sub> H <sub>20</sub> N <sub>2</sub> S•HCl	[M-HCl+H] <sup>+</sup>	285.14200	10.5
	172	赛克利嗪	Cyclizine Hydrochloride	303-25-3	C <sub>18</sub> H <sub>23</sub> ClN <sub>2</sub>	[M-HCl+H] <sup>+</sup>	267.18558	9.9
	173	二苯拉林	Diphenylpyraline	147-20-6	C <sub>19</sub> H <sub>23</sub> NO	[M+H] <sup>+</sup>	282.18524	10.6
	174	多西拉敏	Doxylamine	469-21-6	C <sub>17</sub> H <sub>22</sub> N <sub>2</sub> O	[M+H] <sup>+</sup>	271.18049	6.9
麻醉剂	175	盐酸丁卡因	Tetracaine hydrochloride	136-47-0	C <sub>15</sub> H <sub>25</sub> ClN <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	[M-HCl+H] <sup>+</sup>	265.19106	9.6
	176	苯佐卡因	Benzocaine	94-09-7	C <sub>9</sub> H <sub>11</sub> NO <sub>2</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	166.08626	10.5
	177	利多卡因	Lidocaine	137-58-6	C <sub>14</sub> H <sub>22</sub> N <sub>2</sub> O	[M+H] <sup>+</sup>	235.18049	7.0
	178	盐酸氯普鲁卡因	Chloroprocaine hydrochloride	3858-89-7	C <sub>13</sub> H <sub>20</sub> Cl <sub>2</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	[M-HCl+H] <sup>+</sup>	271.12078	6.6
	179	盐酸普鲁卡因	Procaine hydrochloride	51-05-8	C <sub>13</sub> H <sub>21</sub> ClN <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	[M-HCl+H] <sup>+</sup>	237.15975	5.9
	180	普鲁卡因胺	procainamide	51-06-9	C <sub>13</sub> H <sub>21</sub> N <sub>3</sub> O	[M+H] <sup>+</sup>	236.17574	4.7
	181	辛可卡因	Cinchocaine	85-79-0	C <sub>20</sub> H <sub>29</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	344.23325	11.3
农残	182	甲萘威	Carbaryl	63-25-2	C <sub>12</sub> H <sub>11</sub> NO <sub>2</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	202.08626	12.3
	183	多菌灵	Carbendazim	10605-21-7	C <sub>9</sub> H <sub>9</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	192.07676	6.2
	184	丁变敌	Di-allate	2303-16-4	C <sub>10</sub> H <sub>17</sub> Cl <sub>2</sub> NOS	[M+H] <sup>+</sup>	270.04807	17.8
	185	敌草隆	Diuron	330-54-1	C <sub>9</sub> H <sub>10</sub> Cl <sub>2</sub> N <sub>2</sub> O	[M+H] <sup>+</sup>	233.02430	12.7
	186	氟环唑	Epoxiconazole	106325-08-0	C <sub>17</sub> H <sub>13</sub> ClFN <sub>3</sub> O	[M+H] <sup>+</sup>	330.08040	15.3
	187	丁苯吗啉	Fenpropimorph	67306-03-0	C <sub>20</sub> H <sub>33</sub> NO	[M+H] <sup>+</sup>	304.26349	13.0
	188	精吡氟禾草灵	Fluazifop-p-butyl	79241-46-6	C <sub>19</sub> H <sub>20</sub> F <sub>3</sub> NO <sub>4</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	384.14172	17.9
	189	丙炔氟草胺	Flumioxazin	103361-09-7	C <sub>19</sub> H <sub>15</sub> FN <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	355.10887	14.7
	190	异菌脲	Iprodione	36734-19-7	C <sub>13</sub> H <sub>13</sub> Cl <sub>2</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	330.04068	16.0
	191	异恶唑草酮	Isoxaflutole	141112-29-0	C <sub>15</sub> H <sub>12</sub> F <sub>3</sub> NO <sub>4</sub> S	[M+H] <sup>+</sup>	360.05119	15.1
	192	亚胺菌	Kresoxim-methyl	143390-89-0	C <sub>18</sub> H <sub>19</sub> NO <sub>4</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	314.13869	16.7
	193	禾草敌	Molinate	2212-67-1	C <sub>9</sub> H <sub>17</sub> NOS	[M+H] <sup>+</sup>	188.11037	15.3
	194	久效磷	Monocrotophos	2157-98-4	C <sub>7</sub> H <sub>14</sub> NO <sub>5</sub> P	[M+H] <sup>+</sup>	224.06824	6.2
	195	炔螨特	Propargite	2312-35-8	C <sub>19</sub> H <sub>26</sub> O <sub>4</sub> S	[M+NH <sub>4</sub> ] <sup>+</sup>	368.18901	18.3
	196	扑灭津	Propazine	139-40-2	C <sub>9</sub> H <sub>16</sub> ClN <sub>5</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	230.11670	14.2

197	西玛津	Simazine	122-34-9	C <sub>7</sub> H <sub>12</sub> ClN <sub>5</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	202.08540	10.7
198	十三吗啉	Tridemorph	24602-86-6	C <sub>19</sub> H <sub>39</sub> NO	[M+H] <sup>+</sup>	298.31044	15.5
199	二苯胺	Diphenylamine	122-39-4	C <sub>12</sub> H <sub>11</sub> N	[M+H] <sup>+</sup>	170.09643	16.2
200	炔苯酰草胺	Propyzamide	23950-58-5	C <sub>12</sub> H <sub>11</sub> Cl <sub>2</sub> NO	[M+H] <sup>+</sup>	256.02905	15.6
201	甲草胺	Alachlor	15972-60-8	C <sub>14</sub> H <sub>20</sub> ClNO <sub>2</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	270.12553	16.2
202	倍硫磷	Fenthion	55-38-9	C <sub>10</sub> H <sub>15</sub> O <sub>3</sub> PS <sub>2</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	279.02730	16.9
203	腈菌唑	Myclobutanil	88671-89-0	C <sub>15</sub> H <sub>17</sub> ClN <sub>4</sub>	[M+H] <sup>+</sup>	289.12145	15.0
204	氟硅唑	Flusilazole	85509-19-9	C <sub>16</sub> H <sub>15</sub> F <sub>2</sub> N <sub>3</sub> Si	[M+H] <sup>+</sup>	316.10761	15.8
205	氯苯嘧啶醇	Fenarimol	60168-88-9	C <sub>17</sub> H <sub>12</sub> Cl <sub>2</sub> N <sub>2</sub> O	[M+H] <sup>+</sup>	331.03995	15.0
206	特乐酚	Dinoterb	1420-07-1	C <sub>10</sub> H <sub>12</sub> N <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	[M-H] <sup>-</sup>	239.06734	16.8
207	碘苯腈	Ioxynil	1689-83-4	C <sub>7</sub> H <sub>3</sub> I <sub>2</sub> NO	[M-H] <sup>-</sup>	369.82313	13.8
208	氨苄西林三水合物	Ampicillin Trihydrate	7177-48-2	C <sub>16</sub> H <sub>19</sub> N <sub>3</sub> O <sub>4</sub> S•3H <sub>2</sub> O	[M-3H <sub>2</sub> O+H] <sup>+</sup>	350.11690	11.9
209	青霉素 G 钾盐	Penicillin G potassium salt	113-98-4	C <sub>16</sub> H <sub>17</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub> SK	[M-K+2H] <sup>-</sup>	335.10600	10.0
210	青霉素 V 钾盐	Penicillin V potassium salt	132-98-9	C <sub>16</sub> H <sub>17</sub> N <sub>2</sub> O <sub>5</sub> SK	[M-K+2H] <sup>-</sup>	351.10092	10.8
211	苯唑西林钠	Oxacillin sodium monohydrate	7240-38-2	C <sub>19</sub> H <sub>18</sub> N <sub>3</sub> NaO <sub>5</sub> S•H <sub>2</sub> O	[M-Na-H <sub>2</sub> O+2H] <sup>+</sup>	402.11182	11.5
212	氯唑西林钠	Cloxacillin sodium hydrate	7081-44-9	C <sub>19</sub> H <sub>19</sub> ClN <sub>3</sub> NaO <sub>6</sub> S•H <sub>2</sub> O	[M-Na-2H <sub>2</sub> O+2H] <sup>+</sup>	436.07285	12.3
213	萘夫西林钠	Nafcillin sodium hydrate	7177-50-6	C <sub>21</sub> H <sub>23</sub> N <sub>3</sub> NaO <sub>6</sub> S•H <sub>2</sub> O	[M-Na-2H <sub>2</sub> O+2H] <sup>+</sup>	415.13222	12.7
214	双氯西林钠	Dicloxacillin sodium hydrate	13412-64-1	C <sub>19</sub> H <sub>16</sub> Cl <sub>2</sub> N <sub>3</sub> NaO <sub>5</sub> S•H <sub>2</sub> O	[M-Na-H <sub>2</sub> O+2H] <sup>+</sup>	470.03387	13.4

### 2.3 二级高分辨质谱库建立

配制 100 ng/mL 的 214 种风险物质混合标准样品溶液，按照前述条件进行前处理，上机分析。进行一级 MS 扫描，以及 MS/MS (DDA) 扫描，获得不同碰撞能 (10 V、20 V、30 V、40 V、50 V、60 V) 下的二级质谱图，使用 LabSolutions insight 软件进行二级质谱库的建立。200 余种风险物质高分辨二级质谱库收录了 1000 余张二级质谱图，以及化合物的中英文名、分子式、保留时间、色谱条件，高分辨质荷比等信息。

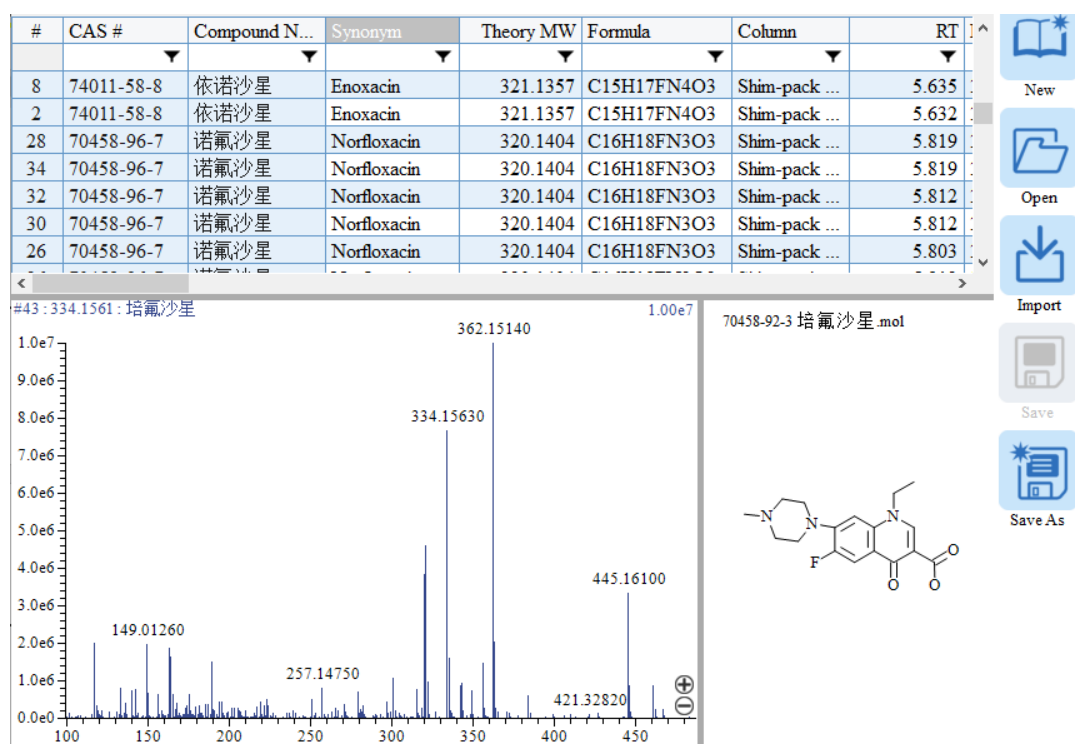


图 2 风险物质二级质谱库预览

## 2.4 化妆品样品加标鉴别与确认

按照前述分析条件，制备 100 ng/mL 加标样品，根据保留时间及精确质量数进行鉴别，二级质谱库或典型二级碎片离子丰度比进行确认。以磺胺氯哒嗪为例演示加标样品的定性过程，混合标液中磺胺氯哒嗪  $m/z$  285.0208 色谱出峰时间  $RT=8.321$  min。利用岛津 LabSolutions Insight Explore 的谱库检索功能，对加标样品中  $m/z$  285.0208 的化合物进行二级质谱图谱库匹配，相似度得分 96 分，如图 4 所示。典型碎片离子与标准谱库中质量偏差小于 5 ppm，如表 3 所示。

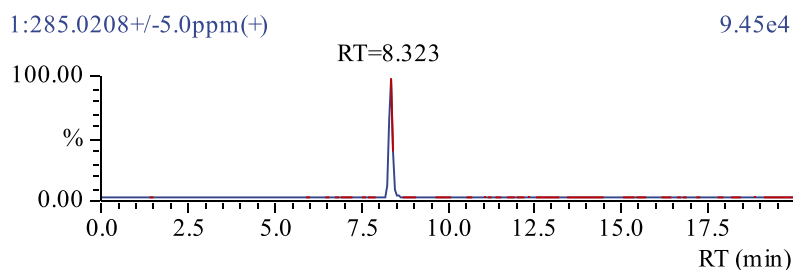


图 3  $m/z$  285.0208 提取离子流图

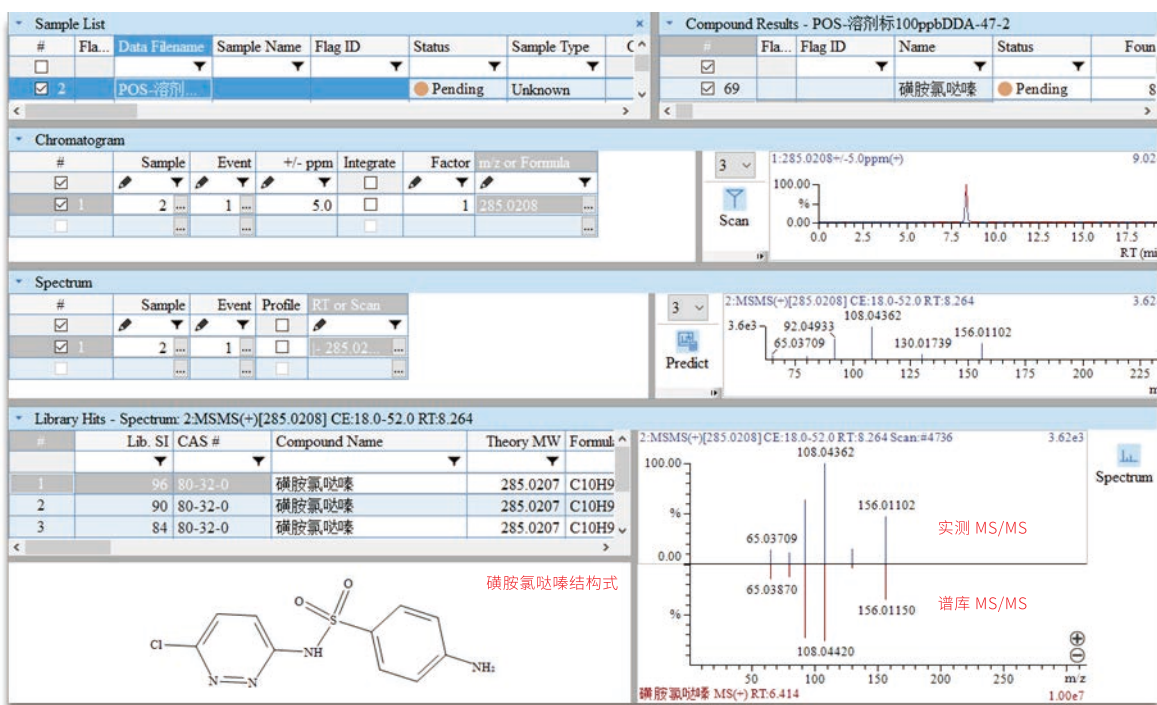


图 4  $m/z$  285.0208 二级质谱图谱库检索结果

表 3  $m/z$  285.0208 二级质谱图典型碎片离子质量偏差

化合物	典型二级碎片离子 1	典型二级碎片离子 2
标准谱库	92.04920	156.0115
加标样品	92.04933	156.0110
质量偏差	1.41229	3.076696

## 2.5 加标回收率

10 ng/mL 柔肤水、护肤霜两种加标样品进行计算加标回收率，回收率结果如图 5、6 所示，柔肤水、护肤霜两种化妆品的回收率在 50-120% 之间的化合物数量分别为 156 和 179 个。

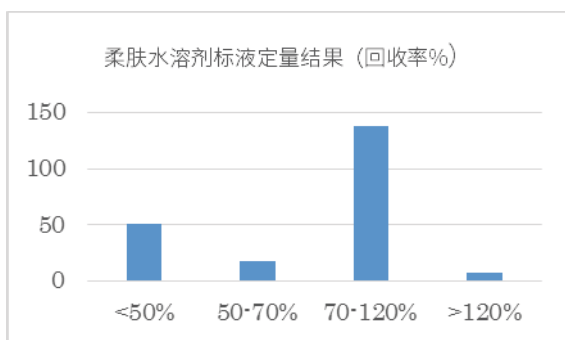


图 5 柔肤水基质加标 (10 ng/mL) 回收率结果

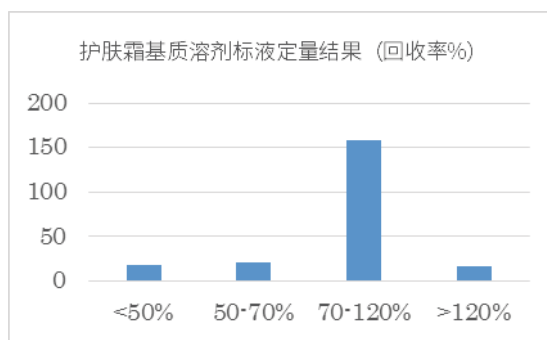


图 6 护肤霜基质加标 (10 ng/mL) 回收率结果

## ■ 结论

本文采用岛津公司 LCMS-9030 超高效液相色谱四极杆飞行时间质谱联用仪，建立了化妆品中 214 种风险物质鉴别与确认的方法，同时创建了二级质谱库。经添加回收样品分析，质谱库匹配度良好。该方法简便、灵敏、定性筛查准确性好，可用于化妆品中风险物质的快速定性筛查。

岛津应用云

