

LCMS-QTOF 定性分析保健食品中 95 种那非类成分

LCMS-QTOF-118

摘要： 本文利用岛津 LCMS-9050 液相色谱 - 四极杆飞行时间串联质谱仪建立了（保健）食品中 95 种那非类成分的快速定性方法。参考标准 BJS 202405《食品中西地那非、他达拉非等化合物的测定》，并对该方法的灵敏度、准确性、稳定性和回收率进行测试。其结果显示，5 ng/mL 浓度下各物质均可以检出，20 ng/mL 浓度下所有化合物的一级 m/z 相对偏差均小于 5 ppm，保留时间和峰面积的相对标准偏差小于 0.12% 和 8.9%，各目标物回收率在 91.4~106.2% 范围内，回收率良好。对样品进行分析，结果显示目标化合物的 MS1 质荷比偏差小于 5 ppm，MS2 质荷比偏差小于 10 ppm，二级谱图的相似度得分大于 90，保留时间偏差不大于 $\pm 2.5\%$ 。使用该方法，可通过一针进样，快速完成目标物的定性分析，结果准确可靠。

关键词： 四极杆飞行时间串联质谱仪 保健食品 BJS 202405 那非类成分

技术特点：

- ❖ 多组同分异构体的有效分离，目标物辨别更准确。
- ❖ Insight Explore 软件多功能数据处理功能，满足标准 BJS 202405 定性要求，实现快速定性。

近年来，（保健）食品中非法添加化学成分的现象趋于多元化、隐蔽化，许多不法商贩为了使产品达到宣传的功效，会在食品、保健品中添加危害身体健康的药物成分，从而牟取暴利，并且添加的化学成分不局限于某一化合物单体，而是发展为添加单体目标成分的衍生物等多样性物质。

2024 年 12 月，国家市场监督管理总局发布了食品补充检验规定《食品中西地那非、他达拉非等化合物的测定》(BJS 202405)，给出 95 种那非类的检测方法，LC-MS/MS 作为定量法，LCMS-QTOF 作为确证方法；该标准是替代了食品补充检验规定的《食品中那非类物质的测定》(BJS 201601) 检测方法；主要变更是

化合物种类由 90 种增加至 95 种；其中增加了羟基卡巴地那非、苯丙代卡巴地那非、丙氧苯基去碳去甲基卡巴地那非、3- 羟丙基去甲他达拉非、N- 环己基去甲他达拉非、N- 苄基他达拉非和四氢咪啉共 7 种成分，删除育亨彬和伐地那非乙酰基类似物。

此外，对标准的更新对之前应用报告《岛津四极杆飞行时间串联质谱仪 LCMS-9030 定性筛查抗疲劳饮料中 90 种那非类物质》(LCMS-QTOF-022) 进行更新。本文使用岛津 LCMS-9050 超高效液相色谱 - 四极杆飞行时间串联质谱仪，建立了一种对（保健）食品中那非类物质快速定性确认的分析方法，该方法准确可靠。

■ 实验部分

1.1 仪器

岛津 LCMS-9050 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-40D XS×2	系 统 控 制 器：	SCL-40
自 动 进 样 器：	SIL-40C XS	柱 温 箱：	CTO-40C
在 线 脱 气 机：	DGU-405	飞 行 时 间 质 谱 仪：	LCMS-9050
色 谱 工 作 站：	LabSolutions Ver. 5.128; LabSolutions Insight Ver. 4.0SP2		

1.2 分析条件

色谱条件：

色 谱 柱： Shim-pack GIST (100 mm×2.1 mm., 2.0 μm, C18
(岛津(上海)实验器材有限公司, P/N: 227-30001-04)
流 动 相： A相 -0.1% 甲酸水溶液; B相 - 乙腈
流 速： 0.3 mL/min
柱 温： 35 °C 进 样 量： 20 μL
洗 脱 方 式： 梯度洗脱, B相初始浓度为 42%, 时间程序见表 1

表 1 梯度洗脱时间程序

Time(min)	Module	Command	Value
15.00	泵	B.Conc	60
18.00	泵	B.Conc	98
21.00	泵	B.Conc	98
21.10	泵	B.Conc	42
25.00	控制器	Stop	

质谱条件

离 子 源： ESI(+)
雾 化 气 流 速： 3.0 L/min
加 热 气 流 速： 10.0 L/min
干 燥 气 流 速： 10.0 L/min
加 热 模 块 温 度： 400 °C
DL 温 度： 200 °C
接 口 温 度： 300 °C
碰 撞 能 量： 10~80 V
扫 描 模 式： MS/MS 模式

1.3 样品前处理



图 1 样品前处理过程

■ 结果与讨论

2.1 色谱图及灵敏度

制备浓度为 5 ng/mL 的 95 种那非类成分加标样品, 经前处理后, 上机分析; 其结果显示目标化合物均可检出。其色谱图如图 2 所示, 化合物具体信息详见附录。

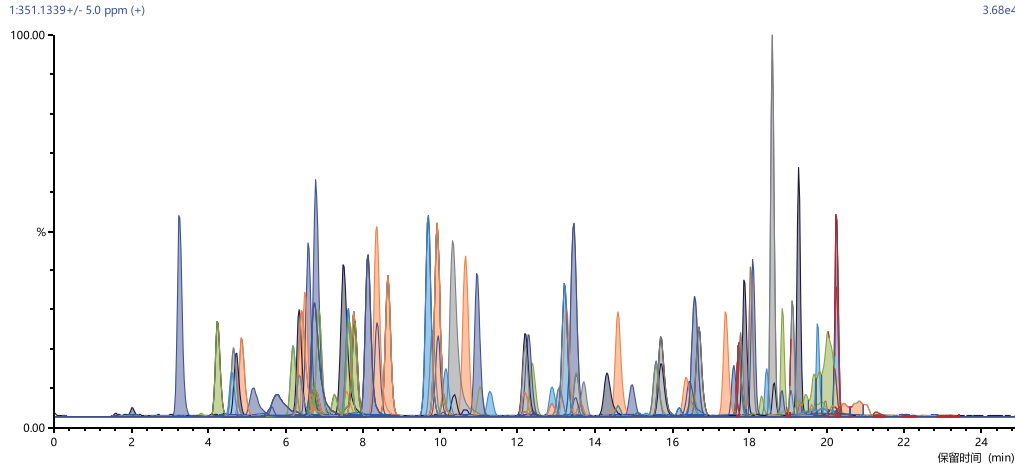


图 2 5 ng/mL 加标样品色谱图

2.2 准确性

使用空白基质液配置浓度为 20 ng/mL 的 95 种那非类成分质控样品，将质控样品连续重复 6 次进样分析，分别统计目标化合物的质荷比偏差，所有化合物的一级 m/z 相对偏差均小于 3 ppm，满足《食品中西地那非、他达拉非等化合物的测定》(BJS 202405) 规定的一级 m/z 相对偏差小于 5 ppm 的规定。化合物质荷比偏差统计情况如图 3 所示：

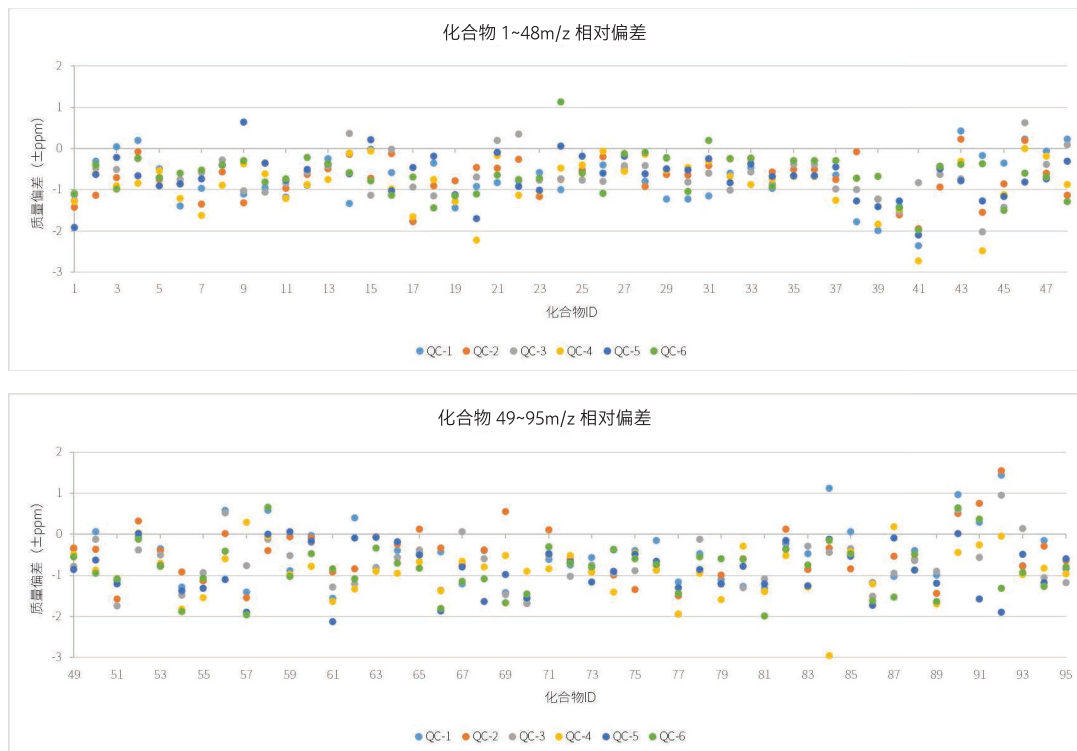


图 3 质控样品连续分析的质荷比偏差 (n=6, 化合物 ID 见附录,)

2.3 稳定性

使用空白基质液配置浓度为 20 ng/mL 的 95 种那非类成分质控样品，连续重复 6 次进样分析。保留时间和峰面积的相对标准偏差小于 0.12% 和 8.9%，具体统计情况如图 4 所示：

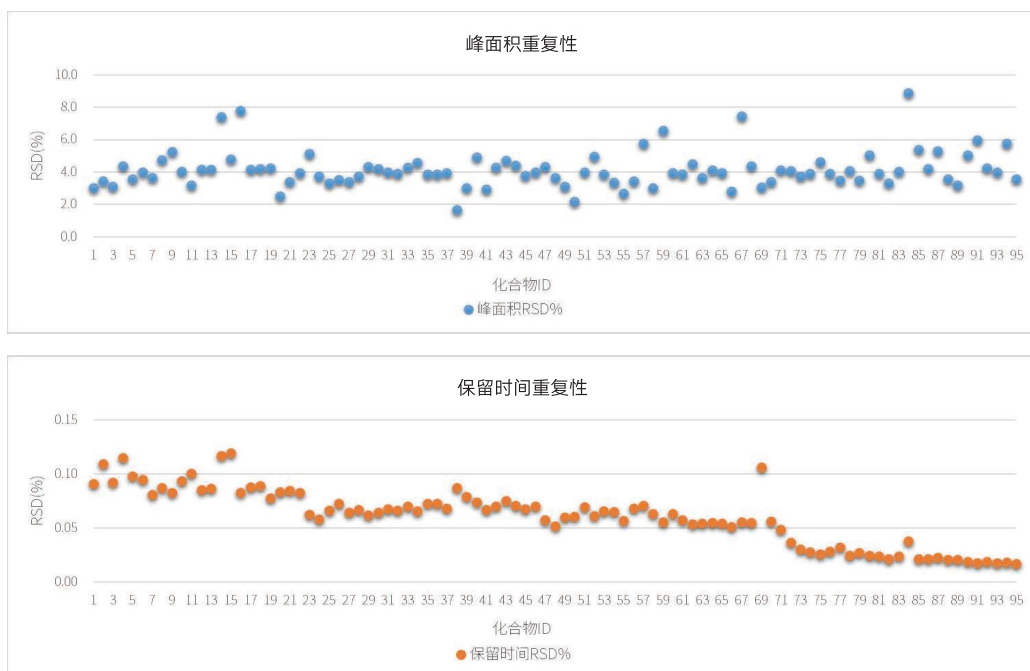


图 4 保留时间和峰面积的相对标准偏差 (n=6, 化合物 ID 见附录)

2.4 回收率

分别配置浓度为 20 ng/mL 的 95 种那非类成分加标样品和标准品，平行三份，依次分析，考察回收率情况。结果显示，各目标物回收率在 91.4~106.2% 范围内，回收率良好，其结果如图 5 所示：

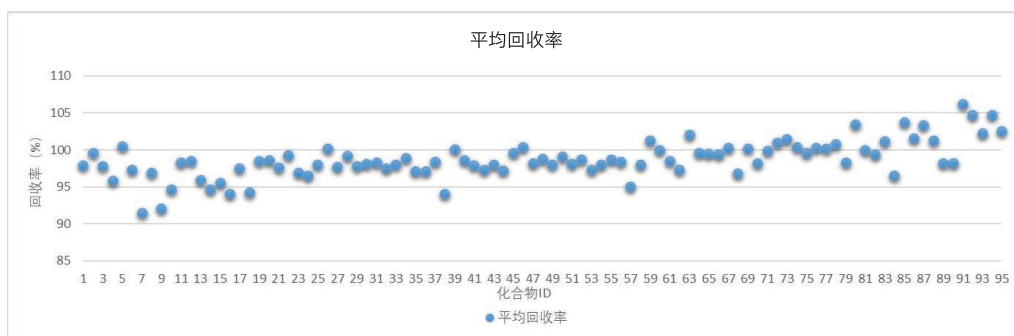


图 5 平均回收率结果 (n=3, 化合物 ID 见附录)

2.5 定性分析

2.5.1 目标化合物的判定

基于 1.3 样品前处理对样品进行处理，并参考 1.2 分析条件和标准 BJS 202405 中高分辨法定性要求对样品进行分析。目标物确认判定条件如表 2 所示：

表 2 目标物确认判定条件

Time(min)	Module	Value
1	保留时间	化合物的保留时间应至少大于死时间的 2 倍。目标物与参考标准品以相同条件测定所获保留时间的相对偏差不大于 ±2.5%。
2	质量准确性	一级母离子的 m/z 相对偏差 ≤ 5 ppm; 二级离子的 m/z 相对偏差 ≤ 10 ppm; 当 m/z < 200 时, 其绝对偏差应 < 1 mDa
3	同位素峰	同位素峰的 m/z 应符合目标物确认的质量准确性要求
4	碎片相对离子丰度比	比较二级碎片质谱图, 其主要碎片离子有 2 个或 2 个以上符合质量准确性要求, 且其相对离子丰度比符最大允许偏差要求

2.5.2 样品定性分析处理

使用 MS/MS 模式对样品进行分析, 通过 Insight Explore 软件设置 “目标物确认判定条件” 相关参数, 对样品中目标物进行确认, 参数设定如图 6 示例所示:



图 6 Insight Explore 分析参数设定

分析结果显示该样品为阳性。目标化合物的保留时间偏差为 0.7%, MS1 质荷比偏差为 0.547 ppm, MS2 中 m/z 283.1195 质荷比偏差为 0.353 ppm, m/z 100.0995 质荷比偏差为 0.799 ppm, 二级谱图的相似度得分大于 90, 同位素得分为 95.84, 具体结果如图 7 所示, 样本检测结果色谱图及 MS2 质谱图如图 8 所示:

定量结果(化合物) - 演示											
#	化合物名称	库化合物...	保留时间(实...)	保留时间差(%)	m/z	实测m/z	质量误差 (ppm)	质量误差 (mDa)	Ref 1 m/z	Ref 2 m/z	同位素得分
25	西地那非	西地那非	7.635	-0.70	475.2122	475.21194	-0.547	-0.26	283.1195	100.0995	95.84

定量结果(化合物) - 演示											
#	化合物名称	库化合物...	保留时间(实...)	Ref 1 质量误差 (ppm)	Ref 1 质量误差 (mDa)	Ref 1 测定%	Ref 1 允许范围	Ref 2 质量误差 (ppm)	Ref 2 质量误差 (mDa)	Ref 2 测定%	Ref 2 允许范围
25	西地那非	西地那非	7.635	0.353	0.10	9.75	4.88 - 14.63	-0.799	-0.08	1.18	0.59 - 1.76

图 7 Insight Explore 分析结果视图

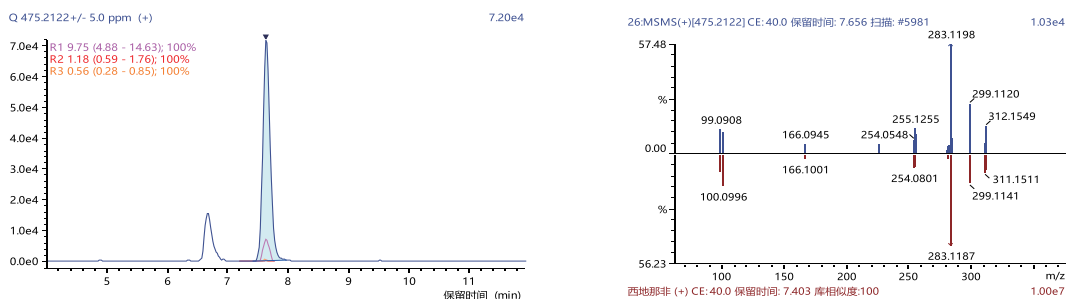


图 8 Insight Explore 样本检测结果色谱图及 MS2 质谱图

2.5.3 多功能辅助定性

通过将结果发送至 Insight Explore 软件中的 Assign 界面，链接到 ChemSpider 或 PubChem 公共数据库通过 Assign 进行在线搜索，对结构片段进一步比对确认，与库搜索结果比对，进一步提高分析准确性。此外，通过 Insight Explore 软件中的标记功能，能快速标记设定范围以外的数据，并通过汇总界面进行查看，进一步提高分析效率，具体分析结果如图 9 所示：

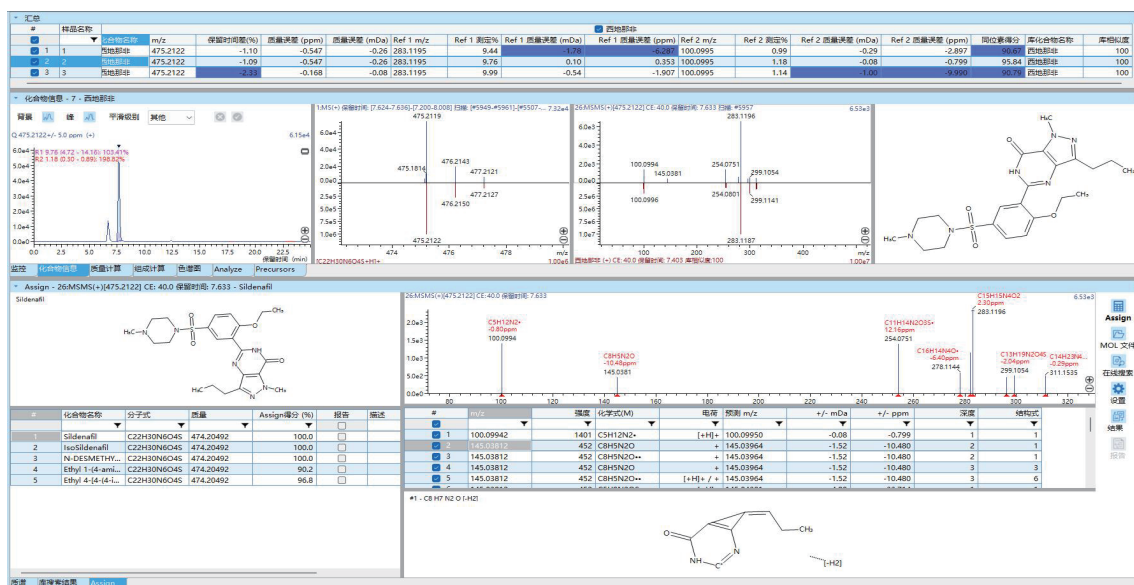


图 9 Insight Explore 分析结果视图
(标记参数设置：保留时间差 % 小于 2，质量误差 (mDa) 小于 0.9，质量误差 (ppm) 小于 5，同位素得分大于 91 以外的数据标记为蓝色)

结论

本文利用岛津公司 LCMS-9050 超高效液相色谱四极杆飞行时间质谱联用仪，结合 Labsolution Insight Explore 软件快速对 95 种那非类物质进行定性分析。对方法的灵敏度、稳定性、准确性和回收率进行测试，结果良好，满足 BJS 2020405《食品中西地那非、他达拉非等化合物的测定》相关定性分析要求。此外，该方法既能对 95 种那非成分中多对同分异构体有效分离，也能通过 Insight Explore 数据处理软件对定性相关参数进行显示，使用 Assign 开源库搜索和标记功能，再使用汇总界面进行查看，进一步提高分析准确性和分析效率。该方案可以实现一针进样，具有一定的实际应用价值，供相关人员参考。

附录 . 化合物信息表

ID	化合物名称	化学式	前体离子 (m/z)	二级质谱特征离子 (m/z)	保留时间 (min)	加合 方式	检出限 (ng/mL)
1	四氢喹啉	C ₂₀ H ₁₈ N ₂ O ₄	351.1339	265.1052, 264.1019, 250.0863, 206.0964, 135.0441, 88.0393	3.267	[M+H] ⁺	5
2	吡唑 N- 去甲 基西地那非	C ₂₁ H ₂₈ N ₆ O ₄ S	461.1966	297.1139, 269.1027, 100.0995, 99.0917, 58.0651	4.255	[M+H] ⁺	5
3	羟基卡巴地 那非	C ₂₄ H ₃₂ N ₆ O ₄	469.2558	339.1452, 311.1139, 255.1240, 166.0975, 147.0077	4.624	[M+H] ⁺	5
4	去甲基卡巴地 那非	C ₂₃ H ₃₀ N ₆ O ₃	439.2452	339.1452, 311.1139, 283.1190, 255.1240, 166.0975	4.657	[M+H] ⁺	5
5	去乙基卡巴地 那非	C ₂₂ H ₂₈ N ₆ O ₃	425.2296	339.1452, 311.1139, 166.0975	4.740	[M+H] ⁺	5
6	卡巴地那非	C ₂₄ H ₃₂ N ₆ O ₃	453.2609	339.1452, 311.1139, 166.0975, 147.0077, 113.1073	4.873	[M+H] ⁺	5
7	乙酰伐地那非	C ₂₅ H ₃₄ N ₆ O ₃	467.2765	396.2030, 355.1765, 341.1608, 325.1295, 297.1346, 151.0866, 127.1230, 111.0917	5.421	[M+H] ⁺	5
8	羟基红地那非	C ₂₅ H ₃₄ N ₆ O ₄	483.2714	396.2030, 341.1608, 311.1430, 297.1346, 143.1179, 127.0866, 97.0760	6.204	[M+H] ⁺	5
9	N- 去乙基红 地那非	C ₂₃ H ₃₀ N ₆ O ₃	439.2452	353.1608, 341.1608, 325.1295, 311.1430, 297.1346, 166.0975, 99.0917	6.320	[M+H] ⁺	5
10	那红地那非	C ₂₄ H ₃₂ N ₆ O ₃	453.2609	341.1608, 325.1295, 297.1346, 166.0975, 113.1073, 97.0760, 70.0651	6.397	[M+H] ⁺	5
11	双去碳西地那 非	C ₂₀ H ₂₈ N ₆ O ₄ S	449.1966	312.1542, 311.1503, 299.1139, 283.1195, 166.0975, 58.0651	6.382	[M+H] ⁺	5
12	去碳西地那非	C ₂₁ H ₃₀ N ₆ O ₄ S	463.2122	418.1544, 312.1542, 311.1503, 283.1183, 72.0808, 58.0651	6.528	[M+H] ⁺	5
13	阿伐那非	C ₂₃ H ₂₆ ClN ₇ O ₃	484.1858	375.1205, 357.1099, 233.1020, 221.1033, 155.0258	6.615	[M+H] ⁺	5
14	羟基伐地那非	C ₂₃ H ₃₂ N ₆ O ₅ S	505.2228	376.1054, 312.1581, 299.1139, 151.0866, 99.0917	6.670	[M+H] ⁺	5
15	N- 去乙基 -N- 甲基伐地那非	C ₂₂ H ₃₀ N ₆ O ₄ S	475.2122	376.1067, 312.1581, 299.1139, 284.1268, 151.0866	6.683	[M+H] ⁺	5
16	红地那非	C ₂₅ H ₃₄ N ₆ O ₃	467.2765	341.1608, 325.1322, 297.1346, 166.0975, 127.1230, 111.0917, 84.0808	6.714	[M+H] ⁺	5
17	N- 去乙基伐 地那非	C ₂₁ H ₂₈ N ₆ O ₄ S	461.1966	331.0852, 312.1581, 299.1139, 284.1268, 151.0866	6.743	[M+H] ⁺	5
18	伐地那非	C ₂₃ H ₃₂ N ₆ O ₄ S	489.2279	376.1067, 312.1581, 299.1139, 284.1268, 151.0866, 113.1073	6.771	[M+H] ⁺	5
19	苯噻啉红地那 非	C ₂₄ H ₃₁ N ₅ O ₃	438.2500	341.1608, 325.1322, 313.1295, 297.1346, 166.0975, 98.0964	6.809	[M+H] ⁺	5

ID	化合物名称	化学式	前体离子 (m/z)	二级质谱特征离子 (m/z)	保留时间 (min)	加合 方式	检出限 (ng/mL)
20	去甲基哌嗪基 西地那非磺酸	C ₁₇ H ₂₀ N ₄ O ₅ S	393.1227	365.0914, 336.0523, 285.1319, 269.1006, 256.0955, 166.0975, 136.0505	6.732	[M+H] ⁺	5
21	哌唑那非	C ₂₅ H ₃₄ N ₆ O ₄	483.2714	465.2609, 436.2231, 297.1346, 203.1179, 166.0975, 127.0866	6.899	[M+H] ⁺	5
22	羟基豪莫西地 那非	C ₂₃ H ₃₂ N ₆ O ₅ S	505.2228	487.2122, 311.1503, 283.1195, 129.1022, 99.0917	7.278	[M+H] ⁺	5
23	硫唑那非	C ₂₄ H ₂₈ N ₆ OS	449.2118	258.0808, 204.1383, 186.1277	7.513	[M+H] ⁺	5
24	环戊那非	C ₂₆ H ₃₆ N ₆ O ₄ S	529.2592	461.1966, 377.1278, 311.1503, 283.1195, 112.1121, 98.0964	7.592	[M+H] ⁺	5
25	西地那非	C ₂₂ H ₃₀ N ₆ O ₄ S	475.2122	311.1503, 283.1195, 100.0995, 99.0917, 58.0651	7.650	[M+H] ⁺	5
26	伐地那非 -N- 氧化物	C ₂₃ H ₃₂ N ₆ O ₅ S	505.2228	477.1915, 377.1271, 312.1581, 151.0866, 113.1271	7.677	[M+H] ⁺	5
27	豪莫西地那非	C ₂₃ H ₃₂ N ₆ O ₄ S	489.2279	311.1503, 283.1195, 113.1073, 99.0917, 72.0808	7.797	[M+H] ⁺	5
28	N- 去甲基西 地那非	C ₂₁ H ₂₈ N ₆ O ₄ S	461.1966	377.1278, 311.1503, 299.1139, 283.1195, 85.0760	7.581	[M+H] ⁺	5
29	二甲基红地那 非	C ₂₅ H ₃₄ N ₆ O ₃	467.2765	410.2187, 353.1846, 325.1587, 297.1346, 166.0975, 127.1230	8.157	[M+H] ⁺	5
30	丙氧苯基去碳 去甲基卡巴地 那非	C ₂₃ H ₃₂ N ₆ O ₃	441.2609	396.2030, 354.1601, 311.1139, 166.0975, 147.0077	8.377	[M+H] ⁺	5
31	西地那非 -N- 氧化物	C ₂₂ H ₃₀ N ₆ O ₅ S	491.2071	404.1387, 312.1554, 311.1503, 283.1195, 99.0917	8.412	[M+H] ⁺	5
32	艾地那非	C ₂₃ H ₃₂ N ₆ O ₄ S	489.2279	377.1271, 311.1503, 283.1195, 113.1073, 99.0917	8.693	[M+H] ⁺	5
33	乌地那非	C ₂₅ H ₃₆ N ₆ O ₄ S	517.2592	474.2170, 325.1653, 299.1139, 283.1195, 191.0849, 112.1121, 84.0808	9.730	[M+H] ⁺	5
34	O- 去乙基西 地那非	C ₂₀ H ₂₆ N ₆ O ₄ S	447.1809	347.0808, 299.1139, 283.1195, 101.1073, 99.0917	9.840	[M+H] ⁺	5
35	丙氧苯基西地 那非	C ₂₃ H ₃₂ N ₆ O ₄ S	489.2279	325.1659, 299.1139, 283.1195, 166.0975, 100.0995, 99.0917, 58.0651	9.961	[M+H] ⁺	5
36	异丁基西地那 非	C ₂₃ H ₃₂ N ₆ O ₄ S	489.2279	325.1653, 297.1339, 100.0995, 99.0917, 58.0651	9.961	[M+H] ⁺	5
37	丙氧苯基羟基 豪莫西地那非	C ₂₄ H ₃₄ N ₆ O ₅ S	519.2384	501.2279, 325.1619, 299.1152, 283.1195, 129.1022, 99.0917	9.994	[M+H] ⁺	5
38	乙酰胺基他达 拉非	C ₂₃ H ₂₀ N ₄ O ₅	433.1506	391.1401, 311.1139, 263.0914, 262.0849, 204.0808, 135.0441	10.129	[M+H] ⁺	5
39	氨基他达拉非	C ₂₁ H ₁₈ N ₄ O ₄	391.1401	269.1033, 263.0941, 262.0849, 169.0760, 204.0808, 135.0441	10.197	[M+H] ⁺	5
40	达泊西汀	C ₂₁ H ₂₃ NO	306.1852	261.1274, 233.0961, 183.0804, 157.1648, 127.0542, 117.0699	10.339	[M+H] ⁺	5

ID	化合物名称	化学式	前体离子 (m/z)	二级质谱特征离子 (m/z)	保留时间 (min)	加合 方式	检出限 (ng/mL)
41	苯酰胺那非	C ₁₉ H ₂₃ N ₃ O ₆	390.1660	151.0754, 107.0491	10.408	[M+H] ⁺	5
42	伐地那非哌嗪 酮	C ₂₁ H ₂₆ N ₆ O ₅ S	475.1758	312.1581, 299.1139, 284.1268, 151.0866	10.708	[M+H] ⁺	5
43	丙氧苯基艾地 那非	C ₂₄ H ₃₄ N ₆ O ₄ S	503.2435	325.1653, 299.1139, 283.1195, 115.1230, 113.1073, 99.0917, 71.0730	11.011	[M+H] ⁺	5
44	去甲基他达拉 非	C ₂₁ H ₁₇ N ₃ O ₄	376.1292	302.0812, 263.0901, 262.0862, 254.0924, 233.0835, 204.0808, 169.076, 135.0441	11.084	[M+H] ⁺	5
45	2- 羟乙基去甲 他达拉非	C ₂₃ H ₂₁ N ₃ O ₅	420.1554	298.1186, 270.1237, 262.0862, 197.0709, 169.0760, 135.0441	11.339	[M+H] ⁺	5
46	亚硝地那非	C ₂₇ H ₃₅ N ₉ O ₅ S ₂	630.2275	487.2109, 377.1267, 312.1574, 142.0070, 113.1073	12.253	[M+H] ⁺	5
47	苄西地那非	C ₂₈ H ₃₄ N ₆ O ₄ S	551.2435	459.1775, 377.1271, 312.1574, 134.0964, 91.0542	12.271	[M+H] ⁺	5
48	3- 羟丙基去甲 他达拉非	C ₂₄ H ₂₃ N ₃ O ₅	434.1710	312.1343, 284.1394, 262.0863, 169.0760, 135.0441	12.235	[M+H] ⁺	5
49	酮红地那非	C ₂₅ H ₃₂ N ₆ O ₄	481.2558	410.2187, 396.2030, 325.1619, 297.1346, 72.0808	12.347	[M+H] ⁺	5
50	双酮红地那非	C ₂₅ H ₃₀ N ₆ O ₅	495.2350	311.1139, 166.0975, 127.0866	12.448	[M+H] ⁺	5
51	他达拉非	C ₂₂ H ₁₉ N ₃ O ₄	390.1448	268.1081, 262.0862, 250.0863, 240.1131, 169.0760, 135.0441	12.954	[M+H] ⁺	5
52	羟基硫代伐地 那非	C ₂₃ H ₃₂ N ₆ O ₄ S ₂	521.1999	328.1352, 315.0910, 299.0961, 167.0638, 129.1022, 99.0917	13.133	[M+H] ⁺	5
53	丙氧苯基异丁 基艾地那非	C ₂₅ H ₃₆ N ₆ O ₄ S	517.2592	339.1809, 313.1295, 297.1339, 113.1073, 99.0917, 71.0730	13.276	[M+H] ⁺	5
54	氨基西地那非	C ₁₈ H ₂₃ N ₅ O ₄ S	406.1544	364.1074, 299.1139, 283.1195, 256.0968, 255.1214, 166.0975	13.320	[M+H] ⁺	5
55	那莫伐地那非	C ₁₈ H ₂₀ N ₄ O ₄	357.1557	329.1244, 300.0853, 151.0866, 123.0917	13.513	[M+H] ⁺	5
56	N- 叔丁氧羰 基 -N- 去乙基 红地那非	C ₂₈ H ₃₈ N ₆ O ₅	539.2976	439.2452, 353.1568, 339.1816, 297.1346, 99.0917	13.596	[M+H] ⁺	5
57	2- 羟丙基去甲 他达拉非	C ₂₄ H ₂₃ N ₃ O ₅	434.1710	312.1343, 284.1393, 262.0862, 169.0760, 135.0427	13.684	[M+H] ⁺	5
58	米罗那非	C ₂₆ H ₃₇ N ₅ O ₅ S	532.2588	404.1632, 312.1336, 296.1387, 129.1022, 99.0917	13.771	[M+H] ⁺	5
59	羟基硫代红地 那非	C ₂₅ H ₃₄ N ₆ O ₃ S	499.2486	341.1174, 327.1240, 313.1112, 143.1173, 127.0862	14.346	[M+H] ⁺	5
60	桂地那非	C ₃₂ H ₃₈ N ₆ O ₃	555.3078	437.2296, 355.1765, 117.0699, 115.0542	14.659	[M+H] ⁺	5
61	N- 乙基他达 拉非	C ₂₃ H ₂₁ N ₃ O ₄	404.1605	282.1237, 262.0862, 250.0822, 135.0441	15.036	[M+H] ⁺	5
62	硫代西地那非	C ₂₂ H ₃₀ N ₆ O ₃ S ₂	491.1894	341.1424, 327.1274, 299.0961, 100.0995, 99.0917, 58.0651	15.641	[M+H] ⁺	5

ID	化合物名称	化学式	前体离子 (m/z)	二级质谱特征离子 (m/z)	保留时间 (min)	加合 方式	检出限 (ng/mL)
63	羟基硫代豪莫西地那非	C ₂₃ H ₃₂ N ₆ O ₄ S ₂	521.1999	503.1894, 327.1274, 299.0961, 129.1022, 99.0917	15.657	[M+H] ⁺	5
64	硫代豪莫西地那非	C ₂₃ H ₃₂ N ₆ O ₃ S ₂	505.2050	355.1581, 327.1274, 299.0961, 113.1073, 99.0917, 72.0808, 58.0651	15.775	[M+H] ⁺	5
65	去甲基硫代西地那非	C ₂₁ H ₂₈ N ₆ O ₃ S ₂	477.1737	393.1016, 327.1274, 299.0961, 271.0985, 85.0760	15.786	[M+H] ⁺	5
66	二硫代去乙基卡巴地那非	C ₂₂ H ₂₈ N ₆ OS ₂	457.1839	371.0995, 343.0682	16.416	[M+H] ⁺	5
67	二硫代去甲基卡巴地那非	C ₂₃ H ₃₀ N ₆ OS ₂	471.1995	414.1417, 371.0995, 343.0682	16.489	[M+H] ⁺	5
68	他达拉非甲基氯化物	C ₂₂ H ₁₉ ClN ₂ O ₅	427.1055	334.1074, 302.0812, 274.0862, 262.0862, 135.0441	16.630	[M+H] ⁺	5
69	脱哌嗪基硫代西地那非	C ₁₇ H ₂₀ N ₄ O ₄ S ₂	409.0999	381.0686, 292.0387, 212.0818, 167.0638, 99.0137	16.538	[M+H] ⁺	5
70	那非乙酸	C ₁₈ H ₂₀ N ₄ O ₄	357.1557	329.1244, 311.1139, 300.0853, 285.1346, 256.0955, 166.0975	16.666	[M+H] ⁺	5
71	硫代艾地那非	C ₂₃ H ₃₂ N ₆ O ₃ S ₂	505.2050	327.1274, 315.0910, 299.0961, 113.1073, 99.0917, 71.0730	16.774	[M+H] ⁺	5
72	N-甲基二硫代艾地那非	C ₂₅ H ₃₄ N ₆ OS ₂	499.2308	468.1886, 428.1573, 371.0995, 343.0682, 72.0808	17.441	[M+H] ⁺	5
73	二硫代艾地那非	C ₂₄ H ₃₂ N ₆ OS ₂	485.2152	468.1886, 428.1573, 371.0995, 343.0682	17.639	[M+H] ⁺	5
74	丙氧苯基硫代西地那非	C ₂₃ H ₃₂ N ₆ O ₃ S ₂	505.2050	355.1553, 341.1431, 329.1033, 315.0910, 313.1118, 299.0961, 271.1012, 99.0917, 58.0651	17.759	[M+H] ⁺	5
75	丙氧苯基硫代羟基豪莫西地那非	C ₂₄ H ₃₄ N ₆ O ₄ S ₂	535.2156	315.0910, 299.0961, 271.0985, 129.1022, 99.0917	17.762	[M+H] ⁺	5
76	丙氧苯基硫代豪莫西地那非	C ₂₄ H ₃₄ N ₆ O ₃ S ₂	519.2207	327.1274, 315.0910, 299.0961, 113.1073, 99.0917, 72.0808, 58.0651	17.803	[M+H] ⁺	5
77	庆地那非	C ₁₉ H ₂₂ N ₄ O ₃	355.1765	327.1452, 313.1659, 298.1061, 285.1346, 256.0955, 166.0975	17.917	[M+H] ⁺	5
78	丙氧苯基硫代艾地那非	C ₂₄ H ₃₄ N ₆ O ₃ S ₂	519.2207	341.1424, 315.0910, 299.0955, 113.1073, 99.0917, 71.0730	18.059	[M+H] ⁺	5
79	羟基氯地那非	C ₁₉ H ₂₃ ClN ₄ O ₃	391.1531	363.1219, 313.1295, 285.1346, 256.0955, 166.0975	18.125	[M+H] ⁺	5
80	他达拉非二氯乙酰化物	C ₂₂ H ₁₈ Cl ₂ N ₂ O ₅	461.0666	349.1183, 334.1074, 302.0812, 274.0862, 263.0914, 262.0862, 204.0808, 135.0441	18.350	[M+H] ⁺	5
81	氯地那非	C ₁₉ H ₂₁ ClN ₄ O ₃	389.1375	361.1062, 311.1139, 285.1346, 256.0968, 166.0975	18.469	[M+H] ⁺	5
82	伪伐地那非	C ₂₂ H ₂₉ N ₅ O ₄ S	460.2013	312.1581, 299.1139, 284.1268, 256.0955, 151.0866	18.613	[M+H] ⁺	5
83	N-丁基他达拉非	C ₂₅ H ₂₅ N ₃ O ₄	432.1918	310.1550, 282.1601, 262.0862, 197.0709, 169.0769, 135.0441	18.656	[M+H] ⁺	5

ID	化合物名称	化学式	前体离子 (m/z)	二级质谱特征离子 (m/z)	保留时间 (min)	加合 方式	检出限 (ng/mL)
84	罗地那非碳酸酯	C ₄₇ H ₆₂ N ₁₂ O ₁₁ S ₂	1035.4175	487.2109, 112.0995	18.743	[M+H] ⁺	5
85	N- 苄基他达拉非	C ₂₈ H ₂₃ N ₃ O ₄	466.1761	344.1390, 316.1427, 262.0841, 169.0748, 135.0436	18.861	[M+H] ⁺	5
86	硝地那非	C ₁₇ H ₁₉ N ₅ O ₄	358.1510	330.1197, 284.1268, 256.0955, 136.0505	18.878	[M+H] ⁺	5
87	N- 环己基去甲他达拉非	C ₂₇ H ₂₇ N ₃ O ₄	458.2074	336.1707, 308.1757, 262.0863, 197.0709, 169.0760, 135.0441	19.089	[M+H] ⁺	5
88	那莫西地那非	C ₂₂ H ₂₉ N ₅ O ₄ S	460.2013	312.1581, 299.1139, 283.1195, 256.0955, 84.0808	19.132	[M+H] ⁺	5
89	脱哌嗪磺酰基西地那非	C ₁₇ H ₂₀ N ₄ O ₂	313.1659	285.1346, 256.0955, 241.0720, 166.0975, 120.0444	19.293	[M+H] ⁺	5
90	伐地那非二聚体	C ₃₈ H ₄₆ N ₁₀ O ₈ S ₂	835.3014	312.1581, 299.1134, 284.1268, 283.1195, 151.0866	19.313	[M+H] ⁺	5
91	N- 苯丙烯基他达拉非	C ₃₀ H ₂₄ N ₄ O ₄	505.1870	383.1502, 262.0849, 250.0849, 159.0917, 135.0441	19.327	[M+H] ⁺	5
92	西地那非二聚体	C ₃₈ H ₄₆ N ₁₀ O ₈ S ₂	835.3014	312.1581, 299.1139, 283.1195, 255.1202, 166.0975, 85.0760	19.619	[M+H] ⁺	5
93	苯丙代卡巴地那非	C ₂₉ H ₃₄ N ₆ O ₃	515.2765	353.1608, 311.1139, 166.0975, 147.0077	19.784	[M+H] ⁺	5
94	N- 辛基去甲他达拉非	C ₂₉ H ₃₃ N ₃ O ₄	488.2544	366.2176, 338.2200, 262.0862, 169.0760, 135.0441	19.977	[M+H] ⁺	5
95	双氯地那非	C ₁₉ H ₂₀ Cl ₂ N ₄ O ₂	407.1036	379.0723, 363.0410, 350.0332, 343.0956, 280.0955, 166.0975, 136.0505	20.272	[M+H] ⁺	5

岛津应用云

