

LCMS-QTOF 快速筛查尿液中 108 种毒物成分

LCMS-QTOF-081

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结合《法医毒物 QTOF 高分辨质谱库》建立了尿液中毒物药物的快速筛查方法。参考《生物检材中 382 种药（毒）物筛选 液相色谱 - 高分辨质谱法》征求意见稿，利用该方法对 2 份尿液样品中毒药物进行定性分析，结果显示：两份样品中分别检出吗啡、单乙酰吗啡和环丙沙星成分，目标化合物的 MS1、MS2 质荷比偏差均小于 5 ppm，二级谱图的相似度得分均大于 90。使用该方法，可通过一针进样，快速完成目标物的定性筛查，结果准确可靠。

关键词： 四极杆飞行时间串联质谱仪 尿液 毒药物

技术特点：

- ❖ 利用《法医毒物 QTOF 高分辨质谱库》可实现尿液中毒药物的快速定性
- ❖ Insight Explore 软件的批量搜库和小标记筛选，快速定位化合物结果，提升分析效率

在法医检验工作中，毒药物检验是一项重要的工作内容。法医毒药物检验应用在侦破刑事案件中是比较常见的，能够为案件的侦破提供有力的证据。当前，随着科学技术的不断进步与发展，毒药物种类的不断增多，对于检验的效率也需要进一步的提升。因此，一种快速便捷的检测方法尤为重要。基于实践工作中，对于检验方法的准确性方面也有较高的要求，开发一种快速、便捷和准确分析的方法十分有意义。

生物检材中毒品检测技术是了解体内毒药物摄入情况的重要技术手段。当前毒品种类变化越来越快，

飞行时间质谱不仅能够快速定性体内摄入的已知毒品，更能够在新出现的毒品鉴定时提供有效信息，有助于掌握体内毒药物摄入趋势。区别与三重四极杆质谱的分析模式，飞行时间质谱具有分析目标物广泛、质荷比检测准确度高、二级谱图准确度高等特点，非常适合做定性分析。

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，建立了一种对尿液中毒药物快速定性的分析方法。对 2 份尿液样品进行了分析，可快速筛查出样品中的毒药物成分，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. 5.118; LabSolutions Insight Ver. 4.0SP2		

1.2 分析条件

色谱条件

色 谱 柱：Shim-pack GIST AQ-C18 (100 mm×3.0 mm I.D., 3 μm, 岛津（上海）实验器材有限公司，P/N:227-30722-05)

流 动 相 : A相 -2 mmol/L 甲酸铵 -0.1 % 甲酸水溶液;
B相 -2 mmol/L 甲酸铵 -0.1 % 甲酸甲醇溶液
进 样 口 温 度 : 0.4 mL/min
进 样 方 式 : 40 °C
线 速 度 : 10 μL
离 子 源 温 度 : 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
3.00	泵	B.Conc	30
6.00	泵	B.Conc	60
9.00	泵	B.Conc	98
11.00	泵	B.Conc	98
11.10	泵	B.Conc	5
15.00	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 : 250 °C
接 口 温 度 : 300 °C
碰 撞 能 量 : 35±15 V
扫 描 模 式 : MS Scan(m/z 50 - 1000); DDA MS/MS (m/z 50 -1000)

1.4 样品前处理

1.4.1 样品前处理

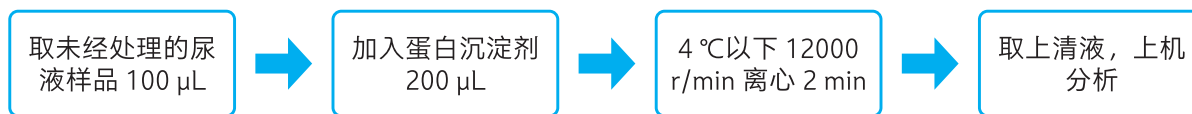


图 1 样品前处理过程

1.4.2 质控样品配制

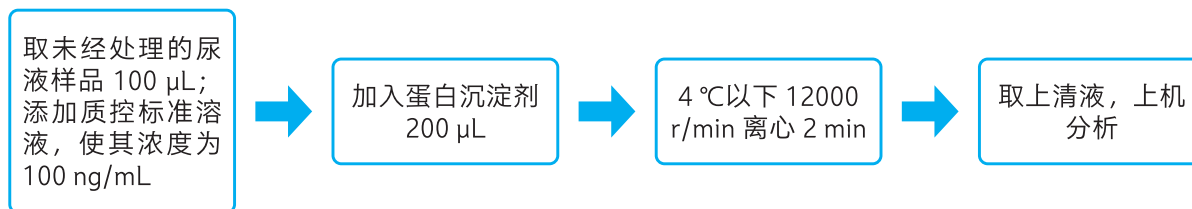


图 2 质控样品配制

■ 结果与讨论

2.1 色谱图及灵敏度

制备浓度为 10 ng/mL 的 108 种成分加标样品, 经前处理后, 上机分析; 利用《法医毒物 QTOF 高分辨质谱库》进行谱图检索定性确认, 其结果显示目标化合物均可检出。其色谱图如图 3 所示, 化合物具体信息详见附录。

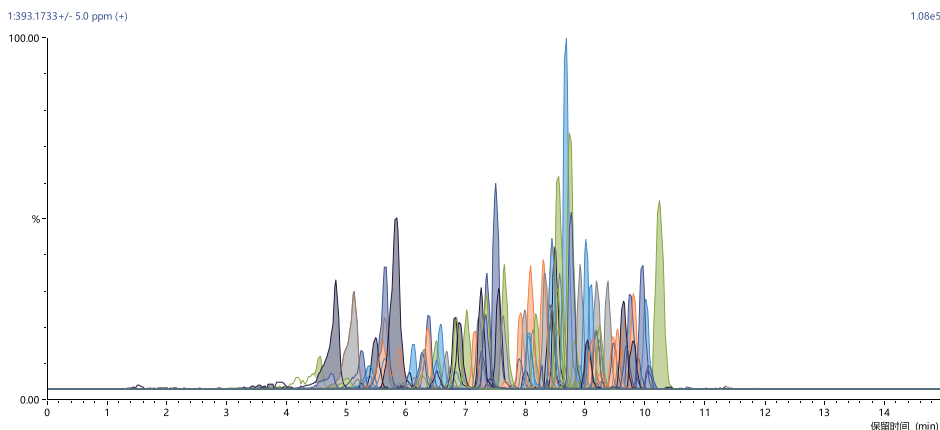
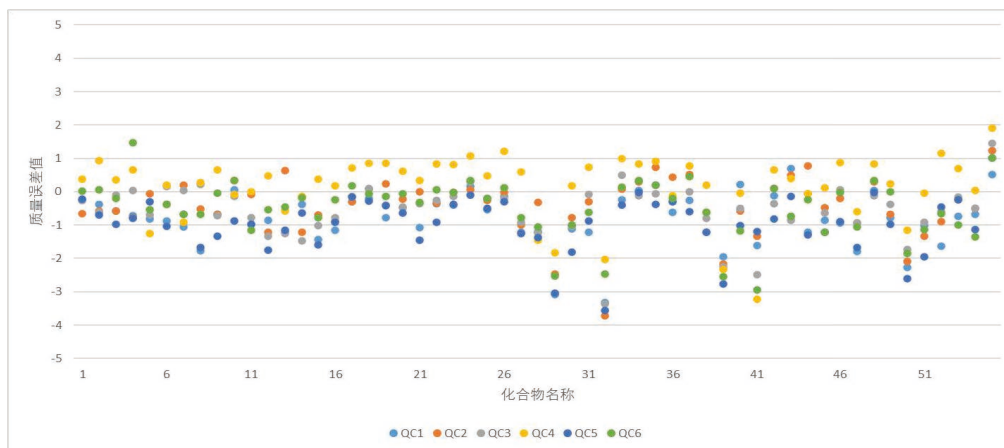


图 3 10 ng/mL 加标样品色谱图

2.2 准确性

配置浓度为 100 ng/mL 的 108 种毒药物成分质控样品, 经前处理后, 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, 所有化合物的质荷比偏差均小于 5 ppm。化合物质荷比偏差统计情况如图 4 所示:



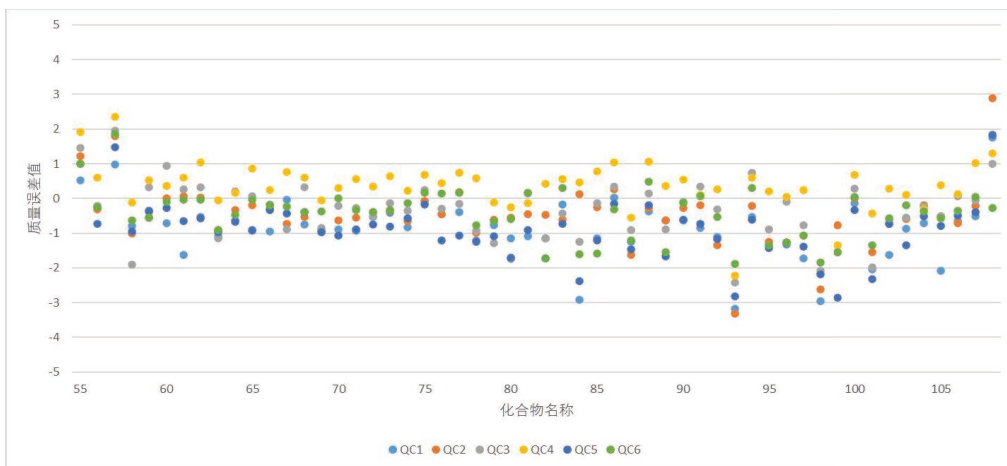


图 4 质控样品连续分析的质荷比偏差 (n=6, 化合物 ID 见附录)

2.3 稳定性

配置浓度为 100 ng/mL 的 108 种成分质控样品，经前处理后，将质控样品连续重复 6 次进样分析。保留时间和峰面积的相对标准偏差小于 0.54% 和 6.8%，具体统计情况如图 5 所示。

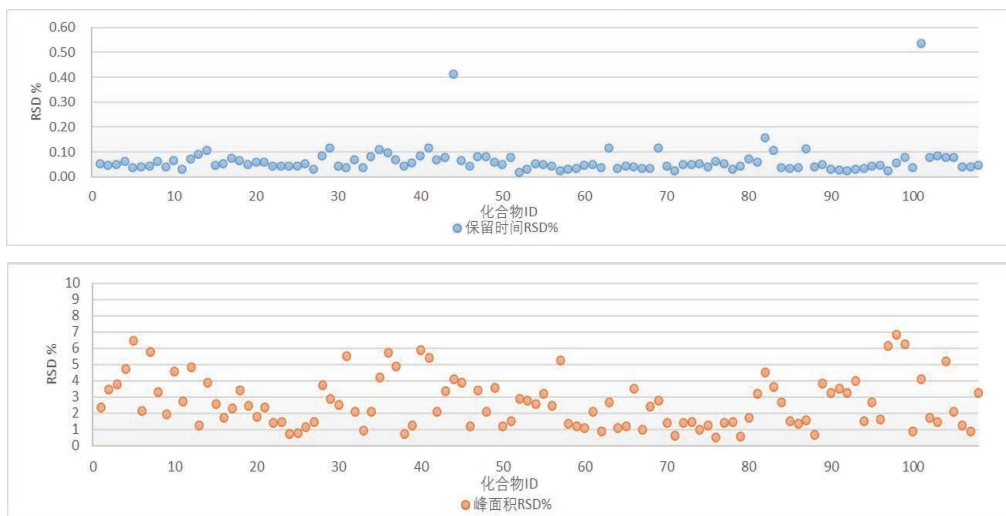


图 5 保留时间和峰面积的相对标准偏差 (n=6, 化合物 ID 见附录)

2.4 样品分析

使用 DDA(+) 模式对两份尿液样品进行分析，结合《法医毒物 QTOF 高分辨质谱库》，使用 Insight Explore 软件的批量搜库功能，对样品中毒物组分进行快速筛查。数据处理步骤如下：

导入质谱库中筛查化合物列表，设置积分参数

导入二级质谱库“法医毒物 QTOF 高分辨质谱库”

编辑“Flags”参数，设置定性筛选条件

导入样品数据，批量搜库，快速查看数据：

标准中对于阳性样品的判断依据为：样品中目标物的色谱峰保留时间与标准物质工作溶液一致（相对误差在 $\pm 2.5\%$ 之内），且样品中目标物前体离子的质荷比与理论质荷比一致（质荷比大于等于 200 时，质量精度小于等于 5 ppm；质荷比小于 200 时，质量精度小于 1 mDa），同时至少 1 个二级质谱特征离子与标准物质工作溶液一致（质荷比大于等于 200 时，质量精度小于等于 5 ppm；质荷比小于 200 时，质量精度小于 1 mDa）。

参考标准中定性要求，对 2 份尿液样品进行检测，结果显示两份尿液样品均为阳性。目标化合物的 MS1、MS2 质荷比偏差均小于 5 ppm，二级谱图的相似度得分均大于 90，具体结果如下：

表 2 两份尿液样品检测结果

	化合物	保留时间 (min)	MS1 m/z 偏差 (ppm)	MS2 搜库相似度
样本 1	吗啡	4.158	0.210	99
	单乙酰吗啡	5.510	0.396	96
样本 2	环丙沙星	6.602	2.529	97

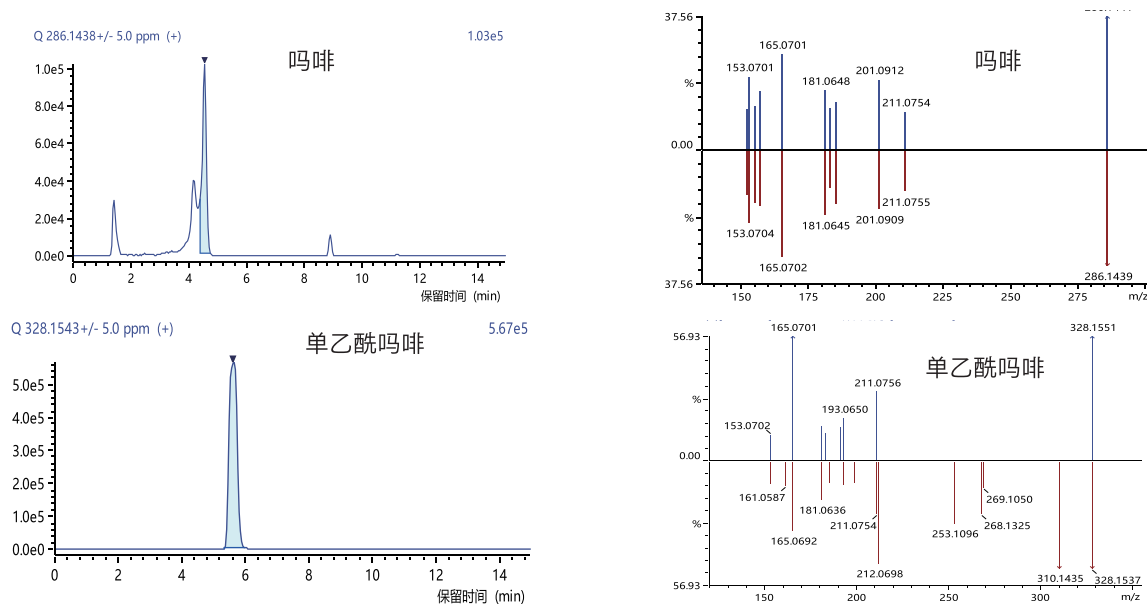


图 6 样本 1 检测结果色谱图及 MS2 质谱图

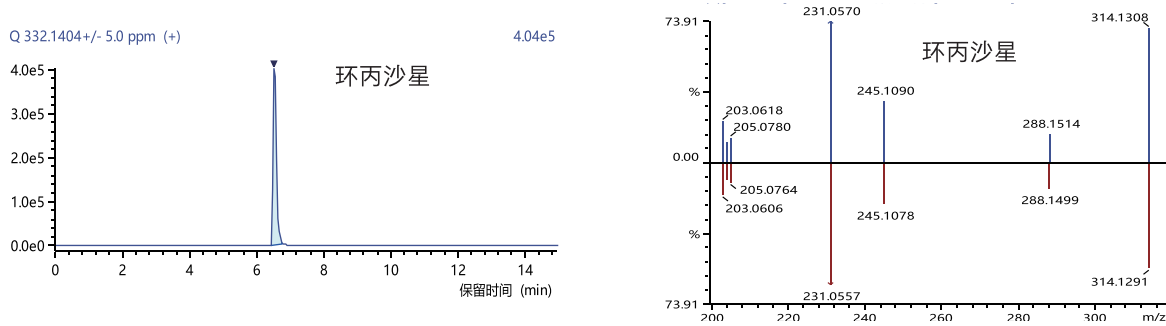


图 7 样本 2 检测结果色谱图及 MS2 质谱图

■ 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《法医毒物 QTOF 高分辨质谱库》快速对 2 份尿液样品中毒物药物进行筛查。结果显示：两份尿液样品分别筛查出吗啡、单乙酰吗啡和环丙沙星，目标化合物的 MS1、MS2 质荷比偏差小于 5 ppm，二级谱图的相似度得分均大于 90。该方案可以实现一针进样，快速完成目标物的定性筛查，具有一定的实际应用价值，供相关人员参考。

岛津应用云



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	司帕沙星	C ₁₉ H ₂₂ F ₂ N ₄ O ₃	393.1733	230.0724 349.1834 292.1256	7.339	[M+H] ⁺	10
2	双氟沙星	C ₂₁ H ₁₉ F ₂ N ₃ O ₃	400.1467	299.0991 256.0569 148.0557	6.903	[M+H] ⁺	10
3	恩诺沙星	C ₁₉ H ₂₂ FN ₃ O ₃	360.1718	245.1085 203.0615 316.1820	6.602	[M+H] ⁺	20
4	氧氟沙星	C ₁₈ H ₂₀ FN ₃ O ₄	362.1511	261.1034 205.0408 318.1612	6.300	[M+H] ⁺	20
5	环丙沙星	C ₁₇ H ₁₈ FN ₃ O ₃	332.1404	231.0564 203.0615 288.1507	6.602	[M+H] ⁺	20
6	氟甲喹	C ₁₄ H ₁₂ FNO ₃	262.0874	238.0499 220.0405 174.0350	9.182	[M+H] ⁺	10
7	吡喹酮	C ₁₉ H ₂₄ N ₂ O ₂	313.1911	83.0855 203.1179 132.0808	10.154	[M+H] ⁺	10
8	依诺沙星	C ₁₅ H ₁₇ FN ₄ O ₃	321.1357	204.0568 250.0623 234.1037	6.267	[M+H] ⁺	20
9	西诺沙星	C ₁₂ H ₁₀ N ₂ O ₅	263.0662	217.0608 189.0295 207.0400	8.110	[M+H] ⁺	10
10	洛美沙星	C ₁₇ H ₁₉ F ₂ N ₃ O ₃	352.1467	265.1147 237.0834 195.0490	6.702	[M+H] ⁺	10
11	萘啶酸	C ₁₂ H ₁₂ N ₂ O ₃	233.0921	205.0608 159.0553 187.0502	9.115	[M+H] ⁺	10
12	阿奇霉素	C ₃₈ H ₇₂ N ₂ O ₁₂	749.5158	591.4215 158.1176 98.0964	7.654	[M+2H] ²⁺	10
13	沙丁胺醇	C ₁₃ H ₂₁ NO ₃	240.1594	148.0757 222.1489 121.0648	4.826	[M+H] ⁺	20
14	奥拉多司	C ₁₂ H ₁₃ N ₃ O ₄	264.0979	143.0604 212.0818 221.0557	4.993	[M+H] ⁺	20
15	苯环利定	C ₁₇ H ₂₅ N	244.2060	86.0964 159.1168 91.0542	8.043	[M+H] ⁺	20
16	7-氨基氟 硝西泮	C ₁₆ H ₁₄ FN ₃ O	284.1194	135.0917 226.0901 240.0932	7.674	[M+H] ⁺	10
17	辛可尼丁	C ₁₉ H ₂₂ N ₂ O	295.1805	81.0699 168.0808 130.0651	6.937	[M+H] ⁺	10
18	阿托品	C ₁₇ H ₂₃ NO ₃	290.1751	124.1121 93.0699 91.0542	6.401	[M+H] ⁺	10
19	马钱子碱	C ₂₃ H ₂₆ N ₂ O ₄	395.1965	324.1234 367.1649 244.0970	6.434	[M+H] ⁺	10
20	原阿片碱	C ₂₀ H ₁₉ NO ₅	354.1336	188.0706 149.0597 189.0784	7.372	[M+H] ⁺	10
21	毒扁豆碱	C ₁₅ H ₂₁ N ₃ O ₂	276.1707	162.0913 147.0679 219.1128	6.099	[M+H] ⁺	10
22	阿芬太尼	C ₂₁ H ₃₂ N ₆ O ₃	417.2609	165.1022 99.0553 197.1285	8.344	[M+H] ⁺	10
23	瑞芬太尼	C ₂₀ H ₂₈ N ₂ O ₅	377.2071	113.0597 146.0964 81.0335	7.272	[M+H] ⁺	10
24	卡芬太尼	C ₂₄ H ₃₀ N ₂ O ₃	395.2328	105.0699 113.0597 246.1489	8.344	[M+H] ⁺	10
25	舒芬太尼	C ₂₂ H ₃₀ N ₂ O ₂ S	387.2101	238.1260 355.1839 111.0263	8.746	[M+H] ⁺	10
26	对氟芬太尼	C ₂₂ H ₂₇ FN ₂ O	355.2178	188.1434 105.0699 150.0714	8.210	[M+H] ⁺	10
27	左美沙芬	C ₁₈ H ₂₅ NO	272.2009	215.1430 171.0804 147.0804	8.478	[M+H] ⁺	10
28	扑米酮	C ₁₂ H ₁₄ N ₂ O ₂	219.1128	162.0913 91.0540	6.166	[M+H] ⁺	20
29	可乐定	C ₉ H ₉ Cl ₂ N ₃	230.0246	159.9715 123.9949 69.0447	5.864	[M+H] ⁺	10
30	芬氟拉明	C ₁₂ H ₁₆ F ₃ N	232.1308	159.0416 187.0729 109.0448	7.976	[M+H] ⁺	10
31	去甲西洋	C ₁₅ H ₁₁ ClN ₂ O	271.0633	140.0262 208.0995 165.0214	9.953	[M+H] ⁺	10
32	多塞平	C ₁₉ H ₂₁ NO	280.1696	235.1117 107.0491 117.0600	8.646	[M+H] ⁺	10
33	丙咪嗪	C ₁₉ H ₂₄ N ₂	281.2011	86.0964 58.0651 193.0886	9.048	[M+H] ⁺	10
34	纳洛酮	C ₁₉ H ₂₁ NO ₄	328.1543	310.1438 253.1097 212.0706	5.161	[M+H] ⁺	20

35	舒必利	C ₁₅ H ₂₃ N ₃ O ₄ S	342.1481	112.1121 214.0169 84.0800	4.826	[M+H] ⁺	10
36	消旋山莨菪碱	C ₁₇ H ₂₃ NO ₄	306.1700	140.1070 122.0964 306.1700	5.630	[M+H] ⁺	20
37	奥氮平	C ₁₇ H ₂₀ N ₄ S	313.1481	256.0903 198.0246 169.0760	5.563	[M+H] ⁺	20
38	秋水仙碱	C ₂₂ H ₂₅ NO ₆	400.1755	267.1016 224.0832 295.0900	8.780	[M+H] ⁺	10
39	喹硫平	C ₂₁ H ₂₅ N ₃ O ₂ S	384.1740	221.1073 253.0794 210.0372	8.679	[M+H] ⁺	10
40	氯胺酮	C ₁₃ H ₁₆ ClNO	238.0993	179.0622 125.0153 220.0888	6.803	[M+H] ⁺	10
41	苯丙胺	C ₉ H ₁₃ N	136.1121	91.0542 119.0855 65.0386	5.965	[M+H] ⁺	100
42	可卡因	C ₁₇ H ₂₁ NO ₄	304.1543	182.1176 150.0913 82.0650	7.171	[M+H] ⁺	10
43	可待因	C ₁₈ H ₂₁ NO ₃	300.1594	165.0699 199.0754 225.0910	5.261	[M+H] ⁺	20
44	吗啡	C ₁₇ H ₁₉ NO ₃	286.1438	165.0699 201.0910 181.0648	1.452	[M+H] ⁺	50
45	海洛因	C ₂₁ H ₂₃ NO ₅	370.1649	165.0699 268.1332 211.0754	6.870	[M+H] ⁺	20
46	美沙酮	C ₂₁ H ₂₇ NO	310.2165	105.0335 265.1587 95.0493	9.222	[M+H] ⁺	10
47	甲基苯丙胺	C ₁₀ H ₁₅ N	150.1277	91.0542 119.0855	6.066	[M+H] ⁺	20
48	单乙酰吗啡	C ₁₉ H ₂₁ NO ₄	328.1543	211.0756 165.0700 193.0651	5.651	[M+H] ⁺	20
49	土的宁	C ₂₁ H ₂₂ N ₂ O ₂	335.1754	156.0808 184.0757 129.0699	6.200	[M+H] ⁺	10
50	罂粟碱	C ₂₀ H ₂₁ NO ₄	340.1549	324.1230 171.0679 202.0863	7.674	[M+H] ⁺	10
51	咖啡因	C ₈ H ₁₀ N ₄ O ₂	195.0877	138.0662 110.0713 83.0602	6.602	[M+H] ⁺	20
52	奥沙西洋	C ₁₅ H ₁₁ ClN ₂ O ₂	287.0581	241.0527 104.0495	9.618	[M+H] ⁺	10
53	替马西洋	C ₁₆ H ₁₃ ClN ₂ O ₂	301.0738	255.0684 283.0633 177.0214	9.785	[M+H] ⁺	10
54	硝西洋	C ₁₅ H ₁₁ N ₃ O ₃	282.0873	180.0808 236.0944 207.0911	9.316	[M+H] ⁺	10
55	阿普唑仑	C ₁₇ H ₁₃ ClN ₄	309.0897	205.0542 281.0451 309.0453	9.718	[M+H] ⁺	10
56	7-氨基氯硝西洋	C ₁₅ H ₁₂ ClN ₃ O	286.0742	121.0760 222.1026 250.0975	7.071	[M+H] ⁺	10
57	三氟拉嗪	C ₂₁ H ₂₄ F ₃ N ₃ S	408.1708	70.0651 113.1073 141.1386	10.020	[M+H] ⁺	10
58	安替比林	C ₁₁ H ₁₂ N ₂ O	189.1022	95.0491 56.0495 106.0651	7.305	[M+H] ⁺	10
59	安眠酮	C ₁₆ H ₁₄ N ₂ O	251.1178	132.0808 91.0542 117.0573	9.651	[M+H] ⁺	10
60	硝甲西洋	C ₁₆ H ₁₃ N ₃ O ₃	296.1029	250.1119 222.1161 282.1015	9.450	[M+H] ⁺	10
61	舒乐安定	C ₁₆ H ₁₁ ClN ₄	295.0745	205.1080 267.1178 240.176	9.517	[M+H] ⁺	20
62	阿米替林	C ₂₀ H ₂₃ N	278.1903	91.0542 117.0699 191.0855	9.216	[M+H] ⁺	10
63	伪麻黄碱	C ₁₀ H ₁₅ NO	166.1226	148.1121 133.0886 91.0542	5.395	[M+H] ⁺	20
64	卡马西平	C ₁₅ H ₁₂ N ₂ O	237.1022	194.0964 165.0699 192.0808	9.216	[M+H] ⁺	10
65	地芬尼多	C ₂₁ H ₂₇ NO	310.2165	129.0699 91.0542	8.478	[M+H] ⁺	20
66	奋乃静	C ₂₁ H ₂₆ ClN ₃ OS	404.1558	171.1492 143.1179 246.0139	9.819	[M+H] ⁺	10
67	洛非西定	C ₁₁ H ₁₂ Cl ₂ N ₂ O	259.0399	98.0839 259.0399 97.0760	7.339	[M+H] ⁺	10
68	西地那非	C ₂₂ H ₃₀ N ₆ O ₄ S	475.2122	58.0651 100.0995 283.1190	8.914	[M+H] ⁺	10
69	麻黄碱	C ₁₀ H ₁₅ NO	166.1226	148.1121 133.0886 91.0542	5.395	[M+H] ⁺	20
70	丙烯酰芬太尼	C ₂₂ H ₂₆ N ₂ O	335.2118	105.0699 188.1434 79.0542	7.976	[M+H] ⁺	10
71	乙酰芬太尼	C ₂₁ H ₂₆ N ₂ O	323.2118	188.1418 105.0692 132.0804	7.641	[M+H] ⁺	10

72	吠喃芬太尼	C ₂₄ H ₂₆ N ₂ O ₂	375.2067	105.0699 188.1434 146.0964	8.143	[M+H] ⁺	10
73	奥芬太尼	C ₂₂ H ₂₇ FN ₂ O ₂	371.2129	105.0699 188.1434	7.574	[M+H] ⁺	20
74	异丁酰芬太尼	C ₂₃ H ₃₀ N ₂ O	351.2431	105.0699 188.1434	8.579	[M+H] ⁺	10
75	戊酰芬太尼	C ₂₄ H ₃₂ N ₂ O	365.2587	105.0699 188.1434	9.014	[M+H] ⁺	10
76	芬太尼	C ₂₂ H ₂₈ N ₂ O	337.2274	105.0699 188.1434 132.0808	8.110	[M+H] ⁺	10
77	蒂巴因	C ₁₉ H ₂₁ NO ₃	312.1594	58.0651 266.0938 189.0699	6.870	[M+H] ⁺	10
78	美沙芬	C ₁₈ H ₂₅ NO	272.2009	215.1430 171.0804 147.0804	8.512	[M+H] ⁺	10
79	哌替啶	C ₁₅ H ₂₁ NO ₂	248.1645	174.1260 220.1313 70.0642	7.406	[M+H] ⁺	10
80	利多卡因	C ₁₄ H ₂₂ N ₂ O	235.1805	86.0964 58.0651	6.602	[M+H] ⁺	10
81	异丙嗪	C ₁₇ H ₂₀ N ₂ S	285.1420	86.0964 198.0372 240.0842	8.880	[M+H] ⁺	10
82	普鲁卡因	C ₁₃ H ₂₀ N ₂ O ₂	237.1598	100.1121 164.0706 120.0444	5.194	[M+H] ⁺	10
83	氨基比林	C ₁₃ H ₁₇ N ₃ O	232.1444	111.0917 98.0839	5.462	[M+H] ⁺	10
84	氯丙嗪	C ₁₇ H ₁₉ ClN ₂ S	319.1030	58.0651 86.0964 214.0418	9.584	[M+H] ⁺	10
85	溴西洋	C ₁₄ H ₁₀ BrN ₃ O	316.0080	182.0839 209.0948 181.0760	9.081	[M+H] ⁺	20
86	氯氮平	C ₁₈ H ₁₉ ClN ₄	327.1370	270.0793 296.0949 192.0682	8.579	[M+H] ⁺	20
87	涕灭威砒	C ₇ H ₁₄ N ₂ O ₄ S	240.1013	148.0427 166.0532 86.0600	5.663	[M+H] ⁺	100
88	醚磺隆	C ₁₅ H ₁₉ N ₅ O ₇ S	414.1078	183.0513 157.0720 215.0373	8.612	[M+H] ⁺	10
89	速灭磷碎片	C ₆ H ₉ O ₅ P	193.0260	127.0154 67.0179 109.0050	8.110	[M+H] ⁺	50
90	啶嘧磺隆	C ₁₃ H ₁₂ F ₃ N ₅ O ₅ S	408.0584	182.0560 227.0097 162.9761	9.685	[M+H] ⁺	10
91	苄嘧磺隆	C ₁₆ H ₁₈ N ₄ O ₇ S	411.0969	149.0597 182.0560 213.0216	9.785	[M+H] ⁺	10
92	恶虫威	C ₁₁ H ₁₃ NO ₄	224.0917	109.0284 167.0703 59.0491	8.947	[M+H] ⁺	20
93	甲萘威	C ₁₂ H ₁₁ NO ₂	202.0863	145.0648 155.0603 117.0699	9.182	[M+H] ⁺	20
94	伐灭磷	C ₁₀ H ₁₆ NO ₅ PS ₂	326.0280	298.9814 245.0175 235.0188	9.383	[M+H] ⁺	10
95	抗蚜威	C ₁₁ H ₁₈ N ₄ O ₂	239.1503	182.1288 137.0709 85.0760	8.445	[M+H] ⁺	10
96	毒草安	C ₁₁ H ₁₄ ClNO	212.0837	170.0367 94.0651 106.0651	9.651	[M+H] ⁺	10
97	仲丁威	C ₁₂ H ₁₇ NO ₂	208.1332	95.0491 152.0706 57.0699	9.696	[M+H] ⁺	20
98	特丁草净	C ₁₀ H ₁₉ N ₅ S	242.1434	186.0808 91.0325 158.0495	10.254	[M+H] ⁺	10
99	涕灭威亚砒	C ₇ H ₁₄ N ₂ O ₃ S	207.0798	89.0420 105.0369 65.0056	5.429	[M+H] ⁺	50
100	甲磺隆	C ₁₄ H ₁₅ N ₅ O ₆ S	382.0816	167.0564 199.0060 135.0441	8.914	[M+H] ⁺	10
101	甲胺磷	C ₂ H ₈ NO ₂ PS	142.0086	112.0158 63.9947 78.9943	3.807	[M+H] ⁺	100
102	4- 甲基甲 卡西酮	C ₁₁ H ₁₅ NO	178.1226	144.0804 160.1119 119.0855	6.602	[M+H] ⁺	20
103	布苯丙胺	C ₁₁ H ₁₆ BrNO ₂	274.0437	257.0172 178.0988 135.0804	7.942	[M+H] ⁺	10
104	芬纳西洋	C ₁₅ H ₁₀ BrClN ₂ O	348.9738	183.9757 206.0839 242.0605	9.986	[M+H] ⁺	10
105	乙卡西酮	C ₁₁ H ₁₅ NO	178.1226	160.1121 145.0886 119.0855	6.635	[M+H] ⁺	20
106	氟西汀	C ₁₇ H ₁₈ F ₃ NO	310.1413	148.1121 259.0929 117.0699	9.283	[M+H] ⁺	20
107	丁丙诺非	C ₂₉ H ₄₁ NO ₄	468.3108	396.2169 252.1019 414.2639	8.545	[M+H] ⁺	10
108	去甲基氟西洋	C ₁₅ H ₁₀ FN ₃ O ₃	300.0779	198.0714 254.0850 225.0823	9.028	[M+H] ⁺	10