

LC-MS/MS 法测定化妆品中氢化曲安奈德等 121 种激素

LCMSMS-965

摘要： 本文使用岛津三重四极杆液质联用仪建立了快速测定化妆品中 121 种激素的方法。121 种激素在相应标曲范围内，相关系数均大于 0.995，各浓度点的回读准确度在 85.2%~114.6% 之间，线性相关性良好。稳定性考察中，121 种组分的保留时间和峰面积的相对标准偏差分别在 0.02%~0.40% 之间和 0.3%~7.0% 之间，仪器精密度良好。样品加标回收率在 73.4%~118.8% 之间，仪器检出限在 0.02~0.65 ng/mL 之间，可用于化妆品中 121 种激素的测定。

关键词： 激素 化妆品 三重四极杆液质联用仪

技术特点：

- ❖ 在不改变 63 种激素分析条件，将化合物种类扩展至 121 种，为方法扩项带来便利。
- ❖ 高柱效 Velox 色谱柱，实现 19.5 min 内快速分析 121 种化合物，3 对同分异构体实现良好分离。

激素是一类具有免疫抑制等药理作用的化合物，用在化妆品上可使皮肤光滑细腻、红润白嫩，对皮肤具有一定的嫩白作用，但长期使用该类激素会导致皮肤血管扩张、激素依赖性皮炎及不可逆转的皮肤萎缩等局部副作用。我国现行《化妆品安全技术规范》禁止在化妆品中添加糖皮质激素、性激素等。然而，仍有厂家非法将其添加到化妆品中，使皮肤达到速效祛痘美白的效果，给广大消费者带来危害。

2019 年国家药监局发布将化妆品中激素类成分的检测方法和化妆品中抗感染类药物的检测方法纳入

化妆品安全技术规范的通告，将《化妆品中激素类成分的检测方法》和《化妆品中抗感染类药物的检测方法》，作为第 2.34 和 2.35 项纳入《化妆品安全技术规范》第四章，方法包括 63 种化合物，其中有 41 种糖皮质激素、氟轻松和 7 种性激素等。本文针对已发布的 63 种激素方法进行修订，并参考《化妆品中 16 α -羟基泼尼松龙等 129 种原料的检验方法（征求意见稿）》，将 63 种激素扩增至 121 种，用岛津三重四极杆液质联用仪建立了化妆品中 121 种激素的分析方法。

■ 实验部分

1.1 仪器

采用岛津高效液相色谱 LC-30 AD 与三重四极杆质谱仪 LCMS-8050 联用系统，采用 Co-injection 功能。具体配置为：

| | | | |
|--------|----------|--------|-------------------------|
| 系统控制器： | CBM-20A | 自动进样器： | SIL-30AC |
| 输液泵： | LC-30AD | 质谱仪： | LCMS-8050 |
| 柱温箱： | CTO-30AC | 色谱工作站： | LabSolutions Ver. 5.118 |

1.2 分析条件

液相条件

色谱柱：Shim-pack Velox C18 2.1 mm I.D.× 100 mm L., 2.7 μ m, 岛津(上海)实验器材有限公司, P/N: 227-32009-03

流动相：A 相 - 水; B 相 - 乙腈 柱温：40 $^{\circ}$ C

流速：0.45 mL/min 进样体积：3 μ L

洗脱方式：梯度洗脱，B 相初始浓度为 25%，时间程序见表 1。

表 1 梯度洗脱时间程序

| Time(min) | Module | Command | Value |
|-----------|--------|---------|-------|
| 4.00 | 泵 | B.Conc | 25 |
| 9.50 | 泵 | B.Conc | 38 |
| 10.50 | 泵 | B.Conc | 38 |
| 14.50 | 泵 | B.Conc | 60 |
| 15.00 | 泵 | B.Conc | 95 |
| 16.00 | 泵 | B.Conc | 95 |
| 16.10 | 泵 | B.Conc | 25 |
| 19.50 | 控制器 | Stop | |

质谱条件

| | | | |
|-------|-------------------------|--------|---------------|
| 离子源 | : ESI+/- | D L 温度 | : 250°C |
| 雾化气流速 | : 3.0 L/min | 加热模块温度 | : 400°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 | : 多反应监测 (MRM) |
| 接口电压 | : 4 kV(ESI+);3 kV(ESI-) | | |

■ 样品前处理

2.1 样品制备

称取样品 0.2 g (精确到 0.001 g), 置于 15 mL 具塞塑料离心管中, 加入 8 mL 乙腈, 在涡旋混合仪上振荡 30 s 至试样与提取溶剂混合均匀, 超声提取 20 min, 静置至室温, 用乙腈定容至 10 mL, 摇匀。采用离心机以 4000 r/min 转速 4°C 离心 10 min, 上清液经 0.22 μm 滤膜过滤至 1.5 mL 样品瓶, 备用。

2.2 基质匹配曲线溶液的制备

选取化妆品样本, 经过 2.1 样品前处理制备出空白样品溶液, 以此空白样本溶液做溶剂, 配制不同浓度的校准曲线溶液, 浓度分别为 0.5、1.0、2.0、5.0、10.0、20.0、50.0、100.0 和 200 ng/mL, 用于建立基质匹配曲线。

■ 结果与讨论

3.1 标准溶液色谱图与同分异构体的分离

100 ng/mL 混合标准溶液色谱图如图 1 所示, 有几组物质互为同分异构体, 包括甲羟松和甲羟孕酮、双氟拉松和氟米松、去氧皮质酮和 17α- 羟孕酮, 本方法选择高柱效的 Velox 色谱柱, 实现了 3 组同分异构体的液相分离。另外, 121 种激素中倍他米松、地塞米松和帕拉米松也是同分异构体, 现有液相方法能够分离倍他米松和地塞米松, 帕拉米松则无法实现与倍他米松和地塞米松完全分离, 若发现分离度较差, 可使用 16% 乙腈水等度洗脱实现该组同分异构体的液相分离。

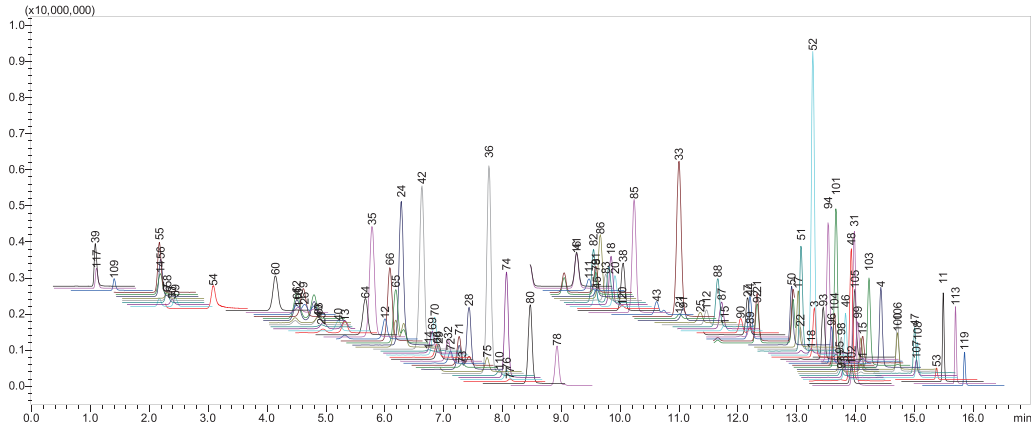


图1 121种激素基质标准溶液MRM色谱图(100 μg/L, 峰ID号同表2)

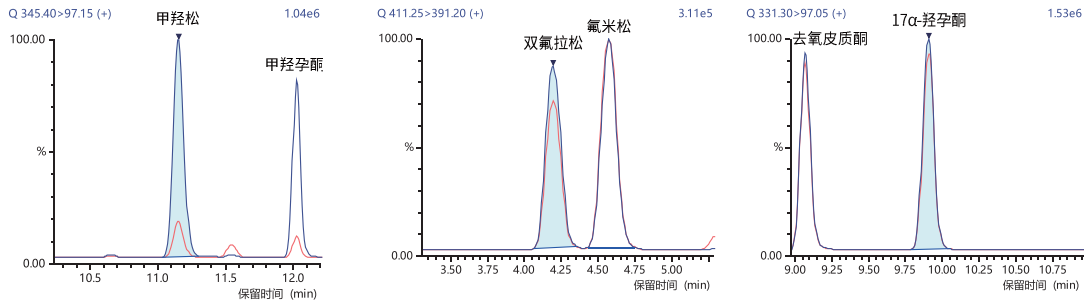


图2 三组同分异构体MRM色谱图

3.2 标准曲线

按 1.2 分析条件测定，以浓度为横坐标，峰面积为纵坐标，采用外标法建立基质匹配校准曲线（部分化合物的校准曲线见图 3），121 种激素在相应线性浓度范围内，相关系数在 0.9950~0.9999 之间，各浓度点的回读准确度在 85.2%~114.6% 之间，线性相关性良好。121 种化合物的检出限（ASTM, S/N=3）在 0.02 ~0.65 ng/mL 间，其保留时间、线性范围、相关系数及仪器检出限见表 2。

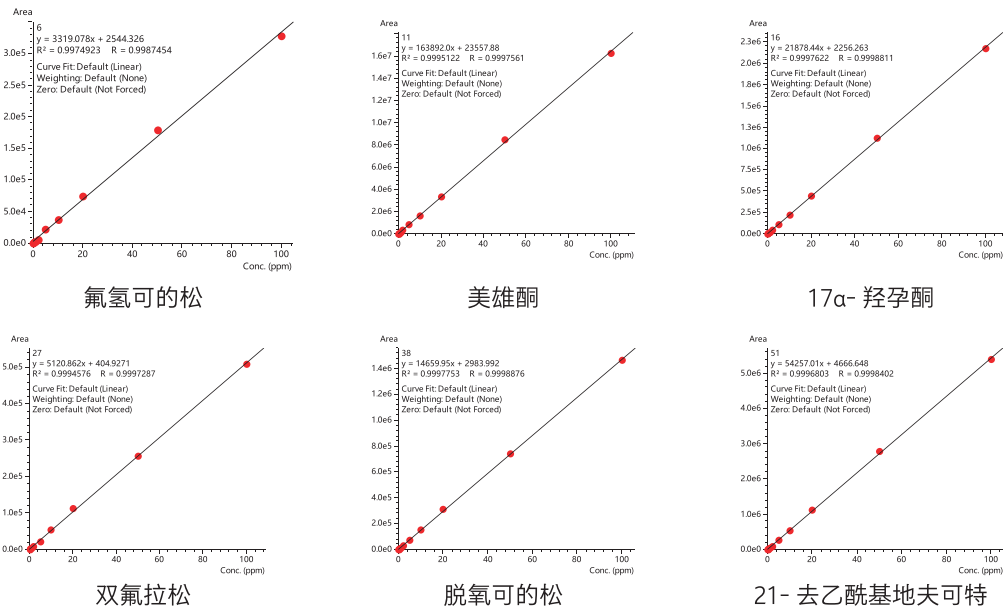


图3 部分激素校准曲线

表 2 121 种激素校准曲线信息

| 序号 | 化合物 | 保留时间 (min) | 线性范围 (ng/mL) | 相关系数 r^2 | 检出限 (ng/mL) | 序号 | 化合物 | 保留时间 (min) | 线性范围 (ng/mL) | 相关系数 r^2 | 检出限 (ng/mL) |
|----|----------------------------|---------------|-----------------|---------------|----------------|----|---------------|---------------|-----------------|---------------|----------------|
| 1 | 氢化曲安奈德 | 14.106 | 1~100 | 0.9993 | 0.07 | 62 | 地塞米松 | 4.580 | 1~100 | 0.9992 | 0.03 |
| 2 | 脱氧皮质醇 | 4.808 | 1~100 | 0.9992 | 0.34 | 63 | 氟米松 | 4.740 | 1~100 | 0.9996 | 0.04 |
| 3 | 醋酸 去氧皮质酮 | 13.236 | 0.5~100 | 0.9981 | 0.10 | 64 | 倍氯米松 | 5.490 | 2~100 | 0.9983 | 0.62 |
| 4 | 丙丁酸 氢化可的松 | 14.408 | 0.5~100 | 0.9979 | 0.05 | 65 | 曲安奈德 | 6.174 | 0.5~100 | 0.9994 | 0.07 |
| 5 | 氢化可的 松半琥珀酯 | 2.676 | 1~100 | 0.9994 | 0.15 | 66 | 地索奈德 | 5.902 | 0.5~100 | 0.9991 | 0.03 |
| 6 | 6 α - 甲基 氢化可的松 | 2.253 | 1~100 | 0.9988 | 0.14 | 67 | 氟尼缩松 | 6.149 | 0.5~100 | 0.9992 | 0.05 |
| 7 | 6 α - 氟 - 异 氟泼尼龙 | 2.240 | 1~100 | 0.9995 | 0.06 | 68 | 氟轻松 | 6.748 | 0.5~100 | 0.9986 | 0.03 |
| 8 | 泼尼松龙 半琥珀酸酯 | 2.442 | 1~100 | 0.9991 | 0.15 | 69 | 曲安西龙 双醋酸酯 | 6.688 | 0.5~100 | 0.9985 | 0.03 |
| 9 | 迪普罗酮 | 4.426 | 1~100 | 0.9993 | 0.13 | 70 | 泼尼松龙 醋酸酯 | 6.696 | 1~100 | 0.9994 | 0.13 |
| 10 | 甲基泼尼松龙 琥珀酸酯 | 4.880 | 1~100 | 0.9991 | 0.15 | 71 | 氟米龙 | 7.166 | 0.5~100 | 0.9991 | 0.12 |
| 11 | 己曲安奈德 | 15.505 | 0.5~100 | 0.9997 | 0.03 | 72 | 氢化可的松 醋酸酯 | 6.951 | 1~100 | 0.9994 | 0.10 |
| 12 | 脱氧可的松 | 5.813 | 0.5~100 | 0.9999 | 0.08 | 73 | 氟氢可的松 醋酸酯 | 7.156 | 1~100 | 0.9996 | 0.14 |
| 13 | 肾上腺酮 | 5.102 | 1~100 | 0.9987 | 0.16 | 74 | 地夫可特 | 7.931 | 0.5~100 | 0.9992 | 0.09 |
| 14 | 氟泼尼龙 | 2.103 | 0.5~100 | 0.9983 | 0.12 | 75 | 泼尼松醋酸酯 | 7.621 | 1~100 | 0.9995 | 0.08 |
| 15 | 氟米松新 戊酸酯 | 14.108 | 1~100 | 0.9986 | 0.17 | 76 | 可的松醋酸酯 | 7.912 | 1~100 | 0.9997 | 0.06 |
| 16 | 去氧皮质酮 | 9.125 | 0.5~100 | 0.9989 | 0.09 | 77 | 卤美他松 | 8.038 | 1~100 | 0.9990 | 0.29 |
| 17 | 苯甲酸 倍他米松 | 12.966 | 0.5~100 | 0.9992 | 0.07 | 78 | 甲基泼尼松龙 醋酸酯 | 8.812 | 1~100 | 0.9993 | 0.04 |
| 18 | 倍他米松 丙酸酯 | 9.744 | 1~100 | 0.9985 | 0.11 | 79 | 倍他米松 醋酸酯 | 8.929 | 1~100 | 0.9984 | 0.14 |
| 19 | 氯倍他索 乙酸酯 | 12.738 | 1~100 | 0.9992 | 0.14 | 80 | 睾酮 | 8.313 | 0.5~100 | 0.9997 | 0.08 |
| 20 | 甲泼尼松 醋酸酯 | 9.812 | 0.5~100 | 0.9997 | 0.13 | 81 | 地塞米松 醋酸酯 | 8.915 | 1~100 | 0.9991 | 0.13 |
| 21 | 地塞米松 戊酸酯 | 12.264 | 0.5~100 | 0.9982 | 0.06 | 82 | 布地奈德 | 9.420 | 1~100 | 0.9985 | 0.07 |
| 22 | 双氟泼尼酯 | 13.020 | 0.5~100 | 0.9978 | 0.12 | 83 | 氢化可的松 丁酸酯 | 9.659 | 1~100 | 0.9993 | 0.06 |

| | | | | | | | | | | | |
|----|--------------------------|--------|---------|--------|------|-----|--------------|--------|---------|--------|------|
| 23 | 四氢可的松 | 4.703 | 1~100 | 0.9994 | 0.15 | 84 | 孕三烯酮 | 9.312 | 0.5~100 | 0.9982 | 0.02 |
| 24 | 21- 去乙酰基 地夫可特 | 6.116 | 0.5~100 | 0.9998 | 0.06 | 85 | 氟米龙醋酸酯 | 10.135 | 0.5~100 | 0.9992 | 0.03 |
| 25 | 甲羟松 | 11.226 | 1~100 | 0.9993 | 0.12 | 86 | 甲基睾丸酮 | 9.548 | 0.5~100 | 0.9994 | 0.04 |
| 26 | 甲基泼尼松 | 4.423 | 1~100 | 0.9975 | 0.33 | 87 | 氢化可的松 戊酸酯 | 11.636 | 0.5~100 | 0.9991 | 0.06 |
| 27 | 甲羟孕酮 | 12.075 | 1~100 | 0.9989 | 0.13 | 88 | 曲安奈德 醋酸酯 | 11.574 | 0.5~100 | 0.9993 | 0.02 |
| 28 | 去羟米松 | 7.302 | 0.5~100 | 0.9996 | 0.16 | 89 | 二氟拉松 双醋酸酯 | 12.143 | 0.5~100 | 0.9998 | 0.07 |
| 29 | 异氟泼尼松 醋酸酯 | 6.775 | 0.5~100 | 0.9992 | 0.09 | 90 | 氟轻松醋酸酯 | 11.969 | 1~100 | 0.9992 | 0.02 |
| 30 | 氟氢可的松 | 2.325 | 0.5~100 | 0.9987 | 0.11 | 91 | 炔诺孕酮 | 10.938 | 1~100 | 0.9991 | 0.04 |
| 31 | 醋酸美伦孕酮 | 13.927 | 0.5~100 | 0.9990 | 0.08 | 92 | 倍他米松 戊酸酯 | 12.877 | 0.5~100 | 0.9989 | 0.02 |
| 32 | 诺龙 | 6.901 | 1~100 | 0.9995 | 0.14 | 93 | 泼尼卡酯 | 13.406 | 0.5~100 | 0.9993 | 0.02 |
| 33 | 烯丙孕素 | 10.860 | 0.5~100 | 0.9994 | 0.04 | 94 | 氟替泼诺 | 13.494 | 0.5~100 | 0.9990 | 0.02 |
| 34 | 米非司酮 | 13.653 | 1~100 | 0.9995 | 0.38 | 95 | 阿氯米松 双丙酸酯 | 13.681 | 0.5~100 | 0.9988 | 0.04 |
| 35 | 群勃龙 | 5.558 | 0.5~100 | 0.9996 | 0.07 | 96 | 安西奈德 | 13.553 | 0.5~100 | 0.9989 | 0.06 |
| 36 | 美雄酮 | 7.610 | 0.5~100 | 0.9998 | 0.03 | 97 | 卤倍他索 丙酸酯 | 13.743 | 1~100 | 0.9958 | 0.05 |
| 37 | 醋酸炔诺酮 | 13.757 | 1~100 | 0.9995 | 0.12 | 98 | 氯倍他索 丙酸酯 | 13.713 | 0.5~100 | 0.9981 | 0.02 |
| 38 | 表睾酮 | 9.956 | 0.5~100 | 0.9993 | 0.14 | 99 | 氟替卡松 丙酸酯 | 14.034 | 0.5~100 | 0.9993 | 0.02 |
| 39 | 16 α - 羟基 泼尼松龙 | 1.033 | 1~100 | 0.9989 | 0.15 | 100 | 莫米他松 糠酸酯 | 14.032 | 1~100 | 0.9997 | 0.05 |
| 40 | 氟甲睾酮 | 4.978 | 1~100 | 0.9992 | 0.17 | 101 | 醋酸甲地孕酮 | 13.642 | 0.5~100 | 0.9992 | 0.06 |
| 41 | 17 α - 羟孕酮 | 9.968 | 0.5~100 | 0.9998 | 0.10 | 102 | 醋酸氯地孕酮 | 13.859 | 0.5~100 | 0.9990 | 0.03 |
| 42 | 去氢睾酮 | 6.456 | 0.5~100 | 0.9996 | 0.07 | 103 | 倍他米松 双丙酸酯 | 14.231 | 0.5~100 | 0.9982 | 0.06 |
| 43 | 醋酸氟轻松 22- 甲基 同系物 | 10.528 | 1~100 | 0.995 | 0.16 | 104 | 黄体酮 | 13.567 | 0.5~100 | 0.9987 | 0.04 |
| 44 | 醋丙氢可的松 | 12.126 | 0.5~100 | 0.9998 | 0.05 | 105 | 醋酸甲羟孕酮 | 13.947 | 0.5~100 | 0.9995 | 0.04 |
| 45 | 双氟美松 醋酸酯 | 9.516 | 1~100 | 0.9996 | 0.12 | 106 | 倍氯米松 双丙酸酯 | 14.691 | 0.5~100 | 0.9992 | 0.03 |
| 46 | 丁乙酸 泼尼松龙 | 13.804 | 1~100 | 0.9991 | 0.13 | 107 | 双氟可龙 戊酸酯 | 15.051 | 1~100 | 0.9989 | 0.06 |
| 47 | 氟可龙特 戊酸酯 | 15.003 | 1~100 | 0.9990 | 0.11 | 108 | 氯倍他 松丁酸酯 | 15.023 | 1~100 | 0.9984 | 0.05 |

| | | | | | | | | | | | |
|----|----------------------------|--------|---------|--------|------|-----|-----------------|--------|---------|--------|------|
| 48 | 瑞美松龙 | 13.89 | 1~100 | 0.9992 | 0.08 | 109 | 雌三醇 | 1.329 | 2~100 | 0.9991 | 0.65 |
| 49 | 双氟拉松 | 4.299 | 1~100 | 0.9997 | 0.12 | 110 | 雌二醇 | 7.754 | 1~100 | 0.9975 | 0.32 |
| 50 | 泼尼松龙 戊酸酯 | 12.868 | 1~100 | 0.9992 | 0.15 | 111 | 雌酮 | 9.336 | 0.5~100 | 0.9988 | 0.16 |
| 51 | 甲基泼尼松龙 乙丙酸酯 | 13.022 | 0.5~100 | 0.9992 | 0.13 | 112 | 己烯雌酚 | 11.312 | 0.5~100 | 0.9992 | 0.13 |
| 52 | 群勃龙醋酸酯 | 13.221 | 0.5~100 | 0.9993 | 0.06 | 113 | 己酸羟孕酮 | 15.684 | 0.5~100 | 0.9993 | 0.05 |
| 53 | 氯可托龙特 戊酸酯 | 15.393 | 1~100 | 0.9997 | 0.09 | 114 | 氟氢缩松 | 6.596 | 1~100 | 0.9993 | 0.11 |
| 54 | 16 α -羟基泼尼 松龙醋酸酯 | 2.963 | 1~100 | 0.9991 | 0.15 | 115 | 氟替卡松 | 11.691 | 1~100 | 0.9995 | 0.13 |
| 55 | 泼尼松龙 | 2.084 | 0.5~100 | 0.9992 | 0.03 | 116 | 帕拉米松 | 4.227 | 1~100 | 0.9984 | 0.36 |
| 56 | 泼尼松 | 2.084 | 0.5~100 | 0.9993 | 0.06 | 117 | 曲安西龙 | 1.075 | 1~100 | 0.9989 | 0.11 |
| 57 | 异氟泼尼松 | 2.094 | 0.5~100 | 0.9994 | 0.12 | 118 | 哈西奈德 | 13.206 | 1~100 | 0.9985 | 0.15 |
| 58 | 氢化可的松 | 2.230 | 0.5~100 | 0.9997 | 0.04 | 119 | 环索奈德 | 15.836 | 1~100 | 0.9996 | 0.35 |
| 59 | 可的松 | 2.341 | 0.5~100 | 0.9995 | 0.07 | 120 | 双氟拉松 -17-丙酸酯 | 10.121 | 1~100 | 0.9993 | 0.41 |
| 60 | 甲基泼尼松龙 | 3.993 | 1~100 | 0.9998 | 0.03 | 121 | 双氟拉松 -21-丙酸酯 | 11.129 | 1~100 | 0.9979 | 0.20 |
| 61 | 倍他米松 | 4.303 | 1~100 | 0.9995 | 0.05 | | | | | | |

3.3 精密度

用空白基质配制不同浓度的混合标准溶液依次进样，每个浓度平行测定 6 次，考察仪器的精密度。结果显示，121 种激素在各浓度下的保留时间和峰面积的相对标准偏差分别在 0.02%~0.40% 之间和 0.3%~7.0% 之间，仪器精密度良好，测定结果如图 4-5 所示。

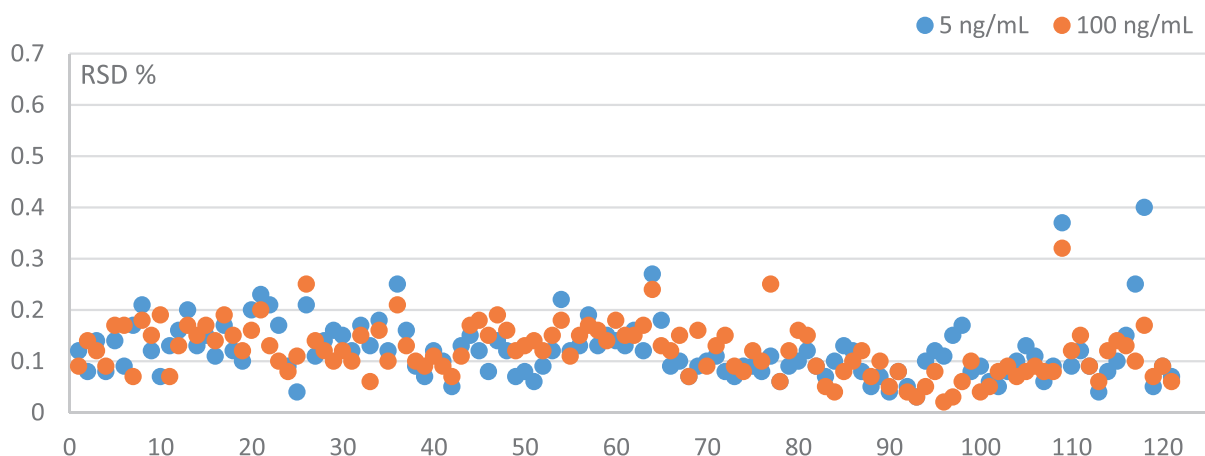


图 4 保留时间重复性结果 (n=6)

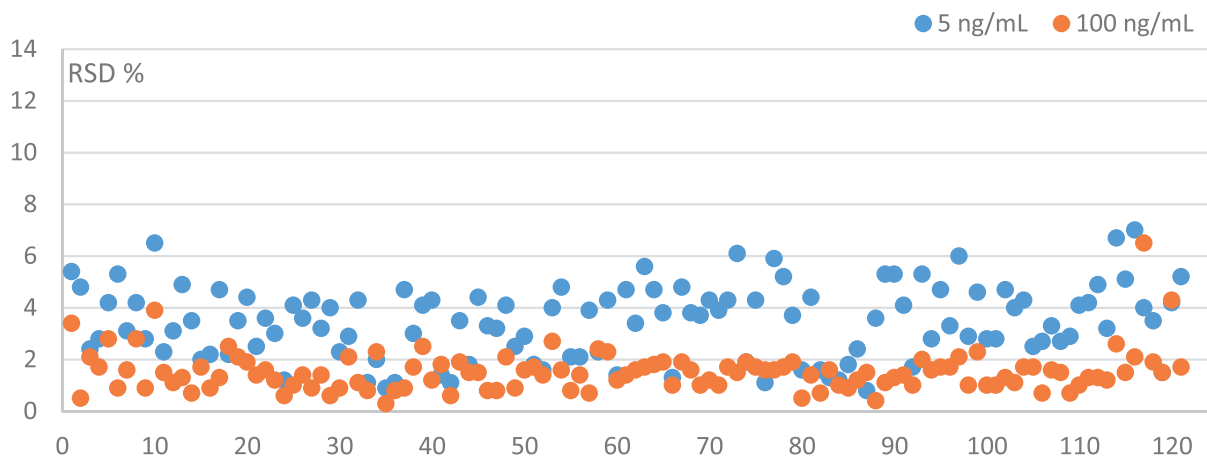


图 5 峰面积重复性结果 (n=6)

3.4 基质加标实验

取化妆品样品(本底样品经测试未检出 121 种激素)加入一定浓度的 121 种激素标液(加标浓度如表 3 所示),按照 2.1 中样品制备方法,每个浓度平行制备 3 份样品,其中样品本底(未检出)和加标样的色谱图分别见下图 6 和 7。加标回收率测试结果显示:121 种激素的样品加标回收率在 73.4%~118.8% 之间,测定结果结果如图 8 所示。

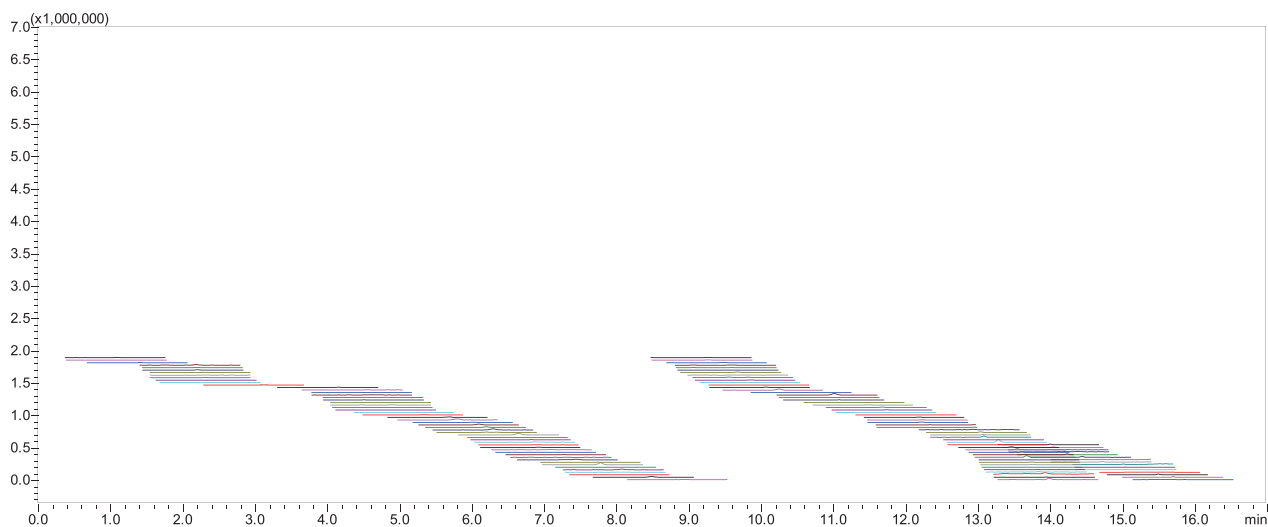


图 6 空白样品 MRM 色谱图

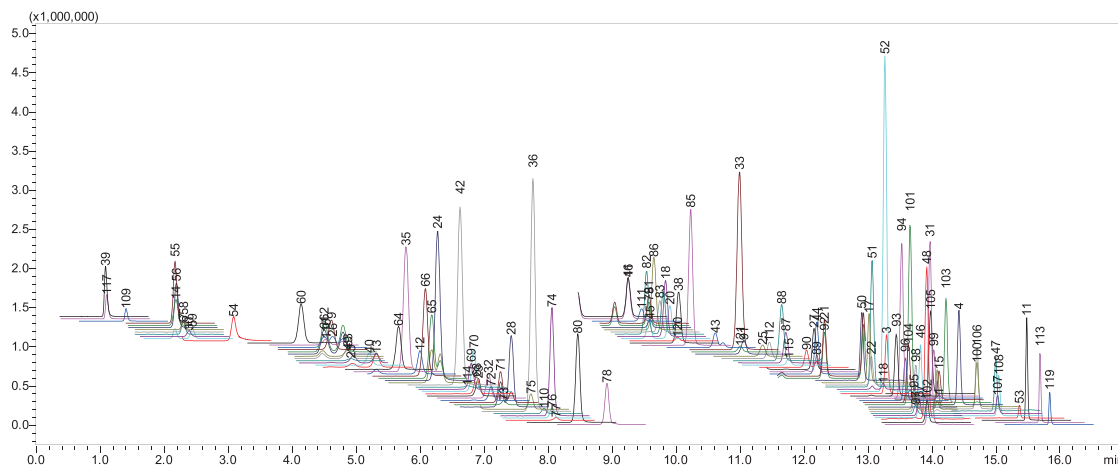


图7 2.0 µg/g 样品加标样的 MRM 色谱图 (峰 ID 号同表 2)

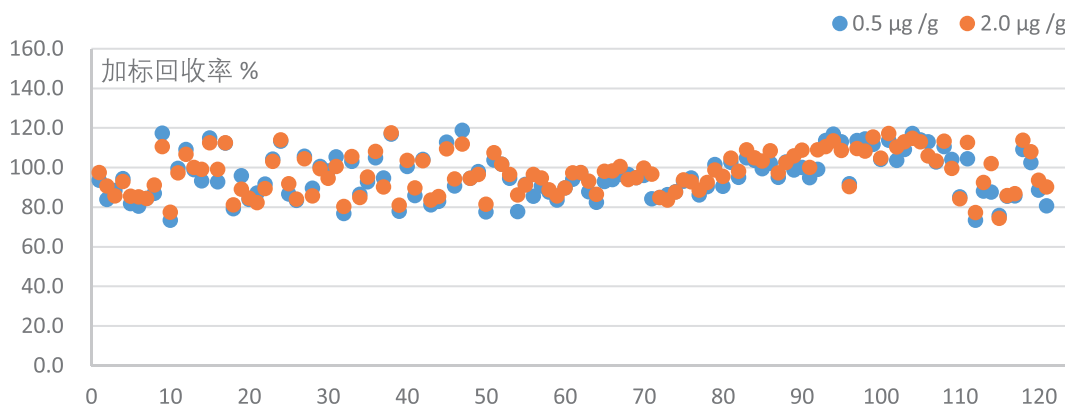


图8 加标回收率结果 (n=3)

■ 结论

本文使用岛津三重四极杆液质联用仪建立化妆品中 121 种激素测定方法。在相应标曲范围内，各化合物的相关系数均在 0.995 以上。在分析精密度的上，各化合物的保留时间和峰面积的相对标准偏差分别在 0.02 %~0.40% 之间和 0.3%~7.0% 之间；加标回收率在 73.4%~118.8% 之间，仪器检出限在 0.02 ~0.65 ng/mL 之间，可用于化妆品中 121 种激素的定性定量检测。

表 3 MRM 参数

| No. | 中文名称 | 英文名称 | CAS No. | 前体离子 | 产物离子 | Q1Pre Bias (V) | CE (V) | Q3Pre Bias (V) |
|-----|--------|---|-----------|--------|----------|----------------|--------|----------------|
| 1 | 氢化曲安奈德 | 9-Fluoro-16 α ,17-(iso-propylidenedioxy)corticosterone | 1524-86-3 | 437.30 | 335.25* | -12 | -15 | -25 |
| | | | | | 251.00 | -13 | -30 | -27 |
| 2 | 脱氧皮质醇 | 21-Deoxycortisol | 641-77-0 | 347.25 | 311.10 * | -12 | -17 | -21 |
| | | | | | 121.20 | -10 | -30 | -21 |

| | | | | | | | | |
|----|------------------|-------------------------------------|-------------------------|-----------|-------------------|------------------|------------|------------|
| 3 | 醋酸 去氧皮质酮 | Deoxycorticosterone acetate | 56-47-3 | 373.35 | 97.15* 109.15 | -14 -13 | -29 -30 | -16 -11 |
| 4 | 丙丁酸 氢化可的松 | Hydrocortisone probu- tate | 72590-77-3 | 489.40 | 401.20* 345.20 | -11 -14 | -13 -18 | -27 -25 |
| 5 | 氢化可的松 半琥珀酯 | hydrocortisone hemisuc- cinate | 2203-97-6 | 463.35 | 445.20* 327.20 | -13 -20 | -13 -17 | -16 -24 |
| 6 | 6α- 甲基 氢化可的松 | 6α-Methyl hydrocorti- sone | 1625-39-4 | 377.35 | 253.20* 359.15 | -11 -10 | -20 -15 | -17 -10 |
| 7 | 6α- 氟 - 异氟泼尼龙 | 6α-Fluoro-isoflupre- done | 806-29-1 | 397.30 | 253.15* 121.10 | -15 -11 | -17 -34 | -25 -25 |
| 8 | 泼尼松龙 半琥珀酸酯 | prednisolone 21-hemisuccinate | 2920-86-7 | 461.30 | 443.15* 307.15 | -17 -11 | -11 -16 | -21 -15 |
| 9 | 迪普罗酮 | Deprodone | 20423-99-8 | 345.35 | 327.25* 309.15 | -10 -10 | -11 -11 | -23 -15 |
| 10 | 甲基泼尼松龙 琥珀酸酯 | Methylprednisolone hemisuccinate | 2921-57-5 | 475.35 | 457.20* 321.20 | -23 -10 | -12 -17 | -23 -23 |
| 11 | 己曲安奈德 | Triamcinolone hexace- tonide | 5611-51-8 | 533.40 | 415.25* 397.20 | -20 -20 | -16 -18 | -30 -19 |
| 12 | 脱氧可的松 | cortisolone | 152-58-9 | 347.35 | 109.15* 97.25 | -10 -10 | -31 -25 | -23 -10 |
| 13 | 肾上腺酮 | corticosterone | 50-22-6 | 347.35 | 329.15* 121.10 | -11 -15 | -15 -28 | -16 -13 |
| 14 | 氟泼尼龙 | Fluprednisolone | 53-34-9 | 379.30 | 341.10* 237.10 | -18 -12 | -13 -20 | -24 -12 |
| 15 | 氟米松新 戊酸酯 | Flumetasone pivalate | 2002-29-1 | 495.35 | 57.20* 477.20 | -11 -17 | -29 -13 | -23 -23 |
| 16 | 去氧皮质酮 | Desoxycorticosterone | 64-85-7 | 331.25 | 97.10* 109.20 | -12 -12 | -24 -29 | -10 -24 |
| 17 | 苯甲酸 倍他米松 | Betamethasone 17-ben- zoate | 22298-29-9 | 497.30 | 355.25* 279.10 | -11 -11 | -14 -20 | -18 -30 |
| 18 | 倍他米松 丙酸酯 | betamethasone 17-propionate | 5534-13-4 | 449.35 | 355.20* 279.20 | -10 -13 | -13 -19 | -24 -29 |
| 19 | 氯倍他索 乙酸酯 | Clobetasol acetate | 25122-45-6 | 453.20 | 278.15* 263.15 | -17 -13 | -21 -33 | -28 -13 |
| 20 | 甲泼尼松 醋酸酯 | 16- 甲基泼尼松醋酸酯 | meprednisone acetate | 1106-03-2 | 415.30* 441.20 | 309.20 147.15 | -15 -15 | -15 -26 |
| 21 | 地塞米松 戊酸酯 | Dexamethasone valerate | 33755-46-3 | 477.40 | 355.20* 279.10 | -14 -14 | -12 -21 | -17 -13 |

| | | | | | | | | |
|----|--------------------------|--|------------|--------|-------------------|------------|------------|------------|
| 22 | 双氟泼尼酯 | Difluprednate | 23674-86-4 | 509.35 | 303.15* 279.05 | -24 -24 | -15 -17 | -20 -30 |
| 23 | 四氢可的松 | Tetrahydrocortisone | 53-05-4 | 409.20 | 333.20* 345.20 | 14 14 | 19 24 | 10 15 |
| 24 | 21- 去乙酰基 地夫可特 | 21-Deacetoxy de- flazacort | 13649-88-2 | 384.25 | 126.15* 147.10 | -14 -14 | -32 -30 | -27 -15 |
| 25 | 甲羟松 | Medrysone | 2668-66-8 | 345.40 | 97.15* 267.20 | -10 -29 | -29 -19 | -10 -20 |
| 26 | 甲基泼尼松 | Meprednisone | 1247-42-3 | 373.35 | 337.30* 279.30 | -13 -13 | -14 -19 | -16 -30 |
| 27 | 甲羟孕酮 | Medroxyprogesterone | 520-85-4 | 345.20 | 123.10* 97.10 | -15 -11 | -25 -27 | -24 -10 |
| 28 | 去羟米松 | Desoximetasone | 382-67-2 | 377.35 | 339.30* 357.35 | -14 -14 | -14 -10 | -16 -17 |
| 29 | 异氟泼尼松 醋酸酯 | Isoflupredone acetate | 338-98-7 | 421.35 | 401.30* 383.30 | -12 -15 | -10 -12 | -19 -18 |
| 30 | 氟氢可的松 | Fludrocortisone | 127-31-1 | 381.40 | 239.30* 181.10 | -11 -10 | -25 -31 | -24 -13 |
| 31 | 醋酸美伦孕酮 | Melengestrol acetate | 2919-66-6 | 397.40 | 337.30* 279.20 | -12 -12 | -15 -23 | -16 -14 |
| 32 | 诺龙 | Nortestosterone | 434-22-0 | 275.40 | 109.10* 257.35 | -10 -10 | -26 -20 | -11 -18 |
| 33 | 烯丙孕素 | Altrenogest | 850-52-2 | 311.35 | 227.25* 227.10 | -10 -14 | -23 -24 | -23 -16 |
| 34 | 米非司酮 | Mifepristone | 84371-65-3 | 430.35 | 372.30* 134.15 | -16 -13 | -22 -46 | -28 -13 |
| 35 | 群勃龙 | Trenbolone | 10161-33-8 | 271.30 | 253.25* 199.20 | -10 -10 | -20 -24 | -26 -21 |
| 36 | 美雄酮 | Methandrostenolone | 72-63-9 | 301.35 | 121.15* 149.20 | -11 -12 | -26 -16 | -23 -26 |
| 37 | 醋酸炔诺酮 | Norethisterone acetate | 51-98-9 | 341.35 | 281.30* 109.15 | -13 -13 | -16 -28 | -29 -11 |
| 38 | 表睾酮 | Epitestosterone | 481-30-1 | 289.35 | 109.10* 97.20 | -11 -11 | -26 -23 | -11 -10 |
| 39 | 16 α - 羟基 泼尼松龙 | 16 α -Hydroxyprednison- lone | 13951-70-7 | 377.35 | 359.20* 147.10 | -10 -10 | -11 -27 | -14 -30 |
| 40 | 氟甲睾酮 | Fluoxymesterone | 76-43-7 | 337.30 | 241.20* 281.30 | -11 -12 | -24 -24 | -22 -29 |

| | | | | | | | | |
|----|------------------------|----------------------------------|------------|--------|---------|-----|-----|-----|
| 41 | 17 α -羟孕酮 | 17 α -Hydroxyprogesterone | 68-96-2 | 331.30 | 97.05* | -12 | -27 | -10 |
| | | | | | 109.15 | -12 | -28 | -17 |
| 42 | 去氢睾酮 | Boldenone | 846-48-0 | 287.25 | 121.15* | -10 | -24 | -28 |
| | | | | | 135.20 | -10 | -15 | -14 |
| 43 | 醋酸氟轻松 22-甲基同系物 | Fluocinonide 22-methyl homologue | 51333-59-6 | 481.30 | 461.20* | -11 | -13 | -22 |
| | | | | | 441.20 | -17 | -15 | -22 |
| 44 | 醋丙氢可的松 | Hydrocortisone aceponate | 74050-20-7 | 461.30 | 387.20* | -16 | -13 | -28 |
| | | | | | 309.20 | -10 | -18 | -22 |
| 45 | 双氟美松醋酸酯 | Flumethasone acetate | 2823-42-9 | 453.25 | 253.20* | -16 | -18 | -29 |
| | | | | | 235.10 | -19 | -25 | -17 |
| 46 | 丁乙酸泼尼松龙 | Prenisolone tebutate | 7681-14-3 | 459.25 | 441.25* | -16 | -13 | -22 |
| | | | | | 325.15 | -10 | -15 | -15 |
| 47 | 氟可龙特戊酸酯 | Fluocortolone 21-pivalate | 29205-06-9 | 461.30 | 57.20* | -10 | -25 | -10 |
| | | | | | 443.25 | -17 | -13 | -21 |
| 48 | 瑞美松龙 | Rimexolone | 49697-38-3 | 371.25 | 353.30* | -13 | -12 | -25 |
| | | | | | 57.10 | -13 | -23 | -24 |
| 49 | 双氟拉松 | Diflorasone | 2557-49-5 | 411.25 | 391.20* | -11 | -11 | -19 |
| | | | | | 121.20 | -28 | -30 | -28 |
| 50 | 泼尼松龙戊酸酯 | prednisolone pivalate | 1107-99-9 | 445.30 | 427.20* | -12 | -11 | -16 |
| | | | | | 307.20 | -12 | -14 | -22 |
| 51 | 甲基泼尼松龙乙丙酸酯 | Methylprednisolone aceponate | 86401-95-8 | 473.30 | 455.25* | -17 | -11 | -22 |
| | | | | | 381.25 | -11 | -10 | -14 |
| 52 | 群勃龙醋酸酯 | Trenbolone acetate | 10161-34-9 | 313.25 | 253.20* | -11 | -21 | -26 |
| | | | | | 199.10 | -11 | -29 | -21 |
| 53 | 氯可托龙特戊酸酯 | Clocortolone pivalate | 34097-16-0 | 495.20 | 457.20* | -21 | -15 | -17 |
| | | | | | 337.20 | -13 | -17 | -25 |
| 54 | 16 α -羟基泼尼松龙醋酸酯 | 16 α -Hydroxyprednisolone | 86401-80-1 | 419.25 | 401.35* | -10 | -13 | -19 |
| | | | | | 323.25 | -16 | -14 | -2 |
| 55 | 泼尼松龙 | Prednisolone | 50-24-8 | 361.15 | 343.25* | -19 | -12 | -15 |
| | | | | | 147.15 | -19 | -24 | -13 |
| 56 | 泼尼松 | Prednisone | 19420 | 359.20 | 341.20* | -19 | -12 | -15 |
| | | | | | 147.20 | -19 | -24 | -14 |
| 57 | 异氟泼尼松 | 9-fluoroprednisolone | 338-95-4 | 379.20 | 359.25* | -20 | -9 | -24 |
| | | | | | 341.20 | -20 | -12 | -23 |
| 58 | 氢化可的松 | Hydrocortisone | 50-23-7 | 363.20 | 121.20* | -18 | -24 | -22 |
| | | | | | 105.15 | -13 | -46 | -18 |
| 59 | 可的松 | Cortisone | 53-06-5 | 361.15 | 163.25* | -19 | -23 | -15 |
| | | | | | 121.20 | -19 | -30 | -11 |

| | | | | | | | | |
|----|----------|----------------------------|------------|--------|---------|-----|-----|-----|
| 60 | 甲基泼尼松龙 | Methylprednisolone | 83-43-2 | 375.20 | 357.25* | -20 | -11 | -23 |
| | | | | | 161.20 | -20 | -20 | -15 |
| 61 | 倍他米松 | Betamethasone | 378-44-9 | 393.20 | 355.25* | -27 | -13 | -23 |
| | | | | | 147.15 | -14 | -26 | -25 |
| 62 | 地塞米松 | Dexamethasone | 18296 | 393.20 | 373.20 | -20 | -9 | -12 |
| | | | | | 355.25* | -20 | -13 | -16 |
| 63 | 氟米松 | Flumethasone | 2135-17-3 | 411.15 | 147.15 | -14 | -10 | -25 |
| | | | | | 253.20* | -22 | -17 | -26 |
| 64 | 倍氯米松 | Beclomethasone | 4419-39-0 | 409.15 | 121.15 | -22 | -35 | -21 |
| | | | | | 391.20* | -22 | -12 | -18 |
| 65 | 曲安奈德 | Triamcinolone acetonide | 76-25-5 | 435.15 | 279.20 | -22 | -19 | -12 |
| | | | | | 147.20 | -22 | -29 | -26 |
| 66 | 地索奈德 | Desonide | 638-94-8 | 417.20 | 415.25* | -23 | -11 | -19 |
| | | | | | 339.20 | -23 | -15 | -15 |
| 67 | 氟尼缩松 | Flunisolide | 77326-96-6 | 435.15 | 397.25 | -23 | -16 | -18 |
| | | | | | 399.30* | -22 | -13 | -18 |
| 68 | 氟轻松 | Fluocinolone acetonide | 67-73-2 | 453.15 | 225.15 | -22 | -25 | -22 |
| | | | | | 323.25 | -22 | -14 | -22 |
| 69 | 曲安西龙双醋酸酯 | Triamcinolone diacetate | 67-78-7 | 479.15 | 321.20* | -16 | -14 | -20 |
| | | | | | 397.20 | -30 | -11 | -18 |
| 70 | 泼尼松龙醋酸酯 | Prednisolone 21-acetate | 52-21-1 | 403.20 | 339.20 | -30 | -14 | -15 |
| | | | | | 121.20* | -23 | -34 | -21 |
| 71 | 氟米龙 | Fluorometholone | 426-13-1 | 377.20 | 337.20 | -23 | -15 | -15 |
| | | | | | 441.15* | -25 | -12 | -21 |
| 72 | 氢化可的松醋酸酯 | Hydrocortisone 21-acetate | 50-03-3 | 405.20 | 321.20 | -25 | -17 | -14 |
| | | | | | 147.20* | -21 | -25 | -28 |
| 73 | 氟氢可的松醋酸酯 | Fludrocortisone 21-acetate | 514-36-3 | 423.20 | 307.20 | -21 | -14 | -13 |
| | | | | | 385.25 | -22 | -11 | -17 |
| 74 | 地夫可特 | Deflazacort | 14484-47-0 | 442.20 | 279.30* | -12 | -17 | -18 |
| | | | | | 321.30 | -12 | -14 | -14 |
| 75 | 氢化可的松醋酸酯 | Hydrocortisone 21-acetate | 50-03-3 | 405.20 | 309.25* | -12 | -18 | -19 |
| | | | | | 121.15 | -23 | -28 | -11 |
| 76 | 氟氢可的松醋酸酯 | Fludrocortisone 21-acetate | 514-36-3 | 423.20 | 239.30* | -23 | -25 | -10 |
| | | | | | 121.10 | -23 | -33 | -17 |
| 77 | 地夫可特 | Deflazacort | 14484-47-0 | 442.20 | 142.20* | -24 | -35 | -13 |
| | | | | | 124.10 | -24 | -47 | -11 |

| | | | | | | | | |
|----|-----------|---------------------------------|------------|--------|---------|-----|-----|-----|
| 75 | 泼尼松醋酸酯 | Prednisone 21-acetate | 125-10-0 | 401.15 | 295.20* | -21 | -16 | -13 |
| | | | | | 147.15 | -21 | -14 | -20 |
| 76 | 可的松醋酸酯 | Cortisone 21-acetate | 50-04-4 | 403.20 | 163.20* | -21 | -26 | -15 |
| | | | | | 343.20 | -21 | -20 | -23 |
| 77 | 卤美他松 | Halometasone | 50629-82-8 | 445.10 | 155.10* | -23 | -32 | -25 |
| | | | | | 287.15 | -23 | -15 | -18 |
| 78 | 甲基泼尼松龙醋酸酯 | Methylprednisolone 21-acetate | 53-36-1 | 417.20 | 399.25* | -22 | -11 | -18 |
| | | | | | 253.30 | -22 | -22 | -26 |
| 79 | 倍他米松醋酸酯 | Betamethasone 21-acetate | 987-24-6 | 435.20 | 309.20* | -23 | -14 | -13 |
| | | | | | 337.20 | -23 | -14 | -13 |
| | | | | | 415.25 | -23 | -9 | -19 |
| 80 | 睾酮 | Testosterone | 58-22-0 | 289.15 | 97.00* | -14 | -23 | -17 |
| | | | | | 109.05 | -14 | -24 | -17 |
| 81 | 地塞米松醋酸酯 | Dexamethasone 21-acetate | 1177-87-3 | 435.20 | 309.25* | -13 | -14 | -14 |
| | | | | | 337.25 | -23 | -13 | -15 |
| | | | | | 415.25 | -13 | -10 | -19 |
| 82 | 布地奈德 | Budesonide | 51333-22-3 | 431.20 | 413.25* | -23 | -12 | -19 |
| | | | | | 147.20 | -23 | -30 | -14 |
| 83 | 氢化可的松丁酸酯 | Hydrocortisone 17-butyrate | 13609-67-1 | 433.20 | 345.25* | -23 | -13 | -22 |
| | | | | | 121.15 | -13 | -28 | -11 |
| 84 | 孕三烯酮 | Gestrinone | 16320-04-0 | 309.10 | 241.20* | -16 | -23 | -25 |
| | | | | | 199.15 | -16 | -33 | -19 |
| 85 | 氟米龙醋酸酯 | Fluorometholone 17-acetate | 3801-06-7 | 419.20 | 279.25* | -22 | -16 | -18 |
| | | | | | 321.25 | -22 | -14 | -14 |
| 86 | 甲基睾丸酮 | Methyltestosterone | 58-18-4 | 303.20 | 109.10* | -16 | -27 | -17 |
| | | | | | 97.10 | -16 | -26 | -16 |
| 87 | 氢化可的松戊酸酯 | Hydrocortisone 17-valerate | 57524-89-7 | 447.25 | 345.30* | -14 | -13 | -15 |
| | | | | | 121.20 | -24 | -25 | -11 |
| 88 | 曲安奈德醋酸酯 | Triamcinolone acetonide acetate | 3870-07-3 | 477.20 | 339.15* | -26 | -16 | -15 |
| | | | | | 321.20 | -25 | -19 | -10 |
| | | | | | 457.20 | -15 | -10 | -21 |
| 89 | 二氟拉松双醋酸酯 | Diflorasone diacetate | 33564-31-7 | 495.15 | 317.15* | -26 | -14 | -14 |
| | | | | | 279.20 | -26 | -16 | -12 |
| 90 | 氟轻松醋酸酯 | Fluocinonide | 356-12-7 | 495.15 | 337.15* | -26 | -18 | -15 |
| | | | | | 121.15 | -26 | -41 | -11 |
| 91 | 炔诺孕酮 | Norgestrel | 6533-00-2 | 313.20 | 109.15* | -16 | -27 | -10 |
| | | | | | 245.25 | -17 | -18 | -15 |

| | | | | | | | | |
|-----|--------------|-----------------------------------|------------|--------|-----------------------------|-------------------|-------------------|-------------------|
| 92 | 倍他米松 戊酸酯 | Betamethasone 17-val- erate | 2152-44-5 | 477.20 | 355.20* 279.20 | -25 -25 | -12 -18 | -16 -18 |
| 93 | 泼尼卡酯 | Prednicarbate | 73771-04-7 | 489.30 | 381.20* 115.10 | -26 -26 | -12 -15 | -17 -19 |
| 94 | 氯替泼诺 | Loteprednol etabonate | 82034-46-6 | 467.15 | 265.25* 359.20 | -24 -24 | -21 -13 | -17 -16 |
| 95 | 阿氯米松双 丙酸酯 | Alclometasone dipropio- nate | 66734-13-2 | 521.20 | 301.20* 279.20 | -28 -28 | -21 -19 | -19 -10 |
| 96 | 安西奈德 | Amcinonide | 51022-69-6 | 503.20 | 339.15* 321.20 | -26 -26 | -17 -20 | -15 -14 |
| 97 | 卤倍他索 丙酸酯 | Halobetasol Propionate | 66852-54-8 | 485.15 | 391.05* 353.15 | -25 -25 | -13 -16 | -18 -16 |
| 98 | 氯倍他索 丙酸酯 | Clobetasol 17-propio- nate | 25122-46-7 | 467.15 | 373.20* 355.25 | -25 -24 | -12 -15 | -17 -16 |
| 99 | 氟替卡松 丙酸酯 | Fluticasone propionate | 80474-14-2 | 501.15 | 313.25* 293.20 | -26 -26 | -15 -18 | -20 -30 |
| 100 | 莫米他松 糠酸酯 | Mometasone furoate | 83919-23-7 | 521.10 | 503.15* 263.25 | -28 -28 | -13 -25 | -24 -27 |
| 101 | 醋酸甲地孕酮 | Megestrol acetate | 595-33-5 | 385.25 | 325.25* 267.25 | -20 -20 | -15 -18 | -14 -17 |
| 102 | 醋酸氯地孕酮 | Chlormadinone acetate | 302-22-7 | 405.15 | 309.20* 267.20 | -21 -21 | -17 -22 | -19 -16 |
| 103 | 倍他米松双 丙酸酯 | Betamethasone dipropi- onate | 5593-20-4 | 505.20 | 319.20* 411.25 279.20 | -26 -26 -26 | -16 -12 -19 | -20 -19 -18 |
| 104 | 黄体酮 | Progesterone | 57-83-0 | 315.25 | 97.15* 109.15 | -17 -17 | -23 -26 | -17 -10 |
| 105 | 醋酸甲羟孕酮 | Medroxyprogesterone 17-acetate | 71-58-9 | 387.20 | 327.25* 123.15 | -20 -20 | -15 -29 | -14 -11 |
| 106 | 倍氯米松双 丙酸酯 | Beclmetasone dipropio- nate | 5534-09-8 | 521.20 | 503.20* 319.20 | -28 -28 | -13 -17 | -24 -14 |
| 107 | 双氟可龙 戊酸酯 | Diflucortolone valerate | 59198-70-8 | 479.25 | 375.25* 439.25 | -25 -25 | -14 -13 | -17 -20 |
| 108 | 氯倍他松 丁酸酯 | Clobetasone 17-buty- rate | 25122-57-0 | 479.20 | 343.15* 279.15 | -15 -15 | -17 -18 | -23 -18 |
| 109 | 雌三醇 | Estradiol | 50-28-2 | 287.20 | 143.10* 171.20 | 14 13 | 54 37 | 14 17 |

| | | | | | | | | |
|-----|-------------|------------------------------|-------------|--------|----------|-----|-----|-----|
| 110 | 雌二醇 | Estriol | 50-27-1 | 271.25 | 183.10* | 13 | 39 | 19 |
| | | | | | 145.15 | 13 | 38 | 29 |
| 111 | 雌酮 | Estrone | 53-16-7 | 269.25 | 145.10* | 13 | 36 | 27 |
| | | | | | 183.20 | 13 | 35 | 12 |
| 112 | 己烯雌酚 | Diethylstilbestrol | 56-53-1 | 267.20 | 251.15* | 13 | 24 | 17 |
| | | | | | 222.10 | 13 | 34 | 23 |
| 113 | 己酸羟孕酮 | Hydroxyprogesterone caproate | 630-56-8 | 429.25 | 313.30* | -22 | -15 | -21 |
| | | | | | 271.25 | -22 | -21 | -17 |
| 114 | 氟氢缩松 | Fludrocortide | 1524-88-5 | 437.20 | 361.20* | -23 | -19 | -16 |
| | | | | | 285.15 | -23 | -25 | -12 |
| 115 | 氟替卡松 | Fluticasone | 90566-53-3 | 445.20 | 293.20* | -12 | -16 | -22 |
| | | | | | 201.00 | -12 | -20 | -22 |
| 116 | 帕拉米松 | Paramethasone | 53-33-8 | 393.35 | 375.25* | -13 | -13 | -18 |
| | | | | | 319.20 | -10 | -14 | -15 |
| 117 | 曲安西龙 | Triamcinolone | 124-94-7 | 395.15 | 357.20* | -21 | -14 | -16 |
| | | | | | 225.15 | -21 | -20 | -23 |
| 118 | 哈西奈德 | Halcinonide | 3093-35-4 | 455.15 | 105.20* | -24 | -53 | -21 |
| | | | | | 121.20 | -24 | -45 | -19 |
| 119 | 环索奈德 | Ciclesonide | 126544-47-6 | 541.30 | 523.30* | -28 | -13 | -24 |
| | | | | | 323.20 | -28 | -18 | -14 |
| 120 | 双氟拉松-17-丙酸酯 | Diflorasone 17-propionate | 924726-89-6 | 467.25 | 353.20 * | -16 | -15 | -26 |
| | | | | | 335.10 | -17 | -13 | -13 |
| 121 | 双氟拉松-21-丙酸酯 | Diflorasone 21-propionate | 541502-98-1 | 467.25 | 317.20 * | -17 | -15 | -22 |
| | | | | | 335.20 | -10 | -14 | -25 |

* 定量离子对

岛津应用云

