

LC-MS/MS 测定化妆品中二甲硝咪唑等 120 种抗感染类药物

LCMSMS-878

摘要： 本文建立了岛津超高效液相色谱三重四极杆质谱联用测定化妆品中 120 种抗感染类药物的方法，参考国家药监局发布的《化妆品中二甲硝咪唑等 120 种原料的测定方法》，化妆品经乙腈提取后，离心、过滤后上机测定。120 种抗感染类药物使用外标法定量，在 0.2 ~100 ng/mL 浓度范围内线性良好；在 2 和 20 ng/mL 两个浓度下连续 6 针进样，化合物的保留时间和峰面积的 RSD 分别在 0.02~0.32% 和 1.79~8.70%，仪器精密度良好；2 mg/kg 浓度加标实验，其平均回收率在 72.1~129.3% 之间，RSD 在 0.72~8.31% 之间。该方法灵敏度高，分析时间短，通量高，供相关人员参考。

关键词： 三重四极杆液质联用仪 化妆品 抗感染类药物 120 种

技术特点：

- ❖ 应对国家药监局发布的《化妆品中二甲硝咪唑等 120 种原料的测定方法》
- ❖ 该方法能有效分离同分异构体，较标准方法更加节省时间。
- ❖ Peakintelligence 智能积分功能，提高实际样品分析效率。

抗感染药物属于处方药，主要指用来治疗各种病原体所致感染的各类药物，这类药物大多具有抑制或杀灭细菌、病毒等功效。化妆品为了实现某些功效，在利益驱使下就会违规添加抗感染药物。当抗感染类药物散布在人体皮肤表面时，尤其是面部或口唇等部位，这些地方的皮肤通常比较柔嫩、膜血管丰富，药物很快就会被微血管或黏膜吸收，这时候皮肤表面的菌群就会被破坏，进而出现皮疹、速发性过敏等不良反应，长期使用可能还会导致癌变、皮肤耐药性增加，造成后期治疗困难。《化妆品安全技术规范》中明确规定，抗感染类药物在化妆品中属于禁用组分。

2024 年 3 月 21 日，国家药品监督管理局发布了《化妆品中二甲硝咪唑等 120 种原料的测定方法》，并将

其纳入《化妆品安全技术规范（2015 年版）》；该方法中 120 种抗感染化合物包括《化妆品中 36 种抗感染类药物的检测方法》、《化妆品安全技术规范》（2015 年版）中收录的 4 个抗感染类药物检测方法、化妆品补充检验方法“BJH 202202 化妆品中新康唑等 8 种组分的测定”以及化妆品补充检验方法“BJH 202201 化妆品中莫匹罗星等 5 种组分的测定”中所有抗感染类药物，一针快速检测方法提高化妆品抗感染类药物的检测效率。

本文参考《化妆品中二甲硝咪唑等 120 种原料的测定方法》方法，使用岛津 LCMS-8050 建立了化妆品中 120 种抗感染类药物检测方法，该方法快速、高效、灵敏度高，可为相关从业人员提供参考。

实验部分

1.1 仪器

岛津三重四极杆液质联用仪 LCMS-8050，配置信息如下：

系统控制器：CBM-40

脱气机：DGU-40 5R

输液泵：LC-40B X3

柱温箱：CTO-40C

自动进样器：SIL-40C X3

色谱工作站：Labsolutions Ver. 5.120

1.2 分析条件

液相色谱条件:

色 谱 柱 : Shim-pack Scepter HD-C18 (1.9 μ m, 2.1 \times 100 mm) ;
岛津 (上海) 实验器材有限公司, P/N: 227-31026-05)

流 动 相 : 正离子模式, A-0.1% 甲酸水溶液; B- 乙腈 (含 0.1% 甲酸)
负离子模式, A- 水; B- 乙腈

进 样 体 积 : 5 μ L 柱 温 : 40 $^{\circ}$ C

流 速 : 0.3 mL/min 洗 针 液 : 甲醇 / 水 =1:1 (v:v)

洗 脱 方 式 : 梯度洗脱, B 相起始浓度为 5%, 时间程序如表 1 所示

表 1 梯度洗脱时间程序 (正、负离子模式)

时间 (min)	单元	处理命令	值
1.00	泵	B Conc	5
4.00	泵	B Conc	20
12.00	泵	B Conc	48
15.00	泵	B Conc	95
17.00	泵	B Conc	95
17.10	泵	B Conc	5
20.00	控制器	STOP	

质谱条件

离子化模式 : ESI (+&-)

雾化气流速 : 3.0 L/min

接口电压 : 1 kV

干燥气流速 : 5.0 L/min

接口温度 : 350 $^{\circ}$ C

加热气流速 : 15.0 L/min

D L 温度 : 280 $^{\circ}$ C

加热模块温度 : 400 $^{\circ}$ C

喷雾针位置 : +3

扫描模式 : 多反应监测 (MRM)

MRM 参数 : 见附录 1

■ 标样与样品的制备

2.1 样品溶液的制备

① 二甲硝咪唑等 119 种原料: 准确称取样品 0.5 g, 置于 10 mL 比色管中, 加乙腈 2 mL, 振摇。加乙腈至 10 mL, 超声 20 min, 取出, 以 10000 r/min 转速 4 $^{\circ}$ C 离心 10 min, 吸取乙腈提取液。准确量取 1 mL 乙腈提取液, 至 5 mL 容量瓶中, 加 0.4% 甲酸溶液至刻度, 定容。以 10000 r/min 转速 4 $^{\circ}$ C 离心 10 min, 吸取上清液, 过 0.22 μ m 滤膜后, 上机。

② 环吡酮胺的测定: 准确吸取上述乙腈提取液 1 mL, 加入氢氧化钠溶液 0.5 mL, 再准确加入硫酸二甲酯 50 μ L, 置于 37 $^{\circ}$ C 水浴 15 min, 准确加入三乙胺 50 μ L, 过滤后上机。

2.2 标准品溶液的制备

① 二甲硝咪唑等 119 种原料: 取空白化妆品, 按 2.1 前处理方式①制备, 获得基质空白溶液。以基质空白溶液为溶剂, 将混合标准溶液稀释成 0.2、0.5、1、2、5、10、20、50、100 ng/mL 标准曲线系列溶液。

② 环吡酮胺标准溶液: 称取 10 mg 环吡酮胺至 10 mL 量瓶中, 加甲醇溶解并定容, 获得 1 mg/mL 环吡酮胺

单标储备液。量取单标储备液 100 μL ，置于 50 mL 量瓶，用乙腈稀释，获得 2 $\mu\text{g}/\text{mL}$ 中间液。分别准确量取中间液 20、50、100、200、300、400、500 μL 中间液，加乙腈至 1 mL，照 2.1 前处理方式^②制备，获得环吡酮胺标准曲线系列溶液。

■ 结果与讨论

3.1 标准样品谱图

在本实验条件下，磺胺间甲氧嘧啶和磺胺林（编号 55 和 59）、磺胺曲沙唑和磺胺异噁唑（编号 71 和 74）分离良好。

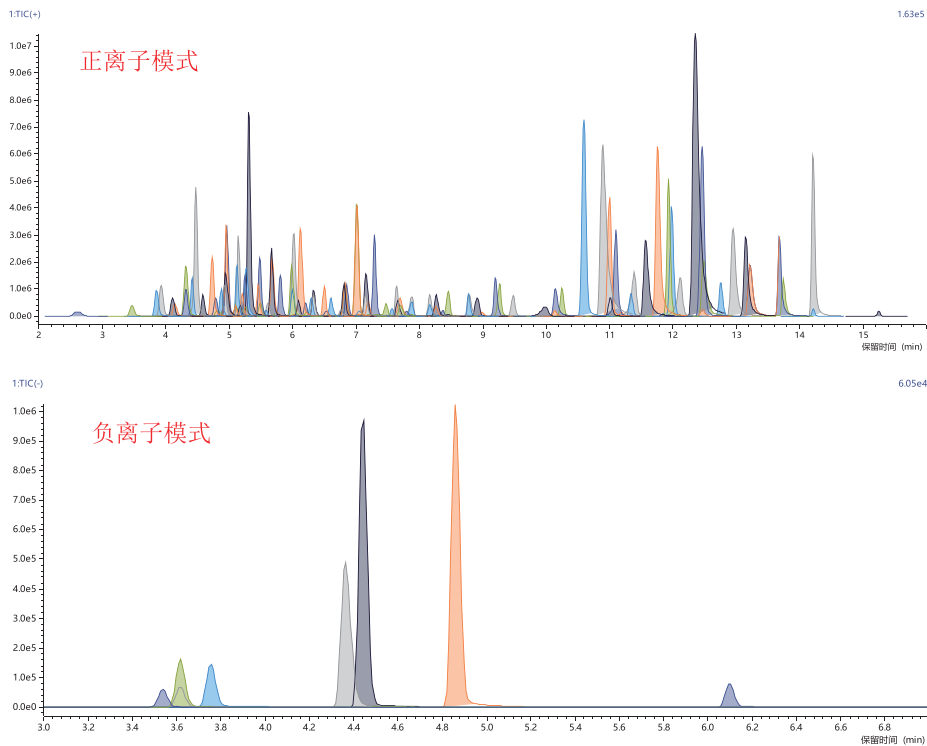
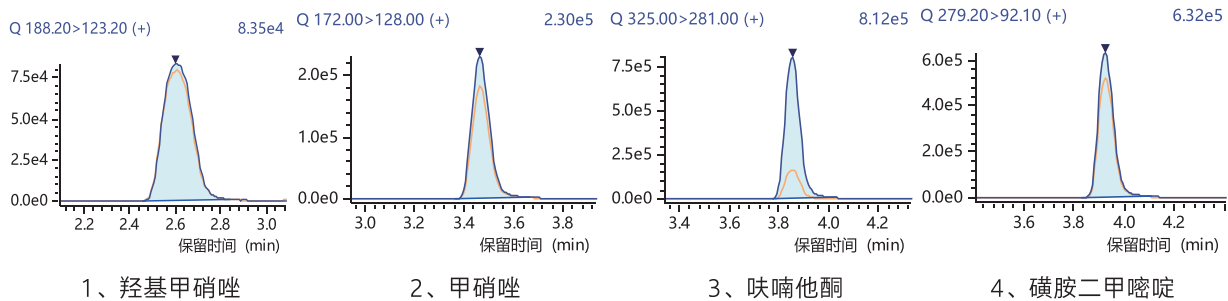


图 1 护肤水中 120 种抗感染类药物 MRM 色谱图 (20 ng/mL)

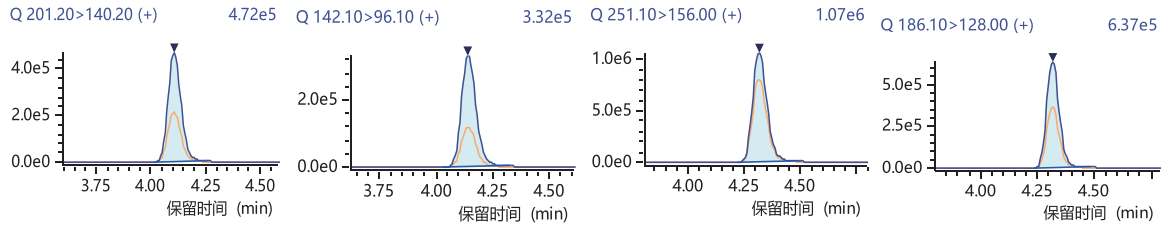


1、羟基甲硝唑

2、甲硝唑

3、呋喃他酮

4、磺胺二甲嘧啶

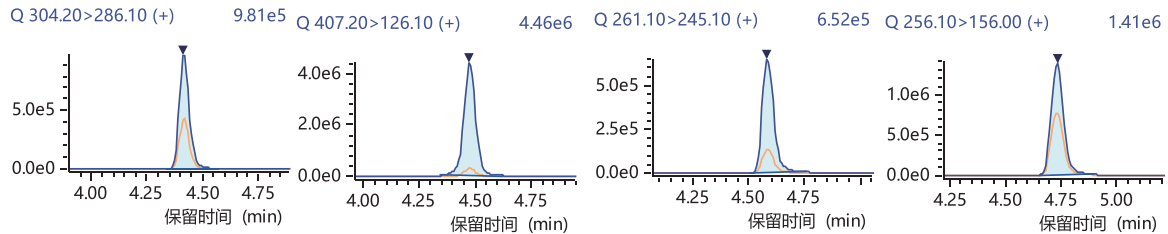


5、洛硝哒唑

6、二甲硝咪唑

7、磺胺嘧啶

8、特硝唑

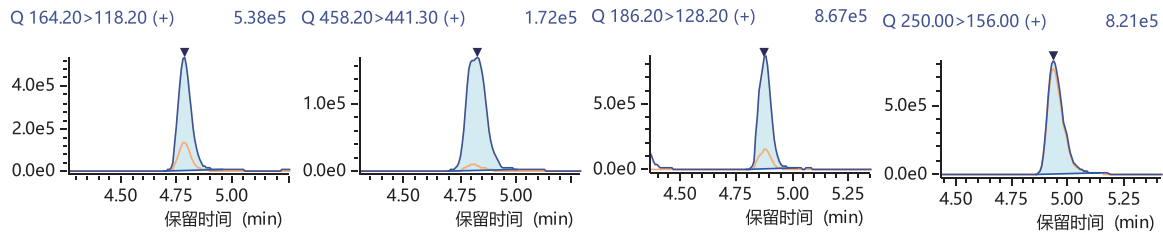


9、吡哌酸

10、林可霉素

11、二甲氧苄啶

12、磺胺噻唑

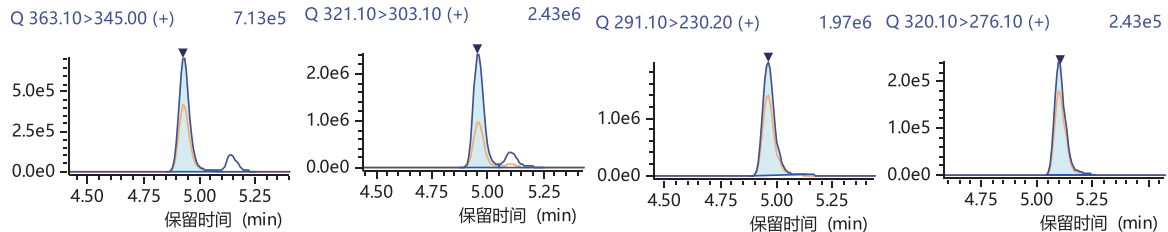


13、苯硝咪唑

14、米诺环素

15、塞克硝唑

16、磺胺吡啶

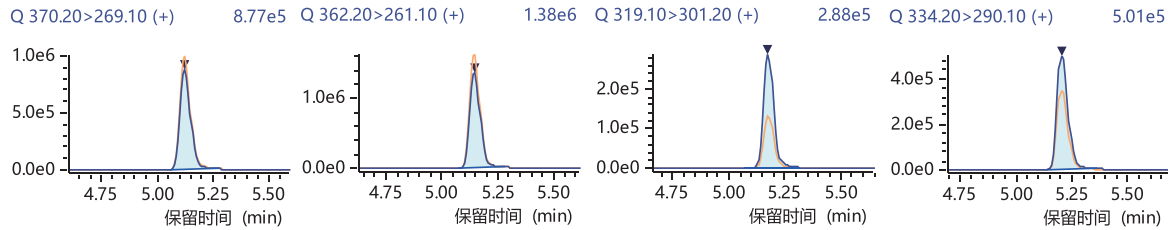


17、麻保沙星

18、依诺沙星

19、甲氧苄啶

20、诺氟沙星

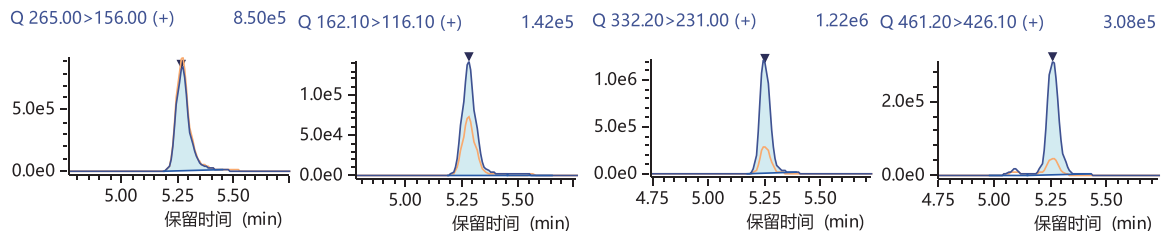


21、氟罗沙星

22、氧氟沙星

23、帕珠沙星

24、培氟沙星

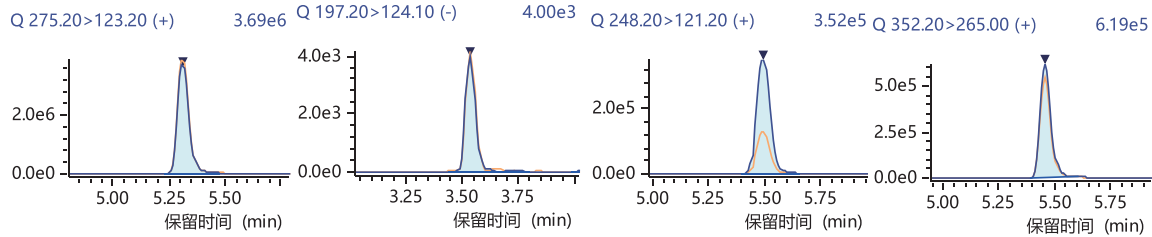


25、磺胺甲噁啶

26、氯甲硝咪唑

27、环丙沙星

28、土霉素

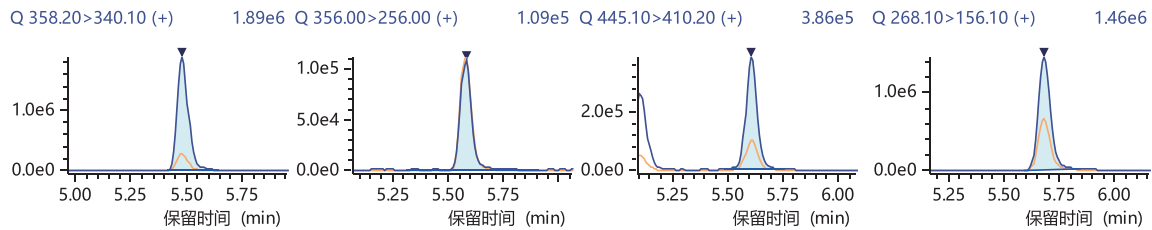


29、奥美普林

30、呋喃西林

31、替硝唑

32、洛美沙星

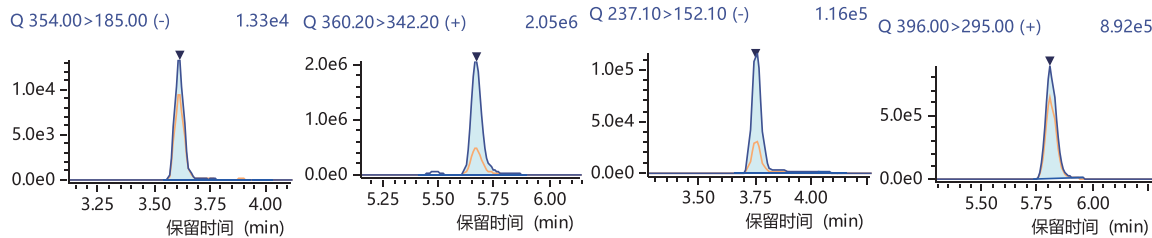


33、达氟沙星

34、琥珀酰磺胺噻唑

35、四环素

36、磺胺二甲唑

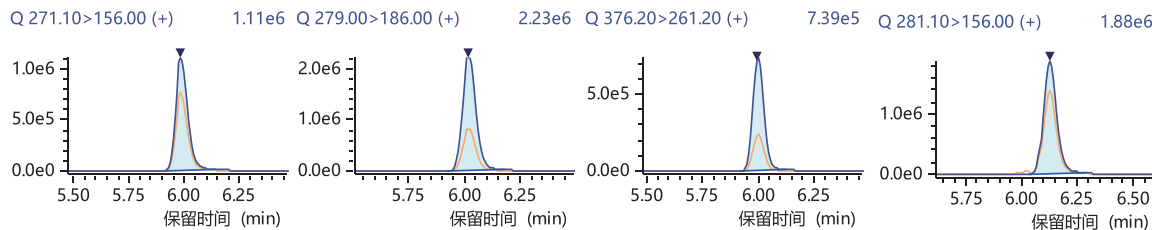


37、甲砜霉素

38、恩诺沙星

39、呋喃妥因

40、奥比沙星

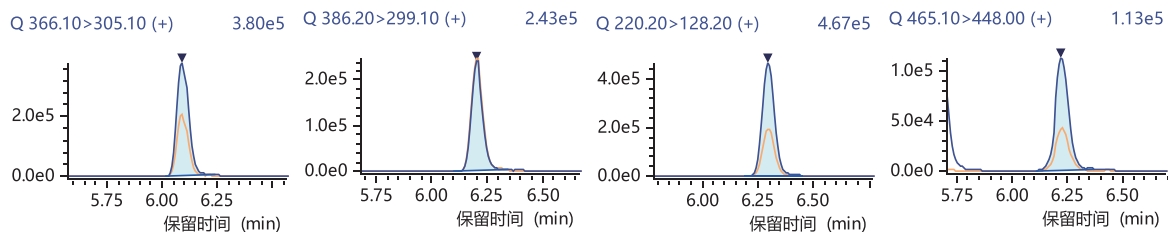


41、磺胺甲二唑

42、磺胺索嘧啶

43、加替沙星

44、磺胺甲氧唑

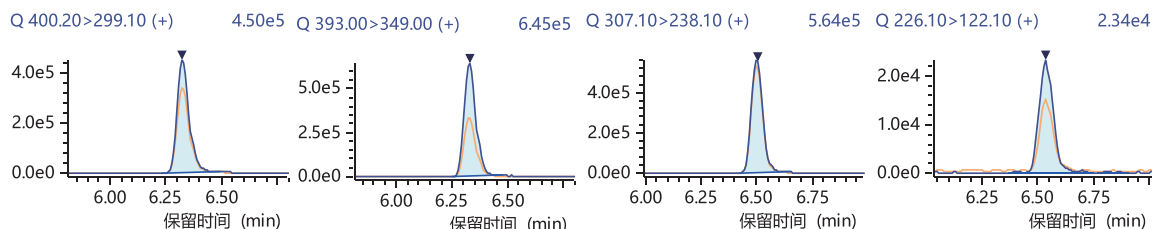


45、克林沙星

46、沙拉沙星

47、奥硝唑

48、去甲基金霉素

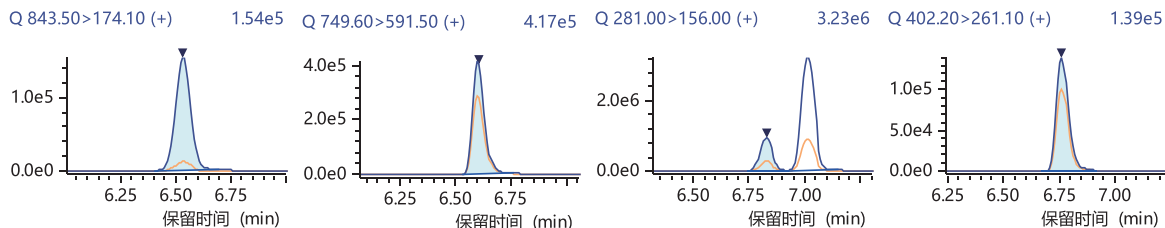


49、双氟沙星

50、司帕沙星

51、氟康唑

52、呋喃唑酮

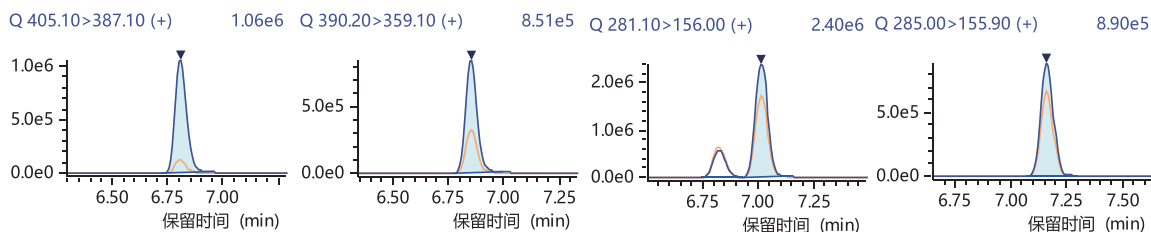


53、螺旋霉素

54、阿奇霉素

55、磺胺间甲氧嘧啶

56、莫西沙星

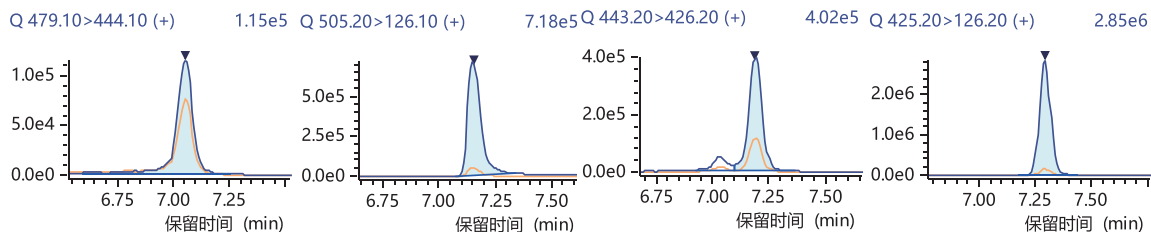


57、妥舒沙星

58、巴洛沙星

59、磺胺林

60、磺胺氯吡嗪

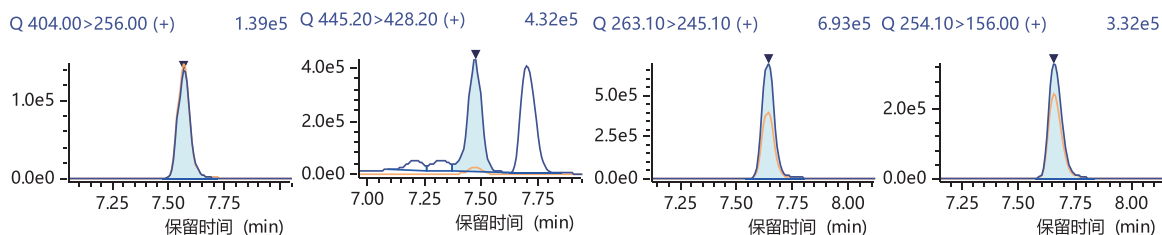


61、金霉素

62、克林霉素磷酸酯

63、美他环素

64、克林霉素

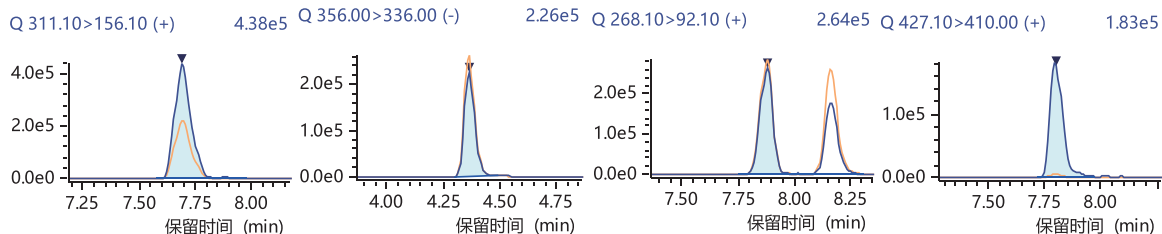


65、酞磺胺噻唑

66、多西环素

67、西诺沙星

68、磺胺甲噁唑

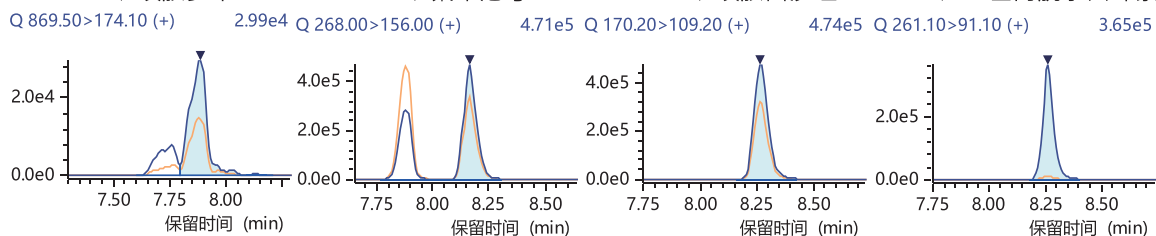


69、磺胺多辛

70、氟苯尼考

71、磺胺曲沙唑

72、4- 差向脱水四环素

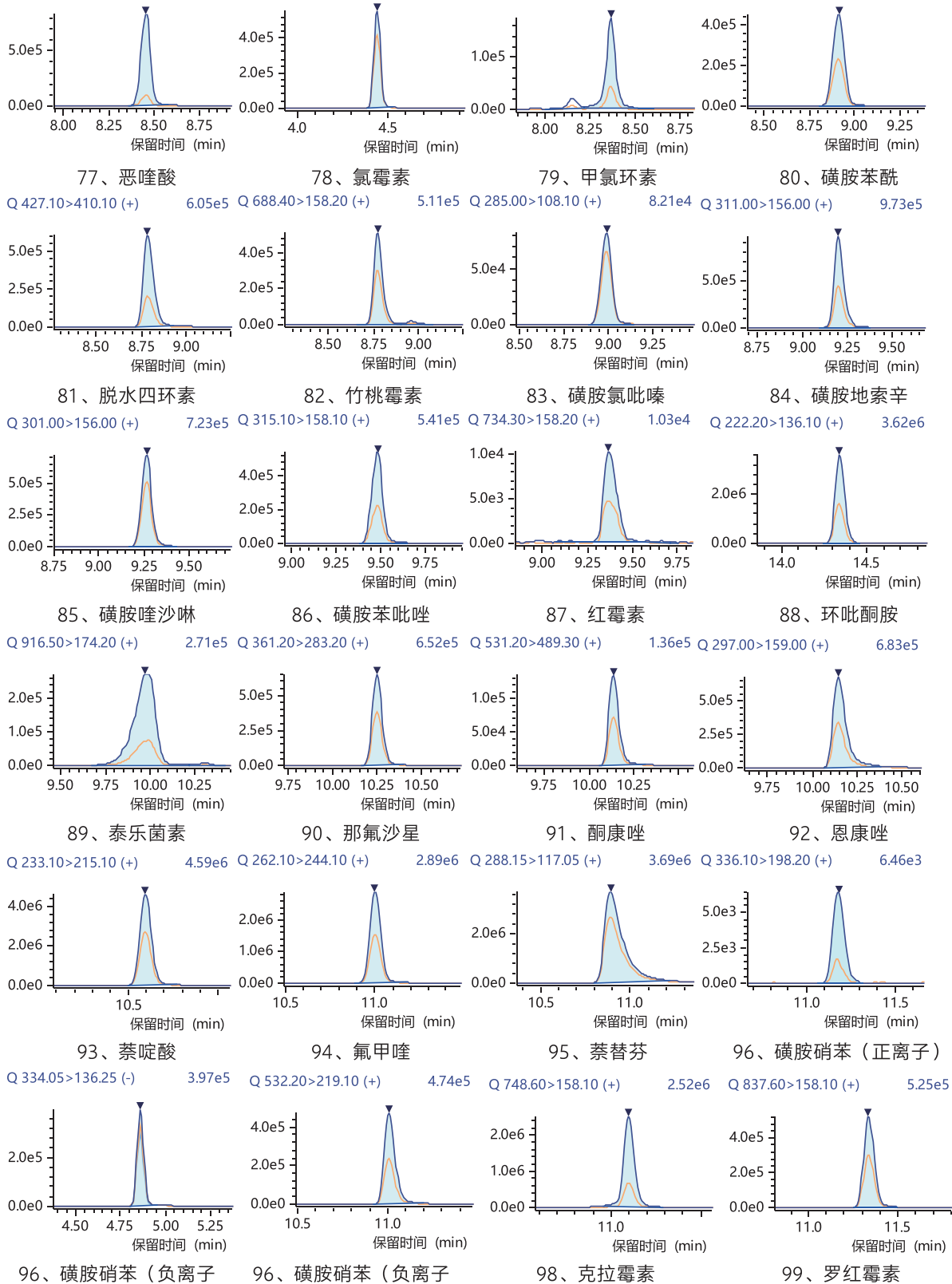


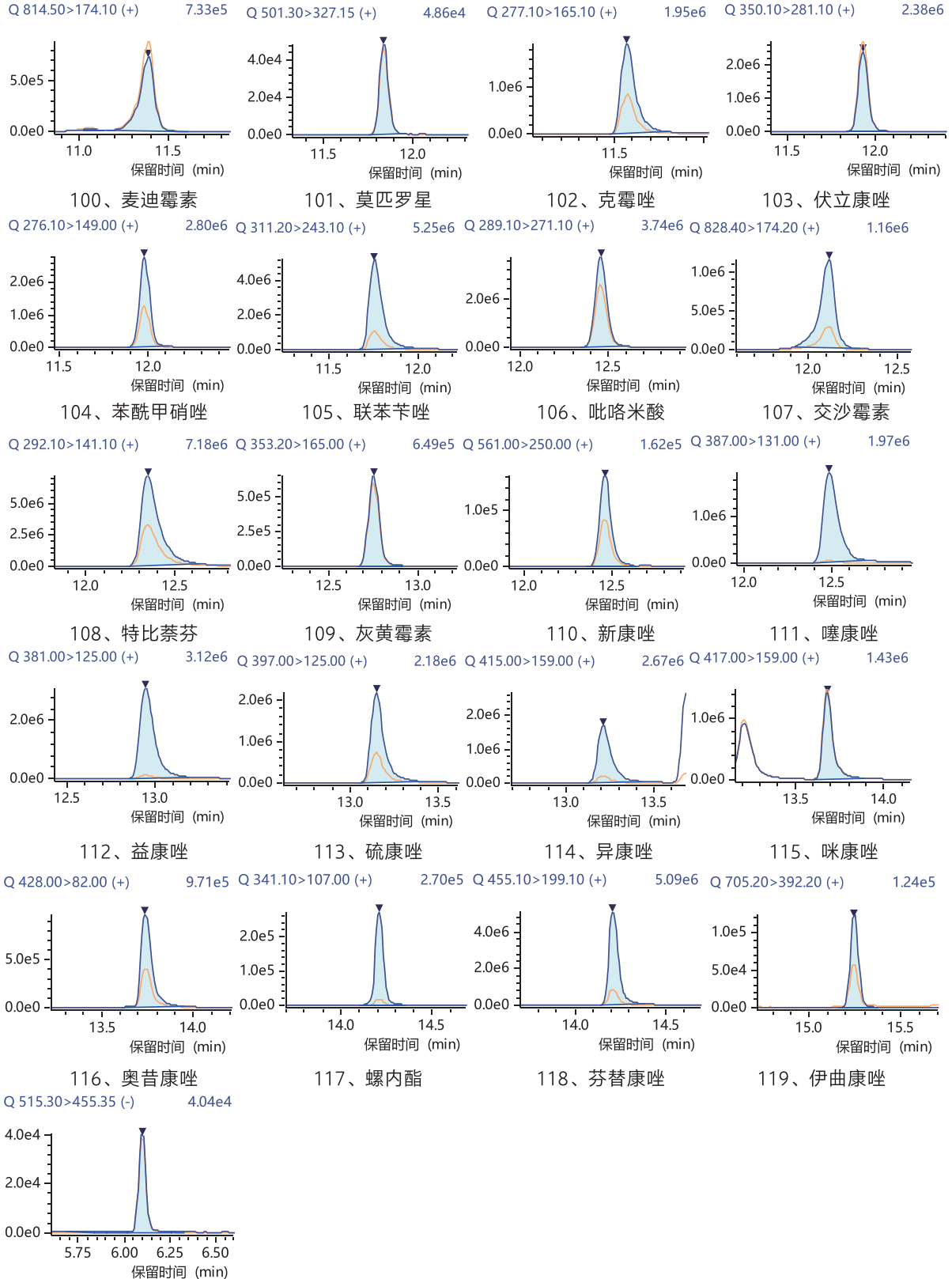
72、4- 差向脱水四环素

74、磺胺异噁唑

75、异丙硝唑

76、苄达唑




 图 2 120 种抗感染类药物 MRM 色谱图 (20 ng/mL, 各化合物采集其保留时间 ± 0.5 min)

3.2 校准曲线和灵敏度

按 2.2 中方式配制标准曲线，外标法定量。以浓度为横坐标，峰面积为纵坐标，绘制校准曲线。根据曲线最低点标样数据，以 3 倍信噪比计算检出限。化合物校准曲线信息如表 2 所示。

表 2 化合物校准曲线信息

序号	化合物	线性范围 (ng/mL)	相关系数 r^2	检出限 (ng/mL)	序号	化合物	线性范围 (ng/mL)	相关系数 r^2	检出限 (ng/mL)
1	羟基甲硝唑	0.5~100	0.998	0.2	61	金霉素	1~100	0.998	0.5
2	甲硝唑	0.5~100	0.999	0.2	62	克林霉素磷酸酯	0.5~100	0.999	0.2
3	呋喃他酮	0.5~100	0.999	0.2	63	美他环素	0.5~100	0.999	0.2
4	磺胺二甲嘧啶	0.5~100	0.998	0.2	64	克林霉素	0.5~100	0.999	0.2
5	洛硝哒唑	0.5~100	0.999	0.2	65	酞磺胺噻唑	0.5~100	0.998	0.2
6	二甲基咪唑	0.5~100	0.997	0.2	66	多西环素	1~100	0.996	0.5
7	磺胺嘧啶	0.2~100	0.997	0.1	67	西诺沙星	0.5~100	0.998	0.2
8	特硝唑	0.2~100	0.998	0.1	68	磺胺甲噁唑	0.5~100	0.999	0.2
9	吡哌酸	0.2~100	0.999	0.1	69	磺胺多辛	0.5~100	0.999	0.2
10	林可霉素	0.2~100	0.999	0.02	70	氟苯尼考	0.5~100	0.997	0.2
11	二甲氧苄啶	0.2~100	0.997	0.05	71	磺胺曲沙唑	0.2~100	0.998	0.1
12	磺胺噻唑	0.5~100	0.997	0.2	72	4- 差向脱水四环素	0.5~100	0.999	0.2
13	苯硝咪唑	0.5~100	0.998	0.2	73	替米考星	1~100	0.997	0.5
14	米诺环素	0.2~100	0.998	0.05	74	磺胺异噁唑	0.2~100	0.997	0.1
15	塞克硝唑	0.2~100	0.999	0.1	75	异丙硝唑	0.5~100	0.996	0.2
16	磺胺吡啶	0.2~100	0.997	0.05	76	苄达唑	0.2~100	0.999	0.02
17	麻保沙星	0.2~100	0.997	0.1	77	恶喹酸	0.5~100	0.995	0.2
18	依诺沙星	0.5~100	0.996	0.2	78	氯霉素	0.5~100	0.997	0.2
19	甲氧苄啶	0.2~100	0.998	0.05	79	甲氯环素	0.5~100	0.999	0.2
20	诺氟沙星	0.5~100	0.997	0.2	80	磺胺苯酰	0.5~100	0.999	0.2
21	氟罗沙星	0.2~100	0.996	0.1	81	脱水四环素	0.2~100	0.999	0.1
22	氧氟沙星	0.5~100	0.996	0.2	82	竹桃霉素	0.2~100	0.999	0.1
23	帕珠沙星	1~100	0.999	0.5	83	磺胺氯吡嗪	0.5~100	0.998	0.2
24	培氟沙星	0.2~100	0.998	0.1	84	磺胺地索辛	0.5~100	0.998	0.2
25	磺胺甲噁唑	0.5~100	0.996	0.2	85	磺胺喹沙啉	0.5~100	0.997	0.2
26	氯甲硝咪唑	1~100	0.997	0.5	86	磺胺苯吡唑	0.5~100	0.997	0.2
27	环丙沙星	0.5~100	0.998	0.2	87	红霉素	1~100	0.996	0.5
28	土霉素	1~100	0.997	0.5	88	环吡酮胺	1~500	0.995	0.5
29	奥美普林	0.2~100	0.998	0.05	89	泰乐菌素	0.5~100	0.997	0.2
30	呋喃西林	0.5~100	0.999	0.2	90	那氟沙星	0.2~100	0.999	0.1

31	替硝唑	0.5~100	0.998	0.2	91	酮康唑	1~100	0.997	0.5
32	洛美沙星	0.5~100	0.999	0.2	92	恩康唑	0.5~100	0.997	0.2
33	达氟沙星	0.5~100	0.999	0.2	93	萘啶酸	0.2~100	0.999	0.1
34	琥珀酰磺胺噻唑	2~100	0.999	1	94	氟甲唑	0.2~100	0.999	0.1
35	四环素	0.5~100	0.999	0.2	95	萘替芬	0.5~100	0.998	0.2
36	磺胺二甲唑	0.5~100	0.996	0.2	96	磺胺硝苯	0.5~100	0.997	0.2
37	甲矾霉素	0.5~100	0.999	0.2	97	特康唑	0.2~100	0.999	0.1
38	恩诺沙星	0.5~100	0.999	0.2	98	克拉霉素	0.2~100	0.999	0.1
39	呋喃妥因	1~100	0.996	0.5	99	罗红霉素	0.5~100	0.998	0.2
40	奥比沙星	0.2~100	0.999	0.02	100	麦迪霉素	0.5~100	0.997	0.2
41	磺胺甲二唑	0.5~100	0.999	0.2	101	莫匹罗星	1~100	0.996	0.5
42	磺胺索嘧啶	0.5~100	0.997	0.2	102	克霉唑	0.2~100	0.999	0.1
43	加替沙星	0.5~100	0.999	0.2	103	伏立康唑	0.2~100	0.999	0.1
44	磺胺甲氧嗪	0.5~100	0.999	0.2	104	苯酰甲硝唑	0.2~100	0.999	0.1
45	克林沙星	0.5~100	0.997	0.2	105	联苯苄唑	0.2~100	0.997	0.1
46	沙拉沙星	0.5~100	0.999	0.2	106	吡咯米酸	0.2~100	0.999	0.1
47	奥硝唑	0.5~100	0.999	0.2	107	交沙霉素	0.5~100	0.996	0.2
48	去甲基金霉素	1~100	0.999	0.5	108	特比萘芬	0.2~100	0.997	0.1
49	双氟沙星	0.5~100	0.999	0.2	109	灰黄霉素	0.5~100	0.999	0.2
50	司帕沙星	0.2~100	0.998	0.1	110	新康唑	0.5~100	0.999	0.2
51	氟康唑	0.2~100	0.999	0.1	111	噻康唑	0.5~100	0.997	0.2
52	呋喃唑酮	1~100	0.999	0.5	112	益康唑	0.5~100	0.998	0.2
53	螺旋霉素	0.2~100	0.999	0.1	113	硫康唑	0.5~100	0.999	0.2
54	阿奇霉素	0.2~100	0.998	0.1	114	异康唑	0.5~100	0.997	0.2
55	磺胺间甲氧嘧啶	0.2~100	0.996	0.1	115	咪康唑	0.2~100	0.998	0.1
56	莫西沙星	0.2~100	0.999	0.1	116	奥昔康唑	0.5~100	0.999	0.2
57	妥舒沙星	0.2~100	0.999	0.05	117	螺内酯	0.5~100	0.999	0.2
58	巴洛沙星	0.2~100	0.999	0.05	118	芬替康唑	0.2~100	0.999	0.1
59	磺胺林	0.2~100	0.997	0.1	119	伊曲康唑	1~100	0.997	0.5
60	磺胺氯哒嗪	0.2~100	0.997	0.1	120	夫西地酸	0.5~100	0.997	0.2

3.3 重复性实验

取 2.0 和 20 ng/mL 连续进样 6 次，考察仪器的重复性，测定结果如图 3-4 所示：各目标物的保留时间和峰面积的 RSD 分别在 0.02~0.32% 和 1.79~8.70% 之间。

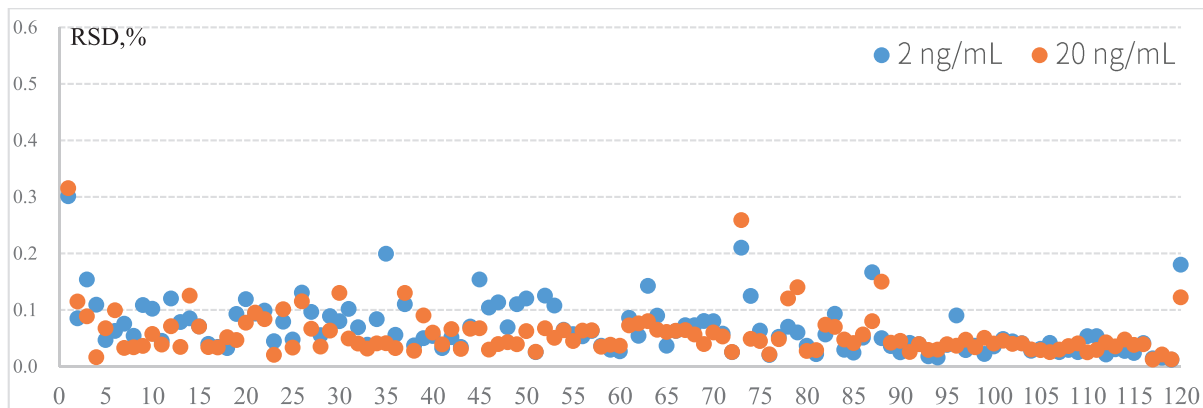


图3 保留时间重复性结果 (n=6)

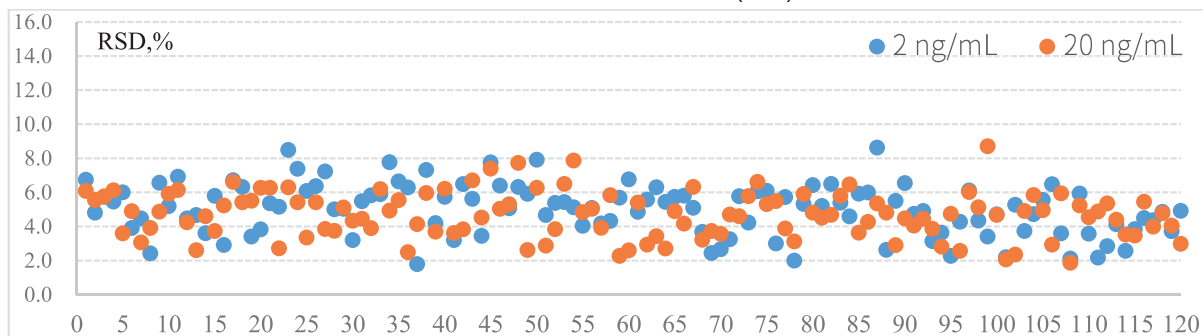


图4 峰面积重复性结果 (n=6)

3.4 加标回收率

在护肤水空白样品上进行 2 mg/kg 浓度加标，前处理后上机，重复 3 次，测定平均回收率，结果如图 5 所示：120 种抗感染类药物的回收率在 72.1~129.3% 之间，RSD 在 0.72~8.31% 之间。

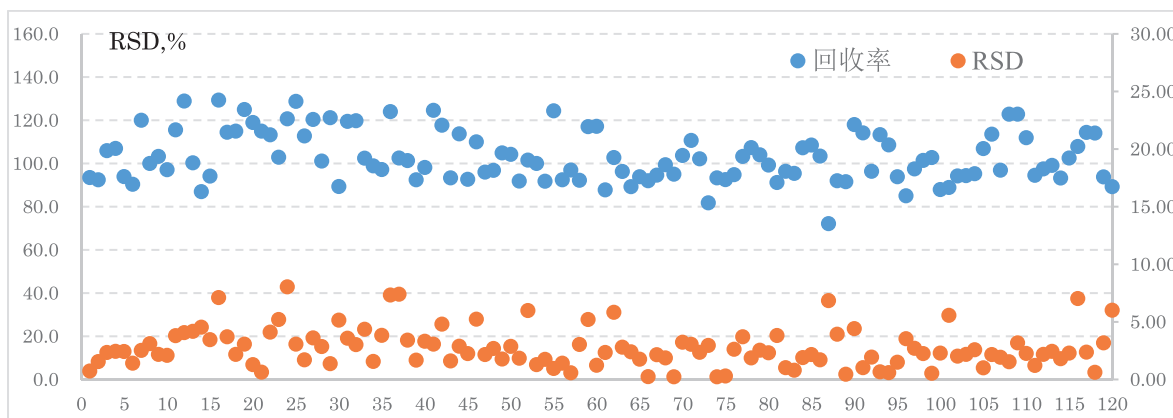


图5 添加回收率结果 (n=3)

3.4 智能积分软件的使用

本次实验过程使用了岛津 Peakintelligence 智能积分功能。如图 6.1 和 6.2 所示，对于未检出的化合物，传统的积分方式仍会对噪音进行积分，需要实验人员手动取消该样品积分；而智能积分方式判断正确不进行积分。智能积分无需设置任何参数，较传统积分方式更加正确的对样品进行积分，减少实验人员重复校正积分的次数，提高工作效率。

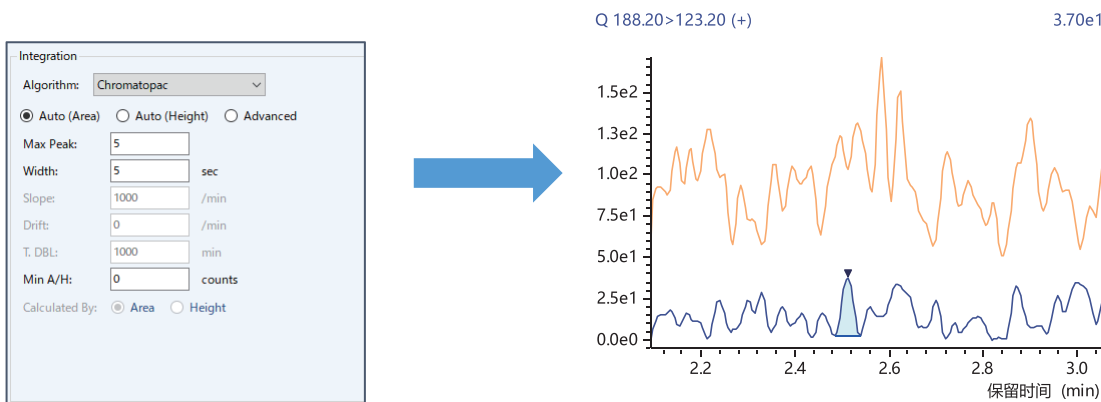


图 6.1 传统积分方式

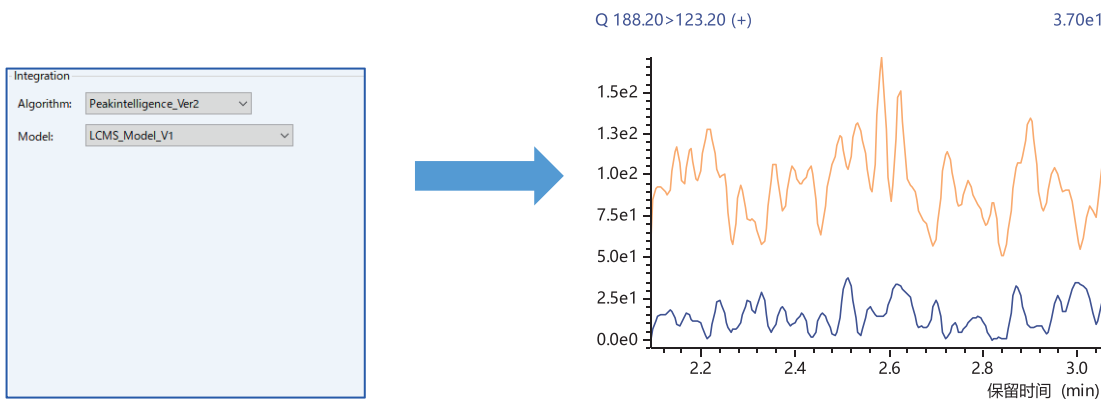


图 6.2 智能积分方式

■ 结论

本文参考国家药监局发布《化妆品中二甲硝咪唑等 120 种原料的测定方法》方法，建立了使用岛津三重四极杆液质联用仪测定化妆品中 120 种抗感染类药物的方法。120 种化合物在 0.2 ~100 ng/mL 浓度范围内线性良好，相关系数 r^2 在 0.995 以上。方法的重复性、回收率等指标均满足标准规定要求。该方法灵敏度高，分析时间短，通量高，可为化妆品中抗感染类药物的日常监测提供依据。

附录 1 120 种抗感染药物 MRM 参数

No.	中文名	电离方式	保留时间 (min)	前体离子	定量离子	Q1 Pre Bias	CE	Q3 Pre Bias	定性离子	Q1 Pre Bias	CE	Q3 Pre Bias
1	羟基甲硝唑	+	2.579	188.2	123.2	-11	-15	-22	126.2	-12	-16	-23
2	甲硝唑	+	3.433	172	82	-11	-24	-15	128	-11	-14	-14

3	呋喃它酮	+	3.845	325	100	-12	-15	-17	281	-12	-12	-20
4	磺胺二甲嘧啶	+	3.909	279.2	186.1	-19	-22	-19	92.1	-19	-30	-18
5	洛硝哒唑	+	4.092	201.2	140.2	-10	-13	-30	55.2	-11	-22	-22
6	二甲硝咪唑	+	4.091	142.1	96.1	-30	-16	-17	81.1	-30	-27	-14
7	磺胺嘧啶	+	4.294	251.1	156	-17	-14	-16	108.1	-17	-23	-20
8	特硝唑	+	4.279	186.1	128	-21	-16	-22	82.1	-21	-28	-30
9	吡哌酸	+	4.420	304.2	286.1	-30	-18	-22	215.1	-30	-38	-24
10	林可霉素	+	4.48	407.2	359.4	-20	-20	-20	126.1	-20	-30	-20
11	二甲氧苄啶	+	4.591	261.1	245.1	-30	-40	-24	123.1	-14	-12	-10
12	磺胺噻唑	+	4.706	256.1	156	-17	-14	-16	108.2	-17	-24	-21
13	苯硝咪唑	+	4.708	164.2	118.2	-10	-22	-20	91.1	-10	-39	-15
14	米诺环素	+	4.752	458.2	441.3	-10	-19	-17	283.1	-10	-30	-20
15	塞克硝唑	+	4.838	186.2	128.2	-10	-14	-25	59.2	-13	-19	-22
16	磺胺吡啶	+	4.917	250	156	-12	-15	-17	92	-12	-27	-17
17	麻保沙星	+	4.940	363.1	320	-14	-15	-22	345	-14	-20	-24
18	依诺沙星	+	4.962	321.1	232	-16	-35	-26	303.1	-11	-22	-22
19	甲氧苄啶	+	4.975	291.1	230.2	-20	-22	-25	123.2	-20	-23	-13
20	诺氟沙星	+	5.119	320.1	233.1	-16	-24	-17	276.1	-12	-18	-20
21	氟罗沙星	+	5.136	370.2	269.1	-11	-27	-19	326	-11	-20	-23
22	氧氟沙星	+	5.156	362.2	261.1	-10	-28	-19	318.2	-10	-20	-23
23	帕珠沙星	+	5.183	319.1	301.2	-15	-15	-15	281.1	-15	-25	-15
24	培氟沙星	+	5.222	334.2	233.1	-12	-26	-17	290.1	-12	-19	-21
25	磺胺甲噁啶	+	5.247	265	156	-10	-17	-17	92	-10	-29	-18
26	氯甲硝咪唑	+	5.276	162.1	145.1	-19	-16	-26	116.1	-19	-16	-11
27	环丙沙星	+	5.262	332.2	231	-12	-36	-16	288.1	-10	-18	-21
28	土霉素	+	5.263	461.2	426.1	-13	-19	-22	444.2	-10	-17	-22
29	奥美普林	+	5.327	275.2	123.2	-14	-23	-24	259.1	-14	-28	-29
30	呋喃西林	-	3.537	197.2	124.1	21	10	23	80.1	21	9	30
31	替硝唑	+	5.471	248.2	121.2	-13	-17	-20	128.2	-13	-22	-13
32	洛美沙星	+	5.473	352.2	265	-18	-22	-20	308.2	-18	-16	-23
33	达氟沙星	+	5.492	358.2	340.1	-14	-20	-26	255	-14	-42	-29
34	琥珀酰磺胺噻唑	+	5.572	356	256	-15	-15	-15	192.1	-15	-25	-15
35	四环素	+	5.615	445.1	410.2	-12	-20	-21	427.3	-10	-13	-16
36	磺胺二甲唑	+	5.653	268.1	156.1	-30	-15	-29	113.1	-30	-22	-21
37	甲矾霉素	-	3.618	354	185	27	22	19	289.9	27	12	20

38	恩诺沙星	+	5.688	360.2	245.1	-10	-27	-17	342.2	-10	-22	-25
39	呋喃妥因	-	3.759	237.1	152.1	19	13	16	124	19	15	25
40	奥比沙星	+	5.829	396	352	-17	-19	-24	295	-16	-25	-20
41	磺胺甲二唑	+	5.969	271.1	156	-10	-14	-17	92	-10	-27	-17
42	磺胺索嘧啶	+	5.982	279	156	-27	-19	-16	186	-30	-17	-19
43	加替沙星	+	6.020	376.2	261.2	-14	-33	-18	245.1	-19	-53	-28
44	磺胺甲氧唑	+	6.099	281.1	156	-10	-17	-16	92	-10	-28	-18
45	克林沙星	+	6.114	366.1	305.1	-15	-20	-15	236.1	-15	-40	-15
46	沙拉沙星	+	6.229	386.2	299.1	-11	-29	-22	342.1	-11	-20	-17
47	奥硝唑	+	6.267	220.2	82.1	-12	-30	-16	128.2	-12	-15	-13
48	去甲基金霉素	+	6.247	465.1	448	-12	-16	-24	154.2	-12	-32	-18
49	双氟沙星	+	6.353	400.2	299.1	-11	-29	-21	356	-11	-21	-26
50	司帕沙星	+	6.357	393	349	-30	-21	-24	292	-30	-21	-24
51	氟康唑	+	6.488	307.1	238.1	-11	-16	-17	220	-11	-18	-15
52	呋喃唑酮	+	6.519	226.1	122.1	-13	-21	-22	139.1	-13	-15	-24
53	螺旋霉素	+	6.579	843.5	174.1	-26	-45	-19	540.3	-26	-26	-20
54	阿奇霉素	+	6.648	749.6	591.5	-20	-30	-22	116.1	-22	-47	-23
55	磺胺间甲氧嘧啶	+	6.803	281	156	-12	-18	-16	108	-23	-18	-22
56	莫西沙星	+	6.798	402.2	261.1	-11	-25	-19	364.5	-11	-27	-27
57	妥舒沙星	+	6.840	405.1	387.1	-15	-25	-15	344.1	-15	-15	-15
58	巴洛沙星	+	6.890	390.2	359.1	-15	-15	-15	315.1	-15	-25	-15
59	磺胺林	+	6.993	281.1	156	-10	-15	-30	92.1	-10	-29	-16
60	磺胺氯吡嗪	+	7.133	285	155.9	-11	-15	-17	92	-11	-29	-18
61	金霉素	+	7.085	479.1	444.1	-13	-20	-23	462.2	-13	-16	-23
62	克林霉素磷酸酯	+	7.151	505.2	126.1	-20	-32	-24	457.2	-26	-21	-17
63	美他环素	+	7.23	443.2	426.2	-11	-20	-23	201.2	-11	-30	-22
64	克林霉素	+	7.329	425.2	377.2	-12	-20	-14	126.2	-12	-27	-26
65	酞磺胺噻唑	+	7.565	404	256	-15	-15	-15	156	-15	-25	-15
66	多西环素	+	7.524	445.2	428.2	-12	-17	-22	154	-12	-26	-16
67	西诺沙星	+	7.633	263.1	245.1	-21	-16	-19	189	-21	-30	-22
68	磺胺甲口唑	+	7.644	254.1	156	-13	-15	-17	107.9	-10	-23	-20
69	磺胺多辛	+	7.676	311.1	156.1	-22	-18	-30	108.1	-22	-26	-20
70	氟苯尼考	-	4.366	356	336	13	10	23	185	13	20	19
71	磺胺曲沙唑	+	7.848	268.1	92.1	-17	-28	-30	156	-17	-16	-29
72	4-差向脱水四环素	+	7.848	427.1	410	-15	-12	-15	269	-15	-25	-15

73	替米考星	+	7.906	869.5	174.1	-28	-50	-20	696.6	-28	-40	-28
74	磺胺异噁唑	+	8.148	268	156	-30	-13	-16	92.1	-30	-27	-17
75	异丙硝唑	+	8.192	170.2	109.2	-22	-25	-21	124.2	-22	-20	-20
76	苄达唑	+	8.250	261.1	91.1	-15	-35	-15	107	-15	-35	-15
77	恶唑酸	+	8.435	262.1	244.1	-30	-18	-30	216	-30	-32	-26
78	氟霉素	-	4.444	321.1	152	12	17	14	257.2	12	12	17
79	甲氧环素	+	8.423	477.2	460	-15	-15	-15	235	-15	-35	-15
80	磺胺苯酰	+	8.894	277.1	156.1	-15	-13	-29	108.1	-15	-23	-20
81	脱水四环素	+	8.766	427.1	410.1	-25	-17	-28	154.1	-25	-28	-28
82	竹桃霉素	+	8.843	688.4	158.2	-22	-30	-18	544.4	-22	-15	-30
83	磺胺氯吡嗪	+	8.963	285	156.1	-15	-17	-30	108.1	-15	-26	-20
84	磺胺地索辛	+	9.183	311	156	-23	-22	-29	92.1	-23	-35	-17
85	磺胺喹沙啉	+	9.238	301	156	-23	-17	-29	92.1	-23	-30	-17
86	磺胺苯吡唑	+	9.454	315.1	158.1	-30	-28	-30	156.1	-30	-21	-30
87	红霉素	+	9.448	734.3	158.2	-40	-35	-18	576.4	-40	-20	-32
88	环吡酮胺	+	14.322	222.2	136.1	-25	-26	-26	162.1	-24	-23	-17
89	泰乐菌素	+	10.038	916.5	174.2	-30	-45	-20	101.1	-20	-52	-19
90	那氟沙星	+	10.235	361.2	283.2	-11	-38	-20	257.2	-13	-37	-12
91	酮康唑	+	10.127	531.2	244	-20	-34	-18	489.3	-20	-31	-18
92	恩康唑	+	10.237	297	159	-15	-25	-15	201	-15	-18	-15
93	萘啶酸	+	10.580	233.1	215.1	-30	-14	-26	187	-30	-28	-22
94	氟甲喹	+	10.988	262.1	244.1	-30	-16	-18	202	-30	-36	-23
95	萘替芬	+	11.013	288.15	117.05	-20	-15	-20	115.1	-20	-50	-23
96	磺胺硝苯	+	11.125	336.1	198.2	-23	-9	-14	294.1	-23	-12	-30
		-	4.863	334.1	136.2	11	29	13	270.2	11	23	12
97	特康唑	+	11.132	532.2	219.1	-15	-35	-15	192.1	-15	-45	-15
98	克拉霉素	+	11.225	748.6	158.1	-22	-28	-17	590.6	-20	-20	-22
99	罗红霉素	+	11.473	837.6	158.1	-20	-34	-17	679.6	-20	-23	-26
100	麦迪霉素	+	11.517	814.5	174.1	-15	-32	-15	109.1	-15	-48	-15
101	莫匹罗星	+	11.836	501.3	327.15	-36	-13	-12	309.05	-26	-16	-21
102	克霉唑	+	11.642	277.1	165.1	-20	-30	-20	241	-10	-28	-17
103	伏立康唑	+	11.923	350.1	281.1	-10	-17	-19	127.1	-10	-35	-23
104	苯酰甲硝唑	+	11.955	276.1	149	-15	-15	-15	105	-15	-35	-15
105	联苯苄唑	+	11.882	311.2	243.1	-12	-16	-12	165	-12	-34	-18
106	吡咯米酸	+	12.450	289.1	271.1	-15	-15	-15	243.1	-15	-30	-15

107	交沙霉素	+	12.274	828.4	174.2	-26	-35	-20	229.2	-26	-30	-17
108	特比萘芬	+	12.502	292.1	141.1	-15	-23	-14	115.05	-15	-54	-21
109	灰黄霉素	+	12.751	353.2	165	-11	-21	-18	215	-10	-21	-15
110	新康唑	+	12.500	561.0	250	-28	-35	-26	515	-28	-31	-26
111	噻康唑	+	12.661	387.0	131	-15	-31	-15	199	-15	-20	-15
112	益康唑	+	13.132	381.0	125	-30	-30	-12	193.1	-30	-19	-13
113	硫康唑	+	13.302	397.0	125	-15	-25	-15	183	-15	-16	-15
114	异康唑	+	13.381	415.0	159	-15	-30	-15	123	-15	-50	-15
115	咪康唑	+	13.781	417.0	159	-30	-38	-29	161	-30	-35	-30
116	奥昔康唑	+	13.811	428.0	234	-15	-31	-15	82	-15	-35	-15
117	螺内酯	+	14.201	341.1	107	-12	-29	-11	165	-17	-55	-17
118	芬替康唑	+	14.304	455.1	199.1	-15	-30	-15	167.1	-15	-48	-15
119	伊曲康唑	+	15.117	705.2	392.2	-15	-35	-15	432.2	-15	-30	-15
120	夫西地酸	-	6.105	515.3	455.35	38	20	20	393.35	24	24	17

岛津应用云

