

# 中华人民共和国农业农村部公告

第 937 号

依据《兽药管理条例》、《饲料和饲料添加剂管理条例》规定，我部组织制定了《饲料中风险物质的筛查与确认技术指南 液相色谱-串联质谱法》，现予发布，自发布之日起实施。

特此公告。

农业农村部

2025 年 8 月 11 日

# 饲料中风险物质的筛查与确认技术指南

## 液相色谱-串联质谱法

### 1 范围

本文件确立了饲料、饲料添加剂和饲料原料中风险物质筛查与确认的技术要求,描述了 373 种风险物质的液相色谱-串联质谱筛查确认方法。

### 2 规范性引用文件

下列文件中的内容通过文中的规范性引用而构成本文件必不可少的条款。其中,注日期的引用文件,仅该日期对应的版本适用于本文件;不注日期的引用文件,其最新版本(包括所有的修改单)适用于本文件。

GB/T 6682 分析实验室用水规格和试验方法

GB/T 20195 动物饲料 试样的制备

### 3 术语和定义

本文件没有需要界定的术语和定义。

### 4 样品

按 GB/T 20195 制备试样,称取样品至少 200 g,粉碎后通过

0.425 mm 孔径的试验筛,充分混匀,装入密闭容器中保存,备用。选取类型相同、均匀一致且在目标物保留时间处的仪器响应值小于方法检出限 30% 的饲料样品,作为空白试样。

## 5 串联质谱仪

仪器配备电喷雾离子源;正模式下对利血平的检出限小于 50 fg,负模式下对氯霉素的检出限小于 10 fg。

## 6 质谱数据库

在仪器正常条件下,依次测定标准溶液,通过质谱全扫描和二级子离子扫描模式,依据目标物名称、母离子质荷比、两个以上特征碎片离子质荷比、保留时间等信息建立目标物质谱数据库。373 种目标物的质谱数据库及相关信息表见附录 A。

## 7 试验步骤

### 7.1 试样处理

样品前处理方法一般包含提取、净化、稀释(或浓缩)等操作。提取试剂可参考使用附录 A 中的溶剂。为提高样品净化效果,可选用具有除脂、除水等功能的净化材料。373 种目标物的样品前处理参考条件示例见附录 B。

### 7.2 液相色谱 - 串联质谱条件

#### 7.2.1 液相色谱条件

液相色谱条件应满足但不限于以下条件:

a) 色谱柱:依据筛查目标物性质及数量,选择填料、柱长、内

径、粒度等适宜的色谱柱。进样分析中尽可能使各组分充分分离，获得适合质谱定性分析的总离子流色谱图；

b) 流动相：有利于目标物离子化，以获取良好的仪器响应信号；

c) 保留时间：目标物色谱峰保留时间应大于等于色谱柱死时间的 2 倍。

### 7.2.2 串联质谱条件

串联质谱条件应满足但不限于以下条件：

a) 有利于获得目标物母离子和二级特征碎片离子；

b) 目标物二级特征碎片离子不少于 2 个(五氯酚等特殊化合物除外)；

c) 单个目标物特征离子峰不少于 10 个数据点。

## 8 筛查

在仪器正常条件下，试样溶液上机测定，试样溶液中待测物与质谱数据库中目标物色谱峰的保留时间相对偏差应在 $\pm 2.5\%$ 之内，且至少两个定性离子对的信噪比不小于 3，则认为筛查到疑似阳性样品，应进行确认。若出现仪器信号饱和等色谱峰异常情况，应将试样溶液稀释后再进行确认。

## 9 确认

空白试样按附录 B 中 B.3 操作，制得空白基质溶液。将目标物的标准溶液添加到空白基质溶液中配制成基质匹配标准溶液，

其仪器响应值应与样品中目标物响应值相差不超过30%。试样溶液与基质匹配标准溶液中目标物色谱峰的保留时间相对偏差应在 $\pm 2.5\%$ 之内,试样溶液与基质匹配标准溶液中选取两对或两对以上离子进行定性确证,且偏差不超过表1规定的范围,则确认为样品中存在对应的目标物,报告为阳性结果,否则为阴性结果。

表1 定性确证时相对离子丰度的最大允许偏差

|            |           |                  |                  |          |
|------------|-----------|------------------|------------------|----------|
| 相对离子丰度 (%) | $\geq 50$ | $\geq 20\sim 50$ | $\geq 10\sim 20$ | $< 10$   |
| 允许相对偏差 (%) | $\pm 20$  | $\pm 25$         | $\pm 30$         | $\pm 50$ |

## 10 定量

阳性样品使用现行有效标准或经验证的方法进行定量。

373 种目标物的质谱数据库及相关信息表

(目标物按照中文名称拼音排序)

| 序号 | 中文名称           | 英文名称                           | CAS 号       | 分子式                                                                          | 溶剂    | 保留时间<br>(min) | 加成<br>离子           | 母离子<br>(m/z) | 典型二级碎片离子<br>(m/z) | 碰撞能量<br>(eV) |
|----|----------------|--------------------------------|-------------|------------------------------------------------------------------------------|-------|---------------|--------------------|--------------|-------------------|--------------|
| 1  | 阿苯达唑           | Albendazole                    | 54965-21-8  | C <sub>12</sub> H <sub>15</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub> S              | 甲醇    | 10.412        | [M+H] <sup>+</sup> | 266          | 234/191/159       | 24/36/40     |
| 2  | 奥苯达唑           | Oxibendazole                   | 20559-55-1  | C <sub>12</sub> H <sub>15</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>                | 甲醇    | 8.185         | [M+H] <sup>+</sup> | 250.1        | 218.1/176.1/148   | 16/28/40     |
| 3  | 阿苯达唑<br>-2-氨基砒 | Albendazole<br>-2-aminosulfone | 80983-34-2  | C <sub>10</sub> H <sub>13</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub> S              | 甲醇    | 4.421         | [M+H] <sup>+</sup> | 240.1        | 198/133.1/106.1   | 20/20/40     |
| 4  | 阿苯达唑砒          | Albendazole sulfone            | 75184-71-3  | C <sub>12</sub> H <sub>15</sub> N <sub>3</sub> O <sub>4</sub> S              | 甲醇    | 6.842         | [M+H] <sup>+</sup> | 298.1        | 266.1/224/159     | 20/20/40     |
| 5  | 阿苯达唑亚砒         | Albendazole sulfoxide          | 54029-12-8  | C <sub>12</sub> H <sub>15</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub> S              | 甲醇    | 5.638         | [M+H] <sup>+</sup> | 282.1        | 239.9/208/159     | 12/24/35     |
| 6  | 氨苯砒            | Dapson                         | 80-08-0     | C <sub>12</sub> H <sub>12</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub> S              | 甲醇    | 7.072         | [M+H] <sup>+</sup> | 249.1        | 156/92/108        | 10/28/20     |
| 7  | 奥比沙星           | Orbifloxacin                   | 113617-63-3 | C <sub>19</sub> H <sub>20</sub> F <sub>3</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub> | 甲醇    | 6.019         | [M+H] <sup>+</sup> | 396.2        | 352.1/295.1/267   | 16/28/39     |
| 8  | 氨苄西林           | Ampicillin                     | 69-53-4     | C <sub>16</sub> H <sub>19</sub> N <sub>3</sub> O <sub>4</sub> S              | 50%乙腈 | 4.774         | [M+H] <sup>+</sup> | 350          | 160/114/106       | 10/36/16     |
| 9  | 奥芬达唑           | Oxfendazole                    | 53716-50-0  | C <sub>15</sub> H <sub>13</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub> S              | 甲醇    | 7.880         | [M+H] <sup>+</sup> | 316.1        | 284/159/191.1     | 16/32/16     |
| 10 | 氨基甲苯咪唑         | Mebendazole amine              | 52329-60-9  | C <sub>14</sub> H <sub>11</sub> N <sub>3</sub> O                             | 甲醇    | 7.049         | [M+H] <sup>+</sup> | 238.1        | 105.1/77.1/133.1  | 28/40/44     |
| 11 | 埃玛菌素           | Emamectin                      | 119791-41-2 | C <sub>49</sub> H <sub>75</sub> NO <sub>13</sub>                             | 乙腈    | 15.328        | [M+H] <sup>+</sup> | 886.5        | 157.9/302.1/887.5 | 40/32/0      |
| 12 | 阿莫西林           | Amoxicillin                    | 26787-78-0  | C <sub>16</sub> H <sub>19</sub> N <sub>3</sub> O <sub>5</sub> S              | 50%乙腈 | 3.610         | [M+H] <sup>+</sup> | 366.1        | 349.1/207.9/114.1 | 4/12/32      |

| 序号 | 中文名称                 | 英文名称                        | CAS 号      | 分子式                                                              | 溶剂 | 保留时间<br>(min) | 加成<br>离子            | 母离子<br>(m/z) | 典型二级碎片离子<br>(m/z) | 碰撞能量<br>(eV) |
|----|----------------------|-----------------------------|------------|------------------------------------------------------------------|----|---------------|---------------------|--------------|-------------------|--------------|
| 13 | 安普乐定                 | Apraclonidine               | 66711-21-5 | C <sub>9</sub> H <sub>10</sub> Cl <sub>2</sub> N <sub>4</sub>    | 甲醇 | 3.766         | [M+H] <sup>+</sup>  | 245          | 209/174.1/147.1   | 24/36/40     |
| 14 | 阿奇霉素                 | Azithromycin                | 83905-01-5 | C <sub>38</sub> H <sub>72</sub> N <sub>2</sub> O <sub>12</sub>   | 甲醇 | 7.645         | [M+H] <sup>+</sup>  | 749.5        | 591.4/158.1/116.3 | 40/40/54     |
| 15 | 奥沙西洋                 | Oxazepam                    | 604-75-1   | C <sub>15</sub> H <sub>11</sub> ClN <sub>2</sub> O <sub>2</sub>  | 甲醇 | 13.186        | [M+H] <sup>+</sup>  | 287.1        | 241.1/163/104     | 20/40/40     |
| 16 | 阿托品                  | Atropine                    | 51-55-8    | C <sub>17</sub> H <sub>23</sub> NO <sub>3</sub>                  | 乙腈 | 5.375         | [M+H] <sup>+</sup>  | 290          | 124.1/93.1/91.1   | 24/36/40     |
| 17 | 阿维菌素 B <sub>1a</sub> | Avermectin B <sub>1a</sub>  | 65195-55-3 | C <sub>48</sub> H <sub>72</sub> O <sub>14</sub>                  | 乙腈 | 18.033        | [M+Na] <sup>+</sup> | 895.5        | 751.4/607.2/449.3 | 48/52/48     |
| 18 | 安西奈德                 | Aminonide                   | 51022-69-6 | C <sub>28</sub> H <sub>35</sub> FO <sub>7</sub>                  | 乙腈 | 15.830        | [M+H] <sup>+</sup>  | 503.3        | 321/339.1/483.1   | 20/12/8      |
| 19 | 奥西那林                 | Orciprenaline               | 586-06-1   | C <sub>11</sub> H <sub>17</sub> NO <sub>3</sub>                  | 甲醇 | 3.119         | [M+H] <sup>+</sup>  | 212.1        | 125.1/152.1/193.9 | 24/16/12     |
| 20 | 氨溴索                  | Ambroxol                    | 18683-91-5 | C <sub>13</sub> H <sub>18</sub> Br <sub>2</sub> N <sub>2</sub> O | 甲醇 | 7.421         | [M+H] <sup>+</sup>  | 379.1        | 263.8/116/104.1   | 14/18/50     |
| 21 | 奥硝唑                  | Ornidazole                  | 16773-42-5 | C <sub>7</sub> H <sub>10</sub> ClN <sub>3</sub> O <sub>3</sub>   | 甲醇 | 6.322         | [M+H] <sup>+</sup>  | 220          | 128/82.1/57       | 20/40/20     |
| 22 | 阿扎哌醇                 | Azaperol                    | 2804-05-9  | C <sub>19</sub> H <sub>24</sub> FN <sub>3</sub> O                | 甲醇 | 4.582         | [M+H] <sup>+</sup>  | 330.2        | 312.1/149/121     | 16/28/20     |
| 23 | 阿扎哌隆                 | Azaperone                   | 1649-18-9  | C <sub>19</sub> H <sub>22</sub> FN <sub>3</sub> O                | 甲醇 | 5.348         | [M+H] <sup>+</sup>  | 328.2        | 121.1/123/165.1   | 20/40/20     |
| 24 | 巴胶磷                  | Propetamphos                | 31218-83-4 | C <sub>10</sub> H <sub>20</sub> NO <sub>4</sub> PS               | 乙腈 | 16.091        | [M+H] <sup>+</sup>  | 282.1        | 156/137.9/183.1   | 4/20/20      |
| 25 | 苯丙酸诺龙                | Nandrolone phenylpropionate | 62-90-8    | C <sub>27</sub> H <sub>34</sub> O <sub>3</sub>                   | 乙腈 | 17.711        | [M+H] <sup>+</sup>  | 407.3        | 257.2/105.1/91.1  | 20/20/40     |
| 26 | 班布特罗                 | Bambuterol                  | 81732-65-2 | C <sub>18</sub> H <sub>29</sub> N <sub>3</sub> O <sub>5</sub>    | 甲醇 | 7.712         | [M+H] <sup>+</sup>  | 368.2        | 294.2/72.1/57.3   | 18/40/28     |
| 27 | 吡布特罗                 | Pirbuterol                  | 38677-81-5 | C <sub>12</sub> H <sub>20</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>    | 甲醇 | 3.211         | [M+H] <sup>+</sup>  | 240.9        | 122.1/148.9/166.9 | 32/20/16     |

| 序号 | 中文名称   | 英文名称               | CAS 号      | 分子式                                                                                          | 溶剂 | 保留时间<br>(min) | 加成<br>离子              | 母离子<br>(m/z) | 典型二级碎片离子<br>(m/z) | 碰撞能量<br>(eV) |
|----|--------|--------------------|------------|----------------------------------------------------------------------------------------------|----|---------------|-----------------------|--------------|-------------------|--------------|
| 28 | 吡虫隆    | Fluazuron          | 86811-58-7 | C <sub>20</sub> H <sub>10</sub> Cl <sub>2</sub> F <sub>5</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub> | 乙腈 | 16.876        | [M+H] <sup>+</sup>    | 506          | 349/158/141       | 25/15/40     |
| 29 | 勃地酮    | Boldenone          | 846-48-0   | C <sub>19</sub> H <sub>26</sub> O <sub>2</sub>                                               | 甲醇 | 14.039        | [M+H] <sup>+</sup>    | 287.1        | 269/135.1/121     | 9/17/25      |
| 30 | 苯甲酸雌二醇 | Estradiol benzoate | 50-50-0    | C <sub>23</sub> H <sub>28</sub> O <sub>3</sub>                                               | 乙腈 | 17.359        | [M+H] <sup>+</sup>    | 377.2        | 359.2/105/77      | 10/10/10     |
| 31 | 苯甲酰磺胺  | Sulfabenzamide     | 127-71-9   | C <sub>13</sub> H <sub>12</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub> S                              | 甲醇 | 9.649         | [M+H] <sup>+</sup>    | 277.1        | 155.9/92/108.1    | 12/36/36     |
| 32 | 吡唑酮    | Praziquantel       | 55268-74-1 | C <sub>19</sub> H <sub>24</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>                                | 乙腈 | 14.643        | [M+H] <sup>+</sup>    | 313.1        | 55.3/83.3/203.1   | 40/28/12     |
| 33 | 丙卡特罗   | Procaterol         | 72332-33-3 | C <sub>16</sub> H <sub>22</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>                                | 甲醇 | 3.683         | [M+H] <sup>+</sup>    | 291          | 162.1/230.9/272.8 | 28/20/16     |
| 34 | 苯硫胍    | Febantel           | 58306-30-2 | C <sub>20</sub> H <sub>22</sub> N <sub>4</sub> O <sub>6</sub> S                              | 乙腈 | 15.748        | [M+H] <sup>+</sup>    | 447.1        | 415.1/383.1/280.1 | 10/16/32     |
| 35 | 倍硫磷    | Fenthion           | 55-38-9    | C <sub>10</sub> H <sub>15</sub> O <sub>3</sub> PS <sub>2</sub>                               | 乙腈 | 16.380        | [M+H] <sup>+</sup>    | 279          | 247.1/169.1/105.1 | 8/12/20      |
| 36 | 倍硫磷亚砷  | Fenthion sulfone   | 3761-42-0  | C <sub>10</sub> H <sub>15</sub> O <sub>5</sub> PS <sub>2</sub>                               | 乙腈 | 14.633        | [M+H] <sup>+</sup>    | 311          | 279/125/79        | 12/16/40     |
| 37 | 倍硫磷亚砷  | Fenthion sulfoxide | 3761-41-9  | C <sub>10</sub> H <sub>15</sub> O <sub>4</sub> PS <sub>2</sub>                               | 乙腈 | 13.340        | [M+H] <sup>+</sup>    | 295          | 280/109/79        | 16/32/48     |
| 38 | 倍氯米松   | Beclomethasone     | 4419-39-0  | C <sub>22</sub> H <sub>29</sub> ClO <sub>5</sub>                                             | 甲醇 | 13.463        | [M+HC00] <sup>-</sup> | 453.2        | 377/341.2/297     | 16/24/28     |
| 39 | 吡利霉素   | Pirlimycin         | 79548-73-5 | C <sub>17</sub> H <sub>31</sub> ClN <sub>2</sub> O <sub>5</sub> S                            | 甲醇 | 7.412         | [M+H] <sup>+</sup>    | 411.1        | 56.2/112.1/363.1  | 40/32/16     |
| 40 | 吡罗昔康   | Piroxicam          | 36322-90-4 | C <sub>15</sub> H <sub>13</sub> N <sub>3</sub> O <sub>4</sub> S                              | 乙腈 | 13.041        | [M+H] <sup>+</sup>    | 332.1        | 95/78/121         | 20/76/20     |
| 41 | 斑蝥黄    | Canthaxanthin      | 514-78-3   | C <sub>40</sub> H <sub>52</sub> O <sub>2</sub>                                               | 甲醇 | 20.904        | [M+H] <sup>+</sup>    | 565.4        | 202.9/147.1/133.2 | 26/42/42     |
| 42 | 吡哌酸    | Pipemidic acid     | 51940-44-4 | C <sub>14</sub> H <sub>17</sub> N <sub>5</sub> O <sub>3</sub>                                | 甲醇 | 4.558         | [M+H] <sup>+</sup>    | 304          | 285.9/216.8/214.9 | 24/20/36     |

| 序号 | 中文名称           | 英文名称                     | CAS 号        | 分子式                                                             | 溶剂 | 保留时间<br>(min) | 加成<br>离子              | 母离子<br>(m/z) | 典型二级碎片离子<br>(m/z) | 碰撞能量<br>(eV) |
|----|----------------|--------------------------|--------------|-----------------------------------------------------------------|----|---------------|-----------------------|--------------|-------------------|--------------|
| 43 | 丙酸睾酮           | Testosterone propionate  | 57-85-2      | C <sub>22</sub> H <sub>32</sub> O <sub>3</sub>                  | 乙腈 | 17.342        | [M+H] <sup>+</sup>    | 345.3        | 270.9/109.2/97.1  | 16/24/24     |
| 44 | 丙酸诺龙           | Nandrolone 17-propionate | 7207-92-3    | C <sub>21</sub> H <sub>30</sub> O <sub>3</sub>                  | 乙腈 | 17.099        | [M+H] <sup>+</sup>    | 331.1        | 256.9/239.2/57.1  | 12/20/28     |
| 45 | 布他磷            | Butafosfan               | 17316-67-5   | C <sub>7</sub> H <sub>18</sub> NO <sub>2</sub> P                | 甲醇 | 3.198         | [M-H] <sup>-</sup>    | 178.2        | 63.1/64/65        | 30/30/16     |
| 46 | 倍他米松           | Betamethasone            | 378-44-9     | C <sub>22</sub> H <sub>29</sub> FO <sub>5</sub>                 | 甲醇 | 12.944        | [M+HCOO] <sup>-</sup> | 437.3        | 361.3/307.3/292.2 | 12/36/40     |
| 47 | 保泰松            | Phenylbutazone           | 50-33-9      | C <sub>19</sub> H <sub>20</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>   | 乙腈 | 15.922        | [M+H] <sup>+</sup>    | 309.2        | 160.2/77.1/162.1  | 20/68/16     |
| 48 | 丙酰二甲氨基<br>丙吩噻嗪 | Propionylpromazine       | 3568-24-9    | C <sub>20</sub> H <sub>24</sub> N <sub>2</sub> OS               | 甲醇 | 13.225        | [M+H] <sup>+</sup>    | 341.2        | 86.1/58.1/268.1   | 20/56/24     |
| 49 | 苯乙胺            | Phenethylamine           | 64-04-0      | C <sub>8</sub> H <sub>11</sub> N                                | 水  | 4.357         | [M+H] <sup>+</sup>    | 122          | 105/103/77.2      | 8/24/36      |
| 50 | 苯乙醇胺 A         | Phenylethanolamine A     | 1346746-81-3 | C <sub>19</sub> H <sub>24</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>   | 甲醇 | 10.554        | [M+H] <sup>+</sup>    | 345          | 327.3/150/118.2   | 10/20/36     |
| 51 | 苯唑西林           | Oxacillin                | 66-79-5      | C <sub>19</sub> H <sub>19</sub> N <sub>3</sub> O <sub>5</sub> S | 甲醇 | 14.005        | [M+H] <sup>+</sup>    | 401.9        | 284.2/159.9/114.1 | 16/12/40     |
| 52 | 茶碱             | Theophylline             | 58-55-9      | C <sub>7</sub> H <sub>8</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>     | 甲醇 | 3.949         | [M+H] <sup>+</sup>    | 181          | 124/96.1/93.9     | 20/24/32     |
| 53 | 赤霉素            | Gibberellic              | 77-06-5      | C <sub>19</sub> H <sub>22</sub> O <sub>6</sub>                  | 乙腈 | 6.644         | [M-H] <sup>-</sup>    | 345.1        | 239.1/222/143     | 12/28/28     |
| 54 | 醋酸氟氢可的松        | Fludrocortisone acetate  | 514-36-3     | C <sub>23</sub> H <sub>31</sub> FO <sub>6</sub>                 | 乙腈 | 14.157        | [M+HCOO] <sup>-</sup> | 467.2        | 421.1/349.1/341.2 | 9/25/21      |
| 55 | 醋酸氟羟松          | Fluocinolone acetonide   | 67-73-2      | C <sub>24</sub> H <sub>30</sub> F <sub>2</sub> O <sub>6</sub>   | 乙腈 | 13.875        | [M+H] <sup>+</sup>    | 453.3        | 120.9/253.1/454.1 | 24/20/4      |
| 56 | 醋酸氟孕酮          | Flugestone acetate       | 2529-45-5    | C <sub>23</sub> H <sub>31</sub> FO <sub>5</sub>                 | 甲醇 | 14.686        | [M+H] <sup>+</sup>    | 407.1        | 285/267/225       | 20/20/36     |
| 57 | 醋酸甲地孕酮         | Megestrol acetate        | 595-33-5     | C <sub>24</sub> H <sub>32</sub> O <sub>4</sub>                  | 乙腈 | 16.169        | [M+H] <sup>+</sup>    | 385.2        | 325.2/267.2/282.2 | 8/12/20      |

| 序号 | 中文名称   | 英文名称                              | CAS 号       | 分子式                                                                          | 溶剂 | 保留时间<br>(min) | 加成<br>离子              | 母离子<br>(m/z) | 典型二级碎片离子<br>(m/z) | 碰撞能量<br>(eV) |
|----|--------|-----------------------------------|-------------|------------------------------------------------------------------------------|----|---------------|-----------------------|--------------|-------------------|--------------|
| 58 | 醋酸甲羟孕酮 | Medroxyprogesterone<br>17-acetate | 71-58-9     | C <sub>24</sub> H <sub>34</sub> O <sub>4</sub>                               | 甲醇 | 16.313        | [M+H] <sup>+</sup>    | 387.2        | 327.1/285.1/122.9 | 16/20/40     |
| 59 | 醋酸可的松  | Cortisone acetate                 | 50-04-4     | C <sub>23</sub> H <sub>30</sub> O <sub>6</sub>                               | 甲醇 | 14.372        | [M+HCOO] <sup>-</sup> | 447.3        | 401/341/329.2     | 8/12/20      |
| 60 | 醋酸氯地孕酮 | Chlormadinone acetate             | 302-22-7    | C <sub>23</sub> H <sub>29</sub> ClO <sub>4</sub>                             | 乙腈 | 16.228        | [M+H] <sup>+</sup>    | 405.2        | 345.2/309.2/301.2 | 8/12/16      |
| 61 | 醋酸美伦孕酮 | Melengestrol acetate              | 2919-66-6   | C <sub>25</sub> H <sub>32</sub> O <sub>4</sub>                               | 甲醇 | 16.317        | [M+H] <sup>+</sup>    | 397.2        | 337.3/279.2/236.6 | 8/20/28      |
| 62 | 常山酮    | Halofuginone                      | 55837-20-2  | C <sub>16</sub> H <sub>17</sub> BrClN <sub>3</sub> O <sub>3</sub>            | 甲醇 | 8.289         | [M+H] <sup>+</sup>    | 414          | 120/138/396       | 20/20/10     |
| 63 | 对氨基苯甲酸 | p-Arsanilic acid                  | 98-50-0     | C <sub>6</sub> H <sub>8</sub> AsNO <sub>3</sub>                              | 甲醇 | 2.055         | [M+H] <sup>+</sup>    | 218.1        | 65.2/80.2/109.1   | 40/40/16     |
| 64 | 敌百虫    | Trichlorfon                       | 52-68-6     | C <sub>4</sub> H <sub>8</sub> Cl <sub>3</sub> O <sub>4</sub> P               | 乙腈 | 6.594         | [M+H] <sup>+</sup>    | 256.9        | 221/109/79        | 10/17/33     |
| 65 | 敌敌畏    | Dichlorvos                        | 62-73-7     | C <sub>4</sub> H <sub>7</sub> Cl <sub>2</sub> O <sub>4</sub> P               | 乙腈 | 11.644        | [M+H] <sup>+</sup>    | 221          | 109/79/60         | 20/32/80     |
| 66 | 地夫可特   | Deflazacort                       | 14484-47-0  | C <sub>25</sub> H <sub>31</sub> NO <sub>6</sub>                              | 乙腈 | 14.155        | [M+H] <sup>+</sup>    | 442.3        | 124.2/142/424.3   | 50/42/10     |
| 67 | 达氟沙星   | Danofloxacin                      | 112398-08-0 | C <sub>19</sub> H <sub>20</sub> FN <sub>3</sub> O <sub>3</sub>               | 甲醇 | 5.545         | [M+H] <sup>+</sup>    | 358.2        | 340.1/82.1/255.1  | 20/48/44     |
| 68 | 单甲脒    | Semiamitraz                       | 33089-74-6  | C <sub>10</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub>                               | 乙腈 | 5.257         | [M+H] <sup>+</sup>    | 163.1        | 122.2/117/106.9   | 16/24/28     |
| 69 | 地克珠利   | Diclazuril                        | 101831-37-2 | C <sub>17</sub> H <sub>9</sub> Cl <sub>3</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub> | 甲醇 | 15.684        | [M-H] <sup>-</sup>    | 404.8        | 337.1/334.5/333.9 | 16/20/20     |
| 70 | 靛蓝     | Indigo                            | 482-89-3    | C <sub>16</sub> H <sub>10</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>                | 甲醇 | 15.113        | [M+H] <sup>+</sup>    | 263.1        | 234.9/219.1/132.3 | 28/28/40     |
| 71 | 多拉菌素   | Doramectin                        | 117704-25-3 | C <sub>30</sub> H <sub>74</sub> O <sub>14</sub>                              | 甲醇 | 18.529        | [M+Na] <sup>+</sup>   | 921.5        | 777.4/449.3/183.1 | 44/56/60     |
| 72 | 达那唑    | Danazol                           | 17230-88-5  | C <sub>22</sub> H <sub>27</sub> NO <sub>2</sub>                              | 乙腈 | 16.032        | [M+H] <sup>+</sup>    | 338.2        | 104.9/120.1/148.2 | 44/40/36     |

| 序号 | 中文名称   | 英文名称                                                              | CAS 号       | 分子式                                                              | 溶剂 | 保留时间<br>(min) | 加成<br>离子              | 母离子<br>(m/z) | 典型二级碎片离子<br>(m/z) | 碰撞能量<br>(eV) |
|----|--------|-------------------------------------------------------------------|-------------|------------------------------------------------------------------|----|---------------|-----------------------|--------------|-------------------|--------------|
| 73 | 得曲恩特   | Derquantel                                                        | 187865-22-1 | C <sub>28</sub> H <sub>37</sub> N <sub>3</sub> O <sub>4</sub>    | 甲醇 | 9.642         | [M+H] <sup>+</sup>    | 480.2        | 148.1/405.3/461.9 | 40/32/28     |
| 74 | 地塞米松   | Dexamethasone                                                     | 50-02-2     | C <sub>22</sub> H <sub>29</sub> FO <sub>5</sub>                  | 甲醇 | 13.086        | [M+HCOO] <sup>-</sup> | 437.2        | 361.1/307/292.3   | 16/36/40     |
| 75 | 地昔尼尔   | Dicyclanil                                                        | 112636-83-6 | C <sub>8</sub> H <sub>10</sub> N <sub>6</sub>                    | 乙腈 | 3.415         | [M+H] <sup>+</sup>    | 191.1        | 109.1/92/67       | 40/40/40     |
| 76 | 地西洋    | Diazepam                                                          | 439-14-5    | C <sub>16</sub> H <sub>13</sub> ClN <sub>2</sub> O               | 甲醇 | 14.575        | [M+H] <sup>+</sup>    | 285.1        | 193.1/154/91.1    | 40/40/40     |
| 77 | 对乙酰氨基酚 | Acetaminophen                                                     | 103-90-2    | C <sub>8</sub> H <sub>9</sub> NO <sub>2</sub>                    | 甲醇 | 3.861         | [M+H] <sup>+</sup>    | 152          | 110/93.1/65       | 20/24/36     |
| 78 | 二甲硝咪唑  | Dimetridazole                                                     | 551-92-8    | C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>      | 甲醇 | 4.364         | [M+H] <sup>+</sup>    | 142.1        | 96.1/81.1/77.1    | 16/28/28     |
| 79 | 恶唑酸    | Oxolinic acid                                                     | 14698-29-4  | C <sub>13</sub> H <sub>11</sub> NO <sub>5</sub>                  | 甲醇 | 9.257         | [M+H] <sup>+</sup>    | 262.1        | 243.9/159.9/202   | 20/45/32     |
| 80 | 恩诺沙星   | Enrofloxacin                                                      | 93106-60-6  | C <sub>19</sub> H <sub>22</sub> FN <sub>3</sub> O <sub>3</sub>   | 甲醇 | 5.789         | [M+H] <sup>+</sup>    | 360.2        | 342.2/316.2/245.1 | 20/16/32     |
| 81 | 二羟丙茶碱  | Diprophylline                                                     | 479-18-5    | C <sub>10</sub> H <sub>14</sub> N <sub>4</sub> O <sub>4</sub>    | 水  | 3.919         | [M+H] <sup>+</sup>    | 254.9        | 180.9/123.9/96.1  | 22/34/40     |
| 82 | 二氢吡啶   | Diethyl<br>1,4-dihydro-2,6-dimethyl-3,<br>5-pyridinedicarboxylate | 1149-23-1   | C <sub>13</sub> H <sub>19</sub> NO <sub>4</sub>                  | 乙腈 | 14.946        | [M+H] <sup>+</sup>    | 254          | 208/108/180.1     | 6/22/24      |
| 83 | 二嗪磷    | Diazinon                                                          | 333-41-5    | C <sub>12</sub> H <sub>21</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub> PS | 乙腈 | 16.583        | [M+H] <sup>+</sup>    | 305.1        | 169.1/153.1/97    | 32/28/40     |
| 84 | 二硝托胺   | Dinitolmide                                                       | 148-01-6    | C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> N <sub>3</sub> O <sub>5</sub>      | 甲醇 | 8.010         | [M-H] <sup>-</sup>    | 224          | 181.1/77/151      | 12/24/16     |
| 85 | 芬苯达唑   | Fenbendazole                                                      | 43210-67-9  | C <sub>15</sub> H <sub>13</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub> S  | 甲醇 | 13.413        | [M+H] <sup>+</sup>    | 300.1        | 268.1/159/131     | 20/36/56     |
| 86 | 芬苯达唑砒  | Fenbendazole sulfone                                              | 54029-20-8  | C <sub>15</sub> H <sub>13</sub> N <sub>3</sub> O <sub>4</sub> S  | 甲醇 | 10.613        | [M+H] <sup>+</sup>    | 332.1        | 300.1/159/131     | 20/40/60     |

| 序号  | 中文名称   | 英文名称                  | CAS 号       | 分子式                                                                                           | 溶剂 | 保留时间<br>(min) | 加成<br>离子           | 母离子<br>(m/z) | 典型二级碎片离子<br>(m/z) | 碰撞能量<br>(eV) |
|-----|--------|-----------------------|-------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------|----|---------------|--------------------|--------------|-------------------|--------------|
| 87  | 氟苯咪唑   | Flubendazole          | 31430-15-6  | C <sub>16</sub> H <sub>12</sub> FN <sub>3</sub> O <sub>3</sub>                                | 甲醇 | 11.478        | [M+H] <sup>+</sup> | 314.1        | 282.1/123/95.1    | 20/36/56     |
| 88  | 氟苯尼考   | Florfenicol           | 73231-34-2  | C <sub>12</sub> H <sub>14</sub> Cl <sub>2</sub> FNO <sub>4</sub> S                            | 甲醇 | 8.377         | [M-H] <sup>-</sup> | 356          | 336/185.1/119     | 0/12/28      |
| 89  | 氟苯尼考胺  | Florfenicol amine     | 76639-93-5  | C <sub>10</sub> H <sub>14</sub> FNO <sub>3</sub> S                                            | 甲醇 | 2.893         | [M+H] <sup>+</sup> | 248          | 229.9/130/131     | 12/24/20     |
| 90  | 氟虫腈    | Fipronil              | 120068-37-3 | C <sub>12</sub> H <sub>4</sub> Cl <sub>2</sub> F <sub>6</sub> N <sub>4</sub> OS               | 乙腈 | 16.048        | [M-H] <sup>-</sup> | 435          | 330/250/317.8     | 12/28/20     |
| 91  | 氟虫腈砒   | Fipronil sulfone      | 120068-36-2 | C <sub>12</sub> H <sub>4</sub> Cl <sub>2</sub> F <sub>6</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub> S | 乙腈 | 16.343        | [M-H] <sup>-</sup> | 450.9        | 414.9/282.2/244.1 | 16/28/28     |
| 92  | 氟虫腈亚砒  | Fipronil sulfide      | 120067-83-6 | C <sub>12</sub> H <sub>4</sub> Cl <sub>2</sub> F <sub>6</sub> N <sub>4</sub> S                | 乙腈 | 16.375        | [M-H] <sup>-</sup> | 418.9        | 382.9/261.9/313.9 | 11/28/20     |
| 93  | 氟甲萆酮   | Fluoxymesterone       | 76-43-7     | C <sub>20</sub> H <sub>29</sub> FO <sub>3</sub>                                               | 乙腈 | 13.228        | [M+H] <sup>+</sup> | 337.3        | 130.8/241.3/281.1 | 32/28/20     |
| 94  | 氟甲腈    | Fipronil desulfinyl   | 205650-65-3 | C <sub>12</sub> H <sub>4</sub> Cl <sub>2</sub> F <sub>6</sub> N <sub>4</sub>                  | 乙腈 | 16.169        | [M-H] <sup>-</sup> | 386.9        | 350.9/324.8/281.8 | 20/40/40     |
| 95  | 氟甲喹    | Flumequine            | 42835-25-6  | C <sub>14</sub> H <sub>12</sub> FNO <sub>3</sub>                                              | 甲醇 | 12.857        | [M+H] <sup>+</sup> | 262.1        | 244.1/202/126     | 12/32/52     |
| 96  | 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>                  | 甲醇 | 5.116         | [M+H] <sup>+</sup> | 370.1        | 326/268.9/222.1   | 20/24/40     |
| 97  | 氟灭酸    | Flufenamic acid       | 530-78-9    | C <sub>14</sub> H <sub>10</sub> F <sub>3</sub> NO <sub>2</sub>                                | 乙腈 | 16.008        | [M+H] <sup>+</sup> | 282.1        | 264.1/167.1/244.1 | 20/45/40     |
| 98  | 氟米松    | Flumethasone          | 2135-17-3   | C <sub>22</sub> H <sub>28</sub> F <sub>2</sub> O <sub>5</sub>                                 | 甲醇 | 13.086        | [M+H] <sup>+</sup> | 411.2        | 391.1/253.1/121.2 | 4/12/28      |
| 99  | 福莫特罗   | Formoterol            | 73573-87-2  | C <sub>19</sub> H <sub>24</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>                                 | 甲醇 | 6.426         | [M+H] <sup>+</sup> | 345.1        | 327.1/148.9/121   | 12/20/28     |
| 100 | 呋喃苯烯酸钠 | Sodium nifurstylenate | 54992-23-3  | C <sub>13</sub> H <sub>8</sub> NNaO <sub>5</sub>                                              | 乙腈 | 14.364        | [M-H] <sup>-</sup> | 258          | 214/46.2/114      | 12/44/24     |
| 101 | 奋乃静    | Perphenazine          | 58-39-9     | C <sub>21</sub> H <sub>26</sub> ClN <sub>3</sub> OS                                           | 甲醇 | 12.269        | [M+H] <sup>+</sup> | 404          | 171/143.1/70.1    | 24/32/40     |

| 序号  | 中文名称   | 英文名称                 | CAS 号       | 分子式                                                                          | 溶剂 | 保留时间<br>(min) | 加成<br>离子           | 母离子<br>(m/z) | 典型二级碎片离子<br>(m/z) | 碰撞能量<br>(eV) |
|-----|--------|----------------------|-------------|------------------------------------------------------------------------------|----|---------------|--------------------|--------------|-------------------|--------------|
| 102 | 非诺特罗   | Fenoterol            | 13392-18-2  | C <sub>17</sub> H <sub>21</sub> NO <sub>4</sub>                              | 乙腈 | 4.011         | [M+H] <sup>+</sup> | 304.1        | 107.1/135.1/285.9 | 40/20/12     |
| 103 | 呋喃它酮   | Furaltadone          | 139-91-3    | C <sub>13</sub> H <sub>16</sub> N <sub>4</sub> O <sub>6</sub>                | 甲醇 | 3.855         | [M+H] <sup>+</sup> | 324.9        | 284.1/252.1/100.1 | 20/16/24     |
| 104 | 呋喃妥因   | Nitrofurantoin       | 67-20-9     | C <sub>8</sub> H <sub>6</sub> N <sub>4</sub> O <sub>5</sub>                  | 甲醇 | 6.113         | [M-H] <sup>-</sup> | 236.9        | 193.8/152.1/123.9 | 8/8/12       |
| 105 | 呋喃西林   | Nitrofurazone        | 59-87-0     | C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>4</sub> O <sub>4</sub>                  | 甲醇 | 5.648         | [M-H] <sup>-</sup> | 196.9        | 150/124/80.1      | 4/4/8        |
| 106 | 氟尼辛葡甲胺 | Flunixin meglumine   | 42461-84-7  | C <sub>21</sub> H <sub>28</sub> F <sub>3</sub> N <sub>3</sub> O <sub>7</sub> | 甲醇 | 14.438        | [M+H] <sup>+</sup> | 297.1        | 279.1/264.1/259.1 | 24/32/34     |
| 107 | 非那西汀   | Phenacetin           | 62-44-2     | C <sub>10</sub> H <sub>13</sub> NO <sub>2</sub>                              | 甲醇 | 9.096         | [M+H] <sup>+</sup> | 180.1        | 93/110/65.1       | 32/24/40     |
| 108 | 呋喃唑酮   | Furazolidone         | 67-45-8     | C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> N <sub>3</sub> O <sub>5</sub>                  | 甲醇 | 6.954         | [M+H] <sup>+</sup> | 226          | 139/122/67        | 20/20/40     |
| 109 | 氟哌啶醇   | Haloperidol          | 52-86-8     | C <sub>21</sub> H <sub>23</sub> ClFNO <sub>2</sub>                           | 甲醇 | 11.251        | [M+H] <sup>+</sup> | 376.1        | 358.1/165.1/123   | 20/20/40     |
| 110 | 氟哌利多   | Droperidol           | 548-73-2    | C <sub>22</sub> H <sub>22</sub> FN <sub>3</sub> O <sub>2</sub>               | 甲醇 | 9.104         | [M+H] <sup>+</sup> | 380.1        | 194/165/123.1     | 16/28/40     |
| 111 | 泛昔洛韦   | Famciclovir          | 104227-87-4 | C <sub>14</sub> H <sub>19</sub> N <sub>5</sub> O <sub>4</sub>                | 甲醇 | 4.820         | [M+H] <sup>+</sup> | 322          | 280/262/136       | 16/16/28     |
| 112 | 胍基乙酸   | Guanidineacetic acid | 352-97-6    | C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>                  | 甲醇 | 1.303         | [M+H] <sup>+</sup> | 118          | 101/76.1/72.2     | 8/12/16      |
| 113 | 睾酮     | Testosterone         | 58-22-0     | C <sub>19</sub> H <sub>28</sub> O <sub>2</sub>                               | 甲醇 | 14.664        | [M+H] <sup>+</sup> | 289.2        | 109/97/123.1      | 32/36/24     |
| 114 | 磺胺苯吡唑  | Sulfaphenazole       | 526-08-9    | C <sub>15</sub> H <sub>14</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub> S              | 甲醇 | 10.337        | [M+H] <sup>+</sup> | 315.1        | 158.1/92/158.9    | 40/40/28     |
| 115 | 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              | 甲醇 | 4.858         | [M+H] <sup>+</sup> | 250.1        | 156/92/108        | 17/29/20     |
| 116 | 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               | 甲醇 | 4.219         | [M+H] <sup>+</sup> | 215          | 156/108/92        | 8/16/20      |

| 序号  | 中文名称     | 英文名称                   | CAS 号     | 分子式                                                                         | 溶剂 | 保留时间<br>(min) | 加成<br>离子           | 母离子<br>(m/z) | 典型二级碎片离子<br>(m/z) | 碰撞能量<br>(eV) |
|-----|----------|------------------------|-----------|-----------------------------------------------------------------------------|----|---------------|--------------------|--------------|-------------------|--------------|
| 117 | 磺胺对甲氧嘧啶  | Sulfameter             | 651-06-9  | C <sub>11</sub> H <sub>12</sub> N <sub>4</sub> O <sub>3</sub> S             | 甲醇 | 6.969         | [M+H] <sup>+</sup> | 281.1        | 215.1/156/92      | 20/20/40     |
| 118 | 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             | 甲醇 | 5.918         | [M+H] <sup>+</sup> | 279.1        | 186.1/124/92.1    | 12/21/38     |
| 119 | 磺胺二甲异噁唑  | Sulfisoxazole          | 127-69-5  | C <sub>11</sub> H <sub>13</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub> S             | 甲醇 | 8.750         | [M+H] <sup>+</sup> | 268.1        | 156/92/113.1      | 10/40/20     |
| 120 | 磺胺恶唑     | Sulfamoxole            | 729-99-7  | C <sub>11</sub> H <sub>13</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub> S             | 甲醇 | 8.744         | [M+H] <sup>+</sup> | 268.1        | 155.9/108/92      | 20/20/20     |
| 121 | 磺胺间二甲氧嘧啶 | Sulfadimethoxine       | 122-11-2  | C <sub>12</sub> H <sub>14</sub> N <sub>4</sub> O <sub>4</sub> S             | 甲醇 | 10.018        | [M+H] <sup>+</sup> | 311.1        | 156/108.1/92.1    | 16/28/36     |
| 122 | 磺胺甲基嘧啶   | Sulfamerazine          | 127-79-7  | C <sub>11</sub> H <sub>12</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub> S             | 甲醇 | 5.235         | [M+H] <sup>+</sup> | 265.1        | 156/92.1/172      | 12/28/12     |
| 123 | 磺胺甲基异噁唑  | Sulfamethoxazole       | 723-46-6  | C <sub>10</sub> H <sub>11</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub> S             | 甲醇 | 8.152         | [M+H] <sup>+</sup> | 254.1        | 156/92.1/108      | 12/24/20     |
| 124 | 磺胺间甲氧嘧啶  | Sulfamonomethoxine     | 1220-83-3 | C <sub>11</sub> H <sub>12</sub> N <sub>4</sub> O <sub>3</sub> S             | 甲醇 | 6.968         | [M+H] <sup>+</sup> | 281          | 156/126/108       | 10/20/28     |
| 125 | 磺胺甲噻二唑   | Sulfamethizole         | 144-82-1  | C <sub>9</sub> H <sub>10</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub> S <sub>2</sub> | 甲醇 | 5.985         | [M+H] <sup>+</sup> | 271          | 156/92/108        | 9/29/20      |
| 126 | 磺胺甲氧吡嗪   | Sulfamethoxypyridazine | 80-35-3   | C <sub>11</sub> H <sub>12</sub> N <sub>4</sub> O <sub>3</sub> S             | 甲醇 | 6.114         | [M+H] <sup>+</sup> | 281.1        | 108.1/92.1/156    | 28/32/12     |
| 127 | 磺胺喹噁啉    | Sulfaquinoxaline       | 59-40-5   | C <sub>14</sub> H <sub>12</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub> S             | 甲醇 | 10.103        | [M+H] <sup>+</sup> | 301.1        | 156/92/108        | 16/32/28     |
| 128 | 磺胺氯吡嗪    | Sulfaclozine           | 102-65-8  | C <sub>10</sub> H <sub>9</sub> ClN <sub>4</sub> O <sub>2</sub> S            | 甲醇 | 9.734         | [M+H] <sup>+</sup> | 285          | 155.9/108.1/130   | 20/24/24     |
| 129 | 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            | 甲醇 | 9.741         | [M+H] <sup>+</sup> | 285          | 156/108.1/92.1    | 12/24/24     |
| 130 | 磺胺邻二甲氧嘧啶 | Sulfadoxine            | 2447-57-6 | C <sub>12</sub> H <sub>14</sub> N <sub>4</sub> O <sub>4</sub> S             | 甲醇 | 10.016        | [M+H] <sup>+</sup> | 311.1        | 156/92.1/65.1     | 16/32/64     |
| 131 | 磺胺脒      | Sulfaguanidine         | 57-67-0   | C <sub>7</sub> H <sub>10</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub> S              | 甲醇 | 2.584         | [M+H] <sup>+</sup> | 215.1        | 156/108/92        | 12/24/20     |

| 序号  | 中文名称   | 英文名称          | CAS 号      | 分子式                                                                        | 溶剂 | 保留时间<br>(min) | 加成<br>离子            | 母离子<br>(m/z) | 典型二级碎片离子<br>(m/z) | 碰撞能量<br>(eV) |
|-----|--------|---------------|------------|----------------------------------------------------------------------------|----|---------------|---------------------|--------------|-------------------|--------------|
| 132 | 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            | 甲醇 | 4.513         | [M+H] <sup>+</sup>  | 251.1        | 108.1/92.1/156    | 20/28/8      |
| 133 | 磺胺索嘧啶  | Sulfisomidine | 515-64-0   | C <sub>12</sub> H <sub>14</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub> S            | 甲醇 | 4.030         | [M+H] <sup>+</sup>  | 279.1        | 186/124.1/92      | 20/20/40     |
| 134 | 磺胺噻唑   | Sulfathiazole | 72-14-0    | C <sub>9</sub> H <sub>9</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub> S <sub>2</sub> | 甲醇 | 4.690         | [M+H] <sup>+</sup>  | 256          | 156/92.1/108.1    | 12/28/20     |
| 135 | 磺胺硝苯   | Sulfanitran   | 122-16-7   | C <sub>14</sub> H <sub>13</sub> N <sub>3</sub> O <sub>5</sub> S            | 甲醇 | 13.229        | [M+H] <sup>+</sup>  | 336.1        | 293.9/156/318.2   | 8/8/12       |
| 136 | 环丙氨嗪   | Cyromazine    | 66215-27-8 | C <sub>6</sub> H <sub>10</sub> N <sub>6</sub>                              | 乙腈 | 3.064         | [M+H] <sup>+</sup>  | 167.1        | 108.1/85/68       | 20/16/40     |
| 137 | 环丙沙星   | Ciprofloxacin | 85721-33-1 | C <sub>17</sub> H <sub>18</sub> FN <sub>3</sub> O <sub>3</sub>             | 甲醇 | 5.235         | [M+H] <sup>+</sup>  | 332.1        | 314/288/231       | 20/20/48     |
| 138 | 红霉素    | Erythromycin  | 114-07-8   | C <sub>37</sub> H <sub>67</sub> NO <sub>13</sub>                           | 甲醇 | 10.851        | [M+H] <sup>+</sup>  | 734.5        | 576.3/158.1/83.1  | 16/32/60     |
| 139 | 黄体酮    | Progesterone  | 57-83-0    | C <sub>21</sub> H <sub>30</sub> O <sub>2</sub>                             | 乙腈 | 16.287        | [M+H] <sup>+</sup>  | 315.2        | 108.9/97/79.1     | 32/28/40     |
| 140 | 哈西奈德   | Halcinonide   | 3093-35-4  | C <sub>24</sub> H <sub>32</sub> ClFO <sub>5</sub>                          | 乙腈 | 15.716        | [M+H] <sup>+</sup>  | 455.4        | 143.2/189.3/359.3 | 50/34/26     |
| 141 | 间氨基苯乙醚 | m-Phenetidine | 621-33-0   | C <sub>8</sub> H <sub>11</sub> NO                                          | 甲醇 | 4.482         | [M+H] <sup>+</sup>  | 138.1        | 110.1/92.9/65     | 16/20/32     |
| 142 | 甲苯咪唑   | Mebendazole   | 31431-39-7 | C <sub>16</sub> H <sub>13</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>              | 甲醇 | 10.463        | [M+H] <sup>+</sup>  | 296.1        | 264.1/77/105      | 20/48/36     |
| 143 | 加巴喷丁   | Gabapentin    | 60142-96-3 | C <sub>9</sub> H <sub>17</sub> NO <sub>2</sub>                             | 甲醇 | 4.092         | [M+H] <sup>+</sup>  | 172.2        | 67.1/137.1/154.2  | 36/16/12     |
| 144 | 甲矾霉素   | Thiamphenicol | 15318-45-3 | C <sub>12</sub> H <sub>15</sub> Cl <sub>2</sub> NO <sub>5</sub> S          | 甲醇 | 5.628         | [M-H] <sup>-</sup>  | 354          | 290/207.7/185.1   | 12/16/8      |
| 145 | 金刚烷胺   | Amantadine    | 768-94-5   | C <sub>10</sub> H <sub>17</sub> N                                          | 甲醇 | 5.105         | [M+H] <sup>+</sup>  | 152.1        | 135/93.1/77.1     | 18/32/50     |
| 146 | 甲基吡啶磷  | Azamethiphos  | 35575-96-3 | C <sub>9</sub> H <sub>10</sub> ClN <sub>2</sub> O <sub>5</sub> PS          | 甲醇 | 12.024        | [M+Na] <sup>+</sup> | 346.9        | 112.1/139.1/236.9 | 40/32/16     |

| 序号  | 中文名称    | 英文名称                          | CAS 号       | 分子式                                                             | 溶剂  | 保留时间<br>(min) | 加成<br>离子              | 母离子<br>(m/z) | 典型二级碎片离子<br>(m/z) | 碰撞能量<br>(eV) |
|-----|---------|-------------------------------|-------------|-----------------------------------------------------------------|-----|---------------|-----------------------|--------------|-------------------|--------------|
| 147 | 甲基睾酮    | Methyltestosterone            | 58-18-4     | C <sub>20</sub> H <sub>30</sub> O <sub>2</sub>                  | 乙腈  | 15.067        | [M+H] <sup>+</sup>    | 303.2        | 109.1/97.1/285.2  | 32/32/12     |
| 148 | 甲基泼尼松龙  | Methylprednisolone            | 83-43-2     | C <sub>22</sub> H <sub>30</sub> O <sub>5</sub>                  | 甲醇  | 12.603        | [M+HCOO] <sup>-</sup> | 419.2        | 343.1/309.2/294.2 | 12/36/38     |
| 149 | 甲基炔酮    | D-(-)-Norgestrel              | 797-63-7    | C <sub>21</sub> H <sub>28</sub> O <sub>2</sub>                  | 乙腈  | 15.436        | [M+H] <sup>+</sup>    | 313.2        | 245.1/108.9/106.9 | 16/24/40     |
| 150 | 甲基盐霉素   | Narasin                       | 55134-13-9  | C <sub>43</sub> H <sub>72</sub> O <sub>11</sub>                 | 甲醇  | 18.028        | [M+Na] <sup>+</sup>   | 787.5        | 769.1/531.3/431.1 | 42/50/50     |
| 151 | 甲基异噻唑啉酮 | 2-Methyl-4-isothiazolin-3-one | 2682-20-4   | C <sub>4</sub> H <sub>5</sub> NOS                               | 甲醇  | 3.448         | [M+H] <sup>+</sup>    | 116.2        | 53.3/58.1/71.3    | 40/36/16     |
| 152 | 加米霉素    | Gamithromycin                 | 145435-72-9 | C <sub>40</sub> H <sub>76</sub> N <sub>2</sub> O <sub>12</sub>  | 乙腈  | 8.582         | [M+H] <sup>+</sup>    | 777.5        | 116.1/158.1/619.4 | 40/40/36     |
| 153 | 金霉素     | Chlortetracycline             | 57-62-5     | C <sub>22</sub> H <sub>23</sub> ClN <sub>2</sub> O <sub>8</sub> | 甲醇  | 7.686         | [M+H] <sup>+</sup>    | 479.1        | 462/444/154.1     | 12/20/36     |
| 154 | 甲灭酸     | Mefenamic acid                | 61-68-7     | C <sub>15</sub> H <sub>15</sub> NO <sub>2</sub>                 | 乙腈  | 16.115        | [M+H] <sup>+</sup>    | 242.1        | 224.1/209.1/180.1 | 8/28/44      |
| 155 | 吉米沙星    | Gemifoxacin                   | 175463-14-6 | C <sub>18</sub> H <sub>20</sub> FN <sub>5</sub> O <sub>4</sub>  | 甲醇  | 7.382         | [M+H] <sup>+</sup>    | 389.9        | 371.9/312.9/244.8 | 20/32/32     |
| 156 | 交沙霉素    | Josamycin                     | 16846-24-5  | C <sub>42</sub> H <sub>69</sub> NO <sub>15</sub>                | 甲醇  | 13.886        | [M+H] <sup>+</sup>    | 828.5        | 600/582.2/228.9   | 30/30/34     |
| 157 | 吉他霉素    | Kitasamycin                   | 1392-21-8   | C <sub>33</sub> H <sub>59</sub> NO <sub>13</sub>                | 甲醇  | 13.134        | [M+H] <sup>+</sup>    | 772.5        | 174/108.9/214.9   | 36/48/30     |
| 158 | 加替沙星    | Gatifloxacin                  | 112811-59-3 | C <sub>19</sub> H <sub>22</sub> FN <sub>3</sub> O <sub>4</sub>  | 甲醇  | 6.280         | [M+H] <sup>+</sup>    | 376          | 358/332/261       | 15/15/30     |
| 159 | 甲硝唑     | Metronidazole                 | 443-48-1    | C <sub>6</sub> H <sub>9</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>     | 甲醇  | 3.813         | [M+H] <sup>+</sup>    | 172.1        | 128/82.1/42.2     | 12/24/60     |
| 160 | 甲氧苄啶    | Trimethoprim                  | 738-70-5    | C <sub>14</sub> H <sub>18</sub> N <sub>4</sub> O <sub>3</sub>   | 甲醇  | 4.893         | [M+H] <sup>+</sup>    | 291.2        | 261.1/230.1/123.1 | 24/20/24     |
| 161 | 甲氧苄啶酯   | Nequinat                      | 13997-19-8  | C <sub>22</sub> H <sub>23</sub> NO <sub>4</sub>                 | DMF | 15.368        | [M+H] <sup>+</sup>    | 366.2        | 334.1/200.9/91    | 16/32/44     |

| 序号  | 中文名称 | 英文名称             | CAS 号       | 分子式                                                                           | 溶剂 | 保留时间<br>(min) | 加成<br>离子              | 母离子<br>(m/z) | 典型二级碎片离子<br>(m/z) | 碰撞能量<br>(eV) |
|-----|------|------------------|-------------|-------------------------------------------------------------------------------|----|---------------|-----------------------|--------------|-------------------|--------------|
| 162 | 坎苯达唑 | Cambendazole     | 26097-80-3  | C <sub>14</sub> H <sub>14</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub> S               | 甲醇 | 7.609         | [M+H] <sup>+</sup>    | 303.1        | 261/217.1/190     | 16/32/40     |
| 163 | 卡巴克络 | Carbazochrome    | 69-81-8     | C <sub>10</sub> H <sub>12</sub> N <sub>4</sub> O <sub>3</sub>                 | 甲醇 | 3.879         | [M+H] <sup>+</sup>    | 237.1        | 118/164.1/220.1   | 36/20/8      |
| 164 | 卡布特罗 | Carbuterol       | 34866-47-2  | C <sub>13</sub> H <sub>21</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>                 | 甲醇 | 3.404         | [M+H] <sup>+</sup>    | 268.7        | 133.8/177/194.2   | 24/20/16     |
| 165 | 克百威  | Carbofuran       | 1563-66-2   | C <sub>12</sub> H <sub>15</sub> NO <sub>3</sub>                               | 乙腈 | 13.199        | [M+H] <sup>+</sup>    | 222.1        | 165.1/123.1/124   | 20/30/20     |
| 166 | 卡巴氧  | Carbadox         | 6804-07-5   | C <sub>11</sub> H <sub>10</sub> N <sub>4</sub> O <sub>4</sub>                 | 甲醇 | 5.293         | [M+H] <sup>+</sup>    | 262.9        | 230.8/89.9/77     | 12/32/40     |
| 167 | 可的松  | Cortisone        | 53-06-5     | C <sub>21</sub> H <sub>28</sub> O <sub>5</sub>                                | 甲醇 | 10.967        | [M+HCOO] <sup>-</sup> | 405.2        | 359.1/329.1/301.1 | 8/12/20      |
| 168 | 可尔特罗 | Colterol         | 18866-78-9  | C <sub>12</sub> H <sub>19</sub> NO <sub>3</sub>                               | 甲醇 | 3.435         | [M+H] <sup>+</sup>    | 226.1        | 107/135/151.9     | 32/28/16     |
| 169 | 可乐定  | Clonidine        | 4205-90-7   | C <sub>9</sub> H <sub>9</sub> Cl <sub>2</sub> N <sub>3</sub>                  | 甲醇 | 4.262         | [M+H] <sup>+</sup>    | 230          | 213/100/160       | 26/38/34     |
| 170 | 卡洛芬  | Carprofen        | 53716-49-7  | C <sub>15</sub> H <sub>12</sub> ClNO <sub>2</sub>                             | 乙腈 | 15.256        | [M-H] <sup>-</sup>    | 272          | 227.9/225.9/190   | 12/28/52     |
| 171 | 克拉霉素 | Clarithromycin   | 81103-11-9  | C <sub>38</sub> H <sub>69</sub> NO <sub>13</sub>                              | 甲醇 | 13.456        | [M+H] <sup>+</sup>    | 748.5        | 590.4/158.1/83    | 20/40/40     |
| 172 | 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             | 甲醇 | 8.100         | [M+H] <sup>+</sup>    | 425.2        | 377.2/126.1/389.2 | 20/20/16     |
| 173 | 克伦普罗 | Clenproperol     | 38339-11-6  | C <sub>11</sub> H <sub>16</sub> Cl <sub>2</sub> N <sub>2</sub> O              | 甲醇 | 5.434         | [M+H] <sup>+</sup>    | 263          | 132/202.9/245.8   | 28/20/8      |
| 174 | 克伦塞罗 | Clencyclohexerol | 157877-79-7 | C <sub>14</sub> H <sub>20</sub> Cl <sub>2</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub> | 甲醇 | 4.706         | [M+H] <sup>+</sup>    | 319.2        | 132.1/202.9/301   | 40/20/12     |
| 175 | 克伦特罗 | Clenbuterol      | 37148-27-9  | C <sub>12</sub> H <sub>18</sub> Cl <sub>2</sub> N <sub>2</sub> O              | 甲醇 | 6.470         | [M+H] <sup>+</sup>    | 277.1        | 259.1/203/168.1   | 4/12/28      |
| 176 | 孔雀石绿 | Malachite green  | 569-64-2    | C <sub>23</sub> H <sub>25</sub> ClN <sub>2</sub>                              | 甲醇 | 14.207        | [M+H] <sup>+</sup>    | 329.3        | 284/241/208.2     | 50/50/36     |

| 序号  | 中文名称   | 英文名称                   | CAS 号      | 分子式                                                            | 溶剂   | 保留时间<br>(min) | 加成<br>离子            | 母离子<br>(m/z) | 典型二级碎片离子<br>(m/z) | 碰撞能量<br>(eV) |
|-----|--------|------------------------|------------|----------------------------------------------------------------|------|---------------|---------------------|--------------|-------------------|--------------|
| 177 | 喹烯酮    | Quinocetone            | 81810-66-4 | C <sub>18</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>  | 甲醇   | 13.710        | [M+H] <sup>+</sup>  | 307          | 273/197/131.1     | 20/20/24     |
| 178 | 卡硝唑    | Carnidazole            | 42116-76-7 | C <sub>8</sub> H <sub>12</sub> N <sub>4</sub> O <sub>3</sub> S | 甲醇   | 9.206         | [M+H] <sup>+</sup>  | 245          | 118/75.2/58.1     | 4/36/40      |
| 179 | 喹乙醇    | Olaquinox              | 23696-28-8 | C <sub>12</sub> H <sub>13</sub> N <sub>3</sub> O <sub>4</sub>  | 甲醇   | 3.714         | [M+H] <sup>+</sup>  | 264.1        | 230/143/102       | 16/40/56     |
| 180 | 癸氧喹酯   | Decoquinat             | 18507-89-6 | C <sub>24</sub> H <sub>35</sub> NO <sub>5</sub>                | 二氯甲烷 | 17.085        | [M+H] <sup>+</sup>  | 418.3        | 372.2/232.1/204   | 24/36/48     |
| 181 | 吡唑心安   | Carazolol              | 57775-29-8 | C <sub>18</sub> H <sub>22</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>  | 甲醇   | 8.329         | [M+H] <sup>+</sup>  | 299          | 222.2/116.1/56.2  | 20/20/40     |
| 182 | 氯苯胍    | Robenidine             | 25875-50-7 | C <sub>15</sub> H <sub>14</sub> Cl <sub>3</sub> N <sub>5</sub> | 甲醇   | 14.167        | [M+H] <sup>+</sup>  | 333.9        | 154.8/138.1/111   | 20/32/40     |
| 183 | 拉贝洛尔   | Labetalol              | 36894-69-6 | C <sub>19</sub> H <sub>24</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>  | 甲醇   | 8.408         | [M+H] <sup>+</sup>  | 329          | 310.9/161.9/91    | 12/32/36     |
| 184 | 氯丙那林   | Clorprenaline          | 3811-25-4  | C <sub>11</sub> H <sub>16</sub> ClNO                           | 甲醇   | 5.502         | [M+H] <sup>+</sup>  | 214.1        | 196/153.9/118     | 8/12/24      |
| 185 | 氯苯那敏   | Chlorpheniramine       | 132-22-9   | C <sub>16</sub> H <sub>19</sub> ClN <sub>2</sub>               | 甲醇   | 6.778         | [M+H] <sup>+</sup>  | 275          | 229.9/201/167     | 20/40/40     |
| 186 | 氯丙嗪    | Chlorpromazine         | 50-53-3    | C <sub>17</sub> H <sub>19</sub> ClN <sub>2</sub> S             | 甲醇   | 13.520        | [M+H] <sup>+</sup>  | 319.1        | 86.1/58.2/214     | 16/44/40     |
| 187 | 利巴韦林   | Ribavirin              | 36791-04-5 | C <sub>8</sub> H <sub>12</sub> N <sub>4</sub> O <sub>5</sub>   | 甲醇   | 1.412         | [M+H] <sup>+</sup>  | 245          | 112.8/95.9/209.2  | 9/29/20      |
| 188 | 利多卡因   | Lidocaine              | 137-58-6   | C <sub>14</sub> H <sub>22</sub> N <sub>2</sub> O               | 甲醇   | 5.538         | [M+H] <sup>+</sup>  | 235.1        | 58.4/86.2/234     | 36/24/0      |
| 189 | 龙胆紫    | Crystal violet         | 548-62-9   | C <sub>23</sub> H <sub>30</sub> ClN <sub>3</sub>               | 甲醇   | 14.893        | [M+H] <sup>+</sup>  | 372.3        | 356.1/340/235     | 44/55/55     |
| 190 | 利福霉素 S | Rifamycin S            | 13553-79-2 | C <sub>37</sub> H <sub>45</sub> NO <sub>12</sub>               | 甲醇   | 16.577        | [M+Na] <sup>+</sup> | 718.3        | 658/572/546.1     | 36/40/40     |
| 191 | 氯化氮氨菲啶 | Isometamidium chloride | 34301-55-8 | C <sub>28</sub> H <sub>26</sub> ClN <sub>7</sub>               | 甲醇   | 7.304         | [M+H] <sup>+</sup>  | 460.3        | 311.8/296.8/283.1 | 42/38/50     |

| 序号  | 中文名称             | 英文名称                         | CAS 号       | 分子式                      | 溶剂 | 保留时间<br>(min) | 加成<br>离子  | 母离子<br>(m/z) | 典型二级碎片离子<br>(m/z) | 碰撞能量<br>(eV) |
|-----|------------------|------------------------------|-------------|--------------------------|----|---------------|-----------|--------------|-------------------|--------------|
| 192 | 罗红霉素             | Roxithromycin                | 80214-83-1  | $C_{41}H_{76}N_2O_{15}$  | 甲醇 | 13.581        | $[M+H]^+$ | 837.5        | 679.4/158.1/116.1 | 20/40/44     |
| 193 | 氯己定              | Chlorhexidine                | 55-56-1     | $C_{22}H_{30}Cl_2N_{10}$ | 甲醇 | 9.646         | $[M+H]^+$ | 505.2        | 353.3/336.1/184.1 | 16/16/32     |
| 194 | 莱克多巴胺            | Ractopamine                  | 97825-25-7  | $C_{18}H_{23}NO_3$       | 甲醇 | 5.370         | $[M+H]^+$ | 302.2        | 284.2/164.1/107.1 | 8/12/24      |
| 195 | 林可霉素             | Lincomycin                   | 154-21-2    | $C_{18}H_{34}N_2O_6S$    | 甲醇 | 4.083         | $[M+H]^+$ | 407.2        | 359.2/126.1/42.2  | 20/29/75     |
| 196 | 氯霉素              | Chloramphenicol              | 56-75-7     | $C_{11}H_{12}Cl_2N_2O_5$ | 甲醇 | 9.150         | $[M+H]^+$ | 321          | 257/152.1/121     | 0/14/36      |
| 197 | 雷尼替丁             | Ranitidine                   | 66357-35-5  | $C_{13}H_{22}N_4O_3S$    | 甲醇 | 3.638         | $[M+H]^+$ | 315.2        | 176/130/102.2     | 16/28/40     |
| 198 | 氯羟吡啶             | Clopidol                     | 2971-90-6   | $C_7H_7Cl_2NO$           | 甲醇 | 4.395         | $[M+H]^+$ | 192.1        | 101/87/51         | 25/30/48     |
| 199 | 拉沙洛西钠            | Lasalocid sodium             | 25999-20-6  | $C_{34}H_{53}NaO_8$      | 甲醇 | 19.810        | $[M+H]^+$ | 613.4        | 595.3/577.3/377.3 | 28/36/40     |
| 200 | 利托君              | Ritodrine                    | 26652-09-5  | $C_{17}H_{21}NO_3$       | 甲醇 | 4.310         | $[M+H]^+$ | 288.2        | 121.1/150/270.2   | 32/16/12     |
| 201 | L-硒-甲基硒代<br>半胱氨酸 | 3-Methylseleno-L-<br>alanine | 26046-90-2  | $C_4H_9NO_2Se$           | 水  | 1.466         | $[M+H]^+$ | 167          | 55.2/94.9/123     | 16/24/12     |
| 202 | 螺旋霉素             | Spiramycin                   | 8025-81-8   | $C_{43}H_{74}N_2O_{14}$  | 甲醇 | 7.467         | $[M+H]^+$ | 843.5        | 174/142.1/101     | 40/36/56     |
| 203 | 罗硝唑              | Ronidazole                   | 7681-76-7   | $C_6H_8N_4O_4$           | 甲醇 | 4.466         | $[M+H]^+$ | 201.1        | 140.1/55.2/42.2   | 8/25/50      |
| 204 | 氯唑西林             | Cloxacillin                  | 61-72-3     | $C_{19}H_{18}ClN_3O_5S$  | 甲醇 | 14.292        | $[M+H]^+$ | 436          | 276.9/160/114     | 18/10/42     |
| 205 | 马波沙星             | Marbofloxacin                | 115550-35-1 | $C_{17}H_{19}FN_4O_4$    | 甲醇 | 4.869         | $[M+H]^+$ | 363          | 320.2/277.2/345.1 | 10/18/16     |
| 206 | 马布特罗             | Mabuterol                    | 56341-08-3  | $C_{13}H_{18}ClF_3N_2O$  | 甲醇 | 8.023         | $[M+H]^+$ | 311.1        | 293.1/237.1/217.2 | 6/14/28      |

| 序号  | 中文名称 | 英文名称         | CAS 号       | 分子式                                                                            | 溶剂 | 保留时间<br>(min) | 加成<br>离子            | 母离子<br>(m/z) | 典型二级碎片离子<br>(m/z) | 碰撞能量<br>(eV) |
|-----|------|--------------|-------------|--------------------------------------------------------------------------------|----|---------------|---------------------|--------------|-------------------|--------------|
| 207 | 马杜霉素 | Maduramicin  | 61991-54-6  | C <sub>47</sub> H <sub>80</sub> O <sub>17</sub>                                | 甲醇 | 20.154        | [M+Na] <sup>+</sup> | 939.5        | 895.4/877.4/859.4 | 48/28/50     |
| 208 | 麦迪霉素 | Midecamycin  | 35457-80-8  | C <sub>41</sub> H <sub>67</sub> NO <sub>15</sub>                               | 甲醇 | 13.647        | [M+H] <sup>+</sup>  | 814.5        | 108.8/174.1/614.5 | 40/40/28     |
| 209 | 美金刚  | Memantine    | 19982-08-2  | C <sub>12</sub> H <sub>21</sub> N                                              | 甲醇 | 8.425         | [M+H] <sup>+</sup>  | 180          | 91.1/107.1/163.1  | 40/28/16     |
| 210 | 咪喹莫特 | Imiquimod    | 99011-02-6  | C <sub>14</sub> H <sub>16</sub> N <sub>4</sub>                                 | 甲醇 | 7.705         | [M+H] <sup>+</sup>  | 241          | 185.2/168/57.2    | 28/40/32     |
| 211 | 米诺地尔 | Minoxidil    | 38304-91-5  | C <sub>9</sub> H <sub>15</sub> N <sub>5</sub> O                                | 甲醇 | 5.347         | [M+H] <sup>+</sup>  | 210          | 193.1/163.9/84    | 16/24/28     |
| 212 | 吗啉胍  | Moroxydine   | 3731-59-7   | C <sub>6</sub> H <sub>13</sub> N <sub>5</sub> O                                | 乙腈 | 1.397         | [M+H] <sup>+</sup>  | 172.1        | 130.1/113.1/60.5  | 15/20/36     |
| 213 | 马拉硫磷 | Malathion    | 121-75-5    | C <sub>10</sub> H <sub>19</sub> O <sub>6</sub> PS <sub>2</sub>                 | 乙腈 | 15.806        | [M+H] <sup>+</sup>  | 331          | 285/126.9/99      | 10/5/5       |
| 214 | 美洛昔康 | Meloxicam    | 71125-38-7  | C <sub>14</sub> H <sub>13</sub> N <sub>3</sub> O <sub>4</sub> S <sub>2</sub>   | 乙腈 | 14.726        | [M+H] <sup>+</sup>  | 352          | 140.9/115/73      | 16/16/44     |
| 215 | 莫能菌素 | Monensin     | 17090-79-8  | C <sub>36</sub> H <sub>62</sub> O <sub>11</sub>                                | 甲醇 | 20.405        | [M+Na] <sup>+</sup> | 693.5        | 675.3/479.3/461.3 | 40/60/60     |
| 216 | 马喷特罗 | Mapenterol   | 95656-68-1  | C <sub>14</sub> H <sub>20</sub> ClF <sub>3</sub> N <sub>2</sub> O              | 甲醇 | 9.176         | [M+H] <sup>+</sup>  | 325.1        | 306.9/236.8/216.9 | 8/16/28      |
| 217 | 美他环素 | Methacycline | 914-00-1    | C <sub>22</sub> H <sub>22</sub> N <sub>2</sub> O <sub>8</sub>                  | 甲醇 | 7.999         | [M+H] <sup>+</sup>  | 443.1        | 426.1/201.1/213.1 | 20/40/40     |
| 218 | 美托洛尔 | Metoprolol   | 37350-58-6  | C <sub>15</sub> H <sub>25</sub> NO <sub>3</sub>                                | 甲醇 | 6.315         | [M+H] <sup>+</sup>  | 268.2        | 56.3/74.1/116     | 36/24/20     |
| 219 | 莫奈太尔 | Monepantel   | 887148-69-8 | C <sub>20</sub> H <sub>13</sub> F <sub>6</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub> S | 乙腈 | 16.300        | [M+H] <sup>+</sup>  | 474          | 204.9/221.9/446.9 | 28/12/12     |
| 220 | 莫西菌素 | Moxidectin   | 113507-06-5 | C <sub>37</sub> H <sub>53</sub> NO <sub>8</sub>                                | 甲醇 | 18.255        | [M+H] <sup>+</sup>  | 640.3        | 622.2/528.4/498.4 | 12/4/8       |
| 221 | 莫西沙星 | Moxifloxacin | 151096-09-2 | C <sub>21</sub> H <sub>24</sub> FN <sub>3</sub> O <sub>4</sub>                 | 甲醇 | 7.460         | [M+H] <sup>+</sup>  | 402.1        | 383.9/363.9/259.9 | 24/32/40     |

| 序号  | 中文名称   | 英文名称           | CAS 号       | 分子式                                                             | 溶剂              | 保留时间<br>(min) | 加成<br>离子                          | 母离子<br>(m/z) | 典型二级碎片离子<br>(m/z) | 碰撞能量<br>(eV) |
|-----|--------|----------------|-------------|-----------------------------------------------------------------|-----------------|---------------|-----------------------------------|--------------|-------------------|--------------|
| 222 | 美雄酮    | Metandienone   | 72-63-9     | C <sub>20</sub> H <sub>28</sub> O <sub>2</sub>                  | 甲醇              | 14.332        | [M-H] <sup>-</sup>                | 301.3        | 149.2/121.1/93.1  | 14/26/42     |
| 223 | 萘啶酸    | Nalidixic acid | 389-08-2    | C <sub>12</sub> H <sub>12</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>   | 甲醇              | 12.087        | [M+H] <sup>+</sup>                | 233.1        | 215.1/159.1/187   | 20/40/28     |
| 224 | 那氟沙星   | Nadifloxacin   | 124858-35-1 | C <sub>19</sub> H <sub>21</sub> FN <sub>2</sub> O <sub>4</sub>  | 甲醇              | 12.077        | [M+H] <sup>+</sup>                | 361          | 343/282.9/256.9   | 24/40/40     |
| 225 | 诺氟沙星   | Norfloxacin    | 70458-96-7  | C <sub>16</sub> H <sub>18</sub> FN <sub>3</sub> O <sub>3</sub>  | 甲醇              | 5.048         | [M+H] <sup>+</sup>                | 320.1        | 302.1/282.1/231.1 | 25/35/40     |
| 226 | 萘夫西林   | Nafcillin      | 147-52-4    | C <sub>21</sub> H <sub>22</sub> N <sub>2</sub> O <sub>5</sub> S | 甲醇              | 14.484        | [M+H] <sup>+</sup>                | 415          | 256.2/199.1/171   | 22/14/38     |
| 227 | 尼卡巴嗪   | Nicarbazine    | 330-95-0    | C <sub>19</sub> H <sub>18</sub> N <sub>6</sub> O <sub>6</sub>   | 乙腈:<br>DMF(9:1) | 15.773        | [M-H] <sup>-</sup>                | 301.1        | 137/106.9/46.3    | 20/45/59     |
| 228 | 诺龙     | Nandrolone     | 434-22-0    | C <sub>18</sub> H <sub>26</sub> O <sub>2</sub>                  | 乙腈              | 14.229        | [M+H] <sup>+</sup>                | 275.2        | 109/77.1/79.1     | 32/64/56     |
| 229 | 萘普生    | Naproxen       | 22204-53-1  | C <sub>14</sub> H <sub>14</sub> O <sub>3</sub>                  | 甲醇              | 14.518        | [M+H] <sup>+</sup>                | 231          | 153.1/170.1/185.1 | 36/32/12     |
| 230 | 尼日利亚菌素 | Nigericin      | 28380-24-7  | C <sub>40</sub> H <sub>68</sub> O <sub>11</sub>                 | 甲醇              | 21.233        | [M+NH <sub>4</sub> ] <sup>+</sup> | 742.5        | 657.1/125/107     | 28/60/70     |
| 231 | 那他霉素   | Natamycin      | 7681-93-8   | C <sub>33</sub> H <sub>47</sub> NO <sub>13</sub>                | 甲醇              | 10.970        | [M+H] <sup>+</sup>                | 666.4        | 648.4/503.2/467.2 | 8/8/8        |
| 232 | 喷布特罗   | Penbutolol     | 38363-40-5  | C <sub>18</sub> H <sub>29</sub> NO <sub>2</sub>                 | 甲醇              | 13.371        | [M+H] <sup>+</sup>                | 292.2        | 236/133/201       | 12/24/8      |
| 233 | 培氟沙星   | Pefloxacin     | 70458-92-3  | C <sub>17</sub> H <sub>20</sub> FN <sub>3</sub> O <sub>3</sub>  | 甲醇              | 5.182         | [M+H] <sup>+</sup>                | 334.2        | 290.1/233.1/316.2 | 16/28/20     |
| 234 | 普鲁卡因   | Procaine       | 59-46-1     | C <sub>13</sub> H <sub>20</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>   | 乙腈              | 3.999         | [M+H] <sup>+</sup>                | 237.3        | 100.3/120.1/164.2 | 16/32/16     |
| 235 | 哌拉西林   | Piperacillin   | 61477-96-1  | C <sub>23</sub> H <sub>27</sub> N <sub>5</sub> O <sub>7</sub> S | 甲醇              | 10.849        | [M+H] <sup>+</sup>                | 518.2        | 159.2/143/114.9   | 70/20/70     |
| 236 | 普萘洛尔   | Propranolol    | 525-66-6    | C <sub>16</sub> H <sub>21</sub> NO <sub>2</sub>                 | 甲醇              | 9.219         | [M+H] <sup>+</sup>                | 260          | 116/56/183.1      | 16/28/20     |

| 序号  | 中文名称    | 英文名称                         | CAS 号      | 分子式                                                                          | 溶剂 | 保留时间<br>(min) | 加成<br>离子              | 母离子<br>(m/z) | 典型二级碎片离子<br>(m/z) | 碰撞能量<br>(eV) |
|-----|---------|------------------------------|------------|------------------------------------------------------------------------------|----|---------------|-----------------------|--------------|-------------------|--------------|
| 237 | 泼尼松     | Prednisone                   | 53-03-2    | C <sub>21</sub> H <sub>26</sub> O <sub>5</sub>                               | 甲醇 | 10.606        | [M+HCOO] <sup>-</sup> | 403.3        | 299.4/327.3/357.2 | 16/12/4      |
| 238 | 泼尼松龙    | Prednisolone                 | 50-24-8    | C <sub>21</sub> H <sub>28</sub> O <sub>5</sub>                               | 甲醇 | 10.565        | [M+HCOO] <sup>-</sup> | 405.3        | 329.4/295.2/280.2 | 10/34/34     |
| 239 | 曲安奈德    | Triamcinolone acetoneide     | 76-25-5    | C <sub>24</sub> H <sub>31</sub> FO <sub>6</sub>                              | 乙腈 | 13.681        | [M+H] <sup>+</sup>    | 435.2        | 415.2/397.1/339.1 | 8/16/12      |
| 240 | 曲安西龙    | Triamcinolone                | 124-94-7   | C <sub>21</sub> H <sub>27</sub> FO <sub>6</sub>                              | 甲醇 | 8.936         | [M+H] <sup>+</sup>    | 395.2        | 375/357.2/225.1   | 8/12/20      |
| 241 | 全氟辛酸    | Perfluorooctanoic acid       | 335-67-1   | C <sub>8</sub> HF <sub>15</sub> O <sub>2</sub>                               | 乙腈 | 15.020        | [M-H] <sup>-</sup>    | 412.9        | 368.9/219/169     | 4/12/16      |
| 242 | 全氟辛烷磺酸  | Perfluorooctanesulfonic acid | 1763-23-1  | C <sub>8</sub> HF <sub>17</sub> O <sub>3</sub> S                             | 甲醇 | 16.818        | [M-H] <sup>-</sup>    | 498.9        | 130/99/80         | 50/55/80     |
| 243 | 醛固酮     | Aldosterone                  | 52-39-1    | C <sub>21</sub> H <sub>28</sub> O <sub>5</sub>                               | 乙腈 | 9.558         | [M+H] <sup>+</sup>    | 361.1        | 315.1/325/343     | 16/20/16     |
| 244 | 青蒿琥酯    | Artesunate                   | 88495-63-0 | C <sub>19</sub> H <sub>28</sub> O <sub>8</sub>                               | 甲醇 | 15.340        | [M+Na] <sup>+</sup>   | 407          | 163.1/261/289.1   | 22/14/14     |
| 245 | 氢化可的松   | Hydrocortisone               | 50-23-7    | C <sub>21</sub> H <sub>30</sub> O <sub>5</sub>                               | 甲醇 | 10.786        | [M+H] <sup>+</sup>    | 363.4        | 327.2/121.1/309.2 | 8/20/20      |
| 246 | 羟基甲硝唑   | Hydroxymetronidazole         | 4812-40-2  | C <sub>6</sub> H <sub>9</sub> N <sub>3</sub> O <sub>4</sub>                  | 甲醇 | 3.566         | [M+H] <sup>+</sup>    | 188.1        | 126.1/123.1/68.1  | 16/8/24      |
| 247 | 多西环素    | Doxycycline                  | 564-25-0   | C <sub>22</sub> H <sub>24</sub> N <sub>2</sub> O <sub>8</sub>                | 甲醇 | 8.365         | [M+H] <sup>+</sup>    | 445.2        | 428.1/410/321.1   | 16/24/28     |
| 248 | 氢氯噻嗪    | Hydrochlorothiazide          | 58-93-5    | C <sub>7</sub> H <sub>8</sub> ClN <sub>3</sub> O <sub>4</sub> S <sub>2</sub> | 甲醇 | 4.839         | [M-H] <sup>-</sup>    | 296          | 77.9/205/268.9    | 36/24/20     |
| 249 | 青霉素 G   | Penicillin G                 | 61-33-6    | C <sub>16</sub> H <sub>18</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub> S              | 水  | 11.689        | [M+H] <sup>+</sup>    | 335.1        | 176/160.1/114     | 8/8/18       |
| 250 | 青霉素 V 钾 | Penicillin V potassium       | 132-98-9   | C <sub>16</sub> H <sub>17</sub> KN <sub>2</sub> O <sub>5</sub> S             | 甲醇 | 12.603        | [M+H] <sup>+</sup>    | 351          | 160/114.1/192     | 8/36/8       |
| 251 | 群勃龙     | Trenbolone                   | 10161-33-8 | C <sub>18</sub> H <sub>22</sub> O <sub>2</sub>                               | 乙腈 | 13.737        | [M+H] <sup>+</sup>    | 271.2        | 253.2/199.1/165.2 | 20/28/56     |

| 序号  | 中文名称    | 英文名称          | CAS 号       | 分子式                                                                          | 溶剂 | 保留时间<br>(min) | 加成<br>离子           | 母离子<br>(m/z) | 典型二级碎片离子<br>(m/z) | 碰撞能量<br>(eV) |
|-----|---------|---------------|-------------|------------------------------------------------------------------------------|----|---------------|--------------------|--------------|-------------------|--------------|
| 252 | 炔诺酮     | Norethindrone | 68-22-4     | C <sub>20</sub> H <sub>26</sub> O <sub>2</sub>                               | 乙腈 | 14.729        | [M+H] <sup>+</sup> | 299.2        | 231.2/109.1/104.9 | 16/28/32     |
| 253 | 齐帕特罗    | Zilpaterol    | 117827-79-9 | C <sub>14</sub> H <sub>19</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>                | 甲醇 | 3.531         | [M+H] <sup>+</sup> | 262.2        | 244.2/185.1/202.1 | 6/22/16      |
| 254 | 噻苯达唑    | Thiabendazole | 148-79-8    | C <sub>10</sub> H <sub>7</sub> N <sub>3</sub> S                              | 甲醇 | 4.448         | [M+H] <sup>+</sup> | 202          | 175/131/65        | 24/36/52     |
| 255 | 舒巴坦     | Sulbactam     | 68373-14-8  | C <sub>8</sub> H <sub>11</sub> NO <sub>5</sub> S                             | 水  | 4.413         | [M-H] <sup>-</sup> | 232          | 140.1/64.1/188    | 12/44/8      |
| 256 | 杀虫脒     | Chlordimeform | 6164-98-3   | C <sub>10</sub> H <sub>13</sub> ClN <sub>2</sub>                             | 乙腈 | 5.962         | [M+H] <sup>+</sup> | 197.1        | 117/46.2/89       | 32/16/45     |
| 257 | 沙丁胺醇    | Salbutamol    | 18559-94-9  | C <sub>13</sub> H <sub>21</sub> NO <sub>3</sub>                              | 甲醇 | 3.531         | [M+H] <sup>+</sup> | 240.2        | 166.1/148.1/77.2  | 4/16/60      |
| 258 | 苏丹红 I   | Sudan I       | 842-07-9    | C <sub>16</sub> H <sub>12</sub> N <sub>2</sub> O                             | 甲醇 | 17.300        | [M+H] <sup>+</sup> | 249          | 231.9/155.8/127.9 | 12/16/32     |
| 259 | 苏丹红 II  | Sudan II      | 3118-97-6   | C <sub>18</sub> H <sub>16</sub> N <sub>2</sub> O                             | 甲醇 | 18.135        | [M+H] <sup>+</sup> | 277.1        | 259.9/121/106.1   | 12/20/40     |
| 260 | 苏丹红 III | Sudan III     | 85-86-9     | C <sub>22</sub> H <sub>16</sub> N <sub>4</sub> O                             | 甲醇 | 18.605        | [M+H] <sup>+</sup> | 353.1        | 197/128/120.1     | 16/40/24     |
| 261 | 苏丹红 IV  | Sudan IV      | 85-83-6     | C <sub>24</sub> H <sub>20</sub> N <sub>4</sub> O                             | 甲醇 | 19.783        | [M+H] <sup>+</sup> | 380.8        | 258.8/224.4/106.1 | 28/20/36     |
| 262 | 三氮脒     | Diminazene    | 536-71-0    | C <sub>14</sub> H <sub>15</sub> N <sub>7</sub>                               | 甲醇 | 5.778         | [M+H] <sup>+</sup> | 281.9        | 207.7/123/118.9   | 24/32/20     |
| 263 | 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> | 甲醇 | 6.747         | [M+H] <sup>+</sup> | 400.1        | 382.1/356.2/299.1 | 20/16/32     |
| 264 | 四环素     | Tetracycline  | 60-54-8     | C <sub>22</sub> H <sub>24</sub> N <sub>2</sub> O <sub>8</sub>                | 甲醇 | 5.649         | [M+H] <sup>+</sup> | 445.2        | 410.1/154.2/98.1  | 17/30/40     |
| 265 | 三聚氰胺    | Melamine      | 108-78-1    | C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> N <sub>6</sub>                                 | 甲醇 | 1.378         | [M+H] <sup>+</sup> | 127.2        | 110.2/85/68.2     | 20/24/40     |
| 266 | 塞克硝唑    | Secnidazole   | 3366-95-8   | C <sub>7</sub> H <sub>11</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>                 | 甲醇 | 4.743         | [M+H] <sup>+</sup> | 186          | 128/82.1/59.3     | 12/24/20     |

| 序号  | 中文名称    | 英文名称              | CAS 号       | 分子式                                                                                         | 溶剂 | 保留时间<br>(min) | 加成<br>离子           | 母离子<br>(m/z) | 典型二级碎片离子<br>(m/z) | 碰撞能量<br>(eV) |
|-----|---------|-------------------|-------------|---------------------------------------------------------------------------------------------|----|---------------|--------------------|--------------|-------------------|--------------|
| 267 | 三氯苯达唑   | Triclabendazole   | 68786-66-3  | C <sub>14</sub> H <sub>9</sub> Cl <sub>3</sub> N <sub>2</sub> O <sub>5</sub>                | 甲醇 | 15.972        | [M+H] <sup>+</sup> | 359          | 343.9/274/242     | 28/40/60     |
| 268 | 双氯芬酸    | Diclofenac        | 15307-86-5  | C <sub>14</sub> H <sub>11</sub> Cl <sub>2</sub> NO <sub>2</sub>                             | 乙腈 | 15.556        | [M+H] <sup>+</sup> | 296          | 215.1/214.1/250   | 16/48/8      |
| 269 | 赛拉嗪     | Xylazine          | 7361-61-7   | C <sub>12</sub> H <sub>16</sub> N <sub>2</sub> S                                            | 甲醇 | 6.332         | [M+H] <sup>+</sup> | 221.1        | 90/72/164.1       | 40/40/40     |
| 270 | 舒林酸     | Sulindac          | 38194-50-2  | C <sub>20</sub> H <sub>17</sub> FO <sub>3</sub> S                                           | 乙腈 | 13.858        | [M+H] <sup>+</sup> | 357.1        | 340.1/248.1/233.1 | 20/40/40     |
| 271 | 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>                | 甲醇 | 6.567         | [M+H] <sup>+</sup> | 386.1        | 368.1/342.1/299.1 | 20/20/40     |
| 272 | 双氯西林    | Dicloxacillin     | 3116-76-5   | C <sub>19</sub> H <sub>17</sub> Cl <sub>2</sub> N <sub>3</sub> O <sub>5</sub> S             | 甲醇 | 14.799        | [M+H] <sup>+</sup> | 470          | 256/160/114       | 40/10/40     |
| 273 | 双咪苯脲    | Imidocarb         | 27885-92-3  | C <sub>19</sub> H <sub>20</sub> N <sub>6</sub> O                                            | 甲醇 | 3.731         | [M+H] <sup>+</sup> | 349.3        | 306.1/188/162     | 28/28/32     |
| 274 | 虱螨脲     | Lufenuron         | 103055-07-8 | C <sub>17</sub> H <sub>8</sub> Cl <sub>2</sub> F <sub>8</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub> | 甲醇 | 16.821        | [M-H] <sup>-</sup> | 509          | 326.1/339/488.9   | 16/8/4       |
| 275 | 洛美沙星    | Lomefloxacin      | 98079-51-7  | C <sub>17</sub> H <sub>19</sub> F <sub>2</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>                | 甲醇 | 5.525         | [M+H] <sup>+</sup> | 352.2        | 334/308.2/265     | 20/16/25     |
| 276 | 噻霉酮     | Benzisothiazolone | 2634-33-5   | C <sub>7</sub> H <sub>5</sub> NO <sub>5</sub>                                               | 甲醇 | 6.112         | [M+H] <sup>+</sup> | 152.1        | 105.2/109.1/133.9 | 28/28/24     |
| 277 | 沙美特罗    | Salmeterol        | 89365-50-4  | C <sub>25</sub> H <sub>37</sub> NO <sub>4</sub>                                             | 甲醇 | 13.349        | [M+H] <sup>+</sup> | 416          | 91.1/379.9/398.1  | 40/24/16     |
| 278 | 司帕沙星    | Sparfloxacin      | 110871-86-8 | C <sub>19</sub> H <sub>22</sub> F <sub>2</sub> N <sub>4</sub> O <sub>3</sub>                | 甲醇 | 6.795         | [M+H] <sup>+</sup> | 393.2        | 375.2/349/292.1   | 20/20/28     |
| 279 | 双羟萘酸噻嘧啶 | Pyrantel pamoate  | 22204-24-6  | C <sub>34</sub> H <sub>30</sub> N <sub>2</sub> O <sub>6</sub> S                             | 乙腈 | 5.317         | [M+H] <sup>+</sup> | 207.2        | 109/136/150.1     | 40/40/32     |
| 280 | 司坦唑醇    | Stanozolol        | 10418-03-8  | C <sub>21</sub> H <sub>32</sub> N <sub>2</sub> O                                            | 乙腈 | 13.690        | [M+H] <sup>+</sup> | 329.1        | 121.1/95.1/81.2   | 44/48/48     |
| 281 | 双烯雌酚    | Dienestrol        | 84-17-3     | C <sub>18</sub> H <sub>18</sub> O <sub>2</sub>                                              | 甲醇 | 16.171        | [M+H] <sup>+</sup> | 267.1        | 209.1/179.1/224.1 | 24/48/12     |

| 序号  | 中文名称 | 英文名称           | CAS 号      | 分子式                                                                          | 溶剂     | 保留时间<br>(min) | 加成<br>离子            | 母离子<br>(m/z) | 典型二级碎片离子<br>(m/z) | 碰撞能量<br>(eV) |
|-----|------|----------------|------------|------------------------------------------------------------------------------|--------|---------------|---------------------|--------------|-------------------|--------------|
| 282 | 水杨酸  | Salicylic acid | 69-72-7    | C <sub>7</sub> H <sub>6</sub> O <sub>3</sub>                                 | 乙腈     | 8.565         | [M+H] <sup>-</sup>  | 137.2        | 93.1/75.1/65.1    | 16/36/36     |
| 283 | 头孢氨苄 | Cephalexin     | 15686-71-2 | C <sub>16</sub> H <sub>17</sub> N <sub>3</sub> O <sub>4</sub> S              | 50% 乙腈 | 4.822         | [M+H] <sup>+</sup>  | 348.1        | 174/157.9/106     | 12/10/40     |
| 284 | 头孢唑肟 | Cefquinome     | 84957-30-2 | C <sub>23</sub> H <sub>24</sub> N <sub>6</sub> O <sub>5</sub> S <sub>2</sub> | 50% 乙腈 | 4.003         | [M+H] <sup>+</sup>  | 529.1        | 166.9/134.2/125   | 28/8/60      |
| 285 | 头孢克洛 | Cefaclor       | 53994-73-3 | C <sub>15</sub> H <sub>14</sub> ClN <sub>3</sub> O <sub>4</sub> S            | 50% 乙腈 | 3.986         | [M+H] <sup>+</sup>  | 368.1        | 174/118/106       | 20/35/35     |
| 286 | 头孢拉定 | Cefradine      | 38821-53-3 | C <sub>16</sub> H <sub>19</sub> N <sub>3</sub> O <sub>4</sub> S              | 50% 乙腈 | 4.846         | [M+H] <sup>+</sup>  | 350.1        | 175.9/157.9/90.8  | 17/8/30      |
| 287 | 头孢洛宁 | Cephalonium    | 5575-21-3  | C <sub>20</sub> H <sub>18</sub> N <sub>4</sub> O <sub>5</sub> S <sub>2</sub> | 50% 乙腈 | 4.911         | [M+H] <sup>+</sup>  | 459.1        | 337/152/123.1     | 8/20/8       |
| 288 | 头孢孟多 | Cefamandole    | 34444-01-4 | C <sub>18</sub> H <sub>18</sub> N <sub>6</sub> O <sub>5</sub> S <sub>2</sub> | 50% 乙腈 | 8.759         | [M+H] <sup>+</sup>  | 463.1        | 347/158/140       | 4/16/32      |
| 289 | 头孢匹林 | Cefapirin      | 21593-23-7 | C <sub>17</sub> H <sub>17</sub> N <sub>3</sub> O <sub>6</sub> S <sub>2</sub> | 50% 乙腈 | 3.987         | [M+H] <sup>+</sup>  | 424.1        | 364/291.9/151.9   | 8/12/28      |
| 290 | 头孢哌酮 | Cefoperazone   | 62893-19-0 | C <sub>25</sub> H <sub>27</sub> N <sub>9</sub> O <sub>8</sub> S <sub>2</sub> | 50% 乙腈 | 7.938         | [M+H] <sup>+</sup>  | 646.2        | 530.2/147.9/143   | 8/60/45      |
| 291 | 头孢曲松 | Ceftriaxone    | 73384-59-5 | C <sub>18</sub> H <sub>18</sub> N <sub>8</sub> O <sub>7</sub> S <sub>3</sub> | 50% 乙腈 | 4.675         | [M+H] <sup>+</sup>  | 555          | 395.9/166.9/277   | 6/26/20      |
| 292 | 头孢噻肟 | Cefotaxime     | 63527-52-6 | C <sub>16</sub> H <sub>17</sub> N <sub>5</sub> O <sub>7</sub> S <sub>2</sub> | 50% 乙腈 | 5.315         | [M+H] <sup>+</sup>  | 456.1        | 395.9/324/125     | 4/8/60       |
| 293 | 头孢噻吩 | Ceftiofur      | 80370-57-6 | C <sub>19</sub> H <sub>17</sub> N <sub>5</sub> O <sub>7</sub> S <sub>3</sub> | 50% 乙腈 | 9.181         | [M+H] <sup>+</sup>  | 524          | 241/210/126       | 16/20/40     |
| 294 | 头孢噻吩 | Cephalothin    | 153-61-7   | C <sub>16</sub> H <sub>16</sub> N <sub>2</sub> O <sub>6</sub> S <sub>2</sub> | 50% 乙腈 | 10.417        | [M+Na] <sup>+</sup> | 419          | 358.8/314.8/203.9 | 10/14/18     |
| 295 | 特布他林 | Terbutaline    | 23031-25-6 | C <sub>12</sub> H <sub>19</sub> NO <sub>3</sub>                              | 甲醇     | 3.519         | [M+H] <sup>+</sup>  | 226.1        | 152.1/107.1/77.1  | 12/28/56     |
| 296 | 妥布特罗 | Tulobuterol    | 41570-61-0 | C <sub>12</sub> H <sub>18</sub> ClNO                                         | 甲醇     | 6.395         | [M+H] <sup>+</sup>  | 228.1        | 154/119.1/172.1   | 12/32/4      |

| 序号  | 中文名称   | 英文名称                   | CAS 号       | 分子式                                                                            | 溶剂    | 保留时间<br>(min) | 加成<br>离子            | 母离子<br>(m/z) | 典型二级碎片离子<br>(m/z) | 碰撞能量<br>(eV) |
|-----|--------|------------------------|-------------|--------------------------------------------------------------------------------|-------|---------------|---------------------|--------------|-------------------|--------------|
| 297 | 头孢他美酯  | Cefetamet pivoxyl      | 65243-33-6  | C <sub>20</sub> H <sub>25</sub> N <sub>5</sub> O <sub>7</sub> S <sub>2</sub>   | 50%乙醇 | 13.926        | [M+H] <sup>+</sup>  | 512.1        | 241/125.9/57.1    | 16/52/48     |
| 298 | 头孢西丁   | Cefoxitin              | 35607-66-0  | C <sub>16</sub> H <sub>17</sub> N <sub>3</sub> O <sub>7</sub> S <sub>2</sub>   | 50%乙醇 | 7.833         | [M+Na] <sup>+</sup> | 450          | 388.9/344.9/265.8 | 10/14/14     |
| 299 | 头孢唑啉   | Cefazolin              | 25953-19-9  | C <sub>14</sub> H <sub>14</sub> N <sub>8</sub> O <sub>4</sub> S <sub>3</sub>   | 50%乙醇 | 6.304         | [M+H] <sup>+</sup>  | 455          | 323/156/124       | 8/11/27      |
| 300 | 酮基布洛芬  | Ketoprofen             | 22071-15-4  | C <sub>16</sub> H <sub>14</sub> O <sub>3</sub>                                 | 乙醇    | 14.465        | [M+H] <sup>+</sup>  | 255.1        | 209/105/77        | 12/28/56     |
| 301 | 泰乐菌素   | Tylosin                | 1401-69-0   | C <sub>46</sub> H <sub>77</sub> NO <sub>17</sub>                               | 甲醇    | 12.006        | [M+H] <sup>+</sup>  | 916.5        | 772.4/174.1/101   | 30/40/56     |
| 302 | 替诺昔康   | Tenoxicam              | 59804-37-4  | C <sub>13</sub> H <sub>11</sub> N <sub>3</sub> O <sub>4</sub> S <sub>2</sub>   | 甲醇    | 8.776         | [M+H] <sup>+</sup>  | 338          | 121/78/95         | 24/72/30     |
| 303 | 泰妙菌素   | Tiamulin               | 55297-95-5  | C <sub>28</sub> H <sub>47</sub> NO <sub>4</sub> S                              | 甲醇    | 12.985        | [M+H] <sup>+</sup>  | 494.3        | 192.1/119/74.1    | 20/40/40     |
| 304 | 替米考星   | Tilmicosin             | 108050-54-0 | C <sub>46</sub> H <sub>80</sub> N <sub>2</sub> O <sub>13</sub>                 | 甲醇    | 9.378         | [M+H] <sup>+</sup>  | 869.6        | 696.4/174.1/88.1  | 44/48/70     |
| 305 | 土霉素    | Oxytetracycline        | 79-57-2     | C <sub>22</sub> H <sub>24</sub> N <sub>2</sub> O <sub>9</sub>                  | 甲醇    | 5.141         | [M+H] <sup>+</sup>  | 461.2        | 444/426.1/201.1   | 16/14/48     |
| 306 | 托伐酸    | Tolfenamic acid        | 13710-19-5  | C <sub>14</sub> H <sub>12</sub> ClNO <sub>2</sub>                              | 乙醇    | 16.297        | [M+H] <sup>+</sup>  | 262.1        | 244/209.1/180.1   | 12/28/48     |
| 307 | 托麦汀    | Tolmetin               | 26171-23-3  | C <sub>15</sub> H <sub>15</sub> NO <sub>3</sub>                                | 乙醇    | 14.200        | [M+H] <sup>+</sup>  | 258.1        | 119/91/65         | 24/44/40     |
| 308 | 脱氢异雄酮  | Dehydroepiandrosterone | 53-43-0     | C <sub>19</sub> H <sub>29</sub> O <sub>2</sub>                                 | 乙醇    | 13.885        | [M+H] <sup>+</sup>  | 290.3        | 98.1/109/110.1    | 30/26/26     |
| 309 | 妥曲珠利   | Toltrazuril            | 69004-03-1  | C <sub>18</sub> H <sub>14</sub> F <sub>3</sub> N <sub>3</sub> O <sub>4</sub> S | 甲醇    | 15.916        | [M-H] <sup>-</sup>  | 424.1        | 424.1/42.2/385.9  | 0/16/14      |
| 310 | 妥曲珠利亚砷 | Toltrazuril sulfoxide  | 69004-15-5  | C <sub>18</sub> H <sub>14</sub> F <sub>3</sub> N <sub>3</sub> O <sub>5</sub> S | 甲醇    | 14.531        | [M-H] <sup>-</sup>  | 440          | 371.2/42.2/332.9  | 16/24/14     |
| 311 | 泰万菌素   | Tylvalosin             | 63409-12-1  | C <sub>53</sub> H <sub>87</sub> NO <sub>19</sub>                               | 甲醇    | 14.342        | [M+H] <sup>+</sup>  | 1042.6       | 173.9/109.1/229.1 | 45/52/40     |

| 序号  | 中文名称                | 英文名称                         | CAS 号      | 分子式                                                              | 溶剂 | 保留时间<br>(min) | 加成<br>离子             | 母离子<br>(m/z) | 典型二级碎片离子<br>(m/z) | 碰撞能量<br>(eV) |
|-----|---------------------|------------------------------|------------|------------------------------------------------------------------|----|---------------|----------------------|--------------|-------------------|--------------|
| 312 | 替硝唑                 | Timidazole                   | 19387-91-8 | C <sub>8</sub> H <sub>13</sub> N <sub>3</sub> O <sub>4</sub> S   | 甲醇 | 5.567         | [M+H] <sup>+</sup>   | 248.1        | 121/82.1/128      | 20/40/20     |
| 313 | 脱氧卡巴氧               | Desoxycarbadox               | 55456-55-8 | C <sub>11</sub> H <sub>10</sub> N <sub>4</sub> O <sub>2</sub>    | 甲醇 | 8.713         | [M+H] <sup>+</sup>   | 230.9        | 198.8/142.9/101.9 | 12/24/40     |
| 314 | 替扎尼定                | Tizanidine                   | 51322-75-9 | C <sub>9</sub> H <sub>8</sub> ClN <sub>5</sub> S                 | 甲醇 | 4.014         | [M+H] <sup>+</sup>   | 254          | 209.9/69.1/59.2   | 32/24/32     |
| 315 | 维吉霉素 M <sub>1</sub> | Virginiamycin M <sub>1</sub> | 21411-53-0 | C <sub>28</sub> H <sub>35</sub> N <sub>3</sub> O <sub>7</sub>    | 甲醇 | 14.105        | [M+H] <sup>+</sup>   | 526.3        | 508.1/355/337     | 12/16/20     |
| 316 | 五氯酚                 | Pentachlorophenol            | 87-86-5    | C <sub>6</sub> HCl <sub>5</sub> O                                | 乙腈 | 16.465        | [M-H] <sup>-</sup>   | 262.9        | 262.9             | 5            |
|     |                     |                              |            |                                                                  |    |               | [M-H+2] <sup>-</sup> | 264.9        | 264.9             | 5            |
|     |                     |                              |            |                                                                  |    |               | [M-H+4] <sup>-</sup> | 266.9        | 266.9             | 5            |
| 317 | 溴苯那敏                | Brompheniramine              | 86-22-6    | C <sub>16</sub> H <sub>19</sub> BrN <sub>2</sub>                 | 甲醇 | 8.136         | [M+H] <sup>+</sup>   | 319.1        | 167.1/194.1/274   | 51/51/24     |
| 318 | 溴布特罗                | Brombuterol                  | 41937-02-4 | C <sub>12</sub> H <sub>18</sub> Br <sub>2</sub> N <sub>2</sub> O | 甲醇 | 7.412         | [M+H] <sup>+</sup>   | 366.7        | 292.7/348.8/211.9 | 16/12/32     |
| 319 | 西布特罗                | Cimbuterol                   | 54239-39-3 | C <sub>13</sub> H <sub>19</sub> N <sub>3</sub> O                 | 甲醇 | 4.038         | [M+H] <sup>+</sup>   | 234.1        | 143.1/160.1/216   | 28/12/8      |
| 320 | 烯丙孕素                | Altrenogest                  | 850-52-2   | C <sub>21</sub> H <sub>26</sub> O <sub>2</sub>                   | 甲醇 | 15.404        | [M+H] <sup>+</sup>   | 311.2        | 227.1/252/269.2   | 24/20/12     |
| 321 | 硝碘酚腈                | Nitroxinil                   | 1689-89-0  | C <sub>7</sub> H <sub>3</sub> IN <sub>2</sub> O <sub>3</sub>     | 乙腈 | 13.904        | [M-H] <sup>-</sup>   | 288.9        | 162/127/259       | 20/28/16     |
| 322 | 溴代克伦特罗              | Bromclenbuterol              | 37153-52-9 | C <sub>12</sub> H <sub>18</sub> BrClN <sub>2</sub> O             | 甲醇 | 6.913         | [M+H] <sup>+</sup>   | 322.6        | 304.7/248.6/168   | 12/16/36     |
| 323 | 硝呋烯腙                | Nitrovin                     | 804-36-4   | C <sub>14</sub> H <sub>12</sub> N <sub>6</sub> O <sub>6</sub>    | 甲醇 | 11.090        | [M+H] <sup>+</sup>   | 361.1        | 221.9/58.1/199    | 16/32/40     |
| 324 | 溴化新斯的明              | Neostigmine bromide          | 114-80-7   | C <sub>12</sub> H <sub>19</sub> BrN <sub>2</sub> O <sub>2</sub>  | 乙腈 | 3.974         | [M+H] <sup>+</sup>   | 223.2        | 72.2/151.1/207.9  | 36/28/24     |
| 325 | 辛硫磷                 | Phoxim                       | 14816-18-3 | C <sub>12</sub> H <sub>15</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub> PS | 乙腈 | 16.563        | [M+H] <sup>+</sup>   | 299          | 153/129.1/77.1    | 40/4/24      |

| 序号  | 中文名称    | 英文名称                      | CAS 号       | 分子式                                                             | 溶剂 | 保留时间<br>(min) | 加成<br>离子                          | 母离子<br>(m/z) | 典型二级碎片离子<br>(m/z) | 碰撞能量<br>(eV) |
|-----|---------|---------------------------|-------------|-----------------------------------------------------------------|----|---------------|-----------------------------------|--------------|-------------------|--------------|
| 326 | 新螺旋霉素 I | Neospiramycin I           | 70253-62-2  | C <sub>36</sub> H <sub>62</sub> N <sub>2</sub> O <sub>11</sub>  | 甲醇 | 6.346         | [M+H] <sup>+</sup>                | 699.4        | 540.4/522/482.3   | 18/18/34     |
| 327 | 溴莫尼定    | Brimonidine               | 59803-98-4  | C <sub>11</sub> H <sub>10</sub> BrN <sub>5</sub>                | 甲醇 | 3.682         | [M+H] <sup>+</sup>                | 292          | 248.7/211.8/170.2 | 40/36/36     |
| 328 | 西马特罗    | Cimaterol                 | 54239-37-1  | C <sub>12</sub> H <sub>17</sub> N <sub>3</sub> O                | 甲醇 | 3.651         | [M+H] <sup>+</sup>                | 220.1        | 160.1/143.1/116.1 | 12/20/36     |
| 329 | 西诺沙星    | Cinoxacin                 | 28657-80-9  | C <sub>12</sub> H <sub>10</sub> N <sub>2</sub> O <sub>5</sub>   | 甲醇 | 8.305         | [M+H] <sup>+</sup>                | 263          | 244.9/216.8/188.8 | 16/24/32     |
| 330 | 溴氟菊酯    | Deltamethrin              | 52918-63-5  | C <sub>22</sub> H <sub>19</sub> Br <sub>2</sub> NO <sub>3</sub> | 乙腈 | 18.473        | [M+NH <sub>4</sub> ] <sup>+</sup> | 523          | 463.2/381.2/365.1 | 28/28/24     |
| 331 | 异丙嗪     | Promethazine              | 60-87-7     | C <sub>17</sub> H <sub>20</sub> N <sub>2</sub> S                | 甲醇 | 11.301        | [M+H] <sup>+</sup>                | 285.1        | 198/86.1/71.1     | 40/40/40     |
| 332 | 异丙硝唑    | Ipronidazole              | 14885-29-1  | C <sub>7</sub> H <sub>11</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub>    | 甲醇 | 8.292         | [M+H] <sup>+</sup>                | 170.1        | 124/109/81.1      | 16/24/36     |
| 333 | 蝇毒磷     | Coumaphos                 | 56-72-4     | C <sub>14</sub> H <sub>16</sub> ClO <sub>3</sub> PS             | 乙腈 | 16.464        | [M+H] <sup>+</sup>                | 363          | 334.9/226.9/307   | 16/32/20     |
| 334 | 吡啶美辛    | Indometacin               | 53-86-1     | C <sub>19</sub> H <sub>16</sub> ClNO <sub>4</sub>               | 乙腈 | 15.561        | [M+H] <sup>+</sup>                | 358.1        | 138.9/110.9/75.1  | 24/68/80     |
| 335 | 氧氟沙星    | Ofloxacin                 | 82419-36-1  | C <sub>18</sub> H <sub>20</sub> FN <sub>3</sub> O <sub>4</sub>  | 甲醇 | 5.116         | [M+H] <sup>+</sup>                | 362.2        | 221.1/261.1/318.2 | 40/40/20     |
| 336 | 盐霉素     | Salinomycin               | 53003-10-4  | C <sub>42</sub> H <sub>70</sub> O <sub>11</sub>                 | 甲醇 | 17.824        | [M+Na] <sup>+</sup>               | 773.6        | 531.5/431.3/775.3 | 50/50/40     |
| 337 | 依诺沙星    | Enoxacin                  | 74011-58-8  | C <sub>15</sub> H <sub>17</sub> FN <sub>4</sub> O <sub>3</sub>  | 甲醇 | 4.864         | [M+H] <sup>+</sup>                | 321.1        | 303.3/277.1/234   | 16/16/24     |
| 338 | 依普菌素    | Eprinomectin              | 123997-26-2 | C <sub>50</sub> H <sub>75</sub> NO <sub>14</sub>                | 甲醇 | 17.545        | [M+Na] <sup>+</sup>               | 936.5        | 490.2/352.1/223.9 | 56/60/66     |
| 339 | 盐酸氨丙啉   | Amprolium hydrochloride   | 137-88-2    | C <sub>14</sub> H <sub>20</sub> N <sub>4</sub> Cl <sub>2</sub>  | 甲醇 | 1.421         | [M+H] <sup>+</sup>                | 243.2        | 81.2/94.1/150.2   | 40/12/8      |
| 340 | 盐酸苯氧丙胺  | Isoxsuprine hydrochloride | 579-56-6    | C <sub>18</sub> H <sub>24</sub> ClNO <sub>3</sub>               | 甲醇 | 7.701         | [M+H] <sup>+</sup>                | 302.1        | 283.6/163.9/106.9 | 12/16/36     |

| 序号  | 中文名称    | 英文名称                         | CAS 号       | 分子式                                                               | 溶剂 | 保留时间<br>(min) | 加成<br>离子            | 母离子<br>(m/z) | 典型二级碎片离子<br>(m/z) | 碰撞能量<br>(eV) |
|-----|---------|------------------------------|-------------|-------------------------------------------------------------------|----|---------------|---------------------|--------------|-------------------|--------------|
| 341 | 盐酸金刚乙胺  | Rimantadine hydrochloride    | 1501-84-4   | C <sub>12</sub> H <sub>22</sub> ClN                               | 甲醇 | 8.145         | [M+H] <sup>+</sup>  | 180.2        | 163.1/81.1/79.2   | 16/28/40     |
| 342 | 盐酸克伦潘特  | Clenpenterol hydrochloride   | 37158-47-7  | C <sub>13</sub> H <sub>21</sub> Cl <sub>3</sub> N <sub>2</sub> O  | 甲醇 | 7.772         | [M+H] <sup>+</sup>  | 291.1        | 132/202.7/272.8   | 32/16/8      |
| 343 | 隐色孔雀石绿  | Leucomalachite green         | 129-73-7    | C <sub>23</sub> H <sub>26</sub> N <sub>2</sub>                    | 甲醇 | 11.042        | [M+H] <sup>+</sup>  | 331.2        | 316.2/239.2/223.1 | 20/28/60     |
| 344 | 隐色龙胆紫   | Leucocrystal violet          | 603-48-5    | C <sub>25</sub> H <sub>31</sub> N <sub>3</sub>                    | 甲醇 | 5.685         | [M+H] <sup>+</sup>  | 374          | 358.1/252.9/237.9 | 28/32/32     |
| 345 | 盐酸沃尼妙林  | Valnemulin hydrochloride     | 133868-46-9 | C <sub>31</sub> H <sub>53</sub> ClN <sub>2</sub> O <sub>5</sub> S | 甲醇 | 13.686        | [M+H] <sup>+</sup>  | 565.1        | 262.9/164/285.2   | 16/36/16     |
| 346 | 盐酸赛庚啶   | Cyproheptadine hydrochloride | 969-33-5    | C <sub>21</sub> H <sub>22</sub> NCl                               | 甲醇 | 12.502        | [M+H] <sup>+</sup>  | 288          | 215/191.1/96      | 40/30/32     |
| 347 | 盐酸赛拉唑   | Xylazole hydrochloride       | 123941-49-1 | C <sub>11</sub> H <sub>13</sub> ClN <sub>2</sub> S                | 甲醇 | 7.181         | [M+H] <sup>+</sup>  | 205.2        | 79.1/99/105.2     | 40/28/24     |
| 348 | 异噻唑啉酮   | Isothiazolinones             | 26172-55-4  | C <sub>4</sub> H <sub>4</sub> ClNOS                               | 甲醇 | 5.397         | [M+H] <sup>+</sup>  | 150.1        | 58.1/86.9/135     | 40/36/28     |
| 349 | 茚酮苯丙酸   | Indoprofen                   | 31842-01-0  | C <sub>17</sub> H <sub>15</sub> NO <sub>3</sub>                   | 乙腈 | 13.635        | [M+H] <sup>+</sup>  | 282.1        | 236.1/77.1/218    | 20/76/40     |
| 350 | 伊维菌素    | Ivermectin                   | 70288-86-7  | C <sub>48</sub> H <sub>74</sub> O <sub>14</sub>                   | 乙腈 | 19.421        | [M+Na] <sup>+</sup> | 897.5        | 753.4/183/329.3   | 52/56/60     |
| 351 | N-乙酰氨基砒 | N-Acetyldapsone              | 565-20-8    | C <sub>14</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub> S   | 甲醇 | 8.122         | [M+H] <sup>+</sup>  | 291.1        | 108/155.8/197.9   | 36/16/12     |
| 352 | 乙酰丙嗪    | Acepromazine                 | 61-00-7     | C <sub>19</sub> H <sub>22</sub> N <sub>2</sub> OS                 | 甲醇 | 11.384        | [M+H] <sup>+</sup>  | 327.2        | 222.1/86.1/58.1   | 40/20/40     |
| 353 | 乙酰甲嗪    | Mequindox                    | 13297-17-1  | C <sub>11</sub> H <sub>10</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>     | 乙腈 | 6.056         | [M+H] <sup>+</sup>  | 218.9        | 185.1/143/102     | 20/20/40     |
| 354 | 乙氧酰胺苯甲酯 | Ethopabate                   | 59-06-3     | C <sub>12</sub> H <sub>15</sub> NO <sub>4</sub>                   | 甲醇 | 9.837         | [M+H] <sup>+</sup>  | 238.1        | 205.9/135.9/164.1 | 4/36/20      |
| 355 | 竹桃霉素    | Oleandomycin                 | 3922-90-5   | C <sub>33</sub> H <sub>61</sub> NO <sub>12</sub>                  | 甲醇 | 9.899         | [M+H] <sup>+</sup>  | 688.3        | 544.3/158.2/116   | 15/25/34     |

| 序号  | 中文名称               | 英文名称                                     | CAS 号      | 分子式                                                           | 溶剂 | 保留时间<br>(min) | 加成<br>离子           | 母离子<br>(m/z) | 典型二级碎片离子<br>(m/z) | 碰撞能量<br>(eV) |
|-----|--------------------|------------------------------------------|------------|---------------------------------------------------------------|----|---------------|--------------------|--------------|-------------------|--------------|
| 356 | 左旋咪唑               | Levamisole                               | 14769-73-4 | C <sub>11</sub> H <sub>12</sub> N <sub>2</sub> S              | 乙腈 | 4.487         | [M+H] <sup>+</sup> | 205.1        | 178.1/123/91.1    | 20/32/44     |
| 357 | 1-甲基-5-硝基-2-羧甲基咪唑  | 1-Methyl-5-nitro-1H-imidazole-2-methanol | 936-05-0   | C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>   | 甲醇 | 3.938         | [M+H] <sup>+</sup> | 158.1        | 140/55.2/42.2     | 8/20/40      |
| 358 | 2, 4-二甲基苯胺         | 2,4-Dimethylaniline                      | 95-68-1    | C <sub>8</sub> H <sub>11</sub> N                              | 甲醇 | 4.372         | [M+H] <sup>+</sup> | 122          | 106.9/79/77       | 16/24/32     |
| 359 | 2-氨基氟苯咪唑           | 2-Aminoflubendazole                      | 82050-13-3 | C <sub>14</sub> H <sub>10</sub> FN <sub>3</sub> O             | 甲醇 | 7.724         | [M+H] <sup>+</sup> | 256.1        | 123/95/133.1      | 40/40/40     |
| 360 | 2-喹啉羧酸             | 2-Quinoxalinecarboxylic acid             | 879-65-2   | C <sub>9</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>   | 甲醇 | 2.878         | [M+H] <sup>+</sup> | 175          | 129/101.9/131     | 18/18/16     |
| 361 | 3-氨基-2-甲基-5-硝基苯甲酰胺 | 3-Amino-2-methyl-5-nitrobenzamide        | 3572-44-9  | C <sub>8</sub> H <sub>9</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>   | 乙腈 | 4.349         | [M+H] <sup>+</sup> | 196.1        | 153/107/106       | 12/20/24     |
| 362 | 3-甲基喹噁啉-2-羧酸       | 3-Methyl-quinoxaline-2-carboxylic acid   | 74003-63-7 | C <sub>10</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>  | 甲醇 | 6.669         | [M+H] <sup>+</sup> | 189.1        | 145.1/143/77      | 10/15/30     |
| 363 | 3-羧基克百威            | 3-Hydroxycarbofuran                      | 16655-82-6 | C <sub>12</sub> H <sub>15</sub> NO <sub>4</sub>               | 乙腈 | 7.576         | [M+H] <sup>+</sup> | 238.1        | 181.1/107.1/163.1 | 10/28/10     |
| 364 | 4, 6-二硝基邻甲酚        | 4,6-Dinitro-o-cresol                     | 534-52-1   | C <sub>7</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O <sub>5</sub>   | 乙腈 | 14.498        | [M-H] <sup>-</sup> | 197          | 179.9/137.1/121.9 | 20/20/28     |
| 365 | 4-氨基安替比林           | 4-Aminoantipyrine                        | 83-07-8    | C <sub>11</sub> H <sub>13</sub> N <sub>3</sub> O              | 甲醇 | 3.827         | [M+H] <sup>+</sup> | 204.1        | 85/83.1/56.1      | 16/16/28     |
| 366 | 4-甲基氨基安替比林         | 4-Methylaminoantipyrine                  | 519-98-2   | C <sub>12</sub> H <sub>15</sub> N <sub>3</sub> O              | 甲醇 | 3.828         | [M+H] <sup>+</sup> | 218.1        | 190.8/146.9/56.1  | 28/40/28     |
| 367 | 4-甲酰胺基安替比林         | 4-Formylaminoantipyrine                  | 1672-58-8  | C <sub>12</sub> H <sub>13</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub> | 乙腈 | 4.910         | [M+H] <sup>+</sup> | 232.1        | 104/83/213.9      | 20/20/12     |
| 368 | 4-硝基苯酚             | 4-Nitrophenol                            | 100-02-7   | C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> NO <sub>3</sub>                 | 乙腈 | 9.181         | [M-H] <sup>-</sup> | 138          | 107.9/92/46.2     | 20/24/56     |
| 369 | 4-乙酰氨基安替比林         | 4-Acetamidoantipyrine                    | 83-15-8    | C <sub>13</sub> H <sub>15</sub> N <sub>3</sub> O <sub>2</sub> | 甲醇 | 4.896         | [M+H] <sup>+</sup> | 246.1        | 227.9/104/83      | 12/20/40     |

| 序号  | 中文名称         | 英文名称                       | CAS 号      | 分子式                                                           | 溶剂 | 保留时间<br>(min) | 加成<br>离子           | 母离子<br>(m/z) | 典型二级碎片离子<br>(m/z) | 碰撞能量<br>(eV) |
|-----|--------------|----------------------------|------------|---------------------------------------------------------------|----|---------------|--------------------|--------------|-------------------|--------------|
| 370 | 5-羟基噻苯咪唑     | 5-Hydroxythiabenzodazole   | 948-71-0   | C <sub>10</sub> H <sub>7</sub> N <sub>3</sub> OS              | 甲醇 | 3.972         | [M+H] <sup>+</sup> | 218          | 191/147.1/81      | 32/40/45     |
| 371 | 5-羟基甲苯咪唑     | 5-Hydroxymethylbenzodazole | 60254-95-7 | C <sub>16</sub> H <sub>15</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub> | 甲醇 | 6.842         | [M+H] <sup>+</sup> | 298.1        | 266.1/79.1/77.1   | 25/44/60     |
| 372 | 7-氯-8-羟基喹啉   | 7-Chloro-8-quinolinol      | 876-86-8   | C <sub>9</sub> H <sub>6</sub> ClNO                            | 甲醇 | 9.264         | [M+H] <sup>+</sup> | 180          | 117.1/127/145.1   | 36/40/28     |
| 373 | 19-去甲-4-雄烯二酮 | Norandrostenedione         | 734-32-7   | C <sub>18</sub> H <sub>24</sub> O <sub>2</sub>                | 甲醇 | 14.507        | [M+H] <sup>+</sup> | 273          | 109.1/197.1/255   | 28/16/20     |

注：不同厂家的仪器，保留时间、典型二级碎片离子等技术参数可能存在差异。

## 附录 B

### 筛查确认方法参考条件示例

#### B.1 试剂或材料

除非另有规定，仅使用分析纯试剂。

B.1.1 水：GB/T 6682，一级。

B.1.2 乙腈：色谱纯。

B.1.3 甲酸：色谱纯。

B.1.4 甲酸铵：色谱纯。

B.1.5 乙酸铵：色谱纯。

B.1.6 5%甲酸乙腈溶液：量取 50 mL 甲酸，用乙腈稀释至 1000 mL，混匀。

B.1.7 流动相 A：称取 0.126 g 甲酸铵，加适量水溶解，加入 2 mL 甲酸，用水稀释并定容至 1000 mL，混匀。

B.1.8 流动相 B：移取 2 mL 甲酸，用乙腈稀释至 1000 mL，混匀。

B.1.9 乙酸铵溶液 I (200 mmol/L)：称取 3.1 g 乙酸铵，用水溶解并定容至 200 mL，混匀。

B.1.10 乙酸铵溶液 (5 mmol/L)：移取 12.5 mL 乙酸铵溶液 I (B.1.9)，用水稀释并定容至 500 mL，混匀。

B.1.11 0.1%甲酸乙腈溶液：量取 25 mL 乙腈，加入 0.2 mL 甲酸，用水稀释至 100 mL，混匀。

B.1.12 标准品：纯度均不低于 95%，CAS 号及相关信息见附录 A。或购买有证标准物质。

B.1.13 标准储备溶液（100  $\mu\text{g/mL}$ ）：分别称取适量标准品（精确至 0.01 mg），采用附录 A 中溶剂配制。-18  $^{\circ}\text{C}$  以下避光保存。

B.1.14 混合标准中间溶液（10  $\mu\text{g/mL}$ ）：准确移取适量标准储备溶液（B.1.13），用甲醇稀释并定容，混匀。-18  $^{\circ}\text{C}$  以下避光保存。

B.1.15 混合标准工作溶液（50  $\text{ng/mL}$ ）：准确移取混合标准中间溶液（B.1.14）50  $\mu\text{L}$ ，用 0.1%甲酸乙腈溶液（B.1.11）稀释并定容至 10 mL，混匀。临用现配。

B.1.16 基质匹配标准溶液：空白试样按 B.3 操作，制得空白基质溶液。将目标物的标准溶液添加到空白基质溶液中制成基质匹配标准溶液，其仪器响应值应与样品中目标物响应值接近。临用现配。

B.1.17 QuEChERS 净化吸附剂：具有除水和除脂功能。

B.1.18 滤膜：0.22  $\mu\text{m}$ ，有机系。

## B.2 仪器设备

B.2.1 液相色谱-串联质谱仪：配电喷雾离子源。

B.2.2 分析天平：精度 0.01 g 和 0.01 mg。

B.2.3 离心机：转速不低于 8 000 r/min。

B.2.4 超声波清洗器。

B.2.5 涡旋混合器。

B.2.6 往复式振荡器。

### B.3 试验步骤

#### B.3.1 提取

称取试样2 g (精确至0.01 g) 于50 mL离心管中, 加入10 mL 5%甲酸乙腈溶液 (B.1.6), 涡旋混匀, 振荡20 min, 8 000 r/min 离心5 min, 转移上清液5 mL至15 mL离心管, 加入5 mL乙酸铵溶液 (B.1.10), 涡旋混匀, 作为备用液。

#### B.3.2 净化

备用液 (B.3.1) 中加入QuEChERS净化吸附剂 (B.1.17) 2 g, 振荡2 min, 8 000 r/min离心5 min, 移取上清液0.5 mL, 加水0.5 mL, 涡旋混匀, 过0.22  $\mu\text{m}$ 滤膜 (B.1.18), 待测定。

#### B.3.3 测定

##### B.3.3.1 液相色谱参考条件

液相色谱参考条件如下:

a) 色谱柱:  $\text{C}_{18}$ 柱, 柱长150 mm, 内径3.0 mm, 粒径1.8  $\mu\text{m}$ , 或性能相当者;

b) 柱温: 40  $^{\circ}\text{C}$ ;

c) 流速: 0.5 mL/min;

d) 进样量: 5  $\mu\text{L}$ ;

梯度洗脱程序见下表。

### 梯度洗脱程序

| 时间<br>min | 流动相 A<br>% | 流动相 B<br>% |
|-----------|------------|------------|
| 0         | 98         | 2          |
| 0.5       | 98         | 2          |
| 1.8       | 85         | 15         |
| 3.5       | 80         | 20         |
| 6         | 75         | 25         |
| 7         | 70         | 30         |
| 11        | 65         | 35         |
| 16        | 0          | 100        |
| 26        | 0          | 100        |
| 26.01     | 98         | 2          |
| 30        | 98         | 2          |

#### B.3.3.2 质谱参考条件

质谱参考条件如下：

- a) 电离模式：电喷雾电离（ESI）；
- b) 扫描方式：正离子、负离子切换或分别扫描；
- c) 检测方式：多反应监测或动态多反应监测；
- d) 毛细管电压：正离子模式3.5 KV，负离子模式4.0 KV。

目标物监测离子和碰撞能量见附录A。