

司 法 鉴 定 技 术 规 范

SF/Z JD0107005——2016

血液、尿液中 238 种毒(药)物的检测 液相色谱-串联质谱法

2016-9-22 发布

2016-9-22 实施

中华人民共和国司法部司法鉴定管理局 发布

目 次

前言	I
1 范围	1
2 规范性引用文件	1
3 术语和定义	1
4 原理	1
5 试剂和仪器	1
6 测定步骤	2
7 结果评价	5
8 方法检出限	5
附录 A（资料性附录） 238 种毒（药）物的 LC-MS/MS 分析资料	6

前 言

本技术规范按照 GB/T 1.1-2009 给出的规则起草。

本技术规范由司法部司法鉴定科学技术研究所提出。

本技术规范由司法部司法鉴定管理局归口。

本技术规范起草单位：司法部司法鉴定科学技术研究所。

本技术规范主要起草人：向平、卓先义、沈敏、刘伟、沈保华、卜俊、马栋、严慧。

本技术规范所代替规范的历次版本发布情况为：SF/Z JD0107005—2010。

血液、尿液中 238 种毒(药)物的检测

液相色谱-串联质谱法

1 范围

本技术规范规定了血液或尿液中阿片类、苯丙胺类、大麻酚类滥用药物，有机磷及氨基甲酸酯类杀虫剂、苯二氮卓类、抗抑郁类、抗癫痫类、平喘类、解热镇痛类药物以及其它常见治疗药物共 238 种毒(药)物(见附录 A)的液相色谱-串联质谱(LC-MS/MS)检验方法。

本技术规范适用于血液或尿液中阿片类、苯丙胺类、大麻酚类滥用药物，有机磷类及氨基甲酸酯类杀虫剂、苯二氮卓类、抗抑郁类、抗癫痫类、平喘类、解热镇痛类药物以及其它常见治疗药物共238种毒(药)物的定性定量分析。也适用于体外样品、可疑物证中238种毒(药)物的定性分析。

2 规范性引用文件

下列文件中对本技术规范的应用是必不可少的。凡是注日期的引用文件，仅所注日期的版本适用于本技术规范。凡是不注日期的引用文件，其最新版本(包括所有的修改单)适用于本技术规范。

GA/T122 毒物分析名词术语

GB/T 6682 分析实验室用水规格和试验方法

3 术语和定义

GA/T122 中界定的术语和定义适用于本技术规范。

4 原理

本技术规范利用阿片类、苯丙胺类、大麻酚类滥用药物，有机磷及氨基甲酸酯类杀虫剂、苯二氮卓类、抗抑郁类、抗癫痫类、平喘类、解热镇痛类以及其他常见治疗药物共 238 种毒(药)物可在碱性条件下被有机溶剂从生物检材中提取出来的特点，利用 LC-MS/MS 多反应监测进行检测。经与平行操作的毒(药)物对照品比较，以保留时间、两对母离子/子离子对进行定性分析；以定量离子对峰面积为依据，内标法或外标法定量。

5 试剂和仪器

5.1 试剂

5.1.1 乙腈。

5.1.2 乙醚：分析纯。

5.1.3 乙酸胺。

5.1.4 甲酸(50%)：优级纯。

- 5.1.5 超纯水：由纯水系统制得，电阻率 $18.2\text{M}\Omega \cdot \text{cm}$ 。
- 5.1.6 pH9.2 硼砂缓冲液。
- 5.1.7 20mmol/L 乙酸胺和 0.1%甲酸缓冲液：分别称取 1.54g 乙酸胺和 1.84g 甲酸，置于 1000mL 容量瓶中，加水至刻度，摇匀备用，pH 值约为 4。
- 5.1.8 238 种毒(药)物对照品标准溶液：分别精密称取 238 种毒(药)物对照品各适量，用甲醇配成 1.0mg/mL 对照品标准储备溶液，置冰箱中冷冻保存，保存时间为 12 个月。试验中所用其它浓度的对照品标准溶液均从上述储备液用甲醇稀释而得。
- 5.1.9 内标物地西洋-d5 和 SKF_{525A} 对照品标准溶液：精密称取地西洋-d5 和 SKF_{525A} 适量，用甲醇配成 1.0mg/mL 地西洋-d5 和 SKF_{525A} 对照品混合标准储备溶液，置冰箱中冷冻保存，保存时间为 12 个月。将储备液用甲醇稀释得 1 $\mu\text{g}/\text{mL}$ 地西洋-d5 和 SKF_{525A} 内标工作液，置冰箱中冷藏保存，保存时间为 6 个月。

注：本技术规范所用试剂除另有说明外均为色谱纯，试验用水为一级水（见 GB/T 6682 规定）。

5.2 仪器

- 5.2.1 液相色谱-串联质谱联用仪（LC-MS/MS）：配有电喷雾离子源。
- 5.2.2 旋涡混合器。
- 5.2.3 离心机。
- 5.2.4 恒温水浴锅。
- 5.2.5 精密移液器。
- 5.2.6 具塞离心试管。
- 5.2.7 分析天平：感量 0.1mg。

6 测定步骤

6.1 样品预处理

6.1.1 待测样品

取血液或尿液 1mL，加入 10 μL 地西洋-d5 和 SKF_{525A} 内标溶液(1 $\mu\text{g}/\text{mL}$)，加入 2mL pH9.2 硼酸缓冲液后用 3.5mL 乙醚提取，混旋，离心。上清液于 60 $^{\circ}\text{C}$ 水浴中挥干，残余物中加入 200 μL 流动相复溶，取 10 μL 进 LC-MS/MS 分析。

6.1.2 空白样品

取空白血液或尿液 1 mL，按“6.1.1”项下进行操作和分析。

6.1.3 添加样品

取空白血液或尿液 1 mL，添加待测样品中出现的可疑毒（药）物对照品，按“6.1.1”项下进行操作和分析。

6.2 测定

6.2.1 LC-MS/MS 参考条件

以下为参考条件，可根据不同品牌仪器和不同样品等实际情况进行调整：

- 液相柱：Allure PFP Propyl 100mm \times 2.1mm \times 5 μm 或相当者，接 C18 保护柱；
- 流动相：乙腈:20mmol/L 乙酸胺和 0.1%甲酸缓冲液（70:30）；
- 流速：200 $\mu\text{L}/\text{min}$ ；

- d) 进样量: 10 μ L;
- e) 离子源: 电喷雾电离-正离子模式 (ESI+);
- f) 检测方式: 多反应监测 (MRM);
- g) 碰撞气 (CAD)、气帘气 (CUR)、雾化气 (GS1)、辅助加热气均为高纯氮气, 使用前调节各气流流量以使质谱灵敏度达到检测要求;
- h) 去簇电压 (DP)、碰撞能量 (CE) 等电压值应优化至最优灵敏度, 参见附录 A。

6.2.2 定性分析

6.2.2.1 筛选

筛选分析选取毒(药)物的第一对母离子/子离子。如果待测样品的 MRM 色谱图中出现峰高超过 5000 的色谱峰, 则记录该峰的保留时间和对应的母离子/子离子对, 由附录 A 筛选出可疑的毒(药)物, 并进行空白添加实验, 进行确证分析。

6.2.2.2 确证

重新设定 LC-MS/MS 条件, 按照附录 A 增加可疑毒(药)物的第二对母离子/子离子。如果待测样品出现可疑毒(药)物两对母离子/子离子对的特征色谱峰, 保留时间与添加样品中相应对照品的色谱峰保留时间比较, 相对误差在 $\pm 2.5\%$ 内, 且所选择的离子对相对丰度比与添加对照品的离子对相对丰度比之相对误差不超过表 1 规定的范围, 则可认为待测样品中检出此种毒(药)物成分。

表 1 相对离子对丰度比的最大允许相对误差 (%)

相对离子对丰度比	≥ 50	20~50	10~20	≤ 10
允许的相对误差	± 20	± 25	± 30	± 50

6.2.3 定量分析

6.2.3.1 定量方法

根据待测样品中毒(药)物的浓度情况, 用空白血液或尿液添加相应毒(药)物对照品, 采用内标法或外标法, 以定量离子对峰面积进行定量测定。定量方法可采用工作曲线法或单点校正法。

采用工作曲线法时待测样品中毒(药)物的浓度应在工作曲线的线性范围内。配制系列浓度的毒(药)物血液或尿液质控样品, 按“6.1.1”进行样品处理, 按“6.2.1”条件进行测定, 以毒(药)物和内标定量离子对峰面积比[或毒(药)物定量离子对峰面积]为纵坐标, 血液或尿液中毒(药)物浓度为横坐标绘制工作曲线, 用工作曲线对待测样品中毒(药)物浓度进行定量。

采用单点校正法时待测样品中毒(药)物的浓度应在添加样品中毒(药)物浓度的 $\pm 50\%$ 内。

6.2.3.2 结果计算

6.2.3.2.1 内标-工作曲线法

在系列浓度的毒(药)物血液或尿液质控样品中, 以毒(药)物与内标定量离子对的峰面积比 (Y) 为纵坐标、毒(药)物质量浓度 (C) 为横坐标进行线性回归, 得线性方程。

根据待测样品中毒（药）物与内标定量离子对峰面积比，按公式（1）计算出待测样品中毒（药）物的质量浓度。

$$C = \frac{Y - a}{b} \quad \dots\dots\dots (1)$$

式中：

- C ——待测样品中毒（药）物质量浓度，单位为纳克每毫升（ng/mL）；
- Y ——待测样品中毒（药）物与内标峰面积比；
- a ——线性方程的截距；
- b ——线性方程的斜率。

6.2.3.2.2 内标-单点校正法

根据待测样品及添加样品中毒（药）物与内标定量离子对峰面积比，按公式（2）计算出待测样品中毒（药）物的质量浓度。

$$C = \frac{A \times A_i' \times c}{A' \times A_i} \quad \dots\dots\dots (2)$$

式中：

- C ——待测样品中毒（药）物质量浓度，单位为纳克每毫升（ng/mL）；
- A ——待测样品中毒（药）物的峰面积；
- A' ——添加样品中毒（药）物的峰面积；
- A_i ——待测样品中内标的峰面积；
- A_i' ——添加样品中内标的峰面积；
- c ——添加样品中毒（药）物的质量浓度，单位为纳克每毫升（ng/mL）。

6.2.3.2.3 外标-工作曲线法

在系列浓度的毒（药）物血液或尿液质控样品中，以毒（药）物定量离子对的峰面积（ Y ）为纵坐标、毒（药）物质量浓度（ C ）为横坐标进行线性回归，得线性方程。

根据待测样品中毒（药）物定量离子对峰面积，按公式（3）计算出待测样品中毒（药）物的质量浓度。

$$C = \frac{Y - a}{b} \quad \dots\dots\dots (3)$$

式中：

- C ——待测样品中毒（药）物质量浓度，单位为纳克每毫升（ng/mL）；
- Y ——待测样品中毒（药）物的峰面积；
- a ——线性方程的截距；
- b ——线性方程的斜率。

6.2.3.2.4 外标-单点校正法

根据待测样品及添加样品中毒（药）物定量离子对峰面积，按公式（4）计算出待测样品中毒（药）物的质量浓度。

$$C = \frac{A \times c}{A'} \quad \dots\dots\dots (4)$$

式中：

- C ——待测样品中毒（药）物质量浓度，单位为纳克每毫升(ng/mL)；
 A ——待测样品中毒（药）物的峰面积；
 A' ——添加样品中毒（药）物的峰面积；
 c ——添加样品中毒（药）物的质量浓度，单位为纳克每毫升(ng/mL)。

6.2.3.3 平行试验

待测样品同时平行测定两份，双样相对相差按公式（5）计算：

$$RD(\%) = \frac{|C_1 - C_2|}{\bar{C}} \times 100 \quad \dots\dots\dots (5)$$

式中：

- RD ——相对相差；
 C_1 、 C_2 ——两份待测样品平行定量测定的质量浓度；
 \bar{C} ——两份待测样品平行定量测定质量浓度的平均值。

6.2.4 空白试验

用空白血液或尿液进行空白试验。

7 结果评价

7.1 定性结果评价

7.1.1 阴性结果评价

如果待测样品中仅检出内标地西洋-d5和SKF_{525A}，未检出附录A中238种毒（药）物成分，则阴性结果可靠；如果待测样品中未检出内标，则阴性结果不可靠。

7.1.2 阳性结果评价

如果待测样品中检出附录A中毒（药）物成分且空白样品无干扰，则阳性结果可靠；如果待测样品中检出毒（药）物成分且空白样品亦呈阳性，则阳性结果不可靠。

7.2 定量结果评价

平行试验中两份检材的双样相对相差不得超过20%（腐败检材不得超过30%），结果按两份检材浓度的平均值计算，否则需要重新测定。

8 方法检出限

本技术规范血液中238种毒（药）物成分的最低检出限见附录A。

附录 A

(资料性附录)

表 238 种毒(药)物的 LC-MS/MS 分析资料

目标物名称	母离子/子离子对(m/z)		DP	CE(1/2)	Rt	LOD
中文名 英文名	1	2	(V)	(eV)	(min)	(ng/mL)
苯丙胺 amphetamine	136.1/119.1	136.1/91.1	40	20/16	6.7	1
甲胺磷 methamidophos	142.1/94	142.1/112.1	60	20/17	1.74	20
甲基苯丙胺 methamphetamine	150.1/119.1	150.1/91.1	30	16/26	8.03	1
苯丁胺 phentermine	150/91.1	150/133.3	20	27/13	8.05	1
苯丙醇胺 phenylpropanolamine	152.1/134.3	152.1/117.2	40	16/24	5.15	20
金刚烷胺 amantadine	152.2/135.3		40	24	6.97	1
对乙酰氨基酚 acetaminophenol	152.3/110.2	152.3/93	50	21/31	1.56	10
尼古丁 nicotine	163.2/130.2	163.2/117.1	30	30/36	5.79	1
灭多威 methomyl	163.2/88.0		30	20	1.7	20
甲卡西酮 methcathinone	164.0/146.0	164.0/130.0	60	10/34	5.7	1
速灭威 metolcarb	166.1/109.1	166.1/81.1	50	19/31	2.26	1
麻黄碱 ephedrine	166.1/148.1	166.1/133.1	40	18/26	6.09	1
苯佐卡因 benzocaine	166.3/138.2	166.3/120.1	60	16/23	2.09	20
加巴喷丁 gabapentin	172.2/154.2	172.2/137.3	60	18/21	2.16	20
可铁宁 cotinine	177.2/101.2	177.2/80.2	30	11/32	1.95	1
尼可刹米 nikethamide	179.3/108.1	179.3/72.1	65	26/30	2.09	1
3,4-亚甲基二氧基苯丙胺 MDA	180.1/163.1	180.1/135.1	40	15/18	6.48	1
美西律 mexiletine	180.2/58.2	180.2/163.3	50	22/20	9.07	1
乙酰甲胺磷 acephate	184/143.1	184/125.1	55	12/24	1.6	10
爱康宁 ecognine	186.2/168.3	186.2/82.2	57	25/38	1.7	10
安替比林 antipyrine	189.0/56.0	189.0/77.0	60	27/37	1.96	20
异丙威 isoprocarb	194.1/137.2	194.1/152	55	13/12	2.48	1
1-(3,4-亚甲二氧基苯)-2-丁胺 BDB	194.2/135.3	194.2/177.2	50	19/13	7.76	1
3,4-亚甲基二氧基甲基苯丙胺 MDMA	194.2/163.4	194.2/135.3	35	18/29	7.76	1
咖啡因 caffeine	195.2/138.2	195.2/110	50	29/32	1.83	1
爱康宁甲酯 ecognine ester	200.2/182.2	200.2/82.2	52	25/32	5.05	10
甲萘威 carbaryl	202.1/145.2	202.1/117.1	50	14/35	2.43	1
乙胺丁醇 ethambutol	205.2/116.1	205.2/149	60	21/12	8.68	10
异丙隆 isotoproturon	207.1/72	207.1/165.1	60	36/21	2.28	10
N-甲基-1-(3,4-亚甲二氧基苯)-2-丁胺 MBDB	208.3/177	208.3/135.3	50	15/28	8.85	1
3,4-亚甲二氧基-N-乙基-苯丙胺 MDEA	208.4/163.1	208.4/133.2	71	19/23	8.5	1
氧乐果 omethoate	214/155.1	214/183.1	50	22/15	1.57	10
莠去津 atrazine	216.2/174	216.2/95.8	75	25/33	2.11	10

目标物名称 中文名 英文名	母离子/子离子对(m/z)		DP (V)	CE(1/2) (eV)	Rt (min)	LOD (ng/mL)
	1	2				
敌稗 propanil	218.0/162.3	218.0/127.0	60	21/37	2.84	20
眠尔通 meprobamate	219.2/158.2	219.2/97	50	12/19	1.78	1
扑米酮 primidone	219.2/162.3	219.2/119.2	55	17/24	1.76	20
3,4-亚甲基二氧基丙基苯丙胺 MDPR	222.2/163.3	222.2/135.3	50	19/29	10.54	1
克百威 carbofuran	222.2/165.2	222.2/123	50	17/34	2.26	1
敌敌畏 dichlorvos	223.1/127.1	223.1/109.1	60	23/24	2.15	1
久效磷 monocrotophos	224.1/127.1	224.1/193.1	50	20/11	1.73	1
去甲氯胺酮 norketamine	224.1/207.1	224.1/125.1	40	19/32	4	1
特布他林 terbutaline	226.1/152.1	226.1/170.2	60	23/16	3.99	20
阿米洛利 amiloride	230.1/171	230.1/212.4	60	24/20	4.12	10
乐果 dimethoate	230/199	230/171.1	45	13	1.82	1
异丁司特 ibudilast	231.1/161.5	231.1/189.3	60	25/26	3.19	20
异丙安替比林 isopropylantipyrine	231.1/189.1	231.1/201	90	28/32	2.15	10
萘普生 naproxen	231.2/185.4	231.2/170.3	60	20/35	2.56	20
可乐定 clonidine	232.1/162.3	232.1/215.2	60	48/34	3.19	20
芬氟拉明 fenflutamine	232.2/159.3	232.2/187.3	20	32/20	13.64	1
氨基比林 aminophenazone	232.3/111.2	232.3/98.1	50	21/25	2.42	10
去甲哌替啶 normeperidine	234.2/160.3	234.2/91.1	75	23/60	13.67	1
利多卡因 lidocaine	235.2/86.3	235.2/101.2	35	28/14	9.04	1
普鲁卡因 procaine	237.2/100.2	237.2/164.4	50	22/23	7.05	20
卡马西平 carbamazepine	237.3/194.3	237.3/192.3	60	26/32	1.76	1
氯胺酮 ketamine	238.1/179.1	238.1/125.1	40	25/40	7.48	1
沙丁胺醇 salbutamol	240.1/148.2	240.1/222.2	50	26/17	4.02	20
灭线磷 mocap	243.2/131	243.2/173.0	50	26/20	2.59	20
苯环利定 phencyclidine	244.2/86.0	244.2/159.3	40	17/19	5.59	20
哌替啶 meperidine	248.3/220.3	248.3/174.1	50	30/28	10.92	1
7-氨基硝西洋 7-aminonitrazepam	252.2/121.1	252.2/146.2	80	37/38	1.84	10
奥卡西平 oxcarbazepine	253.0/235.9	253.0/208.1	70	19/20	1.78	1
西米替丁 cimetidine	253.2/159.3		70	20	3.28	10
三氨蝶啶 triamterene	254.0/237	254.0/104	60	27/37	4.03	10
奈福泮 nefopam	254.1/181.3	254.1/166.3	60	27/38	11.58	20
拉莫三嗪 lamotrigine	256.1/211.2	256.1/145.1	50	35/53	3.37	1
苯海拉明 diphenhydramine	256.2/167.2	256.2/165.2	30	17/54	15.5	1
敌百虫 trichlorfon	259.3/223	259.3/127.1	60	16/23	1.5	1
普萘洛尔 propranolol	260.1/116.1	260.1/183.2	60	25	11.59	10
卡立普多 carisoprodol	261.3/200.2	261.3/97.1	50	23/15	1.5	10
甲拌磷 phorate	261/75.1	261/244.3	40	17/10	4.11	10

目标物名称	母离子/子离子对(m/z)		DP	CE(1/2)	Rt	LOD
中文名 英文名	1	2	(V)	(eV)	(min)	(ng/mL)
甲基对硫磷 parathion-methyl	264.1/125	264.1/232	60	30/21	9.75	20
噻氯匹定 ticlopidine	264.1/125	264.1/239.1	60	44/24	9.73	20
去甲替林 nortriptyline	264.2/233.1	264.2/191.3	50	20/32	16	20
曲马多 tramadol	264.2/58	264.2/246.2	50	37/16	9.74	1
丁卡因 tetracaine	265.2/176.2	265.2/220.4	50	21/25	11.99	20
米氮平 mirtazapine	266.1/195.1	266.1/208.8	80	37/35	9.2	10
阿替洛尔 atenolol	267.2/145.2	267.2/190.3	60	38/26	3.61	20
美托洛尔 metoprolol	268.3/116.1	268.3/133.2	60	26/35	7.17	20
乙草胺 acetochlor	270.1/224.1	270.1/148	60	13/30	3.16	20
甲草胺 alachlor	270.2/238.3	270.2/162.3	60	16/27	3.09	20
硫线磷 cadusafos	271.1/159.0	271.1/215.0	60	18/13	3.45	20
去甲西洋 nordiazepam	271.2/140.2	271.2/208.1	70	36/36	2.32	10
右美沙芬 dexromethorphan	272.3/147.2	272.3/213.3	60	42/37	14.67	1
布桂嗪 bucinnazine	273.2/117.1	273.2/155.2	60	25/20	5.8	10
氯苯那敏 chlorpheniramine	275.2/230.1	275.2/167.1	50	22/53	12.47	1
罗哌卡因 ropivacaine	275.3/126.2	275.3/84.2	60	31/58	11.39	10
环苯扎林 cyclobenzaprine	276.3/216.3	276.3/231	50	34/25	18.88	20
克仑特罗 clenbuterol	277.2/203.1	277.2/259.1	60	23/16	8.83	1
杀螟松 fenitrothion	278.1/124.9	278.1/246.2	76	30/25	2.16	10
马普替林 maprotiline	278.1/250.2	278.1/219.2	60	26/34	15.61	10
阿米替林 amitriptyline	278.2/191.3	278.2/233.3	60	35/30	20.28	10
2-亚乙基-1,5-二甲基-3,3-二苯基吡咯烷 EDDP	278.2/234.3	278.2/249.3	70	41/33	29	10
文拉法辛 venlafaxine	278.3/58.1	278.3/259.9	40	40/17	11.28	10
倍硫磷 fenthion	279.3/247.0	279.3/169.0	50	23/23	3.74	20
多塞平 doxepin	280.3/107.2	280.3/220.2	50	31/36	15.64	1
丙咪嗪 imipramine	281.3/86.2	281.3/208.2	50	24/35	19.07	1
硝西洋 nitrazepam	282.2/236.2	282.2/180.2	70	32/52	2.14	10
酚妥拉明 phentolamine	282/212.3	282/239.5	60	20/15	9.26	20
7-氨基氟硝西洋 7-aminoflunitrazepam	284.2/135.2	284.2/226.2	80	39/41	1.96	1
地西洋 diazepam	285.1/193.3	285.1/154.1	80	45/36	2.77	1
异丙嗪 promethazine	285.2/86.1	285.2/198.1	55	25/31	17.23	1
吗啡 morphine	286.1/201.2	286.1/165.3	80	36/56	3.97	1
7-氨基氯硝西洋 7-aminoclonazepam	286.1/222.2	286.1/250.1	60	34/25	1.61	1
氢吗啡酮 hydromorphone	286.2/185.3	286.2/199.1	85	40/40	4.51	10
地莫西洋 demoxepam	287.1/269.3	287.1/180.2	70	38/32	1.87	10
奥沙西洋 oxazepam	287.2/241.2	287.2/269.3	50	31/21	2.02	10
加兰他敏 galanthamine	288.1/213.2	288.1/231	60	32/24	5.06	10

目标物名称 中文名 英文名	母离子/子离子对(m/z)		DP (V)	CE(1/2) (eV)	Rt (min)	LOD (ng/mL)
	1	2				
特丁硫磷 terbufos	289.2/103	289.2/233	50	14/10	5.4	20
N-去羟氟西洋 desalkylflurazepam	289.2/140.2	289.2/226.1	60	37/38	2.1	20
布比卡因 bupivacaine	289.3/140.2	289.3/84.1	60	29/51	13.7	10
异稻瘟净 iprobenfos	289/91.1	289/205.1	60	66/14	3.06	1
苯甲酰爱康宁 benzoylecognine	290.2/168.3	290.2/105.2	70	26/43	2.15	10
阿托品 atropine	290.3/124.1	290.3/93.1	85	34/44	6.2	1
对硫磷 parathion	292.1/236	292.1/264	60	21/15	3.89	20
美利曲辛 melitracen	292.3/247.2	292.3/232.2	60	26/34	24.37	20
昂丹司琼 ondansetron	294.2/170.3	294.2/184.3	60	37	9.92	20
艾司唑仑 estazolam	295.2/267.3	295.2/205.2	70	34/53	2.4	10
辛可尼丁 cinchonidine	295.3/81.2	295.3/168.3	60	42/39	7.64	20
尼美西洋 nimetazepam	296.1/250.2	296.1/222.1	70	36/38	2.47	1
去甲氟西汀 norfluoxetine	296.2/134.2		60	10	3.68	20
艾司洛尔 esmolol	296.3/145.2	296.3/219.2	50	34/28	7.43	10
辛硫磷 phoxim	299.3/77	299.3/129.0	60	46/16	4.33	20
喹硫磷 quinalphos	299.1/163.2	299.1/243.2	50	29/24	3.81	10
去甲奥氮平 norolanzapine	299.2/198.1	299.2/213.1	75	50/37	13.42	20
可待因 codeine	300.2/199.2	300.2/165.3	80	40/52	5.16	1
替马西洋 temazepam	301.2/255.2	301.2/283.1	70	36/19	2.34	1
苯海索 trihexyphenidyl	302.1/97.8	302.1/284.1	60	29/24	19.49	10
双氢可待因 dihydrocodeine	302.5/199.3	302.5/201.2	60	44/42	5.4	10
杀扑磷 methidathion	303.1/145	303.1/85.1	50	15/32	2.95	1
可卡因 cocaine	304.1/182.2	304.1/150.2	60	28/35	12.93	1
东莨菪碱 scopolamine	304.3/138.3	304.3/156.3	60	31/23	5.55	20
二嗪农 diazinon	305.1/169.2	305.1/153.1	60	29/30	3.9	10
山莨菪碱 anisodamine	306.2/140.3	306.2/122	60	35/40	4.73	10
舍曲林 sertraline	306.2/275.1	306.2/159.2	80	17/34	20.41	20
唑吡坦 zolpidem	308.1/235.1	308.1/263.2	40	53/35	6.21	1
丁咯地尔 buflomedil	308.1/237.1	308.1/140.2	60	28/22	10.52	20
阿普唑仑 alprazolam	309.1/281.1	309.1/274.2	80	33/32	2.85	1
氟西汀 fluoxetine	310.1/43.7	310.1/148.2	60	24/16	19.2	10
美沙酮 methadone	310.2/265.2	310.2/105.1	50	22/38	25.68	1
地芬尼多 diphenidol	310.2/292	310.2/128.9	130	23/35	14.23	20
大麻酚 CBN	311.2/223.2	311.2/293.1	60	29/23	7.06	20
蒂巴因 thebaine	312.2/58.2	312.2/266.2	60	38/24	8.82	1
奥氮平 olanzapine	313.1/255.9	313.1/84.1	70	25/32	12.44	1
去甲氯氮平 norclozapine	313.4/270	313.4/192.1	70	32/55	9.24	20

目标物名称	母离子/子离子对(m/z)		DP	CE(1/2)	Rt	LOD
中文名 英文名	1	2	(V)	(eV)	(min)	(ng/mL)
氟硝西洋 flunitrazepam	314.2/268.3	314.2/239.3	85	35/45	5.81	1
乙基吗啡 ethylmorphine	314.3/229.3	314.3/165.4	80	36/53	5.79	10
四氢大麻酚 THC	315.2/193.2	315.2/259.2	60	32/28	7.03	20
大麻二酚 CBD	315.2/193.2	315.2/105.2	60	32/26	4.65	20
雷尼替丁 ranitidine	315.3/176.2	315.3/270.3	70	23/18	2.92	20
氯硝西洋 clonazepam	316.2/270.1	316.2/214.1	75	36/49	2.16	1
羟考酮 oxycodone	316.2/298.1	316.2/241.1	80	27/36	5.74	1
氯普噻吨 chlorprothixene	316.3/271.2	316.3/231.1	65	27/39	25.45	20
溴西洋 bromazepam	317.1/183.3	317.1/210.2	60	43/35	2.11	10
古柯乙烯 cocaethylene	318.2/196.2	318.2/150.2	61	26/35	15.11	20
氯丙嗪 chlorpromazine	319.3/86.2	319.3/246.2	60	30/34	24.01	10
稻丰散 phenthoate	321.1/247.2	321.1/163.1	60	15/17	4.04	10
劳拉西洋 lorazepam	321.1/275.1	321.1/303.1	60	30/21	1.99	1
甲基毒死蜱 chlorpyrifos methyl	322.1/125.0	322.1/290.0	66	28/22	4.17	
治螟磷 sulfotep	323.1/171.1	323.1/295.2	60	20/15	4.29	10
二甲弗林 dimeflin	324.4/279.3	324.4/163.4	80	22/35	12.2	20
α -羟基阿普唑仑 α -hydroxyalprazolam	325.2/297.2	325.2/279.2	90	35/33	3.53	10
西酞普兰 citalopram	325.3/109.2	325.3/262.0	80	41/26	13.9	10
咪达唑仑 midazolam	326.2/291.4	326.2/244.2	65	37/35	4.74	1
比索洛尔 bisoprolol	326.3/116.2	326.3/74.1	80	25/40	7.94	20
氯氮平 clozapine	327.3/270.1	327.3/296.3	75	32/33	11.35	1
单乙酰吗啡 6-acetylmorphine	328.1/211.3	328.1/165.3	90	36/54	5.35	1
洛沙平 loxapine	328.2/271.2	328.2/297.3	80	30/36	14.46	20
纳洛酮 naloxone	328.3/310.1	328.3/253.2	60	27/37	4.84	1
拉贝洛尔 labetalol	329.2/311.1	329.2/294.3	80	18/27	7.3	20
帕罗西汀 paroxetine	330.3/192.3	330.3/70.1	60	28/51	13.42	10
马拉硫磷 malathion	331.1/127.1	331.1/99.1	60	18/19	3.32	1
胺菊酯 tetramethrin	332.4/164.4	332.4/135.3	60	34/25	4.62	1
咳必清 carbetapentane	334.4/100.1	334.4/145.3	60	33/30	21.48	10
芬太尼 fentanyl	337.2/188.3	337.2/105.2	70	31/55	13.86	1
法莫替丁 famotidine	338.2/189.3	338.2/259	60	27/17	2.8	20
洛贝林 lobeline	338.2/96	338.2/216.3	60	30/40	18.8	20
罂粟碱 papaverine	340.1/202.2	340.1/202.2	60	37/41	5.86	1
右丙氧芬 dextropropoxyphene	340.2/266.2	340.2/324.3	60	12/35	20.18	10
去氯羟嗪 decloxizine	341.2/167.3		60	24	10.36	20
α -羟基咪达唑仑 α -hydroxymidazolam	342.0/324.2	342.0/203	70	29/30	2.43	10
舒必利 sulpiride	342.1/112.2	342.1/214.2	60	35/46	5.3	20

目标物名称	母离子/子离子对(m/z)		DP	CE(1/2)	Rt	LOD
中文名 英文名	1	2	(V)	(eV)	(min)	(ng/mL)
乙酰可待因 acetylcodeine	342.2/225.2	342.2/165.3	85	35/61	8.04	1
三唑仑 triazolam	343.2/308.2	343.2/315.2	80	36/35	2.71	1
贝凡洛尔 bevantolol	346.3/165.3	346.3/150.1	80	29/45	11.35	20
硝苯地平 nifedipine	347.3/315.2	347.3/271.4	60	12/16	2.34	20
毒死蜱 chlorpyrifos	350.0/198.0	350.0/322.0	70	26/17	5.6	20
美洛昔康 meloxicam	352.1/115.1	352.1/141.2	80	25/29	1.38	20
他扎罗汀 tazarotene	352.2/324.2	352.2/294.3	80	35/54	6.34	20
萝巴新 raubasine	353.2/144.1	353.2/210.2	70	37/29	11.4	10
罗通定 rotundine	356.2/192.3	356.2/165.3	60	36/34	10.74	20
吲哚美辛 indomethacin	358.2/139.3	358.2/174.2	70	26/18	3.25	20
阿曲库铵 atracurium	358.4/206	358.4/151.2	85	27/41	9.65	20
α -羟基三唑仑 α -hydroxytriazolam	359.2/331.2	359.2/176.1	80	38/37	2.01	1
尼群地平 nitrendipine	361.3/315.1	361.3/329.2	80	13/20	2.9	20
伏杀磷 phosaline	370.1/184.1	370.1/324.1	70	20/18	4.49	1
海洛因 heroin	370.2/268.2	370.2/165	90	38/60	7.62	1
曲唑酮 trazodone	372.2/176.2	372.2/148.3	60	34/50	8.25	1
羟嗪 hydroxyzine	375.2/201.1		60	26	13.48	20
氟哌啶醇 haloperidol	376.2/165.4	376.2/358.2	60	33/28	15.24	1
氨溴索 ambroxol	379.1/264.1	379.1/116.2	80	22/24	6.36	20
赛利洛尔 celiprolol	380.3/251.2	380.3/307.2	80	31/25	6.33	20
甲磺隆 metsulfuron-methyl	382.1/167.6	382.1/350.1	80	19/16	1.66	20
哌唑嗪 prazosin	384.2/247.2	384.2/138.2	60	39/43	9.18	20
喹硫平 quetiapine	384.4/253.1	384.4/221	54	35/53	9.22	20
乙硫磷 ethion	385.1/199.0	385.1/143.0	60	13/33	5.81	20
丁螺环酮 buspirone	386.5/121.9	386.5/222.2	100	42/39	9.55	20
舒芬太尼 sufentanil	387.1/238.1	387.1/355.3	50	27/26	18.22	20
氟西洋 flurazepam	388.2/315.2	388.2/288.1	65	32/33	10.13	10
尼索地平 nisoldipine	389.1/344.2	389.1/357.1	60	16/14	14.38	20
佐匹克隆 zopiclone	389/245.1	389/345.1	80	30/25	4.3	20
地塞米松 dexamethasone	393.3/355.2	393.3/237.1	51	17/25	18.1	20
苯磺隆 tribenuron-methyl	396/155.1	396/181.0	70	24/33	2.82	20
福尔可定 pholcodine	399.1/114.2	399.1/381.1	80	47/33	17.94	20
羟基喹硫平 hydroxyquetiapine	400.2/269.1	400.2/295.2	80	34/36	5.11	10
奋乃静 perphenazine	404.2/171.3	404.2/143.2	60	33/39	16.15	20
洛伐他汀 lovastatin	405.4/285.1	405.4/43.2	70	15/21	3.32	20
三氟拉嗪 trifluoperazine	408.4/195.3	408.4/133.3	40	19/29	6.61	1
氨氯地平 amlodipine	409.2/238.2	409.2/294.2	60	26/32	7.67	20

目标物名称	母离子/子离子对(m/z)		DP	CE(1/2)	Rt	LOD
中文名 英文名	1	2	(V)	(eV)	(min)	(ng/mL)
苜蓿磺隆 bensulfuron methyl	411.1/149.1	411.1/182.2	80	27/23	2.29	20
利培酮 risperidone	411.2/191.4		80	43	10.11	10
齐拉西酮 ziprasidone	413.1/194.2	413.1/177.2	80	39/39	8.06	20
那可丁 norcotine	414.2/220.3	414.2/353.2	60	32/33	6.04	1
去甲丁丙诺啡 norbuprenorphine	414.2/83.1	414.2/101.1	80	64/52	7.72	20
哌氟酰胺 flecanide	415.1/398.1	415.1/301.2	70	25/33	3.96	10
尼莫地平 nimodipine	419/343.1	419/359.1	60	13/22	3.06	20
多潘立酮 domperidone	426.4/175.1	426.4/147.2	100	39/58	6.08	20
羟基利培酮 hydroxyrisperidone	427.2/207.2	427.2/110.2	70	40/58	7.65	20
去氢阿立哌唑 dehydroaripiprazole	446.1/285.2	446.1/98.1	80	33/58	10	20
阿立哌唑 aripiprazole	448.0/285.2	448.0/98.1	80	38/54	13.01	20
地芬诺酯 diphenoxylate	453.3/425.1	453.3/187.4	80	20/30	31.85	20
西沙比利 cisapride	466.2/184.2	466.2/234.1	75	38/30	10.54	10
丁丙诺啡 buprenorphine	468.1/396	468.1/187.2	110	52/57	13.49	20
西地那非 sildenafil	475.0/58.1	475.0/100.1	80	50/60	5.43	10
尼卡地平 nicardipine	480.1/315	480.1/166.3	60	31/30	13.8	20
格列本脲 glibenclamide	496.3/371	496.3/451.3	70	19/23	2.62	20
乌头碱 aconitine	646.4/586.1	646.4/526.2	80	46/51	15.9	20
甲氨基阿维菌素 emamectin	886.6/158.2	886.6/302.2	80	51/42	20.69	20
阿维菌素 avermectin	890.7/305.3	890.7/567.5	80	38/20	3.9	20
双苯戊二氨酯 SKF _{525A} (内标)	354.3/209.3	354.3/167.3	80	25/37	28.24	
地西洋-d ₅ (内标)	290.2/198.2	290.2/159.2	60	45/36	2.77	