

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±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 (%)	≥ 50	≥ 20~50	≥ 10~20	< 10
允许相对偏差 (%)	±20	±25	±30	±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 (min)	加成 离子	母离子 (m/z)	典型二级碎片离子 (m/z)	碰撞能量 (eV)
1	阿苯达唑	Albendazole	54965-21-8	C ₁₂ H ₁₅ N ₃ O ₂ S	甲醇	10.412	[M+H] ⁺	266	234/191/159	24/36/40
2	奥苯达唑	Oxibendazole	20559-55-1	C ₁₂ H ₁₅ N ₃ O ₃	甲醇	8.185	[M+H] ⁺	250.1	218.1/176.1/148	16/28/40
3	阿苯达唑 -2-氨基砜	Albendazole -2-amino sulfone	80983-34-2	C ₁₀ H ₁₃ N ₃ O ₂ S	甲醇	4.421	[M+H] ⁺	240.1	198/133.1/106.1	20/20/40
4	阿苯达唑砜	Albendazole sulfone	75184-71-3	C ₁₂ H ₁₅ N ₃ O ₄ S	甲醇	6.842	[M+H] ⁺	298.1	266.1/224/159	20/20/40
5	阿苯达唑亚砜	Albendazole sulfoxide	54029-12-8	C ₁₂ H ₁₅ N ₃ O ₃ S	甲醇	5.638	[M+H] ⁺	282.1	239.9/208/159	12/24/35
6	氨苯砜	Dapson	80-08-0	C ₁₂ H ₁₂ N ₂ O ₂ S	甲醇	7.072	[M+H] ⁺	249.1	156/92/108	10/28/20
7	奥比沙星	Orbifloxacin	113617-63-3	C ₁₉ H ₂₀ F ₃ N ₃ O ₃	甲醇	6.019	[M+H] ⁺	396.2	352.1/295.1/267	16/28/39
8	氨苄西林	Ampicillin	69-53-4	C ₁₆ H ₁₉ N ₃ O ₄ S	50%乙醇	4.774	[M+H] ⁺	350	160/114/106	10/36/16
9	奥芬达唑	Oxfendazole	53716-50-0	C ₁₅ H ₁₃ N ₃ O ₃ S	甲醇	7.880	[M+H] ⁺	316.1	284/159/191.1	16/32/16
10	氨基甲苯咪唑	Mebendazole amine	52329-60-9	C ₁₄ H ₁₁ N ₃ O	甲醇	7.049	[M+H] ⁺	238.1	105.1/77.1/133.1	28/40/44
11	埃玛菌素	Emamectin	119791-41-2	C ₄₉ H ₇₅ NO ₁₃	乙醇	15.328	[M+H] ⁺	886.5	157.9/302.1/887.5	40/32/0
12	阿莫西林	Amoxicillin	26787-78-0	C ₁₆ H ₁₉ N ₃ O ₅ S	50%乙醇	3.610	[M+H] ⁺	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 (min)	加成 离子	母离子 (m/z)	典型二级碎片离子 (m/z)	碰撞能量 (eV)
13	安普乐定	Apraclonidine	66711-21-5	C ₉ H ₁₀ Cl ₂ N ₄	甲醇	3.766	[M+H] ⁺	245	209/174.1/147.1	24/36/40
14	阿奇霉素	Azithromycin	83905-01-5	C ₃₈ H ₇₂ N ₅ O ₁₂	甲醇	7.645	[M+H] ⁺	749.5	591.4/158.1/116.3	40/40/54
15	奥沙西洋	Oxazepam	604-75-1	C ₁₅ H ₁₁ ClN ₂ O ₂	甲醇	13.186	[M+H] ⁺	287.1	241.1/163/104	20/40/40
16	阿托品	Atropine	51-55-8	C ₁₇ H ₂₃ NO ₃	乙腈	5.375	[M+H] ⁺	290	124.1/93.1/91.1	24/36/40
17	阿维菌素 B _{1a}	Avermectin B _{1a}	65195-55-3	C ₄₈ H ₇₂ O ₁₄	乙腈	18.033	[M+Na] ⁺	895.5	751.4/607.2/449.3	48/52/48
18	安西奈德	Aminonide	51022-69-6	C ₂₈ H ₃₅ FO ₇	乙腈	15.830	[M+H] ⁺	503.3	321/339.1/483.1	20/12/8
19	奥西那林	Orciprenaline	586-06-1	C ₁₁ H ₁₇ NO ₃	甲醇	3.119	[M+H] ⁺	212.1	125.1/152.1/193.9	24/16/12
20	氨溴索	Ambroxol	18683-91-5	C ₁₃ H ₁₈ Br ₂ N ₂ O	甲醇	7.421	[M+H] ⁺	379.1	263.8/116/104.1	14/18/50
21	奥硝唑	Ornidazole	16773-42-5	C ₇ H ₁₀ ClN ₃ O ₃	甲醇	6.322	[M+H] ⁺	220	128/82.1/57	20/40/20
22	阿扎哌醇	Azaperol	2804-05-9	C ₁₉ H ₂₄ FN ₃ O	甲醇	4.582	[M+H] ⁺	330.2	312.1/149/121	16/28/20
23	阿扎哌隆	Azaperone	1649-18-9	C ₁₉ H ₂₂ FN ₃ O	甲醇	5.348	[M+H] ⁺	328.2	121.1/123/165.1	20/40/20
24	巴胺磷	Propetamphos	31218-83-4	C ₁₀ H ₂₀ NO ₄ PS	乙腈	16.091	[M+H] ⁺	282.1	156/137.9/183.1	4/20/20
25	苯丙酸诺龙	Nandrolone phenylpropionate	62-90-8	C ₂₇ H ₃₄ O ₃	乙腈	17.711	[M+H] ⁺	407.3	257.2/105.1/91.1	20/20/40
26	班布特罗	Bambuterol	81732-65-2	C ₁₈ H ₂₉ N ₃ O ₅	甲醇	7.712	[M+H] ⁺	368.2	294.2/72.1/57.3	18/40/28
27	吡布特罗	Pirbuterol	38677-81-5	C ₁₂ H ₂₀ N ₂ O ₃	甲醇	3.211	[M+H] ⁺	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 (min)	加成 离子	母离子 (m/z)	典型二级碎片离子 (m/z)	碰撞能量 (eV)
28	吡虫隆	Fluazuron	86811-58-7	C ₂₀ H ₁₀ Cl ₂ F ₅ N ₃ O ₃	乙腈	16.876	[M+H] ⁺	506	349/158/141	25/15/40
29	勃地酮	Boldenone	846-48-0	C ₁₉ H ₂₆ O ₂	甲醇	14.039	[M+H] ⁺	287.1	269/135.1/121	9/17/25
30	苯甲酸雌二醇	Estradiol benzoate	50-50-0	C ₂₃ H ₂₈ O ₃	乙腈	17.359	[M+H] ⁺	377.2	359.2/105/77	10/10/10
31	苯甲酰磺胺	Sulfabenzamide	127-71-9	C ₁₃ H ₁₂ N ₂ O ₃ S	甲醇	9.649	[M+H] ⁺	277.1	155.9/92/108.1	12/36/36
32	吡唑酮	Praziquantel	55268-74-1	C ₁₉ H ₂₄ N ₂ O ₂	乙腈	14.643	[M+H] ⁺	313.1	55.3/83.3/203.1	40/28/12
33	丙卡特罗	Procaterol	72332-33-3	C ₁₆ H ₂₂ N ₂ O ₃	甲醇	3.683	[M+H] ⁺	291	162.1/230.9/272.8	28/20/16
34	苯硫脲	Febantel	58306-30-2	C ₂₀ H ₂₂ N ₄ O ₆ S	乙腈	15.748	[M+H] ⁺	447.1	415.1/383.1/280.1	10/16/32
35	倍硫磷	Fenthion	55-38-9	C ₁₀ H ₁₅ O ₃ PS ₂	乙腈	16.380	[M+H] ⁺	279	247.1/169.1/105.1	8/12/20
36	倍硫磷亚砷	Fenthion sulfone	3761-42-0	C ₁₀ H ₁₅ O ₃ PS ₂	乙腈	14.633	[M+H] ⁺	311	279/125/79	12/16/40
37	倍硫磷亚砷	Fenthion sulfoxide	3761-41-9	C ₁₀ H ₁₅ O ₄ PS ₂	乙腈	13.340	[M+H] ⁺	295	280/109/79	16/32/48
38	倍氯米松	Beclomethasone	4419-39-0	C ₂₂ H ₂₉ ClO ₅	甲醇	13.463	[M+HC00] ⁻	453.2	377/341.2/297	16/24/28
39	吡利霉素	Pirlimycin	79548-73-5	C ₁₇ H ₃₁ ClN ₂ O ₅ S	甲醇	7.412	[M+H] ⁺	411.1	56.2/112.1/363.1	40/32/16
40	吡罗昔康	Piroxicam	36322-90-4	C ₁₅ H ₁₃ N ₃ O ₄ S	乙腈	13.041	[M+H] ⁺	332.1	95/78/121	20/76/20
41	斑蝥黄	Canthaxanthin	514-78-3	C ₄₀ H ₅₂ O ₂	甲醇	20.904	[M+H] ⁺	565.4	202.9/147.1/133.2	26/42/42
42	吡哌酸	Pipemidic acid	51940-44-4	C ₁₄ H ₁₇ N ₅ O ₃	甲醇	4.558	[M+H] ⁺	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 (min)	加成 离子	母离子 (m/z)	典型二级碎片离子 (m/z)	碰撞能量 (eV)
43	丙酸睾酮	Testosterone propionate	57-85-2	C ₂₂ H ₃₂ O ₃	乙腈	17.342	[M+H] ⁺	345.3	270.9/109.2/97.1	16/24/24
44	丙酸诺龙	Nandrolone 17-propionate	7207-92-3	C ₂₁ H ₃₀ O ₃	乙腈	17.099	[M+H] ⁺	331.1	256.9/239.2/57.1	12/20/28
45	布他磷	Butafosfan	17316-67-5	C ₇ H ₁₈ N ₂ O ₂ P	甲醇	3.198	[M-H] ⁻	178.2	63.1/64/65	30/30/16
46	倍他米松	Betamethasone	378-44-9	C ₂₂ H ₂₉ FO ₅	甲醇	12.944	[M+HCOO] ⁻	437.3	361.3/307.3/292.2	12/36/40
47	保泰松	Phenylbutazone	50-33-9	C ₁₉ H ₂₀ N ₂ O ₂	乙腈	15.922	[M+H] ⁺	309.2	160.2/77.1/162.1	20/68/16
48	丙酰二甲氨基 丙吩噻嗪	Propionylpromazine	3568-24-9	C ₂₀ H ₂₄ N ₂ OS	甲醇	13.225	[M+H] ⁺	341.2	86.1/58.1/268.1	20/56/24
49	苯乙胺	Phenethylamine	64-04-0	C ₈ H ₁₁ N	水	4.357	[M+H] ⁺	122	105/103/77.2	8/24/36
50	苯乙醇胺 A	Phenylethanolamine A	1346746-81-3	C ₁₉ H ₂₄ N ₂ O ₄	甲醇	10.554	[M+H] ⁺	345	327.3/150/118.2	10/20/36
51	苯唑西林	Oxacillin	66-79-5	C ₁₉ H ₁₉ N ₃ O ₅ S	甲醇	14.005	[M+H] ⁺	401.9	284.2/159.9/114.1	16/12/40
52	茶碱	Theophylline	58-55-9	C ₇ H ₈ N ₄ O ₂	甲醇	3.949	[M+H] ⁺	181	124/96.1/93.9	20/24/32
53	赤霉素	Gibberellic	77-06-5	C ₁₉ H ₂₂ O ₆	乙腈	6.644	[M-H] ⁻	345.1	239.1/222/143	12/28/28
54	醋酸氟氢可的松	Fludrocortisone acetate	514-36-3	C ₂₃ H ₃₁ FO ₆	乙腈	14.157	[M+HCOO] ⁻	467.2	421.1/349.1/341.2	9/25/21
55	醋酸氟羟松	Fluocinolone acetonide	67-73-2	C ₂₄ H ₃₀ F ₂ O ₆	乙腈	13.875	[M+H] ⁺	453.3	120.9/253.1/454.1	24/20/4
56	醋酸氟孕酮	Flugestone acetate	2529-45-5	C ₂₃ H ₃₁ FO ₅	甲醇	14.686	[M+H] ⁺	407.1	285/267/225	20/20/36
57	醋酸甲地孕酮	Megestrol acetate	595-33-5	C ₂₄ H ₃₂ O ₄	乙腈	16.169	[M+H] ⁺	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 (min)	加成 离子	母离子 (m/z)	典型二级碎片离子 (m/z)	碰撞能量 (eV)
58	醋酸甲羟孕酮	Medroxyprogesterone 17-acetate	71-58-9	C ₂₄ H ₃₄ O ₄	甲醇	16.313	[M+H] ⁺	387.2	327.1/285.1/122.9	16/20/40
59	醋酸可的松	Cortisone acetate	50-04-4	C ₂₃ H ₃₀ O ₆	甲醇	14.372	[M+HCOO] ⁻	447.3	401/341/329.2	8/12/20
60	醋酸氯地孕酮	Chlormadinone acetate	302-22-7	C ₂₃ H ₂₉ ClO ₄	乙腈	16.228	[M+H] ⁺	405.2	345.2/309.2/301.2	8/12/16
61	醋酸美伦孕酮	Melengestrol acetate	2919-66-6	C ₂₅ H ₃₂ O ₄	甲醇	16.317	[M+H] ⁺	397.2	337.3/279.2/236.6	8/20/28
62	常山酮	Halofuginone	55837-20-2	C ₁₆ H ₁₇ BrClN ₃ O ₃	甲醇	8.289	[M+H] ⁺	414	120/138/396	20/20/10
63	对氨基苯甲酸	p-Arsanilic acid	98-50-0	C ₆ H ₈ AsNO ₃	甲醇	2.055	[M+H] ⁺	218.1	65.2/80.2/109.1	40/40/16
64	敌百虫	Trichlorfon	52-68-6	C ₄ H ₈ Cl ₃ O ₄ P	乙腈	6.594	[M+H] ⁺	256.9	221/109/79	10/17/33
65	敌敌畏	Dichlorvos	62-73-7	C ₄ H ₇ Cl ₂ O ₄ P	乙腈	11.644	[M+H] ⁺	221	109/79/60	20/32/80
66	地夫可特	Deflazacort	14484-47-0	C ₂₅ H ₃₁ NO ₆	乙腈	14.155	[M+H] ⁺	442.3	124.2/142/424.3	50/42/10
67	达氟沙星	Danofloxacin	112398-08-0	C ₁₉ H ₂₀ FN ₃ O ₃	甲醇	5.545	[M+H] ⁺	358.2	340.1/82.1/255.1	20/48/44
68	单甲脒	Semiamitraz	33089-74-6	C ₁₀ H ₁₄ N ₂	乙腈	5.257	[M+H] ⁺	163.1	122.2/117/106.9	16/24/28
69	地克珠利	Diclazuril	101831-37-2	C ₁₇ H ₉ Cl ₃ N ₄ O ₂	甲醇	15.684	[M-H] ⁻	404.8	337.1/334.5/333.9	16/20/20
70	靛蓝	Indigo	482-89-3	C ₁₆ H ₁₀ N ₂ O ₂	甲醇	15.113	[M+H] ⁺	263.1	234.9/219.1/132.3	28/28/40
71	多拉菌素	Doramectin	117704-25-3	C ₅₀ H ₇₄ O ₁₄	甲醇	18.529	[M+Na] ⁺	921.5	777.4/449.3/183.1	44/56/60
72	达那唑	Danazol	17230-88-5	C ₂₂ H ₂₇ NO ₂	乙腈	16.032	[M+H] ⁺	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 (min)	加成 离子	母离子 (m/z)	典型二级碎片离子 (m/z)	碰撞能量 (eV)
73	得曲恩特	Derquantel	187865-22-1	C ₂₈ H ₃₇ N ₃ O ₄	甲醇	9.642	[M+H] ⁺	480.2	148.1/405.3/461.9	40/32/28
74	地塞米松	Dexamethasone	50-02-2	C ₂₂ H ₂₉ FO ₅	甲醇	13.086	[M+HCOO] ⁻	437.2	361.1/307/292.3	16/36/40
75	地昔尼尔	Dicyclanil	112636-83-6	C ₈ H ₁₀ N ₆	乙腈	3.415	[M+H] ⁺	191.1	109.1/92/67	40/40/40
76	地西洋	Diazepam	439-14-5	C ₁₆ H ₁₃ ClN ₂ O	甲醇	14.575	[M+H] ⁺	285.1	193.1/154/91.1	40/40/40
77	对乙酰氨基酚	Acetaminophen	103-90-2	C ₈ H ₉ NO ₂	甲醇	3.861	[M+H] ⁺	152	110/93.1/65	20/24/36
78	二甲硝咪唑	Dimetridazole	551-92-8	C ₃ H ₇ N ₃ O ₂	甲醇	4.364	[M+H] ⁺	142.1	96.1/81.1/77.1	16/28/28
79	恶唑酸	Oxolinic acid	14698-29-4	C ₁₃ H ₁₁ NO ₅	甲醇	9.257	[M+H] ⁺	262.1	243.9/159.9/202	20/45/32
80	恩诺沙星	Enrofloxacin	93106-60-6	C ₁₉ H ₂₂ FN ₃ O ₃	甲醇	5.789	[M+H] ⁺	360.2	342.2/316.2/245.1	20/16/32
81	二羟丙茶碱	Diprophylline	479-18-5	C ₁₀ H ₁₄ N ₄ O ₄	水	3.919	[M+H] ⁺	254.9	180.9/123.9/96.1	22/34/40
82	二氢吡啶	Diethyl 1,4-dihydro-2,6-dimethyl-3, 5-pyridinedicarboxylate	1149-23-1	C ₁₃ H ₁₉ NO ₄	乙腈	14.946	[M+H] ⁺	254	208/108/180.1	6/22/24
83	二嗪磷	Diazinon	333-41-5	C ₁₂ H ₂₁ N ₂ O ₃ PS	乙腈	16.583	[M+H] ⁺	305.1	169.1/153.1/97	32/28/40
84	二硝托胺	Dinitolmide	148-01-6	C ₈ H ₇ N ₃ O ₅	甲醇	8.010	[M-H] ⁻	224	181.1/77/151	12/24/16
85	芬苯达唑	Fenbendazole	43210-67-9	C ₁₅ H ₁₃ N ₃ O ₂ S	甲醇	13.413	[M+H] ⁺	300.1	268.1/159/131	20/36/56
86	芬苯达唑砒	Fenbendazole sulfone	54029-20-8	C ₁₅ H ₁₃ N ₃ O ₄ S	甲醇	10.613	[M+H] ⁺	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 (min)	加成 离子	母离子 (m/z)	典型二级碎片离子 (m/z)	碰撞能量 (eV)
87	氟苯咪唑	Flubendazole	31430-15-6	C ₁₆ H ₁₂ FN ₃ O ₃	甲醇	11.478	[M+H] ⁺	314.1	282.1/123/95.1	20/36/56
88	氟苯尼考	Florfenicol	73231-34-2	C ₁₂ H ₁₄ Cl ₂ FNO ₄ S	甲醇	8.377	[M-H] ⁻	356	336/185.1/119	0/12/28
89	氟苯尼考胺	Florfenicol amine	76639-93-5	C ₁₀ H ₁₄ FNO ₃ S	甲醇	2.893	[M+H] ⁺	248	229.9/130/131	12/24/20
90	氟虫腴	Fipronil	120068-37-3	C ₁₂ H ₄ Cl ₂ F ₆ N ₄ OS	乙腈	16.048	[M-H] ⁻	435	330/250/317.8	12/28/20
91	氟虫腴砒	Fipronil sulfone	120068-36-2	C ₁₂ H ₄ Cl ₂ F ₆ N ₄ O ₂ S	乙腈	16.343	[M-H] ⁻	450.9	414.9/282.2/244.1	16/28/28
92	氟虫腴亚砒	Fipronil sulfide	120067-83-6	C ₁₂ H ₄ Cl ₂ F ₆ N ₄ S	乙腈	16.375	[M-H] ⁻	418.9	382.9/261.9/313.9	11/28/20
93	氟甲萘酮	Fluoxymesterone	76-43-7	C ₂₀ H ₂₉ FO ₃	乙腈	13.228	[M+H] ⁺	337.3	130.8/241.3/281.1	32/28/20
94	氟甲腴	Fipronil desulfinyl	205650-65-3	C ₁₂ H ₄ Cl ₂ F ₆ N ₄	乙腈	16.169	[M-H] ⁻	386.9	350.9/324.8/281.8	20/40/40
95	氟甲喹	Flumequine	42835-25-6	C ₁₄ H ₁₂ FNO ₃	甲醇	12.857	[M+H] ⁺	262.1	244.1/202/126	12/32/52
96	氟罗沙星	Fleroxacin	79660-72-3	C ₁₇ H ₁₈ F ₃ N ₃ O ₃	甲醇	5.116	[M+H] ⁺	370.1	326/268.9/222.1	20/24/40
97	氟灭酸	Flufenamic acid	530-78-9	C ₁₄ H ₁₀ F ₃ NO ₂	乙腈	16.008	[M+H] ⁺	282.1	264.1/167.1/244.1	20/45/40
98	氟米松	Flumethasone	2135-17-3	C ₂₂ H ₂₈ F ₂ O ₅	甲醇	13.086	[M+H] ⁺	411.2	391.1/253.1/121.2	4/12/28
99	福莫特罗	Formoterol	73573-87-2	C ₁₉ H ₂₄ N ₂ O ₄	甲醇	6.426	[M+H] ⁺	345.1	327.1/148.9/121	12/20/28
100	呋喃苯烯酸钠	Sodium nifurstylenate	54992-23-3	C ₁₃ H ₈ NNaO ₅	乙腈	14.364	[M-H] ⁻	258	214/46.2/114	12/44/24
101	奋乃静	Perphenazine	58-39-9	C ₂₁ H ₂₆ ClN ₃ OS	甲醇	12.269	[M+H] ⁺	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 (min)	加成 离子	母离子 (m/z)	典型二级碎片离子 (m/z)	碰撞能量 (eV)
102	非诺特罗	Fenoterol	13392-18-2	C ₁₇ H ₂₁ NO ₄	乙腈	4.011	[M+H] ⁺	304.1	107.1/135.1/285.9	40/20/12
103	呋喃它酮	Furaltadone	139-91-3	C ₁₃ H ₁₆ N ₄ O ₆	甲醇	3.855	[M+H] ⁺	324.9	284.1/252.1/100.1	20/16/24
104	呋喃妥因	Nitrofurantoin	67-20-9	C ₈ H ₆ N ₄ O ₅	甲醇	6.113	[M-H] ⁻	236.9	193.8/152.1/123.9	8/8/12
105	呋喃西林	Nitrofurazone	59-87-0	C ₆ H ₆ N ₄ O ₄	甲醇	5.648	[M-H] ⁻	196.9	150/124/80.1	4/4/8
106	氟尼辛葡甲胺	Flunixin meglumine	42461-84-7	C ₂₁ H ₂₈ F ₃ N ₃ O ₇	甲醇	14.438	[M+H] ⁺	297.1	279.1/264.1/259.1	24/32/34
107	非那西汀	Phenacetin	62-44-2	C ₁₀ H ₁₃ NO ₂	甲醇	9.096	[M+H] ⁺	180.1	93/110/65.1	32/24/40
108	呋喃唑酮	Furazolidone	67-45-8	C ₈ H ₇ N ₃ O ₅	甲醇	6.954	[M+H] ⁺	226	139/122/67	20/20/40
109	氟哌啶醇	Haloperidol	52-86-8	C ₂₁ H ₂₃ ClFNO ₂	甲醇	11.251	[M+H] ⁺	376.1	358.1/165.1/123	20/20/40
110	氟哌利多	Droperidol	548-73-2	C ₂₂ H ₂₂ FN ₃ O ₂	甲醇	9.104	[M+H] ⁺	380.1	194/165/123.1	16/28/40
111	泛昔洛韦	Famciclovir	104227-87-4	C ₁₄ H ₁₉ N ₅ O ₄	甲醇	4.820	[M+H] ⁺	322	280/262/136	16/16/28
112	胍基乙酸	Guanidineacetic acid	352-97-6	C ₃ H ₇ N ₃ O ₂	甲醇	1.303	[M+H] ⁺	118	101/76.1/72.2	8/12/16
113	睾酮	Testosterone	58-22-0	C ₁₉ H ₂₈ O ₂	甲醇	14.664	[M+H] ⁺	289.2	109/97/123.1	32/36/24
114	磺胺苯吡唑	Sulfaphenazole	526-08-9	C ₁₅ H ₁₄ N ₄ O ₂ S	甲醇	10.337	[M+H] ⁺	315.1	158.1/92/158.9	40/40/28
115	磺胺吡啶	Sulfapyridine	144-83-2	C ₁₁ H ₁₁ N ₃ O ₂ S	甲醇	4.858	[M+H] ⁺	250.1	156/92/108	17/29/20
116	磺胺醋酰	Sulfacetamide	144-80-9	C ₈ H ₁₀ N ₂ O ₃ S	甲醇	4.219	[M+H] ⁺	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 (min)	加成 离子	母离子 (m/z)	典型二级碎片离子 (m/z)	碰撞能量 (eV)
117	磺胺对甲氧嘧啶	Sulfamer	651-06-9	C ₁₁ H ₁₂ N ₄ O ₃ S	甲醇	6.969	[M+H] ⁺	281.1	215.1/156/92	20/20/40
118	磺胺二甲嘧啶	Sulfamethazine	57-68-1	C ₁₂ H ₁₄ N ₄ O ₂ S	甲醇	5.918	[M+H] ⁺	279.1	186.1/124/92.1	12/21/38
119	磺胺二甲异噁唑	Sulfisoxazole	127-69-5	C ₁₁ H ₁₃ N ₃ O ₃ S	甲醇	8.750	[M+H] ⁺	268.1	156/92/113.1	10/40/20
120	磺胺恶唑	Sulfamoxole	729-99-7	C ₁₁ H ₁₃ N ₃ O ₃ S	甲醇	8.744	[M+H] ⁺	268.1	155.9/108/92	20/20/20
121	磺胺间二甲氧嘧啶	Sulfadimethoxine	122-11-2	C ₁₂ H ₁₄ N ₄ O ₄ S	甲醇	10.018	[M+H] ⁺	311.1	156/108.1/92.1	16/28/36
122	磺胺甲基嘧啶	Sulfamerazine	127-79-7	C ₁₁ H ₁₂ N ₄ O ₂ S	甲醇	5.235	[M+H] ⁺	265.1	156/92.1/172	12/28/12
123	磺胺甲基异噁唑	Sulfamethoxazole	723-46-6	C ₁₀ H ₁₁ N ₃ O ₃ S	甲醇	8.152	[M+H] ⁺	254.1	156/92.1/108	12/24/20
124	磺胺间甲氧嘧啶	Sulfamonomethoxine	1220-83-3	C ₁₁ H ₁₂ N ₄ O ₃ S	甲醇	6.968	[M+H] ⁺	281	156/126/108	10/20/28
125	磺胺甲噻二唑	Sulfamethizole	144-82-1	C ₉ H ₁₀ N ₄ O ₂ S ₂	甲醇	5.985	[M+H] ⁺	271	156/92/108	9/29/20
126	磺胺甲氧吡嗪	Sulfamethoxy-pyridazine	80-35-3	C ₁₁ H ₁₂ N ₄ O ₃ S	甲醇	6.114	[M+H] ⁺	281.1	108.1/92.1/156	28/32/12
127	磺胺喹噁啉	Sulfaquinoxaline	59-40-5	C ₁₄ H ₁₂ N ₄ O ₂ S	甲醇	10.103	[M+H] ⁺	301.1	156/92/108	16/32/28
128	磺胺氯吡嗪	Sulfaclozine	102-65-8	C ₁₀ H ₉ ClN ₄ O ₂ S	甲醇	9.734	[M+H] ⁺	285	155.9/108.1/130	20/24/24
129	磺胺氯吡嗪	Sulfachloropyridazine	80-32-0	C ₁₀ H ₉ ClN ₄ O ₂ S	甲醇	9.741	[M+H] ⁺	285	156/108.1/92.1	12/24/24
130	磺胺邻二甲氧嘧啶	Sulfadoxine	2447-57-6	C ₁₂ H ₁₄ N ₄ O ₄ S	甲醇	10.016	[M+H] ⁺	311.1	156/92.1/65.1	16/32/64
131	磺胺脒	Sulfaguanidine	57-67-0	C ₇ H ₁₀ N ₄ O ₂ S	甲醇	2.584	[M+H] ⁺	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 (min)	加成 离子	母离子 (m/z)	典型二级碎片离子 (m/z)	碰撞能量 (eV)
132	磺胺嘧啶	Sulfadiazine	68-35-9	C ₁₀ H ₁₀ N ₄ O ₂ S	甲醇	4.513	[M+H] ⁺	251.1	108.1/92.1/156	20/28/8
133	磺胺索嘧啶	Sulfisomidine	515-64-0	C ₁₂ H ₁₄ N ₄ O ₂ S	甲醇	4.030	[M+H] ⁺	279.1	186/124.1/92	20/20/40
134	磺胺噻唑	Sulfathiazole	72-14-0	C ₉ H ₆ N ₃ O ₂ S ₂	甲醇	4.690	[M+H] ⁺	256	156/92.1/108.1	12/28/20
135	磺胺硝苯	Sulfanitran	122-16-7	C ₁₄ H ₁₃ N ₃ O ₅ S	甲醇	13.229	[M+H] ⁺	336.1	293.9/156/318.2	8/8/12
136	环丙氨嗪	Cyromazine	66215-27-8	C ₆ H ₁₀ N ₆	乙腈	3.064	[M+H] ⁺	167.1	108.1/85/68	20/16/40
137	环丙沙星	Ciprofloxacin	85721-33-1	C ₁₇ H ₁₈ FN ₃ O ₃	甲醇	5.235	[M+H] ⁺	332.1	314/288/231	20/20/48
138	红霉素	Erythromycin	114-07-8	C ₃₇ H ₆₇ NO ₁₃	甲醇	10.851	[M+H] ⁺	734.5	576.3/158.1/83.1	16/32/60
139	黄体酮	Progesterone	57-83-0	C ₂₁ H ₃₀ O ₂	乙腈	16.287	[M+H] ⁺	315.2	108.9/97/79.1	32/28/40
140	哈西奈德	Halcinonide	3093-35-4	C ₂₄ H ₃₂ ClFO ₅	乙腈	15.716	[M+H] ⁺	455.4	143.2/189.3/359.3	50/34/26
141	间氨基苯乙醚	m-Phenetidine	621-33-0	C ₈ H ₁₁ NO	甲醇	4.482	[M+H] ⁺	138.1	110.1/92.9/65	16/20/32
142	甲苯咪唑	Mebendazole	31431-39-7	C ₁₆ H ₁₃ N ₃ O ₃	甲醇	10.463	[M+H] ⁺	296.1	264.1/77/105	20/48/36
143	加巴喷丁	Gabapentin	60142-96-3	C ₉ H ₁₇ NO ₂	甲醇	4.092	[M+H] ⁺	172.2	67.1/137.1/154.2	36/16/12
144	甲矾霉素	Thiamphenicol	15318-45-3	C ₁₂ H ₁₅ Cl ₂ NO ₅ S	甲醇	5.628	[M-H] ⁻	354	290/207.7/185.1	12/16/8
145	金刚烷胺	Amantadine	768-94-5	C ₁₀ H ₁₇ N	甲醇	5.105	[M+H] ⁺	152.1	135/93.1/77.1	18/32/50
146	甲基吡啶磷	Azamethiphos	35575-96-3	C ₉ H ₁₀ ClN ₂ O ₅ PS	甲醇	12.024	[M+Na] ⁺	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 (min)	加成 离子	母离子 (m/z)	典型二级碎片离子 (m/z)	碰撞能量 (eV)
147	甲基睾酮	Methyltestosterone	58-18-4	C ₂₀ H ₃₀ O ₂	乙腈	15.067	[M+H] ⁺	303.2	109.1/97.1/285.2	32/32/12
148	甲基泼尼松龙	Methylprednisolone	83-43-2	C ₂₂ H ₃₀ O ₅	甲醇	12.603	[M+HCOO] ⁻	419.2	343.1/309.2/294.2	12/36/38
149	甲基炔酮	D-(-)-Norgestrel	797-63-7	C ₂₁ H ₂₈ O ₂	乙腈	15.436	[M+H] ⁺	313.2	245.1/108.9/106.9	16/24/40
150	甲基盐霉素	Narasin	55134-13-9	C ₄₃ H ₇₂ O ₁₁	甲醇	18.028	[M+Na] ⁺	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 ₄ H ₅ NOS	甲醇	3.448	[M+H] ⁺	116.2	53.3/58.1/71.3	40/36/16
152	加米霉素	Gamithromycin	145435-72-9	C ₄₀ H ₇₆ N ₂ O ₁₂	乙腈	8.582	[M+H] ⁺	777.5	116.1/158.1/619.4	40/40/36
153	金霉素	Chlortetracycline	57-62-5	C ₂₂ H ₂₃ ClN ₂ O ₈	甲醇	7.686	[M+H] ⁺	479.1	462/444/154.1	12/20/36
154	甲灭酸	Mefenamic acid	61-68-7	C ₁₅ H ₁₅ NO ₂	乙腈	16.115	[M+H] ⁺	242.1	224.1/209.1/180.1	8/28/44
155	吉米沙星	Gemifloxacin	175463-14-6	C ₁₈ H ₂₀ FN ₅ O ₄	甲醇	7.382	[M+H] ⁺	389.9	371.9/312.9/244.8	20/32/32
156	交沙霉素	Josamycin	16846-24-5	C ₄₂ H ₆₉ NO ₁₅	甲醇	13.886	[M+H] ⁺	828.5	600/582.2/228.9	30/30/34
157	吉他霉素	Kitasamycin	1392-21-8	C ₃₃ H ₅₉ NO ₁₃	甲醇	13.134	[M+H] ⁺	772.5	174/108.9/214.9	36/48/30
158	加替沙星	Gatifloxacin	112811-59-3	C ₁₉ H ₂₂ FN ₃ O ₄	甲醇	6.280	[M+H] ⁺	376	358/332/261	15/15/30
159	甲硝唑	Metronidazole	443-48-1	C ₆ H ₉ N ₃ O ₃	甲醇	3.813	[M+H] ⁺	172.1	128/82.1/42.2	12/24/60
160	甲氧苄啉	Trimethoprim	738-70-5	C ₁₄ H ₁₈ N ₄ O ₃	甲醇	4.893	[M+H] ⁺	291.2	261.1/230.1/123.1	24/20/24
161	甲氧苄啉酯	Nequinatate	13997-19-8	C ₂₂ H ₂₃ NO ₄	DMF	15.368	[M+H] ⁺	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 (min)	加成 离子	母离子 (m/z)	典型二级碎片离子 (m/z)	碰撞能量 (eV)
162	坎苯达唑	Cambendazole	26097-80-3	C ₁₄ H ₁₄ N ₄ O ₂ S	甲醇	7.609	[M+H] ⁺	303.1	261/217.1/190	16/32/40
163	卡巴克洛	Carbazochrome	69-81-8	C ₁₀ H ₁₂ N ₄ O ₃	甲醇	3.879	[M+H] ⁺	237.1	118/164.1/220.1	36/20/8
164	卡布特罗	Carbuterol	34866-47-2	C ₁₃ H ₂₁ N ₃ O ₃	甲醇	3.404	[M+H] ⁺	268.7	133.8/177/194.2	24/20/16
165	克百威	Carbofuran	1563-66-2	C ₁₂ H ₁₅ NO ₃	乙腈	13.199	[M+H] ⁺	222.1	165.1/123.1/124	20/30/20
166	卡巴氧	Carbadox	6804-07-5	C ₁₁ H ₁₀ N ₄ O ₄	甲醇	5.293	[M+H] ⁺	262.9	230.8/89.9/77	12/32/40
167	可的松	Cortisone	53-06-5	C ₂₁ H ₂₈ O ₅	甲醇	10.967	[M+HCOO] ⁻	405.2	359.1/329.1/301.1	8/12/20
168	可尔特罗	Colterol	18866-78-9	C ₁₂ H ₁₉ NO ₃	甲醇	3.435	[M+H] ⁺	226.1	107/135/151.9	32/28/16
169	可乐定	Clonidine	4205-90-7	C ₉ H ₉ Cl ₂ N ₃	甲醇	4.262	[M+H] ⁺	230	213/100/160	26/38/34
170	卡洛芬	Carprofen	53716-49-7	C ₁₅ H ₁₂ ClNO ₂	乙腈	15.256	[M-H] ⁻	272	227.9/225.9/190	12/28/52
171	克拉霉素	Clarithromycin	81103-11-9	C ₃₈ H ₆₉ NO ₁₃	甲醇	13.456	[M+H] ⁺	748.5	590.4/158.1/83	20/40/40
172	克林霉素	Clindamycin	18323-44-9	C ₁₈ H ₃₃ ClN ₂ O ₅ S	甲醇	8.100	[M+H] ⁺	425.2	377.2/126.1/389.2	20/20/16
173	克伦普罗	Clenproperol	38339-11-6	C ₁₁ H ₁₆ Cl ₂ N ₂ O	甲醇	5.434	[M+H] ⁺	263	132/202.9/245.8	28/20/8
174	克伦塞罗	Clencyclohexerol	157877-79-7	C ₁₄ H ₂₀ Cl ₂ N ₂ O ₂	甲醇	4.706	[M+H] ⁺	319.2	132.1/202.9/301	40/20/12
175	克伦特罗	Clenbuterol	37148-27-9	C ₁₂ H ₁₈ Cl ₂ N ₂ O	甲醇	6.470	[M+H] ⁺	277.1	259.1/203/168.1	4/12/28
176	孔雀石绿	Malachite green	569-64-2	C ₂₃ H ₂₅ ClN ₂	甲醇	14.207	[M+H] ⁺	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 (min)	加成 离子	母离子 (m/z)	典型二级碎片离子 (m/z)	碰撞能量 (eV)
177	喹烯酮	Quinocetone	81810-66-4	C ₁₈ H ₁₄ N ₂ O ₃	甲醇	13.710	[M+H] ⁺	307	273/197/131.1	20/20/24
178	卡硝唑	Carnidazole	42116-76-7	C ₈ H ₁₂ N ₄ O ₃ S	甲醇	9.206	[M+H] ⁺	245	118/75.2/58.1	4/36/40
179	喹乙醇	Olaquinox	23696-28-8	C ₁₂ H ₁₃ N ₃ O ₄	甲醇	3.714	[M+H] ⁺	264.1	230/143/102	16/40/56
180	癸氧喹酯	Decoquinat	18507-89-6	C ₂₄ H ₃₅ NO ₅	二氯甲烷	17.085	[M+H] ⁺	418.3	372.2/232.1/204	24/36/48
181	唑啉心安	Carazolol	57775-29-8	C ₁₈ H ₂₂ N ₂ O ₂	甲醇	8.329	[M+H] ⁺	299	222.2/116.1/56.2	20/20/40
182	氯苯胍	Robenidine	25875-50-7	C ₁₅ H ₁₄ Cl ₃ N ₅	甲醇	14.167	[M+H] ⁺	333.9	154.8/138.1/111	20/32/40
183	拉贝洛尔	Labetalol	36894-69-6	C ₁₉ H ₂₄ N ₂ O ₃	甲醇	8.408	[M+H] ⁺	329	310.9/161.9/91	12/32/36
184	氯丙那林	Clorprenaline	3811-25-4	C ₁₁ H ₁₆ ClNO	甲醇	5.502	[M+H] ⁺	214.1	196/153.9/118	8/12/24
185	氯苯那敏	Chloropheniramine	132-22-9	C ₁₆ H ₁₉ ClN ₂	甲醇	6.778	[M+H] ⁺	275	229.9/201/167	20/40/40
186	氯丙嗪	Chlorpromazine	50-53-3	C ₁₇ H ₁₉ ClN ₂ S	甲醇	13.520	[M+H] ⁺	319.1	86.1/58.2/214	16/44/40
187	利巴韦林	Ribavirin	36791-04-5	C ₈ H ₁₂ N ₄ O ₅	甲醇	1.412	[M+H] ⁺	245	112.8/95.9/209.2	9/29/20
188	利多卡因	Lidocaine	137-58-6	C ₁₄ H ₂₂ N ₂ O	甲醇	5.538	[M+H] ⁺	235.1	58.4/86.2/234	36/24/0
189	龙胆紫	Crystal violet	548-62-9	C ₂₅ H ₃₀ ClN ₃	甲醇	14.893	[M+H] ⁺	372.3	356.1/340/235	44/55/55
190	利福霉素 S	Rifamycin S	13553-79-2	C ₃₇ H ₄₅ NO ₁₂	甲醇	16.577	[M+Na] ⁺	718.3	658/572/546.1	36/40/40
191	氯化氮氨菲啶	Isometamidium chloride	34301-55-8	C ₂₈ H ₂₆ ClN ₇	甲醇	7.304	[M+H] ⁺	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 (min)	加成 离子	母离子 (m/z)	典型二级碎片离子 (m/z)	碰撞能量 (eV)
192	罗红霉素	Roxithromycin	80214-83-1	C ₄₁ H ₇₆ N ₂ O 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 ₂ N 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 ₂ O ₆ S	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 ₂ N ₂ O 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 ₄ O ₃ S	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 ₇ H ₇ Cl ₂ NO	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 半胱氨酸	3-Methylseleno-L- alanine	26046-90-2	C ₄ H ₉ NO ₂ Se	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 ₂ O 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 ₆ H ₈ N ₄ O 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 ₃ O ₅ S	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 ₄ O 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 ₃ N ₂ O	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 (min)	加成 离子	母离子 (m/z)	典型二级碎片离子 (m/z)	碰撞能量 (eV)
207	马杜霉素	Maduramicin	61991-54-6	C ₄₇ H ₈₀ O ₁₇	甲醇	20.154	[M+Na] ⁺	939.5	895.4/877.4/859.4	48/28/50
208	麦迪霉素	Midecamycin	35457-80-8	C ₄₁ H ₆₇ NO ₁₅	甲醇	13.647	[M+H] ⁺	814.5	108.8/174.1/614.5	40/40/28
209	美金刚	Memantine	19982-08-2	C ₁₂ H ₂₁ N	甲醇	8.425	[M+H] ⁺	180	91.1/107.1/163.1	40/28/16
210	咪喹莫特	Imiquimod	99011-02-6	C ₁₄ H ₁₆ N ₄	甲醇	7.705	[M+H] ⁺	241	185.2/168/57.2	28/40/32
211	米诺地尔	Minoxidil	38304-91-5	C ₉ H ₁₅ N ₅ O	甲醇	5.347	[M+H] ⁺	210	193.1/163.9/84	16/24/28
212	吗啉呱	Moroxydine	3731-59-7	C ₆ H ₁₃ N ₅ O	乙腈	1.397	[M+H] ⁺	172.1	130.1/113.1/60.5	15/20/36
213	马拉硫磷	Malathion	121-75-5	C ₁₀ H ₁₉ O ₆ PS ₂	乙腈	15.806	[M+H] ⁺	331	285/126.9/99	10/5/5
214	美洛昔康	Meloxicam	71125-38-7	C ₁₄ H ₁₃ N ₃ O ₄ S ₂	乙腈	14.726	[M+H] ⁺	352	140.9/115/73	16/16/44
215	莫能菌素	Monensin	17090-79-8	C ₃₆ H ₆₂ O ₁₁	甲醇	20.405	[M+Na] ⁺	693.5	675.3/479.3/461.3	40/60/60
216	马喷特罗	Mapenterol	95656-68-1	C ₁₄ H ₂₀ ClF ₃ N ₂ O	甲醇	9.176	[M+H] ⁺	325.1	306.9/236.8/216.9	8/16/28
217	美他环素	Methacycline	914-00-1	C ₂₂ H ₂₂ N ₂ O ₈	甲醇	7.999	[M+H] ⁺	443.1	426.1/201.1/213.1	20/40/40
218	美托洛尔	Metoprolol	37350-58-6	C ₁₅ H ₂₅ NO ₃	甲醇	6.315	[M+H] ⁺	268.2	56.3/74.1/116	36/24/20
219	莫奈太尔	Monepantel	887148-69-8	C ₂₀ H ₁₃ F ₆ N ₃ O ₂ S	乙腈	16.300	[M+H] ⁺	474	204.9/221.9/446.9	28/12/12
220	莫西菌素	Moxidectin	113507-06-5	C ₃₇ H ₅₃ NO ₈	甲醇	18.255	[M+H] ⁺	640.3	622.2/528.4/498.4	12/4/8
221	莫西沙星	Moxifloxacin	151096-09-2	C ₂₁ H ₂₄ FN ₃ O ₄	甲醇	7.460	[M+H] ⁺	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 (min)	加成 离子	母离子 (m/z)	典型二级碎片离子 (m/z)	碰撞能量 (eV)
222	美雄酮	Metandienone	72-63-9	C ₂₀ H ₂₈ O ₂	甲醇	14.332	[M-H] ⁻	301.3	149.2/121.1/93.1	14/26/42
223	萘啶酸	Nalidixic acid	389-08-2	C ₁₂ H ₁₂ N ₂ O ₃	甲醇	12.087	[M+H] ⁺	233.1	215.1/159.1/187	20/40/28
224	那氟沙星	Nadifloxacin	124858-35-1	C ₁₉ H ₂₁ FN ₂ O ₄	甲醇	12.077	[M+H] ⁺	361	343/282.9/256.9	24/40/40
225	诺氟沙星	Norfloxacin	70458-96-7	C ₁₆ H ₁₈ FN ₃ O ₃	甲醇	5.048	[M+H] ⁺	320.1	302.1/282.1/231.1	25/35/40
226	萘夫西林	Nafcillin	147-52-4	C ₂₁ H ₂₂ N ₂ O ₅ S	甲醇	14.484	[M+H] ⁺	415	256.2/199.1/171	22/14/38
227	尼卡巴嗪	Nicarbazin	330-95-0	C ₁₉ H ₁₈ N ₆ O ₆	乙腈: DMF(9:1)	15.773	[M-H] ⁻	301.1	137/106.9/46.3	20/45/59
228	诺龙	Nandrolone	434-22-0	C ₁₈ H ₂₆ O ₂	乙腈	14.229	[M+H] ⁺	275.2	109/77.1/79.1	32/64/56
229	萘普生	Naproxen	22204-53-1	C ₁₄ H ₁₄ O ₃	甲醇	14.518	[M+H] ⁺	231	153.1/170.1/185.1	36/32/12
230	尼日利亚菌素	Nigericin	28380-24-7	C ₄₀ H ₆₈ O ₁₁	甲醇	21.233	[M+NH ₄] ⁺	742.5	657.1/125/107	28/60/70
231	那他霉素	Natamycin	7681-93-8	C ₃₃ H ₄₇ NO ₁₃	甲醇	10.970	[M+H] ⁺	666.4	648.4/503.2/467.2	8/8/8
232	喷布特罗	Penbutolol	38363-40-5	C ₁₈ H ₂₉ NO ₂	甲醇	13.371	[M+H] ⁺	292.2	236/133/201	12/24/8
233	培氟沙星	Pefloxacin	70458-92-3	C ₁₇ H ₂₀ FN ₃ O ₃	甲醇	5.182	[M+H] ⁺	334.2	290.1/233.1/316.2	16/28/20
234	普鲁卡因	Procaine	59-46-1	C ₁₃ H ₂₀ N ₂ O ₂	乙腈	3.999	[M+H] ⁺	237.3	100.3/120.1/164.2	16/32/16
235	哌拉西林	Piperacillin	61477-96-1	C ₂₃ H ₂₇ N ₅ O ₇ S	甲醇	10.849	[M+H] ⁺	518.2	159.2/143/114.9	70/20/70
236	普萘洛尔	Propranolol	525-66-6	C ₁₆ H ₂₁ NO ₂	甲醇	9.219	[M+H] ⁺	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 (min)	加成 离子	母离子 (m/z)	典型二级碎片离子 (m/z)	碰撞能量 (eV)
237	泼尼松	Prednisone	53-03-2	C ₂₁ H ₂₆ O ₅	甲醇	10.606	[M+HCOO] ⁻	403.3	299.4/327.3/357.2	16/12/4
238	泼尼松龙	Prednisolone	50-24-8	C ₂₁ H ₂₈ O ₅	甲醇	10.565	[M+HCOO] ⁻	405.3	329.4/295.2/280.2	10/34/34
239	曲安奈德	Triamcinolone acetonide	76-25-5	C ₂₄ H ₃₁ FO ₆	乙腈	13.681	[M+H] ⁺	435.2	415.2/397.1/339.1	8/16/12
240	曲安西龙	Triamcinolone	124-94-7	C ₂₁ H ₂₇ FO ₆	甲醇	8.936	[M+H] ⁺	395.2	375/357.2/225.1	8/12/20
241	全氟辛酸	Perfluorooctanoic acid	335-67-1	C ₈ HF ₁₅ O ₂	乙腈	15.020	[M-H] ⁻	412.9	368.9/219/169	4/12/16
242	全氟辛烷磺酸	Perfluorooctanesulfonic acid	1763-23-1	C ₈ HF ₁₇ O ₃ S	甲醇	16.818	[M-H] ⁻	498.9	130/99/80	50/55/80
243	醛固酮	Aldosterone	52-39-1	C ₂₁ H ₂₈ O ₅	乙腈	9.558	[M+H] ⁺	361.1	315.1/325/343	16/20/16
244	青蒿琥酯	Artesunate	88495-63-0	C ₁₉ H ₂₈ O ₈	甲醇	15.340	[M+Na] ⁺	407	163.1/261/289.1	22/14/14
245	氢化可的松	Hydrocortisone	50-23-7	C ₂₁ H ₃₀ O ₅	甲醇	10.786	[M+H] ⁺	363.4	327.2/121.1/309.2	8/20/20
246	羟基甲硝唑	Hydroxymetronidazole	4812-40-2	C ₆ H ₉ N ₃ O ₄	甲醇	3.566	[M+H] ⁺	188.1	126.1/123.1/68.1	16/8/24
247	多西环素	Doxycycline	564-25-0	C ₂₂ H ₂₄ N ₂ O ₈	甲醇	8.365	[M+H] ⁺	445.2	428.1/410/321.1	16/24/28
248	氢氯噻嗪	Hydrochlorothiazide	58-93-5	C ₇ H ₈ ClN ₃ O ₄ S ₂	甲醇	4.839	[M-H] ⁻	296	77.9/205/268.9	36/24/20
249	青霉素 G	Penicillin G	61-33-6	C ₁₆ H ₁₈ N ₂ O ₄ S	水	11.689	[M+H] ⁺	335.1	176/160.1/114	8/8/18
250	青霉素 V 钾	Penicillin V potassium	132-98-9	C ₁₆ H ₁₇ KN ₂ O ₅ S	甲醇	12.603	[M+H] ⁺	351	160/114.1/192	8/36/8
251	群勃龙	Trenbolone	10161-33-8	C ₁₈ H ₂₂ O ₂	乙腈	13.737	[M+H] ⁺	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 (min)	加成 离子	母离子 (m/z)	典型二级碎片离子 (m/z)	碰撞能量 (eV)
252	炔诺酮	Norethindrone	68-22-4	C ₂₀ H ₂₆ O ₂	乙腈	14.729	[M+H] ⁺	299.2	231.2/109.1/104.9	16/28/32
253	齐帕特罗	Zilipaterol	117827-79-9	C ₁₄ H ₁₉ N ₃ O ₂	甲醇	3.531	[M+H] ⁺	262.2	244.2/185.1/202.1	6/22/16
254	噻苯达唑	Thiabendazole	148-79-8	C ₁₀ H ₇ N ₃ S	甲醇	4.448	[M+H] ⁺	202	175/131/65	24/36/52
255	舒巴坦	Sulbactam	68373-14-8	C ₈ H ₁₁ NO ₅ S	水	4.413	[M-H] ⁻	232	140.1/64.1/188	12/44/8
256	杀虫脒	Chlordimeform	6164-98-3	C ₁₀ H ₁₃ ClN ₂	乙腈	5.962	[M+H] ⁺	197.1	117/46.2/89	32/16/45
257	沙丁胺醇	Salbutamol	18559-94-9	C ₁₃ H ₂₁ NO ₃	甲醇	3.531	[M+H] ⁺	240.2	166.1/148.1/77.2	4/16/60
258	苏丹红 I	Sudan I	842-07-9	C ₁₆ H ₁₂ N ₂ O	甲醇	17.300	[M+H] ⁺	249	231.9/155.8/127.9	12/16/32
259	苏丹红 II	Sudan II	3118-97-6	C ₁₈ H ₁₆ N ₂ O	甲醇	18.135	[M+H] ⁺	277.1	259.9/121/106.1	12/20/40
260	苏丹红 III	Sudan III	85-86-9	C ₂₂ H ₁₆ N ₄ O	甲醇	18.605	[M+H] ⁺	353.1	197/128/120.1	16/40/24
261	苏丹红 IV	Sudan IV	85-83-6	C ₂₄ H ₂₀ N ₄ O	甲醇	19.783	[M+H] ⁺	380.8	258.8/224.4/106.1	28/20/36
262	三氮脒	Diminazene	536-71-0	C ₁₄ H ₁₅ N ₇	甲醇	5.778	[M+H] ⁺	281.9	207.7/123/118.9	24/32/20
263	双氟沙星	Difloxacin	98106-17-3	C ₂₁ H ₁₉ F ₂ N ₃ O ₃	甲醇	6.747	[M+H] ⁺	400.1	382.1/356.2/299.1	20/16/32
264	四环素	Tetracycline	60-54-8	C ₂₂ H ₂₄ N ₂ O ₈	甲醇	5.649	[M+H] ⁺	445.2	410.1/154.2/98.1	17/30/40
265	三聚氰胺	Melamine	108-78-1	C ₃ H ₆ N ₆	甲醇	1.378	[M+H] ⁺	127.2	110.2/85/68.2	20/24/40
266	塞克硝唑	Secnidazole	3366-95-8	C ₇ H ₁₁ N ₃ O ₃	甲醇	4.743	[M+H] ⁺	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 (min)	加成 离子	母离子 (m/z)	典型二级碎片离子 (m/z)	碰撞能量 (eV)
267	三氯苯达唑	Triclabendazole	68786-66-3	C ₁₄ H ₉ Cl ₃ N ₂ O ₅	甲醇	15.972	[M+H] ⁺	359	343.9/274/242	28/40/60
268	双氯芬酸	Diclofenac	15307-86-5	C ₁₄ H ₁₁ Cl ₂ NO ₂	乙腈	15.556	[M+H] ⁺	296	215.1/214.1/250	16/48/8
269	赛拉嗪	Xylazine	7361-61-7	C ₁₂ H ₁₆ N ₂ S	甲醇	6.332	[M+H] ⁺	221.1	90/72/164.1	40/40/40
270	舒林酸	Sulindac	38194-50-2	C ₂₀ H ₁₇ FO ₃ S	乙腈	13.858	[M+H] ⁺	357.1	340.1/248.1/233.1	20/40/40
271	沙拉沙星	Sarafloxacin	98105-99-8	C ₂₀ H ₁₇ F ₂ N ₃ O ₃	甲醇	6.567	[M+H] ⁺	386.1	368.1/342.1/299.1	20/20/40
272	双氯西林	Dicloxacillin	3116-76-5	C ₁₉ H ₁₇ Cl ₂ N ₃ O ₅ S	甲醇	14.799	[M+H] ⁺	470	256/160/114	40/10/40
273	双咪唑啉	Imidocarb	27885-92-3	C ₁₉ H ₂₀ N ₆ O	甲醇	3.731	[M+H] ⁺	349.3	306.1/188/162	28/28/32
274	虱螨脲	Lufenuron	103055-07-8	C ₁₇ H ₈ Cl ₂ F ₈ N ₂ O ₃	甲醇	16.821	[M-H] ⁻	509	326.1/339/488.9	16/8/4
275	洛美沙星	Lomefloxacin	98079-51-7	C ₁₇ H ₁₉ F ₂ N ₃ O ₃	甲醇	5.525	[M+H] ⁺	352.2	334/308.2/265	20/16/25
276	噻霉酮	Benzisothiazolone	2634-33-5	C ₇ H ₅ NOS	甲醇	6.112	[M+H] ⁺	152.1	105.2/109.1/133.9	28/28/24
277	沙美特罗	Salmeterol	89365-50-4	C ₂₅ H ₃₇ NO ₄	甲醇	13.349	[M+H] ⁺	416	91.1/379.9/398.1	40/24/16
278	司帕沙星	Sparfloxacin	110871-86-8	C ₁₉ H ₂₂ F ₂ N ₄ O ₃	甲醇	6.795	[M+H] ⁺	393.2	375.2/349/292.1	20/20/28
279	双羟萘酸噻嘧啉	Pyrantel pamoate	22204-24-6	C ₃₄ H ₃₀ N ₂ O ₆ S	乙腈	5.317	[M+H] ⁺	207.2	109/136/150.1	40/40/32
280	司坦唑醇	Stanozolol	10418-03-8	C ₂₁ H ₃₂ N ₂ O	乙腈	13.690	[M+H] ⁺	329.1	121.1/95.1/81.2	44/48/48
281	双烯雌酚	Dienestrol	84-17-3	C ₁₈ H ₁₈ O ₂	甲醇	16.171	[M+H] ⁺	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 (min)	加成 离子	母离子 (m/z)	典型二级碎片离子 (m/z)	碰撞能量 (eV)
282	水杨酸	Salicylic acid	69-72-7	C ₇ H ₆ O ₃	乙腈	8.565	[M-H] ⁻	137.2	93.1/75.1/65.1	16/36/36
283	头孢氨苄	Cephalexin	15686-71-2	C ₁₆ H ₁₇ N ₃ O ₄ S	50%乙腈	4.822	[M+H] ⁺	348.1	174/157.9/106	12/10/40
284	头孢唑肟	Cefquinome	84957-30-2	C ₂₃ H ₂₄ N ₆ O ₅ S ₂	50%乙腈	4.003	[M+H] ⁺	529.1	166.9/134.2/125	28/8/60
285	头孢克洛	Cefaclor	53994-73-3	C ₁₅ H ₁₄ ClN ₃ O ₄ S	50%乙腈	3.986	[M+H] ⁺	368.1	174/118/106	20/35/35
286	头孢拉定	Cefradine	38821-53-3	C ₁₆ H ₁₉ N ₃ O ₄ S	50%乙腈	4.846	[M+H] ⁺	350.1	175.9/157.9/90.8	17/8/30
287	头孢洛宁	Cephalonium	5575-21-3	C ₂₀ H ₁₈ N ₄ O ₅ S ₂	50%乙腈	4.911	[M+H] ⁺	459.1	337/152/123.1	8/20/8
288	头孢孟多	Cefamandole	34444-01-4	C ₁₈ H ₁₈ N ₆ O ₅ S ₂	50%乙腈	8.759	[M+H] ⁺	463.1	347/158/140	4/16/32
289	头孢匹林	Cefapirin	21593-23-7	C ₁₇ H ₁₇ N ₃ O ₆ S ₂	50%乙腈	3.987	[M+H] ⁺	424.1	364/291.9/151.9	8/12/28
290	头孢哌酮	Cefoperazone	62893-19-0	C ₂₅ H ₂₇ N ₉ O ₈ S ₂	50%乙腈	7.938	[M+H] ⁺	646.2	530.2/147.9/143	8/60/45
291	头孢曲松	Ceftriaxone	73384-59-5	C ₁₈ H ₁₈ N ₈ O ₇ S ₃	50%乙腈	4.675	[M+H] ⁺	555	395.9/166.9/277	6/26/20
292	头孢噻肟	Cefotaxime	63527-52-6	C ₁₆ H ₁₇ N ₅ O ₇ S ₂	50%乙腈	5.315	[M+H] ⁺	456.1	395.9/324/125	4/8/60
293	头孢噻吩	Ceftiofur	80370-57-6	C ₁₉ H ₁₇ N ₅ O ₇ S ₃	50%乙腈	9.181	[M+H] ⁺	524	241/210/126	16/20/40
294	头孢噻吩	Cephalothin	153-61-7	C ₁₆ H ₁₆ N ₂ O ₆ S ₂	50%乙腈	10.417	[M+Na] ⁺	419	358.8/314.8/203.9	10/14/18
295	特布他林	Terbutaline	23031-25-6	C ₁₂ H ₁₉ NO ₃	甲醇	3.519	[M+H] ⁺	226.1	152.1/107.1/77.1	12/28/56
296	妥布特罗	Tulobuterol	41570-61-0	C ₁₂ H ₁₈ ClNO	甲醇	6.395	[M+H] ⁺	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 (min)	加成 离子	母离子 (m/z)	典型二级碎片离子 (m/z)	碰撞能量 (eV)
297	头孢他美酯	Cefetamet pivoxyl	65243-33-6	C ₂₀ H ₂₅ N ₅ O ₇ S ₂	50%乙醇	13.926	[M+H] ⁺	512.1	241/125.9/57.1	16/52/48
298	头孢西丁	Cefoxitin	35607-66-0	C ₁₆ H ₁₇ N ₃ O ₇ S ₂	50%乙醇	7.833	[M+Na] ⁺	450	388.9/344.9/265.8	10/14/14
299	头孢唑啉	Cefazolin	25953-19-9	C ₁₄ H ₁₄ N ₈ O ₄ S ₃	50%乙醇	6.304	[M+H] ⁺	455	323/156/124	8/11/27
300	酮基布洛芬	Ketoprofen	22071-15-4	C ₁₆ H ₁₄ O ₃	乙醇	14.465	[M+H] ⁺	255.1	209/105/77	12/28/56
301	泰乐菌素	Tylosin	1401-69-0	C ₄₆ H ₇₇ NO ₁₇	甲醇	12.006	[M+H] ⁺	916.5	772.4/174.1/101	30/40/56
302	替诺昔康	Tenoxicam	59804-37-4	C ₁₃ H ₁₁ N ₃ O ₄ S ₂	甲醇	8.776	[M+H] ⁺	338	121/78/95	24/72/30
303	泰妙菌素	Tiamulin	55297-95-5	C ₂₈ H ₄₇ NO ₄ S	甲醇	12.985	[M+H] ⁺	494.3	192.1/119/74.1	20/40/40
304	替米考星	Tilmicosin	108050-54-0	C ₄₆ H ₈₀ N ₂ O ₁₃	甲醇	9.378	[M+H] ⁺	869.6	696.4/174.1/88.1	44/48/70
305	土霉素	Oxytetracycline	79-57-2	C ₂₂ H ₂₄ N ₂ O ₉	甲醇	5.141	[M+H] ⁺	461.2	444/426.1/201.1	16/14/48
306	托吡酸	Tolfenamic acid	13710-19-5	C ₁₄ H ₁₂ ClNO ₂	乙醇	16.297	[M+H] ⁺	262.1	244/209.1/180.1	12/28/48
307	托麦汀	Tolmetin	26171-23-3	C ₁₅ H ₁₅ NO ₃	乙醇	14.200	[M+H] ⁺	258.1	119/91/65	24/44/40
308	脱氢异雄酮	Dehydroepiandrosterone	53-43-0	C ₁₉ H ₂₉ O ₂	乙醇	13.885	[M+H] ⁺	290.3	98.1/109/110.1	30/26/26
309	妥曲珠利	Toltrazuril	69004-03-1	C ₁₈ H ₁₄ F ₃ N ₃ O ₄ S	甲醇	15.916	[M-H] ⁻	424.1	424.1/42.2/385.9	0/16/14
310	妥曲珠利亚砷	Toltrazuril sulfoxide	69004-15-5	C ₁₈ H ₁₄ F ₃ N ₃ O ₅ S	甲醇	14.531	[M-H] ⁻	440	371.2/42.2/332.9	16/24/14
311	泰万菌素	Tylvalosin	63409-12-1	C ₅₃ H ₈₇ NO ₁₉	甲醇	14.342	[M+H] ⁺	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 (min)	加成 离子	母离子 (m/z)	典型二级碎片离子 (m/z)	碰撞能量 (eV)
312	替硝唑	Timidazole	19387-91-8	C ₈ H ₁₃ N ₃ O ₄ S	甲醇	5.567	[M+H] ⁺	248.1	121/82.1/128	20/40/20
313	脱氧卡巴氧	Desoxycarbadox	55456-55-8	C ₁₁ H ₁₀ N ₄ O ₂	甲醇	8.713	[M+H] ⁺	230.9	198.8/142.9/101.9	12/24/40
314	替扎尼定	Tizanidine	51322-75-9	C ₉ H ₈ ClN ₅ S	甲醇	4.014	[M+H] ⁺	254	209.9/69.1/59.2	32/24/32
315	维吉霉素 M ₁	Virginiamycin M ₁	21411-53-0	C ₂₈ H ₃₅ N ₃ O ₇	甲醇	14.105	[M+H] ⁺	526.3	508.1/355/337	12/16/20
316	五氟酚	Pentachlorophenol	87-86-5	C ₆ HCl ₅ O	乙腈	16.465	[M-H] ⁻	262.9	262.9	5
							[M-H+2] ⁻	264.9		
							[M-H+4] ⁻	266.9		
317	溴苯那敏	Brompheniramine	86-22-6	C ₁₆ H ₁₉ BrN ₂	甲醇	8.136	[M+H] ⁺	319.1	167.1/194.1/274	51/51/24
318	溴布特罗	Brombuterol	41937-02-4	C ₁₂ H ₁₈ Br ₂ N ₂ O	甲醇	7.412	[M+H] ⁺	366.7	292.7/348.8/211.9	16/12/32
319	西布特罗	Cimbuterol	54239-39-3	C ₁₃ H ₁₉ N ₃ O	甲醇	4.038	[M+H] ⁺	234.1	143.1/160.1/216	28/12/8
320	烯丙孕素	Altrenogest	850-52-2	C ₂₁ H ₂₆ O ₂	甲醇	15.404	[M+H] ⁺	311.2	227.1/252/269.2	24/20/12
321	硝碘酚腈	Nitroximil	1689-89-0	C ₇ H ₃ IN ₂ O ₃	乙腈	13.904	[M-H] ⁻	288.9	162/127/259	20/28/16
322	溴代克伦特罗	Bromclenbuterol	37153-52-9	C ₁₂ H ₁₈ BrClN ₂ O	甲醇	6.913	[M+H] ⁺	322.6	304.7/248.6/168	12/16/36
323	硝呋烯腈	Nitrovin	804-36-4	C ₁₄ H ₁₂ N ₆ O ₆	甲醇	11.090	[M+H] ⁺	361.1	221.9/58.1/199	16/32/40
324	溴化新斯的明	Neostigmine bromide	114-80-7	C ₁₂ H ₁₉ BrN ₂ O ₂	乙腈	3.974	[M+H] ⁺	223.2	72.2/151.1/207.9	36/28/24
325	辛硫磷	Phoxim	14816-18-3	C ₁₂ H ₁₅ N ₂ O ₃ PS	乙腈	16.563	[M+H] ⁺	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 (min)	加成 离子	母离子 (m/z)	典型二级碎片离子 (m/z)	碰撞能量 (eV)
326	新螺旋霉素 I	Neospiramycin I	70253-62-2	C ₃₆ H ₆₂ N ₂ O ₁₁	甲醇	6.346	[M+H] ⁺	699.4	540.4/522/482.3	18/18/34
327	溴莫尼定	Brimonidine	59803-98-4	C ₁₁ H ₁₀ BrN ₅	甲醇	3.682	[M+H] ⁺	292	248.7/211.8/170.2	40/36/36
328	西马特罗	Cimaterol	54239-37-1	C ₁₂ H ₁₇ N ₃ O	甲醇	3.651	[M+H] ⁺	220.1	160.1/143.1/116.1	12/20/36
329	西诺沙星	Cinoxacin	28657-80-9	C ₁₂ H ₁₀ N ₂ O ₅	甲醇	8.305	[M+H] ⁺	263	244.9/216.8/188.8	16/24/32
330	溴氟菊酯	Deltamethrin	52918-63-5	C ₂₂ H ₁₉ Br ₂ NO ₃	乙腈	18.473	[M+NH ₄] ⁺	523	463.2/381.2/365.1	28/28/24
331	异丙嗪	Promethazine	60-87-7	C ₁₇ H ₂₀ N ₂ S	甲醇	11.301	[M+H] ⁺	285.1	198/86.1/71.1	40/40/40
332	异丙硝唑	Ipronidazole	14885-29-1	C ₇ H ₁₁ N ₃ O ₂	甲醇	8.292	[M+H] ⁺	170.1	124/109/81.1	16/24/36
333	蝇毒磷	Coumaphos	56-72-4	C ₁₄ H ₁₆ ClO ₃ PS	乙腈	16.464	[M+H] ⁺	363	334.9/226.9/307	16/32/20
334	吡喹酮	Indometacin	53-86-1	C ₁₉ H ₁₆ ClNO ₄	乙腈	15.561	[M+H] ⁺	358.1	138.9/110.9/75.1	24/68/80
335	氧氟沙星	Ofloxacin	82419-36-1	C ₁₈ H ₂₀ FN ₃ O ₄	甲醇	5.116	[M+H] ⁺	362.2	221.1/261.1/318.2	40/40/20
336	盐霉素	Salinomycin	53003-10-4	C ₄₂ H ₇₀ O ₁₁	甲醇	17.824	[M+Na] ⁺	773.6	531.5/431.3/775.3	50/50/40
337	依诺沙星	Enoxacin	74011-58-8	C ₁₅ H ₁₇ FN ₄ O ₃	甲醇	4.864	[M+H] ⁺	321.1	303.3/277.1/234	16/16/24
338	依普菌素	Eprinomectin	123997-26-2	C ₅₀ H ₇₅ NO ₁₄	甲醇	17.545	[M+Na] ⁺	936.5	490.2/352.1/223.9	56/60/66
339	盐酸氨丙啉	Amprolium hydrochloride	137-88-2	C ₁₄ H ₂₀ N ₄ Cl ₂	甲醇	1.421	[M+H] ⁺	243.2	81.2/94.1/150.2	40/12/8
340	盐酸苯氧丙胺	Isoxsuprine hydrochloride	579-56-6	C ₁₈ H ₂₄ ClNO ₃	甲醇	7.701	[M+H] ⁺	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 (min)	加成 离子	母离子 (m/z)	典型二级碎片离子 (m/z)	碰撞能量 (eV)
341	盐酸金刚乙胺	Rimantadine hydrochloride	1501-84-4	C ₁₂ H ₂₂ ClN	甲醇	8.145	[M+H] ⁺	180.2	163.1/81.1/79.2	16/28/40
342	盐酸克伦潘特	Clenpenterol hydrochloride	37158-47-7	C ₁₃ H ₂₁ Cl ₃ N ₂ O	甲醇	7.772	[M+H] ⁺	291.1	132/202.7/272.8	32/16/8
343	隐色孔雀石绿	Leucomalachite green	129-73-7	C ₂₃ H ₂₆ N ₂	甲醇	11.042	[M+H] ⁺	331.2	316.2/239.2/223.1	20/28/60
344	隐色龙胆紫	Leucocystal violet	603-48-5	C ₂₅ H ₃₁ N ₃	甲醇	5.685	[M+H] ⁺	374	358.1/252.9/237.9	28/32/32
345	盐酸沃尼妙林	Valnemulin hydrochloride	133868-46-9	C ₃₁ H ₅₃ ClN ₂ O ₅ S	甲醇	13.686	[M+H] ⁺	565.1	262.9/164/285.2	16/36/16
346	盐酸赛庚啉	Cyproheptadine hydrochloride	969-33-5	C ₂₁ H ₂₂ NCl	甲醇	12.502	[M+H] ⁺	288	215/191.1/96	40/30/32
347	盐酸赛拉唑	Xylazole hydrochloride	123941-49-1	C ₁₁ H ₁₃ ClN ₂ S	甲醇	7.181	[M+H] ⁺	205.2	79.1/99/105.2	40/28/24
348	异噻唑啉酮	Isothiazolinones	26172-55-4	C ₄ H ₄ ClNOS	甲醇	5.397	[M+H] ⁺	150.1	58.1/86.9/135	40/36/28
349	茚酮苯丙酸	Indoprofen	31842-01-0	C ₁₇ H ₁₅ NO ₃	乙腈	13.635	[M+H] ⁺	282.1	236.1/77.1/218	20/76/40
350	伊维菌素	Ivermectin	70288-86-7	C ₄₈ H ₇₄ O ₁₄	乙腈	19.421	[M+Na] ⁺	897.5	753.4/183/329.3	52/56/60
351	N-乙酰氨基苯砒	N-Acetyldapsone	565-20-8	C ₁₄ H ₁₄ N ₂ O ₃ S	甲醇	8.122	[M+H] ⁺	291.1	108/155.8/197.9	36/16/12
352	乙酰丙嗪	Acepromazine	61-00-7	C ₁₉ H ₂₂ N ₂ OS	甲醇	11.384	[M+H] ⁺	327.2	222.1/86.1/58.1	40/20/40
353	乙酰甲嗪	Mequindox	13297-17-1	C ₁₁ H ₁₀ N ₂ O ₃	乙腈	6.056	[M+H] ⁺	218.9	185.1/143/102	20/20/40
354	乙氧酰胺苯甲酯	Ethopabate	59-06-3	C ₁₂ H ₁₅ NO ₄	甲醇	9.837	[M+H] ⁺	238.1	205.9/135.9/164.1	4/36/20
355	竹桃霉素	Oleandomycin	3922-90-5	C ₃₃ H ₆₁ NO ₁₂	甲醇	9.899	[M+H] ⁺	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 (min)	加成 离子	母离子 (m/z)	典型二级碎片离子 (m/z)	碰撞能量 (eV)
356	左旋咪唑	Levamisole	14769-73-4	C ₁₁ H ₁₂ N ₂ S	乙腈	4.487	[M+H] ⁺	205.1	178.1/123/91.1	20/32/44
357	1-甲基-5-硝基-2-羟甲基咪唑	1-Methyl-5-nitro-1H-imidazole-2-methanol	936-05-0	C ₃ H ₇ N ₃ O ₃	甲醇	3.938	[M+H] ⁺	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 ₈ H ₁₁ N	甲醇	4.372	[M+H] ⁺	122	106.9/79/77	16/24/32
359	2-氨基氟苯咪唑	2-Aminoflumbenzazole	82050-13-3	C ₁₄ H ₁₀ FN ₃ O	甲醇	7.724	[M+H] ⁺	256.1	123/95/133.1	40/40/40
360	2-喹啉羧酸	2-Quinoxalinecarboxylic acid	879-65-2	C ₉ H ₆ N ₂ O ₂	甲醇	2.878	[M+H] ⁺	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 ₈ H ₉ N ₃ O ₃	乙腈	4.349	[M+H] ⁺	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 ₁₀ H ₈ N ₂ O ₂	甲醇	6.669	[M+H] ⁺	189.1	145.1/143/77	10/15/30
363	3-羧基克百威	3-Hydroxycarbofuran	16655-82-6	C ₁₂ H ₁₅ NO ₄	乙腈	7.576	[M+H] ⁺	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 ₇ H ₆ N ₂ O ₅	乙腈	14.498	[M-H] ⁻	197	179.9/137.1/121.9	20/20/28
365	4-氨基安替比林	4-Aminoantipyrine	83-07-8	C ₁₁ H ₁₃ N ₃ O	甲醇	3.827	[M+H] ⁺	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 ₁₂ H ₁₅ N ₃ O	甲醇	3.828	[M+H] ⁺	218.1	190.8/146.9/56.1	28/40/28
367	4-甲酰氨基安替比林	4-Formylaminoantipyrine	1672-58-8	C ₁₂ H ₁₃ N ₃ O ₂	乙腈	4.910	[M+H] ⁺	232.1	104/83/213.9	20/20/12
368	4-硝基苯酚	4-Nitrophenol	100-02-7	C ₆ H ₅ NO ₃	乙腈	9.181	[M-H] ⁻	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 ₁₃ H ₁₅ N ₃ O ₂	甲醇	4.896	[M+H] ⁺	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 (min)	加成 离子	母离子 (m/z)	典型二级碎片离子 (m/z)	碰撞能量 (eV)
370	5-羟基噻苯咪唑	5-Hydroxythiabenzodazole	948-71-0	C ₁₀ H ₇ N ₃ OS	甲醇	3.972	[M+H] ⁺	218	191/147.1/81	32/40/45
371	5-羟基甲基咪唑	5-Hydroxymethylbenzodazole	60254-95-7	C ₁₆ H ₁₅ N ₃ O ₃	甲醇	6.842	[M+H] ⁺	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 ₉ H ₆ ClNO	甲醇	9.264	[M+H] ⁺	180	117.1/127/145.1	36/40/28
373	19-去甲-4-雄烯二酮	Norandrostenedione	734-32-7	C ₁₈ H ₂₄ O ₂	甲醇	14.507	[M+H] ⁺	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 $\mu\text{g}/\text{mL}$ ）：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 $\mu\text{g}/\text{mL}$ ）：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 ng/mL ）：准确移取混合标准中间溶液（B.1.14）50 μL ，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 μm ，有机系。

B.2 仪器设备

B.2.1 液相色谱-串联质谱仪：带电喷雾离子源。

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 μm 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: C_{18} 柱, 柱长150 mm, 内径3.0 mm, 粒径1.8 μm , 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 μL ;

梯度洗脱程序见下表。

梯度洗脱程序

时间 min	流动相 A %	流动相 B %
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。