

化妆品中二甲硝咪唑等 120 种原料的检验方法

Determination of Dimetridazole and Other 119 Kinds of Components in Cosmetics

1 范围

本方法规定了化妆品中二甲硝咪唑等120种抗感染药物的液相色谱-质谱联用法，包括定性筛查方法与定量测定方法。

本方法适用于水剂类、膏霜乳液类、凝胶类、粉类、蜡基类、油基类等化妆品中二甲硝咪唑等120种原料的定性筛查与定量测定。

本方法所包含的二甲硝咪唑等120种原料的中文名称、英文名称、CAS号等信息详见附录A。

2 方法提要

本方法以乙腈为溶剂提取样品中二甲硝咪唑等120种原料，采用高效液相色谱仪分离，质谱检测器检测，根据保留时间和特征离子对的相对丰度比定性，定量离子对峰面积定量，以标准曲线法计算含量。

本方法中二甲硝咪唑等120种原料的检出限、定量下限及取样量为0.5g时检出浓度和最低定量浓度见附录B。

3 试剂和材料

除另有规定外，本方法所用试剂均为分析纯或以上规格，水为 GB/T 6682 规定的一级水。

3.1 甲醇，色谱纯。

3.2 乙腈，色谱纯。

3.3 甲酸，色谱纯。

3.4 氢氧化钠。

3.5 三乙胺。

3.6 硫酸二甲酯。

3.7 石油醚（30~60℃）。

3.8 氢氧化钠溶液：称取1.2 g氢氧化钠（3.4），置于250mL烧杯中，加入100mL水，用玻璃棒搅拌至溶解，即得。

3.9 含0.1%甲酸的20%乙腈溶液：量取20mL乙腈（3.2）于100mL容量瓶中，加入0.1mL甲酸（3.3），用水稀释并定容至刻度，摇匀，即得。

3.10 0.4%甲酸溶液：准确量取2mL甲酸（3.3），置500mL容量瓶中，用水稀释并定容至刻度，摇匀，即得。

3.11标准品：二甲硝咪唑等120种原料的标准品信息详见附录A。

为方便标准品溶液的配制，将120种原料分为三组，第一组为依诺沙星、米诺环素、甲氯环素、磺胺苯吡唑、红霉素、螺旋霉素、替米考星、新康唑、伊曲康唑共9种，第二组为特比萘芬、萘替芬、联苯苄唑共3种，第三组为二甲硝咪唑等其余108种。

3.12单标标准储备溶液：精密称取二甲硝咪唑等120种原料的标准品（3.11）各10 mg（精确至0.00001 g），置于不同10mL容量瓶中，加甲醇（3.1）使溶解并定容至刻度（标准品为盐酸盐、硝酸盐等盐类形态时加少量水助溶，吡咯米酸、恶唑酸、西诺沙星、氟罗沙星、克林沙星、妥舒沙星、磺胺嘧啶等标准品加少量甲酸助溶，呋喃妥因、呋喃唑酮加少量乙腈助溶），摇匀，制得质量浓度均为1 mg/mL的120种单标标准品储备溶液。

3.13混合标准溶液（1）：分别准确量取第一组原料的单标标准储备溶液（3.12）各1 mL，置于同一个20 mL容量瓶中，用乙腈（3.2）稀释并定容至刻度，制成质量浓度为50 μ g/mL的混合标准溶液（1）。

3.14混合标准溶液（2）：分别准确量取第二组原料的单标标准储备溶液（3.12）各100 μ L、第三组除环吡酮胺外的单标标准储备溶液（3.12）各1 mL，置于同一个200 mL容量瓶中，用乙腈（3.2）稀释并定容至刻度，制成第二组原料的质量浓度为0.5 μ g/mL、第三组原料的质量浓度为5 μ g/mL的混合标准溶液（2）。

3.15环吡酮胺标准溶液：准确量取环吡酮胺标准储备溶液（3.12）100 μ L，置于50mL容量瓶中，用乙腈（3.2）稀释至刻度，摇匀，即得质量浓度为2 μ g/mL的环吡酮胺标准溶液。

3.16 0.1%甲酸溶液：准确量取1mL甲酸（3.3），置1000mL容量瓶中，用水稀释并定容至刻度，摇匀，即得。

3.17 0.1%甲酸乙腈溶液：准确量取1mL甲酸（3.3），置1000mL容量瓶中，用乙腈（3.2）稀释并定容至刻度，摇匀，即得。

4仪器和设备

4.1高效液相色谱-三重四极杆质谱联用仪。

4.2 天平。

4.3超声波清洗仪。

4.4 可控温离心机，转速不低于10000 r/min。

4.5 涡旋混合仪。

4.6 水浴锅。

4.7 微孔滤膜（0.22 μ m）。

5测定步骤

5.1 定性筛查

5.1.1 筛查用标准溶液的制备

5.1.1.1 除环吡酮胺外119种原料的筛查用标准溶液：分别准确量取混合标准溶液（1）（3.13）和混合标准溶液（2）（3.14）各100 μL ，置于同一个25 mL容量瓶中，用含0.1%甲酸的20%乙腈溶液（3.9）稀释至刻度，摇匀，制成第一组原料的质量浓度为200ng/mL、第二组原料的质量浓度为2 ng/mL、第三组原料的质量浓度为20ng/mL的筛查用混合标准溶液。

5.1.1.2 环吡酮胺筛查用标准溶液：准确量取环吡酮胺标准溶液（3.15）50 μL 于玻璃试管中，加乙腈（3.2）至1 mL，照“5.1.2.2”下方法，自“准确加入氢氧化钠溶液（3.8）0.5 mL”起同法操作，制成环吡酮胺筛查用标准溶液。

5.1.2 样品处理

5.1.2.1 样品处理（用于除环吡酮胺外119种原料）

5.1.2.1.1 水剂类、膏霜乳液类、凝胶类、粉类、油基类样品：准确称取样品0.5g（精确至0.0001g），置于10 mL具塞比色管中，加乙腈（3.2）2 mL，振摇（必要时超声处理）使样品分散均匀。加乙腈（3.2）至10mL，剧烈振摇3min，超声处理20min，取出，放置至室温，涡旋10 s，转移至具塞离心管中，密塞，以10000r/min转速4 $^{\circ}\text{C}$ 离心10min，吸取乙腈提取液，备用。

准确量取上述乙腈提取液1mL，至5mL容量瓶中，加0.4%甲酸溶液（3.10）至刻度，摇匀，转移至具塞离心管中，密塞，以10000r/min转速4 $^{\circ}\text{C}$ 离心10min，吸取澄清溶液，经微孔滤膜（0.22 μm ）（4.7）过滤，取续滤液，作为除环吡酮胺外119种原料的待测溶液。

5.1.2.1.2 蜡基类样品：准确称取样品0.5g（精确至0.0001g），置于10 mL具塞比色管中，加石油醚（30~60 $^{\circ}\text{C}$ ）（3.7）2 mL，振摇（必要时超声处理）使样品分散均匀。加乙腈（3.2）至10mL，剧烈振摇3min，超声处理20min，取出，放置至室温，涡旋10 s，转移至具塞离心管中，密塞，以10000r/min转速4 $^{\circ}\text{C}$ 离心10min，吸取乙腈提取液，备用。

准确量取上述乙腈提取液1mL，至5mL容量瓶中，加0.4%甲酸溶液（3.10）至刻度，摇匀，转移至具塞离心管中，密塞，以10000r/min转速4 $^{\circ}\text{C}$ 离心10min，吸取澄清溶液，经微孔滤膜（0.22 μm ）（4.7）过滤，取续滤液，作为除环吡酮胺外119种原料的待测溶液。

5.1.2.2 样品处理（环吡酮胺）

准确量取“5.1.2.1”项下备用的乙腈提取液1 mL，置于玻璃试管中，准确加入氢氧化钠溶液（3.8）0.5 mL，混匀，再准确加入硫酸二甲酯（3.6）50 μL ，涡旋30s，置于37 $^{\circ}\text{C}$ 水浴中15min，取出，准确加入三乙胺（3.5）50 μL ，涡旋30s，经微孔滤膜（0.22 μm ）（4.7）过滤，取续滤液，作为环吡酮胺的待测溶液。

注：硫酸二甲酯毒性强，使用时最好佩戴防毒面具，保持实验室通风，并密封贮存于干燥通风处，远离火种、热源，防止阳光直射。

5.1.3 参考液相色谱-三重四极杆质谱联用条件

5.1.3.1 色谱条件

色谱柱： C_{18} 柱（100mm \times 2.1mm \times 3.5 μm ）或等效色谱柱；

流动相：正离子模式下，水相为0.1%甲酸溶液（3.16），有机相为0.1%甲酸乙腈溶液（3.17）；负离子模式下，水相为水，有机相为乙腈（3.2）；梯度洗脱程序见表1。

表 1 流动相梯度洗脱程序

时间/min	V（水相）/%	V（有机相）/%
0.00	95	5
1.00	95	5
4.00	80	20
8.00	40	60
9.00	5	95
11.00	5	95
11.01	95	5
15.00	95	5

流速：0.3mL/min；

柱温：室温；

进样量：5 μ L。

5.1.3.2 质谱条件

离子源：电喷雾离子源（ESI源）；

监测模式：正、负离子多反应监测模式，监测离子对及相关参数设定见附录C（可根据仪器情况进行调整）。

5.1.4 定性判定

取筛查用标准溶液（5.1.1）和待测溶液（5.1.2），照“5.1.3”项下的条件进行测定，必要时用含0.1%甲酸的20%乙腈溶液（3.9）稀释。

样品中如呈现定量离子对和定性离子对的色谱峰，被测原料的特征离子峰保留时间与标准溶液对应的保留时间一致，且选择的定性离子的相对丰度比与相当浓度标准品溶液的定性离子的相对丰度比的最大偏差不超过表 2 的规定，则可以判定样品中存在对应的原料。

表 2 定性确证时相对离子丰度的最大允许偏差

相对离子丰度（k）	k>50%	50% \geq k>20%	20% \geq k>10%	k \leq 10%
允许的最大偏差	\pm 20%	\pm 25%	\pm 30%	\pm 50%

5.2 定量测定

当定性筛查（5.1）结果为阳性时，按下列步骤进行定量测定。

5.2.1 基质标准系列溶液的制备

5.2.1.1 除环吡酮胺外119种原料基质标准系列溶液：取与待测化妆品配方相同或相近的基质空白样品 5份，每份0.5g（精确至0.0001g），置于10 mL具塞比色管中，分别加入混合标准溶液（1）（3.13）和混合标准溶液（2）（3.14）适量，照“5.1.2.1”下方法操作，制成基质标准系列溶液（第一组原料系列溶液的质量浓度分别为200、400、600、800、1000ng/mL，第二组原料系列溶液的质量浓度分别为2、4、6、8、10ng/mL，第三组原料系列溶液的质量浓度分别为20、40、60、80、100ng/mL）。标准系列溶液的浓度范围可根据实际情况进行调整。

5.2.1.2 环吡酮胺基质标准系列溶液：取与待测化妆品配方相同或相近的基质空白样品5份，每份0.5g（精确至0.0001g），置于10 mL具塞比色管中，分别准确加入环吡酮胺标准溶液

(3.15) 适量，照“5.1.2”下方法操作，制成备用乙腈提取液（环吡酮胺的质量浓度分别为100、200、300、400、500ng/mL）。标准系列溶液的浓度范围可根据实际情况进行调整。

分别准确量取不同浓度的备用乙腈提取液1 mL，置于玻璃试管中，准确加入氢氧化钠溶液（3.8）0.5 mL，混匀，再准确加入硫酸二甲酯（3.6）50μL，涡旋30s，置于37℃水浴中15min，取出，准确加入三乙胺（3.5）50μL，涡旋30s，经微孔滤膜（0.22 μm）（4.7）过滤，续滤液作为环吡酮胺基质标准系列溶液。

5.2.2 样品处理

同“5.1.2”。

5.2.3 参考液相色谱-三重四极杆质谱联用条件

同“5.1.3”。

注：当磺胺曲沙唑和磺胺异噁唑、磺胺林和磺胺间甲氧嘧啶等同分异构体采用“5.1.3”项下流动相梯度洗脱程序分离度不佳时，可采用表3所述流动相梯度洗脱程序进行测定。

表 3 流动相梯度洗脱程序

时间/min	V（水相）/%	V（有机相）/%
0.00	95	5
2.00	95	5
8.00	90	10
18.00	78	22
28.00	45	55
33.00	5	95
35.00	5	95
35.01	95	5
40.00	95	5

5.2.4 定量测定

取基质标准系列溶液依次测定，以待测原料的系列浓度为横坐标，待测原料的定量离子对峰面积为纵坐标，进行线性回归，建立基质标准曲线，其线性相关系数应不小于0.99。取待测溶液测定，将对应的定量离子色谱峰面积代入线性回归方程，按“6 计算”项下公式，计算样品中待测原料的含量。

6 计算

$$\omega = \frac{\rho \times V \times D}{m \times 1000}$$

式中：ω——化妆品中待测原料的质量分数，mg/kg；

ρ——待测溶液中待测原料的质量浓度，ng/mL；

V——样品定容体积，mL；

m——样品称取量，g；

D——稀释倍数（不稀释则为1）。

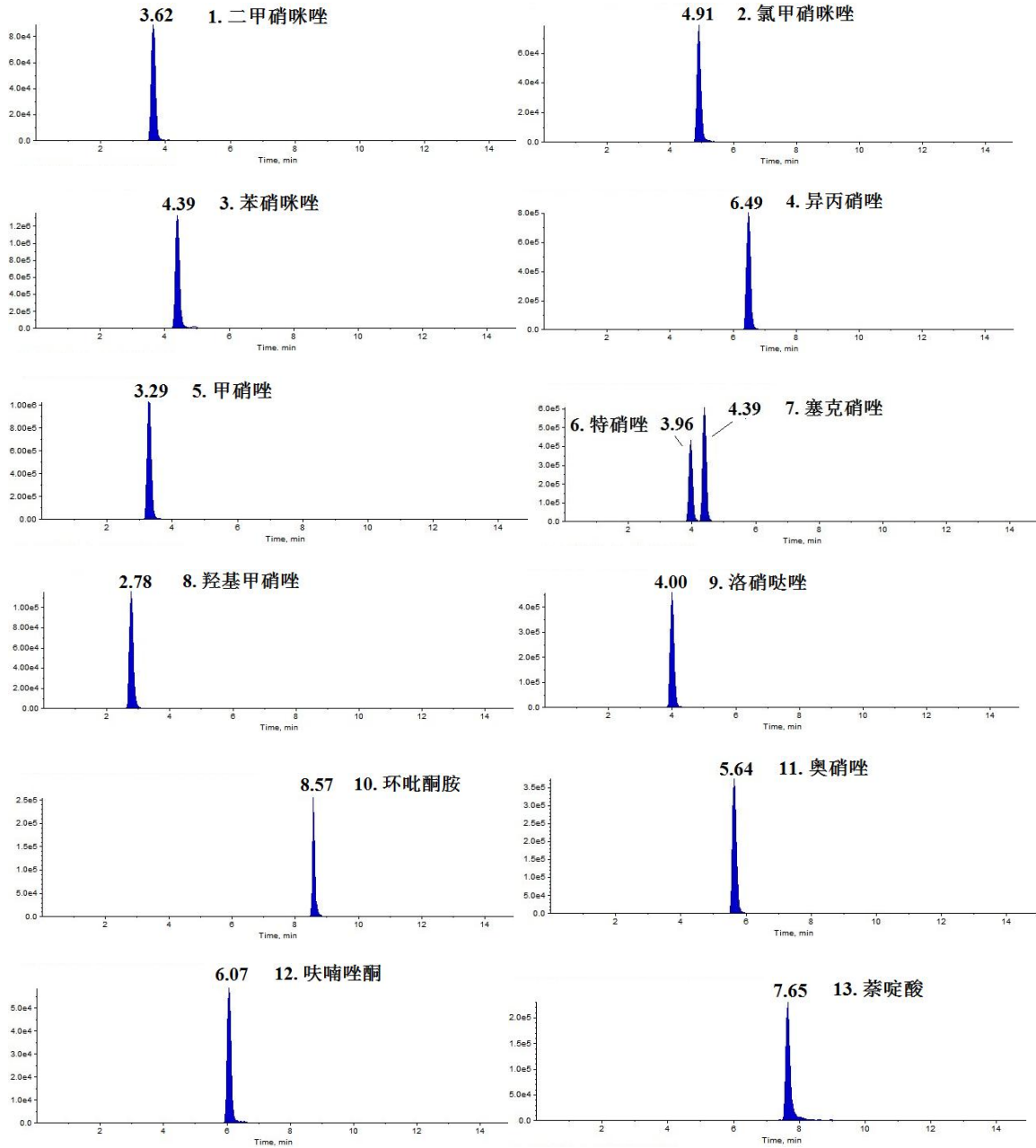
相同条件下获得的两次独立测试结果的绝对差值不得超过算术平均值的15%，结果保留2

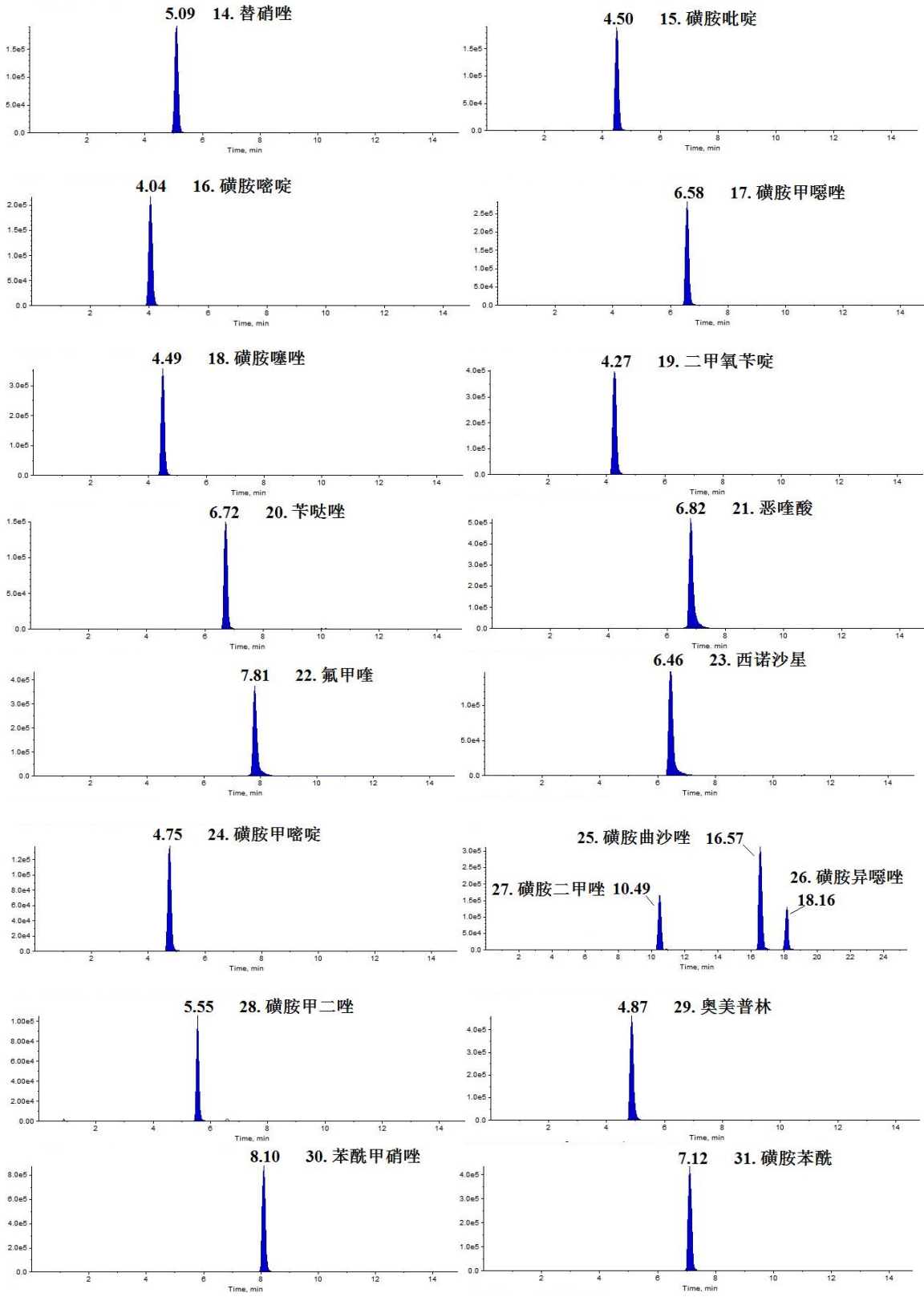
位有效数字。

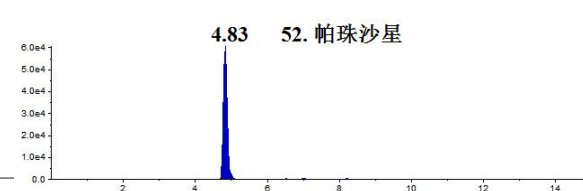
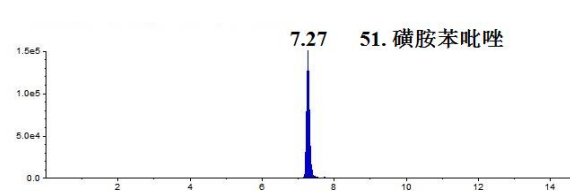
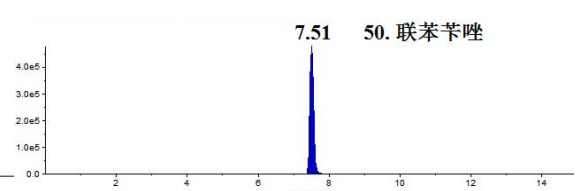
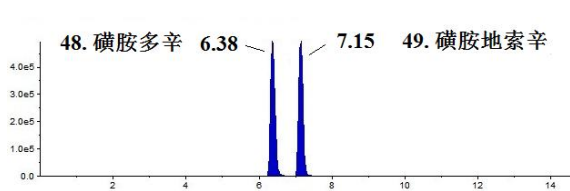
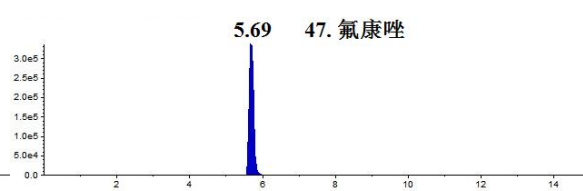
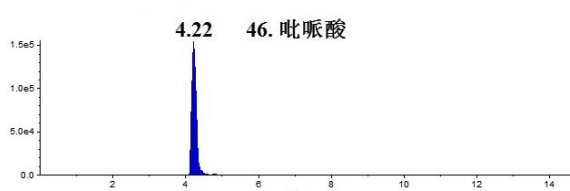
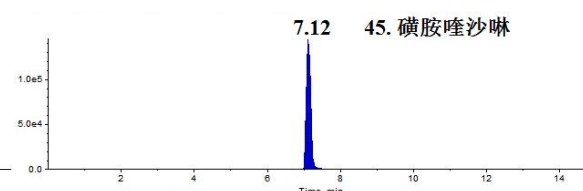
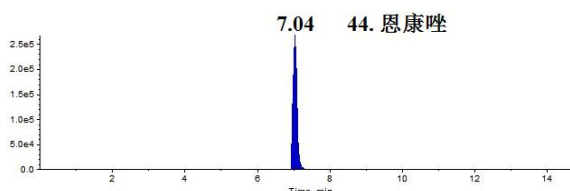
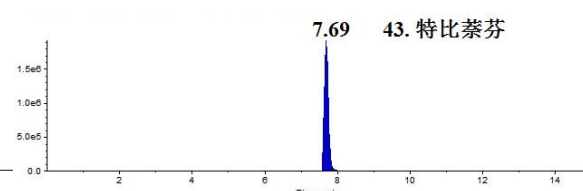
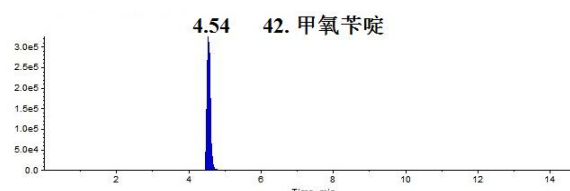
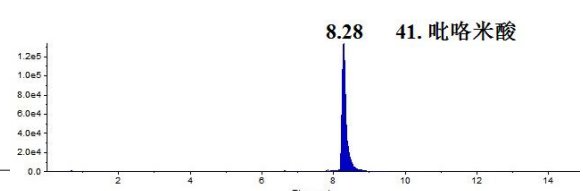
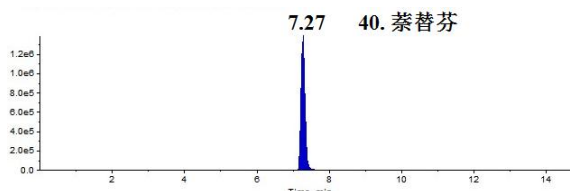
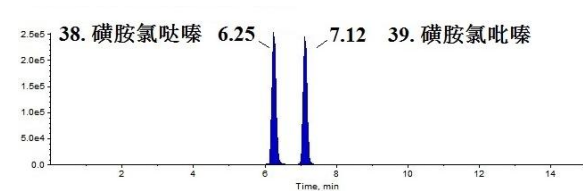
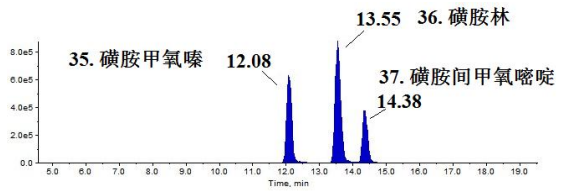
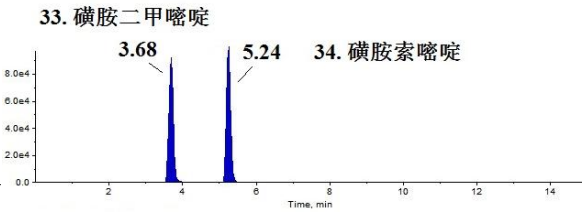
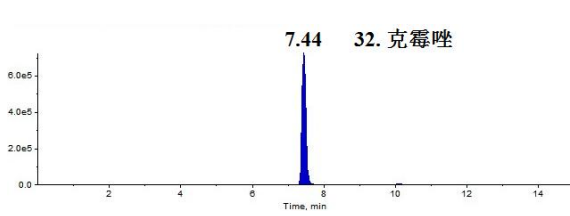
7回收率和精密度

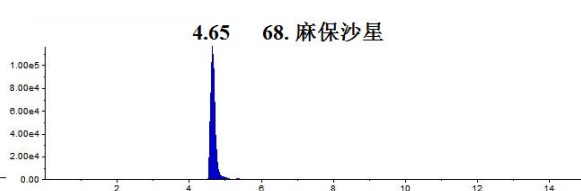
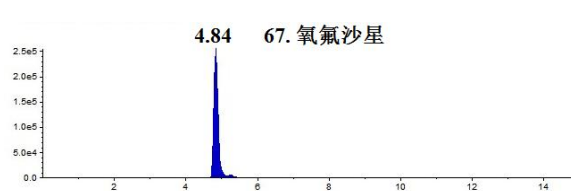
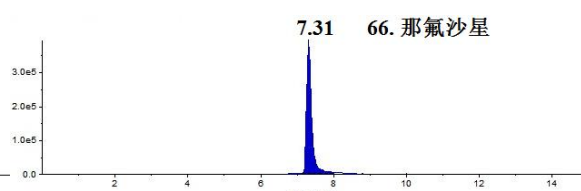
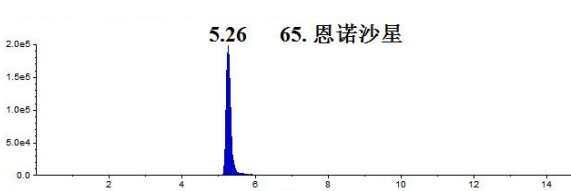
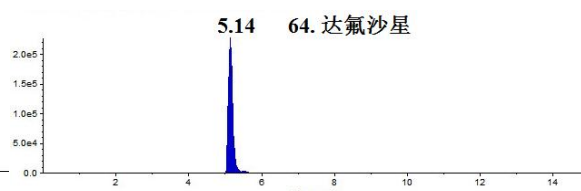
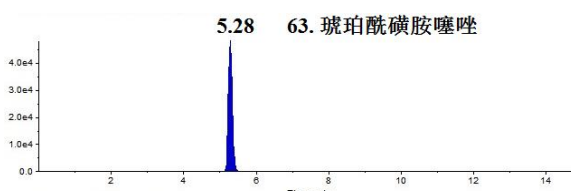
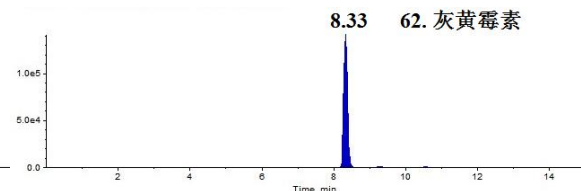
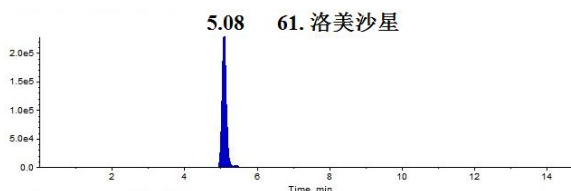
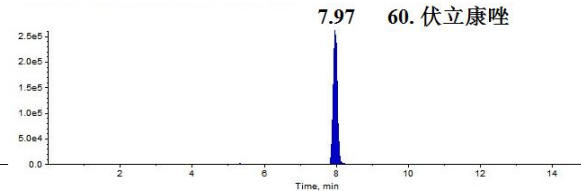
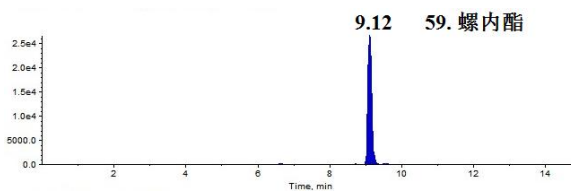
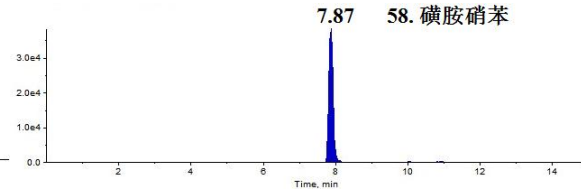
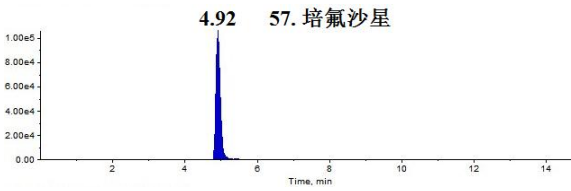
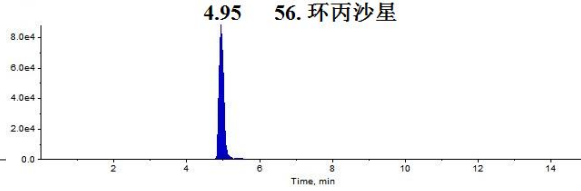
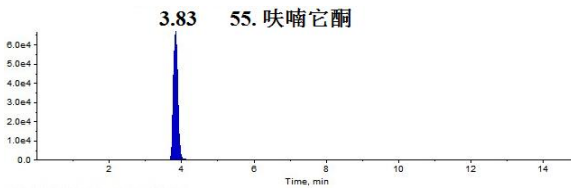
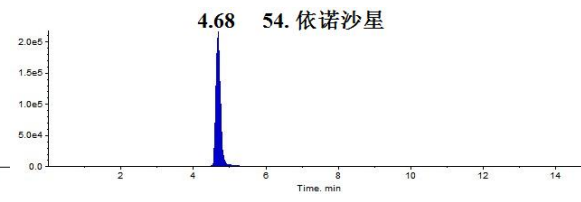
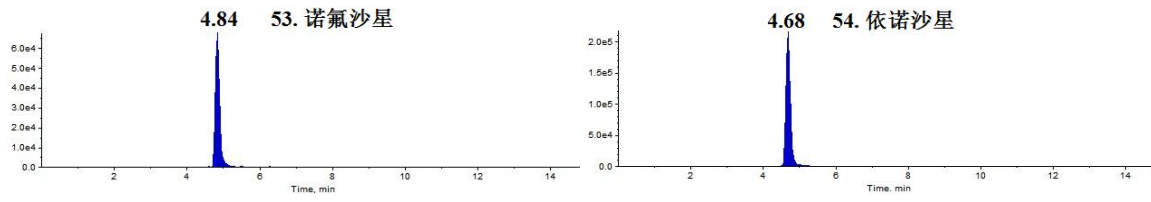
多家实验室验证方法回收率为80.3%~119.2%，相对标准偏差小于14%。

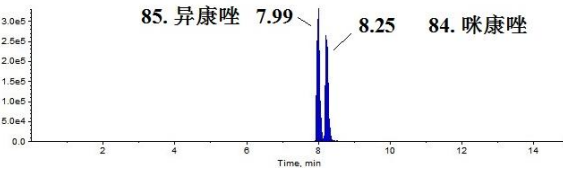
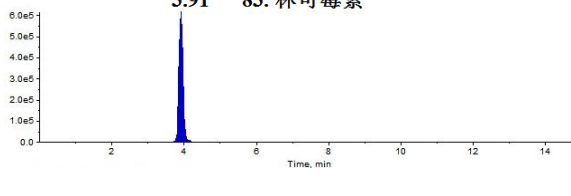
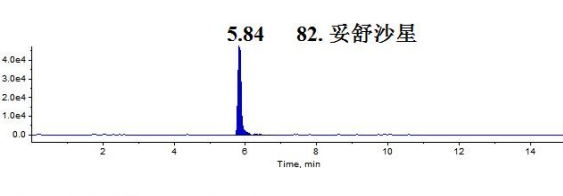
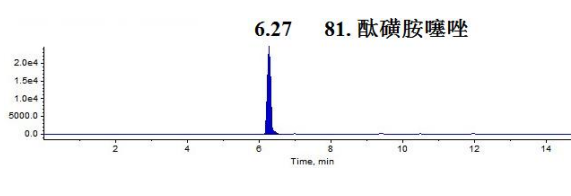
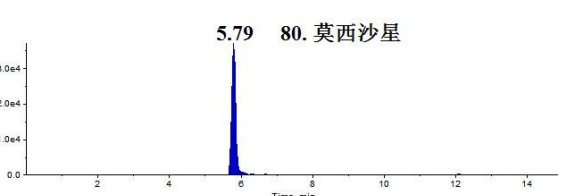
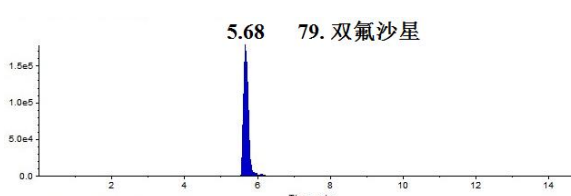
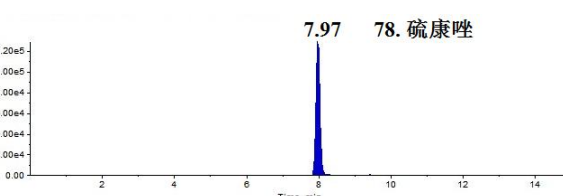
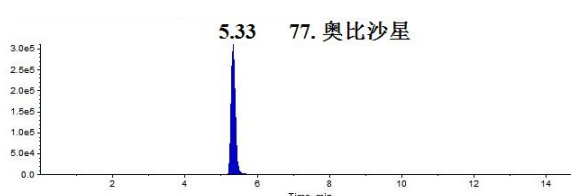
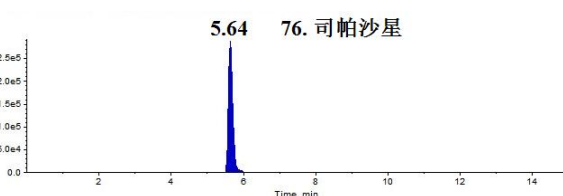
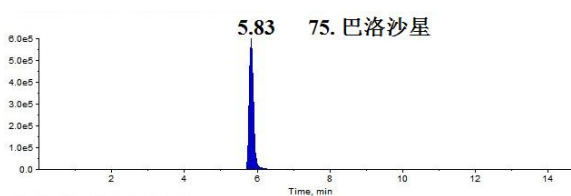
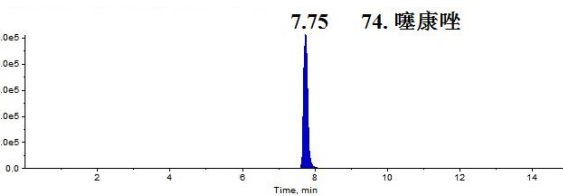
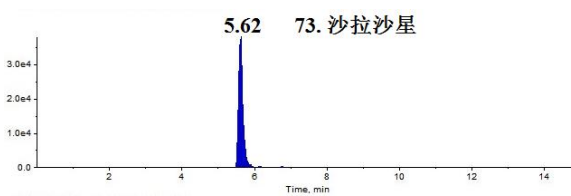
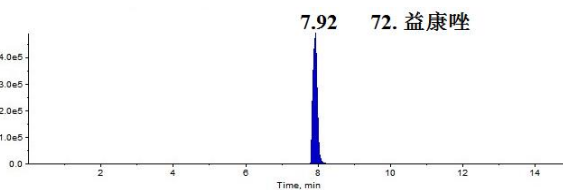
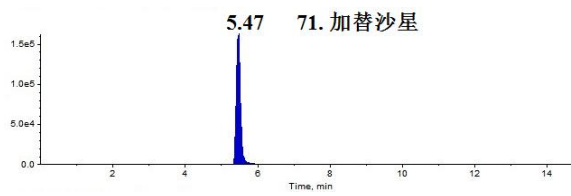
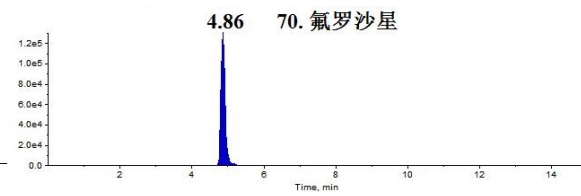
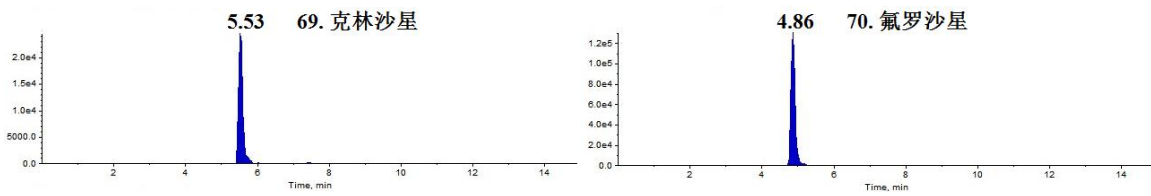
8图谱

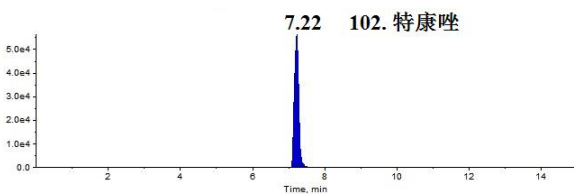
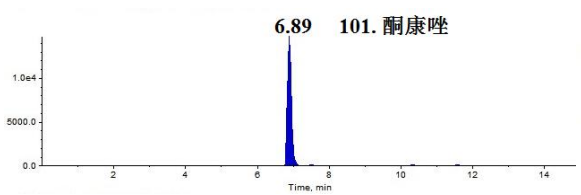
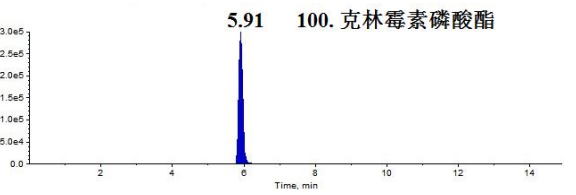
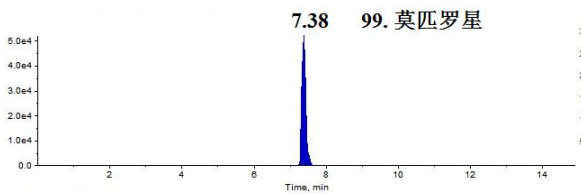
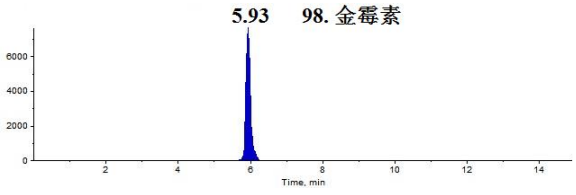
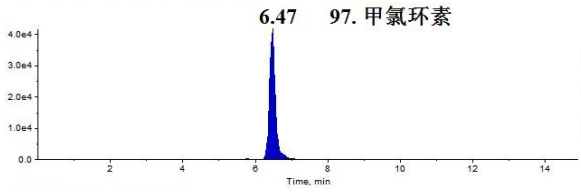
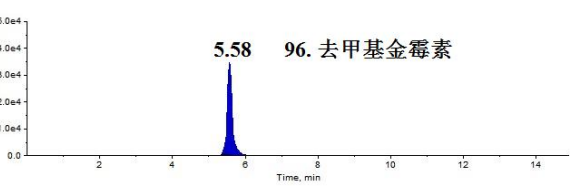
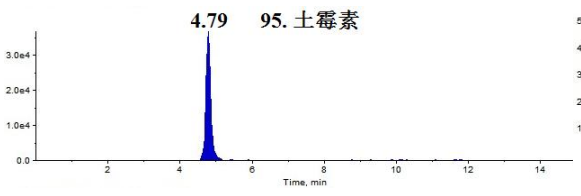
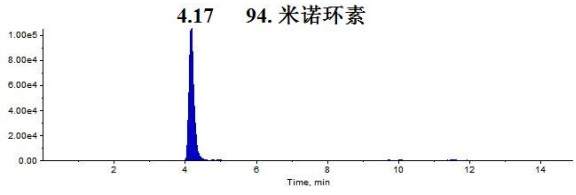
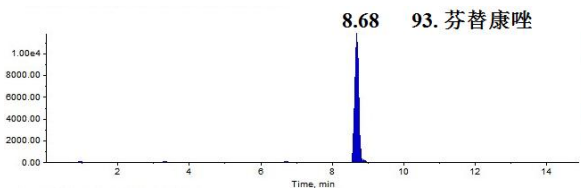
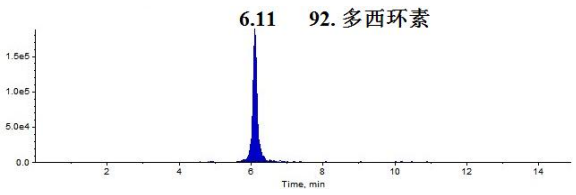
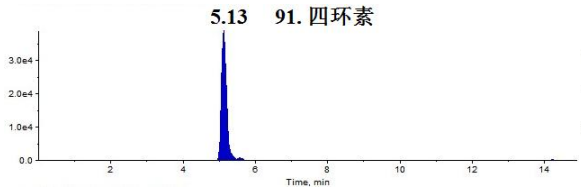
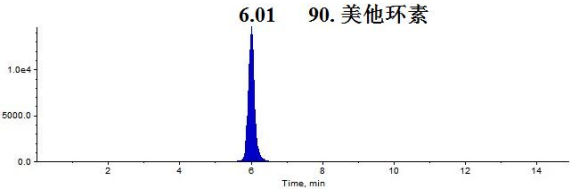
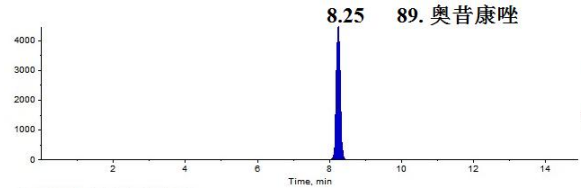
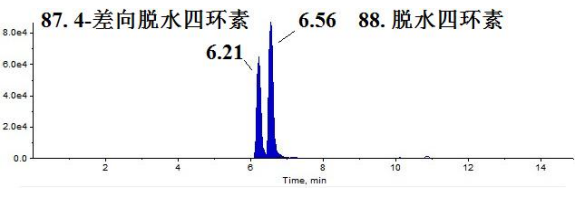
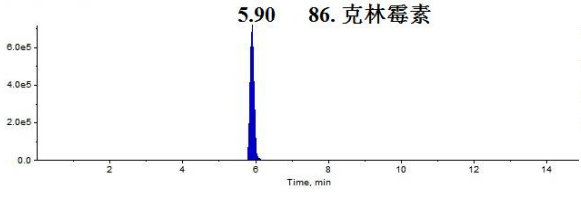


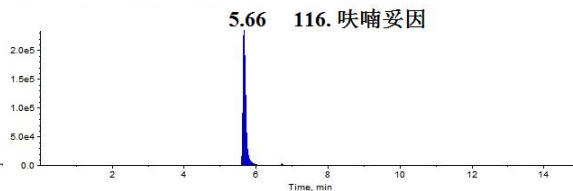
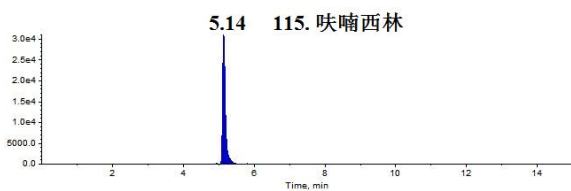
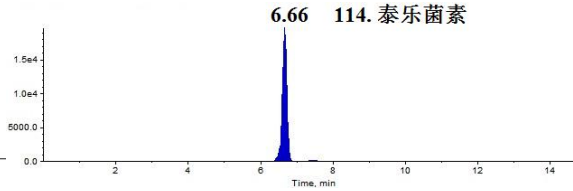
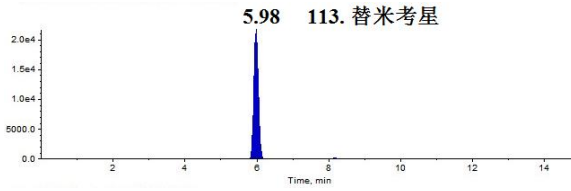
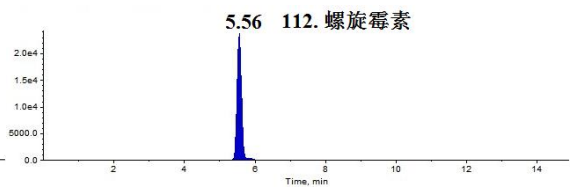
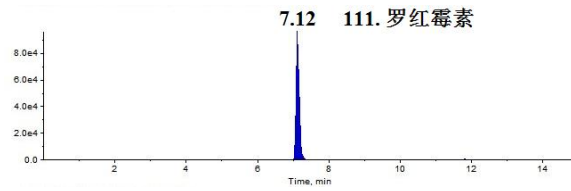
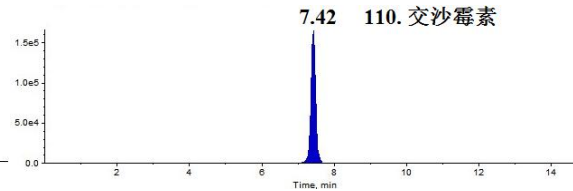
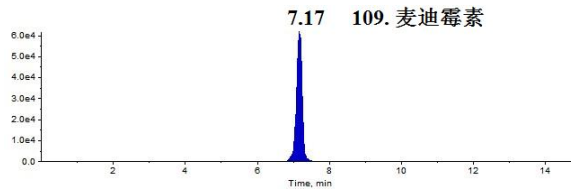
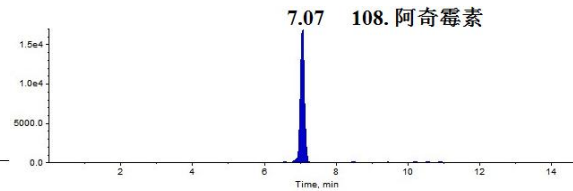
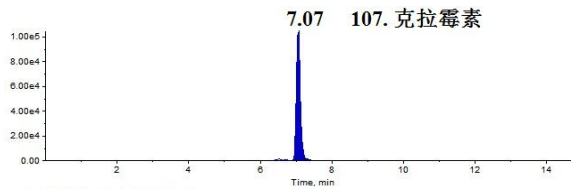
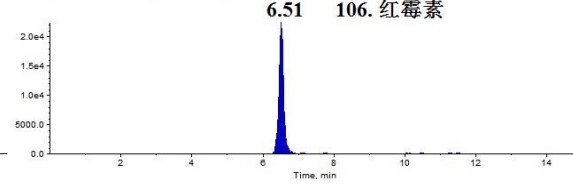
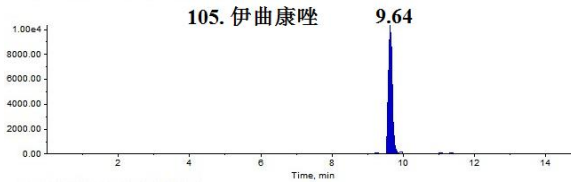
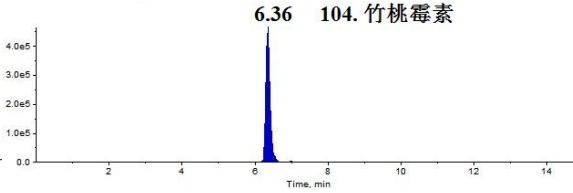
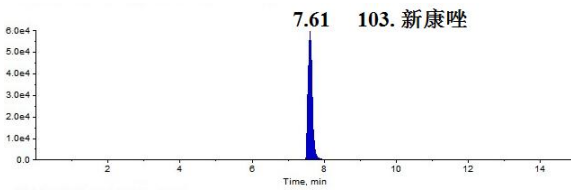












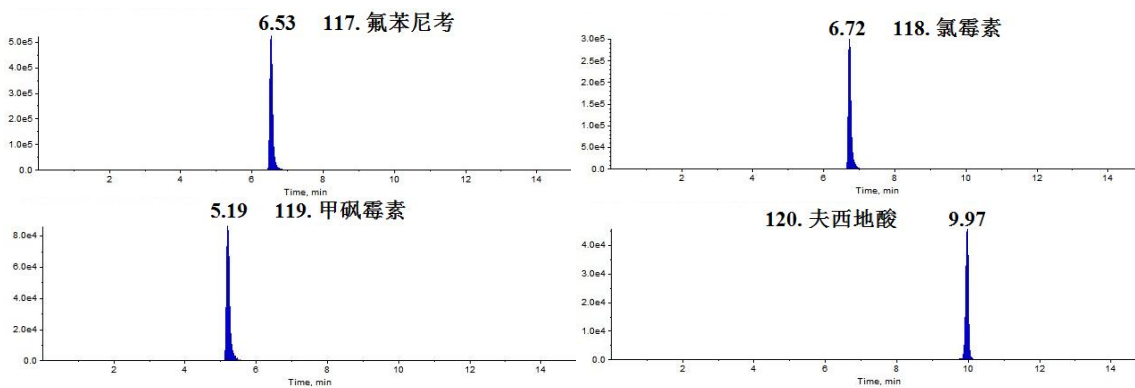


图 1 混合标准溶液 HPLC-MS/MS 色谱图

1. 二甲硝咪唑 (3.62 min); 2. 氯甲硝咪唑 (4.91 min); 3. 苯硝咪唑 (4.39 min); 4. 异丙硝唑 (6.49 min); 5. 甲硝唑 (3.29 min); 6. 特硝唑 (3.96 min); 7. 塞克硝唑 (4.39 min); 8. 羟基甲硝唑 (2.78 min); 9. 洛硝哒唑 (4.00 min); 10. 环吡酮胺 (8.57 min); 11. 奥硝唑 (5.64 min); 12. 呋喃唑酮 (6.07 min); 13. 萘啶酸 (7.65 min); 14. 替硝唑 (5.09 min); 15. 磺胺吡啶 (4.50 min); 16. 磺胺嘧啶 (4.04 min); 17. 磺胺甲噁唑 (6.58 min); 18. 磺胺噻唑 (4.49 min); 19. 二甲氧苄啶 (4.27 min); 20. 苄哒唑 (6.72 min); 21. 恶喹酸 (6.82 min); 22. 氟甲喹 (7.81 min); 23. 西诺沙星 (6.46 min); 24. 磺胺甲嘧啶 (4.75 min); 25. 磺胺曲沙唑 (16.57 min); 26. 磺胺异噁唑 (18.16 min); 27. 磺胺二甲唑 (10.49 min); 28. 磺胺甲二唑 (5.55 min); 29. 奥美普林 (4.87 min); 30. 苯酰甲硝唑 (8.10 min); 31. 磺胺苯酰 (7.12 min); 32. 克霉唑 (7.44 min); 33. 磺胺二甲嘧啶 (3.68 min); 34. 磺胺索嘧啶 (5.24 min); 35. 磺胺甲氧嗪 (12.08 min); 36. 磺胺林 (13.55 min); 37. 磺胺间甲氧嘧啶 (14.38 min); 38. 磺胺氯哒嗪 (6.25 min); 39. 磺胺氯吡嗪 (7.12 min); 40. 萘替芬 (7.27 min); 41. 吡咯米酸 (8.28 min); 42. 甲氧苄啶 (4.54 min); 43. 特比萘芬 (7.69 min); 44. 恩康唑 (7.04 min); 45. 磺胺喹沙啉 (7.12 min); 46. 吡哌酸 (4.22 min); 47. 氟康唑 (5.69 min); 48. 磺胺多辛 (6.38 min); 49. 磺胺地索辛 (7.15 min); 50. 联苯苄唑 (7.51 min); 51. 磺胺苯吡唑 (7.27 min); 52. 帕珠沙星 (4.83 min); 53. 诺氟沙星 (4.84 min); 54. 依诺沙星 (4.68 min); 55. 呋喃它酮 (3.83 min); 56. 环丙沙星 (4.95 min); 57. 培氟沙星 (4.92 min); 58. 磺胺硝苯 (7.87 min); 59. 螺内酯 (9.12 min); 60. 伏立康唑 (7.97 min); 61. 洛美沙星 (5.08 min); 62. 灰黄霉素 (8.33 min); 63. 琥珀酰磺胺噻唑 (5.28 min); 64. 达氟沙星 (5.14 min); 65. 恩诺沙星 (5.26 min); 66. 那氟沙星 (7.31 min); 67. 氧氟沙星 (4.84 min); 68. 麻保沙星 (4.65 min); 69. 克林沙星 (5.53 min); 70. 氟罗沙星 (4.86 min); 71. 加替沙星 (5.47 min); 72. 益康唑 (7.92 min); 73. 沙拉沙星 (5.62 min); 74. 噻康唑 (7.75 min); 75. 巴洛沙星 (5.83 min); 76. 司帕沙星 (5.64 min); 77. 奥比沙星 (5.33 min); 78. 硫康唑 (7.97 min); 79. 双氟沙星 (5.68 min); 80. 莫西沙星 (5.79 min); 81. 酞磺胺噻唑 (6.27 min); 82. 妥舒沙星 (5.84 min); 83. 林可霉素 (3.91 min); 84. 咪康唑 (8.25 min); 85. 异康唑 (7.99 min); 86. 克林霉素 (5.90 min); 87. 4-差向脱水四环素 (6.21 min); 88. 脱水四环素 (6.56 min); 89. 奥昔康唑 (8.25 min); 90. 美他环素 (6.01 min); 91. 四环素 (5.13 min); 92. 多西环素 (6.11 min); 93. 芬替康唑 (8.68 min); 94. 米诺环素 (4.17 min); 95. 土霉素 (4.79 min);

96.去甲基金霉素 (5.58 min) ; 97.甲氯环素 (6.47 min) ; 98.金霉素 (5.93 min) ; 99.莫匹罗星 (7.38 min) ; 100.克林霉素磷酸酯 (5.91 min) ; 101.酮康唑 (6.89 min) ; 102.特康唑 (7.22 min) ; 103.新康唑 (7.61 min) ; 104.竹桃霉素 (6.36 min) ; 105.伊曲康唑 (9.64 min) ; 106.红霉素 (6.51 min) ; 107.克拉霉素 (7.07 min) ; 108.阿奇霉素 (7.07 min) ; 109.麦迪霉素 (7.17 min) ; 110.交沙霉素 (7.42 min) ; 111.罗红霉素 (7.12 min) ; 112.螺旋霉素 (5.56 min) ; 113.替米考星 (5.98 min) ; 114.泰乐菌素 (6.66 min) ; 115.呋喃西林 (5.14 min) ; 116.呋喃妥因 (5.66 min) ; 117.氟苯尼考 (6.53 min) ; 118.氯霉素 (6.72 min) ; 119.甲砒霉素 (5.19 min) ; 120.夫西地酸 (9.97 min) 。

附录A

(资料性附录)

二甲硝咪唑等 120 种原料的相关信息

序号	中文名称	英文名称	CAS 号	相对分子 量	分子式
1	二甲硝咪唑	Dimetridazole	551-92-8	141.13	C ₅ H ₇ N ₃ O ₂
2	氯甲硝咪唑	5-Chloro-1-methyl-4-nitroimidazole	4897-25-0	161.55	C ₄ H ₄ ClN ₃ O ₂
3	苯硝咪唑	5-Nitrobenzimidazole	94-52-0	163.13	C ₇ H ₅ N ₃ O ₂
4	异丙硝唑	Ipronidazole	14885-29-1	169.18	C ₇ H ₁₁ N ₃ O ₂
5	甲硝唑	Metronidazole	443-48-1	171.15	C ₆ H ₉ N ₃ O ₃
6	特硝唑	Ternidazole	1077-93-6	185.18	C ₇ H ₁₁ N ₃ O ₃
7	塞克硝唑	Secnidazole	3366-95-8	185.18	C ₇ H ₁₁ N ₃ O ₃
8	羟基甲硝唑	Hydroxymetronidazole	4812-40-2	187.15	C ₆ H ₉ N ₃ O ₄
9	洛硝哒唑	Ronidazole	7681-76-7	200.15	C ₆ H ₈ N ₄ O ₄
10	环吡酮胺	Ciclopirox	29342-05-0	207.27	C ₁₂ H ₁₇ NO ₂
11	奥硝唑	Ornidazole	16773-42-5	219.63	C ₇ H ₁₀ ClN ₃ O ₃
12	呋喃唑酮	Furazolidone	67-45-8	225.16	C ₈ H ₇ N ₃ O ₅
13	萘啶酸	Nalidixic Acid	389-08-2	232.24	C ₁₂ H ₁₂ N ₂ O ₃
14	替硝唑	Tinidazole	19387-91-8	247.27	C ₈ H ₁₃ N ₃ O ₄ S
15	磺胺吡啶	Sulfapyridine	144-83-2	249.29	C ₁₁ H ₁₁ N ₃ O ₂ S
16	磺胺嘧啶	Sulfadiazine	68-35-9	250.28	C ₁₀ H ₁₀ N ₄ O ₂ S
17	磺胺甲噁唑	Sulfamethoxazole	723-46-6	253.28	C ₁₀ H ₁₁ N ₃ O ₃ S
18	磺胺噻唑	Sulfathiazole	72-14-0	255.32	C ₉ H ₉ N ₃ O ₂ S ₂
19	二甲氧苄啶	Diaveridine	5355-16-8	260.29	C ₁₃ H ₁₆ N ₄ O ₂
20	苄哒唑	Benznidazole	22994-85-0	260.25	C ₁₂ H ₁₂ N ₄ O ₃
21	恶喹酸	Oxolinic acid	14698-29-4	261.23	C ₁₃ H ₁₁ NO ₅
22	氟甲喹	Flumequine	42835-25-6	261.25	C ₁₄ H ₁₂ FNO ₃
23	西诺沙星	Cinoxacin	28657-80-9	262.22	C ₁₂ H ₁₀ N ₂ O ₅
24	磺胺甲噻啶	Sulfamerazine	127-79-7	264.30	C ₁₁ H ₁₂ N ₄ O ₂ S
25	磺胺曲沙唑	Sulfatroxazole	23256-23-7	267.30	C ₁₁ H ₁₃ N ₃ O ₃ S
26	磺胺异噁唑	Sulfafurazole	127-69-5	267.30	C ₁₁ H ₁₃ N ₃ O ₃ S
27	磺胺二甲唑	Sulfamoxole	729-99-7	267.30	C ₁₁ H ₁₃ N ₃ O ₃ S
28	磺胺甲二唑	Sulfamethizole	144-82-1	270.33	C ₉ H ₁₀ N ₄ O ₂ S ₂
29	奥美普林	Ormetoprim	6981-18-6	274.32	C ₁₄ H ₁₈ N ₄ O ₂
30	苯酰甲硝唑	Metronidazole benzoate	13182-89-3	275.26	C ₁₃ H ₁₃ N ₃ O ₄

序号	中文名称	英文名称	CAS 号	相对分子 量	分子式
31	磺胺苯酰	Sulfabenzamide	127-71-9	276.31	C ₁₃ H ₁₂ N ₂ O ₃ S
32	克霉唑	Clotrimazole	23593-75-1	344.84	C ₂₂ H ₁₇ ClN ₂
33	磺胺二甲嘧啶	Sulfadimidine	57-68-1	278.33	C ₁₂ H ₁₄ N ₄ O ₂ S
34	磺胺索嘧啶	Sulfisomidine	515-64-0	278.33	C ₁₂ H ₁₄ N ₄ O ₂ S
35	磺胺甲氧嘧啶	Sulfamethoxypyridazine	80-35-3	280.30	C ₁₁ H ₁₂ N ₄ O ₃ S
36	磺胺林	Sulfalene	152-47-6	280.30	C ₁₁ H ₁₂ N ₄ O ₃ S
37	磺胺间甲氧嘧啶	Sulfamonomethoxine	1220-83-3	280.30	C ₁₁ H ₁₂ N ₄ O ₃ S
38	磺胺氯吡啶	Sulfachlorpyridazine	80-32-0	284.72	C ₁₀ H ₉ ClN ₄ O ₂ S
39	磺胺氯吡啶	Sulfaclozine	102-65-8	284.72	C ₁₀ H ₉ ClN ₄ O ₂ S
40	萘替芬	Naftifine	65472-88-0	287.40	C ₂₁ H ₂₁ N
41	吡咯米酸	Piromidic Acid	19562-30-2	288.30	C ₁₄ H ₁₆ N ₄ O ₃
42	甲氧苄啶	Trimethoprim	738-70-5	290.32	C ₁₄ H ₁₈ N ₄ O ₃
43	特比萘芬	Terbinafine	91161-71-6	291.43	C ₂₁ H ₂₅ N
44	恩康唑	Enilconazole	35554-44-0	297.18	C ₁₄ H ₁₄ Cl ₂ N ₂ O
45	磺胺喹沙啉	Sulfaquinoxaline	59-40-5	300.34	C ₁₄ H ₁₂ N ₄ O ₂ S
46	吡哌酸	Pipemidic Acid	51940-44-4	303.32	C ₁₄ H ₁₇ N ₅ O ₃
47	氟康唑	Fluconazole	86386-73-4	306.27	C ₁₃ H ₁₂ F ₂ N ₆ O
48	磺胺多辛	Sulfadoxine	2447-57-6	310.33	C ₁₂ H ₁₄ N ₄ O ₄ S
49	磺胺地索辛	Sulfadimethoxine	122-11-2	310.33	C ₁₂ H ₁₄ N ₄ O ₄ S
50	联苯苄唑	Bifonazole	60628-96-8	310.39	C ₂₂ H ₁₈ N ₂
51	磺胺苯吡唑	Sulfaphenazole	526-08-9	314.36	C ₁₅ H ₁₄ N ₄ O ₂ S
52	帕珠沙星	Pazufloxacin	127045-41-4	318.30	C ₁₆ H ₁₅ FN ₂ O ₄
53	诺氟沙星	Norfloxacin	70458-96-7	319.33	C ₁₆ H ₁₈ FN ₃ O ₃
54	依诺沙星	Enoxacin	74011-58-8	320.32	C ₁₅ H ₁₇ FN ₄ O ₃
55	呋喃它酮	Furaltadone	139-91-3	324.29	C ₁₃ H ₁₆ N ₄ O ₆
56	环丙沙星	Ciprofloxacin	85721-33-1	331.34	C ₁₇ H ₁₈ FN ₃ O ₃
57	培氟沙星	Pefloxacin	70458-92-3	333.36	C ₁₇ H ₂₀ FN ₃ O ₃
58	磺胺硝苯	Sulfanitran	122-16-7	335.34	C ₁₄ H ₁₃ N ₃ O ₅ S
59	螺内酯	Spiro lactone	52-01-7	416.57	C ₂₄ H ₃₂ O ₄ S
60	伏立康唑	Voriconazole	137234-62-9	349.31	C ₁₆ H ₁₄ F ₃ N ₅ O
61	洛美沙星	Lomefloxacin	98079-51-7	351.35	C ₁₇ H ₁₉ F ₂ N ₃ O ₃
62	灰黄霉素	Griseofulvin	126-07-8	352.77	C ₁₇ H ₁₇ ClO ₆
63	琥珀酰磺胺噻唑	Succinylsulfathiazole	116-43-8	355.39	C ₁₃ H ₁₃ N ₃ O ₅ S ₂
64	达氟沙星	Danofloxacin	112398-08-0	357.38	C ₁₉ H ₂₀ FN ₃ O ₃
65	恩诺沙星	Enrofloxacin	93106-60-6	359.39	C ₁₉ H ₂₂ FN ₃ O ₃

序号	中文名称	英文名称	CAS 号	相对分子 量	分子式
66	那氟沙星	Nadifloxacin	124858-35-1	360.38	C ₁₉ H ₂₁ FN ₂ O ₄
67	氧氟沙星	Ofloxacin	82419-36-1	361.37	C ₁₈ H ₂₀ FN ₃ O ₄
68	麻保沙星	Marbofloxacin	115550-35-1	362.36	C ₁₇ H ₁₉ FN ₄ O ₄
69	克林沙星	Clinafloxacin	105956-97-6	365.79	C ₁₇ H ₁₇ FN ₃ O ₃
70	氟罗沙星	Fleroxacin	79660-72-3	369.34	C ₁₇ H ₁₈ F ₃ N ₃ O ₃
71	加替沙星	Gatifloxacin	112811-59-3	375.39	C ₁₉ H ₂₂ FN ₃ O ₄
72	益康唑	Econazole	27220-47-9	381.68	C ₁₈ H ₁₅ Cl ₃ N ₂ O
73	沙拉沙星	Sarafloxacin	98105-99-8	385.36	C ₂₀ H ₁₇ F ₂ N ₃ O ₃
74	噻康唑	Tioconazole	65899-73-2	387.71	C ₁₆ H ₁₃ Cl ₃ N ₂ OS
75	巴洛沙星	Balofloxacin	127294-70-6	389.42	C ₂₀ H ₂₄ FN ₃ O ₄
76	司帕沙星	Sparfloxacin	110871-86-8	392.40	C ₁₉ H ₂₂ F ₂ N ₄ O ₃
77	奥比沙星	Orbifloxacin	113617-63-3	395.38	C ₁₉ H ₂₀ F ₃ N ₃ O ₃
78	硫康唑	Sulconazole	61318-90-9	397.75	C ₁₈ H ₁₅ Cl ₃ N ₂ S
79	双氟沙星	Difloxacin	98106-17-3	399.39	C ₂₁ H ₁₉ F ₂ N ₃ O ₃
80	莫西沙星	Moxifloxacin	151096-09-2	401.43	C ₂₁ H ₂₄ FN ₃ O ₄
81	酞磺胺噻唑	Phthalylsulfathiazole	85-73-4	403.43	C ₁₇ H ₁₃ N ₃ O ₅ S ₂
82	妥舒沙星	Tosufloxacin	100490-36-6	404.34	C ₁₉ H ₁₅ F ₃ N ₄ O ₃
83	林可霉素	Lincomycin	154-21-2	406.54	C ₁₈ H ₃₄ N ₂ O ₆ S
84	咪康唑	Miconazole	22916-47-8	416.13	C ₁₈ H ₁₄ Cl ₄ N ₂ O
85	异康唑	Isoconazole	27523-40-6	416.13	C ₁₈ H ₁₄ Cl ₄ N ₂ O
86	克林霉素	Clindamycin	18323-44-9	424.98	C ₁₈ H ₃₃ ClN ₂ O ₅ S
87	4-差向脱水四环素盐酸盐	4-Epianhydrotetracycline Hydrochloride	4465-65-0	462.88	C ₂₂ H ₂₂ N ₂ O ₇ ·HCl
88	脱水四环素	Anhydrotetracycline	1665-56-1	426.42	C ₂₂ H ₂₂ N ₂ O ₇
89	奥昔康唑	Oxiconazole	64211-45-6	429.13	C ₁₈ H ₁₃ Cl ₄ N ₃ O
90	美他环素	Methacycline	914-00-1	442.42	C ₂₂ H ₂₂ N ₂ O ₈
91	四环素	Tetracycline	60-54-8	444.43	C ₂₂ H ₂₄ N ₂ O ₈
92	多西环素	Doxycycline	564-25-0	444.43	C ₂₂ H ₂₄ N ₂ O ₈
93	芬替康唑	Fenticonazole	72479-26-6	455.40	C ₂₄ H ₂₀ Cl ₂ N ₂ OS
94	米诺环素	Minocycline	10118-90-8	457.48	C ₂₃ H ₂₇ N ₃ O ₇
95	土霉素	Oxytetracycline	79-57-2	460.43	C ₂₂ H ₂₄ N ₂ O ₉
96	去甲基金霉素	Demeclocycline	127-33-3	464.85	C ₂₁ H ₂₁ ClN ₂ O ₈
97	甲氯环素	Meclocycline	2013-58-3	476.86	C ₂₂ H ₂₁ ClN ₂ O ₈
98	金霉素	Chlortetracycline	57-62-5	478.88	C ₂₂ H ₂₃ ClN ₂ O ₈
99	莫匹罗星	Mupirocin	12650-69-0	500.62	C ₂₆ H ₄₄ O ₉

序号	中文名称	英文名称	CAS 号	相对分子 量	分子式
100	克林霉素磷酸酯	Clindamycin phosphate	24729-96-2	504.96	C ₁₈ H ₃₄ ClN ₂ O ₈ PS
101	酮康唑	Ketoconazole	65277-42-1	531.43	C ₂₆ H ₂₈ Cl ₂ N ₄ O ₄
102	特康唑	Terconazole	67915-31-5	532.46	C ₂₆ H ₃₁ Cl ₂ N ₅ O ₃
103	新康唑	Elubiol	67914-69-6	561.46	C ₂₇ H ₃₀ Cl ₂ N ₄ O ₅
104	竹桃霉素	Oleandomycin	3922-90-5	687.86	C ₃₅ H ₆₁ NO ₁₂
105	伊曲康唑	Itraconazole	84625-61-6	705.63	C ₃₅ H ₃₈ Cl ₂ N ₈ O ₄
106	红霉素	Erythromycin	114-07-8	733.93	C ₃₇ H ₆₇ NO ₁₃
107	克拉霉素	Clarithromycin	81103-11-9	747.95	C ₃₈ H ₆₉ NO ₁₃
108	阿奇霉素	Azithromycin	83905-01-5	748.98	C ₃₈ H ₇₂ N ₂ O ₁₂
109	麦迪霉素	Midecamycin	35457-80-8	813.97	C ₄₁ H ₆₇ NO ₁₅
110	交沙霉素	Josamycin	16846-24-5	827.99	C ₄₂ H ₆₉ NO ₁₅
111	罗红霉素	Roxithromycin	80214-83-1	837.05	C ₄₁ H ₇₆ N ₂ O ₁₅
112	螺旋霉素	Spiramycin	8025-81-8	843.05	C ₄₃ H ₇₄ N ₂ O ₁₄
113	替米考星	Tilmicosin	108050-54-0	869.13	C ₄₆ H ₈₀ N ₂ O ₁₃
114	泰乐菌素	Tylosin	1401-69-0	916.10	C ₄₆ H ₇₇ NO ₁₇
115	呋喃西林	Nitrofurazone	59-87-0	198.14	C ₆ H ₆ N ₄ O ₄
116	呋喃妥因	Nitrofurantoin	67-20-9	238.16	C ₈ H ₆ N ₄ O ₅
117	氟苯尼考	Florfenicol	73231-34-2	358.21	C ₁₂ H ₁₄ Cl ₂ FNO ₄ S
118	氯霉素	Chloramphenicol	56-75-7	323.13	C ₁₁ H ₁₂ Cl ₂ N ₂ O ₅
119	甲砒霉素	Thiamphenicol	15318-45-3	356.22	C ₁₂ H ₁₅ Cl ₂ NO ₅ S
120	夫西地酸	Fusidic Acid	6990-06-3	516.71	C ₃₁ H ₄₈ O ₆

附录B

(规范性附录)

二甲硝咪唑等120种原料的检出限、定量下限及取样量为0.5g时检出浓度和最低定量浓度

序号	中文名称	检出限 (ng)	定量下限 (ng)	检出浓度 (mg/kg)	最低定量浓度 (mg/kg)
1	二甲硝咪唑	0.03	0.1	0.6	2
2	氯甲硝咪唑	0.03	0.1	0.6	2
3	苯硝咪唑	0.03	0.1	0.6	2
4	异丙硝唑	0.03	0.1	0.6	2
5	甲硝唑	0.03	0.1	0.6	2
6	特硝唑	0.03	0.1	0.6	2
7	塞克硝唑	0.03	0.1	0.6	2
8	羟基甲硝唑	0.03	0.1	0.6	2
9	洛硝哒唑	0.03	0.1	0.6	2
10	环吡酮胺	0.03	0.1	0.6	2
11	奥硝唑	0.03	0.1	0.6	2
12	呋喃唑酮	0.03	0.1	0.6	2
13	萘啶酸	0.03	0.1	0.6	2
14	替硝唑	0.03	0.1	0.6	2
15	磺胺吡啶	0.03	0.1	0.6	2
16	磺胺嘧啶	0.03	0.1	0.6	2
17	磺胺甲噁唑	0.03	0.1	0.6	2
18	磺胺噻唑	0.03	0.1	0.6	2
19	二甲氧苄啶	0.03	0.1	0.6	2
20	苄哒唑	0.03	0.1	0.6	2
21	恶喹酸	0.03	0.1	0.6	2
22	氟甲喹	0.03	0.1	0.6	2
23	西诺沙星	0.03	0.1	0.6	2
24	磺胺甲噁啶	0.03	0.1	0.6	2
25	磺胺曲沙唑	0.03	0.1	0.6	2
26	磺胺异噁唑	0.03	0.1	0.6	2
27	磺胺二甲唑	0.03	0.1	0.6	2
28	磺胺甲二唑	0.03	0.1	0.6	2
29	奥美普林	0.03	0.1	0.6	2
30	苯酰甲硝唑	0.03	0.1	0.6	2
31	磺胺苯酰	0.03	0.1	0.6	2

序号	中文名称	检出限 (ng)	定量下限 (ng)	检出浓度 (mg/kg)	最低定量浓度 (mg/kg)
32	克霉唑	0.03	0.1	0.6	2
33	磺胺二甲嘧啶	0.03	0.1	0.6	2
34	磺胺索嘧啶	0.03	0.1	0.6	2
35	磺胺甲氧嘧啶	0.03	0.1	0.6	2
36	磺胺林	0.03	0.1	0.6	2
37	磺胺间甲氧嘧啶	0.03	0.1	0.6	2
38	磺胺氯吡啶	0.03	0.1	0.6	2
39	磺胺氯吡啶	0.03	0.1	0.6	2
40	萘替芬	0.003	0.01	0.06	0.2
41	吡咯米酸	0.03	0.1	0.6	2
42	甲氧苄啶	0.03	0.1	0.6	2
43	特比萘芬	0.003	0.01	0.06	0.2
44	恩康唑	0.03	0.1	0.6	2
45	磺胺喹沙啉	0.03	0.1	0.6	2
46	吡派酸	0.03	0.1	0.6	2
47	氟康唑	0.03	0.1	0.6	2
48	磺胺多辛	0.03	0.1	0.6	2
49	磺胺地索辛	0.03	0.1	0.6	2
50	联苯苄唑	0.003	0.01	0.06	0.2
51	磺胺苯吡唑	0.3	1	6	20
52	帕珠沙星	0.03	0.1	0.6	2
53	诺氟沙星	0.03	0.1	0.6	2
54	依诺沙星	0.3	1	6	20
55	呋喃它酮	0.03	0.1	0.6	2
56	环丙沙星	0.03	0.1	0.6	2
57	培氟沙星	0.03	0.1	0.6	2
58	磺胺硝苯	0.03	0.1	0.6	2
59	螺内酯	0.03	0.1	0.6	2
60	伏立康唑	0.03	0.1	0.6	2
61	洛美沙星	0.03	0.1	0.6	2
62	灰黄霉素	0.03	0.1	0.6	2
63	琥珀酰磺胺噻唑	0.03	0.1	0.6	2
64	达氟沙星	0.03	0.1	0.6	2
65	恩诺沙星	0.03	0.1	0.6	2
66	那氟沙星	0.03	0.1	0.6	2

序号	中文名称	检出限 (ng)	定量下限 (ng)	检出浓度 (mg/kg)	最低定量浓度 (mg/kg)
67	氧氟沙星	0.03	0.1	0.6	2
68	麻保沙星	0.03	0.1	0.6	2
69	克林沙星	0.03	0.1	0.6	2
70	氟罗沙星	0.03	0.1	0.6	2
71	加替沙星	0.03	0.1	0.6	2
72	益康唑	0.03	0.1	0.6	2
73	沙拉沙星	0.03	0.1	0.6	2
74	噻康唑	0.03	0.1	0.6	2
75	巴洛沙星	0.03	0.1	0.6	2
76	司帕沙星	0.03	0.1	0.6	2
77	奥比沙星	0.03	0.1	0.6	2
78	硫康唑	0.03	0.1	0.6	2
79	双氟沙星	0.03	0.1	0.6	2
80	莫西沙星	0.03	0.1	0.6	2
81	酞磺胺噻唑	0.03	0.1	0.6	2
82	妥舒沙星	0.03	0.1	0.6	2
83	林可霉素	0.03	0.1	0.6	2
84	咪康唑	0.03	0.1	0.6	2
85	异康唑	0.03	0.1	0.6	2
86	克林霉素	0.03	0.1	0.6	2
87	4-差向脱水四环素	0.03	0.1	0.6	2
88	脱水四环素	0.03	0.1	0.6	2
89	奥昔康唑	0.03	0.1	0.6	2
90	美他环素	0.03	0.1	0.6	2
91	四环素	0.03	0.1	0.6	2
92	多西环素	0.03	0.1	0.6	2
93	芬替康唑	0.03	0.1	0.6	2
94	米诺环素	0.3	1	6	20
95	土霉素	0.03	0.1	0.6	2
96	去甲基金霉素	0.03	0.1	0.6	2
97	甲氯环素	0.3	1	6	20
98	金霉素	0.03	0.1	0.6	2
99	莫匹罗星	0.03	0.1	0.6	2
100	克林霉素磷酸酯	0.03	0.1	0.6	2

序号	中文名称	检出限 (ng)	定量下限 (ng)	检出浓度 (mg/kg)	最低定量浓度 (mg/kg)
101	酮康唑	0.03	0.1	0.6	2
102	特康唑	0.03	0.1	0.6	2
103	新康唑	0.3	1	6	20
104	竹桃霉素	0.03	0.1	0.6	2
105	伊曲康唑	0.3	1	6	20
106	红霉素	0.3	1	6	20
107	克拉霉素	0.03	0.1	0.6	2
108	阿奇霉素	0.03	0.1	0.6	2
109	麦迪霉素	0.03	0.1	0.6	2
110	交沙霉素	0.03	0.1	0.6	2
111	罗红霉素	0.03	0.1	0.6	2
112	螺旋霉素	0.3	1	6	20
113	替米考星	0.3	1	6	20
114	泰乐菌素	0.03	0.1	0.6	2
115	呋喃西林	0.03	0.1	0.6	2
116	呋喃妥因	0.03	0.1	0.6	2
117	氟苯尼考	0.03	0.1	0.6	2
118	氯霉素	0.03	0.1	0.6	2
119	甲砒霉素	0.03	0.1	0.6	2
120	夫西地酸	0.03	0.1	0.6	2

附录 C
(规范性附录)

二甲硝咪唑等 120 种原料的质谱监测离子对相关参数设定

序号	中文名称	离子形式	母离子(m/z)	子离子(m/z)	碰撞能量(eV)
1	二甲硝咪唑	[M+H] ⁺	142.1	81.0 *	36
			142.1	95.1	34
2	氯甲硝咪唑	[M+H] ⁺	162.0	116.0 *	27
			162.0	145.0	24
3	苯硝咪唑	[M+H] ⁺	164.2	118.0 *	30
			164.2	91.0	49
4	异丙硝唑	[M+H] ⁺	170.1	109.2 *	35
			170.1	124.2	25
5	甲硝唑	[M+H] ⁺	172.1	128.0 *	20
			172.1	82.1	35
6	特硝唑	[M+H] ⁺	186.1	128.0 *	21
			186.1	82.1	38
7	塞克硝唑	[M+H] ⁺	186.1	128.0 *	20
			186.1	82.0	30
8	羟基甲硝唑	[M+H] ⁺	188.2	123.0 *	19
			188.2	126.0	26
9	洛硝哒唑	[M+H] ⁺	201.2	140.2 *	15
			201.2	55.2	35
10	环吡酮胺	[M+H] ⁺	222.2	136.2 *	36
			222.2	162.2	25
11	奥硝唑	[M+H] ⁺	220.0	128.0 *	23
			220.0	82.0	47
12	呋喃唑酮	[M+H] ⁺	226.0	139.0 *	19
			226.0	95.0	22
13	萘啶酸	[M+H] ⁺	233.1	187.1 *	35
			233.1	215.1	20
14	替硝唑	[M+H] ⁺	248.1	121.0 *	25
			248.1	128.0	29
15	磺胺吡啶	[M+H] ⁺	250.1	156.0 *	23
			250.1	108.0	37
16	磺胺嘧啶	[M+H] ⁺	251.1	156.0 *	20
			251.1	92.0	35
17	磺胺甲噁唑	[M+H] ⁺	254.1	156.0 *	23
			254.1	92.0	38

序号	中文名称	离子形式	母离子(m/z)	子离子(m/z)	碰撞能量(eV)
18	磺胺噻唑	[M+H] ⁺	256.0	156.0 *	22
			256.0	108.0	28
19	二甲氧苄啶	[M+H] ⁺	261.1	245.0 *	35
			261.1	123.0	32
20	苄哒唑	[M+H] ⁺	261.1	91.1 *	35
			261.1	107.0	25
21	恶喹酸	[M+H] ⁺	262.1	244.1 *	26
			262.1	216.0	38
22	氟甲喹	[M+H] ⁺	262.1	244.1 *	30
			262.1	202.0	45
23	西诺沙星	[M+H] ⁺	263.1	217.1 *	30
			263.1	189.0	38
24	磺胺甲噁啶	[M+H] ⁺	265.1	156.0 *	24
			265.1	92.0	41
25	磺胺曲沙唑	[M+H] ⁺	268.0	156.0 *	25
			268.0	108.2	36
26	磺胺异噁唑	[M+H] ⁺	268.1	156.1 *	21
			268.1	113.2	26
27	磺胺二甲唑	[M+H] ⁺	268.1	156.0 *	22
			268.1	113.0	24
28	磺胺甲二唑	[M+H] ⁺	271.0	156.0 *	22
			271.0	108.0	31
29	奥美普林	[M+H] ⁺	275.1	259.1 *	37
			275.1	123.1	33
30	苯酰甲硝唑	[M+H] ⁺	276.1	149.0 *	25
			276.1	105.0	48
31	磺胺苯酰	[M+H] ⁺	277.1	156.0 *	18
			277.1	108.0	30
32	克霉唑	[M+H] ⁺	277.1	165.1 *	30
			277.1	241.1	38
33	磺胺二甲噁啶	[M+H] ⁺	279.1	156.0 *	30
			279.1	124.1	31
34	磺胺索噁啶	[M+H] ⁺	279.1	124.1 *	31
			279.1	156.0	30
35	磺胺甲氧嗪	[M+H] ⁺	281.1	156.0 *	24
			281.1	108.0	32
36	磺胺林	[M+H] ⁺	281.1	156.0 *	24
			281.1	108.0	32
37	磺胺间甲氧噁啶	[M+H] ⁺	281.1	156.0 *	24

序号	中文名称	离子形式	母离子(m/z)	子离子(m/z)	碰撞能量(eV)
			281.1	108.0	32
38	磺胺氯吡嗪	[M+H] ⁺	285.0	156.0 *	21
			285.0	92.0	42
39	磺胺氯吡嗪	[M+H] ⁺	285.0	156.0 *	21
			285.0	92.0	42
40	萘替芬	[M+H] ⁺	288.2	117.1 *	24
			288.2	141.1	35
41	吡咯米酸	[M+H] ⁺	289.1	271.1 *	23
			289.1	243.1	40
42	甲氧苄啶	[M+H] ⁺	291.1	230.1 *	33
			291.1	123.1	33
43	特比萘芬	[M+H] ⁺	292.2	141.1 *	25
			292.2	115.1	75
44	恩康唑	[M+H] ⁺	297.0	159.0 *	35
			297.0	201.0	26
45	磺胺喹沙啉	[M+H] ⁺	301.1	156.0 *	23
			301.1	108.0	35
46	吡哌酸	[M+H] ⁺	304.1	217.1 *	27
			304.1	189.1	43
47	氟康唑	[M+H] ⁺	307.1	220.1 *	23
			307.1	238.1	22
48	磺胺多辛	[M+H] ⁺	311.1	156.0 *	26
			311.1	108.0	46
49	磺胺地索辛	[M+H] ⁺	311.1	156.1 *	30
			311.1	108.0	38
50	联苯苄唑	[M+H] ⁺	311.1	243.1 *	35
			311.1	165.1	55
51	磺胺苯吡唑	[M+H] ⁺	315.1	92.0 *	30
			315.1	158.0	15
52	帕珠沙星	[M+H] ⁺	319.1	301.2 *	24
			319.1	281.1	35
53	诺氟沙星	[M+H] ⁺	320.1	276.1 *	23
			320.1	233.1	33
54	依诺沙星	[M+H] ⁺	321.1	303.0 *	26
			321.1	232.0	45
55	呋喃它酮	[M+H] ⁺	325.1	100.1 *	35
			325.1	128.0	28
56	环丙沙星	[M+H] ⁺	332.1	288.1 *	25
			332.1	245.2	32

序号	中文名称	离子形式	母离子(m/z)	子离子(m/z)	碰撞能量(eV)
57	培氟沙星	[M+H] ⁺	334.1	290.2 *	24
				334.1	233.1
58	磺胺硝苯	[M+H] ⁺	336.1	156.0 *	19
				336.1	294.0
59	螺内酯	[M+H] ⁺	341.1	107.0 *	45
				341.1	187.2
60	伏立康唑	[M+H] ⁺	350.3	127.0 *	45
				350.3	281.0
61	洛美沙星	[M+H] ⁺	352.1	265.1 *	31
				352.1	308.1
62	灰黄霉素	[M+H] ⁺	353.1	165.1 *	26
				353.1	215.0
63	琥珀酰磺胺噻唑	[M+H] ⁺	356.0	256.0 *	25
				356.0	192.1
64	达氟沙星	[M+H] ⁺	358.1	340.1 *	30
				358.1	314.0
65	恩诺沙星	[M+H] ⁺	360.2	316.2 *	27
				360.2	245.1
66	那氟沙星	[M+H] ⁺	361.1	343.1 *	37
				361.1	283.1
67	氧氟沙星	[M+H] ⁺	362.1	318.2 *	28
				362.1	261.1
68	麻保沙星	[M+H] ⁺	363.1	320.1 *	22
				363.1	72.1
69	克林沙星	[M+H] ⁺	366.1	305.1 *	29
				366.1	236.1
70	氟罗沙星	[M+H] ⁺	370.1	326.1 *	28
				370.1	269.2
71	加替沙星	[M+H] ⁺	376.2	332.0 *	26
				376.2	261.1
72	益康唑	[M+H] ⁺	381.0	125.0 *	39
				381.0	193.1
73	沙拉沙星	[M+H] ⁺	386.1	342.1 *	27
				386.1	299.1
74	噻康唑	[M+H] ⁺	387.0	131.0 *	41
				387.0	199.0
75	巴洛沙星	[M+H] ⁺	390.2	359.1 *	24
				390.2	315.1
76	司帕沙星	[M+H] ⁺	393.2	349.2 *	27

序号	中文名称	离子形式	母离子(m/z)	子离子(m/z)	碰撞能量(eV)
			393.2	292.1	35
77	奥比沙星	[M+H] ⁺	396.1	352.1 *	26
			396.1	295.1	35
78	硫康唑	[M+H] ⁺	397.0	125.0 *	35
			397.0	183.0	24
79	双氟沙星	[M+H] ⁺	400.1	356.2 *	28
			400.1	299.1	35
80	莫西沙星	[M+H] ⁺	402.2	384.2 *	35
			402.2	261.1	35
81	酞磺胺噻唑	[M+H] ⁺	404.0	256.0 *	23
			404.0	156.0	32
82	妥舒沙星	[M+H] ⁺	405.1	387.1 *	35
			405.1	344.1	29
83	林可霉素	[M+H] ⁺	407.2	126.1 *	36
			407.2	359.2	26
84	咪康唑	[M+H] ⁺	415.0	159.0 *	40
			415.0	69.0	45
85	异康唑	[M+H] ⁺	415.0	159.0 *	40
			415.0	123.0	88
86	克林霉素	[M+H] ⁺	425.2	126.1 *	41
			425.2	377.2	26
87	4-差向脱水四环素	[M+H] ⁺	427.1	410.0 *	20
			427.1	269.0	44
88	脱水四环素	[M+H] ⁺	427.1	410.0 *	20
			427.1	269.0	44
89	奥昔康唑	[M+H] ⁺	428.0	234.0 *	41
			428.0	82.0	47
90	美他环素	[M+H] ⁺	443.1	426.1 *	26
			443.1	201.0	45
91	四环素	[M+H] ⁺	445.1	410.2 *	29
			445.1	427.1	20
92	多西环素	[M+H] ⁺	445.2	428.1 *	28
			445.2	154.0	42
93	芬替康唑	[M+H] ⁺	455.1	199.1 *	45
			455.1	167.1	67
94	米诺环素	[M+H] ⁺	458.2	441.2 *	25
			458.2	283.0	60
95	土霉素	[M+H] ⁺	461.1	443.2 *	20
			461.1	426.2	26

序号	中文名称	离子形式	母离子(m/z)	子离子(m/z)	碰撞能量(eV)
96	去甲基金霉素	[M+H] ⁺	465.1	448.0 *	23
			465.1	430.0	33
97	甲氯环素	[M+H] ⁺	477.2	460.0 *	25
			477.2	235.0	48
98	金霉素	[M+H] ⁺	479.1	444.1 *	29
			479.1	154.0	40
99	莫匹罗星	[M+H] ⁺	501.3	327.1 *	18
			501.3	309.1	20
100	克林霉素磷酸酯	[M+H] ⁺	505.1	126.1 *	46
			505.1	457.1	29
101	酮康唑	[M+H] ⁺	531.1	82.0 *	70
			531.1	489.1	45
102	特康唑	[M+H] ⁺	532.2	219.1 *	46
			532.2	192.1	56
103	新康唑	[M+H] ⁺	561.2	82.0 *	74
			561.2	250.0	47
104	竹桃霉素	[M+H] ⁺	688.4	158.1 *	39
			688.4	544.3	25
105	伊曲康唑	[M+H] ⁺	705.2	392.2 *	50
			705.2	432.2	45
106	红霉素	[M+H] ⁺	734.5	158.1 *	38
			734.5	576.4	25
107	克拉霉素	[M+H] ⁺	748.5	158.1 *	41
			748.5	590.4	28
108	阿奇霉素	[M+H] ⁺	749.5	158.1 *	45
			749.5	591.4	28
109	麦迪霉素	[M+H] ⁺	814.5	174.1 *	42
			814.5	109.1	61
110	交沙霉素	[M+H] ⁺	828.5	174.1 *	49
			828.5	109.1	60
111	罗红霉素	[M+H] ⁺	837.5	679.5 *	29
			837.5	158.1	46
112	螺旋霉素	[M+H] ⁺	843.5	174.1 *	49
			843.5	101.1	70
113	替米考星	[M+H] ⁺	869.6	174.0 *	60
			869.6	88.0	100
114	泰乐菌素	[M+H] ⁺	916.5	174.1 *	50
			916.5	772.4	41
115	呋喃西林	[M-H] ⁻	197.0	124.0	-12

序号	中文名称	离子形式	母离子(m/z)	子离子(m/z)	碰撞能量(eV)
			197.0	80.0 *	-15
116	呋喃妥因	[M-H] ⁻	237.0	152.0 *	-18
			237.0	42.0	-40
117	氟苯尼考	[M-H] ⁻	356.0	185.0 *	-28
			356.0	119.0	-49
118	氯霉素	[M-H] ⁻	321.0	152.0 *	-22
			321.0	257.0	-17
119	甲砒霉素	[M-H] ⁻	354.0	290.0 *	-18
			354.0	185.0	-31
120	夫西地酸	[M-H] ⁻	515.3	393.3 *	-31
			515.3	455.3	-26

注：“*”为定量离子对。