

# 唾液中的药物和代谢物： 免疫筛查与 LC/MS/MS 确认和定量

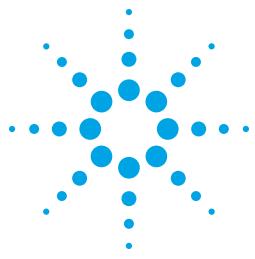
应用文集

The Measure of Confidence



Agilent Technologies

本页留为空白



# 方法、验证和文集目录

**James Tuyay**

**Cynthia Coulter**

**Christine Moore**

Immunoanalysis 公司

美国加利福尼亚州波莫纳

## 设计和编辑

**John M. Hughes**

安捷伦科技有限公司

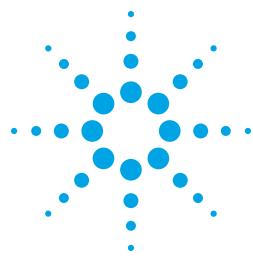
美国加利福尼亚州普莱森顿

本页留为空白



# 目录

化合物按药物类别索引 .....	I
化合物按首字母索引 .....	II
简介 .....	III
样品前处理 .....	IV
仪器 .....	V
化合物筛查和确认方法 .....	VI



# 化合物按药物类别索引

## 苯二氮卓类及其代谢物

化合物	页码
阿普唑仑	3
溴西泮	9
利眠宁	13
氯硝西泮	16
地西泮	25
艾司唑仑	31
氟西泮	34
劳拉西泮	45
咪达唑仑	55
去甲西泮	59
奥沙西泮	61
芬纳西泮	67
替马西泮	75
三唑仑	79

## 兴奋剂类

可卡因	18
苯甲酰爱冈宁	8
古柯乙烯	17
去甲可卡因	58

## 类鸦片类及其代谢物

可待因	19
吗啡	57
6-乙酰可待因	1
6-乙酰吗啡	2
氢可酮	37
氢吗啡酮	38
羟考酮	62
氧吗啡酮	63
丁丙诺啡	10
芬太尼	32
美沙酮	51
EDDP	30
度冷丁	49
丙氧芬	70
他喷他多	74
曲马多	77

## 大麻素类

化合物	页码
THC	76
CP 47,497	20
CP 47,497-C8	21
HU-210	36
JWH-018	40
JWH-073	41
JWH-200	42
JWH-250	43
AM-2201	4

## 致幻剂、游离药物

右美沙芬	24
氯胺酮	44
PCP	65

## 安眠药类

扎来普隆	82
唑吡坦	83
佐匹克隆	84

## 拟交感神经胺类 (SMAS)

苯丙胺	7
甲基苯丙胺	53
MDMA	48
MDA	46
MDEA	47
哌醋甲酯	53
芬特明	69

## 抗组胺类

苯海拉明	26
多西拉敏	29

## 肌肉松弛剂

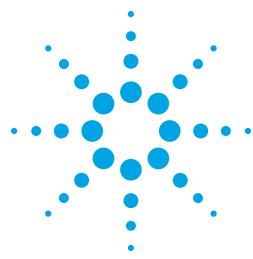
化合物	页码
肌安宁	12
眠尔通	50
环苯扎林	22

## 抗抑郁剂

化合物	页码
阿米替林	5
阿莫沙平	6
西酞普兰	14
氯米帕明	15
地昔帕明	23
度硫平	27
多虑平	28
氟苯氧丙胺	33
氟伏沙明	35
丙咪嗪	39
米安色林	54
米氮平	56
去甲替林	60
帕罗西汀	64
普罗替林	71
舍曲林	73
曲唑酮	78
三甲丙咪嗪	80
文拉法辛	81

## 巴比妥类

布他比妥	11
戊巴比妥	66
苯巴比妥	68
司可巴比妥	72



# 化合物按首字母索引

化合物	页码	化合物	页码	化合物	页码
6-乙酰可待因	1	氟苯氧丙胺	33	PCP	65
6-乙酰吗啡	2	氟伏沙明	35	帕罗西汀	64
AM-2201	4	氟西洋	34	哌醋甲酯	53
阿米替林	5	古柯乙烯	17	普罗替林	71
阿莫沙平	6	HU-210	36	羟考酮	62
阿普唑仑	3	环苯扎林	22	羟吗啡酮	63
艾司唑仑	31	JWH-018	40	氢可酮	37
奥沙西洋	61	JWH-073	41	氢吗啡酮	38
苯巴比妥	68	JWH-200	42	曲马多	77
苯丙胺	7	JWH-250	43	曲唑酮	78
苯海拉明	26	肌安宁	12	去甲可卡因	58
苯甲酰爱冈宁	8	甲基苯丙胺	52	去甲替林	60
丙咪嗪	39	可待因	19	去甲西洋	59
丙氧芬	70	可卡因	18	三甲丙咪嗪	80
布他比妥	11	劳拉西洋	45	三唑仑	79
CP 47,497	20	利眠宁	13	舍曲林	73
CP 47,497-C8	21	氯胺酮	44	司可巴比妥	72
地西洋	25	氯米帕明	15	THC	76
地昔帕明	23	氯硝西洋	16	他喷他多	74
丁丙诺啡	10	MDA	46	替马西洋	75
度冷丁	49	MDEA	47	文拉法辛	81
度硫平	27	MDMA	48	戊巴比妥	66
多虑平	28	吗啡	57	西酞普兰	14
多西拉敏	29	美沙酮	51	溴西洋	9
EDDP	30	咪达唑仑	55	右美沙芬	24
芬纳西洋	67	米安色林	54	扎来普隆	82
芬太尼	32	米氮平	56	佐匹克隆	84
芬特明	69	眠尔通	50	唑吡坦	83



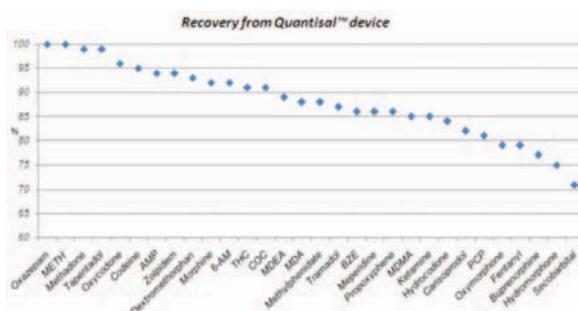
# 唾液中的药物和代谢物： 免疫筛查和 LC/MS/MS 确认和定量

## 应用文集

### 前言

唾液因为其容易获取，难以掺伪，技术改进可以进行更广泛的药物筛查而越来越广泛地被作为药物测试基质使用。唾液分析用于工作场所药物检测、刑事司法、路边样品采集、事故后处理、“追因”检查和疼痛管理计划等方面。

唾液中药物定量的主要问题之一是较难收集足够体积的样本量以便对更多的化合物进行可靠的确认。很多装置都不能给出唾液收集的体积，因此，如果没有实验室进一步的处理，任何定量结果都毫无意义。此外，配备收集垫或材料用于唾液收集的装置在分析之前不能给出每种药物能从垫上回收的量，这也使定量成为一难题。本文提到的分析方法使用 Quantisal™ 唾液收集器（Immunalysis 公司，如下所示），可以采集已知体积的纯唾液量。对很多药物从收集衬垫回收至转运缓冲液中的回收率进行了评估，结果列于下图。



实验室分析：法医毒理学学会 (SOT) 和美国法医学学院 (AAFS) 推荐在可能的情况下，可基于两种截然不同的化学原理，对生物标本中的药物分析采取两种技术进行分析。通常情况下，实验室采用免疫筛查为主要测试手段，然后再采用质谱技术进一步证实推定为阳性的结果。



## 样品采集与前处理

使用 Quantisal™ 唾液收集器（Immunalysis 公司，美国加利福尼亚州波莫纳），根据厂家说明进行唾液收集。

## 用于 LC/MS/MS 确认和定量的样品前处理

鉴定过程包括向唾液样品中添加氘代内标、用缓冲液处理、固相萃取 (SPE)，以及使用液相色谱-串联质谱 (LC/MS/MS) 进行分析。

### 碱性药物（这里适用于除大麻素、肌安宁和眠尔通以外的所有药物）

**SPE 色谱柱：Plexa PCX** （部件号 12108601, 60 mg/1 mL 或部件号 12108603, 60 mg/3 mL）

1. 量取一份 (1 mL) 唾液样品：Quantisal 缓冲液混合物（相当于 0.25 mL 纯唾液）
2. 向样品中加入适量内标和 0.1 M 磷酸钾缓冲液 (pH 6.0; 1 mL)
3. 活化：甲醇 (0.5 mL)
4. 上样；不要使柱子完全干燥
5. 淋洗：2% 甲酸 (1 mL); 甲醇 (1 mL)
6. 通氮气吹干柱子 (5 min)
7. 洗脱：乙酸乙酯：氢氧化铵 (98:2, v/v; 2 mL)
8. 蒸发至干；用流动相重新溶解 (50 µL)

### 酸性药物（这里用于大麻素）

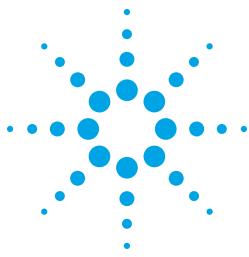
**SPE 色谱柱：Plexa** （部件号 12109301, 30 mg/1 mL 或部件号 12109303, 30 mg/3 mL）

1. 量取一份 (1 mL) 唾液样品：Quantisal 缓冲液混合物（相当于 0.25 mL 纯唾液）
2. 向样品中加入适量内标和醋酸 (pH 4.0; 1 mL)
3. 活化：甲醇 (0.5 mL); 0.1 M 醋酸 (0.1 mL)
4. 上样；不要使柱子完全干燥
5. 淋洗：去离子水:醋酸 (80:20, v/v; 1 mL); 去离子水:甲醇 (40:60, v/v; 1 mL)
7. 通氮气吹干柱子 (5 min)
8. 洗脱：己烷:醋酸 (98:2, v/v; 1 mL)
9. 蒸发至干；用流动相重新溶解 (50 µL)

### 肌安宁和眠尔通

**SPE 色谱柱：Plexa** （部件号 12109301, 30 mg/1 mL 或部件号 12109303, 30 mg/3 mL）

1. 量取一份 (1 mL) 唾液样品：Quantisal 缓冲液混合物（相当于 0.25 mL 纯唾液）
2. 向样品中加入适量内标和 0.1 M 磷酸钾缓冲液 (pH 6.0; 1 mL)
3. 活化：甲醇 (2 mL), 0.1 M 磷酸钾缓冲液 (pH 6.0; 2 mL)
4. 上样；不要使柱子完全干燥
5. 淋洗：去离子水 (2 mL); 甲醇:去离子水 25:75 v/v (1 mL)
6. 通氮气吹干柱子 (30 psi, 5 min)
7. 淋洗：己烷 (1 mL)
8. 真空下干燥柱子 (5 min)
9. 洗脱：乙酸乙酯:己烷 50:50 v/v (3 mL)
10. 蒸发至干；用流动相重新溶解 (50 µL)



## LC/MS/MS 仪器

本文介绍的检测均在下列仪器上进行：

**Agilent 1200 系列 UHPLC**，包括：G1379B 微量真空脱气机

G1312B SL (600 bar) 二元泵，配备溶剂选择阀；标准延迟体积配置

G1367D 多孔板进样器，在针座和进样阀间配有 0.2 μm 在线过滤器（部件号 5067-1553）

G1316B 恒温柱箱，带 6 通柱切换阀

**Agilent 6430A** 三重四极杆 LC/MS/MS 系统，配置安捷伦正交 ESI 电离源。除非另有说明用于特定的化合物，否则离子化模式采用阳离子模式。

研究所用色谱柱为 Agilent Zorbax RRHT (1.8 μm 粒径，600 bar) UHPLC 色谱柱：

固定相	内径 x 长度, mm	安捷伦部件号
Eclipse Plus C18	4.6 x 50	959941-902
Eclipse Plus C18	2.1 x 50	959741-902
Extend-C18	2.1 x 50	727700-902

每种化合物所用色谱柱在第 VI 部分的方法描述中都有详细说明。

### 注意

- 在筛查方法列表中，交叉反应“无数据”表示此化合物还未用 ELISA 试剂盒进行过评估。
- 本文集展示了多种液相色谱方法，当梯度上升为高有机相后，如 95% B，在梯度洗脱表的最后一行 %B 在下降。这并非是印刷错误，而是一个技术手段，为了使某些晚流出的高难化合物的峰形变得尖锐。
- 在每种药物的 LC-MS/MS 离子对列表上，都用**黑体**字标示出用于定量的离子对，如下所示：

化合物	母离子	子离子	裂解电压 (V)	碰撞能量 (V)
THC-d <sub>3</sub>	318.3	196.3	125	20
<b>THC</b>	<b>315.4</b>	<b>193.3</b>	<b>150</b>	<b>20</b>
THC	315.4	123.3	150	30

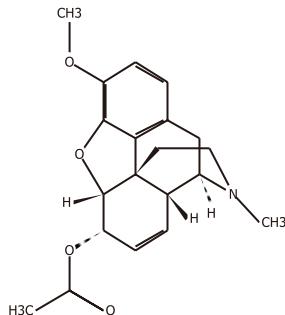


## 化合物的筛查和确认

# 6-乙酰可待因 (6-AC)

化学名称:	6-单乙酰可待因; 6-MAC; (IUPAC) 3-甲氧基-6-乙酰基-(5 $\alpha$ ,6 $\alpha$ )-7,8-二脱氢-4,5-环氧-17-甲基吗啡喃
分子式:	C <sub>20</sub> H <sub>23</sub> NO <sub>4</sub>
分子量*:	341.4

## 分子结构:



## 筛查方法: Immunalysis ELISA 目录 #2070F

临界浓度: 20 ng/mL    目标化合物: 吗啡

### 显著交叉反应:

吗啡	100%
6-AC	41%
6-AM	83%
可待因	200%
氢可酮	93%

## 确认方法: LC-MS/MS

LOQ 4 ng/mL

## LC 参数

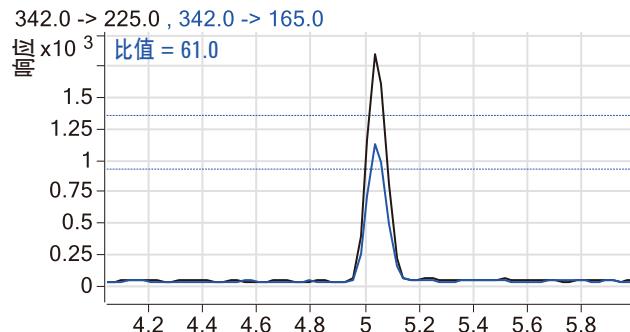
色谱柱	Zorbax Eclipse Plus C18 快速分离高通量色谱柱 4.6 x 50 mm, 1.8 $\mu$ m
流速	0.7 mL/min
柱温	60 °C
流动相	A = 20 mM 甲酸铵 pH 6.4, B = 甲醇
梯度程序	0 min 15% B 6 min 78% B 后运行 3min
进样量	5 $\mu$ L

## MS 参数

雾化器压力	50 psi
干燥气流量	10 L/min
干燥气温度	350 °C
毛细管电压	4000 V

## LC-MS/MS 离子对:

化合物	母离子	子离子	碎裂电压 (V)	碰撞能量 (V)
6-AM-d <sub>3</sub>	331	165	160	35
<b>6-AC</b>	<b>342</b>	<b>225</b>	<b>160</b>	<b>30</b>
6-AC	342	165	160	40



\* 单一同位素分子量

LOQ 水平的 MRM 谱图, ± 20% 离子比限值

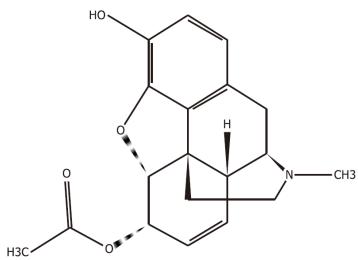
# 6-乙酰吗啡 (6-AM)

化学名称: 6-单乙酰吗啡; 6-MAM; (IUPAC)  
6-O-乙酰吗啡

分子式: C<sub>19</sub>H<sub>21</sub>NO<sub>4</sub>

分子量\*: 327.2

## 分子结构:



## 筛查方法: Immunalysis ELISA 目录 #2070F

临界浓度: 20 ng/mL    目标化合物: 吗啡

### 显著交叉反应:

吗啡	100%
6-AM	83%
可待因	200%
氢可酮	93%
双氢可待因	85%

## 确认方法: LC-MS/MS

LOQ 4ng/mL

## LC 参数

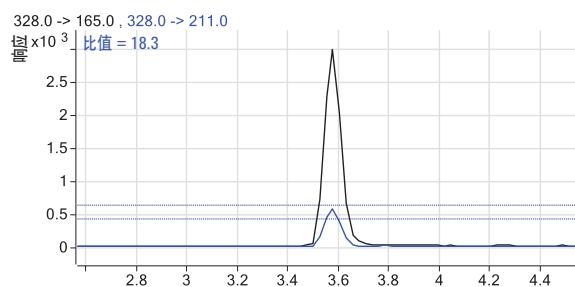
色谱柱	Zorbax Eclipse Plus C18 快速分离高通量色谱柱 4.6 x 50 mm, 1.8 μm
流速	0.7 mL/min
柱温	60 °C
流动相	A = 20 mM 甲酸铵 pH 6.4, B = 甲醇
梯度程序	0 min 15% B 6 min 78% B 后运行 3 min
进样量	5 μL

## MS 参数

雾化器压力	50 psi
干燥气流量	10 L/min
干燥气温度	350 °C
毛细管电压	4000 V

## LC-MS/MS 离子对:

化合物	母离子	子离子	碎裂电压(V)	碰撞能量(V)
6-AM-d <sub>3</sub>	331	165	160	35
6-AM	328	211	160	40
<b>6-AM</b>	<b>328</b>	<b>165</b>	<b>160</b>	<b>40</b>



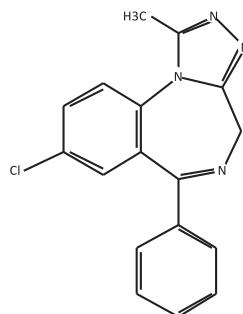
\* 单一同位素分子量

LOQ 水平的 MRM 谱图, ± 20% 离子比限值

# 阿普唑仑

化学名称:	(IUPAC) 8-氯-1-甲基-6-苯基-4H-[1,2,4]-三唑并[4,3-a][1,4]苯并二氮杂卓
分子式:	C <sub>17</sub> H <sub>13</sub> ClN <sub>4</sub>
分子量*:	308.1

## 分子结构:



## 筛查方法: Immunalysis ELISA 目录 #214

临界浓度: 5 ng/mL    目标化合物: 奥沙西泮

### 显著交叉反应

奥沙西泮	100%
阿普唑仑	180%
氯硝西泮	70%
替马西泮	200%
地西泮	70%

## 确认方法: LC-MS/MS

LOQ 1 ng/mL

## LC 参数

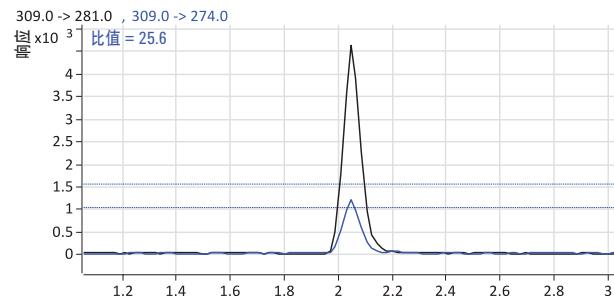
色谱柱	Zorbax Eclipse Plus C18 快速分离高通量色谱柱 4.6 x 50 mm, 1.8 μm
流速	0.5 mL/min
柱温	35 °C
流动相	A = 20 mM 甲酸铵水溶液 pH 8.6, B = 乙腈
梯度程序	0 min 50% B 等度洗脱 5.5 min 停止。后运行关闭
进样量	5 μL

## MS 参数

雾化器压力	50 psi
干燥气流量	10 L/min
干燥气温度	300 °C
毛细管电压	3500 V

## LC-MS/MS 离子对:

化合物	母离子	子离子	碎裂电压(V)	碰撞能量 (V)
阿普唑仑-d <sub>5</sub>	314	286	160	25
<b>阿普唑仑</b>	<b>309</b>	<b>281</b>	<b>160</b>	<b>25</b>
阿普唑仑	309	274	160	30



\* 单一同位素分子量

LOQ 水平的 MRM 谱图, ± 20% 离子比限值

# AM-2201

分子结构:

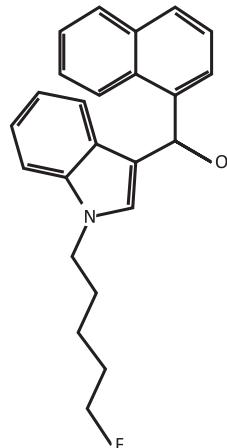
化学名称:	(IUPAC) 1-[(5-氟戊基)-1H-吲哚-3-基]-1H-萘-1-基)甲酮
分子式:	C <sub>24</sub> H <sub>22</sub> FNO
分子量*:	359.435

筛查方法: Immunalysis ELISA 目录 #244

临界浓度: 5 ng/mL    目标化合物: JWH-200

显著交叉反应:

JWH-200	100%
AM 2201	50%
JWH-073	31%
JWH-018	22%



确认方法: LC-MS/MS

LOQ 1 ng/mL

## LC 参数

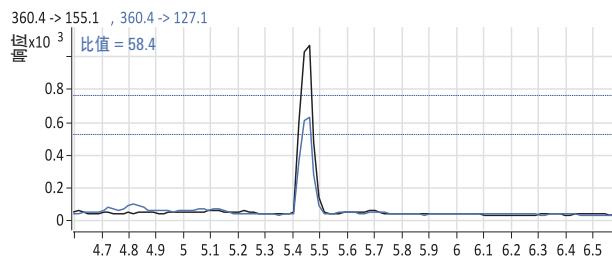
色谱柱	Zorbax Eclipse Plus C18 快速分离高通量色谱柱 2.1 x 50 mm, 1.8 μm
流速	0.4 mL/min
柱温	60 °C
流动相	A = 0.2% 醋酸水溶液, B = 乙腈
梯度程序	0 min 5% B 5 min 100% B 7 min 1% B 9 min 停止。后运行 2 min
进样量	5 μL

## MS 参数

雾化器压力	55 psi
干燥气流量	10 L/min
干燥气温度	350 °C
毛细管电压	2500 V

## LC-MS/MS 离子对:

化合物	母离子	子离子	碎裂电压(V)	碰撞能量 (V)
JWH-073-d <sub>7</sub>	335.3	207.2	120	20
<b>AM-2201</b>	<b>360.4</b>	<b>155.1</b>	<b>160</b>	<b>25</b>
AM-2201	360.4	127.1	160	35



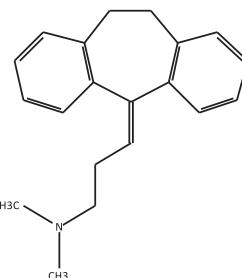
\* 单一同位素分子量

LOQ 水平的 MRM 谱图, ± 20% 离子比限值

# 阿米替林

化学名称:	10,11-二氢-N,N-二甲基-5H-二苯并[a,d]环庚烯-Δ5, γ-丙胺
分子式:	C <sub>20</sub> H <sub>23</sub> N
分子量*:	277.4

## 分子结构:



## 筛查方法: Immunalysis ELISA 目录 #222

临界浓度: 25 ng/mL    目标化合物: 去甲替林

### 显著交叉反应:

去甲替林	100%
阿米替林	200%
地昔帕明	200%
丙咪嗪	200%
三甲丙咪嗪	50%

## 确认方法: LC-MS/MS

LOQ 10 ng/mL

## LC 参数

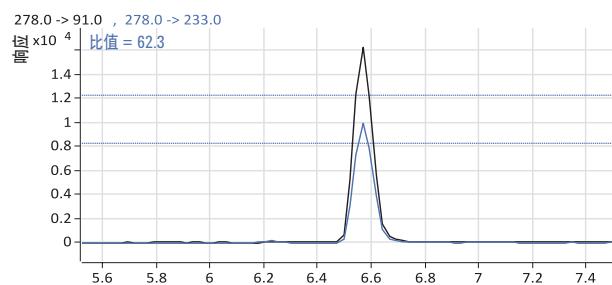
色谱柱	Zorbax Eclipse Plus C18 快速分离高通量色谱柱 4.6 x 50 mm, 1.8 μm
流速	1 mL/min
柱温	45 °C
流动相	A = 0.2% 醋酸水溶液, B = 甲醇
梯度程序	0 min 30% B 0.1 min 30% B 8 min 70% B 9 min 30% B 11 min 停止。后运行 2 min
进样量	5 μL

## MS 参数

雾化器压力	50 psi
干燥气流量	11 L/min
干燥气温度	350 °C
毛细管电压	4000 V

## LC-MS/MS 离子对:

化合物	母离子	子离子	碎裂电压(V)	碰撞能量 (V)
去甲替林-d <sub>3</sub>	267	233	100	10
阿米替林	278	233	100	10
<b>阿米替林</b>	<b>278</b>	<b>91</b>	<b>100</b>	<b>20</b>



\* 单一同位素分子量

LOQ 水平的 MRM 谱图, ± 20% 离子比限值

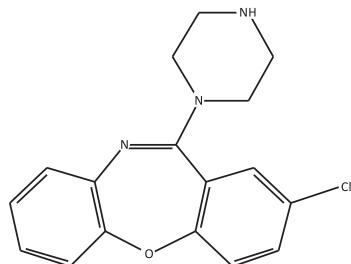
# 阿莫沙平

化学名称：2-氯-11-(1-哌嗪基)二苯并[b,f]氧氮杂卓

分子式：C17H16ClN3O

分子量\*：313.1

## 分子结构：



## 筛查方法：Immunalysis ELISA 目录 #222

临界浓度：N/A      目标化合物：去甲替林

显著交叉反应：

无数据

## 确认方法：LC-MS/MS

LOQ 10 ng/mL

## LC 参数

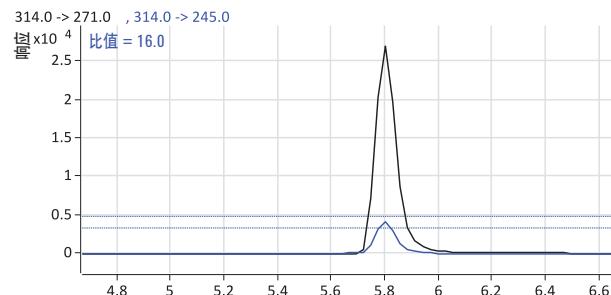
色谱柱	Zorbax Eclipse Plus C18 快速分离高通量色谱柱 4.6 x 50 mm, 1.8 μm
流速	1 mL/min
柱温	45 °C
流动相	A = 0.2% 醋酸水溶液, B = 甲醇 0 min 30% B 0.1 min 30% B 8 min 70% B 9 min 30% B 11 min 停止。后运行 2 min
梯度程序	
进样量	5 μL

## MS 参数

雾化器压力	50 psi
干燥气流量	11 L/min
干燥气温度	350 °C
毛细管电压	4000 V

## LC-MS/MS 离子对：

化合物	母离子	子离子	碎裂电压(V)	碰撞能量 (V)
帕罗西汀-d <sub>6</sub>	336	76	120	20
<b>阿莫沙平</b>	<b>314</b>	<b>271</b>	<b>120</b>	<b>20</b>
阿莫沙平	314	245	120	20



\* 单一同位素分子量

LOQ 水平的 MRM 谱图, ± 20% 离子比限值

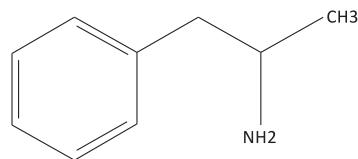
# 安非他明

化学名称: 芳基异丙胺; (IUPAC) 1-苯基丙-2-胺

分子式: C<sub>9</sub>H<sub>13</sub>N

分子量\*: 135.1

## 分子结构:



## 筛查方法: Immunalysis ELISA 目录 #2090F

临界浓度: 25 ng/mL    目标化合物: d-安非他明

### 显著交叉反应:

d-安非他明	100%
l-安非他明	9.7%
dl-MDA	178%
芬特明	89%

## 确认方法: LC-MS/MS

LOQ 10 ng/mL

### LC 参数 (方法还适用保留时间更长的相关化合物)

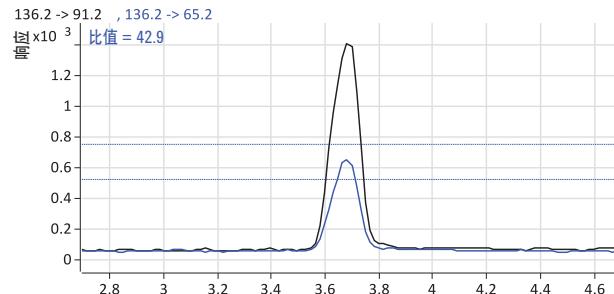
色谱柱	Zorbax Eclipse Plus C18 快速分离高通量色谱柱 4.6 x 50 mm, 1.8 μm
流速	0.7 mL/min
柱温	40 °C
流动相	A = 20 mM 甲酸铵水溶液 pH 6.4, B = 甲醇 0 min 15% B 8 min 50% B 9 min 15% B 12 min 停止。后运行 1 min
梯度程序	
进样量	5 μL

### MS 参数

雾化器压力	40 psi
干燥气流量	6 L/min
干燥气温度	350 °C
毛细管电压	4000 V

### LC-MS/MS 离子对:

化合物	母离子	子离子	碎裂电压(V)	碰撞能量 (V)
安非他明-d <sub>5</sub>	141.2	96.1	80	15
<b>安非他明</b>	<b>136.2</b>	<b>91.2</b>	<b>80</b>	<b>25</b>
安非他明	136.2	65.2	80	45



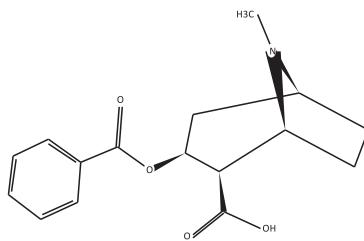
\* 单一同位素分子量

LOQ 水平的 MRM 谱图, ± 20% 离子比限值

# 苯甲酰爱冈宁

化学名称:	苯甲酰芽子碱; (IUPAC) 3-(苯甲酰氧基)-8-甲基-8-氮杂双环[3.2.1]辛烷-2-羧酸
分子式:	C <sub>16</sub> H <sub>19</sub> NO <sub>4</sub>
分子量*:	289.1

## 分子结构:



## 筛查方法: Immunalysis ELISA 目录 #2120F

临界浓度: 20 ng/mL    目标化合物: 苯甲酰爱冈宁

### 显著交叉反应:

苯甲酰爱冈宁	100%
古柯乙稀	90%
可卡因	70%
去甲可卡因	0.2%

## 确认方法: LC-MS/MS

LOQ 2 ng/mL

## LC 参数

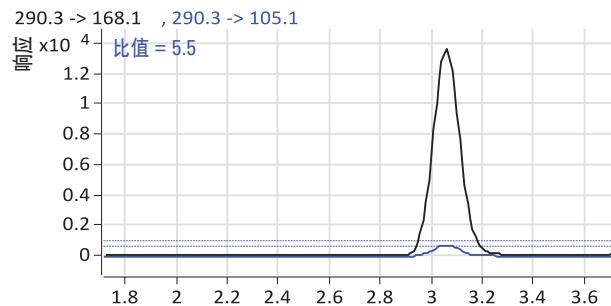
色谱柱	Zorbax Eclipse Plus C18 快速分离高通量色谱柱 4.6 x 50 mm, 1.8 μm
流速	0.2 mL/min
柱温	60 °C
流动相	A = 20 mM 甲酸铵水溶液 pH 6.4, B = 甲醇
	0 min 80% B
梯度程序	4 min 30%
	6 min 停止。后运行 4 min
进样量	5 μL

## MS 参数

雾化器压力	50 psi
干燥气流量	10 L/min
干燥气温度	350 °C
毛细管电压	4000 V

## LC-MS/MS 离子对:

化合物	母离子	子离子	碎裂电压(V)	碰撞能量 (V)
苯甲酰爱冈宁-d <sub>3</sub>	293.3	171.2	120	20
<b>苯甲酰爱冈宁</b>	<b>290.3</b>	<b>168.1</b>	<b>120</b>	<b>15</b>
苯甲酰爱冈宁	290.3	105.1	100	15

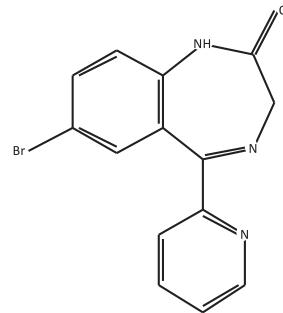


\* 单一同位素分子量

LOQ 水平的 MRM 谱图, ± 20% 离子比限值

# 溴西泮

分子结构:



化学名称:	7-溴-1,3-二氢-5-(2-吡啶基)-2H-1,4-苯并二氮杂卓-2-酮
分子式:	C <sub>14</sub> H <sub>10</sub> BrN <sub>3</sub> O
分子量*:	315.0

筛查方法: Immunalysis ELISA 目录 #214

临界浓度: 5 ng/mL    目标化合物: 奥沙西泮

显著交叉反应:

奥沙西泮	100%
溴西泮	70%
阿普唑仑	180%
替马西泮	200%
地西泮	70%

确认方法: LC-MS/MS

LOQ 1 ng/mL

## LC 参数

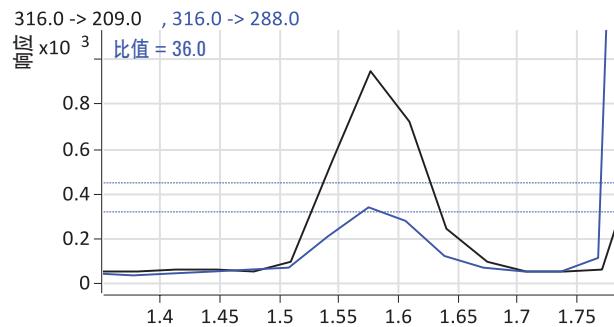
色谱柱	Zorbax Eclipse Plus C18 快速分离高通量色谱柱 4.6 x 50 mm, 1.8 μm
流速	0.5 mL/min
柱温	35 °C
流动相	A = 20 mM 甲酸铵水溶液 pH 8.6, B = 乙腈
梯度程序	0 min 50% B 等度洗脱 5.5 min 停止。后运行关闭
进样量	5 μL

## MS 参数

雾化器压力	50 psi
干燥气流量	10 L/min
干燥气温度	300 °C
毛细管电压	3500 V

## LC-MS/MS 离子对:

化合物	母离子	子离子	碎裂电压(V)	碰撞能量 (V)
阿普唑仑-d <sub>5</sub>	314	286	160	25
溴西泮	316	288	160	20
<b>溴西泮</b>	<b>316</b>	<b>209</b>	<b>160</b>	<b>30</b>



\* 单一同位素分子量

LOQ 水平的 MRM 谱图, ± 20% 离子比限值

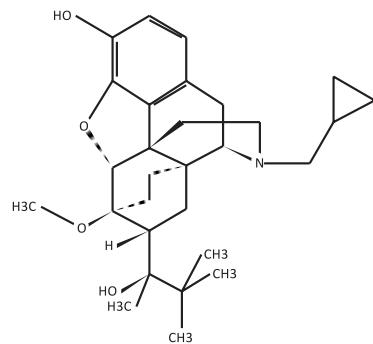
# 丁丙诺啡

化学名称：  
[5 $\alpha$ ,7 $\alpha$ (S)]-17-(环丙基甲基)- $\alpha$ -(1,1-二甲基乙基)-4,5-环氧-18,19-二氢-3-羟基-6-甲氧基- $\alpha$ -甲基-6,14-亚乙烯吗啡喃-7-甲醇

分子式：  
 $C_{29}H_{41}NO_4$

分子量\*：  
467.3

## 分子结构：



## 筛查方法：Immunoassay ELISA 目录 #236

临界浓度：5 ng/mL    目标化合物：丁丙诺啡

### 显著交叉反应：

丁丙诺啡	100%
去甲丁丙诺啡	120%

## 确认方法：LC-MS/MS

LOQ 1 ng/mL

## LC 参数

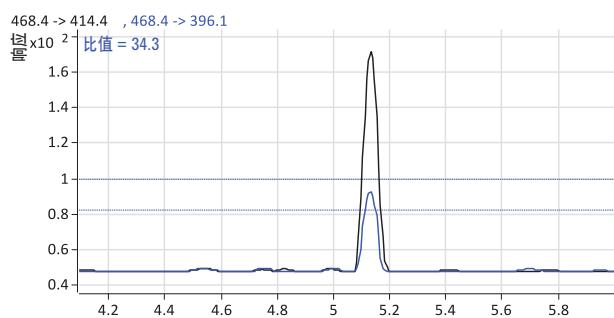
色谱柱	Zorbax Eclipse Plus C18 快速分离高通量色谱柱 4.6 x 50 mm, 1.8 $\mu$ m
流速	0.8 mL/min
柱温	50 °C
流动相	A = 20 mM 甲酸铵 pH 6.4, B = 甲醇
梯度程序	0 min 25% B 3 min 100% B 6 min 停止。后运行 2 min
进样量	5 $\mu$ L

## MS 参数

雾化器压力	50 psi
干燥气流量	10 L/min
干燥气温度	300 °C
毛细管电压	4000 V

## LC-MS/MS 离子对：

化合物	母离子	子离子	碎裂电压(V)	碰撞能量 (V)
丁丙诺啡-d <sub>4</sub>	472.5	400.4	240	45
<b>丁丙诺啡</b>	<b>468.4</b>	<b>414.4</b>	<b>240</b>	<b>35</b>
丁丙诺啡	468.4	396.1	240	55



\* 单一同位素分子量

LOQ 水平的 MRM 谱图，± 20% 离子比限值

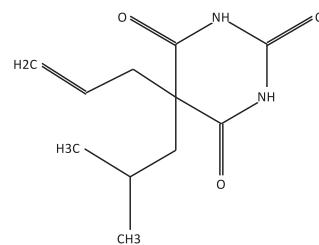
# 布他比妥

化学名称: 5-(2-甲基丙基)-5-(2-丙烯基)-2,4,6(1H,3H,5H)-嘧啶三酮

分子式: C<sub>11</sub>H<sub>16</sub>N<sub>2</sub>O<sub>3</sub>

分子量\*: 224.1

## 分子结构:



## 筛查方法: Immunalysis ELISA 目录 #210

临界浓度: 50 ng/mL 目标化合物: 司可巴比妥

### 显著交叉反应:

司可巴比妥	100%
布他比妥	83%
阿普比妥	89%
戊巴比妥	83%
苯巴比妥	50%
仲丁巴比妥	33%

## 确认方法: LC-MS/MS

LOQ 25 ng/mL

### LC 参数

色谱柱	Zorbax Eclipse Plus C18 快速分离高通量色谱柱 4.6 x 50 mm, 1.8 μm
流速	0.8 mL/min
柱温	35 °C
流动相	A = 0.2% 醋酸水溶液, B = 甲醇
	0 min 5% B
	0.2 min 5% B
梯度程序	5 min 95% B
	5.2 min 95% B
	6 min 5%
	8.2 min 停止。后运行关闭
进样量	5 μL

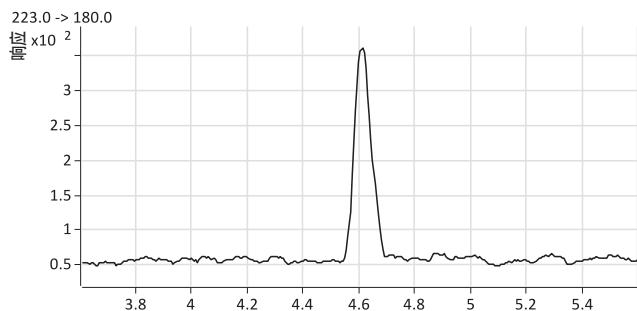
### MS 参数 – 阴离子模式

雾化器压力	35 psi
干燥气流量	10 L/min
干燥气温度	300 °C
毛细管电压	4500 V

### LC-MS/MS 离子对:

化合物	母离子	子离子	碎裂电压(V)	碰撞能量 (V)
戊巴比妥-d <sub>5</sub>	230	42	120	15
<b>布他比妥</b>	<b>223</b>	<b>180</b>	<b>100</b>	<b>4</b>

\* 单一同位素分子量



LOQ 水平的 MRM 谱图, ± 20% 离子比限值

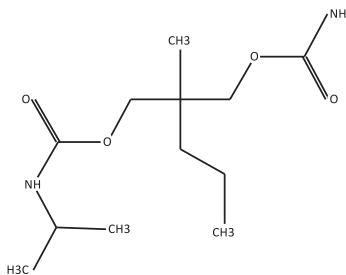
# 肌安宁

化学名称：N-异丙基眠尔通；2-[(氨基羰基)氧]甲基]-2-甲基戊基(1-甲基乙基)氨基甲酸酯

分子式： $C_{12}H_{24}N_2O_4$

分子量\*：260.17

## 分子结构：



## 筛查方法：Immunalysis ELISA 目录 #231

临界浓度：50 ng/mL

目标化合物：肌安宁

显著交叉反应：

肌安宁 100%

眠尔通 118%

## 确认方法：LC-MS/MS

LOQ 10 ng/mL

### LC 参数

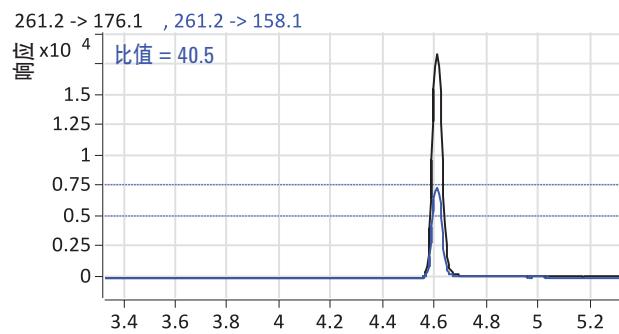
色谱柱	Zorbax Eclipse Plus C18 快速分离高通量色谱柱 4.6 x 50 mm, 1.8 μm
流速	0.7 mL/min
柱温	40 °C
流动相	A = 20 mM 甲酸铵水溶液 pH 6.4, B = 甲醇 0 min 15% B 4 min 100% B 5 min 15% B 5.5 min 停止。后运行 3 min
进样量	5 μL

### MS 参数

雾化器压力	40 psi
干燥气流量	8 L/min
干燥气温度	350 °C
毛细管电压	4000 V

### LC-MS/MS 离子对：

化合物	母离子	子离子	碎裂电压(V)	碰撞能量 (V)
肌安宁-d <sub>7</sub>	268.2	183.2	60	2
<b>肌安宁</b>	<b>261.2</b>	<b>176.1</b>	<b>60</b>	<b>2</b>
肌安宁	261.2	158.1	60	2



\* 单一同位素分子量

LOQ 水平的 MRM 谱图, ± 20% 离子比限值

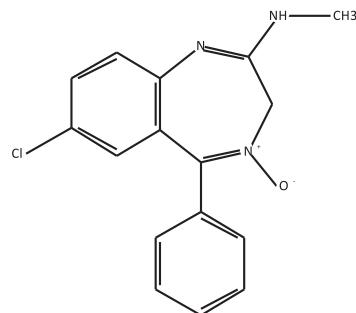
# 利眠宁

化学名称: 7-氯-N-甲基-5-苯基-3H-1,4-苯并二氮杂卓-2-胺-4-氧化物

分子式: C<sub>16</sub>H<sub>14</sub>ClN<sub>3</sub>O

分子量\*: 300.1

## 分子结构:



## 筛查方法: Immunalysis ELISA 目录 #214

临界浓度: 5 ng/mL    目标化合物: 奥沙西泮

### 显著交叉反应:

奥沙西泮	100%
利眠宁	30%
地西泮	70%
去甲西泮	50%
替马西泮	200%

## 确认方法: LC-MS/MS

LOQ 1 ng/mL

## LC 参数

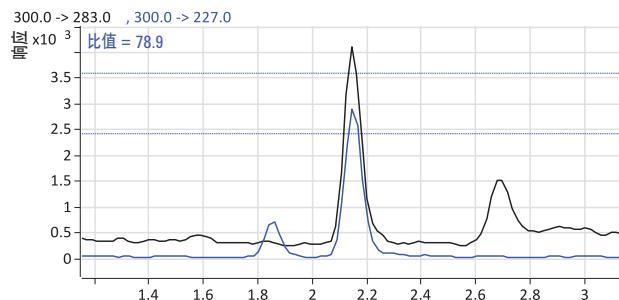
色谱柱	Zorbax Eclipse Plus C18 快速分离高通量色谱柱 4.6 x 50 mm, 1.8 μm
流速	0.5 mL/min
柱温	35 °C
流动相	A = 20 mM 甲酸铵水溶液 pH 8.6, B = 乙腈 0 min 50% B
梯度程序	等度洗脱 5.5 min 停止。后运行关闭
进样量	5 μL

## MS 参数

雾化器压力	50 psi
干燥气流量	10 L/min
干燥气温度	300 °C
毛细管电压	3500 V

## LC-MS/MS 离子对:

化合物	母离子	子离子	碎裂电压(V)	碰撞能量 (V)
阿普唑仑-d <sub>5</sub>	314	286	160	25
<b>利眠宁</b>	<b>300</b>	<b>283</b>	<b>120</b>	<b>15</b>
利眠宁	300	227	120	30



\* 单一同位素分子量

LOQ 水平的 MRM 谱图, ± 20% 离子比限值

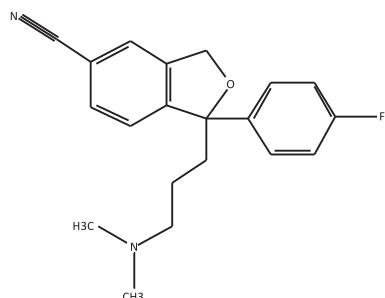
# 西酞普兰

化学名称: (IUPAC) 1-[3-(二甲氨基)丙基]-1-(4-氟苯基)-1,3-二氢-5-异苯并呋喃腈

分子式: C<sub>20</sub>H<sub>21</sub>FN<sub>2</sub>O

分子量\*: 324.2

## 分子结构:



## 筛查方法: Immunalysis ELISA 目录 #222

临界浓度: N/A      目标化合物: 去甲替林

显著交叉反应:

无数据

## 确认方法: LC-MS/MS

LOQ 10 ng/mL

## LC 参数

色谱柱 Zorbax Eclipse Plus C18 快速分离高通量色谱柱  
4.6 x 50 mm, 1.8 μm

流速 1 mL/min

柱温 45 °C

流动相 A = 0.2% 醋酸水溶液, B = 甲醇

0 min 30% B

0.1 min 30% B

梯度程序 8 min 70% B

9 min 30% B

11 min 停止。后运行 2 min

进样量 5 μL

## MS 参数

雾化器压力 50 psi

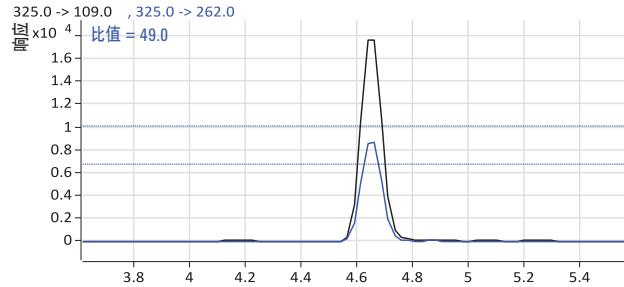
干燥气流量 11 L/min

干燥气温度 350 °C

毛细管电压 4000 V

## LC-MS/MS 离子对:

化合物	母离子	子离子	碎裂电压(V)	碰撞能量 (V)
帕罗西汀-d <sub>6</sub>	336	76	120	20
西酞普兰	325	262	110	15
<b>西酞普兰</b>	<b>325</b>	<b>109</b>	<b>110</b>	<b>20</b>



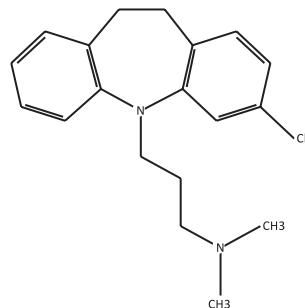
\* 单一同位素分子量

LOQ 水平的 MRM 谱图, ± 20% 离子比限值

# 氯米帕明

化学名称:	单氯丙咪嗪；3-氯-10,11-二氢-N,N-二甲基-5H-二苯并 [b,f]氮杂卓-5-丙胺
分子式:	C <sub>19</sub> H <sub>23</sub> ClN <sub>2</sub>
分子量*:	314.2

## 分子结构:



## 筛查方法: Immunalysis ELISA 目录 #222

临界浓度: 25 ng/mL    目标化合物: 去甲替林

### 显著交叉反应:

去甲替林	100%
氯米帕明	40%
地昔帕明	200%
丙咪嗪	200%
三甲丙咪嗪	50%

## 确认方法: LC-MS/MS

LOQ 10 ng/mL

## LC 参数

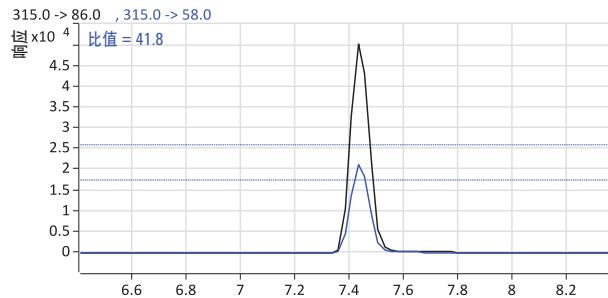
色谱柱	Zorbax Eclipse Plus C18 快速分离高通量色谱柱 4.6 x 50 mm, 1.8 μm
流速	1 mL/min
柱温	45 °C
流动相	A = 0.2% 醋酸水溶液, B = 甲醇
	0 min 30% B
	0.1 min 30% B
梯度程序	8 min 70% B
	9 min 30% B
	11 min 停止。后运行 2 min
进样量	5 μL

## MS 参数

雾化器压力	50 psi
干燥气流量	11 L/min
干燥气温度	350 °C
毛细管电压	4000 V

## LC-MS/MS 离子对:

化合物	母离子	子离子	碎裂电压(V)	碰撞能量 (V)
帕罗西汀-d <sub>6</sub>	336	76	120	20
<b>氯米帕明</b>	<b>315</b>	<b>86</b>	<b>110</b>	<b>15</b>
氯米帕明	315	58	110	35



\* 单一同位素分子量

LOQ 水平的 MRM 谱图, ± 20% 离子比限值

# 氯硝西泮

化学名称:	5-(2-氯苯基)-1,3-二氢-7-硝基-2H-1,4-苯并二氮杂卓-2-酮
分子式:	C <sub>15</sub> H <sub>10</sub> ClN <sub>3</sub> O <sub>3</sub>
分子量*:	315.0

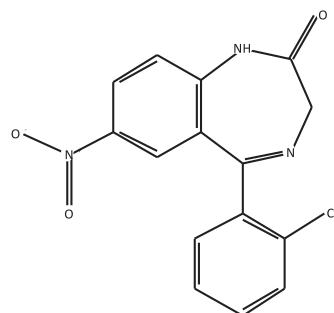
## 筛查方法: Immunalysis ELISA 目录 #214

临界浓度: 5 ng/mL    目标化合物: 奥沙西泮

### 显著交叉反应:

奥沙西泮	100%
氯硝西泮	70%
阿普唑仑	180%
替马西泮	200%
地西泮	70%

## 分子结构:



## 确认方法: LC-MS/MS

LOQ 1 ng/mL

### LC 参数

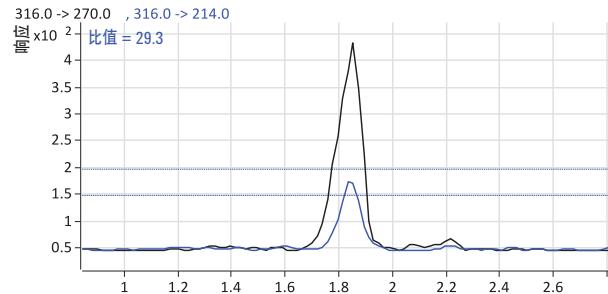
色谱柱	Zorbax Eclipse Plus C18 快速分离高通量色谱柱 4.6 x 50 mm, 1.8 μm
流速	0.5 mL/min
柱温	35 °C
流动相	A = 20 mM 甲酸铵水溶液 pH 8.6, B = 乙腈
梯度程序	0 min 50% B 等度洗脱 5.5 min 停止。后运行关闭
进样量	5 μL

### MS 参数

雾化器压力	50 psi
干燥气流量	10 L/min
干燥气温度	300 °C
毛细管电压	3500 V

### LC-MS/MS 离子对:

化合物	母离子	子离子	碎裂电压(V)	碰撞能量 (V)
氯硝西泮-d <sub>4</sub>	320	274	120	25
<b>氯硝西泮</b>	<b>316</b>	<b>270</b>	<b>120</b>	<b>25</b>
氯硝西泮	316	214	120	35



\* 单一同位素分子量

LOQ 水平的 MRM 谱图, ± 20% 离子比限值

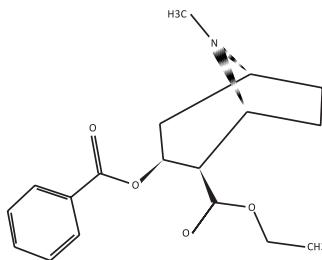
# 古柯乙稀

化学名称：乙基苯甲酰爱冈宁；(IUPAC) (2R,3S)-3-苯甲酸基-8-甲基-8-氮杂双环[3.2.1]辛烷-2-羧酸乙酯

分子式： $C_{18}H_{23}NO_4$

分子量\*：317.2

## 分子结构：



## 筛查方法：Immunalysis ELISA 目录 #2120F

临界浓度：20 ng/mL    目标化合物：苯甲酰爱冈宁

### 显著交叉反应：

苯甲酰爱冈宁	100%
古柯乙稀	90%
可卡因	70%
去甲可卡因	0.2%

## 确认方法：LC-MS/MS

LOQ 2 ng/mL

## LC 参数

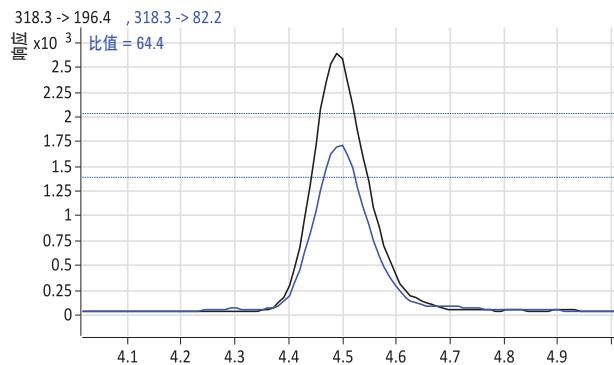
色谱柱	Zorbax Eclipse Plus C18 快速分离高通量色谱柱 4.6 x 50 mm, 1.8 μm
流速	0.2 mL/min
柱温	60 °C
流动相	A = 20 mM 甲酸铵水溶液 pH 6.4, B = 甲醇 0 min 80% B 4 min 30% 6 min 停止。后运行 4 min
梯度程序	
进样量	5 μL

## MS 参数

雾化器压力	50 psi
干燥气流量	10 L/min
干燥气温度	350 °C
毛细管电压	4000 V

## LC-MS/MS 离子对：

化合物	母离子	子离子	碎裂电压(V)	碰撞能量 (V)
古柯乙稀-d <sub>8</sub>	326.3	204.4	160	20
<b>古柯乙稀</b>	<b>318.3</b>	<b>196.4</b>	<b>120</b>	<b>25</b>
古柯乙稀	318.3	82.2	120	25

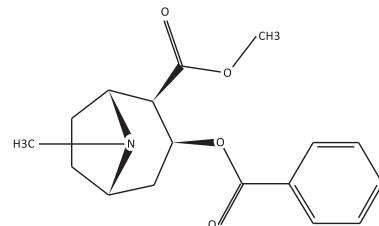


\* 单一同位素分子量

LOQ 水平的 MRM 谱图, ± 20% 离子比限值

# 可卡因

## 分子结构:



化学名称:	甲基苯甲酰爱冈宁; (IUPAC) (1S,3S,4R,5R)-3-苯甲酸基-8-甲基-8-氮杂双环[3.2.1]辛烷-4-羧酸甲酯
分子式:	C <sub>17</sub> H <sub>21</sub> NO <sub>4</sub>
分子量*:	303.2

## 筛查方法: Immunalysis ELISA 目录 #2120F

临界浓度: 20 ng/mL    目标化合物: 莱甲酰爱冈宁

### 显著交叉反应:

苯甲酰爱冈宁	100%
古柯乙烯	90%
可卡因	70%
去甲可卡因	0.2%

## 确认方法: LC-MS/MS

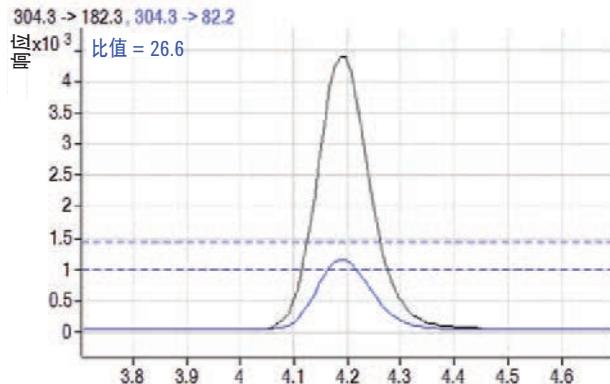
LOQ 2 ng/mL

## LC 参数

色谱柱	Zorbax Eclipse Plus C18 快速分离高通量色谱柱 4.6 x 50 mm, 1.8 μm
流速	0.2 mL/min
柱温	60 °C
流动相	A = 20 mM 甲酸铵水溶液 pH 6.4, B = 甲醇 0 min 80% B 4 min 30% 6 min 停止。后运行 4 min
梯度程序	
进样量	5 μL

## MS 参数

雾化器压力	50 psi
干燥气流量	10 L/min
干燥气温度	350 °C
毛细管电压	4000 V



## LC-MS/MS 离子对:

化合物	母离子	子离子	碎裂电压(V)	碰撞能量 (V)
可卡因-d3	307.3	185.3	120	20
<b>可卡因</b>	<b>304.3</b>	<b>182.3</b>	<b>120</b>	<b>20</b>
可卡因	304.3	82.2	120	25

\* 单一同位素分子量

LOQ 水平的 MRM 谱图, ± 20% 离子比限值

# 可待因

化学名称:	(IUPAC) (5 $\alpha$ ,6 $\alpha$ )-3-甲氧基-17-甲基-7,8-二脱氢-4,5-环 氧基吗啡喃-6-醇
分子式:	C <sub>18</sub> H <sub>21</sub> NO <sub>3</sub>
分子量*:	299.2

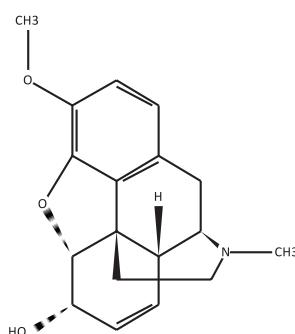
## 筛查方法: Immunalysis ELISA 目录 #2070F

临界浓度: 20 ng/mL    目标化合物: 吗啡

### 显著交叉反应:

吗啡	100%
6-AM	83%
可待因	200%
氢可酮	93%
双氢可待因	85%

## 分子结构:



## 确认方法: LC-MS/MS

LOQ 4 ng/mL

## LC 参数

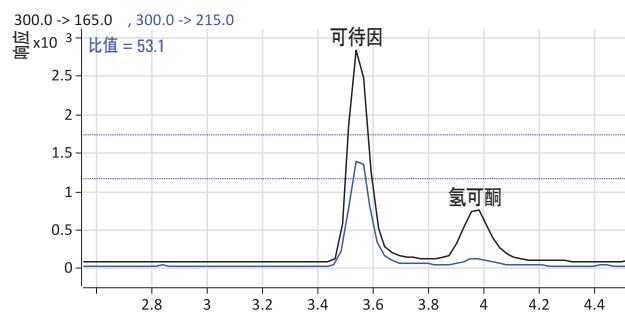
色谱柱	Zorbax Eclipse Plus C18 快速分离高通量色谱柱 4.6 x 50 mm, 1.8 $\mu$ m
流速	0.7 mL/min
柱温	60 °C
流动相	A = 20 mM 氨水 pH 6.4, B = 甲醇
梯度程序	0 min 15% B 6 min 78% B 后运行 3 min
进样量	5 $\mu$ L

## MS 参数

雾化器压力	50 psi
干燥气流量	10 L/min
干燥气温度	350 °C
毛细管电压	4000 V

## LC-MS/MS 离子对:

化合物	母离子	子离子	碎裂电压(V)	碰撞能量 (V)
可待因-d <sub>3</sub>	303	165	140	40
可待因	300	215	140	25
<b>可待因</b>	<b>300</b>	<b>165</b>	<b>140</b>	<b>45</b>



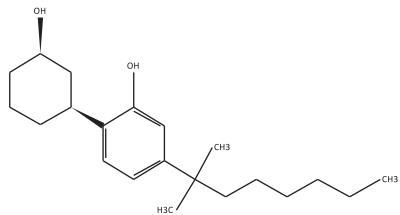
\* 单一同位素分子量

LOQ 水平的 MRM 谱图, ± 20% 离子比限值

# CP 47, 497

化学名称:	(IUPAC) 1-[1R,3S]-3-羟基环己基]-5-(2-甲基辛-2-基)苯酚
分子式:	C <sub>21</sub> H <sub>34</sub> O <sub>2</sub>
分子量*:	318.5

分子结构:



筛查方法: Immunalysis ELISA 正在开发中

临界浓度: N/A    目标化合物: N/A

显著交叉反应:

无	N/A
---	-----

确认方法: LC-MS/MS

LOQ 2 ng/mL

## LC 参数

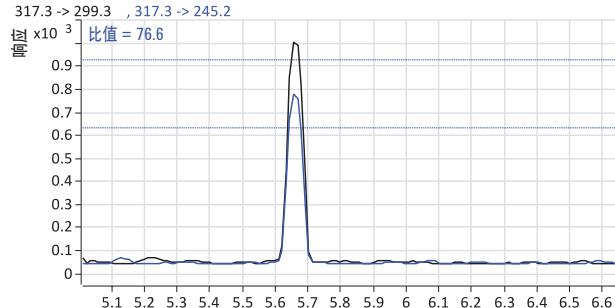
色谱柱	Zorbax Eclipse Plus C18 快速分离高通量色谱柱 2.1 x 50 mm, 1.8 μm
流速	0.5 mL/min
柱温	60 °C
流动相	A = 0.2% 醋酸水溶液, B = 乙腈
梯度程序	0 min 5% B 5 min 100% B 7 min 1% B 9.2 min 停止。后运行 2 min
进样量	5 μL

## MS 参数 – 阴离子模式

雾化器压力	55 psi
干燥气流量	10 L/min
干燥气温度	350 °C
毛细管电压	4000 V

## LC-MS/MS 离子对:

化合物	母离子	子离子	碎裂电压(V)	碰撞能量 (V)
JWH-073-d <sub>7</sub>	335.3	207.2	120	20
<b>CP 47497</b>	<b>317.3</b>	<b>299.3</b>	<b>160</b>	<b>20</b>
CP 47497	317.3	245.2	160	30



\* 单一同位素分子量

LOQ 水平的 MRM 谱图, ± 20% 离子比限值

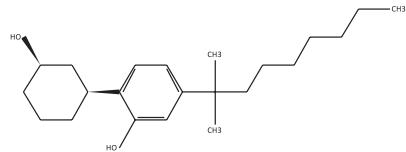
# CP 47, 497-C8

化学名称: 2-[(1R,3S)-3-羟基环己基]-5-(2-甲基壬-2-基)苯酚

分子式: C<sub>22</sub>H<sub>36</sub>O<sub>2</sub>

分子量\*: 332.3

## 分子结构:



筛查方法: Immunoassay ELISA 正在开发中

临界浓度: N/A      目标化合物: N/A

显著交叉反应:

无	N/A
---	-----

确认方法: LC-MS/MS

LOQ 2 ng/mL

## LC 参数

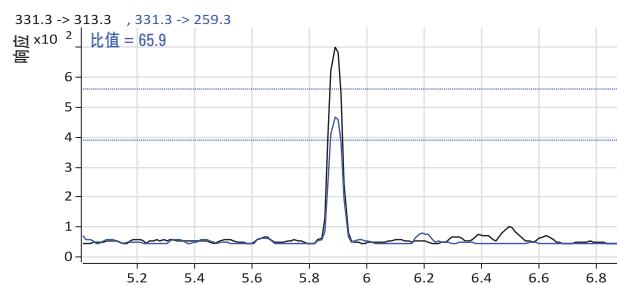
色谱柱	Zorbax Eclipse Plus C18 快速分离高通量色谱柱 2.1 x 50 mm, 1.8 μm
流速	0.5 mL/min
柱温	60 °C
流动相	A = 0.2% 醋酸水溶液, B = 乙腈
梯度程序	0 min 5% B 5 min 100% B 7 min 1% B 9.2 min 停止。后运行 2 min
进样量	5 μL

## MS 参数 – 阴离子模式

雾化器压力	55 psi
干燥气流量	10 L/min
干燥气温度	350 °C
毛细管电压	4000 V

## LC-MS/MS 离子对:

化合物	母离子	子离子	碎裂电压 (V)	碰撞能量 (V)
JWH-073-d <sub>7</sub>	335.3	207.2	120	20
<b>CP 47497 C8</b>	<b>331.3</b>	<b>313.3</b>	<b>160</b>	<b>25</b>
CP 47497 C8	331.3	259.3	160	35



\* 单一同位素分子量

LOQ 水平的 MRM 谱图, ± 20% 离子比限值

# 环苯扎林

化学名称:	胺苯环庚烯; (IUPAC) 3-(5H-二苯并[a,d]环庚烯-5-亚基)-N,N-二甲基-1-丙胺
分子式:	C <sub>20</sub> H <sub>21</sub> N
分子量*:	275.2

## 筛查方法: Immunalysis ELISA 目录 #242

临界浓度: 25 ng/mL    目标化合物: 莎海拉明

### 显著交叉反应:

莎海拉明	100%
环苯扎林	200%
阿米替林	100%
多虑平	50%
氯米帕明	20%

## 确认方法: LC-MS/MS

LOQ 10 ng/mL

### LC 参数

色谱柱	Zorbax Eclipse Plus C18 快速分离高通量色谱柱 4.6 x 50 mm, 1.8 μm
流速	1 mL/min
柱温	45 °C
流动相	A = 0.2% 醋酸水溶液, B = 甲醇
梯度程序	0 min 30% B 0.1 min 30% B 8 min 70% B 9 min 30% B 11 min 停止。后运行 2 min
进样量	5 μL

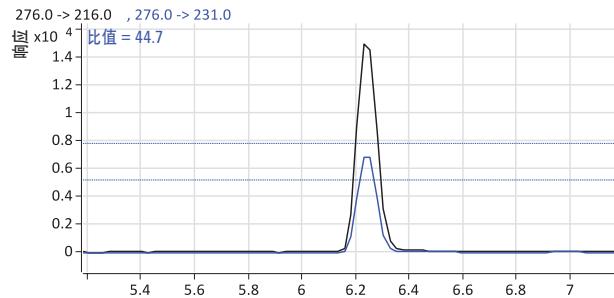
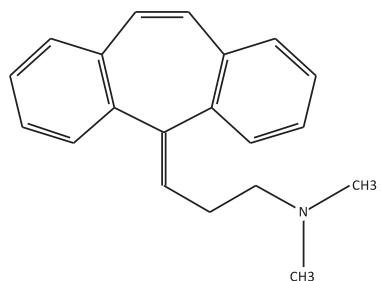
### MS 参数

雾化器压力	50 psi
干燥气流量	11 L/min
干燥气温度	350 °C
毛细管电压	4000 V

### LC-MS/MS 离子对:

化合物	母离子	子离子	碎裂电压(V)	碰撞能量 (V)
帕罗西汀-d <sub>6</sub>	336	76	120	20
环苯扎林	276	231	110	10
<b>环苯扎林</b>	<b>276</b>	<b>216</b>	<b>110</b>	<b>20</b>

### 分子结构:



\* 单一同位素分子量

LOQ 水平的 MRM 谱图, ± 20% 离子比限值

# 地昔帕明

化学名称:	去甲丙咪嗪; (IUPAC) 10,11-二氢-N-甲基-5H-二苯并[b,f]氮杂卓-5-丙胺
分子式:	C <sub>18</sub> H <sub>22</sub> N <sub>2</sub>
分子量*:	266.2

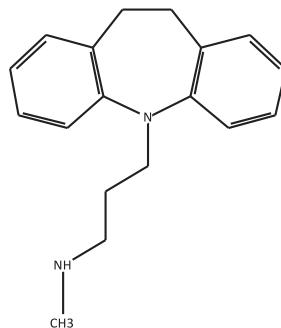
## 筛查方法: Immunalysis ELISA 目录 #222

临界浓度: 25 ng/mL    目标化合物: 去甲替林

### 显著交叉反应:

去甲替林	100%
阿米替林	83%
地昔帕明	10%
丙咪嗪	<1%
三甲丙咪嗪	<1%

## 分子结构:



## 确认方法: LC-MS/MS

LOQ 10 ng/mL

## LC 参数

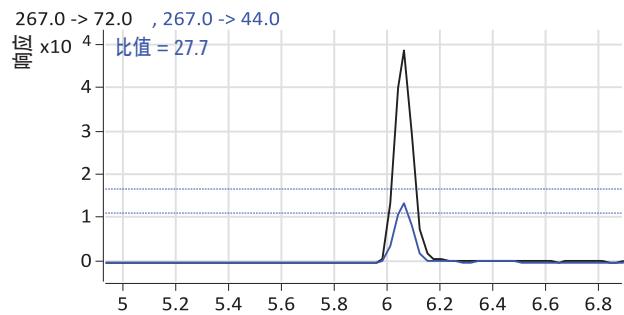
色谱柱	Zorbax Eclipse Plus C18 快速分离高通量色谱柱 4.6 x 50 mm, 1.8 μm
流速	1 mL/min
柱温	45 °C
流动相	A = 0.2% 醋酸水溶液, B = 甲醇
	0 min 30% B
	0.1 min 30% B
梯度程序	8 min 70% B
	9 min 30% B
	11 min 停止。后运行 2 min
进样量	5 μL

## MS 参数

雾化器压力	50 psi
干燥气流量	11 L/min
干燥气温度	350 °C
毛细管电压	4000 V

## LC-MS/MS 离子对:

化合物	母离子	子离子	碎裂电压(V)	碰撞能量 (V)
帕罗西汀-d <sub>6</sub>	336	76	120	20
<b>地昔帕明</b>	<b>267</b>	<b>72</b>	<b>110</b>	<b>15</b>
地昔帕明	267	44	110	30



\* 单一同位素分子量

LOQ 水平的 MRM 谱图, ± 20% 离子比限值

# 右美沙芬

化学名称:	消旋甲吗喃
分子式:	C <sub>18</sub> H <sub>25</sub> NO
分子量*:	271.2

筛查方法: Immunalysis ELISA 目录 #238

临界浓度: 50 ng/mL    目标化合物: 右美沙芬

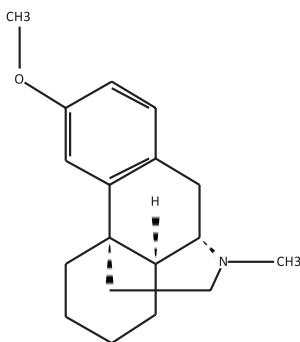
显著交叉反应:

右美沙芬	100%
右啡烷	83%

确认方法: LC-MS/MS

LOQ 10 ng/mL

分子结构:



## LC 参数

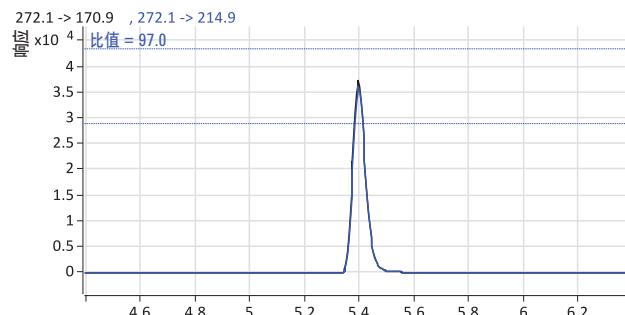
色谱柱	Zorbax Eclipse Plus C18 快速分离高通量色谱柱 4.6 x 50 mm, 1.8 μm
流速	0.5 mL/min
柱温	40 °C
流动相	A = 20 mM 甲酸铵水溶液 pH 6.4, B = 甲醇 0 min 25% B 4 min 100% B 5 min 25% B 6.5 min 停止。后运行 3 min
梯度程序	
进样量	5 μL

## MS 参数

雾化器压力	50 psi
干燥气流量	10 L/min
干燥气温度	350°C
毛细管电压	4000 V

## LC-MS/MS 离子对:

化合物	母离子	子离子	碎裂电压(V)	碰撞能量 (V)
右啡烷-d <sub>3</sub>	261	156.9	120	40
右美沙芬	272.1	214.9	120	20
<b>右美沙芬</b>	<b>272.1</b>	<b>170.9</b>	<b>120</b>	<b>40</b>



\* 单一同位素分子量

LOQ 水平的 MRM 谱图, ± 20% 离子比限值

# 地西泮

化学名称:	(IUPAC) 7-氯-1,3-二氢-1-甲基-5-苯基-3H-1,4-苯并二氮杂卓-2-酮
分子式:	C <sub>15</sub> H <sub>10</sub> ClN <sub>3</sub> O <sub>3</sub>
分子量*:	315

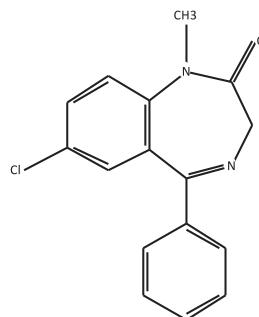
## 筛查方法: Immunalysis ELISA 目录 #214

临界浓度: 5 ng/mL    目标化合物: 奥沙西泮

### 显著交叉反应:

奥沙西泮	100%
地西泮	70%
去甲西泮	50%
替马西泮	200%

## 分子结构:



## 确认方法: LC-MS/MS

LOQ 1 ng/mL

### LC 参数

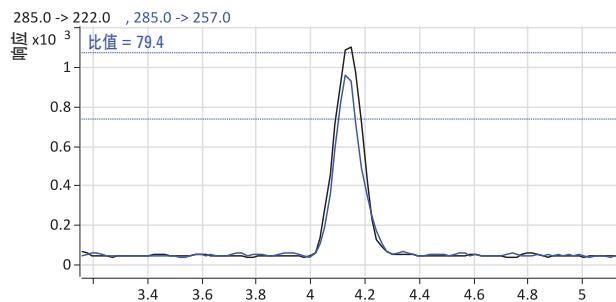
色谱柱	Zorbax Eclipse Plus C18 快速分离高通量色谱柱 4.6 x 50 mm, 1.8 μm
流速	0.5 mL/min
柱温	35 °C
流动相	A = 20 mM 甲酸铵水溶液 pH 8.6, B = 乙腈 0 min 50% B 梯度程序 等度洗脱 5.5 min 停止。后运行关闭
进样量	5 μL

### MS 参数

雾化器压力	50 psi
干燥气流量	10 L/min
干燥气温度	300 °C
毛细管电压	3500 V

### LC-MS/MS 离子对:

化合物	母离子	子离子	碎裂电压(V)	碰撞能量 (V)
地西泮-d <sub>5</sub>	290	262	160	25
地西泮	285	257	160	25
<b>地西泮</b>	<b>285</b>	<b>222</b>	<b>160</b>	<b>25</b>



\* 单一同位素分子量

LOQ 水平的 MRM 谱图, ± 20% 离子比限值

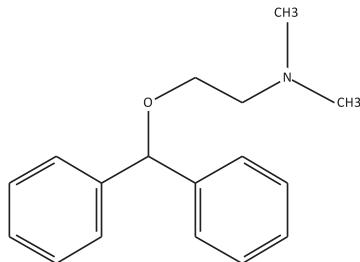
# 苯海拉明

分子结构:

化学名称: 苯那君; (IUPAC) 2-二苯甲氧基-N,N-二甲基乙胺

分子式: C<sub>17</sub>H<sub>21</sub>NO

分子量\*: 255.2



筛查方法: Immunalysis ELISA 目录 #242

临界浓度: 25 ng/mL 目标化合物: 苯海拉明

显著交叉反应:

苯海拉明	100%
环苯扎林	200%
阿米替林	100%
多虑平	50%
氯米帕明	20%

确认方法: LC-MS/MS

LOQ 5 ng/mL

## LC 参数

色谱柱	Zorbax Eclipse Plus C18 快速分离高通量色谱柱 4.6 x 50 mm, 1.8 μm
流速	0.7 mL/min
柱温	60 °C
流动相	A = 0.2% 醋酸水溶液 pH 4.0, B = 甲醇
梯度程序	0 min 0% B 2 min 0% B 6 min 100% B 7 min 0% B 10 min 停止。后运行关闭
进样量	5 μL

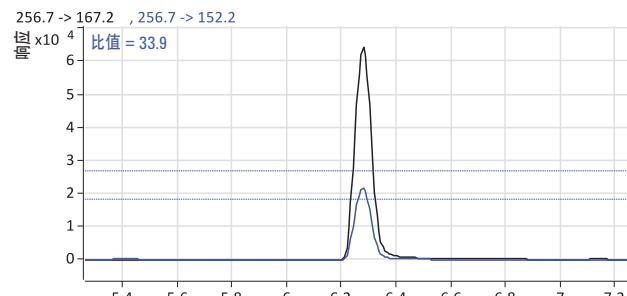
## MS 参数

雾化器压力	50 psi
干燥气流量	10 L/min
干燥气温度	350 °C
毛细管电压	4000 V

## LC-MS/MS 离子对:

化合物	母离子	子离子	碎裂电压(V)	碰撞能量 (V)
苯海拉明-d <sub>3</sub>	259.7	165.2	80	35
<b>苯海拉明</b>	<b>256.7</b>	<b>167.2</b>	<b>80</b>	<b>15</b>
苯海拉明	256.7	152.2	80	35

\* 单一同位素分子量



LOQ 水平的 MRM 谱图, ± 20% 离子比限值

平硫度

化学名称：二苯噻庚英；3-二苯并[b,e]噻庚英-11(6H)-基啶-N,N-二甲基-1-丙胺

分子式： $C_{19}H_{21}NS$

分子量\*: 295.1

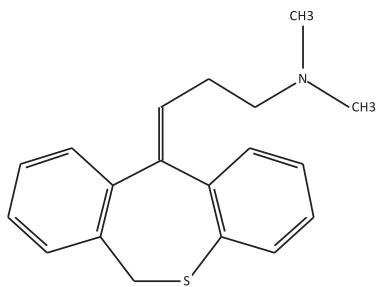
筛查方法：Immunalysis ELISA 目录 #222

临界浓度：25 ng/mL    目标化合物：去甲替林

**显著交叉反应：**

去甲替林	100%
度硫平	25%
地昔帕明	200%
丙咪嗪	200%
三甲丙咪嗪	50%

分子结构：



确认方法：LC-MS/MS

LOQ 10 ng/mL

LC 参数

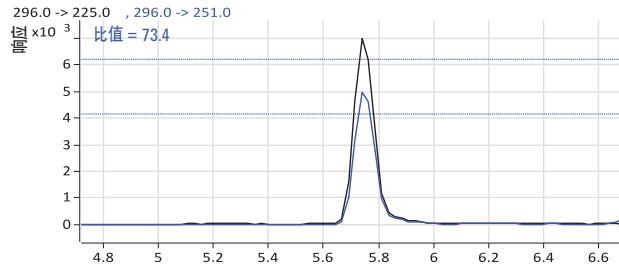
色谱柱	Zorbax Eclipse Plus C18 快速分离高通量色谱柱 4.6 x 50 mm, 1.8 µm
流速	1 mL/min
柱温	45 °C
流动相	A = 0.2% 醋酸水溶液, B = 甲醇
梯度程序	0 min 30% B 0.1 min 30% B 8 min 70% B 9 min 30% B 11 min 停止。后运行 2 min
进样量	5 µL

MS 参数

雾化器压力	50 psi
干燥气流量	11 L/min
干燥气温度	350 °C
毛细管电压	4000 V

## LC-MS/MS 离子对:

化合物	母离子	子离子	碎裂电压(V)	碰撞能量 (V)
帕罗西汀-d <sub>6</sub>	336	76	120	20
度硫平	296	251	120	15
度硫平	<b>296</b>	<b>225</b>	<b>120</b>	<b>15</b>



\* 单一同位素分子量

LOQ 水平的 MRM 谱图， $\pm 20\%$  离子比限值

# 多虑平

化学名称:	(IUPAC) (3E)-3-(6H-苯并[c][1]苯并氧杂卓-11-亚基)N,N-二甲基丙胺
分子式:	C <sub>19</sub> H <sub>21</sub> NO
分子量*:	279.2

## 筛查方法: Immunalysis ELISA 目录 #222

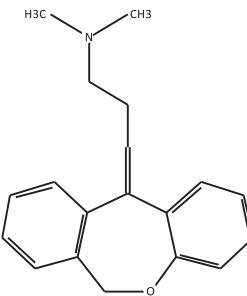
临界浓度: 25 ng/mL    目标化合物: 去甲替林  
显著交叉反应:

去甲替林	100%
多虑平	15%
地昔帕明	200%
丙咪嗪	200%
三甲丙咪嗪	50%

## 确认方法: LC-MS/MS

LOQ 10 ng/mL

### 分子结构:



### LC 参数

色谱柱	Zorbax Eclipse Plus C18 快速分离高通量色谱柱 4.6 x 50 mm, 1.8 μm
流速	1 mL/min
柱温	45 °C
流动相	A = 0.2% 醋酸水溶液, B = 甲醇
	0 min 30% B
	0.1 min 30% B
梯度程序	8 min 70% B 9 min 30% B 11 min 停止。后运行 2 min
进样量	5 μL

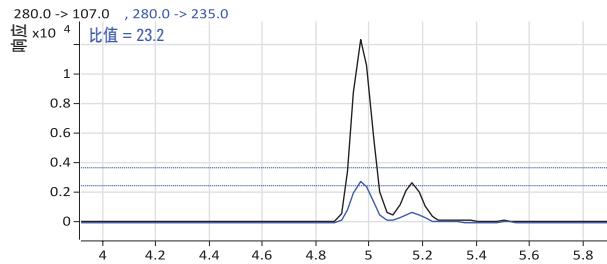
### MS 参数

雾化器压力	50 psi
干燥气流量	11 L/min
干燥气温度	350 °C
毛细管电压	4000 V

注: 包括顺式和反式同分异构体的多虑平通过此 LC 条件实现分离

### LC-MS/MS 离子对:

化合物	母离子	子离子	碎裂电压(V)	碰撞能量 (V)
帕罗西汀-d <sub>6</sub>	336	76	120	20
多虑平	280	235	120	10
<b>多虑平</b>	<b>280</b>	<b>107</b>	<b>120</b>	<b>20</b>

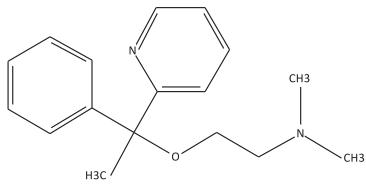


\* 单一同位素分子量

LOQ 水平的 MRM 谱图, ± 20% 离子比限值

# 多西拉敏

分子结构:



化学名称:	苯毗甲醇胺; N,N-二甲基-2-[1-苯基-1-(2-吡啶基)乙氧基]乙胺
分子式:	C <sub>17</sub> H <sub>22</sub> N <sub>2</sub> O
分子量*:	270.2

筛查方法: Immunalysis ELISA 目录 #242

临界浓度: 25 ng/mL    目标化合物: 荚海拉明

显著交叉反应:

苯海拉明	100%
多西拉敏	1%
环苯扎林	200%
阿米替林	100%
多虑平	50%

确认方法: LC-MS/MS

LOQ 5 ng/mL

## LC 参数

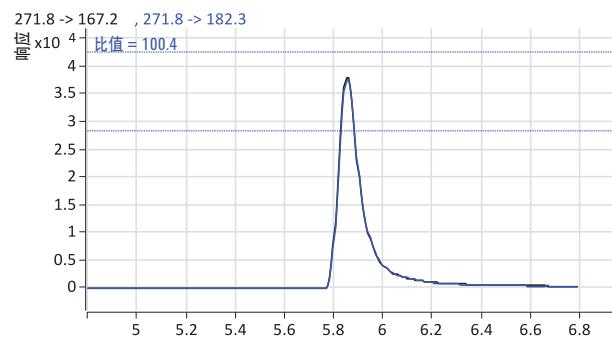
色谱柱	Zorbax Eclipse Plus C18 快速分离高通量色谱柱 4.6 x 50 mm, 1.8 μm
流速	0.7 mL/min
柱温	60 °C
流动相	A = 0.2% 醋酸水溶液 pH 4.0, B = 甲醇
梯度程序	0 min 0% B 2 min 0% B 6 min 100% B 7 min 0% B 10 min 停止。后运行关闭
进样量	5 μL

## MS 参数

雾化器压力	50 psi
干燥气流量	10 L/min
干燥气温度	350 °C
毛细管电压	4000 V

## LC-MS/MS 离子对:

化合物	母离子	子离子	碎裂电压(V)	碰撞能量 (V)
氯苯毗胺-d <sub>6</sub>	281.8	118	80	35
多西拉敏	271.8	182.3	95	10
<b>多西拉敏</b>	<b>271.8</b>	<b>167.2</b>	<b>95</b>	<b>35</b>



\* 单一同位素分子量

LOQ 水平的 MRM 谱图, ± 20% 离子比限值

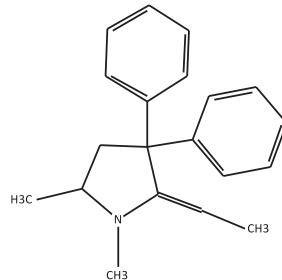
# EDDP

化学名称: 2-亚乙基-1,5-二甲基-3,3-二苯基吡咯烷

分子式: C<sub>20</sub>H<sub>23</sub>N

分子量\*: 277.2

分子结构:



筛查方法: Immunalysis ELISA 目录 #232

临界浓度: 50 ng/mL 目标化合物: 美沙酮

显著交叉反应:

美沙酮	100%
美沙多	50%
EDDP	<5%
LAAM	15%
去甲基-LAAM	<1%

确认方法: LC-MS/MS

LOQ 10 ng/mL

## LC 参数

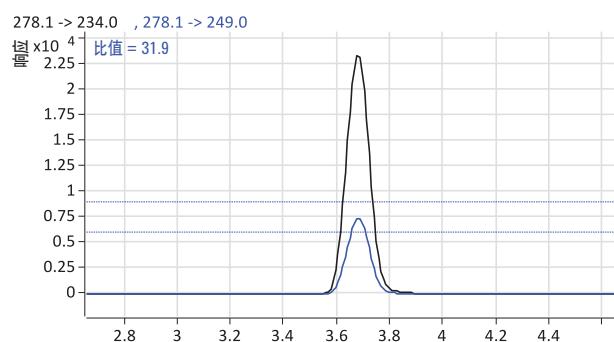
色谱柱	Zorbax Eclipse Plus C18 快速分离高通量色谱柱 4.6 x 50 mm, 1.8 μm
流速	0.5 mL/min
柱温	40 °C
流动相	A = 20 mM 甲酸铵 pH 6.4, B = 甲醇 0 min 50% B 4 min 100% B 5 min 25% B 6.5 min 停止。后运行 3 min
进样量	5 μL

## MS 参数

雾化器压力	50 psi
干燥气流量	10 L/min
干燥气温度	350 °C
毛细管电压	4000 V

## LC-MS/MS 离子对:

化合物	母离子	子离子	碎裂电压(V)	碰撞能量 (V)
EDDP-d <sub>3</sub>	281.1	234	120	20
EDDP	278.1	249	120	20
<b>EDDP</b>	<b>278.1</b>	<b>234</b>	<b>120</b>	<b>30</b>

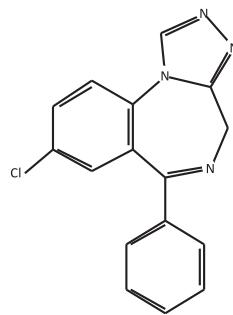


\* 单一同位素分子量

LOQ 水平的 MRM 谱图, ± 20% 离子比限值

# 艾司唑仑

分子结构:



化学名称:	(IUPAC) 8-氯-6-苯基-4H-1,2,4-三唑并[4,3a]-1,4-苯并二氮杂卓
分子式:	C <sub>16</sub> H <sub>11</sub> ClN <sub>4</sub>
分子量*:	294.1

筛查方法: Immunalysis ELISA 目录 #214

临界浓度: 5 ng/mL    目标化合物: 奥沙西泮

显著交叉反应:

奥沙西泮	100%
艾司唑仑	70%
阿普唑仑	180%
替马西泮	200%
地西泮	70%

确认方法: LC-MS/MS

LOQ 1 ng/mL

## LC 参数

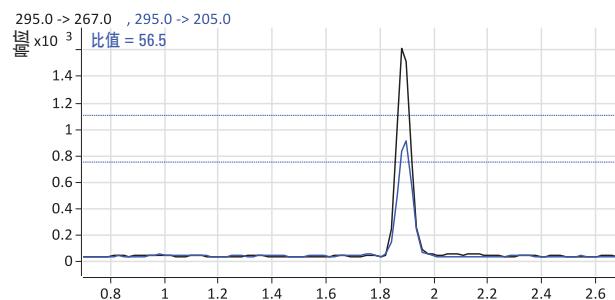
色谱柱	Zorbax Eclipse Plus C18 快速分离高通量色谱柱 4.6 x 50 mm, 1.8 μm
流速	0.5 mL/min
柱温	35 °C
流动相	A = 20 mM 甲酸铵水溶液 pH 8.6, B = 乙腈 0 min 50% B 等度洗脱 5.5 min 停止。后运行关闭
进样量	5 μL

## MS 参数

雾化器压力	50 psi
干燥气流量	10 L/min
干燥气温度	300 °C
毛细管电压	3500 V

## LC-MS/MS 离子对:

化合物	母离子	子离子	碎裂电压(V)	碰撞能量 (V)
艾司唑仑-d <sub>5</sub>	300	272	160	25
<b>艾司唑仑</b>	<b>295</b>	<b>267</b>	<b>140</b>	<b>25</b>
艾司唑仑	295	205	140	35



\* 单一同位素分子量

LOQ 水平的 MRM 谱图, ± 20% 离子比限值

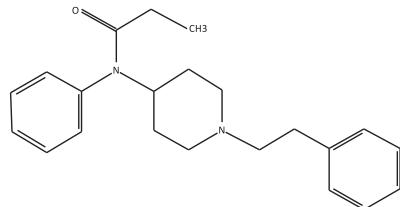
# 芬太尼

化学名称: N-苯基-N-[1-(2-苯乙基)-4-哌啶基]丙酰胺

分子式: C<sub>22</sub>H<sub>28</sub>N<sub>2</sub>O

分子量\*: 336.2

## 分子结构:



## 筛查方法: Immunalysis ELISA 目录 #218

临界浓度: 1 ng/mL    目标化合物: 芬太尼

### 显著交叉反应:

芬太尼	100%
羟基芬太尼	83%
脱丙酰基芬太尼	10%
去甲基芬太尼	<1%
羟基去甲基芬太尼	<1%

## 确认方法: LC-MS/MS

LOQ 1 ng/mL

### LC 参数

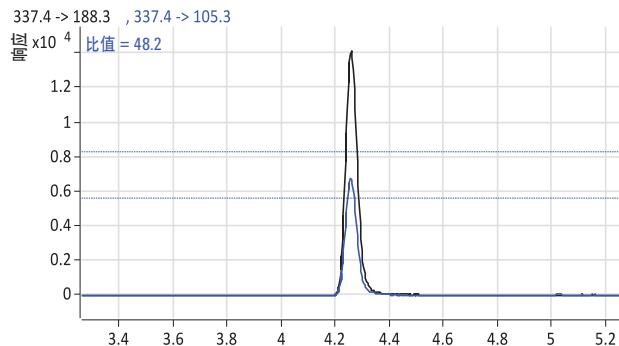
色谱柱	Zorbax Eclipse Plus C18 快速分离高通量色谱柱 4.6 x 50 mm, 1.8 μm
流速	0.7 mL/min
柱温	40 °C
流动相	A = 20 mM 甲酸铵 pH 6.4, B = 甲醇
梯度程序	0 min 50% B 0.1 min 50% B 4 min 100% B 5 min 15% B 6 min 停止。后运行 3 min
进样量	10 μL

### MS 参数 – 阴离子模式

雾化器压力	50 psi
干燥气流量	12 L/min
干燥气温度	350 °C
毛细管电压	4000 V

### LC-MS/MS 离子对:

化合物	母离子	子离子	碎裂电压(V)	碰撞能量 (V)
芬太尼-d <sub>5</sub>	342.4	221.5	160	20
<b>芬太尼</b>	<b>337.4</b>	<b>188.3</b>	<b>160</b>	<b>25</b>
芬太尼	337.4	105.3	160	25



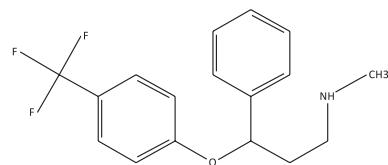
\* 单一同位素分子量

LOQ 水平的 MRM 谱图, ± 20% 离子比限值

# 氟西汀

## 分子结构:

化学名称:	(IUPAC) N-甲基-3-苯基-3-[4-(三氟甲基)苯氧基]丙-1-胺
分子式:	C <sub>17</sub> H <sub>18</sub> F <sub>3</sub> NO
分子量*:	309.1



筛查方法: Immunalysis ELISA 目录 #234

临界浓度: 50 ng/mL 目标化合物: 氟西汀

### 显著交叉反应:

氟西汀	100%
去甲基氟西汀	25%

确认方法: LC-MS/MS

LOQ 10 ng/mL

## LC 参数

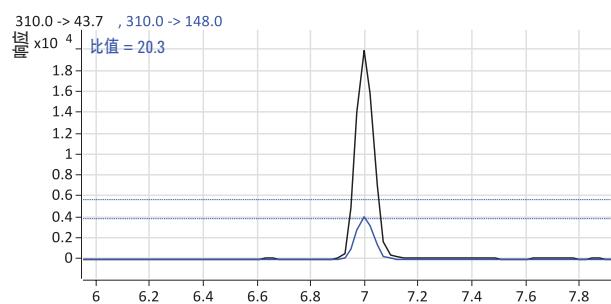
色谱柱	Zorbax Eclipse Plus C18 快速分离高通量色谱柱 4.6 x 50 mm, 1.8 μm
流速	1 mL/min
柱温	45 °C
流动相	A = 0.2% 醋酸水溶液, B = 甲醇
梯度程序	0 min 30% B 0.1 min 30% B 8 min 70% B 9 min 30% B 11 min 停止。后运行 2 min
进样量	5 μL

## MS 参数

雾化器压力	50 psi
干燥气流量	11 L/min
干燥气温度	350 °C
毛细管电压	4000 V

## LC-MS/MS 离子对:

化合物	母离子	子离子	碎裂电压(V)	碰撞能量 (V)
氟西汀-d <sub>6</sub>	316	154	100	2
氟西汀	310	148	100	1
<b>氟西汀</b>	<b>310</b>	<b>43.7</b>	<b>100</b>	<b>10</b>



\* 单一同位素分子量

LOQ 水平的 MRM 谱图, ± 20% 离子比限值

# 氟西泮

化学名称:	7-氯-1-[2-(二乙基氨基)乙基]-5-(2-氟苯基)-1,3-二氢-2H-1,4-苯并二氮杂卓-2-酮
分子式:	C <sub>21</sub> H <sub>23</sub> ClFN <sub>3</sub> O
分子量*:	387.2

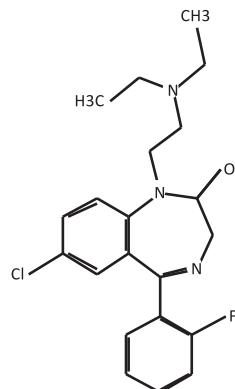
## 筛查方法: Immunalysis ELISA 目录 #214

临界浓度: 5 ng/mL    目标化合物: 奥沙西泮

### 显著交叉反应:

奥沙西泮	100%
氟西泮	100%
2-羟基-乙基氟西泮	240%
氟硝西泮	30%
N-去甲基氟硝西泮	90%

## 分子结构:



## 确认方法: LC-MS/MS

LOQ 1 ng/mL

## LC 参数

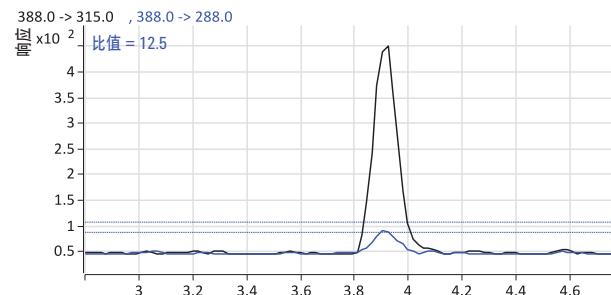
色谱柱	Zorbax Eclipse Plus C18 快速分离高通量色谱柱 4.6 x 50 mm, 1.8 μm
流速	0.5 mL/min
柱温	35 °C
流动相	A = 20 mM 甲酸铵水溶液 pH 8.6, B = 乙腈 0 min 50% B
梯度程序	等度洗脱 5.5 min 停止。后运行关闭
进样量	5 μL

## MS 参数

雾化器压力	50 psi
干燥气流量	10 L/min
干燥气温度	300 °C
毛细管电压	3500 V

## LC-MS/MS 离子对:

化合物	母离子	子离子	碎裂电压(V)	碰撞能量 (V)
地西泮-d <sub>5</sub>	290	262	160	25
<b>氟西泮</b>	<b>388</b>	<b>315</b>	<b>160</b>	<b>25</b>
氟西泮	388	288	160	25



\* 单一同位素分子量

LOQ 水平的 MRM 谱图, ± 20% 离子比限值

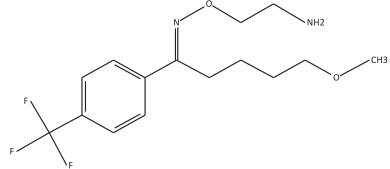
# 氟伏沙明

化学名称: (E)-5-甲氨基-1-[4-(三氟甲基)苯基]-1-戊酮

分子式: C<sub>15</sub>H<sub>21</sub>F<sub>3</sub>N<sub>2</sub>O<sub>2</sub>

分子量\*: 318.2

## 分子结构:



筛查方法: Immunoassay ELISA 目录 #222

临界浓度: N/A      目标化合物: 去甲替林

显著交叉反应:

无数据

确认方法: LC-MS/MS

LOQ 10 ng/mL

## LC 参数

色谱柱 Zorbax Eclipse Plus C18 快速分离高通量色谱柱  
4.6 x 50 mm, 1.8 μm

流速 1 mL/min

柱温 45 °C

流动相 A = 0.2% 醋酸水溶液, B = 甲醇

0 min 30% B

0.1 min 30% B

8 min 70% B

9 min 30% B

11 min 停止。后运行 2 min

进样量 5 μL

## MS 参数

雾化器压力 50 psi

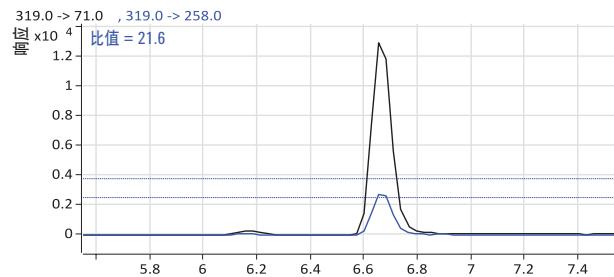
干燥气流量 11 L/min

干燥气温度 350 °C

毛细管电压 4000 V

## LC-MS/MS 离子对:

化合物	母离子	子离子	碎裂电压(V)	碰撞能量 (V)
帕罗西汀-d <sub>6</sub>	336	76	120	20
氟伏沙明	319	258	100	2
<b>氟伏沙明</b>	<b>319</b>	<b>71</b>	<b>100</b>	<b>6</b>



\* 单一同位素分子量

LOQ 水平的 MRM 谱图, ± 20% 离子比限值

# HU-210

化学名称:	(6aR,10aR)-9-(羟甲基)-6,6-二甲基-3-(2-甲基辛-2-基)-6a,7,10a,10a-四氢苯并[c]吡喃-1-醇
分子式:	C <sub>25</sub> H <sub>38</sub> O <sub>3</sub>
分子量*:	386.3

筛查方法: Immunalysis ELISA 正在开发中

临界浓度: N/A      目标化合物: N/A

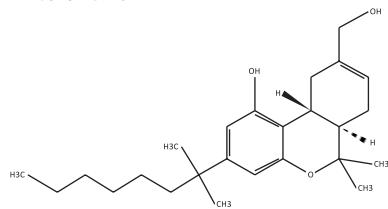
显著交叉反应:

无	N/A
---	-----

确认方法: LC-MS/MS

LOQ 5 ng/mL

分子结构:



## LC 参数

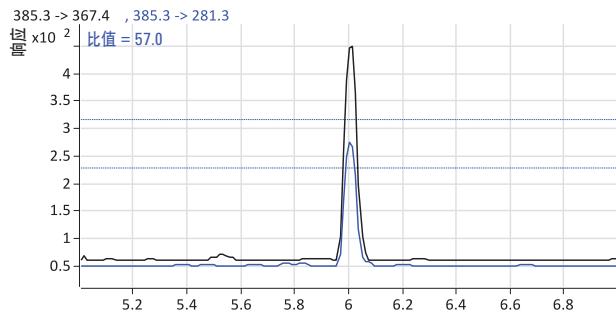
色谱柱	Zorbax Eclipse Plus C18 快速分离高通量色谱柱 2.1 x 50 mm, 1.8 μm
流速	0.5 mL/min
柱温	60 °C
流动相	A = 0.2% 醋酸水溶液, B = 乙腈
梯度程序	0 min 5% B 5 min 100% B 7 min 1% B 9.2 min 停止。后运行 2 min
进样量	5 μL

## MS 参数 – 阴离子模式

雾化器压力	55 psi
干燥气流量	10 L/min
干燥气温度	350 °C
毛细管电压	4000 V

## LC-MS/MS 离子对:

化合物	母离子	子离子	碎裂电压(V)	碰撞能量 (V)
JWH-073-d <sub>7</sub>	335.3	207.2	120	20
<b>HU-210</b>	<b>385.3</b>	<b>367.4</b>	<b>120</b>	<b>30</b>
HU-210	385.3	281.3	120	45



\* 单一同位素分子量

LOQ 水平的 MRM 谱图, ± 20% 离子比限值

# 氢可酮

化学名称:	二氢可待因酮
分子式:	C <sub>18</sub> H <sub>21</sub> NO <sub>3</sub>
分子量*:	299.2

筛查方法: Immunalysis ELISA 目录 #2070F

临界浓度: 20 ng/mL    目标化合物: 吗啡

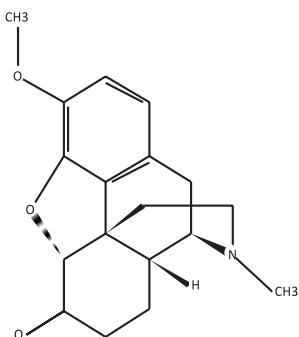
显著交叉反应:

吗啡	100%
6-AM	83%
可待因	200%
氢可酮	93%
双氢可待因	85%

确认方法: LC-MS/MS

LOQ 4 ng/mL

分子结构:



## LC 参数

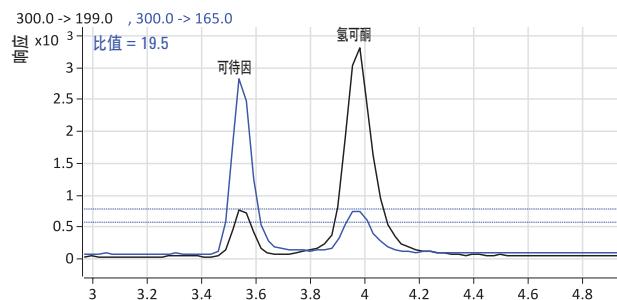
色谱柱	Zorbax Eclipse Plus C18 快速分离高通量色谱柱 4.6 x 50 mm, 1.8 μm
流速	0.7 mL/min
柱温	60 °C
流动相	A = 20 mM 甲酸铵 pH 6.4, B = 甲醇
梯度程序	0 min 15% B 6 min 78% B 后运行 3 min
进样量	5 μL

## MS 参数

雾化器压力	50 psi
干燥气流量	10 L/min
干燥气温度	350 °C
毛细管电压	4000 V

## LC-MS/MS 离子对:

化合物	母离子	子离子	碎裂电压(V)	碰撞能量 (V)
可待因 D <sub>3</sub>	303	165	140	40
<b>氢可酮</b>	<b>300</b>	<b>199</b>	<b>160</b>	<b>35</b>
氢可酮	300	165	140	45



\* 单一同位素分子量

LOQ 水平的 MRM 谱图, ± 20% 离子比限值

# 氢吗啡酮

化学名称:	二氢吗啡酮; 4,5-环氧-3-羟基-17-甲基吗啡喃-6-酮
分子式:	C <sub>18</sub> H <sub>21</sub> NO <sub>3</sub>
分子量*:	299.2

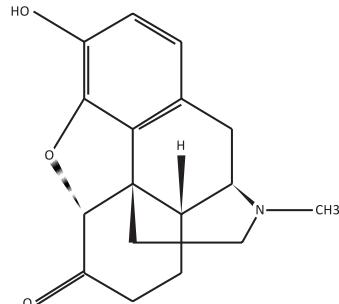
## 筛查方法: Immunalysis ELISA 目录 #2070F

临界浓度: 20 ng/mL    目标化合物: 吗啡

### 显著交叉反应:

吗啡	100%
6-AM	83%
可待因	200%
氢可酮	93%
氢吗啡酮	81%

## 分子结构:



## 确认方法: LC-MS/MS

LOQ 4 ng/mL

## LC 参数

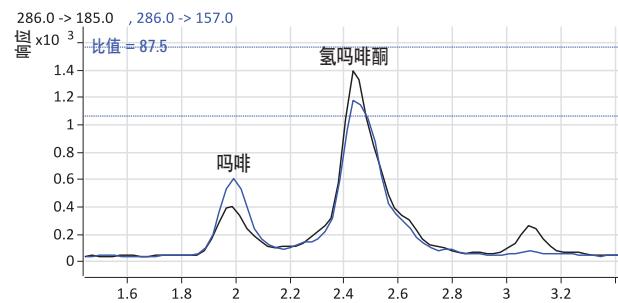
色谱柱	Zorbax Eclipse Plus C18 快速分离高通量色谱柱 4.6 x 50 mm, 1.8 μm
流速	0.7 mL/min
柱温	60 °C
流动相	A = 20 mM 甲酸铵 pH 6.4, B = 甲醇
梯度程序	0 min 15% B 6 min 78% B 后运行 3 min
进样量	5 μL

## MS 参数

雾化器压力	50 psi
干燥气流量	10 L/min
干燥气温度	350 °C
毛细管电压	4000 V

## LC-MS/MS 离子对:

化合物	母离子	子离子	碎裂电压(V)	碰撞能量 (V)
吗啡-d <sub>3</sub>	289	165	130	40
<b>氢吗啡酮</b>	<b>286</b>	<b>185</b>	<b>160</b>	<b>35</b>
氢吗啡酮	286	157	160	50

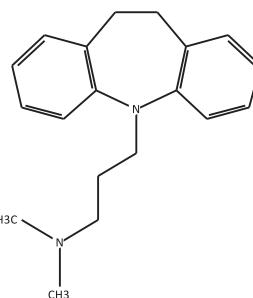


\* 单一同位素分子量

LOQ 水平的 MRM 谱图, ± 20% 离子比限值

# 丙咪嗪

分子结构:



化学名称:	5-(3-二甲基氨基丙基)-10,11-二氢-5H-二苯并[b,f]氮杂卓
分子式:	C <sub>19</sub> H <sub>24</sub> N <sub>2</sub>
分子量*:	280.2

筛查方法: Immunalysis ELISA 目录 #222

临界浓度: 25 ng/mL    目标化合物: 去甲替林

显著交叉反应:

去甲替林	100%
阿米替林	200%
地昔帕明	200%
丙咪嗪	200%
三甲丙咪嗪	50%

确认方法: LC-MS/MS

LOQ 10 ng/mL

## LC 参数

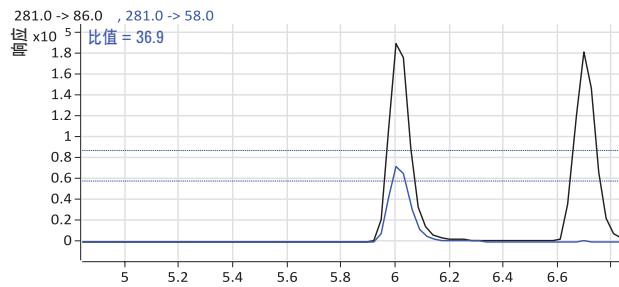
色谱柱	Zorbax Eclipse Plus C18 快速分离高通量色谱柱 4.6 x 50 mm, 1.8 μm
流速	1 mL/min
柱温	45 °C
流动相	A = 0.2% 醋酸水溶液, B = 甲醇
梯度程序	0 min 30% B 0.1 min 30% B 8 min 70% B 9 min 30% B 11 min 停止。后运行 2 min
进样量	5 μL

## MS 参数

雾化器压力	50 psi
干燥气流量	11 L/min
干燥气温度	350 °C
毛细管电压	4000 V

## LC-MS/MS 离子对:

化合物	母离子	子离子	碎裂电压(V)	碰撞能量 (V)
帕罗西汀-d <sub>6</sub>	336	76	120	20
<b>丙咪嗪</b>	<b>281</b>	<b>86</b>	<b>100</b>	<b>10</b>
丙咪嗪	281	58	100	30



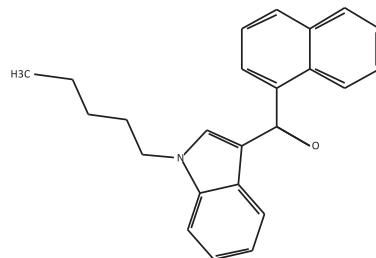
\* 单一同位素分子量

LOQ 水平的 MRM 谱图, ± 20% 离子比限值

# JWH-018

化学名称:	1-戊基-3-(1-萘甲酰基)吲哚; (IUPAC) 萘-1-基-(1-戊基吲哚-3-基)甲酮
分子式:	C <sub>24</sub> H <sub>23</sub> NO
分子量*:	341.2

## 分子结构:



## 筛查方法: Immunalysis ELISA 目录 #244

临界浓度: 5 ng/mL    目标化合物: JWH-200

### 显著交叉反应:

JWH-200	100%
JWH-018	22%
JWH-073	31%
AM-2201	50%

## 确认方法: LC-MS/MS

LOQ 2 ng/mL

### LC 参数

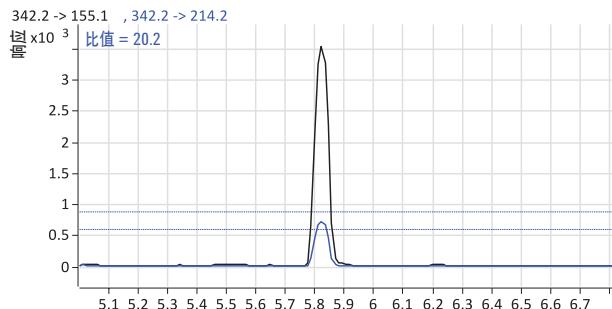
色谱柱	Zorbax Eclipse Plus C18 快速分离高通量色谱柱 2.1 x 50 mm, 1.8 μm
流速	0.5 mL/min
柱温	60 °C
流动相	A = 0.2% 醋酸水溶液, B = 乙腈
梯度程序	0 min 5% B 5 min 100% B 7 min 1% B 9.2 min 停止。后运行 2 min
进样量	5 μL

### MS 参数

雾化器压力	55 psi
干燥气流量	10 L/min
干燥气温度	350 °C
毛细管电压	4000 V

### LC-MS/MS 离子对:

化合物	母离子	子离子	碎裂电压(V)	碰撞能量 (V)
JWH-018-d <sub>9</sub>	351.3	223.4	140	20
<b>JWH-018</b>	<b>342.2</b>	<b>214.2</b>	<b>120</b>	<b>20</b>
JWH-018	342.2	155.1	120	20



\* 单一同位素分子量

LOQ 水平的 MRM 谱图, ± 20% 离子比限值

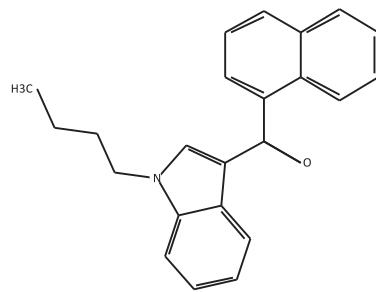
# JWH-073

化学名称: (IUPAC) 萘-1-基-(1-丁基吲哚-3-基)甲酮

分子式: C<sub>23</sub>H<sub>21</sub>NO

分子量\*: 327.1

## 分子结构:



## 筛查方法: Immunalysis ELISA 目录 #244

临界浓度: 5 ng/mL    目标化合物: JWH-200

### 显著交叉反应:

JWH-200	100%
JWH-073	31%
JWH-018	22%
AM 2201	50%

## 确认方法: LC-MS/MS

LOQ 0.5 ng/mL

## LC 参数

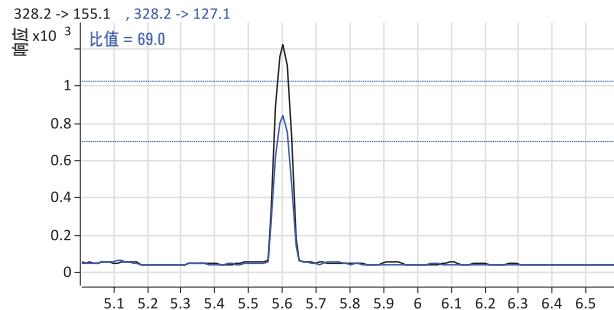
色谱柱	Zorbax Eclipse Plus C18 快速分离高通量色谱柱 2.1 x 50 mm, 1.8 μm
流速	0.5 mL/min
柱温	60 °C
流动相	A = 0.2% 醋酸水溶液, B = 乙腈
梯度程序	0 min 5% B 5 min 100% B 7 min 1% B 9.2 min 停止。后运行 2 min
进样量	5 μL

## MS 参数

雾化器压力	55 psi
干燥气流量	10 L/min
干燥气温度	350 °C
毛细管电压	4000 V

## LC-MS/MS 离子对:

化合物	母离子	子离子	碎裂电压(V)	碰撞能量 (V)
JWH-073-d <sub>7</sub>	335.3	207.2	120	20
<b>JWH-073</b>	<b>328.2</b>	<b>155.1</b>	<b>120</b>	<b>20</b>
JWH-073	328.2	127.1	120	35

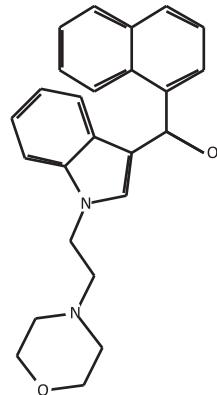


\* 单一同位素分子量

LOQ 水平的 MRM 谱图, ± 20% 离子比限值

# JWH-200

分子结构:



化学名称: (IUPAC) (1-(2-吗啉-4-基乙基)吲哚-3-基)-萘-1-基甲酮

分子式: C<sub>25</sub>H<sub>24</sub>N<sub>2</sub>O<sub>2</sub>

分子量\*: 384.2

筛查方法: Immunalysis ELISA 目录 #244

临界浓度: 5 ng/mL 目标化合物: JWH-200

显著交叉反应:

JWH-200	100%
AM 2201	50%
JWH-073	31%
JWH-018	22%

确认方法: LC-MS/MS

LOQ 0.5 ng/mL

## LC 参数

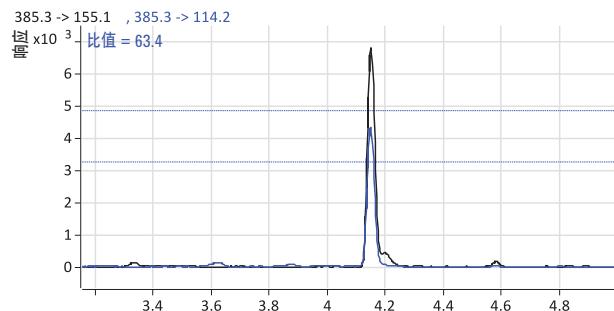
色谱柱	Zorbax Eclipse Plus C18 快速分离高通量色谱柱 2.1 x 50 mm, 1.8 μm
流速	0.5 mL/min
柱温	60 °C
流动相	A = 0.2% 醋酸水溶液, B = 乙腈
梯度程序	0 min 5% B 5 min 100% B 7 min 1% B 9.2 min 停止。后运行 2 min
进样量	5 μL

## MS 参数

雾化器压力	55 psi
干燥气流量	10 L/min
干燥气温度	350 °C
毛细管电压	4000 V

## LC-MS/MS 离子对:

化合物	母离子	子离子	碎裂电压(V)	碰撞能量 (V)
JWH-073-d <sub>7</sub>	335.3	207.2	120	20
<b>JWH-200</b>	<b>385.3</b>	<b>155.1</b>	<b>140</b>	<b>20</b>
JWH-200	385.3	114.2	140	25



\* 单一同位素分子量

LOQ 水平的 MRM 谱图, ± 20% 离子比限值

# JWH-250

化学名称:	(IUPAC) 2-(2-甲氧基苯基)-1-(1-戊基吲哚-3-基)乙酮
分子式:	C <sub>22</sub> H <sub>25</sub> NO <sub>2</sub>
分子量*:	335.2

筛查方法: Immunalysis ELISA 正在开发中

临界浓度: N/A    目标化合物: N/A

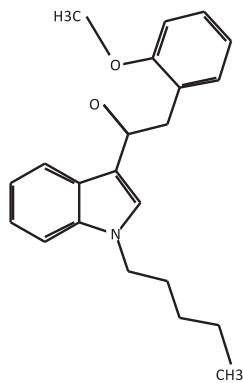
显著交叉反应:

无	N/A
---	-----

确认方法: LC-MS/MS

LOQ 5 ng/mL

分子结构:



## LC 参数

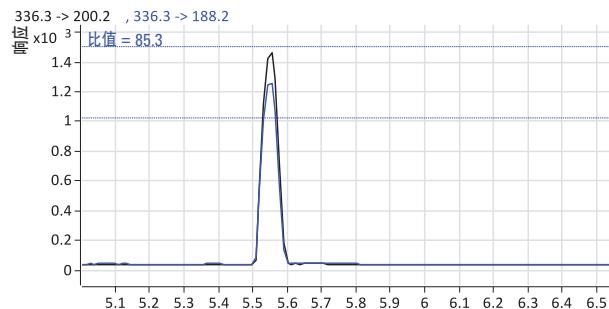
色谱柱	Zorbax Eclipse Plus C18 快速分离高通量色谱柱 2.1 x 50 mm, 1.8 μm
流速	0.5 mL/min
柱温	60 °C
流动相	A = 0.2% 醋酸水溶液, B = 乙腈
梯度程序	0 min 5% B 5 min 100% B 7 min 1% B 9.2 min 停止。后运行 2 min
进样量	5 μL

## MS 参数

雾化器压力	55 psi
干燥气流量	10 L/min
干燥气温度	350 °C
毛细管电压	4000 V

## LC-MS/MS 离子对:

化合物	母离子	子离子	碎裂电压(V)	碰撞能量 (V)
JWH-073-d <sub>7</sub>	335.3	207.2	120	20
<b>JWH-250</b>	<b>336.3</b>	<b>200.2</b>	<b>120</b>	<b>20</b>
JWH-250	336.3	188.2	120	12



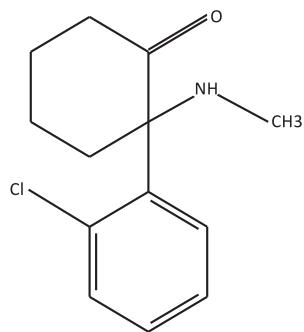
\* 单一同位素分子量

LOQ 水平的 MRM 谱图, ± 20% 离子比限值

# 氯胺酮

化学名称:	(IUPAC) 2-(2-氯苯基)-2-(甲基氨基)环己酮
分子式:	C <sub>13</sub> H <sub>16</sub> ClNO
分子量*:	237.1

## 分子结构:



## 筛查方法: Immunalysis ELISA 目录 #240

临界浓度: 10 ng/mL    目标化合物: 氯胺酮  
显著交叉反应:

氯胺酮	100%
去甲基氯胺酮	5%

## 确认方法: LC-MS/MS

LOQ 3 ng/mL

## LC 参数

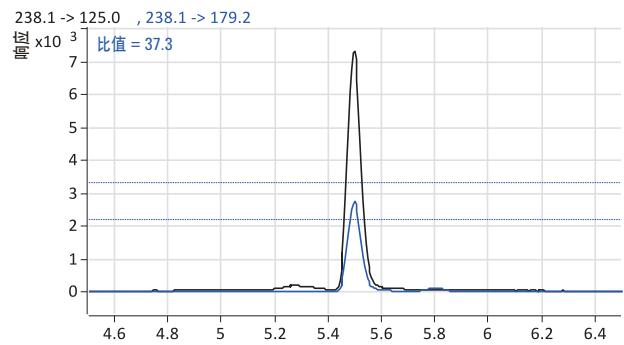
色谱柱	Zorbax Eclipse Plus C18 快速分离高通量色谱柱 4.6 x 50 mm, 1.8 μm
流速	0.5 mL/min
柱温	40 °C
流动相	A = 20 mM 甲酸铵水溶液 pH 6.4, B = 甲醇
梯度程序	0 min 25% B 0.5 min 25% B 3.5 min 100% B 4.5 min 25% B 6.0 min 停止。后运行 3 min
进样量	5 μL

## MS 参数

雾化器压力	50 psi
干燥气流量	6 L/min
干燥气温度	350 °C
毛细管电压	4000 V

## LC-MS/MS 离子对:

化合物	母离子	子离子	碎裂电压(V)	碰撞能量 (V)
氯胺酮-d <sub>4</sub>	242.2	129	80	30
氯胺酮	238.1	179.2	120	15
<b>氯胺酮</b>	<b>238.1</b>	<b>125</b>	<b>120</b>	<b>20</b>



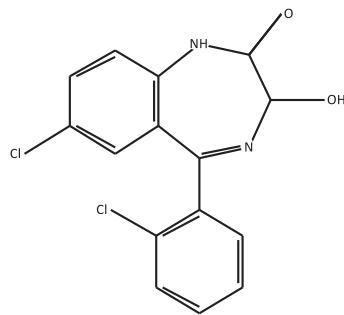
\* 单一同位素分子量

LOQ 水平的 MRM 谱图, ± 20% 离子比限值

# 劳拉西泮

化学名称:	7-氯-5-(2-氯苯基)-1,3-二氢-3-羟基-2H-1,4-苯并二氮杂卓-2-酮
分子式:	C <sub>15</sub> H <sub>10</sub> Cl <sub>2</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>
分子量*:	320.01

## 分子结构:



## 筛查方法: Immunalysis ELISA 目录 #214

临界浓度: 5 ng/mL    目标化合物: 奥沙西泮

### 显著交叉反应:

奥沙西泮	100%
劳拉西泮	90%
氯甲西泮	120%
地西泮	70%

## 确认方法: LC-MS/MS

LOQ 1 ng/mL

### LC 参数

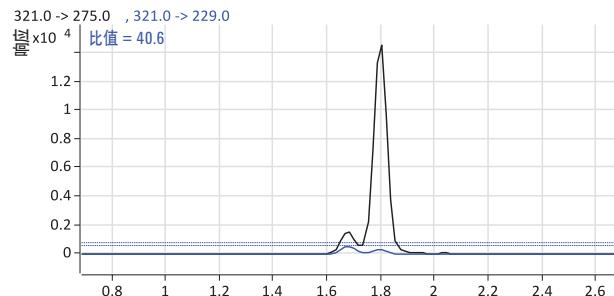
色谱柱	Zorbax Eclipse Plus C18 快速分离高通量色谱柱 4.6 x 50 mm, 1.8 μm
流速	0.5 mL/min
柱温	35 °C
流动相	A = 20 mM 甲酸铵水溶液 pH 8.6, B = 乙腈
梯度程序	0 min 50% B 等度洗脱 5.5 min 停止。后运行关闭
进样量	5 μL

### MS 参数

雾化器压力	50 psi
干燥气流量	10 L/min
干燥气温度	300 °C
毛细管电压	3500 V

### LC-MS/MS 离子对:

化合物	母离子	子离子	碎裂电压(V)	碰撞能量 (V)
阿普唑仑-d <sub>5</sub>	314	286	160	25
<b>劳拉西泮</b>	<b>321</b>	<b>275</b>	<b>140</b>	<b>25</b>
劳拉西泮	321	229	140	25

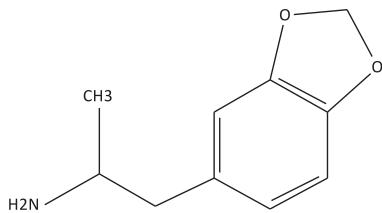


\* 单一同位素分子量

LOQ 水平的 MRM 谱图, ± 20% 离子比限值

# MDA

分子结构:



化学名称:	亚甲二氧基苯丙胺; α-甲基-1,3-苯并二茂-5-乙胺
分子式:	C <sub>10</sub> H <sub>13</sub> NO <sub>2</sub>
分子量*:	179.1

筛查方法: Immunalysis ELISA 目录 #2090F

临界浓度: 50 ng/mL    目标化合物: d-安非他明

显著交叉反应:

d-安非他明	100%
dl-MDA	178%
l-安非他明	9.7%
芬特明	89%

确认方法: LC-MS/MS

LOQ 25 ng/mL

LC 参数 (方法还适用保留时间更长的相关化合物)

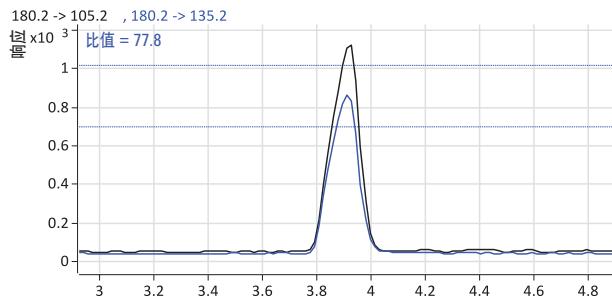
色谱柱	Zorbax Eclipse Plus C18 快速分离高通量色谱柱 4.6 x 50 mm, 1.8 μm
流速	0.7 mL/min
柱温	40 °C
流动相	A = 20 mM 甲酸铵水溶液 pH 6.4, B = 甲醇 0 min 15% B 8 min 50% B 9 min 15% B 12 min 停止。后运行 1 min
梯度程序	
进样量	5 μL

MS 参数

雾化器压力	40 psi
干燥气流量	6 L/min
干燥气温度	350 °C
毛细管电压	4000 V

LC-MS/MS 离子对:

化合物	母离子	子离子	碎裂电压(V)	碰撞能量 (V)
MDA-d <sub>5</sub>	185.2	110.1	80	25
MDA	180.2	135.2	40	20
<b>MDA</b>	<b>180.2</b>	<b>105.2</b>	<b>40</b>	<b>20</b>



\* 单一同位素分子量

LOQ 水平的 MRM 谱图, ± 20% 离子比限值

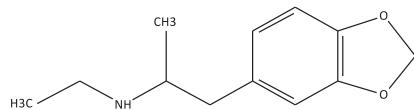
# MDEA

化学名称: 3,4-亚甲二氧基-N-乙基安非他明

分子式: C<sub>12</sub>H<sub>17</sub>NO<sub>2</sub>

分子量\*: 207.1

分子结构:



筛查方法: Immunalysis ELISA 目录 #2110F

临界浓度: 50 ng/mL    目标化合物: d-甲基安非他明

显著交叉反应:

d- 甲基安非他明	100%
l- 甲基安非他明	3%
d, l-MDMA	98%
d, l-MDEA	6.4%

确认方法: LC-MS/MS

LOQ 25 ng/mL

LC 参数 (方法还适用保留时间更长的相关化合物)

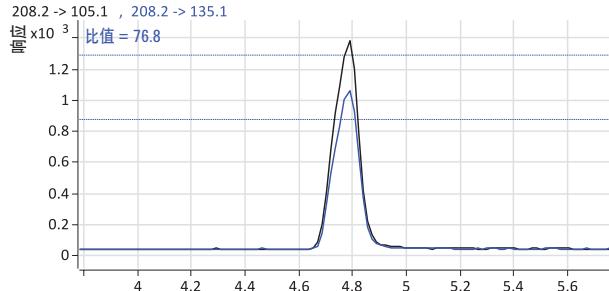
色谱柱	Zorbax Eclipse Plus C18 快速分离高通量色谱柱 4.6 x 50 mm, 1.8 μm
流速	0.7 mL/min
柱温	40 °C
流动相	A = 20 mM 甲酸铵水溶液 pH 6.4, B = 甲醇 0 min 15% B 8 min 50% B 9 min 15% B 12 min 停止。后运行 1 min
梯度程序	
进样量	5 μL

MS 参数

雾化器压力	40 psi
干燥气流量	6 L/min
干燥气温度	350 °C
毛细管电压	4000 V

LC-MS/MS 离子对:

化合物	母离子	子离子	碎裂电压(V)	碰撞能量 (V)
MDEA-d <sub>5</sub>	213.2	105.1	120	30
MDEA	208	135.1	120	25
<b>MDEA</b>	<b>208</b>	<b>105.1</b>	<b>120</b>	<b>30</b>



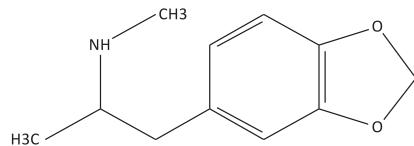
\* 单一同位素分子量

LOQ 水平的 MRM 谱图, ± 20% 离子比限值

# MDMA

化学名称:	亚甲二氧基甲基安非他明; (2-苯[1,3]二氧杂环戊烯-5-基-1-甲基-乙基)-甲基-胺
分子式:	C <sub>11</sub> H <sub>15</sub> NO <sub>2</sub>
分子量*:	193.1

## 分子结构:



## 筛查方法: Immunalysis ELISA 目录 #2110F

临界浓度: 50 ng/mL    目标化合物: d-甲基安非他明

### 显著交叉反应:

d-甲基安非他明	100%
l-甲基安非他明	3%
d, l-MDMA	98%
d, l-MDEA	6.4%

## 确认方法: LC-MS/MS

LOQ 25 ng/mL

### LC 参数 (方法还适用保留时间更长的相关化合物)

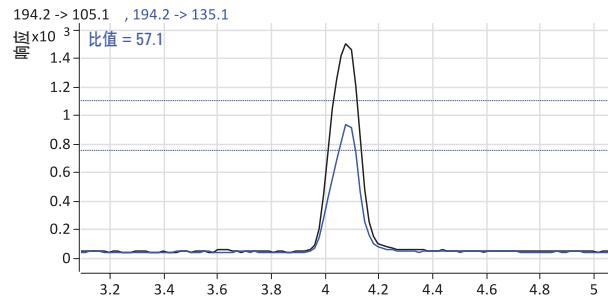
色谱柱	Zorbax Eclipse Plus C18 快速分离高通量色谱柱 4.6 x 50 mm, 1.8 μm
流速	0.7 mL/min
柱温	40 °C
流动相	A = 20 mM 甲酸铵水溶液 pH 6.4, B = 甲醇 0 min 15% B 8 min 50% B 9 min 15% B 12 min 停止。后运行 1 min
梯度程序	
进样量	5 μL

### MS 参数

雾化器压力	40 psi
干燥气流量	6 L/min
干燥气温度	350 °C
毛细管电压	4000 V

### LC-MS/MS 离子对:

化合物	母离子	子离子	碎裂电压(V)	碰撞能量 (V)
MDMA-d <sub>5</sub>	199.2	107.1	80	25
MDMA	194	135.1	80	25
<b>MDMA</b>	<b>194</b>	<b>105.1</b>	<b>80</b>	<b>25</b>



\* 单一同位素分子量

LOQ 水平的 MRM 谱图, ± 20% 离子比限值

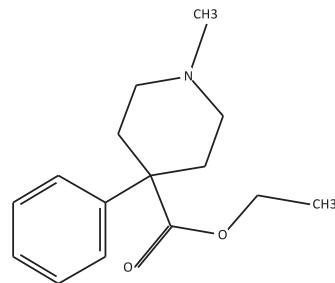
# 度冷丁

化学名称: 1-甲基-4-苯基-4-哌啶羧酸乙酯

分子式: C<sub>15</sub>H<sub>21</sub>NO<sub>2</sub>

分子量\*: 247.1

## 分子结构:



## 筛查方法: Immunalysis ELISA 目录 #220

临界浓度: 25 ng/mL    目标化合物: 度冷丁

### 显著交叉反应:

度冷丁	100%
去甲基度冷丁	7%
哌替啶酸	3%
6-乙酰基可待因	0.2%

## 确认方法: LC-MS/MS

LOQ 25 ng/mL

## LC 参数

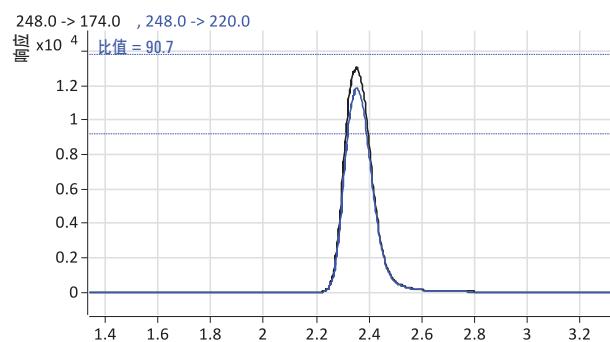
色谱柱	Zorbax Eclipse Plus C18 快速分离高通量色谱柱 4.6 x 50 mm, 1.8 μm
流速	0.5 mL/min
柱温	40 °C
流动相	A = 20 mM 甲酸铵水溶液 pH 6.4, B = 甲醇 0 min 50% B 3 min 100% B 4 min 50% B 4.5 min 停止。后运行 3 min
梯度程序	
进样量	5 μL

## MS 参数

雾化器压力	50 psi
干燥气流量	10 L/min
干燥气温度	350 °C
毛细管电压	4000 V

## LC-MS/MS 离子对:

化合物	母离子	子离子	碎裂电压(V)	碰撞能量 (V)
度冷丁-d <sub>4</sub>	252	178	160	20
度冷丁	248	220	160	20
<b>度冷丁</b>	<b>248</b>	<b>174</b>	<b>160</b>	<b>20</b>



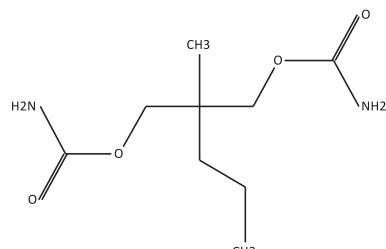
\* 单一同位素分子量

LOQ 水平的 MRM 谱图, ± 20% 离子比限值

# 眠尔通

化学名称:	氨甲丙二酯, (IUPAC) 2-甲基-2-丙基-1,3-丙二醇二氨基甲酸酯
分子式:	C <sub>9</sub> H <sub>18</sub> N <sub>2</sub> O <sub>4</sub>
分子量*:	218.1

## 分子结构:



## 筛查方法: Immunalysis ELISA 目录 #231

临界浓度: 50 ng/mL    目标化合物: 肌安宁  
显著交叉反应:

肌安宁	100%
眠尔通	118%

## 确认方法: LC-MS/MS

LOQ 10 ng/mL

## LC 参数

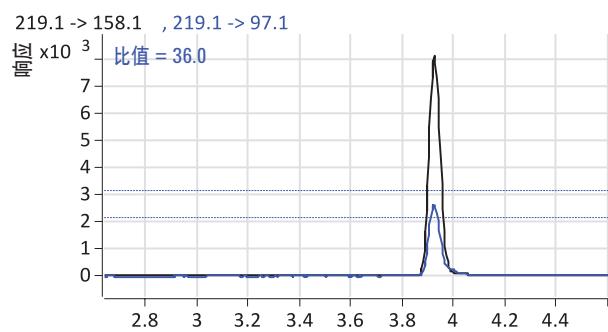
色谱柱	Zorbax Eclipse Plus C18 快速分离高通量色谱柱 4.6 x 50 mm, 1.8 μm
流速	0.7 mL/min
柱温	40 °C
流动相	A = 20 mM 甲酸铵水溶液 pH 6.4, B = 甲醇 0 min 15% B 4 min 100% B 5 min 15% B 5.5 min 停止。后运行 3 min
进样量	5 μL

## MS 参数

雾化器压力	40 psi
干燥气流量	8 L/min
干燥气温度	350 °C
毛细管电压	4000 V

## LC-MS/MS 离子对:

化合物	母离子	子离子	碎裂电压(V)	碰撞能量 (V)
肌安宁-d <sub>7</sub>	268.2	183.2	60	2
<b>眠尔通</b>	<b>219.1</b>	<b>158.1</b>	<b>60</b>	<b>2</b>
眠尔通	219.1	97.1	60	8



\* 单一同位素分子量

LOQ 水平的 MRM 谱图, ± 20% 离子比限值

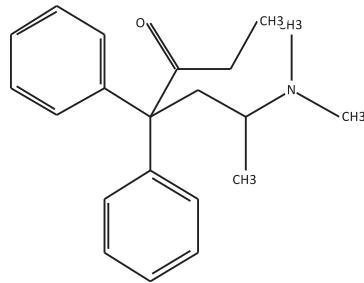
# 美沙酮

化学名称: 6-二甲基氨基-4,4-二苯基-3-庚酮

分子式: C<sub>21</sub>H<sub>27</sub>NO

分子量\*: 309.2

## 分子结构:



## 筛查方法: Immunalysis ELISA 目录 #232

临界浓度: 50 ng/mL    目标化合物: 美沙酮

### 显著交叉反应:

美沙酮	100%
美沙多	50%
EDDP	<5%
LAAM	15%
去甲基-LAAM	<1%

## 确认方法: LC-MS/MS

LOQ 2 ng/mL

## LC 参数

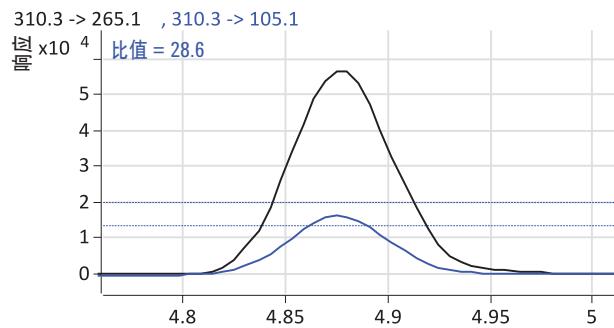
色谱柱	Zorbax Eclipse Plus C18 快速分离高通量色谱柱 4.6 x 50 mm, 1.8 μm
流速	0.5 mL/min
柱温	40 °C
流动相	A = 20 mM 甲酸铵水溶液 pH 6.4, B = 甲醇 0 min 50% B 4 min 100% B 5 min 25% B 6.5 min 停止。后运行 3 min
梯度程序	
进样量	5 μL

## MS 参数

雾化器压力	50 psi
干燥气流量	10 L/min
干燥气温度	350 °C
毛细管电压	4000 V

## LC-MS/MS 离子对:

化合物	母离子	子离子	碎裂电压(V)	碰撞能量 (V)
美沙酮-d <sub>9</sub>	319.3	268.1	120	10
<b>美沙酮</b>	<b>310.3</b>	<b>265.1</b>	<b>120</b>	<b>10</b>
美沙酮	310.3	105.1	120	25



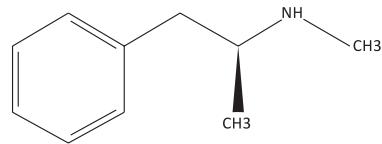
\* 单一同位素分子量

LOQ 水平的 MRM 谱图, ± 20% 离子比限值

# 甲基安非他明

化学名称:	苯基甲基氨基丙烷; (IUPAC) (2S)-N-甲基-1-苯基丙-2-胺
分子式:	C <sub>10</sub> H <sub>15</sub> N
分子量*:	149.1

分子结构:



## 筛查方法: Immunalysis ELISA 目录 #2110F

临界浓度: 50 ng/mL    目标化合物: d-甲基安非他明

### 显著交叉反应:

d-甲基安非他明	100%
l-甲基安非他明	3%
d, l-MDMA	98%
d, l-MDEA	6.4%

## 确认方法: LC-MS/MS

LOQ 10 ng/mL

### LC 参数 (方法还适用保留时间更长的相关化合物)

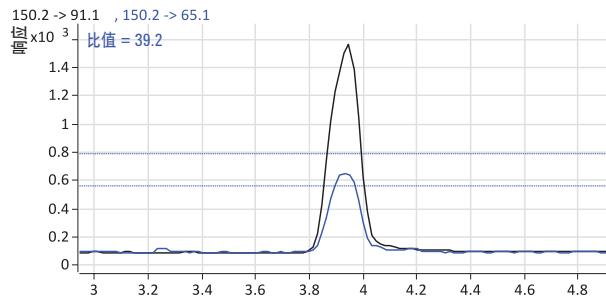
色谱柱	Zorbax Eclipse Plus C18 快速分离高通量色谱柱 4.6 x 50 mm, 1.8 μm
流速	0.7 mL/min
柱温	40 °C
流动相	A = 20 mM 甲酸铵水溶液 pH 6.4, B = 甲醇
	0 min 15% B
梯度程序	8 min 50% B 9 min 15% B 12 min 停止。后运行 1 min
进样量	5 μL

### MS 参数

雾化器压力	40 psi
干燥气流量	6 L/min
干燥气温度	350 °C
毛细管电压	4000 V

### LC-MS/MS 离子对:

化合物	母离子	子离子	碎裂电压(V)	碰撞能量 (V)
甲基安非他明-d <sub>5</sub>	155.2	92.1	80	25
<b>甲基安非他明</b>	<b>150.2</b>	<b>91.1</b>	<b>120</b>	<b>25</b>
甲基安非他明	150.2	65.1	120	50



\* 单一同位素分子量

LOQ 水平的 MRM 谱图, ± 20% 离子比限值

# 哌醋甲酯

化学名称: 哌醋甲酯; α-苯基-2-哌啶乙酸甲酯

分子式: C<sub>14</sub>H<sub>19</sub>NO<sub>2</sub>

分子量\*: 233.1

筛查方法: Immunalysis ELISA 目录 #219

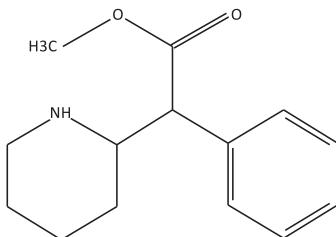
临界浓度: 10 ng/mL    目标化合物: 哌醋甲酯

显著交叉反应:

    哌醋甲酯                          100%

    盐酸哌甲酯                          1%

分子结构:



确认方法: LC-MS/MS

LOQ 5 ng/mL

LC 参数 (方法还适用保留时间更长的相关化合物)

色谱柱 Zorbax Eclipse Plus C18 快速分离高通量色谱柱  
4.6 x 50 mm, 1.8 μm

流速 0.7 mL/min

柱温 40 °C

流动相 A = 20 mM 甲酸铵水溶液 pH 6.4, B = 甲醇  
0 min 15% B

梯度程序 8 min 50% B

9 min 15% B

12 min 停止。后运行 1 min

进样量 5 μL

MS 参数

雾化器压力 40 psi

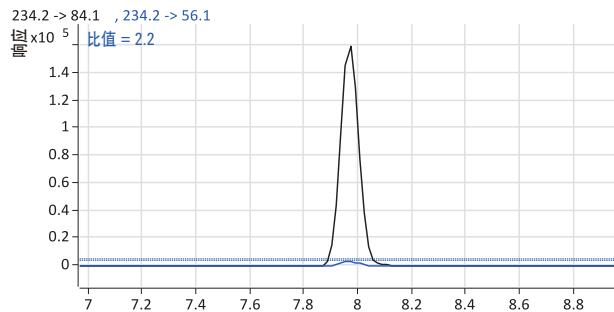
干燥气流量 6 L/min

干燥气温度 350 °C

毛细管电压 4000 V

LC-MS/MS 离子对:

化合物	母离子	子离子	碎裂电压(V)	碰撞能量 (V)
甲基安非他明-d <sub>5</sub>	155.2	92.1	80	25
<b>哌醋甲酯</b>	<b>234.2</b>	<b>84.1</b>	<b>120</b>	<b>25</b>
哌醋甲酯	234.2	56.1	120	25



\* 单一同位素分子量

LOQ 水平的 MRM 谱图, ± 20% 离子比限值

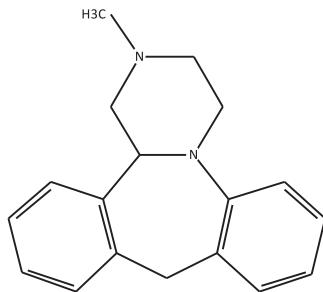
# 米安色林

化学名称: (IUPAC) 1,2,3,4,10,14b-六氢-2-甲基二苯并[c,f]-吡嗪  
[1,2-a]氮杂卓

分子式: C<sub>18</sub>H<sub>20</sub>N<sub>2</sub>

分子量\*: 264.2

## 分子结构:



## 筛查方法: Immunalysis ELISA 目录 #222

临界浓度: N/A    目标化合物: 去甲替林

显著交叉反应:

无数据

## 确认方法: LC-MS/MS

LOQ 10 ng/mL

### LC 参数

色谱柱 Zorbax Eclipse Plus C18 快速分离高通量色谱柱  
4.6 x 50 mm, 1.8 μm

流速 1 mL/min

柱温 45 °C

流动相 A = 0.2% 醋酸水溶液, B = 甲醇

0 min 30% B

0.1 min 30% B

梯度程序 8 min 70% B

9 min 30% B

11 min 停止。后运行 2 min

进样量 5 μL

### MS 参数

雾化器压力 50 psi

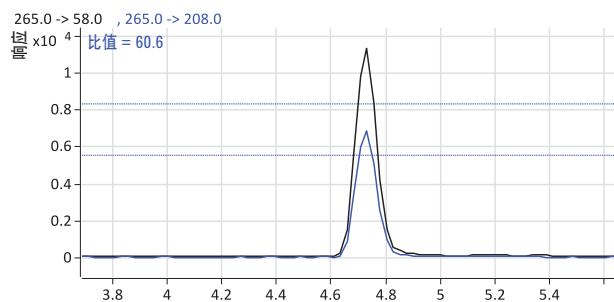
干燥气流量 11 L/min

干燥气温度 350 °C

毛细管电压 4000 V

### LC-MS/MS 离子对:

化合物	母离子	子离子	碎裂电压(V)	碰撞能量 (V)
帕罗西汀-d <sub>6</sub>	336	76	120	20
米安色林	265	208	120	15
<b>米安色林</b>	<b>265</b>	<b>58</b>	<b>120</b>	<b>25</b>



\* 单一同位素分子量

LOQ 水平的 MRM 谱图, ± 20% 离子比限值

# 咪达唑仑

化学名称:	(IUPAC) 8-氯-6-(2-氟苯基)-1-甲基-4H-咪唑并[1,5-a][1,4]苯并二氮杂卓
分子式:	C <sub>18</sub> H <sub>13</sub> ClFN <sub>3</sub>
分子量*:	325.1

## 筛查方法: Immunalysis ELISA 目录 #214

临界浓度: 5 ng/mL    目标化合物: 奥沙西泮

### 显著交叉反应:

奥沙西泮	100%
咪达唑仑	60%
美达西洋	40%
地西洋	70%

## 确认方法: LC-MS/MS

LOQ 1 ng/mL

### LC 参数

色谱柱	Zorbax Eclipse Plus C18 快速分离高通量色谱柱 4.6 x 50 mm, 1.8 μm
流速	0.5 mL/min
柱温	35 °C
流动相	A = 20 mM 甲酸铵水溶液 pH 8.6, B = 乙腈
梯度程序	0 min 50% B 等度洗脱 5.5 min 停止。后运行关闭
进样量	5 μL

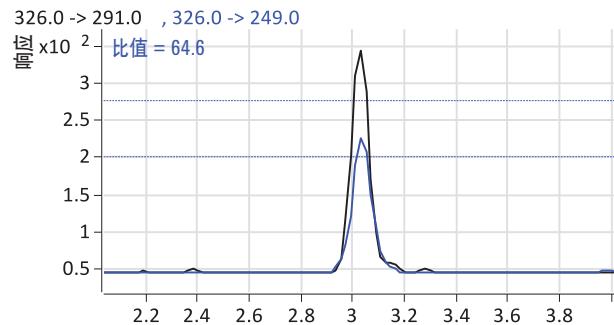
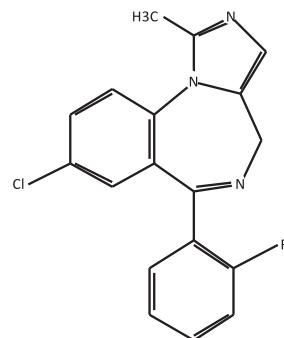
### MS 参数

雾化器压力	50 psi
干燥气流量	10 L/min
干燥气温度	300 °C
毛细管电压	3500 V

### LC-MS/MS 离子对:

化合物	母离子	子离子	碎裂电压(V)	碰撞能量 (V)
阿普唑仑-d <sub>5</sub>	314	286	160	25
<b>咪达唑仑</b>	<b>326</b>	<b>291</b>	<b>200</b>	<b>30</b>
咪达唑仑	326	249	200	40

### 分子结构:



\* 单一同位素分子量

LOQ 水平的 MRM 谱图, ± 20% 离子比限值

# 米氮平

化学名称:	米他扎品; (IUPAC) 1,2,3,4,10,14b-六氢-2-甲基吡嗪[2,1-a]吡啶并[2,3-C][2]苯并氮杂卓
分子式:	C <sub>18</sub> H <sub>20</sub> N <sub>2</sub>
分子量*:	265.2

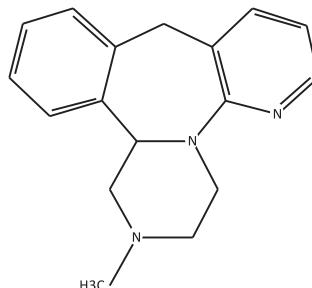
## 筛查方法: Immunalysis ELISA 目录 #222

临界浓度: N/A    目标化合物: 去甲替林

显著交叉反应:

无数据

## 分子结构:



## 确认方法: LC-MS/MS

LOQ 10 ng/mL

### LC 参数

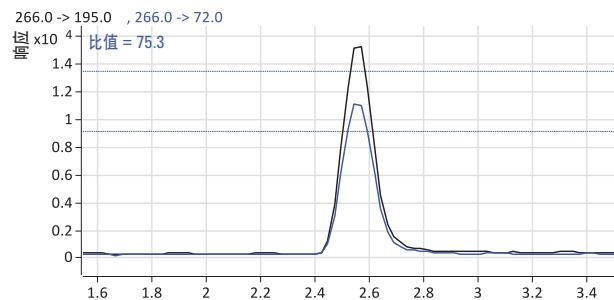
色谱柱	Zorbax Eclipse Plus C18 快速分离高通量色谱柱 4.6 x 50 mm, 1.8 μm
流速	1 mL/min
柱温	45 °C
流动相	A = 0.2% 醋酸水溶液, B = 甲醇
梯度程序	0 min 30% B 0.1 min 30% B 8 min 70% B 9 min 30% B 11 min 停止。后运行 2 min
进样量	5 μL

### MS 参数

雾化器压力	50 psi
干燥气流量	11 L/min
干燥气温度	350 °C
毛细管电压	4000 V

### LC-MS/MS 离子对:

化合物	母离子	子离子	碎裂电压(V)	碰撞能量 (V)
帕罗西汀-d <sub>6</sub>	336	76	120	20
<b>米氮平</b>	<b>266</b>	<b>195</b>	<b>100</b>	<b>25</b>
米氮平	266	72	100	20



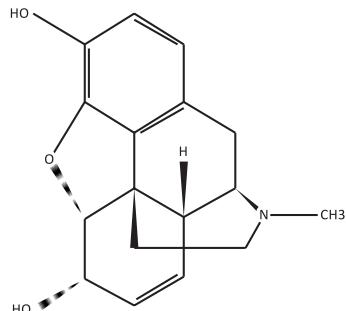
\* 单一同位素分子量

LOQ 水平的 MRM 谱图, ± 20% 离子比限值

# 吗啡

化学名称:	(IUPAC) (5 $\alpha$ ,6 $\alpha$ )-17-甲基-7,8-二脱氢-4,5-环氧基吗啡 喃-3,6-二醇
分子式:	C <sub>17</sub> H <sub>19</sub> NO <sub>3</sub>
分子量*:	285.1

## 分子结构:



## 筛查方法: Immunalysis ELISA 目录 #2070F

临界浓度: 20 ng/mL    目标化合物: 吗啡

### 显著交叉反应:

吗啡	100%
6-AM	83%
可待因	200%
氢可酮	93%
双氢可待因	85%

## 确认方法: LC-MS/MS

LOQ 4 ng/mL

## LC 参数

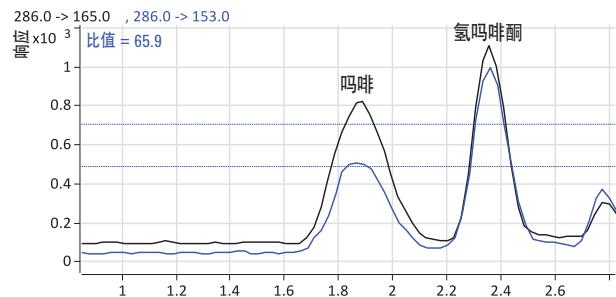
色谱柱	Zorbax Eclipse Plus C18 快速分离高通量色谱柱 4.6 x 50 mm, 1.8 $\mu$ m
流速	0.7 mL/min
柱温	60 °C
流动相	A = 20 mM 甲酸铵 pH 6.4, B = 甲醇
梯度程序	0 min 15% B 6 min 78% B 后运行 3 min
进样量	5 $\mu$ L

## MS 参数

雾化器压力	50 psi
干燥气流量	10 L/min
干燥气温度	350 °C
毛细管电压	4000 V

## LC-MS/MS 离子对:

化合物	母离子	子离子	碎裂电压(V)	碰撞能量 (V)
吗啡-d <sub>3</sub>	289	165	130	40
<b>吗啡</b>	<b>286</b>	<b>165</b>	<b>170</b>	<b>35</b>
吗啡	286	153	150	45



\* 单一同位素分子量

LOQ 水平的 MRM 谱图, ± 20% 离子比限值

# 去甲可卡因

化学名称:	(IUPAC) (1R,2R,3S,5S)-3-(苯甲酰氨基)-8-氮杂双环[3.2.1]辛烷-2-羧酸甲酯
分子式:	C <sub>16</sub> H <sub>19</sub> NO <sub>4</sub>
分子量*:	289.1

筛查方法: Immunalysis ELISA 目录 #2120F

临界浓度: 20 ng/mL    目标化合物: 莱甲酰爱冈宁

显著交叉反应:

苯甲酰爱冈宁	100%
古柯乙稀	90%
可卡因	70%
去甲可卡因	0.2%

确认方法: LC-MS/MS

LOQ 2 ng/mL

## LC 参数

色谱柱	Zorbax Eclipse Plus C18 快速分离高通量色谱柱 4.6 x 50 mm, 1.8 μm
流速	0.2 mL/min
柱温	60 °C
流动相	A = 20 mM 甲酸铵水溶液 pH 6.4, B = 甲醇
梯度程序	0 min 80% B 4 min 30% 6 min 停止。后运行 4 min
进样量	5 μL

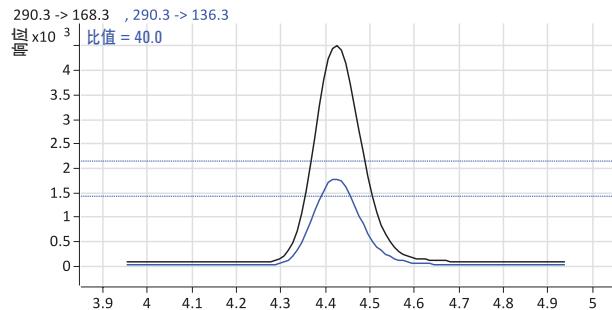
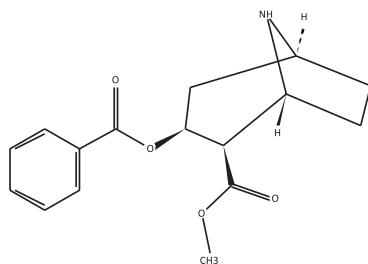
## MS 参数

雾化器压力	50 psi
干燥气流量	10 L/min
干燥气温度	350 °C
毛细管电压	4000 V

## LC-MS/MS 离子对:

化合物	母离子	子离子	碎裂电压(V)	碰撞能量 (V)
苯甲酰爱冈宁-d <sub>3</sub>	293.3	171.2	120	20
<b>去甲可卡因</b>	<b>290.3</b>	<b>168.3</b>	<b>120</b>	<b>15</b>
去甲可卡因	290.3	136.3	120	25

## 分子结构:



\* 单一同位素分子量

LOQ 水平的 MRM 谱图, ± 20% 离子比限值

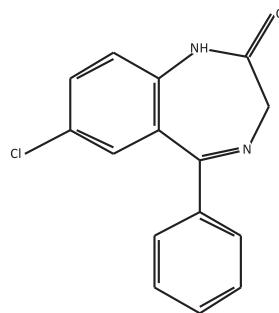
# 去甲西泮

化学名称: 7-氯-1,3-二氢-5-苯基-2H-1,4-苯并二氮杂卓-2-酮

分子式: C<sub>15</sub>H<sub>11</sub>ClN<sub>2</sub>O

分子量\*: 270.7

分子结构:



筛查方法: Immunalysis ELISA 目录 #214

临界浓度: 5 ng/mL    目标化合物: 奥沙西泮

显著交叉反应:

奥沙西泮	100%
去甲西泮	50%
地西泮	70%
替马西泮	200%

确认方法: LC-MS/MS

LOQ 1 ng/mL

## LC 参数

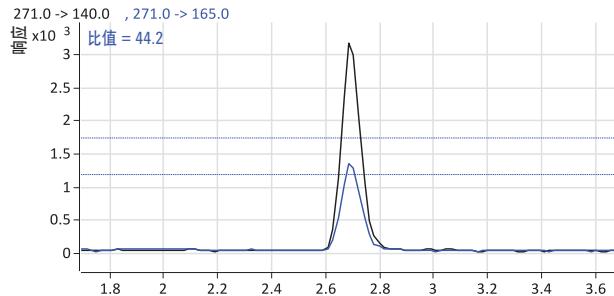
色谱柱	Zorbax Eclipse Plus C18 快速分离高通量色谱柱 4.6 x 50 mm, 1.8 μm
流速	0.5 mL/min
柱温	35 °C
流动相	A = 20 mM 甲酸铵水溶液 pH 8.6, B = 乙腈 0 min 50% B
梯度程序	等度洗脱 5.5 min 停止。后运行关闭
进样量	5 μL

## MS 参数

雾化器压力	50 psi
干燥气流量	10 L/min
干燥气温度	300 °C
毛细管电压	3500 V

## LC-MS/MS 离子对:

化合物	母离子	子离子	碎裂电压(V)	碰撞能量 (V)
阿普唑仑-d <sub>5</sub>	314	286	160	25
去甲西泮	271	165	160	30
<b>去甲西泮</b>	<b>271</b>	<b>140</b>	<b>160</b>	<b>30</b>



\* 单一同位素分子量

LOQ 水平的 MRM 谱图, ± 20% 离子比限值

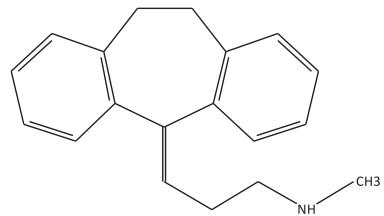
# 去甲替林

化学名称: 3-(10,11-二氢-5H-二苯并[a,d]环庚烯-5-基啶-N-甲基-1-丙胺

分子式: C<sub>19</sub>H<sub>21</sub>N

分子量\*: 263.2

## 分子结构:



## 筛查方法: Immunalysis ELISA 目录 #222

临界浓度: 25 ng/mL    目标化合物: 去甲替林

### 显著交叉反应:

去甲替林	100%
阿米替林	200%
地昔帕明	200%
丙咪嗪	200%
三甲丙咪嗪	50%

## 确认方法: LC-MS/MS

LOQ 10 ng/mL

## LC 参数

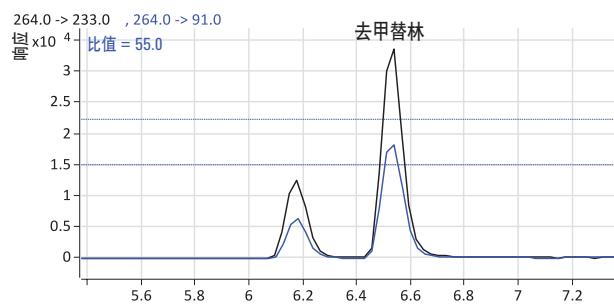
色谱柱	Zorbax Eclipse Plus C18 快速分离高通量色谱柱 4.6 x 50 mm, 1.8 μm
流速	1 mL/min
柱温	45 °C
流动相	A = 0.2% 醋酸水溶液, B = 甲醇
梯度程序	0 min 30% B 0.1 min 30% B 8 min 70% B 9 min 30% B 11 min 停止。后运行 2 min
进样量	5 μL

## MS 参数

雾化器压力	50 psi
干燥气流量	11 L/min
干燥气温度	350 °C
毛细管电压	4000 V

## LC-MS/MS 离子对:

化合物	母离子	子离子	碎裂电压(V)	碰撞能量(V)
去甲替林-d <sub>5</sub>	267	233	100	10
去甲替林	<b>264</b>	<b>233</b>	<b>100</b>	<b>10</b>
去甲替林	264	91	100	25

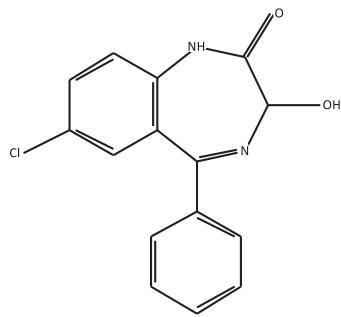


\* 单一同位素分子量

LOQ 水平的 MRM 谱图, ± 20% 离子比限值

# 奥沙西泮

分子结构:



化学名称:	7-氯-1,3-二氢-3-羟基-5-苯基-2H-1,4-苯并二氮杂卓-2-酮
分子式:	C <sub>15</sub> H <sub>11</sub> ClN <sub>2</sub> O <sub>2</sub>
分子量*:	286.1

筛查方法: Immunalysis ELISA 目录 #214

临界浓度: 5 ng/mL    目标化合物: 奥沙西泮

显著交叉反应:

奥沙西泮	100%
地西泮	70%
去甲西泮	50%
替马西泮	200%

确认方法: LC-MS/MS

LOQ 1 ng/mL

## LC 参数

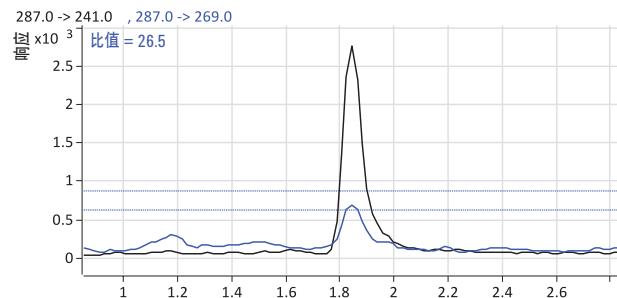
色谱柱	Zorbax Eclipse Plus C18 快速分离高通量色谱柱 4.6 x 50 mm, 1.8 μm
流速	0.5 mL/min
柱温	35 °C
流动相	A = 20 mM 甲酸铵水溶液 pH 8.6, B = 乙腈
梯度程序	0 min 50% B 等度洗脱 5.5 min 停止。后运行关闭
进样量	5 μL

## MS 参数

雾化器压力	50 psi
干燥气流量	10 L/min
干燥气温度	300 °C
毛细管电压	3500 V

## LC-MS/MS 离子对:

化合物	母离子	子离子	碎裂电压(V)	碰撞能量 (V)
奥沙西泮-d <sub>5</sub>	292	246	120	20
奥沙西泮	287	269	120	20
<b>奥沙西泮</b>	<b>287</b>	<b>241</b>	<b>120</b>	<b>20</b>



\* 单一同位素分子量

LOQ 水平的 MRM 谱图, ± 20% 离子比限值

# 羟考酮

化学名称: 7,8-二氢-14-羟基可待因酮

分子式: C<sub>18</sub>H<sub>21</sub>NO<sub>4</sub>

分子量\*: 315.2

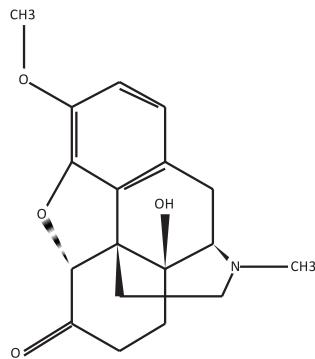
筛查方法: Immunalysis ELISA 目录 #221B

临界浓度: 20 ng/mL    目标化合物: 羟考酮

显著交叉反应:

羟考酮	100%
氢吗啡酮	88%
氢可酮	10%
氢吗啡酮	3%

分子结构:



确认方法: LC-MS/MS

LOQ 4 ng/mL

## LC 参数

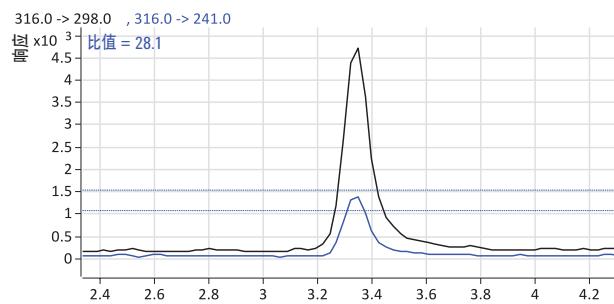
色谱柱	Zorbax Eclipse Plus C18 快速分离高通量色谱柱 4.6 x 50 mm, 1.8 μm
流速	0.7 mL/min
柱温	60 °C
流动相	A = 20 mM 甲酸铵 pH 6.4, B = 甲醇
梯度程序	0 min 15% B 6 min 78% B 后运行 3 min
进样量	5 μL

## MS 参数

雾化器压力	50 psi
干燥气流量	10 L/min
干燥气温度	350 °C
毛细管电压	4000 V

## LC-MS/MS 离子对:

化合物	母离子	子离子	碎裂电压(V)	碰撞能量 (V)
羟考酮 D <sub>6</sub>	322	247	160	25
<b>羟考酮</b>	<b>316</b>	<b>298</b>	<b>160</b>	<b>15</b>
羟考酮	316	241	160	30



\* 单一同位素分子量

LOQ 水平的 MRM 谱图, ± 20% 离子比限值

# 氧吗啡酮

化学名称:	7,8-二氢-14-羟基吗啡酮
分子式:	C <sub>17</sub> H <sub>19</sub> NO <sub>4</sub>
分子量*:	301.1

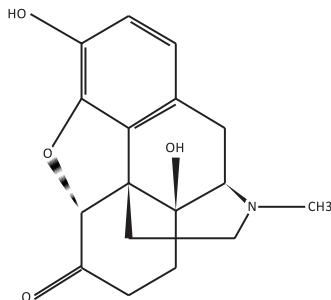
筛查方法: Immunalysis ELISA 目录 #221B

临界浓度: 20 ng/mL    目标化合物: 羟考酮

显著交叉反应:

羟考酮	100%
氧吗啡酮	88%
氢可酮	10%
氢吗啡酮	3%

分子结构:



确认方法: LC-MS/MS

LOQ 4 ng/mL

## LC 参数

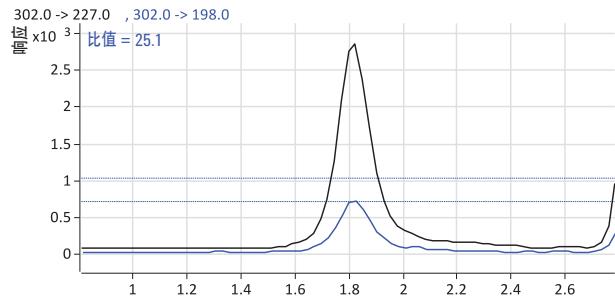
色谱柱	Zorbax Eclipse Plus C18 快速分离高通量色谱柱 4.6 x 50 mm, 1.8 μm
流速	0.7 mL/min
柱温	60 °C
流动相	A = 20 mM 甲酸铵 pH 6.4, B = 甲醇
梯度程序	0 min 15% B 6 min 78% B 后运行 3 min
进样量	5 μL

## MS 参数

雾化器压力	50 psi
干燥气流量	10 L/min
干燥气温度	350 °C
毛细管电压	4000 V

## LC-MS/MS 离子对:

化合物	母离子	子离子	碎裂电压(V)	碰撞能量 (V)
氧吗啡酮-d <sub>3</sub>	305	230	120	35
<b>氧吗啡酮</b>	<b>302</b>	<b>227</b>	<b>140</b>	<b>30</b>
氧吗啡酮	302	198	120	45



\* 单一同位素分子量

LOQ 水平的 MRM 谱图, ± 20% 离子比限值

# 帕罗西汀

化学名称: (3S-反式)-3-[(1,3-苯并二氧杂环戊烯-5-基氧基)甲基]-4-(4-氟苯基)哌啶

分子式: C<sub>19</sub>H<sub>20</sub>FNO<sub>3</sub>

分子量\*: 329.1

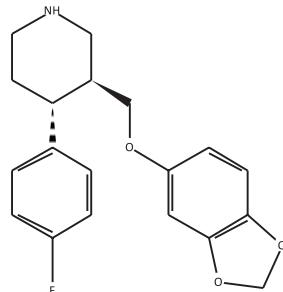
筛查方法: Immunalysis ELISA 目录 #222

临界浓度: N/A      目标化合物: N/A

显著交叉反应:

N/A

分子结构:



确认方法: LC-MS/MS

LOQ 10 ng/mL

## LC 参数

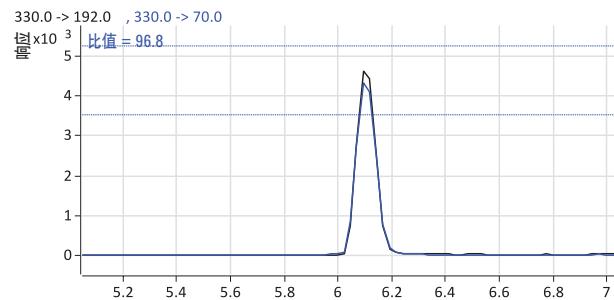
色谱柱	Zorbax Eclipse Plus C18 快速分离高通量色谱柱 4.6 x 50 mm, 1.8 μm
流速	1 mL/min
柱温	45 °C
流动相	A = 0.2% 醋酸水溶液, B = 甲醇
	0 min 30% B
	0.1 min 30% B
梯度程序	8 min 70% B
	9 min 30% B
	11 min 停止。后运行 2 min
进样量	5 μL

## MS 参数

雾化器压力	50 psi
干燥气流量	11 L/min
干燥气温度	350 °C
毛细管电压	4000 V

## LC-MS/MS 离子对:

化合物	母离子	子离子	碎裂电压(V)	碰撞能量 (V)
帕罗西汀-d <sub>6</sub>	336	76	120	20
<b>帕罗西汀</b>	<b>330</b>	<b>192</b>	<b>100</b>	<b>20</b>
帕罗西汀	330	70	100	20



\* 单一同位素分子量

LOQ 水平的 MRM 谱图, ± 20% 离子比限值

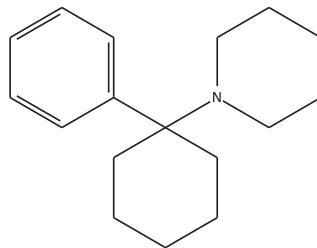
# 苯环己哌啶 (PCP)

化学名称: 1-(1-苯基环己基)哌啶

分子式: C<sub>17</sub>H<sub>25</sub>N

分子量\*: 243.2

分子结构:



筛查方法: Immunalysis ELISA 目录 #208

临界浓度: 10 ng/mL    目标化合物: 苯环己哌啶

显著交叉反应:

苯环己哌啶	100%
1[1-(2-噻吩基)环己基]-哌啶	50%
1[1-(2-噻吩基)环己基]-吗啉	10%
1-(1-苯基环己基)吡咯烷	10%
1-(1-苯基环己基)吗啉	8%

确认方法: LC-MS/MS

LOQ 5 ng/mL

## LC 参数

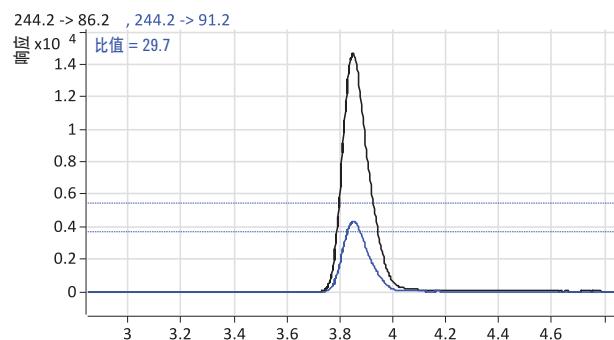
色谱柱	Zorbax Eclipse Plus C18 快速分离高通量色谱柱 4.6 x 50 mm, 1.8 μm
流速	0.5 mL/min
柱温	40 °C
流动相	A = 20 mM 甲酸铵水溶液 pH 6.4, B = 甲醇 0 min 50% B
梯度程序	4 min 100% B 5 min 25% B 6 min 停止。后运行 3 min
进样量	5 μL

## MS 参数

雾化器压力	35 psi
干燥气流量	10 L/min
干燥气温度	300 °C
毛细管电压	4000 V

## LC-MS/MS 离子对:

化合物	母离子	子离子	碎裂电压(V)	碰撞能量 (V)
苯环己哌啶-d <sub>5</sub>	249.2	96.1	5	30
苯环己哌啶	244.2	91.2	5	15
<b>苯环己哌啶</b>	<b>244.2</b>	<b>86.2</b>	<b>5</b>	<b>10</b>



\* 单一同位素分子量

LOQ 水平的 MRM 谱图, ± 20% 离子比限值

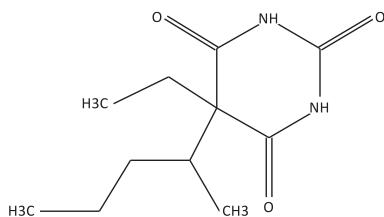
# 戊巴比妥

化学名称: 5-乙基-5-(1-甲基丁基)2,4,6(1H,3H,5H)-嘧啶三酮

分子式: C<sub>11</sub>H<sub>18</sub>N<sub>2</sub>O<sub>3</sub>

分子量\*: 226.1

## 分子结构:



## 筛查方法: Immunalysis ELISA 巴比妥类试剂盒目录 #210

临界浓度: 50 ng/mL    目标化合物: 司可巴比妥

### 显著交叉反应:

司可巴比妥	100%
布他比妥	83%
阿普比妥	89%
戊巴比妥	83%
苯巴比妥	50%
仲丁巴比妥	33%

## 确认方法: LC-MS/MS

LOQ 25 ng/mL

### LC 参数

色谱柱	Zorbax Eclipse Plus C18 快速分离高通量色谱柱 4.6 x 50 mm, 1.8 μm
流速	0.8 mL/min
柱温	35 °C
流动相	A = 0.2% 醋酸水溶液, B = 甲醇
梯度程序	0 min 5% B 0.2 min 5% B 5 min 95% B 5.2 min 95% B 6 min 5% 8.2 min 停止。后运行关闭
进样量	5 μL

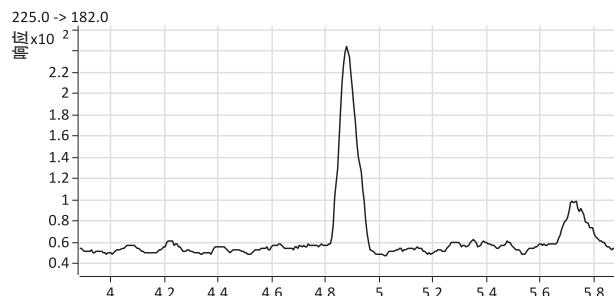
### MS 参数 – 阴离子模式

雾化器压力	35 psi
干燥气流量	10 L/min
干燥气温度	300 °C
毛细管电压	4500 V

### LC-MS/MS 离子对:

化合物	母离子	子离子	碎裂电压(V)	碰撞能量 (V)
戊巴比妥-d <sub>5</sub>	230	42	120	15
<b>戊巴比妥</b>	<b>225</b>	<b>182</b>	<b>80</b>	<b>4</b>

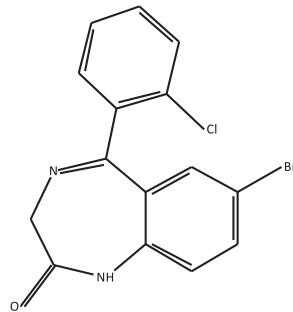
\* 单一同位素分子量



LOQ 水平的 MRM 谱图, ± 20% 离子比限值

# 芬纳西泮

分子结构:



化学名称:	(IUPAC) 7-溴-5-(2-氯苯基)-1,3-二氢-2H-1,4-苯并二氮杂卓-2-酮
分子式:	C <sub>15</sub> H <sub>10</sub> N <sub>2</sub> OBrCl
分子量*:	349.6

筛查方法: Immunalysis ELISA 目录 #214

临界浓度: 5 ng/mL    目标化合物: 奥沙西泮

显著交叉反应:

奥沙西泮	100%
芬纳西泮	100%
氟西泮	100%
替马西泮	200%
地西泮	70%

确认方法: LC-MS/MS

LOQ 10 ng/mL

## LC 参数

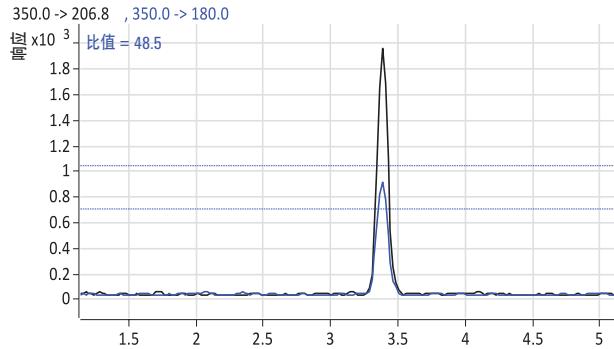
色谱柱	Zorbax Eclipse Plus C18 快速分离高通量色谱柱 4.6 x 50 mm, 1.8 μm
流速	0.5 mL/min
柱温	35 °C
流动相	A = 20 mM 甲酸铵水溶液 pH 8.6, B = 乙腈
梯度程序	0 min 50% B 等度洗脱 5.5 min 停止。后运行关闭
进样量	5 μL

## MS 参数

雾化器压力	50 psi
干燥气流量	10 L/min
干燥气温度	300 °C
毛细管电压	3500 V

## LC-MS/MS 离子对:

化合物	母离子	子离子	碎裂电压(V)	碰撞能量 (V)
奥沙西泮-d <sub>5</sub>	292	246	120	20
<b>芬纳西泮</b>	<b>350</b>	<b>206.8</b>	<b>140</b>	<b>45</b>
芬纳西泮	350	180	140	50



\* 单一同位素分子量

LOQ 水平的 MRM 谱图, ± 20% 离子比限值

# 苯巴比妥

化学名称:	5-乙基-5-苯基-2,4,6(1H,3H,5H)-嘧啶三酮
分子式:	C <sub>12</sub> H <sub>12</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>
分子量*:	232.1

筛查方法: Immunoassay ELISA 巴比妥类试剂盒目录 #210

临界浓度: 50 ng/mL 目标化合物: 司可巴比妥

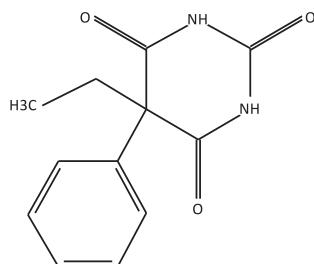
显著交叉反应:

司可巴比妥	100%
布他比妥	83%
阿普比妥	89%
戊巴比妥	83%
苯巴比妥	50%
仲丁巴比妥	33%

确认方法: LC-MS/MS

LOQ 25 ng/mL

分子结构:



## LC 参数

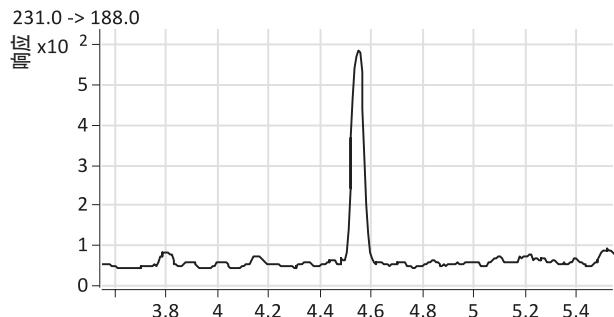
色谱柱	Zorbax Eclipse Plus C18 快速分离高通量色谱柱 4.6 x 50 mm, 1.8 μm
流速	0.8 mL/min
柱温	35 °C
流动相	A = 0.2% 醋酸水溶液, B = 甲醇
梯度程序	0 min 5% B 0.2 min 5% B 5 min 95% B 5.2 min 95% B 6 min 5% 8.2 min 停止。后运行关闭
进样量	5 μL

## MS 参数 – 阴离子模式

雾化器压力	35 psi
干燥气流量	10 L/min
干燥气温度	300 °C
毛细管电压	4500 V

## LC-MS/MS 离子对:

化合物	母离子	子离子	碎裂电压(V)	碰撞能量 (V)
戊巴比妥-d <sub>5</sub>	230	42	120	15
<b>苯巴比妥</b>	<b>231</b>	<b>188</b>	<b>80</b>	<b>3</b>



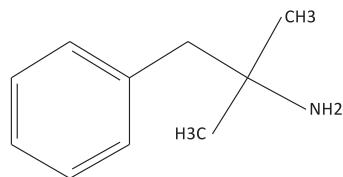
\* 单一同位素分子量

LOQ 水平的 MRM 谱图, ± 20% 离子比限值

# 芬特明

化学名称:	苯基-叔-丁基胺; α,α-二甲基苯乙胺
分子式:	C <sub>10</sub> H <sub>15</sub> N
分子量*:	149.1

## 分子结构:



筛查方法: Immunalysis ELISA 目录 #2090F

临界浓度: 50 ng/mL    目标化合物: d-安非他明

### 显著交叉反应:

d-安非他明	100%
l-安非他明	9.7%
dl-MDA	178%
芬特明	89%

确认方法: LC-MS/MS

LOQ 25 ng/mL

### LC 参数 (方法还适用保留时间更长的相关化合物)

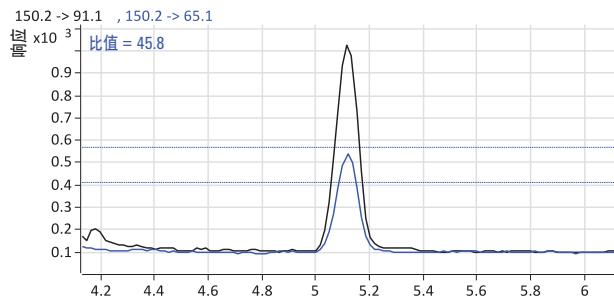
色谱柱	Zorbax Eclipse Plus C18 快速分离高通量色谱柱 4.6 x 50 mm, 1.8 μm
流速	0.7 mL/min
柱温	40 °C
流动相	A = 20 mM 甲酸铵水溶液 pH 6.4, B = 甲醇 0 min 15% B
梯度程序	8 min 50% B 9 min 15% B 12 min 停止。后运行 1 min
进样量	5 μL

### MS 参数

雾化器压力	40 psi
干燥气流量	6 L/min
干燥气温度	350 °C
毛细管电压	4000 V

### LC-MS/MS 离子对:

化合物	母离子	子离子	碎裂电压(V)	碰撞能量(V)
甲基安非他明-d <sub>5</sub>	155.2	92.1	80	25
<b>芬特明</b>	<b>150.2</b>	<b>91.1</b>	<b>120</b>	<b>25</b>
芬特明	150.2	65.1	120	50



\* 单一同位素分子量

LOQ 水平的 MRM 谱图, ± 20% 离子比限值

# 丙氧芬

化学名称:	右旋丙氧吩; ( $\alpha$ S)- $\alpha$ -[(1R)-2-(二甲基氨基)-1-甲基乙基]- $\alpha$ -苯基苯乙醇丙酸酯
分子式:	C <sub>22</sub> H <sub>29</sub> NO <sub>2</sub>
分子量*:	339.2

筛查方法: Immunalysis ELISA 目录 #237

临界浓度: 20 ng/mL    目标化合物: 丙氧芬

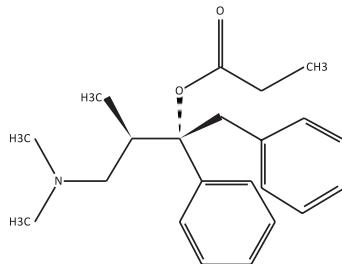
显著交叉反应:

丙氧芬	100%
去甲基丙氧芬	10%

确认方法: LC-MS/MS

LOQ 2 ng/mL

分子结构:



LC 参数

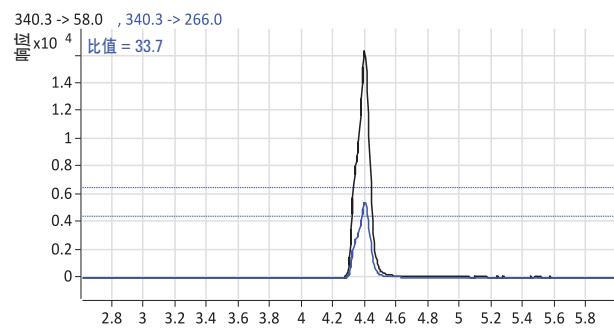
色谱柱	Zorbax Eclipse Plus C18 快速分离高通量色谱柱 4.6 x 50 mm, 1.8 $\mu$ m
流速	0.7 mL/min
柱温	40 °C
流动相	A = 0.2% 醋酸, B = 甲醇 0 min 15% B 4 min 100% B 5 min 15% B 6 min 停止。后运行 3 min
进样量	5 $\mu$ L

MS 参数

雾化器压力	50 psi
干燥气流量	11 L/min
干燥气温度	350 °C
毛细管电压	4000 V

LC-MS/MS 离子对:

化合物	母离子	子离子	碎裂电压(V)	碰撞能量(V)
丙氧芬-d <sub>5</sub>	345.3	271	80	0
丙氧芬	340.3	266	80	0
丙氧芬	<b>340.3</b>	<b>58</b>	<b>80</b>	<b>20</b>



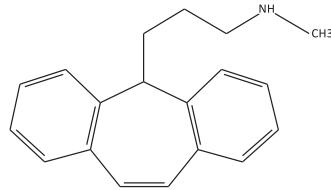
\* 单一同位素分子量

LOQ 水平的 MRM 谱图, ± 20% 离子比限值

# 普罗替林

化学名称:	N-甲基-5H-二苯并[a,d]环庚烯-5-丙胺
分子式:	C <sub>19</sub> H <sub>21</sub> N=263.4
分子量*:	263.2

## 分子结构:



筛查方法: Immunalysis ELISA 目录 #222

临界浓度: 25 ng/mL    目标化合物: 去甲替林

显著交叉反应:

去甲替林	100%
普罗替林	25%
地昔帕明	200%
丙咪嗪	200%
三甲丙咪嗪	50%

确认方法: LC-MS/MS

LOQ 10 ng/mL

## LC 参数

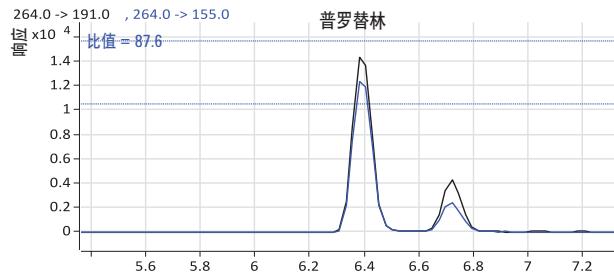
色谱柱	Zorbax Eclipse Plus C18 快速分离高通量色谱柱 4.6 x 50 mm, 1.8 μm
流速	1 mL/min
柱温	45 °C
流动相	A = 0.2% 醋酸水溶液, B = 甲醇
梯度程序	0 min 30% B 0.1 min 30% B 8 min 70% B 9 min 30% B 11 min 停止。后运行 2 min
进样量	5 μL

## MS 参数

雾化器压力	50 psi
干燥气流量	11 L/min
干燥气温度	350 °C
毛细管电压	4000 V

## LC-MS/MS 离子对:

化合物	母离子	子离子	碎裂电压(V)	碰撞能量 (V)
去甲替林-d <sub>5</sub>	267	233	100	10
<b>普罗替林</b>	<b>264</b>	<b>191</b>	<b>110</b>	<b>30</b>
普罗替林	264	155	110	20

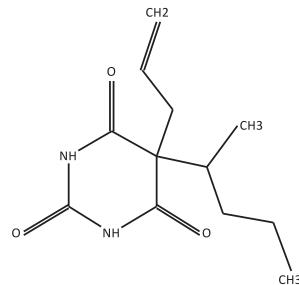


\* 单一同位素分子量

LOQ 水平的 MRM 谱图, ± 20% 离子比限值

# 司可巴比妥

## 分子结构:



化学名称:	5-(1-甲基丁基)-5-(2-丙烯基)-2,4,6(1H,3H,5H)-嘧啶三酮
分子式:	C <sub>12</sub> H <sub>18</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>
分子量*:	238.1

筛查方法: Immunalysis ELISA 巴比妥类试剂盒目录 #210

临界浓度: 50 ng/mL    目标化合物: 司可巴比妥

### 显著交叉反应:

司可巴比妥	100%
布他比妥	83%
阿普比妥	89%
戊巴比妥	83%
苯巴比妥	50%
仲丁巴比妥	33%

确认方法: LC-MS/MS

LOQ 25 ng/mL

### LC 参数

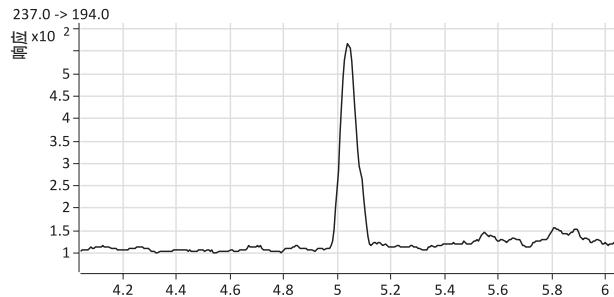
色谱柱	Zorbax Eclipse Plus C18 快速分离高通量色谱柱 4.6 x 50 mm, 1.8 μm
流速	0.8 mL/min
柱温	35 °C
流动相	A = 0.2% 醋酸水溶液, B = 甲醇
	0 min 5% B
	0.2 min 5% B
梯度程序	5 min 95% B
	5.2 min 95% B
	6 min 5%
	8.2 min 停止。后运行关闭
进样量	5 μL

### MS 参数 – 阴离子模式

雾化器压力	35 psi
干燥气流量	10 L/min
干燥气温度	300 °C
毛细管电压	4500 V

### LC-MS/MS 离子对:

化合物	母离子	子离子	碎裂电压(V)	碰撞能量 (V)
戊巴比妥-d <sub>5</sub>	230	42	120	15
<b>司可巴比妥</b>	<b>237</b>	<b>194</b>	<b>110</b>	<b>6</b>

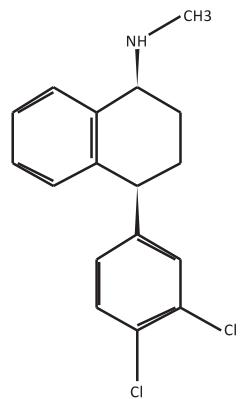


\* 单一同位素分子量

LOQ 水平的 MRM 谱图, ± 20% 离子比限值

# 舍曲林

分子结构:



化学名称:	(IUPAC) (1S,4S)-4-(3,4-二氯苯基)-1,2,3,4-四氢-N-甲基-1-萘胺
分子式:	C <sub>17</sub> H <sub>17</sub> Cl <sub>2</sub> N
分子量*:	305.1

筛查方法: Immunalysis ELISA 目录 #235

临界浓度: 25 ng/mL    目标化合物: 舍曲林

显著交叉反应:

舍曲林	100%
去甲基舍曲林	5%

确认方法: LC-MS/MS

LOQ 10 ng/mL

## LC 参数

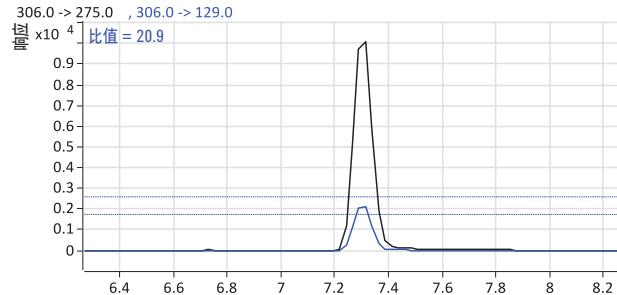
色谱柱	Zorbax Eclipse Plus C18 快速分离高通量色谱柱 4.6 x 50 mm, 1.8 μm
流速	1 mL/min
柱温	45 °C
流动相	A = 0.2% 醋酸水溶液, B = 甲醇
梯度程序	0 min 30% B 0.1 min 30% B 8 min 70% B 9 min 30% B 11 min 停止。后运行 2 min
进样量	5 μL

## MS 参数

雾化器压力	50 psi
干燥气流量	11 L/min
干燥气温度	350 °C
毛细管电压	4000 V

## LC-MS/MS 离子对:

化合物	母离子	子离子	碎裂电压(V)	碰撞能量 (V)
氟西汀-d <sub>6</sub>	316	154	100	2
<b>舍曲林</b>	<b>306</b>	<b>275</b>	<b>35</b>	<b>10</b>
舍曲林	306	129	35	20



\* 单一同位素分子量

LOQ 水平的 MRM 谱图, ± 20% 离子比限值

# 他喷他多

化学名称:	3-[(1 <i>R</i> , 2 <i>R</i> )-3-(二甲基氨基)-1-乙基-2-甲基丙基]苯酚盐酸盐
分子式:	C <sub>14</sub> H <sub>23</sub> NO
分子量*:	221.3

筛查方法: Immunalysis ELISA 正在开发中

临界浓度: N/A    目标化合物: N/A

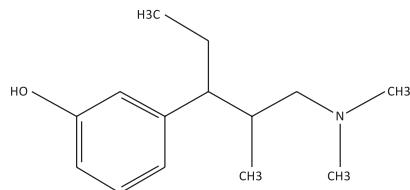
显著交叉反应:

N/A	N/A
-----	-----

确认方法: LC-MS/MS

LOQ 10 ng/mL

分子结构:



## LC 参数

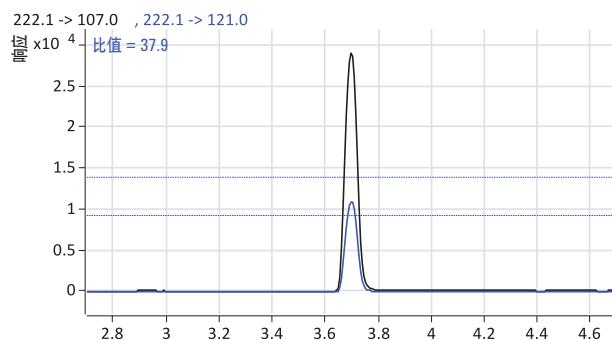
色谱柱	Zorbax Eclipse Plus C18 快速分离高通量色谱柱 4.6 x 50 mm, 1.8 μm
流速	0.7 mL/min
柱温	40 °C
流动相	A = 20 mM 甲酸铵 pH 6.4, B = 甲醇 0 min 15% B 4 min 100% B 5 min 15% B 8 min 停止。后运行关闭
梯度程序	
进样量	2 μL

## MS 参数

雾化器压力	50 psi
干燥气流量	10 L/min
干燥气温度	350 °C
毛细管电压	4000 V

## LC-MS/MS 离子对:

化合物	母离子	子离子	碎裂电压(V)	碰撞能量 (V)
甲基安非他明-d <sub>5</sub>	155.2	92	80	25
他喷他多	222.1	121	120	15
<b>他喷他多</b>	<b>222.1</b>	<b>107</b>	<b>120</b>	<b>20</b>



\* 单一同位素分子量

LOQ 水平的 MRM 谱图, ± 20% 离子比限值

# 替马西泮

化学名称:	7-氯-3-二氢-3-羟基-1-甲基-5-苯基-2H-1,4-苯并二氮杂卓-2-酮
分子式:	C <sub>16</sub> H <sub>13</sub> ClN <sub>2</sub> O <sub>2</sub>
分子量*:	300.1

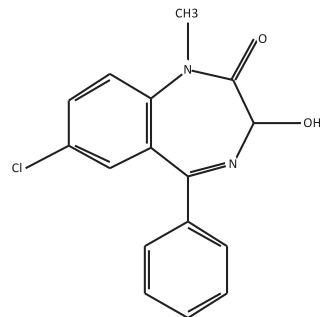
## 筛查方法: Immunalysis ELISA 目录 #214

临界浓度: 5 ng/mL    目标化合物: 奥沙西泮

### 显著交叉反应:

奥沙西泮	100%
替马西泮	200%
地西泮	70%
去甲西泮	50%

## 分子结构:



## 确认方法: LC-MS/MS

LOQ 1 ng/mL

### LC 参数

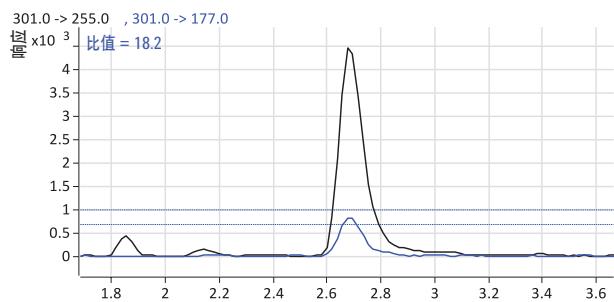
色谱柱	Zorbax Eclipse Plus C18 快速分离高通量色谱柱 4.6 x 50 mm, 1.8 μm
流速	0.5 mL/min
柱温	35 °C
流动相	A = 20 mM 甲酸铵水溶液 pH 8.6, B = 乙腈
梯度程序	0 min 50% B 等度洗脱 5.5 min 停止。后运行关闭
进样量	5 μL

### MS 参数

雾化器压力	50 psi
干燥气流量	10 L/min
干燥气温度	300 °C
毛细管电压	3500 V

### LC-MS/MS 离子对:

化合物	母离子	子离子	碎裂电压(V)	碰撞能量 (V)
替马西泮-d <sub>5</sub>	306	260	120	25
<b>替马西泮</b>	<b>301</b>	<b>255</b>	<b>120</b>	<b>35</b>
替马西泮	301	177	120	40



\* 单一同位素分子量

LOQ 水平的 MRM 谱图, ± 20% 离子比限值

# THC

化学名称:	$\Delta^9$ -THC; (-)-反式- $\Delta^9$ -四氢大麻酚
分子式:	C <sub>21</sub> H <sub>30</sub> O <sub>2</sub>
分子量*:	314.2

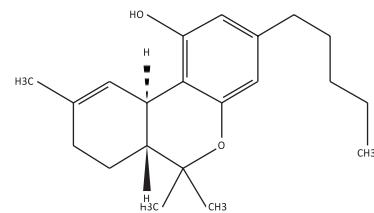
筛查方法: Immunalysis ELISA 目录 #224

临界浓度: 4 ng/mL    目标化合物:  $\Delta^9$ -THC

显著交叉反应:

$\Delta^9$ -THC	100%
$\Delta^8$ -THC	66.7%
大麻酚	4%
大麻二酚	50%

分子结构:



确认方法: LC-MS/MS

LOQ 1 ng/mL

## LC 参数

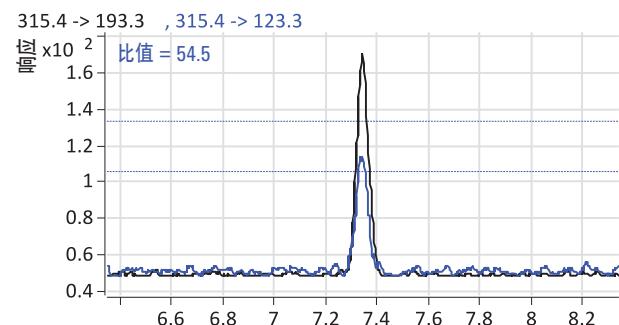
色谱柱	Zorbax Extend-C18 快速分离高通量色谱柱 2.1 x 50 mm, 1.8 $\mu$ m
流速	0.3 mL/min
柱温	40 °C
流动相	A = 20 mM 甲酸铵 pH 8.6, B = 甲醇 0 min 70% B 5 min 90% B 8 min 100% B 8.5 min 停止。后运行 6 min
进样量	5 $\mu$ L

## MS 参数

雾化器压力	35 psi
干燥气流量	10 L/min
干燥气温度	350°C 毛
细管电压	3500 V

## LC-MS/MS 离子对:

化合物	母离子	子离子	碎裂电压(V)	碰撞能量 (V)
THC-d <sub>3</sub>	318.3	196.3	125	20
<b>THC</b>	<b>315.4</b>	<b>193.3</b>	<b>150</b>	<b>20</b>
THC	315.4	123.3	150	30



\* 单一同位素分子量

LOQ 水平的 MRM 谱图, ± 20% 离子比限值

# 曲马多

化学名称:	(IUPAC) (1R,2R)-2-(二甲基氨基甲基)-1-(3-甲氧基苯基)环己-1-醇
分子式:	C <sub>16</sub> H <sub>25</sub> NO <sub>2</sub>
分子量*:	263.2

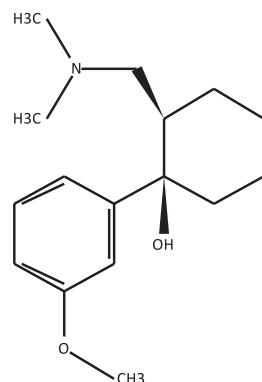
## 筛查方法: Immunalysis ELISA 目录 #225

临界浓度: 50 ng/mL    目标化合物: 曲马多

### 显著交叉反应:

曲马多	100%
O-去甲基-曲马多	<1%
N-去甲基-曲马多	30%
文拉法辛	<0.05%
O-去甲基-文拉法辛	未检出
N-去甲基-文拉法辛	未检出

## 分子结构:



## 确认方法: LC-MS/MS

LOQ 20 ng/mL

### LC 参数

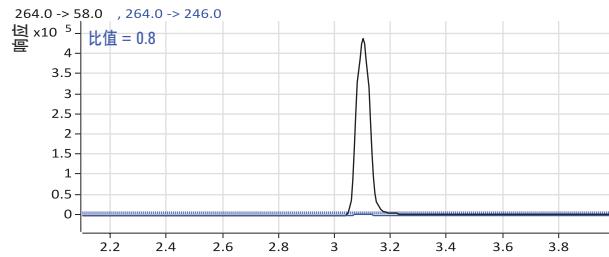
色谱柱	Zorbax Eclipse Plus C18 快速分离高通量色谱柱 4.6 x 50 mm, 1.8 μm
流速	0.7 mL/min
柱温	40 °C
流动相	A = 0.2% 醋酸水溶液, B = 甲醇 0 min 15% B 4 min 100% B 5 min 15% B 4 min 停止。后运行 2.5 min
梯度程序	
进样量	5 μL

### MS 参数

雾化器压力	50 psi
干燥气流量	10 L/min
干燥气温度	350 °C
毛细管电压	4000 V

### LC-MS/MS 离子对:

化合物	母离子	子离子	碎裂电压(V)	碰撞能量 (V)
曲马多 C13-d <sub>3</sub>	268	58	100	15
曲马多	264	246	100	5
<b>曲马多</b>	<b>264</b>	<b>58</b>	<b>100</b>	<b>15</b>



\* 单一同位素分子量

LOQ 水平的 MRM 谱图, ± 20% 离子比限值

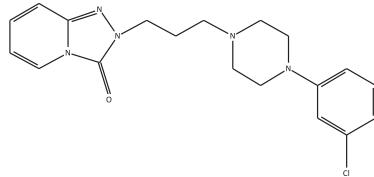
# 曲唑酮

化学名称: 2-[3-[4-(3-氯苯基)哌嗪-1-基]丙基]-[1,2,4]三唑并[4,3-a]吡啶-3-酮

分子式: C<sub>19</sub>H<sub>22</sub>ClN<sub>5</sub>O

分子量\*: 371.2

## 分子结构:



筛查方法: Immunalysis ELISA 目录 #222

临界浓度: N/A    目标化合物: 去甲替林

显著交叉反应:

无数据

确认方法: LC-MS/MS

LOQ 10 ng/mL

## LC 参数

色谱柱 Zorbax Eclipse Plus C18 快速分离高通量色谱柱  
4.6 x 50 mm, 1.8 μm

流速 1 mL/min

柱温 45 °C

流动相 A = 0.2% 醋酸水溶液, B = 甲醇

0 min 30% B

0.1 min 30% B

梯度程序 8 min 70% B

9 min 30% B

11 min 停止。后运行 2 min

进样量 5 μL

## MS 参数

雾化器压力 50 psi

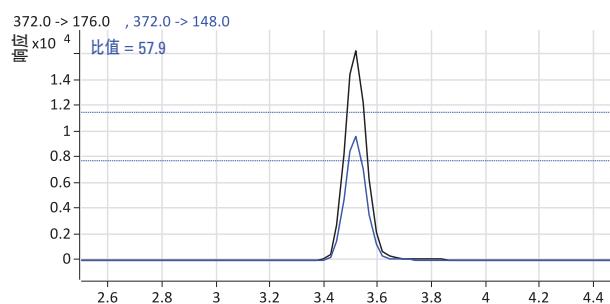
干燥气流量 11 L/min

干燥气温度 350 °C

毛细管电压 4000 V

## LC-MS/MS 离子对:

化合物	母离子	子离子	碎裂电压(V)	碰撞能量(V)
帕罗西汀-d <sub>6</sub>	336	76	120	20
<b>曲唑酮</b>	<b>372</b>	<b>176</b>	<b>100</b>	<b>25</b>
曲唑酮	372	148	100	30



\* 单一同位素分子量

LOQ 水平的 MRM 谱图, ± 20% 离子比限值

# 三唑仑

化学名称:	三唑氯安定; (IUPAC) 8-氯-6-(2-氯苯基)-1-甲基-4H-1,2,4-三唑并[4,3-a]-1,4-苯并二氮杂卓
分子式:	C <sub>17</sub> H <sub>12</sub> Cl <sub>2</sub> N <sub>4</sub>
分子量*:	342.0

## 筛查方法: Immunalysis ELISA 目录 #214

临界浓度: 5 ng/mL    目标化合物: 奥沙西泮

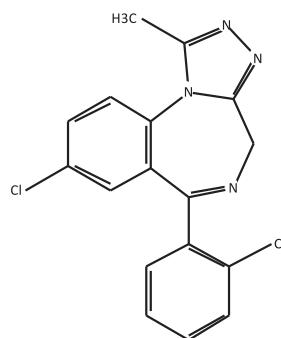
### 显著交叉反应:

奥沙西泮	100%
三唑仑	75%
阿普唑仑	180%
替马西泮	200%
地西泮	70%

## 确认方法: LC-MS/MS

LOQ 1 ng/mL

### 分子结构:



### LC 参数

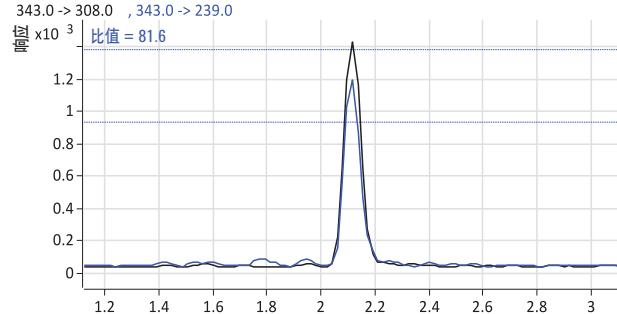
色谱柱	Zorbax Eclipse Plus C18 快速分离高通量色谱柱 4.6 x 50 mm, 1.8 μm
流速	0.5 mL/min
柱温	35 °C
流动相	A = 20 mM 甲酸铵水溶液 pH 8.6, B = 乙腈
梯度程序	0 min 50% B 等度洗脱 5.5 min 停止。后运行关闭
进样量	5 μL

### MS 参数

雾化器压力	50 psi
干燥气流量	10 L/min
干燥气温度	300 °C
毛细管电压	3500 V

### LC-MS/MS 离子对:

化合物	母离子	子离子	碎裂电压(V)	碰撞能量(V)
阿普唑仑-d <sub>5</sub>	314	286	160	25
<b>三唑仑</b>	<b>343</b>	<b>308</b>	<b>120</b>	<b>35</b>
三唑仑	343	239	120	35



\* 单一同位素分子量

LOQ 水平的 MRM 谱图, ± 20% 离子比限值

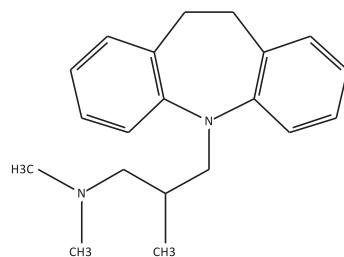
# 三甲丙咪嗪

化学名称：三甲丙咪嗪；(IUPAC) 10,11-二氢-N,N, $\beta$ -三甲基-5H-二苯并[b,f]氮杂卓-5-丙胺

分子式： $C_{20}H_{26}N_2$

分子量\*：294.2

## 分子结构：



## 筛查方法：Immunalysis ELISA 目录 #222

临界浓度：25 ng/mL    目标化合物：去甲替林

### 显著交叉反应：

去甲替林	100%
阿米替林	200%
地昔帕明	200%
丙咪嗪	200%
三甲丙咪嗪	50%

## 确认方法：LC-MS/MS

LOQ 10 ng/mL

## LC 参数

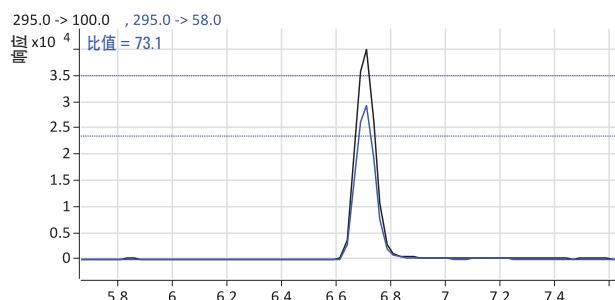
色谱柱	Zorbax Eclipse Plus C18 快速分离高通量色谱柱 4.6 x 50 mm, 1.8 $\mu$ m
流速	1 mL/min
柱温	45 °C
流动相	A = 0.2% 醋酸水溶液, B = 甲醇
	0 min 30% B
	0.1 min 30% B
梯度程序	8 min 70% B
	9 min 30% B
	11 min 停止。后运行 2 min
进样量	5 $\mu$ L

## MS 参数

雾化器压力	50 psi
干燥气流量	11 L/min
干燥气温度	350 °C
毛细管电压	4000 V

## LC-MS/MS 离子对：

化合物	母离子	子离子	碎裂电压(V)	碰撞能量 (V)
帕罗西汀-d <sub>6</sub>	336	76	120	20
<b>三甲丙咪嗪</b>	<b>295</b>	<b>100</b>	<b>110</b>	<b>10</b>
三甲丙咪嗪	295	58	110	30



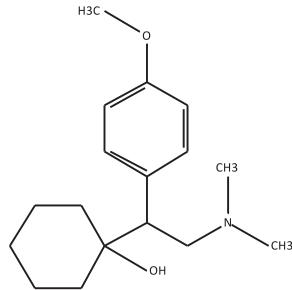
\* 单一同位素分子量

LOQ 水平的 MRM 谱图,  $\pm 20\%$  离子比限值

# 文拉法辛

分子结构:

化学名称:	(IUPAC) 1-[2-(二甲氨基)-1-(4-甲氧基苯基)乙基]环己烷-1-醇
分子式:	C <sub>17</sub> H <sub>27</sub> NO <sub>2</sub>
分子量*:	277.2



筛查方法: 无

确认方法: LC-MS/MS

LOQ 10 ng/mL

## LC 参数

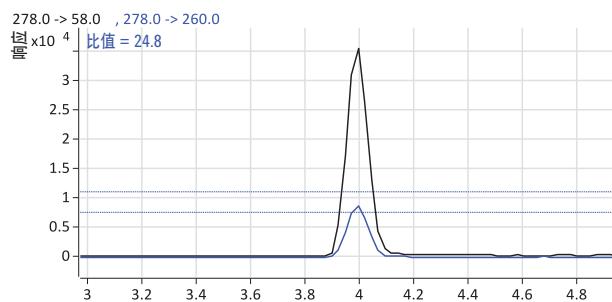
色谱柱	Zorbax Eclipse Plus C18 快速分离高通量色谱柱 4.6 x 50 mm, 1.8 μm
流速	1 mL/min
柱温	45 °C
流动相	A = 0.2% 醋酸水溶液, B = 甲醇
梯度程序	0 min 30% B 0.1 min 30% B 8 min 70% B 9 min 30% B 11 min 停止。后运行 2 min
进样量	5 μL

## MS 参数

雾化器压力	50 psi
干燥气流量	11 L/min
干燥气温度	350 °C
毛细管电压	4000 V

## LC-MS/MS 离子对:

化合物	母离子	子离子	碎裂电压(V)	碰撞能量(V)
帕罗西汀-d <sub>6</sub>	336	76	120	20
文拉法辛	278	260	100	5
<b>文拉法辛 278</b>	<b>58</b>	<b>100</b>	<b>15</b>	



\* 单一同位素分子量

LOQ 水平的 MRM 谱图, ± 20% 离子比限值

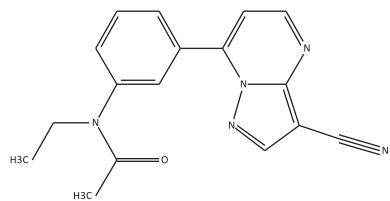
# 扎来普隆

化学名称: N-[3-(3-氰基吡唑并[1,5-a]嘧啶-7-基苯基]-N-乙基乙酰胺

分子式: C<sub>17</sub>H<sub>15</sub>N<sub>5</sub>O

分子量\*: 305.1

## 分子结构:



筛查方法: Immunalysis ELISA 正在开发中

临界浓度: N/A 目标化合物: N/A

显著交叉反应:

无	N/A
---	-----

确认方法: LC-MS/MS

LOQ 10 ng/mL

## LC 参数

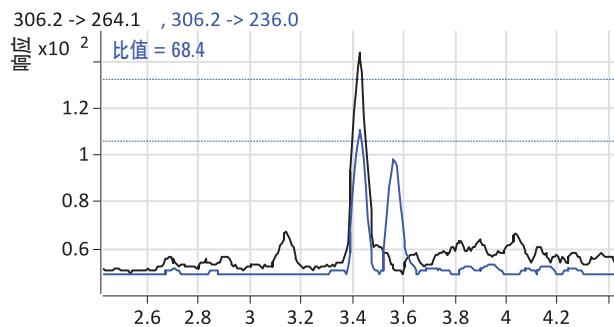
色谱柱	Zorbax Eclipse Plus C18 快速分离高通量色谱柱 4.6 x 50 mm, 1.8 μm
流速	0.7 mL/min
柱温	40 °C
流动相	A = 20 mM 甲酸铵水溶液 pH 6.4, B = 乙腈 0 min 15% B 4 min 100% B 5 min 15% B 5.5 min 停止。后运行 2 min
梯度程序	
进样量	5 μL

## MS 参数

雾化器压力	50 psi
干燥气流量	6 L/min
干燥气温度	350 °C
毛细管电压	4000 V

## LC-MS/MS 离子对:

化合物	母离子	子离子	碎裂电压(V)	碰撞能量(V)
唑吡坦-d <sub>6</sub>	313.9	235.1	100	30
<b>扎来普隆</b>	<b>306.2</b>	<b>264.1</b>	<b>80</b>	<b>20</b>
扎来普隆	306.2	236	80	30



\*单一同位素分子量

LOQ 水平的 MRML 水平的 DMF 离子比限值 20% 离子比限值

# 唑吡坦

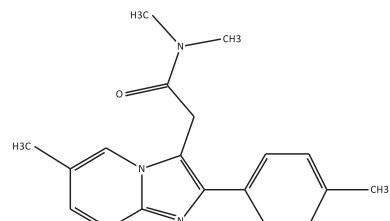
化学名称:	N,N-6-三甲基-2-(4-甲基苯基)咪唑并[1,2-a]吡啶 3-乙酰胺
分子式:	C <sub>19</sub> H <sub>21</sub> N <sub>3</sub> O
分子量*:	307.2

筛查方法: Immunalysis ELISA 目录 #233

临界浓度: 5 ng/mL    目标化合物: 唑吡坦  
显著交叉反应:

唑吡坦	100%
-----	------

## 分子结构:



确认方法: LC-MS/MS

LOQ 1 ng/mL

## LC 参数

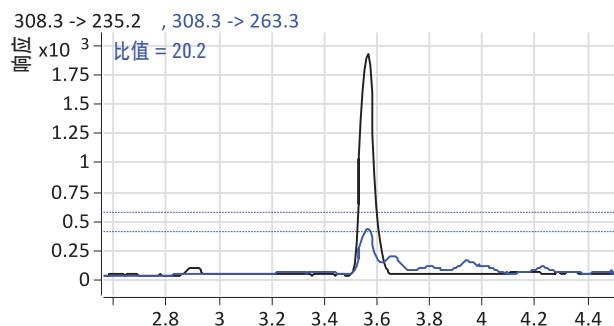
色谱柱	Zorbax Eclipse Plus C18 快速分离高通量色谱柱 4.6 x 50 mm, 1.8 μm
流速	0.7 mL/min
柱温	40 °C
流动相	A = 20 mM 甲酸铵水溶液 pH 6.4, B = 乙腈
	0 min 15% B
梯度程序	4 min 100% B
	5 min 15% B
	5.5 min 停止。后运行 2 min
进样量	5 μL

## MS 参数

雾化器压力	50 psi
干燥气流量	6 L/min
干燥气温度	350 °C
毛细管电压	4000 V

## LC-MS/MS 离子对:

化合物	母离子	子离子	碎裂电压(V)	碰撞能量 (V)
唑吡坦-d <sub>6</sub>	313.9	235.1	100	30
唑吡坦	308.3	263.3	100	20
<b>唑吡坦</b>	<b>308.3</b>	<b>235.2</b>	<b>100</b>	<b>20</b>



\* 单一同位素分子量

LOQ 水平的 MRM 谱图, ± 20% 离子比限值

# 佐匹克隆

化学名称:	4-甲基-1-哌嗪-羧酸-6-(5-氯-2-吡啶基)-6,7-二氢-7-氧代-5H-吡咯并[3,4-b]吡嗪-5-基酯
分子式:	C <sub>17</sub> H <sub>17</sub> ClN <sub>6</sub> O <sub>3</sub>
分子量*:	388.1

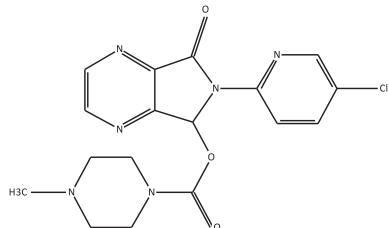
筛查方法: Immunalysis ELISA 正在开发中

临界浓度: N/A      目标化合物: N/A

显著交叉反应:

无	N/A
---	-----

## 分子结构:



确认方法: LC-MS/MS

LOQ 1 ng/mL

## LC 参数

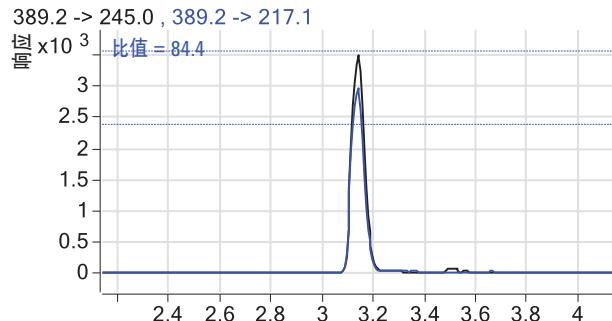
色谱柱	Zorbax Eclipse Plus C18 快速分离高通量色谱柱 4.6 x 50 mm, 1.8 μm
流速	0.7 mL/min
柱温	40 °C
流动相	A = 20 mM 甲酸铵水溶液 pH 6.4, B = 乙腈 0 min 15% B 4 min 100% B 5 min 15% B 5.5 min 停止。后运行 2 min
梯度程序	
进样量	5 μL

## MS 参数

雾化器压力	50 psi
干燥气流量	6 L/min
干燥气温度	350 °C
毛细管电压	4000 V

## LC-MS/MS 离子对:

化合物	母离子	子离子	碎裂电压(V)	碰撞能量 (V)
唑吡坦-d <sub>6</sub>	313.9	235.1	100	30
<b>佐匹克隆</b>	<b>389.2</b>	<b>245.1</b>	<b>100</b>	<b>10</b>
佐匹克隆	389.2	217.1	100	30



\* 单一同位素分子量

LOQ 水平的 MRM 谱图, ± 20% 离子比限值

本页留为空白页

本页留为空白页

本页留为空白页

## **更多信息**

了解更多信息：

**[www.agilent.com/chem/cn](http://www.agilent.com/chem/cn)**

在线购买：

**[www.agilent.com/chem/store](http://www.agilent.com/chem/store)**

查找当地的安捷伦客户中心：

**[www.agilent.com/chem/contactus:cn](http://www.agilent.com/chem/contactus:cn)**

安捷伦客户服务：

**免费专线： 800-820-3278**

**400-820-3278 (手机用户)**

联系我们：

**[customer-cn@agilent.com](mailto:customer-cn@agilent.com)**

在线询价：

**[www.agilent.com/chem/quote:cn](http://www.agilent.com/chem/quote:cn)**

本资料中的信息如有变更，恕不另行通知。

© 安捷伦科技（中国）有限公司，2013

2013年1月15日，中国印刷

5991-1820CHCN



**Agilent Technologies**