

中藥及食品中摻加西藥之檢驗方法
Method of Test for Adulterants in Chinese Medicine and Foods

1. 適用範圍：

- 1.1. 中藥材所製備之顆粒劑、膠囊劑、散劑、丸劑、錠劑、液劑、膏劑及外用貼膏劑等傳統或濃縮製劑，及生藥藥材、藥粉等。
- 1.2. 食品包括膠囊、錠狀、粉狀等製品及其原料。

2. 檢驗方法：檢體經萃取後，以薄層層析法(thin layer chromatography, TLC)及分光光度計(spectrophotometer)分析之方法。

2.1. 裝置：

- 2.1.1 分光光度計。
- 2.1.2 紫外燈：具 254 nm 及 366 nm 波長。
- 2.1.3 超音波振盪器(Ultrasonicator)。
- 2.1.4 離心機(Centrifuge)。
- 2.1.5 減壓濃縮裝置(Rotary evaporator)。
- 2.1.6 電熱板(Hot plate)。
- 2.1.7 恆溫槽。

2.2. 試藥：乙醇(95%)、正丁醇、醋酸、磷酸、硫酸、鹽酸、乙酸乙酯、乙醚、氯仿、甲醇、氨水、丙酮、次硝酸鉍(bismuth subnitrate)、四吡唑啉藍(tetrazolium blue)、氫氧化鉀、碘化鉀(potassium iodide)、過錳酸鉀(potassium permanganate)、二氫節三酮(ninhydrin)、對茴香醛 (*p*-anisaldehyde)、2,4-二硝基苯肼(2,4-dinitrophenylhydrazine)、對二甲胺基桂皮醛(*p*-dimethylaminocinnamaldehyde)、對二甲胺基苯甲醛(*p*-dimethylaminobenzaldehyde)、氯化鐵(ferric chloride)、氫氯鉑酸(hydrochloroplatinic acid)、硝酸亞汞(mercurous nitrate)、香莢蘭醛(vanillin)及碘(iodine)均採用試藥特級。西藥對照用標準品acetaminophen 等 214 項(品項見表一)。

2.3. 器具及材料：

- 2.3.1 減壓濃縮瓶：100 mL。
- 2.3.2 燒杯：50 mL。
- 2.3.3 噴霧瓶：50 mL。
- 2.3.4 展開槽：12 cm × 7 cm × 13 cm，玻璃材質。
- 2.3.5 離心管：15 mL 及 50 mL。

2.3.6. 薄層層析板：silica gel 60 F₂₅₄，20 cm × 20 cm。

2.3.7. 濾膜：孔徑 0.45μm，Nylon 材質。

2.3.8. 毛細管：5 μL，具刻度。

2.4. 展開液之調製：

2.4.1. 正丁醇：水：醋酸(7:2:1, v/v/v)溶液

取正丁醇、水及醋酸以 7:2:1 (v/v/v) 比例混勻。

2.4.2. 乙酸乙酯：乙醚(4:1, v/v)溶液

取乙酸乙酯及乙醚以 4:1 (v/v) 比例混勻。

2.4.3. 氯仿：乙醇(9:1, v/v)溶液

取氯仿及乙醇以 9:1 (v/v) 比例混勻。

2.4.4. 氯仿：乙酸乙酯(1:1, v/v)溶液

取氯仿及乙酸乙酯以 1:1 (v/v) 比例混勻。

2.4.5. 乙酸乙酯：甲醇：氨水(8:1:1, v/v/v)溶液

取乙酸乙酯、甲醇及氨水以 8:1:1 (v/v/v) 比例混勻。

2.5. 試劑之調製：

2.5.1. 6N 氫氧化鉀溶液

取氫氧化鉀 33.7 g，加水溶解使成 100 mL。

2.5.2. 6N 鹽酸溶液

取鹽酸 49.4 mL，加水使成 100 mL。

2.6. 呈色劑之調製：

2.6.1. Dragendorff's 試液：

2.6.1.1. A 液：取次硝酸鉍 2 g，以醋酸 25 mL 及水 100 mL 溶解，儲存於冰箱中備用。

2.6.1.2. B 液：取碘化鉀 40 g，以水 100 mL 溶解，儲存於冰箱中備用。

2.6.1.3. 使用時取 A 液與 B 液等量混合。

2.6.2. 50%硫酸乙醇試液：

取乙醇及硫酸等量混合。

2.6.3. 碘蒸氣：

取適量碘置於密閉容器中。

2.6.4. 四吡啶藍試液：

取四吡啶藍 0.5 g，以甲醇 100 mL 溶解，儲存於冰箱中備用。使用時以 6N 氫氧化鉀溶液等量混合。

2.6.5. 對二甲胺基苯甲醛試液：

取對二甲胺基苯甲醛 2 g，以水 2 mL 及硫酸 18 mL 溶解後，冷卻。

2.6.6. 二氫節三酮試液：

取二氫節三酮 0.1 g，以丙酮 20 mL 溶解。

2.6.7. 對茴香醛試液：

取對茴香醛 0.5 mL，以醋酸 0.1 mL、硫酸 0.5 mL 及乙醇 9 mL 混合。

2.6.8. 2,4-二硝基苯肼試液：

取 2,4-二硝基苯肼 0.3 g，以硫酸和水等量混合之冷液 20 mL 溶解。

2.6.9. 對二甲胺基桂皮醛試液：

取對二甲胺基桂皮醛 2 g，以 6N 鹽酸溶液 100 mL 及乙醇 100 mL 溶解後備用。使用時以 4 倍量乙醇混合。

2.6.10. 5%氯化鐵試液：

取氯化鐵 1 g，以水 20 mL 溶解。

2.6.11. Iodoplatinate 試液：

取氫氣鉑酸 0.04 g 及碘化鉀 1 g，以水 20 mL 溶解。

2.6.12. Iodoplatinate 酸性試液：

取 Iodoplatinate 試液 20 mL，加鹽酸 0.4 mL 混合。可貯存兩星期。

2.6.13. 1%硝酸亞汞試液：

取硝酸亞汞 0.2 g，以水 20 mL 溶解。

2.6.14. 1%過錳酸鉀試液：

取過錳酸鉀 0.2 g，以水 20 mL 溶解。

2.6.15. 1%香莢蘭醛硫酸試液：

取香莢蘭醛 0.2 g，以硫酸 20 mL 溶解。

2.7. 標準溶液之配製：

取對照用標準品各約 10 mg，精確稱定，以乙醇溶解並定容至 10 mL，供作標準溶液。

2.8. 檢液之調製：

2.8.1. 顆粒劑、散劑、粉狀檢體：

取混合均勻之檢體約 5 g，置於 50 mL 離心管內，加適量乙醇(約檢體重量之 3~4 倍量，視檢體特性調整)，超音波振盪萃取 30 分鐘後，靜置，取上清液，經濾膜過濾，取濾液供作檢液。

2.8.2. 膠囊劑檢體：

取檢體約 5 g，倒出內容物，內容物與膠囊殼共置於 50 mL 離心管內，加適量乙醇(約檢體重量之 3~4 倍量，視檢體特性調整)，超音

波振盪萃取 30 分鐘後，靜置，取上清液，經濾膜過濾，取濾液供作檢液。

2.8.3. 錠劑、丸劑、外用貼膏劑、生藥藥材檢體：

取已磨碎或剪碎之檢體約 5 g，置於 50 mL 離心管內，加適量乙醇(約檢體重量之 3~4 倍量，視檢體特性調整)，超音波振盪萃取 30 分鐘後，靜置，取上清液，經濾膜過濾，取濾液供作檢液。

2.8.4. 液劑檢體：

取檢體 40 mL，置於 100 mL 減壓濃縮瓶中，於 40°C 水浴減壓濃縮至乾，加乙醇 10 mL，超音波振盪溶解後，取上清液，經濾膜過濾，取濾液供作檢液。

2.8.5. 膏劑檢體：

取檢體約 5 g，置於 50 mL 燒杯內，加入乙醇 20 mL，於 40°C 水浴加熱，使其溶解並充分混合。置於 0°C 約 2 小時後取出，取上清液，經濾膜過濾，取濾液供作檢液。

2.9. 鑑別試驗：

2.9.1. 調製 2.4.節展開液 4 種，其中乙酸乙酯：乙醚(4:1, v/v)溶液與氯仿：乙酸乙酯(1:1, v/v)溶液擇一調製，均取適量分別倒入展開槽中，靜置約 5 分鐘，使呈飽和狀態。

2.9.2. 以毛細管分別吸取檢液及標準溶液，點樣在薄層層析板(10 × 10 cm)上，檢液點樣長度約 1-2 cm，標準溶液約 0.5 cm，於層析板分別標示檢液、標準溶液及展開液代號。以波長 254 nm 之紫外燈輔助，觀察點樣之斑點深淺，選擇適當之點樣次數。

2.9.3. 將點注檢液之層析板，放入展開槽中展開。

2.9.4. 以紫外燈於波長 254 nm 或 366 nm 檢視展開後風乾之層析板，用鉛筆將檢液展開後之可疑斑點圈出。

2.9.5. 將圈出之斑點刮下，置於離心管中，加入乙醇 3 mL，以超音波振盪萃取 5 分鐘，經 3000 rpm 離心 10 分鐘後，取上清液，以分光光度計分析。所得紫外光吸收圖譜與西藥對照用標準品圖譜比對。

2.9.6. 圖譜比對結果如疑似為西藥成分，則重複步驟 2.9.1.~2.9.5.節，層析板同時點注檢液及欲比對之西藥標準溶液，並記錄展開條件及 R_f 值(R_f 值=樣品展開起點至終點距離/展開液展開起點至終點距離)。

2.9.7. 依各檢體主治效能類別或可能添加之西藥成分之特異呈色反應，選擇呈色劑(如表二)，進行層析板呈色反應，並記錄顏色變化。

2.10. 結果判定：

檢體可疑斑點萃取液與西藥對照用標準品之紫外光吸收圖譜、 R_f 值及呈色反應均比對相符者，視為同一西藥成分；比對不完全相同者，非此西藥成分。

附註：

1. 薄層層析法適用於紫外燈檢視可見吸收斑點，或以呈色劑呈色可顯色之西藥成分，惟中藥或食品成分複雜易造成干擾，加上各類西藥成分化學特性皆有差異，有影響檢驗結果之物質時，應自行探討，依狀況更改展開液比例或呈色劑。
2. 以本檢驗方法檢出西藥成分時，應利用氣相層析質譜儀(GC/MS)或液相層析串聯質譜儀(LC/MS/MS)等進行確認。
3. 以 GC/MS 及 LC/MS/MS 進行檢測時，應進行方法確效。GC/MS 及 LC/MS/MS 之參考分析參數如表三及表四。
4. 本檢驗方法所列之檢驗成分係常見或曾摻加之西藥或化學成分，如檢出未涵蓋於本檢驗方法之成分，或檢出疑似西藥成分者，應自行研究與探討。隨著新藥及新成分發現，宜自行評估並增加檢驗成分。

表一、中藥及食品摻加西藥之檢驗類別及其成分

檢驗類別	檢驗成分
補腎滋養類 (壯陽類)	Acetil acid, Acetildenafil, Acetylvarildenafil, Aminotadalafil, Caffeine, Carbodenafil, Chloropretadalafil, <i>N</i> -Desethyl vardenafil, <i>N</i> -Desmethylsildenafil, <i>N</i> -Desmethylacetildenafil, Dimethylsildenafil, Fluoxymesterone, Gendenafil, Homosildenafil, Hydroxyacetildenafil, Hydroxyhomosildenafil, Hydroxythiohomosildenafil, Hydroxyvardenafil, Imidazosagatriazinone, 7-Ketodehydroepiandrosterone, Methyltestosterone, Noracetildenafil, Norneosildenafil, Nortadalafil, Phentolamine, Piperiacetildenafil, Piperidenafil, Sildenafil, Tadalafil, Testosterone, Thiodimethylsildenafil, Thiohomosildenafil, Thiosildenafil, Vardenafil, Vardenafil analogue 【2-(2-ethoxy-phenyl)-5-methyl-7-propyl-3H-imidazo (5,1-f)-(1,2,4) triazin-4-one】 及 Yohimbine
減肥類	Caffeine, Cetilistat, Clobenzorex, Diethylpropion, <i>N</i> -Desmethylsibutramine, <i>N</i> -Didesmethylsibutramine, Fenfluramine, Fluoxetine, Mazindol, Mephentermine, Methamphetamine, Orlistat, Phenylpropanolamine, Phenolphthalein, Phentermine, Rimonabant, Sibutramine 及 Synephrine
感冒類	Acetaminophen, Aminopyrine, Aspirin, Bucetin, Bromhexine, Caffeine, Carbetapentane, Carbinoxamine, Chlorpheniramine, Dextromethorphan, Diprophylline, Ethoxybenzamide, Guaifenesin, Phenacetin, Phenylephrine 及 Terfenadine
類固醇類	Betamethasone, Cortisone, Dexamethasone, Hydrocortisone, Methylprednisolone, Prednisolone, Prednisone 及 Triamcinolone
風濕鎮痛類	Acetaminophen, Aminopyrine, Aspirin, Bucetin, Carisoprodol, Chlormezanone, Chlorzoxazone, Dexamethasone, Diclofenac, Ethoxybenzamide, Ibuprofen, Indomethacin, Ketoprofen, Mefenamic acid, Naproxen, Oxyphenbutazone, Piroxicam, Phenylbutazone, Prednisolone, Salicylamide 及 Sulindac
止痛類	Acetaminophen, Aminopyrine, Aspirin, Bucetin, Ethoxybenzamide, Ibuprofen, Mefenamic acid, Piroxicam, Salicylamide 及 Sulindac
跌打損傷類	Acetaminophen, Guaifenesin, Indomethacin, Phenacetin 及 Phenylbutazone
氣喘類	Chlorpheniramine, Dexamethasone, Dextromethorphan, Diprophyllin, Prednisolone 及 Theophylline
春藥、麻醉藥類	Amphetamine, Methamphetamine, Methyltestosterone, Morphine, Pentazocine, Strychnine, Testosterone 及 Yohimbine
外用局部麻醉劑	Benzocaine, Cocaine, Dibucaine, Lidocaine, Procaine, Testosterone, Tetracaine 及 Yohimbine
健胃類	Atropine, Butropium, Camylofine, Cimetidine, Dicyclomine, Glycopyrronium, Homatropine, Metoclopramide, Oxethazaine, Oxyphencyclimine, Pirenzepine, Propantheline, Ranitidine 及 Scopolamine

檢驗類別	檢驗成分
小兒驚風類	Acetaminophen, Aminopyrine, Aspirin, Chlordiazepoxide, Diazepam, Phenacetin 及 Quinine
解毒類	Chloramphenicol, Sulfanilamide, Sulfadiazine, Sulfadimethoxine, Sulfamerazine, Sulfamethazine, Sulfamethoxazole, Sulfamethoxypyridazine, Sulfathiazole 及 Sulfisoxazole
瀉劑	Bisacodyl
治糖尿病類	Acetohexamide, Chlorpropamide, Glibenclamide, Metformin, Phenformin, Pioglitazone, Rosiglitazone 及 Tolbutamide
治血管硬化、血管擴張類	Bezafibrate, Clofibrate, Etofibrate, Fenofibrate, Gemfibrozil, Nicametate, Nylidrin 及 Xanthinol Niacinate
抗過敏類	Brompheniramine, Carbinoxamine, Chlorpheniramine, Diphenhydramine 及 Terfenadine
精神安定類	Amitriptyline, Barbitol, Bromvalerylurea, Chlordiazepoxide, Chlorpromazine, Diazepam, Fluoxetine, Lorazepam, Melatonin, Meprobamate, Methaqualone, Phenobarbital, Secobarbital, Thioridazine 及 Zolpidem
降壓、利尿類	Chlorothiazide, Cinnarizine, Dipyridamole, Furosemide, Hydralazine, Hydrochlorothiazide, Propranolol 及 Reserpine
調經理帶類	Estradiol, Ethinylestradiol, Metronidazole, Progesterone 及 Tinidazole
動情激素類	Diethylstilbestrol, Estradiol, Estrone, Estriol, Ethisterone, Ethinylestradiol, Norethisterone 及 Progesterone
泌尿用藥類	Flavoxate, Nalidixic acid, Nitrofurantoin, Norfloxacin, Sulfamethizole, Sulfisoxazole 及 Phenazopyridine
蛋白同化賀爾蒙類	Ethylestrenol, Methandriol, Methandrostenolone, Nandrolone, Oxymetholone 及 Stanozolol
抗癲癇及鎮痙	Benzhexol, Diphenylhydantoin, Mephensin, Metharbital, Orphenadrine, Phenobarbital 及 Primidone
強心類	Caffeine 及 Digitoxin
心臟用藥類	Atenolol, Dipyridamole, Nifedipine 及 Propranolol
治尿酸痛風類	Allopurinol, Benzbromarone, Colchicine, Probenecid 及 Sulfipyrazone
治甲狀腺機能缺陷	Carbimazole, Liothyronine 及 Methimazole
保眼類	Cortisone, Diclofenac 及 Sulfamethoxazole
興奮劑類	Atropine, Caffeine, Pentazocine, Strychnine 及 Theobromine
抗黴菌類	Econazole, Ketoconazole 及 Terbinafine

檢驗類別	檢驗成分
治禿頭	Estriol, Finasteride, Griseofulvin, Ketoconazole, Minoxidil, Prednisolone 及 Salicylic acid
外用膏、粉類	Chlorpheniramine, Cortisone, Dexamethasone, Diphenhydramine, Prednisolone 及 Salicylic acid

表二、中藥及食品摻加西藥之檢驗類別建議之呈色劑

檢驗類別	建議之呈色劑
補腎滋養類 (壯陽類)	Dragendorff's 試液；50%硫酸乙醇試液；Iodoplatinate 酸性試液
減肥類	Dragendorff's 試液；50%硫酸乙醇試液；二氫節三酮試液
感冒類	Dragendorff's 試液；50%硫酸乙醇試液；碘蒸氣；二氫節三酮試液；1%過錳酸鉀試液；1%香莢蘭醛硫酸試液
類固醇類	Dragendorff's 試液；50%硫酸乙醇試液；四吡唑啉藍試液；1%香莢蘭醛硫酸試液
風濕鎮痛類	Dragendorff's 試液；50%硫酸乙醇試液；碘蒸氣；2,4-二硝基苯肼試液；5%氯化鐵試液；1%香莢蘭醛硫酸試液
止痛類	Dragendorff's 試液；50%硫酸乙醇試液；碘蒸氣；對茴香醛試液；5%氯化鐵試液
跌打損傷類	Dragendorff's 試液；50%硫酸乙醇試液；碘蒸氣
氣喘類	Dragendorff's 試液；50%硫酸乙醇試液；碘蒸氣；二氫節三酮試液；1%過錳酸鉀試液
春藥、麻醉藥類	Dragendorff's 試液；50%硫酸乙醇試液；碘蒸氣；Iodoplatinate 酸性試液；過錳酸鉀試液
外用局部麻醉劑	Dragendorff's 試液；碘蒸氣；Iodoplatinate 酸性試液；二氫節三酮試液
健胃類	Dragendorff's 試液；50%硫酸乙醇試液；對茴香醛試液
小兒驚風類	Dragendorff's 試液；碘蒸氣；對二甲胺基苯甲醛試液；對二甲胺基桂皮醛試液
解毒類	對二甲胺基苯甲醛試液；對二甲胺基桂皮醛試液；1%香莢蘭醛硫酸試液
瀉劑	Dragendorff's 試液
治糖尿病類	Dragendorff's 試液；二氫節三酮試液；1%香莢蘭硫酸試液
治血管硬化、血管擴張類	Dragendorff's 試液；50%硫酸乙醇試液；碘蒸氣；Iodoplatinate 酸性試液；1%過錳酸鉀試液
抗過敏類	碘蒸氣；Iodoplatinate 試液；Iodoplatinate 酸性試液
精神安定類	Dragendorff's 試液；碘蒸氣；對茴香醛試液；1%硝酸亞汞試液
降壓、利尿類	Dragendorff's 試液；碘蒸氣；Iodoplatinate 酸性試液；1%過錳酸鉀試液；1%香莢蘭醛硫酸試液
調經理帶類	50%硫酸乙醇試液
動情激素類	50%硫酸乙醇試液

檢驗類別	建議之呈色劑
泌尿用藥類	Dragendorff's 試液；碘蒸氣；Iodoplatinate 試液；對二甲胺基苯甲醛試液；對二甲胺基桂皮醛試液
蛋白同化賀爾蒙類	50%硫酸乙醇試液
抗癲癇及鎮痙	碘蒸氣；Iodoplatinate 試液；1%硝酸亞汞試液；1%過錳酸鉀試液
強心類	Dragendorff's 試液；50%硫酸乙醇試液
心臟用藥類	Dragendorff's 試液；Iodoplatinate 試液；Iodoplatinate 酸性試液
治尿酸痛風類	Dragendorff's 試液；對茴香醛試液；1%過錳酸鉀試液
治甲狀腺機能缺陷	Dragendorff's 試液；碘蒸氣
保眼類	對二甲胺基苯甲醛試液；對二甲胺基桂皮醛試液
興奮劑類	Dragendorff's 試液；50%硫酸乙醇試液；碘蒸氣；Iodoplatinate 酸性試液
抗黴菌類	Dragendorff's 試液；50%硫酸乙醇試液；二氫節三酮試液
治禿頭	Dragendorff's 試液；50%硫酸乙醇試液；5%氯化鐵試液
外用膏、粉類	Dragendorff's 試液；50%硫酸乙醇試液；碘蒸氣；5%氯化鐵試液

註：當檢體疑似摻加上表檢驗類別外之西藥成分，宜依該成分之化學特性另擇適當呈色劑。

表三、Acetaminophen 等 214 項西藥之氣相層析質譜儀分析參數

編號	名稱	分子式	分子量	鑑別離子
1	Acetaminophen	C ₈ H ₉ NO ₂	151	151, 109, 80, 83
2	Acetil acid	C ₁₈ H ₂₀ N ₄ O ₄	356	—
3	Acetildenafil	C ₂₅ H ₃₄ N ₆ O ₃	466	127, 70, 84, 42, 112, 56, 98
4	Acetohexamide	C ₁₅ H ₂₀ N ₂ O ₄ S	324	199, 184, 120, 104, 91, 76, 64, 51
5	Acetylwardenafil	C ₂₅ H ₃₄ N ₆ O ₃	466	—
6	Allopurinol	C ₅ H ₄ N ₄ O	136	136, 52, 109, 120, 67
7	Aminopyrine	C ₁₃ H ₁₇ N ₃ O	231	231, 97, 77, 56
8	Aminotadalafil	C ₂₁ H ₁₈ N ₄ O ₄	390	390, 262, 204, 289, 233, 102, 169, 375, 43, 405
9	Amitriptyline	C ₂₀ H ₂₃ N	277	277, 202, 178, 152, 115, 91, 58
10	Amphetamine	C ₉ H ₁₃ N	135	44, 91, 65, 120
11	Aspirin	C ₉ H ₈ O ₄	180	120, 92, 152, 65, 45
12	Atenolol	C ₁₄ H ₂₂ N ₂ O ₃	266	222, 107, 72
13	Atropine	C ₁₇ H ₂₃ NO ₃	289	124, 82, 94, 289, 140, 67, 103, 42
14	Barbital	C ₈ H ₁₂ N ₂ O ₃	184	156, 141, 98, 112, 55, 41, 83, 69
15	Benzbromarone	C ₁₇ H ₁₂ Br ₂ O ₃	424	264, 173, 279, 115, 249, 328, 145, 132, 221
16	Benzhexol	C ₂₀ H ₃₁ NO	301	—
17	Benzocaine	C ₉ H ₁₁ NO ₂	165	165, 120, 92, 65
18	Betamethasone	C ₂₂ H ₂₉ FO ₅	392	312, 281, 207, 160, 122, 91, 55
19	Bezafibrate	C ₁₉ H ₂₀ ClNO ₄	361	120, 139, 107, 77, 156
20	Bisacodyl	C ₂₂ H ₁₉ NO ₄	361	361, 319, 276, 246, 199, 154
21	Bromhexine	C ₁₄ H ₂₀ Br ₂ N ₂	376	376, 293, 264, 112, 70, 374
22	Brompheniramine	C ₁₆ H ₁₉ BrN ₂	318	247, 58, 167, 72, 180, 42, 139
23	Bromvalerylurea	C ₆ H ₁₁ BrN ₂ O ₂	222	137, 44, 100, 55, 83, 69, 120
24	Bucetin	C ₁₂ H ₁₇ NO ₃	223	223, 137, 108, 81, 53
25	Butropium	C ₂₈ H ₃₈ NO ₄ ⁺	452	—
26	Caffeine	C ₈ H ₁₀ N ₄ O ₂	194	194, 109, 67
27	Camylofine	C ₁₉ H ₃₂ N ₂ O ₂	320	—
28	Carbetapentane	C ₂₀ H ₃₁ NO ₃	333	86, 144, 115, 100, 58, 100, 115
29	Carbimazole	C ₇ H ₁₀ N ₂ O ₂ S	186	186, 114, 72, 81, 42, 56, 127, 141
30	Carbinoxamine	C ₁₆ H ₁₉ ClN ₂ O	290	201, 167, 139, 71
31	Carbodenafil	C ₂₄ H ₃₂ O ₃ N ₆	452	84, 56, 70, 381, 452, 339, 311, 42, 113, 136
32	Carisoprodol	C ₁₂ H ₂₄ N ₂ O ₄	260	245, 184, 158, 97, 83, 69, 55
33	Chloramphenicol	C ₁₁ H ₁₂ Cl ₂ N ₂ O ₅	322	207, 172, 153, 106, 77
34	Chlordiazepoxide	C ₁₆ H ₁₄ ClN ₃ O	299	282, 247, 220, 190, 165, 124, 91
35	Chlormezanone	C ₁₁ H ₁₂ ClNO ₃ S	273	208, 174, 152, 125, 98, 69
36	Chloropretadalafil	C ₂₂ H ₁₉ ClN ₂ O ₅	426	—
37	Chlorothiazide	C ₇ H ₆ ClN ₃ O ₄ S ₂	295	—
38	Chlorpheniramine	C ₁₆ H ₁₉ ClN ₂	274	203, 58, 167, 72, 180, 42

編號	名稱	分子式	分子量	鑑別離子
39	Chlorpromazine	C ₁₇ H ₁₉ ClN ₂ S	318	318, 272, 232, 196, 86, 58
40	Chlorpropamide	C ₁₀ H ₁₃ ClN ₂ O ₃ S	276	190, 174, 127, 111, 75
41	Chlorzoxazone	C ₇ H ₄ ClNO ₂	169	169, 113, 78
42	Cimetidine	C ₁₀ H ₁₆ N ₆ S	252	45, 116, 55, 70, 60, 74, 42, 88
43	Cinnarizine	C ₂₆ H ₂₈ N ₂	368	201, 117, 167, 251, 152, 91
44	Clobenzorex	C ₁₆ H ₁₈ ClN	259	168, 127, 91, 65
45	Clofibrate	C ₁₂ H ₁₅ ClO ₃	242	242, 169, 128
46	Cocaine	C ₁₇ H ₂₁ NO ₄	303	182, 82, 303, 105, 272, 198, 122, 51
47	Colchicine	C ₂₂ H ₂₅ NO ₆	399	399, 371, 312, 281, 254
48	Cortisone	C ₂₁ H ₂₈ O ₅	360	122, 300, 91, 256, 105, 77, 147, 161, 55
49	7-keto-Dehydroepiandrosterone (7-keto-DHEA)	C ₁₉ H ₂₆ O ₃	302	302, 161, 91, 79, 105, 134, 187, 55, 41, 205
50	N-Desethylvarденаfil	C ₂₁ H ₂₈ N ₆ O ₄ S	460	—
51	N-Desmethylacetildenafil	C ₂₃ H ₃₀ N ₆ O ₃	438	—
52	N-Desmethylsibutramine	C ₁₆ H ₂₄ ClN	265	100, 58, 44, 137, 128, 115
53	N-Desmethylsildenafil	C ₂₁ H ₂₈ N ₆ O ₄ S	460	—
54	N-Didesmethylsibutramine	C ₁₅ H ₂₂ ClN	251	137, 115, 86
55	Dexamethasone	C ₂₂ H ₂₉ FO ₅	392	312, 160, 122, 91, 55
56	Dextromethorphan	C ₁₈ H ₂₅ NO	271	271, 150, 214, 59, 171, 203, 128
57	Diazepam	C ₁₆ H ₁₃ ClN ₂ O	284	283, 256, 221, 165, 77, 51
58	Dibucaine	C ₂₀ H ₂₉ N ₃ O ₂	343	116, 86, 58
59	Diclofenac	C ₁₄ H ₁₁ Cl ₂ NO ₂	295	295, 242, 214, 179, 151
60	Dicyclomine	C ₁₉ H ₃₅ NO ₂	309	86, 55
61	Diethylpropion	C ₁₃ H ₁₉ NO	205	100, 77, 51
62	Diethylstilbesterol	C ₁₈ H ₂₀ O ₂	268	268, 239, 145, 107
63	Digitoxin	C ₄₁ H ₆₄ O ₁₃	764	—
64	Dimethylsildenafil	C ₂₃ H ₃₂ O ₄ N ₆ S	488	113, 312, 70, 84, 42, 283, 136
65	Diphenhydramine	C ₁₇ H ₂₁ NO	255	165, 58
66	Diphenylhydantoin	C ₁₅ H ₁₂ N ₂ O ₂	252	180, 223, 209, 252, 104, 77, 165, 147, 51
67	Diprophylline	C ₁₀ H ₁₄ N ₄ O ₄	254	254, 223, 180, 137, 109, 81, 54
68	Dipyridamole	C ₂₄ H ₄₀ N ₈ O ₄	504	—
69	Econazole	C ₁₈ H ₁₅ Cl ₃ N ₂ O	380	299, 207, 125, 81, 54
70	Estradiol Benzoate	C ₂₅ H ₂₈ O ₃	376	376, 105, 77
71	Estriol	C ₁₈ H ₂₄ O ₃	288	288, 160, 146, 213, 133, 172, 201, 115, 185
72	Estrone	C ₁₈ H ₂₂ O ₂	270	270, 146, 285, 213
73	Ethinylestradiol	C ₂₀ H ₂₄ O ₂	296	213, 296, 160, 133, 145, 228, 172, 185, 115
74	Ethisterone	C ₂₁ H ₂₈ O ₂	312	124, 312, 91, 229, 245, 79, 105, 148, 286, 189, 67
75	Ethoxybenzamide	C ₉ H ₁₁ NO ₂	165	165, 150, 120, 92, 65
76	Ethylestrenol	C ₂₀ H ₃₂ O	288	216, 241, 201, 288, 91, 270, 79, 121, 147, 105
77	Etofibrate	C ₁₈ H ₁₈ ClNO ₅	363	—

編號	名稱	分子式	分子量	鑑別離子
78	Fenfluramine	C ₁₂ H ₁₆ F ₃ N	231	159, 109, 72, 56
79	Fenofibrate	C ₂₀ H ₂₁ ClO ₄	360	—
80	Finasteride (Proscar)	C ₂₃ H ₃₆ N ₂ O ₂	372	372, 110, 58, 272, 357, 258, 128, 230, 72, 245
81	Flavoxate	C ₂₄ H ₂₅ NO ₄	391	263, 234, 147, 98
82	Fluoxetine	C ₁₇ H ₁₈ F ₃ NO	309	309, 183, 162, 133, 104, 78, 59
83	Fluoxymesterone	C ₂₀ H ₂₉ FO ₃	336	336, 279, 109, 71
84	Furosemide	C ₁₂ H ₁₁ ClN ₂ O ₅ S	330	—
85	Gemfibrozil	C ₁₅ H ₂₂ O ₃	250	250, 122
86	Gildenafil	C ₁₉ H ₂₂ N ₄ O ₃	354	354, 326, 339, 136, 166, 282, 43, 311, 297
87	Glibenclamide	C ₂₃ H ₂₈ ClN ₃ O ₅ S	493	—
88	Glycopyrronium	C ₁₉ H ₂₈ NO ₃ ⁺	317	—
89	Griseofulvin	C ₁₇ H ₁₇ ClO ₆	352	352, 310, 284, 254, 214, 171, 138, 95, 69
90	Guaiifenesin	C ₁₀ H ₁₄ O ₄	198	124, 109, 198, 77, 95, 65, 52, 167, 149
91	Homatropine	C ₁₆ H ₂₁ NO ₃	275	275, 124, 79
92	Homosildenafil	C ₂₃ H ₃₂ N ₆ O ₄ S	488	113, 70, 281, 56, 42, 207, 355, 341, 309, 253
93	Hydralazine	C ₈ H ₈ N ₄	160	160, 103, 131, 115, 89, 76, 145, 63, 50
94	Hydrochlorothiazide	C ₇ H ₈ ClN ₃ O ₄ S ₂	297	—
95	Hydrocortisone	C ₂₁ H ₃₀ O ₅	362	305, 163, 123, 91, 55
96	Hydroxyacetildenafil	C ₂₅ H ₃₄ N ₆ O ₄	482	—
97	Hydroxyhomosildenafil	C ₂₃ H ₃₂ N ₆ O ₅ S	504	—
98	Hydroxythiohomosildenafil	C ₂₃ H ₃₂ N ₆ O ₄ S ₂	520	—
99	Hydroxyvarildenafil	C ₂₃ H ₃₂ N ₆ O ₅ S	504	—
100	Ibuprofen	C ₁₃ H ₁₈ O ₂	206	206, 161, 117, 91, 65
101	Imidazosagatriazinone	C ₁₇ H ₂₀ N ₄ O ₂	312	312, 284, 136, 240
102	Indomethacin	C ₁₉ H ₁₆ ClNO ₄	357	139, 313, 111, 75
103	Ketoconazole	C ₂₆ H ₂₈ Cl ₂ N ₄ O ₄	530	—
104	Ketoprofen	C ₁₆ H ₁₄ O ₃	254	105, 177, 209, 77, 254, 45, 194, 131, 165
105	Lidocaine	C ₁₄ H ₂₂ N ₂ O	234	234, 120, 86, 58
106	Liothyronine	C ₁₅ H ₁₂ I ₃ NO ₄	651	—
107	Lorazepam	C ₁₅ H ₁₀ Cl ₂ N ₂ O ₂	320	239, 274, 302, 75, 138, 177, 111, 203, 163, 100
108	Mazindol	C ₁₆ H ₁₃ ClN ₂ O	284	266, 231, 204, 176, 128, 102, 75
109	Mefenamic acid	C ₁₅ H ₁₅ NO ₂	241	241, 223, 180, 152, 102
110	Melatonin	C ₁₃ H ₁₆ N ₂ O ₂	232	232, 172, 160, 145, 130, 117, 102, 89
111	Mephesisin	C ₁₀ H ₁₄ O ₃	182	182, 108, 91
112	Mephentermine	C ₁₁ H ₁₇ N	163	72, 91, 148, 56, 42, 115
113	Meprobamate	C ₉ H ₁₈ N ₂ O ₄	218	83, 55, 43, 71, 62, 96, 114, 144, 101

編號	名稱	分子式	分子量	鑑別離子
114	Metformin	C ₄ H ₁₁ N ₅	129	—
115	Methamphetamine	C ₁₀ H ₁₅ N	149	58, 91, 65, 134, 42, 115, 119
116	Methandriol	C ₂₀ H ₃₂ O ₂	304	253, 213, 271, 304, 105, 145, 286, 228, 119, 159
117	Methandrostenolone	C ₂₀ H ₂₈ O ₂	300	122, 91, 161, 147, 105, 134, 77
118	Methaqualone	C ₁₆ H ₁₄ N ₂ O	250	250, 91, 132, 65, 77, 217, 117, 50, 104
119	Metharbital	C ₉ H ₁₄ N ₂ O ₃	198	155, 112, 83, 55
120	Methimazole	C ₄ H ₆ N ₂ S	114	114, 72, 81, 42, 54, 86, 59
121	Methylprednisolone	C ₂₂ H ₃₀ O ₅	374	136, 91, 55
122	Methyltestosterone	C ₂₀ H ₃₀ O ₂	302	302, 229, 202, 161, 124, 91
123	Metoclopramide	C ₁₄ H ₂₂ ClN ₃ O ₂	299	184, 86, 58
124	Metronidazole	C ₆ H ₉ N ₃ O ₃	171	171, 124, 81, 53
125	Minoxidil	C ₉ H ₁₅ N ₅ O	209	193, 164, 138, 110, 84, 67
126	Morphine	C ₁₇ H ₁₉ NO ₃	285	285, 162, 42, 215, 115, 55, 65, 92, 81
127	Nalidixic acid	C ₁₂ H ₁₂ N ₂ O ₃	232	188, 160, 132, 173, 145, 104, 232, 77
128	Nandrolone	C ₁₈ H ₂₆ O ₂	274	274, 215, 173, 147, 119, 91, 67
129	Naproxen	C ₁₄ H ₁₄ O ₃	230	230, 185, 170, 141, 115
130	Nicametate	C ₁₂ H ₁₈ N ₂ O ₂	222	—
131	Nifedipine	C ₁₇ H ₁₈ N ₂ O ₆	346	329, 284, 224, 268, 254, 195, 180
132	Nitrofurantoin	C ₈ H ₆ N ₄ O ₅	238	—
133	Noracetildenafil	C ₂₄ H ₃₂ N ₆ O ₃	452	113, 70, 42, 56, 98, 207, 311, 452, 136, 354
134	Norethisterone	C ₂₀ H ₂₆ O ₂	298	298, 283, 265
135	Norfloracin	C ₁₆ H ₁₈ FN ₃ O ₃	319	—
136	Norneosildenafil	C ₂₂ H ₂₉ N ₅ O ₄ S	459	—
137	Nortadalafil	C ₂₁ H ₁₇ N ₃ O ₄	375	—
138	Nylidrin	C ₁₉ H ₂₅ NO ₂	299	—
139	Orlistat	C ₂₉ H ₅₃ NO ₅	495	—
140	Orphenadrine	C ₁₈ H ₂₃ NO	269	58, 73, 165, 178, 45
141	Oxethazaine	C ₂₈ H ₄₁ N ₃ O ₃	467	114, 86, 213, 56, 133, 72, 304
142	Oxymetholone	C ₂₁ H ₃₂ O ₃	332	174, 275, 332, 43, 161, 91, 81, 71, 216, 107
143	Oxyphenbutazone	C ₁₉ H ₂₀ N ₂ O ₃	324	93, 45, 55, 69, 161, 193, 77, 249
144	Oxyphencyclimine	C ₂₀ H ₂₈ N ₂ O ₃	344	—
145	Pentazocine	C ₁₉ H ₂₇ NO	285	217, 202, 285, 110, 270, 70, 45, 159, 173
146	Phenacetin	C ₁₀ H ₁₃ NO ₂	179	179, 137, 108, 80, 65, 53
147	Phenazopyridine	C ₁₁ H ₁₁ N ₅	213	213, 108, 81, 54, 136, 97, 184, 66, 155
148	Phenformin	C ₁₀ H ₁₅ N ₅	205	146, 104, 91, 77, 65
149	Phenobarbital	C ₁₂ H ₁₂ N ₂ O ₃	232	204, 117, 232, 161, 146, 103, 77, 91, 174

編號	名稱	分子式	分子量	鑑別離子
150	Phenolphthalein	C ₂₀ H ₁₄ O ₄	318	318, 274, 225, 181, 152, 152, 104, 65
151	Phentermine	C ₁₀ H ₁₅ N	149	70, 91, 105, 58, 65, 115, 41, 115
152	Phentolamine	C ₁₇ H ₁₉ N ₃ O	281	199, 183, 91, 154, 77, 128, 170
153	Phenylbutazone	C ₁₉ H ₂₀ N ₂ O ₂	308	308, 252, 183, 152, 105, 77
154	Phenylephrine	C ₉ H ₁₃ NO ₂	167	135, 44, 107, 179, 160, 77, 51, 91
155	Phenylpropanolamine	C ₉ H ₁₃ NO	151	44, 77, 105, 51, 117, 91
156	Pioglitazone	C ₁₉ H ₂₀ N ₂ O ₃ S	356	—
157	Piperiacetildenafil	C ₂₄ H ₃₁ N ₅ O ₃	437	—
158	Piperidenafil	C ₂₂ H ₂₉ N ₅ O ₄ S	459	431, 459, 283, 67, 42, 84, 121, 135, 149, 215
159	Pirenzepine	C ₁₉ H ₂₁ N ₅ O ₂	351	351, 281, 211, 113, 70
160	Piroxicam	C ₁₅ H ₁₃ N ₃ O ₄ S	331	104, 76, 43, 152, 169, 118, 386, 211, 91
161	Prednisolone	C ₂₁ H ₂₈ O ₅	360	122, 91, 55
162	Prednisone	C ₂₁ H ₂₆ O ₅	358	298, 245, 226, 186, 160, 131, 115, 91
163	Primidone	C ₁₂ H ₁₄ N ₂ O ₂	218	146, 190, 117, 161, 103, 91, 77, 174
164	Probenecid	C ₁₃ H ₁₉ NO ₄ S	285	270, 135, 199, 104, 76, 43
165	Procaine	C ₁₃ H ₂₀ N ₂ O ₂	236	86, 99, 120, 65, 56, 164
166	Progesterone	C ₂₁ H ₃₀ O ₂	314	314, 272, 229, 147, 124, 91, 67
167	Propantheline	C ₂₃ H ₃₀ NO ₃ ⁺	368	86, 181, 310, 99, 152, 44, 58, 325, 127, 71
168	Propranolol	C ₁₆ H ₂₁ NO ₂	259	259, 215, 144, 115, 72
169	Quinine	C ₂₀ H ₂₄ N ₂ O ₂	324	189, 160, 136
170	Ranitidine	C ₁₃ H ₂₂ N ₄ O ₃	314	235, 137, 94, 67
171	Reserpine	C ₃₃ H ₄₀ N ₂ O ₉	608	—
172	Rimonabant	C ₂₂ H ₂₁ Cl ₃ N ₄ O	462	84, 363, 55, 99, 282, 335, 299, 41, 380, 145, 462
173	Rosiglitazone	C ₁₈ H ₁₉ N ₃ O ₃ S	357	—
174	Salicylamide	C ₇ H ₇ NO ₂	137	120, 137, 92, 65, 53, 44, 80
175	Salicylic acid	C ₇ H ₆ O ₃	138	120, 92, 138, 64, 46
176	Scopolamine	C ₁₇ H ₂₁ NO ₄	303	94, 138, 108, 154, 303
177	Secobarbital	C ₁₂ H ₁₈ N ₂ O ₃	238	195, 168, 124, 97, 53
178	Sibutramine	C ₁₇ H ₂₆ ClN	279	114, 72, 58, 101, 128, 137
179	Sildenafil	C ₂₂ H ₃₀ N ₆ O ₄ S	474	404, 281, 207, 99, 56
180	Stanozolol	C ₂₁ H ₃₂ N ₂ O	328	96, 328, 257, 270, 133, 119, 175
181	Strychnine	C ₂₁ H ₂₂ N ₂ O ₂	334	334, 167, 130, 107, 77, 55
182	Sulfadiazine	C ₁₀ H ₁₀ N ₄ O ₂ S	250	185, 92, 65, 108
183	Sulfadimethoxine	C ₁₂ H ₁₄ N ₄ O ₄ S	310	259, 140, 92, 65, 168, 108, 121, 82, 187
184	Sulfamerazine	C ₁₁ H ₁₂ N ₄ O ₂ S	264	199, 92, 65
185	Sulfamethazine	C ₁₂ H ₁₄ N ₄ O ₂ S	278	213, 92, 65
186	Sulfamethizole	C ₉ H ₁₀ N ₄ O ₂ S ₂	270	—

編號	名稱	分子式	分子量	鑑別離子
187	Sulfamethoxazole	C ₁₀ H ₁₁ N ₃ O ₃ S	253	238, 224, 42, 206, 165, 266, 72, 91, 56
188	Sulfamethoxypyridazine	C ₁₁ H ₁₂ N ₄ O ₃ S	280	215, 92, 108, 65, 53, 80, 280
189	Sulfanilamide	C ₆ H ₈ N ₂ O ₂ S	172	172, 92, 65
190	Sulfathiazole	C ₉ H ₉ N ₃ O ₂ S ₂	255	—
191	Sulfinpyrazone	C ₂₃ H ₂₀ N ₂ O ₃ S	404	278, 249, 209, 183, 152, 130, 105, 77, 51
192	Sulfisoxazole	C ₁₁ H ₁₃ N ₃ O ₃ S	267	—
193	Sulindac	C ₂₀ H ₁₇ FO ₃ S	356	233, 297, 312, 248, 67, 123, 47, 133, 220
194	Synephrine	C ₉ H ₁₃ NO ₂	167	135, 44, 107, 179, 160, 77, 51, 91
195	Tadalafil	C ₂₂ H ₁₉ N ₃ O ₄	389	389, 262, 204, 169
196	Terbinafine	C ₂₁ H ₂₅ N	291	141, 276, 234, 115, 291, 196
197	Terfenadine	C ₃₂ H ₄₁ NO ₂	471	—
198	Testosterone	C ₁₉ H ₂₈ O ₂	288	288, 246, 203, 147, 124, 91, 55
199	Tetracaine	C ₁₅ H ₂₄ N ₂ O ₂	264	58, 71, 176, 150, 105, 193, 92
200	Theobromine	C ₇ H ₈ N ₄ O ₂	180	180, 67, 109, 55, 82, 137, 42, 94
201	Theophylline	C ₇ H ₈ N ₄ O ₂	180	180, 95, 68, 53
202	Thiodimethylsildenafil	C ₂₃ H ₃₂ N ₆ O ₃ S ₂	504	113, 70, 42, 84, 328, 343, 56
203	Thiohomosildenafil	C ₂₃ H ₃₂ N ₆ O ₃ S ₂	504	113, 70, 56, 475, 98, 42, 327, 341, 269, 84
204	Thioridazine	C ₂₁ H ₂₆ N ₂ S ₂	370	370, 244, 185, 126, 98, 70
205	Thiosildenafil	C ₂₂ H ₃₀ N ₆ O ₃ S ₂	490	99, 448, 56, 489, 425, 70, 207
206	Tinidazole	C ₈ H ₁₃ N ₃ O ₄ S	247	201, 123, 80, 68, 93, 107, 53, 154, 247
207	Tolbutamide	C ₁₂ H ₁₈ N ₂ O ₃ S	270	91, 171, 155, 65, 107, 77, 197
208	Triamcinolone	C ₂₁ H ₂₇ FO ₆	394	—
209	Vardenafil	C ₂₃ H ₃₂ N ₆ O ₄ S	488	—
210	Vardenafil analogue 【2-(2-ethoxy-phenyl)-5-methyl-7-propyl-3H-imidazo(5,1-f)-(1,2,4)triazin-4-one】	C ₁₇ H ₂₀ N ₄ O ₂	312	284, 312, 256, 67, 297, 120, 269, 93, 135
211	Xanthinol Niacinate	C ₁₃ H ₂₁ N ₅ O ₄	311	—
212	Yohimbine	C ₂₁ H ₂₆ N ₂ O ₃	354	353, 169
213	Zolpidem	C ₁₉ H ₂₁ N ₃ O	307	235, 207, 219, 281, 307, 65, 92, 191
214	Cetilistat	C ₂₅ H ₃₉ NO ₃	401	177, 160, 133, 55, 104, 77, 401

- 註：1. 離子化模式：電子撞擊游離(EI)。
 2. 碰撞能量：70 eV。
 3. ”—”表示以 GC/MS 無法檢出。
 4. 以上參數不適時，依所使用之儀器，設定適合之參數。

表四、Acetaminophen 等 213 項西藥成分之液相層析串聯質譜儀分析參數

編號	名稱	分子式	分子量	離子化 模式	進樣錐電壓 (V)	碰撞能量 (eV)	前驅離子 (m/z)	產物離子 (m/z)
1	Acetaminophen	C ₈ H ₉ NO ₂	151	ESI ⁺	40	26	152	110, 94
2	Acetil acid	C ₁₈ H ₂₀ N ₄ O ₄	356	ESI ⁺	40	25	357	329, 285, 300
3	Acetildenafil	C ₂₅ H ₃₄ N ₆ O ₃	466	ESI ⁺	50	40	467	127, 111, 84, 72
4	Acetohexamide	C ₁₅ H ₂₀ N ₂ O ₄ S	324	ESI ⁺	40	25	347	222, 302, 248, 122
5	Acetylvardenafil	C ₂₅ H ₃₄ N ₆ O ₃	466	ESI ⁺	30	35	467	341, 151, 107, 166, 317
6	Allopurinol	C ₅ H ₄ N ₄ O	136	ESI ⁺	40	21	137	110, 94, 54, 120, 81
7	Aminopyrine	C ₁₃ H ₁₇ N ₃ O	231	ESI ⁺	30	20	232	113, 98, 72
8	Aminotadalafil	C ₂₁ H ₁₈ N ₄ O ₄	390	ESI ⁺	60	25	391	135, 286, 150
9	Amitriptyline	C ₂₀ H ₂₃ N	277	ESI ⁺	30	20	278	91, 233, 105, 117, 155, 191, 218, 84
10	Amphetamine	C ₉ H ₁₃ N	135	ESI ⁺	15	8	136	119, 91
11	Aspirin	C ₉ H ₈ O ₄	180	ESI ⁻	8	2	179	137
12	Atenolol	C ₁₄ H ₂₂ N ₂ O ₃	266	ESI ⁺	30	21	267	145, 190, 74, 72, 225, 208, 178, 116
13	Atropine	C ₁₇ H ₂₃ NO ₃	289	ESI ⁺	35	21	290	124, 93
14	Barbital	C ₈ H ₁₂ N ₂ O ₃	184	ESI ⁻	25	15	183	42, 140, 96, 85
15	Benzbromarone	C ₁₇ H ₁₂ Br ₂ O ₃	424	ESI ⁻	45	29	423	251, 407, 81, 278
16	Benzhexol	C ₂₀ H ₃₁ NO	301	ESI ⁺	30	10	302	98
17	Benzocaine	C ₉ H ₁₁ NO ₂	165	ESI ⁺	20	17	166	138, 120, 94
18	Betamethasone	C ₂₂ H ₂₉ FO ₅	392	ESI ⁺	20	10	393	393, 355, 309, 337, 279
19	Bezafibrate	C ₁₉ H ₂₀ ClNO ₄	361	ESI ⁺	15	15	362	276, 362
20	Bisacodyl	C ₂₂ H ₁₉ NO ₄	361	ESI ⁺	30	20	362	184, 226
21	Bromhexine	C ₁₄ H ₂₀ Br ₂ N ₂	376	ESI ⁺	30	18	377	264, 114
22	Brompheniramine	C ₁₆ H ₁₉ BrN ₂	318	ESI ⁺	30	8	319	274
23	Bromvalerylurea	C ₆ H ₁₁ BrN ₂ O ₂	222	ESI ⁺	30	15	223	223, 163
24	Bucetin	C ₁₂ H ₁₇ NO ₃	223	ESI ⁺	20	15	224	138, 164, 206
25	Butropium	C ₂₈ H ₃₈ NO ₄ ⁺	452	ESI ⁺	45	35	453	163, 288, 349
26	Caffeine	C ₈ H ₁₀ N ₄ O ₂	194	ESI ⁺	40	32	195	138
27	Camylofine	C ₁₉ H ₃₂ N ₂ O ₂	320	ESI ⁺	40	20	321	100, 72, 135, 178, 248
28	Carbetapentane	C ₂₀ H ₃₁ NO ₃	333	ESI ⁺	40	18	334	100, 145, 217

編號	名稱	分子式	分子量	離子化模式	進樣錐電壓 (V)	碰撞能量 (eV)	前驅離子 (m/z)	產物離子 (m/z)
29	Carbimazole	C ₇ H ₁₀ O ₂ N ₂ S	186	ESI ⁺	20	15	187	115, 143, 159
30	Carbinoxamine	C ₁₆ H ₁₉ ClN ₂ O	290	ESI ⁺	25	15	291	202, 167, 72
31	Carbodenafil	C ₂₄ H ₃₂ N ₆ O ₃	452	ESI ⁺	50	23	453	339, 311
32	Carisoprodol	C ₁₂ H ₂₄ N ₂ O ₄	260	ESI ⁺	30	20	261	97, 62, 176, 158
33	Chloramphenicol	C ₁₁ H ₁₂ Cl ₂ N ₂ O ₅	322	ESI ⁺	20	10	323	305, 275, 241
34	Chlordiazepoxide	C ₁₆ H ₁₄ ClN ₃ O	299	ESI ⁺	30	20	300	227, 283, 241, 255
35	Chlormezanone	C ₁₁ H ₁₂ ClNO ₃ S	273	ESI ⁻	25	20	272	208, 180, 152, 71
36	Chloropretadalafil	C ₂₂ H ₁₉ ClN ₂ O ₅	426	ESI ⁺	30	14	427	135, 334, 395, 262
37	Chlorothiazide	C ₇ H ₆ ClN ₃ O ₄ S ₂	295	ESI ⁺	15	15	296	278, 221, 205
38	Chlorpheniramine	C ₁₆ H ₁₉ ClN ₂	274	ESI ⁺	20	15	275	230
39	Chlorpromazine	C ₁₇ H ₁₉ ClN ₂ S	318	ESI ⁺	40	20	319	86, 58, 239, 246, 274
40	Chlorpropamide	C ₁₀ H ₁₃ ClN ₂ O ₃ S	276	ESI ⁻	30	17	275	190
41	Chlorzoxazone	C ₇ H ₄ ClNO ₂	169	ESI ⁺	50	3	170	114, 142
42	Cimetidine	C ₁₀ H ₁₆ N ₆ S	252	ESI ⁺	30	15	253	159, 117, 95, 172, 211
43	Cinnarizine	C ₂₆ H ₂₈ N ₂	368	ESI ⁺	30	15	369	167, 201
44	Clobenzorex	C ₁₆ H ₁₈ ClN	259	ESI ⁺	30	20	260	91, 119, 125, 142
45	Clofibrate	C ₁₂ H ₁₅ ClO ₃	242	ESI ⁺	25	10	243	87, 169, 197, 115
46	Cocaine	C ₁₇ H ₂₁ NO ₄	303	ESI ⁺	35	25	304	182
47	Colchicine	C ₂₂ H ₂₅ O ₆ N	399	ESI ⁺	50	40	400	310, 358, 282, 298
48	Cortisone	C ₂₁ H ₂₈ O ₅	360	ESI ⁻	30	3	359	137, 311, 329
49	7-Ketodehydroepiandrosterone (7-keto-DHEA)	C ₁₉ H ₂₆ O ₃	302	ESI ⁻	20	12	301	283, 245
50	<i>N</i> -Desethylvaridenafil	C ₂₁ H ₂₈ N ₆ O ₄ S	460	ESI ⁺	45	30	461	151, 312, 284, 85, 376
51	<i>N</i> -Desmethylacetildenafil	C ₂₃ H ₃₀ N ₆ O ₃	438	ESI ⁺	50	27	439	99, 339, 353
52	<i>N</i> -Desmethylsibutramine	C ₁₆ H ₂₄ ClN	265	ESI ⁺	25	20	266	139, 125, 153
53	<i>N</i> -Desmethylsildenafil	C ₂₁ H ₂₈ N ₆ O ₄ S	460	ESI ⁺	45	29	461	85, 311, 283, 377
54	<i>N</i> -Didesmethylsibutramine	C ₁₅ H ₂₂ ClN	251	ESI ⁺	20	13	252	139, 125, 153, 179, 97
55	Dexamethasone	C ₂₂ H ₂₉ FO ₅	392	ESI ⁻	30	20	391	361
56	Dextromethorphan	C ₁₈ H ₂₅ NO	271	ESI ⁺	35	35	272	147, 213, 215, 121
57	Diazepam	C ₁₆ H ₁₃ ClN ₂ O	284	ESI ⁺	50	35	285	222, 193, 154

編號	名稱	分子式	分子量	離子化 模式	進樣錐電壓 (V)	碰撞能量 (eV)	前驅離子 (m/z)	產物離子 (m/z)
58	Dibucaine	C ₂₀ H ₂₉ N ₃ O ₂	343	ESI ⁺	40	25	344	271, 215
59	Diclofenac	C ₁₄ H ₁₁ Cl ₂ NO ₂	295	ESI ⁻	10	12	294	250
60	Dicyclomine	C ₁₉ H ₃₅ NO ₂	309	ESI ⁺	30	25	310	165, 237, 155, 109, 100
61	Diethylpropion	C ₁₃ H ₁₉ NO	205	ESI ⁺	30	20	206	105, 100, 133, 72
62	Diethylstilbestrol	C ₁₈ H ₂₀ O ₂	268	ESI ⁻	50	27	267	251, 237, 222, 223, 209, 93
63	Digitoxin	C ₄₁ H ₆₄ O ₁₃	764	ESI ⁻	60	10	763	133, 85
64	Dimethylsildenafil	C ₂₃ H ₃₂ N ₆ O ₄ S	488	ESI ⁺	50	29	489	113, 99, 71, 311, 283, 377
65	Diphenhydramine	C ₁₇ H ₂₁ NO	255	ESI ⁺	20	8	256	167
66	Diphenylhydantoin	C ₁₅ H ₁₂ N ₂ O ₂	252	ESI ⁺	30	10	253	182, 104
67	Diprophylline	C ₁₀ H ₁₄ N ₄ O ₄	254	ESI ⁺	30	19	255	181, 124
68	Dipyridamole	C ₂₄ H ₄₀ N ₈ O ₄	504	ESI ⁺	50	42	505	429, 385
69	Econazole	C ₁₈ H ₁₅ Cl ₃ N ₂ O	380	ESI ⁺	40	20	381	125, 193, 69
70	Estradiol Benzoate	C ₂₅ H ₂₈ O ₃	376	ESI ⁺	40	15	377	105, 359, 135
71	Estriol	C ₁₈ H ₂₄ O ₃	288	ESI ⁻	40	50	287	145, 171
72	Estrone	C ₁₈ H ₂₂ O ₂	270	ESI ⁻	50	45	269	145, 159
73	Ethinylestradiol	C ₂₀ H ₂₄ O ₂	296	ESI ⁻	60	40	295	145, 159, 183
74	Ethisterone	C ₂₁ H ₂₈ O ₂	312	ESI ⁺	35	20	313	97, 109
75	Ethoxybenzamide	C ₉ H ₁₁ NO ₂	165	ESI ⁺	25	16	166	149, 121
76	Ethylestrenol	C ₂₀ H ₃₂ O	288	ESI ⁺	25	3	289	270
77	Etofibrate	C ₁₈ H ₁₈ ClNO ₅	363	ESI ⁺	30	15	364	150, 169, 113, 236
78	Fenfluramine	C ₁₂ H ₁₆ F ₃ N	231	ESI ⁺	20	13	232	159, 187
79	Fenofibrate	C ₂₀ H ₂₁ ClO ₄	360	ESI ⁺	40	15	361	233, 139
80	Finasteride	C ₂₃ H ₃₆ N ₂ O ₂	372	ESI ⁺	50	32	373	305, 317, 95, 69, 57
81	Flavoxate	C ₂₄ H ₂₅ NO ₄	391	ESI ⁺	30	17	392	112, 307, 263
82	Fluoxetine	C ₁₇ H ₁₈ F ₃ NO	309	ESI ⁺	30	20	310	259, 148, 70, 105, 117, 231
83	Fluoxymesterone	C ₂₀ H ₂₉ FO ₃	336	ESI ⁺	50	40	337	131
84	Furosemide	C ₁₂ H ₁₁ ClN ₂ O ₅ S	330	ESI ⁻	10	20	329	285, 205
85	Gemfibrozil	C ₁₅ H ₂₂ O ₃	250	ESI ⁻	25	8	249	121, 127
86	Gildenafil	C ₁₉ H ₂₂ N ₄ O ₃	354	ESI ⁺	45	25	355	327, 285, 297
87	Glibenclamide	C ₂₃ H ₂₈ ClN ₃ O ₅ S	493	ESI ⁻	50	26	492	170, 367, 378, 460

編號	名稱	分子式	分子量	離子化 模式	進樣錐電壓 (V)	碰撞能量 (eV)	前驅離子 (m/z)	產物離子 (m/z)
88	Glycopyrronium	$C_{19}H_{28}NO_3^+$	317	ESI ⁺	35	3	318	116, 58, 88
89	Griseofulvin	$C_{17}H_{17}ClO_6$	352	ESI ⁺	35	18	353	165, 285, 215, 69
90	Guaifenesin	$C_{10}H_{14}O_4$	198	ESI ⁺	20	7	199	163, 125, 181, 151
91	Homatropine	$C_{16}H_{21}NO_3$	275	ESI ⁺	40	23	276	124, 142, 93
92	Homosildenafil	$C_{23}H_{32}N_6O_4S$	488	ESI ⁺	60	37	489	283, 113, 72
93	Hydralazine	$C_8H_8N_4$	160	ESI ⁺	35	16	161	89, 116, 132, 145
94	Hydrochlorothiazide	$C_7H_8ClN_3O_4S_2$	297	ESI ⁻	40	27	296	269, 205
95	Hydrocortisone	$C_{21}H_{30}O_5$	362	ESI ⁺	35	20	363	121, 309, 267, 241, 187, 147
96	Hydroxyacetildenafil	$C_{25}H_{34}N_6O_4$	482	ESI ⁺	50	40	483	143, 127, 112, 97
97	Hydroxyhomosildenafil	$C_{23}H_{32}N_6O_5S$	504	ESI ⁺	60	35	505	487, 112, 99
98	Hydroxythiohomosildenafil	$C_{23}H_{32}N_6O_4S_2$	520	ESI ⁺	50	30	521	99, 503, 327, 299, 129, 112
99	Hydroxyvardenafil	$C_{23}H_{32}N_6O_5S$	504	ESI ⁺	50	35	505	151, 99, 312, 299, 376
100	Ibuprofen	$C_{13}H_{18}O_2$	206	ESI ⁻	20	6	205	161, 159
101	Imidazosagatriazinone	$C_{17}H_{20}N_4O_2$	312	ESI ⁺	40	24	313	285, 256, 166
102	Indomethacin	$C_{19}H_{16}ClNO_4$	357	ESI ⁺	20	3	358	312, 89
103	Ketoconazole	$C_{26}H_{28}Cl_2N_4O_4$	530	ESI ⁺	50	40	531	82, 489, 255, 244, 177, 112
104	Ketoprofen	$C_{16}H_{14}O_3$	254	ESI ⁺	30	15	255	209, 105, 177
105	Lidocaine	$C_{14}H_{22}N_2O$	234	ESI ⁻	40	25	233	215, 143, 120
106	Liothyronine	$C_{15}H_{12}I_3NO_4$	651	ESI ⁺	40	20	652	606, 508, 635
107	Lorazepam	$C_{15}H_{10}Cl_2N_2O_2$	320	ESI ⁺	30	15	321	275, 320
108	Mazindol	$C_{16}H_{13}ClN_2O$	284	ESI ⁺	35	19	285	44
109	Mefenamic acid	$C_{15}H_{15}NO_2$	241	ESI ⁺	20	15	242	224
110	Melatonin	$C_{13}H_{16}N_2O_2$	232	ESI ⁺	30	11	233	174, 216
111	Mephenesin	$C_{10}H_{14}O_3$	182	ESI ⁺	20	10	183	147, 135, 109, 121, 165
112	Mephentermine	$C_{11}H_{17}N$	163	ESI ⁺	20	15	164	133, 91
113	Meprobamate	$C_9H_{18}N_2O_4$	218	ESI ⁺	15	5	219	158, 97
114	Metformin	$C_4H_{11}N_5$	129	ESI ⁺	25	20	130	60, 71, 85, 88, 113
115	Methamphetamine	$C_{10}H_{15}N$	149	ESI ⁺	20	11	150	91, 119
116	Methandriol	$C_{20}H_{32}O_2$	304	ESI ⁺	30	20	305	270, 214
117	Methandrostenolone	$C_{20}H_{28}O_2$	300	ESI ⁺	30	13	301	149, 283, 121

編號	名稱	分子式	分子量	離子化 模式	進樣錐電壓 (V)	碰撞能量 (eV)	前驅離子 (m/z)	產物離子 (m/z)
118	Methaqualone	C ₁₆ H ₁₄ N ₂ O	250	ESI ⁺	40	26	251	132, 91, 161
119	Metharbital	C ₉ H ₁₄ N ₂ O ₃	198	ESI ⁻	25	20	197	42
120	Methimazole	C ₄ H ₆ N ₂ S	114	ESI ⁺	30	26	115	57, 81, 88, 100, 82, 83, 56
121	Methylprednisolone	C ₂₂ H ₃₀ O ₅	374	ESI ⁺	50	35	375	135, 357, 161
122	Methyltestosterone	C ₂₀ H ₃₀ O ₂	302	ESI ⁺	40	25	303	109, 97
123	Metoclopramide	C ₁₄ H ₂₂ ClN ₃ O ₂	299	ESI ⁺	30	15	300	227, 184
124	Metronidazole	C ₆ H ₉ N ₃ O ₃	171	ESI ⁺	25	17	172	128, 82, 111, 56
125	Minoxidil	C ₉ H ₁₅ N ₅ O	209	ESI ⁺	30	16	210	193, 164, 137, 110, 84
126	Morphine	C ₁₇ H ₁₉ NO ₃	285	ESI ⁺	30	20	286	165, 153, 181, 209
127	Nalidixic acid	C ₁₂ H ₁₂ N ₂ O ₃	232	ESI ⁺	25	10	233	215
128	Nandrolone	C ₁₈ H ₂₆ O ₂	274	ESI ⁺	35	22	275	109, 257, 239, 83
129	Naproxen	C ₁₄ H ₁₄ O ₃	230	ESI ⁺	15	15	231	185, 170
130	Nicametate	C ₁₂ H ₁₈ N ₂ O ₂	222	ESI ⁺	20	12	223	150, 106, 78, 100
131	Nifedipine	C ₁₇ H ₁₈ N ₂ O ₆	346	ESI ⁺	35	25	347	195, 223, 167, 253, 270
132	Nitrofurantoin	C ₈ H ₆ N ₄ O ₅	238	ESI ⁺	30	15	239	222, 95, 122, 168, 67
133	Noracetildenafil	C ₂₄ H ₃₂ N ₆ O ₃	452	ESI ⁺	50	30	453	97, 113, 453, 70, 325, 353, 297, 396
134	Norethisterone	C ₂₀ H ₂₆ O ₂	298	ESI ⁺	30	15	299	109, 299, 231, 135
135	Norfloxacin	C ₁₆ H ₁₈ FN ₃ O ₃	319	ESI ⁺	30	15	320	302, 233, 276, 205
136	Norneosildenafil	C ₂₂ H ₂₉ N ₅ O ₄ S	459	ESI ⁺	50	35	460	283, 299, 311, 256, 84
137	Nortadalafil	C ₂₁ H ₁₇ N ₃ O ₄	375	ESI ⁺	30	20	376	276, 254, 135, 262, 302
138	Nylidrin	C ₁₉ H ₂₅ NO ₂	299	ESI ⁺	40	25	300	150, 91, 133, 105, 282
139	Orlistat	C ₂₉ H ₅₃ NO ₅	495	ESI ⁻	40	14	494	158, 140, 266, 451
140	Orphenadrine	C ₁₈ H ₂₃ NO	269	ESI ⁺	20	6	270	181
141	Oxethazaine	C ₂₈ H ₄₁ N ₃ O ₃	467	ESI ⁺	40	18	468	145, 204, 277, 336
142	Oxymetholone	C ₂₁ H ₃₂ O ₃	332	ESI ⁺	30	10	333	187, 223, 239
143	Oxyphenbutazone	C ₁₉ H ₂₀ N ₂ O ₃	324	ESI ⁺	35	17	325	160, 162, 176, 227, 297
144	Oxyphencylimine	C ₂₀ H ₂₈ N ₂ O ₃	344	ESI ⁺	40	18	345	129
145	Pentazocine	C ₁₉ H ₂₇ NO	285	ESI ⁺	30	20	286	218, 69, 159, 175
146	Phenacetin	C ₁₀ H ₁₃ NO ₂	179	ESI ⁺	40	25	180	110, 138
147	Phenazopyridine	C ₁₁ H ₁₁ N ₅	213	ESI ⁺	40	18	214	122, 77, 93

編號	名稱	分子式	分子量	離子化 模式	進樣錐電壓 (V)	碰撞能量 (eV)	前驅離子 (m/z)	產物離子 (m/z)
148	Phenformin	C ₁₀ H ₁₅ N ₅	205	ESI ⁺	30	23	206	60, 105, 164
149	Phenobarbital	C ₁₂ H ₁₂ N ₂ O ₃	232	ESI ⁻	20	14	231	42, 188, 85
150	Phenolphthalein	C ₂₀ H ₁₄ O ₄	318	ESI ⁻	43	3	317	93, 265, 169
151	Phentermine	C ₁₀ H ₁₅ N	149	ESI ⁺	15	9	150	133, 91
152	Phentolamine	C ₁₇ H ₁₉ N ₃ O	281	ESI ⁻	40	21	280	133, 120, 161, 197, 210
153	Phenylbutazone	C ₁₉ H ₂₀ N ₂ O ₂	308	ESI ⁻	30	26	307	279, 131, 160
154	Phenylephrine	C ₉ H ₁₃ NO ₂	167	ESI ⁺	20	11	168	150
155	Phenylpropanolamine	C ₉ H ₁₃ NO	151	ESI ⁺	19	11	152	134
156	Pioglitazone	C ₁₉ H ₂₀ N ₂ O ₃ S	356	ESI ⁻	30	30	355	312, 150, 178, 115, 284
157	Piperiacetildenafil	C ₂₄ H ₃₁ N ₅ O ₃	437	ESI ⁺	50	26	438	98
158	Piperidenafil	C ₂₂ H ₂₉ N ₅ O ₄ S	459	ESI ⁺	50	30	460	151, 284, 312
159	Pirenzepine	C ₁₉ H ₂₁ N ₅ O ₂	351	ESI ⁺	40	16	352	113, 252, 141, 70
160	Piroxicam	C ₁₅ H ₁₃ N ₃ O ₄ S	331	ESI ⁺	34	26	332	95
161	Prednisolone	C ₂₁ H ₂₈ O ₅	360	ESI ⁺	20	12	361	147, 325, 307, 265, 361, 343
162	Prednisone	C ₂₁ H ₂₆ O ₅	358	ESI ⁺	25	14	359	341, 313, 267, 147, 93, 213, 171
163	Primidone	C ₁₂ H ₁₄ N ₂ O ₂	218	ESI ⁺	20	12	219	162, 119, 174
164	Probenecid	C ₁₃ H ₁₉ NO ₄ S	285	ESI ⁻	30	13	284	240, 141, 198, 164
165	Procaine	C ₁₃ H ₂₀ N ₂ O ₂	236	ESI ⁺	25	15	237	164, 120, 100
166	Progesterone	C ₂₁ H ₃₀ O ₂	314	ESI ⁺	40	16	315	97, 109, 297, 85
167	Propantheline	C ₂₃ H ₃₀ NO ₃ ⁺	368	ESI ⁺	40	19	369	100, 181, 326, 253
168	Propranolol	C ₁₆ H ₂₁ NO ₂	259	ESI ⁺	35	25	260	116, 183, 157, 98, 74, 72
169	Quinine	C ₂₀ H ₂₄ N ₂ O ₂	324	ESI ⁺	50	27	325	81, 307, 184, 160, 253, 110, 264
170	Ranitidine	C ₁₃ H ₂₂ N ₄ O ₃	314	ESI ⁺	30	14	315	176, 270, 124, 144, 224
171	Reserpine	C ₃₃ H ₄₀ N ₂ O ₉	608	ESI ⁺	65	28	609	195, 397, 174, 448
172	Rimonabant	C ₂₂ H ₂₁ Cl ₃ N ₄ O	462	ESI ⁺	50	25	463	363, 84
173	Rosiglitazone	C ₁₈ H ₁₉ N ₃ O ₃ S	357	ESI ⁺	50	33	358	135
174	Salicylamide	C ₇ H ₇ NO ₂	137	ESI ⁻	25	15	136	118, 93, 91
175	Salicylic acid	C ₇ H ₆ O ₃	138	ESI ⁻	25	11	137	93
176	Scopolamine	C ₁₇ H ₂₁ NO ₄	303	ESI ⁺	30	25	304	138, 121, 186, 110, 98
177	Secobarbital	C ₁₂ H ₁₈ N ₂ O ₃	238	ESI ⁻	25	16	237	42, 194, 85, 150

編號	名稱	分子式	分子量	離子化 模式	進樣錐電壓 (V)	碰撞能量 (eV)	前驅離子 (m/z)	產物離子 (m/z)
178	Sibutramine	C ₁₇ H ₂₆ ClN	279	ESI ⁺	40	18	280	179, 153, 139, 125, 97
179	Sildenafil	C ₂₂ H ₃₀ N ₆ O ₄ S	474	ESI ⁺	50	35	475	100, 58, 283, 311
180	Stanozolol	C ₂₁ H ₃₂ N ₂ O	328	ESI ⁺	75	37	329	81, 95, 107, 135
181	Strychnine	C ₂₁ H ₂₂ N ₂ O ₂	334	ESI ⁺	70	38	335	184, 156, 144, 264, 222
182	Sulfadiazine	C ₁₀ H ₁₀ N ₄ O ₂ S	250	ESI ⁺	30	13	251	156, 92, 94, 96
183	Sulfadimethoxine	C ₁₂ H ₁₄ N ₄ O ₄ S	310	ESI ⁺	40	17	311	156, 245, 218, 108, 92
184	Sulfamerazine	C ₁₁ H ₁₂ N ₄ O ₂ S	264	ESI ⁺	30	15	265	156, 172, 110, 92
185	Sulfamethazine	C ₁₂ H ₁₄ N ₄ O ₂ S	278	ESI ⁺	35	15	279	186, 156, 124, 92
186	Sulfamethizole	C ₉ H ₁₀ N ₄ O ₂ S ₂	270	ESI ⁺	35	14	271	156, 108, 92
187	Sulfamethoxazole	C ₁₀ H ₁₁ N ₃ O ₃ S	253	ESI ⁺	25	16	254	156, 188, 147, 108, 92
188	Sulfamethoxypyridazine	C ₁₁ H ₁₂ N ₄ O ₃ S	280	ESI ⁺	35	15	281	156, 126, 108, 92, 188
189	Sulfanilamide	C ₆ H ₈ O ₂ N ₂ S	172	ESI ⁺	10	10	173	92, 108, 156
190	Sulfathiazole	C ₉ H ₉ N ₃ O ₂ S ₂	255	ESI ⁺	40	15	256	156, 108, 92
191	Sulfinpyrazone	C ₂₃ H ₂₀ N ₂ O ₃ S	404	ESI ⁺	35	19	405	279, 185, 387, 253, 93, 294
192	Sulfisoxazole	C ₁₁ H ₁₃ N ₃ O ₃ S	267	ESI ⁺	25	11	268	156, 113, 108, 92
193	Sulindac	C ₂₀ H ₁₇ FO ₃ S	356	ESI ⁺	36	25	357	233, 248, 295, 340
194	Synephrine	C ₉ H ₁₃ NO ₂	167	ESI ⁺	25	7	168	150
195	Tadalafil	C ₂₂ H ₁₉ N ₃ O ₄	389	ESI ⁺	30	20	390	268, 135
196	Terbinafine	C ₂₁ H ₂₅ N	291	ESI ⁺	25	13	292	141, 170, 93
197	Terfenadine	C ₃₂ H ₄₁ NO ₂	471	ESI ⁺	40	23	472	436, 454, 58
198	Testosterone	C ₁₉ H ₂₈ O ₂	288	ESI ⁺	10	15	289	97, 109, 122
199	Tetracaine	C ₁₅ H ₂₄ N ₂ O ₂	264	ESI ⁺	25	17	265	220, 176, 72
200	Theobromine	C ₇ H ₈ N ₄ O ₂	180	ESI ⁺	25	20	181	138, 67, 163, 110, 122
201	Theophylline	C ₇ H ₈ N ₄ O ₂	180	ESI ⁺	40	25	181	96, 69, 124
202	Thiodimethylsildenafil	C ₂₃ H ₃₂ N ₆ O ₃ S ₂	504	ESI ⁺	50	30	505	99, 113, 327, 299, 71, 393
203	Thiohomosildenafil	C ₂₃ H ₃₂ N ₆ O ₃ S ₂	504	ESI ⁺	60	40	505	113, 99, 73, 299, 327
204	Thioridazine	C ₂₁ H ₂₆ N ₂ S ₂	370	ESI ⁺	40	25	371	126, 98
205	Thiosildenafil	C ₂₂ H ₃₀ N ₆ O ₃ S ₂	490	ESI ⁺	50	37	491	341, 100, 58
206	Tinidazole	C ₈ H ₁₃ N ₃ O ₄ S	247	ESI ⁺	20	10	248	121, 93, 128, 110
207	Tolbutamide	C ₁₂ H ₁₈ N ₂ O ₃ S	270	ESI ⁻	30	20	269	170

編號	名稱	分子式	分子量	離子化模式	進樣錐電壓 (V)	碰撞能量 (eV)	前驅離子 (m/z)	產物離子 (m/z)
208	Triamcinolone	C ₂₁ H ₂₇ FO ₆	394	ESI ⁻	33	12	393	363, 345, 325
209	Vardenafil	C ₂₃ H ₃₂ N ₆ O ₄ S	488	ESI ⁺	50	40	489	151, 114, 99, 72, 58
210	Vardenafil analogue 【2-(2-ethoxy-phenyl)-5-methyl-7-propyl-3H-imidazo(51-f)-(1,2,4)triazin-4-one】	C ₁₇ H ₂₀ N ₄ O ₂	312	ESI ⁺	50	31	313	151
211	Xanthinol Niacinate	C ₁₃ H ₂₁ N ₅ O ₄	311	ESI ⁺	30	3	312	124
212	Yohimbine	C ₂₁ H ₂₆ N ₂ O ₃	354	ESI ⁺	50	30	355	212, 144
213	Zolpidem	C ₁₉ H ₂₁ N ₃ O	307	ESI ⁺	45	25	308	235, 263

註：1.毛細管電壓均為 3 kV。

2.以上參數不適時，依所使用之儀器，設定適合之參數。