

## Selective Reaction Monitoring (SRM) Daten von mehr als 900 Xenobiotika für Aufbau und Validierung von LC-MS/MS Analysen

---

Brunhilde Güssregen, Stefanie Schröfel, Markus Nauck, Torsten Arndt

---

*Bioscientia Institut für Medizinische Diagnostik GmbH, Konrad-Adenauer-Str. 17, 55218 Ingelheim;  
e-mail: torsten.arndt@bioscientia.de*

Die Flüssigkeitschromatographie-Tandem-Massenspektrometrie (LC-MS/MS) hat in den letzten Jahren eine zunehmende Bedeutung nicht nur in der klinisch-chemischen sondern auch in der toxikologischen Analytik gewonnen. Sie kann heute neben den klassischen Verfahren wie UV/VIS-Spektrometrie, Hochleistungs-Flüssigkeitschromatographie (HPLC) und Gaschromatographie-Massenspektrometrie (GC-MS) als integraler Bestandteil der qualitativen und quantitativen Analytik gewertet werden. Dies drückt sich nicht zuletzt in der steigenden Zahl der Meldungen von mit LC-MS/MS erhobenen GTFCh- Ringversuchsergebnissen aus. Die Ursachen für diese Popularität sind vielfältig. Es sind u. a. einige analytische Vorteile im Vergleich zu den o. g. Analysentechniken:

- Vereinfachte Probenvorbereitung (z. B. ohne Derivatisierungsreaktionen),
- Einsatz geringerer Probenmengen,
- Kürzere Chromatographie- und dadurch Analysezeiten,
- Spezifitätssteigerung durch die Kombination von minimal 4 Identifizierungskriterien (Retentionszeit, Massenübergänge 1 und 2 [SRM 1 und SRM 2], Intensitätsverhältnis von SRM1 und SRM2), deren Anzahl bei Verwendung von mehr als 2 SRM erhöht werden kann,
- Eignung für alle löslichen Substanzen unabhängig von ihrer Fähigkeit, zerstörungsfrei in die Gasphase überführt werden zu können.

Derzeitige Nachteile der LC-MS/MS im Methodenvergleich sind:

- Fehlende Standardisierung sowohl der Chromatographie- als auch der Tandem-Massenspektrometrie-Analysenteilschritte,
- Variabilität der Massenspektren infolge der vglw. milden Fragmentierungsbedingungen,
- Fehlen von allgemein verfügbaren LC-MS/MS-Spektren- und/oder Massenübergangs (SRM)-Bibliotheken mit einer der Pfleger-Maurer-Weber Bibliothek [1] oder der Pragst et al. UV-Spektren-Bibliothek [2] nur annähernd vergleichbaren Informationsdichte zu jeweils mehreren tausend Substanzen,
- Geringere Erfahrungen im Einsatz im toxikologischen Labor.

Das Fehlen einer LC-MS/MS-Datensammlung ist unbefriedigend, weil bereits eine Vielzahl von geeigneten Informationen verstreut im Internet und der Literatur vorliegt, aber z. T. nur mühsam aufzufinden ist. Dies ist insbesondere dann nachteilig, wenn in einem akuten Intoxikationsfall ggf. mit Verdacht auf eine bestimmte Substanz oder Substanzgruppe für die erforderliche experimentelle Ermittlung der LC-MS/MS-Massenspektren oder der Massenübergänge keine Standardsubstanz zur Verfügung steht.

Einen wichtigen Ansatz zur Behebung dieses Defizits präsentiert Weinmann unter [3]. Dort ist eine LC-MS/MS-Massenspektrensammlung zu ca. 800 Substanzen mit je Substanz 3 (bei 20V, 35V und 50V Kollisionsenergie aufgenommenen) Massenspektren (API 365 Tripel-Quadrupol-Massenspektrometer) frei zugänglich. Diese äußerst hilfreiche Datensammlung ist offenbar inspiriert durch die Pfleger-Maurer-Weber GC-MS-Spektren-Bibliothek [1]. Sie

demonstriert aber gleichzeitig sehr deutlich ein Kernproblem der toxikologischen LC-MS/MS-Suchanalyse, die Nichtvergleichbarkeit der Massenspektren infolge milder Fragmentierungsbedingungen. So differieren bereits die für eine Substanz mit demselben API 365 Tripelquadrupol bei verschiedenen Kollisionsenergien aufgezeichneten Massenspektren erheblich. Bei Einsatz verschiedener Tripelquadrupol-Massenspektrometer eines Herstellers oder verschiedener Produzenten wird diese Variabilität noch stärker ausgeprägt sein. Ein Spektrenvergleich (wie in der GC-MS) sollte deshalb für LC-MS/MS-Massenspektren nur innerhalb eines Gerätes (bei definierter Kollisionsenergie) und sonst nicht oder nur sehr eingeschränkt möglich sein.

Im Unterschied hierzu stellten wir immer wieder fest, dass Massenübergänge aus der Literatur unabhängig von Tripel-Quadrupol-Massenspektrometer-Typ und -Hersteller sehr gut mit den von uns experimentell ermittelten Massenübergängen übereinstimmen. Wir belegen diese Feststellung in Tabelle 1 anhand einer objektiven Substanzauswahl, den Zielanalyten des zukünftigen Drogenscreenings im Rahmen der Fahreignungsbegutachtung [4].

Aufgrund dieser positiven Erfahrungen wurde von uns im Rahmen einer Diplomarbeit [5] eine Massenübergangs (SRM)-Datenbank aufgebaut. Diese Datensammlung speist sich aus den folgenden 3 Quellen:

- a) Eigene Tune-Experimente mit einem Thermo Fisher Quantum Ultra AM Tandem-Massenspektrometer mit Infusion von je 2 µg/L Substanz (in Methanol), Datensammlung mit der systeminternen Xcalibur 1.4 Software und Registrierung der 6 intensivsten Massenübergänge mit ihren zugehörigen Kollisionsenergien.
- b) Auswertung der von Weinmann unter [3] gezeigten LC-MS/MS Massenspektren bzgl. der 6 intensivsten Fragmentationen und der zugehörigen Kollisionsenergien.
- c) SRM-Angaben aus der Literatur.

Derzeit enthält diese Datenbank SRM-Daten zu mehr als 900 Substanzen (Tabelle 2). SRM geringer Selektivität wie z. B. solche durch Verlust von Wasser (Massendifferenz 18) oder Produkt-Ionen geringer Molmasse wurden nicht nur aus Vollständigkeitsgründen in der SRM-Datensammlung belassen. Einerseits können sie zu einer Empfindlichkeitssteigerung beitragen (nicht selten ist der auf Wasserverlust basierende Massenverlust der intensivste). Andererseits sind bei kleinen Ausgangsmolmassen keine hochmolekularen Produkt-Ionen zu erwarten. Schließlich sollte die analytische und diagnostische Wertigkeit eines Produkt-Ions nicht ohne experimentelle Belege präjudiziert werden.

Die in Tabelle 2 am Ende dieser Arbeit gezeigten Datensätze sind Bestandteil einer in unserem Labor im Aufbau befindlichen LC-MS/MS-basierten Suchanalyse (LC-MS/MS Multi Target Screening). Das analytische Potential dieses Analysenkonzeptes bestätigen klinisch-toxikologische Auftragsanalysen sowie erfolgreich durchgeführte Ringversuche der GTFCH und DGKL.

Neben der alphabetischen Listung der Substanzen mit Precursor-Ion, Produkt-Ionen, zugehörigen Kollisionsenergien und Datenquelle (Tabelle 2) bietet die Datenbank vielfältige Abfrageoptionen z. B. nach isobaren Ausgangsmassen (Precursor-Ionen) und/oder isobaren Produkt-Ionen. Diese Suchoptionen haben sich bei der Validierung von LC-MS/MS-Analysenverfahren und -ergebnissen als sehr hilfreich erwiesen.

So können unter Verwendung der Datenbank isobare Massenübergänge z. B. von Nortilidin/Propranolol [5], Codein/Hydrocodon, Morphin/Hydromorphon und Atropin/ Benzoyllecgonin [6] schon im Vorfeld eines LC-MS/MS-Analysenaufbaus schnell erkannt und die chromatographischen Bedingungen unter Vermeidung einer Koelution dieser Substanzen entsprechend angepasst werden.

**Tabelle 1.** Vergleichbarkeit der mit Tripelquadrupol-Massenspektrometern verschiedener Hersteller gewonnenen intensivsten MS/MS-Massenübergänge (SRM) am Beispiel der zukünftigen Zielanalyte [4] des Drogenscreenings im Rahmen der Fahreignungsbegutachtung.

*Graue Felder:* Experimentell ermittelte Daten aus dem Labor der Bioscientia GmbH (Thermo Fisher Quantum Ultra AM Tripelquadrupol-Massenspektrometer) [5].

*Helle Felder:* Durch Selektion der intensivsten Produkt-Ionen aus den bei 20V, 35V und 50V Kollisionsenergie (CE) erzeugten und unter [3] publizierten Massenspektren (API 365 Tripelquadrupol-Massenspektrometer) gewonnene Daten bzw. Übernahme aus der Literatur.

Substanz	M+1/z	Ion 1 (CE)	Ion 2 (CE)	Ion 3 (CE)	Lit.
Morphin	286	153 (49)	165 (50)	181 (45)	5
	286	153 (50)	165 (50)	181 (45)	3
Codein	300	165 (53)	153 (50)	199 (42)	5
	300	165 (50)	153 (50)	199 (42)	3
DHC	302	199 (43)	171 (51)		5
	302	199 (50)	171 (50)		3
THC (M-1/z)	313	191 (45)	245 (38)	311 (39)	5
	(M+1/z)	315	193 (20)		9
THC-COOH (M-1/z)	343	325 (31)	297 (43)	191 (53)	5
	(M+1/z)	345	327 (20)	299 (20)	193 (35)
Benzoylcegonin	290	168 (26)	105 (54)	82 (50)	5
	290	168 (20)	105 (35)	82 (35)	3
Amphetamin	136	91 (18)	65 (37)		5
	136	91 (35)	65 (50)		3
Methamphetamin	150	91 (30)	119 (21)	65 (44)	5
	150	91 (20)	119 (20)	65 (50)	3
MDMA	194	163 (13)	105 (23)	79 (33)	5
	194	163 (20)	105 (35)	79 (50)	3
MDEA	208	163 (12)	105 (30)	135 (25)	5
	208	163 (20)	105 (35)	135 (25)	3
MDA	180	135 (18)	163 (10)	77 (34)	5
	180	135 (20)	163 (20)	77 (50)	3
Methadon	310	265 (25)	105 (44)	91 (46)	5
	310	265 (20)	105 (35)	91 (50)	3
EDDP	278	234 (43)	249 (35)	219 (49)	5
	278	234	249		10
Diazepam	285	193 (45)	154 (43)	222 (38)	5
	285	193 (35)	154 (35)	222 (35)	3
Nordiazepam	271	165 (33)	140 (32)	208 (29)	5
	271	165 (35)	140 (45)	208 (35)	3
Oxazepam	287	241 (25)	269 (31)	104 (45)	5
	287	241 (35)	269 (20)	104 (50)	3
Alprazolam	309	281 (42)	205 (53)	274 (32)	5
	309	281 (35)	205 (50)	274 (35)	3
$\alpha$ -OH-Alprazolam	325	216 (46)	297 (32)		5
	325	216 (44)	297 (32)		20
Bromazepam	316	182 (37)	209 (31)	181 (52)	5
	316	182 (35)	209 (35)	181 (50)	3
Flunitrazepam	314	268 (40)	239 (44)	211 (44)	5
	314	268 (35)	239 (50)	211 (50)	3
7-Aminoflunitrazepam	284	227 (17)	135 (24)	226 (37)	5
	284	227 (35)	135 (35)	226 (50)	3

Die hier genannten Beispiele unterstreichen darüber hinaus die Forderung nach mindestens 2 (besser 3) Massenübergängen (SRM), Berechnung der SRM-Intensitätsverhältnisse und ausreichender Beachtung der Chromatographie in toxikologischen LC-MS/MS-Analysen [6]. Der Identifizierung von interferierenden Substanzen wird in der LC-MS/MS-Literatur zu-

nehmend Beachtung geschenkt [6-8]. Nach unserer Erfahrung kann eine SRM-Datenbank dabei sehr hilfreich sein.

Unsere Datenbank und die hier in Tabelle 2 gezeigten Datensätze erheben nicht den Anspruch auf Vollständigkeit. Für viele Analyte findet sich eine größere Zahl von Literaturstellen mit ebenso geeigneten Angaben zu LC-MS/MS-Massenübergängen. Eine encyclopädische, d. h. lückenlose, Erfassung aller LC-MS/MS-Literaturstellen zu jeder Substanz war und ist jedoch nicht das Ziel bei Aufbau und Pflege unserer Datenbank. Eine Vollständigkeit bzgl. der Erfassung von mindestens 2 SRM zu möglichst vielen Substanzen ist dagegen anzustreben. Für eine einzelne Arbeitsgruppe kann dies aufgrund der großen Zahl unterschiedlichster Datenquellen stets nur eine Annäherung an das Ziel bedeuten. Wir möchten deshalb anregen, eine allgemein zugängliche Plattform und eine fachliche Betreuung für eine LC-MS/MS-SRM-Datenbank, z. B. unter der Webseite der GTFCH, zu etablieren.

## Literatur

1. Pflieger K, Maurer HH, Weber A. Mass Spectral and GC Data on Drugs, Poisons, Pesticides, Pollants and Their Metabolites. Verlag Chemie, Weinheim, 2007.
2. Pragst F, Herzler M, Herre S, Erxleben B-T, Rothe M. UV-Spectra of Toxic Compounds . Database of Photodiode Array UV Spectra of Illegal and Therapeutic Drugs, Ecotoxic Compounds and Other Poisons. CD-ROM version 2007 and Manual version 2001 (Verlag Dr. Dieter Helm, Heppenheim 2001) and Supplement volume (Verlag Toxicological Chemistry, Berlin 2008).
3. Weinmann W. <http://www.chemicalsoft.de/msmlib2005/MS2-2005-index.html>
4. Mußhoff F. Neue Anforderungen an chemisch-toxikologische Untersuchungen bei Abstinenzkontrollen im Rahmen der Fahreignungsdiagnostik. Roche-Symposium - Die Rolle des Labors bei Drogenmissbrauch und Drogenentzug. Düsseldorf, 20.11.2008, Abstractband.
5. Schröfel S. Aufbau und Implementierung einer Datenbank zum Medikamenten- und Drogennachweis mit Hochleistungs-Flüssigkeitschromatographie-Tandem-Massenspektrometrie (LC-MS/MS) in einem klinisch-chemischen Labor. Diplomarbeit, Fachhochschule Bingen FB1 Life Sciences and Engineering, Bingen, 2008.
6. Sauvage F-L, Gaulier J-M, Marquet P. Pitfalls and prevention strategies for liquid chromatography-tandem mass spectrometry in the selected reaction monitoring mode for drug analysis. *Clin Chem* 2008;54:1519-1527.
7. Keller BO, Sui J, Young AB, Whittal RM. Interferences and contaminants encountered in modern mass spectrometry. *Anal Chimica Acta* 2008;627:71-81.
8. Annesley TM. Ion suppression in mass spectrometry. *Clin Chem* 2003;49:637-642.
9. Müller C. Entwicklung von Screeningverfahren für Arzneistoffe und Metaboliten mittels LC-MS und LC-MS/MS. Dissertationsschrift, Universität Freiburg, 2004. <http://www.freidok.uni-freiburg.de/volltexte/1402/pdf/Dissertation.pdf>
10. Johansen SS, Linnert K. Chiral analysis of methadone and its main metabolite EDDP in postmortem blood by liquid chromatography-mass spectrometry. *J Anal Toxicol* 2008;32:499-504.
11. Gergov M, Robson JN, Duchoslav E, Ojanperae I. Automated liquid chromatographic/tandem mass spectrometric method for screening beta-blocking drugs in urine. *J Mass Spectrom* 2000;35:912-918.
12. Weinmann W, Gergov M., Goerner M. MS/MS-libraries with triple quadrupole-tandem mass spectrometers for drug identification and drug screening. *Analisis* 2000;28:934-41.
13. Grobosch T, Binscheck T, Müller H, Angelow B, Martens F, Lampe D. A toxic self-made beverage: Analyt-ics of alkaloids from *Veratrum album* by LC-MS/MS. *T + K* (2008) 75:63-67.
14. Van De Steene JC, Lambert WE. LC-ESI-MS/MS analysis of nine basic pharmaceuticals in influent, effluent and surface water. Laboratory of Toxicology, University Ghent. [www.toxicologie.ugent.be/images/PosterHPLC2007nieww.ppt](http://www.toxicologie.ugent.be/images/PosterHPLC2007nieww.ppt)
15. Sturm S. A general unknown screening for drugs and toxic compounds in human serum. Dissertationsschrift, Universität Basel, 2005.
16. Ojanpara I, Gergov M, Rasanen I, Lunetta P, Toivonen S, Tiainen E, Vuori E. Blood levels of 3-methylfentanyl in 3 fatal poisoning cases. *Am J For Med Pathol* 2006;27:328-331.
17. Weinmann W, Dresen S. [www.chemicalsoft.de/mts%20400.pdf](http://www.chemicalsoft.de/mts%20400.pdf)

18. Palleschi L, Lucentini L, Ferretti E, Anastasi F, Amoroso M, Draisci G. Quantitative determination of sufentanil in human plasma by liquid chromatography-tandem mass spectrometry. *J Pharm Biomed Anal* 2003;32:329-336.
19. Oertel BG, Schmidt R, Schneider A, Geisslinger G, Lotsch J. The  $[\mu]$ -opioid receptore gene polymorphism 118A>G depletes alfentanil-induced analgesia and protects against respiratory depression in homozygous carriers. *Pharmacogenet Genomics* 2006;16:625-636.
20. Quintela O, Sauvage F-L, Charvier F, Gaulier J-M, Lachatre G, Marquet P. Liquid chromatography-tandem mass spectrometry for detection of low concentrations of 21 benzodiazepines, metabolites, and analogs in urine: method with forensic applications. *Clin Chem* 2006;52:1346-1355.
21. Lachenmeier K. Methoden und Methodenkombination zur forensisch-toxikologischen Haaranalytik und Verwendung in klinischen Studien. Dissertationsschrift, Universität Bonn, 2006.

**Tabelle 2. Precursor-Ionen (m/z), Produkt-Ionen (Ion 1-6) und zugehörige Kollisionsenergien (CE in Volt) bei der LC-MS-MS Analyse von ca. 900 Substanzen in alphabetischer Listung.**

*Anmerkung: Differierende Precursor-Ionen für eine Substanz aus unterschiedlichen Literaturstellen können durch Addukte (z. B. Na, K) bzw. durch Selektion von in der ESI-Quelle entstandenen Zerfalls-Ionen bedingt sein.*

Compound	m/z	Ion 1	CE	Ion 2	CE	Ion 3	CE	Ion 4	CE	Ion 5	CE	Ion 6	CE	Ref
Acebutolol	337	116	34	319	28	260	30	98	28	74	34	218	33	5
	337	116	35	72	35	56	50	98	35	-	-	-	-	3
	337	319	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
	337	116	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	11
Aceclidine	170	110	20	128	35	82	35	42	50	-	-	-	-	3
Acenocoumarol	354	163	20	296	20	192	20	249	50	-	-	-	-	3
Aceprometazine	327	86	35	240	35	-	-	-	-	-	-	-	-	3
	327	240	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Acetaminodantrolene	327	186	35	172	35	228	20	130	50	158	50	131	50	3
Acetaminophen	152	57	33	88	20	90	22	92	37	87	39	73	59	5
	152	110	20	65	35	43	35	93	35	92	35	-	-	3
	152	110	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Acetanilide	136	108	20	78	35	96	35	-	-	-	-	-	-	3
Acetazolamide	223	181	20	164	35	59	50	73	35	-	-	-	-	3
Acetylamino-nitropropoxybenzene	239	197	20	109	35	155	20	151	20	43	50	-	-	3
Acetylsalicylic acid	179	93	33	137	22	59	43	65	45	75	50	135	27	5
Acipimox	155	137	20	109	20	155	20	58	35	111	20	-	-	3
Acriflavonium	224	209	35	182	50	181	50	207	35	-	-	-	-	3
Acrivastine	349	278	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Actinoquinol	254	226	35	145	50	117	50	-	-	-	-	-	-	3
Adrenalone	182	146	20	164	20	118	35	123	35	-	-	-	-	3
Ajmalicine	353	144	35	210	20	178	35	117	50	-	-	-	-	3
Ajmaline	327	144	50	158	50	182	50	194	50	210	50	-	-	3
	327	158	50	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Alachlor	270	238	20	162	20	45	35	-	-	-	-	-	-	3
Alfentanyl	417	268	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	19
Alimemazine	299	100	20	58	50	212	35	180	50	-	-	-	-	3
Alizapride	316	124	35	148	35	176	35	133	50	-	-	-	-	3
Almitrine	478	203	35	183	50	201	50	274	50	-	-	-	-	3
Alprazolam	309	205	53	281	42	177	47	255	39	204	48	274	32	5
	309	281	35	205	50	165	35	274	35	-	-	-	-	3
Alprenolol	250	56	35	72	35	91	50	74	35	-	-	-	-	3
	250	173	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
	250	91	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	11
Altretamine	211	96	35	71	35	-	-	-	-	-	-	-	-	3
Amantadine	152	135	18	77	38	79	34	93	31	91	32	107	31	5
	152	135	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Ambroxol	379	264	32	104	50	185	40	183	43	182	50	81	39	5
	379	264	20	116	35	-	-	-	-	-	-	-	-	3
Amcinonide	503	339	20	399	20	381	20	-	-	-	-	-	-	3



Compound	m/z	Ion 1	CE	Ion 2	CE	Ion 3	CE	Ion 4	CE	Ion 5	CE	Ion 6	CE	Ref
Azidocillin	376	160	20	114	50	87	50	104	50	-	-	-	-	3
Azinphos methyl	318	132	20	160	20	125	20	104	35	95	35	77	50	3
Aziprotryne	226	156	20	125	20	83	20	198	20	58	20	89	20	3
Azithromycin	750	158	50	591	35	116	50	83	50	434	50	573	50	3
Azoluron	231	138	20	112	20	94	20	110	35	84	35	82	50	3
Azosemide	371	97	20	147	20	-	-	-	-	-	-	-	-	3
Bacampicillin	466	276	20	186	20	232	20	160	35	114	50	202	35	3
Baclofen	214	151	35	178	20	196	20	77	35	115	50	95	35	3
Bambuterol	368	294	20	72	50	312	20	-	-	-	-	-	-	3
Bamethan	210	192	20	91	35	121	20	119	35	-	-	-	-	3
Bamifylline	386	297	35	105	50	116	35	193	35	-	-	-	-	3
Barverin	510	174	35	112	50	-	-	-	-	-	-	-	-	3
Beclamid	198	91	20	120	20	65	50	-	-	-	-	-	-	3
Befunolol	292	177	35	250	20	203	35	56	35	274	20	189	35	3
	292	177	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Bemetizide	402	133	20	105	50	305	20	339	20	253	20	385	20	3
Benactyzine	328	100	35	118	35	310	20	239	20	167	35	105	35	3
Benazepril	425	351	35	190	50	118	50	91	50	164	50	144	50	3
	425	351	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Benazeprilat	397	351	20	190	35	118	50	91	50	131	50	144	50	3
Bendamustine	359	341	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	3
Bendiacarb	224	109	20	167	20	-	-	-	-	-	-	-	-	3
Benomyl	291	192	20	160	35	-	-	-	-	-	-	-	-	3
Benorilate	314	121	20	152	20	110	50	-	-	-	-	-	-	3
Benproperine	310	126	35	91	50	84	50	107	35	-	-	-	-	3
Bentiromide	405	240	20	105	35	-	-	-	-	-	-	-	-	3
4-Benzamidosalicyclic acid	258	105	35	240	20	77	50	95	50	118	50	-	-	3
Benzatropine	308	167	35	152	50	142	50	98	50	-	-	-	-	3
	308	167	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Benzobarbital	337	105	20	95	50	-	-	-	-	-	-	-	-	3
Benzocaine	166	138	20	94	35	77	35	65	50	95	35	120	35	3
	166	138	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Benzocetamine	250	191	35	189	50	-	-	-	-	-	-	-	-	3
	250	191	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Benzoyllecgonine	290	168	26	105	54	77	49	82	50	91	54	119	43	5
	290	168	20	105	35	150	35	82	35	119	35	91	50	3
	290	168	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
	290	168	30	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	12
Benzquinamide	405	154	35	345	35	100	50	272	35	193	35	72	50	3
Benzthiazide	432	91	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	3
Benzylamine	310	86	20	58	50	174	35	-	-	-	-	-	-	3
Berberine	336	320	35	292	35	321	35	278	50	304	50	318	50	3
Betaine	118	58	35	59	20	-	-	-	-	-	-	-	-	3
Betamethasone 17-valerate	477	279	20	355	20	337	20	-	-	-	-	-	-	3
Betamethasone 17-benzoate	497	279	20	355	20	337	20	319	20	291	20	147	35	3
Betaxolol	308	72	35	98	35	55	35	74	35	-	-	-	-	3
	308	116	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
	308	98	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	11
Bethanidine	178	91	35	71	20	147	20	65	50	-	-	-	-	3
Bezafibrate	362	316	20	121	35	139	35	276	20	161	35	207	20	3
Bifonazole	311	243	20	157	20	165	50	130	50	-	-	-	-	3
Biperiden	312	98	31	70	33	294	30	143	33	128	49	96	23	5
	312	98	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Bisacodyl	362	184	35	226	20	183	50	167	50	-	-	-	-	3
Bisoprolol	326	116	20	74	35	56	50	98	35	133	35	72	50	3
	326	116	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
	326	74	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	11
Bitertanol	338	99	35	70	50	269	35	251	35	183	50	-	-	3
Boprobezin	306	201	20	57	35	116	20	106	35	86	35	42	50	3
Bornaprine	330	171	35	67	50	91	50	114	35	86	50	129	50	3

Compound	m/z	Ion 1	CE	Ion 2	CE	Ion 3	CE	Ion 4	CE	Ion 5	CE	Ion 6	CE	Ref
Brallobarbitol	287	81	20	42	35	205	20	162	20	-	-	-	-	3
Brimonidine	292	212	35	249	35	44	50	170	50	-	-	-	-	3
Bromacil	261	205	20	188	35	-	-	-	-	-	-	-	-	3
Bromazepam	316	182	37	181	52	208	48	209	31	259	52	260	45	5
	316	182	35	209	35	260	35	208	50	181	50	184	35	3
	316	182	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Bromazine	334	245	20	166	35	165	50	-	-	-	-	-	-	3
Bromhexine	377	114	20	264	35	83	50	263	50	-	-	-	-	3
Bromocriptine	655	346	35	301	50	637	20	347	50	384	35	286	50	3
	655	346	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Bromopride	344	271	20	228	35	227	35	256	50	200	50	270	35	3
Brompheniramine	320	275	20	168	50	274	35	195	50	-	-	-	-	3
	319	274	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Bromurone	244	72	35	46	50	73	35	47	50	-	-	-	-	3
Brotizolam	393	314	37	279	43	282	55	210	57	227	50	339	30	5
	394	315	35	211	50	245	50	314	35	-	-	-	-	3
	395	315	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Brucine	395	244	50	229	50	324	50	263	50	213	50	350	50	3
Bucizine	433	155	35	173	20	111	50	217	20	154	35	113	50	3
Buclosamide	228	155	35	74	20	172	20	57	35	99	50	127	50	3
Bufexamac	224	107	20	163	20	122	20	77	50	57	35	41	50	3
Buflomedil	308	237	20	140	20	195	50	180	50	-	-	-	-	3
Bufotenine	205	58	35	160	20	115	50	-	-	-	-	-	-	3
Bumadizone	327	185	20	253	20	93	50	309	20	-	-	-	-	3
Bumetanide	365	240	20	184	35	284	20	156	50	183	50	196	50	3
Bunazosin	374	247	32	261	31	304	28	231	51	233	52	245	36	5
Bunitrolol	249	193	20	56	35	120	35	-	-	-	-	-	-	3
	249	193	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Bupivacaine	289	140	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Bupranolol	272	216	20	56	35	74	35	155	35	181	35	-	-	3
	272	216	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Buprenorphine	468	396	46	414	42	187	47	243	54	225	53	211	54	5
	468	396	50	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Buspirone	386	122	50	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Butalamine	317	188	20	199	20	145	35	156	35	-	-	-	-	3
Butamirate	308	100	35	91	50	119	35	191	35	72	35	-	-	3
Butaperazine	410	141	35	113	35	70	50	-	-	-	-	-	-	3
	410	141	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Butinoline	292	167	20	274	20	115	35	152	50	165	50	202	50	3
Butizide	354	337	20	253	35	205	35	230	35	142	50	198	35	3
Butoxycaine	294	100	20	221	20	121	35	165	35	177	20	72	35	3
Butoxycarboxim	223	44	20	63	20	106	20	86	20	65	20	-	-	3
Cafaminol	268	223	35	222	35	-	-	-	-	-	-	-	-	3
Camazepam	372	255	35	283	20	-	-	-	-	-	-	-	-	3
Candesartan	441	263	20	423	20	192	35	194	35	207	35	235	35	3
	441	263	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Capreomycin	669	652	35	507	50	455	50	282	50	-	-	-	-	3
Caproylesorcinol	209	123	20	139	20	149	20	111	35	93	35	95	50	3
Captopril	218	116	20	70	50	75	35	172	20	103	20	-	-	3
	218	116	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Carazolol	299	116	17	194	28	222	17	167	35	184	30	193	34	5
	299	116	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
	299	116	20	222	20	194	35	184	35	56	50	74	35	3
Carbachol	149	121	20	65	35	93	20	-	-	-	-	-	-	3
Carbamazepine	237	194	23	193	36	192	27	179	32	165	47	190	45	5
	237	194	20	192	35	179	50	165	50	152	50	-	-	3
	237	194	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Carbamazepine 10,11-epoxide	253	180	35	210	20	236	20	254	20	167	50	182	35	3
Carbaril	202	145	20	117	35	127	50	115	50	91	50	-	-	3
Carbendazim	192	160	20	132	35	65	50	92	50	105	50	-	-	3
Carbimazole	187	115	20	143	20	88	35	57	35	-	-	-	-	3



Compound	m/z	Ion 1	CE	Ion 2	CE	Ion 3	CE	Ion 4	CE	Ion 5	CE	Ion 6	CE	Ref
	187	115	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Carbinoxamine	291	202	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Carboxin	236	143	20	93	35	87	35	43	35	124	35	-	-	3
Carbutamide	272	156	20	74	20	108	35	92	35	65	50	57	50	3
Carbuterol	268	194	20	134	35	250	20	177	20	151	20	57	50	3
	268	194	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Carisoprodol	261	176	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Carprofen	274	228	20	193	35	-	-	-	-	-	-	-	-	3
Carteolol	293	237	20	202	35	74	35	57	35	160	50	122	50	3
	293	237	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Carvedilol	407	100	35	224	35	194	50	222	50	56	50	-	-	3
	407	222	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
	407	222	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	11
Cefadroxil	364	114	20	208	20	158	20	134	35	86	50	68	50	3
Cefalexin	348	158	20	174	20	140	35	106	35	118	35	68	50	3
Cefotaxime	456	324	20	156	35	277	20	125	50	167	35	211	35	3
Cefpirome	515	120	20	396	20	324	20	167	35	156	35	277	20	3
Celiprolol	380	251	35	74	35	233	35	216	35	307	35	204	35	3
	380	251	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
	380	251	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	11
Cerivastatine	460	356	50	400	35	314	50	324	50	-	-	-	-	3
Cetirizine	389	201	20	166	50	-	-	-	-	-	-	-	-	3
	389	201	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Cevadine	592	574		456		162								13
Chinidine	325	184	26	307	23	172	36	253	34	79	32	198	24	5
Chlorambucil	305	193	35	169	35	242	20	192	35	168	35	119	50	3
Chlorbenzoxamine	435	201	20	166	50	233	20	-	-	-	-	-	-	3
Chlorcyclizine	201	166	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Chlordiazepoxide	300	227	40	283	24	165	57	192	50	282	31	241	30	5
	300	282	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Chlorfluazuron	540	383	20	158	35	347	50	187	50	141	50	-	-	3
Chloridazon	222	92	35	104	35	65	50	77	50	95	50	-	-	3
Chlormezanone	274	154	20	209	20	117	35	152	35	208	35	138	50	3
Chloroquine	320	247	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Chloroxylonol	158	77	20	95	20	141	20	51	50	118	20	-	-	3
Chlorphenamine	275	230	20	202	35	167	50	194	35	118	50	-	-	3
	275	230	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Chlorphenethazine	305	72	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	3
	305	72	50	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Chlorpromazine	319	86	20	58	35	239	35	-	-	-	-	-	-	3
	319	246	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Chlorpropham	214	141	20	158	20	77	35	95	35	-	-	-	-	3
Chlorprothixene	316	231	35	271	35	221	50	236	35	-	-	-	-	3
	316	231	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Chlorpyriphos-methyl	324	292	20	125	35	143	20	109	35	79	50	214	50	3
Chlorthenoxazine	212	121	20	65	50	93	35	56	50	-	-	-	-	3
8-Chlortheophylline	215	158	35	42	50	130	35	122	35	-	-	-	-	3
Chlorzoxazone	170	114	35	99	35	124	50	99	50	62	50	56	50	3
Ciclopiroxolamine	208	136	35	162	35	94	35	53	35	55	35	81	35	3
Cilazapril	418	211	20	70	50	114	50	183	50	-	-	-	-	3
Cimetidine	253	159	20	95	35	117	20	99	35	-	-	-	-	3
Cinnarizine	369	167	20	165	50	152	50	-	-	-	-	-	-	3
	369	167	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
	369	167	-	115	-	-	-	-	-	-	-	-	-	14
Cinoxacin	263	245	20	189	35	217	35	161	35	131	50	105	50	3
Ciprofloxacin	332	288	20	314	20	245	35	204	35	231	50	203	50	3
Citalopram	325	109	30	262	27	234	32	246	51	83	56	227	42	5
	325	109	35	262	20	234	35	116	35	247	35	-	-	3
	325	109	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Clemastine	344	215	20	137	50	180	35	178	50	130	35	103	50	3
	344	215	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Clenbuterol	278	204	20	203	20	260	20	169	35	168	35	133	35	3

Compound	m/z	Ion 1	CE	Ion 2	CE	Ion 3	CE	Ion 4	CE	Ion 5	CE	Ion 6	CE	Ref
	260	169	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Clioquinol	306	179	35	151	50	-	-	-	-	-	-	-	-	3
Clobazam	301	259	43	224	47	195	57	223	44	216	45	215	42	5
	301	259	35	224	35	105	50	216	50	153	50	-	-	3
	301	259	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Clobutinol	256	238	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Clomethiazole	162	112	44	113	28	126	34	71	41	85	49	65	50	5
	162	113	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Clomipramine	315	86	27	58	34	227	54	242	38	192	59	220	42	5
	315	86	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
	315	270	-	242	-	86	-	58	-	-	-	-	-	6
Clonazepam	316	270	34	214	48	241	35	207	41	190	51	206	33	5
	316	270	35	214	50	241	50	206	50	205	50	180	50	3
	316	270	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Clonidine	230	133	56	160	43	145	58	152	46	124	50	187	26	5
	230	44	35	213	35	44	50	124	50	133	50	-	-	3
	230	213	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Clopamide	346	250	35	169	35	55	50	98	50	112	35	138	50	3
Clostebolacetate	365	323	20	305	20	143	35	131	35	269	20	159	35	3
Cloxiquine	180	145	35	117	35	127	50	90	50	100	50	-	-	3
Clozapine	327	192	55	270	33	227	43	165	59	164	60	296	37	5
	327	270	35	192	50	227	50	127	20	-	-	-	-	3
	327	270	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Cocaine	304	182	28	82	52	91	47	105	44	77	43	108	40	5
	304	182	20	82	35	105	35	150	35	119	50	91	50	3
	304	182	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Codeine	300	165	53	152	59	153	50	199	42	215	35	128	60	5
	300	165	50	153	50	155	50	181	50	199	50	171	50	3
	300	215	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Caffeine	195	138	22	110	24	123	30	83	34	99	11	69	21	5
	195	138	20	110	35	83	35	42	50	56	50	69	35	3
	195	138	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Colchicine	400	310	35	326	35	358	35	298	35	282	35	295	50	3
Corticosterone	347	329	20	121	35	97	50	105	50	159	50	91	50	3
Cortisone	361	163	35	121	35	135	35	107	50	93	50	145	35	3
Coumatetralyl	293	175	35	91	35	107	50	121	50	79	50	131	35	3
	293	175	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Cromoglicic acid	469	245	20	263	20	207	35	206	50	451	20	217	50	3
Cyamemazine	324	100	20	58	50	237	35	279	20	-	-	-	-	3
Cyanazine	241	214	20	205	20	104	35	96	35	68	50	132	35	3
Cyclandelate	277	125	20	69	35	135	20	68	35	-	-	-	-	3
Cyclizine	267	167	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Cyclobarbitol	235	42	35	192	20	-	-	-	-	-	-	-	-	3
Cyphenotrin	376	181	35	123	35	208	20	151	20	81	50	330	20	3
Cytarabine	244	112	20	95	50	-	-	-	-	-	-	-	-	3
D-Norpseudoephedrine	152	134	20	117	20	115	35	91	35	-	-	-	-	3
Dectaflur	268	55	50	69	35	83	35	97	20	42	50	-	-	3
Deflazacort	442	142	50	400	35	124	50	121	50	147	50	312	35	3
Dehydrocholic acid	403	385	20	367	20	339	20	349	20	321	35	159	35	3
Delorazepam	306	141	35	140	50	215	35	180	50	207	50	-	-	3
Demeton-O	259	89	20	61	50	-	-	-	-	-	-	-	-	3
Demeton-S-methylsulfone	263	169	20	121	20	127	35	125	35	109	35	231	20	3
Demoxepam	287	269	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Desethylamiodarone	618	72	50	373	50	201	50	159	50	44	50	58	50	3
Desethylatrazine	188	146	20	104	35	79	35	68	35	43	50	110	35	3
Desipramine	267	72	28	193	43	192	55	208	39	165	60	194	55	5
Desmedipham	301	136	35	182	20	154	20	108	50	93	50	111	50	3
Desmethyl diazepam (s. Nordiazepam)														
Desoxycortone 21-(3-phenylpropionate)	463	105	50	97	50	109	50	146	35	331	20	133	35	3
Desoxycortone enantate	443	97	35	331	20	109	35	113	35	85	35	138	35	3
Dexamethasone	393	355	20	337	20	237	20	147	35	319	20	279	20	3

Compound	m/z	Ion 1	CE	Ion 2	CE	Ion 3	CE	Ion 4	CE	Ion 5	CE	Ion 6	CE	Ref
Dexamethasone 21-isonicotinate	498	478	20	124	50	106	50	460	20	147	50	237	35	3
Dexfenfluramine	232	159	35	109	50	187	20	200	35	46	35	139	50	3
Dextropropoxyphene	340	58	20	128	56	91	42	143	38	266	18	105	45	5
	340	266	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Diamorphine (s. Heroin)														
Diaveridine	261	245	35	123	35	81	50	217	35	107	50	187	50	3
Diazepam	285	193	43	154	43	222	38	257	30	206	56	241	48	5
	285	154	35	193	35	222	35	228	35	257	35	180	35	3
	285	222	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
	285	193	40	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	12
Dibenzepin	296	251	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Dibutyladipate	259	129	20	101	35	111	20	83	35	55	50	57	50	3
Dichlone	227	121	20	42	35	45	50	91	35	77	50	95	50	3
Dichlorfluamid	333	123	35	224	20	-	-	-	-	-	-	-	-	3
Diclofenac	296	214	44	236	22	179	42	178	14	222	45	208	15	5
Dienestrol	267	107	35	121	20	173	20	238	35	145	35	157	50	3
Dienogest	312	161	35	135	35	159	35	91	50	133	35	105	50	3
Diethazine	299	100	20	72	50	198	35	44	50	-	-	-	-	3
Diethylcarbamazine	200	100	20	72	35	127	20	44	50	-	-	-	-	3
Difenoconazole	406	251	35	337	20	188	50	-	-	-	-	-	-	3
Difenoxuron	287	72	35	123	35	46	35	95	50	-	-	-	-	3
Digitoxin	765	280	43	187	48	650	33	323	36	147	41	706	21	5
Digoxin	781	97	35	651	20	131	50	243	35	521	20	-	-	3
Dihydralazine	191	129	20	102	35	174	20	147	20	165	20	191	20	3
Dihydrocodeine	302	199	43	171	51	201	41	128	59	141	56	165	50	5
	302	199	50	171	50	195	35	227	35	-	-	-	-	3
	302	199	50	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Dihydroergotamine	584	270	35	253	35	566	20	322	35	-	-	-	-	3
3,5-Diidotyrosine	434	388	20	290	35	261	35	417	20	375	35	134	50	3
Dilazep	605	195	50	253	50	393	35	153	50	-	-	-	-	3
	605	195	50	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Diltiazem	415	178	35	150	50	370	20	310	20	137	50	-	-	3
	415	178	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Dimefuron	339	72	50	167	35	256	20	140	50	-	-	-	-	3
Dimethachlor	256	224	20	148	35	105	50	132	50	-	-	-	-	3
4-(Dimethylamino)phenol	138	123	20	122	35	108	35	94	50	-	-	-	-	3
1,5-Dimethyl-3,3-diphenyl-2-ethylidenpyrrolidine	278	234	43	219	49	186	43	249	35	158	55	157	58	5
Dimetindene	293	248	20	106	50	58	50	232	50	107	50	-	-	3
Dimetotiazine	392	86	20	305	20	238	35	198	50	-	-	-	-	3
Dimettriazole	142	96	20	95	35	81	35	112	20	-	-	-	-	3
Dionine	314	165	51	153	51	157	51	183	42	181	47	201	42	5
	314	229	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Dioxethedrin	212	194	20	103	35	179	35	131	35	164	35	123	35	3
Diphenamid	240	134	35	167	35	91	50	152	50	165	50	-	-	3
Diphenhydramine	256	165	46	152	47	167	29	166	43	128	53	164	60	5
	256	167	20	152	50	165	50	-	-	-	-	-	-	3
	256	167	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Diprophylline	255	181	20	124	35	96	50	69	50	-	-	-	-	3
Dipyridamole	505	429	50	385	50	-	-	-	-	-	-	-	-	3
	505	429	50	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Disopyramide	340	239	20	195	35	194	50	-	-	-	-	-	-	3
	340	239	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Dithianon	297	281	20	265	35	249	35	114	50	73	50	191	50	3
Dithranol	227	181	35	152	50	209	20	153	35	-	-	-	-	3
Dixyrazine	428	229	35	187	35	98	50	101	50	212	35	180	50	3
	428	229	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Dobutamine	302	137	35	107	35	91	50	166	20	119	35	-	-	3
Docetaxel	808	226	20	527	20	509	20	182	35	327	20	345	20	3
Domperidone	426	175	-	147	-	-	-	-	-	-	-	-	-	14
Dorzolamide	325	135	50	199	20	216	20	46	20	91	50	151	35	3

Compound	m/z	Ion 1	CE	Ion 2	CE	Ion 3	CE	Ion 4	CE	Ion 5	CE	Ion 6	CE	Ref
Doxapram	379	292	35	97	50	129	50	167	50	264	35	143	35	3
	379	292	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Doxepine	280	107	21	165	56	202	38	115	49	77	38	178	48	5
	280	107	35	84	35	235	20	58	35	-	-	-	-	3
	280	235	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Doxylamine	271	182	20	167	35	90	20	-	-	-	-	-	-	3
Drazoloxon	238	130	35	177	20	126	20	99	50	-	-	-	-	3
Drofenine	318	245	20	91	50	100	35	163	35	-	-	-	-	3
Droperidol	380	123	51	165	41	194	25	95	58	113	57	93	48	5
Ebastine	470	203	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Ecgonine methyl ester	200	81	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
EDDP	278	234	43	219	49	186	43	249	35	158	55	157	58	5
	278	234												10
Embutramide	294	121	35	191	20	208	20	135	35	149	20	276	20	3
	294	208	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Enalapril	377	234	20	303	20	117	50	160	35	-	-	-	-	3
	377	234	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Ephedrine	166	148	23	115	43	91	42	133	30	117	29	132	43	5
	166	148	20	115	35	91	35	133	35	-	-	-	-	3
Epinephrine	184	77	54	122	26	105	40	91	32	166	20	94	34	5
Epitestosterone	289	97	35	109	35	253	20	123	35	271	20	-	-	3
Eprosartan	425	207	35	135	50	107	50	163	50	-	-	-	-	3
	425	207	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Ergotamine	582	564	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Esculin	341	179	20	133	50	123	50	-	-	-	-	-	-	3
Esmolol	296	145	35	219	20	116	35	-	-	-	-	-	-	3
	296	145	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Estazolam	295	205	49	267	33	241	35	163	53	240	40	239	46	5
Etafedrine	194	176	20	135	20	60	20	117	35	-	-	-	-	3
Etafenone	326	100	20	72	50	44	50	-	-	-	-	-	-	3
Etamivan	224	151	20	224	50	100	20	123	35	72	35	108	50	3
Ethacridine	254	226	35	197	50	225	35	-	-	-	-	-	-	3
Ethenzamide	166	121	20	149	20	120	20	-	-	-	-	-	-	3
	166	149	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Ethosuximide	142	114	13	65	31	84	56	53	10	110	43	43	38	5
Ethyl (2-naphthylloxy)acetate	231	157	20	127	50	129	35	-	-	-	-	-	-	3
Ethyl benzolin	272	198	20	170	35	-	-	-	-	-	-	-	-	3
Ethylglucuronide	221	85	15	113	19	76	33	203	26	112	18	-	-	5
Ethylmorphin (s. Dionine)														
Ethyl parathion	292	236	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Ethyl sulfate	125	97	26	80	50	96	50	64	52	93	21	43	54	5
Etidocaine	277	128	20	86	50	-	-	-	-	-	-	-	-	3
Etilefrine	182	164	20	91	35	135	35	-	-	-	-	-	-	3
Etofylline	225	181	20	124	35	45	35	-	-	-	-	-	-	3
Etoloxamine	284	100	35	72	35	44	50	58	50	-	-	-	-	3
Etryptamine	189	130	20	172	20	58	20	-	-	-	-	-	-	3
Fedrilate	348	100	35	161	35	142	20	-	-	-	-	-	-	3
Felodipine	384	356	35	338	20	352	20	287	50	-	-	-	-	3
	384	338	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Fenarimol	332	269	35	185	20	81	50	-	-	-	-	-	-	3
Fenazepam	351	206	50	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Fendiline	316	212	20	105	35	91	35	-	-	-	-	-	-	3
	316	212	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Fenetylline	342	91	35	207	35	119	20	224	20	-	-	-	-	3
	342	207	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Fenfluramine	232	159	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Fenfuram	202	109	20	43	50	-	-	-	-	-	-	-	-	3
Fenofibrate	361	233	20	121	35	139	35	111	50	-	-	-	-	3
Fenoterol	304	135	20	107	50	286	20	152	35	-	-	-	-	3
Fenpipramide	323	238	20	182	50	-	-	-	-	-	-	-	-	3
Fenpiprane	280	167	35	91	35	165	50	152	50	-	-	-	-	3

Compound	m/z	Ion 1	CE	Ion 2	CE	Ion 3	CE	Ion 4	CE	Ion 5	CE	Ion 6	CE	Ref
Fenproporex	189	91	20	119	20	-	-	-	-	-	-	-	-	3
Fentanyl	337	105	45	188	31	103	49	79	45	77	47	132	45	5
	337	188	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Fenticonazole	456	200	50	199	35	-	-	-	-	-	-	-	-	3
Fexofenadine	502	466	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Flavoxate	392	112	35	147	50	263	35	307	35	-	-	-	-	3
Flecainide	415	398	33	301	42	209	56	232	42	98	48	135	58	5
	415	398	35	301	50	98	35	332	50	0	50	-	-	3
	415	398	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Floctafenine	407	295	50	315	35	-	-	-	-	-	-	-	-	3
Fluanisone	357	165	35	123	50	-	-	-	-	-	-	-	-	3
Flubendazole	314	282	-	123	-	-	-	-	-	-	-	-	-	14
Flucloxacillin	454	196	35	238	20	160	35	339	20	295	20	436	20	3
Fluconazole	307	220	20	238	20	169	35	151	50	-	-	-	-	3
	307	238	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Fludrocortisone	423	239	35	343	35	181	50	43	50	-	-	-	-	3
Flumazenil	304	91	37	212	12	58	37	65	27	247	26	71	36	5
Flunitrazepam	314	268	40	239	44	183	55	211	44	222	49	198	56	5
	314	268	35	239	50	211	50	-	-	-	-	-	-	3
	314	268	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
	314	268	32	239	40	-	-	-	-	-	-	-	-	20
Fluorochloridone	312	292	35	53	50	-	-	-	-	-	-	-	-	3
Fluoxetine	310	148	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Flupentixol	435	305	35	265	50	100	35	128	35	-	-	-	-	3
	435	390	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Fluphenazine	438	171	35	143	35	100	50	98	50	70	50	280	50	3
	438	171	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Flupirtine	305	196	20	150	35	109	50	124	35	-	-	-	-	3
Flurazepam	388	315	32	317	29	287	43	225	45	258	59	224	53	5
	388	315	35	317	20	288	35	-	-	-	-	-	-	3
	388	315	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Fluvoxamine	319	71	20	45	50	259	20	200	35	-	-	-	-	3
	319	259	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Fominoben	402	159	20	244	35	166	50	105	50	-	-	-	-	3
Formetanate	222	165	20	46	35	93	50	120	35	-	-	-	-	3
Fuberidazole	185	157	35	156	35	65	50	129	50	-	-	-	-	3
Furalaxyl	302	242	20	95	35	270	20	-	-	-	-	-	-	3
Furazolidone	226	95	20	139	20	122	35	209	20	-	-	-	-	3
Furosemide	331	119	54	303	46	299	47	267	19	109	34	163	46	5
Gabapentin	172	154	23	137	23	67	26	91	33	95	30	119	31	5
Gallopamil	485	165	50	150	50	333	35	290	35	-	-	-	-	3
	485	165	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Gemfibrozil	251	129	20	83	20	55	50	128	20	123	20	57	35	3
Gentamicin	478	434	44	285	40	393	10	98	18	-	-	-	-	5
Gitoxigenin	391	355	20	215	20	229	35	337	20	161	50	171	50	3
Glafenine	373	281	35	280	50	246	50	-	-	-	-	-	-	3
Glibenclamide	494	369	20	169	35	304	35	288	35	-	-	-	-	3
	494	369	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Glibornuride	367	170	20	152	20	135	20	196	20	349	20	107	50	3
	367	152	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Gliclazide	324	127	20	110	35	153	35	168	20	91	35	155	35	3
	324	127	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Glimepiride	491	352	20	126	50	181	50	335	35	167	35	-	-	3
	491	352	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Glipizide	446	321	20	347	20	100	20	167	35	286	35	103	50	3
	446	321	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Gliquidon	528	403	20	386	35	202	35	103	50	167	35	121	50	3
	528	403	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Guanabenz	232	215	20	173	35	137	50	85	20	101	50	136	50	3
Guanethidine	199	140	20	86	20	55	35	72	35	44	50	-	-	3
Guanfacine	246	60	20	159	35	-	-	-	-	-	-	-	-	3
Guanoxan	208	166	20	100	20	119	35	41	50	-	-	-	-	3

Compound	m/z	Ion 1	CE	Ion 2	CE	Ion 3	CE	Ion 4	CE	Ion 5	CE	Ion 6	CE	Ref
Halcinonide	455	121	50	189	50	181	50	123	50	159	50	195	50	3
Haloperidol	376	123	47	165	33	95	60	358	26	113	45	194	31	5
	376	165	35	123	50	358	20	-	-	-	-	-	-	3
	376	165	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
	376	165	30	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	12
Haloxyfop ethoxyethyl ester	434	316	20	117	20	91	50	288	35	73	35	272	50	3
Heroin	370	165	53	211	39	268	41	193	40	191	42	181	47	5
	370	268	35	328	35	165	50	58	35	211	35	191	50	3
	370	165	50	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Hexamidine	355	338	20	120	50	137	35	-	-	-	-	-	-	3
Hexazinone	253	171	20	71	50	85	50	-	-	-	-	-	-	3
Hexobarbital	237	205	20	213	20	81	35	132	35	69	35	-	-	5
Hexobendine	593	253	50	310	35	195	50	-	-	-	-	-	-	3
Hexoprenaline	421	234	35	269	20	385	20	232	35	137	50	403	20	3
Histamine	112	95	20	94	20	68	35	41	35	-	-	-	-	3
Histapyrrodine	281	98	20	210	20	91	35	56	50	-	-	-	-	3
Homatropine	276	124	35	142	35	93	35	-	-	-	-	-	-	3
Hordenine	166	121	20	103	35	77	50	91	35	93	35	95	50	3
Hydralazine	161	89	20	116	20	-	-	-	-	-	-	-	-	3
Hydrocodone	300	199	42	171	48	128	59	141	52	153	55	152	58	5
	300	199	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Hydrocortisone	363	121	35	309	20	123	50	-	-	-	-	-	-	3
Hydrocortisone 21-acetate	405	309	20	121	50	241	35	327	20	185	35	43	50	3
Hydromorphone	286	185	43	157	49	128	60	153	54	152	59	199	40	5
Hydroxychloroquine	336	247	35	158	35	179	50	191	50	102	50	205	50	3
	336	247	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
$\alpha$ -Hydroxyalprazolam	325	216	46	297	32	205	50	189	37	214	57	251	38	5
	325	297	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
	325	297	32	216	44	-	-	-	-	-	-	-	-	20
$\gamma$ -Hydroxybutyric acid	103	57	12	85	11	101	13	59	49	-	-	-	-	5
11-Hydroxy-delta9-tetrahydrocannabinol	331	313	20	193	35	201	35	105	50	295	20	-	-	3
	331	313	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Hydroxymethylpyridine	110	93	35	80	20	79	35	-	-	-	-	-	-	3
8-Hydroxyquinoline	146	74	35	83	35	101	50	75	50	118	20	77	50	3
9-Hydroxyrisperidone	427	207	35	110	50	-	-	-	-	-	-	-	-	3
Hydroxyzine	375	201	20	166	50	165	50	-	-	-	-	-	-	3
	375	201	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Hymecromone	177	105	20	121	20	103	35	77	50	-	-	-	-	3
Ibuprofen	206	161	30	91	49	119	27	105	44	117	57	115	53	5
Imipenem	346	103	20	172	20	284	20	126	50	112	50	-	-	3
Imipramine	281	86	26	58	36	193	47	208	39	192	59	165	58	5
	281	208	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Indanazoline	202	44	50	115	50	91	50	-	-	-	-	-	-	3
Indapamide	366	132	20	91	50	117	50	-	-	-	-	-	-	3
Indomethacin	358	139	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Indoramin	348	217	20	105	50	174	35	144	35	-	-	-	-	3
Inositol nicotinate	811	106	50	229	50	460	35	-	-	-	-	-	-	3
Iopodic acid	599	345	50	427	50	327	50	301	50	-	-	-	-	3
Ipratropium	333	167	35	124	35	291	35	93	50	166	50	-	-	3
Ipirazochrome	265	248	20	192	20	150	35	177	35	220	20	132	50	3
Irbesartan	429	207	35	195	35	180	50	-	-	-	-	-	-	3
	429	207	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Isalon "Diwag"	265	100	20	192	20	72	50	58	35	-	-	-	-	3
Isoaminile	245	158	20	105	20	91	35	131	35	143	35	46	35	3
Isoconazole	415	159	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	3
Isoniazid	138	121	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Isoprenaline	212	194	20	152	20	107	35	135	35	134	35	106	35	3
Isoproturon	207	72	20	46	20	165	20	-	-	-	-	-	-	3
Isothipendyl	286	241	20	199	50	86	50	168	50	225	50	71	50	3
Isoxsuprine	302	284	20	150	35	107	35	105	50	133	35	95	50	3
Isradipine	372	312	20	208	35	340	20	209	35	236	35	254	35	3









Compound	m/z	Ion 1	CE	Ion 2	CE	Ion 3	CE	Ion 4	CE	Ion 5	CE	Ion 6	CE	Ref
Moxaverine	308	292	35	264	50	-	-	-	-	-	-	-	-	3
Moxisylyte	280	72	35	45	50	70	50	-	-	-	-	-	-	3
Moxonidine	242	44	35	199	35	206	35	56	35	-	-	-	-	3
Mycophenolic acid	321	159	34	207	16	177	33	91	40	165	45	239	25	5
Nabumetone	229	171	20	128	35	170	35	-	-	-	-	-	-	3
Naftidrofuryl	384	100	35	267	20	249	35	141	50	181	35	-	-	3
Naftifine	288	117	20	141	20	115	50	91	50	-	-	-	-	3
Nalidixic acid	233	215	20	187	35	159	50	131	50	104	50	-	-	3
Naloxone	328	310	27	212	44	268	28	253	34	184	51	226	46	5
	328	310	20	212	50	253	35	268	35	-	-	-	-	3
	328	310	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Naltrexone	342	212	58	324	30	267	31	270	38	282	33	228	39	5
	342	342	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Nandrolone	275	109	35	83	35	257	35	-	-	-	-	-	-	3
Nandrolone phenylpropionate	407	105	35	257	20	133	20	-	-	-	-	-	-	3
Naphazoline	211	141	50	44	35	115	50	-	-	-	-	-	-	3
Napropamide	272	129	20	199	20	171	20	74	20	100	35	58	35	3
Naproxen	231	185	20	170	35	153	35	141	50	169	50	95	35	3
Natamycin	666	503	20	485	35	648	20	345	20	131	50	157	50	3
Nateglinide	318	125	20	166	20	120	20	69	35	83	35	153	20	3
	319	166	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
N-Desmethyldoxepin	266	107	35	235	20	115	50	202	50	178	50	141	35	3
Nefopam	254	181	20	165	50	179	35	166	35	178	50	-	-	3
Nicametate	223	150	20	100	20	106	35	78	50	72	35	44	50	3
Nicardipine	480	315	35	166	20	148	35	91	50	359	35	269	50	3
	480	315	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Nicergoline	269	254	20	196	35	211	35	237	50	253	50	182	35	3
Nicotinamide	123	80	35	53	35	78	35	96	35	-	-	-	-	3
Nicotine	163	130	20	132	20	117	35	106	20	-	-	-	-	3
	163	132	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Nifedipine	347	167	48	254	31	195	41	194	43	192	52	223	40	5
	347	254	20	239	20	154	20	195	20	-	-	-	-	3
	347	254	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Nifenazone	309	291	20	106	35	78	50	159	35	-	-	-	-	3
Niflumic acid	283	265	35	245	50	145	50	217	50	168	50	196	50	3
Nilvadipine	386	326	20	312	20	344	20	280	35	316	20	221	35	3
	386	326	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Nimodipine	419	343	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Nimorazole	227	114	20	100	35	70	35	140	20	-	-	-	-	3
Nisoldipine	389	239	20	315	20	240	35	313	20	195	50	254	20	3
	389	357	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
N-Isopropylsalicylamide	180	121	20	138	20	65	50	93	35	-	-	-	-	3
Nitrazepam	282	236	29	180	59	207	42	190	49	152	59	153	59	5
	282	236	35	180	50	207	50	-	-	-	-	-	-	3
	282	236	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Nitrendipine	361	315	20	329	20	210	50	269	35	283	35	255	50	3
	361	315	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Nizatidine	332	286	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
N-Methylephedrine	180	162	20	46	20	135	20	91	35	117	20	147	20	3
N-methyl-1-(1,3-benzodioxol-5-yl)-2-butanamine	210	137	18	136	35	77	36	51	34	149	12	107	32	5
Nomifensine	239	44	50	196	20	91	35	118	35	181	35	-	-	3
Nonivamide	294	137	20	122	50	-	-	-	-	-	-	-	-	3
Norbuprenorphine	414	187	48	340	40	396	41	223	59	211	49	265	45	5
	414	187	50	101	50	57	50	211	50	-	-	-	-	3
	414	187	50	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Norclobazam	287	245	25	210	33	181	42	215	57	167	35	140	52	5
	287	245	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Norclomipramine	301	72	29	227	49	192	54	242	36	220	40	270	22	5
	301	270	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Nordiazepam	271	140	32	208	29	165	33	104	42	207	35	190	37	5



Compound	m/z	Ion 1	CE	Ion 2	CE	Ion 3	CE	Ion 4	CE	Ion 5	CE	Ion 6	CE	Ref
Oxomemazine	331	58	50	100	35	244	35	180	50	-	-	-	-	3
Oxprenolol	266	72	31	116	26	225	23	56	40	77	48	189	25	5
	266	72	20	116	20	225	20	56	35	98	35	-	-	3
	266	225	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
	266	72	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	11
Oxybuprocaine	309	192	20	100	35	136	50	236	20	72	50	108	50	3
Oxybutynin	358	142	35	72	50	97	35	105	35	124	35	189	35	3
Oxycodone	316	298	28	241	42	212	51	256	35	181	58	226	49	5
Oxycone	316	298	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Oxyfedrine	314	164	20	146	20	105	50	296	20	129	35	117	50	3
Oxymetazoline	261	205	35	57	35	44	50	135	50	-	-	-	-	3
Oxymorphone	302	284	30	227	41	198	53	242	40	181	55	161	44	5
Oxypendyl	371	241	35	213	50	-	-	-	-	-	-	-	-	3
Oxypertine	380	175	20	218	20	132	50	70	50	187	50	160	50	3
Oxytetracycline	461	426	35	443	20	201	50	283	50	365	50	444	20	3
Papaverine	340	202	35	324	35	171	50	296	35	308	50	187	50	3
	340	202	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Paramethoxyamphetamine	166	121	19	91	32	78	40	77	34	65	43	149	11	5
Paroxetine	330	192	20	70	50	44	35	123	35	178	35	151	35	3
	330	192	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Penbutolol	292	236	20	74	35	133	35	201	20	57	50	168	20	3
	292	236	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Pentamidine	341	324	35	137	35	120	35	-	-	-	-	-	-	3
Pentobarbital	225	42	25	182	25	171	27	138	30	85	18	153	27	5
	225	42	50	182	20	138	20	-	-	-	-	-	-	3
Pentoxifylline	279	181	20	99	20	43	50	138	35	-	-	-	-	3
Pentoxyverine	334	100	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Perazine	340	141	35	113	35	70	50	212	35	240	20	-	-	3
	340	141	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Perphenazine	404	171	35	143	35	100	50	70	50	246	35	-	-	3
	404	171	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Pethidine	248	220	31	174	30	70	40	91	44	103	44	131	41	5
	248	220	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Phenazone	189	147	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Phenazopyridine	214	122	20	80	50	93	35	121	35	77	35	109	35	3
Phenindione	223	205	20	176	50	177	35	151	50	195	20	-	-	3
Phenmedipham	301	168	20	136	35	93	50	108	50	-	-	-	-	3
Phenobarbital	231	42	16	137	22	199	27	144	30	149	32	123	49	5
	231	42	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	3
Phenoxyethylpenicillin	351	160	20	114	50	-	-	-	-	-	-	-	-	3
Phenprocoumon	281	203	20	175	35	121	50	107	50	-	-	-	-	3
Phentermine	150	91	32	65	45	77	50	105	25	63	54	79	22	5
Phentolamine	282	212	20	120	35	91	50	118	50	-	-	-	-	3
Phenylbutazone	309	160	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Phenylpropanolamine	152	134	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Phenyltoloxamine	256	72	35	70	50	42	50	-	-	-	-	-	-	3
	256	72	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Phenytoin	251	102	31	208	33	180	24	77	52	42	15	169	23	5
	253	182	20	104	35	225	20	-	-	-	-	-	-	3
	253	182	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Pholedrine	166	135	20	107	20	77	50	95	50	-	-	-	-	3
Phthalylsulfathiazole	404	256	20	156	35	149	35	108	50	92	50	223	50	3
Physostigmine	276	219	20	162	35	147	50	176	35	233	20	44	35	3
Pilocarpine	209	95	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Pindolol	249	116	20	172	20	74	35	56	50	144	35	-	-	3
	249	172	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
	249	144	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	11
Pioglitazone	357	134	35	119	50	135	35	-	-	-	-	-	-	3
	357	134	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Pipamperone	376	165	-	123	-	-	-	-	-	-	-	-	-	14
Pipemidic acid	304	217	35	286	35	189	50	215	50	148	50	243	35	3
Piprozolin	299	214	20	131	35	184	20	84	20	159	35	103	50	3



Compound	m/z	Ion 1	CE	Ion 2	CE	Ion 3	CE	Ion 4	CE	Ion 5	CE	Ion 6	CE	Ref
Proxipham	193	56	20	74	20	-	-	-	-	-	-	-	-	3
Pseudoephedrine	166	148	21	91	45	115	42	133	30	117	29	132	41	5
	166	148	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Psilocin	205	115	45	160	28	58	31	117	46	89	60	132	37	5
Pyrazinamide	124	107	20	79	20	81	20	97	20	52	35	-	-	3
Pyridoxine	170	134	23	152	17	77	36	80	32	106	32	79	39	5
	170	152	20	134	35	77	50	-	-	-	-	-	-	3
Pyritinol	369	153	35	124	50	199	35	135	50	-	-	-	-	3
Pyrvinium	383	367	50	353	50	185	50	-	-	-	-	-	-	3
Quetiapine	384	253	35	221	50	279	35	210	50	247	50	158	35	3
	384	253	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Quinapril	439	234	20	117	50	130	35	160	35	134	35	365	20	3
	439	234	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Quinaprilat	411	206	20	117	50	160	35	178	20	102	35	365	20	3
Quinine	325	160	35	184	35	79	50	307	35	172	50	198	35	3
	325	307	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Rabeprazole	360	242	-	195	-	-	-	-	-	-	-	-	-	14
Ramifenazone	246	56	35	125	20	153	20	96	20	204	20	187	20	3
Ramipril	417	234	35	130	35	117	50	160	35	343	20	134	35	3
	417	234	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Ramiprilat	389	206	35	156	35	117	50	160	35	102	35	343	20	3
Ranitidine	315	176	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Raubasine (s. Ajmalicine)														
Raupin	311	293	20	138	35	160	35	120	35	146	35	172	35	3
Remifentanyl	377	285	35	317	35	345	35	-	-	-	-	-	-	15
Remoxipride	371	243	35	112	35	228	50	-	-	-	-	-	-	3
Repaglinide	453	230	35	162	20	174	50	86	35	292	20	146	50	3
	453	230	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Reproterol	390	372	20	221	35	192	35	136	50	164	35	109	50	3
	390	372	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Reserpine	609	195	45	174	45	397	42	448	37	236	43	159	59	5
Riboflavin	377	228	26	229	30	198	46	170	39	183	36	243	16	5
Rifampicin	821	397	20	99	50	789	20	98	35	390	50	-	-	3
Risperidone	411	191	43	110	60	163	51	82	56	69	38	150	52	5
	411	191	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	3
	411	191	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Ritodrine	288	121	35	270	20	150	20	103	50	93	50	105	50	3
Rocuron	529	487	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Ropivacaine	275	126	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Rosiglitazone	358	135	35	107	50	94	50	119	50	-	-	-	-	3
	358	135	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Salbutamol	240	148	20	166	20	222	20	121	35	133	35	57	35	3
Salicylamide	138	121	20	65	35	95	20	-	-	-	-	-	-	3
Salicylic acid	137	93	19	65	26	75	40	67	26	41	38	91	35	5
Salmeterol	416	398	20	232	35	91	50	380	20	-	-	-	-	3
Salsalate	259	121	20	65	50	129	20	185	20	-	-	-	-	3
Scopolamine	304	138	35	156	20	121	35	103	50	-	-	-	-	3
	304	138	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Sebuthylazine	230	174	20	96	35	104	35	132	35	68	50	79	35	3
Secbutabarbital	211	42	20	168	20	-	-	-	-	-	-	-	-	3
Secobarbital	237	42	43	194	26	150	24	167	32	209	39	108	46	5
	237	42	35	194	20	-	-	-	-	-	-	-	-	3
Serotonin	177	160	11	115	43	117	36	132	26	77	48	130	28	5
	177	160	20	132	20	115	50	117	50	105	35	130	50	3
Sertindole	441	113	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Sertraline	306	159	41	123	43	275	19	128	48	129	36	91	32	5
	306	159	35	275	20	129	35	-	-	-	-	-	-	3
	306	275	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Sibutramin	280	125	35	139	20	153	20	46	35	179	20	-	-	3
Sildenafil	475	58	50	100	35	283	50	311	35	-	-	-	-	3
	475	100	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Simazine	202	124	20	96	35	132	20	104	35	68	50	71	35	3

Compound	m/z	Ion 1	CE	Ion 2	CE	Ion 3	CE	Ion 4	CE	Ion 5	CE	Ion 6	CE	Ref
Sisapride	466	184	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Sotalol	273	255	20	213	20	133	35	134	35	176	35	106	50	3
	273	255	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
	273	133	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	11
Stanozolol	329	81	50	95	50	107	50	-	-	-	-	-	-	3
Streptomycin	582	263	50	246	35	176	50	-	-	-	-	-	-	3
Sufentanyl	387	140	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	18
Sulfentine	315	120	20	91	35	166	20	-	-	-	-	-	-	3
Sulfabenzamide	277	156	20	92	35	108	35	65	50	-	-	-	-	3
Sulfacetamide	215	156	20	92	35	108	35	65	50	-	-	-	-	3
Sulfaclomide	313	158	20	220	20	92	35	-	-	-	-	-	-	3
Sulfadiazine	251	156	20	92	35	108	35	65	50	-	-	-	-	3
Sulfadicramide	255	156	20	108	35	92	35	65	50	83	35	-	-	3
Sulfadoxine	311	156	20	92	35	108	35	140	35	245	20	-	-	3
Sulfaethidole	285	156	20	92	35	108	35	65	50	130	35	-	-	3
Sulfaguandine	215	156	20	60	20	92	35	108	35	65	50	110	35	3
Sulfalene	281	156	20	92	50	108	35	65	50	126	35	-	-	3
Sulfamerazine	265	172	20	156	20	108	35	92	35	110	20	-	-	3
Sulfamethizole	271	156	20	92	35	108	35	65	50	-	-	-	-	3
Sulfamethoxazole	254	156	20	92	35	108	35	188	20	160	20	147	20	3
Sulfamethoxypyridazine	281	156	20	92	35	108	35	65	50	126	35	-	-	3
Sulfanilamide	173	93	20	108	20	92	35	65	50	-	-	-	-	3
Sulfapyridine	250	156	20	184	20	92	35	108	35	65	50	95	35	3
Sulfaquinoxaline	301	156	20	92	50	108	35	-	-	-	-	-	-	3
Sulfasalazine	399	381	20	223	35	119	50	94	50	213	35	-	-	3
Sulfathiazole	256	156	20	92	35	108	35	65	50	101	35	80	50	3
Sulfinpyrazone	405	279	20	185	35	186	35	93	50	-	-	-	-	3
Sulindac	357	233	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Sulpiride	342	214	43	112	42	84	43	98	54	134	54	75	57	5
	342	112	35	214	35	84	50	58	35	-	-	-	-	3
	342	214	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Sultiame	291	185	20	227	20	147	20	105	50	-	-	-	-	3
Suxibuzone	439	309	20	321	20	160	50	202	20	267	20	339	20	3
Talinolol	364	308	20	100	35	209	35	226	35	191	35	-	-	3
	364	308	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Tamoxifen	372	72	35	45	50	129	35	-	-	-	-	-	-	3
Tebuconazole	308	70	35	125	35	151	35	-	-	-	-	-	-	3
Telmisartan	515	497	50	276	50	305	35	211	50	-	-	-	-	3
	515	497	50	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Temazepam	301	255	31	177	42	193	50	239	52	283	20	125	43	5
	301	255	35	283	20	193	50	-	-	-	-	-	-	3
	301	255	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Teniposide	657	229	20	383	20	185	50	299	35	-	-	-	-	3
Tenoxicam	338	95	20	121	20	164	20	159	35	-	-	-	-	3
Terazosin	388	290	35	247	50	71	50	231	50	221	50	-	-	3
Terbinafine	292	141	20	93	20	115	50	-	-	-	-	-	-	3
Terbumeton	226	170	20	142	35	114	35	100	35	75	35	-	-	3
Terbutaline	226	152	26	107	29	125	33	77	48	110	44	79	40	5
	226	152	20	107	50	125	35	170	20	-	-	-	-	3
Terbuthylazine	230	174	20	132	35	96	35	68	50	79	35	104	50	3
Terbutryn	242	186	20	91	35	96	35	68	50	-	-	-	-	3
Terconazole	533	220	50	235	50	177	50	-	-	-	-	-	-	3
Terfenadine	472	436	35	454	35	57	50	-	-	-	-	-	-	3
	472	436	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Tertalolol	296	240	20	74	35	56	35	165	35	-	-	-	-	3
	296	240	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Testosterone	289	97	35	109	35	-	-	-	-	-	-	-	-	3
Testosterone benzoate	393	105	50	97	35	109	50	271	20	-	-	-	-	3
Tetracaine	265	176	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Tetracycline	445	154	35	410	35	427	20	98	50	241	50	-	-	3
Tetrahydrocannabinol	313	245	38	191	45	311	39	179	38	203	49	229	57	5
	315	193	35	259	20	93	35	123	50	107	35	135	35	3

Compound	m/z	Ion 1	CE	Ion 2	CE	Ion 3	CE	Ion 4	CE	Ion 5	CE	Ion 6	CE	Ref
	315	193	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Tetramethrin	332	135	20	164	35	314	20	107	50	-	-	-	-	3
Tetrazeepam	289	225	43	197	46	253	35	182	58	254	32	183	53	5
Tetroxoprim	335	230	35	123	35	275	35	110	50	229	50	-	-	3
Tetryzoline	201	131	35	91	50	71	35	-	-	-	-	-	-	3
Thebacon	342	243	35	44	50	181	50	211	35	-	-	-	-	3
Thenalidine	287	190	20	97	35	98	35	130	35	70	50	-	-	3
Theobromine	181	138	20	163	20	42	50	108	35	-	-	-	-	3
	181	138	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Theodrenaline	376	358	20	207	35	178	35	235	35	181	35	-	-	3
Theophylline	181	124	31	85	32	69	27	96	40	117	24	87	24	5
	181	124	20	69	35	96	35	42	50	-	-	-	-	3
	181	124	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Thiabendazole	202	175	35	131	35	65	50	-	-	-	-	-	-	3
Thiamazole	115	57	20	74	20	56	20	88	20	-	-	-	-	3
Thiamine	265	122	20	144	20	81	50	42	50	-	-	-	-	3
Thiazaffluron	241	184	20	74	35	164	35	91	35	-	-	-	-	3
Thiazinamium	300	199	20	241	20	198	20	-	-	-	-	-	-	3
Thiethylperazine	400	141	35	113	35	70	50	-	-	-	-	-	-	3
Thiobutabarbital	227	171	20	97	35	91	20	-	-	-	-	-	-	3
Thiodicarb	355	88	35	108	20	163	20	-	-	-	-	-	-	3
Thiofanox	219	57	35	76	20	-	-	-	-	-	-	-	-	3
Thioguanine	168	151	20	134	20	107	35	126	20	-	-	-	-	3
Thiopropazate	446	213	35	185	35	98	50	87	50	246	35	-	-	3
Thioridazine	371	126	35	98	35	-	-	-	-	-	-	-	-	3
	371	126	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Thiram	241	88	35	120	20	77	50	-	-	-	-	-	-	3
Thonzylamine	287	121	35	242	20	-	-	-	-	-	-	-	-	3
Thymopentin	680	400	50	383	50	157	50	500	50	140	50	-	-	3
Tiapride	329	256	20	213	50	212	35	133	50	177	50	-	-	3
Ticlopidine	264	154	20	125	35	-	-	-	-	-	-	-	-	3
Tiemonium	319	189	35	190	35	111	50	105	50	-	-	-	-	3
Tilidine	274	155	28	153	43	77	48	128	58	91	50	129	44	5
	274	155	20	91	50	153	50	-	-	-	-	-	-	3
	274	155	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Timolol	317	261	20	74	35	244	35	188	35	-	-	-	-	3
	317	261	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
	317	244	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	11
Tinidazole	248	121	20	93	20	128	20	82	50	-	-	-	-	3
Tiocarlid	401	180	35	110	50	93	50	-	-	-	-	-	-	3
Tiothixene	444	98	50	70	50	235	50	344	35	-	-	-	-	3
	444	98	50	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Tiracizine	368	58	50	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	3
Titzanidine	254	44	50	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	3
	254	210	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Tobramycin	468	202	19	188	26	424	16	425	22	389	24	159	43	5
Tocainide	193	44	20	122	20	-	-	-	-	-	-	-	-	3
	194	122	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Tolazamide	312	115	20	91	50	97	20	98	35	141	35	155	20	3
Tolazoline	161	91	35	44	35	65	50	-	-	-	-	-	-	3
Tolbutamide	271	74	20	155	20	91	50	109	35	-	-	-	-	3
	271	155	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Toliprolol	224	147	20	116	20	98	20	182	20	56	35	-	-	3
	224	147	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Tolmetin	256	210	25	212	27	197	27	195	30	238	23	120	29	5
	258	119	20	91	50	-	-	-	-	-	-	-	-	3
Tolnaftate	308	148	20	120	50	180	20	-	-	-	-	-	-	3
Tolpropamine	254	181	35	105	35	165	50	91	35	166	35	-	-	3
Tolubuterol (s. Tulobuterol)														
Tolycaine	279	86	20	58	50	-	-	-	-	-	-	-	-	3
Topiramate	340	80	23	251	13	57	21	176	24	-	-	-	-	5



Compound	m/z	Ion 1	CE	Ion 2	CE	Ion 3	CE	Ion 4	CE	Ion 5	CE	Ion 6	CE	Ref
Toraseamide	349	264	20	183	50	290	20	168	50	125	50	-	-	3
Tramadol	264	58	20	42	30	56	20	91	58	121	38	246	14	5
	264	58	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Tranlycypromine	134	117	20	91	35	115	20	-	-	-	-	-	-	3
Trazodone	372	148	42	176	33	78	58	96	52	133	42	120	54	5
	372	176	35	148	50	-	-	-	-	-	-	-	-	3
	372	176	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Triadimefon	294	197	20	69	35	225	20	57	35	141	20	155	20	3
Triadimenol	296	70	20	99	20	43	50	-	-	-	-	-	-	3
Triallate	304	86	20	143	35	43	50	128	20	262	20	141	35	3
Triamcinolone	395	357	20	225	20	185	20	339	20	237	20	321	20	3
Triamcinolone hexacetoneide	533	415	20	99	35	397	20	57	50	-	-	-	-	3
Triamterene	254	237	35	104	50	195	35	168	50	141	50	-	-	3
	254	237	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Triasulfuron	402	167	20	141	35	137	50	-	-	-	-	-	-	3
Triazolam	343	239	53	315	39	308	35	204	55	177	49	253	40	5
	344	309	35	123	35	316	35	-	-	-	-	-	-	3
	343	308	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Trifluorperazine	408	141	35	113	35	70	50	280	35	-	-	-	-	3
	408	141	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Trifluoperidol	410	165	35	123	50	392	20	-	-	-	-	-	-	3
	410	165	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Trihexyphenidyl	302	98	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	3
Trimazosin	436	249	50	320	50	346	35	418	35	231	50	332	50	3
Trimethoprim	291	261	35	230	35	123	35	275	35	110	50	229	35	3
	291	230	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Trimipramine	295	100	27	193	47	58	44	208	37	167	54	250	23	5
	295	100	20	58	35	193	50	208	35	-	-	-	-	3
	295	100	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Tripelennamine	256	211	20	119	50	120	35	91	35	-	-	-	-	3
Triperiden	312	98	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	3
Triprolidine	279	193	32	208	20	192	44	167	38	206	44	165	58	5
	279	208	20	193	35	192	50	93	50	-	-	-	-	3
Tritoqualine	501	220	35	205	50	-	-	-	-	-	-	-	-	3
Tromantadine	281	135	35	72	50	93	50	107	50	-	-	-	-	3
Trospium	393	182	50	164	35	-	-	-	-	-	-	-	-	3
Tryptamine	161	144	20	115	50	127	35	117	35	143	35	91	50	3
Tulobuterol	228	154	20	172	20	119	35	118	50	57	35	91	50	3
	228	154	20	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	9
Urapidil	388	205	35	190	50	196	35	233	35	219	35	162	50	3
Valproic acid	145	115	32	128	23	129	24	105	31	130	22	91	41	5
Valsartan	436	306	20	235	20	291	20	207	35	192	50	362	20	3
	436	306	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Vardenafil	489	151	50	312	50	169	50	299	50	-	-	-	-	3
	489	151	50	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Vecuronium	557	100	50	356	50	338	50	398	50	-	-	-	-	3
Venlafaxine	278	58	15	121	42	91	47	260	21	147	33	215	28	5
	278	58	50	260	20	121	35	215	20	-	-	-	-	3
	278	260	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Verapamil	455	165	42	150	47	303	43	135	59	105	60	260	39	5
	455	165	35	150	50	303	35	-	-	-	-	-	-	3
	455	165	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Veratrine	674	492		456		165								13
Vetrabutine	314	131	20	151	35	191	20	-	-	-	-	-	-	3
Vigabatrin	130	71	21	67	25	65	39	39	45	41	21	43	27	5
Viloxazine	238	100	20	56	35	74	35	-	-	-	-	-	-	3
Viminol	363	345	20	218	35	125	50	108	50	233	35	206	35	3
Vincamine	355	337	20	294	35	308	35	144	50	280	35	212	35	3
Vinpocentine	351	280	35	294	35	266	50	322	35	308	35	219	50	3
Viquidil	325	307	20	160	35	110	20	186	35	202	35	162	35	3
Warfarin	309	163	20	251	20	147	20	121	50	155	50	43	35	3

