

МИНИСТЕРСТВО ЗДРАВООХРАНЕНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

НАЦИОНАЛЬНЫЙ НАУЧНЫЙ ЦЕНТР НАРКОЛОГИИ

«Утверждаю»

Директор ФБГУ НИЦ Наркологии Минздрава России
профессор, д.м.н. _____ Е.А.Кошкина

« 7 » июля 2014 г.



**Обнаружение синтетических каннабимиметиков, наркотических,
психоактивных веществ и их метаболитов в моче, волосах и ногтях
методами жидкостной хроматографии с масс-спектрометрическим
детектированием**

Информационное письмо

Москва

2014 г.

Методика разработана в ФБГУ ННЦ Наркологии Минздрава России

Автор: д.х.н. Савчук С.А.

Выбор и исследование референсных образцов: Гофенберг М.А., Никитина Н.М., Гизетдинова Л.А., Мингазов А.А., Скребкова К.А., Самышкина Н.В., Ризванова Л.Н., Кошелева Ю.В.

Научные консультанты: Гофенберг М.А., к.х.н. Шевырин В.А., к.х.н. Катаев С.С., к.х.н. Григорьев А.М., Васильев А.Б., Печников А.Л., Лабутин А.В., Джурко Ю. А., Шитов А.Н.

Авторы библиотек: Савчук С.А., Лабутин А.В.

Версия 1.1

Введение

Метод методами жидкостной хроматографии с масс-спектрометрическим детектированием предназначен для качественного определения метаболитов ряда синтетических каннабимиметиков (JWH-018, JWH-073, JWH-210, JWH-250, JWH-251, JWH-203, AB-001, UR-144, АКВ-48, РВ-22, РВ-22F, АВ-PINACA, АВ-PINACA-F, АВ-FUBINACA, FUB-РВ-22, THJ-2201, ТМСР-2201, ММВ-2201, СВЛ-2201, МДМВ-Chm), а также их гомологов, аналогов наркотических, психоактивных и сопутствующих веществ в моче, волосах и ногтях человека с методом высокоэффективной жидкостной хроматографии с масс-спектрометрическим детектированием. В дальнейшем, с появлением в незаконном обороте новых веществ, перечень целевых соединений может быть расширен. Перечень определяемых веществ дан в приложении.

Описание методов

Метод методом высокоэффективной жидкостной хроматографии с масс-спектрометрическим детектированием (ВЭЖХ-МС/МС) основан на сочетании двух аналитических методов: высокоэффективной жидкостной хроматографии и тандемной масс-спектрометрии. Метод ионизации - электрораспыление.

Для определения наркотических и психоактивных веществ применили два варианта методов ВЭЖХ-МС/МС, позволяющих, с одной стороны, идентифицировать новые психоактивные вещества, а, с другой, стороны провести высокочувствительный подтверждающий анализ.

Метод ВЭЖХ с детектором типа трехмерная ионная ловушка основан на следующих принципах. Вещества разделенные на хроматографической колонке ионизируются электрораспылением с образованием протонированных молекулярных ионов (MS1), полученные

ионы запираются и возбуждаются в ионной ловушке электрическим полем с определенными характеристиками и образуют фрагментные (продукт-) ионы второго и третьего порядка MS₂ и MS₃.

Подобный способ детектирования позволяет получать спектры продукт-ионов не только веществ, включенных в методику, но и новых неизвестных веществ, а также проводить ретроспективный анализ файлов данных, полученных ранее, по аналогии с методом газовой хроматографии с масс-селективным детектированием (ГХ-МС). Для идентификации целевых веществ используют четыре аналитических параметра: время хроматографического удерживания (RT) и полные спектры молекулярных (MS) и фрагментных ионов второго (MS₂) и третьего (MS₃) порядков. Перечисленные параметры соответствующие определяемым веществам занесены в библиотеки масс-спектров. Библиотеки редактируемые, пополняемые. Времена удерживания и масс-спектры веществ получают в стандартных унифицированных условиях, что позволяет транслировать метод с прибора на прибор и создавать общие библиотеки масс-спектров и времен удерживания. Обработку данных и формирование отчета выполняют в автоматическом режиме. Чувствительность методики в режиме полного сканирования продукт-ионов 5 нг/мл.

Метод ВЭЖХ с тандемным квадрупольным масс-спектрометрическим детектором основан на следующих принципах. Вещества разделенные на хроматографической колонке ионизируются электрораспылением с образованием протонированных молекулярных ионов. После масс-сепарации на первом квадруполе протонированные молекулярные ионы последовательно поступают в ячейку соударений (второй квадруполь), где происходит их фрагментация с образованием спектра продукт-ионов. Образовавшиеся фрагментные ионы поступают на третий квадруполь, где происходит их масс-сепарация с образованием масс-спектра продукт ионов, соответствующих определенному иону-предшественнику (молекулярному протонированному иону). Одновременно, с высоким качеством, можно регистрировать не более 4-5 полных спектров продукт-ионов. При скрининговом анализе для одного вещества регистрируют три наиболее интенсивных фрагментных иона из полного спектра его продукт-иона. Если выбирать ионы фон по которым минимален можно обеспечить высокую чувствительность определения методики (до 0.3 нг/мл). Регистрация фрагментного продукт-иона, полученного из иона предшественника называется MRM переход (Мониторинг Множественных Реакций). Возможно регистрировать до 150-300 MRM переходов в одном методе. Метод позволяет проводить высокочувствительное скрининговое определение до 150 веществ в одном методе, после которого желателен подтверждающий анализ полного спектра продукт-ионов веществ, идентифицированных при скрининге. Чувствительность в режиме регистрации полного спектра продукт-ионов 10 нг/мл. В рутинном анализе метод позволяет регистрировать только вещества, внесенные в список определяемых.

Материально-техническое обеспечение методики

Для выполнения методики используют ВЭЖХ хроматографы соединенные с тандемными трехквადрупольными масс-спектрометрами или масс-спектрометрами типа ионная ловушка.

Аппаратура ВЭЖХ с детектором типа трехмерная ионная ловушка. Масс-спектрометрический детектор Toxtuper Bruker с жидкостным хроматографом Dionex Ultimate 3000, унифицированным методическим обеспечением, библиотекой масс-спектров MS1, MS2, MS3 и времен удерживания целевых соединений на 960 веществ. Перечень определяемых веществ дан в приложении.

Таблица 1. Параметры и условия ВЭЖХ

Хроматографическая система LC-System	Dionex Ultimate 3000 RS Pump, HPG-3200RS
Хроматографическая колонка (Column)	Acclaim® RSLC 120 C18 2.2 µm, 120A 2.1 x 100 mm (Dionex)
Температура колонки (°C)	40
Растворитель А (Eluent A)	Деионизованная вода (HPLC grade), 0.1 % муравьиной кислоты, 2 mM формиата аммония, 1 % ацетонитрил.
Растворитель В (Eluent B)	Ацетонитрил (HPLC grade), 0.1 % муравьиной кислоты, 2 mM формиата аммония, 1 % деионизованной воды
Тип ввода (Injection Type)	Needle Wash
Объем вводимой пробы, мм ³ (мкл, Injection Volume, µl)	5

Таблица 2. Условия градиентного режима подачи элюента.

Время, мин	Скорость потока элюента, см ³ /мин	Содержание элюента В, %
0	0,5	1
1	0,5	1
8	0,5	95
9	0,5	95

9.06	0,5	1
11	0,5	1

Таблица 3. Параметры и условия масс-спектрометрического детектирования

Параметры источника (Source Parameters)	Значение при детектировании положительных ионов	Значение при детектировании положительных ионов
Dry Temp (°C)	320	320
Gas Flow (l/min)	8	8
Nebulizer (bar)	2	2
Capillary (V)	4500	4500
End Plate Offset (V)	500	500
MS/MS Frag Amp (V)	0.8	0.8
Режим детектирования 1 (pos/neg)*	MS1,2,3 (Full SCAN) 70-800 а.е.м. Method: Toxtuper.M (регистрация только в окнах поиска целевых веществ) в режиме регистрации положительных ионов	MS1,2,3 (Full SCAN) 70-800 а.е.м. Method: Toxtuper.M (регистрация только в окнах поиска целевых веществ) в режиме регистрации отрицательных ионов
Режим детектирования 2 (pos)	MS1,2,3 (Full SCAN) 70-800 а.е.м. Method: Toxtuper_positive.M (регистрация в окнах поиска целевых веществ и в режиме Auto MSn для нецелевых компонентов)) в режиме регистрации только положительных ионов	
Режим детектирования 3 (neg)		MS1,2,3 (Full SCAN) 70-800 а.е.м. Method: Toxtuper_positive.M (регистрация в окнах поиска целевых веществ и в режиме

		Auto MSn для нецелевых компонентов) в режиме регистрации только отрицательных ионов
--	--	---

* - наиболее специфичный режим детектирования

Таблица 4. Добавления (ННЦ наркологии МЗ) к библиотеке Toxtuper 1.1. Library (Список веществ библиотеки Toxtuper 1.1. Library дан в приложении)

ID*		RT, min	M+H	MS2	MS3
901	FUB_PB_22_M214_5.67	5.67	270.1	358.3, 235.2, 109	
839	AB_CHMINACA_M358_6.8 5 min	6.85	358.3	340.3, 312.4 , 241,3	241.3, 145.2
840	5F_PINACA_M362_1_4.81 min	4.81	362.2	316.3	298.3, 245
841	PINACA nativ_ 6.49	6.49	332.3	286.3 , 215.2	215.2
842	AB_CHMINACA_M2_259	6.09	259.2	241.15	163.08, 145.09
843	AB_FUBINACA_M370_6.0 3 min	6.03	370.2	324.18	253.20
844	PB_22F_M250_5.46 min	5.46	250.1	206.13 , 186.16, 132	132.17, 118.20
847	JWH-251_M1_336_6.09 min	6.09	336.3	186.1	130.2
848	JWH-203_M_356_6.07 min	6.07	356	186	130.2
849	JWH-073_M_344_5.81 min	5.81	344.2	216.1, 155.1	145.1
853	MDPV_3.65 min	3.65	267.07	205 ,175, 135	175,135
855	PVP_3.62 min	3.62	232.06	161,191	
	Carfentanyl_4.38 min	4.38	395.30	335 , 246	279, 145
857	Methoxetamine_3.08 min	3.08	248.09	203 ,	174, 121
854	AB-PINACA nativ 6.05	6.05	331.0	286 , 314	286

859	THJ-2201_M_373_155_6.4min	6.35	373.2	355.3	329, 154.9
860	THJ-2201_M_359_6.3min	6.20	359.2	341.2	323.1,155
866	TMCP_2201(XLR11) termal isomer_7.29	7.29	330	249, 232	
867	TMCP-2201_7.58 min	7.58	330	312, 232, 125	
868	JWH-018_7.81 min	7.81	342	214, 154.80, 144.85, 126.92	
869*	TMCP-2201_nativ_ok_7.57 min	7.57	330	312, 232 ,125	212, 143.8
870*	TMCP-2201_ok2_7.57 min	7.57	330	312, 232 ,125	212, 143.8
871*	THJ-2201_nativ_7.44	7.44	361	233 , 213, 176 (minor),144 (minor)	213, 176, 144
872*	AB-001_metab 7.31 min, (11.33 min long)	7.31	366	151	133
873*	AKB-48 _metab 7.38 min	7.38	382	151	133
874*	AKB-48 _metab 6.95 min	6.95 min	382.2	151	133
875*	UR-144_metab 6.78 min	6.78 min	328.2	214	144
877*	JWH-018_metab 6.23 min	6.23 min	358.2	155	145
878*	JWH -018_metab 6.83 min	6.83 min	372.2	155	145
879*	JWH -018_metab 6.08 min	6.08 min	372.2	155	145
880*	ur matrix 4.76 min	4.76	358.2	155	137
881*	JWH-250 metab 6.59 min	6.59 min	352.2	137	109
882*	JWH-250 metab 5.28 min	5.28 min	366.2	137	109
883*	AB-001 metab 6.92 min	6.92 min	366.2	151	133
945*	MDMB-Chm_metab 7.11 min	7.11 min	372.2	326.2	241.0

946*	MDMB-Chm_metab_frag MS1_241	17.11 min	241.2	145.0	117.0
947*	AB-PINACA-F_metab 5.10 min	5.10 min	251.0	233.0	213.0
948*	AB-PINACA-F_metab. 4.98 min	4.98 min	263.0	245.0	203.0
950*	CBL-2201 nativ 7.61 min	7.61 min	376.2	232.0	144.0
951*	MMB-2201 nativ 6.31 min	6.31 min	363.2	232.0	144.0
952*	THJ-2201_ nativ 7.44 min	7.44 min	361.2	233.0	213.0, 251.0
953*	FUB-PB-22 nativ 6.95 min	6.95 min	397.1	252.0	109.0

* ID 1.1. Toxtuper Library

Аппаратура ВЭЖХ с тандемным трехкврупольным детектором детектором Масс-спектрометрический детектор EVOQ Qube Bruker с жидкостным хроматографом Advans или Dionex Ultimate. Условия advans хроматографического разделения

Параметры хроматографической системы приведены в таблице 1. Условия градиентного режима подачи элюента приведены в таблице 2.

Таблица 5. Параметры и условия ВЭЖХ.

Хроматографическая система LC-System	Advans или Dionex Ultimate 3000 RS Pump, HPG-3200RS
Хроматографическая колонка (Column)	Acclaim® RSLC 120 C18 2.2 µm, 120A 2.1 x 100 mm (Dionex)
Температура колонки (°C)	40
Растворитель А (Solvent A)	200 см ³ деионизованной воды, 0,3 г ацетата аммония, 100 мм ³ муравьиной кислоты
Растворитель В (Solvent B)	Ацетонитрил
Тип ввода (Injection Type)	Needle Wash
Объем вводимой пробы, мм ³ (мкл, Injection Volume, µl)	5

Таблица 6. Условия градиентного режима подачи элюента.

Время, мин	Скорость потока элюента, см ³ /мин	Содержание элюента А, %
0	0,2	95

2	0,2	95
5	0,2	70
8	0,2	40
10	0,2	5
12,5	0,2	5
25	0,2	70
26	0,2	95

2. Условия масс-спектрометрического детектирования

Параметры масс-спектрометрического детектирования приведены в таблице 3. Условия регистрации аналитических сигналов в режиме MRM приведены в таблице 4. Оптимизацию условий детектирования проводят с использованием рабочего раствора с концентрацией 0,1 мкг/см³, приготовленного согласно 5.2.2. Энергию фрагментации (Frag) оптимизировали с шагом 10 В по максимальному отклику протонированного молекулярного иона (Precursor). Энергию коллизии (CE) оптимизировали с шагом 10 В по максимальному отклику характеристичного продукт-иона (Product).

Таблица 7. Параметры масс-спектрометрического детектирования MS QQQ.

Параметры источника (Source Parameters)	Значение при детектировании положительных ионов
Gas Temp (°C)	320
Gas Flow (l/min)	8
Nebulizer (psi)	27
Capillary (V)	3700
Vcharging (V)	500
Режим детектирования 1	MS2 (Full SCAN) 50-700 a.e.m.
Режим детектирования 2	MRM

MRM

	Compound Name	Precursor Ion	Product Ion	RT, min	Collision Energy
1.	2C_I_NBOMe 14.78 min	428,8	121,4	14.78	15
2.	JWH-210 metab 11.65 min	400,2	197	11.65	18
3.	JWH-210 metab 12.16 min	400,2	197	12.16	18
4.	FUB-PB22 nativ 16.54 min	397	252,3	16.54	8
5.	Carfentanyl nativ 14.03 min	395,4	246	14.03	20

6.	AKB-48 metab 14.31 min	382,4	151,3	14.31	15
7.	2C_B_NBOMe 14.52 min	380,1	121,2	14.52	15
8.	PB-22F nativ 16.42 min	377,1	232,1	16.42	8
9.	MAM-2201 nativ 17.12 min	374,5	169,4	17.12	20
10.	MDMB-Chminaca metab 15.77 min	373,5	241,3	15.77	10
11.	THJ-2201 metab1 15.68 min	373,2	155,5	15.68	15
12.	THJ-2201 metab 15.67 min	373,2	155,2	15.67	15
13.	JWH-018 metab 15.34 min	372,3	155,2	15.34	15
14.	JWH-250 metab 14.21 min	368,4	137,2	14.21	15
15.	AB-001 metab 16.66 min	366,3	151,2	16.66	20
16.	JWH-250 metab 14.58 min	366,3	137,2	14.58	15
17.	JWH-250 metab 14.93 min	366,3	121,2	14.93	15
18.	JWH-250 metab 14.92 min	366,3	121,2	14.92	15
19.	MMB-2201 nativ 15.86 min	363,6	232,4	15.86	15
20.	THJ-2201 nativ 17.27 min	361,4	233,3	17.27	15
21.	PB-22 nativ 17.43 min	359	214,1	17.43	8
22.	AB-Chminaca metab 15.20 min	358,3	241,3	15.20	15
23.	JWH-018 metab 15.74 min	358,2	155,1	15.74	15
24.	JWH-018 metab 15.11 min	358,2	155,1	15.11	15
25.	ur matrix 13.93 min	358,2	137,2	13.93	15
26.	JWH-203 metab 16.20 min	356,2	282,1	16.20	18
27.	JWH-203 metab 15.54 min	356,2	186,2	15.54	18
28.	JWH-203 metab 15.86 min	356,2	125,2	15.86	18
29.	JWH-250 metab 15.23 min	352,4	186,3	15.23	15
30.	JWH-250 metab 15.31 min	352,4	186,3	15.31	15
31.	JWH-250 metab 16.13 min	352,4	137,2	16.13	15
32.	JWH-250 metab 15.94 min	352,4	121,2	15.94	15
33.	AB-PINACA metab 13.60 min	348,4	330,4	13.60	10
34.	AB-PINACA metab 13.27 min	348,4	302,4	13.27	10
35.	AB-PINACA metab 14.28, 14.61 min	348,4	302,4	14.61	10
36.	AB-PINACA metab 13.60 min	348,4	231,3	13.60	10
37.	TMCP-2201 metab 15.67 min	346,3	232,1	15.67	15
38.	TMCP-2201 metab 16.12 min	346,3	125,2	16.12	15

39.	UR-144 metab 16.51 min	344,4	326,3	16.51	15
40.	UR-144 metab 16.13 min	344,4	246,2	16.13	15
41.	UR-144 metab 15.68 min	344,4	230,2	15.68	15
42.	UR-144 metab 13.36 min	344,3	326,3	13.36	15
43.	JWH-073 metab 15.62 min	344,3	155,2	15.62	18
44.	JWH-073 metab 15.65 min	344,3	155,2	15.65	18
45.	TMCP-2201 metab 15.86 min	342,7	125,4	15.86	15
46.	JWH-018 nativ 17.89 min	342,6	155,3	17.89	20
47.	JWH-203 nativ 14.08 min	340,1	282,3	14.08	18
48.	JWH-251 metab 15.60 min	336,4	186,3	15.60	18
49.	AB-PINACA nativ 15.60 min	331,4	286,3	15.60	10
50.	TMCP nativ 17.42 min	330,6	232,4	17.42	20
51.	UR-144 metab 15.82 min	328,4	230,3	15.82	15
52.	UR-144 metab 18.22 min	328,4	230,3	18.22	15
53.	JWH-073 nativ 17.46 min	328,3	155,2	17.46	18
54.	UR-144 metab 16.88 min	328,2	214,3	13.87	15
55.	Clozapine nativ 13.87 min	327,4	270,4	13.87	20
56.	Imipramine 17.39 min	279,2	149,1	17.39	20
57.	MDPV nativ 12.59 min	276,5	175,5	12.59	20
58.	FUB-PB22 metab 15.06 min	270,2	109,4	15.06	8
59.	Tramal nativ 12.10 min	264,1	58,2	12.10	15
60.	AB-Chminaca metab 15.05 min	259,4	241,2	15.05	8
61.	AB-PINACA-F metab 13.69 min	251,3	233,1	13.69	15
62.	PB-22F metab 14.82 min	250	206,4	14.82	15
63.	Carbamazepine nativ 13.87 min	237,4	194,5	13.87	15
64.	PVP nativ 12.37 min	232,4	161,3	12.37	15
65.	PB-22 metab 15.63 min	232,1	188,3	15.63	15
66.	Caffeine	195,3	138,3		12
67.	Nicotine	163,3	131,9	2.05	12

Подготовка проб мочи для ВЭЖХ-МС/МС анализа

Метод включает две аналитические процедуры подготовки пробы и анализа.

Процедура 1. кислотный гидролиз экстрация при pH 9, дериватизация трифторуксусным ангидридом (ТФАА). Определяют индивидуальные вещества следующих химических групп:

- Каннабимиметики JWH-018, 073, 250, 251 их структурные аналоги и их метаболиты.
- Опиаты, метаболиты, сопутствующие компоненты.
- Амфетамины и их метаболиты.
- Барбитураты и их метаболиты.
- Бензодиазепины и продукты их гидролиза.
- Синтетические наркотические вещества (в т.ч. PVP, MDPV) и их метаболиты.
- Псилоцин, псилоцибин.
- Бензоилэкгонин. клофелин.

Процедура 2. Мочу подвергают щелочному гидролизу, экстрагируют смесью гексан-этилацетат 7:1 при pH 2-3. Определяют индивидуальные вещества следующих химических групп:

- Каннабимиметики PB-22, PB-22F, FUB-PB, AB-Pinaca, Ab-Chminaca, THJ-2201, TMCP-2201, MDMB-Chm, MMB-2201 их структурные аналоги и их метаболиты.
- Кислые метаболиты JWH-018, 073, и кислые метаболиты их структурных аналогов.
- Метаболит тетрагидроканнабинола: 11- нор -дельта- 9- карбокситетрагидроканнабиноловой кислоты в виде пентафторпроизводного.

Процедура 1.

Приготовление смеси органических растворителей. Для экстракции готовят смесь растворителей:

1. изопропиловый спирт 10%
2. дихлорметан 35%
3. 1,2-дихлорэтан 23%
4. гептан 32%

В мерный цилиндр на 100 мл вносят 10 мл изопропилового спирта, 35 мл дихлорметана, 23 мл 1,2-дихлорэтана и 32 мл гептана. Смесь перемешивают и хранят в герметично закрытой стеклянной емкости.

Можно использовать экстракционную смесь - метиленхлорид : гептан : изопропанол (7:2:1).

Приготовление твердого буфера. Взвешивают 100 г гидрокарбоната натрия и 50 г карбоната натрия, перемешивают и перетирают в ступке.

Подготовка пробы для анализа. Методика подготовки пробы включает стадии гидролиза, экстракции и дериватизации.

Кислотный гидролиз. В пробирку с завинчивающейся крышкой вместимостью 9 мл вносят 3 мл анализируемой мочи, добавляют 300 мкл концентрированной HCl, и выдерживают 1 час при 90⁰C. Гидролизат охлаждают до комнатной температуры. К гидролизату добавляют 300 мкл

аммиака 10% - ного водного и экстрагируют, как описано ниже.

Выделение веществ из мочи жидкость/жидкостной экстракцией. В чистую, сухую пробирку объемом 10 мл внести 3 г хлорида натрия, твердый буфер на кончике шпателя 40-50 мг и 3 мл экстракционной смеси.

- В пробирку вносят 3 мл мочи или гидролизата мочи.
- Экстрагируют 10 мин на орбитальном шейкере.
- Центрифугируют при 3000 об/мин 5 мин.
- Отделяют органический слой, переносят в металлический колпачок TOX-LAB для упаривания и упаривают в токе горячего воздуха (экстракт не пересушивать, прекращать упаривание сразу после исчезновения жидкой фазы). К упаренному экстракту добавляют 500 мкл ацетонитрила, встряхивают на вибромиксере 2-3 сек и анализируют.

Процедура 2.

Приготовление реактивов. Для щелочного гидролиза используют NaOH или KOH.

Приготовление 5М раствора NaOH . К 2г NaOH добавляют дист. воду до объема 10 мл.

Приготовление 5М раствора KOH. К 2.8г KOH добавляют дист. воду до объема 10 мл.

Подготовка пробы

Гидролиз: к 3 мл мочи добавляют 0.5 мл 5N раствора NaOH, выдерживают при 50⁰C в течение 20 минут.

Выделение определяемых веществ жидкостной экстракцией.

- в пробирку вносят 3 мл мочи или гидролизата мочи.
- гидролизат подкисляют до pH 2-3 добавлением 250-350 мкл конц. соляной кислоты,
- экстрагируют 3 мл смеси изооктан-этилацетат 7:1 на орбитальном шейкере 5 мин, Экстрагируют 10 мин на орбитальном шейкере.
- центрифугируют при 3000 об/мин 5 мин.
- отделяют органический слой, переносят в металлический колпачок TOX-LAB для упаривания и упаривают в токе горячего воздуха (экстракт не пересушивать, прекращать упаривание сразу после исчезновения жидкой фазы). К упаренному экстракту добавляют 500 мкл ацетонитрила, встряхивают на вибромиксере 2-3 сек и анализируют.

**Подготовка образцов волос и ногтей для анализа
Ферментный гидролиз образцов волос**

- Образец волос отмывают от загрязнений в химическом стакане с водным раствором ПАВ.
- Промывают деионизированной водой до полного удаления моющего средства, затем промывают метанолом.
- Высушивают и измельчают ножницами.
- Взвешивают, масса навески 20-100 мг.
- Помещают в пластиковую пробирку добавляют 1.5 мл метанола, выдерживают на вибромиксере 1 мин, метанол переносят в виалу и анализируют на наличие возможных поверхностных загрязнений образца.
- Добавляют 1 мл водного раствора (рН 6.5.) 1/10 β-глюкуронидазы, пепсина, трипсина или кератиназы.
- Выдерживают при 40° С в течение 12 ч.
- Обрабатывают на 1 ч. на ультразвуковой бане.
- Центрифугируют в течение 5 минут при 14000 об/мин.
- Водную фазу отделяют и обрабатывают методом твердофазной экстракции.

Щелочной гидролиз образцов волос

- Образец волос отмывают от загрязнений в химическом стакане с водным раствором ПАВ.
- Промывают деионизированной водой до полного удаления моющего средства, затем промывают метанолом.
- Высушивают и измельчают ножницами.
- Взвешивают, масса навески 20-100 мг.
- Помещают в пластиковую пробирку добавляют 1.5 мл метанола, выдерживают на вибромиксере 1 мин, метанол переносят в виалу и анализируют на наличие возможных поверхностных загрязнений образца.
- Добавляют 1.5 мл водного раствора 2М NaOH. Выдерживают при 60°С в течение 1 ч. на ультразвуковой бане.
- Гидролизат подкисляют до рН 2-3 добавлением 170 мкл конц. соляной кислоты.
- Экстрагируют 3 мл смеси изооктан-этилацетат 7:1 на орбитальном шейкере 5 мин.
- Центрифугируют при 3000 об/мин 5 мин.
- Отделяют органический слой, переносят в металлический колпачок TOX-LAB для упаривания и упаривают в токе горячего воздуха (экстракт не пересушивать, прекращать упаривание сразу после исчезновения жидкой фазы). К упаренному экстракту добавляют 200 мкл ацетонитрила, встряхивают на вибромиксере 2-3 сек и анализируют.

Экстракция метанолом образцов волос и ногтей

- Образец волос или ногтей отмывают от загрязнений в химическом стакане с водным раствором ПАВ.
- Промывают деионизированной водой до полного удаления моющего средства, затем промывают метанолом.
- Высушивают и измельчают (ножницами).
- Взвешивают, масса навески 20-100 мг.
- Помещают в пластиковый флакон.
- Добавляют 3 мл метанола.
- Выдерживают на ультразвуковой бане 3 часа.
- Центрифугируют при 6 - 14 тыс об/мин.
- Метанол отделяют и упаривают в алюминиевом колпачке TOX-LAB.
- К сухому остатку добавляют 150 мкл метанола, 3 мл 0,1 М фосфатного буфера, рН 6.0 и подвергают очистке методом твердофазной экстракции.

Твердофазная экстракция

Для твердофазной экстракции используют картриджи Bond Elute Certify вместимостью 3 мл с массой сорбента 200 мг.

- Кондиционирование картриджа (колонки) (поток 3-5 мл/мин).
 - 3 мл метанола.
 - 3 мл 0,1 М фосфатного буфера, рН 6.0.
- Нанесение образца на картридж.
 - Пропускали пробу через картридж. Ыт Промывка водой.
 - Пропускали через картридж 3 мл деионизированной воды (поток 3-5 мл/мин).
- Подкисление.
 - Пропускают 2 мл 1М уксусной кислоты через картридж (поток 3-5 мл/мин).
 - Высушивали картридж в течение 2 минут.
- Промывка гексаном.
 - Пропускают через картридж 3 мл гексана (поток 3-5 мл/мин).
- Сбор кислой/нейтральной фракции.
 - Пропускают через картридж 1,7 мл смеси гексан:этилацетат (1:1) (поток 1-2 мл/мин).
 - Собирают кислую/нейтральную фракцию.
 - Удаляют остатки элюента током азота.
- Промывка картриджа метанолом.
 - Пропускают через картридж 3 мл метанола (поток 3-5 мл/мин).
 - Высушивают картридж в течение 2 минут.
- Сбор основной фракции.
 - Пропускают через картридж 1,7 мл смеси дихлорметан : пропанол-2 : концентрированный раствор аммиака (78:20:2) (поток 1-2 мл/мин).
 - Собирают основную фракцию.

- Концентрирование фракций.
- Упаривают содержимое виал с собранными фракциями.
- Растворяют сухой остаток в 150 мкл ацетонитрила и анализируют.

Приложение 1.

Растворители и реактивы для ВЭЖХ-МС/МС анализа

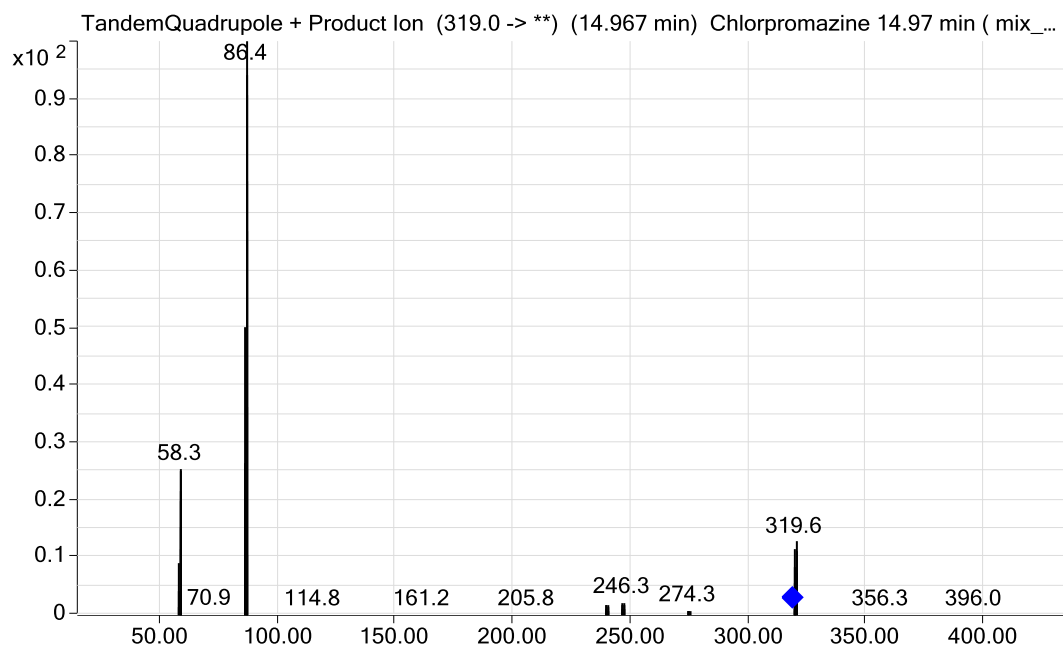
Наименование	Ед. изм.	Количество На 2000 анализов
Вода деионизованная с остаточным сопротивлением 10-18 МоМ и содержанием общего углерода 10-20 ppb/	л	
Метанол для ВЭЖХ (HPLC grade)	л	8
Ацетонитрил для ВЭЖХ (HPLC grade)	л	20
Пропанол-2 «ОСЧ 13-5»	л	9
Гептан ХЧ	л	9
Этилацетат ХЧ	л	9
Бутилацетат ХЧ	л	9
Гексан или изооктан (триметилпентан) ХЧ	л	10
Метилен хлористый ХЧ «Lichrosolv»	л	10
1,2-Дихлорэтан	л	9
Натрия хлорид ч.д.а.	кг	3
Ацетон	л	5
Толуол	л	5
Карбонат натрия ч.д.а.	кг	1
Бикарбонат натрия ч.д.а.	кг	1
Гидроксид натрия ч.д.а.	кг	1
Кислота соляная ХЧ	л	1
Аммиак 25% водный	л	3
Перекись водорода 33%	л	3
Калия фосфат двузамещенный K_2HPO_4 ч.д.а.	кг	1
Калия фосфат однозамещенный KH_2PO_4	кг	1
Натрия фосфат двузамещенный Na_2HPO_4	кг	1
Натрия фосфат одноамещенный NaH_2PO_4	кг	1
Ацетат натрия	кг	1
Уксусная кислота	л	1
Муравьиная кислота	л	1
Ортофосфорная кислота	л	1
Трихлоруксусная кислота	кг	1

Формиат аммония	Г	500
Ацетат аммония	Г	1000

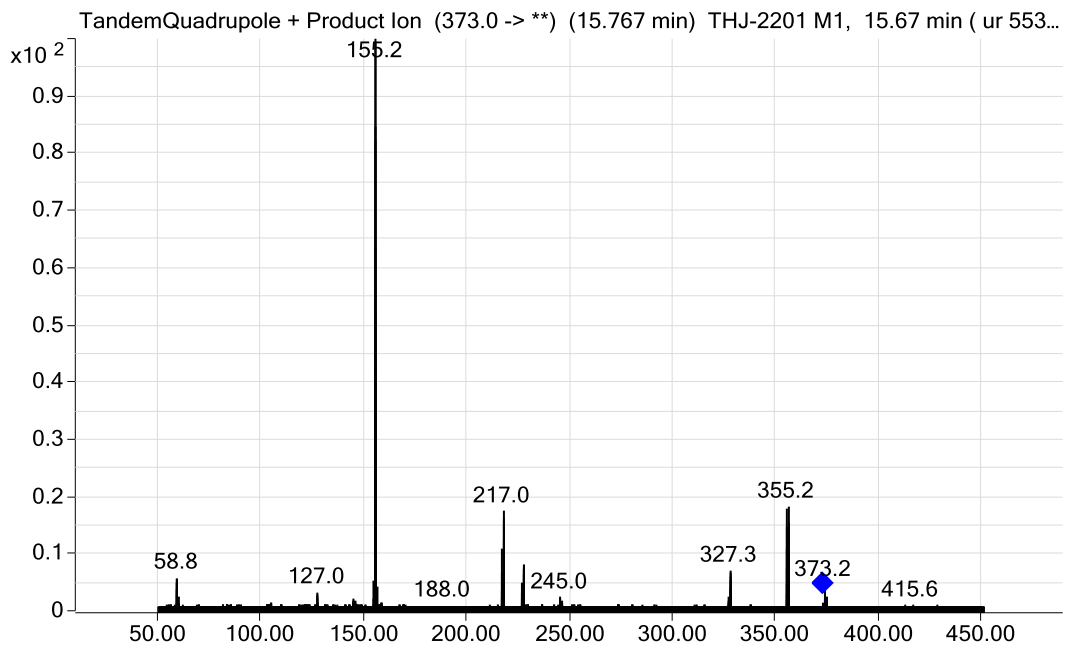
Приложение 2.

Спектры продукт-ионов MS-QQQ, каннабимиметиков, их метаболитов и сопутствующих веществ.

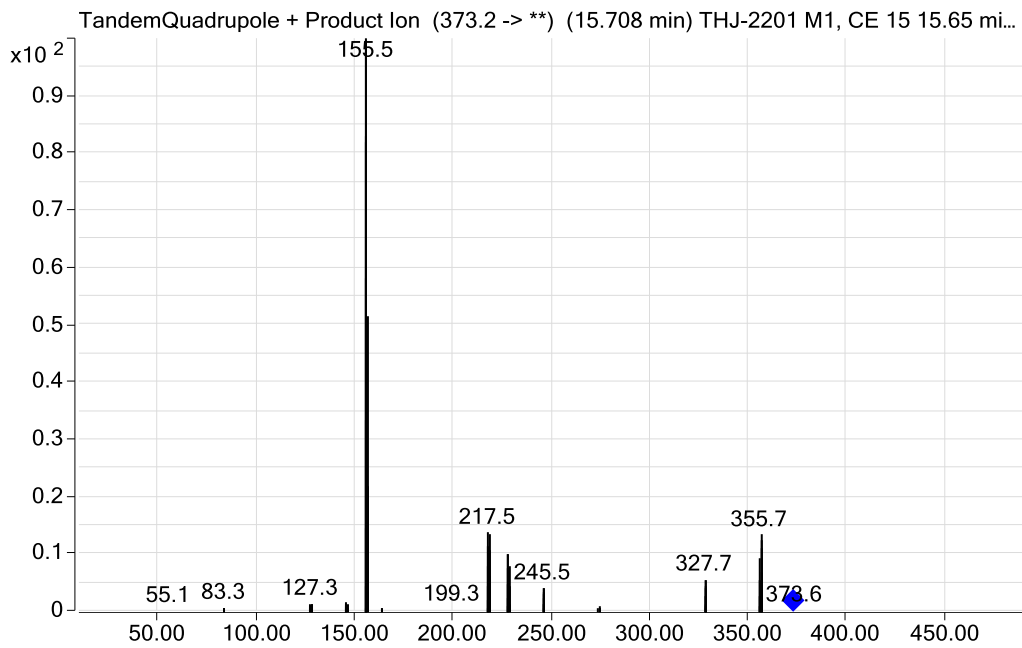
MS/MS full Prod



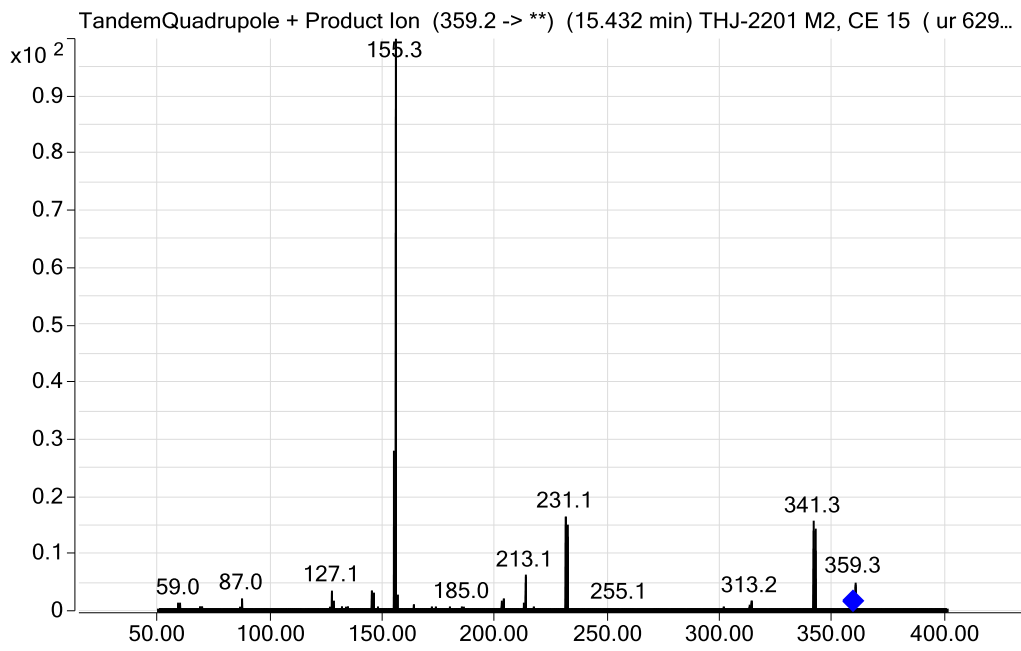
Chlorpromazine 14.97 min, ID 21, CE 15.



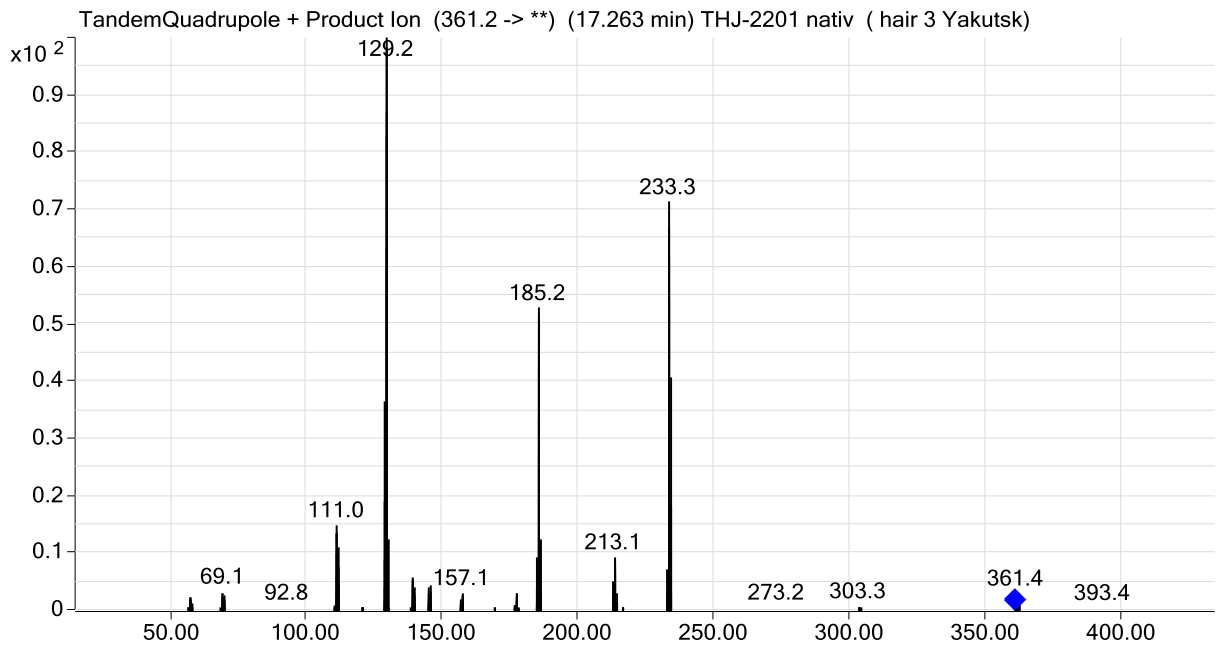
THJ-2201 M1, 15.67 min, ID 94, CE 15



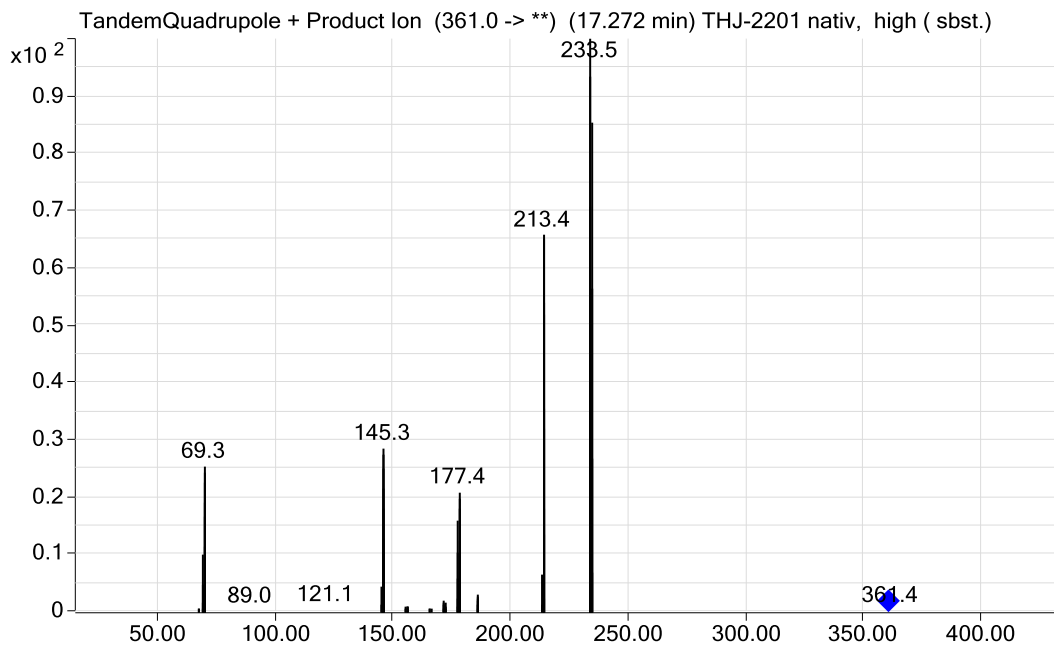
THJ-2201 M1, CE 15 15.65 min, ID 16, CE 15



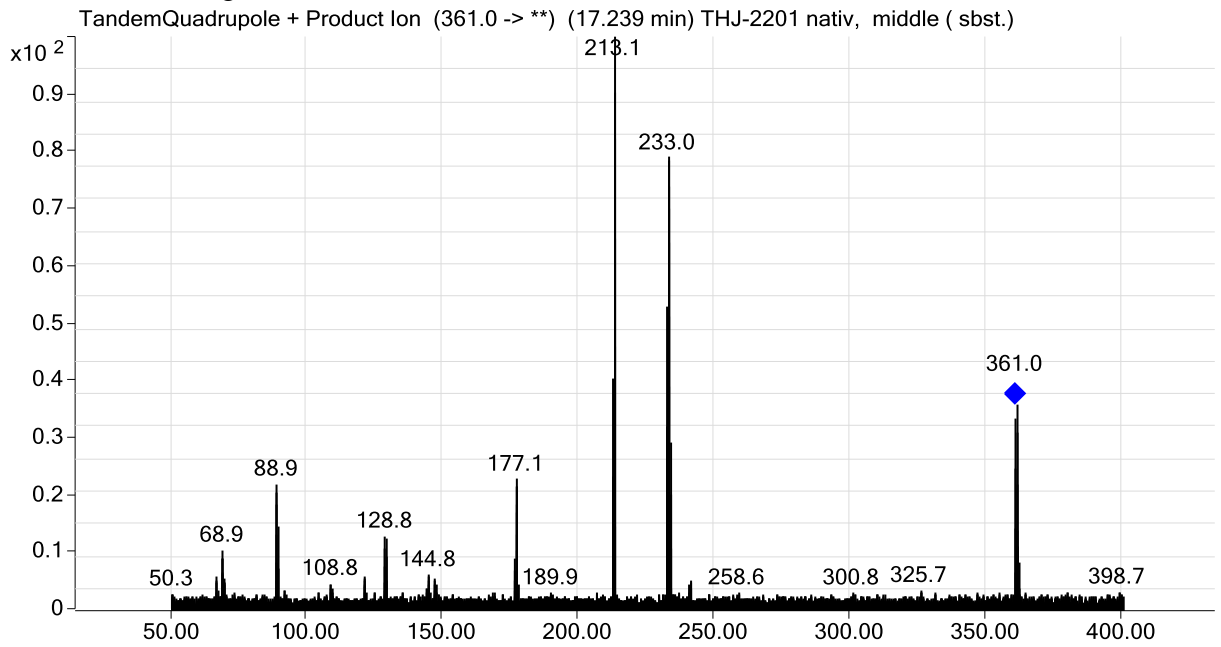
THJ-2201 M2, 15.42 min, ID 17, CE 15.



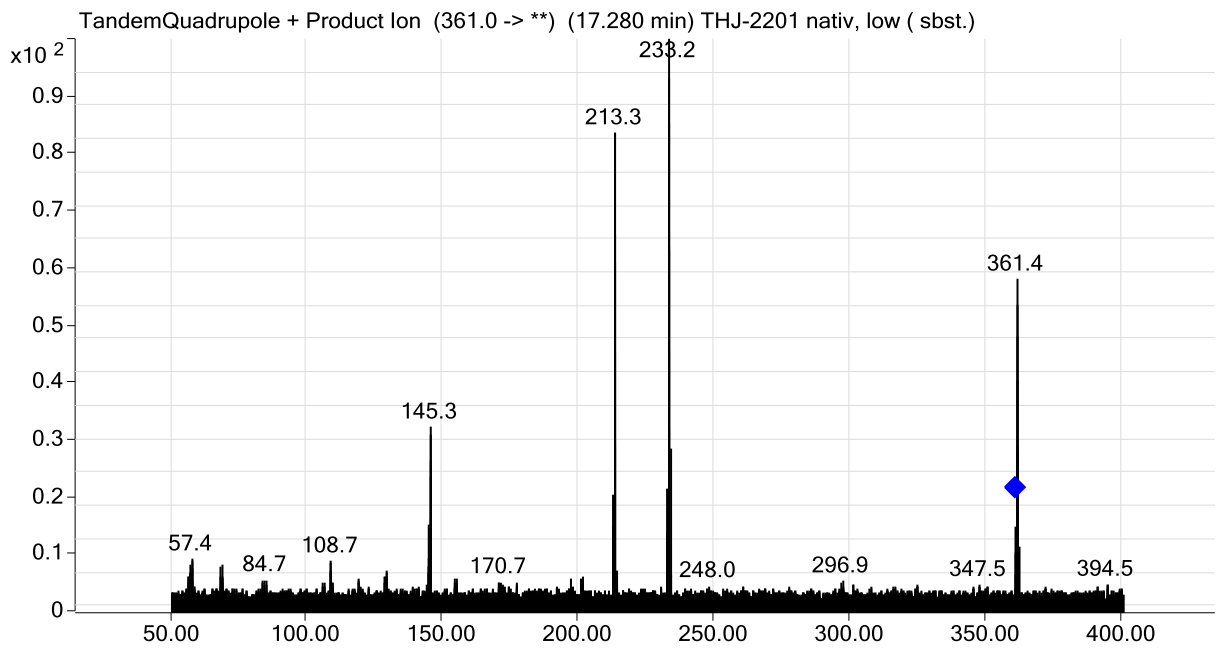
THJ-2201 nativ ID 11, CE 15



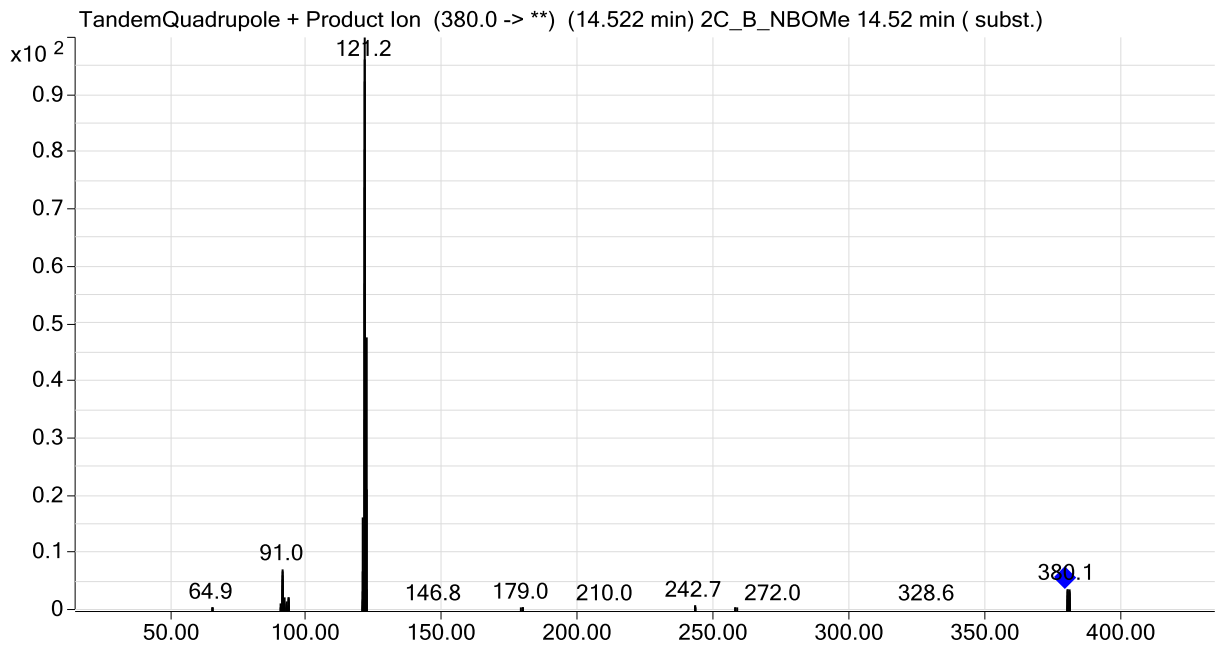
THJ-2201 nativ, high, ID13 CE 20



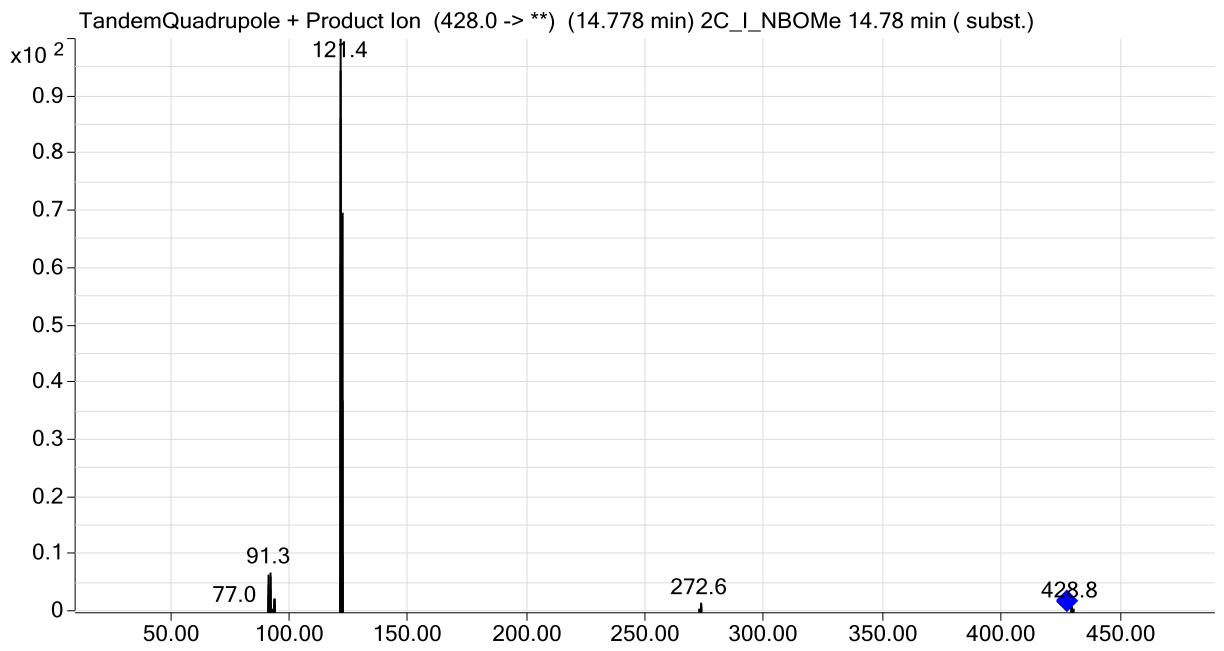
THJ-2201 nativ, middle ID14.



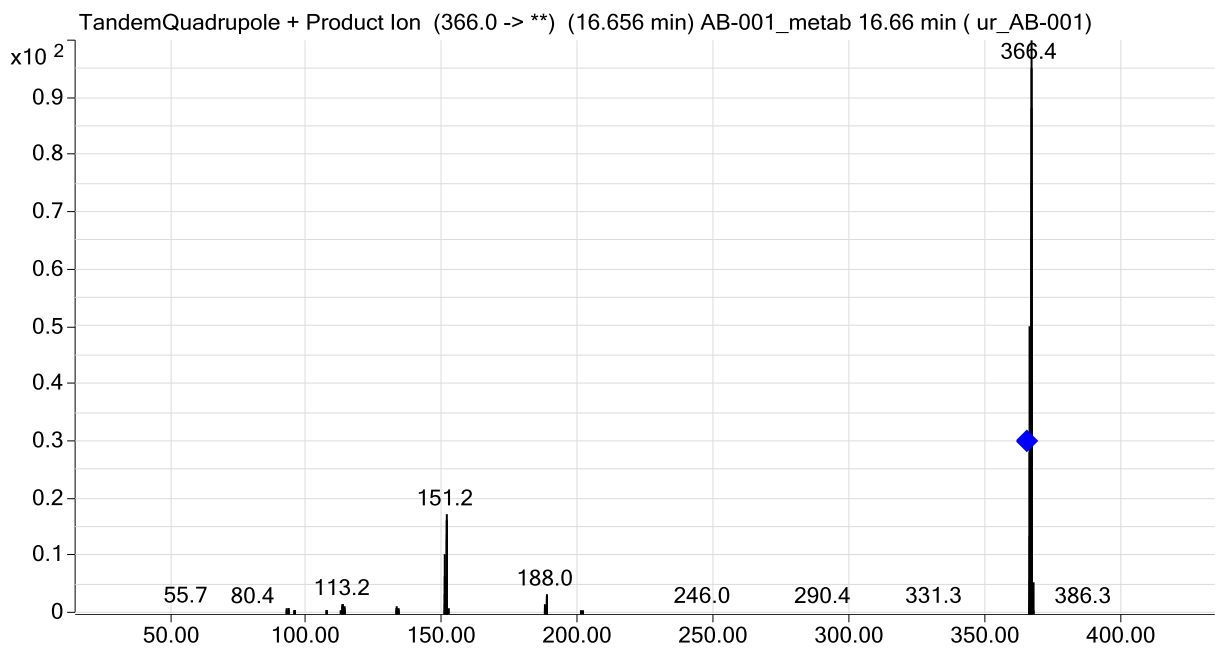
THJ-2201 nativ, low, ID15, CE20



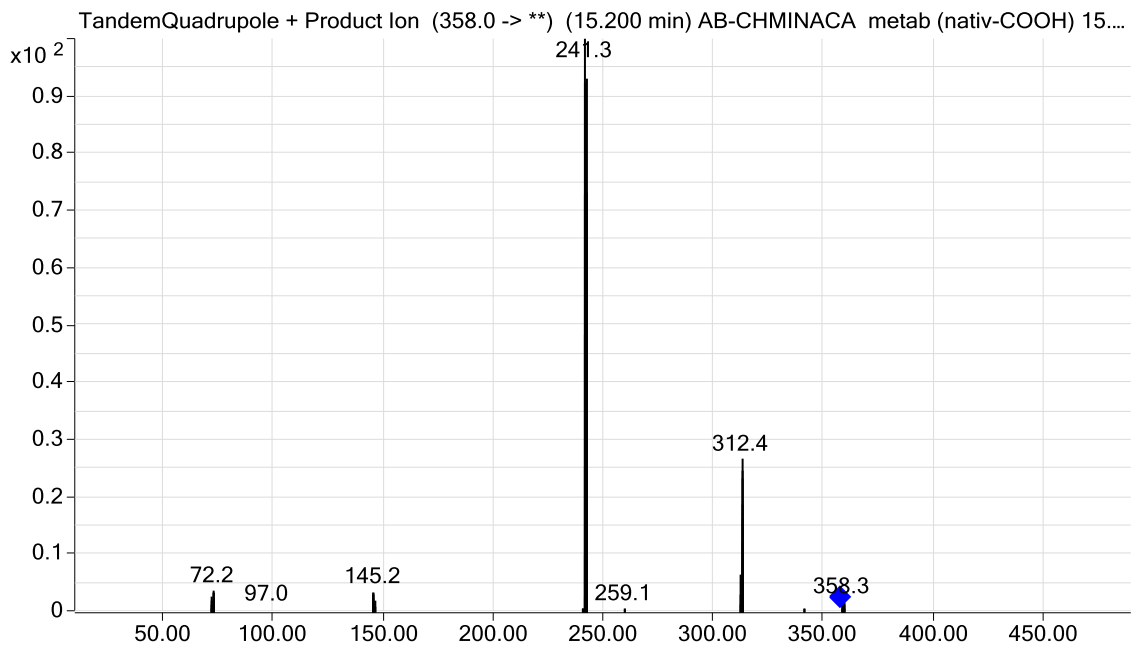
2C_B_NBOMe 14.52 min, ID81, CE15



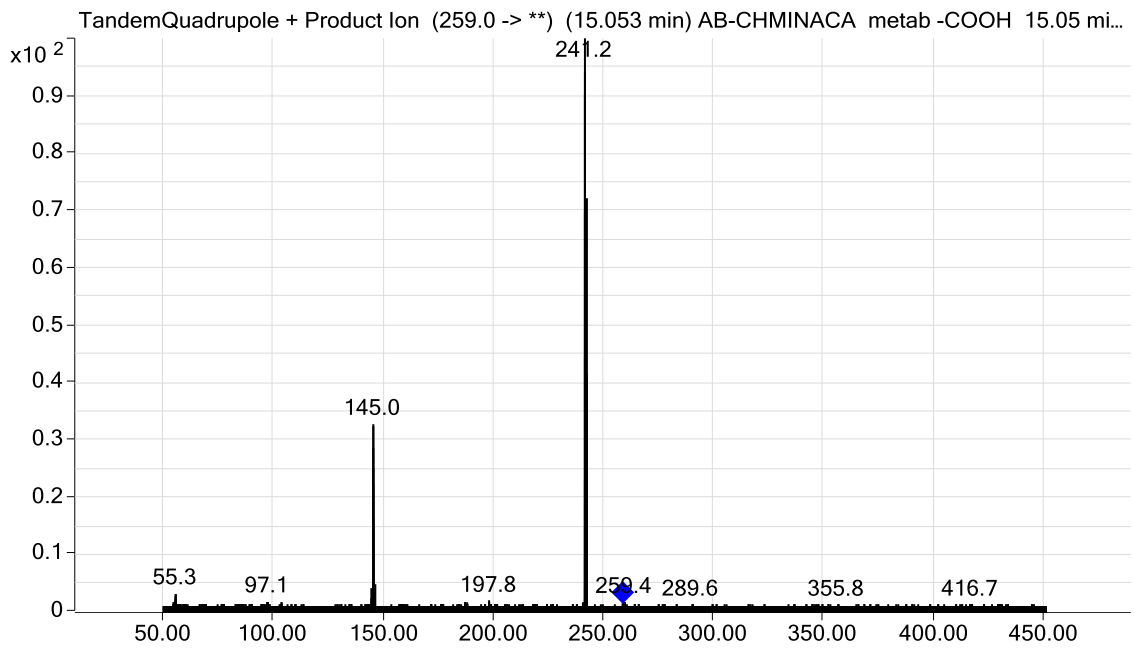
2C_I_NBOMe 14.78 min, ID82, CE15



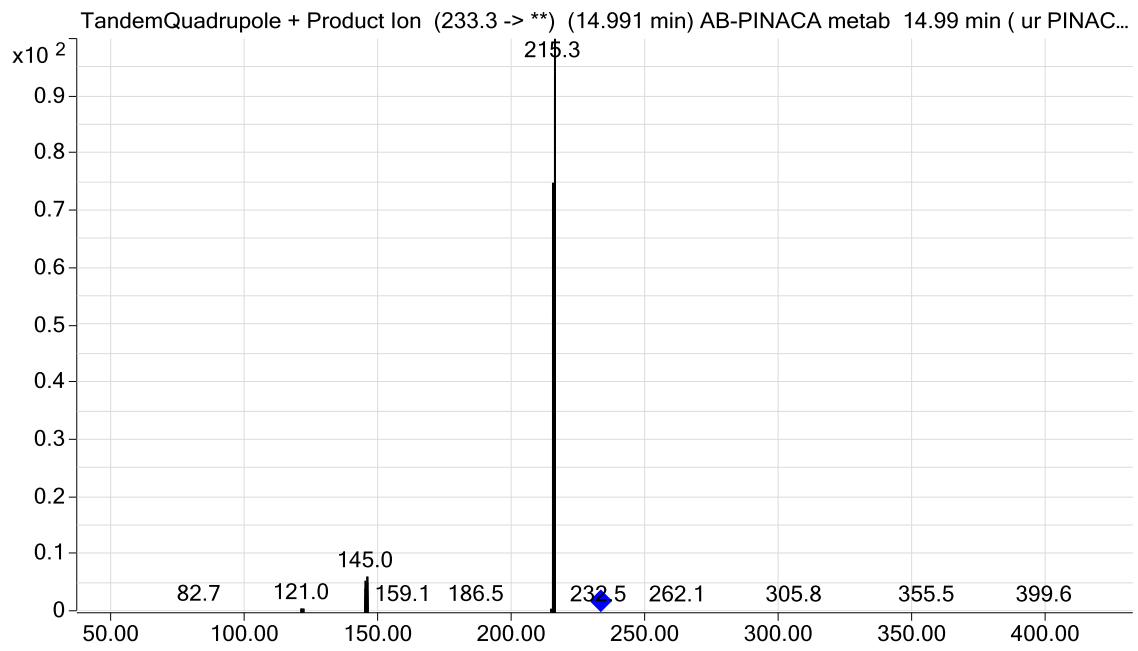
AB-001_metab 16.66 min, ID 67, CE15



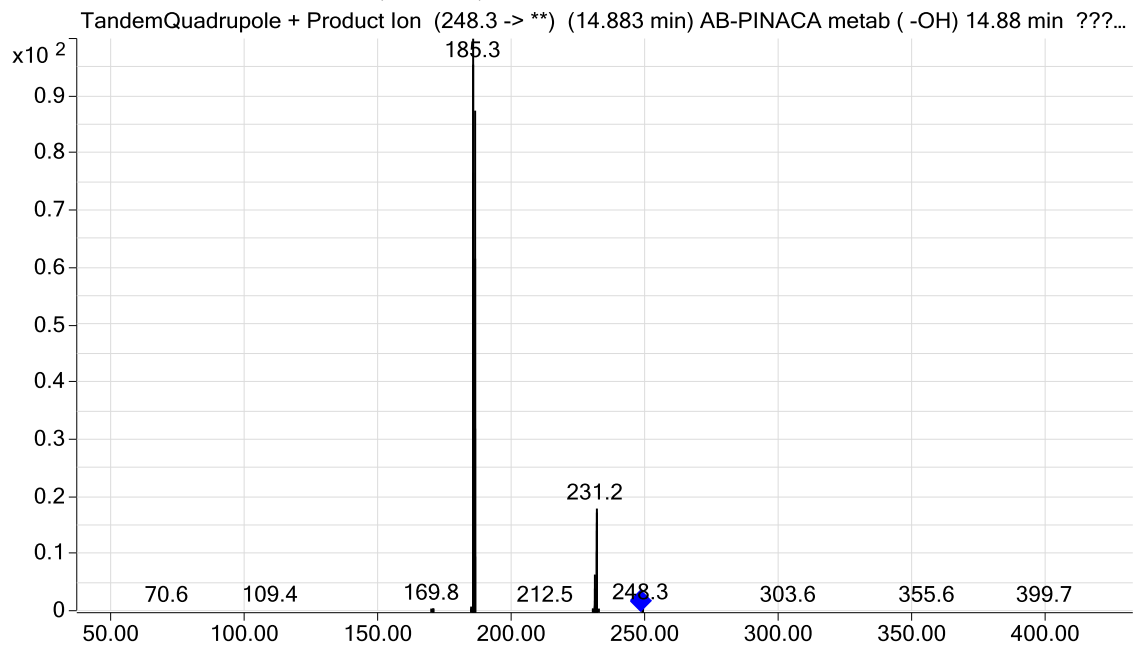
AB-CHMINACA metab (nativ-COOH) 15.20 min, ID 95, CE15



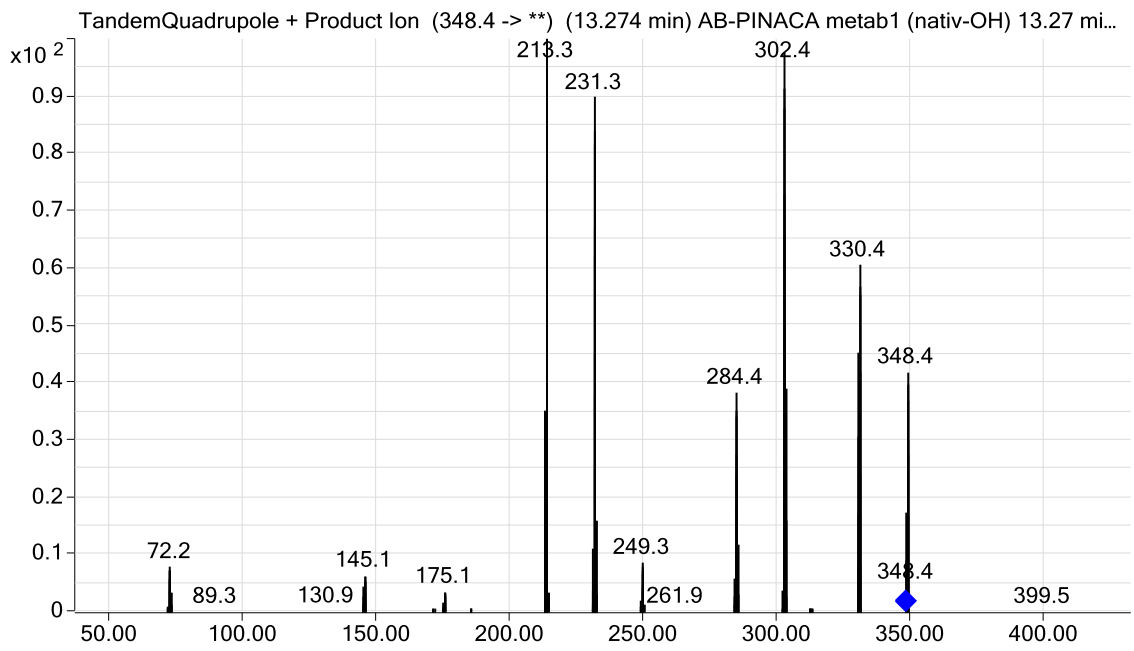
AB-CHMINACA metab -COOH 15.05 min, ID 96, CE15



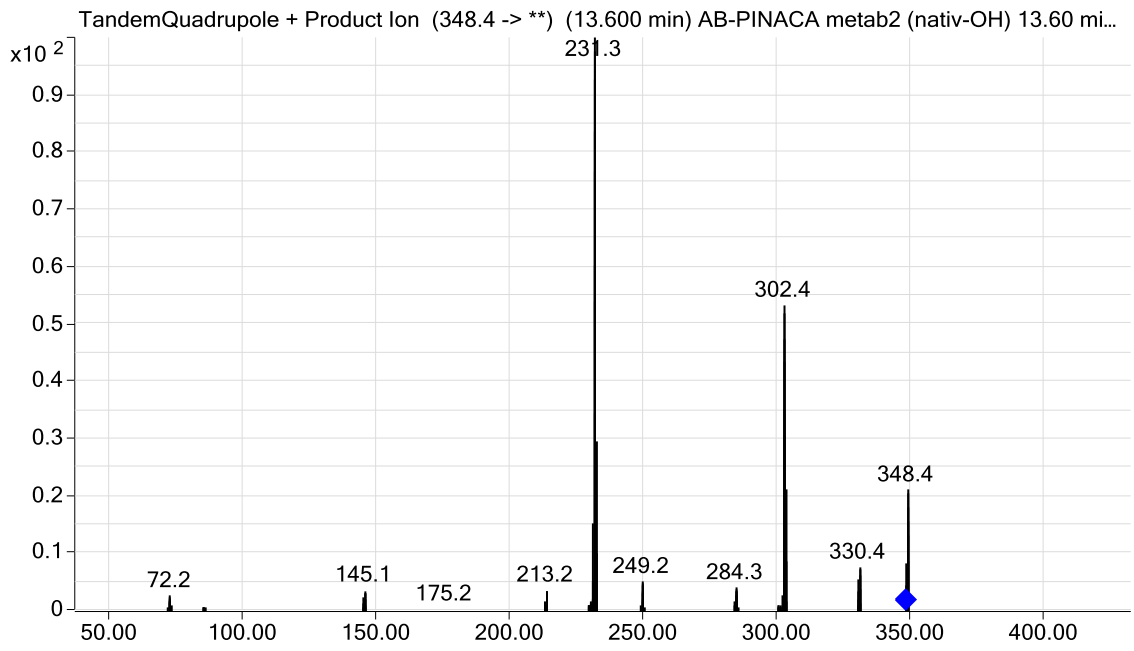
AB-PINACA metab 14.99 min, ID 87, CE10



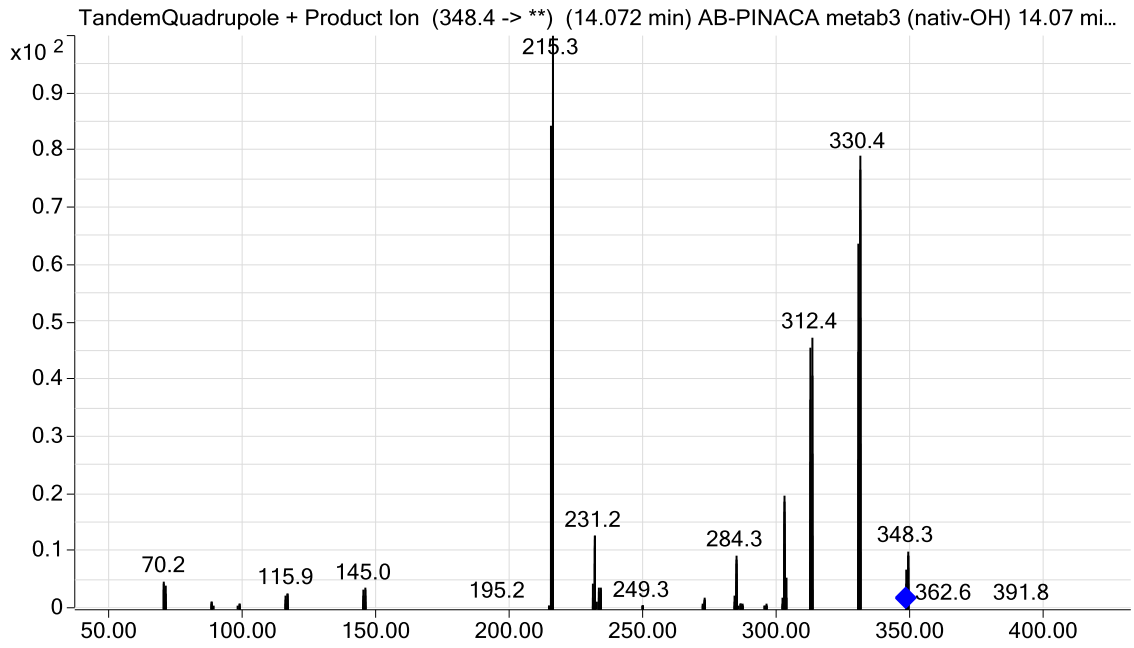
AB-PINACA metab (-OH) 14.88 min ID 93, CE10



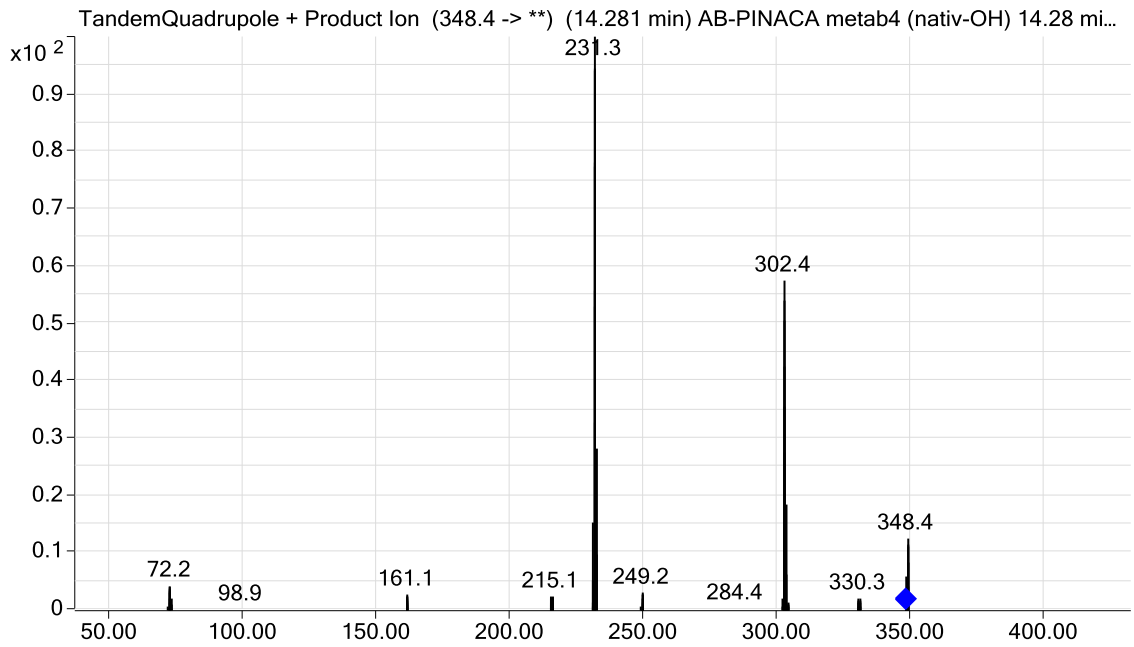
AB-PINACA metab1 (nativ-OH) 13.27 min, ID 88, CE10



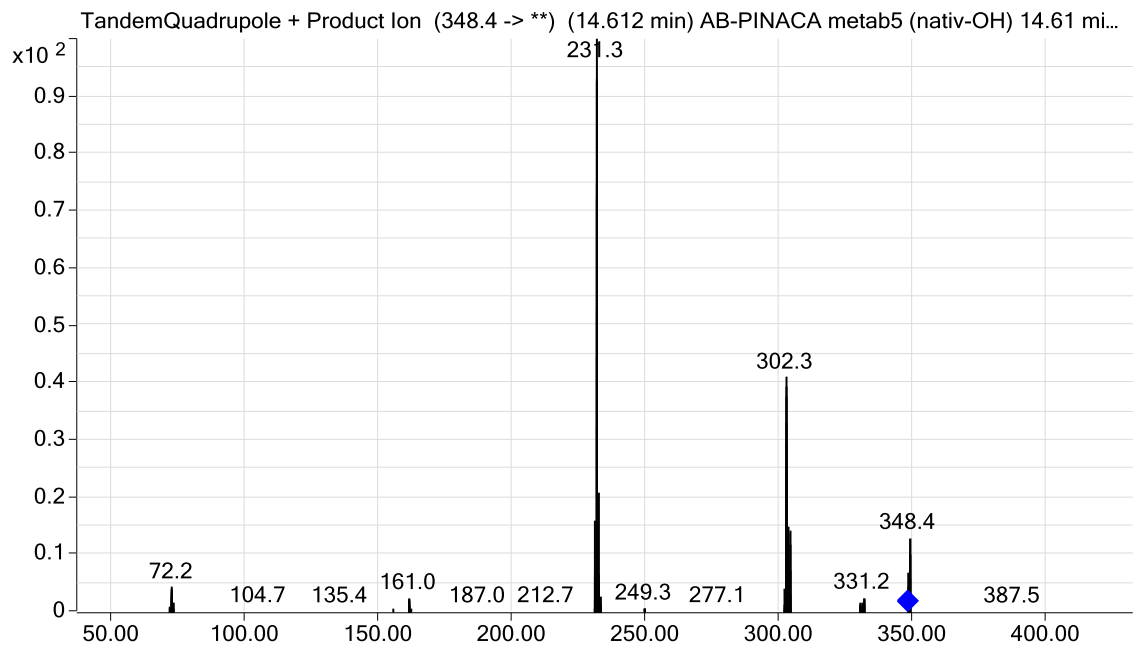
AB-PINACA metab2 (nativ-OH) 13.60 min, ID89, CE10



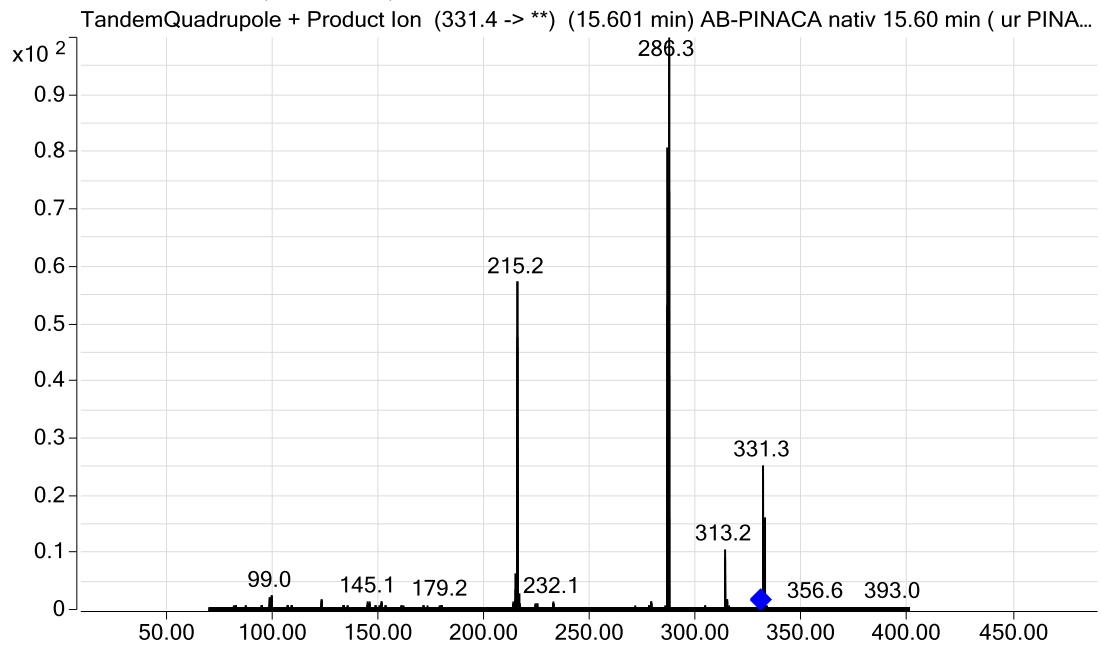
AB-PINACA metab3 (nativ-OH) 14.07 min, ID90, CE10



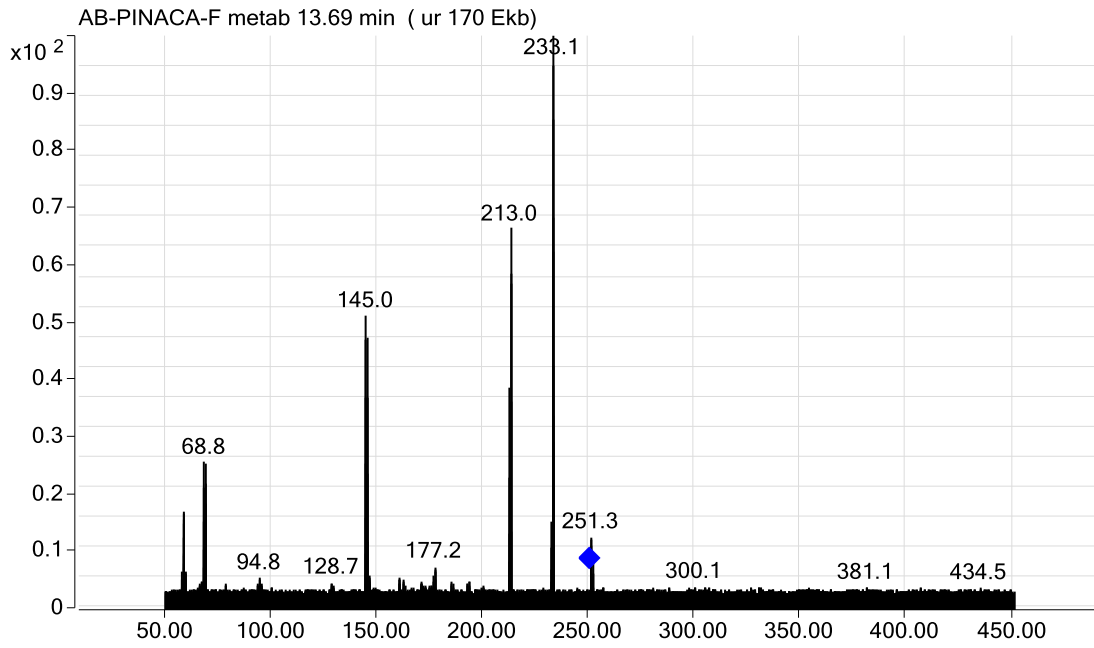
AB-PINACA metab4 (nativ-OH) 14.28 min, ID91, CE10



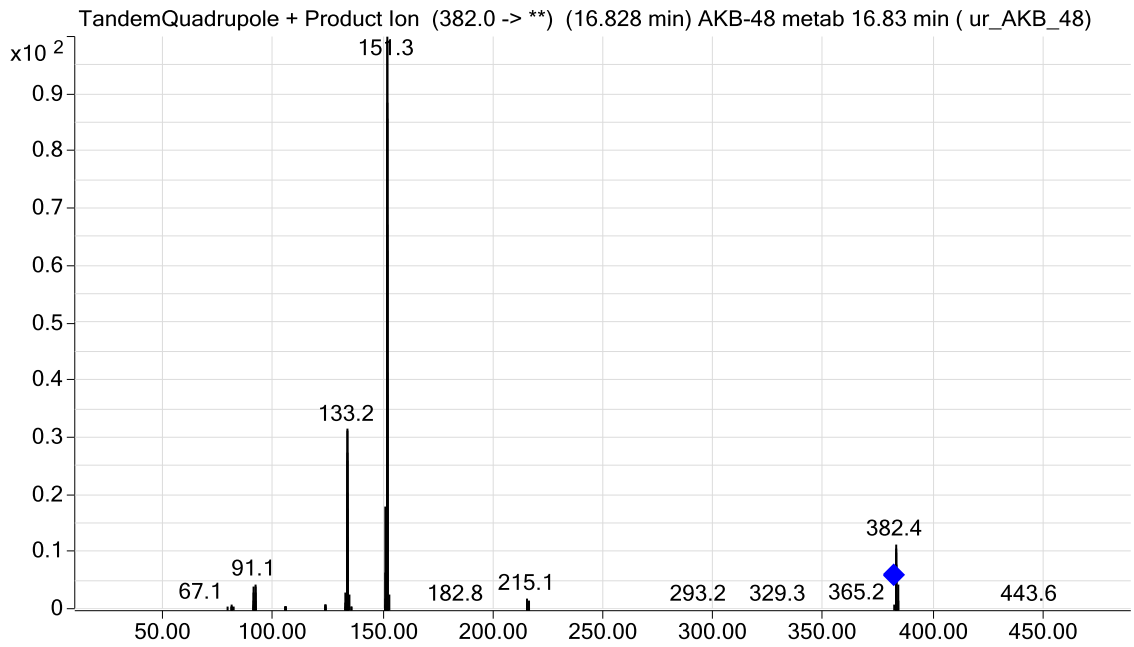
AB-PINACA metab5 (nativ-OH) 14.61 min, ID92, CE10



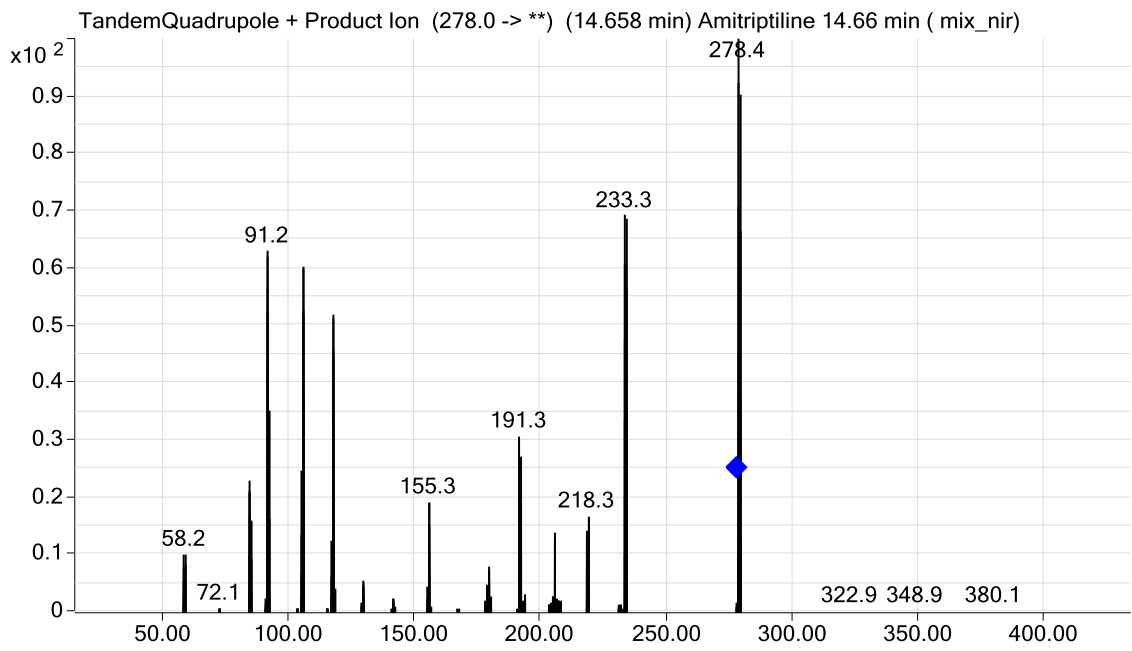
AB-PINACA nativ 15.60 min, ID86, CE10



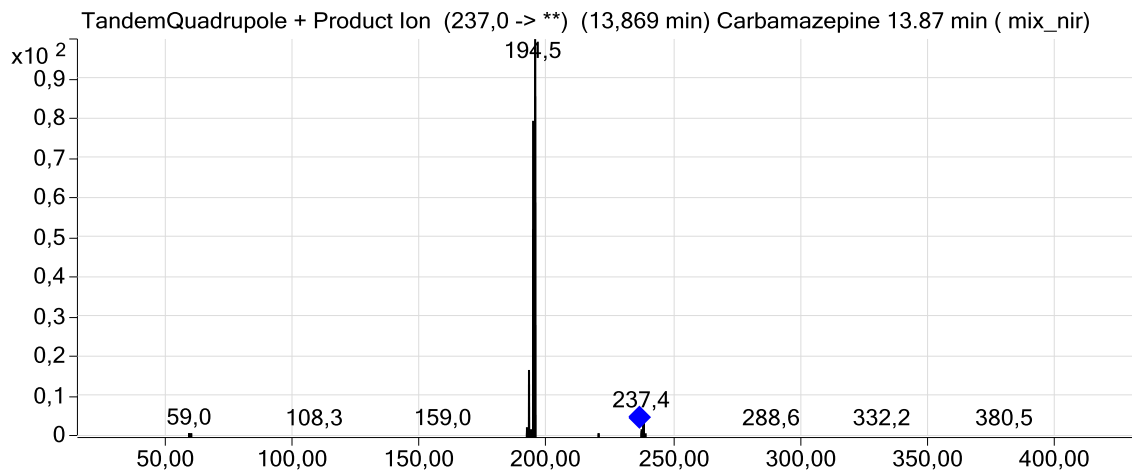
AB-PINACA-F metab 13.69 min, ID84, CE15



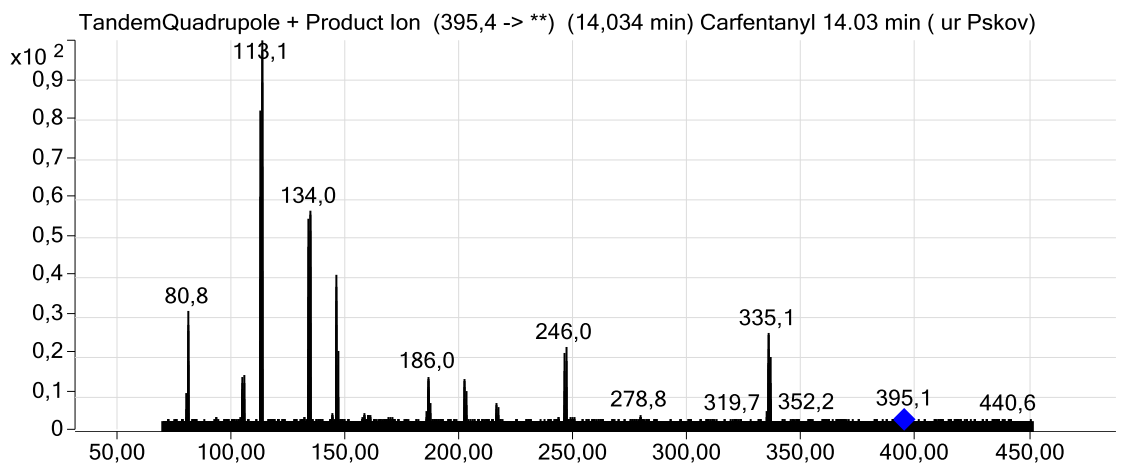
AKB-48 metab 16.83 min , ID46, CE15



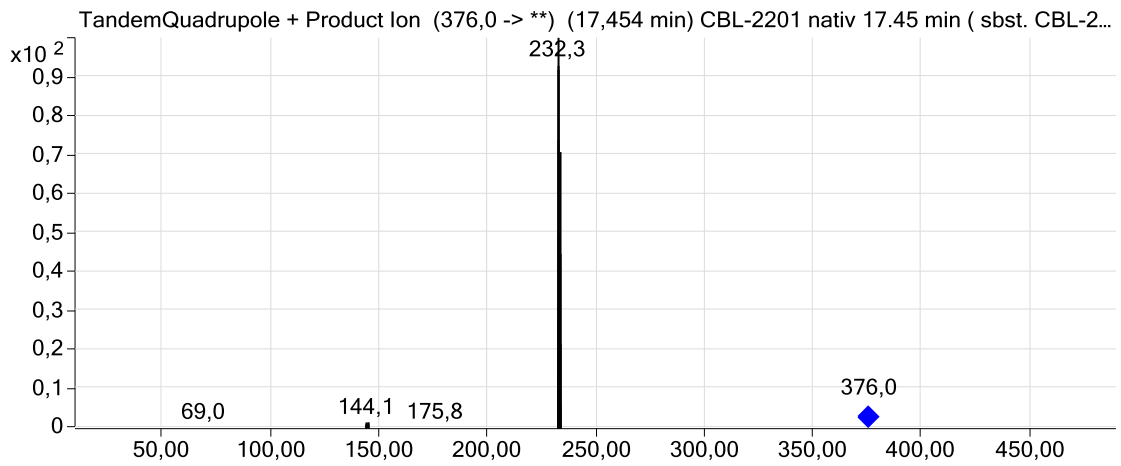
Amitriptiline 14.66 min, ID24, CE15.



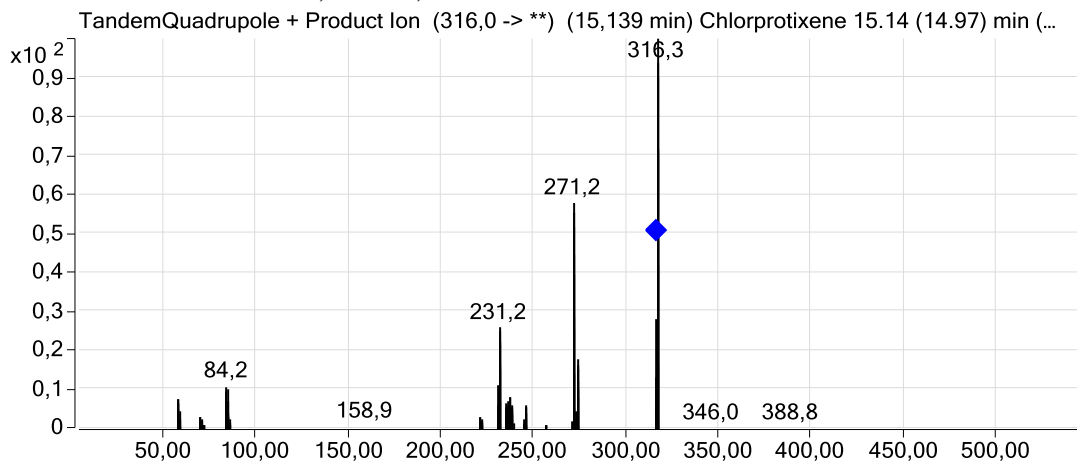
Carbamazepine 13.87 min, ID28, CE15.



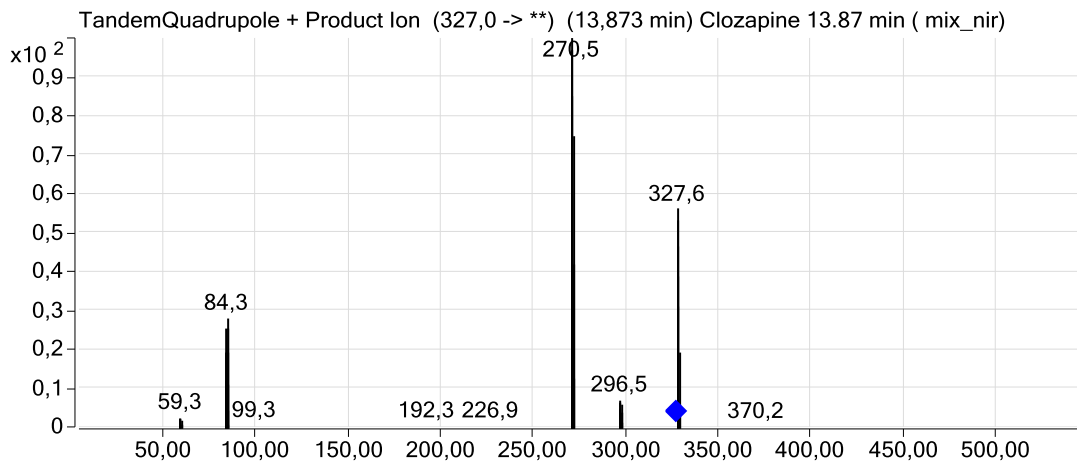
Carfentanyl 14.03 min, ID20, CE25



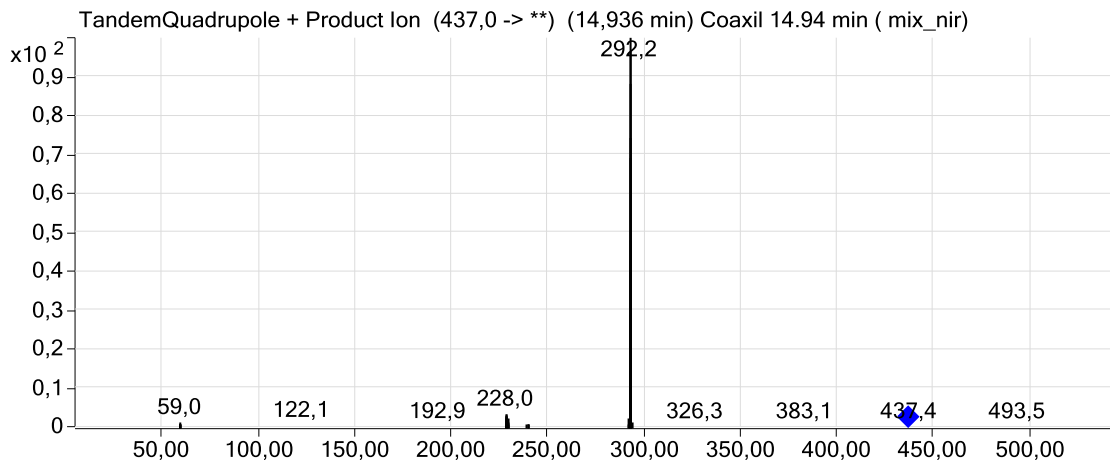
CBL-2201 nativ 17.45 min, ID98, CE25



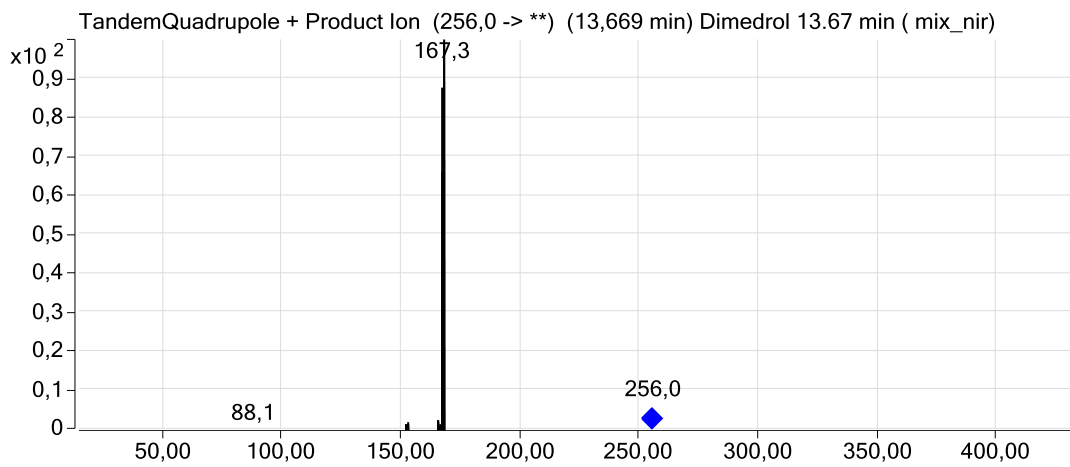
Chlorprotixene 15.14 (14.97) min, ID23, CE15



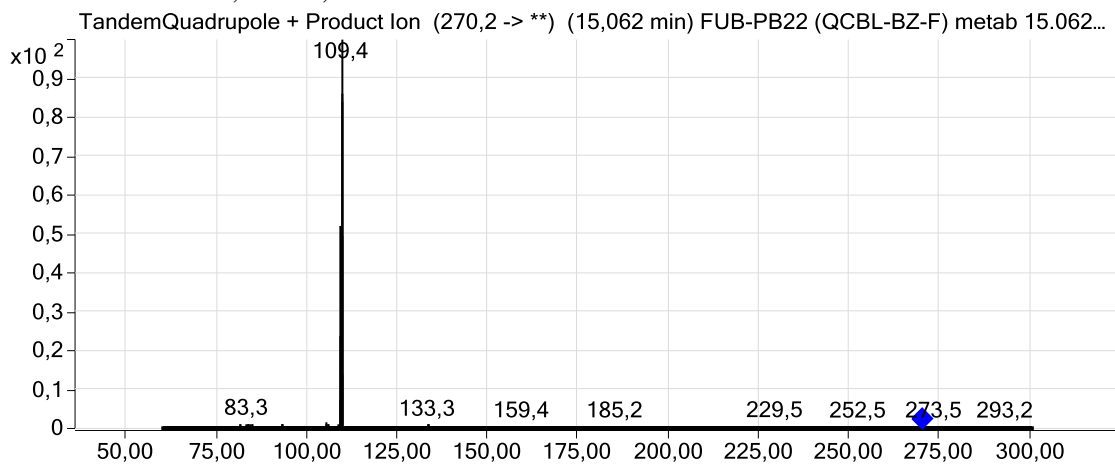
Clozapine 13.87 min, ID22, CE15



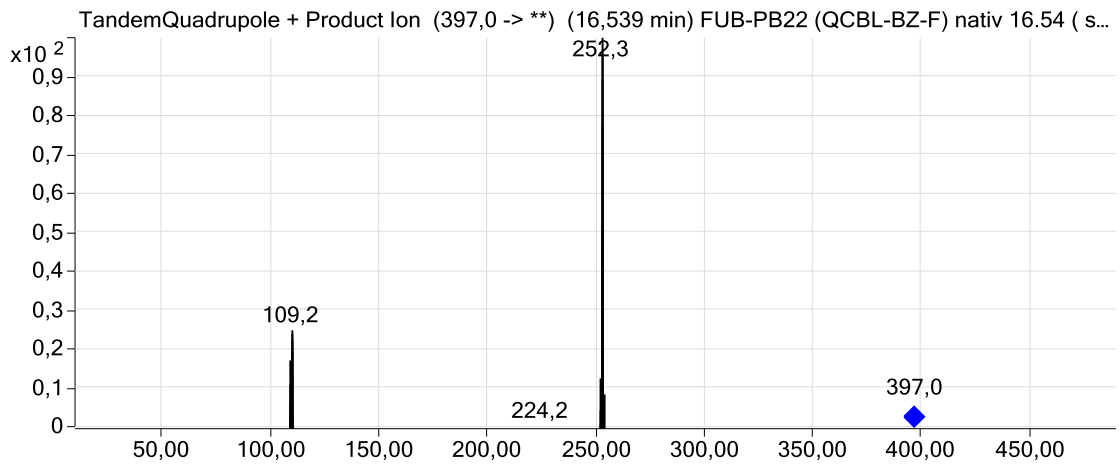
Coaxil 14.94 min, ID30, CE20



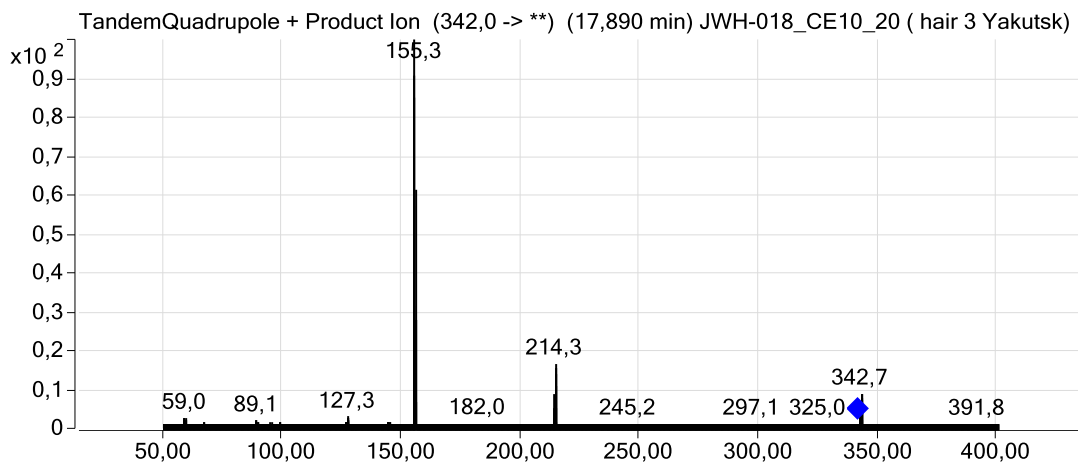
Dimedrol 13.67 min, ID26, CE15



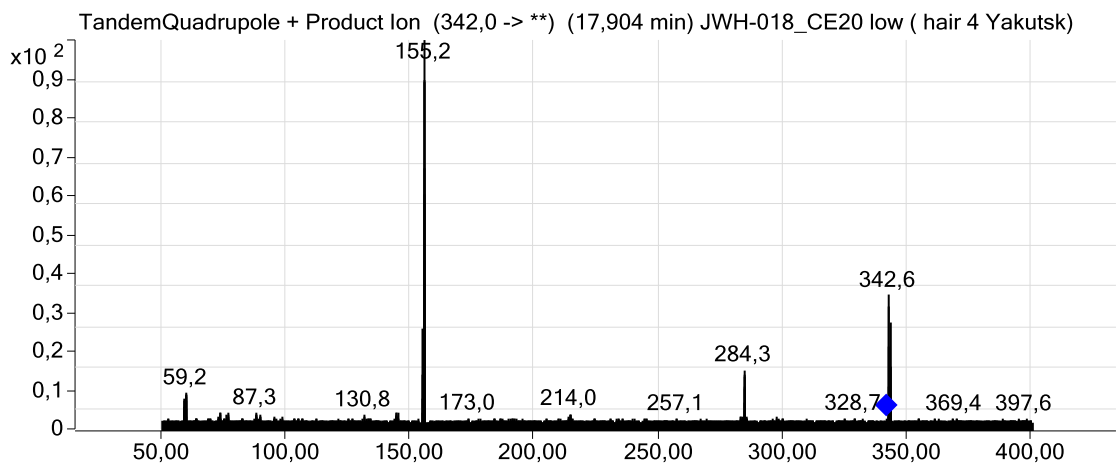
FUB-PB22 (QCBL-BZ-F) metab 15.062 min, ID100, CE15



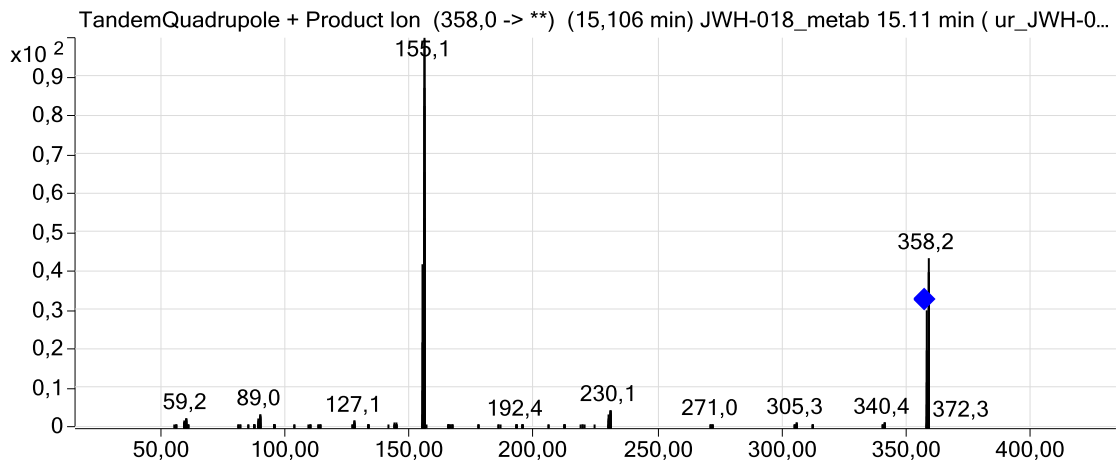
FUB-PB22 (QCBL-BZ-F) nativ 16.54 min, ID99, CE15



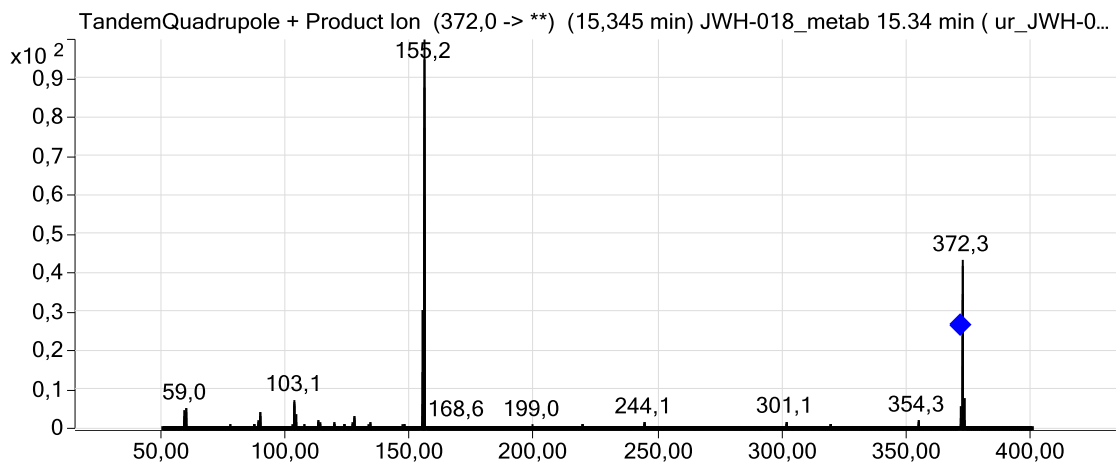
JWH-018 nativ 17.89 min, ID3, CE20



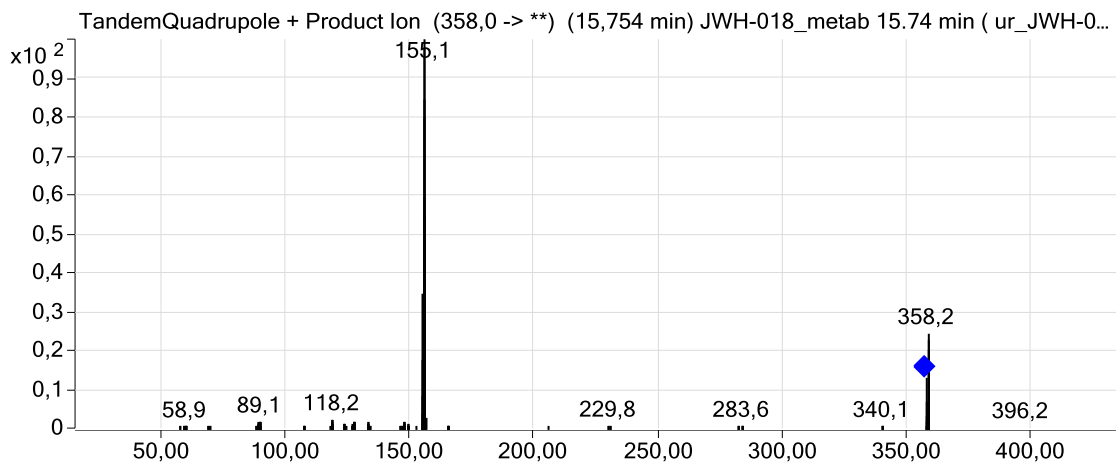
JWH-018 low nativ 17.89 min, ID9, CE20



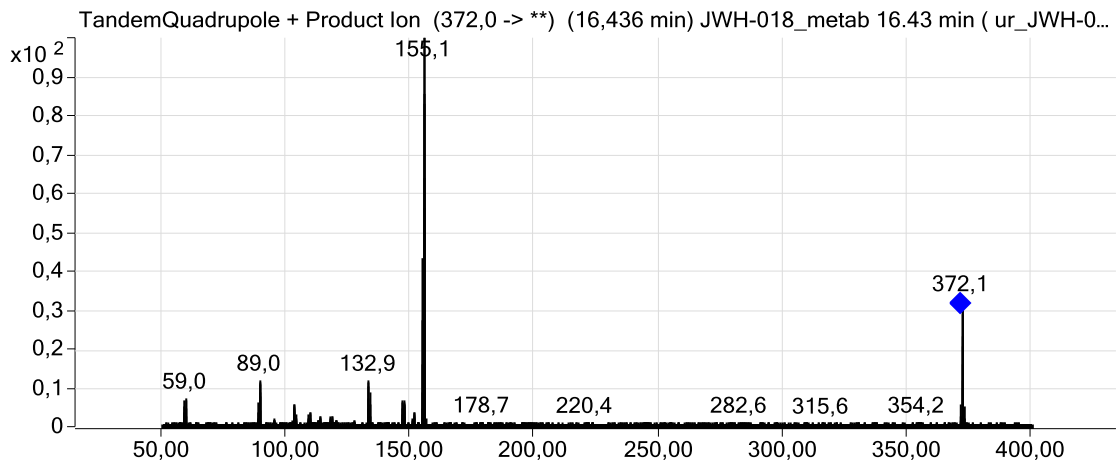
JWH-018_metab 15.11 min, ID57, CE15



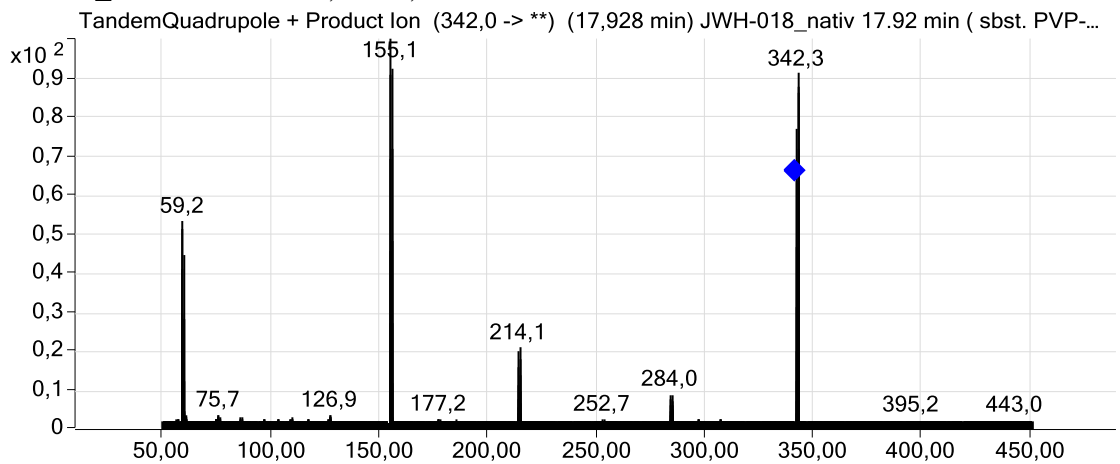
JWH-018_metab 15.34 min, ID59, CE15



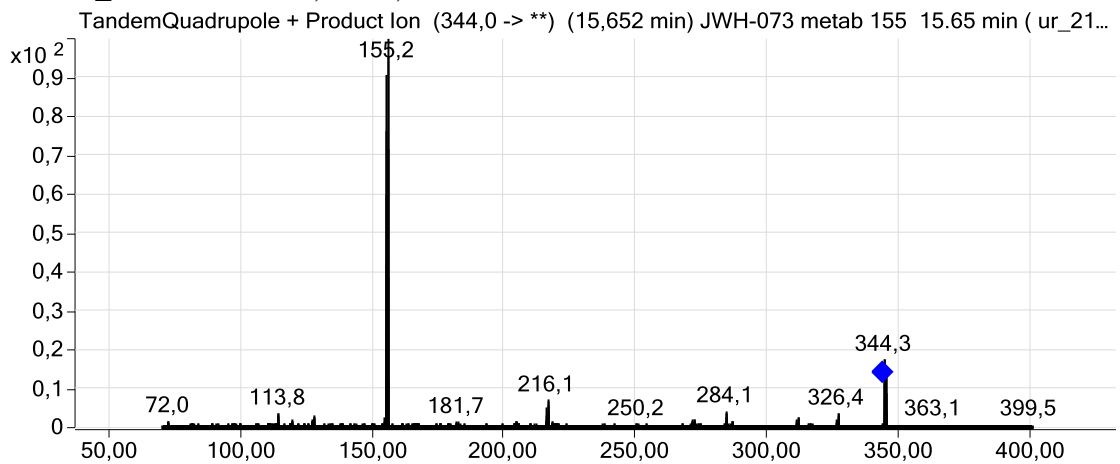
JWH-018_metab 15.74 min, ID56, CE15



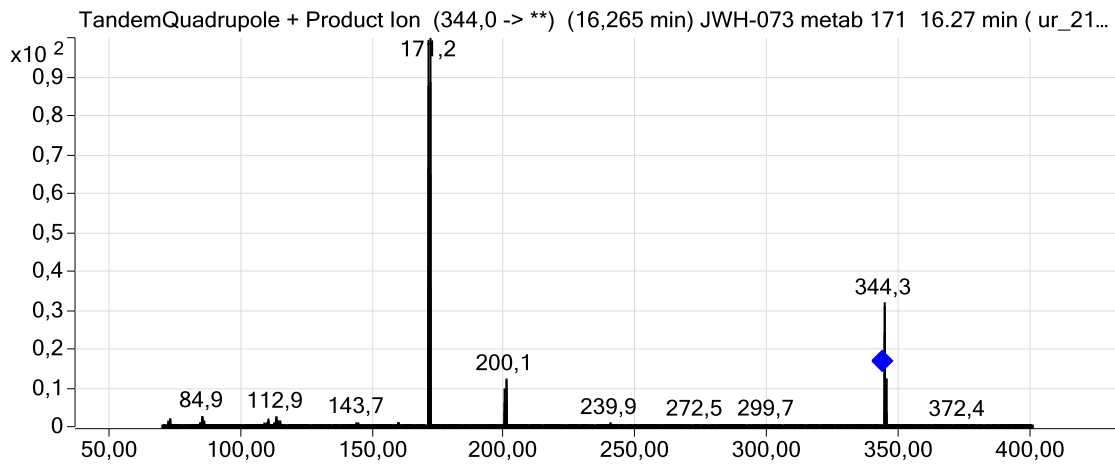
JWH-018_metab 16.43 min, ID60, CE15



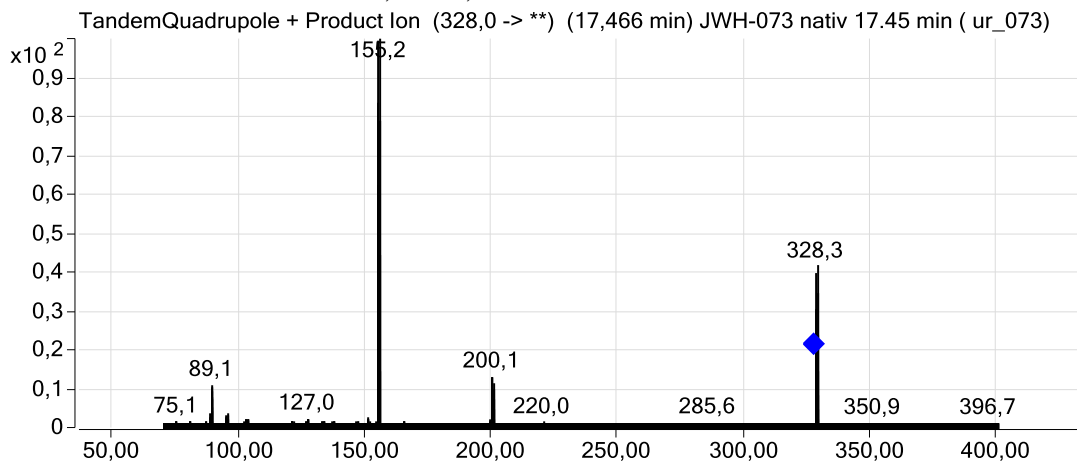
JWH-018_nativ 17.92 min, ID97, CE15



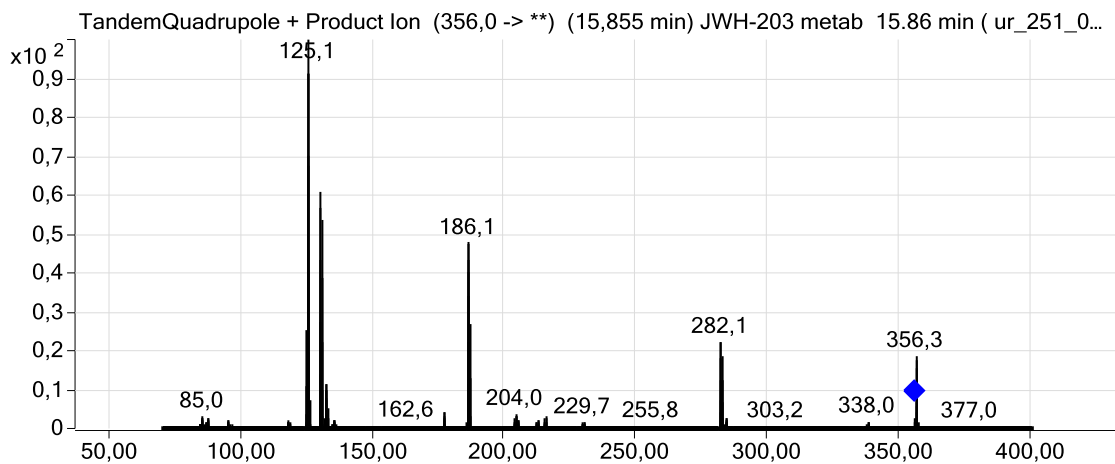
JWH-073_metab 15.65 min, ID36, CE18



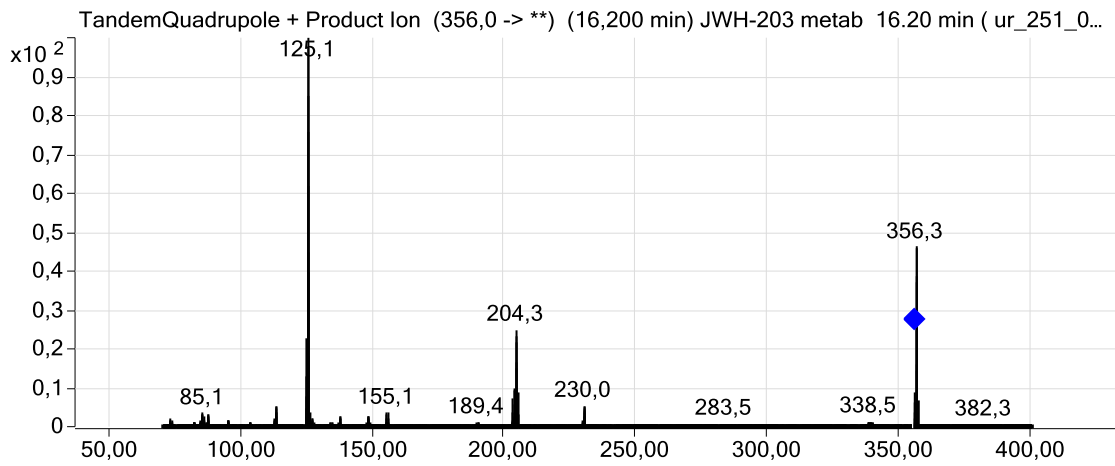
JWH-073 metab 171 16.27 min, ID35, CE18



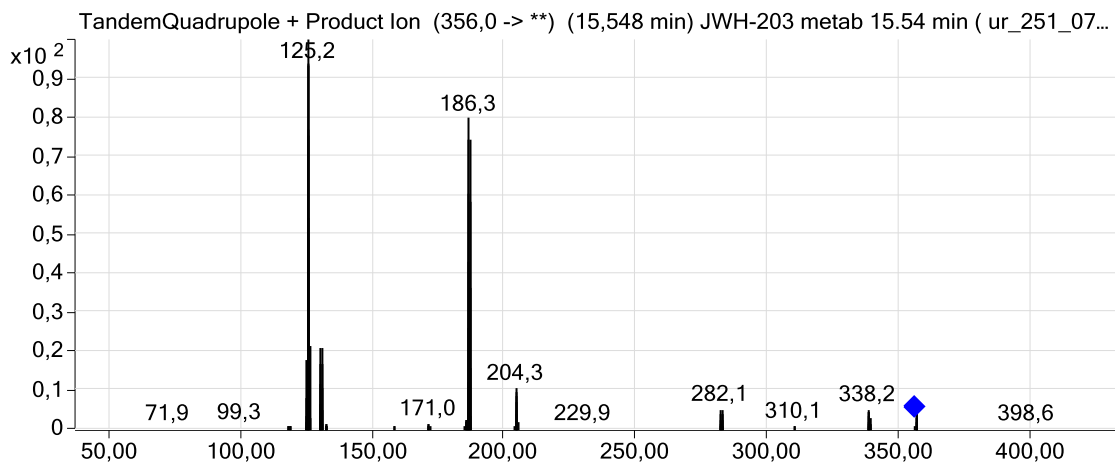
JWH-073 nativ 17.45 min, ID32, CE18



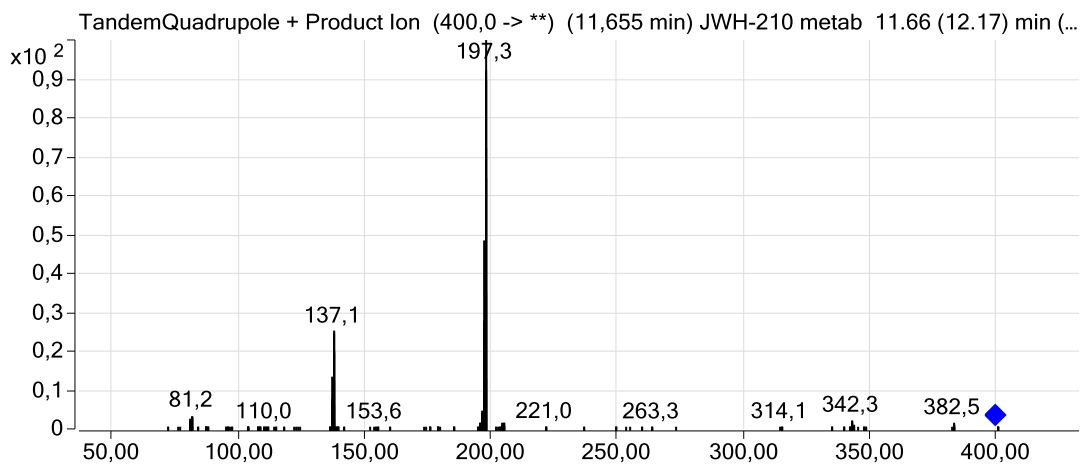
JWH-203 metab 15.86 min, ID40, CE18



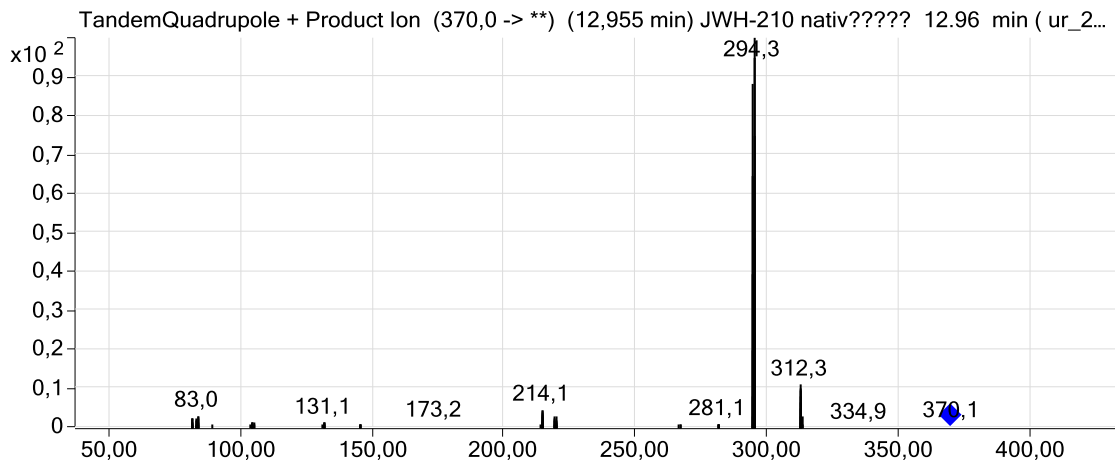
JWH-203 metab 16.20 min, ID41, CE18



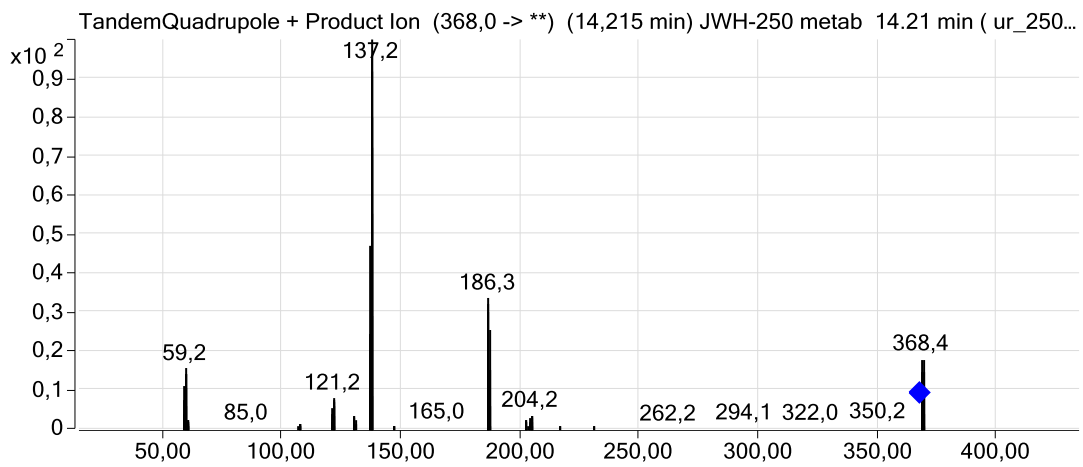
JWH-203 metab 15.54 min, ID39, CE18



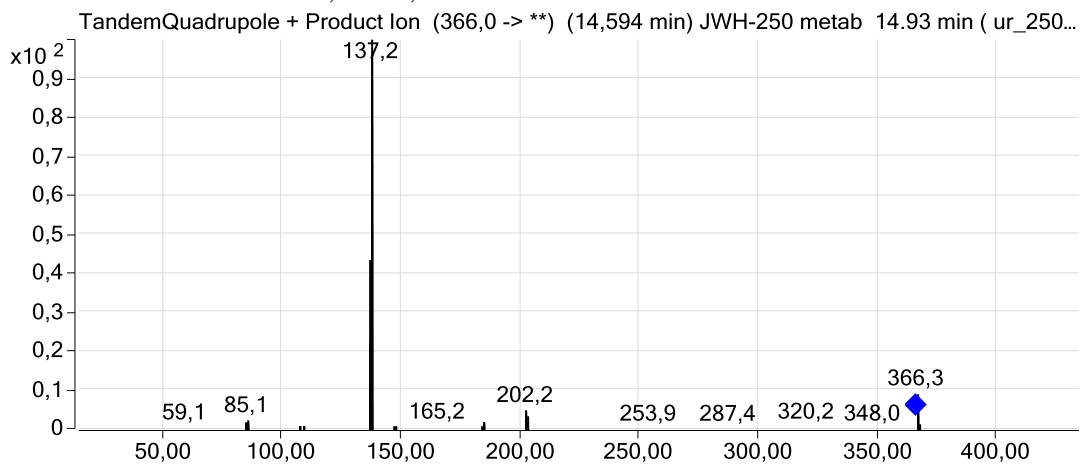
JWH-210 metab1 11.66min, metab2 12.17 min, ID37, CE18



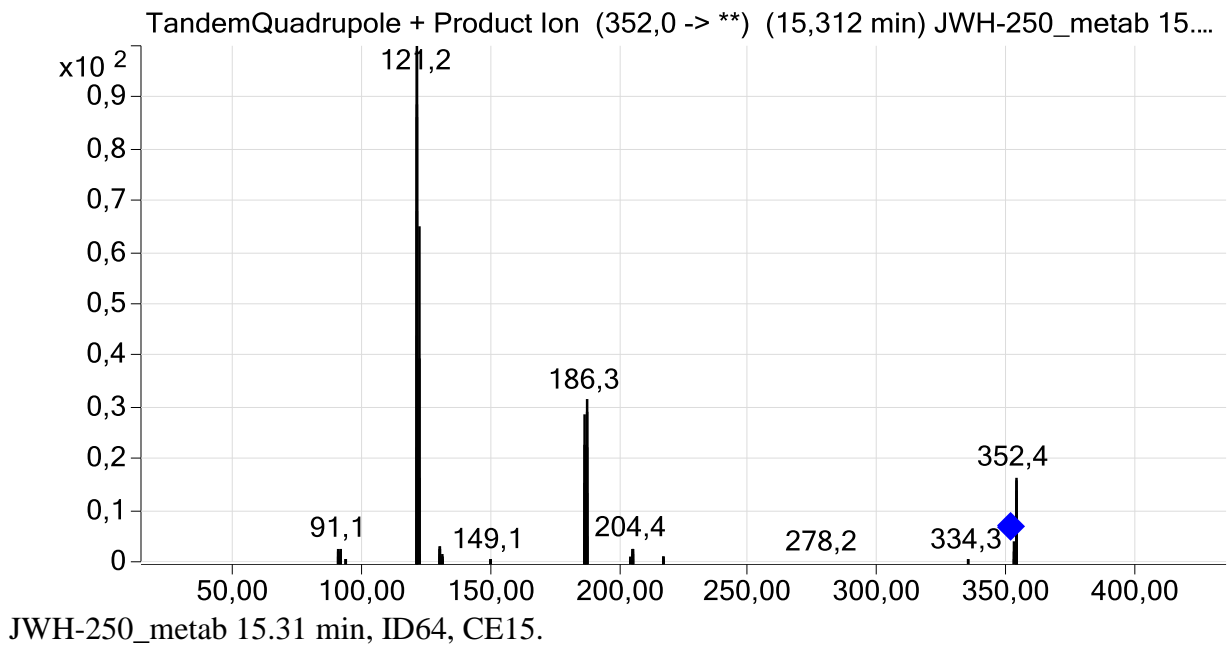
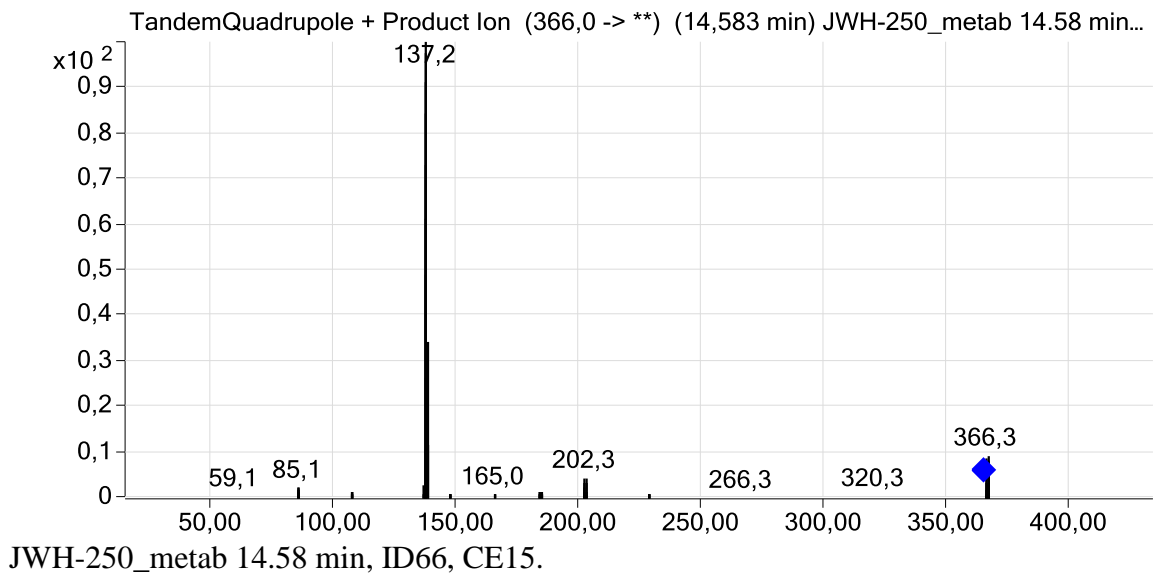
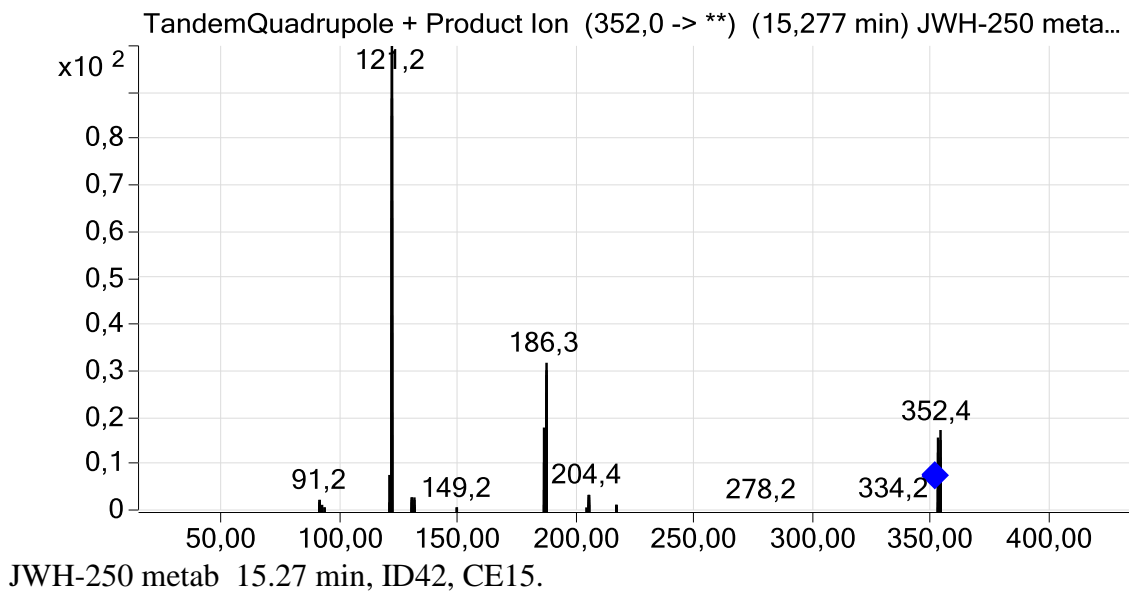
JWH-210 nativ 12.96 min, ID38, CE18

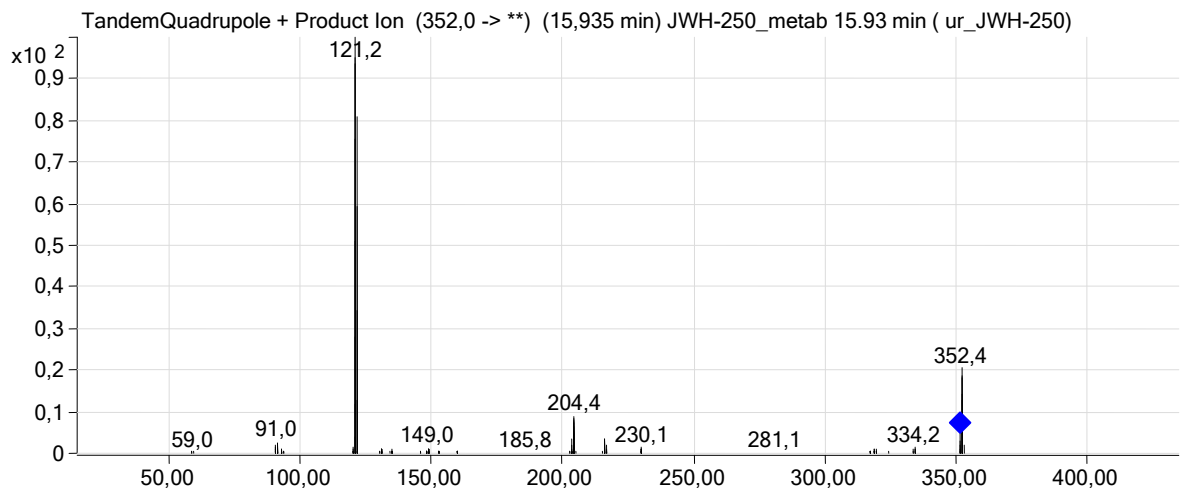
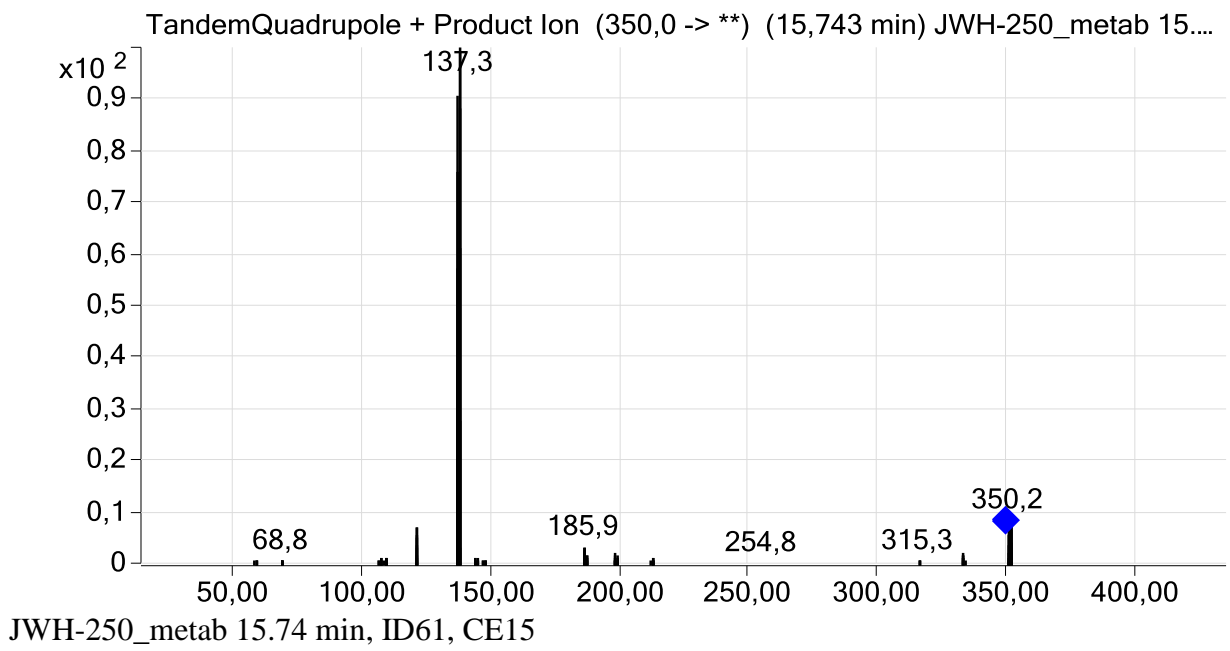


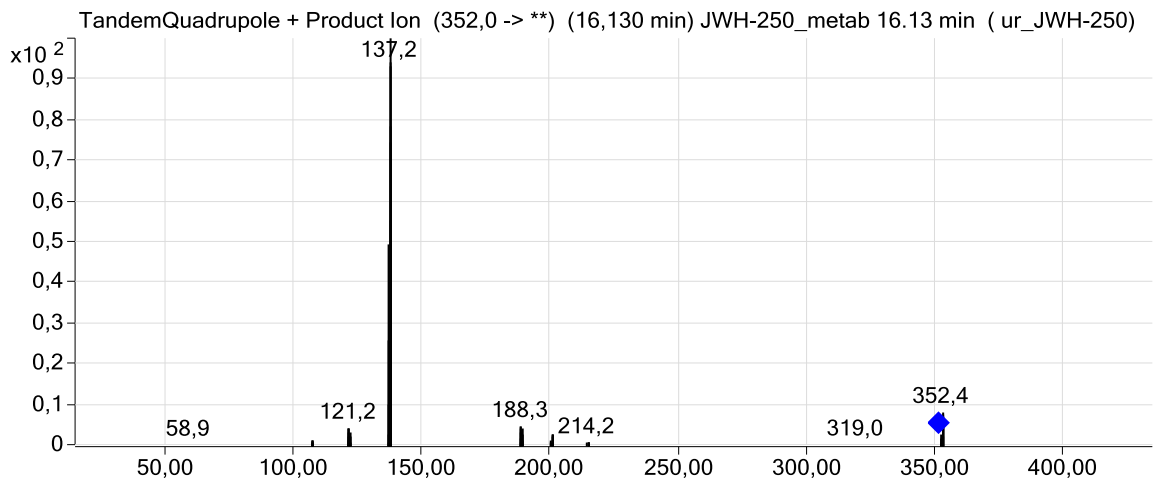
JWH-250 metab 14.21 min, ID45, CE15



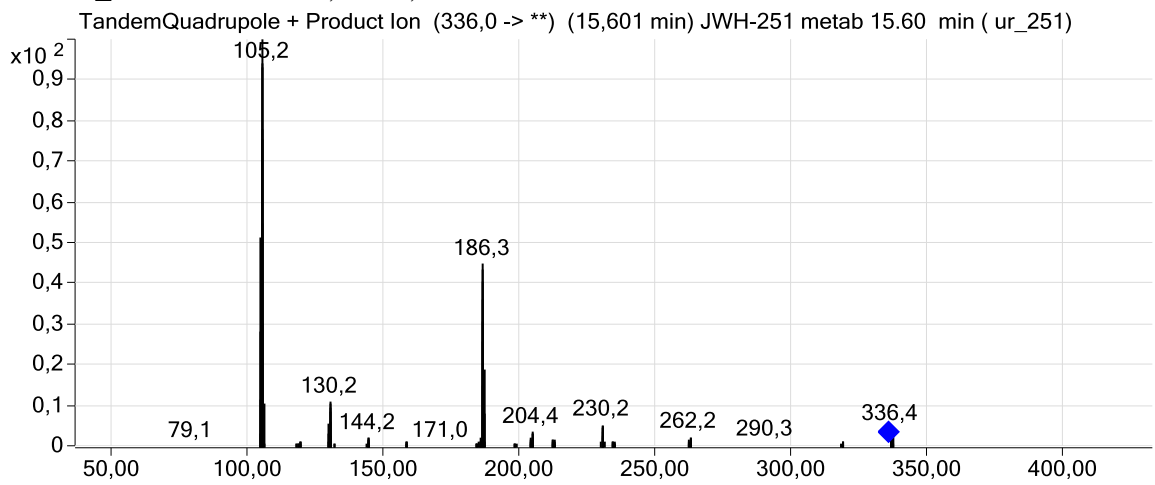
JWH-250 metab 14.93 min, ID43, CE15.



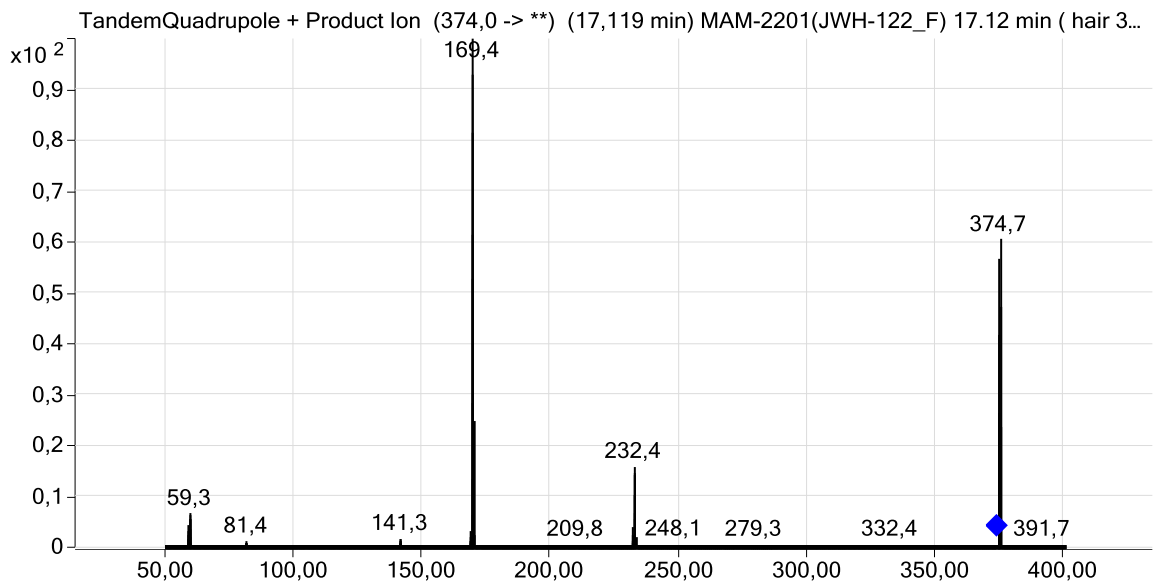




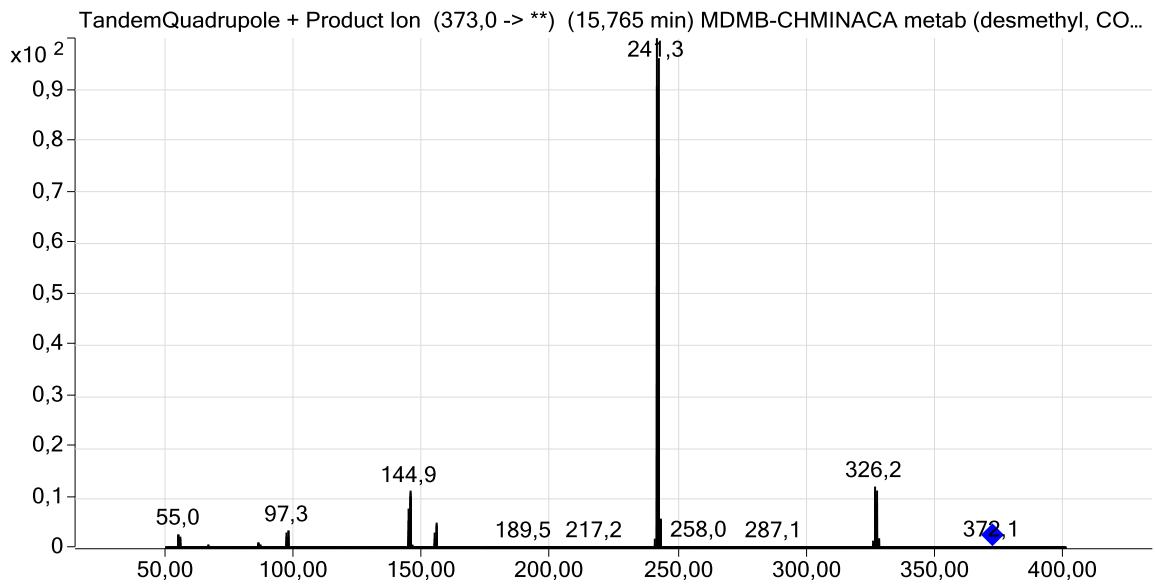
JWH-250_metab 16.13 min, ID62, CE15.



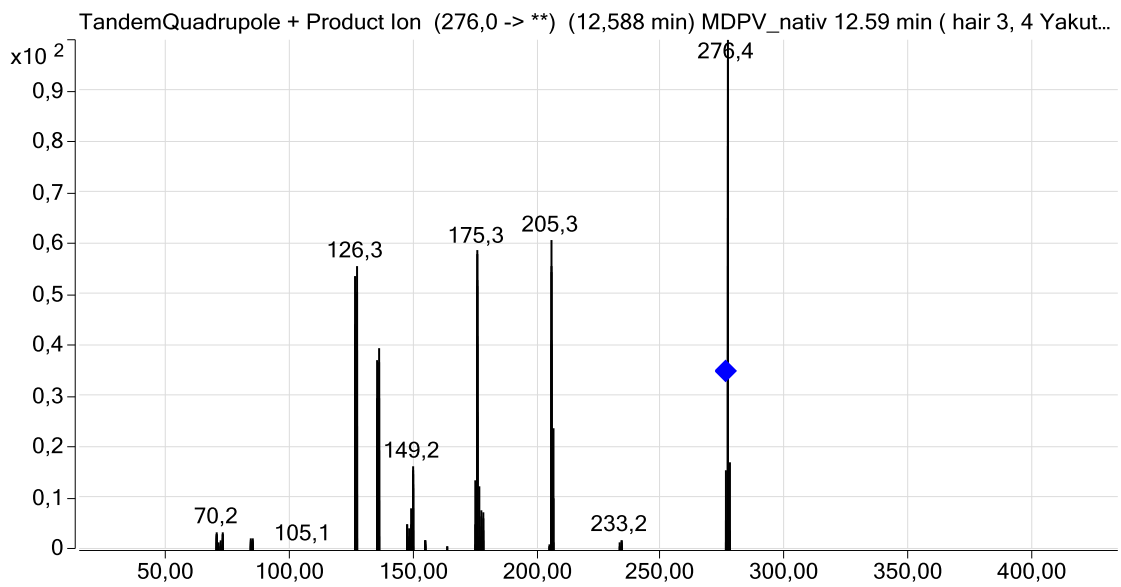
JWH-251 metab 15.60 min, ID33, CE15



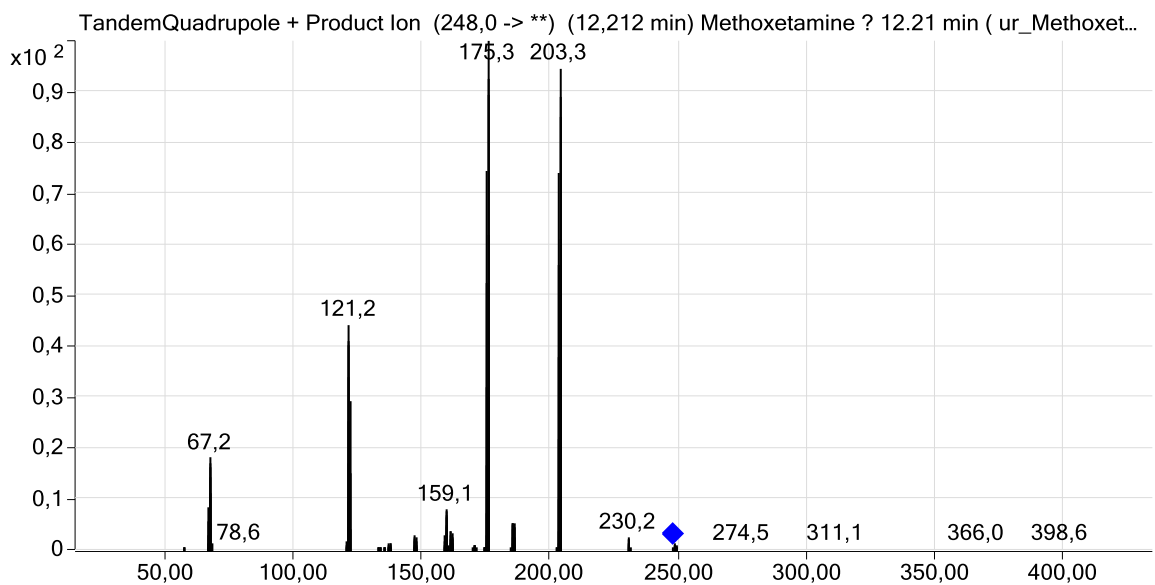
MAM-2201(JWH-122_F) 17.12 min, ID2, CE15



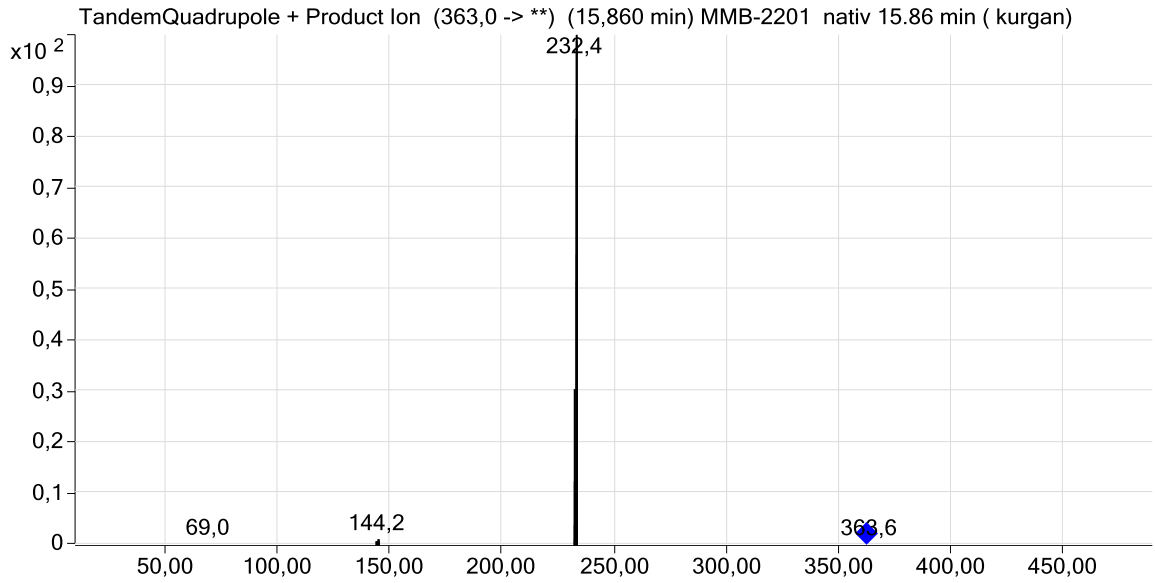
MDMB-CHMINACA metab (desmethyl, COOH) 15.77 min, ID83, CE15



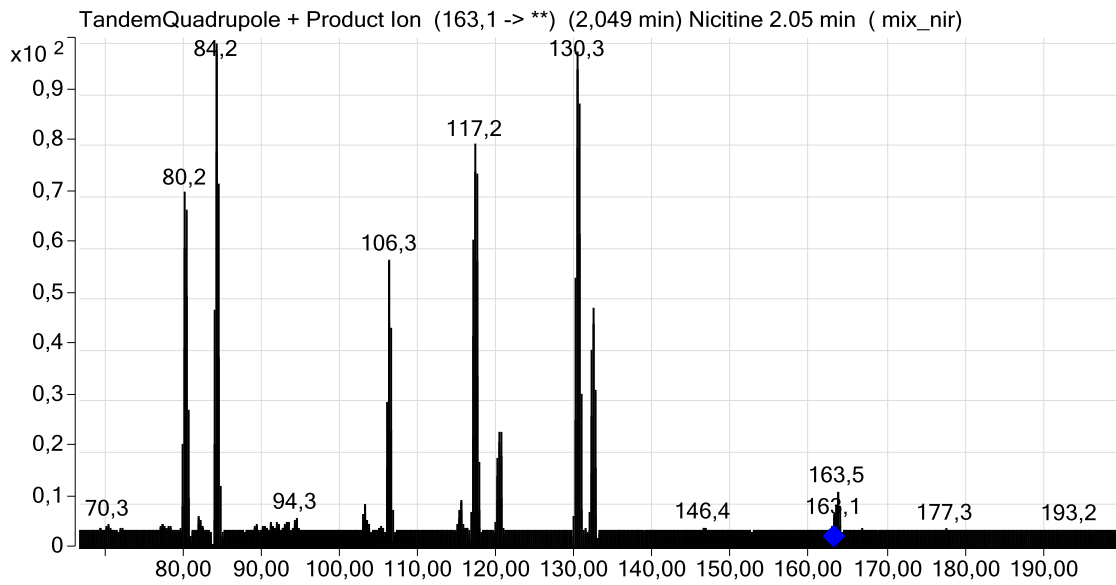
MDPV_nativ 12.59 min, ID7, CE15.



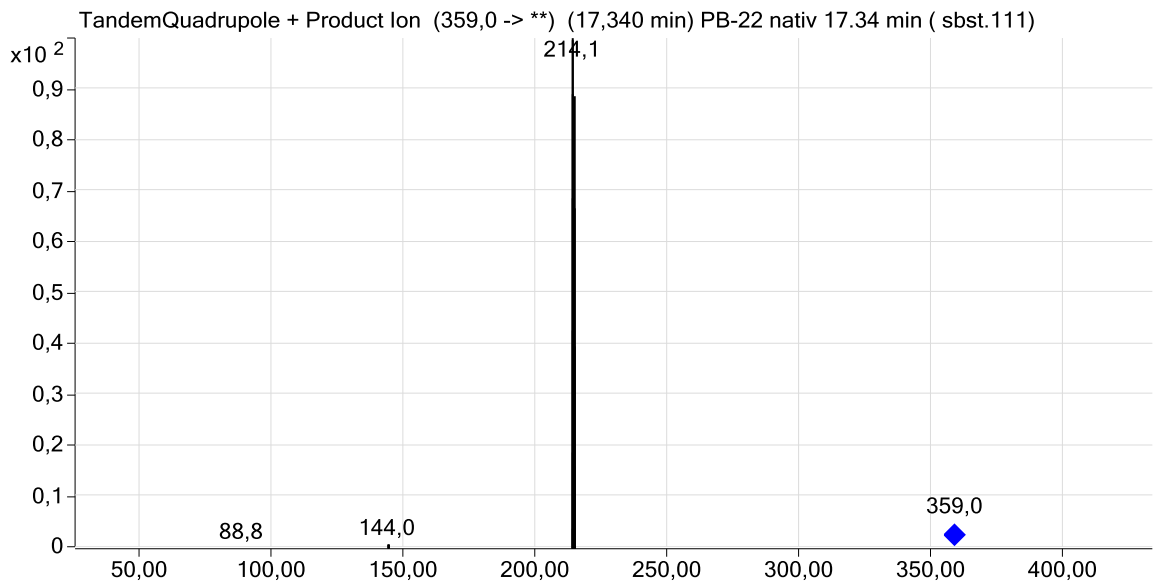
Methoxetamine ? 12.21 min, ID47, CE15



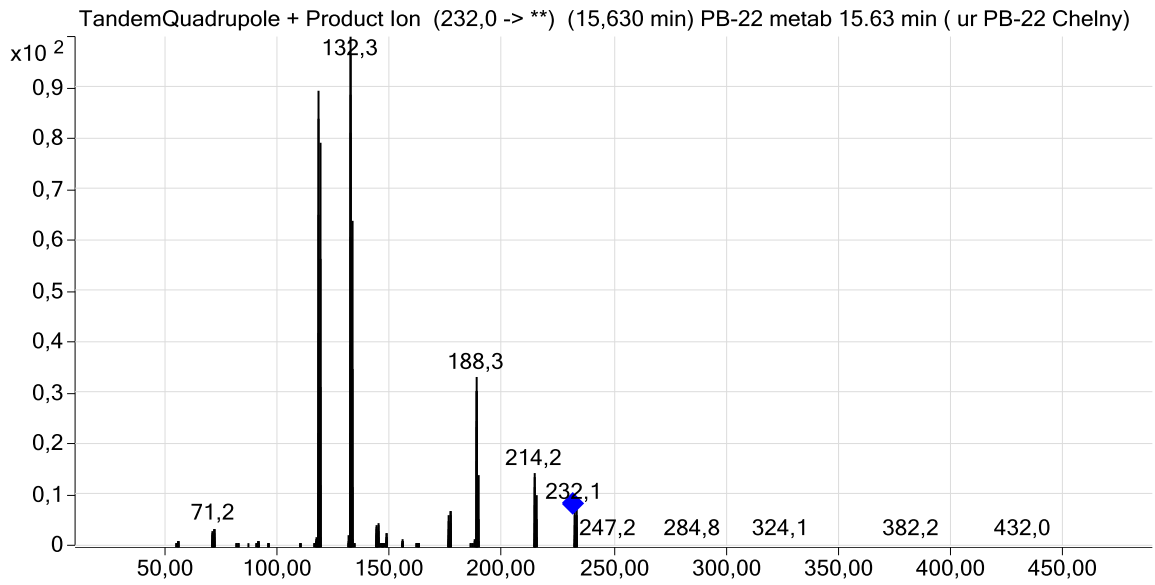
MMB-2201 nativ 15.86 min, ID85, CE15



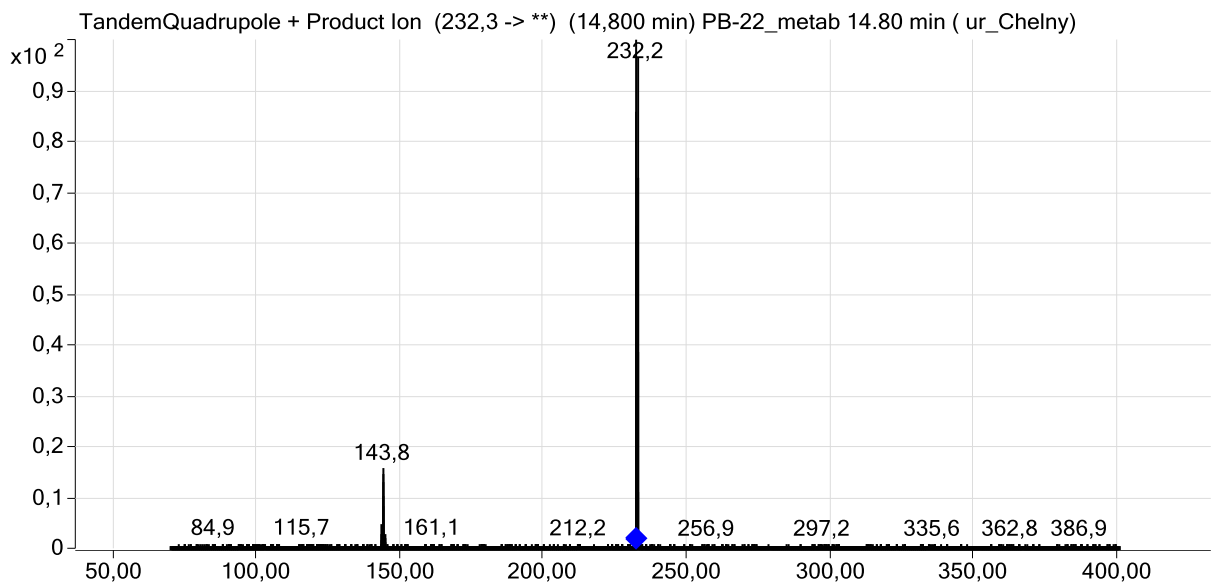
Nicotine 2.05 min, ID27, CE20



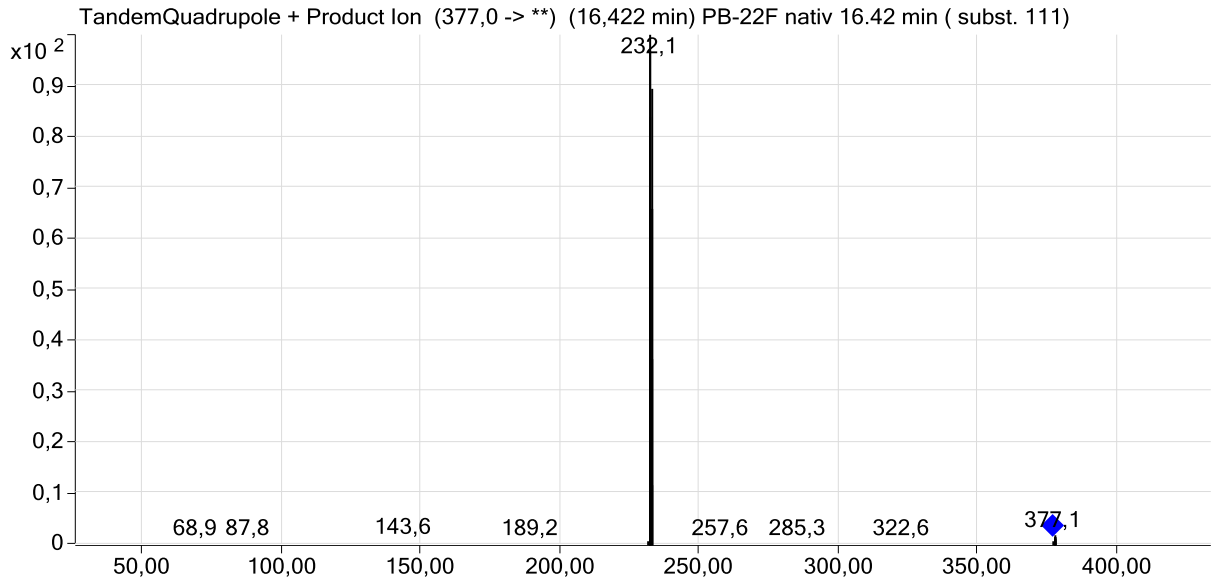
PB-22 nativ 17.34 min, ID102, CE10.



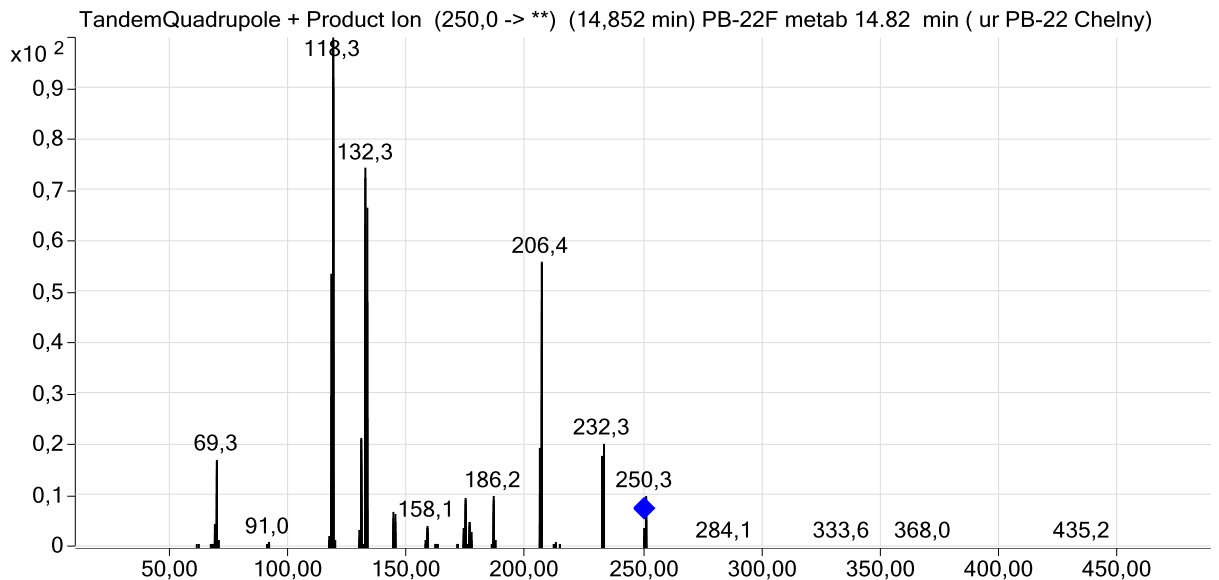
PB-22 metab 15.63 min, ID103, CE15.



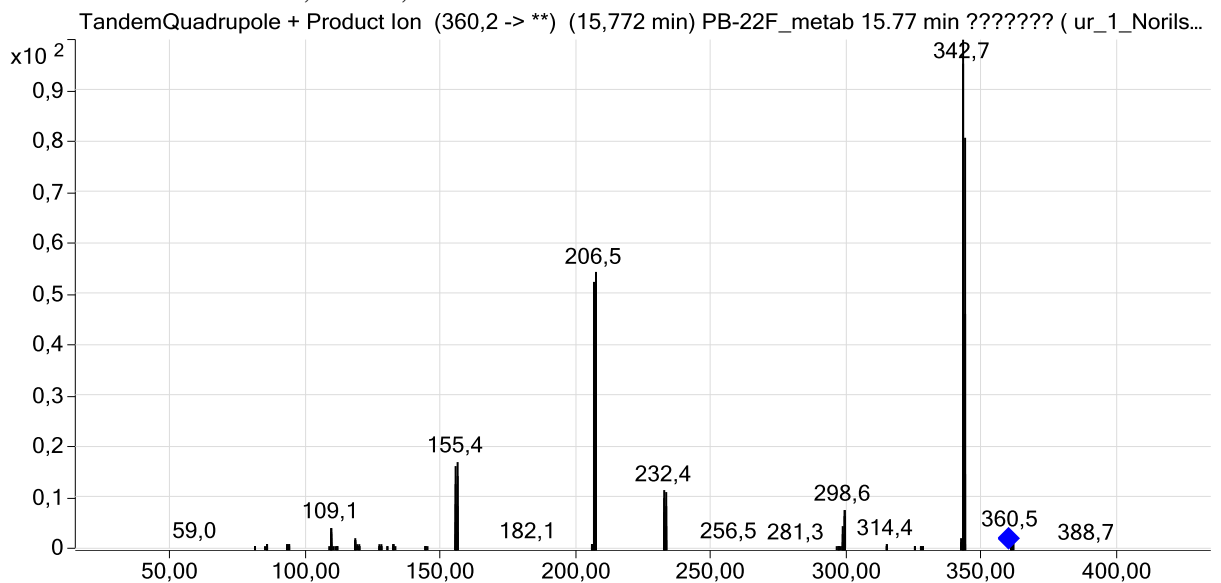
PB-22_metab 14.80 min, ID80, CE10.



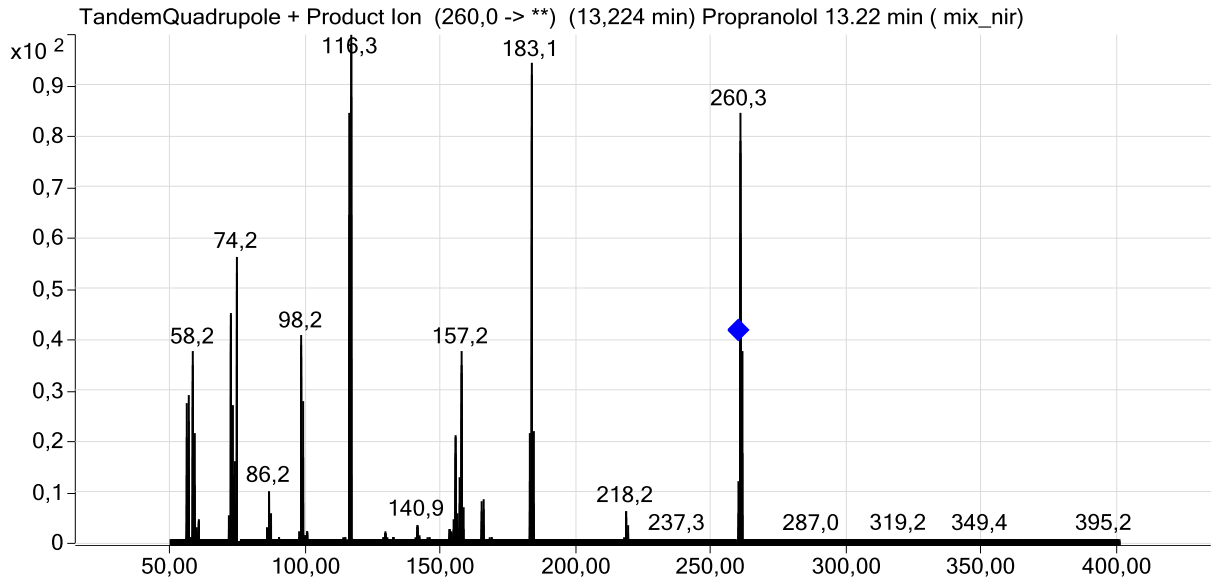
PB-22F nativ 16.42 min, ID101, CE10.



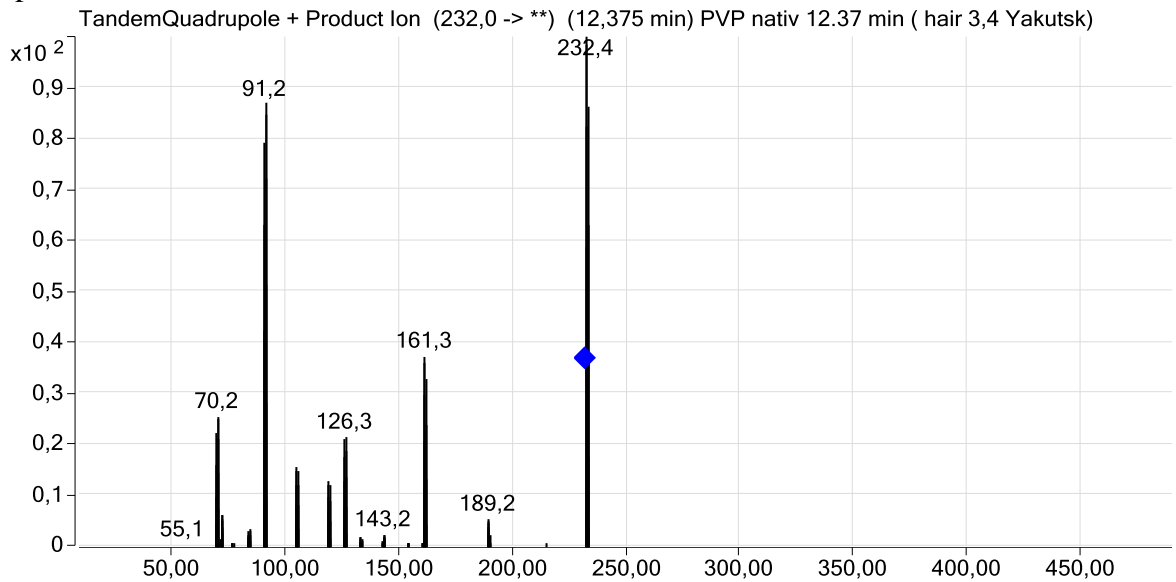
PB-22F metab 14.82 min, ID104, CE10.



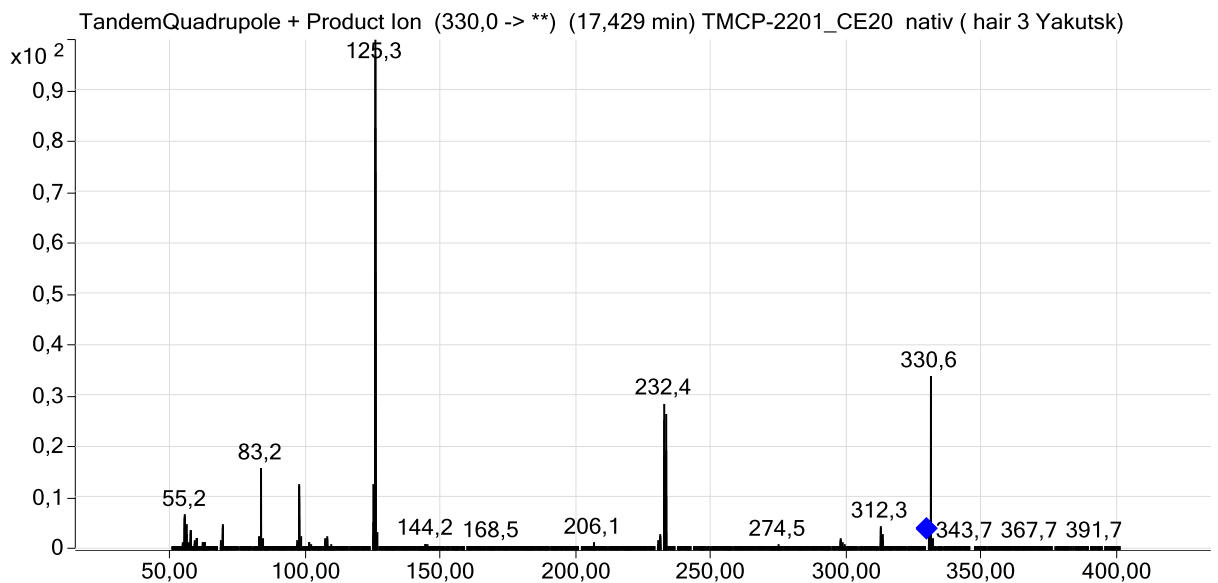
PB-22F_metab 15.77 min, ID70, CE15.



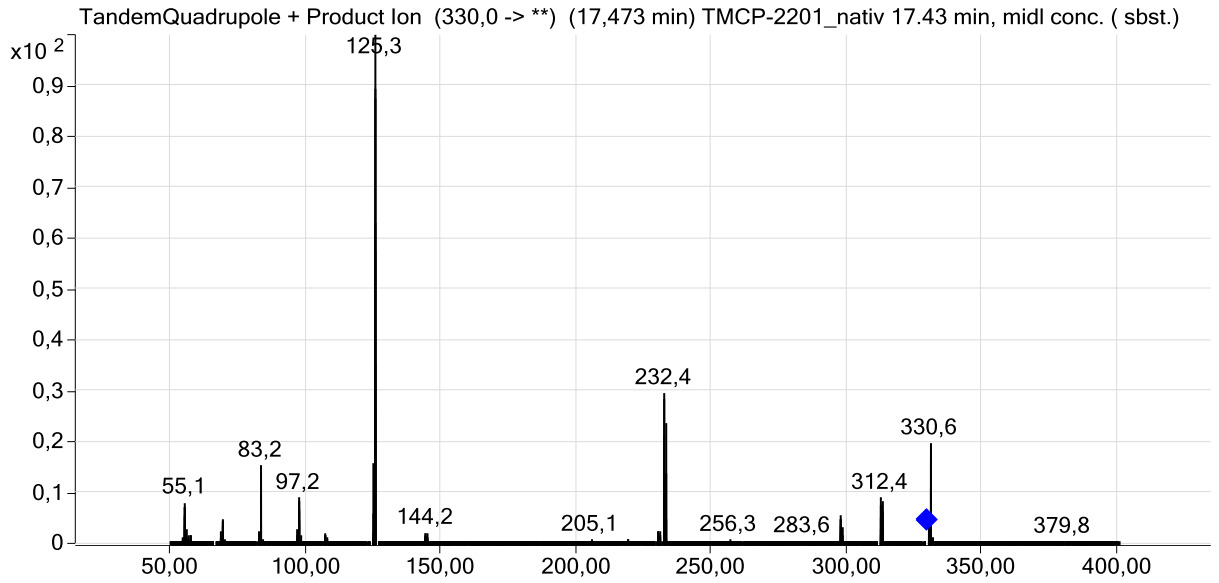
Propranolol 13.22 min, ID25, CE15.



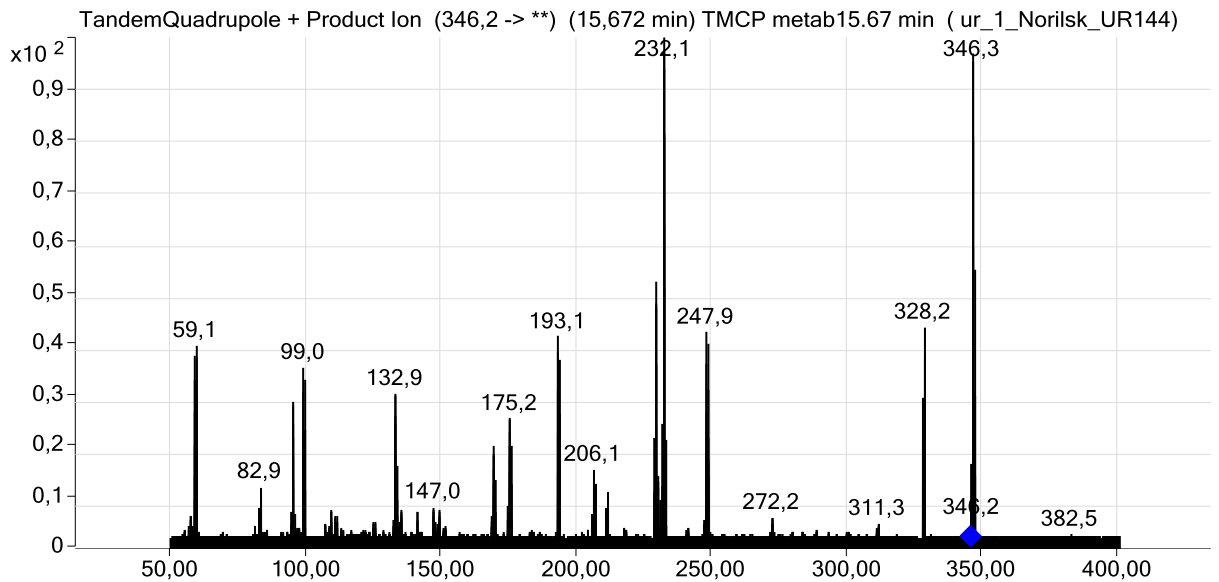
PVP nativ 12.37 min, ID8, CE15.



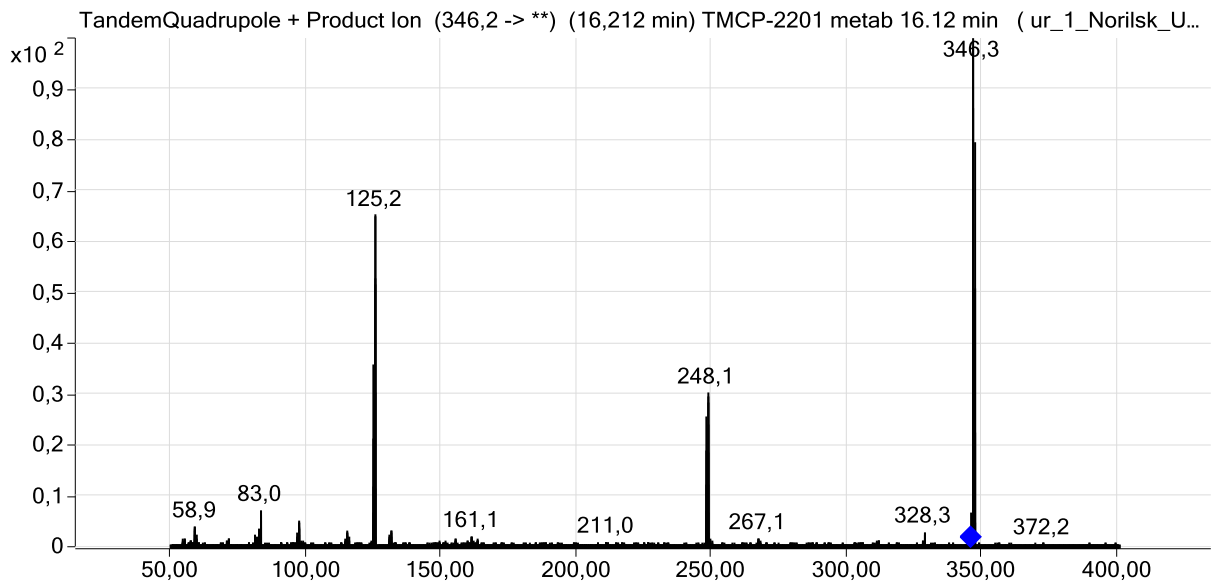
TMCP-2201 nativ, 17.43 min, ID6, CE20.



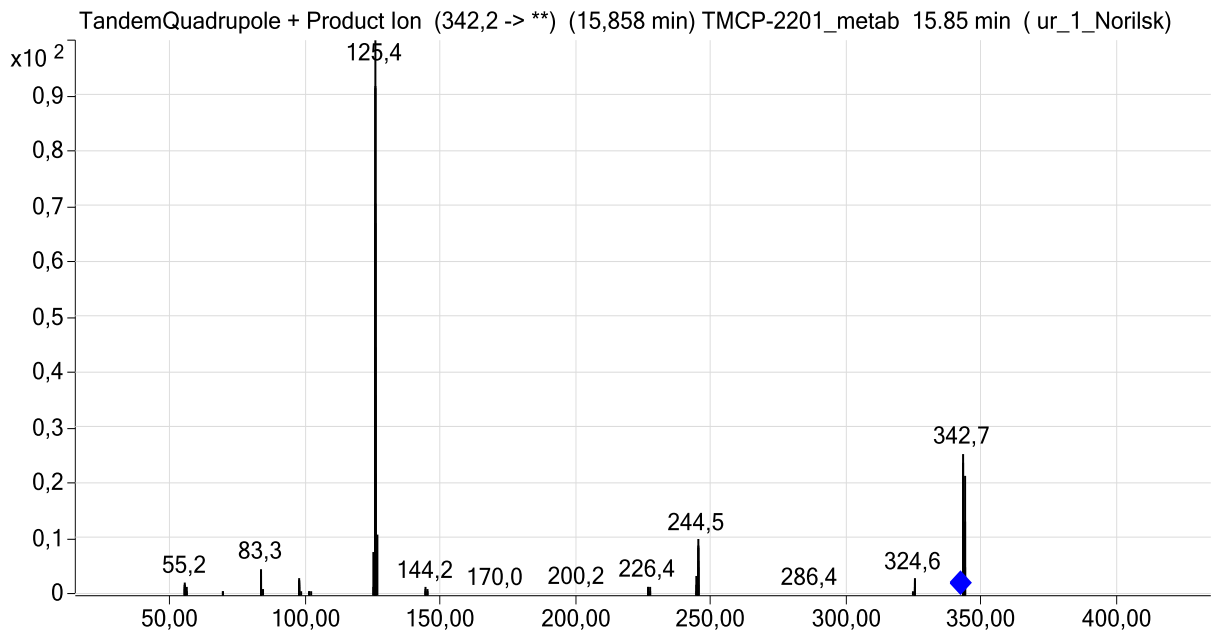
TMCP-2201_nativ 17.43 min , midl conc..., ID12, CE15.



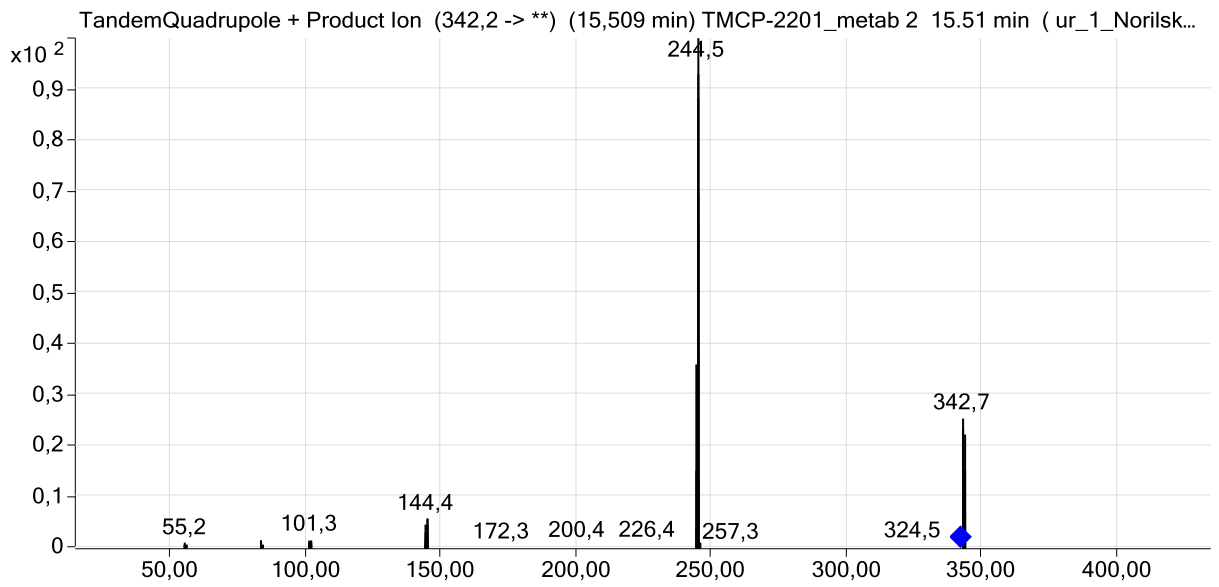
TMCP metab 15.67 min, ID74, CE15.



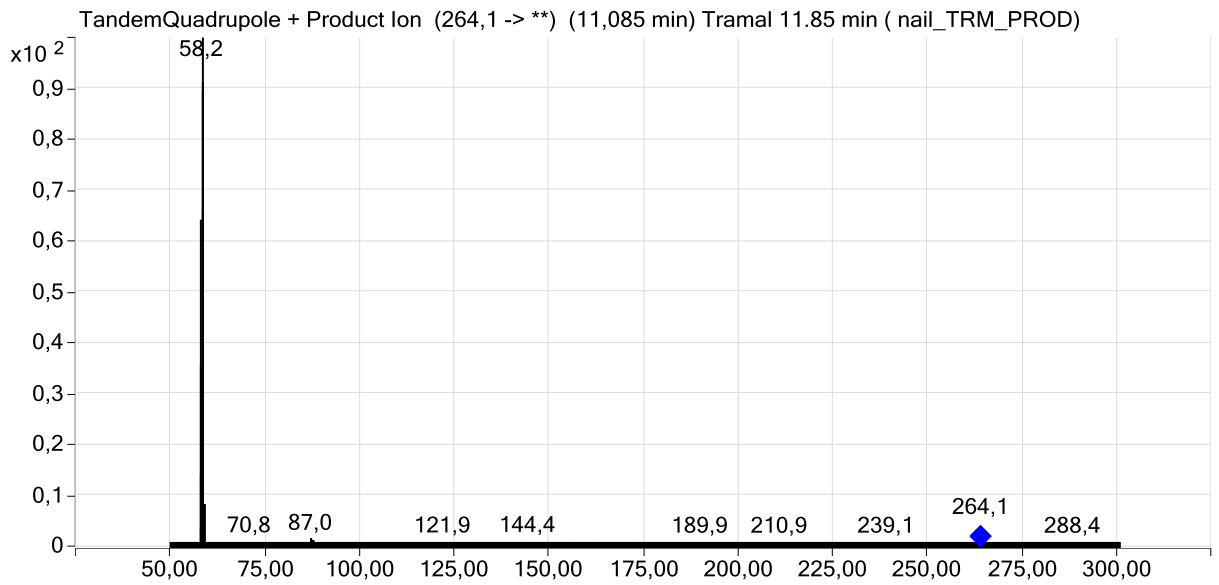
TMCP-2201 metab 16.12 min, ID73, CE15.



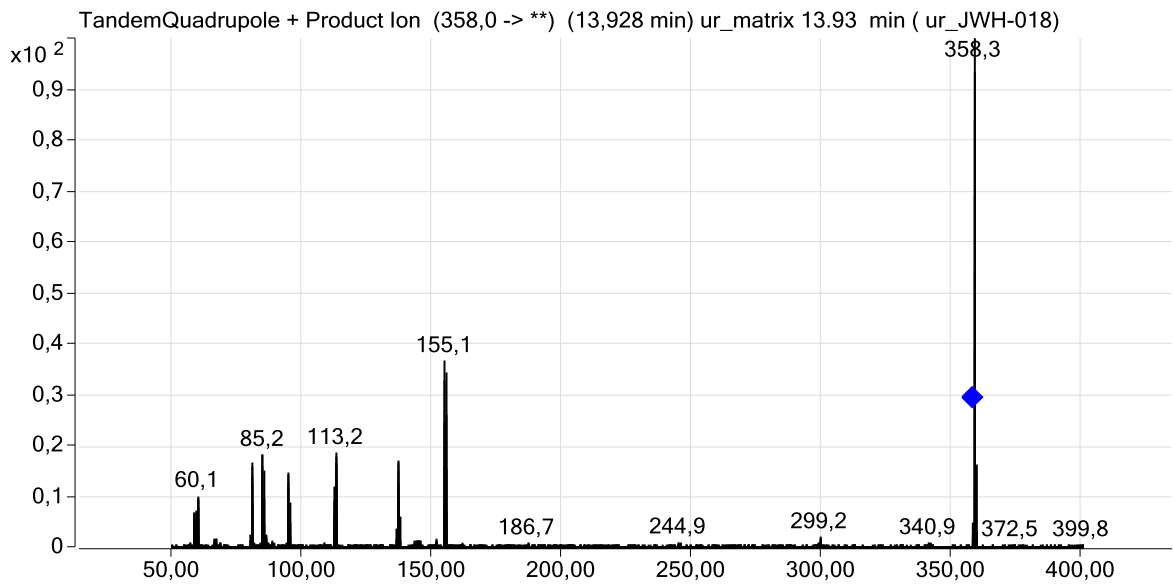
TMCP-2201_metab 15.85 min, ID68, CE15.



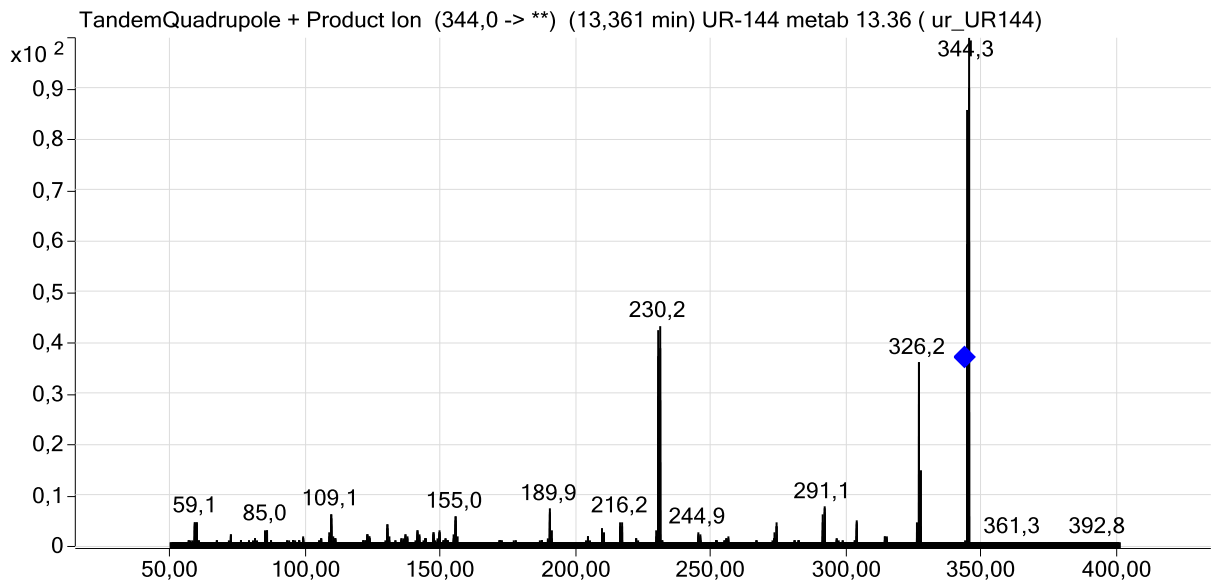
TMCP-2201_metab 2 15.51 min, ID69, CE15.



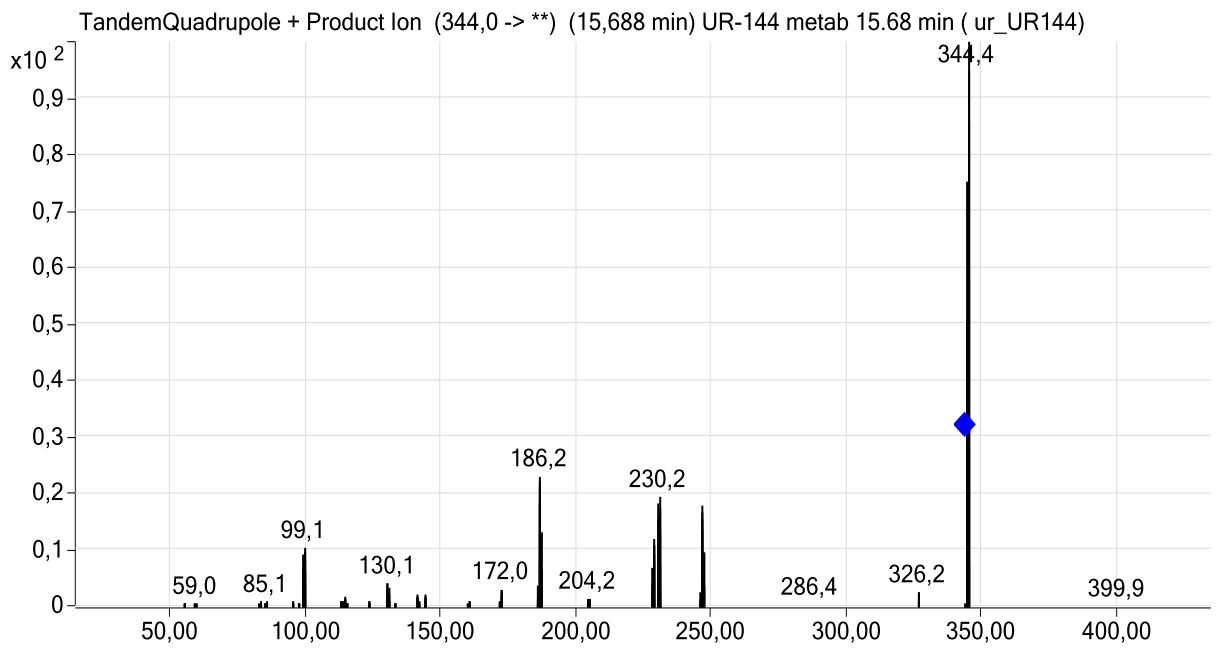
Tramal 11.85 min, ID18, CE30.



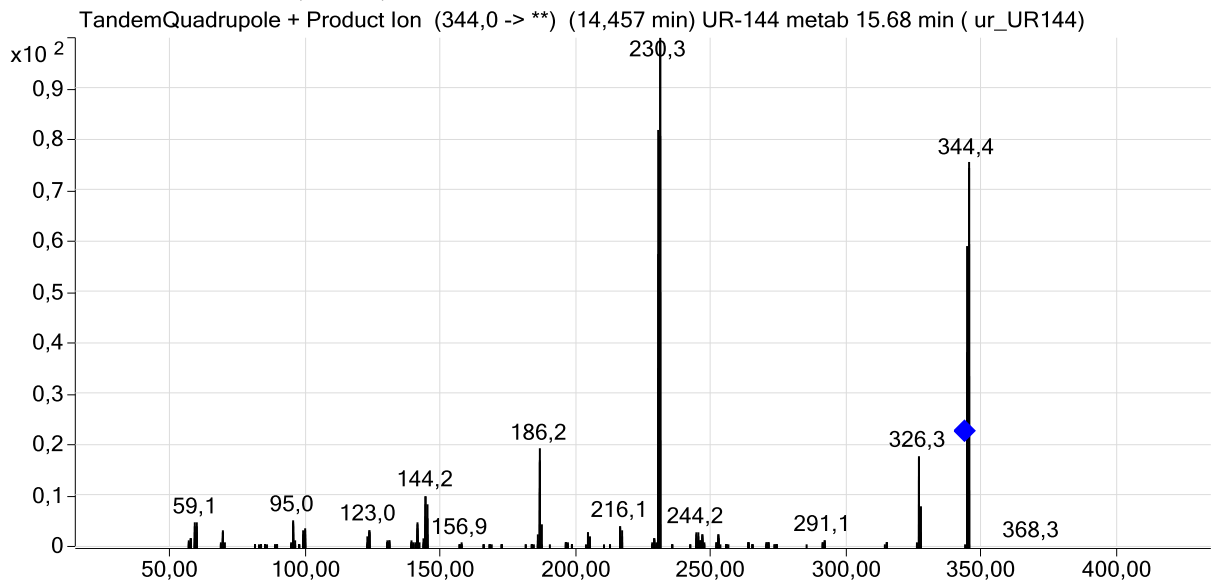
ur_matrix 13.93 min, ID58, CE15.



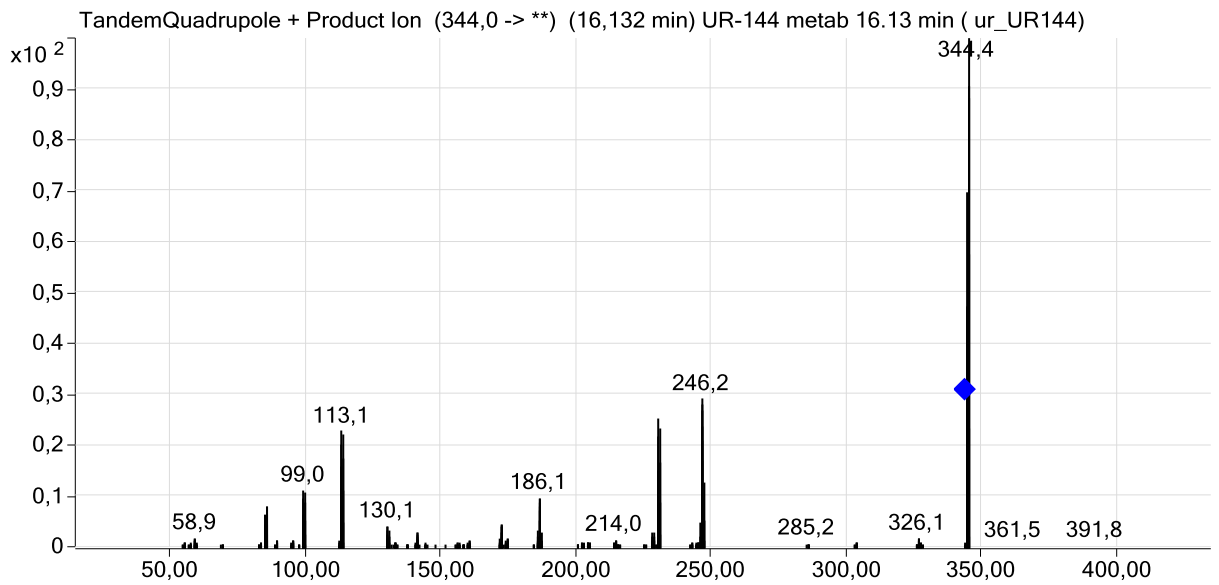
UR-144 metab 13.36 min, ID55, CE15.



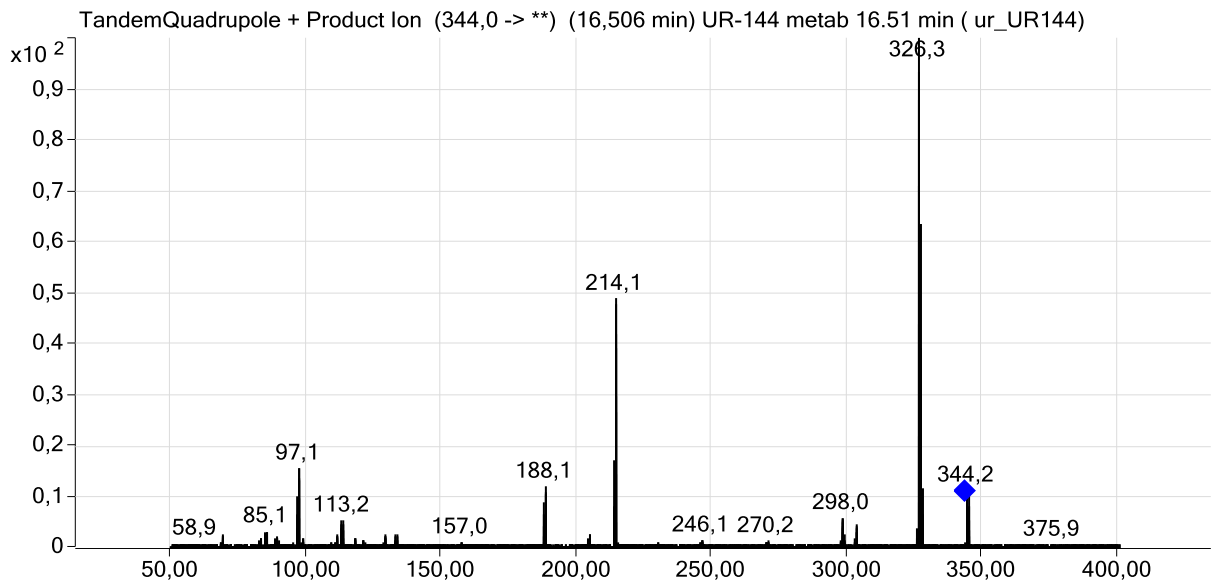
UR-144 metab 15.68 min, ID51, CE10.



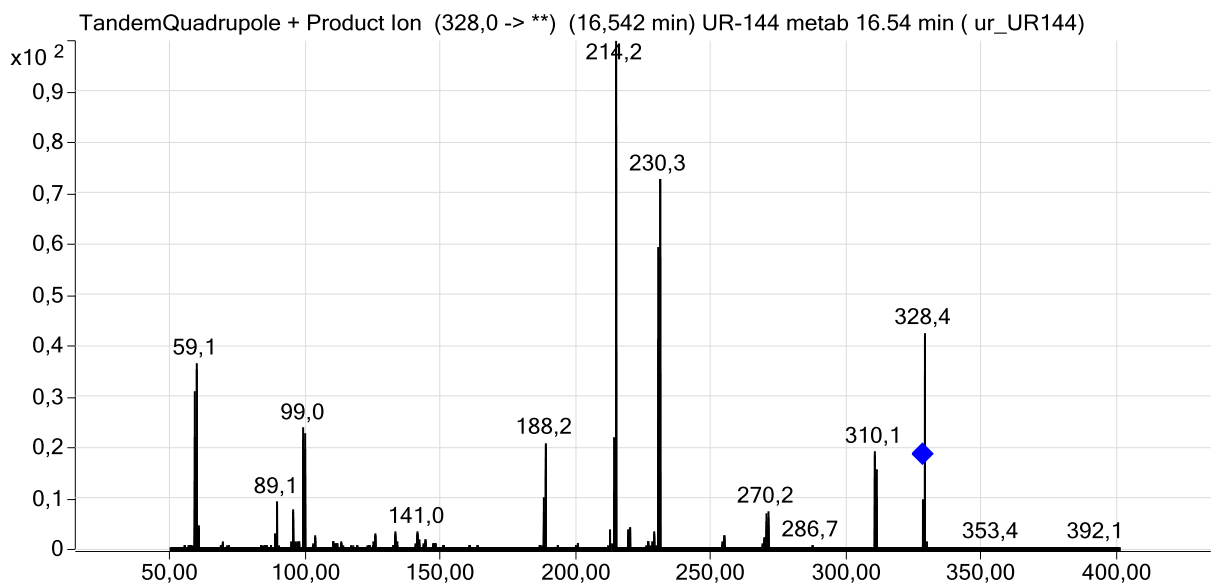
UR-144 metab 15.68 min, ID52, CE15.



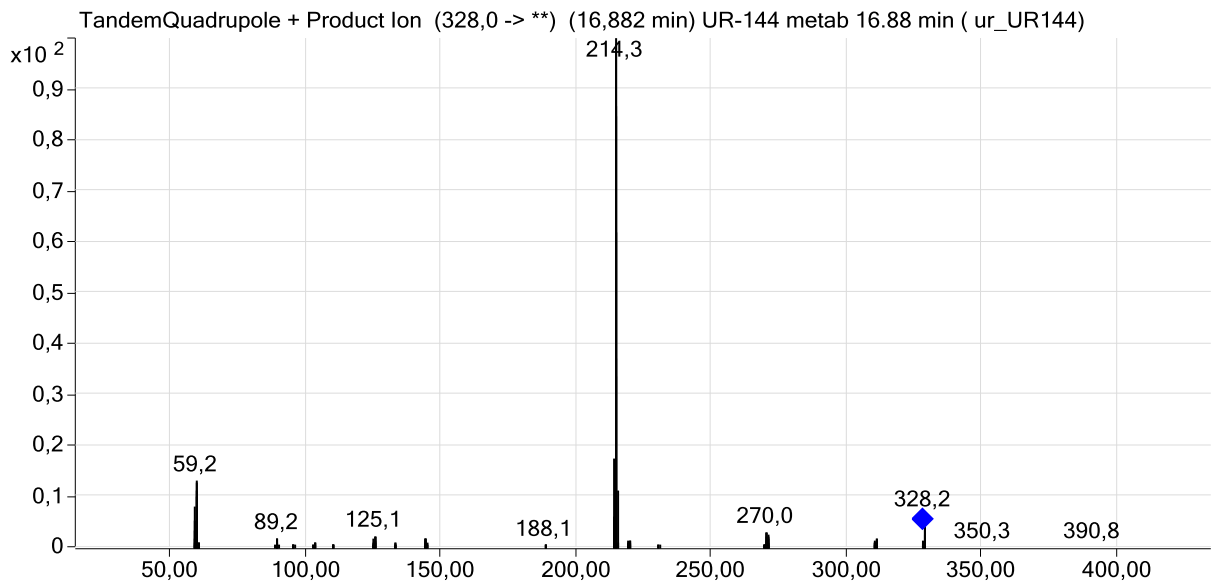
UR-144 metab 16.13 min, ID53, CE15.



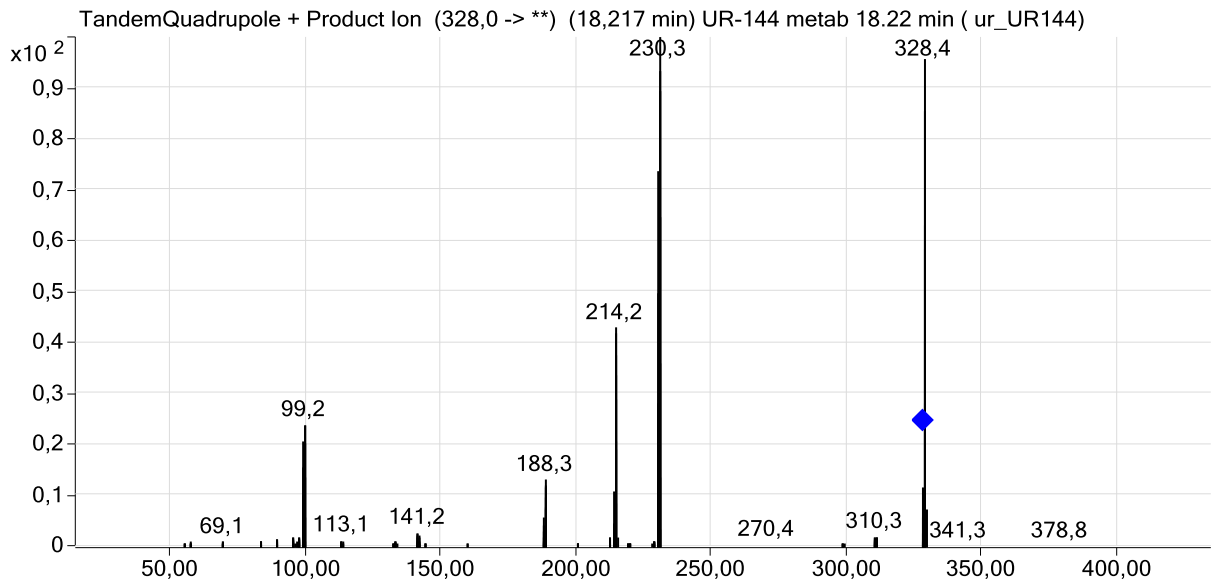
UR-144 metab 16.51 min, ID54, CE15.



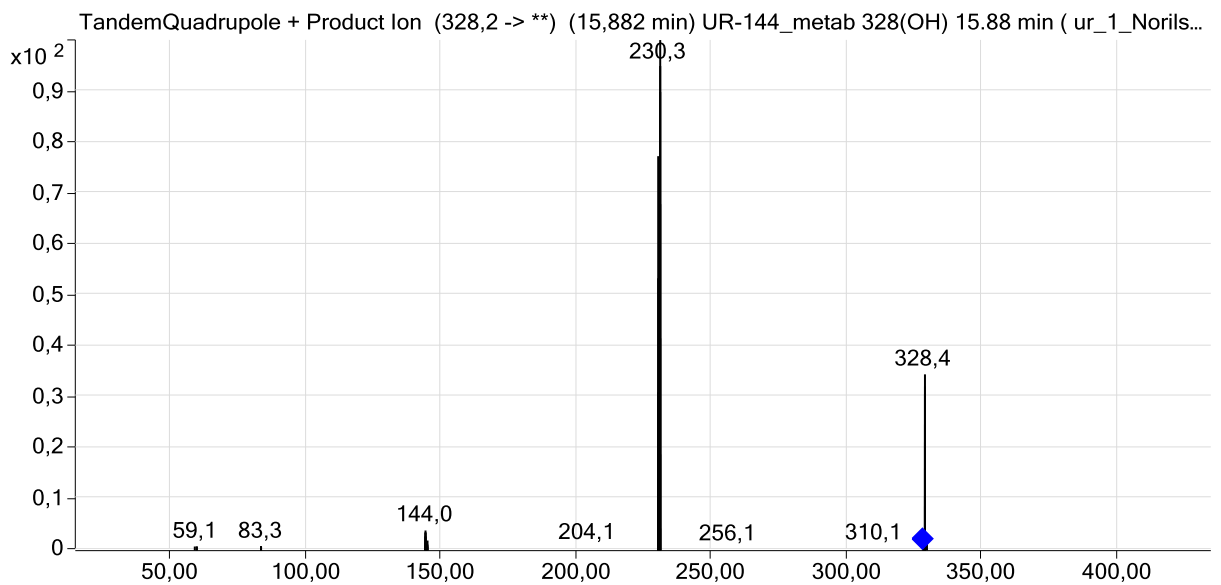
UR-144 metab 16.54 min, ID50, CE15.



UR-144 metab 16.88 min, ID48, CE15.

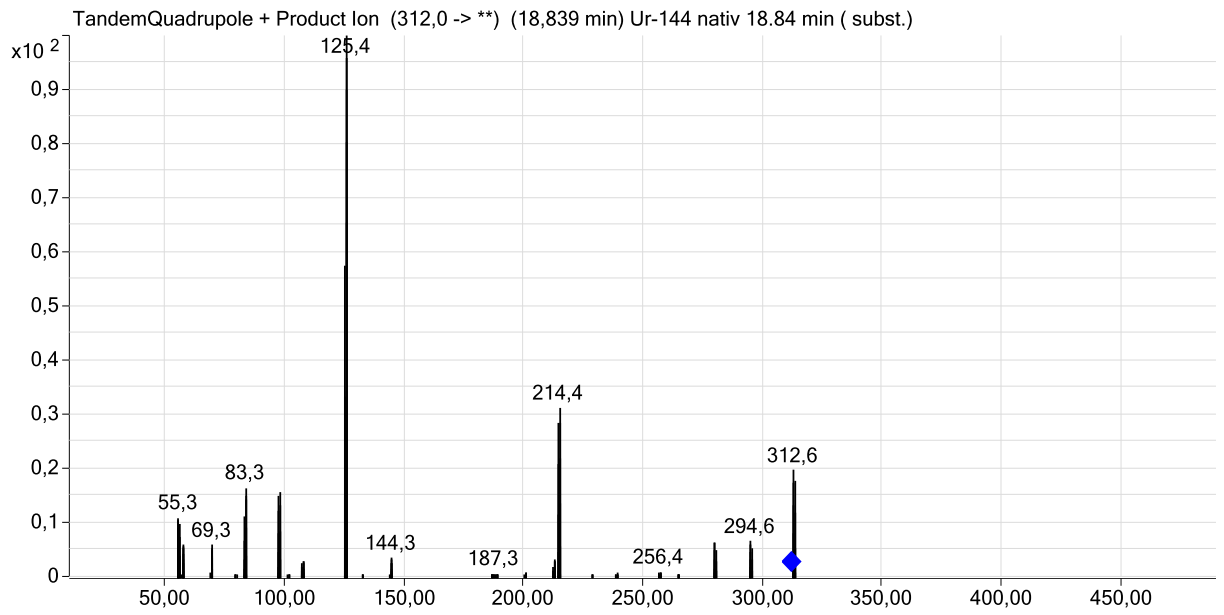


UR-144 metab 18.22 min, ID49, CE15.

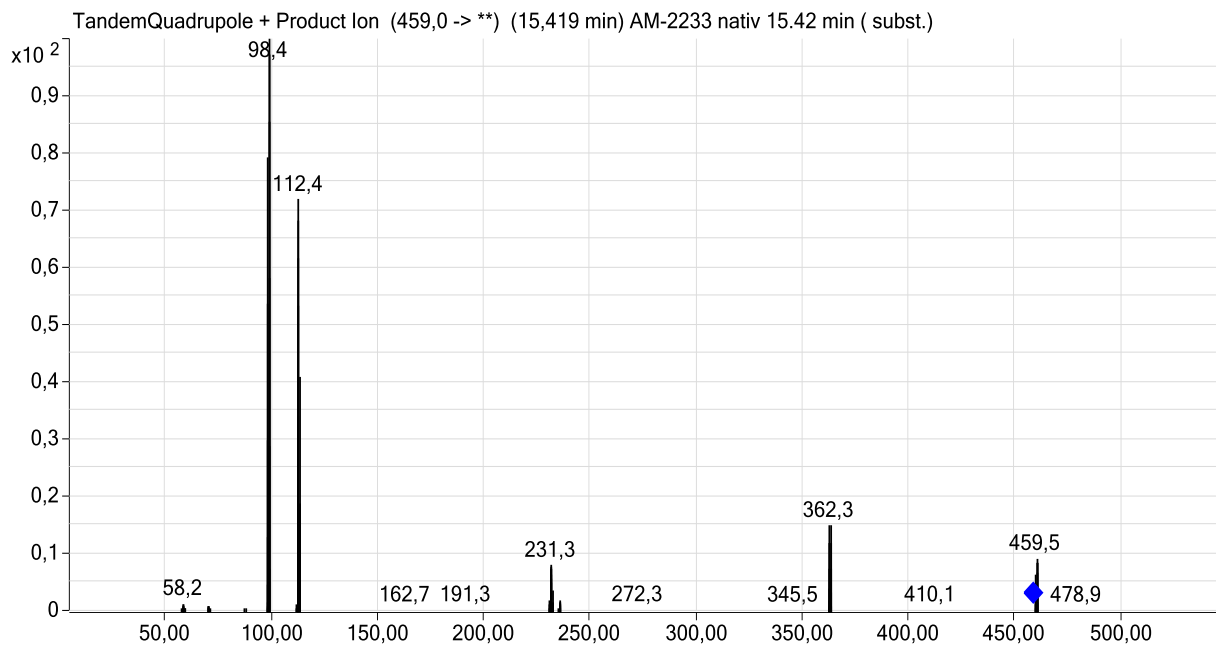


UR-144_metab 328(OH) 15.88 min, ID71, CE15.

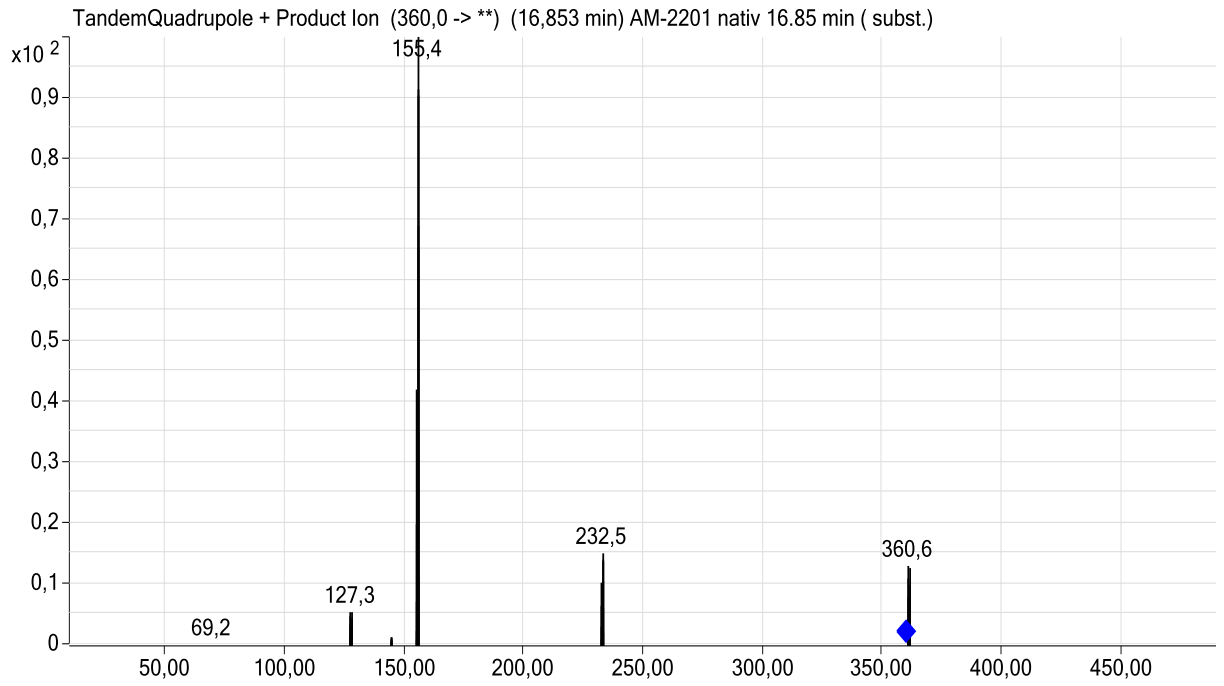
Спектры дополнительно 105-108



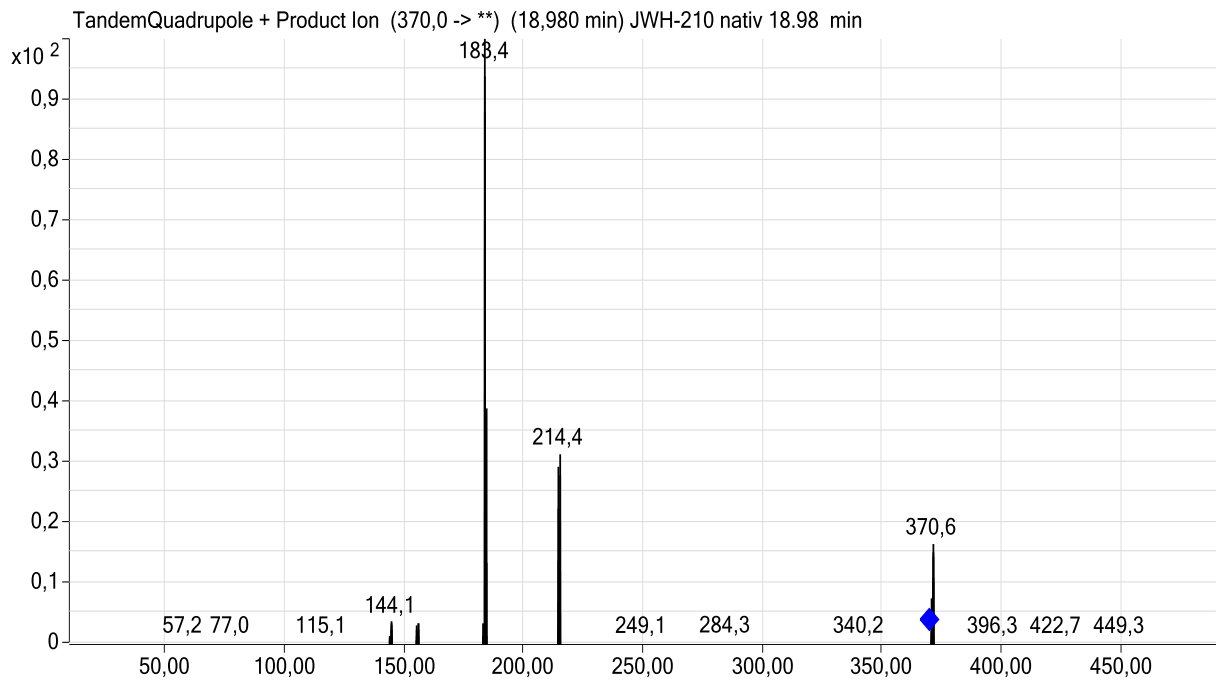
Ur-144 nativ 18.84 min, ID105, CE20



AM-2233 nativ 15.42 min, ID106, CE20.



AM-2201 nativ 16.85 min, ID107, CE20.



JWH-210 nativ 18.98 min, ID108, CE20.

Приложение 3.

Toxtuper 1.1. Library

Compound	CAS	Monoisotopic neutral mass	Formula	Polarity	RT [min]
11-Nor-Delta9-THC9-carboxylic acid glucuronide	1362113-32-3	520.23	C27H36O10	NEGATIVE	6.24
17-Alpha-methyltestosterone	58-18-4	302.22	C20H30O2	POSITIVE	5.94
2 C-D	24333-19-5	195.13	C11H17NO2	POSITIVE	3.61
2 C-H	3600-86-0	181.11	C10H15NO2	POSITIVE	3.12
2 C-I	69587-11-7	307.01	C10H14INO2	POSITIVE	3.94
2 C-P	207740-22-5	223.16	C13H21NO2	POSITIVE	4.41
2,5-Dimethoxy-4-methylamphetamine	26011-50-7	209.14	C12H19NO2	POSITIVE	3.77
2,5-DMA	2801-68-5	195.13	C11H17NO2	POSITIVE	3.37
2-Amino-5-chlorobenzophenone	719-59-5	231.05	C13H10ClNO	POSITIVE	6.66
2-Amino-5-chloropyridine	1072-98-6	128.01	C5H5ClN2	POSITIVE	1.71
2-Amino-5-nitrobenzophenone	1775-95-7	242.07	C13H10N2O3	POSITIVE	5.94
2-Benzyltetronicacid	3734-22-3	190.06	C11H10O3	POSITIVE	4.40
2C-B	66142-81-2	259.02	C10H14BrNO2	POSITIVE	3.74
2C-B-BZP	1094424-37-9	314.06	C13H19BrN2O2	POSITIVE	3.34
2-Hydroxyethylflurazepam	20971-53-3	332.07	C17H14ClFN2O 2	POSITIVE	5.21
2-Oxo-3-OH-LSD		355.19	C20H25N3O3	POSITIVE	3.19
3,4-	120-20-7	181.11	C10H15NO2	POSITIVE	2.69

Dimethoxyphenethylamine					
3,5-Diidotyrosine	66-02-4	432.87	C9H9I2NO3	POSITIVE	3.20
3-Hydroxybromazepam	13132-73-5	331.00	C14H10BrN3O2	POSITIVE	4.09
3-Methylfentanyl	42045-86-3	350.24	C23H30N2O	POSITIVE	4.53
4-Acetylaminoantipyrine	83-15-8	245.12	C13H15N3O2	POSITIVE	3.15
4-Benzamidosa licyclic acid	13898-58-3	257.07	C14H11NO4	POSITIVE	4.83
4-Formylaminoantipyrine	1672-58-8	231.10	C12H13N3O2	POSITIVE	3.14
4'-Hydroxynordazepam		286.05	C15H11 CIN2O2	POSITIVE	3.86
4-Methylaminoantipyrine	519-98-2	217.12	C12H15N3O	POSITIVE	2.68
5-Aminosalicilic acid	89-57-6	153.04	C7H7NO3	POSITIVE	0.73
5-Carboxybupranolol	42242-69-3	301.11	C14H20CN04	POSITIVE	3.63
5-MeO-DMT	1019-45-0	218.14	C13H18N2O	POSITIVE	3.13
6-Chlorothymolsulfonic acid	83732-70-1	264.02	C10H13ClO4S	NEGATIVE	5.91
6-Mercaptourine	50-44-2	152.02	C5H4N4S	POSITIVE	1.35
6-O-Acetylmorphine	2784-73-8	327.15	C19H21NO4	POSITIVE	3.04
7-Aminoclonazepam	4959-17-5	285.07	C15H12CN3O	POSITIVE	3.52
7-Aminodesmethylflunitrazepam	894-76-8	269.10	C15H12FN3O	POSITIVE	3.21
7-Aminoflunitrazepam	34084-50-9	283.11	C16H14FN3O	POSITIVE	3.84
7-Aminonitrazepam	4928-02-3	251.11	C15H13N3O	POSITIVE	2.79
9-Hydroxyrisperidone	144598-75-4	426.21	C23H27FN4O 3	POSITIVE	3.85

Compound	CAS	Monoisotopic neutral mass	Formula	Polarity	RT [min]
Acebutolol	37517-30-9	336.20	C18H28N2O4	POSITIVE	3.46
Aceclidine	827-61-2	169.11	C9H15NO2	POSITIVE	1.55
Acemetacin	53164-05-9	415.08	C21H18ClNO6	POSITIVE	6.36
Acepromazine	61-00-7	326.15	C19H22N2OS	POSITIVE	4.55
Aceprometazine	13461-01-3	326.15	C19H22N2OS	POSITIVE	4.48
Acetaminodantrolene	41515-09-7	326.10	C16H14N4O4	POSITIVE	4.00
Acetamin	28008-04-0	366.14	C16H22N4O4 S	POSITIVE	3.16
Acetylsalicylic acid	50-78-2	180.04	C9H8O4	NEGATIVE	3.93
Aciclovir	59277-89-3	225.09	C8H11N5O3	POSITIVE	1.49
Aconitine	302-27-2	645.31	C34H47NO11	POSITIVE	4.78
Actinoquinol	15301-40-3	253.04	C11H11 NO4S	POSITIVE	2.43
Adenine	73-24-5	135.05	C5H5N5	POSITIVE	0.63
Adenosine	58-61-7	267.10	C10H13N5O4	POSITIVE	1.61
Adrenalone	99-45-6	181.07	C9H11NO3	POSITIVE	0.71

Agomelatine	138112-76-2	243.13	C15H17NO2	POSITIVE	5.09
Ajmaline	4360-12-7	326.20	C20H26N2O2	POSITIVE	3.67
Alachlor	15972-60-8	269.12	C14H20CNO2	POSITIVE	6.61
Alfentanil	71195-58-9	416.25	C21 H32N6O3	POSITIVE	4.25
Alimemazine	84-96-8	298.15	C18H22N2S	POSITIVE	4.81
Alizapride	59338-93-1	315.17	C16H21 N5O2	POSITIVE	2.84
Almitrine	27469-53-0	477.25	C26H29F2N7	POSITIVE	6.60
Alpha-hydroxyalprazolam	37115-43-8	324.08	C17H13CN4O	POSITIVE	4.92
Alpha-hydroxymidazolam	59468-90-5	341.07	C18H13CIFN3 O	POSITIVE	4.36
Alpha-hydroxytriazolam	37115-45-0	358.04	C17H12CI2N4 O	POSITIVE	4.92
Alprazolam	28981-97-7	308.08	C17H13CIN4	POSITIVE	5.19
Alprenolol	13655-52-2	249.17	C15H23NO2	POSITIVE	4.19
Altretamine	645-05-6	210.16	C9H18N6	POSITIVE	3.92
Alypin	963-07-5	278.20	C16H26N2O2	POSITIVE	4.07
AM-1220	137642-54-7	382.20	C26H26N2O	POSITIVE	4.80
AM-2201 N-(4-hydroxypentyl) metabolite	1427521-34-3	375.16	C24H22FNO2	POSITIVE	6.17
AM-2233	444912-75-8	458.09	C22H23IN2O	POSITIVE	4.59
AM-694	335161-03-0	435.05	C20H19FINO	POSITIVE	7.03
Amantadine	768-94-5	151.14	C10H17N	POSITIVE	3.17
Ambroxol	18683-91-5	375.98	C13H18Br2N2 O	POSITIVE	3.79
Ametryn	834-12-8	227.12	C9H17N5S	POSITIVE	5.13
Amfepramone	90-84-6	205.15	C13H19NO	POSITIVE	3.10
Amidopyrine	58-15-1	231.14	C13H17N3O	POSITIVE	2.77
Aminoantipyrine	83-07-8	203.11	C11H13N3O	POSITIVE	2.80
Aminodantrolene	14663-28-6	284.09	C14H12N4O3	POSITIVE	3.57
Aminoglutethimide	125-84-8	232.12	C13H16N2O2	POSITIVE	3.13
Aminopromazine	58-37-7	327.18	C19H25N3S	POSITIVE	4.94
Aminorex	2207-50-3	162.08	C9H10N2O	POSITIVE	2.80
Amiodarone	1951-25-3	645.02	C25H29I2NO3	POSITIVE	6.29
Amisulpride	71675-85-9	369.17	C17H27N3O4 S	POSITIVE	3.28
Compound	CAS	Monoisotopic neutral mass	Formula	Polarity	RT [min]
Amitriptyline	50-48-6	277.18	C20H23N	POSITIVE	4.80
Amitriptylinoxide	4317-14-0	293.18	C20H23NO	POSITIVE	4.98
Amobarbital	57-43-2	226.13	C11H18N2O3	NEGATIVE	4.92
Amorolfine	78613-35-1	317.27	C21H35NO	POSITIVE	5.66
Amoxapine	14028-44-5	313.10	C17H16CIN3 O	POSITIVE	4.50
Amphetamine	300-62-9	135.10	C9H13N	POSITIVE	2.78
Amrinone	60719-84-8	187.07	C10H9N3O	POSITIVE	0.72

Antazoline	91-75-8	265.16	C17H19N3	POSITIVE	4.26
Apomorphine	58-00-4	267.13	C17H17NO2	POSITIVE	3.17
Apophedrin	7568-93-6	137.08	C8H11NO	POSITIVE	1.65
Apraclonidin	66711-21-5	244.03	C9H10Cl2N4	POSITIVE	2.51
Aprindine	37640-71-4	322.24	C22H30N2	POSITIVE	5.02
Arecoline	63-75-2	155.09	C8H13NO2	POSITIVE	0.96
Aripiprazole	129722-12-9	447.15	C23H27Cl2N3O 2	POSITIVE	4.74
Atenolol	29122-68-7	266.16	C14H22N2O3	POSITIVE	2.61
Atomoxetine	83015-26-3	255.16	C17H21 NO	POSITIVE	4.45
Atorvastatin	134523-00-5	558.25	C33H35FN2O 5	POSITIVE	6.27
Atracurium	64228-79-1	928.51	C53H72N2O1 2	POSITIVE	4.28
Atraton	1610-17-9	211.14	C9H17N5O	POSITIVE	4.03
Atrazine	1912-24-9	215.09	C8H14ClN5	POSITIVE	5.36
Atrazine-desethyl	6190-65-4	187.06	C6H10ClN5	POSITIVE	3.93
Atropine	51-55-8	289.17	C17H23NO3	POSITIVE	3.26
Axeen isomere 1	2537-29-3	226.10	C10H14N2O4	POSITIVE	3.97
Azatadine	3964-81-6	290.18	C20H22N2	POSITIVE	3.31
Azelastine	58581-89-8	381.16	C22H24ClN3 O	POSITIVE	4.76
Azithromycin	83905-01-5	748.51	C38H72N2O1 2	POSITIVE	3.70
Baclofen	1134-47-0	213.06	C10H12ClNO 2	POSITIVE	3.03
Bambuterol	81732-65-2	367.21	C18H29N3O5	POSITIVE	3.82
Bamethane	3703-79-5	209.14	C12H19NO2	POSITIVE	2.80
Bamifylline	2016-63-9	385.21	C20H27N5O3	POSITIVE	3.51
Bamipine	4945-47-5	280.19	C19H24N2	POSITIVE	4.67
Barverin	1639-79-8	509.34	C29H43N5O3	POSITIVE	3.90
Beclamide	501-68-8	197.06	C10H12ClNO	POSITIVE	4.56
Befunolol	39552-01-7	291.15	C16H21NO4	POSITIVE	3.56
Bendamustine	16506-27-7	357.10	C16H21 Cl2N3O2	POSITIVE	4.31
Bendroflumethiazide	73-48-3	421.04	C15H14F3N3O4 S2	NEGATIVE	5.34
Benodanil	15310-01-7	322.98	C13H10INO	POSITIVE	5.85
Benperidol	2062-84-2	381.19	C22H24FN3O 2	POSITIVE	4.10
Benproperine	2156-27-6	309.21	C21H27NO	POSITIVE	5.10
Bensultap	17606-31-4	431.04	C17H21 NO4S4	POSITIVE	6.17
Benzatropine	86-13-5	307.19	C21H25NO	POSITIVE	4.90
Benzethonium	121-54-0	411.31	C27H41NO2	POSITIVE	6.66

Benzocaine	94-09-7	165.08	C9H11NO2	POSITIVE	4.72
Benzocetamine	17243-39-9	249.15	C18H19N	POSITIVE	4.23
Benzodioxazolylbutanamin	107447-03-0	193.11	C11H15NO2	POSITIVE	3.29

Compound	CAS	Monoisotopic neutral mass	Formula	Polarity	RT [min]
Benzoxonium	19379-90-9	363.31	C23H41NO2	POSITIVE	6.27
Benzoylecgonine	519-09-5	289.13	C16H19NO4	POSITIVE	3.36
Benzthiazide	91-33-8	430.98	C15H14CIN3O4 S3	POSITIVE	5.10
Benzthiazuron	1929-88-0	207.05	C9H9N3OS	POSITIVE	4.41
Benzylpiperazine	2759-28-6	176.13	C11H16N2	POSITIVE	1.87
Betaxolol	63659-18-7	307.21	C18H29NO3	POSITIVE	4.30
Bethanidine	55-73-2	177.13	C10H15N3	POSITIVE	3.03
Bezafibrate	41859-67-0	361.11	C19H20CINO4	POSITIVE	5.65
Bicalutamide	90357-06-5	430.06	C18H14F4N2O4 S	POSITIVE	5.89
Biotin	58-85-5	244.09	C10H16N2O3 S	POSITIVE	3.24
Biperiden	514-65-8	311.22	C21H29NO	POSITIVE	4.61
Bisoprolol	66722-44-9	325.23	C18H31NO4	POSITIVE	4.05
Bopranolol	14556-46-8	271.13	C14H22CINO2	POSITIVE	4.27
Bornaprine	20448-86-6	329.24	C21H31NO2	POSITIVE	5.20
Brallobarbitol	561-86-4	286.00	C10H11BrN2O3	NEGATIVE	4.23
Brodifacoum	56073-10-0	522.08	C31 H23BrO3	POSITIVE	8.28
Bromazepam	1812-30-2	315.00	C14H10BrN3O	POSITIVE	4.54
Bromperidol	10457-90-6	419.09	C21 H23BrFNO2	POSITIVE	4.61
Bromural	496-67-3	222.00	C6H11BrN2O2	POSITIVE	4.23
Brotizolam	57801-81-7	391.95	C15H10BrCIN4S	POSITIVE	5.39
Bucetin	1083-57-4	223.12	C12H17NO3	POSITIVE	4.17
Budipine	57982-78-2	293.21	C21H27N	POSITIVE	4.67
Bufexamac	2438-72-4	223.12	C12H17NO3	POSITIVE	4.93
Bulbocapnine	298-45-3	325.13	C19H19NO4	POSITIVE	3.35
Bumadizone	3583-64-0	326.16	C19H22N2O3	POSITIVE	6.15
Bumetanide	28395-03-1	364.11	C17H20N2O5 S	POSITIVE	5.69
Bunitrolol	34915-68-9	248.15	C14H20N2O2	POSITIVE	3.49
Bupivacaine	2180-92-9	288.22	C18H28N2O	POSITIVE	4.12
Buprenorphine	52485-79-7	467.30	C29H41NO4	POSITIVE	4.42
Buprofezin	69327-76-0	305.16	C16H23N3OS	POSITIVE	7.78
Bupropion	34911-55-2	239.11	C13H18CINO	POSITIVE	3.97
Buspirone	36505-84-7	385.25	C21H31N5O2	POSITIVE	4.05
Butalbital	77-26-9	224.12	C11H16N2O3	NEGATIVE	4.46
Butaperazine	653-03-2	409.22	C24H31 N3OS	POSITIVE	5.16

Butizide	2043-38-1	353.03	C11 H16CIN3O4S2	POSITIVE	4.90
Butoxycaine	3772-43-8	293.20	C17H27NO3	POSITIVE	4.89
Cafaminol	30924-31-3	267.13	C11H17N5O3	POSITIVE	3.35
Caffeine	58-08-2	194.08	C8H10N4O2	POSITIVE	3.08
Calteridol	121915-83-1	404.23	C17H32N4O7	POSITIVE	0.56
Cannabidiol	13956-29-1	314.22	C21H30O2	POSITIVE	7.81
Cannabinol	521-35-7	310.19	C21H26O2	NEGATIVE	8.24
Canrenone	976-71-6	340.20	C22H28O3	POSITIVE	6.10
Caproylresorcinol	70807-24-8	208.11	C12H16O3	POSITIVE	6.39
Captopril	62571-86-2	217.08	C9H15NO3S	POSITIVE	3.58
Carazolol	57775-29-8	298.17	C18H22N2O2	POSITIVE	3.94

Compound	CAS	Monoisotopic neutral mass	Formula	Polarity	RT [min]
Carbachol	51-83-2	146.11	C6H14N2O2	POSITIVE	0.52
Carbamazepine	298-46-4	236.09	C15H12N2O	POSITIVE	4.88
Carbamazepine10,11-epoxide	36507-30-9	252.09	C15H12N2O2	POSITIVE	4.29
Carbutamide	339-43-5	271.10	C11H17N3O3S	POSITIVE	4.37
Carbuterol	34866-47-2	267.16	C13H21N3O3	POSITIVE	2.50
Carteolol	51781-06-7	292.18	C16H24N2O3	POSITIVE	3.05
Carticaine	23964-58-1	284.12	C13H20N2O3S	POSITIVE	3.43
Carvedilol	72956-09-3	406.19	C24H26N2O4	POSITIVE	4.64
Cathinone	71031-15-7	149.08	C9H11NO	POSITIVE	2.46
Celiprolol	56980-93-9	379.25	C20H33N3O4	POSITIVE	3.80
Cerivastatin	145599-86-6	459.24	C26H34FNO5	POSITIVE	6.73
Chloramphenicol	56-75-7	322.01	C11 H12Cl2N2O5	NEGATIVE	4.42
Chlorazanyl	500-42-5	221.05	C9H8ClN5	POSITIVE	4.26
Chlorbenzoxamine	522-18-9	434.21	C27H31 ClN2O	POSITIVE	5.93
Chlordiazepoxide	58-25-3	299.08	C16H14ClN3O	POSITIVE	4.02
Chlorfluazuron	71422-67-8	538.96	C20H9Cl3F5N3O 3	POSITIVE	8.00
Chloridazon	1698-60-8	221.04	C10H8ClN3O	POSITIVE	3.88
Chlormezanone	80-77-3	273.02	C11 H12ClNO3S	POSITIVE	4.63
Chloroquine	54-05-7	319.18	C18H26ClN3	POSITIVE	2.86
Chlorphenethiazine	2095-24-1	304.08	C16H17N2SCl	POSITIVE	4.84
Chlorpromazine	50-53-3	318.10	C17H19ClN2S	POSITIVE	5.06
Chlorprothixene	113-59-7	315.08	C18H18ClNS	POSITIVE	5.14
Chlortalidone	77-36-1	338.01	C14H11ClN2O 4S	NEGATIVE	3.98

Cimetidine	51481-61-9	252.12	C10H16N6S	POSITIVE	2.52
Cinchocaine	85-79-0	343.23	C20H29N3O2	POSITIVE	4.88
Cinnarizine	298-57-7	368.23	C26H28N2	POSITIVE	5.54
Cinoxacin	28657-80-9	262.06	C12H10N2O5	POSITIVE	4.03
Ciprofloxacin	85721-33-1	331.13	C17H18FN3O3	POSITIVE	3.24
Cisapride	81098-60-4	465.18	C23H29ClFN3 O4	POSITIVE	4.54
Citalopram	59729-33-8	324.16	C20H21 FN2O	POSITIVE	4.39
Clemastine	15686-51-8	343.17	C21 H26ClNO	POSITIVE	5.38
Clenbuterol	37148-27-9	276.08	C12H18Cl2N2 O	POSITIVE	3.58
Clibucaine	15302-10-0	314.10	C15H20Cl2N2 O	POSITIVE	4.17
Climbazol	38083-17-9	292.10	C15H17ClN2O 2	POSITIVE	5.04
Clobazam	22316-47-8	300.07	C16H13ClN2O 2	POSITIVE	5.58
Clobenzepam	1159-93-9	315.11	C17H18ClN3O	POSITIVE	4.13
Clobetasone butyrat	25122-57-0	478.19	C26H32ClFO5	POSITIVE	7.08
Clobutinol	14860-49-2	255.14	C14H22ClNO	POSITIVE	4.18
Clomethiazole	533-45-9	161.01	C6H8ClNS	POSITIVE	4.72
Clomipramine	303-49-1	314.15	C19H23ClN2	POSITIVE	5.09
Clonazepam	1622-61-3	315.04	C15H10ClN3O 3	POSITIVE	5.21
Clonidine	4205-90-7	229.02	C9H9Cl2N3	POSITIVE	2.82
Clopamide	636-54-4	345.09	C14H20ClN3O 3S	POSITIVE	4.29
Clopentixol	982-24-1	400.14	C22H25ClN2O S	POSITIVE	5.10
Clopidogrel	113665-84-2	321.06	C16H16ClNO2 S	POSITIVE	7.06

Compound	CAS	Monoisotopic neutral mass	Formula	Polarity	RT [min]
Clotiapine	2058-52-8	343.09	C18H18ClN3S	POSITIVE	4.74
Clotiazepam	33671-46-4	318.06	C16H15ClN2O S	POSITIVE	6.02
Clozapine	5786-21-0	326.13	C18H19ClN4	POSITIVE	4.23
Cocaethylene	529-38-4	317.16	C18H23NO4	POSITIVE	4.85
Cocaine	50-36-2	303.15	C17H21NO4	POSITIVE	3.79
Codeine	76-57-3	299.15	C18H21NO3	POSITIVE	2.80
Codeine-6-beta-D-glucuronide	20736-11-2	475.18	C24H29NO9	POSITIVE	2.66
Colchicine	64-86-8	399.17	C22H25NO6	POSITIVE	4.31

Corticosterone	50-22-6	346.21	C21H30O4	POSITIVE	5.10
Cortisone	53-06-5	360.19	C21H28O5	POSITIVE	4.59
Cotinine	486-56-6	176.09	C10H12N2O	POSITIVE	1.02
Coumatetralyl	5836-29-3	292.11	C19H16O3	POSITIVE	6.34
Creatinine	60-27-5	113.06	C4H7N3O	POSITIVE	0.53
Croconazole	77175-51-0	310.09	C18H15CN2O	POSITIVE	4.88
Cyamemazine	3546-03-0	323.15	C19H21N3S	POSITIVE	4.81
Cyclamicacid	100-88-9	179.06	C6H13NO3S	NEGATIVE	2.92
Cyclizine	82-92-8	266.18	C18H22N2	POSITIVE	4.39
Cyclobenzaprine	303-53-7	275.17	C20H21N	POSITIVE	4.78
Cyclovalone	579-23-7	366.15	C22H22O5	POSITIVE	5.72
Cyproheptadine	129-03-3	287.17	C21H21N	POSITIVE	4.75
D3-6-O-Acetylmorphine		330.17	C19H18D3NO 4	POSITIVE	2.97
D3-Atropin		292.19	C17H20D3NO 3	POSITIVE	3.28
D3-Benzoylcegonine	115732-68-8	292.15	C16H16D3NO 4	POSITIVE	3.35
D3-Chlorpromazine	136765-28-1	321.11	C17H16CID3N2 S	POSITIVE	5.07
D3-Clomipramine	136765-29-2	317.17	C19H20CIN2D 3	POSITIVE	4.97
D3-Cocaethylene		320.18	C18H20D3NO 4	POSITIVE	4.09
D3-Cocaine	65266-73-1	306.17	C17H18D3NO 4	POSITIVE	3.81
D3-Codeine	70420-71-2	302.17	C18H18D3NO 3	POSITIVE	2.79
D3-Cotinine	110952-70-0	179.11	C10H9D3N2O	POSITIVE	1.26
D3-Doxepin		282.18	C19H18NOD3	POSITIVE	4.51
D3-Ecgoninemethylester	136765-34-9	202.14	C10H14D3NO 3	POSITIVE	0.65
D3-EDDP	136765-23-6	280.20	C20H20D3N	POSITIVE	4.65
D3-Fenetylline		344.20	C18H20D3N5 O2	POSITIVE	3.61
D3-Hydromorphone		288.16	C17H16D3NO 3	POSITIVE	2.48
D3-Imipramine		283.21	C19H21N2D3	POSITIVE	4.61
D3-LSD	136765-38-3	326.22	C20H22D3N3 O	POSITIVE	3.93
D3-Morphine	67293-88-3	288.16	C17H16D3NO 3	POSITIVE	2.19
D3-Morphine-3-beta-D-glucuronide		464.19	C23H24D3NO 9	POSITIVE	1.30

D3-Morphine-6-beta-D-glucuronide		464.19	C23H24D3NO 9	POSITIVE	2.18
D3-Nortilidine		262.18	C16H18D3NO 2	POSITIVE	3.83
D3-Oxycodone		318.17	C18H18D3NO 4	POSITIVE	3.01
D3-THC	81586-39-2	317.24	C21 H27D3O2	NEGATIVE	8.48
D3-THC-COOH	136844-96-7	347.22	C21 H25D3O4	NEGATIVE	7.27
D3-THC-OH	362044-74-4	333.24	C21 H27D3O3	NEGATIVE	7.23

Compound	CAS	Monoisotopic neutral mass	Formula	Polarity	RT [min]
D3-Trimipramine	136765-54-3	297.23	C20H23D3N2	POSITIVE	4.97
D4-7-Aminoclonazepam	125070-96-4	289.09	C15H8D4ClN3 O	POSITIVE	3.52
D4-Clonazepam	170082-15-2	319.07	C15H6D4ClN3 O3	POSITIVE	5.18
D4-Haloperidol	136765-35-0	379.17	C21 H19ClD4FNO2	POSITIVE	4.56
D4-Lorazepam		324.04	C15H6D4Cl2N2 O2	POSITIVE	5.14
D4-Meperidine	53484-73-4	251.18	C15H17D4NO2	POSITIVE	3.81
D4-Midazolam		329.10	C18H9D4ClFN 3	POSITIVE	4.31
D4-N-Desmethyflunitrazepam		303.10	C15H6D4FN3O 3	POSITIVE	5.01
D4-Nicotine		166.14	C10H10D4N2	POSITIVE	0.88
D4-Norketamine		227.10	C12H10D4ClN O	POSITIVE	3.20
D5-Diazepam	65854-76-4	289.10	C16H8ClN2OD 5	POSITIVE	5.89
D5-JWH-073-N-(3-hydroxybutyl) metabolite	1413427-47-0	348.19	C23H16D5NO2	POSITIVE	6.15
D5-MBDB		212.16	C12H12D5NO2	POSITIVE	3.43
D5-MDEA	160227-43-0	212.16	C12H12D5NO2	POSITIVE	3.29
D5-MDMA	136765-43-0	198.14	C11H10D5NO2	POSITIVE	3.15
D5-Nordiazepam	65891-80-7	275.09	C15H6ClD5N2 O	POSITIVE	5.38
D5-Oxazepam		291.08	C15H6D5ClN2 O2	POSITIVE	5.04
D5-Temazepam	136765-51-0	305.10	C16H8D5ClN2 O2	POSITIVE	5.50
D6-Dihydrocodeine		307.21	C18H17D6NO3	POSITIVE	2.80
D6-Fluoxetine		315.17	C17H12D6NOF	POSITIVE	4.89

			3		
D6-Zolpidem		313.21	C19H15D6N3O	POSITIVE	3.85
D7-7-Aminoflunitrazepam		290.16	C16H7D7FN3O	POSITIVE	3.82
D7-Flunitrazepam	1286448-08-5	320.13	C16H5D7FN3O 3	POSITIVE	5.42
D9-Heroin		378.21	C21 H14D9NO5	POSITIVE	3.65
D9-Methadone		318.27	C21H18D9NO	POSITIVE	4.95
Dapiprazole	72822-12-9	325.23	C19H27N5	POSITIVE	3.56
Debrisoquine	1131-64-2	175.11	C10H13N3	POSITIVE	3.22
Deflazacort	14484-47-0	441.22	C25H31NO6	POSITIVE	5.45
Delorazepam	2894-67-9	304.02	C15H10Cl2N2 O	POSITIVE	5.57
Demeclocycline	127-33-3	464.10	C21 H21 CIN2O8	POSITIVE	3.52
Demeton-S-methylsulfone	17040-19-6	262.01	C6H15O5PS2	POSITIVE	3.40
Denaverine	3579-62-2	383.25	C24H33NO3	POSITIVE	6.07
Desalkylflurazepam	2886-65-9	288.05	C15H10ClFN2 O	POSITIVE	5.41
Desipramine	50-47-5	266.18	C18H22N2	POSITIVE	4.69
Desmethyl-chlordiazepoxide	7722-15-8	285.07	C15H12ClN3O	POSITIVE	3.91
Desmethyl-Citalopram	144010-85-5	310.15	C19H19FN2O	POSITIVE	4.34
Desmethyloclobazam	22316-55-8	286.05	C15H11 CIN2O2	POSITIVE	5.18
Desmethylclomipramine	303-48-0	300.14	C18H21 CIN2	POSITIVE	5.07
Desmethyloclozapine	6104-71-8	312.11	C17H17ClN4	POSITIVE	4.04
Desmethyl-Mirtazapine	61337-68-6	251.14	C16H17N3	POSITIVE	3.39
Desmethylvenlafaxine	93413-62-8	263.19	C16H25NO2	POSITIVE	3.38
Desoxycortone 21 -(3-phenylpropionate)	14007-50-2	462.28	C30H38O4	POSITIVE	7.85
Desoxycortone enantate	64-85-7	442.31	C28H42O4	POSITIVE	8.44
Detajmium	33774-52-6	455.31	C27H41 N3O3	POSITIVE	3.13

Compound	CAS	Monoisotopic neutral mass	Formula	Polarity	RT [min]
Dexamethasone	50-02-2	392.20	C22H29FO5	POSITIVE	4.95
Dexfenfluramine	3239-44-9	231.12	C12H16F3N	POSITIVE	4.14
Dextromethorphan	125-71-3	271.19	C18H25NO	POSITIVE	4.26
Diaveridine	5355-16-8	260.13	C13H16N4O2	POSITIVE	3.02
Diazepam	439-14-5	284.07	C16H13ClN2O	POSITIVE	5.93
Dibenzepin	4498-32-2	295.17	C18H21N3O	POSITIVE	3.95
Diclofenac	15307-86-5	295.02	C14H11 Cl2NO2	POSITIVE	6.35
Dicycloverine	77-19-0	309.27	C19H35NO2	POSITIVE	5.53
Dienogest	65928-58-7	311.19	C20H25NO2	POSITIVE	5.11

Diethazine	60-91-3	298.15	C18H22N2S	POSITIVE	4.64
Diethylcarbazine	90-89-1	199.17	C10H21N3O	POSITIVE	2.48
Difenoconazole	119446-68-3	405.06	C19H17Cl2N3 O3	POSITIVE	6.92
Difenoxuron	14214-32-5	286.13	C16H18N2O3	POSITIVE	5.49
Difenzoquat	43222-48-6	248.13	C17H16N2	POSITIVE	4.21
Digitoxigenin	143-62-4	374.25	C23H34O4	POSITIVE	5.35
Digoxin	20830-75-5	780.43	C41H64O14	POSITIVE	4.06
Dihydrocodeine	125-28-0	301.17	C18H23NO3	POSITIVE	2.77
Dihydroergocristine	17479-19-5	611.31	C35H41 N5O5	POSITIVE	4.70
Diltiazem	42399-41-7	414.16	C22H26N2O4 S	POSITIVE	4.47
Dimefuron	34205-21-5	338.11	C15H19ClN4O 3	POSITIVE	5.78
Dimethachlor	50563-36-5	255.10	C13H18ClNO2	POSITIVE	5.72
Dimethacrine	4757-55-5	294.21	C20H26N2	POSITIVE	4.91
Dimethomorph	110488-70-5	387.12	C21 H22ClNO4	POSITIVE	5.89
Dimetindene	5636-83-9	292.19	C20H24N2	POSITIVE	3.82
Dimetotiazine	7456-24-8	391.14	C19H25N3O2 S2	POSITIVE	4.53
Dimetridazole	551-92-8	141.05	C5H7N3O2	POSITIVE	2.95
Dioxethedrin	497-75-6	211.12	C11H17NO3	POSITIVE	1.27
Diphenamid	957-51-7	239.13	C16H17NO	POSITIVE	5.77
Diphenhydramine	58-73-1	255.16	C17H21 NO	POSITIVE	4.38
Diponium	58875-33-5	323.28	C20H37NO2	POSITIVE	5.53
Diprophylline	479-18-5	254.10	C10H14N4O4	POSITIVE	2.77
Dipyridamole	58-32-2	504.32	C24H40N8O4	POSITIVE	4.31
Disopyramide	3737-09-5	339.23	C21H29N3O	POSITIVE	3.74
Dixyrazine	2470-73-7	427.23	C24H33N3O2 S	POSITIVE	4.98
DOB	32156-26-6	273.04	C11H16BrNO2	POSITIVE	3.79
Dobutamine	34368-04-2	301.17	C18H23NO3	POSITIVE	3.22
Dopexamine	86197-47-9	356.25	C22H32N2O2	POSITIVE	3.00
Dorzolamide	120279-96-1	324.03	C10H16N2O4 S3	POSITIVE	2.53
Dosulepine	113-53-1	295.14	C19H21NS	POSITIVE	4.73
Doxapram	309-29-5	378.23	C24H30N2O2	POSITIVE	3.96
Doxepin	1668-19-5	279.16	C19H21 NO	POSITIVE	4.46
Doxylamine	469-21-6	270.17	C17H22N2O	POSITIVE	3.21
Drazoloxon	5707-69-7	237.03	C10H8ClN3O2	POSITIVE	6.55
Drofenine	1679-76-1	317.24	C20H31NO2	POSITIVE	5.19
Duloxetine	116539-59-4	297.12	C18H19NOS	POSITIVE	4.75

Compound	CAS	Monoisotopic neutral mass	Formula	Polarity	RT [min]
Ecgoninemethylester	7143-09-1	199.12	C10H17NO3	POSITIVE	0.63
EDDP	66729-78-0	277.18	C20H23N	POSITIVE	4.64
Embutramide	15687-14-6	293.20	C17H27NO3	POSITIVE	5.25
Enalapril	75847-73-3	376.20	C20H28N2O5	POSITIVE	4.16
Enoximon	77671-31-9	248.06	C12H12N2O2 S	POSITIVE	4.26
Entacapone	130929-57-6	305.10	C14H15N3O5	POSITIVE	5.03
Ephedrine	299-42-3	165.12	C10H15NO	POSITIVE	2.78
Eprosartan	133040-01-4	424.15	C23H24N2O4 S	POSITIVE	4.10
Esculin	531-75-9	340.08	C15H16O9	POSITIVE	2.79
Esmolol	103598-03-4	295.18	C16H25NO4	POSITIVE	3.75
Esomeprazole	119141-88-7	345.11	C17H19N3O3 S	POSITIVE	3.96
Estazolam	29975-16-4	294.07	C16H11 CIN4	POSITIVE	5.07
Ethambutol	74-55-5	204.18	C10H24N2O2	POSITIVE	0.53
Ethenzamide	938-73-8	165.08	C9H11NO2	POSITIVE	4.17
Ethylglucuronide	17685-04-0	222.07	C8H14O7	NEGATIVE	1.00
Etilefrine	709-55-7	181.11	C10H15NO2	POSITIVE	1.89
Etizolam	40054-69-1	342.07	C17H15CIN4S	POSITIVE	5.38
Etofylline	519-37-9	224.09	C9H12N4O3	POSITIVE	2.89
Famotidine	76824-35-6	337.04	C8H15N7O2S 3	POSITIVE	2.46
Fedrilate	23271-74-1	347.21	C20H29NO4	POSITIVE	3.90
Fenarimol	60168-88-9	330.03	C17H12Cl2N2 O	POSITIVE	6.12
Fendiline	13042-18-7	315.20	C23H25N	POSITIVE	5.17
Fenethylline	3736-08-1	341.19	C18H23N5O2	POSITIVE	3.61
Fenfuram	24691-80-3	201.08	C12H11NO2	POSITIVE	5.41
Fenofibrate	49562-28-9	360.11	C20H21 ClO4	POSITIVE	7.87
Fenoterol	13392-18-2	303.15	C17H21NO4	POSITIVE	2.80
Fenpipramide	77-01-0	322.20	C21H26N2O	POSITIVE	3.98
Fenpiprane	3329-14-4	279.20	C20H25N	POSITIVE	4.64
Fentanyl	437-38-7	336.22	C22H28N2O	POSITIVE	4.28
Fenticonazole	72479-26-6	454.07	C24H20Cl2N2O S	POSITIVE	6.19
Fexofenadine	83799-24-0	501.29	C32H39NO4	POSITIVE	4.82
Flecainide	54143-55-4	414.14	C17H20F6N2O 3	POSITIVE	4.51
Flocoumafen	90035-08-8	542.17	C33H25F3O4	POSITIVE	7.94
Floctafenine	23779-99-9	406.11	C20H17F3N2O 4	POSITIVE	4.17

Fluanisone	1480-19-9	356.19	C21H25FN2O 2	POSITIVE	4.39
Fluconazol	86386-73-4	306.10	C13H12F2N6 O	POSITIVE	3.68
Fludrocortisone	514-36-3	380.20	C21H29FO5	POSITIVE	4.54
Flumazenil	78755-81-4	303.10	C15H14FN3O 3	POSITIVE	4.31
Flunitrazepam	1622-62-4	313.09	C16H12FN3O 3	POSITIVE	5.45
Fluoxetine	54910-89-3	309.13	C17H18NOF3	POSITIVE	4.80
Flupentixol	2709-56-0	434.16	C23H25F3N2O S	POSITIVE	5.37
Fluphenazine	69-23-8	437.17	C22H26F3N3O S	POSITIVE	5.22
Flupirtine	56995-20-1	304.13	C15H17FN4O 2	POSITIVE	4.02
Flurazepam	17617-23-1	387.15	C21 H23ClFN3O	POSITIVE	4.40
Flurochloridone	61213-25-0	311.01	C12H10Cl2F3N O	POSITIVE	6.59

Compound	CAS	Monoisotopic neutral mass	Formula	Polarity	RT [min]
Fluspirilen	1841-19-6	475.24	C29H31F2N3O	POSITIVE	5.42
Fluvastatin	93957-54-1	411.18	C24H26FNO4	POSITIVE	6.27
Fluvoxamine	54739-18-3	318.16	C15H21 F3N2O2	POSITIVE	4.80
Fuberidazole	3878-19-1	184.06	C11H8N2O	POSITIVE	3.17
Furalaxyl	57646-30-7	301.13	C17H19NO4	POSITIVE	5.99
Furazolidone	67-45-8	225.04	C8H7N3O5	POSITIVE	3.70
Furosemide	54-31-9	330.01	C12H11ClN2O 5S	NEGATIVE	4.68
Gabapentin	60142-96-3	171.13	C9H17NO2	POSITIVE	2.78
Galantamine	357-70-0	287.15	C17H21NO3	POSITIVE	2.53
Gallopamil	16662-47-8	484.29	C28H40N2O5	POSITIVE	4.94
Glafenin	3820-67-5	372.09	C19H17ClN2O 4	POSITIVE	3.53
Glibenclamide	10238-21-8	493.14	C23H28ClN3O 5S	POSITIVE	6.30
Glibornuride	26944-48-9	366.16	C18H26N2O4S	POSITIVE	6.11
Gliclazide	21187-98-4	323.13	C15H21N3O3S	POSITIVE	5.70
Glimepiride	93479-97-1	490.22	C24H34N4O5S	POSITIVE	6.46
Glipizide	29094-61-9	445.18	C21 H27N5O4S	POSITIVE	5.35
Griseofulvin	126-07-8	352.07	C17H17ClO6	POSITIVE	5.44

Guanabenz	5051-62-7	230.01	C8H8Cl2N4	POSITIVE	3.73
Guanethidine	55-65-2	198.18	C10H22N4	POSITIVE	0.74
Guanoxan	2165-19-7	207.10	C10H13N3O2	POSITIVE	3.26
Halcinonide	3093-35-4	454.19	C24H32ClFO5	POSITIVE	6.49
Haloperidol	52-86-8	375.14	C21 H23ClFNO2	POSITIVE	4.58
Haloxyfop ethoxyethyl ester	87237-48-7	433.09	C19H19ClF3N O5	POSITIVE	7.49
Heroin	561-27-3	369.16	C21H23NO5	POSITIVE	3.66
Hexazinone	51235-04-2	252.16	C12H20N4O2	POSITIVE	4.52
Hexobendine	54-03-5	592.30	C30H44N2O10	POSITIVE	4.29
Histamine	51-45-6	111.08	C5H9N3	POSITIVE	0.44
Histapyrrodine	493-80-1	280.19	C19H24N2	POSITIVE	4.64
Histidine	71-00-1	155.07	C6H9N3O2	POSITIVE	0.45
Homatropine	87-00-3	275.15	C16H21NO3	POSITIVE	2.99
Homofenazine	3833-99-6	451.19	C23H28F3N3O S	POSITIVE	4.57
Hordenine	539-15-1	165.12	C10H15NO	POSITIVE	1.78
Hydralazine	86-54-4	160.07	C8H8N4	POSITIVE	2.05
Hydrochlorothiazide	58-93-5	296.96	C7H8ClN3O4S 2	NEGATIVE	3.00
Hydrocodone	125-29-1	299.15	C18H21NO3	POSITIVE	3.04
Hydrocortisone	50-23-7	362.21	C21H30O5	POSITIVE	4.53
Hydrocortisone 21 -acetate	50-03-3	404.22	C23H32O6	POSITIVE	5.32
Hydromorphone	466-99-9	285.14	C17H19NO3	POSITIVE	2.50
Hydroxychloroquine	118-42-3	335.18	C18H26ClN3O	POSITIVE	2.81
Hydroxyzine	68-88-2	374.18	C21 H27ClN2O2	POSITIVE	4.80
Ibuprofen	15687-27-1	223.16	C13H17O2NH4	POSITIVE	6.53
Imipramine	50-49-7	280.19	C19H24N2	POSITIVE	4.80
Indanazoline	40507-78-6	201.13	C12H15N3	POSITIVE	3.39
Indapamine	26807-65-8	365.06	C16H16ClN3O 3S	POSITIVE	5.03
Indinavir	150378-17-9	613.36	C36H47N5O4	POSITIVE	4.37

Compound	CAS	Monoisotopic neutral mass	Formula	Polarity	RT [min]
Indometacin	53-86-1	357.08	C19H16ClNO 4	POSITIVE	6.36
Indoramin	26844-12-2	347.20	C22H25N3O	POSITIVE	4.04
Iopodicacid	5587-89-3	597.81	C12H13I3N2O2	POSITIVE	4.43
Ipratropium	22254-24-6	331.21	C20H29NO3	POSITIVE	3.40
Irbesartan	138402-11-6	428.23	C25H28N6O	POSITIVE	5.35
Isoaminile	77-51-0	244.19	C16H24N2	POSITIVE	4.17

Isoconazole	24168-96-5	413.99	C18H14Cl4N2O	POSITIVE	5.65
Iso-LSD		323.20	C20H25N3O	POSITIVE	4.12
Isoniazid	54-85-3	137.06	C6H7N3O	POSITIVE	0.73
Isoproturon	34123-59-6	206.14	C12H18N2O	POSITIVE	5.41
Isothipendyl	482-15-5	285.13	C16H19N3S	POSITIVE	4.35
Isoxsuprine	395-28-8	301.17	C18H23NO3	POSITIVE	3.82
JWH-007	155471-10-6	355.19	C25H25NO	POSITIVE	8.06
JWH-015		327.16	C23H21 NO	POSITIVE	7.46
JWH-018		341.18	C24H23NO	POSITIVE	7.98
JWH-018-N-(4-hydroxypentyl) metabolite	1320363-47-0	357.17	C24H23NO2	POSITIVE	6.26
JWH-019		355.19	C25H25NO	POSITIVE	8.30
JWH-019-(5-hydroxyindol) metabolite	1379604-70-2	371.19	C25H25NO2	POSITIVE	7.21
JWH-020		369.21	C26H27NO	POSITIVE	8.56
JWH-072		313.15	C22H19NO	POSITIVE	7.35
JWH-073		327.16	C23H21 NO	POSITIVE	7.68
JWH-073-N-(3-hydroxybutyl) metabolite	1320363-48-1	343.16	C23H21NO2	POSITIVE	6.17
JWH-081		371.19	C25H25NO2	POSITIVE	8.09
JWH-081-N-(5-hydroxypentyl) metabolite	1427325-66-3	387.18	C25H25NO3	POSITIVE	6.36
JWH-122		355.19	C25H25NO	POSITIVE	8.24
JWH-122-5-fluoropentyl-derivate	1354631-24-5	373.18	C25H24FNO	POSITIVE	7.48
JWH-122-N-(4-hydroxypentyl) metabolite		371.19	C25H25NO2	POSITIVE	6.54
JWH-200		384.18	C25H24N2O2	POSITIVE	5.02
JWH-200-4-hydroxyindole metabolite	1427325-73-2	400.18	C25H24N2O3	POSITIVE	5.30
JWH-210		369.21	C26H27NO	POSITIVE	8.47
JWH-210-N-(4-hydroxypentyl) metabolite	1427521-37-6	385.20	C26H27NO2	POSITIVE	6.80
JWH-250		335.19	C22H25NO2	POSITIVE	7.57
JWH-250- N -(4- hydroxypentyl) metabolite	1427521-38-7	351.18	C22H25NO3	POSITIVE	5.89
JWH-307	914458-26-7	385.18	C26H24FNO	POSITIVE	8.12
JWH-387		419.09	C24H22BrNO	POSITIVE	8.54
JWH-398	1292765-18-4	375.14	C24H22ClNO	POSITIVE	8.42
JWH-398- N-(5- hydroxypentyl) metabolite	1379604-69-9	391.13	C24H22ClNO 2	POSITIVE	6.77
JWH-412	1364933-59-4	359.17	C24H22FNO	POSITIVE	8.09

Compound	CAS	Monoisotopic neutral mass	Formula	Polarity	RT [min]
Kavain	500-64-1	230.09	C14H14O3	POSITIVE	5.63
Ketamin	6740-88-1	237.09	C13H16ClNO	POSITIVE	3.31

Ketazolam	27223-35-4	368.09	C20H17CIN2O 3	POSITIVE	6.15
Ketoprofen	22071-15-4	254.09	C16H14O3	POSITIVE	5.59
Ketorolac	74103-06-3	255.09	C15H13NO3	POSITIVE	5.08
Ketotifen	34580-13-7	309.12	C19H19NOS	POSITIVE	4.07
Labetalol	36894-69-6	328.18	C19H24N2O3	POSITIVE	3.96
Lamotrigine	84057-84-1	255.01	C9H7CI2N5	POSITIVE	3.52
L-Ascorbicacid	50-81-7	176.03	C6H8O6	NEGATIV E	0.76
Laudanosine	2688-77-9	357.19	C21H27NO4	POSITIVE	3.69
Lercanidipine	100427-26-7	611.30	C36H41 N3O6	POSITIVE	5.68
Levobunolol	47141-42-4	291.18	C17H25NO3	POSITIVE	3.61
Levocabastine	79516-68-0	420.22	C26H29FN2O 2	POSITIVE	4.60
Levomepromazine	60-99-1	328.16	C19H24N2OS	POSITIVE	4.92
Levopropylhexedrine	6192-97-8	155.17	C10H21N	POSITIVE	3.81
Lidocaine	137-58-6	234.17	C14H22N2O	POSITIVE	3.28
Lisinopril	76547-98-3	405.23	C21H31N3O5	POSITIVE	2.90
Lisuride	18016-80-3	338.21	C20H26N4O	POSITIVE	4.13
Lofepramine	23047-25-8	420.17	C26H27CINO2	POSITIVE	5.56
Lonazolac	53808-88-1	312.07	C17H13CIN2O 2	POSITIVE	6.50
Loperamide	53179-11-6	476.22	C29H33CIN2O 2	POSITIVE	5.35
Loratadine	79794-75-5	382.14	C22H23CIN2O 2	POSITIVE	5.78
Lorazepam	846-49-1	320.01	C15H10CI2N2O2	POSITIVE	5.17
Lormetazepam	848-75-9	334.03	C16H12CI2N2O2	POSITIVE	5.65
Losartan	114798-39-9	422.16	C22H23CIN6O	POSITIVE	5.26
Loxapine	1977-10-2	327.11	C18H18CIN3O	POSITIVE	4.62
LSD	50-37-3	323.20	C20H25N3O	POSITIVE	3.94
Maprotiline	10262-69-8	277.18	C20H23N	POSITIVE	4.83
Mazindol	22232-71-9	284.07	C16H13CIN2O	POSITIVE	3.95
MBDB	103818-46-8	207.13	C12H17NO2	POSITIVE	3.42
MCPP	6640-24-0	196.08	C10H13CIN2	POSITIVE	3.62
MDA	4764-17-4	179.09	C10H13NO2	POSITIVE	2.96
MDBP	32231-06-4	220.12	C12H16N2O2	POSITIVE	2.27
MDDMA	74698-50-3	207.13	C12H17NO2	POSITIVE	3.19
MDEA	82801-81-8	207.13	C12H17NO2	POSITIVE	3.27
MDMA	42542-10-9	193.11	C11H15NO2	POSITIVE	3.13
Mebeverine	3625-06-7	429.25	C25H35NO5	POSITIVE	4.78
Meclofenamic acid	644-62-2	295.02	C14H11 CI2NO2	POSITIVE	6.80
Meclozine	569-65-3	390.19	C25H27CIN2	POSITIVE	5.79
Medazepam	2898-12-6	270.09	C16H15CIN2	POSITIVE	4.42

Mefenamic acid	61-68-7	241.11	C15H15NO2	POSITIVE	6.78
Mefenorex	17243-57-1	211.11	C12H18ClN	POSITIVE	3.77
Mefexamide	1227-61-8	280.18	C15H24N2O3	POSITIVE	3.34
Mefloquine	53230-10-7	378.12	C17H16F6N2 O	POSITIVE	5.05
Mefruside	7195-27-9	382.04	C13H19ClN2O5 S2	POSITIVE	5.18

Compound	CAS	Monoisotopic neutral mass	Formula	Polarity	RT [min]
Mianserin	24219-97-4	264.16	C18H20N2	POSITIVE	4.40
Miconazole	22916-47-8	413.99	C18H14Cl4N2 O	POSITIVE	6.01
Midazolam	59467-70-8	325.08	C18H13ClFN3	POSITIVE	4.36
Minocycline	10118-90-8	457.18	C23H27N3O7	POSITIVE	3.19
Minoxidil	38304-91-5	209.13	C9H15N5O	POSITIVE	3.28
Mirtazapine	61337-67-5	265.16	C17H19N3	POSITIVE	3.54
Mizolastine	108612-45-9	432.21	C24H25FN6O	POSITIVE	4.20
Moclobemide	71320-77-9	268.10	C13H17ClN2O 2	POSITIVE	3.30
Monolinuron	1746-81-2	214.05	C9H11 ClN2O2	POSITIVE	5.41
Moperone	1050-79-9	355.19	C22H26FNO2	POSITIVE	4.43
Morphin-3-beta-D-glucuronide	20290-09-9	461.17	C23H27NO9	POSITIVE	1.29
Morphine	57-27-2	285.14	C17H19NO3	POSITIVE	2.20
Morphine-6-beta-D-glucuronide	20290-10-2	461.17	C23H27NO9	POSITIVE	2.18
Moxaverine	10539-19-2	307.16	C20H21NO2	POSITIVE	4.52
Moxisylyte	54-32-0	279.18	C16H25NO3	POSITIVE	4.31
Moxonidine	75438-57-2	241.07	C9H12ClN5O	POSITIVE	2.49
MPPH	51169-17-6	266.11	C16H14N2O2	POSITIVE	5.24
N,N-Diethyl-m-toluamide	134-62-3	191.13	C12H17NO	POSITIVE	5.41
Nabumetone	42924-53-8	228.12	C15H16O2	POSITIVE	6.29
Nadolol	42200-33-9	309.19	C17H27NO4	POSITIVE	3.06
Naftidrofuryl	31329-57-4	383.25	C24H33NO3	POSITIVE	5.04
Naftifine	65472-88-0	287.17	C21H21N	POSITIVE	4.89
Nalbuphine	20594-83-6	357.19	C21H27NO4	POSITIVE	3.15
Nalidixic acid	389-08-2	232.08	C12H12N2O3	POSITIVE	4.89
Nalorphine	62-67-9	311.15	C19H21NO3	POSITIVE	2.71
Naloxone	465-65-6	327.15	C19H21NO4	POSITIVE	2.77
Naltrexon	16590-41-3	341.16	C20H23NO4	POSITIVE	3.00
Nandrolone	434-22-0	274.19	C18H26O2	POSITIVE	5.42
Nandrolone phenylpropionate	62-90-8	406.25	C27H34O3	POSITIVE	8.26

Naphazoline	835-31-4	210.12	C14H14N2	POSITIVE	3.48
Napropamide	15299-99-7	271.16	C17H21NO2	POSITIVE	6.44
Naproxen	22204-53-1	230.09	C14H14O3	POSITIVE	5.63
N-Desmethylflunitrazepam	2558-30-7	299.07	C15H10FN3O 3	POSITIVE	5.03
N-Desmethylolanzapine	161696-76-0	298.13	C16H18N4S	POSITIVE	2.76
N-Desmethylpropafenone	86383-21-3	299.15	C18H21NO3	POSITIVE	4.32
Nebivolol	99200-09-6	405.18	C22H25F2NO 4	POSITIVE	4.84
Nefazodone	83366-66-9	469.22	C25H32CIN5O 2	POSITIVE	5.05
Nefopam	13669-70-0	253.15	C17H19NO	POSITIVE	4.01
N-Ethyl-Amphetamine	457-87-4	163.14	C11H17N	POSITIVE	3.28
Nicardipine	55985-32-5	479.21	C26H29N3O6	POSITIVE	4.80
Nicotinamide	98-92-0	122.05	C6H6N2O	POSITIVE	0.95
Nicotine	54-11-5	162.12	C10H14N2	POSITIVE	0.88
Nifedipine	21829-25-4	346.12	C17H18N2O6	POSITIVE	5.69
Nifenazone	2139-47-1	308.13	C17H16N4O2	POSITIVE	3.29
Niflumicacid	4394-00-7	282.06	C13H9F3N2O 2	POSITIVE	6.34

Compound	CAS	Monoisotopic neutral mass	Formula	Polarity	RT [min]
Nilvadipine	75530-68-6	385.13	C19H19N3O6	POSITIVE	6.49
Nimorazole	6506-37-2	226.11	C9H14N4O3	POSITIVE	1.25
Nisodipine	63675-72-9	388.16	C20H24N2O6	POSITIVE	6.69
N-Isopropylsalicylamide	551-35-9	179.09	C10H13NO2	POSITIVE	5.27
Nitrazepam	146-22-5	281.08	C15H11 N3O3	POSITIVE	5.05
Nizatidin	76963-41-2	331.11	C12H21N5O2S 2	POSITIVE	2.40
Nomifensine	24526-64-5	238.15	C16H18N2	POSITIVE	3.83
Norbuprenorphine	78715-23-8	413.26	C25H35NO4	POSITIVE	3.87
Norcocaine	18717-72-1	289.13	C16H19NO4	POSITIVE	3.84
Norcodeine	467-15-2	285.14	C17H19NO3	POSITIVE	2.73
Nordiazepam	1088-11-5	270.06	C15H11CIN2O	POSITIVE	5.37
Nordoxepine	1225-56-5	265.15	C18H19NO	POSITIVE	4.37
Norethisterone	68-22-4	298.19	C20H26O2	POSITIVE	5.70
Norethisterone acetate	51-98-9	340.20	C22H28O3	POSITIVE	6.78
Norfentanyl	1609-66-1	232.16	C14H20N2O	POSITIVE	3.27
Norflouxacin	70458-96-7	319.13	C16H18FN3O 3	POSITIVE	3.24
Norfluoxetine	83891-03-6	295.12	C16H16F3NO	POSITIVE	4.71
Norketamin	35211-10-0	223.08	C12H14CINO	POSITIVE	3.26
Nor-LSD	35779-43-2	309.18	C19H23N3O	POSITIVE	3.94
Normorphine	466-97-7	271.12	C16H17NO3	POSITIVE	1.79

Noroxycodone	57664-96-7	301.13	C17H19NO4	POSITIVE	2.97
Norpropoxyphene	66796-40-5	325.20	C21H27NO2	POSITIVE	4.62
Norsertaline	87857-41-8	275.04	C16H13Cl2	POSITIVE	4.75
Nortilidine	38677-94-0	259.16	C16H21NO2	POSITIVE	3.82
Nortriptyline	72-69-5	263.17	C19H21N	POSITIVE	4.82
Noscapine	128-62-1	413.15	C22H23NO7	POSITIVE	3.98
Nuarimol	63284-71-9	314.06	C17H12ClFN2O	POSITIVE	5.72
Obidoxime	114-90-9	288.12	C14H16N4O3	POSITIVE	0.54
O-Desmethyltramadol	73986-53-5	249.17	C15H23NO2	POSITIVE	3.01
Ofloxacin	82419-36-1	361.14	C18H20FN3O 4	POSITIVE	3.18
Olanzapine	132539-06-1	312.14	C17H20N4S	POSITIVE	2.91
Olsalazine	15772-48-2	302.05	C14H10N2O6	NEGATIVE	5.02
Ondansetron	99614-02-5	293.15	C18H19N3O	POSITIVE	3.81
Opipramol	315-72-0	363.23	C23H29N3O	POSITIVE	4.35
Ornidazole	16773-42-5	219.04	C7H10ClN3O3	POSITIVE	3.64
Quabain	630-60-4	584.28	C29H44O12	POSITIVE	3.48
Oxatomide	60607-34-3	426.24	C27H30N4O	POSITIVE	4.93
Oxazepam	604-75-1	286.05	C15H11 ClN2O2	POSITIVE	5.06
Oxcarbazepine	28721-07-5	252.09	C15H12N2O2	POSITIVE	4.45
Oxeladin	468-61-1	335.25	C20H33NO3	POSITIVE	5.03
Oxetacaine	126-27-2	467.31	C28H41N3O3	POSITIVE	5.73
Oxitropium	30286-75-0	331.18	C19H25NO4	POSITIVE	3.19
Oxomemazine	3689-50-7	330.14	C18H22N2O2 S	POSITIVE	3.97
Oxprenolol	6452-71-7	265.17	C15H23NO3	POSITIVE	3.91
Oxybuprocaine	99-43-4	308.21	C17H28N2O3	POSITIVE	4.35

Compound	CAS	Monoisotopic neutral mass	Formula	Polarity	RT [min]
Oxybutynin	5633-20-5	357.23	C22H31NO3	POSITIVE	5.07
Oxycodone	76-42-6	315.15	C18H21NO4	POSITIVE	2.95
Oxyfedrine	15687-41-9	313.17	C19H23NO3	POSITIVE	4.20
Oxymetazoline	1491-59-4	260.19	C16H24N2O	POSITIVE	4.31
Oxymorphone	76-41-5	301.13	C17H19NO4	POSITIVE	2.39
Oxypendyl	17297-82-4	370.18	C20H26N4OS	POSITIVE	4.20
Oxypertine	153-87-7	379.23	C23H29N3O2	POSITIVE	4.29
Oxytetracycline	79-57-2	460.15	C22H24N2O9	POSITIVE	3.25
Papaverin	58-74-2	339.15	C20H21NO4	POSITIVE	3.93
Paracetamol	103-90-2	151.06	C8H9NO2	POSITIVE	2.58
Paraoxon	311-45-5	275.06	C10H14NO6P	POSITIVE	5.54
Paraoxon-methyl	950-35-6	247.02	C8H10NO6P	POSITIVE	4.74

Paroxetine	61869-08-7	329.14	C19H20FNO3	POSITIVE	4.65
Penbutolol	38363-40-5	291.22	C18H29NO2	POSITIVE	5.00
Penfluridol	26864-56-2	523.17	C28H27ClF5N O	POSITIVE	5.92
Pentetrazole	54-95-5	138.09	C6H10N4	POSITIVE	3.38
Pentobarbital	76-74-4	226.13	C11H18N2O3	NEGATIV E	4.77
Pentoxifylline	6493-05-6	278.14	C13H18N4O3	POSITIVE	3.78
Pentoxyverine	77-23-6	333.23	C20H31NO3	POSITIVE	4.95
Perazine	84-97-9	339.18	C20H25N3S	POSITIVE	4.73
Pergolide	66104-22-1	314.18	C19H26N2S	POSITIVE	4.41
Periciazine	2622-26-6	365.16	C21H23N3OS	POSITIVE	4.58
Perindopril	82834-16-0	368.23	C19H32N2O5	POSITIVE	4.27
Perphenazine	58-39-9	403.15	C21 H26ClN3OS	POSITIVE	5.03
Pethidine	57-42-1	247.16	C15H21NO2	POSITIVE	3.80
Phenacetin	62-44-2	179.09	C10H13NO2	POSITIVE	4.27
Phenazone	60-80-0	188.09	C11H12N2O	POSITIVE	3.58
Phenazopyridine	94-78-0	213.10	C11H11N5	POSITIVE	4.21
Phencyclidine	77-10-1	243.20	C17H25N	POSITIVE	4.04
Phenelzine	51-71-8	136.10	C8H12N2	POSITIVE	2.59
Phenethylamine	64-04-0	121.09	C8H11N	POSITIVE	2.57
Pheniramine	86-21-5	240.16	C16H20N2	POSITIVE	3.22
Phenobarbital	50-06-6	232.08	C12H12N2O3	NEGATIV E	4.17
Phenprocoumon	435-97-2	280.11	C18H16O3	POSITIVE	6.24
Phenylbutazone	50-33-9	308.15	C19H20N2O2	POSITIVE	6.62
Phenyltoloxamine	92-12-6	255.16	C17H21NO	POSITIVE	4.60
Phenytoin	57-41-0	252.09	C15H12N2O2	POSITIVE	4.88
Pholedrine	370-14-9	165.12	C10H15NO	POSITIVE	2.35
Phthalylsulfathiazole	85-73-4	403.03	C17H13N3O5S2	POSITIVE	3.92
Physostigmine	57-47-6	275.16	C15H21N3O2	POSITIVE	3.10
Pimozide	2062-78-4	461.23	C28H29F2N3 O	POSITIVE	5.25
Pindolol	13523-86-9	248.15	C14H20N2O2	POSITIVE	3.15
Pipamperone	1893-33-0	375.23	C21 H30FN3O2	POSITIVE	3.23
Piprozolin	17243-64-0	298.14	C14H22N2O3 S	POSITIVE	6.23
Pirenzepine	28797-61-7	351.17	C19H21N5O2	POSITIVE	3.02

Compound	CAS	Monoisotopic neutral mass	Formula	Polarity	RT [min]
Piretanide	55837-27-9	362.09	C17H18N2O5	POSITIVE	5.41

			S		
Piritramide	302-41 -0	430.27	C27H34N4O	POSITIVE	4.21
Piroxicam	36322-90-4	331.06	C15H13N3O4 S	POSITIVE	5.13
Pizotifen	15574-96-6	295.14	C19H21NS	POSITIVE	4.73
p-Methylthioamphetamine	14116-06-4	181.09	C10H15NS	POSITIVE	3.46
PMMA	3398-68-3	179.13	C11H17NO	POSITIVE	3.19
Practolol	6673-35-4	266.16	C14H22N2O3	POSITIVE	2.68
Prajmalium	35080-11-6	368.25	C23H32N2O2	POSITIVE	4.51
Pramipexol	104632-26-0	211.11	C10H17N3S	POSITIVE	0.72
Prazepam	2955-38-6	324.10	C19H17CN2O	POSITIVE	6.68
Prazosin	19216-56-9	383.16	C19H21 N5O4	POSITIVE	3.68
Prednisone	53-03-2	358.18	C21H26O5	POSITIVE	4.51
Prenylamine	390-64-7	329.21	C24H27N	POSITIVE	5.38
Primaquine	90-34-6	259.17	C15H21N3O	POSITIVE	4.06
Primidone	125-33-7	218.11	C12H14N2O2	POSITIVE	6.45
Procainamide	51-06-9	235.17	C13H21N3O	POSITIVE	2.33
Procaine	59-46-1	236.15	C13H20N2O2	POSITIVE	2.77
Prochlorperazin	58-38-8	373.14	C20H24ClN3S	POSITIVE	5.08
Procyclidine	77-37-2	287.22	C19H29NO	POSITIVE	4.67
Progesterone	57-83-0	314.22	C21H30O2	POSITIVE	6.82
Promazine	58-40-2	284.13	C17H20N2S	POSITIVE	4.71
Promethazine	60-87-7	284.13	C17H20N2S	POSITIVE	4.62
Prometryn	7287-19-6	241.14	C10H19N5S	POSITIVE	5.84
Propafenone	54063-53-5	341.20	C21H27NO3	POSITIVE	4.82
Propallylonal	545-93-7	288.01	C10H13BrN2O3	NEGATIVE	4.39
Propiconazole	60207-90-1	341.07	C15H17Cl2N3O 2	POSITIVE	6.73
Propionylpromazine	3568-24-9	340.16	C20H24N2OS	POSITIVE	4.93
Propipocaine	3670-68-6	275.19	C17H25NO2	POSITIVE	4.39
Propiverine	60569-19-9	367.21	C23H29NO3	POSITIVE	5.26
Propoxyphene	469-62-5	339.22	C22H29NO2	POSITIVE	4.69
Propranolol	525-66-6	259.16	C16H21NO2	POSITIVE	4.22
Propyphenazone	479-92-5	230.14	C14H18N2O	POSITIVE	5.15
Prothipendyl	303-69-5	285.13	C16H19N3S	POSITIVE	4.43
Protionamide	14222-60-7	180.07	C9H12N2S	POSITIVE	3.12
Protriptyline	438-60-8	263.17	C19H21N	POSITIVE	4.72
Pseudoephedrine	90-82-4	165.12	C10H15NO	POSITIVE	2.75
Psilocin	520-53-6	204.13	C12H16N2O	POSITIVE	2.60
Psilocybin	520-52-5	284.09	C12H17N2O4 P	POSITIVE	2.01
Pyranocoumarin	518-20-7	322.12	C20H18O4	POSITIVE	6.99
Pyribenzamine	91-81-6	255.17	C16H21N3	POSITIVE	3.90
Pyrilamine	91-84-9	285.18	C17H23N3O	POSITIVE	3.85
Pyrimethamine	58-14-0	248.08	C12H13ClN4	POSITIVE	3.96

Pyritinol	1098-97-1	368.09	C16H20N2O4S2	POSITIVE	2.63
Pyrvinium	548-84-5	381.22	C26H27N3	POSITIVE	5.86
Quetiapine	111974-72-2	383.17	C21H25N3O2 S	POSITIVE	4.37

Compound	CAS	Monoisotopic neutral mass	Formula	Polarity	RT [min]
Quinapril	85441-61-8	438.22	C25H30N2O5	POSITIVE	5.01
Quinine	130-95-0	324.18	C20H24N2O2	POSITIVE	3.33
Ramifenazone	3615-24-5	245.15	C14H19N3O	POSITIVE	2.98
Ramipril	87333-19-5	416.23	C23H32N2O5	POSITIVE	4.65
Ranitidine	66357-35-5	314.14	C13H22N4O3S	POSITIVE	2.57
Raubasine	483-04-5	352.18	C21H24N2O3	POSITIVE	4.11
RCS-4 N-(4-hydroxypentyl) metabolite	1448893-03-5	337.17	C21H23NO3	POSITIVE	5.71
RCS-4 ortho-isomer	1345966-78-0	321.17	C21H23NO2	POSITIVE	7.18
Reboxetine	98769-81-4	313.17	C19H23NO3	POSITIVE	4.45
Remifentanil	132539-07-2	376.20	C20H28N2O5	POSITIVE	3.79
Repaglinide	135062-02-1	452.27	C27H36N2O4	POSITIVE	6.30
Reproterol	54063-54-6	389.17	C18H23N5O5	POSITIVE	2.70
Reserpine	50-55-5	608.27	C33H40N2O9	POSITIVE	4.98
Riluzole	1744-22-5	234.01	C8H5F3N2OS	POSITIVE	5.27
Risperidone	106266-06-2	410.21	C23H27FN4O2	POSITIVE	3.96
Ritalinicacid	19395-41-6	219.13	C13H17NO2	POSITIVE	3.21
Rizatriptan	145202-66-0	269.16	C15H19N5	POSITIVE	2.74
Rocuronium	119302-91-9	528.39	C32H52N2O4	POSITIVE	3.35
Ropinirole	91374-21-9	260.19	C16H24N2O	POSITIVE	3.24
Ropivacaine	84057-95-4	274.20	C17H26N2O	POSITIVE	3.75
Rosiglitazone	122320-73-4	357.11	C18H19N3O3S	POSITIVE	3.71
Salicylamide	65-45-2	137.05	C7H7NO2	POSITIVE	3.52
Salicylic acid	69-72-7	138.03	C7H6O3	NEGATIVE	4.08
Scopolamine	51-34-3	303.15	C17H21NO4	POSITIVE	2.97
Sebuthylazine	7286-69-3	229.11	C9H16ClN5	POSITIVE	5.85
Secobarbital	76-73-3	238.13	C12H18N2O3	NEGATIVE	4.99
Selegilin	14611-51-9	187.14	C13H17N	POSITIVE	3.42
Sertindole	106516-24-9	440.18	C24H26ClFN4 O	POSITIVE	5.22
Sertraline	79559-97-0	305.07	C17H17Cl2N	POSITIVE	5.04
Sibutramin	106650-56-0	279.18	C17H26ClN	POSITIVE	5.08
Sildenafil	139755-83-2	474.20	C22H30N6O4S	POSITIVE	4.39
Simazine	122-34-9	201.08	C7H12ClN5	POSITIVE	4.77
Sotalol	959-24-0	272.12	C12H20N2O3S	POSITIVE	2.52
Spirapril	83647-97-6	466.16	C22H30N2O5S 2	POSITIVE	4.77

Stanozolol	10418-03-8	328.25	C21H32N2O	POSITIVE	5.78
Strychnin	57-24-9	334.17	C21H22N2O2	POSITIVE	3.14
Sufentanil	56030-54-7	386.20	C22H30N2O2S	POSITIVE	4.74
Sulfabenzamide	127-71-9	276.06	C13H12N2O3S	POSITIVE	4.36
Sulfacloamide	4015-18-3	312.04	C12H13ClN4O2S	POSITIVE	3.21
Sulfadiazine	68-35-9	250.05	C10H10N4O2S	POSITIVE	2.85
Sulfadoxine	2447-57-6	310.07	C12H14N4O4S	POSITIVE	4.02
Sulfaethidole	94-19-9	284.04	C10H12N4O2S2	POSITIVE	4.03
Sulfaguanidin	57-67-0	214.05	C7H10N4O2S	POSITIVE	1.05
Sulfalene	152-47-6	280.06	C11H12N4O3S	POSITIVE	3.79

Compound	CAS	Monoisotopic neutral mass	Formula	Polarity	RT [min]
Sulfamerazine	127-79-7	264.07	C11H12N4O2S	POSITIVE	3.25
Sulfamethizole	144-82-1	270.02	C9H10N4O2S2	POSITIVE	3.47
Sulfamethoxazole	723-46-6	253.05	C10H11N3O3S	POSITIVE	4.02
Sulfamethoxypyridazine	80-35-3	280.06	C11H12N4O3S	POSITIVE	3.80
Sulfapyridine	144-83-2	249.06	C11H11N3O2S	POSITIVE	3.14
Sulfaquinoxaline	59-40-5	300.07	C14H12N4O2S	POSITIVE	4.47
Sulfasalazine	599-79-1	398.07	C18H14N4O5S	POSITIVE	4.71
Sulfathiazole	72-14-0	255.01	C9H9N3O2S2	POSITIVE	3.06
Sulfinpyrazon	57-96-5	404.12	C23H20N2O3S	POSITIVE	5.61
Sulindac	38194-50-2	356.09	C20H17FO3S	POSITIVE	5.18
Sulpiride	15676-16-1	341.14	C15H23N3O4S	POSITIVE	2.71
Sultiame	61-56-3	290.04	C10H14N2O4S2	NEGATIVE	3.66
Sumatriptan	103628-46-2	295.14	C14H21N3O2S	POSITIVE	2.81
Suxibuzone	27470-51-5	438.18	C24H26N2O6	POSITIVE	6.20
Tacrine	321-64-2	198.12	C13H14N2	POSITIVE	3.30
Tadalafil	171596-29-5	389.14	C22H19N3O4	POSITIVE	5.23
Talinolol	57460-41-0	363.25	C20H33N3O3	POSITIVE	4.16
Tamoxifen	10540-29-1	371.22	C26H29NO	POSITIVE	6.04
Tapentadol	175591-23-8	221.18	C14H23NO	POSITIVE	3.54

Telmisartan	144701-48-4	514.24	C33H30N4O2	POSITIVE	5.21
Temazepam	846-50-4	300.07	C16H13CIN2O 2	POSITIVE	5.50
Terazosin	63590-64-7	387.19	C19H25N5O4	POSITIVE	3.43
Terbinafine	91161-71-6	291.20	C21H25N	POSITIVE	5.36
Terbutaline	23031-25-6	225.14	C12H19NO3	POSITIVE	2.80
Terbutylazine	5915-41-3	229.11	C9H16CIN5	POSITIVE	6.02
Terbutryn	886-50-0	241.14	C10H19N5S	POSITIVE	5.86
Terconazole	67915-31-5	531.18	C26H31 CI2N5O3	POSITIVE	4.99
Terfenadine	50679-08-8	471.31	C32H41NO2	POSITIVE	5.68
Tertalolol	34784-64-0	295.16	C16H25NO2S	POSITIVE	4.27
Testosterone benzoate	2088-71-3	392.24	C26H32O3	POSITIVE	8.40
Tetracaine	94-24-6	264.18	C15H24N2O2	POSITIVE	4.38
Tetramethrin	7696-12-0	331.18	C19H25NO4	POSITIVE	7.68
Tetrazepam	10379-14-3	288.10	C16H17CIN2O	POSITIVE	5.88
Tetroxoprim	53808-87-0	334.16	C16H22N4O4	POSITIVE	3.26
Tetryzolin	84-22-0	200.13	C13H16N2	POSITIVE	3.23
TFMPP	15532-75-9	230.10	C11H13F3N2	POSITIVE	3.96
THC	1972-08-3	314.22	C21H30O2	NEGATIVE	8.46
THC-COOH	64280-14-4	344.20	C21H28O4	NEGATIVE	7.25
THC-OH	36557-05-8	330.22	C21H30O3	NEGATIVE	7.23
Thebacon	466-90-0	341.16	C20H23NO4	POSITIVE	3.61
Thebaine	115-37-7	311.15	C19H21NO3	POSITIVE	3.63
Theobromine	83-67-0	180.06	C7H8N4O2	POSITIVE	2.59
Theophylline	58-55-9	180.06	C7H8N4O2	POSITIVE	2.71
Thiethylperazine	1420-55-9	399.18	C22H29N3S2	POSITIVE	5.42
Thioguanine	154-42-7	167.03	C5H5N5S	POSITIVE	1.26

Compound	CAS	Monoisotopic neutral mass	Formula	Polarity	RT [min]
Thiopropazate	84-06-0	445.16	C23H28CIN3O2 S	POSITIVE	5.24
Thiopropazine	316-81-4	446.18	C22H30N4O2 S2	POSITIVE	4.72
Thioridazine	50-52-2	370.15	C21H26N2S2	POSITIVE	5.37
Thymopentin	69558-55-0	679.37	C30H49N9O9	NEGATIVE	2.29
Tianeptine	66981-73-5	436.12	C21 H25CIN2O4S	POSITIVE	4.42
Tiapride	51012-32-9	328.15	C15H24N2O4 S	POSITIVE	2.83
Ticlopidine	55142-85-3	263.05	C14H14CINS	POSITIVE	3.92
Tiemonium	144-12-7	317.14	C18H23NO2S	POSITIVE	3.82
Tilidine	20380-58-9	273.17	C17H23NO2	POSITIVE	3.85

Timolol	26839-75-8	316.16	C13H24N4O3 S	POSITIVE	3.46
Tinidazole	19387-91-8	247.06	C8H13N3O4S	POSITIVE	3.33
Tiocarlide	910-86-1	400.22	C23H32N2O2 S	POSITIVE	8.04
Tizanidine	51322-75-9	253.02	C9H8CIN5S	POSITIVE	2.68
Tolazamide	1156-19-0	311.13	C14H21N3O3 S	POSITIVE	5.59
Tolazoline	59-98-3	160.10	C10H12N2	POSITIVE	2.50
Tolbutamide	64-77-7	270.10	C12H18N2O3 S	POSITIVE	5.43
Toliprolol	2933-94-0	223.16	C13H21NO2	POSITIVE	3.72
Tolmetin	26171-23-3	257.11	C15H15NO3	POSITIVE	5.45
Tolnaftate	2398-96-1	307.10	C19H17NOS	POSITIVE	7.63
Tolpropamine	5632-44-0	253.18	C18H23N	POSITIVE	4.67
Tolycaine	3686-58-6	278.16	C15H22N2O3	POSITIVE	3.29
Topotecan	123948-87-8	421.16	C23H23N3O5	POSITIVE	3.20
Torasemide	56211-40-6	348.13	C16H20N4O3 S	POSITIVE	4.29
Tramadol	27203-92-5	263.19	C16H25NO2	POSITIVE	3.55
Tranexamicacid	1197-18-8	157.11	C8H15NO2	POSITIVE	0.74
Trapidil	155-09-9	205.13	C10H15N5	POSITIVE	3.56
Trazodone	15421-84-8	371.15	C19H22CIN5O	POSITIVE	4.07
Triadimefon	43121-43-3	293.09	C14H16CIN3O 2	POSITIVE	6.27
Triamcinolone	124-94-7	394.18	C21H27FO6	POSITIVE	3.73
Triamterene	396-01-0	253.11	C12H11N7	POSITIVE	3.22
Triasulfuron	82097-50-5	401.06	C14H16CIN5O5 S	POSITIVE	5.10
Triazolam	28911-01-5	342.04	C17H12Cl2N4	POSITIVE	5.28
Trifluoperazine	117-89-5	407.16	C21H24F3N3S	POSITIVE	5.44
Trifluoperidol	749-13-3	409.17	C22H23F4NO 2	POSITIVE	4.81
Triflupromazine	146-54-3	352.12	C18H19F3N2S	POSITIVE	5.23
Trihexyphenidyl	144-11-6	301.24	C20H31 NO	POSITIVE	4.76
Trimethobenzamid	138-56-7	388.20	C21 H28N2O5	POSITIVE	3.71
Trimethoprim	738-70-5	290.14	C14H18N4O3	POSITIVE	3.14
Trimipramine	739-71-9	294.21	C20H26N2	POSITIVE	4.96
Triperiden isomere 2	14617-17-5	311.22	C21H29NO	POSITIVE	4.57
Tripolidine	486-12-4	278.18	C19H22N2	POSITIVE	4.05
Tritoqualine	14504-73-5	500.22	C26H32N2O8	POSITIVE	5.31
Tromantadine	53783-83-8	280.22	C16H28N2O2	POSITIVE	4.02
Tropisetron	89565-68-4	284.15	C17H20N2O2	POSITIVE	3.69
Trospium	10405-02-4	391.21	C25H29NO3	POSITIVE	4.32

Compound	CAS	Monoisotopic neutral mass	Formula	Polarity	RT [min]
Tryptamine	61-54-1	160.10	C10H12N2	POSITIVE	2.94
Tulobuterol	41570-61-0	227.11	C12H18ClNO	POSITIVE	3.56
Valacyclovir	124832-26-4	324.15	C13H20N6O4	POSITIVE	2.33
Valdecobix	181695-72-7	314.07	C16H14N2O3 S	POSITIVE	5.40
Vardenafil	224785-90-4	488.22	C23H32N6O4 S	POSITIVE	4.16
Venlafaxine	93413-69-5	277.20	C17H27NO2	POSITIVE	4.02
Verapamil	52-53-9	454.28	C27H38N2O4	POSITIVE	4.78
Viloxazine	46817-91-8	237.14	C13H19NO3	POSITIVE	3.71
Vincamine	1617-90-9	354.19	C21H26N2O3	POSITIVE	3.91
Warfarin	81-81-2	308.10	C19H16O4	POSITIVE	5.95
Win 55212-2	131543-22-1	426.19	C27H26N2O3	POSITIVE	6.69
Xipamide	14293-44-8	354.04	C15H15ClN2O4 S	POSITIVE	5.52
Xylometazoline	526-36-3	244.19	C16H24N2	POSITIVE	4.60
Yohimbin	146-48-5	354.19	C21H26N2O3	POSITIVE	3.73
Zaleplon	151319-34-5	305.13	C17H15N5O	POSITIVE	4.87
Ziprasidone	146939-27-7	412.11	C21 H21 ClN4OS	POSITIVE	4.31
Zolazepam	31352-82-6	286.12	C15H15FN4O	POSITIVE	3.29
Zolpidem	82626-48-0	307.17	C19H21N3O	POSITIVE	3.88
Zopiclone	43200-80-2	388.11	C17H17ClN6O 3	POSITIVE	3.39
Zuclopenthixol	53772-83-1	400.14	C22H25ClN2O S	POSITIVE	5.13

DOA Bruker Library

Compound	CAS	Monoisotopic neutral mass	Formula	Polarity	RT [min]
2-Amino-5-chloropyridine	1072-98-6	128.01	C5H5ClN2	POSITIVE	2.05
2-Hydroxyethylflurazepam	20971-53-3	332.07	C17H14ClFN2O 2	POSITIVE	10.11
3-Hydroxybromazepam	13132-73-5	331.00	C14H10BrN3O 2	POSITIVE	6.07
6-O-Acetylmorphine	2784-73-8	327.15	C19H21NO4	POSITIVE	3.56
7-Aminoflunitrazepam	34084-50-9	283.11	C16H14FN3O	POSITIVE	5.17
Alpha-	37115-43-8	324.08	C17H13ClN4O	POSITIVE	9.48

hydroxyalprazolam					
Alprazolam	28981-97-7	308.08	C17H13CN4	POSITIVE	10.18
Amobarbital	57-43-2	226.13	C11H18N2O3	NEGATIVE	8.88
Amphetamine	300-62-9	135.10	C9H13N	POSITIVE	3.49
Atomoxetine	83015-26-3	255.16	C17H21 NO	POSITIVE	9.00
Benzoylecgonine	519-09-5	289.13	C16H19NO4	POSITIVE	4.34
Benzylpiperazine	2759-28-6	176.13	C11H16N2	POSITIVE	2.05
Bromazepam	1812-30-2	315.00	C14H10BrN3O	POSITIVE	7.40
Buprenorphine	52485-79-7	467.30	C29H41NO4	POSITIVE	8.18
Butalbital	77-26-9	224.12	C11H16N2O3	NEGATIVE	7.28
Clobazam	22316-47-8	300.07	C16H13CIN2O 2	POSITIVE	10.78
Clonazepam	1622-61-3	315.04	C15H10CIN3O 3	POSITIVE	9.98
Cocaethylene	529-38-4	317.16	C18H23NO4	POSITIVE	6.13
Cocaine	50-36-2	303.15	C17H21NO4	POSITIVE	5.16
Codeine	76-57-3	299.15	C18H21NO3	POSITIVE	3.32
Creatinine	60-27-5	113.06	C4H7N3O	POSITIVE	0.50
D3-Clomipramine	136765-29-2	317.17	C19H20CIN2D 3	POSITIVE	10.42
D4-Haloperidol	136765-35-0	379.17	C21H19CID4FN O2	POSITIVE	8.33
D5-Diazepam	65854-76-4	289.10	C16H8CIN2OD 5	POSITIVE	11.43
Desalkylflurazepam	2886-65-9	288.05	C15H10CIFN2 O	POSITIVE	10.48
Diazepam	439-14-5	284.07	C16H13CIN2O	POSITIVE	11.48
Dihydrocodeine	125-28-0	301.17	C18H23NO3	POSITIVE	3.19
DOB	32156-26-6	273.04	C11H16BrNO2	POSITIVE	5.67
Ecgoninemethylester	7143-09-1	199.12	C10H17NO3	POSITIVE	0.60
EDDP	66729-78-0	277.18	C20H23N	POSITIVE	8.49
Ethylglucuronide	17685-04-0	222.07	C8H14O7	NEGATIVE	1.00
Fentanyl	437-38-7	336.22	C22H28N2O	POSITIVE	7.10
Flunitrazepam	1622-62-4	313.09	C16H12FN3O3	POSITIVE	10.48
Flurazepam	17617-23-1	387.15	C21 H23CIFN3O	POSITIVE	7.73
Heroin	561-27-3	369.16	C21H23NO5	POSITIVE	4.97
Hydrocodone	125-29-1	299.15	C18H21NO3	POSITIVE	3.78
Hydromorphone	466-99-9	285.14	C17H19NO3	POSITIVE	2.75
Ketamin	6740-88-1	237.09	C13H16CINO	POSITIVE	4.32

Compound	CAS	Monoisotopic neutral mass	Formula	Polarity	RT [min]
Lorazepam	846-49-1	320.01	C15H10Cl2N2O	POSITIVE	10.03

			2		
LSD	50-37-3	323.20	C20H25N3O	POSITIVE	5.68
MBDB	103818-46-8	207.13	C12H17NO2	POSITIVE	4.43
MDA	4764-17-4	179.09	C10H13NO2	POSITIVE	3.65
MDEA	82801-81-8	207.13	C12H17NO2	POSITIVE	4.17
MDMA	42542-10-9	193.11	C11H15NO2	POSITIVE	3.83
Mephedrone	1189805-46-6	177.12	C11H15NO	POSITIVE	4.12
Methadone	76-99-3	309.21	C21H27NO	POSITIVE	9.87
Methamphetamine	537-46-2	149.12	C10H15N	POSITIVE	3.73
Methaqualone	72-44-6	250.11	C16H14N2O	POSITIVE	9.96
Methylone	186028-79-5	207.09	C11H13NO3	POSITIVE	3.33
Midazolam	59467-70-8	325.08	C18H13ClFN3	POSITIVE	7.33
Morphin-3-beta-D-glucuronide	20290-09-9	461.17	C23H27NO9	POSITIVE	1.58
Morphine	57-27-2	285.14	C17H19NO3	POSITIVE	2.33
N-Desmethyflunitrazepam	2558-30-7	299.07	C15H10FN3O 3	POSITIVE	9.41
Nitrazepam	146-22-5	281.08	C15H11N3O3	POSITIVE	9.46
Norbuprenorphine	78715-23-8	413.26	C25H35NO4	POSITIVE	5.83
Norcocaine	18717-72-1	289.13	C16H19NO4	POSITIVE	5.34
Norcodeine	467-15-2	285.14	C17H19NO3	POSITIVE	3.14
Nordiazepam	1088-11-5	270.06	C15H11ClN2O	POSITIVE	10.33
Norfentanyl	1609-66-1	232.16	C14H20N2O	POSITIVE	4.37
Noroxycodone	57664-96-7	301.13	C17H19NO4	POSITIVE	3.53
Norpropoxyphene	66796-40-5	325.20	C21H27NO2	POSITIVE	9.59
Nortilidine	38677-94-0	259.16	C16H21NO2	POSITIVE	5.32
O-Desmethyltramadol	73986-53-5	249.17	C15H23NO2	POSITIVE	4.82
Oxazepam	604-75-1	286.05	C15H11 ClN2O2	POSITIVE	9.70
Oxycodone	76-42-6	315.15	C18H21NO4	POSITIVE	3.59
Oxymorphone	76-41-5	301.13	C17H19NO4	POSITIVE	2.54
Pentobarbital	76-74-4	226.13	C11H18N2O3	NEGATIVE	8.72
Pethidine	57-42-1	247.16	C15H21NO2	POSITIVE	5.42
Phencyclidine	77-10-1	243.20	C17H25N	POSITIVE	6.47
Phenobarbital	50-06-6	232.08	C12H12N2O3	NEGATIVE	6.20
Propoxyphene	469-62-5	339.22	C22H29NO2	POSITIVE	9.78
Psilocin	520-53-6	204.13	C12H16N2O	POSITIVE	3.00
Psilocybin	520-52-5	284.09	C12H17N2O4 P	POSITIVE	2.08
Ritalinicacid	19395-41 -6	219.13	C13H17NO2	POSITIVE	4.25
Secobarbital	76-73-3	238.13	C12H18N2O3	NEGATIVE	9.66
Sufentanil	56030-54-7	386.20	C22H30N2O2 S	POSITIVE	9.17
Temazepam	846-50-4	300.07	C16H13ClN2O 2	POSITIVE	10.70

Tetrazepam	10379-14-3	288.10	C16H17ClN2O	POSITIVE	11.03
THC	1972-08-3	314.22	C21 H30O2	NEGATIVE	15.42
THC-COOH	64280-14-4	344.20	C21 H28O4	NEGATIVE	14.23
THC-OH	36557-05-8	330.22	C21 H30O3	NEGATIVE	14.17
Tilidine	20380-58-9	273.17	C17H23NO2	POSITIVE	5.46

Compound	CAS	Monoisotopic neutral mass	Formula	Polarity	RT [min]
Tramadol	27203-92-5	263.19	C16H25NO2	POSITIVE	4.78
Zaleplon	151319-34-5	305.13	C17H15N5O	POSITIVE	8.91
Zolpidem	82626-48-0	307.17	C19H21N3O	POSITIVE	5.48
Zopiclone	43200-80-2	388.11	C17H17ClN6O 3	POSITIVE	4.67

Appendix A — New compounds in the Toxtyper 1.1 Library

Compound	CAS	Monoisotopic neutral mass	Formula	Polarity	RT [min]
2-Amino-5-chloropyridine	1072-98-6	128.01	C5H5ClN2	POSITIVE	1.71
3-Hydroxybromazepam	13132-73-5	331.00	C14H10BrN3O2	POSITIVE	4.09
4-Acetylaminoantipyrine	83-15-8	245.12	C13H15N3O2	POSITIVE	3.15
4-Formylaminoantipyrine	1672-58-8	231.10	C12H13N3O2	POSITIVE	3.14
4-Methylaminoantipyrine	519-98-2	217.12	C12H15N3O	POSITIVE	2.68
Agomelatine	138112-76-2	243.13	C15H17NO2	POSITIVE	5.09
AM-2201 N-(4-hydroxypentyl) metabolite	1427521-34-3	375.16	C24H22FNO2	POSITIVE	6.17
Aminoantipyrine	83-07-8	203.11	C11H13N3O	POSITIVE	2.80
Atomoxetine	83015-26-3	255.16	C17H21 NO	POSITIVE	4.45
Bamethane	3703-79-5	209.14	C12H19NO2	POSITIVE	2.80
Bumadizone	3583-64-0	326.16	C19H22N2O3	POSITIVE	6.15
Butalbital	77-26-9	224.12	C11H16N2O3	NEGATIVE	4.46
Butaperazine	653-03-2	409.22	C24H31 N3OS	POSITIVE	5.16
Chloramphenicol	56-75-7	322.01	C11H12Cl2N2O5	NEGATIVE	4.42
Creatinine	60-27-5	113.06	C4H7N3O	POSITIVE	0.53
D5-JWH-073-N-(3-hydroxybutyl) metabolite	1413427-47-0	348.19	C23H16D5NO2	POSITIVE	6.15

Digitoxigenin	143-62-4	374.25	C23H34O4	POSITIVE	5.35
Digoxin	20830-75-5	780.43	C41H64O14	POSITIVE	4.06
Dimethacrine	4757-55-5	294.21	C20H26N2	POSITIVE	4.91
DOB	32156-26-6	273.04	C11H16BrNO2	POSITIVE	3.79
Ethylglucuronide	17685-04-0	222.07	C8H14O7	NEGATIVE	1.00
Etizolam	40054-69-1	342.07	C17H15ClN4S	POSITIVE	5.38
Furosemide	54-31-9	330.01	C12H11ClN2O5S	NEGATIVE	4.68
Gliclazide	21187-98-4	323.13	C15H21N3O3S	POSITIVE	5.70
Homofenazine	3833-99-6	451.19	C23H28F3N3O3S	POSITIVE	4.57
JWH-018-N-(4-hydroxypentyl) metabolite	1320363-47-0	357.17	C24H23NO2	POSITIVE	6.26
JWH-019-(5-hydroxyindol) metabolite	1379604-70-2	371.19	C25H25NO2	POSITIVE	7.21
JWH-073-N-(3-hydroxybutyl) metabolite	1320363-48-1	343.16	C23H21NO2	POSITIVE	6.17
JWH-081-N-(5-hydroxypentyl) metabolite	1427325-66-3	387.18	C25H25NO3	POSITIVE	6.36
JWH-122-N-(4-hydroxypentyl) metabolite		371.19	C25H25NO2	POSITIVE	6.54
JWH-200-4-hydroxyindole metabolite	1427325-73-2	400.18	C25H24N2O3	POSITIVE	5.30
JWH-210-N-(4-hydroxypentyl) metabolite	1427521-37-6	385.20	C26H27NO2	POSITIVE	6.80
JWH-250- N -(4- hydroxypentyl) metabolite	1427521-38-7	351.18	C22H25NO3	POSITIVE	5.89
JWH-398- N-(5- hydroxypentyl) metabolite	1379604-69-9	391.13	C24H22ClNO2	POSITIVE	6.77
Lofepamine	23047-25-8	420.17	C26H27ClNO2	POSITIVE	5.56

Compound	CAS	Monoisotopic neutral mass	Formula	Polarity	RT [min]
Metamizole	50567-35-6	311.09	C13H17N3O4S	NEGATIVE	3.41
Methsuximide	77-41-8	203.09	C12H13NO2	POSITIVE	5.05
Methylone	186028-79-5	207.09	C11H13NO3	POSITIVE	2.80
N-Desmethyloanzapine	161696-76-0	298.13	C16H18N4S	POSITIVE	2.76
Norbuprenorphine	78715-23-8	413.26	C25H35NO4	POSITIVE	3.87
Norfentanyl	1609-66-1	232.16	C14H20N2O	POSITIVE	3.27
Norfluoxetine	83891-03-6	295.12	C16H16F3NO	POSITIVE	4.71
Noroxycodone	57664-96-7	301.13	C17H19NO4	POSITIVE	2.97
Norpropoxyphene	66796-40-5	325.20	C21H27NO2	POSITIVE	4.62
Norsertaline	87857-41-8	275.04	C16H13Cl2	POSITIVE	4.75
Ouabain	630-60-4	584.28	C29H44O12	POSITIVE	3.48

Pentetrazole	54-95-5	138.09	C6H10N4	POSITIVE	3.38
Pentobarbital	76-74-4	226.13	C11H18N2O3	NEGATIVE	4.77
Phencyclidine	77-10-1	243.20	C17H25N	POSITIVE	4.04
Phenobarbital	50-06-6	232.08	C12H12N2O3	NEGATIVE	4.17
p-Methylthioamphetamine	14116-06-4	181.09	C10H15NS	POSITIVE	3.46
Propoxyphene	469-62-5	339.22	C22H29NO2	POSITIVE	4.69
Psilocin	520-53-6	204.13	C12H16N2O	POSITIVE	2.60
Psilocybin	520-52-5	284.09	C12H17N2O4P	POSITIVE	2.01
RCS-4 N-(4-hydroxypentyl) metabolite	1448893-03-5	337.17	C21H23NO3	POSITIVE	5.71
Ritalinic acid	19395-41-6	219.13	C13H17NO2	POSITIVE	3.21
Secobarbital	76-73-3	238.13	C12H18N2O3	NEGATIVE	4.99
Strychnin	57-24-9	334.17	C21H22N2O2	POSITIVE	3.14
Tapentadol	175591-23-8	221.18	C14H23NO	POSITIVE	3.54
Terbutaline	23031-25-6	225.14	C12H19NO3	POSITIVE	2.80
Thebaine	115-37-7	311.15	C19H21NO3	POSITIVE	3.63
Tianeptine	66981-73-5	436.12	C21H25ClN2O4S	POSITIVE	4.42
Viloxazine	46817-91-8	237.14	C13H19NO3	POSITIVE	3.71

Приложение 4.

Библиотека мс-мс-спектров высокого разрешения SUDMED_lc-ms-ms v.1.1

адрес постоянного размещения пакета <http://www.sudmed.ru/index.php?showtopic=6924>

Состав пакета: файл SUDMED_lc-ms-ms.cdb - база данных масс-спектров соударений высокого разрешения в формате ПО MassHunter, включающая информацию о веществах и их структурах.

Библиотека включает спектры метаболитов, нативных веществ "дизайнерских наркотиков" наиболее часто встречающихся в практике химико-токсикологической лаборатории

В библиотеку вошли спектры опубликованные, в научных публикациях, а также спектры проверенные с помощью базы данных Broecker, Herre, and Pragst master forensic and toxicology accurate mass compound database with accurate mass MS/MS spectra.

Для проведения исследований использовался жидкостный хроматограф Agilent 1200 (Agilent, США) соединенный с масс-спектрометрическим квадруполь-времяпролетным детектором Agilent 6540 (Agilent, США) с электрораспылительной ионизацией (ЭРИ) в режиме регистрации положительных ионов, под управлением ПО Mass Hunter 6.0 в следующих

условиях: температура источника ионизации – 350 °С, напряжение на источнике ионизации – 3.5 кВ, напряжение на фрагментаторе – 100 В, напряжение на скиммере – 65 В, давление газа на распылителе – 20 psig, расход газа-осушителя 8 л/мин, расход оболочного газа 8 л/мин, регистрация ионов в режиме сканирования полного ионного тока в диапазоне 100–500 Да и регистрацией ионов-продуктов в диапазоне 50–500 Да. Газ-мишень – азот, давления газа-мишени в ячейке соударений – 20.5 psi, энергия соударений 20 эВ. Режим работы детектора – высокое разрешение (40000 FWHM при m/z 622), скорость сканирования – 5 спектров/сек. Прибор работал в режиме auto-ms, когда из первичного спектра высокого разрешения выбирались 5 наиболее интенсивных ионов и подвергались фрагментации в камере соударений при энергии 20эВ.

Разделение осуществлялось с использованием колонки Poroshell 120 EC-C18 (2.1 × 75мм, 1.8 мкм). Температура термостата колонок – 45 °С.

Для всех соединений тип ионизации – положительный электроспрей

Название соединения	формула	Точная моноизотопная масса
tmcp-018-TMCP-018(alken)-COOH	C21H27NO3	341.19909
AB-PIN-F-ACID	C18H24FN3O3	349.18017
1-(4-fluorobenzyl)-1H-indole-3-carboxylic acid	C16H12FNO2	269.08521
AB-PINACA-CHM-COOH	C20H27N3O3	357.20524
Quinolin-8-ol	C9H7NO	145.05276
AB-PINACA-CHM-COOH (MonoHydroxyIndazol)	C20H27N3O4	373.20016
AB-PINACA-CHM-COOH (MonoHydroxycyclohexyll)	C20H27N3O4	373.20016
AB-PINACA-CHM-COOH (second_hydr)	C15H18N2O2	258.13683
PB-22-F(ACID)	C14H16FNO2	249.11651
JWH-018(indazol)-C2COOH	C21H16N2O3	344.11609
JWH-018(indazo,HO-naphtl)-C2COOH	C21H16N2O4	360.11101
JWH-018(indazol)-C4COOH	C23H20N2O3	372.14739
JWH-018(indazol)-glyc	C24H20N2O7	448.12705
5-F-ADB-PINACA-COOH	C19H26FN3O3	363.19582
THC-COOH / 11-Nor-9-Carboxy-tetrahydrocannabinol	C21H28O4	344.19876
Indometacin	C19H16ClNO4	357.07679
8-Hydroxyquinolin (8-Hydroxyquinoline)	C9H7NO	145.05276
Morphine-3-beta-D-glucuronide	C23H27NO9	461.1685814694
Morphine-6-beta-D-glucuronide	C23H27NO9	461.16858
3-monoacetyl-morphine	C19H21NO4	327.14706
6-Acetylmorphine	C19H21NO4	327.14706
Morphine	C17H19NO3	285.13649
Desomorphine	C17H21NO2	271.1572289219
α-PVP / α-Pyrrolidinopentiophenone	C15H21NO	231.16231
MDPV / Methylenedioxypropylvalerone	C16H21NO3	275.15214
JWH-018-5-COOH	C24H21NO3	371.15214
JWH-018-5-OH	C24H23NO2	357.17288
JWH-018-C2-COOH	C22H17NO3	343.12084

AB-PINACA-M1	C18H25N3O3	331.18959
1-pentyl-1H-indazole-3-carboxylic acid	C13H16N2O2	232.12118
AB-FUBINACA-M1	C20H20FN3O3	369.14887
MMB-2201-COOH (2-((1-(5-fluoropentyl)-1H-indol-3-yl)carbonyl)amino)-3-methylbutanoic acid)	C19H25FN2O3	348.18492
Codeine	C18H21NO3	299.15214
4-MEC / 4-Methylethcathinone	C12H17NO	191.13101
Caffeine	C8H10N4O2	194.0803755932
MDMB-CHM-COOH	C22H30N2O3	370.22564
Alfentanil	C21H32N6O3	416.25359
Lofentanil	C25H32N2O3	408.24129
Carfentanil	C24H30N2O3	394.22564
Sufentanil	C22H30N2O2S	386.2028
Remifentanil	C20H28N2O5	376.19982
4'-Methoxy fentanyl	C23H30N2O2	366.23073
N-Isobutanoyl 4'-fluoro fentanyl	C22H27FN2O	354.21074
p-F-fentanyl (Fluorofentanyl)	C22H27FN2O	354.21074
4'-Methyl fentanyl	C23H30N2O	350.23581
Methyl-3-fentanyl	C23H30N2O	350.23581
α-Methylfentanyl	C23H30N2O	350.23581
Fentanyl	C22H28N2O	336.22016
Norsufentanil	C16H24N2O2	276.18378
Norfentanyl	C14H20N2O	232.1575632751
Morphine-3-beta-D-glucuronide	C23H27NO9	461.1685814694
Morphine-6-beta-D-glucuronide	C23H27NO9	461.16858
Desomorphine	C17H21NO2	271.1572289219
6-Acetylmorphine	C19H21NO4	327.14706
3-monoacetyl-morphine	C19H21NO4	327.14706
Tramadol	C16H25NO2	263.18853
N-Desmethyltramadol	C15H23NO2	249.17288
Amitriptyline	C20H23N	277.18305
oxo-PVP	C15H19NO2	245.14158
Carbamazepine	C15H12N2O	236.09496
Carbamazepine 10,11-epoxide	C15H12N2O2	252.0898776422
MDMB(N)-CHM-COOH	C21H29N3O3	371.22089
AB-PINACA-CHM-COOH (MonoHydroxycyclohexyl-1)	C20H27N3O4	373.20016
DXM / Dextromethorphan (Methorphan)	C18H25NO	271.19361
Tropicamide	C17H20N2O2	284.15248
Trimethoprim	C14H18N4O3	290.13789
Noscapine	C22H23NO7	413.14745
Haloperidol	C21H23ClFNO2	375.14013
Loperamide	C29H33ClN2O2	476.22306
Fenazepam-Hydrolysis	C13H10BrClNO	309.96343
phenobarbital	C12H12N2O3	232.08479
Muscarine	C9H20NO2	174.1494
Papaverine	C20H21NO4	339.14706
tmcp-018-5-COOH	C21H27NO3	341.19909
Acetylcodeine	C20H23NO4	341.16271
2-Methylamino-5-chlorobenzophenone (Diazepam HY)	C14H12ClNO	245.0607417225
MDMB-CHM-COOH-mono-hydroxy	C22H30N2O4	386.22056
APINACA-mono-hydroxy metabolit	C23H31N3O2	381.24163
APICA-mono-hydroxy metabolit	C24H32N2O2	380.24638
MDMB(N)-Bz-F-COOH	C21H23FN3O3	384.17234
MDMB(N)-Bz-F-COOH(mono-OH)	C21H23FN3O4	400.16726

4-FA / 4-Fluoroamphetamine	C9H12FN	153.09538
PB-22-acid	C14H17NO2	231.12593
THC-COOH-glucuronid / 11-Nor-9-Carboxy-tetrahydrocannabinol	C27H36O10	520.23085