

	compound name	survey precursor ion	survey fragment ion	CE	t _R
1	3-Methylfentanyl	351,2	105,1	50	*
2	6-O-Monoacetylmorphine	328,2	165,2	50	3,33
3	7-Aminoflunitrazepam	284,1	135,1	35	3,12
4	9-Hydroxyrisperidone	427,2	207,2	35	5,79
5	Acebutolol	337,2	116,1	35	*
6	Aceprometazine	327,2	86,1	35	7,40
7	Acrivastine	349,2	278,2	20	*
8	Ajmaline	327,2	144,2	50	5,44
9	Alimemazine	299,2	100,1	20	*
10	Alprazolam	309,1	281,2	35	4,24
11	Alprenolol	250,2	116,1	20	6,77
12	Amantadine	152,1	135,1	20	3,51
13	Amiloride	230,1	171,1	20	2,03
14	Aminophenazone	232,1	113,1	20	2,56
15	Aminopromazine	328,2	212,2	20	9,29
16	Amiodarone	646	58	50	11,30
17	Amiphenazole	192,1	117,1	35	2,77
18	Amisulpride	370,2	242,1	35	*
19	Amitriptylin	278,2	233,2	20	6,87
20	Amitriptylinoxide	294,2	233,2	20	*
21	Amlodipine	409,2	238,3	20	*
22	Amphetamine	136,1	91	20	3,37
23	Apomorphine	268,1	191,2	35	3,91
24	Aprindine	323,2	86,1	50	10,10
25	Astemizole	459,3	135,1	50	*
26	Atenolol	267,2	145,1	35	1,93
27	Atropine	290,2	124,1	35	3,02
28	Baclofen	214,1	151,1	20	*
29	Befunolol	292,2	250,2	20	4,84
30	Benperidol	382,2	165,1	35	*
31	Benzatropine	308,2	167,2	35	8,49
32	Benzocaine	166,1	138,1	20	3,44
33	Benzoctamine	250,2	191,2	35	6,66
34	Benzoylcegonine	290,1	168,2	20	3,02
35	Betaxolol	308,2	116,1	35	6,38
36	Biperiden	312,2	98,1	35	8,31
37	Bisoprolol	326,2	116,1	20	5,65
38	Bornaprine	330,2	171,2	35	*
39	Bromazepam	316	182,2	50	3,19
40	Bromocriptine	655	301	50	7,41
41	Bromperidol	420,1	165,1	35	*
42	Brompheniramine	319,1	274,1	20	6,98
43	Brotizolam	393	314,1	35	*
44	Brucine	395,2	244,1	50	*
45	Bunitrolol	249,2	193,2	20	4,88
46	Bupivacaine	289,2	140,2	35	7,19
47	Bupranolol	272,1	216,1	20	7,01
48	Buprenorphine	468,3	396,3	50	7,61
49	Buspirone	386,3	122,1	50	6,21

50	Butaperazine	410,2	141,2	35	9,68
51	Caffeine	195,1	138,1	20	1,54
52	Candesartan	441,2	263,2	20	*
53	Captopril	218,1	70	35	*
54	Carazolol	299,2	116,1	35	6,07
55	Carbamazepine	237,1	194,2	20	3,51
56	Carbimazol	187,1	115	20	*
57	Carbinoxamine	291,1	167,2	50	6,80
58	Carbuterol	268,2	134,1	35	1,86
59	Carisoprodol	261,2	62	35	*
60	Carteolol	293,2	237,2	20	3,05
61	Carvedilol	407,2	224,3	20	7,65
62	Celiprolol	380,3	251,2	35	5,02
63	Cetirizine	389,2	201,1	20	6,84
64	Chlorbenzoxamine	435,2	201,2	20	*
65	Chlorcyclizine	301,1	201,1	20	8,31
66	Chlordiazepoxide	300,1	282,2	35	4,84
67	Chloroquine	320,2	247,2	20	*
68	Chlorphenethiazine	305,1	72,1	35	8,38
69	Chlorpheniramine	275,1	230,2	20	6,84
70	Chlorpromazine	319,1	86,1	35	8,91
71	Chlorprothixene	316,1	231,1	35	9,08
72	Cilazapril	419	211,2	20	7,19
73	Cinnarizine	369,2	167,1	20	10,10
74	Citalopram	325,2	109,1	50	7,58
75	Clemastine	344,2	215,1	20	9,75
76	Clenbuterol	277,1	203,1	20	5,40
77	Clobazam	301,1	259,2	20	4,42
78	Clobutinol	256,1	58	35	7,30
79	Clomethiazole	162	113	35	3,19
80	Clomipramine	315,2	86,1	35	9,15
81	Clonazepam	316	270,2	35	4,17
82	Clonidine	230	213,1	35	3,79
83	Clopenthixol	401,1	231	50	*
84	Clotiapine	344,1	287	35	*
85	Clotiazepam	319,1	291,1	35	*
86	Clozapine	327,1	270,1	35	7,44
87	Cocaine	304,2	182,2	20	6,21
88	Codeine	300,2	165,2	50	2,80
89	Coniine	128,1	69,1	20	*
90	Cotinine	177,1	80	35	*
91	Coumatetralyl	293,1	175,1	35	5,47
92	Crotetamide	227,2	86,1	20	*
93	Cyamemazine	324,2	100,1	35	*
94	Cyclizine	267,2	167,1	20	7,33
95	Cyclobenzaprine	276,2	215,1	50	*
96	D3-Doxepin	283	107,1	35	7,61
97	D5-Diazepam	290	154,1	35	4,84
98	Delorazepam	305	140,1	35	*
99	Desmethylclomipramine	301,1	72,1	35	3,61
100	Dextropropoxyphene	340,2	58	35	6,10
101	Diazepam	285,1	154,2	35	4,84

102	Dibenzepin	296,2	251,2	20	*
103	Dihydrocodeine	302,2	199,2	35	2,70
104	Dihydroergotamine	584,3	270,2	35	6,28
105	Dilazep	605,3	195,1	50	10,30
106	Diltiazem	415,2	178,2	20	7,16
107	Dimetacrine	295,2	86,1	35	*
108	Diphenhydramine	256,2	167,1	20	7,54
109	Dipyridamole	505,3	429,2	50	5,68
110	Disopyramide	340,2	239,2	20	6,03
111	Dixyrazine	428,2	229,4	20	8,66
112	Dobutamine	302,2	137,1	35	*
113	Dosulepin	296,1	223,1	35	*
114	Doxapram	379,2	292,2	35	6,07
115	Doxepin	280,2	107,1	35	7,61
116	Drofenine	318,2	91,1	50	*
117	Ecgoninemethylester	200,1	182,2	20	0,98
118	EDDP	278,2	234,2	35	*
119	Embutramide	294,2	121,1	35	3,96
120	Enalapril	377,2	234,2	20	5,96
121	Enoximone	249,1	125,1	20	*
122	Ephedrine	166,1	148,1	20	2,88
123	Eprosartan	425,2	135,1	50	5,68
124	Esmolol	296,2	145,1	35	5,26
125	Estazolam	295,1	205,2	50	3,89
126	Etafenone	326,2	100,1	35	*
127	Etamivan	224,1	151,1	20	*
128	Ethenzamide	166,1	121	20	2,84
129	Ethylparathion	292	236,1	20	*
130	Etidocaine	277,2	128,1	20	*
131	Etilefrine	182,1	164,1	20	*
132	Etofilline	225,1	181,1	20	*
133	Etomidate	245,1	95,1	35	*
134	Felodipine	384,1	338	20	7,51
135	Fendiline	316,2	105,1	35	9,19
136	Fenetylline	342,2	91	50	4,70
137	Fenfluramine	232,1	159,1	35	7,23
138	Fentanyl	337,2	105,1	50	7,51
139	Fexofenadine	502,3	466,2	35	7,44
140	Flecainide	415,1	398,4	20	8,00
141	Fluanisone	357,2	165,2	35	*
142	Fluconazole	307,1	220,2	20	2,35
143	Flunitrazepam	314,1	268,2	35	4,52
144	Fluoxetine	310,1	91,1	50	9,05
145	Flupentixol	435,2	305	35	*
146	Fluphenazine	438,2	171,2	35	9,47
147	Flupirtine	305,1	196,2	20	*
148	Flurazepam	388,2	315,1	35	7,12
149	Fluspirilene	476,3	98,1	50	*
150	Fluvoxamine	319,2	71	20	7,93
151	Gabapentin	172,1	154,2	20	2,49
152	Galantamine	288,2	213,2	35	*

153	Gallopamil	485,3	165,1	35	8,66
154	Glibenclamide	494,2	169,1	50	5,65
155	Glibornuride	367,2	170,2	20	5,09
156	Gliclazide	324,1	91,1	50	*
157	Glimepiride	491,2	352,1	20	5,58
158	Glipizide	446,2	321,1	20	4,31
159	Gliquidone	528,2	403,1	20	6,17
160	Haloperidol	376,1	165,1	35	8,10
161	Heptaminol	146,2	128,1	20	*
162	Heroin	370,2	165	50	5,05
163	Homofenazine	452,2	185,2	35	*
164	Hydroxychloroquine	336,2	247,2	35	*
165	Hydroxyzine	375,2	201,1	20	7,75
166	Imipramine	281,2	86,1	20	8,28
167	Indomethacin	358,1	139,1	20	*
168	Irbesartan	429,2	207,1	35	6,63
169	Isoniazide	138,1	121	20	*
170	Isoprenaline	212,1	194,2	20	*
171	Isradipine	372,2	312,2	20	*
172	Ketamine	238,1	125	35	4,21
173	Ketazolam	369,1	285,2	20	*
174	Ketoprofen	255,1	209,2	20	4,52
175	Ketorolac	256,1	105,1	35	3,93
176	Labetalol	329,2	91	50	*
177	Lacidipine	456,2	310,2	20	*
178	Lamotrigine	256	211,1	35	4,42
179	Lercarnidipine	612,3	280,3	35	10,50
180	Levobunolol	292,2	236,2	20	*
181	Levocabastine	421,2	70	50	7,82
182	Levodopa	198,1	152,1	20	*
183	Levomepromazine	329,2	100,1	35	8,63
184	Lidocaine	235,2	86,1	20	4,88
185	Lisinopril	406,2	84,1	50	2,98
186	Lobeline	338,2	96,1	50	*
187	Lofepramine	419,2	224,2	20	*
188	Lonazolac	313,1	267,1	35	*
189	Loperamide	477,2	266,4	20	9,89
190	Loratadine	383,2	337,2	35	7,51
191	Lorazepam	321	275,1	35	3,82
192	Losartan	423,2	207,2	35	4,63
193	Loxapine	328,1	271,1	35	*
194	Lysergide	324,2	223,2	35	5,93
195	Maprotilin	278,2	191,1	50	7,96
196	MDA (3,4 Methylendioxyamphetamine)	180,1	163,1	20	3,58
197	MDE(3,4 Methylendioxyethamphetamine)	208,1	163,2	20	4,63
198	MDMA(3,4-Methylendioxymethamphetamine)	194,1	163,1	20	4,07
199	Meclizine	391,2	201,1	20	10,60
200	Mecloxacine	318,2	215,1	20	*
201	Medazepam	271,1	91	50	7,47
202	Mefexamide	281,2	208,2	20	*
203	Melitracen	292,2	217,2	50	*

204	Meloxicam	352	115	35	4,66
205	Melperone	264,2	165,2	20	7,30
206	Mepindolol	263,2	116,1	20	4,81
207	Meprobamate	219,1	97,1	20	*
208	Mescaline	212,1	195,2	20	9,19
209	Mesoridazine	387,2	98,1	50	6,24
210	Metaclazepam	395	241,2	50	8,17
211	Metamfepramone	178,1	105,1	35	3,51
212	Metamphetamine	150,1	91	20	3,89
213	Metformin	130,1	71	35	0,95
214	Methadone	310,2	265,2	20	9,05
215	Methaqualone	251,1	91,1	50	*
216	Methocarbamol	242,1	118,1	20	*
217	Methyldopa	212,1	166,2	20	*
218	Methylphenidate	234,1	84,1	20	5,30
219	Metipranolol	310,2	135,1	50	9,08
220	Metoclopramide	300,1	227,2	20	*
221	Metofenazate	598,2	195,1	50	*
222	Metoprolol	268,2	133,1	35	4,70
223	Metronidazole	172,1	128	20	1,30
224	Mexiletine	180,1	58	20	5,26
225	Mianserin	265,2	208,2	20	7,23
226	Miconazole	417	159,1	50	10,20
227	Midazolam	326,1	291,2	35	6,59
228	Midodrine	255,1	180,2	20	2,49
229	Minoxidil	210,1	164,2	35	3,72
230	Mirtazapine	266,2	195,2	35	5,47
231	Mizolastine	433,2	308,2	35	7,08
232	Moclobemide	269,1	182,1	20	4,21
233	Modafinil	274,1	167,2	20	*
234	Molindone	277,2	100,1	35	*
235	Molsidomine	243,1	86,1	20	*
236	Moperone	356,2	123,1	50	*
237	Morazone	378,2	201,2	20	*
238	Morphine	286,1	165,2	50	1,75
239	Morphine-3-B-D-Glucuronide	462,2	286,2	35	0,81
240	Morphine-6-B-D-Glucuronide	462,2	286,2	35	
241	Naloxone	328,2	310,2	20	2,77
242	Naltrexone	342,2	324,2	20	*
243	Nebivolol	406,2	151,1	35	*
244	Nefazodone	470,2	274,2	35	*
245	Nicardipine	480,2	315,1	35	8,17
246	Nicotine	163,1	130,1	20	1,44
247	Nifedipine	347,1	254,2	20	4,21
248	Nifenazone	309,1	106,1	35	2,21
249	Nimodipine	419,2	343,1	20	5,72
250	Nisoldipine	389,2	239,1	20	6,17
251	Nitrazepam	282,1	236,2	35	4,03
252	Nitrendipine	361,1	315,1	20	3,61
253	Nomifensine	239,2	196,2	20	*
254	Norbuprenorphine	414,3	101,1	50	5,51

255	Norephedrine	152,1	134,1	20	*
256	Norfefrine	154,1	91,1	35	5,30
257	Nortriptyline	264,2	233,2	20	8,00
258	Noscapine	414,2	220,2	35	6,10
259	Obidoxime	144,1	79,1	35	*
260	Octopamine	154,1	91,1	35	*
261	Olanzapine	313,1	256,2	35	10,10
262	Ondansetron	294,2	170,2	35	5,68
263	Opi Pramol	364,2	171,2	35	*
264	Orciprenaline	212,1	194,2	20	*
265	Orphenadrine	270,2	181,2	20	8,10
266	Oxazepam	287,1	241,2	35	3,72
267	Oxcarbazepine	253,1	180,2	50	3,09
268	Oxedrine	168,1	150,1	20	*
269	Oxetacaine	468,3	145,2	35	10,30
270	Oxilofrine	182,1	164,1	20	*
271	Oxitropium	333,2	167,2	35	4,00
272	Oxprenolol	266,2	116,1	20	5,86
273	Oxybuprocaine	309,2	192,2	20	*
274	Oxycodone	316,2	298,2	20	3,26
275	Oxymorphone	302,1	284,1	20	*
276	Oxyperine	380,2	175,2	20	*
277	Papaverine	340,2	202,2	35	6,07
278	Paracetamol	152,1	110,1	20	0,98
279	Paroxetine	330,2	69,9	50	7,65
280	Penbutolol	292,2	236,3	20	*
281	Penfluridol	524,2	109	50	*
282	Pentoxiverine	334,2	100,1	35	8,70
283	Perazine	340,2	141,2	20	8,80
284	Periciazine	366,2	142,2	35	*
285	Perindopril	369,2	172,2	20	*
286	Perphenazine	404,2	171,2	35	8,80
287	Pethidine	248,2	220,3	20	*
288	Phenazone	189,1	77,1	50	2,24
289	Phencyclidine	244,2	91,1	50	7,58
290	Phenothiazine	200,1	168,1	35	*
291	Phentolamine	282,2	212,2	20	*
292	Phenylbutazone	309,2	160,1	20	*
293	Phenylephrine	168,1	150,1	20	3,02
294	Phenylpropanolamine	152,1	134,1	20	*
295	Phenyltoloxamine	256,2	72	35	7,82
296	Phenytoin	253,1	182,2	20	*
297	Pholedrine	166,1	107,1	35	*
298	Physostigmine	276,2	162,2	20	3,54
299	Pilocarpine	209,1	95,1	50	2,53
300	Pimozide	462,2	328,2	35	*
301	Pindolol	249,2	116,1	20	4,07
302	Pioglitazone	357,1	134,2	35	5,54
303	Pipamperone	376,2	165,2	35	*
304	Pirbuterol	241,2	122,1	35	2,03
305	Pirenzepine	352,2	113,1	35	2,70
306	Piroxycam	332,1	95,1	50	3,96

307	Practolol	267,2	190,2	20	*
308	Prajmalium	370,3	328,3	35	7,68
309	Prazepam	325,1	271,2	35	5,58
310	Prazosin	384,2	247,2	35	4,84
311	Prilocaine	221,2	86,1	20	*
312	Primidone	219,1	91	50	1,93
313	Procainamide	236,2	163,2	20	2,24
314	Procaine	237,2	100,1	20	*
315	Prochlorperazine	374,1	141,3	35	*
316	Procyclidine	288,2	84,1	35	*
317	Promazine	285,1	86,1	20	7,93
318	Promethazine	285,1	86,1	35	*
319	Prometryn	242,1	200,2	20	6,28
320	Propafenone	342,2	116,1	35	8,00
321	Propionylpromazine	341,2	86,1	35	8,31
322	Propranolol	260,2	183,2	20	6,73
323	Propyphenazone	231,1	189,2	20	3,82
324	Prothipendyl	286,1	241,2	20	7,26
325	Protriptyline	264,2	191,2	35	7,79
326	Pseudoephedrine	166,1	148,1	20	2,88
327	Pyritinol	369,1	153,1	35	*
328	Quetiapine	384,2	253,2	35	6,77
329	Quinapril	439,2	234,2	20	7,44
330	Quinine	325,2	79	50	7,23
331	Ramifenazone	246,2	56	35	*
332	Ramipril	417,2	234,4	20	6,98
333	Ranitidine	315,1	176,1	20	2,63
334	Reboxetine	314,2	176,1	20	*
335	Remoxipride	371,1	243	35	*
336	Repaglinide	453,3	230,2	35	8,07
337	Reproterol	390,2	221,2	35	*
338	Reserpine	609,3	195,1	50	8,92
339	Risperidone	411,2	191,2	35	7,37
340	Rocuronium	530,4	487,3	35	*
341	Ropivacaine	275,2	126,1	35	6,28
342	Rosiglitazon	358,1	135,1	35	5,02
343	Scopolamine	304,2	138,2	35	3,19
344	Serotonin	177,1	160,1	20	6,66
345	Sertindole	441,2	113	50	8,84
346	Sertraline	306,1	159	35	8,73
347	Sibutramin	280,2	125	35	*
348	Sildenafil	475,2	58	50	5,96
349	Sotalol	273,1	133,1	35	2,49
350	Sulindac	357,1	233,2	50	4,35
351	Sulpiride	342,1	112,2	35	2,81
352	Talinolol	364,3	308,2	20	5,65
353	Telmisartan	515,2	497,3	50	8,73
354	Temazepam	301,1	255,2	20	4,21
355	Tenoxicam	338	95,1	50	*
356	Terfenadine	472,3	436,3	35	9,68
357	Tertalolol	296,2	240,2	20	*

358	Tetracaine	265,2	176,2	20	6,73
359	Tetrazepam	289,1	225,2	35	5,65
360	Tetryzoline	201,1	91,1	50	4,70
361	THC	315,2	193,2	35	7,30
362	THC-COOH	345,2	327,2	20	6,00
363	THC-OH	331,2	313,2	20	
364	Theobromine	181,1	138,1	20	0,81
365	Theophylline	181,1	124	20	0,95
366	Thiopropazate	446,2	213,2	35	*
367	Thiopropazine	447,2	141,2	35	*
368	Thioridazine	371,2	98,1	50	9,50
369	Thiotixene	444,2	98,1	50	*
370	Tiapride	329,2	256,1	35	*
371	Tilidine	274,2	155,2	20	6,59
372	Timolol	317,2	261,2	20	4,49
373	Tizanidine	254	210,1	35	3,12
374	Tocainide	193,1	122,1	20	3,19
375	Tolbutamide	271,1	91,1	50	4,35
376	Toliprolol	224,2	91	50	5,47
377	Tramadol	264,2	58	50	5,23
378	Tranlycypromine	134,1	117	20	*
379	Trazodone	372,2	176,1	35	6,17
380	Triamterene	254,1	237,2	35	3,51
381	Triazolam	343,1	308,2	35	4,21
382	Trifluperazine	408	141,2	35	10,30
383	Trifluperidol	410,2	165,1	35	8,80
384	Triflupromazine	353,1	86,1	35	*
385	Trihexyphenidyl	302,2	98,1	35	*
386	Trimethoprim	291,1	230,2	35	3,47
387	Trimipramine	295,2	100,1	35	8,70
388	Valsartan	436,2	207,1	35	4,84
389	Vardenafil	489,2	151,2	50	7,33
390	Venlafaxine	278,2	58	35	5,96
391	Verapamil	455,3	165,1	35	8,49
392	Viloxacine	238,1	100,1	20	*
393	Vincamine	355,2	337,3	20	6,21
394	Warfarin	309,1	163,1	20	4,91
395	Yohimbine	355,2	144,1	35	5,40
396	Zimeldine	317,1	193,2	35	*
397	Zolpidem	308,2	235,2	50	6,03
398	Zopiclone	389,1	245,1	20	7,08
399	Zotepin	332,1	72,1	35	*
400	Zuclopenthixol	401,1	231,1	50	8,77

* retention time not known yet