

## Selective Reaction Monitoring (SRM) Daten von Xenobiotika für Aufbau und Validierung von LC-MS/MS Analysen – Teil 2

**Stefanie Schröfel, Brunhilde Güssregen, Annika Werle, Markus Nauck, Torsten Arndt**

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

---

In Fortführung unserer Zusammenstellung von Single Reaction Monitoring (SRM)-Daten von ca. 900 Xenobiotika (Toxichem Krimtech 2008;75(3):149-174) listen wir nachfolgend SRM zu weiteren ca. 820 Substanzen auf. Diese SRM wurden wie zuvor beschrieben durch eigene Tune-Experimente an einem TSQ Quantum Ultra (ThermoFisher) ermittelt oder aus dem Internet und der Literatur zusammen getragen. Mit der vorliegenden Erweiterung enthält die Datenbank SRM-Einträge zu ca. 1700 Substanzen. Sie sollte damit ein noch aussagekräftigeres Hilfsmittel sein bei Aufbau und Validierung von LC-MS/MS-Analysenmethoden (z. B. Erkennung isobarer Massenübergänge von Substanzen mit gleicher Retentionszeit) und bei Tandem-Massenspektrometrie-basierten toxikologischen Suchanalysen bei konkretem Vergiftungsverdacht aber Fehlen von Referenzsubstanzen zur SRM-Ermittlung.

Ein Beispiel für die Nützlichkeit einer solchen SRM-Sammlung ist der im vorangehenden Heft (Toxichem Krimtech 2010;77(1):23-28) beschriebene Fall eines „Krypton“-Kräutermischungs-Missbrauchs durch eine Opiatabhängige in der stationären Entwöhnungstherapie. Laut Anbieter im Internet enthält diese Räuchermischung, die weniger geraucht, sondern vorrangig als Teeaufguss getrunken wird, Blätter des Kratombaumes (*Mitragyna speciosa*). Ein Hauptalkaloid der Kratombaumblätter ist Mitragynin. Mitragynin war für uns als Reinsubstanz zeitnah nicht verfügbar. Dennoch konnten wir Mitragynin im Urin der Patientin nachweisen, in dem wir die unten in der Tabelle gelisteten 3 SRM für Mitragynin in unserer LC-MS/MS-Multi-Target-Analyse verwendeten. O-Desmethyltramadol als das eigentliche pharmakologische Prinzip der „Krypton“-Mischung stand als Referenzsubstanz im Labor zur Verfügung. Aber auch hier hätte (bei Nichtverfügbarkeit der Substanz) der Nachweis mit Hilfe der unten gelisteten SRM für O-Desmethyltramadol schnell geführt werden können. Bei einer akuten Intoxikation kann eine solche Vorgehensweise eine erhebliche Zeitersparnis und damit verbesserte Therapiechance für den Betroffenen bedeuten. Nach unserer Kenntnis ist Mitragynin nicht in der aktuellen Pfleger-Maurer-Weber-Bibliothek enthalten, was den Nutzen einer LC-MS/MS-SRM-Datenbank als komplementäres Hilfsmittel zu den GC-MS- und HPLC-UV/VIS-Datenbanken bestätigt.

Wir danken sehr herzlich Herrn Dr. Kirchherr (Medizinisches Labor Bremen) für die uns, nach Erscheinen von Teil 1 der Datensammlung, zugesandten SRM zu ca. 80 Substanzen [4], Herrn Prof. Dr. Weinmann (Institut für Rechtsmedizin, Universität Freiburg) für den Hinweis auf mehrere Hundert neue LC-MS/MS-Massenspektren unter [22], aus denen wir für jede Substanz die bis zu 6 quantitativ wichtigsten SRM ausgelesen haben und Herrn Dr. Teske (Institut für Rechtsmedizin, Medizinische Hochschule Hannover) für die Zusammenstellung von SRM synthetischer Cannabinoide der JWH- und CP-Reihen [24], die bei der Bearbeitung von „Spice“-Konsum-Verdachtsfällen hilfreich sein können.

Wenn Ihnen SRM zu weiteren, hier und in Toxichem Krimtech 2008;75(3):149-174 nicht enthaltenen, Substanzen vorliegen oder Quellen zu entsprechenden Daten bekannt sind, würden wir uns über eine entsprechende Nachricht an die o. g. e-Mail-Adresse sehr freuen.

**Tabelle 1. Precursor-Ionen (m/z), Produkt-Ionen (Ion 1-6) und zugehörige Kollisionsenergien (CE in Volt) bei der LC-MS/MS Analyse von 820 Substanzen in alphabetischer Listung.** Weitere ca. 900 Substanzen und deren SRM listet Teil 1 dieser Sammlung (Toxichem Krimtech 2008;75(3):149-174).

**Anmerkungen:** m/z-Angaben (Precursor-Ion) beruhen gewöhnlich auf einfach geladenen Molekülionen. Ist m/z = M+1 wurden die SRM im positiven Ionisations-Modus gewonnen, ist m/z = M-1 wurde im negativen Ionisations-Modus gearbeitet. Differierende Precursor-Ionen für eine Substanz aus unterschiedlichen Literaturstellen können durch Addukte (z. B. Na, K) bzw. durch Selektion von in der ESI-Quelle entstandenen Zerfalls-Ionen bedingt sein. Die SRM isotopenmarkierter Substanzen hängen von den Isotopen-Bindungsstellen im Molekül ab. Diese sind ggf. den Originalquellen zu entnehmen.

Compound	m/z	Ion 1	CE	Ion 2	CE	Ion 3	CE	Ion 4	CE	Ion 5	CE	Ion 6	CE	Ref
Abacavir	287	191	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Abamectin B1	896	751	50	327	40	-	-	-	-	-	-	-	-	10
Acecarbromal	277	79	20	112	20	197	20	58	35	-	-	-	-	22
Aceclofenac	352	75	20	250	20	73	50	-	-	-	-	-	-	22
Acemetacin	416	139	20	174	20	312	20	260	20	-	-	-	-	22
Acephat	184	143	8	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	8
Acepromazin	327	86	35	58	50	254	35	222	50	239	35	-	-	22
Acetamiprid	223	126	20	99	40	-	-	-	-	-	-	-	-	10
Acetiamin	367	122	35	123	50	81	50	186	35	339	20	126	50	22
Acetylsalicylamid	180	121	20	65	50	93	35	-	-	-	-	-	-	22
Aciclovir	226	152	21	135	39	110	45	-	-	-	-	-	-	4
	226	152	20	135	35	110	50	-	-	-	-	-	-	22
Acifluorfen	360	316	12	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	11
Acrivastin	349	278	20	260	35	232	50	217	50	-	-	-	-	22
Adefovir	274	162	35	136	35	135	50	256	20	226	35	192	35	22
Adenin	134	107	20	92	35	65	50	66	50	-	-	-	-	22
Adenosin	268	136	35	119	50	137	35	-	-	-	-	-	-	22
Agomelatin	244	185	23	141	63	-	-	-	-	-	-	-	-	4
Alclometason-17,21-dipropionat	521	301	20	319	20	279	20	337	20	373	20	171	50	22
Alcuronium	333	312	20	144	50	291	35	130	50	182	50	206	50	22
Aldicarb	208	116	7	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	8
	208	116	11	89	23	-	-	-	-	-	-	-	-	11
Aldicarb-sulfon	240	86	25	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	11
Aldicarb-sulfoxid	207	132	10	89	14	-	-	-	-	-	-	-	-	8
	224	132	10	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	11
Aldoxycarb	240	86	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	8
Alfuzosin	388	358	35	373	35	203	50	245	35	230	50	217	35	22
Allobarbitol	207	167	-	127	-	42	-	-	-	-	-	-	-	20
Allopurinol	137	110	31	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	4
	135	92	20	64	35	107	20	-	-	-	-	-	-	22
Alprostadil	353	317	20	235	20	335	20	273	35	191	35	223	35	22
Alypin	279	58	35	112	20	157	20	234	20	82	50	-	-	22
Am benonium	268	125	20	86	35	-	-	-	-	-	-	-	-	22
Ambucetamid	293	136	35	164	20	109	50	94	50	-	-	-	-	22
Amezinium	202	77	50	186	35	170	20	93	35	106	35	104	35	22
Amidopyrin	232	113	20	97	35	58	35	56	50	70	20	111	35	22
Amidosulfuron	370	261	14	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	8
Amidotrizoesäure	615	233	50	361	20	192	50	-	-	-	-	-	-	22
7-Aminoflunitrazepam D7	291	138	35	230	50	244	50	148	35	-	-	-	-	22
Aminorex	163	120	20	103	35	77	50	91	50	-	-	-	-	22

Compound	m/z	Ion 1	CE	Ion 2	CE	Ion 3	CE	Ion 4	CE	Ion 5	CE	Ion 6	CE	Ref
Amisulprid	370	112	31	149	50	168	51	196	47	214	44	242	42	1
	370	242	37	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	4
	370	242	35	196	50	112	35	149	50	168	50	214	50	22
Amitriptylinoxid	294	233	26	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	4
	294	233	20	91	35	117	35	191	35	105	35	218	35	22
Ammoidin	217	174	35	202	20	89	50	161	35	90	50	118	50	22
Amobarbital	225	155	-	197	-	127	-	42	-	-	-	-	-	20
	225	182	20	136	35	-	-	-	-	-	-	-	-	22
Amoxapin	314	271	35	193	50	297	35	228	35	245	35	70	35	22
Amoxicillin	366	134	50	114	35	349	20	208	20	160	20	70	35	22
Amphetamin D5	141	93	20	92	35	124	20	77	20	95	20	66	50	22
Amphotericin B	924	906	20	743	20	707	35	761	20	725	20	671	35	22
Ampicillin	350	106	35	192	20	160	20	114	50	79	50	118	35	22
Amprenavir	506	245	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Amprolium	279	237	20	219	35	191	35	189	50	165	50	194	35	22
AMT	175	158	20	143	35	130	35	117	35	115	50	-	-	25
Anethol	149	121	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	16
Anilofos	368	199	20	171	20	125	30	-	-	-	-	-	-	10
Apophedrin	138	120	20	103	35	77	50	91	35	-	-	-	-	22
Aprobarbital	209	167	-	169	-	127	-	42	-	-	-	-	-	20
Aripiprazol	448	285	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	3
	448	285	37	176	45	98	51	-	-	-	-	-	-	4
	448	285	-	176	-	-	-	-	-	-	-	-	-	13
Atomoxetin	256	44	31	148	13	-	-	-	-	-	-	-	-	4
Atropin D3	293	127	35	93	50	67	50	95	50	103	50	145	50	22
Atropinmethylbromid	305	139	35	138	20	93	50	77	50	96	50	-	-	22
Atropin-N-octylbromid	403	237	35	91	50	154	50	-	-	-	-	-	-	22
Axeen	225	182	20	95	20	139	20	-	-	-	-	-	-	22
Azelainsäure	187	125	20	97	20	95	50	-	-	-	-	-	-	22
Azidamphenicol	294	121	35	151	20	176	20	194	20	83	20	-	-	22
Azintamid	260	159	35	187	20	105	50	131	50	-	-	-	-	22
Azoxystrobin	404	372	15	329	30	-	-	-	-	-	-	-	-	8
	404	372	20	329	30	344	30	-	-	-	-	-	-	10
Aztreonam	434	96	35	122	50	80	50	103	50	-	-	-	-	22
Bamipin	281	98	20	210	20	70	20	91	50	-	-	-	-	22
Barbital	183	155	-	127	-	42	-	-	-	-	-	-	-	20
	183	140	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	22
Beclometason dipropionat	521	319	20	337	20	301	20	393	20	279	35	429	20	22
Benazolin	242	198	7	170	15	-	-	-	-	-	-	-	-	11
Bendroflumethiazid	420	289	35	328	35	197	50	224	50	239	35	160	50	22
Benfluorex	352	230	20	159	50	105	50	149	20	-	-	-	-	22
Benfotiamin	467	122	50	105	50	220	35	387	35	-	-	-	-	22
Benodanil	324	231	35	203	50	76	50	-	-	-	-	-	-	22
Benperidol	382	165	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	4
	382	165	35	123	50	-	-	-	-	-	-	-	-	22
Benserazid	256	137	20	109	35	88	20	118	20	-	-	-	-	22
Bensulfuron-methyl	411	149	22	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	8
	411	149	20	182	20	119	40	-	-	-	-	-	-	10
Bensulid	398	314	10	158	20	356	10	-	-	-	-	-	-	10
Bensultap	432	290	20	150	35	105	50	104	35	76	50	77	35	22
Benzethonium	413	91	50	321	35	72	50	-	-	-	-	-	-	22
Benzobicyclon	447	257	30	349	30	229	40	-	-	-	-	-	-	10
Benzododecinium	304	91	50	212	35	58	35	-	-	-	-	-	-	22

Compound	m/z	Ion 1	CE	Ion 2	CE	Ion 3	CE	Ion 4	CE	Ion 5	CE	Ion 6	CE	Ref
Benzofenap	453	320	20	147	30	266	20	-	-	-	-	-	-	10
Benzoxonium	364	91	50	256	35	272	35	-	-	-	-	-	-	22
Benzoylcegonin D3	293	171	20	105	35	85	50	119	35	-	-	-	-	22
Benzthiazuron	208	151	20	109	50	153	20	124	50	-	-	-	-	22
Benzylpenicillin	335	289	35	91	50	159	35	128	35	176	35	-	-	22
1-Benzylpiperazin	177	91	35	85	20	65	50	-	-	-	-	-	-	25
2-Benzyltetronsäure	189	161	35	115	35	131	35	103	35	-	-	-	-	22
Betamethason 21-phosphat	471	79	50	97	50	441	35	-	-	-	-	-	-	22
Bevonium	354	144	35	105	50	81	50	126	35	-	-	-	-	22
Bezitramid	493	437	35	303	35	192	50	-	-	-	-	-	-	22
Bicalutamid	429	255	20	185	50	184	20	173	35	-	-	-	-	22
Bidesmethylocitalopram	297	262	20	109	50	279	20	234	35	116	35	-	-	22
Bietamiverin	319	100	20	72	50	-	-	-	-	-	-	-	-	22
Bifenox	326	282	12	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	11
Biotin	245	227	20	97	50	123	35	105	35	-	-	-	-	22
Bisnortilidin	237	72	10	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	8
Bopindolol	381	186	35	178	20	325	20	158	35	105	50	143	50	22
Bosentan	550	197	50	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	22
Brallobarbital	285	245	-	167	-	127	-	42	-	-	-	-	-	20
Brivudin	331	79	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	22
Brodifacoum	521	135	50	79	50	-	-	-	-	-	-	-	-	22
Bromchlorophen	423	205	35	79	50	-	-	-	-	-	-	-	-	22
Bromoxynil	274	79	25	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	8
Bromperidol	420	165	36	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	4
	420	165	35	123	50	402	20	-	-	-	-	-	-	22
Bromural	221	79	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	22
Bucetin	224	108	35	136	20	206	20	81	50	-	-	-	-	22
Budesonid	431	413	20	147	35	323	20	173	35	-	-	-	-	22
Budipin	294	238	20	91	50	160	35	-	-	-	-	-	-	22
Bulbocapnin	326	295	20	235	35	263	20	205	50	265	35	177	50	22
Buphenin	300	282	20	150	20	91	50	133	35	105	50	-	-	22
Bupivacain	289	140	35	84	50	98	50	-	-	-	-	-	-	22
Buprenorphin D4	472	400	50	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	22
Buprofezin	306	106	50	201	20	57	35	250	20	208	20	116	20	22
Bupropion	240	131	28	184	14	166	19	103	34	139	26	-	-	1
	240	184	19	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	4
Buspiron	386	122	50	265	35	222	35	150	35	148	50	109	50	22
Busulfan	247	151	13	55	33	-	-	-	-	-	-	-	-	4
Butabarbital	211	155	-	183	-	127	-	42	-	-	-	-	-	20
Butafenacil	475	331	20	180	40	349	10	-	-	-	-	-	-	10
Butalbital	223	180	14	42	18	167	25	139	26	182	16	-	-	1
	223	180	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	21
	223	167	-	183	-	127	-	42	-	-	-	-	-	20
	223	180	20	139	35	167	35	94	35	66	35	-	-	22
Butallylonal	301	79	20	221	20	-	-	-	-	-	-	-	-	22
Butanilicain	255	86	20	57	50	107	50	-	-	-	-	-	-	22
Butetamat	264	91	50	191	20	100	20	-	-	-	-	-	-	22
Butethal	211	155	-	183	-	127	-	42	-	-	-	-	-	20
Butocarboxim	213	75	14	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	8
Butocarboxim-sulfoxid	207	75	14	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	11
Butoxycarboxim-sulfoxid	207	132	6	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	8
Buturon	237	84	22	126	41	-	-	-	-	-	-	-	-	11
Cabaril	215	197	20	199	20	118	50	119	35	168	35	103	35	22

Compound	m/z	Ion 1	CE	Ion 2	CE	Ion 3	CE	Ion 4	CE	Ion 5	CE	Ion 6	CE	Ref
Cabergolin	237	72	10	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	8
	452	381	20	279	35	336	35	251	50	238	50	-	-	22
Cabral	215	197	20	118	50	119	35	168	35	103	35	78	50	22
Calteridol	405	203	35	102	50	304	35	157	35	-	-	-	-	22
Camlylofin	321	100	35	248	20	72	50	-	-	-	-	-	-	22
Canrenoinsäure	357	313	35	339	35	145	50	71	50	-	-	-	-	22
Capecitabin	358	154	20	153	50	125	50	221	35	-	-	-	-	22
Captodiam	360	255	20	166	50	199	35	-	-	-	-	-	-	22
Carbazochrom	237	164	20	220	20	146	35	118	50	192	20	119	50	22
Carbenoxolon	571	453	20	135	50	189	50	-	-	-	-	-	-	22
Carbidopa	227	181	21	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	4
Carbidopa D5	232	186	15	66	43	94	33	125	26	79	42	140	21	1
Carbofuran-3-hydroxy	238	163	10	220	10	-	-	-	-	-	-	-	-	10
Carbofuran-3-hydroxy	220	163	10	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	8
Carbofuran	222	165	15	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	8
	222	123	20	165	10	-	-	-	-	-	-	-	-	10
Carisoprodol	261	97	20	62	35	158	20	200	20	176	20	69	20	22
Carnitin	162	85	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	2
Carpropamid	334	139	20	103	40	-	-	-	-	-	-	-	-	10
Carticain	285	86	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	22
Cathinon	150	132	20	117	35	105	20	89	50	90	50	133	20	25
2C-B	260	243	20	228	35	213	35	106	50	134	35	149	35	25
2C-D	196	179	20	164	20	149	35	91	50	117	35	115	35	25
Cefaclor	368	106	35	174	20	118	50	191	20	-	-	-	-	22
Cefamandol	463	347	15	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	4
	463	158	20	140	20	347	20	185	35	141	50	108	50	22
Cefapirin	424	292	21	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	4
	424	292	20	152	35	320	20	181	35	124	50	141	20	22
Cefazedon	548	181	35	344	20	416	20	148	35	153	50	204	50	22
Cefazolin	455	323	17	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	4
Cefepim	481	396	17	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	4
	481	324	20	86	20	167	35	396	20	125	50	277	20	22
Cefetamet	398	241	20	126	50	227	35	285	20	166	35	210	20	22
Cefixim	454	285	20	126	50	210	20	329	20	152	35	227	35	22
Cefmenoxim	512	396	20	324	20	167	35	125	50	277	20	241	20	22
Cefodizim	585	396	21	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	4
	585	396	20	167	35	324	20	125	50	141	50	277	20	22
Cefotiam	526	174	21	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	4
	526	174	20	141	50	353	20	168	50	198	20	131	35	22
Ceftazidim	547	468	19	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	4
	547	468	20	167	35	396	20	277	20	142	50	440	20	22
Ceftizoxim	384	227	20	125	50	126	35	285	20	241	20	200	35	22
Ceftriaxon	555	396	19	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	4
	555	396	20	324	20	167	35	125	50	241	20	277	20	22
Cefuroxim	442	336	21	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	4
	423	207	20	284	20	318	20	-	-	-	-	-	-	22
Cetobemidon	248	190	35	230	20	201	35	70	50	94	35	200	50	22
2C-H	182	150	20	165	20	135	35	105	35	95	50	107	50	25
Chlomafozid	395	175	20	339	10	147	50	-	-	-	-	-	-	10
Chloramphenicol	321	257	20	152	20	121	35	176	20	194	20	-	-	22
Chlorazanyl	222	153	35	178	20	111	50	-	-	-	-	-	-	22
Chlorcyclizin	301	201	20	165	50	166	35	-	-	-	-	-	-	22
Chlordimeform	197	117	35	125	50	89	50	-	-	-	-	-	-	22





Compound	m/z	Ion 1	CE	Ion 2	CE	Ion 3	CE	Ion 4	CE	Ion 5	CE	Ion 6	CE	Ref
Demecarium	278	271	20	137	50	111	35	152	35	-	-	-	-	22
Demeclocyclin	465	448	20	430	35	289	35	154	35	261	50	98	50	22
Demeton-O-methyl	231	155	20	61	35	111	35	129	35	113	35	157	20	22
Denaverin	384	282	20	167	35	239	20	105	50	72	50	183	35	22
Desallylflurazepam	289	140	35	226	35	165	35	214	50	179	50	261	35	22
N-Desmethylatomoxetin	242	30	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	26
Desmethylicitalopram	311	262	20	109	35	293	20	234	35	246	50	116	35	22
Desmethylozapin	313	192	52	270	32	-	-	-	-	-	-	-	-	1
	313	270	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	3
	313	270	-	296	-	192	-	-	-	-	-	-	-	13
Desmethylfluoxetin	296	202	30	30	40	204	47	114	34	23	27	172	32	1
	296	134	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	3
	296	134	11	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	4
	296	134	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	13
Desmethylmianserin	251	208	29	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	4
Desmethylmirtazapin	252	193	44	194	42	195	23	209	24	-	-	-	-	1
	252	195	29	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	4
Desmethylolanzapin	299	256	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	3
	299	256	-	213	-	198	-	-	-	-	-	-	-	13
Desmethylsertralin	292	275	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	3
	292	159	-	275	-	129	-	-	-	-	-	-	-	13
Desmethyltamoxifen	358	58	36	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	4
N-Desmethyltramadol	250	44	14	232	9	42	52	91	50	77	56	121	29	1
O-Desmethyltramadol	250	42	70	58	15	77	70	-	-	-	-	-	-	1
	250	58	53	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	4
O-Desmethylvenlafaxin	264	107	60	133	22	-	-	-	-	-	-	-	-	1
	264	246	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	3
	264	58	47	246	19	107	47	-	-	-	-	-	-	4
	264	246	-	201	-	107	-	-	-	-	-	-	-	13
	264	107	-	153	-	-	-	-	-	-	-	-	-	19
Desoximethason	377	339	20	147	35	171	35	357	20	303	20	321	20	22
N-Despropylpropafenon	300	282	20	91	50	74	35	253	20	265	20	105	35	22
Detajmium	456	130	43	86	67	339	41	-	-	-	-	-	-	4
	457	130	50	86	50	384	35	340	35	131	50	158	50	22
Dexamethason 21-Acetat	433	353	20	59	35	361	20	307	35	373	20	325	35	22
Dextromethorphan	272	171	50	215	35	147	35	213	50	173	50	198	50	22
	272	213	25	147	25	-	-	-	-	-	-	-	-	29
Dextromoramid	393	306	35	236	50	167	50	-	-	-	-	-	-	22
Dextrorphan	258	199	28	133	28	-	-	-	-	-	-	-	-	29
Diazepam D5	290	154	35	198	35	227	35	262	35	233	35	182	35	22
Diazoxid	231	126	35	142	20	99	50	114	50	90	35	73	50	22
Dichlorophen	267	127	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	22
Dibenzepin	296	251	20	209	35	236	35	195	50	180	50	235	50	22
Dicamba	219	175	7	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	11
4-(2,4-Dichlorphenoxy)buttersäure	247	161	10	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	11
2,4-Dichlorphenoxyessigsäure	219	161	15	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	11
Dichlorprop	233	161	13	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	11
Diclofop	325	253	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	11
Diclosulam	406	161	30	378	20	-	-	-	-	-	-	-	-	10
Dicycloverin	310	237	20	109	35	155	35	95	35	100	35	83	35	22
Didanosin	237	137	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
	235	135	35	134	50	92	50	108	50	-	-	-	-	22
N,N-Diethyl-m-toluamid	192	119	20	91	50	109	35	65	50	-	-	-	-	22





Compound	m/z	Ion 1	CE	Ion 2	CE	Ion 3	CE	Ion 4	CE	Ion 5	CE	Ion 6	CE	Ref
	298	154	-	188	-	-	-	-	-	-	-	-	-	13
Ecgonin D3	189	171	20	85	35	127	20	91	35	103	35	67	50	22
Ecgoninmethylester	200	182	20	82	35	91	35	68	50	119	35	150	35	22
Ecgoninmethylester D3	203	185	20	85	35	93	35	91	50	97	50	125	35	22
EDDP D3	281	234	35	249	35	189	50	219	50	159	50	204	35	22
Efavirenz	316	244	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Eldoral	240	84	50	154	20	-	-	-	-	-	-	-	-	22
Emepronium	282	167	35	152	50	105	35	74	35	91	50	-	-	22
Emetin	481	246	50	274	50	165	50	464	35	-	-	-	-	22
Emodin	269	225	35	241	35	197	35	182	50	-	-	-	-	22
Enallypropymal	223	181	-	183	-	141	-	42	-	-	-	-	-	20
Enaprilat	349	206	27	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	4
Endomid	293	227	20	154	35	220	20	98	50	126	50	80	50	22
Endoxifen	374	58	53	73	53	-	-	-	-	-	-	-	-	4
Enoximon	249	125	20	69	50	151	20	-	-	-	-	-	-	22
Epoxiconazol	330	121	30	70	50	-	-	-	-	-	-	-	-	11
Eprazinon	381	247	20	201	35	97	50	105	50	335	20	70	50	22
Erythromycin	735	158	41	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	4
	735	576	20	158	35	83	50	116	50	558	20	522	35	22
Etaconazol	328	159	40	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	11
Etamiphyllin	280	207	35	86	35	134	50	100	35	163	35	95	50	22
Etacrynsäure	301	243	20	192	50	207	35	69	50	-	-	-	-	22
Ethambutol	205	116	20	118	20	98	35	55	50	-	-	-	-	22
Ethaverin	396	368	35	352	35	324	50	296	50	202	35	174	50	22
Ethiofencarb	226	107	15	164	8	-	-	-	-	-	-	-	-	8
Ethiofencarbsulfon	275	107	20	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	8
Ethiofencarbsulfoxid	242	107	18	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	8
	242	107	33	185	10	-	-	-	-	-	-	-	-	11
Ethionamid	165	58	35	57	50	-	-	-	-	-	-	-	-	22
Ethofenprox	394	359	10	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	10
Ethoprophos	243	173	22	215	15	-	-	-	-	-	-	-	-	11
Ethoxysulfuron	399	261	20	218	30	-	-	-	-	-	-	-	-	10
N-ethyl-Amphetamin	164	91	35	119	20	65	50	-	-	-	-	-	-	25
Ethylbenzhydramin	284	167	20	152	50	165	50	-	-	-	-	-	-	22
Ethylglucuronid D5	226	75	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	17
	226	75	20	85	20	113	20	208	20	69	35	57	35	22
N2-Ethylguanin	180	163	20	135	35	110	35	152	20	-	-	-	-	22
Ethylparathion	292	236	20	94	50	264	20	97	50	110	35	156	35	22
Ethylsulfat D5	130	98	20	80	50	96	50	-	-	-	-	-	-	22
5-Ethyl-5p-tolyl barbituric acid	245	155	-	217	-	127	-	42	-	-	-	-	-	20
Etifelmin	238	91	20	105	20	143	20	221	20	128	50	-	-	22
Etilamfetamin	164	91	35	65	50	119	20	-	-	-	-	-	-	22
Etiroxat	818	575	50	127	50	702	50	360	50	-	-	-	-	22
Etodolac	288	172	20	143	50	270	20	-	-	-	-	-	-	22
Etodroxizin	419	201	35	166	50	217	20	-	-	-	-	-	-	22
Etofenamat	370	264	20	244	50	195	50	216	50	-	-	-	-	22
Etofibrat	364	150	20	114	35	124	50	99	50	169	20	113	50	22
Etofyllinclofibrat	421	114	50	169	20	99	50	241	20	225	20	207	20	22
Etomidat	245	95	35	141	20	105	35	113	20	77	50	103	50	22
Etoposid	589	229	20	185	50	247	20	-	-	-	-	-	-	22
Eucatropin	292	58	50	109	35	67	50	79	50	140	35	-	-	22
Exemestan	297	121	35	149	20	93	35	279	20	105	50	91	50	22
Famciclovir	322	136	35	280	20	262	20	202	35	67	50	148	35	22



Compound	m/z	Ion 1	CE	Ion 2	CE	Ion 3	CE	Ion 4	CE	Ion 5	CE	Ion 6	CE	Ref
Fluoxetin	310	44	22	91	29	248	23	216	35	192	35	308	20	1
	310	148	20	117	50	91	50	145	50	183	50	259	35	22
Flupentixol	435	97	35	265	38	139	34	305	30	100	32	128	27	1
Flupentixol D4	439	265	46	305	30	99	34	141	35	104	30	97	33	1
Fluprednyliden 21-Acetat	431	351	20	59	50	-	-	-	-	-	-	-	-	22
Flurbiprofen	243	199	20	197	35	179	35	101	50	-	-	-	-	22
Fluridon	330	310	30	294	40	290	30	-	-	-	-	-	-	10
Flusilazol	316	247	27	165	38	-	-	-	-	-	-	-	-	11
Fluspirilen	476	98	63	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	4
	474	144	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	22
Flutamid	275	202	35	186	35	182	50	160	35	229	35	134	50	22
Fluticason Propionat	501	293	20	313	20	275	35	265	20	205	20	121	50	22
Fluvastadin	410	348	20	210	35	322	20	306	35	264	35	59	50	22
Fluvoxamin	319	71	29	200	30	228	23	226	17	244	31	130	59	1
Formylsulfamethin	305	122	50	120	35	106	50	150	20	65	50	92	50	22
Fosinopril	564	152	50	436	20	390	35	418	20	372	35	-	-	22
Furaltadon	325	252	20	100	35	281	20	128	35	86	50	225	20	22
Furametpyr	334	157	30	290	20	131	30	-	-	-	-	-	-	10
Furametpyr hydroxy	332	157	30	159	20	-	-	-	-	-	-	-	-	10
Furathiocarb	383	195	16	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	8
	383	195	20	252	30	167	30	-	-	-	-	-	-	10
Galantamin	288	213	35	198	35	231	20	183	50	270	20	225	20	22
Ganciclovir	256	152	14	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	4
Gemcitabin	264	112	29	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	4
	264	112	35	95	50	69	50	-	-	-	-	-	-	22
Gepefrin	152	107	20	77	50	135	20	79	35	-	-	-	-	22
Gestoden	311	109	35	81	50	133	35	105	50	91	50	293	20	22
Gibberelinsäure	345	143	35	239	20	221	35	227	35	-	-	-	-	22
Glisoxepid	448	225	50	82	50	308	20	-	-	-	-	-	-	22
Glucosamin	180	162	20	84	20	72	20	126	20	144	20	60	20	22
Glycin	76	30	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	2
Glymidin	310	252	20	77	50	186	35	111	35	59	50	83	50	22
Granisetron	313	138	35	159	35	70	50	79	50	-	-	-	-	22
Grepafloxacin	360	316	20	342	35	245	50	273	35	259	35	217	50	22
Griseofulvin	353	165	35	285	20	215	20	69	35	-	-	-	-	22
Guafecainol	298	100	35	72	50	-	-	-	-	-	-	-	-	22
Guaiifenesin	199	125	20	77	50	122	35	110	35	163	20	95	20	22
Guaclanin	183	124	20	86	20	56	35	-	-	-	-	-	-	22
Halofantrin	500	142	35	100	50	58	50	-	-	-	-	-	-	22
Halofuginon	412	257	35	271	20	313	20	79	50	177	50	-	-	22
Halometason	443	413	20	303	35	362	35	357	35	342	50	377	35	22
Haloperidol D4	380	169	35	127	50	362	20	-	-	-	-	-	-	22
Halosulfuron-methyl	435	182	20	139	50	-	-	-	-	-	-	-	-	10
	362	316	20	91	30	-	-	-	-	-	-	-	-	10
Haloxypop	360	288	18	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	11
	376	316	18	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	8
Haloxypop-methyl	495	167	20	149	35	93	50	121	50	-	-	-	-	22
Hapargosid	215	172	41	200	41	-	-	-	-	-	-	-	-	5
Harmalin	213	170	41	198	41	-	-	-	-	-	-	-	-	5
Harmin	213	170	41	198	41	-	-	-	-	-	-	-	-	5
Heptabarbital	249	155	-	221	-	127	-	42	-	-	-	-	-	20
Heptaminol	146	128	20	69	20	59	35	67	35	-	-	-	-	22
Hesperidin	609	301	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	22
Hexachlorophen	403	195	35	367	20	159	50	303	35	-	-	-	-	22





Compound	m/z	Ion 1	CE	Ion 2	CE	Ion 3	CE	Ion 4	CE	Ion 5	CE	Ion 6	CE	Ref
Lysergsäurediäthylamid D3	327	226	35	208	35	180	35	281	20	210	50	200	35	22
mCPP	197	154	35	118	50	119	35	44	50	-	-	-	-	25
MDBP	221	135	20	77	50	95	50	105	50	-	-	-	-	25
MDDMA	208	163	20	105	35	135	35	133	35	79	50	103	50	25
MDEA-D5	213	163	20	105	35	135	35	133	35	79	50	77	50	25
MDMA-D5	199	165	20	107	35	135	20	105	50	78	50	81	50	25
Meclizin	391	201	20	166	50	-	-	-	-	-	-	-	-	22
Mecoprop	213	141	16	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	11
Mefrusid	381	345	35	78	50	317	35	189	50	125	50	153	35	22
Melatonin	231	144	35	216	20	-	-	-	-	-	-	-	-	22
Menthol	156	83	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	16
5-MeO-DMT	219	174	20	58	35	130	50	159	35	143	50	131	35	25
MeOPP	193	150	20	133	35	119	35	176	20	122	35	-	-	25
Meperidin D4	252	224	35	178	20	135	35	105	50	93	50	180	35	22
Mephedron	178	160	-	145	-	119	-	-	-	-	-	-	-	15
Mephentermin	164	91	35	65	50	133	20	105	20	-	-	-	-	22
Mephobarbital	245	169	-	217	-	141	-	42	-	-	-	-	-	20
Mepivacain	247	98	35	70	50	-	-	-	-	-	-	-	-	22
Mesoridazin	387	98	50	126	35	372	35	259	50	274	35	-	-	22
Metalaxyl	280	220	13	192	17	-	-	-	-	-	-	-	-	8
	280	192	20	248	10	160	20	-	-	-	-	-	-	10
Metamidophos	142	94	20	125	20	-	-	-	-	-	-	-	-	11
Metamizol	310	80	50	191	20	175	35	81	20	94	35	-	-	22
Metanephrin	198	180	9	148	20	165	17	77	42	120	20	-	-	1
	180	148	17	165	15	-	-	-	-	-	-	-	-	12
Metanephrin D3	201	183	10	151	21	123	21	127	25	168	20	-	-	1
	183	151	21	168	18	-	-	-	-	-	-	-	-	12
Methadon D3	313	268	20	105	50	60	35	226	35	-	-	-	-	22
Methadon D9	319	268	20	105	50	60	35	226	35	-	-	-	-	22
Methamidophos	142	94	14	125	13	-	-	-	-	-	-	-	-	8
Methamphetamin D5	155	92	20	91	50	121	20	93	35	66	50	-	-	22
Methamphetamin D8	158	93	20	92	35	124	20	66	50	-	-	-	-	22
Methamphetamin D11	161	97	20	96	20	127	20	69	50	-	-	-	-	22
Metharbital	197	169	-	141	-	42	-	-	-	-	-	-	-	20
Methcathinon	164	146	20	131	35	130	50	105	35	-	-	-	-	25
Methiocarb	243	121	22	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	8
	226	169	10	121	20	91	30	-	-	-	-	-	-	10
Methionin	150	104	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	2
Methohexital	261	181	-	221	-	141	-	42	-	-	-	-	-	20
Methohexital D5	266	185	35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	22
Methomyl	163	88	8	106	10	-	-	-	-	-	-	-	-	8
	163	88	10	106	10	-	-	-	-	-	-	-	-	10
Methomyl oxim	106	58	10	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	10
Methotrexat	455	308	29	176	53	-	-	-	-	-	-	-	-	4
	455	308	20	175	50	134	50	-	-	-	-	-	-	22
Methoxyfenozid	369	149	20	313	10	91	40	-	-	-	-	-	-	10
p-Methoxymethamphetamin (PMMA)	180	121	20	91	32	78	37	77	32	149	11	65	46	1
Methoxytyrosin	212	149	21	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	4
2-Methyl-4-chlorphenoxyessigsäure	199	141	18	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	11
3,4-Methylendioxyamphetamin D5	185	168	20	110	35	138	20	137	35	-	-	-	-	22
3,4-Methylendioxyethamphetamin D5	213	163	20	105	35	135	35	133	35	103	50	79	50	22
3,4-Methylendioxymethamphetamin D5	199	165	20	107	35	135	35	78	50	105	50	80	50	22
N1-(3,4-Methylendioxyphenyl)butamin D5	213	136	20	179	20	149	20	137	20	78	50	-	-	22







Compound	m/z	Ion 1	CE	Ion 2	CE	Ion 3	CE	Ion 4	CE	Ion 5	CE	Ion 6	CE	Ref
Primisulfuron-methyl	467	226	15	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	8
Probarbital	197	155	-	169	-	127	-	42	-	-	-	-	-	20
Procainamid	236	163	20	120	35	92	50	65	50	121	35	-	-	22
Prochlorperazin	374	141	35	113	35	70	50	246	35	214	50	239	35	22
Procyclidin	288	84	35	270	20	-	-	-	-	-	-	-	-	22
Progesteron	315	109	35	97	35	297	20	79	50	123	50	95	50	22
Promecarb	208	151	9	109	15	-	-	-	-	-	-	-	-	8
	208	151	10	109	20	-	-	-	-	-	-	-	-	10
Propallylonal	287	79	20	207	20	-	-	-	-	-	-	-	-	22
Propamocarb	189	102	17	144	12	-	-	-	-	-	-	-	-	8
Propoxur	210	111	21	168	10	-	-	-	-	-	-	-	-	11
	210	111	20	168	10	93	20	-	-	-	-	-	-	10
Prosulfuron	420	141	20	167	18	-	-	-	-	-	-	-	-	8
	420	141	20	167	20	109	50	-	-	-	-	-	-	10
Protionamid	181	121	35	154	20	125	35	147	35	92	50	118	50	22
Pymetrozin	218	105	17	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	8
Pyranocoumarin	323	251	20	173	35	155	50	183	35	121	50	291	20	22
Pyrazosulfuron-ethyl	415	182	20	139	50	-	-	-	-	-	-	-	-	10
Pyribenzamin	256	211	20	91	50	119	50	72	35	-	-	-	-	22
Pyridat	379	207	16	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	8
	379	207	20	351	10	-	-	-	-	-	-	-	-	10
Pyridostigmin	181	72	33	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	4
Pyrilamin	286	121	35	241	20	77	50	91	50	-	-	-	-	22
Pyrimethamin	249	233	35	177	35	198	50	128	50	154	50	163	35	22
Pyrimethanil	200	107	22	82	25	-	-	-	-	-	-	-	-	8
Quinidin	325	307	35	172	50	160	35	79	50	184	35	81	35	22
Quinmerac	222	141	33	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	8
Quizalofop	343	271	17	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	11
Quizalofop-ethyl	373	299	19	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	8
Ranitidin	315	176	20	102	35	125	35	81	50	97	50	224	20	22
Reboxetin	314	176	19	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	4
	314	176	20	91	35	85	35	158	20	56	50	131	35	22
Remifentanyl	377	113	33	146	32	285	18	317	15	345	12	261	22	1
Rifabutin	847	815	34	755	38	-	-	-	-	-	-	-	-	4
Riluzol	235	166	35	138	50	208	35	150	35	111	50	-	-	22
Rimsulfuron	432	182	22	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	8
	432	182	20	325	20	139	40	-	-	-	-	-	-	10
Ritalinsäure	220	84	25	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	4
Ritonavir	721	296	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Rivastigmin	251	206	23	86	33	-	-	-	-	-	-	-	-	4
Rizatriptan	270	201	20	158	20	58	50	156	50	143	50	172	20	22
Rocuronium	530	487	35	358	50	413	50	112	50	-	-	-	-	22
Ropinirol	261	114	35	160	35	132	50	86	35	117	50	134	50	22
Ropinorol	261	114	31	132	43	-	-	-	-	-	-	-	-	4
Roxithromycin	838	679	32	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	4
Saquinavir	672	128	43	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	4
	671	570	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Secobarbital	237	42	25	194	10	-	-	-	-	-	-	-	-	1
Selegilin	188	91	35	119	20	65	50	70	20	-	-	-	-	22
Sertindol	441	113	50	355	35	71	50	-	-	-	-	-	-	22
Sigmodal	315	245	-	197	-	127	-	42	-	-	-	-	-	20
Simeconazol	294	135	20	70	20	115	40	-	-	-	-	-	-	10
Simvastatin	419	199	20	285	20	225	20	243	20	173	35	267	20	22



Compound	m/z	Ion 1	CE	Ion 2	CE	Ion 3	CE	Ion 4	CE	Ion 5	CE	Ion 6	CE	Ref
Trimethobenzamid	389	72	35	166	20	195	35	70	50	-	-	-	-	22
Trimipramin D3	298	103	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	19
Tropisetron	283	116	50	160	35	-	-	-	-	-	-	-	-	22
Tyrosin	182	136	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	2
Valacyclovir	325	152	20	135	50	72	50	84	35	146	20	110	50	22
Valdecoxib	313	118	35	233	35	206	35	210	20	172	35	80	50	22
Vamidothion	288	146	12	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	8
Vinbarbital	223	155	-	195	-	127	-	42	-	-	-	-	-	20
Voriconazol	350	281	25	127	41	-	-	-	-	-	-	-	-	4
Xantanol	312	237	20	114	35	84	50	219	20	132	35	162	35	22
Xipamid	353	274	35	78	50	127	50	170	35	206	35	-	-	22
Zalcitabin	212	112	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Zidovudin	268	127	17	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	4
	268	127	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	9
Zotepin	332	72	31	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	4
	332	72	35	70	50	71	35	67	35	-	-	-	-	22

## Literatur

- [1] Schröfel S, Werle A. SRM-Datenbank. Bioscientia GmbH, Ingelheim, April 2010.
- [2] Stopsack M. Aminosäuren und Acylcarnitine NON Derivatised. Chromsystems Dialog 1/08.
- [3] Schütze G, Burghardt S. Therapeutisches Drug Monitoring mit Tandem-Massenspektrometrie: MassTox Psychopharmaka. Chromsystems Dialog 1/08.
- [4] Kirchherr H. Persönliche Mitteilung, Medizinisches Labor Bremen, Januar 2009.
- [5] Björnstad K, Beck O, Helander A. A multi-component LC-MS/MS method for detection of ten plant-derived psychoactive substances in urine. *Journal of Chromatography B* 2009;877:1162–1168.
- [6] Köhler C, Grobosch T, Binscheck T. Determination of tilidine, nortilidine and naloxone in urine by LC-ESIMS/MS. In: Pragst F, Arndt T (Hrsg.) XVI. GTFCh-Symposium. Toxikologie psychisch aktiver Substanzen. Psychopharmaka – Neue Drogen – Suchanalyse – Kasuistiken. Verlag Gesellschaft für Toxikologische und Forensische Chemie, 2009:321-326.
- [7] Auwärter V, Dresen S, Weinmann W, Ferreirós N. „SPICE“ sowie weitere Räucher-mischungen enthalten Designer-Cannabinoid. *Toxicchem Krimtech* 2008;75(3):127-129.
- [8] Rontree S, Ryan C, Kearney G, Winkler M. Schnelle UPLC/MS/MS zur simultanen Analyse multipler Pestizidrückstände in landwirtschaftlichen Produkten. <http://www.labor.at/Artikel/L+B053-pdf2.pdf>
- [9] Notox B. V. Simultaneous analysis of all registered anti-HIV drugs in human plasma by high throughput HPLC-MSMS. <http://www.notox.nl/posters.php>
- [10] Klein J, Alder L. Applicability of gradient liquid chromatography with tandem mass spectrometry to the simultaneous screening for about 100 pesticides in crops. *J AOAC Int* 2003;86(5):1015-1037.
- [11] Pantiru ME. Entwicklung einer LC/MS/MS-Methode zur Analytik polarer Pflanzenschutzmittel-Wirkstoffe und ihrer Metabolite in Erntegütern. Dissertation. Technische Universität München, 2004.
- [12] Shi Y, Lafontaine C, Esposito C, Espourteille F, Franklin, MA. Plasma-free metaneph-rine and normetaneph-rine quantitation using online sample extraction coupled with tandem mass spectrometry. Thermo Fisher Scientific Application Note: 460.
- [13] Chromsystems. Arbeitsvorschrift für die LC-MS/MS-Bestimmung von Antidepressiva/Neuroleptika im Serum/Plasma. April 2009.

- [14] Trafkowski J, Thieme D, Sachs H, Schlutt B, Besa A. MRM – a Sophisticated Tool for Sensitive and Selective Detection of THC Carboxylic Acid directly from Hair. *Ann Toxicol Anal* 2009;21:S1-14-15.
- [15] Davies S, Puchnarewicz M, Button J, Dargan PI, Wood DM, et al. Two cases of confirmed ingestion of the novel designer compounds: 4-methylmethcathinone (mephedrone) and 3-fluoromethcathinone. *Ann Toxicol Anal* 2009;21:S1-60-61.
- [16] Hackett J, Telepchak MJ, Coyer MJ. Analysis of absinthe by solid phase extraction and LC-M/MS: a simple test for thujone concentration. *Ann Toxicol Anal* 2009;21:S1-80.
- [17] Albermann ME, Musshoff F, Madea B. Validation of a liquid chromatographic-tandem mass spectrometric method (LC-MS/MS) for the quantification of ethyl glucuronide in hair according to the guidelines of forensic toxicology. *Ann Toxicol Anal* 2009;21:S1-82-83.
- [18] Habrdova V, Vorisek V, Palicka V. Two cases positive to ketamine: possibilities of detection and identification in human serum and urine. *Ann Toxicol Anal* 2009;21:S1-76.
- [19] Pil K, Van Heule S, Goessaert AS, Veramme J, Verstraete A. False positive results for phencyclidine on on-site oral fluid test Varian Oralab 6 caused by venlafaxine and o-desmethylvenlafaxine. *Ann Toxicol Anal* 2009;21:S1-87.
- [20] Jones LV, Whitehouse MJ. Anion mass spectrometry of barbiturates. *Biomed Mass Spectrom* 1981;8(5):231-236.
- [21] Spell JC, Srinivasan K, Stewart JT, Bartlett MG. Supercritical fluid extraction and negative ion electrospray liquid chromatography tandem mass spectrometry analysis of phenobarbital, butalbital, pentobarbital and thiopental in human serum. *Rapid Commun Mass Spectrom* 1998;12(13):890-894.
- [22] Weinmann W, Dresen S. Database of QTrap LC-MS-MS mass spectra. [http://www.chemicalsoft.de/MSMS\\_QTrap/MSMS\\_QTrap-index.php](http://www.chemicalsoft.de/MSMS_QTrap/MSMS_QTrap-index.php)
- [23] Lu S, Tran BN, Nelsen JL, Aldous KM. Quantitative analysis of mitragynine in human urine by high performance liquid chromatography-tandem mass spectrometry. *J Chrom B* 2009;877(24):2499-2505.
- [24] Teske J. Persönliche Mitteilung, Institut für Rechtsmedizin der Medizinischen Hochschule Hannover, Dezember 2009.
- [25] Weinmann W. Designer Drugs Product-Ion Spectra API 365 (2009). [http://www.chemicalsoft.de/designerdrugs2009/MSMS\\_API-DD-index.php](http://www.chemicalsoft.de/designerdrugs2009/MSMS_API-DD-index.php)
- [26] Mattiuz EL, Ponsler GD, Barbuch RJ, Wood PG, Mullen JH, Shugert RL, Li Q, Wheeler WJ, Kuo F, Conrad PC, Sauer J-M. Disposition and metabolic fate of Atomoxetine hydrochloride: pharmacokinetics, metabolism, and excretion in the Fischer 344 rat and Beagle Dog. *Drug Metabolism and Disposition*. DMD 31:88-97, 2003.
- [27] Philipp AA, Wissenbach DK, Zoerntlein SW, Klein ON, Kanogsunthornrat J, Maurer HH. Studies on the metabolism of mitragynine, the main alkaloid of the herbal drug Kratom, in rat and human urine using liquid chromatography-linear ion trap mass spectrometry. *J. Mass Spectrom*. 2009;44:1249-1261.
- [28] Philipp AA, Wissenbach DK, Weber AA, Zapp J, Zoerntlein SW, Kanogsunthornrat J, Maurer HH. Use of liquid chromatography coupled to low- and high-resolution linear ion trap mass spectrometry for studying the metabolism of paynantheine, an alkaloid of the herbal drug Kratom in rat and human urine. *Anal Bioanal Chem* 2010;396(7):2379-2391.
- [29] Volotinen M, Turpeinen M, Tolonen A, Uusitalo J, Mäenpää J, Pelkonen O. Timolol Metabolism in Human Liver Microsomes Is Mediated Principally by CYP2D6. *Drug Metab Dispos* 2007;35(7):1135-1141.