

	compound name	survey precursor ion	survey fragment ion	CE	t _R
1	2-Hydroxyethylflurazepam	333,1	211,2	50,0	3,96
2	3,4-Methylenedioxyamphetamine	180,1	163,1	20,0	3,58
3	3,4-Methylenedioxyethylamphetamine	208,1	163,2	20,0	4,63
4	3,4-Methylenedioxymethamphetamine	194,1	163,1	20,0	4,07
5	6-O-Monoacetylmorphine	328,2	165,2	50,0	3,33
6	7-Aminoclonazepam	286,1	222,2	35,0	2,60
7	7-Aminoflunitrazepam	284,1	135,1	35,0	3,12
8	7-Aminonitrazepam	252,1	121,1	35,0	2,35
9	9-Hydroxyrisperidone	427,2	207,2	35,0	5,79
10	Aceclidine	170,1	128,1	35,0	1,79
11	Aceprometazine	327,2	86,1	35,0	7,40
12	Aciclovir_Positive	226,1	152,1	20,0	0,46
13	Ajmaline	327,2	144,2	50,0	5,44
14	alpha-Hydroxyalprazolam	325,1	297,2	35,0	3,65
15	alpha-Hydroxytriazolam	359,0	331,1	35,0	3,65
16	Alprazolam	309,1	281,2	35,0	4,24
17	Alprenolol	250,2	116,1	20,0	6,77
18	Amantadine	152,1	135,1	20,0	3,51
19	Amiloride	230,1	171,1	20,0	2,03
20	Aminophenazone	232,1	113,1	20,0	2,56
21	Aminopromazine	328,2	212,2	20,0	9,29
22	Amiodarone	646,0	58,0	50,0	11,30
23	Amiphenazole	192,1	117,1	35,0	2,77
24	Amitriptylin	278,2	233,2	20,0	6,87
25	Amoxicillin	366,1	114,0	35,0	6,94
26	Amphetamine	136,1	91,0	20,0	3,37
27	Apomorphine	268,1	191,2	35,0	3,91
28	Aprinidine	323,2	86,1	50,0	10,10
29	Atenolol	267,2	145,1	35,0	1,93
30	Atorvastatin	559,3	440,1	35,0	5,37
31	Atropine	290,2	124,1	35,0	3,02
32	Aztreonam	436,1	313,0	20,0	1,05
33	Befunolol	292,2	250,2	20,0	4,84
34	Bendiocarb	224,1	109,0	20,0	2,74
35	Benfluorex	352,2	230,2	20,0	*
36	Benzatropine	308,2	167,2	35,0	8,49
37	Benzocaine	166,1	138,1	20,0	3,44
38	Benzoctamine	250,2	191,2	35,0	6,66
39	Benzoylecgonine	290,1	168,2	20,0	3,02
40	Berberine	336,1	278,1	50,0	8,03
41	Betaxolol	308,2	116,1	35,0	6,38
42	Bezafibrate	362,1	139,1	35,0	4,73
43	Biperiden	312,2	98,1	35,0	8,31
44	Bisoprolol	326,2	116,1	20,0	5,65
45	Bromazepam	316,0	182,2	50,0	3,19

46	Bromocriptine	655,0	301,0	50,0	7,41
47	Brompheniramine	319,1	274,1	20,0	6,98
48	Bucetin	224,1	108,1	35,0	2,74
49	Bunitrolol	249,2	193,2	20,0	4,88
50	Bupivacaine	289,2	140,2	35,0	7,19
51	Bupranolol	272,1	216,1	20,0	7,01
52	Buprenorphine	468,3	396,3	50,0	7,61
53	Buspirone	386,3	122,1	50,0	6,21
54	Butaperazine	410,2	141,2	35,0	9,68
55	Caffeine	195,1	138,1	20,0	1,54
56	Carazolol	299,2	116,1	35,0	6,07
57	Carbamazepine	237,1	194,2	20,0	3,51
58	Carbinoxamine	291,1	167,2	50,0	6,80
59	Carbuterol	268,2	134,1	35,0	1,86
60	Carteolol	293,2	237,2	20,0	3,05
61	Carvedilol	407,2	224,3	20,0	7,65
62	Celiprolol	380,3	251,2	35,0	5,02
63	Cetirizine	389,2	201,1	20,0	6,84
64	Chlorcyclizine	301,1	201,1	20,0	8,31
65	Chlordiazepoxide	300,1	282,2	35,0	4,84
66	Chlorphenethiazine	305,1	72,1	35,0	8,38
67	Chlorpheniramine	275,1	230,2	20,0	6,84
68	Chlorpromazine	319,1	86,1	35,0	8,91
69	Chlorprothixene	316,1	231,1	35,0	9,08
70	Cilazapril_Positive	419,0	211,2	20,0	7,19
71	Cinnarizine	369,2	167,1	20,0	10,10
72	Citalopram	325,2	109,1	50,0	7,58
73	Clemastine	344,2	215,1	20,0	9,75
74	Clenbuterol	277,1	203,1	20,0	5,40
75	Clobazam	301,1	259,2	20,0	4,42
76	Clobutinol	256,1	58,0	35,0	7,30
77	Clomethiazole	162,0	113,0	35,0	3,19
78	Clomipramine	315,2	86,1	35,0	9,15
79	Clonazepam	316,0	270,2	35,0	4,17
80	Clonidine	230,0	213,1	35,0	3,79
81	Clozapine	327,1	270,1	35,0	7,44
82	Cocaine	304,2	182,2	20,0	6,21
83	Codeine	300,2	165,2	50,0	2,80
84	Coumatetralyl	293,1	175,1	35,0	5,47
85	Cyclicine	267,2	167,1	20,0	7,33
86	D3-Doxepin	283,0	107,1	35,0	7,61
87	D5-Diazepam	290,0	154,1	35,0	4,84
88	Desalkylflurazepam	289,1	140,1	35,0	4,17
89	Desipramine	267,2	72,1	20,0	7,82
90	Desmethylclomipramine	301,1	72,1	35,0	3,61
91	Dextromethorphan	272,2	171,2	50,0	6,94
92	Dextropropoxyphene	340,2	58,0	35,0	6,10
93	Diazepam	285,1	154,2	35,0	4,84

94	Dihydrocodeine	302,2	199,2	35,0	2,70
95	Dihydroergotamine	584,3	270,2	35,0	6,28
96	Dilazep	605,3	195,1	50,0	10,30
97	Diltiazem	415,2	178,2	20,0	7,16
98	Diphenhydramine	256,2	167,1	20,0	7,54
99	Dipyridamole	505,3	429,2	50,0	5,68
100	Disopyramide	340,2	239,2	20,0	6,03
101	Dixyrazine	428,2	229,4	20,0	8,66
102	Doxapram	379,2	292,2	35,0	6,07
103	Doxepin	280,2	107,1	35,0	7,61
104	Ecgoninemethylester	200,1	182,2	20,0	0,98
105	Embutramide	294,2	121,1	35,0	3,96
106	Enalapril	377,2	234,2	20,0	5,96
107	Ephedrine	166,1	148,1	20,0	2,88
108	Eprosartan	425,2	135,1	50,0	5,68
109	Esmolol	296,2	145,1	35,0	5,26
110	Estazolam	295,1	205,2	50,0	3,89
111	Ethenzamide	166,1	121,0	20,0	2,84
112	Felodipine	384,1	338,0	20,0	7,51
113	Fenarimol	332,0	81,0	35,0	4,03
114	Fenbutrazate	368,2	91,1	50,0	*
115	Fendiline	316,2	105,1	35,0	9,19
116	Fenetylline	342,2	91,0	50,0	4,70
117	Fenfluramine	232,1	159,1	35,0	7,23
118	Fentanyl	337,2	105,1	50,0	7,51
119	Fexofenadine	502,3	466,2	35,0	7,44
120	Flecainide	415,1	398,4	20,0	8,00
121	Fluconazole	307,1	220,2	20,0	2,35
122	Flunitrazepam	314,1	268,2	35,0	4,52
123	Fluoxetine	310,1	91,1	50,0	9,05
124	Fluphenazine	438,2	171,2	35,0	9,47
125	Flurazepam	388,2	315,1	35,0	7,12
126	Fluvoxamine	319,2	71,0	20,0	7,93
127	Gabapentin	172,1	154,2	20,0	2,49
128	Gallopamil	485,3	165,1	35,0	8,66
129	Glibenclamide	494,2	169,1	50,0	5,65
130	Glibornuride	367,2	170,2	20,0	5,09
131	Glimepiride	491,2	352,1	20,0	5,58
132	Glipizide	446,2	321,1	20,0	4,31
133	Gliquidone	528,2	403,1	20,0	6,17
134	Haloperidol	376,1	165,1	35,0	8,10
135	Heroin	370,2	165,0	50,0	5,05
136	Hydrocodone	300,2	199,1	35,0	3,58
137	Hydrocortisone	363,2	121,1	35,0	3,16
138	Hydromorphone	286,1	185,1	35,0	2,21
139	Hydroxyzine	375,2	201,1	20,0	7,75
140	Imipramine	281,2	86,1	20,0	8,28
141	Indoprofen	282,1	236,1	35,0	4,03

142	Irbesartan	429,2	207,1	35,0	6,63
143	Ketamine	238,1	125,0	35,0	4,21
144	Ketoprofen	255,1	209,2	20,0	4,52
145	Ketorolac	256,1	105,1	35,0	3,93
146	Lamotrigine	256,0	211,1	35,0	4,42
147	Lercanidipine	612,3	280,3	35,0	10,50
148	Levocabastine	421,2	70,0	50,0	7,82
149	Levomepromazine	329,2	100,1	35,0	8,63
150	Lidocaine	235,2	86,1	20,0	4,88
151	Lisinopril	406,2	84,1	50,0	2,98
152	Loperamide	477,2	266,4	20,0	9,89
153	Loratadine	383,2	337,2	35,0	7,51
154	Lorazepam	321,0	275,1	35,0	3,82
155	Lormetazepam	335,0	289,1	20,0	4,35
156	Losartan	423,2	207,2	35,0	4,63
157	Lysergide	324,2	223,2	35,0	5,93
158	Maprotiline	278,2	191,1	50,0	7,96
159	Meclizine	391,2	201,1	20,0	10,60
160	Medazepam	271,1	91,0	50,0	7,47
161	Meloxicam	352,0	115,0	35,0	4,66
162	Melperone	264,2	165,2	20,0	7,30
163	Mepindolol	263,2	116,1	20,0	4,81
164	Mescaline	212,1	195,2	20,0	9,19
165	Mesoridazine	387,2	98,1	50,0	6,24
166	Metaclazepam	395,0	241,2	50,0	8,17
167	Metamfepramone	178,1	105,1	35,0	3,51
168	Metamphetamine	150,1	91,0	20,0	3,89
169	Metformin	130,1	71,0	35,0	0,95
170	Methadone	310,2	265,2	20,0	9,05
171	Methylphenidate	234,1	84,1	20,0	5,30
172	Metipranolol	310,2	135,1	50,0	9,08
173	Metoprolol	268,2	133,1	35,0	4,70
174	Metronidazole	172,1	128,0	20,0	1,30
175	Mexiletine	180,1	58,0	20,0	5,26
176	Mianserin	265,2	208,2	20,0	7,23
177	Miconazole	417,0	159,1	50,0	10,20
178	Midazolam	326,1	291,2	35,0	6,59
179	Midodrine	255,1	180,2	20,0	2,49
180	Minoxidil	210,1	164,2	35,0	3,72
181	Mirtazapine	266,2	195,2	35,0	5,47
182	Mizolastine	433,2	308,2	35,0	7,08
183	Moclobemide	269,1	182,1	20,0	4,21
184	Morphine	286,1	165,2	50,0	1,75
185	Morphine-3-β-D-glucuronide	462,2	286,2	35,0	0,81
186	Naloxone	328,2	310,2	20,0	2,77
187	Nandrolone	275,2	109,1	35,0	4,14
188	Nicardipine	480,2	315,1	35,0	8,17
189	Nicotine	163,1	130,1	20,0	1,44

190	Nifedipine	347,1	254,2	20,0	4,21
191	Nifenazone	309,1	106,1	35,0	2,21
192	Nimodipine	419,2	343,1	20,0	5,72
193	Nisoldipine	389,2	239,1	20,0	6,17
194	Nitrazepam	282,1	236,2	35,0	4,03
195	Nitrendipine	361,1	315,1	20,0	3,61
196	Norbuprenorphine	414,3	101,1	50,0	5,51
197	Nordiazepam	271,1	140,1	35,0	4,31
198	Norfefrine	154,1	91,1	35,0	5,30
199	Norfentanyl	233,2	84,1	20,0	3,75
200	Normorphine	272,1	165,2	50,0	1,51
201	Nortriptyline	264,2	233,2	20,0	8,00
202	Noscapine	414,2	220,2	35,0	6,10
203	Olanzapine	313,1	256,2	35,0	10,10
204	Ondansetron	294,2	170,2	35,0	5,68
205	Orphenadrine	270,2	181,2	20,0	8,10
206	Oxazepam	287,1	241,2	35,0	3,72
207	Oxcarbazepine	253,1	180,2	50,0	3,09
208	Oxetacaine	468,3	145,2	35,0	10,30
209	Oxitropium	333,2	167,2	35,0	4,00
210	Oxprenolol	266,2	116,1	20,0	5,86
211	Oxycodone	316,2	298,2	20,0	3,26
212	Papaverine	340,2	202,2	35,0	6,07
213	Paracetamol	152,1	110,1	20,0	0,98
214	Paroxetine	330,2	69,9	50,0	7,65
215	Pentoxifyverine	334,2	100,1	35,0	8,70
216	Perazine	340,2	141,2	20,0	8,80
217	Perphenazine	404,2	171,2	35,0	8,80
218	Phenazone	189,1	77,1	50,0	2,24
219	Phencyclidine	244,2	91,1	50,0	7,58
220	Pheniramine	241,2	196,2	20,0	5,58
221	Phenylephrine	168,1	150,1	20,0	3,02
222	Phenyltoloxamine	256,2	72,0	35,0	7,82
223	Physostigmine	276,2	162,2	20,0	3,54
224	Pilocarpine	209,1	95,1	50,0	2,53
225	Pindolol	249,2	116,1	20,0	4,07
226	Pioglitazone	357,1	134,2	35,0	5,54
227	Pirbuterol	241,2	122,1	35,0	2,03
228	Pirenzepine	352,2	113,1	35,0	2,70
229	Piroxicam	332,1	95,1	50,0	3,96
230	Prajmalium	370,3	328,3	35,0	7,68
231	Prazepam	325,1	271,2	35,0	5,58
232	Prazosin	384,2	247,2	35,0	4,84
233	Primidone	219,1	91,0	50,0	1,93
234	Procainamide	236,2	163,2	20,0	2,24
235	Progesterone	315,2	109,1	35,0	5,61
236	Promazine	285,1	86,1	20,0	7,93
237	Prometryn	242,1	200,2	20,0	6,28

238	Propafenone	342,2	116,1	35,0	8,00
239	Propionylpromazine	341,2	86,1	35,0	8,31
240	Propranolol	260,2	183,2	20,0	6,73
241	Propyphenazone	231,1	189,2	20,0	3,82
242	Prothiopendyl	286,1	241,2	20,0	7,26
243	Protriptyline	264,2	191,2	35,0	7,79
244	Pseudoephedrine	166,1	148,1	20,0	2,88
245	Quetiapine	384,2	253,2	35,0	6,77
246	Quinapril	439,2	234,2	20,0	7,44
247	Quinine	325,2	79,0	50,0	7,23
248	Ramipril	417,2	234,4	20,0	6,98
249	Ranitidine	315,1	176,1	20,0	2,63
250	Repaglinide	453,3	230,2	35,0	8,07
251	Risperidone	411,2	191,2	35,0	7,37
252	Ritodrine	288,2	121,1	35,0	3,23
253	Ropivacaine	275,2	126,1	35,0	6,28
254	Rosiglitazon	358,1	135,1	35,0	5,02
255	Scopolamine	304,2	138,2	35,0	3,19
256	Serotonin	177,1	160,1	20,0	6,66
257	Sertindole	441,2	113,0	50,0	8,84
258	Sertraline	306,1	159,0	35,0	8,73
259	Sildenafil	475,2	58,0	50,0	5,96
260	Sotalol	273,1	133,1	35,0	2,49
261	Sulindac	357,1	233,2	50,0	4,35
262	Sulpiride	342,1	112,2	35,0	2,81
263	Talinolol	364,3	308,2	20,0	5,65
264	Tamoxifen	372,2	72,1	50,0	10,10
265	Telmisartan	515,2	497,3	50,0	8,73
266	Temazepam	301,1	255,2	20,0	4,21
267	Terfenadine	472,3	436,3	35,0	9,68
268	Tetracaine	265,2	176,2	20,0	6,73
269	Tetrazepam	289,1	225,2	35,0	5,65
270	Tetryzoline	201,1	91,1	50,0	4,70
271	THC	315,2	193,2	35,0	7,30
272	THC-COOH	345,2	327,2	20,0	6,00
273	THC-OH	331,2	313,2	20,0	6,91
274	Theobromine	181,1	138,1	20,0	0,81
275	Theophylline	181,1	124,0	20,0	0,95
276	Thioridazine	371,2	98,1	50,0	9,50
277	Tilidine	274,2	155,2	20,0	6,59
278	Timolol	317,2	261,2	20,0	4,49
279	Tizanidine	254,0	210,1	35,0	3,12
280	Tocainide	193,1	122,1	20,0	3,19
281	Tolbutamide	271,1	91,1	50,0	4,35
282	Toliprolol	224,2	91,0	50,0	5,47
283	Tramadol	264,2	58,0	50,0	5,23
284	Trazodone	372,2	176,1	35,0	6,17
285	Triamterene	254,1	237,2	35,0	3,51

286	Triazolam	343,1	308,2	35,0	4,21
287	Trifluoperazine	408,0	141,2	35,0	10,30
288	Trifluoperidol	410,2	165,1	35,0	8,80
289	Trimethoprim	291,1	230,2	35,0	3,47
290	Trimipramine	295,2	100,1	35,0	8,70
291	Urapidil	388,2	205,2	35,0	4,03
292	Valsartan	436,2	207,1	35,0	4,84
293	Vardenafil	489,2	151,2	50,0	7,33
294	Venlafaxine	278,2	58,0	35,0	5,96
295	Verapamil	455,3	165,1	35,0	8,49
296	Vincamine	355,2	337,3	20,0	6,21
297	Warfarin	309,1	163,1	20,0	4,91
298	Yohimbine	355,2	144,1	35,0	5,40
299	Zolpidem	308,2	235,2	50,0	6,03
300	Zopiclone	389,1	245,1	20,0	7,08
301	Zuclopenthixol	401,1	231,1	50,0	8,77

* retention time not known yet