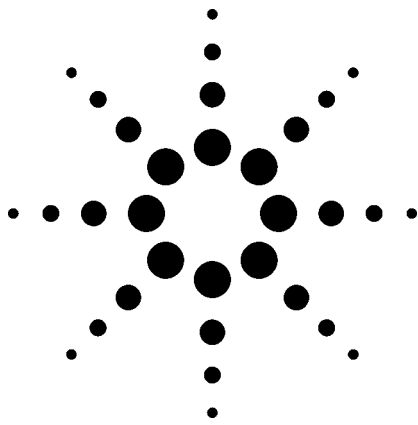


使用具有解卷积报告软件和新农药数据库的 GC/MS 筛选 926 种农药和内分泌干扰物

应用报告



食品和环境

作者

Philip L. Wylie
Agilent Technologies, Inc.
2850 Centerville Rd.
Wilmington, DE 19808-1610
USA

摘要

本文介绍了一种最新扩展的质谱数据库，来代替安捷伦的保留时间锁定农药数据库和解卷积农药应用。新的数据库包括了 926 种农药、内分泌干扰物质和相关化合物 — 比原来的数据库多了 359 种化合物，包括了日本的“肯定列表 (Positive List)”中用 GC/MS 分析的所有化合物。所有保留时间锁定的化合物，都可以在安捷伦的 GC/MS 保留时间锁定软件中精确重复。新的数据库可以作为标准的 GC/MS 数据库来确证化合物，或者结合安捷伦筛选软件在保留时间和质谱谱图匹配的基础上定性检测化合物。当这些数据库与安捷伦新版本的解卷积报告软件 (部件号 G1716AA 版本 A.03.00) 结合使用时，可以得到最大的收益。本方法对所有 926 种农药和内分

泌干扰物进行 GC/MS 筛选，大约只需要 2 分钟。解卷积帮助确证谱图中隐藏在共流出物中的农药。本文比较了新的数据库和较小的数据库，通过解卷积报告软件分析 17 个地表水样品。在新的数据库的协助下，解卷积报告软件找到了 99 种农药、代谢物、阻燃剂和相关污染物，而这些在以前的农药和内分泌干扰物保留时间所定数据库中是不包含的。

引言

几年前安捷伦科技在气相色谱 (GC) 和气相色谱 — 质谱 (GC-MS) 联用上引进了保留时间锁定 (RTL) 的概念。只要使用相同的初始方法和相同的色谱柱，RTL 软件使得世界上任何实验室的任何安捷伦 GC 或者 GC/MS 上的保留时间再现成为可能 (1)。既然任何实验室都可以重复另外一个实验室的保留时间，那么就有可能创建包含保留时间锁定的质谱数据库。通过在数据库上锁定方法，使用者可以在 GC/MS 文件中筛选数据库中的所有化合物。通过“命中数” (Hits) 来确定正确的保留时间和正确的谱图，从而排除假阳性结果，提供更精确的化合物确证 (2)。



Agilent Technologies

最近，安捷伦引入了解卷积报告软件（DRS），结合了质谱解卷积和传统的数据库检索和定量技术。解卷积报告软件是三种不同 GC/MS 软件包的结合：

- 1) 安捷伦 GC/MS 化学工作站
- 2) 结合 NIST '05 质谱库的 NIST 质谱搜索程序
- 3) 同样来自 NIST 的 AMDIS 软件

以前的解卷积报告软件作为一种广泛的农药分析解决方案，包括了 567 种农药和可疑内分泌干扰物的质谱图（AMDIS 格式）和锁定的保留时间（3）。

最近，安捷伦推出了一种最新扩展的农药和内分泌干扰物数据库（部件号 G1672AA），包括 926 种化合物。在以前的数据库基础上，增加了 359 种新的化合物到。同时，安捷伦也推了解卷积报告软件的新版本（部件号 G1716AA 版本 A.03.00），可以在任何安捷伦推出的或者用户自建的解卷积报告软件数据库上使用。

农药和内分泌干扰物数据库的内容

G1672AA 农药和内分泌干扰物数据库包含所有可用 GC 分析的农药，包括最近推出的农药。另外，还包括大量的代谢物，更多的内分泌干扰物，重要的多氯联苯和多环芳烃，一些染料（如苏丹红），人造的麝香化合物以及一些有机磷阻燃剂。

新的数据库包括：

- 安捷伦 GC/MS 化学工作站的常规分析质谱数据库
- 筛选数据库，集成到安捷伦 GC/MS 化学工作站上的安捷伦功能强大的筛选软件

- 所有 926 种化合物锁定的保留时间，安捷伦 5975 或 5973 的 GC/MS 用户可以在自己的实验室重现
- 用于安捷伦 G1716AA（A.03.00）解卷积报告软件的文件
- 可以装载到安捷伦的 G1701DA（D.02.00 SP1 版本或更高）的电子方法，包含 GC/MS 文件所需的仪器参数和解卷积报告软件处理的数据。这些参数列于表 1
- 实例文件
- 应用报告

2005 年 11 月 29 日，日本政府公布了“肯定列表”（Positive List）制度来规范农药、食品添加剂和兽药。设置了 758 种化学品的最大残留限量（MRL），同时从列表中除去了 65 种化合物。15 种物质的残留不得被检出。其他未提及的农用化学品的最大残留限量（MRL）一致定为 0.01 ppm（4）。新的列表于 2006 年 5 月 29 日实施。

在日本的肯定列表里有 265 种农药是用 GC/MS 分析。新的 G1672AA 农药数据库包含了所有这些化合物的质谱图和锁定的保留时间。因此，一个实验室可以在 GC/MS 运行后的 1-3 分钟内筛选这 265 种“肯定列表”中的化合物和其他几百种更多的农药。

实验

表 1 列出了安捷伦用于农药分析的仪器，软件和分析参数。根据所需的进样量的不同，可以使用程序升温汽化进样（PTV）或者分流/不分流进样方式。

表 1. 分析仪器与条件

气相色谱仪	Agilent 6890N
自动进样器	Agilent 7683 进样器和自动进样器
进样口	Agilent PTV 溶剂放空模式或分流/不分流
色谱柱	Agilent 30 m × 0.25 mm × 0.25 μm HP-5MSi (部件号 19091S-433i)
载气	氦气, 恒压模式
保留时间锁定	Chlorpyrifos-methyl 锁定在 16.596 min (公称柱头压 = 17.1 psi)
炉温程序	70 °C (保持 2 min), 以 25 °C/min 升温至 150 °C (保持 0 min), 以 3 °C/min 升温至 200 °C (保持 0 min), 以 8 °C/min 升温至 280 °C (保持 10–15 min)
PTV 进样口参数	温度程序: 40 °C (保持 0.25 min), 以 1600 °C/min 升温至 250 °C (保持 2 min); 放空时间: 0.2 min; 放空流速: 200 mL/min; 放空电压: 0.0 psi; 吹扫流速: 60.0 mL/min; 吹扫时间: 2.00 min
进样量	15 uL (用 50 uL 的注射器)
质谱仪	Agilent 5975 inert
调谐文件	Atune.u
模式	扫描 (或用 SIM DRS 库选择离子检测)
扫描范围	50–550 u
离子源、四极杆、传输线温度	分别为 230, 150 和 280 °C
溶剂延迟	4.00 min
倍增器电压	自动调谐电压
软件	
GC/MSD 化学工作站	安捷伦部件号 G1701DA (D02.00 sp1 版或更高版本)
解卷积报告软件	安捷伦部件号 G1716AA (A.03.00 版) 解卷积报告软件
谱库检索软件	NIST MS 检索 (2.0d 版或更新版本) (与 NIST '05 质谱库合在一起 — 安捷伦部件号 G1033A)
解卷积软件	自动质谱解卷积和鉴定软件 (AMDIS_32 2.62 版或更高版本; 与 NIST '05 质谱库合在一起 — 安捷伦部件 G1033A)
MS 谱库	NIST '05 质谱库 (安捷伦部件号 G1033A) Agilent RTL 农药和内分泌干扰物库 (Agilent 与 NIST 格式) (部件号 G1672AA)

结果和讨论

关于以前发表的文章 (3, 5, 6) 中介绍过的解卷积报告软件, 总结如下:

解卷积报告软件结合了三个相互独立的数据分析步骤。首先, GC/MS 化学工作站软件根据目标化合物的一个目标离子和三个确认离子, 对目标农药化合物进行一般的定量分析。报告给出检测到并经过校正的化合物的含量。对于数据库中的其他化合物, 将根据

解卷积报告软件中提供的农药平均响应因子来估计浓度。然后解卷积报告软件把数据文件发送给 AMDIS 解卷积图谱, 使用解卷积后的全谱在安捷伦 RTL 农药数据库中检索。在 AMDIS 可以设置一个过滤器, 从而使分析物的保留时间落在用户指定的时间窗口内。由于保留时间锁定的作用就是高精度地再现保留时间, 这个窗口一般比较小 — 一般为 10–20 秒。最后, 通过 AMDIS 解卷积的所有目标化合物的质谱图在 NIST 质谱库的 147, 000 种化合物中检索确证; 这一步没有保留时间要求。

此方法很快就被许多实验室采用，正是由于此方法可以在高含量共流出物基质的干扰下能够在复杂的色谱图中确证农药。事实上，这个解决措施十分有用，好多用户开始创建自己的解卷积报告软件数据库（7）。因此，解卷积报告软件从农药数据库中分离出来，可用于安捷伦提供的或者用户自建的数据库。

原来的 567 种化合物 RTL 农药数据库 (G1049A) 包括在当时已有的农药，少量代谢物及大部分可用 GC 分析的内分泌干扰物质。新版数据库包括更多的农药，内分泌干扰物和代谢物。此次更新还包括在食品和水中发现的其他种类的污染物。包括 18 种多氯联苯 (PCBs)，4 种多溴联苯 (PBBs)，一些多环芳烃 (PAHs)，一些有机磷的阻燃剂，三种重要的毒杀芬同系物和三种苏丹染料。

解卷积的优势

图 1 显示了 AMDIS 的一个界面，说明了解卷积软件的强大功能。图 1A 中的白线是总离子流色谱图，其他三条线是解卷积峰 (AMDIS 中的术语) 的提取离子流图。注意总离子流色谱图中的峰和提取离子峰不在一个位置，这个化合物实际上被共流出物所掩盖。图 1B 把化合物的解卷积谱图 (白色线) 同未解卷积的谱图 (黑色线) 重叠放置。很明显，共流出物掩盖了这个化合物，使分析不清晰。图 1C 显示了解卷积的峰 (白色谱图) 同数据库中的吡草伏 (黑色谱图) 匹配良好。RTL 农药数据库中吡草伏的保留时间是 26.933 分钟，同这个色谱图中看到的保留时间仅仅相差 2.3 秒。谱图的解卷积和锁定的保留时间结合使化合物的确证更加明确。

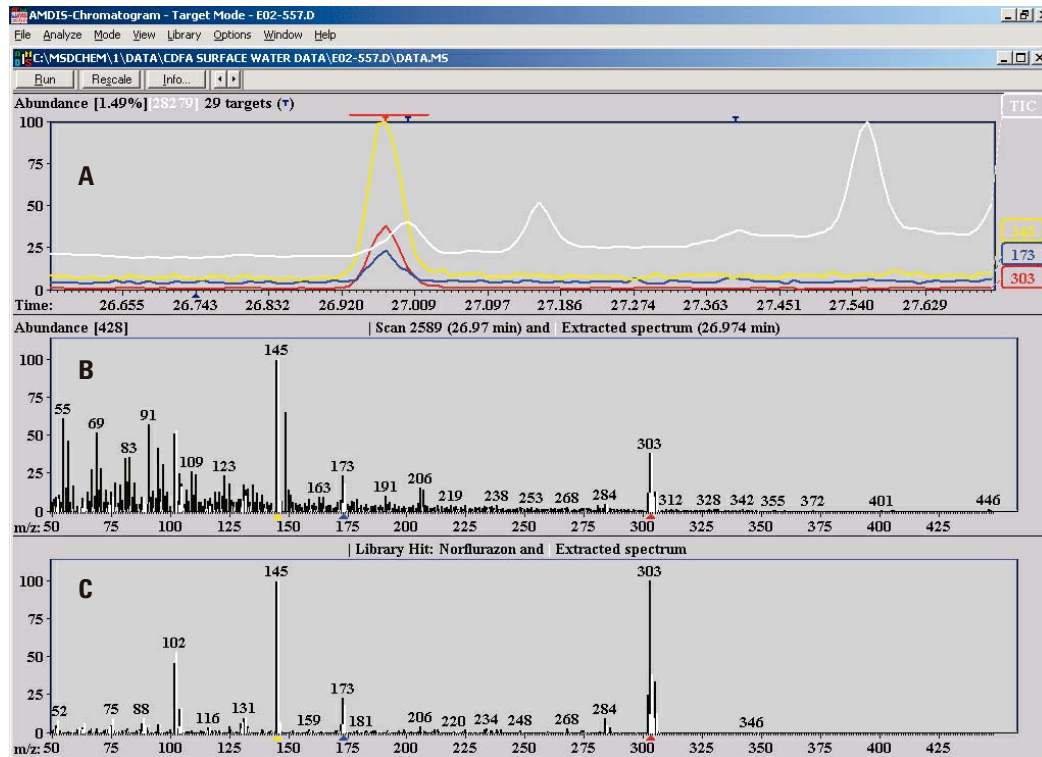


图 1. 确定吡草伏的 AMDIS 界面

- A) 吡草伏洗出的总离子流图和提取离子流图
- B) 重叠放置化合物的解卷积谱图 (白色线) 同 26.972 分钟处的谱图 (黑色线)
- C) 解卷积后的谱图与数据库中吡草伏的谱图一致

地表水分析 — 重复早期的研究

较早的研究中，比较了安捷伦的解卷积报告软件和常规的农药分析 (3)。加州农药管理局 (CDFA) 提供了在他们实验室分析的 17 种地表水提取物的数据文件。采用安捷伦的农药分析方法对 GC/MS 谱图进行时间锁定，从而使得用解卷积报告软件分析这些文件而不用重新进样。原来的解卷积报告软件分析使用的是 567 种化合物 RTL 农药数据库。为了比较，用新的 926 种化合物 RTL 农药数据库重新分析了相同的化合物。下面是其中一个样品的色谱图 (图 2) 和解卷积报告软件报告 (图 3)。

除了邻苯二甲酸盐，926 种化合物数据库确证了 7 种新的化合物 (图 3 中粗体表示)：4-氯苯异氰酸酯 (一种苯基脲类除草剂的代谢物)；3,4-二氯苯异氰酸酯 (敌草隆代谢物)；磷酸三 (-2-氯乙酯) (一种阻燃剂)；咖啡因 (一种刺激物)；啞菌环胺 (一种杀菌剂)；去甲基吡草伏 (吡草伏的代谢物，一种除草剂)；四丁氧基乙基磷 (一种阻燃剂)。虽然一般认为咖啡因不会有危险，之所以包括在数据库中是因为经常在污水中发现，在下水道中和各种药物或农药在一起 (8)。

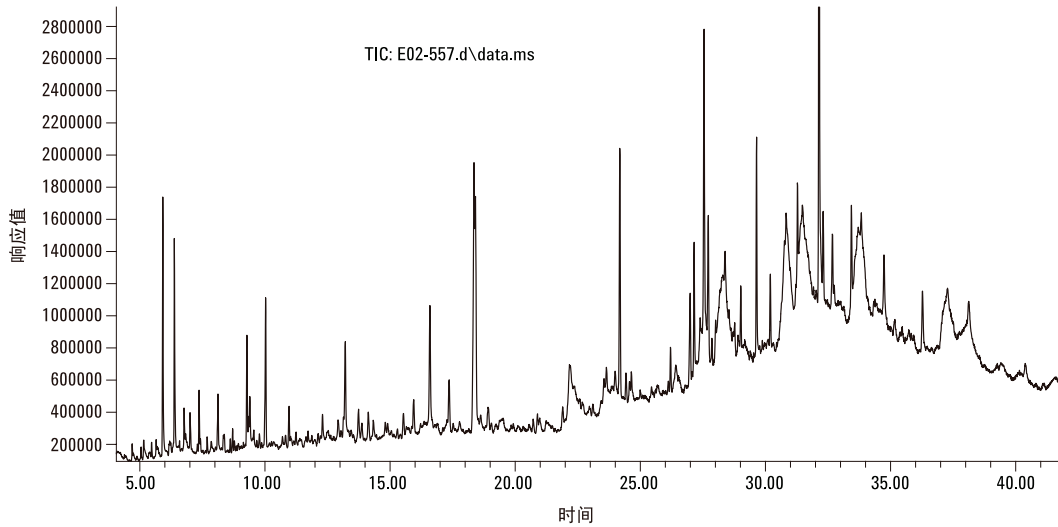


图 2. 通过解卷积报告软件采用新的 RTL 农药和内分泌干扰物数据库分析地表水提取物的色谱图。分析结果如图 3 所示

MSD Deconvolution Report

Sample Name: E02-557
Data File: C:\MSDCHEM\1\DATA\CDFA surface water data\E02-557.d
Date/Time: 11:24 AM Tuesday, Apr 4 2006

The NIST library was searched for the components that were found in the AMDIS target library.

RT	Cas #	Compound name	Agilent		RT Diff (sec.)	NIST	
			ChemStation amount (ng)	AMDIS match		reverse match	Hit number
4.4689	106445	4-Methylphenol		62	3.2		
4.4689	0000	3-Carbobenzyloxy-4-ketoproline				48	1
4.8840	104121	4-Chlorophenyl isocyanate		84	-1.8	86	2
6.3879	102363	Diuron Metabolite [3,4-Dichlorophenyl isocyanate]		99	3.1	95	1
6.8357	759944	EPTC		84	2.0	85	1
7.6988	95761	3,4-Dichloroaniline		93	2.1	89	2
7.9342	131113	Dimethylphthalate		67	1.7	84	2
8.1112	25013165	Butylated hydroxyanisole		63	-7.7		
8.1112	0000	7-Methoxy-2,2,4,8-tetramethyltricyclo [5.3.1.0(4,11)]undecane				62	1
8.941	29878317	Tolyltriazole [1H-Benzotriazole, 4-meth-]	1.29				
9.7903	134623	N,N-Diethyl-m-toluamide		85	2.2	84	2
10.0019	84662	Diethyl phthalate		98	2.6	92	1
10.7109	119619	Benzophenone		86	2.6	88	2
10.9684	126738	Tributyl phosphate		96	3.0	90	1
11.6491	1582098	Trifluralin		83	0.7	74	1
12.9326	122349	Simazine		88	1.4	86	2
13.4309	115968	Tris(2-chloroethyl) phosphate		79	1.0	78	1
13.7478	1517222	Phenanthrene-d10		95	1.3	83	1
15.4048	58082	Caffeine		80	1.6	74	1
15.9474	84695	Diisobutyl phthalate		90	3.2	88	4
16.5988	5598130	Chlorpyrifos Methyl		97	0.4	90	1
17.3653	7287196	Prometryn		90	1.5	84	1
18.4213	84742	Di-n-butylphthalate		99	0.4	94	1
18.9214	51218452	Metolachlor		90	0.7	87	1
20.5633	121552612	Cyprodinil		69	-0.1		
20.5633	76470252	9,9-Dimethoxy-9-sila-9, 10-dihydroanthracene				70	1
26.4247	23576241	Norflurazon, Desmethyl-		87	-4.5	69	2
26.9700	27314132	Norflurazon		87	1.5	79	1
26.9992	85687	Butyl benzyl phthalate		94	-0.5	94	1
27.3984	51235042	Hexazinone		89	0.8	83	1
28.0127	78513	Tris(2-butoxyethyl) phosphate		75	3.3	83	1
29.6537	117817	Bis(2-ethylhexyl)phthalate		98	0.3	90	3
33.9298	84764	Di-n-nonyl phthalate		65	-1.9		
33.9298	0000	Phthalic acid, 3,4-dichlorophenyl propyl ester				71	1
13.739		Phenanthrene-d10	10				

图 3. 地表水样品分析解卷积报告软件报告。粗体字表示的化合物在新的RTL农药数据库中被找到，原来的数据库由于不包括这些而没有发现

这个样品中，化学工作站在 8.941 分钟只发现了甲基苯骈三氮唑，但是 AMDIS 不能确证，包括手动也无法确证。AMDIS 以低的匹配度暂时性确证了叔丁基-4-羟基茴香醚，但是保留时间偏离了 -7.7 秒，比其它大多数命中的化合物都要多。这个化合物不在 NIST 库中，所以不能被确证。化学工作站方法要求所有三个确证离子峰在 $\pm 20\%$ 以内（相对），这对于一个复杂的样品是很严格的。这就解释了为什么化学工作站找到的化合物很少了。

AMDIS 确证了啞菌环胺（20.563 分钟），但是 NIST 数据库没有检索出来。下面一行显示最好的 NIST 匹配是葱的衍生物，不是啞菌环胺。当设置 AMDIS “可使用未确定峰”时就会出现这种结果，如图 4 所示。当在解卷积报告软件化合物确证配置中关闭这个

选项时，NIST 检索出的最好的匹配物质就是啞菌环胺。当化合物的确证中出现像啞菌环胺这样不明确的化合物时，同时执行两种解卷积报告软件检索方式并且比较结果是很有效的一种方法。

在以前介绍的比较中（3），解卷积报告软件可以确证所有的 CDFA 化学家发现的 37 种农药。然而，解卷积报告软件完成 17 个样品的测试花费大约 20 分钟，而手动操作需要 8 个小时（表 2）。而且，解卷积报告软件发现了 CDFA 报告中的一个假阳性结果，并且发现了另外 34 种农药和相关化合物。

使用新的 926 种化合物数据库，只需要 32 分钟即可完成分析所有样品，解卷积报告软件发现了另外的 99 种农药、代谢物、阻燃剂和相关化合物（表 2）。

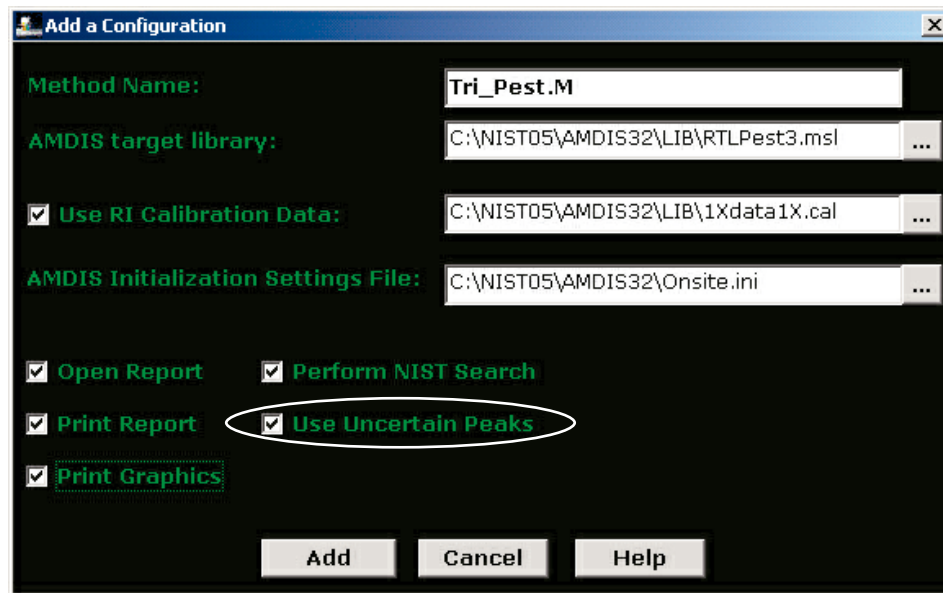


图 4. 方法名为 Tri_Pest 的解卷积报告软件配置界面。当方格中钩上“可使用未确定峰”时，AMDIS 将会使用未确定峰检索数据库。如果未钩上该项，AMDIS 就会忽略未确定峰。有时候，这个选项将会影响到与数据库的匹配质量

表 2. 采用传统方法 (CDFA) 和使用带两种数据库 (包含 567 种化合物的 G1049A 和包含 926 种化合物的 G1672AA) 的解卷积报告软件检测 17 种地表水提取物的结果比较

	CDFA	Agilent DRS (原来的 G1049A 数据库)	Agilent DRS (G1672 AA 数据库)
匹配的农药数目	37	同样的 37 种加上另外的 34 种化合物	同样的 37 种加上另外的 99 种化合物
不匹配农药数目	1	0	0
处理所需时间	~8 小时 (只用化学工作站)	20 分钟	32 分钟

立体异构体的处理

很多化合物有多个立体异构体, 具有相同的质谱图。例如, 氟氯氰菊酯有三个手性中心产生了四对非对映异构体。很难而且有时也不可能确定这些异构体的洗脱顺序, 大部分分析工作者按异构体的总量来报告。安捷伦的 G1049A RTL 农药数据库任意将这些异构体按罗马字母分配, I 是最早流出的异构体, II 是第二个, 依次类推。所有这些异构体都有着相同的 CAS 号。一般采用 CAS 号来确定“不稳定的立体化学品”。这将导致 AMDIS 的一些不兼容问题, 说明如下。

AMDIS 软件利用“化学品鉴别号”来区别这些化合物。最简单的和最一致的方法是使用美国化合物的 CAS 号。AMDIS 默认的设置就是在分析 GC/MS 数据文件时, 每个 CAS 号只使用一次。这样看上去更合理, 要求数据库的每个条目都有一个不同的 CAS 号。在 AMDIS 的分析/设置/确证的下拉菜单中选择条目, 可以允许每个化合物有多个匹配。这样, 就会使多个峰具有相同的化合物名称。

在新的 RTL 农药数据库 (G1672AA) 中, 仍然保留罗马数字名称, 给系列中的第一个异构体真正的 CAS 号。给系列中其它的异构体一个统一的安捷伦编制的 CAS 号。真正的 CAS 号在条目中化合物的名字之后。例如, 氟氯氰菊酯异构体在数据库中的条目如表 3 所示。

表 3. 新 G1672AA RTL 农药数据库中多个立体异构体的排列方法

保留时间	化合物名称*	CAS 号**
32.218	氟氯氰菊酯 I	68359-37-5
32.359	氟氯氰菊酯 II {CAS # 68359-37-5}	999028-03-4
32.477	氟氯氰菊酯 III {CAS # 68359-37-5}	999029-03-7
32.536	氟氯氰菊酯 IV {CAS # 68359-37-5}	999030-03-4

* 在一个系列中, 最早流出的异构体后面加上 I, 并配以真正的 CAS 号。后面的同分异构体用唯一的、但是由安捷伦编制的 CAS 号 (见注释**)。它们的实际 CAS 号在化合物名称后面的括号里。

** 氟氯氰菊酯 I 已经给出了真正的 CAS 号。氟氯氰菊酯 II 给出了唯一号, 能够与实际 CAS 号区别出来, 因为它们都是在第一个连字符前有 6 个数字 (共 9 个数字) 并且开头都是 999。

图 5 说明了两个数据库是如何使用 AMDIS 配置（每个化合物一对一匹配）来确证在菠菜样品中的氯菊酯的。使用旧的 567 种化合物数据库（G1049A）因为只用一次 CAS 号，所以只确认了一个氯菊酯异构体。使用新版的 926 种化合物 RTL 农药数据库（G1672AA），确证了氯菊酯的两个异构体。不出所料，用氯菊酯 II 的编制 CAS 号在 NIST 数据库上没有匹配。因此，软件在接下来的一行打印出匹配最好的化合物。这个化合物，环丙基甲酸衍生物就是氯菊酯的异构体。

现在，只要在解卷积报告软件中开启 NIST 数据库检索，报告就会在编制 CAS 号化合物之后打印出另外一行。注意这些编制 CAS 号一般是以 999 开头的 9 位数字。

A)

RT	Cas #	Compound name	Agilent			NIST	
			ChemStation amount (ng)	AMDIS match	RT Diff (sec.)	reverse match	Hit number
31.6158	52645531	Permethrin II		88	3.9	91	3

B)

RT	Cas #	Compound name	Agilent			NIST	
			ChemStation amount (ng)	AMDIS match	RT Diff (sec.)	reverse match	Hit number
31.4127	52645531	Permethrin I		78	2.6	81	3
31.6088	999046036	Permethrin II {CAS # 52645-53-1}		65	3.5		
31.6088	51877748	Cyclopropanecarboxylic acid, 3-(2,2-dichlorovinyl)-2,2-dimethyl-, (3-phenoxyphenyl)methyl ester, (1R-trans)-				95	1

图 5. A) 当 AMDIS 不允许一个化合物有多重匹配时，解卷积报告软件使用 G1049A 的 567 种化合物数据库只检测到氯菊酯的一个异构体
B) 相同环境下解卷积报告软件使用 G1672AA 的 926 种化合物数据库检测到两种氯菊酯的异构体

结论

新的 G1672AARTL 农药和内分泌干扰物数据库比它的早期版本包括了更多的目标化合物，增加了 359 种新的化合物，是目前最全面的数据库。增加了许多新的农药、代谢物和内分泌干扰物，例如重要的多氯联苯，多溴联苯，多环芳烃，人造麝香化合物，苏丹染料以及有机磷阻燃剂。此数据库包括新的日本“肯定列表”制度中所有使用 GC/MS 检测的分析物。

结合完整的解卷积报告软件方法，可以在约两分钟的时间内，在每个样品的 GC/MS 数据文件中筛选所有的 926 种化合物。对于检测食品和环境样品中的这些化合物，这是一种最快、最全面、最精确、最简单的方法。

参考文献

1. V.Giarocco, B.Quimby, 和 M.Klee, “保留时间锁定：概念和应用”，安捷伦科技，印刷号 5966-2469E, www.agilent.com/chem
2. H.Prest, P.Wylie, K.Weiner, 和 D.Agnew, “使用 6890/5973 GC/MSD 系统有效筛选农药和内分泌干扰物质”，安捷伦科技，印刷号 5968-4884E, www.agilent.com/chem
3. P.L.Wylie, M.J.Szelewski, C.-K.Meng, C.P.Sandy, “GC/MSD 使用解卷积报告软件全面筛选农药”，安捷伦科技，印刷号 5989-1157EN, www.agilent.com/chem
4. “农用化学品残留的肯定列表制度介绍，食品安全管理局，健康劳动社会安全部” <http://www.mhlw.go.jp/english/topics/foodsafety/positivelist060228/introduction.html>

5. C.P.Sandy, “使用解卷积报告软件对添加和未添加的水果提取物中农药残留的盲检”，安捷伦科技，印刷号 5989-1564EN, www.agilent.com/chem
6. C.Lesueur 和 M.Gartner, “全扫描，选择离子检测，解卷积报告软件对水果和蔬菜样品中农药多残留的常规性和定量”，2005 *Ernahrung/Nutrition*, **29** (11) 466–471
7. X.Ping, C.-K.Meng 和 M.Szelewski, “安捷伦 GC/MSD 解卷积报告数据库的应用”，安捷伦科技，印刷号 5989-2249EN, www.agilent.com/chem
8. “环境中新的污染物的分布和突发事件的方大规模研究 — 探索研究”，USGS, *Contaminant Occurrence Studies*, http://toxics.usgs.gov/topics/reconnaissance_studies.html

更多信息

有关我们产品和服务的更多信息请访问我们的网址 www.agilent.com/chem/cn.

致谢

作者对 Landesuntersuchungsanstalt Sachsen, Institut, Chemnitz, Germany 的 Dr.G.Kempethe 提供了许多更新数据库的数据表示感谢。同时感谢 CDFA 的 Dr.Mark Lee 和 Mr.Steve Siegel 提供了地表水提取物的数据文件。

附录 A

数据库中化合物列表

1,2,4-三氯苯	2,6-二甲基苯胺	乙草胺
1,2-二溴-3-氯丙烷	2-[3-氯苯氧基]丙酰胺	三氟羧草醚
1,3,5-三溴苯	2-氯苯酚	苯草醚
1,3-二氯苯	2-乙基-1,3-己二醇	氟酯菊酯
17a-乙炔基雌二醇	2-乙基-6-甲基苯胺	甲草胺
1-萘酚	2-羟雌甾二醇	艾氏剂
2-(1-萘)乙酰胺	2-甲基-4,6-二硝基苯酚	草毒死
2-(2-丁氧基乙氧基)乙基硫酸盐	2-甲基苯酚	莠灭津
避虫醇	2-硝基苯酚	赛果
2,3,4,5-四氯硝基苯	2-苯氧丙酸	灭害威
2,3,4,5-四氯苯酚	3,4,5-混杀威	虫螨脒
2,3,4,6-四氯苯酚	3,4-二氯苯胺	虫螨脒代谢物[甲脒, N-(2,4-二甲基苯基)-N'-甲基-]
2,3,5,6-四氯苯酚	3,5-二氯苯胺	啉啉醇
2,3,5,6-四氯对联三苯	3-氨基苯酚	敌菌灵
2,3,5-三氯苯酚	3-氯-4-氟苯胺	苯胺
2,3,5-混杀威	3-氯-4-甲氧苯胺	莎稗磷
2,3,6-三氯苯甲醚	3-氯苯胺	葱
2,3,7,8-四氯二苯吡啉	3-羟基吡喃丹	杀螨特 I
2,3,7,8-四氯二苯异吡啉	3-吡啉乙腈	杀螨特 II {CAS#140-57-8}
2,4,5,6-四氯间二甲苯	3-三氟甲基苯胺	阿特拉通
2,4,5-涕甲酯	4,4'-二氯苯甲酮	阿特拉津
2,4,5-三氯苯胺	4,4'-二氨基二苯醚	去乙基阿特拉津
2,4,5-三氯苯酚	4,6-二硝基-邻甲酚	戊环唑
2,4,5-三氯-对三联苯	4-氨基联苯	唑啉磷
2,4,5-三甲苯胺	4-溴苯胺	Azibenzolar-S-methyl
2,4,6-三溴苯甲醚	4-氯-2-甲基苯胺	乙基谷硫磷
2,4,6-三溴苯酚	4-氯-3-甲基苯胺	谷硫磷
2,4,6-三氯苯甲醚	4-氯苯胺	叠氮津代谢物[2-氨基-4-异丙基氨基-6-甲硫基-1,3,5-三嗪]
2,4,6-三氯苯酚	4-氯苯基异氰酸酯	叠氮津
2,4-滴甲酯	4-异丙基苯胺	偶氮苯
2,4-滴正丁酯	4-甲基苯酚	氧化偶氮苯
2,4-滴丁酸甲酯	4-硝基苯酚	腈啉菌酯
2,4'-二氯二苯甲酮 (2,4'-三氯杀螨醇降解产物)	4-壬基苯酚	燕麦灵
2,4-二氯苯酚	5,7-二羟基-4'-甲氧基异黄酮	Beflubutamid
2,4-二氯苯基苯磺酸酯	9,10-蒽醌	苯霜灵
2,4-二甲基苯胺	威杀灵	草除灵
2,4-二甲基苯酚	威杀灵	恶虫威
2,6-二氯苯甲酰胺	乙酰甲胺磷	氟草胺
2,6-二氯氟苯	灭螨醌	
	吡虫清	

丙硫克百威	乙基溴硫磷	杀虫脒
吡草黄	溴螨酯	壤虫氯磷
麦锈灵	溴苯腈	氟唑虫清
解草酮	溴苯腈辛酸酯	杀螨醇
苯达松	糠菌唑 I	燕麦酯
苯达松甲基衍生物	糠菌唑 II {CAS # 116255-48-2}	杀螨酯
杀草丹	合杀威	毒虫畏
苯, 1,3-二(溴甲基)-	磺噻菌灵	顺式毒虫畏
苯磺酰胺	噻嗪酮	反式毒虫畏
联苯胺	丁草胺	氯甲丹
苯并[a]蒽	氟丙啉草酯	氯甲磷
苯并[a]芘	草胺磷	草枯醚
苯并[b]萤蒽	氧丁叉威	乙酯杀螨醇
苯并[ghi]芘 (二萘嵌苯)	地乐胺	地茂散
苯并[k]萤蒽	邻苯二甲酸丁苄酯	丙酯杀螨醇
苯甲酮	苏达灭	百菌清
苯螨特	叔丁基-4-羟基茴香醚	绿麦隆
新燕灵	硫线磷	氯苯胺灵
苯甲酸苄酯	苯酮唑	毒死蝉
β-雌二醇	咖啡因	甲基毒死蝉
α-六六六异构体	敌菌丹	敌草索
β-六六六异构体	克菌丹	草克乐
δ-六六六异构体	西维因	氯硫磷
ε-六六六异构体	长杀草	氯甲硫磷
联苯胼酯代谢物 (5-苯基-邻-茴香胺)	呋喃丹	氯甲硫磷砒
治草醚	呋喃丹-3-酮	氯甲硫磷亚砒
氟氯菊酯	呋喃丹-7-苯酚	乙菌利
乐杀螨	三硫磷	茚
反丙烯除虫菊	丁硫克百威	瓜菊酯 I
反丙烯除虫菊-S-环戊烯基异构体	萎锈灵	瓜菊酯 II
右旋反灭虫菊酯	氟酮唑草	吡啶酮草酯
联苯	氯环丙酰胺	顺式氯丹
二(2,3,3,3-四氯丙基)醚	香芹酮	炔草酯
邻苯二甲酸双(2-丁氧基乙)酯	Cashmeran	异恶草酮
邻苯二甲酸双(2-乙基己基)酯	Cekafix	噻氧乙酸
双酚 A	萨利麝香	蝇毒磷
双苯三唑醇 I	灭螨猛	鼠立死
双苯三唑醇 II {CAS # 55179-31-2}	草灭平甲酯	丁烯磷
啶酰菌胺 (BAS510)	地快乐	育畜磷
除草定	氯杀螨	草净津
溴苯烯磷-(E)	氯杀螨砒	苯腈磷
溴苯烯磷-(Z)	冰片丹	杀螟腈
溴丁酰草胺	氯溴隆	环糠酰胺
溴烯杀	氯草灵	草灭特
溴硫磷	开蓬	Cyclopentadecanone
	反式六氯	环莠隆

环氟菌胺	抑菌灵代谢物 (DMSA)	敌螨普 I
氟氯氰菊酯 I	二氯萘醌	敌螨普 II {CAS # 39300-45-3}
氟氯氰菊酯 II {CAS # 68359-37-5}	抑害胺	敌螨普 III {CAS # 39300-45-3}
氟氯氰菊酯 III {CAS # 68359-37-5}	双氯酚	敌螨普 IV {CAS # 39300-45-3}
氟氯氰菊酯 IV {CAS # 68359-37-5}	2,4-滴丙酸	邻苯二甲酸二正辛酯
氟氯草酯	2,4-滴丙酸甲酯	地乐酚
氯氟氰菊酯 I (λ)	敌敌畏	地乐酯
氯氟氰菊酯 (γ)	苜氯三唑醇	地乐酚甲酯
甲基异丙苯基吡咯	双氯氟菌胺 I	地乐消酚
霜脍氰	双氯氟菌胺 II {CAS # 139920-32-4}	地乐消
氯氟菊酯 I	禾草灵	邻苯二甲酸二正丙酯
氯氟菊酯 II {CAS # 52315-07-8}	氯硝胺	恶茂醚 I
氯氟菊酯 III {CAS # 52315-07-8}	百治磷	恶茂醚 II {CAS # 63837-33-2}
氯氟菊酯 IV {CAS # 52315-07-8}	邻苯二甲酸二环己酯	杀抗松
顺式苯醚氰菊酯	双环戊二烯	二氧威
反式苯醚氰菊酯 {CAS # 39515-40-7}	狄氏剂	敌杀磷
环丙津	安塔	敌鼠
环丙唑醇	乙霉威	草乃敌
噻菌环胺	二乙基苯并噻唑 (硫逐甲酸) (EXD)	邻苯二甲酸二苯酯
酯菌胺	邻苯二甲酸二乙酯	二苯胺
灭蝇胺	二甘醇	杀草净
右旋-(顺反) 苯醚菊酯 I	乙底酚	Dipropyl isocinchomeronate
右旋-(顺反) 苯醚菊酯 II {CAS#260002-80-2}	恶醚唑 I	乙拌磷
棉隆	恶醚唑 II {CAS # 119446-68-3}	二氧乙拌磷
DDMU [1-氯-2,2-二(4'-氯苯基)]	枯莠隆	灭菌磷
十氯代联苯	吡氟草胺	氟硫草定
溴氰菊酯	邻苯二甲酸二异丁基酯	敌草隆
田乐磷	甲氟磷	敌草隆代谢物 [3,4-二氯苯异氰酸酯]
内吸磷	呱草丹	吗菌灵 I
砒吸磷	克草胺	吗菌灵 II {CAS # 1593-77-7}
去溴-溴丁酰草胺	戊草津	敌菌酮
异苯敌草	噻吩草胺	克瘟散
敌草净	噻节因	烯炔菊酯 I
氯亚磷	乐果	烯炔菊酯 II {CAS # 54406-48-3}
燕麦敌 I	烯酰吗啉-(E)	烯炔菊酯 III {CAS # 54406-48-3}
燕麦敌 II {CAS # 2303-16-4}	烯酰吗啉-(Z) {CAS # 110488-70-5}	烯炔菊酯 IV {CAS # 54406-48-3}
邻苯二甲酸二戊酯	驱蚊酯	烯炔菊酯 V {CAS # 54406-48-3}
二噻磷	甲基毒虫畏	硫丹 (α 异构体)
牛津郡二噻磷	敌蝇威	硫丹 (β 异构体)
二苯并[a,h]蒽	醚菌胺	硫丹乙酯
麦草畏	邻苯二甲酸二正丁酯	硫丹内酯
麦草畏甲酯	邻苯二甲酸二正己酯	硫丹硫酸盐
异氯磷	烯唑醇	异狄氏剂
除线磷	敌乐胺	异狄氏剂醚
抑菌灵	邻苯二甲酸二正壬酯	异狄氏剂酮
	敌螨通	

苯硫磷	2,4,5-涕丙酸甲酯	氟啶菌酯
氧唑菌	苯硫威	噻唑菌酮
扑草灭	稻瘟酰胺	抑草丁
抑草蓬	噁唑禾草灵	抑草丁甲酯
高氟戊菊酯	双氧威	氟草同
禾草畏	拌种咯	氟咯草酮 I
乙环唑	甲氟菊酯	氟咯草酮 II {CAS # 61213-25-0}
丁氟消草	苯锈啶	氟咯草酮, 去氯
噻二唑隆	除螨酯	氟草烟-1-甲基庚基酯
苯虫威	丰索磷	调啞醇
抑草威	牛津郡丰索磷	呋草酮
乙硫磷	牛津郡丰索磷砒	氟硅唑
醚菊酯	丰索磷砒	达草氟
乙呋草黄	倍硫磷	氟酰胺
乙呋草黄, 2-酮	倍硫磷亚砒	粉唑醇
灭克磷	倍硫磷砒	氟胺氟菊酯 I
氯氟草醚乙酯	非草隆	氟胺氟菊酯 II {CAS # 102851-06-9}
促长啞	氟戊菊酯 I	灭菌丹
乙撑硫脲	氟戊菊酯 II {CAS # 51630-58-1}	地虫磷
特苯噁唑	Fepropimorph	安果
氯唑灵	氟虫腈	噻唑磷 I
氯唑灵, 去氯-(5-乙氧基-3-二氯甲基-1,2,4-噻二唑)	氟虫腈, 去亚硫酰基	噻唑磷 II {CAS # 98886-44-3}
氧啞啞磷	氟虫腈硫化物	麦穗宁
丁子香酚	氟虫腈砒	呋霜灵
环十五内酯 (15-十五内酯)	强氟燕灵	呋氨丙灵
噁唑菌酮	甲氟燕灵	呋线威
伐灭磷	啞螨酯	解草呋
咪唑菌酮	精吡氟禾草灵	拌种胺
克线磷亚砒	氟啞胺	卤醚菊酯
克线磷砒	异丙吡草酯	吡氟氯禾灵
异啞菌醇	噻唑啞	七氯
抗啞啞	氯消草	环氧七氯异构体 A
抗啞啞代谢物	氟氟戊菊酯 I	环氧七氯异构体 B
啞啞啞	氟氟戊菊酯 II {CAS # 70124-77-5}	庚虫磷
腈苯唑	氟噁菌	六溴苯
解草唑乙酯	氟噻草胺	六氯苯
皮蝇磷	氟节胺	菌啞啞
牛津郡皮蝇磷	酰亚胺苯氧乙酸戊酯	己啞醇
解草啞	氟噁啞啞	六啞同
呋菌胺	呋草隆	己烷雌啞
环啞菌胺	茛菝	蒙五一二
杀螟硫磷	芬	烯菌灵
牛津郡杀螟硫磷	消草啞	咪草酯 I
丁苯威	乙羧氟草啞	咪草酯 II {CAS#81405-85-8}
2,4,5-涕丙酸	氟菌安	酰啞啞
	菌啞灵	酰啞啞-去苄基

茚苯[1,2,3-cd]芘	2甲4氯丙酸甲酯	久效磷
噁二唑虫和二氧威降解产物[苯酚, 2-(1,3-二氧戊环-2-基)-]	苯噻草胺	绿谷隆
碘苯腈	吡咯二酸二乙酯	葵子麝香
碘苯腈辛酸酯	氟草磺	麝香酮
环戊唑醇	灭蚜松	伞花麝香
异稻瘟净	醚菌胺	三甲苯麝香 (moschustibeten)
异菌脲	二噻磷	二甲苯麝香
缬霉威 I	丙氧灭锈胺	腈菌唑
缬霉威 II {CAS # 140923-25-7}	甲霜灵	N,N-二乙基-间-甲苯酰胺
Irgarol	苯嗪草	N-1-萘乙酰胺
氯唑磷	甲基一零五九硫醇	二溴磷
碳氯灵	吡草胺	萘
敌稻瘟	环戊唑菌 I	萘二甲酐
丁环隆	环戊唑菌 II {CAS # 125116-23-6}	萘丙胺
水胺硫磷	噻唑隆 (降解产物)	草萘胺
异艾氏剂	虫螨畏	烟碱
异柳磷	甲胺磷	磺乐灵
牛津郡异柳磷	甲呋菌胺	氯定
噻丁草	杀扑磷	除草醚
异丙威	灭虫威	异丙消
异乐灵	灭虫威砒	N-甲基-1-萘乙酰胺
稻瘟灵	灭虫威亚砒	顺式九氯
异丙隆	灭多虫	反式九氯
异恶草胺	蒙五一五 I	达草灭
双苯恶唑酸	蒙五一五 II {CAS # 40596-69-8}	达草灭, 去甲基
异噁氟草	盖草津	氟苯嘧啶醇
异噁唑磷	甲氧滴滴涕	o,p'-DDD
茉莉菊酯 I	甲氧滴滴涕烯烃	o,p'-DDE
茉莉菊酯 II	乙酸 (2-萘氧) 甲酯	o,p'-DDT
碘硫磷	甲基对氧磷	八氯苯乙烯
蒙七七七	甲基对硫磷	邻联茴香胺
亚胺菌	乙酸-1-萘甲酯	邻二氯苯
乳氟禾草灵	苯丙隆	甲呋酰胺
环草定	秀谷隆	氧乐果
对溴磷	异丙甲草胺	邻苯基苯酚
牛津郡对溴磷	速灭威	坪草丹
林丹	又氨苯酰胺- (E)	邻氨基偶氮甲苯
利谷隆	又氨苯酰胺- (Z) {CAS # 133408-50-1}	黄草消
马拉硫磷	苯菌酮	解草腈
马拉硫磷-0-同系物	赛克津	恶草灵
2甲4氯甲酯	速灭磷	噁霜灵
2甲4氯丁氧基乙酯	灭蚊灵	甲氧又威
2甲4氯丁酸甲酯	草达灭	氧化萎锈灵
间甲酚	杀草利	氧化氯丹
灭蚜磷		砒吸磷
		乙氧氟草醚

p,p'-DDD	菲	猛杀威
p,p'-DDE	菲-d10	人造猛杀威 [5-异丙基-3-甲基苯酚]
p,p'-DDM [二(4-氯苯)甲烷]	芬硫磷	扑灭通
p,p'-DDT	苯酚	扑草净
p,p'-二溴苯甲酮	吩噻嗪	毒草安
p,p'-开乐散	苯醚菊酯 I	百维灵
多效唑	苯醚菊酯 II	敌稗
对氧磷	苯氧乙酸	丙虫磷
对硫磷	稻丰散	克螨特
PBB 52 四溴联苯	甲拌磷	克螨特代谢物 [环己醇, 2-(4-特丁基苯氧基)]
PBB 101	甲拌磷砷	扑灭津
PBB 15	甲拌磷亚砷	烯虫磷
PBB 169 六溴联苯	牛津郡甲拌磷	苯胺灵
PCB 101	伏杀磷	丙环唑 I
PCB 105	棉安磷	丙环唑 II {CAS # 60207-90-1}
PCB 110	亚胺硫磷	异丙草胺
PCB 118	磷胺 I	残杀威
PCB 126	磷胺 II {CAS # 13171-21-6}	拿草特
PCB 127	四氯苯酞	芊草丹
PCB 131	酞酰亚胺	丙硫菌唑-去硫基
PCB 136	毒莠定甲酯	丙硫磷
PCB 138	氟吡酰草胺	发果
PCB 153	啶氧菌酯	比锈灵
PCB 169	杀鼠酮	吡唑硫磷
PCB 170	粉病灵	氟唑草酯
PCB 180	增效醚	杀草敏
PCB 30	呱草磷	定菌磷
PCB 31	抗蚜威	芊草唑
PCB 49	乙基虫螨磷	茚
PCB 77	虫螨磷	除虫菊酯 I
PCB 81	蚊蝇灵	除虫菊酯 II
对二氯苯	对硝基甲苯	稗草畏
克草猛	扑打散	哒螨酮
戊菌唑	顺式炔酮菊酯	打杀磷
胺硝草	反式炔酮菊酯 {CAS#23031-36-9}	达草止
五氯苯胺	丙草胺	病定清
五氯苯甲醚	噻菌灵	啶斑肟 I
五氯苯	丙氯灵	啶斑肟 II {CAS # 88283-41-4}
五氯硝基苯	杀菌利	环酯草醚
五氯苯酚	氨基丙氟灵	二甲噻菌胺
蔬草灭	丙溴磷	啞胺苯醚
氯菊酯 I	丙溴磷代谢物 (4-溴-2-氯苯酚)	肟啶草 (E)
氯菊酯 II {CAS # 52645-53-1}	卡乐施	肟啶草 (Z) {CAS # 136191-64-5}
乙滴滴	茉莉酸诱导体 I	
粉檀麝香	茉莉酸诱导体 II {CAS # 158474-72-7}	
克线磷		

蚊蝇醚	四氯硝基苯	唑菌醇
咯嗉酮	顺式七氟菊酯	野麦畏
噻恶磷	双硫磷	三唑磷胺
灭藻醌	特草定	抑芽唑
噻氧灵	芽根草	唑蚜威
五氯硝基苯代谢物 (五氯苯基甲基硫化物)	特丁磷	三唑磷
噻禾灵	牛津郡特丁磷砒	磷酸三丁酯
吡咪唑菌	特丁磷砒	三硫代亚磷酸三丁酯
灭虫菊	甲氧去草净	杨菌胺
灭虫菊 I	Terbuthylazine	敌百虫
灭虫菊 II {CAS # 10453-86-8}	Terbuthylazine-desethyl	壤虫磷
鱼藤酮	Terbutryne	绿草定甲酯
S,S,S-三丁基三硫赶磷酸酯	杀虫畏	三氯生
八甲磷	氟醚唑	三氯生-甲基
另丁津	三氯杀螨砒	磷酸三甲苯酯, 间位
去乙基另丁津	特普	磷酸三甲苯酯, 邻位
密草通	四氢邻苯二甲酰亚胺, 顺式1,2,3,6-	磷酸三甲苯酯, 对位
灭虫硅醚	胺菊酯 I	三环唑
硅噻菌胺	胺菊酯 II {CAS # 7696-12-0}	十三吗啉, 4-十三烷基
西玛津	硫代二磷酸四丙基酯	灭草环
硅氟唑	杀螨仔	草达津
西草津	噻醚草胺	三乙基磷酸酯
季酮螨酯	可可豆碱	蜗螺杀
季酮甲螨酯	涕必灵	肟菌酯
螺噻茂胺 I	噻氟吡草	氟菌唑
螺噻茂胺 II {CAS # 118134-30-8}	溴氟唑菌	氟乐灵
螺噻茂胺代谢物 (4-特丁基)	特氧叉威	三苯基磷酸酯
苏丹 I	甲基乙拌磷	磷酸三 (-2-丁氧基乙基) 酯
苏丹 II	硫磷嗪	磷酸三 (-2-氯乙基) 酯
苏丹红	麝香草酚	磷酸三 (-2-乙基己基) 酯
草克死	丁草威 I	戊叉菌唑
对氨基苯磺酰胺	丁草威 II {CAS # 36756-79-3}	Tricyclopyrbutoxyethyl
磺胺草唑	甲基立枯磷	Tycor (SMY 1500)
硫特普	唑虫酰胺	高烯效唑
硫	对甲抑菌灵	蚜灭多
乙丙硫磷	对甲抑菌灵代谢物 (DMST)	灭草猛
灭草灵	甲基苯骈三氮唑 [1H-苯并三唑, 4-甲基-]	烯菌酮
他莫昔芬	甲基苯骈三氮唑 [1H-苯并三唑, 5-甲基-]	XMC (3,4-Dimethylphenyl N-methylcarbama
清菌噻唑	吐纳麝香	XMC (3,5-Dimethylphenyl N-methylcarbama
戊唑醇	毒杀芬 Parlar 26	苯酰菌胺
吡螨胺	毒杀芬 Parlar 50	苯酰菌胺降解产物
噻丙磷	毒杀芬 Parlar 62	
丙戊草胺	反式氯丹	
丁唑隆	四氟菊酯	
	Traseolide	
	三唑酮	

安捷伦对于本文中的错误或及设备、性能或本品的使用有关的意外损坏或由此造成的损坏概不负责。

本出版物的信息、说明和技术指标如有变更，恕不另行通知。

© 安捷伦科技公司版权所有，2006

中国印刷

2006年4月18日

5989-5076CHCN



Agilent Technologies