

Скрининг 926 пестицидов и эндокринных деструкторов методами ГХ/МС с использованием программного обеспечения, генерирующего отчеты о деконволюции, и новой библиотеки пестицидов

Рекомендации по применению

Пищевая промышленность и экология

Авторы

Филип Л. Вайли (Philip L. Wylie)
Agilent Technologies, Inc.
2850 Centerville Road
Wilmington, DE 19808-1610,
США

Аннотация

Внедрены обновленные и существенно расширенные библиотеки масс-спектров, заменившие библиотеку фиксированного времени удерживания (RTL) пестицидов компании Agilent и программу создания отчетов деконволюции пестицидов (DRS). Новая библиотека содержит 926 пестицидов, эндокринных деструкторов и родственных соединений – на 359 больше, чем исходная библиотека. Включены все соединения для анализа ГХ/МС, разрешенные новыми законодательными положениями к применению в Японии. Для всех соединений имеется фиксированное время удерживания, которое можно в точности воспроизвести, используя систему ГХ/МС Agilent и ПО ChemStation для фиксации времени удерживания. Новую базу данных можно использовать в качестве стандартной библиотеки ГХ/МС для идентификации соединений или совместно с ПО скрининга Agilent для идентификации на основании времени удерживания и сравнения спектров. Наибольший эффект достигается, когда эти библиотеки используются совместно с новой версией DRS от Agilent (кат. № G1716AA, версия A.03.00). Данное решение позволяет проверять файлы ГХ/МС для всех 926 пестицидов и эндокринных деструкторов в течение приблизительно двух минут на одну пробу. Деконволюция позволяет идентифицировать пестициды, скрытые

в хроматограмме совместно экстрагированных материалов. Базу данных сравнивали с меньшей базой для анализа 17 проб поверхностных вод с помощью DRS. С помощью новой базы данных и DRS было обнаружено 99 пестицидов, метаболитов, антипиренов и сопутствующих загрязнений, которые не содержались в исходной библиотеке RTL пестицидов и эндокринных деструкторов.

Введение

Несколько лет назад компания Agilent Technologies представила технологию фиксации времени удерживания (RTL) для газовой хроматографии (ГХ) и ГХ в сочетании с масс-спектрометрическим определением (ГХ/МС). ПО RTL позволяет воспроизводить времена удерживания поэтапно на любом оборудовании Agilent для ГХ или ГХ/МС в любой лаборатории по всему миру, при условии использования той же заданной методики и колонки для ГХ (1). Поскольку любая лаборатория может воспроизвести времена удерживания, полученные в другой лаборатории, возможно создание библиотек масс-спектров, содержащих фиксированные времена удерживания. При использовании своей методики совместно с опубликованной базой данных пользователи могут просматривать файлы ГХ/МС для всех соединений в библиотеке. Чтобы получить корректные значения времени удерживания и корректный спектр, необходимы точные совпадения, исключая многие ложноположительные результаты и дающие больше уверенности при идентификации соединений (2).



Agilent Technologies

В последнее время компания Agilent представила ПО DRS, которое объединяет деконволюцию масс-спектра с традиционным поиском в библиотеке и количественным анализом. ПО DRS стало результатом слияния трех различных программных пакетов для ГХ/МС:

- 1) ChemStation ГХ/МС Agilent;
- 2) программы поиска масс-спектров Национального института стандартов и технологии (NIST) с библиотекой масс-спектров NIST '05;
- 3) автоматизированного ПО деконволюции масс-спектров и системы идентификации AMDIS (NIST).

Первоначально DRS было предназначено для комплексного анализа пестицидов и поэтому содержало масс-спектры (в формате AMDIS) и фиксированное время удерживания для 567 пестицидов и предполагаемых эндокринных деструкторов (3).

Недавно компания Agilent представила обновленную и существенно расширенную базу данных пестицидов и эндокринных деструкторов (кат. № G1672AA), которая теперь содержит 926 записей. Это означает добавление 359 новых соединений к исходной библиотеке. В то же время компания Agilent выпустила новую версию DRS (кат. № G1716AA, версия A.03.00), которую можно использовать с любой предоставленной компанией Agilent или составленной пользователем библиотекой DRS.

Содержание базы данных пестицидов и эндокринных деструкторов

База данных пестицидов и эндокринных деструкторов G1672AA содержит фактически все пригодные для ГХ пестициды, включая внесенные совсем недавно. Кроме того, база данных включает многочисленные метаболиты, многие эндокринные деструкторы, важные ПХБ и ПЦАУ, некоторые красители (например, судановый красный), синтетические мускусные соединения и некоторые фосфорорганические антипирены.

Эта новая база данных включает следующие компоненты:

- традиционную библиотеку масс-спектров для использования с ChemStation для ГХ/МС Agilent;
- базу данных для скрининга для использования с мощным ПО Agilent, интегрированным в ChemStation ГХ/МС;

- фиксированные времена удерживания для всех 926 соединений, которые любой пользователь Agilent 5975 или 5973 ГХ/МС может воспроизвести в своей лаборатории;
- файлы для использования с DRS от Agilent G1716AA (A.03.00);
- электронный метод, который можно загрузить в Agilent G1701DA (версия D.02.00 SP1 или выше) с параметрами прибора для получения файлов ГХ/МС и анализа данных с помощью DRS; эти параметры указаны в табл. 1;
- файлы образцов;
- рекомендации по применению.

29 ноября 2005 года правительство Японии опубликовало классификацию разрешенных к применению веществ в рамках контроля пестицидов, кормовых добавок и ветеринарных препаратов. ПДК были установлены для 758 реагентов, в то время как с 65 других контроль был снят. Для пятнадцати веществ не должно обнаруживаться остаточных количеств. Для остальных сельскохозяйственных реагентов, которые не были упомянуты, ПДК составляет 0,01 млн д. (4). Этот новый нормативный акт вступил в силу 29 мая 2006.

Среди разрешенных к применению в Японии пестицидов 265 подлежат анализу с помощью ГХ/МС. Новая библиотека пестицидов G1672AA содержит масс-спектры и фиксированные времена удерживания для всех этих соединений. Таким образом, лаборатория может проводить скрининг для всех 265 соединений, допущенных к применению, и для нескольких сотен пестицидов всего за 1–3 минуты после запуска ГХ/МС.

Экспериментальная часть

В табл. 1 представлены оборудование, ПО и аналитические параметры, используемые компанией Agilent для анализа пестицидов. В зависимости от желаемого объема ввода может быть использован ввод с помощью испарителя с программируемой температурой (PTV) или ввод с разделением или без разделения потока.

Таблица 1. Оборудование и условия анализа

Газовый хроматограф	Agilent 6890N
Автосамплер	Agilent 7683 устройство ввода пробы и автосамплер
Инжектор	С программируемой температурой PTV Agilent, эксплуатируемый в режиме отдувки растворителя или с делением/без деления потока
Колонка	Agilent 30 м × 0,25 мм × 0,25 мкм HP-5MSi (кат. № 19091S-433i)
Газ-носитель	Гелий в режиме постоянного давления
Фиксация времени удерживания	Хлорпирифос-метил, зафиксированный при 16,596 мин (номинальное давление на входе в колонку = 17,1 psi)
Программа изменения температуры термостата	70 °C (2 мин), 25 °C/мин до 150 °C (0 мин), 3 °C/мин до 200 °C (0 мин), 8 °C/мин до 280 °C (10–15 мин)
параметры на входе ИПТ	Температурная программа: 40 °C (0,25 мин), 1600 °C/мин. до 250 °C (2 мин); Момент начала отдувки: 0,2 мин; Скорость отдувки через сброс: 200 мл/мин; давление в режиме отдувки: 0,0 psi; сброс: 60,0 мл/мин; время отдувки: 2,00 мин
Объем ввода	15 мкл (с использованием шприца на 50 мкл)
Масс-селективный детектор	Agilent 5975 inert
Файл настройки	Atune.u
Режим	Сканирование (или мониторинг селективных ионов с использованием библиотеки DRS)
Диапазон сканирования	50–550 а. е. м.
Температуры источника, квадруполь, устройства сопряжения	230, 150 и 280 °C соответственно
Задержка для устранения эффектов растворителя	4,0 мин
Напряжение на электронном умножителе	Автоматическая настройка напряжения
Программное обеспечение	
GC/MSD ChemStation	Кат. № Agilent G1701DA (версия D02.00 sp1 или выше)
Программа создания отчетов о деконволюции DRS	Кат. № Agilent G1716AA (версия A.03.00), Программа создания отчетов о деконволюции DRS
Программа поиска по библиотеке	Поиск MC NIST (версия 2.00d или выше) (включает в себя библиотеку масс-спектров NIST '05 – кат. № Agilent G1033A)
Программа деконволюции	Программа автоматической деконволюции масс-спектров и идентификации (AMDIS_32 версия 2.62 или выше; включает в себя библиотеку масс-спектров NIST '05 – кат. № Agilent G1033A)
Библиотеки масс-спектров	Библиотека масс-спектров NIST '05 (кат. № Agilent G1033A) Библиотеки RTL пестицидов и эндокринных деструкторов Agilent в формате Agilent и NIST (кат. № G1672AA)

Результаты и обсуждение

Ниже представлена краткая характеристика DRS (описание см. в предыдущих документах 3, 5 и 6).

DRS сочетает в себе три отдельных, но дополняющих друг друга этапа анализа данных. Сначала ПО ChemStation ГХ/МС выполняет обычный количественный анализ на целевые пестициды с использованием целевого иона и до трех классификаторов. Определяется количество всех калиброванных соединений, которые были обнаружены. Что касается других соединений базы данных, оценка их концентрации может быть описана на основании среднего коэффициента чувствительности детектора к пестицидам, полученного с помощью ПО DRS. DRS отправляет

файл данных в ПО AMDIS, которое осуществляет деконволюцию спектров и просматривает библиотеку RTL пестицидов Agilent, используя полные спектры после деконволюции. В AMDIS может быть установлен фильтр, который ограничивает время удерживания анализа задаваемым пользователем временным интервалом. Поскольку RTL используется для воспроизведения времен удерживания базы данных RTL с высокой точностью, этот интервал может быть достаточно небольшим – обычно 10–20 секунд. В результате спектры после деконволюции для всех целевых веществ, найденные с помощью AMDIS, проверяют по библиотеке масс-спектров NIST, включающую 147000 соединений, для подтверждения; для этого шага не требуется время удерживания.

Этот подход был быстро внедрен многими лабораториями из-за возможности идентификации пестицидов в смешанных хроматограммах с высокими уровнями помех от совместно экстрагированных соединений. Фактически решение оказалось настолько полезным, что пользователи начали создавать свои собственные библиотеки для DRS (7). В связи с тем, что программа DRS не была связана с базой данных пестицидов, ее можно было использовать с любой базой данных компании Agilent или созданной пользователем.

Исходная библиотека RTL пестицидов (G1049A), содержащая 567 соединений, включала пестициды, некоторые метаболиты и большинство определяемых методом ГХ эндокринных деструкторов, известных на тот момент. Новая версия библиотеки включает еще больше пестицидов, эндокринных деструкторов и метаболитов. Эта обновленная версия также содержит важные соединения, относящиеся к другим классам загрязнений, обнаруживаемых в пищевых продуктах и запасах воды. Включены восемнадцать полихлорированных бифенилов (ПХБ), четыре полибромированных бифенила (ПББ), некоторые полиядерные ароматические углеводороды (ПАУ), некоторые фосфорорганические антипирены, три важных токсафеновых соединения и три судановых красителя.

Преимущества деконволюции

На рис. 1 показан экран AMDIS, который иллюстрирует производительность этого ПО для деконволюции. Белая линия на рис. 1А является хроматограммой по полному ионному току, в то время как остальные три являются пиками выделенных ионов после деконволюции («компонент» в соответствии с терминологией AMDIS). Обратите внимание на то, что ТИС-хроматограммы и выделенные ионы не соответствуют друг другу по масштабу и этот компонент фактически перекрывается совместно элюированными соединениями. На рис. 1В объединены спектр компонента после деконволюции (белый) и полный спектр «без деконволюции» (черный). Очевидно, что этот компонент скрыт пиками совместно элюированных соединений, которые в обычной ситуации маскировали бы аналит. На рис. 1С показано, что пик после деконволюции (белый спектр) совпадает с библиотечным значением для норфлуразона (черный спектр). Фиксированное время удерживания для норфлуразона из базы данных RTL пестицидов составляет 26,933 мин, что всего на 2,3 секунды отличается от полученного с помощью данной хроматограммы ВУ. Достоверность идентификации пиков значительно повышается при сочетании спектральной деконволюции и применения фильтров для фиксированного времени удерживания.

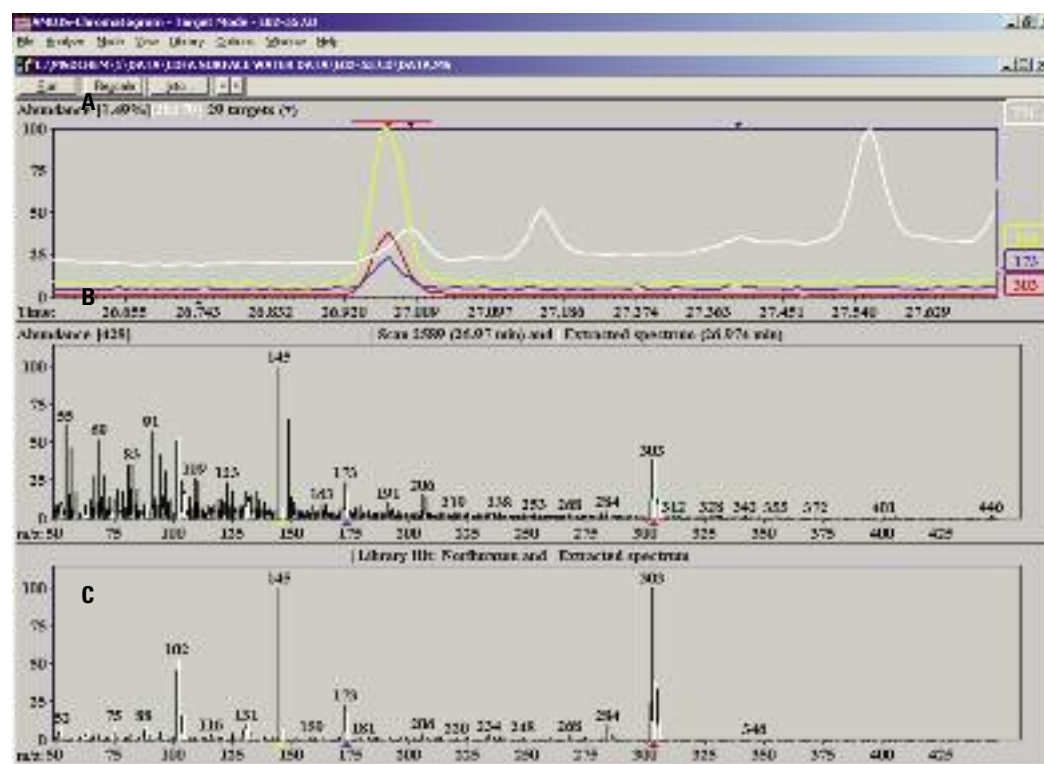


Рис. 1. Экран AMDIS, отображающий идентификацию норфлуразона:
 А) Полная ионная хроматограмма и хроматограммы выделенных ионов с элюировавшим норфлуразоном.
 В) Спектр компонента после деконволюции (белый), объединенный со спектром при 26,972 мин (черный).
 С) Компонент после деконволюции соответствует библиотечному спектру норфлуразона.

Анализ поверхностных вод — повторный обзор более раннего исследования

В ходе более раннего исследования было проведено сравнение анализа с использованием DRS от Agilent и традиционного анализа пестицидов (3). Калифорнийский департамент пищевой промышленности и сельского хозяйства (CDFA) проанализировал и предоставил файлы данных для 17 проб поверхностных вод. Поскольку хроматограммы ГХ/МС были объединены с методом определения пестицидов Agilent, было возможно проанализировать эти файлы данных с помощью DRS без повторного анализа проб. Исходный анализ с помощью DRS был проведен с использованием базы данных RTL для пестицидов, включающей 567 соединений. Для сравнения те же самые файлы данных были повторно проанализированы с использованием новой базы данных RTL для пестицидов, включающей 926 соединений. Хроматограмма (рис. 2) и отчет DRS (рис. 3) для одной из этих проб представлены ниже.

За исключением фталатов с помощью базы данных, включающей 926 соединений, были идентифицированы семь новых соединений (показаны жирным шрифтом на рис. 3): 4-хлорфенил изоцианат (метаболит гербицида фенилмочевины); 3,4-дихлорфенил изоцианат (метаболит диурона); трис (2-хлорэтил) фосфат (антипирен); кофеин (стимулятор); ципродинил (фунгицид); дезметил-норфлуразон (метаболит норфлуразона, гербицид); и трис (2-бутоксипропил) фосфат (антипирен). Несмотря на то что кофеин, в общем, не считается опасным, он включен в базу данных, поскольку его часто обнаруживают в канализационных стоках и во многих других водных артериях вместе с различными лекарственными препаратами и пестицидами (8).

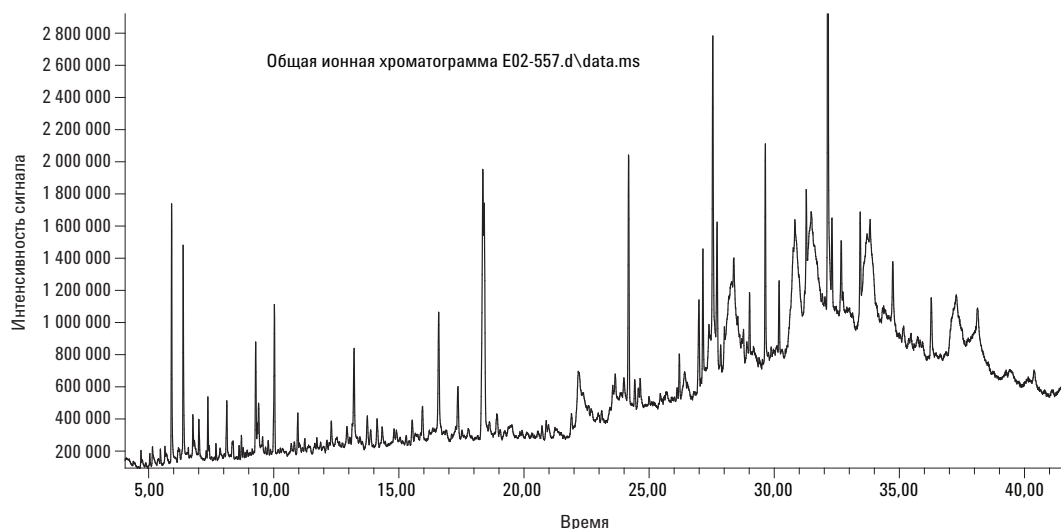


Рис. 2. Хроматограмма экстракта поверхностной воды, которая была проанализирована в DRS с использованием базы данных RTL пестицидов и эндокринных деструкторов. Результаты этого анализа представлены на рис. 3.

Отчет о деконволюции МСД

Название пробы: E02-557

Файл данных: C:\MSDCHEM\1\DATA\CDFA surface water data\E02-557.d

Дата/время: 11:24, вторник, 4 апр. 2006

Был проведен поиск по библиотеке NIST компонентов, которые были обнаружены в библиотеке целевых веществ AMDIS.

RT	Номер Cas	Название соединения	Agilent	AMDIS		NIST обратная	
			ChemStation количество (нг)	Степень совпадения	Разн. RT (с)	Степень совпадения	Число совпадений
4,4689	106445	4-метилфенол		62	3,2		
4,4689	0000	3-карбобензилокси-4-кетопролин				48	1
4,8840	104121	4-хлорфенил изоцианат		84	-1,8	86	2
6,3879	102363	метаболит диурона [3,4-дихлорфенил изоцианат]		99	3,1	95	1
6,8357	759944	этил-N, N-ди-n-пропилтиокарбамат		84	2,0	85	1
7,6988	95761	3,4-дихлоранилин		93	2,1	89	2
7,9342	131113	диметилфталат		67	1,7	84	2
8,1112	25013165	бутилированный гидроксанизол		63	-7,7		
8,1112	0000	7-метокси-2,2,4,8-тетраметилтрицикло [5.3.1.0(4,11)]ундекан				62	1
8,941	29878317	толилтриазол [1H-бензотриазол, 4-мет-]	1,29				
9,7903	134623	N,N-диэтил-м-толуамид		85	2,2	84	2
10,0019	84662	диэтилфталат		98	2,6	92	1
10,7109	119619	бензофенон		86	2,6	88	2
10,9684	126738	трибутилфосфат		96	3,0	90	1
11,6491	1582098	трифлуралин		83	0,7	74	1
12,9326	122349	симазин		88	1,4	86	2
13,4309	115968	трис(2-хлорэтил) фосфат		79	1,0	78	1
13,7478	1517222	фенантрен-d10		95	1,3	83	1
15,4048	58082	кофеин		80	1,6	74	1
15,9474	84695	диизобутилфталат		90	3,2	88	4
16,5988	5598130	хлорпирифос-метил	97	0,4	90	1	
17,3653	7287196	прометрин		90	1,5	84	1
18,4213	84742	ди-n-бутилфталат		99	0,4	94	1
18,9214	51218452	метолахлор		90	0,7	87	1
20,5633	121552612	ципродинил		69	-0,1		
20,5633	76470252	9,9-дметокси-9-сила-9, 10-дигидроантрацен				70	1
26,4247	23576241	норфлуразон, дезметил-		87	-4,5	69	2
26,9700	27314132	норфлуразон		87	1,5	79	1
26,9992	85687	бутилбензилфталат		94	-0,5	94	1
27,3984	51235042	гексазинон		89	0,8	83	1
28,0127	78513	трис(2-бутоксизтил) фосфат		75	3,3	83	1
29,6537	117817	бис(2-этилгексил)фталат		98	0,3	90	3
33,9298	84764	ди-n-нонилфталат		65	-1,9		
33,9298	0000	фталевая кислота, 3,4-дихлорфенил пропиловый эфир				71	1
13,739		фенантрен-d10	10				

Рис. 3. Отчет DRS об анализе пробы поверхностной воды. Соединения, отмеченные жирным шрифтом, были обнаружены с помощью новой базы данных RTL пестицидов, но не с помощью исходной, поскольку эти соединения не были включены.

Для данной пробы ChemStation идентифицировала только толлилтриазол при 8,941 мин, но AMDIS не подтверждает этот результат, а также он не может быть подтвержден вручную. Бутилированный гидроксанизол был экспериментально идентифицирован AMDIS со слабым соответствием, но время удерживания составило около -7,7 с, что значительно выше, чем для большинства других совпадений. Этого соединения нет в библиотеке NIST, поэтому оно не может быть подтверждено. Методика ChemStation, использованная для данного анализа, предписывает, чтобы все три иона, по которым проводится качественный анализ, находились в пределах $\pm 20\%$ (относительно), что является слишком строгим требованием для пробы такого сложного состава. Это объясняет, почему так мало соединений обнаруживается с помощью ChemStation.

Ципродинил (20,563 мин) был идентифицирован AMDIS, но поиск по библиотеке NIST не подтвердил его наличие. Следующая линия демонстрирует, что наиболее точным совпадением по библиотеке NIST является производное антрацена, которое ничуть не похоже на ципродинил. Результат был получен, когда AMDIS было настроено на «использование

неопределенных пиков», как показано рис. 4. Если эта функция отключена в конфигурации идентификации соединений DRS, наилучшим совпадением в библиотеке NIST для данного спектра действительно является ципродинил. Если идентификация соединения неоднозначная, как в случае с ципродинилом, может быть полезным выполнить поиск с помощью DRS обоими способами и сравнить результаты.

В описанном выше сравнении (3) DRS удалось идентифицировать все 37 пестицидов, обнаруженных химиком CDFA. Однако DRS выполнила задачу для всех 17 проб примерно за 20 минут по сравнению с ~8 часами с помощью ручной процедуры (табл. 2). Кроме того, DRS идентифицировала один ложноположительный результат в отчете CDFA и обнаружила 34 дополнительных пестицида и родственных соединения.

При использовании новой базы данных, включающей 926 соединений, анализ всех проб занял 32 минуты, а DRS смогла обнаружить дополнительно 99 пестицидов, метаболитов, антипиренов и родственных соединений (табл. 2).

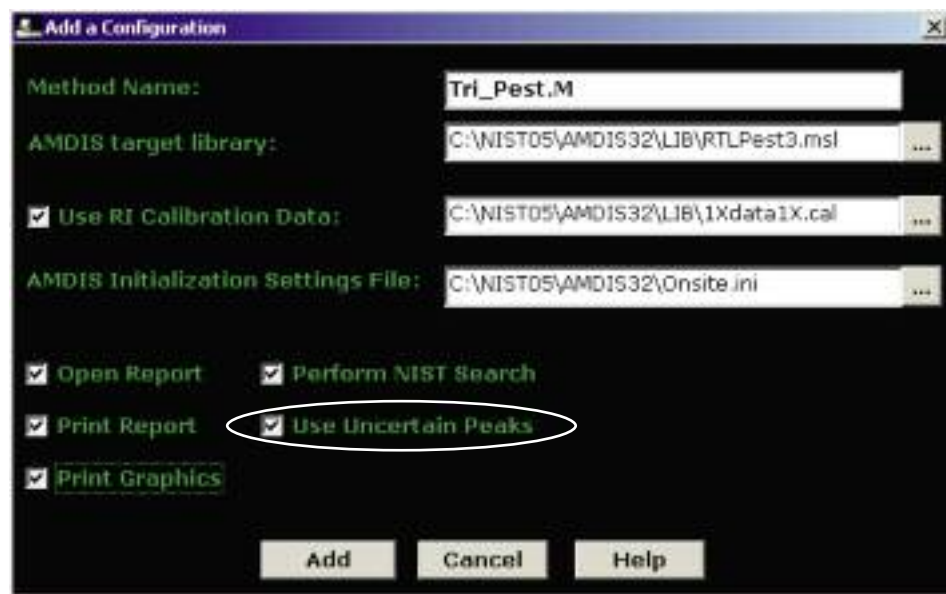


Рис. 4. Экран настройки конфигурации DRS для метода, именуемого Tri_Pest. Если в окне Use Uncertain Peaks (Использовать неопределенные пики) стоит галочка, AMDIS будет использовать неопределенные пики для поисков по библиотекам. Если галочка не стоит, AMDIS не учитывает неопределенные масс-спектральные пики. Иногда это может повлиять на качество совпадения с библиотекой.

Таблица 2. Сравнение результатов, полученных путем скрининга 17 проб поверхностных вод с использованием традиционных методов (CDFA) и DRS с двумя различными базами данных – G1049A, включающей 567 соединений, и G1672AA, включающей 926 записей

	CDFA	Agilent DRS (исходная G1049A база данных)	Agilent DRS (G1672 AA база данных)
Обнаруженные целевые вещества (не считая внутренний стандарт)	37	Те же 37 + еще 34	Те же 37 + еще 99
Ложноположительные	1	0	0
Время обработки	~8 ч (только ChemStation)	20 минут	32 минуты

Обработка стереоизомеров

Многие пестициды имеют несколько стереоизомеров с практически идентичным масс-спектром. Например, цифлутрин имеет четыре диастереомера, наличие которых обусловлено его тремя хиральными центрами. Очень сложно, а иногда невозможно определить порядок элюирования этих изомеров. Многие аналитики описывают их как суммарное количество изомеров. База данных RTL для пестицидов компании Agilent G1049A условно приписывает римскую цифру I изомеру, элюировавшему самым первым, II – следующему и т. д. Такие номера CAS были присвоены всем остальным изомерам. В большинстве случаев это был номер CAS для соединения с «несформулированной стереохимией». Это является причиной некоторой несовместимости с AMDIS, как изложено ниже.

AMDIS дифференцирует соединения, используя «химический идентификационный номер». Самый легкий и наиболее непротиворечивый подход заключается в использовании номера CAS для каждого соединения. Стандартная настройка AMDIS должна позволять лишь однократное использование каждого номера CAS при анализе файла данных ГХ-МС. Поскольку это выглядит логичным, необходимо, чтобы каждый элемент базы данных имел отличный от других номер CAS. Можно разрешить многократные совпадения для соединения, поставив «галочку» в раскрывающемся меню AMDIS (Analyze > Settings > Identif). Однако это позволит присвоить многим пикам одно и то же название соединения.

В новой базе данных RTL для пестицидов (G1672AA) сохраняются обозначения с помощью римских цифр, и первому изомеру в серии присваивают его настоящий номер CAS. Последующим изомерам серии назначают однозначные, но фиктивные номера CAS, сгенерированные компанией Agilent. Подлинный номер CAS показан в скобках после названия соединения. Например, изомеры цифлутрина вносятся в базу данных, как показано в табл. 3.

Таблица 3. Метод регистрации соединений с несколькими стереоизомерами в новой базе данных пестицидов RTL (G1672AA)

RT	Название соединения*	Номер CAS**
32,218	цифлутрин I	68359-37-5
32,359	цифлутрин II {CAS # 68359-37-5}	999028-03-4
32,477	цифлутрин III {CAS # 68359-37-5}	999029-03-7
32,536	цифлутрин IV {CAS # 68359-37-5}	999030-03-4

* В сериях изомер, элюировавший раньше, идентифицировали как «I» и присваивали ему его подлинный номер CAS. Последующим изомерам присваивали однозначные, но фиктивные номера CAS (см. сноску **). Действительный номер CAS представлен в скобках после названия соединения.

** Цифлутрину I был присвоен его истинный номер CAS. Цифлутринам II–IV были присвоены однозначные номера, которые можно отличить от фактических номеров CAS, поскольку они все имеют шесть цифр перед первым дефисом (всего 9) и все начинаются с серии 999.

На рис. 5 представлено, как был идентифицирован перметрин в пробе шпината с использованием обеих баз данных при настройке AMDIS на одно соответствие для соединения. С помощью более старой базы данных, включающей 567 соединений (G1049A), был идентифицирован только один изомер перметрина, поскольку его номер CAS мог быть использован только один раз. С помощью нового формата, используемого в базе данных RTL пестицидов, которая включает 926 соединений (G1672AA), были идентифицированы оба изомера перметрина. Неудивительно, что поиск по библиотеке NIST не дал совпадений с аналогичным фиктивным номером CAS, присвоенным перметрину II. Таким образом, ПО отобразило наилучшее соответствие в следующей строке. Это соединение, производное циклопропанкарбоновой кислоты, является изомером перметрина.

Поскольку поиск по библиотеке NIST включен в DRS, она всегда будет отображать другую строку после отчета о соединении с фиктивным номером CAS. Обратите внимание на то, что эти фиктивные номера CAS всегда содержат 9 цифр и начинаются с 999.

A)

RT	Номер Cas	Название соединения	Agilent	AMDIS		NIST обратная	
			ChemStation количество (нг)	Степень совпадения	Разн. RT (с)	Степень совпадения	Число совпадений
31,6158	52645531	перметрин II		88	3,9	91	3

B)

RT	Номер Cas	Название соединения	Agilent	AMDIS		NIST обратная	
			ChemStation количество (нг)	Степень совпадения	Разн. RT (с)	Степень совпадения	Число совпадений
31,4127	52645531	перметрин I		78	2,6	81	3
31,6088	999046036	перметрин II {CAS # 52645-53-1}		65	3,5		
31,6088	51877748	циклопропанкарбоксильная кислота, 3-(2,2-дихлорвинил)-2,2-диметил-, (3-феноксифенил)метиповый эфир, (1R-транс)-				95	1

Рис. 5. А) Единственный изомер перметрина был идентифицирован DRS с использованием базы данных G1049A, включающей 567 соединений, в то время как AMDIS не позволило использовать несколько совпадений для одного соединения. В) Два изомера перметрина идентифицированы DRS с помощью базы данных G1672AA, включающей 926 соединений, при тех же условиях.

Выводы

Новая библиотека RTL пестицидов и эндокринных деструкторов G1672AA содержит существенно больше целевых аналитов, чем предыдущая.

С добавлением 359 новых соединений библиотека стала наиболее исчерпывающей среди доступных на сегодняшний день библиотек такого типа. Было добавлено много новых пестицидов, метаболитов и эндокринных деструкторов наряду с важными ПХБ, ПББ, ПАУ, синтетическими мускусными соединениями, судановыми красителями и фосфорорганическими антипиренами. База данных содержит все аналиты для анализа ГХ/МС, разрешенные новыми законодательными положениями к применению в Японии.

В сочетании с полным решением DRS, можно проверить файлы данных ГХ/МС для 926 соединений примерно за две минуты для одной пробы. Это самый быстрый, наиболее исчерпывающий, наиболее точный и наименее трудоемкий метод проверки проб пищевых продуктов и проб из окружающей среды на наличие этих соединений.

Литература

1. V. Giarocco, B. Quimby, and M. Klee, "Retention Time Locking: Concepts and Applications," Agilent Technologies, publication 5966-2469E, www.agilent.com/chem
2. H. Prest, P. Wylie, K. Weiner, and D. Agnew, "Efficient Screening for Pesticides and Endocrine Disrupters Using the 6890/5973 GC/MSD System," Agilent Technologies, publication 5968-4884E, www.agilent.com/chem
3. P. L. Wylie, M. J. Szelewski, C.-K. Meng, C. P. Sandy, "Comprehensive Pesticide Screening by GC/MSD using Deconvolution Reporting Software," Agilent Technologies, publication 5989-1157EN, www.agilent.com/chem
4. "Introduction of the Positive List System for Agricultural Chemical Residues in Foods Department of Food Safety, Ministry of Health, Labour and Welfare" <http://www.mhlw.go.jp/english/topics/food-safety/positivelist060228/introduction.html>

5. C. P. Sandy, "A Blind Study of Pesticide Residues in Spiked and Unspiked Fruit Extracts using Deconvolution Reporting Software," Agilent Technologies, publication 5989-1564EN, www.agilent.com/chem
6. C. Lesueur and M. Gartner, "Routine Identification and Quantification of Pesticide Multiresidues in Fruit and Vegetable Samples with Full Scan, SIM, and Deconvolution Reporting Software," 2005 *Erndhrung/Nutrition*, **29** (11) 466–471
7. X. Ping, C.-K. Meng, and M. Szelewski, "Building Agilent GC/MSD Deconvolution Reporting Libraries for any Application," Agilent Technologies, publication 5989-2249EN, www.agilent.com/chem
8. "Large-scale studies of the occurrence and distribution of new contaminants in the environment – Reconnaissance studies," *USGS, Contaminant Occurrence Studies*, http://toxics.usgs.gov/topics/reconnaissance_studies.html

Дополнительная информация

Дополнительную информацию о продуктах и услугах нашей компании см. на веб-сайте www.agilent.com/chem.

Список благодарностей от автора

Автор хотел бы поблагодарить др. Г. Кемпе (G. Kempe) из Института исследования почвы (Саксония, институт Хемниц, Германия) за помощь в получении большого объема данных для этой обновленной библиотеки. Автор также благодарит др. Марка Ли (Mark Lee) и господина Стива Зигеля (Steve Siegel) из Калифорнийского департамента пищевой промышленности и сельского хозяйства за предоставление файлов данных проб поверхностных вод.

Список соединений в базах данных

1,2,4-трихлорбензол	2,6-диметиланилин	ацетохлор
1,2-дибром-3-хлорпропан	2-[3-хорфенокси]пропионамид	ацифлуорфен метилэфир
1,3,5-трибромбензол	2-хлорфенол	аклонифен
1,3-дихлорбензол	2-этил-1,3-гександиол	акринатрин
17α-этинилэстрадиол	2-этил-6-метиланилин	алахлор
1-нафталинол	2-гидроксиэстрадиол	альдрин
2-(1-нафтил)ацетамид	2-метил-4,6-динитрофенол	аллидохлор
2-(2-бутоксизтокс)этил тиоцианат	2-метилфенол	аметрин
2-(октилтио)этанол	2-нитрофенол	амидитион
2,3,4,5-тетрахлоронитробензол	2-феноксипропионовая кислота	аминокарб
2,3,4,5-тетрахлорфенол	3,4,5-триметакарб	амитраз
2,3,4,6-тетрахлорфенол	3,4-дихоранилин	метаболит амитраза [метанимидамид, N-(2,4-диметилфенил)-N'-метил-]
2,3,5,6-тетрахлорфенол	3,5-дихоранилин	анцимидол
2,3,5,6-тетрахлоро-п-терфенил	3-аминофенол	анилазин
2,3,5-трихлорфенол	3-хлоро-4-фторанилин	анилин
2,3,5-триметакарб	3-хлоро-4-метоксианилин	анилофос
2,3,6-трихлоранизол	3-хоранилин	антрацен
2,3,7,8-тетрахлордибензофуран	3-гидроксикарбофуран	арамит I
2,3,7,8-тетрахлоро-п-диоксин	3-индолилацетонитрил	арамит II {CAS # 140-57-8}
2,4,5,6-тетрахлоро-м-ксилол	3-трифторметиланилин	атратон
2,4,5-Т метилэфир	4,4'-дихлорбензофенон	атразин
2,4,5-трихлоранилин	4,4'-оксидианилин	атразин-дезэтил
2,4,5-трихлорфенол	4,6-динитро-о-крезол (ДНОК)	азаконазол
2,4,5-трихлоро-п-терфенил	4-аминодифенил	азаметифос
2,4,5-триметиланилин	4-броманилин	ацибензолар-с-метил
2,4,6-триброманизол	4-хлор-2-метиланилин	азинфос-этил
2,4,6-трибромфенол	4-хлор-3-метилфенол	азинфос-метил
2,4,6-трихлоранизол	4-хоранилин	метаболит азипротрина [2-амино-4-изопропиламино-6-метилтио-1,3,5-триазин]
2,4,6-трихлорфенол	4-хлорфенил изоцианат	азипротрин
2,4-Д метилэфир	4-изопропиланилин	азобензол
2,4-Д-втор-бутилэфир	4-метилфенол	азоксibenзол
2,4-ДБ метилэфир	4-нитрофенол	азоксистробин
2,4'-дихлорбензофенон (продукт разложения 2,4'-дикофола)	4-нонилфенол	карбин
2,4-дихлорфенол	5,7-дигидрокси-4'-метоксиизофлавон	бефлубутамид
2,4-дихлорфенилбензосульфат	9,10-антрахинон	беналаксил
2,4-диметиланилин	аценафтен	беназолин-этил
2,4-диметилфенол	аценафтилен	бендиокарб
2,6-дихлоробензамид	ацефат	бенфлуралин
2,6-дихлорбензонитрил	ацехиноцил	
	ацетамиприд	

бенфуракарб	бромофос-этил	хлордимеформ
бенфурезат	бромопропилат	хлорэтоксифос
беноданил	бромоксинил	хлорфенапир
беносакор	бромоксиниловый эфир октановой кислоты	хлорфенетол
бентазон	бромуконазол I	хлорфенпропиловый эфир
производное бентазон метила	бромуконазол II {CAS # 116255-48-2}	хлорфензон
бентиокарб	буфенкарб	хлорфенвинфос
бензол, 1,3-бис(бромметил)-	бупиримат	хлорфенвинфос, <i>цис</i> -
бензолсульфонамид	бупрофезин	хлорфенвинфос, <i>транс</i> -
бензидин	бутахлор	хлорфлурекол-метилэфир
бензо(а)антрацен	бутафенацил	хлормефос
бензо(а)пирен	бутамифос	хлорнитрофен
бензо[b]флуорантен	бутоксикарбоксим	хлорбензилат
бензо[g,h,i]перилен	бутралин	хлорнеб
бензо[k]флуорантен	бутилбензилфталат	хлоропропилат
бензофенон	бутилат	хлороталонил
метаболит бензоксимата	бутилированный гидроксанизол	хлортолурон
бензоилпропиловый этил	кадузафос	хлорпрофам
бензилбензоат	кафенстрол	хлорпирифос
бета-эстрадиол	кофеин	хлорпирифос-метил
альфа-изомер бензогексахлорида	каптафол	хлортал-диметил
бета-изомер бензогексахлорида	каптан	хлортиамид
дельта-изомер бензогексахлорида	карбарил	хлортион
эпсилон-изомер бензогексахлорида	карбетамид	хлортиофос
метаболит бифеназата (5-фенил-о-анизидин)	карбофуран	хлортиофос сульфон
бифенокс	карбофуран-3-кето	хлортиофос сульфоксид
бифентрин	карбофуран-7-фенол	хлозолинат
бинапакрил	карбофенотион	хризен
биоаллетрин	карбосульфам	цинерин I
изомер биоаллетрин-с-циклопентенила	карбоксин	цинерин II
биоресметрин	карфентразон-этил	цинидон-этил
бифенил	карпропамид	цис-хлордан
<i>бис</i> (2,3,3,3-тетрахлорпропиловый) эфир	карвон	клодинафоп-пропаргил
<i>бис</i> (2-бутоксизтил) фталат	кашмеран	кломазон
<i>бис</i> (2-этилгексил) фталат	кекафикс	клоквинтосет-мексил
бисфенол А	селестролид	кумафос
битеранол I	хинметионат	кримидин
битеранол II {CAS # 55179-31-2}	хлорамбен метилэфир	кротоксифос
боскалид (никобифен)	хлоранокрил	круфомат
бромацил	хлорбензид	цианазин
бромфенвинфос-(E)	хлорбензид сульфон	цианофенфос
бромфенвинфос-(Z)	хлорбициклен	цианофос
бромбутид	хлорбромурон	циклафурамид
бромциклен	хлорбуфам	циклоат
бромофос	хлордекон	циклопентадеканон
	хлорден, <i>транс</i> -	циклурон

цифлуфенамид	метаболит диклофлуанида (ДМЯК)	динокап I
цифлутрин I	дихлон	динокап II {CAS # 39300-45-3}
цифлутрин II {CAS # 68359-37-5}	дихлормид	динокап III {CAS # 39300-45-3}
цифлутрин III {CAS # 68359-37-5}	дихлорфен	динокап IV {CAS # 39300-45-3}
цифлутрин IV {CAS # 68359-37-5}	дихлорпроп	ди-н-октилфталат
цигалофоп-бутил	дихлорпроп метилэфир	диносеб
цигалотрин I (лямбда)	дихлофос	диносеб ацетат
цигалотрин (гамма)	диклобутразол	диносеб метилэфир
цимиазол	диклоцимет I	динотерб
цимоксанил	диклоцимет II {CAS # 139920-32-4}	динотерп ацетат
циперметрин I	диклофоп метил	ди-н-пропил фталат
циперметрин II {CAS # 52315-07-8}	диклоран	диофенолан I
циперметрин III {CAS # 52315-07-8}	дикротофос	диофенолан II {CAS # 63837-33-2}
циперметрин IV {CAS # 52315-07-8}	дициклогексилфталат	диоксабензофос
цифенотрин <i>цис</i> -	дицклопентадиен	диоксакарб
цифенотрин <i>транс</i> - {CAS # 39515-40-7}	дильдрин	диоксатион
ципразин	диэтиловый эфир	дифацинон
ципроконазол	диэтофенкарб	дифенамид
ципродинил	диэтил дитиобис (тионоформат) (ЭКД)	дифенил фталат
ципрофурам	диэтил фталат	дифениламин
циромазин	диэтиленгликоль	дипропетрин
<i>д</i> -(<i>цис-транс</i>)-фенотрин-I	диэтилстилбестрол	дипропил изоцинхомиронат
<i>д</i> -(<i>цис-транс</i>)-фенотрин-II {CAS # 260002-80-2}	дифеноконазол I	дисульфотон
дазомет	дифеноконазол II {CAS # 119446-68-3}	дисульфотона сульфен
DDMU [1-хлоро-2,2- <i>бис</i> (4'-хлорфенил)]	дифеноксурон	диталимфос
декахлоробифенил	дифлуфенциан	дитиопир
дельтаметрин	диизобутилфталат	диурон
демефион	димефокс	метаболит диурона [3,4-дихлорофенил изоцианат]
деметон-с	димепиперат	додеморф I
деметон-с-метилсульфон	диметахлор	додеморф II {CAS # 1593-77-7}
десбромом-бромобутид	диметаметрин	дразоксолон
десмедифам	диметенамид	эдифенфос
десметрин	диметипин	эмпетрин I
диалифос	диметоат	эмпетрин II {CAS # 54406-48-3}
диаллат	диметоформ-(E)	эмпетрин III {CAS # 54406-48-3}
диаллат II {CAS # 2303-16-4}	диметоформ-(Z)I {CAS # 110488-70-5}	эмпетрин IV {CAS # 54406-48-3}
диамил фталат	диметилфталат	эмпетрин V {CAS # 54406-48-3}
диазинон	диметилвинфос (Z)	эндосульфан (альфа-изомер)
диазинон-оксон	диметилан	эндосульфан (бета-изомер)
добензо[а,h]антрацен	димоксистробин	эндосульфан эфир
дикамба	ди-н-бутилфталат	эндосульфан лактон
дкамба метилэфир	ди-н-гексилфталат	эндосульфан сульфат
дикаптон	диниконазол	эндрин
диклофентион	динитрамин	эндрин-альдегид
диклофлуанид	ди-н-нонилфталат	эндринкетон
	динобутон	

этил-п-нитрофенил-тионо-бензил фосфат	фенопроп метилэфир	флуоксастробин <i>цис</i> -
эпоксиконазол	фенотиокарб	флухинконазол
этил-N-N-ди-н-пропилтиокарбамат	феноксанил	флуренол бутилэфир
эрбон	феноксапроп-этил	флуренол-метилэфир
эсфенвалерат	феноксикарб	Флуридон
эспрокарб	фенпиклонил	флурохлоридон I
этаконазол	фенпропатрин	флурохлоридон II {CAS # 61213-25-0}
эталфлуралин	фенпропидин	флурохлоридон, десхлоро-
этидимурон	фензон	флуроксипир-1-метилгептилэфир
этиофенкарб	фенсульфотион	флурпримидол
этионат	фенсульфотион-оксон	флуртамон
этион	фенсульфотион-оксон-сульфон	флусилазол
этофенпрокс	фенсульфотион-сульфон	флутиацет-метил
этофумезат	фентион	флутоланил
этофумезат, 2-кето	фентион-сульфоксид	флутриафол
этопрофос	фентион-сульфон	флувалинат-тау-I
этоксифен-этил	фенурон	флувалинат-тау II {CAS # 102851-06-9}
этоксихин	фенвалерат I	фолпет
этилентиомочевина	фенвалерат II {CAS # 51630-58-1}	фонофос
этоксазол	фепропиморф	формотион
этридиазол	фипронил	фостиазат I
этридиазол, десхлоро- (5-этокси-3-дихлорметил-1,2,4-тиадиазол)	фипронил, десульфенил-	фостиазат II {CAS # 98886-44-3}
этримфос	фипронил-сульфид	фуберидазол
эвгенол	фипронил-сульфон	фуралаксил
эксальтолид [15-пентадеканолид]	флампроп-изопропил	фуратиокарб
фамоксадон	флампроп-метил	фурилазол
фамфур	флуакрипирим	фурмециклокс
фенамидон	флуазифоп-п-бутил	галфенпрокс
фенамифос сульфоксид	флуазинам	галоксифоп-метил
фенамифос-сульфон	флуазолат	гептахлор
фенаримол	флубензимин	изомер А гептахлор эпоксида
феназафлор	флухлоралин	изомер Б гептахлор экзо-эпоксида
метаболит феназафлора	флуцитринат I	гептенофос
феназахин	флуцитринат II {CAS # 70124-77-5}	гексабромбензол
фенбуконазол	флудиоксонил	гексахлорбензол
фенхлоразол-этил	флуфенацет	гексахлорофен
фенхлорфос	флуметралин	гексаконазол
фенхлорфос-оксон	флумиклорак-пентил	гексазинон
фенхлорим	флумиоксацин	гексэстрол
фенфурам	флуометурон	гидропрен
фенгексамид	флуорантен	имазалил
фенитротрион	флуорен	имазаметабенз-метил I
фенитротрион-оксон	флуородифен	имазаметабенз-метил II {CAS # 81405-85-8}
фенобукарб	флуорогликофен-этил	имибенконазол
фенопроп	флуороимид	имибенконазол-десбензил
	флуотримазол	

индено[1,2,3-с,d]пирен	мекопром метилэфир	монокротофос
индоксакарб и продукт разложения диоксакарба [фенол, 2-1,3-диоксолан-2-ил]	мефенацет	монолинурон
иоксинил	мефенпир диэтил	крезольный мускус
иоксинил октаноат	мефлуидид	мускус-кетон
ипконазол	меназон	мускус-москен
ипробенфос	мепанипирим	мускус-тибетен (Moschustibeten)
ипродион	мефосфолан	мускус-ксилен
ипроваликарб I	мепронил	миклобутанил
ипроваликарб II {CAS # 140923-25-7}	металаксил	N,N-диэтил-м-толуамид
иргарол	метамитрон	N-1-нафтилацетамид
изазофос	метасистокс тиол	налед
изобензан	метазахлор	нафталин
изоборнил тиоцианоацетат	метконазол I	нафталиновый ангидрид
изокарбамид	метконазол II {CAS # 125116-23-6}	напроанилид
изокарбофос	метабензтиазурон [продукт разложения]	напропамид
изодрин	метакрифос	никотин
изофенфос	метаמידофос	нитрапин
изофенфос-оксон	метфуроксам	нитрапирин
изометиоцин	метидатион	нитрофен
изопрокарб	метиокарб	нитротал-изопропил
изопропалин	метиокарб сульфон	N-метил-N-1-нафтил ацетамид
изопротиолан	метиокарб сульфоксид	нонахлор, <i>цис</i> -
изопротурон	метомил	нонахлор, <i>транс</i> -
изоксабен	метопрен I	ноर्फлуразон
изоксадифен-этил	метопрен II {CAS # 40596-69-8}	ноर्फлуразон, десметил-
изоксафлутол	метопротрин	нуаримол
изоксатион	метоксихлор	о,п'-ДДД
жасмолин I	метоксихлор олефин	о,п'-ДДЭ
жасмолин II	метил (2-нафтокси)ацетат	о,п'-ДДТ
жодфенфос	метилпараоксон	октахлоростирол
кинопрен	метилпаратион	о-дизанизидин
метилкрезоксим	метил-1-нафтален ацетат	о-дихлорбензол
лактофен	метилдимрон	офурак
ленацил	метобромурон	ометоат
лептофос	метолахлор	о-фенилфенол
лептофос-оксон	метолкарб	орбенкарб
линдан	метоминонтробин (E)	<i>орта</i> -аминоазотолуол
линурон	метоминонстробин(Z) {CAS # 133408-50-1}	оризалин
малатион	метрафенон	оксабетринил
малатион-о-аналог	метрибузин	оксадиазон
метилэфир МЦПА	мевинфос	оксациксил
бутоксидэтиловый эфир МЦПА	мирекс	оксамил
метилэфир а-масляной кислоты	молинат	оксикарбоксин
м-крезол	моналид	оксихлордан
мекарбам		оксидеметон-метил
		оксифлуорфен

п,п'-ДДД	фенантрен	промекарб
п,п'-ДДЭ	фенантрен-d10	искусственный промекарб [5-изопропил-3-метилфенол]
п,п'-ДДМ [бис(4-хлорфенил)метан]	фенкаптон	прометон
п,п'-ДДТ	фенол	прометрин
п,п'-дибромбензофенон	фенолтиазин	пропахлор
п,п'-дикофол	фенотрин I	пропамокарб
паклобутразол	фенотрин II	пропанил
параоксон	феноксиуксусна кислота	пропафос
паратион	фентоат	пропаргит
ПБД 52 тетрабромбифенил	форат	метаболит пропаргита [циклогексанол, 2-(4-трет-бутилфенокси)]
ПБД 101	форат сульфон	пропазин
ПБД 15	форат сульфоксид	пропетамфос
ПБД 169 гексабромбифенил	форат-оксон	профам
ПХБ 101	фосалон	пропиконазол I
ПХБ 105	фосфолан	пропиконазол II {CAS # 60207-90-1}
ПХБ 110	фосмет	пропизохлор
ПХБ 118	фосфамидон I	пропоксур
ПХБ 126	фосфамидон II {CAS # 13171-21-6}	пропизамид
ПХБ 127	фталид	просульфокарб
ПХБ 131	фталимид	протиоконазол-дестио
ПХБ 136	пиклорам метилэфир	протиофос
ПХБ 138	пиколинафен	протоат
ПХБ 153	пикоксистробин	пиракарболид
ПХБ 169	пиндон	пираклофос
ПХБ 170	пипералин	пирафлуфен-этил
ПХБ 180	пиперонил бутоксид	пиразон
ПХБ 30	пиперофос	пиразофос
ПХБ 31	пиримикарб	пиразоксифен
ПХБ 49	пиримифос-этил	пирен
ПХБ 77	пиримифос-метил	пиретрин I
ПХБ 81	плифенат	пиретрин II
п-дихлорбензол	п-нитротолуол	пирибутикарб
пебулат	потасан	пиридабен
пенконазол	пралетрин, <i>цис</i> -	пиридафентион
пендиметалин	пралетрин, <i>транс</i> - {CAS # 23031-36-9}	пиридат
пентахлоранилин	претилахлор	пиридинитрил
пентахлоранизол	пробеназол	пирифенокс I
пентахлорбензол	прохлораз	пирифенокс II {CAS # 88283-41-4}
пентахлорнитробензол	просаймидон	пирифталид
пентахлорфенол	продиамин	пириметанил
пентанохлор	профенофос	пиримидифен
перметрин I	метаболит профенофоса (4-бром-2-хлорофенол)	пириминобак-метил (E)
перметрин II {CAS # 52645-53-1}	профлуралин	пириминобак-метил (Z) {CAS # 136191-64-5}
пертан	прогидрожасмон I	пирипроксифен
фантолид	прогидрожасмон II {CAS # 158474-72-7}	
фенамифос		

пироквинол	тефлутрин, <i>цис</i> -	триадименол
квиналфос	темефос	триаллат
квинокламин	тербацил	триамифос
квиноксифен	тербукарб	триапентенол
метаболит квинтозена (пентахлорфенил-метилсульфид)	тербуфос	триазамаат
квизалофоп-этил	тербуос-оксон-сульфон	триазофос
рабензазол	тербуос-сульфон	трибутилфосфат
ресметрин	тербуметон	трибутил фосфоротритиоит
ресметрин I	тербутилазин	трихламид
ресметрин II {CAS # 10453-86-8}	тербутилазин-дезэтил	трихлорфон
ротенон	тербутрин	трихлоронат
S,S,S-трибутилфосфоротритиоат	тетрахлорвинфос	триклопир метилэфир
скрадан	тетраконазол	триклозан
себутилазин	тетрадифон	триклозан-метил
себутилазин-дезэтил	тетраэтилпирофосфат (ТЭПФ)	трикрезилфосфат, <i>мета</i> -
секбуметон	тетрагидрофталимид, <i>цис</i> -1,2,3,6-	трикрезилфосфат, <i>орто</i> -
силафлуофен	тетраметрин I	трикрезилфосфат, <i>пара</i>
силтиофам	тетраметрин II {CAS # 7696-12-0}	трициклазол
симазин	тетрапропил тиодифосфат	тридеморф, 4-тридецил
симеконазол	тетрасул	тридифан
симетрин	тенилхлор	триэтазин
спиродиклофен	теобромин	триэтилфосфат
спиромесифен	тиабендазол	трифенморф
спироксамин I	тиазопир	трифлорксистробин
спироксамин II {CAS # 118134-30-8}	тифлузамид	трифлумизол
метаболит спироксамина (4-трет-бутилциклогексанон)	тиофанокс	трифлуралин
судан I	тиометон	трифенилфосфат
судан II	тионазин	трис(2-бутоксиэтил) фосфат
судановый красный	тимол	трис(2-хлорэтил) фосфат
сульфаллат	тиокарбазил I	трис(2-этилгексил) фосфат
сульфаниламид	тиокарбазил II {CAS # 36756-79-3}	тристиконазол
сульфентразон	толклофос-метил	триклопирбутоксиэтил
сульфотеп	толфенпирад	тикор (сми 1500)
сера (S8)	толилфлуанид	униконизол-п
сульпрофос	метаболит толилфлуанида (диметилсульфтолуидид/ДМСТ)	вамидотион
свеп	толилтриазол [1H-бензотриазол, 4-метил-]	вернолат
тамоксифен	толилтриазол [1H-бензотриазол, 5-метил-]	винклозолин
2-(тиоцианометилтио)бензотиазол (ТЦМТБТ)	тоналид	ХМС (3,4-диметилфенил N-метилкарбама
тебуконазол	токсафен парлар 26	ХМС (3,5-диметилфенил N-метилкарбама
тебуфенпирад	токсафен парлар 50	зоксамид
тебупиримифос	токсафен парлар 62	продукт разложения зоксамида
тебутам	<i>транс</i> -хлордан	
тебутиурон	трансфлутрин	
текнацен	тразеолид	
	триадимефон	

Компания Agilent не несет ответственности за возможные ошибки в настоящем документе, а также за убытки, связанные или являющиеся следствием получения настоящего документа, ознакомления с ним и его использования.

Информация, описания и спецификации в настоящем документе могут быть изменены без предупреждения.

© Agilent Technologies, Inc., 2006

Напечатано в США
18 апреля 2006 г.
5989-5076RU