

### 3.2.21 农药高分辨质谱数据库

**数据库介绍:** 本数据库目前收录了多种国内外农药标准样的精确分子质量(后文称高分辨质谱), 信息来自中科院上海有机所分析测试中心的检测数据。农药信息包括了农药类别、化合物名称、质谱保留时间、特征片段分子式及其精确分子量, 精度达到 0.0001。这是国内迄今为止最权威的农药高分辨质谱数据, 用户可通过输入样本谱峰, 对农药残留物质进行精确筛选定位。也可通过农药化合物的名称、CAS 号码、分子式等标识信息检索指定农药的高分辨质谱数据。

#### 检索方式与示例:

1) 化合物检索 农药化合物名称涵盖了中英文物质名称、俗名和商品名, 对每一种名称均可进行模糊检索或者精确检索。如图 3.2.21.1, 输入“敌敌畏”模糊检索敌敌畏这种农药(例 1), 检索结果如图 3.2.21.2。

化学专业数据库: 农药化合物高分辨质谱数据库->化合物检索 [输入谱峰检索](#) [上传谱峰检索](#)

检索关键字  检索式

精确检索  模糊检索 (最多只显示前20条匹配的记录)

新用户小贴士:  
(1) 化合物名称可以是中英文物质名称、俗名、商品名, 例如 敌敌畏。  
(2) 模糊检索的关键词至少包括3个字符或者数字, 例如 DDV%。  
(3) 请注意CAS号码不能模糊检索。

图 3.2.21.1 农药化合物名称检索

化学专业数据库: 农药化合物高分辨质谱数据库->检索结果列表 [返回](#)

您输入的关键词是 敌敌畏, 共为您找到符合要求的结果如下 (最多只显示前20条匹配的记录):

编号	结构	名称	CAS号	分子式	GC-MS高分辨质谱
1		敌敌畏; Dichlorvos;	62-73-7	C4H7Cl2O4P	<a href="#">GC-MS数据</a>

图 3.2.21.2 农药化合物名称检索的结果

除了化合物名称, 还可以检索 CAS 号码, 注意 CAS 号码没有模糊检索, 都是精确检索。如下图。

化学专业数据库: 农药化合物高分辨质谱数据库->化合物检索 [输入谱峰检索](#) [上传谱峰检索](#)

检索关键字  检索式

精确检索  模糊检索 (最多只显示前20条匹配的记录)

新用户小贴士:  
(1) 化合物名称可以是中英文物质名称、俗名、商品名, 例如 敌敌畏。  
(2) 模糊检索的关键词至少包括3个字符或者数字, 例如 DDV%。  
(3) 请注意CAS号码不能模糊检索。

图 3.2.21.3 农药化合物 CAS 号码检索

点击图 3.2.21.2 中的[GC-MS数据](#)的超链接，即可查看化合物的高分辨质谱与其他相关信息。详情如图 3.2.21.4。

<b>农药名</b>	Apavap; Bayer 19149; DDVF; DDVP; Dede vap; Dichlorfos; Dichlorvos; Mogos; Nuvan; O, O-DIMETHYL-o-(2,2-dichlorovinyl)phosphate; O, O-二甲基-O-(2,2-二氯乙烯基)磷酸酯; Vapona; 敌敌畏; 二氯松;																												
<b>CAS号码</b>	<a href="#">62-73-7</a>																												
<b>质谱保留时间</b>	5.056 分钟	<a href="#">GC-MS测试条件</a>																											
<b>高分辨质谱</b>	<table border="1"> <thead> <tr> <th>分子式</th> <th>分子离子峰</th> <th>特征片段式</th> <th>特征片段峰</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>C4H7Cl2O4P</td> <td>219.9459</td> <td>C2H6O3P</td> <td>109.0049</td> </tr> </tbody> </table>				分子式	分子离子峰	特征片段式	特征片段峰	C4H7Cl2O4P	219.9459	C2H6O3P	109.0049																	
分子式	分子离子峰	特征片段式	特征片段峰																										
C4H7Cl2O4P	219.9459	C2H6O3P	109.0049																										
<b>农药类别</b>	杀虫(螨)剂:有机磷杀虫剂																												
<b>急性毒性</b>	大鼠急性经口LD <sub>50</sub> 为80mg/kg(雄)、56mg/kg(雌)，雄大鼠急性经皮LD <sub>50</sub> 为107mg/kg，雌性为75mg/kg；小鼠急性吸入LC <sub>50</sub> 为13.2mg/m <sup>3</sup> (4h)，大鼠吸入LC <sub>50</sub> 为14.8mg/m <sup>3</sup> 。雄大鼠90d饲喂试验的无作用剂量为1mg/kg。鲤鱼LC <sub>50</sub> 为4mg/L(36h)、蓝鳃鱼LC <sub>50</sub> 为1mg/L(24h)。对蜜蜂、瓢虫有毒。																												
<b>无公害农药检测标准</b>	<table border="1"> <thead> <tr> <th>适用产品</th> <th>检测项目</th> <th>限量值</th> <th>执行依据</th> <th>检测方法</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>大豆</td> <td>敌敌畏 (dichlorvos)</td> <td>0.1</td> <td>GB 2763-2005</td> <td>GB/T 5009.20 食品中有机磷农药残留量的测定</td> </tr> <tr> <td>稻米等</td> <td>敌敌畏 (dichlorvos)</td> <td>0.1</td> <td>GB 2763-2005</td> <td>GB/T 5009.20 食品中有机磷农药残留量的测定</td> </tr> <tr> <td>平菇、香菇、双孢蘑菇、竹荪、黑木耳、金针菇、银耳、毛木耳、鸡腿菇、茶树菇、杏鲍菇、灰树花、姬松茸、白灵菇、口蘑、榛蘑、松口蘑、牛肝菌、羊肚菌、干巴菌、青头菌及其它食用菌</td> <td>敌敌畏 (dichlorvos)</td> <td>0.2</td> <td>GB 2763-2005</td> <td>NY/T 761 蔬菜和水果中有机磷、有机氯、拟除虫菊酯和氨基甲酸酯类农药多残留的测定</td> </tr> <tr> <td>各类茶叶</td> <td>敌敌畏 (dichlorvos)</td> <td>不得检出 (0.02)*</td> <td>欧盟指令EC 149/2008</td> <td>GB/T 5009.20 食品中有机磷农药残留量的测定</td> </tr> </tbody> </table>				适用产品	检测项目	限量值	执行依据	检测方法	大豆	敌敌畏 (dichlorvos)	0.1	GB 2763-2005	GB/T 5009.20 食品中有机磷农药残留量的测定	稻米等	敌敌畏 (dichlorvos)	0.1	GB 2763-2005	GB/T 5009.20 食品中有机磷农药残留量的测定	平菇、香菇、双孢蘑菇、竹荪、黑木耳、金针菇、银耳、毛木耳、鸡腿菇、茶树菇、杏鲍菇、灰树花、姬松茸、白灵菇、口蘑、榛蘑、松口蘑、牛肝菌、羊肚菌、干巴菌、青头菌及其它食用菌	敌敌畏 (dichlorvos)	0.2	GB 2763-2005	NY/T 761 蔬菜和水果中有机磷、有机氯、拟除虫菊酯和氨基甲酸酯类农药多残留的测定	各类茶叶	敌敌畏 (dichlorvos)	不得检出 (0.02)*	欧盟指令EC 149/2008	GB/T 5009.20 食品中有机磷农药残留量的测定
适用产品	检测项目	限量值	执行依据	检测方法																									
大豆	敌敌畏 (dichlorvos)	0.1	GB 2763-2005	GB/T 5009.20 食品中有机磷农药残留量的测定																									
稻米等	敌敌畏 (dichlorvos)	0.1	GB 2763-2005	GB/T 5009.20 食品中有机磷农药残留量的测定																									
平菇、香菇、双孢蘑菇、竹荪、黑木耳、金针菇、银耳、毛木耳、鸡腿菇、茶树菇、杏鲍菇、灰树花、姬松茸、白灵菇、口蘑、榛蘑、松口蘑、牛肝菌、羊肚菌、干巴菌、青头菌及其它食用菌	敌敌畏 (dichlorvos)	0.2	GB 2763-2005	NY/T 761 蔬菜和水果中有机磷、有机氯、拟除虫菊酯和氨基甲酸酯类农药多残留的测定																									
各类茶叶	敌敌畏 (dichlorvos)	不得检出 (0.02)*	欧盟指令EC 149/2008	GB/T 5009.20 食品中有机磷农药残留量的测定																									
	注： 1.*括号中为最低检出限。 2.各检测项目除采用表中所列检测方法外，如有其他国家标准、行业标准以及部文公告的检测方法，且其最低检出限能满足限量值要求时，在无公害农产品认证检测中可以采用。 3.表中所列限量值如与最新颁布的食品安全国家标准的限量值不一致时，按最新颁布的食品安全国家标准的限量值进行判定。																												
<b>化合物信息</b>	<a href="#">化学结构</a>	<a href="#">理化性质</a>	<a href="#">中文文献</a>	<a href="#">英文文献</a>	<a href="#">化学专利</a>	<a href="#">化学反应</a>																							
	<a href="#">质谱谱图</a>	<a href="#">生物活性</a>	<a href="#">化工产品</a>	<a href="#">物质毒性</a>	<a href="#">危化品处置</a>	<a href="#">相关试剂</a>																							
	<a href="#">天然产物</a>	<a href="#">MSDS</a>	<a href="#">热化学性质</a>	<a href="#">相变数据</a>	<a href="#">物质活性</a>																								

图 3.2.21.4 农药的高分辨质谱与其他信息

化学专业数据库: [农药化合物高分辨质谱数据库](#) -> [化合物检索](#) [输入谱峰检索](#) [上传谱峰检索](#)

检索关键字  检索式

精确检索  模糊检索 (最多只显示前20条匹配的记录)

**新用户小贴士：**

(1) 化合物名称可以是中英文物质名称、俗名、商品名，例如 **敌敌畏**。

(2) 模糊检索的关键词至少包括3个字符或者数字，例如 **DDV%**。

(3) 请注意CAS号码不能模糊检索。

图 3.2.21.5 农药分子式模糊检索

还可以检索化合物的分子式，可以模糊检索，模糊部分使用“%”代替。注意模糊检索的关键词至少包括三个字符或者数字，如图 3.2.21.5。

2)上传谱峰文件检索 高分辨质谱的谱峰是一系列特征峰数据，呈线性排列，丰度通常不在研究范围之内。本数据库所有数据的检测仪器条件如图 3.2.21.6。

本数据库的每个化合物都有 2 个特征峰数据。在谱峰检索中，只有两个特征峰都显阳性，才会报告物质存在阳性。**阳性报告可能存在较低几率的假阳性，但阴性报告是可靠的。**

Chemicals and reagents  
All references of pesticides included in the database were purchased from J&K Scientific Ltd (Beijing, China). Standard solutions of pesticide were prepared in n-hexane (HPLC grade) supplied by Fisher Scientific (Santa Clara, USA).  
GC-MS measurement  
All measurements were performed with a 7200 accurate-mass GC-QTOF MS instrument (Agilent Technologies, Santa Clara, USA), using a fused silica DB-35 MS capillary column of 30 m × 0.25 mm i.d. The injector was operated at 250°C in splitless mode and helium (purity > 99.999%) was used as the carrier gas at 1.2 mL/min. The GC oven temperature was programmed from an initial temperature of 80°C held for 1 min, ramped at 25°C/min to 170°C, and then at 6°C/min to final 300°C held for 10 min, resulting in a total run time of 36.267 min. Injection volume was 1 µL. The other optimized parameters included a transfer line temperature of 300°C and an ion source of 250°C. TOF for MS was operated at 5.0 spectra/s acquiring the mass range *m/z* 50–600 and about 13,500 (FWHM). Perfluorotributylamine (PFTBA) was utilized for daily MS calibration. MassHunter Acquisition B.06 and MassHunter Qualitative Analysis B.05 were applied for the control of the equipment, and the acquisition and treatment of data.  
Total pesticides were collected and prepared at 200 ppb in n-hexane for GC-QTOF MS analysis. TOF MS was calibrated first by using PFTBA to achieve a typical mass resolution >13,000 and mass accuracy <5 ppm. Then 1 µL of each group standard solution was injected into the system for detection.

图 3.2.21.6 农药高分辨质谱检测仪器与条件

用于检索的谱峰文件必须保存成 TXT 格式，每个数据占一行。如图 3.2.21.7。

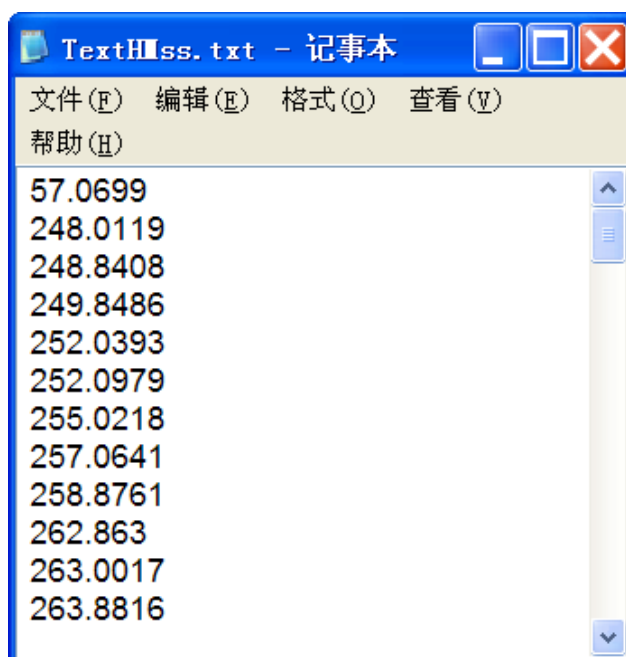


图 3.2.21.7 高分辨质谱谱峰文件格式

高分辨质谱谱峰数据，在实验条件相同的时候，不同仪器做出来的数据误差是非常小的，相对值不应当超过 100ppm。上传谱峰文件后，需选择合适的容许误差，以提高的数据检索的准确性，降低假阳性的可能。

容许误差有 2 种计量方法：绝对值、相对值。

绝对值的容许误差分为 4 档，分别是：0.1、0.01、0.001、0.0001。

相对值的容许误差以 ppm 为单位，分成 4 档：10、30、50、100。

化学专业数据库: [农药化合物高分辨质谱数据库->高分辨质谱文件上传](#) [输入谱峰检索](#) [化合物检索](#)

容许误差(绝对值) 0.001

容许误差(ppm) 30

选择谱图文件:  TextHMss.txt

**谱图检索步骤：**

(1) 上传谱图txt文件-->(2)设置检索参数-->(3)检索得到结果。

**检索注意事项：**

(1) 本数据库的高分辨质谱数据来自上海有机所实验数据，精度达到0.0001。

(2) 本库中农药都有2个特征峰数据，只有2个特征峰都显阳性才会报告阳性。

(3) 本库目前只接受txt文件，如果没有txt文件，可往[此处输入谱峰检索](#)。

图 3.2.21.8 上传谱峰文件检索

选择好谱峰文件，配置好容许误差后，点击“上传文件开始检索”，即可或者可能存在的农药列表，如下图。

化学专业数据库: [农药化合物留高分辨质谱数据库->检索结果列表](#) [返回](#)

根据您提交的高分辨质谱数据，共为您找到可能存在的农药22种：

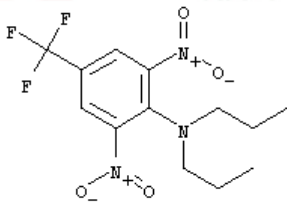
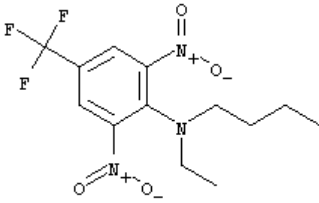
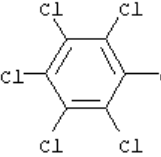
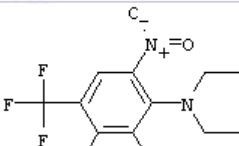
编号	结构	名称	CAS号	分子式	GC-MS高分辨质谱
1		氟乐灵; Trifluralin;	1582-09-8	C <sub>13</sub> H <sub>16</sub> F <sub>3</sub> N <sub>3</sub> O <sub>4</sub>	<a href="#">GC-MS数据</a>
2		乙丁氟灵; Benfluralin;	1861-40-1	C <sub>13</sub> H <sub>16</sub> F <sub>3</sub> N <sub>3</sub> O <sub>4</sub>	<a href="#">GC-MS数据</a>
3		六氯苯; Hexachlorobenzene;	118-74-1	C <sub>6</sub> Cl <sub>6</sub>	<a href="#">GC-MS数据</a>
4		氮氟灵; Dintramine;	29091-05-2	C <sub>11</sub> H <sub>13</sub> F <sub>3</sub> N <sub>4</sub> O <sub>4</sub>	<a href="#">GC-MS数据</a>

图 3.2.21.9 上传谱峰文件检索结果

点击第一条记录的[GC-MS数据](#)，可查看农药的高分辨质谱与其他信息。如图 3.2.21.10。

当前位置: [化学专业数据库->农药化合物高分辨质谱数据库](#) [返回](#) [我要纠错](#)

**农药名**  
2, 6-dinitro-N, N-dipropyl-4-trifluoromethylaniline;  
2, 6-二硝基-N, N-二丙基-4-三氟甲基苯胺;  
Basalin;  
Elancolan;  
Flutrix;  
L 36352;  
Treficon;  
Treflan;  
trifluralin;  
Triflurex;  
Trim;  
氟乐灵;  
氟利克;  
氟特力;  
茄科宁;  
特氟力;  
特福力;

**CAS号码** [1582-09-8](#)

**质谱保留时间** 7.963 分钟 [GC-MS测试条件](#)

**高分辨质谱**

分子式	分子离子峰	特征片段式	特征片段峰
C13H16F3N3O4	335.1093	C8H5F3N3O4	264.0227

**急性毒性**  
大鼠急性经口LD<sub>50</sub>>10000mg/kg，小鼠为5000mg/kg，狗>2000mg/kg，家兔急性经皮LD<sub>50</sub>>2000mg/kg；以2000mg/kg剂量喂养大鼠2年，未见不良影响。对鱼类毒性较在，鲤鱼LC<sub>50</sub>为4.2mg/L (48h)，金鱼为0.59mg/L，蓝鳃鱼为0.058mg/L。蜜蜂致死量为24mg/只。

**化合物信息**

<a href="#">化学结构</a>	<a href="#">理化性质</a>	<a href="#">中文文献</a>	<a href="#">英文文献</a>	<a href="#">化学专利</a>	<a href="#">质谱谱图</a>
<a href="#">中药药材</a>	<a href="#">化工产品</a>	<a href="#">物质毒性</a>	<a href="#">危化品处置</a>	<a href="#">相关试剂</a>	<a href="#">MSDS</a>
<a href="#">热化学性质</a>	<a href="#">相变数据</a>	<a href="#">物质活性</a>			

图 3.2.21.10 查看农药的高分辨质谱与其他信息

化学专业数据库: [农药化合物高分辨质谱数据库->输入谱峰检索](#) [上传谱峰文件检索](#) [化合物检索](#)

分析您输入的高分辨质谱数据，查找可能存在的农药成分。

**请设置误差：**

容许误差(绝对值)

容许误差(ppm)

请在下框中输入高分辨质谱数据，每个数据只占一行：

```
109.00
158.33
187.50
219.95
```

图 3.2.21.11 输入谱峰数据检索

3)输入谱峰检索 如用户没有 Txt 格式的谱峰文件,也可手动输入高分辨质谱谱峰。注意每一行只有一个数据。如图 3.2.21.11 所示。

请注意容许误差与样本数据精度之间的一致,否则很难检索出正确的结果。

容许误差有 2 种计量方法:绝对值、相对值。

绝对值的容许误差分为 4 档,分别是:0.1、0.01、0.001、0.0001。

相对值的容许误差以 ppm 为单位,分成 4 档:10、30、50、100。

如图 3.2.21.11 所示,样本数据精度为 0.01,选择容许误差是绝对值的 0.01。然后点击“开始检索”,即可获得检索结果,如图 3.2.21.12 所示。

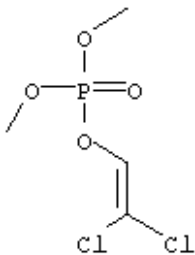
编号	结构	名称	CAS号	分子式	GC-MS高分辨质谱
1		敌敌畏; Dichlorvos;	62-73-7	C4H7Cl2O4P	<a href="#">GC-MS数据</a>

图 3.2.21.12 输入谱峰数据检索的结果

查看检索结果,可看到农药的高分辨质谱的数据,可与图 3.2.21.11 相比,分子离子峰和特征片段峰都匹配成功,即样本谱峰数据与目标谱峰数据的误差都在容许误差范围之内。

<b>农药名</b>	Apavap; Bayer 19149; DDVF; DDVF; Dedevap; Dichlorfos; Dichlorvos; Nogos; Nuvan; O,O-DIMETHYL-O-(2,2-dechlorovinlyl)phosphate; O,O-二甲基-O-(2,2-二氯乙烯基)磷酸酯; Vapona; 敌敌畏; 二氯松;										
<b>CAS号码</b>	<a href="#">62-73-7</a>										
<b>质谱保留时间</b>	5.056 分钟	<a href="#">GC-MS测试条件</a>									
<b>高分辨质谱</b>	<table border="1"> <thead> <tr> <th>分子式</th> <th>分子离子峰</th> <th>特征片段式</th> <th>特征片段峰</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>C4H7Cl2O4P</td> <td>219.9459</td> <td>C2H6O3P</td> <td>109.0049</td> </tr> </tbody> </table>			分子式	分子离子峰	特征片段式	特征片段峰	C4H7Cl2O4P	219.9459	C2H6O3P	109.0049
分子式	分子离子峰	特征片段式	特征片段峰								
C4H7Cl2O4P	219.9459	C2H6O3P	109.0049								
<b>农药类别</b>	杀虫(螨)剂:有机磷杀虫剂										

图 3.2.21.13 查看农药高分辨质谱数据