

Fast electronic access to the pestizid database by means of Access 2000

Dr. rer. nat. Günther Kempe

Landesuntersuchungsanstalt for health and veterinarian surgeon Dept. of pesticide – Zschopauer Straße 87, D-09111 Chemnitz - Germany

e-mail: Guenther.Kempe@LUA.SMS.SACHSEN.de

Problem

Currently approx. 900 active agent of plants and pest fighting means as well as plant treatment means worldwide are produced and traded. The global trade of foods require to search for all possible pesticides that were used all over the world.

Objective

Much information about many different pesticides are used in a very short time

To increase productivity

Solution

Fast electronic access to a special database with analytical, chemical and gaschromatographic details

Advantage

All common and trade names, chemical code numbers ,properties, structure and sum formula, m/z fragments, retention times at different capillary columns are given in less then one minute.

Furthermore some animal medicine substances, hormones and environment pollutants, some typical poisons and some plant content substances e.g. caffeine etc. are content.

The gas chromatographic investigation of black tea is very difficult. It is important to know where is the peak of caffeine .

Content of property module

All know information about the German multimethod DFG S19, a short reference to the Dutch "Analytical methods for pesticide residues in foodstuffs" and the Swiss list of pesticide retention times are given. You can also search for the Merck index number (11.edition).

There are many possibility to filter after more as 100 chemical classes, disciplines (e.g. insecticides, xenoestrogens and metabolites).

The highlight is the data field "analytical notes". This field contain special analytical notes who was collected from the author about more then ten years.

When the m/z number of electron impact mass spectrometry is known you can discover it in this module. The chromatographer can find information about GC detectability at specific detectors ECD and NPD quickly, one "x" are a weak response and three "xxx" is very high response.

m/z number

WIRKSTOFF: Acephat

Trade name/Code: Orthen; Orthene; Acephos; Ortran;

Summenformel: C₄H₁₀N₁₀P₁S₁ P: 1 N: 1 S: 1 HALOGEN: TWL: µg/l MG 183,10

Labor-Nr: 260 S19: x S19_onl: x DFG: 358 Holland: I (M-1) El m/z: 136,94,111,125,183,168

ELU_1: 0 ELU_2: 0 ELU_3: 0 ELU_4: 0 ELU_5: 5 ELU_6: 0

GPCBEREICH: 115-145 Beständigkeit gegen H₂SO₄: vz b=beständig; tb=teilweise beständig

GC: x ECD: x NPD: xx P-FPD: x S-FPD: x HPLC: UV Max

RHMV: x BBA-Zulassung EU 7 KLASSE: Insektizid

IUPAC_NAME: O,S-Dimethyl-N-acetyl-amidothiophosphat

Substanzklasse: P - org. Kategorie (IV) mit versch. Substituenten

ABBAU_PR: Methamidophos ist Metabolit von Acephat; O,S-Dimethylamidothiophosphat;

Metabolit von:

weitere CAS-Nr + Memos

Dt.PSM Verz.:

Analytisch: adsorptionsempfindlich, unterschiedliche Retentionszeiten zwischen Probe und Standard; Wiederfindung häufig nur 50%; tailed häufig an unpolaren Säulen, an Carbowax deutlich besserer Response; mit S 8 nicht erfassbar; wenn mit alkalisch gepufferter Extraktion gearbeitet wird ist der Wirkstoff weg; Acephat mit Matrix kalibrieren; mit S19 Online nur ca. 40 % Recovery; Acephat metabolisiert teilweise im Pflanzengewebe zu Methamidophos

Mixturen: mischbar mit anderen Insektiziden und Fungiziden;

Stabilität: farblose Kristalle; Schmelzp.: 82 - 93 °C; nicht unzersetzt destillierbar; relativ stabil gegen Hydrolyse; Halbwertszeit bei pH 9 und 40 °C = 60 Stunden, bei pH 3 und 40 °C = 710 Stunden;

Löslichkeit: leicht löslich in Wasser 790 g/l bei 20 °C; 151 g/l Aceton; 35 g/l Essigester; 16 g/l Benzol; 0,1 g/l Hexan; >100 g/l Ethanol; bei 20 °C; ebenfalls in Methylchlorid;

ANW_IN: gegen beißende und saugende Insekten im Obst-, Gemüse-, Wein-, Garten- und Hopfenbau; besonders gegen Blattläuse einschl. resistenter Stämme;

Wirkungstyp: Systemisches Insektizid mit Fraßgiftwirkung.; schwacher Hemmstoff der Cholinesterasen; Abbau: als Metabolit ist O,S-Dimethylamidothiophosphat nachgewiesen (=Methamidophos); das hydrolytisch bis zur Phosphorsäure aufgespalten wird; Halbwertszeit

LD-50 / Tier: akut oral 605-1 100 mg/kg

LITERATUR: Quelle: PM 5 S. 1; PM 9 S. 4; PM 10 S. 9; PERKOW; CRC Handbook of Pesticide;

Special GC module

The user can create personal GC modules.

Filter for DFG multimethod S19

Filter for minicolumn silica eluates.

Last change of retention time (automatically).

This two data fields contain the number of pesticide mixtures that were used in our laboratory.

RT ECD neu sortiert nach HP 1701 = Front Auswahlkriterien : Labornummer + GC + ECD

WIRKSTOFF: GC: abor-Nr.: Klasse:

Summenformel ECD:

HP1701-P1

HP1701-P2

HP1701-P3

HP1701-P4

E1 E2 E3 E4 E5 E6

HP5_P1

HP5-P2

HP5-P3

HP5-P4

ANALYTISCHE HINWEISE:

Silica minicolumn eluates

WIRKSTOFF:	ECD	Summenformel	HP1701-P1	E1	E2	E3	E4	E5	E6	HP5_P1
Cyanazin	xx	C9H13ClN6	60,42	0	0	0	4	0	0	47,095
Chlorfenson	xxx	C12H8Cl2O3S1	60,8	1	5	0	0	0	0	57,01
Dibrombenzophenon	xx	C13H8Br2O1	60,971	0	5	0	0	0	0	61,411
Oxadiazon	xxx	C15H18Cl2N2O3	61,237	0	0	5	0	0	0	59,718
DDT-o,p	xxx	C14H9Cl5	61,25	5	0	0	0	0	0	64,477
Kresoxim-methyl	x	C18H19N1O4	61,721	0	0	5	0	0	0	61,02
PCB-2,2',4,4',5,5' (B-Nr. 153)	xxx	C12H4Cl6	61,786	5	0	0	0	0	0	68,164
Paclobutrazol	x	C15H20Cl1N3O1	61,91	0	0	0	3	3	0	55,126
Imazalil	x	C14H14Cl2N2O1	62,03	0	0	0	0	5	2	57,76

Table view (small part) of all compounds which were detectable with ECD.

Retention time module

In the Rt module you can find many GC information at different columns e.g. DB5, DB 1701; HP35MS and HP50+. The signals come from different GC detectors e.g. AED, ECD; NPD, FPD.

NUMMER: 260 CAS_NR: 30560-19-1 MG: 183,1 Struktur Formel

WIRKSTOFF: Acephal GC: x ECD: x EI Fragmente: 136,94,111,125,183,168

Formel: C4H10N1O3P1S1 NPD: xx

KLASSE: Insektizid FPD_P: x Analytische Hinweise: adsorptionsempfindlich, unterschiedliche Retentionszeiten zwischen Probe und Standard; Wiederfindung häufig nur 50%; tailed häufig an unpolaren Säulen, an Carbowax deutlich besserer Response; mit S 8 nicht erfassbar; wenn mit alkalisch gepufferter Extraktion gearbeitet wird ist der Wirkstoff weg; Acephal mit Matrix kalibrieren; mit S19 Online nur ca. 40% Recovery; Acephal

Stan_RRt DB5: 0,418 N: 100 P: 60 S: 6 Cl: Br: F:

HP5-AED: 7,657 Fast-AED: 5,782 P2:

GC 2 Doppel-NPD Peak2: Peak3: Parathion AED HP-5

DB5 30m DF: 6,712 RRT-HP5: 0,397 19,277 DB 5 Front

HP 50+ 30m: 7,165 RRT-HP35: 0,511 14,69

GC 3 Doppel-ECD Peak2: Peak3: Peak4: 1701 Front

Front HP1701: 24,21 DB5 Rear

Rear HP 5: 14,87

GC 4 Doppel-ECD Peak 2 Peak 3 Peak 4

Optima_d6: 10,09

Optima1_OnCol: 15,8

MIXE: 428,M23/1,M32,M5 Mixe2: 106,M121,M131,M1

GC 6 ECD-NPD Peak2: Peak3: Peak4: HP35MS_RT_ECD_NPD_Comment

HP35MS_RT: 7,5 7,51 min sind überprüft und i.O.

HP5890 V2

ECD: 0 P_FPD: 8,254

NPD: 8,161 S_FPD: 0

For each columns exist a special notes field, there are specific information in it about substances at this column or detector behaviour, e.g. shoulder peak form, peak overlaps etc.

A interesting feature is to calculate the relative retention time (RRt). The RRt referring to Parathion is given for DB5MS and HP35MS capillary column with more then 500 compounds/isomers.

One click create a Rt-list of DDT metabolites

DDT Compounds	HP1701	HP5	Omega d6	Optima 1	35 MS	MS Ultra 2	J&W 1701
DDE-o,p	51,92	54,51	37,25	46,21	16,72	21,20	18,15
DDMU	52,06	54,61	38,26	45,72	16,78	21,04	18,38
DDE-p,p	56,01	58,85	41,11	49,78	18,03	22,77	19,81
DDD-o,p	59,99	59,56	42,78	44,76	19,08	23,25	21,15
DDD-ethyl (Perthan)	59,87	62,74	44,04	52,38	19,47	24,15	21,28
DDD-p,p	65,83	64,27	47,81	54,05	20,91	25,00	23,83
DDT-o,p	61,25	64,48	45,80	50,42	20,54	25,03	21,93
DDT-p,p	67,47	69,16	50,99	57,79	22,39	26,89	24,57

↑
sort by HP 5

Dutch retention time list allow to compare with own results

Wirkstoff: Profenofos Schweiz: x RHiste/WIRKST: Profenofos

Summenformel: C11H15BrCl1O3P1S1 CAS NR: 41198-08-7

S19_up: x GPC: 130-155 ELU_1: 0 ELU_2: 0 ELU_3: 4 ELU_4: 1 ELU_5: 0 ELU_6: 0

Auszug aus schweizerischen Lebensmittelbuch Rf Basis Parathion

RRTP_DB1 Remark_DB1 RRTP_DB-17 Remark_DB-17 RRTP_DB-210 Remark_DB-210

Schweizremark: 1,136 1,169 1,269

LUA Chemnitz RRT DB1 60m RRT DB5MS 30m RRT 1701 60m RRT HP35MS 30m

1,256 1,241 1,148 1,274

MRL module

European MRL list is under construction finished in summertime.

The complete German "Rückstandshöchstmengen-VO" version "6.-Änderungs-VO) from 16.01.2002 you can find it.

Früchte | Gemüse | Blattgemüse | Ölsaaten | Getreide | tierische Lbm

Wirkstoff: **Carbendazim** EU_harmonisiert seit: 27.11.1990 EU letzte Änderung: 22.06.2000
 Cas_Nr: 10605-21-7 EU Fundstelle: RL 2000/42/EG

Früchte alle Angaben in mg/kg

Zitrusfrüchte 5	Schalenfrüchte 0,1 (*)	Kernobst 2	Beeren und Kleinobst
Grapefruit	Mandeln	Äpfel	Tafel und Keltertrauber 2
Zitronen	Paranüsse	Birnen	Tafeltrauben:
Limonen	Kaschnüsse	Quitten	Keltertrauben
Mandarin	Maronen	Sonstiges Kernobst	Erdbeeren 0,1 (*)
Orangen	Kokosnüsse	Steinobst	Strauchbeerenobst 0,1 (*)
Pampelmusen	Haselnüsse	Aprikosen 1	Brombeeren
Sonstige Zitrusfrüchte	Macadamia	Kirschen	Taubeeren
	Pekannüsse	Pfirsiche / Nektarine 1	Loganbeeren
	Pinienkerne	Pflaumen 0,5	Himbeeren
	Pistazien	Sonstiges Steinobst 0,1 (*)	Sonstige Strauchbeeren
	Walnüsse		Anderes Kleinobst und Beeren: 0,1 (*)
	Sonstige Schalenfrüchte		Heidelbeeren:
Sonstige Früchte	Feigen	Oliv	Preiselbeeren:
Avocados	Kiwis	Passionsfrüchte	Johannisbeeren:
Bananen 1	Kumquats	Ananas	Stachelbeeren:
Datteln	Litchis	Papaya	Sonstiges Kleinobst:
	Mangos	Granatapfel	Wildfrüchte 0,1 (*)
		Sonstige 0,1 (*)	

Früchte: frisch, getrocknet oder ungekocht, durch gefrieren haltbar gemacht, ohne Zusatz von Zucker

Höchstmengen Höchstmengen Stand 6. Änderungs-VO Jan

Wirkstoff: **Procymidon** CAS-Nr.: 32809-16-8
 µg/kg Anlage 2 Liste A (pflanzlich) x Anlage 5:

300	Erbse ohne Hülsen(frisch)
50	Schalenfrüchte, übrige Ölsaaten
100	Hopfen, Tee, teeähnliche Erzeugnisse
200	Erbse (Hülsenfrucht), Knoblauch, Schalotten, Speisewiebeln
1000	Cucurbitaceen mit genießbarer u. ungenießbarer Schale, Erbse mit Hülsen (frisch)
1000	Sonnenblumenkerne mit Schalen, Rapsamen, Sojabohnen, Birnen
2000	Bohnen mit Hülsen (frisch), Solanaceen, Chicoree, Steinobst außer Kirschen
5000	Erdbeeren, Kiwis, Salatarten, Trauben
10000	Himbeeren
20	andere pflanzliche Lebensmittel

RHMV: x § 47a y umgesetzt mit 5. ÄVO

Berechnungsgrundlage für RHMV

Summe aus Iprodion, Procymidon, Vinclozolin + alle Metaboliten, die die 3,5-Dichloranilgruppe

← → 🔍 **zeigen EU-Liste**

Reference to exception authorization §47a can find quickly at every active agent.

With one click the customer can see in how many European countries there was a registration for the specific pesticide.

WIRKSTOFF	Anzahl der EU-Zulassung	FI	SE	DK	IR	UK	NL	BE	LU	DE	AU	FR	ES	PT	IT	GR
Procymidon	9						✗	✗	✗		✗	✗	✗	✗	✗	✗

Structure module

The structure module consists of 2500 "WMF" formatted graphic files with CAS-Nr. and common name. Structure files can easily copy into the most common word processing programs they can zoom in every size without loss of quality.

Structure formula is stored **into** the database

Advantage: **very fast search**

Disadvantage: **very big** database more then 100 MB

The search after a active agent include all know trade names in the world, IUPAC name or code numbers.

Structure formula is stored **out of** the database

Advantage: **small database**

Disadvantage: **not so fast search**

The screenshot shows the 'Structur' software interface. At the top, there are input fields for CAS number (53905-38-7), Summenformel (C21H36O1), MG (304,5148), and Merck-Index (7778). The 'WIRKSTOFF' field is set to 'Pro-drone' and the 'Klasse' is 'Juvenilhormone, Juvenoids'. Below this, there are two chemical structure displays for 'Pro-drone' (CAS-Nr.: 53905-38-7). The left one is highlighted in yellow. A text box 'Click for a new formula' with a green arrow points to the right structure. Below the structures, there are fields for 'Trade Name + Codes' (MV-678; AI 3-36206; 1-(8-Methoxy-4,8-dimethynonyl)-4-(1-methylethyl)-benzol; 2-Methoxy-9-[p-isopropylphenyl]-2,6-methylnonan;), 'IUPAC_NAME' (2-Methoxy-9-[p-isopropylphenyl]-2,6-dimethylnonane // 1-(8-Methoxy-4,8-dimethylnonyl)-4-1-methylethyl-benzene), and 'weitere CAS-Nr. + Memos' (Analogon der Juvenil-Hormone;). At the bottom, there is a section for 'Pheromone und Analoge' with a 'Formel' button. Below that, there are buttons for 'Öffnen Eigenschaften', 'Öffnen Eingabe neuer Wirkstoffe', 'Formular schließen', and 'Verlassen und beenden'. A 'Substanz Klasse:' field is also visible.

53905-30-7.wmf