ГЛАВА 10

НЕЦЕЛЕВОЙ СКРИНИНГОВЫЙ АНАЛИЗ «НОВЫХ» СТОЙКИХ ОРГАНИЧЕСКИХ ЗАГРЯЗНЯЮЩИХ ВЕЩЕСТВ (СОЗ) В ДАЛЬНЕВОСТОЧНЫХ МОРЯХ

В.Ю. Цыганков^{1,2}, М.М. Донец¹

Впервые для дальневосточного региона проведен нецелевой скрининговый анализ-поиск «новых» (non-target screening analysis) стойких органических загрязняющих веществ (СОЗ). Определение «нетрадиционных» СОЗ в окружающей среде указывает на необходимость регулярного контроля с применением качественного и количественного анализа.

Ключевые слова: нецелевой скрининговый анализ; «новые» СОЗ; «традиционные» СОЗ; дальневосточные моря.

¹ Школа биомедицины, Дальневосточный федеральный университет (ДВФУ), 690922, Владивосток, о. Русский, п. Аякс, 10. E-mail: tsig_90@mail.ru

² Школа естественных наук, Дальневосточный федеральный университет (ДВФУ), 690922, Владивосток, о. Русский, п. Аякс, 10.

Для цитирования: Цыганков В.Ю., Донец М.М. Нецелевой скрининговый анализ «новых» стойких органических загрязняющих веществ (СОЗ) в Дальневосточных морях // Стойкие органические загрязняющие вещества (СОЗ) в Дальневосточном регионе: моря, организмы, человек : монография / В.Ю. Цыганков, М.М. Донец, Н.К. Христофорова [и др.] ; науч. ред. В.Ю. Цыганков. – Владивосток : Изд-во Дальневост. федерал. ун-та, 2020. – С. 249–262. – <https://doi.org/10.24866/7444-4891-2/249-262>.

For citing: Tsygankov V.Yu., Donets M.M. Non-targeting screening analysis of "new" persistent organic pollutants (POPs) in the Far Eastern Seas // Persistent organic pollutants (POPs) in the Far Eastern Region: Seas, Organisms, Human : monograph / V.Yu. Tsygankov, M.M. Donets, N.K. Khristoforova [et al.] ; ed. by V.Yu. Tsygankov. – Vladivostok : Publishing House of the Far Eastern Federal University, 2020. – P. 249–262. – <https://doi.org/10.24866/7444-4891-2/249-262>.

CHAPTER 10. Non-targeting screening analysis of "new" persistent organic pollutants (POPs) in the Far Eastern Seas

V.Yu. Tsygankov^{1,2}, M.M. Donets¹

For the first time for the Far East region, a non-target screening analysis of “new” persistent organic pollutants (POPs) was carried out. The determination of “old” POPs in the environment indicates the need for regular monitoring using qualitative and quantitative analysis.

Keywords: non-target screening analysis; “new” POPs; “old” POPs; Far Eastern seas.

Анализ сложных смесей в образцах окружающей среды является чрезвычайно сложной задачей. Поскольку матрица выборки в большинстве случаев сложная, традиционные следовые аналитические методы были специально разработаны для определенного типа образца и группы веществ. Этот традиционный целевой подход обеспечивает хорошую чувствительность, надежную идентификацию, количественную оценку соединений-мишеней и успешно используется в течение нескольких десятилетий. Однако, этот традиционный подход имеет существенный недостаток, поскольку он всегда будет пропускать все неизвестные соединения или другие нецелевые вещества даже в высоких концентрациях или с сильным токсическим потенциалом. Имеются веские основания полагать, что концентрация неизвестных соединений превышает концентрацию известных. Во многих случаях исследования эффективности показали, что концентрации известных соединений недостаточно велики для объяснения некоторых токсических потенциалов образцов [1, 3]. Чтобы заполнить этот пробел в знаниях, нецелевые методы скрининга являются очень важными инструментами для экологической химии. В течение последнего десятилетия разработаны новые аналитические аппаратные и программные средства, которые делают нецелевой подход к экранированию гораздо более реалистичным и доступным сегодня, чем в предыдущие годы. Иссле-

дования СОЗ в настоящее время наряду с «традиционными приоритетными загрязнителями» сосредоточены на «новых загрязнителях» окружающей среды, которые присутствуют в среде на следовых уровнях, но обладают высокой токсичностью. В литературе мало сообщений, в которых используется режим полного сканирования для нецелевого скрининга токсичных соединений в живых организмах [2, 4, 5].

В течение последнего десятилетия масс-спектрометрия (МС), основанная на технологии времени пролета (time of flight (TOF-MS)), стала более доступной, стабильной и полезной для экологического анализа. TOF-MS приобретает полный масс-спектр с гораздо лучшей чувствительностью, чем стандартная квадрупольная ловушка МС, и делает его универсальным инструментом как для целевого, так и для нецелевого анализа загрязняющих веществ окружающей среды. В сочетании с газовой или жидкостной хроматографией (GC-MS или LC-MS) можно выделить и обнаружить очень широкий диапазон химических соединений.

В нецелевом подходе, который также называется «неизвестным скринингом», информация о загрязняющих веществах в образце отсутствует. Информация о веществах выводится исключительно из хроматограмм и масс-спектров. Информация, полученная из MS-детектора, обычно огромна и требует автоматической оценки записанных файлов данных. NIST/EPA/NIH/PESTICIDES/AMDIS (автоматические идентификационные библиотеки) – это программное обеспечение, которое не только идентифицирует скрытые соединения, но и ускоряет оценку полномасштабного анализа на основе GC-MS и является надежным инструментом для экологических и токсикологических исследований.

10.1. «Новые» СОЗ в дальневосточных морях России

В нашем исследовании был использован GC-MS (Shimadzu GCMS-QP2010 Ultra). Примеры хроматограммы при нецелевом скрининговом анализе представлены на рисунках 10.1 и 10.2.

Рис. 10.1. Неразмеченная хроматограмма пробы (пример)
при нецелевом скрининговом анализе на Shimadzu GCMS-QP2010 Ultra

Рис. 10.2. Размеченная хроматограмма пробы (пример)
при нецелевом скрининговом анализе на Shimadzu GCMS-QP2010 Ultra

За 10 лет изучения СОЗ в дальневосточных морях нами собран банк проб, который насчитывает около 10000 образцов. Пробоподготовку использовали стандартную, описанную в Главе 2, только при качественной идентификации использовали не стандарты, а библиотеки NIST/EPA/NIH/**PESTICIDES**/AMDIS (автоматические идентификационные библиотеки). Пробы из банка отбирались выборочно по матрицам – рыбы, птицы, человек. Достоверность обнаруженных соединений смотрели по соответствию их стандартным веществам (не менее 80%) из библиотеки. «Традиционные» СОЗ, обнаруженные при нецелевом анализе представлены в таблице 10.1. Спектр «новых» СОЗ представлен в таблице 10.2.

Наиболее часто встречающиеся «традиционные» органические соединения при нецелевом скрининге проб из дальневосточных морей

Название вещества, номер CAS	Другие названия (по CAS Common Chemistry и PubChem)
α -ГХЦГ 319-84-6	(1 α ,2 α ,3 β ,4 α ,5 β ,6 β)-1,2,3,4,5,6-Hexachlorocyclohexan; (1 α ,2 α ,3 β ,4 α ,5 β ,6 β)-1,2,3,4,5,6-Hexachlorocyclohexane; (1 α ,2 α ,3 β ,4 α ,5 β ,6 β)-1,2,3,4,5,6-hexachlorociclohexano; ALPHA-1,2,3,4,5,6-HEXACHLOROCYCLOHEXAN; Cyclohexane, 1,2,3,4,5,6-hexachloro-, (1 α ,2 α ,3 β ,4 α ,5 β ,6 β)-; Cyclohexane, 1,2,3,4,5,6-hexachloro-, α -; Hexachlorocyclohexane; α -1,2,3,4,5,6-Hexachlorocyclohexane; α -666; α -Benzenehexachloride; α -Benzohexachloride; α -BHC; α -HCH; α -Hexachloran; α -Hexachlorane; α -Hexachlorocyclohexane; α -Hexachlorocyclohexane; α -Lindane.
β -ГХЦГ 319-85-7	(1 α ,2 β ,3 α ,4 β ,5 α ,6 β)-1,2,3,4,5,6-Hexachlorocyclohexan; (1 α ,2 β ,3 α ,4 β ,5 α ,6 β)-1,2,3,4,5,6-Hexachlorocyclohexane; (1 α ,2 β ,3 α ,4 β ,5 α ,6 β)-1,2,3,4,5,6-hexachlorociclohexano; BETA-1,2,3,4,5,6-HEXACHLOROCYCLOHEXAN; Cyclohexane, 1,2,3,4,5,6-hexachloro-, (1 α ,2 β ,3 α ,4 β ,5 α ,6 β)-; Cyclohexane, 1,2,3,4,5,6-hexachloro-, β -; Hexachlorocyclohexane; β -1,2,3,4,5,6-Hexachlorocyclohexane; β -666; β -Benzene hexachloride; β -BHC; β -HCH; β -Hexachloran; β -Hexachlorobenzene; β -Hexachlorocyclohexane; β -Lindane.
γ -ГХЦГ 58-89-9	(1 α ,2 α ,3 β ,4 α ,5 α ,6 β)-1,2,3,4,5,6-Hexachlorocyclohexane; 1,2,3,4,5,6-G-HEXACHLOROCYCLOHEXANE; 1,2,3,4,5,6-Hexachlorocyclohexane; 666; Aal-indan; Aficide; Agrocide; Agrocide III; Agrocide WP; Ameisenmittel Merck; Aparasin; Aphtiria; Aplidal; BHC; BHC (insecticide); Celanex; Chloresene; Codechine; Cyclohexane, 1,2,3,4,5,6-hexachloro-, (1 α ,2 α ,3 β ,4 α ,5 α ,6 β)-; Cyclohexane, 1,2,3,4,5,6-hexachloro-, γ -; DBH; Detmol Extract; Entomoxan; Esoderm; Fenofort; Gamacid; Gamacide; Gamacide 20; Gamene; Gamma benzene hexachloride; Gamma-HCH; Gammalin; Gexane; HCC; HCCH; HCH; Heclotox; Hexatin; Lidano (HCH); Lidenal; Lindafor; Lindane; Lindane (g-BHC or g-HCH); Lindane [cyclohexane, 1,2,3,4,5,6-hexachloro-(1 α ,2 α ,3 β ,4 α ,5 α ,6 β)-]; γ -1,2,3,4,5,6-Hexachlorocyclohexane; γ -666; γ -Benzene hexachloride; γ -Benzohexachloride; γ -BHC; γ -HCH; γ -HCH or γ -BHC и др.
δ -ГХЦГ 319-86-8	(1 α ,2 α ,3 α ,4 β ,5 α ,6 β)-1,2,3,4,5,6-Hexachlorocyclohexane; (1 α ,2 α ,3 α ,4 β ,5 α ,6 β)-1,2,3,4,5,6-Hexachlorocyclohexane; (1 α ,2 α ,3 α ,4 β ,5 α ,6 β)-1,2,3,4,5,6-hexachlorociclohexano; Cyclohexane, 1,2,3,4,5,6-hexachloro-, (1 α ,2 α ,3 α ,4 β ,5 α ,6 β)-; Cyclohexane, 1,2,3,4,5,6-hexachloro-, δ -; Delta-BHC; Hexachlorocyclohexane; δ -1,2,3,4,5,6-Hexachlorocyclohexane; δ -666; δ -Benzene hexachloride; δ -BHC; δ -HCH; δ -Hexachlorocyclohexane; δ -Lindane.
<i>o,p'</i> -ДДТ 789-02-6	(.+)-1-(o-Chlorophenyl)-1-(p-chlorophenyl)-2,2,2-trichloroethane; (+)-o,p'-DDT; 1-(2-Chlorophenyl)-1-(4-chlorophenyl)-2,2,2-trichloroethane; 1-(o-Chlorophenyl)-1-(p-chlorophenyl)-2,2,2-trichloroethane; 1,1,1-Trichloro-2-(o-chlorophenyl)-2-(p-chlorophenyl)ethane; 2-(2-Chlorophenyl)-2-(4-chlorophenyl)-1,1,1-trichloroethane; 2,2,2,o,p'-Pentachlorethylidenbisbenzol 2,2,2,o,p'-pentachloroethylidenbisbenzene; 2,2,2,o,p'-pentacloroetilidenbisbenzeno; 2,4'-DDT; 2,4'-Dichlorodiphenyltrichloroethane; Benzene, 1-chloro-2-[2,2,2-trichloro-1-(4-chlorophenyl)ethyl]-; Ethane, 1,1,1-trichloro-2-(o-chlorophenyl)-2-(p-chlorophenyl)-; NSC 33446; NSC 57644; o,p'-Chlorophenothane; o,p'-DDT
<i>p,p'</i> -ДДТ	1,1,1-Trichloro-2,2-bis(4-chlorophenyl) ethane; 1,1,1-Trichloro-2,2-bis(p-

50-29-3	chlorophenyl)ethane; 1,1,1-Trichloro-2,2-di(p-chlorophenyl)ethane; 1,1-Bis(4-chlorophenyl)-2,2,2-trichloroethane 1,1-Bis(p-chlorophenyl)-2,2,2-trichloroethane; 2,2,2-Trichloro-1,1-bis(4-chlorophenyl)ethane; 2,2-bis(p-Chlorophenyl)-1,1,1-trichloroethane; 4,4'-DDT; 4,4'-Dichlorodiphenyltrichloroethane; 4,4-Dichlorodiphenyl-trichloroethane; Aavero-extra; Agritan; Arkotine; Benzene, 1,1'-(2,2,2-trichloroethylidene)bis[4-chloro-; Benzene, 1,1'-(2,2,2-trichloroethylidene)bis[4-chloro-; Benzene, 1,1'-(2,2,2-trichloroethylidene)bis[4-chloro-; Benzochloryl; Bovidermol; Chlorophenothane; Chlorphenothan; Chlorphenotoxum; Citox; D.D.T.; DDT; Deoval; Detox; Detox (pesticide); Detoxan; Dibovin; Dichlorodiphenyltrichloroethane; Dicophane; ENT-1506; Estonate; Ethane, 1,1,1-trichloro-2,2-bis(4-chlorophenyl)-; Ethane, 1,1,1-trichloro-2,2-bis(p-chlorophenyl)-; ETHANE, 1,1-BIS(4-CHLOROPHENYL)-2,2,2-TRICHLORO-; Gesafid; NSC 8939; p,p'-DDT; p,p'-Dichlorodiphenyltrichloroethane; p,p'-Dichlorodiphenyltrichloromethylmethane и др.
<i>o,p'</i> -ДДД 53-19-0	1-(2-Chlorophenyl)-1-(4-chlorophenyl)-2,2-dichloroethane; 1-(o-Chlorophenyl)-1-(p-chlorophenyl)-2,2-dichloroethane; 1,1-Dichloro-2-(o-chlorophenyl)-2-(p-chlorophenyl)ethane; 2-(2-Chlorophenyl)-2-(4-chlorophenyl)-1,1-dichloroethane; 2-(p-Chlorophenyl)-2-(o-chlorophenyl)-1,1-dichloroethane; 2,4'-Dichlorodiphenyldichloroethane; Benzene, 1-chloro-2-[2,2-dichloro-1-(4-chlorophenyl)ethyl]-; Benzene, 1-chloro-2-[2,2-dichloro-1-(4-chlorophenyl)ethyl]-; CB 313; Chloditan; Chlodithane; Ethane, 1,1-dichloro-2-(o-chlorophenyl)-2-(p-chlorophenyl)-; Lysodren; Mitotan; Mitotan; mitotane; mitotano; NSC 38721; o,p'-DDD; o,p'-Dichlorodiphenyldichloroethane; o,p'-TDE; Opeprim.
<i>p,p'</i> -ДДД 72-54-8	1,1'-(2,2-Dichloroethylidene)bis[4-chlorobenzene]; 1,1-Bis(4-chlorophenyl)-2,2-dichloroethane; 1,1-Bis(p-chlorophenyl)-2,2-dichloroethane; 1,1-Dichloro-2,2-bis(4-chlorophenyl)ethane; 1,1-Dichloro-2,2-bis(p-chlorophenyl)ethane; 2,2-Bis(4-chlorophenyl)-1,1-dichloroethane; 2,2-bis(para-Chlorophenyl)-1,1-dichloroethane; 2,2-Bis(p-chlorophenyl)-1,1-dichloroethane; 4,4'-DDD; 4,4'-Dichlorodiphenyldichloroethane; 4,4'-TDE; Benzene, 1,1'-(2,2-dichloroethylidene)bis[4-chloro-; Benzene, 1,1'-(2,2-dichloroethylidene)bis[4-chloro-; Benzene, 1,1'-(2,2-dichloroethylidene)bis[4-chloro-; DDD; Dichlorodiphenyl dichloroethane; Dichlorodiphenyldichloroethane; DICHLORODIPHENYLDICHLOROETHANE (DDD); Dilene; Ethane, 1,1-dichloro-2,2-bis(p-chlorophenyl)-; ME 1700; NSC 8941; p,p'-DDD; p,p'-Dichlorodiphenyldichloroethane; p,p'-Dichlorodiphenylethylene dichloride; p,p'-TDE; Rhothane; TDE; TDE (1,1-DICHLORO-2,2-BIS(P-CHLOROPHENYL)ETHANE); UN 2761
<i>o,p'</i> -ДДЕ 3424-82-6	1,1-Dichloro-2-(o-chlorophenyl)-2-(p-chlorophenyl)ethylene; 2-(2-Chlorophenyl)-2-(4-chlorophenyl)-1,1-dichloroethylene; 2,2,o,p'-tetrachlorovinylidenebisbenzene; 2,2,o,p'-Tetrachlorovinylidenbisbenzol; 2,2,o,p'-tetrachlorovinilidenobisbenceno; 2,4'-DDE; 2,4'-Dichlorodiphenyldichloroethylene; Benzene, 1-chloro-2-[2,2-dichloro-1-(4-chlorophenyl)ethenyl]-; Ethylene, 1,1-dichloro-2-(o-chlorophenyl)-2-(p-chlorophenyl)-; NSC 59908; o,p'-DDE.
<i>p,p'</i> -ДДЕ 72-55-9	1,1'-(Dichloroethenylidene)bis(4-chlorobenzene); 1,1-Bis(4-chlorophenyl)-2,2-dichloroethene; 1,1-BIS-(4-CHLOROPHENYL)-2,2-DICHLOR-AETHEN; 1,1-Bis(p-chlorophenyl)-2,2-dichloroethylene; 1,1-Dichloro-2,2-bis(p-chlorophenyl)ethylene; 1,1-Dichloro-2,2-di(p-chlorophenyl)ethylene; 2,2-bis(4-Chlorophenyl)-1,1-dichloroethylene; 2,2-bis(p-chlorophenyl)-1,1-dichloroethylene; 2,2-Bis(p-chlorophenyl)-1,1-dichlorethylen; 2,2-bis(p-clorofenil)-1,1-dicloroetileno; 2,2-Dichloro-1,1-bis(4-chlorophenyl)ethylene; 4,4'-DDE; 4,4'-Dichlorodiphenyldichloroethylene; Benzene, 1,1'-(2,2-dichloroethenylidene)bis[4-chloro-; Benzene, 1,1'-(dichloroethenylidene)bis(4-chloro-; Benzene, 1,1'-

**Наиболее часто встречающиеся «новые» органические соединения
при нецелевом скрининговом анализе проб из дальневосточных морей**

Название вещества, номер CAS	Другие названия (по Pubchem) +	Характеристика
Aldicarb 116-06-3	2-Methyl-2-(methylthio)propanal O-((methylamino)carbonyl)oxime; 2-Methyl-2-(methylthio)propionaldehyde O(methylcarbamoyl)oxime; 2-Methyl-2-(methylthio)propionaldehyde O- (methylcarbamoyl)oxime; Propanal, 2-methyl-2-(methylthio)-, O- [(methylamino)carbonyl]oxime; Propionaldehyde, 2-methyl-2- (methylthio)-, O-(methylcarbamoyl)oxime; Aldicarb; Aldicarbe; NSC 379586; OMS 771; Temik; Temik 10G; Temik G 10; UC 21149; UN 2757 и др.	Инсектицид карбамата, который является активным веществом в пестициде Темік. В основном используется как нематод. Aldicarb является ингибитором холинэстеразы, который предотвращает распад ацетилхолина в синапсе. В случае сильного отравления жертва умирает от респираторной недостаточности.
Cyromazine 66215-27-8	2-N-cyclopropyl-1,3,5-triazine-2,4,6-triamine; 2-cyclopropylamino-4,6-diamino-s-triazine; CGA 72662; CGA-72662; cyromazin; cyromazine dihydrochloride; Larvadex; N-cyclopropylmelamine; Neporex; Vetrazin и др.	Cyromazine является регулятором роста триазина, используемым в качестве инсектицида и акарицида. Это циклопропильное производное меламина. Cyromazine работает, воздействуя на нервную систему незрелых личиночных стадий некоторых насекомых. В ветеринарии используется как эктопаразитицид.
Metribuzin 21087-64-9	4-amino-6-tert-butyl-3-(methylsulfanyl)-1,2,4-triazin-5(4H)-one; 4-amino-6-tert-butyl-4,5-dihydro-3-methylthio-1,2,4-triazin-5-one; Lexone; Sencor; Metribuzine; Zenkor; Sencorex; Senkor; Lexone DF; Sencor DF; Lexone 4L; Sencor 4F; Bayer 6159H; Bayer 6443H; Bayer 94337; BAY dic 1468; Sencorex L.F.; Metribuzin [BSI:ISO] и др.	Гербицид из группы триазинонов. Метрибузин входит в качестве активного ингредиента в состав множества пестицидов. Механизм действия основан на ингибировании работы фотосистемы II.
Prohydrojasmon-1 158474-72-7	Prohydrojasmon; Prohydrojasmon [ISO]; propyl 2-[(1R,2R)-3-oxo-2-pentylcyclopentyl]acetate; propyl [(1r,2r)-3-oxo-2-pentylcyclopentyl]acetate и др.	Гербицид. Ингибитор роста. Подробная информация отсутствует.
Oxamyl 23135-22-0	DPX 1410; DPX 1410L; Du Pont 1410; NSC 379588; Oxamyl; Oxamyl (pesticide); Thioxamyl; Vydate; Vydate CLV; Vydate G; Vydate L Ethanimidothioic acid, 2-(dimethylamino)-N-	Оксамил представляет собой карбаматный пестицид. Химическое вещество, используемое в качестве пестицида, которое имеет две формы:

	<p>гранулированную и жидкую. Гранулированная форма запрещена в Соединенных Штатах. Обычно продается под торговой маркой Vydate. Он классифицируется как чрезвычайно опасное вещество в Соединенных Штатах, как определено в Разделе 302 Закона США о чрезвычайном планировании и сообществе о праве на жизнь (42 USC 11002), и подлежит строгим требованиям к отчетности со стороны объектов, которые производят, хранят, или использовать его в значительных количествах.</p> <p>Тиоциклам - это нереистоксиновые анаэтоксиды, селективный инсектицид с контактным действием для чешуекрылых и др. При низких концентрациях тиоциклам действует как агонисты ацетилхолинового рецептора, при более высоких концентрациях - как блокаторы каналов. Относится к гербицидам фенилкарбамата и классифицируется как митотический разрушающий гербицид. Было обнаружено, что соединение нарушает митотические центры образования микроорганизмов в растениях.</p>
<p>Thiocyclame 31895-21-3</p>	<p>[[[(methylamino)carbonyl]oxy]-2-oxo-, methyl ester; N',N'-dimethylcarbamoyl(methylthio)methylenamine N-methylcarbamate; N',N'-Dimethylcarbamoyl(methylthio)methylenamin-N-methylcarbamate; N-methylcarbamate de N',N'-dimethylcarbamoyl(methylthio)methylenamine; N-metilcarbamato de N',N'-dimetilcarbamoi(metiltilio)metilenamina; Oxamimidic acid, N',N'-dimethyl-N-[(methylcarbamoyl)oxy]-1-thio-, methyl ester и др.</p>
<p>Thiocyclame 1918-11-2</p>	<p>Thiocyclam; Thiocyclame; Sultamine; 5-(Dimethylamino)-1,2,3-trithiane; Thiocyclam [BSI:ISO]; N,N-dimethyl-1,2,3-trithian-5-amine; N,N-Dimethyl-1,2,3-trithian-5-ylamine; Thiocyclame [ISO-French]; 1,2,3-Trithian-5-amine, N,N-dimethyl-; N,N-Dimethyl-1,2,3-trithian-5-amine (9CI); N,N-dimethyltrithian-5-amine и др. Terbucarb; Terbutol; Azak; Terbucarb [ISO]; AZAC; AZAR; Phenol, 2,6-bis(1,1-dimethylethyl)-4-methyl-, methylcarbamate; UNII-17B625R8YT; Carbamic acid, methyl-, 2,6-di-tert-butyl-p-tolyl ester; 2,6-Di-tert-butyl-p-tolyl methylcarbamate; 2,6-Di-t-butyl-4-methylphenyl-N-methylcarbamate; (2,6-ditert-butyl-4-methylphenyl) N-methylcarbamate; Phenol, 2,6-bis(1,1-dimethylethyl)-4-methyl-, methylcarbamate (9CI) и др.</p>
<p>Bis(2-ethylhexyl)phthalate 117-81-7</p>	<p>DEHP; Bis(2-ethylhexyl) phthalate; Di(2-ethylhexyl)phthalate Diethylhexyl phthalate; Di-sec-octyl phthalate; Octyl phthalate; Fleximel; Octoil; Ethylhexyl phthalate; Palatinol AH; Celluflex DOP; Vestinol AH; Bisoflex DOP; Kodaflex DOP; Staflex DOP; Truflex DOP; Flexol DOP</p>
	<p>Используют при получении поливинилхлорида (ПВХ). Он проявляет низкую токсичность от острых (краткосрочных) и хронических (долгосрочных) воздействий. Острое воздействие крупными дозами DEHP может вызвать желудочно-кишечные расстройства у людей. Информация о репродуктивном развитии или канцерогенном эффекте DEHP у людей отсутствует.</p>

Триадимефон 43121-43-3	TRIADIMEFON; Bayleton; Azocene; Triadimefone; Amiral; Fenximin; Haleton; Acizol; Adifon; Mighty; Miltek; Strike; Typhon; Nurex; 1-(4-Chlorophenoxy)-3,3-dimethyl-1-(1,2,4-triazol-1-yl)-butan-2-one; 1-(4-Chlorophenoxy)-3,3-dimethyl-1-(1H-1,2,4-triazol-1-yl)-2-butanone; 1-(1,2,4-Triazol-1-yl)-1-(4-chloro-phenoxy)-3,3-dimethylbutanone; 1-(4-Chlorophenoxy)-3,3-dimethyl-1-(1,2,4-triazol-1-yl)butanone и др.	Триадимефон – системный фунгицид. Механизм действия препарата заключается в ингибировании деметилирования в положении C-14 в процессе биосинтеза эргостерина. Реакции, приводящие к деметилированию в положении C-14, катализируются оксигеназами смешанной функции. Одна из них происходит при участии цитохрома P-450.
Spirodiclofen 148477-71-8	Spirodiclofen; 3-(2,4-dichlorophenyl)-2-oxo-1-oxaspiro[4.5]dec-3-en-4-yl 2,2-dimethylbutanoate; Envior; [3-(2,4-dichlorophenyl)-2-oxo-1-oxaspiro[4.5]dec-3-en-4-yl] 2,2-dimethylbutanoate; Spirodiclofen [ISO]; [2-(2,4-dichlorophenyl)-3-oxo-4-oxaspiro[4.5]dec-1-en-1-yl] 2,2-dimethylbutanoate и др.	Акарицид и инсектицид, используемый против клещей. Спиродилокен относится к классу тетраеновой кислоты и действует путем ингибирования биосинтеза липидов.
Triadimenol 55219-65-3	TRIADIMENOL; Baytan; Bayfidan; Spinnaker; Triafol; Baytan 15; Triaphol; Triadimenol [BSI:ISO]; alpha-tert-Butyl-beta-(4-chlorophenoxy)-1H-1,2,4-triazole-1-ethanol; 1-(4-Chlorophenoxy)-3,3-dimethyl-1-(1H-1,2,4-triazol-1-yl)butan-2-ol; 1-(4-chlorophenoxy)-3,3-dimethyl-1-(1,2,4-triazol-1-yl)ethanol и др.	Пестицид, системный фунгицид из класса триазолов. При действии триадименола баланс процессов терпеноидного биосинтеза смещается в сторону фитогормонов – абсцизовой кислоты, гиббереллина, цитокинина.
Flutriafol 76674-21-0	Flutriafol; Flutriafol [BSI:ISO]; alpha-(2-Fluorophenyl)-alpha-(4-fluorophenyl)-1H-1,2,4-triazole-1-ethanol; 1-(2-fluorophenyl)-1-(4-fluorophenyl)-2-(1,2,4-triazol-1-yl)ethanol; (RS)-2,4'-Difluoro-alpha-(1H-1,2,4-triazol-1-ylmethyl)benzhydrol alcohol; flutriafen и др.	Пестицид, фунгицид из класса производных триазола. Вещество блокирует биосинтез эргостерина, нарушая тем самым образование клеточной оболочки и развитие гиф мицелия. Обладает также фунгицидным действием, особенно в отношении мучнисторосяных грибов.
Di-n-butyl Phthalate (DBP) 84-74-2	Di-n-butyl phthalate; dibutyl phthalate; n-Butyl phthalate; Butyl phthalate; Elaol; Genoplast B; Palatinol C; Polycizer DBP; Unimoll DB; Dibutyl-o-phthalate; Witcizer 300; Dibutyl 1,2-benzenedicarboxylate и др.	Применяется как пластификатор композиций на основе поливинилхлорида, каучуков, эпокси-ных смол, некоторых эфиров целлюлозы и как высококипящий растворитель. Входит в состав клея БФ-6. Дибутилфталат применяется также в качестве репеллента

Dimethylvinphos 2274-67-1	Dimethylvinphos; (Z)-DIMETHYLVINPHOS; Dimethylvinphos (Z type); 2-Chloro-1-(2,4-dichlorophenyl)vinyl dimethyl phosphate; [(Z)-2-chloro-1-(2,4-dichlorophenyl)ethenyl] dimethyl phosphate; 2-Chloro-1-(2,4-dichlorophenyl)ethenyl dimethyl phosphate; Phosphoric acid, 2-chloro-1-(2,4-dichlorophenyl)ethenyl dimethyl ester; Phosphoric acid, 2-chloro-1-(2,4-dichlorophenyl)vinyl dimethyl ester и др.	Фосфорорганический пестицид. Они угнетают активность фермента нервной системы ацетилхолинэстеразы и других эстераз, что приводит к накоплению в нервных синапсах ацетилхолина, который вызывает картину отравления. Действие на центральную нервную систему сопровождается дистрофическими изменениями и гибелью нервных клеток в результате гипоксии.
Hexazinone 51235-04-2	HEXAZINONE; Velpar; Brushkiller; Velpar L; 3-Cyclohexyl-6-(dimethylamino)-1-methyl-1,3,5-triazine-2,4-(1H,3H)-dione; Gridball 1,3,5-Triazine-2,4-(1H,3H)-dione, 3-cyclohexyl-6-(dimethylamino)-1-methyl-; Hexazinone; Hexazinone [ANSI:BSI:ISO]; 3-Cyclohexyl-1-methyl-6-(dimethylamino)-s-triazine-2,4-(1H,3H)-dione; 3-cyclohexyl-6-(dimethylamino)-1-methyl-1,3,5-triazine-2,4-dione; 3-Cyclohexyl-6-dimethylamino-1-methyl-1,2,3,4-tetrahydro-1,3,5-triazine-2,4-dione и др.	Неселективный гербицид широкого спектра действия из группы триазинов и дикетонов (триазинов). Действует путем ингибирования фотосинтеза на уровне фотосистемы II. Наблюдается тенденция к повышению активности щелочной фосфатазы сыворотки (SAP) и сыворотки глутаминовой пировино-трансаминазы (SGPT).
Tebuconazole 107534-96-3	Tebuconazole; Folicur; Fenetrazole; Ethyltrianol; Tebuconazole; Terbutrazole; Etiltrianol; Raxil; Preventol A 8; Tebuconazol; LYNX; Tebuconazole [ISO]; 3-((1H-1,2,4-Triazol-1-yl)methyl)-1-(4-chlorophenyl)-4,4-dimethylpentan-3-ol; 1-(4-Chlorophenyl)-4,4-dimethyl-3-((1H-1,2,4-triazol-1-yl)methyl)pentan-3-ol; 1-(4-Chlorophenyl)-4,4-dimethyl-3-((1H-1,2,4-triazol-1-yl)methyl)pentan-3-ol; (RS)-1-(4-Chlorophenyl)-4,4-dimethyl-3-((1H-1,2,4-triazol-1-yl)methyl)pentan-3-ol; (alpha-(2-(4-Chlorophenyl)ethyl)-alpha-(1,1-dimethylethyl)-1H-1,2,4-triazole-1-ethanol и др.	Пестицид, эффективный системный фунгицид. Относится к триазолам третьего поколения. Подавляет биосинтез эргостерина в мембранах клеток фитопатогенов, ингибируя деметилирование в положении C-14. Образующиеся Д5-стерины также воздействуют на метаболизм, и этим тебуконазол отличается от других триазолов.
Piperophos 24151-93-7	Rilof; Avirosan; Piperofos; Piperophos [BSI:ISO]; 1-(Di-N-propoxyphosphinothioylthiomethylcarbonyl-2-methylpiperidine); O,O-Dipropyl S-2-methyl-piperidinocarbonyl-methyl phosphorodithioate; Phosphorodithioic acid, O,O-dipropyl S-(2-pipecolinocarbonylmethyl) ester; S-2-Methylpiperidinocarbonylmethyl O,O-dipropyl phosphorodithioate;	Фосфорорганический пестицид. Они угнетают активность фермента нервной системы ацетилхолинэстеразы и других эстераз, что приводит к накоплению в нервных синапсах ацетилхолина, который вызывает картину отравления. Действие на центральную нервную систему сопровождается дистрофическими изменениями и гибелью нервных клеток в результате гипоксии.

Imibenconazole 86598-92-7	2-dipropoxyphosphinothioylsulfanyl-1-(2-methylpiperidin-1-yl)ethenone; Phosphorodithioic acid, S-[2-(2-methyl-1-piperidinyl)-2-oxoethyl] O,O-dipropyl ester и др. Imibenconazole; Imibenconazole [ISO]; 4-Chlorobenzyl N-2,4-dichlorophenyl-2-(1H-1,2,4-triazol-1-yl)thioacetamidate; 1H-1,2,4-Triazole-1-ethanamidithioic acid, N-(2,4-dichlorophenyl)-, (4-chlorophenyl)methyl ester; (4-chlorophenyl)methyl (1E)-N-(2,4-dichlorophenyl)-2-(1,2,4-triazol-1-yl)ethanimidodithioate и др.	Фунгицид и протравитель семян, активный против широкого круга патогенов, включая аскомицеты, базидиомицеты и дейтеромицеты. Персистентен и устойчив к смыванию дождем.
Molinate 2212-67-1	Ordram; S-Ethyl azepane-1-carbothioate; Janan; Higalinate; Molinate; Hydram; Felan; Yalan; Yulan; Sakkimol; S-Ethyl hexahydro-1H-azepine-1-carbothioate; Molinate [BSI:ISO]; 1H-Azepine-1-carbothioic acid, hexahydro-, S-ethyl ester; S-Ethyl-N-hexamethylenethiocarbamate; Ethyl 1-hexamethyleneiminocarbothiolate; S-Ethyl N,N-hexamethylenethiocarbamate и др.	Гербицид. Очень токсичен, может быть смертельным при вдыхании, проглатывании или всасывании через кожу. Вызывает онкологию. Имеет способность к биоаккумуляции и биомagnификации. Агент, который разрушает сперматозоиды в мужских половых органах и блокирует сперматогенез.
Chloroneb 2675-77-6	1,4-Dichloro-2,5-dimethoxybenzene; Demosan; Tersan SP; Demasan; Tersan-SP; Chloronebe; Demosan 65W; Terraneb; Terraneb SP; Benzene, 1,4-dichloro-2,5-dimethoxy-, Nuflo D; Chloroneb [AN-SI:BSI:ISO]; Dichloro-2,5-dimethoxybenzene и др.	Фунгитотоксичность обусловлена специфическим ингибированием полимеризации ДНК. Данные недостаточны для оценки канцерогенного потенциала.
Jasmolin I 4466-14-2	Jasmolin I; Jasmoline I; (1S)-2-methyl-4-oxo-3-[(2Z)-pent-2-en-1-yl]cyclopent-2-en-1-yl (1R,3R)-2,2-dimethyl-3-(2-methylprop-1-en-1-yl)cyclopropanecarboxylate; Cyclopropanecarboxylic acid, 2,2-dimethyl-3-(2-methyl-1-propenyl)-, (1S)-2-methyl-4-oxo-3-(2Z)-2-pentenyl-2-cyclopenten-1-yl ester, (1R,3R)-; (1R-(1alpha(S*(Z)),3beta))-2-Methyl-4-oxo-3-(2-pentenyl)-2-cyclopenten-1-yl 2,2-dimethyl-3-(2-methyl-1-propenyl)cyclopropanecarboxylate; (1R,3R)-2,2-Dimethyl-3-(2-methyl-1-propen-1-yl)cyclopropanecarboxylic Acid (1S)-2-Methyl-4-oxo-3-(2Z)-2-penten-1-yl-2-cyclopenten-1-yl Ester и др.	Пиретрины – инсектициды контактного действия, очень быстро всасываются в организм насекомого и поражают нервную систему, нарушая процесс передачи нервных импульсов по аксонам.
Cinerin I 97-12-1	Cinerin; Cinerin I [BSI:ISO]; 3-(2-butenyl)-2-methyl-4-oxo-2-cyclopenten-1-yl 2,2-dimethyl-3-(2-methyl-1-propenyl)cyclopentanecarboxylate; Cinerine I; (1S)-3-[(2Z)-but-2-en-1-yl]-2-methyl-4-oxocyclopent-2-en-1-yl (1R,3R)-2,2-dimethyl-3-(2-methylprop-1-en-1-	Пиретрины – инсектициды контактного действия, очень быстро всасываются в организм насекомого и поражают нервную систему, нарушая процесс передачи нервных импульсов по аксонам.

yl)cyclopropanecarboxylate;
2,2-dimethyl-3-(2-methyl-1-propenyl)cyclopropanecarboxylic acid 3-(2-butenyl)-2-methyl-4-oxo-2-cyclopenten-1-yl ester;
Chrysanthemummonocarboxylic acid, cinerolone ester;
Cinerolone, chrysanthemummonocarboxylic acid ester и др.
Etsan; Ronit; Ro-Neet; Hexylthiocarbam; Eurex; Sabet; S-Ethyl N-cyclohexylthiocarbamate; Ro-Neet E; Cycloate [BSI:ISO]; Carbamothioic acid, cyclohexylethyl-, S-ethyl ester; S-Ethylethylcyclohexylthiocarbamate и др.

Cycloate
1134-23-2

Тиокарбамаг. Применяется в качестве гербицида избирательного действия против однолетних двудольных и некоторых однодольных сорняков. Относится к малотоксичным веществам. Классифицируется как не являющийся канцерогеном для человека

10.2. Заключение

Нецелевой скрининговый анализ липофильных ксенобиотиков проведен впервые для дальневосточного региона. Наличие всех указанных соединений в пробах говорит о присутствии различных СОЗ в окружающей среде и живых организмах, и требует регулярного контроля с применением качественного и количественного анализа. Большинство этих поллютантов не являются запрещенными, поэтому их количества в окружающей среде должны быть строго регламентированы, чтобы избежать негативных последствий для живых организмов, в том числе человека.

10.3. Список литературы

1. Bader, T. General strategies to increase the repeatability in non-target screening by liquid chromatography-high resolution mass spectrometry / T. Bader, W. Schulz, K. Kümmerer, R. Winzenbacher // *Analytica Chimica Acta*. – 2016. – V. 935. – P.173–186.
2. Blum, K.M. Non-target screening and prioritization of potentially persistent, bioaccumulating and toxic domestic wastewater contaminants and their removal in on-site and large-scale sewage treatment plants / K.M. Blum, P.L. Andersson, G. Renman [et al.] // *Science of The Total Environment*. – 2017. – V. 575. – P. 265–275.
3. Kunzelmann, M. Non-targeted analysis of unexpected food contaminants using LC-HRMS / M. Kunzelmann, M. Winter, M. Aberg, K.E. Hellenäs, J. Rosén // *Analytical and Bioanalytical Chemistry*. – 2018. – V. 410. – P. 5593–5602.
4. Rager, J.E. Linking high resolution mass spectrometry data with exposure and toxicity forecasts to advance high-throughput environmental monitoring / J.E. Rager, M.J. Strynar, S. Liang [et al.] // *Environment International*. – 2016. – V. 88. – P. 269–280.
5. Singer, H.P. Rapid Screening for Exposure to “Non-Target” Pharmaceuticals from Wastewater Effluents by Combining HRMS-Based Suspect Screening and Exposure Modeling / H.P. Singer, A.E. Wössner, C.S. McArdell, K. Fenner // *Environmental Science & Technology*. – 2016. – V. 50. – P. 6698–6707.