

926種類の農薬物質と外因性内分泌攪乱物質のスクリーニング-デコンボリューションレポート作成ソフトウェアと新農薬物質ライブラリによるGC/MS分析

アプリケーション

食品と環境

著者

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

要旨

マススペクトルライブラリの収集データが更新され大幅に拡張されたことにより、AgilentのRTL農薬物質ライブラリとDRS農薬物質ソリューションが更新されました。この新しいライブラリには、従来のライブラリよりも359種類多い926種類の農薬物質、外因性内分泌攪乱物質、および関連化合物が含まれています。日本の新しい"ポジティブリスト"制度でGC/MS分析が指定されているすべての化合物が含まれます。すべての化合物にはロックされたリテンションタイムがあり、このタイムはAgilent GC/MSシステムで ChemStationのリテンションタイム ロッキングソフトウェアを使用することで正確に再現することができます。この新しいデータベースは、化合物同定時にGC/MSの標準ライブラリとして使用したり、Agilentのスクリーナーソフトウェアでリテンションタイムとマス スペクトルマッチングによる同定に使用できます。このライブラリは、新バージョンであるAgilentのデコンボリューションレポート作成ソフトウェア(パーツ番号G1716AAバージョンA.03.00)と一緒に使用する場合に最大の効用が得られます。このソリューションを使用すると、GC/MSファイルを、926種類の

農薬物質と外因性内分泌攪乱物質すべてに対して、サンプルあたり約2分でスクリーニングできます。デコンボリューションは、共抽出された物質によってクロマトグラム中に埋もれている農薬物質の同定に役立ちます。この新しいデータベースと小規模のデータベースを、17種類の地表水サンプルのDRS分析で比較しました。新しいデータベースでは、農薬および外因性内分泌攪乱物質についての従来のRTLライブラリに収録されていなかった99種類の農薬物質、代謝物、難燃剤、および関連汚染物質がDRSで利用できます。

はじめに

Agilent Technologiesでは数年前に、ガスクロマトグラフ(GC)およびGCとマススペクトル検出(GC/MS)用にリテンションタイム ロッキング(RTL)を発表しました。RTLソフトウェアを使用することで、同一のメソッドと同じ品番のGCカラムを使用する限りは、世界中のあらゆるラボでのすべてのAgilent GCやGC/MSで、分析間のリテンションタイムを再現することができます(1)。どのラボでも別のラボで生成されたリテンションタイムを再現できるため、ロックされたリテンションタイムを収録したマススペクトルライブラリを作成することができます。これらのメソッドを公開データベースにロックさせることで、ユーザーは、そのライブラリの化合物すべてについてGC/MSファイルをスクリーニングすることができます。"ヒット"は、リテンションタイムが正確に一致することに加えて、スペクトルも正確に一致することが必須とされます。この条件によって、数多くの誤検出が排除され、より確実な化合物同定が可能になります(2)。



Agilent Technologies

さらにAgilentは最近、デコンボリューションレポート作成ソフトウェア (DRS) も発表しました。これは、従来のライブラリ検索と定量ソフトウェアに、マスペクトルデコンボリューションソフトウェアを組み込んだものです。DRSは、次の3種類のGC/MSソフトウェアパッケージを統合したものです。

- 1) Agilent GC/MS用 ChemStation
- 2) National Institute of Standards and Technology (NIST) マスペクトル検索プログラム (NIST '05 MSライブラリ付き)
- 3) NISTのマスペクトルデコンボリューションと同定の自動化システム (AMDIS) ソフトウェア

NIST オリジナルのDRSソフトウェアは、農薬物質分析用の包括的なソリューションであることを目的としていたため、農薬物質と外因性内分泌攪乱の疑いがある物質567種類のマスペクトル (AMDIS形式) とロックされたりテンションタイムが収録されていました (3)。

最近、Agilentは、データベースの更新と大幅な拡張として、926種類のエントリーを含んだ農薬物質と外因性内分泌攪乱物質についてのデータベース (パーツ番号G1672AA) を発表しました。このデータベースでは、従来のライブラリに加えて359種類の新たな化合物が追加されています。同時にAgilentでは、Agilent提供のライブラリやユーザー開発のライブラリのどちらでも使用できる新しいバージョンのDRSソフトウェア (パーツ番号G1716AA バージョンA.03.00) を発表しました。

農薬物質と外因性内分泌攪乱物質データベースの内容

G1672AA農薬物質と外因性内分泌攪乱物質データベースには、最新のデータを含むGCで検出可能なほぼすべての農薬物質が収録されています。さらに、数多くの代謝物、外因性内分泌攪乱物質、重要なPCBとPAH、一部の染料 (スーダンレッドなど)、合成ムスク化合物、および数種類の有機リン系難燃剤も収録されています。

この新しいデータベースは以下のものが含まれています。

- Agilent GC/MS ChemStationsで使用する従来のマスペクトルライブラリ

- GC/MS ChemStationに付属のAgilentのスクリーナーソフトウェアで使用するスクリーナーデータベース
- Agilent 5975または5973 GC/MSのユーザーが手持ちのGC/MSで再現可能な、926種類の化合物すべてに対するロックされたりテンションタイム
- AgilentのG1716AA (A.03.00) デコンボリューションレポート作成ソフトウェアで使用する各種ファイル
- GC/MSファイルの取り込み用およびDRSでのデータ解析用の機器パラメータでAgilentのG1701DA (バージョンD.02.00 SP1以上) に読み込み可能なe-メソッドこれらのパラメータを表1に示します。
- サンプルファイル
- アプリケーションノート

日本政府は2005年11月29日に、食品に残留する農薬、飼料添加物、動物用医薬品の規制に関する"ポジティブリスト"制度を告示しました。758種類の化学物質に対して最大残留基準値 (MRL) が設定され、65種類の化学物質に対しては規制の適用から除外されています。15種類の物質は不検出でなければなりません。言及されていないその他の農薬については、MRLが0.01 ppmの一律基準値となっています (4)。この新規制は、2006年5月29日に施行する予定となっています。

GC/MSでは日本のポジティブリストにある農薬物質の中から265種類の農薬物質を分析できます。新しいG1672AA 農薬物質ライブラリには、これらの化合物すべてについてのマスペクトルとロックされたりテンションタイムが収録されています。そのため、ラボ側で265種類の"ポジティブリスト"化合物すべて、およびさらに数百種類の農薬物質に対して、GC/MS分析後たった1~3分でスクリーニングを行うことができます。

実験

表1に、Agilentが農薬物質分析に使用する機器パラメータ、ソフトウェアパラメータ、および分析パラメータを示します。希望する注入量によっては、PTV注入口またはスプリット/スプリットレス注入口を使い分けることができます。

表1. 機器と分析条件

ガスクロマトグラフ	Agilent 6890N
自動サンブラ	Agilent 7683インジェクタおよびオートサンブラ
注入口	Agilent PTV、溶媒排出モードまたはスプリット/スプリットレスモードで操作
カラム	Agilent 30 m × 0.25 mm × 0.25 μm HP-5MSi (部品番号19091S-433i)
キャリアガス	ヘリウム、定圧モードで
リテンションタイムロッキング	16.596分にロックされたクロルピリフォスメチル (公称カラムヘッド圧力 = 17.1 psi)
オープン温度プログラム	70 °C (2分)、25 °C/min ~ 150 °C (0分)、3 °C/min ~ 200 °C (0分)、8 °C/min ~ 280 °C (10 ~ 15分)
PTV注入口パラメータ	温度プログラム:40 °C (0.25分)、1600 °C/minで昇温 250 °C (2分) ; 溶媒排出時間:0.2分; 溶媒排出流量:200 mL/min; 溶媒排出圧力:0.0 psi; パージ流量:60.0 mL/min; パージ時間:2.00分
注入量	15 μL (50-μLシリンジを使用)
質量選択検出器	Agilent 5975 inert
チューンファイル	Atune.u
モード	スキャン (またはSIM DRSライブラリ付きSIM)
スキャン範囲	50 ~ 550 u
イオン源、四重極、トランスファライン温度	それぞれ230、150、280 °C
溶媒ディレイ	4.00分
EM電圧	オートチューン電圧
ソフトウェア	
GC/MSD ChemStation	Agilent部品番号G1701DA (バージョンD02.00 sp1以降)
デコンボリューションレポート作成ソフトウェア	Agilent部品番号G1716AA (バージョンA.03.00) デコンボリューションレポート作成ソフトウェア
ライブラリ検索ソフトウェア	NIST MS 検索 (バージョン2.0d以降) (NIST '05 MSライブラリに付属 - Agilent部品番号G1033A)
デコンボリューションソフトウェア	自動マススペクトルデータデコンボリューションおよび同定ソフトウェア (AMDIS_32バージョン2.62以降、NIST '05 MSライブラリに付属 - Agilent 部品番号G1033A)
MSライブラリ	NIST '05 MSライブラリ (Agilent部品番号G1033A) Agilent RTL農薬および環境ホルモライブラリ、AgilentおよびNISTフォーマット (部品番号G1672AA)

結果と考察

DRSについては前報(3、5、6)で説明したとおりですが、次のようにまとめられます。

3つの独立した、しかし相補的なデータ解析手順が、DRSでは統合されています。最初に、GC/MS ChemStationソフトウェアでは、ターゲットイオンと最大3つのクォリファイアイオンを使用して目標の農薬物質に対して通常の定量分析を行います。検出されたキャリブレーション済み化合物の全てについてアマウントが報告されます。データベースに含まれているが、キャリブレーションしていない化合物に対し、DRSソフトウェアに付属の平均農薬物質レスポンスファクタに基づいて、それらの化合物の濃度の概算値を出すことができます。

次に、DRSでは、AMDISに上記のデータファイルを送信します。AMDISにより、スペクトルをデコンボリューションして、そのデコンボリューションしたフルスペクトルを使用してAgilentの農薬物質RTLライブラリを検索します。AMDISでは、レポートする化合物のリテンションタイムはユーザー指定のタイムウィンドウ内に収まるようにフィルタを設定できます。RTLの使用によりRTLデータベースのリテンションタイムは高精度で再現されるため、このウィンドウは非常に小さくすることができます。通常は、10~20秒です。最後に、AMDISによって検出されたすべての目標化合物に対するデコンボリューション済みスペクトルが、確認のためにNISTの147,000種類の化合物マススペクトルライブラリに対して検索されます。このステップでは、リテンションタイムによる検索要件はありません。

このアプローチは、共抽出成分による干渉レベルが高い複雑なクロマトグラムにおいて農薬物質を同定できることから、多くのラボで急速に採用されました。実際に、このソリューションは有用であるためユーザー側で自家製のDRSライブラリの作成を開始しています(7)。そのため、DRS プログラムは農薬物質データベースとは独立して提供されています。これにより、DRSはAgilent提供のデータベースやユーザー自家製のデータベースのどちらでも使用できます。

従来の567種類の農薬物質RTLライブラリ(G1049A)には、農薬物質、少数の代謝物、およびその時点で知られていたGCで検出可能な大部分の外因性内分泌攪乱物質が収録されていました。新しいバージョンのライブラリには、さらに多くの種類の農薬物質、外因性内分泌攪乱物質、および代謝物が収録されています。この更新によって、食物や水道水で検出されたその他のクラスの汚染物質から重要な化合物も選出されています。18種類のポリ塩化ビフェニル(PCB)、4類の多臭素化ビフェニル(PBB)、数種類の多環芳香族炭化水素(PAH)、幾つかの有機リン系難燃剤、重要な3種類のトキサフェン同族体、および3種類のスーダン染料が収録されています。

デコンボリューションの利点

図1に示す AMDIS の画面により、このデコンボリューションソフトウェアの能力を説明します。図1Aの白色線はトータルイオンクロマトグラム(TIC)で、残り3本の線はデコンボリューションされたピーク(AMDISの用語でいうAMDISの用語でいう"コンポーネント"の抽出イオンクロマトグラムです。ここで、TICと抽出イオンは互いに尺度が同じでないこと、およびこのコンポーネントは実際には、共溶出している化合物によって隠れていることに注意してください。図1Bでは、デコンボリューションされた化合物スペクトル(白)と"デコンボリューションされていない"完全なスペクトル(黒)とが並べて表示されています。このコンポーネントは明らかに、通常ならば化合物を隠してしまう共溶出ピークに埋もれています。図1Cでは、デコンボリューションされたピーク(白色のスペクトル)とノルフルラゾン(黒色のスペクトル)とがライブラリによく一致していることを示します。農薬物質RTLデータベース内にあるノルフルラゾンのロックされたリテンションタイムは26.933分で、この値はこのクロマトグラムでのRT実測値と2.3秒しか離れていません。スペクトルのデコンボリューションとロックされたリテンションタイムのフィルタリングによって、より確実にピークが同定されます。

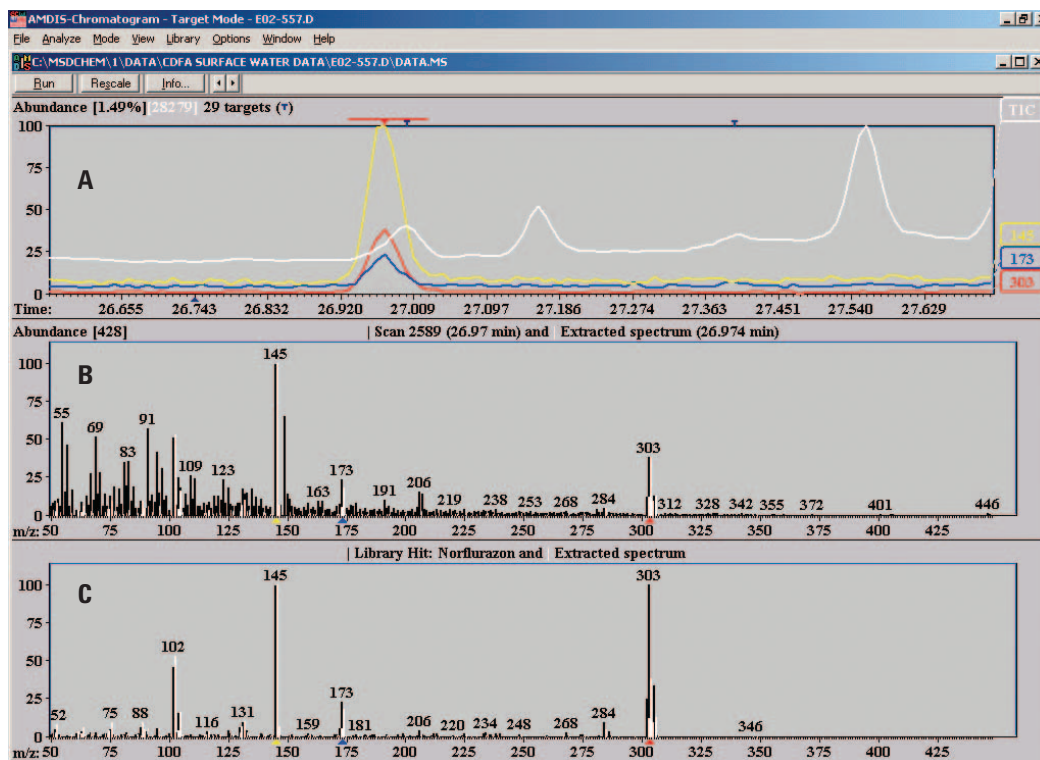


図1. ノルフルラゾンの同定を示すAMDIS画面
 A) ノルフルラゾン溶出位置の全イオンおよび抽出イオンクロマトグラム。
 B) 26.792分のスペクトル(黒色)と並べられたデコンボリューションされたコンポーネントスペクトル(白色)。
 C) ノルフルラゾンのライブラリスペクトルと一致したデコンボリューションされたコンポーネント。

地表水の分析 - 過去の研究を改訂

過去の研究では、AgilentのDRS分析と従来の農薬物質分析とを比較しました(3)。カリフォルニア州食品農業局(CDFA)より、CDFAのラボで分析された17種類の地表水抽出物に関するデータファイルが提供されました。GC/MSクロマトグラムはAgilentの農薬物質メソッドにロックしているため、支給されたデータファイルは、サンプルの再分析をしないでもDRSを使用してデータ解析を行うことができました。前報のDRS分析は、567種類の農薬物質のRTLデータベースを使用して行われています。比較のため同じデータファイルを、926種類の新しい農薬物質RTLデータベースを使用して再解析しました。下に示すクロマトグラム(図2)とDRSレポート(図3)は、提供されたサンプルの1つからのものです。

フタル酸を除いた新しい7種類の化合物は、イソシアン酸4-クロロフェニル(フェニル尿素系除草剤の代謝物質)、イソシアン酸3,4-ジクロロフェニル(ジウロンの代謝物)、リン酸トリス(2-クロロエチル)(難燃剤)、カフェイン(興奮剤)、シプロジニル(抗真菌剤)、デスマチル-ノルフルラゾン(除草剤ノルフルラゾンの代謝物)、リン酸トリス(2-プトキシエチル)(難燃剤)です。これらの化合物は図3の太字で示してあり、926種類のデータベースから同定された化合物です。カフェインは一般的には危険であると思われていませんが、さまざまな薬剤や農薬物質と同様に、下水や多くの公共水路で頻繁に検出されているため、カフェインもデータベースに含まれています(8)。

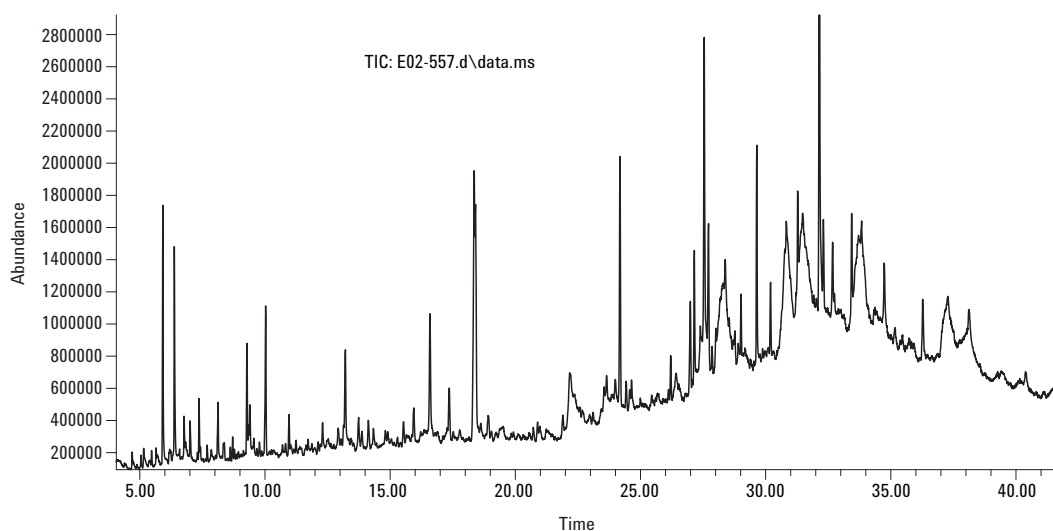


図2. 新しいRTL農薬および環境ホルモンデータベースを使用してDRSで分析した地表水抽出物のクロマトグラム。この分析の結果は、図3に示します。

MSDデコンボリューションレポート

サンプル名: E02-557

データファイル: C:\MSDCHEM\1\DATA\CDFA surface water data\E02-557.d

日時: 2006年4月4日、火曜日、午前11時24分

AMDIS対象ライブラリで発見されたコンポーネントに対して、NISTライブラリが検索されました。

リテンション			Agilent	AMDIS	リテンション	NIST	ヒット
タイム	CAS番号	化合物名	ChemStation アmount (ng)	一致	逆 タイム差 (秒)	一致	数
4.4689	106445	4-メチルフェノール		62	3.2		
4.4689	0000	3-カルボベンゾキシル-4-ケトプロリン				48	1
4.8840	104121	4-クロロフェニルイソシアネート		84	-1.8	86	2
6.3879	102363	ジウロン代謝物[3,4-ジクロロフェニル イソシアネート]		99	3.1	95	1
6.8357	759944	EPTC		84	2.0	85	1
7.6988	95761	3,4-ジクロロアニリン		93	2.1	89	2
7.9342	131113	フタル酸ジメチル		67	1.7	84	2
8.1112	25013165	ブチル化ヒドロキシアニソール		63	-7.7		
8.1112	0000	7-メトキシ-2,2,4,8-テトラメチルトリシクロ [5.3.1.0(4,11)]ウンデカン				62	1
8.941	29878317	トリルトリアゾール[1H-ベンゾトリアゾール、 4-メス-]	1.29				
9.7903	134623	N,N-ジエチル-m-トルアミド		85	2.2	84	2
10.0019	84662	フタル酸ジエチル		98	2.6	92	1
10.7109	119619	ベンゾフェノン		86	2.6	88	2
10.9684	126738	リン酸トリブチル		96	3.0	90	1
11.6491	1582098	トリフルラリン		83	0.7	74	1
12.9326	122349	シマジン		88	1.4	86	2
13.4309	115968	トリス(2-クロロエチル)リン酸		79	1.0	78	1
13.7478	1517222	フェナントレン-d10		95	1.3	83	1
15.4048	58082	カフェイン		80	1.6	74	1
15.9474	84695	フタル酸ジイソブチル		90	3.2	88	4
16.5988	5598130	クロルピリフォスメチル		97	0.4	90	1
17.3653	7287196	プロメトリン		90	1.5	84	1
18.4213	84742	フタル酸ジ-n-ブチル		99	0.4	94	1
18.9214	51218452	メトラクロール		90	0.7	87	1
20.5633	121552612	シプロジニル		69	-0.1		
20.5633	76470252	9,9-ジメトキシ-9-シラ-9, 10-ジヒドロアントラセン				70	1
26.4247	23576241	ノルフルラゾン、デスメチル-		87	-4.5	69	2
26.9700	27314132	ノルフルラゾン		87	1.5	79	1
26.9992	85687	フタル酸ブチルベンジル		94	-0.5	94	1
27.3984	51235042	ヘキサジノン		89	0.8	83	1
28.0127	78513	トリス(2-ブトキシエチル)リン酸		75	3.3	83	1
29.6537	117817	フタル酸ビス(2-エチルヘキシル)		98	0.3	90	3
33.9298	84764	フタル酸ジ-n-ノニル		65	-1.9		
33.9298	0000	フタル酸、3,4-ジクロロフェニル プロピルエステル				71	1
13.739		フェナントレン-d10	10				

図3. 地表水サンプルの分析からのDRSレポート。太字で示された化合物は、旧データベースではヒットせず、新しいRTL農業データベースでは見つかりました。その化合物が旧データベースに含まれていなかったためです。

この例ではChemStationが8.941 minでトリルトリアゾールのみを同定していますが、AMDISではこの帰属が確認されず、また手動での確認もできませんでした。ブチル化ヒドロキシアニソールは、AMDISによって低い一致値で暫定的に同定されましたが、リテンションタイムは -7.7秒と他の大半のヒットよりもかなり大きく離れています。この化合物はNISTライブラリにはないため、確認を行うことができませんでした。この分析で使用したChemStationメソッドでは、3種類のクォリファイアイオンがすべて ±20%(相対的)に収まっているという、複雑なサンプルの場合での厳しい要件を満たす必要がありました。そのため、ChemStationで検出された化合物はごく少数でした。

シプロジニル (20.563 分)はAMDISでは同定されましたが、NISTライブラリ検索では存在が確認されませんでした。最も一致したNISTライブラリの検索結果はシプロジニルではなく、その次の行にあるアントラセン誘導体となっています。この結果は、図4で示画面でAMDISが「不確定ピークを使用する」に設定されたために得られ

たものです。このDRS化合物同定設定の機能がオフになると、このスペクトルに対するNISTライブラリの最適ヒットは本来のシプロジニルとなります。シプロジニルの場合のように化合物の同定が不明確である場合には、両方のやり方でDRS検索を実行して、両者の結果を比較することが有効であると考えられます。

先述した比較(3)では、CDFAの研究者によって検出された37種類の農薬物質すべてについて、DRSで同定することができました。しかし、17種類のサンプルすべての作業について、マニュアル手順の場合では8時間以内で完了したのに比べて、DRSでは約20分で完了しました(表2)。さらにDRSでは、CDFA レポートにあった1例の誤検出が同定され、新たに34種類の農薬物質と関連化合物が検出されました。

新しい926種類化合物データベースを使用した場合には、全サンプルの分析時間が32分でした。このときDRSによって、新たに99種類の農薬物質、代謝物、難燃剤、および関連化合物を検出することができました。

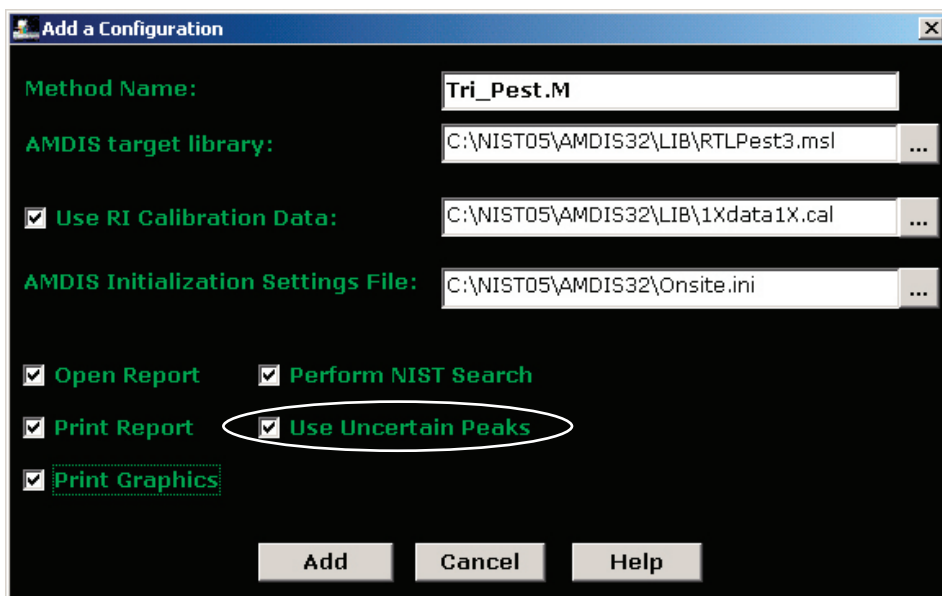


図4. Tri Pestと呼ばれるメソッドのDRS設定画面。「不確かなピークを使用」と書いてあるボックスにチェックが入っている場合、AMDISはライブラリ検索に不確かなピークを使用します。チェックが入っていない場合、AMDISは不確かなマススペクトルピークを無視します。これがライブラリ検索の品質に影響を及ぼすことがあります。

表2. 17種類の地表水抽出物のスクリーニング結果の比較。従来型メソッド (CDFA) による結果と、2種類の異なるデータベース (567の化合物を含むG1049Aと926のエントリを含むG1672AA) によりDRSを使用した結果。

	CDFA	Agilent DRS (元のG1049A データベース)	Agilent DRS (G1672 AA データベース)
出されたターゲット (ISTDは数えない)	37	同じ37種類 に加えて34種類	同じ37種類 に加えて99種類
誤検出	1	0	0
処理時間	約8時間 (ChemStation のみ)	20分	32分

立体異性体の処理

多くの農薬物質には、マススペクトルがほぼ同一である複数の立体異性体を有します。例えば、シフルトリンには3つの不斉中心から生じた4つの立体異性体があります。これらの異性体の溶出順序を判定することは非常に難しく時には不可能であり、ほとんどの分析者は合計異性体数としての報告を行っています。AgilentのG1049A農薬物質RTLデータベースでは各異性体に対して、Iは一番最初に溶出する異性体、IIは二番目に溶出する異性体、などというように独自にローマ数字が割り当てられてきました。すべての異性体には、同じChemical Abstracts Service (CAS #) 番号が割り当てられました。この番号は、"立体化学的な説明がない"化合物に対して与えられるCAS番号でした。これにより、以下に記すようにAMDISとはいくらかの不一致が起こります。

AMDISソフトウェアは"化学的同定番号"を使用して、化合物の識別を行います。最も簡単でかつ矛盾が起こらない方法は、各化合物のCAS番号を使用することです。AMDISのデフォルト設定では、GC/MSデータファイルの分析時には各CAS番号を1回のみ使用できるようになっています。これは論理的である一方で、データベースエントリによってCAS番号が異なっていることが必要となります。化合物あたりのヒットを複数にするには、[分析]/[設定]/[同定]からドロップダウンメニューで、AMDISにあるチェックボックスをオンにします。ただし、これによって同じ化合物名に複数のピークが割り当てられます。

新しい農薬物質RTLデータベース (G1672AA) では、ローマ数字の記号が残り、一番最初の異性体に本来のCAS番号が与えられます。以降の異性体には、Agilentによって独自で架空の"CAS #"が生成されます。化合物の真のCAS番号は、化合物名の後ろに中括弧で表されます。例えば、シフルトリンの異性体は、表3のとおりデータベースに入力されます。

表3. 新しいG1672AA RTL農薬データベースで、複数の立体異性体を持つリスト収載化合物用のメソッド

RT	化合物名*	CAS番号**
32.218	シフルトリンI	68359-37-5
32.359	シフルトリンII {CAS番号68359-37-5}	999028-03-4
32.477	シフルトリンIII {CAS番号68359-37-5}	999029-03-7
32.536	シフルトリンIV {CAS番号68359-37-5}	999030-03-4

* 一連の中で、最初に溶出する異性体が"I"と同定され、その正しいCAS番号が割り当てられます。それに続く異性体には固有で、架空のCAS番号が割り当てられます(脚注**を参照してください)。これらの実際のCAS番号は化合物名の後ろの大括弧に挿入されています。

**シフルトリンIIには正しいCAS番号が与えられました。シフルトリンII ~ IVには、すべてが最初のハイフンの前に6桁(合計9桁)あり、すべて999のシリーズで始まり、実際のCAS番号と区別できる固有の番号が与えられました。

図5は、両方のデータベースと、化合物あたり1ヒットに設定されたAMDISとを併用して、ハウレンソウのサンプルでペルメトリンを同定した図です。従来の567種類化合物データベース (G1049A) を使用すると、CAS番号の使用は1回のみであったために、同定されたペルメトリン異性体は1つのみです。926種類の農薬物質のRTLデータベース (G1672AA) で採用された新しい書式では、ペルメトリン異性体は2つとも同定されました。当然ながら、NISTライブラリ検索では、ペルメトリンIIに割り当てられた同じ架空のCAS番号でのヒットは検出されていません。そのため、このソフトウェアによって出力された最適一致は次の行に書かれています。この化合物はシクロプロパンカルボン酸の誘導体であり、ペルメトリン異性体のひとつです。

こうした化合物のレポート出力場所は、NISTライブラリ検索がDRSでオンになっている限りは常に、架空のCAS番号付き化合物の次にある行です。架空CAS番号は必ず、9桁で999から始まることに注意してください。

A)

リテンション タイム	CAS番号	化合物名	Agilent		NIST		
			ChemStation 量 (ng)	AMDIS 一致	リテンション タイム差 (秒)	逆 一致	ヒット 数
31.6158	52645531	ペルメトリンII		88	3.9	91	3

B)

リテンション タイム	CAS番号	化合物名	Agilent		NIST		
			ChemStation 量 (ng)	AMDIS 一致	リテンション タイム差 (秒)	逆 一致	ヒット 数
31.4127	52645531	ペルメトリンI		78	2.6	81	3
31.6088	999046036	ペルメトリンII {CAS # 52645-53-1}		65	3.5		
31.6088	51877748	シクロプロパンカルボン酸、 3- (2,2-ジクロロビニル) -2,2-ジメチル -, (3-フェノキシフェニル) メチルエステル、 (1R-トランス) -				95	1

図5. A) AMDISで化合物ごとに複数ヒットの使用が認められなかった時に、G1049A 567化合物データベースを使用して、DRSでペルメトリンの1種類の異性体が同定されました。
B) 同じ状況で、G1672AA 926化合物データベースによるDRSでは2種類のペルメトリン異性体が同定されます。

結論

新しいG1672AA農薬と外因性内分泌攪乱物質のRTLライブラリに収録されているターゲット化合物の数は、前のバージョンに比べて著しく多くなっています。359種類の化合物が新たに追加され、現在市販されているこの種のライブラリの中で最も包括的なライブラリとなっています。新たに追加された数多くの農薬物質、代謝物、および外因性内分泌攪乱物質に加えて、PCB、PBB、PAH、合成ムスク化合物、スーダン染料、および有機リン系難燃剤も追加されました。このデータベースには、日本の新しい"ポジティブリスト"制度でGC/MS分析に指定されたすべての化合物が収録されています。

DRSソリューションと組み合わせて使用すると、GC/MSデータファイルのスクリーニングをサンプルあたり約2分で、926種類の化合物すべてに対して行うことができます。このメソッドは、食品サンプルおよび環境サンプルで前述の化合物についてスクリーニングするメソッドとして、速度、包括性、正確性が最も高く、入力作業の退屈さは極力少なくなっています。

参考文献

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 Disruptors 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, "デコンボリューションレポーティングソフトウェア (DRS) を使用したGC/MSDによる農薬スクリーニング," Agilent Technologies, publication 5989-1157JAJP, 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 Multi-residues in Fruit and Vegetable Samples with Full Scan, SIM, and Deconvolution Reporting Software," 2005 Ernährung/Nutrition, 29 (11) 466-471
7. X. Ping, C.-K. Meng, and M. Szelewski, "レポーティングライブラリをアプリケーション分野別に構築する," Agilent Technologies, publication 5989-2249JAJP, 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

詳細について

製品とサービスの詳細については、弊社ウェブ・サイトをご覧ください (www.agilent.com/chem/jp)。

謝辞

Dr. G. Kempe (Landesuntersuchungsanstalt Sachsen, Institut, Chemnitz, Germany) に対し、本ライブラリの更新用の多数のデータ採取にご協力いただいたことを感謝します。また、カリフォルニア州食料農業省 (CDFA) のDr. Mark LeeとMr. Steve Siegelに対しても、地表水抽出物のデータファイルをご提供いただいたことについて感謝いたします。

データベースに収録された化合物リスト

1,2,4-トリクロロベンゼン	2、6-ジメチルアニリン	アセトクロール
1,2-ジブromo-3-クロロプロパン	2-[3-クロロフェノキシ]プロピオンアミド	アシフルオルフェンメチルエステル
1,3,5-トリブromoベンゼン	2-クロロフェノール	アクロニフェン
1,3-ジクロロベンゼン	2-エチル-1,3-ヘキサジオール	アクリナトリン
17a-エチニルエストラジオール	2-エチル-6-メシリアニリン	アラクロール
1-ナフタレノール	2-ヒドロキシエストラジオール	アルドリン
2- (1-ナフチル) アセトアミド	2-メチル-4,6-ジニトロフェノール	アリドクロール
2- (2-プトキシエトキシ) エチルチオシアナート	2-メチルフェノール	アメトリン
2- (オクチルチオ) エタノール	2-ニトロフェノール	アミジチオン
2,3,4,5-テトラクロロニトロベンゼン	2-フェノキシプロピオン酸	アミノカルブ
2,3,4,5-テトラクロロフェノール	3,4,5-トリメタカルブ	アミトラズ
2,3,4,6-テトラクロロフェノール	3,4-ジクロロアニリン	アミトラズ代謝物[メタンイミド、N-(2,4-ジメチルフェニル)-Ni-メチル-]
2,3,5,6-テトラクロロフェノール	3,5-ジクロロアニリン	アンシミドール
2,3,5,6-テトラクロロ-p-テルフェニル	3-アミノフェノール	アニラジン
2,3,5-トリクロロフェノール	3-クロロ-4-フルオロアニリン	アニリン
2,3,5-トリメタカルブ	3-クロロ-4-メトキシアニリン	アニロホス
2,3,6-トリクロロアニソール	3-クロロアニリン	アントラセン
2,3,7,8-テトラクロロジベンゾフラン	3-ヒドロキシカルボフラン	アラマイト I
2,3,7,8-テトラクロロジベンゾ-p-ダイオキシシ	3-インドリルアセトラトリル	アラマイト II {CAS番号140-57-8}
2,4,5,6-テトラクロロ-m-キシレン	3-トリフルオルメチルアニリン	アトラトン
2,4,5-T メチルエステル	4,4i-ジクロロベンゾフェノン	アトラジン
2,4,5-トリクロロアニリン	4,4i-オキシジアニリン	アトラジン-デセチル
2,4,5-トリクロロフェノール	4,6-ジニトロ-o-クレゾール (DNOC)	アザコナゾール
2,4,5-トリクロロ-p-テルフェニル	4-アミノジフェニル	アザメチホス
2,4,5-トリメチルアニリン	4-ブromoアニリン	アジベンゾラル-S-メチル
2,4,6-トリブromoアニソール	4-クロロ-2-メチルアニリン	アジンホス-エチル
2,4,6-トリブromoフェノール	4-クロロ-3-メチルフェノール	アジンホス-メチル
2,4,6-トリクロロアニソール	4-クロロアニリン	アジプロトリン代謝物[2-アミノ-4-イソプロピルアミノ-6-メチルチオ-1,3,5-トリアジン]
2,4,6-トリクロロフェノール	4-クロロフェニルイソシアネート	アジプロトリン
2,4-D メチルエステル	4-イソプロピルアニリン	アゾベンゼン
2,4-D sec- ブチルエステル	4-メチルフェノール	アゾキシベンゼン
2,4-DB メチルエステル	4-ニトロフェノール	アゾキシストロピン
2,4i-ジクロロベンゾフェノン (2,4i-ジコホー ル分解物)	4-ノニルフェノール	バルバン
2,4-ジクロロフェノール	5,7-ジヒドロキシ-4i-メトキシイソフラボン	ビフルブタミド
2,4-ジクロロフェニルベンゼンスルホン酸	9,10-アントラキノン	ベナラキシル
2、4-ジメチルアニリン	アセナフテン	ベナゾリン-エチル
2、4-ジメチルフェノール	アセナフチレン	ベンダイオカルブ
2,6-ジクロロベンズアミド	アセフェート	ベンフルラリン
2,6-ジクロロベンゾニトリル	アセキノシル	
	アセタミプリド	

ベンフラカルブ	ブromoホス-エチル	クロルジメホルム
ベンフレセート	ブromoプロピレート	クロルエトキシホス
ベノダニル	ブromoキシニル	クロルフェナビル
ベノキサコール	ブromoキシニルオクタン酸エステル	クロルフェネトール
ベンタゾン	ブロムコナゾール I	クロルフェンブロップ-メチル
ベンタゾンメチル派生物	ブロムコナゾール II {CAS番号116255-48-2}	クロルフェンソン
ベンチオカーブ	ブヘンカルブ	クロルフェンビンホス
ベンゼン、1,3-ビス(ブromoメチル) -	ブピリメート	クロルフェンビンホス、シス-
ベンゼンスルホンアミド	ブプロフェジン	クロルフェンビンホス、トランス-
ベンジジン	ブタクロール	クロルフルレコル-メチルエステル
ベンゾ(a)アントラセン	ブタフェナシル	クロルメホス
ベンゾ(a)ピレン	ブタミホス	クロルニトロフェン
ベンゾ[b]フルオランテン	ブトキシカルボキシム	クロルベジレート
ベンゾ[g,h,i]ペリレン	ブトラリン	クロロネブ
ベンゾ[k]フルオランテン	フタル酸ブチルベンジル	クロロプロピレート
ベンゾフェノン	ブチレート	クロロタロニル
ベンゾキシメート代謝物	ブチル化ヒドロキシアニソール	クロロトルロン
ベンゾイルプロベチル	カズサホス	クロルプロファム
安息香酸ベンジル	カフェンストロール	クロルピリホス
b-エストラジオール	カフェイン	クロルピリフォスメチル
BHCアルファ異性体	カブタホル	クロルタール-ジメチル
BHCベータ異性体	キャプタン	クロルチアミド
BHCデルタ異性体	カルバリル	クロルチオン
BHCエプシロン異性体	カルベタミド	クロルチオホス
ビフェナゼート代謝物 (5-フェニル-o-アニシジン)	カルボフラン	クロルチオホススルホン
ビフェノックス	カルボフラン-3-ケトン	クロルチオホススルホキシド
ビフェントリン	カルボフラン-7-フェノール	クロゾリネート
ビナバクリル	カルボフェノチオン	クリセン
ビオアレトリン	カルボスルフォン	シネリン I
ビオトレトリンS-シクロペンテニル異性体	カルボキシム	シネリン II
ビオレスメトリン	カルフェントラゾン-エチル	シニドンエチル
ビフェニル	カルプロバミド	シス-クロルデン
ビス (2,3,3,3-テトラクロロプロピル) エーテル	カルボン	クロジナホッププロパルギル
フタル酸ビス (2-ブトキシエチル)	カシュメラン	クロマゾン
フタル酸ビス (2-エチルヘキシル)	セカフィックス	クロキントセットメキシル
ビスフェノールA	セレストライド	クマホス
ビテルタノールI	キノメチオネート	クリミジン
ビテルタノールII {CAS番号55179-31-2}	クロラムベンメチルエステル	クロトキシホス
ボスカリド (ニコピフェン)	クロラノクリル	クルホメート
ブロマシル	クロルベンシド	シアナジン
ブロムフェンビンホス- (E)	クロルベンシドスルホン	シアノフェンホス
ブロムフェンビンホス- (Z)	クロルビスクレン	シアノホス
ブromoブチド	クロルブロムロン	シクラフラミド
ブromoシクレン	クロルブファム	シクロエート
ブromoホス	クロルデコン	シクロペンタデカノン
	クロルデン、トランス-	シクルロン

シフルフェナミド	ジクロフルアニド代謝物 (DMSA)	ジノカップ I
シフルトリン	ジクロン	ジノカップ II {CAS番号39300-45-3}
シフトリン II {CAS番号68359-37-5}	ジクロルミド	ジノカップ III {CAS番号39300-45-3}
シフトリン III {CAS番号68359-37-5}	ジクロロフェン	ジノカップ IV {CAS番号39300-45-3}
シフトリン IV {CAS番号68359-37-5}	ジクロルブロップ	フタル酸ジ-n-オクチル
シハロホップブチル	ジクロルブロップメチルエステル	ジノセブ
シハロトリン I (ラムダ)	ジクロルボス	酢酸ジノセブ
シハロトリン (ガンマ)	ジクロブトラゾール	ジノセブメチルエーテル
シミアゾール	ジクロシメット I	ジノテルブ
シモキサニル	ジクロシメット II {CAS番号139920-32-4}	酢酸ジノテルブ
シベルメトリン I	ジクロホップメチル	フタル酸ジ-n-プロピル
シベルメトリン II {CAS番号52315-07-8}	ジクロラン	ジオフェノラン I
シベルメトリン III {CAS番号52315-07-8}	ジクロトホス	ジオフェノラン II {CAS番号63837-33-2}
シベルメトリン IV {CAS番号52315-07-8}	フタル酸ジシクロヘキシル	ジオキサベンゾホス
シフェノトリン、シス-	ジシクロペンタジエン	ジオキサカルブ
シフェノトリントランス- {CAS番号39515-40-7}	ディルドリン	ジオキサチオン
シブラジン	ジエタチルエチル	ジファシノン
シプロコナゾール	ジエトフェンカルブ	ジフェナミド
シプロジニル	ジエチルジチオビス(チオフォルメート) (EXD)	フタル酸ジフェニル
シプロフラム	フタル酸ジエチル	ジフェニルアミン
シロマジン	ジエチレングリコール	ジプロペトリン
d- (シス-トランス) -フェノトリン- I	ジエチルスチルベストロール	イソシンコメロン酸二プロピル
d- (シス-トランス) -フェノトリン- II {CAS番号260002-80-2}	ジフェノコナゾール I	ジスルホトン
ダゾメット	ジフェノコナゾール II {CAS番号119446-68-3}	ジスルホトンスルホン
DDMU [1-クロロ-2,2-ビス(4'-クロロフェニル)]	ジフェノクスウロン	ジタリムホス
デカクロロビフェニル	ジフルフェニカン	ジチオビル
デルタメトリン	フタル酸ジイソブチル	ジウロン
デメフィオン	ジメホックス	ジウロン代謝物[3,4-ジクロロフェニル イソシアネート]
デメトン-S	ジメピペレート	ジデモルフ I
デメトン-S-メチルスルホン	ジメタクロール	ジデモルフ II {CAS番号1593-77-7}
デスプロモプロモブチド	ジメタメトリン	ドラゾキシロン
デスメディファム	ジメテナミド	エディフェンホス
デスメトリン	ジメチピン	エンベントリン I
ジアリホス	ジメトエート	エンベントリン II {CAS番号54406-48-3}
ダイアレート I	ジメトモルフ- (E)	エンベントリン III {CAS番号54406-48-3}
ダイアレート II {CAS番号2303-16-4}	ジメトモルフ- (Z) {CAS番号110488-70-5}	エンベントリン IV {CAS番号54406-48-3}
フタル酸ジアミル	フタル酸ジメチル	エンベントリン V {CAS番号54406-48-3}
ダイアジノン	ジメチルビンホス (Z)	エンドスルファン (アルファ異性体)
ダイアジノンオキソン	ジメチラン	エンドスルファン (ベータ異性体)
ジベンズ[a,h]アントラセン	ジモキストロピン	エンドスルファンエーテル
ジカンバ	フタル酸ジ-n-ブチル	エンドスルフォンラクトン
ジカンバメチルエステル	フタル酸ジ-n-ヘキシル	エンドスルファンサルフェート
ジキャプトン	ジニコナゾール	エンドリン
ジクロフェンチオン	ジニトラミン	エンドリンアルデヒド
ジクロフルアニド	フタル酸ジ-n-ノニル	エンドリンケトン
	ジノプトン	

EPN	フェノプロップメチルエステル	フルオキサストロピン シス-
エポキシコナゾール	フェノチオカルブ	フルキンコナゾール
EPTC	フェノキサニル	フルレノールブチルエステル
エルボン	フェノキサプロップエチル	フルレノールメチルエステル
エスフェンバレレート	フェノキシカルブ	フルリドン
エスプロカルブ	フェンピクロニル	フルロクロリドン I
エタコナゾール	フェンプロパトリン	フルロクロリドン II {CAS番号61213-25-0}
エタルフルラリン	フェンプロピディン	フルロクロリドン、デスクロロ-
エチジムロン	フェンソン	フルロキシピル-1-メチルヘプチルエステル
エチオフェンカルブ	フェンスルホチオン	フルルプリミドール
エチオレート	フェンスルホチオンオキソン	フルルタモン
エチオン	フェンスルホチオンオキソンスルホン	フルシラゾール
エトフェンブロックス	フェンスルホチオンスルホン	フルチアセットメチル
エトフメセート	フェンチオン	フルトラニル
エトフメセート、2-ケトン	フェンチオンスルホキシド	フルトリアホール
エトプロホス	フェンチオンスルホン	フルバリネート-タウ- I
エトキシフェンエチル	フェヌロン	フルバリネート-タウ- II {CAS番号102851-06-9}
エトキシキン	フェンバレレート I	フォルベット
エチレンチオウレア	フェンバレレート II {CAS番号51630-58-1}	ホノホス
エトキサゾール	フェプロピモルフ	ホルモチオン
エトリジアゾール	フィプロニル	ホスチアゼート I
エトリジアゾール、デスクロロ- (5-エトキシ- 3-ジクロロメチル-1,2,4-チアジアゾール)	フィプロニル、デスルフィニル-	ホスチアゼート II {CAS番号98886-44-3}
エトリムホス	フィプロニルスルフィド	フベリダゾール
ユージノール	フィプロニルスルホン	フララキシル
エキサルトリド[15-ペンタデカノリド]	フラムプロップイソプロピル	フラチオカルブ
ファモキサドン	フラムプロップメチル	フリラゾール
ファムフル	フルアクリピリム	フルメシクロックス
フェナミドン	フルアジホップ-p-ブチル	ハルフェンブロックス
フェナミホススルホキシド	フルアジナム	ハロキシホップメチル
フェナミホススルホン	フルアゾレート	ヘブタクロル
フェナリモル	フルベンジミン	ヘブタクロルエポキシサイド異性体A
フェナザフロール	フルクロラリン	ヘブタクロルエポキシサイド異性体B
フェナザフロール代謝物	フルシトリネート I	ヘプテノホス
フェナザキン	フルシトリネート II {CAS番号70124-77-5}	ヘキサプロモベンゼン
フェンブコナゾール	フルジオキシニル	ヘキサクロロベンゼン
フェンクロラゾールエチル	フルフェナセット	ヘキサクロロフェン
フェンクロルホス	フルメトラリン	ヘキサコナゾール
フェンクロルホスオクソン	フルミクロラックペンチル	ヘキサジノン
フェンクロリム	フルミオキサジン	ヘキセストロール
フェンフラム	フルオメツロン	ハイドロブレン
フェンヘキサミド	フルオランテン	イマザリル
フェントロチオン	フルオレン	イマザメタベンズメチル I
フェントロチオンオクソン	フルオロジフェン	イマザメタベンズメチル II {CAS番号81405-85-8}
フェノブカルブ	フルオログリコフェンエチル	イミベンコナゾール
フェノプロップ	フリオルイミド	イミベンコナゾールデスベンジル
	フルオトリマゾール	

イデノ[1,2,3-cd]ピレン	メコプロップメチルエステル	モノリニユロン
インドキサカルブとジオキサカルブ分解物 [フェノール、2-(1,3-ジオキソラン-2-イル)-]	メフェナセツト	ムスクアンベレット
アンオキシニル	メフェンビルジエチル	ムスクケトン
アンオキシニルオクタノアート	メフルイジド	ムスクモスケン
イブコナゾール	メナゾン	ムスクチベタン (チベットジャコウジカ)
イプロベンホス	メバニピリム	ムスクキシレン
イプロジオン	メホスホラン	マイクロブタニル
イプロバリカルブ	メプロニル	N,N-ジエチル-m-トルアミド
イプロバリカルブⅡ {CAS番号140923-25-7}	メタラキシル	N-1-ナフチルアセトアミド
イルガロール	メタミトロン	ナレド
イサゾホス	メタシストックスチオール	ナフタレン
イソベンザン	メタザクロール	ナフタル酸無水物
チオシアン酢酸イソボルニル	メトコナゾールⅠ	ナプロアニリド
イソカルバミド	メトコナゾールⅡ {CAS番号125116-23-6}	ナプロバミド
イソカルボホス	メタベンズチアズロン[分解生成物]	ニコチン
イソドリノ	メタクリホス	ニトラリン
イソフェンホス	メタミドホス	ニトラピリン
イソフェンホスオキシソ	メトフロキサム	ニトメフェン
イソメチオジン	メチダチオン	ニトロタールイソプロピル
イソプロカルブ	メチオカルブ	N-メチル-N-1-ナフチルアセトアミド
イソプロパリン	メチオカルブスルホン	ノナクロール、シス-
イソプロチオラン	メチオカルブスルホキシド	ノナクロール、トランス-
イソプロトッロン	メソミル	ノルフルラジン
イソキサベン	メトブレンⅠ	ノルフルラジン、デスメチル-
イソキサジフェンイエ	メトブレンⅡ {CAS番号40596-69-8}	ヌアリモル
イソキサフルトール	メトプロトリン	o,p'-DDD
イソキサチオン	メトキシクロル	o,p'-DDE
ジャスモリンⅠ	メトキシクロルオレフィン	o,p'-DDT
ジャスモリンⅡ	メチル(2-ナフトキシ)アセテート	オクタクロロスチレン
ヨドフェンホス	メチルパラオキソン	o-ジアニシジン
キノブレン	メチルパラチオン	o-ジクロロベンゼン
クレソキシムメチル	メチル-1-ナフタレンアセテート	オフレース
ラクトフェン	メチルダイムロン	オメトエート
レナシル	メトプロムロン	o-フェニルフェノール
レプトフォス	メトラクロー	オルベンカルブ
レプトフォスオキシソ	メトルカルブ	オルト-アミノアゾトルエン
リンデン	メトミノストロビン(E)	オリザリン
リヌロン	メトミノストロビン(Z) {CAS番号133408-50-1}	オキサベトリニル
マラチオン	メトラフェノン	オキサジアゾン
マラチオン-o-アナログ	メトリブジン	オキサジキシル
MCPAメチルエステル	メビンホス	オキサミル
MCPAプトキシエチルエステル	マイレツクス	オキシカルボキシソ
MCPBメチルエステル	モリネート	オキシクロルデン
m-クレゾール	モナライド	オキシデメトンメチル
メカルバム	モノクロトホス	オキシフルオルフェン
		p,p'-DDD

p,p'-DDE	フェナントレン-d10	プロメカルブ加工品[5-イソプロピル-3-メチルフェノール]
p,p'-DDM [ビス (4-クロロフェニル) メタン]	フェンカプトン	プロメトン
p,p'-DDT	フェノール	プロメトリン
p,p'-ジブロモベンゾフェノン	フェノチアジン	プロバクロール
p,p'-ジコホル	フェノトリン I	プロバモカルブ
パクロブトラゾール	フェノトリン II	プロバニル
パラオキソン	フェノキシ酢酸	プロバホス
パラチオン	フェントエート	プロバルギット
PBB 52テトラブロムビフェニル	ホレート	プロバルギット代謝物[シクロヘキサノール、2-(4-tert-ブチルフェノキシ)]
PBB 101	ホレートスルホン	プロバジン
PBB 15	ホレートスルホキシド	プロベタンホス
PBB 169ヘキサブロムビフェニル	ホレートオキソン	プロファミン
PCB 101	ホサロン	プロピコナゾール- I
PCB 105	ホスホラン	プロピコナゾール- II {CAS番号60207-90-1}
PCB 110	ホスメット	プロピソクロー
PCB 118	ホスファミドン I	プロボクスール
PCB 126	ホスファミドン II {CAS番号13171-21-6}	プロビザミド
PCB 127	フタリド	プロスルホカルブ
PCB 131	フタルイミド	プロチオコナゾールデスチオ
PCB 136	ピクロラムメチルエステル	プロチオホス
PCB 138	ピコリナフェン	プロトエート
PCB 153	ピコキシストロピン	ピラカルボリド
PCB 169	ピンドン	ピラクロホス
PCB 170	ピベラリン	ピラフルフェンエチル
PCB 180	ピペロニルブトキサイド	ピラゾン
PCB 30	ピペロホス	ピラソホス
PCB 31	ピリミカルブ	ピラソキシフェン
PCB 49	ピリミホスエチル	ピレン
PCB 77	ピリミホスメチル	ピレトリン I
PCB 81	プリフェナット	ピレトリン II
P-ジクロロベンゼン	p-ニトロトルエン	ピリブチカルブ
ペブレート	ポタサン	ピリダベン
ペコナゾール	ブラレトリン、シス-	ピリダフェンチオン
ベンディメタリン	ブラレトリン、トランス- {CAS番号23031-36-9}	ビリデート
ペンタクロロアニリン	ブレチラクロー	ビリジニトリル
ペンタクロロアニソール	プロベナゾール	プリフェノックス I
ペンタクロロベンゼン	プロクロラス	プリフェノックス II {CAS番号88283-41-4}
ペンタクロロニトロベンゼン	プロシミドン	プリフタリド
ペンタクロロフェノール	プロジアミン	プリメタニル
ペンタノクロー	プロフェノホス	プリミジフェン
ペルメトリン I	プロフェノホス代謝物 (4-ブromo-2-クロロフェノール)	プリミノバックメチル (E)
ペルメトリン II {CAS # 52645-53-1}	プロフルラリン	プリミノバックメチル (Z) {CAS番号136191-64-5}
ペルセン	プロヒドロジャスモン I	
ファントライド	プロヒドロジャスモン II {CAS番号158474-72-7}	
フェナモホス	プロメカルブ	
フェナントレン		

ピリプロキシフェン	テクナゼン	トラセオライド
ピロキロン	テフルトリン、シス-	トリアジメホン
キナルホス	テメホス	トリアジメノール
キノクラミン	テルバシル	トリアレート
キノキシフェン	テルブカルブ	トリアミホス
キントゼン代謝物 (ペンタクロロフェニルメチルスルフィド)	テルブホス	トリアベンテノール
キザロホップエチル	テルブホスオキソンスルホン	トリアザメート
ラベンザゾール	テルブホススルホン	トリアゾホス
レスメトリン	テルブメトン	リン酸トリブチル
レスメトリン I	テルブチラジン	トリブチルホスホロトリチオアイト
レスメトリン II {CAS番号10453-86-8}	テルブチラジンデスエチル	トリクラミド
ロテノン	テルブトリン	トリクロルホン
S,S,S-トリブチルホスホロトリチオエート	テトラクロルビンホス	トリクロロネート
シュラーダン	テトラコナゾール	トリクロピルメチルエステル
セブチルアジン	テトラジホン	トリクロサン
セブチルアジンデスエチル	テトラエチルピロリン酸 (TEPP)	トリクロサンメチル
セクブメトン	テトラヒドロフタルイミド、シス-1,2,3,6-	リン酸トリクレシル、メタ-
シラフルオフェン	テトラメトリン I	リン酸トリクレシル、オルト-
シルチオファミ	テトラメトリン II {CAS番号7696-12-0}	リン酸トリクレシル、パラ-
シマジン	テトラプロピルチオニリン酸	トリシクラゾール
シメコナゾール	テトラサル	トリデモルフ、4-トリデシル-
シメトリン	テニルクロール	トリジファン
スピロジクロフェン	テオプロミン	トリエタジン
スピロメシフェン	チアベンダゾール	リン酸トリエチル
スピロキサミン I	チアゾピル	トリフェンモルフ
スピロキサミン II {CAS番号118134-30-8}	チフルザミド	トリフロキシストロピン
スピロキサミン代謝物 (4-tert-ブチルシクロヘキサノン)	チオファノックス	トリフルミゾール
スーダン I	チオメトン	トリフルラリン
スーダン II	チオナジン	リン酸トリフェニル
スーダンレッド	チモール	トリス (2-ブトキシエチル) リン酸
スルファレート	チオカルバジール I	トリス (2-クロロエチル) リン酸
スルファニルアミド	チオカルバジール II {CAS番号36756-79-3}	トリス (2-エチルヘキシル) リン酸
スルフェントラゾン	トルクロホスメトル	トリチコナゾール
スルホテップ	トルフェンピラド	トリクロピルプトキシエチル
硫黄 (S8)	トリルフルアニド	Tycor (SMY 1500)
スルプロホス	トリルフルアニド代謝物 (DMST)	ユニコニゾール-P
スウェップ	トリルトリアゾール[1H-ベンゾトリアゾール、4-メチル-]	バミドチオン
タモキシフェン	トリルトリアゾール[1H-ベンゾトリアゾール、5-メチル-]	バーノレート
TCMTB	トナリド	ピンクロゾリン
テブコナゾール	トキサフェンParlar 26	XMC (3,4-ジメチルフェニル N-メチルカルバマ
テブフェンピラド	トキサフェンParlar 50	XMC (3,5-ジメチルフェニル N-メチルカルバマ
テブピリミホス	トキサフェンParlar 62	ゾキサミド
テブタム	トランス-クロルデン	ゾキサミド分解物
テブチウロン	トランスフルトリン	

www.agilent.com/chem

Agilent は、万一この資料に誤りが発見されたとしても、また、本資料の使用により付随的または間接的に損害が発生する事態が発生したとしても一切免責とさせていただきます。

本資料に記載の情報、説明、製品仕様等は予告なしに変更されることがあります。

© Agilent Technologies, Inc. 2006

Printed in Japan
April 18, 2006
5989-5076JAJP

