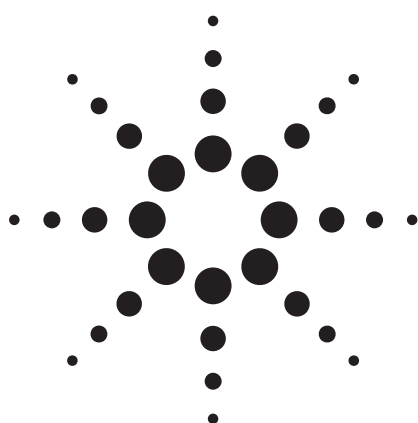


# 725化合物DRSデータベースとGC/MS/NPDシステムを使用した法中毒スクリーニングの改善



## アプリケーション

### 法中毒学

#### 著者

Bruce Quimby  
Agilent Technologies  
2850 Centerville Road  
Wilmington, DE 19808  
USA

#### 概要

中毒学スクリーニングを実行するラボでは、複合マトリクス干渉物中の多数のターゲット化合物を検索することが課題になっています。法医学の分野では、GC/MS法が広く使用されています。フルスキャンEI法は、対象物質数の制限の無い広範なスクリーニング、フルスペクトルによる定性、ノンターゲット化合物を同定するためのライブラリ検索など、多くの利点を提供します。GC/MSテクノロジーの進歩によって、スクリーニングされるターゲット化合物数は大幅に増加し、サンプルあたりの所要時間が短縮されつつあります。

ここで説明するシステムでは、AgilentのG1674AA法中毒DBLを使用して725化合物のスクリーニングが行われます。データ確認時間は、Agilent Deconvolution Reportingソフトウェアを使用して大幅に短縮されています。大量のマトリクスの分析後の焼き出しは、より高速でシステム保守の少ないバックフラッシュで置き換えられています。高速なGC分析(注入間が9.75分)を使用し、Scan、SIM、およびNPDデータを同時に収集することで分析時間が短縮されています。Scanデータはデコンボリューションされ、725のターゲット化合物のどれであるかを同定さ

れます。SIMデータは、Scanモードでは検出できない低濃度の化合物を探すために使用されます。NPDの窒素レスポンスはターゲット窒素化合物の確認および必要に応じて定量にも使用されます。このシステムでは、全血サンプル抽出物中の化合物を従来の方法よりも短い時間で検出します。

#### はじめに

GC/MSスクリーニング法は、中毒学ラボで重要な役割を果たしています。新しい薬物や毒素は絶えず出現しているため、スクリーニングするターゲット化合物数は優に数百に達します。GC分析が可能な化合物については、電子衝撃イオン化(EI)を使用したフルスキャンモードのGC/MSがこの仕事に適しています。この手法にはいくつかの利点があります。

- 単純で信頼性が高くなじみのある装置を使用する。
- 任意の数のターゲット化合物をモニタリングできる。
- MS/MSのMRMのようにターゲット化合物数が制限されることはない。
- 保管されたフルスキャンデータで数年後に新しいターゲット化合物を検査することも可能である。
- 同一性確認はフルスペクトルに基づく。
- NISTおよびその他の業界標準ライブラリでスペクトルを検索することにより、未知の非ターゲット化合物を同定できる。
- LC/MS法よりも、マトリクスによるイオン化抑制の問題がはるかに小さい。



Agilent Technologies

GC/MS法には上記の利点がありますが、従来のアプローチには限界があります。スクリーニングでターゲット化合物の数が増えると、メソッドの開発、保守、およびアプリケーションに関連する負担が急速に大きくなります。これらの理由によって、中毒学ラボで使用されるスクリーニング法の範囲が制限されることがあります。

GC/MS法は、通常は10~100の化合物を分析するように開発されています。ターゲット化合物は、ターゲットイオンと特定のアバンドランス比を持つ2つまたは3つのクオリファイアイオンが、定義されたリテンションタイム枠内に収まる場合に存在すると見なされます。さらに、ピーク頂点のスペクトルをライブラリスペクトルと比較することで、ターゲット化合物の同一性を確認できます。

通常、マトリクス干渉はサンプル前処理、GCおよびMSパラメータの組み合わせを最適化することで最小化されます。少数のマトリクスタイプのみ扱うメソッドの場合、同定イオンはそのマトリクス内で干渉が最小のものを選ぶべきです。レスポンスファクタ、リテンションタイム、およびクオリファイアイオンのアバンドランス比の再設定は、少数のキャリアレーション用混合物の注入によって実現できます。

多様な複合マトリクス内の非常に多くのターゲット化合物に対するスクリーニング法は、メソッド開発者に新たな一連の課題を提示します。数百のターゲット化合物をスクリーニングする場合は、いくつかの点を検討する必要があります。

- 厳密なクリーンアップ手順によってターゲット化合物が意図せず除去される可能性があるため、現在、マトリクス干渉を軽減するためのサンプル前処理は制限されているが、こうしてクリーンアップレベルを下げることにより、競合するマトリクスの干渉レベルが大幅に高くなる可能性がある。
- ターゲット化合物の数が多いため、レスポンスファクタ、リテンションタイム、およびクオリファイアアバンドランス比の再設定が困難である。
- すべてのターゲット化合物の標準試料を入手しなくても、メソッドを複数のラボに展開できる。
- 複合マトリクス内の数百のターゲット化合物のデータ確認に必要な時間は、手に負えないほど長くなる場合がある。
- 非常に種類の多いターゲット化合物データベースを使用しても、ターゲット化合物リスト内には重要な化合物がサンプル中に存在する場合がある。

近年、上記の一連の課題に取り組むのに役立ついくつかの手法が使用可能になりました。リテンションタイムロッキング(RTL)は、データベースのリテンションタイムと実際に得られるリテンションタイムを正確に一致させます[1]。これにより、個々のリテンションタイムとSIMグループのようなタイムイベントの再調整の必要性がなくなります。信頼性の高い不活性キャピラリーフローテクノロジー(CFT)スプリッタの導入により、マススペクトルと窒素/リン検出器(NPD)データの同時収集が可能になります[2]。NPDクロマトグラムでは、MSターゲット化合物リストにないものを含め、含窒素化合物が強調されます。含窒素ターゲット化合物の存在を確認するのに役立ち、定量の代替手段にもなります。

SIM/Scan機能の導入により、ScanデータとSIMデータの両方を1回の注入で同時に取り込むことができます[2、3]。Scanデータは、データベース内のすべてのターゲット化合物のスクリーニングに使用できますが、SIMデータは優先順位の高い化合物群(フェンタニルなど)を非常に低濃度のレベルまで探索できます。

データ確認に必要な時間を短縮するために開発された最も重要なツールの1つは、Agilentのデコンボリューションレポート作成ソフトウェア(DRS)です[4]。このツールは、高度な計算手法(デコンボリューション)を使用して、重なった干渉ピークのスペクトルからターゲット化合物のスペクトルを抽出します。さらに、抽出したスペクトルをライブラリと比較してターゲット化合物が存在するか否かを判断します。必要に応じてNISTライブラリを検索することでもヒットを確認できます。プロセス全体は自動化され、データ解析の時間を大幅に短縮します。DRSを使用すると、偽陽性と偽陰性の数も大幅に減少します。

DRSは4つのイオンの代わりにスペクトル全体を使用するため、通常のアプローチではうまくいかないような干渉が存在する場合でも、ターゲット化合物の同定を正しく行うことができます。また、正確なターゲットイオン/クオリファイアイオン比の代わりにスペクトル全体を使用して同定するため、比率の頻繁な更新が不要です。この点は、めったに検出されないにもかかわらずスクリーニング対象であるターゲット化合物に便利です。

このアプリケーションでは、上記の手法とスクリーニングの目的に使用する新しい725化合物のデータベースであるAgilent G1674AA法中毒DBLの組み合わせについて説明します。DBLには次のものが含まれます。

- DB-5MSおよびDB-35MSカラムのRTLメソッド

- DRSおよびMSDケミステーションのスペクトルライブラリ
- ハードウェア構成に応じて30分、15分、10分、7分、または5分といった複数の分析時間で事前に作成されたRTLメソッド
- MSD直接接続(真空)およびキャピラリーフローテクノロジー スプリッタ(3.8 psig)のためのメソッド
- メソッドごとに含まれる3つの定量データベース
  - ターゲットとクオリファイイオンとして大きい方から4つのイオンが採用されたデータベース。
  - カラムブリードおよびバックグラウンドに対してS/N比が最高になるように最適化されたデータベース。
  - 血液中の一般的な脂肪酸に対してS/N比が最高になるように最適化されたデータベース。

データベース内のすべての化合物名をこのアプリケーションノート末尾の付録に記載します。DBLには、ドラッグおよびそれらの分解生成物、TMS誘導体、アセチル誘導体が含まれています。誘導体として登録された化合物のうち、一般に言う第1および第2アミノ化合物(脂肪族と芳香族を含む)がアセチル化されています。ヒドロキシル基(アルコール/フェノール/カルボン酸など)は、BSTFAでTMS化されています。複合官能基を持つ化合物(たとえば、第1脂肪族アミンとアルコールを含むフェニルプロパノールアミン)は、アセチル化のみが施されています。

メソッドは2種類のカラム固定相について与えられるので、2種類のカラムによる確認が可能であり、また、同じカラムを使用するものであれば、他のメソッドを同じ装置で走らせることもできます。一般には最終オープン温度が低いDB-5MSメソッドが好まれます。

データベースに採用されたクロマトグラフィ条件は、ごく一般的なものであり、表にはない他の化合物の分析にも利用できます。その規模の大小にかかわらず、すべてのラボのニーズが1つのターゲット化合物リストで満たされることはないため、適宜新しい化合物を追加できるようになっています。

データベース内の化合物のリテンションタイムは、MSDに直接接続されているカラムと、CFTスプリッタで出口圧3.8 psigに分岐されたカラムの両方に対して提供されます。これは、サンプル分析中に観察されるリテンションタイムを、装置構成に関係なくデータベース内のリテンションタイムに一致させるための配慮です。

データベースのクロマトグラフィ条件は、Agilentのメソッド変換手法で得られたものです。より高速の運用に対してメソッド変換を正確にできるように、GC注入口は定圧モードとしました[5]。Agilentの法中毒DBLで提供されるのは、プライマリデータベース(1x)の2倍(2x)、3倍(3x)、4倍(4x)、および6倍(6x)の速度で正確に分析を実行するためのファイルです。速度の選択は、要求されるクロマトグラフィ分離の程度と、使用するGC/MSDシステムのハードウェア能力によって決定されます。

120V GCオープンと拡散ポンプを搭載したMSDを使用し、MSDに直接カラム接続されたシステムでは、1xまたは2xメソッドのみ使用できます。3x、4x、および6xのメソッドでは、カラム流量が1分あたり2mLを超えるため、高速オープン(240V)と高性能ターボポンプが必要です。これらのメソッドには高性能エレクトロニクスも望まれます。6xメソッドでは、60°C/分の昇温を得るために、240Vオープンとオープン“ピロー”アクセサリも必要です。ピローを使用するには、MSD、注入口、およびNPD(使用されている場合)をGCのバックポジションに配置する必要があることに注意してください。

定量データベースで使用されるイオンの選び方によって、各メソッドセットにつき3種類の異なるバージョンが提供されます。化合物のスペクトル中で大きいほうから4つのイオンを使用するメソッドでは、ターゲットイオンは、アバンダンスが最大のイオンです。次にアバンダンスの大きい3つのイオンがクオリファイイオンになります。これらのメソッドセットは、より高度なアプローチで使用するために提供されています。

最大4つのイオンによるアプローチの欠点は、場合によってはS/N比に悪影響があることです。例えば、化合物の最大イオンが207で、カラム固定相の最大ブリードイオンも207である場合、その質量でのS/N比が大幅に低下することがあります。CO<sub>2</sub>やその他のバックグラウンドガスによって干渉やノイズが増加する可能性のある44などの低質量にも、同じ問題が見られます。この問題を緩和するために、2番目のメソッドセットが提供されています。このメソッドでは、定量データベースとして選択されるイオンは、カラムブリードとバックグラウンドガスに対するS/N比が最適なものになっています。これらは性能を最も引き出すために通常使用されるメソッドです。

3番目のメソッドタイプは、血液サンプルで通常見られるような大量の脂肪酸を持つサンプルに対してイオンの選択が最適化されています。これらのメソッドは、高い脂肪酸マトリク

ス存在下でのS/N比を最高にします。これらは、干渉する脂肪酸のレベルが低いサンプルには最適な選択肢ではありません。

## 実験

### システム構成

使用されるシステム構成を図1に示します。GCはAgilent 7890A (G3440A) です。

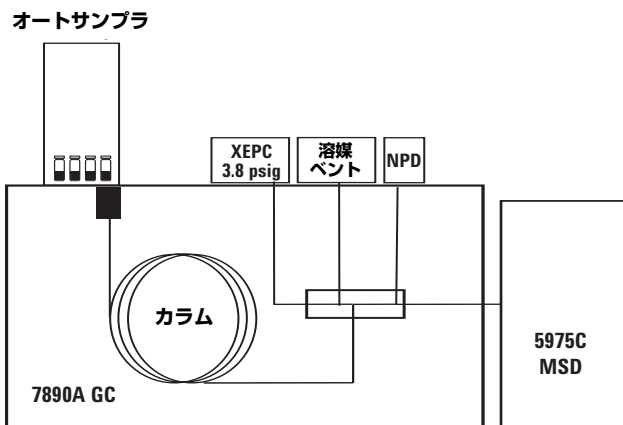


図1. 血液抽出物のスクリーニングに使用されるGC/MS/NPDシステム構成

主要構成要素は次のとおりです。

**高速オープン:** 基本的な1xメソッドでは、30-mカラムを使用し10℃/分の昇温速度であるため、120Vオープンで十分です。7890A 240Vオープン (オプション002) では、15-mカラムを使用することにより最大4倍高速にスクリーニングメソッドを実行できます。さらに240V GCにオプション199および202 (スプリット/スプリットレス注入口とMSDインタフェースをオープンのバックポジションに配置) を装備し、G2646-60500オープン注入アクセサリを使用する場合は、カスタム長の10-mカラムで速度を6倍高速 (60℃/分) にできます。NPDをスプリッタと共に使用する場合、オプション299はピローと共に使用するためにオープンのバックポジションに配置します。

**NPD:** 7890Aオプション251は、窒素リン検出器です。NPDからのシグナルは、MSケミステーションによってMSデータと同時に収集、保存、および処理されます。NPD検出器は選択性が高く、窒素化合物とリン化合物に対して非常に高感度のレスポンスを示しますが、低ピコグラムレンジに検出限界があります。NPDデータは複数の方法で使用できます。非ターゲット窒素 (およびリン) 化合物は、データ確認担当者のために強調表示されます。同定された化合物のリテンションタイムにピークが存在した場合、同定がより確かなものになります。NPD上のレスポンスは定量分析に使用できますが、

レスポンスファクタは化合物に依存し、その種類によって異なるため、標準試料でのキャリブレーションが必要です。NPDビードは、含ハロゲン溶媒および過剰なシラン化試薬存在下では使用できません。これらをNPDで使用する必要がある場合は、スプリッタのセットアップに溶媒ベント機能が必要です。

**キャピラリーフローテクノロジースプリッタ:** Agilentは、このアプリケーションで7890Aと共に使用できる2種類のカラム溶出スプリッタを提供しています。オプション889はカラムの溶出をMSDとNPD方向に分割する2方向スプリッタです。7890AオプションSP1 (7890-0363) は同じ処理を行います。溶媒ベント機能も追加します。デバイスは拡散溶接プレートテクノロジーに基づいた、不活性で使いやすくリークのない高温対応のスプリッタで、メタルカラムフェラルと組み合わせて使用します。スプリッタは、定圧メークアップにはAux EPCを使用します (7890Aオプション301)。Aux EPCメークアップは、分析終了時に圧力をより高压にプログラムできますが、一方で注入口圧力は常圧付近にまで下げられます。これによりカラム内のフローの方向が反転し、注入口のスプリットベントから難揮発性物質がバックフラッシュします。バックフラッシュによって、高沸点マトリクス成分を含むサンプルの分析時間が大幅に短縮され、カラムヘッドのトリミングとMSDソーススクリーニングの頻度が減少します [6]。Aux EPCでは、MSDのベントなしでカラムを交換および保守することもできます。

NPDに使用可能な溶媒を用い、シラン化試薬を含有しないサンプルの場合は標準の2方向スプリッタを使用できます。含ハロゲン (またはその他のNPDに使用できない) 溶媒またはシラン化試薬を使用する場合は、溶媒ベント機能付きの7890AオプションSP1 (7890-0363) 2方向スプリッタを使用して、NPDビードを保護する必要があります。ここではこの構成を使用します。

**MSDシステム:** 高性能ターボ (G3243A) を搭載した5975C inert MSDまたは高性能電子部品と高性能ターボ (G2579A) を搭載した5973N inert MSDが使用されます。これらの構成では、感度を維持したままスキャンレートを高速にできます。スキャンレートが早いと、高速クロマトグラフィで生成されたより幅狭のピークにも対応できます。高性能ターボポンプは、スプリッタを使用しているシステムにおける大流量のフローを処理するために必要です。また、真空アウトレット (MSDに直接接続されているカラム) での高速バージョン (3x、4x、および6x) のスクリーニングメソッドにも必要です。標準ターボポンプは、より低速な1xおよび2x真空アウトレットバージョンのメソッドに使用できます。高性能ターボと標準ターボは、どちらもバックフラッシュに対応しています。拡散ポンプを使用するシステムは対応していません。

**SIM/Scan:** Agilent MSDケミステーションのD.02.00(以上)のリビジョンにはSIM/Scan同時取込機能があるため、このリビジョンが使用されます。SIM/SCANは、クロマトグラム全体でSIMデータとScanデータを1サイクルずつ交互に収集します。従来のSIMメソッドと同様に、SIMのグループを時間で区切る必要があるため、725のターゲット化合物すべてを1インジェクションでモニタリングすることはできません。一般に、SIMデータの取り込みは優先度が高く濃度レベルの低いターゲット化合物向けに設定されます。例えばフェンタニルやフェンサイクリデンです。

**DRSソフトウェア (G1716AA) :** MSデータのスペクトルデコンボリューションによって、マトリクスピークが重なっている場合でもターゲット化合物を同定できます[4, 7]。これにより、要求されるクロマトグラフィ分離が大幅に緩和されるため、より高いレベルのマトリクス存在下でターゲット化合物を検出したり、高速クロマトグラフィ化して分析時間を短縮したりできます。DRSは、もともと複雑なサンプル内の微量化学兵器検出のために開発された、NISTのAMDISデコンボリューションプログラムを利用します。DRSは、分析担当者に次の3レベルの化合物同定を提示します。(1) リテンションタイムと4イオン一致に基づくケミステーションでの同定、(2) “クリーンアップされたスペクトル” の一致とロックされたリテンションタイムに基づくAMDISでの同定、(3) 163,000の化合物ライブラリを使用したNIST05a検索による同定。

**G1674AA法中毒DBL:** これは、725化合物スクリーニングメソッドとしてMSスペクトルライブラリ、メソッド、およびDRSファイルを提供します。

**表1. ガスクロマトグラフと質量分析計条件**

|  |                                       |
|--|---------------------------------------|
| <b>GC</b>  |                                       |
| オートインジェクタとトレイを搭載した<br>Agilent Technologies 7890A |                                       |
| <b>注入口</b>                                       | EPCスプリット/スプリットレス                      |
| モード  | 定圧                                    |
| 注入タイプ  | スプリットレス                               |
| 注入量  | 1.0 µL                                |
| 注入口温度  | 280°C                                 |
| ライナ  | 不活性処理された<br>デュアルターバ、<br>P/N 5181-3315 |
| 圧力   | 14.9 psig                             |
| RTロッキング化合物                                       | プロアジフェン(SKF-525a)                     |
| RTロッキング時間  | 4.285分                                |
| ページ流量  | 50mL/min                              |
| ページモード   | 切り替え                                  |
| ページ時間  | 0.4分                                  |
| ガスタイプ  | ヘリウム                                  |
| 注入口バックフラッシュ圧力                                    | 1 psig                                |

|             |        |
|-------------|--------|
| <b>オープン</b> |        |
| 電圧(VAC)     | 240*   |
| 初期オープン温度    | 100°C  |
| ホールドタイム     | 0.25分  |
| ランプレート      | 40°C/分 |
| 最終温度        | 325°C  |
| ホールドタイム     | 1.25分  |
| 合計実行時間      | 7.13分  |
| 平衡化時間       | 0.5分   |
| バックフラッシュ時間  | 0.5分   |
| バックフラッシュ温度  | 325°C  |

|             |            |
|-------------|------------|
| <b>カラム</b>  |            |
| タイプ         | DB-5MS     |
| Agilent部品番号 | カスタム       |
| 長さ          | 10m        |
| 直径          | 0.25mm     |
| フィルム厚       | 0.25 µm    |
| 初期流量        | 2.52mL/min |
| 出口圧         | 3.8 psig   |

|                         |          |
|-------------------------|----------|
| <b>溶媒ベントのある2方向スプリッタ</b> |          |
| 7890A SP-1, #7890-0363  |          |
| MSDリストリクタ長              | 0.69m    |
| MSDリストリクタ直径             | 0.15mm   |
| NPDリストリクタ長              | 0.36 m   |
| NPDリストリクタ直径             | 0.15mm   |
| MSD:NPDスプリット比           | 1.4:1    |
| 溶媒ベント時間範囲               | 0~0.75分  |
| 実行時のスプリッタ圧              | 3.8 psig |
| バックフラッシュ時のスプリッタ圧        | 76 psig  |

|            |          |
|------------|----------|
| <b>NPD</b> |          |
| 水流流量       | 3mL/min  |
| エア流量       | 60mL/min |
| 窒素メークアップ流量 | 8mL/min  |
| 温度         | 300°C    |

|   |           |
|---|-----------|
| <b>MSD</b>                                    |           |
| 高性能エレクトロニクスを搭載した<br>Agilent 5975または5973 inert |           |
| 真空ポンプ   | 高性能ターボ    |
| チューニングファイル                                    | Atune.U** |
| モード   | SIM/Scan  |
| 溶媒ディレイ  | 0.7分      |
| EM圧   | Atune圧    |
| 低質量   | 40amu     |
| 高質量   | 570amu    |
| しきい値  | 0         |
| TID   | オフ        |
| サンプリング  | 1         |
| 四重極温度   | 180°C     |
| イオン源温度  | 300°C     |
| トランスファライン温度                                   | 300°C     |

\* バックポジションにある注入ポートとMSDインタフェースおよびG2646-60500  
オープンピロー

\*\*ゲインノーマライズ、1x

## 装置パラメータ

### データ取り込み

使用されている装置パラメータ (特に注記がない場合) を表1に示します。

DB-5MSは、現行システムの固定相として採用されました。スクリーニングで最後の化合物を溶出するのに必要な温度は、DB-35MSで必要とされている345℃より低い325℃でした。これによりランタイムが短くなり、カラムの寿命が長くなります。

メソッドパラメータは、クロマトグラフィ分離とサンプルスルーピット間のトレードオフが最適になるように選択されました。ここで分析した血液サンプルの場合は、4xメソッドで比較的短時間の妥当な分離が得られました。4xメソッドは標準の15-mカラムでも実行できますが、より低いカラム流量で同程度の分離を示す10-mカラムが採用されました。

分析後のカラム焼き出しに代わり、バックフラッシュを使用して高沸点サンプルマトリクス化合物を除去することにより、時間を節約できました。バックフラッシュはより効果的で高速であり、NPDおよびMSDイオン源に高沸点物質とカラムブリードを送り込みません。現行の構成では、0.5分のバックフラッシュにより、高沸点物質がすべてカラムから除去されました。より短いカラム長(10m)を使用することで、15-mカラムに比べてバックフラッシュ時間が短縮されました。

4xメソッドは、ピローアクセサリを使用せずに240Vオープンで実行できます。ピローを使用するとオープンの冷却時間がある程度短縮され、装置の消費電力量が低減されるため、ここではピローを使用しました。

オートインジェクタでのオーバーラップ注入設定を使用して、サイクルタイムのさらなる短縮が実現されました。この機能を使用すると、現在の測定が終了しオープンが冷える間にオートインジェクタが次に注入するサンプルを前処理し、シリンジの準備が整います。この機能により、使用されている注入パラメータによってはサイクルタイムを約1分短縮できます。

表2. SIM/Scanモードで使用されたSIMグループ

| SIMグループ (番号) | 開始時間 (分) | 化合物                    | RT (分) | 対象 (amu) | Q1 (amu) | Q2 (amu) |
|--------------|----------|------------------------|--------|----------|----------|----------|
| 1            | 0        | アンフェタミン                | 0.900  | 44       | 91       | 65       |
| 2            | 0.97     | メタンフェタミン               | 1.050  | 58       | 91       | 65       |
| 3            | 1.5      | メチレンジオキシアニフェタミン(MDA)   | 1.978  | 136      | 135      | 51       |
| 4            | 2.06     | メチレンジオキシメタンフェタミン(MDMA) | 2.147  | 58       | 135      | 77       |
| 4            |          | エクゴニンメチルエステル           | 2.222  | 94       | 82       | 96       |
| 4            |          | エチルエクゴニン               | 2.223  | 94       | 82       | 96       |
| 5            | 2.52     | メペリジン                  | 2.826  | 246      | 218      | 247      |
| 6            | 2.96     | ケタミン                   | 3.138  | 180      | 182      | 209      |
| 6            |          | フェンシクリジン               | 3.249  | 243      | 242      | 200      |
| 6            |          | トラマドール                 | 3.389  | 58       | 263      | 59       |
| 7            | 3.64     | メタドン                   | 3.866  | 72       | 57       | 165      |
| 7            |          | デキストロメトルファン            | 3.895  | 271      | 212      | 270      |
| 8            | 3.98     | コカイン                   | 4.042  | 182      | 82       | 94       |
| 8            |          | コカエチレン                 | 4.175  | 196      | 82       | 94       |
| 9            | 4.53     | ジアゼパム                  | 4.598  | 258      | 286      | 257      |
| 9            |          | テトラヒドロカンナビノール          | 4.666  | 299      | 300      | 231      |
| 9            |          | 6-アセチルモルフィン            | 4.773  | 268      | 327      | 328      |
| 10           | 4.85     | オキシコドン                 | 4.801  | 315      | 230      | 115      |
| 10           |          | テマゼパム                  | 4.922  | 271      | 273      | 272      |
| 10           |          | ヘロイン                   | 4.992  | 310      | 268      | 327      |
| 10           |          | フェンタニル                 | 5.177  | 245      | 146      | 189      |
| 11           | 5.25     | ゾルピデム                  | 5.332  | 235      | 236      | 219      |
| 11           |          | 7-アミノクロナゼパム            | 5.433  | 285      | 258      | 286      |
| 12           | 5.53     | アルプラゾラム                | 5.630  | 308      | 279      | 280      |
| 12           |          | ザレプロン                  | 5.695  | 305      | 263      | 248      |
| 13           | 5.8      | ゾピクロン                  | 5.905  | 112      | 99       | 139      |
| 13           |          | リゼルギド(LSD)             | 6.000  | 323      | 324      | 222      |

(全ドゥエル時間5ミリ秒)

SIM、ScanおよびNPDデータを同時に取り込むと、別々の実行で取り込む場合と比較して時間が大幅に節約されます。モニタリングされる化合物および対応するSIMグループを表2に示します。4xメソッドのピークは比較的狭いため、SIMイオンのドゥエルタイムは5ミリ秒に設定しました。

上記の時間節約手順を使用すると、注入から注入までのサイクルタイムは9.6分でした。

## データ分析

50の血液抽出物を分析した経験に基づき、データ分析スキームが進化し、DRS、SIMおよびNPDデータに組み込まれました。

得られたデータの確認スキームは次のようになります。

- DRSによるデコンボリューション結果は化合物の存在を確認するために使用されました。AMDIS最小一致係数は50に設定しました。一致係数が65未満であるか、リテンションタイムの差が4秒を超える化合物は、サスペクト(たとえば、ターゲット/クオリファイア比などの他のデータで存在が支持されない限り存在しない)と見なされました。サスペクトの同定には、NPDシグナルを調べて、同じピーク形状とリテンションタイムを持つ対応するレスポンスがあるかどうかを確認しました。(表の化合物の大多数と同じように)サスペクト化合物に窒素が含まれる場合は、NPDレスポンスが化合物の存在を支持する証拠となります。
- AMDISでは同定されたものの、クオリファイアが範囲外のためMSDケミステーションでは不検出の化合物は、QEditを使用して手動で調査しました。許容されるスペクトルとリテンションタイムの一致がAMDISによって示された場合は、定量を行いました。
- 別のケミステーションデータ分析メソッドを使用して、表2に示した27化合物のSIMクロマトグラムを確認しました。SIMはスペクトルデータで確認できるよりも低濃度の化合物を検出できるため、同定はターゲットイオン/クオリファイアイオン比とNPDデータで行いました。
- NPDトレースを用い、同定されていない、より大きなピークが調べられました。これらのピークのリテンションタイムでデコンボリューションされたスペクトルは、NIST 05aライブラリで検索されました。実際問題として、小さなNPDピークは数が多く、対応するスキャンデータのS/N比が小さすぎて実用的でないため、追跡しませんでした。

特に断らない限り、ケミステーションデータ分析には、カラムブリードに対して最適化されたイオンを用いた4xメソッドを使用しました。メソッドで提供された概算のレスポンスファクタは、標準の5ng/μLのプロアジフェン(ロックン化合物)を用いて設定されました。定量データベース内のすべての化合物のレスポンスには、標準のプロアジフェンに対して計算された結果が5ng/μLに等しくなるために必要な係数を乗算しました。これにより、化合物が個々にキャリブレーションされていない場合に、同定されたターゲット化合物の濃度を推定できます。

メソッドで提供される概算のレスポンスファクタは、キャリブレーションされていないターゲット化合物の濃度を推定することのみを目的としています。確実な定量には、分析に使用される装置上でのレスポンスファクタの再キャリブレーションが必要であるため、推定濃度を定量結果としてレポートすべきではありません。これらの値の誤差は容易に10倍かそれ以上になります。推定値の目的は、定量のためのキャリブレーション用の標準を調製する場合のおよその目安を示すことです。レポートされるすべての分析対象物について、個々のキャリブレーションを使用すべきです。

27の化合物に対するSIMデータ分析メソッドは、脂肪酸に対して最適化された4xメソッドからのターゲットイオンおよび最初の2つのクオリファイアイオンを使用して作成されました。これは、血液サンプル中のマトリクスからの干渉を最小化するために行いました。

MSDケミステーションで使用するピーク認知率は、Scanデータに対しては±0.150分、SIMデータに対しては±0.075分、AMDISに対しては±6秒に設定しました。これらの幅は、ある程度のリテンションタイムドリフトには十分に対応でき、偽陽性の数を最小化するのには十分なものでした。

比較の目的で、従来の2つのデータ確認アプローチも使用してデータを分析しました。

最初のアプローチは、定量データベース内の各化合物のターゲットイオンのEICが抽出および積分される標準定量ソフトウェアです。ピーク認知時間枠内にピークが検出された場合は、クオリファイアイオンとターゲットイオンの比率が測定されます。複数のオプションのレポート形式を使用できます。ここで使用したレポートは、1) ターゲットイオンEIC内にピークが検出され、許容される比率範囲内にすべてのクオリファイアがある化合物のみのレポート、および2) クオリファイアイオンの状態に関係なく、ターゲットイオンEICにピークが検出された

すべての化合物のレポートです。レポートの結果は、QEditで確認できます。QEditでは、検査を容易にするために、抽出されたターゲットイオンとクォリファイアイオンのEICが重ね描きされます。化合物の参照スペクトルおよび定量されるピークの頂点スペクトルも表示されます。EICおよびスペクトルの調査に基づいて、確認担当者はレポートに化合物を含めること、または除外することができます。

2つ目のデータ確認アプローチでは、ChemStation Screenerソフトウェアを使用しました。これはQEditとほぼ同じですが、ピークの頂点スペクトルと参照ライブラリの相互参照値(XCR)もレポートする点が異なります。XCR値は、スペクトル一致度を示すものであり、ターゲット化合物を特定するために使用する追加パラメータとして使用できます。ScreenerにはQEditと同様のレポートオプションがあり、ここでは同じ2つのタイプを使用しました。Screenerは定性ツールであることに注意してください。Screenerで同定された化合物を、QEditで定量する必要があります。

## サンプル

GC/MS分析用に前処理された全血抽出物が、NMSラボ(Willow Grove, PA)から提供されました。全血は、単一ステップで溶媒に液/液抽出され、乾固後、1/10の量のトルエンに再溶解されました。

## 結果と考察

図2Aに、同時に取り込んだ血液抽出物のScan、SIM、およびNPDクロマトグラムの一例を示します。クロマトグラムからは一見単純なサンプルに見えます。図2Bには、スケールを拡大した同じScanおよびNPDクロマトグラムを示します。低レベルのレスポンスを含めると400を超える化合物がこれらのクロマトグラム上に存在します。

サンプルから得られたデータは、まず、従来のアプローチで確認しました。標準の定量ソフトウェアを使用した最初のレポートでは、すべてのクォリファイアイオン対ターゲットイオン比がここで使用したかなり寛大な50%の許容範囲内にあった化合物がリストされました。レポートされた28の化合物を手動で確認したところ22が偽陽性になりました。つまり、これらは実際に存在しませんでした。サンプルに実際に存在した11のターゲット化合物のうち、このレポートでは6つのみ検出され、残りの5つは偽陰性でした。

こうした状況は稀なことではないため、通常はクォリファイアイオン比に関係なく、ターゲットイオンでレスポンスがあったすべての化合物をレポートする必要があります。これらの不確定性は、QEditで手動で確認する必要があります。インテグレーターは非常に小さいピークを捕獲するように設定する必要があるため、ベースラインノイズの積分により大量のレスポンスが発生します。ここで使用したサンプルの場合、

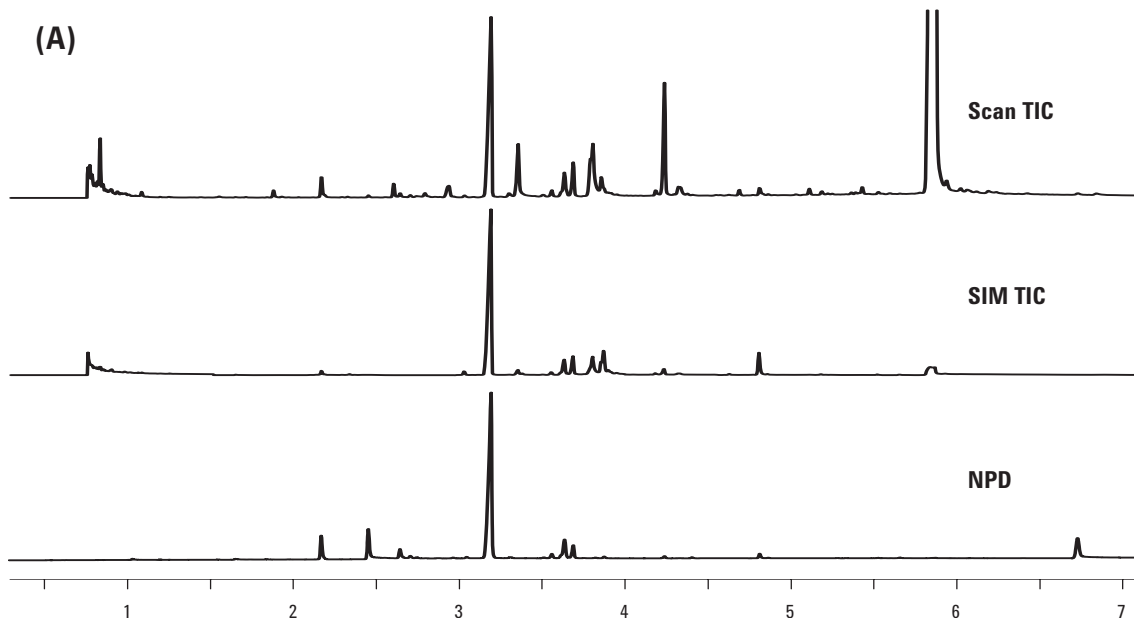


図2A. 血液抽出物の分析で得られたScan、SIMおよびNPDクロマトグラム

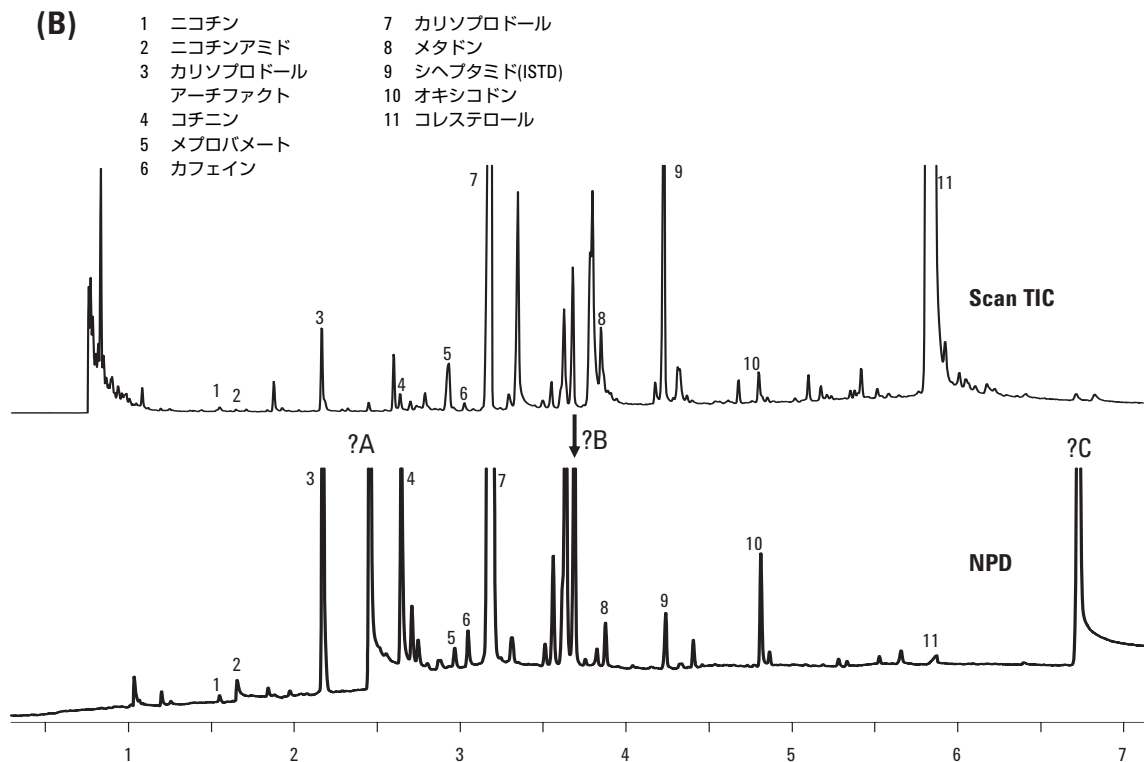


図2B. 血液抽出物の分析で得られたScanおよびNPDの拡張スケールクロマトグラム(続き)

367の化合物が発見された(つまり、ターゲットイオンにレスポンスがあった)ことがレポートされました。当然、356は偽陽性でした。実際に存在する11の化合物はすべて検出されたため、偽陰性はありませんでした。つまり、確認担当者は偽陰性を回避するために367の化合物を手動で評価し、11の存在を検出しなければならないことになります。

サンプルから得られたデータは、次にChemStation Screenerソフトウェアで評価されました。予想された通り、ターゲットイオン/クオリファイアイオン比のみに基づくScreenerレポートでは、QEditと非常に似た結果が得られました。偽陰性を回避する唯一の方法は、数百のターゲットイオンレスポンスを評価して11の存在を検出することです。

評価が必要な偽陽性の数を減らすために、ターゲットイオンレスポンスのあった273の化合物をすべてリストするScreenerレポートをXCRの降順でソートしました。実際に存在する化合物のいくつかは、リストの上部付近に集まりました。ただし、実際に存在する中でXCR値が最も低かったターゲット化合物は、リスト中の162番目の化合物でした。この結果から言えるのは、XCRによってターゲット化合物を正しく特定できる可能性が高まりますが、ターゲットイオンレスポ

ンスのあるすべての化合物を詳細に調査しなければ、依然として偽陰性は発生するという事です。

ここで説明したタイプのサンプルの場合、従来のアプローチによって存在するターゲット化合物を正しく同定することは、分析プロセス全体の中で最も時間のかかるステップの1つです。そのため、デコンボリューションとDRSの使用が非常に有効です。

この同じサンプルをDRSソフトウェアで評価した場合、12の化合物がAMDISによってレポートされ、デコンボリューションされたスペクトルの一致係数は50を超え、リテンションタイムはロックされたリテンションタイムの6秒以内でした。12のリストされた化合物を確認した後、一致係数が低すぎるために1つが除去されました。実際に存在する11の化合物はすべて同定され、偽陽性は1つのみ含まれていました。実際に存在するターゲット化合物を適切に特定するプロセス全体で要した時間は、QEditでターゲットイオンだけを調査する場合やScreenerアプローチを使用する場合が1時間以上であったのに対して、DRSでは約5分にすぎませんでした。DRSによって同定された化合物について、最終レポートはQEditを使用してターゲット化合物を定量した後で作成されました。

AMDISターゲット化合物ライブラリで見つかった化合物についてNISTライブラリでは検索されませんでした。

| R.T.   | CAS番号     | 化合物名            | Agilent            | AMDIS |          |
|--------|-----------|-----------------|--------------------|-------|----------|
|        |           |                 | ケミステーション量<br>(~ng) | 一致度   | R.T.差(秒) |
| 1.539  | 54115     | ニコチン            | 0.03               | 59    | -0.5     |
| 1.6446 | 98920     | ニコチンアミド         | 0.27               | 93    | -0.9     |
| 2.1631 | 999401024 | カリソプロドールアーチファクト | 64.87              | 93    | -0.5     |
| 2.6367 | 486566    | コチニン            | 1                  | 96    | -0.4     |
| 2.928  | 57534     | メプロバメート         | 4.11               | 99    | 0.0      |
| 3.033  | 58082     | カフェイン           | 0.04               | 82    | -0.5     |
| 3.1832 | 78444     | カリソプロドール        | 127.4              | 96    | 1.0      |
| 3.8653 | 76993     | メタドン            | 0.39               | 74    | -0.1     |
| 4.2279 | 7199293   | シヘプタミド          | 22.5               | 98    | 0.1      |
| 4.8014 | 76426     | オキシコドン          | 2.37               | 82    | 0.0      |
| 5.850  | 57885     | コレステロール         | 922.73             | 97    | 3.4      |

### 図3. 図2の分析に対するDRSレポート

図3に、サンプルのDRSレポートを示します。同定された各化合物について、リテンションタイム (R.T.)、Chemical Abstracts番号 (CAS番号)、および化合物名がリストされます。化合物がAgilent ChemStation、AMDIS、またはその両方で見つかった場合に行が作成されます。

レポートの[Agilent ChemStation量]列に値が表示される場合は、Agilent ChemStationがその化合物が存在すると判断したことを示しています。これは、メソッドのDATA ANALYSISセクションで設定された同定基準を満たしたことを意味します。一般的な基準は、ターゲットイオンが存在し(また、積分され)、3つのクオリファイアイオンすべてがその化合物の許容範囲内に収まる比率であることです。データ確認担当者がターゲットイオンの積分を手動で実行した場合にもここに表示されます。

[AMDIS]列にリストされている一致度は、そのRTでピークの抽出(デコンボリューション)されたスペクトルが、AMDISターゲット化合物ライブラリのスペクトルに一致した程度を表します。この数値が高いほど(最大100)、スペクトルの一致度が高くなります。[R.T.差(秒)]列は、観察されたRTと、AMDISターゲット化合物ライブラリ内のRTの違いを秒単位で示します。この数値が低いほど、RTの一致度が高くなります。

レポートの3つ目のオプション機能は、NIST検索列(ここには示されていません)です。NIST列には、同じCAS番号を持つ、NISTメインライブラリスpekトルと比較した、抽出されたspekトルのリバース一致度が示されます。現在のセットアップでは、CAS番号が利用可能でない化合物が大量にあります。法中毒DBLには、NISTライブラリに見つからないいくつかのCAS番号が含まれています。したがって、現在のところNIST検索機能はオフになっています。

図2BのNPDトレースには、?A、?B、?Cというラベルの付いた3つのピークもあります。この3つの比較的大きなピークは、725のターゲット化合物リストにありません。3つの各NPDレスポンスに対応するデコンボリューションされたspekトルはAMDISで見つかり、メインNISTライブラリで検索されました。ピーク?Aは、サンプル処理アーチファクトとしてよく見られるリン化合物であるリン酸トリブチルと同定されました。ピーク?Bは、10,11-ジヒドロジベンゾ(b,f)(1,4)オキサゼピン-11-1と同定されました。これは、後にサンプル前処理時に添加された2番目の内標準物質であることが判明しました。ピーク?Cは同定されていません。これはNIST 05aライブラリにはありませんが(最高のヒットは一致値がわずかに38でした)、多くのサンプルに出現しています。

レポート内の一部の化合物の同定を行い、その詳細を参照することは有益です。オキシドコンはAMDISカラム内の一致度が高く、リテンションタイムの差が非常に小さいため、容易に同定されます。図4Aに、QEditで見られた抽出イオンクロマトグラム (EIC) を示します。すべてのイオンは干渉なしに明確に示され、クオリファイイオンとターゲットイオンの比率は許容範囲内です。SIMイオンのEICも示されています。これらも干渉なしに明確に示され、クオリファイイオンとターゲットイオンの比率は許容範囲内です。図4Aの一番下のNPDトレースは、マストレースのオキシドコンレスポンスと同じ形状および時間のレスポンスを示しています。図4Bでは、

オキシドコンのリテンションタイムに見られたデコンボリューションされたスペクトルを、オキシドコンのターゲット化合物ライブラリの参照スペクトルと比較しています。一致は非常に良好で、一致度は82です。オキシドコンは容易に同定され、すべてのパラメータが明確にその存在を示していました。

図5はもう少し難しい状況を示しています。この化合物はメタドンで、スペクトルの72に1つの大きなイオンがあり、残りのイオンは非常に小さいものです。図5AのEICはSIMデータからのものです。Scanデータからのトレースも同様でした

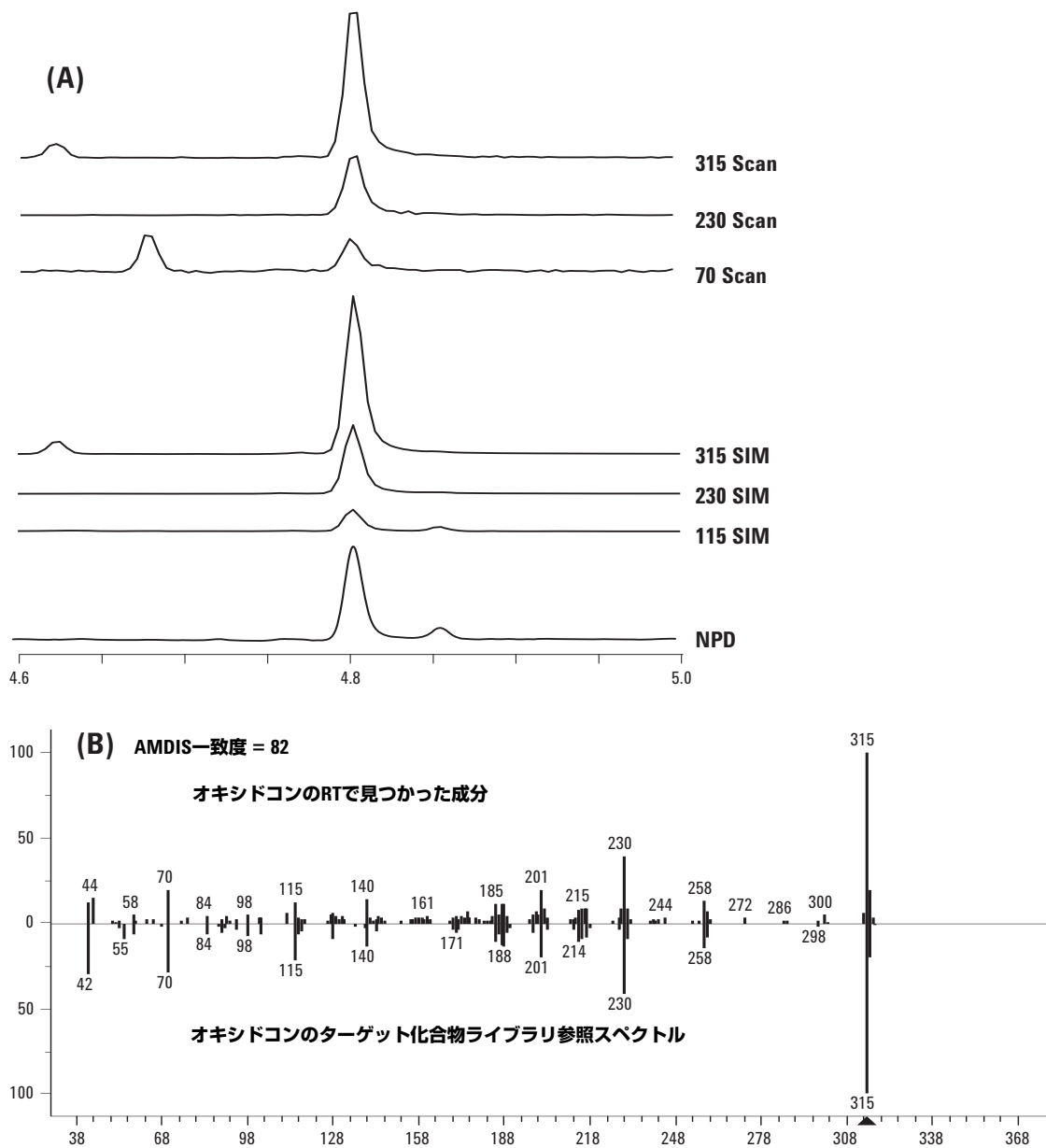


図4. (A) 同時に得られたオキシドコンのSIM、Scan、およびNPDクロマトグラム  
(B) デコンボリューションされたオキシドコンスペクトルとターゲット化合物ライブラリ参照スペクトルの比較

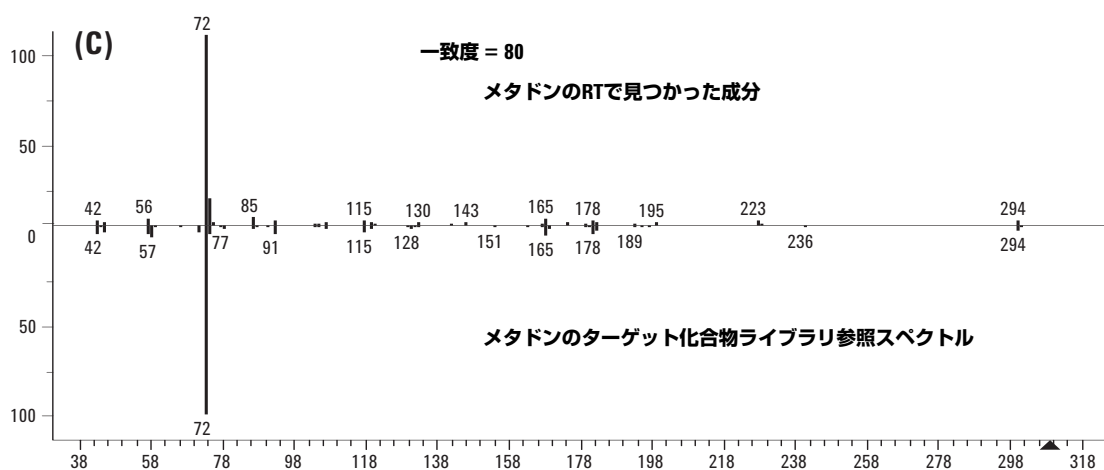
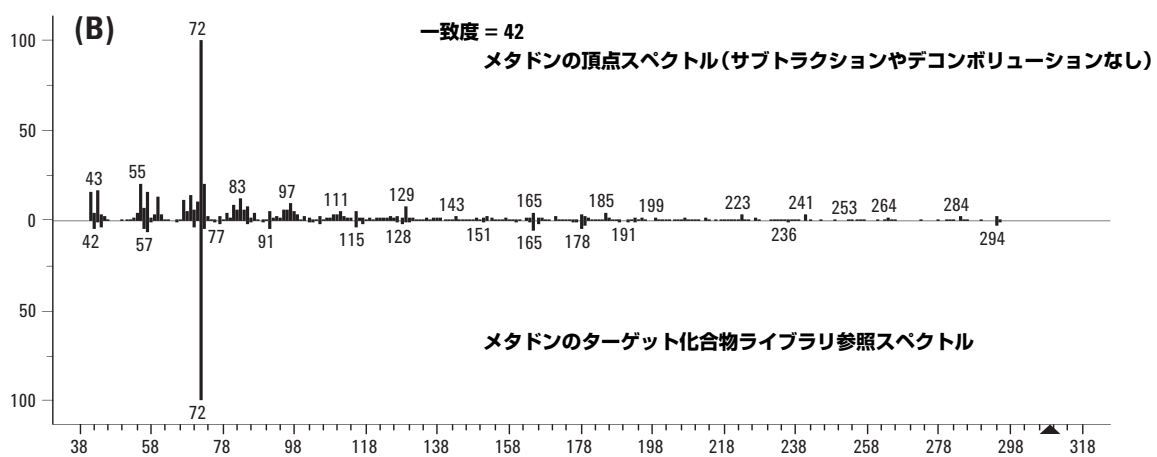
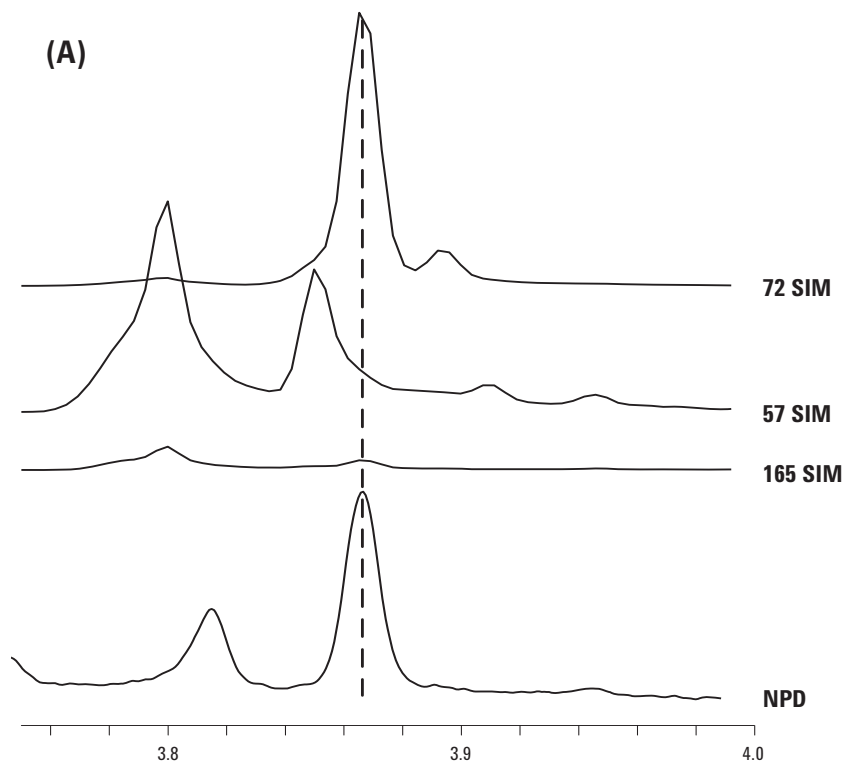


図5. (A)メタドンSIMおよびNPDクロマトグラム  
(B)サブトラクションやデコンポリューションを行わないメタドンスペクトルと参照スペクトルの比較  
(C) ターゲット化合物ライブラリで検索されたメタドンのデコンポリューションされたスペクトル

(S/N比が低いことを除いては)。ターゲットイオンは明確なピークがありますが、真ん中のクオリファイアイオン (57) には、オクタデカン酸ピークからの大きな干渉があります。EICデータのみを使用した場合、クオリファイアイオンの1つが干渉により消失するため同定は不確かです。SIMトレースの下に示されているNPDレスポンスは、そのリテンションタイムに窒素含有化合物があるという事実を支持します。

図5Bに、ターゲット化合物ライブラリの参照スペクトルと比較した、サブトラクションやデコンボリューションされていないメタドンの頂点スペクトルを示します。一致度はオクタデカン酸ピークの干渉のため、42と予期せず低くなっています。

72のイオンは明確に示されていますが、他のメタドンイオンはあいまいです。図5Cでは、メタドンリテンションタイムからのデコンボリューションされたスペクトルが、参照スペクトルと比較されています。デコンボリューションによってオクタデカン酸の干渉が除去され、一致度が80となり、サンプル内のメタドンの存在を明確に示しています。メタドンの存在は、3つのイオンのうち2つが明確に存在しその比率が正しいこと、加えて同じリテンションタイムとピーク形状を持つNPDレスポンスによっても支持されています。

カフェインは特に優先度の高いターゲット化合物ではありませんが、図6に示す例は参考になります。図6Aに示す4つのScan EICの低いS/N比からわかるように、カフェインはたと

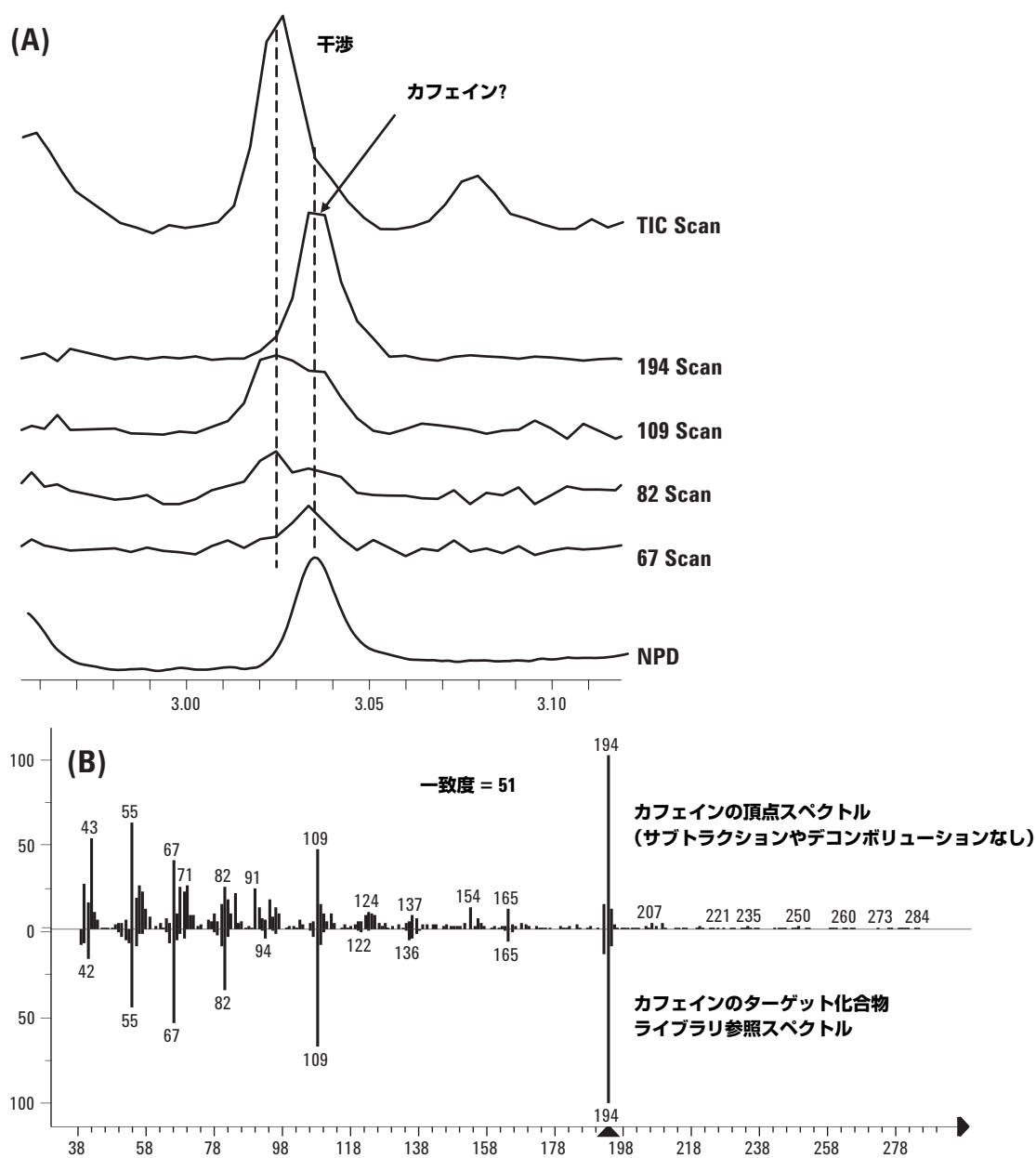


図6. (A)カフェインのTIC、Scan EICおよびNPDシグナル  
(B)サブトラクションやデコンボリューションしていないカフェインスペクトルはマトリクス化合物による干渉の存在を示す

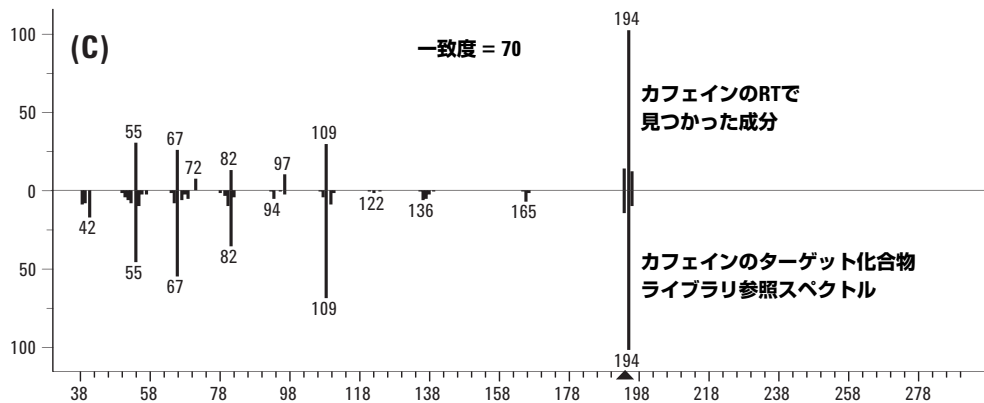


図6C ターゲット化合物ライブラリで検索された、デコンボリューションされたカフェインスペクトル(続き)

え存在したとしても非常に低いレベルです。109と82の2つのイオンには、一番上のTICに示されているように、重なる大きなピークからの干渉の問題もあります。NPDトレースはカフェインと同じピーク形状およびリテンションタイムを持つ含窒素化合物の存在を示しています。干渉ピークはNISTメインライブラリでデコンボリューションされたスペクトルを検索することにより、6,10,14-トリメチル-2-ペンタデカノンとして同定されました。この化合物はイオン109および82をカフェインと共有するため、干渉が発生します。

図6Bに、サブトラクションやデコンボリューションしていないカフェインの頂点スペクトルを示します。カフェインの参照スペクトルと比較した場合、一致度は51と良くありません。図6Cは、カフェインのリテンションタイムでのデコンボリューションされたスペクトルを参照スペクトルと比較したもので、一致度はかなり改善されて70になっています。この例は、デコンボリューションプロセスが、S/N比の低い小さなピークでも効果を発揮することを示しています。

図7の例は、異なるサンプルから得られたものであり、その目的は従来のアプローチの限界と比較したデコンボリューションの限界を示すことです。両アプローチはS/N比という同じ事象によって制限されるという意味で似ています。図7AにアルプラゾラムのScan、SIMおよびNPDトレースを示します。Scanデータでは、4つのイオンのうち3つがろうじて参照可能であり、4つ目はノイズで失われています。SIMデータは、アルプラゾラムリテンションタイムに存在するピークを明確に示し、比率は適切な範囲内にあります。NPDは同じリテンションタイムでレスポンスを示し、形状も似ています。図7Bは、アルプラゾラムのデコンボリューションされたスペクトルをNIST 05aライブラリと比較したものです。一致度はわず

か57.5です。化合物の濃度レベルが非常に低いことから、AMDISはわずかなアルプラゾラムイオンしか発見できなかったため、一致が十分ではありません。これはScanデータとデコンボリューションを使用したターゲット/クオリファイアアプローチが、およそこのレベルのS/N比で難しくなることを示しています。この例ではSIMデータとNPDデータが非常に役立ちます。この例でScanデータのみ使用可能な場合、アルプラゾラムの同定は疑わしく、おそらくレポートされません。正しい比率のSIMデータとそれをサポートするNPDレスポンスが得られれば、非常に低いレベルであってもアルプラゾラムが実際に存在するということを示すことができた例です。

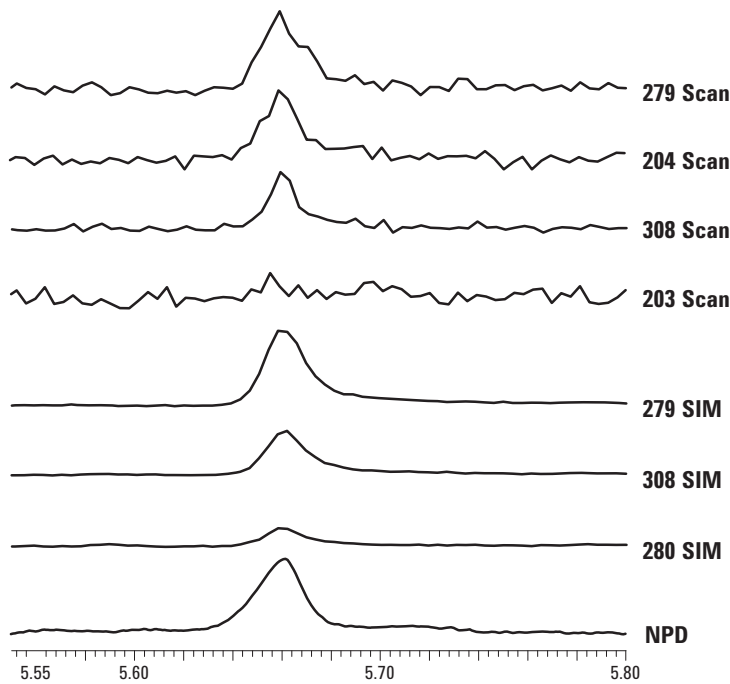
最後は、非常に高レベルの脂肪酸干渉物を含むサンプルの例です。これらは図8Aに明確に示されています。QEditではメプロバメートの存在は、図8Bの3.007分に表示されているピークで示されました。クオリファイアイオンとターゲットイオンの比率はこの時使用した比較的広い許容範囲内にありましたが、同定には疑いがあります。EICの調査は、QEditで見つかったリテンションタイムで複数のピークのように見えるものが何であるかを示しています。リテンションタイムは、メソッドで通常見られる2.928分の予想リテンションタイムからはるかに離れていました(+0.080分)。また、3.007のリテンションタイムの4つのトレースには、明確なピーク形状の証拠はありません。これらの結果のみに基づくと、メプロバメートは偽陽性的のように見えます。

示されたEICトレースは、カラムブリードに対して最適化されたメソッドからのものでした。83をターゲットイオンとして使用すると、このサンプルでは明らかに高レベルの脂肪酸による干渉の問題が発生します。脂肪酸に対して最適化されたイオンのメソッドが使用されると、全体像がもう少し明確に

なります。このメソッドでは、イオン62がターゲット化合物として使用されています。イオン62は干渉の程度が大幅に低いからです。図8のイオン62のトレースを見ると、ピークは2.948にあるように見え、予想リテンションタイムの2.928分にはかなり近くなっています。イオン62でのレスポンスは実際のピークに少し似ていますが、脂肪酸で最適化されたメソッドの他のイオンは、干渉の程度によってまだ疑問があり、偽陽性の可能性があることが提示されています。2.928分および3.007分付近にNPDピークがあったため、NPDトレース（示されていません）では問題が解決されません。

問題は、DRSソフトウェアの新しいA.04リリースを使用して簡単に解決されました。このバージョンでは、AMDISがデコンボリューションデータから抽出したピークプロファイルをQEditにインポートし、それをQEdit EICにオーバーレイできます。デコンボリューションされたスペクトルもインポートされ、QEditでサブトラクトされたスペクトルおよびライブラリ参照スペクトルと比較されます。これらの機能は、QEditの内部のデコンボリューション情報を示すことで確認プロセスを簡略化しています。ScanデータのEICと比較しながらAMDIS抽出ピークプロファイルを調査することで、脂肪酸最適化メソッドで見つかったターゲット化合物のレスポンスが

(A)



(B)

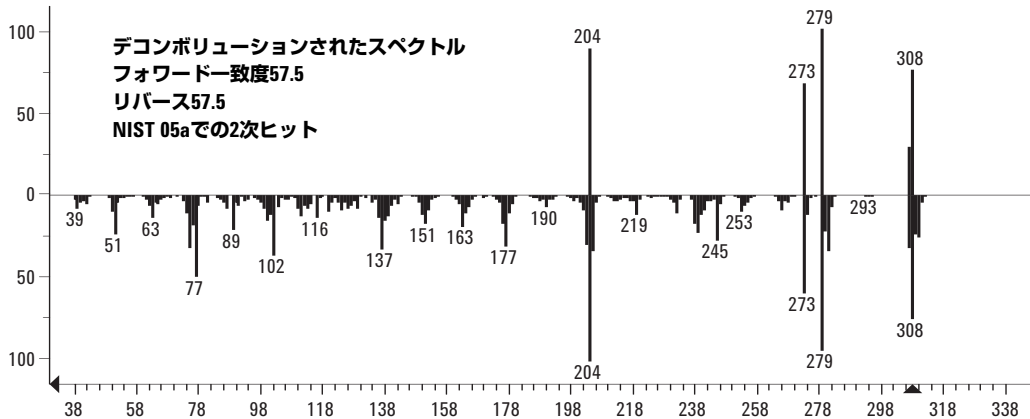


図7. (A) SIM、ScanおよびNPDシグナルでのアルプラゾラムレスポンス  
(B) NIST 05aライブラリで検索されたアルプラゾラムデコンボリューションスペクトル

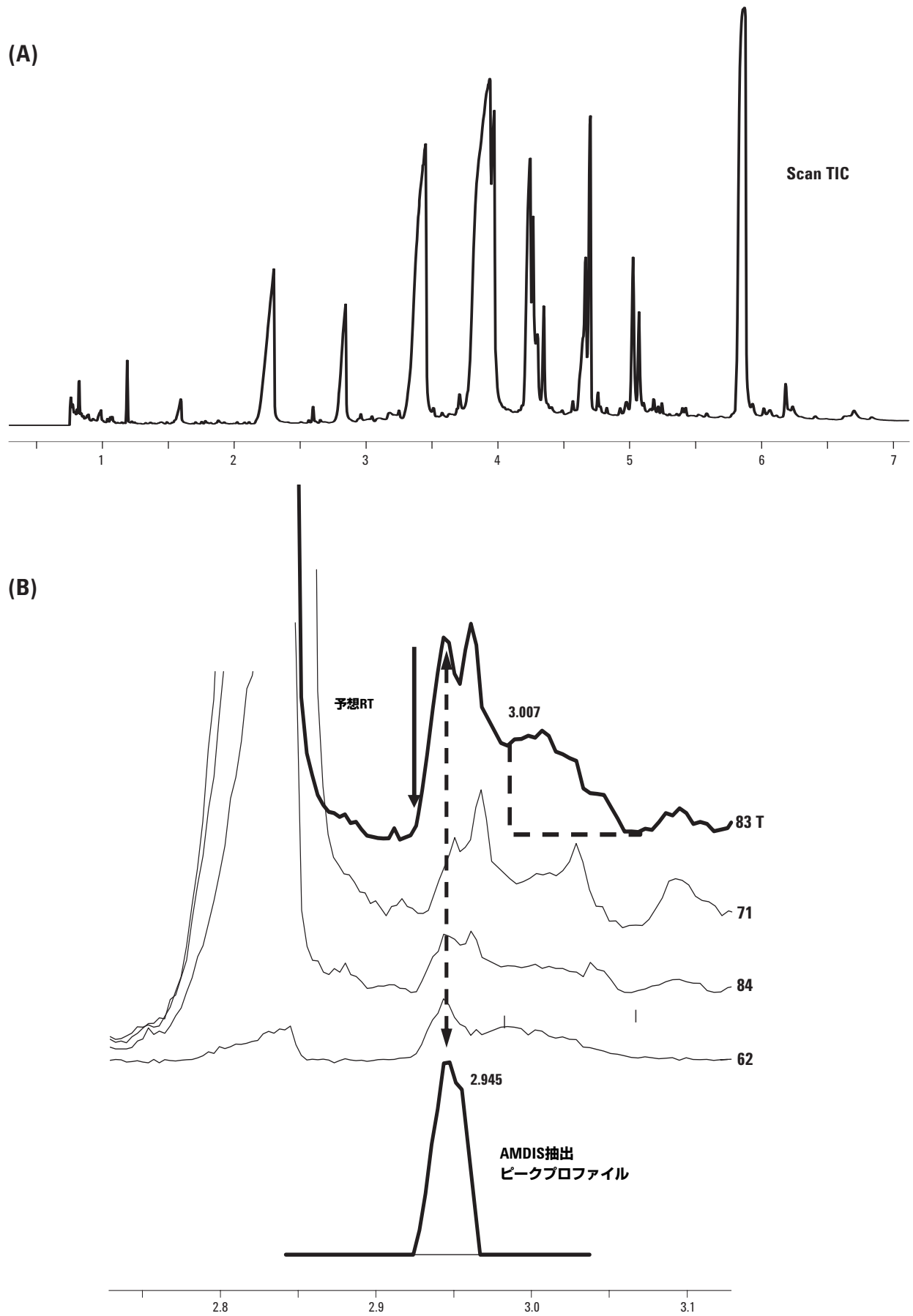


図8. (A) 脂肪酸のレベルが高いサンプルのScan TICクロマトグラム  
 (B) AMDIS抽出ピークプロファイルとオーバーレイされた、ブリード最適化メソッドで得られたScan EIC

(C)

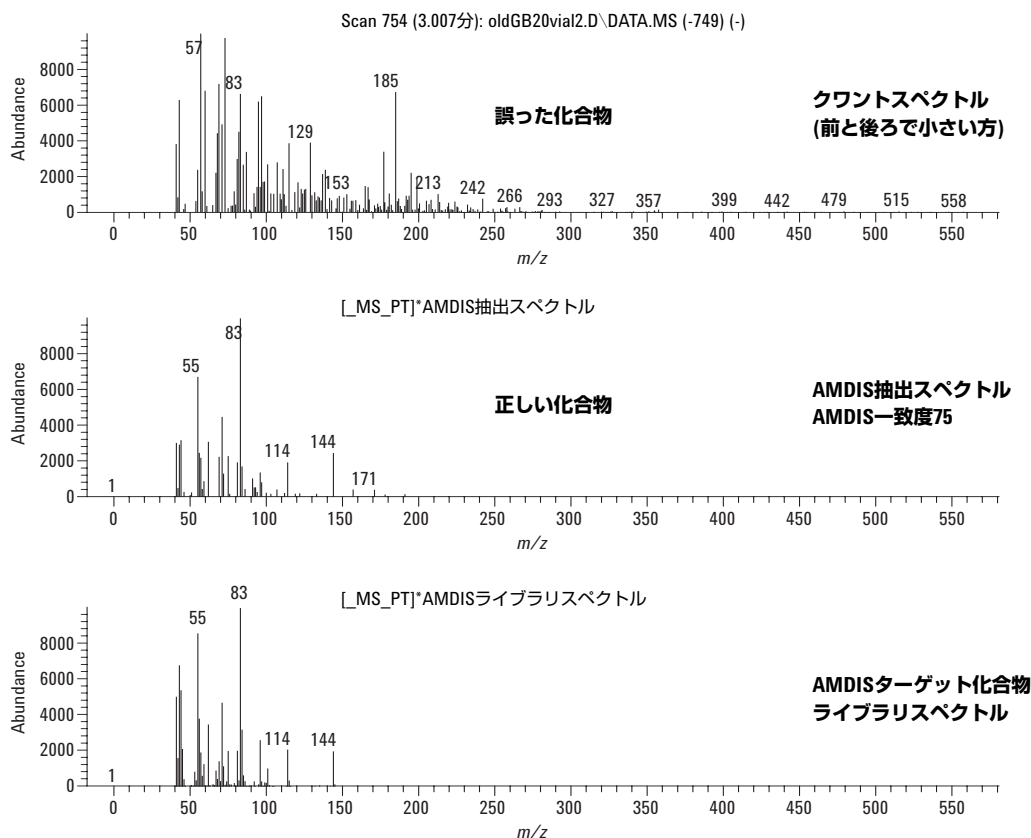


図8C. DRS A.04を使用してデータ確認時に比較するための、QEditで示された3つのメプロバメートスペクトル

実際にメプロバメートであることが示されます。AMDISで抽出されたピークプロファイルは62のそれにとっても似ています。ターゲットイオンに干渉の問題がある場合は、必要に応じてAMDIS抽出ピークプロファイルを積分して定量できます。

デコンボリューションされたスペクトルによる確認が最善の方法です。図8Cでは、比較のために3つのスペクトルがQEditで示されています。ここに示す3つのスペクトルは、ブリード最適化メソッドで得られたものです。このメソッドは、3.007分のピークを誤ってメプロバメートとしていました。ここでは、メソッドは“前と後ろで小さい方”をサブトラクションメソッドとして使用するため、一番上のスペクトルは、3.007分のスペクトルからそれより前の5つのScanのスペクトルを引いたものです。ピークは異なるリテンションタイムに見られたため、スペクトルは異なる化合物のものであり、当然メプロバメートのスペクトルとは一致しません。NISTメインライブラリで検索した場合、メプロバメートは上位100にヒットしませんでした。

中央のスペクトルは、AMDISによってデコンボリューションされた成分です。これは、一番下の参照スペクトルに対して75の一致度を示し、メプロバメートの存在を確かなものになっています。この例は、従来のアプローチでは容易に見逃されてしまうような化合物の存在を判断する際のデコンボリューションの有用性を示しています。

## まとめ

ここで説明したシステムには、中毒学サンプルのスクリーニングにおいていくつかの優位な点があります。技術の融合によってもたらされるその優位性は、高速かつ正確なスクリーニング結果をもたらします。

- MSでスクリーニングするための725化合物のリテンションタイムロックターゲット化合物データベース (G1674AA法中毒DBL)

- CFTスプリッター – MSデータに確認のためのNPDを追加し、ノンターゲットサスペクト化合物の検出と代替定量を可能にします。
  - SIM/Scan – Scanデータと同時に優先度の高いターゲット化合物のSIMデータを取り込みます。両方のモードでサンプル分析する必要がないため、時間を節約できます。
  - DRS – 自動化されたデコンボリューションによって、最も難しいマトリクス中のターゲット化合物の同定精度が上がります。特に、1時間を超えるデータ解析を10分未満に短縮できる点が役立ちます。
  - より短いカラム、高速なオープンおよびバックフラッシュを使用して分析時間を大幅に短縮する高速クロマトグラフィ
4. Philip Wylie, Michael Szelewski, Chin-Kai Meng, and Christopher Sandy, “Comprehensive Pesticide Screening by GC/MSD Using Deconvolution Reporting Software,” Agilent Technologies publication 5989-1157EN
  5. B. D. Quimby, L. M. Blumberg, M. S. Klee, and P. L. Wylie, “Precise Time-Scaling of Gas Chromatographic Methods Using Method Translation and Retention Time Locking,” Agilent Technologies publication 5967-5820E
  6. Michael J. Szelewski and Bruce Quimby, “New Tools for Rapid Pesticide Analysis in High Matrix Samples,” Agilent Technologies publication 5989-1716EN
  7. Bruce D. Quimby and Michael J. Szelewski, “Screening for Hazardous Chemicals in Homeland Security and Environmental Samples Using a GC/MS/ECD/FPD with a 731 Compound DRS Database,” Agilent Technologies publication 5989-4834EN

ここで説明した手法を組み合わせた単一システムを使用することには非常に役立ちます。また、上記のいずれかを別々に追加すること、または別の組み合わせで使用することも大いに役立ちます。最も顕著な改善は、DRSを使用することで得られます。データ確認のための時間が大幅に短縮されます。

## 参考文献

1. Vince Giarrocco, Bruce Quimby, and Matthew Klee, “Retention Time Locking: Concepts and Applications,” Agilent Technologies publication 5966-2469E
2. Chin Kai-Meng and Bruce Quimby, “Identifying Pesticides with Full Scan, SIM, uECD, and FPD from a Single Injection,” Agilent Technologies publication 5989-3299EN
3. Chin-Kai Meng, “Improving Productivity with Synchronous SIM/Scan,” Agilent Technologies publication 5989-3108EN

## 詳細情報

Agilent製品とサービスの詳細については、Agilentのウェブサイト[www.agilent.com/chem](http://www.agilent.com/chem)をご覧ください。

## 付録

| 化合物名                         | CAS番号*      | 化合物名               | CAS番号*      |
|------------------------------|-------------|--------------------|-------------|
| 10,11-ジヒドロ-10-ヒドロキシカルバゼピン    | 999402-02-7 | アンピロン2AC           | 999240-02-7 |
| 10,11-ジヒドロ-10-ヒドロキシカルバゼピンTMS | 999423-02-8 | アンヒドロエクゴニンメチルエステル  | 043021-26-7 |
| 10,11-ジヒドロカルバマゼピン            | 003564-73-6 | アニレリジン             | 000144-14-9 |
| 5-アミノ2クロロピリジン                | 005350-93-6 | アニシンジオン            | 000117-37-3 |
| 5-メトキシジプロピルトリプタミン            | 999001-02-4 | アンタゾリン             | 000091-75-8 |
| 6-アセチルモルフィン                  | 002784-73-8 | アンタゾリンAC           | 999408-02-5 |
| 6-アセチルモルフィンTMS               | 999155-02-1 | アンチピリン             | 000060-80-0 |
| 7-アミノフルニトラゼパム                | 034084-50-9 | アポモルフィン2TMS        | 074841-68-2 |
| 7-アミノフルニトラゼパムTMS             | 999176-02-2 | アプロバルピタール          | 000077-02-1 |
| 7-ヒドロキシアモキサピン                | 037081-76-8 | アプロバルピタール2TMS      | 999180-02-8 |
| 8-メトキシロキサピン                  | 070020-54-1 | アテノロールホルミルアーチファクト  | 999459-02-8 |
| アセプロマジン                      | 000061-00-7 | アトモксеチン           | 083015-26-3 |
| アセトアミノフェン                    | 000103-90-2 | アトモксеチンAC         | 999257-02-2 |
| パラセタモールジTMS                  | 055530-61-5 | アトバクオン             | 953233-18-4 |
| アセトアニリド                      | 000103-84-4 | アトバクオンTMS          | 999409-02-8 |
| アジフェニン                       | 000064-95-9 | アトロピン              | 000051-55-8 |
| ジフェニル酢酸メチル                   | 003469-00-9 | アトロピンTMS           | 055334-03-7 |
| アルフェンタニル                     | 071195-58-9 | アザシクロノール           | 000115-46-8 |
| アロバルピタール                     | 000052-43-7 | アザタジン              | 003964-81-6 |
| アロプリノールTMS                   | 999178-02-8 | バルピタール             | 000057-44-3 |
| アルファプロジン                     | 000077-20-3 | BDMPEA             | 066142-81-2 |
| アルフェナール                      | 000115-43-5 | BDMPEA AC          | 999357-02-7 |
| アルブラゾラム                      | 028981-97-7 | BDMPEAホルミルアーチファクト  | 999378-02-8 |
| アルプレノロールTMS                  | 999381-02-1 | ベメグリド              | 000064-65-3 |
| アルベリン                        | 000150-59-4 | ベンゾカイン             | 000094-09-7 |
| アマンタジン                       | 000768-94-5 | ベンゾイルエクゴニン         | 000519-09-5 |
| アマンタジンAC                     | 999127-02-5 | ベンゾイルエクゴニンTMS      | 999462-02-1 |
| アンブロキソール                     | 018683-91-5 | ベンズフェタミン           | 000156-08-1 |
| アンブロキソール2AC                  | 999341-02-5 | ベンゾキナミド            | 000063-12-7 |
| アミノグルテチミド                    | 000125-84-8 | ベンズトロピン            | 000086-13-5 |
| アミノピリン                       | 000058-15-1 | ベンジダミン             | 000642-72-8 |
| アミトリプチリン                     | 000050-48-6 | ベンジルピペラジン          | 002759-28-6 |
| アムロジピンAC                     | 999299-02-4 | ベンジルピペラジンAC        | 999129-02-1 |
| アモバルピタール                     | 000057-43-2 | ベタヒスチン             | 005579-84-0 |
| アモバルピタール2TMS                 | 999179-02-1 | ベタヒスチンAC           | 999439-02-0 |
| アモキサピン                       | 014028-44-5 | ベタキシノール            | 063659-18-7 |
| アモキサピンAC                     | 999128-02-8 | ベタキシノールホルミルアーチファクト | 999436-02-1 |
| アンフェタミン                      | 000060-15-1 | ビペリデン              | 000514-65-8 |
| アンフェタミンAC                    | 999107-02-7 | ビスコジル              | 000603-50-9 |
| アンピロン                        | 000083-07-8 | ビソプロロール            | 066722-44-9 |
| アンピロンAC                      | 000083-15-8 | ブロマゼパム             | 001812-30-2 |

\* 実際のCAS番号が見つからなかった化合物には、999から始まる番号が与えられています。これらは実際のCAS番号ではありません。

| 化合物名                     | CAS番号       | 化合物名              | CAS番号       |
|--------------------------|-------------|-------------------|-------------|
| ブロマゼパムTMS                | 999158-02-0 | クロルメザノンアーチファクト    | 999245-02-2 |
| プロモジフェンヒドラミン             | 000118-23-0 | クロロアンフェタミン        | 000064-12-0 |
| プロモクリプチン                 | 025614-03-3 | クロロアンフェタミンAC      | 999414-02-7 |
| ブロムペリドール                 | 010457-90-6 | クロロフェニルピペラジン      | 038212-33-8 |
| ブロムフェニラミン                | 000086-22-6 | クロロフェニルピペラジンAC    | 999486-02-1 |
| ブルシン                     | 000357-57-3 | 2-クロロプロカイン        | 000133-16-4 |
| ブクリジン                    | 000082-95-1 | クロロキン             | 000054-05-7 |
| ブピバカイン                   | 002180-92-9 | クロルフェニラミン         | 000132-22-9 |
| ブプレノルフィン                 | 052485-79-7 | クロルフェネシン          | 000104-29-0 |
| ブプレノルフィンTMS              | 999159-02-3 | クロルフェンテルミン        | 000461-78-9 |
| ブプロピオン                   | 034911-55-2 | クロルフェンテルミンAC      | 999130-02-8 |
| ブスピロン                    | 036505-84-7 | クロルプロバミドアーチファクト-2 | 999246-02-5 |
| ブタバルピタール                 | 000125-40-6 | クロルプロチキセン         | 000113-59-7 |
| ブタバルピタール2TMS             | 052988-92-8 | クロルゾキサゾン          | 000095-25-0 |
| ブタカイン                    | 000149-16-6 | コレステロール           | 000057-88-5 |
| ブタルピタール                  | 000077-26-9 | コレステロールTMS        | 001856-05-9 |
| ブタルピタール2TMS              | 052937-70-9 | シンナリジン            | 000298-57-7 |
| ブテタール                    | 000077-28-1 | シサブリド             | 081098-60-4 |
| ブトルファノール                 | 042408-82-2 | シタロプラム            | 059729-33-8 |
| ブトルファノールTMS              | 100013-72-3 | クレマスチン            | 015686-51-8 |
| カフェイン                    | 000058-08-2 | クレミゾール            | 000442-52-4 |
| カンレノン                    | 000976-71-6 | クレンブテロール          | 037148-27-9 |
| カンレノンTMS                 | 999413-02-4 | クレンブテロールAC        | 999360-02-0 |
| カンタリジン                   | 000056-25-7 | クロバザム             | 022316-47-8 |
| カルバマゼピン                  | 000298-46-4 | クロフィブラート          | 000637-07-0 |
| カルバマゼピン-M (ホルミルアクリジン)    | 999243-02-6 | クロミプラミン           | 000303-49-1 |
| カルビノキサミン                 | 000486-16-8 | クロナゼパム            | 001622-61-3 |
| カルプロマル-M/アーチファクト         | 999196-02-0 | クロナゼパムTMS         | 999184-02-0 |
| カリソプロドール                 | 000078-44-4 | 7-アミノクロナゼパム       | 004959-17-5 |
| カリソプロドールアーチファクト          | 999401-02-4 | 7-アミノクロナゼパム - TMS | 999175-02-9 |
| カチノンAC                   | 999485-02-8 | クロニジン             | 004205-90-7 |
| セレコキシブ                   | 169590-42-5 | クロニジン2AC          | 999131-02-1 |
| セチリジンメタノールアダクト           | 083881-46-3 | クロニジンAC           | 999132-02-4 |
| セチリジンTMS                 | 999183-02-7 | クロピドグレレル          | 113665-84-2 |
| クロフェダノール                 | 000791-35-5 | クロザピン             | 005786-21-0 |
| クロフェダノールTMS              | 999464-02-7 | クロザピンAC           | 999133-02-7 |
| クロラムフェニコール2TMS           | 021196-84-9 | コカエチレン            | 000529-38-4 |
| クロルシクリジン                 | 000082-93-9 | コカイン              | 000050-36-2 |
| クロルジアゼポキシド               | 000058-25-3 | コデイン              | 000076-57-3 |
| クロルジアゼポキシドアーチファクト(デスオキソ) | 999197-02-3 | コデインTMS           | 074367-14-9 |
| クロルメザノン                  | 000080-77-3 | コルヒチン             | 000064-86-8 |

| 化合物名               | CAS番号       | 化合物名                    | CAS番号       |
|--------------------|-------------|-------------------------|-------------|
| コルヒチン分解            | 999532-02-4 | ジエチルトリプタミン              | 000061-51-8 |
| コニイン               | 000458-88-8 | ジヒドロコデイン                | 000125-28-0 |
| コニインAC             | 999361-02-3 | 7,8-ジヒドロキシ-4-メチルクマリンTMS | 999236-02-1 |
| コチニン               | 000486-56-6 | ジオドヒドロキシキン              | 000083-73-8 |
| シクランデラート           | 000456-59-7 | ジルチアゼム                  | 042399-41-7 |
| シクランデラートTMS        | 999442-02-3 | ジメタジオン                  | 000695-53-4 |
| シクリジン              | 000082-92-8 | ジファシノン                  | 000082-66-6 |
| シクロベンザプリン          | 000303-53-7 | ジフェニヒドラミン               | 000058-73-1 |
| シクロホスファミド          | 000050-18-0 | ジフェニドール                 | 000972-02-1 |
| シクロホスファミド-HCL      | 999379-02-1 | ジフェニドールTMS              | 999417-02-6 |
| シヘプタミド             | 007199-29-3 | ジフェノキシラート               | 000915-30-0 |
| シプロヘプタジン           | 000129-03-3 | ジフェニルピラリン               | 000147-20-6 |
| ダブソン               | 000080-08-0 | ジソピラミド                  | 003737-09-5 |
| デブリンキンAC           | 999415-02-0 | ドネペジール                  | 120014-06-4 |
| デアアルキルフルラゼパムAC     | 999298-02-1 | ドスレピン                   | 000113-53-1 |
| デアエチルドカイン(MegX)    | 999044-02-9 | ドキサブラム                  | 000309-29-5 |
| デアエチルドカインAC (MegX) | 999263-02-4 | ドキサブラム(cis)             | 999515-02-5 |
| デシブラミン             | 000050-47-5 | ドキセピン(trans)            | 001668-19-5 |
| デシブラミンAC           | 999108-02-0 | ドキシラミン                  | 000469-21-6 |
| デスメチルクロミブラミン       | 000303-48-0 | ジプロフィリン                 | 000479-18-5 |
| デスメチルクロミブラミンAC     | 999134-02-0 | ジプロフィリンTMS              | 999446-02-5 |
| デスメチルクロザピン         | 006104-71-8 | エクゴニンメチルエステル            | 106293-60-1 |
| デスメチルクロザピン(cis)    | 999516-02-8 | エクゴニンメチルエステルTMS         | 999162-02-6 |
| デスメチルクロザピン(cis) AC | 999517-02-1 | エファビレンツ                 | 154598-52-4 |
| ノルドキセピン            | 001225-56-5 | エファビレンツAC               | 999489-02-0 |
| ノルドキセピンAC          | 999443-02-6 | エファビレンツTMS              | 999505-02-1 |
| デスメチルセレギリン         | 999072-02-5 | エメチン                    | 000483-18-1 |
| デスメチルセレギリンAC       | 999147-02-3 | エンカイニド                  | 999034-02-5 |
| デスメチルセルトラリン        | 091797-58-9 | エフェドリン                  | 000299-42-3 |
| 0-デスメチルセルトラリン      | 999018-02-9 | エフェドリン2AC               | 055133-90-9 |
| 0-デスメチルセルトラリン2TMS  | 999444-02-9 | エピネフリンAC                | 999111-02-3 |
| デスメチルトリミブラミン       | 999019-02-2 | エルゴノビンAC                | 999447-02-8 |
| デスメチルトリミブラミンAC     | 999445-02-2 | エスタゾラム                  | 029975-16-4 |
| デキストロメトルファン        | 000125-71-3 | エタクリン酸TMS               | 999227-02-0 |
| ヘロイン               | 000561-27-3 | エタンブトールAC               | 999261-02-8 |
| ジアゼパム              | 000439-14-5 | エタミバン                   | 000304-84-7 |
| ジクロロフェン            | 000097-23-4 | エチナメート                  | 000126-52-3 |
| ジクロロフェンTMS         | 999237-02-4 | エトプロパジン                 | 000522-00-9 |
| ジクロフェナク-H2O        | 999200-02-1 | エトスクシミド                 | 000077-67-8 |
| ジクロフェナクTMS         | 999222-02-5 | エトトイン                   | 000086-35-1 |
| ジシクロミン             | 000077-19-0 | 2-エチル-2-マロンアミド          | 068692-83-1 |

| 化合物名                        | CAS番号       | 化合物名                 | CAS番号       |
|-----------------------------|-------------|----------------------|-------------|
| 2-エチル-2-マロンアミドTMS           | 999418-02-9 | デスアルキルフルラゼパム         | 002886-65-9 |
| エチルアンフェタミン                  | 000457-87-4 | 1-(2-ヒドロキシエチル)フルラゼパム | 020971-53-3 |
| エチルアンフェタミンAC                | 999148-02-6 | フルルビプロフェン            | 005104-49-4 |
| エチルエクゴニン                    | 999037-02-4 | フルタミド                | 013311-84-7 |
| エチルエクゴニンTMS                 | 999448-02-1 | フルタミドTMS             | 999467-02-6 |
| エチルモルフィン                    | 000076-58-4 | フルボキサミン              | 054739-18-3 |
| エチルモルフィンTMS                 | 999221-02-2 | フルボキサミンAC            | 999262-02-1 |
| エトドラクTMS                    | 999212-02-1 | フラゾリドン               | 000067-45-8 |
| エトフィリン                      | 000519-37-9 | フラゾリドン2TMS           | 999214-02-7 |
| エトフィリンTMS                   | 077630-35-4 | ゲムフィブロジル             | 025812-30-0 |
| エトミダート                      | 033125-97-2 | ゲムフィブロジルAC           | 999389-02-5 |
| オйкаトロピン異性体1                | 999038-02-7 | グルテチミド               | 000077-21-4 |
| オйкаトロピン異性体1 TMS            | 999278-02-3 | グリセオフルビン             | 000126-07-8 |
| オйкаトロピン異性体2                | 999277-02-0 | グアイフェネシン             | 000093-14-1 |
| オйкаトロピン異性体2 TMS            | 999518-02-4 | グアイフェネシン2TMS         | 107966-19-8 |
| フェルバマートアーチファクト1             | 999250-02-1 | グアネチジン               | 000055-65-2 |
| フェルバマートアーチファクト2             | 999251-02-4 | ハロペリドール              | 000052-86-8 |
| フェルバマートアーチファクト3             | 999252-02-7 | ハルマリン                | 000304-21-2 |
| フェロジピン                      | 072509-76-3 | ハルマリンAC              | 999301-02-9 |
| フェロジピン-M/アーチファクト(デヒドロ)      | 999296-02-5 | ハルミン                 | 000442-51-3 |
| フェンフルラミン                    | 000458-24-2 | ヘキソバルビタール            | 000056-29-1 |
| フェンフルラミンAC                  | 999139-02-5 | ヘキソバルビタールTMS         | 999469-02-2 |
| フェノプロフェン                    | 031879-05-7 | ヘキシルレソルシノール          | 000136-77-6 |
| フェノプロフェンTMS                 | 999310-02-0 | ヘキシルレソルシノール3TMS      | 999422-02-5 |
| フェンタニル                      | 000437-38-7 | ホマトロピン               | 000087-00-3 |
| フィナステリド                     | 098319-26-7 | ホマトロピンTMS            | 999282-02-9 |
| フラボキサート                     | 015301-69-6 | ヒドラスチン               | 000118-08-1 |
| フラボキサート-M/アーチファクト(HOOC-) ME | 999279-02-6 | ヒドロコドン               | 000125-29-1 |
| フレカイニド                      | 054143-55-4 | ヒドロモルホン              | 000466-99-9 |
| フレカイニドAC                    | 999140-02-2 | ヒドロモルホンエノール2TMS      | 999513-02-9 |
| フルマゼニル                      | 078755-81-4 | ヒドロモルホンエノールTMS       | 221209-08-1 |
| フルナリジン                      | 052468-60-7 | ヒドロキシクロロキンAC         | 999512-02-6 |
| フルニトラゼパム                    | 001622-62-4 | ヒドロキシエチルフルラゼパムTMS    | 999204-02-3 |
| フルオキセチン                     | 054910-89-3 | 8-ヒドロキシロキサピン         | 999053-02-0 |
| フルオキセチンAC                   | 999141-02-5 | ヒドロキシジン              | 000068-88-2 |
| フルベンチキソール                   | 002709-56-0 | ヒドロキシジンAC            | 999113-02-9 |
| フルベンチキソールTMS                | 999387-02-9 | イブプロフェン              | 015687-27-1 |
| フルフェナジン                     | 000069-23-8 | イブプロフェンTMS           | 999165-02-5 |
| フルフェナジンTMS                  | 999280-02-3 | イミノスチルベン             | 000256-96-2 |
| 2-トリフルオロメチル-10H-フェノチアジン     | 000092-30-8 | イミプラミン               | 000050-49-7 |
| フルラゼパム                      | 017617-23-1 | インドメタシンTMS           | 999318-02-4 |

| 化合物名          | CAS番号       | 化合物名             | CAS番号       |
|---------------|-------------|------------------|-------------|
| イソカルボキサジド     | 000059-63-2 | メマンチン            | 019982-08-2 |
| イソメテブテンAC     | 999265-02-0 | メマンチンAC          | 999115-02-5 |
| イソニアジド        | 000054-85-3 | メベリジン            | 000057-42-1 |
| イソニアジド2AC     | 999266-02-3 | メフェネシン           | 000059-47-2 |
| イソニアジドAC      | 999254-02-3 | メフェネシン2TMS       | 999325-02-9 |
| イソプロテレノール2TMS | 999424-02-1 | メフェンテルミン         | 000100-92-5 |
| イソクスブリン       | 000395-28-8 | メフェンテルミンAC       | 999143-02-1 |
| イソクスブリンTMS    | 999319-02-7 | メフェニトイン          | 000050-12-4 |
| ケタミン          | 006740-88-1 | メホバルビタール         | 000115-38-8 |
| ケタミンAC        | 999114-02-2 | メビバカイン           | 000096-88-8 |
| ケトプロフェンTMS    | 999320-02-4 | メプロバメート          | 000057-53-4 |
| ケトロラックTMS     | 999215-02-0 | メスカリン            | 000054-04-6 |
| ケトチフェン        | 034580-13-7 | メスカリンAC          | 999511-02-3 |
| ラモトリギン        | 084057-84-1 | メスカリンホルミルアーチファクト | 999284-02-5 |
| ラモトリギン2AC     | 999255-02-6 | N-デスメチルメトスキシミド   | 001497-17-2 |
| ラウダノシン        | 020412-65-1 | メタプロテレノールAC      | 999391-02-5 |
| レバロルファン       | 000152-02-3 | メタキサロン           | 001665-48-1 |
| レバロルファンTMS    | 999321-02-7 | メタキサロンAC         | 999116-02-8 |
| レベチラセタム       | 102767-28-2 | メタドン             | 000076-99-3 |
| レボルファノール      | 000077-07-6 | メタドンM (EDDP)     | 999058-02-5 |
| レボルファノールTMS   | 999223-02-8 | メタンフェタミン         | 000537-46-2 |
| リドカイン         | 000137-58-6 | メタンフェタミンAC       | 999117-02-1 |
| ロラタジン         | 079794-75-5 | メタピリレン           | 000091-80-5 |
| ロラゼパム         | 000846-49-1 | メタクアロン           | 000072-44-6 |
| ロラゼパム2TMS     | 999202-02-7 | メタルビタール          | 000050-11-3 |
| ロルカイニド        | 059729-31-6 | メタルビタールTMS       | 999186-02-6 |
| ロルメタゼパム       | 000848-75-9 | メタゾラミド           | 000554-57-4 |
| ロキサピン         | 001977-10-2 | メタゾラミドAC         | 999300-02-6 |
| Ly170222      | 999123-02-3 | メトカチノン           | 005650-44-2 |
| リセルギド(LSD)    | 000050-37-3 | メトジラジン           | 001982-37-2 |
| マプロチリン        | 010262-69-8 | メチマゾール           | 000060-56-0 |
| マプロチリンAC      | 999366-02-8 | メチマゾールAC         | 999368-02-4 |
| マジンドール        | 022232-71-9 | メトカルバモール2TMS     | 999285-02-8 |
| MBDB          | 100031-29-2 | メトヘキシタール         | 000151-83-7 |
| MBDB AC       | 999142-02-8 | メトヘキシタールTMS      | 999425-02-4 |
| メカミラミン        | 000060-40-2 | メトトリメブラジン        | 000060-99-1 |
| メクリジン         | 000569-65-3 | メトキシベラパミル        | 016662-47-8 |
| メクロフェナム酸TMS   | 999322-02-0 | メスクシミド           | 000077-41-8 |
| メダゼパム         | 002898-12-6 | 4-メチルアミノレックス     | 029493-77-4 |
| メフェナム酸TMS     | 999324-02-6 | 4-メチルアミノレックス2AC  | 999508-02-0 |
| メフロキン         | 053230-10-7 | 4-メチルアミノレックスAC   | 999510-02-0 |

| 化合物名                   | CAS番号       | 化合物名                  | CAS番号       |
|------------------------|-------------|-----------------------|-------------|
| メチレンジオキシアンフェタミンAC      | 999479-02-6 | ナロルフィン                | 000062-67-9 |
| メチレンジオキシアンフェタミン(MDA)   | 004764-17-4 | ナロルフィン2TMS            | 999473-02-8 |
| メチレンジオキシエチルアンフェタミン     | 014089-52-2 | ナロキソン                 | 000465-65-6 |
| メチレンジオキシエチルアンフェタミンAC   | 999481-02-6 | ナロキソンTMS              | 999427-02-0 |
| メチレンジオキシメタンフェタミンAC     | 999480-02-3 | $\beta$ -ナルトレキソール     | 999406-20-9 |
| メチレンジオキシメタンフェタミン(MDMA) | 042542-10-9 | $\beta$ -ナルトレキソール2TMS | 999405-02-6 |
| メチルエフェドリン              | 000552-79-4 | $\beta$ -ナルトレキソール3TMS | 999520-02-4 |
| メチルエフェドリンAC            | 999370-02-4 | ナルトレキソン               | 016590-41-3 |
| メチルニコチン                | 999065-02-0 | ナルトレキソン2TMS           | 999328-02-8 |
| メチルフェニデート              | 000113-45-1 | ナルトレキソン3TMS           | 999523-02-3 |
| メチルフェニデートAC            | 999144-02-4 | ナルトレキソンTMS            | 999522-02-0 |
| メチルフェノバルビタール           | 999509-02-3 | ナブロキセンME              | 999295-02-2 |
| メチルプリミドン               | 059026-32-3 | ナブロキセンTMS             | 074793-83-2 |
| メチルプリミドン2TMS           | 999286-02-1 | ネビラピン                 | 129618-40-2 |
| メチプリロン                 | 000125-64-4 | ネビラピンTMS              | 999451-02-4 |
| メトクロプラミド               | 000364-62-5 | ニコロサマイド               | 000050-65-7 |
| メトクロプラミドAC             | 999145-02-7 | ニコチンアミド               | 000098-92-0 |
| メトプロロール2AC             | 999306-02-4 | ニコチンアミド               | 000054-11-5 |
| メトロニダゾール               | 000443-48-1 | ニフェジピン                | 021829-25-4 |
| メトロニダゾールTMS            | 999450-02-1 | ニクタミド                 | 000059-26-7 |
| メキシレチン                 | 031828-71-4 | ニモジピン                 | 066085-59-4 |
| メキシレチンAC               | 999146-02-0 | ニモジピン-M/アーチファクト       | 999340-02-2 |
| ミアンセリン                 | 024219-97-4 | ニトラゼパム                | 000146-22-5 |
| ミアンセリン-M(nor-)         | 999015-02-0 | ニトラゼパムTMS             | 999288-02-7 |
| ミアンセリン-M(nor-) AC      | 999364-02-2 | ノミフェンシン               | 024526-64-5 |
| ミダゾラム                  | 059467-70-8 | ノミフェンシンAC             | 999371-02-7 |
| ミルタザピン                 | 061337-67-5 | ノルアルフェンタニル            | 061086-18-8 |
| モクロベミド                 | 071320-77-9 | ノルアルフェンタニルAC          | 999150-02-6 |
| モリンドン                  | 007416-34-4 | ノルクロルジアゼボキシド          | 016300-25-7 |
| モルフィン                  | 000057-27-2 | ノルクロルジアゼボキシドAC        | 999525-02-9 |
| モルフィン2TMS              | 055449-66-6 | ノルクロルジアゼボキシド分解        | 999524-02-6 |
| ムコン酸TMS                | 999166-02-8 | ノルクロルジアゼボキシド分解AC      | 999372-02-0 |
| N,N-ジメチル-5-メトキシトリプタミン  | 001019-45-0 | ノルクロザピン2AC            | 999135-02-3 |
| N,N-ジメチルトリプタミン         | 000061-50-7 | ノルクロザピンAC             | 999136-02-6 |
| ナブメトン                  | 042924-53-8 | ノルコデイン                | 000467-15-2 |
| Nアセチルプロカインアミド          | 999070-02-9 | ノルコデイン2AC             | 999118-02-4 |
| ナオドリール3TMS             | 999287-02-4 | ノルジアゼパム               | 001088-11-5 |
| ナルブフィン                 | 020594-83-6 | ノルジアゼパムTMS            | 999207-02-2 |
| ナルブフィン2TMS             | 999167-02-1 | ノルアドレナリン2AC           | 999119-02-7 |
| ナリジクス酸                 | 000389-08-2 | ノルアドレナリン3AC           | 999528-02-8 |
| ナリジクス酸TMS              | 999238-02-7 | ノルフェンフルラミン            | 001886-26-6 |

| 化合物名                | CAS番号       | 化合物名               | CAS番号       |
|---------------------|-------------|--------------------|-------------|
| ノルフェンフルラミンAC        | 999120-02-4 | パラジオン              | 000115-67-3 |
| ノルフェンタニル            | 999076-02-7 | バルギリン              | 000555-57-7 |
| ノルフェンタニルAC          | 999272-02-5 | パロキセチン             | 061869-08-7 |
| ノルフルオキセチン           | 999077-02-0 | パロキセチンAC           | 999124-02-6 |
| ノルフルオキセチンAC         | 999121-02-7 | ペモリン               | 002152-34-3 |
| ノルケタミン              | 999078-02-3 | ペンタクロロフェノール        | 000087-86-5 |
| ノルケタミンAC            | 999494-02-9 | ペンタゾシン             | 000359-83-1 |
| ノルメペリジン             | 000077-17-8 | ペンタゾシンTMS          | 100013-72-2 |
| ノルメペリジンAC           | 999122-02-0 | ペントバルビタール          | 000076-74-4 |
| ノルメタネフリンAC          | 999373-02-3 | ペントバルビタール2TMS      | 052937-68-5 |
| ノルメトスクシミドTMS        | 999429-02-6 | ペントキシフィリン          | 006493-05-6 |
| ノルオキシコドン            | 057664-96-7 | ペンチレンテトラゾール        | 000054-95-5 |
| ノルオキシコドンAC          | 999495-02-2 | ベルゴリド              | 066104-22-1 |
| ノルプロボキシフェン          | 999079-02-6 | ペルフェナジンTMS         | 999291-02-0 |
| ノルプロボキシフェン分解1       | 999530-02-8 | フェネツリド             | 000063-98-9 |
| ノルプロボキシフェン分解2       | 999531-02-1 | フェナセチン             | 000062-44-2 |
| ノルプロボキシフェンアミド       | 999080-02-3 | フェナセチンAC           | 999496-02-5 |
| ノルプソイドエフェドリン        | 000492-41-1 | フェナセチンTMS          | 999504-02-8 |
| ノルプソイドエフェドリンAC      | 999081-02-6 | フェナソピリジン           | 000094-78-0 |
| ノルプソイドエフェドリンアーチファクト | 999478-02-3 | フェナソピリジンAC         | 999303-02-5 |
| ノルトリブチリン            | 000072-69-5 | フェンシクリジン           | 000077-10-1 |
| ノルトリブチリンAC          | 999151-02-9 | フェンシクリジンアーチファクト    | 000771-98-2 |
| ノルベンラファキシソ          | 130198-38-8 | フェンジメトラジン          | 000634-03-7 |
| ノルベラパミル             | 067018-85-3 | フェネルジンAC           | 999304-02-8 |
| ノルベラパミルAC           | 999488-02-7 | フェニンジオン            | 000083-12-5 |
| オランザピン              | 132539-06-1 | フェニラミン             | 000086-21-5 |
| オピブラモールTMS          | 999226-02-7 | フェンジメトラジン          | 000134-49-6 |
| オルフェナドリン            | 000083-98-7 | フェンジメトラジンAC        | 999090-02-7 |
| オルソコチニン             | 999083-02-2 | フェノバルビタール          | 000050-06-6 |
| オキサゼパム              | 000604-75-1 | フェノバルビタール2TMS      | 052937-73-2 |
| オキサゼパム2TMS          | 999168-02-4 | フェノールフタレイン         | 000077-09-8 |
| オキシカルバマゼピン          | 028721-07-5 | フェノールフタレイン2TMS     | 999292-02-3 |
| オクスプレノロール2AC        | 999374-02-6 | フェノキシベンザミン         | 000059-96-1 |
| オキシブチニン             | 005633-20-5 | フェンスクシミド           | 000086-34-0 |
| オキシコドン              | 000076-42-6 | フェンテルミン            | 000122-09-8 |
| オキシコドンエノール2TMS      | 999514-02-2 | フェンテルミンAC          | 999152-02-2 |
| オキシコドンTMS           | 221209-10-5 | フェニルアセトアミド         | 000103-81-1 |
| オキシモルホン             | 000076-41-5 | フェニルブタゾン           | 000050-33-9 |
| オキシモルホン2TMS         | 999521-02-7 | フェニルブタゾンアーチファクト    | 999338-02-2 |
| オキシモルホンTMS          | 999208-02-5 | フェニルブタゾンアーチファクトTMS | 999198-02-6 |
| パバベリン               | 000058-74-2 | フェニルブタゾンTMS        | 074810-87-0 |

| 化合物名                  | CAS番号       | 化合物名               | CAS番号       |
|-----------------------|-------------|--------------------|-------------|
| フェニレフリン3AC            | 999091-02-0 | ピリラミン              | 000091-84-9 |
| $\beta$ -フェネチルアミン     | 000064-04-0 | ピリメタミン             | 000058-14-0 |
| $\beta$ -フェネチルアミンAC   | 999343-02-1 | クエチアピン             | 999097-02-8 |
| フェニルプロパノールアミン         | 999498-02-1 | クエチアピンTMS          | 999527-02-5 |
| フェニルプロパノールアミンAC       | 999092-02-3 | キナクリン              | 000083-89-6 |
| フェニルトロキサミン            | 000092-12-6 | キニジン               | 000056-54-2 |
| フェニトイン                | 000057-41-0 | キニン                | 000130-95-0 |
| フェニトイン2TMS            | 063435-72-3 | ラメルテオン             | 999274-02-1 |
| ピロカルピン                | 000092-13-7 | レボキセチン             | 098769-81-4 |
| ピンドロール                | 013523-86-9 | レボキセチン3TMS         | 999218-02-9 |
| ピンドロールホルミルアーチファクト     | 999458-02-5 | ロフェコキシブ            | 162011-90-7 |
| PMA TMS               | 999172-02-0 | ロビバカイン             | 132112-35-7 |
| パラメトキシアンフェタミン         | 000064-13-1 | サルブタモール3TMS        | 999394-02-4 |
| プラゼパム                 | 002955-38-6 | サリチルアミド            | 000065-45-2 |
| プリロカイン                | 000721-50-6 | サリチルアミド2TMS        | 055887-58-6 |
| プリミドン                 | 000125-33-7 | サリチル酸2TMS          | 003789-85-3 |
| プロベネシドTMS             | 999294-02-9 | サリチル酸エチル           | 000118-61-6 |
| プロカインアミド              | 000051-06-9 | サリチル酸メチル           | 000119-36-8 |
| プロカイン                 | 000059-46-1 | スコポラミン             | 000051-34-3 |
| プロクロルペラジン             | 000058-38-8 | スコポラミンTMS          | 999194-02-4 |
| プロシクリジン               | 000077-37-2 | セコバルビタール           | 000051-34-3 |
| デヒドロプロシクリジンアーチファクト    | 999460-02-5 | セコバルビタール2TMS       | 052937-71-0 |
| プロシクリジンTMS            | 999454-02-3 | セレギリン              | 014611-51-9 |
| プロマジン                 | 000058-40-2 | セレギリン-M (HO-) AC   | 999482-02-9 |
| プロメタジン                | 000060-87-7 | セルトラリン             | 079617-96-2 |
| 臭化プロバンテリン             | 000050-34-0 | セルトラリンAC           | 999125-02-9 |
| プロピオマジン               | 000362-29-8 | セルトラリン-M (nor-) AC | 999109-02-3 |
| プロポフォール               | 002078-54-8 | シルデナフィルTMS         | 999213-02-4 |
| プロボキスル                | 000114-26-1 | SKF-525a           | 000302-33-0 |
| プロボキスル-M/アーチファクト      | 999393-02-1 | ストリキニン             | 000057-24-9 |
| プロボキシフェン              | 000469-62-5 | スフェンタニル            | 056030-54-7 |
| プロピルアンフェタミン           | 051799-32-7 | スルファジアジン           | 000068-35-9 |
| プロピルアンフェタミンAC         | 999302-02-2 | スルファジメトキシシン        | 000122-11-2 |
| プロトリブチリン              | 000438-60-8 | スルファメタジン           | 000057-68-1 |
| プロトリブチリンAC            | 999273-02-8 | スルファメタジンAC         | 999501-02-9 |
| ブソイドエフェドリン            | 000090-82-4 | スルファメトキサゾール        | 000723-46-6 |
| ブソイドエフェドリン2AC         | 999500-02-6 | スルファニルアミド          | 000063-74-1 |
| ブソイドエフェドリンホルミルアーチファクト | 999483-02-2 | スルファピリジン           | 000144-83-2 |
| ブシロシン2TMS             | 999192-02-8 | スルファチアゾール          | 000072-14-0 |
| ブシロシピン3TMS            | 999193-02-1 | スルフィンピラゾン          | 000057-96-5 |
| ピラジナミド                | 000098-96-4 | タクリン               | 000321-64-2 |

| 化合物名                               | CAS番号       | 化合物名                   | CAS番号       |
|------------------------------------|-------------|------------------------|-------------|
| タルブタール                             | 000115-44-6 | トリアゾラム                 | 028911-01-5 |
| タモキシフェン                            | 010540-29-1 | トリフルオペラジン              | 000117-89-5 |
| テマゼパム                              | 000846-50-4 | トリフルプロマジン              | 000146-54-3 |
| テマゼパムアーチファクト-2                     | 020927-53-1 | トリヘキシフェニジル             | 000144-11-6 |
| テマゼパムTMS                           | 035147-95-6 | トリメブラジン                | 000084-96-8 |
| テルビナフィン                            | 091161-71-6 | トリメトベンズアミド             | 000138-56-7 |
| テルビナフィンTMS                         | 999220-02-9 | トリメトプリム                | 000738-70-5 |
| テリフルノミドAC                          | 999502-02-2 | トリミブラミン                | 000739-71-9 |
| テトラカイン                             | 000094-24-6 | トリペレンナミン               | 000091-81-6 |
| テトラヒドロカンナビノール                      | 001972-08-3 | トリプロリジン                | 000486-12-4 |
| テトラヒドロカンナビノールTMS                   | 999529-02-1 | トロパコカイン                | 000537-26-8 |
| テトラヒドロゾリン                          | 000084-22-0 | トリプタミン                 | 000061-54-1 |
| テトラヒドロゾリンAC                        | 999398-02-6 | トリプタミン2AC              | 999352-02-2 |
| テバイン                               | 000115-37-7 | トリプタミンAC               | 999353-02-5 |
| テオプロミン                             | 000083-67-0 | D-トリプトファンAC            | 999519-02-7 |
| テオフィリン                             | 000058-55-9 | バルプロ酸                  | 000099-66-1 |
| チアミラール                             | 000077-27-0 | ベンラファキシン               | 093413-69-5 |
| チエチルペラジン                           | 001420-55-9 | ベンラファキシンTMS            | 999173-02-3 |
| チオベンタール                            | 000076-75-5 | ベラパミル                  | 000052-53-9 |
| チオリダジン                             | 000050-52-2 | ビガバトリンAC               | 999376-02-2 |
| トンジラミン                             | 000091-85-0 | ワルファリン                 | 000081-81-2 |
| チクロピジン                             | 055142-85-3 | ワルファリンアーチファクト          | 000122-57-6 |
| チレタミン                              | 014176-49-9 | ワルファリンTMS              | 036307-79-6 |
| チモロールTMS                           | 999399-02-9 | キサントノールTMS             | 999239-02-0 |
| トカイニド                              | 041708-72-9 | キシラジン                  | 007361-61-7 |
| トカイニドAC                            | 999375-02-9 | ヨヒンビン                  | 000146-48-5 |
| トラゾリン                              | 000059-98-3 | ヨヒンビンTMS               | 999457-02-2 |
| トピラマートアーチファクト(-SO <sub>2</sub> NH) | 020880-92-6 | ザレプロン                  | 151319-34-5 |
| トピラマート分解                           | 097240-79-4 | ゾラゼパム                  | 031352-82-6 |
| トラマドール                             | 027203-92-5 | ゾルピデム                  | 082626-48-0 |
| トラマドールTMS                          | 999336-02-6 | ゾメピラック-CO <sub>2</sub> | 999355-02-1 |
| トラニルシプロミン                          | 000155-09-9 | ゾニサミド                  | 068291-97-4 |
| トラニルシプロミンAC                        | 999305-02-1 | ゾニサミドAC                | 999354-02-8 |
| トラゾドン                              | 019794-93-5 | ゾピクロン                  | 043200-80-2 |
| トリアムテレン                            | 000396-01-0 | ゾテピン                   | 026615-21-4 |

アジレントは、本文書に誤りが発見された場合、また、本文書の使用により付随的または間接的に生じる損害について一切免責とさせていただきます。また、本文書掲載の機器類は薬事法に基づく登録を行っておりません。

本文書に記載の情報、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。著作権法で許されている場合を除き、書面による事前の許可なく、本文書を複製、翻案、翻訳することは禁じられています。

アジレント・テクノロジー株式会社  
© Agilent Technologies, Inc. 2008

Printed in Japan  
May 13, 2008  
5989-8582JAJP