

Agilent GC/MSDシステム用 半揮発性物質のリテンションタイム ロッキング(RTL)デコンボリューション データベース

アプリケーション

環境

著者

Mike Szelewski
Agilent Technologies, Inc.
2850 Centerville Road
Wilmington, DE 19808
USA

要約

デコンボリューションレポート作成ソフトウェアとG1677AA半揮発性物質リテンションタイムロッキングデータベース/ライブラリを使用すると、複雑なマトリックス中の環境汚染物質を迅速に確認することができます。リテンションタイムがロックされた排水用および飲料水用の個別のメソッドとデータベースが用意されています。化合物リストは、U.S. EPA Method 8270 (273の化合物)およびMethod 525 (119の化合物)に基づいています。スプリットレスおよびプログラマブル温度気化注入口の両方についてのメソッドが用意されています。デコンボリューションされた分析対象成分の同定には、抽出イオンではなくフルスペクトルを使用します。MSD ChemStationのリビジョンE.02以降で使用すると、通常の定量に加え、AMDISでデコンボリューションされたデータを定量することができます。G1677AA環境半揮発性物質のリテンションタイムロッキングデータベース/ライブラリは、基本のデコンボリューションレポート作成ソフトウェア(G1716AA)のアドオン製品です。

はじめに

アジレントのデコンボリューションレポート作成ソフトウェア(DRS)は、3つの情報、つまり、1) MSD ChemStationの同定および定量結果、2) 業界標準のAMDISデコンボリューションによるフルスペクトルを用いた同定結果、3) NISTフルスペクトル検索結果を、読みやすい一つのレポートに統合するソフトウェアパッケージです。DRSの最大の利点は、複雑なマトリックスの分析結果の解析時間が大幅に短縮できることです。

環境サンプル中の対象化合物の同定や定量は、時間のかかる場合が多く、DRSが有効です。対象化合物のリストは、地域、政

府の要件、およびサンプルの種類によって、大きく異なります。常にすべてのラボが使用できる対象化合物の汎用的なリストはありません。

U.S. EPA (United States Environmental Protection Agency) は、各種マトリックスの有機分析対象化合物用に多数のGC/MSDメソッドを発行してきました。U.S. EPA Method 525は飲料水、Method 8270は排水用で、それぞれ独自の化合物を含んでいます。これらのメソッドの化合物リストは広範囲にわたっており、本書で説明するデコンボリューションデータベースの基礎となります。ラボでデータベースを効果的に使用するには、U.S. EPAメソッドに必ずしも厳密に準拠する必要がない場合もあります。それぞれのラボに適した機能を実現するため、ユーザは化合物やスペクトルをデータベースに容易に追加できます。

データベース/ライブラリ

MSスペクトルデータを集めたものは、ライブラリまたはデータベースと呼ばれます。DRSでは、データベースとライブラリ(DBL)を組み合わせて使用します。リテンションタイムはサンプル同定に重要な要素の1つで、これらのDBLに収録されている化合物はリテンションタイムロッキング(RTL)を利用して取り込まれたものです。

G1677AA環境半揮発性物質のRTLのDBLは、アジレントおよびNIST/AMDISフォーマットのMSスペクトルライブラリです。3つのファイルとメソッドのセットから構成されています。8270セットには、U.S. EPA Method 8270によって規定されている243の単一成分の半揮発性化合物および内部標準、さらに環境に関連する30の追加化合物、つまり合計で273の化合物のMSスペクトルとロックされたリテンションタイムが含まれています。525のセットは2種類あり、1つはスプリット/スプリットレス注入用用最適化されたセットで、もう1つは“ロング”と呼ばれているPTV注入用用最適化されたセットです。525セットには、U.S. EPA Method 525によって規定されている119の単一成分の半揮発性化合物と内部標準のMSスペクトルおよびロックされたリテンションタイムが含まれています。DBL化合物の完全なリストは、付録Aに記載されています。



Agilent Technologies

各DBLエントリには、以下の情報が含まれています。

- 5975 MSDのAtune.uを使用して取り込んだMSスペクトル
- 6890N/5975または7890A/5975 GC/MSDシステムで求められたロックされたリテンションタイム。化合物は9.500 ± 0.01分にロックされたフェナントレン-d10と共に少なくとも1回注入しました。フェナントレン-d10は525 PTV “ロング” メソッドに関して12.700 ± 0.01分にロックされました。
- 分子式
- 分子量(整数質量)
- CAS番号

スペクトルは、NIST05a MSスペクトルライブラリに含まれているスペクトルと比較しました。テストは、炭化水素の影響を含むスパイクされたサンプルで実施され、その結果をスパイクされた化合物のリストと比較しました。

semi-VOAのDBLを使用するための最小限のシステム要件は以下のとおりです。

- G1716AAデコンボリューションレポート作成ソフトウェア(基本製品)
- Agilent GC/MSシステム、E.02.00.xxx以降のソフトウェアを推奨

実験

8270と525のスペクトルおよびリテンションタイムの取り込みに使用した装置の操作条件を表1に示しました。MSDに直接接続したカラムでスプリット/スプリットレス注入口を使用したスプリットレス注入を行いました。長さ20 mの厚膜のカラムを使用すると、早く溶出する成分に関してよい分離が得られ、分析時間は17分になります。遅めに溶出するPAHに適した注入口温度は300℃です。一方、ベンジジンなどの塩基性化合物の場合は、それよりも低い注入口温度(250~275℃)でレスポンスファクタが向上しました。フェナントレン-d10に対するリテンションタイムロッキングは一定流量モード、0.8mL/minで実施しました。どちらの化合物リストについても、35~500の質量範囲が適しています。6 mmの大口径ドロアアウトレンズによって、感度が多少低下しますが、優れた直線性が得られます。標準の3 mmレンズを使用することもできます。

525の“ロング”リテンションタイムでの取り込みに使用した装置条件を表2に示します。プログラマブル温度気化注入口(PTV)は25 µL大容量注入(LVI)と共に使用しました。PTV-LVIは、低い検出限界を必要とする飲料水の分析に一般的に使用されます。

高温のスプリットレス注入と比較すると、活性分析対象物は、気化可能な最低限の温度で気化するため、パフォーマンスが向上しました。フェナントレン-d10は、1.5mL/minの一定流量モードで実施する12.700分のリテンションタイムロッキングでの化合物として使用されます。PTVパラメータは、リテンションタイムに影響を与えるため、表1の20mカラムには直接使用できません。SIM分析に関しては、

表1. 8270および525メソッド、ガスクロマトグラフと質量分析計の条件

GC	Agilent 6890Nまたは7890A		
注入口	EPCスプリット/スプリットレス—バック側に設置されたシステム例		
モード	スプリットレス、0.5 µL注入		
注入口温度	300 °C		
圧力	16.9psi、初期		
パージ流量	30.0mL/min		
パージ時間	0.75分		
ガスセーバ	オフ		
ガスの種類	ヘリウム		
ライナ	Agilentヘリックス、シングルテーパー、部品番号5188-5397		
オープン	240V		
オープンランプ	°C/min	次の°C	ホールド時間(分)
初期		40	1.00
ランプ1	25	320	4.80
合計分析時間	17.0分		
平衡化時間	0.5 min		
オープン最高温度	325 °C		
カラム	Agilent DB-5.625、部品番号121-5622		
長さ	20.0m		
直径	0.18mm		
膜厚	0.36 µm		
モード	コンスタントフロー = 0.8 mL/min		
圧力	16.7psi、初期		
注入口	バック		
出口	MSD		
出口圧	真空		
RTL	フェナントレン-d10のリテンションタイムロック、9.500分		
MSD	Agilent 5975、ターボポンプ仕様 ドロアアウトレンズ 6-mmの大開口部ドロアアウトレンズ 部品番号G2589-20045		
溶媒ディレイ	2.8分		
チューン	Atune.u		
EM圧	チューン電圧		
質量範囲	35~500amu		
リミット値	0		
サンプリング	2		
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	280 °C		

30mカラムは、短いカラムよりも多くのイオンや化合物、SIMサイクルやピークが認められるため、分離性が優れています。デコンボリューションで最適な同定を行うため、4つのイオン/化合物の基準を使用して独自のSIMベースのDBLを作成できます。また、定量化にSIMデータを用い、スキャンデータをフルスペクトルのデコンボリューションに使用する、SIM/スキャンデータ取り込みも可能です。525 DBLには、45～450のスキャン範囲が適しています。SIM/スキャンを使用する場合、スキャンサイクルの数を等しくするため、サンプルングレートを2から1に変更することができます。

表2. 525 ロングメソッド、ガスクロマトグラフと質量分析計の条件

GC	Agilent 6890Nまたは7890A		
注入口	EPC PTV – フロント側		
モード	溶媒ベント – 25µL注入		
温度ランプ	°C/min	次の°C	ホールド時間(分)
初期		20	0.60
ランプ1	600	350	1.30
ランプ2	10	250	0.00
クライオ	オン		
クライオ使用温度	100 °C		
Cryo timeout	10.00分(オン)		
Cryo fault	オン		
圧力	11.77psi (オン)		
ベント時間	0.60分		
ベントフロー	100.0mL/min		
ベント圧力	0.0psi		
パージ流量	50.0mL/min		
パージ時間	2.50分		
総流量	53.9mL/min		
ガスセーバ	オフ		
ガスの種類	ヘリウム		
PTVライナ	Agilentマルチバツフルライナ、充てんなし、部品番号5183-2037		
オープン	120V		
オープンランプ	°C/min	次の°C	ホールド時間(分)
初期		40	2.50
ランプ1	50	110	0.00
ランプ2	10	320	1.10
合計分析時間	26分		
平衡化時間	0.5分		
オープン最高温度	325 °C		
カラム	Agilent HP 5 MSi、部品番号19091S-433i		
長さ	30.0m		
直径	0.25mm		
膜厚	0.25 µm		
モード	コンスタントフロー – 1.5mL/min		
圧力	11.77psi		

注入口	フロント
出口	MSD
出口圧	真空
RTL	フェナントレン-d10のリテンションタイムロック、12.700分

フロントインジェクタ

サンプル洗浄	0
サンプルポンプ	2
注入量	25マイクロリットル
シリンジサイズ	50マイクロリットル
注入前溶媒A洗浄	0
注入前溶媒B洗浄	1
注入後溶媒A洗浄	2
注入後溶媒B洗浄	2
粘性の遅延	1秒
プランジャ速度	可変
注入速度	50マイクロリットル/分
吸引速度	600マイクロリットル/分
吐出速度	6000マイクロリットル/分
注入前デュエル	0分
注入後デュエル	0分
MSD	Agilent 5975C、ターボポンプ仕様
ドロアアウトレンズ	6-mmの大開口部ドロアアウトレンズ 部品番号G2589-20045
溶媒ディレイ	4分
低質量	45amu
高質量	450amu
リミット値	0
サンプリング	2
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	280 °C
チューンタイプ	オートチューン
EM圧	チューン電圧、1247 V

結果および考察

リテンションタイムのロックまたはロックなし

GC/MSDシステムのリテンションタイムをロックすると、DRSから最大限の生産性が得られます。DRSレポートには、検出された化合物のリテンションタイムとそこから予測されるターゲットとのリテンションタイムの差が表示されます。これは、類似したスペクトルを有する化合物と区別するために重要です。AMDISパラメータは、予測されるRTウィンドウから外れた化合物を除外するように設定でき、偽陽性を排除することができます。リテンションタイムロッキングによって、SIM取り込み時間の変更、つまり複数のSIMグループでの時間のかかる作業が不要になります。そのため、RTLを搭載したシステムでの分析を推奨します。

多くのラボではRTLを実施していますが、実施しないユーザもいます。そのような場合の2つのアプローチ方法を紹介します。

アプローチ1 - *.calファイルの更新

.calファイルは、AMDISデータベース (.mslおよび*.cid)で予測されるリテンションタイムとある時点で得られたリテンションタイムの相関を構築します。半揮発性物質のDBLの*.calファイルには、ISTDとsurrogatesのみが含まれています。他の分析対象物はこれらの化合物のリテンションタイムの変更に追従するとみなされます。RTが変わる場合は必ず*.calファイルのRTを変更する必要があります。これは、メモ帳で*.calファイルのRTを手動で編集することによって行えます。すべてのRTを更新し終えたら、[Save]を選択します([Save As]ではありません)。2番目の選択は、AMDISで*.calファイルを再作成することです。この手順はAMDISヘルプに記載されています。

アプローチ2 - *.mslおよび *.cidファイルの更新

MSDデータ分析にメニュー項目が用意されており、[DRS] > [定量データベースによるAMDISライブラリRTの更新]の順に選択します。これにより、現在のMSD定量化データベース時間で両方のAMDISファイルのRTが更新され、元の2つのAMDISファイルのコピーが保存されます。

注意事項：定量データベースの時間が正しくない場合でもその時間が使用されます。定量データベースにAMDISファイル内の化合物が含まれていない場合、AMDIS RTは更新されません。

半揮発性物質のRTL DBLの使用

以下のファイルがインストールされています。

8270_DRS_Demo.D	525_DRS_Demo.D	525_Long_DRS_Demo.D
8270_DRS.L	525_DRS.L	
8270_RTL_DRS.M	525_RTL_DRS.M	525_Long_RTL_DRS.M
8270.MSL	525.MSL	525_Long.MSL
8270.CID	525.CID	525_Long.CID
8270_cal_RT.CAL	525_cal_RT.CAL	525_Long_cal_RT.CAL
8270_cal_RT.CSL	525_cal_RT.CSL	525_Long_cal_RT.CSL

CDインストーラは、通常以下の場所にファイルが置かれています。

Agilent MSD ChemStationデータファイル*.Dおよびメソッド*.m

C:\msdchem\MSDemo\Semivolatiles Example Data

C:\msdchem\MSDemo\Semivolatiles Example Methods

AMDISファイル*.msl、*.cid、*.cal、および*.csl

C:\NIST05\AMDIS32\LIB\

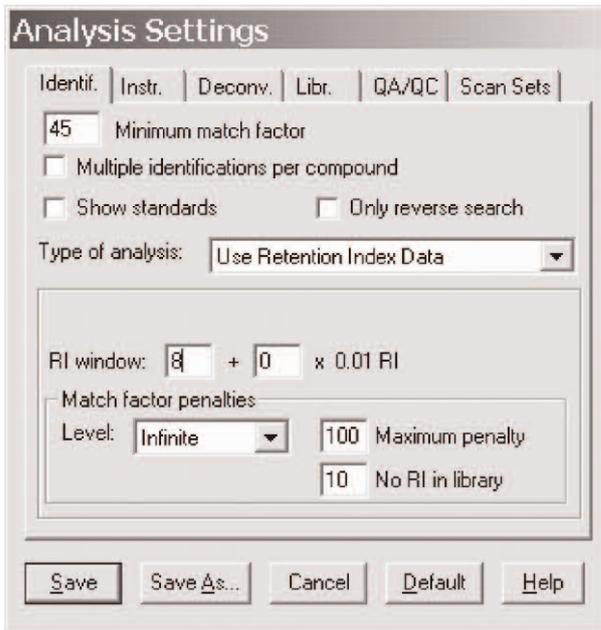
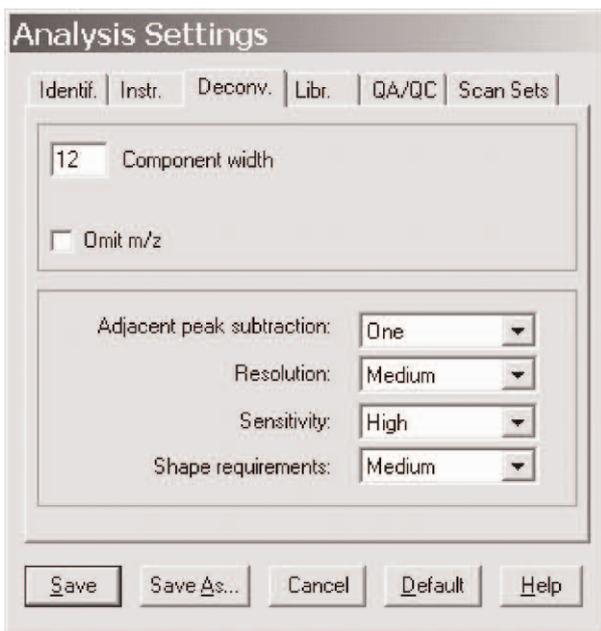
MSD ChemStationライブラリファイル、*.L in C:\Database

MSD ChemStationメソッドには、一点キャリブレーションのリテンションタイムをロックした定量データベースが含まれています。これらのメソッドは、後述のように、データ分析で直接使用できます。メソッドには、データ取り込みパラメータおよびリテンションタイムロッキングデータも含まれています。データ取り込みでメソッドを読み込む際に、ユーザは自身のシステムと設定されたメソッドの違いを調整する必要があります。また、新しいリテンションタイムロッキングデータの取り込みが必要となる場合があります。表1または表2のシステムと同様に設定されている場合は、システムの再ロックのみ必要になります。

MSDデータ分析のDRS

DRSの使用経験がない場合は、最初に全般のヘルプファイルセクション「手動またはインタラクティブにDRSを使用したレポートの生成および解釈」を参照することを推奨します。DRSについての基本的な理解を得るため、ハウレンソウA、B、およびCの実習のすべての項目を実施してください。方法は以下のとおりです。

スタンドアロンアプリケーションとしてAMDISを開き、[Analyze] > [Settings]を選択します。設定が下記のとおりであることを確認してから、[Save]を選択します。再分析を要求されたら、[No]を選択し、AMDISを終了します。この設定は、AMDIS初期ファイルonsite.iniに永久に保存されます。

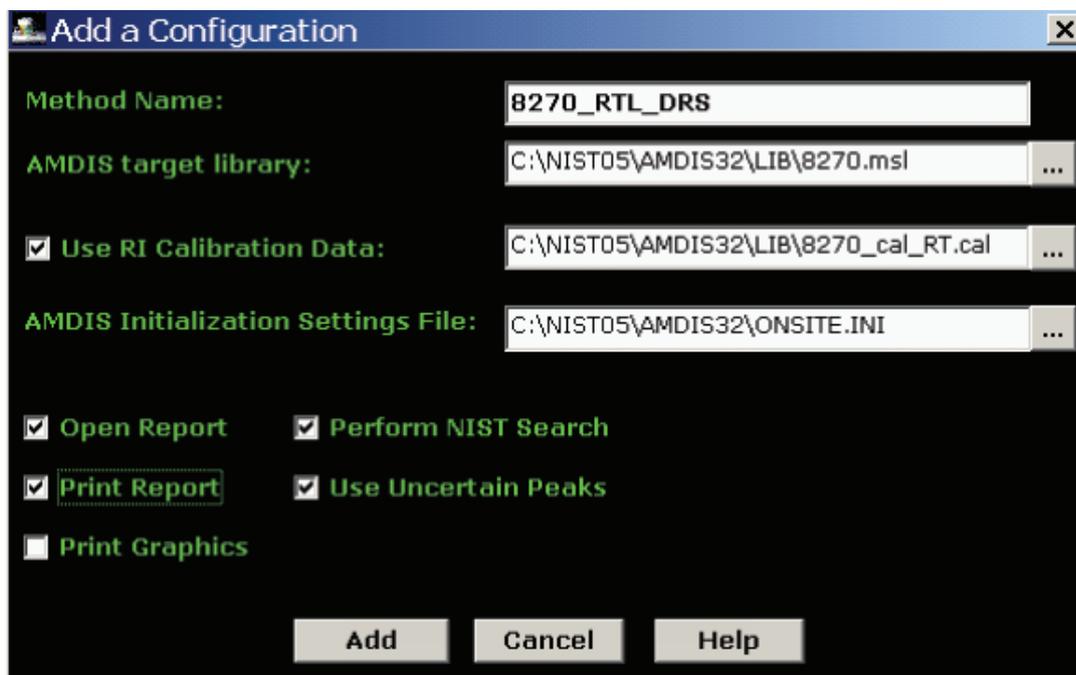


AMDIS設定を割り当てた後、選択した分析に応じて、DRSメソッドを設定する必要があります。AMDISおよびMSD ChemStationファイルの関係を下表に示します。

MSD ChemStation メソッド	MSD ChemStation ライブラリの選択	DRS コンフィギュレータ メソッド	DRS コンフィギュレータ AMDIS ターゲットライブラリ	DRS コンフィギュレータ RI キャリブレーション ファイル	DRS コンフィギュレータ AMDIS .ini ファイル
8270_RTL_DRS.m	8270_DRS.L	8270_RTL_DRS	8270.msl	8270_cal_RT.cal	Onsite.ini
525_RTL_DRS.m	525_DRS.L	525_RTL_DRS	525.msl	525_cal_RT.cal	Onsite.ini
525_long_DRS.m	525_DRS.L	525_long_DRS	525_long.msl	525_long_cal_RT.cal	Onsite.ini

後で使用する各アプリケーションのDRSメソッドを設定する必要があります。下記の8270セットの半揮発性物質DBLの使用例を参照してください。

1. 以下に示すようにメソッドコンフィギュレータを使用してNEW DRS Methodを設定します。



2. [Add]を選択してから、[Exit] > [Exit and Save]を選択します。
3. MSD ChemStationのデータ解析ビューで、メソッド8270_RTL_DRS.mを読み込みます。
4. データファイル8270_DRS_Demo.Dを読み込みます。
5. データ解析ビューのDRSメニューで、[Quant + DRS Single File]を選択します。

DRSプロセスが完了すると、表示されているようなレポートが生成されます。

MSD Deconvolution Report
 Sample Name: 5ppm 8270sm + 50GKD
 Data File: C:\msdchem\1\DATA\8270_D~1.D
 Date/Time: 05:00 PM Monday, Dec 17 2007

Adjacent Peak Subtraction = 1
 Resolution = Medium
 Sensitivity = High
 Shape Requirements = Medium

The NIST library was searched for the components that were found in the AMDIS target library.

R.T.	Cas #	Compound Name	Amount (ng)		AMDIS		NIST	
			Chem station	AMDIS	Match	R.T. Diff sec.	Reverse Match	Hit Num.
2.8499	62759	N-Nitrosodimethylamine	5.56		93	-0.5	96	1
4.7302	62533	Aniline			98	4.2	96	1
5.0358	3855821	1,4-Dichlorobenzene-d4	40		99	-0.2	93	1
5.2143	106445	4-Methylphenol			66	-7.7	89	1
5.3059	98862	Acetophenone			49	-4.6		
5.3059	105055	Benzene, 1,4-diethyl-					89	1
6.2476	1146652	Naphthalene-d8	40		99	-0.1	86	1
6.2679	91203	Naphthalene	3.77		58	-0.1		
6.2679	5405798	3-Hexanone, 2,2-dimethyl-					81	1
6.787	680319	Hexamethylphosphoramid	0.28					
6.9442	91576	2-Methylnaphthalene			97	0.1	91	1
7.761	95830	4-Chloro-1,2-phenylenediamine	0.69					
7.845	5131602	4-Chloro-1,3-phenylenediamine	0.1					
7.9945	15067262	Acenaphthene-d10	40		98	-0.1	82	1
8.0256	51285	2,4-Dinitrophenol			58	0.0	68	1
8.0572	100027	4-Nitrophenol	2.44		81	-0.1	92	1
8.195	132649	Dibenzofuran	0.11					
8.3833	84662	Diethyl phthalate	0.23		78	-0.2	75	1
8.530	99558	5-nitro-o-toluidine	0.11					
8.5420	86737	Fluorene			56	0.0	80	58
8.5644	534521	4,6-Dinitro-2-methylphenol			89	-0.1	88	1
8.6164	86306	N-Nitrosodiphenylamine			45	-0.8		
8.6164	3892000	Pentadecane, 2,6,10-trimethyl-					84	1
9.2806	92671	4-Aminobiphenyl	6.1		94	-0.1	89	2
9.2829	87865	Pentachlorophenol	4.22		91	-0.1	66	11
9.4964	1517222	Phenanthrene-d10	40		97	-0.1	86	1
9.5139	120127	Anthracene			52	-3.4	70	15
9.5175	85018	Phenanthrene			68	-0.2	80	1
10.0286	84742	di-n-Butyl phthalate			74	-0.1	84	9
10.8285	92875	Benzidine	5.67		97	0.8	91	1
12.1025	91941	3,3'-Dichlorobenzidine	5.3		95	-0.4	97	1
12.1665	1719035	Chrysene-d12	40		93	-0.3	92	1
12.168	56553	Benz[a]anthracene	0.06					
12.168	218019	Chrysene	0.08					
12.168	732116	Phosmet	0.27					
13.3443	207089	Benzo[k]fluoranthene			93	-2.4	94	2
13.3443	205992	Benzo[b]fluoranthene	5.75		95	-0.2	90	2
13.381	207089	Benzo[k]fluoranthene	5.89					
13.8809	1520963	Perylene-d12	40		99	-0.6	77	1

このレポートは、DRSリビジョンA.04に基づいて作成されています。以前のDRSリビジョンには、ヘッダのAMDIS設定はなく、AMDISでのアマウント計算の列もありませんでした。AMDISで計算されたアマウントは、MSD ChemStationリビジョンE.02以降のQEditで使用できるようになります。詳細については、DRS A.04ヘルプセクション「QEditのDRS定量データとの併用」を参照してください。

また、ユーザは、8270セットと同様に、525セットのファイルについてもDRSメソッドを設定できます。メソッドおよびデモデータファイルが用意されています。

結論

半揮発性物質のRTL DBL をDRSで使用すると、複雑なマトリックス内の環境汚染物質を迅速に確認することができます。ロックされたリテンションタイムと共に、排水および飲料水用のデータベースが含まれています。デコンボリユーションされた分析対象成分の同定には、フルスペクトルを使用します。MSD ChemStationのRev E.02以降で使用すると、通常の数値化に加え、AMDISでデコンボリユーションされたデータを数値化することができます。G1677AA環境半揮発性物質のRTL DBLは、基本のDRS製品G1716AAに対するアドオン製品です。

詳細情報

当社の製品およびサービスの詳細情報については、当社のホームページwww.agilent.com/chem/jpをご覧ください。

付録A

化合物のリスト

CAS番号およびライブラリエントリ番号を含む8270_DRS.Lおよび525_DRS.Lからの化合物のアルファベット順の複合リストです。斜体の文字は、8270 DBLの30の追加化合物を示しています。リテンションタイム情報は、メソッド定量化データベース、Agilentライブラリ、またはAMDISデータベースで検索することができます。

Compound name	CAS #	8270_DRS.L entry #	525_DRS.L entry #	Compound name	CAS #	8270_DRS.L entry #	525_DRS.L entry #
Acenaphthene	83329	71		gamma-BHC (lindane)	58899	115	39
Acenaphthene-d10	15067262	55	1	Bis(2-chloroethoxy)methane	111911	39	
Acenaphthylene	208968	69	12	Bis(2-chloroethyl) ether	111444	13	
Acetophenone	98862	26		Bis(2-chloroisopropyl) ether	108601	21	
2-Acetylaminofluorene	53963	185		Bis(2-ethylhexyl)phthalate	117817	191	108
1-Acetyl-2-thiourea	591082	271		Bromacil	314409		58
Alachlor	15972608		54	4-Bromophenyl phenyl ether	101553	103	
Aldrin	309002	137	61	Bromoxynil	1689845	97	
Ametryn	834128		55	Butachlor	23184669		79
2-Aminoanthraquinone	117793	267		Butifos	78488		85
Aminoazobenzene	60093	253		Butyl benzyl phthalate	85687	173	95
4-Aminobiphenyl	92671	111		Butylate	2008415		8
3-Amino-9-ethylcarbazole	132321	264		Captafol	2425061	186	
Anilazine	101053	141		Captan	133062	142	
Aniline	62533	12		Carbaryl	63252	129	
o-Anisidine	90040	240		Carbazole	86748	126	
Anthracene	120127	124	43	Carbofuran	1563662	110	
Aramite	140578	155		Carbophenothion	786196	176	
Atraton	1610179		31	Carboxin	5234684		88
Atrazine	1912249		35	Chlordane (NOS)	57749	252	
Azinphos-methyl	86500	199		alpha-Chlordane	5103719		80
Azobenzene (conv: 1,2-diphenylhydrazine)	103333	93		gamma-Chlordane	5103742		73
Barban	101279	160		Chlorfenvinphos	470906	145	
Benz[a]anthracene	56553	193	103	4-Chloroaniline	106478	44	
Benzidine	92875	149		Chlorobenzilate	510156	164	91
Benzo[a]pyrene	50328	216	114	<i>2-Chlorobiphenyl</i>	2051607	73	16
Benzo[b]fluoranthene	205992	212	112	5-Chloro-2-methylaniline	95794	256	
Benzo[ghi]perylene	191242	223	119	4-Chloro-3-methylphenol	59507	51	
Benzo[k]fluoranthene	207089	213	113	3-(Chloromethyl)pyridine	3099318	276	
Benzoic acid	65850	37		1-Chloronaphthalene	90131	270	
p-Benzoquinone	106514	238		2-Chloronaphthalene	91587	62	
Benzyl alcohol	100516	18		Chloroneb	2675776		17
alpha-BHC (alpha-HCH)	319846	104	28	2-Chlorophenol	95578	15	
beta-BHC (beta-HCH)	319857	109	38	4-Chloro-1,2-phenylenediamine	95830	260	
delta-BHC (delta-HCH)	319868	123	47	4-Chloro-1,3-phenylenediamine	5131602	259	
				4-Chlorophenyl phenyl ether	7005723	84	

Compound name	CAS #	8270_DRS.L entry #	525_DRS.L entry #	Compound name	CAS #	8270_DRS.L entry #	525_DRS.L entry #
Chlorothalonil	1897456		49	3,3'-Dimethylbenzidine	119937	174	
Chlorpropham	101213		26	a,a-Dimethylphenethylamine	122098	40	
Chlorpyrifos	2921882		63	1,3-Dimethyl-2-nitrobenzene-ss	81209		3
Chrysene	218019	194	105	2,4-Dimethylphenol	105679	36	
Chrysene-d12	1719035	153	99	Dimethyl phthalate	131113	66	11
Coumaphos	56724	208		Di-n-butyl phthalate	84742	131	59
p-Cresidine	120718	237		1,2-Dinitrobenzene	528290	274	
Crotoxyphos	7700176	146		1,3-Dinitrobenzene	99650	67	
Cyanazine	21725462		64	1,4-Dinitrobenzene	100254	273	
Cycloate	1134232		25	4,6-Dinitro-2-methylphenol	534521	89	
2-Cyclohexyl-4,6-dinitro-phenol	131895	266		2,4-Dinitrophenol	51285	72	
Dacthal (DCPA)	1861321		66	2,4-Dinitrotoluene	121142	76	19
4,4'-DDD	72548	167	93	2,6-Dinitrotoluene	606202	68	15
4,4'-DDE	72559	154	86	Dinocap I	39300453	190	
4,4'-DDT	50293	179	98	Di-n-octyl phthalate	117840	207	
Demeton-O	298033	251		Dinoseb	88857	119	
Demeton-S	126750	107		Diphenamid	957517	239	68
Diallate	2303164	100		Diphenylamine	122394	91	
2,4-Diaminotoluene	95807	268		5,5-Diphenylhydantoin	57410	257	
Diazinon	333415		44	1,2-Diphenylhydrazine	122667	272	
Dibenz[a,h]anthracene	53703	222	118	Disulfoton	298044	120	45
Dibenz[a,j]acridine	224420	250		Disulfoton sulfone	2497065		75
Dibenzofuran	132649	77		Disulfoton sulfoxide	2497076		6
Dibenzo(a,e)pyrene	192654	249		Endosulfan I	959988	150	78
Dibrom (naled)	300765	94		Endosulfan II	33213659	169	92
1,2-Dibromo-3-chloropropane	96128	275		Endosulfan sulfate	1031078	182	96
Dichlone	117806	116		Endrin	72208	166	90
1,2-Dichlorobenzene	95501	19		Endrin aldehyde	7421934	172	94
1,3-Dichlorobenzene	541731	16		Endrin ketone	53494705	189	
1,4-Dichlorobenzene	106467	17		EPN	2104645	197	
1,4-Dichlorobenzene-d4	3855821	1		EPTC	759944		7
3,3'-Dichlorobenzidine	91941	192		Ethion	563122	168	
2,3-Dichlorobiphenyl	16605917	105	29	Ethoprophos	13194484		24
2,4-Dichlorophenol	120832	41		Ethyl carbamate	51796	246	
2,6-Dichlorophenol	87650	45		Ethyl methanesulfonate	62500	9	
Dichlorvos	62737	48	4	Etridiazole	2593159		13
Dicrotophos	141662	248		Famphur	52857	171	
Dieldrin	60571	161	87	Fenamiphos	22224926		82
Di(2-ethylhexyl)adipate	103231		101	Fenarimol	60168889		109
Diethyl phthalate	84662	82	22	Fensulfothion	115902	159	
Diethylstilbestrol	56531	181		Fenthion	55389	139	
Diethyl sulfate	64675	247		Fluchloralin	33245395	125	
Dimethoate	60515	108		Fluoranthene	206440	152	
3,3'-Dimethoxybenzidine	119904	265		2-Fluorobiphenyl	321608	60	
p-(Dimethylamino)azobenzene	60117	163		Fluorene	86737	86	21
7,12-Dimethylbenz[a]anthracene	57976	211		Fluridone	59756604		116

Compound name	CAS #	8270_DRS.L entry #	525_DRS.L entry #	Compound name	CAS #	8270_DRS.L entry #	525_DRS.L entry #
2-Fluorophenol	367124	7		Methyl parathion	298000	128	
Heptachlor	76448	130	53	2-Methylphenol	95487	20	
Heptachlor epoxide -isomer B	1024573	143	70	3-Methylphenol	108394	23	
2,2',3,3',4,4',5-Heptachlorobiphenyl	35065306	203		4-Methylphenol	106445	22	
2,2',3,3',4,4',6-Heptachlorobiphenyl	52663715		104	Metolachlor	51218452		62
2,2',3,4,4',5,5'-Heptachlorobiphenyl	35065293	195		Metribuzin	21087649		51
2,2',3,4,4',5',6-Heptachlorobiphenyl	52663691	187		Mevinphos	7786347	63	9
2,2',3,4',5,5',6-Heptachlorobiphenyl	52663680	184		Mexacarbate	315184	241	
1,2,3,4,6,7,8-Heptachlorodibenzo- furan	67562394	215		MGK 264 - a	113484		67
1,2,3,4,6,7,8-Heptachlorodibenzo- p-dioxin	35822469	217		MGK 264 - b	113484		69
Hexachlorobenzene	118741	106	30	Mirex	2385855	204	
2,2',3,4,4',5'-Hexachlorobiphenyl	35065282	180		Molinatate	2212671		20
2,2',3,4,5,5'-Hexachlorobiphenyl	52712046	175		Monocrotophos	6923224	98	
2,2',3,5,5',6-Hexachlorobiphenyl	52663635	162		Naphthalene	91203	43	
2,2',4,4',5,5'-Hexachlorobiphenyl	35065271	170		Naphthalene-d8	1146652	30	
2,2',4,4',5,6'-Hexachlorobiphenyl	60145224		89	1,4-Naphthoquinone	130154	65	
Hexachlorobutadiene	87683	47		1-Naphthylamine	134327	80	
Hexachlorocyclopentadiene	77474	56	5	2-Naphthylamine	91598	78	
1,2,3,4,7,8-Hexachlorodibenzofuran	70648269	205		Napropamide	15299997		83
1,2,3,4,7,8-Hexachlorodibenzo- p-dioxin	39227286	209		Nicotine	54115	58	
Hexachloroethane	67721	29		5-Nitroacenaphthene	602879	255	
Hexachlorophene	70304	214		2-Nitroaniline	88744	64	
Hexachloropropene	1888717	46		3-Nitroaniline	99092	70	
Hexamethylphosphoramid	680319	245		4-Nitroaniline	100016	87	
Hexazinone	51235042		100	5-Nitro-o-anisidine	99592	254	
Hydroquinone	123319	244		Nitrobenzene	98953	32	
Indeno[1,2,3-cd]pyrene	193395	221	117	Nitrobenzene-d5	4165600	31	
Isodrin	465736	140		4-Nitrobiphenyl	92933	258	
Isophorone	78591	34	2	Nitrofen	1836755	165	
Isosafrole	120581	61		2-Nitrophenol	88755	35	
Kepone	143500	177		4-Nitrophenol	100027	74	
Leptophos	21609905	201		4-Nitroquinoline-1-oxide	56575	136	
Malathion	121755	132		5-Nitro-o-toluidine	99558	85	
Maleic anhydride	108316	243		N-Nitrosodiethylamine	55185	8	
Merphos	150505		72	N-Nitrosodimethylamine	62759	2	
Mestranol	72333	242		N-Nitrosodi-n-butylamine	924163	49	
Methapyrilene	91805	138		N-Nitrosodi-n-propylamine	621647	25	
Methoxychlor	72435	188	106	N-Nitrosodiphenylamine	86306	90	
3-Methylcholanthrene	56495	218		N-Nitrosomethylethylamine	10595956	4	
4,4'-Methylenebis (2-chloroaniline)	101144	263		N-Nitrosomorpholine	59892	27	
4,4'-Methylenebis (N,N-dimethylaniline)	101611	262		N-Nitrosopiperidine	100754	33	
Methyl methanesulfonate	66273	6		N-Nitrosopyrrolidine	930552	24	
2-Methylnaphthalene	91576	53		trans-Nonachlor	39765805		81
Methyl paraoxon	950356		46	Norflurazon	27314132		97
				2,2',3,3',4,4',5,5',6-Nonachlorobi- phenyl	40186729	210	
				2,2',3,3',4,5',6,6'-Octachlorobi- phenyl	40186718		107

Compound name	CAS #	8270_DRS.L entry #	525_DRS.L entry #	Compound name	CAS #	8270_DRS.L entry #	525_DRS.L entry #
Octachlorodibenzofuran	39001020	220		Simazine	122349		33
Octachlorodibenzo-p-dioxin	3268879	219		Simetryn	1014706		52
Octamethyl pyrophosphoramidate	152169	239		Stirofos (Tetrachlorvinphos)	22248799		77
4,4'-Oxydianiline	101804	261		Strychnine	57249	231	
Parathion (ethyl)	56382	134		Sulfallate	95067	230	
Pebulate	1114712		14	Sulfotepp	3689245	95	
Pentachlorobenzene	608935	75		Tebuthiuron	34014181		18
2,2',3,4,5'-Pentachlorobiphenyl	38380028	156		Terbacil	5902512		48
2,2',3',4,6'-Pentachlorobiphenyl	60233252		71	Terbufos	13071799	121	40
2,2',4,5,5'-Pentachlorobiphenyl	37680732	148		Terbutryne	886500		57
2,3,3',4',6'-Pentachlorobiphenyl	38380039	158		Terphenyl-d14	1718510	157	
1,2,3,7,8-Pentachlorodibenzofuran	57117416	198		1,2,4,5-Tetrachlorobenzene	95943	54	
1,2,3,7,8-Pentachlorodibenzo-p-dioxin	40321764	202		2,2',3,5'-Tetrachlorobiphenyl	41464395	135	
Pentachloroethane	76017	14		2,2',4,4'-Tetrachlorobiphenyl	2437798		60
Pentachloronitrobenzene	82688	113		2,2',5,5'-Tetrachlorobiphenyl	35693993	133	
Pentachlorophenol	87865	112	37	2,3',4,4'-Tetrachlorobiphenyl	32598100	144	
cis-Permethrin	54774457		110	2,3,7,8-Tetrachlorodibenzofuran	51207319	178	
trans-Permethrin	51877748		111	2,3,7,8-Tetrachlorodibenzo-p-dioxin	1746016	183	
Perylene-d12	1520963	206	115	2,3,4,6-Tetrachlorophenol	58902	79	
Phenacetin	62442	101		Tetrachlorvinphos	961115	151	
Phenanthrene	85018	122	42	Tetraethylpyrophosphate (TEPP)	107493	81	
Phenanthrene-d10	1517222	88	32	Thiophenol (Benzenethiol)	108985	229	
Phenobarbital	50066	236		Thionazin	297972	83	
Phenol	108952	11		Toluene diisocyanate	584849	228	
Phenol-d5	4165622	10		o-Toluidine	95534	28	
p-Phenylenediamine	106503	50		Toxaphene	58002190	227	
Phorate	298022	102		Triadimefon	43121433		65
Phosalone	2310170	200		2,4,6-Tribromophenol	118796	96	
Phosmet	732116	196		1,2,4-Trichlorobenzene	120821	42	
Phosphamidon I	13171216	118		2,2',5'-Trichlorobiphenyl	37680652	117	
Phthalic anhydride	85449	235		2,4,5-Trichlorobiphenyl	15862074		50
2-Picoline (2-Methylpyridine)	109068	5		2,4',5'-Trichlorobiphenyl	16606023	127	
Piperonyl sulfoxide	120627	234		2,4,5-Trichlorophenol	95954	59	
Prometon	1610180		34	2,4,6-Trichlorophenol	88062	57	
Prometryn	7287196		56	Tricyclazole	41814782		84
Propyzamide (Pronamide)	23950585	114	41	O,O,O-Triethyl phosphorothioate	126681	38	
Propachlor	1918167		23	Trifluralin	1582098	92	27
Propazine	139402		36	2,4,5-Trimethylaniline	137177	269	
Propylthiouracil	51525	233		Trimethyl phosphate	512561	226	
Pyrene	129000	147	76	1,3,5-Trinitrobenzene	99354	99	
Pyrene-d10-ss	1718521		74	Triphenylphosphate-ss	115866		102
Pyridine	110861	3		Tris(2,3-dibromopropyl) phosphate	126727	224	
Resorcinol	108463	232		Tri-p-tolylphosphate	78320	225	
Safrole	94597	52		Vernolate	1929777		10

アジレントは、本書に含まれている誤植、あるいは本品の設置、性能、または使用に関する偶発的ないし間接的な損害に関して責任を負いません。

本書に記載されている情報、説明、および仕様は予告なく変更されることがあります。

© Agilent Technologies, Inc. 2008

Printed in Japan,
February 8, 2008
5989-7875JAJP

