

デコンボリューションレポーターティング ソフトウェア (DRS) を使用したGC/MSD による包括的な農薬スクリーニング

アプリケーション

食品安全

著者

Philip L. Wylie, Michael J. Szelewski, and Chin-Kai Meng
Agilent Technologies, Inc.
2850 Centerville Road
Wilmington, DE 19808-1610
USA

Christopher P. Sandy
Agilent Technologies, Inc.
Block A, CSC Eskdale Road
Winnersh Triangle Estate
Wokingham, Berk RG41 5DZ
United Kingdom

はじめに

The Pesticide Manual (農薬マニュアル) によれば、現在世界で使用が認められている農薬の数は700を超えています[1]。過去にはそれ以外に600以上の農薬が使用されてきましたが、これらは現在では禁止されているか、販売が中止されています。これらの農薬のいくつかは、使用が中止されたにもかかわらず依然として環境中に残存し、植物相や動物相で生物蓄積されている可能性があります。多くの農薬やその分解副産物は、食品、飲料、土壌、水、空気、水中および地上の動植物、ヒトの血液、脂肪組織、母乳中のごく微量検出されることがあります。世界保健機関は、農薬を人体に対する毒性の度合いに応じて5つのグループに分類しています[2]。そのカテゴリーは、「深刻な危険をもたらす」から「通常の使用では深刻な危険をもたらすとは思われない」までです。ある種の農薬は、残留性有機汚染物質 (POPs)、発ガン性物質、催奇形性物質、あるいは内分泌攪乱物質として分類されています。現在では、食品の安全供給を図るために、食品試料や環境試料中の農薬を分析して、環境中における農薬の分布を追跡することは一般的です。

現在の分析方法は、疑いのある化合物のサブセットだけをターゲットとしています。食品試料であれ環境試料であれ、同時に抽出される天然物質の存在によって分析はしばしば複雑なものとなります。食品や組織の抽出物が極端に複雑なマトリックスであれば、分析の前に複数のクリーンアップ作業が必要になります[3]。また、複数のクリーンアップを行っても、残留マトリックス中に含まれるごく微量の汚染物質は検出することが困難な場合があります。

効率化を図るためには、ほとんどの農薬の分析に残留農薬一斉分析 (MRM) を使用する必要があります。これまで、これらの方法は多様なマトリックス中の農薬を検出するのに、ガスクロマトグラフィ (GC) とさまざまな元素選択検出器に依存してきました[4, 5, 6]。ヒットした物質の確定には、GCと質量分析計の組合せ (GC/MS) が広く使用されてきました。GCで分析できない化合物には液体クロマトグラフィ (LC) が使用されてきました[2]。今日では、LCと質量分析計 (LC/MS)、およびGC/MSを主要な分析ツールとして使用する農薬分析ラボがますます増えつつあります[7, 8]。とはいえ、ほとんどのMRMが疑いのある小さなサブセットの農薬を分析するターゲット化合物分析法であることに変わりはありません。MRMでは、ターゲット化合物のリストに入っていない化合物は見逃される可能性があります。

リテンションタイムロック (RTL) 法[9, 10, 11]とスペクトルのデコンボリューション[12]を利用して、567種類の農薬と内分泌攪乱物質の疑いのある物質を1回のGC/MS分析でスクリーニングするための方法が開発されました。スペクトルのデコンボリューションは、同時溶出するマトリックス化合物の下に埋もれている農薬を特定するのに役立ちます。RTLは、間違っただけの候補を排除して結果の確度を高めるのに役立ちます。ユーザは、必要に応じて化合物を容易にメソッドに追加できます。



Agilent Technologies

実験

表1は、Agilentが農薬を分析するのに使用した装置、ソフトウェア、および分析パラメータを示したものです。必要な試料注入量に応じて、PTV注入口、またはスプリット/スプリットレス注入口を使用できます。

試料

野菜の抽出物は、The California Department of Food and Agriculture (CDFA；アメリカ、カリフォルニア州、サクラメント)のMark Lee博士およびStephen Siegel博士、TNO Nutrition and Food Research（オランダ、ザイスト）のJ.G.J. Mol博士から入手しました。CDFAからは地表水試料のGC/MS分析で得られた17のデータファイルも提供され、これらのファイルは当ラボでデコンボリューションレポーティングソフトウェア（DRS）を使用して処理しました。17の農作物の（Agilentの農薬メソッド用にロックされた）GC/MSデータファイルは、英国バークシャーのNRM Laboratoriesから提供されました。

表1：分析装置とその条件

ガスクロマトグラフ	Agilent 6890N
オートサンブラ	Agilent 7683
注入口	Agilent PTVをソルベントベントモードで使用
カラム	Agilent 30 m x 0.25 mm x 0.25 µm HP-5MS (部品番号 19091S-433)
キャリアガス	ヘリウム、定圧モード
RTL	クロルピリフォスメチルを16.596分にロック（カラムヘッド圧 = 17.1 psi）
オープン温度プログラム	70 °C (2分)、25 °C/分~150 °C (0分)、3°C/分~200 °C (0分)、8 °C/分~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/分~250°C (2分)；ベントタイム： 0.2分；ベント速度： 200 mL/分；ベント圧： 0.0 psi；ページ速度： 60.0 mL/分；ページ時間： 2.00分
注入量	15 µL (50 µLシリンジを使用)
質量選択検出器 (MSD)	Agilent 5973 inert
スキャン範囲	50~550 amu
イオン源、四重極、トランスファーラインの温度	それぞれ230、150、280 °C
ソルベントディレイ	4.00分
マルチプライヤ電圧	オートチューン電圧
ソフトウェア	
GC/MSDケミステーション	Agilent 製品番号 G1701DA (バージョンD01.00 sp1)
デコンボリューションレポーティングソフトウェア (DRS)	Agilent 製品番号 G1716AA
ライブラリサーチソフトウェア	NIST MS Search (バージョン2.0) (Agilent 製品番号G1033AのNIST '02質量スペクトルライブラリに含まれる。)
デコンボリューションソフトウェア	自動質量スペクトルデコンボリューション/同定ソフトウェア (AMDIS) (Agilent 製品番号G1033AのNIST '02質量スペクトルライブラリに含まれる。)
MSライブラリ	NIST '02質量スペクトルライブラリ (Agilent 製品番号 G1033A)； Agilent RTL農薬ライブラリ (製品番号G1049A)

結果と考察

RTLおよびRTLデータベース

RTLはAgilentによって開発された技術で、同一のGCメソッドとキャピラリカラムを使用している限り、世界のどんなラボでもどんなAgilent 6890 GCでも化合物の保持時間 (RT) を一致させることができます[13]。RTLを使用することにより、Agilentは各化合物のロックされた保持時間、化合物名、CAS番号、分子式、分子量、質量スペクトル (GC/MSデータベースのみ) を含むGCおよびGC/MS用のいくつかのリテンションタイムロックデータベースを開発しました[14]。AgilentのRTL農薬ライブラリには、GCが可能なほとんどすべての農薬、およびいくつかの内分泌攪乱物質を含む全部で567の化合物の情報が網羅されています。下で考察するDRSで使用する際には、このライブラリをNISTフォーマットに変換しました[15]。RTと化合物情報のための自動質量スペクトルデコンボリューション/同定ソフトウェア (AMDIS) ライブラリは、もとのRTL農薬ライブラリから別途作成しました。これらのライブラリは、ユーザが関心のある新たな農薬やその他の化合物の情報を任意に拡張できます[15]。

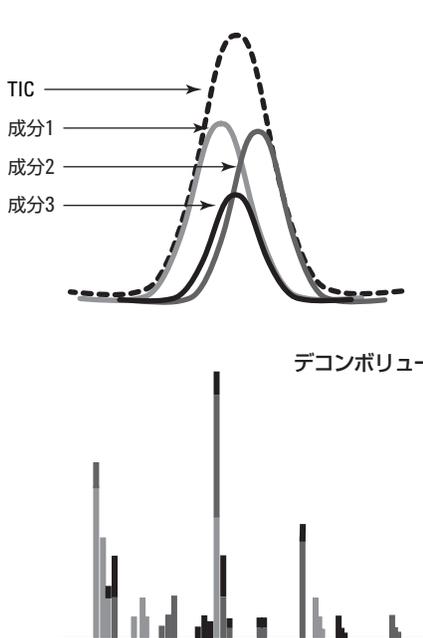
デコンボリューションの基本原則

GC/MSにおけるデコンボリューションは、重なり合った質量スペクトルを個々の化合物の「きれいなスペクトル」に「分離」する数学的手法です。図1は、このプロセスを単純化して示したものです。この図では、全イオンクロマトグラム (TIC) とピークスペクトルが示されています。よくあることですが、このピークは複数の成分が重なり合ったものであり、そのスペクトルはこれらの成分のスペクトルを混合したものです。質量スペクトルライブラリの検索だけでは、どんなによくても一致度の低い候補しか検索できず、混合「スペクトル」を構成している個々の成分のすべてを同定することが不可能であることは確かです。

デコンボリューションでは、スペクトル内でアバundanceが同時に上昇、下降するイオンを探します。その際、まず最初に四重極質量スペクトルに固有の歪みを補正し、クロマトグラフの個々のピークのより正確なピークRTを決定します。図1に示すように、デコンボリューションでは重なり合っている個々の成分の「きれいな」スペクトルが得られます。これらの個々のスペクトルをライブラリで検索すれば、一致度の高い候補が見つかることが期待できます。

Agilent DRSに組み込まれたAMDISは、米国標準技術研究所 (NIST) から提供されたものです[12]。

TICとスペクトル



デコンボリューションされたピークとスペクトル

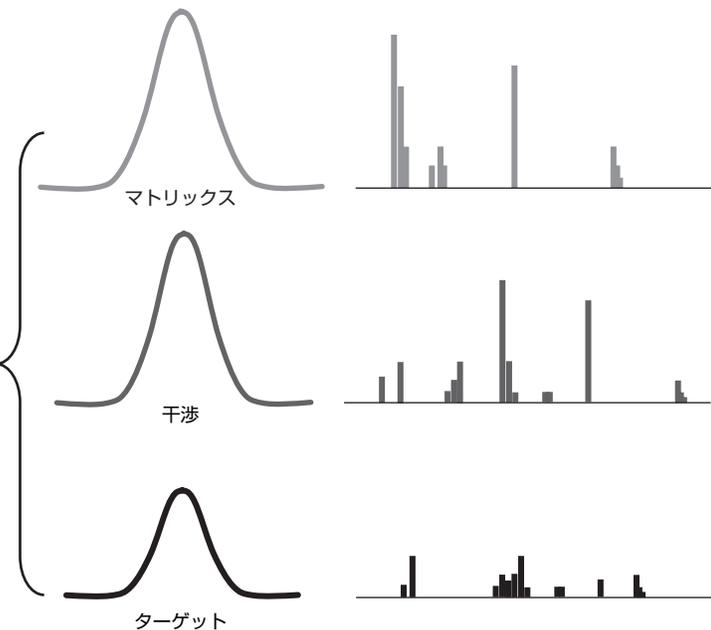


図1: 質量スペクトルのデコンボリューションプロセス

DRS

AgilentのDRSは、異なる3つのGC/MSソフトウェアパッケージを組み合わせたものです。その3つとは、1) Agilent GC/MSケミステーション、2) NIST '02 MSライブラリを含むNIST質量スペクトルサーチプログラム、および3) NIST AMDISソフトウェアです。DRSには、農薬、および内分泌攪乱物質として疑いのある物質567種類の質量スペクトルとロックされたRTのライブラリが含まれています。

DRSは、補完的に機能する3つの異なるデータ分析ステップを1つに統合したものです。まず最初に、GC/MSケミステーションソフトウェアがターゲットイオンと最大3つのクオリファイヤを使用してターゲット農薬を定量分析します。検出されたすべてのキャリブレーション済み化合物に関してその量が報告されます。データベースのその他の化合物に関しては、DRSソフトウェアと共に提供される農薬の平均応答係数 (RF) に基づいてそれら化合物の濃度の推定値が報告されます。続いて、DRS

はデータファイルをAMDISに送出し、AMDISはスペクトルをデコンボリューションし、デコンボリューションされたフルスペクトルを使用してAgilent RTL農薬ライブラリ (AMDISフォーマット) を検索します。AMDISでは、ユーザが設定した時間枠内に収まっている化合物のRTだけを篩い分けるフィルタを設定できます。RTLデータベースのRTはRTLを使用して高精度で再現されるため、この時間枠は非常に短く、一般的には20秒未満です。最後に、AMDISによって検出されたすべてのターゲットのデコンボリュートされたスペクトルが、147,000の化合物を含むNISTの質量スペクトルライブラリで検索され、確定されます。このステップでは、RTは必要とされません。

適当なメソッドをロードした後は、図2に示すようにマウスを1回クリックするだけでDRSレポートを生成できます。ソフトウェアは、毎回の分析後自動的に実行できます。あるいは後で1つのファイルまたは複数のファイルに対してバッチで実行させることもできます。

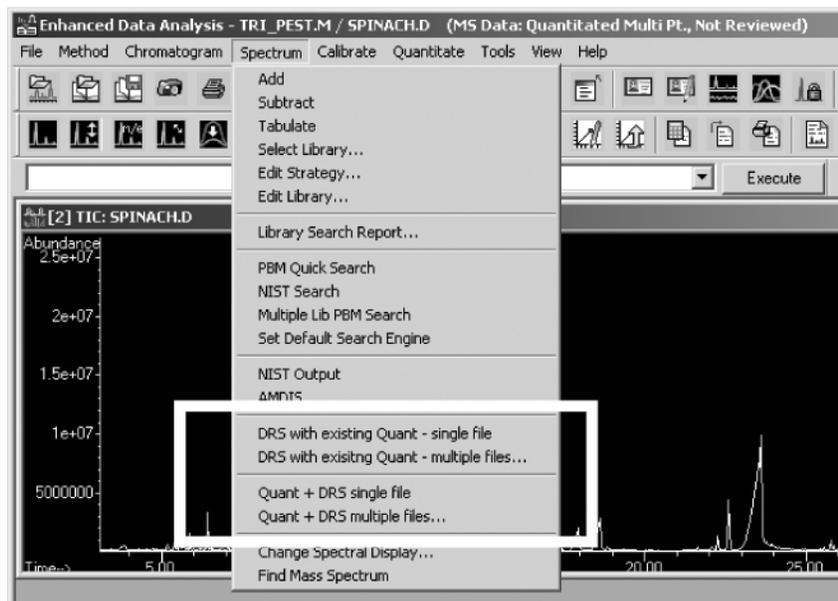


図2：DRSを1つのファイルに対して実行するか複数のファイルに対して実行するかを選択するためのオプションが表示されたケミステーションのプルダウンメニュー

混合ハーブ中の農薬

図3は、混合ハーブの抽出物のTICを示したものです。図4は、この試料のMSDデコンボリューションレポートです。レポートは、HTMLフォーマットで作成されているため、簡単にeメールで送信したりスプレッドシートにコピーしたりできます。この試料が選ばれたのは、ハーブは最も分析が困難な野菜の1つであるためです。ハーブの抽出物には、農薬の分析に干渉をもたらす多数の天然物が含まれています。

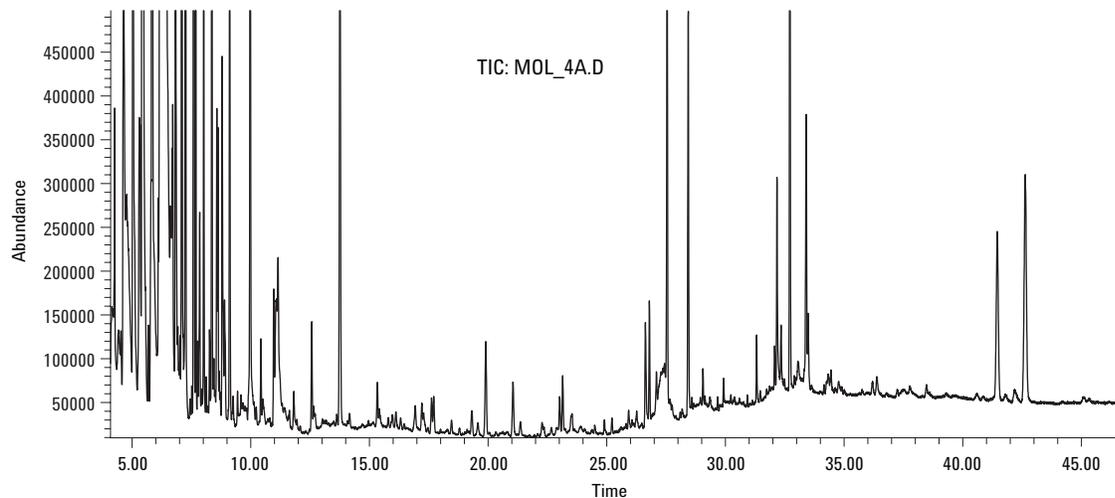


図3：混合ハーブのTIC

Document - Microsoft Internet Explorer provided by Agilent Technologies, Inc.

Address: C:\MSDCHEM\1\DATA\Hans Mol Data Feb 04 samples\Mar03_X4\MOL_4A.D\MOL_4A.htm

MSD Deconvolution Report
 Sample Name: Herbal Mix Control
 Data File: C:\MSDCHEM\1\DATA\Hans Mol Data Feb 04 samples\Mar03_X4\MOL_4A.D
 Date/Time: 02:03:11 PM Tuesday, Apr 27 2004

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

R.T.	Cas #	Compound Name	Agilent ChemStation Amount (ng)	AMDIS Match	R.T. Diff sec.	NIST Reverse Match	Hit Num.
13.038	1610180	Prometon		84	2.5	71	1
18.468	84742	Di-n-butylphthalate	1.7	90	2.5	84	1
23.654	38727558	Diethyl ethyl		69	3.2	73	1
24.079	72559	p,p'-DDE		64	3.3	55	1
27.436	51235042	Hexazinone		61	3.3	80	1
29.681	117817	Bis(2-ethylhexyl)phthalate	0.62	92	2.7	88	3
29.770	21609905	Leptophos		87	3.0	71	1
29.864	2385855	Mirex	0.06	63	2.4	86	2
34.344	51630581	Fenvalerate I		70	5.3	83	2
34.779	102851069	Fluvalinate-tau-I		63	4.6		
34.779	69409945	Fluvalinate				71	1
13.766		Phenanthrene-d10	10				

図4：図3に示した混合ハーブの抽出物のMSDデコンボリューションレポート

図4のDRSレポートには、ヒットしたそれぞれの化合物のRT、CAS番号、化合物名が示されています。レポートのいちばん下に表示されているフェナントレン-d10は、ケミステーションが検出した個々の化合物の量を推定するために使用した内部標準（ISTD）です。567のすべてのターゲット化合物には平均農薬応答係数が使用されているため、第4列に表示された量は推定値にすぎません。経験上、平均農薬応答係数を使用して報告されたほとんどの推定値は実際値との誤差が10%未満であることがわかっています。正確な定量には、正規の方法による農薬標準を使用したキャリブレーションが必要になりますが、データベースのすべての農薬についてこれを行うことは実際的ではありません。通常、ラボではターゲットとなるいくつかの農薬のキャリブレーション曲線を作成し、データベースのそれ以外の化合物に対しては平均RFを使用します。この方法では、新たな化合物が検出された場合に直ちにその濃度のおおよその推定値を計算し、キャリブレーションリストに追加すべきかどうかを判断できます。

レポートの第5列には、AMDISによるデコンボリューション、およびデコンボリュートされたフルスペクトルを使用してRTL農薬ライブラリを検索した結果得られた候補の一致度の係数が表示されます。ここでは、ケミステーションのソフトウェアによって検出された数よりも多くの化合物（プロメトン、p,p'-DDEなど）が同定されていますが、これは複雑な試料では一般的に見られることです。ロックされたRTを使用できる場合は、AMDISソフトウェアでRT条件を設定することが1つの大きなメリットになります。ここでは、データベースのRTとの差が±10秒を上回る候補が除外されています。第6列は、化合物のライブラリでのRTの値とクロマトグラムでの実際の値との差（秒数）が表示されます。

図4は、農薬の他に（内分泌攪乱物質としての疑いのある）2つのフタレートが同定されていることを示しています。フタレートは環境中に広く存在し、バックグラウンドから除去することはきわめて困難です。今回は、これらのフタレートが実際に試料から抽出されたのか、ラボで混入したのかを決定するための調査は行っていません。

DRSレポートの最後の2列は、AMDISでヒットしたすべての候補を147,000種類の化合物のNIST質量スペクトルライブラリで検索した結果を示しています。NISTライブラリの検索でAMDISの結果と一致する上位100の候補（値はユーザが設定可能）が見つかると、第7列にその一致係数が表示されます。最後の列にはヒットナンバーが表示され、「1」はNISTデータベースで最もよく一致していることを表します（最高の一致係数）。ときには、NISTライブラリの検索で上位100のスペクトルの中にAMDISでヒットした化合物が見つからない場合があります。その場合、ライブラリでそのスペクトルと最もよく一致する候補がレポートの次の行に表示されます。このことをよく示しているのが、34.779分に溶出したフルバリネート・タウIです（図4）。NISTライブラリでこのスペクトルに最もよく一致する候補、すなわちフルバリネートが次の行に表示されています。この場合、フルバリネート・タウIと同じCAS番号を持つ化合物は、NISTの質量スペクトルライ

ブラリに含まれていません。実際には、フルバリネート・タウIはD異性体で、フルバリネートはDL異性体の混合物です。

DRSによるデータ検証と従来の方法（メソッド）によるデータ検証のブラインド比較

DRSが食品抽出物や環境抽出物のような複雑な試料中のターゲット化合物の同定において従来の方法より優れていることは、多くの比較調査によって確認されています。以下では、これらの2つの調査について説明します。最初のケースでは、英国パークシャーのNRM LaboratoriesでAgilentのRTロック農薬法を使用して17種類の無添加の農作物試料が分析されました。そのデータファイル（ヒットした農薬のリストではない）はAgilentに送られ、新しいDRSを使用して分析されました。表2は、比較のために2つのラボでの結果を示したものです。NRMでは、手作業でデータを検証し、17の試料で28種類の農薬が同定されましたが、そのうちの4つは最低キャリブレーションレベルを下回っていました。DRSでは、同じデータファイルを使用して33種類の農薬が同定されました。

Agilentの自動化された方法では、春タマネギ試料中のアゾキシストロビンは同定されませんでしたでしたが、これはRTLの農薬ライブラリに含まれていなかったためです。この物質はNISTライブラリで検索できましたが、その分子イオンは403 amuで、NRMで使用した方法では400 amuまでしかスキャンされませんでした。DRSを使用した方法では、NRMでキャリブレーション範囲未満であった4つのすべての農薬が確定され、さらにNRMの方法には含まれていなかった5種類の農薬（ターバシル、ピリメタニル、メチオカーブ、ピリダベン、プロパモカルブ）が検出されました。

手作業による方法と自動化された方法の結果はよく一致しています。しかし、DRSではより多くの農薬を検出でき、手作業による方法で見逃されたいくつかの農薬を検出することが可能でした。また、手作業による方法では17の試料のデータを検証するのに約7時間かかったのに対し、DRSでは無人のコンピュータが50分で作業を完了しました。

表2：従来の方法とAgilentのDRSによるデータ検証で検出された17の無添加農作物試料中の農薬比較。アンダーラインを引いた農薬は一方の方法でのみ検出された農薬です。

試料	Agilent DRS法で検出され農薬*	NRMで手作業による方法で検出された農薬**
コリアンダ	プロピザミド クロルタールジメチル p,p'-DDE	プロピザミド クロルタールジメチル p,p'-DDE
ローズマリー	ターバシル ピリミカーブ クロルタールジメチル	検出されず*** ピリミカーブ クロルタールジメチル
春タマネギ	プロピザミド ピリメタニル ピリミカーブ メタラキシル イプロジオン DRSライブラリに含まれない†	プロピザミド 検出されず*** ピリミカーブ メタラキシル イプロジオン <u>アゾキシストロビン</u>
チャイブ（エゾネギ）	メチオカーブ イプロジオン	検出されず*** イプロジオン
チェリートマト	プロシミドン <u>ピリダベン</u>	プロシミドン 検出されず***
ズッキーニ	<u>フロパモカルブ</u>	検出されず***
ナス	プロシミドン ブプロフェジン 硫酸エンドスルファン イプロジオン	プロシミドン ブプロフェジン 硫酸エンドスルファン イプロジオン
フラットリーフパセリ	クロルタールジメチル	クロルタールジメチル
ラムズレタス	イプロジオン	イプロジオン‡‡‡
ロメインレタス	ジメトエート メタラキシル プロシミドン テルブコナゾール オメトエート††	ジメトエート メタラキシル プロシミドン テルブコナゾール‡‡‡ オメトエート
ファインエンダイブ	プロシミドン ラムダシハロトリン	プロシミドン ラムダシハロトリン
レッドポテト	クロロプロファム ピリミカーブ	クロロプロファム ピリミカーブ‡‡‡
ファインエンダイブ	ピリミカーブ	ピリミカーブ‡‡‡

* AgilentのDRSソフトウェアによるNRMデータファイルの再分析で検出された農薬。

** NRMでターゲット化合物分析と手作業による検証で検出された農薬。

*** NRMのターゲット化合物に入っていなかった化合物。

† Agilent RTL農薬ライブラリまたはDRSソフトウェアに入っていなかった化合物。

†† Agilentケミステーションで検出され、デコンボリューション後のAMDISまたはNISTライブラリの検索で検出されなかった物質。この化合物を慎重に調べた結果、オメトエートは試料中に存在しないと判断された。

‡‡‡ 検出されたものの、キャリブレーション範囲未満であった化合物。

地表水試料の分析：別の調査において、CDFAは17の地表水の抽出物で農薬を分析しました。図5は、典型的な2つの試料のTICを示したものです。CDFAは、RTLとRTLデータベース検索を使用しましたが、スペクトルのデコンボリューションの利点は使用しませんでした。その後、比較のためにDRSを使用して同じデータファイルを分析しました。

表3は、17の試料についてCDFAの手作業による分析結果とDRSによる分析結果を示したものです。CDFAでは17の試料で38の農薬を検出しましたが、そのうちのいくつかは複数の試料で共通していました。熟練の分析者が結果を検証し、誤った候補を排除し、すべての候補を検証するのに約8時間を要しました。DRSでは、CDFAで検出された37の化合物が検出され、加えてCDFAで検出された化合物の1つが間違っただ候補として指摘されました。また、

新たに34の農薬も検出され、17の試料で計71の農薬が検出されました。作業は完全に自動化され、無人のコンピュータですべてのデータファイル进行处理するのに要した時間は20分でした。

表3：17の地表水試料のGC/MSによる分析結果の比較。CDFAではRTLおよびRTLデータベース検索を使用し、デコンボリューションは使用していません。試料のデータファイルの分析にはAgilentのDRSを使用しました。

	CDFA	DRS
検出された農薬の数	37	同じ37 + 新たな34
間違っただ候補	1	0
分析に要した時間	～8時間	20分

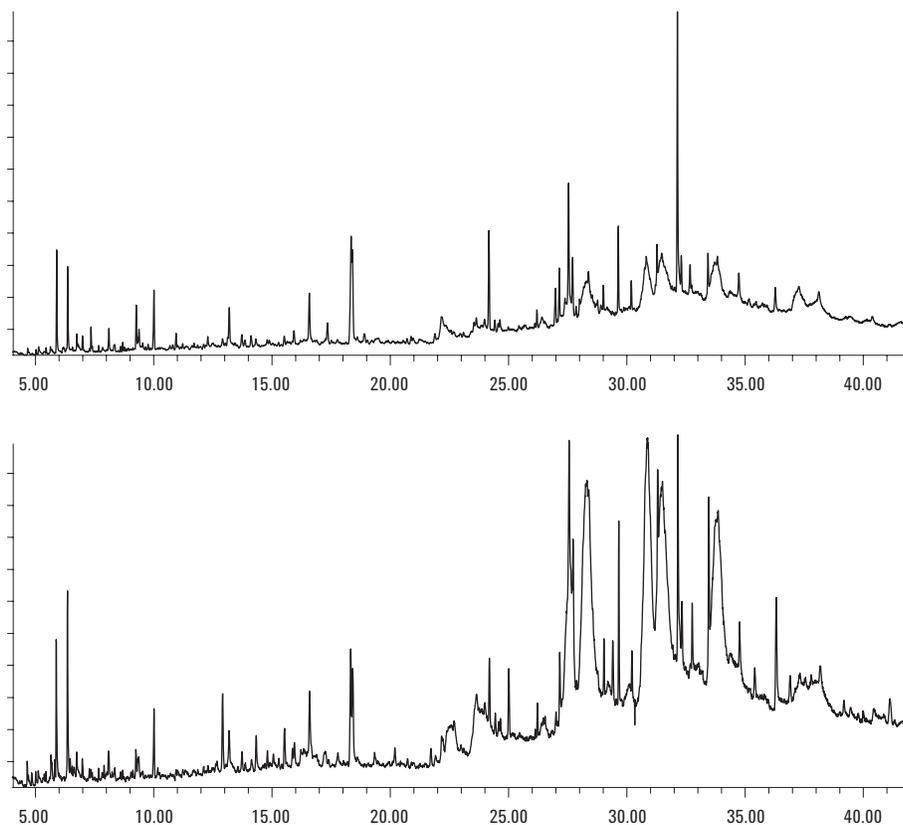


図5：CDFAによる一般的な地表水抽出物のTIC

結論

農薬分析のためのAgilentの新しいDRSソリューションは、ラボに数多くの現実的なメリットを提供します。

- **使いやすい:** このソフトウェアソリューションは非常に簡単に使用でき、6890N/5973イナートGC/MSシステムを使用するのに特殊な技術は必要ありません。ユーザは、デコンボリューションに関する複雑なことからを勉強したり新しいソフトウェアパッケージをマスターしたりする必要はありません。
- **自動化:** デコンボリューションレポートを毎回のランの後に自動的に生成したり、試料のバッチをまとめて一度に処理したりすることができます。
- **時間の節約:** 何時間もかかっていたデータの検証を分単位で行うことができます。
- **品質:** 間違った候補を正しい候補として検出したり、正しい候補を検出しなかったりといったエラーが最小限に抑えられます。
- **再現性:** 結果はオペレータの技術や経験に依存しません。
- **正確さ:** このアプリケーションノートで考察したような比較調査では、DRSは手作業によるデータ分析よりも正確に農薬を検出できることが確認されています。DRSは、同時に溶出するマトリックス成分によってターゲットとなる農薬の痕跡が見えにくくなる比較的複雑な試料にとくに有効です。
- **包括的:** この方法は、GCで検出可能なほとんどすべての農薬と、内分泌攪乱物質としての疑いのあるいくつかの物質を1回のGC/MSランでスクリーニングできます。メソッドには567の化合物が含まれているため、最も包括的な農薬スクリーニングツールとなっています。メソッドにはユーザが必要に応じて化合物を追加できます。
- **定量、半定量、および定性分析の結果を生成:** キャリブレーションされたすべての化合物を定量できます。その他のどんな化合物も、ソフトウェアが提供する平均農薬応答係数を使用して濃度を推定できます。

DRSの用途は農薬の分析に限定されません。他のターゲット化合物の質量スペクトルライブラリをAMDISフォーマットに変換し、このソフトウェアで使用することが可能です。たとえば、違法薬物、香辛料、香料、有機汚染物質などの既存のライブラリを使用できます。ユーザは、独自のライブラリを作成し、それをDRSで使用することも可能です。RTLライブラリや個々の化合物のロックRTは、かならずしも必要であるわけではありませんが、これらを使用すると間違った候補を検出する可能性を最小限に抑えられるため、あれば大きなメリットになります。

謝辞

試料やデータを提供して下さったMark Lee博士およびStephen Siegel博士 (CDFA: The California Department of Food and Agriculture)、J.G.J. Mol博士 (TNO Research オランダ)、およびイギリス、NRM Laboratoriesの経営陣とスタッフに謝意を表します。

参考文献

1. C.D.S Tomlin, editor. The Pesticide Manual, 13th edition, British Crop Protection Council, Surry, UK (2003).
2. http://www.who.int/pcs/docs/Classif_Pestic_2000-02.pdf
3. J. Cook, M.P. Beckett, B. Reliford, W. Hammock, and M. Engel (1999) *J. AOAC Int.*, **82** (6), 1419-1435.
4. M.A. Luke, J.E. Froberg, and H.T. Masumoto, (1975) *J. Assoc. Off. Anal. Chem.* **58**, 1020-1026.
5. M. Luke, J. Froberg, G. Doose, and H. Masumoto, (1981) *J. Assoc. Off. Anal. Chem.* **64**, 1187-1195.
6. B. McMahon and N. Hardin (1994) Pesticide Analytical Manual, Vol. 1, 3rd Ed., U.S. Food and Drug Administration, Washington, DC.
7. J. Fillion, R. Hindle, M. Lacroux, and J. Selwyn (1995) *J. AOAC Int.* **78**, 1252-1266.
8. J. Fillion, F. Sauvé, and J. Selwyn (2000) *J. AOAC Int.*, **83**, 698-712.
9. P. Wylie and B. Quimby, "A Method Used to Screen for 567 Pesticides and Suspected Endocrine Disrupters," Agilent Technologies, publication 5967-5860E www.agilent.com/chem.
10. H. Prest, P. Wylie, K. Weiner, and D. Agnew, "Efficient Screening for Pesticides and Endocrine Disrupters Using the 6890/5973 GC/MSD System," Agilent Technologies, publication 5968-4884E www.agilent.com/chem.
11. K. Weiner and H. Prest, "Retention Time Locking: Creating Custom Retention Time Locked Screener Libraries," Agilent Technologies, publication 5968-8657E www.agilent.com/chem.
12. National Institute of Standards and Technology, AMDIS Literature and Downloads website: http://www.amdis.net/What_is_AMDIS/AMDIS_Literature_and_Downloads/amdis_literature_and_downloads.html.

13. V. Giarocco, B. Quimby and M. Klee, "Retention Time Locking: Concepts and Applications," Agilent Technologies, publication 5966-2469E www.agilent.com/chem.
14. <http://www.chem.agilent.com/cag/servsup/usersoft/main.html#RTL>.
15. M. Szelewski and C.K. Meng, "Building and Editing RTL Screener Databases and Libraries," Agilent Technologies, publication 5989-0916EN www.agilent.com/chem.

さらに詳しくは...

弊社製品とサービスについて更に詳しい情報をご希望のお客様は是非弊社Web サイト (www.agilent.com/chem/jp) をご覧ください。

お問い合わせは： 0120-477-111
横河アナリティカルシステムズ株式会社
〒192-0033 東京都八王子市高倉町9-1

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. 2004

Printed in the USA
May 19, 2004
5989-1157JAJP