

平成 30 年度厚生労働科学研究費補助金

(健康安全・危機管理対策総合研究事業) 分担研究報告書

水道水質の評価及び管理に関する総合研究

- 水質分析法に関する研究 -

研究分担者	小林 憲弘 高木 総吉 宮脇 崇	国立医薬品食品衛生研究所 生活衛生化学部 (地独)大阪健康安全基盤研究所 衛生化学部 福岡県保健環境研究所 水質課
研究協力者	五十嵐 良明 内野 正 土屋 裕子 吉田 仁 安達 史恵 古閑 豊和 鈴木 俊也 小西 浩之 木下 輝昭 山崎 貴子 門上 希和夫 大窪 かおり 山田 早紀 上村 仁 仲野 富美 辻 清美 寺中 郁夫 齋藤 賢知 柿沼 良介 野村 あづみ 林 幸範 平林 達也 古川 浩司 中村 弘揮 岩間 紀知 粕谷 智浩 浴口 典幸	国立医薬品食品衛生研究所 生活衛生化学部 国立医薬品食品衛生研究所 生活衛生化学部 国立医薬品食品衛生研究所 生活衛生化学部 (地独)大阪健康安全基盤研究所 衛生化学部 (地独)大阪健康安全基盤研究所 衛生化学部 福岡県保健環境研究所 環境科学部 東京都健康安全研究センター 薬事環境科学部 東京都健康安全研究センター 薬事環境科学部 東京都健康安全研究センター 薬事環境科学部 東京都健康安全研究センター 薬事環境科学部 北九州市立大学環境技術研究所 佐賀県衛生薬業センター 理化学課 佐賀県衛生薬業センター 理化学課 神奈川県衛生研究所 理化学部 神奈川県衛生研究所 理化学部 神奈川県衛生研究所 理化学部 埼玉県企業局 水質管理センター 埼玉県企業局 水質管理センター 川崎市上下水道局水管理センター 水道水質課 川崎市上下水道局水管理センター 水道水質課 横須賀市上下水道局 技術部 計画課 大阪市水道局 工務部水質試験所 (一財)三重県環境保全事業団 調査部 (一財)岐阜県公衆衛生検査センター 検査分析部 (一財)岐阜県公衆衛生検査センター 検査分析部 (一財)千葉県薬剤師会検査センター 技術検査部 (一財)千葉県薬剤師会検査センター 技術検査部

横山 結子	千葉県衛生研究所	生活環境研究室
豊崎 緑	千葉県衛生研究所	生活環境研究室
坂田 脩	埼玉県衛生研究所	水・食品担当
渡邊 弘樹	埼玉県衛生研究所	水・食品担当
大家 寿彦	横須賀市健康安全科学センター	理化学検査係

研究要旨

水質分析法に関する研究として、水質分析をより簡便・迅速かつ高精度に分析できる新規分析法を開発するとともに、平常時および異常発生時の簡便かつ網羅的な水質スクリーニングを行うことができる分析手法について検討した。また、これらの分析法の妥当性評価を行うとともに、水道事業体、地方衛生・環境研究所および保健所に普及させることで、水質検査に関わる機関の分析技術の向上と水質監視体制の強化を図ることを目的とした。

スクリーニング分析では、多成分の化合物測定を行うため、装置性能を適切に評価し、良好な状態に維持しておくことが重要になる。そこで、農薬の中から、幅広い物性値をもつ 23 種を装置性能評価用の候補物質として選び、検討試験を行った。本試験では、水質マトリックスとして河川水の抽出液を注入し、マトリックス負荷による装置性能評価物質にどのような影響が生じるのかを調べた。その結果、マトリックスの注入回数に伴い、キャプタンやペンシクロン等の一部の農薬について、定量値やピーク形状に影響を及ぼすことが明らかになった。ただし、GC 部のインサートライナー交換やキャピラリーカラム切断等のメンテナンスを実施した後は、これらの影響はほぼ改善され、初期状態に近い装置性能に戻っていることが確認された。また、本試験で選定した装置性能評価物質は、市販の GC-MS 装置性能評価物質と比べ、早い段階でピーク形状に影響が現れることがわかった。これらのことは、水道水質の検査スクリーニング分析におけるメンテナンスの時期を判断する上で有用な知見になると考えられる。

A. 研究目的

水質分析法に関する研究として、水質分析をより簡便・迅速かつ高精度に分析できる新規分析法を開発するとともに、平常時および異常発生時の簡便かつ網羅的な水質スクリーニングを行うことができる分析手法について検討した。また、これらの分析法の妥当性評価を行うとともに、水道事業体、地方衛生・環境研究所および保健所に普及させることで、水質検査に関わる機関の分析技術の向上と水質監視体制の強化を図ることを目的とした。

現在、国内では人口減少に伴い、水需要の

減少と水道施設の老朽化に伴う設備費用が増加している。このように水道事業が深刻化する一方、水質管理の人員や予算が削減されるという別の問題も抱えている。そのような状況下において、水道水の安全性を確保し続けるためには、より迅速で簡便な水質検査方法が必要になる。しかし、従来の個別分析法では、多数の分析法を用いる必要があり、時間、労力、コストの面で負担が大きくなる。これらの問題を解決するためにも、迅速かつ網羅的に計測する新たなスクリーニング分析法の開発が急務となる。

そこで、我々は水道水質スクリーニング分析法として、ガスクロマトグラフ-質量分析計 (GC-MS) 用の自動同定定量データベースシステムの開発に取り組んできた。厚生労働省がリストアップしている農薬のうち、GC-MS で測定可能な 173 種、代謝産物 2 種および構造異性体 1 種の計 176 種を対象とし、複数機関の GC-MS を使用してデータベースを構築した。昨年度は、そのデータベースの精度の検証した結果、一部の物質を除いた場合、装置や測定機関に関係なく、多くの農薬で定量イオンや相対保持時間が一致することがわかった。また、定量値の誤差も少なかったことから、実試料への適用が可能であると考えられた。今後、実用化に向けた検討を行うが、その 1 つに GC-MS 装置性能評価がある。

GC-MS 測定は、試料中のマトリックス成分による汚れや劣化等により、装置性能が低下することが知られている (門上ら 2004)。具体的には、検出ピーク面積値の減少やのテーリングなどがあげられるが、この場合、ターゲット化合物の同定・定量精度に大きな影響を及ぼすことになる。その要因としてあげられるのが、GC 部インサートライナーやキャピラリーカラムの汚れ、イオン源の汚れ、試料中のマトリックス成分の影響などがある。特に、インサートライナーやキャピラリーカラムの汚れによる影響については、これまでに多くの報告例があり (奥村 1995, 津村ら 1998)、注意を要するポイントである。

GC-MS スクリーニング分析法で信頼できる定量値を得るためには、装置の状態を可能な限りデータベース構築時の性能に近づけることである。特に、本スクリーニング法は、多成分の化合物測定を行うことから、装置性能を適切に評価し、良好な状態に維持しておくことが分析精度を確保する上で必須となる。そこで、本試験では 176 種の農薬の中から 23 種を装置性能評価用の候補物質として選び、水道水質の連続測定によって生じる装置性能

の変化について、GC 部を対象に評価基準に関する試験を行った。

B. 研究方法

1 対象物質

本研究では測定対象とした 176 種農薬の中から、水道水や水道原水において検出頻度が高い物質、GC-MS 測定による検出感度が低い極性物質、装置性能評価物質として報告例がある物質 (陣矢, 2011)、計 23 種を GC/MS スクリーニング分析用の装置性能評価の候補物質として選定した (アセフェート、アトラジン、ベンタゾン、プロモブチド、キャプタン、クロロタロニル、ジクロメジン、フェニトロチオン、フルアジナム、フルスルファミド、ホスチアゼート-1、ホスチアゼート-2、イソフェンホスオキソン、イソキサチオン、モリネート、オリサストロビン、ペンシクロン、ピロキロン、キノクラミン、シマジン、テニルクロール、チアクロプリド、トリクロルホン)。また、市販クワイテリアに含まれる物質のうち、GC 部の注入口の汚れに敏感なキャプタホールを比較用として追加した (計 24 物質、水道クワイテリアと略す)。物質の極性を表す LogPow や水溶解度の範囲はそれぞれ $-0.85 \sim 4.82$ 、 $0.3 \sim 818,000 \text{ mg/L}$ であり、親水性物質を含む幅広い化合物で構成されている。対象物質の詳細を表 1 に示す。

また、比較対照として、市販の GC/MS 装置性能評価物質 (NAGINATA 用クワイテリアサンプル、林純薬工業株式会社) 計 18 物質 (2,4-ジクロロアニリン、2,4-ジニトロアニリン、2,6-ジクロロフェノール、2,6-ジメチルアニリン、2,6-ジメチルフェノール、ベンゾチアゾール、フタル酸ブチルベンジル、キャプタホール、クロルピリホス、クロルピリホスメチル、フタル酸ジエチル、フェニトロチオン、イソキサチオン、オクタノール、ペンタクロロフェノール、シマジン、リン酸トリブチル、リン酸トリス (2-クロロエチル)) を評

価対象とした（以下、市販クライテリアと略す）。その詳細を表2に示す。

2 分析法

2.1 試薬

農薬の標準品は和光純薬工業製を使用した。各標準品 5 mg をメスフラスコに入れ、ジクロロメタンで 50 mL に調製したものを標準液とした（100 mg/L）。内標準物質は、RESTEK 社製の Custom Internal Standard を用い、多環芳香族炭素水素を主体とするの重水素標識化合物 8 種（4-クロロトルエン-d₄, 1,4-ジクロロベンゼン-d₄, ナフタレン-d₈, アセナフテン-d₁₀, フェナントレン-d₁₀, フルオランテン-d₁₀, クリセン-d₁₂, ペリレン-d₁₂）をジクロロメタンで 100 mg/L に調製したものを内標準液とした。各農薬標準液および内標準液 500 μL をメスフラスコに入れ、ジクロロメタンで 50 mL に混合調製（各濃度：1 mg/L）したものを試験用試料（水道クライテリア）とした。

なお、比較用の市販クライテリアは、同内標準物質を含有し、各物質が 1 mg/L に調製されているため、そのまま試験用試料として測定に供試した。

2.2 試験試料

GC-MS の装置性能を調べるためには、実試料を注入し、GC 部のインサートライナーやキャピラリーカラム等を劣化させる必要がある。そのため、本試験では、水質試料の中でも比較的マトリックスを含有する河川水を用いることにした。本研究の協力機関であるいくつかの水道事業体から、前処理済の河川水のジクロロメタン抽出液を提供してもらった。本試験では、これをマトリックス負荷用の試験用試料（以下、マトリックス試料と略す）とした。

2.3 分析条件

本試験で使用した GC-MS は Agilent 製の 6890/5973N である。装置性能評価を行うため、本研究では 2 つ GC-MS 条件を使用した。

1 つは水道水質検査用のスクリーニング分析法で採用した条件（小林ら, 2017）、もう 1 つは門上らが考案した条件（門上ら, 2004）である。前者はマトリックス試料を測定する際に使用し、後者は水道および市販クライテリアを測定する際に使用した。これにより、マトリックス負荷による装置性能の状態変化を段階的に評価できると考えた。各 GC-MS 条件の詳細を表 3 および 4 に示す。

なお、本試験では、水道および市販クライテリアの測定データの同定および定量は、自動同定定量ソフトウェア NAGINATA2（西川計測株式会社）を使用した。

2.4 装置性能評価試験

GC-MS の装置性能評価試験は以下の手順で実施した。オートチューニング後、評価試験に使用する GC-MS の性能状態を調べるため、市販クライテリアを用いてシステムパフォーマンスチェックを行った。ピーク形状や保持時間等に影響する注入口やキャピラリーカラムについて、NAGINATA で判定する基準内（西川計測株式会社）であることを確認し、装置性能が良好であることを事前に確認した。

初めに、実試料注入前の装置の初期状態を把握するため、水道および市販クライテリアを 1 回ずつ測定した（Inj0）。次に、マトリックス試料を 20 回連続測定した後、水道および市販クライテリアを 1 回ずつ測定した。以降、これら一連の測定操作を繰り返し（Inj20, 40, 60, 80, 100, 120, 140, 160, 180, 200, 220, 240, 260）、マトリックス試料の測定は計 260 回、水道および市販クライテリアの測定はそれぞれ 14 回であった。

その後、メンテナンスとして GC 部のインサートライナーの交換、キャピラリーカラム注入口側を 50 cm 切断した。再度オートチュ

ーニングをした後、水道および市販クライテリアを1回ずつ測定した。さらに、GC-MSの検出感度の安定性を確認するため、マトリックス試料を20回連続測定した後、水道および市販クライテリアを1回ずつ測定した。

C. 結果と考察

1 マトリックス負荷による GC-MS 装置性能への影響 (水道クライテリア)

1.1 定量値の変化について

水道クライテリアを用いて、マトリックス負荷による定量値への影響について評価した。なお、各測定データは、初回測定時 (Inj0) の定量値を100%とした場合の比率として表し、測定回数に伴う定量値の変化を調べた。その結果を表5に示す。なお、定量値の変化は定量比率として表し、次式により算出した。定量比率 (%) = 相対定量値 (Inj) / 相対定量値 (各 Inj) × 100

表5中のInj0, 100, 180, 260, メンテ直後, Inj20はそれぞれ、付表1~6のデータに基づくものであり、例として、ペンシクロンの定量比率の算出過程を以下に示す。

例) ペンシクロン (Inj260) の定量比率 (%) (0.697 [Inj260: 付表4] / 1.176 [Inj0: 付表1]) × 100 = 59 (Inj260: 表5)

表5について、マトリックス試料の測定回数が160回 (Inj160) まででは、各物質の定量比率は概ね80~120%の範囲であり、大きな差異はみられなかった。しかし、Inj160以降ではキャプタホール、キャプタン、フルスルファミド、ペンシクロンの比率が徐々に低下して、Inj260では50~60%まで低下していた。以上の結果から、これらの物質はマトリックスの負荷によって、定量値が低下することが示された。キャプタホールは、GC部注入口の性能評価用として使用されているが (陣矢, 2011)、本試験の結果からキャプタン、フルス

ルファミド、ペンシクロンについても同様の挙動を示すことがわかった。

一方、GC部のメンテナンス (インサートライナーの交換およびカラム注入口側50cm切断) 後に実施した測定では、多くの物質で定量比率が向上し、80~120%の範囲内であった。この結果から、メンテナンスを実施することで初回測定時の状態に近い装置性能に戻ることが確認された。しかし、一部の物質では120%を超え、アセフェートでは142%、キャプタホールでは146%、トリクロルホンについては194%を示した。これら回収率の異常値の原因について現段階では不明であるが、新品インサートライナー或いはキャピラリーカラムが影響した可能性が考えられた。奥村は、マトリックスの負荷がない状態において、農薬のオキソン体などの極性物質の回収率が異常に高くなることを報告している (奥村, 1995)。また、陣矢らは、インサートライナーやキャピラリーカラムに活性点がある場合、内標準物質と対象物質によって相対感度に差があることを指摘している (陣矢ら, 2011)。本試験においても、メンテナンスの前後で内標準物質の面積値に大きな差異はなかったが、アセフェート、キャプタホール、トリクロルホンの面積値については変動がみられた。

なお、その後にマトリックス試料を20回注入して水道クライテリアを測定したところ、アセフェート、キャプタホール、トリクロルホンはそれぞれ121%、94%、132%まで低下していた。この結果から、インサートライナーやキャピラリーカラムの活性点がコーティングされて改善した可能性も考えられたが、その詳細については今後の検討課題としたい。

1.2 保持時間の変化について

マトリックス負荷による保持時間への影響について調べた。マトリックス負荷によって、保持時間の実測値が予測値よりも遅くなることから (陣矢ら, 2011)、保持時間差 (測

定保持時間から予測保持時間を減算した値)を指標として用いた。つまり、マトリックス負荷による影響があれば、保持時間差(RT, 秒)が大きくなる。

本試験では、初回測定時(Inj0)の保持時間差を基準とし、各測定で得られた保持時間差で減算して、これらを比較することで保持時間の変化を調べた。その結果を表6に示す。なお、表中のInj0, 100, 180, 260, メンテ直後, Inj20 はそれぞれ付表1~6のデータに基づくものであり、例として、ペンシクロンの保持時間差の算出過程を以下に示す。

例)ペンシクロン(Inj260)の保持時間差(秒)
(1.73 [Inj260: 付表4]) - (0.60 [Inj0: 付表1])
= 1.13 (Inj260: 表6)

表6についてInj200までは、RTが概ね1秒以内でほぼ変化はなかったが、Inj220以降でチアクロプリドの保持時間が遅くなる傾向がみられ、Inj260ではRTが4.91秒であった。ただし、メンテナンス直後の測定では、すべての物質のRTが1秒以内に収まり、メンテナンスによって保持時間のズレが改善されたことがわかった。

1.3 ピーク形状について

マトリックス負荷によるピーク形状への影響について調べた。水道クライテリアは、幅広い物性値をもつ物質で構成されている。ここでは、水道水および水道原水から検出頻度が高い物質としてプロモブチドとモリネートを、装置性能に敏感な反応を示した物質として、ペンシクロンとアセフェートを例とし、各クロマトグラムの変化を図1~4に示す。

プロモブチドとモリネートについては、Inj0~Inj260およびメンテナンス直後の測定において、各ピーク形状に変化がみられなかった。一方、ペンシクロンについては、マトリックス試料の注入回数に伴う顕著な変化がみられた。Inj0~Inj100まではピーク形状に大

きな変化はなかったが、Inj180ではピークのテーリングが確認された(図3)。さらにInj260では、より大きなテーリングを示した。また、アセフェートもペンシクロンほど顕著ではなかったが、同様にマトリックス負荷に伴うピークテーリングが確認された(図4)。ただし、両物質ともメンテナンス後には、初回測定時に近いピーク形状に戻っていることが確認された。

2 マトリックス負荷による GC-MS 装置性能への影響(市販クライテリア)

2.1 定量値の変化について

市販クライテリアを用いて、マトリックス負荷による定量値の変化を調べた。その結果を表7に示す。表中のInj0, 100, 180, 260, メンテ直後, Inj20 はそれぞれ、付表7~12のデータに基づくものであり、例として、キャプタホールの定量比率の算出過程を以下に示す。

例)キャプタホール(Inj260)の定量比率(%)
(0.480 [Inj260: 付表10] / 1.060 [Inj0: 付表7])
× 100 = 45 (Inj260: 表7)

表7について、マトリックス試料の測定回数が160回(Inj160)までは、各物質の定量比率は概ね80~120%の範囲内であり、大きな差異はみられなかった。しかし、Inj160以降はキャプタホールの比率が漸次的に低下して、Inj260では50%を下回った。キャプタホールは市販クライテリアにおいてGC部注入口の性能評価として使用されている。本試験においても、Inj160以降の測定においてマトリックスの負荷によって吸着や分解等が起こり、定量値が低下したのではないかと推察された。

一方、GC部のメンテナンスをした後は、キャプタホールの定量比率が45%から135%に向上した。これは、前述した水道クライテ

リアと同じ傾向であるが、市販クライテリアではキャプタホールの定量比率が最も高く、他の物質については概ね 80～120%の範囲内であった。さらに、メンテナンス後にマトリックス試料を 20 回注入して市販クライテリアを測定したところ、すべての物質で 90～110%の範囲内であった(表 7)。

2.2 保持時間の変化について

マトリックス負荷による保持時間への影響について調べた。その結果を表 8 に示す。なお、表中の Inj0, 100, 180, 260, メンテ直後, Inj20 はそれぞれ付表 7～12 のデータに基づくものであり、例として、2,4-ジニトロアニリンの保持時間差の算出過程を以下に示す。

例) 2,4-ジニトロアニリン (Inj260) の保持時間差 (秒)

$(2.83 [\text{Inj260: 付表 10}]) - (0.93 [\text{Inj0: 付表 7}]) = 1.90 (\text{Inj260: 表 8})$

表 8 について Inj220 までは、RT が 1 秒以内でほぼ変化がなかったが、Inj240 以降で 2,4-ジニトロアニリンの保持時間が遅くなる傾向がみられた。ただし、メンテナンス直後の測定では、2,4-ジニトロアニリンの RT が 1 秒以内に収まっていた。この結果から、水道クライテリアと同様に、メンテナンスの実施によりマトリックスの影響を改善することができた。

2.3 ピーク形状について

マトリックス負荷によるピーク形状への影響について調べた。市販クライテリアでは、定量値への影響がみられたキャプタホールと水道クライテリアの中にも含まれるシマジンのほか、極性基を有するペンタクロロフェノールおよび 2,6-ジメチルアニリンを例とし、各クロマトグラムの変化を図 5～8 に示す。

キャプタホールは、マトリックス試料の注

入回数に伴い、定量比率が減少したが、ピーク形状には変化がみられなかった(図 5)。また、シマジンについても同様にピーク形状に変化がなかった(図 6)。一方、ペンタクロロフェノールはインサートライナーやキャピラリーカラムがマトリックスによって汚れた場合にピーク形状等に影響することが知られているが(陣矢ら 2011)、本試験では Inj260 において軽微なテーリングがあった程度で大きな変化はみられなかった(図 7)。同様にピークテーリングの指標として用いられる 2,6-ジメチルアニリンも大きな変化は認められなかった(図 8)。この原因については、装置性能評価に使用するマトリックス試料が異なるためだと考えられた。すなわち、陣矢らが使用したのは食品試料のマトリックスであり、本試験では河川水試料をマトリックスとした。一般的に、水質試料は食品試料よりも夾雑成分が少ないことから、本試験で使用したマトリックス試料では、ペンタクロロフェノールや 2,6-ジメチルアニリンのピーク形状に影響が現れにくかったと考えられた。

3 水道および市販クライテリアによる装置性能評価試験結果の比較

本試験では、水道および市販クライテリアを用いて、マトリックス負荷に伴う GC-MS 装置性能の変化について調べた。それぞれの評価項目(定量値・保持時間・ピーク形状)について比較した結果を以下にまとめる。

定量値への影響：両方のクライテリアに含まれていたキャプタホールが Inj160 以降に定量比率が 80%を下回り、マトリックスの影響を受けやすいことがわかった。また、水道クライテリアのキャプタン、フルスルファミド、ペンシクロンもキャプタホールと同様の挙動を示すことが明らかになった。

保持時間への影響：水道クライテリアでは Inj220 以降でチアクロプリドの保持時

間が遅くなり，市販クライテリアでは Inj240 以降で 2,4-ジニトロアニリンの保持時間が遅くなる傾向がみられた。

ピーク形状への影響：水道および市販クライテリアの間で，ピーク形状に影響が生じるタイミングに差がみられた。市販クライテリアでは Inj260 でペンタクロロフェノールのピークに軽微なテーリングがあったのに対し，水道クライテリアでは，ペンシクロンが Inj180 の段階でテーリングが確認された。

D. 結論

GC/MS スクリーニング分析における装置性能を調べるため，水道クライテリア(24種)と市販クライテリア(18種)を用いて評価試験を行った。その結果，マトリックス負荷による定量値や保持時間への影響に関しては，両クライテリアの間で大きな差はなかったが，ピーク形状への影響のタイミングについては明らかな差が認められた。

このことは，本スクリーニング法を水道水質の検査に適用する上で重要な知見となる。すなわち，早い段階でピーク形状への影響が現れるペンシクロン等(水道クライテリア)を基準にメンテナンス時期を判断した方が，分析精度を確保する上で望ましいと考えられる。本試験の成果は，水道水質の検査スクリーニング分析法を実用化する上で有用な情報になると期待される。

E. 健康危機情報

なし

F. 研究発表

1. 論文発表

- 1) 小杉有希，渡邊喜美代，鈴木俊也，小西浩之，守安貴子：専用水道の水道水中の非イオン界面活性剤の偽陽性事例．水道協会雑誌，87(7)，17-21 (2018).

- 2) 小林憲弘，土屋裕子，堀池秀樹，増田潤一，五十嵐良明：液体クロマトグラフィー-タンデム質量分析による水道水中の141農薬の一斉分析法の開発．水環境学会誌，42(1)，13-25 (2019)．
- 3) 木下輝昭，山崎貴子，中川慎也，小田智子，小西浩之，守安貴子：アミトラスおよびその分解物の LC-MS/MS による同時分析および消毒剤による分解挙動．水環境学会誌，42(2)，73-78 (2019).

2. 学会発表

- 1) 小林憲弘：水質検査の現状の課題と最新の検討状況．第27回環境化学討論会自由集会「水質検査の将来のあり方について考える(その2)」(2018.5.23 沖縄県那覇市)．
- 2) 高木総吉：GC/MS スクリーニング分析法に用いる検量線の比較．第27回環境化学討論会自由集会「水質検査の将来のあり方について考える(その2)」(2018.5.23 沖縄県那覇市)．
- 3) 宮脇崇：GC/MS スクリーニング分析における装置性能評価．第27回環境化学討論会自由集会「水質検査の将来のあり方について考える(その2)」(2018.5.23 沖縄県那覇市)．
- 4) 安達史恵，吉田仁，高木総吉，小泉義彦，中島孝江，北村雅世，鳥居将士，吉田直志，小林憲弘：水道原水および浄水中における農薬類代謝物の分析方法の検討および実態調査．第27回環境化学討論会(2018.5.24 沖縄県那覇市)．
- 5) 高木総吉，小林憲弘，宮脇崇，安達史恵，吉田仁，木下輝昭，中川慎也，梅津萌子，仲野富美，辻清美，上村仁，大窪かおり，門上希和夫：ガスクロマトグラフ-質量分析計を用いた水道水中農薬類のスクリーニング分析法の検討．第27回環境化学討論会(2018.5.24 沖縄県那覇市)．

- 6) 小林憲弘,土屋裕子,高木総吉,宮脇崇,門上希和夫,五十嵐良明:GC/MS スクリーニング分析法を用いた水道原水・水道水中農薬の実態調査.第 27 回環境化学討論会(2018.5.24 沖縄県那覇市).
- 7) 小林憲弘,土屋裕子,高木総吉,宮脇崇,門上希和夫,五十嵐良明:水道水中農薬の GC/MS スクリーニング分析法の開発と実試料への適用.第 21 回日本水環境学会シンポジウム(2018.9.4 島根県松江市).
- 8) 小林憲弘,土屋裕子,高木総吉,宮脇崇,門上希和夫,五十嵐良明:GC/MS スクリーニング分析による水道原水・水道水中の 176 農薬の実態調査.環境科学会 2018 年会(2018.9.10 東京都北区).
- 9) 小林憲弘:水道水質検査のためのスクリーニング分析法の開発と適用.環境科学 2018 年会シンポジウム「スクリーニング分析法を用いた水道水質検査」(2018.9.11 東京都北区).
- 10) 高木総吉:GC/MS を用いた農薬類のスクリーニング分析における定性・定量精度評価.環境科学 2018 年会シンポジウム「スクリーニング分析法を用いた水道水質検査」(2018.9.11 東京都北区).
- 11) 宮脇崇:GC/MS スクリーニング分析における装置性能の評価.環境科学 2018 年会シンポジウム「スクリーニング分析法を用いた水道水質検査」(2018.9.11 東京都北区).
- 12) 木下輝昭:環境水中でのアミトラズおよびその分解物の挙動.環境科学 2018 年会シンポジウム「スクリーニング分析法を用いた水道水質検査」(2018.9.11 東京都北区).
- 13) 吉田仁:農薬類代謝物の分析法検討及び浄水場における検出状況.環境科学 2018 年会シンポジウム「スクリーニング分析法を用いた水道水質検査」(2018.9.11 東京都北区).
- 14) Norihiro Kobayashi, Yuko Tsuchiya, Sokichi Takagi, Takashi Miyawaki, Kiwao Kadokami, Yoshiaki Ikarashi: Monitoring of 176 agricultural chemicals in raw water and tap water by GC/MS screening analytical method. SETAC North America 39th Annual Meeting (2018. 11. 5 Sacramento, CA, USA).
- 15) Sokichi Takagi, Norihiro Kobayashi, Takashi Miyawaki, Fumie Adachi, Jin Yoshida, Yuko Tsuchiya, Kiwao Kadokami: Development of an analytical screening method for agricultural chemicals in drinking water using GC-MS. SETAC North America 39th Annual Meeting (2018. 11. 5 Sacramento, CA, USA).
- 16) 小池真生子,長谷川有紀,安達史恵,吉田仁,高木総吉,小泉義彦,中島孝江,北村雅世,鳥居将士,吉田直志,小林憲弘:大阪府内河川および浄水場における農薬代謝物の検出状況と浄水処理評価.平成 30 年度地方衛生研究所全国協議会近畿支部理化学部会研修会(2018.11.22 大阪府東大阪市).
- 17) 小池真生子,長谷川有紀,安達史恵,吉田仁,高木総吉,小泉義彦,中島孝江,北村雅世,鳥居将士,吉田直志,小林憲弘:水環境中における農薬代謝物の検出状況と浄水処理評価.第 55 回全国衛生化学技術協議会年会(2018.11.29 神奈川県横浜市).
- 18) 長谷川有紀,小池真生子,高木総吉,安達史恵,吉田仁,小林憲弘:水環境中における除外農薬類の検出特性.第 55 回全国衛生化学技術協議会年会(2018.11.29 神奈川県横浜市).
- 19) 土屋裕子,小林憲弘,高木総吉,宮脇崇,門上希和夫,五十嵐良明:水道原水・水

道水中の 176 農薬の GC/MS スクリーニング分析による実態調査．第 55 回全国衛生化学技術協議会年会（2018.11.29 神奈川県横浜市）．

- 20) 高木総吉, 小林憲弘, 宮脇崇, 安達史恵, 吉田仁, 土屋裕子, 木下輝昭, 中川慎也, 梅津萌子, 仲野富美, 辻清美, 上村仁, 大窪かおり, 門上希和夫：176 種農薬を対象とした GC-MS によるスクリーニング分析法の定量精度について．第 55 回全国衛生化学技術協議会年会(2018.11.30 神奈川県横浜市)．
- 21) 高木総吉：質量分析計を用いた水質分析におけるターゲットスクリーニング分析法の適用について．平成 30 年度市町村水道水質共同検査水質講演会（2018.12.5 大阪府大阪市）．

1. 特許取得

なし

2. 実用新案特許

なし

3. その他

なし

H. 参考文献

- 1) 小林憲弘, 土屋裕子, 高木総吉, 宮脇崇, 門上希和夫, 五十嵐良明, 2017. 水道水中農薬の GC/MS ターゲットスクリーニング分析法の開発と実試料への適用, 第 21 回日本水環境学会シンポジウム講演要旨集, 144-145.
- 2) 門上希和夫, 棚田京子, 種田克行, 中川勝博, 2004. 有害化学物質一斉分析用ガスクロマトグラフィー/質量分析法データベースの開発, 分析化学, 53, 581-588.
- 3) 奥村為男, 1995. キャピラリー・GC/MS による水中の農薬及びその酸化生成物の定量 標準液の PEG 共注入法, 環境化学, 5, 575-583.
- 4) 津村ゆかり, 中村優美子, 外海泰秀, 柴田正, 玄米中の殺菌剤テクロフタラム及びその代謝物テクロフタラムイミドの分析, 食品衛生学会雑誌, 39, 2, 142-147.
- 5) 陣矢大介, 岩村幸美, 門上希和夫, 宮川治彦, 中川勝博, 近藤友明, 楠田哲也, 2011. 半揮発性化学物質多成分同時分析のためのガスクロマトグラフ四重極型質量分析計の性能評価物質, 分析化学, 60, 965-975.
- 6) 西川計測株式会社：GC/MS 精度管理・相対定量ソフトウェア NAGINATA, <<http://www.nskw.co.jp/analytical/product/chemplus/naginata.php>>, (accessed 2019-4-2).

表1 GC/MSスクリーニング分析用の装置性能評価候補物質（水道クライテリア）

化合物名	Log P_{ow}	水溶解度 (mg/L)	化合物名	Log P_{ow}	水溶解度 (mg/L)
アセフェート	-0.85	818000	テニルクロール	3.53	11
アトラジン	2.61	34.7	トリクロルホン	0.51	120000
イソキサチオン	3.73	1.9	ピロキロン	1.57	4000
イソフェンホスオキソン	-	-	フェニトロチオン	3.3	38
オリサストロピン	-	-	フルアジナム	3.56	1.76
キノクラミン	2.12	6300	フルスルファミド	-	2.9
キャプタホール	3.8	1.4	プロモブチド	3.47	3.54
キャプタン	2.8	5.1	ベンシクロン	4.82	0.3
クロロタロニル	3.05	0.6	ベンタゾン	2.34	500
ジクロメジン	3.55	0.74	ホスチアゼート-1	1.68	9850
シマジン	2.18	6.2	ホスチアゼート-2	1.68	9850
チアクロプリド	1.26	185	モリネート	3.21	970

表2 市販のGC/MS装置性能評価物質（市販クライテリア）

化合物名	Log P_{ow}	水溶解度 (mg/L)	化合物名	Log P_{ow}	水溶解度 (mg/L)
2,4-ジクロロアニリン	2.78	620	クロルピリホスメチル	4.31	4.76
2,4-ジニトロアニリン	1.84	1440	シマジン	2.18	6.2
2,6-ジクロロフェノール	2.75	1900	フェニトロチオン	3.3	38
2,6-ジメチルアニリン	1.84	8240	フタル酸ジエチル	2.42	1080
2,6-ジメチルフェノール	2.36	6050	フタル酸ブチルベンジル	4.73	2.69
イソキサチオン	3.73	1.9	ベンゾチアゾール	2.01	4300
オクタノール	3.0	540	ペンタクロロフェノール	5.12	14
キャプタホール	3.8	1.4	リン酸トリス(2-クロロエチル)	1.44	7000
クロルピリホス	4.96	1.12	リン酸トリブチル	4.0	280

表3 GC-MS測定条件（マトリックス試料測定用）

機 器	項 目	設 定
GC	カラム	DB-5MS (30 m × 0.25 mm i.d, 0.25 μm Film thickness)
	カラム温度	50°C (1 min) - 20 °C/min - 200 °C (0 min) - 5 °C/min - 300 °C (1 min)
	カラム流量	1.2 mL/min (コンスタントフロー)
	注入口温度	250 °C
	注入法	スプリットレス (パージオフ時間 1 min)
	注入量	2 μL
MS	測定モード	Scanモード (スキャンレンジ m/z 40 ~ 500)
	イオン化法	EI (70 eV)
	チューニング法	オートチューニング
	インターフェイス温度	280 °C
	イオン源温度	250 °C

表4 GC-MS測定条件（水道および市販クライテリア測定用）

機 器	項 目	設 定
GC	カラム	DB-5MS (30 m × 0.25 mm i.d, 0.25 μm Film thickness)
	カラム温度	40 °C (2 min) - 8 °C/min - 310 °C (5 min)
	カラム流量	1.2 mL/min (コンスタントフロー)
	注入口温度	250 °C
	注入法	スプリットレス (パージオフ時間 1 min)
	注入量	1 μL
MS	測定モード	Scanモード (スキャンレンジ m/z 40 ~ 600)
	イオン化法	EI (70 eV)
	チューニング法	オートチューニング
	インターフェイス温度	280 °C
	イオン源温度	250 °C

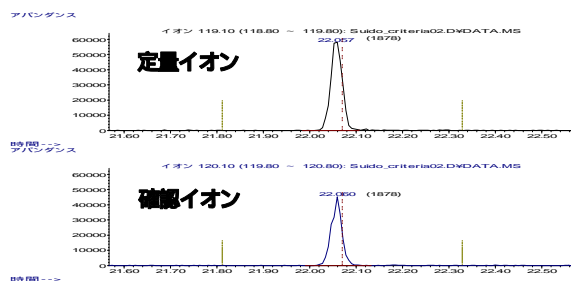
表5 マトリックス負荷による水道クライテリアの定量比率の変化(%)

	Inj0	Inj20	Inj40	Inj60	Inj80	Inj100	Inj120	Inj140	Inj160	Inj180	Inj200	Inj220	Inj240	Inj260	メンテ直後	Inj20
アセフェート	100	99	113	113	100	78	115	108	109	104	116	88	95	83	142	121
アトラジン	100	100	103	97	100	102	100	101	103	104	99	95	98	94	98	103
イソキサチオン	100	110	111	109	108	95	110	102	104	105	110	109	105	97	124	117
イソフェンホスオキソン	100	108	103	97	109	97	95	100	100	111	106	111	109	107	91	112
オリサストロピン	100	104	101	97	105	103	99	102	103	97	101	101	102	102	112	120
キノクラミン	100	99	97	100	86	91	103	95	94	81	87	81	83	82	91	89
キャプタホール	100	108	109	100	104	108	101	93	83	71	68	70	64	59	146	94
キャプタン	100	105	104	104	94	99	95	97	93	79	79	75	71	62	130	93
クロロタロニル	100	105	102	96	103	104	102	102	100	94	94	89	90	86	82	84
ジクロメジン	100	103	102	104	99	101	103	95	100	104	106	102	95	96	97	97
シマジン	100	106	107	114	115	105	112	115	111	112	114	110	118	113	101	104
チアクロプリド	100	101	100	99	97	95	113	98	99	101	96	89	80	72	116	103
テニルクロール	100	107	102	93	107	102	96	101	108	96	94	97	96	96	108	117
トリクロルホン	100	103	127	133	91	89	125	120	125	116	126	108	117	117	194	132
ピロキロン	100	103	98	93	102	98	100	96	101	97	97	95	97	96	97	103
フェニトロチオン	100	110	112	108	114	109	105	108	108	112	111	110	105	107	96	102
フルアジナム	100	103	119	106	125	109	116	109	111	113	110	111	112	116	82	90
フルスルファミド	100	102	96	104	112	85	84	82	91	81	75	79	51	50	113	105
プロモブチド	100	103	100	91	100	97	97	97	101	93	94	94	92	92	95	109
ペンシクロン	100	103	109	103	108	100	106	104	108	83	79	71	69	59	108	86
ベンタゾン	100	100	122	128	107	99	116	115	102	101	100	94	96	87	110	100
ホスチアゼート-1	100	112	107	106	114	98	106	110	107	101	101	110	103	101	109	108
ホスチアゼート-2	100	121	112	114	125	103	106	103	116	119	110	109	112	114	115	119
モリネート	100	102	101	102	102	101	105	101	104	100	100	98	98	100	110	111

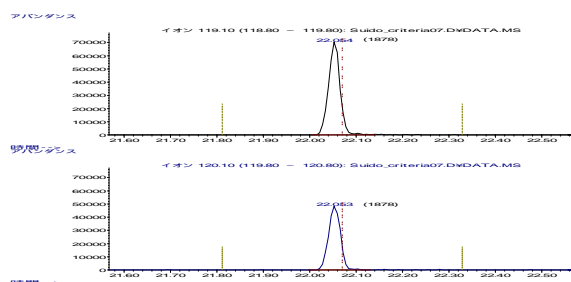
表6 マトリックス負荷による水道クライテリアの保持時間差の変化(秒)

	Inj0	Inj20	Inj40	Inj60	Inj80	Inj100	Inj120	Inj140	Inj160	Inj180	Inj200	Inj220	Inj240	Inj260	メンテ直後	Inj20
アセフェート	0.00	0.04	0.41	0.42	0.41	0.41	0.80	0.80	0.80	0.41	0.80	0.42	0.80	0.41	0.68	0.89
アトラジン	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.02	-0.01	-0.01	-0.01	-0.02	-0.01	-0.01	0.37	0.36	0.49	0.28
イソキサチオン	0.00	0.00	-0.01	-0.38	-0.40	-0.39	-0.39	-0.38	-0.76	-0.77	-0.38	-0.38	-0.76	-0.77	-0.16	-0.49
イソフェンホスオキソン	0.00	0.00	-0.38	-0.38	-0.39	-0.38	-0.38	-0.38	-0.38	-0.77	-0.37	-0.38	-0.75	-0.76	0.35	0.09
オリサストロピン	0.00	0.00	-0.38	-0.76	-0.39	-0.25	-0.76	-0.76	-0.75	-1.14	-0.75	-1.14	-1.13	-1.14	0.18	0.17
キノクラミン	0.00	0.02	0.01	0.02	0.38	0.39	0.02	0.02	0.02	0.01	0.40	0.01	0.78	0.39	-0.30	-0.25
キャプタホール	0.00	0.03	-0.35	-0.35	-0.36	-0.35	-0.35	-0.73	-0.34	0.02	-0.72	-0.35	-0.72	-0.73	-0.71	-0.19
キャプタン	0.00	-0.02	-0.01	-0.01	-0.02	-0.01	-0.38	-0.01	-0.38	-0.39	-0.38	-0.38	-0.38	-0.01	-0.52	-0.07
クロロタロニル	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.01	-0.01	-0.38	-0.38	-0.38	-0.01	0.00	0.00	0.00	-0.01	-0.23	0.29
ジクロメジン	0.00	0.02	-0.36	-0.35	0.01	0.02	-0.36	0.02	-0.35	-0.37	0.03	0.02	0.02	0.40	0.04	-0.20
シマジン	0.00	0.04	0.03	0.04	0.02	0.03	0.04	0.03	0.04	0.02	0.04	0.03	0.04	0.03	0.91	1.09
チアクロプリド	0.00	0.38	0.02	-0.38	-0.01	-0.38	0.00	-0.38	1.14	1.13	1.14	2.27	3.78	4.91	-0.42	0.75
テニルクロール	0.00	0.02	0.01	-0.36	0.01	-0.37	-0.37	-0.37	-0.36	-0.37	-0.36	-0.74	-0.74	-0.74	-0.32	-0.56
トリクロルホン	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.39	-0.38	0.00	0.00	-0.37	0.37	0.39	0.38	0.76	0.38	0.06	0.67
ピロキロン	0.00	0.02	0.02	0.02	0.01	0.02	0.02	0.02	0.02	0.01	0.03	0.02	0.40	0.39	0.17	0.32
フェニトロチオン	0.00	0.02	0.01	-0.36	0.01	-0.36	0.02	0.01	-0.36	-0.37	-0.35	-0.36	-0.36	-0.36	0.14	-0.23
フルアジナム	0.00	0.02	-0.37	-0.36	-0.75	-0.75	-0.36	-0.74	-0.36	-0.38	-0.36	-0.74	-0.74	-0.75	-0.07	0.41
フルスルファミド	0.00	0.02	0.01	-0.36	0.01	0.01	0.02	0.40	-0.35	0.01	0.02	0.02	0.78	0.39	0.20	-0.19
プロモブチド	0.00	0.01	0.00	0.00	-0.01	0.00	0.00	-0.38	-0.37	-0.39	-0.37	-0.38	-0.38	-0.38	0.23	0.19
ペンシクロン	0.00	0.00	-0.01	-0.38	-0.39	-0.01	-0.38	-0.01	-0.38	0.36	0.76	0.75	1.13	1.13	0.07	0.66
ベンタゾン	0.00	-0.37	0.00	0.00	-0.01	-0.38	-0.38	-0.38	-0.37	-0.39	-0.37	0.00	-0.37	0.38	-0.06	0.06
ホスチアゼート-1	0.00	0.00	-0.01	-0.01	-0.02	-0.01	-0.39	-0.39	-0.38	-0.02	0.00	-0.39	-0.38	-0.01	-0.08	-0.34
ホスチアゼート-2	0.00	0.02	0.02	0.02	0.38	0.39	0.01	0.01	0.02	0.01	0.02	-0.36	-0.36	0.01	-0.06	0.06
モリネート	0.00	0.00	-0.39	-0.38	-0.01	-0.39	-0.38	-0.38	-0.37	-0.39	-0.37	-0.38	-0.38	-0.39	-0.32	-0.10

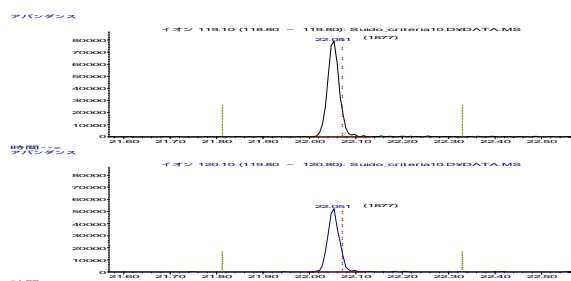
Inj0(初回測定時)



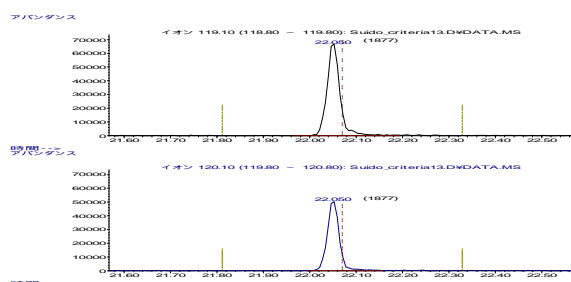
Inj100



Inj180



Inj260



メンテナンス直後

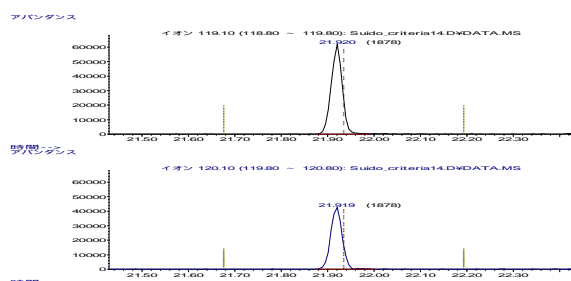
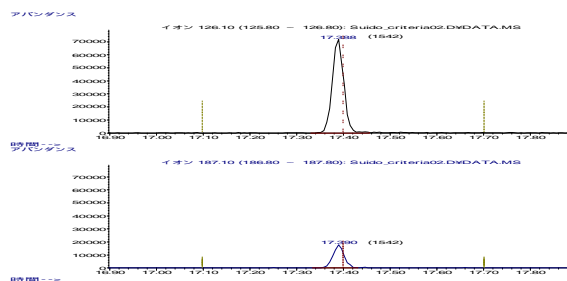
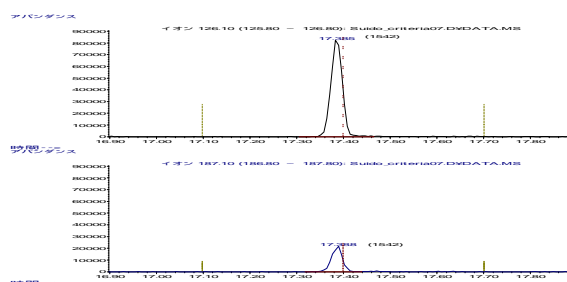


図1 マトリックス負荷によるプロモプシド (水道クライテリア) の定量値の変化

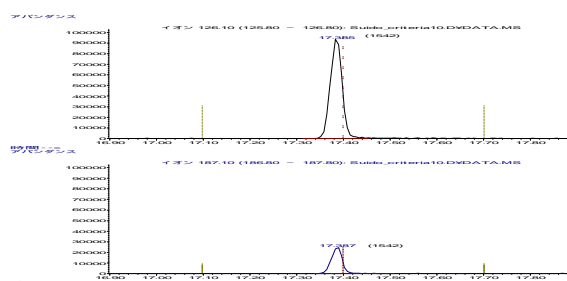
Inj0(初回測定時)



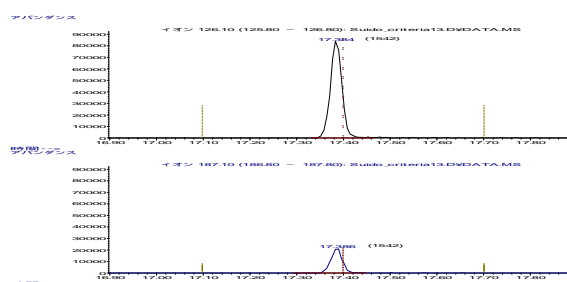
Inj100



Inj180



Inj260



メンテナンス直後

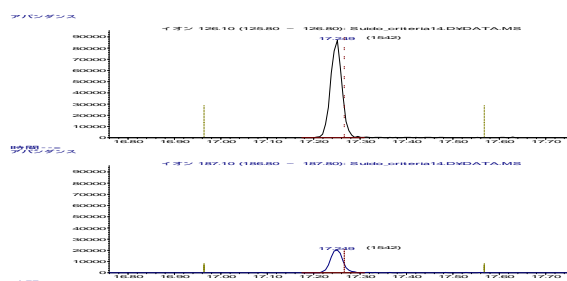
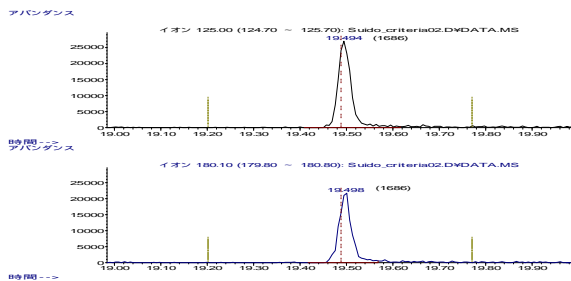
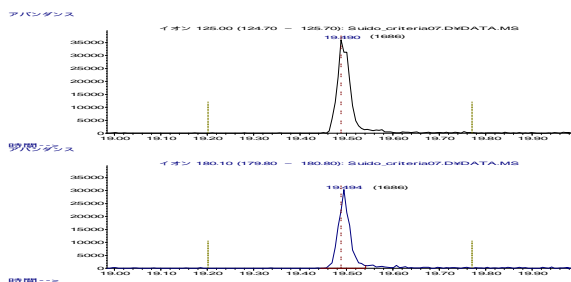


図2 マトリックス負荷によるモリネート(水道クライテリア) の定量値の変化

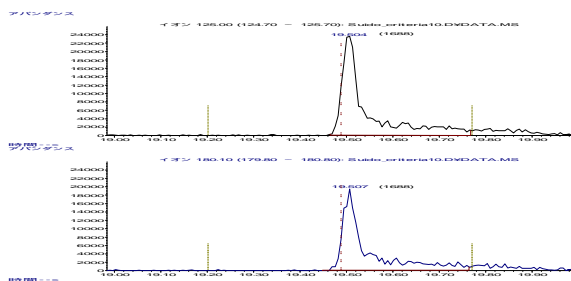
Inj0(初回測定時)



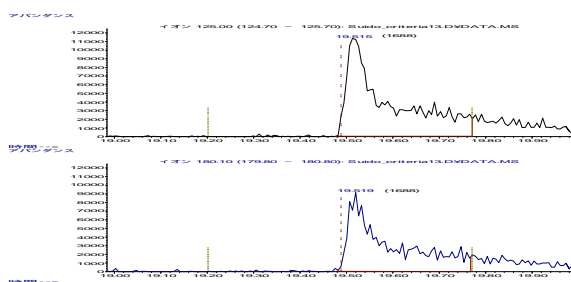
Inj100



Inj180



Inj260



メンテナンス直後

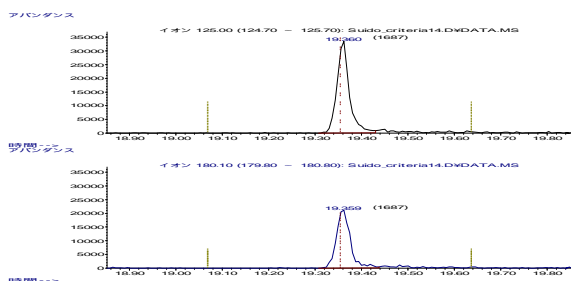
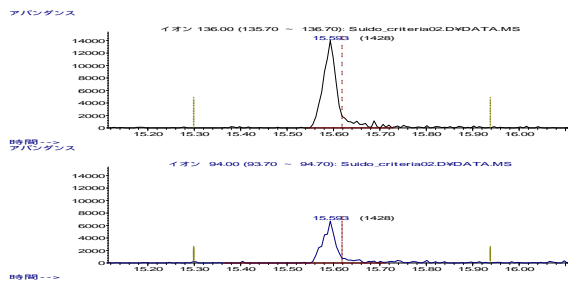
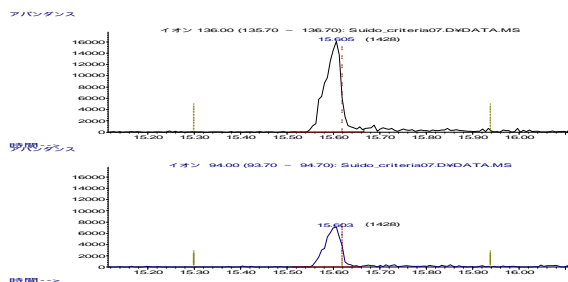


図3 マトリックス負荷によるペンシクロン (水道クライテリア) の定量値の変化

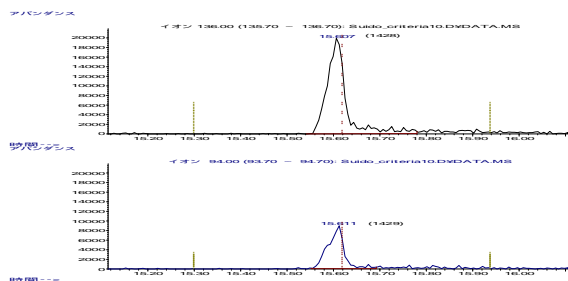
Inj0(初回測定時)



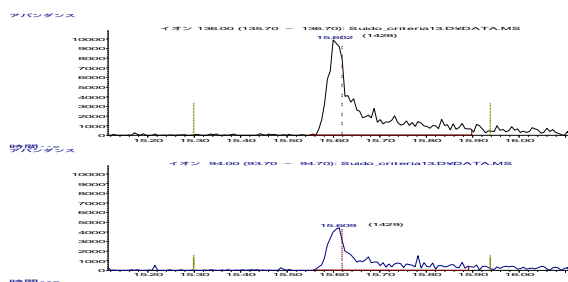
Inj100



Inj180



Inj260



メンテナンス直後

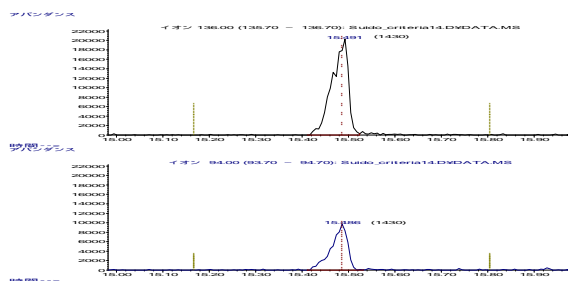


図4 マトリックス負荷によるアセフェート (水道クライテリア) の定量値の変化

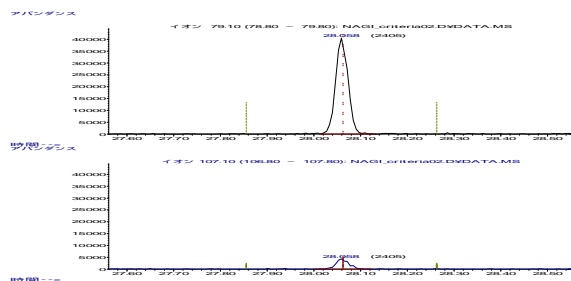
表7 マトリックス負荷による市販クライテリアの定量比率の変化(%)

	Inj0	Inj20	Inj40	Inj60	Inj80	Inj100	Inj120	Inj140	Inj160	Inj180	Inj200	Inj220	Inj240	Inj260	メンテ直後	Inj20
2,4-ジクロロアニリン	100	106	102	100	101	109	102	106	103	106	105	100	101	99	101	106
2,4-ジニトロアニリン	100	106	100	98	99	99	104	106	107	96	102	91	95	77	102	100
2,6-ジクロロフェノール	100	107	104	105	107	109	108	101	108	112	105	107	113	106	100	101
2,6-ジメチルアニリン	100	98	99	100	101	98	98	96	102	103	99	98	98	97	103	102
2,6-ジメチルフェノール	100	93	102	99	99	95	101	104	100	99	102	101	100	100	109	95
イソキサチオン	100	102	103	109	116	99	95	100	100	102	105	101	97	94	117	109
オクタノール	100	91	95	91	92	82	97	94	90	88	98	96	94	94	110	104
キャプタホール	100	112	108	105	102	99	94	87	84	65	63	55	52	45	135	95
クロルピリホス	100	91	104	105	103	99	100	104	101	100	101	107	101	112	123	108
クロルピリホスメチル	100	105	113	119	116	103	106	112	109	112	115	115	116	119	94	104
シマジン	100	113	107	106	113	111	115	119	118	117	118	113	122	114	88	103
フェニトロチオン	100	107	113	114	110	104	111	117	112	111	111	111	110	109	108	106
フタル酸ジエチル	100	104	104	107	103	104	104	108	105	102	104	102	105	104	100	102
フタル酸ブチルベンジル	100	106	112	110	107	100	102	115	108	100	97	109	103	114	121	109
ベンゾチアゾール	100	106	98	100	104	102	106	104	111	108	106	106	111	108	99	102
ペンタクロロフェノール	100	123	120	124	122	110	125	122	122	120	112	115	115	106	96	102
リン酸トリス(2-クロロエチル)	100	99	107	107	105	105	104	109	104	97	101	97	97	100	101	96
リン酸トリブチル	100	105	106	107	104	96	107	110	110	106	104	102	108	108	97	109

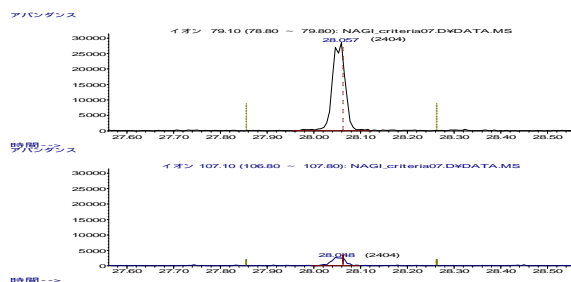
表8 マトリックス負荷による市販クライテリアの保持時間差の変化(秒)

	Inj0	Inj20	Inj40	Inj60	Inj80	Inj100	Inj120	Inj140	Inj160	Inj180	Inj200	Inj220	Inj240	Inj260	メンテ直後	Inj20
2,4-ジクロロアニリン	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01	0.04	-0.14
2,4-ジニトロアニリン	0.00	-0.38	-0.37	-0.38	0.01	0.01	-0.38	0.00	0.01	0.38	0.38	0.77	1.51	1.90	0.12	0.12
2,6-ジクロロフェノール	0.00	-0.01	0.01	0.01	0.39	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.02	0.01	0.40	0.44	0.37
2,6-ジメチルアニリン	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01	0.01	-0.37	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.37	-0.01	0.31
2,6-ジメチルフェノール	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01	0.24	0.58
イソキサチオン	0.00	-0.37	0.01	-0.37	-0.36	0.01	-0.37	-0.75	-0.36	-0.75	-0.75	-0.36	-0.37	-0.36	-0.14	-0.08
オクタノール	0.00	0.38	0.39	0.00	0.39	0.39	0.00	0.00	0.39	0.00	0.37	0.00	0.38	0.02	0.55	0.50
キャプタホール	0.00	0.00	-0.37	-0.38	0.01	-0.37	-0.38	-0.38	-0.75	-0.76	-0.38	-0.36	-0.76	-0.74	-0.35	-0.59
クロルピリホス	0.00	-0.01	-0.01	-0.39	-0.39	-0.39	-0.39	-0.39	-0.39	-0.39	-0.39	-0.38	-0.77	-0.76	0.40	0.10
クロルピリホスメチル	0.00	-0.01	0.00	-0.39	0.00	0.00	-0.39	-0.39	-0.38	-0.39	-0.39	-0.38	-0.39	-0.38	0.22	0.19
シマジン	0.00	0.00	-0.37	-0.37	0.01	0.01	-0.37	-0.38	-0.37	0.00	0.00	0.01	0.00	-0.36	0.51	0.31
フェニトロチオン	0.00	-0.38	-0.38	-0.38	-0.37	-0.75	-0.75	-0.38	-0.38	-0.76	-0.38	-0.75	-0.38	-0.75	0.13	-0.24
フタル酸ジエチル	0.00	-0.08	-0.07	-0.08	-0.07	-0.07	-0.08	-0.08	-0.07	-0.08	-0.08	-0.06	-0.08	-0.07	0.31	0.18
フタル酸ブチルベンジル	0.00	0.05	-0.38	0.05	-0.37	-0.37	-0.75	-0.76	-0.75	-0.76	-0.76	-0.75	-0.76	-0.75	0.09	-0.16
ベンゾチアゾール	0.00	0.00	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.00	0.01	0.00	0.01	-0.32	-0.05
ペンタクロロフェノール	0.00	0.02	0.03	0.02	0.03	0.03	0.02	0.02	0.03	0.02	0.02	0.03	0.02	0.41	-0.22	-0.05
リン酸トリス(2-クロロエチル)	0.00	0.01	-0.36	-0.37	-0.36	-0.36	-0.37	-0.37	-0.36	-0.37	-0.37	-0.36	0.01	0.01	0.14	0.69
リン酸トリブチル	0.00	0.00	-0.37	-0.37	-0.37	-0.37	-0.37	-0.37	-0.37	-0.38	-0.38	-0.37	-0.37	-0.37	0.42	0.65

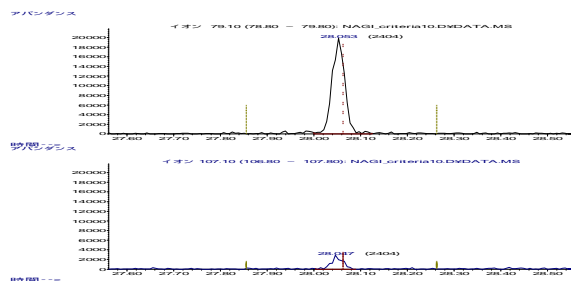
Inj0(初回測定時)



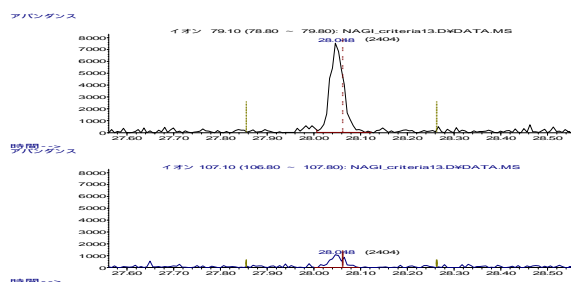
Inj100



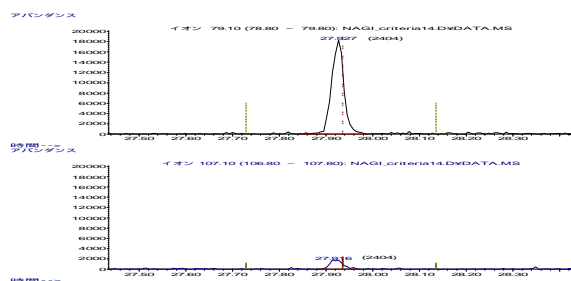
Inj180



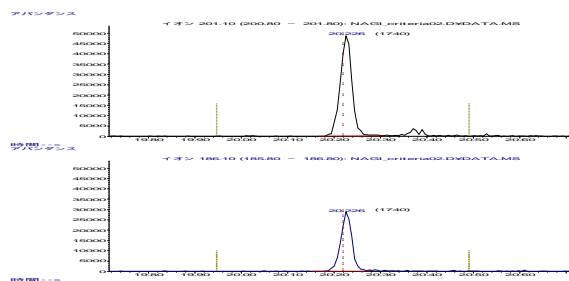
Inj260



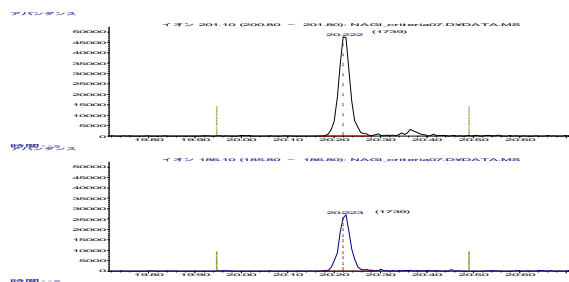
メンテナンス直後



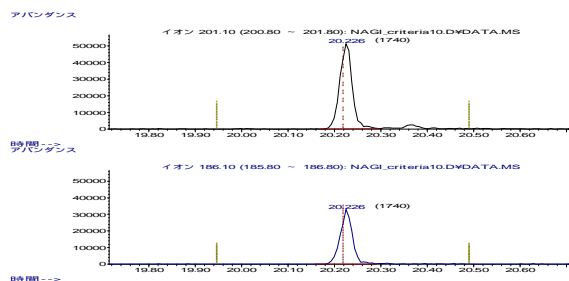
Inj0(初回測定時)



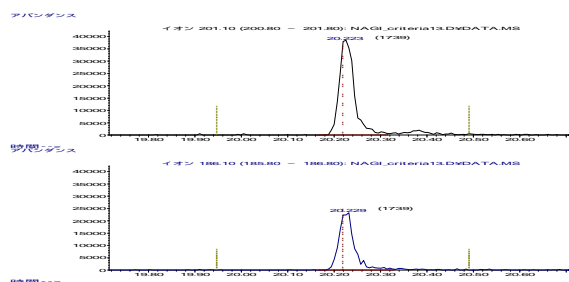
Inj100



Inj180



Inj260



メンテナンス直後

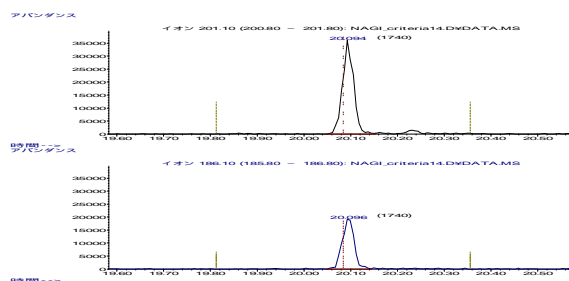
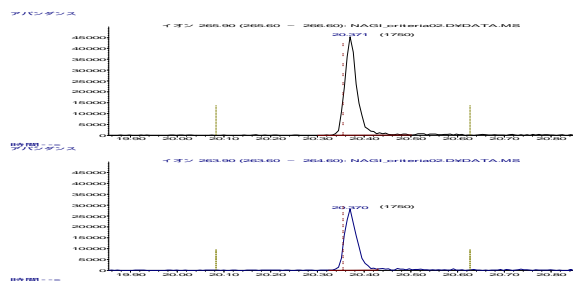


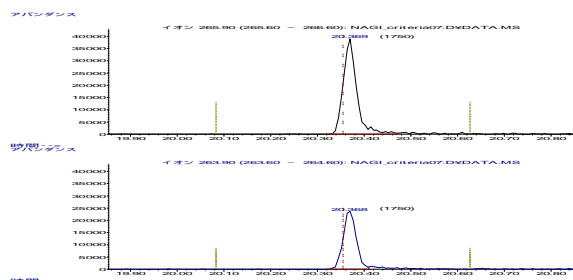
図5 マトリックス負荷によるキャプタホール(市販クライテリア)の定量値の変化

図6 マトリックス負荷によるシマジン(市販クライテリア)の定量値の変化

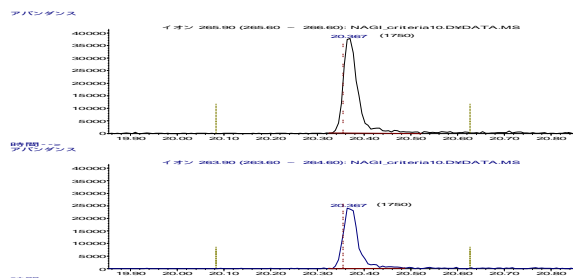
Inj0(初回測定時)



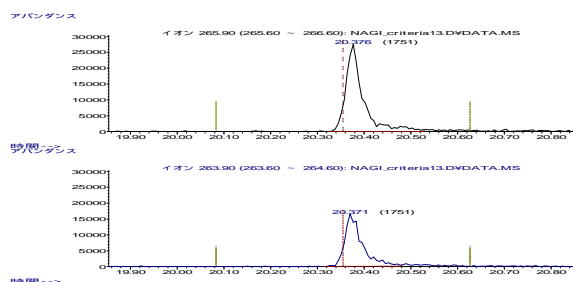
Inj100



Inj180



Inj260



メンテナンス直後

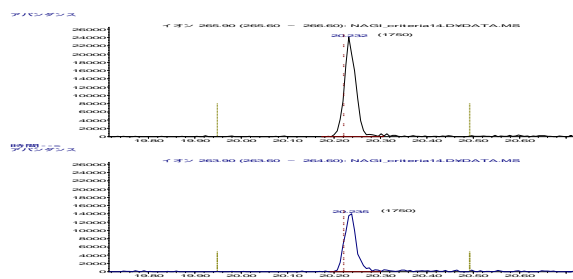
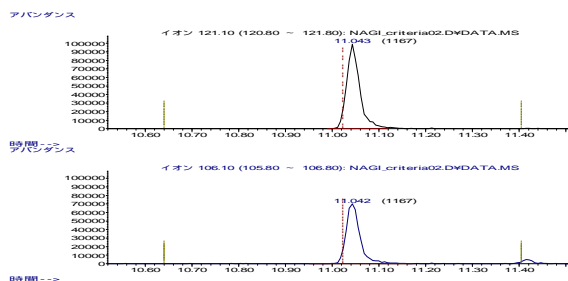
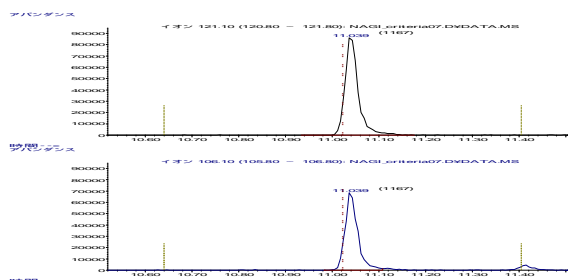


図7 マトリックス負荷によるペンタクロロフェノール(市販クライテリア)の定量値の変化

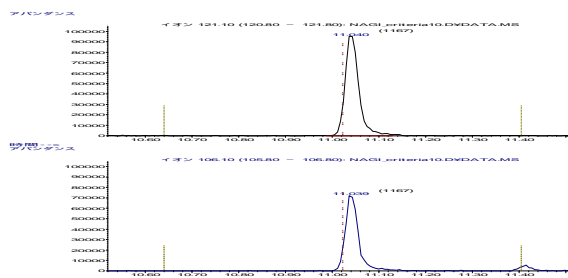
Inj0(初回測定時)



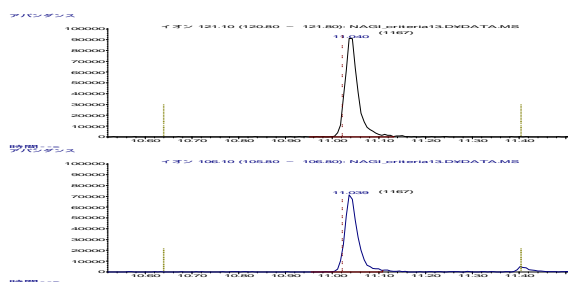
Inj100



Inj180



Inj260



メンテナンス直後

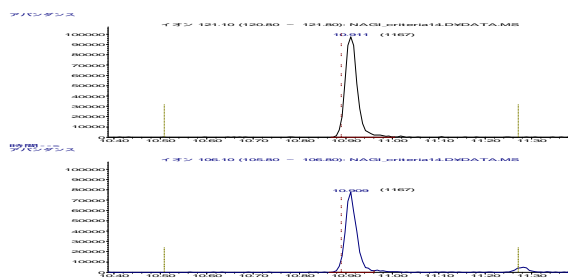


図8 マトリックス負荷による2,6-ジメチルアニリン(市販クライテリア)の定量値の変化

付表1 水道クライテリアの測定結果一覧 (Inj0)

化合物名	判定	相対定量値	MS HIT率	測定RT	予想RT	RT	QT比率
アセフェート	+++++	0.813	90	15.59	15.61	-1.32	0.96
アトラジン	+++++	0.909	99	20.35	20.35	-0.34	0.99
イソキサチオン	+++++	1.061	90	26.14	26.13	0.24	0.76
イソフェンホスオキソン	+++++	0.893	93	23.48	23.49	-0.17	1.18
オリサストロビン	+++++	0.925	83	28.94	29.15	-12.75	2.39
キノクラミン	+++++	0.731	86	23.09	23.09	-0.31	1.00
キャプタホール	+++++	0.808	83	28.07	28.06	0.01	1.24
キャプタン	+++++	0.818	93	24.49	24.48	0.66	1.01
クロタロニル	+++++	0.927	96	20.95	20.94	0.87	1.01
ジクロメジン	+++++	3.213	92	28.00	27.99	0.12	1.09
シマジン	+++++	0.763	93	20.22	20.21	0.21	1.07
チアクロプリド	+++++	0.956	90	32.69	32.76	-4.23	1.61
テニルクロール	+++++	0.717	90	27.76	27.75	0.12	0.87
トリクロルホン	+++++	0.836	50	16.06	16.05	0.84	0.98
ピロキロン	+++++	0.832	95	20.83	20.83	-0.19	0.95
フェニトロチオン	+++++	0.831	93	22.85	22.84	0.13	0.92
フルアジナム	+++++	3.118	42	23.99	23.97	0.82	1.48
フルスルファミド	+++++	2.700	9	28.88	28.81	1.70	0.48
プロモブチド	+++++	0.999	90	22.06	22.07	-0.83	0.98
ベンシクロン	+++++	1.176	72	19.49	19.48	0.60	0.94
ペントゾン	+++++	13.491	64	23.72	23.70	1.23	1.15
ホスチアゼート-1	+++++	0.441	94	23.82	23.81	0.54	0.62
ホスチアゼート-2	+++++	0.404	83	23.88	23.87	0.38	0.69
モリネート	+++++	0.874	91	17.39	17.40	-0.37	0.89

付表2 水道クライテリアの測定結果一覧 (Inj100)

化合物名	判定	相対定量値	MS HIT率	測定RT	予想RT	RT	QT比率
アセフェート	+++++	0.638	53	15.60	15.61	-0.91	1.07
アトラジン	+++++	0.928	91	20.35	20.35	-0.36	1.04
イソキサチオン	+++++	1.004	87	26.13	26.13	-0.15	0.90
イソフェンホスオキソン	+++++	0.865	83	23.48	23.49	-0.55	1.21
オリサストロビン	+++++	0.951	83	28.92	29.15	-13.00	3.24
キノクラミン	+++++	0.663	96	23.09	23.09	0.08	0.90
キャプタホール	+++++	0.869	40	28.05	28.06	-0.34	1.25
キャプタン	+++++	0.813	95	24.49	24.48	0.65	0.95
クロタロニル	+++++	0.963	94	20.95	20.94	0.86	1.07
ジクロメジン	+++++	3.247	90	27.99	27.99	0.14	0.99
シマジン	+++++	0.798	91	20.22	20.21	0.24	1.02
チアクロプリド	+++++	0.911	9	32.68	32.76	-4.61	0.86
テニルクロール	+++++	0.733	95	27.74	27.75	-0.25	0.84
トリクロルホン	+++++	0.745	78	16.05	16.05	0.46	1.04
ピロキロン	+++++	0.814	93	20.82	20.83	-0.17	0.95
フェニトロチオン	+++++	0.906	80	22.84	22.84	-0.23	0.84
フルアジナム	+++++	3.406	46	23.98	23.97	0.07	1.05
フルスルファミド	+++++	2.282	91	28.84	28.81	1.71	1.02
プロモブチド	+++++	0.971	91	22.05	22.07	-0.83	0.95
ベンシクロン	+++++	1.171	83	19.49	19.48	0.59	0.94
ペントゾン	++++	13.42	4	23.72	23.70	0.85	1.49
ホスチアゼート-1	+++++	0.433	68	23.82	23.81	0.53	0.94
ホスチアゼート-2	+++++	0.415	87	23.88	23.87	0.77	0.96
モリネート	+++++	0.881	91	17.38	17.40	-0.76	0.94

付表3 水道クライテリアの測定結果一覧 (Inj180)

化合物名	判定	相対定量値	MS HIT率	測定RT	予想RT	RT	QT比率
アセフェート	+++++	0.848	91	15.60	15.61	-0.91	0.96
アトラジン	+++++	0.946	90	20.34	20.35	-0.36	0.93
イソキサチオン	+++++	1.109	93	26.12	26.13	-0.53	0.87
イソフェンホスオキソン	+++++	0.993	94	23.47	23.49	-0.94	1.03
オリサストロビン	+++++	0.901	46	28.92	29.15	-13.89	2.06
キノクラミン	+++++	0.594	90	23.09	23.09	-0.30	0.99
キャプタホール	+++++	0.574	90	28.06	28.06	0.03	1.21
キャプタン	+++++	0.647	74	24.49	24.48	0.27	1.01
クロタロニル	+++++	0.876	97	20.95	20.94	0.86	1.06
ジクロメジン	+++++	3.326	94	27.98	27.99	-0.25	0.97
シマジン	+++++	0.856	91	20.22	20.21	0.23	1.05
チアクロプリド	+++++	0.969	53	32.71	32.76	-3.10	1.26
テニルクロール	+++++	0.685	91	27.74	27.75	-0.25	0.84
トリクロルホン	+++++	0.966	80	16.07	16.05	1.21	0.02
ピロキロン	+++++	0.807	95	20.82	20.83	-0.18	1.02
フェニトロチオン	+++++	0.932	91	22.84	22.84	-0.24	0.85
フルアジナム	+++++	3.527	53	23.98	23.97	0.44	1.12
フルスルファミド	+++++	2.194	94	28.84	28.81	1.71	0.62
プロモブチド	+++++	0.931	50	22.05	22.07	-1.22	1.02
ベンシクロン	+++++	0.973	40	19.50	19.48	0.96	1.19
ペンタゾン	+++++	13.616	5	23.72	23.70	0.84	1.45
ホスチアゼート-1	+++++	0.446	83	23.82	23.81	0.52	0.86
ホスチアゼート-2	+++++	0.482	49	23.87	23.87	0.39	0.77
モリネート	+++++	0.878	91	17.38	17.40	-0.76	0.92

付表4 水道クライテリアの測定結果一覧 (Inj260)

化合物名	判定	相対定量値	MS HIT率	測定RT	予想RT	RT	QT比率
アセフェート	+++++	0.675	87	15.60	15.61	-0.91	0.88
アトラジン	+++++	0.856	91	20.35	20.35	0.02	1.01
イソキサチオン	+++++	1.030	91	26.12	26.13	-0.53	0.85
イソフェンホスオキソン	+++++	0.952	64	23.47	23.49	-0.93	1.13
オリサストロビン	+++++	0.943	90	28.92	29.15	-13.89	1.21
キノクラミン	+++++	0.599	90	23.09	23.09	0.08	1.02
キャプタホール	+++++	0.473	83	28.05	28.06	-0.72	1.48
キャプタン	+++++	0.509	83	24.49	24.48	0.65	1.11
クロタロニル	+++++	0.795	87	20.95	20.94	0.86	1.05
ジクロメジン	+++++	3.088	94	28.00	27.99	0.52	1.05
シマジン	+++++	0.860	91	20.22	20.21	0.24	1.10
チアクロプリド	+++++	0.687	50	32.77	32.76	0.68	0.21
テニルクロール	+++++	0.687	91	27.74	27.75	-0.62	0.84
トリクロルホン	+++++	0.981	74	16.07	16.05	1.22	0.86
ピロキロン	+++++	0.802	95	20.83	20.83	0.20	0.98
フェニトロチオン	+++++	0.889	91	22.84	22.84	-0.23	0.87
フルアジナム	+++++	3.626	53	23.98	23.97	0.07	1.15
フルスルファミド	+++++	1.339	43	28.85	28.81	2.09	0.06
プロモブチド	+++++	0.919	96	22.05	22.07	-1.21	0.99
ベンシクロン	+++++	0.697	74	19.51	19.48	1.73	1.17
ペンタゾン	+++++	11.719	9	23.73	23.70	1.61	1.47
ホスチアゼート-1	+++++	0.446	58	23.82	23.81	0.53	0.84
ホスチアゼート-2	+++++	0.461	83	23.87	23.87	0.39	0.76
モリネート	+++++	0.878	91	17.38	17.40	-0.76	0.95

付表5 水道クライテリアの測定結果一覧（メンテ直後）

化合物名	判定	相対定量値	MS HIT率	測定RT	予想RT	RT	QT比率
アセフェート	+++++	1.151	94	15.49	15.48	-0.64	1.04
アトラジン	+++++	0.892	99	20.22	20.22	0.15	0.92
イソキサチオン	+++++	1.311	91	26.00	26.00	0.08	0.59
イソフェンホスオキソン	+++++	0.811	94	23.36	23.35	0.18	1.15
オリサストロビン	+++++	1.035	91	28.81	29.02	-12.57	0.15
キノクラミン	+++++	0.663	81	22.95	22.96	-0.61	1.03
キャプタホール	+++++	1.176	74	27.92	27.93	-0.70	1.18
キャプタン	+++++	1.067	90	24.35	24.35	0.14	0.83
クロロタロニル	+++++	0.764	98	20.81	20.80	0.64	1.07
ジクロメジン	+++++	3.117	87	27.86	27.86	0.16	1.27
シマジン	+++++	0.772	89	20.10	20.08	1.12	1.12
チアクロプリド	+++++	1.105	43	32.56	32.64	-4.65	1.48
テニルクロール	+++++	0.774	94	27.62	27.62	-0.20	0.62
トリクロルホン	+++++	1.618	64	15.93	15.91	0.90	0.86
ピロキロン	+++++	0.810	96	20.69	20.69	-0.02	1.09
フェニトロチオン	+++++	0.798	93	22.71	22.71	0.27	1.00
フルアジナム	+++++	2.543	30	23.86	23.84	0.75	1.38
フルスルファミド	+++++	3.042	18	28.71	28.68	1.90	0.87
プロモブチド	+++++	0.950	74	21.92	21.93	-0.60	1.01
ベンシクロン	+++++	1.266	90	19.36	19.35	0.67	0.89
ペンタゾン	+++++	14.862	12	23.59	23.57	1.17	2.05
ホスチアゼート-1	+++++	0.480	94	23.69	23.68	0.46	0.62
ホスチアゼート-2	+++++	0.466	83	23.74	23.74	0.32	0.63
モリネート	+++++	0.960	91	17.25	17.26	-0.69	0.90

付表6 水道クライテリアの測定結果一覧（メンテ後 Inj20）

化合物名	判定	相対定量値	MS HIT率	測定RT	予想RT	RT	QT比率
アセフェート	+++++	0.987	76	15.48	15.48	-0.43	1.05
アトラジン	+++++	0.934	98	20.21	20.21	-0.06	0.95
イソキサチオン	+++++	1.239	72	26.00	26.00	-0.25	0.56
イソフェンホスオキソン	+++++	1.000	83	23.35	23.35	-0.08	1.14
オリサストロビン	+++++	1.112	91	28.81	29.02	-12.58	2.39
キノクラミン	+++++	0.652	80	22.95	22.96	-0.56	0.97
キャプタホール	+++++	0.758	83	27.93	27.93	-0.18	1.33
キャプタン	+++++	0.761	87	24.36	24.35	0.59	0.84
クロロタロニル	+++++	0.778	99	20.82	20.80	1.16	1.04
ジクロメジン	+++++	3.125	83	27.86	27.86	-0.08	1.40
シマジン	+++++	0.795	94	20.10	20.08	1.30	1.06
チアクロプリド	+++++	0.988	45	32.58	32.64	-3.48	0.04
テニルクロール	+++++	0.842	97	27.61	27.62	-0.44	0.61
トリクロルホン	+++++	1.100	43	15.93	15.91	1.51	0.91
ピロキロン	+++++	0.861	98	20.69	20.69	0.13	1.10
フェニトロチオン	+++++	0.848	91	22.71	22.71	-0.10	0.94
フルアジナム	+++++	2.804	72	23.86	23.84	1.23	1.33
フルスルファミド	+++++	2.845	25	28.71	28.68	1.51	0.93
プロモブチド	+++++	1.086	95	21.92	21.93	-0.64	0.93
ベンシクロン	+++++	1.008	72	19.37	19.35	1.26	1.05
ペンタゾン	+++++	13.478	5	23.59	23.57	1.29	1.79
ホスチアゼート-1	+++++	0.477	96	23.68	23.68	0.20	0.76
ホスチアゼート-2	+++++	0.481	87	23.74	23.73	0.44	0.79
モリネート	+++++	0.966	91	17.25	17.26	-0.47	0.91

付表7 市販クライテリアの測定結果一覧 (Inj0)

化合物名	判定	相対定量値	MS HIT率	測定RT	予想RT	RT	QT比率
2,4-ジクロロアニリン	+++++	0.895	91	13.98	13.97	0.66	0.98
2,4-ジニトロアニリン	+++++	1.281	90	22.88	22.87	0.93	0.85
2,6-ジクロロフェノール	+++++	0.958	91	11.70	11.69	0.73	1.00
2,6-ジメチルアニリン	+++++	1.054	94	11.04	11.02	1.46	0.86
2,6-ジメチルフェノール	+++++	1.020	94	9.88	9.85	1.43	0.89
イソキサチオン	+++++	1.313	92	26.14	26.13	0.22	0.82
オクタノール	+++++	0.711	78	9.15	9.15	-0.16	1.11
キャプタホール	+++++	1.060	91	28.06	28.06	0.03	1.07
クロルピリホス	+++++	1.198	97	23.24	23.24	-0.10	0.97
クロルピリホスメチル	+++++	1.049	76	22.06	22.05	-0.05	0.98
シマジン	+++++	0.953	91	20.23	20.21	0.61	0.92
フェニトロチオン	+++++	1.047	91	22.85	22.84	0.52	0.90
フタル酸ジエチル	+++++	0.888	97	18.07	18.06	0.40	0.96
フタル酸ブチルベンジル	+++++	0.861	96	27.43	27.44	-0.05	0.90
ベンゾチアゾール	+++++	0.883	91	12.22	12.19	1.61	1.00
ペンタクロロフェノール	+++++	0.879	95	20.38	20.35	1.13	0.99
リン酸トリス(2-クロロエチル)	+++++	1.706	62	20.46	20.49	-1.34	0.89
リン酸トリブチル	+++++	0.908	83	18.84	18.87	-1.45	1.00

付表8 市販クライテリアの測定結果一覧 (Inj100)

化合物名	判定	相対定量値	MS HIT率	測定RT	予想RT	RT	QT比率
2,4-ジクロロアニリン	+++++	0.972	95	13.98	13.97	0.67	0.95
2,4-ジニトロアニリン	+++++	1.274	91	22.88	22.87	0.94	0.95
2,6-ジクロロフェノール	+++++	1.040	97	11.70	11.69	0.75	0.98
2,6-ジメチルアニリン	+++++	1.033	94	11.04	11.02	1.47	0.90
2,6-ジメチルフェノール	+++++	0.965	94	9.88	9.85	1.44	0.98
イソキサチオン	+++++	1.298	87	26.14	26.13	0.23	0.86
オクタノール	+++++	0.584	64	9.16	9.15	0.23	1.53
キャプタホール	+++++	1.054	91	28.05	28.06	-0.34	1.35
クロルピリホス	+++++	1.188	99	23.23	23.24	-0.49	0.98
クロルピリホスメチル	+++++	1.085	99	22.05	22.05	-0.05	0.97
シマジン	+++++	1.061	93	20.23	20.21	0.62	1.04
フェニトロチオン	+++++	1.089	86	22.84	22.84	-0.23	0.93
フタル酸ジエチル	+++++	0.920	94	18.06	18.06	0.33	0.96
フタル酸ブチルベンジル	+++++	0.862	90	27.43	27.44	-0.42	0.93
ベンゾチアゾール	+++++	0.898	95	12.22	12.19	1.62	0.94
ペンタクロロフェノール	+++++	0.966	91	20.37	20.35	1.16	1.02
リン酸トリス(2-クロロエチル)	+++++	1.788	83	20.46	20.49	-1.70	0.88
リン酸トリブチル	+++++	0.873	83	18.84	18.87	-1.82	0.98

付表9 市販クライテリアの測定結果一覧 (Inj180)

化合物名	判定	相対定量値	MS HIT率	測定RT	予想RT	RT	QT比率
2,4-ジクロロアニリン	+++++	0.949	94	13.98	13.97	0.66	1.02
2,4-ジニトロアニリン	+++++	1.233	91	22.89	22.87	1.31	0.78
2,6-ジクロロフェノール	+++++	1.071	95	11.70	11.69	0.74	0.98
2,6-ジメチルアニリン	+++++	1.087	94	11.04	11.02	1.46	0.88
2,6-ジメチルフェノール	+++++	1.013	97	9.88	9.85	1.43	0.96
イソキサチオン	+++++	1.343	90	26.12	26.13	-0.53	0.90
オクタノール	+++++	0.627	74	9.15	9.15	-0.16	1.38
キャプタホール	+++++	0.692	74	28.05	28.06	-0.73	1.20
クロルピリホス	+++++	1.197	91	23.23	23.24	-0.49	0.96
クロルピリホスメチル	+++++	1.176	90	22.05	22.05	-0.44	1.02
シマジン	+++++	1.119	91	20.23	20.21	0.61	1.01
フェニトロチオン	+++++	1.157	87	22.84	22.84	-0.24	0.86
フタル酸ジエチル	+++++	0.906	91	18.06	18.06	0.32	0.99
フタル酸ブチルベンジル	+++++	0.860	97	27.42	27.44	-0.81	0.90
ベンゾチアゾール	+++++	0.953	94	12.22	12.19	1.61	0.93
ペンタクロロフェノール	+++++	1.059	96	20.37	20.35	1.15	0.97
リン酸トリス(2-クロロエチル)	+++++	1.660	68	20.46	20.49	-1.71	0.93
リン酸トリブチル	+++++	0.965	90	18.84	18.87	-1.83	0.92

付表10 市販クライテリアの測定結果一覧 (Inj260)

化合物名	判定	相対定量値	MS HIT率	測定RT	予想RT	RT	QT比率
2,4-ジクロロアニリン	+++++	0.890	94	13.98	13.97	0.67	0.99
2,4-ジニトロアニリン	+++++	0.985	83	22.92	22.87	2.83	0.87
2,6-ジクロロフェノール	+++++	1.012	97	11.70	11.69	1.13	1.00
2,6-ジメチルアニリン	+++++	1.025	95	11.04	11.02	1.09	0.92
2,6-ジメチルフェノール	+++++	1.015	94	9.88	9.85	1.44	0.91
イソキサチオン	+++++	1.230	92	26.13	26.13	-0.14	0.77
オクタノール	+++++	0.671	47	9.15	9.15	-0.14	1.24
キャプタホール	+++++	0.480	72	28.05	28.06	-0.71	1.64
クロルピリホス	+++++	1.339	99	23.23	23.24	-0.86	0.97
クロルピリホスメチル	+++++	1.246	95	22.05	22.05	-0.43	0.96
シマジン	+++++	1.089	89	20.22	20.21	0.25	1.06
フェニトロチオン	+++++	1.137	93	22.84	22.84	-0.23	0.89
フタル酸ジエチル	+++++	0.920	98	18.06	18.06	0.33	1.02
フタル酸ブチルベンジル	+++++	0.978	96	27.42	27.44	-0.80	0.93
ベンゾチアゾール	+++++	0.954	94	12.22	12.19	1.62	0.94
ペンタクロロフェノール	+++++	0.934	95	20.38	20.35	1.54	1.05
リン酸トリス(2-クロロエチル)	+++++	1.708	93	20.46	20.49	-1.33	0.85
リン酸トリブチル	+++++	0.979	83	18.84	18.87	-1.82	0.96

付表 11 市販クライテリアの測定結果一覧（メンテ直後）

化合物名	判定	相対定量値	MS HIT率	測定RT	予想RT	RT	QT比率
2,4-ジクロロアニリン	+++++	0.907	94	13.85	13.84	0.70	1.02
2,4-ジニトロアニリン	+++++	1.308	89	22.75	22.74	1.05	0.96
2,6-ジクロロフェノール	+++++	0.956	95	11.57	11.55	1.17	0.97
2,6-ジメチルアニリン	+++++	1.090	91	10.91	10.89	1.45	0.89
2,6-ジメチルフェノール	+++++	1.108	94	9.75	9.72	1.67	0.89
イソキサチオン	+++++	1.535	91	26.00	26.00	0.08	0.56
オクタノール	+++++	0.784	74	9.03	9.03	0.39	1.28
キャプタホール	+++++	1.434	38	27.93	27.93	-0.32	1.18
クロルピリホス	+++++	1.468	91	23.11	23.11	0.30	0.94
クロルピリホスメチル	+++++	0.984	83	21.92	21.92	0.17	0.98
シマジン	+++++	0.838	91	20.10	20.08	1.12	1.02
フェニトロチオン	+++++	1.127	90	22.72	22.71	0.65	0.91
フタル酸ジエチル	+++++	0.890	98	17.94	17.93	0.71	0.93
フタル酸ブチルベンジル	+++++	1.038	78	27.31	27.31	0.04	0.80
ベンゾチアゾール	+++++	0.870	91	12.08	12.06	1.29	1.03
ペンタクロロフェノール	+++++	0.843	90	20.23	20.22	0.91	1.01
リン酸トリス(2-クロロエチル)	+++++	1.722	91	20.33	20.35	-1.20	1.11
リン酸トリブチル	+++++	0.883	83	18.72	18.74	-1.03	0.88

付表 12 市販クライテリアの測定結果一覧（メンテ後 Inj20）

化合物名	判定	相対定量値	MS HIT率	測定RT	予想RT	RT	QT比率
2,4-ジクロロアニリン	+++++	0.945	91	13.84	13.83	0.52	0.99
2,4-ジニトロアニリン	+++++	1.284	94	22.76	22.73	1.05	0.87
2,6-ジクロロフェノール	+++++	0.970	97	11.57	11.55	1.10	1.01
2,6-ジメチルアニリン	+++++	1.071	94	10.91	10.88	1.77	0.92
2,6-ジメチルフェノール	+++++	0.973	95	9.75	9.72	2.01	0.99
イソキサチオン	+++++	1.437	91	26.00	26.00	0.14	0.65
オクタノール	+++++	0.742	90	9.03	9.02	0.34	1.28
キャプタホール	+++++	1.008	74	27.92	27.93	-0.56	1.24
クロルピリホス	+++++	1.295	83	23.11	23.11	0.00	1.03
クロルピリホスメチル	+++++	1.089	94	21.92	21.92	0.14	0.95
シマジン	+++++	0.981	93	20.09	20.08	0.92	1.08
フェニトロチオン	+++++	1.110	91	22.71	22.71	0.28	0.89
フタル酸ジエチル	+++++	0.904	98	17.93	17.92	0.58	0.96
フタル酸ブチルベンジル	+++++	0.938	93	27.30	27.31	-0.21	0.86
ベンゾチアゾール	+++++	0.897	95	12.08	12.05	1.56	1.00
ペンタクロロフェノール	+++++	0.893	94	20.23	20.21	1.08	1.05
リン酸トリス(2-クロロエチル)	+++++	1.636	45	20.34	20.35	-0.65	1.16
リン酸トリブチル	+++++	0.993	91	18.72	18.73	-0.80	0.91