

## Application Note

No. 56

環境

# 低温濃縮-GC-MS/MS (MRM) 法による揮発性有害 大気汚染物質およびオゾン前駆物質の分析

渡辺靖二\*1、鈴木明\*2



Environment

## 1. はじめに

大気中の揮発性有機化合物の環境モニタリングは、健康影響を把握する目的や光化学オゾンおよび PM2.5 の発生源推定の目的で実施されてきました。それらの分析法としては容器捕集-GC/MS (SIM) による多成分同時分析法が普及しています。有害大気汚染物質に該当する可能性があるとして 248 物質がリストアップされており<sup>1)</sup>、多成分同時分析法の拡充が期待されています。

GC/MS (SIM) 法では、測定対象物質数を増やすと測定物質相互あるいは夾雑物質によるイオン干渉のために分析が難しくなる可能性があります。

一方、マルチリアクションモニタリング (MRM) 法は選択性能が優れており SIM 法の代替法として活用されていますが、揮発性有機化合物分析に適用した報告は限られます<sup>2)</sup>。また、GC×GC 装置あるいは二重収束型や飛行時間型等の高分解能質量分析計を用いる分析法も選択性能に優れていますが、装置の普及の観点から GC/MS/MS (MRM) 法の適用は実際的と考えられます。

本報では、有害大気汚染物質に分類される 51 種と光オゾン前駆物質 55 種 (10 種が重複するので計 96 種) の GC/MS/MS (MRM) 法による同時分析法を開発し、環境試料の分析に適用した結果を報告します。

\*1 元環境調査研修所教官  
\*2 ジーエルサイエンス株式会社

## 2. GC/MS/MS (MRM) 法構築工程

### 2-1. サンプル

スキャン分析及びプロダクトイオンスキャン分析用の混合標準ガスは、標準原ガス（HAPS-J44+F7（各約 1 ppmv/窒素バランス〔住友精化製〕）と PAMS-J58（各約 1 ppmv/窒素バランス〔住友精化製〕））各 5 mL を、ガスタイトシリンジを使って減圧した 6 L キャニスターに精製水 100  $\mu$ L を添加した後に注入し、加湿純窒素ガスで 179 kPa まで充填しました（各成分 476 pptv、両標準原ガスで重複する成分 952 pptv）。SIM 分析、MRM 分析及び Pseudo-MRM（プリカーサイオンとプロダクトイオンに同質量のイオンを選択する測定法）分析用標準ガスは、各成分 426 pptv、2 種の標準原ガスで重複する成分 852 pptv を調製しました。

内標準ガスは、原ガス（フルオロベンゼン、トルエン-d8、クロロベンゼン-d5 各 1 ppmv/窒素バランス〔高千穂工業製〕）10 mL を減圧した 15 L キャニスターに注入した後、加湿純窒素ガスで 250 kPa まで充填しました（各成分 338 pptv）。キャニスターは、上記標準ガスに含まれる全成分の回収率が 90~110% のものを使用しました。

一般環境大気試料として埼玉県所沢市の住宅地域で 2017 年 3 月 25 日と埼玉県狭山市の住宅地域で 3 月 28 日に、沿道大気試料として埼玉県所沢市の国道の側 2ヶ所 で 3 月 25 日と 3 月 28 日に、発生源周辺試料として埼玉県狭山市の工業団地敷地境界の 2ヶ所 で 3 月 28 日に採取しました。各試料は、実験室に持ち帰り、室温に戻してから内圧を測定した後、150 kPa まで加湿超高純度窒素ガスで加圧後、分析まで保管しました。

### 2-2. 装置とメソッド

図 1 に低温濃縮装置付き GC-MS/MS システムを示します。

表 1-1 から 1-5 に、分析条件および SIM 測定条件、プロダクトイオンスキャン測定条件、MRM 測定条件をまとめて示します。



キャニスター濃縮導入装置  
CC2100 シリーズ

GCMS-TQ™8040

図 1 キャニスター濃縮導入装置付き GC-MS/MS システム

表 1-1 分析条件

キャニスター濃縮導入装置	: CC2100 (GL サイエンス)
トリプル四重極型ガスクロマトグラフ質量分析計	: GCMS-TQ8040 (島津製作所)
カラム	: InertCap®624, 0.25 mm×60 m, 1.4 $\mu$ m (6% Cyano-phenyl / 94% methyl-polysiloxane, GL サイエンス)
キャニスター濃縮導入装置	
Sample transfer flow	: 65 mL/min
Trap temp.	: Trap 1 (40 °C), Trap 2 (-100 °C)
Dry purge temp.	: Trap 1 (40 °C), Trap 2 (-20 °C)
Desorb time	: 6 min
Desorb temp.	: Trap 1 (220 °C), Trap 2 (220 °C)
MCS temp	: 35 °C
Cryo. Cool temp.	: -185 °C
Inject time	: 2 min
Inject temp.	: 200 °C
濃縮量	: 内標準ガス (100 mL) 標準ガス及び環境大気試料 (50~400 mL)
キャリアガス	: ヘリウム (1.50 mL/min)
圧力プログラム	: 155.4 kPa (5 min), 2.41 kPa/min, 172.6 kPa, 4.11 kPa/min, 213.7 kPa, 10.91 kPa/min, 309.2 kPa (2 min) による流量一定モード
ガスクロマトグラフ	
カラムオープン温度	: 35 °C (5min), 3.5 °C/min, 60 °C, 6 °C/min, 120 °C, 16 °C/min, 260 °C
質量分析計	
イオン源温度	: 200 °C
インターフェイス温度	: 260 °C
イオン化エネルギー	: 70 eV
コリジョンガス	: アルゴン
設定圧力	: 200 kPa

トランジションは、化合物ごとにスキャン測定で得られたマススペクトルの強度を基に選定した 2 種のプリカーサイオンについてコリジョンエネルギー (CE) を 5、15、25、35、45 V でプロダクトイオンスキャン測定し、最も強い強度が得られた 2 種類のプロダクトイオンとの組み合わせを選定しました。それらのトランジションについて CE を 2~38 V (3 V 刻み) で測定し、最適 CE 値を決定しました。3 種のモードでの測定は、質量分解能 (Low, Unit, High) を変えて行い、感度と選択性を比較しました。

使用したキャピラリーカラム (InertCap624) から HAPs に属する 51 種の化合物の溶出順序は既報 3) に従いました。PAMS に属する成分は、マススペクトルの NIST ライブラリー検索結果に従って同定しました。マススペクトルでは判別できなかった異性体については、標準原ガスまたは標品を購入して調製した単品の標準ガスをスキャン測定して得られた保持時間に基づいて同定しました (表 2)。

表 1-2 SIM、プロダクトイオンスキャン、MRM、Pseudo-MRM\*1メソッド

Compounds	CAS#	Rt (min)	SIM				
			Target (m/z)	Qualifier (m/z)	Start time (min)	End time (min)	Event time (sec)
1,1,1,2-Tetrafluoroethane (HFC134a)	811-97-2	4.85	69.0	83.0	4.75	5.35	0.06
<i>n</i> -Propane	115-07-1	4.99	29.0	43.0	4.75	5.35	0.06
Propylene	74-98-6	5.00	41.1	39.0	4.75	5.35	0.06
Dichlorodifluoromethane (CFC12)	75-71-8	5.10	85.0	87.0	4.75	5.35	0.06
Chlorodifluoromethane (HCFC22)	75-45-6	5.14	51.0	67.0	4.75	5.35	0.06
Dichlorotetrafluoroethane (CFC114)	76-14-2	5.53	85.0	135.0	5.35	5.88	0.075
Isobutane	75-28-5	5.58	43.1	57.1	5.35	5.88	0.075
1-Chloro-1,1-difluoroethane (HCFC142b)	75-68-3	5.60	65.0	85.0	5.35	5.88	0.075
Methyl chloride (chloromethane)	74-87-3	5.71	50.0	52.0	5.35	5.88	0.075
1-Butene	106-98-9	6.03	56.1	41.1	5.88	7.00	0.05
<i>n</i> -Butane	106-97-8	6.08	43.1	58.1	5.88	7.00	0.05
Vinyl chloride (chloroethene)	75-01-4	6.09	62.0	64.0	5.88	7.00	0.05
1,3-Butadiene	106-99-0	6.24	54.1	39.1	5.88	7.00	0.05
<i>trans</i> -2-Butene	624-64-6	6.36	41.1	56.1	5.88	7.00	0.05
<i>cis</i> -2-Butene	590-18-1	6.66	41.1	56.1	5.88	7.00	0.05
Methyl bromide (bromomethane)	74-83-9	7.21	93.9	96.0	7.00	7.41	0.3
Ethyl chloride (chloroethane)	75-00-3	7.57	64.0	66.0	7.41	8.09	0.15
Isopentane (2-methylbutane)	78-78-4	7.79	43.1	42.1	7.41	8.09	0.15
Trichlorofluoroethane (CFC11)	75-69-4	8.34	101.0	102.9	8.09	8.84	0.1
1-Pentene	109-67-1	8.44	42.1	55.1	8.09	8.84	0.1
<i>n</i> -Pentane	109-66-0	8.61	43.1	42.1	8.09	8.84	0.1
<i>trans</i> -2-Pentene	646-04-8	9.06	55.1	70.1	8.84	9.71	0.06
1,1-Dichloro-1-fluoroethane (HCFC141b)	1717-00-6	9.22	81.0	83.0	8.84	9.71	0.06
2-Methyl-1,3-butadiene	78-79-5	9.38	67.0	53.0	8.84	9.71	0.06
<i>cis</i> -2-Pentene	627-20-3	9.39	55.1	70.0	8.84	9.71	0.06
2,2-Dichloro-1,1,1-trifluoroethane (HCFC123)	306-83-2	9.48	83.0	85.0	8.84	9.71	0.06
1,1,2-Trifluoroethane (CFC113)	76-13-1	9.95	101.0	151.0	9.71	10.38	0.1
Vinylidene chloride (1,1-dichloroethylene)	75-35-4	10.00	96.0	61.0	9.71	10.38	0.1
2,2-Dimethylbutane	75-83-2	10.09	43.1	57.1	9.71	10.38	0.1
3,3-Dichloro-1,1,1,2,2-pentafluoropropane (HCFC225ca)	422-56-0	10.74	83.0	85.0	10.38	10.99	0.3
Allyl chloride (3-chloro-1-propene)	107-05-1	11.18	41.1	39.1	10.99	11.99	0.05
1,3-Dichloro-1,1,2,2,3-pentafluoropropane (HCFC225cb)	507-55-1	11.35	67.0	69.0	10.99	11.99	0.05
2,3-Dimethylbutane	79-29-8	11.48	42.1	43.1	10.99	11.99	0.05
2-Methylpentane	107-83-5	11.54	43.1	42.1	10.99	11.99	0.05
Dichloromethane	75-09-2	11.56	49.0	84.0	10.99	11.99	0.05
Cyclopentane	287-92-3	11.76	42.1	55.1	10.99	11.99	0.05
Acrylonitrile	107-13-1	12.17	53.0	52.0	11.99	12.61	0.15
3-Methylpentane	96-14-0	12.34	57.1	56.1	11.99	12.61	0.15
2-Methyl-1-Pentene	763-29-1	12.84	56.1	41.1	12.61	14.17	0.1
<i>n</i> -Hexane	110-54-3	13.13	57.1	41.1	12.61	14.17	0.1
Ethylidene dichloride (1,1-dichloroethane)	75-34-3	13.73	63.0	65.0	12.61	14.17	0.1
2,4-Dimethyl-pentane	108-08-7	14.61	43.1	57.1	14.17	14.82	0.3
Methyl-cyclopentane	96-37-7	15.00	56.1	69.1	14.82	15.69	0.15
<i>cis</i> -1,2-Dichloroethene	156-59-2	15.25	61.0	96.0	14.82	15.69	0.15
Chloroform	67-66-3	16.15	83.0	85.0	15.69	16.35	0.3
2-Methylhexane	591-76-4	16.52	43.1	85.1	16.35	17.31	0.05
Methyl chloroform (1,1,1-trichloroethane)	71-55-6	16.65	97.0	99.0	16.35	17.31	0.05
2,3-Dimethylpentane	565-59-3	16.80	43.1	56.1	16.35	17.31	0.05
Cyclohexane	110-82-7	16.87	84.1	56.1	16.35	17.31	0.05
3-Methylhexane	589-34-4	17.00	43.1	71.1	16.35	17.31	0.05
Carbon Tetrachloride	56-23-5	17.11	116.9	118.9	16.35	17.31	0.05
Benzene	71-43-2	17.58	78.1	77.1	17.31	17.94	0.1
2,2,4-Trimethylpentane	540-84-1	17.66	57.1	56.1	17.31	17.94	0.1
Ethylene dichloride (1,2-dichloroethane)	107-06-2	17.78	62.0	64.0	17.31	17.94	0.1
<i>n</i> -Heptane	142-82-5	18.13	43.1	71.1	17.94	18.75	0.15
Fluorobenzene (IS)	462-6-6	18.31	96.1	70.0	17.94	18.75	0.15
Trichloroethylene	79-01-6	19.24	129.9	131.9	18.75	19.52	0.3
Methylcyclohexane	108-87-2	19.83	83.1	55.1	19.52	20.29	0.15
1,2-Dichloropropane	78-87-5	19.92	63.0	62.0	19.52	20.29	0.15
2,3,4-Trimethylpentane	565-75-3	20.64	43.1	71.1	20.29	21.26	0.15
2-Methylheptane	592-27-8	21.07	57.1	43.1	20.29	21.26	0.15
3-Methylheptane	589-81-1	21.43	43.1	57.1	21.26	22.07	0.15
<i>cis</i> -1,3-Dichloropropene	10061-01-5	21.57	75.0	110.0	21.26	22.07	0.15
Toluene-d8 (IS)	2037-26-5	22.21	98.1	100.1	22.07	23.12	0.075
Toluene	108-88-3	22.39	91.1	92.1	22.07	23.12	0.075
<i>n</i> -Octane	111-65-9	22.50	43.1	85.1	22.07	23.12	0.075
<i>trans</i> -1,3-Dichloropropene	542-75-6	22.89	110.0	75.0	22.07	23.12	0.075
1,1,2-Trichloroethane	79-00-5	23.36	97.0	83.0	23.12	24.08	0.15
Tetrachloroethylene	127-18-4	23.56	165.9	163.9	23.12	24.08	0.15
Ethylene dibromide (1,2-dibromoethane)	106-93-4	24.50	107.0	109.0	24.08	24.87	0.3
Chlorobenzene-d5 (IS)	3114-55-4	25.23	117.1	82.1	24.87	25.89	0.06
Chlorobenzene	108-90-7	25.29	112.0	114.0	24.87	25.89	0.06
Ethylbenzene	100-41-4	25.40	91.1	106.1	24.87	25.89	0.06
<i>n</i> -Nonane	111-84-2	25.51	43.1	57.1	24.87	25.89	0.06

Compounds	CAS#	Rt (min)	SIM				
			Target (m/z)	Qualifier (m/z)	Start time (min)	End time (min)	Event time (sec)
<i>m</i> -Xylene	108-38-3	25.61	91.1	106.1	24.87	25.89	0.06
<i>p</i> -Xylene	106-42-3	25.61	91.1	106.1	24.87	25.89	0.06
<i>o</i> -Xylene	95-47-6	26.25	91.1	106.1	25.89	27.05	0.1
Styrene	100-42-5	26.30	104.1	78.1	25.89	27.05	0.1
Isopropylbenzene (cumene)	98-82-8	26.81	105.1	120.1	25.89	27.05	0.1
1,1,2,2-Tetrachloroethane	79-34-5	27.25	83.0	85.0	27.05	27.81	0.043
$\alpha$ -Pinene	80-56-8	27.30	93.1	121.1	27.05	27.81	0.043
<i>n</i> -Propylbenzene	103-65-1	27.43	91.1	120.1	27.05	27.81	0.043
3-Ethyltoluene	620-14-4	27.53	105.1	120.1	27.05	27.81	0.043
<i>n</i> -Decane	124-18-5	27.56	57.1	43.1	27.05	27.81	0.043
4-Ethyltoluene	622-96-8	27.61	105.1	120.1	27.05	27.81	0.043
1,3,5-Trimethylbenzene	108-67-8	27.67	105.1	120.1	27.05	27.81	0.043
2-Ethyltoluene	611-14-3	27.95	105.1	120.1	27.81	28.06	0.3
1,2,4-Trimethylbenzene	95-63-6	28.20	105.1	120.1	28.06	28.48	0.1
$\beta$ -Pinene	127-91-3	28.38	121.1	93.1	28.06	28.48	0.1
<i>m</i> -Dichlorobenzene	541-73-1	28.67	146.0	148.0	28.48	29.03	0.06
1,2,3-Trimethylbenzene	526-73-8	28.76	105.1	120.1	28.48	29.03	0.06
<i>p</i> -Dichlorobenzene	106-46-7	28.82	146.0	148.0	28.48	29.03	0.06
Benzyl chloride	100-44-7	28.92	126.0	91.0	28.48	29.03	0.06
1,3-Diethylbenzene	141-93-5	28.96	105.1	119.1	28.48	29.03	0.06
1,4-Diethylbenzene	105-05-5	29.11	119.1	105.1	29.03	30.28	0.1
<i>n</i> -Undecane	1120-21-4	29.12	57.1	43.1	29.03	30.28	0.1
<i>o</i> -Dichlorobenzene	95-50-1	29.26	146.0	148.0	29.03	30.28	0.1
1,2,4-Trichlorobenzene	120-82-1	31.14	179.9	181.9	30.28	32.00	0.15
Hexachlorobutadiene	87-68-3	31.23	224.9	226.8	30.28	32.00	0.15

\*1 Pseudo-MRM とは、プリカーサイオンとプロダクトイオンに同質量のイオンを選択する測定法です。原理的なメリットは、夾雑イオンをコリジョンセルで除去することが可能になります。

表 1-3 SIM、プロダクトイオンスキャン、MRM、Pseudo-MRM\*1メソッド

Compounds	CAS#	Rt (min)	プロダクトイオンスキャン								
			Start time (min)	End time (min)	Event time (sec)	Start (m/z)	End (m/z)	Precursor (m/z)	Start (m/z)	End (m/z)	Precursor (m/z)
1,1,1,2-Tetrafluoroethane (HFC134a)	811-97-2	4.85	3.50	4.97	0.15	29	84	69	29	98	83
<i>n</i> -Propane	115-07-1	4.99	4.49	5.31	0.075	15	44	29	15	58	43
Propylene	74-98-6	5.00	4.49	5.31	0.075	15	56.1	41.1	15	54	39
Dichlorodifluoromethane (CFC12)	75-71-8	5.10	4.97	5.28	0.075	29	100	85	29	102	87
Chlorodifluoromethane (HCFC22)	75-45-6	5.14	4.97	5.28	0.075	29	66	51	29	82	67
Dichlorotetrafluoroethane (CFC114)	76-14-2	5.53	5.28	5.91	0.05	29	100	85	29	150	135
Isobutane	75-28-5	5.58	5.31	5.85	0.15	15	58.1	43.1	15	72.1	57.1
1-Chloro-1,1-difluoroethane (HCFC142b)	75-68-3	5.60	5.28	5.91	0.05	29	80	65	29	100	85
Methyl chloride (chloromethane)	74-87-3	5.71	5.28	5.91	0.05	29	65	50	29	67	52
1-Butene	106-98-9	6.03	5.85	6.22	0.075	15	71.1	56.1	15	56.1	41.1
<i>n</i> -Butane	106-97-8	6.08	5.85	6.22	0.075	15	58.1	43.1	15	73.1	58.1
Vinyl chloride (chloroethene)	75-01-4	6.09	5.91	6.71	0.075	29	77	62	29	79	64
1,3-Butadiene	106-99-0	6.24	5.91	6.71	0.075	29	69.1	54.1	29	54.1	39.1
<i>trans</i> -2-Butene	624-64-6	6.36	6.22	6.52	0.15	15	56.1	41.1	15	71.1	56.1
<i>cis</i> -2-Butene	590-18-1	6.66	6.52	7.22	0.15	15	56.1	41.1	15	71.1	56.1
Methyl bromide (bromomethane)	74-83-9	7.21	6.71	7.40	0.15	29	108.9	93.9	29	111	96
Ethyl chloride (chloroethane)	75-00-3	7.57	7.40	8.75	0.075	29	79	64	29	81	66
Isopentane (2-methylbutane)	78-78-4	7.79	7.22	8.00	0.15	15	58.1	43.1	15	57.1	42.1
Trichlorofluoroethane (CFC11)	75-69-4	8.34	7.40	8.75	0.075	29	116	101	29	117.9	102.9
1-Pentene	109-67-1	8.44	8.00	8.77	0.075	15	57.1	42.1	15	70.1	55.1
<i>n</i> -Pentane	109-66-0	8.61	8.00	8.77	0.075	15	58.1	43.1	15	57.1	42.1
<i>trans</i> -2-Pentene	646-04-8	9.06	8.77	9.18	0.15	15	70.1	55.1	15	85.1	70.1
1,1-Dichloro-1-fluoroethane (HCFC141b)	1717-00-6	9.22	8.75	9.73	0.075	29	96	81	29	98	83
2-Methyl-1,3-butadiene	78-79-5	9.38	9.18	9.63	0.05	15	68	53	15	82	67
<i>cis</i> -2-Pentene	627-20-3	9.39	9.18	9.63	0.05	15	70.1	55.1	15	85.1	70.1
2,2-Dichloro-1,1,1-trifluoroethane (HCFC123)	306-83-2	9.48	8.75	9.73	0.075	29	98	83	29	100	85
1,1,2-Trifluoroethane (CFC113)	76-13-1	9.95	9.73	10.35	0.075	29	116	101	29	166	151
Vinylidene chloride (1,1-dichloroethylene)	75-35-4	10.00	9.73	10.35	0.075	29	111	96	29	76	61
2,2-Dimethylbutane	75-83-2	10.09	9.63	10.78	0.15	15	86.2	71.2	15	72.1	57.1
3,3-Dichloro-1,1,1,2,2-pentafluoropropane (HCFC225ca)	422-56-0	10.74	10.35	10.98	0.15	29	98	83	29	100	85
Allyl chloride (3-chloro-1-propene)	107-05-1	11.18	10.98	11.86	0.05	29	56.1	41.1	29	54.1	39.1
1,3-Dichloro-1,1,2,2,3-pentafluoropropane (HCFC225cb)	507-55-1	11.35	10.98	11.86	0.05	29	82	67	29	84	69
2,3-Dimethylbutane	79-29-8	11.48	10.78	11.99	0.05	15	57.1	42.1	15	58.1	43.1
2-Methylpentane	107-83-5	11.54	10.78	11.99	0.05	15	58.1	43.1	29	86.1	71.1
Dichloromethane	75-09-2	11.56	10.98	11.86	0.05	29	64	49	29	99	84
Cyclopentane	287-92-3	11.76	10.78	11.99	0.05	15	70.1	55.1	15	70.1	70.1
Acrylonitrile	107-13-1	12.17	11.86	13.00	0.15	29	68	53	29	67	52

Compounds	CAS#	Rt (min)	プロダクトイオンスキャン								
			Start time (min)	End time (min)	Event time (sec)	Start (m/z)	End (m/z)	Precursor (m/z)	Start (m/z)	End (m/z)	Precursor (m/z)
3-Methylpentane	96-14-0	12.34	11.99	12.52	0.15	15	72.1	57.1	15	71.1	56.1
2-Methyl-1-Pentene	763-29-1	12.84	12.52	12.92	0.15	15	71.1	56.1	15	56.1	69.1
<i>n</i> -Hexane	110-54-3	13.13	12.92	13.86	0.15	15	72.1	57.1	15	56.1	86.1
Ethylidene dichloride (1,1-dichloroethane)	75-34-3	13.73	13.00	14.47	0.15	29	78	63	29	80	65
2,4-Dimethyl-pentane	108-08-7	14.61	13.86	14.76	0.15	15	58.1	43.1	15	72.1	57.1
Methyl-cyclopentane	96-37-7	15.00	14.76	15.76	0.15	15	71.1	56.1	15	84.1	69.1
<i>cis</i> -1,2-Dichloroethene	156-59-2	15.25	14.47	15.69	0.15	29	76	61	29	111	96
Chloroform	67-66-3	16.15	15.69	16.40	0.15	29	98	83	29	100	85
2-Methylhexane	591-76-4	16.52	15.76	17.24	0.038	15	58.1	43.1	15	100.1	85.1
Methyl chloroform (1,1,1-trichloroethane)	71-55-6	16.65	16.40	16.88	0.15	29	112	97	29	114	99
2,3-Dimethylpentane	565-59-3	16.80	15.76	17.24	0.038	15	58.1	43.1	15	71.1	56.1
Cyclohexane	110-82-7	16.87	15.76	17.24	0.038	15	99.1	84.1	15	71.1	56.1
3-Methylhexane	589-34-4	17.00	15.76	17.24	0.038	15	58.1	43.1	15	58.1	56.1
Carbon Tetrachloride	56-23-5	17.11	16.88	17.33	0.15	29	131.9	116.9	29	133.9	118.9
Benzene	71-43-2	17.58	17.33	18.12	0.075	29	93.1	78.1	29	92.1	77.1
2,2,4-Trimethylpentane	540-84-1	17.66	17.24	17.85	0.075	15	72.1	57.1	15	71.1	56.1
Ethylene dichloride (1,2-dichloroethane)	107-06-2	17.78	17.33	18.12	0.075	29	77	62	29	79	64
<i>n</i> -Heptane	142-82-5	18.13	17.85	19.07	0.075	15	58.1	43.1	15	86.1	71.1
Fluorobenzene (IS)	462-6-6	18.31	17.85	19.07	0.075	15	111.1	96.1	15	85	70
Trichloroethylene	79-01-6	19.24	18.12	19.58	0.075	29	144.9	129.9	29	146.9	131.9
Methylcyclohexane	108-87-2	19.83	19.07	20.24	0.15	15	98.1	83.1	15	98.1	98.1
1,2-Dichloropropane	78-87-5	19.92	19.58	20.75	0.15	29	78	63	29	77	62
2,3,4-Trimethylpentane	565-75-3	20.64	20.24	20.79	0.15	15	58.1	43.1	15	86.1	71.1
2-Methylheptane	592-27-8	21.07	20.79	21.21	0.15	15	72.1	99.1	15	72.1	57.1
3-Methylheptane	589-81-1	21.43	21.21	21.80	0.15	15	58.1	43.1	15	72.1	57.1
<i>cis</i> -1,3-Dichloropropene	10061-01-5	21.57	20.75	21.98	0.15	29	90	75	29	125	110
Toluene-d8 (IS)	2037-26-5	22.21	21.80	24.82	0.05	15	113.1	98.1	15	115.1	100.1
Toluene	108-88-3	22.39	21.98	22.68	0.075	29	106.1	91.1	29	107.1	92.1
<i>n</i> -Octane	111-65-9	22.50	21.80	24.82	0.05	15	100.1	85.1	15	58.1	43.1
<i>trans</i> -1,3-Dichloropropene	542-75-6	22.89	22.68	23.12	0.15	29	125	110	29	90	75
1,1,2-Trichloroethane	79-00-5	23.36	23.12	23.46	0.15	29	112	97	29	98	83
Tetrachloroethylene	127-18-4	23.56	23.46	24.02	0.15	29	180.9	165.9	29	178.9	163.9
Ethylene dibromide (1,2-dibromoethane)	106-93-4	24.50	24.02	24.92	0.15	29	122	107	29	124	109
Chlorobenzene-d5 (IS)	3114-55-4	25.23	24.82	25.94	0.038	15	132.1	117.1	15	97.1	82.1
Chlorobenzene	108-90-7	25.29	24.92	25.49	0.05	29	127	112	29	129	114
Ethylbenzene	100-41-4	25.40	24.92	25.49	0.05	29	106.1	91.1	29	121.1	106.1
<i>n</i> -Nonane	111-84-2	25.51	24.82	25.94	0.038	15	58.1	43.1	15	72.1	57.1
<i>m</i> -Xylene	108-38-3	25.61	25.49	25.95	0.15	29	106.1	91.1	29	121.1	106.1
<i>p</i> -Xylene	106-42-3	25.61	24.82	25.94	0.038	15	106.1	91.1	15	121.1	106.1
<i>o</i> -Xylene	95-47-6	26.25	25.95	26.74	0.075	29	106.1	91.1	29	121.1	106.1
Styrene	100-42-5	26.30	25.95	26.74	0.075	29	119.1	104.1	29	93.1	78.1
Isopropylbenzene (cumene)	98-82-8	26.81	26.49	27.02	0.15	15	120.1	105.1	15	135.1	120.1
1,1,2,2-Tetrachloroethane	79-34-5	27.25	26.74	27.43	0.15	29	98	83	29	100	85
$\alpha$ -Pinene	80-56-8	27.30	27.02	27.31	0.15	15	108.1	93.1	15	136.1	121.1
<i>n</i> -Propylbenzene	103-65-1	27.43	27.31	27.75	0.03	15	106.1	91.1	15	135.1	120.1
3-Ethyltoluene	620-14-4	27.53	27.31	27.75	0.03	15	120.1	105.1			
<i>n</i> -Decane	124-18-5	27.56	27.31	27.75	0.03	15	72.1	57.1	15	58.1	43.1
4-Ethyltoluene	622-96-8	27.61	27.43	27.94	0.075	29	120.1	105.1	29	135.1	120.1
1,3,5-Trimethylbenzene	108-67-8	27.67	27.43	27.94	0.075	29	120.1	105.1	29	135.1	120.1
2-Ethyltoluene	611-14-3	27.95	27.75	28.05	0.15	15	120.1	105.1	15	135.1	120.1
1,2,4-Trimethylbenzene	95-63-6	28.20	27.94	28.45	0.15	29	120.1	105.1	29	135.1	120.1
$\beta$ -Pinene	127-91-3	28.38	28.05	28.47	0.05	15	136.1	121.1	15	108.1	93.1
<i>m</i> -Dichlorobenzene	541-73-1	28.67	28.45	28.76	0.15	29	161	146	29	163	148
1,2,3-Trimethylbenzene	526-73-8	28.76	28.47	28.85	0.15	15	120.1	105.1	15	135.1	120.1
<i>p</i> -Dichlorobenzene	106-46-7	28.82	28.76	29.10	0.075	29	161	146	29	163	148
Benzyl chloride	100-44-7	28.92	28.76	29.10	0.075	29	141	126	29	106	91
1,3-Diethylbenzene	141-93-5	28.96	28.85	29.02	0.15	15	120.1	105.1	15	134.1	119.1
1,4-Diethylbenzene	105-05-5	29.11	29.02	32.00	0.075	15	134.1	119.1	15	120.1	105.1
<i>n</i> -Undecane	1120-21-4	29.12	29.02	32.00	0.075	15	72.1	57.1	15	58.1	43.1
<i>o</i> -Dichlorobenzene	95-50-1	29.26	29.10	30.02	0.15	29	161	146	29	163	148
1,2,4-Trichlorobenzene	120-82-1	31.14	30.02	31.55	0.075	29	194.9	179.9	29	196.9	181.9
Hexachlorobutadiene	87-68-3	31.23	30.02	31.55	0.075	29	239.9	224.9	29	241.8	226.8

\*1 Pseudo-MRM とは、プリカーサイオンとプロダクトイオンに同質量のイオンを選択する測定法です。原理的なメリットは、夾雑イオンをコリジョンセルで除去することが可能になります。

表 1-4 SIM、プロダクトイオンスキャン、MRM、Pseudo-MRM\*1メソッド

Compounds	CAS#	Rt (min)	MRM						
			Start time (min)	End (min)	Event (sec)	Target transition (m/z)	CE (V)	Qualifoer transition (m/z)	CE (V)
1,1,1,2-Tetrafluoroethane (HFC134a)	811-97-2	4.85	4.35	5.38	0.06	83.0>33.0	11	69.0>50.0	26
<i>n</i> -Propane	115-07-1	4.99	4.35	5.38	0.06	29.1>27.1	2	43.1>27.1	11
Propylene	74-98-6	5.00	4.35	5.38	0.06	41.1>39.0	6	29.1>15.0	27
Dichlorodifluoromethane (CFC12)	75-71-8	5.10	4.35	5.38	0.06	85.0>50.0	25	87.0>50.0	25
Chlorodifluoromethane (HCFC22)	75-45-6	5.14	4.35	5.38	0.06	51.0>31.0	23	67.0>31.0	20
Dichlorotetrafluoroethane (CFC114)	76-14-2	5.53	5.38	5.83	0.075	135.0>85.0	11	85.0>50.0	25
Isobutane	75-28-5	5.58	5.38	5.83	0.075	43.1>27.1	9	57.1>29.0	9
1-Chloro-1,1-difluoroethane (HCFC142b)	75-68-3	5.60	5.38	5.83	0.075	65.0>45.0	17	85.0>50.0	25
Methyl chloride (chloromethane)	74-87-3	5.71	5.38	5.83	0.075	50.0>15.0	11	52.0>15.0	11
1-Butene	106-98-9	6.03	5.83	6.95	0.05	41.1>39.0	6	56.1>41.1	9
<i>n</i> -Butane	106-97-8	6.08	5.83	6.95	0.05	43.1>27.1	9	58.1>43.10	2
Vinyl chloride (chloroethene)	75-01-4	6.09	5.83	6.95	0.05	62.0>27.1	11	64.0>27.1	11
1,3-Butadiene	106-99-0	6.24	5.83	6.95	0.05	54.0>39.0	10	54.0>28.0	11
<i>trans</i> -2-Butene	624-64-6	6.36	5.83	6.95	0.05	41.1>39.1	6	56.1>41.1	9
<i>cis</i> -2-Butene	590-18-1	6.66	5.83	6.95	0.05	41.1>39.1	5	56.1>41.1	9
Methyl bromide (bromomethane)	74-83-9	7.21	6.95	7.40	0.3	94.0>15.0	17	96.0>15.0	17
Ethyl chloride (chloroethane)	75-00-3	7.57	7.40	8.06	0.15	64.0>29.0	5	64.0>49.0	17
Isopentane (2-methylbutane)	78-78-4	7.79	7.40	8.06	0.15	57.1>29.1	9	43.1>27.1	9
Trichlorofluoroethane (CFC11)	75-69-4	8.34	8.06	8.80	0.1	101.0>66.0	26	103.0>66.0	26
1-Pentene	109-67-1	8.44	8.06	8.80	0.1	70.1>55.0	7	42.1>27.1	15
<i>n</i> -Pentane	109-66-0	8.61	8.06	8.80	0.1	42.1>27.1	15	43.1>27.1	9
<i>trans</i> -2-Pentene	646-04-8	9.06	8.80	9.71	0.06	70.1>55.1	9	55.1>29.1	9
1,1-Dichloro-1-fluoroethane (HCFC141b)	1717-00-6	9.22	8.80	9.71	0.06	81.0>61.0	14	83.0>63.0	14
2-Methyl-1,3-butadiene	78-79-5	9.38	8.80	9.71	0.06	70.1>55.1	9	55.1>27.1	15
<i>cis</i> -2-Pentene	627-20-3	9.39	8.80	9.71	0.06	67.0>41.0	15	53.1>27.1	9
2,2-Dichloro-1,1,1-trifluoroethane (HCFC123)	306-83-2	9.48	8.80	9.71	0.06	83.0>47.0	26	85.0>47.0	26
1,1,2-Trifluorotrchloroethane (CFC113)	76-13-1	9.95	9.71	10.45	0.1	151.0>101.0	11	101.0>66.0	26
Vinylidene chloride (1,1-dichloroethylene)	75-35-4	10.00	9.71	10.45	0.1	96.0>61.0	17	61.0>26.0	21
2,2-Dimethylbutane	75-83-2	10.09	9.71	10.45	0.1	57.1>29.1	9	71.1>29.1	18
3,3-Dichloro-1,1,1,2,2-pentafluoropropane (HCFC225ca)	422-56-0	10.74	10.45	10.98	0.3	83.0>45.0	24	85.0>49.0	26
Allyl chloride (3-chloro-1-propene)	107-05-1	11.18	10.98	11.98	0.05	76.0>41.0	8	76.0>39.0	8
1,3-Dichloro-1,1,2,2,3-pentafluoropropane (HCFC225cb)	507-55-1	11.35	10.98	11.98	0.05	67.0>31.0	25	85.0>50.0	26
2,3-Dimethylbutane	79-29-8	11.48	10.98	11.98	0.05	42.1>27.1	17	43.1>15.1	22
2-Methylpentane	107-83-5	11.54	10.98	11.98	0.05	43.1>27.1	10	71.1>41.1	7
Dichloromethane	75-09-2	11.56	10.98	11.98	0.05	84.0>49.0	8	86.0>51.0	8
Cyclopentane	287-92-3	11.76	10.98	11.98	0.05	70.1>55.1	18	42.1>27.1	6
Acrylonitrile	107-13-1	12.17	11.98	12.57	0.15	53.0>26.0	8	52.0>26.0	8
3-Methylpentane	96-14-0	12.34	11.98	12.57	0.15	56.1>41.1	9	57.1>29.1	9
2-Methyl-1-Pentene	763-29-1	12.84	12.57	13.43	0.15	56.1>41.1	9	84.1>56.1	6
<i>n</i> -Hexane	110-54-3	13.13	12.57	13.43	0.15	57.1>29.1	9	86.1>41.1	15
Ethylidene dichloride (1,1-dichloroethane)	75-34-3	13.73	13.43	14.18	0.3	63.0>27.0	17	65.0>27.0	17
2,4-Dimethyl-pentane	108-08-7	14.61	14.18	14.77	0.3	57.1>29.1	9	85.1>43.1	7
Methyl-cyclopentane	96-37-7	15.00	14.77	15.69	0.15	56.1>41.0	9	69.1>41.1	9
<i>cis</i> -1,2-Dichloroethene	156-59-2	15.25	14.77	15.69	0.15	96.0>61.0	17	61.0>26.0	22
Chloroform	67-66-3	16.15	15.69	16.30	0.3	83.0>47.0	26	85.0>47.0	26
2-Methylhexane	591-76-4	16.52	16.30	17.30	0.05	85.1>43.1	9	43.1>27.1	9
Methyl chloroform (1,1,1-trichloroethane)	71-55-6	16.65	16.30	17.30	0.05	97.0>61.0	17	99.0>61.0	17
2,3-Dimethylpentane	565-59-3	16.80	16.30	17.30	0.05	56.1>41.1	9	71.1>43.1	6
Cyclohexane	110-82-7	16.87	16.30	17.30	0.05	56.1>41.1	9	84.1>41.1	18
3-Methylhexane	589-34-4	17.00	16.30	17.30	0.05	71.1>43.1	6	43.1>27.1	10
Carbon Tetrachloride	56-23-5	17.11	16.30	17.30	0.05	117.0>82.0	26	119.0>84.0	26
Benzene	71-43-2	17.58	17.30	17.93	0.1	78.1>52.0	18	77.1>51.0	18
2,2,4-Trimethylpentane	540-84-1	17.66	17.30	17.93	0.1	57.1>29.1	9	56.1>41.1	9
Ethylene dichloride (1,2-dichloroethane)	107-06-2	17.78	17.30	17.93	0.1	62.0>27.1	17	64.0>27.1	17
<i>n</i> -Heptane	142-82-5	18.13	17.93	18.73	0.15	43.1>27.1	6	71.1>43.1	10
Fluorobenzene (IS)	462-6-6	18.31	17.93	18.73	0.15	96.1>70.1	18		
Trichloroethylene	79-01-6	19.24	18.73	19.56	0.3	130.0>95.0	17	132.0>97.0	17
Methylcyclohexane	108-87-2	19.83	19.56	20.27	0.15	83.1>55.1	9	98.1>55.1	15
1,2-Dichloropropane	78-87-5	19.92	19.56	20.27	0.15	63.0>27.1	17	62.0>27.1	17
2,3,4-Trimethylpentane	565-75-3	20.64	20.27	20.85	0.3	71.1>43.1	7	43.1>27.1	10
2-Methylheptane	592-27-8	21.07	20.85	21.27	0.3	57.1>29.1	10	99.1>57.1	6
3-Methylheptane	589-81-1	21.43	21.27	21.89	0.15	85.1>43.1	7	57.1>29.1	9
<i>cis</i> -1,3-Dichloropropene	10061-01-5	21.57	21.27	21.89	0.15	110.0>75.0	8	75.0>49.1	17
Toluene-d8 (IS)	2037-26-5	22.21	21.89	22.71	0.1	98.1>70.2	16		
Toluene	108-88-3	22.39	21.89	22.71	0.1	92.1>91.1	6	91.1>65.1	16
<i>n</i> -Octane	111-65-9	22.50	21.89	22.71	0.1	85.1>43.1	8	43.1>27.1	10
<i>trans</i> -1,3-Dichloropropene	542-75-6	22.89	22.71	23.15	0.3	110.0>75.0	8	75.0>49.1	17
1,1,2-Trichloroethane	79-00-5	23.36	23.15	24.08	0.15	97.0>61.0	17	83.0>47.1	26
Tetrachloroethylene	127-18-4	23.56	23.15	24.08	0.15	166.0>131.0	17	164.0>129.0	17
Ethylene dibromide (1,2-dibromoethane)	106-93-4	24.50	24.08	24.90	0.3	107.0>27.1	18	109.0>27.1	18
Chlorobenzene-d5 (IS)	3114-55-4	25.23	24.90	25.96	0.06	117.1>82.1	18		0
Chlorobenzene	108-90-7	25.29	24.90	25.96	0.06	112.0>77.0	17	114.0>77.0	17

Compounds	CAS#	Rt (min)	MRM						
			Start time (min)	End (min)	Event (sec)	Target transition (m/z)	CE (V)	Qualifoer transition (m/z)	CE (V)
Ethylbenzene	100-41-4	25.40	24.90	25.96	0.06	106.1>91.1	10	91.1>65.1	18
<i>n</i> -Nonane	111-84-2	25.51	24.90	25.96	0.06	85.1>43.1	9	43.1>27.1	10
<i>m</i> -Xylene	108-38-3	25.61	24.90	25.96	0.06	106.1>91.1	15	91.1>65.1	18
<i>p</i> -Xylene	106-42-3	25.61	24.90	25.96	0.06	106.1>91.1	15	91.1>65.1	18
<i>o</i> -Xylene	95-47-6	26.25	25.96	26.58	0.15	106.1>91.1	15	91.1>65.1	18
Styrene	100-42-5	26.30	25.96	26.58	0.15	104.1>103.1	3	104.1>78.1	18
Isopropylbenzene (cumene)	98-82-8	26.81	26.58	27.09	0.3	105.1>77.1	18	120.1>105.1	9
1,1,2,2-Tetrachloroethane	79-34-5	27.25	27.09	27.83	0.043	168.0>83.0	8	166.0>83.0	8
$\alpha$ -Pinene	80-56-8	27.30	27.09	27.83	0.043	93.1>77.1	15	121.1>93.1	9
<i>n</i> -Propylbenzene	103-65-1	27.43	27.09	27.83	0.043	91.1>65.1	18	120.1>91.1	10
3-Ethyltoluene	620-14-4	27.53	27.09	27.83	0.043	105.1>77.1	18	120.10105.1	12
<i>n</i> -Decane	124-18-5	27.56	27.09	27.83	0.043	57.1>29.1	10	43.1>27.1	10
4-Ethyltoluene	622-96-8	27.61	27.09	27.83	0.043	105.1>77.1	18	120.1>105.1	12
1,3,5-Trimethylbenzene	108-67-8	27.67	27.09	27.83	0.043	120.1>105.1	15	105.1>77.1	18
2-Ethyltoluene	611-14-3	27.95	27.83	28.09	0.3	105.1>77.1	18	120.1>105.1	12
1,2,4-Trimethylbenzene	95-63-6	28.20	28.09	28.51	0.15	120.1>105.1	15	105.1>77.1	18
$\beta$ -Pinene	127-91-3	28.38	28.09	28.51	0.15	121.1>106.1	15	93.1>77.0	12
<i>m</i> -Dichlorobenzene	541-73-1	28.67	28.51	29.05	0.06	146.0>111.1	17	148.0>113.1	17
1,2,3-Trimethylbenzene	526-73-8	28.76	28.51	29.05	0.06	120.1>105.1	15	105.1>77.1	18
<i>p</i> -Dichlorobenzene	106-46-7	28.82	28.51	29.05	0.06	146.0>111.1	17	148.0>113.1	17
Benzyl chloride	100-44-7	28.92	28.51	29.05	0.06	126.0>91.1	10	91.1>65.1	17
1,3-Diethylbenzene	141-93-5	28.96	28.51	29.05	0.06	105.1>77.1	18	119.1>91.1	12
1,4-Diethylbenzene	105-05-5	29.11	29.05	30.21	0.1	119.1>91.1	12	105.1>77.1	18
<i>n</i> -Undecane	1120-21-4	29.12	29.05	30.21	0.1	57.1>29.1	10	43.1>27.1	10
<i>o</i> -Dichlorobenzene	95-50-1	29.26	29.05	30.21	0.1	146.0>111.1	17	148.0>113.1	17
1,2,4-Trichlorobenzene	120-82-1	31.14	30.21	32.00	0.15	179.9>109.1	17	181.9>147.1	26
Hexachlorobutadiene	87-68-3	31.23	30.21	32.00	0.15	226.8>191.8	17	224.9>189.9	17

\*1 Pseudo-MRM とは、プリカーサイオンとプロダクトイオンに同質量のイオンを選択する測定法です。原理的なメリットは、夾雑イオンをコリジョンセルで除去することが可能になります。

表 1-5 SIM、プロダクトイオンスキャン、MRM、Pseudo-MRM\*1メソッド

Compounds	CAS#	Rt (min)	Pseudo-MRM						
			Start (min)	End (min)	Event (sec)	Target transition (m/z)	CE (V)	Qualifier transition (m/z)	CE (V)
1,1,1,2-Tetrafluoroethane (HFC134a)	811-97-2	4.85	4.75	5.35	0.03	69.0>69.0	0	83.0>83.0	0
<i>n</i> -Propane	115-07-1	4.99	4.75	5.35	0.03	29.0>29.0	0	43.0>43.0	0
Propylene	74-98-6	5.00	4.75	5.35	0.03	41.1>41.1	0	39.0>39.0	0
Dichlorodifluoromethane (CFC12)	75-71-8	5.10	4.75	5.35	0.03	85.0>85.0	0	87.0>87.0	0
Chlorodifluoromethane (HCFC22)	75-45-6	5.14	4.75	5.35	0.03	51.0>51.0	0	67.0>67.0	0
Dichlorotetrafluoroethane (CFC114)	76-14-2	5.53	5.35	5.88	0.03	85.0>85.0	0	135.0>135.0	0
Isobutane	75-28-5	5.58	5.35	5.88	0.03	43.1>43.1	0	57.1>57.1	0
1-Chloro-1,1-difluoroethane (HCFC142b)	75-68-3	5.60	5.35	5.88	0.03	65.0>65.0	0	85.0>85.0	0
Methyl chloride (chloromethane)	74-87-3	5.71	5.35	5.88	0.03	50.0>50.0	0	52.0>52.0	0
1-Butene	106-98-9	6.03	5.88	7.00	0.03	56.1>56.1	0	41.1>41.1	0
<i>n</i> -Butane	106-97-8	6.08	5.88	7.00	0.03	43.1>43.1	0	58.1>58.1	0
Vinyl chloride (chloroethene)	75-01-4	6.09	5.88	7.00	0.03	62.0>62.0	0	64.0>64.0	0
1,3-Butadiene	106-99-0	6.24	5.88	7.00	0.03	54.1>54.1	0	39.1>39.1	0
<i>trans</i> -2-Butene	624-64-6	6.36	5.88	7.00	0.03	41.1>41.1	0	56.1>56.1	0
<i>cis</i> -2-Butene	590-18-1	6.66	5.88	7.00	0.03	41.1>41.1	0	56.1>56.1	0
Methyl bromide (bromomethane)	74-83-9	7.21	7.00	7.41	0.03	93.9>93.9	0	96.0>96.0	0
Ethyl chloride (chloroethane)	75-00-3	7.57	7.41	8.09	0.03	64.0>64.0	0	66.0>66.0	0
Isopentane (2-methylbutane)	78-78-4	7.79	7.41	8.09	0.03	43.1>43.1	0	42.1>42.1	0
Trichlorofluoroethane (CFC11)	75-69-4	8.34	8.09	8.84	0.03	101.0>101.0	0	102.9>102.9	0
1-Pentene	109-67-1	8.44	8.09	8.84	0.03	42.1>42.1	0	55.1>55.1	0
<i>n</i> -Pentane	109-66-0	8.61	8.09	8.84	0.03	43.1>43.1	0	42.1>42.1	0
<i>trans</i> -2-Pentene	646-04-8	9.06	8.84	9.71	0.03	55.1>55.1	0	70.1>70.1	0
1,1-Dichloro-1-fluoroethane (HCFC141b)	1717-00-6	9.22	8.84	9.71	0.03	81.0>81.0	0	83.0>83.0	0
2-Methyl-1,3-butadiene	78-79-5	9.38	8.84	9.71	0.03	67.0>67.0	0	53.0>53.0	0
<i>cis</i> -2-Pentene	627-20-3	9.39	8.84	9.71	0.03	55.1>55.1	0	70.0>70.0	0
2,2-Dichloro-1,1,1-trifluoroethane (HCFC123)	306-83-2	9.48	8.84	9.71	0.03	83.0>83.0	0	85.0>85.0	0
1,1,2-Trifluorotrchloroethane (CFC113)	76-13-1	9.95	9.71	10.38	0.03	101.0>101.0	0	151.0>151.0	0
Vinylidene chloride (1,1-dichloroethylene)	75-35-4	10.00	9.71	10.38	0.03	96.0>96.0	0	61.0>61.0	0
2,2-Dimethylbutane	75-83-2	10.09	9.71	10.38	0.03	43.1>43.1	0	57.1>57.1	0
3,3-Dichloro-1,1,1,2,2-pentafluoropropane (HCFC225ca)	422-56-0	10.74	10.38	10.99	0.03	83.0>83.0	0	85.0>85.0	0
Allyl chloride (3-chloro-1-propene)	107-05-1	11.18	10.99	11.99	0.03	41.1>41.1	0	39.1>39.1	0
1,3-Dichloro-1,1,2,2,3-pentafluoropropane (HCFC225cb)	507-55-1	11.35	10.99	11.99	0.03	67.0>67.0	0	69.0>69.0	0
2,3-Dimethylbutane	79-29-8	11.48	10.99	11.99	0.03	42.1>42.1	0	43.1>43.1	0
2-Methylpentane	107-83-5	11.54	10.99	11.99	0.03	43.1>43.1	0	42.1>42.1	0
Dichloromethane	75-09-2	11.56	10.99	11.99	0.03	49.0>49.0	0	84.0>84.0	0
Cyclopentane	287-92-3	11.76	10.99	11.99	0.03	42.1>42.1	0	55.1>55.1	0

Compounds	CAS#	Rt (min)	Pseudo-MRM						
			Start (min)	End (min)	Event (sec)	Target transition (m/z)	CE (V)	Qualifier transition (m/z)	CE (V)
Acrylonitrile	107-13-1	12.17	11.99	12.61	0.03	53.0>53.0	0	52.0>52.0	0
3-Methylpentane	96-14-0	12.34	11.99	12.61	0.03	57.1>57.1	0	56.1>56.1	0
2-Methyl-1-Pentene	763-29-1	12.84	12.61	14.17	0.03	56.1>56.1	0	41.1>41.1	0
n-Hexane	110-54-3	13.13	12.61	14.17	0.03	57.1>57.1	0	41.1>41.1	0
Ethylidene dichloride (1,1-dichloroethane)	75-34-3	13.73	12.61	14.17	0.03	63.0>63.0	0	65.0>65.0	0
2,4-Dimethyl-pentane	108-08-7	14.61	14.17	14.82	0.03	43.1>43.1	0	57.1>57.1	0
Methyl-cyclopentane	96-37-7	15.00	14.82	15.69	0.03	56.1>56.1	0	69.1>69.1	0
cis-1,2-Dichloroethene	156-59-2	15.25	14.82	15.69	0.03	61.0>61.0	0	96.0>96.0	0
Chloroform	67-66-3	16.15	15.69	16.35	0.03	83.0>83.0	0	85.0>85.0	0
2-Methylhexane	591-76-4	16.52	16.35	17.31	0.03	43.1>43.1	0	85.1>85.1	0
Methyl chloroform (1,1,1-trichloroethane)	71-55-6	16.65	16.35	17.31	0.03	97.0>97.0	0	99.0>99.0	0
2,3-Dimethylpentane	565-59-3	16.80	16.35	17.31	0.03	43.1>43.1	0	85.1>85.1	0
Cyclohexane	110-82-7	16.87	16.35	17.31	0.03	84.1>84.1	0	56.1>56.1	0
3-Methylhexane	589-34-4	17.00	16.35	17.31	0.03	43.1>43.1	0	71.1>71.1	0
Carbon Tetrachloride	56-23-5	17.11	16.35	17.31	0.03	116.9>116.9	0	118.9>118.9	0
Benzene	71-43-2	17.58	17.31	17.94	0.03	78.1>78.1	0	77.1>77.1	0
2,2,4-Trimethylpentane	540-84-1	17.66	17.31	17.94	0.03	57.1>57.1	0	56.1>56.1	0
Ethylene dichloride (1,2-dichloroethane)	107-06-2	17.78	17.31	17.94	0.03	62.0>62.0	0	64.0>64.0	0
n-Heptane	142-82-5	18.13	17.94	18.75	0.03	43.1>43.1	0	71.1>71.1	0
Fluorobenzene (IS)	462-6-6	18.31	17.94	18.75	0.03	96.1>96.1	0		
Trichloroethylene	79-01-6	19.24	18.75	19.52	0.03	129.9>129.9	0	131.9>131.9	0
Methylcyclohexane	108-87-2	19.83	19.52	20.29	0.03	83.1>83.1	0	55.1>55.1	0
1,2-Dichloropropane	78-87-5	19.92	19.52	20.29	0.03	63.0>63.0	0	62.0>62.0	0
2,3,4-Trimethylpentane	565-75-3	20.64	20.29	21.26	0.03	43.1>43.1	0	71.1>71.1	0
2-Methylheptane	592-27-8	21.07	20.29	21.26	0.03	57.1>57.1	0	43.1>43.1	0
3-Methylheptane	589-81-1	21.43	21.26	22.07	0.03	43.1>43.1	0	57.1>57.1	0
cis-1,3-Dichloropropene	10061-01-5	21.57	21.26	22.07	0.03	75.0>75.0	0	110.0>110.0	0
Toluene-d8 (IS)	2037-26-5	22.21	22.07	23.12	0.03	98.1>98.1	0		
Toluene	108-88-3	22.39	22.07	23.12	0.03	91.1>91.1	0	92.1>92.1	0
n-Octane	111-65-9	22.50	22.07	23.12	0.03	43.1>43.1	0	85.1>85.1	0
trans-1,3-Dichloropropene	542-75-6	22.89	22.07	23.12	0.03	110.0>110.0	0	75.0>75.0	0
1,1,2-Trichloroethane	79-00-5	23.36	23.12	24.08	0.03	97.0>97.0	0	83.0>83.0	0
Tetrachloroethylene	127-18-4	23.56	23.12	24.08	0.03	165.9>165.9	0	163.9>163.9	0
Ethylene dibromide (1,2-dibromoethane)	106-93-4	24.50	24.08	24.87	0.03	107.0>107.0	0	109.0>109.0	0
Chlorobenzene-d5 (IS)	3114-55-4	25.23	24.87	25.89	0.03	117.1>117.1	0		
Chlorobenzene	108-90-7	25.29	24.87	25.89	0.03	112.0>112.0	0	114.0>114.0	0
Ethylbenzene	100-41-4	25.40	24.87	25.89	0.03	91.1>91.1	0	106.1>106.1	0
n-Nonane	111-84-2	25.51	24.87	25.89	0.03	43.1>43.1	0	57.1>57.1	0
m-Xylene	108-38-3	25.61	24.87	25.89	0.03	91.1>91.1	0	106.1>106.1	0
p-Xylene	106-42-3	25.61	24.87	25.89	0.03	91.1>91.1	0	106.1>106.1	0
o-Xylene	95-47-6	26.25	25.89	27.05	0.03	91.1>91.1	0	106.1>106.1	0
Styrene	100-42-5	26.30	25.89	27.05	0.03	104.1>104.1	0	78.1>78.1	0
Isopropylbenzene (cumene)	98-82-8	26.81	25.89	27.05	0.03	105.1>105.1	0	120.1>120.1	0
1,1,2,2-Tetrachloroethane	79-34-5	27.25	27.05	27.81	0.03	83.0>83.0	0	85.0>85.0	0
α-Pinene	80-56-8	27.30	27.05	27.81	0.03	93.1>93.10	0	121.1>121.1	0
n-Propylbenzene	103-65-1	27.43	27.05	27.81	0.03	91.1>91.1	0	120.1>120.1	0
3-Ethyltoluene	620-14-4	27.53	27.05	27.81	0.03	105.1>105.1	0	120.1>120.1	0
n-Decane	124-18-5	27.56	27.05	27.81	0.03	57.1>57.1	0	43.1>43.1	0
4-Ethyltoluene	622-96-8	27.61	27.05	27.81	0.03	105.1>105.1	0	120.1>120.1	0
1,3,5-Trimethylbenzene	108-67-8	27.67	27.05	27.81	0.03	105.1>105.1	0	120.1>120.1	0
2-Ethyltoluene	611-14-3	27.95	27.81	28.06	0.03	105.1>105.1	0	120.1>120.1	0
1,2,4-Trimethylbenzene	95-63-6	28.20	28.06	28.48	0.03	105.1>105.1	0	120.1>120.1	0
β-Pinene	127-91-3	28.38	28.06	28.48	0.03	121.1>121.1	0	93.1>93.1	0
m-Dichlorobenzene	541-73-1	28.67	28.48	29.03	0.03	146.0>146.0	0	148.0>148.0	0
1,2,3-Trimethylbenzene	526-73-8	28.76	28.48	29.03	0.03	105.1>105.1	0	120.1>120.1	0
p-Dichlorobenzene	106-46-7	28.82	28.48	29.03	0.03	146.0>146.0	0	148.0>148.0	0
Benzyl chloride	100-44-7	28.92	28.48	29.03	0.03	126.0>126.0	0	91.0>91.0	0
1,3-Diethylbenzene	141-93-5	28.96	28.48	29.03	0.03	105.1>105.1	0	119.1>119.1	0
1,4-Diethylbenzene	105-05-5	29.11	29.03	30.28	0.03	119.1>119.1	0	105.1>105.1	0
n-Undecane	1120-21-4	29.12	29.03	30.28	0.03	57.1>57.1	0	43.1>43.1	0
o-Dichlorobenzene	95-50-1	29.26	29.03	30.28	0.03	146.0>146.0	0	148.0>148.0	0
1,2,4-Trichlorobenzene	120-82-1	31.14	30.28	32.00	0.03	179.9>179.9	0	181.9>181.9	0
Hexachlorobutadiene	87-68-3	31.23	30.28	32.00	0.03	224.9>224.9	0	226.8>226.8	0

\*1 Pseudo-MRM とは、プリカーサイオンとプロダクトイオンに同質量のイオンを選択する測定法です。原理的なメリットは、夾雑イオンをコリジョンセルで除去することが可能になります。



表 2 異性体同定の根拠

溶出順序	化合物名	分子式	同定の根拠
1	Isobutane	C4H10	イオン $m/z=27$ と $29$ の存在比が NIST ライブラリーデータに類似
2	1-Butene		
3	n-Butane	C4H8	異性体 3 種の間でマススペクトルに明瞭なちがいが認められなかったため、2 種について単品で調製した標準ガスを測定して得られた保持時間
4	<i>trans</i> -2-Butene		
5	<i>cis</i> -2-Butene		
6	1-Pentene	C5H10	
7	<i>trans</i> -2-Pentene		1-ペンテンとシクロペンタンは、とくにイオン $m/z=42, 55, 70$ のプロファイルが NIST ライブラリーデータに類似。 <i>c</i> -2-ペンテンと <i>t</i> -2-ペンテンのマススペクトルに明瞭なちがいと NIST ライブラリーデータの類似度が認められなかったため、一方を単品で調製した標準ガスを測定して得られた保持時間
8	<i>cis</i> -2-Pentene		
9	Cyclopentane		
10	Isopentane	C5H12	イオン $m/z=43, 57, 72$ のプロファイルが NIST ライブラリーデータに類似
11	<i>n</i> -Pentane		
12	2-Methyl-1-pentene	C6H12	イオン $m/z=27, 29, 56, 69, 84$ のプロファイルが NIST ライブラリーデータに類似
13	Methylcyclopentane		
14	Cyclohexane		
15	2,2-Dimethylbutane	C6H14	イオン $m/z=41, 43, 55, 56, 71$ のプロファイルが NIST ライブラリーデータに類似
16	2,3-Dimethylbutane		
17	2-Methylpentane		
18	3-Methylpentane		
19	<i>n</i> -Hexane		
20	2,4-Dimethylpentane	C7H16	イオン $m/z=41, 42, 43, 56, 57, 70, 71, 72, 85$ のプロファイルが NIST ライブラリーに類似
21	2-Methylhexane		
22	2,3-Dimethylpentane		
23	3-Methylhexane		
24	<i>n</i> -Heptane		
25	2,2,4-Trimethyl pentane	C8H18	イオン $m/z=43, 57, 70, 71, 85, 91$ のプロファイルが NIST ライブラリーに類似
26	2,3,4-Trimethylpentane		
27	2-Methylheptane		
28	3-Methylheptane		
29	<i>n</i> -Octane		
30	Cumene (isopropylbenzene)	C9H12	8 種の異性体の中の 4-エチルトルエン、1,3,5-トリメチルベンゼンと 1,2,4-トリメチルベンゼンの 3 種は、HAPs 標準ガスに含まれているので保持時間を基に同定。 <i>n</i> -プロピルベンゼン、イソプロピルベンゼンと 3 種の異性体 (3-エチルトルエン、2-エチルトルエン及び 1,2,3-トリメチルベンゼン) は、イオン $m/z=77, 91, 105$ のプロファイルが NIST ライブラリーに類似。残りの 3-エチルトルエン、2-エチルトルエン及び 1,2,3-トリメチルベンゼンは、マススペクトルで判別できなかったため、単品で調製した標準ガスの保持時間を基に同定
31	<i>n</i> -Propylbenzene		
32	3-Ethyltoluene		
33	4-Ethyltoluene		
34	1,3,5-Trimethylbenzene		
35	2-Ethyltoluene		
36	1,2,4-Trimethylbenzene		
37	1,2,3-Trimethylbenzene		
38	1,3-Diethylbenzene	C10H14	キシレンの 3 種の異性体、エチルトルエンの 3 種の異性体が <i>m</i> -, <i>p</i> -の順に溶出するので、この法則に従った
39	1,4-Diethylbenzene		
40	$\alpha$ -Pinene	C10H16	イオン $m/z=67$ と $77$ の存在比が NIST ライブラリーに類似
41	$\beta$ -Pinene		

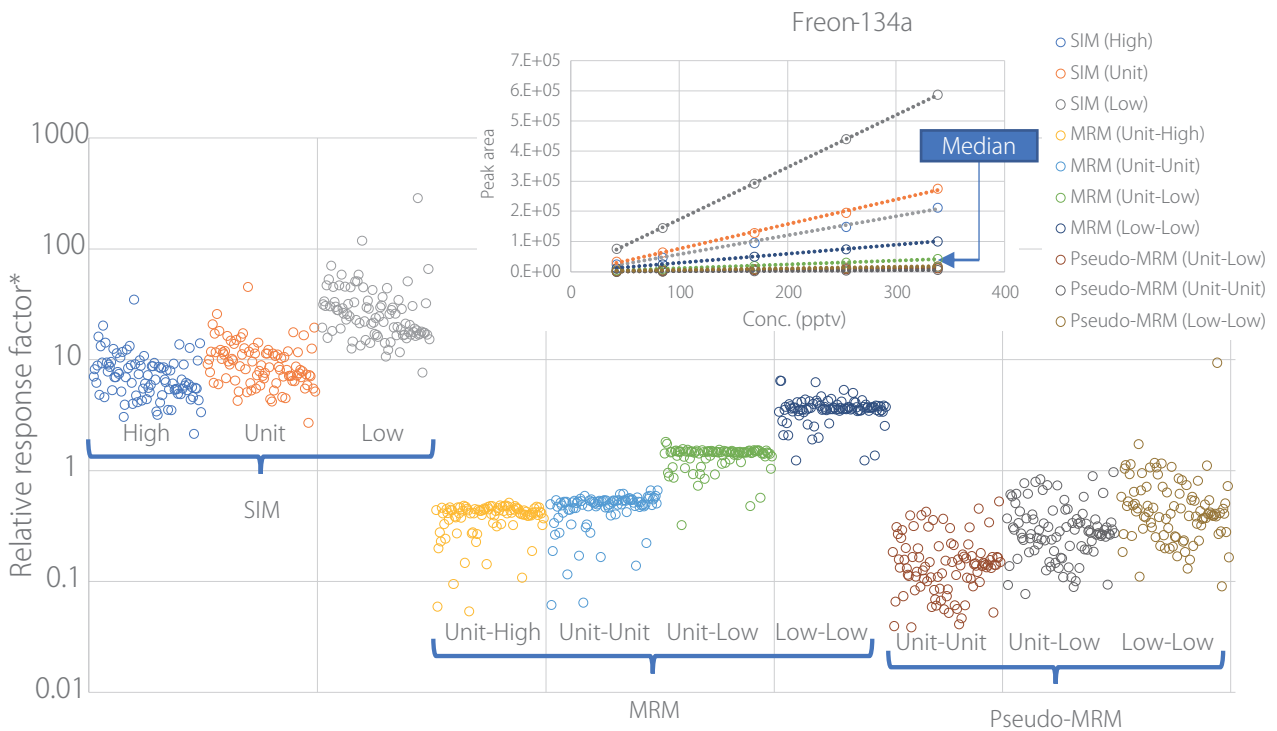
### 3. 結果

#### 3-1. 測定方法の検出力の違い

MSの測定モードと質量分解能の組み合わせを変えたメソッドで標準ガス(42.6 pptv~341 pptv、5段階濃度)を測定して作成した絶対検量線の傾きを指標として、各メソッドの感度(イオン量)を比較した結果を図2に示します。図の縦軸の相対感度係数は、測定対象物質毎に得られた傾きをその中央値(Median)で除して標準化しました。感度の高低は、検出力の優劣の1面と考えられます。イオン量は、SIM (Low) > SIM (Unit) > SIM (High) > MRM (Low-Low) > MRM (Unit-Low) > MRM (Unit-Unit) ≒ Pseudo-MRM (Low-Low) > MRM (Unit-High) ≒ Pseudo-MRM (Unit-Low) > Pseudo-MRM (Unit-Unit) でした。測定モードの中で最も感

度が低かった Pseudo-MRM (Unit-Unit)では、42.7 pptvのエチルクロライドと85.5 pptvのアクリロニトリルを検出できませんでした。環境大気試料を測定して検出下限値未満(ピーク対ピーク S/N<3)だった化合物の延べ物質数を指標にして比較した各メソッドの検出力の強さは、MRM (Low-Low) > MRM (Unit-Low) > SIM (Unit) > SIM (High) > MRM (Unit-Unit) > SIM (Low) > Pseudo-MRM (Unit-Low) > Pseudo-MRM (Low-Low)でした(表3)。

検出力に係る2つの結果の順序は、一致しませんでした。これは、MRMモードの感度(イオン量)の低さを選択性の高さがカバーしていることを示唆しています。



\*Relative response factor = Slope of absolute calibration curve / median slopes of 10 absolute calibration curve

図2 測定モード及び分解能が異なる測定方法の感度比較

表3 95種の測定対象物質のうちS/N(ピーク対ピーク)3未満で不検出だった物質数

測定モード	分解能	一般環境-1	一般環境-2	沿道-1	沿道-2	発生源周辺-1	発生源周辺-2	のべ物質不検出数
SIM	High	15	12	12	10	15	15	79
	Unit	9	10	10	10	13	15	67
	Low	16	14	14	13	17	10	84
MRM	Unit-Unit	15	11	13	11	16	17	83
	Unit-Low	9	8	8	9	9	11	54
	Low-Low	10	6	6	7	9	9	47
Pseudo-MRM	Unit-Low	23	19	24	18	25	26	135
	Low-Low	25	21	24	18	28	28	144

### 3-2. 測定方法による選択力（イオン干渉の受けやすさ）の違い

環境大気試料を測定モードと分解能が異なるメソッドで測定した結果、夾雑物質あるいは測定物質相互のイオン干渉の受けやすさの違いによりいくつかの測定対象物質のSIM クロマトグラムまたはMRM クロマトグラムにおいて、ベースラインドリフト、ブロードピークやショルダーピークの発生、定量イオン（トランジション）と確認イオン（トランジション）比の変化が認められました（表4）。表示していない測定対象物質のうち HCFC123、1,1-ジクロロエテン、HCFC225cb、1,2-ジブプロモエタン、ベンジルクロライドは、環境試料から検出されず、測定方法の選択力のちがいを評価できませんでした。これら以外のHFC134aを含む26種の物質および3種の内標準物質については、測定方法のちがいが認められませんでした。Pseudo-MRM を使った測定結果は、SIM モード及びMRM モード測定結果に比べて、測定対象物

分ピークのS/Nが低く、加えてSIMモードに比べてイオン干渉を軽減する効果を認めることができなかつたので、評価しませんでした。

表からわかるように、MRMモード測定で分解能をUnit-Unitに設定することで、他の分解能設定やSIMモード測定で観察されたイオン干渉を最も効果的に回避できることが確認されました。一方で、2-メチル-1,3-ブタジエンのように、Unit-Unitに設定することで、検出できなくなる物質が存在しました。本検討結果から、VOC測定用MRMのメソッドの分解能設定は、Unit-Unitを基本とし、対象物質の濃度が低い場合にUnit-Lowに変更し、Low-Lowの設定は避けると精度よく分析することが可能になると推測されます。ただし、Unit-Low、Low-Lowに設定した場合にベースラインドリフトが発生するトランジション：41>39、75>49、180>109に関しては、モニタリングトランジションの変更を検討する必要があると考えます（図3）。

表4 定性・定量の障害となる各クロマトグラムにおける課題

問題が観察された測定対象物質	定性・定量の障害となるクロマトグラムの問題点	SIMモード	MRMモード
		分解能（質量）	分解能-分解能（トランジション）
<i>n</i> -Propane	ベースラインドリフト	Low (43)	
Propylene	ピーク不検出		Unit-Unit と Unit-Low、Low-Low (29>15)
	ベースラインドリフト		Low-Low (41>39)
HCFC22	フロン-12による干渉	Low (51)	Low (51>31, 57>31)
HCFC142b	Unknownによる干渉（テーリングピーク）	Low (65)	
	ピーク不検出	Low (85)	
CFC114	イソブタンによる干渉	High、Unit、Low (85)	
Methyl chloride (chloromethane)	Unknownによる干渉（テーリングピーク）	Low (50, 52)	
1-Butene	<i>n</i> -ブタンによる干渉	High、Unit、Low (56, 41)	Unit-Unit、Unit-Low、Low-Low (56>41, 41>39)
	ベースラインドリフト	Low (41)	Unit-Low、Low-Low (41>39)
Vinyl chloride (chloroethene)	ベースラインドリフト	High、_Unit、_Low (64)	
<i>trans</i> -2-Butene	ベースラインドリフト		Unit-Low、Low-Low (41>39)
<i>cis</i> -2-Butene	Unknownによる干渉（ショルダーピーク）	Low (41)	
	ベースラインドリフト		Unit-Low、Low-Low (41>39)
Methyl bromide (bromomethane)	ベースラインドリフト	High、Unit、Low (96)	
Ethyl chloride (chloroethane)	ベースラインドリフト	High、Unit、Low (66)	
	ベースラインドリフト	Low (43, 42)	
Isopentane (2-methylbutane)	T/Qが不一致	High、Unitの(43/42)とLowの(43/42)	
1-Pentene	ベースラインドリフト	Low (42)	
<i>n</i> -Pentane	ベースラインドリフト	Low (43)	
	T/Qが不一致	High、Unitの(43/42)とLowの(43/42)	Unit-Unit、Unit-Lowの(43>27/42>27)とLow-Lowの(43>27/42>27)
<i>trans</i> -2-Pentene	ピークがブロード化し、定量イオンと確認イオンの保持時間不一致、Unknownによる干渉	Low (70)	
<i>cis</i> -2-Pentene	Unknownによる干渉のためTとQの保持時間が不一致	Low (70)	
2-Methyl-1,3-butadiene	Unknownによる干渉のためブロードピーク	High、Unit、Low (67)	
	ピーク不検出		Unit-Unit (55>27)
2,2-Dimethylbutane	Unknownによる干渉	High、Unit、Low (43)	Unit-Unit、Unit-Low、Low-Low (71>29)
HCFC225ca	ピーク不検出		Unit-Unit、Unit-Low、Low-Low (83>45, 85>49)
HCFC225cb	Unknown及び2,3-ジメチルブタン、2-メチルペンタンの干渉	Unit、Low (69)	
2,3-Dimethylbutane & 2-Methylpentane	相互に干渉	High、Unit、Low (42, 43)	Unit-Unit、Unit-Low、Low-Low (43>27, 43>15)
2-Methylpentane	ピーク不検出		Unit-Unit (71>41)
Acrylonitrile	3-メチルペンタンの干渉	High、Unit (53)、Low (53, 52)	Unit-Low (53>26)、Low-Low (53>26, 52>26)

問題が観察された測定対象物質	定性・定量の障害となるクロマトグラムの問題点	SIM モード	MRM モード
		分解能 (質量)	分解能-分解能 (トランジション)
2-Methyl-1-Pentene	Unknown による干渉	High、Unit、Low (41, 56)	Unit-Unit、Unit-Low、Low-Low (56>41)
Ethylidene dichloride	ベースラインドリフト	High、Unit、Low (65)	
2,4-Dimethyl-pentane	Unknown による干渉	High、Unit、Low (43, 57)	Unit-Unit、Unit-Low、Low-Low (57>29)
<i>cis</i> -1,2-Dichloroethene	Unknown による干渉	High、Unit、Low (61)	
2-Methylhexane	ベースラインドリフト	High、Unit、Low (43)	
Methyl chloroform	Unknown による干渉	High、Unit、Low (99)	
	ベースラインドリフト	High、Unit、Low (97)	
2,3-Dimethylpentane	Unknown 及びシクロヘキサンによる干渉	High、Unit、Low (56)	Low-Low (43>27)
Cyclohexane	Unknown による干渉 (ブロードピーク)	High、Unit、Low (56)	Unit-Unit、Unit-Low、Low-Low (56>41)
	ベースラインドリフト	High、Unit、Low (43)	Unit-Unit、Unit-Low、Low-Low (43>27)
3-Methylhexane	Unknown 及び四塩化炭素による干渉	High、Unit、Low (43)	
	T/Q が不一致	High 及び Unit の (117/119) と Low の (117/119)	
Benzene	T/Q が不一致	High 及び Unit の (77/78) と Low の (77/78)	Unit-Unit、Unit-Low の (78>52/77>51) と Low-Low の (78>52/77>51)
2,2,4-Trimethylpentane	Unknow による干渉	High、_Unit (56)、_Low (56, 57)	Unit-Unit、Unit-Low、Low-Low (56>41)
<i>n</i> -Heptane	ベースラインドリフト	High、Unit、Low (43)	
Trichloroethylene	ベースラインドリフト	Low (132)	
Methylcyclohexane	ブロードピーク	SIM_Low (55)	
	T/Q が不一致	High 及び Unit の (83/55) と Low の (83/55)	
1,2-Dichloropropane	Unknow による干渉	Low (62)	
2,3,4-Trimethylpentane	ベースラインドリフト	High、Unit、Low (43)	
2-Methylheptane	3 種の Unknow による干渉	High、Unit、Low (57, 43)	
	2 種の Unknow による干渉		Unit-Unit、Unit-Low、Low-Low (57>29)
	1 種の Unknow による干渉		Unit-Unit、Unit-Low、Low-Low (99>57)
	ベースラインドリフト	High、_Unit、_Low (43)	Unit-Unit、Unit-Low、Low-Low (57>29)
3-Methylheptane	ベースラインドリフト	High、Unit、Low (43)	
	Unknow による干渉		Unit-Low、Low-Low (85>43)
<i>cis</i> -1,3-Dichloropropene	ベースラインドリフト	High、Unit、Low (75)	Low-Low (75>49)
<i>trans</i> -1,3-Dichloropropene	Unknow による干渉	Unit (75)	
	ピーク不検出	High、Unit、Low (110, 75)	
1,1,2-Trichloroethane	Unknown による干渉 (ショルダーピーク)	High、Unit、Low (97, 83)	Unit-Unit、Unit-Low、Low-Low (83>47)
Chlorobenzene	クロロベンゼン-d5 による干渉	Low (114)	Low-Low (114>77)
Styrene	<i>o</i> -キシレンによる干渉	High、Unit、Low (104, 78)	Unit-Unit、Unit-Low、Low-Low (104>78)
	T/Q が不一致		Unit-Unit の (104>103/104>78) と Unit-Low、Low-Low の (104>103/104>78)
Isopropylbenzene	T/Q が不一致	High、Unit の (105/120) と Low の (105/120)	
<i>n</i> -Dacane	Unknown による干渉	High、Unit (43)、Low (43, 57)	
$\beta$ -Pinene	Unknown による干渉		Unit-Unit、Unit-Low、Low-Low (93>77)
<i>m</i> -Dichlorobenzene	ベースラインドリフト	Low (146, 148)	
<i>p</i> -Dichlorobenzene	ベースラインドリフト	Low (146, 148)	
1,3-Diethylbenzene	Unknow による干渉	High、Unit、Low (105, 119)	Unit-Low、Low-Low (105>77, 119>91)
1,4-Diethylbenzene	Unknow による干渉	High、Unit (119)、Low (105, 119)	Unit-Unit、Unit-Low、Low-Low (105>77, 119>91)
	ベースラインドリフト	Low (43)	Unit-Unit、Unit-Low、Low-Low (57>29)
<i>n</i> -Undecane	Unknow による干渉	High、Unit、Low (57, 43)	Unit-Unit、Unit-Low、Low-Low (57>29)
	<i>o</i> -Dichlorobenzene	Unknown による干渉によりブロードピーク	Low (146, 148)
1,2,4-Trichlorobenzene	ピーク不検出	Low (180, 182)	
	ベースラインドリフト		Low-Low (180>109)
Hexachlorobutadiene	ピーク不検出	High、_Unit、_Low (225, 227)	

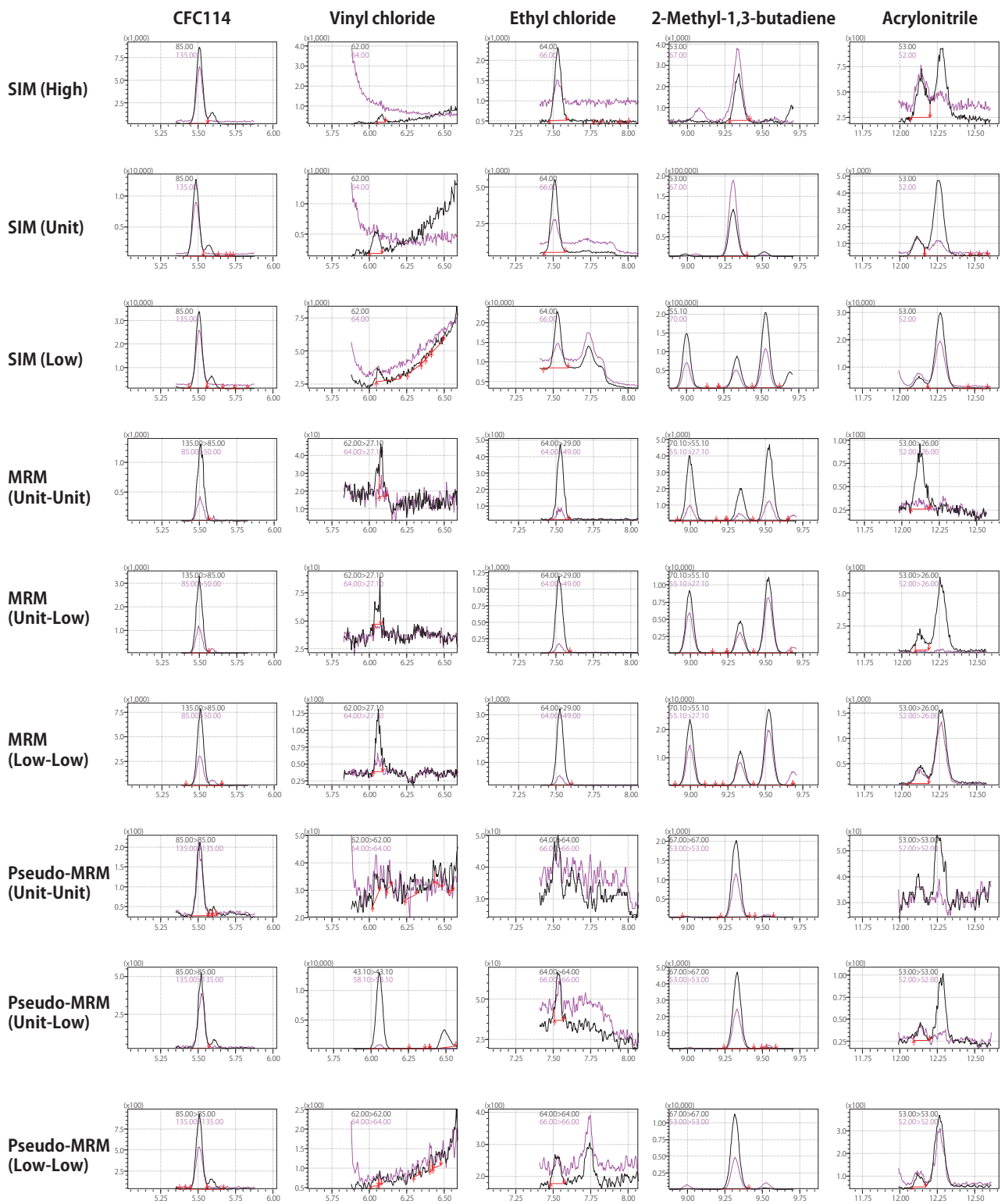


図3 沿道大気試料における各種測定モードのクロマトグラム比較

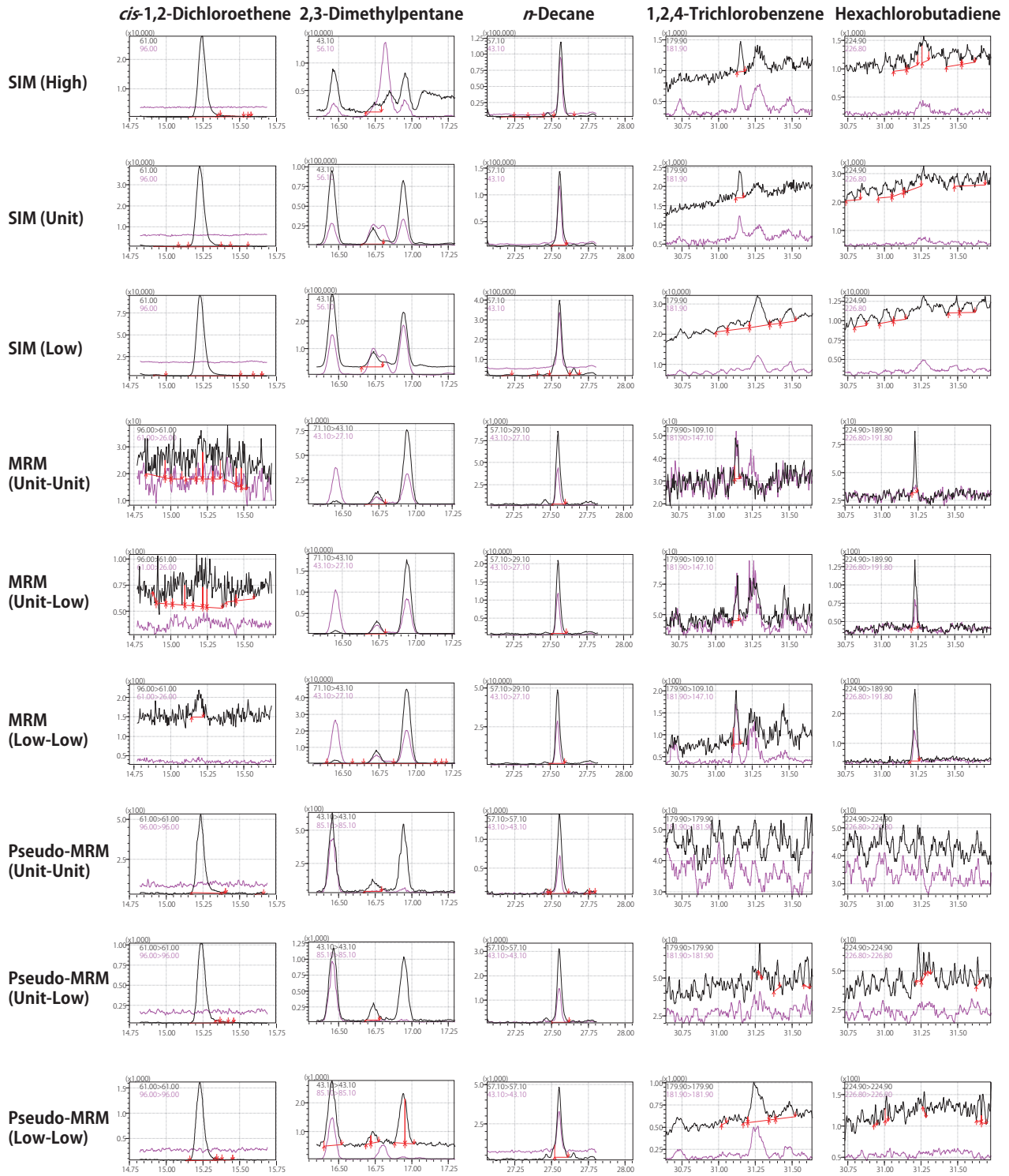


図3 沿道大気試料における各種測定モードのクロマトグラム比較

## 4. まとめ

本検討により GC/MS/MS 法は、イオン量が SIM 法に劣るものの、検出力が優れていることを確認できました。今後の課題としては、表 4 に列記した定性・定量に問題を引き起こす可能性があるトランジションの変更、感度を向上させるための EM 電圧の調整、さらにデータ処理における適切なプロダクトイオンスキャンクロマトグラムのスムージング方法の検討が残されました。

### <参考文献>

- 1) [www.env.go.jp/press/files/jp/16391.pdf](http://www.env.go.jp/press/files/jp/16391.pdf)
- 2) Fast GCMSMS analysis of 76 VOC compounds using headspace-trap sampling H.J. Schulte et al. (Shimadzu Application Note).
- 3) [www.an.shimadzu.co.jp/gcms/cat/c146-0334a.pdf](http://www.an.shimadzu.co.jp/gcms/cat/c146-0334a.pdf)

GCMS-TQ は、株式会社島津製作所の日本およびその他の国における商標です。  
Inertcap は、ジーエルサイエンス株式会社の日本における登録商標です。

**株式会社 島津製作所**  
分析計測事業部 <http://www.an.shimadzu.co.jp/>

本資料の掲載情報に関する著作権は当社または原作者に帰属しており、権利者の事前の書面による許可なく、本資料を複製、転用、改ざん、販売等することはできません。掲載情報については十分検討を行っていますが、当社はその正確性や完全性を保証するものではありません。また、本資料の使用により生じたいかなる損害に対しても当社は一切責任を負いません。本資料は発行時の情報に基づいて作成されており、予告なく改訂することがあります。

初版発行：2019年8月  
© Shimadzu Corporation, 2019