

川崎港における化学物質検索調査

Identification of Chemical Substances in Sea Water
and Sediment at Kawasaki Port Area

柴田 幸雄	Yukio	SHIBATA
吉川 サナエ	Sanac	YOSHIKAWA
野村 博	Hiroshi	NOMURA
山本 順昭	Nobuaki	YAMAMOTO
梶川 光行	Mituyuki	KAJIKAWA

キーワード：海水，底質，化学物質，GC-MS分析

Key words : sae water, sediment, chemical substance, GC-MS analysis

1 はじめに

現在，我々の周りには多くの化学物質がいろいろな形で存在し，その種類，使用形態は増加しつつある。それら化学物質の中には難分解性，蓄積性，変異原性等を有し，生態系への影響が懸念される物質やフロンのように環境システムへ直接影響する物質が少なくない。これらは生産，使用，廃棄というサイクルの中で環境に放出されており，その種類や量を把握することは困難な状況にある。

川崎市は鉄鋼業を初め化学，石油化学工業などの重化学工業が立地する日本を代表する工業地域を有し，それだけに化学物質による環境汚染が考えられる。環境庁による化学物質環境調査¹⁾において，川崎市では1977年から1995年までに延べ217物質について調査を行い，69物質が検出されている。このような化学物質汚染に対して川崎市では環境汚染を未然に防止し，良好な環境の保全

を図ることを目的とした「川崎市先端技術産業環境対策指針」²⁾を1992年に制定した。

今回，これらの有害化学物質対策の一環として，市内の有害化学物質汚染実態を把握することを目的に，川崎港の水質，底質を対象に化学物質検索調査を行った。

化学物質の検索には一般にガスクロマトグラフ/質量分析計(GC/MS)による方法³⁻⁷⁾が報告されており，本調査もこれらの報告を参考に行った。

2 調査方法

2.1 試料

2.1.1 試料採取地点及び期日

1995年8月15日に川崎港内の大師運河，池上運河，塩浜運河，田辺運河の各中央位置において，海水および底質試料の採取を行った。採取地点は図1に示した。

採取地点の水深は9～15mであった。

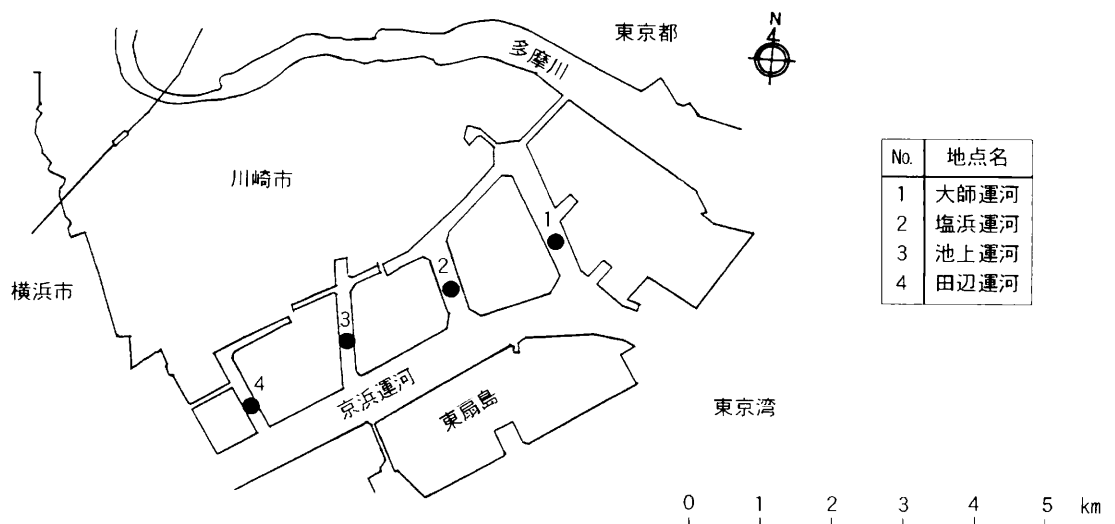


図1 調査地点

2.1.2 試料採取方法

海水試料は表面水を揮発性物質分析用と難揮発性物質分析用試料に分けて採取した。揮発性物質分析用試料は約300mlのBOD分析用ふらん瓶に採取し気泡が入らないように密栓をした。難揮発性物質分析用試料は2ℓの栓付き広口瓶に採取した。

底質試料はエックマンバージ採泥器で採取した。

2.1.3 試料の状況

海水試料

水温 : 21.5℃ ~ 27.4℃
pH : 8.1 ~ 8.2

底質試料

外観 : 黒色泥状
臭気 : 硫化水素臭, 石油臭
夾雑物 : なし

2.2 分析方法

2.2.1 前処理操作

前処理操作は主に「環境微量分析マニュアル」¹⁾を参考に行った。

(1) 海水揮発性物質分析用試料

試料5mlをバージ・トラップ装置に入れ、バージ瓶を40℃に保ちHeガス40ml/minで4分間バージさせ、吸着捕集管(Tenax/Silica Gel/Charcoal)に捕集し、160℃で5分間加熱脱着後カラム導入部に-150℃で冷却濃縮した後、200℃に過熱しGC/MSへ導入した。

(2) 海水難揮発性物質分析用試料

今回の調査では化学物質の検索を目的とし、各地点で採取した試料を混合し分析に供した。

海水試料を各地点2ℓずつ、計8ℓ混合し、pHを7に調整した。これをジクロロメタン(400, 200ml)で2度振とう抽出し、抽出液を100ml程度に濃縮した。このジクロロメタンにpH12~13のNaOH溶液15mlを加え振とう抽出を行った。この操作を繰り返し酸性成分を水層に抽出した。

次にジクロロメタン層にpH2~3のHCl溶液15mlを加え振とう抽出した。この操作を繰り返し、塩基性成分を水層に抽出した。

次にジクロロメタン層を精製水で洗浄後、無水硫酸ナトリウムで脱水し、1ml以下に濃縮した。この溶液にヘキサン50mlを加え濃縮し、1gの無水硫酸ナトリウムを加え、溶媒を留去し、試料成分を無水硫酸ナトリウムに含ませた。これを5%含水ジカゲルマトグラフに負荷し、分画(ヘキサン30ml, 1%アセトン・ヘキサン60ml, 2%アセトン・ヘキサン40ml, 10%アセトン・ヘキサン60ml, アセトン30mlによる溶出)を行った。各分画の溶出液を1.0mlに濃縮しGC/MS分析用試料とした。

先に得られた酸性成分抽出水溶液は6N HClでpH2~3にした後、ヘキサン20mlで2回振とう抽出し、ヘキサン層を精製水で洗浄後、無水硫酸ナトリウムで脱水、1.0mlに濃縮してGC/MS分析用試料とした。

塩基性成分抽出水溶液は5N HClでpH12~13にした後、無水硫酸ナトリウムで脱水、1.0mlに濃縮してGC/MS分析用試料とした。

(3) 底質難揮発性物質分析用試料

エックマンバージ採泥器で採取した底質試料を3000rpmで10分間遠心分離し、水分を除去した。この底質試料を各地点10gずつ混合し底質試料とした。この底質試料をホジナ付瓶に入れ、ヘキサン・アセトン混合溶液(2:1, 150ml)で1分間抽出し、3000rpmで遠心分離した。この操作を繰り返した後、抽出液を水洗浄し無水硫酸ナトリウムで脱水、10mlに濃縮した。次にこの溶液中の脂肪分除去のためヘキサン飽和アセトニトリル(50ml)抽出を2回を行い、成分をアセトニトリル層へ分配した。

次いで2%塩化ナトリウム(500ml), ヘキサン(50ml)を加え振とう抽出を行いヘキサン層へ分配した。このヘキサン層に対し2.2.1(2)の海水試料と同様な操作を行い、酸性成分試料, 塩基性成分試料, 中性成分試料に分けた。

酸性成分試料, 塩基性成分試料については海水試料と同様に処理し、GC/MS分析用試料とした。

中性成分試料は水洗浄後、無水硫酸ナトリウムで脱水後3~5mlに濃縮し、銅チップ処理を行った後D-列-IVボレーターで濃縮し、無水硫酸ナトリウムを加え、溶媒を留去した。これを5%含水ジカゲルマトグラフに負荷し、海水試料と同様にヘキサン・アセトン溶液で分画、濃縮し、GC/MS用分析試料とした。

2.2.2 試薬

使用した試薬は残留農薬試験用を用いた。精製水は蒸留水をジクロロメタンで2回、ヘキサンで1回洗浄した後沸騰したものを用いた。

2.2.3 GC/MS分析

2.2.1の前処理を行った試料をGC/MSに導入した。得られたクロマトグラムの各ピークについて物質の同定を行った。なお、物質の同定に当たってはデータベースにNISTを用いた検索を行った。その他にPTRI(Programmed Temperature Retention Index)や各報文を参考にした。また、標準品によるGC保持時間とマススペクトルの確認も行った。

分析装置及び分析条件を表1に示した。なお、対照には揮発性物質分析の場合はバージ瓶を空にして、難揮発性物質分析の場合は前処理操作を使用した試薬のみで行った場合に得られた試料溶液をGC/MS分析したものを用いた。

2.2.4 PTRIの測定

n-アルカンの保持時間を基準とした昇温保持指標(PTRI)を求めため、表1に示した各分析条件においてC₈~C₃₃のn-アルカンについて分析を行い、それぞれの保持時間を求めた。

表1 分析条件

海水揮発性物質分析	
P&T条件)	
P&T機種	: Teknar LSC-2000
Trap管	: G3 Tenax / Silica Gel / Charcoal
Cryo coolant	: Liquid N ₂
Program	
Stand by Temp	: 35 °C
Sample Temp	: 40 °C
Preheat Time	: 4min
Purge Gas	: He
Purge Time	: 4min
Purge flow	: 40ml/min
Dry Purge Time	: 2min
Cryo Cool down	: -150
Desorb Time	: 5min at 160 °C
Bake Time	: 15min at 220 °C
Inject Time	: 4min at 200 °C
GC条件)	
機種	: HP 5890 II
Carrier Gas	: He
Gas Press	: 1.3 kgf/cm ²
Column	: AQUATIC, 60m x 0.25mm x ID 1.0um
Column Temp	: 40°C(5min) - 4°C/min - 200°C(10min)
MS条件)	
機種	: Auto mass 50
イオン源温度	: 200 °C
Interface Temp	: 200 °C
Scan range	: 35-500amu / 500min
Gain	: -0.7 kV
海水及び底質難揮発性物質分析	
GC条件)	
機種	: HP 5890 II
Carrier Gas	: He
Gas Press	: 40kPa
Column	: Ultra 2, 25m x 0.32mm i.d., df=0.52um
Column Temp	: 60 °C (1min) - 10 °C/min - 300 °C (15min)
Inj Temp	: 280 °C
Inj Sys	: Splitless (A'-ジ) 2min)
MS条件)	
イオン源温度	: 200 °C
Interface Temp	: 280 °C
Ion energy	: 70 eV
Scan Range	: 50-500 amu/500msec
Gain	: -0.8 kV
Pressuer	: 2.7*10 ² torr

3 結果及び考察

3.1 検索化学物質

今回の調査により海水試料中の揮発性物質として70物質、難揮発性物質として59物質、底質中の難揮発性物質として89物質が同定された。

各試料より検索された物質をPTRI順に並べたものを表2~4に示した。化合物が異性体を持ち、正確に同定できない物質は最も高いピークを示したものを代表ピークとして扱い表示した。また、ピーク強度の目安とするため、それぞれの試料のGC/MS分析条件でn-アルカンを測定し、そのピーク強度に対し100%を超えるものを「++++」、100~51%を「+++」、50~11%を「++」、10~1%を「+」、1%以下を「-/」として相対強度を表示した。n-アルカンは海水中の揮発性物質の場合はC₁₀H₂₂ 1ng、海水、底質中の難揮発性物質の場合はC₂₀H₄₂ 1ngを用

表5 試料中の物質

物質	海水試料		底質試料
	揮発性物質	難揮発性物質	難揮発性物質
ハロゲン化合物	21	4	3
脂肪族炭化水素	11	14	6
芳香族炭化水素	9	1	31
含酸素化合物	25	29	36
含S、N化合物	4	11	13

いた。

各試料中の物質の内訳は、ハロゲン化合物、脂肪族炭化水素、芳香族炭化水素、含酸素化合物(酸、エステル、アルデヒド、ケトン等)、含N・S化合物に分けて表5に示した。

3.2 ハロゲン化合物

ハロゲン化合物は海水揮発性物質試料から多く検出され、21物質のうち20物質はハロゲン化脂肪族であった。海水、底質難揮発性物質試料からはハロゲン化芳香族が検出された。特に底質からはダイオキシンの前駆体と言われるトリクロサン^{S1}が検出された。

3.3 脂肪族炭化水素

n-アルカンは海水試料においてC₈~C₂₂が検出された。底質難揮発性物質試料は前処理でヘキサン洗浄をしているためかC₁₀、C₁₁以外は検出されなかった。

3.4 芳香族炭化水素

芳香族炭化水素は海水揮発性物質試料と底質難揮発性物質試料から検出された。海水揮発性物質試料からはベンゼン、キシレン、アルキルベンゼンが主な検出物質であった。底質難揮発性物質試料からは31物質が検出され、その内23物質が多環芳香族炭化水素類であった。

3.5 含酸素化合物

海水揮発性物質試料では主にアルデヒド(C₆~C₁₂)とケトンであった。海水難揮発性物質試料ではエステル、カルボン酸、ケトンであった。底質難揮発性物質試料ではケトンとカルボン酸(C₈~C₁₈)が主なものであった。

4 まとめ

本調査において川崎港の海水、底質から約200物質を同定することができた。

ピーク相対強度の強いものは海水揮発性物質試料では1-Propanol, 2-(methylethoxy)-と1,2-Dichloropropane、難揮発性物質試料ではHexadecanoic acidとDibutyl phthalateとBis(2-ethylhexyl) phthalateであった。底質試料ではDiphenyl etherとBis(2-ethylhexyl) phthalate及びPhenanthreneやB(a)P等の多環芳香族化合物であった。特に多環芳香族化合物は全体的に高い相対強度を示していた。

海水、底質ともに高い相対強度を示したフタル酸エステル類はプラスチックの可塑剤として多く使用されており、今後環境中の汚染実態を把握する必要があると思われる。

今回の結果はデータベースを用いた検索結果の他、一部は既に報告されている資料、PTRIデータ、標準品等を用い検討を加えて求めた。高い相対強度を示しながら検索できないものやピークの分離できないものも多数あり、今後の検討が必要である。

文 献

- 1) 環境庁環境保健部環境安全課，化学物質と環境，昭和52年版－平成7年版（1977 - 1995）
- 2) 川崎市環境保全局公害部指導課，川崎市先端技術産業環境対策指針，（1992）
- 3) 劔持堅志：水質，底質モニタリング，水環境学会誌，16(5)，5-10(1993)
- 4) 花田喜文，門上希和夫，白石寛明，今村 清，鈴木 茂，長谷川敦子，村山 等：ガスクロマトグラフィー／質量分析法を用いた環境中の化学物質検索，環境化学，5(1)，47-64（1995）
- 5) 石塚伸一：GC／MSによる環境水質・底質中化学物質の検索，青森県環境保健センター研究報告，5，26-35（1994）
- 6) 尹 順子，寺口智美，朱 曉明，岩島 清：多摩川における溶存微量有機物の検索と定量，P P M，5，48-54（1994）
- 7) 新矢将尚，松井三郎：下水汚泥中の有機化合物の分析，生活衛生，39(4)，193-197（1995）
- 8) 環境庁保健調査室監修：最新環境微量物質分析マニュアル，公害対策技術同友会，（1992）
- 9) 兼俊明夫，小川 広，桂 英二，金島弘恭：塩素化2-ヒドロキシジフェニルエーテル類の環境衛生化学的考察，環境化学，2，515-522（1992）

表2 海水中揮発性物質試料から検索された化学物質

化合物名	分子式	分子量	分画	Cas. 番号	No. 1		
					保持時間 (sec)	保持指標 PTR1	相対強度
1-Butene	C4H8	56	P&T	106-98-9	307	501	++
1-Butyne	C4H6	54	P&T	107-00-6	315	504	++
Cyclopropane, 1,1-dimethyl-	C5H10	70	P&T	1630-94-0	406	536	+
Furan	C4H4O	68	P&T	110-00-9	445	549	+
Acetone	C3H6O	58	P&T	67-64-1	468	558	++
Methane, dimethoxy-	C3H8O2	76	P&T	109-87-5	481	562	+
Dimethyl sulfide	C2H6S	62	P&T	75-18-3	492	566	+
Acetonitrile	C2H3N	41	P&T	75-05-8	515	574	++
Dichloromethane	CH2Cl2	49	P&T	75-09-2	530	580	++
1-Propanol, 2-(methylethoxy)-	C6H14O2	118	P&T	3944-37-4	621	612	+++
1,3-Butadiene, 2-chloro-	C4H5Cl	88	P&T	126-99-8	642	619	+++
Chloroform	CHCl3	118	P&T	67-66-3	745	655	+++
Furan, 2,5-dihydro-	C4H6O	70	P&T	1708-29-8	760	661	+
Ethane, 1,1,1-trichloro-	C2H3Cl3	132	P&T	71-55-6	802	676	+
1,2-Dichloro ethane	C2H4Cl2	98	P&T	107-06-2	882	703	++
Benzene	C6H6	78	P&T	107-06-2	887	705	+
Thiophene	C4H4S	84	P&T	110-02-1	942	722	-/+
Trichloro ethylene	C2HCl3	130	P&T	79-01-6	986	735	+
1,2-Dichloropropane	C3H6Cl2	112	P&T	78-87-5	1015	744	+++
Bromodichloromethane	CHBrCl2	162	P&T	75-27-4	1071	761	+
Dibromomethane	CH2Br2	172	P&T	74-95-3	1087	766	+
1,3-Butadiene, 1,4-dichloro-	C4H4Cl2	122	P&T	2984-42-1	1132	780	++
n-Octane	C8H18	114	P&T	111-65-9	1200	800	-/+
Disulfide, dimethyl-	C2H6S2	94	P&T	624-92-0	1214	805	-/+
Butane, 2,3-dichloro	C4H8Cl2	126	P&T	7581-97-7	1291	829	+
Hexanal	C6H12O	100	P&T	66-25-1	1335	843	-/+
1-Butene, 3,4-dichloro-	C4H6Cl2	124	P&T	760-23-6	1341	845	++
Tetrachloroethylene	C2HCl4	164	P&T	127-18-4	1360	851	+
Methane, dibromochloro-	CHBr2Cl	206	P&T	124-48-1	1423	870	+
n-Nonane	C9H20	128	P&T	111-48-2	1521	900	+
1,3,6-Heptatriene, 5-methyl-	C8H12	108	P&T	925-52-0	1535	906	++
Ethylbenzene	C8H10	106	P&T	100-41-4	1551	911	+
2-Hexanone, 3,4-dimethyl-	C8H16O	128	P&T	19550-10-8	1558	913	+
m,p-Xylene	C8H10	106	P&T	106-42-3	1572	918	+
3-Hexanone, 5-methyl-	C7H14O	114	P&T	623-56-3	1600	927	-/+
Heptanal	C7H14O	114	P&T	111-71-7	1652	945	+
o-Xylene	C8H10	106	P&T	95-47-6	1668	950	+
1-Heptene, 5-methyl-	C8H16	112	P&T	13151-04-7	1740	974	+
Bromoform	CHBr3	250	P&T	75-25-2	1775	985	++
Hexanal, 2-ethyl-	C8H16O	128	P&T	123-05-7	1795	992	+
Propane, 1,2,3-trichloro-	C3H5Cl3	146	P&T	96-18-4	1820	1000	++
Propanoic acid, 3-cyano-, methyl ester	C5H7NO2	113	P&T	4107-62-4	1826	1003	+
Decene, i	C10H20	140	P&T	20063-97-2	1839	1007	-/+
Benzene, 1,2,3-trimethyl-	C9H12	120	P&T	526-73-8	1859	1014	+
4-Cyclopentene-1,3-diol, cis	C5H8O2	100	P&T	29783-26-4	1895	1027	+

表2 海水中揮発性物質試料から検索された化学物質

化合物名	分子式	分子量	分画	Cas. 番号	No.2		
					保持時間 (sec)	保持指標 PTRI	相対強度
5-Hepten-2-one, 6-methyl-	C8H14O	126	P&T	110-93-0	1933	1041	+
Octanal	C8H16O	128	P&T	124-13-0	1948	1046	+
.alpha.-Methylstyrene	C9H10	118	P&T	98-83-9	1955	1049	+
Benzene, 1,2,4-trimethyl-	C9H12	120	P&T	95-63-0	1967	1053	+
2-Propyl-1-pentanol	C8H18O	130	P&T	58175-57-8	1999	1065	+++
m-Dichlorobenzene	C6H4Cl2	146	P&T	541-73-1	2059	1086	+
Bicyclo(2,2,1)hept-2-one, 5-ethylidene-	C9H12	120	P&T	162-75-3	2076	1092	+
p-Dichlorobenzene	C6H4Cl2	146	P&T	106-46-7	2090	1097	+
Undecane	C11H24	170	P&T	1120-21-4	2099	1100	+
Bis(2-chloroisopropyl)ether	C6H12Cl2O	170	P&T	39638-32-9	2147	1119	++
Nonanal	C9H18O	142	P&T	124-19-6	2223	1148	+
Acetophenone	C8H8O	120	P&T	98-86-2	2317	1185	+
1-Nonanol	C9H20O	144	P&T	143-08-8	2383	1212	+
Benzene, (1,1,2-trimethylpropyl)-	C12H18	162	P&T	26356-11-6	2442	1236	+
Menthol	C10H20O	156	P&T	1490-04-6	2453	1240	+
Phenol, 2,6-dimethyl-	C8H10O	122	P&T	576-26-1	2460	1243	-/+
Decanal	C10H20O	156	P&T	112-31-2	2479	1251	++
Tridecane	C13H28	184	P&T	629-50-5	2594	1300	+
Tetradecene	C14H28	196	P&T	1120-36-1	2627	1313	+
Undecanal	C11H22O	170	P&T	112-44-7	2717	1351	+
Butane, 1,1,3,4-tetrachloro1,2,2,3,4,4,-hexafluoro-	C4Cl4F6	302	P&T	423-38-1	2808	1391	+
Dodecanal	C12H24O	184	P&T	112-54-9	2971	1452	+
Dodecane, 1-chloro-	C12H25Cl	204	P&T	112-52-7	3120	1508	+
5,9-Undecadien-2-one, 6,10-dimethyl-	C13H22O	194	P&T	3796-70-1	3174	1528	+
2H-2,4a-Methanonaphthalene, 1,3,4,5,6,7-hexahydro-1,1,5,5-tetramethyl-	C15H24	204	P&T	1135-66-6	3226	1547	+
2,5-Cyclohexadiene-1,4-dione, 2,6-bis(1,1-dimethylethyl)-	C14H20O2	220	P&T	719-22-2	3297	1574	+

表3 海水中難揮発性物質試料から検索された化学物質

化合物名	分子式	分子量	分画	Cas. 番号	保持時間 (sec)	No. 1		相対強度
						保持指標 PTR1		
1-Butene-3-ethoxy	C6H12O	100	N2	1470-08-0	232	977		+
3-Heptene, 3-ethyl-	C9H18	126	N1	74754-46-8	232	956		+
Decene	C10H20	140	B	124-18-5	302	1031		+
Undecane	C11H24	154	B	1120-21-4	367	1100		+
2,2,6,6,-Tetramethylheptane	C11H24	156	N3	40117-45-1	368	1102		++
1,4-Dimethyl-3-cyclohexenyl methyl keton	C10H16O	152	N3	43219-68-7	378	1113		+
1,3,8-p-Menthatriens	C10H14	134	N1	21195-59-5	420	1158		-/+
Octanoic acid	C8H16O2	144	N4	124-07-2	430	1170		+
Benzene, 1.3.5-trichloro-	C6H3Cl3	180	N1	108-70-3	443	1183		-/+
Benzothiazole	C7H5NS	135	N2	98-16-9	488	1233		+
Nonanoic acid	C9H18O2	158	N4	112-05-0	518	1267		+
Tridecane	C13H28	184	B	629-50-5	548	1300		-/+
Acetophenone, 4'-amino-	C8H9N	135	N3	99-92-3	554	1308		+
Benzene, 1,3-dichloro-5-isocyanato-	C7H3Cl2NO	187	N5	102-36-3	558	1313		+
Phthalic anhydride	C8H4O3	148	N5	85-44-9	566	1323		+
2,4,6-Cycloheptatrien-1-one, 2-hydroxy-5-(1-methylethyl)-	C10H12O2	164	N2	672-76-4	595	1357		+
Pyridine, 3-(1-methyl-2-pyrrolidinyl)-	C10H14N2	162	B	75202-10-7	596	1358		+
Decanoic acid	C10H20O2	172	N4	334-48-5	602	1365		+
Phenol, 2,6-dibromo-	C6H4Br2O	250	A	608-33-3	619	1386		+
2,5-Cyclohexadiene-1,4-dion,2,6-bis(1,1-methylethyl)-	C14H20O2	220	N4	719-22-2	694	1477		++
2,5,8,11,14-Pentaoxapentadecane	C10H22O5	222	N5	143-24-8	720	1510		+
Quinoline, 4-methoxy-	C10H9NO	159	B	607-31-8	756	1559		+
Dodecanoic acid	C12H24O2	200	N4	143-07-7	758	1561		+
Thiophene, 2-butyl-5-(2-methylpropyl)-	C12H20S	196	N3	54845-35-1	761	1565		+
Diethyltoluamide	C12H17NO	119	N4	134-62-3	781	1592		++
Hexadecane	C16H34	226	N1	544-76-3	787	1600		+
Diethyl Phthalate	C12H14O4	222	N3	84-66-2	789	1602		+
2-Butenamide, N-ethyl-N-(2-methylphenyl)-	C13H17NO	203	N4	483-63-6	794	1609		+
Benzene, 1-(1,1-dimethylgthyl)-4-ethoxy-	C12H18O	178	N4	17269-94-2	820	1645		++
Phenol, 2,4,6-tribromo-	C6H3Br3O	328	A	118-79-6	825	1652		+
Heptadecane	C17H36	240	N1	629-78-7	859	1698		+
Tetradecanoic acid, methyl ester	C15H30O2	242	N2	124-10-7	879	1727		+
Tetradecanoic acid	C14H28O2	228	N4	544-63-8	901	1760		++
Ethanone, 1-(2,7-dimethylpyrazolo[1,5-a]pyridin-3-yl)-	C11H12N2O	188	N3	17408-30-9	909	1772		+
Tri(2-chloroethyl) phosphate	C6H12Cl3O4P	284	N5	115-96-8	909	1772		++
Phenol, 2,6-bis(1,1-dimethylethyl)-4-ethyl-	C16H26O	234	N2	4130-42-1	914	1779		+++
Octadecane	C18H38	254	N1	593-45-3	928	1800		+
6-Pentadecen-1-ol	C15H30O	226	N4	68797-95-5	955	1841		++
Caffeine	C8H10N4O2	194	N5	58-08-2	968	1861		+
4-Tridecen-6-yen, (E)-	C13H22	178	N2	74744-43-7	992	1899		+
Nonadecane	C19H40	268	N1	629-92-5	993	1900		+
Hexadecanoic acid, methyl ester	C17H34O2	270	N2	112-39-0	1011	1929		+
Hexadecanoic acid	C16H32O2	256	N4	57-10-3	1032	1963		+++
Dibutyl phthalate	C16H22O4	278	N2	84-74-2	1038	1972		+++
Eicosane	C20H42	282	N1	112-95-8	1056	2001		+

表3 海水中難揮発性物質試料から検索された化学物質

化合物名	分子式	分子量	分画	Cas. 番号	No. 2		
					保持時間 (sec)	保持指標 PTRI	相対強度
Sulfer	S8	256	N1	10544-50-0	1098	2071	+
1-Octadecanol	C18H38O	270	N4	112-92-5	1108	2088	++
Heneicosane	C21H44	296	N1	629-94-7	1115	2100	+
Pyrene	C16H10	202	N1	129-00-0	1141	2145	+
Octadecanoic acid	C18H36O2	284	N4	57-11-4	1151	2163	++
Flutolanil	C17H16F3NO2	323	N4	66332-96-5	1161	2180	+
Hexadecanamide	C16H33NO	255	N5	629-54-9	1163	2184	+
Isoprothiolane	C12H18O4S2	290	N4	50512-35-1	1167	2191	+
Butyl citrate	C18H32O7	360	N4	77-94-1	1171	2198	+
Docosane	C22H46	310	N1	629-97-0	1171	2198	+
Tributyl acetylcitrate	C20H34O8	402	N4	77-90-7	1209	2267	+
Benzyl butyl phthalate	C19H20O4	312	N3	85-68-7	1263	2369	++
Hexadecanoic acid, dioctyl ester	C22H42O4	370	N2	123-79-5	1281	2404	+
Bis(2-ethylhexyl) phthalate	C24H38O4	390	N2	117-81-7	1359	2560	+++
Cholesta-5,22-dien-3-ol, (3.beta.)-	C27H44O	384	N4	34347-28-9	1635	3124	++

表4 底質中難揮発性物質試料から検索された化学物質

化合物名	分子式	分子量	分画	Cas. 番号	No. 1		
					保持時間 (sec)	保持指標 PTR1	相対強度
Decane	C10H22	142	N1	124-18-5	270	1000	+
Decane, 2,2-dimethyl-	C12H26	170	N1	17302-37-3	305	1034	+
Indene	C9H8	116	N4	95-13-6	319	1050	+
Undecane	C11H24	156	N1	1120-21-4	368	1100	++
Hexanoic acid, 2-ethyl-	C8H16O2	144	N4	149-57-5	380	1115	+
2,6,6-Trimethyl-2-cyclohexane-1,4-dione	C9H12O2	152	N5	1125-21-9	411	1150	+
Benzoic acid	C7H6O2	122	N5	65-85-0	422	1161	+
Octanoic acid	C8H16O2	144	N4	124-07-2	428	1167	+
Naphthalene	C10H8	128	N1	91-20-3	450	1191	++
Ethanone, 1-(3-methylphenyl)-	C9H10O	134	N5	585-74-0	450	1191	+
Tridecene	C13H26	182	N1	2437-56-1	484	1229	++
Nonanoic acid	C9H18O2	158	A	112-05-0	517	1266	+
Tetradecene	C14H28	196	N1	1120-36-1	533	1284	++
Naphthalene, 1-methyl-	C11H10	142	N1	90-12-0	549	1302	++
Benzene, 1,3-dichloro-5-isocyanato-	C7H3Cl2NO	187	N5	102-36-3	558	1313	+
Phthalic anhydride	C8H4O3	148	N5	85-44-9	566	1323	+
2,4,6-Cycloheptatrien-1-one, 2-hydroxy-5-(1-methylethyl)-	C10H12O2	164	N2	672-76-4	593	1355	++
Naphthalene, 1,2-dihydro-1,5,8-trimethyl-	C13H16	172	N5	4506-36-9	600	1363	+
Decanoic acid	C10H20O2	172	A	334-48-5	601	1364	+
Biphenyl	C12H10	154	N1	92-52-4	621	1388	++
5-Phenylbicyclo(2,2,1)-2-heptene	C13H14	170	N4	6143-30-2	631	1400	+
Benzaldehyde, 3-(chloroacetoxy)-4-methoxy-	C10H9ClO4	228	N4	66267-38-7	635	1405	+
Diphenyl ether	C12H10O	170	N1	101-84-8	640	1411	+++
Naphthalene, dimethyl-i	C12H12	156	N5	-	643	1415	+
Acenaphthylene	C12H8	152	N2	208-96-8	681	1462	++
2,5-Cyclohexadiene-1,4-dione, 2,6-bis(1,1-methylethyl)-	C14H20O2	220	N4	719-22-2	692	1475	++
1,4-Benzenediol, 2,3,5-trimethyl-	C9H12O2	152	N5	700-13-0	722	1513	+
Phenol, 2,6-bis(1,1-dimethylethyl)-4-methyl-, methylcarbamate	C17H27NO2	277	N2	1981-11-2	726	1519	+
Dibenzofuran	C12H8O	168	N1	132-64-9	734	1529	+++
2,5-Cyclohexadiene-1,4-dione, 3-hydroxy-5-methyl-2-(1-methylethyl)	C10H12O3	180	N4	4586-59-8	747	1546	+
Benzene, (1-propylheptyl)-	C16H26	218	N1	4537-12-6	751	1552	++
Dodecanoic acid	C12H24O2	200	A	143-07-7	758	1560	+
Thiophene, 2-butyl-5-(2-methylpropyl)-	C12H20S	196	N3	54845-35-1	760	1564	+
2,2-Dimethyl-4-phenyl-2H-pyrrole	C12H13N	171	B	80541-54-4	770	1577	+
Fluorene	C13H10	166	N1	86-73-7	793	1597	++
1(3H)-Isobenzofuranone, 4-methoxy-3-methyl-	C10H10O3	178	N4	-	819	1644	++
1,1-Biphenyl, 3,4-diethyl-	C16H18	210	N2	61141-66-0	854	1692	++
Phenol, 4,4'-(1,2-diethyl-1,2-ethanediyl)bis-, (R*, S*)-	C18H22O2	270	N4	84-16-2	868	1711	+
2-Nonylphenol	C15H24O	220	N4	136-83-4	874	1720	++
Benzene, (1-pentylheptyl)-	C18H30	246	N1	2719-62-2	883	1734	+++
Benzene, (1-butyl-octyl)-	C18H30	246	N1	2719-63-3	886	1738	++
Tetradecanoic acid	C14H28O2	228	A	544-63-8	901	1760	++
Phenol, nonyl-	C15H24O	220	N4	25154-52-3	907	1769	+
Phenol, 2,6-bis(1,1-dimethylethyl)-4-ethyl-	C16H26O	234	N3	4130-42-1	914	1778	++
Phenanthrene	C14H10	178	N1	85-01-8	924	1799	+++

表4 底質中難揮発性物質試料から検索された化学物質

化合物名	分子式	分子量	分画	Cas. 番号	No. 2		相対強度
					保持時間 (sec)	保持指標 PTR1	
Anthracene	C14H10	178	N1	120-12-7	934	1809	++++
Benzo(b)quinoline	C13H9N	179	N3	260-94-6	941	1820	+
Benzene, (1-pentyl-octyl)-	C19H32	260	N1	4534-49-0	950	1832	++
Benzene, (1-butyl-nonyl)-	C19H32	260	N1	4534-49-0	954	1840	++
6-Pentadecen-1-ol	C15H30O	226	N4	68797-95-5	954	1840	+++
2-Pentadecanone, 6,10,14-trimethyl-	C18H36O	268	N4	502-69-2	959	1848	+
1-Naphthaleneacetone nitrile	C12H9N	167	N3	132-75-2	963	1854	+
Ethanone, 1-(4-phenoxyphenyl)-	C14H12O2	212	N5	5031-78-7	967	1860	++
Pentadecanoic acid	C15H30O2	242	A	1002-84-2	967	1860	+
3,7,11,15-Tetramethyl-2-hexadecen-1-ol	C20H40O	296	N4	102608-53-	970	1864	+
2-Fluorenamine	C13H11N	181	N3	153-78-6	1013	1932	+
Phenanthrene, 1-methyl-	C15H12	192	N1	832-69-6	1013	1932	++
Benzoyl chloride, 2,4-dichloro-	C7H3Cl3O	208	N4	89-75-8	1023	1948	+
Hexadecanoic acid	C16H32O2	256	A	57-10-3	1031	1961	+++
Dibutyl phthalate (DnBP)	C16H22O4	278	N3	84-74-2	1037	1971	++
2,8-Dimethyldibenzo(B,D)thiophene	C14H12S	212	N1	1207-15-4	1042	1972	++
2-Phenylnaphthalene	C16H12	204	N1	35465-71-5	1051	1994	++
9,10-Phenanthrene dione	C14H8O2	208	N3	84-11-7	1051	1994	+
Octane, 3,6-dimethyl-	C10H22	142	N2	15869-94-0	1089	2057	+
Sulfer	S8	256	N2	10544-50-0	1097	2072	+
1-Octadecanol	C18H38O	270	N4	112-92-5	1106	2085	+
Fluoranthene	C16H10	202	N2	206-44-0	1108	2087	+++
Triclosan	C12H7Cl3O2	288	A	3380-34-5	1130	2126	+
Octadecanoic acid	C18H36O2	284	N4	57-11-4	1149	2159	++
Phenanthrene, 2,3,5-trimethyl-	C17H16	220	N1	3674-73-5	1162	2182	++
Hexadecanamide	C16H33NO	255	N5	629-54-9	1163	2184	++
Acenaphtho(1,2-B)pyridine	C15H9N	203	B	206-49-5	1167	2191	++
9H-Fluorene-9-carbonitrile	C14H9N	191	N3	1529-40-4	1182	2218	+
Benzyl butyl phthalate (BBP)	C19H20O4	312	N3	85-68-7	1262	2367	++
Benzo[b]naphtho[2,3-d]thiophene	C16H10S	234	N1	243-46-9	1289	2420	++
Phosphoric acid, triphenyl ester (TPHP)	C18H15O4P	326	N4	115-86-6	1290	2422	++
Benzo[ghi]fluoranthene	C18H10	226	N1	203-12-3	1295	2431	+++
1-Hydroxypyrene	C16H10O	218	A	5315-79-7	1310	2460	+
Benzo[a]anthracene	C18H12	228	N2	56-55-3	1324	2488	++++
Chrysen	C18H12	228	N2	218-01-9	1330	2500	++++
Bis(2-ethylhexyl) phthalate	C24H38O4	390	N2	117-81-7	1359	2560	++++
Benz(a)anthracene, 9-methyl-	C19H14	242	N2	2381-16-0	1389	2633	+++
Benzo(b+k+j)fluoranthene	C20H12	252	N2	-	1494	2852	+++
Benzo[e]pyrene	C20H12	252	N2	192-97-2	1515	2900	++++
Benzo[a]pyrene	C20H12	252	N2	50-32-8	1523	2915	++++
Perylene	C20H12	252	N2	198-55-0	1534	2940	++++
Dibenz(a,h)anthracene	C22H14	278	N2	53-70-3	1709	3230	+++
Cholest-4-en-3-one	C27H44O	384	N3	601-57-0	1758	3240	++
Benzo(ghi)perylene	C22H12	276	N2	191-24-2	1761	3296	+++
Dibenzochrysen -j	C24H14	302	N2	-	2058	>3300	++