

Peak No.	マススペクトル	フラグメンテーションがよく一致した化合物の構造式と化合物名	ピークサイズ		Prob.
			熱湯	DCM	
13	<p>Learned Spect 1 Range 15.172 min. Scan: 637 Chan: 1 Ion: 6052 us RIC: 27256 EBC</p>	 Acetovanillone	++	++	1.93
14	<p>Learned Spect 1 Range 15.575 min. Scan: 668 Chan: 1 Ion: 5189 us RIC: 46001 EBC</p>	 Methyl vanillate	++	++	62.03
15	<p>Learned Spect 1 Range 15.995 min. Scan: 680 Chan: 1 Ion: 9505 us RIC: 16751 EBC</p>	 (M)(p-Hydroxyphenyl)glyoxal	++	++	38.87
16	<p>Learned Spect 1 Range 17.398 min. Scan: 663 Chan: 1 Ion: 6335 us RIC: 15953 EBC</p>	 Phenyl benzoate	++	+++	23.12

Peak No.	マススペクトル	フラグメンテーションパターンがよく一致した化合物の構造式と化合物名	ピークサイズ		Prob.
			熱湯	DCM	
17	<p>Learned Spect 1 Range 18.182 min. Scan: 994 Chan: 1 Ion: 13085 us RIC: 5717 EBC</p>	<p>(M)Naphthalene, 1-ethyl-1,2,3,4-tetrahydro-</p>	+	+++	10.15
18	<p>Learned Spect 1 Range 18.335 min. Scan: 980 Chan: 1 Ion: 15693 us RIC: 81685 EBC</p>	<p>(M)1,5-Pentanediol, monobenzoate</p>	+	++	10.15
19	<p>Learned Spect 1 Range 18.964 min. Scan: 1022 Chan: 1 Ion: 1351 us RIC: 98645 EBC</p>	<p>Ethylene glycol dibenzoate</p>	+	++	18.64
20	<p>Learned Spect 1 Range 19.631 min. Scan: 1070 Chan: 1 Ion: 5685 us RIC: 34045 EBC</p>	<p>Diisobutyl phthalate</p>	++	+++	22.08

Peak No.	マススペクトル	フラグメンテーションがよく一致した化合物の構造式と化合物名	ピークサイズ		Prob.
			熱湯	DCM	
21	<p>Learned Spect 1 Range 20.668 min. Scan: 1110 Chan: 1 Ion: 373 us RIC: 244038 EBC</p>	 Dibutyl phthalate	++	++++	35.46
22	<p>Learned Spect 1 Range 20.800 min. Scan: 1117 Chan: 1 Ion: 163 us RIC: 1636081 EBC</p>	 Ambucetamide	++	++++	0.19
23	<p>Learned Spect 1 Range 22.021 min. Scan: 1181 Chan: 1 Ion: 357 us RIC: 474137 EBC</p>	 2-(2-Hydroxy-5-methyl-phenyl)benzotriazole	++	+++	87.56
24	<p>Learned Spect 1 Range 25.918 min. Scan: 1380 Chan: 1 Ion: 910 us RIC: 135250 EBC</p>	 Triphenyl phosphate	+	++	93.06

Peak No.	マススペクトル	フラグメンテーションパターンがよく一致した化合物の構造式と化合物名	ピークサイズ		Prob.
			熱湯	DCM	
25	<p>Learned Spect 1 Range 9.585 min. Scan: 487 Chan: 1 Ion: 7354 us RIC: 9528 EBC</p>	<p>1,2,3,4-Tetramethylbenzene</p>	-	++	15.63
26	<p>Learned Spect 1 Range 9.633 min. Scan: 541 Chan: 1 Ion: 6265 us RIC: 19952 EBC</p>	<p>1,2,4,5-Tetramethylbenzene (Durene)</p>	-	+	19.40
27	<p>Learned Spect 1 Range 11.346 min. Scan: 630 Chan: 1 Ion: 1520 us RIC: 133167 EBC</p>	<p>2-Phenoxyethanol</p>	-	+++	95.61
28	<p>Learned Spect 1 Range 13.183 min. Scan: 728 Chan: 1 Ion: 200 us RIC: 1407970 ERC</p>	<p>Toluene 2,6-diisocyanate</p>	-	++++	49.85

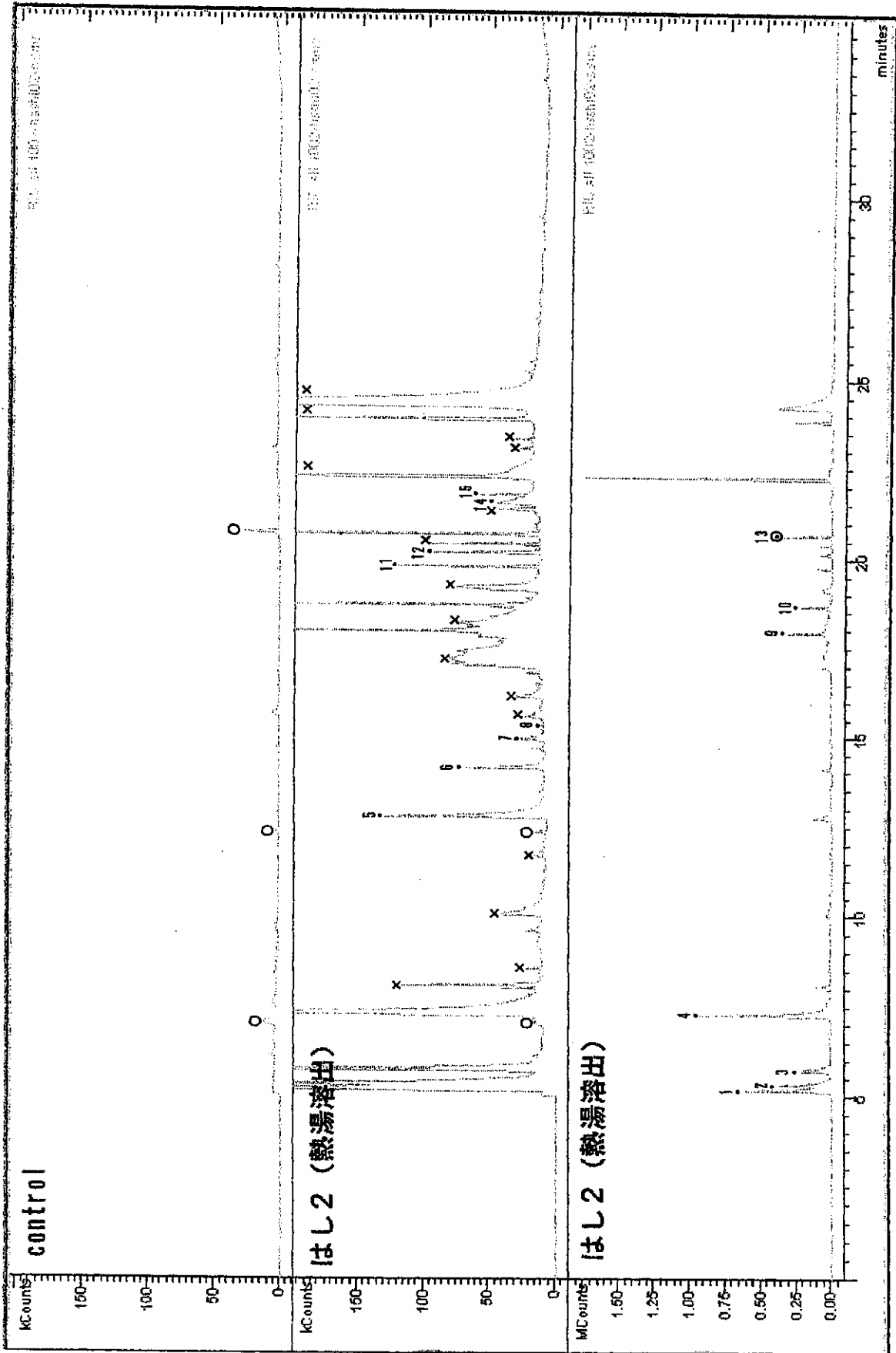
Peak No.	マススペクトル	フラグメンテーションがよく一致した化合物の構造式と化合物名	ピークサイズ		Prob.
			熱湯	DCM	
29	<p>Learned Spect 1 Range 13.324 min. Scan: 733 Chan: 1 Ion: 292 us RIC: 859779 EBC</p>	<p>Toluene-2,4-diisocyanate (TDI)</p>	-	++++	61.04
30	<p>Learned Spect 1 Range 13.971 min. Scan: 766 Chan: 1 Ion: 1697 us RIC: 76787 EBC</p>	<p>(M)1,1'-Biphenyl,2-methyl-</p>	-	++	14.93
31	<p>Learned Spect 1 Range 15.211 min. Scan: 830 Chan: 1 Ion: 2844 us RIC: 36622 EBC</p>	<p>(M)1,1'-Biphenyl,4-methyl-</p>	-	++	24.04
32	<p>Learned Spect 1 Range 15.328 min. Scan: 836 Chan: 1 Ion: 2037 us RIC: 106834 EBC</p>	<p>2,6-Di-tert-butyl-4-methylphenol(BHT)</p>	-	+++	51.07

Peak No.	マススペクトル	フラグメンテーションがよく一致した化合物の構造式と化合物名	ピークサイズ		Prob.
			熱湯	DCM	
33	<p>Learned Spect 1 Range 15.404 min. Scan: 840 Chan: 1 Ion: 2968 us RIC: 42467 EBC</p>	<p>2,4-Di-tert-butylphenol</p>	-	++	18.43
34	<p>Learned Spect 1 Range 23.088 min. Scan: 1237 Chan: 1 Ion: 526 us RIC: 263816 EBC</p>	<p>Butyl Hydrogen Phthalate</p>	-	+++	6.59
35	<p>Learned Spect 1 Range 34.029 min. Scan: 1806 Chan: 1 Ion: 151 us RIC: 3094659 EBC</p>	<p>(M)21h,23H-Porphine, 2,3,10,17,18,22-hexahydro-2,2,7,8,12,13,15,17,17-nonamethyl-</p>	-	++++	58.09

・; 1k カウント未満または不検出

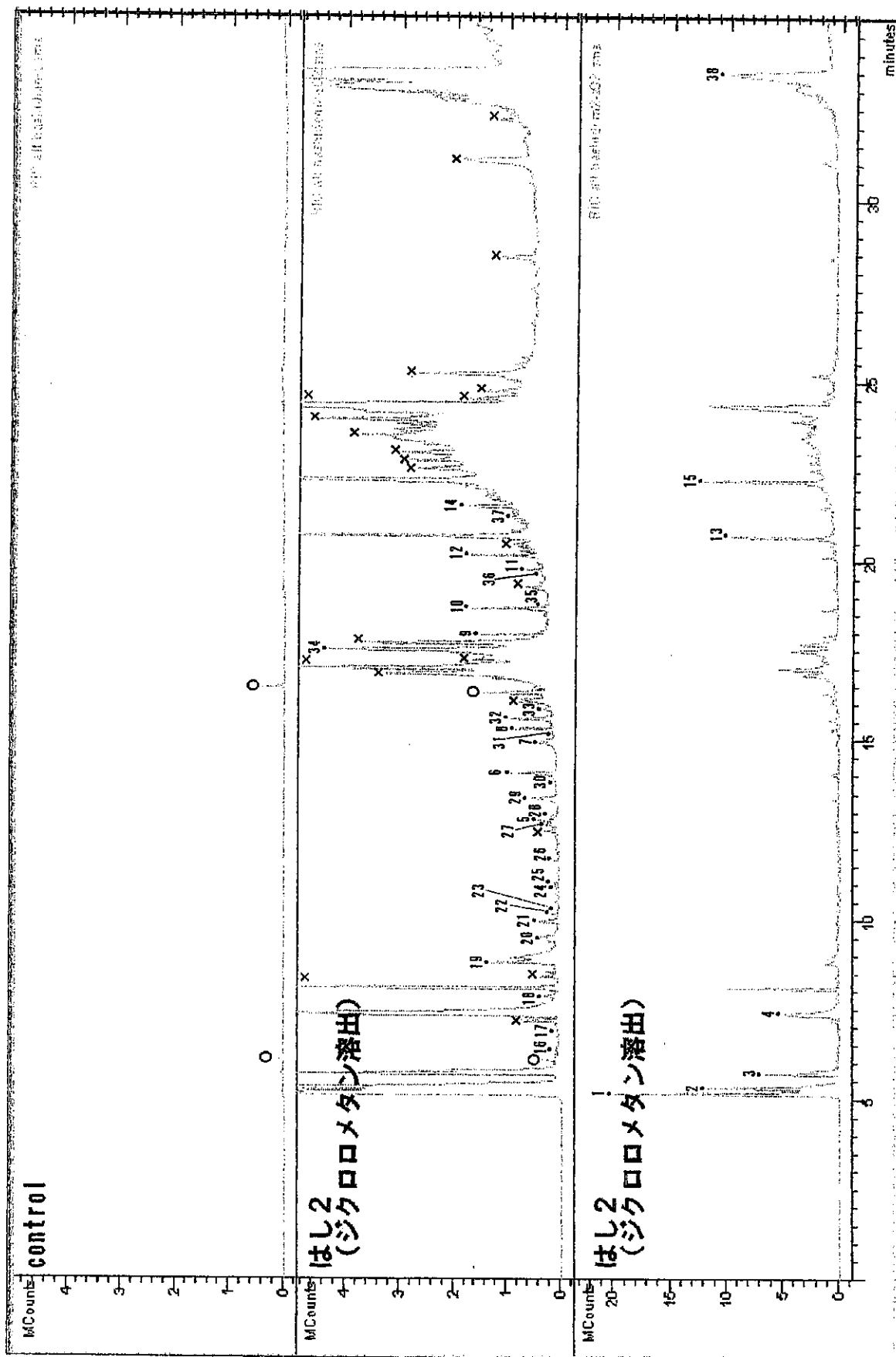
+; 1~9k カウント, ++; 10~99k カウント

+++; 100k~999k カウント, ++++; 1M カウント以上



はし-2 (Sample No. 8)の熱湯溶出のトータルイオンクロマトグラム
(上段はコントロールのクロマトグラム)

O; コントロールにも出たピーク
X; 有害性が低いと判断したピーク

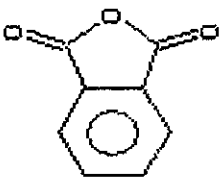
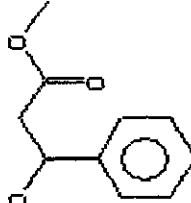
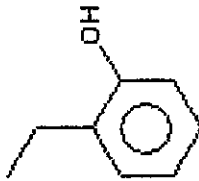
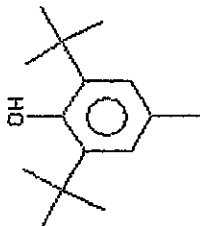


はし-2 (Sample No. 8) のジクロロメタン溶出のトータルイオンクロマトグラム
 (上段はコントロールのクロマトグラム)

○; コントロールにも出たピーク
 ×; 有害性が低いと判断したピーク

はし-2 (Sample No.8)から検出された有機化学物質のマススペクトルと構造式

Peak No.	マススペクトル	フラグメンテーションがよく一致した化合物の構造式と化合物名		ピークサイズ		Prob.
		熱湯	DCM	熱湯	DCM	
1	<p>Learned Spect 1 Range 5.167 min. Scan: 310 Chan: 1 Ion: 378 us RIC: 628272 BC</p>	<p>o-Xylene</p>	+++	++++	22.41	
2	<p>Learned Spect 1 Range 5.302 min. Scan: 317 Chan: 1 Ion: 1315 us RIC: 232039 BC</p>	<p>m-Xylene</p>	+++	++++	28.84	
3	<p>Learned Spect 1 Range 5.698 min. Scan: 337 Chan: 1 Ion: 58 us RIC: 6506794 BC</p>	<p>p-Xylene</p>	+++	++++	31.45	
4	<p>Learned Spect 1 Range 7.366 min. Scan: 426 Chan: 1 Ion: 74 us RIC: 4943938 BC</p>	<p>Phenol</p>	+++	++++	45.14	

Peak No.	マススペクトル	フラグメンテーションがよく一致した化合物の構造式と化合物名	ピークサイズ		Prob.
			熱湯	DCM	
5	<p>Learned Spect 1 Range 12.792 min. Scan: 714 Chan: 1 Ion: 2416 us RIC: 104166 BC</p>	 Phthalic anhydride	+++	+++	28.17
6	<p>Learned Spect 1 Range 14.088 min. Scan: 773 Chan: 1 Ion: 257 us RIC: 662607 BC</p>	 Benzenepranoic acid, β -hydroxy, methyl ester	++	+++	30.26
7	<p>Learned Spect 1 Range 14.972 min. Scan: 830 Chan: 1 Ion: 9606 us RIC: 16256 BC</p>	 2-Ethylphenol	++	+++	19.40
8	<p>Learned Spect 1 Range 15.281 min. Scan: 835 Chan: 1 Ion: 1249 us RIC: 162027 BC</p>	 2,6-Di-tert-butyl-4-methylphenol(BHT)	+	+++	70.68

Peak No.	マススペクトル	フラグメンテーションがよく一致した化合物の構造式と化合物名	ピークサイズ		Prob.
			熱湯	DCM	
9	<p>Learned Spect 1 Range 17.947 min. Scan: 986 Chan: 1 Ion: 925 us RIC: 312074 BC</p>	 1,2-Benzenedicarboxylic acid, butyl methyl ester	+++	+++	43.39
10	<p>Learned Spect 1 Range 18.863 min. Scan: 1012 Chan: 1 Ion: 409 us RIC: 564996 BC</p>	 Diethyl phthalate	+++	++++	74.11
11	<p>Learned Spect 1 Range 19.794 min. Scan: 1081 Chan: 1 Ion: 2622 us RIC: 106786 BC</p>	 (M)-1,2-Benzenedicarboxylic acid, ethyl methyl ester	+++	+++	32.04
12	<p>Learned Spect 1 Range 20.132 min. Scan: 1090 Chan: 1 Ion: 186 us RIC: 1195838 BC</p>	 Butyl 2-ethylhexyl phthalate	++	++++	28.42

Peak No.	マススペクトル	フラグメンテーションがよく一致した化合物の構造式と化合物名	ピークサイズ		Prob.
			熱湯	DCM	
13	<p>Learned Spect 1 Range 20.046 min. Scan: 1127 Chan: 1 Ion: 6955 us RIC: 38778 BC</p>	 Dibutyl phthalate	+++	++++	33.89
14	<p>Learned Spect 1 Range 21.542 min. Scan: 1174 Chan: 1 Ion: 5995 us RIC: 29517 BC</p>	 bis(2-hydroxyphenyl)methane	++	++++	49.11
15	<p>Learned Spect 1 Range 22.202 min. Scan: 1209 Chan: 1 Ion: 2027 us RIC: 136561 BC</p>	 bis(2-butoxyethyl) phthalate	++++	++++	40.30
16	<p>Learned Spect 1 Range 5.390 min. Scan: 373 Chan: 1 Ion: 3817 us RIC: 26646 BC</p>	 alpha-Thujene	.	++	19.40

Peak No.	マススペクトル	フラグメーションパターンがよく一致した化合物の構造式と化合物名	ピークサイズ		Prob.
			熱湯	DCM	
17	<p>Learned Spect 1 Range 16.735 min. Scan: 362 Chan: 1 Ion: 4830 us RIC: 19228 BC</p>	 Propylbenzene	-	+	51.77
18	<p>Learned Spect 1 Range 7.866 min. Scan: 451 Chan: 1 Ion: 1243 us RIC: 189657 BC</p>	 (M)-4,7-Methano-1H-indene, 3a,4,7,7a-tetrahydro-	-	+++	58.65
19	<p>Learned Spect 1 Range 8.774 min. Scan: 498 Chan: 1 Ion: 204 us RIC: 1165485 BC</p>	 (M)-5-Norbornene-2-methanol	-	++++	64.60
20	<p>Learned Spect 1 Range 9.503 min. Scan: 536 Chan: 1 Ion: 1251 us RIC: 162523 BC</p>	 2-norbornanemethanol, mixture of endo and ex	-	+++	66.71

Peak No.	マススペクトル	フラグメンテーションパターンがよく一致した化合物の構造式と化合物名	ピークサイズ		Prob.
			熱湯	DCM	
21	<p>Learned Spect 1 Range 9.988 min. Scan: 560 Chan: 1 Ion: 1086 us RIC: 236927 BC</p>	 Isonicotinic acid hydrazide (INAH)	-	+++	4.62
22	<p>Learned Spect 1 Range 10.181 min. Scan: 570 Chan: 1 Ion: 1928 us RIC: 108815 BC</p>	 N-Methylnicotinamide	-	++	30.13
23	<p>Learned Spect 1 Range 10.218 min. Scan: 573 Chan: 1 Ion: 3529 us RIC: 31261 BC</p>	 1,3-Cyclopentadiene, 5-(1,3-dimethylbutylidene)-	-	++	24.25
24	<p>Learned Spect 1 Range 10.906 min. Scan: 609 Chan: 1 Ion: 2897 us RIC: 16126 BC</p>	 Benzene, 1-methyl-4-nitro-	-	+	22.98

Peak No.	マススペクトル	フラグメンテーションパターンがよく一致した化合物の構造式と化合物名	ピークサイズ		Prob.
			熱湯	DCM	
25	<p>Learned Spect 1 Range 11.022 min. Scan: 615 Chan: 1 Ion: 2054 us RIC: 82853 BC</p>	<p>1,3-Cyclopentadiene, 1,2,3,4-tetrachloro-</p>	-	++	97.59
26	<p>Learned Spect 1 Range 11.970 min. Scan: 665 Chan: 1 Ion: 4063 us RIC: 17980 BC</p>	<p>2-Ethoxyphenyl isocyanate</p>	-	+	86.47
27	<p>Learned Spect 1 Range 12.609 min. Scan: 698 Chan: 1 Ion: 1086 us RIC: 181044 BC</p>	<p>Phenol, 4-(methoxymethyl)-</p>	-	+++	85.23
28	<p>Learned Spect 1 Range 12.919 min. Scan: 714 Chan: 1 Ion: 2962 us RIC: 34064 BC</p>	<p>Benzene, 1,3,5-trichloro-2-methoxy-</p>	-	++	57.19

Peak No.	マススペクトル	フラグメンテーションがよく一致した化合物の構造式と化合物名	ピークサイズ		Prob.
			熱湯	DCM	
29	<p>Learned Spect 1 Range 13.384 min. Scan: 737 Chan: 1 Ion: 519 us RIC: 482061 BC</p>	 Phenol, 2,4,6-trichloro-	-	+++	68.75
30	<p>Learned Spect 1 Range 13.658 min. Scan: 752 Chan: 1 Ion: 2712 us RIC: 19479 BC</p>	 Benzenemethanol, 4-hydroxy-	-	+	64.55
31	<p>Learned Spect 1 Range 15.144 min. Scan: 828 Chan: 1 Ion: 1902 us RIC: 25502 BC</p>	 Benzenesulfonamide, N,4-dimethyl-N-nitroso-	-	+	41.16
32	<p>Learned Spect 1 Range 15.552 min. Scan: 849 Chan: 1 Ion: 807 us RIC: 206368 BC</p>	 Benzenamine, 2-methyl-4-nitro-	-	+++	21.38

Peak No.	マススペクトル	フラグメンテーションがよく一致した化合物の構造式と化合物名	ピークサイズ		Prob.
			熱湯	DCM	
33	<p>Learned Spect 1 Range 15.859 min. Scan: 965 Chan: 1 Ion: 815 us RIC: 148895 BC</p>	 1-Naphthalenol	-	+++	23.12
34	<p>Learned Spect 1 Range 17.708 min. Scan: 963 Chan: 1 Ion: 80 us RIC: 2781582 BC</p>	 1,4-Methanobenzocyclodecene, 1,2,3,4,4a,5,8,9,12,12a-decahydro-	-	++++	19.40
35	<p>Learned Spect 1 Range 19.738 min. Scan: 1017 Chan: 1 Ion: 838 us RIC: 113095 BC</p>	 Benzene, undecyl-	-	++	72.93
36	<p>Learned Spect 1 Range 19.619 min. Scan: 1003 Chan: 1 Ion: 869 us RIC: 22846 BC</p>	 Diisobutyl phthalate	-	+	0.71

Peak No.	マススペクトル	フラグメンテーションがよく一致した化合物の構造式と化合物名	ピークサイズ		Prob.
			熱湯	DCM	
37	<p>Learned Spect 1 Range 21.208 min. Scan: 1147 Chan: 1 Ion: 336 us RIC: 298719 BC</p>	<p>2,4'-Dihydroxydiphenylmethane</p>	-	+++	30.33
38	<p>Learned Spect 1 Range 33.513 min. Scan: 1799 Chan: 1 Ion: 54 us RIC: 7629475 BC</p>	<p>(M)21h,23H-Porphine, 2,3,10,17,18,22-hexahydro-2,2,7,8,12,13,15,17,17-nonamethyl-</p>	-	++++	51.78

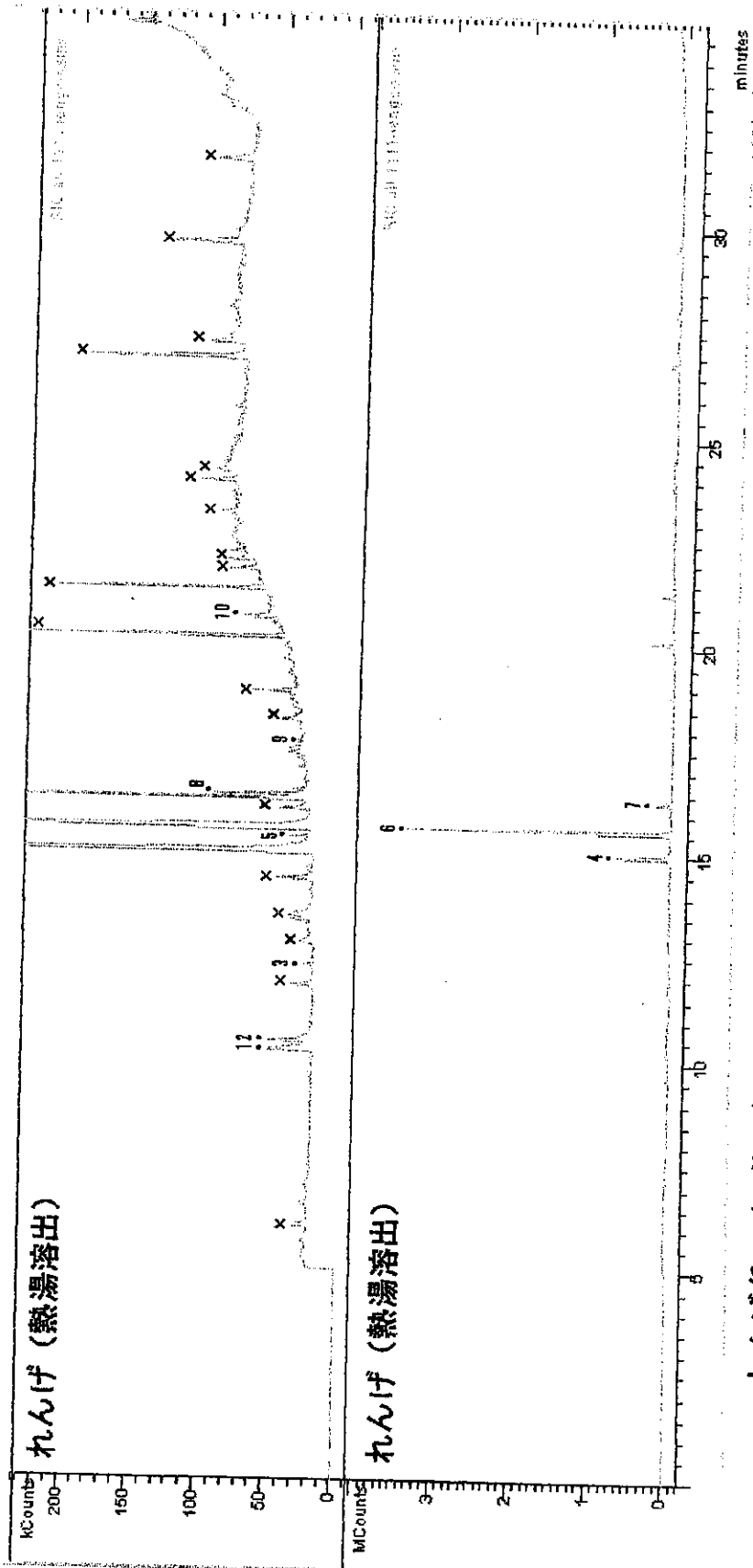
- ; 1k カウント未満または不検出

+ ; 1~9k カウント, ++ ; 10~99k カウント

+++ ; 100k~999k カウント, ++++ ; 1M カウント以上

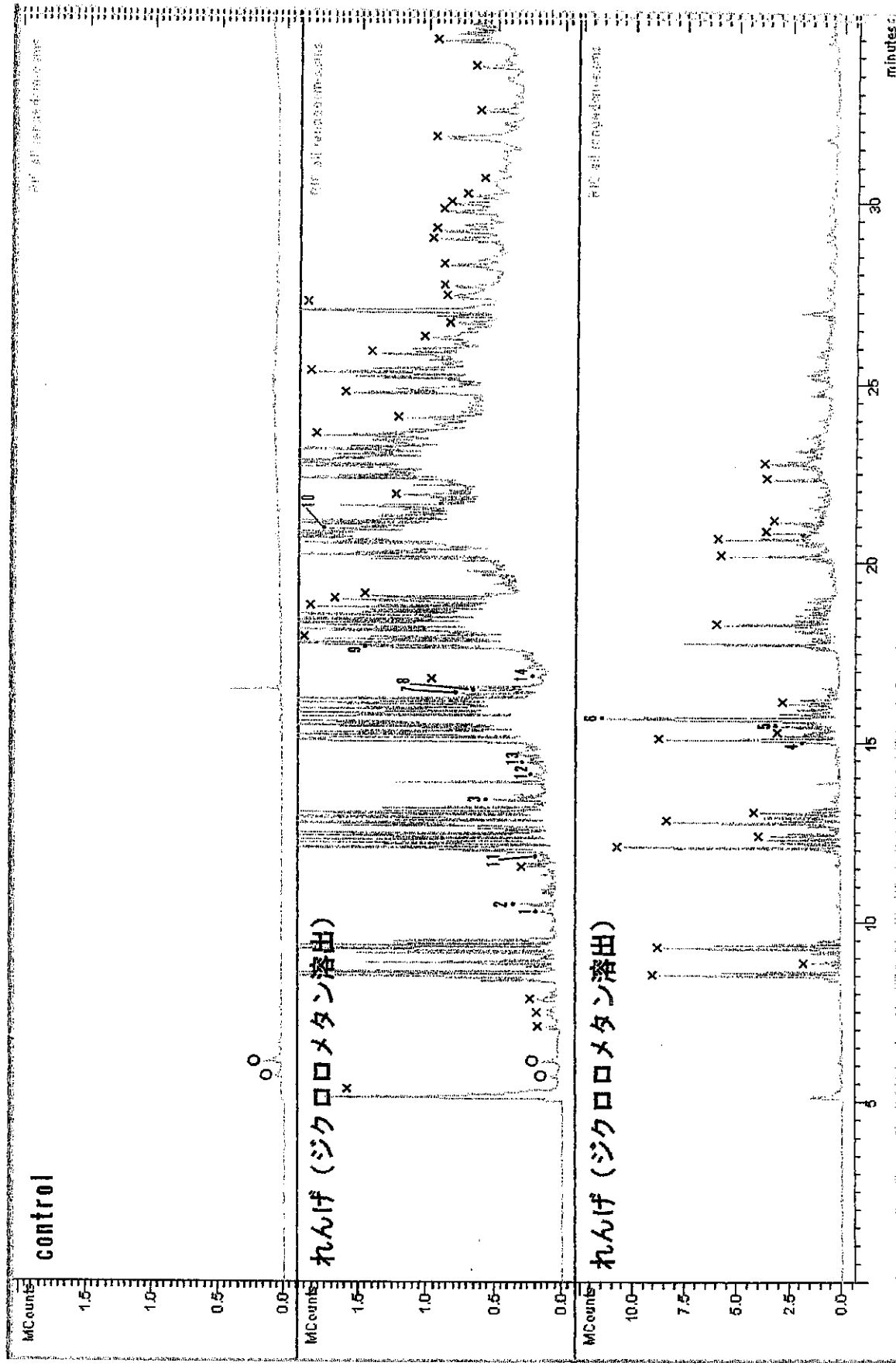
control

データミス



れんげ (Sample No. 9) の熱湯溶出のトータルイオンクロマトグラム
 (コントロールはデータミス)

○; コントロールにも出たピーク
 ×; 毒性が低いと判断したピーク



れんげ (Sample No. 9) のジクロロメタン溶出のトータルイオンクロマトグラム
 (上段はコントロールのクロマトグラム)

○; コントロールにも出たピーク
 ×; 有害性が低いと判断したピーク