

図4 ヒト肝マイクロゾームによる DEHP から MEPH への加水分解反応の速度論的解析

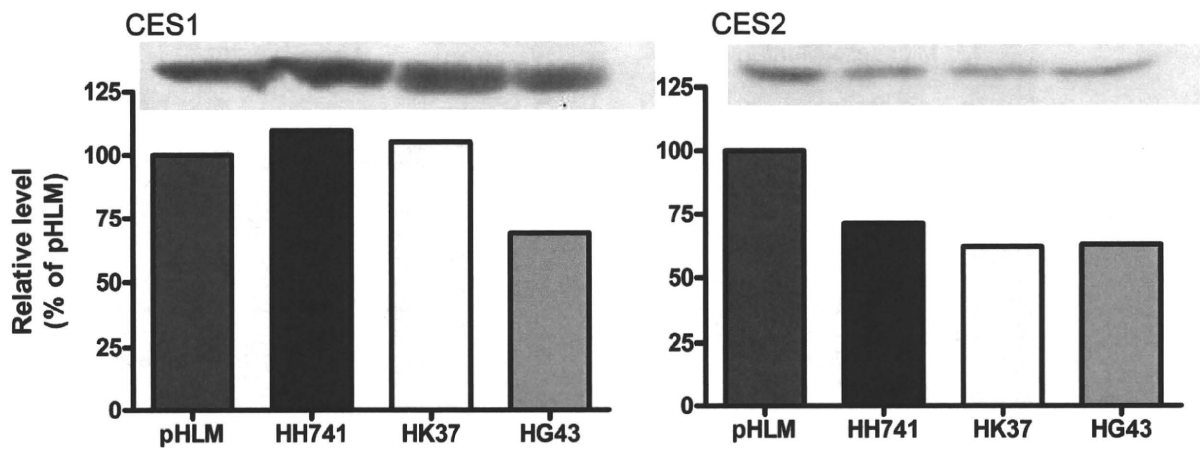


図5 ヒト肝マイクロゾームにおける CES1 及び CES2 のウェスタンブロッティング

表1 プールドヒト肝マイクロゾームにおけるフタル酸エステル類の加水分解反応の速度論的パラメーター

Substrate	Metabolite	S_{50}^a	V_{max}^b	n^c	CL_{int}^d
DBP	MBP	94 ± 8	17 ± 2	2.3 ± 0.4	92 ± 1
BBP	MBzP	65 ± 4	12 ± 1	2.0 ± 0.2	94 ± 4
	MBuP	100 ± 19	0.41 ± 0.05	1.2 ± 0.0	2.4 ± 0.1
DEHP	MEPH	7.8 ± 0.3	0.41 ± 0.04	1.6 ± 0.1	28 ± 3

Each value is the mean ± SD of three separate experiments. ^aμM. ^bnmol/min/mg protein. ^cHill coefficient. ^dμL/min/mg protein.

表 2 プールド及び個人ヒト肝ミクロゾームにおけるフタル酸エステル類の加水分解反応の速度論的パラメーター

Substrate	Metabolite	Donor	S_{50}^a	V_{max}^b	n^c	CL_{int}^d
DBP	MBP	pHLM	78	14	1.5	92
		HH741	100	19	2.4	94
		HK37	104	18	2.9	91
		HG43	77	13	2.3	88
BBP	MBzP	pHLM	59	10	1.7	87
		HH741	64	12	2.2	97
		HK37	72	14	2.1	98
		HG43	65	12	2.6	95
	MBuP	pHLM	69	0.32	1.3	2.6
		HH741	102	0.40	1.2	2.4
		HK37	134	0.50	1.2	2.3
		HG43	83	0.43	1.5	2.7
DEHP	MEPH	pHLM	7.6	0.34	1.6	23
		HH741	7.5	0.41	1.8	28
		HK37	8.4	0.48	1.3	33

Each value is single experiments ^a μ M. ^bnmol/min/mg protein. ^cHill coefficient. ^d μ L/min/mg protein.

厚生労働科学研究費補助金（化学物質リスク研究事業）
分担研究年度終了報告書

家庭用品に由来する化学物質の多経路暴露評価手法の開発に関する研究

家庭用品に由来する室内環境化学物質の網羅的解析手法の開発に関する研究
ハウスダスト中可塑剤・難燃剤リン酸トリエステル類の実態調査

研究分担者 香川(田中) 聡子 国立医薬品食品衛生研究所 生活衛生化学部 主任研究官
研究代表者 神野 透人 国立医薬品食品衛生研究所 生活衛生化学部 第一室長
研究協力者 古川 容子 国立医薬品食品衛生研究所 生活衛生化学部 第一室
研究協力者 永井 美緒 国立医薬品食品衛生研究所 生活衛生化学部 第一室

研究要旨：室内環境中での化学物質暴露において、その主要な暴露媒体として室内空気及びハウスダストは極めて重要な役割を果たす。建材や家庭用品から放散される溶剤等の揮発性有機化合物には主に室内空気を介して暴露されるが、比較的沸点の高い準揮発性有機化合物の場合には、粒子を形成、あるいは粒子に吸着して床に沈降すると考えられるため、暴露媒体として室内空気よりもむしろハウスダストが重要である。本研究では、室内環境中でハウスダストを媒体として暴露される可能性のある化学物質を網羅的に解析する目的で、ハウスダストのアセトン抽出液をガスクロマトグラフ飛行時間型質量分析計（GC/TOF-MS）によって分析し、デコンボリューション解析によってハウスダスト中の化学物質を暫定的に同定した。その結果、一般家庭24件からサンプリングしたハウスダスト中の化学物質として、高頻度且つ高濃度にDiethylhexyl phthalateが検出されることが確認された。GC/TOF-MSによる分析の結果、Diethylhexyl phthalateに次いで高頻度に検出された物質として可塑剤・難燃剤リン酸トリエステル類に着目し、11種のリン酸トリエステル類についてガスクロマトグラフ四重極型質量分析法（GC/MS）による定量方法を確立し、ハウスダスト中の濃度を測定した。その結果、複数の発がん性試験の結果から、動物試験において腎臓及び肝臓に腫瘍を引き起こす発がん性物質であることが示唆されており、欧州REACH規制の高懸念物質(SVHC)に指定されているTris(2-chloroethyl) phosphate (TCEP)が高頻度に検出され、今回の実態調査結果における最高濃度を用いて摂取量を算出した場合、ハウスダストを介する推定1日摂取量が経口摂取量（飲料水+食物）の15%となる可能性が示された。

A. 研究目的

シックハウス症候群や本態性化学物質過敏状態など室内環境化学物質に起因すると考えられる健康被害の増加に伴って、建材や家具等の家庭用品から放散される化学物質に大きな関心が寄せられている。主要な発生源の一つである建材に関しては、建築基準法の改正によって放散化学物質の低減化策が講じられている。一方、居住者によって家庭内に持ち込まれる家庭用品には多種多様な化学物質が使用されているものの、それらの製品から放散される化学物質の室内環境への負荷については情報が限られている。

これまで高揮発性有機化合物 (VVOC, b.p.: <0°C~50-100°C) や揮発性有機化合物 (VOC, b.p.: 50-100°C ~ 240-260°C) 等による室内空気汚染に関する研究が積極的に進められてきた。しかし、比較的沸点の高い準揮発性有機化合物 (SVOC, b.p.: 240-260°C ~ 380-400°C) は、粒子を形成、あるいは粒子に吸着して床に沈降すると考えられるため、室内空気よりもむしろハウスダストに貯留している可能性が高い。特に小児は、床近くで行動し、**Hand-to-mouth** 等の行動特性があるため、指手を介して経口摂食する可能性が高く、ハウスダストが化学物質の重要な暴露源となることが予想される。

前年度実施した室内空気及びハウスダスト中のフタル酸エステル類に関する実態調査結果からも、**Dibutyl phthalate (DBP)** の場合には、1日推定摂取量のほとんどが食物及び飲料水を介した暴露によるのに対して、**Bis (2-ethylhexyl) phthalate**、(**Diethylhexyl phthalate**)に

ついては食物及び飲料水を暴露媒体として摂取する量の約 80% に相当する量をハウスダストから摂取する可能性のあることを明らかにした。そこで、本研究では先ずハウスダストのアセトン抽出液をガスクロマトグラフ飛行時間型質量分析計 (GC/TOF-MS) で分析し、デコンボリューション解析した。その結果から、フタル酸エステル類に次いでハウスダスト中の濃度が高かったリン酸トリエステル類を調査対象物質とすることとし、ガスクロマトグラフ四重極型質量分析法 (GC/MS) による測定法を確立して、一般家庭室内の室内環境における汚染状況を調査した。

B. 研究方法

B-1 調査方法

一般家庭 (関東近郊) を対象として調査開始に先立ち、調査協力に意思確認を目的としたアンケート調査を行った後に、調査協力の了解を得られた 25 件に寝室及び居間のハウスダストのサンプリングを依頼した。ハウスダストは平成 22 年 8 月-9 月にサンプリングした。調査協力者にサンプリング実施要領及び試料採取状況に関するアンケートを配布した (平成 21 年度分担研究年度終了報告書に掲載)。ハウスダストはサンプリング終了後速やか (サンプリング終了当日~2 日後まで) に回収した。回収したハウスダストは抽出操作直前まで -20°C で保存した。

(倫理面への配慮)

調査の実施に際して、調査協力者に関して知り得た個人情報については外部に

漏えいすることのないようアンケート用紙等は書庫に保管し厳重に管理した。また、検体及び測定結果については番号によって識別することとし、管理者以外は個人を特定できないように加工した。

B-2 ハウスダスト採取方法

ハウスダストはシリカ繊維円筒濾紙を装着したステンレス製ダスト採取管を家庭用掃除機に接続して採取した。尚、サンプリング過程でのリン酸トリエステル類の汚染を避ける目的で、ダスト採取に用いる部材はすべてステンレスないしはテフロン樹脂製とした。ハウスダストのサンプリングに使用したデバイスを Fig. 1 に示す。ハウスダストは寝室及び居間の床・棚からほぼ同じ面積をほぼ同じ時間掃除機で吸引するように調査協力者に依頼した。採取したダストを振動ふるいで分級し、63 μm 以下の画分の一部を試験に用いた (Fig. 2)。ハウスダスト試料 25 mg にアセトン 2 mL を加えて超音波抽出し GC/MS により分析を行った。

B-3 GC/TOF-MS によるハウスダストサンプル中化学物質の網羅的解析

GC/TOF-MS によるハウスダスト中化学物質の分析には GC2010 (Shimadzu) 及び TruTOF HT (LECO Japan) を使用した。GC による分析条件として、注入口温度は 280°C、スプリットレスモードで Rxi 5Sill MS カラム (0.25 mm i.d. \times 30 m, 膜厚 0.25 μm) に試料を導入し、80°C (2 min.) \cdot (20°C/min.) \cdot 320°C (4 min.) の昇温条件で分離した。尚、He をキャリアガスとして線速度一定モード (30

cm/sec) で分析した。TOF-MS による分析条件として、トランスファーライン温度は 300°C、イオン源温度は 280°C とした。分離された成分は EI 法 70eV でイオン化し、35-500 のイオンを 2600 V で検出した。データ取り込み速度は 20 spectra / second に設定した。TOF-MS は 72 時間ごとに校正を行った。定量及びデコンボリューション解析には ChromaTOF Version 4.23 (LECO Japan) を使用した。

B-4 GC/MS 法によるハウスダストサンプル中のリン酸トリエステル類の定量

GC/MS 測定には GCMS-QP2010 (島津製作所) を使用した。分析条件として、注入口温度は 250°C、スプリットレスモードで Rtx-5MS カラム (0.25 mm i.d. \times 30 m, 0.25 μm) に試料を導入し、50°C (2 min.) \cdot (10°C/min.) \cdot 260°C (10 min.) の昇温条件で分離した。尚、He をキャリアガスとして線速度一定モード (30 cm/sec) で分析した。トランスファーライン温度は 250°C、イオン源温度は 230°C とした。SIM 法で Trimethyl phosphate (TMP; m/z 79, 110)、Triethyl phosphate (TEP; m/z 99, 155)、Tripropyl phosphate (TPP; m/z 99, 141)、Tributyl phosphate (TBP; m/z 99, 155)、Tris (2-chloroethyl) phosphate (TCEP; m/z 249, 251)、Tris (2-chloroisopropyl) phosphate (TCIPP; m/z 99, 125)、Tris(1,3-dichloro-2-propyl) phosphate (TDCPP; m/z 99, 191)、Tris(butoxyethyl) phosphate (TBEP; m/z 85, 125)、Triphenyl phosphate (TPHP; m/z 326, 325) 、

Tris(2-ethylhexyl) phosphate (TEHP; m/z 99, 113)、Tricrecyl phosphate (TCP; m/z 368,367)の各イオンを測定した。

B-5 統計的解析手法

結果の解析は Prism 5.00 (GraphPad Software, San Diego, CA) を用いた。

C. 研究結果

C-1 ハウスダストサンプル中化学物質の

GC/TOF-MS による網羅的解析結果
今回の調査では一般家庭 25 件の寝室及び居間のハウスダストを採取した。25 件のうち 1 件については、分析に要する充分量のハウスダストが得られなかったため、24 検体について先ず GC/TOF-MS による分析を実施した。Fig. 3-1— Fig. 3-4 に GC/TOF-MS 分析で得られた各ハウスダストサンプルのトータルイオンクロマトグラムを示す。また、デコンボリューション解析した結果を Table 1 に示す。尚、同定された各物質についてはそれぞれのピーク面積からトルエン換算値を算出し、ハウスダスト 1g 中の濃度として示した。デコンボリューション解析の結果、24 検体すべてから 1,2-Benzenedicarboxylic acid, bis(2-ethylhexyl) ester (すなわち Diethylhexyl phthalate) が検出され、2 検体を除く 22 検体については暫定的に同定された物質の中で最高濃度であった。可塑剤・難燃剤として使用されるリン酸トリエステル類に関しても高頻度で検出され、中でも Ethanol, 2-butoxy-, phosphate (3:1) が最高濃度で検出された検体も存在した。

C-2 ハウスダスト中リン酸トリエステル類の濃度

測定対象としたリン酸トリエステル類 11 物質の化学構造式を Fig. 4 に、また、これら化合物の標準品について GC/MS 分析によって得られたクロマトグラムを Fig. 5 に示した。一般家庭 24 件の居間及び寝室のハウスダスト中のリン酸トリエステル類濃度の分布を Fig. 6 に示した。ハウスダスト中のリン酸トリエステル類濃度の中央値及び最大値はそれぞれ TCEP ; 0.0015 mg/g Dust、0.016 mg/g Dust、TBEP ; 0.19 mg/g Dust、2.8 mg/g Dust、TPHP ; 0 mg/g Dust、0.011 mg/g Dust であった。尚、今回サンプリングしたハウスダストに関しては、TMP、TEP、TPP、TBP、TCIPP、TDCPP、TEHP 及び TCP については今回の分析条件においては定量下限値未満であった。

D. 考察

室内環境において家庭用品に由来する化学物質の暴露を考える上では、ホルムアルデヒドのような高揮発性有機化合物やトルエン及びキシレン等の揮発性有機化合物の室内空気を媒体とした暴露が重要であり、それに関する情報はこれまでに数多く蓄積されている。一方、揮発性の低い準揮発性有機化合物に関しては、粒子に吸着して床に沈降するために、室内空気に比べてハウスダストを暴露媒体として考慮する必要がある。特に、小児の場合は成人に比べて床付近で行動することが多いために床表面のハウスダストを経気道的及び経口的に摂取する可能性

が高く、ハウスダストは化学物質の主要な暴露源となりうる。そこで本研究では室内環境からの化学物質の暴露状況を把握する目的で特にハウスダストに着目し実態調査を実施した。本年度の調査では、ハウスダストのアセトン抽出液をGC/TOF-MSで分析し、デコンボリューション解析によってハウスダスト中の化学物質を網羅的に解析した。その結果、昨年度の研究で一般家庭の室内空気及びハウスダストに関する実態調査の対象物質としたフタル酸エステル類、中でもDiethylhexyl phthalateがハウスダストサンプルすべてから最も高濃度に検出されることが確認された。

本年度の研究では、ハウスダスト中の化学物質としてフタル酸エステル類に次いで高頻度、高濃度に検出されたリン酸トリエステル類についてGC/MS分析によって定量した。その結果、TCEP、TBEP及びTPHPの三種類のリン酸トリエステル類が検出された。最も頻度高く、且つ高濃度に検出されたのはTBEPであった。TBEPは床ワックスの可塑剤に用いられることから、フローリングのワックスがけによってハウスダスト中に極めて高濃度に検出された可能性が考えられる。また、可塑剤・難燃剤として使用されているTCEPは複数の発がん性試験の結果から、動物試験において腎臓及び肝臓に腫瘍を発生させる発がん性物質であることが示唆されており、欧州REACH規制の高懸念物質(SVHC)に指定されている。本調査においても高頻度に検出された。その最高濃度値を用い、成人のハウスダスト摂取量を50 mg (RIVM, 2008)としてハウ

スダストを介するTCEPの1日摂取量を推定したところ

$16 (\mu\text{g/g}) \times 50 (\text{mg/day}) = 0.8 (\mu\text{g/day})$ であった。

成人の体重を平均50 kgと仮定して、体重1 kg当たりの摂取量を求めると、

$0.8 (\mu\text{g/day}) / 50 (\text{kg}) = 0.016 (\mu\text{g/kg/day})$ と推定された。

飲料水中及び食物中の濃度に関して化学物質の初期リスク評価書 No.205 Tris (2-chloroethyl) phosphate (製品評価技術基盤機構、化学物質評価研究機構、新エネルギー・産業技術総合開発機構 2008)で採用されている数値を引用すると、

飲料水 (地下水):

$0.26 (\mu\text{g/L}) \times 2 (\text{L/day}) = 0.52 (\mu\text{g/day})$

食物:

$0.0025 (\mu\text{g/g}) \times 2,000 (\text{g/day}) = 5.0 (\mu\text{g/day})$

となり、

成人の体重を平均50 kgとして、体重1 kg当たりの摂取量を求めると、

経口摂取量 (飲料水+食物):

$(0.52 + 5.0) (\mu\text{g/day}) / 50 (\text{kg}) = 0.11 (\mu\text{g/kg/day})$ となる。

従って、ハウスダストを介する推定1日摂取量 $0.016 (\mu\text{g/kg/day})$ は経口摂取量 (飲料水+食物) の15%となる。子供のハウスダストの摂取量に関して、RIVM, 2008では成人に比べて2倍高く (100 mg/day) 設定されており、また、土壌摂食量調査の結果に基づいて、日本人小児のハウスダスト1日摂取量の50%値を 25 mg/day 、最大値を 200 mg/kg と設定している報告もあることから、飲料水及び食物から摂取される総量に対してハウスダストを介

して摂取される TCEP の割合は高くなる
ことが予想される。今後も引き続き詳細
な調査及び評価等を行う必要があると考
えられる。

E. 結論

ハウスダスト中の化学物質の実態調査
として、一般家庭 24 件 のハウスダスト
中の化学物質について、GC/TOF-MS に
よって分析し、デコンボリューション解
析によって化合物を暫定的に同定した。
その結果、高頻度且つ高濃度
Diethylhexyl phthalate が検出されるこ
とが確認された。Diethylhexyl phthalate
に次いで高頻度に検出された物質として
可塑剤・難燃剤リン酸トリエステル類を
対象物質として、GC/MS によってハウス
ダスト中の濃度を測定した。その結果、
複数の発がん性試験の結果から、動物試
験において腎臓及び肝臓に腫瘍を引き起
こす発がん性物質であることが示唆され
ており、欧州 REACH 規制の高懸念物質
(SVHC) に 指 定 さ れ て い る
Tris(2-chloroethyl) phosphate (TCEP) の
ハウスダストを介する推定 1 日摂取量が
経口摂取量 (飲料水+食物) の 15% となる
可能性が示された。

ハウスダストを介した暴露は生活様式
を反映することから、今後我が国独自の
暴露シナリオの設定を含めた暴露評価手
法の確立が必要であると考えられる。

F. 引用文献

- 1) 独立行政法人 製品評価技術基盤機
構、財団法人 化学物質評価研究機構、
独立行政法人 新エネルギー・産業技
術総合開発機構 (2008 年 3 月) 化学
物質の初期リスク評価書 Ver. 1.0
No. 205 リン酸トリス(2-クロロエチ
ル) Tris (2-chloroethyl) phosphate.

G. 研究発表

G-1 論文発表

なし

G-2 学会発表

- 1) Tanaka-Kagawa T. Jinno H.,
Furukawa Y. and Nishimura T.:
Field Survey on the Phthalates in
House Dust and Residential Air.
The 2nd Korea-Japan Symposium
on Environmental Chemistry
(2010.11)

H. 知的所有権の取得状況

H-1 特許取得

なし

H-2 実用新案登録

なし

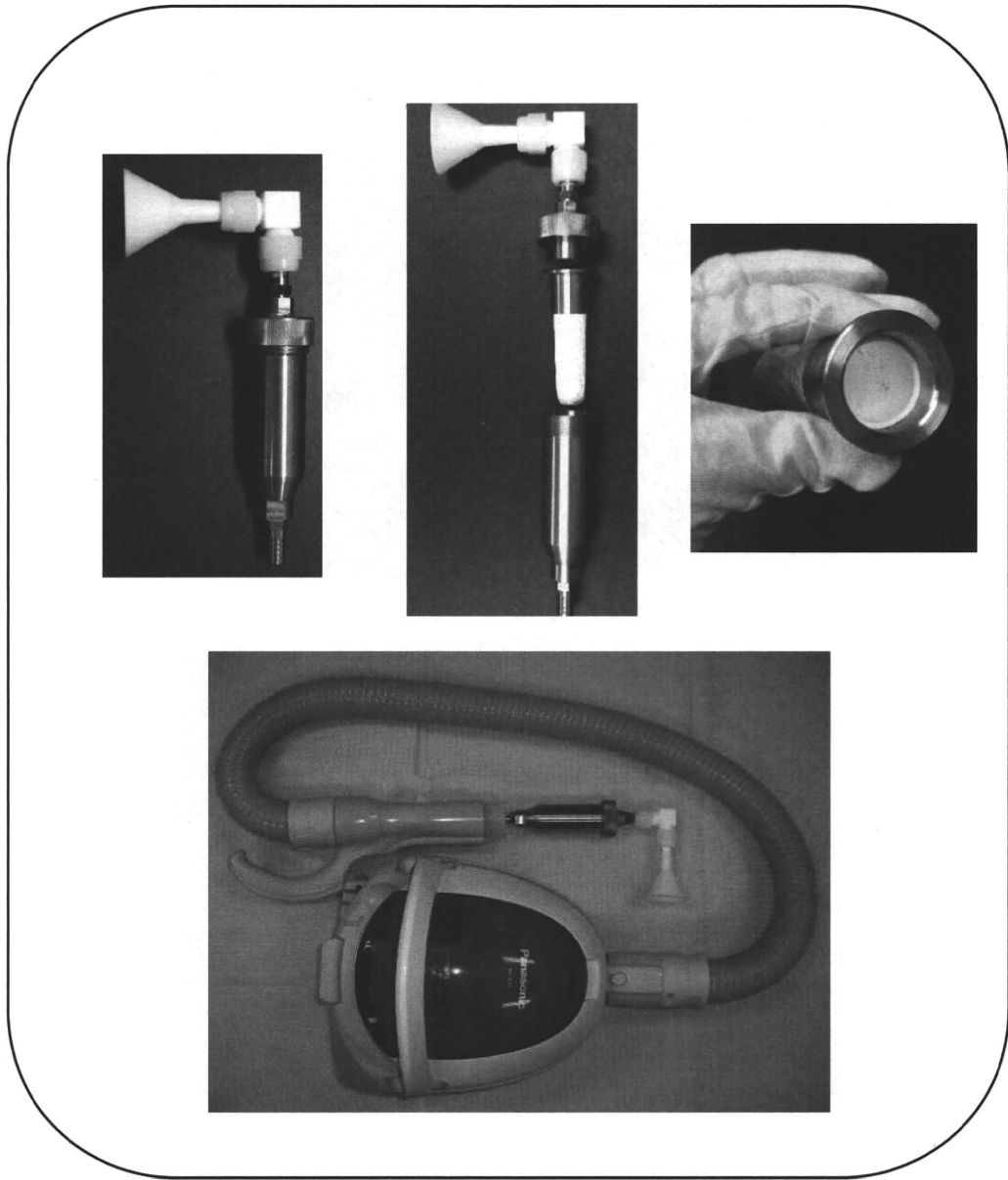


Fig. 1 Sampling devices of house dust



Fig. 2 Sieving devices of house dust samples

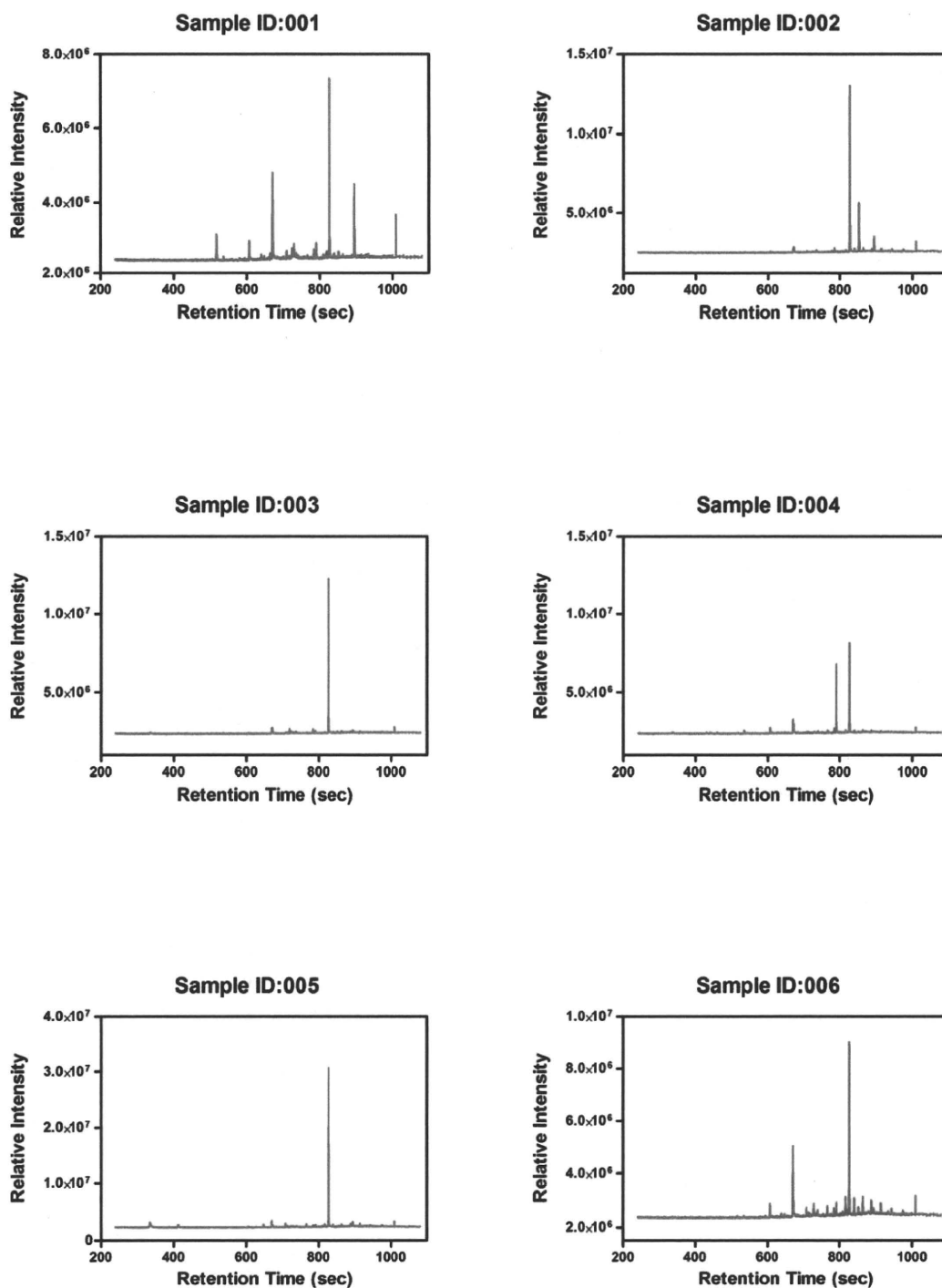


Fig. 3-1 Total ion chromatograms of the acetone extract of house dust samples by GC/TOF-MS analysis

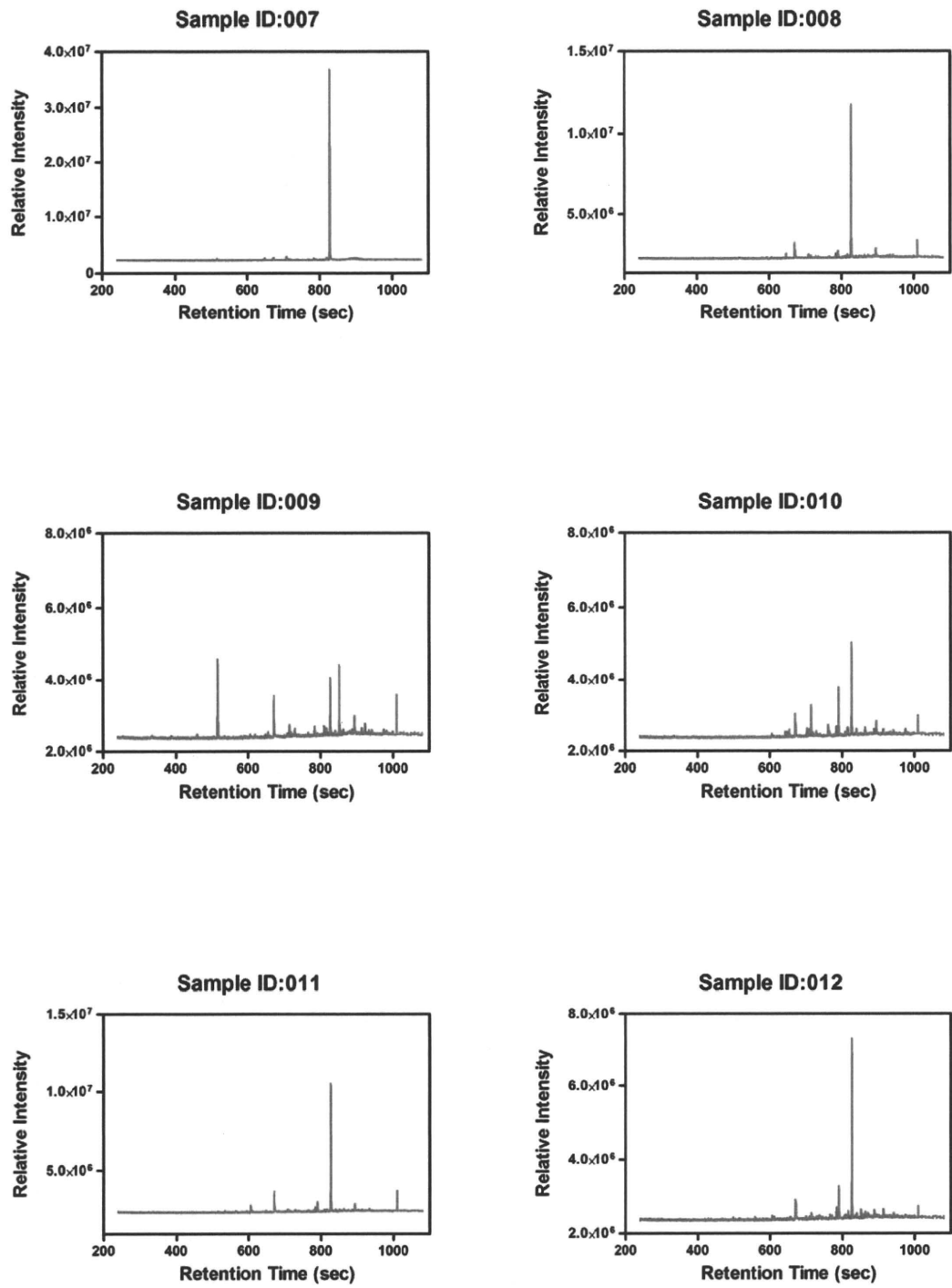


Fig. 3-2 Total ion chromatograms of the acetone extract of house dust samples by GC/TOF-MS analysis

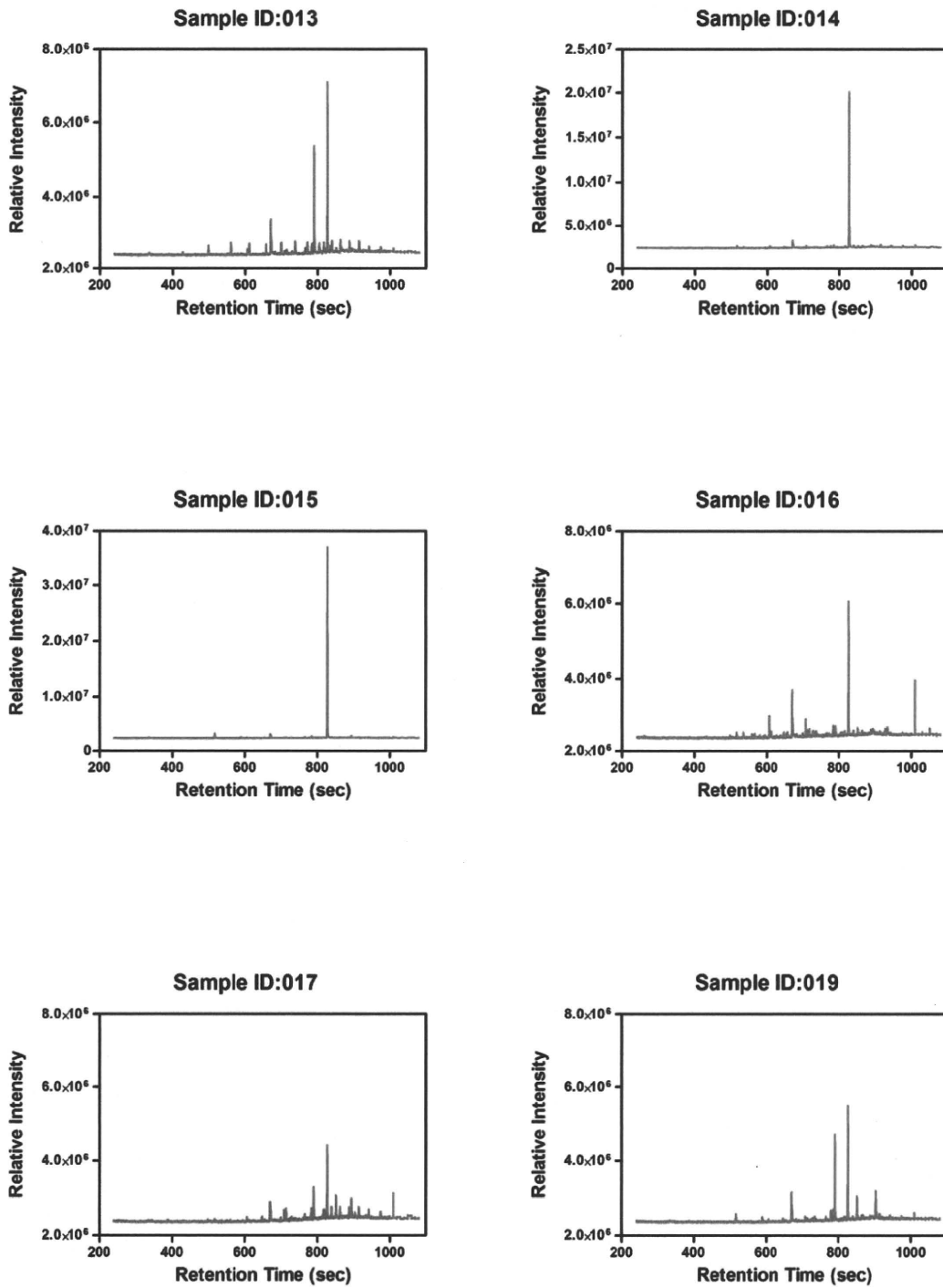


Fig. 3-3 Total ion chromatograms of the acetone extract of house dust samples by GC/TOF-MS analysis

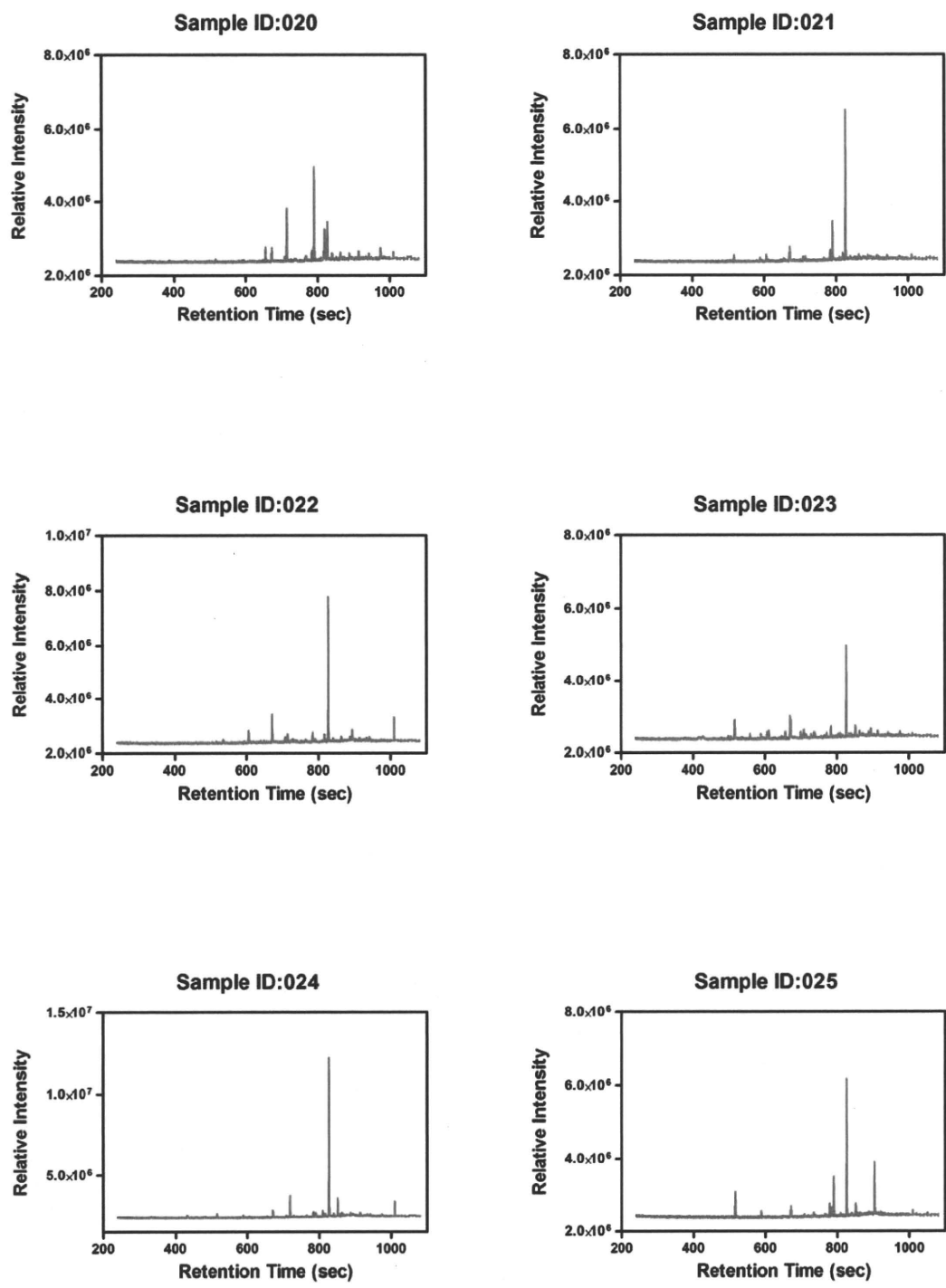


Fig. 3-4 Total ion chromatograms of the acetone extract of house dust samples by GC/TOF-MS analysis

Table 1 Tentatively identified compounds in 24 house dust samples by GC/TOF-MS and deconvolution analysis

*mg Toluene eq / g Dust

Sample ID: 001	R.T. (s)	Conc*
1,2-Benzenedicarboxylic acid, bis(2-ethylhexyl) ester	826.50	9.32
n-Hexadecanoic acid	671.05	5.59
2,6,10,14,18,22-Tetracosahexaene, 2,6,10,15,19,23-hexamethyl-, (all-E)-	893.80	4.52
Cholesterol	1008.40	4.29
1-Dodecanamine, N,N-dimethyl-	516.30	1.72
Tetradecanoic acid	606.40	1.19
Ethanol, 2-butoxy-, phosphate (3:1)	790.35	0.97
Octadecanoic acid	728.95	0.87
Oleic Acid	723.20	0.76
Propanehydrazide, N2-(3-nitrophenyl)-	784.00	0.50
3-Octadecene, (E)-	708.75	0.48
Naphthalene, 1-isocyano-	672.20	0.44
Heptadecane, 2,6,10,15-tetramethyl-	851.45	0.38
l-Isoleucine, N-trifluoroacetyl-	826.10	0.36
Myristoleic acid	664.80	0.36
1-Pentadecanamine, N,N-dimethyl-	818.65	0.33
Pentadecanoic acid	638.95	0.32
Dodecanamide	735.80	0.26
Hexanoic acid, 2-ethyl-, anhydride	838.70	0.24
Hexanoic acid, 2-ethyl-, hexadecyl ester	809.30	0.23
Dodecanoic acid	535.15	0.19
Dodecane, 2,6,10-trimethyl-	863.00	0.18
n-Tridecan-1-ol	647.75	0.18
Cholesta-4,6-dien-3-ol, (3á)-	927.15	0.18
Tetradecane	816.15	0.17
Nonadecane, 2-methyl-	887.45	0.17
Hexadecenoic acid, Z-11-	992.20	0.16
Octadecane, 2-methyl-	913.65	0.15
Dodecane, 2,6,11-trimethyl-	766.30	0.15
2-Hexyl-1-octanol	594.30	0.14
Cholesteryl hydrocinnamate	933.60	0.14
11-Tricosene	999.70	0.14
Cyclopropane, nonyl-	580.35	0.14
3-Eicosene, (E)-	978.50	0.12
Sulfurous acid, 2-propyl undecyl ester	739.95	0.11

Sample ID: 002		
	R.T. (s)	Conc*
1,2-Benzenedicarboxylic acid, bis(2-ethylhexyl) ester	826.65	20.57
Pentadecane, 2,6,10,14-tetramethyl-	851.50	7.16
Cholesterol	1008.30	2.19
2,6,10,14,18,22-Tetracosahexaene, 2,6,10,15,19,23-hexamethyl-, (all-E)-	893.75	2.13
1-Methyl-6-oxo-1,6-dihydro-3-pyridinecarboxylic acid #	672.20	0.66
n-Hexadecanoic acid	670.35	0.52
Arsine, diethylphenyl-	784.05	0.49
Hexanoic acid, 2-ethyl-, anhydride	838.70	0.48
Octadecane, 2-methyl-	863.05	0.47
Nonadecane, 2-methyl-	913.65	0.42
Eicosane, 2-methyl-	942.55	0.40
Dodecane, 2,6,10-trimethyl-	974.95	0.38
Oxamide, N-(3-methoxypropyl)-N'-cycloheptylidenamino-	826.25	0.35
Pentadecane, 2,6,10-trimethyl-	887.40	0.35
1-Iodo-2-methylundecane	1011.95	0.27
Succinic acid, di(2-ethylhexyl) ester	734.90	0.25
Pentadecane, 2,6,10-trimethyl-	816.10	0.25
Hexadecane	839.60	0.20
Cholesterol isocaproate	933.70	0.17
Sulfurous acid, 2-ethylhexyl isohexyl ester	1054.90	0.16
Hexadecen-1-ol, trans-9-	708.70	0.15
n-Tridecan-1-ol	815.65	0.14
2-Ethylhexyl trans-4-methoxycinnamate	775.45	0.11
Tridecanoic acid	606.00	0.11
Dodecane, 2,6,10-trimethyl-	791.80	0.11
Sample ID: 003		
	R.T. (s)	Conc*
1,2-Benzenedicarboxylic acid, bis(2-ethylhexyl) ester	826.50	18.78
Cholesterol	1008.10	1.19
n-Hexadecanoic acid	670.35	0.66
Oxamide, N-(3-methoxypropyl)-N'-cycloheptylidenamino-	672.15	0.64
Ethylamine, N-decyl-N-methyl-2-(2-thiophenyl)-	718.95	0.50
Naphthalene, 1-isocyano-	783.95	0.48
l-Isoleucine, N-trifluoroacetyl-	826.10	0.37
Dodecanamide	790.30	0.37
Oleic Acid	723.00	0.31
Nonanal	334.60	0.28
2,6,10,14,18,22-Tetracosahexaene, 2,6,10,15,19,23-hexamethyl-, (all-E)-	893.65	0.25
1-Iodo-2-methylundecane	862.95	0.20

Heptadecane, 2,6,10,15-tetramethyl-	851.40	0.19
Sulfurous acid, decyl 2-ethylhexyl ester	913.60	0.18
Sulfurous acid, 2-ethylhexyl undecyl ester	816.05	0.15
Sulfurous acid, 2-ethylhexyl tridecyl ester	887.35	0.13
Dodecanoic acid	535.10	0.12
Dodecanamide	735.60	0.12
Tetradecanoic acid	606.00	0.12
3-Octadecene, (E)-	708.65	0.11
Nonadecane, 2-methyl-	839.55	0.10
Heptadecane, 2,6,10,15-tetramethyl-	974.80	0.10
Sample ID: 004		
	R.T. (s)	Conc*
1,2-Benzenedicarboxylic acid, bis(2-ethylhexyl) ester	826.50	10.64
Ethanol, 2-butoxy-, phosphate (3:1)	790.50	8.59
n-Hexadecanoic acid	670.60	1.72
Cholesterol	1008.25	1.10
Tetradecanoic acid	606.30	0.75
Furan-2-carboxylic acid, 4-diethylaminomethyl-5-ethyl-	784.00	0.55
Dibutyl phthalate	672.75	0.50
Oxamide, N-(3-methoxypropyl)-N'-cycloheptylidenamino-	672.20	0.49
Dodecanoic acid	535.25	0.42
l-Isoleucine, N-trifluoroacetyl-	826.10	0.37
Nonadecane, 2-methyl-	816.10	0.32
Dodecane, 2,6,10-trimethyl-	862.95	0.32
Dodecane, 2,7,10-trimethyl-	839.65	0.28
Pentadecane, 7-methyl-	766.25	0.26
Dodecane, 2,6,10-trimethyl-	887.45	0.25
2-Bromo dodecane	913.65	0.24
2-Pentanone, 4-hydroxy-4-methyl-	337.00	0.22
Pentanoic acid (octahydroquinolizin-1-yl)methyl ester	672.30	0.22
1-Iodo-2-methylundecane	739.90	0.20
Phthalic anhydride	443.35	0.18
n-Hexadecanoic acid	728.70	0.16
Bis-(3,5,5-trimethylhexyl) phthalate	871.20	0.16
2-Acetyl-2-methyltetrahydrofuran	460.65	0.16
2(5H)-Furanone, 3,5,5-trimethyl-	430.10	0.15
3-Eicosene, (E)-	708.70	0.14
2,6,10,14,18,22-Tetracosahexaene, 2,6,10,15,19,23-hexamethyl-, (all-E)-	893.75	0.13
Phthalic acid, dodecyl octyl ester	873.25	0.12
2-Hexanone, 5-methyl-5-nitro-	439.30	0.12
Sulfurous acid, hexyl pentadecyl ester	942.50	0.11
Heptadecane, 2,6,10,15-tetramethyl-	851.45	0.10

Ethylamine, 2-((p-bromo-à-methyl-à-phenylbenzyl)oxy)-N,N-dimethyl-	516.35	0.10
Sample ID: 005		
	R.T. (s)	Conc*
1,2-Benzenedicarboxylic acid, bis(2-ethylhexyl) ester	827.00	59.39
Nonanal	334.60	5.34
Cholesterol	1008.25	2.87
n-Hexadecanoic acid	670.60	2.69
2,6,10,14,18,22-Tetracosahexaene, 2,6,10,15,19,23-hexamethyl-, (all-E)-	893.70	1.90
Nonanoic acid	412.65	1.79
Hexadecen-1-ol, trans-9-	708.60	1.21
Nonadecane, 2-methyl-	913.70	1.19
Hexadecane	816.15	1.09
Octadecane, 2-methyl-	887.40	1.00
n-Pentadecanol	647.55	0.99
Octadecane, 2-methyl-	862.95	0.96
Octadecane, 2-methyl-	839.55	0.77
Nonadecane, 2-methyl-	942.50	0.77
Octadecane, 2-methyl-	975.00	0.72
Hexadecane	791.70	0.62
1-Methyl-6-oxo-1,6-dihydro-3-pyridinecarboxylic acid #	672.10	0.59
1-Iodo-2-methylundecane	766.15	0.56
Hexanedioic acid, bis(2-ethylhexyl) ester	789.25	0.56
Arsine, diethylphenyl-	783.90	0.48
Heptadecane, 2,6,10,15-tetramethyl-	1012.00	0.42
15-Hydroxypentadecanoic acid	766.00	0.42
Oxamide, N-(3-methoxypropyl)-N'-cycloheptylidenamino-	826.25	0.41
Octadecanoic acid	728.75	0.37
Decanal	387.60	0.33
cis-Vaccenic acid	723.00	0.31
Tetradecanoic acid	605.95	0.26
1-Nonadecanamine, N,N-dimethyl-	714.20	0.25
Sulfurous acid, butyl dodecyl ester	1054.95	0.25
Heptadecane, 2,6,10,15-tetramethyl-	739.80	0.24
Cholesta-3,5-diene	933.55	0.23
Hexanoic acid, 2-ethyl-, hexadecyl ester	809.30	0.22
Dodecane, 2,7,10-trimethyl-	851.40	0.20
17-Octadecynoic acid	811.95	0.20
Phthalic acid, 2-methylbutyl nonyl ester	902.30	0.20
1,2-Benzenedicarboxylic acid, ditridecyl ester	890.60	0.15
Tetradecanoic acid, tetradecyl ester	999.45	0.15
1-Pentadecanamine, N,N-dimethyl-	818.70	0.15

Sulfurous acid, 2-ethylhexyl nonyl ester	880.95	0.14
Dodecanamide	735.65	0.13
Phthalic acid, 4-cyanophenyl nonyl ester	873.30	0.12
Sulfurous acid, butyl heptadecyl ester	856.70	0.12
Cholesta-4,6-dien-3-ol, (3á)-	927.10	0.11
Phthalic acid, 2-methylbutyl nonyl ester	924.70	0.11
Cyclopropane, nonyl-	580.25	0.10
Sample ID: 006		
	R.T. (s)	Conc*
1,2-Benzenedicarboxylic acid, bis(2-ethylhexyl) ester	826.45	12.75
n-Hexadecanoic acid	671.00	6.47
Cholesterol	1008.20	2.37
Octadecane, 2-methyl-	862.90	1.30
Hexadecane	816.05	1.24
Octadecane, 2-methyl-	839.55	1.20
Tetradecanoic acid	606.30	1.05
Heptadecane, 2,6,10,15-tetramethyl-	791.65	1.03
Nonadecane, 2-methyl-	887.35	1.03
Octadecanoic acid	728.85	0.96
Nonadecane, 2-methyl-	913.55	0.92
Pentadecane, 2,6,10,14-tetramethyl-	851.35	0.65
Pentadecane, 2,6,10-trimethyl-	766.25	0.64
5-Octadecene, (E)-	708.65	0.63
Nonadecane, 2-methyl-	942.50	0.55
Arsine, diethylphenyl-	783.90	0.52
1-Methyl-6-oxo-1,6-dihydro-3-pyridinecarboxylic acid #	672.15	0.48
1-Nonadecanamine, N,N-dimethyl-	818.60	0.43
2,6,10,14,18,22-Tetracosahexaene, 2,6,10,15,19,23-hexamethyl-, (all-E)-	893.70	0.42
Eicosane, 2-methyl-	975.00	0.41
l-Isoleucine, N-trifluoroacetyl-	826.05	0.38
Hexadecane	739.80	0.38
Pentadecanoic acid	638.85	0.27
Sulfurous acid, dodecyl 2-propyl ester	878.35	0.24
Sulfurous acid, hexyl pentadecyl ester	1012.05	0.23
N-Dimethylaminomethyl-tert.-butyl-isopropylphosphine	714.30	0.22
1-Hexadecanol	647.65	0.21
Dibutyl phthalate	672.70	0.19
Hexanoic acid, 2-ethyl-, hexadecyl ester	809.25	0.19
Phthalic acid, 2-cyclohexylethyl nonyl ester	880.20	0.17
Dodecanamide	735.70	0.17
Dodecanamide	790.25	0.16

Ethylamine, 2-((p-bromo-à-methyl-à-phenylbenzyl)oxy)-N,N-dimethyl-	516.25	0.15
Nitric acid, nonyl ester	933.35	0.15
Dodecanoic acid	535.00	0.14
Tetradecanoic acid, tetradecyl ester	999.55	0.14
Dodecane, 2,6,10-trimethyl-	712.10	0.14
Cholesta-3,5-diene	933.55	0.14
Pentadecanal	593.95	0.14
Ethylamine, N-decyl-N-methyl-2-(2-thiophenyl)-	718.95	0.13
1,2-Benzenedicarboxylic acid, diheptyl ester	803.15	0.12
Phthalic acid, nonyl pentadecyl ester	905.25	0.12
Phthalic acid, nonyl pentadecyl ester	873.45	0.10
1,2-Benzenedicarboxylic acid, diheptyl ester	805.15	0.10
Cholesta-3,5-diene	896.05	0.10
Sample ID: 007		
	R.T. (s)	Conc*
1,2-Benzenedicarboxylic acid, bis(2-ethylhexyl) ester	827.05	74.74
Hexadecen-1-ol, trans-9-	708.55	1.09
N-Dimethylaminomethyl-tert.-butyl-isopropylphosphine	818.60	0.77
1-Hexadecanol	647.60	0.73
1,2-Benzenedicarboxylic acid, dinonyl ester	901.85	0.69
Oxamide, N-(3-methoxypropyl)-N'-cycloheptylidenamino-	672.10	0.67
Propanehydrazide, N2-(3-nitrophenyl)-	783.95	0.52
1,2-Benzenedicarboxylic acid, dinonyl ester	897.65	0.49
n-Hexadecanoic acid	670.30	0.47
Piperidine-4-carbonitrile, 4-hydroxy-1,2,5-trimethyl-	826.60	0.43
Phthalic acid, bis(7-methyloctyl) ester	890.70	0.43
1,2-Benzenedicarboxylic acid, dinonyl ester	905.20	0.41
Cholesterol	1008.10	0.40
Phthalic acid, bis(7-methyloctyl) ester	894.65	0.39
Ethylamine, 2-((p-bromo-à-methyl-à-phenylbenzyl)oxy)-N,N-dimethyl-	516.15	0.38
Phthalic acid, bis(7-methyloctyl) ester	883.05	0.33
2,6,10,14,18,22-Tetracosahexaene, 2,6,10,15,19,23-hexamethyl-, (all-E)-	893.65	0.33
Phthalic acid, bis(7-methyloctyl) ester	887.65	0.28
Phthalic acid, nonyl 4-octyl ester	909.30	0.28
1-Pentadecanamine, N,N-dimethyl-	714.25	0.26
Nitrous Oxide	516.00	0.25
Decane, 1-chloro-	505.25	0.23
Decane, 3,7-dimethyl-	887.25	0.23
Phthalic acid, bis(7-methyloctyl) ester	880.05	0.23
Hexanedioic acid, bis(2-ethylhexyl) ester	789.20	0.21
Ethylamine, N-decyl-N-methyl-2-(2-thiophenyl)-	718.90	0.16