

令和3年度厚生労働科学研究費補助金
食品の安全確保推進研究事業

食品用器具・容器包装等の 安全性確保に資する研究

総括・分担研究報告書

令和4(2022)年3月

研究代表者	六鹿 元雄	国立医薬品食品衛生研究所
研究分担者	片岡 洋平	国立医薬品食品衛生研究所
研究分担者	阿部 裕	国立医薬品食品衛生研究所

目 次

I. 総括研究報告書	1
食品用器具・容器包装等の安全性確保に資する研究 六鹿元雄	1
II. 分担研究報告書	14
1. 規格試験法の性能に関する研究	14
片岡洋平	
<その1>ポリ乳酸を主成分とする合成樹脂製の器具又は容器包装に おける溶出試験の総乳酸定量分析法の性能評価	17
海野明広、片岡洋平、阿部 裕、六鹿元雄	
別添 ポリ乳酸を主成分とする合成樹脂製の器具又は容器包装を対象 とした溶出試験の総乳酸定量分析法共同実験プロトコル	27
<その2>器具・容器包装におけるジフェニルカーボネート、ビスフ ェノール A 及びアミン類の改良分析法の検討	39
片岡洋平、四柳道代、近藤 翠、阿部 裕、六鹿元雄	
別添 ポリカーボネートを主成分とする合成樹脂製の器具又は容器包 装を対象とした材質試験の改良アミン類分析法共同実験プロト コル	57
<その3>メタクリル酸メチル試験法への HPLC の適用	70
阿部 裕、山口未来、片岡洋平、六鹿元雄	
2. 市販製品に残存する化学物質に関する研究	75
阿部 裕	
<その1>合成樹脂製器具・容器包装に含有される非意図的添加物質 の探索(2)	77
尾崎麻子、水口智晴、岸 映里、浅川大地、片岡洋平、阿部 裕	
<その2>乳幼児用おもちゃにおける過マンガン酸カリウム消費量と総 有機炭素量の関係	103
阿部 裕、山口未来、片岡洋平、六鹿元雄	
<その3>ポリ塩化ビニル製おもちゃの使用可塑剤調査(第3報)	113
阿部 裕、山口未来、片岡洋平、六鹿元雄	
<その4>電子レンジ加熱時の液体または液状の内容物の温度	126
阿部 裕、山口未来、片岡洋平、六鹿元雄	
3. ポジティブリスト制度施行に伴う分析法の開発	132
六鹿元雄、阿部 裕	
III. 研究成果の刊行に関する一覧表	158

食品用器具・容器包装等の安全性確保に資する研究

研究代表者 六鹿 元雄 国立医薬品食品衛生研究所 食品添加物部 室長

研究要旨

食品用器具・容器包装、おもちゃ及び洗浄剤（以下、「器具・容器包装等」）の安全性は、食品衛生法の規格基準により担保されているが、新規材質の開発、再生材料の使用、諸外国からの輸入品の増加等により製品が多様化しており、規格試験法の信頼性や市販製品の安全性確保の面で課題が生じている。さらに、令和2年6月より器具・容器包装のポジティブリスト（PL）制度が施行されたが、物質の同定や確認等を目的とした分析法の整備が不十分である。そこで本研究では、規格試験法の性能に関する研究として、総乳酸試験法の性能評価、ジフェニルカーボネート（DPC）、アミン類、メタクリル酸メチル（MMA）試験法の改良分析法に関する検討、市販製品に残存する化学物質に関する研究として、合成樹脂製器具・容器包装に含有される非意図的添加物質の探索、乳幼児用玩具における過マンガン酸カリウム（ KMnO_4 ）消費量と総有機炭素（TOC）量の関係性の検証、PVC製乳幼児用おもちゃに使用される可塑剤の実態調査、容器の材質、内容物等の違いによる電子レンジ加熱時の温度の確認、PL制度施行に伴う分析法の開発として、PL収載物質を対象としたGC-MS及びLC-MS/MS用の分析情報の収集を実施した。

総乳酸試験法の性能評価では、26試験所が参加する共同実験を実施し、 RSD_R とHorRat値を指標として評価した結果、Codex委員会が分析法承認のために設定している性能規準の指標値を満たしており、規格の判定を行う分析法として妥当であることを確認した。DPC試験法については、ビスフェノールA等も同時に分析可能な改良分析法を構築した。その性能を評価した結果、真度、精度ともに良好な結果が得られ、改良分析法は規格の適否判定を行うための分析法として利用可能で有用であると考えられた。アミン類試験法については選択性が高い質量分析計及びタンデム型質量分析計を利用した改良分析法を構築した。その性能を評価した結果、規格の適否判定を行うための分析法として利用可能で有用であると考えられた。ただし、十分な性能が得られない試験所もあったことから、引き続き器具類への吸着を低減させるための対処法を検討する必要があると考えられた。HPLCを用いたMMA分析法については、試験溶液を調製後速やかにエタノールで10倍以上希釈することとし、MMA標準溶液は20%エタノール溶液からエタノール溶液に変更した。本法は限度分析法及び定量分析法のいずれにおいても規格試験として適用可能な性能を有していることが判明した。

合成樹脂製器具・容器包装に含有される非意図的添加物質の探索では、ペレットから無添加試験片を作製した際に増加・生成した化合物は非常に少なく、NIASが大きく増加・

生成することはないと考えられた。一方、5種類の汎用添加剤を練りこんだ試験片の作製工程における含有化合物の変化を確認した結果、種々の化合物が確認された。NIAS 探索には LC-QTOFMS のライブラリーを充実させる必要がある。乳幼児用おもちゃについては、KMnO₄ 消費量及び TOC 量を測定し、これらの相関について検討した。その結果、KMnO₄ 消費量と TOC 量には正の相関がみられ、KMnO₄ 消費量と TOC 量の比 (TOC 量 / KMnO₄ 消費量) は最大で約 3 倍であった。乳幼児用おもちゃを対象とした KMnO₄ 消費量及び TOC 量に関する調査報告は少なく、本成果は規格基準改正の参考情報として活用が期待される。さらに、市販ポリ塩化ビニル製おもちゃに使用される可塑剤を調査した結果、テレフタル酸ジ(2-エチルヘキシル)が主要な可塑剤として使用されており、その他の可塑剤は使用頻度が減少していた。一方、アセチルクエン酸トリブチルからクエン酸トリブチルへの切り替え、アジピン酸エステル系可塑剤の使用の減少及びフタル酸エステル類の一種と推定された新しい可塑剤の使用も確認された。電子レンジ加熱時の液体または液状の内容物の温度を測定し、その温度推移を確認するとともに、電子レンジ加熱する際の適切な加熱時間を検証した。内容物の上部中央が最も温度が上がりやすく、出力数と加熱時間は理論通り反比例の関係にあった。また、材質の違いが加熱対象物の温度に与える影響も小さいと考えられた。一方、加熱対象物の形状や量を変える場合は、加熱時間は対象物の表面積を考慮し、酒類や油分を含む食品を加熱する場合は、加熱しすぎないように加熱時間を調節する必要がある。

PL 制度施行に伴う物質の同定や確認を目的として、PL 収載物質 (候補物質も含む) 約 220 物質を対象に、GC-MS 及び LC-MS/MS 分析を行うための情報を国内の主要分析機器メーカーの協力を得て収集し、公開データベースを作成した。これらの情報を活用することで、標準品が入手出来ない場合でも物質の同定が可能となること期待される。また、測定したい化合物がある場合、GC-MS と LC-MS/MS のどちらを使用したらより高感度に測定できるか、どれくらいの濃度まで測定できるかの参考になると考えられる。

研究分担者

片岡 洋平	国立医薬品食品衛生研究所
阿部 裕	国立医薬品食品衛生研究所
六鹿 元雄	国立医薬品食品衛生研究所

A. 研究目的

食品用器具・容器包装、おもちゃ及び洗剤 (以下、「器具・容器包装等」) の安全性は、食品衛生法の規格基準により担保されているが、新規材質の開発、再生材料の使用、諸外国からの輸入品の増加等により製品が多様化しており、規格試験法の信頼性や市販製品の安全性確保の面で課題が生じている。さらに、令和 2 年 6 月より器具・容器包装のポ

ジティブリスト (PL) 制度が施行されたが、物質の同定や確認等を行うための分析法の整備が不十分である。そこで本研究では、器具・容器包装等の安全性に対する信頼性確保及び向上を目的として、規格試験法の性能に関する研究、市販製品に残存する化学物質に関する研究、並びにポジティブリスト制度施行に伴う分析法の開発を実施した。

食品衛生法では、器具・容器包装等の安全性を確保するための規格基準とともに、その規格基準を満たしているか否かを判定するための試験法が定められている。しかし、多くの試験法については、その性能について十分な評価が行われていない。また、技術の進歩

に伴い、近年では様々な簡便で有用な代替法が開発されており、これらの代替法による試験の実施を希望する試験機関も存在する。そこで、器具・容器包装の規格試験に対する信頼性確保及び向上を目的として、器具・容器包装におけるジフェニルカーボネート(DPC)、アミン類、メタクリル酸メチル(MMA)試験法の改良分析法に関する検討、並びに総乳酸試験法の性能評価を実施した。

器具・容器包装等は合成樹脂、ゴム、金属など多種多様な材質で製造される。製品には原料、添加剤、不純物等の様々な化学物質が残存し、これらの化学物質は食品や唾液を介してヒトを曝露する可能性がある。したがって、器具・容器包装等の安全性を確保するためには、製品に残存する化学物質やその溶出量等を把握することが重要である。そこで、市販製品に残存する化学物質に関する研究として、合成樹脂製器具・容器包装に含有される非意図的添加物質の探索、乳幼児用玩具における過マンガン酸カリウム(KMnO₄)消費量と総有機炭素(TOC)量の関係性の検証、ポリ塩化ビニル(PVC)製乳幼児用おもちゃに使用される可塑剤の実態調査、容器の材質、内容物等の違いによる電子レンジ加温時の温度の確認を実施した。

平成30年6月の改正食品衛生法の公布により、国際整合的な衛生規制の整備の観点から、令和2年6月より食品用器具・容器包装の原材料である合成樹脂に対するPL制度が施行された。しかし、器具・容器包装の製造に使用される物質の大部分については、その物質の同定や確認等を行うための分析法が未整備である。そこで、PL制度施行に伴う分析法の開発として、PL収載物質を対象としたGC-MS及びLC-MS/MS用の分析情報の収集を実施した。

B. 研究方法

1. 規格試験法の性能に関する研究

1) ポリ乳酸を主成分とする合成樹脂製の器具又は容器包装における溶出試験の総乳酸定量分析法の性能評価

①共同実験

室間共同実験の計画及びプロトコール作成には民間の登録検査機関14試験所と公的な衛生研究所など16試験所の計30試験所が参加し、このうち26試験所が試験を実施した。

乳酸を含む溶液(5濃度×各2試料)を参加試験所に濃度非明示で配付し、試料到着後3ヶ月間以内に計画書に従い分析を実施した。

②結果の解析

参加試験所から報告された同濃度2試料の結果をそれぞれの2併行分析の結果として、Codex分析・サンプリング部会の関連文書であるCXG64-1995に示されたプロトコールにしたがい、Microsoft Excel 2016を使用して解析した。解析で併行相対標準偏差(RSD_r%)、室間再現相対標準偏差(RSD_R%)及びRSD_RとHorwitz/Thompson式で予測される室間再現相対標準偏差(PRSD_R%)の比であるHorRat値を算出した。なお、PRSD_Rは各試料の濃度に対応するHorwitz/Thompson式である $PRSD_R \% = 2C^{-0.1505}$ (C:試料濃度)から算出した。また、HorRat値による分析法の性能評価における性能規準の指標としてCodex委員会の手順書⁴⁾を参照した。なおこの手順書では、分析法の性能規準として、HorRat値2以下を設定している。

2) 器具・容器包装におけるジフェニルカーボネート、ビスフェノールA及びアミン類の改良分析法の検討

①改良ジフェニルカーボネート分析法

試料1.0gを遠沈管に入れ、ジクロロメタン10mLを加えて、試料を溶解させた後、アセトン120mLを徐々に滴加し不純物を沈殿させた。これを毎分3,000回転で10分間遠心分離し、上清をナスフラスコに移した。沈殿にアセトン30mLを加えて洗浄後、同様に

遠心分離し、上清を先のナスフラスコに合わせた。ここに 10 vol% ジエチレングリコール-アセトン溶液 2 mL を添加し、40°C の水浴で加温しつつ、エバポレーターにより溶媒を留去した。これに 4 vol% 酢酸・50 vol% アセトニトリルを加えて 20 mL に定容後、1 mL を採り、孔径 0.5 μm 以下のメンブランフィルターでろ過した溶液を測定溶液とした。

HPLC 分析条件

カラム：KinetexC18(内径 4.6 mm、長さ 250 mm、粒子径 5 μm、Phenomenex 社製)

カラム温度：40°C

移動相：A 液 アセトニトリル、B 液 水

グラジエント条件：A/B：30/70-100/0 (0-35 min)- 100/0 (35-45 min)- 30/70 (45-55 min)

流速：1 mL/min

注入量：20 μL

測定波長：217 nm

②改良アミン類分析法

試料 1.0 g を遠沈管に入れ、2 vol% ギ酸・アセトニトリル 1 mL 及びジクロロメタン 10 mL を加えて試料を溶解させた。水を 1 mL 加えた後、攪拌子でよくかき混ぜながらアセトン 120 mL を滴加し不純物を析出させた後、毎分 3,000 回転で 10 分間遠心分離し、上清を 300 mL ナスフラスコに移した。沈殿にアセトン 30 mL を加えて洗浄後、同様に遠心分離し、上清を先の 300 mL ナスフラスコに移した。40°C の水浴で加温しつつ、エバポレーターにより 1 mL 以下まで溶媒を濃縮後、2 vol% ギ酸/アセトニトリル(1:1)で 50 mL に定容した。その 1 mL を採り、孔径 0.5 μm 以下のメンブランフィルターでろ過した溶液を測定溶液とした。

LC-MS/MS 分析条件

カラム：ZIC-HILIC(内径 2.1 mm、長さ 150 mm、粒子径 3.5 μm、Merck 社製)

カラム温度 40°C

移動相：A 液 12.5 mM ギ酸アンモニウム・0.1 vol% ギ酸、B 液 0.1 vol% ギ酸アセトニ

リル

グラジエント条件：A/B：40/60 (0-10 min)-100/0 (10-15 min)- 40/60 (15-25 min)

流速：0.2 mL/min

注入量：2 μL

イオン化法：ESI(+)

3) メタクリル酸メチル試験法への HPLC の適用

①試料

試料 1 (メタクリル酸樹脂製計量カップ、ネットで購入、熱分解 GC-MS 分析により得られたクロマトグラムから PMMA 製であることを確認) 及び試料 2 (PMMA 製シート、ポリオレフィン等衛生協議会より供与を受けたもの)。

②装置及び測定条件

装置：HPLC (alliance e2695 Separation Module, 2489 UV/VIS Detector, Waters 社製)

カラム：Inertsil ODS-4、4.6×150 mm、粒子径 5 μm (ジーエルサイエンス株式会社製)

移動相：A 液 水、B 液 アセトニトリル
グラジエント：B 液 25% → 10 分 → 60% → 0.1 分 → 100% (7 分)

流速：1.2 mL/min

注入量：25 μL

カラムオープン温度：35°C

測定波長：205 nm

2. 市販製品に残存する化学物質に関する研究

1) 合成樹脂製器具・容器包装に含有される非意図的添加物質の探索 (2)

①試料

PP 製の樹脂ペレット及びそれらを加工してシート化した試験片を用いた。試験片は、添加剤を加えずに作製した無添加試験片と、各種添加剤をそれぞれ 1% 添加した添加試験片とし、大きさは 10 cm×20 cm (厚さ 2 mm) とした。

②試験溶液の調製

試料は2~3 mm 角に細切し、その0.50 gにシクロヘキサン・2-プロパノール(1:1)混液10 mLを加え、37°Cの恒温槽中に静置して一晩浸漬後メンブランフィルターでろ過した。ろ液5.0 mLを窒素気流下40°Cで約0.2 mLまで濃縮した。50°Cに加温したアセトニトリルを約4.5 mL加えて十分に攪拌したのち、冷後アセトニトリルを加えて全量を5.0 mLとした。その一部をメンブランフィルターでろ過し、ろ液をGC-MS用及びLC-QTOFMS用の試験溶液とした。

GC-MS 測定条件

カラム: DB-5MS (0.25 mm i.d.×30 m、膜厚0.25 µm、Agilent Technologies 社製)

カラム温度: 40°C (2分間保持) -10°C/min (昇温) -300°C (10分間保持)

注入口温度: 250°C

注入モード: スプリットレス

注入量: 1 µL

キャリアーガス及び流量: He 約1.0 mL/min (定流量、フェナントレン-d10を用いて保持時間を固定)

トランスファーライン温度: 280°C

イオン源温度: 230°C

四重極温度: 150°C

測定モード: SCAN (m/z : 40~800)

LC-QTOFMS 測定条件

カラム: ACQUITY UPLC BEH C18 Column (1.7 µm、2.1 mm×150 mm、Waters 社製)

カラム温度: 35°C

移動相: A液 5% メタノール (10 mM 酢酸アンモニウム)、B液 95% メタノール (10 mM 酢酸アンモニウム)

グラジエント: 移動相 B 濃度 2 - 100% (at 0 - 10 min, linear) - 100% (at 10 - 40 min) - 2% (at 40 - 50 min)

流速: 0.2 mL/min

注入量: 5 µL

イオン化: ESI (+)

サーベイスキャン測定範囲: m/z 50-1200

MS/MS スキャン: データ依存型

キャピラリー温度: 300°C

キャピラリー電圧: 5,500 V

コリジョン電圧: 35V (CE spread 15V)

2) 乳幼児用玩具における過マンガン酸カリウム消費量と総有機炭素量の関係

①試料

乳幼児用おもちゃまたは育児用品 207 検体。内訳は、軟質 PVC 製品 118 検体 (空気注入玩具、人形、ボール、風呂用玩具、浮き輪、その他)、硬質 PVC 製品 8 検体 (その他) 及びポリエチレン (PE) 製品 81 検体 (ボール、ブロック玩具、砂場用玩具、風呂用玩具、その他)。

②試験溶液の調製

試料表面積 1 cm²につき 2 mL の割合の 40°Cに加温した水に試料を浸し、蓋をしたのち時々振とうしながら 40°Cで 30 分間放置した。その後速やかに試料を取り除き室温まで冷却したものを試験溶液とした。試験溶液の調製は一つの試料につき 3 回行い、それぞれ 1 回ずつ測定した。また、試験溶液調製後はすみやかに KMnO₄消費量及び TOC 量の測定に供した。

③ KMnO₄消費量の測定

試験溶液 100 mL を用い、器具又は容器包装一般の試験法の KMnO₄消費量試験法に準じて測定した。なお、おもちゃの規格基準では試験溶液 50 mL を水で 100 mL に希釈したものをを用いることとされているが、今回はできるだけ低濃度まで正確に測定するため、試験溶液は希釈せずに試験に供した。

④ TOC 量の測定

TOC 計: TOC-L CPH (酸化分解方式: 燃焼酸化式、二酸化炭素検出: 非分散赤外吸収方式 (NDIR))、(株) 島津製作所製

試料注入量: 500 µL

試料注入回数: 3 回

燃焼管温度：680°C
燃焼酸化触媒：白金
測定法：NPOC法（酸性化通気処理法）
キャリアーガス（空気）流量：150 mL/min
パージガス（空気）流量：80 mL/min
通気時間：1.5 分間
検出：NDIR

3) ポリ塩化ビニル製おもちゃの使用可塑剤調査（第3報）

①試料

PVC製おもちゃ220検体を用いた。これらは2019及び2020年に主に神奈川県内で購入した。その内訳は、軟質PVC製おもちゃが209検体（指定おもちゃ：146検体、指定外おもちゃ：63検体）、硬質PVC製おもちゃが11検体（指定おもちゃ：9検体、指定外おもちゃ：2検体）、種類別では、人形62検体、風呂用玩具48検体、ボール37検体、空気注入玩具32検体、その他（パズル、縄跳び、水鉄砲、スプリング等）21検体、浮き輪14検体、お面6検体。

②装置及び測定条件

装置：GC-MS (7890A GC System, 5975C inert XL MSD with Triple-Axis Detector (Agilent Technologies 社製)

カラム：DB-5MS (30 m×0.25 mm i.d., 膜厚 0.25 µm, Agilent Technologies 社製)

カラム温度：100°C→20°C/min→320°C (10 min)

注入口温度：250°C

トランスファーライン温度：280°C

キャリアーガス：ヘリウム 1.0 mL/min (定流量)

注入量：1.0 µL

注入モード：スプリットレス

イオン化電圧：70 eV

測定モード：同定はスキャンモード (m/z 50～800)

③試験溶液の調製

細切した試料 0.25 g を精秤して 50 mL 容ガラス遠沈管にとり、アセトン・ヘキサン混液 (3 : 7) 15 mL を加えて振り混ぜた後、密栓をして約 40°C の恒温器内で一晩静置した。冷後ろ紙 (No. 5C、125 もしくは 185 mm) を用いてろ過し、アセトンで遠沈管及び漏斗を洗い、得られたろ液及び洗液を 25 mL 容メスフラスコに合わせ、アセトンを加えて定容したものを同定用試験溶液とした。さらにこの液をとり、アセトンで 10～1000 倍に適宜希釈したものを定量用試験溶液とした。

4) 電子レンジ加熱時の液体または液状の内容物の温度

①試料

電子レンジ可能なガラス、陶器、磁器、ストーンウェア (炆器)、合成樹脂、ゴム製のピーカー及びマグカップ 20 種類。

②試薬および装置

水：PURELAB flex 3 (ELGA LabWater 社製) で製造した超純水。

電子レンジ：業務用 (温度センサーを挿入できるように上部に 4 カ所穴あけ加工したもの)、NE-1802 (パナソニック株式会社製)

蛍光式光ファイバー温度計：AMOTH FL-2000 (安立計器株式会社製)

3. ポジティブリスト制度施行に伴う分析法の開発

1) GC-MS による分析

①測定溶液の調製

それぞれの標準品を 0.01、0.02、0.05、0.1、0.2、0.5 及び 1 µg/mL となるようにアセトンまたはヘキサンで希釈したものを測定溶液とした。

②測定条件

注入口温度：250°C以上

カラム：5%フェニル-メチルポリシロキサン (MS 用も可) (長さ 30 m 程度、内径 0.25 mm、膜厚 0.1～0.25 µm)

カラム温度：50°C以下-20°C/min-320°C (20 min)

キャリアーガス：He

キャリアーガス流量：1 mL/min 程度（定流量もしくは定圧）

インターフェース温度：280°C程度

注入量：1 µL（スプリットレスもしくはスプリット）

イオン化電圧：70 eV

検出モード：SCAN（範囲指定はしない）及びSIM（物質ごとに設定）

チューニング：オートチューンもしくはDFTPP (Decafluoro-triphenylphosphine) 法

③測定及びデータの収集

上記の測定条件（SCAN モード）でマススペクトルが得られた場合は、適切な定量イオンを選択し、SIM モードによる測定を行った。マススペクトルが得られなかった場合は、条件の最適化等の検討は行わないこととした。

化合物ごとに得られたマススペクトル、マスプロットマトグラム（SCAN 及び SIM）、検量線、測定限界、リテンションインデックス (RI) 等の情報を収集してまとめた。なお、測定限界は、測定溶液のうち、SIM モードにおいてピークが確認された最も濃度が低い溶液のピークの S/N と注入量から、S/N=10 となる量 (ng) を計算で求めた。

2) LC-MS/MS による分析

①測定溶液の調製

それぞれの標準品を 0.01、0.02、0.05、0.1、0.2、0.5 及び 1 µg/mL となるようにメタノールまたはアセトニトリルで希釈したものを測定溶液とした。

②測定条件

カラム：C18 または C8 系カラム

カラム温度：40°C

移動相：A 液 5 mM ギ酸アンモニウム、B 液 5 mM ギ酸アンモニウム/メタノール溶液

グラジエント条件：B 液 5%→直線グラジエ

ント→100%

注入量：2~10 µL

イオン化モード：ESI (+) または ESI (-)
イオン化電圧、温度、ガス流量等：一般的な条件

検出モード：SCAN 及び Multi Reaction Monitoring (MRM)

③測定及びデータの収集

原則としてポジティブモード (Pos) の SCAN モードで測定を行い、マススペクトルが得られた場合は、適切なプリカーサーイオンとプロダクトイオンを選択したのち、MRM モードで測定溶液を測定した。ただし多種の化合物を測定するため、それぞれの化合物に対するコリジョンエネルギー等の最適化は不要とし、Pos で測定できた場合はネガティブモード (Neg) での測定は不要とした。一方、Pos でマススペクトルが得られなかった場合は Neg で測定し、マススペクトルが得られた場合は Pos と同様に MRM モードで測定した。Neg でもスペクトルが得られなかった場合は、条件の最適化等を行わないこととした。

化合物ごとにマススペクトルもしくはマスプロットマトグラム (SCAN 及び MRM)、検量線、測定限界等の情報を収集してまとめた。なお、測定限界は、測定溶液のうち、MRM モードにおいてピークが確認された最も濃度が低い溶液の MRM 測定におけるピークの S/N と注入量から、S/N=10 となる量 (ng) を計算で求めた。

3) 紫外可視吸収スペクトルの測定

①測定溶液の調製

各試薬をメタノールまたはアセトニトリルで適宜希釈した溶液を測定溶液とした。

②測定条件

装置：UV-1800（株式会社島津製作所製）

光源：タングステンヨウ素ランプ

測定波長：200~700 nm

スリット幅：1 nm

吸収セル：石英セル、光路長 10 mm

C. 研究結果及び考察

1. 規格試験法の性能に関する研究

1) ポリ乳酸を主成分とする合成樹脂製の器具又は容器包装における溶出試験の総乳酸定量分析法の性能評価

26 試験所から報告された各試料の分析結果を用いて解析した結果、試料原液 1 (濃度：8 µg/mL) では、2 試験所の分析結果が外れ値に該当した。試料原液 2 (濃度：23 µg/mL) 及び試料原液 3 (濃度：30 µg/mL) では、それぞれ 1 試験所の分析結果が外れ値に該当した。試料原液 4 (濃度：42 µg/mL) 及び試料原液 5 (濃度：57 µg/mL) では、それぞれ 5 試験所の分析結果が外れ値に該当し、試料測定溶液の取り違い (2 施設) や検量線用測定溶液の誤調製 (1 施設) が原因と推察される外れ値が存在した。

分析法の性能パラメーターを求めた結果、最終推定された RSD_r は 0.48~2.26%、 RSD_R は 1.00~4.03%であった。最終推定された RSD_r 、 RSD_R の値は、初期推定の値と比較し最大で約 1/15 の値である場合も確認され、外れ値となった分析値は、試験所内及び試験所間のばらつきが大きかった。試料原液 1 から試料原液 5 の HorRat 値は、0.12~0.35 の範囲にあり、Codex 委員会の指標値 2 を下回っていたが、本分析法の工程は単純であることが要因と推察された。

以上の解析結果より、総乳酸定量分析法は、精確な分析法であると考えられた。

2) 器具・容器包装におけるジフェニルカーボネート、ビスフェノール A 及びアミン類の改良分析法の検討

①改良 DPC 分析法の検討

現行の標準溶液では DPC が調製後に分解するため検量線の直線性が悪く、分析値の真度が低いことが指摘されている。そこで、標

準原液及び標準溶液の調製溶媒、室温における標準溶液の分解抑制溶解再沈法における溶媒量、溶媒留去時のキーパー添加に関する検討を行い、DPC だけでなくビスフェノール A、フェノール及び *p-tert*-ブチルフェノールも同時に分析可能な分析法を構築した。

1 日 2 併行で 5 日間の試験により得られた分析値を解析した結果、DPC は併行精度 0.1~0.3%、室内精度 0.3~0.9%、真度 98~100%と推定され、改良分析法は規格を適否判定する分析法として有用であると考えられた。

②改良アミン類分析法の検討

現行の試験法では、トリエチルアミン (TEA) 及びトリブチルアミン (TBA) をガスクロマトグラフで分析する際、窒素リン検出器 (NPD) での感度が低く、定量性も悪いことが判明している。また、TEA と TBA は第 3 級アミンであるためガラス等への吸着が認められた。そこで、既報及び、環境省の報告書を参考に溶解再沈法における溶媒量、分析器具への吸着抑制、測定機器及び測定条件等を検討し、規格値の 1/5 濃度 (0.2 µg/g) でも定量可能な分析法を構築した。

1 日 2 併行で 5 日間の試験により得られた分析値を解析した結果、LC-MS 法の TEA は併行精度 0.7~3.4%、室内精度 1.2~4.8%、真度 93~98%、TBA は併行精度 0.8~2.4%、室内精度 1.2~4.4%、真度 79~97%と推定され、LC-MS/MS 法の TEA は併行精度 0.4~3.5%、室内精度 1.5~7.3%、真度 93~98%、TBA は併行精度 0.4~2.4%、室内精度 1.8~5.7%、真度 78~97%と推定され、改良分析法は規格を適否判定する分析法として有用であると考えられた。

3) メタクリル酸メチル試験法への HPLC の適用

HPLC の分析条件は、JIS T6501 (義歯床用アクリル系レジン中の MMA モノマーの分析) を参考に、カラムは ODS 系の 15 cm カラ

ム、移動相はアセトニトリルを用いたグラジエント条件、検出波長は 205 nm とした。さらに、MMA は 20%エタノール溶液中で不安定であることが判明したため、試験溶液を調製後速やかにエタノールで 10 倍以上希釈することとし、MMA 標準溶液は 20%エタノール溶液からエタノール溶液に変更した。

限度分析法としての性能を評価した結果、いずれも「食品中の有害物質等に関する分析法の妥当性確認ガイドラインについて」における限度分析の目標値 ($SI_{ratio} : 0.9-1.0$ 、 $S_{standard} : < 5$ 、 $S_{sample} : < 15$) を満たしていた。さらに、1 日 2 併行で 5 日間分析し、定量分析法としての性能を評価した結果、真度は 98.5 及び 100.5%、 RSD_r は 1.2 及び 0.6%、 RSD_R は 1.9 及び 1.0%であり、改良分析法は規格を適否判定する分析法として有用であると考えられた。

2. 市販製品に残存する化学物質に関する研究

1) 合成樹脂製器具・容器包装に含有される非意図的添加物質の探索 (2)

PP ペレット、添加剤及びそれらから作製した試験片に含有される化合物を解析した。なお、PP ペレットと無添加試験片の含有化合物を比較することで、主にペレットから試験片に加工する際に生成したポリマー由来の NIAS を調査した。また、無添加試験片と添加試験片の含有化合物を比較することで添加剤を練りこんで試験片に加工する際に生成する添加剤由来の NIAS を調査した。さらに、添加剤自体に不純物や分解物等の NIAS が含まれている可能性があることから、添加剤由来の NIAS についても測定を行った。

その結果、ペレットから無添加試験片を作製した際に増加・生成した化合物は非常に少なく、ポリマー由来である POH や、ペレットに元々含有されていた添加剤の変化は見られなかった。これより、新たに添加剤を加えずにペレットから試験片に加工する工程におい

ては、NIAS が大きく増加・生成することはないことが示された。一方、5 種類の汎用添加剤を練りこんだ試験片の作製工程における含有化合物の変化を確認した結果、種々の化合物が確認された。その由来として、練りこんだ添加剤に元々含まれていた不純物や添加剤の分解物のほか、由来が不明なものもあった。また、試験片の作製工程において混入が疑われたものもあった。

NIAS を把握するためには測定原理の異なる複数の機器を使用することが重要であることが示された。しかしながら、LC-QTOFMS では、NIAS 探索のためのライブラリーの整備が不十分であり、マススペクトルライブラリーの作成や、過去に検出された NIAS 情報についてのデータベース作成が必要であることが示された。

2) 乳幼児用おもちゃにおける過マンガン酸カリウム消費量と総有機炭素量の関係

$KMnO_4$ 消費量は、軟質 PVC 製品 118 検体全ての試料において 0.78~14.3 $\mu g/mL$ であった。一方、硬質 PVC 製品 8 検体及び PE 製品 81 検体ではいずれも定量下限未満であった。TOC 量は、軟質 PVC 製品 118 検体全ての試料において 0.50~17.5 $\mu g/mL$ であった。一方、硬質 PVC 製品 8 検体及び PE 製品 81 検体ではいずれも定量下限未満であった。

軟質 PVC 製品 118 検体から得られた $KMnO_4$ 消費量と TOC 量の相関を検証した結果、両者の回帰直線の相関係数 (r) は 0.639 となり、正の相関が確認された。また、 $KMnO_4$ 消費量と TOC 量の比 (TOC 量/ $KMnO_4$ 消費量) は 0.27~2.6 であった。続いて、厚さが 0.03mm 以下の浮き輪や空気注入玩具のみ (浮き輪等) の場合と、これらを除いたボール、人形、風呂用玩具等のみ (ボール等) の場合とに分け、それぞれの回帰直線から相関係数を求めたところ、いずれにおいても 0.920 となり、強い正の相関が確認された。

3) ポリ塩化ビニル製おもちゃの使用可塑剤調査 (第3報)

軟質PVC製の指定おもちゃ146検体における可塑剤の検出率及び含有量を調査した結果、国内で規制対象の6種のフタル酸エステル(PAEs)は本研究においても検出されなかったが、フタル酸ジイソブチルが検出(検出率4.2%、平均含有量22.2wt%、最大含有量35.4wt%)された。PAEs以外の可塑剤としてはテレフタル酸ジ(2-エチルヘキシル)(DEHTP)が主に使用されており、シクロヘキサン-1,2-ジカルボン酸ジイソノニル(DINCH)やアセチルクエン酸トリブチル(ATBC)も引き続き使用されていた。一方、ATBCがクエン酸トリブチル(TBC)へ切り替わっている可能性、アジピン酸エステル系の可塑剤の使用頻度の減少、及びPAEsの一種と推定される新たな可塑剤が使用されている可能性が明らかとなった。

軟質PVC製の指定外おもちゃ63検体における可塑剤の検出率及び含有量を調査した結果、PAEsはこれまでの調査と同じフタル酸ジブチル(DBP)、フタル酸ジイソノニル(DINP)、フタル酸ジイソブチル(DIBP)及びフタル酸ジ(2-エチルヘキシル)(DEHP)が検出された。PAEs以外の可塑剤としては指定外おもちゃにおいてもDEHTPが主に使用されており、ATBCからTBCへの切り替え、アジピン酸エステル系可塑剤の使用減、PAEsの一種と推定される新しい可塑剤の使用が確認された。

また、1検体あたりの使用量も2009年度調査に比べ低いレベルで推移していることが示唆された。一方、「ATBC-TBC」と記載されている一部の製品ではATBCが使用されていない場合があった。

4) 電子レンジ加熱時の液体または液状の内容物の温度

様々な容量、形状、材質の容器に水を入れ

て電子レンジで加熱し、液体または液状の食品を電子レンジ加熱する際の条件とその設定根拠を検証した。その結果、内容物の上部中央が最も温度が上がりやすかった。出力数と加熱時間は理論通り反比例の関係にあったことから調整が容易であった。また、材質の違いが加熱対象物の温度に与える影響も小さいと考えられた。

一方、加熱対象物の形状や量が変わるとマイクロ波を受ける面積が変わるため、加熱時間は対象物の表面積を考慮して設定する必要がある。また、酒類や油分を含む食品を加熱する場合は、加熱しすぎないように加熱時間を調節する必要がある。

3. ポジティブリスト制度施行に伴う分析法の開発

1) GC-MSによる分析

収集した228物質の標準品のうち、アセトンまたはヘキサンに溶解した201物質を測定対象とした。取得されたマススペクトルを比較したところ、検出されるイオンやその強度比は全メーカーでほとんど同じであり、およそ130物質について測定限界を決定した。さらに、140物質の化合物についてリテンションインデックス(RI)情報を得ることができ、得られたRIは800~4000の間に含まれていた。平均値と標準偏差から相対標準偏差を求めたところ、最大で1.3%でほとんどが1%未満であった。

2) LC-MS/MSによる分析

収集した228物質の標準品のうち、メタノールまたはアセトニトリルに溶解した204物質を測定対象とした。全てのメーカーでPosもしくはNegでマススペクトルが取得できたのは95物質あった。3メーカー以上で取得できたものを加えると154物質となり約75%に相当した。プリカーサーイオンは、ほとんどの場合が $[M+H]^+$ または $[M+NH_4]^+$ に相当する

イオンであった。また、これらのプリカーサーイオンから生成したプロダクトイオンの強度比は異なっていたが、大部分はメーカー間で共通していた。およそ 110 物質について測定限界を決定した。

3) 紫外可視吸収スペクトルの測定

収集した 228 物質の標準品のうち、メタノールまたはアセトニトリルに溶解した 213 物質の紫外可視吸収スペクトルを測定した。分子内に芳香族環を有する化合物は特徴的な吸収を示し、これらの紫外可視吸収スペクトルは LC-UV 測定の際の化合物同定のための参考情報となりえると考えられた。

D. 結論

規格試験法の性能に関する研究では、総乳酸試験法の性能評価、ジフェニルカーボネート (DPC)、アミン類、メタクリル酸メチル (MMA) 試験法の改良分析法に関する検討、市販製品に残存する化学物質に関する研究では、合成樹脂製器具・容器包装に含有される非意図的添加物質の探索、乳幼児用玩具における過マンガン酸カリウム (KMnO_4) 消費量と総有機炭素 (TOC) 量の関係性の検証、ポリ塩化ビニル (PVC) 製乳幼児用おもちゃに使用される可塑剤の実態調査、容器の材質、内容物等の違いによる電子レンジ加熱時の温度の確認、ポジティブリスト (PL) 制度施行に伴う分析法の開発では、リスト掲載物質を対象とした GC-MS 及び LC-MS/MS 用の分析情報の収集を実施した。

総乳酸試験法の性能評価では、26 試験所が参加する共同実験を実施し、室間再現相対標準偏差、HorRat 値を指標として評価した結果、Codex 委員会が分析法承認のために設定している性能規準の指標値を満たしており、規格の判定を行う分析法であることを確認した。DPC 試験法については、ビスフェノール A、フェノール及び *p*-tert-ブチルフェノール

も同時に分析可能な改良分析法を構築した。その性能を評価した結果、真度、精度ともに良好な結果が得られ、改良分析法は規格の適否判定を行うための分析法として利用可能で有用であると考えられた。アミン類試験法については選択性が高い質量分析計及びタンデム型質量分析計を利用した改良分析法を構築した。その性能を評価した結果、規格の適否判定を行うための分析法として利用可能で有用であると考えられた。ただし、十分な性能が得られない試験所もあったことから、引き続き器具類への吸着を低減させるための対処法を検討する必要があると考えられた。HPLC を用いた MMA 分析法については、試験溶液を調製後速やかにエタノールで 10 倍以上希釈することとし、MMA 標準溶液は 20%エタノール溶液からエタノール溶液に変更した。本法は限度分析法及び定量分析法のいずれにおいても規格試験として適用可能な性能を有していることが判明した。

合成樹脂製器具・容器包装に含有される非意図的添加物質の探索では、ペレットから無添加試験片を作製した際に増加・生成した化合物は非常に少なく、NIAS が大きく増加・生成することはないと考えられた。一方、5 種類の汎用添加剤を練りこんだ試験片の作製工程における含有化合物の変化を確認した結果、種々の化合物が確認された。NIAS 探索には LC-QTOFMS のライブラリーを充実させる必要がある。乳幼児用おもちゃについては、 KMnO_4 消費量及び TOC 量を測定し、これらの相関について検討した。その結果、 KMnO_4 消費量と TOC 量には正の相関がみられ、 KMnO_4 消費量と TOC 量の比 (TOC 量/ KMnO_4 消費量) は最大で約 3 倍であった。乳幼児用おもちゃを対象とした KMnO_4 消費量及び TOC 量に関する調査報告は少なく、本成果は規格基準改正の参考情報として活用が期待される。さらに、市販 PVC 製おも

ちやに使用される可塑剤を調査した結果、テレフタル酸ジ(2-エチルヘキシル)が主要な可塑剤として使用されており、その他の可塑剤は使用頻度が減少していた。一方、アセチルクエン酸トリブチルからクエン酸トリブチルへの切り替え、アジピン酸エステル系可塑剤の使用の減少及びフタル酸エステル的一种と推定された新しい可塑剤の使用も確認された。電子レンジ加熱時の液体または液状の内容物の温度を測定し、その温度推移を確認するとともに、電子レンジ加熱する際の適切な加熱時間を検証した。その結果、内容物の上部中央が最も温度が上がりやすく、出力数と加熱時間は理論通り反比例の関係にあった。また、材質の違いが加熱対象物の温度に与える影響も小さいと考えられた。一方、加熱対象物の形状や量を変える場合は、加熱時間は対象物の表面積を考慮し、酒類や油分を含む食品を加熱する場合は、加熱しすぎないように加熱時間を調節する必要があった。

PL 制度施行に伴う物質の同定や確認を目的として、リスト収載物質(候補物質も含む)約 220 物質を対象に、GC-MS 及び LC-MS/MS 分析を行うための情報を国内の主要分析機器メーカーの協力を得て収集し、公開データベースを作成した。これらの情報を活用することで、標準品が入手出来ない場合でも物質の同定が可能となること期待される。また、測定したい化合物がある場合、GC-MS と LC-MS/MS のどちらを使用したらより高感度に測定できるか、どれくらいの濃度まで測定できるかの参考になると考えられる。

E. 健康被害情報

なし

F. 研究発表

1. 論文発表

- 1) 尾崎麻子、六鹿元雄、岸 映里、阿部智之、阿部 裕、安藤景子、石原絹代、牛山温子、

内田晋作、大坂郁恵、大野浩之、風間貴充、加藤千佳、小林 尚、佐藤 環、柴田 博、関戸晴子、高島秀夫、田中 葵、外岡大幸、花澤耕太郎、山口未来、山田悟志、吉川光英、渡辺一成、佐藤恭子：合成樹脂製の器具・容器包装における溶出試験の精度の検証、食品衛生学雑誌、63、51-61 (2022)

- 2) 阿部 裕、阿部智之、大野浩之、大橋公泰、尾崎麻子、風間貴充、片岡洋平、鈴木公美、永井慎一郎、花澤耕太郎、早川雅人、平林直之、山口未来、渡辺一成、六鹿元雄、佐藤恭子：台所用洗浄剤中のメタノール改良分析法の室間共同実験、食品衛生学雑誌、63、97-103 (2022)

2. 講演、学会発表等

- 1) 山口未来、阿部 裕、大野浩之、片岡洋平、六鹿元雄、佐藤恭子：窒素キャリアーガスを用いたジブチルスズ化合物試験法の妥当性確認、日本食品化学学会第 27 回総会・学術大会 (2021.6)
- 2) 片岡洋平、阿部智之、阿部 裕、牛山温子、内山陽介、大野浩之、大橋公泰、風間貴充、木村亜莉沙、小林保志、佐藤 環、座間俊輔、高橋良幸、竹澤有紗、田中 葵、照井善光、永井慎一郎、野村千枝、花澤耕太郎、早川雅人、藤吉智治、平林尚之、堀田沙希、宮川弘之、六鹿元雄、村山悠子、四柳道代、渡辺一成、佐藤恭子：器具・容器包装の溶出試験における改良ビスフェノール A 分析法の室間共同実験、日本食品衛生学会第 117 回学術講演会 (2021.10)
- 3) 阿部 裕、阿部智之、大野浩之、大橋公泰、尾崎麻子、風間貴充、片岡洋平、鈴木公美、永井慎一郎、花澤耕太郎、早川雅人、平林尚之、山口未来、渡辺一成、六鹿元雄、佐藤恭子：台所用洗浄剤における改良メタノール分析法の検討および室間共同実験、日本食品衛生学会第 117 回学術講演会 (2021.10)

- 4) 片岡洋平、四柳道代、近藤 翠、阿部 裕、六鹿元雄、佐藤恭子：ポリカーボネート製器具・容器包装のジフェニルカーボネート及びビスフェノール A 分析法の検討、第 58 回全国衛生化学技術協議会年会 (2021.11)
- 5) 山口未来、阿部 裕、片岡洋平、六鹿元雄、佐藤恭子：電子レンジ調理時の食品の温度変化、第 58 回全国衛生化学技術協議会年会 (2021.11)

G. 知的財産権の出願・登録状況

なし

規格試験法の性能に関する研究

研究分担者 片岡 洋平 国立医薬品食品衛生研究所 食品添加物部 主任研究官

研究要旨

食品用器具・容器包装、おもちゃ及び洗浄剤（以下、「器具・容器包装等」）の安全性は、食品衛生法の規格基準により担保されているが、近年、食品の安全性及びその信頼性の確保に関する関心の高まりとともに、その試験法及び試験結果に対する信頼性の確保も重要な課題となっている。そこで、器具・容器包装における溶出試験に係わる総乳酸定量分析法の性能評価、並びに材質試験に係わるジフェニルカーボネート試験法及びアミン類試験法の改良に関する研究、並びにメタクリル酸メチル試験法への HPLC の適用に関する研究を実施した。

総乳酸定量分析法の性能評価については、26 試験所が参加する室間共同実験を実施した。室間共同実験により得られた分析結果を、国際的なハーモナイズドガイドラインに沿って統計的に解析した。その結果として推定された RSD_R と Horwitz/Thompson 式を用いて計算される $PRSD_R$ から算出される HorRat 値を指標として評価した結果、総乳酸定量分析法は Codex 委員会が分析法承認のために設定している性能規準の指標値を満たしており、分析法として妥当な水準にあることが確認された。

ジフェニルカーボネート試験法については、標準溶液中のジフェニルカーボネートが調製後に分解するため、検量線の直線性が悪く、分析値の真度が低いことが指摘されている。この問題点を解消したうえでビスフェノール A(フェノール及び *p*-tert-ブチルフェノールを含む)も同時に分析可能な改良ジフェニルカーボネート分析法を構築した。その性能を評価した結果、真度、精度ともに妥当な水準にある結果が得られ、改良分析法は規格の適否判定を行うための分析法として利用可能で有用であると考えられた。

アミン類試験法については、トリエチルアミンの揮散並びにトリエチルアミン及びトリブチルアミンの器具類への吸着により、分析値の真度が低いことが指摘されている。この問題点を解消したうえで、さらに高い選択性が得られる質量分析計(MS)やタンデム型質量分析計(MS/MS)を利用した改良アミン類分析法を構築した。その性能を評価した結果、規格の適否判定を行うための分析法として利用可能で有用であると考えられた。ただし、十分な性能が得られない試験所もあったことから、引き続き器具類への吸着を低減させるための対処法を検討する必要があると考えられた。

メタクリル酸メチル試験法への HPLC の適用に関する研究については、はじめに HPLC 条件の最適化を行った。続いて本条件でメタクリル酸メチル (MMA) を測定し

たところ、MMA のピーク面積値が徐々に小さくなる現象が確認された。これは、浸出用液である 20%エタノール中で MMA が加水分解したためと推定された。そこで試験溶液をエタノールで 10 倍以上希釈したところ MMA を安定的に測定できることを示した。また標準原液および標準溶液もエタノールで調製することとした。本改良 MMA 分析法について限度分析法および定量分析法としての性能を評価したところ、いずれの分析法においても国内外のガイドラインで示された目標値を満たしていたことから、規格の適否判定を行う分析法として利用可能であると考えられた。

以上の結果より、総乳酸定量分析法、改良ジフェニルカーボネート分析法及び改良アミン類分析法、並びに改良 MMA 分析法のいずれもが規格試験法として適用可能な性能を有していると考えられ、告示試験法の代替分析法としての使用が期待された。

研究協力者

六鹿元雄：国立医薬品食品衛生研究所
阿部 裕：国立医薬品食品衛生研究所
四柳道代：国立医薬品食品衛生研究所
近藤 翠：国立医薬品食品衛生研究所

浅川大地：大阪市立環境科学研究センター
阿部智之：(公社) 日本食品衛生協会
池本玲子：(一財) 日本食品分析センター
石黒 聡：(一財) 日本食品分析センター
糸川尚子：(一財) 日本食品分析センター
今井浩一：埼玉県衛生研究所
岩越景子：東京都健康安全研究センター
宇木千晶：(一財) 日本食品検査
牛山温子：川崎市健康安全研究所
内山陽介：神奈川県衛生研究所
海野明弘：愛知県衛生研究所
大野浩之：名古屋市衛生研究所
大橋公泰：(一財) 日本文化用品安全試験所
大畑昌輝：国立研究開発法人 産業技術
総合研究所
大脇進治：(一財) 食品分析開発センター
SUNATEC
尾崎麻子：(地独) 大阪健康安全基盤研究所
風間貴充：(一財) 日本食品分析センター
加藤由紀子：埼玉県衛生研究所
河村葉子：国立医薬品食品衛生研究所
岸 映里：(地独) 大阪健康安全基盤研究所

木村亜莉沙：静岡市環境保健研究所
桑原千雅子：神奈川県衛生研究所
御所窪誠：(一財) 日本食品分析センター
小林千恵：静岡県環境衛生科学研究所
近藤貴英：さいたま市健康科学研究
センター
佐藤恭子：国立医薬品食品衛生研究所
佐藤 環：福岡県保健環境研究所
座間俊輔：(一財) 日本食品分析センター
鈴木昌子：名古屋市衛生研究所
高坂典子：(一財) 食品薬品安全センター
高島秀夫：(一財) 化学研究評価機構
高橋良幸：(一財) 千葉県薬剤師会
検査センター
竹澤有紗：長野県環境保全研究所
田中 葵：(一社) 日本海事検定協会
田中秀幸：国立研究開発法人 産業技術
総合研究所
田中佑典：川崎市健康安全研究所
棚橋高志：愛知県衛生研究所
谷 拓哉：(一財) 日本穀物検定協会
照井善光：(一財) 日本食品検査
外岡大幸：さいたま市健康科学研究
センター
永井慎一郎：(一財) 東京顕微鏡院
長嶺 樹：(一財) 東京顕微鏡院
野村千枝：大阪健康安全基盤研究所
八田淳司：(一財) 日本食品検査

羽石奈穂子：東京都健康安全研究センター
早川雅人：(一財) 化学研究評価機構
平林尚之：(一財) 食品薬品安全センター
本田幸康：愛知県衛生研究所
水口智晴：(地独) 大阪健康安全基盤研究所
宮川弘之：東京都健康安全研究センター
村山悠子：さいたま市健康科学研究センター
藪谷充孝：名古屋市衛生研究所
山口未来：国立医薬品食品衛生研究所
山田恭平：さいたま市健康科学研究センター
横峯真吾：(一財) 食品環境検査協会
吉川光英：東京都健康安全研究センター
渡辺一成：(一財) 化学研究評価機構
和田侑里華：(一財) 食品環境検査協会

研究発表

1. 論文発表

- 1) 尾崎麻子、六鹿元雄、岸 映里、阿部智之、阿部 裕、安藤景子、石原絹代、牛山温子、内田晋作、大坂郁恵、大野浩之、風間貴充、加藤千佳、小林 尚、佐藤 環、柴田 博、関戸晴子、高島秀夫、田中 葵、外岡大幸、花澤耕太郎、山口未来、山田悟志、吉川光英、渡辺一成、佐藤恭子：合成樹脂製の器具・容器包装における溶出試験の精度の検証、食品衛生学雑誌、63、51-61 (2022)
- 2) 阿部 裕、阿部智之、大野浩之、大橋公泰、尾崎麻子、風間貴充、片岡洋平、鈴木公美、永井慎一郎、花澤耕太郎、早川雅人、平林

直之、山口未来、渡辺一成、六鹿元雄、佐藤恭子：台所用洗浄剤中のメタノール改良分析法の室間共同実験、食品衛生学雑誌、63、97-103 (2022)

2. 講演、学会発表等

- 1) 山口未来、阿部 裕、大野浩之、片岡洋平、六鹿元雄、佐藤恭子：窒素キャリアガスを用いたジブチルスズ化合物試験法の妥当性確認、日本食品化学学会第 27 回総会・学術大会 (2021.6)
- 2) 片岡洋平ら、器具・容器包装の溶出試験における改良ビスフェノール A 分析法の室間共同実験、第 117 回日本食品衛生学会学術講演会 (2021.10)
- 3) 阿部 裕ら：台所用洗浄剤における改良メタノール分析法の検討および室間共同実験、日本食品衛生学会第 117 回学術講演会 (2021.10)
- 4) 片岡 洋平、四柳 道代、近藤 翠、阿部 裕、六鹿 元雄、佐藤 恭子、ポリカーボネート製器具・容器包装のジフェニルカーボネート及びビスフェノール A 分析法の検討、第 58 回全国衛生化学技術協議会年会 (2021.11)

健康危害情報

なし

知的財産権の出願・登録状況

なし

＜その1＞ ポリ乳酸を主成分とする合成樹脂製の器具又は容器包装 における溶出試験の総乳酸定量分析法の性能評価

研究協力者 海野 明広
研究分担者 片岡 洋平
研究協力者 阿部 裕
研究代表者 六鹿 元雄

愛知県衛生研究所
国立医薬品食品衛生研究所
国立医薬品食品衛生研究所
国立医薬品食品衛生研究所

A. 研究目的

食品衛生法における食品・添加物等の規格基準では、ポリ乳酸(PLA)を主成分とする合成樹脂製の器具又は容器包装について、個別規格が設定されている。そのうち総乳酸については、溶出量として 30 $\mu\text{g/mL}$ の規格値とともに、溶出試験を行うための試験法(以下、告示試験法)が定められている。

告示試験法において、総乳酸試験法は標準溶液と試験溶液を測定機器により分析し、測定機器により得られる信号強度等を比較して規格値への適否を判定するいわゆる限度試験法である。PLA から溶出したラクチド又はオリゴマーをアルカリで乳酸に加水分解した後、モノマーとして測定される。この時、試験溶液中の乳酸のピーク面積は、乳酸標準溶液(30 $\mu\text{g/mL}$)のピーク面積より大きくてはならないとされている。しかし、この告示試験法については、これまで多試験所が参加した共同実験による性能評価がされておらず、分析法の妥当性が確認されていない。また、告示試験法に規定される注入量 100 μL では、負荷量が原因と推定されるピーク割れ等がしばしば発生するなど定性及び定量性に課題があった。

近年、分析機器の高性能化に伴い、少量の注入量で規格値レベルの乳酸を検出できるようになった。そこで、従来の 100 μL から 20 μL に変更し、さらに、限度試

験法から定量分析法への改良を検討し、総乳酸定量分析法を構築した(＜別添＞ポリ乳酸を主成分とする合成樹脂製の器具又は容器包装を対象とした溶出試験の総乳酸定量分析法共同実験プロトコル(以下、手順書))。本研究では、構築した総乳酸定量分析法について、26 試験所で室間共同実験を実施し、その性能を評価した。

B. 研究方法

1. 配付試料

1) 試料

PLA カップ(SW95 16 オンス)

2) 試薬等

水:オルガノ株式会社製超純水装置ピューリック ω で精製した水及び蒸留水:高速液体クロマトグラフィー用、富士フイルム和光純薬株式会社製

水酸化ナトリウム:特級、シグマアルドリッチジャパン社製

リン酸:高速液体クロマトグラフィー用、関東化学株式会社製

アセトニトリル:LC/MS 用、Waters 製
L-乳酸リチウム標準品:生化学用、富士フイルム和光純薬株式会社製

1600 $\mu\text{g/mL}$ 乳酸標準原液:L-乳酸リチウム標準品 171.2 mg を量りとり、水で 100 mL に定容した。

4600 $\mu\text{g/mL}$ 乳酸標準原液:L-乳酸リチウ

ム標準品 492.2 mg を量りとり、水で 100 mL に定容した。

6000 µg/mL 乳酸標準原液:L-乳酸リチウム標準品 642.0 mg を量りとり、水で 100 mL に定容した。

8400 µg/mL 乳酸標準原液:L-乳酸リチウム標準品 898.8 mg を量りとり、水で 100 mL に定容した。

11400 µg/mL 乳酸標準原液 : L-乳酸リチウム標準品 1219.8 mg を量りとり、水で 100 mL に定容した。

1000 µg/mL 乳酸標準溶液(検量線用標準溶液) : L-乳酸リチウム標準品 1070.0 mg を量りとり水で 1000 mL に定容した。

0.2 mol/L 水酸化ナトリウム試液 : NaOH8.0 g を水に溶かして 1000 mL に定容した。

0.2 mol/L リン酸 : リン酸 14 mL に水を加えて 1000 mL に定容した。

3) 浸出液の調製

PLA カップを 10 cm×25 cm に切断し、予め 60°C に加温した水 1000 mL に浸漬し、60°C に設定した低温恒温振とう水槽内に 30 分間静置した。この操作を 14 回繰り返し行い、得られた溶液を 20 L ポリプロピレン製容器に移し、よく混合した後の溶液を浸出液とした。

4) 配付試料の調製

試料原液 1:1600 µg/mL 乳酸標準原液 10 mL を正確に量りとり、浸出液を加えて 2000 mL に定容した(濃度 : 8 µg/mL)。

試料原液 2:4600 µg/mL 乳酸標準原液 10 mL を正確に量りとり、浸出液を加えて 2000 mL に定容した(濃度 : 23 µg/mL)。

試料原液 3:6000 µg/mL 乳酸標準原液 10 mL を正確に量りとり、浸出液を加えて 2000 mL に定容した(濃度 : 30 µg/mL)。

試料原液 4:8400 µg/mL 乳酸標準原液 10

mL を正確に量りとり、浸出液を加えて 2000 mL に定容した(濃度 : 42 µg/mL)。

試料原液 5 : 11400 µg/mL 乳酸標準原液 10 mL を正確に量りとり、浸出液を加えて 2000 mL に定容した(濃度 : 57 µg/mL)。

ブランク試料 1 及びブランク試料 2 : 浸出液。

試料 2 及び試料 8 : 試料原液 1

試料 3 及び試料 10 : 試料原液 2

試料 1 及び試料 5 : 試料原液 3

試料 4 及び試料 6 : 試料原液 4

試料 7 及び試料 9 : 試料原液 5

5) 配付

ブランク試料 1~2、試料 1~10 を 1 組として、それぞれ容量 15mL のねじ口ガラス瓶に分注し、濃度非明示で令和 3 年 9 月 14 日にクール便で室間共同実験の参加試験所に配付した。

6) 均質性及び安定性の確認

均質性の確認は試料配付後 1 週間以内(0 日目)に、安定性の確認は試料配付後約 3 か月後(90 日目)にそれぞれ国立医薬品食品衛生研究所にて実施した。

方法は原則として手順書(別添)に準じて実施した。ただし、試料測定溶液の調製は、ブランク試料 1~2、試料 1~10 を 1 組としたものを、ランダムに 10 組を選択し、各組の試料 2 及び試料 8、試料 3 及び試料 10、試料 1 及び試料 5、試料 4 及び試料 6、並びに試料 7 及び試料 9 を併行分析した。

試料測定溶液をランダムに分析して得られた分析値を用いて以下の方法により試料の均質性及び安定性を確認した。

試料の均質性は、IUPAC の技能試験のハーモナイズドプロトコールの 2006 年版¹⁾ Appendix により示されている統計的手法を用いて分析結果を解析して評価し

た。すなわち、0 日目に分析した各試料の分析値とその値を下記の判定式(式 1)に代入し、判定式が成立する場合は均質性に問題はないと判断した。なお、併行分析した測定溶液の点数に応じて、自由度 9 の χ^2 値(1.88)と F 値(1.01)を代入した。 σ_R は各試料の濃度に対応する Horwitz/Tompson 式($\sigma_R=0.02C^{0.8495}$ 、C: 試料濃度)から算出し代入した。

$$(式 1) \quad S_{sam}^2 \leq \chi^2 \times (0.3\sigma_R) + F \times S_{an}^2$$

S_{sam} : 試料間標準偏差

χ^2 : χ^2 値

σ_R : 室間再現標準偏差の予測値

F: F 値

S_{an} : 試料内標準偏差

試料の安定性は ISO 13528:2015²⁾ Annex B により示されている統計的手法を参考に分析結果を解析して評価した。すなわち、90 日目に分析した各試料の分析値と 0 日目と 90 日目に分析した分析値の平均値の最大値と最小値を下記の判定式(式 2)に代入し、判定式が成立する場合は安定性に問題はないと判断した。

$$(式 2) \quad X_{max} - X_{min} \leq 0.3\sigma_R$$

X_{max} : 検証期間中に取得した分析結果の平均値の最大値

X_{min} : 検証期間中に取得した分析結果の平均値の最小値

σ_R : 室間再現標準偏差の予測値

2. 参加試験所

室間共同実験の計画及びプロトコール作成には民間の登録検査機関 14 試験所と公的な衛生研究所など 16 試験所の計 30 試験所が参加し、このうち室間共同実験の実施には 26 試験所が参加した。なお、

同一企業であっても地域が異なる試験所で実施した場合は別試験所として扱った。

3. 室間共同実験の実施と結果の解析

1) 室間共同実験の実施

室間共同実験は手順書(別添 1)にしたがい実施した。手順書には、分析方法の他、分析の全般、配付試料の保管、分析計画、分析実施期間、分析結果の報告に関する注意事項を示した。また、ガラス器具は洗浄後の使用を徹底するなど、妨害ピークの発生を未然に防ぐための注意事項を会議にて周知した。室間共同実験の分析の実施期間は、試料到着後の 2021 年 9 月 15 日～2021 年 12 月 15 日の約 3 ヶ月間とした。分析方法及び分析結果の報告について以下に示した。

①分析方法

・ 試料測定溶液の調製

試料 10 mL を試験管にとり、0.2 mol/L 水酸化ナトリウム試液 1 mL ずつ加えて密栓し、60°C に保ちながら時々振り混ぜて 15 分間放置した。冷後、0.2 mol/L リン酸 1 mL ずつ加えた溶液を試料測定溶液とした。また、ブランク試料についても、同様の分析操作を実施した。

・ 検量線用測定溶液の調製

1000 $\mu\text{g/mL}$ 乳酸標準溶液(検量線用標準溶液)を各 0.5 mL、1 mL、2 mL、3 mL、4 mL、5 mL、6 mL、7 mL 量りとり、水で 100 mL に定容した(濃度は 5 $\mu\text{g/mL}$ 、10 $\mu\text{g/mL}$ 、20 $\mu\text{g/mL}$ 、30 $\mu\text{g/mL}$ 、40 $\mu\text{g/mL}$ 、50 $\mu\text{g/mL}$ 、60 $\mu\text{g/mL}$ 、70 $\mu\text{g/mL}$)。また、0 $\mu\text{g/mL}$ 溶液として水を用いた。これら各濃度の溶液をそれぞれ 10 mL ずつ採り、0.2 mol/L 水酸化ナトリウム試液 1 mL ずつ加えて密栓し、60°C に保ちながら時々振り混ぜて 15 分間放置した。冷後、0.2 mol/L リン酸 1 mL ずつ加えた溶液を検量線用測

定溶液とした。

- 分析操作

試料測定溶液及び検量線用測定溶液 20 µL を HPLC に注入した。

- 測定条件

カラム：オクタデシルシリル化シリカゲルカラム(内径 4.6 mm、長さ 250 mm、粒子径 5 µm) を用いた。

カラム温度：40°C

移動相：リン酸、アセトニトリル及び水混液(0.1 : 1 : 99)

流速：1 mL/min

測定波長：210 nm

- 定量

検量線用測定溶液の乳酸のピーク面積又はピーク高さから濃度との 1 次回帰式を求め、乳酸の検量線を作成した。作成した各検量線に試料測定溶液の乳酸のピーク面積又はピーク高さを内挿し、分析値(定量値)を算出した。

②分析結果の報告

Microsoft Excel を使って作成した結果報告シートを配付し、分析結果の他、分析環境の情報、また分析に関して気づいた点などの情報を提供するように参加試験所に依頼した。

2) 結果の解析

参加試験所から報告された室間共同実験結果は Codex 分析・サンプリング部会の関連文書である CXG64-1995³⁾に示されたプロトコールにしたがい、Microsoft Excel 2016 を使用して解析した。ただし、試料 1 及び 5 の結果は試料原液 3 の 2 併行分析の結果、試料 2 及び 8 の結果は試料原液 1 の 2 併行分析の結果、試料 3 及び 10 の結果は試料原液 2 の 2 併行分析の結果、試料 4 及び 6 の結果は試料原液 4 の 2 併行分析の結果、試料 7 及び 9 の結

果は試料原液 5 の 2 併行分析の結果と見なした。解析で併行相対標準偏差 (RSD_r %)、室間再現相対標準偏差 (RSD_R %)及び RSD_R と Horwitz/Thompson 式で予測される室間再現相対標準偏差 (PRSD_R %)の比である HorRat 値を算出した。なお、PRSD_R は各試料の濃度に対応する Horwitz/Thompson 式である PRSD_R % = 2C^{-0.1505}(C : 試料濃度)から算出した。また、HorRat 値による分析法の性能評価における性能規準の指標として Codex 委員会の手順書⁴⁾を参照した。なおこの手順書では、分析法の性能規準として、HorRat 値 2 以下を設定している。

C. 研究結果及び考察

1. 試料の均質性及び安定性

試料の均質性については、0 日目に分析した各試料の分析値を判定式に代入した。その結果、いずれの試料についても B.1.6) で示した判定式(式 1)が成立したことから、試料が均質であると確認された(表 1)。

試料の安定性については、90 日目の各試料の分析値と 0 日目と 90 日目の分析値の平均値の最大値と最小値を上記の判定式に代入した。その結果、いずれの試料についても B.1.6) で示した判定式(式 2)が成立したことから、各試料の 90 日目までの安定性が確認された(表 1)。したがって、手順書に記載の分析実施期間における試料の安定性に問題はないと判断した。

2. 共同実験で取得された分析結果の解析

1) 室間共同実験の概要

共同実験の分析は令和 3 年 9 月 16 日から 12 月 2 日までに実施され、手順書の実施期間内に完了した。

全 26 試験所が使用した装置及び測定条件の概要を表 2 に示した。

表 1 0 日目及び 90 日目の試料原液の分析結果と均質性及び安定性の解析結果

	試料原液 1				試料原液 2				試料原液 3			
	0日目濃度(µg/mL)		90日目濃度(µg/mL)		0日目濃度(µg/mL)		90日目濃度(µg/mL)		0日目濃度(µg/mL)		90日目濃度(µg/mL)	
	併行分析1	併行分析2	併行分析1	併行分析2	併行分析1	併行分析2	併行分析1	併行分析2	併行分析1	併行分析2	併行分析1	併行分析2
1	8.01	8.00	8.00	8.01	23.0	23.0	23.0	23.0	30.3	30.3	30.2	30.1
2	8.01	8.02	8.01	8.01	23.0	23.0	23.0	23.0	30.2	30.2	30.2	30.2
3	8.00	8.00	8.01	8.01	23.0	23.0	23.0	23.0	30.2	30.2	30.2	30.2
4	8.01	8.00	8.02	8.01	23.0	23.0	23.0	23.0	30.3	30.3	30.2	30.2
5	8.01	8.01	8.01	8.01	23.0	23.0	23.0	23.0	30.3	30.2	30.2	30.2
6	8.01	8.01	8.01	8.01	23.0	23.0	23.0	23.0	30.3	30.3	30.2	30.2
7	8.02	8.02	8.01	8.02	23.0	23.0	23.0	23.0	30.3	30.3	30.2	30.1
8	8.01	8.01	8.02	8.02	23.0	23.0	23.0	23.0	30.3	30.3	30.2	30.2
9	8.02	8.01	8.00	8.01	23.0	23.0	23.0	23.0	30.3	30.3	30.1	30.2
10	8.01	8.01	8.01	8.01	23.0	23.0	23.0	23.0	30.3	30.2	30.2	30.1
s_{sam}^2	0.0000237				0.0000475				0.000251			
$\chi^2 \times (0.3\sigma_R) + F \times s_{an}^2$	0.149				0.892				1.42			
$X_{max} - X_{min}$	0.0193				0.0328				0.187			
$0.3\sigma_R$	0.281				0.689				0.868			

	試料原液 4				試料原液 5			
	0日目濃度(µg/mL)		90日目濃度(µg/mL)		0日目濃度(µg/mL)		90日目濃度(µg/mL)	
	併行分析1	併行分析2	併行分析1	併行分析2	併行分析1	併行分析2	併行分析1	併行分析2
1	42.0	42.0	42.1	42.0	57.2	57.1	57.1	57.1
2	42.0	42.0	42.0	42.1	57.2	57.1	57.1	57.1
3	42.1	42.1	42.0	42.0	57.2	57.1	57.1	57.2
4	42.0	42.0	42.0	42.0	57.2	57.2	57.1	57.1
5	42.0	42.0	42.0	42.1	57.1	57.1	57.2	57.3
6	42.0	42.0	42.1	42.0	57.1	57.1	57.2	57.2
7	42.1	42.1	42.0	42.0	57.1	57.1	57.2	57.1
8	42.1	42.1	42.0	42.0	57.2	57.2	57.1	57.1
9	42.0	42.0	42.0	42.0	57.1	57.1	57.0	57.1
10	42.1	42.0	42.1	42.1	57.1	57.2	57.2	57.1
s_{sam}^2	0.00117				0.000388			
$\chi^2 \times (0.3\sigma_R) + F \times s_{an}^2$	2.48				4.19			
$X_{max} - X_{min}$	0.115				0.138			
$0.3\sigma_R$	1.15				1.49			

表 2 各試験所の分析条件の概要

試験所コード	メーカー	HPLC-UV-Vis/PDA	カラムの種類		乳酸の保持時間(min)
1	島津製作所	LC-20AD SPD-20A	Tosoh	TSKgel ODS-80Ts	4.1
2	島津製作所	prominence	GL Science	Inertsil-ODS3V	5.3
3	HITACHI	L-2000シリーズ L-2450	GL Science	Inertsil ODS-3	5.1
4	Waters	Arc HPLC	関東化学	Mightysil RP-18GP	4.5
5	島津製作所	Prominence-i	Tosoh	TSKgel ODS-80Ts	5.2
6	島津製作所	LC-20A SPD-M20A	Tosoh	TSKgel ODS-80Ts	4.7
7	Waters	Alliance e2695 2998PDA	Tosoh	TSKgel ODS-80Ts	5.2
8	島津製作所	Prominence LC-20AT SPD-M20A	化学物質評価研究機構	L-column2 ODS	4.5
9	Waters	alliance e2695 2998PDA	Tosoh	TSKgel ODS-80Ts	4.4
10	島津製作所	LC-20AD SPD-M20A	Tosoh	TSKgel ODS-80Ts	5.1
11	Agilent Technologies	1260 Infinity 1200 Series	Tosoh	TSKgel ODS-80Ts	4.8
12	島津製作所	LC-20AT SPD-20A	Tosoh	TSKgel ODS-80Ts	4.4
13	島津製作所	Nexera XR SPD-40	化学物質評価研究機構	L-column3 CERI C18	4.3
14	島津製作所	LC-20AD SPD-M20A	GL Science	Inertsil ODS- II	4.5
15	島津製作所	Prominence SPD-M20A	島津製作所	Shim-pack VP-ODS	4.9
16	島津製作所	LC-20AD SPD-20AV	関東化学	Mightysil RP-18 GP	4.7
17	島津製作所	Prominence SPD-M20A	GL Science	Inertsil ODS-3	5.1
18	Agilent Technologies	1260 LC 1260 DAD	ナカライテスク	COSMOSIL 5C18-MS- II	4.4
19	島津製作所	Nexera SPD-20AV	Tosoh	TSKgel ODS-80Ts	4.7
20	Agilent Technologies	1260 シリーズ	Tosoh	TSKgel ODS-80Ts	4.9
21	島津製作所	LC-20ADXR SPD-M20A	GL Science	Inertsil ODS-4	5.0
22	Waters	Alliance e2695 Separation Module	GL Science	Inertsil ODS-2	4.4
23	Agilent Technologies	Agilent 1290 システム	Tosoh	TSKgel ODS-80Ts	4.8
24	Waters	ACQUITY UPLC H-Class ACQUITY UPLC PDA eA	Tosoh	TSKgel ODS-80Ts	5.0
25	Agilent Technologies	1200 Series	Tosoh	TSKgel ODS-80Ts	4.9
26	島津製作所	LC-2030C 3D Plus	島津GLC	Kinetex C18	5.2

2) ピーク形状の解析

検量線用測定溶液(30 µg/mL)のクロマトグラムを図1に示した。告示試験法に規定される注入量 100 µL では、26 試験所中 2 試験所で 2 峰性のピークが確認されたが、20 µL 注入では、このようなピークは確認されなかった。これらの結果より、注入量を 20 µL に変更することでピーク形状への影響を改善できることが確認できた。

なお、2 峰性のピークが観察された試験所において使用された試薬、カラム及び測定機器に傾向があるか確認するため、各試験所で使用された試薬等の種類(製造元、等級)を比較したが傾向はわからなかった。

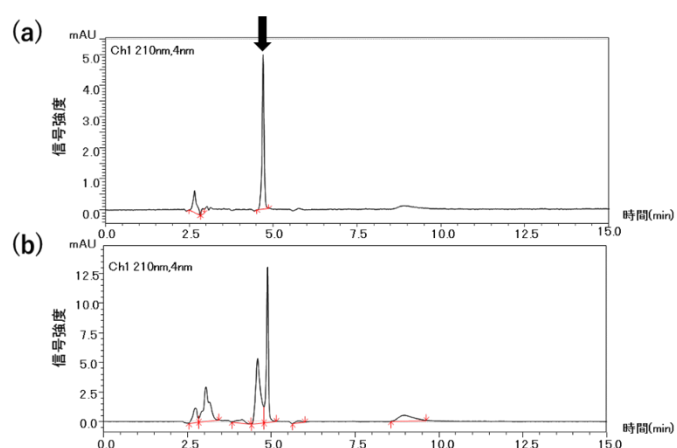


図1 検量線用測定溶液(30 µg/mL)のクロマトグラム

(a)20 µL 注入、(b)100 µL 注入
矢印は乳酸のピークを示す(約 4.7min)

3) 外れ値の検定

全 26 試験所から報告された各試料の分析結果を用いて解析した。全分析結果を表 3 に示した。

CXG64-1995 で示された Cochran 検定と Grubbs 検定を実施した。その結果、試料原液 1(濃度：8 µg/mL)では、2 試験所の分析結果が外れ値に該当した。試料原液 2(濃度：23 µg/mL)及び試料原液 3(濃度：30 µg/mL)では、それぞれ 1 試験所の分析結果が外れ値に該当した。試料原液 4(濃度：42 µg/mL)及び試料原液 5(濃度：57 µg/mL)では、それぞれ 5 試験所の分析結果が外れ値に該当した。

検量線用測定溶液の調製方法やガラス器具の取り扱い注意事項を記載するなど詳細な手順書を策定することで室間共同実験の可能な限りの管理を行ったが、得られた分析結果には、試料測定溶液の取り違い(2 施設)や検量線用測定溶液の誤調製(1 施設)が原因と推察される外れ値が観察された。

4) 分析結果の解析

外れ値除外前の全分析値と外れ値除外後の分析値をそれぞれ一元配置の分散分析し、それぞれを初期推定結果及び最終推定結果として分析法の性能パラメータを求めた。これらの結果を表 4 及び表 5 に示した。初期推定の RSD_f は 0.70～12.2%、 RSD_R は 3.35～12.5%であった。最終推定された RSD_f は 0.48～2.26%、 RSD_R は 1.00～4.03%であった。最終推定された RSD_f 、 RSD_R の値は、初期推定の値と比較し最大で約 1/15 の値である場合も確認され、外れ値となった分析値は、試験所内及び試験所間のばらつきが大きかった。

RSD_R は、室間共同実験を行うことでし

か推定することのできない重要な性能パラメータである。そこで推定されたこれらの値に基づいて総乳酸定量分析法の性能を評価するために、Horwitz/Thompson 式を用いて計算される $PRSD_R$ から算出される HorRat 値を指標にした。

試料原液 1 から試料原液 5 の HorRat 値は、0.12～0.35 の範囲にあり、Codex 委員会の指標値 2 を下回っていた。ただし、HorRat 値が 0.5 を下回る場合には、分析法の性能が過度に小さく推定されていないか考察する必要がある⁵⁾。複雑な精製や高度な測定機器が必要となる他の理化学分析法に比べて、本分析法の工程は単純であることが、HorRat の値が 0.5 を下回った要因であると推察された。

以上の解析結果より、総乳酸定量分析法は、精確な分析法であると考えられた。

D. 結論

PLA を主成分とする合成樹脂製の器具又は容器包装における溶出試験の総乳酸定量分析法について、26 試験所が参加する共同実験を実施し、共同実験により得られた分析結果を、国際的なハーモナイズドガイドラインに沿って統計的に解析した。

その結果として推定された RSD_R と Horwitz/Thompson 式を用いて計算される $PRSD_R$ から算出される HorRat 値を指標として評価した結果、総乳酸定量分析法は、Codex 委員会が分析法承認のために設定している性能規準の指標値を満たしており、分析法として妥当な水準にあることが確認された。したがって、本分析法は規格の判定を行う分析法として期待できる分析法であると判断した。

表 3 各試験所の分析結果

試験所コード	試料原液 1		試料原液 2		試料原液 3		試料原液 4		試料原液 5	
	併行分析1 試料2	併行分析2 試料8	併行分析1 試料3	併行分析2 試料10	併行分析1 試料1	併行分析2 試料5	併行分析1 試料4	併行分析2 試料6	併行分析1 試料7	併行分析2 試料9
1	7.67	7.64	23.1	23.1	29.3	29.6	41.4	41.9	56.2	56.2
2	8.06	8.03	23.3	23.2	30.1	30.2	42.1	42.2	57.2	57.3
3	8.58	8.52	22.8	23.1	29.9	29.8	41.6	41.1	(55.2)*	(55.0)*
4	7.51	7.56	22.1	22.6	30.2	29.5	(28.4)*	(41.1)*	56.5	57.0
5	8.20	7.97	22.9	22.9	29.7	29.8	41.8	41.8	56.8	56.4
6	8.35	8.25	22.9	22.8	29.7	29.7	41.8	42.3	57.1	57.1
7	(10.7)*	(10.6)*	(26.2)*	(26.9)*	(34.3)*	(34.9)*	(48.0)*	(47.6)*	(64.3)*	(64.5)*
8	8.09	8.36	22.9	23.1	29.9	29.8	41.9	41.7	56.4	56.7
9	8.49	9.03	23.3	23.2	30.5	30.1	42.1	41.9	58.6	57.3
10	(9.50)*	(8.48)*	22.9	22.5	29.7	29.7	41.5	41.3	55.9	57.8
11	8.29	7.81	23.9	23.7	30.6	30.3	42.8	42.3	57.5	57.4
12	8.15	8.08	22.8	23.5	29.8	30.1	(41.4)*	(43.9)*	(62.3)*	(57.0)*
13	8.13	8.09	22.9	23.0	29.9	30.0	41.9	41.9	56.9	56.8
14	8.01	7.96	22.7	22.3	29.3	29.4	41.4	42.0	56.1	57.0
15	8.78	8.12	22.8	22.4	29.2	29.1	(41.2)*	(44.6)*	56.3	57.5
16	8.25	8.09	23.3	23.2	30.3	30.2	42.4	42.3	57.3	57.8
17	8.18	8.10	23.0	23.1	30.1	30.0	41.9	41.6	56.7	56.7
18	8.12	7.99	23.1	22.9	30.0	30.0	42.1	42.1	(57.1)*	(8.10)*
19	8.23	8.44	23.6	23.6	31.2	30.7	42.3	42.3	57.5	57.4
20	7.82	8.05	23.0	22.8	29.9	29.8	41.7	41.5	56.5	56.6
21	8.27	8.44	23.2	23.4	30.2	29.7	42.0	42.2	56.7	56.9
22	7.88	7.76	23.2	23.0	30.2	29.8	42.0	41.9	56.3	56.2
23	8.07	8.03	22.7	22.8	29.5	29.6	41.3	41.4	56.2	56.2
24	7.58	7.90	23.0	22.9	29.7	30.0	42.0	42.0	56.8	57.0
25	7.89	7.73	22.7	22.4	29.9	29.7	(43.2)*	(41.7)*	56.5	56.3
26	8.42	8.85	23.8	24.1	31.1	30.7	43.1	43.1	(57.6)*	(60.1)*

単位 : µg/mL

*: 外れ値(Cochran検定とGrubbs検定の結果) 参考文献:Pure appl chem67(2)331-343,1995

表 4 分析法性能の推定結果(初期推定結果)

分析対象試料	試料原液 1	試料原液 2	試料原液 3	試料原液 4	試料原液 5
試験所数	26				
平均値($\mu\text{g}/\text{mL}$)	8.25	23.2	30.1	42.0	56.3
併行標準偏差 S_r ($\mu\text{g}/\text{mL}$)	0.23	0.21	0.21	1.88	6.86
併行許容差 $2.8S_r$ ($\mu\text{g}/\text{mL}$)	0.63	0.59	0.59	5.26	19.2
併行相対標準偏差 RSD_r (%)	2.74	0.91	0.70	4.47	12.2
室間再現標準偏差 S_R ($\mu\text{g}/\text{mL}$)	0.61	0.80	1.01	2.33	7.06
室間再現許容差 $2.8S_R$ ($\mu\text{g}/\text{mL}$)	1.72	2.23	2.83	6.51	19.8
室間再現相対標準偏差 RSD_R (%)	7.44	3.44	3.35	5.54	12.5

表 5 分析法性能の推定結果(最終推定結果)

分析対象試料	試料原液 1	試料原液 2	試料原液 3	試料原液 4	試料原液 5
試験所数	26				
データ解析に有効な試験所数	24	25	25	21	21
外れ値になった試験所数	2	1	1	5	5
平均値($\mu\text{g}/\text{mL}$)	8.12	23.0	29.9	42.0	56.8
併行標準偏差 S_r ($\mu\text{g}/\text{mL}$)	0.18	0.19	0.20	0.20	0.45
併行許容差 $2.8S_r$ ($\mu\text{g}/\text{mL}$)	0.51	0.53	0.56	0.56	1.26
併行相対標準偏差 RSD_r (%)	2.26	0.83	0.66	0.48	0.79
室間再現標準偏差 S_R ($\mu\text{g}/\text{mL}$)	0.33	0.40	0.44	0.44	0.57
室間再現許容差 $2.8S_R$ ($\mu\text{g}/\text{mL}$)	0.92	1.13	1.22	1.23	1.59
室間再現相対標準偏差 RSD_R (%)	4.03	1.74	1.45	1.05	1.00
HorRat	0.35	0.18	0.15	0.12	0.12

E. 参考文献

- 1) Thompson, M., Ellison, S. L., Wood, R. The international harmonized protocol for the proficiency testing of analytical chemistry laboratories (IUPAC Technical Report). *Pure Appl. Chem.*, **78**, 145-196 (2006).
- 2) ISO, E. 13528:2015. Statistical methods for use in proficiency testing by interlaboratory comparisons. ISO 13528 (2015).
- 3) Horwitz, W. Protocol for the design, conduct and interpretation of method-performance studies: Revised 1994 (Technical Report). *Pure Appl. Chem.*, **67**, 331-343 (1995).
- 4) Joint FAO/WHO Codex Alimentarius Commission. Procedural manual (Twenty-seventh edition). Food & Agriculture Org. (2004).
- 5) AOAC Int. Appendix D: Guidelines for collaborative study procedures to validate characteristics of a method of analysis. In *Official Methods of Analysis of AOAC Int.* 18 ed., Gaithersburg, MD, USA. 2005

<別添>

令和3年度 厚生労働科学研究費補助金（食品の安全確保推進研究事業）

分担研究課題

規格試験法の性能に関する研究

ポリ乳酸を主成分とする合成樹脂製の器具又は容器包装を対象とした溶出試験の

総乳酸定量分析法

共同実験プロトコル

令和3年 7月 5日

1. 共同実験の目的

本共同実験は、ポリ乳酸を主成分とする合成樹脂製の器具又は容器包装について、食品、添加物等の規格基準(昭和34年厚生省告示第370号)で定める総乳酸の規格適合性を判定する場合に用いる試験法として溶出試験における総乳酸定量分析法の性能評価を行うことを目的とする。

2. スケジュール

試料の配付・・・・・・・・・・・・・・・・・・(一財)食品薬品安全センター⇒各試験所
↓
(9月13-17日に配付予定)
各試験所で分析・・・・・・・・・・・・・・・・(試料配付後約3ヶ月間)
↓
結果の報告・・・・・・・・・・・・・・・・・・各試験所⇒研究代表者⇒解析者
↓
(12月上旬まで)
全体の結果を集約及び報告・・・・・・・・・・解析者による解析
↓
報告書の作成・・・・・・・・・・・・・・・・・・研究代表者・解析者

3. 分析に関する全般的な注意事項

- 1) 本計画書に指示された分析法からの変更は認められない。
- 2) 分析に用いる機器及び器具類は、実際に食品衛生法の規格試験を実施する際に使用しているもの、または今後の使用が見込まれるものであること。ただし、長期間使用していない機器及び器具類を用いる場合は、事前に整備等を行うこと。
- 3) 分析対象である乳酸のコンタミネーションの予防に努め、得られる分析値に影響を及ぼさないように、これらの吸着や溶出を認めないと判断する分析器具を用いること。
- 4) 使用する器具によっては事前に校正されていることを確認しておくこと。
- 5) 分析は、規格試験を実施した経験のある者による実施が望ましい。経験が無いものが実施する場合は、事前に操作法、注意点等を確認しておくこと。
- 6) 分析の実施期間は試料受領後3ヶ月以内とする。突発的な他業務の遂行による遅延、機器の故障、特段の事情により分析の実施が遅延または分析が不可能となった場合は速やかに連絡すること。
- 7) 分析結果は研究終了後、1年間保管すること。分析に関する測定データ等は令和5年3月末日まで保管すること。
- 8) 受領した試料は、分析までの間、本プロトコルに示された条件で保管すること。

4. 解析者

海野 明広(愛知県衛生研究所)

【注意】 研究代表者及び解析者は、本研究で知り得た各試験所の情報・結果について守秘義務を負うものとする。

5. 参加試験所及び試験所コード

① 参加試験所

東京都健康安全研究センター、埼玉県衛生研究所、さいたま市健康科学研究センター、神奈川県衛生研究所、川崎市健康安全研究所、長野県環境保全研究所、静岡県環境衛生科学研究所、静岡市環境保健研究所、愛知県衛生研究所、名古屋市衛生研究所、大阪健康安全基盤研究所、福岡県保健環境研究所、国立医薬品食品衛生研究所、国立研究開発法人 産業技術総合研究所、(一財)化学研究評価機構 高分子試験・評価センター(東京事業所及び大阪事業所)、(一財)日本食品分析センター(多摩研究所及び彩都研究所)、(一財)食品環境検査協会、(一財)日本食品検査、(公社)日本食品衛生協会、(一財)東京顕微鏡院、(一財)日本文化用品安全試験所、(一財)日本穀物検定協会、(一社)日本海事検定協会、(一財)千葉県薬剤師会検査センター、(一財)食品分析開発センターSUNATEC、(一財)食品薬品安全センター

【注意】 共同実験を実施しない試験所も含む。

② 試験所コード

共同実験を実施する試験所には試験所コードを交付する。

試験所名と試験所コードの対応は非公開とする。

結果シートは、各試験所の担当者から研究代表者を經由して解析者へ提出する。

【注意】 試験所コードは他試験所や解析者に知られないよう注意すること。

6. 試料の調製及び配付

試料の調製及び配付は(一財)食品薬品安全センターが行う。

7. 試料の均質性及び安定性の確認

① 均質性の確認

国立医薬品食品衛生研究所にて各試料 10 点を受領直後に分析し、その分析値を解析して確認する。

② 安定性の確認

溶出試験の試料については、国立医薬品食品衛生研究所にて、各試料 10 点について①の分析値と、その 3 ヶ月後の分析値を解析して確認する。

8. 試料の配付及び保管

①試料配付時期の連絡

試料の配付予定時期は9月13-17日である。発送日はその1週間前に参加試験所に連絡する。各試験所は試料保管場所の確保、必要な器具類の購入、装置の動作確認、試薬の購入等の準備を適宜行うこと。

②配付する試料

分析試料：10 試料(試料1～10)

ブランク試料：2 試料(ブランク試料1～2)

③試料の確認

受領後はただちに試料数、溶媒・試料 No の判別、試料の状態を確認し、問題があれば至急連絡すること。

④試料の保管及び管理

試料は冷蔵で保管する。

【注意】 試料は冷蔵で送付する。

⑤試料の不足

何らかの事情により試料が不足して予定する分析が不可能となった場合は速やかに研究代表者に連絡すること。

9. 分析手順

①試薬・試液等

次に示すもの以外は、食品、添加物等の規格基準(昭和34年厚生省告示第370号 以下、告示) 第2 添加物の部 C試薬・試液等の項及び第3 器具及び容器包装の部 C試薬・試液等の項に示すものを用いる。

- ・水：市販の分析用精製水を含め、分析対象化合物から得られる分析値に影響を及ぼす濃度の含有を認めないもの。
- ・1000 µg/mL 乳酸標準溶液：L-乳酸リチウム標準品 1.07 g を量りとり、水で 1000 mL に定容する。

【注意】 分析対象化合物から得られる分析値に影響を及ぼす不純物等の含有を認めない試薬の使用も可とする。

【注意】 分析環境に応じて異なる濃度の標準原液の使用や指示された調製法と同一割合での調製容量の変更も可とする。

②試料測定溶液の調製

試料1～10及びブランク試料1～2をそれぞれ10 mLずつ採り、0.2 mol/L 水酸化ナ

トリウム試液 1 mL ずつ加えて密栓し、60℃に保ちながら時々振り混ぜて 15 分間放置する。冷後、0.2 mol/L リン酸 1 mL ずつ加えた溶液を試料測定溶液とする。

(→試料測定溶液 1～10)

(→ブランク試料測定溶液 1～2)

【注意】 測定溶液のフィルターろ過については、公定法にフィルター使用の記載がないため、本計画書でもフィルター使用について記載していないが、その使用を妨げるものではない。測定溶液をフィルターろ過した場合は報告様式に使用したフィルター等のメーカー名と製品名を記載する。

③検量線用測定溶液の調製

1000 µg/mL 乳酸標準溶液を各 0.5 mL、1 mL、2 mL、3 mL、4 mL、5 mL、6 mL、7 mL 量りとり、水で 100 mL に定容する(濃度は 5 µg/mL、10 µg/mL、20 µg/mL、30 µg/mL、40 µg/mL、50 µg/mL、60 µg/mL、70 µg/mL)。また、0 µg/mL 溶液として水を用いる。これら各濃度の溶液をそれぞれ 10 mL ずつ採り、0.2 mol/L 水酸化ナトリウム試液 1 mL ずつ加えて密栓し、60℃に保ちながら時々振り混ぜて 15 分間放置する。冷後、0.2 mol/L リン酸 1 mL ずつ加えた溶液を検量線用測定溶液とする。

【注意】 分析環境に応じて指示された調製法と同一割合での調製容量の変更も可とする。

④測定条件

以下に示す以外の測定条件は使用する機器や分析環境に合わせて最適化する。

カラム オクタデシルシリル化シリカゲルカラム(内径 4.6 mm、長さ 250 mm、粒子径 5 µm) を用いる。

カラム温度 40℃

移動相 リン酸、アセトニトリル及び水混液(0.1 : 1 : 99)

流速 1 mL/min

注入量 20 µL

測定波長 210 nm

測定時間 : 15 min

⑤検量線用測定溶液及び試料測定溶液の分析

検量線用測定溶液及び試料測定溶液の分析順は以下に示すとおりとする。

- 1、検量線用測定溶液(0 µg/mL、5 µg/mL、10 µg/mL、20 µg/mL、30 µg/mL、40 µg/mL、50 µg/mL、60 µg/mL、70 µg/mL)
- 2、ブランク試料測定溶液(2 点)
- 3、試料測定溶液(10 点)
- 4、検量線用測定溶液(30 µg/mL)

⑥定量

検量線用測定溶液の乳酸のピーク面積又はピーク高さ と濃度との1次回帰式を求め、乳酸の検量線を作成する。作成した各検量線に試料測定溶液の乳酸のピーク面積又はピーク高さを内挿し、分析値(定量値)を算出する。

⑦選択性の確認

定量に妨害となるピーク等が検出されないことを確認する。方法は特に指定しない。通常実施している確認法があればその方法を用いてよい。

【注意】 ブランク試料測定溶液を分析することにより確認することもできる。

⑧100 µL 注入による分析

「⑤検量線用測定溶液及び試料測定溶液の分析」とは別に 30 µg/mL 検量線用標準溶液のみを繰り返し3回分析する。

【注意】 100 µL 注入可能な HPLC を所持している試験所のみ分析を実施する。

10. 結果の報告

- 1) 分析値、選択性の確認結果及びその他コメント等は、別添の報告様式(結果報告シート1～5: Excel ファイル)に入力する。なお、分析中に機器のトラブル等の問題が発生した場合は必ず記載すること。

【報告シートの内容】

報告シート1…試薬等の情報、分析に関するコメント等

報告シート2…測定条件

報告シート3…定量結果

報告シート4…測定溶液の生データ

(分析値の算出に用いたピーク面積又はピーク高さ)

報告シート5…30 µg/mL 検量線用標準溶液の 100 µL 注入のクロマトグラム(3回分)

【注意】 報告シート5は乳酸のピーク形状が確認可能な保持時間付近の画面のコピーのベタうちでよい。

- 2) 各測定溶液の分析値から試料の濃度(µg/mL)を算出し、有効数字3桁で算出された数値(有効数字4桁目を四捨五入した数値)を報告する。

【注意】 解析ソフトによっては2桁しか表示されない場合がある。また、検量線の近似式の傾き及び切片の桁数にも注意し、これらの桁数が4桁以上であることを確認する。十分な桁数が得られない場合は µg/L 単位で検量線を作成するとよい。

- 3) 試料の濃度が検量線の濃度範囲よりも低い場合は、濃縮して測定する必要はない。この場合の分析値は「<5」($\mu\text{g/mL}$) のように記載して報告する。
- 4) 結果入力後の報告様式の電子ファイルは下記のe-mail アドレスまで提出する。また、全電子ファイルの印刷物1部を研究代表者まで提出する。
なお、試料に異常があった場合、分析に関する事前紹介先も以下の提出先に同じである。
提出先(e-mail)：国立医薬品食品衛生研究所食品添加物部
六鹿元雄(mitsuga@nihs.go.jp)

報告期限：令和3年12月3日(金)

以上

R3「総乳酸定量分析法」結果報告シート1

(試料・機器・試薬の情報)

1. 試験所コード

試験所コード *1
XX

2. 使用した機器

機器 *2	メーカー	型式	開示の可否 *3	
HPLC	Waters	ACQUITY UPLC H-Class	可	
UV/PDA	Waters	ACQUITY UPLC PDA eλ	一部可	クロマトのみ可能

3. 使用した試薬

試薬 *4*5	メーカー	Grade	純度 (%)または濃度	
L-乳酸リチウム	富士フィルム和光純薬	生化学用	> 99.9%	
リン酸	関東化学	特級	> 85.0%	
水酸化ナトリウム	富士フィルム和光純薬	特級	> 99.0%	
リン酸 (HPLC用)	関東化学	高速液体クロマトグラフィー用	> 85.0%	
水	メルク社	Milli-Q Advantage (最終フィルター: EDS-Pak)により製造	比抵抗>18.2MΩ・cm、TOC<3 μg/L	

4. 試料の保管

試料の保管方法	受領後、冷蔵庫で保管し、使用時は室温で1時間放置後に使用。
---------	-------------------------------

5. 共同実験全体に対する感想・コメントなど

簡単だった。

- *1 コードのみを記入、試験所名は記入しない
- *2 測定に使用した機種すべてを記入。
- *3 開示してもよいかどうか条件があれば記載
- *4 他に使用した試薬があれば行を追加して記入
- *5 市販の混合標準液を使用した場合はまとめて記載

R3「総乳酸定量分析法」結果報告シート2 *1

(測定条件)

1. 試験所コード

試験所コード *1
XX

2. 測定条件*2*3

カラムの種類、サイズ	東ソー TSKgel ODS-80Ts 内径4.6 mm、長さ250 mm、粒子径5 μm
注入量	20 μL
流速	1 mL/min
測定波長	210 nm
測定時間	15 min

3. 検出条件

化合物	保持時間 (分)
乳酸	5.2

*1 コードのみを記入、試験所名は記入しない

*2 計画書と同じであっても確認のため記入する。

*3 開示してもよい条件があれば記載

R3「総乳酸定量分析法」結果報告シート3
(定量結果)

1. 試験所コード、試料受領日、試料分析日

試験所コード*1	試料受領日	試料分析日

2. 分析結果

分析項目	濃度(μg/mL)*2												
	ブランク試料1	ブランク試料2	試料1	試料2	試料3	試料4	試料5	試料6	試料7	試料8	試料9	試料10	
乳酸													

3. 検量線情報

分析項目	一回帰式	相関係数(R)*3
乳酸		

4. その他

選択性の確認方法及びその知見
気になった点、測定中のトラブルなど

*1 コードのみを記入、試験所名は記入しない

*2 濃度(μg/mL)を記入。有効数字3桁(4桁目を四捨五入)

*3 R2ではなくRで記入。3桁以上記入

R3「総乳酸定量分析法」結果報告シート4

(測定データ)

1. 試験所コード

試験所コード *1

2. 測定情報

分析対象化合物	面積値か高さか選択→											
	0 µg/mL	5 µg/mL	10 µg/mL	20 µg/mL	30 µg/mL	40 µg/mL	50 µg/mL	60 µg/mL	70 µg/mL	ブランク試料1	ブランク試料2	
乳酸												

分析対象化合物	面積値か高さか選択→											
	試料1	試料2	試料3	試料4	試料5	試料6	試料7	試料8	試料9	試料10	30 µg/mL (2回目)	
乳酸												

*1 コードのみを記入、試験所名は記入しない

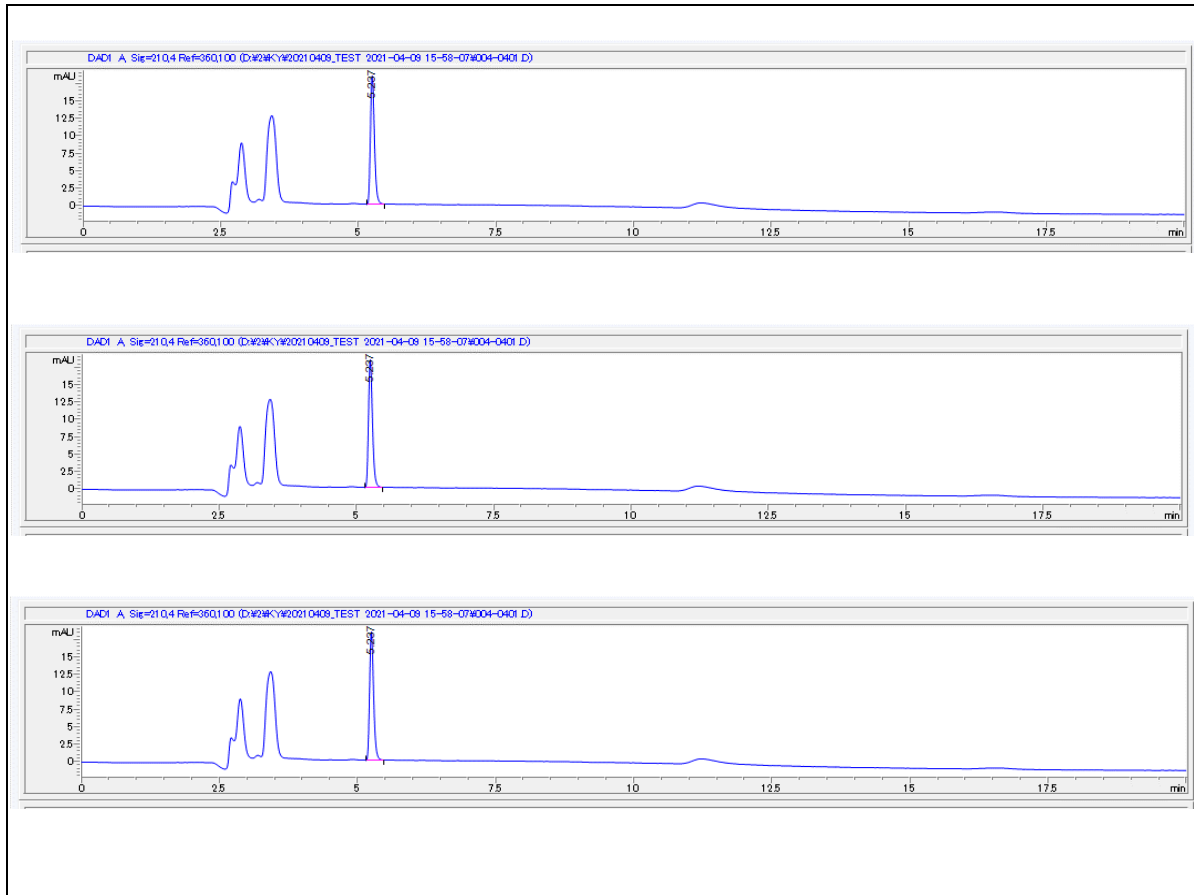
*2 面積値又は高さが得られない場合は「0」を記入する。

R3「総乳酸定量分析法」結果報告シート5
(クロマトグラム)

1. 試験所コード

試験所コード *1
XX

2. クロマトグラム



*1 コードのみを記入、試験所名は記入しない

<その2> 器具・容器包装におけるジフェニルカーボネート、ビスフェノール A 及びアミン類の改良分析法の検討

研究分担者	片岡 洋平	国立医薬品食品衛生研究所
研究協力者	四柳 道代	国立医薬品食品衛生研究所
研究協力者	近藤 翠	国立医薬品食品衛生研究所
研究協力者	阿部 裕	国立医薬品食品衛生研究所
研究代表者	六鹿 元雄	国立医薬品食品衛生研究所

A. 研究目的

食品衛生法では、ポリカーボネート(PC)を主成分とする合成樹脂製の器具又は容器包装の材質試験としてジフェニルカーボネート(DPC)、ビスフェノール A(BPA)、フェノール(PH)及び *p-tert*-ブチルフェノール(BuPH)並びにアミン類としてトリエチルアミン(TEA)及びトリブチルアミン(TBA)の残存量の規格が設定されている。規格値はDPCとBPAでは各500 µg/g(ただし、BPAはPH及びBuPHを含む合算値)、アミン類では1 µg/g(TBA及びTEAの合算値)とされている。

DPC及びBPAの告示試験法は分析操作及び測定条件が同じである。試料をジクロロメタンに溶解後、アセトンでポリマー等の不要物を沈殿として析出させた後、上清を分取し減圧濃縮器で濃縮する。アセトニトリルと水で定容後、高速液体クロマトグラフ(HPLC)で測定する。

アミン類の告示試験法は、試料をジクロロメタンに溶解後、アセトンでポリマー等の不要物を沈殿として析出させた後、上清を分取するところまではDPC及びBPAと同じである。上清を濃縮しジクロロメタンで定容後、ガスクロマトグラフ-水素炎イオン化検出器(GC-FID)で測定する。

このうちDPCについては、標準溶液中のDPCがその調製後に分解されることで検量線の直線性が悪いため、分析値の真度

が低いことが指摘されている。また、アミン類についても、TEAの高揮発性による揮散やTEA及びTBAが共に3級アミンの塩基性物質であることから分析に使用する器具等への吸着などにより分析値の真度が低いことが指摘されている。

そこで本研究では、DPC分解の問題点を解消したうえでBPA(PH及びBuPHを含む)も同時に分析可能な改良DPC分析法を検討し、その性能を評価した。同様にアミン類についても、揮散や吸着の問題点を解消し、質量分析計(MS)やタンデム型質量分析計(MS/MS)を利用した改良アミン類分析法を検討し、その性能を評価した。また、改良アミン類分析法については11試験所が参加した室間共同実験を行い他試験所での適用性を検証した。

B. 研究方法

1. 改良DPC分析法

1) 試薬、試液等

①試薬及び試液

- ・水：オルガノ株式会社製超純水装置ピューリック ω で精製した超純水
- ・メタノール及びアセトニトリル：LC-MS用、BPA標準品：環境分析用、PH標準品：特級、BuPH標準品：環境分析用、関東化学株式会社製
- ・DPC標準品：>99.0%、ジエチレングリコール：>99.5%、東京化成工業株式会社製

- ・酢酸：特級、ジクロロメタン：残留農薬・PCB分析用、富士フィルム和光純薬株式会社製
- ・アセトン：残留農薬・PCB分析用、シグマアルドリッチ社製
- ・4 vol%酢酸・50 vol%アセトニトリル：酢酸 20 mL 及びアセトニトリル 250 mL に水を加えて混和し、正確に 500 mL とした。
- ・10 vol%ジエチレングリコール・アセトン溶液：ジエチレングリコール 10 mL にアセトンを加えて混和し、正確に 100 mL とした。

②標準原液及び標準溶液

- ・1000 µg/mL 混合標準原液：BPA 標準品、PH 標準品、BuPH 標準品及び DPC 標準品各 100 mg をとり、アセトニトリルを加えて正確に 100 mL とした。
- ・100 µg/mL 混合標準溶液：1000 µg/mL 混合標準原液 5 mL を正確にとり、4 vol%酢酸・50 vol%アセトニトリルを加えて正確に 50 mL とした。
- ・添加用標準溶液 A(濃度：500 µg/mL)：1000 µg/mL 混合標準原液 10mL を正確にとり、アセトニトリルを加えて正確に 20 mL とした。
- ・添加用標準溶液 B(濃度：100 µg/mL)：1000 µg/mL 混合標準原液 2 mL を正確にとり、アセトニトリルを加えて正確に 20 mL とした。
- ・添加用標準溶液 C(濃度：800 µg/mL)：1000 µg/mL 混合標準原液 20 mL を正確にとり、アセトニトリルを加えて正確に 25 mL とした。

③装置等

- ・遠心分離機：H-80R、株式会社コクサン製
- ・水浴：SB-1300、エバポレーター：N-1300E、以上、東京理化学器械株式会社製
- ・HPLC：紫外吸光度検出器付、Agilent 1260

Infinity シリーズ、Agilent Technologies 社製

2) 試料

4 化合物(DPC、BPA、PH、BuPH)の残存量が規格値(500 µg/g)の 1/50 以下である食品用 PC 製耐熱ボール(株式会社エンテック、PB-417 クックボール(17 cm))を試料とした。

また、この試料を 5 mm 角以下に細切後、添加用標準溶液 A、B 又は C を 1 mL 添加し、よく混合したものを添加試料とした。添加濃度は、規格値相当(500 µg/g)及び、その 0.2 倍濃度(100 µg/g)と 1.6 倍濃度(800 µg/g)の 3 濃度とした。

3) 測定溶液の調製

試料 1.0 g を遠沈管に入れ、ジクロロメタン 10 mL を加えて、試料を溶解させた後、アセトン 120 mL を徐々に滴加し不純物を沈殿させた。これを毎分 3,000 回転で 10 分間遠心分離し、上清をナスフラスコに移した。沈殿にアセトン 30 mL を加えて洗浄後、同様に遠心分離し、上清を先のナスフラスコに合わせた。ここに 10 vol%ジエチレングリコール・アセトン溶液 2 mL を添加し、40°C の水浴で加温しつつ、エバポレーターにより溶媒を留去した。これに 4 vol%酢酸・50 vol%アセトニトリルを加えて 20 mL に定容後、1 mL を採り、孔径 0.5 µm 以下のメンブランフィルターでろ過した溶液を測定溶液とした。

4) 検量線用測定溶液の調製

100 µg/mL 混合標準溶液を 1、2、3、4、5、6、8 及び 10 mL ずつ量りとり、4 vol%酢酸・50 vol%アセトニトリルで 20 mL に定容したものを検量線用測定溶液とした(各溶液の 4 化合物の濃度は、5、10、15、20、25、30、40 及び 50 µg/mL)。また、25

μg/mL 検量線用測定溶液 2 mL を量りとり、4 vol%酢酸・50 vol%アセトニトリルで 20 mL に定容した(4 化合物の濃度は、2.5 μg/mL)。これら溶液を検量線用測定溶液とした。また、0 μg/mL 検量線用測定溶液として 4 vol%酢酸・50 vol%アセトニトリルを用いた。

5) 定量

検量線用測定溶液を HPLC に注入し、以下の分析条件を用いて各分析対象化合物のピーク面積値と濃度との 1 次回帰式を求め、各分析対象化合物の検量線を作成した。各試料から調製した測定溶液を測定し、作成した各検量線に測定溶液の各分析対象化合物のピーク面積値を内挿して分析値を算出した。

分析条件

- ・カラム：KinetexC18(内径 4.6 mm、長さ 250 mm、粒子径 5 μm、Phenomenex 社製)
- ・カラム温度：40℃
- ・移動相 A：アセトニトリル、移動相 B：水
- ・グラジエント条件：A/B：30/70-100/0 (0-35 min)- 100/0 (35-45 min)- 30/70 (45-55 min)
- ・流速：1 mL/min
- ・注入量：20 μL
- ・測定波長：217 nm

6) 性能評価

ブランク試料と添加試料の分析をそれぞれ 1 日 2 併行で 5 日間実施した。各添加試料から得られた分析値をブランク試料から得られた分析値の平均値によって補正し、補正值の平均値の添加量に対する比率を真度(%)とした。また、補正值を一元配置の分散分析により解析し、算出された分散に基づき、併行精度(RSD%)及び室内精

度(RSD%)を推定した。

2. 改良アミン類分析法

1) 試薬、試液等

①試薬及び試液

以下に示すもの以外は、1. 改良 DPC 分析法の検討と同じものを用いた。

- ・トリエチルアミン塩酸塩：>99.0%、シグマアルドリッチ社製
- ・トリブチルアミン：特級、ギ酸：LC/MS 用、1 mol/L ギ酸アンモニウム溶液：高速液体クロマトグラフ用、富士フイルム和光純薬株式会社製
- ・12.5 mM ギ酸アンモニウム・0.1 vol%ギ酸：1 mol/L ギ酸アンモニウム溶液 12.5 mL 及びギ酸 1 mL に水を加え正確に 1000 mL とした。
- ・0.1 vol%ギ酸アセトニトリル：ギ酸 1 mL にアセトニトリルを加えて正確に 1000 mL とした。
- ・2 vol%ギ酸：ギ酸 20 mL に水を加えて混和し、正確に 1000 mL とした。
- ・2 vol%ギ酸・アセトニトリル：ギ酸 20 mL にアセトニトリルを加えて混和し、正確に 1000 mL とした。
- ・2 vol%ギ酸/アセトニトリル(1:1)：2 vol%ギ酸 500 mL にアセトニトリル 500 mL を加えて混和した。

②標準原液及び標準溶液

- ・1000 μg/mL トリエチルアミン標準原液：トリエチルアミン塩酸塩 68.0 mg をとり、2 vol%ギ酸・アセトニトリルを加えて正確に 50 mL とした。
- ・1000 μg/mL トリブチルアミン標準原液：トリブチルアミン 50 mg をとり、2 vol%ギ酸・アセトニトリルを加えて正確に 50 mL とした。
- ・50 μg/mL 混合標準溶液：1000 μg/mL トリエチルアミン標準原液及び 1000 μg/mL トリブチルアミン標準原液各 1

- mL を正確にとり、2 vol%ギ酸・アセトニトリルを加えて正確に 20 mL とした。
- ・ 12.5 µg/mL 混合標準溶液：50 µg/mL 混合標準溶液 5 mL を正確にとり、2 vol%ギ酸・アセトニトリルを加えて正確に 20 mL とした。
 - ・ 添加用標準溶液 D(濃度：1 µg/mL)：12.5 µg/mL 混合標準溶液 4 mL を正確にとり、2 vol%ギ酸・アセトニトリルを加えて正確に 50mL とした。
 - ・ 添加用標準溶液 E(濃度：0.2 µg/mL)：添加用標準溶液 D 5 mL を正確にとり、2 vol%ギ酸・アセトニトリルを加えて正確に 25 mL とした。
 - ・ 添加用標準溶液 F(濃度：2 µg/mL)：12.5 µg/mL 混合標準溶液 4 mL を正確にとり、2 vol%ギ酸・アセトニトリルを加えて正確に 25 mL とした。
 - ・ 0.125 µg/mL 標準溶液：12.5 µg/mL 混合標準溶液 1 mL を正確にとり、2 vol%ギ酸/アセトニトリル(1:1)を加えて正確に 100 mL とした。
 - ・ 0.1 vol%ギ酸・50 vol%メタノール：ギ酸 1 mL 及びメタノール 500 mL に水を加えて混和し、正確に 1000 mL とした。

③装置等

以下に示すもの以外は、1. 改良 DPC 分析法 と同じものを用いた。

- ・ HPLC：ACQUITY UPLC システム、日本ウォーターズ社製
- ・ MS 及び MS/MS：Xevo TQ-S cronos、日本ウォーターズ社製

2) 試料

TEA 及び TBA の残存量が規格値(1 µg/g) の 1/50 以下である PC 製ボトル(MA BOISSON(BK)500 mL) を試料とした。

また、この試料を 5 mm 角以下に細切後、添加用混合標準溶液 D、E 又は F を 1 mL 添加し、よく混和したものを添加試料とし

た。添加濃度は、規格値相当(1 µg/g)及び、その 0.2 倍濃度(0.2 µg/g) と 2 倍濃度(2 µg/g)の 3 濃度とした。

3) 測定溶液の調製

試料 1.0 g を遠沈管に入れ、2 vol%ギ酸・アセトニトリル 1 mL 及びジクロロメタン 10 mL を加えて試料を溶解させた。水を 1 mL 加えた後、攪拌子でよくかき混ぜながらアセトン 120 mL を滴加し不純物を析出させた後、毎分 3,000 回転で 10 分間遠心分離し、上清を 300 mL ナスフラスコに移した。沈殿にアセトン 30 mL を加えて洗浄後、同様に遠心分離し、上清を先の 300 mL ナスフラスコに移した。40°C の水浴で加温しつつ、エバポレーターにより 1 mL 以下まで溶媒を濃縮後、2 vol%ギ酸/アセトニトリル(1:1)で 50 mL に定容した。その 1 mL を採り、孔径 0.5 µm 以下のメンブランフィルターでろ過した溶液を測定溶液とした。

4) 検量線用測定溶液の調製

0.125 µg/mL 標準溶液を 1、2、3、4、10 及び 20 mL ずつ量りとり、2 vol%ギ酸/アセトニトリル(1:1)で 50 mL に定容した溶液を検量線用測定溶液とした(各溶液の TEA 及び TBA 濃度は 0.0025、0.005、0.0075、0.01、0.025 及び 0.05 µg/mL)。また、0 µg/mL 検量線用測定溶液として 2 vol%ギ酸/アセトニトリル(1:1)を用いた。

5) 定量

検量線用測定溶液を HPLC に注入し、以下の分析条件を用いて各分析対象化合物のピーク面積値と濃度との 1 次回帰式を求め、各分析対象化合物の検量線を作成した。各試料から調製した測定溶液を測定し、作成した各検量線に測定溶液の各分析対象化合物のピーク面積値を内挿して分析値を算出した。

分析条件

- ・カラム： ZIC-HILIC(内径 2.1 mm、長さ 150 mm、粒子径 3.5 μm 、Merck 社製)
- ・カラム温度 40°C
- ・移動相： A 液 12.5 mM ギ酸アンモニウム・0.1 vol% ギ酸、B 液 0.1 vol% ギ酸アセトニトリル
- ・グラジエント条件： A/B： 40/60 (0-10 min)-100/0 (10-15 min)- 40/60 (15-25 min)
- ・流速： 0.2 mL/min
- ・注入量： 2 μL
- ・イオン化法： ESI(+)
- ・定量イオン及び定性イオン(m/z)：

検出器	TEA	TBA
MS	102	186
MS/MS	定量 102→74 定性 102→58	定量 186→130 定性 186→57

6) 性能評価

① 併行精度及び室内精度

ブランク試料と添加試料の分析をそれぞれ 1 日 2 併行で 5 日間実施した。各添加試料から得られた分析値をブランク試料から得られた分析値の平均値によって補正し、補正值の平均値の添加量に対する比率を真度(%)とした。また、補正值を一元配置の分散分析により解析し、算出された分散に基づき、併行精度(RSD%)及び室内精度(RSD%)を推定した。

② 室間共同実験

(1) 参加試験所

室間共同実験の計画及びプロトコル作成は、国立医薬品食品衛生研究所で行った。室間共同実験の実施には民間の登録検査機関の 8 試験所と公的な衛生研究所などの 3 試験所の計 11 試験所が参加した。このうち改良アミン類分析法(LC-MS 法)には 10 試

験所、改良アミン類分析法(LC-MS/MS 法)には 6 試験所が参加した。なお、同一企業であっても地域が異なる試験所で実施した場合は別試験所として扱った。

(2) 室間共同実験の実施

室間共同実験は「<別添>ポリカーボネートを主成分とする合成樹脂製の器具又は容器包装を対象とした材質試験の改良アミン類分析法共同実験プロトコル(以下、計画書)」に従い実施した。計画書には、分析方法の他、分析の全般、配付試料の保管、分析計画、分析実施期間、分析結果の報告に関する注意事項を示した。

分析結果の報告では、Microsoft Excel を使って作成した報告様式を配布し、分析結果の他、分析環境の情報、また分析に関して気づいた点などの情報を提供するように参加試験所に依頼した。室間共同実験の分析実施期間は、検体到着(2021 年 12 月 1 日頃)~2022 年 2 月 28 日の約 3 ヶ月間とした。

(3) 室間共同実験結果の解析

各試験所から報告された生データ(面積値)を国立医薬品食品衛生研究所で一律に解析して定量値を算出後、一元配置の分散分析を行って、各試験所の併行精度(RSD%)、室内精度(RSD%)、真度(%)を推定した。

C. 研究結果及び考察

1. 改良 DPC 分析法の検討

現行の標準溶液では DPC が調製後に分解するため検量線の直線性が悪く、分析値の真度が低いことが指摘されている。この問題点を解消したうえで、DPC だけでなく BPA(PH 及び BuPH を含む)も同時に分析可能な分析法を構築した(図 1)。

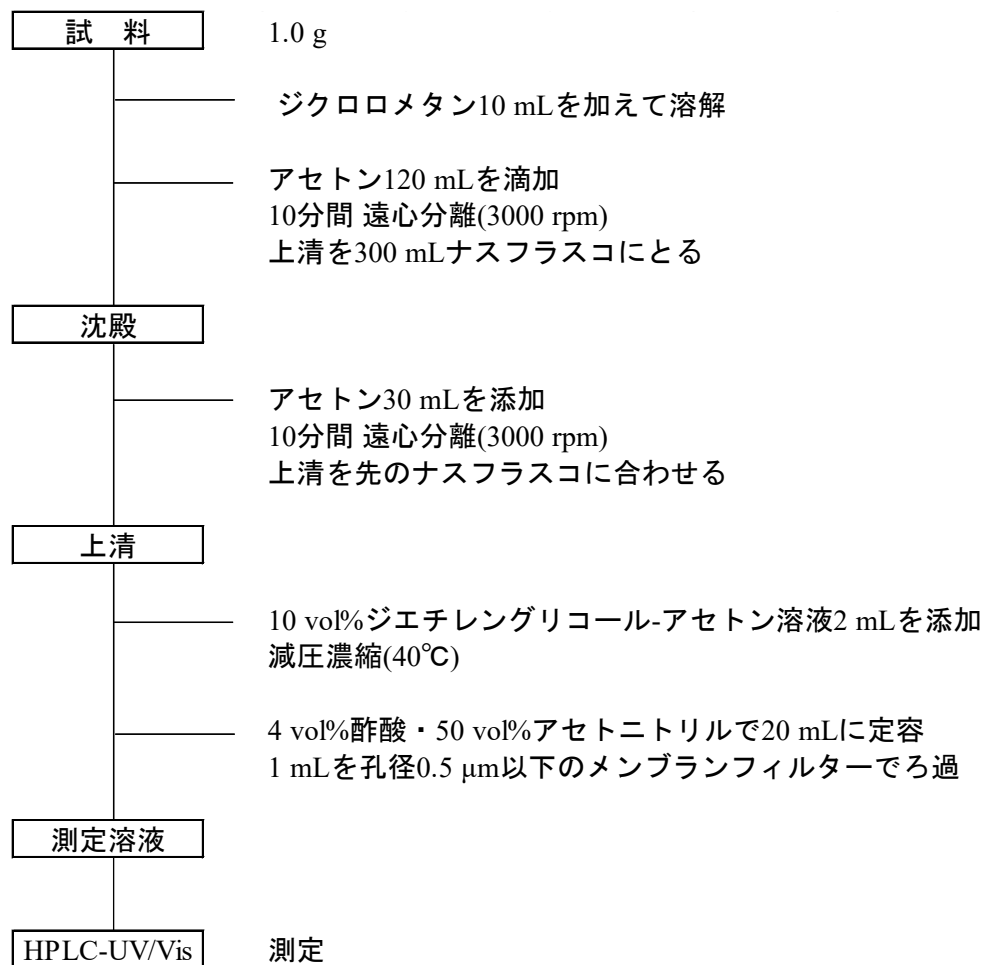


図1 改良 DPC 分析法のフローチャート

1) DPC の分解抑制

①標準溶液調製後の保存温度

告示試験法と同様にメタノールで標準原液を調製し、これを水で希釈した標準溶液(50 μg/mL)を調製後、保存温度の違いで DPC の分解の程度に違いが生じるかを 4°C と 30°C で検討した。

標準溶液の調製直後の濃度に対する経過時間後の DPC の濃度比(%)を求めた。その結果、DPC は 30°C の方が 4°C よりもより分解されたことから温度が高いと分解が促進されやすく DPC の安定性は温度により影響を受けることを確認した(図 2)。

②標準原液及び標準溶液の調製溶媒

告示試験法は標準原液をメタノールで調製し、水で希釈することになっているが、HPLC の移動相はアセトニトリルが用いら

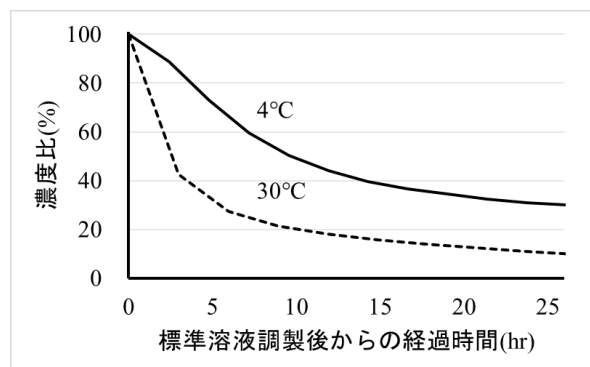


図2 温度の違いによる DPC 標準溶液の安定性(メタノール溶液、濃度：50 μg/mL)

れている。そこで、アセトニトリルで標準原液を調製し、①標準溶液調製後の温度の検討と同様の手順で DPC 標準溶液(50 μg/mL)を調製後に保存温度の違いで分解の程度に違いが生じるかを 4°C と 30°C で検討した。その結果、30°C では分解による濃

度の減少がみられたが、4℃では24時間後でもDPC濃度は減少せず、分解しないことを確認した(図3)。また、調製溶媒をメタノールからアセトニトリルに変更したことで、標準品の溶解のしやすさが格段に改善した。以上の結果から、標準原液の調製溶媒としてアセトニトリルを選択した。

次いで、標準溶液のアセトニトリル濃度を検討した。標準溶液のアセトニトリル濃度を変化させて標準溶液(50 µg/mL)を調製し、4℃における調製直後の濃度に対する経過時間後のDPCの濃度比(%)を求めた。その結果、DPCの分解を抑制するためには、標準溶液のアセトニトリル濃度が25 vol%以上必要であった(図4)。また、25 vol%及び50 vol%アセトニトリル濃度の標準溶液のクロマトグラムを比較した結果、ピークの対称性が50 vol%アセトニトリル濃度の方がよいことを確認した。

以上の結果より、標準溶液のアセトニトリル濃度は50 vol%とした。

③室温における標準溶液の分解抑制

上記の検討結果から標準溶液のアセトニトリル濃度が25 vol%以上であれば4℃で測定することによりDPCの分解を抑制できることを確認した。しかし、試験所によっては冷却機能付きオートサンプラーを所持していないなど、標準溶液及び試験溶液を4℃以下に保つことが困難となる可能性がある。そこで、室温でもDPCが分解しない条件を検討した。

DPCはその構造から中性～アルカリ性で分解されやすいと考えられたことから、食品衛生法の器具容器包装の部 C 試薬・試液等に記載されている4 vol%酢酸を用いて標準溶液(50 µg/mL)を調製し、30℃における調製直後の濃度に対する経過時間後のDPCの濃度比(%)を求めた。その結果、標準溶液中のアセトニトリル濃度が50 vol%かつ、酢酸濃度が4 vol%であることで、

30℃でもDPCの分解を抑制できた(図5)。なお、4 vol%酢酸の添加は、BPA(PH及びBuPHを含む)の安定性には影響しなかった。

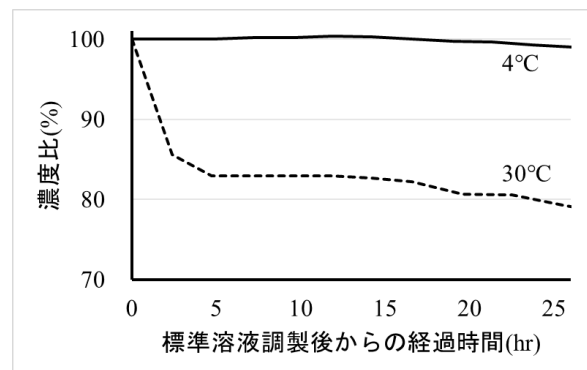


図3 温度の違いによるDPC標準溶液の安定性(アセトニトリル溶液、濃度：50 µg/mL)

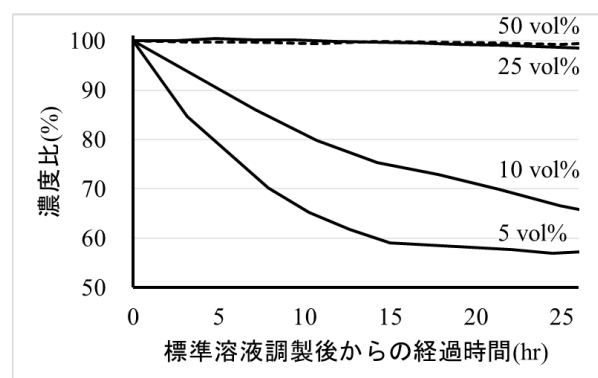


図4 アセトニトリル濃度の違いによるDPC標準溶液の安定性(4℃、濃度：50 µg/mL)

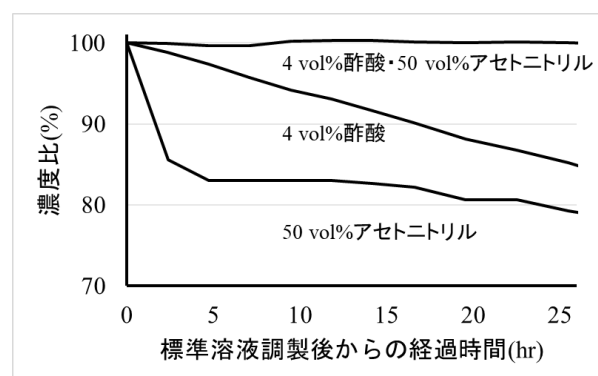


図5 液性の違いによるDPC標準溶液の安定性(30℃、濃度：50 µg/mL)

以上の結果より、標準溶液は 4 vol%酢酸・50 vol%アセトニトリルで調製することにした。

2) 試料測定溶液調製法

①溶解再沈法における溶媒量

告示法では試料を溶かす溶媒(ジクロロメタン 20 mL)に対してポリマーを析出させるために添加する貧溶媒(アセトン 100 mL)の比率は 5 倍であるが、通常は 10 倍以上の貧溶媒の方がよいとされる¹⁾。そこで、適切な溶解溶媒と貧溶媒の量を検討した。告示試験法の溶媒量[試料の溶解溶媒(20 mL) : 貧溶媒(100 mL)=1 : 5]と試料の溶解溶媒と貧溶媒の比が 10 以上になるような溶媒量[試料の溶解溶媒(10 mL) : 貧溶媒(120 mL)=1 : 12]によるポリマー析出後の状態を比較した結果、後者では、図 6 に示すように析出後の上清が澄んでいるだけでなく、告示試験法よりも析出量が多く(図 7)、より多くのポリマーを除去できることを確認した。

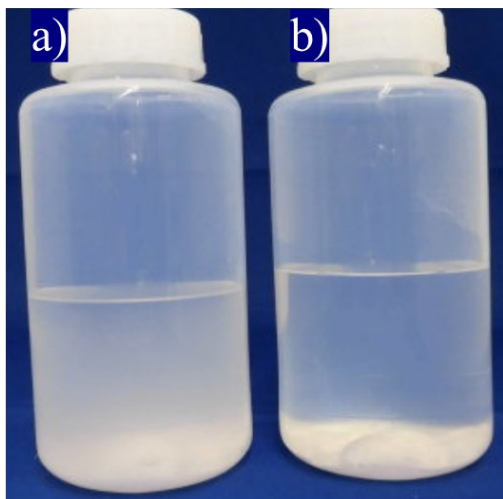


図 6 アセトン添加によるポリマー等の析出後の状態

- a) 告示試験法 (試料の溶解溶媒(20 mL) : 貧溶媒(100 mL)=1 : 5)
- b) 改良 DPC 分析法 (試料の溶解溶媒(10 mL) : 貧溶媒(120 mL)=1 : 12)

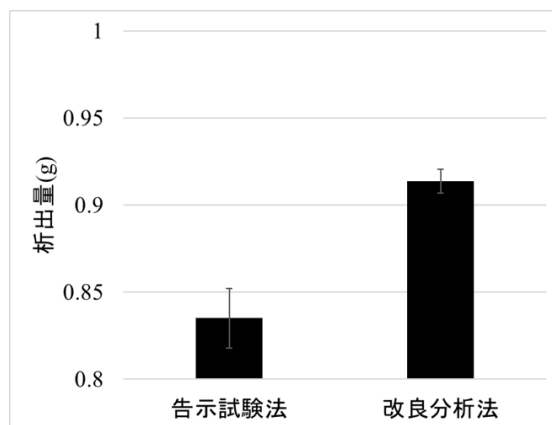


図 7 アセトン添加によるポリマー等の析出量の比較(試料数 : n=5)

したがって、改良分析法ではジクロロメタン 10 mL で試料を溶解させ、アセトン 120 mL でポリマー等を析出させることにした。

②溶媒留去時のキーパー添加

ポリマー析出後のジクロロメタン溶液は HPLC で測定できないため、ジクロロメタンを留去し、水系溶媒の試験溶液とする必要があるが、PH は揮散しやすく、ジクロロメタン留去の際に一部が消失してしまう。そこで、キーパーとしてジエチレングリコールを添加し、PH の揮散抑制を試みた。各濃度のジエチレングリコール-アセトン溶液をポリマー析出後の上清に添加し、ジクロロメタン留去後の PH の残存率を確認した(図 8)。その結果、2 vol%ジエチレングリコール-アセトン溶液 10 mL、10 vol%ジエチレングリコール-アセトン溶液 2 mL、または 20 vol%ジエチレングリコール-アセトン溶液 1 mL を添加した時に PH の揮散が抑制できた。なお、ジエチレングリコールの添加は BPA、BuPH の定量にまったく影響を及ぼさなかった。

今回開発した改良法では、扱いやすさと添加操作を考慮して、10 vol%ジエチレングリコール-アセトン溶液 2 mL を選択し、ポリマー析出後の上清に添加してジクロロ

メタンを留去することとした。

3) 改良 DPC 分析法の性能評価

1日2併行で5日間の試験により得られた分析値を解析した結果、DPCは併行精度0.1~0.3%、室内精度0.3~0.9%、真度98~100%、BPAは併行精度0.2~0.3%、室内精度0.3~1.5%、真度101~102%、PHは

併行精度0.2~0.4%、室内精度0.4~0.7%、真度97~98%、BuPHは併行精度0.2~0.4%、室内精度0.2~0.4%、真度99~100%と推定された(表1)。

以上の結果より、改良分析法は規格を適否判定する分析法として有用であると考えられた。

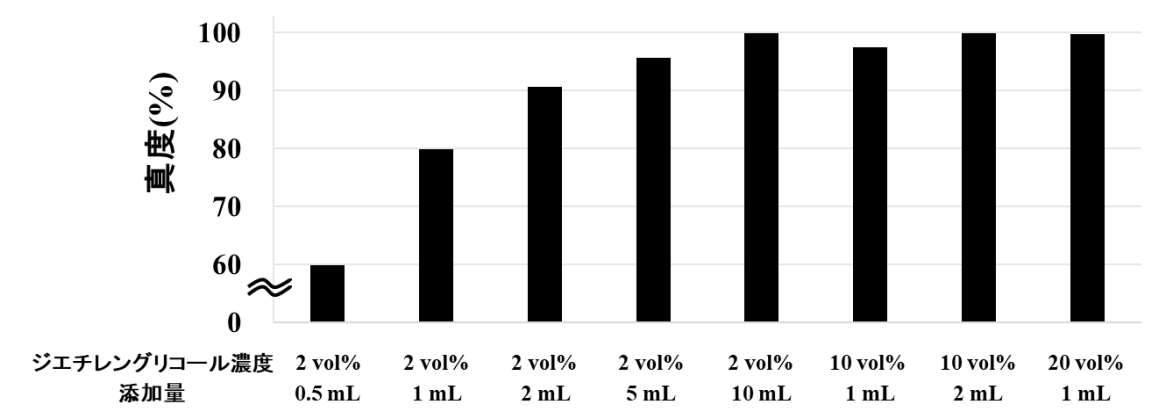


図8 ジエチレングリコール-アセトン溶液の添加濃度と添加量の検討結果(PH)

表1 改良 DPC 分析法の性能評価結果

分析対象化合物	添加濃度 (μg/g)		濃度(μg/g)					平均値 (μg/g)	併行精度 (RSD%)	室内精度 (RSD%)	真度 (%)
			1st	2nd	3rd	4th	5th				
PH	100	sample 1	97.2	98.0	96.1	96.4	96.2	96.9	0.4	0.7	97
		sample 2	97.8	97.4	96.2	96.8	96.8				
	500	sample 1	487	490	484	483	484	486	0.2	0.6	97
		sample 2	489	491	485	484	485				
	800	sample 1	785	786	786	785	786	787	0.4	0.4	98
		sample 2	791	789	791	789	784				
BPA	100	sample 1	100	102	104	103	103	102	0.2	1.5	102
		sample 2	101	101	104	103	103				
	500	sample 1	504	506	508	505	507	506	0.2	0.3	101
		sample 2	504	505	506	507	507				
	800	sample 1	803	804	805	810	812	807	0.3	0.4	101
		sample 2	808	803	810	811	807				
BtPH	100	sample 1	98.0	99.3	98.2	98.4	98.9	98.7	0.4	0.4	99
		sample 2	99.0	99.2	98.7	98.5	98.7				
	500	sample 1	499	500	499	497	500	499	0.2	0.2	100
		sample 2	499	499	497	499	500				
	800	sample 1	796	799	800	803	805	801	0.3	0.3	100
		sample 2	802	799	803	803	801				
DPC	100	sample 1	98.1	99.0	98.8	99.2	99.8	99.2	0.3	0.7	99
		sample 2	98.5	99.3	99.0	99.8	100				
	500	sample 1	496	497	498	499	507	499	0.1	0.3	100
		sample 2	497	498	497	499	501				
	800	sample 1	776	777	780	794	786	783	0.3	0.9	98
		sample 2	777	783	780	791	787				

2. 改良アミン類分析法の検討

また、アミン類告示試験法の問題点として既報²⁾により、TEA 及び TBA をガスクロマトグラフで分析する際、窒素リン検出器(NPD)での感度が低く、定量性も悪いことが判明している。また、TEA と TBA は第3級アミンであるためガラス等への吸着が認められ、コンタミネーションの可能性が考えられた。そこで、既報及び、環境省の報告書^{3) 4)}を参考にアミン類は TEA と TBA の合算値で規格値(1 µg/g)が設定されていることを考慮し、規格値の 1/5 濃度(0.2

µg/g)でも定量可能な分析法を構築した(図9)。

1) TEA 標準品

TEA は常温で液体の物質であり、告示試験法では TEA の標準原液は 99%以上を含む TEA を精密に量りとることで調製することになっている。しかし、TEA は揮発性が高く秤量中に揮散し、精密に量りとることが困難である。このため、調製に使用する標準品を揮発性がなく、常温で固体である TEA 塩酸塩(CAS RN: 554-68-7)に変更した。

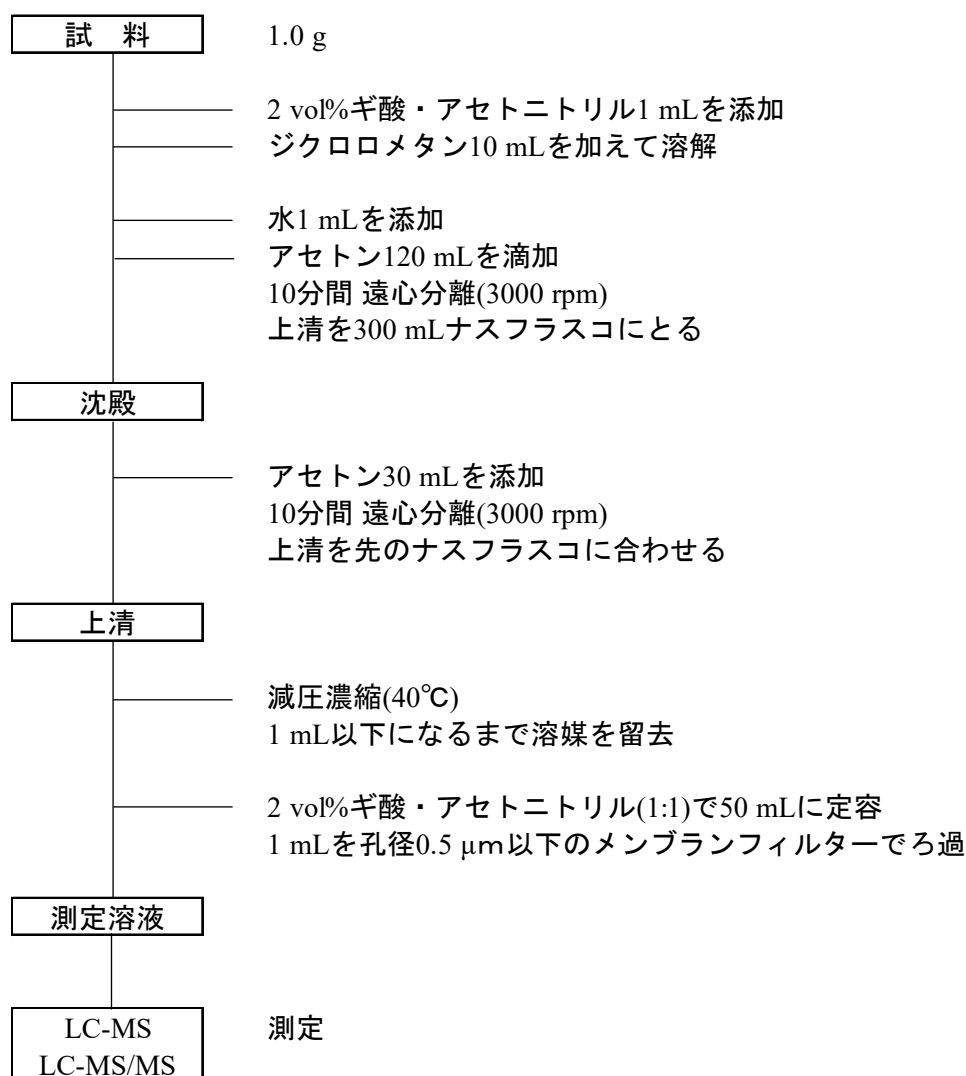


図9 改良アミン類分析法のフローチャート

2) 試料測定溶液調製法

①溶解再沈法における溶媒量

溶解再沈法における溶媒量は、1. 改良DPC分析法と同じとした。

②TEAの揮散抑制

TEAの揮散防止及び分析操作中のガラス器具への吸着抑制を目的に、既報に従いキーパーとして2 vol%濃度となるようにギ酸の添加を検討した。TEAの揮散への対策としては、ギ酸存在下で各分析操作が行われるように、試料測定溶液の調製の開始時(試料のジクロロメタンによる溶解時)からギ酸を添加することにした。

③分析器具への吸着抑制

分析器具への吸着の対応策として、使用するガラス器具及びバイアルを全て最低2 vol%ギ酸以上の水溶液に一晩浸漬し、水で濯いだ後に使用した。

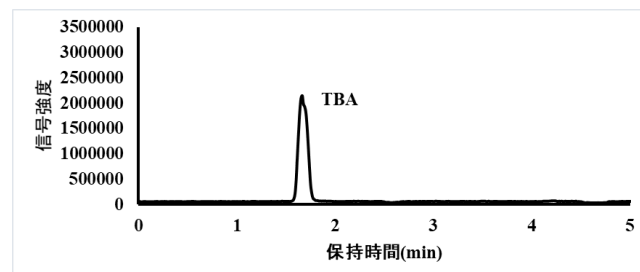
さらに、器具への吸着抑制と分析操作の効率化のため、告示試験法の三角フラスコからフッ素樹脂製遠心瓶の使用、及び遠心から綿栓ろ過への分析工程の変更を検討した。その結果、吸着によるコンタミネーションも抑制され、告示試験法よりも短時間で分析可能となった。なお、分析操作時の遠心分離後または綿栓ろ過後の溶液に析出後の沈殿が混入しても、その後の分析操作や分析値に影響はなかった。

3) 標準溶液及び試料測定溶液の定容溶媒

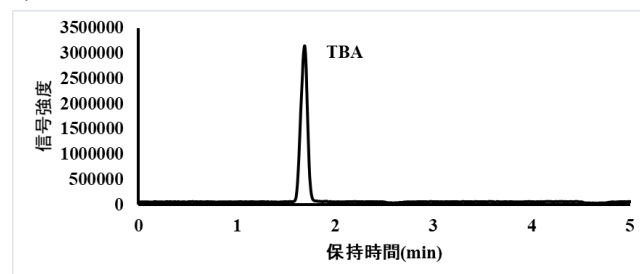
環境省の報告書では、標準溶液及び試料溶液の定容時の溶媒は2%ギ酸である。この時、クロマトグラム上では2化合物のピークの近傍に大きな非特異ピークの出現、ベースラインの落ち込み、ピーク形状の対称性が悪い等の現象が確認された。この原因として、移動相と測定溶液との組成の違いによる影響が考えられた。そこで、定容に用いる溶媒を移動相の組成と近い2 vol%ギ酸/アセトニトリル(1:1)に変更した。

その結果、ピーク形状が改善し、LC-MS(/MS)測定時の感度が上昇した。さらに、ベースラインの落ち込みや非特異ピークの出現も低減化できた(図10)。

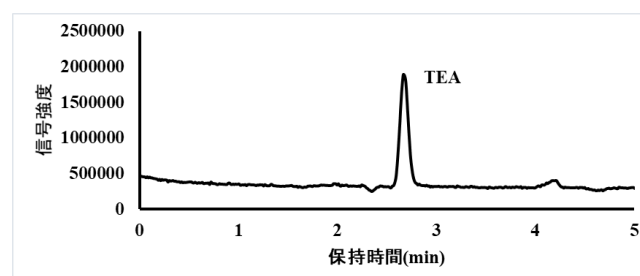
a) 定容溶媒：2 v/v%ギ酸



b) 定容溶媒：2 v/v%ギ酸・アセトニトリル(1:1)



c) 定容溶媒：2 v/v%ギ酸



d) 定容溶媒：2 v/v%ギ酸・アセトニトリル(1:1)

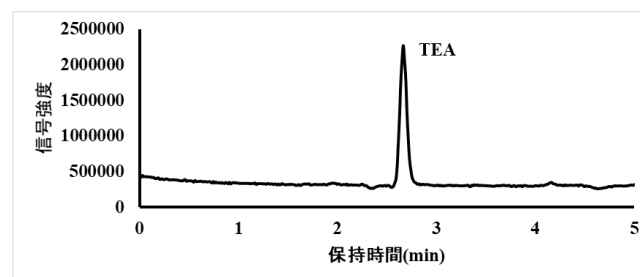


図10 TEA及びTBAのクロマトグラム (SIM)

4) 測定機器及び測定条件

既報及び環境省の報告書でも使用されているように、告示試験法では検出器としてアルカリ熱イオン化検出器(FTD) または NPD が用いられているが、汎用性が低く、所有している試験機関が限られている。そこで、近年普及しており、より高感度で測定可能な LC-MS(/MS)を測定機器として選択し、その分析条件を検討した。

既報では、LC-MS の移動相に 0.1%TFA を用いているが、0.1%ギ酸等と比較して感度が 1/10 程度に低下することが判明している。実際に、この条件で規格値の 1/5 濃度を測定したところ、感度不足により性能評価が困難であった。そこで環境省の報告書をもとに、親水性相互作用クロマトグラフィ(HILIC)による分析条件を検討した。

カラムは各種官能基を検討した結果、2 化合物が最も保持された ZIC-HILIC カラムを用い、移動相は水-アセトニトリル系に変更した。さらに、環境省の報告書と同様の送液条件下で移動相に添加するギ酸及びギ酸アンモニウム濃度を検討した結果、ギ酸及びギ酸アンモニウム濃度が高くなるにつれて、キャリアオーバーが抑制されたが、ピーク割れ及び感度の低下が確認された。そこで、キャリアオーバーが抑制されつつ、定量可能な感度が得られ、ピーク割れが発生しない至適濃度であるギ酸 0.1 vol%、ギ酸アンモニウム 12.5 mM を移動相への添加濃度として選択した。

また、TEA はオートサンプラーのニードル内に残留しやすいことから、ニードルの洗浄液にもギ酸を添加するとともに、TEA が溶解しやすいメタノールも洗浄液に添加した。0.1 vol%ギ酸・50 vol%メタノールを洗浄液とした結果、ニードル内への残留に起因するキャリアオーバーが抑制された。ただし、測定機器により注入口の構造や注入様式や異なるため、洗浄液の組成は

測定機器ごとに最適化する必要があると考えられる。

5) 改良アミン類分析法の性能評価

①併行精度及び室内精度

改良アミン類分析法の性能評価として、1 日 2 併行で 5 日間の分析を行った。その際、HPLC への注入量を 2、5 及び 10 μL 、アミン類の添加濃度を 0.2、1 及び 2 $\mu\text{g/g}$ とした。その結果、TEA はいずれの注入量においても、十分な真度が得られたが、TBA は注入量が 5 及び 10 μL の場合は真度が 90%未満となる場合があった(表 2)。そのため注入量 2 μL の分析値を用いて併行精度と室内精度を解析した。

3 濃度を通じて LC-MS 法の TEA は併行精度 0.7~3.4%、室内精度 1.2~4.8%、真度 93~98%、TBA は併行精度 0.8~2.4%、室内精度 1.2~4.4%、真度 79~97%と推定され、LC-MS/MS 法の TEA は併行精度 0.4~3.5%、室内精度 1.5~7.3%、真度 93~98%、TBA は併行精度 0.4~2.4%、室内精度 1.8~5.7%、真度 78~97%と推定され(表 2)、改良分析法は規格を適否判定する分析法として有用であると考えられた。

②室間共同実験

TEA 及び TBA はガラス器具や装置に吸着しやすく、その程度は試験機関によって大きく異なる可能性があるため、他の試験機関においても同様の性能評価を実施した。各試験所の分析値の解析結果を表 3 に示した。なお、LC-MS 法では 10 試験所中 2 試験所、LC-MS/MS 法では 6 試験所中 1 試験所が共同実験期間中に分析環境が整えられず、分析が成立していなかったことから、解析から除外した。

LC-MS 法における TEA は併行精度 0.9~13%、室内精度 1.4~15%、真度 68~100%、TBA は併行精度 0.5~7.6%、室内精度 1.9~32%、真度 59~101%と推定された。

LC-MS/MS法のTEAは併行精度 0.6~11%、室内精度 2.7~17%、真度 78~102%、TBAは併行精度 1.0~6.0%、室内精度 1.9~17%、真度 67~116%と推定された。精度は、LC-MS法では8試験所中7試験所、LC-MS/MS法では全6試験所の結果が分析対象物質及び添加濃度をとおして室内精度が20%以内であった。真度は、LC-MS法では8試験所中6試験所、LC-MS/MS法では6試験所中5試験所の結果が真度70~120%の範囲内であった。また、検証濃度におけるCodexの規準値設定のためのガイドライン⁴⁾の値(80~110%)と比較すると、LC-MS法では5試

験所、LC-MS/MS法では3試験所の結果が分析対象物質及び添加濃度をとおして、このガイドライン値を満たしていた。

以上の結果より、半数以上の試験所において、一定の性能で分析が可能であったことから改良アミン類分析法はLC-MS法、LC-MS/MS法のいずれも規格の適否を判定する分析法として有用であると考えられた。ただし、十分な性能が得られない試験所があったことから、引き続き器具類への吸着を低減させるための対処法を検討する必要があると考えられた。

表2 改良アミン類分析法の性能評価結果

a) LC-MS法

分析対象 化合物(m/z)	注入量 (μ L)	添加濃度 (μ g/g)	濃度(μ g/g)					平均値 (μ g/g)	併行精度 (RSD%)	室内精度 (RSD%)	真度 (%)	
			1st	2nd	3rd	4th	5th					
TEA (102)	2	0.2	sample 1	0.202	0.184	0.183	0.189	0.196	0.193	1.9	4.8	96
			sample 2	0.209	0.188	0.189	0.187	0.201				
		1	sample 1	0.947	0.945	0.953	0.969	0.966				
			sample 2	1.042	0.964	0.964	0.970	1.009				
		2	sample 1	1.92	1.93	1.98	1.99	1.94				
			sample 2	1.95	1.93	1.99	1.97	2.00				
	5	0.2	sample 1	0.180	0.181	0.178	0.188	0.194	0.187	2.7	3.2	94
			sample 2	0.188	0.187	0.190	0.188	0.196				
		1	sample 1	0.993	0.961	0.967	0.931	0.959				
			sample 2	0.990	0.961	0.985	0.948	0.993				
		2	sample 1	1.93	1.86	2.05	1.98	1.94				
			sample 2	1.94	1.92	2.04	2.00	1.93				
	10	0.2	sample 1	0.192	0.179	0.180	0.183	0.186	0.187	2.2	2.7	93
			sample 2	0.195	0.188	0.190	0.186	0.188				
		1	sample 1	0.985	0.973	0.966	0.970	0.954				
			sample 2	0.990	0.979	0.961	0.976	0.973				
		2	sample 1	1.96	1.90	1.93	1.98	1.91				
			sample 2	1.93	1.92	1.96	1.98	1.93				
TBA (186)	2	0.2	sample 1	0.203	0.182	0.185	0.187	0.200	0.191	1.1	4.4	96
			sample 2	0.197	0.185	0.188	0.185	0.201				
		1	sample 1	0.967	0.954	0.947	0.962	0.956				
			sample 2	1.036	0.941	0.952	0.963	0.982				
		2	sample 1	1.88	1.89	1.91	1.98	1.93				
			sample 2	1.91	1.91	1.88	1.95	2.02				
	5	0.2	sample 1	0.176	0.171	0.166	0.178	0.180	0.175	1.0	2.7	87
			sample 2	0.179	0.172	0.170	0.177	0.179				
		1	sample 1	0.934	0.907	0.906	0.898	0.920				
			sample 2	0.933	0.912	0.913	0.923	0.952				
		2	sample 1	1.84	1.75	1.93	1.84	1.87				
			sample 2	1.84	1.84	1.89	1.89	1.88				
	10	0.2	sample 1	0.162	0.157	0.158	0.157	0.159	0.159	0.8	1.2	79
			sample 2	0.162	0.161	0.159	0.157	0.159				
		1	sample 1	0.859	0.840	0.846	0.837	0.848				
			sample 2	0.875	0.832	0.839	0.837	0.833				
		2	sample 1	1.70	1.69	1.69	1.80	1.70				
			sample 2	1.72	1.72	1.65	1.82	1.75				

b) LC-MS/MS 法

分析对象 化合物(m/z)	注入量 (μ L)	添加濃度 (μ g/g)	濃度(μ g/g)					平均值 (μ g/g)	併行精度 (RSD%)	室内精度 (RSD%)	真度 (%)	
			1st	2nd	3rd	4th	5th					
TEA (74)	2	0.2	sample 1	0.207	0.180	0.180	0.189	0.201	0.193	2.0	7.3	96
			sample 2	0.213	0.184	0.181	0.183	0.209				
		1	sample 1	0.950	0.943	0.935	0.974	0.974				
			sample 2	1.046	0.946	0.966	0.956	1.002				
		2	sample 1	1.92	1.97	1.97	1.97	1.96				
			sample 2	1.93	1.92	1.98	1.95	2.03				
	5	0.2	sample 1	0.183	0.178	0.173	0.193	0.188	0.186	3.4	3.4	93
			sample 2	0.185	0.189	0.189	0.190	0.191				
		1	sample 1	0.983	0.968	0.959	0.945	0.973				
			sample 2	0.991	0.970	0.975	0.960	0.988				
		2	sample 1	1.94	1.86	2.06	2.00	1.95				
			sample 2	1.94	1.92	2.06	2.00	1.93				
	10	0.2	sample 1	0.193	0.189	0.170	0.179	0.185	0.186	2.1	4.5	93
			sample 2	0.196	0.193	0.181	0.180	0.190				
		1	sample 1	0.982	0.979	0.948	0.963	0.957				
			sample 2	1.000	0.992	0.945	0.969	0.966				
		2	sample 1	1.97	1.90	2.00	2.02	1.87				
			sample 2	1.94	1.91	2.00	2.03	1.90				
TEA (58)	2	0.2	sample 1	0.204	0.184	0.180	0.186	0.198	0.193	2.9	6.8	97
			sample 2	0.216	0.191	0.184	0.183	0.208				
		1	sample 1	0.951	0.943	0.934	0.965	0.977				
			sample 2	1.044	0.968	0.957	0.966	1.002				
		2	sample 1	1.92	1.93	1.96	1.99	1.96				
			sample 2	1.94	1.91	1.98	1.97	2.02				
	5	0.2	sample 1	0.181	0.182	0.174	0.191	0.185	0.186	3.3	3.3	93
			sample 2	0.185	0.193	0.187	0.187	0.193				
		1	sample 1	0.981	0.964	0.974	0.943	0.962				
			sample 2	0.992	0.960	0.988	0.957	1.003				
		2	sample 1	1.92	1.85	2.07	2.00	1.95				
			sample 2	1.93	1.92	2.06	2.02	1.94				
	10	0.2	sample 1	0.194	0.191	0.174	0.184	0.184	0.188	2.7	3.8	94
			sample 2	0.199	0.194	0.187	0.189	0.189				
		1	sample 1	0.993	0.985	0.943	0.972	0.961				
			sample 2	0.995	0.987	0.945	0.972	0.972				
		2	sample 1	1.97	1.89	1.98	2.00	1.87				
			sample 2	1.92	1.92	2.00	2.02	1.91				
TBA (130)	2	0.2	sample 1	0.201	0.181	0.180	0.181	0.199	0.189	1.6	5.7	95
			sample 2	0.199	0.185	0.183	0.181	0.206				
		1	sample 1	0.970	0.968	0.937	0.980	0.974				
			sample 2	1.038	0.959	0.953	0.969	0.996				
		2	sample 1	1.87	1.91	1.91	1.96	1.98				
			sample 2	1.91	1.92	1.86	1.93	2.06				
	5	0.2	sample 1	0.176	0.179	0.165	0.184	0.180	0.177	1.6	3.3	88
			sample 2	0.174	0.181	0.171	0.178	0.178				
		1	sample 1	0.950	0.919	0.925	0.912	0.936				
			sample 2	0.964	0.925	0.922	0.954	0.969				
		2	sample 1	1.84	1.76	1.94	1.86	1.89				
			sample 2	1.83	1.83	1.92	1.87	1.89				
	10	0.2	sample 1	0.161	0.158	0.150	0.159	0.156	0.157	0.5	2.7	79
			sample 2	0.161	0.160	0.151	0.159	0.155				
		1	sample 1	0.867	0.862	0.842	0.852	0.850				
			sample 2	0.889	0.849	0.832	0.849	0.832				
		2	sample 1	1.71	1.69	1.75	1.82	1.69				
			sample 2	1.71	1.70	1.68	1.84	1.74				
TBA (57)	2	0.2	sample 1	0.203	0.180	0.182	0.184	0.200	0.190	1.1	5.1	95
			sample 2	0.198	0.183	0.186	0.185	0.201				
		1	sample 1	0.977	0.971	0.954	0.977	0.960				
			sample 2	1.036	0.969	0.948	0.966	0.978				
		2	sample 1	1.92	1.92	1.93	2.00	1.94				
			sample 2	1.94	1.92	1.89	1.97	2.03				
	5	0.2	sample 1	0.172	0.174	0.171	0.183	0.181	0.176	1.3	2.3	88
			sample 2	0.174	0.175	0.175	0.178	0.179				
		1	sample 1	0.951	0.925	0.926	0.914	0.946				
			sample 2	0.941	0.928	0.937	0.942	0.974				
		2	sample 1	1.83	1.76	1.92	1.87	1.90				
			sample 2	1.82	1.84	1.90	1.90	1.88				
	10	0.2	sample 1	0.161	0.155	0.155	0.155	0.156	0.157	0.4	1.8	78
			sample 2	0.162	0.157	0.154	0.155	0.156				
		1	sample 1	0.880	0.859	0.859	0.852	0.857				
			sample 2	0.894	0.853	0.844	0.853	0.841				
		2	sample 1	1.71	1.69	1.71	1.80	1.70				
			sample 2	1.73	1.72	1.65	1.84	1.76				

表3 改良アミン類分析法の室間共同実験の結果

a) LC-MS 法

分析対象 化合物(m/z)	試験所 Code	添加濃度 (µg/g)	濃度(µg/g)					平均値 (µg/g)	併行精度 (RSD%)	室内精度 (RSD%)	真度 (%)		
			1st	2nd	3rd	4th	5th						
TEA (102)	A	0.2	sample 1	0.202	0.184	0.183	0.189	0.196	0.193	1.9	4.8	96	
			sample 2	0.209	0.188	0.189	0.187	0.201					
		1		sample 1	0.947	0.945	0.953	0.969	0.966	0.973	3.4	3.4	97
				sample 2	1.042	0.964	0.964	0.970	1.009				
	B	0.2		sample 1	0.193	0.193	0.190	0.199	0.183	0.192	1.9	2.4	96
				sample 2	0.190	0.189	0.195	0.197	0.192				
		1		sample 1	0.993	0.974	0.931	0.966	0.915	0.957	1.2	3.2	96
				sample 2	0.998	0.982	0.942	0.938	0.934				
	C	0.2		sample 1	0.163	0.184	0.174	0.190	0.188	0.181	4.1	6.8	91
				sample 2	0.172	0.171	0.182	0.205	0.186				
		1		sample 1	0.868	0.924	0.935	0.922	0.892	0.894	3.5	5.2	89
				sample 2	0.785	0.938	0.910	0.878	0.894				
	D	0.2		sample 1	0.191	0.184	0.189	0.187	0.186	0.187	0.9	1.4	93
				sample 2	0.186	0.183	0.189	0.188	0.186				
		1		sample 1	0.931	0.940	0.950	0.932	0.938	0.941	1.5	1.5	94
				sample 2	0.951	0.973	0.927	0.942	0.930				
	E	0.2		sample 1	0.199	0.211	0.195	0.197	0.183	0.201	5.0	7.8	100
				sample 2	0.220	0.223	0.180	0.212	0.188				
		1		sample 1	0.924	0.940	0.931	0.970	0.898	0.941	2.9	3.7	94
				sample 2	0.986	0.901	0.925	1.000	0.934				
	F	0.2		sample 1	0.123	0.187	0.144	0.144	0.149	0.145	7.0	14.2	72
				sample 2	0.112	0.157	0.145	0.143	0.144				
		1		sample 1	0.855	0.855	0.838	0.835	0.816	0.832	3.0	3.6	83
				sample 2	0.790	0.888	0.816	0.830	0.799				
G	0.2		sample 1	0.125	0.137	0.147	0.156	0.144	0.143	6.1	9.7	71	
			sample 2	0.124	0.158	0.152	0.156	0.128					
	1		sample 1	0.852	0.580	0.616	0.773	0.821	0.742	4.3	14.8	74	
			sample 2	0.837	0.659	0.663	0.762	0.859					
H	0.2		sample 1	0.106	0.149	0.142	0.098	0.166	0.136	12.0	15.4	68	
			sample 2	0.135	0.150	0.144	0.132	0.141					
	1		sample 1	0.538	0.612	0.596	0.698	0.858	0.699	12.5	15.2	70	
			sample 2	0.609	0.794	0.764	0.749	0.768					
TBA (186)	A	0.2	sample 1	0.203	0.182	0.185	0.187	0.200	0.191	1.1	4.4	96	
			sample 2	0.197	0.185	0.188	0.185	0.201					
		1		sample 1	0.967	0.954	0.947	0.962	0.956	0.966	2.4	2.8	97
				sample 2	1.036	0.941	0.952	0.963	0.982				
	B	0.2		sample 1	0.188	0.186	0.195	0.186	0.183	0.187	1.8	1.9	93
				sample 2	0.185	0.185	0.187	0.190	0.184				
		1		sample 1	1.001	0.957	0.949	0.951	0.927	0.961	1.7	2.4	96
				sample 2	0.985	0.979	0.943	0.945	0.970				
	C	0.2		sample 1	0.166	0.182	0.196	0.196	0.195	0.185	1.7	6.7	93
				sample 2	0.165	0.180	0.191	0.188	0.194				
		1		sample 1	0.852	0.929	0.942	0.946	0.896	0.900	3.8	5.6	90
				sample 2	0.802	0.921	0.940	0.853	0.920				
	D	0.2		sample 1	0.191	0.192	0.192	0.183	0.190	0.190	0.5	2.2	95
				sample 2	0.193	0.191	0.193	0.182	0.191				
		1		sample 1	0.996	0.987	0.982	0.958	0.962	0.972	1.1	2.0	97
				sample 2	0.994	0.985	0.947	0.957	0.954				
	E	0.2		sample 1	0.174	0.165	0.234	0.228	0.215	0.203	1.9	16.6	101
				sample 2	0.169	0.161	0.231	0.237	0.213				
		1		sample 1	0.962	0.929	0.985	0.968	0.933	0.950	3.6	5.3	95
				sample 2	0.984	0.825	0.987	0.973	0.955				
	F	0.2		sample 1	0.176	0.231	0.174	0.176	0.158	0.179	7.6	11.9	90
				sample 2	0.177	0.188	0.175	0.178	0.156				
		1		sample 1	0.901	0.963	0.893	0.941	0.863	0.912	1.2	5.0	91
				sample 2	0.886	0.991	0.896	0.928	0.857				
G	0.2		sample 1	0.207	0.073	0.129	0.166	0.195	0.157	5.9	32.1	78	
			sample 2	0.195	0.086	0.144	0.183	0.189					
	1		sample 1	0.772	0.417	0.442	0.547	0.756	0.592	2.6	29.8	59	
			sample 2	0.796	0.394	0.451	0.573	0.777					
H	0.2		sample 1	0.151	0.154	0.143	0.129	0.166	0.150	2.7	10.7	75	
			sample 2	0.152	0.153	0.139	0.131	0.178					
	1		sample 1	0.858	0.812	0.859	0.835	0.899	0.864	3.4	3.6	86	
			sample 2	0.889	0.900	0.851	0.840	0.898					

b) LC-MS/MS 法 (TEA の分析結果)

分析対象 化合物(m/z)	試験所 Code	添加濃度 ($\mu\text{g/g}$)	濃度($\mu\text{g/g}$)					平均値 ($\mu\text{g/g}$)	併行精度 (RSD%)	室内精度 (RSD%)	真度 (%)						
			1st	2nd	3rd	4th	5th										
TEA (74)	A	0.2	sample 1	0.207	0.180	0.180	0.189	0.201	0.193	2.0	7.3	96					
			sample 2	0.213	0.184	0.181	0.183	0.209									
		1	sample 1	0.950	0.943	0.935	0.974	0.974									
			sample 2	1.046	0.946	0.966	0.956	1.002									
		B	0.2	sample 1	0.194	0.193	0.191	0.185					0.181	0.189	0.6	2.8	94
				sample 2	0.195	0.190	0.193	0.187					0.181				
	1		sample 1	0.985	0.971	0.964	0.948	0.922									
			sample 2	0.991	0.968	0.935	0.908	0.949									
	C		0.2	sample 1	0.154	0.186	0.190	0.143	0.160	0.164	5.0	11.0	82				
				sample 2	0.160	0.186	0.167	0.147	0.149								
		1	sample 1	0.841	0.871	0.864	0.883	0.819									
			sample 2	0.826	0.870	0.868	0.852	0.781									
		D	0.2	sample 1	0.205	0.177	0.187	0.212	0.189					0.199	6.3	10.2	99
				sample 2	0.226	0.201	0.173	0.230	0.187								
	1		sample 1	0.928	0.931	0.930	0.962	0.924									
			sample 2	0.943	0.886	0.935	0.984	0.969									
	E		0.2	sample 1	0.196	0.201	0.197	0.211	0.190	0.201	4.2	4.2	101				
				sample 2	0.210	0.190	0.202	0.207	0.209								
		1	sample 1	0.948	1.024	1.064	1.021	0.982									
			sample 2	0.892	1.037	1.035	0.968	0.993									
		F	0.2	sample 1	0.185	0.174	0.170	0.184	0.189					0.181	4.6	4.6	91
				sample 2	0.196	0.180	0.185	0.171	0.177								
	1		sample 1	0.909	0.897	0.906	0.903	0.883									
			sample 2	0.970	0.863	0.894	0.905	0.882									
TEA (58)	A		0.2	sample 1	0.204	0.184	0.180	0.186	0.198	0.193	2.9	6.8	97				
				sample 2	0.216	0.191	0.184	0.183	0.208								
		1	sample 1	0.951	0.943	0.934	0.965	0.977									
			sample 2	1.044	0.968	0.957	0.966	1.002									
		B	0.2	sample 1	0.204	0.191	0.203	0.188	0.180					0.191	1.6	4.9	96
				sample 2	0.197	0.186	0.199	0.185	0.180								
	1		sample 1	0.991	0.973	0.970	0.921	0.915									
			sample 2	1.022	0.973	0.956	0.931	0.945									
	C		0.2	sample 1	0.128	0.175	0.133	0.175	0.167	0.155	4.2	17.3	78				
				sample 2	0.122	0.190	0.125	0.168	0.173								
		1	sample 1	0.796	0.890	0.767	0.858	0.826									
			sample 2	0.768	0.907	0.762	0.848	0.815									
		D	0.2	sample 1	0.180	0.180	0.183	0.235	0.177					0.204	10.8	17.2	102
				sample 2	0.205	0.215	0.178	0.283	0.204								
	1		sample 1	0.901	0.903	0.923	0.966	0.934									
			sample 2	0.914	0.876	0.933	1.016	0.968									
	E		0.2	sample 1	0.189	0.204	0.197	0.198	0.190	0.201	5.6	5.6	101				
				sample 2	0.197	0.195	0.213	0.215	0.214								
		1	sample 1	0.950	1.023	1.035	1.004	0.997									
			sample 2	0.889	1.040	1.031	0.968	0.965									
		F	0.2	sample 1	0.186	0.186	0.171	0.167	0.173					0.180	4.0	7.4	90
				sample 2	0.206	0.192	0.165	0.174	0.175								
	1		sample 1	0.928	0.893	0.882	0.889	0.853									
			sample 2	0.931	0.876	0.898	0.901	0.892									

b) LC-MS/MS 法 (TBA の分析結果)

分析対象 化合物(m/z)	試験所 Code	添加濃度 (µg/g)	濃度(µg/g)					平均値 (µg/g)	併行精度 (RSD%)	室内精度 (RSD%)	真度 (%)						
			1st	2nd	3rd	4th	5th										
TBA (130)	A	0.2	sample 1	0.201	0.181	0.180	0.181	0.199	0.189	1.6	5.7	95					
			sample 2	0.199	0.185	0.183	0.181	0.206									
		1	sample 1	0.970	0.968	0.937	0.980	0.974									
			sample 2	1.038	0.959	0.953	0.969	0.996									
		B	0.2	sample 1	0.191	0.190	0.194	0.187					0.183	0.188	1.2	2.0	94
				sample 2	0.190	0.184	0.191	0.187					0.185				
	1		sample 1	1.000	0.955	1.002	0.972	0.964									
			sample 2	0.996	0.958	0.972	0.930	0.968									
	C		0.2	sample 1	0.138	0.168	0.172	0.151	0.162	0.200	2.5	8.4	79				
				sample 2	0.138	0.165	0.165	0.155	0.171								
		1	sample 1	0.831	0.919	0.685	0.876	0.716									
			sample 2	0.797	0.900	0.706	0.866	0.712									
		D	0.2	sample 1	0.172	0.175	0.218	0.236	0.231					0.202	6.0	17.3	101
				sample 2	0.177	0.145	0.195	0.241	0.226								
	1		sample 1	0.985	0.956	1.035	1.048	1.057									
			sample 2	0.996	0.853	1.042	1.039	1.044									
	E		0.2	sample 1	0.232	0.225	0.234	0.241	0.228	0.232	1.0	2.6	116				
				sample 2	0.226	0.225	0.235	0.238	0.232								
		1	sample 1	1.053	1.120	1.153	1.120	1.087									
			sample 2	0.982	1.136	1.149	1.078	1.136									
		F	0.2	sample 1	0.132	0.148	0.141	0.141	0.141					0.141	1.7	5.0	70
				sample 2	0.132	0.153	0.135	0.142	0.142								
	1		sample 1	0.920	0.913	0.955	0.910	0.889									
			sample 2	0.948	0.950	0.958	0.932	0.925									
TBA (57)	A		0.2	sample 1	0.203	0.180	0.182	0.184	0.200	0.190	1.1	5.1	95				
				sample 2	0.198	0.183	0.186	0.185	0.201								
		1	sample 1	0.977	0.971	0.954	0.977	0.960									
			sample 2	1.036	0.969	0.948	0.966	0.978									
		B	0.2	sample 1	0.192	0.187	0.192	0.190	0.184					0.190	1.2	1.9	95
				sample 2	0.195	0.187	0.195	0.192	0.189								
	1		sample 1	1.003	0.968	1.004	0.952	0.942									
			sample 2	1.010	0.950	0.963	0.934	0.968									
	C		0.2	sample 1	0.145	0.177	0.176	0.163	0.162	0.166	3.1	7.4	83				
				sample 2	0.147	0.174	0.170	0.168	0.176								
		1	sample 1	0.879	0.935	0.862	0.886	0.871									
			sample 2	0.852	0.921	0.890	0.875	0.907									
		D	0.2	sample 1	0.193	0.187	0.247	0.258	0.226					0.219	3.4	14.2	109
				sample 2	0.199	0.175	0.230	0.255	0.217								
	1		sample 1	0.981	0.980	1.040	0.954	1.044									
			sample 2	0.996	0.867	1.083	1.015	1.023									
	E		0.2	sample 1	0.228	0.222	0.224	0.238	0.235	0.231	1.3	2.8	115				
				sample 2	0.228	0.224	0.233	0.238	0.238								
		1	sample 1	1.066	1.117	1.112	1.124	1.100									
			sample 2	0.983	1.145	1.125	1.076	1.125									
		F	0.2	sample 1	0.142	0.132	0.143	0.136	0.123					0.134	4.4	7.0	67
				sample 2	0.144	0.138	0.127	0.135	0.117								
	1		sample 1	0.917	0.893	0.961	0.926	0.872									
			sample 2	0.948	0.922	0.963	0.932	0.906									

D. 結論

ポリカーボネートを主成分とする合成樹脂製の器具又は容器包装の材質試験である DPC 試験法及びアミン類試験法について改良法を検討し、その性能を評価した。

現行の DPC 試験法では、標準溶液中の DPC が調製後に分解するため、検量線の直線性が悪く、分析値の真度が低いことが指摘されている。この問題点を解消したうえで BPA(PH 及び BuPH を含む)も同時に分析可能な改良分析法を構築した。その性能を評価した結果、真度、精度ともに妥当な水準にある結果が得られ、改良分析法は規格の適否判定を行うための分析法として利用可能で有用であると考えられた。

現行のアミン類試験法では、TEA の揮散や TEA 及び TBA の器具類への吸着により、分析値の真度が低いことが指摘されている。この問題点を解消したうえで、さらに高い選択性が得られる質量分析計(MS)やタンデム型質量分析計(MS/MS)を利用した改良分析法を構築した。その性能を評価した結果、規格の適否判定を行うための分析法として利用可能で有用であると考えられた。ただし、十分な性能が得られな

い試験所もあったことから、引き続き器具類への吸着を低減させるための対処法を検討する必要があると考えられた。

以上の結果より、改良 DPC 分析法及び改良アミン類分析法ともに規格試験法として適用可能な性能を有していることが考えられ、告示試験法の代替分析法としての使用が期待される。

E. 参考文献

- 1) 佐藤信之：高分子材料，ぶんせき，557，192-197 (2021)
- 2) Haneishi N., Kaneko R., Uematsu Y., Kawamura Y. Analytical method of triethylamine and tributylamine in polycarbonate products. *Jpn. J. Food Chem. Safety*, 20(2), 114-118 (2013)
- 3) 化学物質と環境 平成 22 年度化学物質分析法開発調査報告書，環境省総合環境政策局環境保健部環境安全課，413-460 (2011)
- 4) 化学物質と環境 平成 27 年度化学物質分析法開発調査報告書，環境省総合環境政策局環境保健部環境安全課，851-877 (2016)

<別添>

令和3年度 厚生労働科学研究費補助金（食品の安全確保推進研究事業）

分担研究課題

規格試験法の性能に関する研究

ポリカーボネートを主成分とする合成樹脂製の器具又は容器包装を対象とした材質試験の改良アミン類分析法
共同実験プロトコル

令和3年12月20日

1. 共同実験の目的と注意事項

・目的

本共同実験は、ポリカーボネートを主成分とする合成樹脂製の器具又は容器包装について、食品、添加物等の規格基準(昭和34年厚生省告示第2：80号)で定めるアミン類(トリエチルアミン及びトリブチルアミンに限る。)の規格に適合していることの判定を目的として試験を実施する場合に、材質試験における改良アミン類分析法(定量分析法)の性能評価を目的とする。

・分析に関する全般的な注意事項

1) 計画書に指示された分析法からの変更は認められない。

2) 分析対象であるトリエチルアミン(TEA)およびトリブチルアミン(TBA)のコンタミネーション(主に、ガラス吸着を理由とするコンタミネーション)を予防するために、以下に示す手順で分析器具を洗浄した後に用いること。

【ガラス器具の洗浄手順】

2 vol%以上のギ酸槽を用意する(別添資料 1_図 1)。これに使用するガラス器具を一晩浸漬し、水ですすぎ乾燥させる(以下、ギ酸洗浄)。ギ酸槽を作成するのに用いるギ酸は1級のものでよい。

ギ酸洗浄するガラス器具の例を以下に示す。

三角フラスコ、ナスフラスコ、ホールピペット、メスフラスコ、保存瓶、
測定バイアル

なお、ガラス器具以外の材質の器具は一晩ギ酸槽に浸漬する必要はなく、ギ酸槽に数回潜らせたのち水ですすぎ乾燥させる。

3) 使用する器具によっては事前に校正されていることを確認しておくこと。

・試料の保管に関する注意事項

受領した試料は、分析までの間それぞれの分析プロトコルに示された条件で保管すること。

・分析計画に関する注意事項

1) 「ポリカーボネートを主成分とする合成樹脂製の器具又は容器包装を対象とした材質試験の改良アミン類定量分析法(以下、定量分析法)」にしたがって実施する。

1日にブランク試料(2試料)及び添加試料(2濃度を各2試料で計4試料)を調製し、定量分析法にしたがって、ブランク試料及び添加試料の計6試料を併行分析し、この分析を5日間実施する。なお、分析の実施にあたり、1日に定量分析法による試料の併行分析を複数回行わないこと。

2) 分析1回につき試料を使用せずに同様の分析操作を行う空試験(操作ブランク分析)2点の併行分析を実施する。

- ・ 配付試料の内訳は、以下の通りである。
ポリカーボネート製ボトル：1本(約60 g)
- ・ 分析の実施期間に関する注意事項
分析の実施期間は試料受領後から報告期限までとする。
- ・ 分析結果の報告に関する注意事項
分析結果は、求められた分析に付随する情報とともに、配布された報告様式(エクセルファイル)に入力し、下記のe-mail アドレスまで提出する。
試料に異常があった場合、分析に関する事前紹介先も以下の提出先に同じである。
提出先 (e-mail)：国立医薬品食品衛生研究所食品添加物部
六鹿元雄 (mitsuga@nihs.go.jp)
阿部裕 (y-abe@nihs.go.jp)
片岡洋平 (ykataoka@nihs.go.jp)

【報告様式の内容】

報告シート1…試薬等の情報、分析に関するコメント等

報告シート2…分析条件、測定条件

報告シート3…定量結果

報告シート4…測定溶液の生データ

(定量結果の算出に用いたピーク面積又はピーク高さ)

報告シート5…0.0025 µg/mL 検量線用標準溶液のクロマトグラム(1回分)

【報告様式の報告期限】 令和4年2月28日(月)

定量分析法プロトコル 液体クロマトグラフ-質量分析法(LC-MS法、LC-MS/MS法)

1. 試薬、試液*1

次に示すもの以外は、食品、添加物等の規格基準(昭和34年厚生省告示第370号 以下、告示)第2 添加物の部 C試薬・試液等の項及び第3 器具及び容器包装の部 C試薬・試液等の項に示すものを用いる。

- ・水：市販の分析用精製水を含め、添加濃度の分析対象元素から得られる分析値に影響を及ぼす濃度の含有を認めないもの。
- ・TEA塩酸塩 97%以上を含むもの。
- ・ギ酸：特級以上の試薬を用いる。
- ・ギ酸アンモニウム：特級以上の試薬を用いる。又は、高速液体クロマトグラフィー用 1mol/L ギ酸アンモニウム溶液を用いる。
- ・2 vol%ギ酸：ギ酸20 mLを量りとり、水で1000 mLとする。
- ・2 vol%ギ酸・アセトニトリル：ギ酸20 mLを量りとり、アセトニトリルで1000 mLとする。
- ・2 vol%ギ酸・アセトニトリル(1:1)：2 vol%ギ酸500 mLと2 vol%ギ酸・アセトニトリル 500 mLを混合する。
- ・1000 µg/mL TEA標準原液：TEA塩酸塩を68.0 mgを量りとり、2 vol%ギ酸・アセトニトリルで50 mLに定容する。又は、TEA 50 mgを量りとり、2 vol%ギ酸・アセトニトリルで50 mLに定容する。
- ・1000 µg/mL TBA標準原液：TBA 50 mgを量りとり、2 vol%ギ酸・アセトニトリルで50 mLに定容する。
- ・50 µg/mL混合標準溶液：1000 µg/mL TEA標準原液及び1000 µg/mL TBA標準原液を各1 mL量りとり、2 vol%ギ酸・アセトニトリルで20 mLに定容する。
- ・12.5 µg/mL混合標準溶液：50 µg/mL 混合標準溶液を5 mL量りとり、2 vol%ギ酸・アセトニトリルで20 mLに定容する。
- ・添加用標準溶液A：12.5 µg/mL混合標準溶液を4 mL量りとり、2 vol%ギ酸・アセトニトリルで50 mLに定容する。(TEA及びTBA濃度：1 µg/mL)
- ・添加用標準溶液B：添加用標準溶液Aを5 mL量りとり、2 vol%ギ酸・アセトニトリルで25 mLに定容する。(TEA及びTBA濃度：0.2 µg/mL)
- ・0.125 µg/mL標準溶液：12.5 µg/mL混合標準溶液を1 mL量りとり、2 vol%ギ酸・アセトニトリル(1:1)で100 mLに定容する。(TEA及びTBA濃度：0.125 µg/mL)
- ・12.5 mMギ酸アンモニウム・0.1 vol%ギ酸：ギ酸アンモニウム0.788 g (1mol/L ギ酸アンモニウム溶液の場合は12.5 mL)およびギ酸1 mLを量りとり、水で1000 mLに定容する。
- ・0.1 vol%ギ酸アセトニトリル：ギ酸1 mLを量りとり、アセトニトリルで1000 mLに定容する。

注意事項

- *1 1) 分析対象化合物から得られる分析値に影響を及ぼす不純物等の含有を認めない試薬を使用してもよい。なお、分析に用いる試薬は、新たに開封後の試薬をアミン類分析専用として他の分析に用いる試薬とは区別して用いること(コンタミネーション予防のためであり、特に、ギ酸、アセトニトリル、1mol/L ギ酸アンモニウム溶液は必ずアミン

類分析専用とすること)。

- 2) 分析環境に応じて異なる濃度の標準原液の使用や指示された調製法と同一割合での調製容量を変更してもよい。

2. 器具*2

ホールピペット：容量が1 mL、2 mL、3 mL、4 mL、5 mL、10 mL、20 mLのものを用いる。
マイクロピペット：量りとることができる最大容量が0.2 mL、1 mL及び5 mLのものを用いる。

メスフラスコ：容量が20 mL、25 mL、50 mL、100 mL、1000 mLのものを用いる。

200 mL三角フラスコ

300 mLナスフラスコ

メスシリンダー

攪拌子(回転子)

注意事項

- *2
- 1) フッ素樹脂製の器具がある場合は、それらを用いる方が吸着の懸念が少ない。
 - 2) TEA 及び TBA は光曝露により徐々に分解する可能性があるため、ガラスの保存瓶を用いる場合は褐色の器具や保存瓶を使用するのが望ましい。なお、フッ素樹脂製保存瓶(例、サンプルテック社製、カタログ No. : 18100、容量 : 100 mL : [別添資料 1_図 2](#))を用いることもできる。この場合の標準溶液の保存については、保存瓶にアルミ箔を巻いておくもよい。

3. 機器

- ・スターラー
- ・減圧濃縮器(エバポレーター)
- ・液体クロマトグラフ質量分析計(LC-MS又はLC-MS/MS)

4. 試料

- ・受領した試料は分析までの間は室温で保存し、5 mm角以下に細切して分析に用いること。

5. 分析

5-1. 測定溶液の調製*3

- 1) ブランク試料の場合

試料1.0 gを200 mL三角フラスコに入れ、2 vol%ギ酸・アセトニトリル1 mL及びジクロロメタン10 mLを加えて試料を溶解させる。水を1 mL加えた後、攪拌子でよくかき混ぜながらアセトン120 mLを滴加し不純物を析出させる。毎分3,000回転で10分間遠心分離し、上清を300 mLナスフラスコにとる。沈殿にアセトン30 mLを加えて洗浄後、毎分3,000回転で10分間遠心分離し、上清を先の300 mLナスフラスコにとる。40℃の水浴で加温しつつ、エバポレーターにより1 mL以下まで溶媒を留去する。これを2 vol%ギ酸・アセトニトリル(1:1)で50 mLに定容する。その1 mLを採り、孔径0.5 µm以下のメンブランフィルターでろ過した溶液を測定溶液とする。また、同時に試料を使用しないで、試料と同様の分析操作を行う空試験(操作ブランク分析)も2併行で

実施する。

→ブランク測定溶液1及びブランク測定溶液2

→操作ブランク測定溶液1及び操作ブランク測定溶液2

2) 添加試料の場合

試料1.0 gを200 mL三角フラスコに入れ、添加溶液A又は添加溶液Bを1 mL及びジクロロメタン10 mLを加えて試料を溶解させる。水を1 mL加えた後、攪拌子でよくかき混ぜながらアセトン120 mLを滴加し不純物を析出させる。毎分3,000回転で10分間遠心分離し、上清を300 mLナスフラスコにとる。沈殿にアセトン30 mLを加えて洗浄後、毎分3,000回転で10分間遠心分離し、上清を先の300 mLナスフラスコにとる。40℃の水浴で加温しつつ、エバポレーターにより1 mL以下まで溶媒を留去する。これを2 vol%ギ酸・アセトニトリル(1:1)で50 mLに定容する。その1 mLを採り、孔径0.5 µm以下のメンブランフィルターでろ過した溶液を測定溶液とする。

→添加測定溶液A-1及び添加測定溶液A-2

→添加測定溶液B-1及び添加測定溶液B-2

注意事項

*3 1) 三角フラスコを使用する代わりに、フッ素樹脂製遠心瓶(例、ThermoFisher Scientific社製、カタログ No. : 3127-0250PK、容量 : 250 mL : [別添資料 1_図 3](#))を用いることもできる。

2) 遠心する代わりにろ過することもできる。その場合は、綿栓ろ過でよいが、ガラス漏斗はギ酸洗浄すること([別添資料 1_図 4](#))。この場合の分析概要を[別添資料 2](#)に示す。

3) 遠心分離又は綿栓ろ過後の溶液に析出後の不純物が混じったとしても、その後の操作や分析値に影響ないことを確認している。

4) 測定バイアルはガラス製バイアルの場合、ギ酸洗浄後のもの又は低吸着バイアル(島津ジーエルシー社製 TORAST-H Glass Vial、カタログ No. : 370-04300-03 又は 370-04300-04、容量 : 1.5 mL)を用いること。

(<https://solutions.shimadzu.co.jp/cgi/ac?cmd=1&url=/glc/shopping/vials/level2/f21.html>)

ポリプロピレン製バイアルを用いる場合、LC-MS での測定の際に TBA のピークの近傍に非特異ピークが確認される(各社のポリプロピレン製バイアルで確認している)ので注意する(別添資料 1_図 5)。なお、LC-MS/MS での測定時にはこのピークによる定量への影響はないことを確認している。

5-2. 検量線用測定溶液の調製

0.125 µg/mL 標準溶液を 1 mL、2 mL、3 mL、4 mL、10 mL、20 mL ずつ量りとり、2 vol%ギ酸・アセトニトリル(1:1)で 50 mL に定容した溶液を調製する(各溶液の TEA 及び TBA 濃度は 0.0025 µg/mL、0.005 µg/mL、0.0075 µg/mL、0.01 µg/mL、0.025 µg/mL、0.05 µg/mL)。また、0 µg/mL 検量線用測定溶液として 2 vol%ギ酸・アセトニトリル(1:1)を用いる。

5-3. 測定条件*4

以下に示す以外の測定条件は使用する機器や分析環境に合わせて最適化する。

カラム： スルホベタイン基化学結合型シリカゲルカラム(HILIC カラム)
(内径 2.1 mm、長さ 150 mm、粒子径 3.5 μm)を用いる。

カラム温度 40°C

移動相： A：12.5 mM ギ酸アンモニウム・0.1 vol%ギ酸

B：0.1 vol%ギ酸アセトニトリル

A/B：40/60 (0-10 min)- 100/0 (10-15 min)- 40/60 (15-25 min)

流速：0.2 mL/min

注入量：2 μL

イオン化法：ESI(+)

定量イオンおよび定性イオン (m/z)：

	TEA	TBA
MS 条件	102	186
MS/MS 条件	102→74(定量イオン) 102→58(定性イオン)	186→130(定量イオン) 186→57(定性イオン)

注意事項

- *4
- 1) 使用するカラムとして ZIC-HILIC(メルク社製)が挙げられる。
 - 2) 機器の性能に応じて、移動相条件のうちカラム洗浄時間およびカラム平衡化時間を変更してもよい。
 - 3) TEA はオートサンプラーのニードル等に残留しやすいためキャリーオーバーに注意する。ニードルの洗浄液として 0.1 vol%ギ酸・50 vol%メタノールでキャリーオーバーがほぼ解消されることを確認している(洗浄液中のメタノール含量を 50 vol%以上にする)。
 - 4) 分析環境に応じて測定に注入量を変更することも可とするが、注入量を増やすと TBA の分析値が低くなる場合があることを確認している。

5-4. 検量線用測定溶液及び試料測定溶液の分析

標準溶液及び試料測定溶液の分析順は以下に示すとおりとする*5。

- 1、検量線用測定溶液(0 μg/mL、0.0025 μg/mL、0.005 μg/mL、0.0075 μg/mL、0.01 μg/mL、0.025 μg/mL、0.05 μg/mL)
- 2、操作ブランク測定溶液 1 及び操作ブランク測定溶液 2
- 3、ブランク測定溶液 1 及びブランク測定溶液 2
- 4、添加測定溶液 A-1 及び添加測定溶液 A-2
- 5、添加測定溶液 B-1 及び添加測定溶液 B-2
- 6、検量線用測定溶液(0.025 μg/mL)

注意事項

- *5 分析環境に応じて測定に任意の工程(捨てうち、QC 溶液の測定、洗浄等)を適宜追加してもよい。

以上

R3「材質試験_アミン類」結果報告シート1

(検体・機器・試薬の情報)

1. 試験所名、御担当者名、分析項目

試験所名	御担当者名	
国立医薬品食品衛生研究所	御名前	〇〇〇〇
	email@.....

2. 使用した機器

機器 *1	メーカー	型式	開示の可否 *2	
HPLC	Waters	ACQUITY UPLC H-Class	可	
MS	Waters	Xevo-TQD cronos	可	

3. 使用した試薬等

試薬 *3*4	メーカー	Grade	純度 (%)または濃度
トリエチルアミン塩酸塩	シグマ-アルドリッチ		> 99.0%
トリプチルアミン	和光純薬	和光特級	98%
ギ酸	和光純薬	LCMS用	> 99%
アセトニトリル	関東化学	LC/LCMS用	99.9%
1mol/l 硝酸アンモニウム溶液	和光純薬	高速液体クロマトグラフ用	
超純水	ORGANO	ピュアリーク-ω	比抵抗>18.2MΩ TOC<1ppb
メンブレンフィルター	Millex	PTFE LCR	LG 0.20μm
ジクロロメタン	関東化学	ダイオキシン類分析用(10万倍濃縮)	>99.5%(GC)
アセトン	シグマ-アルドリッチ		>99.5%
メタノール	関東化学	LCMS用	>99.8%(GC)

4. 使用した器具の材質

材質	器具名
ガラス	遠沈瓶以外の器具
PFA	遠沈瓶

5. 器具の洗浄方法

ガラス製器具は、10vol%のギ酸に一晩浸漬後、水でよく濯ぎ風乾後に使用した。PFA製器具は使用前に10vol%のギ酸で数回潜らせた後、水でよく濯ぎ風乾後に使用した。

6. 試料の保存

試料の保存方法	室温
---------	----

7. 試験全体に対する感想・コメントなど

- *1 測定に使用した機種すべてを記入。
- *2 開示してもよいかどうか条件があれば記載
- *3 他に使用した試薬があれば行を追加して記入
- *4 市販の混合標準液を使用した場合はまとめて記載

R3「材質試験_アミン類」結果報告シート2

(測定条件)

試験所名

国立医薬品食品衛生研究所

1. 分析条件、測定条件等*1*2

分析項目	トリブチルアミン・トリエチルアミン
減圧濃縮時の機器の圧力表示値	250 h Pa
1サンプルあたりの減圧時間(概算値)	15分
使用したバイアルの種類・使用法	サーモ製ガラスバイアルを2v/v%ギ酸に一晩浸漬後、水で洗浄してから使用
	HPLC条件
HPLCカラムの種類、サイズ	ZIC-HILIC (150 × 2.1 mm, 3.5 μm)
注入量	2 μL
流速	0.2 mL/min
移動相条件(A/B, 時間)	40/60 (0-10 min)- 100/0 (10-15 min)- 40/60 (15-25 min)
選択して下さい→	MS条件
イオン化モード	ESI(+)
キャピラリー電圧	1000V
コーン電圧	20V
ソース温度	150℃
脱溶媒温度	400℃
コーンガス流量	50L/hr
脱溶媒ガス流量	600L/hr

2. 検出条件

化合物	保持時間 (分)
トリブチルアミン	1.8
トリエチルアミン	2.6

*1 計画書と同じであっても確認のため記入する。

*2 必要に応じて追加する。

R3「材質試験_アミン類」 結果報告シート3

試験所名

1日目

測定

MS

1. 定量結果

測定試料		濃度(μg/g)*1	
		トリブチルアミン	トリエチルアミン
		<i>m/z</i> 186	<i>m/z</i> 102
操作ブランク 測定溶液	1		
	2		
ブランク 測定溶液	1		
	2		
添加測定溶液A	1		
	2		
添加測定溶液B	1		
	2		

2. 検量線情報

分析項目		一次回帰式	相関係数(R)*2
トリブチルアミン	<i>m/z</i> 186		
トリエチルアミン	<i>m/z</i> 102		

3. その他

選択性の確認方法及びその知見
気になった点、測定中のトラブルなど

*1 濃度(μg/g)を記入。有効数字3桁(4桁目を四捨五入)

*2 R2ではなくRで記入。3桁以上記入

R3「材質試験_アミン類」 結果報告シート3

試験所名

1日目

測定

MS/MS

1. 定量結果

測定試料		濃度(μg/g)*1			
		トリブチルアミン		トリエチルアミン	
		m/z 130	m/z 57	m/z 74	m/z 58
操作ブランク 測定溶液	1				
	2				
ブランク 測定溶液	1				
	2				
添加測定溶液A	1				
	2				
添加測定溶液B	1				
	2				

2. 検量線情報

分析項目		一次回帰式	相関係数(R)*2
トリブチルアミン	m/z 130		
	m/z 57		
トリエチルアミン	m/z 74		
	m/z 58		

3. その他

選択性の確認方法及びその知見
気になった点、測定中のトラブルなど

*1 濃度(μg/mL)を記入。有効数字3桁(4桁目を四捨五入)

*2 R2ではなくRで記入。3桁以上記入

R3「材質試験_アミン類」結果報告シート4

試験所名

1日目

測定

MS

1. 検量線情報*1

濃度点(μg/mL)	ピーク面積値	
	トリブチルアミン	トリエチルアミン
	m/z 186	m/z 102
0		
0.0025		
0.005		
0.0075		
0.01		
0.025		
0.05		
0.025(2回目)		

2. 測定結果*1

測定試料		ピーク面積値	
		トリブチルアミン	トリエチルアミン
		m/z 186	m/z 102
操作ブランク 測定溶液	1		
	2		
ブランク 測定溶液	1		
	2		
添加測定溶液A	1		
	2		
添加測定溶液B	1		
	2		

濃度点(μg/mL)	ピーク高さ	
	トリブチルアミン	トリエチルアミン
	m/z 186	m/z 102
0		
0.0025		
0.005		
0.0075		
0.01		
0.025		
0.05		
0.025(2回目)		

測定試料		ピーク高さ	
		トリブチルアミン	トリエチルアミン
		m/z 186	m/z 102
操作ブランク 測定溶液	1		
	2		
ブランク 測定溶液	1		
	2		
添加測定溶液A	1		
	2		
添加測定溶液B	1		
	2		

*1 面積値又は高さが得られない場合は「0」を記入する。

R3「材質試験_アミン類」結果報告シート4

試験所名

1日目

測定

MS/MS

1. 検量線情報*1

濃度点(μg/mL)	ピーク面積値			
	トリブチルアミン		トリエチルアミン	
	m/z 130	m/z 57	m/z 74	m/z 58
0				
0.0025				
0.005				
0.0075				
0.01				
0.025				
0.05				
0.025(2回目)				

濃度点(μg/mL)	ピーク高さ			
	トリブチルアミン		トリエチルアミン	
	m/z 130	m/z 57	m/z 74	m/z 58
0				
0.0025				
0.005				
0.0075				
0.01				
0.025				
0.05				
0.025(2回目)				

2. 測定結果*1

測定試料		ピーク面積値			
		トリブチルアミン		トリエチルアミン	
		m/z 130	m/z 57	m/z 74	m/z 58
操作ブランク 測定溶液	1				
	2				
ブランク 測定溶液	1				
	2				
添加測定溶液A	1				
	2				
添加測定溶液B	1				
	2				

測定試料		ピーク高さ			
		トリブチルアミン		トリエチルアミン	
		m/z 130	m/z 57	m/z 74	m/z 58
操作ブランク 測定溶液	1				
	2				
ブランク 測定溶液	1				
	2				
添加測定溶液A	1				
	2				
添加測定溶液B	1				
	2				

*1 面積値又は高さが得られない場合は「0」を記入する。

＜その3＞ メタクリル酸メチル試験法への HPLC の適用

研究協力者 阿部 裕
研究協力者 山口 未来
研究協力者 片岡 洋平
研究代表者 六鹿 元雄

国立医薬品食品衛生研究所
国立医薬品食品衛生研究所
国立医薬品食品衛生研究所
国立医薬品食品衛生研究所

A. 研究目的

ポリメタクリル酸メチル (PMMA) はメタクリル酸メチル (MMA) を原料モノマーとするポリマーで、メタクリル樹脂やアクリル樹脂とも呼ばれる。透明度が高い、光透過度がガラスよりも優れている、軽くて強靱、耐酸性・耐アルカリ性などの特徴を有しているため、建物や乗り物のガラスの代替、義歯床など幅広い分野で使用される。また、食品用器具・容器包装としては、しょう油差し、計量カップ、コーヒードリッパー、コップなどに使用される。

原料モノマーである MMA のヒト健康への影響については、製品評価技術基盤機構 (NITE) の有害性評価書¹⁾によると、ラットに MMA を吸入または経口投与すると速やかに吸収され体内に分布し、その後速やかに代謝され、メタクリル酸とメタノールに分解される。実験動物に対する MMA の急性毒性値 (LD50 または LC50) は、ラットの経口投与で 7900~9400 mg/kg、吸入ばく露で 7093 (4 時間) ~16800 (2 時間) ppm、ラット経皮 (閉塞貼付) で 7500 mg/kg を示す。また、げっ歯類およびウサギにばく露した場合、眼、皮膚および気道粘膜への刺激作用が観察されることから、皮膚感作性物質と判断される。また、職業ばく露による喘息例も報告される。一方、吸入ばく露による生殖発生毒性と遺伝毒性は確認されず、また、経口による反復投与ではラットに飲水で 2 年間投与した試験で MMA による影響は確認されていない。発がん性についても国際

がん研究機関 (International Agency for Research on Cancer, IARC) はグループ 3 (ヒトに対する発がん性については分類できない物質) に分類している。

PMMA の製造工程において未反応の MMA が残存することがあり、また、残存した MMA は 20%エタノール (EtOH) に溶出しやすいことが報告されている²⁾。そのため食品衛生法では、浸出用液として 20% EtOH を用いる溶出試験 (60°C 30 分間) が規定され、溶出量を 15 µg/mL 以下としている。

その試験法は、溶出試験で得られた試験溶液を、水素炎イオン化検出器付きガスクロマトグラフ (GC-FID) で測定することとされている。しかし、20% EtOH のように水を多く含む溶液を GC-FID に注入すると、注入精度が安定しない場合があり³⁾、また、GC-FID の一部の錆びを促進するなどの問題が生じる。

本研究では、上記の課題を解決するため、高速液体クロマトグラフ (HPLC) を用いた MMA の分析について検討し、その性能を評価した。

B. 研究方法

1. 試料

試料 1 (メタクリル酸樹脂製計量カップ、ネットで購入、熱分解 GC-MS 分析により得られたクロマトグラムから PMMA 製であることを確認) および試料 2 (PMMA 製シート、ポリオレフィン等衛生協議会より供与頂いたもの)。

2. 試薬等

1) 試薬

MMA：純度 >99.8%、安定剤 (6-*tert*-butyl-2,4-xyleneol) 入り、東京化成工業株式会社製

EtOH：残留農薬・PCB 試験用、富士フィルム和光純薬株式会社製

水：ピューリック Ω (オルガノ株式会社製) で製造した超純水。

アセトニトリル：LC-MS 用、関東化学株式会社製

2) 標準原液および標準溶液

MMA 標準原液 (EtOH)：MMA 0.3 g を採り、EtOH を加え 200 mL とした (1500 μg/mL)。

MMA 標準原液 (20% EtOH)：MMA 0.3 g を採り、20% EtOH を加え 200 mL とした (1500 μg/mL)。

MMA 標準溶液 (EtOH)：MMA 標準原液 (EtOH) 1 mL を採り、EtOH を加え 100 mL とした (15 μg/mL)。

MMA 標準溶液 (20% EtOH)：MMA 標準原液 (20%EtOH) 1 mL を採り、20% EtOH を加え 100 mL とした (15 μg/mL)。

3. 装置

HPLC (alliance e2695 Separation Module, 2489 UV/VIS Detector, Waters 社製)

4. HPLC 測定条件

カラム：Inertsil ODS-4、4.6×150 mm, 粒子径 5 μm (ジーエルサイエンス株式会社製)

A 液：水、B 液：アセトニトリル

グラジエント：B 液 25% → 10 分 → 60% → 0.1 分 → 100% (7 分)

流速：1.2 mL/min

注入量：25 μL

カラムオープン温度：35℃

測定波長：205 nm

C. 研究結果及び考察

1. MMA 分析条件の検討

HPLC の分析条件は、JIS T6501 (義歯床用アクリル系レジン中のメタクリル酸メチルモノマーの分析)⁴⁾ を参考に、カラムは ODS 系カラム、移動相はアセトニトリル (ACN)、検出波長は 205 nm とした。JIS T6501 ではカラム長 25 cm のカラムを用いて 66% ACN の isocratic 条件で分析するが、その場合 20% EtOH でも検出される不純物ピークが MMA のピークと重なった (図 1)。そのためこれらのピークが分離可能なグラジエント条件を用いることとし、分析時間を短縮するため 15 cm カラムを用いた。さらに注入量、流速等を最適化し、研究方法で示す測定条件を決定した。そのクロマトグラムを図 2 に示した。

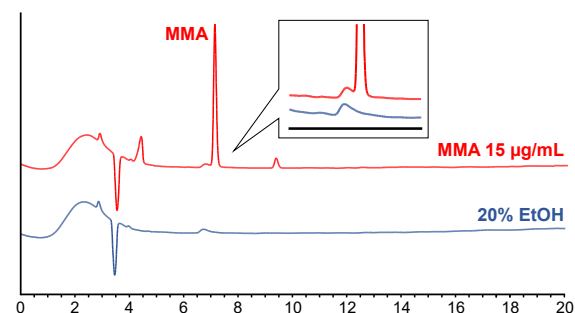


図 1 JIS T6501:2019 の分析条件による MMA 標準溶液 (15 μg/mL 20% EtOH 溶液) のクロマトグラム (205 nm)

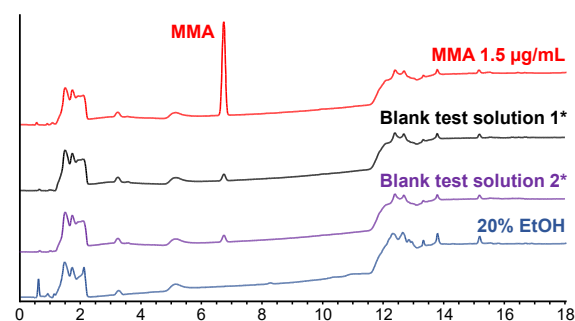


図 2 最適化した分析条件による MMA 標準溶液 (1.5 μg/mL EtOH 溶液) のクロマトグラム (205 nm)

*ブランク溶液 1、ブランク溶液 2

2. 標準溶液および試験溶液の調製

現行の規格試験法における MMA 標準溶液の調製方法は、“メタクリル酸メチル標準溶液 メタクリル酸メチル 1.5 g を採り、20%エタノールに溶かして 1000 mL とする。この液 1 mL を採り、20%エタノールを加えて 100 mL とする。”とされており、まず 1500 $\mu\text{g/mL}$ の 20%EtOH 溶液（標準原液）を調製した後、20%EtOH で 100 倍希釈して標準溶液を調製する。しかし、この方法で調製した MMA 標準溶液（20%EtOH）及び MMA 標準原液（20%EtOH）を経時的に測定したところ、ピーク面積の減少が観察され、MMA が加水分解している可能性が考えられた。溶出試験の浸出用液も同様の 20% EtOH であるため、試料からの MMA 溶出量を正確に測定するには、得られた試験溶液をできるだけ簡易な処理によって、試験溶液中の MMA の分解を抑制する必要がある。そこで、試験溶液を調製後、速やかに EtOH で希釈することにより加水分解の抑制を図った。

MMA 標準溶液（20%EtOH）を EtOH で 10、20、50 および 100 倍にそれぞれ希釈し、経時的に HPLC で測定した。その結果、希釈しない場合は 8 時間で約 15%、一晚（約 16 時間）で約 30%面積値が減少したが、EtOH で 10 倍以上希釈すると MMA の面積値は一晚（約 16 時間）経過後もほとんど変わらず、加水分解を抑制できることを確認した（図 3）。また、MMA 標準溶液（20%EtOH）を 10 倍希釈した後の溶液（MMA 1.5 $\mu\text{g/mL}$ ）のシグナルノイズ比（S/N）は 500 以上であり、限度試験を実施する上で、ピーク強度も十分であった。

次いで、MMA 標準原液の安定性についても検証した。20% EtOH および EtOH で調製した MMA 標準原液を調製し、室温および冷蔵条件で保存した際の MMA の安定性を確認した。MMA 標準原液（20% EtOH）

および MMA 標準原液（EtOH）は測定の直前に EtOH で 100 倍希釈して 15 $\mu\text{g/mL}$ 溶液として測定した。

MMA 標準原液を調製直後（0 日）の MMA の面積値を 100 として、1、2、3、7、10、14 及び 21 日後の MMA の面積値を比較した。その結果、室温で保存した MMA 標準原液（20% EtOH）から調製した場合、MMA の面積値は徐々に低下し、21 日で約 13%低下した。一方、冷蔵保存した MMA 標準原液（20% EtOH）から調製した場合、10 日以降でわずかに減少する傾向がみられた。MMA 標準原液（EtOH）の面積値は、室温保存および冷蔵保存のいずれの場合においても全期間を通して 0 日目の 97%以上であった（図 4）。

このように、MMA 標準原液（20% EtOH）は、冷蔵保存で 1 週間程度まで保管できるが、試験溶液を EtOH で希釈した後に測定することを考慮し、標準原液及び標準溶液は EtOH 溶液とすることとした。

以上の結果から、溶出試験によって得られた試験溶液を EtOH で 10 倍希釈して測定し、MMA 標準溶液は 20%EtOH 溶液から EtOH 溶液に変更することとした。

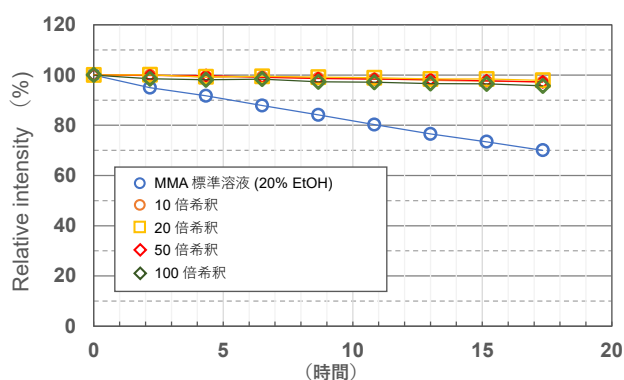


図 3 EtOH 希釈による室温放置下の MMA のピーク面積値の変化

最初に測定したときのピーク面積値を 100 とし、各経過時間における面積値を相対的に示した

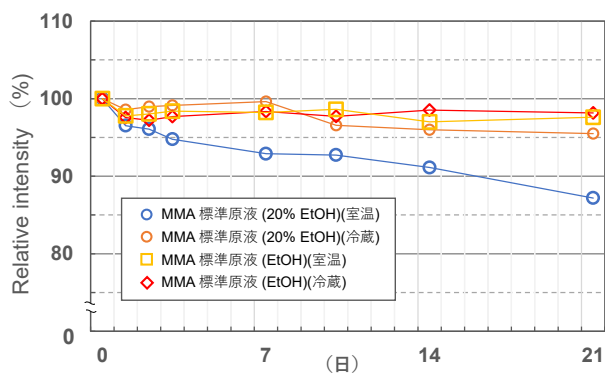


図3 標準原液の安定性

開始時に測定したときのピーク面積値を 100 とし、各経過時間における面積値を相対的に示した

4. 性能評価

1) 限度分析法

PMMA 製試料を用いて限度分析法としての性能を評価した。試料は溶出試験（浸出用液：20% EtOH、条件：60℃ 30 分間）を行い、MMA のピーク面積値が、MMA 1.5 $\mu\text{g/mL}$ における面積値の 1/10 以下（図 2）であった試料 1 および試料 2 を用いた。これらの試料を用いて溶出試験（浸出用液および条件：同上）を行い、得られた試験溶液をそれぞれのブランク溶液とした。また、MMA 標準原液（EtOH）200 μL にブランク溶液を加えて 20 mL としたものを添加溶液とした。各溶液は調製後すみやかに EtOH で 10 倍希釈した。

各溶液について 5 併行で希釈および測定を行った。また MMA 標準溶液（EtOH）は同じものを 5 回繰り返し測定した。

添加溶液のピーク面積値は、ブランク溶液のピーク面積値の平均値（ $n=5$ ）を差し引いた数値を用いた。標準溶液のピーク面積値（ SI_{standard} ）の平均値に対する添加溶液のピーク面積値（ SI_{sample} ）の平均値の比（ SI_{ratio} ）は、添加溶液 1 では 1.00、添加溶液 2 では 0.98 であった。また、 SI_{standard} の相対標準偏差（ S_{standard} ）は 2.4、 SI_{sample} の相対標準偏差（ S_{sample} ）は 3.1 および 1.9 であった（表 1）。いずれも「食品中の有害物質等に関する分

析法の妥当性確認ガイドラインについて」⁵⁾における限度分析の目標値（ $SI_{\text{ratio}} : 0.9-1.0$ 、 $S_{\text{standard}} : < 5$ 、 $S_{\text{sample}} : < 15$ ）を満たしていた。このように今回提案した分析法は告示に示された試験法と比べて検出されるピーク面積値が 1/10 となるが、規格試験法として適用可能な性能を有していることが判明した。

表 1 限度分析法における性能パラメーター

Trial	Peak area		
	SI_{standard}	$SI_{\text{sample 1}}^*$	$SI_{\text{sample 2}}^*$
1	2603	2599	2537
2	2567	2563	2510
3	2525	2502	2448
4	2511	2574	2425
5	2446	2401	2445
AVE	2530	2528	2473
SI_{ratio}	-	1.00	0.98
S_{standard} and S_{sample}	2.4	3.1	1.9

*Peak area: The blank value (average of five trials of blank solutions) was subtracted from each analyzed value.

SI_{standard} : peak area of the MMA standard solution (1.5 $\mu\text{g/mL}$, EtOH)

SI_{sample} : peak area of analytical solution

SI_{ratio} : ratio of SI_{sample} average to SI_{standard} average

S_{standard} : relative standard deviation of SI_{standard} ($n = 5$)

S_{sample} : relative standard deviation of SI_{sample} ($n = 5$)

2) 定量分析法

次いで、定量分析法としての性能を評価した。検量線範囲は規格値相当濃度（1.5 $\mu\text{g/mL}$ ）の 1/5~2 倍の範囲、すなわち 0.3~3 $\mu\text{g/mL}$ の範囲とした。なお、この範囲における検量線の決定係数（ r^2 ）は 0.999 以上と良好な直線性が得られた。また、0.3 $\mu\text{g/mL}$ における S/N は 50 以上であり、十分なシグナル強度であった。以上のことから検量線範囲として問題はないと考えられた。

1) 限度分析法と同様に調製した添加溶液およびブランク溶液について、それぞれ試験者 1 名が 1 日 2 併行で 5 日間分析した。得られた MMA の濃度（ $\mu\text{g/mL}$ ）から真度（%）および一元配置の分散分析により併行精度

(RSD_r%) および室内精度 (RSD_R%) を求めた (表 2)。ただし添加溶液の濃度はブランク溶液の濃度を差し引いた値を用いた。それぞれの添加溶液における真度は 98.5 および 100.5%、RSD_r は 1.2 および 0.6%、RSD_R は 1.9 および 1.0% であった。真度は CODEX ALIMENTARIUS COMMISSION PROCEDURAL MANUAL (27th edition)⁶⁾ が定めるサンプル濃度 10 mg/kg (10 µg/mL に相当) における目標値 (80–110%)、精度は Guidelines on Good Laboratory Practice in Pesticide Residue Analysis (CAC/GL 40)⁷⁾ が設定するサンプル濃度 1 mg/kg (1 µg/mL に相当) 以上における室内性能評価の目標値 (repeatability: 10%, within laboratory reproducibility: 16%) を満たしていたことから、本法の性能が妥当であると判断した。

D. 結論

HPLC を用いた MMA 分析法を検討し、その妥当性を確認した。

HPLC 条件は JIS の方法を参考にし、より分析時間の短い条件とした。また、MMA は 20% EtOH 溶液中で不安定であることが判明したため、試験溶液を調製後速やかに EtOH で 10 倍以上希釈することとし、MMA 標準溶液は 20%EtOH 溶液から EtOH 溶液に変更した。本法は限度分析法及び定量分析法のいずれにおいても規格試験として適用可能な性能を有していることが判明したことから、規格基準に示された GC-FID を使う試験法の代替分析法として使用可能であると考えられた。

E. 参考文献

- 1) 有害性評価書 Ver. 1.0 No.93 メタクリル酸メチル, https://www.nite.go.jp/chem/chrip/chrip_search/dt/pdf/CI_02_001/hazard/hyokasyo/No-93.pdf (最終アクセス日: 令和 4 年 3 月 29 日)
- 2) Ohno, H., Mutsuga, M., Kawamura Y.: Identification and Quantitation of Volatile Organic Compounds in Poly(methyl methacrylate) Kitchen Utensils by Headspace Gas Chromatography/Mass Spectrometry, Journal of AOAC INTERNATIONAL, 97, 1452-1458 (2014).
- 3) 阿部 裕、山口未来、大野浩之、阿部智之、六鹿元雄、佐藤恭子: ナイロン製食品用器具・容器包装のカプロラクタム試験におけるピーク形状改善のための GC 測定条件の検討、日本食品化学学会誌、27, 178-183 (2020).
- 4) 日本産業規格、義歯床用レジン、T6501:2019
- 5) 食品中の有害物質等に関する分析法の妥当性確認ガイドラインについて、食安発 1222 第 8 号 平成 26 年 12 月 22 日
- 6) Codex Alimentarius Commission Procedural Manual (27th edition) (ISSN 1020-8070), Joint FAO/WHO Food Standards Programme (2019).
- 7) Guidelines on Good Laboratory Practice in Pesticide Residue Analysis, CAC/GL 40-1993

表 2 定量分析法における性能パラメーター

Sample	Trial	Concentration (µg/mL)*					Mean (µg/mL)	Trueness (%)	RSD _r (%)	RSD _R (%)
		Day 1	Day 2	Day 3	Day 4	Day 5				
1	1	14.7	14.8	14.4	15.1	14.3	14.8	98.5	1.2	1.9
	2	15.0	15.1	14.7	15.0	14.6				
2	1	15.1	15.1	14.8	15.2	14.9	15.1	100.5	0.6	1.0
	2	15.1	15.2	15.0	15.3	15.0				

*Concentration: The blank value (average of five trials of blank solutions) was subtracted from each quantified value of test solutions.

市販製品に残存する化学物質に関する研究

研究分担者 阿部 裕 国立医薬品食品衛生研究所 主任研究官

研究要旨

器具・容器包装及び乳幼児用おもちゃ（以下、器具・容器包装等）は合成樹脂、ゴム、金属など多種多様な材質で製造される。これらには原料、添加剤、不純物等の様々な化学物質が残存し、食品や唾液を介してヒトがばく露する可能性がある。したがって、器具・容器包装等の安全性を確保するためには、製品に残存する化学物質および食品等へ移行する化学物質の種類や量を把握することが重要である。そこで今年度は、市販製品に残存する化学物質に関する研究として、ポリ塩化ビニル（PVC）製おもちゃの使用可塑剤調査、並びに乳幼児用おもちゃにおける過マンガン酸カリウム（ KMnO_4 ）消費量および総有機炭素（TOC）量の関係について調査した。また、昨年度に引き続き、合成樹脂製器具・容器包装に含有される非意図的添加物質（NIAS）の探索と、電子レンジ加熱時の温度に関する検討を行った。

PVC 製おもちゃの使用可塑剤調査については、2019-2020 年に購入した 220 検体を対象に可塑剤の検出率および含有量を調査し、2009 年度および 2014 年度の調査結果と比較した。その結果、フタル酸エステル類（PAEs）は指定おもちゃではフタル酸ジイソブチル（DIBP）のみ検出し、一部の試料では主可塑剤として使用されていることが判明した。また、指定外おもちゃでも DIBP の検出率および含有量がわずかに増加傾向にあった。一方フタル酸ジブチル（DBP）やフタル酸ジ(2-エチルヘキシル)（DEHP）の使用頻度は大幅に減少していた。その他の可塑剤については、指定おもちゃおよび指定外おもちゃのいずれにおいても、テレフタル酸ジ(2-エチルヘキシル)（DEHTP）が主要な可塑剤であった。また、1,2-シクロヘキサンジカルボン酸ジイソノニル（DINCH）も継続して高頻度・高濃度で検出した。一方、アセチルクエン酸トリブチル（ATBC）がクエン酸トリブチル（TBC）へ切り替わっている可能性、アジピン酸エステル系可塑剤の使用頻度の減少、フタル酸エステルと推定される新たな可塑剤が使用されている可能性も明らかとなった。

乳幼児用おもちゃにおける KMnO_4 消費量および TOC 量の関係については、軟質 PVC 118 検体、硬質 PVC 8 検体およびポリプロピレン（PP） 81 検体を対象とした。全ての軟質 PVC から KMnO_4 消費量および TOC 量がそれぞれ $0.78\sim 14.3\ \mu\text{g}/\text{mL}$ および $0.50\sim 17.5\ \mu\text{g}/\text{mL}$ 検出された。また、 KMnO_4 消費量および TOC 量には正の相関が確認された。一方、硬質 PVC および PP ではいずれも定量下限（ $0.5\ \mu\text{g}/\text{mL}$ ）未満であった。これらは過去の報告と同様の傾向であった。乳幼児用おもちゃを対象とした KMnO_4

消費量および TOC 量に関する調査報告は少なく、本成果は規格基準改正の参考情報として活用が期待された。

合成樹脂製器具・容器包装に含有される NIAS の探索においては、昨年度に引き続き PP を対象とし、添加剤の種類と添加量をあらかじめ設定したモデル試料を作製し、GC-MS および LC-QTOFMS を用いて NIAS の把握を試みた。その結果、ペレットから試験片に加工する工程においては、NIAS が大きく増加・生成することはないことが示された。一方、5 種類の汎用添加剤を添加した試験片および添加しない試験片を比較したところ、試料作製工程において添加剤に由来する分解物や不純物、製造工程で混入が疑われる化合物の他、由来不明の化合物も確認された。これらの分析においては、GC-MS もしくは LC-QTOMS のどちらか一方でのみ検出されたものが多かったことから、NIAS 把握のためには検出原理等の異なる複数の分析手法を用いるべきであることが示された。また、GC-MS や LC-QTOFMS 用のデータライブラリーの拡充が必要であると考えられた。

電子レンジ加熱時の温度に関する検討については、液体または液状の内容物を対象に電子レンジ加熱時の温度推移を確認するとともに、加熱する際の条件とその設定根拠について検証した。サイズ、形状、材質の異なる容器に水をいれ種々の条件で昇温温度の時間を比較した。出力数 (W) と加熱時間には理論通り反比例の関係にあったことから調整は容易であった。また、容器の材質による違いは影響が小さいことが示唆された。一方、加熱対象物の形状や量が変わるとマイクロ波を受ける面積が変わるため、加熱時間は対象物の表面積を考慮して設定する必要があるがあった。また、酒類や油分は加熱されやすいため、これらを多く含む食品を加熱する場合は、加熱しすぎないように加熱時間を調節する必要があるがあった。

研究協力者

浅川大地：大阪市立環境科学研究センター
尾崎麻子：(地独) 大阪健康安全基盤研究所
片岡洋平：国立医薬品食品衛生研究所
岸 映里：(地独) 大阪健康安全基盤研究所
水口智晴：(地独) 大阪健康安全基盤研究所
六鹿元雄：国立医薬品食品衛生研究所
山口未来：国立医薬品食品衛生研究所

研究発表

1. 論文発表

なし

2. 講演、学会発表等

- 1) 山口未来、阿部 裕、片岡洋平、六鹿元雄、佐藤恭子：電子レンジ調理時の食品の温度変化、第 58 回全国衛生化学技術協議会年会 (2021.11)

健康危害情報

なし

知的財産権の出願・登録状況

なし

<その1> 合成樹脂製器具・容器包装に含有される非意図的添加物質の探索（2）

研究協力者	尾崎麻子	（地独）大阪健康安全基盤研究所
研究協力者	水口智晴	（地独）大阪健康安全基盤研究所
研究協力者	岸 映里	（地独）大阪健康安全基盤研究所
研究協力者	浅川大地	大阪市立環境科学研究センター
研究協力者	片岡洋平	国立医薬品食品衛生研究所
研究分担者	阿部 裕	国立医薬品食品衛生研究所

A. 研究目的

2020年6月に器具・容器包装の原材料である合成樹脂にポジティブリスト（PL）制度が施行された。これにより、安全性を評価された基ポリマーや添加剤等のみが使用可能となった。PL制度の対象は、基ポリマーや添加剤等の「最終製品に残存することを意図して用いられる物質」であるが、最終製品には意図的に用いられる基ポリマーや添加剤等だけでなく、合成樹脂や添加剤等の分解物、不純物、副生成物、汚染物質といった非意図的添加物質（Non-Intentionally Added Substance：NIAS）が含まれる可能性があり、PL制度への適合性を確認するためには、最終製品の分析等により検出された物質を意図的添加物質とNIASに判別する必要がある。

我々は昨年度、合成樹脂製器具・容器包装に含有されるNIASを把握するために、汎用樹脂であるポリプロピレン（PP）製品24検体を用いてGC-MSを用いた網羅的分析により含有物質を調査した¹⁾。検出された物質についてライブラリー検索等によって物質同定を試みた結果、滑剤であるステアリン酸やオレアミド、界面活性剤であるモノパルミチン及びモノステアリン、酸化防止剤であるIrgafos 168等のPL収載物質が同定または推定された。一方、滑剤や酸化防止剤由来のNIASの含有も示唆されたが、それらの多くは物質同定も、NIASであるかどうかの判定も困難であった。また、ポリマー由来の

NIASと推定されるpolyolefin oligomeric hydrocarbons（POH）や脂肪族アルコール類も多数検出されたが、物質同定には至らなかった。このように、市販製品では使用されている添加剤をあらかじめ把握することができないため、検出された物質が意図的に添加された添加剤か、NIASかを判別することが困難であった。さらに、物質の同定にも課題が残った。

そこで、今年度も引き続きPPを対象とし、添加剤の種類と添加量をあらかじめ設定したモデル試料を作製し、シート作製時の含有物質の変化を観察することで主に添加剤由来のNIASの把握を試みた。さらに、GC-MSでは検出不可能な物質の分析のため液体クロマトグラフ-飛行時間型質量分析計（LC-QTOFMS）を用いた物質同定の検討も行った。

B. 研究方法

1. 試料

PP製の樹脂ペレット及びそれらを加工してシート化した試験片を用いた。試験片は、添加剤を加えずに作製した無添加試験片と、各種添加剤をそれぞれ1%添加した添加試験片とし、大きさは10 cm×20 cm（厚さ2 mm）とした。樹脂ペレットは株式会社スタンダードテストピースより購入し、試験片の作製も同社に依頼した。

2. 試薬及び試液

1) 試薬等

①モデル試料作製用

2,6-ジ-*tert*-ブチル-*p*-クレゾール (BHT、>99.0%)、モノパルミチン (>95.0%)、エルカ酸アミド (>85.0%)、Irgafos 168 (>98.0%)、Irganox 1010 (>95.0%)、以上東京化成工業株式会社製

②試験溶液調製用

シクロヘキサン、アセトニトリル、アセトン、ヘキサン：残留農薬・PCB 分析用、富士フイルム和光純薬株式会社製

2-プロパノール：高速液体クロマトグラフ用、富士フイルム和光純薬株式会社製

メンブランフィルター：DISMIC、親水性 PTFE、0.45 μm 、アドバンテック東洋株式会社製

③ GC-MS 用

保持指標 (RI) 標準物質：*n*-アルカン混合標準液 (C8~C40)、各 1,000 $\mu\text{g/mL}$ (ヘキサン溶液)、Merck 社製

フェナントレン-*d*10：環境分析用、>98.0%、関東化学株式会社製

④ LC-QTOFMS 用

メタノール：LC/MS 用、>99.8%、関東化学株式会社製

酢酸アンモニウム溶液 (1 mol/L)：高速液体クロマトグラフ用、富士フイルム和光純薬株式会社製

RI 標準物質：三級トリアルキルアミン 8 種 (C2：トリエチルアミン (特級、>99.0%、キシダ化学株式会社)、C3：トリプロピルアミン、C4：トリブチルアミン、C5：トリアミルアミン、C7：トリヘプチルアミン、C8：トリオクチルアミン、C9：トリノニルアミン、C10：トリ-*n*-デシルアミン (>97.0%、東京化成工業株式会社))

2) 試液

① GC-MS 用

RI 混合標準溶液：*n*-アルカン混合標準溶液 (C8~C40) は *n*-アルカン混合標準液をヘキサンで希釈して各 10 $\mu\text{g/mL}$ とした。

フェナントレン-*d*10 溶液：フェナントレン-*d*10 を 50 mg とり、アセトンを加えて 50 mL とした (1,000 $\mu\text{g/mL}$)。これをさらにアセトンで希釈して 10 $\mu\text{g/mL}$ とした。

② LC-QTOFMS 用

RI 混合標準溶液：三級トリアルキルアミン (アルキル鎖長 C2~C10) は、C2~C10 を各 100 mg とり、C2~7 はそれぞれメタノールで、C8~10 はそれぞれアセトンで 10 mL とした (10,000 $\mu\text{g/mL}$)。これを適宜メタノールで希釈し、C2~7 は 50 $\mu\text{g/mL}$ 、C8~10 は 10 $\mu\text{g/mL}$ の混合標準溶液とした。さらにメタノールで 100 倍希釈し、C2~7 は 500 ng/mL、C8~10 は 100 ng/mL とした。

3. 装置

ガスクロマトグラフ-質量分析計 (GC-MS)：ガスクロマトグラフ 7890B GC、質量分析計 5977B MSD、Agilent Technologies 社製

液体クロマトグラフ-四重極飛行時間型質量分析装置 (LC-QTOFMS)：液体クロマトグラフ ExionLC AD、QTOFMS X500R、株式会社エービー・サイエックス製

恒温槽：CRB-32、日本フリーザー株式会社製

4. 試験溶液の調製

試料は 2~3 mm 角に細切し、その 0.50 g にシクロヘキサン・2-プロパノール (1 : 1) 混液 10 mL を加え、37°C の恒温槽中に静置して一晩浸漬後メンブランフィルターでろ過した。ろ液 5.0 mL を窒素気流下 40°C で約 0.2 mL まで濃縮した。50°C に加温したアセトニトリルを約 4.5 mL 加えて十分に攪拌したのち、冷後

アセトニトリルを加えて全量を 5.0 mL とした。その一部をメンブランフィルターでろ過し、ろ液を GC-MS 用及び LC-QTOFMS 用の試験溶液とした。

5. GC-MS 条件

1) 測定条件

カラム：DB-5MS (0.25 mm i.d.×30 m、膜厚 0.25 µm、Agilent Technologies 社製)

カラム温度：40°C (2 分間保持) -10°C/min (昇温) -300°C (10 分間保持)

注入口温度：250°C

注入モード：スプリットレス

注入量：1 µL

キャリアーガス及び流量：He 約 1.0 mL/min (定流量、フェナントレン-*d*10 を用いて保持時間を固定)

トランスファーライン温度：280°C

イオン源温度：230°C

四重極温度：150°C

測定モード：SCAN (m/z ：40~800)

2) 解析条件

①ソフトウェア

MassHunter Unknowns Analysis (Agilent Technologies 社製)

②自動定性解析条件

ライブラリー：NIST20 をベースとし、以前の研究²⁾において得られた器具・容器包装関連物質 (152 物質) のマススペクトル及び RI 情報を追加したもの

S/N：10 以上

面積フィルタ：ピーク面積値 10,000 以上

ピーク最大数：1,000

一致率：70%以上

ヒット候補最大数：3

③ RI

昨年度と同様に、*n*-アルカン (C8~C40)

を測定することにより試料から検出された各ピークの RI を算出し、Unknowns Analysis において推定された物質について、さらに RI 比が 0.9~1.1 の物質に絞り込んだ。

④推定及び同定

①~③の条件により検出された化合物の「推定」を行った。さらに、一部の「推定」された化合物については、市販標準品の測定を行い、そのマススペクトル及び RI が試料から検出されたピークと一致することを確認して「同定」した。

6. LC-QTOFMS 条件

1) 測定条件

カラム：ACQUITY UPLC BEH C18 Column (1.7 µm、2.1 mm×150 mm、Waters 社製)

カラム温度：35°C

移動相：A. 5 % メタノール (10 mM 酢酸アンモニウム)、B. 95 % メタノール (10 mM 酢酸アンモニウム)

グラジエント：移動相 B 濃度 2 - 100 % (at 0 - 10 min、linear) - 100 % (at 10 - 40 min) - 2 % (at 40 - 50 min)

流速：0.2 mL/min

注入量：5 µL

イオン化：ESI(+)

サーベイスキャン測定範囲： m/z 50-1200

MS/MS スキャン：データ依存型

キャピラリー温度：300°C

キャピラリー電圧：5,500 V

コリジョン電圧：35V (CE spread 15V)

2) 解析条件

①ソフトウェア

SCIEX OS (株式会社エービー・サイエックス製)

② RI

8 種類の三級トリアルキルアミン (アルキ

ル鎖長 C2~C10) を測定することにより検出された物質の RI 値を次式にて算出した。

$$RI(X) = 100n + 100 \times \frac{RT(X) - RT(n)}{RT(n+1) - RT(n)}$$

$$RT(n) < RT(X) < RT(n+1)$$

RI (X) : 物質 X の RI

n : 三級トリアルキルアミンのアルキル鎖の炭素数

RT (n) : n 個の炭素数を持つ三級トリアルキルアミンの保持時間

RT (n+1) : (n+1) 個の炭素数を持つ三級トリアルキルアミンの保持時間

RT (X) : 物質 X の保持時間

③定性解析

汎用添加剤や予測される NIAS を含む計 322 種類の化合物についてあらかじめ分子式等を集約したデータベースを作成し、SCIEX OS にて計算精密質量値から物質の検索を行った。検出された化合物については、精密質量及び同位体分布から「推定」し、標準品がある化合物はマススペクトル及び RI から「同定」した。

C. 研究結果及び考察

1. モデル試料の作成

1) PP ペレットの分析

はじめに、モデル試料の作製に使用する PP ペレットを選定するために、少量販売されている PP ペレット 9 検体について GC-MS による分析を行った。得られたトータルイオンクロマトグラムを抜粋を図 1 に示した。9 検体全てにおいて 9 分から 30 分の間に POH に由来する繰り返しのピーク群が検出された。なお、POH は PP やポリエチレン等のポリオレフィン製造時の副生成物としてその後の工程においても除去されることなく最終製品中に残存する NIAS である^{3)~5)}。また、ペレット 2

Irgafos 168 が検出された。なお、ペレット 2 からは Irganox 1010 の分解物である 7,9-di-tert-butyl-1-oxaspiro(4,5)deca-6,9-diene-2,8-dione⁶⁾が検出されたことから、酸化防止剤として Irganox 1010 が使用されていることが示唆された。このように、酸化防止剤がペレットの段階で既に使用されていた。その他、紫外線吸収剤である bis(2,2,6,6-tetramethyl-4-piperidyl) sebacate (Tinuvin 770) が 4 検体から、滑剤であるエルカ酸アミドが 1 検体から検出された。

2) PP ペレットの選定

モデル試料作製時にペレットにあらかじめ含まれる物質は少ない方が NIAS の把握が容易になると考えられた。そこで、POH のピーク強度が最も小さく、かつ Irgafos 168 が主な添加剤であったペレット 1 と、Irgafos 168 が検出されなかったペレット 2 の 2 種類を用いてモデル試料を作製することにした。

3) 添加剤の選定

添加剤由来の NIAS について検討するために、モデル試料に練りこむ添加剤を選定した。選定基準としては、昨年度の PP 製品の検討において実際に製品から検出された物質であり、かつ入手できる試薬の純度が高くなるべく高いものとした。

滑剤としては脂肪酸アミド系のオレアミドの検出頻度が最も高かったが、市販されている試薬の純度が 65%と比較的低かったことから、純度 85%のものが入手出来たエルカ酸アミドを選定した。界面活性剤としてモノパルミチン及びモノステアリンが PP 製品から検出されていたが、モノステアリンは試薬純度が 60%と低かったことから、純度 95%のものが入手可能であったモノパルミチンを選定した。酸化防止剤としては、BHT、Irgafos 168

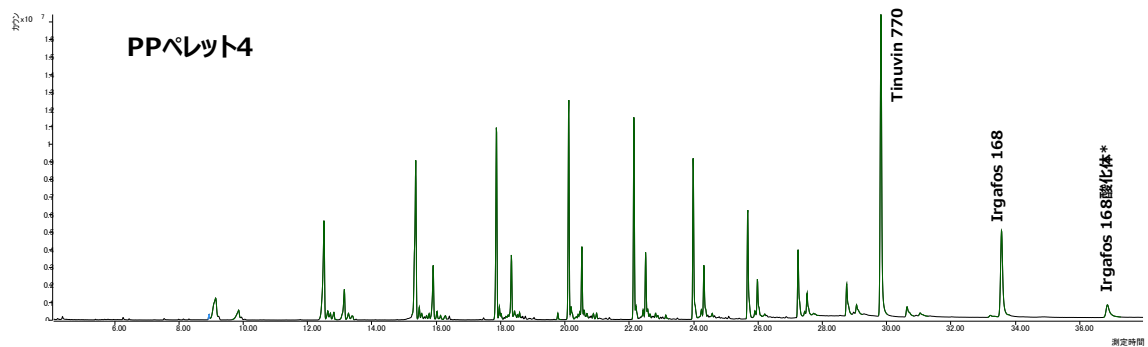
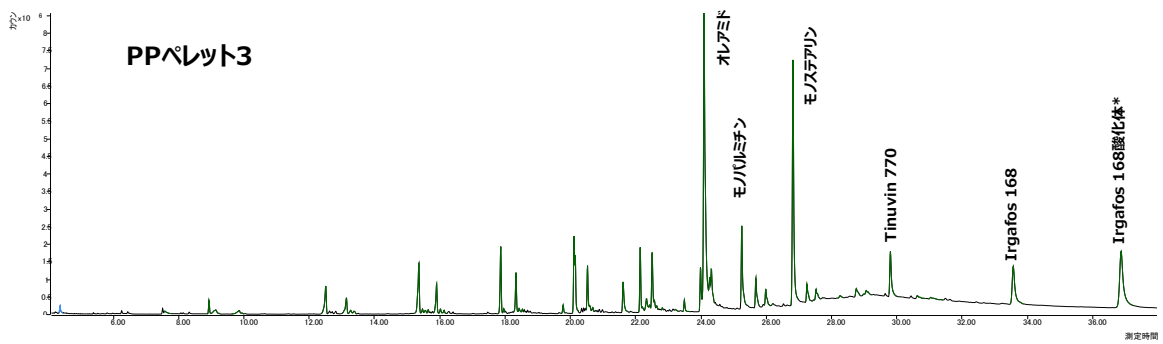
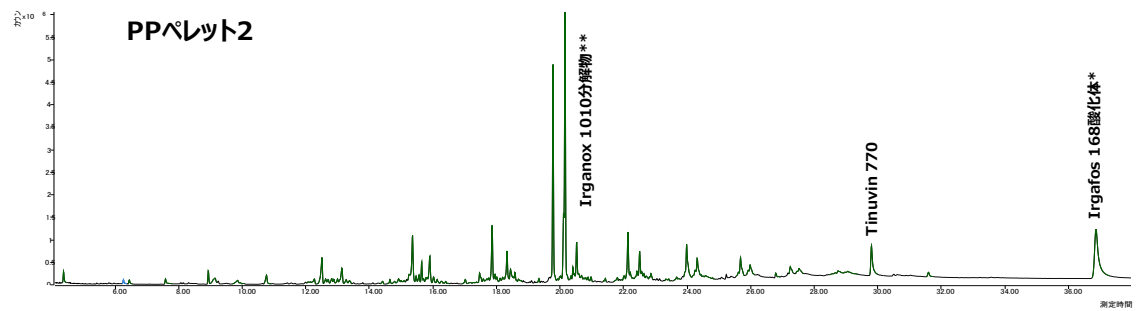
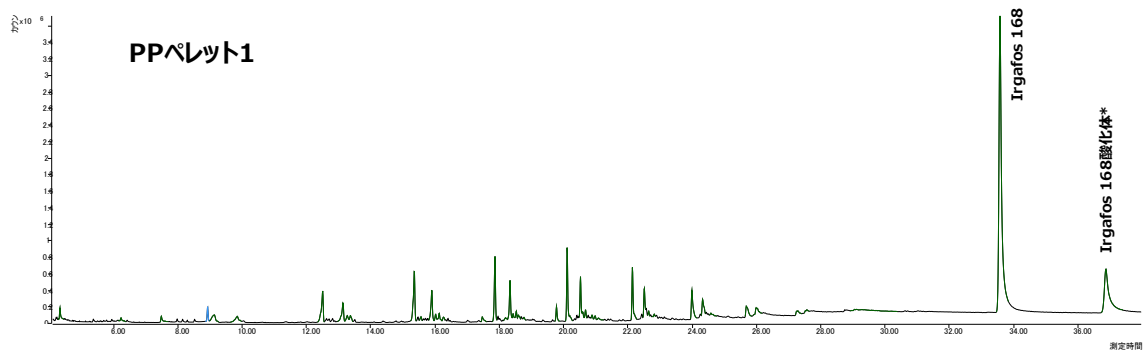


図1 ポリプロピレン (PP) ペレットのトータルイオンクロマトグラム (抜粋)

* : Tris(2,4-di-*tert*-butylphenyl) phosphate, ** : 7,9-Di-*tert*-butyl-1-oxaspiro(4,5)deca-6,9-diene-2,8-dione

及び Irganox 1010 の 3 種類を選定した。それぞれの添加剤を一般的な添加量である 1% となるように添加した試験片と無添加の試験片を作製するよう設計した (表 1)。

上記で選定した各種添加剤を株式会社スタンダードテストピースに送付して試験片の作製を依頼した。

2. GC-MS による PP ペレット、添加剤及び試験片の解析結果

PP ペレット、添加剤及びそれらから作製した試験片に含有される化合物を解析した。なお、PP ペレットと無添加試験片の含有化合物を比較することで、主にペレットから試験片に加工する際に生成したポリマー由来の NIAS を調査した。また、無添加試験片と添加試験片の含有化合物を比較することで添加剤を練りこんで試験片に加工する際に生成する添加剤由来の NIAS を調査した。さらに、添加剤自体に不純物や分解物等の NIAS が含まれている可能性があることから、添加剤由

来の NIAS についても測定を行った。

1) PP ペレットと無添加試験片の解析結果

PP ペレットと無添加試験片に含有される化合物を解析し、無添加試験片のみで検出された化合物を NIAS とした。さらに、PP ペレットと無添加試験片の両方で検出された化合物については、無添加試験片におけるピーク面積値が、その基となる PP ペレットにおける面積値の 3 倍以上であった化合物を NIAS とした。

その結果を表 2 に示す。なお、POH については面積値が比較的大きい 3 物質について表に示した。試験片 1-0 においては、ペレット 1 と比較して octadecanoic acid (ステアリン酸) に若干増加が見られ、squalene が新たに検出された。一方、ポリマー由来である POH のピーク種類や面積値に大きな変化は見られなかった。さらに、PP ペレットに元々含有されていた酸化防止剤の Irgafos 168 及びその酸化体にも変化は見られなかった。

表 1 モデル試料の設計

ポリプロピレン ペレットの種類 ¹⁾	加工 ²⁾	略称	添加剤		
			種類	CAS No.	添加量
ペレット1	なし	ペレット1	—	—	—
	試験片	試験片1-0	なし	—	—
	試験片	試験片1-1	BHT	128-37-0	1%
	試験片	試験片1-2	モノバルミチン	542-44-9	1%
	試験片	試験片1-3	エルカ酸アミド	112-84-5	1%
	試験片	試験片1-4	Irgafos 168	31570-04-4	1%
ペレット2	なし	ペレット2	—	—	—
	試験片	試験片2-0	なし	—	—
	試験片	試験片2-1	BHT	128-37-0	1%
	試験片	試験片2-2	モノバルミチン	542-44-9	1%
	試験片	試験片2-3	エルカ酸アミド	112-84-5	1%
	試験片	試験片2-4	Irgafos 168	31570-04-4	1%
	試験片	試験片2-5	Irganox 1010	6683-19-8	1%

1) ペレット1: ノバテック、BC3B、NAT (日本ポリプロ株式会社製)、ペレット2: POLYPRO T150、TK0270、黒 (DynaChisso社製)

2) 試験片: 10 cm×20 cm (厚さ2 mm)、各30枚

試験片 2-0 においては、ペレット 2 と比較して 7,9-di-*tert*-butyl-1-oxaspiro(4,5)deca-6,9-diene-2,8-dione に類似したスペクトルを示したピーク (RI は不一致) が新たに検出された。しかし、試験片 1-0 と同様に POH のピーク種類や面積値に大きな変化は見られず、さらに、PP ペレットに元々含有されていた紫外線吸収剤の Tinuvin 770 や、Irganox 1010 の分解物である 7,9-di-*tert*-butyl-1-oxaspiro(4,5)deca-6,9-diene-2,8-dione に変化は見られなかった。

以上より、PP ペレットから試験片への加工工程において、添加剤を練りこまずに試験片を作製した場合は、NIAS が大きく増加・生成しないことが示された。

2) 添加剤及び添加試験片の解析結果

添加剤について、それぞれ 100 µg/mL (感度の高かった BHT のみ 10 µg/mL) の標準溶液を測定し、検出された化合物の推定・同定を行った。

また、添加剤を練りこんだ試験片については、無添加試験片では検出されずに添加試験片のみで検出された化合物を NIAS とした。両方で検出された化合物については、添加試験片におけるピーク面積値が、無添加試験片における面積値の 3 倍以上であった化合物を NIAS とした。添加剤及び試験片の解析結果を表 3~7 に示した。

① BHT

結果を表 3 に示した。BHT 標準溶液からは BHT の他に 1 化合物 (不明ピーク、RI : 1487) が検出された。

試験片 1-1 及び 2-1 からは BHT の他にそれぞれ 2 化合物が検出された。両試験片から標準溶液からも検出された不明ピーク (RI : 1487) が検出され、標準溶液と両試験片における不明ピーク的面積%値が同程度であったことから、添加剤由来の不純物であると考え

られた。なお、本ピークは過去の報告^{6),7)}やそのマススペクトルより 2,6-di-*tert*-butyl-4-methylene-2,5-cyclohexadienone であると示唆されたが、標準品が入手できず同定には至らなかった。

試験片 2-1 で検出された 2,6-di-*tert*-butyl-4-hydroxy-4-methylcyclohexa-2,5-dien-1-one (推定) は BHT の構造と類似しており、試験片に加工した際に BHT が分解して生じた化合物であると考えられた。試験片 1-1 で検出された bis(2-ethylhexyl) phthalate は可塑剤として汎用されるが、その面積値は小さく、由来は不明であった。

②モノパルミチン

結果を表 4 に示した。モノパルミチンの標準溶液からは比較的多くの不純物が検出され、5 化合物 (うち 3 つは不明ピーク) が検出された。同定された 2 化合物は *n*-hexadecanoic acid (パルミチン酸) 及びモノパルミチンと同じグリセリン脂肪酸エステル類アシル鎖長の異なる tetradecanoic acid, 2,3-dihydroxypropyl ester (モノミリスチン) であった。

試験片 1-2 からはモノパルミチンの他に 8 化合物、試験片 2-2 からは 4 化合物が検出された。両試験片から検出されたモノミリスチン及び 1 種類の不明ピーク (RI : 2151)、ならびに試験片 1-2 から検出された不明ピーク (RI : 2478) はモノパルミチン標準溶液からも検出されており、それらの面積%値が同程度であったことから、添加剤由来の不純物であると考えられた。

その他、両試験片で検出されたのは glycidyl palmitate (推定) 及び octadecanoic acid, 2,3-dihydroxypropyl ester (モノステアリン) であった。glycidyl palmitate はグリシドール脂肪酸エステル類であり、モノパルミチンと炭素数が同じであったことから、試験片加工時に生成した可能性が考えられた。モノス

テアリンはモノパルミチンよりも炭素鎖 ($C_{2}H_{4}$) が長く、検出された原因は不明であった。

試験片 1-2 から isopropyl palmitate (推定)、BHT 及び 2,5-cyclohexadiene-1,4-dione, 2,6-bis(1,1-dimethylethyl)- (推定) が検出された。isopropyl palmitate はモノパルミチンと比較的類似した構造を有していたが、検出された原因は不明であった。次に BHT 及び 2,5-cyclohexadiene-1,4-dione, 2,6-bis(1,1-dimethylethyl)- が検出された原因を考察した。GC-MS 分析時に、BHT を練りこんだ試験片 1-1 を試験片 1-2 の前に GC-MS で分析したため、キャリアオーバーの可能性が考えられた。しかし、試験片 1-1 と試験片 1-2 の間に分析したアセトンからは BHT はほとんど検出されていなかった。さらに、試験片 1-2 を 2 回繰り返し分析した際にその両方で同程度の BHT が検出されており、その面積値はサンプル間に分析したアセトンと比較して 100 倍以上であった。以上より、試験片 1-2 で検出された BHT は GC-MS 分析時でのキャリアオーバーではないことを確認した。その他の原因として、試験片作製時に BHT が混入した可能性が考えられた。なお、2,5-cyclohexadiene-1,4-dione, 2,6-bis(1,1-dimethylethyl)- は BHT の分解物⁷⁾であることから、BHT 由来であると考えられた。

③エルカ酸アミド

結果を表 5 に示した。エルカ酸アミドの標準溶液からも比較的多くの不純物が検出され、5 化合物が推定・同定された。そのうち、2,5-hexanedione 及び nonanal はごく少量検出された。また、エルカ酸アミドと同じ脂肪酸アミド類で異なる脂肪酸鎖を有する 9-octadecenamide, (Z)- (オレアミド) や cis-11-eicosenamide (推定) が検出された。また、脂肪酸ニトリルである (Z)-docos-9-enenitrile (推定) が検出された。

試験片 1-3 からはエルカ酸アミドの他に 8 化合物、試験片 2-3 からは 7 化合物が検出された。両試験片から標準溶液で検出されたオレアミド、(Z)-docos-9-enenitrile (推定) 及び cis-11-eicosenamide (推定) が検出されたが、標準溶液と比べて面積%値が 3~10 倍高くなっていたことから、エルカ酸アミドを練りこんで試験片に加工する際に生成した可能性が考えられた。

その他、試験片 1-3 もしくは 2-3 から benzene, 1,3-bis(1,1-dimethylethyl)-, 2,5-cyclohexadiene-1,4-dione, 2,6-bis(1,1-dimethylethyl)- (推定) 及び bis(2-ethylhexyl) phthalate が検出され、両試験片から 1,30-triacontanediol (推定) 及び campesterol, acetate (推定) が検出されたが由来は不明であった。また、RI : 2995 の不明ピークは、13-docosenamide, (Z)- (エルカ酸アミド) と推定されたが、標準品の RI : 2789 とは異なっていた。さらにマススペクトルにおいて最も大きいフラグメントイオンとして m/z 365 が確認されたことから、これが分子イオンであると仮定すれば脂肪酸アミド類である nervonamide ($C_{24}H_{47}NO$) である可能性が考えられたが、標準品が入手できず同定には至らなかった。

④ Irgafos 168

結果を表 6 に示した。Irgafos 168 標準溶液からは 3 種の不純物が検出され、そのうち 2 化合物は同定され、1 化合物は不明ピークであった。同定されたのは 2,4-di-tert-butylphenol 及び tris(2,4-di-tert-butylphenyl) phosphate であり、前者は Irgafos 168 の分解物、後者は酸化体であった⁸⁾。

試験片 1-4 からは Irgafos 168 の他に 1 化合物、試験片 2-4 からは 3 化合物が検出された。両試験片から検出された化合物は標準溶液からも検出されていた tris(2,4-di-tert-butylphenyl) phosphate であったが、面積%値は標準溶液に

比べて試験片で10～50倍と大きく増加していたことから、Irgafos 168 を練りこんで試験片に加工する際に生成したと考えられた。試験片 2-4 で検出された squalane 及び squalene の由来は不明であった。

⑤ Irganox 1010

結果を表 7 に示した。Irganox 1010 の標準溶液からは 2 化合物が検出・同定され、いずれも Irganox 1010 の分解物であった^{6),9)}。

試験片 1-5 からは 4 化合物、試験片 2-5 からは 1 化合物が検出された。標準溶液においても検出されていた benzenepropanoic acid, 3,5-bis(1,1-dimethylethyl)-4-hydroxy-, methyl ester が両試験片からも検出され、添加剤由来の不純物であると考えられた。試験片 1-5 で 2,5-cyclohexadiene-1,4-dione, 2,6-bis(1,1-dimethylethyl)- (推定)、hexadecyl acrylate (推定) 及び bis(2-ethylhexyl) phthalate が検出されたが、その由来は不明であった。

3. LC-QTOFMS による PP ペレット、添加剤及び試験片の解析結果

1) RI 標準物質の選定

GC-MS を用いた検討⁷⁾において、検出された化合物のマススペクトルだけでなく RI 情報を比較することで推定及び同定精度を向上さ

せることが可能であった。そこで、LC-QTOFMS を用いた場合においても RI 情報を利用できないか検討した。RI 標準物質として、疎水性相互作用による保持指標が段階的に変化するよう、側鎖の炭素数のみが異なる 8 種類の三級トリアルキルアミンを選定した (表 8)^{10),11)}。本分析条件における 8 種類の三級トリアルキルアミンのクロマトグラムを図 2 に示した。RT は 2.0～28.8 分と広範に及び、幅広い溶出範囲の化合物の RI 値算出に適していると考えられた。

RI 値をデータベース化するためには、測定回やカラムロット、分析機器が異なっても RI 値が一定の範囲内に存在していることが重要である。試験片に練り込んだモノパルミチン、エルカ酸アミド、Irganox 1010 の 3 種の添加剤について、本条件にて分析し、RI 値を算出した (表 9)。なお、BHT は negative モードで検出されるため、Irgafos 168 は本分析条件にて溶出が遅く次サンプル中に溶出するため、RI 値算出の対象外とした。

初回分析時の各標準試料の RI 値との比率を算出した結果、測定回やカラムロット、分析機器が異なっても RI 値の比率は 1.0 であり、RI 値は一定の範囲内に存在していることが示された。マススペクトルに加えて RI 値を指標

表 8 LC-QTOFMS 分析における保持指標 (RI) 標準物質の選定

	標準物質	分子式	RT (min)	RI	濃度 (ng/mL)
C2	トリエチルアミン	C ₆ H ₁₅ N	2.0	200	500
C3	トリプロピルアミン	C ₉ H ₂₁ N	5.8	300	
C4	トリブチルアミン	C ₁₂ H ₂₇ N	8.8	400	
C5	トリペンチルアミン	C ₁₅ H ₃₃ N	11.0	500	
C7	トリヘプチルアミン	C ₂₁ H ₄₅ N	14.4	700	
C8	トリオクチルアミン	C ₂₄ H ₅₁ N	17.1	800	100
C9	トリノニルアミン	C ₂₇ H ₅₇ N	21.4	900	
C10	トリ- <i>n</i> -デシルアミン	C ₃₀ H ₆₃ N	28.8	1000	

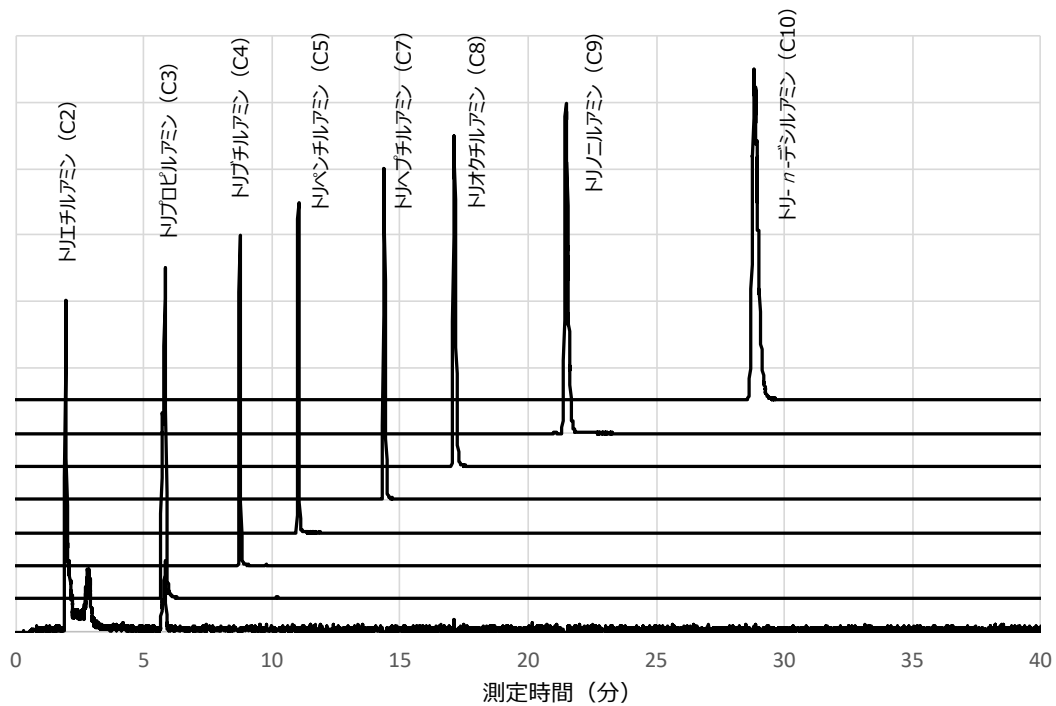


図2 LC-QTOFMS分析における保持指標 (RI) 標準物質のクロマトグラム

表9 RI標準物質の安定性

	モノバルミチン		エルカ酸アミド		Irganox 1010	
	RI	①との比率	RI	①との比率	RI	①との比率
①初回分析時	735	-	854	-	968	-
②異なる測定回	731	1.0	849	1.0	957	1.0
③異なるロットの同カラムで分析	746	1.0	865	1.0	981	1.0
④異なる装置*	738	1.0	856	1.0	966	1.0

*エーピー・サイエックス社のLC-MS/MS (TQ4500) を使用

とすることで、推定及び同定精度の向上が期待された。

2) PPペレットと無添加試験片の解析結果

汎用添加剤やNIASを含む計322種類の化合物のデータベースを用いてPPペレット及び添加剤無添加の試験片の解析を行った。検出された化合物について精密質量及び同位体分布から物質を推定した。推定された化合物

のうち標準品を入手できたものについて、ペレット及び試験片と同様にLC-QTOFMS分析を行い、マススペクトル及びRIから同定を試みた。

まずは、PPペレットに含有される化合物を解析した。PPペレット1及び2から検出された化合物のうち面積値が100,000以上のものについて、操作ブランクにおける面積値との比を算出した（操作ブランクで検出されな

った場合は面積値を仮に 33,000 として比を算出)。比が 3 倍以上、10 倍以上、100 倍以上であった化合物を表 10 に示した。PP ペレット 1 からは、酸化防止剤である Irgafos 168 や Irganox 1010 及びそれら由来の NIAS、滑剤である脂肪酸アミド類が多く検出された。PP ペレット 2 からは、PP ペレット 1 と同様に酸化防止剤とその関連物質、脂肪酸アミド類に加え、紫外線吸収剤である Tinuvin 770、界面活性剤であるグリセリン脂肪酸エステル類も多く検出された。

次に、ペレットから試験片に加工する際の化合物の変化をみるため、添加剤無添加の試験片に含有される化合物を解析した。無添加試験片のみで検出された化合物を NIAS とし、ペレットと無添加試験片の両方で検出された化合物については、無添加試験片におけるピーク面積値がその基となるペレットにおける面積値の 3 倍以上であった化合物を NIAS とした。表 10 に示す通り、エルカ酸アミド及びベヘン酸アミドに若干増加が見られたが、PP ペレットから試験片に加工する過程において増加・生成する添加剤や NIAS はほとんどみられなかった。

3) 添加剤及び添加試験片の解析結果

添加剤を試験片に練り込んだ際の添加剤由来化合物の変化をみるため、試験片に練り込んだ 5 種の添加剤について、各標準溶液 (10 µg/mL) の LC-QTOFMS 分析を行い、それらに含有される物質の推定・同定を行った。

さらに、添加剤を練りこんだ試験片については、無添加試験片では検出されずに添加試験片のみで検出された化合物を NIAS とした。両方で検出された化合物については、添加試験片におけるピーク面積値が、無添加試験片における面積値の 3 倍以上となった化合物を NIAS とした。添加剤及び添加試験片の解析

結果を表 11~15 に示した。

① BHT

結果を表 11 に示した。BHT の標準溶液からはブランク (メタノール) から検出された物質以外のものは検出されなかった。BHT を添加して作製した試験片では $C_{30}H_{50}NO_2$ と同等の精密質量に相当する化合物 (RI : 806) が特徴的に増加した。これは酸化防止剤である Ionox 129 ($C_{30}H_{46}O_2$) のアンモニウムイオン付加体もしくは BHT 二量体の派生物 (BHT 由来の副生成物) である可能性が考えられたが、標準品が入手できず同定には至らなかった。なお、可塑剤である diisononyl phthalate が検出されたが由来は不明であった。

② モノパルミチン

結果を表 12 に示した。モノパルミチンの標準溶液からはモノパルミチンと同じグリセリン脂肪酸エステル類でアシル鎖長の異なるモノミリスチン及びモノステアリンが検出された。モノパルミチンを添加して作成した試験片では、標準溶液同様にモノミリスチンが検出された。これらは標準溶液の面積%値と比べて試験片で増加していたことから、試験片に加工する際に生成した可能性が考えられた。また、GC-MS の結果同様に、モノパルミチンからアシル鎖長が伸長したモノステアリンも試験片への加工に伴い増加していたが、この原因は不明であった。さらにグリセリン脂肪酸エステル類である dodecanoic acid, 2,3-dihydroxypropyl ester (モノラウリン) が検出された。また、分子式 $C_{18}H_{38}NO_4$ と同等の精密質量を有する強度の大きいピーク (RI : 736) が検出された。可塑剤として使用される decanedioic acid, dibutyl ester (セバシン酸ジブチル ($C_{18}H_{34}O_4$)) のアンモニウムイオン付加体の可能性が考えられたが、標準品のマススペクトル及び RI とは一致せず、同定には至

らなかった。

③エルカ酸アミド

結果を表 13 に示した。エルカ酸アミドの標準溶液からはエルカ酸アミドと同じ脂肪酸アミド類で異なる脂肪酸鎖を有するオレアミドや behenic amide (ベヘン酸アミド) が検出された。エルカ酸アミドを添加して作成した試験片においても、標準溶液同様にオレアミド及びベヘン酸アミドが検出された。これらは標準溶液と比較して面積%値が増加しており、試験片に加工する際に生成したと考えられた。その他、Irganox 1010 の分解物と考えられる ethyl 3-(3,5-di-*tert*-butyl-4-hydroxyphenyl) propionate (推定) 及び可塑剤である di-*n*-octyl adipate (推定) が検出されたが由来は不明であった。試験片 1-3 及び 2-3 に共通して分子式 $C_{20}H_{38}O_2$ (RI : 796)、 $C_{20}H_{40}O_2$ (RI : 848)、 $C_{22}H_{44}O_2$ (RI : 853) と同等の精密質量を有する化合物が検出されたが、同定には至らなかった。

④ Irgafos 168

結果を表 14 に示した。本分析条件では Irgafos 168 は次サンプル中に溶出するため、同じサンプルを 2 回分析した際の 2 回目の結果を解析した。Irgafos 168 の標準溶液からは Irgafos 168 以外の物質は検出されなかった。Irgafos 168 を添加して作製した試験片 1-4 では、Irgafos 168 からジ-*tert*-ブチルベンジル基 ($C_{14}H_{20}$) が解離した Irgafos 168 の分解物と推定される化合物 (RI : 807) がわずかに検出され、これは試験片に加工する際に生成した可能性が考えられた。試験片 2-4 からはこの Irgafos 168 の分解物は検出されなかった。

⑤ Irganox 1010

結果を表 15 に示した。Irganox 1010 の分解物は過去の報告を参考にデータベースに登録した⁹⁾。Irganox 1010 の標準溶液からは Irganox 1010 から $C_{17}H_{24}O_2$ が解離した物質 (RI : 811)

が検出された。Irganox 1010 を添加して作製した試験片では、多種類の Irganox 1010 の分解物が検出された。また、試験片 1-5 及び 2-5 に共通して分子式 $C_{10}H_{12}O_3$ と同等の精密質量を有する化合物 (RI : 581) が検出されたが、同定には至らなかった。なお、PP ペレット 2 は元々酸化防止剤として Irganox 1010 を含有していたことから、無添加試験片と試験片 2-5 において Irganox 1010 分解物に大きな強度の増加が見られず、検出数が少なくなったと考えられた。

PP の液体モデルである squalane に Irganox 1010 を溶解して熱処理することにより分解物を評価した過去の報告では、Irganox 1010 に次ぐ大きなピークとして分子式 $C_{56}H_{84}O_{10}$ (RI : 811) 及び分子式 $C_{69}H_{100}O_{12}$ (RI : 893) と同等の精密質量を有する化合物が検出されていた⁹⁾。今回評価したペレット 1、2 及び試験片 1-5、2-5 においてもこの 2 つの化合物が検出されており、これらが実際に PP 中においても Irganox 1010 に由来する主要な NIAS であることが分かった。

D. 結論

昨年度に引き続き、合成樹脂製器具・容器包装に含有される NIAS の探索を行った。添加剤の種類と量が既知の PP 製モデル試料を作製し、シート作製時の含有物質の変化を追うことでポリマー及び添加剤由来の NIAS を調査した。

その結果、ペレットから無添加試験片を作製した際に増加・生成した化合物は非常に少なく、ポリマー由来である POH や、ペレットに元々含有されていた添加剤の変化は見られなかった。これより、新たに添加剤を加えずにペレットから試験片に加工する工程においては、NIAS が大きく増加・生成することはないことが GC-MS 及び LC-QTOFMS の両方

において示された。

一方、5種類の汎用添加剤を練りこんだ試験片の作製工程における含有化合物の変化を確認した結果、種々の化合物が確認された。その由来として、練りこんだ添加剤に元々含まれていた不純物や添加剤の分解物のほか、由来が不明なものもあった。また、試験片の作製工程において混入が疑われたものもあった。GC-MSとLC-QTOFMSで共通して検出された化合物も一部みられたが、検出原理や感度等の違いによりその多くはいずれか一方で検出された。LC-QTOFMSを用いた際はGC-MSでは検出不可能なIrganox 1010やその分解物など比較的分子量の大きな化合物の検出が可能であった。これより、NIASを把握するためには測定原理の異なる複数の機器を使用することが重要であることが示された。

しかしながら、GC-MSではNISTなどライブラリーが充実していることから未知物質の検索が比較的容易なのに対し、LC-QTOFMS用のライブラリーはNIAS探索のためには整備が不十分であり、本研究では汎用添加剤や予測されるNIASを含む化合物について自作のデータベースを作成して用いた。今後、検出化合物の推定・同定及び合成樹脂に含まれる意図的添加物質とNIASを判別するためには、マススペクトルライブラリーの作成や、過去に検出されたNIAS情報についてのデータベース作成が必要であることが示された。

E. 参考文献

- 1) 令和2年度厚生労働科学研究費補助金食品の安全確保推進研究事業 食品用器具・容器包装等の安全性確保に資する研究 総括・分担研究報告書、p.58-68 (2021)
- 2) 尾崎麻子、水口智晴、山口之彦、山野哲夫：GC-MSを用いた合成樹脂製器具・容器包装に含まれる化学物質に関する検討、日本食品衛生学会創立60周年記念第116回学術講演会要旨 (2020)
- 3) Biedermann-Brem, S, Kasprick, N, Simat, Grob K. Migration of polyolefin oligomeric saturated hydrocarbons (POSH) into food, *Food Additives and Contaminants*, 29, 449-460 (2012)
- 4) Conchione, C, Lucci, P, Moret, S. Migration of polypropylene oligomers into ready-to-eat vegetable soups, *Foods*, 9, <https://doi.org/10.3390/foods9101365> (2020)
- 5) 河村葉子、米沢里香、前原玉枝、山田隆：食品用ポリプロピレン製品中の添加剤の分析、*食品衛生学雑誌*、41, 154-161 (2000)
- 6) Graíño S.G., Sendón R., Hernández J.L., Rodríguez-Bernaldo de Quirós A., GC-MS screening analysis for the identification of potential migrants in plastic and paper-based candy wrappers, *Polymers*, 10, 802 (2018)
- 7) 菊池貴子、大竹義人、田中敬二：フェノール系酸化防止剤と光安定剤の併用に伴う変色現象、*日本ゴム協会誌*、85, 283-288 (2012)
- 8) Yan Y., Hu C.Y., Wang Z.W. Degradation of Irgafos 168 and migration of its degradation products from PP - R composite films. *Packaging Technology and Science* 31, 679-688 (2018)
- 9) Beißmann, S, Stiftinger, M, Grabmayer, K, Wallner, G, Nitsche, D, Buchberger, W. Monitoring the degradation of stabilization systems in polypropylene during accelerated aging tests by liquid chromatography combined with atmospheric pressure chemical ionization mass spectrometry, *Polymer Degradation and Stability*, 98(9), 1655-1661 (2013)
- 10) 志摩典明、中西啓子、片木宗弘、鎌田徹、財津桂、鎌田寛恵、西岡裕、三木昭宏、辰

野道昭、土橋均、鈴木廣一：LC/MSⁿを用いた薬物スクリーニングシステムの構築-液体クロマトグラフィー/質量分析における保持指標の適用-、日本法科学技術学会誌、16(1), 13-27 (2011)

- 11) 中野史保子、鎌田寛恵、佐々木啓子、志摩典明、鎌田徹、松田駿太郎、掛橋秀直、西岡裕、三木昭宏、土橋均、片木宗弘：精密質量分析を用いた界面活性剤スクリーニング法の開発と法化学への応用、J. Mass Spectrom. Soc. Jpn., 67(2), 53-63 (2019)

表2 PPペレット及び無添加試験片のGC-MS解析結果

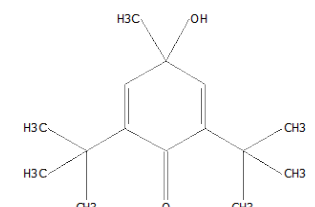
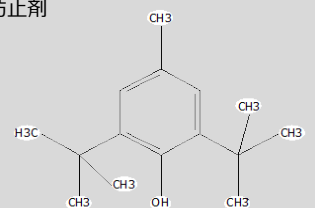
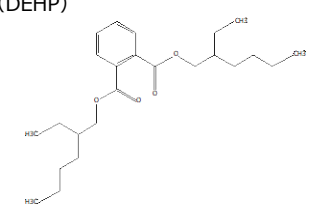
RT (min)	RI	化合物名	CAS No.	分子式	PL収載 ¹⁾	標準品 による 同定	面積値				備考	
							ペレット1		ペレット2			
							ペレット1	試験片1-0 ²⁾	ペレット2	試験片2-0 ²⁾		
18.4	1764	不明ピーク	-	-	-	-	-	-	● 1,000,000	7,9-Di- <i>tert</i> -butyl-1-oxaspiro(4,5)deca-6,9-diene-2,8-dioneとマススペクトルが近似していたがRI不一致		
22.3	2157	Octadecanoic acid	57-11-4	C ₁₈ H ₃₆ O ₂	7	○	50,000	● 230,000	390,000	550,000	滑剤 (ステアリン酸)	
27.6	2834	Squalene	111-02-4	C ₃₀ H ₅₀	825 1039	○	-	● 350,000	-	-	-	可塑剤
15.4	1496	POH-1 ³⁾	-	-	×	-	1,800,000	2,000,000	2,700,000	3,500,000	ポリマー由来	
17.9	1711	POH-2 ³⁾	-	-	×	-	1,600,000	1,800,000	2,600,000	2,900,000	ポリマー由来	
20.2	1931	7,9-Di- <i>tert</i> -butyl-1-oxaspiro(4,5)deca-6,9-diene-2,8-dione	82304-66-4	C ₁₇ H ₂₄ O ₃	×	○	-	-	11,000,000	13,000,000	Irganox 1010の分解物	
22.2	2141	POH-3 ³⁾	-	-	×	-	1,100,000	1,800,000	2,200,000	2,500,000	ポリマー由来	
29.8	3121	Decanedioic acid, bis(2,2,6,6-tetramethyl-4-piperidinyl) ester	52829-07-9	C ₂₈ H ₅₂ N ₂ O ₄	593	○	-	-	1,500,000	1,900,000	紫外線吸収剤 (Tinuvin 770)	
33.6	3441	Irgafos 168	31570-04-4	C ₄₂ H ₆₃ O ₃ P	561	○	10,000,000	13,000,000	-	-	酸化防止剤	
36.9	>3600	Tris(2,4-di- <i>tert</i> -butylphenyl) phosphate	95906-11-9	C ₄₂ H ₆₃ O ₄ P	×	○	1,400,000	2,000,000	-	-	Irgafos 168の酸化体	

1) PL別表第1 第2表の整理番号 (2019年12月23日時点の公表リストに付与されたもの) を示した

2) 無添加試験片のみで検出、もしくは、PPペレットと比較して無添加試験片で3倍以上の面積値が認められた化合物 (NIAS) に●を示した

3) POHは面積値が比較的大きい3物質について示した

表3 BHTの標準品及び添加試験片のGC-MS解析結果

RT (min)	RI	化合物名	CAS No.	分子式	PL収載 ¹⁾	標準品による同定	標準溶液 (面積% ²⁾)	試験片 ³⁾ (面積% ²⁾)		備考 ⁴⁾
								1-1	2-1	
15.1	1475	2,6-Di- <i>tert</i> -butyl-4-hydroxy-4-methylcyclohexa-2,5-dien-1-one	10396-80-2	C ₁₅ H ₂₄ O ₂	×	—	—	—	● (0.2)	
15.3	1487	不明ピーク	—	—	—	—	(0.2)	● (0.3)	● (0.4)	<p><i>m/z</i>: 161, 203, 175, 218, 189</p> <p>2,6-Di-<i>tert</i>-butyl-4-methylene-2,5-cyclohexadienone (CAS No.2607-52-5) である可能性あり</p>
15.7	1520	BHT	128-37-0	C ₁₅ H ₂₄ O	183	○	(100)	(100)	(100)	<p>酸化防止剤</p> 
25.6	2555	Bis(2-ethylhexyl) phthalate	117-81-7	C ₂₄ H ₃₈ O ₄	158	○	—	● (0.04)	—	<p>可塑剤 (DEHP)</p> 

1) PL別表第1 第2表の整理番号 (2019年12月23日時点の公表リストに付与されたもの) を示した

2) 添加剤本体のピーク面積値を100%とした

3) 添加試験片のみで検出、もしくは、無添加試験片と比較して添加試験片で3倍以上の面積値が認められた化合物 (NIAS) に●を示した

4) 不明ピークは*m/z*を強度順で示した (*m/z* > 100)

表4 モノパルミチンの標準品及び添加試験片のGC-MS解析結果

RT (min)	RI	化合物名	CAS No.	分子式	PL収載 ¹⁾	標準品による同定	標準溶液 (面積% ²⁾)	試験片 ³⁾ (面積% ²⁾)		備考 ⁴⁾
								1-2	2-2	
15.1	1476	2,5-Cyclohexadiene-1,4-dione, 2,6-bis(1,1-dimethylethyl)-	719-22-2	C ₁₄ H ₂₀ O ₂	×	-	-	● (0.08)	-	
15.7	1520	BHT	128-37-0	C ₁₅ H ₂₄ O	183	○	-	● (1.8)	-	酸化防止剤
20.4	1955	n-Hexadecanoic acid	57-10-3	C ₁₆ H ₃₂ O ₂	7	○	(0.1)	-	-	滑剤 (パルミチン酸)
21.1	2023	Isopropyl palmitate	142-91-6	C ₁₉ H ₃₈ O ₂	131	-	-	● (0.2)	-	パルミチン酸イソプロピル
22.3	2151	不明ピーク	-	-	-	-	(0.2)	● (0.3)	● (0.5)	m/z : 115, 102, 239, 112, 171
23.5	2297	Glycidyl palmitate	7501-44-2	C ₁₉ H ₃₆ O ₃	×	-	-	● (0.09)	● (0.04)	グリシドールパルミチン酸エステル
23.6	2301	Tetradecanoic acid, 2,3-dihydroxypropyl ester	589-68-4	C ₁₇ H ₃₄ O ₄	175	○	(0.2)	● (0.1)	● (0.2)	界面活性剤 (モノリスチン)
25.0	2478	不明ピーク	-	-	-	-	(0.2)	● (0.3)	-	m/z : 130, 117, 131, 371, 239
25.1	2495	不明ピーク	-	-	-	-	(0.4)	-	-	m/z : 117, 130, 313, 239, 131
25.3	2514	Glycerol 1-palmitate	542-44-9	C ₁₉ H ₃₈ O ₄	175	○	(100)	(100)	(100)	界面活性剤 (モノパルミチン)
26.8	2720	Octadecanoic acid, 2,3-dihydroxypropyl ester	123-94-4	C ₂₁ H ₄₂ O ₄	175	○	-	● (0.07)	● (1.0)	界面活性剤 (モノステアリン)

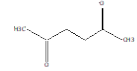

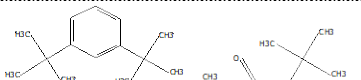
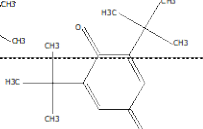
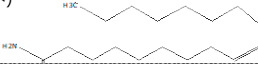

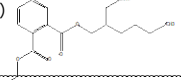
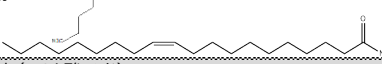

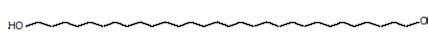
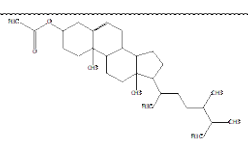
1) PL別表第1 第2表の整理番号 (2019年12月23日時点の公表リストに付与されたもの) を示した

2) 添加剤本体のピーク面積値を100%とした

3) 添加試験片のみで検出、もしくは、無添加試験片と比較して添加試験片で3倍以上の面積値が認められた化合物 (NIAS) に●を示した

4) 不明ピークはm/zを強度順で示した (m/z > 100)

表5 エルカ酸アミドの標準品及び添加試験片のGC-MS解析結果

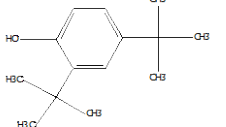
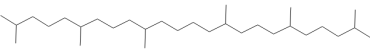
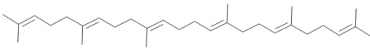
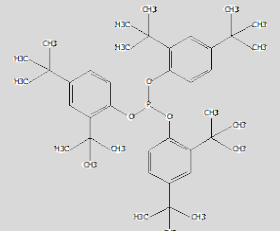
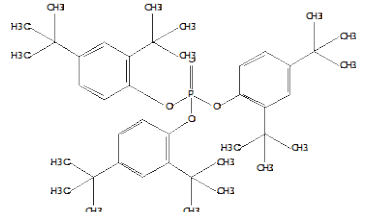
RT (min)	RI	化合物名	CAS No.	分子式	PL収載 ¹⁾	標準品による同定	標準溶液 (面積% ²⁾)	試験片 ³⁾ (面積% ²⁾)		備考
								1-3	2-3	
7.0	931	2,5-Hexanedione	110-13-4	C ₆ H ₁₀ O ₂	×	○	(0.03)	—	—	
9.9	1104	Nonanal	124-19-6	C ₉ H ₁₈ O	×	○	(0.03)	—	—	
12.2	1259	Benzene, 1,3-bis(1,1-dimethylethyl)-	1014-60-4	C ₁₄ H ₂₂	×	○	—	—	● (0.1)	
15.1	1476	2,5-Cyclohexadiene-1,4-dione, 2,6-bis(1,1-dimethylethyl)-	719-22-2	C ₁₄ H ₂₀ O ₂	×	—	—	● (0.03)	—	
24.1	2363	9-Octadecenamide, (Z)-	301-02-0	C ₁₈ H ₃₅ NO	178	○	(0.3)	● (1)	● (3)	滑剤 (オレアミド) 
25.1	2495	(Z)-Docos-9-enenitrile	1000465-48-0	C ₂₂ H ₄₁ N	×	—	(0.5)	● (2)	● (2)	
25.6	2555	Bis(2-ethylhexyl) phthalate	117-81-7	C ₂₄ H ₃₈ O ₄	158	○	—	● (0.04)	—	可塑剤 (DEHP) 
25.7	2573	cis-11-Eicosenamide	10436-08-5	C ₂₀ H ₃₉ NO	178	—	(0.6)	● (4)	● (6)	滑剤 
27.3	2789	13-Docosenamide, (Z)-	112-84-5	C ₂₂ H ₄₃ NO	178	○	(100)	(100)	(100)	滑剤 (エルカ酸アミド) 
28.5	2958	1,30-Triacontanediol	36645-68-8	C ₃₀ H ₆₂ O ₂	×	—	—	● (0.4)	● (0.4)	
28.8	2995	不明ピーク	—	—	—	—	—	● (0.2)	● (0.9)	13-Docosenamide, (Z)-と推定されたが標準品と一致せず。 m/z 365が出ておりC ₂₄ H ₄₇ NO (nervonamide (滑剤)) の可能性あり
29.1	3042	Campesterol, acetate	1000419-55-2	C ₃₀ H ₅₀ O ₂	×	—	—	● (0.2)	● (0.3)	

1) PL別表第1 第2表の整理番号(2019年12月23日時点の公表リストに付与されたもの)を示した

2) 添加剤本体のピーク面積値を100%とした

3) 添加試験片のみで検出、もしくは、無添加試験片と比較して添加試験片で3倍以上の面積値が認められた化合物(NIAS)に●を示した

表 6 Irgafos 168の標準品及び添加試験片のGC-MS解析結果

RT (min)	RI	化合物名	CAS No.	分子式	PL収載 ¹⁾	標準品 による 同定	標準溶液 (面積% ²⁾)	試験片 ³⁾ (面積% ²⁾)		備考 ⁴⁾
								1-4	2-4	
15.6	1513	2,4-Di- <i>tert</i> -butylphenol	96-76-4	C ₁₄ H ₂₂ O	79	○	(0.07)	—	—	酸化防止剤 
26.3	2655	Squalane	111-01-3	C ₃₀ H ₆₂	828 1018	○	—	—	● (0.5)	可塑剤 
27.6	2835	Squalene	111-02-4	C ₃₀ H ₅₀	825 1039	○	—	—	● (2)	可塑剤 
26.7	2704	不明ピーク	—	—	—	—	(0.03)	—	—	<i>m/z</i> : 267, 191, 147, 221, 472
33.6	3443	Irgafos 168	31570-04-4	C ₄₂ H ₆₃ O ₃ P	561	○	(100)	(100)	(100)	酸化防止剤 
36.9	>3600	Tris(2,4-di- <i>tert</i> -butylphenyl) phosphate	95906-11-9	C ₄₂ H ₆₃ O ₄ P	×	○	(0.7)	● (8)	● (39)	Irgafos 168の酸化体 

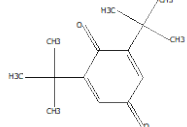

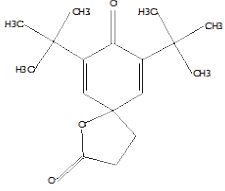
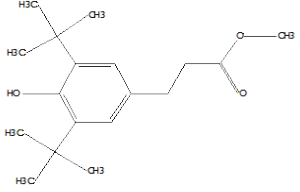
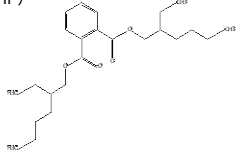
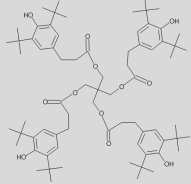
1) PL別表第1 第2表の整理番号(2019年12月23日時点の公表リストに付与されたもの)を示した

2) 添加剤本体のピーク面積値を100%とした

3) 添加試験片のみで検出、もしくは、無添加試験片と比較して添加試験片で3倍以上の面積値が認められた化合物(NIAS)に●を示した

4) 不明ピークは*m/z*を強度順で示した(*m/z* > 100)

表7 Irganox 1010の標準品及び添加試験片のGC-MS解析結果

RT (min)	RI	化合物名	CAS No.	分子式	PL収載 ¹⁾	標準品による同定	標準溶液 (面積% ²⁾)	試験片 ³⁾ (面積% ²⁾)		備考
								1-5	2-5	
15.1	1476	2,5-Cyclohexadiene-1,4-dione, 2,6-bis(1,1-dimethylethyl)-	719-22-2	C ₁₄ H ₂₀ O ₂	×	-	-	● (-)	-	
19.8	1893	Hexadecyl acrylate	13402-02-3	C ₁₉ H ₃₆ O ₂	×	-	-	● (-)	-	
20.2	1929	7,9-Di-tert-butyl-1-oxaspiro(4,5)deca-6,9-diene-2,8-dione	82304-66-3	C ₁₇ H ₂₄ O ₃	×	○	検出 (-)	-	-	
20.4	1950	Benzenepropanoic acid, 3,5-bis(1,1-dimethylethyl)-4-hydroxy-, methyl ester	6386-38-5	C ₁₈ H ₂₈ O ₃	1702 ⁴⁾	○	検出 (-)	● (-)	● (-)	
25.6	2555	Bis(2-ethylhexyl) phthalate	117-81-7	C ₂₄ H ₃₈ O ₄	158	○	-	● (-)	-	可塑剤 (DEHP) 
検出不可	Irganox 1010		6683-19-8	C ₇₃ H ₁₀₈ O ₁₂	356	-	-	-	-	酸化防止剤 

1) PL別表第1 第2表の整理番号 (2019年12月23日時点の公表リストに付与されたもの) を示した

2) 添加剤本体 (Irganox 1010) 検出不可のため算出できず

3) 添加試験片のみで検出、もしくは、無添加試験片と比較して添加試験片で3倍以上の面積値が認められた化合物 (NIAS) に●を示した

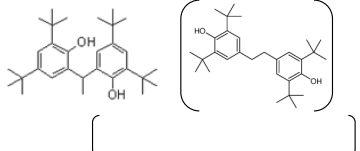
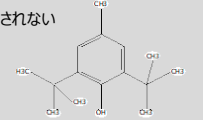
4) 区分1のみ

表10 PPペレット及び無添加試験片のLC-QTOFMS解析結果

RT (min)	RI	m/z	化合物名	分子式	イオンタイプ	CAS No.	PL収載 ¹⁾	標準品による同定	ペレット1		ペレット2		備考
									ペレット1 ²⁾	試験片1-0 ³⁾	ペレット2 ²⁾	試験片2-0 ³⁾	
20.8	886	560.4703	3,3'-Thiobispropanoic acid, dltridecyl ester	C ₃₂ H ₆₂ O ₆ S	[M+NH ₄] ⁺	10595-72-9	×	-	++		++		酸化防止剤 (Cyanox 711)
26.4	968	1194.8168	Pentaerythritol tetrakis[3-(3',5'-di-tert-butyl-4'-hydroxyphenyl)propionate]	C ₇₃ H ₁₀₈ O ₁₂	[M+NH ₄] ⁺	6683-19-8	356	○	+++		+++		酸化防止剤 (Irganox 1010)
32.3	>1000	647.4583	Phenol, 2,4-bis(1,1-dimethylethyl)-, phosphite (3:1)	C ₁₂ H ₁₆ O ₃ P	[M+H] ⁺	31570-04-4	561	○	+++		++		酸化防止剤 (Irgafos 168)
36.6	>1000	532.4393	Propanoic acid, 3,3'-thiobis-, didodecyl ester	C ₃₀ H ₅₈ O ₄ S	[M+NH ₄] ⁺	123-28-4	173	-	++		+		酸化防止剤 (DLTDP)
39.1	>1000	588.5010	Ditetradecyl 3,3'-Thiodipropionate	C ₃₄ H ₆₆ O ₄ S	[M+NH ₄] ⁺	16545-54-3	173	-	+++		+++		酸化防止剤 (DMTDP)
9.5	435	481.3997	Bis(2,2,6,6-tetramethyl-4-piperidyl) sebacate	C ₂₈ H ₅₂ N ₂ O ₄	[M+H] ⁺	52829-07-9	593	○			+++		紫外線吸収剤 (Tinuvin 770)
13.8	664	303.2527	Tetradecanoic acid, 2,3-dihydroxypropyl ester	C ₁₇ H ₃₄ O ₄	[M+H] ⁺	589-68-4	175	○			++		界面活性剤 (モノリスチン)
15.4	736	331.2840	Glycerol 1-palmitate	C ₁₉ H ₃₈ O ₄	[M+H] ⁺	542-44-9	175	○			+++		界面活性剤 (モノパルミチン)
17.3	804	359.3152	Octadecanoic acid, 2,3-dihydroxypropyl ester	C ₂₁ H ₄₂ O ₄	[M+H] ⁺	123-94-4	175	○			+++		界面活性剤 (モノステアリン)
12.3	579	274.2738	n-Hexadecanoic acid	C ₁₆ H ₃₂ O ₂	[M+NH ₄] ⁺	57-10-3	7	○			++		滑剤 (パルミチン酸)
14.9	719	256.2632	Hexadecanamide	C ₁₆ H ₃₃ NO	[M+H] ⁺	629-54-9	178	○	+		+		滑剤 (パルミチン酸アミド)
15.2	731	282.2792	9-Octadecenamide, (Z)-	C ₁₈ H ₃₅ NO	[M+H] ⁺	301-02-0	178	○	++		+		滑剤 (オレアミド)
16.7	786	284.2945	Octadecanamide	C ₁₈ H ₃₇ NO	[M+H] ⁺	124-26-5	178	○	+		+		滑剤 (ステアリン酸アミド)
19.4	854	338.3415	13-Docosenamide, (Z)-	C ₂₂ H ₄₃ NO	[M+H] ⁺	112-84-5	178	○				● (+)	滑剤 (エルカ酸アミド)
22.5	914	340.3569	Behenic amide	C ₂₂ H ₄₅ NO	[M+H] ⁺	3061-75-4	178	○				● (+)	滑剤 (ヘン酸アミド)
11.7	539	235.1695	3,5-Di-tert-butyl-4-hydroxybenzaldehyde	C ₁₅ H ₂₂ O ₂	[M+H] ⁺	1620-98-0	×	-			++		
31.4	>1000	663.4530	Tris(2,4-di-tert-butylphenyl) phosphate	C ₆₂ H ₈₃ O ₄ P	[M+H] ⁺	95906-11-9	×	○	++		++		Irgafos 168酸化体
10.5	478	167.0703	3-(4-Hydroxyphenyl)propionic Acid	C ₉ H ₁₀ O ₃	[M+H] ⁺	501-97-3	×	○			++		Irganox1010の分解物
10.5	478	296.2218	3-(3,5-Di-tert-butyl-4-hydroxyphenyl)propionic Acid	C ₁₇ H ₂₆ O ₃	[M+NH ₄] ⁺	20170-32-5	×	○			++		Irganox1010の分解物
11.7	540	277.1796	7,9-Di-tert-butyl-1-oxaspiro(4,5)deca-6,9-diene-2,8-dione	C ₁₇ H ₂₄ O ₃	[M+H] ⁺	82304-66-3	×	○	+		+++		Irganox1010の分解物
12.4	581	310.2377	Benzeneprpanoic acid, 3,5-bis(1,1-dimethylethyl)-4-hydroxy-, methyl ester	C ₁₈ H ₂₆ O ₃	[M+NH ₄] ⁺	6386-38-5	1702 ⁴⁾	○	+		++		Irganox1010の分解物
13.5	649	674.4619	Irganox 1010からC ₃₄ H ₄₈ O ₉ が分離した化合物	C ₃₈ H ₆₀ O ₉	[M+NH ₄] ⁺	36913-60-7	×	-	++		+++		Irganox1010の分解物
31.4	>1000	685.4338	Irganox 1010からC ₃₃ H ₄₈ O ₉ が分離した化合物	C ₄₀ H ₆₀ O ₉	[M+H] ⁺	-	-	-	+		+		Irganox1010の分解物
15.4	738	878.5773	Irganox 1010からC ₂₁ H ₃₂ O ₂ が分離した化合物	C ₂₃ H ₃₆ O ₁₀	[M+NH ₄] ⁺	-	-	-			+		Irganox1010の分解物
17.3	804	1006.6605	Irganox 1010からC ₁₄ H ₂₀ が分離した化合物	C ₁₈ H ₂₈ O ₁₂	[M+NH ₄] ⁺	-	-	-	+		++		Irganox1010の分解物
17.6	811	934.6390	Irganox 1010からC ₁₇ H ₂₄ O ₂ が分離した化合物	C ₁₉ H ₂₈ O ₁₀	[M+NH ₄] ⁺	84633-54-5	×	-	+++		+++		Irganox1010の分解物
21.2	893	1138.7542	Irganox 1010からC ₁₆ H ₁₆ が分離した化合物	C ₁₈ H ₂₄ O ₁₂	[M+NH ₄] ⁺	-	-	-	++		++		Irganox1010の分解物
16.0	761	950.6338	Irganox 1010からC ₁₇ H ₂₄ Oが分離した化合物	C ₁₉ H ₂₈ O ₁₁	[M+NH ₄] ⁺	-	-	-	+		++		Irganox1010の分解物
26.1	963	1192.8013	Irganox 1010からH ₂ が分離した化合物	C ₁₇ H ₂₆ O ₁₂	[M+NH ₄] ⁺	-	-	-	++		++		Irganox1010の分解物
12.4	581	181.0860	-	C ₁₀ H ₁₂ O ₃	[M+H] ⁺	-	-	-			+		Propyl 4-hydroxybenzoate (CAS No. 94-13-3)、Methyl 3-(4-Hydroxyphenyl)propionate (CAS No. 5597-50-2)とは不一致
15.3	736	332.2876	-	C ₁₈ H ₃₄ O ₄	[M+NH ₄] ⁺	-	-	-			++		セバシン酸 ジブチル (CAS No. 109-43-3)とは不一致
17.3	804	285.2786	-	C ₁₈ H ₃₆ O ₂	[M+H] ⁺	-	-	-			+		ステアリン酸 (CAS No. 57-11-4)、パルミチン酸エチル (CAS No. 628-97-7)とは不一致
27.3	980	492.4407	-	C ₁₁ H ₁₄ O ₃	[M+NH ₄] ⁺	-	-	-			++		Cyasorb UV-2908 (CAS No. 67845-93-6)とは不一致

1) PL別表第1 第2表の整理番号 (2019年12月23日時点の公表リストに付与されたもの) を示した
 2) 操作ブランク試料からの面積値増加率を示した (+3倍以上、+10倍以上、++100倍以上)
 3) PPペレットからの面積値増加率が3倍以上となった化合物 (NIAS) に●を示した (+3倍以上、+10倍以上、++100倍以上)
 4) 区分1のみ

表 1 1 BHTの標準品及び添加試験片のLC-QTOF解析結果

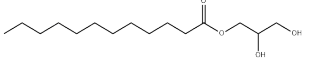
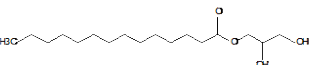
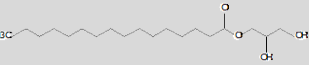
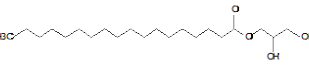
RT (min)	RI	m/z	化合物名	分子式	イオンタイプ	CAS No.	PL収載 ¹⁾	標準品による同定	標準溶液 (面積% ²⁾)	試験片 ³⁾ (面積% ²⁾)		備考
										1-1	2-1	
17.4	806	456.3832	2,2'-Ethyldienebis(4,6-di-tert-butylphenol)	C ₃₀ H ₄₆ O ₂	[M+NH ₄] ⁺	35958-30-6	573	-	-	● (-)	● (-)	酸化剤 (Ionox 129)、(BHT2量体の可能性もあり) 
19.0	844	419.3156	Diisononyl phthalate	C ₂₆ H ₄₂ O ₄	[M+H] ⁺	28553-12-0	553	○	-	● (-)	-	可塑剤
検出不可		BHT		C ₁₅ H ₂₄ O	[M-H] ⁻	128-37-0	183	-	-	-	-	酸化防止剤 positiveモードでは検出されない 

1) PL別表第 1 第 2 表の整理番号 (2019年12月23日時点の公表リストに付与されたもの) を示した

2) 添加剤本体 (BHT) 検出不可のため算出できず

3) 添加試験片のみで検出、もしくは、PPベレットと比較して添加試験片で 3 倍以上の面積値が認められた化合物 (NIAS) に●を示した

表 1 2 モノパルミチンの標準品及び添加試験片のLC-QTOF解析結果

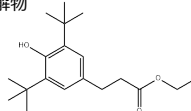
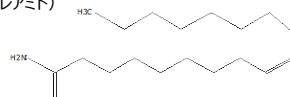
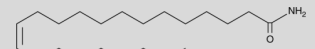
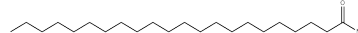
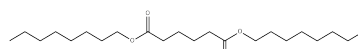
RT (min)	RI	m/z	化合物名	分子式	イオンタイプ	CAS No.	PL収載 ¹⁾	標準品による同定	標準溶液 (面積% ²⁾)	試験片 ³⁾ (面積% ²⁾)		備考
										1-2	2-2	
12.6	594	275.2215	Dodecanoic acid, 2,3-dihydroxypropyl ester	C ₁₅ H ₃₀ O ₄	[M+H] ⁺	142-18-7	175	○	—	● (0.2)	● (0.2)	界面活性剤 (モノラウリン) 
13.8	663	303.2527	—	C ₁₄ H ₂₈ O ₂	[M+H] ⁺	—	—	—	—	● (0.3)	● (0.2)	ミスチン酸 (CAS No. 544-63-8) とは不一致
13.8	664	611.5083	—	C ₃₆ H ₇₁ AlO ₅	[M+H] ⁺	—	—	—	—	● (0.2)	● (0.1)	システアリン酸(ヒドロキシ)アルミニウム (CAS No. 300-92-5) とは不一致
13.8	664	303.2527	Tetradecanoic acid, 2,3-dihydroxypropyl ester	C ₁₇ H ₃₄ O ₄	[M+H] ⁺	589-68-4	175	○	(1)	● (8)	● (7)	界面活性剤 (モノミスチン) 
15.3	735	332.1479	—	C ₁₈ H ₁₈ O ₅	[M+NH ₄] ⁺	—	—	—	—	● (0.1)	—	ジエチレングリコールジベンゾアート (CAS No. 120-55-8) とは不一致
15.3	736	332.2876	—	C ₁₈ H ₃₄ O ₄	[M+NH ₄] ⁺	—	—	—	—	● (50)	● (40)	セバシン酸 ジブチル (CAS No. 109-43-3) とは不一致
15.4	736	331.2840	Glycerol 1-palmitate	C ₁₉ H ₃₈ O ₄	[M+H] ⁺	542-44-9	175	○	(100)	(100)	(100)	界面活性剤 (モノパルミチン) 
17.3	804	359.3152	Octadecanoic acid, 2,3-dihydroxypropyl ester	C ₂₁ H ₄₂ O ₄	[M+H] ⁺	123-94-4	175	○	(1)	● (12)	—	界面活性剤 (モノステアリン) 

1) PL別表第 1 第 2 表の整理番号 (2019年12月23日時点の公表リストに付与されたもの) を示した

2) 添加剤本体のピーク面積値を100%とした

3) 添加試験片のみで検出、もしくは、PPペレットと比較して添加試験片で 3 倍以上の面積値が認められた化合物 (NIAS) に●を示した

表 1 3 エルカ酸アミドの標準品及び添加試験片のLC-QTOF解析結果

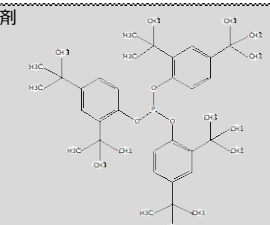
RT (min)	RI	m/z	化合物名	分子式	イオンタイプ	CAS No.	PL収載 ¹⁾	標準品による同定	標準溶液 (面積% ²⁾)	試験片 ³⁾ (面積% ²⁾)		備考
										1-3	2-3	
10.8	491	307.2356	Ethyl 3-(3,5-di- <i>tert</i> -butyl-4-hydroxyphenyl)propionate	C ₁₉ H ₃₀ O ₃	[M+H] ⁺	36294-24-3	×	-	-	● (0.09)	● (0.1)	Irganox1010の分解物 
15.2	731	282.2792	9-Octadecenamide, (Z)-	C ₁₈ H ₃₅ NO	[M+H] ⁺	301-02-0	178	○	(3)	-	● (8)	滑剤 (オレアミド) 
17.0	796	311.3134	-	C ₂₀ H ₃₈ O ₂	[M+H] ⁺	-	-	-	-	● (0.8)	● (0.7)	オレイン酸エチル (CAS No. 111-62-6) とは不一致
19.2	848	313.3292	-	C ₂₀ H ₄₀ O ₂	[M+H] ⁺	-	-	-	-	● (0.3)	● (0.2)	アラキジン酸 (CAS No. 506-30-9)、 ステアリン酸エチル (CAS No. 111-61-5) とは不一致
19.4	853	341.3321	-	C ₂₂ H ₄₄ O ₂	[M+H] ⁺	-	-	-	-	● (0.5)	● (0.4)	ステアリン酸ブチル (CAS No. 123-95-5) とは不一致
19.4	854	338.3415	13-Docosenamide, (Z)-	C ₂₂ H ₄₃ NO	[M+H] ⁺	112-84-5	178	○	(100)	(100)	(100)	滑剤 (エルカ酸アミド) 
22.5	914	340.3569	Behenic amide	C ₂₂ H ₄₅ NO	[M+H] ⁺	3061-75-4	178	○	(6)	● (23)	● (14)	滑剤 (ベヘン酸アミド) 
22.8	919	391.2839	Di- <i>n</i> -octyl adipate	C ₂₂ H ₄₂ O ₄	[M+NH ₄] ⁺	123-79-5	95	-	-	● (0.4)	● (0.3)	可塑剤 

1) PL別表第 1 第 2 表の整理番号 (2019年12月23日時点の公表リストに付与されたもの) を示した

2) 添加剤本体のピーク面積値を100%とした

3) 添加試験片のみで検出、もしくは、PPペレットと比較して添加試験片で3倍以上の面積値が認められた化合物 (NIAS) に●を示した

表 1 4 Irgafos 168の標準品及び添加試験片のLC-QTOF解析結果

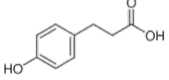
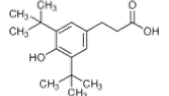
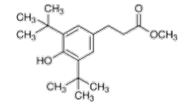
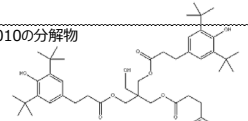


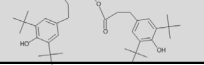
RT (min)	RI	m/z	化合物名	分子式	イオンタイプ	CAS No.	PL収載 ¹⁾	標準品による同定	標準溶液 (面積% ²⁾)	試験片 ³⁾ (面積% ²⁾)		備考
										1-4	2-4	
17.4	807	476.3286	Irgafos168からC ₁₄ H ₂₀ が解離した化合物	C ₂₈ H ₄₃ O ₃ P	[M+NH ₄] ⁺	-	-	-	-	● (0.02)	-	Irgafos 168の分解物
32.3	>1000	647.4583	Irgafos 168	C ₄₂ H ₆₃ O ₃ P	[M+H] ⁺	31570-04-4	561	○	(100)	(100)	(100)	酸化防止剤 

1) PL別表第 1 第 2 表の整理番号 (2019年12月23日時点の公表リストに付与されたもの) を示した

2) 添加剤本体のピーク面積値を100%とした

3) 添加試験片のみで検出、もしくは、PPペレットと比較して添加試験片で 3 倍以上の面積値が認められた化合物 (NIAS) に●を示した

表 1 5 Irganox 1010の標準品及び添加試験片のLC-QTOF解析結果

RT (min)	RI	m/z	化合物名	分子式	イオンタイプ	CAS No.	PL収載 ¹⁾	標準品による同定	標準溶液 (面積% ²⁾)	試験片 ³⁾ (面積% ²⁾)		備考	
										1-5	2-5		
10.5	478	167.0703	3-(4-Hydroxyphenyl)-propionic acid	C ₉ H ₁₀ O ₃	[M+H] ⁺	501-97-3	×	○	—	● (0.2)	—	Irganox1010の分解物 	
10.5	478	296.2218	3-(3,5-Di-tert-butyl-4-hydroxyphenyl)propionic acid	C ₁₇ H ₂₆ O ₃	[M+NH ₄] ⁺	20170-32-5	×	○	—	● (0.9)	—	Irganox1010の分解物 	
12.4	581	181.0860	—	C ₁₀ H ₁₂ O ₃	[M+H] ⁺	—	—	—	—	● (1)	● (2)	Propyl 4-hydroxybenzoate (CAS No. 94-13-3)、Methyl 3-(4-hydroxyphenyl)propionate (CAS No. 5597-50-2) とは不一致	
12.4	581	310.2377	Benzenepropanoic acid, 3,5-bis(1,1-dimethylethyl)-4-hydroxy-, methyl ester	C ₁₈ H ₂₈ O ₃	[M+NH ₄] ⁺	6386-38-5	—	1702 ⁴⁾	○	—	● (6)	● (9)	Irganox1010の分解物 
16.0	761	950.6338	Irganox1010からC ₁₇ H ₂₄ Oが解離した化合物	C ₅₆ H ₈₄ O ₁₁	[M+NH ₄] ⁺	—	—	—	—	● (0.6)	—	Irganox1010の分解物	
17.3	804	1006.6605	Irganox1010からC ₁₄ H ₂₀ Oが解離した化合物	C ₅₉ H ₈₈ O ₁₂	[M+NH ₄] ⁺	—	—	—	—	● (1)	—	Irganox1010の分解物	
17.6	811	934.6390	Irganox1010からC ₁₇ H ₂₄ O ₂ が解離した化合物	C ₅₆ H ₈₄ O ₁₀	[M+NH ₄] ⁺	84633-54-5	×	—	(5)	● (22)	—	Irganox1010の分解物 	
18.5	832	962.6345	Irganox1010からC ₁₆ H ₂₄ Oが解離した化合物	C ₅₇ H ₈₄ O ₁₁	[M+NH ₄] ⁺	—	—	—	—	—	● (0.1)	—	Irganox1010の分解物 
21.2	893	1138.7542	Irganox1010からC ₄ H ₆ Oが解離した化合物	C ₆₉ H ₁₀₀ O ₁₂	[M+NH ₄] ⁺	—	—	—	—	● (3)	● (5)	Irganox1010の分解物	
26.1	963	1192.8013	Irganox1010からH ₂ Oが解離した化合物	C ₇₃ H ₁₀₆ O ₁₂	[M+NH ₄] ⁺	—	—	—	—	● (3)	—	Irganox1010の分解物 	
26.4	968	1194.8168	Irganox 1010	C ₇₃ H ₁₀₆ O ₁₂	[M+NH ₄] ⁺	6683-19-8	356	○	(100)	(100)	(100)	酸化防止剤 	

1) PL別表第 1 第 2 表の整理番号 (2019年12月23日時点の公表リストに付与されたもの) を示した

2) 添加剤本体のピーク面積値を100%とした

3) 添加試験片のみで検出、もしくは、PPペレットと比較して添加試験片で 3 倍以上の面積値が認められた化合物 (NIAS) に ● を示した

4) 区分1のみ

<その2> 乳幼児用おもちゃにおける過マンガン酸カリウム消費量と総有機炭素量の関係

研究分担者 阿部 裕
研究協力者 山口 未来
研究協力者 片岡 洋平
研究代表者 六鹿 元雄

国立医薬品食品衛生研究所
国立医薬品食品衛生研究所
国立医薬品食品衛生研究所
国立医薬品食品衛生研究所

A. 研究目的

過マンガン酸カリウム (KMnO_4) 消費量は、被酸化性物質を酸化 (消費) するために要する KMnO_4 の量を指し、水中の有機物の総量規制の指標とされる。

我が国では、水道水中の有機物汚染指標として水質基準などに古くから採用され、食品用器具・容器包装においては、昭和41年に合成樹脂から溶出する有機物量を規制するため、フェノール樹脂、メラミン樹脂およびユリア樹脂を除くすべての合成樹脂製器具・容器包装に適用された。また、乳幼児用おもちゃに対しても、昭和47年にポリ塩化ビニル (PVC) 樹脂塗料、PVC を主体とする材料およびポリエチレン (PE) を主体とする材料に対しても適用され、PVC 樹脂塗料および PVC を主体とする材料は $50 \mu\text{g}/\text{mL}$ 以下、PE を主体とする材料は $10 \mu\text{g}/\text{mL}$ 以下と定められた。

これまで KMnO_4 消費量については、水中に含有される有機物の KMnO_4 に対する被酸化性に依存してその数値が大きく変わるため有機物量を正しく評価していない、目視による試験であるため試験者によって結果が異なる場合がある、測定対象物が特定されていない、また、そのために妥当性確認ができない等の問題が指摘されてきた。

一方、全有機炭素 (Total organic carbon, TOC) は水中の有機物の総量をその主要構成元素である炭素の量で表したものであり、有機物汚染の指標として、河川の調査・監視、工業排水等の水質管理、半導体

の製造管理、医薬品製造の超純水の純度管理等、幅広い分野で使用されている。また、TOC 計を用いることで測定を自動化でき、その測定精度も高いため、試験者によらず正確な数値を得ることが期待できる。

そのため水道水においては、平成17年から有機物の指標として KMnO_4 消費量に代わって TOC 量が基準項目に追加された。また、ミネラルウォーター類においては有機物等の試験として TOC 量試験が導入されている。

食品用器具・容器包装および乳幼児用おもちゃについても、製品から水へ溶出する有機物量の指標として KMnO_4 消費量から TOC 量への変更が検討されてきた。しかし、これらを対象とした測定はこれまでに数例の報告のみである¹⁻⁴⁾。特に乳幼児用おもちゃの KMnO_4 消費量と TOC 量を比較した例は、2009年に大野らが乳幼児用おもちゃ32検体 (PVC: 12検体、PE: 6検体、エチレン・酢酸ビニル共重合樹脂: 5検体、ポリプロピレン: 3検体、ポリスチレン、アクリロニトリル・ブタジエン・スチレン共重合樹脂、天然ゴム: 各2検体) を対象に測定した1例⁴⁾のみである。

本研究では、乳幼児用おもちゃにおける KMnO_4 消費量試験から TOC 量試験への変更に関する情報を収集する目的で、PVC 製および PE 製乳幼児用おもちゃ合計約200検体の KMnO_4 消費量と TOC 量を測定するとともに、これらの関係性について検討した。

B. 研究方法

1. 試料

乳幼児用おもちゃまたは育児用品 207 検体。これらは都内、神奈川県内等の玩具店、100 円ショップ、インターネット等で入手した（表 1）。内訳は、軟質 PVC 製品 118 検体（空気注入玩具、人形、ボール、風呂用玩具、浮き輪、その他）、硬質 PVC 製品 8 検体（その他）および PE 製品 81 検体（ボール、ブロック玩具、砂場用玩具、風呂用玩具、その他）である。

2. 試薬等

1) 試薬

水：ピューリック Ω（オルガノ株式会社製）で製造した超純水。

0.002 mol/L 過マンガン酸カリウム溶液：容量分析用、0.005 mol/L シュウ酸ナトリウム溶液：容量分析用、以上、富士フィルム和光純薬株式会社製

フタル酸水素カリウム：試薬特級、ナカライテスク株式会社

2) 標準原液および標準溶液

TOC 標準原液：あらかじめ 120°C で 1 時間加熱し、デシケーター内で放冷したフタル酸水素カリウム 0.425 g に水を加えて 200 mL とした（炭素濃度として 1000 μg/mL）

TOC 標準溶液：TOC 標準原液を水で希釈し 0.1~100 μg/mL とした。

3. 試験溶液の調製

試料表面積 1 cm² につき 2 mL の割合の 40°C に加温した水に試料を浸し、蓋をしたのち時々振とうしながら 40°C で 30 分間放置した。その後速やかに試料を取り除き室温まで冷却したものを試験溶液とした。試験溶液の調製は一つの試料につき 3 回行い、それぞれ 1 回ずつ測定した。また、試

験溶液調製後はすみやかに KMnO₄ 消費量および TOC 量の測定に供した。

4. KMnO₄ 消費量の測定

試験溶液 100 mL を用い、器具又は容器包装一般の試験法の KMnO₄ 消費量試験法に準じて測定した。すなわち、あらかじめ三角フラスコに水 100 mL、硫酸（1→3）5 mL および 0.002 mol/L KMnO₄ 溶液 5 mL を入れ、5 分間煮沸した後、液を捨て水で洗う。この三角フラスコに試験溶液 100 mL を採り、硫酸（1→3）5 mL および 0.002 mol/L KMnO₄ 溶液 10 mL を入れ、5 分間煮沸する。次いで、加熱をやめ、直ちに 0.005 mol/L シュウ酸ナトリウム溶液 10 mL を加えて脱色した後、0.002 mol/L 過 KMnO₄ 溶液で微紅色が消えずに残るまで滴定する。同様に空試験を行い、次式により KMnO₄ 消費量を求める。

$$\text{KMnO}_4 \text{ 消費量 } (\mu\text{g/mL}) = \frac{\{(a-b) \times 0.316 \times f \times 1000\}}{100}$$

ただし、

a: 本試験の 0.002 mol/L KMnO₄ 溶液の滴定量 (mL)

b: 空試験の 0.002 mol/L KMnO₄ 溶液の滴定量 (mL)

f: 0.002 mol/L KMnO₄ 溶液のファクター

なお、おもちゃの規格基準では試験溶液 50 mL を水で 100 mL に希釈したものをを用いることとされているが、今回はできるだけ低濃度まで正確に測定するため、試験溶液は希釈せずに試験に供した。

5. TOC 量の測定

1) 装置

TOC 計：TOC-L CPH（酸化分解方式：燃焼酸化式、二酸化炭素検出：非分散赤外吸収方式 (NDIR))、(株) 島津製作所製

表 1 試料情報

No.	材質	種類	対象年齢	製造国	No.	材質	種類	対象年齢	製造国	No.	材質	種類	対象年齢	製造国
1	軟質PVC	空気注入玩具	3歳以上	中国	36	軟質PVC	人形	1.5歳以上	中国	71	軟質PVC	ボール	1.5歳以上	中国
2	軟質PVC	空気注入玩具	3歳以上	中国	37	軟質PVC	人形	3歳以上	中国	72	軟質PVC	ボール	3歳以上	中国
3	軟質PVC	空気注入玩具	3歳以上	中国	38	軟質PVC	人形	6か月以上	中国	73	軟質PVC	ボール	1歳以上	中国
4	軟質PVC	空気注入玩具	1.5歳以上	中国	39	軟質PVC	人形	3歳以上	中国	74	軟質PVC	ボール	3歳以上	中国
5	軟質PVC	空気注入玩具	3歳以上	中国	40	軟質PVC	人形	3歳以上	中国	75	軟質PVC	ボール	3歳以上	中国
6	軟質PVC	空気注入玩具	3歳以上	中国	41	軟質PVC	人形	6か月以上	中国	76	軟質PVC	風呂用玩具	1.5歳以上	中国
7	軟質PVC	空気注入玩具	3歳以上	中国	42	軟質PVC	人形	6か月以上	中国	77	軟質PVC	風呂用玩具	1.5歳以上	中国
8	軟質PVC	空気注入玩具	3歳以上	中国	43	軟質PVC	人形	6か月以上	中国	78	軟質PVC	風呂用玩具	1.5歳以上	中国
9	軟質PVC	空気注入玩具	3歳以上	中国	44	軟質PVC	人形	3歳以上	中国	79	軟質PVC	風呂用玩具	1.5歳以上	中国
10	軟質PVC	空気注入玩具	3歳以上	中国	45	軟質PVC	人形	1.5歳以上	中国	80	軟質PVC	風呂用玩具	3歳以上	中国
11	軟質PVC	空気注入玩具	3歳以上	中国	46	軟質PVC	人形	8か月以上	中国	81	軟質PVC	風呂用玩具	3歳以上	中国
12	軟質PVC	空気注入玩具	3歳以上	中国	47	軟質PVC	人形	3歳以上	中国	82	軟質PVC	風呂用玩具	3歳以上	中国
13	軟質PVC	空気注入玩具	3歳以上	中国	48	軟質PVC	人形	3歳以上	中国	83	軟質PVC	風呂用玩具	3歳以上	中国
14	軟質PVC	空気注入玩具	3歳以上	中国	49	軟質PVC	人形	3歳以上	中国	84	軟質PVC	風呂用玩具	3歳以上	中国
15	軟質PVC	空気注入玩具	3歳以上	中国	50	軟質PVC	人形	6か月以上	中国	85	軟質PVC	風呂用玩具	3歳以上	中国
16	軟質PVC	空気注入玩具	3歳以上	中国	51	軟質PVC	人形	3歳以上	中国	86	軟質PVC	風呂用玩具	1.5歳以上	中国
17	軟質PVC	空気注入玩具	3歳以上	中国	52	軟質PVC	人形	3歳以上	中国	87	軟質PVC	風呂用玩具	1.5歳以上	中国
18	軟質PVC	空気注入玩具	3歳以上	中国	53	軟質PVC	人形	3歳以上	中国	88	軟質PVC	風呂用玩具	1.5歳以上	中国
19	軟質PVC	空気注入玩具	3歳以上	中国	54	軟質PVC	人形	7歳以上	中国	89	軟質PVC	風呂用玩具	1.5歳以上	中国
20	軟質PVC	空気注入玩具	3歳以上	中国	55	軟質PVC	人形	6歳以上	中国	90	軟質PVC	風呂用玩具	1.5歳以上	中国
21	軟質PVC	空気注入玩具	1.5歳以上	中国	56	軟質PVC	ボール	3歳以上	中国	91	軟質PVC	風呂用玩具	1.5歳以上	中国
22	軟質PVC	空気注入玩具	-	中国	57	軟質PVC	ボール	3歳以上	中国	92	軟質PVC	風呂用玩具	6か月以上	中国
23	軟質PVC	空気注入玩具	-	中国	58	軟質PVC	ボール	1.5歳以上	中国	93	軟質PVC	風呂用玩具	1.5歳以上	中国
24	軟質PVC	空気注入玩具	3歳以上	中国	59	軟質PVC	ボール	1.5歳以上	中国	94	軟質PVC	浮輪	1.5歳以上3歳未満	中国
25	軟質PVC	空気注入玩具	3歳以上	中国	60	軟質PVC	ボール	1.5歳以上	中国	95	軟質PVC	浮輪	1.5歳以上3歳未満	中国
26	軟質PVC	空気注入玩具	3歳以上	中国	61	軟質PVC	ボール	1.5歳以上	中国	96	軟質PVC	浮輪	1.5歳以上3歳未満	中国
27	軟質PVC	空気注入玩具	3歳以上	中国	62	軟質PVC	ボール	3歳以上	中国	97	軟質PVC	浮輪	1.5歳以上3歳未満	中国
28	軟質PVC	空気注入玩具	3歳以上	中国	63	軟質PVC	ボール	1.5歳以上	中国	98	軟質PVC	浮輪	1.5歳以上3歳未満	中国
29	軟質PVC	空気注入玩具	3歳以上	中国	64	軟質PVC	ボール	1.5歳以上	中国	99	軟質PVC	浮輪	1.5歳以上3歳未満	中国
30	軟質PVC	空気注入玩具	3歳以上	中国	65	軟質PVC	ボール	1.5歳以上	中国	100	軟質PVC	浮輪	1.5歳以上3歳未満	中国
31	軟質PVC	空気注入玩具	3歳以上	中国	66	軟質PVC	ボール	1.5歳以上	中国	101	軟質PVC	浮輪	1.5歳以上3歳未満	中国
32	軟質PVC	空気注入玩具	6歳以上	中国	67	軟質PVC	ボール	1.5歳以上	中国	102	軟質PVC	浮輪	1.5歳以上3歳未満	中国
33	軟質PVC	空気注入玩具	6歳以上	中国	68	軟質PVC	ボール	1.5歳以上	中国	103	軟質PVC	浮輪	1.5歳以上3歳未満	中国
34	軟質PVC	人形	1.5歳以上	中国	69	軟質PVC	ボール	1.5歳以上	中国	104	軟質PVC	浮輪	1.5歳以上3歳未満	中国
35	軟質PVC	人形	1.5歳以上	中国	70	軟質PVC	ボール	1.5歳以上	中国	105	軟質PVC	浮輪	1.5歳以上3歳未満	中国

表 1 試料情報 (続き)

No.	材質	種類	対象年齢	製造国	No.	材質	種類	対象年齢	製造国	No.	材質	種類	対象年齢	製造国
106	軟質PVC	浮輪	3歳以上	中国	141	PE	ボール	1.5歳以上	中国	176	PE	風呂用玩具	1.5歳以上	中国
107	軟質PVC	浮輪	3歳以上	中国	142	PE	ボール	1.5歳以上	中国	177	PE	風呂用玩具	1.5歳以上	中国
108	軟質PVC	浮輪	3歳以上	中国	143	PE	ボール	3歳以上	中国	178	PE	風呂用玩具	1.5歳以上	中国
109	軟質PVC	浮輪	3歳以上	中国	144	PE	ボール	3歳以上	中国	179	PE	風呂用玩具	1.5歳以上	中国
110	軟質PVC	その他	3歳以上	中国	145	PE	ボール	3歳以上	中国	180	PE	風呂用玩具	1.5歳以上	中国
111	軟質PVC	その他	3歳以上	中国	146	PE	ボール	3歳以上	中国	181	PE	風呂用玩具	1.5歳以上	中国
112	軟質PVC	その他	3歳以上	中国	147	PE	ボール	3歳以上	中国	182	PE	その他	1.5歳以上	中国
113	軟質PVC	その他	1.5歳以上	中国	148	PE	ボール	3歳以上	中国	183	PE	その他	3歳以上	中国
114	軟質PVC	その他	1.5歳以上	中国	149	PE	ボール	3歳以上	中国	184	PE	その他	10か月以上	中国
115	軟質PVC	その他(育児用品)	7か月以上	中国	150	PE	ボール	3歳以上	中国	185	PE	その他	5歳以上	中国
116	軟質PVC	その他(育児用品)	7か月以上	中国	151	PE	フロック玩具	2歳以上	日本	186	PE	その他	5歳以上	中国
117	軟質PVC	その他(育児用品)	7か月以上	中国	152	PE	フロック玩具	2歳以上	日本	187	PE	その他	5歳以上	中国
118	軟質PVC	その他	3歳以上	中国	153	PE	フロック玩具	2歳以上	日本	188	PE	その他	5歳以上	中国
119	硬質PVC	その他	3歳以上	日本	154	PE	フロック玩具	2歳以上	日本	189	PE	その他	5歳以上	中国
120	硬質PVC	その他	3歳以上	中国	155	PE	フロック玩具	2歳以上	日本	190	PE	その他	5歳以上	中国
121	硬質PVC	その他	3歳以上	日本	156	PE	フロック玩具	2歳以上	日本	191	PE	その他	3歳以上	中国
122	硬質PVC	その他	3歳以上	中国	157	PE	フロック玩具	1歳以上	カナダ	192	PE	その他	3歳以上	中国
123	硬質PVC	その他	3歳以上	中国	158	PE	フロック玩具	3歳以上	中国	193	PE	その他	1.5歳以上	中国
124	硬質PVC	その他	3歳以上	中国	159	PE	フロック玩具	3歳以上	中国	194	PE	その他	3歳以上	中国
125	硬質PVC	その他	3歳以上	中国	160	PE	フロック玩具	3歳以上	中国	195	PE	その他	3歳以上	中国
126	硬質PVC	その他	3歳以上	中国	161	PE	フロック玩具	3歳以上	中国	196	PE	その他	3歳以上	中国
127	PE	ボール	1.5歳以上	日本	162	PE	フロック玩具	3歳以上	中国	197	PE	その他	3歳以上	中国
128	PE	ボール	1.5歳以上	日本	163	PE	フロック玩具	3歳以上	中国	198	PE	その他	3歳以上	中国
129	PE	ボール	-	台湾	164	PE	砂場用玩具	3歳以上	中国	199	PE	その他	3歳以上	中国
130	PE	ボール	-	台湾	165	PE	砂場用玩具	3歳以上	中国	200	PE	その他	3歳以上	日本
131	PE	ボール	-	台湾	166	PE	砂場用玩具	3歳以上	中国	201	PE	その他	3歳以上	中国
132	PE	ボール	-	台湾	167	PE	砂場用玩具	3歳以上	中国	202	PE	その他	3歳以上	中国
133	PE	ボール	-	台湾	168	PE	砂場用玩具	3歳以上	中国	203	PE	その他	3歳以上	中国
134	PE	ボール	-	中国	169	PE	砂場用玩具	3歳以上	中国	204	PE	その他	3歳以上	中国
135	PE	ボール	-	中国	170	PE	砂場用玩具	3歳以上	中国	205	PE	その他	3歳以上	中国
136	PE	ボール	-	中国	171	PE	砂場用玩具	3歳以上	中国	206	PE	その他	3歳以上	日本
137	PE	ボール	-	中国	172	PE	砂場用玩具	3歳以上	中国	207	PE	その他	3歳以上	日本
138	PE	ボール	1.5歳以上	中国	173	PE	砂場用玩具	3歳以上	中国					
139	PE	ボール	1.5歳以上	中国	174	PE	砂場用玩具	-	中国					
140	PE	ボール	1.5歳以上	中国	175	PE	砂場用玩具	-	中国					

2) 測定条件

試料注入量：500 μ L
試料注入回数：3回
燃焼管温度：680 $^{\circ}$ C
燃焼酸化触媒：白金
測定法：NPOC法（酸性化通気処理法）
キャリアガス（空気）流量：150 mL/min
パージガス（空気）流量：80 mL/min
通気時間：1.5分間
検出：NDIR

6. LC-MSの測定

1) 装置

UPLC H class, Xevo TQD (Waters社製)

2) 測定条件

カラム：Hypersil Gold Phenyl (2.1 mm \times 100 mm、1.9 μ m、Thermo Fisher Scientific社製)

カラム温度：40 $^{\circ}$ C

移動相：A 0.1%ギ酸 B 0.1%ギ酸メタノール

グラジエント条件：B 50% \rightarrow 直線グラジエント (25 min) \rightarrow B 100% (5 min)

流速：0.2 mL/min

試料注入量：10 μ L

イオン化法：ESI (+)

キャピラリー電圧：3 kV

イオン源温度：150 $^{\circ}$ C

脱溶媒温度：350 $^{\circ}$ C

脱溶媒ガス流量：N₂ 600 L/hr

コーンガス流量：N₂ 50 L/hr

測定モード：スキャンモード (m/z 50-1000)

C. 研究結果及び考察

1. KMnO₄消費量

1) 定量下限

KMnO₄消費量の定量下限値は大野らの報告⁴⁾を参考にした。すなわち、水道水で

は最小滴定量の0.05 mLに相当する0.2 μ g/mLが定量下限に設定されているが、乳幼児用おもちゃのKMnO₄消費量試験では、試験溶液で得られた値から空試験溶液で得られた値を差し引く必要があり、この両方に誤差があるため、差し引きでより大きな誤差となりうる。したがってKMnO₄消費量の定量下限は余裕をもって0.5 μ g/mLとした。

2) KMnO₄消費量の測定

測定結果を表2に示した。軟質PVC製品118検体全ての試料において0.78~14.3 μ g/mLを示した。最も高い数値を示したのは試料No.56(ボール)であった。一方、硬質PVC製品8検体およびPE製品81検体ではいずれも定量下限未満であった。

大野らの結果では、PVC製品24検体(器具・容器包装：12検体、乳幼児用おもちゃ：12検体。軟質か硬質かは不明。)でND(<0.5 μ g/mL)~45.5 μ g/mLであった。45.5 μ g/mLのKMnO₄消費量を示した試料を除くとND(<0.5 μ g/mL)~8.9 μ g/mLであった。一方、PE製品21検体(器具・容器包装：15検体、乳幼児用おもちゃ：6検体)でND(<0.5 μ g/mL)~0.8 μ g/mLであった。したがって、概ね本研究と同程度の結果であると考えられた。

2. TOC量

1) 定量下限

低濃度領域における繰り返し測定の精度を確認するため0.1、0.2、0.5および1.0 μ g/mLのTOC標準溶液を5回繰り返し測定したところ、面積値のRSD(%)はそれぞれ7.8、7.0、1.0および1.0%となった。

続いて、0.5~1.0 μ g/mL付近のTOC量を示した試料6検体から得られた試験溶液を用いて繰り返し測定の精度を確認した。その結果、RSD(%)は0.2~4.8%となり、

表 2 軟質 PVC製おもちゃのKMnO₄消費量とTOC量

No.	種類	KMnO ₄ (µg/mL)		TOC (µg/mL)		No.	種類	KMnO ₄ (µg/mL)		TOC (µg/mL)	
		Ave ± SD	RSD (%)	Ave ± SD	RSD (%)			Ave ± SD	RSD (%)	Ave ± SD	RSD (%)
1	空気注入玩具	3.5 ± 0.4	10.6	1.6 ± 0.1	5.0	31	空気注入玩具	6.1 ± 0.1	2.3	2.1 ± 0.0	1.4
2	空気注入玩具	2.0 ± 0.9	45.8	1.4 ± 0.1	5.3	32	空気注入玩具	6.3 ± 0.2	3.0	2.5 ± 0.0	1.9
3	空気注入玩具	2.5 ± 0.5	18.9	1.2 ± 0.2	17.1	33	空気注入玩具	5.2 ± 0.4	8.7	2.1 ± 0.2	8.3
4	空気注入玩具	5.8 ± 0.5	7.9	3.1 ± 0.0	0.3	34	人形	3.0 ± 0.1	3.7	3.7 ± 0.2	4.8
5	空気注入玩具	2.5 ± 0.1	2.0	1.4 ± 0.0	3.0	35	人形	3.8 ± 0.5	13.1	4.5 ± 0.2	4.6
6	空気注入玩具	3.6 ± 0.1	3.8	2.0 ± 0.1	6.1	36	人形	3.4 ± 0.3	9.9	3.9 ± 0.0	0.7
7	空気注入玩具	2.5 ± 0.2	9.4	1.7 ± 0.0	1.2	37	人形	2.3 ± 0.1	4.5	2.6 ± 0.2	5.9
8	空気注入玩具	2.0 ± 0.0	1.6	1.2 ± 0.1	5.7	38	人形	3.4 ± 0.8	24.0	5.9 ± 1.9	32.2
9	空気注入玩具	4.3 ± 0.3	6.0	2.2 ± 0.1	6.7	39	人形	1.4 ± 0.1	8.1	2.1 ± 0.3	12.0
10	空気注入玩具	5.5 ± 0.4	6.6	2.7 ± 0.1	2.5	40	人形	1.1 ± 0.1	9.1	1.8 ± 0.1	5.4
11	空気注入玩具	5.0 ± 0.4	8.0	2.3 ± 0.0	1.5	41	人形	3.3 ± 0.3	8.3	4.6 ± 0.4	9.3
12	空気注入玩具	6.3 ± 0.2	4.0	2.9 ± 0.0	0.5	42	人形	4.2 ± 0.5	11.8	6.0 ± 0.4	5.9
13	空気注入玩具	5.9 ± 0.1	2.2	2.8 ± 0.1	2.5	43	人形	2.8 ± 0.5	17.3	3.5 ± 0.8	22.9
14	空気注入玩具	3.5 ± 0.4	10.9	1.6 ± 0.1	5.7	44	人形	1.9 ± 0.2	11.6	2.1 ± 0.1	5.1
15	空気注入玩具	4.2 ± 0.1	1.2	2.0 ± 0.0	0.0	45	人形	3.4 ± 0.5	15.0	3.3 ± 0.2	4.6
16	空気注入玩具	2.6 ± 0.2	5.9	1.5 ± 0.1	6.9	46	人形	5.9 ± 1.1	19.0	5.9 ± 0.5	9.0
17	空気注入玩具	2.8 ± 0.0	1.7	1.5 ± 0.0	2.2	47	人形	1.0 ± 0.1	8.8	1.4 ± 0.0	2.5
18	空気注入玩具	2.0 ± 0.8	38.1	1.1 ± 0.0	2.9	48	人形	2.5 ± 0.4	16.1	2.1 ± 0.2	8.0
19	空気注入玩具	1.5 ± 0.0	1.2	0.50 ± 0.0	1.9	49	人形	4.2 ± 0.6	14.4	2.3 ± 0.2	6.7
20	空気注入玩具	2.7 ± 0.3	11.6	1.1 ± 0.1	7.6	50	人形	3.3 ± 0.4	11.5	4.1 ± 0.3	8.0
21	空気注入玩具	2.2 ± 0.2	9.9	1.7 ± 0.1	4.8	51	人形	2.2 ± 0.1	4.3	1.9 ± 0.1	7.6
22	空気注入玩具	6.8 ± 0.1	0.7	3.5 ± 0.0	0.4	52	人形	3.7 ± 0.1	3.5	3.2 ± 0.2	5.3
23	空気注入玩具	6.3 ± 0.6	10.0	3.3 ± 0.1	3.0	53	人形	2.6 ± 0.7	27.9	4.2 ± 0.5	12.0
24	空気注入玩具	4.6 ± 0.6	12.6	2.3 ± 0.2	8.0	54	人形	5.3 ± 0.4	7.6	5.8 ± 0.5	8.1
25	空気注入玩具	4.0 ± 0.3	7.8	2.1 ± 0.3	15.5	55	人形	1.2 ± 0.4	32.1	0.80 ± 0.04	5.5
26	空気注入玩具	2.0 ± 0.3	14.9	1.5 ± 0.0	3.1	56	ボール	14.3 ± 0.7	4.8	15.8 ± 1.3	8.4
27	空気注入玩具	3.3 ± 0.0	1.1	2.1 ± 0.0	1.2	57	ボール	13.5 ± 0.6	4.3	14.6 ± 1.1	7.6
28	空気注入玩具	3.6 ± 0.1	3.5	2.5 ± 0.0	1.5	58	ボール	3.6 ± 0.4	11.1	8.4 ± 1.3	15.3
29	空気注入玩具	6.7 ± 0.2	3.3	1.8 ± 0.1	3.8	59	ボール	2.1 ± 0.0	1.1	3.8 ± 0.1	2.8
30	空気注入玩具	4.8 ± 0.2	3.3	1.3 ± 0.1	4.3	60	ボール	2.1 ± 0.1	5.9	3.6 ± 0.1	3.1

n=3

表 2 軟質 PVC 製おもちゃの KMnO_4 消費量と TOC 量 (続き)

No.	種類	KMnO_4 ($\mu\text{g}/\text{mL}$)		TOC ($\mu\text{g}/\text{mL}$)		No.	種類	KMnO_4 ($\mu\text{g}/\text{mL}$)		TOC ($\mu\text{g}/\text{mL}$)	
		AVE \pm SD	RSD (%)	AVE \pm SD	RSD (%)			AVE \pm SD	RSD (%)	AVE \pm SD	RSD (%)
61	ボール	2.3 \pm 0.1	4.2	3.8 \pm 0.1	2.8	91	風呂用玩具	3.1 \pm 0.1	3.6	6.3 \pm 0.2	2.4
62	ボール	3.8 \pm 0.2	5.1	5.8 \pm 0.3	5.4	92	風呂用玩具	0.78 \pm 0.17	22.3	0.74 \pm 0.05	6.2
63	ボール	2.7 \pm 0.2	5.7	3.5 \pm 0.1	3.5	93	風呂用玩具	1.7 \pm 0.2	10.5	3.2 \pm 0.4	12.3
64	ボール	3.2 \pm 0.1	4.1	4.1 \pm 0.1	2.7	94	浮輪	3.8 \pm 0.3	6.9	2.4 \pm 0.1	5.5
65	ボール	2.0 \pm 0.0	0.9	2.1 \pm 0.1	5.4	95	浮輪	3.6 \pm 0.1	4.0	2.5 \pm 0.1	2.6
66	ボール	3.5 \pm 0.4	10.2	3.3 \pm 0.2	6.3	96	浮輪	8.8 \pm 0.2	2.0	5.4 \pm 0.2	2.9
67	ボール	5.6 \pm 0.1	2.5	7.6 \pm 0.0	0.2	97	浮輪	8.4 \pm 0.3	3.8	4.8 \pm 0.1	2.5
68	ボール	5.9 \pm 0.4	6.2	8.4 \pm 0.5	5.5	98	浮輪	6.4 \pm 0.8	12.8	3.6 \pm 0.1	2.1
69	ボール	5.2 \pm 0.0	0.8	7.0 \pm 0.6	8.3	99	浮輪	4.4 \pm 0.1	2.9	3.0 \pm 0.1	2.7
70	ボール	6.3 \pm 0.3	5.2	7.0 \pm 0.4	6.3	100	浮輪	6.4 \pm 0.6	9.8	3.0 \pm 0.2	6.8
71	ボール	5.5 \pm 0.5	8.6	8.4 \pm 0.4	5.3	101	浮輪	5.5 \pm 0.5	8.5	3.3 \pm 0.0	0.8
72	ボール	10.7 \pm 0.7	7.0	17.5 \pm 1.0	5.4	102	浮輪	9.8 \pm 0.1	1.0	4.8 \pm 0.1	2.1
73	ボール	3.6 \pm 0.4	11.5	4.3 \pm 0.6	12.9	103	浮輪	9.0 \pm 0.4	5.0	4.3 \pm 0.0	0.9
74	ボール	4.4 \pm 0.2	4.5	4.7 \pm 0.3	5.9	104	浮輪	8.6 \pm 0.7	7.8	4.2 \pm 0.1	2.5
75	ボール	3.0 \pm 0.2	5.1	3.6 \pm 0.1	1.9	105	浮輪	8.5 \pm 0.5	5.6	4.2 \pm 0.1	2.9
76	風呂用玩具	4.0 \pm 0.3	7.7	6.3 \pm 0.2	3.3	106	浮輪	8.9 \pm 0.2	2.5	4.9 \pm 0.1	2.6
77	風呂用玩具	3.9 \pm 0.1	3.4	5.8 \pm 0.0	0.5	107	浮輪	7.1 \pm 0.1	2.0	3.9 \pm 0.1	1.4
78	風呂用玩具	4.2 \pm 0.2	4.8	6.6 \pm 0.2	3.1	108	浮輪	8.0 \pm 0.8	10.4	4.0 \pm 0.2	5.2
79	風呂用玩具	2.7 \pm 0.4	13.3	3.9 \pm 0.3	8.7	109	浮輪	7.2 \pm 0.4	5.5	3.7 \pm 0.1	2.7
80	風呂用玩具	1.9 \pm 0.1	4.1	1.6 \pm 0.1	4.0	110	その他	1.1 \pm 0.1	10.7	0.97 \pm 0.03	2.7
81	風呂用玩具	2.4 \pm 0.4	17.6	1.7 \pm 0.2	12.8	111	その他	1.2 \pm 0.0	3.1	1.4 \pm 0.0	0.7
82	風呂用玩具	1.2 \pm 0.3	26.3	0.98 \pm 0.07	6.8	112	その他	1.4 \pm 0.0	0.0	1.6 \pm 0.0	2.9
83	風呂用玩具	1.1 \pm 0.3	31.2	1.2 \pm 0.0	2.7	113	その他	3.0 \pm 0.3	9.7	7.8 \pm 1.1	14.7
84	風呂用玩具	1.4 \pm 0.1	8.4	1.1 \pm 0.0	3.2	114	その他	4.1 \pm 0.3	7.1	9.9 \pm 0.4	3.7
85	風呂用玩具	1.3 \pm 0.1	5.6	1.2 \pm 0.0	4.2	115	その他(育児用品)	1.1 \pm 0.0	0.0	1.0 \pm 0.0	0.5
86	風呂用玩具	2.9 \pm 0.5	18.3	4.9 \pm 0.6	11.2	116	その他(育児用品)	1.1 \pm 0.1	6.9	0.97 \pm 0.01	1.0
87	風呂用玩具	2.6 \pm 0.3	9.8	4.6 \pm 0.3	6.4	117	その他(育児用品)	1.3 \pm 0.1	5.0	1.1 \pm 0.0	2.0
88	風呂用玩具	2.4 \pm 0.3	11.6	5.0 \pm 0.4	8.4	118	その他	4.1 \pm 0.4	10.5	5.9 \pm 0.1	2.0
89	風呂用玩具	2.9 \pm 0.3	10.0	5.4 \pm 0.4	6.5						
90	風呂用玩具	2.7 \pm 0.2	6.1	5.1 \pm 0.3	5.6						

n=3

良好な精度であることが確認された。したがって、本研究における TOC 量の定量下限は $0.5 \mu\text{g/mL}$ とした。これは大野らの報告と同等であった。

2) TOC 量の測定

測定結果を表 2 に示した。軟質 PVC 製品 118 検体全ての試料において $0.50 \sim 17.5 \mu\text{g/mL}$ を示した。最も高い数値を示したのは試料 No.72 (ボール) であった。一方、硬質 PVC 製品 8 検体および PE 製品 81 検体ではいずれも定量下限未満であった。

大野らの結果では、PVC 製品 24 検体で ND ($< 0.5 \mu\text{g/mL}$) $\sim 8.9 \mu\text{g/mL}$ 、PE 製品 21 検体で ND ($< 0.5 \mu\text{g/mL}$) $\sim 1.5 \mu\text{g/mL}$ であり、PE 製品では 1 検体のみから検出された。以上の結果から、TOC 量に関しても概ね同等の結果であると考えられた。

3. KMnO_4 消費量と TOC 量の相関

軟質 PVC 製品 118 検体から得られた KMnO_4 消費量と TOC 量の相関を図 1 に示した。

両者の回帰直線の相関係数 (r) は 0.639 となり、正の相関が確認された。また、 KMnO_4 消費量と TOC 量の比 (TOC 量/ KMnO_4 消費量) は $0.27 \sim 2.6$ であった。

続いて、厚さが 0.03mm 以下の浮き輪や空気注入玩具のみ (浮き輪等) の場合と、これらを除いたボール、人形、風呂用玩具等のみ (ボール等) の場合とに分け、それぞれの回帰直線から相関係数を求めたところ、いずれにおいても 0.920 となり、強い正の相関が確認された。また、回帰直線の傾きは、浮き輪等は 1.8 、ボール等は 0.7 となった。したがって、前者は KMnO_4 消費量の方が TOC 量よりも高い傾向があり、後者は TOC 量の方がわずかに高い傾向があった。

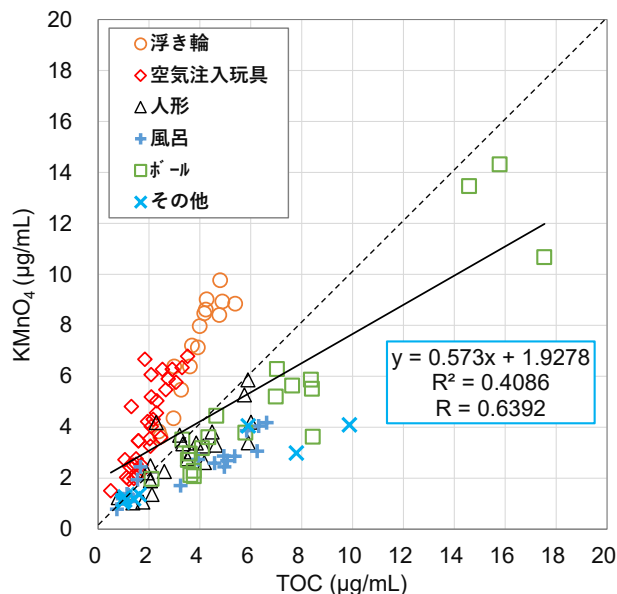


図 1 軟質 PVC 製おもちゃの KMnO_4 消費量と TOC 量の関係

実線は一次回帰直線、破線は $y = x$ の直線を示す

4. KMnO_4 消費量および TOC 量と溶出物の関係

KMnO_4 消費量および TOC 量と溶出物の関係を検討するため、いくつかの試料から得られた試験溶液を LC-MS で測定し、溶出物の推定を試みた。得られた代表的なクロマトグラムを図 2 に示した。

いずれの試料からも約 3.6 分までに複数のピークが検出されたがこれらの同定は出来なかった。一方、ボール等の一部から可塑剤のクエン酸トリブチル (TBC) やアセチルクエン酸トリブチル (ATBC) 等が確認された。また、保持時間 6.07 分のピークは同定には至らなかったが、TBC および ATBC と類似のマスマスペクトルであったことから、これらの構造類似体または分解生成物と推定された。

そこで、TBC および ATBC について KMnO_4 消費量と TOC 量の比較を試みた。しかし、これらは水に不溶であり、微量のメタノールに溶解させてから水に加えても、油のように細かい粒となって溶解せず、比

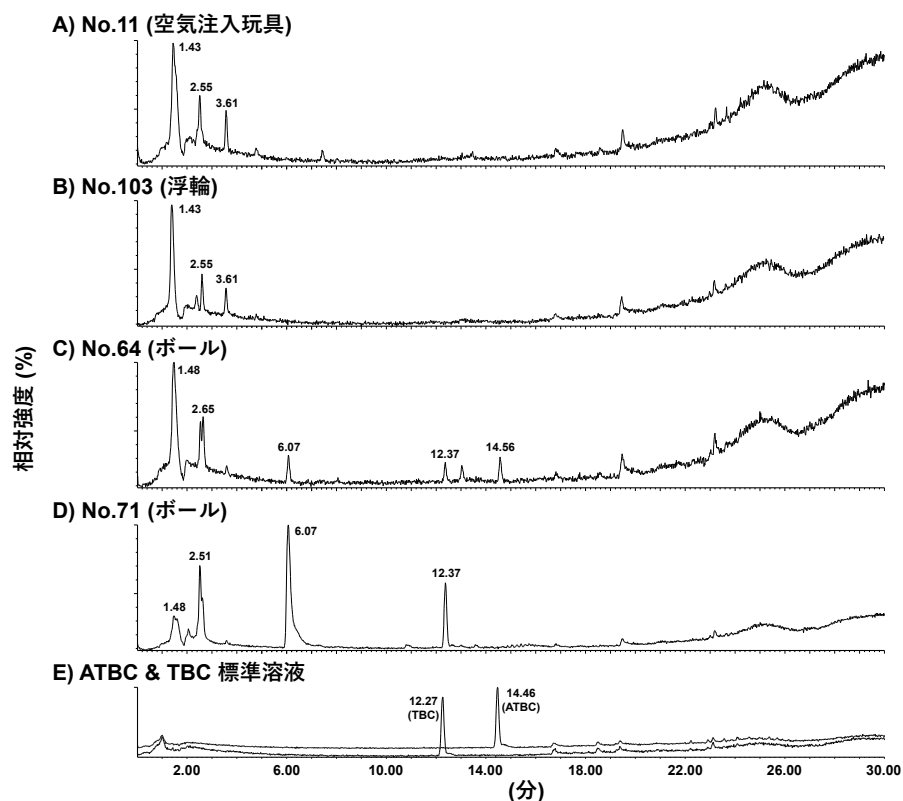


図2 試験溶液のトータルイオンクロマトグラム (m/z 50-1000)

ATBC 及び TBC 標準溶液の濃度は各 1 $\mu\text{g}/\text{mL}$

較することができなかった。したがって浮き輪等とボール等において KMnO_4 消費量が TOC 量の傾向が異なっていた原因を明確にすることはできなかった。

D. 結論

乳幼児用おもちゃにおける KMnO_4 消費量試験から TOC 量試験への変更に関する情報を収集する目的で、PVC 製および PE 製乳幼児用おもちゃ合計約 200 検体の KMnO_4 消費量と TOC 量を測定するとともに、これらの相関について検討した。その結果、軟質 PVC 製おもちゃでは、 KMnO_4 消費量は 0.78~14.3 $\mu\text{g}/\text{mL}$ 、TOC 量は 0.50~17.5 $\mu\text{g}/\text{mL}$ であり、過去の報告とほぼ同等であった。一方、硬質 PVC および PE 製おもちゃではいずれも定量下限未満であった。

KMnO_4 消費量と TOC 量には正の相関が

みられ、 KMnO_4 消費量と TOC 量の比 (TOC 量/ KMnO_4 消費量) は最大で約 3 倍であった。

乳幼児用おもちゃを対象とした KMnO_4 消費量および TOC 量に関する調査報告は少なく、本成果は規格基準改正の参考情報として活用が期待される。

E. 参考文献

- 1) 馬場二夫、楠本一枝、水谷泰久：シリコーンゴムから溶出する酸性物質、食品衛生学雑誌、20、332-337 (1979)
- 2) 馬場二夫、細川 守、山田明男：ゴム製器具等からの溶出物の指標としての過マンガン酸カリウム消費量、TOC および紫外外部吸収、生活衛生、29、279-284 (1985)
- 3) 植松洋子、荻本真美、樺島順一郎、鈴木公美、金子令子、船山恵市、羽石奈穂子、安野哲子、荻野周三：レトルト食品

用包装材についての溶出モデル実験、食品衛生学雑誌、46、133-138 (2005)

4) 大野浩之、鈴木昌子、六鹿元雄、河村葉子：合成樹脂製器具・容器包装およ

び玩具における過マンガン酸カリウム消費量および全有機炭素の検討、食品衛生学雑誌、50、230-236 (2009)

<その3> ポリ塩化ビニル製おもちゃの使用可塑剤調査（第3報）

研究協力者 阿部 裕
研究協力者 山口 未来
研究協力者 片岡 洋平
研究代表者 六鹿 元雄

国立医薬品食品衛生研究所
国立医薬品食品衛生研究所
国立医薬品食品衛生研究所
国立医薬品食品衛生研究所

A. 研究目的

一般的に合成樹脂やゴム等にはその品質を保持するため、もしくはその性質を改変するため、製造時に可塑剤、紫外線吸収剤、酸化防止剤、滑剤などの様々な添加剤が使用される。特に樹脂等に柔軟性を付与する可塑剤は添加量が多く、例えば軟質ポリ塩化ビニル（PVC）製品では、最大で 50 wt%程度添加されることがある¹⁻⁷⁾。

可塑剤には様々な種類のものがあるが、フタル酸ジ(2-エチルヘキシル) (DEHP) やフタル酸ジイソノニル (DINP) などのフタル酸エステル類 (PAEs) は、PVC との相溶性に優れ、独特な柔らかさを与える。そのため、2000 年頃まで世界中で PVC 製乳幼児用おもちゃや育児用品に対して高頻度かつ高濃度で使用されていた。

しかし、DEHP や DINP は生殖毒性や発生毒性などを有することが疑われ⁸⁻¹⁰⁾、さらにこれらの可塑剤が、唾液を介して乳幼児にばく露する可能性が指摘された¹¹⁾。そのため、乳幼児用おもちゃや育児用品への PAEs の使用が世界的に制限されるようになり、我が国でも、食品衛生法において 2002 年に指定おもちゃに対して DEHP の使用が禁止され、さらに口に接触することを本質とするものについては DINP の使用も禁止された¹²⁾。なお、指定おもちゃとは乳幼児が接触することによりその健康を損なうおそれがあるものとして厚生労働大臣（当時、厚生大臣）の指定するおもちゃをいい、主に乳幼児を対象としたものを指

す。

その後、米国や欧州連合（EU）などにおいて、DEHP および DINP のみならず、フタル酸ジブチル (DBP)、フタル酸ベンジルブチル (BBP)、フタル酸ジ-*n*-オクチル (DNOP) およびフタル酸ジイソデシル (DIDP) を加えた 6 種の PAEs が規制対象となった。我が国でも 2010 年に規制対象が拡大され、指定おもちゃの可塑化された材料からなる部分には、DEHP、DBP および BBP を 0.1wt% を超えて含有してはならないとされた¹³⁾。さらに、乳幼児の口に接触することを本質とする部分であって可塑化された材料からなる部分には、DINP、DNOP および DIDP も 0.1wt% を超えて含有してはならないとされた。なお、0.1wt% の限度値が設定されているが、これは製造工程や試験中のコンタミネーションを考慮したものであり、PAEs の意図的な添加を容認したものではない。

また、2018 年 4 月には米国消費者製品安全委員会（Consumer Product Safety Commission, CPSC）が PAEs の規制を改正した。この改正で DNOP および DIDP が規制対象外となり、新たにフタル酸ジイソブチル (DIBP)、フタル酸ジ-*n*-ペンチル (DNPenP)、フタル酸ジ-*n*-ヘキシル (DNHexP) およびフタル酸ジシクロヘキシル (DCHP) の 4 種類が規制対象に追加された¹⁴⁾。

我々は 2009 年度および 2014 年度に、国内で流通する PVC 製おもちゃに使用され

る可塑剤の実態調査を行った（それぞれ、2009年度調査⁶⁾および2014年度調査⁷⁾とする）。

その結果、DEHPおよびDINPのみが規制されていた2009年度調査⁶⁾において、指定おもちゃ以外のおもちゃ（以下、「指定外おもちゃ」とする）の一部にPAEsが使用されていたが、指定おもちゃには使用されていないことが判明した。また、PAEsの代替としてテレフタル酸ジ(2-エチルヘキシル) (DEHTP) やシクロヘキサン-1,2-ジカルボン酸ジイソノニル (DINCH) などの可塑剤が使用されていることが明らかとなった。

6種のPAEsへ規制が拡大された後の2014年度調査⁷⁾の結果では、PVC製おもちゃに使用される可塑剤の種類は2009年度調査と比べ大きな違いはなかった。しかし、DEHTPの使用頻度が大幅に増加し、その他の可塑剤の使用頻度は減少していることが明らかとなった。また、可塑剤の使用量が全体的に減少傾向にあることが示唆された。

本研究ではこれまでの実態調査に続き、2019および2020年に購入した市販PVC製玩具に使用される可塑剤の含有量および検出率の調査（以下、2019年度調査とする）を行うとともに、2009年度調査⁶⁾および2014年度調査の結果⁷⁾と比較した。

なお本研究では、含有量と検出率を区別するためそれぞれwt%と%の単位で示した。

B. 研究方法

1. 試料

PVC製おもちゃ220検体を用いた。これらは2019および2020年に主に神奈川県内で購入した。その内訳は、軟質PVC製おもちゃが209検体（指定おもちゃ：146検体、指定外おもちゃ：63検体）、硬質PVC

製おもちゃが11検体（指定おもちゃ：9検体、指定外おもちゃ：2検体）であった。種類別では、人形62検体、風呂用玩具48検体、ボール37検体、空気注入玩具32検体、その他（パズル、縄跳び、水鉄砲、スプリング等）21検体、浮き輪14検体、お面6検体であった。

2. 試薬等

1) 試薬

アセトン：残留農薬・PCB分析用 シグマアルドリッチ社製

ヘキサン：残留農薬・PCB試験用 富士フイルム和光純薬（株）製

2) 標準品

本研究では、PAEs 10種類およびその他の可塑剤 11種類の合計 21種類を対象とした。これらの標準品の化学名、略号、CAS番号および純度をTable 1に示した。ただし、DINPにはCAS No.28553-12-0と68515-48-0の2種類があるが^{2),3),15)}、本研究では主に流通しているCAS No.28553-12-0を用いた。

3) 標準原液および標準溶液

可塑剤標準原液：各可塑剤標準品をそれぞれ100 mgとり、アセトンを加えて各100 mLとした（各1,000 μg/mL）。

可塑剤混合標準溶液：各可塑剤標準原液を混合し、アセトンで0.05~50 μg/mLに希釈した。

3. 装置

GC-MS (7890A GC System, 5975C inert XL MSD with Triple-Axis Detector (Agilent Technologies社製)

恒温器：小型高温チャンバー、ST-120 (エスペック株式会社製)

Table 1 List of plasticizers used in this study

Chemical name	Abbreviation or Product name	CAS No.	Purity (%)	Supplier* ¹	Retention time (min)	Quantitative ion (m/z)	Qualifying ion (m/z)	Quantification limit* ² (µg/mL)
PAEs* ³								
<i>Diisobutyl phthalate</i>	DIBP	84-69-5	> 99	Wako	7.2	149	223	0.05
<i>Di-n-butyl phthalate</i>	DBP	84-74-2	> 99.5	Wako	7.7	149	223, 205	0.05
<i>Di-n-pentyl phthalate</i>	DNPenP	131-18-0	> 98	Wako	8.6	149	237	0.05
<i>Di-n-hexyl phthalate</i>	DNHexP	84-75-3	> 98	Wako	9.5	149	251	0.05
<i>Benzyl butyl phthalate</i>	BBP	85-68-7	> 99	Wako	9.6	149	91, 206	0.05
<i>Dicyclohexyl phthalate</i>	DCHP	84-61-7	> 99	Wako	10.3	149	167, 249	0.05
<i>Di(2-ethylhexyl) phthalate</i>	DEHP	117-81-7	> 99.5	Wako	10.3	149	167, 279	0.05
<i>Di-n-octyl phthalate</i>	DNOP	117-84-0	> 99	Wako	11.0	149	279	0.05
<i>Diisononyl phthalate</i>	DINP	28553-12-0	> 98	Wako	10.8-12.0	293	149	0.5
<i>Disodecyl phthalate</i>	DIDP	26761-40-0	> 98	Wako	10.8-12.8	307	149	1
Other plasticizers								
2,2,4-Trimethyl-1,3-pentanediol diisobutyrate	TMPPD	6846-50-0	> 97	TCl	5.7	71	111, 159	0.05
Dibutyl sebacate	DBS	109-43-3	> 97	TCl	8.7	241	185	0.05
Tributyl citrate	TBC	77-94-1	> 98	TCl	8.8	185	259, 129	0.05
<i>o</i> -Acetyl tributyl citrate	ATBC	77-90-7	> 90	TCl	9.0	185	259, 129	0.05
Diacetyl lauroyl glycerol	DALG	-	Not indicated	TCl	9.2, 10.0, 10.8	159	183, 98	0.05
Di(2-ethylhexyl) adipate	DEHA	103-23-1	> 98	Wako	9.6	129	241, 259	0.05
Diphenyl 2-ethylhexyl phosphate	DPEHF	1241-94-7	> 90	TCl	9.8	251	94, 362	0.1
Diisononyl adipate	DINA	33703-08-1	Not indicated	Wako	10.3-11.0	129	255	0.05
Diisononyl 1,2-cyclohexane dicarboxylate	DINCH	166412-73-8	Not indicated	BASF	10.6-11.6	155	299	0.05
Bis(2-ethylhexyl) terephthalate	DEHTP	6422-86-2	> 98	ACROS	11.0	261	112, 279	0.05
Tris(2-ethylhexyl) trimellitate	TEHTM	3319-31-1	> 95	TCl	14.5	305	193, 323	0.05

*¹ Wako: FUJIFILM Wako Pure Chemical Corporation, TCl: Tokyo Chemical Industry Co., Ltd., BASF: BASF Japan Ltd., ACROS: Acros Organics B.V.B.A.*² Quantification limit of standard solution*³ Underline: regulated in Japan; italic: regulated in the USA (CPSC)

4. GC-MS 測定条件

カラム：DB-5MS (30 m×0.25 mm i.d., 膜厚 0.25 μm, Agilent Technologies 社製)

カラム温度：100°C→20°C/min→320°C (10 min)

注入口温度：250°C

トランスファーライン温度：280°C

キャリアーガス：ヘリウム 1.0 mL/min (定流量)

注入量：1.0 μL

注入モード：スプリットレス

イオン化電圧：70 eV

測定モード：同定はスキャンモード (m/z 50~800)、定量は Selected Ion Monitoring (SIM) モードを用いた。本条件における各可塑剤の定量イオンおよび確認イオンは保持時間とともに Table 1 に示した。

5. 試験溶液の調製

前報^{6),7)}に準じた。すなわち、細切した試料 0.25 g を精秤して 50 mL 容ガラス遠沈管にとり、アセトン・ヘキサン混液 (3 : 7) 15 mL を加えて振り混ぜた後、密栓をして約 40°C の恒温器内で一晩静置した。冷後ろ紙 (No. 5C、125 もしくは 185 mm) を用いてろ過し、アセトンで遠沈管および漏斗を洗い、得られたろ液および洗液を 25 mL 容メスフラスコに合わせ、アセトンを加えて定容したものを同定用試験溶液とした。さらにこの液をとり、アセトンで 10~1000 倍に適宜希釈したものを定量用試験溶液とした。

6. 可塑剤の同定および定量

1) 同定

同定用試験溶液をスキャンモードで測定し、検出されたピークのマスマスペクトルを国立医薬品食品衛生研究所が所有する可塑剤データベース (約 60 種類の可塑剤のマ

スマスペクトルが登録されている：未公開) と比較した。マスマスペクトルが一致した場合、該当する可塑剤標準原液を適宜希釈してスキャンモードで測定し、マスマスペクトルおよび保持時間を比較して同定した。

2) 定量下限値の設定

0.05~50 μg/mL の可塑剤混合標準溶液を GC-MS の SIM モードにより測定し、各定量イオンのピーク面積から絶対検量線法により検量線を作成した。DPEHF、DINP および DIDP 以外の可塑剤では 0.05 μg/mL 以上で良好な直線性を示した。一方 DPEHF では 0.1 μg/mL 以上、DINP では 0.5 μg/mL 以上、DIDP では 1 μg/mL 以上で良好な直線性を示した。また、いずれも最低濃度におけるシグナル/ノイズ比 (S/N) は 10 以上であったことから、本研究ではこの濃度を標準溶液における各可塑剤の定量下限値とした。

以上の結果をふまえ、DINP および DIDP 以外の可塑剤については、定量用試験溶液 (10 倍希釈) 中の各可塑剤のピーク面積値が、標準溶液の定量下限値におけるピーク面積値より小さかった場合、全て定量下限値未満とした。また DINP および DIDP については、同定用試験溶液中のピーク面積値が標準溶液の定量下限値におけるピーク面積値より小さかった場合、全て定量下限値未満とした。なお、このときの定量下限値は試料中の含有量に換算すると、DPEHF および DIDP 以外の可塑剤は 0.005wt%、DPEHF および DIDP は 0.01wt% となる。ただし、PVC 中の可塑剤の定量は抽出された塩ビオリゴマーや共存可塑剤の影響を受けることから、試料中の定量下限値は少し余裕をみて一律 0.05wt% とした。なお、この定量下限値は前報⁷⁾と同じである。

3) 定量

定量用試験溶液を GC-MS の SIM モードで測定し、各定量イオンのピーク面積から定量用試験溶液中の各可塑剤濃度 ($\mu\text{g/mL}$) を求めた。検量線は定量用試験溶液中の各可塑剤濃度に合わせ、直線性が得られ、かつ定量に最適な範囲のものを用いた。得られた定量用試験溶液中の可塑剤濃度 ($\mu\text{g/mL}$) から試料中の含有量 (wt%) を求めた。

C. 研究結果及び考察

1. 可塑剤の同定

全 220 検体の試料中の可塑剤を同定した結果、PAEs では DIBP、DBP、DINP および DEHP が確認された。

その他の可塑剤では DEHTP、TMPD、DINCH、ATBC、TBC、DBS、DINA、DPEHF、DEHA、TEHTM および DALG の

11 種が同定された。これらはいずれも過去に報告のある可塑剤であった。

一方 5 検体から、11.02、11.18 および 11.33 分にほぼ共通のマスペクトルを有する 3 本の未知ピーク群が同時に検出された (Fig. 1 および Fig. 2)。DIDP のマスペクトルと類似していたがピーク形状が全く異なっており DIDP ではなかった。NIST データベースに含まれる化合物のうち、フタル酸ジ(1-メチルノニル)との一致率が 85%以上と高かった (Fig. 3)。したがってこれら 3 本のピークは、フタル酸ジ(1-メチルノニル)およびその類似体由来すると推定された。しかし、標準品が入手出来なかったため同定には至らなかった。そこで本研究においては、これらのピークは 1 つの未知化合物群 (Unknown) として検出率のみ求めた。

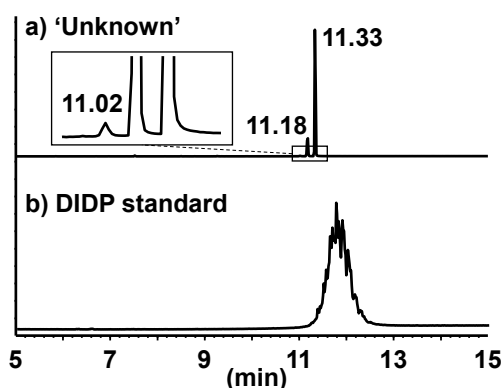


Fig. 1. Total ion chromatograms of a) 'Unknown' and b) DIDP standard
a) Chromatogram of the test solution obtained from the float sample.
b) DIDP standard at the concentration of 100 $\mu\text{g/mL}$.

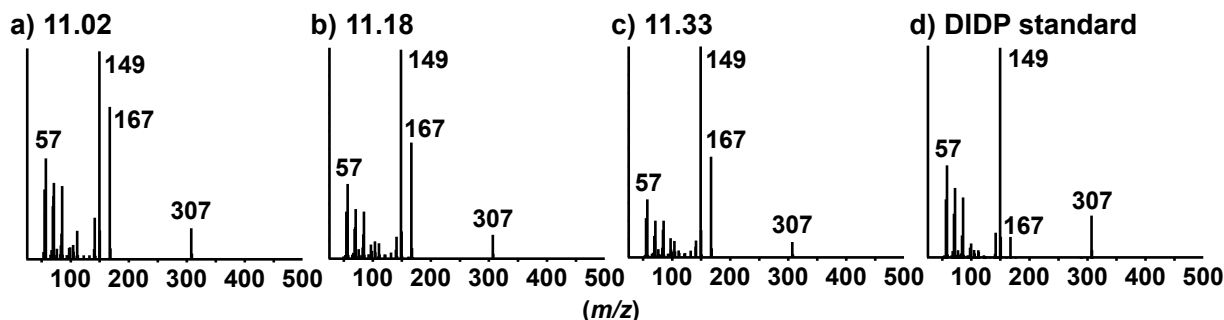


Fig. 2. Mass spectra of a)~c) 'Unknown' and d) DIDP standard
a)~c): Mass spectra of the 'Unknown' at the retention time of 11.02, 11.18, and 11.33, respectively.
d): Mass spectrum of DIDP standard

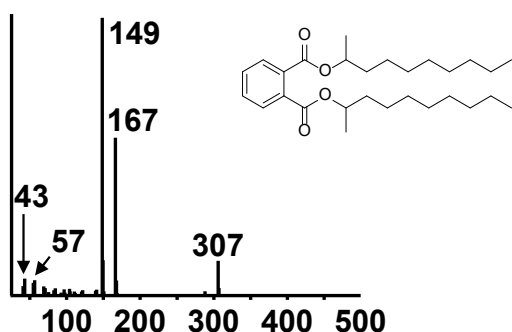


Fig. 3. Mass spectrum and structure of di(1-methylnonyl) phthalate
Mass spectrum is from the NIST 11 Mass Spectral Library.

以上の結果から、定量対象とする PAEs は検出された 4 種 (DIBP、DBP、DINP および DEHP) に、日本または米国で規制対象となっている 6 種 (BBP、DNOP、DIDP、DNPenP、DNHexP および DCHP) を加えた計 10 種とした。またその他の可塑剤は同定された 11 種 (DEHTP、TMPD、DINCH、ATBC、TBC、DBS、DINA、DPOF、DEHA、TOTM および DALG) とした。

2. 軟質 PVC 製おもちゃの可塑剤

1) 指定おもちゃにおける比較

軟質 PVC 製の指定おもちゃ 146 検体における可塑剤の検出率および含有量をこれまでの調査とともに Table 2 に示した。ただし、2009 年度調査以外の各可塑剤の定量下限値は 0.05wt% だが、2009 年度調査ではそれよりも低い定量下限値であったことから、定量下限値は 0.05wt% として再計算した値を用いた。

① PAEs

国内で規制対象の 6 種のフタル酸エステルは本研究においても検出されなかった。一方 DIBP が検出率 4.2% で検出し、平均含有量 22.2wt%、最大含有量 35.4wt% であった。2009 年調査では不検出、2014 年調査では検出率 0.3%、平均含有量が 0.12wt%

でありほとんど検出されていなかったことから、ここ数年の間に一部の試料において主可塑剤 (1 検体中の含有量が最も多い可塑剤) として使用されるようになったと推測された。

なお、米国 CPSC で新たに規制対象となった DNPenP、DNHexP および DCHP については、いずれも定量下限値未満であった。

② その他の可塑剤

フタル酸エステル以外の可塑剤では DEHTP が最も高い検出率 (71.2%) であった。平均含有量 (15.0wt%) も高い値であった。DEHTP は 2009 年度以降徐々に検出率が高くなっており、現在では指定おもちゃにおける主要な可塑剤となっていると考えられた。

続いて検出率が高かったのは TMPD で 66.4% であった。最大含有量は 14.3wt% であったが平均含有量は 2.3wt% であった。これは 2009 年調査と同様の傾向であり、主可塑剤として使用されることもあるが、ほとんどが補助的または製造工程での混入によるものと考えられた。

DINCH は 34.2% の製品から検出された。含有量 (平均含有量: 14.9wt%、最大含有量: 47.4wt%) も高い値であり、過去の調査結果と同様に主可塑剤として引き続き使用されていた。

ATBC は 28.8% の製品から検出された。含有量も高く主可塑剤として使用されているが、検出率、含有量ともに過去の調査結果に比べ減少傾向にあった。

TBC は 13.7% の製品から検出され、2014 年度調査から大幅に増加した。検出率は ATBC の半分程度であったが、含有量はいずれも ATBC よりも高い数値であった。

DBS は含有量が 0.1wt% 未満であったことから、いずれも製造工程で混入したものと推定された。

DINA は検出率、含有量ともに減少傾向

Table 2 Detection ratio and content levels of plasticizers in designated toys in this and previous studies

Plasticizer	This study (n=146)				Year 2014 (n=259) ^{*1}				Year 2009 (n=46) ^{*2}			
	Detection ratio (%)	Content (wt%)			Detection ratio (%)	Content (wt%)			Detection ratio (%)	Content (wt%)		
		Average	Maximum	Minimum		Average	Maximum	Minimum		Average	Maximum	Minimum
PAEs												
DIBP	4.2	22.2	35.4	2.3	0.3	0.12	0.12	0.12	0	ND	ND	ND
<u>DBP</u>	0	ND	ND	ND	0	ND	ND	ND	0	ND	ND	ND
<u>BBP</u>	0	ND	ND	ND	0	ND	ND	ND	0	ND	ND	ND
<u>DEHP</u>	0	ND	ND	ND	0	ND	ND	ND	0	ND	ND	ND
<u>DNOP</u>	0	ND	ND	ND	0	ND	ND	ND	0	ND	ND	ND
<u>DINP</u>	0	ND	ND	ND	0	ND	ND	ND	0	ND	ND	ND
<u>DIDP</u>	0	ND	ND	ND	0	ND	ND	ND	0	ND	ND	ND
DNP _{ent}	0	ND	ND	ND	—	—	—	—	—	—	—	—
DNHexP	0	ND	ND	ND	—	—	—	—	—	—	—	—
DCHP	0	ND	ND	ND	—	—	—	—	—	—	—	—
Other plasticizers												
DEHTP	71.2	15.0	29.1	0.09	60.3	11.9	40.3	0.07	37.0	19.6	39.1	0.68
TMPD	66.4	2.3	14.3	0.06	24.1	3.7	19.0	0.06	67.4	3.9	22.6	0.05
DINCH	34.2	14.9	47.4	0.05	28.5	10.0	39.8	0.27	28.3	19.5	48.9	1.4
ATBC	28.8	6.4	24.7	0.05	40.0	9.2	29.0	0.05	45.7	16.0	34.7	0.21
TBC	13.7	21.2	45.3	0.07	2.0	3.3	13.5	0.3	28.3	2.0	11.1	0.05
DBS	7.5	0.07	0.09	0.06	10.8	0.06	0.16	0.05	6.5	0.07	0.07	0.06
DINA	6.8	0.92	7.1	0.06	21.7	7.5	18.4	0.11	21.7	11.2	15.5	0.52
DEHA	2.7	0.14	0.17	0.11	1.4	9.1	13.4	0.1	4.3	5.2	10.3	0.13
TEHTM	2.7	0.1	0.1	0.05	0.3	0.2	0.2	0.2	10.9	15.2	29.3	0.05
DPEHF	2.1	4.7	9.7	0.51	—	—	—	—	0	ND	ND	ND
Unknown	2.1	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—
DALG	0.7	23.5	23.5	23.5	—	—	—	—	2.2	47.7	47.7	47.7
ASP ^{*3}	—	—	—	—	2.7	50.3	60.8	37.1	—	—	—	—
DPGDB ^{*4}	—	—	—	—	2.0	3.4	7.5	0.07	4.3	0.61	1.1	0.12

The underline shows the six PAEs regulated in Japan.

—: Not determined, ND: Not detected (Under the limit of quantification (0.05 wt(%))).

^{*1} Recalculated from the results of previous study (2014) by Abe *et al.* ⁵⁾

^{*2} Recalculated from the results of previous study (2009) by Abe *et al.* ⁴⁾

^{*3} ASP: alkylsulfonic acid phenyl ester

^{*4} DPGDB: dipropylene glycol dibenzoate

にあった。

DEHA は、検出率が継続的に 3%未満と低いうえ、含有量も全て 0.2wt%未満であったことから、主可塑剤として使用されることがほとんどなくなっていると考えられた。

TEHTMは2014年度よりも検出率が増加したが、含有量は 0.1wt%以下と低い値であり、2009年度以降は主可塑剤として使用されることはほとんどなくなっていると考えられた。

DPEHFは3検体から検出し、そのうち1検体から約 10wt%とこれまでの調査で最も高い含有量であった。

DALGは1検体だけ検出し、主可塑剤として使用されていた。2009年度と同様であった。

Unknownは3検体から検出した。2検体では他に可塑剤は検出されなかったため主可塑剤として使用されていると推定された。1検体では小さなピークとして検出されたことから、原料や製造工程での混入の可能性が推定された。

一方、過去に検出された alkylsulfonic acid phenyl ester (ASP)および dipropylene glycol dibenzoate (DPGDB) は本研究では検出されなかった。

このように、PAEs 以外の可塑剤としては DEHTP が主に使用されており、DINCH や ATBC も引き続き使用されていた。一方、ATBCがTBCへ切り替わっている可能性、アジピン酸エステル系の可塑剤の使用頻度の減少、および PAEs の一種と推定される新たな可塑剤が使用されている可能性が明らかとなった。

2) 指定外おもちゃにおける比較

軟質 PVC 製の指定外おもちゃ 63 検体における可塑剤の検出率および含有量をこれまでの調査とともに Table 3 に示した。た

だし指定おもちゃと同様に定量下限値は 0.05wt%として再計算した。

① PAEs

PAEs はこれまでの調査と同じ DBP, DINP, DIBP および DEHP が検出された。DBP, DINP および DIBP は検出率、含有量ともに 2014 年度と同程度~わずかに増加したが、DEHP はわずか 1 検体からのみ検出され、大幅に使用頻度が減少した。

また、指定おもちゃと同様に米国 CPSC で規制対象となっている DNPenP, DNHexP および DCHP は確認されなかった。

② その他の可塑剤

PAEs 以外の可塑剤では指定おもちゃと同様に DEHTP が最も高い検出率 (88.9%) で検出された。平均含有量 (16.7wt%) も高い値であった。DEHTP は 2009 年度以降徐々に検出率が高くなっており、指定おもちゃと同様に主要な可塑剤となっていることが示唆された。

続いて TMPD が 12.7%の製品から検出された。最大含有量が 5.7wt%であったことから、主可塑剤としてではなく、補助的な役割で使用されることがあったと考えられた。これは 2014 年度調査と同様の傾向であった。

次に DPEHF が 7.9%の製品から検出されたが、含有量が低く主可塑剤として使用されたのではなく混入等によるものと推定された。

続いて TBC が 6.3%の製品から検出された。検出率、含有量ともに 2014 年度と同様であった。

ATBC は 4.8%の製品から検出された。約 15 ポイントも検出率が低下し、また最大含有量も大幅に減少していた。

DINCH は 4.8%の製品から検出された。指定おもちゃに比べると検出率、含有量ともに低いため、引き続き、指定外おもちゃではあまり使用されないことが確認された。

Table 3 Detection ratio and content levels of plasticizers in not-designated toys in this and previous studies

Plasticizer	Detection ratio (%)	This study (n=63)			Year 2014 (n=199) ^{*1}			Year 2009 (n=51) ^{*2}				
		Average	Maximum	Minimum	Average	Maximum	Minimum	Average	Maximum	Minimum		
PAEs												
<u>DBP</u>	6.3	12.6	24.3	0.08	2.8	17.6	38.3	0.10	12.7	7.5	26.3	0.05
<u>DINP</u>	4.8	7.4	11.3	0.4	2.8	4.8	5.4	4.1	25.5	9.8	31.8	0.19
<u>DIBP</u>	3.2	23.5	34.6	12.3	3.8	14.4	34.1	0.05	12.7	11.5	21.6	0.12
<u>DEHP</u>	1.6	21.0	21.0	21.0	15.5	6.8	17.8	0.05	41.8	12.8	27.0	0.08
<u>BBP</u>	0	ND	ND	ND	0	ND	ND	ND	0	ND	ND	ND
<u>DNOP</u>	0	ND	ND	ND	0	ND	ND	ND	0	ND	ND	ND
<u>DIDP</u>	0	ND	ND	ND	0	ND	ND	ND	0	ND	ND	ND
<u>DNP enP</u>	0	ND	ND	ND	—	—	—	—	—	—	—	—
<u>DNHexp</u>	0	ND	ND	ND	—	—	—	—	—	—	—	—
<u>DCHP</u>	0	ND	ND	ND	—	—	—	—	—	—	—	—
Other plasticizers												
<u>DEHTP</u>	88.9	16.7	28.2	0.12	73.7	14.6	41.3	0.06	40.0	21.3	51.2	0.07
<u>TMPD</u>	12.7	1.2	5.7	0.12	5.2	1.9	8.3	0.05	14.5	0.19	0.32	0.10
<u>DPEHF</u>	7.9	0.07	0.08	0.05	—	—	—	—	7.3	0.06	0.05	0.07
<u>TBC</u>	6.3	28.7	40.3	7.3	4.7	25.3	32.7	3.4	14.5	11.8	46.7	0.16
<u>ATBC</u>	4.8	3.8	6.1	0.12	21.6	7.7	29.2	0.11	16.4	21.2	50.5	0.07
<u>DINCH</u>	4.8	2.8	8.4	0.05	8.0	10.0	23.4	0.05	7.3	22.4	32.3	1.4
Unknown	3.2	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—
<u>DEHA</u>	1.6	0.6	0.6	0.6	5.2	5.8	21.5	0.05	9.1	9.9	25.6	0.07
<u>TEHTM</u>	1.6	0.07	0.07	0.07	1.9	1.9	3.8	0.09	1.8	0.09	0.09	0.09
<u>DINA</u>	0	ND	ND	ND	1.4	1.6	1.7	1.5	5.5	4.4	7.0	3.1
<u>DPGDB^{*3}</u>	—	—	—	—	0.9	0.10	0.11	0.08	1.8	0.06	0.06	0.06
<u>DBS</u>	0	ND	ND	ND	0.9	0.10	0.12	0.07	0	ND	ND	ND
<u>DALG</u>	—	—	—	—	—	—	—	—	1.8	0.41	0.41	0.41

The underline shows the six PAEs regulated in Japan.

—: Not determined, ND: Not detected (Under the limit of quantification (0.05 wt%)).

^{*1} Recalculated from the results of previous study (2014) by Abe *et al.*⁵⁾

^{*2} Recalculated from the results of previous study (2009) by Abe *et al.*⁴⁾

^{*3} DPGDB: dipropylene glycol dibenzoate

Unknownが2検体から検出したが、他の可塑剤は検出されなかったため主可塑剤として使用されていると推定された。

DEHAおよびTEHTMは含有量が低く主可塑剤として使用はされたのではなくDPEHFと同様混入等によるものと推定された。

一方、過去に検出されたDINA、DPGDB、DBSおよびDALGは本研究では検出されなかった。

以上のように、指定外おもちゃにおいてもDEHTPが主に使用されており、ATBCからTBCへの切り替えの可能性、アジピン酸エステル系可塑剤の使用減、PAEsの一種と推定される新しい可塑剤の使用が確認された。

3. 硬質PVC製おもちゃの可塑剤

硬質PVC製おもちゃの可塑剤調査の結果を2009年度調査⁶⁾および2014年度調査

7)の結果とともにTable 4にまとめた。

硬質PVC製おもちゃは11検体あり、そのうち指定おもちゃはお面等9検体、指定外おもちゃはスプリング等2検体であった。検出された可塑剤はDEHTP、ATBCおよびTBCであった。一方、1検体あたりの合計含有量は<ND(全ての可塑剤が0.05wt%未満)~1.5wt%であり、ほとんどが1wt%未満であった。

検体数が少ないため単純な比較はできないが、2009年度調査⁶⁾および2014年度調査⁷⁾で検出されたPAEsは検出されなかった。一方2009年度調査⁶⁾および2014年度調査⁷⁾の1検体あたりの合計含有量は<ND~3.5wt%であり、ほとんどが1wt%未満であったため大きく変わっていないことが明らかとなった。

なお、2014年度調査において3.5wt%と硬質PVC製おもちゃの中で高い含有量だった試料はリングであった。

Table 4 Detection number and total content levels of plasticizers in hard PVC toys

	Designated toy			Non-designated toy		
	Sample number	Total contents (wt%)	Detected plasticizer	Sample number	Total contents (wt%)	Detected plasticizer
This study	9	ND - 0.5	DEHTP, ATBC	2	1.2, 1.5	DEHTP, TBC
Year 2014 ^{*1}	16	ND - 3.5	DEHTP, DINCH, DIBP	10	ND - 2.5	DEHP, DBP, ATBC
Year 2009 ^{*2}	0	-	-	4	ND - 1.4	DEHP, DPGDB

ND: Not detected (All plasticizers were under the limit of quantification (0.05 wt%)).

^{*1} Recalculated from the results of previous study (2014) by Abe *et al.*⁵⁾

^{*2} Recalculated from the results of previous study (2009) by Abe *et al.*⁴⁾

4. 検体あたりの含有量の比較

軟質 PVC 製おもちゃを対象に 1 検体あたりの合計含有量を比較した。ただし、Unknown が主可塑剤として使用されていた 4 検体の結果は除外した。

合計含有量の平均値は 2009 年度調査では 29.4wt%、2014 年度調査では 19.2wt%であったが、今回の調査では 22.3wt%であった。1 検体あたりの含有量が「~5wt%未満」、「5~10wt%」、「10~15wt%」など、それぞれ 5%毎の区分に分け、各区分に含まれる試料の割合を Fig. 4 にまとめ比較した。合計含有量が 25wt%未満だった試料は 2009 年度では全体の約 37%であったが、2014 年度は全体の約 85%、今回の調査では全体の約 73%であった。このように、平均含有量は 2014 年度に比べ約 3 ポイント上昇したが、全体的にみると 10 年前に比べ低いレベル (25wt%未満) で使用されていると考えられた。

5. 使用可塑剤の表示と実態の比較

全試料のおよそ 1/3 にあたる 73 検体に使用可塑剤に関する表示があった。そこで、

「食品衛生法・ST (Safety toy) 基準適合」(食品衛生法や ST 基準に対応した可塑剤を使用しているという表示があったもの)、「非フタル酸エステル使用」(フタル酸エステル以外を使用しているという表示があったもの) および「ATBC-PVC」(ATBC を使用しているという表示があったもの) の 3 種類に分け、それぞれの主可塑剤の種類と検出数・検出率を Table 5 にまとめた。なお、ST 基準とは一般社団法人日本玩具協会の自主基準のことであり、可塑剤に関する基準は食品衛生法の規格基準と同じである。

表示の内容として最も多かったのは「食品衛生法・ST 基準適合」で 45 検体に表示があった。これらの検体で主可塑剤として使用されていたのは DEHTP、TBC、DINCH、Unknown、ATBC および TMPD であった。また、DBP が指定外おもちゃ 1 検体から検出されたが主可塑剤として使用されたものではないうえ、含有量は 0.08wt%であったことから、製造工程での混入等と推測された。このように表示に不備はないと考えられた。

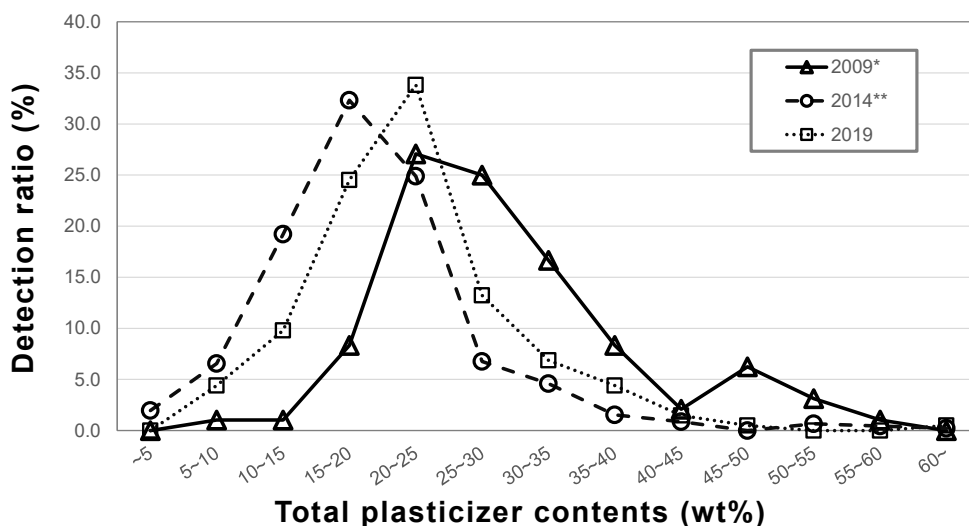


Fig. 4. Comparison of total plasticizer contents with respect to the results of this study, 2009 and 2014
*Recalculated from the results of 20094).
**The results of 20145).

Table 5 Labeling and main plasticizers

Labeling	Main plasticizer ^{*1}			Six PAEs
	Type	No. ^{*2}	Ratio ^{*3}	No. ^{*2}
Confirm to FSA or ST ^{*4} (45 samples)	DEHTP	31	68.9	1
	TBC	6	13.3	(DBP: 0.08wt%)
	DINCH	4	8.9	
	Unknown	2	4.4	
	ATBC	1	2.2	
	TMPD	1	2.2	
Non-phthalate plasticizers are used (22 samples)	DEHTP	20	90.9	0
	TBC	1	4.5	
	DIBP	1	4.5	
ATBC-PVC (6 samples)	DEHTP	4	66.7	0
	ATBC	2	33.3	

^{*1} Main plasticizer: plasticizer contained at the highest amount

^{*2} No.: number of detection

^{*3} Ratio: detection ratio (%)

^{*4} FSA: Food Sanitation Act, ST: Safety toy standard

次に表示として多かったのは「非フタル酸エステル使用」で 22 検体あった。これらには DEHTP, TBC および DIBP が主可塑剤として使用されていた。DIBP は規制対象ではないが PAEs であることから、本検体の表示は不適切であった。一方 DIBP が検出された検体以外では PAEs 以外の可塑剤が使用されており、表示は適切であった。

「ATBC-PVC」と表示があったのは 6 検体あった。このうち 2 検体では ATBC が主可塑剤として使用されており、表示は適切であった。一方、4 検体では DEHTP が主可塑剤として使用されていたが、ATBC はいずれも定量下限未満であり ATBC の使用は確認できなかった。したがってこれらの表示は不適切であった。

D. 結論

2009 年度調査および 2014 年度調査に引き続き、2019 年および 2020 年に購入した市販 PVC 製おもちゃ 220 検体に使用される可塑剤を調査し、これまでの結果と比較

した。

使用された可塑剤の種類に大きな変化はなかったが、DEHTP が主要な可塑剤として使用されており、その他の可塑剤は使用頻度が減少していた。これは 2014 年度調査時の結果と同様であった。一方、ATBC から TBC への切り替え、アジピン酸エステル系可塑剤の使用の減少および PAEs の一種と推定された新しい可塑剤の使用も確認された。また、1 検体あたりの使用量も 2009 年度調査に比べ低いレベルで推移していることが示唆された。一方、「ATBC-TBC」と記載されている一部の製品では ATBC が使用されていない場合があった。これは 2014 年度調査においても同様のことが確認されており、使用可塑剤の切り替えを行った際に表示内容の修正を怠ったことなどが原因と推定された。

E. 参考文献

- 1) 河村葉子, 互井千恵子, 前原玉枝, 山田 隆: ポリ塩化ビニル及びポリ塩化ビ

- ニリデン製品中の残存添加剤, 食品衛生学雑誌, 40, 274-284 (1999)
- 2) 杉田たき子, 平山クニ, 新野竜太, 石橋 亨, 山田 隆: ポリ塩化ビニル製玩具中のフタル酸エステル含有量, 食品衛生学雑誌, 42, 48-55 (2001)
- 3) 河村葉子, 六鹿元雄, 和久井千世子, 棚元憲一: ポリ塩化ビニル中のフタル酸ジ(2-エチルヘキシル)及びフタル酸ジイソノニル試験法, 日本食品化学学会誌, 9, 101-106 (2002)
- 4) Biedermann-Brem S, Biedermann M, Pfenninger S, Bauer M, Altko W, Karl R, Hauri U, Droz C, Grob K.: Plasticizers in PVC Toys and Childcare Products: What Succeeds the Phthalates? Market Survey 2007, *Chromatographia*, 68, 227-234 (2008)
- 5) Kawakami T, Isama K, Matsuoka A.: Analysis of phthalic acid diesters, monoester, and other plasticizers in polyvinyl chloride household products in Japan, *Journal of Environmental Science and Health, Part A*, 46, 855-864 (2011)
- 6) 阿部 裕, 山口未来, 六鹿元雄, 平原嘉親, 河村葉子: ポリ塩化ビニル製玩具中の可塑剤使用実態, 食品衛生学雑誌, 53, 19-27 (2012)
- 7) 阿部 裕, 木嶋麻乃, 山口未来, 伊藤裕才, 六鹿元雄, 穂山 浩, 佐藤恭子: ポリ塩化ビニル製おもちゃに使用される可塑剤の実態の変化, 食品衛生学雑誌, 60, 37-44 (2019)
- 8) Arcadi FA, Costa C, Imperatore C, Marchese A, Rapisarda A, Salemi M, Trimarch GR, Costa G.: Oral toxicity of bis(2-ethylhexyl) phthalate during pregnancy and suckling in the long-event rat, *Food and Chemical Toxicology*, 36, 963-970 (1998)
- 9) Waterman SJ, Ambroso JL, Keller LH, Trimmer GW, Nikiforov AI, Harris SB.: Developmental toxicity of di-isodecyl and di-isononyl phthalates in rats, *Reproductive Toxicology*, 13, 131-136 (1999)
- 10) Nagao T, Ohta R, Marumo H, Shindo T, Yoshimura S, Ono H.: Effect of butyl benzyl phthalate in Sprague-Dawley rats after gavage administration: a two-generation reproductive study, *Reproductive Toxicology*, 14, 513-532 (2000)
- 11) 杉田たき子, 河村葉子, 谷村雅子, 松田りえ子, 新野竜大, 石橋 亨, 平林尚之, 松木容彦, 山田 隆, 米谷民雄: 乳幼児用軟質ポリ塩化ビニル製玩具からのフタル酸エステル暴露量の推定, 食品衛生学雑誌, 44, 96-102 (2003)
- 12) 厚生労働省医薬局食品保健部長通知 “食品, 添加物等の規格基準の一部改正について” 平成 14 年 8 月 2 日 食発第 0802005 号
- 13) 厚生労働省告示 “食品, 添加物等の規格基準の一部を改正する件” 平成 22 年 9 月 6 日 第 336 号
- 14) Code of Federal Regulations, Title 16 Chapter II, Subchapter, PART 1307 - PROHIBITION OF CHILDREN'S TOYS AND CHILD CARE ARTICLES CONTAINING SPECIFIED PHTHALATES (effect on April 25, 2018)
- 15) 河村葉子, 互井千恵子, 前原玉枝, 山田 隆: ポリ塩化ビニル中の添加剤の一斉分析法, 食品衛生学雑誌, 40, 189-197 (1999)

<その4> 電子レンジ加熱時の液体または液状の内容物の温度

研究分担者 阿部 裕
研究協力者 山口 未来
研究協力者 片岡 洋平
研究代表者 六鹿 元雄

国立医薬品食品衛生研究所
国立医薬品食品衛生研究所
国立医薬品食品衛生研究所
国立医薬品食品衛生研究所

A. 研究目的

電子レンジは、電気でマイクロ波を発生させ、そのマイクロ波が食品などに含まれる水分子を振動させることにより発熱させる、いわゆる誘電加熱により食品を温める電化製品である。近年、コンビニエンスストアやスーパーマーケットなどでは、電子レンジを利用して温めて食べる商品の取り扱いが大幅に増えている。

我々は令和元年度の食品健康影響評価技術研究において、コンビニエンスストアで販売されている弁当や冷凍食品約 35 種類を対象に、蛍光式光ファイバー温度計を用いて電子レンジ加熱調理中の食品接触面の温度を測定した¹⁾。その結果、最終的な温度は 50~100℃となり、加熱調理途中で 100℃に到達しても加熱調理終了まで 100℃のままであった。このように、一般的な使用条件では、加熱されるのは主に食品中の水分であることから、加熱後の食品の温度は水の沸点である 100℃を大きく超えなかった。一方、サセプター(アルミニウムの薄膜を合成樹脂フィルムに蒸着または貼り付けることでマイクロ波を吸収し、誘導加熱の原理により高温で加熱する)を用いたポップコーンやピザなどの製品では 100℃を超えることがあった。

一方、電子レンジは市販の食品を加熱調理するだけでなく、様々な電子レンジ対応容器に食品や飲料等を入れて加熱調理する場合もある。特に、液体または液状の食品は、加熱しすぎると過加熱の状態となり、電子レンジから取り出す際に突沸するおそれがある。そこで本研究では、電子レンジ加熱時に器具・容器包装をより安全に使用するための基礎的な情報を収集

することを目的とし、様々な容量、材質、形状の容器に水を入れて電子レンジで加熱し、その温度推移を確認し、どの要因が温度昇温に影響しているかを検証した。さらに、酒や油等の温度推移を確認し、電子レンジ加熱する際の条件とその設定根拠についても考察した。

B. 研究方法

1. 試料

電子レンジに使用可能なガラス、陶磁器(陶器、磁器、ストーンウェア(炆器))、合成樹脂(ポリプロピレン(PP)、合成漆器)、シリコンゴム製のビーカー及びマグカップ 20 種類。これらは神奈川県等の小売店やインターネットで購入した。種類、材質、容量、厚さおよび直径とともに表1に示した。

2. 試薬および装置

水: PURELAB flex 3 (ELGA LabWater 社製)で製造した超純水。

電子レンジ: 業務用(温度センサーを挿入できるように上部に 4 か所穴あけ加工したもの)、NE-1802(パナソニック株式会社製)(図1)

蛍光式光ファイバー温度計: AMOTH FL-2000(安立計器株式会社製)



図1 実験に用いた電子レンジおよび 300 mL 容ビーカーの測定の様子

表1 試料情報

試料番号	容器		容量(mL)	厚さ(mm)	直径(mm)
	種類	材質			
1	ビーカー	ガラス	100	1.90	55
2	ビーカー	ガラス	300	2.15	70
3	ビーカー	ガラス	500	2.95	90
4	トールビーカー	ガラス	300	2.30	62
5	マグカップ	陶器	300	6.40	82
6	マグカップ	陶器	340	5.00	75
7	マグカップ	磁器	300	0.61	77
8	マグカップ	強化磁器	290	3.00	73
9	マグカップ	炻器	— ^{*2}	0.66	74
10	マグカップ	炻器	560	0.57	110
11	マグカップ	陶磁器 ^{*1}	— ^{*2}	0.65	80
12	マグカップ	陶磁器 ^{*1}	— ^{*2}	0.46	72
13	マグカップ	PP	270	2.90	74
14	マグカップ	PP	270	2.90	74
15	マグカップ	PP	290	3.20	61
16	マグカップ	PP	350	4.00	75
17	マグカップ	PP	230	1.60	66
18	マグカップ	合成漆器 ^{*3}	— ^{*2}	0.30	87
19	マグカップ	合成漆器 ^{*3}	— ^{*2}	3.60	73
20	マグカップ	シリコーンゴム	207	3.50	71

*1 記載はなかったが陶磁器製品。

*2 —:表示なし

*3 素地 PET,ABS/表面 ウレタン塗装

C. 研究結果及び考察

1. 測定位置の検討

はじめに容器内の温度の測定位置を決定するため、位置ごとの温度を測定した。300 mL 容のガラス製ビーカーに水 200 mL をいれ、温度センサーの先端を水中にセットし、500W で電子レンジ加熱したときの温度を測定した。なお、容器は 300 mL 容のガラス製ビーカーを用い、温度センサー挿入用の穴の位置の関係上、ビ

ーカーは電子レンジ内の中央ではなく、壁よりの位置に置いて測定した(図1)。温度の測定位置は、上部(液面から 0.5 cm 程度下の位置)、中央部(100 mL の目盛り付近)、下部(底から 0.5 cm 程度上の位置)、容器左部(電子レンジの壁面側)、容器中心部、容器右部(電子レンジの中央側)の上下左右各 3 か所を組み合わせた9か所(上左、上中、上右、中左、中心、中右、下左、下中、下右、図2)とした。

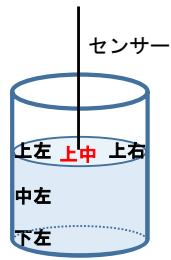


図2 センサー位置の模式図
(中央、中右、下中および下右は省略)

表2 100°Cに到達したときの時間(秒)

センサー位置	左	中	右
上	217	209	214
中	219	210	221
下	223	220	226

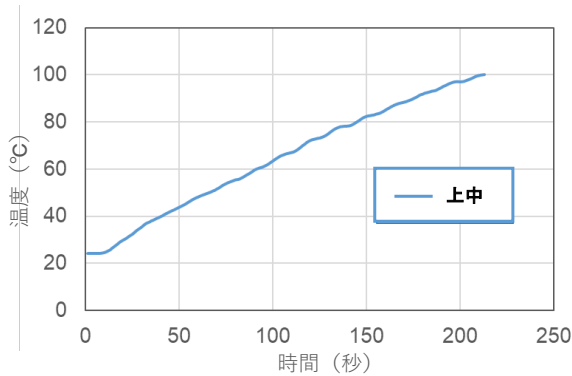


図3 電子レンジ加熱による水の温度変化
容器：300 mL容ガラス製ビーカー、溶媒：水、
容量：200 mL、出力数：500W、測定位置：中央・上

9か所での測定結果から、それぞれの位置について100°Cに到達するまでの時間(秒)を表2に示した。その結果、上中部または中心部が最も温度が上がりやすく、ビーカーのサイズを変えても同様であった。上中部の温度を5回繰り返して測定した結果、100°Cに到達したときの時間(秒)のRSD(%)は0.2%であり、再現性も良好であった。反対に、電子レンジ底面に接触する下部は最も温度が上がりにくかった。電子レンジの底面からはマイクロ波が照射されないため、内容物の下部が吸収するマイクロ波の量が少ないためと考えられた。代表例として上中部の温度推移を図3に示した。電子レンジ加熱開始約10秒後から温度が直線的に上昇した。その他の位置においても同様に上昇し、209～

226秒で100°Cに到達した。

水では100°Cに達すると沸騰し始め、生じた気泡によりセンサーの位置が不安定となる。そのため以降は、最も温度が上がりやすい上中部の温度を測定することとした。

2. 出力数による比較

300 mL容のガラス製ビーカーに水200 mLをいれ、150、250、500、750及び1000 Wの出力数で電子レンジ加熱した。各出力数における温度推移を図4に示した。

電子レンジの電磁波エネルギーは「出力数(W)×時間(秒)」となる。そのため加熱対象物の容量が同じであれば、500Wで2分間加熱した場合と、1000Wで1分間加熱した場合の電磁波エネルギーは同じとなり、対象物の上昇温度も同程度となる。今回の結果においても100°Cに到達した時間は、1000Wで106秒、750Wで148秒、500Wで209秒、250Wで418秒であり、概ね理論通りであった。ただし、150Wの場合15分以上加熱しても100°Cに到達しなかったため、途中で加熱を停止した。

また、各出力数において40、60、80及び100°Cに達するまでの時間を表3に、水温が40°Cから80°Cとなるまでの時間の逆数をx軸、出力数をy軸にとりプロットしたグラフを図5に示した。その結果、一次回帰直線は原点付近を通る直線となり、出力数と加熱時間は理論通り反比例の関係にあることが確認できた。

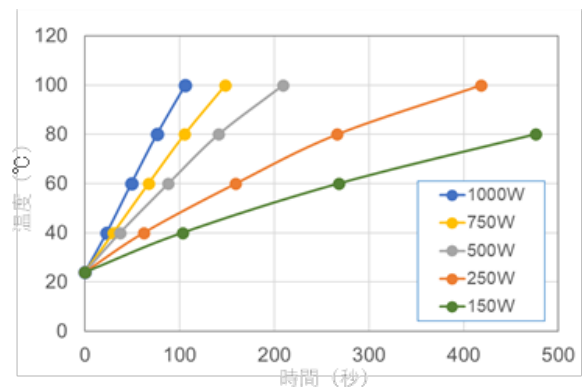


図4 異なる出力数における温度と時間の関係
容器：300 mL容ガラス製ビーカー、溶媒：水、容量：200 mL、出力数：150、250、500、750、1000W、
測定位置：中央・上、0秒時の温度は24°C

表3 各温度に到達したときの時間（出力数別）

出力数 (W)	40°C	60°C	80°C	100°C	40→80°C*
150	103	268	476	-**	373
250	62	159	266	418	204
500	37	88	141	209	104
750	30	67	105	148	75
1000	23	49	76	106	54

*40°Cから80°Cに到達した時間

**15分以上加熱しても100°Cに到達しなかった。

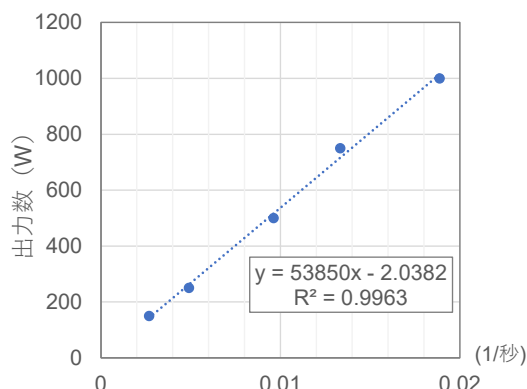


図5 出力数 (W) と 40°C から 80°C に到達するまでの時間 (1/秒) の関係
四角内は一次回帰直線の近似式および決定係数 (R²)

3. 加熱対象物の量および表面積の違いによる比較

電子レンジの出力数と加熱時間は反比例の関係となるため、加熱対象物が同じであれば、出力数に応じた加熱時間を容易に調整することができる。一方、対象物の形状や量が変わると対象物が吸収するマイクロ波の量も変わるため、対象物の量と加熱時間は単純な比例関係とはならず、量を半分にしたときに加熱時間を半分にすると加熱不足となり、反対に、量を2倍にしたときに加熱時間を2倍にすると加熱し過ぎてしまう傾向がある。そこで、100 mL 容、300 mL 容及び 500 mL 容のガラス製ビーカー、300 mL 容のガラス製トルビーカーに水 100、200 および 300 mL を入れ、500W で加熱した時の温度を測定して、加熱対象物の量および形状による温度上昇の違いを確認した。

水温が 40、60、80 及び 100°C に達するまでの時間、並びに 40°C から 80°C まで上昇するの

に要した時間を表4に示した。その結果、水温が 40°C から 80°C まで上昇するのに要した時間は、水 100 mL では 53~66 秒、水 200 mL では 96~104 秒(100 mL の約 1.6 倍)、水 300 mL では 124~136 秒(100 mL の約 2.1 倍)であった。

電子レンジは対象物がマイクロ波を吸収することで発熱するため、対象物の量が多い＝表面積が大きいほど、吸収されるマイクロ波が多く、エネルギー効率が高いと考えられた。そこで、それぞれの容器中の水の表面積(ただし、マイクロ波が放出されない底面の面積を除く)を概算し、40°C から 80°C まで上昇するのに要した時間と比較した。その結果、量が同じであれば容器の形状が変わっても表面積に大きな違いはないうえ、(100 mL: 94.7~96.5 cm²、200 mL: 152.5~159.2 cm²、300 mL: 196.9~223.7 cm²)、表面積と時間の比は、0.55~0.69 とほぼ同程度となった。また、表面積を x 軸、40°C から 80°C まで上昇するのに要した時間を y 軸にとりプロットしたところ、一次回帰直線は原点付近を通る傾きが 0.61 の直線となった(図6)。このように加熱対象物の表面積と加熱時間は比例関係となるため、加熱時間は対象物の量ではなく表面積を考慮して設定すると良いと考えられた。

表3 各温度に到達したときの時間（容量別）

容量 (mL)		40°C	60°C	80°C	100°C	40→80°C*
容器	試料					
100	100	19	43	72	105	53
300	100	25	55	91	134	66
300	200	37	88	141	209	104
300	300	43	106	180	266	137
300t**	100	22	51	83	118	61
300t**	200	36	82	138	195	102
300t**	300	34	89	158	237	124
500	200	38	82	134	193	96
500	300	41	109	177	266	136

*40°Cから80°Cに到達した時間

** 300mL容トルビーカー

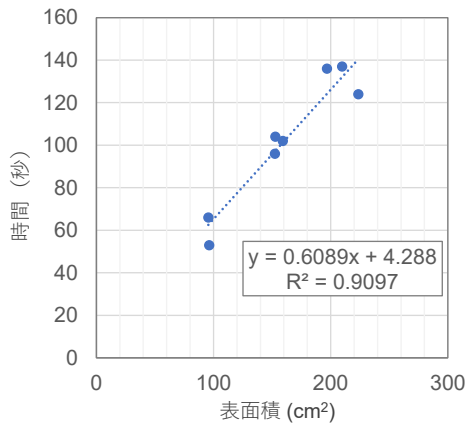


図6 表面積と40℃から80℃に到達するまでの時間の関係
四角内は一次回帰直線の近似式および決定係数 (R²)

4. 容器の材質による比較

陶磁器(磁器、炆器、陶器)、合成樹脂(PP、合成漆器)、シリコーンゴム製のマグカップに水200 mLを入れ、出力数を500Wとして電子レンジ加熱したときの温度および時間の関係を図7、40、60、80及び100℃に達するまでの時間、並びに40℃から80℃まで上昇するのに要した時間を表5に示した。記載順は40℃から80℃に上昇する時間が早い順とした。

その結果、ガラス、陶磁器等の無機材質は、合成樹脂と比べて40℃から80℃まで上昇するのに要した時間がやや短い傾向がみられた。また、表面積(底面の面積を除く)と40℃から80℃まで上昇するのに要した時間の比を求めたところ0.56~0.69となった。この結果は前項(3.加熱対象物の形状および量の違いによる影響)で得られた値と同程度であったことから、容器の材質は加熱対象物の温度に大きな影響を与えないと考えられた。また、今回試した試料では、容器の厚さと加熱時間に相関はみられなかったことから、いずれの材質もマイクロ波を吸収しないと考えられた。

以上のことから、材質によって昇温速度がわずかに異なる傾向が見られたが、その影響は小さく、材質ごとに加熱時間を調整する必要はないと考えられた。

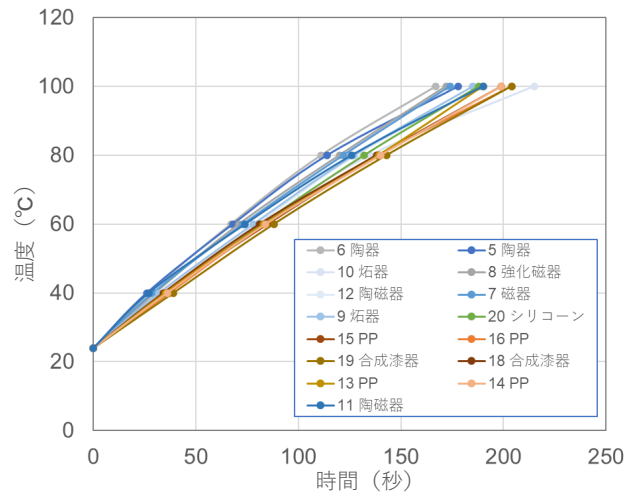


図7 異なる材質における温度と時間の関係
容器：陶器製マグカップ、炆器製マグカップ、磁器製マグカップ、強化磁器製マグカップ、合成漆器製マグカップ、シリコーンゴム製マグカップ、PP製マグカップ、溶媒：水、容量：200 mL、出力数：500W、測定位置：中央・上、0秒時の温度は24℃、試料は番号と材質を示した。

表6 各温度に到達した時間(材質別)

番号	試料 材質	40℃	60℃	80℃	100℃	40→ 80℃*1
		6	陶器	27	67	111
5	陶器	26	68	114	178	88
10	炆器	30	71	120	172	90
8	強化磁器	35	80	128	189	93
17	PP	29	73	122	174	93
12	陶磁器*2	35	82	130	190	95
7	磁器	32	78	127	185	95
9	炆器	36	82	132	188	96
20	シリコーンゴム	36	82	135	215	99
11	陶磁器*2	27	74	126	190	99
15	PP	37	84	139	204	102
16	PP	35	85	139	199	104
19	合成漆器*3	39	88	143	204	104
18	合成漆器*3	34	81	138	*4	104
13	PP	35	83	139	190	104
14	PP	36	84	140	199	104

*1 40℃から80℃に到達した時間

*2 記載はなかったが陶磁器製と推定される

*3 素地 PET,ABS表面 ウレタン塗装

*4 製品表示に準じ3分までの加熱としたが100℃に到達せず。

5. 加熱対象物の比較

内容物による温度の比較を行うため、水、酒(純米酒、アルコール分14度以上15度未満)、牛乳及び油(オリーブ油)を電子レンジで加熱し、

その温度推移を確認した。なお、いずれも 300 mL 容のガラス製ビーカーに 200 mL となるように入れ、室温に戻してから、500W で加熱した。各試料において 40、60、80 及び 100°C に達するまでの時間を表 6 に示した。

40°C から 80°C に到達した時間を比べると、水および酒は 105 秒、牛乳は 89 秒、油は 68 秒であった。牛乳および油で温度が上がりやすかったのは、水に比べ比熱 (物質 1 g を 1°C 上昇させるために必要な熱量) が低いためと考えられた。

油は水よりも沸点が高いため、加熱しすぎると 100°C 以上の高温となり、火傷や発火のおそれがある。また、JIS S2029 では電子レンジに使用できるプラスチック容器の耐熱温度を 140°C と規定しているが、加熱時間が長いと油分の温度が 140°C を超え、非耐熱の容器や一部のラップフィルムを同時に加熱すると溶かしてしまうこともある。実際に油を 500W で加熱し続けたところ、217 秒後に 140°C に達した。

そのため、油分を含む食品を加熱する場合は、水よりも温度が上がりやすいため、加熱しすぎないように食品の表面積や油分含量に応じて加熱時間を調節する必要がある。また、油分を多く含む食品を加熱する際は、一部の合成樹脂製の容器やラップフィルムが溶けるおそれがあるため、200 mL の食品を 500W で 217 秒 (600W では 180 秒、700W では 155 秒、800W では 135 秒、1000W では 108 秒に相当) を超えて加熱する場合は、器具・容器包装の耐熱温度にも注意を払う必要がある。

また、酒類の昇温速度は水とほぼ同じであるが、エタノールは沸点が水よりも低いため、加熱しすぎるとエタノールの一部が揮散し、電子レンジ内で発生したスパーク等により引火するおそれがある。そのため、200 mL の酒類を加

熱する場合は、500W では 120 秒 (600W では 100 秒、700W では 86 秒、800W では 75 秒、1000W では 60 秒に相当) 以内にとどめるべきである。

表 6 各温度に到達した時間 (試料別)

試料	40°C	60°C	80°C	100°C	40→80°C*
水	39	90	144	204	105
酒	34	84	139	-**	105
牛乳	39	81	128	186	97
油	29	61	97	137	68

*40°C から 80°C に到達した時間

**加熱に伴って量が減ったため 80°C で加熱を停止した。

D. 結論

電子レンジ加熱時に器具・容器包装をより安全に使用するための基礎的な情報を収集することを目的とし、様々な容量、形状、材質の容器を用いて液体または液状の食品を電子レンジ加熱する際の条件とその設定根拠を検証した。その結果、上部中央の温度が最も上がりやすかった。出力数と加熱時間は理論通り反比例の関係にあったことから調整が容易であった。また、材質の違いが加熱対象物の温度に与える影響も小さいと考えられた。

一方、加熱対象物の形状や量が変わるとマイクロ波を受ける面積が変わるため、加熱時間は対象物の表面積を考慮して設定する必要がある。また、酒類や油分を含む食品を加熱する場合は、加熱しすぎないように加熱時間を調節する必要がある。

E. 参考文献

- 1) 六鹿元雄ら: 合成樹脂製器具・容器包装のリスク評価における溶出試験法に関する研究、平成 29 年度～令和元年度 食品健康影響評価技術研究 研究成果報告書 (2019)

ポジティブリスト制度施行に伴う分析法の開発

研究分担者 六鹿元雄 国立医薬品食品衛生研究所

研究要旨

平成30年6月の食品衛生法の改正に伴い、令和2年6月から食品用器具・容器包装の材質の一つである合成樹脂に対してポジティブリスト（PL）制度が施行された。しかし、器具・容器包装の製造に使用される物質の大部分については、物質の同定や確認を目的とした分析法は未整備である。そのため、平成29年度、平成30年度および令和2年度の厚生労働科学研究において、国内の業界団体の自主基準、EU または米国の法規制において使用が認められている約900物質を対象にGC-MS およびヘッドスペース GC-MS を用いて網羅的に分析を行い、そのうち約350物質について定性・定量を行うための保持時間、マススペクトルなどの情報を収集した。

一方これらの情報を使用する試験所においては、様々なメーカーの分析装置を使用していることから、複数メーカーの装置で分析に関する情報を取得し、それらを基にした共通の分析情報が必要になると考えられた。そこで本研究においては、国内の主要分析機器メーカーと共同で約220物質のPL収載物質（候補物質を含む）についてGC-MS およびLC-MS/MS に関する分析情報を取得した。GC-MS については4メーカーと、LC-MS/MS については5メーカーと共同し、マススペクトル、定量イオン、確認イオン、測定限界、保持指標（RI、GC-MS のみ）等の情報を得た。また、得られた情報を基に共通の定量イオンおよび確認イオンを選択するとともに、およその測定限界を決定した。これらの情報に、化合物情報（化合物名、CAS No.、組成式、分子量、構造等）、PL収載情報（PLの通し番号、区分別使用制限等）および各化合物の紫外可視吸収スペクトルを加えたデータベースを作成した。

研究協力者

会田祐司	株式会社エービー・サイエックス	尾崎麻子	（地独）大阪健康安全基盤研究所
阿部 裕	国立医薬品食品衛生研究所	片岡洋平	国立医薬品食品衛生研究所
市川千種	株式会社島津製作所	窪田雅之	日本ウォーターズ株式会社
市川裕夏	（一財）日本食品分析センター	近藤友明	株式会社島津製作所
伊藤麻結	（一財）日本食品分析センター	佐藤貴弥	日本電子株式会社
糸川尚子	（一財）日本食品分析センター	佐藤 太	日本ウォーターズ株式会社
生方正章	日本電子株式会社	澤田浩和	アジレント・テクノロジー株式会社
緒方幸恵	株式会社エービー・サイエックス	野上知花	アジレント・テクノロジー株式会社

服部直美 アジレント・テクノロジー株式会社
濱坂友子 サーマフィッシャーサイエンティ
フィック株式会社
森 彬 日本ウォーターズ株式会社
山岸陽子 サーマフィッシャーサイエンティ
フィック株式会社
山口未来 国立医薬品食品衛生研究所
山本五秋 サーマフィッシャーサイエンティ
フィック株式会社
四柳道代 国立医薬品食品衛生研究所

A. 研究目的

合成樹脂製器具・容器包装の製造には、モノマー、重合助剤、添加剤など様々な化学物質が使用されている。その中には有害性を有する化学物質もあることから、わが国では食品衛生法において、安全性に懸念のある化学物質を対象に規格を定め、残存量または溶出量を設定し管理してきた。このような制度はネガティブリスト（NL）制度と呼ばれる。

一方、米国、欧州連合（EU）、中国などでは、合成樹脂製器具・容器包装に使用できる化学物質を管理する、いわゆるポジティブリスト（PL）制度によりこれらの製品の安全性を確保している。わが国以外では使用が認められていない化学物質を用いた製品が輸入される可能性があるが、NL制度だけでは直ちに規制できないなどの問題が指摘された。

このような状況の中、わが国においても器具および容器包装のさらなる安全性の確保を図るための仕組みについて新たな制度設計等を見据えた検討が行われた。この検討を基に平成30年（2018年）6月に食品衛生法が改正され、食品用器具・容器包装の原材料である合成樹脂にPL制度の導入が決定し、安全性が評価された物質だけが使用できることとなり、令和2年（2020年）6月に施行された。なおPL収載物質は、令和3年12月時点で2000項

目を超えるモノマーおよび添加剤が収載されているが、令和4年（2022年）3月の薬事・食品衛生審議会食品衛生分科会器具・容器包装部会において、今後PLの改編と物質の整理が進める旨の説明があり、大幅な改編が予定されている。

PLには非常に多くの化学物質が収載されるが、そのほとんどの物質については、物質の同定や確認を目的とした分析法は未整備である。そこで我々は、PL制度施行後の合成樹脂製品の検査・監視等に資することを目的として、平成29年（2017年）度²⁾、平成30年（2018年）度³⁾および令和2年（2020年）度⁴⁾の厚生労働科学研究において、国内の業界団体の自主基準、EUまたは米国の法規制において使用が認められている物質を対象に、GC-MSおよびヘッドスペースGC-MSを用いて約900物質の化合物を対象に網羅的に分析を行い、約350物質について定性・定量を行うための保持時間、マススペクトルなどの情報を収集した。

一方これまでのデータは国立医薬品食品衛生研究所にて、アジレント・テクノロジー株式会社製のGC-MSを用いて取得したものであるが、データを活用する試験所が同じメーカーのGC-MSを使用するとは限らないため、当所で得られた結果を活用できない場合がある。また、GC-MSでは測定できない物質もあるため、LC-MSまたはLC-MS/MSによるデータも必要となる。

そこで本年度は、国内の主要分析機器メーカーと共同で、PL収載物質（候補物質を含む）を対象にGC-MSおよびLC-MS/MS用の分析情報を収集した。また、LC-UVでの測定も想定し、紫外可視吸収スペクトルも取得した。

B. 研究方法

1. 参加メーカー

GC-MSおよびLC-MS/MSの分析は以下の

表1 参加メーカー名

メーカー名 (五十音順)	略号	GC-MS	LC-MS/MS
アジレント・テクノロジー株式会社	AG	○	○
株式会社 エービー・サイエックス	SX	—	○
株式会社島津製作所	SZ	○	○
サーモフィッシャーサイ エンティフィック 株式会社	TH	○	○
日本ウォーターズ 株式会社	WA	—	○
日本電子株式会社	JE	○	—

○：参加、—：不参加

分析機器メーカーが実施した（表1）。

2. 試薬・標準品

1) 試薬

分析に用いる試薬は各メーカーが通常使用するものを用いた（非公開）。

2) 標準品

本研究で対象とした 228 物質の標準品の物質名（和名および英名）、CAS No.、試薬メーカーおよび純度を表2に示した。

3. GC-MS の測定

1) 測定溶液の調製

それぞれの標準品を 0.01、0.02、0.05、0.1、0.2、0.5 および 1 µg/mL となるようにアセトンまたはヘキサンで希釈したものを測定溶液とした。

2) 装置

表3 各メーカーの使用機種

メーカー名	GC-MS	LC-MS/MS
AG	8890-5977B	6470B
SX	—	QTRAP4500
SZ	GCMS-QP2020 NX	LCMS-8045
TH	ISQ7000または TSQ9000	TSQ Fortis
WA	—	Xevo TQ-S micro
JE	JMS-Q1500GCまたは JMS-Q1600GC	—

—：不参加

一般的な EI イオン源を有する GC-MS を用いた。各メーカーで用いた装置を表3に示した。

3) 測定条件

測定条件は原則以下の通りとし、それ以外は各メーカーにおいて最適化することとした。

注入口温度：250°C以上

カラム：5%フェニル-メチルポリシロキサン（MS用も可）（長さ 30 m 程度、内径 0.25 mm、膜厚 0.1~0.25 µm）

カラム温度：50°C以下-20°C/min-320°C（20 min）

キャリアーガス：He

キャリアーガス流量：1 mL/min 程度（定流量、定線速度もしくは定圧）

インターフェース温度：280°C程度

注入量：1 µL（スプリットレスもしくはスプリット）

イオン化電圧：70 eV

検出モード：SCAN（範囲指定はしない）および SIM（物質ごとに設定）

チューニング：オートチューンもしくは DFTPP（Decafluoro-triphenylphosphine）法

4) 測定

上記の測定条件 (SCAN モード) で 10 µg/mL の標準溶液を測定し、マススペクトルが得られた場合は、適切な定量イオンを選択し、SIM モードによる測定を行った。マススペクトルが得られなかった場合は、条件の最適化等の検討は行わないこととした。

5) データの報告

各メーカーは、装置情報、測定条件、得られたマススペクトル、マスクロマトグラム (SCAN および SIM)、検量線、測定限界、リテンションインデックス (RI) (取得していた場合) 等を別添 1 の結果報告シートに記載して、国立医薬品食品衛生研究所に提出した。なお測定限界は、測定溶液のうち、SIM モードにおいてピークが確認された最も濃度が低い溶液のピークの S/N と注入量から、S/N=10 となる量 (ng) を計算で求めた。また、RI は *n*-アルカン (C7~C40 等) を指標として算出した。

4. LC-MS/MS の測定

1) 測定溶液の調製

それぞれの標準品を 0.01、0.02、0.05、0.1、0.2、0.5 および 1 µg/mL となるようにメタノールまたはアセトニトリルで希釈したものを測定溶液とした。

2) 装置

一般的な四重極型タンデム質量計を接続した LC-MS/MS を用いた。LC は高速または超高速のいずれも使用可能とした。各メーカーで用いた LC-MS/MS を表 3 に示した。

3) 測定条件

測定条件は原則以下の通りとし、それ以外は各メーカーにおいて最適化することとした。
カラム : C18 または C8 系カラム

カラム温度 : 40°C

移動相 : A 液 5 mM ギ酸アンモニウム/水溶液
B 液 5 mM ギ酸アンモニウム/メタノール溶液
グラジエント条件 : B 液 5% → 直線グラジエント → 100%

注入量 : 0.2 ~ 10 µL

イオン化モード : ESI (+) または ESI (-)
イオン化電圧、温度、ガス流量等 : 一般的な条件

検出モード : SCAN および Multi Reaction Monitoring (MRM)

4) 測定

原則としてポジティブモード (Pos) の SCAN モードで 10 µg/mL の標準溶液を測定し、マススペクトルが得られた場合は、適切なプリカーサーイオンとプロダクトイオンを選択したのち、MRM モードで測定溶液を測定した。ただし多種の化合物を測定するため、それぞれの化合物に対するコリジョンエネルギー等の最適化は不要とし、Pos で測定できた場合はネガティブモード (Neg) での測定は不要とした。一方、Pos でマススペクトルが得られなかった場合は Neg で測定し、マススペクトルが得られた場合は Pos と同様に MRM モードで測定した。Neg でもスペクトルが得られなかった場合は、条件の最適化等は行わないこととした。

5) データの報告

各メーカーは、化合物情報、測定条件、マススペクトルもしくはマスマススペクトル、マスクロマトグラム (SCAN および MRM)、検量線、測定限界等を別添 2 の結果報告シートに記載して、国立医薬品食品衛生研究所に提出した。なお測定限界は、測定溶液のうち、MRM モードにおいてピークが確認された最も濃度が低い溶液の MRM 測定におけるピー

クの S/N と注入量から、S/N=10 となる量 (ng) を計算で求めた。

5. 紫外可視吸収スペクトルの測定

紫外可視吸収スペクトルは (一財) 日本食品分析センターにて測定した。

1) 測定溶液の調製

各試薬をメタノールまたはアセトニトリルで適宜希釈した溶液を測定溶液とした。

2) 装置および測定条件

装置 : UV-1800 (株式会社島津製作所製)

光源 : タングステンヨウ素ランプ

測定波長 : 200~700 nm

スリット幅 : 1 nm

吸収セル : 石英セル、光路長 10 mm

6. 分析情報のまとめ

各メーカーにおいて得られたデータを国立医薬品食品衛生研究所にてとりまとめ、公開を目的とした情報として整理した。

GC-MS については、1 化合物につき 1 種の定量イオンおよび 1~3 種の確認イオンを選択した。RI 情報は各メーカーで得られた RI から「平均値±標準偏差 (データ数)」を求めて記載した。また、測定限界は 3 メーカー以上から情報が得られた場合に限り、その中で最も高い数値を示し、それ以外の場合は N/A (not applicable) とした。

LC-MS/MS についても原則として 1 化合物につき 1 種の定量イオンおよび 1~3 種の確認イオンを選択したが、定量イオンや確認イオンの組み合わせが明確に異なっていた場合は、パターン A、B 等として複数の組み合わせとして示した。測定限界は GC-MS と同様に 3 メーカー以上から情報が得られた場合に限り、その中で最も高い数値を示した。

なお、データが得られなかった場合やデー

タを示すのに不十分と判断した場合は該当なし・適用不可とし、N/A (not applicable) とした。

紫外可視吸収スペクトルについては、原則得られたスペクトルをそのまま収載した。

C. 研究結果および考察

1. 対象化合物

令和元年時点での PL 収載物質 (候補物質も含む) の中から試薬として入手可能であった 228 物質を選択した (表 2)。

2. GC-MS

1) 測定条件

対象とした化合物は様々な性質を有しているため、GC は広範な物質に対応可能な条件とした。ただし、RI 情報取得のためカラムは固定相に 5%フェニル-メチルポリシロキサンを用いたものに限定した。カラムの初期温度や MS 条件については全てのメーカーで測定可能な条件とするため、一般的な条件として、具体的な数値は設定しないこととした。

2) 測定結果

収集した 228 物質の標準品のうち、アセトンまたはヘキサンに溶解した 201 物質を測定対象とした。

①マススペクトル

全てのメーカーでマススペクトルが取得できたのは 120 物質あった。3 メーカー以上で取得できたものを加えると 144 物質となり、約 70%に相当した。取得されたマススペクトルを比較したところ、検出されるイオンやその強度比は全メーカーでほとんど同じであった。

一方、全メーカーでマススペクトルが得られなかった物質は、2-ブタノン (化合物番号 : R1-MD-3)、グリコール酸 (R1-MD-4)、ミツロウ (R1-MD-177)、アクリル酸亜鉛 (R1-MD-197) など 44 物質あった。マススペクトルが取得で

きなかった主な原因として、これらの多くは分子量が小さく、揮発性が高いものであったことから、化合物の性質上分析カラムやGC条件が最適ではなかったためと考えられた。一方で、ミツロウなどイオン化されにくいことが原因と考えられる物質も存在した。

1~2 メーカーのみでマススペクトルが取得されたものはフマル酸 (R1-MD-67)、マロン酸 (R1-MD-107) など 13 物質あったが、データが得られたメーカーではオープン初期濃度の保持時間を長くするなどの対応により測定可能となっていたため、測定条件を変更することでデータが得られなかったメーカーの情報も得られると期待された。

② RI

RI 情報は最大 3 メーカーの結果と国立医薬品食品衛生研究所で得られた結果から求めた。その結果、140 物質の化合物について RI 情報を得ることができ、得られた RI は 800~4000 の間に含まれていた。平均値と標準偏差から相対標準偏差を求めたところ、最大で 1.3% でほとんどが 1% 未満であった。以上のことから、RI は分析条件がやや異なっても非常に近い値になるということが示された。したがって、RI は化合物を同定する上で非常に強力な情報になることが示唆された。

3) 測定限界

およそ 130 物質について測定限界を決定した。一方、一部極端に高い数値となっているメーカーの結果が反映されたものもあるため、参考情報として扱うこととし有効数字は切り上げて一桁とした。

3. LC-MS/MS

1) 測定条件

様々な性質の化合物に対応するため、LC は広範な物質に対応可能な条件とした。特にカ

ラムは逆相系の C18 または C8 のどちらを使っても良いこととし、サイズやメーカー等も規定しなかった。また、MS/MS 条件はメーカーごとに設定できる項目が異なるため、最低限必要な条件のみを指定し、それ以外は各メーカーで最適化することとした。測定条件の詳細は **B. 研究方法 4. 3) 測定条件** に示した。

2) 測定結果

収集した 228 物質の標準品のうち、メタノールまたはアセトニトリルに溶解した 204 物質を測定対象とした。

① マススペクトル (プリカーサーおよびフラグメントイオン)

全てのメーカーで Pos もしくは Neg でマススペクトルが取得できたのは 95 物質あった。3 メーカー以上で取得できたものを加えると 154 物質となり約 75% に相当した。これらのプリカーサーイオンは、ほとんどの場合が $[M+H]^+$ または $[M+NH_4]^+$ に相当するイオンであった。また、これらのプリカーサーイオンから生成したプロダクトイオンは強度比は異なっていたが、大部分はメーカー間で共通していた。一方、2-ブロモ-2-ブロモメチルグルタロニトリル (R1-MD-207) については、プロダクトイオンは共通であったが、得られたマススペクトルはデータが取得できたメーカーで全て異なっていた。また、ポリオキシエチレン (20) ソルビタントリオレート (R1-MD-186) やポリオキシエチレン (20) ソルビタントリステアレート (R1-MD-187) 等はポリマー構造の物質であるためプリカーサーイオンはメーカー間で異なっていたが、フラグメントイオンの多くは同じであった。

全メーカーでマススペクトルが得られなかったのは 25 物質あり、これらは 2-ブタノン (化合物番号: R1-MD-3)、トルエン (R1-MD-

62) などの分子量が小さいもの、エチレングリコール (R1-MD-51) やメシチレン (1,3,5-トリメチルベンゼン、R1-MD-60) などのイオン化しにくいもの、ジチオシアン酸メチレン (R1-MD-170) 等の水系溶媒に溶解しにくいもの等であった。また、一部の分析機器メーカーだけが検出できたものは、検出されたイオン強度が低く、測定限界が高いものが多かった。本検討では物質ごとに測定条件の最適化を行っていないため、これらについては測定条件を最適化することによりマススペクトルが得られる可能性がある。

また、2-(メチルアミノ)エタノール (R1-MD-64) や(2-ベンゾチアゾリルチオ)酢酸 (R1-MD-169) 等は GC-MS のマススペクトルは得られなかったが、LC-MS/MS では全メーカーで得られた。反対に、*p*-ベンジルオキシフェノール (R1-MD-44) やメシチレン (R1-MD-60) は LC-MS/MS では全メーカーでマススペクトルは得られなかったが、GC-MS では全メーカーでマ

スペクトルが得られた。このように、化合物によってはどちらかでは検出されないものがあった。一方エチレングリコール (R1-MD-51) 等のようにいずれにおいてもマススペクトルが得られない化合物もあった。

2) 測定限界

およそ 110 物質について測定限界を決定した。本検討では、物質ごとに測定条件の最適化を行っていない。そのため、一部極端に高い数値となっているメーカーの結果が反映された場合もあり、参考情報として扱うこととし有効数字は切り上げて一桁とした。

4. 紫外可視吸収スペクトル

収集した 228 物質の標準品のうち、メタノールまたはアセトニトリルに溶解した 213 物質の紫外可視吸収スペクトルを測定した。

得られた紫外可視吸収スペクトルの代表例を図 1 に示した。

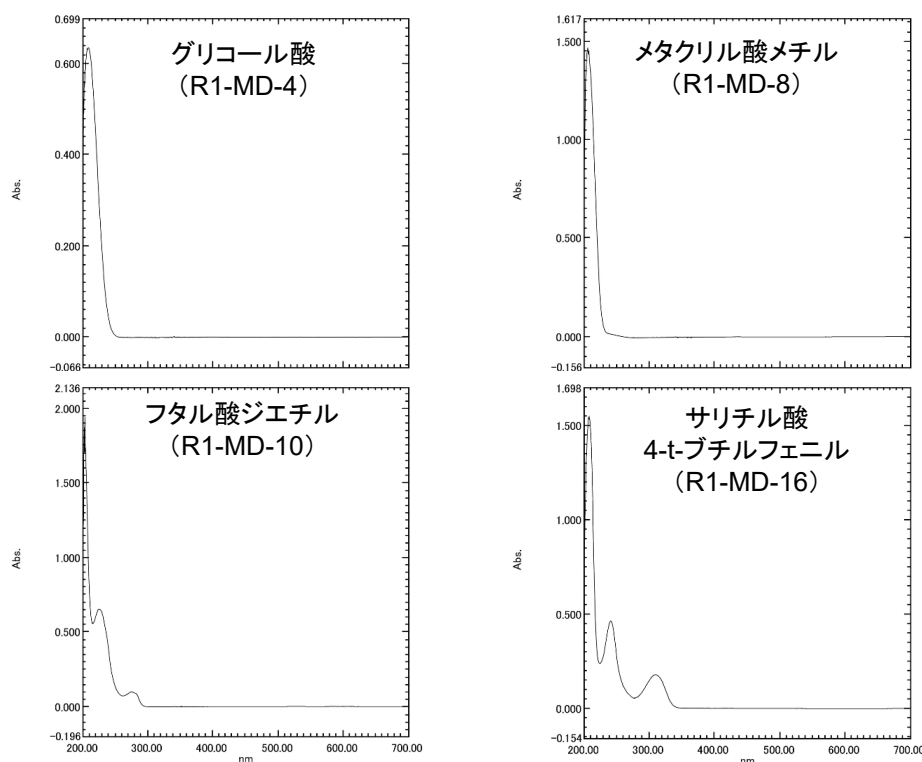


図 1 代表的な紫外可視吸収スペクトル

グリコール酸 (R1-MD-4) やメタクリル酸メチル (R1-MD-8) のように特徴的な吸収スペクトルを示さない化合物もあったが、フタル酸ジエチル (R1-MD-10) やサリチル酸 4-t-ブチルフェニル (R1-MD-16) など分子内に芳香族環を有する化合物は特徴的な吸収を示した。これらの紫外可視吸収スペクトルはLC-UV測定の際の化合物同定のための参考情報となりえると考えられた。

5. 分析情報の整理

得られた分析情報は、化合物ごとに化合物基礎情報、PL 規制情報とともに公開を目的とした表としてまとめた (別添3)。各情報の項目は以下の通りとした。

○ 化合物基礎情報

- ・本研究における番号
- ・CAS No. (登録番号)
- ・組成式
- ・分子量
- ・物質名 (和名・英名)
- ・構造式 (不明の場合は「不明」とした)

○ PL 規制情報

- ・通し番号
- ・区分別使用制限
- ・特記事項

ただし、いずれも令和4年3月時点のもの。

○ 分析情報

① GC-MS

- ・データ：元にしたデータ数
- ・定量イオン (m/z)
- ・定性イオン (m/z)：最大3つ
- ・測定限界 (ng)
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・特記事項

② LC-MS/MS

- ・パターン：メーカー間で検出されたイオン

パターンが異なる場合に分けて示した。

- ・データ：元にしたデータ数
- ・プリカーサーイオン (m/z)
- ・プロダクトイオン (m/z)：最大3つ
- ・測定限界 (ng)
- ・特記事項

③ 紫外可視吸収スペクトル

データが得られなかった場合は N/A とした。

また、食品に残留する農薬、飼料添加物又は動物用医薬品の成分である物質の試験法⁵⁾のGC/MSによる農薬等の一斉試験法 (農産物)⁶⁾やLC/MSによる農薬等の一斉試験法 I (農産物)⁷⁾などを参考に、化合物ごとの「食品用器具・容器包装のPL 収載物質の分析情報」の表も作成した (別添4)。記載順はPLの通し番号順とし、項目は以下の通りとした。

- ・PLの通し番号 (いずれも令和4年3月時点のもの)
- ・化合物名 (和名)
- ・Cas No.
- ・検出イオン (定量イオンおよび確認イオン)
- ・測定限界
- ・RI (GC-MSのみ)

D. 結論

PL制度施行に伴う物質の同定や品質確認を目的として、PL 収載物質 (候補物質も含む) 約220物質を対象に、GC-MS および LC-MS/MS分析を行うための情報を国内の主要分析機器メーカーの協力を得て収集し、公開データベースを作成した。

これらの情報を活用することで、標準品がただちに入手出来ない場合でも物質の推定または同定の一助となることが期待される。また、測定したい化合物がGC-MSとLC-MS/MSのどちらを使用したらより高感度に測定でき

るか、どの程度の濃度まで測定できるかの参考になる。さらには、国内の主要分析機器メーカーから得たデータを元に行っていることから、試験所が所有するメーカーを問わず活用でき、非常に有用なデータベースであると考えられる。

E. 参考文献

- 1) 別表第1 (ポジティブリスト)、<https://www.mhlw.go.jp/content/11130500/000625490.pdf> (最終アクセス日 令和4年3月31日)
- 2) 六鹿元雄ら、合成樹脂製器具・容器包装の製造に使用される化学物質の分析法に関する検討、平成29年度厚生労働科学研究費補助金 総括・分担研究報告書、103-128(2018)
- 3) 六鹿元雄ら、合成樹脂製器具・容器包装の製造に使用される化学物質の分析法に関する検討、平成30年度厚生労働科学研究費補助金 総括・分担研究報告書、85-117 (2019)
- 4) 六鹿元雄、ポジティブリスト制度施行に伴う分析法の開発、令和2年度厚生労働科学研究費補助金 総括・分担研究報告書、90-118 (2021)
- 5) 厚生労働省医薬食品局食品安全部長通知 (平成17年1月24日 食安発第0124001号) 食品に残留する農薬、飼料添加物又は動物用医薬品の成分である物質の試験法について (2005)
- 6) GC/MSによる農薬等の一斉試験法(農産物)、別表、<https://www.mhlw.go.jp/file/06-Seisakujouhou-11130500-Shokuhinzenbu/0000152045.pdf>(最終アクセス日令和4年3月31日)
- 7) LC/MSによる農薬等の一斉試験法I (農産物)、別表1、https://www.mhlw.go.jp/stf/seisakunitsuite/bunya/kenkou_iryoushokuhin/zanryu/zanryu3/siken.html (最終アクセス日、令和4年3月31日)

表2 対象とした化合物情報

番号	物質名 (和名)	物質名 (英名)	CAS No.	メーカー名*	純度(%)
R1-MD-1	リン酸トリエチル	Triethyl Phosphate	78-40-0	A	> 97
R1-MD-2	トリス(2-エチルヘキシル)ホスファート	Tris(2-ethylhexyl) phosphate	78-42-2	B	> 98
R1-MD-3	2-ブタノン	2-Butanone	78-93-3	A	> 99
R1-MD-4	グリコール酸	Glycolic Acid	79-14-1	A	> 97
R1-MD-5	2,5-ジ4-ペンテルヒドロキノン	2,5-Di-4-pentylhydroquinone	79-74-3	C	> 94
R1-MD-6	4,4'-イソプロピリデンジフェノール	4,4'-Isopropylidenediphenol	80-05-7	A	> 95
R1-MD-7	p-ペンテルフェノール	p-Pentylphenol	80-46-6	A	> 97
R1-MD-8	メタクリル酸メチル, モノマー	Methyl Methacrylate, Monomer	80-62-6	A	> 98
R1-MD-9	フタル酸ジシクロヘキシル	Dicyclohexyl Phthalate	84-61-7	A	> 99
R1-MD-10	フタル酸ジエチル	Diethyl Phthalate	84-66-2	A	> 98
R1-MD-11	フタル酸ジブチル	Dibutyl Phthalate	84-74-2	A	> 98
R1-MD-12	フタル酸ジヘキシル	Phthalic Acid Dihexyl Ester	84-75-3	D	98
R1-MD-13	4,4'-ブチリデンビス(6-tert-ブチル-3-メチルフェノール)	4,4'-butylidenebis(2-t-butyl-5-methylphenol)	85-60-9	A	> 95
R1-MD-14	フタル酸ベンジルブチル	Benzyl Butyl Phthalate	85-68-7	A	> 95
R1-MD-15	ブチルブチルブチルグリコラート	Butyl Phthalyl Butyl Glycolate	85-70-1	D	95
R1-MD-16	サリチル酸4-tert-ブチルフェニル	4-tert-butylphenyl Salicylate	87-18-3	D	> 98
R1-MD-17	1-ビニル-2-ピロリドン	1-Vinyl-2-pyrrolidone	88-12-0	A	> 98
R1-MD-18	o-トルエンスルホンアミド	o-Toluenesulfonamide	88-19-7	A	> 98
R1-MD-19	2,2'-メチレンビス(6-tert-ブチル-4-エチルフェノール)	2,2'-Methylenabis(6-t-butyl-4-ethylphenol)	88-24-4	D	> 98
R1-MD-20	o-アミノベンズアミド	o-Aminobenzamide	88-68-6	C	> 97
R1-MD-21	ピロメリット酸無水物	Pyromellitic Dianhydride	89-32-7	D	> 98
R1-MD-22	o-ヒドロキシビフェニル	o-Hydroxybiphenyl	90-43-7	A	> 99
R1-MD-23	ベンゾグアナミン	Benzoguanamine	91-76-9	D	> 99
R1-MD-24	フェノチアジン	Phenothiazine	92-84-2	A	> 99
R1-MD-25	N,N-ジエタノールオレイン酸アミド	N,N-Diethanololeamide	93-83-4	C	不明
R1-MD-26	p-ヒドロキシ安息香酸プロピル	Propyl p-Hydroxybenzoate	94-13-3	A	> 95
R1-MD-27	p-ヒドロキシ安息香酸ブチル	Butyl p-Hydroxybenzoate	94-26-8	A	> 98
R1-MD-28	1H-ベンゾトリアゾール	1H-Benzotriazole	95-14-7	A	> 98
R1-MD-29	メチルヒドロキノン	Methylhydroquinone	95-71-6	A	> 98
R1-MD-30	4,4'-チオビス(2-tert-ブチル-5-メチルフェノール)	4,4'-Thiobis(2-t-butyl-5-methylphenol)	96-69-5	A	> 98
R1-MD-31	2,4-ジ-tert-ブチルフェノール	2,4-Di-tert-butylphenol	96-76-4	D	> 97
R1-MD-32	4-tert-ブチルピロカテコール	4-tert-Butylpyrocatechol	98-29-3	A	> 99
R1-MD-33	α-テルピネオール	α-Terpinol	98-55-5	D	> 95
R1-MD-34	p-ヒドロキシ安息香酸メチル	Methyl p-Hydroxybenzoate	99-76-3	A	> 99
R1-MD-35	N,N-ジエチルエタノールアミン	N,N-Diethylethanolamine	100-37-8	A	> 97
R1-MD-36	ベンジルアルコール	Benzyl Alcohol	100-51-6	A	> 99
R1-MD-37	ベンズアルデヒド	Benzaldehyde	100-52-7	A	> 98
R1-MD-38	ヘキサメチレンテトラミン	Hexamethylenetetramine	100-97-0	A	> 98
R1-MD-39	トリフェニルホスフィット	Triphenyl Phosphite	101-02-0	A	> 95
R1-MD-40	1,3-ジフェニル-2-チオ尿素	1,3-Diphenyl-2-thiourea	102-08-9	A	> 97
R1-MD-41	1,1',1'',1'''-(エチレンジトリロ)テトラキス(2-プロパノール)	1,1',1'',1'''-(Ethylenedinitrilo)tetraakis(2-propanol)	102-60-3	A	> 95
R1-MD-42	グリセロール三酢酸	Glycerol Triacetate	102-78-1	A	> 98
R1-MD-43	2-(ジブチルアミノ)エタノール	N,N-Dibutylethanolamine	102-81-8	D	> 99
R1-MD-44	p-ベンジルオキシフェノール	p-Benzoyloxyphenol	103-16-2	A	> 99
R1-MD-45	アゼライン酸ビス(2-エチルヘキシル)	Bis(2-ethylhexyl) Azelate	103-24-2	D	> 98
R1-MD-46	N,N-ジメチルベンジルアミン	N,N-Dimethylbenzylamine	103-83-3	A	> 98
R1-MD-47	ケイ皮酸アルデヒド	Cinnamic aldehyde	104-55-2	E	> 99
R1-MD-48	ε-カプロラクタム	ε-Caprolactam	105-60-2	A	> 98
R1-MD-49	フマル酸ジブチル	Dibutyl Fumarate	105-75-9	A	> 98
R1-MD-50	メタクリル酸グリシジル	Glycidyl Methacrylate	106-91-2	A	> 95
R1-MD-51	エチレングリコール	Ethylene Glycol	107-21-1	A	> 99.5
R1-MD-52	2-メチル-2,4-ペンタンジオール	2-Methyl-2,4-pentanediol	107-41-5	A	> 99
R1-MD-53	3,5-ジメチル-1-ヘキシン-3-オール	3,5-Dimethyl-1-hexyn-3-ol	107-54-0	A	> 95
R1-MD-54	1-メトキシ-2-プロパノール	1-Methoxy-2-propanol	107-98-2	A	> 98
R1-MD-55	2-ジメチルアミノエタノール	2-Dimethylaminoethanol	108-01-0	A	> 99
R1-MD-56	4-メチル-2-ペンタノン	4-Methyl-2-pentanone	108-10-1	A	> 99.5
R1-MD-57	無水酢酸	Acetic Anhydride	108-24-7	A	> 97
R1-MD-58	無水マレイン酸	Maleic Anhydride	108-31-6	A	> 99
R1-MD-59	酢酸2-メトキシ-1-メチルエチル	2-Methoxy-1-methylethyl Acetate	108-65-6	A	> 97
R1-MD-60	メシチレン	Mesitylene	108-67-8	A	> 97
R1-MD-61	メラミン	Melamine	108-78-1	A	> 99
R1-MD-62	トルエン	Toluene	108-88-3	A	> 99.5
R1-MD-63	セバシン酸ジブチル	Dibutyl Sebacate	109-43-3	A	> 97
R1-MD-64	2-(メチルアミノ)エタノール	2-(Methylamino)ethanol	109-83-1	A	> 99
R1-MD-65	コハク酸二ナトリウム	Disodium Succinate	150-90-3	A	> 97
R1-MD-66	コハク酸	Succinic Acid	110-15-6	A	> 99.5
R1-MD-67	フマル酸	Fumaric Acid	110-17-8	A	> 98
R1-MD-68	N-オレオイルサルコシン	2-(N-Methyloleamido)acetic acid	110-25-8	B	95
R1-MD-69	1,4-ブタンジオール	1,4-Butanediol	110-63-4	A	> 98
R1-MD-70	シクロヘキサン	Cyclohexane	110-82-7	A	> 99.5
R1-MD-71	3,3'-チオジプロピオン酸	3,3'-Thiodipropionic Acid	111-17-1	D	> 99
R1-MD-72	2,2'-イミノジエタノール	2,2'-Iminodethanol	111-42-2	A	> 99
R1-MD-73	2-(アリロキシ)エタノール	2-(Allyloxy)ethanol	111-45-5	A	> 98
R1-MD-74	ジエチレングリコール	Diethylene Glycol	111-46-6	A	> 99
R1-MD-75	2-ブトキシエタノール	2-Butoxyethanol	111-76-2	A	> 99
R1-MD-76	2-(2-メトキシエトキシ)エタノール	2-(2-Methoxyethoxy)ethanol	111-77-3	A	> 98
R1-MD-77	1-オクタニオール	1-Octanethiol	111-88-6	D	> 95
R1-MD-78	トリエチレンテトラミン(エチレンアミン混合物)	Triethylenetetramine (mixture of ethyleneamine)	112-24-3	A	不明
R1-MD-79	3,6-ジオキサ-1,8-オクタジオール	3,6-Dioxo-1,8-octanediol	112-27-6	A	> 95
R1-MD-80	1-ドデカンチオール	1-Dodecanethiol	112-55-0	A	> 98

表2 対象とした化合物情報 (続き)

番号	物質名 (和名)	物質名 (英名)	CAS No.	メーカー名*	純度(%)
R1-MD-81	ステアリン酸メチル	Methyl Stearate	112-61-8	D	> 97
R1-MD-82	リノール酸メチル	Methyl Linoleate	112-63-0	C	> 98
R1-MD-83	1-オクタセレン	1-Octadecene	112-88-9	A	> 90
R1-MD-84	ペンタエリトリトール	Pentaerythritol	115-77-5	D	> 95
R1-MD-85	フタル酸ビス(2-エチルヘキシル)	Bis(2-ethylhexyl) Phthalate	117-81-7	A	> 97
R1-MD-86	フタル酸ジ-n-オクチル	Di-n-octyl Phthalate	117-84-0	D	98
R1-MD-87	サリチル酸フェニル	Phenyl Salicylate	118-55-8	A	> 98
R1-MD-88	4,4'-メチレンビス(2,6-ジ-n-ブチルフェニル)	4,4'-Methylenebis(2,6-di-n-butylphenol)	118-82-1	D	98
R1-MD-89	サリチル酸メチル	Methyl Salicylate	119-36-8	A	> 98
R1-MD-90	2,2'-メチレンビス(6-n-ブチル-4-メチルフェニル)	2,2'-Methylenebis(6-n-butyl-4-methylphenol)	119-47-1	A	> 99
R1-MD-91	ベンゾイン	Benzoin	119-53-9	A	> 98
R1-MD-92	ベンゾフェノン	Benzophenone	119-61-9	A	> 98
R1-MD-93	p-ヒドロキシ安息香酸エチル	Ethyl p-Hydroxybenzoate	120-47-8	A	> 99
R1-MD-94	バニリン	Vanillin	121-33-5	A	> 98
R1-MD-95	トリスプロパノールアミン	Trisopropanolamine	122-20-3	A	> 95
R1-MD-96	アゾジカルボンアミド	Azodicarbonamide	123-77-3	A	> 95
R1-MD-97	アジピン酸	Adipic Acid	124-04-9	A	> 99.5
R1-MD-98	リン酸トリブチル	Tributyl Phosphate	126-73-8	A	> 97
R1-MD-99	2,4,7,9-テトラメチル-5-デシネ-4,7-ジオール	2,4,7,9-Tetramethyl-5-decylene-4,7-diol	126-86-3	A	> 97
R1-MD-100	2,6-ジ-n-ブチル-4-メチルフェニル	2,6-Di-n-butyl-4-methylphenol	128-37-0	A	> 98
R1-MD-101	2,2'-ジヒドロキシ-4-メトキシベンゾフェノン	2,2'-Dihydroxy-4-methoxybenzophenone	131-53-3	F	98
R1-MD-102	2-ヒドロキシ-4-メトキシベンゾフェノン	2-Hydroxy-4-methoxybenzophenone	131-57-7	A	> 98
R1-MD-103	ジブチルジチオカルバミン酸亜鉛	Zinc Dibutyldithiocarbamate	136-23-2	A	> 95
R1-MD-104	N-ドデカノールサルコシン酸ナトリウム	Sodium N-Dodecanoylsarcosinate	137-16-6	A	> 95
R1-MD-105	フマル酸ビス(2-エチルヘキシル)	Bis(2-ethylhexyl) Fumarate	141-02-6	C	> 97
R1-MD-106	2-アミノエタノール	2-Aminoethanol	141-43-5	A	> 99
R1-MD-107	マロン酸	Malonic Acid	141-82-2	A	> 98
R1-MD-108	ヨードアセトアミド	Iodoacetamide	144-48-9	A	> 95
R1-MD-109	2-(4-チアゾリル)ベンゾイミダゾール	2-(4-Thiazolyl)benzimidazole	148-79-8	D	> 98
R1-MD-110	p-メトキシフェニル	p-Methoxyphenyl	150-76-5	A	> 99
R1-MD-111	2-メルカプトベンゾチアゾール亜鉛	2-Mercaptobenzothiazole Zinc Salt	155-04-4	C	> 97
R1-MD-112	1,2,4-トリアゾール	1,2,4-Triazole	288-88-0	C	> 97
R1-MD-113	グルコン酸カルシウム水和物	Calcium Gluconate Monohydrate	299-28-5	A	99-101
R1-MD-114	リノレン酸メチル、混合物	Methyl Linolenate, mixture	301-00-8	C	97-103
R1-MD-115	オレアミド	Oleamide	301-02-0	A	95.5
R1-MD-116	2-エチルヘキサノ酸スズ(II)	Tin(II) 2-Ethylhexanoate	301-10-0	A	> 90
R1-MD-117	ジシアノジアミド	Dicyanodiamide	461-58-5	A	> 90
R1-MD-119	リン酸トリメチル	trimethyl phosphate	512-56-1	A	> 99
R1-MD-120	チオシアン酸ナトリウム	Sodium Thiocyanate	540-72-7	A	> 99
R1-MD-121	デカメチルシクロペンタシロキサン	Decamethylcyclotrisiloxane	541-02-6	C	> 95
R1-MD-122	安息香酸リチウム	Lithium Benzoate	553-54-8	G	> 99
R1-MD-123	ニ安息香酸亜鉛	Zinc Dibenzoate	553-72-0	A	95-102
R1-MD-124	オクタメチルシクロテトラシロキサン	Octamethylcyclotetrasiloxane	556-67-2	D	98
R1-MD-125	マルチトール	Maltitol	585-88-6	D	95
R1-MD-127	トリフェニルホスフィン	Triphenylphosphine	603-35-0	A	> 97
R1-MD-128	トリフェニルイタリム	Triphenylantimony	603-36-1	D	> 95
R1-MD-129	ジグリセリン	Diglycerol	627-82-7	A	94.3
R1-MD-130	1-ヘキサデセン	1-Hexadecene	629-73-2	A	> 90
R1-MD-131	2-メチルイミダゾール	2-Methylimidazole	693-98-1	A	> 98
R1-MD-132	イソシアヌル酸トリス(2-ヒドロキシエチル)	Tris(2-hydroxyethyl) Isocyanurate	839-90-7	A	> 97
R1-MD-133	ジエチルホスホノ酢酸エチル	Ethyl Diethylphosphonoacetate	867-13-0	A	> 97
R1-MD-134	2-フェニルインドール	2-Phenylindole	948-65-2	A	98-102
R1-MD-135	マレイン酸ジアリル	Diallyl maleate	999-21-3	D	> 97
R1-MD-136	1,1,1,3,3,3-ヘキサメチルジシラザン	1,1,1,3,3,3-Hexamethylsilylazane	999-97-3	A	> 96
R1-MD-137	アジポジヒドラジド	Adipodihydrazide	1071-93-8	A	> 97
R1-MD-138	ニメタクリル酸1,3-ブタンジオール	1,3-Butanediol Dimethacrylate	1189-08-8	A	> 95
R1-MD-139	リン酸2-エチルヘキシルジフェニル	2-Ethylhexyl Diphenyl Phosphate	1241-94-7	A	> 90
R1-MD-140	リン酸トリトリル	Triaryl Phosphate	1330-78-5	A	> 98
R1-MD-141	ナフテン酸マンガン (Mn 約6%)	Manganese Naphthenate (Mn ca. 6%)	1336-93-2	D	> 6
R1-MD-142	2,4,6-トリス(3,5-ジ-n-ブチル-4'-ヒドロキシベンジル)メチレン	2,4,6-Tris(3,5-di-n-butyl-4'-hydroxybenzyl)mesitylene	1709-70-2	D	95
R1-MD-143	3-(2-アミノエチルアミノ)プロピルトリメトキシシラン	3-(2-Aminoethylamino)propyltrimethoxysilane	1760-24-3	D	97
R1-MD-144	2-ヒドロキシ-4-(オクチロキシ)ベンゾフェノン	2-Hydroxy-4-(octyloxy)benzophenone	1843-05-6	A	> 99
R1-MD-145	トブチルヒドロキノン	t-Butylhydroquinone	1948-33-0	A	> 98
R1-MD-146	3-(3,5-ジ-n-ブチル-4-ヒドロキシフェニル)プロピオン酸オクタデシル	Octadecyl 3-(3,5-Di-n-butyl-4-hydroxyphenyl)propionate	2082-79-3	D	> 98
R1-MD-147	メタンスルホン酸ナトリウム	Sodium Methanesulfonate	2386-57-4	C	> 96
R1-MD-148	2-(2H-ベンゾトリアゾール-2-イル)-p-クレゾール	2-(2H-Benzotriazol-2-yl)-p-cresol	2440-22-4	A	> 97
R1-MD-149	3-グリシドキシプロピルトリメトキシシラン	3-Glycidyloxypropyltrimethoxysilane	2530-83-8	D	97
R1-MD-150	1,2-ベンジソチアゾール-3(2H)-オン	1,2-Benzisothiazol-3(2H)-one	2634-33-5	F	> 98
R1-MD-151	N,N-ジメチルアクリルアミド	N,N-Dimethylacrylamide	2680-03-7	A	> 98
R1-MD-152	2-メチル-4-イソチアゾリン-3-オン, 50% aqueous solution	2-Methyl-4-isothiazoline-3-one, 50% aqueous solution	2682-20-4	B	50% aqueous solution
R1-MD-153	エチドロン酸	Etidronate	2809-21-4	H	98
R1-MD-154	3-アミノメチル-3,5,5-トリメチルシクロヘキシルアミン(cis-, trans-混合物)	3-Aminomethyl-3,5,5-trimethylcyclohexylamine (mixture of cis- and trans-)	2855-13-2	A	> 98
R1-MD-155	ジアセトンアクリルアミド	Diacetone Acrylamide	2873-97-4	A	> 98
R1-MD-156	3-(2-アミノエチルアミノ)プロピルジメトキシシラン	3-(2-Aminoethylamino)propylmethyldimethoxysilane	3069-29-2	G	97
R1-MD-157	ジシクロヘキシルアミン亜硝酸塩	Dicyclohexylamine Nitrite	3129-91-7	A	> 95
R1-MD-158	2-(2H-ベンゾトリアゾール-2-イル)-4-(1,1,3,3-テトラメチルブチル)フェニル	2-(2H-Benzotriazol-2-yl)-4-(1,1,3,3-tetramethylbutyl)phenol	3147-75-9	A	> 97
R1-MD-159	トリアクリル酸ペンタエリスリトール	2-(Acryloyloxy)ethyl-2-(hydroxymethyl)propane-1,3-diyl diacrylate	3524-68-3	B	95
R1-MD-160	フタル酸ジ-n-ブチル	Diheptyl phthalate	3648-21-3	I	97

表2 対象とした化合物情報 (続き)

番号	物質名 (和名)	物質名 (英名)	CAS No.	メーカー名*	純度(%)
R1-MD-161	2-(5-クロロ-2-ベンゾリチアゾール)-6-tert-ブチル-p-クレゾール	2-(5-Chloro-2-benzotriazolyl)-6-tert-butyl-p-cresol	3896-11-5	D	> 98
R1-MD-162	5-スルホイツフタル酸ジメチルナトリウム	Sodium Dimethyl 5-Sulfisophthalate	3965-55-7	D	> 98
R1-MD-163	2,6-ジ-tert-ブチル-4-エチルフェノール	2,6-Di-tert-butyl-4-ethylphenol	4130-42-1	D	96
R1-MD-164	コハク酸ジヒドラジド	Succinic Dithydrazide	4146-43-4	D	> 97
R1-MD-165	3,5-ジ-tert-ブチル-4-ヒドロキシ安息香酸2,4-ジ-tert-ブチルフェニル	2,4-Di-tert-butylphenyl 3,5-Di-tert-butyl-4-hydroxybenzoate	4221-80-1	A	> 97
R1-MD-166	(3-メルカプトプロピル)トリメチルシラン	(3-Mercaptopropyl)trimethoxysilane	4420-74-0	D	96
R1-MD-167	L(+)-アルギニン	L(+)-Arginine	74-79-3	A	> 98
R1-MD-168	2-シアノ-3,3-ジフェニルアクリル酸2-エチルヘキシル	2-Ethylhexyl 2-Cyano-3,3-diphenylacrylate	6197-30-4	D	98
R1-MD-169	(2-ベンゾチアゾリチオ)酢酸	(2-Benzothiazolythio)acetic Acid	6295-57-4	D	95
R1-MD-170	ジチオシアン酸メチレン	Methylene Dithiocyanate	6317-18-6	D	98
R1-MD-171	1,8-ジアザビシクロ[5.4.0]ウンデカ-7-エン	1,8-Diazabicyclo[5.4.0]undec-7-ene	6674-22-2	A	> 97
R1-MD-172	ペンタエリトリートラキス[3-(3,5-ジ-tert-ブチル-4-ヒドロキシフェニル)プロピオネート]	Pentaerythritol Tetrakis[3-(3,5-di-tert-butyl-4-hydroxyphenyl)propionate]	6683-19-8	D	> 95
R1-MD-173	2,2,4-トリメチル-1,3-ペンタジオールジイソブテラート	2,2,4-Trimethyl-1,3-pentanediol Diisobutyrate	6846-50-0	D	> 98.5
R1-MD-175	2,5-ビス(5-tert-ブチル-2-ペンソキサゾリチオ)チオフェン	2,5-Bis(5-tert-butyl-2-benzoxazolyl)thiophene	7128-64-5	C	> 97
R1-MD-177	蜜ロウ, 白色, ペレット	Bees Wax, White Pellets	8012-89-3	A	なし
R1-MD-178	カルナバワックス	Carnauba wax	8015-86-9	G	95
R1-MD-179	ポリエチレン	Polyethylene	9002-88-4	J	100
R1-MD-180	ヒドロキシプロピルメチルセルロース	Hydroxypropyl methylcellulose	9004-65-3	G	< 100
R1-MD-181	0.5w/v% メチルセルロース400溶液	0.5w/v% Methyl Cellulose 400 Solution	9004-67-5	A	0.5w/v%
R1-MD-183	ポリソルベート 20	Polysorbate 20	9005-64-5	G	>95
R1-MD-184	ポリソルベート 80	Polysorbate 80	9005-65-6	G	>95
R1-MD-185	ポリソルベート 60	Polysorbate 60	9005-67-8	G	100
R1-MD-186	ポリオキシエチレン(20)ソルビタントリオレート	Polyoxyethylene(20) Sorbitan Trioleate	9005-70-3	A	なし
R1-MD-187	ポリオキシエチレン(20)ソルビタントリステアレート	Polyoxyethylene(20) Sorbitan Tristearate(Tween® 65)	9005-71-4	C	なし
R1-MD-188	ナフチン酸亜鉛 (亜鉛 約8%)	Zinc Naphthenate (Zn ca. 8%)	12001-85-3	D	7.5-8.5 (as Zn)
R1-MD-189	ジアクリル酸1,6-ヘキサジオール	1,6-Hexanediol diacrylate	13048-33-4	G	99
R1-MD-190	ジメチルピリチオン	Zinc Pyrithione	13463-41-7	D	> 98
R1-MD-191	2,2-アゾビス(2-メチルブチロニトリル)	2,2-Azobis(2-methylbutyronitrile)	13472-08-7	A	> 98
R1-MD-192	ステアリン酸コバルト(II)	Cobalt(II) Stearate	13586-84-0	A	7.5-9.5 (as Co)
R1-MD-193	アクリル酸2-イソシアトエチル	2-Isocyanatoethyl Acrylate	13641-96-8	C	> 97
R1-MD-194	3-アミノプロピルトリメチルシラン	3-Aminopropyltrimethoxysilane	13822-56-5	C	> 100
R1-MD-195	ジエチルジチオカルバミド酸亜鉛	Zinc Diethylthiocarbamate	14324-55-1	A	97
R1-MD-196	N,O-ジステアリン酸エタノールアミン	Ethanolamine N,O-Distearate	14351-40-7	C	> 97
R1-MD-197	アクリル酸亜鉛	Zinc acrylate	14643-87-9	G	< 100
R1-MD-198	ビス(2-エチルヘキサノ酸)酸化ジルコニウム(IV)・ミネラルスピリット溶液(Zr:12%)	Zirconium(IV) Bis(2-Ethylhexanoate) Oxide, Mineral Spirit Solution (Zr:12%)	22464-99-9	A	11.7-12.3
R1-MD-199	2(3)-tert-ブチル-4-メトキシフェノール	2(3)-tert-Butyl-4-methoxyphenol	25013-16-5	G	96
R1-MD-200	1-ドデカンチオール	1-Dodecanethiol	25103-58-6	A	98-105
R1-MD-201	フタル酸ジイソデシル	Diisodecyl Phthalate	26761-40-0	A	> 97
R1-MD-203	テトラキス[3-(4-ドデシルチオ)プロピオネート]ペンタエリトリートール	Pentaerythritol Tetrakis[3-(dodecylthio)propionate]	29598-76-3	C	> 97
R1-MD-204	亜リン酸トリブチル(2,4-ジ-tert-ブチルフェニル)	Tri(2,4-di-tert-butylphenyl)phosphite	31570-04-4	K	98
R1-MD-205	D(-)ソルビトール	D(-)-Sorbitol	50-70-4	A	> 98
R1-MD-206	ジプロピレングリコールモノメチルエーテル(異性体混合物)	Dipropylene Glycol Monomethyl Ether(mixture of isomers)	34590-94-8	A	> 95
R1-MD-207	2-ブロモ-2-ブロモメチルグルタロニトリル	2-Bromo-2-bromomethylglutaronitrile	35691-65-7	F	99
R1-MD-208	イソシアヌル酸トリス(4-tert-ブチル-3-ヒドロキシ-2,6-ジメチルベンジル)	Tris(4-tert-butyl-3-hydroxy-2,6-dimethylbenzyl) isocyanurate	40601-76-1	F	98
R1-MD-209	2-ブロモ-2-ニトロ-1,3-プロパジオール	2-Bromo-2-nitro-1,3-propanediol	52-51-7	A	> 98
R1-MD-211	セバシン酸ビス(2,2,6,6-テトラメチル-4-ピペリジル)	Bis(2,2,6,6-tetramethyl-4-piperidyl) Sebacate	52829-07-9	C	> 97
R1-MD-212	グリセリン	Glycerol	56-81-5	A	> 99
R1-MD-213	ナフチン酸コバルト(コバルト 約8%)	Cobalt Naphthenate (Co ca. 8%)	61789-51-3	D	(Co ca. 8%)
R1-MD-214	尿素	urea	57-13-6	A	> 99
R1-MD-215	プロピレングリコール	Propylene Glycol	57-55-6	A	> 99
R1-MD-216	3,5-ビス-tert-ブチル-4-ヒドロキシ安息香酸ヘキサデシル	3,5-Di-tert-butyl-4-hydroxybenzoic acid hexadecyl ester	67845-93-6	F	98
R1-MD-217	ビタミンE, Natural	Vitamin E, Natural	59-02-9	L	97
R1-MD-218	トリブチリン	Tributyrin	60-01-05	A	> 97
R1-MD-219	2-(2H-ベンゾトリアゾール-2-イル)-4,6-ビス(1-メチル-1-フェニルエチル)フェノール	2-(2H-Benzotriazol-2-yl)-4,6-bis(1-methyl-1-phenylethyl)phenol	70321-86-7	H	98
R1-MD-220	2-ヒドロキシ-4-(2-ヒドロキシエトキシ)-2-メチルプロピオフェノン	2-Hydroxy-4-(2-hydroxyethoxy)-2-methylpropiophenone	106797-53-9	D	98
R1-MD-221	2-(4,6-ジフェニル-1,3,5-トリアジン-2-イル)-5-[(ヘキシルオキシ)フェノール]	2-(4,6-Diphenyl-1,3,5-triazine-2-yl)-5-[(hexyloxy)phenol]	147315-50-2	H	97
R1-MD-222	1-エチル-3-メチルイミダゾリウム=エチル硫酸塩	1-Ethyl-3-methylimidazolium Ethyl Sulfate	342573-75-5	C	> 96
R1-MD-223	サリチル酸	salicylic acid	69-72-7	A	> 99.5
R1-MD-224	p-トルエンスルホンアミド	p-Toluenesulfonamide	70-55-3	A	> 98
R1-MD-225	ジクロロメタン	Dichloromethane	75-09-2	A	> 99.5
R1-MD-226	tert-ブチルアルコール	tert-Butyl Alcohol	75-65-0	A	> 99
R1-MD-227	2,2'-メチレンビス[6-(1-メチルシクロヘキシル)4-メチルフェノール]	2,2'-Methylenebis[6-(1-methylcyclohexyl)-4-methylpheno]l	77-62-3	C	> 95
R1-MD-228	O-アセチルクエン酸トリエチル	Triethyl O-Acetylcitrate	77-89-4	D	> 97
R1-MD-229	O-アセチルクエン酸トリブチル	Tributyl O-Acetylcitrate	77-90-7	A	> 95
R1-MD-230	クエン酸トリエチル	Triethyl Citrate	77-93-0	A	> 99
R1-MD-231	クエン酸トリブチル	Tributyl Citrate	77-94-1	D	> 98
R1-MD-232	10% テトラエチルアンモニウムヒドロキシド溶液	10% Tetraethylammonium Hydroxide Solution	77-98-5	A	10-11
R1-MD-233	1,1,1-トリス(ヒドロキシメチル)プロパン	1,1,1-Tris(hydroxymethyl)propane	77-99-6	A	> 97
R1-MD-234	トリエトキシビニルシラン	Triethoxyvinylsilane	78-08-0	D	98
R1-MD-235	オルトケイ酸テトラエチル	Tetraethyl Orthosilicate	78-10-4	A	> 95

*A: 富士フイルム和光純薬株式会社, B: Fluorochem Ltd., C: 富士フイルムフコケミカル(株), D: 東京化成工業株式会社, E: MP Biochemicals, F: Combi-Blocks Inc., G: Alfa Aesar, H: Toronto Research Chemicals Inc., I: Sigma, J: Scientific Polymer Products, Inc., K: STREM, L: LKT Laboratories, Inc.

別添 1 結果報告シート (GC-MS 用、一部)

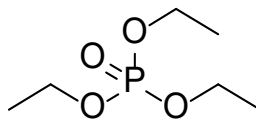
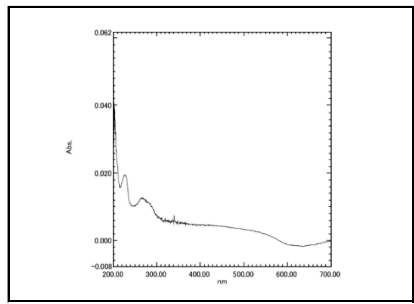
結果報告シート(GC-MS)				検体名
1. 化合物情報				
通し番号	235			
化合物名(和名)	オキシトリブチルアルコール			
分子番号	(No. R1-MD-235)			
化合物名(英名)	Tetraethyl Orthosilicate			
CAS No.	78-10-4			
分子量	208			
2. 測定条件				
機器情報	メーカー			
	製品名			
カラム情報				
カラム名	メーカー			
	製品名			
カラムサイズ	長さ(m)			
	内径(mm)			
	膜厚(µm)			
GC条件				
キャリアガス				
ガス流量	(µL)			
注入量	(µL)			
注入口温度	(°C)			
注入方式				
MS条件				
測定モード	EI or CI etc.			
イオン化エネルギー	(eV)			
イオンコレクタ温度	(°C)			
イオン源温度	(°C)			
チューニング法				
3. 検出条件				
保持時間	(min)			
測定質量範囲(scan)	(m/z)			
モニター(定量)イオン(SIM)	(m/z)			
モニターイオン以外の検出イオン	(m/z)			
定量下限値*2	(µg/ml)	#DIV/0!		
4. 質量スペクトル				
			Conc.	
5. スキャンログラム				
SCAN	Conc.	S/N		
6. 特記事項				
SIM				
	Conc.	µg/mL	S/N	
7. 検量線				
検量線範囲				

別添 2 結果報告シート (LC-MS/MS 用、一部)

検体情報シート(LC-MS/MS)										
検体名										
1. 化合物情報										
通し番号	235									
化合物名(和名)	オキシメチルアミン									
分子番号	No. RI-MD-235)									
化合物名(英名)	Tetraethyl Orthosilicate									
CAS No.	78-10-4									
分子重	208									
2. 測定条件										
機器情報	メーカー									
	製品名									
3. 検出条件										
イオン化方式	ESI or APCI or APQC etc.									
測定モード	(+) or (-)									
キャピラリー電圧	(kV)									
イオン源温度	(°C)									
乾燥気体の流量	(L/hr) or (L/min)									
ネbulizerの流量	(L/hr)									
スクリーン電流	(µA) * APCIの場合									
4. その他の特記事項										
5. 検出条件¹⁾										
イオン-イオン (m/z)	定量イオン (m/z)	DP (V)	CE (V)	定量下限値 (ng)	定性 (y/n)	DP (V)	CE (V)	定性 (y/n)	DP (V)	CE (V)
				#DVI/0						
6. 定量イオン										
イオン-イオン SCAN	Conc.									
7. 定量イオン										
イオン-イオン SCAN	Conc.	µg/mL	S/N							
8. 特記事項										
9. 検出線										
10. 検出条件¹⁾										
イオン-イオン (m/z)	定量イオン (m/z)	DP (V)	CE (V)	定量下限値 (ng)	定性 (y/n)	DP (V)	CE (V)	定性 (y/n)	DP (V)	CE (V)
				#DVI/0						
6. 定量イオン										
イオン-イオン SCAN	Conc.									
7. 定量イオン										
イオン-イオン SCAN	Conc.	µg/mL	S/N							
8. 特記事項										
9. 検出線										

¹⁾ 機器に固有の測定条件を各検体は項目を修正又は追加し、測定値を記載する
²⁾ 定量イオン以外のSCANは省略

別添3 公開データベース (例)

◎化合物基礎情報														
番号*	R1-MD-1	CAS登録番号	78-40-0		構造									
組成式	C6H15O4P	分子量	182											
物質名	和名	りん酸トリエチル												
	英名	Triethyl Phosphate												
*番号は本研究における番号														
◎ポジティブリスト情報*														
通し番号	区分別使用制限 (重量%)						特記事項							
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7							
1628	0.5	—	0.05	—	—	—	0.05							
*令和4年3月時点														
◎分析情報														
OGC/MS														
データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)									
4	99	155	127	109	0.003									
RI	特記情報													
1119 ± 4 (4)														
						○紫外可視吸収スペクトル								
														
OLC-MS/MS														
パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	5	183	99	155	81	127	1.1	0	N/A					N/A
B														
C														
特記情報														
<p>☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明</p> <ul style="list-style-type: none"> ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。 ・データ：元にしたデータ数 ・イオン：単位は m/z ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。 ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数) ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。 ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。 														

別添 4 食品用器具・容器包装の PL 収載物質の分析情報 (続き)

通し 番号 ¹⁾	化合物名(和名)	CAS No.	GC-MS ²⁾				LC-MS/MS ²⁾					測定限界 (ng) ⁴⁾		
			検出イオン(m/z)				Retention index ³⁾	測定限界 (ng) ⁴⁾	検出イオン(m/z)					
			82	55	67	99			1581 ± 1 (3)	0.003	717		747	763
41	ジテトラリン酸1,6-ヘキサジオール	13048-33-4	82	55	67	99	1581 ± 1 (3)	0.003	+227	83	55	73	155	0.7
44	テトラリン酸亜鉛	14643-87-9	N/A				+224	152	207	108	71	N/A		
63	テジピン酸	124-04-9	100	87	110	128	N/A	N/A	+147	129	111	101	83	20
72	テジホピドラジド	1071-93-8	不溶				+175	143	115	111	125	30		
82	ジシクロヘキシルアミン亜硝酸塩	3129-91-7	不溶				+182	100	83	55	2			
97	N-オレオイルサルコニン	110-25-8	N/A				+354	90	44	121	0.06			
97	N-ドデカノイルサルコニン酸ナトリウム	137-16-6	不溶				+272	90	44	57	123	0.5		
103	O-アセチルケエン酸トリエチル	77-89-4	157	203	213	115	1737 ± 9 (4)	0.0005	+319	157	213	273	203	0.4
105	O-アセチルケエン酸トリアチル	77-90-7	185	259	129	157	2246 ± 9 (4)	0.0005	+403	129	185	139	157	0.5
118	アセライン酸ビス(2-エチルヘキシル)	103-24-2	171	283	152	189	2701 ± 5 (4)	0.001	+413	171	125	189	281	0.1
119	アジカルホンプラミド	123-77-3	不溶											
120	2,2'-アジビス(2-メチルブチロニトリル)	13472-08-7	107	135	83	68	1252 ± 3 (4)	0.008	+210	100	138	82	110	N/A
124	o-アミノベンズアミド	88-66-6	119	136	92	65	1543 ± 8 (4)	0.03	+137	120	92	65	9	
126	2-アミノエタノール	141-43-5	N/A				+62	44	45	27	30			
127	3-(2-アミノエチルアミノ)プロピルメチルジメチルアミン	3069-29-2	144	231	105	176	1569 ± 5 (3)	0.03	+207	158	143	105	126	N/A
138	3-アミノプロピルトリメチルアミン	13822-56-5	121	91	84	70	N/A	0.007	+180	116	148	114	91	N/A
140	3-アミノチル-3,5,5-トリメチルシクロヘキシルアミン(cis-, trans-混合物)	2855-13-2	N/A				+171	154	95	137	81	400		
145	4-アミノブチノール	80-46-6	135	107	164		1401 ± 3 (3)	N/A	-163	133	93			N/A
152	2-(アミノオキシ)エタノール	111-45-5	N/A				+103	59	41	85				N/A
164	垂リン酸トリス(2,4-ジエチルフェニル)	31570-04-4	441	646	308	147	3416 ± 31 (4)	0.002						
165	垂リン酸トリフェニル	101-02-0	217	310	152	153	2282 ± 12 (4)	0.0004	+311	153	216	169	199	50
172	L(+)-アルギニン	74-79-3	不溶											
183	1-オクタノール	111-88-6	146	56	112		1131 ± 5 (4)	0.03*						
183	1-ドデカノール	112-55-0	202	168	111		1547 ± 7 (4)	0.007						
183	トドデカノール	25103-58-6	169	57	71	113	N/A	N/A						

別添 4 食品用器具・容器包装の PL 収載物質の分析情報 (続き)

通し 番号 ¹⁾	化合物名 (和名)	CAS No.	GC-MS ²⁾						LC-MS/MS ²⁾												
			検出イオン(m/z)			Retention index ³⁾	測定限界 (ng) ⁴⁾	フリッカー ⁵⁾	検出イオン(m/z)			測定限界 (ng) ⁴⁾									
			Z1	Z2	Z3				Z4	Z5	Z6		Z7								
208	二安息香酸亜鉛	553-72-0			不溶																
209	安息香酸リチウム	553-54-8			不溶																
213	イソシアヌル酸トリメチル(2-ヒドロキシエチル)	839-90-7	<u>231</u>	213	70	100	2223 ± 9 (4)	0.1													
215	イソシアヌル酸トリメチル(4-tert-ブチル-3-ヒドロキシ-2,6-ジメチルベンジル)	40601-76-1	<u>142</u>	342	140	58	3116 ± 5 (4)	0.009													
223	2,2,4-トリメチル-1,3-ペンタジオールジイソブチラート	6846-50-0	<u>243</u>	71	159	173	1593 ± 2 (4)	0.008													
257	ビス(2-エチルヘキサノ酸)酸化ジルニコラム(IV)・ミネラルスピリット溶液(α:12%)	2246499-9					N/A														
258	2-エチルヘキサノ酸スズ(II)	301-10-0					不溶														
266	1-エチル-3-メチルイミダゾラム=エチル硫酸塩	342573-75-5					N/A														
268	エチレンジリコール	107-21-1					N/A														
378	ベンゾエノン	119-61-9	<u>105</u>	182	77	51	1649 ± 13 (3)	0.01													
1407	ジエチルホスホノ酢酸エチル	867-13-0	<u>197</u>	123	151		1395 ± 0 (4)	0.007													
428	1-オクタデセン	112-88-9	<u>83</u>	<u>92</u>	111	125	1793 ± 3 (4)	0.009													
431	ε-カラロラクタム	105-60-2	<u>113</u>	85	55		1259 ± 10 (3)	N/A													
477	カルナバツクス	8015-86-9					不溶														
488	クエン酸トリエチル	77-93-0	<u>157</u>	115	203	139	1653 ± 4 (4)	0.005													
514	クエン酸トリブチル	77-94-1	<u>185</u>	259	129	111	2183 ± 3 (4)	0.005													
515	グリコール酸	79-14-1					N/A														
522	グリセリン	56-81-5	<u>61</u>	43	60	57	967 ± 4 (3)	N/A													
529	グルコン酸カルシウム-水和物	299-28-5					不溶														
538	オルトケイ酸トリエチル	78-10-4	<u>193</u>	149	163	179	980 ± 6 (4)	0.01													
560	ケイ皮酸アルチド ⁶⁾	104-55-2	<u>131</u>	103	77		1281 ± 9 (4)	0.007													
570	コハク酸	110-15-6	<u>100</u>	74	55		N/A	N/A													
580	コハク酸二ナトリウム	150-90-3					不溶														
580	無水酢酸	108-24-7					N/A														
605	酢酸2-メトキシ-1-メチルエチル	108-65-6	<u>Z2</u>	43	87	45	N/A	0.01													
607																					

別添 4 食品用器具・容器包装の PL 収載物質の分析情報 (続き)

通し 番号 ¹⁾	化合物名(和名)	CAS No.	GC-MS ²⁾				LC-MS/MS ²⁾						
			検出イオン(m/z)			Retention index ³⁾	測定限界 (ng) ⁴⁾	トリカーブ ⁵⁾		検出イオン(m/z)			測定限界 (ng) ⁴⁾
			120	138	92			64	N/A	N/A	93	65	
610	サリチル酸	69-72-7	120	138	92	64	N/A	N/A	N/A	93	65	75	N/A
612	サリチル酸フェニル	118-55-8	121	93	65		1763 ± 15 (3)	0.0008	+215	121	65	93	N/A
613	サリチル酸4-エチルフェニル	87-18-3	121	135	270		2128 ± 11 (4)	0.06	+271	121	215	57	N/A
614	サリチル酸メチル	119-36-8	120	152	92		1200 ± 6 (4)	0.001	+153	121		93	65
651	1,8-ジテラピシクロ[5.4.0]ウンデカ-7-エン	6674-22-2	151	123	96	137	1441 ± 15 (4)	0.5	+153	96	125	111	69
652	ジテラピシクロ[5.4.0]ウンデカ-7-エン	2873-97-4	112	126	154	58	1243 ± 3 (4)	0.008	+170	99	72	112	58
656	ジテラピシクロ	461-58-5					N/A		+85	68	43		30
658	2-シアノ-3,3-ジフェニルアクリル酸2-エチルヘキシル	6197-30-4	204	232	250	360	2667 ± 7 (4)	0.004	+362	250	232	204	176
660	ペンタシクロ	91-76-9	187	103	144		2039 ± 12 (4)	0.002	+188	104	77	85	146
662	2,5-ジ-4-ベンチルピロキノン	79-74-3	221	250			1968 ± 4 (4)	0.009	-249	219	149	191	30
672	2,2'-イミジエタノール	111-42-2					N/A		+106	88	70	45	1
674	N,N-ジエチルエタノールアミン	100-37-8	86	58	102	117	898 ± 3 (3)	N/A	+118	100	72	74	58
675	ジエチルジチオカルバミド酸亜鉛	14324-55-1					不溶						400
676	ジエチルジグリコール	111-46-6	45	75			964 ± 4 (4)	0.2*	+124	107	45	89	400
680	2-(2-メトキシエトキシ)エタノール	111-77-3	59	45	90		935 ± 2 (4)	0.04	+121	59	89	103	7
692	ジグリセリン	627-82-7					N/A		+167	75	131	119	30
710	N,O-ジステアリルジ酸エタノールアミン	14351-40-7					不溶						N/A
716	2-メチル-2,4-ペンタンジオール	107-41-5	59	85	103		926 ± 4 (4)	0.06	+119	101	57	83	N/A
717	2,2'-ジヒドロキシ-4-オキシペンゾフェノン	131-53-3	244	227	121		2181 ± 21 (4)	0.03	+245	121	151	93	4
723	1,3-ジフェニル-2-チオ尿素	102-08-9					N/A		+229	94	136	77	6
724	2-(4,6-ジフェニル-1,3,5-トリアジン-2-イル)-5-(4-ヘキシル)オキシフェノール	147315-50-2	425	341	313	135	4009 ± 12 (3)	0.01					20
727	2-(ジチオチルミン)エタノール	102-81-8	142	130	100	88	1250 ± 2 (4)	0.05	+174	118	100	57	156
729	2,6-ジ-4-エチルフェニル	4130-42-1	219	191	234	159	1561 ± 3 (4)	0.0004	-233	187	218	202	159
730	ジチオチルジチオカルバミド酸亜鉛	136-23-2					N/A		+472	172	116	57	70
									+473				

別添 4 食品用器具・容器包装の PL 収載物質の分析情報 (続き)

通し 番号 ¹⁾	化合物名 (和名)	CAS No.	GC-MS ²⁾					LC-MS/MS ²⁾					測定限界 (ng) ⁴⁾	
			検出イオン (m/z)					検出イオン (m/z)						
			Retention index ³⁾	測定限界 (ng) ⁴⁾	トリカーサー ⁵⁾	クロダクト	Retention index ³⁾	測定限界 (ng) ⁴⁾	トリカーサー ⁵⁾	クロダクト				
734	2,4-ジヒドロキシフェニール	96-76-4	191	206	163	1511 ± 2 (4)	0.0009	-205	189	149	125		N/A	
								-205	189	151	130	167	N/A	
								-205	189	121	113		N/A	
736	2,6-ジヒドロキシ-4-メチルフェニール	128-37-0	205	220	177	145	1511 ± 4 (4)	0.0006	-219	203	86		N/A	
738	ジクロロビシフェニルエーテルモノメチルエーテル (異性体混合物)	34590-94-8	103	73	59	45	1000 ± 2 (4)	0.04	+149	73	131	59	80	
									+284	71	97	209	N/A	
740	2-クロロ-2-クロロメチルグルタロニトリル	35691-65-7	187	185	106	66	1518 ± 8 (4)	0.4	+284	32	29		N/A	
									+284	18	723		N/A	
745	オレフィン ¹⁾	301-02-0	59	72	126	112	2362 ± 11 (4)	0.05	+282	97	83	265	247	4
750	ポリソルベート 20 ⁶⁾	9005-64-5	N/A					+605	227	133	89		N/A	
			N/A					+1244	227	287	177		N/A	
750	ポリソルベート 80 ⁶⁾	9005-65-6	N/A					+629	283	133	89	239	N/A	
			N/A					+689	309	133	89	177	N/A	
			N/A					+1326	283	177	415		N/A	
			N/A					+562	133	283	89	177	N/A	
			N/A					+703	283	133	89	177	N/A	
			N/A					+1328	311	287	331	177	N/A	
750	ポリオキシエチレン(20)ソルビタート ⁶⁾	9005-70-3	N/A					+826	309	133	195		N/A	
			N/A					+760	309	133	265	277	N/A	
			N/A					+1855	309	441			N/A	
			N/A					+653	311	283	133	177	N/A	
			N/A					+654	311	133	177		N/A	
			N/A					+1861	311	443			N/A	
753	グリセロール三酢酸	102-76-1	103	145	43		1338 ± 8 (4)	0.001	+219	159	117	43	99	2

別添 4 食品用器具・容器包装の PL 収載物質の分析情報 (続き)

通し 番号 ¹⁾	化合物名(和名)	CAS No.	GC-MS ²⁾				LC-MS/MS ²⁾							
			検出イオン(m/z)		Retention index ³⁾	測定限界 (ng) ⁴⁾	フリッカー ⁵⁾	検出イオン(m/z)			測定限界 (ng) ⁴⁾			
			1)	2)				1)	2)	3)				
753	トリチリン	60-01-5	<u>71</u>	201	143	131	1837 ± 5 (4)	0.0007	+303	<u>215</u>	71	43		0.5
761	リノール酸メチル	112-63-0	<u>263</u>	67	81	294	2094 ± 3 (4)	0.0008	+295	<u>263</u>	245	221		300
761	リノレン酸メチル、混合物	301-00-8	<u>79</u>	95	121	222	2098 ± 8 (4)	0.01	+293	<u>109</u>	123	261	243	20
764	ステアリン酸メチル	112-61-8	<u>74</u>	<u>87</u>	143	255	2126 ± 2 (4)	0.001	+299	<u>43</u>	57	103	117	N/A
775	N,N-ジメチルアクリルアミド	2680-03-7	<u>98</u>	55	72	58	943 ± 2 (4)	N/A	+100	<u>55</u>	46	72	58	20
778	2,2ジメチルプロピオニトリル	108-01-0					N/A		+90	<u>72</u>	45	57	70	3
796	チカメチルシクロペンタンキサン	541-02-6	<u>355</u>	<u>267</u>	73		1135 ± 12 (4)	0.0008						
796	オクタメチルシクロトランロキサン	556-67-2	<u>281</u>	265	249	193	984 ± 9 (4)	0.0008						
808	3,5ジメチル-1-ヘキシン-3-オール	107-54-0	<u>69</u>	111	43	84	N/A	0.002	+144	<u>127</u>	109	67		N/A
809	N,N-ジメチルベンジルアミン	103-83-3	<u>135</u>	91	58		1045 ± 5 (4)	0.02	+136	<u>91</u>	65	44		70
853	10%トリオエチルアンモニウムピロキシド溶液	77-98-5					N/A		+130	<u>86</u>	100	58	101	3
920	ステアリン酸コバルト(II)	13586-84-0					不溶							
932	5-アルホイタル酸ジメチルトリウム	3965-55-7					N/A		+273	<u>150</u>	209	214	80	N/A
947	セビン酸ジメチル	109-43-3	<u>185</u>	241	199		2170 ± 3 (4)	0.0007	+315	<u>185</u>	241	139	121	2
948	セビン酸ピス(2,2,6,6-テトラメチル-4-ピペリジン)	52829-07-9					N/A		+481	<u>342</u>	140	123	84	0.3
958	D(-)ソルビトール	50-70-4					不溶		-181	<u>89</u>	101	119	131	N/A
972	シクロヘキサン	110-82-7					N/A							
982	2-(4-チアソリル)ベンゾイミダゾール	148-79-8	<u>201</u>	<u>174</u>	129		2092 ± 28 (4)	0.02	+202	<u>175</u>	131	92	65	2
984	チオシアニ酸チトリウム	540-72-7	N/A				N/A	N/A	-58	<u>26</u>	58			N/A
985	3,3-チオジプロピオン酸	111-17-1	<u>178</u>	132	114		N/A	N/A	+196	<u>161</u>	179	89	143	N/A
988	4,4'-チオピス(2,4-チル-5-メチルフェニル)	96-69-5	358	343	136		2785 ± 6 (3)	0.004	+359	<u>195</u>	247	139	303	N/A
									-357	<u>194</u>	179	163		3
1006	ネトラキス[3-(4-チンシルチオ)プロピオン酸]ベンタエリトリール	29598-76-3					N/A							
1008	ベンタエリトリールネトラキス[3-(3,5-ジメチル-4-ピロキソフェニル)プロピオン酸]	6683-19-8					N/A		+1195	<u>219</u>	563	163	619	0.1
1009	1,1',1'',1'''-(エチレンジニトリロ)ネトラキス(2-プロパノール)	102-60-3	<u>146</u>	160			N/A	N/A	+293	<u>160</u>	142	102	84	2

別添 4 食品用器具・容器包装の PL 収載物質の分析情報 (続き)

通し 番号 ¹⁾	化合物名 (和名)	CAS No.	GC-MS ²⁾				LC-MS/MS ²⁾							
			検出イオン (m/z)				Retention index ³⁾	測定限界 (ng) ⁴⁾	検出イオン (m/z)					
			トリカーサー ⁵⁾		プロダクト				測定限界 (ng) ⁴⁾					
1019	2,4,7,9-テトラオキサフル-5-フェンチン-4,7-ジオール	126-86-3	109	151	43	169	1408 ± 1 (4)	0.001		+244	153	191	135	209
1023	α-テルピネオール	98-55-5	136	93	121	136	1201 ± 8 (4)	0.002	+155	137	81			N/A
1024	ピタミル	59-02-9	430	165	205	121	3143 ± 10 (4)	0.05	+431	165	137	111	97	0.7
1050	トリテトリル酸ベンタエリスリトール	3524-68-3	55	127	81	196	1938 ± 2 (3)	0.004*	+299	227	83	125	281	2
1053	トリテトリル酸ベンタエリスリトール	288-88-0	69	42	70		963 ± 6 (4)	0.04	+70	43	28	42		60
1054	1,2,4,4-トリテトリル	122-20-3	146	158	88	98	1435 ± 10 (3)	0.4	+192	174	98	156	116	2
1056	トリテトリル酸ベンタエリスリトール	112-27-6	89	45	75	58	1223 ± 1 (4)	N/A	+151	89	45	133	107	7
1061	3,6-ジオキサ-1,8-オクタジオール	112-24-3	N/A				N/A							
1064	トリエチレンチトラミン(エチレンチトラミン混合物)	78-08-0	145	135	175	163	951 ± 4 (4)	0.005	+191	145	107	135	163	N/A
1067	トリエチレンチトラミン	603-36-1	198	154	352	275	2289 ± 22 (4)	0.0009	+370	155	197	77		N/A
1080	トリエチレンチトラミン	603-35-0	262	183	108		2180 ± 26 (3)	0.0006	+263	183	152	185		N/A
1081	トリエチレンチトラミン	1709-70-2	N/A				N/A							
1086	2,4,6-トリメチル-3,5-ジメチル-4-ヒドロキシベンジルメチレン	108-67-8	105	120	91		973 ± 6 (4)	0.002	+135	99	81	117	69	2
1089	メチレン	77-99-6	86	57	71	55	1266 ± 8 (4)	0.2	+197	133	165			N/A
1093	1,1,1-トリメチル-2-ヒドロキシエチルアルコール	4420-74-0	164	121	91	123	1195 ± 6 (4)	0.006	+393	121	361	163	197	N/A
1096	3-メチルカトロールトリメチレン	1760-24-3	N/A				N/A							
1098	3-(2-アミノエチル)アミノプロピルトリメチレン	2530-83-8	121	147	91	107	1451 ± 2 (4)	0.0008	+237	205	133	173	163	9
1099	3-ブチルトリメチレン	108-88-3	91	65	51		N/A	N/A	+237	133	107			N/A
1103	トルエン	12001-85-3	N/A				N/A							
1121	ナフテン酸亜鉛 (亜鉛 約8%)	61789-51-3	N/A				不溶							
1122	ナフテン酸コバルト (コバルト 約8%)	1336-93-2	N/A				不溶							
1125	ナフテン酸マンガン (Mn 約6%)	57-13-6	60	44			N/A	N/A	+61	44	29	43		20
1138	尿素													

別添 4 食品用器具・容器包装の PL 収載物質の分析情報 (続き)

通し 番号 ¹⁾	化合物名 (和名)	CAS No.	GC-MS ²⁾					LC-MS/MS ²⁾						
			検出イオン(m/z)		Retention index ³⁾	測定限界 (ng) ⁴⁾	検出イオン(m/z)		測定限界 (ng) ⁴⁾					
			152	151			123	109		1402 ± 9 (4)	0.007	トリカーサー ⁵⁾	137	136
1156	パニリン	121-33-5	152	151	123	109	1402 ± 9 (4)	0.007	+153	93	125	65	110	90
1210	4,4'-ジヒドロキシ-2,2'-ジフェニルプロパン	80-05-7	213	228	119		2191 ± 11 (3)	0.0007	-227	212	133	211	93	200
1216	2,5-ビス(6-tert-ブチル-2-ベンゾキシリル)チオフェン	7128-64-5	415	200	267		3895 ± 26 (4)	0.01						
1224	4-ヒドロキシ安息香酸プロピル	94-13-3	121	138	180	93	1625 ± 1 (3)	0.0004	-179	92	136	137	93	N/A
1225	p-ヒドロキシ安息香酸エチル	120-47-8	121	138	166	93	1521 ± 5 (4)	0.005	-165	92	137	65		20
1226	4-ヒドロキシ安息香酸ブチル	94-26-8	121	138	194	93	1730 ± 3 (3)	0.0008	-193	92	137	136	93	N/A
1227	p-ヒドロキシ安息香酸メチル	99-76-3	121	152	93	65	1454 ± 0 (3)	0.01	-151	92	136	121		N/A
1228	エチロキシ酸	2809-21-4					N/A							
1236	2-ヒドロキシ-4-(オクチルオキシ)ベンゾフェノン	1843-05-6	213	326	137	105	2785 ± 22 (4)	0.01	+327	137	105	215	77	0.5
1237	3,5-ジ-tert-ブチル-4-ヒドロキシ安息香酸2,4-ジ-tert-ブチルフェニル	4221-80-1	233	217	175	190	2894 ± 4 (3)	0.0007	+439	233	383	217	149	0.7
1239	3,5-ビス-tert-ブチル-4-ヒドロキシ安息香酸ヘキサデシル	67845-93-6	459	474	235	250	3303 ± 4 (4)	0.02	+475	251	195	139	57	0.3
1242	3-(3,5-ジ-tert-ブチル-4-ヒドロキシフェニル)プロピオン酸オクタデシル	2082-79-3	531	516	219	147	3615 ± 18 (4)	0.02	+548	149	419	167		N/A
1253	2-ヒドロキシ-4-(2-ヒドロキシエトキシ)2-メチルプロピオフェノン	106797-53-9	165	121	93	181	1915 ± 10 (4)	0.04	+225	179	135	107	77	0.5
1254	2-ヒドロキシ-2-フェニルアセトフェノン	119-53-9	107	105	77		1830 ± 14 (3)	0.01	+213	195	167	165	152	3
1255	2-(5-クロロ-2-ベンゾトリアリル)6-tert-ブチル-プロピル	3886-11-5	300	315	119	272	2571 ± 24 (4)	0.001	+316	260	107	154	57	N/A
1260	ヒドロキシプロピルメチルセルロース	9004-65-3					不溶							
1267	2-(2-H-ベンゾトリアリル-2-(1H)-p-クレゾール	2440-22-4	225	168	154	196	2090 ± 24 (4)	0.002	+226	120	107	183	77	6
1269	2-ヒドロキシ-4-tert-ベンゾフェノン	131-57-7	227	151	77	105	2048 ± 20 (4)	0.009	+229	151	105	77	95	4
1272	1-フェニル-2-ヒドロリン	88-12-0	111	56	82		1105 ± 5 (4)	0.004	+112	69	84	41	56	2
1280	ジソクサリチオン	13463-41-7					不溶							
1286	2-フェニルイソブチル	948-65-2	193	165	89	96	2078 ± 24 (4)	0.005	+194	167	152	116	166	3
1289	2-フェニルフェニル	90-43-7	120	141	115	169	1531 ± 13 (3)	0.0002	-169	115	141	93	65	N/A

別添 4 食品用器具・容器包装の PL 収載物質の分析情報 (続き)

通し 番号 ¹⁾	化合物名 (和名)	CAS No.	GC/MS ²⁾					LC/MS/MS ²⁾						
			検出イオン (m/z)			Retention index ³⁾	測定限界 (ng) ⁴⁾	検出イオン (m/z)			測定限界 (ng) ⁴⁾			
			グリカーサ ⁵⁾	プロダクト	グリカーサ ⁵⁾			プロダクト						
1298	フェリチジン	92-84-2	199	167	154	139	2087 ± 26 (3)	0.0003	+199 (200)	167 (166)	154 (155)	139 (140)	127 (126)	30
1304	トコチロール	75-65-0	N/A					N/A						
1306	2-タタノ	78-93-3	N/A					N/A						
1310	タタル酸ジイソデシル	26761-40-0	307	149	167	141	N/A	0.1	+447	149	141	71	289	1
1312	タタル酸ジエチル	84-66-2	149	177	105		1595 ± 3 (4)	0.0004	+223	149	177	121	93	20
1313	タタル酸ジ-n-オクタチル	117-84-0	229	149	167		2735 ± 6 (4)	0.002	+391	149	261	121	93	6
1314	タタル酸ジシクロヘキシル	84-61-7	149	167	249		2544 ± 14 (3)	0.0007	+331	149	249	167	231	0.03
1316	タタル酸ジブチル	84-74-2	149	223	205		1964 ± 5 (4)	0.0004	+279	149	205	121	93	4
1317	タタル酸ジヘキシル	84-75-3	149	251	233		2348 ± 5 (4)	0.0005	+335	149	233	121	93	3
1318	タタル酸ジヘプタチル	3648-21-3	149	265	247	104	2337 ± 10 (4)	0.007	+363	149	247	121	57	2
1320	タタル酸ドデシル(2-エチルヘキシル)	117-81-7	149	167	279		2542 ± 3 (4)	0.006	+391	149	167	279	113	20
1322	タタル酸ペンジルブチル	85-66-7	149	91	206		2363 ± 9 (4)	0.001	+313	91	149	205	239	6
1323	ブチルブタリルブチルグリコラート	85-70-1	149	263	133	207	2313 ± 6 (4)	0.001	+337	149	263	205	207	2
1329	1,4-ブタンジオール	110-63-4	71	57	42	44	947 ± 4 (4)	0.07	+91	71	55	43		200
1334	4,4'-ブチリデンビス(2-ブチル-5-メチルフェノール)	85-60-9	339	148	177	382	2695 ± 7 (3)	0.01	+384	219	177	163		0.3
1338	4-ブチルピロカチコール	98-29-3	151	166	123		1509 ± 1 (4)	0.08	-165	149	133	121	108	N/A
1341	2(3)-ブチル-4-メキソフェノール	25013-16-5	165	180	137	150	1488 ± 3 (4)	0.0008	-179	164				N/A
1343	トコチロヒドロキノン	1948-33-0	123	151	166	77	1549 ± 6 (4)	0.009	-165	108	149	135	121	N/A
1356	2-ブトキシエタノール	111-76-2	57	87	45	75	905 ± 1 (4)	0.05	+119	53	57	45		N/A
1357	ブチル酸	110-17-8	98	45			N/A	N/A	-115	71				70
1359	ブチル酸ブチル	105-75-9	155	117	173		1583 ± 1 (4)	0.001	+229	117	99	145	89	N/A
1360	ブチル酸ビス(2-エチルヘキシル)	141-02-6	112	100	211	70	2222 ± 5 (4)	0.007	+358	229	71	113	99	N/A
1366	ブチルブチルグリコラート	57-55-6	N/A					N/A						
1368	1-メキソ-2-ブチルフェノール	107-98-2	N/A					N/A						

別添 4 食品用器具・容器包装の PL 収載物質の分析情報 (続き)

通し 番号 ¹⁾	化合物名(和名)	CAS No.	GC-MS ²⁾				LC-MS/MS ²⁾								
			検出イオン(m/z)		Retention index ³⁾	測定限界 (ng) ⁴⁾	リカーサー ⁵⁾	検出イオン(m/z)			測定限界 (ng) ⁴⁾				
								プロダクト							
1373	2-フロモ-2-ニトロ-1,3-ジオロベンジオール	52-51-7	132	169	107	123	1259 ± 8 (4)	0.6		-246	170	216	127		N/A
										-244	168	214	125		N/A
										-198	79	73			N/A
1376	1-ヘキサデセン	629-73-2	83	97	111	125	1591 ± 6 (4)	0.0006							N/A
1379	1,1,1,3,3,3-ヘキサメチルジシロザン	999-97-3	146	130	100		N/A	N/A							N/A
1382	ヘキサメチレンテトラミン	100-97-0	140	112	85		1240 ± 14 (4)	0.02		+141	112	85	42	98	3
1392	ベンジルトルコール	100-51-6	108	79	77		1038 ± 2 (4)	0.01		+91	65	73			N/A
1393	p-ベンジルオキシフェノール	103-16-2	91	200	65		1892 ± 10 (4)	0.002							N/A
1396	ベンズアルデヒド	100-52-7	106	105	72		966 ± 6 (4)	0.04		+107	79	72			N/A
1397	1,2-ベンジジチフェニル-3(2H)-オン	2634-33-5	151	96	123	108	1553 ± 15 (4)	0.1		+152	109	134	105	77	20
1400	2-ベンジチフェニルチオ酢酸	6295-57-4								+226	180	136	167	208	3
1401	1H-ベンゾトリフェニル	95-14-7	119	91	64		1470 ± 4 (3)	0.006		+120	65	92			6
1402	2-(2H-ベンゾトリフェニル-2-イル)4(1,1,3,3-チオチオメチル)フェノール	3147-75-9	252	323	105	224	2598 ± 27 (4)	0.002		+324	212	57	92	134	1
1403	2-(2H-ベンゾトリフェニル-2-イル)4,6-ビス(1-メチル-1-フェニルエチル)フェノール	70321-86-7	432	447	342	356	3629 ± 12 (4)	0.01		+448	370	119	292	91	0.1
1408	ベンタエリトール	115-77-5								+137	119	71	101		N/A
1429	ポリエチレン	9002-88-4													
1437	アルコール	585-88-6													
1446	ラレイン酸ジメチル	999-21-3	99	139	82	54	1319 ± 2 (4)	0.03		+197	139	41	81	90	2
1451	マロン酸	141-82-2								-103	59	41			N/A
1455	蜜ろう, 白色, ヘリット	8012-89-3													
1456	ピロキソント酸無水物	89-32-7	174	102	74		1773 ± 1 (3)	0.2		+283	251	207	221		N/A
1459	無水マレイン酸	108-31-6	54	98	44		N/A	500		+99	71	81	45	53	500
1465	メタクリル酸グリンジル	106-91-2	69	41	56		1067 ± 1 (4)	0.007		+143	69	87	41	125	300
1471	ニメタクリル酸1,3-ジオクソール	1189-08-8	69	141	87	95	1434 ± 2 (4)	0.001		+227	141	87	55	69	3
1474	メタクリル酸メチル, モノマ	80-62-6								+101	73	69			N/A

別添 4 食品用器具・容器包装の PL 収載物質の分析情報 (続き)

通し 番号 ^{*1}	化合物名 (和名)	CAS No.	GC-MS ^{*2}				LC-MS/MS ^{*2}							
			検出イオン (m/z)			Retention index ^{*3}	測定限界 (ng) ^{*4}	検出イオン (m/z)		測定限界 (ng) ^{*4}				
			トリカーサー ^{*5}	プロダクト	プロダクト			プロダクト						
1476	メタンサルホニル酸ナトリウム	2386-57-4	不溶				80	64		N/A				
1478	2-(メチルアミノ)エタノール	109-83-1	N/A				58	45	56	4				
1479	2-メチル-4-イソチアゾリノン-3-オン, 50% aqueous solution	2682-20-4	115	87	58	57	1174 ± 10 (3)	0.01	+116	101	71	85	58	200
1480	4-メチル-2-ペンタノン	108-10-1	N/A				52			N/A				
1481	2-メチル-4-ニグゾール	693-98-1	82	41			1005 ± 1 (3)	0.07	+83	42	56	68		20
1490	0.5w/v% メチルセルロース400溶液	9004-67-5	N/A				N/A							
1492	メチルヒドロキノン	95-71-6	124	95	107		1342 ± 1 (3)	0.001	-123	111				N/A
1499	2-メチルベンゼンサルホニル酸ナトリウム	88-19-7	90	106	171	137	1636 ± 7 (3)	0.0006	+172	91	155	65		200
1500	p-トルエンサルホニル酸ナトリウム	70-55-3	171	155	91	107	1674 ± 9 (4)	0.01	+172	155	91	65		2
1505	ジチオシアン酸メチルン	6317-18-6	72	130	45	58	1273 ± 4 (4)	0.03		N/A				
1506	2,2'-メチレンジス(6-ヒドロキシ-4-エチルフェニール)	88-24-4	175	191	368	175	2517 ± 7 (4)	0.007	+386	191	257	135	313	0.2
1508	4,4'-メチレンジス(2,6-ジヒドロキシフェニール)	118-82-1	409	424	367	219	2653 ± 7 (4)	0.0009	+442	219	163	203	147	0.3
1514	2,2'-メチレンジス[6-(1-メチルシクロヘキシル)4-メチルフェニール]	77-62-3	420	217	324	204	3286 ± 17 (4)	0.02	+421	217	121	229		0.01
1516	2,2'-メチレンジス(6-ヒドロキシ-4-メチルフェニール)	119-47-1	177	161	340	149	N/A	N/A	+358	177	285	229	121	N/A
1518	p-ホキシフェニール	150-76-5	109	124	81	53	1215 ± 3 (4)	0.001		N/A				
1521	メラミン	108-78-1	不溶				不溶							
1524	2-メルカプトベンゾチアゾール重鉛	155-04-4	不溶				不溶							
1550	ヨードアセトナトリウム	144-48-9	185	127	58	142	1123 ± 7 (3)	0.1	+186	59	43			2000
1611	リン酸2-エチルヘキシルジエニル	1241-94-7	251	170	94	362	2431 ± 11 (4)	0.003	+363	251	77	215	152	1
1628	リン酸トリエチル	78-40-0	99	155	127	109	1119 ± 4 (4)	1	+183	99	155	81	127	1
1629	トリス(2-エチルヘキシル)ホスファート	78-42-2	99	133	211	71	2458 ± 14 (4)	0.0008	+435	99	113	211	323	0.6
1633	リン酸トリドリル	1330-78-5	368	243	165	261	2674 ± 20 (3)	0.003	+369	91	165	243	196	0.7
1635	リン酸トリブチル	126-73-8	99	155	211	125	1641 ± 1 (4)	0.0007	+267	99	155	211	81	1
1636	リン酸トリスチル	512-56-1	110	140	79	95	930 ± 2 (4)	0.002	+141	109	79	95		4

別添 4 食品用器具・容器包装の PL 収載物質の分析情報 (続き)

通し 番号 ^{*1}	化合物名 (和名)	CAS No.	GC-MS ^{*2}			LC-MS/MS ^{*2}					
			検出イオン (m/z)	Retention index ^{*3}	測定限界 (ng) ^{*4}	検出イオン (m/z)				測定限界 (ng) ^{*4}	
						フリッカーサー ^{*5}	106	309	88		70
無し	N,N-ジエタニールオレイン酸アミド	93-83-4	N/A	N/A	N/A	+370	106	309	88	70	2
無し	コハク酸ジヒドРАЗド	4146-43-4	不溶		N/A						
無し	アクリル酸2-イソブチルエチル	13641-96-8	N/A		N/A						
無し	ジクロロメタン	75-09-2	N/A		N/A						

*1: 令和4年3月時点での通し番号

*2: 下線が定量イオン、斜体は検出されない可能性があるイオンを示した。

*3: 平均値 ± SD (データ数)

*4: 測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3-5-メーカーの機種で求めた値の中で最も高い値を示した。

*5: +Oはポジティブモード、-Oはネガティブモードでの結果を示している。また、*酸アミンを移動相に使用する場合、ポジティブモードのフリッカーサーイオンは [M+NH4]⁺ で検出される場合もある。

*6: ポリマーのためフリッカーサーイオンは他にも複数検出される。プロダクトイオンは共通のものが多い。

研究成果の刊行に関する一覧表

雑 誌

発表者氏名	論文タイトル名	発表誌名	巻号	ページ	出版年
尾崎麻子、六鹿元雄、 岸 映里、阿部智之、 阿部 裕、安藤景子、 石原絹代、牛山温子、 内田晋作、大坂郁恵、 大野浩之、風間貴充、 加藤千佳、小林 尚、 佐藤 環、柴田 博、 関戸晴子、高島秀夫、 田中 葵、外岡大幸、 花澤耕太郎、山口未来、 山田悟志、吉川光英、 渡辺一成、佐藤恭子	合成樹脂製の器具・容器包装にお ける溶出試験の精度の検証	食品衛生学 雑誌	63	51-61	2022
阿部 裕、阿部智之、 大野浩之、大橋公泰、 尾崎麻子、風間貴充、 片岡洋平、鈴木公美、 永井慎一郎、花澤耕太郎、 早川雅人、平林直之、 山口未来、渡辺一成、 六鹿元雄、佐藤恭子	台所用洗浄剤中のメタノール改良 分析法の室間共同実験	食品衛生学 雑誌	63	97-103	2022

食品用器具・容器包装の PL 収載物質*の 化合物基礎情報及び分析情報 データベース

*令和 4 年 3 月時点。候補物質も含む

<免責事項>

当データベースの情報の正確性について

当データベースの情報において、可能な限り正確な情報を掲載するよう努めています。しかし、誤った情報があったり、情報が古くなったりすることがあります。必ずしも正確性を保証するものではありません。なお、情報は策定日または改訂日時点のものです。

損害等の責任について

当データベースに掲載された内容によって生じた損害等の一切の責任を負いかねます。

当データベースで掲載している画像の著作権について

当サイトで掲載している画像の著作権は、各権利所有者に帰属します。無断転載を禁止します。

令和 4 年 3 月 31 日 策定

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-1	CAS登録番号	78-40-0	構造 
組成式	C6H15O4P	分子量	182	
物質名	和名 りん酸トリエチル 英名 Triethyl Phosphate			

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1628	0.5	—	0.05	—	—	—	0.05	

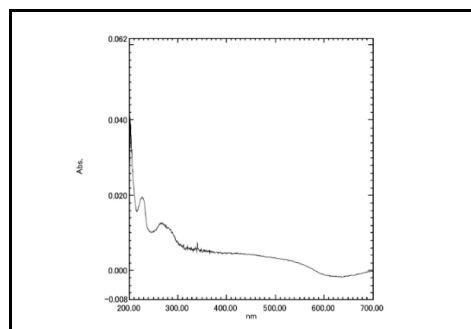
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	99	155	127	109	0.003
RI	特記情報				
1119 ± 4 (4)					

○紫外可視吸収スペクトル



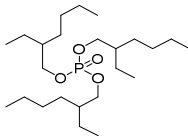
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	5	183	99	155	81	127	1.1	0	N/A					N/A
B														
C														
特記 情報														

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-2	CAS登録番号	78-42-2	構造 
組成式	C24H51O4P	分子量	435	
物質名	和名	トリス(2-エチルヘキシル)ホスファート		
	英名	Tris(2-ethylhexyl) phosphate		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1629	0.5	—	—	—	—	—	—	

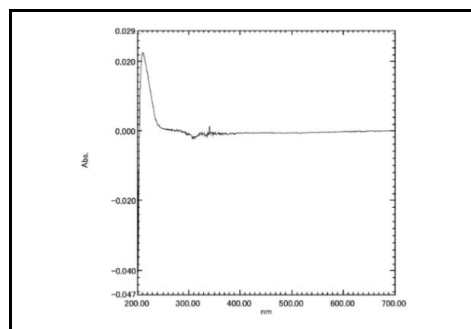
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	99	133	211	71	0.0008
RI	特記情報				
2458 ± 14 (4)					

○紫外可視吸収スペクトル



○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	5	435		99	113	211	323	0	N/A					N/A
B														
C														
特記 情報														

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-3	CAS登録番号	78-93-3	構造 
組成式	C4H8O	分子量	72	
物質名	和名 2-ブタノン 英名 2-Butanone			

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1306	0.001	—	5	0.01	0.001	0.001	0.001	

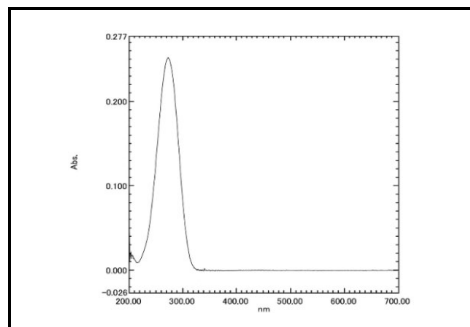
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
0	N/A				N/A
RI	特記情報				
N/A	分析条件が適していない。				

○紫外可視吸収スペクトル



○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	0	N/A					N/A	0	N/A					N/A
B														
C														
特記 情報	対象化合物のイオンが検出されない。													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-4	CAS登録番号	79-14-1	構造 <chem>O=C(O)CO</chem>
組成式	C2H4O3	分子量	76	
物質名	和名	グリコール酸		
	英名	Glycolic Acid		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
522	0.5	—	—	—	—	—	—	

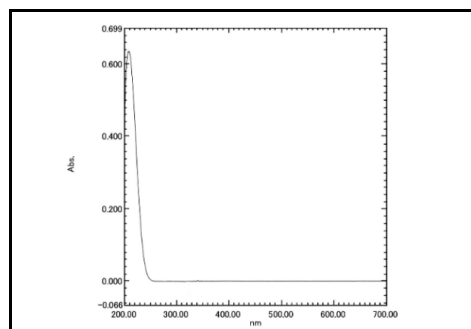
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
0	N/A				N/A
RI	特記情報				
N/A	分析条件が適していない。				

○紫外可視吸収スペクトル



○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン			測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン			測定 限界 (ng)		
			定量	定性					定量	定性				
A	0	N/A				N/A	1	75	47	45			N/A	
B														
C														
特記 情報	対象化合物のイオンが検出されない。						対象化合物のイオンが検出されにくい。							

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-5	CAS登録番号	79-74-3	構造 
組成式	C16H26O2	分子量	250	
物質名	和名 2,5-ジ- <i>t</i> -ペンチルヒドロキノン	英名 2,5-Di- <i>t</i> -pentylhydroquinone		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
662	1	0.2	1	2	0.1	—	—	

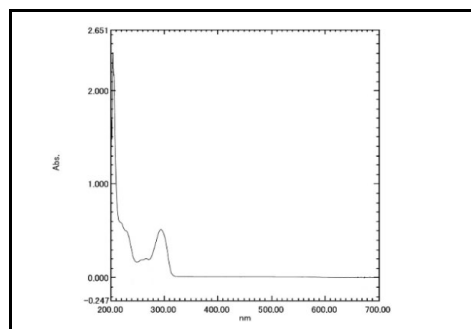
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン	測定限界 (ng)
4	221	250	0.009
RI	特記情報		
1968 ± 4 (4)	分解物と推定されるピークも検出される場合がある。		

○紫外可視吸収スペクトル



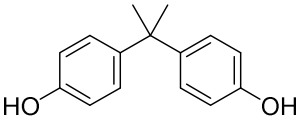
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	0	N/A					N/A	3	249*	219	149	191		27
B														
C														
特記情報	対象化合物のイオンが検出されにくい。							*ギ酸付加体 ([M+COO] ⁻ , M+45=295) の場合もある。						

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-6	CAS登録番号	80-05-7	構造 
組成式	C15H16O2	分子量	228	
物質名	和名 4,4'-ジヒドロキシ-2,2'-ジフェニルプロパン	英名 4,4'-dihydroxy-2,2'-diphenylpropane		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1210	0.003	—	0.003	0.3	0.003	0.003	0.003	

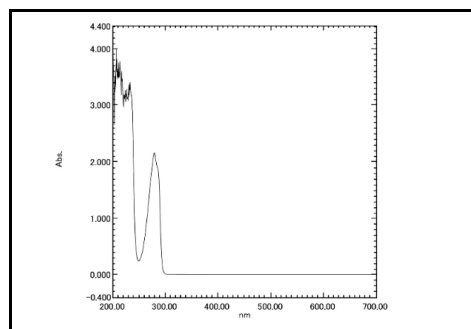
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
3	213	228	119		0.00067
RI	特記情報				
2191 ± 11 (3)					

○紫外可視吸収スペクトル



○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	1	227	211	133	212	93	N/A	3	227	212	133	211	93	111
B														
C														
特記情報	対象化合物のイオンが検出されにくい。													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-7	CAS登録番号	80-46-6	構造 
組成式	C11H16O	分子量	164	
物質名	和名	4-t-アミルフェノール		
	英名	4-amylphenol		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
145	—	—	—	—	0.005	—	—	

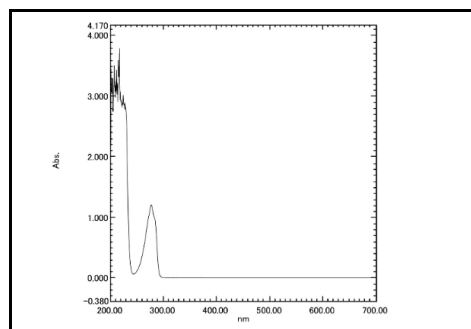
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
2	135	107	164		N/A
RI	特記情報				
1401 ± 3 (3)					

○紫外可視吸収スペクトル



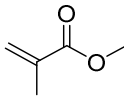
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	1	165	137	109			N/A	2	163*	133	93			N/A
B														
C														
特記情報	対象化合物のイオンが検出されにくい。							*ギ酸付加体 ([M+COO]-, M+45) の場合もある						

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-8	CAS登録番号	80-62-6	構造 
組成式	C5H8O2	分子量	100	
物質名	和名	メタクリル酸メチル, モノマー		
	英名	Methyl Methacrylate, Monomer		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1474	5	5	50	0.02	0.02	0.02	0.02	

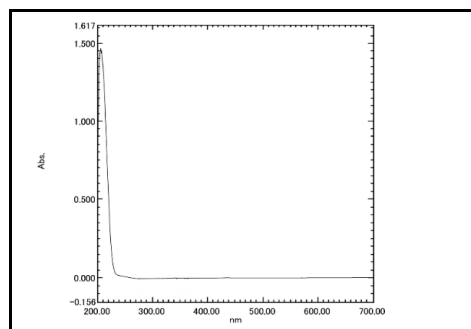
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
0	N/A				N/A
RI	特記情報				
N/A	分析条件が適していない。				

○紫外可視吸収スペクトル



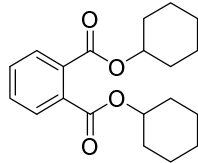
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	1	101	73	69			N/A	0	N/A					N/A
B														
C														
特記 情報	対象化合物のイオンが検出されにくい							対象化合物のイオンが検出されない。						

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-9	CAS登録番号	84-61-7	構造 
組成式	C20H26O4	分子量	330	
物質名	和名 フタル酸ジシクロヘキシル 英名 Dicyclohexyl phthalate			

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1314	50	—	50	20	—	—	—	

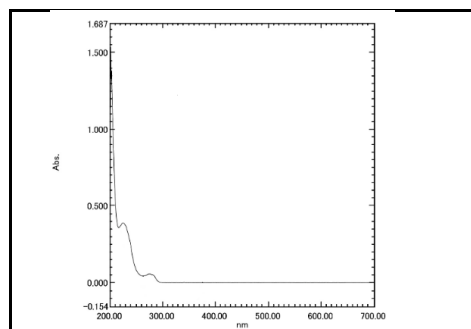
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
3	149*	167*	249		0.0007
RI	特記情報				
2544 ± 14 (3)	*どちらでも測定限界は同程度となる。				

○紫外可視吸収スペクトル



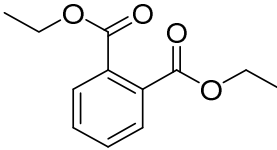
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	5	331	149	249	167	231	0.03	0	N/A					N/A
B														
C														
特記 情報														

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-10	CAS登録番号	84-66-2	構造	
組成式	C12H14O4	分子量	222		
物質名	和名	フタル酸ジエチル			
	英名	Diethyl Phthalate			

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1312	1	—	1	30	—	—	—	

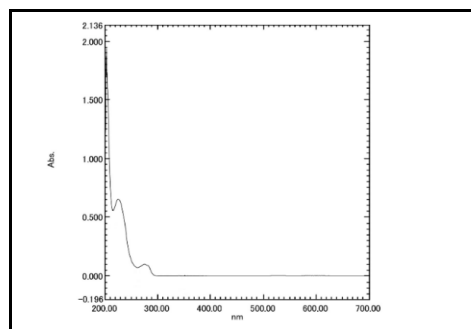
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	149	177	105		0.0004
RI	特記情報				
1595 ± 3 (4)					

○紫外可視吸収スペクトル



○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	5	223	149*	177*	121	93	22	0	N/A					N/A
B														
C														
特記 情報	*逆の場合もある。													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-11	CAS登録番号	84-74-2	構造 
組成式	C16H22O4	分子量	278	
物質名	和名	フタル酸ジブチル		
	英名	Dibutyl Phthalate		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1316	16	10	30	30	0.02	0.02	—	生の肉に接触する部分に使用してはならない。

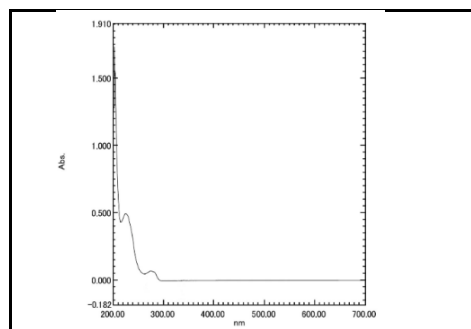
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	149	223	205		0.0004
RI	特記情報				
1964 ± 5 (4)					

○紫外可視吸収スペクトル



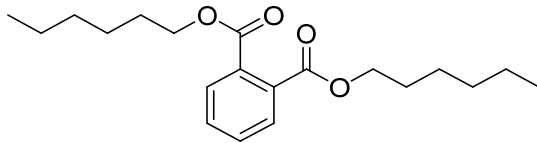
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	5	279	149	205	<u>121</u>	<u>93</u>	4	0	N/A					N/A
B														
C														
特記情報	下線：条件によっては検出されない場合もある													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-12	CAS登録番号	84-75-3	構造 
組成式	C20H30O4	分子量	334	
物質名	和名	フタル酸ジヘキシル		
	英名	Phthalic Acid Diethylhexyl Ester		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1317	—	—	—	30	—	—	—	

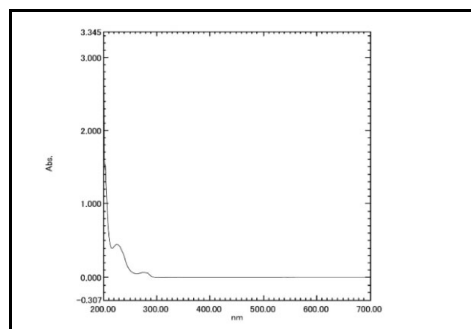
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	149	251	233		0.0005
RI	特記情報				
2348 ± 5 (4)					

○紫外可視吸収スペクトル



○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	5	335	149	233	<u>121</u>	<u>93</u>	3	0	N/A					N/A
B														
C														
特記 情報	下線：条件によっては検出されない場合もある													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-13	CAS登録番号	85-60-9	構造
組成式	C26H38O2	分子量	383	
物質名	和名	4,4'-ブチリデンビス(2-t-ブチル-5-メチルフェノール)		
	英名	4,4'-butylidenebis(2-t-butyl-5-methylphenol)		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1334	0.6	1	1	2	0.3	0.5	0.3	

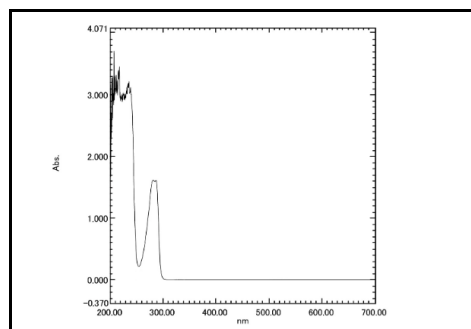
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
3	339	148	177	382	0.01
RI	特記情報				
2695 ± 7 (3)					

○紫外可視吸収スペクトル



○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	3	384*	219	177	163	0.3	3	381	163	338	217	5		
B														
C														
特記情報	*アンモニア付加体 (M+17) の場合もある。							*ギ酸付加体 ([M+COO-], M+45) の場合もある						

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-14	CAS登録番号	85-68-7	構造 
組成式	C19H20O4	分子量	312	
物質名	和名	フタル酸ベンジルブチル		
	英名	Benzyl Butyl Phthalate		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1322	6	6	6	33	0.1	0.1	0.1	

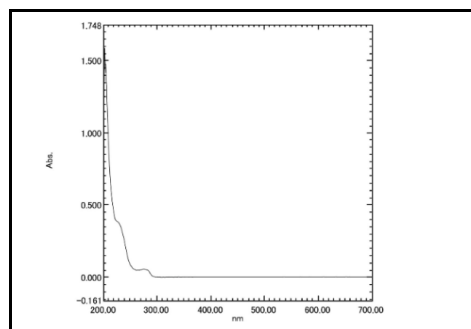
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	149	91	206		0.001
RI	特記情報				
2363 ± 9 (4)					

○紫外可視吸収スペクトル



○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	5	313	91	149	205	239	6	0	N/A					N/A
B														
C														
特記 情報														

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-15	CAS登録番号	85-70-1	構造	
組成式	C18H24O6	分子量	336		
物質名	和名 ブチルフタリルブチルグリコラート	英名 Butyl Phthalyl Butyl Glycolate			

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1323	5	—	—	30	—	—	—	

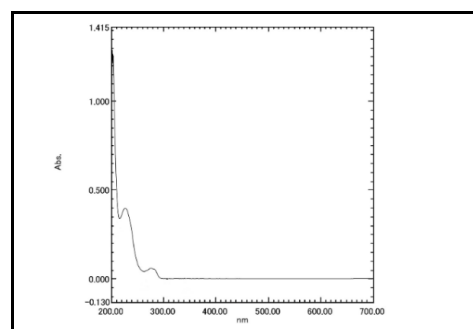
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	149	263	133	207	0.001
RI	特記情報				
2313 ± 6 (4)					

○紫外可視吸収スペクトル



○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	5	337*	149	263	205	207	2	0	N/A					N/A
B														
C														
特記情報	*アンモニア付加体 (M+17) の場合もある。													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-16	CAS登録番号	87-18-3	構造	
組成式	C17H18O3	分子量	270		
物質名	和名	サリチル酸4-t-ブチルフェニル			
	英名	4-t-Butylphenyl Salicylate			

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
613	1	1	1	30	1	1	1	

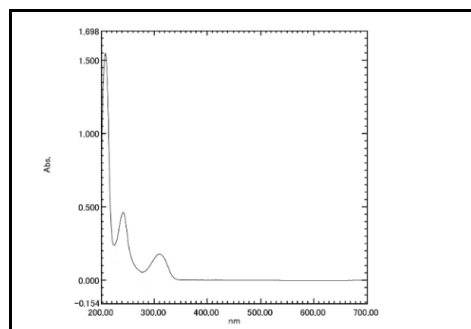
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	121	135	270		0.06*
RI	特記情報				
2128 ± 11 (4)	分解物のピークも確認される場合がある。 *分解物が検出される場合があるため参考値。				

○紫外可視吸収スペクトル



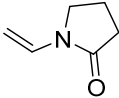
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	2	271	121	215	57		'N/A	0	'N/A					'N/A
B														
C														
特記 情報	対象化合物のイオンが検出されにくい。													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-17	CAS登録番号	88-12-0	構造 
組成式	C6H9NO	分子量	111	
物質名	和名	1-ビニル-2-ピロリドン		
	英名	1-Vinyl-2-pyrrolidone		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1272	—	—	0.3	—	—	—	—	

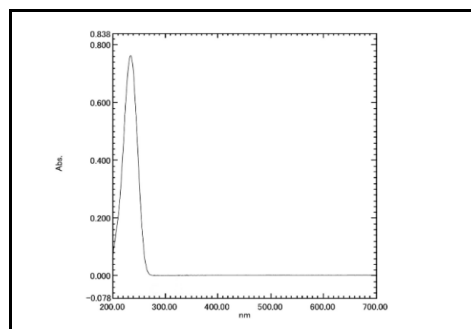
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	111	56	82		0.004
RI		特記情報			
1105 ± 5 (4)					

○紫外可視吸収スペクトル



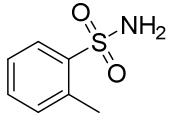
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	5	112	69	84	41	56	2	0	N/A					N/A
B														
C														
特記 情報														

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-18	CAS登録番号	88-19-7	構造 
組成式	C7H9NO2S	分子量	171	
物質名	和名	2-メチルベンゼンスルホン酸アミド		
	英名	2-methylbenzenesulfonamide		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1499	0.5	0.5	0.5	—	—	—	—	

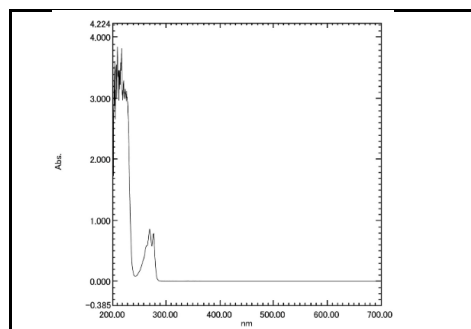
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
3	90	106	171	137	0.0006
RI	特記情報				
1636 ± 7 (3)					

○紫外可視吸収スペクトル



○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	5	172*	91	<u>155</u>	<u>65</u>		150	4	170	79	64	106	62	48
B														
C														
特記情報	*アンモニア付加体 (M+17) の場合もある。 下線：条件によっては検出されない場合もある。													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-19	CAS登録番号	88-24-4	構造
組成式	C25H36O2	分子量	369	
物質名	和名 2,2'-メチレンビス(6-tert-ブチル-4-エチルフェノール)	英名 2,2'-Methylenebis(6-tert-butyl-4-ethylphenol)		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1506	1	1	1	2	1	1	—	

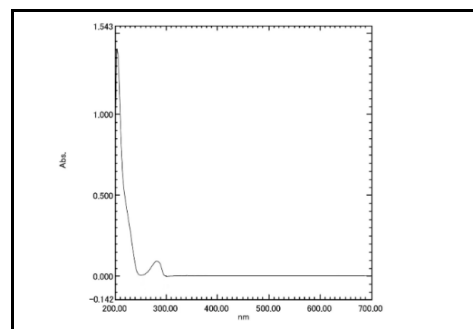
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	175	191*	368	175	0.007
RI	特記情報				
2517±7 (4)	m/z 191 はベースラインの影響あり。				

○紫外可視吸収スペクトル



○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	4	386*	191	257	135	313	0.2	2	367	177	162			N/A
B														
C														
特記情報	*アンモニア付加体 (M+17)。													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-20	CAS登録番号	88-68-6	構造 
組成式	C7H8N2O	分子量	136	
物質名	和名	o-アミノベンズアミド		
	英名	o-Aminobenzamide		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
124	—	—	—	—	—	—	0.05	

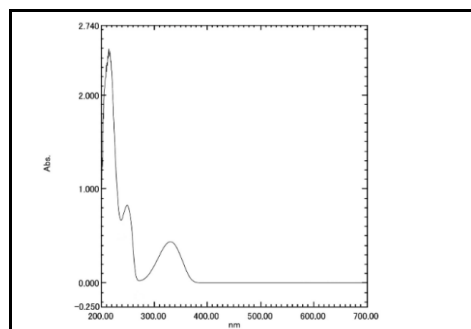
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	119	136	92	65	0.03
RI	特記情報				
1543 ± 8 (4)					

○紫外可視吸収スペクトル



○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	5	137	120	92	65		9	0	N/A					N/A
B														
C														
特記 情報														

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-21	CAS登録番号	89-32-7	構造 
組成式	C10H2O6	分子量	218	
物質名	和名 ピロメリット酸無水物 英名 Pyromellitic Dianhydride			

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1456	1	1	1	-	-	-	2	

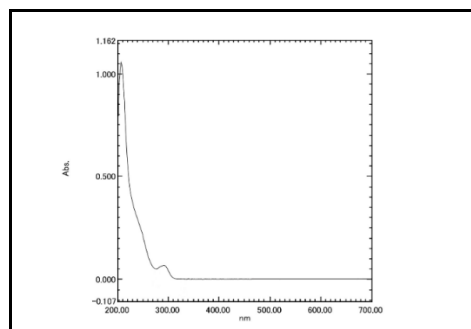
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	174	102	74		0.2
RI	特記情報				
1773 ± 1 (3)					

○紫外可視吸収スペクトル



○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	1	283	251	207	221		N/A	0	N/A					N/A
B														
C														
特記 情報	対象化合物のイオンが検出されにくい。													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-22	CAS登録番号	90-43-7	構造 
組成式	C12H10O	分子量	170	
物質名	和名	2-フェニルフェノール		
	英名	2-phenylphenol		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1289	2	2	2	2	2	2	2	

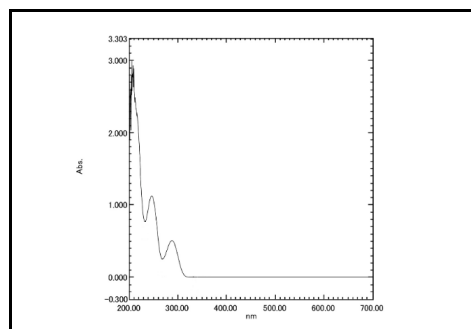
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
3	170	141	115	169	0.0002
RI	特記情報				
1531 ± 13 (3)					

○紫外可視吸収スペクトル



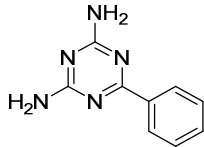
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	0	N/A					N/A	3	169	115	141	93	65	N/A
B														
C														
特記情報	対象化合物のイオンが検出されない。													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-23	CAS登録番号	91-76-9	構造 
組成式	C9H9N5	分子量	187	
物質名	和名	ベンゾグアナミン		
	英名	Benzoguanamine		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
660	35	—	0.2	—	—	—	—	

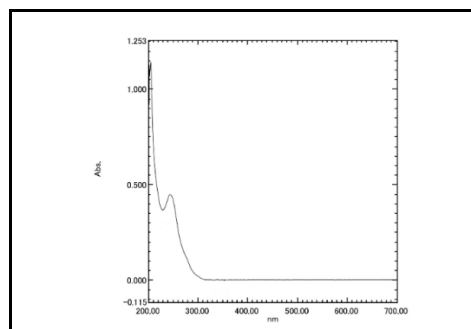
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	187	103	144		0.002
RI	特記情報				
2039 ± 12 (4)					

○紫外可視吸収スペクトル



○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	5	188	104	77	85	<u>146</u>	4	0	N/A					N/A
B														
C														
特記 情報	下線：条件によっては検出されない場合もある													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-24	CAS登録番号	92-84-2	構造 
組成式	C12H9NS	分子量	199	
物質名	和名 フェノチアジン	英名 phenothiazine		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1298	4	—	0.12	2	—	—	—	

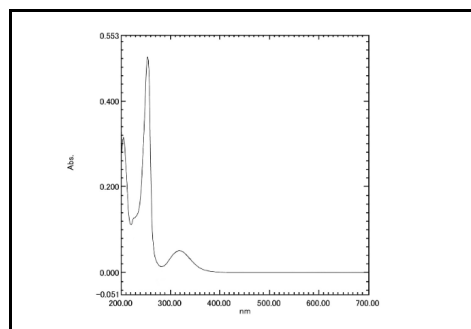
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
3	199	167	154	139	0.0003
RI	特記情報				
2087 ± 26 (3)					

○紫外可視吸収スペクトル



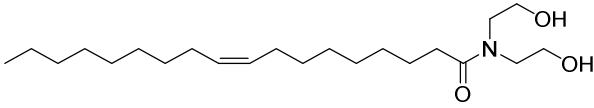
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	5	199 (200)	167 (166)	154 (155)	139 (140)	127 (126)	30	0	N/A					N/A
B														
C														
特記 情報	()													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-25	CAS登録番号	93-83-4	構造  Double bond geometry as shown.
組成式	C22H43NO3	分子量	370	
物質名	和名 N,N-ジエタノールオレイン酸アミド	英名 N,N-Diethanololeamide		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
無し								

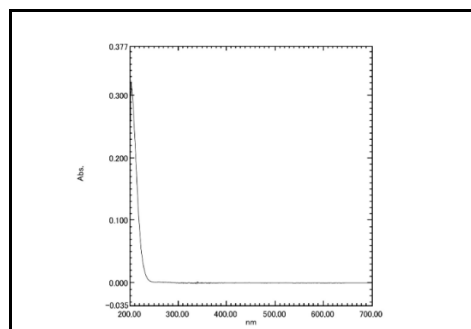
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
0	N/A				N/A
RI	特記情報				
N/A	分析条件が適していない。				

○紫外可視吸収スペクトル



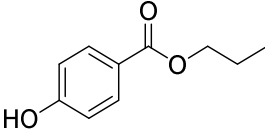
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	5	370	106	309	88	70	2	1	368	281	263			N/A
B														
C														
特記情報														

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-26	CAS登録番号	94-13-3	構造 
組成式	C10H12O3	分子量	180	
物質名	和名	4-ヒドロキシ安息香酸プロピル		
	英名	Propyl p-Hydroxybenzoate		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1224	1	1	1	0.1	0.1	0.1	0.1	600mg/m ² 以下で塗布することができる。

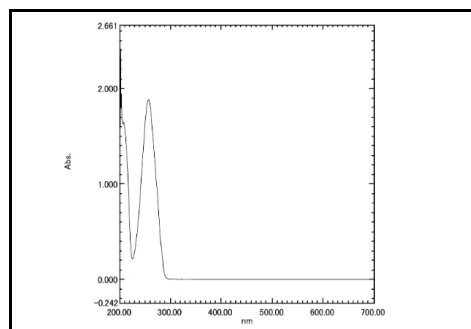
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
3	121	138	180	93	0.0004
RI		特記情報			
1625 ± 1 (3)					

○紫外可視吸収スペクトル



○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	2	181	139	121	95	77	N/A	4	179	92	136	137	93	N/A
B														
C														
特記情報														

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-27	CAS登録番号	94-26-8	構造 
組成式	C11H14O3	分子量	194	
物質名	和名	4-ヒドロキシ安息香酸ブチル		
	英名	Butyl p-Hydroxybenzoate		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1226	0.002	0.002	0.3	0.002	0.002	0.002	0.002	600mg/m ² 以下で塗布することができる。

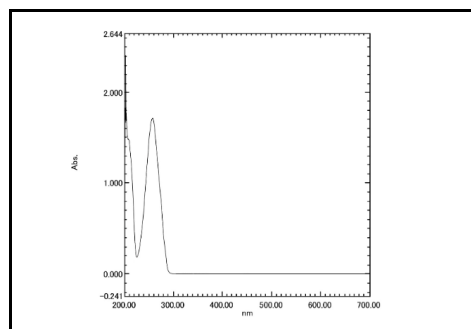
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
3	121	138	194	93	0.00076
RI	特記情報				
1730 ± 3 (3)					

○紫外可視吸収スペクトル



○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	3	195	139	95	121	77	N/A	3	193	92	137	136	93	N/A
B														
C														
特記情報														

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-28	CAS登録番号	95-14-7	構造 
組成式	C6H5N3	分子量	119	
物質名	和名	1H-ベンゾトリアゾール		
	英名	1H-Benzotriazole		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1401	5	0.001	0.2	0.001	0.001	0.001	0.001	

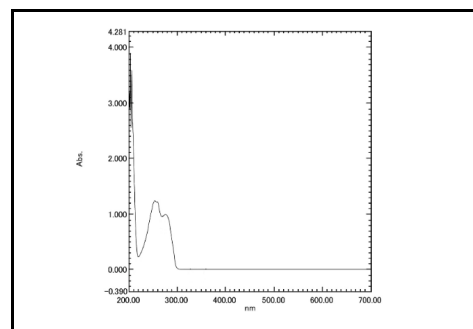
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
3	119	91	64		0.006
RI	特記情報				
1470 ± 4 (3)					

○紫外可視吸収スペクトル



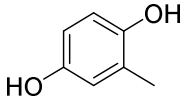
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	5	120	65	92			6	0	N/A					N/A
B														
C														
特記情報														

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-29	CAS登録番号	95-71-6	構造 
組成式	C7H8O2	分子量	124	
物質名	和名 メチルヒドロキノン	英名 Methylhydroquinone		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1492	1	0.01	0.01	0.01	—	—	—	

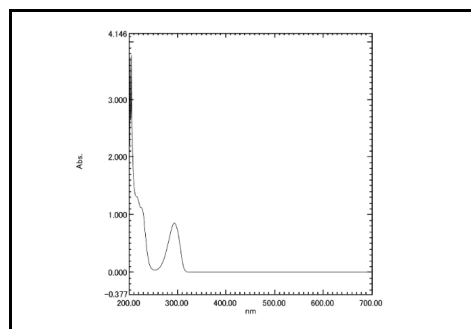
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
3	124	95	107		0.001
RI	特記情報				
1342 ± 1 (3)	分解物と推定されるピークも検出される場合がある。				

○紫外可視吸収スペクトル



○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン			測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン			測定限界 (ng)		
			定量	定性					定量	定性				
A	0	N/A				N/A	2	123	111				N/A	
B														
C														
特記情報	対象化合物のイオンが検出されない。							対象化合物のイオンが検出されにくい。						

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-30	CAS登録番号	96-69-5	構造 
組成式	C22H30O2S	分子量	359	
物質名	和名 4,4'-チオビス(2-tert-ブチル-5-メチルフェノール)	英名 4,4'-Thiobis(2-tert-butyl-5-methylphenol)		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
988	5	5	5	5	5	5	5	

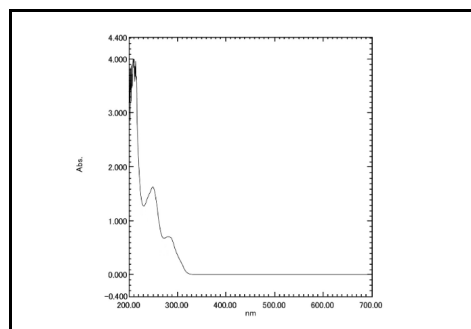
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
3	358	343	136		0.004
RI	特記情報				
2785 ± 6 (3)					

○紫外可視吸収スペクトル



○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	3	359	195	247	139	303	N/A	3	357	194*	179*	163		3
B	1	359	343	195	179	139	N/A							
C														
特記情報								*逆の場合もある。						

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-31	CAS登録番号	96-76-4	構造	
組成式	C14H22O	分子量	206		
物質名	和名	2,4-ジ- <i>t</i> -ブチルフェノール			
	英名	2,4-Di- <i>t</i> -butylphenol			

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
734	—	—	0.01	—	0.01	0.01	0.01	

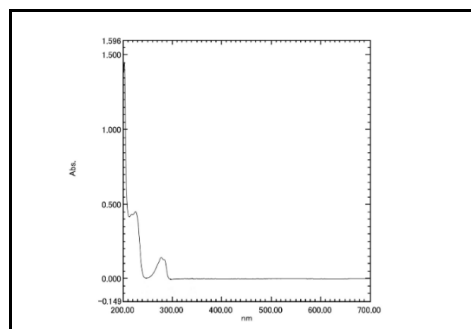
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	191	206	163		0.0009
RI	特記情報				
1511 ± 2 (4)					

○紫外可視吸収スペクトル



○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	0	N/A					N/A	1	205*	189	149	125		N/A
B								1	205*	189	151	130	167	N/A
C								1	205*	189	121	113		N/A
特記 情報								*ギ酸付加体 ([M+COO]-, M+45) の場合もある						

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-32	CAS登録番号	98-29-3	構造 
組成式	C10H14O2	分子量	166	
物質名	和名	4-t-ブチルピロカテコール		
	英名	4-t-Butylpyrocatechol		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1338	1	—	—	—	—	—	—	

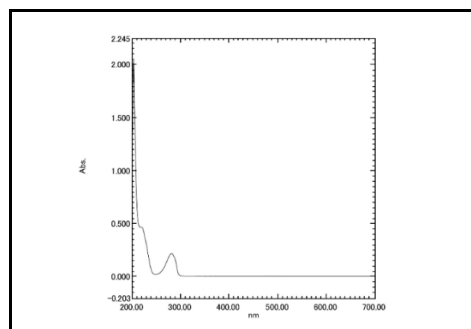
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	151	166	123		0.08
RI	特記情報				
1509 ± 1 (4)					

○紫外可視吸収スペクトル



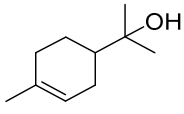
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	1	167	151	138			3	2	165	149	133	121	108	0.9
B														
C														
特記 情報														

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-33	CAS登録番号	98-55-5	構造 
組成式	C10H18O	分子量	154	
物質名	和名	α-テルピネオール		
	英名	α-Terpineol		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1023	0.03	0.03	0.5	0.03	-	-	-	区分別使用制限 (重量%) 上段：通し番号 1023
1024	-	-	0.5	-	-	-	-	下段：通し番号 1024

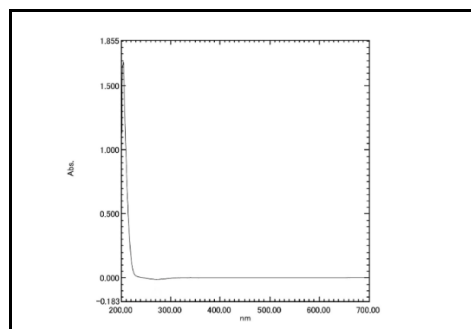
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	136	93	121	136	0.002
RI	特記情報				
1201 ± 8 (4)					

○紫外可視吸収スペクトル



○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	2	155	137	81			'N/A	0	N/A					N/A
B														
C														
特記情報	*アンモニア付加体 (M+17) の場合もある。													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-34	CAS登録番号	99-76-3	構造 
組成式	C8H8O3	分子量	152	
物質名	和名	p-ヒドロキシ安息香酸メチル		
	英名	Methyl p-Hydroxybenzoate		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1227	1	1	1	0.1	0.1	0.1	0.1	600mg/m ² 以下で塗布することができる。

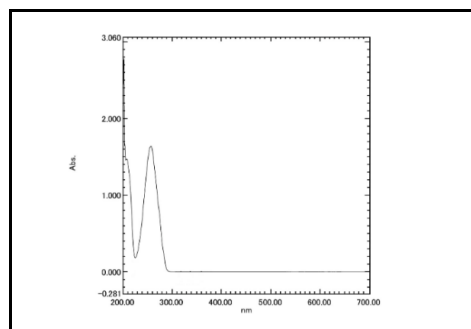
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
3	121	152	93	65	0.01
RI	特記情報				
1454 ± 0 (3)					

○紫外可視吸収スペクトル



○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	2	153	121	107	93	85	N/A	3	151	92	136	121		N/A
B														
C														
特記情報														

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-35	CAS登録番号	100-37-8	構造 
組成式	C6H15NO	分子量	117	
物質名	和名	N,N-ジエチルエタノールアミン		
	英名	N,N-Diethylethanolamine		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
674	1.2	0.7	1.2	0.7	0.01	0.01	0.01	合成樹脂区分1及び3に限り、23mg/m ² 以下で塗布することができる。

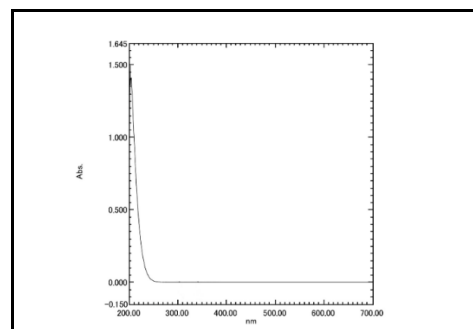
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
3	86	58	102	117	N/A
RI	特記情報				
898 ± 3 (3)					

○紫外可視吸収スペクトル



○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	4	118	100	72	74	58	1	0	N/A					N/A
B														
C														
特記情報	*アンモニア付加体 (M+17) の場合もある。													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-36	CAS登録番号	100-51-6	構造 
組成式	C7H8O	分子量	108	
物質名	和名 ベンジルアルコール	英名 Benzyl Alcohol		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1392	50	—	50	1	—	—	0.03	

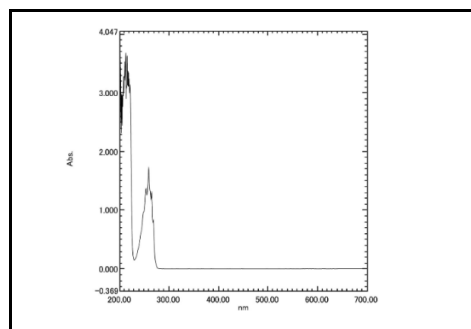
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	108	79	77		0.01
RI	特記情報				
1038 ± 2 (4)					

○紫外可視吸収スペクトル



○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	1	91*	65	73			N/A	0	N/A					N/A
B														
C														
特記 情報	対象化合物のイオンが検出されにくい。 *フラグメントイオン。													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-37	CAS登録番号	100-52-7	構造 
組成式	C7H6O	分子量	106	
物質名	和名 ベンズアルデヒド	英名 Benzaldehyde		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1396	-	-	-	1	-	-	-	

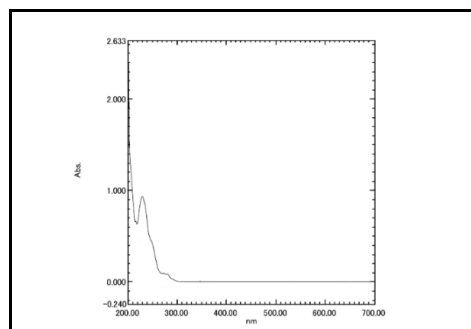
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	106*	105*	77*		0.04
RI	特記情報				
966 ± 6 (4)	*どちらでも測定限界は同程度となる				

○紫外可視吸収スペクトル




○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	2	107	79*	77*			N/A	0	N/A					N/A
B														
C														
特記 情報	*どちらでも可能。													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-38	CAS登録番号	100-97-0	構造 
組成式	C6H12N4	分子量	140	
物質名	和名 ヘキサメチレンテトラミン 英名 Hexamethylenetetramine			

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1382	8	1	1	1	—	—	—	

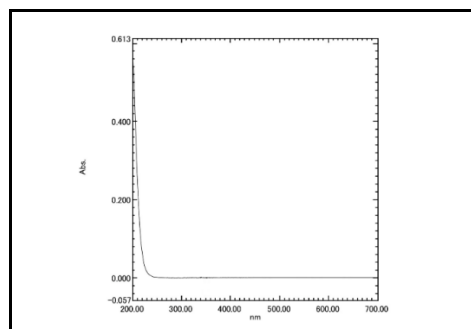
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	140	112	85		0.02
RI	特記情報				
1240 ± 14 (4)					

○紫外可視吸収スペクトル



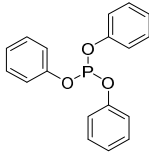
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	5	141	112	85	42	98	3	0	N/A					N/A
B														
C														
特記 情報														

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-39	CAS登録番号	101-02-0	構造 
組成式	C18H15O3P	分子量	310	
物質名	和名	亜りん酸トリフェニル		
	英名	Triphenyl Phosphite		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
165	5	0.2	0.5	0.01	0.2	0.2	0.05	

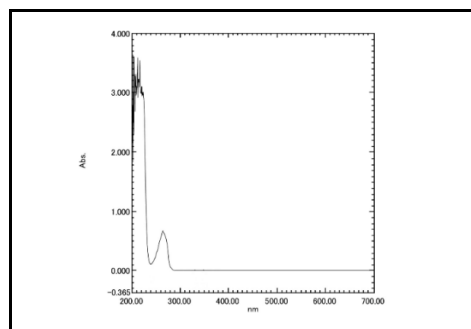
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	217	310	152	153	0.0004
RI	特記情報				
2282 ± 12 (4)					

○紫外可視吸収スペクトル



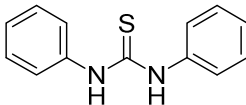
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	4	311	153	216	169	<u>199</u>	47	0	N/A					N/A
B														
C														
特記 情報	*アンモニア付加体 (M+17) の場合もある。 下線：条件によっては検出されない場合もある。													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-40	CAS登録番号	102-08-9	構造 
組成式	C13H12N2S	分子量	228	
物質名	和名 1,3-ジフェニル-2-チオ尿素	英名 1,3-Diphenyl-2-thiourea		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
723	0.5	—	—	0.5	—	—	—	

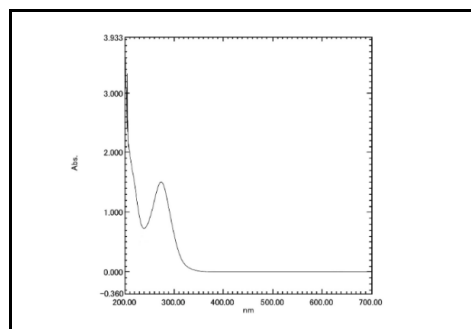
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
0	N/A				N/A
RI	特記情報				
N/A	化合物が不安定なため信頼できるデータが得られなかった。				

○紫外可視吸収スペクトル



○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	5	229	94*	136*	77	109	6	1	227	92	33			N/A
B														
C														
特記情報	*逆の場合もある。													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-41	CAS登録番号	102-60-3	構造
組成式	C14H32N2O4	分子量	292	
物質名	和名	1,1',1'',1'''-(エチレンジニトリロ)テトラキス(2-プロパノール)		
	英名	1,1',1'',1'''-(Ethylenedinitrilo)tetrakis(2-propanol)		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1009	2	2	2	—	—	—	—	

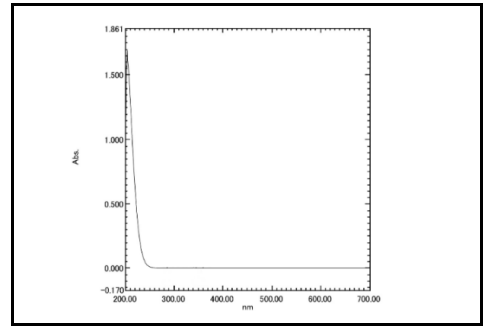
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
2	146	160			N/A
RI	特記情報				
N/A	分析条件が適していない。				

○紫外可視吸収スペクトル



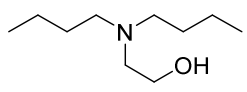
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	5	293	160	142	102	84	2	0	N/A					N/A
B														
C														
特記情報														

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-43	CAS登録番号	102-81-8	構造 
組成式	C10H23NO	分子量	173	
物質名	和名	2-(ジブチルアミノ)エタノール		
	英名	N,N-Dibutylethanolamine		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
727	0.3	—	0.02	—	—	—	0.006	

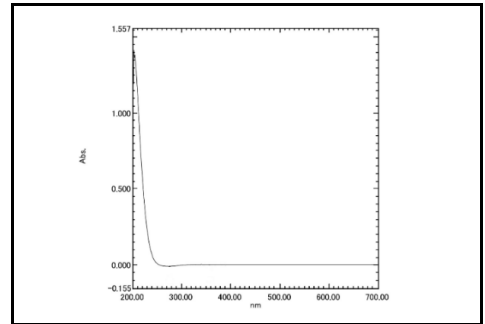
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	142	130	100	88	0.05
RI	特記情報				
1250 ± 2 (4)					

○紫外可視吸収スペクトル



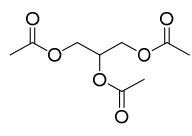
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	5	174	118	100	57	156	12	0	N/A					N/A
B														
C														
特記情報														

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-42	CAS登録番号	102-76-1	構造 
組成式	C9H14O6	分子量	218	
物質名	和名	グリセロール三酢酸		
	英名	Glycerol Triacetate		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
753	50	50	50	30	30	50	50	600mg/m ² 以下で塗布することができる。

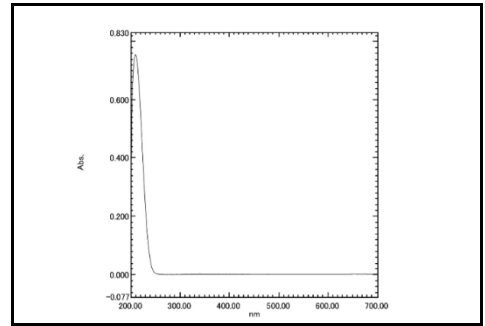
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	103*	145*	43		0.001
RI	特記情報				
1338 ± 8 (4)	*どちらでも測定限界は同程度となる。				

○紫外可視吸収スペクトル



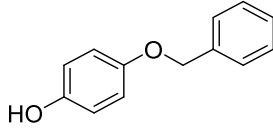
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	5	219*	159	117	43	99	2	0	N/A					N/A
B														
C														
特記情報	*アンモニア付加体 (M+17) の場合もある。													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-44	CAS登録番号	103-16-2	構造 
組成式	C13H12O2	分子量	200	
物質名	和名	p-ベンジルオキシフェノール		
	英名	p-Benzyloxyphenol		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1393	—	—	—	2	—	—	—	

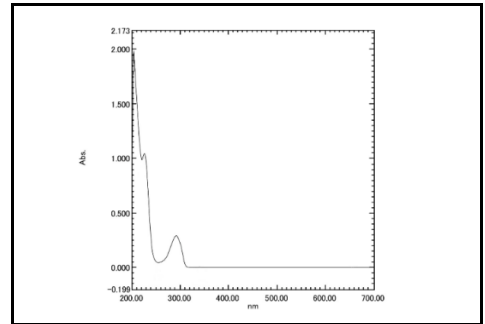
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	91	200	65		0.002
RI		特記情報			
1892 ± 10 (4)					

○紫外可視吸収スペクトル



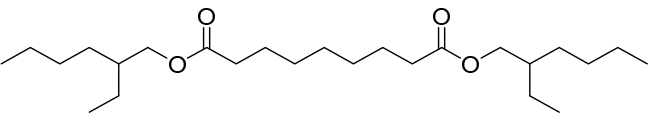
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン			測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン			測定限界 (ng)		
			定量	定性					定量	定性				
A	0	N/A				N/A	0	N/A				N/A		
B														
C														
特記情報	対象化合物のイオンが検出されない。													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-45	CAS登録番号	103-24-2	構造 
組成式	C25H48O4	分子量	413	
物質名	和名	アゼライン酸ビス(2-エチルヘキシル)		
	英名	Bis(2-ethylhexyl) Azelate		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
118	0.5	—	0.05	24	0.05	0.05	0.5	

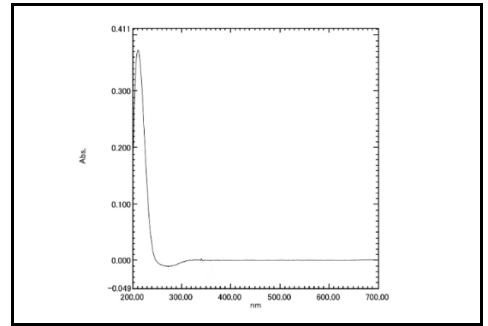
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	171	283	152	189	0.001
RI	特記情報				
2701 ± 5 (4)					

○紫外可視吸収スペクトル



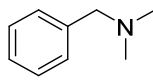
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	5	413*	171	125	189	281	0.1	0	N/A					N/A
B														
C														
特記情報	*アンモニア付加体 (M+17) の場合もある。													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-46	CAS登録番号	103-83-3	構造 
組成式	C9H13N	分子量	135	
物質名	和名	N,N-ジメチルベンジルアミン		
	英名	N,N-Dimethylbenzylamine		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
809	3	—	—	—	—	—	—	

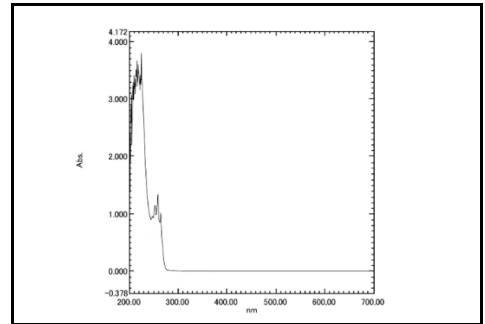
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	135*	91*	58		0.02
RI	特記情報				
1045 ± 5 (4)	*どちらでも測定限界は同程度となる。				

○紫外可視吸収スペクトル



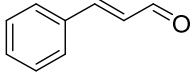
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	5	136	91	65	<u>44</u>		64	0	N/A					'N/A
B														
C														
特記情報	下線：条件によっては検出されない場合もある。													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-47	CAS登録番号	104-55-2	構造 
組成式	C9H8O	分子量	132	
物質名	和名 けい皮酸アルデヒド 英名 Cinnamic aldehyde			

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
570	—	—	—	1	—	—	—	

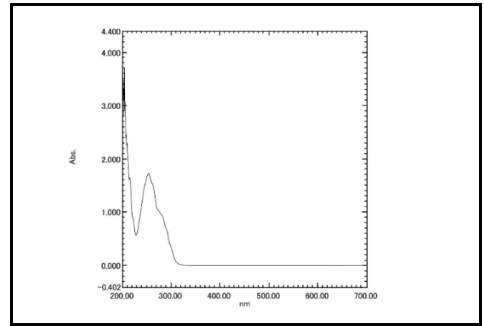
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	131	103	77		0.007
RI	特記情報				
1281 ± 9 (4)					

○紫外可視吸収スペクトル



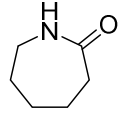
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	3	133	115	105	103	79	280	0	N/A					N/A
B														
C														
特記 情報														

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-48	CAS登録番号	105-60-2	構造 
組成式	C6H11NO	分子量	113	
物質名	和名	ε-カプロラクタム		
	英名	ε-Caprolactam		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
477	3	1	3	—	0.001	—	—	

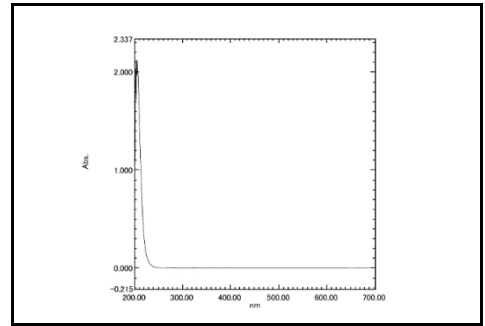
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
3	113	85	55		N/A
RI	特記情報				
1259 ± 10 (3)					

○紫外可視吸収スペクトル



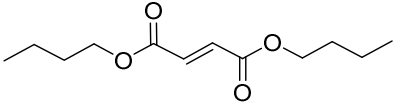
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	5	114	79	69	96	55	3	0	N/A					N/A
B														
C														
特記情報														

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-49	CAS登録番号	105-75-9	構造 
組成式	C12H20O4	分子量	228	
物質名	和名 フマル酸ジブチル	英名 Dibutyl Fumarate		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1359	1.6	1	0.5	—	—	—	0.1	

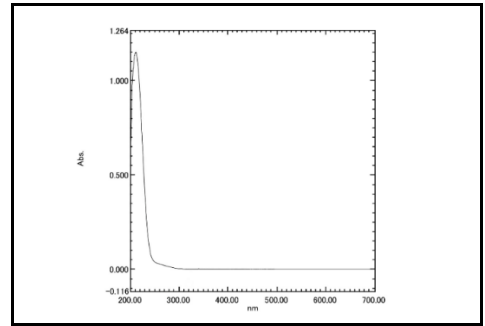
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	155*	117*	173		0.001
RI	特記情報				
1583 ± 1 (4)	*どちらでも測定限界は同程度となる。				

○紫外可視吸収スペクトル



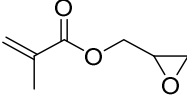
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	3	229	117	99	145	89	N/A	0	N/A					N/A
B														
C														
特記情報	*アンモニア付加体 (M+17) の場合もある。													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-50	CAS登録番号	106-91-2	構造 
組成式	C7H10O3	分子量	142	
物質名	和名	メタクリル酸グリシジル		
	英名	Glycidyl Methacrylate		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1465	2	2	2	2	2	2	2	100°Cを超える温度で食品に接触する部分に使用してはならない。

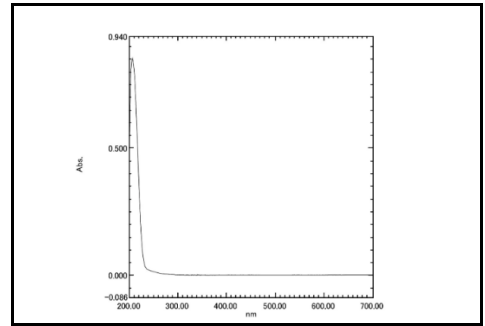
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	69	41	56		0.007
RI	特記情報				
1067 ± 1 (4)					

○紫外可視吸収スペクトル



○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	4	143	69	87	41	<u>125</u>	242	0	N/A					N/A
B														
C														
特記情報	*アンモニア付加体 (M+17) の場合もある。 下線: 条件によっては検出されない場合もある													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン: 装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ: 元にしたデータ数
- ・イオン: 単位は m/z
- ・測定限界 (ng): 測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI: 平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-51	CAS登録番号	107-21-1	構造 <chem>OCCO</chem>
組成式	C2H6O2	分子量	62	
物質名	和名	エチレングリコール		
	英名			

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
268	2	2	20	0.5	1	1	0.2	

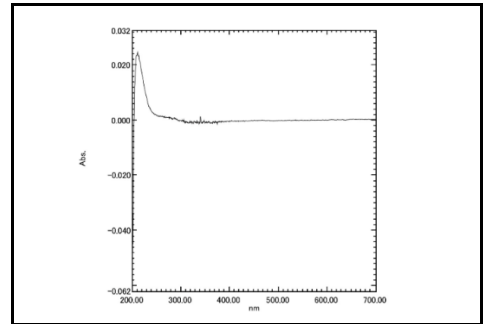
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
0	N/A				N/A
RI	特記情報				
N/A	分析条件が適していない。				

○紫外可視吸収スペクトル



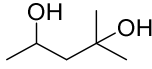
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン			測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン			測定限界 (ng)		
			定量	定性					定量	定性				
A	0	N/A				N/A	0	N/A				N/A		
B														
C														
特記情報	対象化合物のイオンが検出されない。													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-52	CAS登録番号	107-41-5	構造 
組成式	C6H14O2	分子量	118	
物質名	和名	2-メチル-2,4-ペンタンジオール		
	英名	2-Methyl-2,4-pentanediol		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
716	5	1	1	1	1	1	1	

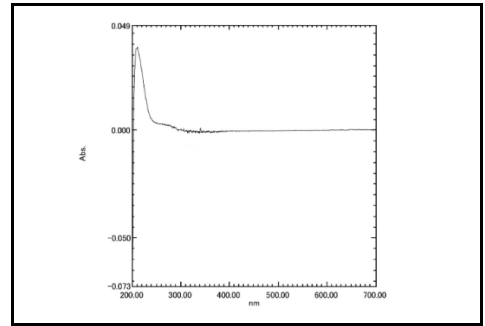
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	59	85	103		0.06
RI		特記情報			
926 ± 4 (4)					

○紫外可視吸収スペクトル



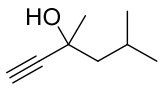
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	3	119	101	57	83		N/A	1	163	45				N/A
B														
C														
特記情報	*アンモニア付加体 (M+17) の場合もある。													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-53	CAS登録番号	107-54-0	構造 
組成式	126	分子量	126	
物質名	和名	3,5-ジメチル-1-ヘキシン-3-オール		
	英名	3,5-Dimethyl-1-hexyn-3-ol		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
808	0.5	—	—	—	—	—	—	

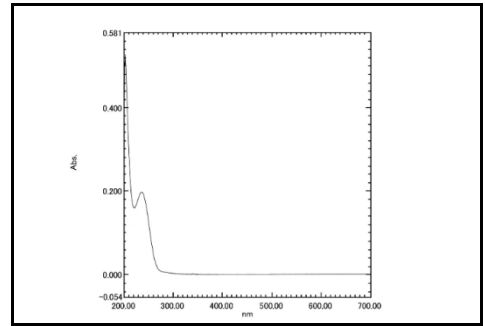
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
3	69	111	43	84	0.002
RI	特記情報				
N/A	分析条件が適していない。				

○紫外可視吸収スペクトル



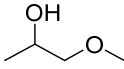
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	1	144*	127	109	67		N/A	0	N/A					N/A
B														
C														
特記情報	対象化合物のイオンが検出されにくい。 *アンモニア付加体 (M+17)													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-54	CAS登録番号	107-98-2	構造 
組成式	C4H10O2	分子量	90	
物質名	和名	1-メトキシ-2-プロパノール		
	英名	1-Methoxy-2-propanol		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1368	5	5	10	5	5	5	5	合成樹脂区分1、3及び4に限り、200mg/m ² 以下で塗布することができる。

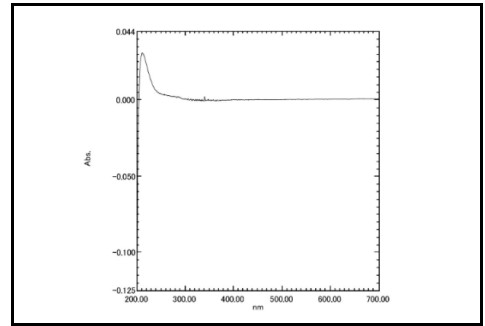
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
1	N/A				N/A
RI	特記情報				
N/A	分析条件が最適ではない。				

○紫外可視吸収スペクトル



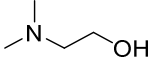
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	2	90	73	55	45		N/A	0	N/A					N/A
B														
C														
特記情報	*アンモニア付加体 (M+17) の場合もある。													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-55	CAS登録番号	108-01-0	構造 
組成式	C4H11NO	分子量	89	
物質名	和名	2-ジメチルアミノエタノール		
	英名	2-Dimethylaminoethanol		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
778	10	10	10	10	—	2	0.03	合成樹脂区分1に限り、600mg/m ² 以下で塗布することができる。

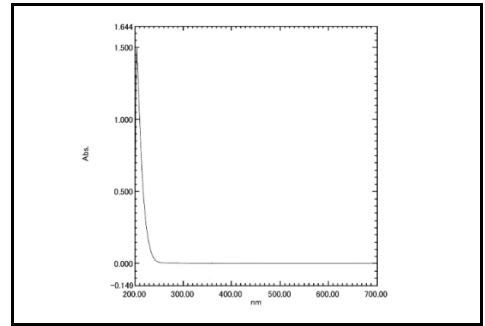
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
0	N/A				N/A
RI	特記情報				
N/A	分析条件が適していない。				

○紫外可視吸収スペクトル



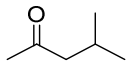
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	5	90	72	45	57	70	3	0	N/A					N/A
B														
C														
特記情報														

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-56	CAS登録番号	108-10-1	構造 
組成式	C6H12O	分子量	100	
物質名	和名	4-メチル-2-ペンタノン		
	英名	4-Methyl-2-pentanone		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1480	1	—	1	0.001	0.001	0.001	0.001	合成樹脂区分1及び3に限り、300mg/m ² 以下で塗布することができる。

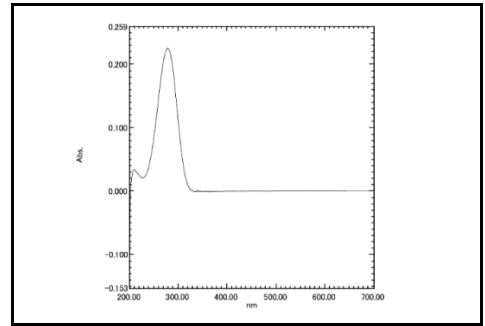
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
0	N/A				N/A
RI	特記情報				
N/A	分析条件が適していない。				

○紫外可視吸収スペクトル



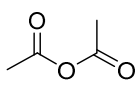
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン			測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン			測定限界 (ng)		
			定量	定性					定量	定性				
A	2	101	57			N/A	0	N/A				N/A		
B														
C														
特記情報	*アンモニア付加体 (M+17) の場合もある。 対象化合物のイオンが検出されにくい参考値													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-57	CAS登録番号	108-24-7	構造 
組成式	C4H6O3	分子量	102	
物質名	和名	無水酢酸		
	英名	Acetic Anhydride		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
605	5	5	5	5	5	5	5	ナトリウム塩に限り、600mg/m ² 以下で塗布することができる。

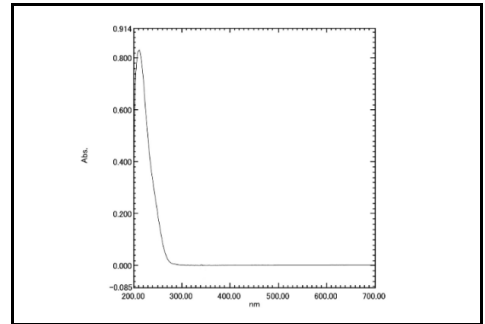
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
0	N/A				N/A
RI	特記情報				
N/A	分析条件が適していない。				

○紫外可視吸収スペクトル



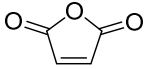
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード						ネガティブモード					
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン			測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン			測定限界 (ng)
			定量	定性					定量	定性		
A	0	N/A				N/A	0	N/A				N/A
B												
C												
特記情報	対象化合物のイオンが検出されない。											

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-58	CAS登録番号	108-31-6	構造 
組成式	C4H2O3	分子量	98	
物質名	和名	無水マレイン酸		
	英名	Maleic Anhydride		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1459	1	1	1	3	0.05	0.05	1	

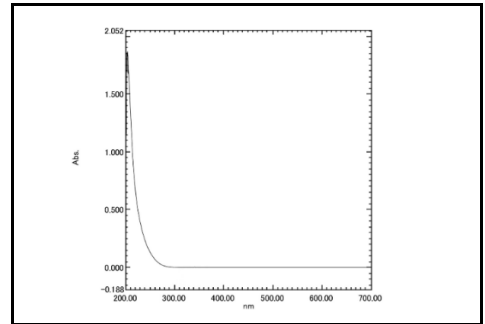
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
2	54	98	44		N/A
RI	特記情報				
N/A	分析条件が最適ではない。				

○紫外可視吸収スペクトル



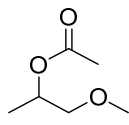
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	3	99	71	81	45	53	480	1	115	71				N/A
B														
C														
特記情報														

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-59	CAS登録番号	108-65-6	構造 
組成式	C6H12O3	分子量	132	
物質名	和名 酢酸2-メトキシ-1-メチルエチル	英名 2-Methoxy-1-methylethyl Acetate		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
607	20	1	20	—	—	0.01	—	合成樹脂区分1及び3に限り、600mg/m ² 以下で塗布することができる。

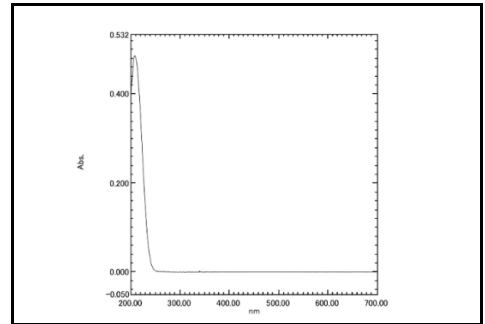
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
3	72	43	87	45	0.01*
RI	特記情報				
N/A	分析条件が最適ではない。				

○紫外可視吸収スペクトル



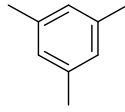
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	4	133*	73	101	45		1250	0	N/A					N/A
B														
C														
特記情報	*アンモニア付加体の可能性もある。													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-60	CAS登録番号	108-67-8	構造 
組成式	C9H12	分子量	120	
物質名	和名	メシチレン		
	英名	Mesitylene		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1089	1.6	—	—	0.1	—	—	—	

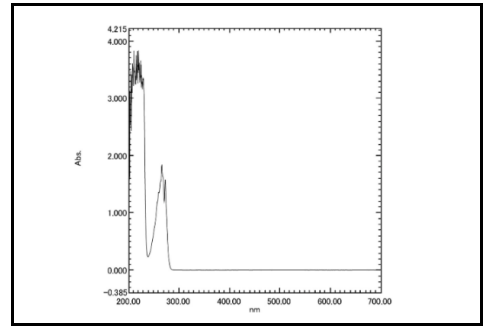
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	105	120	91		0.002
RI	特記情報				
973 ± 6 (4)					

○紫外可視吸収スペクトル



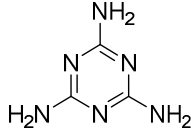
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン			測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン			測定限界 (ng)		
			定量	定性					定量	定性				
A	0	N/A				N/A	0	N/A				N/A		
B														
C														
特記情報	対象化合物のイオンが検出されない。													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・ パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・ データ：元にしたデータ数
- ・ イオン：単位は m/z
- ・ 測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・ RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・ データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・ GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-61	CAS登録番号	108-78-1	構造 
組成式	C3H6N6	分子量	126	
物質名	和名 メラミン	英名 melamine		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1521	1.5	—	0.01	—	—	0.1	0.01	

*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
	N/A				N/A
RI	特記情報				
N/A	対象外 (不溶)				

○紫外可視吸収スペクトル

N/A


○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	0	N/A					N/A	0	N/A					N/A
B														
C														
特記 情報	対象外 (不溶)													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-62	CAS登録番号	108-88-3	構造 
組成式	C7H8	分子量	92	
物質名	和名	トルエン		
	英名	Toluene		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1103	0.1	0.2	10	0.02	0.2	0.2	0.001	

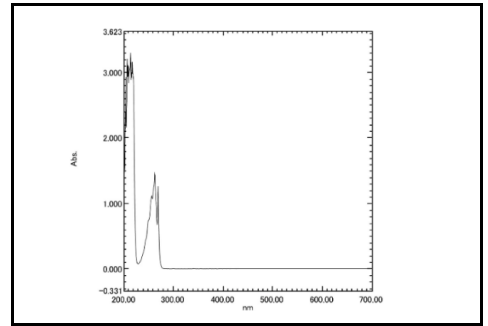
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
2	91	65	51		N/A
RI	特記情報				
N/A	カラムが最適ではない。				

○紫外可視吸収スペクトル



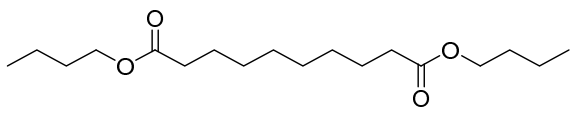
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン			測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン			測定 限界 (ng)		
			定量	定性					定量	定性				
A	0	N/A				N/A	0	N/A				N/A		
B														
C														
特記 情報	対象化合物のイオンが検出されない。													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-63	CAS登録番号	109-43-3	構造 
組成式	C18H34O4	分子量	314	
物質名	和名	セバシン酸ジブチル		
	英名	Dibutyl Sebacate		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
947	5	0.5	12	35	0.5	0.03	0.03	

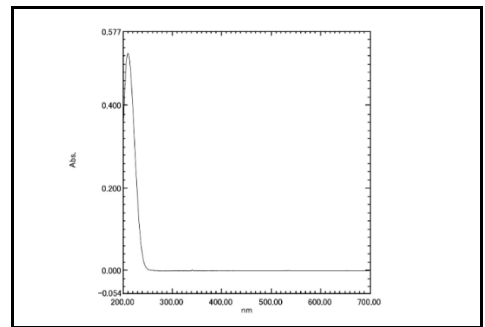
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	185	241	199		0.0007
RI	特記情報				
2170 ± 3 (4)					

○紫外可視吸収スペクトル



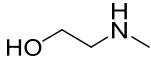
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	5	315*	185	241	139	121	2	0	N/A					N/A
B														
C														
特記情報	*アンモニア付加体 (M+17) の場合もある。													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-64	CAS登録番号	109-83-1	構造 
組成式	C3H9NO	分子量	75	
物質名	和名	2-(メチルアミノ)エタノール		
	英名	2-(Methylamino)ethanol		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1478	—	—	0.01	0.001	0.001	0.001	0.001	

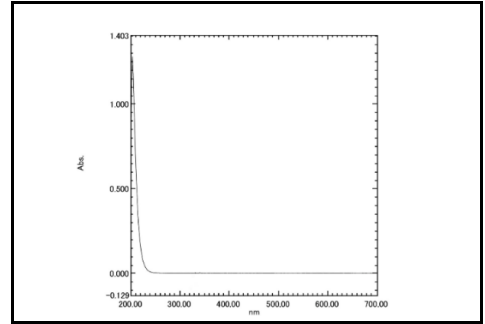
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
0	N/A				N/A
RI	特記情報				
N/A					

○紫外可視吸収スペクトル



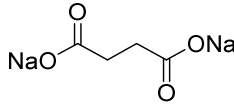
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	5	76	58	45	56		4	0	N/A					N/A
B														
C														
特記 情報														

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-65	CAS登録番号	150-90-3	構造 
組成式	C4H4O4Na2	分子量	162	
物質名	和名	コハク酸二ナトリウム		
	英名	succinic acid (including sodium salt)		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
580	1.6	10	10	5	10	10	0.001	

*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
	N/A				N/A
RI	特記情報				
N/A	対象外 (不溶)				

○紫外可視吸収スペクトル

N/A

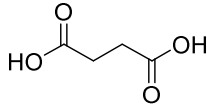
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	0	N/A					N/A	0	N/A					N/A
B														
C														
特記 情報	対象外 (不溶)													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-66	CAS登録番号	110-15-6	構造 
組成式	C4H6O4	分子量	118	
物質名	和名 こはく酸	英名 Succinic Acid		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
580	1.6	10	10	5	10	10	0.001	

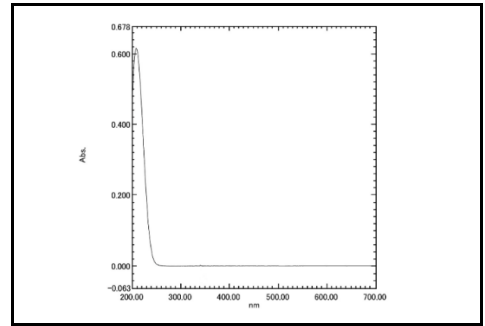
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
2	100	74	55		N/A
RI	特記情報				
N/A	分析条件が適していない。				

○紫外可視吸収スペクトル



○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	1	119	101	91	45		0.1	4	117	73	99			4
B														
C														
特記情報														

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-67	CAS登録番号	110-17-8	構造  Double bond geometry as shown.
組成式	C4H4O4	分子量	116	
物質名	和名 フマル酸 英名 Fumaric Acid			

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1357	10	10	10	10	10	10	10	

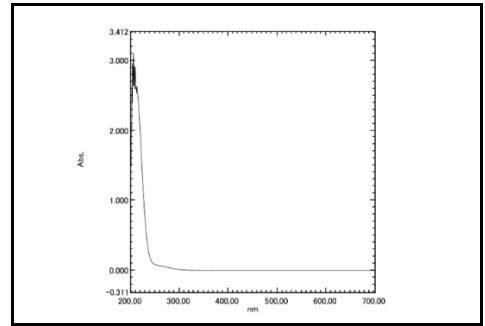
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
1	98	45			N/A
RI	特記情報				
N/A	分析条件が適していない。				

○紫外可視吸収スペクトル



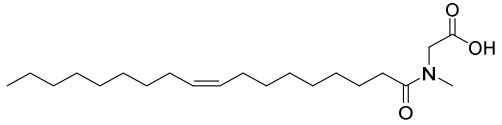
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン			測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン			測定限界 (ng)		
			定量	定性					定量	定性				
A	0	N/A				N/A	4	115	71				72	
B														
C														
特記情報														

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-68	CAS登録番号	110-25-8	構造  Double bond geometry as shown.
組成式	C21H39NO3	分子量	354	
物質名	和名 N-オレオイルサルコシン	英名 2-(N-Methyleamido)acetic acid		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
97	1.3	1.3	1.3	1.3	1.3	1.3	1.3	

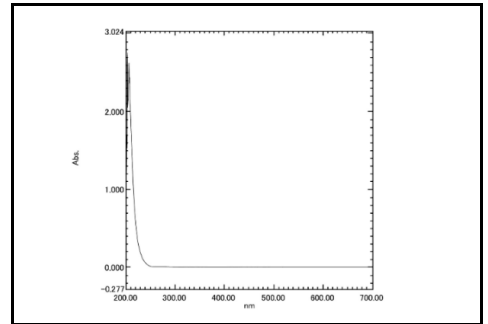
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
0	N/A				N/A
RI	特記情報				
N/A	化合物が不安定なため信頼できるデータが得られなかった。				

○紫外可視吸収スペクトル



○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	3	354	90	44	121		0.06	2	352	88	308	262		N/A
B														
C														
特記情報														

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-69	CAS登録番号	110-63-4	構造 <chem>OCCCO</chem>
組成式	C4H10O2	分子量	90	
物質名	和名	1,4-ブタンジオール		
	英名	1,4-Butanediol		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1329	1	1	1	1	1	1	1	

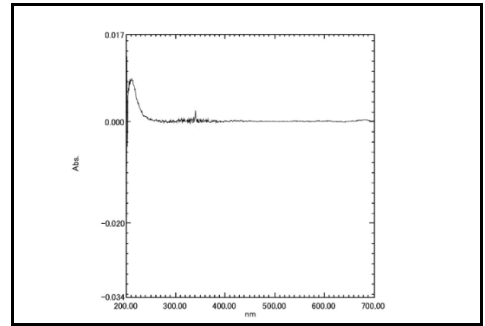
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	71	57	42	44	0.07
RI	特記情報				
947 ± 4 (4)					

○紫外可視吸収スペクトル




○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	4	91	73	55	43		170	0	N/A					N/A
B														
C														
特記情報	*アンモニア付加体 (M+17) の場合もある。													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-70	CAS登録番号	110-82-7	構造 
組成式	C6H12	分子量	84	
物質名	和名	シクロヘキサン		
	英名	Cyclohexane		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
972	50	50	50	10	50	50	10	合成樹脂区分3に限り、600mg/m ² 以下で塗布することができる。

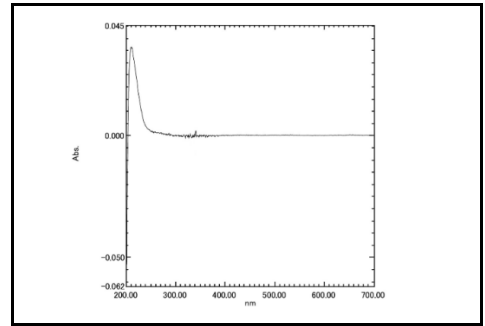
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
0	N/A				N/A
RI	特記情報				
N/A	分析条件が適していない。				

○紫外可視吸収スペクトル



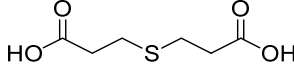
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン			測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン			測定限界 (ng)		
			定量	定性					定量	定性				
A	0	N/A				N/A	0	N/A				N/A		
B														
C														
特記情報	対象化合物のイオンが検出されない。													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-71	CAS登録番号	111-17-1	構造 
組成式	C6H10O4S	分子量	178	
物質名	和名	3,3'-チオジプロピオン酸		
	英名	3,3'-Thiodipropionic Acid		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
985	0.001	0.001	0.001	1	0.001	0.001	0.001	

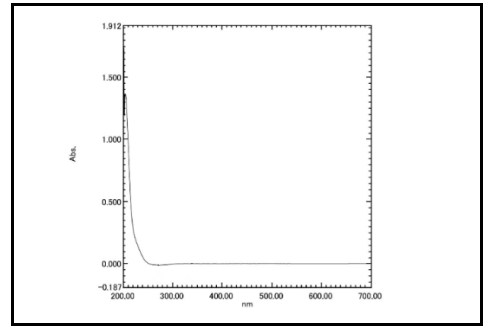
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
2	178	132	114		N/A
RI	特記情報				
N/A	化合物が不安定なため信頼できるデータが得られなかった。				

○紫外可視吸収スペクトル



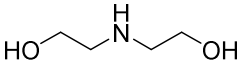
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	2	196	161	179	89	143	N/A	2	177	105	71			N/A
B														
C														
特記情報														

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-72	CAS登録番号	111-42-2	構造 
組成式	C4H11NO2	分子量	105	
物質名	和名	2,2'-イミノジエタノール		
	英名	2,2'-Iminodiethanol		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
672	1	1	1	—	0.5	0.5	0.13	合成樹脂区分1に限り、1 mg/m ² 以下、合成樹脂区分1及び4を除き、110mg/m ² 以下で塗布することができる。

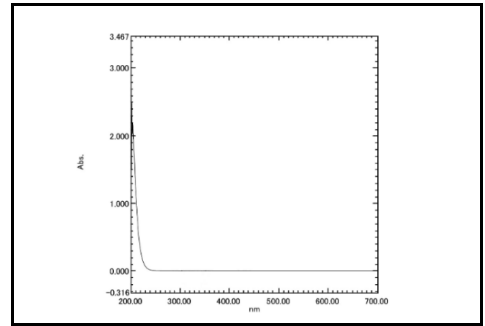
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
0	N/A				N/A
RI	特記情報				
N/A	化合物が不安定なため信頼できるデータが得られなかった。				

○紫外可視吸収スペクトル



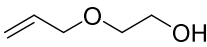
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	5	106	88	70	45		1	0	N/A					N/A
B														
C														
特記情報														

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-73	CAS登録番号	111-45-5	構造 
組成式	C5H10O2	分子量	102	
物質名	和名	2-(アリルオキシ)エタノール		
	英名	2-(Allyloxy)ethanol		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
152	—	—	0.3	—	—	—	—	厚さ0.3mmを超える部分に使用してはならない。

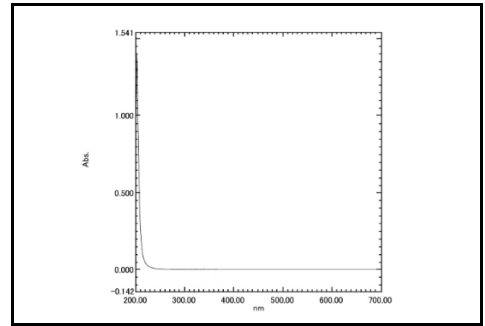
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
2	N/A				N/A
RI	特記情報				
N/A	分析条件が適していない。				

○紫外可視吸収スペクトル



○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	3	103	59	41	85		N/A	0	N/A					N/A
B														
C														
特記情報	*アンモニア付加体 (M+17) の場合もある。													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-74	CAS登録番号	111-46-6	構造 <chem>OCCOCCO</chem>
組成式	C4H10O3	分子量	106	
物質名	和名	ジエチレングリコール		
	英名	Diethylene Glycol		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
676	10	10	10	10	10	10	10	0.1mg/m ² 以下で塗布することができる。

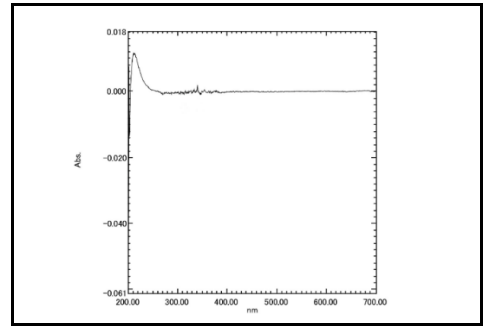
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	45	75			0.2*
RI	特記情報				
964 ± 4 (4)	分析条件が適していない。				

○紫外可視吸収スペクトル



○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	5	124*	107	45	89	39	0	N/A					N/A	
B														
C														
特記情報	*アンモニア付加体 (M+17) の場合もある。													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-75	CAS登録番号	111-76-2	構造 <chem>CCCCOCCO</chem>
組成式	C6H14O2	分子量	118	
物質名	和名	2-ブトキシエタノール		
	英名	2-Butoxyethanol		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1356	5	5	5	0.001	0.001	0.001	0.15	

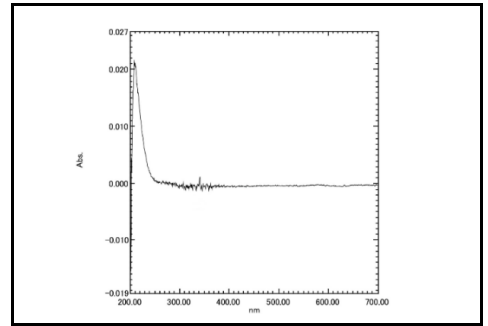
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	57	87	45	75	0.05
RI	特記情報				
905 ± 1 (4)	分析条件が適していない。				

○紫外可視吸収スペクトル



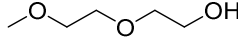
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	3	119	63	57	45		N/A	0	N/A					N/A
B														
C														
特記情報	*アンモニア付加体 (M+17) の場合もある。													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-76	CAS登録番号	111-77-3	構造 
組成式	C5H12O3	分子量	120	
物質名	和名	2-(2-メトキシエトキシ)エタノール		
	英名	2-(2-Methoxyethoxy)ethanol		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
680	0.001	0.001	0.002	0.001	0.001	0.001	0.002	

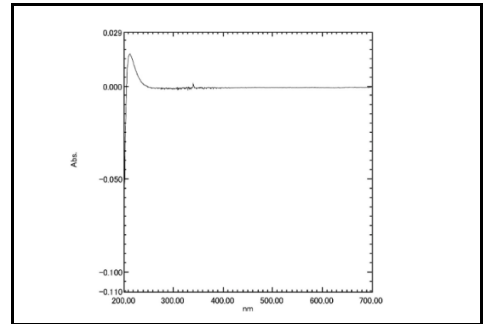
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	59	45	90		0.04
RI	特記情報				
935 ± 2 (4)	分析条件が適していない。				

○紫外可視吸収スペクトル



○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	5	121*	59	89	103	45	7	0	N/A					N/A
B														
C														
特記情報	*アンモニア付加体 (M+17) の場合もある。													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-77	CAS登録番号	111-88-6	構造 <chem>CCCCCCCCS</chem>
組成式	C8H18S	分子量	146	
物質名	和名	1-オクタチオール		
	英名	1-Octanethiol		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
183	3	1.2	1.2	1.2	1	1	0.6	

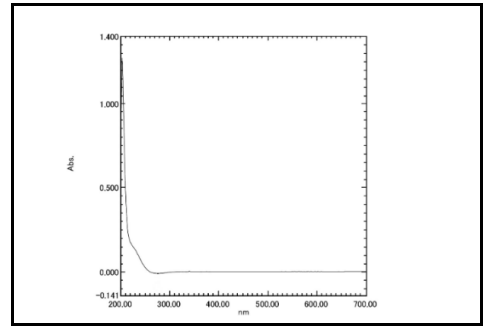
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	146	56	112		0.03*
RI	特記情報				
1131 ± 5 (4)	二量体と推定されるピークも検出される場合がある。				

○紫外可視吸収スペクトル



○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン			測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン			測定限界 (ng)		
			定量	定性					定量	定性				
A	0	N/A				N/A	0	N/A				N/A		
B														
C														
特記情報	対象化合物のイオンが検出されない。													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-78	CAS登録番号	112-24-3	構造 
組成式	C6H18N4	分子量	146	
物質名	和名	トリエチレンテトラミン(エチレンアミン混合物)		
	英名	Triethylenetetramine (mixture of ethyleneamine)		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1064	—	—	0.001	—	0.001	—	—	

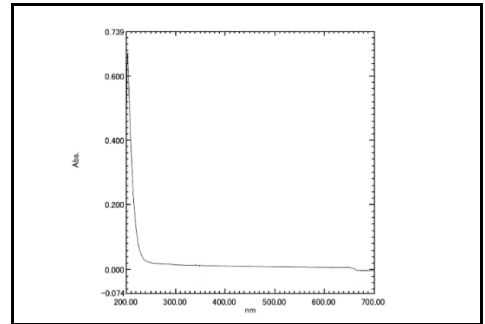
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
0	N/A				N/A
RI	特記情報				
N/A	分析条件が適していない。				

○紫外可視吸収スペクトル



○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン			測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン			測定限界 (ng)		
			定量	定性					定量	定性				
A	0	N/A				N/A	0	N/A				N/A		
B														
C														
特記情報	対象化合物のイオンが検出されない。													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-79	CAS登録番号	112-27-6	構造 <chem>OCCOCCOCCO</chem>
組成式	C6H14O4	分子量	150	
物質名	和名	3,6-ジオキサ-1,8-オクタンジオール		
	英名	3,6-Dioxa-1,8-octanediol		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1061	10	10	10	10	10	10	10	

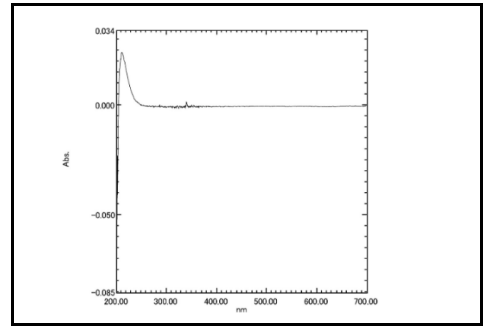
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	89	45	75	58	0.06
RI	特記情報				
1223 ± 1 (4)					

○紫外可視吸収スペクトル



○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	5	151*	89	45	133	<u>107</u>	7	1	149	61	119	105		N/A
B														
C														
特記情報	*アンモニア付加体 (M+17) の場合もある。 下線：条件によっては検出されない場合もある。													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-80	CAS登録番号	112-55-0	構造 <chem>CCCCCCCCCCCCS</chem>
組成式	C12H26S	分子量	202	
物質名	和名	1-ドデカンチオール		
	英名	1-Dodecanethiol		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
183	3	1.2	1.2	1.2	1	1	0.6	

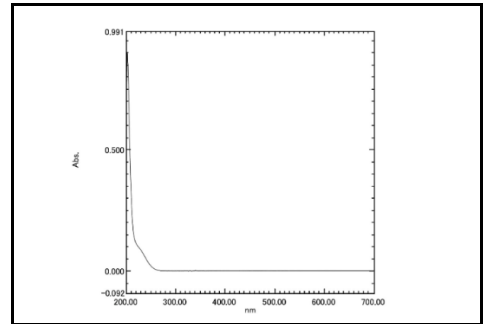
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	202*	168*	111		0.007
RI	特記情報				
1547 ± 7 (4)	*どちらでも測定限界は同程度となる。				

○紫外可視吸収スペクトル



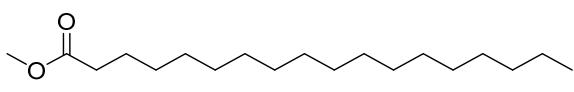
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン			測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン			測定限界 (ng)		
			定量	定性					定量	定性				
A	0	N/A				N/A	0	N/A				N/A		
B														
C														
特記情報														

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-81	CAS登録番号	112-61-8	構造 
組成式	C19H38O2	分子量	299	
物質名	和名	ステアリン酸メチル		
	英名	Methyl Stearate		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
764	50	5	50	40	5	5	50	合成樹脂区分5及び6を除き、25mg/m ² 以下で塗布することができる。

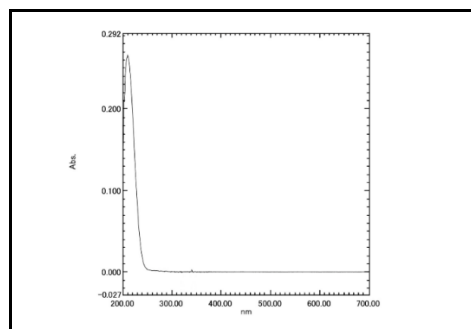
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	74*	87*	143	255	0.001
RI	特記情報				
2126 ± 2 (4)	*どちらでも測定限界は同程度となる。				

○紫外可視吸収スペクトル



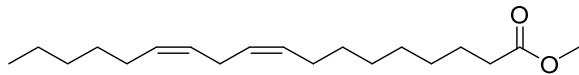
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	2	299	43	57	103	117	N/A	0	N/A					N/A
B														
C														
特記情報	*アンモニア付加体 (M+17) の場合もある。													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-82	CAS登録番号	112-63-0	構造  Double bond geometry as shown.
組成式	C19H34O2	分子量	294	
物質名	和名 リノール酸メチル 英名 Methyl Linoleate			

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
761	30	5	30	30	5	5	5	

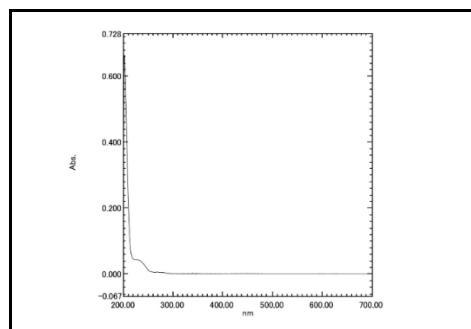
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	263	67	81	294	0.008*
RI	特記情報				
2094 ± 3 (4)	混合物と推定される微量なピークも検出される場合がある。				

○紫外可視吸収スペクトル




○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	4	295*	263	245	221	265	0	N/A					N/A	
B														
C														
特記情報	*アンモニア付加体 (M+17) の場合もある。													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-83	CAS登録番号	112-88-9	構造 
組成式	C18H36	分子量	253	
物質名	和名	1-オクタデセン		
	英名	1-Octadecene		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
431	—	—	0.005	—	0.005	0.005	0.005	

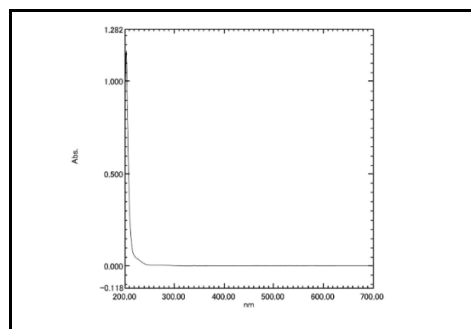
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	83*	97*	111	125	0.009
RI	特記情報				
1793 ± 3 (4)	*どちらでも測定限界は同程度となる。				

○紫外可視吸収スペクトル



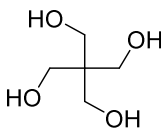
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	0	N/A					N/A	0	N/A					N/A
B														
C														
特記情報	対象化合物のイオンが検出されない。													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-84	CAS登録番号	115-77-5	構造 
組成式	C5H12O4	分子量	136	
物質名	和名	ペンタエリトリトール		
	英名	Pentaerythritol		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1408	3	3	3	0.4	3	3	—	

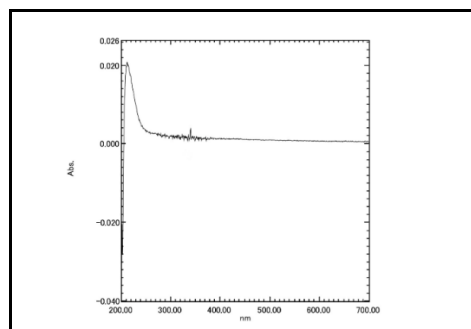
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
0	N/A				N/A
RI	特記情報				
N/A	対象外 (不溶)				

○紫外可視吸収スペクトル



○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	2	137*	119	71	101		N/A	1	181*	79	45			N/A
B														
C														
特記情報	*アンモニア付加体 (M+17) の場合もある。							*ギ酸付加体 ([M+COO]-, M+45)						

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-85	CAS登録番号	117-81-7	構造 
組成式	C24H38O4	分子量	391	
物質名	和名 フタル酸ビス(2-エチルヘキシル)	英名 Bis(2-ethylhexyl) Phthalate		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1320	30	30	30	50	30	30	30	油脂及び脂肪性食品に接触する部分に使用してはならない。

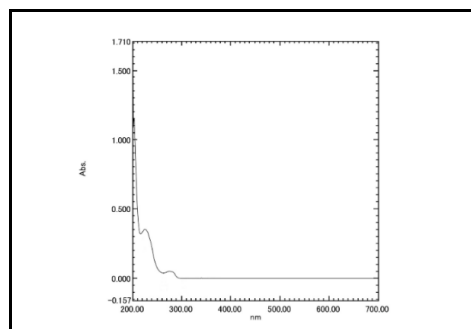
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	149	167	279		0.006
RI	特記情報				
2542 ± 3 (4)					

○紫外可視吸収スペクトル



○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	4	391	149	167	279	113	13	0	N/A					N/A
B														
C														
特記情報														

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-86	CAS登録番号	117-84-0	構造 
組成式	C24H38O4	分子量	391	
物質名	和名	フタル酸ジ-n-オクチル		
	英名	Di-n-octyl Phthalate		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1313	30	2	30	50	0.05	0.05	0.05	

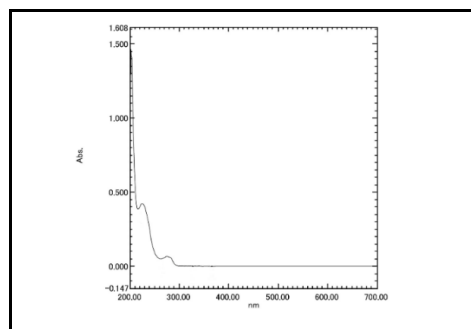
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	279	149	167		0.002
RI		特記情報			
2735 ± 6 (4)					

○紫外可視吸収スペクトル



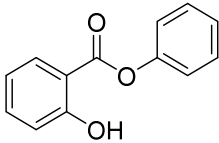
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	4	391	149	261	<u>121</u>	<u>93</u>	6	0	N/A					N/A
B														
C														
特記 情報	下線：条件によっては検出されない場合もある。													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-87	CAS登録番号	118-55-8	構造 
組成式	C13H10O3	分子量	214	
物質名	和名	サリチル酸フェニル		
	英名	Phenyl Salicylate		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
612	1	—	1	1	—	—	1	

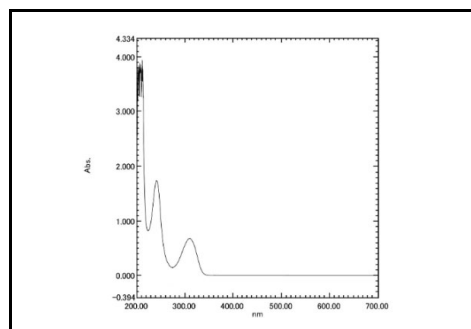
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
3	121	93	65		0.0008
RI	特記情報				
1763 ± 15 (3)	分解しやすく複数ピークが検出する可能性がある。				

○紫外可視吸収スペクトル



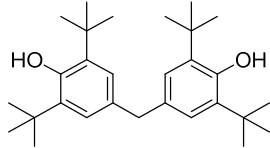
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	4	215	121	65	93		N/A	0	N/A					N/A
B														
C														
特記 情報														

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-88	CAS登録番号	118-82-1	構造 
組成式	C29H44O2	分子量	425	
物質名	和名 4,4'-メチレンビス(2,6-ジ- <i>t</i> -ブチルフェノール)	英名 4,4'-Methylenebis(2,6-di- <i>t</i> -butylphenol)		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1508	0.5	0.5	0.5	—	0.5	—	—	

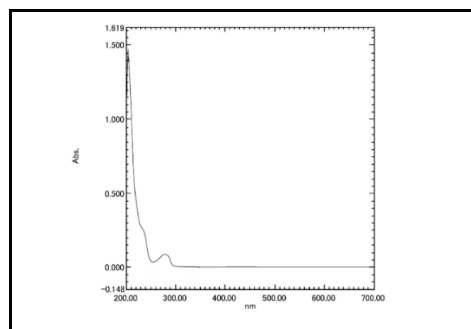
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	409	424	367	219	0.0009
RI	特記情報				
2653 ± 7 (4)					

○紫外可視吸収スペクトル



○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	4	442*	219	163	203	147	0.3	1	423	328	393	315		N/A
B								1	423	407	393	365		N/A
C														
特記 情報	*アンモニア付加体 (M+17)													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-89	CAS登録番号	119-36-8	構造 
組成式	C8H8O3	分子量	152	
物質名	和名	サリチル酸メチル		
	英名	Methyl Salicylate		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
614	0.4	—	0.4	0.4	—	—	—	

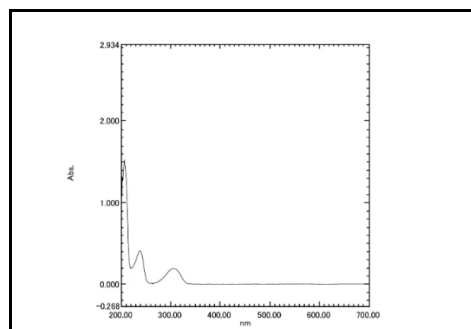
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	120	152	92		0.001
RI	特記情報				
1200 ± 6 (4)					

○紫外可視吸収スペクトル



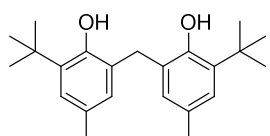
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	1	153	121	93	65		N/A	0	N/A					N/A
B														
C														
特記 情報	対象化合物のイオンが検出されにくい。													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-90	CAS登録番号	119-47-1	構造 
組成式	C23H32O2	分子量	341	
物質名	和名 2,2'-メチレンビス(6-tert-ブチル-4-メチルフェノール)	英名 2,2'-Methylenebis(6-tert-butyl-4-methylphenol)		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1516	1	2	2	2	0.1	0.1	—	

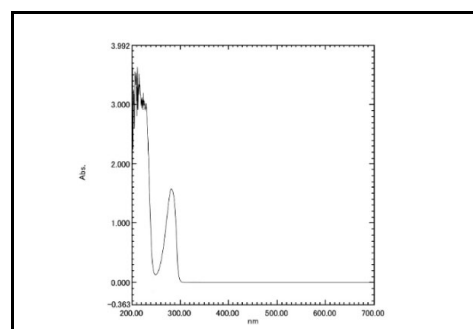
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
2	177	161	340	149	N/A
RI	特記情報				
N/A	複数ピークが検出する可能性がある。				

○紫外可視吸収スペクトル



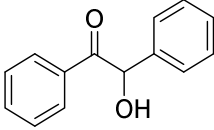
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	2	358	177	285	229	121	N/A	1	339	163		147		N/A
B	1	358	229	121			N/A							
C														
特記 情報														

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-91	CAS登録番号	119-53-9	構造 
組成式	C14H12O2	分子量	212	
物質名	和名 2-ヒドロキシ-2-フェニルアセトフェノン	英名 2-hydroxy-2-phenylacetophenone		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1254	0.5	0.5	0.5	0.002	0.002	0.002	0.002	

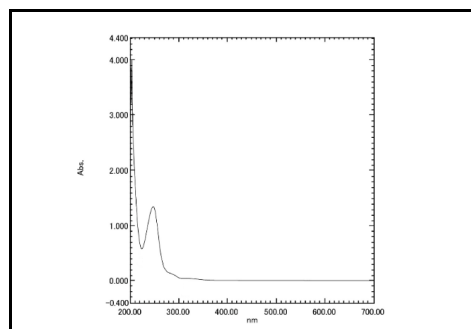
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
3	107	105	77		0.01
RI	特記情報				
1830 ± 14 (3)					

○紫外可視吸収スペクトル



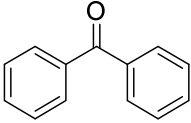
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	5	213*	195**	167	165	152	3	0	N/A					N/A
B														
C														
特記情報	*アンモニア付加体 (M+17) の場合もある。 **プリカーサーイオンとなる場合もある。													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-92	CAS登録番号	119-61-9	構造 
組成式	C13H10O	分子量	182	
物質名	和名	ベンゾフェノン		
	英名	benzophenone		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
378	-	-	-	-	0.3	0.3	-	区分別使用制限 (重量%) 上段：通し番号 378 下段：通し番号 1407
1407	1	1	5	-	-	-	-	

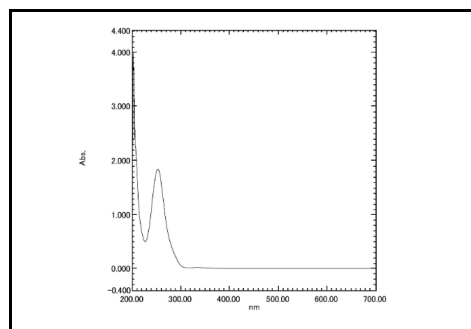
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
3	105	182	77	51	0.01
RI	特記情報				
1649 ± 13 (3)					

○紫外可視吸収スペクトル



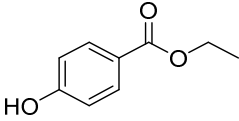
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	5	183	105	77	51	3	0	N/A					N/A	
B														
C														
特記 情報														

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-93	CAS登録番号	120-47-8	構造 
組成式	C9H10O3	分子量	166	
物質名	和名 p-ヒドロキシ安息香酸エチル 英名 Ethyl p-Hydroxybenzoate			

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1225	1	0.002	1	1	0.002	0.002	0.002	600mg/m ² 以下で塗布することができる。

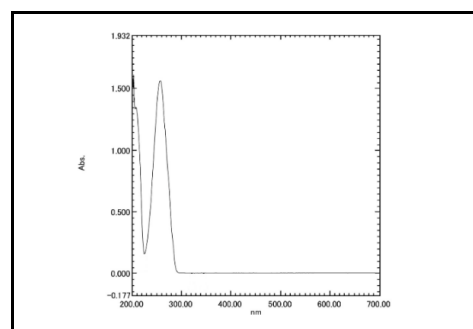
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	121	138	166	93	0.005
RI	特記情報				
1521 ± 5 (4)					

○紫外可視吸収スペクトル



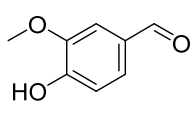
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	2	167	139	121	95	77	N/A	4	165	92	137	<u>65</u>		19
B														
C														
特記情報								下線：条件によっては検出されない場合もある						

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-94	CAS登録番号	121-33-5	構造 
組成式	C8H8O3	分子量	152	
物質名	和名	バニリン		
	英名	Vanillin		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1156	—	—	0.1	0.1	—	—	—	

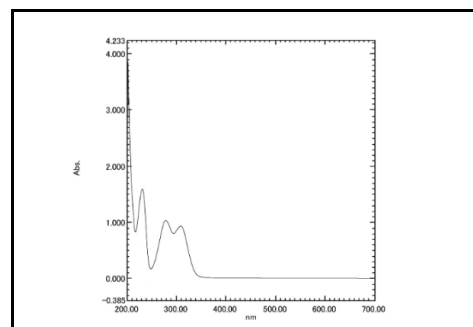
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	152*	151*	123	109	0.007
RI	特記情報				
1402 ± 9 (4)	*どちらでも良い				

○紫外可視吸収スペクトル



○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	5	153	93	125	65	110	87	3	151	136	92	108	N/A	
B														
C														
特記 情報														

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-95	CAS登録番号	122-20-3	構造 
組成式	C9H21NO3	分子量	191	
物質名	和名 トリスプロパノールアミン	英名 Triisopropanolamine		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1056	10	10	10	1	4	1	1	100°Cを超える温度で食品に接触する厚さ0.1mmを超える部分に使用してはならない。

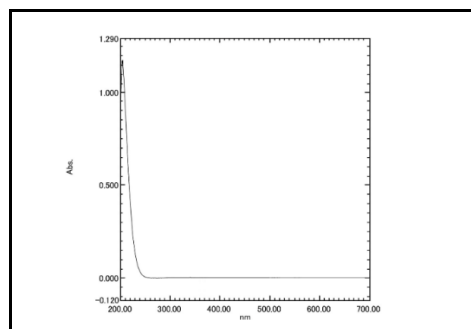
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
3	146	158	88	98	0.4
RI	特記情報				
1435 ± 10 (3)	感度が悪い。				

○紫外可視吸収スペクトル



○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	5	192	174	98	156	116	2	0	N/A					N/A
B														
C														
特記情報														

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-96	CAS登録番号	123-77-3	構造 
組成式	C2H4N4O2	分子量	116	
物質名	和名 アゾジカーボンアミド	英名 azodicarbonamide		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
119	5	5	5	2	5	2	—	

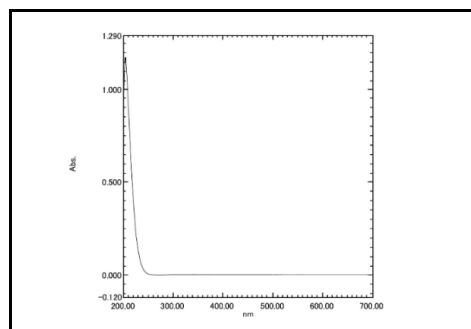
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
0	N/A				N/A
RI	特記情報				
N/A	対象外 (不溶)				

○紫外可視吸収スペクトル



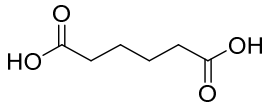
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード							
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	
			定量	定性						定量	定性				
A	0	N/A					N/A	0	N/A						N/A
B															
C															
特記 情報	対象外 (不溶)														

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-97	CAS登録番号	124-04-9	構造	
組成式	C6H10O4	分子量	146		
物質名	和名	アジピン酸			
	英名	Adipic Acid			

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
63	1	—	1.2	2	0.001	0.1	—	

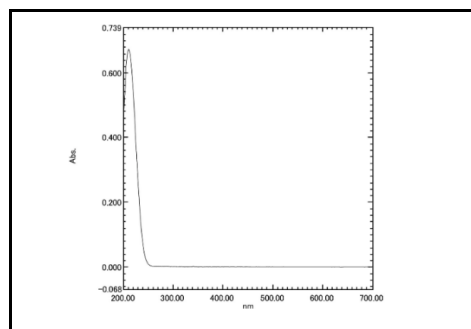
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
2	100	87	110	128	N/A
RI	特記情報				
N/A	感度が悪い。				

○紫外可視吸収スペクトル



○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	3	147	129	111	101	83	18	2	145	101	83	127		N/A
B														
C														
特記 情報	*アンモニア付加体 (M+17) の場合もある。													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-98	CAS登録番号	126-73-8	構造 
組成式	C12H27O4P	分子量	266	
物質名	和名 りん酸トリブチル 英名 Tributyl Phosphate			

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1635	1	0.01	0.5	0.01	—	—	—	

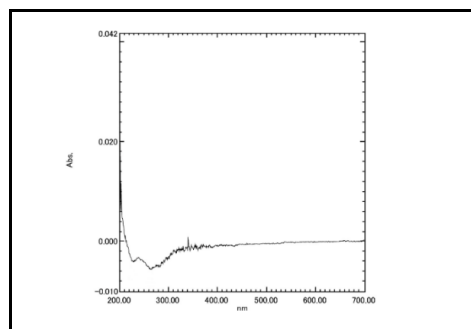
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	99	155	211	125	0.0007
RI	特記情報				
1641 ± 1 (4)					

○紫外可視吸収スペクトル



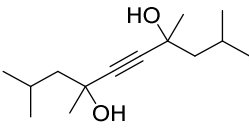
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	5	267	99	155	211	81	1	0	N/A					N/A
B														
C														
特記 情報														

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-99	CAS登録番号	126-86-3	構造 
組成式	C14H26O2	分子量	226	
物質名	和名	2,4,7,9-テトラメチル-5-デシン-4,7-ジオール		
	英名	2,4,7,9-Tetramethyl-5-decyne-4,7-diol		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1019	5	5	5	3	—	—	—	合成樹脂区分1に限り、300mg/m ² 以下、合成樹脂区分3に限り、600mg/m ² 以下で塗布することができる。

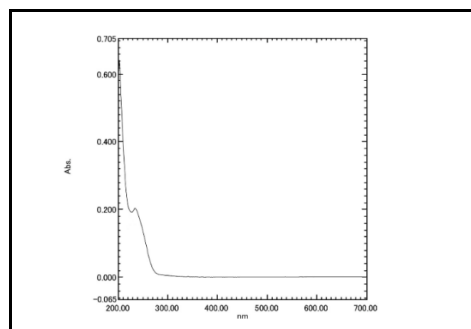
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	109	151	43	169	0.001
RI	特記情報				
1408 ± 1 (4)					

○紫外可視吸収スペクトル



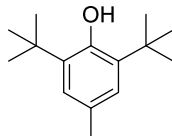
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	5	244	153	191	135	209	5	0	N/A					N/A
B														
C														
特記情報	*アンモニア付加体 (M+17)。													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-100	CAS登録番号	128-37-0	構造 
組成式	C15H24O	分子量	220	
物質名	和名 2,6-ジ- <i>t</i> -ブチル-4-メチルフェノール	英名 2,6-Di- <i>t</i> -butyl-4-methylphenol		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
736	5	5	5	5	5	5	5	合成樹脂区分5及び6を除き、50mg/m ² 以下で塗布することができる。

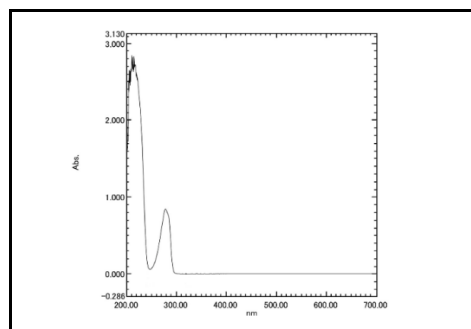
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	205	220	177	145	0.0006
RI	特記情報				
1511 ± 4 (4)					

○紫外可視吸収スペクトル



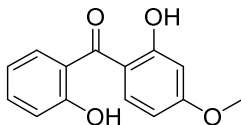
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード							
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	
			定量	定性						定量	定性				
A	0	N/A					N/A	1	219	203	86				N/A
B															
C															
特記情報	対象化合物のイオンが検出されない。							対象化合物のイオンが検出されにくい。							

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-101	CAS登録番号	131-53-3	構造 
組成式	C14H12O4	分子量	244	
物質名	和名 2,2'-ジヒドロキシ-4-メトキシベンゾフェノン	英名 2,2'-Dihydroxy-4-methoxybenzophenone		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
717	0.3	0.3	0.3	0.3	0.3	0.3	0.3	

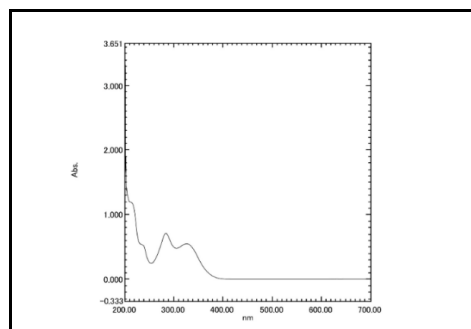
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	244*	227*	121		0.03
RI	特記情報				
2181 ± 21 (4)	*どちらでも測定限界は同程度となる。				

○紫外可視吸収スペクトル



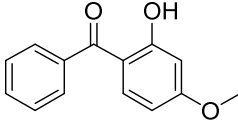
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	5	245	121	151	93	65	4	2	243	123	93	108	199	N/A
B														
C														
特記 情報														

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-102	CAS登録番号	131-57-7	構造 
組成式	C14H12O3	分子量	228	
物質名	和名 2-ヒドロキシ-4-メトキシベンゾフェノン	英名 2-Hydroxy-4-methoxybenzophenone		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1269	0.5	0.3	0.3	0.5	0.3	—	0.3	

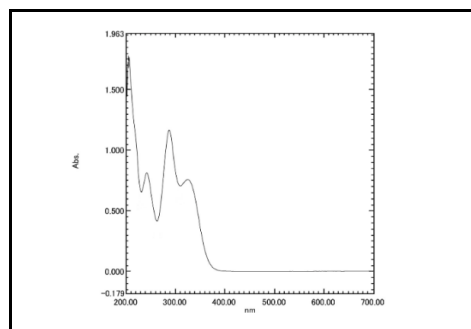
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	227	151	77	105	0.009
RI	特記情報				
2048 ± 20 (4)					

○紫外可視吸収スペクトル



○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	5	229	151	105	77	95	4	0	N/A					N/A
B														
C														
特記 情報														

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-103	CAS登録番号	136-23-2	構造	
組成式	C18H36N2S4Zn	分子量	474		
物質名	和名 ジブチルジチオカルバミン酸亜鉛	英名 Zinc Dibutyldithiocarbamate			

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
730	5	5	5	5	5	5	5	

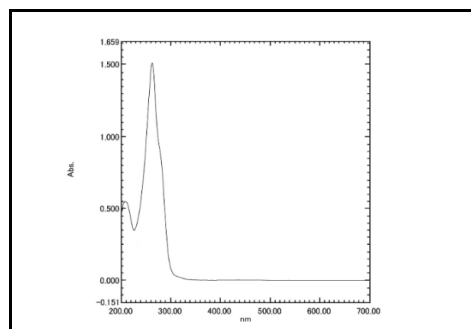
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
0	N/A				N/A
RI	特記情報				
N/A	化合物が不安定なため信頼できるデータが得られなかった。				

○紫外可視吸収スペクトル



○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	4	472 473	172	116	57		66	0	N/A					N/A
B														
C														
特記情報	同位体が複数あるためプリカーサーイオンも複数ある。どれを選択してもプロダクトイオンは同じ。													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-104	CAS登録番号	137-16-6	構造	
組成式	C15H28NO3.Na	分子量	293		
物質名	和名 N-ドデカノイルサルコシン酸ナトリウム 英名 Sodium N-Dodecanoylsarcosinate				

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
97	1.3	1.3	1.3	1.3	1.3	1.3	1.3	

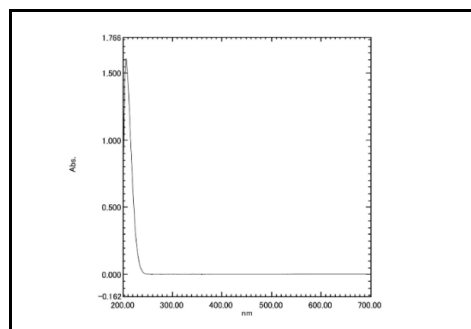
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
0	N/A				N/A
RI	特記情報				
N/A	対象外 (不溶)				

○紫外可視吸収スペクトル



○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	4	272*	90	44	57	<u>123</u>	0.5	2	270	88	226			N/A
B														
C														
特記 情報	*[M-Na+2H] ⁺ 下線：条件によっては検出されない場合もある													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-105	CAS登録番号	141-02-6	構造 
組成式	C20H36O4	分子量	341	
物質名	和名 フマル酸ビス(2-エチルヘキシル)	英名 Bis(2-ethylhexyl) Fumarate		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1360	3	3	3	—	0.03	0.03	0.03	

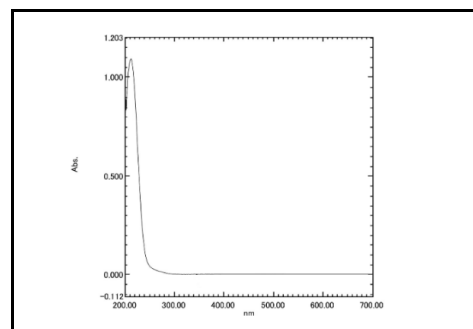
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	112*	100*	211	70	0.007
RI	特記情報				
2222 ± 5 (4)	*どちらでも測定限界は同程度となる。				

○紫外可視吸収スペクトル



○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	2	358	229	71	113	99	N/A	0	N/A					N/A
B														
C														
特記情報	対象化合物のイオンが検出されにくい。													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-106	CAS登録番号	141-43-5	構造 <chem>NCCO</chem>
組成式	C2H7NO	分子量	61	
物質名	和名	2-アミノエタノール		
	英名	2-Aminoethanol		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
126	0.6	0.6	1.3	0.3	0.3	0.3	0.3	油脂及び脂肪性食品に接触する部分に使用してはならない。

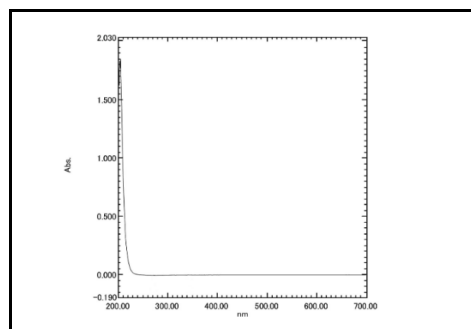
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
0	N/A				N/A
RI	特記情報				
N/A	分析条件が適していない。				

○紫外可視吸収スペクトル



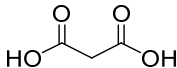
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	5	62	44	45	27		27	0	N/A					N/A
B														
C														
特記 情報														

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-107	CAS登録番号	141-82-2	構造 
組成式	C3H4O4	分子量	104	
物質名	和名 マロン酸	英名 Malonic Acid		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1451	0.5	—	—	—	—	—	—	

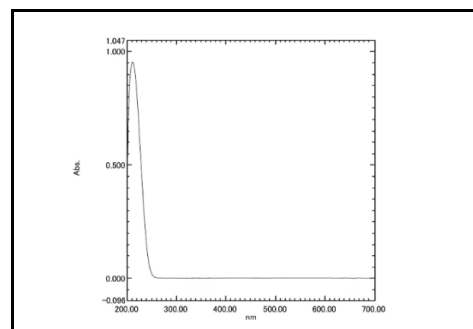
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
0	N/A				N/A
RI	特記情報				
N/A	分析条件が適していない。				

○紫外可視吸収スペクトル



○LC-MS/MS

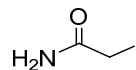
パターン	ポジティブモード							ネガティブモード							
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	
			定量	定性						定量	定性				
A	0	N/A					N/A	3	103	59	41				N/A
B															
C															
特記 情報															

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-108	CAS登録番号	144-48-9	構造
組成式	C2H4INO	分子量	185	
物質名	和名 ヨードアセトアミド	英名 Iodoacetamide		



*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1550	—	0.0005	0.001	—	0.001	0.001	0.001	

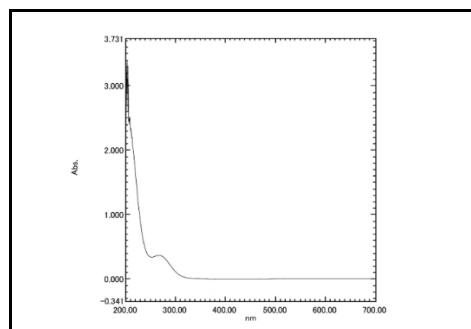
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	185	127	58	142	0.1
RI	特記情報				
1123 ± 7 (3)					

○紫外可視吸収スペクトル



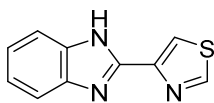
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード						ネガティブモード					
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン			測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン			測定 限界 (ng)
			定量	定性					定量	定性		
A	4	186*	59	43		1700	0	N/A				N/A
B												
C												
特記 情報	*アンモニア付加体 (M+17) の場合もある。											

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-109	CAS登録番号	148-79-8	構造 
組成式	C10H7N3S	分子量	201	
物質名	和名 2-(4-チアゾリル)ベンゾイミダゾール	英名 2-(4-Thiazolyl)benzimidazole		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
982	0.13	0.13	0.5	0.13	0.13	0.13	0.13	13mg/m ² 以下で塗布することができる。

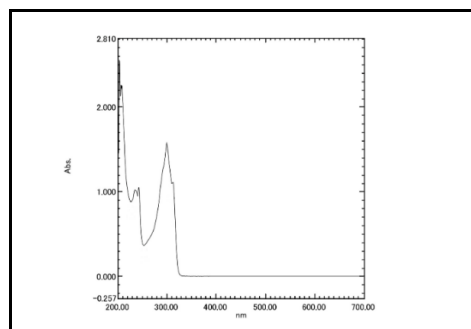
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	201*	174*	129		0.02
RI	特記情報				
2092 ± 28 (4)	*どちらでも測定限界は同程度となる。				

○紫外可視吸収スペクトル



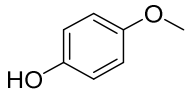
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	5	202	175	131	92	65	2	1	200	173	141	82	156	N/A
B														
C														
特記情報														

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-110	CAS登録番号	150-76-5	構造 
組成式	C7H8O2	分子量	124	
物質名	和名	p-メトキシフェノール		
	英名	p-Methoxyphenol		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1518	1	0.015	1	0.1	0.01	0.01	0.01	

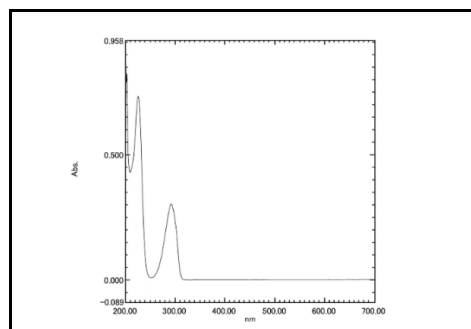
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	109*	124*	81	53	0.001
RI	特記情報				
1215 ± 3 (4)	*どちらでも測定限界は同程度となる				

○紫外可視吸収スペクトル




○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン			測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン			測定 限界 (ng)		
			定量	定性					定量	定性				
A	0	N/A				N/A	0	N/A				N/A		
B														
C														
特記 情報	対象化合物のイオンが検出されない。													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-112	CAS登録番号	288-88-0	構造 
組成式	C2H3N3	分子量	69	
物質名	和名	1,2,4-トリアゾール		
	英名	1,2,4-Triazole		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1054	0.005	0.005	0.005	0.005	0.005	0.005	0.005	合成樹脂区分2、3及び7を除き、1 mg/m ² 以下で塗布することができる。

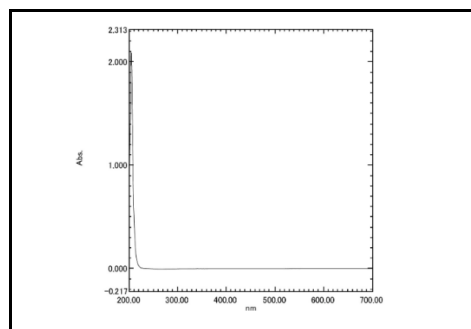
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	69	42	70		0.04
RI	特記情報				
963 ± 6 (4)					

○紫外可視吸収スペクトル



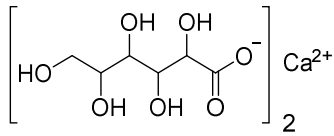
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	5	70	43	28	42		52	0	N/A					N/A
B														
C														
特記情報														

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-113	CAS登録番号	299-28-5	構造 
組成式	C12H22CaO14	分子量	430	
物質名	和名 グルコン酸カルシウム	英名 calcium gluconate		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
538	1.6	0.002	0.5	1	0.002	0.002	0.002	

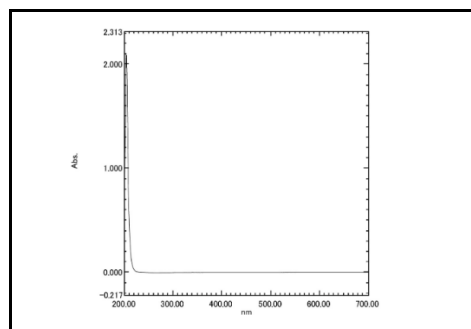
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
0	N/A				N/A
RI	特記情報				
N/A	対象外 (不溶)				

○紫外可視吸収スペクトル



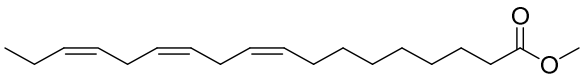
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン			測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン			測定限界 (ng)		
			定量	定性					定量	定性				
A	0	N/A				N/A	0	N/A				N/A		
B														
C														
特記情報	対象外 (不溶)													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-114	CAS登録番号	301-00-8	構造 
組成式	C19H32O2	分子量	292	
物質名	和名 リノレン酸メチル、混合物	英名 Methyl Linolenate, mixture		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
761	30	5	30	30	5	5	5	

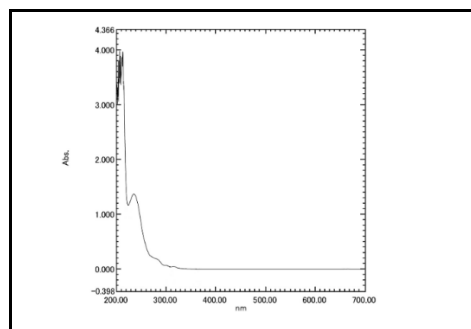
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	79	95	121	222	0.01
RI	特記情報				
2098 ± 8 (4)					

○紫外可視吸収スペクトル



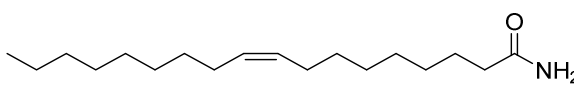
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	5	293*	109	123	261	243	17	0	N/A					N/A
B														
C														
特記情報	*アンモニア付加体 (M+17) の場合もある。													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-115	CAS登録番号	301-02-0	構造  Double bond geometry as shown.
組成式	C18H35NO	分子量	281	
物質名	和名 オレアミド	英名 Oleamide		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
745	50	8	50	6	8	11	50	

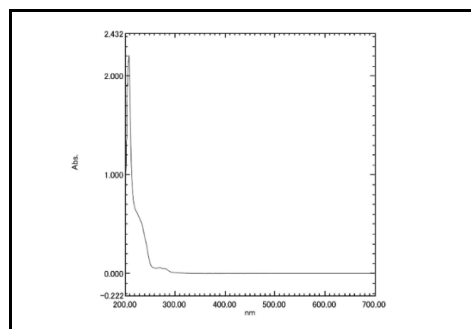
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	59	72	126	112	0.05
RI	特記情報				
2362 ± 11 (4)					

○紫外可視吸収スペクトル



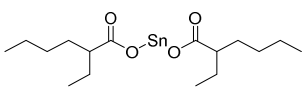
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	5	282	97	83	265	247	4	0	N/A					N/A
B														
C														
特記 情報														

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-116	CAS登録番号	301-10-0	構造 
組成式	C16H30O4Sn	分子量	116	
物質名	和名	2-エチルヘキサン酸すず(II)		
	英名	2-Ethylhexanoic Acid Tin(II) Salt		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
258	5	0.1	0.1	0.1	-	-	-	2-エチルヘキサン酸のスズ塩として

*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
0	N/A				N/A
RI	特記情報				
N/A	対象外 (不溶)				

○紫外可視吸収スペクトル

N/A

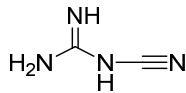
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	0	N/A					N/A	0	N/A					N/A
B														
C														
特記情報	対象外 (不溶)													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-117	CAS登録番号	461-58-5	構造 
組成式	C2H4N4	分子量	84	
物質名	和名	ジシアノジアミド		
	英名	Dicyanodiamide		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
656	1	1	5	—	—	—	—	

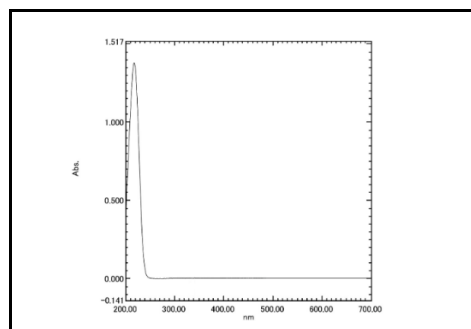
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
0	N/A				N/A
RI	特記情報				
N/A	分析条件が適していない。				

○紫外可視吸収スペクトル



○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード						ネガティブモード					
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン			測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン			測定限界 (ng)
			定量	定性					定量	定性		
A	5	85*	68	43		24	1	83	65	41		N/A
B												
C												
特記情報	*アンモニア付加体 (M+17) の場合もある。											

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-119	CAS登録番号	512-56-1	構造 
組成式	C3H9O4P	分子量	140	
物質名	和名	リン酸トリメチル		
	英名	trimethyl phosphate		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1636	0.25	0.25	0.25	—	0.25	0.25	0.25	

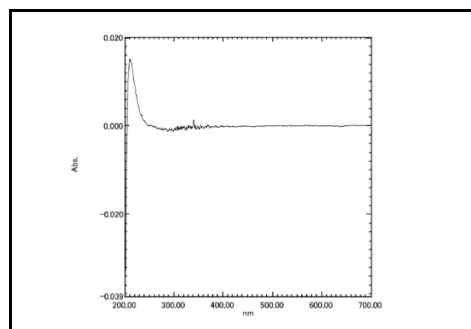
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	110	140	79	95	0.002
RI	特記情報				
930 ± 2 (4)					

○紫外可視吸収スペクトル



○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	5	141*	109	79	95	4	0	N/A					N/A	
B														
C														
特記情報	*アンモニア付加体 (M+17) の場合もある。													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-120	CAS登録番号	540-72-7	構造 <chem>[Na+].[S-]#N</chem>
組成式	CNNaS	分子量	81	
物質名	和名	チオシアン酸ナトリウム		
	英名	Sodium Thiocyanate		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
984	-	-	0.2	-	-	-	-	

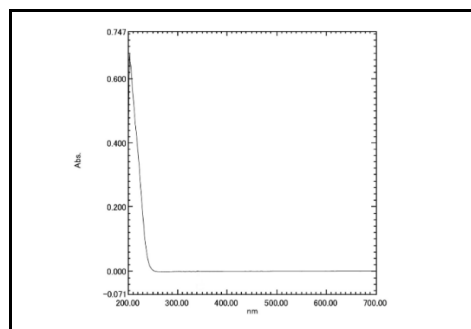
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
0	N/A				N/A
RI	特記情報				
N/A	分析条件が適していない。				

○紫外可視吸収スペクトル



○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン			測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン			測定限界 (ng)		
			定量	定性					定量	定性				
A	0	N/A				N/A	3	58	26	58			N/A	
B														
C														
特記情報								[M-Na]-						

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-121	CAS登録番号	541-02-6	構造 
組成式	C10H30O5Si5	分子量	371	
物質名	和名 デカメチルシクロペンタシロキサン	英名 Decamethylcyclopentasiloxane		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
796	50	50	50	15	50	50	7	36 g / m ² 以下で塗布することができる。

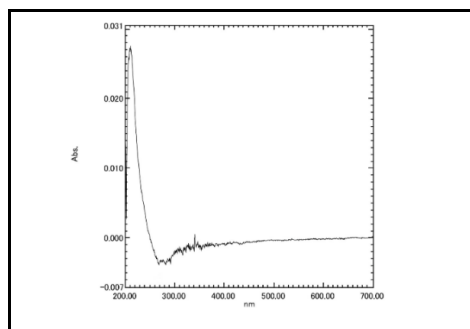
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	355*	267*	73		0.0008
RI	特記情報				
1135 ± 12 (4)	*どちらでも測定限界は同程度となる。 カラム由来成分でもある。				

○紫外可視吸収スペクトル



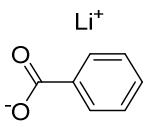
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	0	N/A					N/A	0	N/A					N/A
B														
C														
特記 情報	対象化合物のイオンが検出されない。													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-122	CAS登録番号	553-54-8	構造 
組成式	C7H5LiO2	分子量	128	
物質名	和名 安息香酸リチウム 英名 Lithium Benzoate			

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
209	—	—	—	—	—	0.4	—	

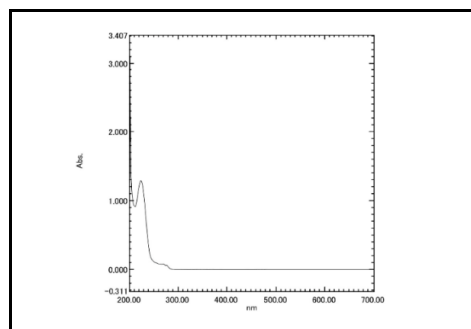
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
0	N/A				N/A
RI	特記情報				
N/A	対象外 (不溶)				

○紫外可視吸収スペクトル



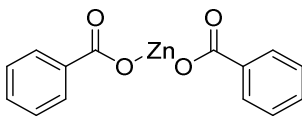
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード							
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	
			定量	定性						定量	定性				
A	0	N/A					N/A	3	121	77	45				N/A
B															
C															
特記 情報															

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-123	CAS登録番号	553-72-0	構造 
組成式	C14H10O4Zn	分子量	308	
物質名	和名 二安息香酸亜鉛	英名 Zinc Dibenzoate		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
208	-	-	-	1	-	-	-	

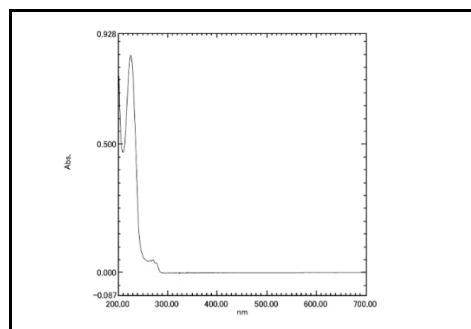
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
0	N/A				N/A
RI	特記情報				
N/A	対象外 (不溶)				

○紫外可視吸収スペクトル



○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード							
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	
			定量	定性						定量	定性				
A	0	N/A					N/A	3	121	77					N/A
B															
C															
特記 情報															

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-124	CAS登録番号	556-67-2	構造 
組成式	C8H24O4Si4	分子量	297	
物質名	和名 オクタメチルシクロテトラシロキサン	英名 Octamethylcyclotetrasiloxane		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
796	50	50	50	15	50	50	7	36 g / m ² 以下で塗布することができる。

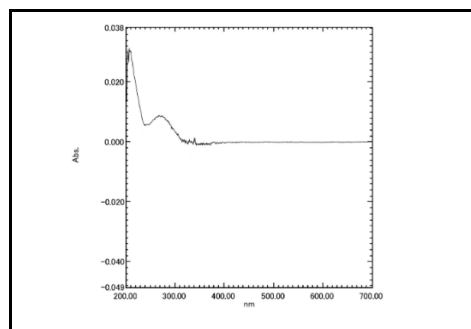
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	281	265	249	193	0.0008
RI	特記情報				
984 ± 9 (4)	*どちらでも測定限界は同程度となる。 カラム由来成分でもある。				

○紫外可視吸収スペクトル



○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	0	N/A					N/A	0	N/A					N/A
B														
C														
特記 情報														

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-125	CAS登録番号	585-88-6	構造 
組成式	C12H24O11	分子量	344	
物質名	和名 マルチトール	英名 maltitol		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1437	—	—	—	1	—	—	—	

*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
0	N/A				N/A
RI	特記情報				
N/A	対象外 (不溶)				

○紫外可視吸収スペクトル

N/A

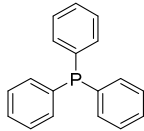
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	0	N/A					N/A	0	N/A					N/A
B														
C														
特記 情報														

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-127	CAS登録番号	603-35-0	構造 
組成式	C18H15P	分子量	262	
物質名	和名	トリフェニルホスフィン		
	英名	Triphenylphosphine		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1081	2	2	2	2	—	—	—	

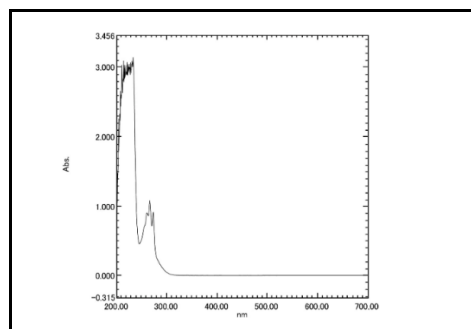
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	262	183	108		0.0006
RI	特記情報				
2180 ± 26 (3)					

○紫外可視吸収スペクトル



○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	3	263	183	152	185		N/A	0	N/A					N/A
B														
C														
特記 情報	化合物の安定性に注意が必要													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-128	CAS登録番号	603-36-1	構造 
組成式	C18H15Sb	分子量	353	
物質名	和名	トリフェニルアンチモン		
	英名	Triphenylantimony		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1080	1	—	—	—	—	—	—	

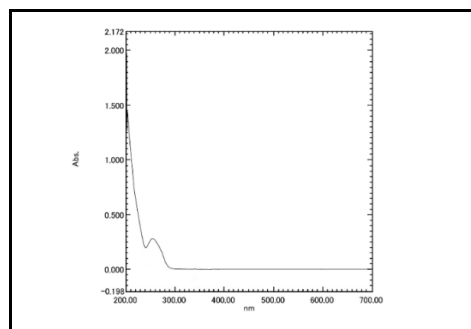
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	198	154	352	275	0.0009
RI	特記情報				
2289 ± 22 (4)					

○紫外可視吸収スペクトル



○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	4	370	155	197	77		N/A	0	N/A					N/A
B														
C														
特記 情報	*アンモニア付加体 (M+17) の場合もある。													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-129	CAS登録番号	627-82-7	構造 
組成式	C6H14O5	分子量	166	
物質名	和名 ジグリセリン	英名 Diglycerol		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
692	—	—	0.001	—	0.001	0.001	0.001	

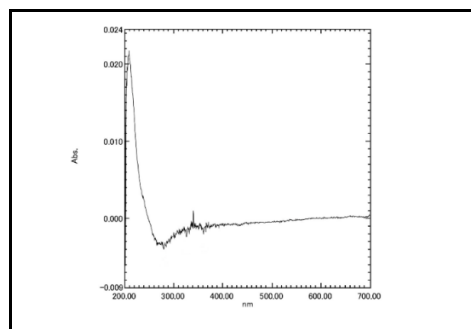
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
0	N/A				N/A
RI	特記情報				
N/A	分析条件が適していない。				

○紫外可視吸収スペクトル



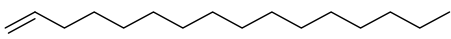
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	5	167	75	131	119	131	23	0	N/A					N/A
B														
C														
特記 情報	*アンモニア付加体 (M+17) の場合もある。													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-130	CAS登録番号	629-73-2	構造 
組成式	C16H32	分子量	224	
物質名	和名	1-ヘキサデセン		
	英名	1-Hexadecene		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1376	—	—	0.02	—	0.02	0.02	0.02	

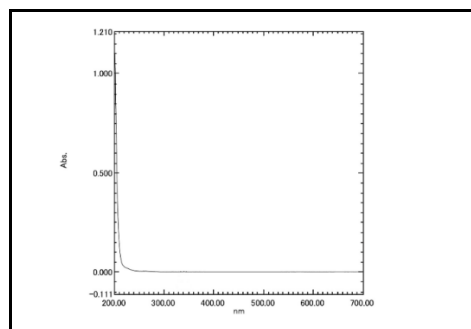
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	83	97	111	125	0.0006
RI	特記情報				
1591 ± 6 (4)					

○紫外可視吸収スペクトル




○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン			測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン			測定限界 (ng)		
			定量	定性					定量	定性				
A	0	N/A				N/A	0	N/A				N/A		
B														
C														
特記情報	対象化合物のイオンが検出されない。													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-131	CAS登録番号	693-98-1	構造 
組成式	C4H6N2	分子量	82	
物質名	和名	2-メチルイミダゾール		
	英名	2-Methylimidazole		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1481	3	0.001	—	—	—	—	—	

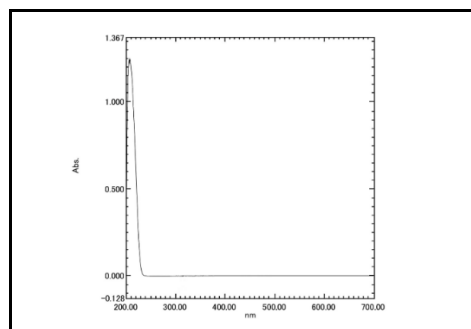
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	82	41			0.07
RI	特記情報				
1005 ± 1 (3)					

○紫外可視吸収スペクトル



○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	4	83	42	56	68		13	0	N/A					N/A
B														
C														
特記 情報														

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-132	CAS登録番号	839-90-7	構造 
組成式	C9H15N3O6	分子量	261	
物質名	和名 イソシアヌル酸トリス(2-ヒドロキシエチル)	英名 Tris(2-hydroxyethyl) Isocyanurate		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
213	-	-	-	2	-	-	-	

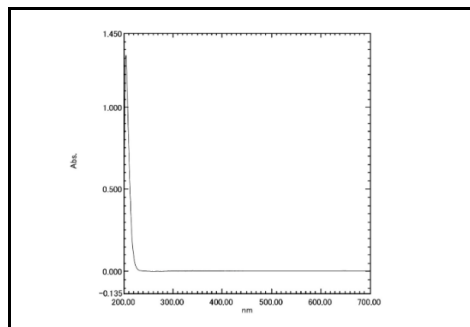
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	231	213	70	100	0.1
RI	特記情報				
2223 ± 9 (4)					

○紫外可視吸収スペクトル



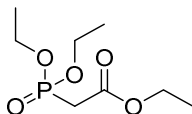
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	5	262*	244	113	182	200	2	0	N/A					N/A
B														
C														
特記情報	*アンモニア付加体 (M+17) の場合もある。													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-133	CAS登録番号	867-13-0	構造 
組成式	C8H17O5P	分子量	224	
物質名	和名	ジエチルホスホノ酢酸エチル		
	英名	Ethyl Diethylphosphonoacetate		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
428	0.14	—	0.07	—	—	—	0.07	

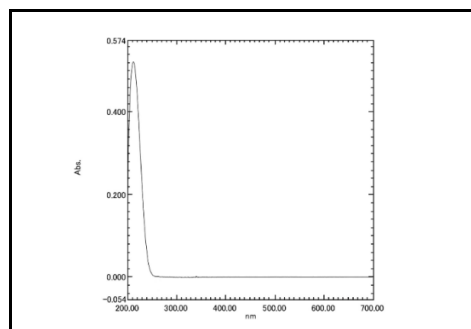
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	197	123	151		0.007
RI	特記情報				
1395 ± 0 (4)					

○紫外可視吸収スペクトル



○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	5	225	123	151	169	105	3	0	N/A					N/A
B														
C														
特記情報														

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-134	CAS登録番号	948-65-2	構造 
組成式	C14H11N	分子量	193	
物質名	和名	2-フェニルインドール		
	英名	2-Phenylindole		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1286	-	-	-	1	-	-	-	

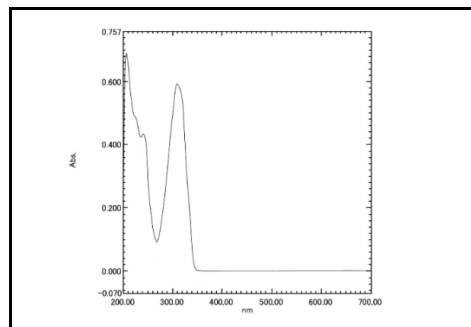
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	193	165	89	96	0.005
RI	特記情報				
2078 ± 24 (4)					

○紫外可視吸収スペクトル



○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	4	194	167	152	116 (117)	166 (167)	3	2	192	116	115			N/A
B														
C														
特記 情報	()							()						

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-135	CAS登録番号	999-21-3	構造 
組成式	C10H12O4	分子量	196	
物質名	和名 マレイン酸ジアリル	英名 Diallyl maleate		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1446	0.5	—	—	—	—	—	—	

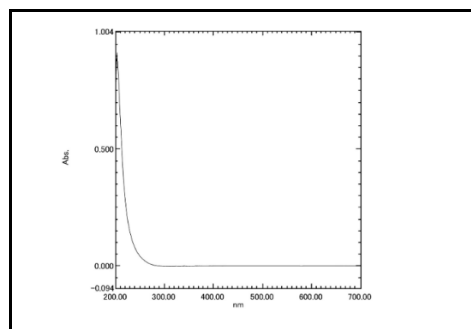
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	99	139	82	54	0.03
RI	特記情報				
1319 ± 2 (4)					

○紫外可視吸収スペクトル



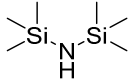
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	5	197	139	41	<u>81</u>	<u>90</u>	2	0	N/A					N/A
B														
C														
特記 情報	下線：条件によっては検出されない場合もある。													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-136	CAS登録番号	999-97-3	構造 
組成式	C6H19NSi2	分子量	161	
物質名	和名 1,1,1,3,3,3-ヘキサメチルジシラザン 英名 1,1,1,3,3,3-Hexamethyldisilazane			

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1379	1	1	1	—	—	—	—	

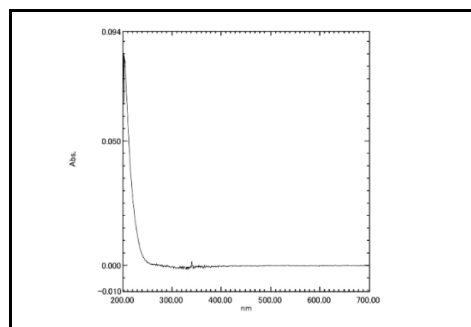
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
3	146	130	100		N/A
RI	特記情報				
N/A	分析条件が適していない。				

○紫外可視吸収スペクトル



○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	0	N/A					N/A	0	N/A					N/A
B														
C														
特記情報														

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-137	CAS登録番号	1071-93-8	構造 
組成式	C6H14N4O2	分子量	174	
物質名	和名	アジポジヒドラジド		
	英名	Adipodihydrazide		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
72	-	-	1.5	-	0.001	0.001	0.001	

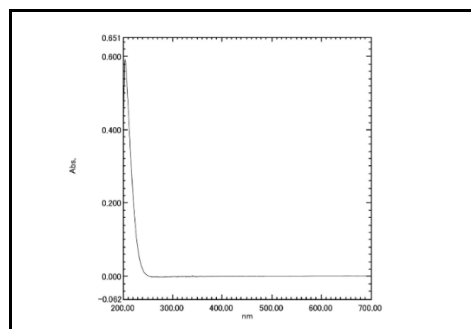
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
0	N/A				N/A
RI	特記情報				
N/A	対象外 (不溶)				

○紫外可視吸収スペクトル



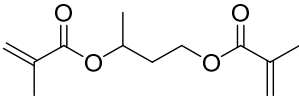
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	5	175	143	115	111	125	23	0	N/A					N/A
B														
C														
特記 情報														

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-138	CAS登録番号	1189-08-8	構造 
組成式	C12H18O4	分子量	226	
物質名	和名 二メタクリル酸1,3-ブタンジオール	英名 1,3-Butanediol Dimethacrylate		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1471	0.3	0.3	0.5	0.3	0.3	0.3	0.3	

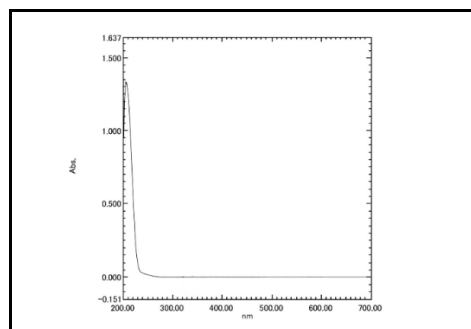
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	69	141	87	95	0.001
RI	特記情報				
1434 ± 2 (4)					

○紫外可視吸収スペクトル



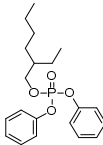
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	5	227	141	87	55	69	3	0	N/A					N/A
B														
C														
特記 情報	*アンモニア付加体 (M+17) の場合もある。													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-139	CAS登録番号	1241-94-7	構造	
組成式	C20H27O4P	分子量	362		
物質名	和名 りん酸2-エチルヘキシルジフェニル	英名 2-Ethylhexyl Diphenyl Phosphate			

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1611	5	—	5	35	0.05	—	—	合成樹脂区分3に限り、200mg/m ² 以下で塗布することができる。

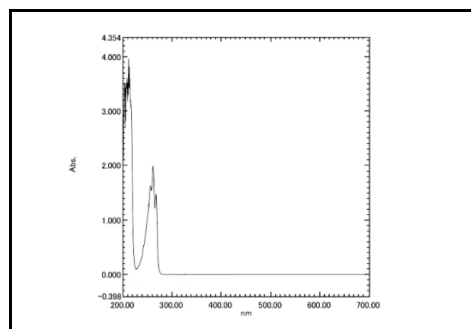
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	251	170	94	362	0.003
RI	特記情報				
2431 ± 11 (4)					

○紫外可視吸収スペクトル



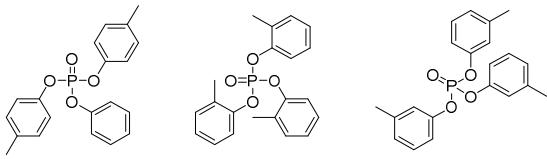
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	4	363	251	77	215	152	1	0	N/A					N/A
B														
C														
特記情報														

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-140	CAS登録番号	1330-78-5	構造 
組成式	C21H21O4P	分子量	368	
物質名	和名	りん酸トリトリル		
	英名	Tritolyl Phosphate		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1633	1	—	0.5	—	—	—	—	

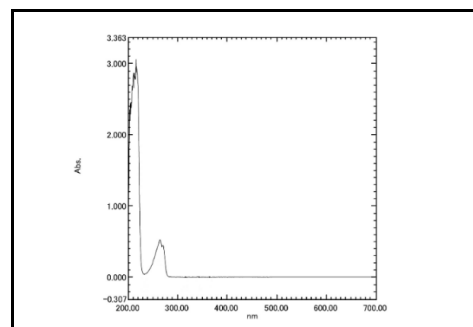
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	368	243	165	261	0.003*
RI	特記情報				
2674 ± 20 (3)	RTちがいで4つつのピークが確認されるが、定量イオンは共通となる。RIは一番大きいピークのみ				

○紫外可視吸収スペクトル



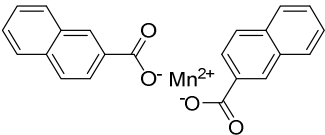
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	4	369	91	165	243	196	0.7	0	N/A					N/A
B														
C														
特記情報														

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-141	CAS登録番号	1336-93-2	構造 
組成式	C22H14MnO4	分子量	397	
物質名	和名 ナフテン酸マンガン (Mn 約6%) 英名 Manganese Naphthenate (Mn ca. 6%)			

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1125	3	—	—	—	—	—	—	

*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
0	N/A				N/A
RI	特記情報				
N/A	分析条件が適していない。				

○紫外可視吸収スペクトル

N/A

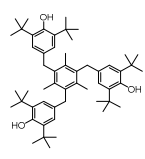
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	0	N/A					N/A	0	N/A					N/A
B														
C														
特記 情報	対象外 (不溶)													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-142	CAS登録番号	1709-70-2	構造 
組成式	C54H78O3	分子量	775	
物質名	和名 2,4,6-トリス(3',5'-ジ-t-ブチル-4'-ヒドロキシベンジル)メシチレン	英名 2,4,6-Tris(3',5'-di-t-butyl-4'-hydroxybenzyl)mesitylene		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1086	1.5	1.5	1.5	1	0.5	0.5	0.5	

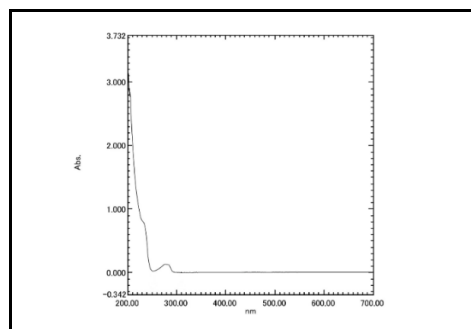
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
0	N/A				N/A
RI	特記情報				
N/A	分析条件が適していない。				

○紫外可視吸収スペクトル



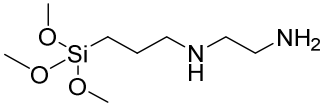
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	4	792*	219	569	513	<u>363</u>	0.03	1	773	718	493			N/A
B														
C														
特記 情報	*793の場合もある。 下線：条件によっては検出されない場合もある													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-143	CAS登録番号	1760-24-3	構造 
組成式	C8H22N2O3Si	分子量	222	
物質名	和名	3-(2-アミノエチルアミノ)プロピルトリメトキシシラン		
	英名	3-(2-Aminoethylamino)propyltrimethoxysilane		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1098	20	20	20	10	20	20	10	合成樹脂区分3に限り、20mg/m ² 以下で塗布することができる。

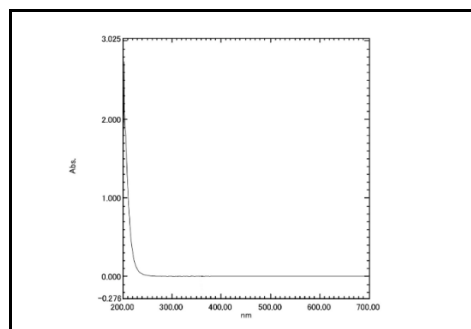
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
0	N/A				N/A
RI	特記情報				
N/A	分析条件が適していない。				

○紫外可視吸収スペクトル



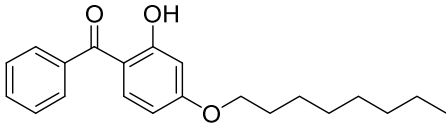
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	2	223	174	159	142	91	N/A	0	N/A					N/A
B														
C														
特記情報														

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-144	CAS登録番号	1843-05-6	構造 
組成式	C21H26O3	分子量	326	
物質名	和名 2-ヒドロキシ-4-(オクチルオキシ)ベンゾフェノン	英名 2-Hydroxy-4-(octyloxy)benzophenone		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1236	2	0.5	1	0.5	0.5	0.5	0.5	

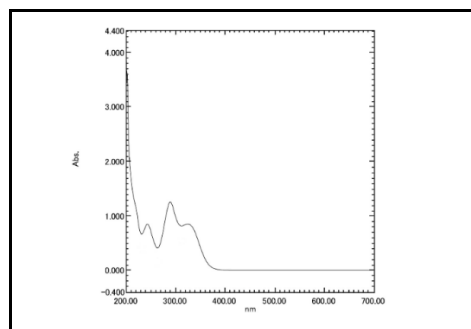
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	213	326	137	105	0.01
RI	特記情報				
2785 ± 22 (4)					

○紫外可視吸収スペクトル



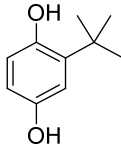
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	5	327	137	105	215	77	0.5	0	N/A					N/A
B														
C														
特記 情報														

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-145	CAS登録番号	1948-33-0	構造	
組成式	C10H14O2	分子量	166		
物質名	和名	t-ブチルヒドロキノン			
	英名	t-Butylhydroquinone			

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1343	1	—	0.3	1	—	—	—	

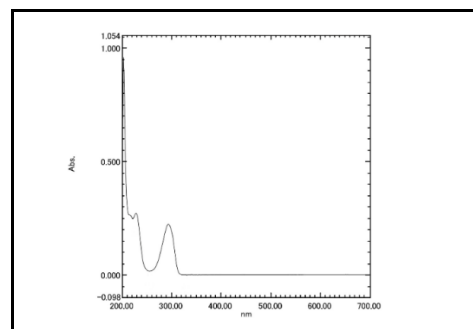
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	123	151	166	77	0.009
RI	特記情報				
1549 ± 6 (4)	分解物と推定されるピークも検出される場合がある。				

○紫外可視吸収スペクトル



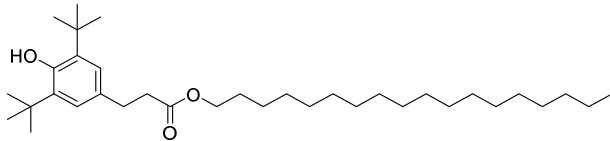
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	0	N/A					N/A	1	165	108	149	135	121	N/A
B														
C														
特記情報	対象化合物のイオンが検出されない。													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-146	CAS登録番号	2082-79-3	構造 
組成式	C35H62O3	分子量	531	
物質名	和名 3-(3,5-ジ-tert-ブチル-4-ヒドロキシフェニル)プロピオン酸オクタデシル	英名 Octadecyl 3-(3,5-Di-tert-butyl-4-hydroxyphenyl)propionate		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1242	2.5	6	2.5	2.5	6	2.5	2.5	

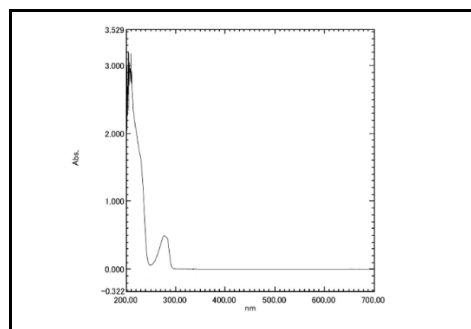
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	531	516	219	147	0.02
RI	特記情報				
3615 ± 18 (4)					

○紫外可視吸収スペクトル



○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	3	548	149	419	167		N/A	1	529	267	41	269	218	N/A
B														
C														
特記 情報	*アンモニア付加体 (M+17) の場合もある。													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-147	CAS登録番号	2386-57-4	構造 <chem>[Na+].[O-]S(=O)(=O)C</chem>
組成式	CH3NaO3S	分子量	118	
物質名	和名	メタンスルホン酸ナトリウム		
	英名	Sodium Methanesulfonate		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1476	—	—	0.001	—	0.01	0.01	0.001	

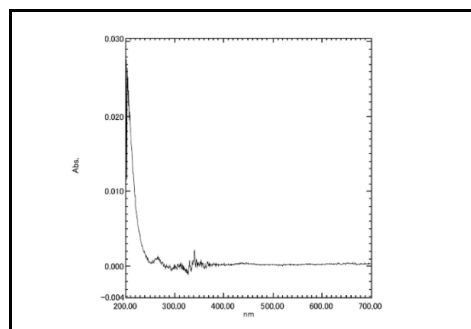
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
0	N/A				N/A
RI	特記情報				
N/A	対象外 (不溶)				

○紫外可視吸収スペクトル



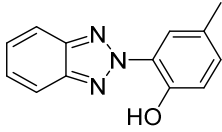
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン			測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン			測定 限界 (ng)		
			定量	定性					定量	定性				
A	0	N/A				N/A	3	95	80	64			N/A	
B														
C														
特記 情報	対象化合物のイオンが検出されない。													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-148	CAS登録番号	2440-22-4	構造	
組成式	C13H11N3O	分子量	225		
物質名	和名 2-(2H-ベンゾトリアゾール-2-イル)-p-クレゾール	英名 2-(2H-Benzotriazol-2-yl)-p-cresol			

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1267	5	5	10	5	5	5	5	

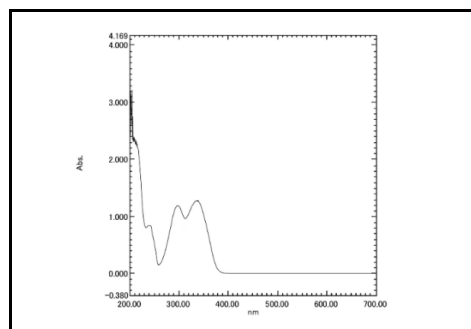
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	225	168	154	196	0.002
RI	特記情報				
2090 ± 24 (4)					

○紫外可視吸収スペクトル



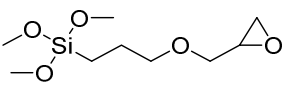
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	5	226	120	107	183	77	6	0	N/A					N/A
B														
C														
特記 情報														

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-149	CAS登録番号	2530-83-8	構造 
組成式	C9H20O5Si	分子量	236	
物質名	和名 3-グリシジルオキシプロピルトリメトキシシラン	英名 3-Glycidyloxypropyltrimethoxysilane		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1099	20	20	20	5	20	20	5	合成樹脂区分3に限り、1 mg/m ² 以下で塗布することができる。

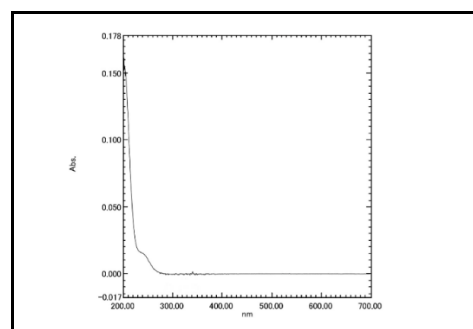
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	121	147	91	107	0.0008
RI	特記情報				
1451 ± 2 (4)	カラム由来成分でもある。				

○紫外可視吸収スペクトル



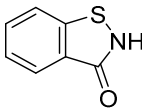
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	4	237*	205	133	173	163	9	0	N/A					N/A
B	1	237*	133	107			9							
C														
特記 情報	*アンモニア付加体の場合もあり。 5													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-150	CAS登録番号	2634-33-5	構造 
組成式	C7H5NOS	分子量	151	
物質名	和名 1,2-ベンジソチアゾール-3(2H)-オン	英名 1,2-Benzisothiazol-3(2h)-one		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1397	1	2	1	0.2	1	1	1	8 g / m ² 以下で塗布することができる。

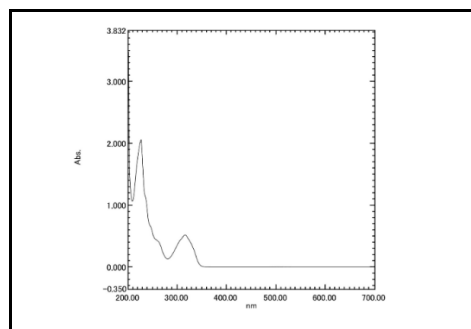
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	151	96	123	108	0.1
RI	特記情報				
1553 ± 15 (4)					

○紫外可視吸収スペクトル



○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	5	152	109	134	105	77	19	0	N/A					N/A
B														
C														
特記 情報														

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-151	CAS登録番号	2680-03-7	構造 
組成式	C5H9NO	分子量	99	
物質名	和名 N,N-ジメチルアクリルアミド	英名 N,N-Dimethylacrylamide		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
775	—	—	0.3	—	—	—	—	

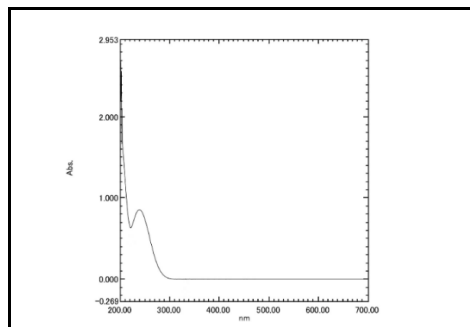
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
3	98	55	72	58	N/A
RI	特記情報				
943 ± 2 (4)	分析条件が適していない。				

○紫外可視吸収スペクトル



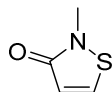
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	5	100	55	46	72	58	11	0	N/A					N/A
B														
C														
特記 情報														

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-152	CAS登録番号	2682-20-4	構造 
組成式	C4H5NOS	分子量	115	
物質名	和名 2-メチル-4-イソチアゾリン-3-オン, 50% aqueous solution	英名 2-Methyl-4-isothiazoline-3-one, 50% aqueous solution		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1479	1	1	1	1	1	1	1	5 mg/m ² 以下で塗布することができる。

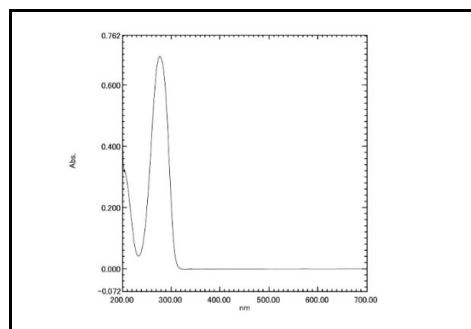
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	115	87	58	57	0.01
RI	特記情報				
1174 ± 10 (3)					

○紫外可視吸収スペクトル



○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	5	116	101	71	85	58	126	0	N/A					N/A
B														
C														
特記 情報														

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-153	CAS登録番号	2809-21-4	構造	
組成式	C2H8O7P2	分子量	206		
物質名	和名	エチドロン酸			
	英名	Etidronate			

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1228	1.6	—	0.2	—	0.001	0.001	0.001	

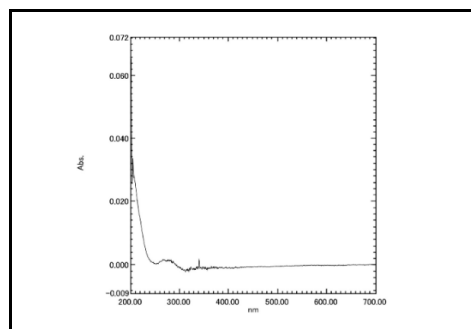
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
0	N/A				N/A
RI	特記情報				
N/A	分析条件が適していない。				

○紫外可視吸収スペクトル



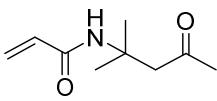
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン			測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン			測定 限界 (ng)		
			定量	定性					定量	定性				
A	0	N/A				N/A	0	N/A				N/A		
B														
C														
特記 情報	対象化合物のイオンが検出されない。													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-155	CAS登録番号	2873-97-4	構造 
組成式	C9H15NO2	分子量	169	
物質名	和名 ジアセトンアクリルアミド	英名 Diacetone Acrylamide		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
652	—	—	0.5	—	—	—	—	

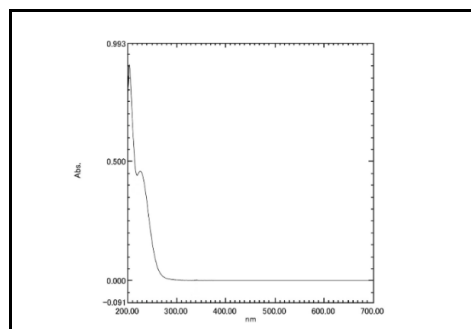
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	112	126	154	58	0.008
RI	特記情報				
1243 ± 3 (4)					

○紫外可視吸収スペクトル



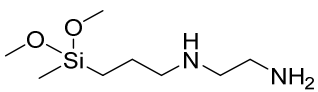
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	5	170	99	72	112	58	0.3	0	N/A					N/A
B														
C														
特記 情報														

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-	CAS登録番号	3069-29-2	構造 
組成式	C8H22N2O2Si	分子量	206	
物質名	和名 3-(2-アミノエチルアミノ)プロピルメチルジメトキシシラン	英名 3-(2-Aminoethylamino)propylmethylmethoxydimethylsilane		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
127	—	—	0.001	—	0.001	0.001	0.4	

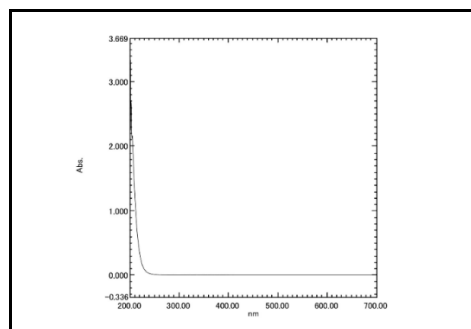
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	144	231	105	176	0.03
RI	特記情報				
1569 ± 5 (3)	アセトン溶液の場合アセトンの反応物が生成するため、他の溶媒を使用した場合と結果が異なる可能性がある。				

○紫外可視吸収スペクトル



○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	3	207	158	143	105	126	N/A	0	N/A					N/A
B														
C														
特記情報														

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-157	CAS登録番号	3129-91-7	構造 
組成式	C12H24N2O2	分子量	228	
物質名	和名 ジシクロヘキシルアミン亜硝酸塩	英名 Dicyclohexylamine Nitrite		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
82	1.6	—	0.003	—	0.003	—	—	

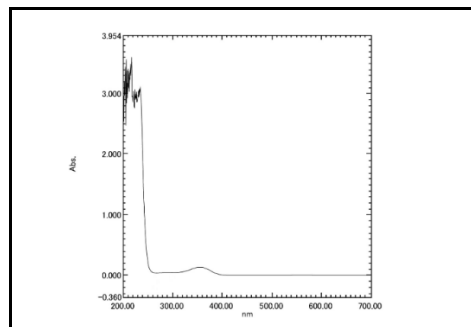
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
0	N/A				N/A
RI	特記情報				
N/A	対象外 (不溶)				

○紫外可視吸収スペクトル



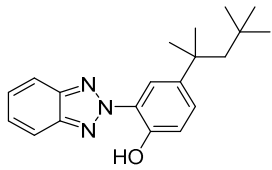
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	4	182	100	83	55		2	0	N/A					N/A
B														
C														
特記 情報														

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-158	CAS登録番号	3147-75-9	構造 
組成式	C20H25N3O	分子量	323	
物質名	和名 2-(2H-ベンゾトリアゾール-2-イル)-4-(1,1,3,3-テトラメチルブチル)フェノール	英名 2-(2H-Benzotriazol-2-yl)-4-(1,1,3,3-tetramethylbutyl)phenol		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1402	10	10	10	5	—	0.3	—	合成樹脂区分 2、3 及び 5 を除き、200mg/m ² 以下で塗布することができる。

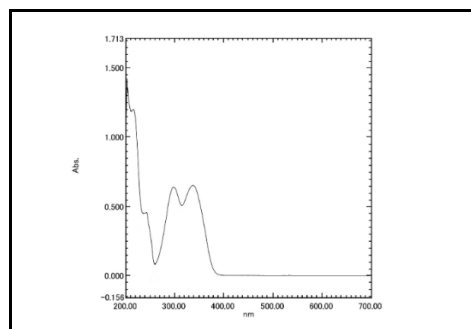
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	252	323	105	224	0.002
RI	特記情報				
2598 ± 27 (4)					

○紫外可視吸収スペクトル



○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	5	324	212	57	92	134	1	0	N/A					N/A
B														
C														
特記情報														

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-159	CAS登録番号	3524-68-3	構造	
組成式	C14H18O7	分子量	298		
物質名	和名 トリアクリル酸ペンタエリスリトール	英名 2-((Acryloyloxy)methyl)-2-(hydroxymethyl)propane-1,3-diyl diacrylate			

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1053	—	—	0.5	—	—	—	—	

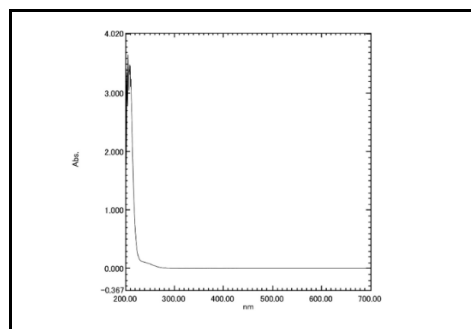
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	55	127	81	196	0.004*
RI	特記情報				
1938 ± 2 (3)	異性体混合物のため2本のピークがでるが、スペクトルはほぼ同じ。				

○紫外可視吸収スペクトル



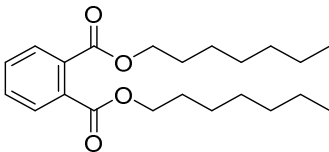
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	5	299*	227	83	125	281	2	0	N/A					N/A
B														
C														
特記情報	*アンモニア付加体 (M+17) の場合もある。													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-160	CAS登録番号	3648-21-3	構造 
組成式	C22H34O4	分子量	363	
物質名	和名 フタル酸ジヘプチル 英名 Diheptyl phthalate			

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1318	—	—	—	30	—	—	—	

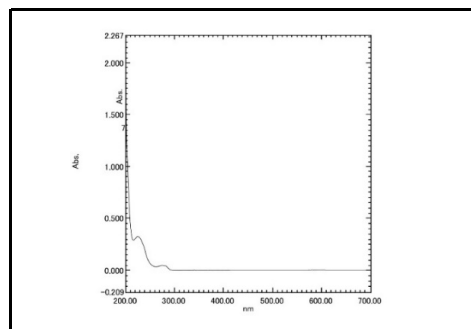
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	149	265	247	104	0.007
RI	特記情報				
2537 ± 10 (4)					

○紫外可視吸収スペクトル



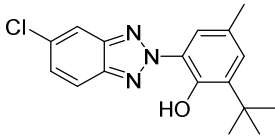
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	5	363	149	247	121	57	2	0	N/A					N/A
B														
C														
特記 情報														

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-161	CAS登録番号	3896-11-5	構造	
組成式	C17H18ClN3O	分子量	316		
物質名	和名 2-(5-クロロ-2-ベンゾトリアゾリル)-6-t-ブチル-p-クレゾール	英名 2-(5-Chloro-2-benzotriazolyl)-6-t-butyl-p-cresol			

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1255	1	1	0.5	0.5	0.5	0.5	0.45	

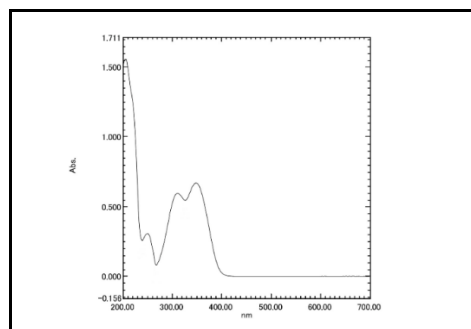
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	300	315	119	272	0.001
RI	特記情報				
2571 ± 24 (4)					

○紫外可視吸収スペクトル



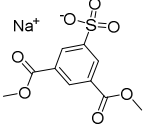
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	2	316	260	107	154	57	N/A	1	314	263	229	152	145	N/A
B														
C														
特記情報														

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-162	CAS登録番号	3965-55-7	構造 
組成式	C10H9NaO7S	分子量	296	
物質名	和名 5-スルホイソフタル酸ジメチルナトリウム 英名 Sodium Dimethyl 5-Sulfoisophthalate			

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
932	5	—	2	0.5	—	—	—	

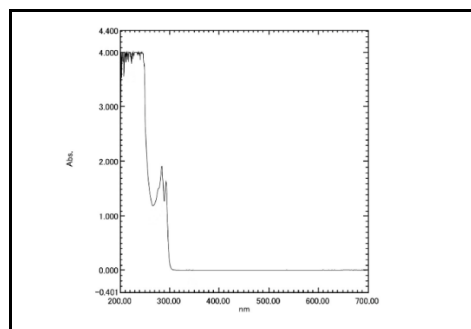
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン				測定限界 (ng)
0	N/A					N/A
RI	特記情報					
N/A	対象外 (不溶)					

○紫外可視吸収スペクトル



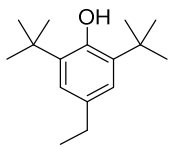
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	3	273	150	209	214	80	N/A	1	273	150	209	214	135	N/A
B														
C														
特記 情報														

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-163	CAS登録番号	4130-42-1	構造 
組成式	C16H26O	分子量	234	
物質名	和名 2,6-ジ- <i>t</i> -ブチル-4-エチルフェノール	英名 2,6-Di- <i>t</i> -butyl-4-ethylphenol		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
729	0.2	0.1	0.1	—	0.1	0.1	—	酒類に接触する部分に使用してはならない。

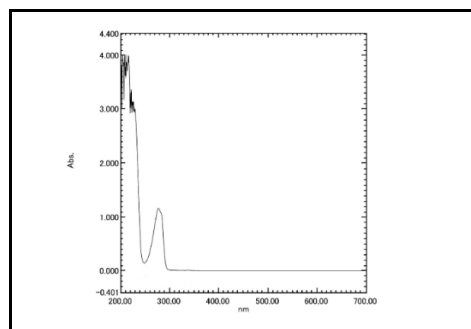
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	219	191	234	159	0.0004
RI	特記情報				
1561 ± 3 (4)					

○紫外可視吸収スペクトル



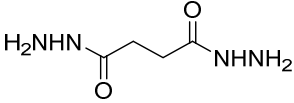
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	0	N/A					N/A	1	233	187	218	202	159	N/A
B														
C														
特記情報														

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-164	CAS登録番号	4146-43-4	構造 
組成式	C4H10N4O2	分子量	146	
物質名	和名	コハク酸ジヒドラジド		
	英名	succinic dihydrazide		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
無し								

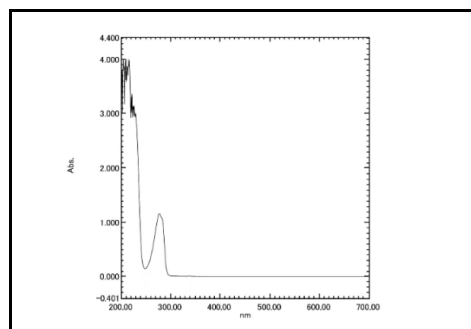
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
0	N/A				N/A
RI	特記情報				
N/A	対象外 (不溶)				

○紫外可視吸収スペクトル



○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	0	N/A					N/A	0	N/A					N/A
B														
C														
特記情報														

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-165	CAS登録番号	4221-80-1	構造 
組成式	C29H42O3	分子量	439	
物質名	和名 3,5-ジ-tert-ブチル-4-ヒドロキシ安息香酸2,4-ジ-tert-ブチルフェニル	英名 2,4-Di-tert-butylphenyl 3,5-Di-tert-butyl-4-hydroxybenzoate		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1237	1	0.3	0.3	—	0.3	0.5	—	油脂及び脂肪性食品に接触する部分に使用してはならない。

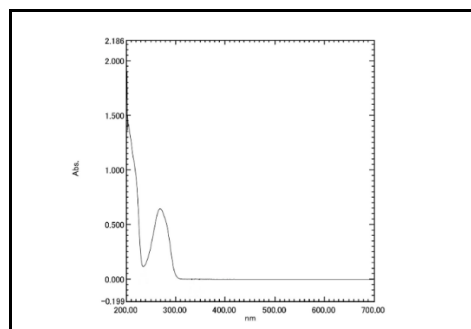
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	233	217	175	190	0.0007
RI	特記情報				
2894 ± 4 (3)					

○紫外可視吸収スペクトル



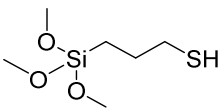
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	4	439	233	383	217	149	0.7	1	437	205	187	149		N/A
B	1	440	234	384	217	149	0.7							
C														
特記情報														

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-166	CAS登録番号	4420-74-0	構造 
組成式	C6H16O3SSi	分子量	196	
物質名	和名 (3-メルカプトプロピル)トリメトキシシラン	英名 (3-Mercaptopropyl)trimethoxysilane		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1096	10	10	10	3	3	3	3	

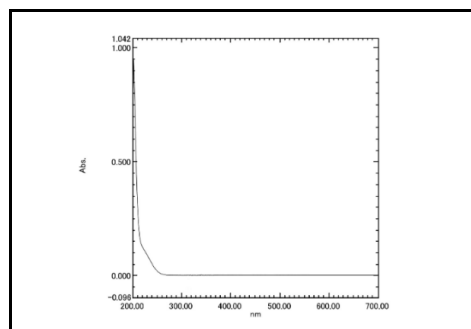
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	164	121	91	123	0.006
RI	特記情報				
1195 ± 6 (4)					

○紫外可視吸収スペクトル



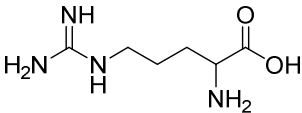
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	2	197*	133	165			N/A	0	N/A					N/A
B	1	393**	121	361	163	197	N/A							
C														
特記情報	*アンモニア付加体 (M+17) の場合もある。 **二量体のイオン。													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-167	CAS登録番号	74-79-3	構造 
組成式	C6H14N4O2	分子量	174	
物質名	和名	L-アルギニン		
	英名	L-arginine		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
172	—	0.5	—	—	—	—	—	合成樹脂区分2に限り、600mg/m ² 以下で塗布することができる。

*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
0	N/A				N/A
RI	特記情報				
N/A	対象外 (不溶)				

○紫外可視吸収スペクトル

N/A

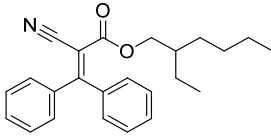
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	1	175	70		116	130	N/A	0	N/A					N/A
B														
C														
特記情報														

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-168	CAS登録番号	6197-30-4	構造	
組成式	C24H27NO2	分子量	361		
物質名	和名 2-シアノ-3,3-ジフェニルアクリル酸2-エチルヘキシル	英名 2-Ethylhexyl 2-Cyano-3,3-diphenylacrylate			

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
658	—	—	—	—	—	—	0.5	

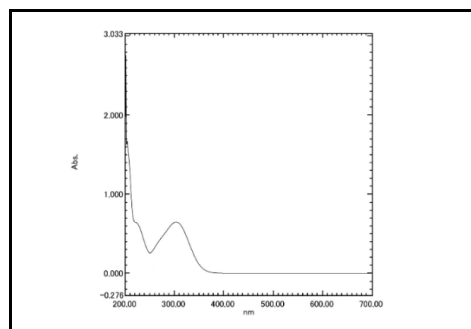
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	204	232	250	360	0.004
RI	特記情報				
2667 ± 7 (4)					

○紫外可視吸収スペクトル



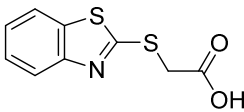
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	5	362*	250	232	204	176	0.9	0	N/A					N/A
B														
C														
特記情報	*アンモニア付加体 (M+17) の場合もある。													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-169	CAS登録番号	6295-57-4	構造 
組成式	C9H7NO2S2	分子量	225	
物質名	和名 (2-ベンゾチアゾリルチオ)酢酸	英名 (2-Benzothiazolylthio)acetic Acid		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1400	—	0.002	0.002	—	0.002	0.002	0.002	

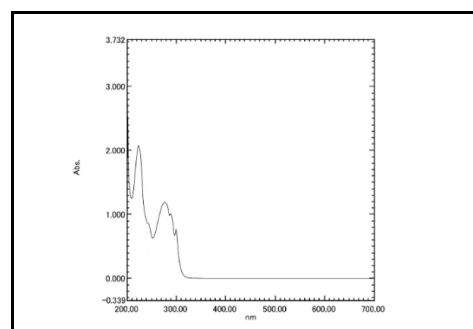
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
0	N/A				N/A
RI	特記情報				
N/A	分析条件が適していない。				

○紫外可視吸収スペクトル



○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	5	226	180	136	167	208	3	0	N/A					N/A
B														
C														
特記 情報														

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-170	CAS登録番号	6317-18-6	構造 <chem>N#N=C=S</chem>
組成式	C3H2N2S2	分子量	130	
物質名	和名 ジチオシアン酸メチレン	英名 Methylene Dithiocyanate		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1505	0.2	0.2	0.2	—	—	—	0.002	

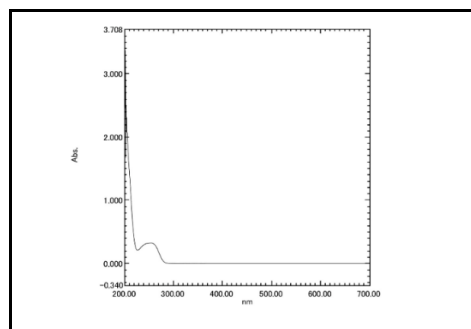
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	72	130	45	58	0.03*
RI	特記情報				
1273 ± 4 (4)	測定限界 *検量線の直線性が悪いため参考値。				

○紫外可視吸収スペクトル



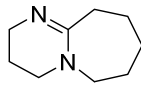
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	0	N/A					N/A	0	N/A					N/A
B														
C														
特記 情報	対象化合物のイオンが検出されない。													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-171	CAS登録番号	6674-22-2	構造 
組成式	C9H16N2	分子量	152	
物質名	和名 1,8-ジアザビシクロ[5.4.0]ウンデカ-7-エン	英名 1,8-Diazabicyclo[5.4.0]undec-7-ene		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
651	—	—	0.3	—	—	—	—	

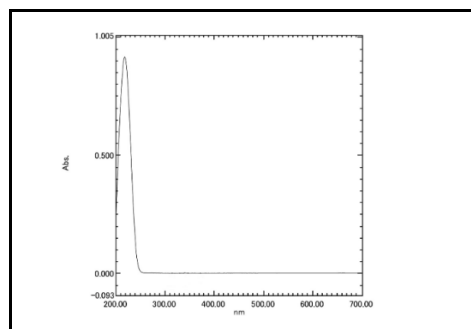
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	151	123	96	137	0.5
RI	特記情報				
1441 ± 15 (4)					

○紫外可視吸収スペクトル



○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	5	153	96	125	111	69	N/A	0	N/A					N/A
B														
C														
特記 情報														

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-172	CAS登録番号	6683-19-8	構造
組成式	C73H108O12	分子量	1178	
物質名	和名 ペンタエリトリールテトラキス[3-(3,5-ジ-t-ブチル-4-ヒドロキシフェニル)プロピオナート]	英名 Pentaerythritol Tetrakis[3-(3,5-di-t-butyl-4-hydroxyphenyl)propionate]		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1008	5	50	50	5	50	50	5	

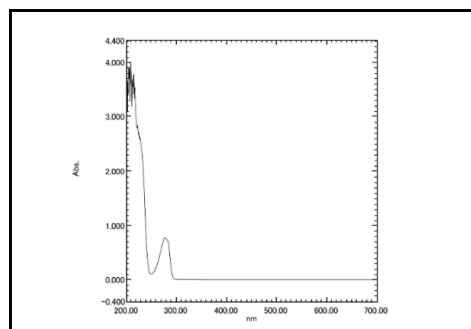
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
0	N/A				N/A
RI	特記情報				
N/A	分析条件が適していない。				

○紫外可視吸収スペクトル



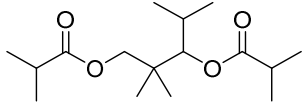
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	5	1195*	219**	563**	163	619	0.1	0	N/A					N/A
B														
C														
特記情報	*アンモニア付加体 (M+17) の場合もある。 **逆の場合もあるが同程度の測定限界となる。													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-173	CAS登録番号	6846-50-0	構造 
組成式	C16H30O4	分子量	286	
物質名	和名	2,2,4-トリメチル-1,3-ペンタンジオールジイソブチレート		
	英名	2,2,4-Trimethyl-1,3-pentanediol Diisobutyrate		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
223	20	10	20	15	—	—	—	

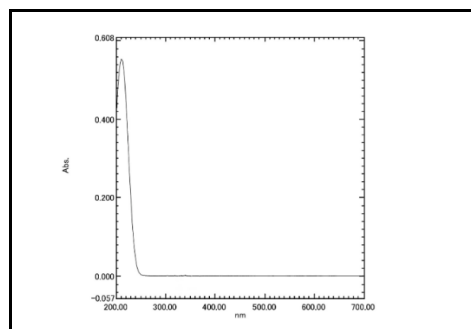
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	243*	71*	159	173	0.008
RI	特記情報				
1593 ± 2 (4)	*バックグラウンドピークの影響が少ないm/z243を定量イオンとした。m/z71の場合測定限界が下がる場合もある。				

○紫外可視吸収スペクトル



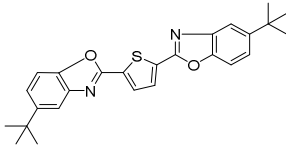
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード						ネガティブモード					
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン			測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン			測定限界 (ng)
			定量	定性					定量	定性		
A	5	287*	111**	199**	69	3	0	N/A				N/A
B												
C												
特記情報	*アンモニア付加体 (M+17) の場合もある。 **逆の場合もあるが同程度の測定限界となる。											

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-175	CAS登録番号	7128-64-5	構造 
組成式	C26H26N2O2S	分子量	431	
物質名	和名 2,5-ビス(5-tert-ブチル-2-ベンゾキサゾリル)チオフェン	英名 2,5-Bis(5-tert-butyl-2-benzoxazolyl)thiophene		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1216	1	1	1	0.05	0.05	0.05	0.03	合成樹脂区分3の場合、酒類に接触する部分に使用してはならない。

*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	430	415	200	267	0.01
RI	特記情報				
3895 ± 26 (4)					

○紫外可視吸収スペクトル

N/A

○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	0	N/A					N/A	0	N/A					N/A
B														
C														
特記情報														

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-177	CAS登録番号	8012-89-3	構造			
組成式	不明	分子量	不明	不明			
物質名	和名	ミツロウ					
	英名	bees wax					

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1455	5	5	5	5	-	-	5	

*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
0	N/A				N/A
RI	特記情報				
N/A	対象外 (不溶)				

○紫外可視吸収スペクトル

N/A

○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	0	N/A					N/A	0	N/A					N/A
B														
C														
特記情報	対象外 (不溶)													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-178	CAS登録番号	8015-86-9	構造
組成式	不明	分子量	不明	不明
物質名	和名	カルナバロウ		
	英名	carnauba wax		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
488	10	10	20	10	5	5	5	合成樹脂区分1及び7に限り100mg/m ² 以下、合成樹脂区分3に限り1g/m ² 以下で塗布することができる。

*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
0	N/A				N/A
RI	特記情報				
N/A	対象外 (不溶)				

○紫外可視吸収スペクトル

N/A

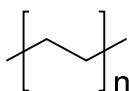
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	0	N/A					N/A	0	N/A					N/A
B														
C														
特記情報	対象外 (不溶)													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-179	CAS登録番号	9002-88-4	構造 
組成式	不明	分子量	不明	
物質名	和名	ポリエチレン		
	英名	polyethylene		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1429	50	50	50	50	50	50	50	ポリエチレンワックスとして。 36 g / m ² 以下で塗布することができる。

*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
0	N/A				N/A
RI	特記情報				
N/A	対象外 (不溶)				

○紫外可視吸収スペクトル

N/A

○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	0	N/A					N/A	0	N/A					N/A
B														
C														
特記 情報	対象外 (不溶)													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-180	CAS登録番号	9004-65-3	構造	
組成式	不明	分子量	不明		
物質名	和名 ヒドロキシプロピルメチルセルロース	英名 hydroxypropyl methyl cellulose			

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1260	5	3	30	5	3	3	3	600 mg/m ² 以下で塗布することができる。

*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
0	N/A				N/A
RI	特記情報				
N/A	対象外 (不溶)				

○紫外可視吸収スペクトル

N/A

○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	0	N/A					N/A	0	N/A					N/A
B														
C														
特記 情報	対象外 (不溶)													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-187	CAS登録番号	9005-71-4	構造
組成式	750	分子量	750	不明
物質名	和名	ポリオキシエチレン(20)ソルビタントリステアレート		
	英名	Polyoxyethylene(20) Sorbitan Tristearate(Tween® 65)		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
750	50	50	10	10	10	10	10	600mg/m ² 以下で塗布することができる。

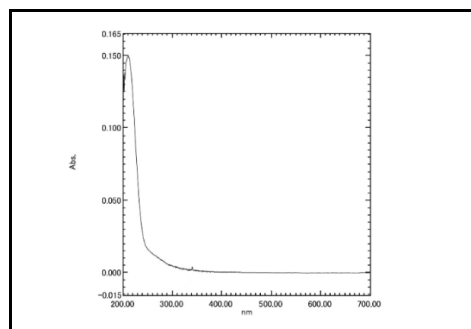
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
0	N/A				N/A
RI	特記情報				
N/A	分析条件が適していない。				

○紫外可視吸収スペクトル



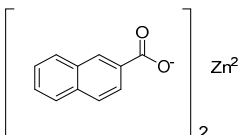
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	1	653	311	283	133	177	N/A	0	N/A					N/A
B	1	654	311	133	177		N/A							
C	1	1861	311	443			N/A							
特記情報	ポリマーのためプリカーサーイオンは複数ありが、フラグメントイオンは共通のものが得られることが多い。													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-188	CAS登録番号	12001-85-3	構造
組成式	2(C ₁₁ H ₇ O ₂).Zn	分子量	320	
物質名	和名 ナフテン酸亜鉛 (亜鉛 約8%)	英名 Zinc Naphthenate (Zn ca. 8%)		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1121	3	—	—	1	—	—	—	

*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
0	N/A				N/A
RI	特記情報				
N/A	分析条件が適していない。				

○紫外可視吸収スペクトル

N/A

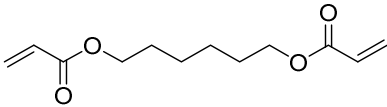
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	0	N/A					N/A	0	N/A					N/A
B														
C														
特記 情報	対象外													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-189	CAS登録番号	13048-33-4	構造 
組成式	C12H18O4	分子量	226	
物質名	和名	ジアクリル酸1,6-ヘキサンジオール		
	英名	1,6-Hexanediol diacrylate		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
41	—	—	0.5	—	—	—	—	

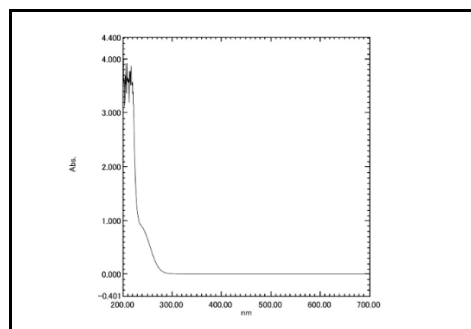
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	82	55	67	99	0.003
RI	特記情報				
1581 ± 1 (3)					

○紫外可視吸収スペクトル



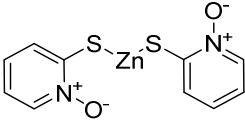
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	5	227	83	55	<u>73</u>	<u>155</u>	0.7	0	N/A					N/A
B														
C														
特記 情報	*アンモニア付加体 (M+17) の場合もある。 下線：条件によっては検出されない場合もある。													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-190	CAS登録番号	13463-41-7	構造 
組成式	C10H8N2O2S2Zn	分子量	317	
物質名	和名 ジンクピリチオン	英名 zinc pyriothione		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1280	0.8	0.8	0.8	1	1	0.8	0.8	80 mg/m ² 以下で塗布することができる。

*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
0	N/A				N/A
RI	特記情報				
N/A	対象外 (不溶)				

○紫外可視吸収スペクトル

N/A

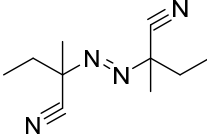
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	0	N/A					N/A	0	N/A					N/A
B														
C														
特記 情報	対象外 (不溶)													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-191	CAS登録番号	13472-08-7	構造 
組成式	C10H16N4	分子量	192	
物質名	和名 2,2'-アゾビス(2-メチルブチロニトリル)	英名 2,2'-Azobis(2-methylbutyronitrile)		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
120	1.8	1.8	1.8	1.8	1.8	1.8	1.8	

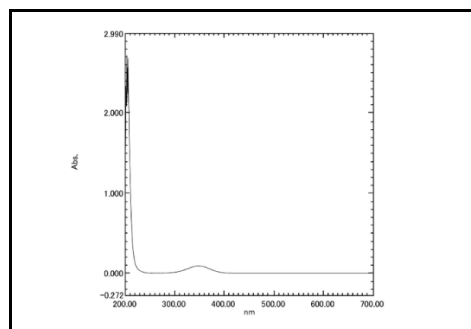
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	107	135	83	68	0.008
RI	特記情報				
1252 ± 3 (4)					

○紫外可視吸収スペクトル



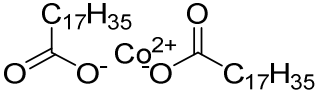
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	3	210*	100	138	82	110	N/A	0	N/A					N/A
B														
C														
特記情報	*アンモニア付加体 (M+17)。化合物の安定性に注意が必要。													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-192	CAS登録番号	13586-84-0	構造 
組成式	C36H70CoO4	分子量	625	
物質名	和名 ステアリン酸コバルト(II)	英名 cobalt stearate		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
920	-	1	1	-	1	-	0.18	ステアリン酸のコバルト塩として。

*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
0	N/A				N/A
RI	特記情報				
N/A	対象外 (不溶)				

○紫外可視吸収スペクトル

N/A

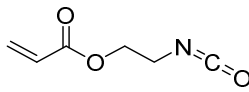
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	0	N/A					N/A	0	N/A					N/A
B														
C														
特記 情報	対象外 (不溶)													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-193	CAS登録番号	13641-96-8	構造 
組成式	C6H7NO3	分子量	141	
物質名	和名 アクリル酸2-イソシアナトエチル	英名 2-Isocyanatoethyl Acrylate		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
無し								

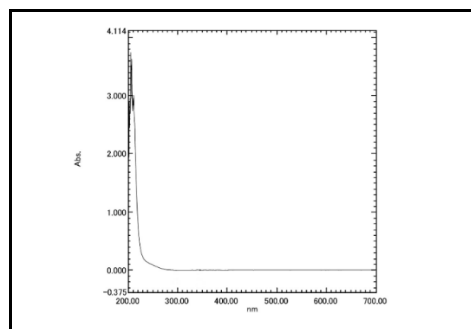
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
	N/A				N/A
RI	特記情報				
N/A	複数ピークが検出され本体が不明。				

○紫外可視吸収スペクトル



○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン			測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン			測定 限界 (ng)		
			定量	定性					定量	定性				
A	0	N/A				N/A	0	N/A				N/A		
B														
C														
特記 情報	対象化合物のイオンが検出されない。													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-194	CAS登録番号	13822-56-5	構造 
組成式	C6H17NO3Si	分子量	179	
物質名	和名 3-アミノプロピルトリメトキシシラン	英名 3-Aminopropyltrimethoxysilane		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
138	20	20	20	10	20	20	10	

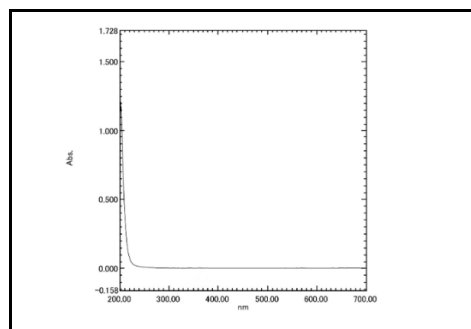
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
3	121	91	84	70	0.007
RI	特記情報				
N/A	アセトン溶液の場合アセトンの反応物が生成するため、他の溶媒を使用した場合と結果が異なる可能性がある。				

○紫外可視吸収スペクトル



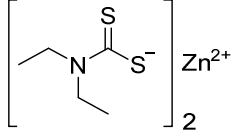
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	3	180	116	148	114	91	N/A	0	N/A					N/A
B														
C														
特記情報														

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-195	CAS登録番号	14324-55-1	構造	
組成式	C10H20N2S4Zn	分子量	362		
物質名	和名 ジエチルジチオカルバミン酸亜鉛	英名 zinc diethyldithiocarbamate			

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
675	—	—	0.001	—	0.001	—	—	

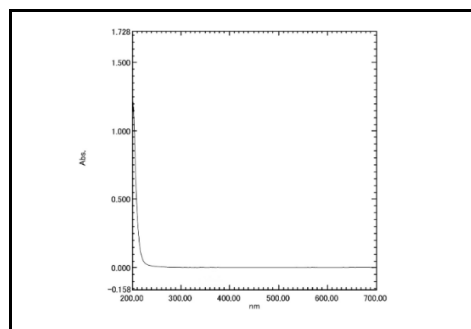
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
0	N/A				N/A
RI	特記情報				
N/A	対象外 (不溶)				

○紫外可視吸収スペクトル



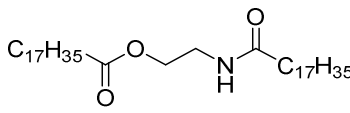
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン			測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン			測定 限界 (ng)		
			定量	定性					定量	定性				
A	0	N/A				N/A	0	N/A				N/A		
B														
C														
特記 情報	対象外 (不溶)													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-196	CAS登録番号	14351-40-7	構造 
組成式	C38H75NO3	分子量	594	
物質名	和名 N,O-ジステアリン酸エタノールアミン 英名 ethanolamine N,O-distearate			

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
710	-	-	-	3	-	-	-	

*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
0	N/A				N/A
RI	特記情報				
N/A	対象外 (不溶)				

○紫外可視吸収スペクトル

N/A

○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	0	N/A					N/A	0	N/A					N/A
B														
C														
特記情報	対象外 (不溶)													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-197	CAS登録番号	14643-87-9	構造 
組成式	C6H6O4Zn	分子量	208	
物質名	和名	アクリル酸亜鉛		
	英名	Zinc acrylate		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
44	-	-	-	-	-	-	0.1	

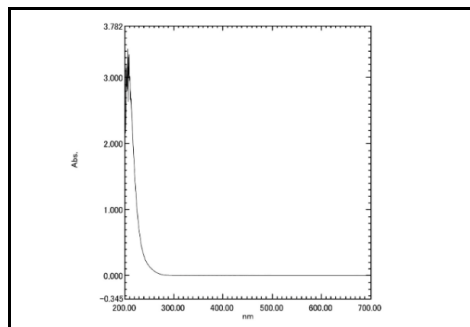
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
0	N/A				N/A
RI	特記情報				
N/A	分析条件が適していない。				

○紫外可視吸収スペクトル



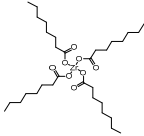
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	1	224*	152	207	108	71	N/A	0	N/A					N/A
B														
C														
特記 情報	*アンモニア付加体。													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-198	CAS登録番号	22464-99-9	構造 
組成式	C32H60O8Zr	分子量	664	
物質名	和名 ビス(2-エチルヘキサノ酸)酸化ジルコニウム(IV)・ミネラルスピリット溶液(Zr:12%) 英名 Zirconium(IV) Bis(2-Ethylhexanoate) Oxide, Mineral Spirit Solution (Zr:12%)			

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
257	3	2	2	—	—	—	—	

*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
0	N/A				N/A
RI	特記情報				
N/A	分析条件が適していない。				

○紫外可視吸収スペクトル

N/A

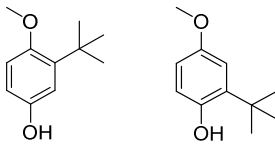
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	0	N/A					N/A	0	N/A					N/A
B														
C														
特記情報	対象外 (不溶)													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-199	CAS登録番号	25013-16-5	構造	
組成式	C11H16O2	分子量	180		
物質名	和名 2(3)-t-ブチル-4-メトキシフェノール	英名 2(3)-t-Butyl-4-methoxyphenol			

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1341	1.6	—	0.05	0.5	—	—	0.05	合成樹脂区分1、3及び7に限り、1 mg/m ² 以下で塗布することができる。

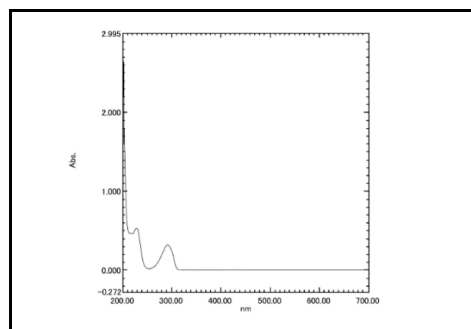
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	165	180	137	150	0.0008
RI	特記情報				
1488 ± 3 (4)					

○紫外可視吸収スペクトル



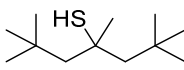
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード							
	0	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	
			定量	定性						定量	定性				
A	0	N/A					N/A	1	179	164					N/A
B															
C															
特記情報															

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-200	CAS登録番号	25103-58-6	構造 
組成式	C12H26S	分子量	202	
物質名	和名	t-ドデカンチオール		
	英名	t-Dodecanethiol		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
183	3	1.2	1.2	1.2	1	1	0.6	

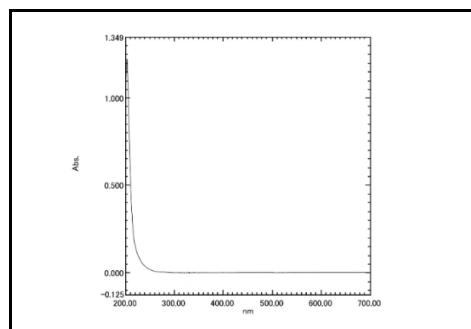
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
3	169	57	71	113	N/A*
RI	特記情報				
N/A	複数異性体のピーク群として検出。代表的なイオンを選択した。				

○紫外可視吸収スペクトル



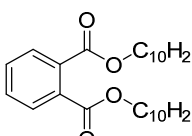
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	0	N/A					N/A	0	N/A					N/A
B														
C														
特記情報	対象化合物のイオンが検出されない。													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-201	CAS登録番号	26761-40-0	構造 
組成式	C28H46O4	分子量	447	
物質名	和名	フタル酸ジイソデシル		
	英名	Diisodecyl Phthalate		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1310	9.5	—	—	50	—	—	—	

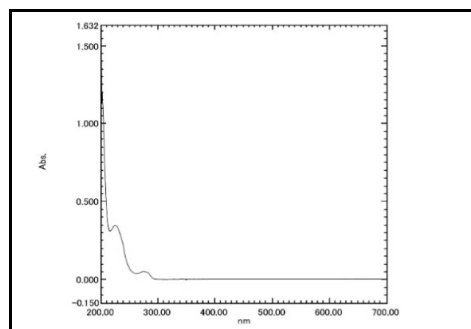
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	307	149	167	141	0.1
RI	特記情報				
N/A	ピーク群として検出する。バックグラウンドピークの影響が少ないm/z307を定量イオンとした。m/z149の場合測定限界が下がる場合もある。				

○紫外可視吸収スペクトル



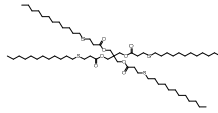
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	5	447	149*	141*	71	<u>289</u>	1	0	N/A					N/A
B														
C														
特記情報	*逆の場合もある。 下線：条件によっては検出されない場合もある													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-203	CAS登録番号	29598-76-3	構造 
組成式	C65H124O8S4	分子量	1162	
物質名	和名	テトラキス[3-(ドデシルチオ)プロピオン酸]ペンタエリトリトール		
	英名	Pentaerythritol Tetrakis[3-(dodecylthio)propionate]		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1006	5	5	5	5	5	5	5	合成樹脂区分3及び7を除き、100°Cを超える温度で食品に接触する部分に使用してはならない。

*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
0	N/A				N/A
RI	特記情報				
N/A	分析条件が適していない。				

○紫外可視吸収スペクトル

N/A

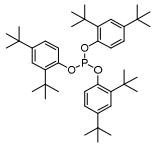
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	0	N/A					N/A	0	N/A					N/A
B														
C														
特記情報	対象外 (不溶)													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-204	CAS登録番号	31570-04-4		構造 
組成式	C42H63O3P	分子量	647		
物質名	和名	亜りん酸トリス(2,4-ジ- <i>t</i> -ブチルフェニル)			
	英名	Tris(2,4-di- <i>t</i> -butylphenyl)phosphite			

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
164	50	3	50	12	3	0.6	1.5	

*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	441	646	308	147	0.002
RI	特記情報				
3416 ± 31 (4)					

○紫外可視吸収スペクトル

N/A

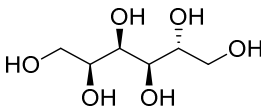
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	0	N/A					N/A	0	N/A					N/A
B														
C														
特記 情報	対象外 (不溶)													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-205	CAS登録番号	50-70-4	構造 
組成式	C6H14O6	分子量	182	
物質名	和名	D(-)-ソルビトール		
	英名	D(-)-Sorbitol		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
958	6.5	0.5	6.5	1	0.001	0.5	—	

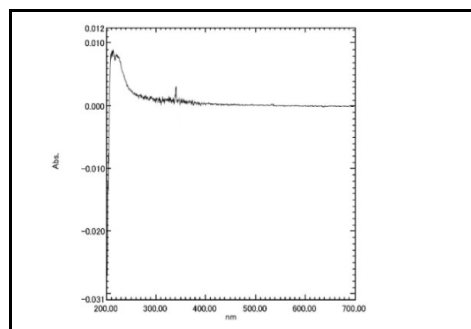
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
	N/A				N/A
RI	特記情報				
N/A	対象外 (不溶)				

○紫外可視吸収スペクトル



○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	1	183	69	55	83		N/A	4	181	89	101	119	131	N/A
B														
C														
特記 情報														

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-206	CAS登録番号	34590-94-8	構造 <chem>OCCCOCCOC</chem>
組成式	C7H16O3	分子量	148	
物質名	和名	ジプロピレングリコールモノメチルエーテル (異性体混合物)		
	英名	Dipropylene Glycol Monomethyl Ether (mixture of isomers)		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
738	5	5	5	0.01	0.02	0.02	0.000002	合成樹脂区分1に限り、600mg/m ² 以下、合成樹脂区分3に限り、1mg/m ² 以下で塗布することができる。

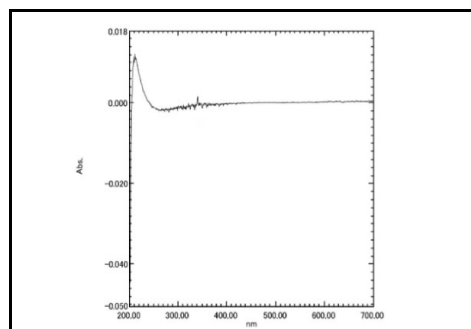
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	103	73	59	45	0.04
RI	特記情報				
1000 ± 2 (4)	異性体混合物のため3本のピークがでるが、スペクトルはほぼ同じ。RIは真ん中のピーク。				

○紫外可視吸収スペクトル



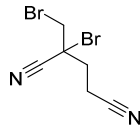
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	4	149*	73	131	59		74	0	N/A					N/A
B														
C														
特記情報	*アンモニア付加体 (M+17) の場合もある。													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-207	CAS登録番号	35691-65-7	構造 
組成式	C6H6Br2N2	分子量	266	
物質名	和名 2-ブromo-2-ブromoメチルグルタロニトリル 英名 2-Bromo-2-bromomethylglutaronitrile			

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
740	—	—	—	—	0.003	—	—	

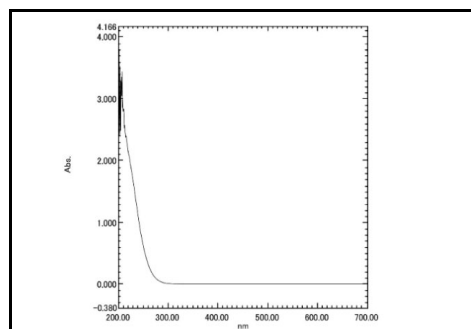
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	187*	185*	106	66	0.4
RI	特記情報				
1518 ± 8 (4)	分解物と推定されるピークも検出される場合がある。*どちらでも測定限界は同程度となる。				

○紫外可視吸収スペクトル



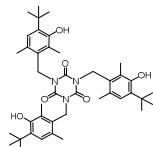
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	1	284*	71	97	209		N/A	0	N/A					N/A
B	1	284*	32	29			N/A							
C	1	284*	18	723			N/A							
特記情報	*アンモニア付加体 (M+17)。プロダクトスキャンスペクトルは異なっていた。													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-208	CAS登録番号	40601-76-1	構造 
組成式	C42H57N3O6	分子量	700	
物質名	和名 イソシアヌル酸トリス(4-tert-ブチル-3-ヒドロキシ-2,6-ジメチルベンジル)	英名 Tris(4-tert-butyl-3-hydroxy-2,6-dimethylbenzyl) isocyanurate		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
215	0.1	0.1	0.1	0.05	0.1	0.1	0.07	

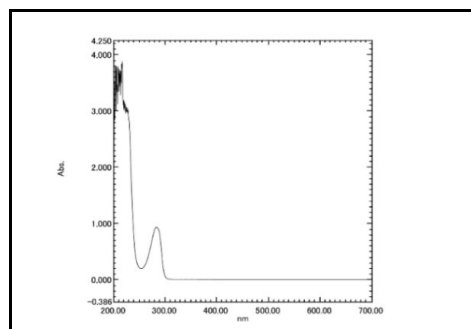
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
0	N/A				N/A
RI	特記情報				
N/A	分析条件が適していない。				

○紫外可視吸収スペクトル



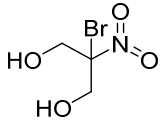
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	2	700*	191	135	644		N/A	5	699	508	232	318	<u>275</u>	0.3
B														
C														
特記情報	*アンモニア付加体 (M+17) の場合もある。							下線：条件によっては検出されない場合もある						

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-209	CAS登録番号	52-51-7	構造 
組成式	C3H6BrNO4	分子量	200	
物質名	和名 2-ブromo-2-ニトロ-1,3-プロパンジオール	英名 2-Bromo-2-nitro-1,3-propanediol		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1373	5	5	5	1	5	5	1	合成樹脂区分1、3及び4を除き、1 mg/m ² 以下で塗布することができる。

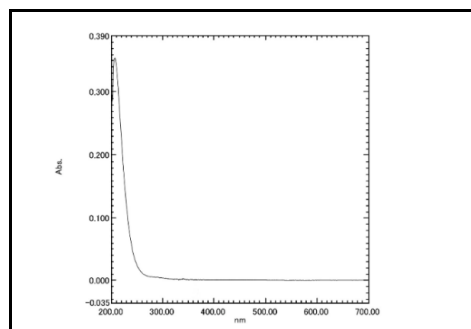
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	137	169	107	123	0.6
RI	特記情報				
1259 ± 8 (4)	分解物と推定されるピークも検出される場合がある。				

○紫外可視吸収スペクトル



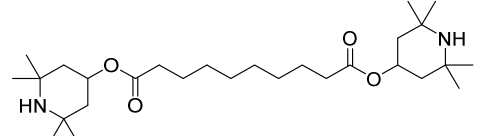
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	0	N/A					N/A	1	246		170	216	127	N/A
B								1	244		168	214	125	
C								1	198		79	73		
特記情報														

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-211	CAS登録番号	52829-07-9	構造 
組成式	C28H52N2O4	分子量	481	
物質名	和名 セバシン酸ビス(2,2,6,6-テトラメチル-4-ピペリジル)	英名 Bis(2,2,6,6-tetramethyl-4-piperidyl) Sebacate		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
948	5	5	5	0.5	0.8	0.8	—	合成樹脂区分1、2及び3を除き、100°Cを超える温度で酒類に接触する部分に使用してはならない。

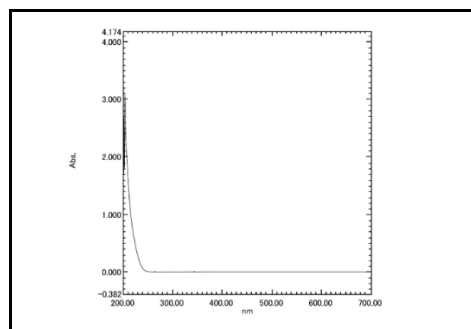
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	142	342	140	58	0.009
RI	特記情報				
3116 ± 5 (4)					

○紫外可視吸収スペクトル



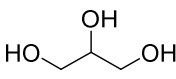
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	4	481	342	140	123	84	N/A	0	N/A					N/A
B														
C														
特記情報														

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-212	CAS登録番号	56-81-5	構造 
組成式	C3H8O3	分子量	92	
物質名	和名	グリセリン		
	英名	Glycerol		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
529	50	50	50	20	50	50	50	22 g / m ² 以下で塗布することができる。

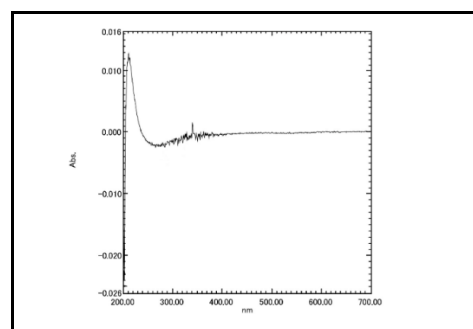
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	61	43	60	57	N/A
RI	特記情報				
967 ± 4 (3)	分析条件が適していない。				

○紫外可視吸収スペクトル



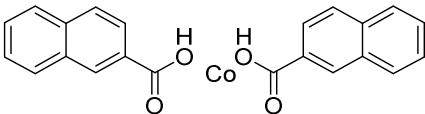
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	1	110	57	93	75	110	N/A	0	N/A					N/A
B														
C														
特記情報														

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-213	CAS登録番号	61789-51-3	構造 
組成式	C22H16CoO4	分子量	403	
物質名	和名 ナフテン酸コバルト (コバルト 約8%) 英名 Cobalt Naphthenate (Co ca. 8%)			

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1122	3	—	—	—	—	—	—	

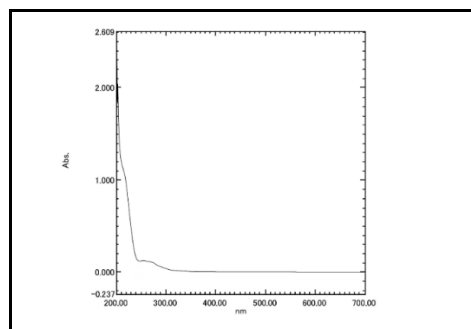
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
0	N/A				N/A
RI	特記情報				
N/A	分析条件が適していない。				

○紫外可視吸収スペクトル



○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	1	404	346	260	404	387	N/A	0	N/A					N/A
B														
C														
特記 情報														

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-214	CAS登録番号	57-13-6	構造 <chem>NC(=O)N</chem>
組成式	CH4N2O	分子量	60	
物質名	和名	尿素		
	英名	urea		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1138	30	10	10	10	10	10	10	

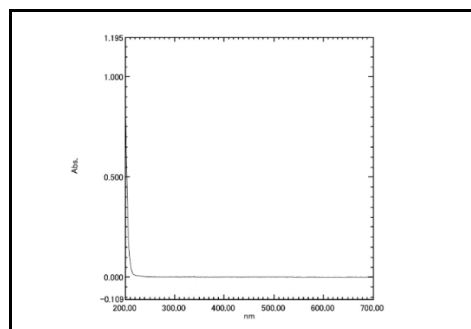
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
2	60	44			
RI	特記情報				
N/A	分析条件が適していない。				

○紫外可視吸収スペクトル



○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	5	61	44	29	43		16	0	N/A					N/A
B														
C														
特記 情報														

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-215	CAS登録番号	57-55-6	構造 
組成式	C3H8O2	分子量	76	
物質名	和名	プロピレングリコール		
	英名	Propylene Glycol		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1366	20	50	25	20	20	20	20	600mg/m ² 以下で塗布することができる。

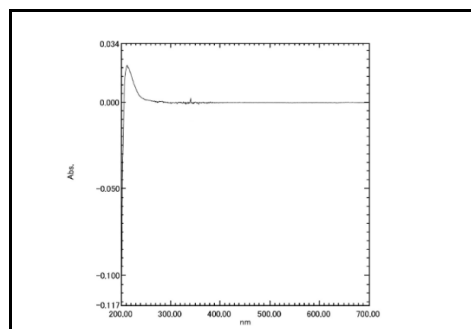
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
0	N/A				N/A
RI	特記情報				
N/A	分析条件が適していない。				

○紫外可視吸収スペクトル



○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	0	N/A					N/A	0	N/A					N/A
B														
C														
特記情報														

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-216	CAS登録番号	67845-93-6	構造 
組成式	C31H54O3	分子量	475	
物質名	和名 3,5-ビス- <i>t</i> -ブチル-4-ヒドロキシ安息香酸ヘキサデシル	英名 3,5-Di- <i>t</i> -butyl-4-hydroxybenzoic acid hexadecyl ester		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1239	—	—	0.1	—	—	0.5	0.1	

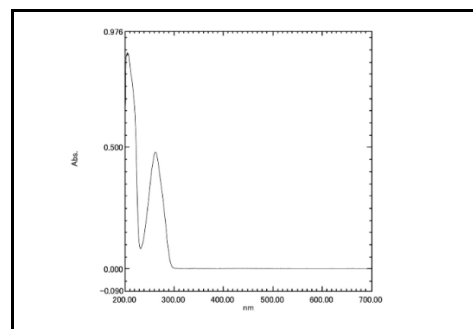
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	459	474	235	250	0.02
RI	特記情報				
3303 ± 4 (4)					

○紫外可視吸収スペクトル



○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	4	475	251	195	139	57	0.3	2	473	204	249	456		N/A
B														
C														
特記 情報														

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-217	CAS登録番号	59-02-9	構造
組成式	C29H50O2	分子量	431	
物質名	和名 ビタミンE 英名 Vitamin E, Natural			

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1050	2	2	2	5	1	1.5	0.5	

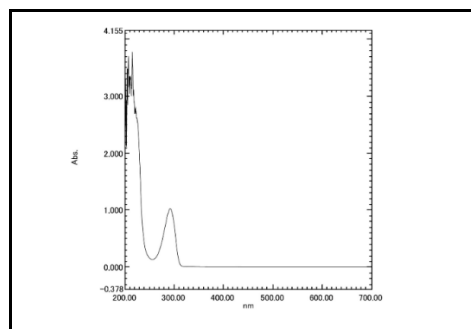
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	430	165	205	121	0.05
RI	特記情報				
3143 ± 10 (4)					

○紫外可視吸収スペクトル



○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	5	431	165	137	111	97	0.7	0	N/A					N/A
B														
C														
特記 情報														

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-218	CAS登録番号	60-01-5	構造 
組成式	C15H26O6	分子量	302	
物質名	和名 トリブチリン	英名 Tributyrin		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
753	50	50	50	30	30	50	50	600mg/m ² 以下で塗布することができる。

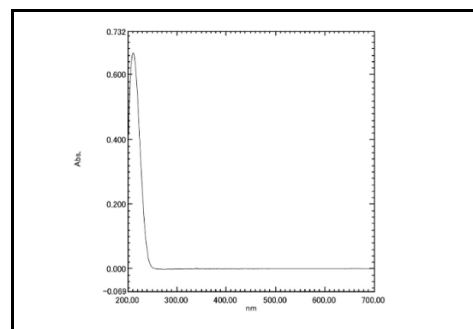
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	71	201	143	131	0.0007
RI		特記情報			
1837 ± 5 (4)					

○紫外可視吸収スペクトル



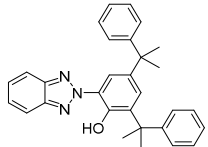
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	5	303*	215	71	43	0.5	0	N/A					N/A	
B														
C														
特記情報	*アンモニア付加体 (M+17) の場合もある。													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-219	CAS登録番号	70321-86-7	構造 
組成式	C30H29N3O	分子量	448	
物質名	和名	2-(2H-ベンゾトリアゾール-2-イル)-4,6-ビス(1-メチル-1-フェニルエチル)フェノール		
	英名	2-(2H-Benzotriazol-2-yl)-4,6-bis(1-methyl-1-phenylethyl)phenol		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1403	3	1	10	2	—	—	0.5	

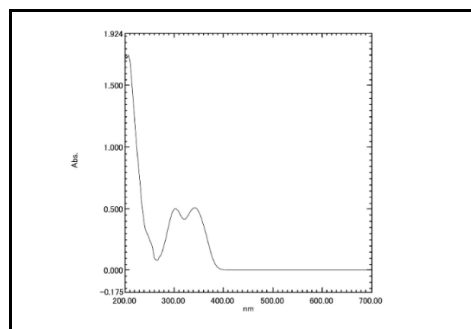
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	432	447	342	356	0.01
RI	特記情報				
3629 ± 12 (4)					

○紫外可視吸収スペクトル



○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	5	448	370	119	292	91	0.1	0	N/A					N/A
B														
C														
特記情報														

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-220	CAS登録番号	106797-53-9	構造 
組成式	C12H16O4	分子量	224	
物質名	和名 2-ヒドロキシ-4'-(2-ヒドロキシエトキシ)-2-メチルプロピオフェノン	英名 2-Hydroxy-4'-(2-hydroxyethoxy)-2-methylpropiophenone		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1253	—	—	—	—	—	—	0.1	

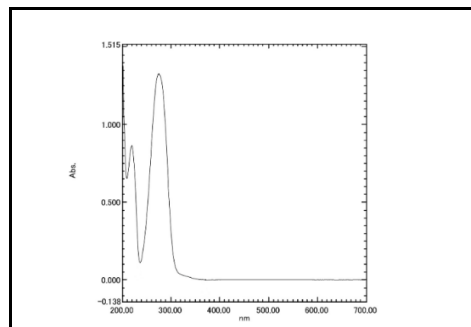
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	165	121	93	181	0.04
RI	特記情報				
1915 ± 10 (4)	分解物と推定されるピークも検出される場合がある。				

○紫外可視吸収スペクトル



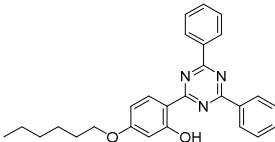
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	5	225	179	135	107	77	0.5	0	N/A					N/A
B														
C														
特記情報														

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-221	CAS登録番号	147315-50-2	構造 
組成式	C27H27N3O2	分子量	426	
物質名	和名 2-(4,6-ジフェニル-1,3,5-トリアジン-2-イル)-5-[(ヘキシル)オキシ]フェノール	英名 2-(4,6-Diphenyl-1,3,5-triazine-2-yl)-5-[(hexyl)oxy]phenol		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
724	0.5	—	0.5	—	—	—	0.5	

*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	425	341	313	135	0.01
RI	特記情報				
4009 ± 12 (3)					

○紫外可視吸収スペクトル

N/A

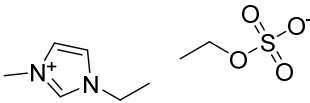
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	0	N/A					N/A	0	N/A					N/A
B														
C														
特記情報	対象外 (不溶)													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-222	CAS登録番号	342573-75-5	構造 
組成式	C8H16N2O4S	分子量	236	
物質名	和名	1-エチル-3-メチルイミダゾリウム=エチル硫酸塩		
	英名	1-Ethyl-3-methylimidazolium Ethyl Sulfate		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
266	—	0.13	0.13	—	0.13	—	—	100°Cを超える温度で油脂及び脂肪性食品に接触する部分に使用してはならない。

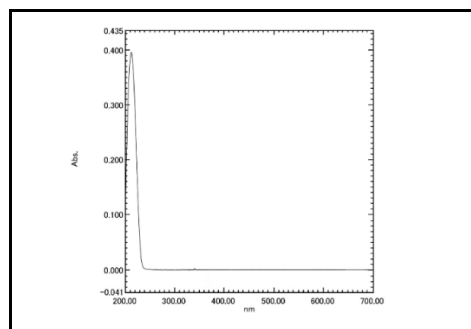
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
0	N/A				N/A
RI	特記情報				
N/A	分析条件が適していない。				

○紫外可視吸収スペクトル



○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード								
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)		
			定量	定性						定量	定性					
A	4	111	83	96	56		N/A	4	125	97	80				N/A	
B																
C																
特記情報																

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-223	CAS登録番号	69-72-7	構造
組成式	C7H6O3	分子量	138	
物質名	和名	サリチル酸		
	英名	salicylic acid		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
610	0.5	—	0.0002	—	—	—	0.0002	

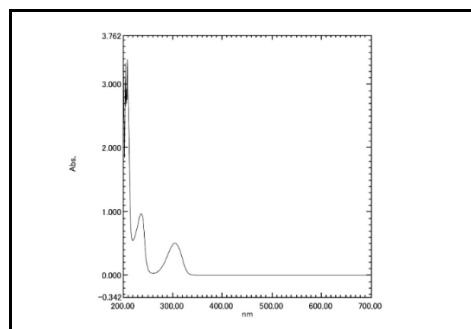
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	120	138	92	64	N/A
RI	特記情報				
N/A	分解物と推定されるピークも検出される場合がある。				

○紫外可視吸収スペクトル



○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	0	N/A					N/A	5	137	93	65	<u>75</u>		2
B														
C														
特記情報								下線：条件によっては検出されない場合もある						

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-224	CAS登録番号	70-55-3	構造 
組成式	C7H9NO2S	分子量	171	
物質名	和名	p-トルエンスルホンアミド		
	英名	p-Toluenesulfonamide		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1500	5	—	0.3	—	—	—	—	

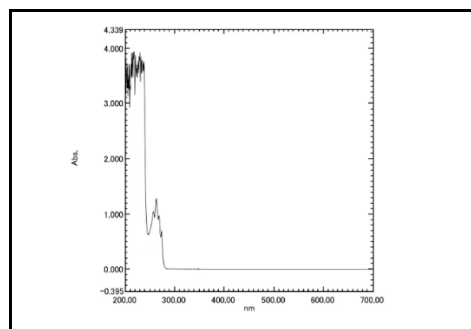
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	171	155	91	107	0.01
RI	特記情報				
1674 ± 9 (4)					

○紫外可視吸収スペクトル



○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	5	172*	155	91	65	2	2	170	106	79	64	80	N/A	
B														
C														
特記情報	*アンモニア付加体 (M+17) の場合もある。													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-225	CAS登録番号	75-09-2	構造 <chem>ClCCl</chem>
組成式	CH2Cl2	分子量	85	
物質名	和名	ジクロロメタン		
	英名	Dichloromethane		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
無し								

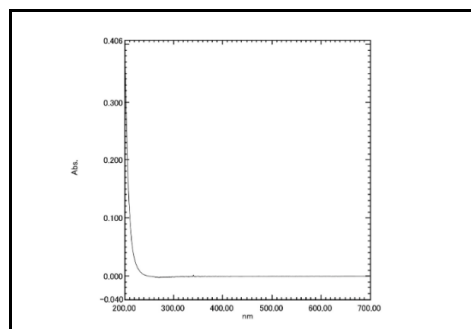
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
0	N/A				N/A
RI	特記情報				
N/A	分析条件が適していない。				

○紫外可視吸収スペクトル




○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン			測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン			測定限界 (ng)		
			定量	定性					定量	定性				
A	0	N/A				N/A	0	N/A				N/A		
B														
C														
特記情報	対象化合物のイオンが検出されない。													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-226	CAS登録番号	75-65-0	構造 
組成式	C4H10O	分子量	74	
物質名	和名	t-ブチルアルコール		
	英名	t-Butyl Alcohol		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1304	5	—	0.001	—	0.001	0.001	0.001	

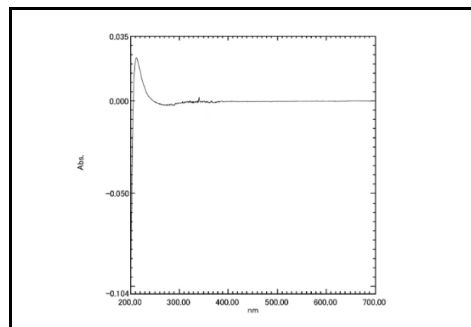
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
0	N/A				N/A
RI	特記情報				
N/A	分析条件が適していない。				

○紫外可視吸収スペクトル



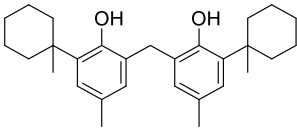
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン			測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン			測定限界 (ng)		
			定量	定性					定量	定性				
A	0	N/A				N/A	0	N/A				N/A		
B														
C														
特記情報														

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-227	CAS登録番号	77-62-3	構造 
組成式	C29H40O2	分子量	421	
物質名	和名 2,2'-メチレンビス[6-(1-メチルシクロヘキシル)-4-メチルフェノール]	英名 2,2'-Methylenebis[6-(1-methylcyclohexyl)-4-methylphenol]		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1514	—	0.2	0.2	5	0.2	—	—	

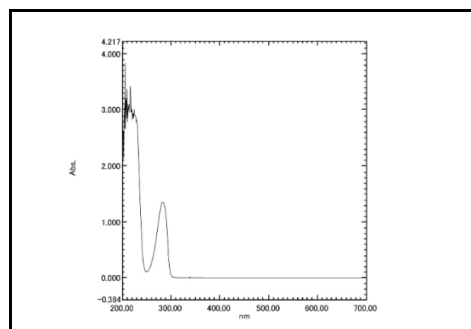
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	420	217	324	204	0.02
RI	特記情報				
3286 ± 17 (4)					

○紫外可視吸収スペクトル



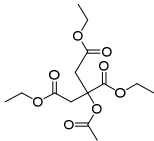
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	5	421*	217	121	229		0.01	4	419	203	<u>135</u>	<u>107</u>	<u>159</u>	0.02
B														
C														
特記情報	*アンモニア付加体 (M+17) の場合もある。							下線：条件によっては検出されない場合もある						

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-228	CAS登録番号	77-89-4	構造 
組成式	C14H22O8	分子量	103	
物質名	和名 O-アセチルクエン酸トリエチル	英名 Triethyl O-Acetylcitrate		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
103	35	3	45	50	3	0.5	5	

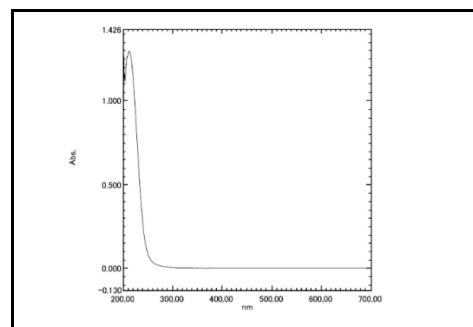
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	157	203	213	115	0.0005
RI	特記情報				
1737 ± 9 (4)	分解物と推定されるピークも検出される場合がある。				

○紫外可視吸収スペクトル



○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	5	319*	157	213	273	203	0.4	0	N/A					N/A
B														
C														
特記情報	*アンモニア付加体 (M+17) の場合もある。													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-229	CAS登録番号	77-90-7	構造 
組成式	C20H34O8	分子量	402	
物質名	和名 O-アセチルクエン酸トリブチル	英名 Tributyl O-Acetylacrylate		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
105	35	3	45	50	3	0.5	5	合成樹脂区分1、3及び7に限り、15mg/m ² 以下で塗布することができる。

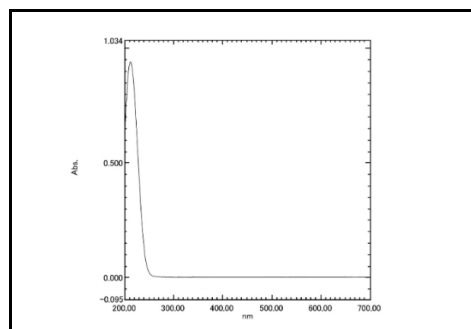
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	185	259	129	157	0.0005
RI	特記情報				
2246 ± 9 (4)	分解物と推定されるピークも検出される場合がある。				

○紫外可視吸収スペクトル



○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	5	403*	129	185	139	157	0.5	0	N/A					N/A
B														
C														
特記情報	*アンモニア付加体 (M+17) の場合もある。													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-230	CAS登録番号	77-93-0	構造	
組成式	C12H20O7	分子量	276		
物質名	和名	くえん酸トリエチル			
	英名	Triethyl Citrate			

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報

通し 番号*	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
514	35	3	45	50	3	0.5	5	

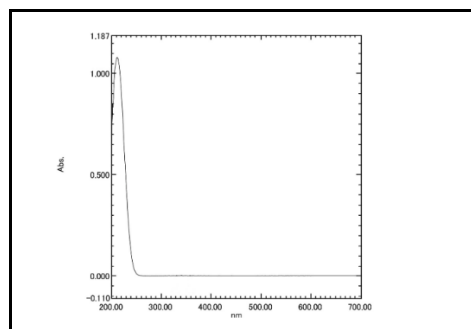
*通し番号は厚労省が公開しているPLの番号

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	157	115	203	139	0.005
RI	特記情報				
1653 ± 4 (4)					

○紫外可視吸収スペクトル



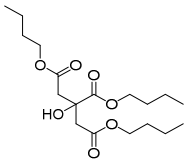
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	5	277	157	115	139	203	0.6	0	N/A					N/A
B														
C														
特記 情報	*アンモニア付加体 (M+17) の場合もある。													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-231	CAS登録番号	77-94-1	構造	
組成式	C18H32O7	分子量	360		
物質名	和名 くえん酸トリブチル	英名 Tributyl Citrate			

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
515	35	3	45	50	3	0.5	5	

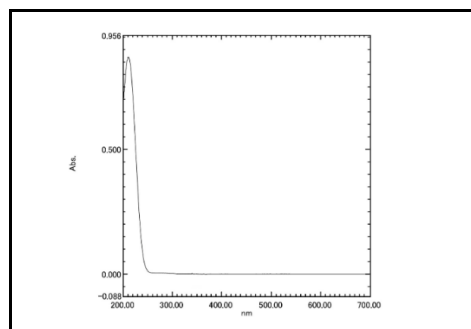
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	185	259	129	111	0.005
RI	特記情報				
2183 ± 3 (4)					

○紫外可視吸収スペクトル



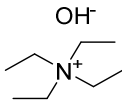
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	5	361*	185	259	129	111	0.4	0	N/A					N/A
B														
C														
特記 情報	*アンモニア付加体 (M+17) の場合もある。													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-232	CAS登録番号	77-98-5	構造 
組成式	C8H21NO	分子量	147	
物質名	和名 10%テトラエチルアンモニウムヒドロキシド溶液 英名 10% Tetraethylammonium Hydroxide Solution			

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報

通し 番号*	区別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
853	-	-	-	-	-	-	0.002	

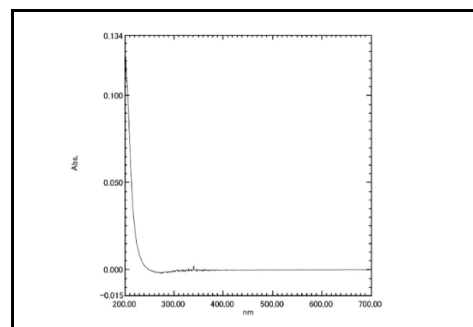
*通し番号は厚労省が公開しているPLの番号

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
0	N/A				N/A
RI	特記情報				
N/A	分析条件が適していない。				

○紫外可視吸収スペクトル



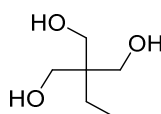
○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	5	130	86	100	58	101	3	0	N/A					N/A
B														
C														
特記 情報														

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときのS/N=10相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-233	CAS登録番号	77-99-6	構造 
組成式	C6H14O3	分子量	134	
物質名	和名 1,1,1-トリス(ヒドロキシメチル)プロパン 英名 1,1,1-Tris(hydroxymethyl)propane			

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報

通し 番号*	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1093	5	5	5	5	1	1	5	

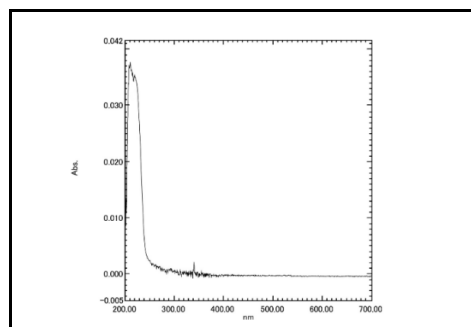
*通し番号は厚労省が公開しているPLの番号

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	86	57	71	55	0.2
RI	特記情報				
1266 ± 8 (4)					

○紫外可視吸収スペクトル



○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	4	135*	99	81	117	69	2	0	N/A					'N/A
B														
C														
特記 情報	*アンモニア付加体 (M+17) の場合もある。													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときのS/N=10相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-234	CAS登録番号	78-08-0	構造 
組成式	C8H18O3Si	分子量	190	
物質名	和名	トリエトキシビニルシラン		
	英名	Triethoxyvinylsilane		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1067	6	—	6	0.002	0.002	0.002	0.002	

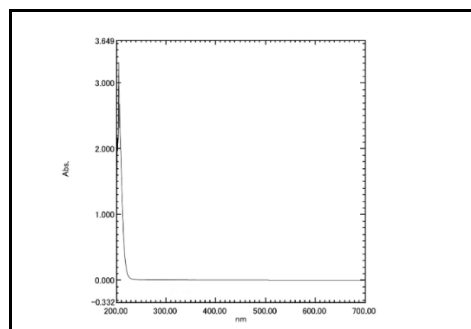
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	145	135	175	163	0.005
RI	特記情報				
951 ± 4 (4)					

○紫外可視吸収スペクトル



○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	2	191*	145	107	135	163	N/A	0	N/A					N/A
B														
C														
特記情報	*アンモニア付加体 (M+17) の場合もある。													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-235	CAS登録番号	78-10-4	構造 
組成式	C8H20O4Si	分子量	208	
物質名	和名	オルトけい酸テトラエチル		
	英名	Tetraethyl Orthosilicate		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
560	30	30	30	30	30	30	30	合成樹脂区分3に限り、2.7g/m ² 以下で塗布することができる。

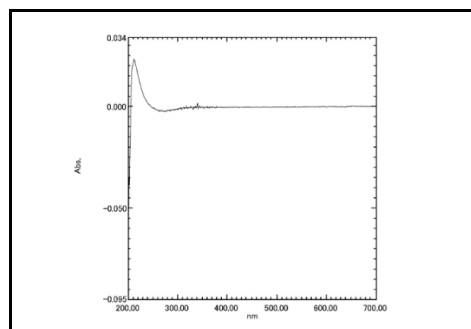
*令和4年3月時点

◎分析情報

○GC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	193	149	163	179	0.01
RI	特記情報				
980 ± 6 (4)					

○紫外可視吸収スペクトル



○LC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)	データ	プリカーサーイオン	プロダクトイオン				測定限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	3	209	97	119	125	<u>181</u>	N/A	0	N/A					N/A
B														
C														
特記情報	下線：条件によっては検出されない場合もある。													

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

厚生労働大臣 殿

機関名 国立医薬品食品衛生研究所

所属研究機関長 職名 所長

氏名 合田 幸広

次の職員の令和3年度厚生労働科学研究費の調査研究における、倫理審査状況及び利益相反等の管理については以下のとおりです。

1. 研究事業名 食品の安全確保推進研究事業
2. 研究課題名 食品用器具・容器包装等の安全性確保に資する研究 (19KA1003)
3. 研究者名 (所属部局・職名) 食品添加物部 第三室長
(氏名・フリガナ) 六鹿 元雄 (ムツガ モトオ)

4. 倫理審査の状況

	該当性の有無		左記で該当がある場合のみ記入 (※1)		
	有	無	審査済み	審査した機関	未審査 (※2)
人を対象とする生命科学・医学系研究に関する倫理指針 (※3)	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		<input type="checkbox"/>
遺伝子治療等臨床研究に関する指針	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		<input type="checkbox"/>
厚生労働省の所管する実施機関における動物実験等の実施に関する基本指針	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		<input type="checkbox"/>
その他、該当する倫理指針があれば記入すること (指針の名称:)	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		<input type="checkbox"/>

(※1) 当該研究者が当該研究を実施するに当たり遵守すべき倫理指針に関する倫理委員会の審査が済んでいる場合は、「審査済み」にチェックし一部若しくは全部の審査が完了していない場合は、「未審査」にチェックすること。

その他 (特記事項)

(※2) 未審査に場合は、その理由を記載すること。

(※3) 廃止前の「疫学研究に関する倫理指針」、「臨床研究に関する倫理指針」、「ヒトゲノム・遺伝子解析研究に関する倫理指針」、「人を対象とする医学系研究に関する倫理指針」に準拠する場合は、当該項目に記入すること。

5. 厚生労働分野の研究活動における不正行為への対応について

研究倫理教育の受講状況	受講 <input checked="" type="checkbox"/> 未受講 <input type="checkbox"/>
-------------	---

6. 利益相反の管理

当研究機関におけるCOIの管理に関する規定の策定	有 <input checked="" type="checkbox"/> 無 <input type="checkbox"/> (無の場合はその理由:)
当研究機関におけるCOI委員会設置の有無	有 <input checked="" type="checkbox"/> 無 <input type="checkbox"/> (無の場合は委託先機関:)
当研究に係るCOIについての報告・審査の有無	有 <input checked="" type="checkbox"/> 無 <input type="checkbox"/> (無の場合はその理由:)
当研究に係るCOIについての指導・管理の有無	有 <input type="checkbox"/> 無 <input checked="" type="checkbox"/> (有の場合はその内容:)

(留意事項) ・該当する□にチェックを入れること。
・分担研究者の所属する機関の長も作成すること。

厚生労働大臣 殿

機関名 国立医薬品食品衛生研究所

所属研究機関長 職名 所長

氏名 合田 幸広

次の職員の令和3年度厚生労働科学研究費の調査研究における、倫理審査状況及び利益相反等の管理については以下のとおりです。

1. 研究事業名 食品の安全確保推進研究事業
2. 研究課題名 食品用器具・容器包装等の安全性確保に資する研究 (19KA1003)
3. 研究者名 (所属部局・職名) 食品添加物部 主任研究官
(氏名・フリガナ) 阿部 裕 (アベ ユタカ)

4. 倫理審査の状況

	該当性の有無		左記で該当がある場合のみ記入 (※1)		
	有	無	審査済み	審査した機関	未審査 (※2)
人を対象とする生命科学・医学系研究に関する倫理指針 (※3)	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		<input type="checkbox"/>
遺伝子治療等臨床研究に関する指針	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		<input type="checkbox"/>
厚生労働省の所管する実施機関における動物実験等の実施に関する基本指針	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		<input type="checkbox"/>
その他、該当する倫理指針があれば記入すること (指針の名称:)	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		<input type="checkbox"/>

(※1) 当該研究者が当該研究を実施するに当たり遵守すべき倫理指針に関する倫理委員会の審査が済んでいる場合は、「審査済み」にチェックし一部若しくは全部の審査が完了していない場合は、「未審査」にチェックすること。

その他 (特記事項)

(※2) 未審査に場合は、その理由を記載すること。

(※3) 廃止前の「疫学研究に関する倫理指針」、「臨床研究に関する倫理指針」、「ヒトゲノム・遺伝子解析研究に関する倫理指針」、「人を対象とする医学系研究に関する倫理指針」に準拠する場合は、当該項目に記入すること。

5. 厚生労働分野の研究活動における不正行為への対応について

研究倫理教育の受講状況	受講 <input checked="" type="checkbox"/> 未受講 <input type="checkbox"/>
-------------	---

6. 利益相反の管理

当研究機関におけるCOIの管理に関する規定の策定	有 <input checked="" type="checkbox"/> 無 <input type="checkbox"/> (無の場合はその理由:)
当研究機関におけるCOI委員会設置の有無	有 <input checked="" type="checkbox"/> 無 <input type="checkbox"/> (無の場合は委託先機関:)
当研究に係るCOIについての報告・審査の有無	有 <input checked="" type="checkbox"/> 無 <input type="checkbox"/> (無の場合はその理由:)
当研究に係るCOIについての指導・管理の有無	有 <input type="checkbox"/> 無 <input checked="" type="checkbox"/> (有の場合はその内容:)

(留意事項) ・該当する□にチェックを入れること。
・分担研究者の所属する機関の長も作成すること。

厚生労働大臣 殿

機関名 国立医薬品食品衛生研究所

所属研究機関長 職名 所長

氏名 合田 幸広

次の職員の令和3年度厚生労働科学研究費の調査研究における、倫理審査状況及び利益相反等の管理については以下のとおりです。

1. 研究事業名 食品の安全確保推進研究事業
2. 研究課題名 食品用器具・容器包装等の安全性確保に資する研究 (19KA1003)
3. 研究者名 (所属部局・職名) 食品添加物部 主任研究官
(氏名・フリガナ) 片岡 洋平 (カタオカ ヨウヘイ)

4. 倫理審査の状況

	該当性の有無		左記で該当がある場合のみ記入 (※1)		
	有	無	審査済み	審査した機関	未審査 (※2)
人を対象とする生命科学・医学系研究に関する倫理指針 (※3)	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		<input type="checkbox"/>
遺伝子治療等臨床研究に関する指針	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		<input type="checkbox"/>
厚生労働省の所管する実施機関における動物実験等の実施に関する基本指針	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		<input type="checkbox"/>
その他、該当する倫理指針があれば記入すること (指針の名称:)	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		<input type="checkbox"/>

(※1) 当該研究者が当該研究を実施するに当たり遵守すべき倫理指針に関する倫理委員会の審査が済んでいる場合は、「審査済み」にチェックし一部若しくは全部の審査が完了していない場合は、「未審査」にチェックすること。

その他 (特記事項)

(※2) 未審査に場合は、その理由を記載すること。

(※3) 廃止前の「疫学研究に関する倫理指針」、「臨床研究に関する倫理指針」、「ヒトゲノム・遺伝子解析研究に関する倫理指針」、「人を対象とする医学系研究に関する倫理指針」に準拠する場合は、当該項目に記入すること。

5. 厚生労働分野の研究活動における不正行為への対応について

研究倫理教育の受講状況	受講 <input checked="" type="checkbox"/> 未受講 <input type="checkbox"/>
-------------	---

6. 利益相反の管理

当研究機関におけるCOIの管理に関する規定の策定	有 <input checked="" type="checkbox"/> 無 <input type="checkbox"/> (無の場合はその理由:)
当研究機関におけるCOI委員会設置の有無	有 <input checked="" type="checkbox"/> 無 <input type="checkbox"/> (無の場合は委託先機関:)
当研究に係るCOIについての報告・審査の有無	有 <input checked="" type="checkbox"/> 無 <input type="checkbox"/> (無の場合はその理由:)
当研究に係るCOIについての指導・管理の有無	有 <input type="checkbox"/> 無 <input checked="" type="checkbox"/> (有の場合はその内容:)

(留意事項) ・該当する□にチェックを入れること。
・分担研究者の所属する機関の長も作成すること。