

ポジティブリスト制度施行に伴う分析法の開発

研究代表者 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。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、その検査・監視等を行うための分析法は未整備である。そのため、平成 29 年度および平成 30 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物質約 880 種類を対象に GC/MS を用いて網羅的に分析を行い、そのうち約 230 種類について、GC/MS による物質の定性・定量を行うための情報を収集した。

そこで今年度は、これまでに情報が得られなかった 411 種類の化学物質を対象として、このうち水に溶解するものをヘッドスペース-GC/MS で分析した。その結果、120 種類について保持時間およびマススペクトルを取得した。これらについて定量イオンを選択し、SIM モードにおけるシグナル/ノイズ比からおよその定量下限を算出した。その結果、およその定量下限は、37 種類は 0.01 $\mu\text{g}/\text{mL}$ 以下、54 種類は 0.01~1 $\mu\text{g}/\text{mL}$ 、29 種類は 1 $\mu\text{g}/\text{mL}$ 以上であった。これにより、既報のものとおおよそ 350 種類について GC/MS 分析における情報を取得した。

研究協力者

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
山口未来 国立医薬品食品衛生研究所

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。

米国では、1958 年に公布された連邦食品医薬品化粧品法に基づく連邦規則集（Code of Federal Regulations : CFR）への収載と、2000 年に始まった食品接触物質の事前届出制度（Food Contact Notification : FCN）の 2 つの制度により、食品接触材料の規制を行っている。CFR では、Title 21 の Part 175~179 に食品接触用途として使用できる一般的な材料、ならびにそれらの製造に使用可能な物質等が示されている¹⁾。また、「規則制定以前に認可された物質」や「一般に安全とみなされる物質」（Generally Recognized As Safe : GRAS）の使用も認められている。その物質数は約 3000 種類

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。有害性が認められてい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

におよぶが、この中には接着剤、ゴム、紙等の合成樹脂以外の材質に対する物質も含まれる。一方 FCN 制度は、CFR に記載されていない新規の材質、添加剤等について各事業者の製品ごとに FDA に届出をする制度である。

EU では、約 20 年にわたり使用可能なモノマーや添加剤リストの作成を進め、2010 年に PL 制度に移行した。食品用途の合成樹脂製品の製造に使用可能なモノマーや添加剤を限定し、さらに有害性が懸念されるものについて特定移行限度値 (Specific Migration Limit : SML) を設定し、これらの化学物質の食品への移行を制限している²⁾。また、SML 以外の制限として最終製品への残存量や使用用途などが制限されている化学物質もある。

中国では、合成樹脂やゴムなどの食品接触材料について、2008 年に食品用器具・容器包装の添加剤に係る国家標準 GB9685-2008 が示され、その後 GB9685-2016³⁾に修正された。食品用器具・容器包装に使用可能な添加剤として 1294 種類が登録されており、このうち合成樹脂に使用できるのは 731 種類となっている。また、その後も継続的に追加等の作業が進められている。

米国、EU および中国以外にも、インド、インドネシア、ベトナム、アルゼンチン、ブラジル等でも PL 制度が導入されており、また、韓国やタイ等でも導入が検討されている。

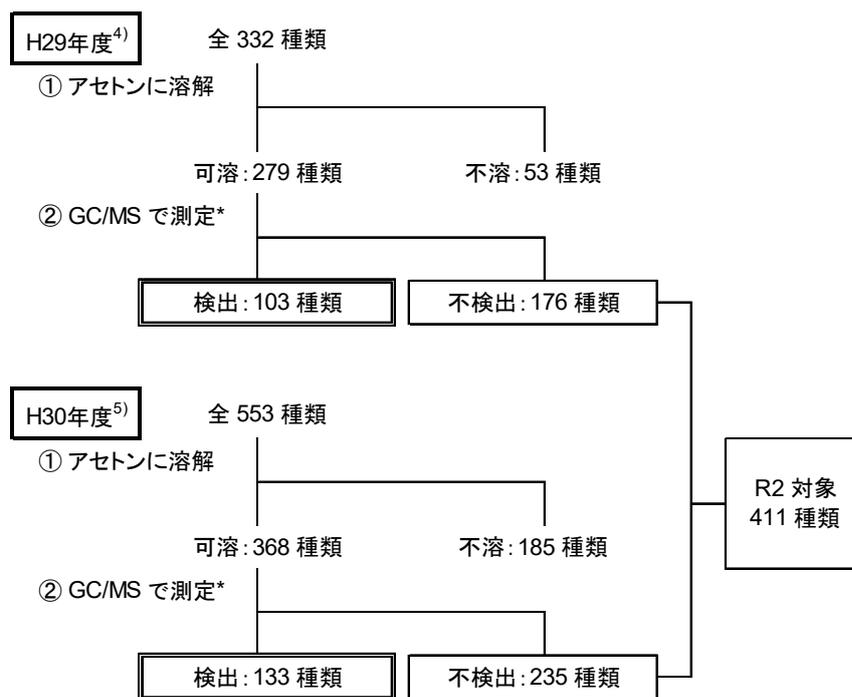
そのため、これらの国や地域では使用が認められておらず安全性が明らかでない化学物質を用いた製品がわが国に輸入された場合、現在の NL 制度だけでは直ちに制限できないなどの問題が指摘された。

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 収載物質については施行前に整理が行われ、令和 2 年 5 月時点で 1665 項目の添加剤が収載されており、現在も整理、追加作業が行なわれている。

このように非常に多くの化学物質が収載されることとなったが、大部分の物質については、その検査・監視等を行うための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⁴⁾および 30 年 (2018 年) 度⁵⁾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 を用いて網羅的に分析を行い、物質の定性・定量を行うための情報を収集した。平成 29 年度は 332 種類、平成 30 年度は 553 種類の計 885 種類について検討した。このうち、238 種類 (H29 : 53 種類、H30 : 185 種類) はアセトンに溶解せず標準原液を調製できなかった。また、アセトンに可溶だったものでも、411 種類 (H29 : 176 種類、H30 : 235 種類) は GC/MS でピークが確認できない、検出されたピークが小さいなどのため、10 µg/mL 以下の濃度が検出できなかったため対象から除外した。これらを除いた 236 種類 (H29 : 103 種類、H30 : 133 種類) について GC/MS 分析における保持時間、マススペクトルおよび定量下限を確認し報告した (図 1)。

そこで本研究では、これまでに情報が得られていない 411 種類を対象として、このうち水に溶解するものについてヘッドスペース (HS) -GC/MS 法による分析を試み、保持時間、マススペクトルおよび定量下限を確認し、これらの定性・定量を行うための情報を収集した。



* DB-5 カラムを使用

図1 以前の研究で対象とした化学物質

B. 研究方法

1. 試薬

水：ピューリック ω（オルガノ株式会社）で精製した超純水

塩化ナトリウム：水質試験用、純度 99.5%以上、富士フィルム和光純薬株式会社

2. 標準品

表1～表3に示した 411 種類を用いた。

3. 標準原液

標準原液：各標準品 10 mg を精密に量り、水 10 mL に溶解した（1000 μg/mL）。

4. 装置

ヘッドスペースサンプラ付きガスクロマトグラフ/質量分析計（HS-GC/MS）：ヘッドスペースサンプラ 7697A、ガスクロマトグラフ 7890、質量分析計 5975C with triple axis detector、以上、Agilent Technologies 社製

5. 測定

1) 測定溶液の調製

1 および 10 μg/mL：飽和食塩水 10 mL を 20 mL 容ヘッドスペースバイアルに採り、標準原液を 10 または 100 μL 加え、すみやかに PTFE/シリコンセプタム付きアルミキャップで密栓した。

100 μg/mL：飽和食塩水 9 mL を 20 mL 容ヘッドスペースバイアルに採り、標準原液を 1 mL 加え、すみやかに PTFE/シリコンセプタム付きアルミキャップで密栓した。

2) HS-GC/MS 条件

① HS 条件

加温温度：80℃

加温時間：30 分間

サンプルループ温度：90℃

トランスファーライン温度：130℃

注入量：1 mL

② GC 条件

カラム：DB-624（長さ 60 m、内径 0.32 mm、

膜厚 1.8 μm 、Agilent Technologies 社製)

カラム温度：40°C (1 min)–(10°C/min、昇温)
–220°C (6 min)

キャリアーガスおよび流量：He 2 mL/min

注入モード：スプリット

スプリット比：20 : 1

注入口温度：220°C

③ MS 条件

イオン源温度：230°C

四重極温度：150°C

インターフェース温度：280°C

イオン化電圧：70 eV

測定モード：SCAN (m/z 40~800) または SIM
(モニターイオンは表 3 に記載)

チューニング：DFTPP (Decafluoro-triphenylphosphine) 法

6. 保持時間およびマススペクトルの確認とモニターイオンの設定

各標準原液から 1 $\mu\text{g/mL}$ の測定溶液をそれぞれ調製して HS-GC/MS のスキャンモードで測定し、得られたピークの保持時間およびマススペクトルを確認した。ピークが得られなかったものについては、10 および 100 $\mu\text{g/mL}$ の測定溶液を調製して測定した。各物質のモニターイオンは、マススペクトル上のピークからイオン強度と選択性を考慮して最大 3 種類を選択した。さらに、モニターイオンの中から最もイオン強度の高いものを定量イオン、それ以外を確認イオンとした。

7. およその定量下限の算出

各標準原液から 1 $\mu\text{g/mL}$ の測定溶液をそれぞれ調製し HS-GC/MS の SIM モードで測定した。各化学物質の定量イオンにおけるシグナルノイズ比 (S/N) を算出し、 S/N 10 に相当する濃度をおよその定量下限値とした。ただし、1 $\mu\text{g/mL}$ における S/N が 10 未満であった場合

は、10 または 100 $\mu\text{g/mL}$ の測定溶液を調製し S/N 10 以上となる定量下限を求めた。

C. 研究結果及び考察

1. 対象化学物質

平成 29 年度および平成 30 年度に測定対象とした計 885 種類のうち、アセトンに溶解しなかった 238 種類およびマススペクトルなどが得られた 236 種類を除いた 411 種類を対象とした (図 1、表 1~表 3)。

ただし、CAS No. 104-15-4 (*p*-toluenesulfonic acid) は水和物 (*p*-toluenesulfonic acid monohydrate, CAS No. 6192-52-5) を用いた。また、CAS No. 9016-45-9 (poly(oxyethylene) mono(nonylphenyl) ether) は *o*-体、*m*-体、*p*-体混合物であるが、標準品を入手できなかったため、入手可能であった *p*-体 (CAS No. 26027-38-3) を用いた。

2. 標準原液の調製

各標準品を水に溶解し、1000 $\mu\text{g/mL}$ の標準原液を作成した。しかし、表 1 に示す 157 種類については、水に溶解しなかったため標準原液を調製できなかった。したがって、今回の検討ではこれらの物質を対象から除外し、標準原液を調製することができた残りの 254 種類について検討を進めた。

3. 測定方法

測定方法はミネラルウォーター類中の揮発性有機化合物一斉試験法 (以後、VOC 一斉試験法とする)⁶⁾を参考にした。

1) 測定溶液

HS-GC/MS 分析において揮発性を有する化学物質を測定する場合、塩析効果により高感度に測定できるようになることが知られている⁷⁾。VOC 一斉試験法では試料を適宜希釈した溶液 10 mL に塩化ナトリウムを 3 g 加え溶

解したものを測定する。本研究においては、測定溶液の調製操作を簡略化するため、対象化学物質を飽和食塩水に溶解した溶液を測定溶液とした。なお飽和食塩水をブランク測定溶液として定期的に測定し、ブランク由来のピークが検出しないことを確認した。

2) 測定条件

HS-GC/MS のオープン加熱温度などの測定条件はそれぞれの化学物質に最適化するのが一般的であるが、本研究では多種の化学物質を対象としているため、個別の化学物質ごとの最適化はせずに、VOC 一斉試験法とほぼ同様とした。すなわち、HS 加熱温度および時間は 80℃で 30 分間とした。一方、サンプルループ温度はバイアル加熱温度よりも 10℃ほど高く設定することが一般的であるため 90℃とした。また、トランスファーライン温度はさらに 20℃ほど高く設定することとされているが、水が極力残留しないようにするため 130℃に設定した。注入量は装置の仕様上 1 mL とした。また、GC 条件も VOC 一斉試験法と同様としたが、最高温度での保持時間は 3 分延長し 6 分間とした。

4. 保持時間およびマススペクトルの確認とモニターイオンの設定

標準原液を調製することができた 254 種類について、前述の測定条件により HS-GC/MS で測定し、それぞれの保持時間およびマススペクトルを確認した。

その結果、表 2 に示す 134 種類については、100 µg/mL の測定溶液でもピークが確認できなかった。一方、120 種類については十分な高さのピークが検出できたため、それらの保持時間およびマススペクトルを確認した。これらの保持時間を表 3、マススペクトルを図 2

にそれぞれ示した。また、マススペクトル上のイオン強度と選択性を考慮して最大 3 種のモニターイオンを選択した。このうち最もイオン強度の高いものを定量イオンとし、残りを確認イオンとした。

5. およその定量下限の算出

今回の測定条件においてマススペクトル等が取得できた 120 種類については、SIM モードにおける定量下限を算出した。ただし、 S/N 10 となる濃度を計算により求めたこと、測定条件が各化学物質に最適化したものではないことから、およその定量下限とした。

その結果、定量下限が 0.01 µg/mL 以下だったのは 37 種類、0.01~1 µg/mL は 54 種類、1 µg/mL 以上は 29 種類であった。

D. 結論

PL 制度施行に伴う合成樹脂製品の検査・監視等に資することを目的として、PL 収載物質（候補物質も含む）の GC/MS 分析を行うための情報を平成 29 年度および平成 30 年度に引き続き収集した。

今年度はこれまでに情報が得られなかった 411 種類の化学物質のうち、水に溶解したものを HS-GC/MS で分析した。その結果、120 種類について保持時間およびマススペクトルを取得した。さらに、これらについて定量イオンを選択し、SIM モードにおける S/N 比からおよその定量下限を算出した。これにより、既報のものとおわせて約 350 種類について GC/MS 分析における情報を取得した。

PL には多くの化学物質が収載され、今後もさらなる追加が予想される。今後も継続して PL 制度の運用に必要な化学物質の情報を収集する予定である。

E. 参考文献

- 1) Electronic Code of Federal Regulations (eCFR), https://www.ecfr.gov/cgi-bin/text-idx?SID=3cad50a0669d58280e2f00765973df08&mc=true&tpl=/ecfrbrowse/Title21/21tab_02.tpl
- 2) The European Commission, COMMISSION REGULATION (EU) No 10/2011 of 14 January 2011 on plastic materials and articles intended to come into contact with food, Official journal of the European Union (2011)
- 3) 中華人民共和国国家標準、GB9685-2016 (2016), 食品安全国家標準、食品接触材料及制品用添加使用標準、https://www.cirs-group.com/Uploads/file/20171212/1513045190_93697.pdf (p. 1-93), https://www.cirs-group.com/Uploads/file/20171212/1513045207_17392.pdf (p. 94-188), https://www.cirs-group.com/Uploads/file/20171212/1513045215_27967.pdf (p. 189-283), https://www.cirs-group.com/Uploads/file/20171212/1513045227_35209.pdf (p. 284-378)
- 4) 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)
- 5) 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)
- 6) 厚生労働省医薬品食品安全部長通知 (平成 26 年 12 月 22 日食安発第 5 号) 清涼飲料水等の規格基準の一部改正に係る試験法について (2014)
- 7) 日本薬学会編、衛生試験法・注解 2020 (ISBN978-4-307-47049-0)、金原出版、p 826-833

表1 水に溶解せず標準原液が調製できなかった物質

EU ^{*1}	US ^{*2}	日本 ^{*3}	化合物名	CAS番号	Formula	分子量	SML ^{*4}
	○		Vitamin D2	0000050-14-6	C ₂₈ H ₄₄ O	396.65	-
	○		allyl isothiocyanate	0000057-06-7	-	-	-
○	○		linoleic acid	0000060-33-3	C ₁₈ H ₃₂ O ₂	280.45	-
○	○	○	benzoic acid	0000065-85-0	C ₇ H ₆ O ₂	122.12	-
	○		Vitamin D3	0000067-97-0	C ₂₇ H ₄₄ O	384.64	-
○			salicylic acid	0000069-72-7	C ₇ H ₆ O ₃	138.12	-
	○		iodoform	0000075-47-8	CHI ₃	393.73	-
○	○		camphor	0000076-22-2	C ₁₀ H ₁₆ O	152.23	-
	○		dibutyltin dilaurate	0000077-58-7	C ₃₂ H ₆₄ O ₄ Sn	631.56	-
	○		dicyclopentadiene	0000077-73-6	C ₁₀ H ₁₂	132.20	-
	○	○	tributyl citrate	0000077-94-1	C ₁₈ H ₃₂ O ₇	360.45	-
○			vinyltriethoxysilane	0000078-08-0	C ₈ H ₁₈ O ₃ Si	190.10	0.05
	○		tris(2-butoxyethyl) phosphate	0000078-51-3	C ₁₈ H ₃₉ O ₇ P	398.48	-
	○		azo-bis-isobutyronitrile	0000078-67-1	C ₈ H ₁₂ N ₄	164.21	-
	○		3,3-bis(chloromethyl)oxetane	0000078-71-7	C ₅ H ₈ OCl ₂	155.02	-
	○		1,1,2-trichloroethane	0000079-00-5	C ₂ H ₃ Cl ₃	133.40	-
	○		amyphenol, p-tert-	0000080-46-6	C ₁₁ H ₁₆ O	164.24	-
	○		cholic acid	0000081-25-4	C ₂₄ H ₄₀ O ₅	408.57	-
	○		tetrahydrophthalic anhydride	0000085-43-8	C ₈ H ₈ O ₃	152.15	-
○	○		phthalic anhydride	0000085-44-9	C ₈ H ₄ O ₃	148.12	-
	○		trichloroisocyanuric acid	0000087-90-1	C ₃ N ₃ O ₃ Cl ₃	232.41	-
	○		2-ethylphenol	0000090-00-6	C ₈ H ₁₀ O	122.16	-
○	○		2,6-toluene diisocyanate	0000091-08-7	C ₉ H ₆ N ₂ O ₂	174.16	ND
	○		decahydronaphthalene (mixture of cis- and trans-)	0000091-17-8	C ₁₀ H ₁₈	138.25	-
	○		N,N-diethylaniline	0000091-66-7	C ₁₀ H ₁₅ N	149.23	-
	○		umbelliferone	0000093-35-6	C ₉ H ₆ O ₃	162.14	-
○			benzoic acid, ethyl ester	0000093-89-0	C ₉ H ₁₀ O ₂	150.17	-
	○	○	N,N'-bis(salicylidene)-1,2-propanediamine	0000094-91-7	C ₁₇ H ₁₈ N ₂ O ₂	282.34	-
	○		indene	0000095-13-6	C ₉ H ₈	116.16	-
	○		2-benzothiazolyl diethylthiocarbamate	0000095-30-7	C ₁₂ H ₁₄ N ₂ S ₃	282.45	-
○	○		methacrylic acid, allyl ester	0000096-05-9	C ₇ H ₁₀ O ₂	126.07	-
	○		styrene oxide	0000096-09-3	C ₈ H ₈ O	120.15	-
○			eugenol	0000097-53-0	C ₁₀ H ₁₂ O ₂	164.08	ND
	○		disulfiram	0000097-77-8	C ₁₀ H ₂₀ N ₂ S ₄	296.52	-
	○		lauroyl sarcosine	0000097-78-9	C ₁₅ H ₂₉ NO ₃	271.40	-
○	○		methacrylic acid, isobutyl ester	0000097-86-9	C ₈ H ₁₄ O ₂	142.20	6
○	○	○	methacrylic acid, butyl ester	0000097-88-1	C ₈ H ₁₄ O ₂	142.20	6
○	○		methacrylic acid, diester with ethyleneglycol	0000097-90-5	C ₁₀ H ₁₄ O ₄	198.09	0.05
○			4-tert-butylphenol	0000098-54-4	C ₁₀ H ₁₄ O	150.10	0.05
○	○		α-methylstyrene	0000098-83-9	C ₉ H ₁₀	118.08	0.05
	○		4-isopropylphenol	0000099-89-8	C ₉ H ₁₂ O	136.19	-
○		○	styrene	0000100-42-5	C ₈ H ₈	104.15	-
○	○		methacrylic acid, cyclohexyl ester	0000101-43-9	C ₁₀ H ₁₆ O ₂	168.12	0.05
	○		1,3-diphenylguanidine	0000102-06-7	C ₁₃ H ₁₃ N ₃	211.26	-
○	○	○	N,N'-diphenylthiourea	0000102-08-9	C ₁₃ H ₁₂ N ₂ S	228.07	3
○			(1,3-phenylenedioxy) diacetic acid	0000102-39-6	C ₁₀ H ₁₀ O ₆	226.05	0.05
○	○		acrylic acid, 2-ethylhexyl ester	0000103-11-7	C ₁₁ H ₂₀ O ₂	184.15	0.05
○		○	2-ethyl-1-hexanol	0000104-76-7	C ₈ H ₁₈ O	130.14	30
	○		polyethylene glycol monooleate (2E.O.)	0000106-12-7	C ₂₂ H ₄₂ O ₄	370.57	-
○	○	○	12-hydroxystearic acid	0000106-14-9	C ₁₈ H ₃₆ O ₃	300.48	-
○			butyric anhydride	0000106-31-0	C ₈ H ₁₄ O ₃	158.19	-
○	○		1,4-dichlorobenzene	0000106-46-7	C ₆ H ₄ Cl ₂	145.97	12
○	○		acrylic acid, isobutyl ester	0000106-63-8	C ₇ H ₁₂ O ₂	128.17	6
	○		2,4,4-trimethyl-1-pentene	0000107-39-1	C ₈ H ₁₆	112.22	-
	○		chlorobenzene	0000108-90-7	C ₆ H ₅ Cl	112.56	-
○	○	○	sorbic acid	0000110-44-1	C ₆ H ₈ O ₂	112.13	-
○			heptanoic acid	0000111-14-8	C ₇ H ₁₄ O ₂	130.18	-
○			1-octene	0000111-66-0	C ₈ H ₁₆	112.13	15
○			1-octanol	0000111-87-5	C ₈ H ₁₈ O	130.23	-

表1 水に溶解せず標準原液が調製できなかった物質 (続き)

EU ^{*1}	US ^{*2}	日本 ^{*3}	化合物名	CAS番号	Formula	分子量	SML ^{*4}
	○		N,N-dimethyldodecylamine	0000112-18-5	C ₁₄ H ₃₁ N	213.40	-
○	○		sebacic acid	0000111-20-6	C ₁₀ H ₁₈ O ₄	202.25	-
○			1-decanol	0000112-30-1	C ₁₀ H ₂₂ O	158.28	-
○			1-dodecene	0000112-41-4	C ₁₂ H ₂₄	168.19	0.05
○	○	○	oleic acid	0000112-80-1	C ₁₈ H ₃₄ O ₂	282.46	-
○			erucic acid	0000112-86-7	C ₂₂ H ₄₂ O ₂	338.57	-
○			4-chlorophthalic anhydride	0000118-45-6	C ₈ H ₃ ClO ₃	181.98	0.05
	○		chloranil	0000118-75-2	C ₆ O ₂ Cl ₄	245.86	-
○	○		salicylic acid, methyl ester	0000119-36-8	C ₈ H ₈ O ₃	152.05	30
	○		n,n-dimethylbenzenamine	0000121-69-7	C ₈ H ₁₁ N	121.18	-
	○		glycidyl phenyl ether	0000122-60-1	C ₉ H ₁₀ O ₂	150.17	-
○			butyraldehyde	0000123-72-8	C ₄ H ₈ O	72.11	-
○	○		azelaic acid	0000123-99-9	C ₉ H ₁₆ O ₄	188.22	-
○	○		caprylic acid	0000124-07-2	C ₈ H ₁₆ O ₂	144.21	-
	○		4,4-bis(4-hydroxyphenyl)pentanoic acid	0000126-00-1	C ₁₇ H ₁₈ O ₄	286.32	-
	○		tetrachloroethylene	0000127-18-4	C ₂ Cl ₄	165.83	-
	○		2,2'-dibenzoylaminodiphenyl disulfide	0000135-57-9	C ₂₆ H ₂₀ N ₂ O ₂ S ₂	456.58	-
○	○		benzoic acid, butyl ester	0000136-60-7	C ₁₁ H ₁₄ O ₂	178.23	-
	○		thiram	0000137-26-8	C ₆ H ₁₂ N ₂ S ₄	240.43	-
	○		dipentene	0000138-86-3	C ₁₀ H ₁₆	136.23	-
○	○		ricinoleic acid	0000141-22-0	C ₁₈ H ₃₄ O ₃	298.25	42
○	○	○	acrylic acid, n-butyl ester	0000141-32-2	C ₇ H ₁₂ O ₂	128.17	6
	○		hexyl methacrylate (stabilized with MEHQ)	0000142-09-6	C ₁₀ H ₁₈ O ₂	170.25	-
	○		heptane	0000142-82-5	C ₇ H ₁₆	100.21	-
○			1-nonanol	0000143-08-8	C ₉ H ₂₀ O	144.25	-
	○		butyl ricinoleate	0000151-13-3	C ₂₂ H ₄₂ O ₃	354.57	-
	○		2,3-benzofuran	0000271-89-6	C ₈ H ₆ O	118.13	-
○			n-decanoic acid	0000334-48-5	C ₁₀ H ₂₀ O ₂	172.26	-
○			bicyclo[2.2.1]hept-2-ene	0000498-66-8	C ₇ H ₁₀	94.08	0.05
	○		dicyclopentadiene (stabilized with BHT) [precursor to cyclopentadiene]	0000542-92-7	C ₅ H ₆	66.10	-
○			2,6-dimethylphenol	0000576-26-1	C ₈ H ₁₀ O	122.07	0.05
○	○		methacrylic acid, tert-butyl ester	0000585-07-9	C ₈ H ₁₄ O ₂	142.20	6
	○		3-ethylphenol	0000620-17-7	C ₈ H ₁₀ O	122.16	-
	○		p-methylstyrene	0000622-97-9	C ₉ H ₁₀	118.18	-
	○		diethyl fumarate	0000623-91-6	C ₈ H ₁₂ O ₄	172.18	-
	○		dimethyl fumarate	0000624-49-7	C ₆ H ₈ O ₄	144.13	-
	○		amyl acetate	0000628-63-7	C ₁₁ H ₂₃ NO ₃	130.18	-
	○		dibutyltin dichloride	0000683-18-1	C ₈ H ₁₈ SnCl ₂	303.84	-
	○		2-ethylhexyl methacrylate	0000688-84-6	C ₁₂ H ₂₂ O ₂	198.31	-
○	○		n-dodecanedioic acid	0000693-23-2	C ₁₂ H ₂₂ O ₄	230.30	-
○			methacrylic anhydride	0000760-93-0	C ₈ H ₁₀ O ₃	154.16	6
○			1-decene	0000872-05-9	C ₁₀ H ₂₀	140.16	0.05
○			cyclooctene	0000931-88-4	C ₈ H ₁₄	110.11	0.05
	○		dibutyltin diacetate	0001067-33-0	C ₁₂ H ₂₄ O ₄ Sn	351.03	-
○			1-tetradecene	0001120-36-1	C ₁₄ H ₂₈	196.22	0.05
○			gallic acid, dodecyl ester	0001166-52-5	C ₁₉ H ₃₀ O ₅	338.44	30
○	○		divinylbenzene	0001321-74-0	C ₁₀ H ₁₀	130.08	ND
	○		xylene	0001330-20-7	C ₈ H ₁₀	106.17	-
○		○	1,2-propyleneglycol monooleate	0001330-80-9	C ₂₁ H ₄₀ O ₃	340.54	-
	○		copper naphthenate	0001338-02-9	C ₂₂ H ₁₄ O ₄ Cu	405.90	-
○			1,9-decadiene	0001647-16-1	C ₁₀ H ₁₈	138.14	0.05
○	○		acrylic acid, tert-butyl ester	0001663-39-4	C ₇ H ₁₂ O ₂	128.17	6
	○		octyl methacrylate	0002157-01-9	C ₁₂ H ₂₂ O ₂	198.30	-
○			methacrylic acid, phenyl ester	0002177-70-0	C ₁₀ H ₁₀ O ₂	162.19	6
○			benzoic acid, propyl ester	0002315-68-6	C ₁₀ H ₁₂ O ₂	164.20	-
○			2,3,6-trimethylphenol	0002416-94-6	C ₉ H ₁₂ O	136.09	0.05

表1 水に溶解せず標準原液が調製できなかった物質 (続き)

EU ^{*1}	US ^{*2}	日本 ^{*3}	化合物名	CAS番号	Formula	分子量	SML ^{*4}
	○		2-bromo-4'-hydroxyacetophenone	0002491-38-5	C ₈ H ₇ BrO ₂	215.04	-
○			acrylic acid, benzyl ester	0002495-35-4	C ₁₀ H ₁₀ O ₂	162.19	6
○			methacrylic acid, benzyl ester	0002495-37-6	C ₁₁ H ₁₂ O ₂	176.21	6
○	○		[3-(methacryloxy)propyl] trimethoxysilane	0002530-85-0	C ₁₀ H ₂₀ O ₅ Si	248.11	0.05
	○		2,4,6,8-tetramethyl-2,4,6,8-tetravinylcyclotetrasiloxane	0002554-06-5	C ₁₂ H ₂₄ O ₄ Si ₄	344.66	-
	○	○	1,2-benzisothiazolin-3-one	0002634-33-5	C ₇ H ₅ NOS	151.19	-
○	○		methacrylic acid, sec-butyl ester	0002998-18-7	C ₈ H ₁₄ O ₂	142.20	6
	○		vinyl hexoate	0003050-69-9	C ₈ H ₁₄ O ₂	142.20	-
	○		dichlorodioctylstannane	0003542-36-7	C ₁₆ H ₃₄ SnCl ₂	416.06	-
	○		diundecyl phthalate	0003648-20-2	C ₃₀ H ₅₀ O ₄	474.72	-
○			adipic acid, divinyl ester	0004074-90-2	C ₁₀ H ₁₄ O ₄	198.09	ND
○	○		1,3,5-benzenetricarboxylic acid trichloride	0004422-95-1	C ₉ H ₃ Cl ₃ O ₃	263.91	0.05
	○		methylene dithiocyanate	0006317-18-6	C ₃ H ₂ N ₂ S ₂	130.19	-
○	○	○	pentaerythritol tetrakis[3-(3,5-di-tert-butyl-4-hydroxyphenyl)-propionate]	0006683-19-8	C ₇₃ H ₁₀₈ O ₁₂	1177.6	-
	○		diisopropyl fumarate	0007283-70-7	C ₁₀ H ₁₆ O ₄	200.23	-
	○		N,N-dimethyloctanamine	0007378-99-6	C ₁₀ H ₂₃ N	157.30	-
	○		clove oil	0008000-34-8	-	-	-
	○		kerosine	0008008-20-6	-	-	-
○			polyethyleneglycol sorbitan monostearate	0009005-67-8	-	-	-
	○	○	methyl methacrylate polymer	0009011-14-7	-	-	-
	○	○	N,N-bis(hydroxyethyl)octadecylamine	0010213-78-2	C ₂₂ H ₄₇ NO ₂	357.61	-
	○		2-ethylhexyl phosphate (mono- and di- ester mixture)	0012645-31-7	C ₂₄ H ₅₄ O ₈ P ₂	532.63	-
	○		4-tert-butyl-o-thiocresol	0015570-10-2	C ₁₁ H ₁₆ S	180.31	-
○	○		5-ethylidenebicyclo[2,2,1] hept-2-ene	0016219-75-3	C ₉ H ₁₂	120.09	0.05
○			6-hydroxy-2-naphthalenecarboxylic acid	0016712-64-4	C ₁₁ H ₈ O ₃	188.05	0.05
	○		methylstyrene	0025013-15-4	C ₉ H ₁₀	118.18	-
	○		tert-dodecyl mercaptan (mixture of isomers)	0025103-58-6	C ₁₂ H ₂₆ S	202.40	-
	○		diisobutylene (mixture of isomers) (stabilized with BHT)	0025167-70-8	C ₁₆ H ₃₂	224.43	-
	○		polybutylene glycol	0025190-06-1	-	-	-
	○		poly(propylene glycol) (600) diglycidyl ether	0026142-30-3	-	-	-
	○		tridecanol (mixture of isomers)	0026248-42-0	-	-	-
	○		cresyl diphenyl phosphate (so called) (mixture of analogue)	0026444-49-5	C ₁₉ H ₁₇ O ₄ P	340.31	-
	○		toluene diisocyanate	0026471-62-5	C ₉ H ₆ N ₂ O ₂	174.16	-
	○		tris(nonylphenyl) phosphite	0026523-78-4	C ₄₅ H ₆₃ O ₃ P	689.00	-
	○		neodecanoic acid	0026896-20-8	C ₁₀ H ₂₀ O ₂	172.26	-
	○		3,5-di-tert-butyl-4-hydroxyhydrocinnamic acid triester with 1,3,5-tris(2-hydroxyethyl)-s-triazine-2,4,6(1H,3H,5H)-trione	0034137-09-2	C ₆₀ H ₈₇ N ₃ O ₁₂	1042.35	-
○			2,2-bis(4-hydroxyphenyl) propane bis(phthalic anhydride)	0038103-06-9	C ₃₁ H ₂₀ O ₈	520.12	0.05
○	○		polyethyleneglycol ester of castor oil	0061791-12-6	-	-	42
○	○	○	1-(2-hydroxyethyl)-4-hydroxy-2,2,6,6-tetramethyl piperidine-succinic acid, dimethyl ester, copolymer	0065447-77-0	(C ₁₅ H ₂₅ NO ₄) _n	-	30
○	○		poly(6-morpholino-1,3,5-triazine-2,4-diyl)-[(2,2,6,6-tetramethyl-4-piperidyl)imino] hexamethylene-[(2,2,6,6-tetramethyl-4-piperidyl)imino]	0090751-07-8 0082451-48-7	-	-	5
	○		2-hydroxy-4'-(2-hydroxyethoxy)-2-methylpropiophenone	0106797-53-9	C ₁₂ H ₁₆ O ₄	224.25	-
○	○	○	N,N',N'',N'''-tetrakis(4,6-bis(N-butyl-(N-methyl-2,2,6,6-tetramethylpiperidin-4-yl) amino)triazin-2-yl)-4,7-diazadecane-1,10-diamine	0106990-43-6	C ₁₃₂ H ₂₅₀ N ₃₂	2284.05	0.05

*1：欧州連合において食品用途の合成樹脂製品の製造に使用可能な物質

*2：食品接触用途として使用できる材料の製造に使用可能な物質

*3：ポリオレフィン等衛生協議会、塩ビ食品衛生協議会またはビニレン衛生協議会のいずれかのPLIに記載されている物質

*4：欧州連合の基準における特定移行限度値

表2 今回の条件では検出できなかった物質 (続き)

EU ^{*1}	US ^{*2}	日本 ^{*3}	化合物名	CAS番号	Formula	分子量	SML ^{*4}
	○		2-bromo-2-nitro-1,3-propanediol	0000052-51-7	C ₃ H ₆ BrNO ₄	199.99	-
	○		sodium salicylate	0000054-21-7	C ₇ H ₅ O ₃ Na	160.10	-
	○		imino-bis-propylamine	0000056-18-8	C ₆ H ₁₇ N ₃	131.22	-
○	○	○	glycerol	0000056-81-5	C ₃ H ₈ O ₃	92.09	-
○	○	○	1,2-propanediol	0000057-55-6	C ₃ H ₈ O ₂	76.09	-
	○		β-propiolactone	0000057-57-8	C ₃ H ₄ O ₂	72.06	-
○	○		formic acid	0000064-18-6	CH ₂ O ₂	46.03	-
○	○		acetic acid	0000064-19-7	C ₂ H ₄ O ₂	60.05	-
	○		diethyl sulfate	0000064-67-5	C ₄ H ₁₀ O ₄ S	154.18	-
○			dimethyl sulphoxide	0000067-68-5	C ₂ H ₆ OS	78.13	-
	○		methylamine	0000074-89-5	CH ₅ N	31.06	-
	○		formamide	0000075-12-7	CH ₃ NO	45.04	-
○			ethylene oxide	0000075-21-8	C ₂ H ₄ O	44.03	ND
	○		dimethyl sulfate	0000077-78-1	C ₂ H ₆ O ₄ S	120.13	-
	○		trimethylolethane	0000077-85-0	C ₅ H ₁₂ O ₃	120.15	-
○	○	○	citric acid	0000077-92-9	C ₆ H ₈ O ₇	192.12	-
○	○	○	1,1,1-trimethylolpropane	0000077-99-6	C ₆ H ₁₄ O ₃	134.09	6
○	○		acrylamide	0000079-06-1	C ₃ H ₅ NO	71.04	ND
○	○	○	acrylic acid	0000079-10-7	C ₃ H ₄ O ₂	72.06	6
○	○		glycolic acid	0000079-14-1	C ₂ H ₄ O ₃	76.05	-
○	○	○	tartaric acid	0000087-69-4	C ₄ H ₆ O ₆	150.09	-
○	○		o-phthalic acid	0000088-99-3	C ₈ H ₆ O ₄	166.13	-
	○		saligenin	0000090-01-7	C ₇ H ₈ O ₂	124.14	-
	○		1,2,3-benzotriazole	0000095-14-7	C ₆ H ₅ N ₃	119.12	-
○	○	○	itaconic acid	0000097-65-4	C ₅ H ₆ O ₄	130.10	-
	○		benzoyl chloride	0000098-88-4	C ₇ H ₅ OCl	140.57	-
○	○	○	N,N,N',N'-tetrakis(2-hydroxypropyl)ethylenediamine	0000102-60-3	C ₁₄ H ₃₂ N ₂ O ₄	292.41	-
	○		N-butyl-diethanolamine	0000102-79-4	C ₈ H ₁₉ NO ₃	161.24	-
	○		p-toluenesulfonic acid ^{*5}	0000104-15-4	C ₇ H ₈ O ₃ S	172.20	-
	○		N,N-diethyl-1,3-propanediamine	0000104-78-9	C ₇ H ₁₈ N ₂	130.23	-
○	○		1,4-bis(hydroxymethyl) cyclohexane	0000105-08-8	C ₈ H ₁₆ O ₂	144.21	-
	○		N-methyldiethanolamine	0000105-59-9	C ₅ H ₁₃ NO ₂	119.16	-
○			caprolactam	0000105-60-2	C ₆ H ₁₁ NO	113.16	15
	○		1,4-benzoquinone	0000106-51-4	C ₆ H ₄ O ₂	108.10	-
○	○		1-butene	0000106-98-9	C ₄ H ₈	56.11	-
○			ethylenediamine	0000107-15-3	C ₂ H ₈ N ₂	60.07	12
○		○	1,3-butanediol	0000107-88-0	C ₄ H ₁₀ O ₂	90.12	-
○			acetic anhydride	0000108-24-7	C ₄ H ₆ O ₃	102.09	-
○			succinic anhydride	0000108-30-5	C ₄ H ₄ O ₃	100.07	-
○	○	○	maleic anhydride	0000108-31-6	C ₄ H ₂ O ₃	98.06	30
	○		propylene carbonate	0000108-32-7	C ₄ H ₆ O ₃	102.09	-
○	○		1,3-phenylenediamine	0000108-45-2	C ₆ H ₈ N ₂	108.07	ND
○			1,3-dihydroxybenzene	0000108-46-3	C ₆ H ₆ O ₂	110.04	2.4
○			glutaric anhydride	0000108-55-4	C ₅ H ₆ O ₃	114.10	-
	○		N,N-dimethyl-1,3-propanediamine	0000109-55-7	C ₅ H ₁₄ N ₂	102.18	-
	○		trimethylenediamine	0000109-76-2	C ₃ H ₁₀ N ₂	74.12	-
	○		ethylene cyanohydrin	0000109-78-4	C ₃ H ₅ NO	71.08	-
○	○	○	succinic acid	0000110-15-6	C ₄ H ₆ O ₄	118.09	-
○	○	○	maleic acid	0000110-16-7	C ₄ H ₄ O ₄	116.07	30
	○		N,N-methylenebisacrylamide	0000110-26-9	C ₇ H ₁₀ N ₂ O ₂	154.17	-
○	○		1,4-diaminobutane	0000110-60-1	C ₄ H ₁₂ N ₂	88.15	-
○	○		1,4-butanediol	0000110-63-4	C ₄ H ₁₀ O ₂	90.12	5
○			glutaric acid	0000110-94-1	C ₅ H ₈ O ₄	132.11	-
	○		diisopropanolamine (DL- and meso- mixture)	0000110-97-4	C ₆ H ₁₅ NO ₂	133.19	-
○	○	○	dipropylene glycol (mixture of isomers)	0000110-98-5	C ₆ H ₁₄ O ₃	134.17	-
	○		diglycolic acid	0000110-99-6	C ₄ H ₆ O ₅	134.09	-
	○	○	3,3-thiodipropionic acid	0000111-17-1	C ₆ H ₁₀ O ₄ S	178.21	-

表2 今回の条件では検出できなかった物質 (続き)

EU ^{*1}	US ^{*2}	日本 ^{*3}	化合物名	CAS番号	Formula	分子量	SML ^{*4}
○			diethylenetriamine	0000111-40-0	C ₄ H ₁₃ N ₃	103.11	5
○	○		N-(2-aminoethyl)ethanolamine	0000111-41-1	C ₄ H ₁₂ N ₂ O	104.09	0.05
	○		diethanolamine	0000111-42-2	C ₄ H ₁₁ NO ₂	105.14	-
○	○		diethyleneglycol	0000111-46-6	C ₄ H ₁₀ O ₃	106.12	30
	○		diethylene glycol monomethyl ether (stabilized with BHT)	0000111-77-3	C ₅ H ₁₂ O ₃	120.15	-
○	○	○	triethyleneglycol	0000112-27-6	C ₆ H ₁₄ O ₄	150.17	-
○	○	○	isobutene	0000115-11-7	C ₄ H ₈	56.11	-
	○		2-imidazolidinone	0000120-93-4	C ₃ H ₆ N ₂ O	86.09	-
○	○	○	triisopropanolamine	0000122-20-3	C ₉ H ₂₁ NO ₃	191.15	5
○			phosphorous acid, triethyl ester	0000122-52-1	C ₆ H ₁₅ O ₃ P	166.08	ND
○	○		1,4-dihydroxybenzene	0000123-31-9	C ₆ H ₆ O ₂	110.04	0.6
○			propionic anhydride	0000123-62-6	C ₆ H ₁₀ O ₃	130.14	-
○			levulinic acid	0000123-76-2	C ₅ H ₈ O ₃	116.12	-
	○		n-(2-hydroxypropyl)ethylenediamine	0000123-84-2	C ₅ H ₁₄ N ₂ O	118.18	-
○	○	○	adipic acid	0000124-04-9	C ₆ H ₁₀ O ₄	146.14	-
	○		2-amino-2-methyl-1-propanol	0000124-68-5	C ₄ H ₁₁ NO	89.14	-
○	○		2,2-dimethyl-1,3-propanediol	0000126-30-7	C ₅ H ₁₂ O ₂	104.08	0.05
○			2-aminoethanol	0000141-43-5	C ₂ H ₇ NO	61.05	0.05
○			malonic acid	0000141-82-2	C ₃ H ₄ O ₄	104.06	-
	○		2-acetamidoethanol	0000142-26-7	C ₄ H ₉ NO ₂	103.12	-
	○		2,2,4-trimethyl-1,3-pentanediol	0000144-19-4	C ₈ H ₁₈ O ₂	146.23	-
○	○		oxalic acid	0000144-62-7	C ₂ H ₂ O ₄	90.00	6
	○		tetradecafluorohexane	0000355-42-0	C ₆ F ₁₄	338.04	-
○			1,3-propanediol	0000504-63-2	C ₃ H ₈ O ₂	76.05	0.05
○	○		trimellitic acid	0000528-44-9	C ₉ H ₆ O ₆	210.14	5
	○		sodium thiocyanate	0000540-72-7	CNSNa	81.07	-
○	○		trimellitic anhydride	0000552-30-7	C ₉ H ₄ O ₅	192.13	5
	○		3-amino-1,2-propanediol	0000616-30-8	C ₃ H ₉ NO ₂	91.11	-
○	○		1,6-hexanediol	0000629-11-8	C ₆ H ₁₄ O ₂	118.10	0.05
○			1,4:3,6-dianhydrosorbitol	0000652-67-5	C ₆ H ₁₀ O ₄	146.06	5
○	○		3-aminopropyltriethoxysilane	0000919-30-2	C ₉ H ₂₃ NO ₃ Si	221.14	0.05
○	○		N-methylolacrylamide	0000924-42-5	C ₄ H ₇ NO ₂	101.05	ND
	○		Vinylsulfonic acid	0001184-84-5	C ₂ H ₄ O ₃ S	108.11	-
	○		benzoyl chloride-3,4-dicarboxylic anhydride	0001204-28-0	C ₉ H ₃ O ₄ Cl	210.57	-
○	○		tannic acids	0001401-55-4	C ₇₆ H ₅₂ O ₄₆	1701.2	-
	○		monomethyl fumarate	0002756-87-8	C ₅ H ₆ O ₄	130.10	-
○			vinyltrimethoxysilane	0002768-02-7	C ₅ H ₁₂ O ₃ Si	148.06	0.05
	○		monomethyl maleate	0003052-50-4	C ₅ H ₆ O ₄	130.10	-
	○		butylaminoethyl methacrylate, tert-	0003775-90-4	C ₁₀ H ₁₉ NO ₂	185.26	-
○			perfluorooctanoic acid, ammonium salt	0003825-26-1	C ₈ H ₄ NO ₂ F ₁₅	431.10	-
○			3-methyl-1,5-pentanediol	0004457-71-0	C ₆ H ₁₄ O ₂	118.10	0.05
○			n-octylphosphonic acid	0004724-48-5	C ₈ H ₁₉ O ₃ P	194.11	0.05
○	○		2,2-bis(hydroxymethyl) propionic acid	0004767-03-7	C ₅ H ₁₀ O ₄	134.06	0.05
	○		1,3-bis(hydroxymethyl)-5,5-dimethylimidazolidine-2,4-dione	0006440-58-0	C ₇ H ₁₂ N ₂ O ₄	188.18	-
○	○	○	malic acid	0006915-15-7	C ₄ H ₆ O ₅	134.09	-
	○		ligroin	0008032-32-4	C ₇ H ₇ BrMg	195.34	-
	○		peg lauryl ether	0009002-92-0	-	-	-
		○	polyethylene glycol mono-4-octylphenyl ether (n=approx. 10)	0009002-93-1 (参考)	-	-	-
		○	polyvinyl methyl ether	0009003-09-2	-	-	-
		○	polyethylene glycol monolaurate (10E.O.)	0009004-81-3	-	-	-
		○	polyethylene glycol monooleate (10E.O.)	0009004-96-0	-	-	-
		○	polyethylene glycol monooleyl ether (n=approx. 10)	0009004-98-2	-	-	-
○		○	polyethyleneglycol sorbitan monolaurate (Tween 20)	0009005-64-5	-	-	-
○		○	polyethyleneglycol sorbitan monooleate (Tween 80)	0009005-65-6	-	-	-

表2 今回の条件では検出できなかった物質 (続き)

EU ^{*1}	US ^{*2}	日本 ^{*3}	化合物名	CAS番号	Formula	分子量	SML ^{*4}
○	○		polyethyleneglycol sorbitan monopalmitate (Tween 40)	0009005-66-7	-	-	-
○	○	○	polyethyleneglycol sorbitan trioleate (Tween 85)	0009005-70-3	-	-	-
○			polyethyleneglycol sorbitan tristearate	0009005-71-4	-	-	-
	○		poly(oxyethylene) mono(nonylphenyl) ether ^{*6}	0009016-45-9	-	-	-
	○		magnesium nitrate hydrate, Puratronic®, 99.999% (metals basis)	0010377-60-3	MgN ₂ O ₆	148.31	-
	○		N,N-bis(3-aminopropyl)ethylenediamine	0010563-26-5	C ₈ H ₂₂ N ₄	174.29	-
○	○		methacrylic acid, 2-sulphoethyl ester	0010595-80-9	C ₆ H ₁₀ O ₅ S	194.02	ND
	○		3-aminopropyltrimethoxysilane	0013822-56-5	C ₆ H ₁₇ NO ₃ Si	179.29	-
○	○		tripropylene glycol	0024800-44-0	C ₉ H ₂₀ O ₄	192.25	-
	○		methyl-5-norbornene-2,3-dicarboxylic anhydride	0025134-21-8	C ₁₀ H ₁₀ O ₃	178.19	-
	○		dipropylene glycol	0025265-71-8	C ₆ H ₁₄ O ₃	134.18	-
○		○	polyethyleneglycol	0025322-68-3	-	-	-
○		○	polypropylene glycol	0025322-69-4	-	-	-
	○		glycerol diacetate	0025395-31-7	C ₇ H ₁₂ O ₅	176.17	-
	○		hydroxypropyl acrylate (mixture of 2-hydroxypropyl and 2-hydroxy-1-methylethyl Acrylate) (stabilized with MEHQ)	0025584-83-2	C ₆ H ₁₀ O ₃	130.14	-
	○		polypropylene glycol, triol type	0025791-96-2	-	-	-
	○		polyethylene glycol mono-4-nonylphenyl ether (n=approx. 10)	0026027-38-3	C ₂₈ H ₅₀ O ₈	514.70	-
○			glycerol monoacetate	0026402-26-6	C ₁₁ H ₂₂ O ₄	218.29	-
	○		hydroxypropyl methacrylate	0027813-02-1	C ₇ H ₁₂ O ₃	144.17	-
	○		α-(3-aminopropyl)-ω-(3-aminopropoxy) polyoxyethylene	0034901-14-9	-	-	-
	○		3-(methylamino)-1-propanol	0042055-15-2	C ₄ H ₁₁ NO	89.14	-
	○		polyoxyethylene-grafted polydimethylsiloxane	0068937-54-2	-	-	-
○	○		polyethyleneglycol-30 dipolyhydroxystearate	0070142-34-6	-	-	-

*1：欧州連合において食品用途の合成樹脂製品の製造に使用可能な物質

*2：食品接触用途として使用できる材料の製造に使用可能な物質

*3：ポリオレフィン等衛生協議会、塩ビ食品衛生協議会またはビニリデン衛生協議会のいずれかのPLに収載されている物質

*4：欧州連合の基準における特定移行限度値

*5：水和物を測定した

*6：CAS No. 9016-45-9 は CAS 26027-38-3 (*p*-体)、51938-25-1 (*o*-体)、20427-84-3 (*m*-体) の混合物であるが、このうち入手できた 26027-38-3 を用いた。

表3 今回の条件で測定可能であった物質の保持時間、定量下限

EU ^{*1}	US ^{*2}	日本 ^{*3}	化合物名	CAS番号	Formula	分子量	SML ^{*4}	Rt (min)	定量イオン (m/z)	確認イオン (m/z)	確認イオン (m/z)	定量下限 (µg/mL)
○	○		perfluoropropylperfluorovinyl ether	0001623-05-8	C ₆ F ₁₀ O	265.98	0.05	3.15	69	169	100	10.5
○			perfluoro[2-(n-propoxy)propanoic acid]	0013252-13-6	C ₆ H ₉ O ₂ F ₁₁	330.05	-	3.31	101	69	169	0.3
○			methanol	0000067-56-1	CH ₄ O	32.04	-	4.05	31	32	29	0.04
○			(perfluorobutyl)ethylene	0019430-93-4	C ₆ H ₃ F ₉	246.07	-	4.16	77	51	69	10.6
○			3-methyl-1-butene	0000563-45-1	C ₅ H ₁₀	70.08	ND	4.34	55	39	70	4.2
○	○		isopentane	0000078-78-4	C ₅ H ₁₂	72.15	-	4.51	43	42	57	9.4
○	○		1-pentene	0000109-67-1	C ₅ H ₁₀	70.08	5	4.76	42	55	70	2.6
○		○	ethanol	0000064-17-5	C ₂ H ₆ O	46.07	-	4.90	31	45	-	0.02
	○		ethyl vinyl ether (stabilized with KOH)	0000109-92-2	C ₄ H ₈ O	72.11	-	5.11	44	43	72	0.04
○	○		2-methyl-1,3-butadiene	0000078-79-5	C ₅ H ₈	68.06	ND	5.12	67	53	68	0.04
○			propylene oxide	0000075-56-9	C ₃ H ₆ O	58.04	ND	5.17	58	28	43	0.008
○			propionaldehyde	0000123-38-6	C ₃ H ₆ O	58.08	-	5.31	58	29	29	0.001
○		○	2-propanol	0000067-63-0	C ₃ H ₈ O	60.10	-	5.49	45	43	-	0.004
	○		ethyl Formate	0000109-94-4	C ₃ H ₆ O ₂	74.08	-	5.57	31	29	45	0.2
○	○		4-methyl-1-pentene	0000691-37-2	C ₆ H ₁₂	84.09	0.05	5.82	43	41	56	3.3
	○		tert-butyl alcohol	0000075-65-0	C ₄ H ₁₀ O	74.12	-	5.93	59	41	31	0.006
○	○		acrylonitrile	0000107-13-1	C ₃ H _{3.5} N	53.03	ND	6.17	53	52	26	0.001
○	○		1-hexene	0000592-41-6	C ₆ H ₁₂	84.09	3	6.43	41	56	84	0.7
	○		1,4-hexadiene	0000592-45-0	C ₆ H ₁₀	82.15	-	6.63	67	39	82	0.05
○			1-propanol	0000071-23-8	C ₃ H ₈ O	60.10	-	6.67	31	59	42	0.006
○			acetic acid, vinyl ester	0000108-05-4	C ₄ H ₆ O ₂	86.04	12	6.70	43	86	-	0.002
	○		diethylamine	0000109-89-7	C ₄ H ₁₁ N	73.14	-	6.71	58	30	73	2.6
○			3-buten-2-ol	0000598-32-3	C ₄ H ₈ O	72.06	ND	7.09	57	43	29	0.008
	○		diacetyl	0000431-03-8	C ₄ H ₆ O ₂	86.09	-	7.13	43	86	-	0.004
○			acetic acid, ethyl ester	0000141-78-6	C ₄ H ₈ O ₂	88.11	-	7.35	43	61	-	0.006
○	○	○	acrylic acid, methyl ester	0000096-33-3	C ₄ H ₆ O ₂	86.09	6	7.42	55	27	85	0.007
○			1,3-dioxolane	0000646-06-0	C ₃ H ₆ O ₂	74.04	5	7.42	73	44	29	0.01
○	○		methacrylonitrile	0000126-98-7	C ₄ H ₅ N	67.04	ND	7.56	41	67	52	0.002
	○		chloral hydrate	0000302-17-0	C ₂ H ₃ Cl ₃ O ₂	165.40	-	7.66	83	85	-	0.0005
○	○		tetrahydrofuran	0000109-99-9	C ₄ H ₈ O	72.06	0.6	7.69	42	41	72	0.0008
	○		2-methylhexane	0000591-76-4	C ₇ H ₁₆	100.20	-	7.88	43	85	7	1.1
	○		1,1,1-trichloroethane	0000071-55-6	C ₂ H ₂ Cl ₃	133.40	-	7.93	97	61	119	0.9
○			isobutyl vinyl ether	0000109-53-5	C ₆ H ₁₂ O	100.09	0.05	7.94	41	57	100	0.03
	○		2-methoxyethanol	0000109-86-4	C ₃ H ₈ O ₂	76.09	-	8.27	45	29	-	0.8
○	○	○	propionic acid, vinyl ester	0000105-38-4	C ₅ H ₈ O ₂	100.12	6	8.66	57	29	100	0.006
○			1-butanol	0000071-36-3	C ₄ H ₁₀ O	74.12	-	8.81	56	41	31	0.007
○	○	○	acrylic acid, ethyl ester	0000140-88-5	C ₅ H ₈ O ₂	100.12	6	9.10	55	27	-	0.003
○	○		trioxane	0000110-88-3	C ₃ H ₆ O ₃	90.03	5	9.27	31	61	89	0.026
○		○	methacrylic acid, methyl ester	0000080-62-6	C ₅ H ₈ O ₂	100.12	6	9.37	41	69	100	0.003
	○		1,4-dioxane (stabilized with BHT)	0000123-91-1	C ₄ H ₈ O ₂	88.11	-	9.46	28	88	58	0.5
	○		2-nitropropane	0000079-46-9	C ₃ H ₇ NO ₂	89.09	-	9.90	43	41	27	0.004
	○	○	tert-butyl hydroperoxide	0000075-91-2	C ₄ H ₁₀ O ₂	90.12	-	9.98	43	57	29	0.03
○	○		epichlorohydrin	0000106-89-8	C ₃ H ₅ ClO	92.00	ND	10.06	57	27	49	0.02
○	○		propionic acid	0000079-09-4	C ₃ H ₆ O ₂	74.08	-	10.08	28	45	74	62.9
○			dimethylaminoethanol	0000108-01-0	C ₄ H ₁₁ NO	89.08	18	10.30	58	42	89	270.3
	○		vinyl butyrate (stabilized with MEHQ)	0000123-20-6	C ₆ H ₁₀ O ₂	114.14	-	10.51	43	71	-	0.003
○	○	○	methacrylic acid, ethyl ester	0000097-63-2	C ₆ H ₁₀ O ₂	114.14	6	10.92	69	41	99	0.003
○			1-pentanol	0000071-41-0	C ₅ H ₁₂ O	88.15	-	10.97	42	55	70	0.007
○	○	○	acrylic acid, propyl ester	0000925-60-0	C ₆ H ₁₀ O ₂	114.14	6	11.15	55	73	27	0.002
	○		2-mercaptoethanol	0000060-24-2	C ₂ H ₆ OS	78.13	-	11.35	60	47	78	1.5
	○		N,N,N',N'-tetramethylethylenediamine	0000110-18-9	C ₆ H ₁₆ N ₂	116.21	-	11.41	58	42	-	0.2
	○		acetylacetone	0000123-54-6	C ₅ H ₈ O ₂	100.12	-	11.43	43	85	100	0.1
○	○		methacrylic acid, isopropyl ester	0004655-34-9	C ₇ H ₁₂ O ₂	128.17	6	11.60	69	41	87	0.002
	○		vinyl crotonate (stabilized with MEHQ)	0014861-06-4	C ₆ H ₈ O ₂	112.13	-	11.71	69	41	-	0.0002
○			butyric acid	0000107-92-6	C ₄ H ₈ O ₂	88.11	-	11.80	60	73	73	0.8
○	○	○	methacrylic acid	0000079-41-4	C ₄ H ₆ O ₂	86.09	6	11.96	41	39	86	24.5
○			crotonic acid	0003724-65-0	C ₄ H ₆ O ₂	86.04	0.05	12.77	86	39	68	49.5
	○		3,5-dimethyl-1-hexyn-3-ol	0000107-54-0	C ₈ H ₁₄ O	126.20	-	12.78	69	43	111	0.002
○			cyclohexylamine	0000108-91-8	C ₆ H ₁₃ N	99.17	-	12.79	56	43	99	3.6
○	○	○	methacrylic acid, propyl ester	0002210-28-8	C ₇ H ₁₂ O ₂	128.17	6	12.84	69	41	87	0.002
	○		diacetone alcohol	0000123-42-2	C ₆ H ₁₂ O ₂	116.16	-	13.04	43	59	58	0.1

表3 今回の条件で測定可能であった物質の保持時間、定量下限 (続き)

EU ^{*1}	US ^{*2}	日本 ^{*3}	化合物名	CAS番号	Formula	分子量	SML ^{*4}	Rt (min)	定量イオン (m/z)	確認イオン (m/z)	確認イオン (m/z)	定量下限 (µg/mL)
○			triethylamine	0000102-70-5	C ₉ H ₁₅ N	137.22	-	13.23	41	110		0.007
○			2-ethoxyethyl acetate	0000111-15-9	C ₈ H ₁₂ O ₃	132.16	-	13.41	43	72	59	0.01
○			allyl glycidyl ether	0000106-92-3	C ₈ H ₁₀ O ₂	114.14	-	13.43	41	57	29	0.3
○			β-diethylaminoethyl chloride	0000869-24-9	C ₈ H ₁₅ NCl ₂	172.10	-	13.59	86	120	-	0.006
○			cyclohexanol	0000108-93-0	C ₆ H ₁₂ O	100.16	-	13.61	57	82	67	0.01
○			2-(dimethylamino)-2-methyl-1-propanol	0007005-47-2	C ₆ H ₁₅ NO	117.19	-	13.95	86	56	72	104.2
○			N-vinyl-N-methylacetamide	0003195-78-6	C ₈ H ₉ NO	99.07	0.02	14.01	57	56	43	0.1
○			dibutylammonium oleate	0007620-75-9	C ₂₆ H ₅₃ NO ₂	411.70	-	14.11	86	44	129	0.2
○			methyl 3-mercaptopropionate	0002935-90-2	C ₄ H ₈ O ₂ S	120.17	-	14.15	61	120	80	0.06
○			1,2,3-trichloropropane	0000096-18-4	C ₃ H ₂ Cl ₃	147.43	-	14.34	75	110	-	0.002
○			2,3-dimethylpyridine	0000583-61-9	C ₇ H ₉ N	107.15	-	14.54	107	106	39	0.002
○			N,N-dimethylcyclohexylamine	0000098-94-2	C ₈ H ₁₇ N	127.23	-	14.80	84	71	127	0.9
○	○	○	acrylic acid, monoester with ethyleneglycol	0000818-61-1	C ₈ H ₈ O ₃	116.12	6	14.87	55	28	44	2.4
○	○	○	methacrylamide	0000079-39-0	C ₆ H ₉ NO	85.05	ND	15.06	41	85	69	21.7
○	○	○	2,4,6-trimethylpyridine	0000108-75-8	C ₈ H ₁₁ N	121.18	-	15.14	121	79	106	0.004
○	○	○	diethyl oxalate	0000095-91-2	C ₆ H ₁₀ O ₄	146.14	-	15.25	29	45	74	0.5
○	○	○	benzaldehyde	0000100-52-7	C ₇ H ₆ O	106.12	-	15.28	77	106	51	0.009
○	○	○	1-vinylimidazole	0001072-63-5	C ₅ H ₈ N ₂	94.05	0.05	15.28	94	41	67	0.5
○	○	○	ethylene glycol diacetate	0000111-55-7	C ₈ H ₁₀ O ₄	146.14	-	15.33	43	86	-	0.2
○	○	○	3,5-dimethylpyridine	0000591-22-0	C ₇ H ₉ N	107.15	-	15.35	107	106	79	0.003
○	○	○	1-ethynyl-1-cyclohexanol	0000078-27-3	C ₈ H ₁₂ O	124.18	-	15.37	81	68	95	0.01
○	○	○	bis(2-chloroethyl) ether	0000111-44-4	C ₄ H ₈ Cl ₂ O	143.01	-	15.46	93	63	27	0.003
○	○	○	dipropylene glycol monomethyl ether	0034590-94-8	C ₇ H ₁₆ O ₃	148.20	-	15.49	59	45	103	1.4
○	○	○	diethylene glycol monoethyl ether	0000111-90-0	C ₆ H ₁₂ O ₃	134.17	-	15.72	45	72	103	72.5
○	○	○	lactic acid, butyl ester	0000138-22-7	C ₇ H ₁₄ O ₃	146.18	-	15.73	45	57	-	0.06
○	○	○	aniline	0000062-53-3	C ₆ H ₇ N	93.13	-	15.77	93	66	39	0.01
○	○	○	3,4-dimethylpyridine	0000583-58-4	C ₇ H ₉ N	107.15	-	15.98	107	106	79	0.007
○	○	○	dimethyl maleate	0000624-48-6	C ₆ H ₈ O ₄	144.13	-	16.08	113	59	85	0.04
○	○	○	N-tert-butylacrylamide	0000107-58-4	C ₇ H ₁₃ NO	127.19	-	16.10	58	72	112	0.03
○	○	○	phenol	0000108-95-2	C ₆ H ₆ O	94.11	3	16.28	94	66	39	0.09
○	○	○	methacrylic acid, monoester with ethyleneglycol	0000868-77-9	C ₈ H ₁₀ O ₃	130.14	6	16.29	69	81	41	1.1
○	○	○	4-(hydroxymethyl)-1-cyclohexene	0001679-51-2	C ₇ H ₁₂ O	112.09	0.05	16.33	79	94	-	0.02
○	○	○	methacrylic acid, 2-(dimethylamino)-ethyl ester	0002867-47-2	C ₈ H ₁₅ NO ₂	157.11	ND	16.55	58	71	-	5.2
○	○	○	2-hydroxypropyl methacrylate	0000923-26-2	C ₇ H ₁₂ O ₃	144.17	-	16.64	69	41	100	0.3
○	○	○	methacrylic acid, 2,3-epoxypropyl ester	0000106-91-2	C ₇ H ₁₀ O ₃	142.06	0.02	16.76	69	41	-	0.4
○	○	○	ethylene glycol monobutyl ether acetate	0000112-07-2	C ₈ H ₁₆ O ₃	160.21	-	16.76	43	57	87	0.01
○	○	○	ethylene carbonate	0000096-49-1	C ₃ H ₄ O ₃	88.02	30	16.77	43	29	88	55.9
○	○	○	benzyl alcohol	0000100-51-6	C ₇ H ₈ O	108.14	-	16.81	79	108	107	0.3
○	○	○	N-methylpyrrolidone	0000872-50-4	C ₅ H ₉ NO	99.13	60	17.29	99	98	44	3.4
○	○	○	o-cresol	0000095-48-7	C ₇ H ₈ O	108.14	-	17.37	108	107	77	0.03
○	○	○	p-cresol	0000106-44-5	C ₇ H ₈ O	108.14	-	17.80	107	108	77	0.03
○	○	○	m-cresol	0000108-39-4	C ₇ H ₈ O	108.14	-	17.83	108	107	77	0.03
○	○	○	dimethyl glutarate	0001119-40-0	C ₇ H ₁₂ O ₄	160.17	-	17.87	100	59	129	0.1
○	○	○	triethyl phosphate	0000078-40-0	C ₆ H ₁₅ O ₄ P	182.16	-	18.01	99	155	127	0.05
○	○	○	2,2,4,4-tetramethylcyclobutane-1,3- diol	0003010-96-6	C ₈ H ₁₆ O ₂	144.12	5	18.18	72	57	43	2.8
○	○	○	1-Vinyl-2-pyrrolidone (stabilized with N,N-di-sec-butyl-p-phenylenediamine)	0000088-12-0	C ₆ H ₉ NO	111.14	-	18.29	56	111	-	0.5
○	○	○	diethylene glycol monoethyl ether acetate	0000112-15-2	C ₈ H ₁₆ O ₄	176.21	-	18.40	43	87	72	0.04
○	○	○	ethyl hydrogen maleate	0003990-03-2	C ₆ H ₈ O ₄	144.13	-	18.47	99	127	-	0.1
○	○	○	diethyl maleate	0000141-05-9	C ₈ H ₁₂ O ₄	172.18	-	18.49	99	127	-	0.01
○	○	○	bis(2-chloroethyl) formal	0000111-91-1	C ₅ H ₁₀ O ₂ Cl ₂	173.04	-	18.59	93	63	123	0.008
○	○	○	diethylene glycol monobutyl ether	0000112-34-5	C ₈ H ₁₈ O ₃	162.23	-	18.85	57	45	-	1.4
○	○	○	caprolactone	0000502-44-3	C ₈ H ₁₄ O ₂	114.14	0.05	19.44	55	42	84	1.9
○	○	○	2-phenoxyethanol	0000122-99-6	C ₈ H ₁₀ O ₂	138.16	-	19.96	94	138	295	0.5
○	○	○	4-methoxyphenol	0000150-76-5	C ₇ H ₈ O ₂	124.14	-	20.27	109	124	81	2.0
○	○	○	tripropylene glycol monomethyl ether (mixture of isomer)	0025498-49-1	C ₁₀ H ₂₂ O ₄	206.28	-	20.43	59	73	45	3.2
○	○	○	diacetone acrylamide (stabilized with MEHQ)	0002873-97-4	C ₉ H ₁₅ NO ₂	169.22	-	20.80	58	112	-	3.9
○	○	○	diallyl maleate	0000999-21-3	C ₁₀ H ₁₂ O ₄	196.20	-	21.10	99	41	-	0.01
○	○	○	diethylene glycol monobutyl ether acetate	0000124-17-4	C ₁₀ H ₂₀ O ₄	204.26	-	21.41	87	43	57	0.04
○	○	○	4-chloro-3-methylphenol	0000059-50-7	C ₇ H ₇ OCl	142.58	-	22.06	107	142	77	0.9

*1: 欧州連合において食品用途の合成樹脂製品の製造に使用可能な物質

*2: 食品接触用途として使用できる材料の製造に使用可能な物質

*3: ポリオレフィン等衛生協議会、塩ビ食品衛生協議会またはビコリン衛生協議会のいずれかのPLIに記載されている物質

*4: 欧州連合の基準における特定移行限度値

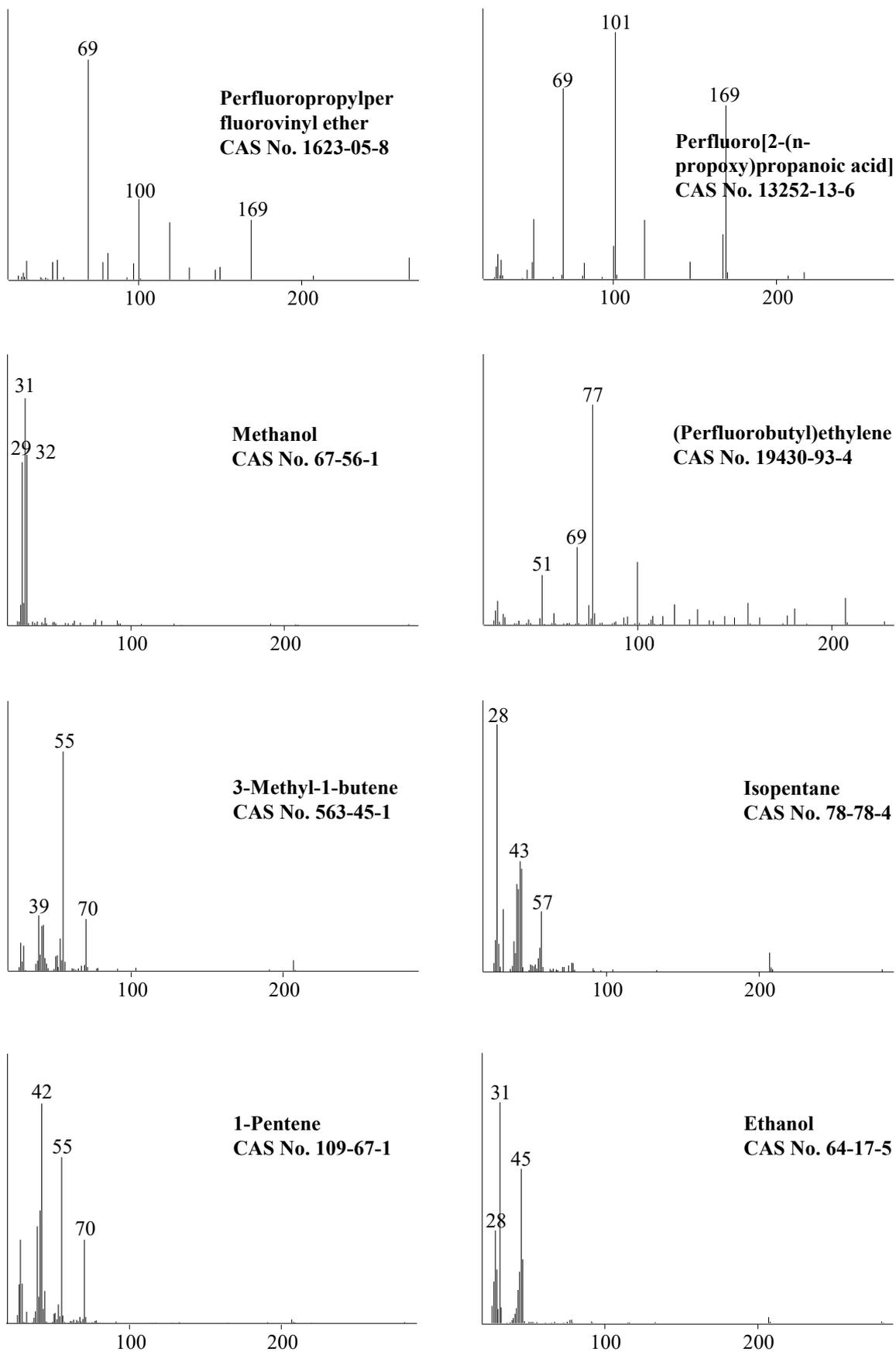


図2 今回の条件で測定可能であった物質のマススペクトル(1)

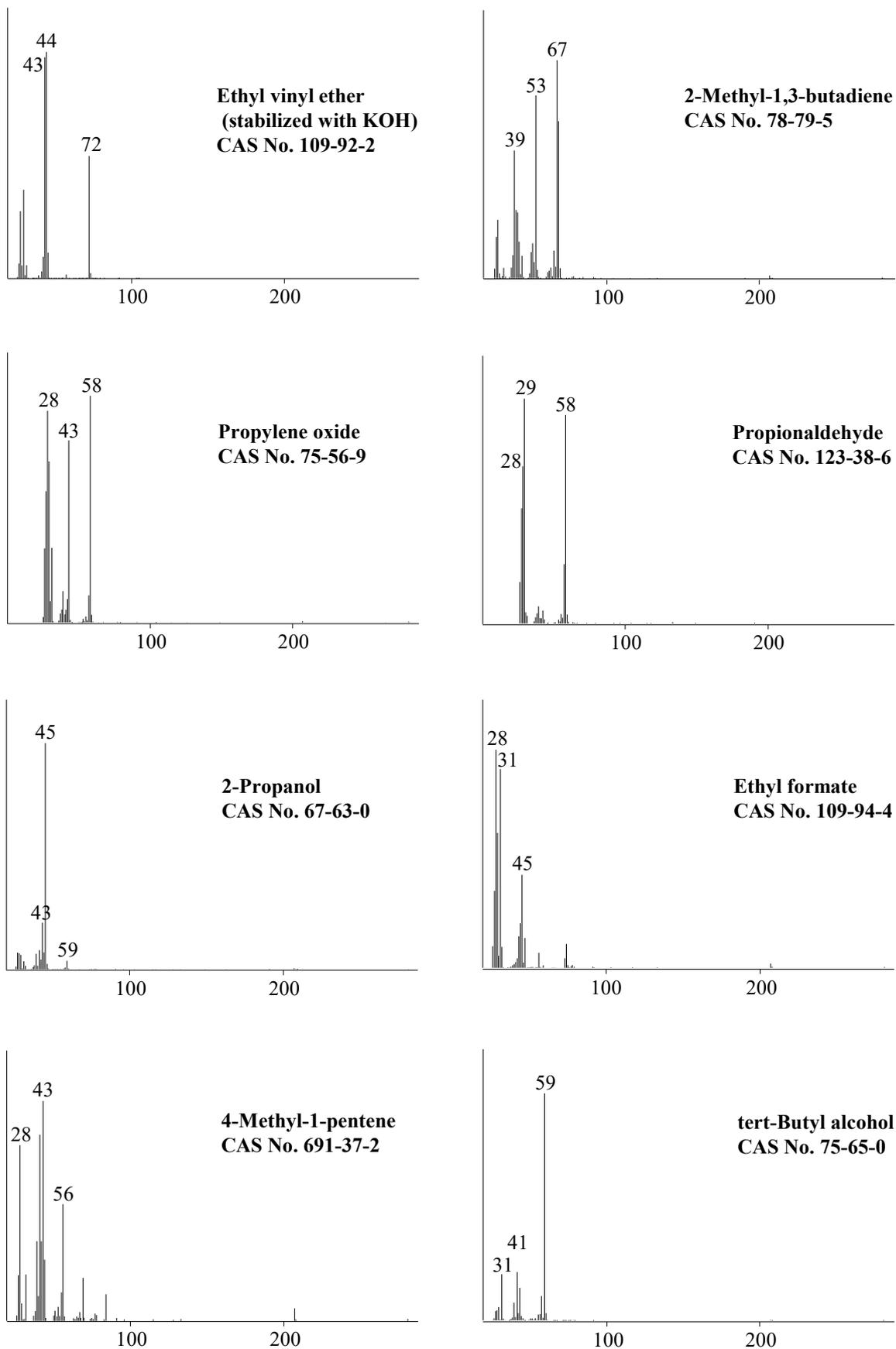


図2 今回の条件で測定可能であった物質のマススペクトル(2)

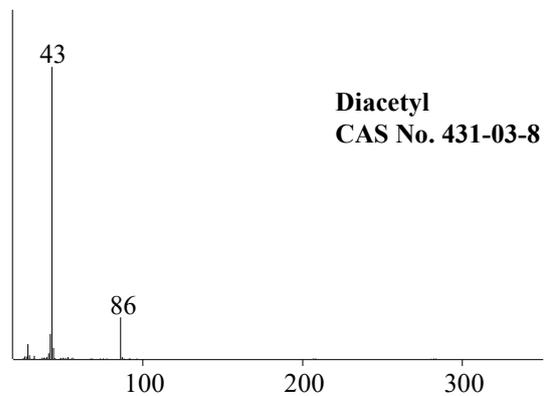
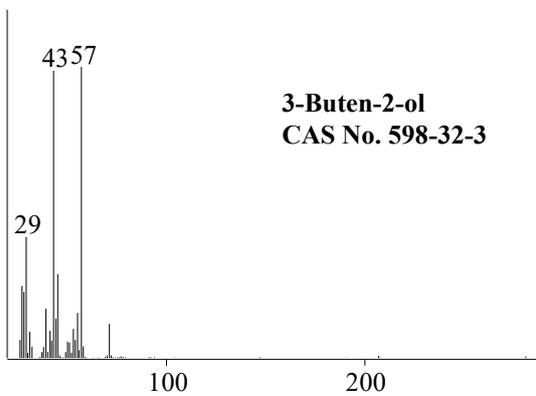
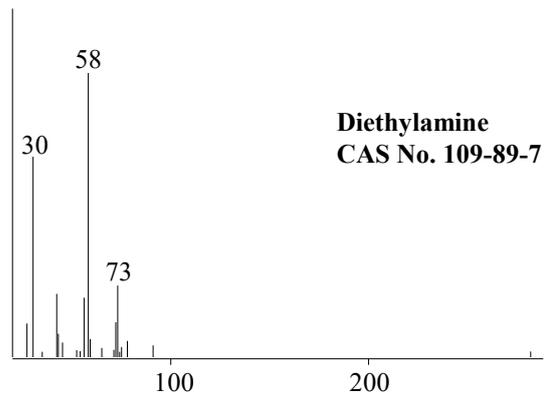
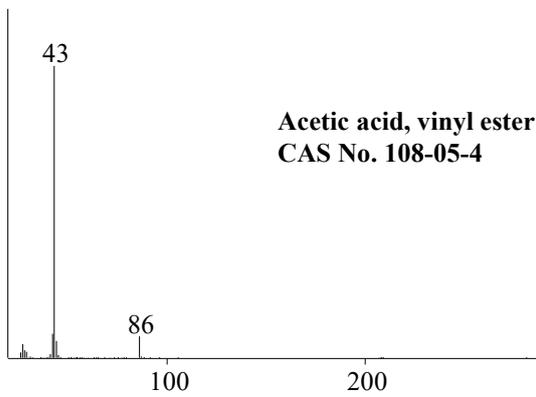
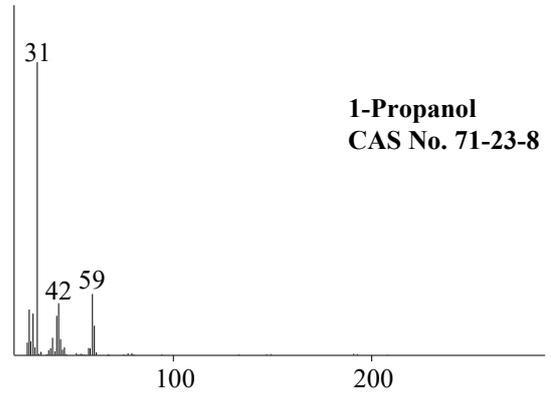
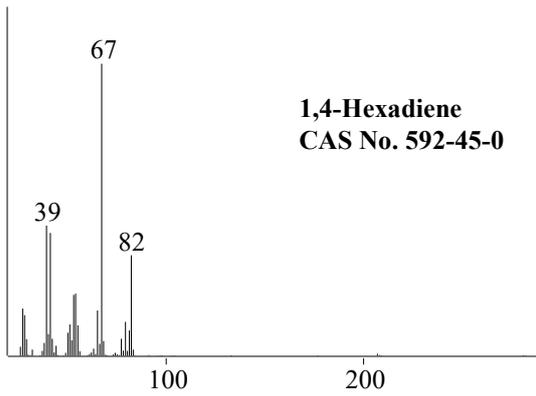
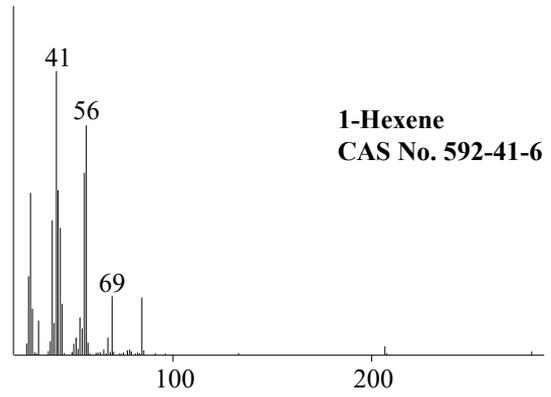
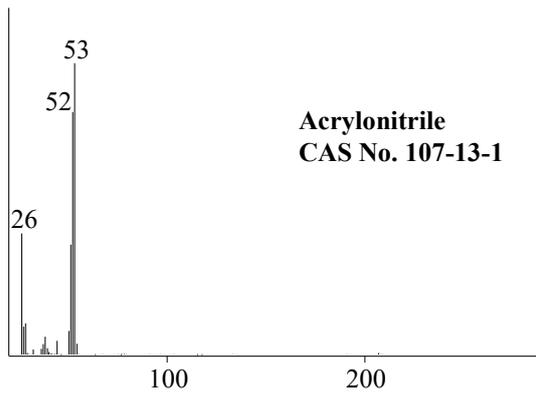


図2 今回の条件で測定可能であった物質のマススペクトル (3)

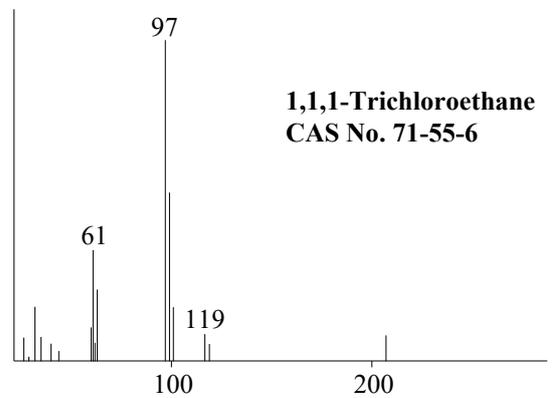
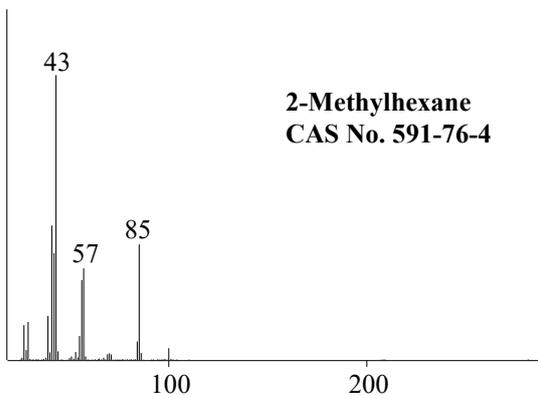
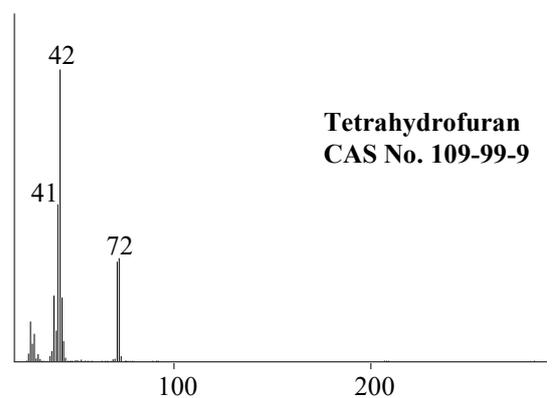
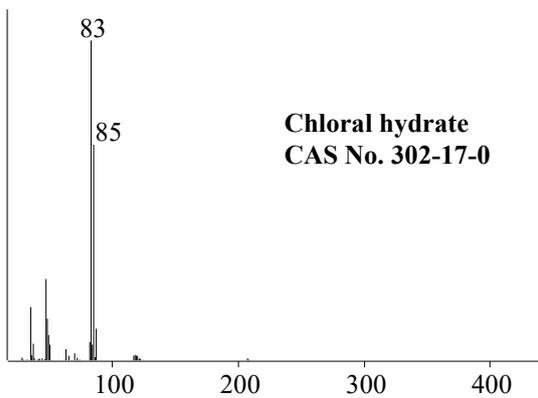
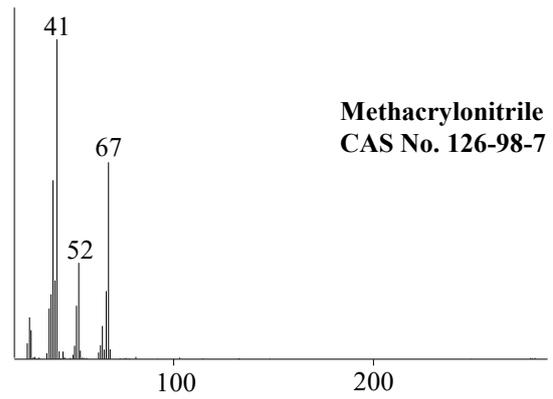
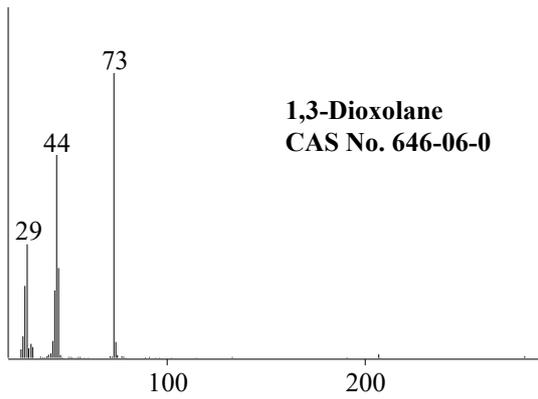
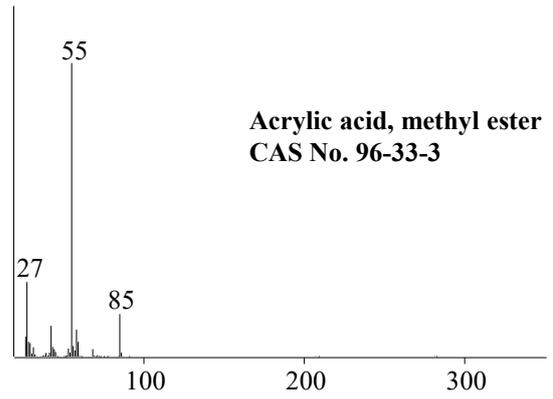
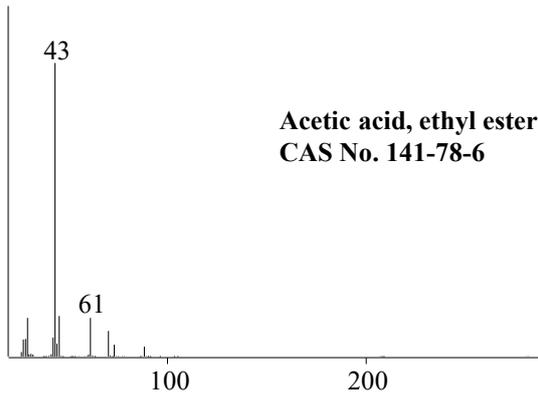


図2 今回の条件で測定可能であった物質のマススペクトル (4)

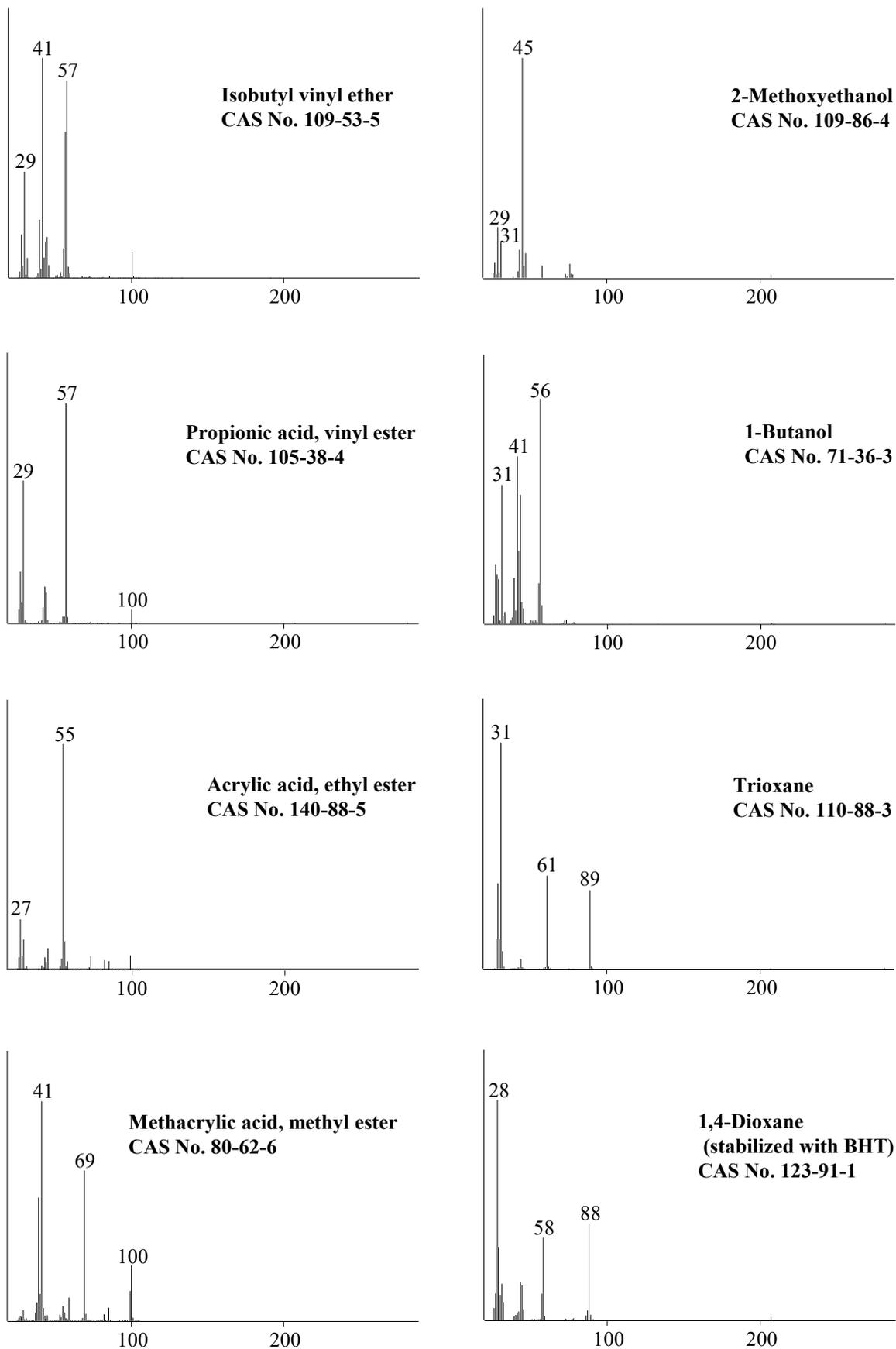


図2 今回の条件で測定可能であった物質のマススペクトル (5)

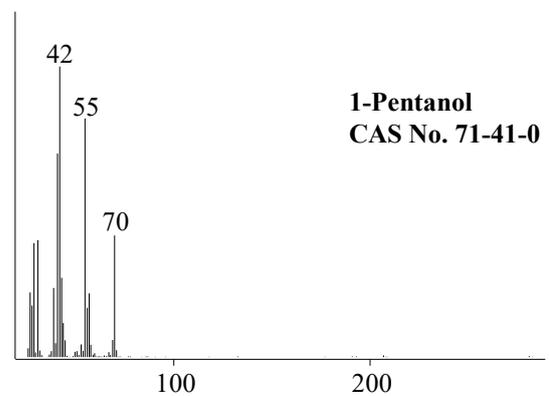
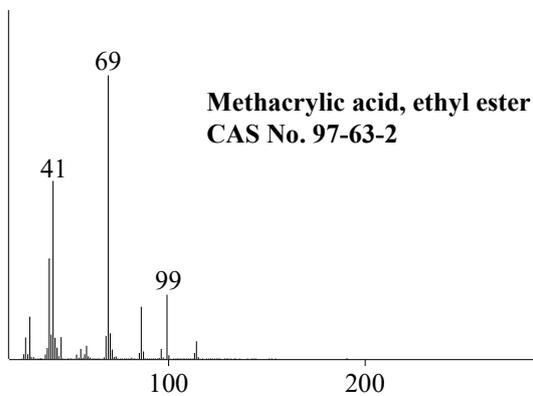
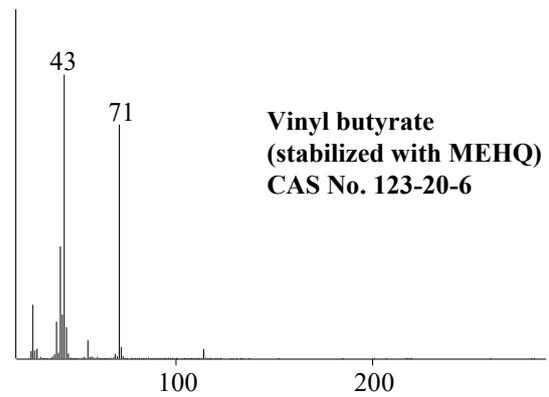
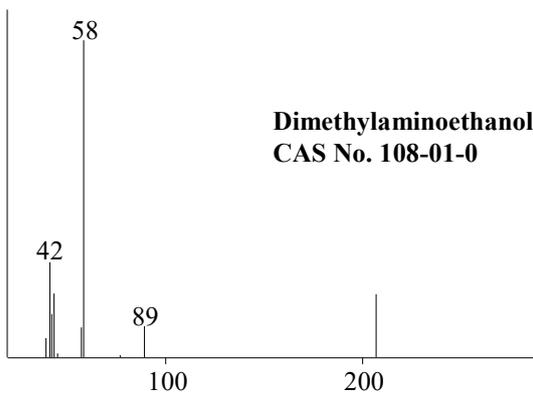
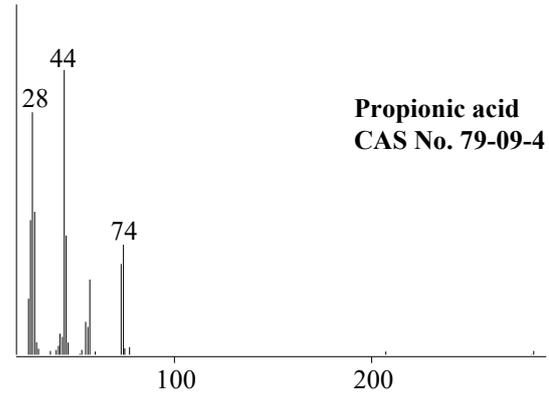
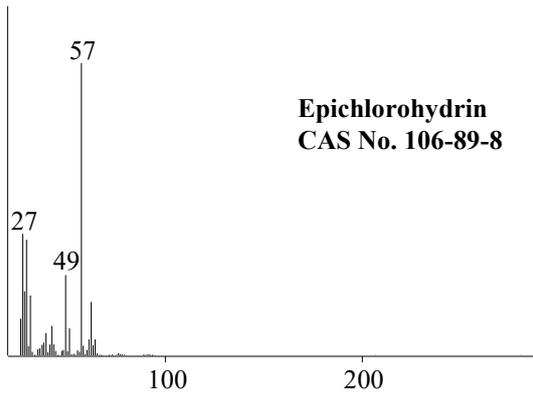
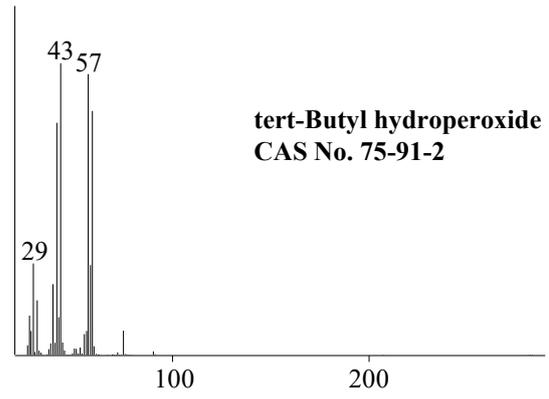
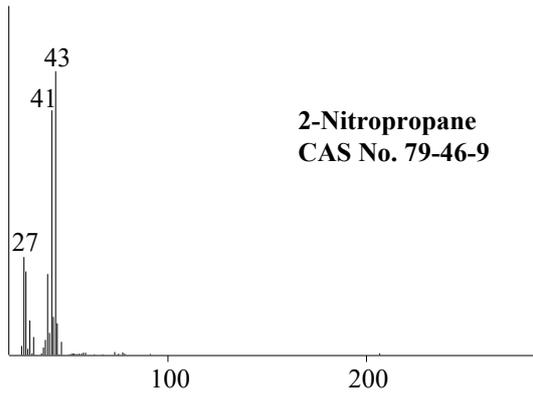


図2 今回の条件で測定可能であった物質のマススペクトル (6)

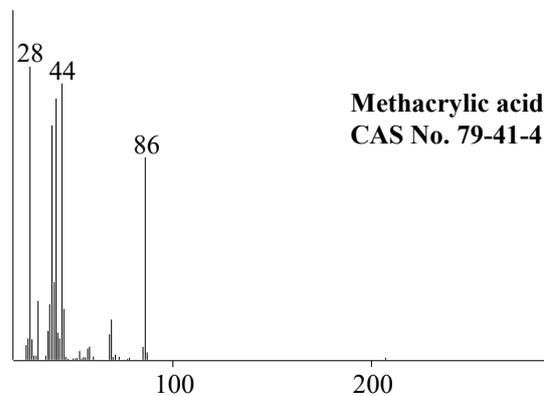
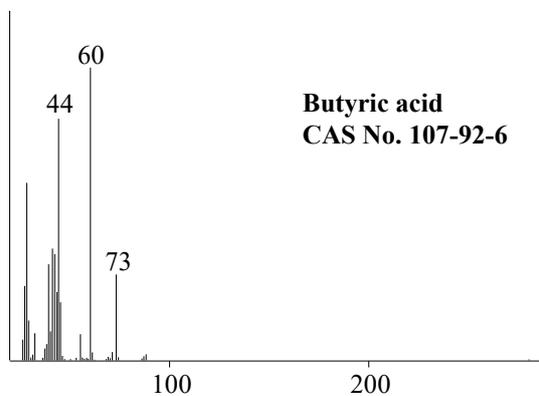
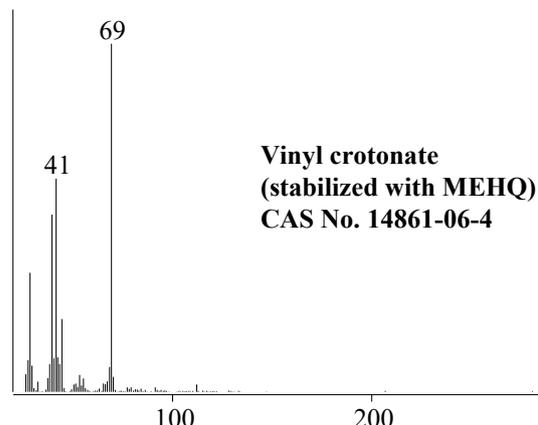
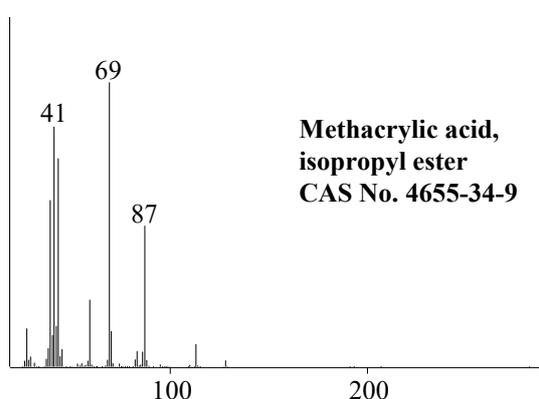
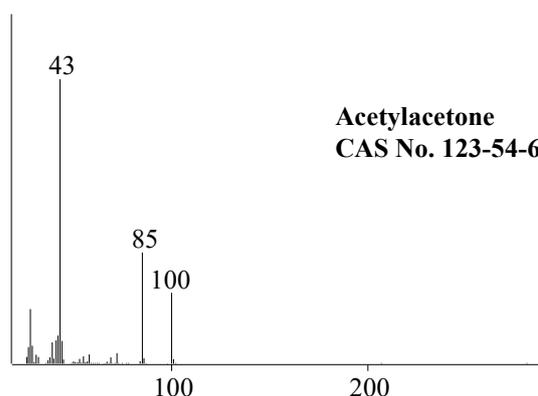
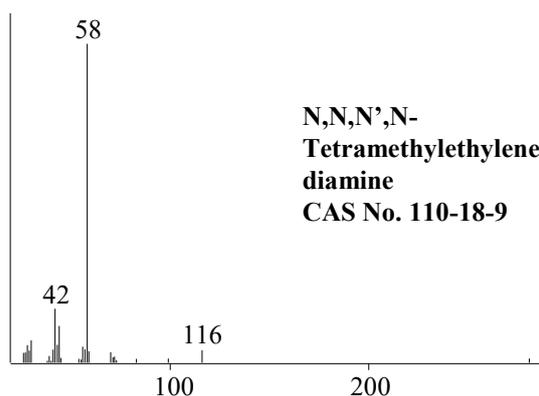
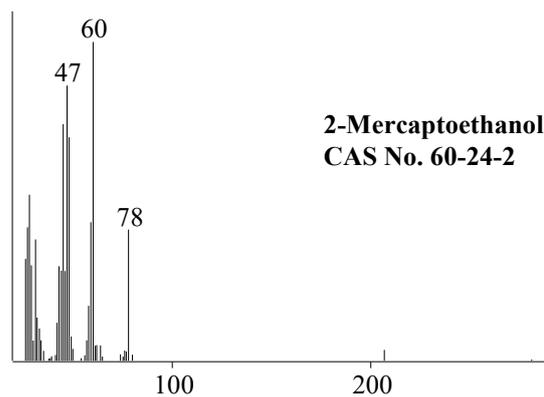
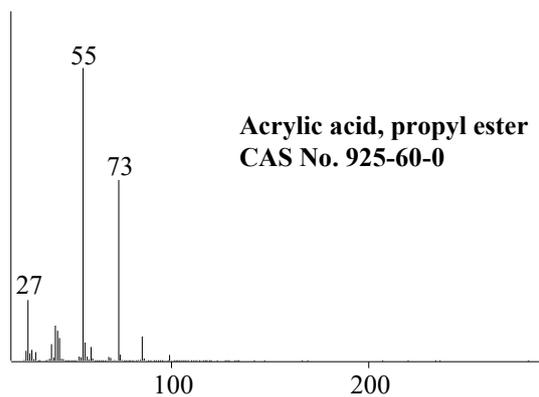


図2 今回の条件で測定可能であった物質のマススペクトル (7)

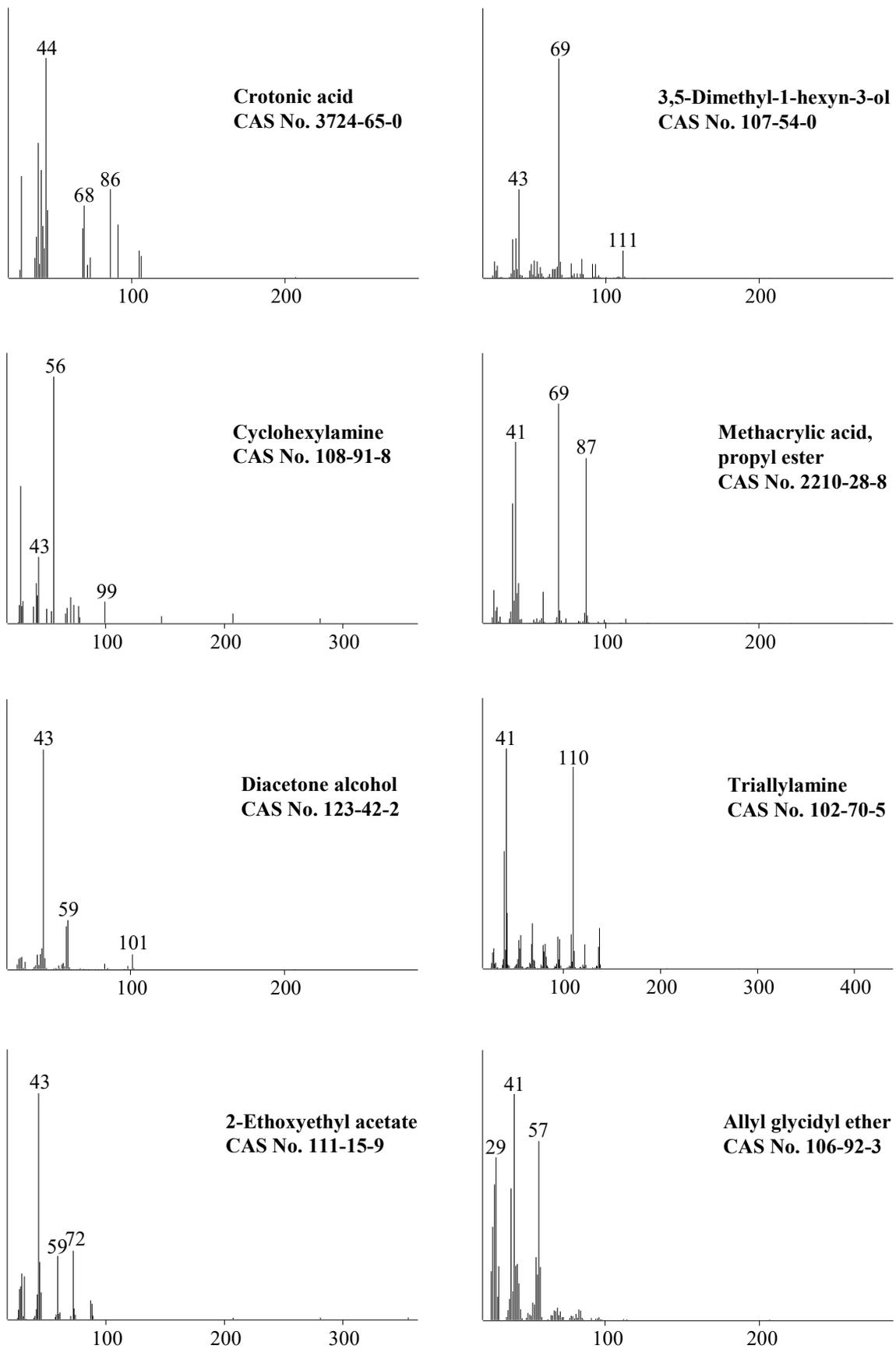


図2 今回の条件で測定可能であった物質のマススペクトル (8)

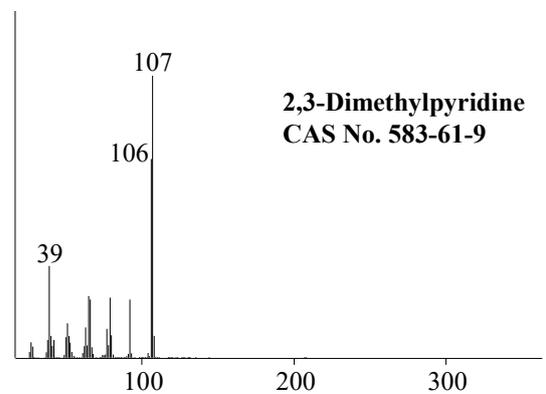
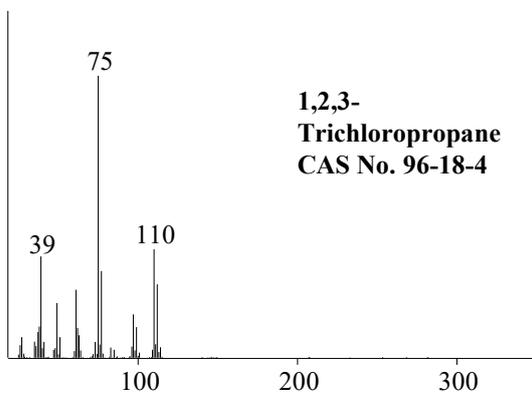
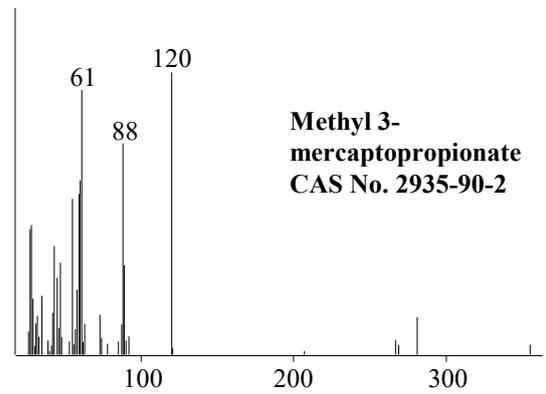
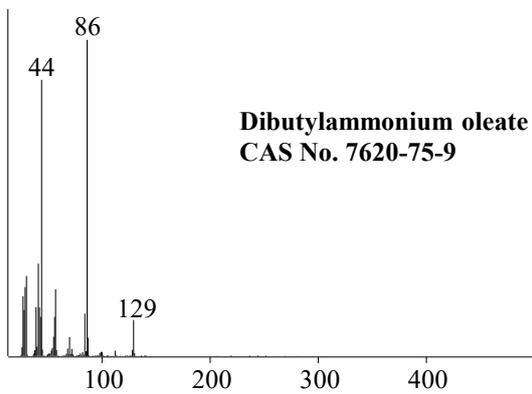
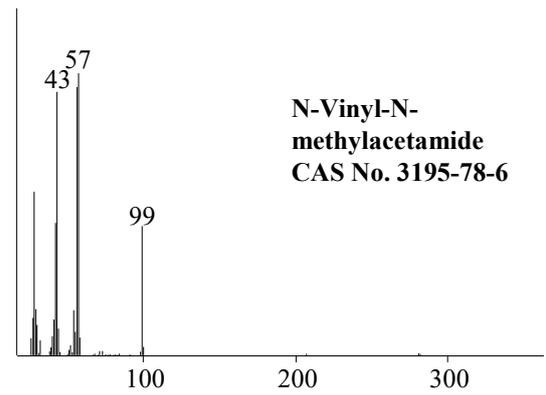
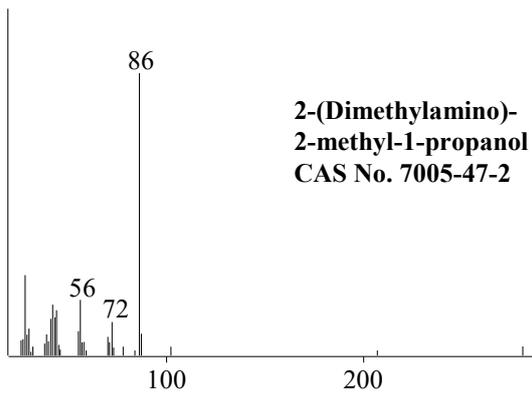
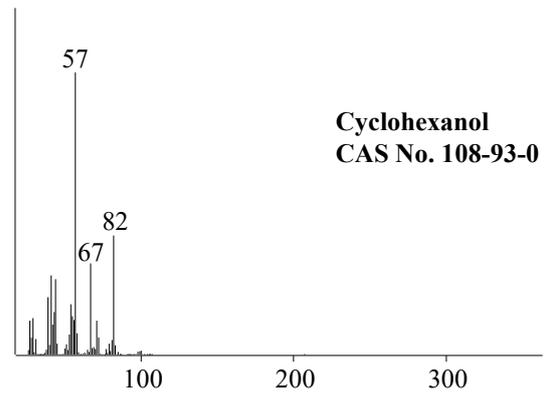
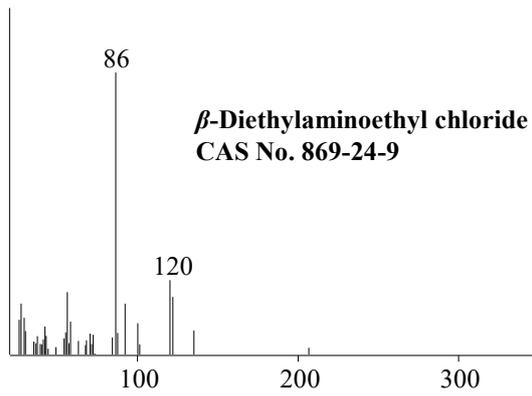


図2 今回の条件で測定可能であった物質のマススペクトル (9)

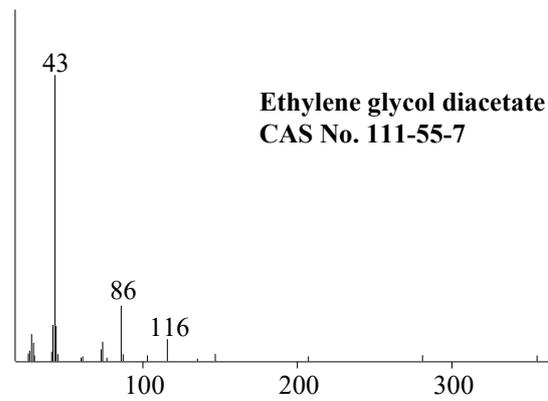
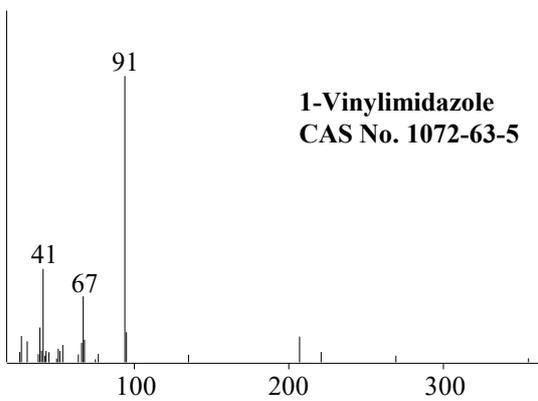
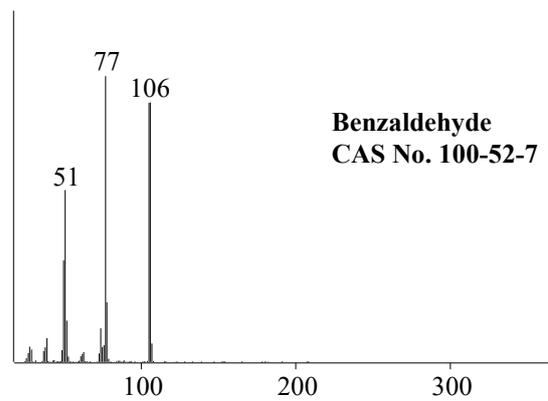
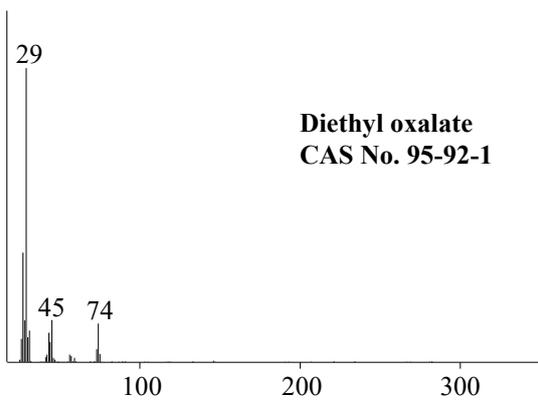
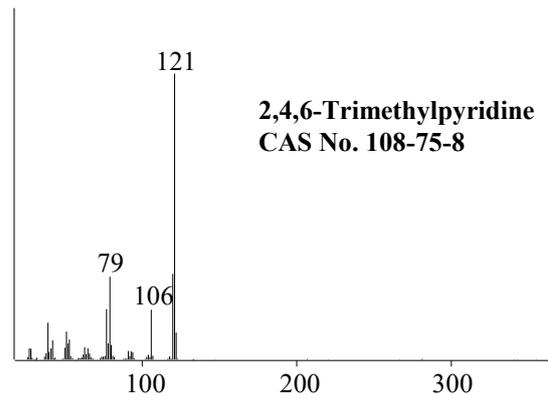
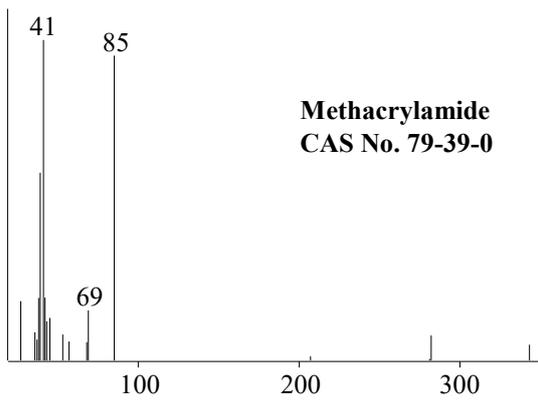
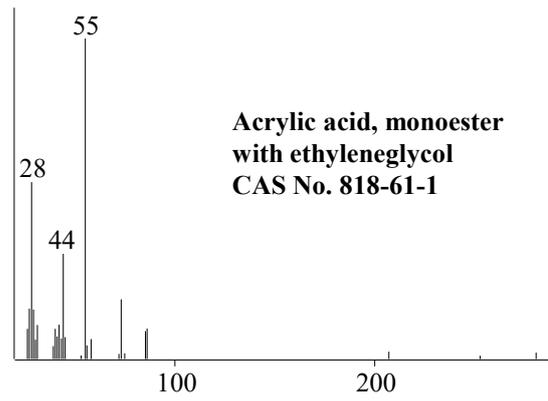
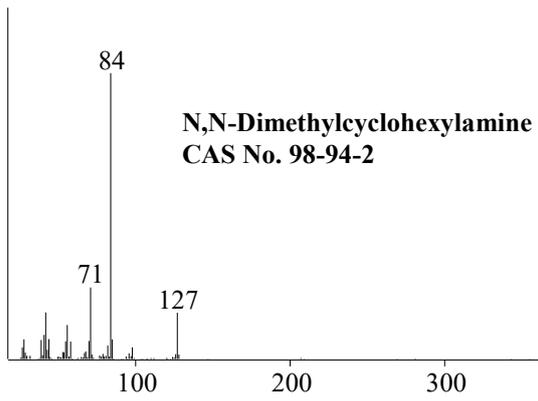


図2 今回の条件で測定可能であった物質のマススペクトル (10)

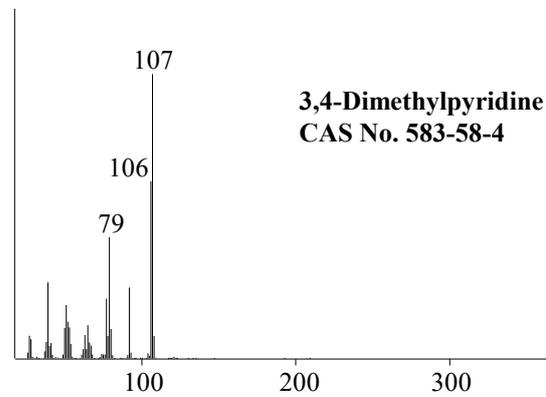
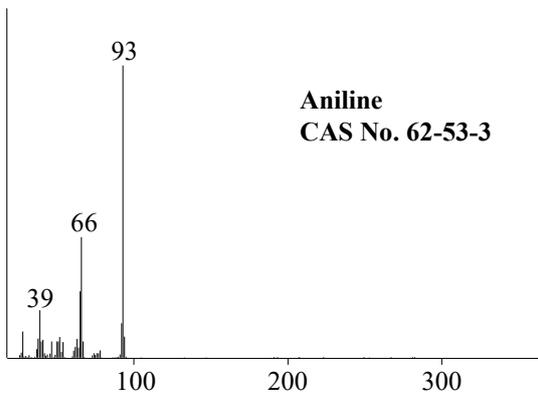
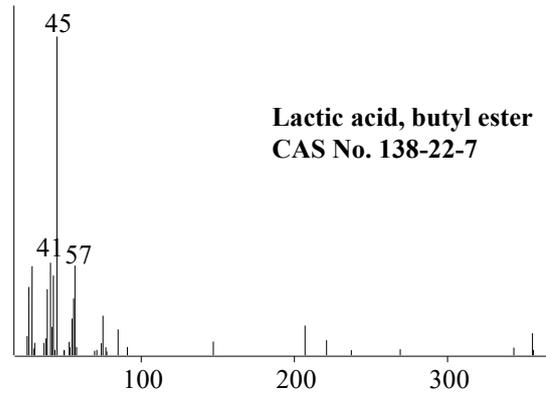
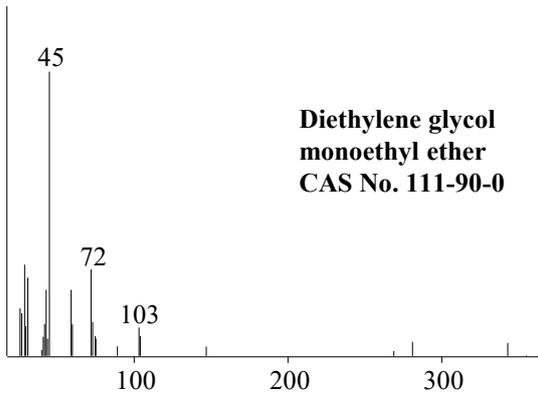
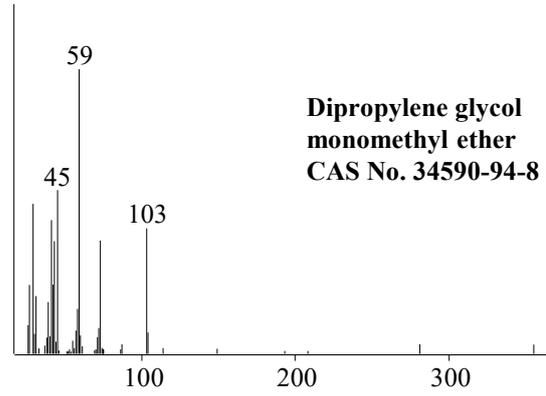
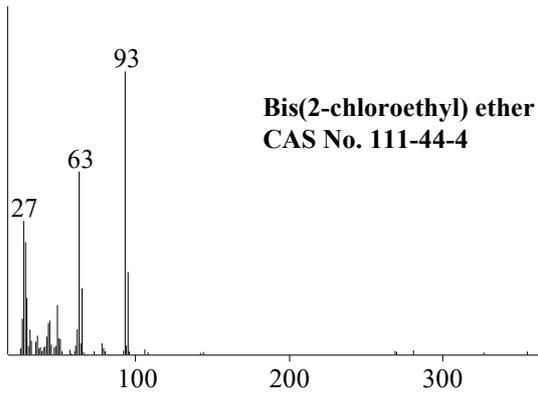
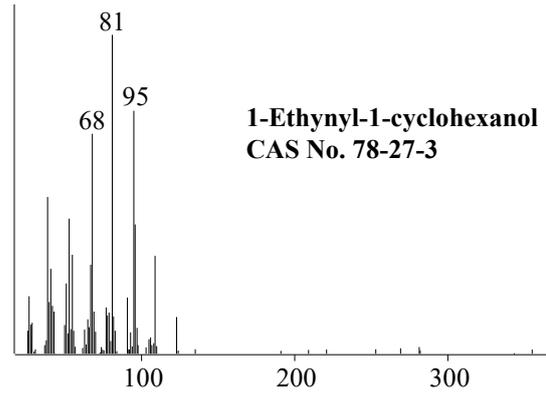
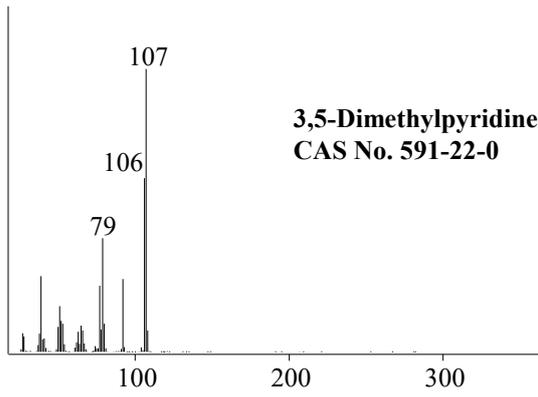


図2 今回の条件で測定可能であった物質のマススペクトル (11)

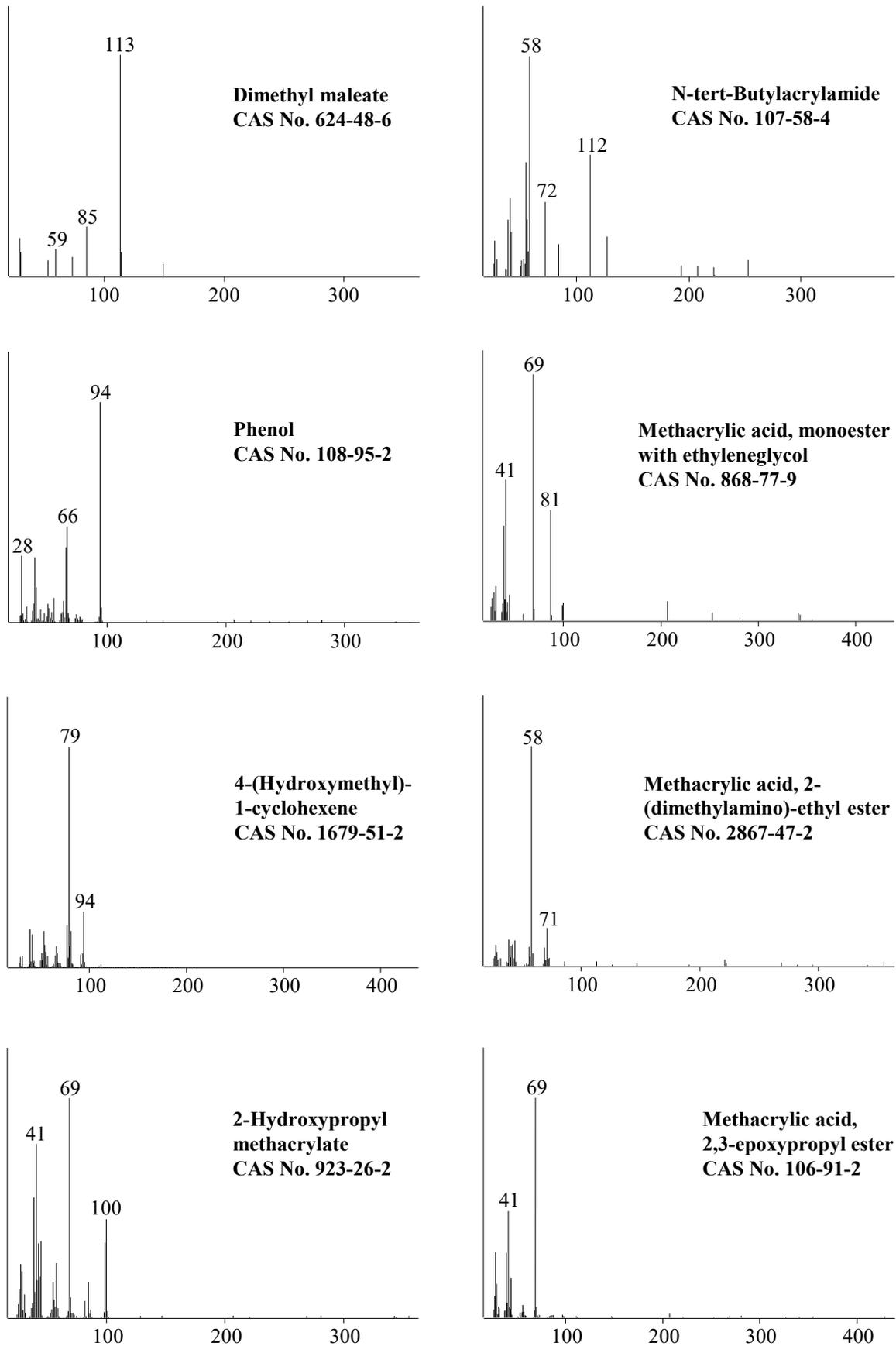


図2 今回の条件で測定可能であった物質のマススペクトル (12)

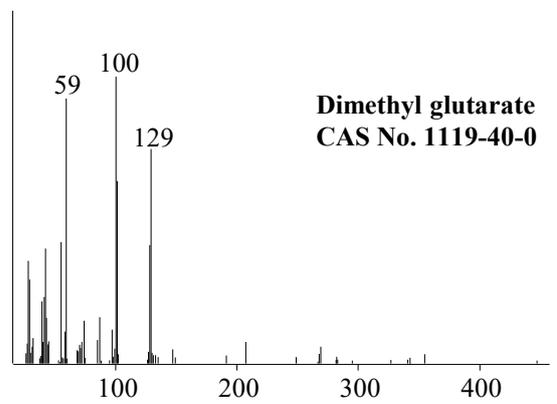
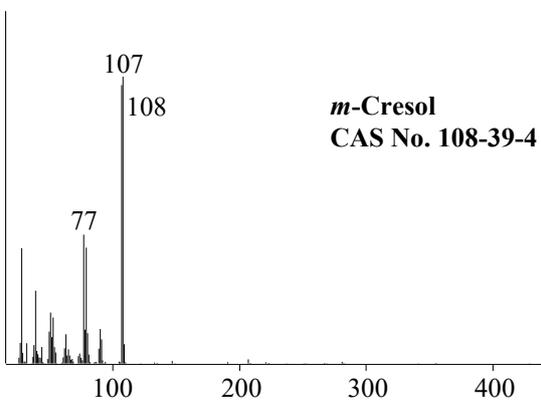
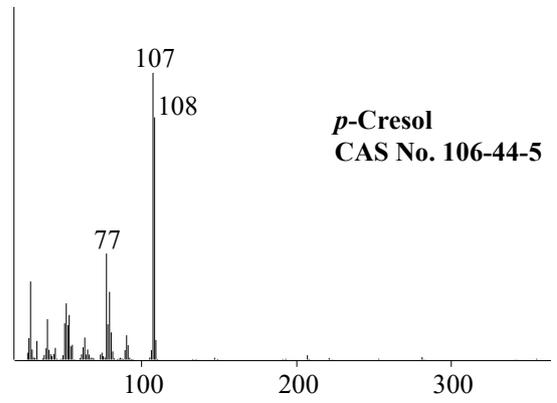
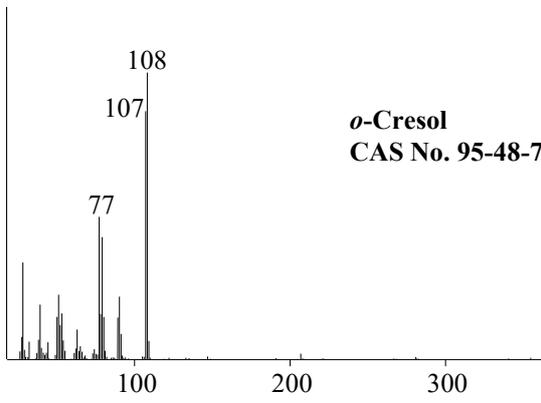
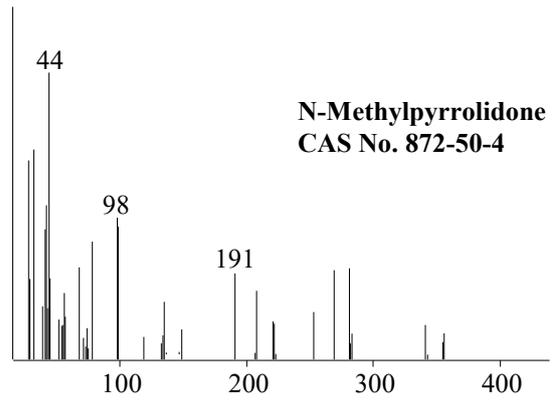
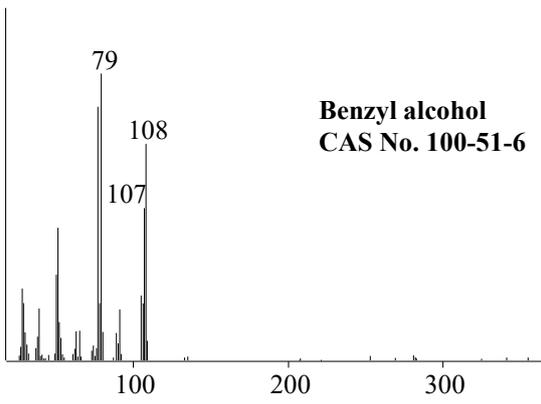
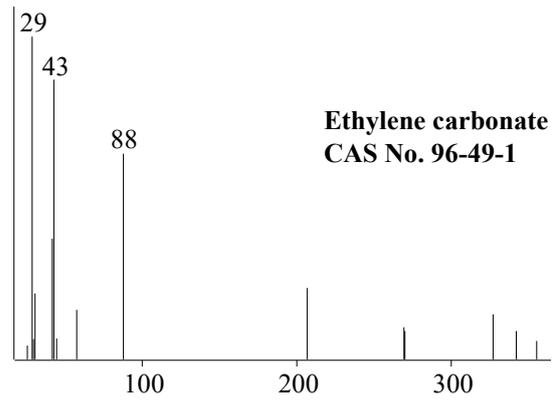
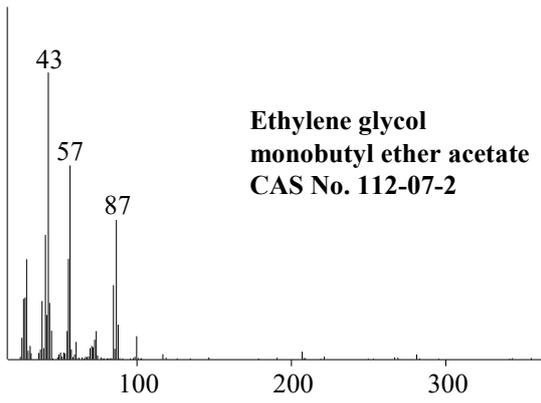


図2 今回の条件で測定可能であった物質のマススペクトル (13)

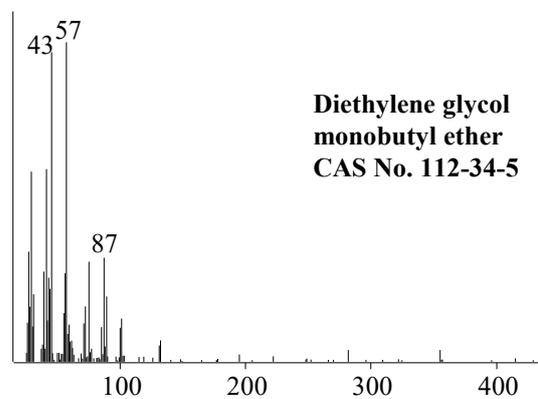
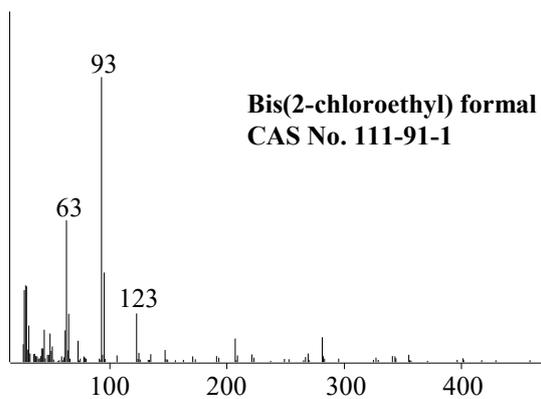
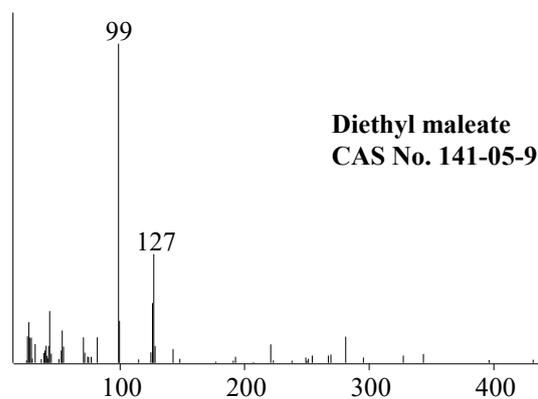
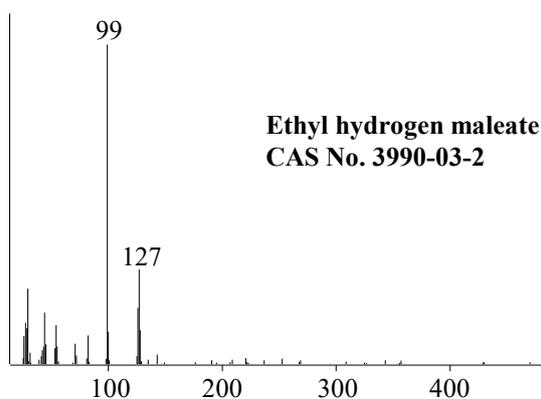
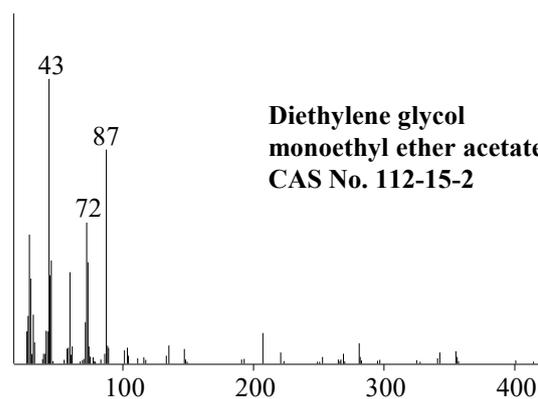
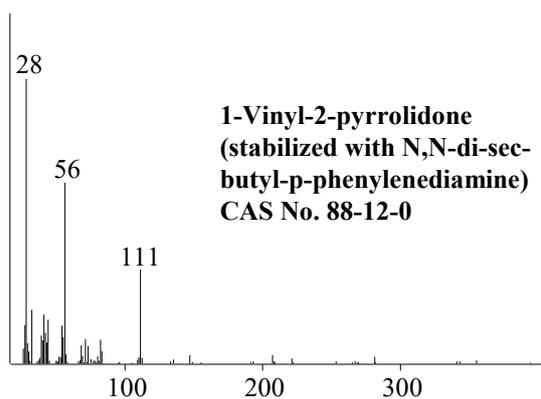
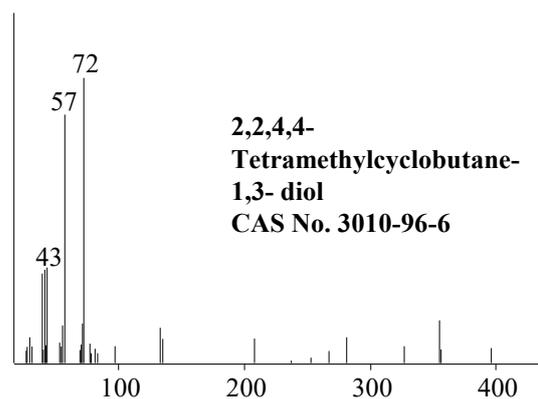
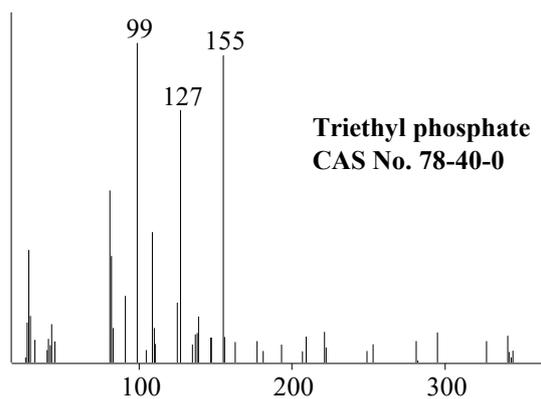


図2 今回の条件で測定可能であった物質のマスペクトル (14)

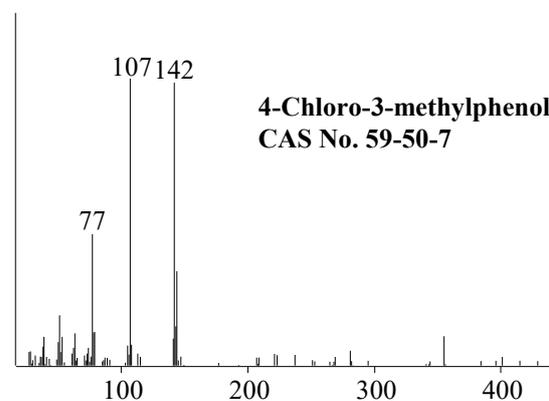
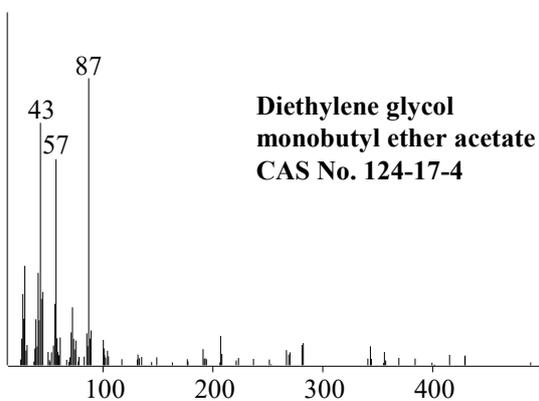
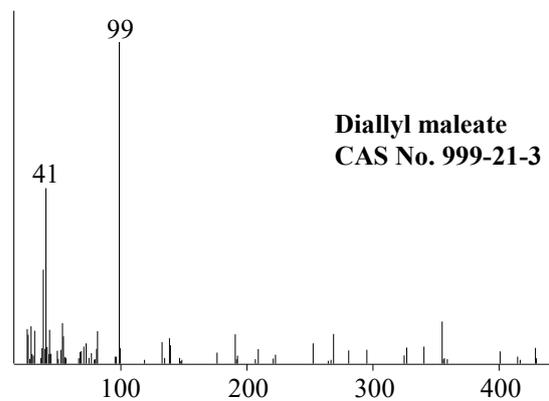
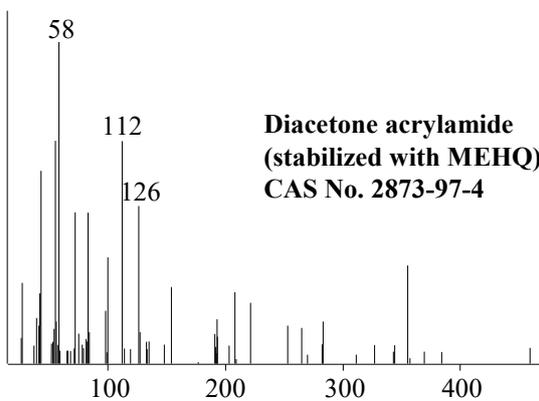
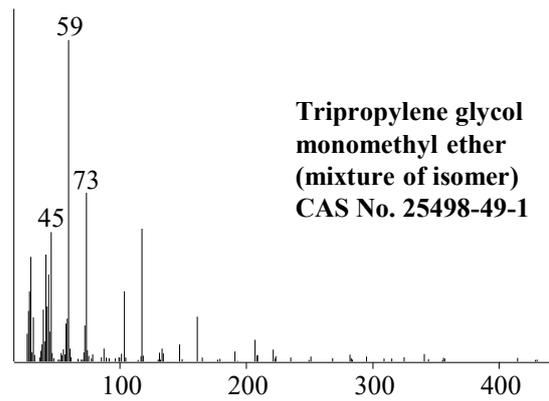
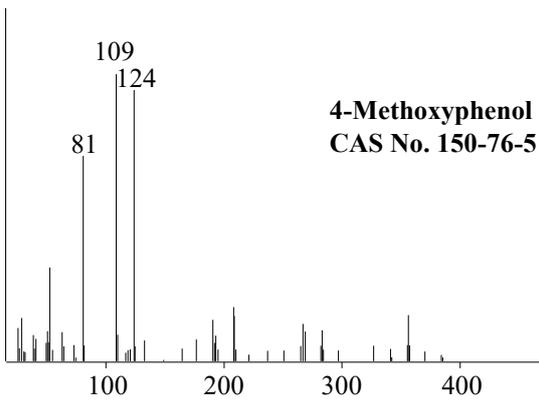
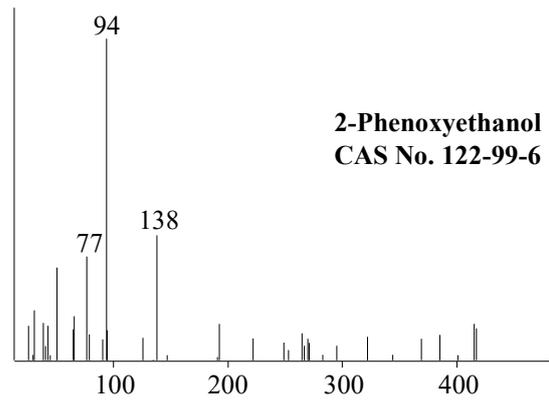
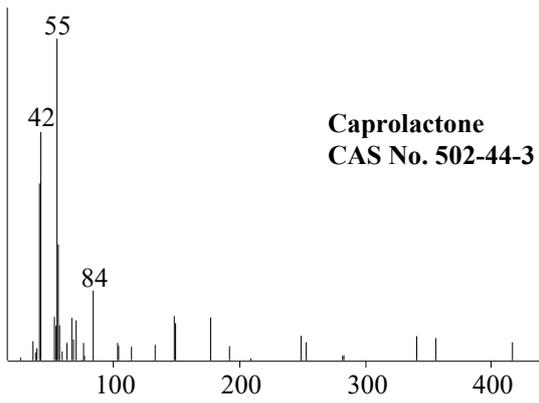


図2 今回の条件で測定可能であった物質のマスペクトル (15)