

<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

| | | | |
|-------|------|------|----------------|
| 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

わが国では2020年6月に器具・容器包装の原材料である合成樹脂について、安全性を評価した基ポリマーや添加剤等のみを使用可能とするポジティブリスト(PL)制度が施行された。その対象は、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。

一方、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、非意図的添加物質が含まれる可能性がある。非意図的添加物質は Non-Intentionally Added Substance (NIAS) と呼ばれ、主に合成樹脂や添加剤等の分解物、不純物、副生成物、汚染物質が該当する。これら NIAS の種類や量は、最終製品の製造に用いられた物質やその製造工程により異なるため、PL 制度による管理が困難であることから、制度の対象外となっている。そのため、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意図的添加物質と NIAS を区別する必要がある。合成樹脂製品に含まれる NIAS については、これまでに数多くの物質が報告されているが^{1)~3)}、PL 制度の運用に資するには不十分である。

そこで、合成樹脂製品に含有されている、もしくは含有される可能性のある NIAS を把握することを目的として、まずは汎用樹脂であるポリプロピレン(PP)製品を用いて、GC-MS を用いた網羅的分析により含有物質を調査し、

検出された物質について意図的添加物質か否かを考察し、製品中に存在する NIAS を探索した。

B. 研究方法

1. 試料

大阪市内のスーパーマーケット、100円ショップやドラッグストアで購入した PP 製品 24 検体(日本製)を用いた。いずれも2020年に購入した。

2. 試薬及び試液

1) 試薬等

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工業株式会社製

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工業株式会社製

n-アルカン混合標準液(C8~C40)：各 1000 µg/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

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

2) 試液

n-アルカン混合標準溶液(C8~C40)：*n*-アルカン混合標準液をヘキサンで希釈して各 10 µg/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 (1000 µg/mL)。これをさらにアセトンで希釈して 10 µg/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

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

試料を 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晚浸漬後ろ過した。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、室温で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 用の試験溶液とした。

5. 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)

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)

6. GC-MS 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：NIST17 をベースとしたもの

S/N : 10 以上

面積フィルタ：相対面積が最大ピークに対して 1 % 以上

ピーク最大数：1000

一致率：70% 以上

ヒット候補最大数：3

C. 研究結果及び考察

1. 解析方法の検討

PP 製品 24 検体から調製した試験溶液を GC-MS で分析した。分析は、河村ら⁴⁾による方法を用いた。本法は分子量約 200~1200 の広範な添加剤が分析可能であり、衛生試験法・注解に酸化防止剤及び紫外線吸収剤の試験法⁵⁾としても収載されている。

その結果、トータルイオンクロマトグラムにおいて数多くのピークが検出された (図 1)。これら全てのピークについてそれぞれのマススペクトルを確認してライブラリ検索することは煩雑で時間も要する。そこで Agilent Technologies 社製 GC-MS の解析ソフトである MassHunter に標準搭載されている自動定性解析ソフトウェアの Unknowns Analysis を利用し一斉解析した。Unknowns Analysis は GC-MS の SCAN データについて自動的にピーク検出、スペクトル抽出、ライブラリ検索を実行し、同一物質である可能性が高い候補物質を挙げるソフトウェアである。なお、マススペクトルのみを用いた解析も可能であるが、各物質の保持時間より算出する保持指標 (リテンションインデックス:RI) の情報を併せて自動定性解析することによって、より精度を高めること

ができる。

そこで本研究ではマススペクトルと RI を用いた自動解析を行い、本ソフトウェアで候補物質として挙げられたものから検出されたピークの「推定」を行った。さらに、一部の「推定」されたピークについては、市販標準品の測定を行い、そのマススペクトル及び RI が、製品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。

2. RI 算出法

RI 算出のためには、保持時間の再現性が必須であることから、GC-MS の保持時間固定機能を用いた。保持時間の固定には総分析時間 (38 分) のほぼ中間に検出されるフェナントレン-*d*10 (18.8 分) を規準物質として選択し、キャリアーガス流量を自動調整した。この条件で *n*-アルカン (C8~C40) を測定し、PP 製品等から検出された各ピークの RI を次式⁶⁾により算出した。なお、本測定条件で検出可能な最長の *n*-アルカンは C36 であった (図 1)。

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

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

RI (X) : 物質 X の RI

n : *n*-アルカンの炭素数

RT (*n*) : *n* 個の炭素数を持つ *n*-アルカンの保持時間

RT (*n*+1) : (*n*+1) 個の炭素数を持つ *n*-アルカンの保持時間

RT (X) : 物質 X の保持時間

マススペクトルライブラリは、NIST17 をベースとし、これに以前の研究⁷⁾において得られた器具・容器包装関連物質 (131 物質) のマススペクトル及び RI 情報を追加したもの (NIST17 に含まれていたものも含む) を用いた。

3. PP 製品の解析結果

PP 製品の自動定性解析において解析対象として検出されたピーク数を表 1 に示した。なお、同時に実施した操作ブランク試料からも試薬由来と思われる物質が検出された。同じ物質が PP 製品から検出された場合は、操作ブランクの 5 倍以上のピークエリアが確認された場合に解析対象とした。

解析対象のピーク数は試料により異なり、6~79 ピーク (平均 43 ピーク) であった。試料によってピーク数が大きく異なっていたが、試料の用途、色や製造者の違いによる傾向は特に見られなかった。

対象のピークについて、ソフトウェアによる解析から最大 3 つの候補物質を挙げ、一致ファクター、マススペクトル及び RI から、最も妥当と判断できる物質を選択して物質の推定を行った。また、ライブラリと実測値のマススペクトルや RI 比の差異から、候補物質の中に妥当な物質が存在しないと判断した場合は「推定不能」とし、これ以降の解析を実施しないこととした。

以下、推定された物質として多くみられた脂肪族飽和炭化水素類とその他の物質に分けて述べる。

1) 脂肪族飽和炭化水素類

脂肪族飽和炭化水素は 24 検体中 20 検体の PP 製品から、保持時間 9~30 分の間に繰り返しのピーク群として検出された。図 2 にそれらのマススペクトルの一例と、飽和炭化水素のオクタデカン (C₁₈H₃₈) のマススペクトルを示した。脂肪族飽和炭化水素のマススペクトルには、メチレン (-CH₂-) に相当する *m/z*14 間隔のフラグメントイオンが現れ、特にプロピル基 (*m/z* 43) やブチル基 (*m/z* 57) のフラグメントイオンが強く現れるのが特徴である。本研究においてもそうした特徴的なフラグメ

ントイオン (m/z 43, 57, 71, 85, 99) を有する物質が多くみられた。これらは、RI 算出用に測定した n -アルカン (C8~C36) の各ピークとの比較より、C12~C30 の脂肪族飽和炭化水素であると考えられた。しかし、RI が n -アルカンと必ずしも一致していなかったことから、直鎖だけでなく分岐の脂肪族飽和炭化水素も含まれると考えられた。これらは polyolefin oligomeric hydrocarbons (POH) と呼ばれ^{8)~10)}、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。

Unknowns Analysis においてこれらは直鎖もしくは分岐の脂肪族飽和炭化水素と推定されたが、保持時間が異なっても同じ物質と推定されたケースが多くみられ、正確に推定できていない可能性が示唆された。

我々は以前の報告⁷⁾において 131 物質の容器包装関連物質の標準品を測定し、うち RI のライブラリ登録値があった 75 物質について実測値と登録値の比率を比較した。その結果、75 物質中 73 物質の比率は 1.0 であり非常によく一致した。残り 2 物質についても比率は 0.9 及び 1.1 であり概ね一致していた。これより、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 の物質に絞り込むことにより推定精度を高めることが可能と考えた。実際に脂肪族飽和炭化水素と推定された物質の RI 比を確認したところ、0.9 未満、1.1 を超えるものも多く、分岐鎖を含む複雑な POH については正確な推定は難しいことが示唆された。

また、脂肪族飽和炭化水素と類似したマススペクトルを有する脂肪族アルコールは滑剤等として使用されている。本研究では、4 検体から 10~19 物質の脂肪族アルコールが検出された。これらは直鎖もしくは分岐の脂肪族ア

ルコールと推定されたが、脂肪族飽和炭化水素と同様に保持時間が異なっても同じ物質と推定されているケースが多くあり、種々の分岐鎖を含む脂肪族アルコールも正確な推定は難しいことが示された。

2) その他の物質

1) を除く 38 物質を表 2 に示し、それぞれが検出された検体数を示した。標準品を保有していた 15 物質について同定を試みた結果、15 物質全てについてマススペクトルと RI が一致し、同一物質であることが確認された。以上より、Unknowns Analysis ソフトウェアで自動定性解析後に RI 比で絞り込む方法により、正確性の高い推定が可能であることが示された。

同定できた 15 物質のうち No.38 を除く 14 物質はいずれも厚生労働省により示された PL 制度における添加剤として別表第 1 第 2 表¹¹⁾に記載されている物質であった。一方、残りの 23 物質については標準品が入手できなかったが、No. 17、24、29、34 及び 36 の 5 物質については、PL に記載されている物質であった。そのため、これら 19 種の PL 収載物質は、添加剤として意図的に添加された物質である可能性が高いと判断した。

① PL 収載物質

PL 収載物質のうち、Irgafos 168 (No. 37) は全検体から検出され、酸化防止剤として使用頻度が非常に高いことが示された。上記を含め、滑剤のステアリルアルコール (No. 20)、ステアリン酸 (No. 23)、オレアミド (No. 26) 及びエルカ酸アミド (No. 30)、界面活性剤のモノパルミチン (No. 28) 及びモノステアリン (No. 29)、光安定剤の Tinuvin 770 (No. 35) の計 8 物質は比較的大きなピーク (ピークエリア: 10^7 以上) として検出された。これらのは多くは河村らが PP 製品中から検出されたこ

とを報告しており¹⁰⁾、汎用添加剤であると考えられた。

また、比較的小さなピーク（ピークエリア： 10^7 未満）として検出された 11 物質のうち、酸化防止剤である 2,4-Di-*tert*-butylphenol (No. 8) と BHT (No. 9) は半数以上の検体から検出された。これらは分子量がより大きなフェノール系酸化防止剤の分解物としても検出されうることから、添加剤として添加された場合と NIAS として混入していた場合の両方が考えられた。また、滑剤であるミリスチン酸 (No.11)、パルミチン酸 (No.18) 及びステアミド (No.27)、可塑剤のアセチルクエン酸トリブチル (ATBC) (No.25) が検出された。その他、脂肪酸アミドである Palmitoleamide (No.24)、食用油脂等である Squalene (No.32)、脂肪酸エステルである Hexadecanoic acid, dodecyl ester (No.34) 及び Octadecanoic acid, dodecyl ester (No.36) が検出された。一方、Benzenepropanoic acid, 3,5-bis(1,1-dimethylethyl)-4-hydroxy-, methyl ester (No. 17) は PP (樹脂区分 6) への使用が認められていない物質であった。

②非 PL 収載物質

PL に収載されていなかった 19 物質については、No. 38 が Tris(2,4-di-*tert*-butylphenyl) phosphate と同定された。この物質は Irgafos 168 (No. 37) の酸化体であり³⁾、Irgafos 168 と同様に全検体から検出された。また、7,9-Di-*tert*-butyl-1-oxaspiro(4,5)deca-6,9-diene-2,8-dione と推定された No. 16 は酸化防止剤である Irganox 1010 の分解物であることが報告されている¹²⁾。これらから、No.16 及び 38 は NIAS に該当すると推察された。なお、Irganox 1010 は PP 製品からの検出が報告されている汎用添加剤であるが¹⁰⁾、分子量が大きく GC-MS では検出不可能であった。

4 検体から検出された No. 21 は 9-

Octadecenenitrile, (Z)- (別名：オレイルニトリル) と推定された。PL には類似のステアロニトリルが添加剤として収載されているが、オレイルニトリルは収載されていない。オレイルニトリルは滑剤であるオレアミド (No. 26) の脱水反応により生成することがあるため、NIAS の可能性が高いと考えられた。No. 4 及び 5 は同じ物質であると推定され、構造異性体である可能性が示された。また、10 検体以上から検出された No. 6 は、No. 4 及び 5 と類似の構造を有する物質と推定された。これらは、酸化防止剤等の分解物である可能性も考えられた。これら 4 物質は複数の検体から検出されたことから汎用添加剤に由来する NIAS である可能性が高いと考えられたが、標準品による同定ができず、その由来も明らかでなかった。

No. 33 は比較的大きなピーク（ピークエリア： 10^7 以上）として 1 検体 (PP-12) から検出されたが、ライブラリとの一致率が 74%と比較的低かったことから、ライブラリに掲載されていない別の物質である可能性も考えられた。

残りの 12 物質 (No. 1~3、7、10、12~15、19、22、31) は、いずれも比較的小さなピーク（ピークエリア： 10^7 未満）として 1 検体ずつから検出された。これらは検出頻度が低く、同定まで至らなかったことから、NIAS と判断することが困難であった。

D. 結論

PP 製品 24 検体について網羅的分析法を用いて含有される化学物質の把握を行った。PP 製品のトータルイオンクロマトグラムにおいて多数のピークが検出されたことから、手動による解析ではなく Unknowns Analysis ソフトウェアによる自動定性解析を試みた。解析条件として、マススペクトルと RI とを組み合わ

せて精度を向上させた。さらに推定候補物質の実測値と登録値の RI 比が 0.9~1.1 のものに絞り込むことによって正確性をより向上させた。

その結果、多岐に渡る直鎖及び分岐鎖を含む POH や脂肪族アルコールは、そのマススペクトルより POH 類であることは判別できたが、物質の正確な推定は難しいことが示された。その他検出された物質はその半分以上が PL 収載物質であり、滑剤のステアリン酸やオレアミド、界面活性剤のモノパルミチン及びモノステアリン、酸化防止剤の Irgafos 168 等が推定または同定された。非 PL 収載物質については、酸化防止剤や滑剤に由来する NIAS が推定または同定されたが、比較的ピーク強度が小さく、検出頻度が低い物質の同定とその由来を特定することはできなかった。

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は困難であることから、意図的添加物質と NIAS を確実に判別することは困難である。そこで、次年度は添加剤の種類と量が既知の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 の把握を行うとともに、GC-MS では検出不可能な物質の分析のため LC-MS/MS を用いた検討も行う予定である。

E. 参考文献

- 1) ILSI. Guidance on best practices on the risk assessment of non intentionally added substances (NIAS) in food contact materials and articles. (https://ilsi.org/europe/wp-content/uploads/sites/3/2016/04/2015-NIAS_version-January-2016.pdf, 最終アクセス日 令和 3 年 2 月 24 日)
- 2) Ibarra V.G., Quirós de A.R.B., Losada P.P. Non-target analysis of intentionally and non intentionally added substances from plastic packaging materials and their migration into food simulants. *Food Packaging and Shelf Life*, 21, <https://doi.org/10.1016/j.fpsl.2019.100325> (2019)
- 3) Vera P., Canellas E., Nerín C. Identification of non volatile migrant compounds and NIAS in polypropylene films used as food packaging characterized by UPLC-MS/QTOF. *Talanta* 188, 750–762 (2018)
- 4) 河村葉子、三浦麻記子、杉田たき子、山田隆、武田明治：HPLC によるポリエチレン中の酸化防止剤及び紫外線吸収剤の一斉分析法、*食品衛生学雑誌*、37, 272-280 (1996)
- 5) 公益社団法人日本薬学会編：器具・容器包装および玩具試験法（酸化防止剤および紫外線吸収剤）、*衛生試験法・注解 2020*、東京、金原出版、p.648-653 (2020)
- 6) Van Den Dool, H., Kratz, P. D. A generalization of the retention index system including linear temperature programmed gas-liquid partition chromatography, *Journal of Chromatography*, 11, 463-471 (1963)
- 7) 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)
- 8) 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)
- 9) 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)
- 10) 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)
- 11) 厚生労働省、食品用器具・容器包装のポジティブリスト制度について (https://www.mhlw.go.jp/stf/newpage_05148.html, 最終アクセス日 令和3年2月24日)
- 12) Graiño S.G., Sendón R., Hernández J.L., Quirós A.R-B. GC-MS screening analysis for the identification of potential migrants in plastic and paper-based candy wrappers, *Polymers*, 10 (2018)

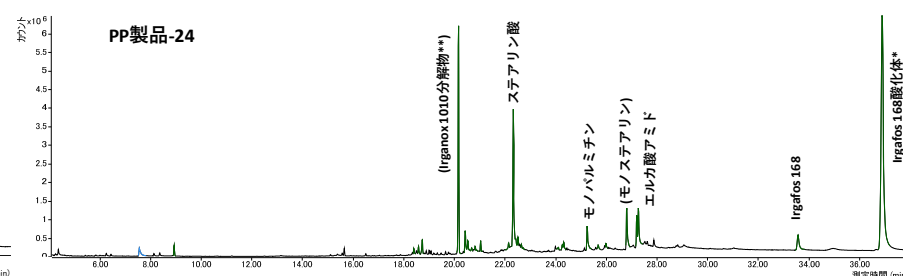
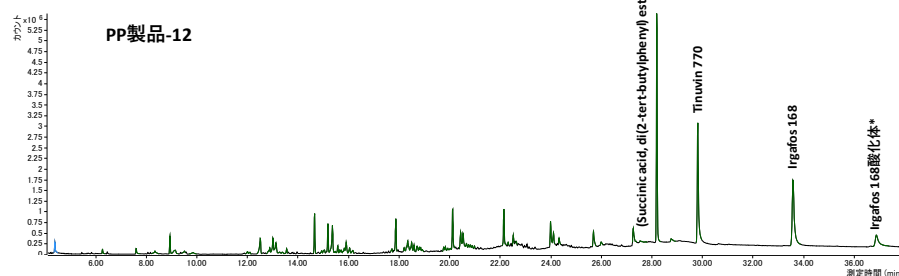
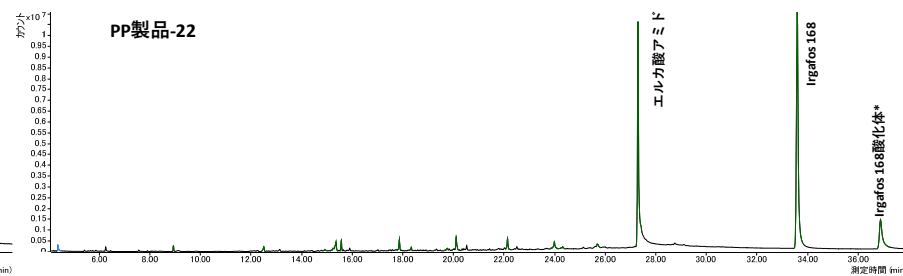
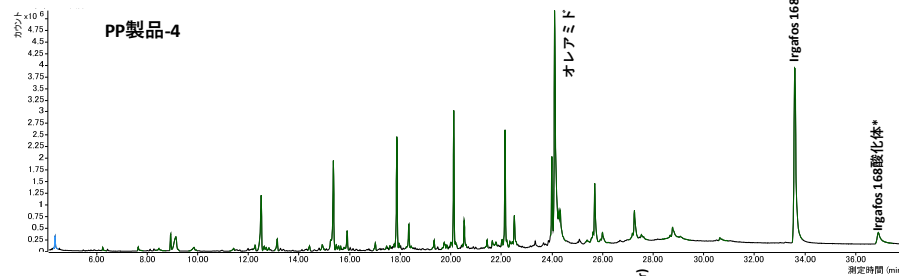
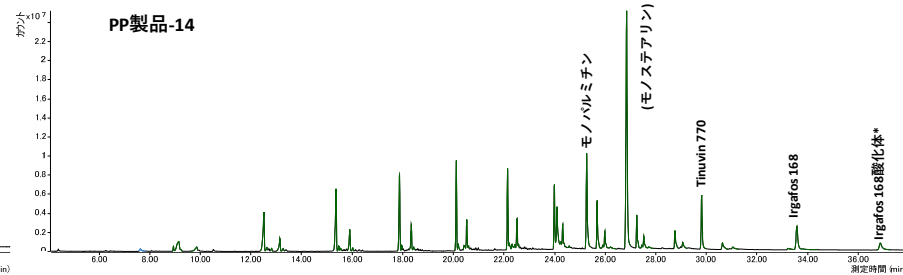
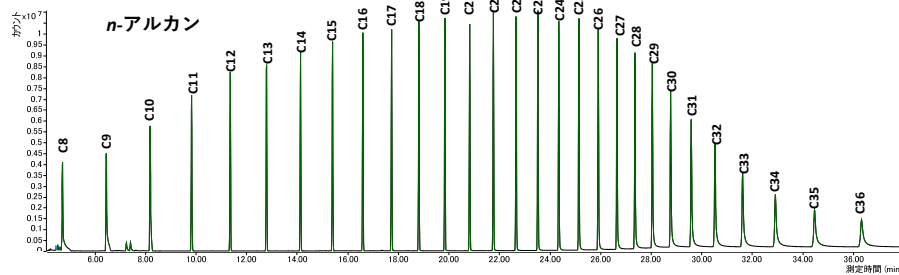


図1 n-アルカン(C8~C36)及びポリプロピレン(PP)製品のトータルイオンクロマトグラム(抜粋)

*: Tris(2,4-di-tert-butylphenyl) phosphate, **: 7,9-Di-tert-butyl-1-oxaspiro(4,5)deca-6,9-diene-2,9-dione
(): 推定物質は括弧で示した

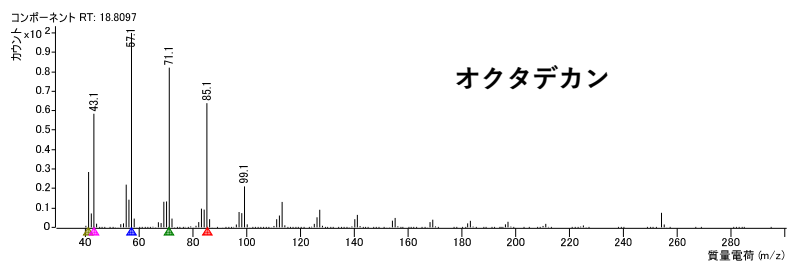
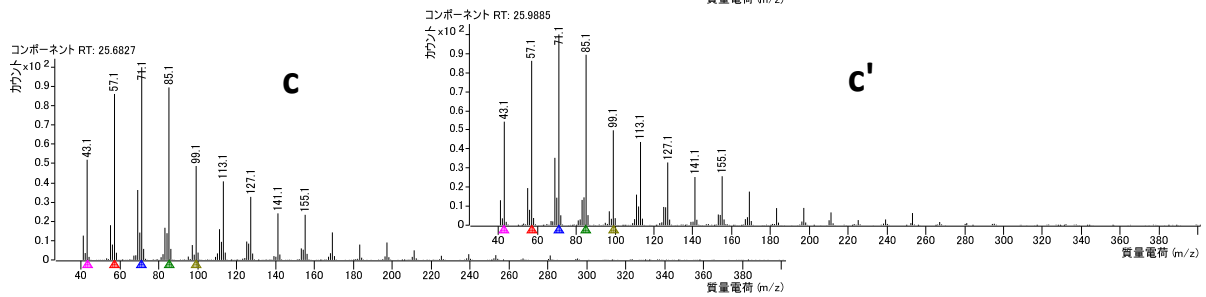
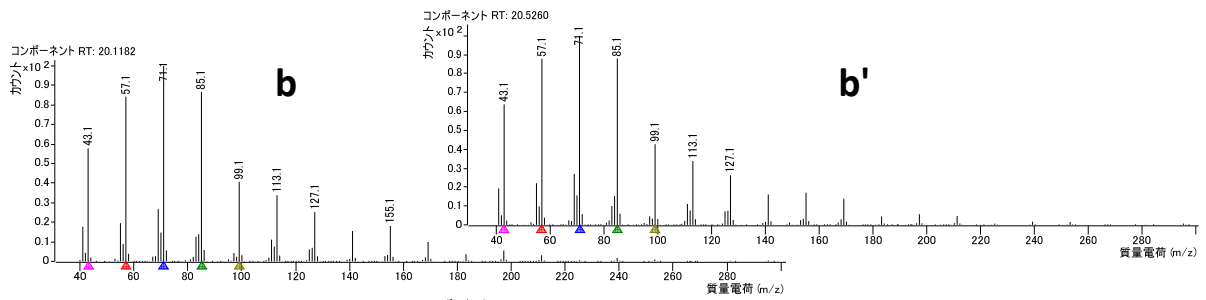
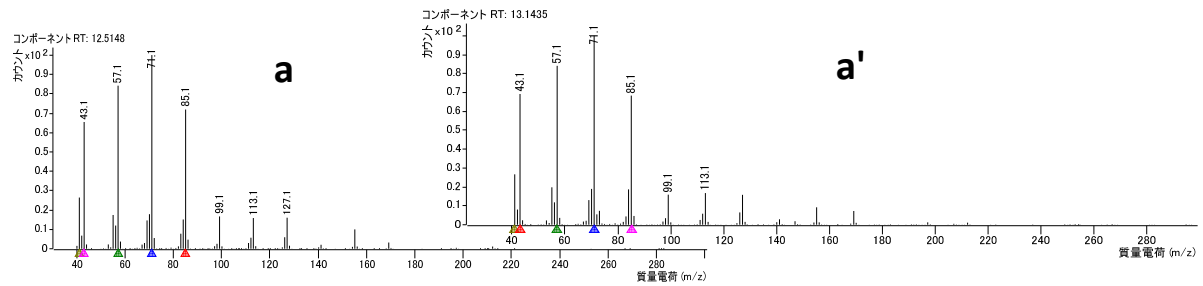
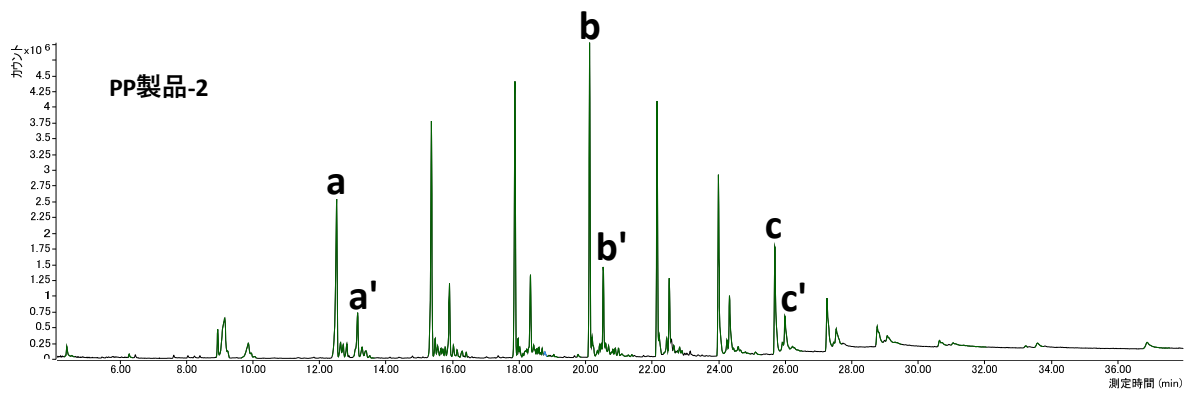


図2 ポリプロピレン(PP)製品-2のトータルイオンクロマトグラム及び検出された脂肪族飽和炭化水素並びにオクタデカンのマススペクトル

表1 ポリプロピレン製品においてUnknowns analysisソフトウェアにより自動定性解析されたピーク数及びその内訳

| 試料 No. | 用途 | 色 | 耐熱温度 (°C) | 耐冷温度 (°C) | 製造者 | 結果 | | | | | |
|--------|---------|----------------|--------------|--------------|-----|-------------------------|---------------------|--------------|----|------------|------------|
| | | | | | | 自動定性解析 による 同定ピーク数 | 内訳 | | | その他の 物質 | 推定不能 物質 |
| | | | | | | | 脂肪族飽和炭化水素 及び類似物質 | 脂肪族 アルコール | | | |
| 1 | 保存容器 | 水色 | 140 | -20 | a | 39 | 34 | 0 | 4 | 1 | |
| 2 | 保存容器 | 白色 | 140 | -20 | b | 70 | 66 | 0 | 4 | 0 | |
| 3 | 保存容器 | 透明 | 140 | -20 | c | 15 | 10 | 0 | 5 | 0 | |
| 4 | 保存容器 | 透明 | 140 | -20 | d | 54 | 46 | 0 | 8 | 0 | |
| 5 | 保存容器 | 透明 | 140 | -20 | e | 73 | 65 | 1 | 5 | 2 | |
| 6 | 保存容器 | 透明 | 120 | -20 | a | 63 | 54 | 0 | 9 | 0 | |
| 7 | 保存容器 | 透明 | 120 | -20 | f | 37 | 27 | 1 | 7 | 2 | |
| 8 | 保存容器 | 透明 | 100 | -20 | g | 79 | 66 | 1 | 11 | 1 | |
| 9 | 保存容器 | 赤色 | 140 | -20 | h | 6 | 0 | 2 | 4 | 0 | |
| 10 | 保存容器 | 透明 | 100 | -20 | g | 77 | 61 | 0 | 16 | 0 | |
| 11 | 皿 | 茶色 | 140 | —* | a | 44 | 36 | 0 | 6 | 2 | |
| 12 | 容器 | 内側:白色 外側:赤色 | 140 | -20 | h | 54 | 28 | 10 | 14 | 2 | |
| 13 | 調理器具 | 透明 | 80 | -20 | i | 41 | 37 | 0 | 4 | 0 | |
| 14 | 調理器具 | 白色 | 100 | -20 | g | 43 | 35 | 0 | 8 | 0 | |
| 15 | 調理器具 | 白色 | 120 | -20 | j | 68 | 37 | 19 | 8 | 4 | |
| 16 | 調理器具 | 黒色 | 120 | -20 | j | 63 | 43 | 10 | 9 | 1 | |
| 17 | 調理器具 | 透明 | 140 | -20 | g | 15 | 7 | 0 | 8 | 0 | |
| 18 | 調理器具 | 透明 | 120 | -20 | k | 10 | 0 | 3 | 7 | 0 | |
| 19 | 調理器具 | 黄色 | 120 | -20 | l | 43 | 26 | 10 | 7 | 0 | |
| 20 | ストロー | 薄黄色 | 約80 | 約-10 | m | 45 | 40 | 1 | 4 | 0 | |
| 21 | スプーン | 白色 | 120 | —* | h | 43 | 32 | 0 | 9 | 2 | |
| 22 | れんげ | 黒色 | 140 | —* | n | 15 | 11 | 0 | 4 | 0 | |
| 23 | 袋・フィルム類 | 透明 | 80 | -10 | —* | 29 | 11 | 1 | 14 | 3 | |
| 24 | 袋・フィルム類 | 透明 | 80 | -10 | n | 20 | 5 | 2 | 12 | 1 | |

*:記載なし

表2 ポリプロピレン製品24試料において推定・同定された化学物質

| No. | RT | RI | | 物質名 | Cas No. | 分子式 | PL収載 | 標準品による同定 | 結果 | | | 備考 |
|-----|--------|-------|--------|---|-------------|-------------|----------------|----------|-------|---------------------------|---------------------------|--------------------|
| | | 実測値 | ライブラリ値 | | | | | | 検出検体数 | エリア 10 ⁷ 以上 | エリア 10 ⁷ 未満 | |
| 1 | 9.507 | 1081 | 1219 | Cyclopentane, 1-butyl-2-propyl- | 62199-50-2 | C12H24 | × | — | 1 | 0 | 1 | |
| 2 | 10.807 | 1164 | 1041 | Silane, cyclohexyldimethoxymethyl- | 17865-32-6 | C9H20O2Si | × | — | 1 | 0 | 1 | |
| 3 | 11.673 | 1222 | 1208 | Benzaldehyde, 3,4-dimethyl- | 5973-71-7 | C9H10O | × | — | 1 | 0 | 1 | |
| 4 | 12.948 | 1316 | 1378 | Ethanone, 1,1'-(1,4-phenylene)bis- | 1009-61-6 | C10H10O2 | × | — | 3 | 0 | 3 | |
| 5 | 13.517 | 1442 | 1378 | Ethanone, 1,1'-(1,4-phenylene)bis- | 1009-61-6 | C10H10O2 | × | — | 10 | 0 | 10 | |
| 6 | 13.509 | 1483 | 1433 | Ethanone, 1-[4-(1-hydroxy-1-methylethyl)phenyl]- | 54549-72-3 | C11H14O2 | × | — | 11 | 0 | 11 | |
| 7 | 15.250 | 1489 | 1685 | 2,5-cyclohexadiene-1,4-dione, 2-(1,1-dimethylethyl)-5-(2-methyl-2-propen-1-yl)- | 40088-60-6 | C14H18O2 | × | — | 1 | 0 | 1 | |
| 8 | 15.564 | 1515 | 1555 | 2,4-Di-tert-butylphenol | 96-76-4 | C14H22O | ○ | ○ | 16 | 0 | 16 | 酸化防止剤 |
| 9 | 15.641 | 1521 | 1668 | Butylated Hydroxytoluene | 128-37-0 | C15H24O | ○ | ○ | 12 | 0 | 12 | 酸化防止剤(BHT) |
| 10 | 17.374 | 1669 | 1654 | Cyclooctasiloxane, hexadecamethyl- | 556-68-3 | C16H48O8Si8 | × | — | 1 | 0 | 1 | |
| 11 | 18.351 | 1757 | 1769 | Tetradecanoic acid | 544-63-8 | C14H28O2 | ○ ¹ | ○ | 1 | 0 | 1 | 滑剤(ミスチン酸) |
| 12 | 18.581 | 1779 | 1856 | 3,5-di-tert-Butyl-4-hydroxybenzaldehyde | 1620-98-0 | C15H22O2 | × | — | 1 | 0 | 1 | |
| 13 | 18.733 | 1793 | 1907 | E-15-Heptadecenal | 944581-82-2 | C17H32O | × | — | 1 | 0 | 1 | |
| 14 | 18.886 | 1807 | 1846 | 2,4-Diphenyl-4-methyl-1-pentene | 6362-80-7 | C18H20 | × | — | 1 | 0 | 1 | |
| 15 | 19.328 | 1850 | 1864 | 2,4-Diphenyl-4-methyl-2(E)-pentene | 22768-22-5 | C18H20 | × | — | 1 | 0 | 1 | |
| 16 | 20.152 | 1933 | 2081 | 7,9-Di-tert-butyl-1-oxaspiro(4,5)deca-6,9-diene-2,8-dione | 82304-66-3 | C17H24O3 | × | — | 2 | 1 | 1 | Irganox 1010の分解物 |
| 17 | 20.356 | 1953 | 2134 | Benzenepropanoic acid, 3,5-bis(1,1-dimethylethyl)-4-hydroxy-, methyl ester | 6386-38-5 | C18H28O3 | △ ² | — | 2 | 0 | 2 | |
| 18 | 20.407 | 1959 | 1968 | n-Hexadecanoic acid | 57-10-3 | C16H32O2 | ○ ¹ | ○ | 6 | 0 | 6 | 滑剤(パルミチン酸) |
| 19 | 20.815 | 1999 | 2007 | 13-Octadecenal, (Z)- | 58594-45-9 | C18H34O | × | — | 1 | 0 | 1 | |
| 20 | 21.630 | 2086 | 2053 | 1-Octadecanol | 112-92-5 | C18H38O | ○ ³ | ○ | 1 | 1 | 0 | 滑剤(ステアリアルアルコール) |
| 21 | 21.630 | 2087 | 2064 | 9-Octadecenenitrile, (Z)- | 112-91-4 | C18H33N | × | — | 4 | 0 | 4 | |
| 22 | 21.035 | 2023 | 1999 | Octadecanal | 638-66-4 | C18H36O | × | — | 1 | 0 | 1 | |
| 23 | 22.318 | 2163 | 2167 | Octadecanoic acid | 57-11-4 | C18H36O2 | ○ ¹ | ○ | 4 | 1 | 3 | 滑剤(ステアリン酸) |
| 24 | 22.327 | 2163 | 2029 | Palmitoleamide | 106010-22-4 | C16H31NO | ○ ⁴ | — | 3 | 0 | 3 | |
| 25 | 23.236 | 2267 | 2594 | Tributyl acetylcitrate | 77-90-7 | C20H34O8 | ○ | ○ | 1 | 0 | 1 | 可塑剤(ATBC) |
| 26 | 24.085 | 2370 | 2228 | 9-Octadecenamide, (Z)- | 301-02-0 | C18H35NO | ○ ⁴ | ○ | 6 | 5 | 1 | 滑剤(オレアミド) |
| 27 | 24.264 | 2391 | 2220 | Octadecanamide | 124-26-5 | C18H37NO | ○ ⁴ | ○ | 4 | 0 | 4 | 滑剤(ステアミド) |
| 28 | 25.241 | 2514 | 2482 | Glycerol 1-palmitate | 542-44-9 | C19H38O4 | ○ ⁵ | ○ | 6 | 2 | 4 | 界面活性剤(モノパルミチン) |
| 29 | 26.796 | 2725 | 2681 | Octadecanoic acid, 2,3-dihydroxypropyl ester | 123-94-4 | C21H42O4 | ○ ⁵ | — | 8 | 4 | 4 | 界面活性剤(モノステアリン) |
| 30 | 27.263 | 2792 | 2625 | 13-Docosenamide, (Z)- | 112-84-5 | C22H43NO | ○ ⁴ | ○ | 3 | 1 | 0 | 滑剤(エルカ酸アミド) |
| 31 | 27.271 | 2788 | 2915 | Cyclotrisiloxane, 2,4-dimethyl-2,4,6,6-tetrahenyl- | 17210-14-9 | C26H26O3Si3 | × | — | 1 | 0 | 1 | |
| 32 | 27.619 | 2838 | 2914 | Squalene | 111-02-4 | C30H50 | ○ ⁶ | ○ | 1 | 0 | 1 | |
| 33 | 28.189 | 2920 | 2753 | Succinic acid, di(2-tert-butylphenyl) ester | — | C24H30O4 | × | — | 1 | 1 | 0 | |
| 34 | 28.537 | 2968 | 2972 | Hexadecanoic acid, dodecyl ester | 42232-29-1 | C28H56O2 | ○ ⁷ | — | 1 | 0 | 1 | |
| 35 | 29.811 | 3125 | 3499 | Decanedioic acid, bis(2,2,6,6-tetramethyl-4-piperidinyl) ester | 52829-07-9 | C28H52N2O4 | ○ | ○ | 2 | 1 | 1 | 光安定剤(Tinuvin 770) |
| 36 | 30.210 | 3167 | 3171 | Octadecanoic acid, dodecyl ester | 5303-25-3 | C30H60O2 | ○ ⁷ | — | 2 | 0 | 2 | |
| 37 | 33.549 | 3444 | 3397 | Phenol, 2,4-bis(1,1-dimethylethyl)-, phosphite (3:1) | 31570-04-4 | C42H63O3P | ○ | ○ | 24 | 12 | 12 | 酸化防止剤(Irgafos 168) |
| 38 | 36.837 | >3600 | >3600 | Tris(2,4-di-tert-butylphenyl) phosphate | 95906-11-9 | C42H63O4P | × | ○ | 24 | 7 | 17 | Irgafos 168の酸化体 |

PLに収載されていない物質を網掛で示した

1:「脂肪酸(C8~C24)」として収載、2:収載されているが、使用制限量は樹脂区分1のみ(ポリプロピレンに該当する区分6はなし)、3:「脂肪酸一価アルコール(直鎖飽和C=8~24)」として収載、4:「脂肪酸アミド(C=8~22)」として収載

5:「脂肪酸(C=2~24)」とグリセロール又はジグリセロールのエステルとして収載、6:「食用油脂」または「動物性油脂」として収載、7:「脂肪酸(飽和C=4~22)と脂肪酸一価アルコール(直鎖C=1~18)のエステル」として収載