

令和2年度 厚生労働行政推進調査事業費補助金（化学物質リスク研究事業）
分担研究報告書

室内空気環境汚染化学物質の標準試験法の策定およびリスク低減化に関する研究

瞬時型放散源の探索

研究分担者 河上 強志 国立医薬品食品衛生研究所 生活衛生化学部第四室長

研究要旨

厚生労働省のシックハウス（室内空気汚染）問題に関する検討会では室内濃度指針値の見直し作業が行われており、新たな策定候補化合物の詳細な曝露評価及びリスク評価の実施には、発生源の特定が必要である。昨年度、瞬時型放散源として屋内で使用される水性塗料や水性ワックスを選定し、室内濃度指針値の改定及び新規策定の候補物質に挙げられている化合物や、フタル酸エステル類及び2-エチル-1-ヘキサノールを生成する可能性のある可塑剤類等 23 種類の化合物の分析法を開発したが、一部の化合物でマトリックス効果による高回収率が認められた。そのうち、2,2,4-トリメチル-1,3-ペンタンジオールジイソブチラート (TPDI)、フタル酸ジブチル及びその異性体であるフタル酸ジイソブチル (DIBP) について、内部標準物質を TPDI-d₁₇ 及び DIBP-d₄ に変更し、マトリックス効果が軽減できるかどうか検討した。その結果、回収率の大幅な改善が認められ、再現性も良好な値を示し、分析法が改良できた。そこで、実試料を再測定したところ、一部試料では改良法で濃度が低い傾向を示した。再測定前後で濃度に差が認められるのは、塗料等に使用されている樹脂成分などによるマトリックス効果の違いに起因するものと考えられた。また、ヘッドスペース (HS) GC/MS 分析によるスクリーニング分析により、測定対象化合物以外の物質についての情報を得ることができた。

研究協力者

田原 麻衣子 国立医薬品食品衛生研究所
生活衛生化学部主任研究官

A. 研究目的

厚生労働省は現在、室内空気環境汚染化学物質として揮発性化合物 (VOC) 及び準揮発性有機化合物 (SVOC) の13化合物について室内濃度指針値を策定している。しかし、最終策定から15年以上が経過し、その間、それらの代替化合物による新たな室内空気汚染の可能性が指摘されている。厚生労働省のシックハウス（室内空気汚染）問題に関する検討会では、室内濃度指針値の見直し作業を進めているが、指針値の新規策定に際しては、室内における汚染化学物質の主要な発生源

を特定し、その発生源によってもたらされる定量的なリスクに関する情報を提供する必要がある。しかし、多様な消費者製品について、そのような情報は極めて限られているのが現状である。

本研究は、VOC及びSVOCの放散源となり得る家庭用品として瞬時放散型製品について、その室内空気質に及ぼす影響を評価することを目的としている。昨年度は屋内で使用される塗料やワックスを対象として、室内濃度指針値の新規設定及び改定の候補物質^{2,3)}に挙げられているVOCを中心に、初年度⁴⁾にハンドポンプ式スプレー製品で測定したフタル酸エステル類等12種類を対象とした⁵⁾。また、加水分解によって2-エチル-1-ヘキサノール (2E1H) を生成する可能性のあるテレフ

タル酸2-エチルヘキシルやアジピン酸2-エチルヘキシル等7種類及び、それらに該当しない可塑剤4種類も対象とした。最終的に、23化合物を測定対象とした。これらの化合物について、ガスクロマトグラフタンデム質量分析計 (GC-MS/MS) を用いた一斉分析法を開発し、水性塗料及び水性ワックスについて実態調査を実施した。一方で、いくつかの化合物でマトリックス効果によると考えられる高回収率が認められており、分析法の改良が必要であった⁵⁾。そこで、今年度は高回収率が認められた化合物のうち、室内濃度指針値策定候補物質である2,2,4-トリメチル-1,3-ペンタンジオールジイソブチラート (TPDI)、並びに指針値策定物質のフタル酸ジブチル (DBP) 及びその異性体であるフタル酸ジイソブチル (DIBP) について、内部標準物質をフタル酸ジエチル (DEP) の重水素化体 (DEP-d₄) から、TPDI及びDIBPの重水素化体に変更し、分析法の改良を試みたので報告する。

また、対象製品中の測定対象化合物以外の化合物についても情報を得るために、ヘッドスペース (HS) GC/MSによるスクリーニング測定も行ったので合わせて報告する。

B. 研究方法

1. 瞬時放散型家庭用品

昨年度⁵⁾に実態調査の対象とした水性塗料10製品及び水性ワックス2製品及び床用洗剤1種類のうち、TPDI及びDBPが検出された9製品について再測定を実施した。これらの製品の製造国、成分及び用途情報などを表1に示した。なお、No.10のみエアゾール製品であり、氷冷したフラスコに噴出物を集めた後、穏やかに振り混ぜて噴射剤であるジメチルエーテルを揮発させた物を分析試料とした。

2. 試薬類

測定対象とした3化合物の入手先を表2に、化学構造式を図1にそれぞれ示した。内部標準物質として用いた、TPDIの重水素化体 (TPDI-d₁₇) はToronto Research Chemicals Inc.

製、DIBPの重水素化体 (DIBP-d₄) は関東化学社製の環境分析用をそれぞれ使用した。

塩化ナトリウムは関東化学社製のフタル酸エステル試験用、ヘキサン及び酢酸エチルは同社製の残留農薬試験・PCB試験用をそれぞれ用いた。無水硫酸ナトリウムはSigma-Aldrich社製の特級試薬を用いた。試験には、ミリポア社製超純水製造装置Milli-Q Advantage A10で製造した水を使用した。

3. 分析方法

試料0.5 gを50 mL容ガラス遠心管に入れ、30%塩化ナトリウム水溶液を10 mL加え攪拌した。次に、抽出溶媒として酢酸エチル/ヘキサン=1/1 (v/v) を10 mL加え、10分間270 rpmで水平振とうした (タイテック社製RECIPRO SHAKER SR-1)。振とう後、3000 rpmで10分間遠心分離した (日立ハイテクノロジーズ社製 himac CT6E)。遠心分離後、有機溶媒相を分取し、もう一度同様に抽出した。有機溶媒相を合わせ、無水硫酸ナトリウムで脱水後、40°C以下の湯浴温度でロータリーエバポレーターを用いて濃縮した。そして、10 mLに定容し試料溶液とした。この試料溶液を適宜希釈し、内部標準物質を添加後、GC-MS/MSを用いて測定した。

HS-GC/MSによるスクリーニング分析では、試料0.2 gをHSバイアルに入れ、5 mLの30%塩化ナトリウム水溶液を加え、PTFE付きシリコンセプタムを装着したアルミキャップで密栓した後、HS-GC/MSにて測定した。なお、スクリーニングは水性塗料のNo.1~9及び水性ワックスのNo.11の10試料を対象とした。

4. GC-MS/MS条件

試料溶液はThermoFisher Scientific製のTraceGC-Quantum XLSを用いて測定した。カラムはAgilent technologies社製のDB-5MS UI (長さ30 m、内径 0.25 mm、膜厚 0.25 µm) を用い、オープン温度は50°Cで1分保持後、20°C/分で200°Cまで昇温した。その後、10°C/分で270°Cまで昇温した。さらに、20°C/分で310°Cまで昇温した後、10分保持した。注入

ロ、トランスファーライン及びイオンソースは250°C、280°C及び250°Cに設定した。注入法はスプリットレス、注入量は1 µLとし、キャリアーガスにはヘリウム (1 mL/分) を用いた。イオン化法は電子イオン化 (EI) 法、イオン化電圧は70 eVとした。コリジョンガスにはアルゴン (0.13 pa) を用い、選択反応モニタリング (SRM) 法にて定量した。各測定対象化合物の定量イオン、コリジョンエネルギー及び保持時間を表3に示した。

5. HS-GC/MS条件

HSオートサンプラーにTriPlus RSHを使用し、Trace 1310/ISQ7000で構成されたGC/MSを使用した (いずれもThermoFisher Scientific製)。試料は、40°Cで30分加温した後、バイアル上部の気相部分を1 mL採取し測定した。カラムはRestek製のRxi-624Sil MS (長さ60 m、内径 0.32 mm、膜厚1.8 µm) を用い、オープン温度は35°Cで5分保持後、5°C/分で120°Cまで昇温した。さらに、20°C/分で200°Cまで昇温した後、10分保持した。注入口、トランスファーライン及びイオンソース温度は、200°C、200°C及び230°Cに設定した。注入法はスプリット (スプリット比1:20)、キャリアーガスにはヘリウム (2 mL/分) を用いた。イオン化法は電子イオン化 (EI) 法、イオン化電圧は70 eVとした。測定はスキャンモードで行い、測定範囲はm/z=30~300とした。

測定結果について MsMetrix 社製のGC-Analyzer を用いてデコンボリューションした後、標準品等を使用して定性解析した。

C. 研究結果及び考察

1. GC-MS/MS条件

TPDI-d₁₇及びDIBP-d₄は重水素化されていないものよりも少し保持時間が早く検出され、最適化した条件でSRM分析を実施し、検量線を作成したところ、定量性に問題はなかった。定量下限値については、昨年度と同様に各化合物の検量線の最下限値 (1 ng/mL) を実試料濃度換算した値とした。具体的には、

0.020 µg/gとした。

2. 分析法の改良

昨年度⁵⁾と同じ実試料 (No.1及びNo.11) を用いた添加回収試験を実施した。なお、No.11はTPDIが検出されていることから、TPDIの回収率試験はNo.1のみで実施した。各試料に低濃度 (2 µg/g) 及び高濃度 (20 µg/g) となるように各測定化合物を添加した (n=3)。回収率試験の結果を表4に示した。

昨年度、TPDIについては、No.1の低濃度で回収率が200%を越え、高濃度でも148%と非常に高い値を示した⁵⁾。それに対して、TPDI-d₁₇を内部標準物質に使用したところ、低濃度で84%、高濃度で89%と良好な回収率を得ることができた。また、その変動係数についても、昨年度は9%を越えていたが、2.4%以下と再現性についても改善が認められた。

DIBP及びDBPについて、昨年度はどちらの化合物もすべての試験条件で回収率が110%を越えていた⁵⁾。今年度、DIBP-d₄を用いたことにより、回収率は78~90%と高回収率を示すことが無く、マトリックス効果の改善が認められた。また、昨年度はNo.1の低濃度で変動係数が10%を示していたが、今年度は5%以下となり、再現性についても改善が認められた。

以上から、昨年度に高回収率が認められた化合物のうち、TPDI、DIBP及びDBPについて、内部標準物質にTPDI-d₁₇及びDIBP-d₄を用いることでマトリックス効果の影響を受けずに測定できることが確認でき、分析法が改良できた。

3. 再測定

昨年度、TPDI及びDBPを検出した試料について、本年度に改良した分析法を用いて再測定を行った。その結果を表5に示した。

TPDIの測定結果について、No.2、3及び8は昨年度にDEP-d₄を内部標準物質に用いた場合とほとんど差は無かった。一方、No.6及び7ではTPDI-d₁₇を用いた場合の方が、昨年度の8割程度の濃度を示しており、マトリック

ス効果の改善によるものと考えられた。また、DBPについても、DIBP-d₄を内部標準物質に用いた方が、1割ほど濃度が低い値を示した。試料によって、再測定前後で濃度に差が認められるのは、塗料等に使用されている樹脂成分などによるマトリックス効果の違いに起因するものと考えられた。

4. HS-GC/MS によるスクリーニング分析

HS分析により得られた各試料のクロマトグラムを図2に、検出されたピークの解析結果を表6にそれぞれ示した。各試料から複数のピークが検出され、そのいくつかは標準品によって同定することができた。また、それ以外にピークが大きく、NISTライブラリーにて一致度の高いものを表に示した。

アセトンや、イソプロピルアルコール及びブタノール等のアルコール類で検出頻度が高い傾向を示した。また、室内濃度指針値策定物質としては、エチルベンゼン、トルエン及びキシレンが検出された。通常、エチルベンゼンはキシレンの不純物として存在する⁶⁾とされており、それらが同じ試料から検出された場合が多かった。なお、今回はスクリーニング分析のため定量しておらず、その含有量は不明であるが、これらの化合物のピークはアルコール類等に比べると相対的に小さい場合が多く、エチルベンゼンのピークがクロマト上で相対的に大きかった試料No.6については、製品に低VOC塗料との記載があった。

D. 結論

昨年度、水性塗料や水性ワックスに含まれる、室内濃度指針値の改定及び新規策定の候補物質に挙げられている化合物や、フタル酸エステル類及び2E1Hを生成する可能性のある可塑剤類等23種類の化合物の分析法を開発したが、一部の化合物でマトリックス効果による高回収率が認められた。そのうち、TPDI、DIBP及びDBPについて、内部標準物質をTPDI-d₁₇及びDIBP-d₄に変更し、マトリックス効果が軽減できるかどうか検討した。その結果、

回収率の大幅な改善が認められ、再現性も良好な値を示し、分析法が改良できた。そこで、実試料を再測定したところ、一部試料では改良法で濃度が低い傾向を示した。再測定前後で濃度に差が認められるのは、塗料等に使用されている樹脂成分などによるマトリックス効果の違いに起因するものと考えられた。また、HS-GC/MS分析によるスクリーニング分析により、測定対象化合物以外の物質についての情報を得ることができた。

E. 研究発表

1. 論文発表

- 1) Kawakami T., Isama K., Ikarashi Y., Jinno H.: Evaluation of the sensitization potential of volatile organic compounds (VOCs) and semi-volatile organic compounds (SVOCs) using the direct peptide reactivity assay (DPRA), *J. Toxicol. Sci.*, 45, 725-735, 2020.
- 2) Kawakami T., Isama K., Jinno H.: Skin transferability of phthalic acid ester plasticizers and other plasticizers using model polyvinyl chloride sheets, *J. Environ. Sci. Health Part A*, 55, 1163-72, 2020.

2. 学会発表

- 1) 森葉子・青木明・岡本誉士典・埴岡伸光・香川(田中)聡子・田原麻衣子・河上強志・酒井信夫・神野透人
2-Ethyl-1-hexanol 含有エステルの加水分解性評価に関する研究, フォーラム2020 衛生薬学・環境トキシコロジー(2020.9)
- 2) 河上強志・田原麻衣子・五十嵐良明 家庭用芳香・消臭・脱臭剤に使用されている第四級アンモニウム系化合物の実態調査, 第57回全国衛生化学技術協議会年会(2020.11)
- 3) 香川(田中)聡子・斎藤育江・酒井信夫・河上強志・田原麻衣子・上村仁・千葉真弘・大貫文・大泉詩織・三浦伸彦・河村伊久雄・五十嵐良明・埴岡伸光・神野透

人，室内空气中フタル酸エステル類標準試験法の妥当性評価（2020.12）

<https://www.mhlw.go.jp/file/05-Shingikai-11121000-Iyakushokuhinkyoku-Soumuka/0000141174.pdf>

F. 知的所有権の取得状況

1. 特許取得

なし

2. 実用新案登録

なし

3. その他

なし

- 3) 第 20 回シックハウス（室内空気汚染）問題に関する検討会 資料 1-1, 室内空気環境汚染化学物質調査において検出された化学物質の初期暴露評価・初期リスク評価の結果について（2016.10.26）

<https://www.mhlw.go.jp/file/05-Shingikai-11121000-Iyakushokuhinkyoku-Soumuka/0000141173.pdf>

G. 参考文献

- 1) 厚生労働省医薬・生活衛生局医薬品審査管理課 化学物質安全対策室: 室内濃度指針値一覧,
<http://www.nihs.go.jp/mhlw/chemical/situnai/hyou.html>
- 2) 第 20 回シックハウス（室内空気汚染）問題に関する検討会 資料 1-2, 指針値の見直し候補となる揮発性有機化合物について（案）（2016.10.26）

- 4) 河上強志・田原麻衣子: 平成 30 年度厚生労働行政推進調査事業費補助金（化学物質リスク研究事業）分担研究報告書

- 5) 河上強志・田原麻衣子: 令和元年度厚生労働行政推進調査事業費補助金（化学物質リスク研究事業）分担研究報告書

- 6) 製品評価技術基盤機構: 化学物質の初期リスク評価書 キシレン,
https://www.nite.go.jp/chem/chrip/chrip_search/dt/pdf/CI_02_001/risk/pdf_hyoukasyo/063riskdoc.pdf

表1. 試料一覧

試料タイプ	本年度対象	試料番号	製造国	成分	用途	その他
水性塗料	○	No.1	不明	合成樹脂(アクリル)・顔料・水	屋内壁用(木部・ビニルクロス・コンクリート・プラスチックボード)、屋内木部(床を除く)	
	○	No.2	不明	顔料・合成樹脂(アクリル)・水	屋内の木材、紙、金属など	
	○	No.3	不明	合成樹脂(アクリル・シリコン)、顔料、防カビ剤、水	屋内外の木部、木製製品、鉄部、鉄製製品、コンクリート・モルタル壁、サイディング(セラミック系は除く)、フロック剤	つやあり
	○	No.4	中国	合成樹脂(アクリル)・顔料・防カビ剤・水	発泡スチロール、プラスチック(硬質塩ビ、アクリル、ABS)*PE、PPなどは除く	低臭タイプ(ペンタイプ)
	○	No.5	日本	合成樹脂(アクリル・ウレタン)、顔料、水	装飾目的で木、紙、プラスチック(アクリル等)、布製の上靴、Tシャツ等	無鉛塗料
	○	No.6	日本	合成樹脂(アクリル)・顔料・水・防カビ剤	手作り家具、建具、木工品、工作品等の木部(高級家具を除く)、無垢木材床(フローリングを除く)	無鉛塗料 (VOC0.1%以下)
	○	No.7	不明	合成樹脂(アクリル)・顔料・水	リビング・寝室・子ども部屋などの室内壁や天井(壁紙・ビニル製壁紙、窓枠などの木部)、和室	無鉛塗料
	○	No.8	不明	合成樹脂(アクリル)・顔料・水・防カビ剤	壁や天井(しつくい、京壁・土壁・砂壁・繊維壁・コンクリート・モルタル)、浴室・キッチン・洗面所・トイレなどの壁や天井	シックハウス対応環境保護塗料
	○	No.9	不明	合成樹脂(アクリル)・顔料・防カビ剤・水	屋内外の木部や鉄部、コンクリート壁・モルタル、浴室、ビニルクロス壁紙、サイディング(セラミック系は除く)、家具、インテリア品、ウッドクラフト、ベンチ、ドア	
	○	No.10	日本	合成樹脂(アクリル)・有機溶剤・水	鉄部、木部、コンクリート、プラスチック(アクリル、ABS、スチレン樹脂に可)	
	○	No.11	不明	合成樹脂(アクリル樹脂・ウレタン樹脂)・水	門扉・フェンス・鉄サッシ、鉄階段・鉄部・羽目板・雨戸・戸袋・木製品、合板・屋外木部、屋内木部(床を除く)、トタン屋根・下見トタン・トタン・内壁・浴室・台所の壁や天井・外壁・コンクリート・モルタル・フロック・スタッコ・かわら・スレート	
	○	No.12	不明	合成樹脂(弾性特殊アクリル樹脂)・グリコール系溶剤・水	鉄、木工品、プラスチック(スチロール、ABS、硬質塩ビ、アクリル)、発泡スチロール、コンクリート、ガラスなど	天然抗菌剤(竹エキス) 除菌剤(クリシン系消毒剤)
	合成洗剤		No.13	日本	界面活性剤(2%、ポリオキシエチレンアルキルエーテル)、溶剤、アルカリ剤	フローリング床(樹脂塗装された木製の床)、ビニル製の床 フローリング床(樹脂塗装された木製の床)、クッションフロア等のビニル製のシート床やタイル床、天然石等の石質床の洗浄、ワックスの剥離

表2. 測定対象化合物一覧

化合物	略称	CASRN.	化学式	分子量	入手先 ^a
Dibutyl phthalate	DBP	84-74-2	C ₁₆ H ₂₂ O ₄	278.4	K
Diisobutyl phthalate	DIBP	84-69-5	C ₁₆ H ₂₂ O ₄	278.4	K
2,2,4-Trimethyl-1,3-pentanediol diisobutyrate	TPDI	6846-50-0	C ₁₆ H ₃₀ O ₄	286.4	T

^a K: 関東化学, T: 東京化成工業

表3. 測定対象化合物のGC-MS/MS条件

化合物	保持時間(分)	Q ₁ [m/z]	Q ₃ [m/z]	CE(V)	内部標準物質
TPDI	8.96	71	43	6	TPDI-d ₁₇
DIBP	10.83	149	121	12	DIBP-d ₄
DBP	11.55	149	121	12	DIBP-d ₄
TPDI-d ₁₇ ^b	8.89	78	50	6	
DIBP-d ₄ ^b	10.82	153	121	12	

^a Q₁: プリカーサーイオン, Q₃: プロダクトイオン, CE: コリジョンエネルギー

^b 内部標準物質

表4. 実試料(No.1及びNo.11)による各化合物の回収率(n=3) ^a

化合物	No.1				No.11			
	Low		High		Low		High	
	Rec(%)	CV(%)	Rec(%)	CV(%)	Rec(%)	CV(%)	Rec(%)	CV(%)
TPDI	84	2.4	89	2.2	^b	-	-	-
DIBP	80	3.9	85	4.2	90	8.8	85	3.2
DBP	78	4.7	87	1.5	89	4.1	103	2.3

^a Low: 2 µg/g, High: 20 µg/g

^b -: 未計算

表5. 再測定結果^a

Sample No.	TPDI		DBP	
	TPDI-d ₁₇	DEP-d ₄	DIBP-d ₄	DEP-d ₄
NO.2	100	99	^b	-
NO.3	36000	35000	-	-
NO.5	41	33	-	-
NO.6	8700	11000	-	-
NO.7	27000	32000	-	-
NO.8	110	110	-	-
NO.9	100	110	-	-
NO.10	-	-	8400	9000
NO.11	14	34	-	-

^a DEP-d₄は昨年度のデータ

^b 定量下限値以下(0.020 µg/g)

表6. HS-GC/MS分析により試料から検出されたピーク

Sample No.	Peak No.	保持時間(分)	同定方法 ^a	化合物名	CAS RN.
NO.1	Peak 1	7.10	Std	Acetone	67-64-1
	Peak 2	7.51	Std	Isopropyl alcohol	67-63-0
	Peak 3	15.02	Std	1-Butanol	71-36-3
	Peak 4	16.00	Library	Methyl methacrylate	80-62-6
	Peak 5	18.46	Std	Toluene	108-88-3
	Peak 6	20.52	Library	Butyl acetate	123-86-4
	Peak 7	22.48	Std	Ethylbenzene	100-41-4
	Peak 8	22.54	Library	<i>n</i> -Butyl ether	142-96-1
	Peak 9	23.81	Library	Propionic acid butyl ester	590-01-2
	Peak 10	26.64	Std	2-Ethyl-1-hexanol	104-76-7
NO.2	Peak 1	7.18	Std	Acetone	67-64-1
	Peak 2	7.60	Std	Isopropyl alcohol	67-63-0
	Peak 3	18.47	Std	Toluene	108-88-3
	Peak 4	22.48	Std	Ethylbenzene	100-41-4
	Peak 5	22.78	Std	<i>m,p</i> -Xylene	108-38-3/106-42-3
	Peak 6	23.61	Std	<i>o</i> -Xylene	95-47-6
	Peak 7	26.64	Std	2-Ethyl-1-hexanol	104-76-7
	Peak 8	34.18	Std	2,2,4-Trimethyl-1,3-pentanediol monoisobutyrate	25265-77-4
	Peak 9	34.56	Std	2,2,4-Trimethyl-1,3-pentanediol monoisobutyrate	25265-77-4
No.3	Peak 1	7.20	Std	Acetone	67-64-1
	Peak 2	7.60	Std	Isopropyl alcohol	67-63-0
	Peak 3	9.50	Library	Isobutyl aldehyde	78-84-2
	Peak 4	18.47	Std	Toluene	108-88-3
	Peak 5	26.64	Std	2-Ethyl-1-hexanol	104-76-7
	Peak 6	34.18	Std	2,2,4-Trimethyl-1,3-pentanediol monoisobutyrate	25265-77-4
	Peak 7	34.56	Std	2,2,4-Trimethyl-1,3-pentanediol monoisobutyrate	25265-77-4
No.4	Peak 1	6.20	Std	Ethanol	64-17-5
	Peak 2	7.60	Std	Isopropyl Alcohol	67-63-0
	Peak 3	8.65	Library	<i>tert</i> -Butyl alcohol	75-65-0
	Peak 4	15.05	Std	1-Butanol	71-36-3
	Peak 5	26.64	Std	2-Ethyl-1-hexanol	104-76-7
NO.5	Peak 1	7.16	Std	Acetone	67-64-1
	Peak 2	8.63	Library	<i>tert</i> -Butyl alcohol	75-65-0
	Peak 3	11.4	Library	Trimethylsilanol	1066-40-6
	Peak 4	18.47	Std	Toluene	108-88-3
	Peak 5	22.48	Std	Ethylbenzene	100-41-4
	Peak 6	22.54	Library	<i>n</i> -Butyl ether	142-96-1
	Peak 7	22.78	Std	<i>m,p</i> -Xylene	108-38-3/106-42-3
	Peak 8	23.61	Std	<i>o</i> -Xylene	95-47-6
	Peak 9	26.64	Std	2-Ethyl-1-hexanol	104-76-7
	Peak 10	34.18	Std	2,2,4-Trimethyl-1,3-pentanediol monoisobutyrate	25265-77-4
	Peak 11	34.56	Std	2,2,4-Trimethyl-1,3-pentanediol monoisobutyrate	25265-77-4
NO.6	Peak 1	7.16	Std	Acetone	67-64-1
	Peak 2	8.63	Library	<i>tert</i> -Butyl alcohol	75-65-0
	Peak 3	18.46	Std	Toluene	108-88-3
	Peak 4	22.48	Std	Ethylbenzene	100-41-4
	Peak 5	22.78	Std	<i>m,p</i> -Xylene	108-38-3/106-42-3
	Peak 6	23.61	Std	<i>o</i> -Xylene	95-47-6
	Peak 7	26.64	Std	2-Ethyl-1-hexanol	104-76-7
	Peak 8	34.18	Std	2,2,4-Trimethyl-1,3-pentanediol monoisobutyrate	25265-77-4
	Peak 9	34.56	Std	2,2,4-Trimethyl-1,3-pentanediol monoisobutyrate	25265-77-4

^a Std: 標準品による同定 Library: NISTライブラリーによる検索のみ

表6. HS-GC/MS分析により試料から検出されたピーク(続き)

Sample	Peak No.	保持時間(分)	同定方法 ^a	化合物名	CAS RN.
NO.7	Peak 1	7.60	Std	Isopropyl alcohol	67-63-0
	Peak 2	9.48	Library	Isobutyl aldehyde	78-84-2
	Peak 3	14.81	Library	Methyl isobutylate	547-63-7
	Peak 4	16.03	Library	Methyl methacrylate	80-62-6
	Peak 5	22.78	Std	<i>m,p</i> -Xylene	108-38-3/106-42-3
	Peak 6	24.84	Library	Octamethyl cyclotetrasiloxane	556-67-2
	Peak 7	26.64	Std	2-Ethyl-1-hexanol	104-76-7
	Peak 8	34.18	Std	2,2,4-Trimethyl-1,3-pentanediol monoisobutyrate	25265-77-4
	Peak 9	34.56	Std	2,2,4-Trimethyl-1,3-pentanediol monoisobutyrate	25265-77-4
No.8	Peak 1	7.10	Std	Acetone	67-64-1
	Peak 2	8.57	Library	<i>tert</i> -Butyl alcohol	75-65-0
	Peak 3	15.03	Std	1-Butanol	71-36-3
	Peak 4	18.47	Std	Toluene	108-88-3
	Peak 5	22.22	Std	Chlorobenzene	108-90-7
	Peak 6	22.49	Std	Ethylbenzene	100-41-4
	Peak 7	22.78	Std	<i>m,p</i> -Xylene	108-38-3/106-42-3
	Peak 8	23.61	Std	<i>o</i> -Xylene	95-47-6
	Peak 9	26.64	Std	2-Ethyl-1-hexanol	104-76-7
	Peak 10	34.18	Std	2,2,4-Trimethyl-1,3-pentanediol monoisobutyrate	25265-77-4
	Peak 11	34.56	Std	2,2,4-Trimethyl-1,3-pentanediol monoisobutyrate	25265-77-4
No.9	Peak 1	7.16	Std	Acetone	67-64-1
	Peak 2	8.63	Library	<i>tert</i> -Butyl alcohol	75-65-0
	Peak 3	15.05	Std	1-Butanol	71-36-3
	Peak 4	18.47	Std	Toluene	108-88-3
	Peak 5	22.22	Std	Chlorobenzene	108-90-7
	Peak 6	22.49	Std	Ethylbenzene	100-41-4
	Peak 7	22.78	Std	<i>m,p</i> -Xylene	108-38-3/106-42-3
	Peak 8	23.61	Std	<i>o</i> -Xylene	95-47-6
	Peak 9	26.64	Std	2-Ethyl-1-hexanol	104-76-7
	Peak 10	34.18	Std	2,2,4-Trimethyl-1,3-pentanediol monoisobutyrate	25265-77-4
	Peak 11	34.56	Std	2,2,4-Trimethyl-1,3-pentanediol monoisobutyrate	25265-77-4
No.11	Peak 1	7.60	Std	Isopropyl alcohol	67-63-0
	Peak 2	11.08	Library	Butanal	123-72-8
	Peak 3	14.80	Library	Methyl isobutyrate	547-63-7
	Peak 4	15.05	Std	1-Butanol	71-36-3
	Peak 5	16.03	Library	Methyl methacrylate	80-62-6
	Peak 6	20.52	Library	Butyl acetate	123-86-4
	Peak 7	22.48	Std	Ethylbenzene	100-41-4
	Peak 8	22.54	Library	<i>n</i> -Butyl ether	142-96-1
	Peak 9	22.78	Std	<i>m,p</i> -Xylene	108-38-3/106-42-3
	Peak 10	23.81	Library	Propionic acid butyl ester	590-01-2
	Peak 11	24.54	Library	1-(2-Chloroethoxy) butane	10503-96-5
	Peak 12	26.34	Library	2-(2-Ethoxyethoxy)ethanol	11-90-0

^a Std: 標準品による同定 Library: NISTライブラリーによる検索のみ

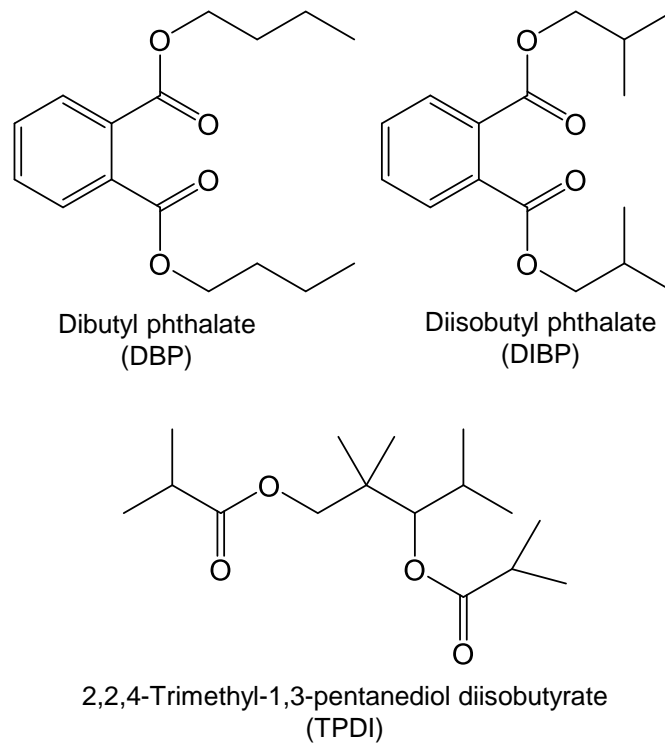
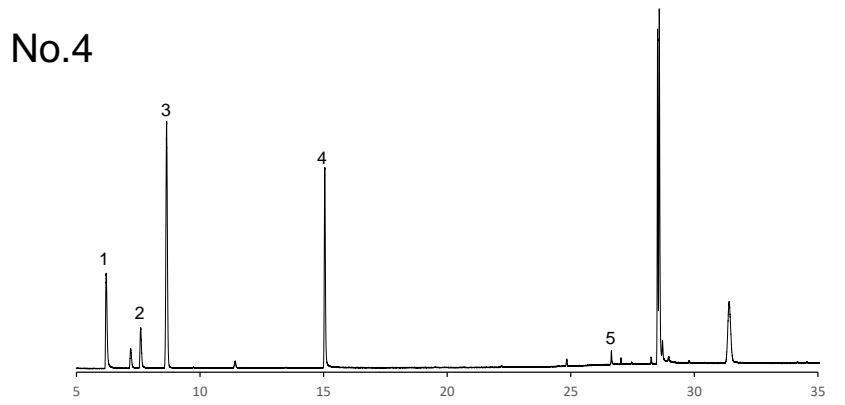
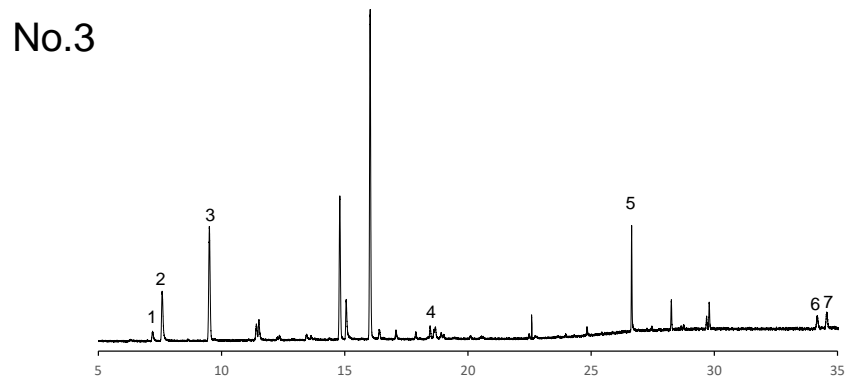
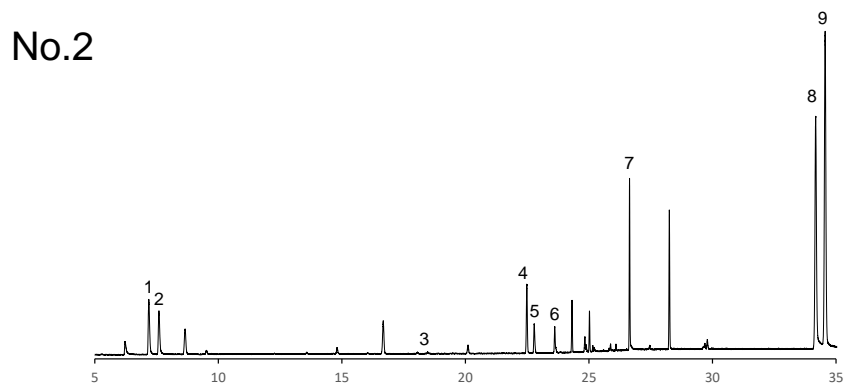
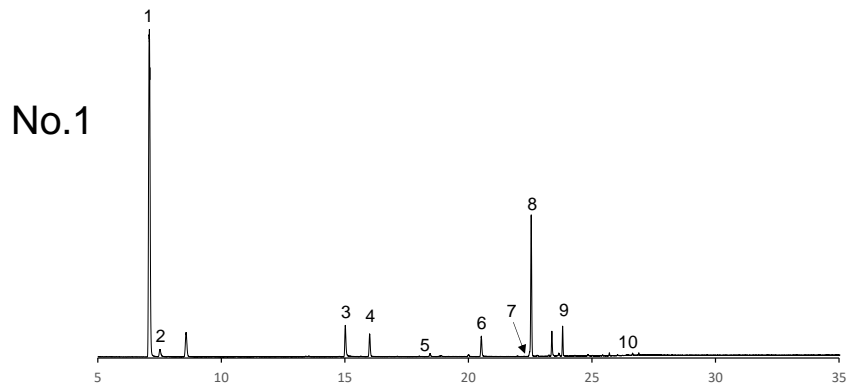


図1. 測定対象化合物の化学構造式



保持時間(分)

図2. HS-GC/MSで得られたマスクロマトグラム (番号は表6参照)

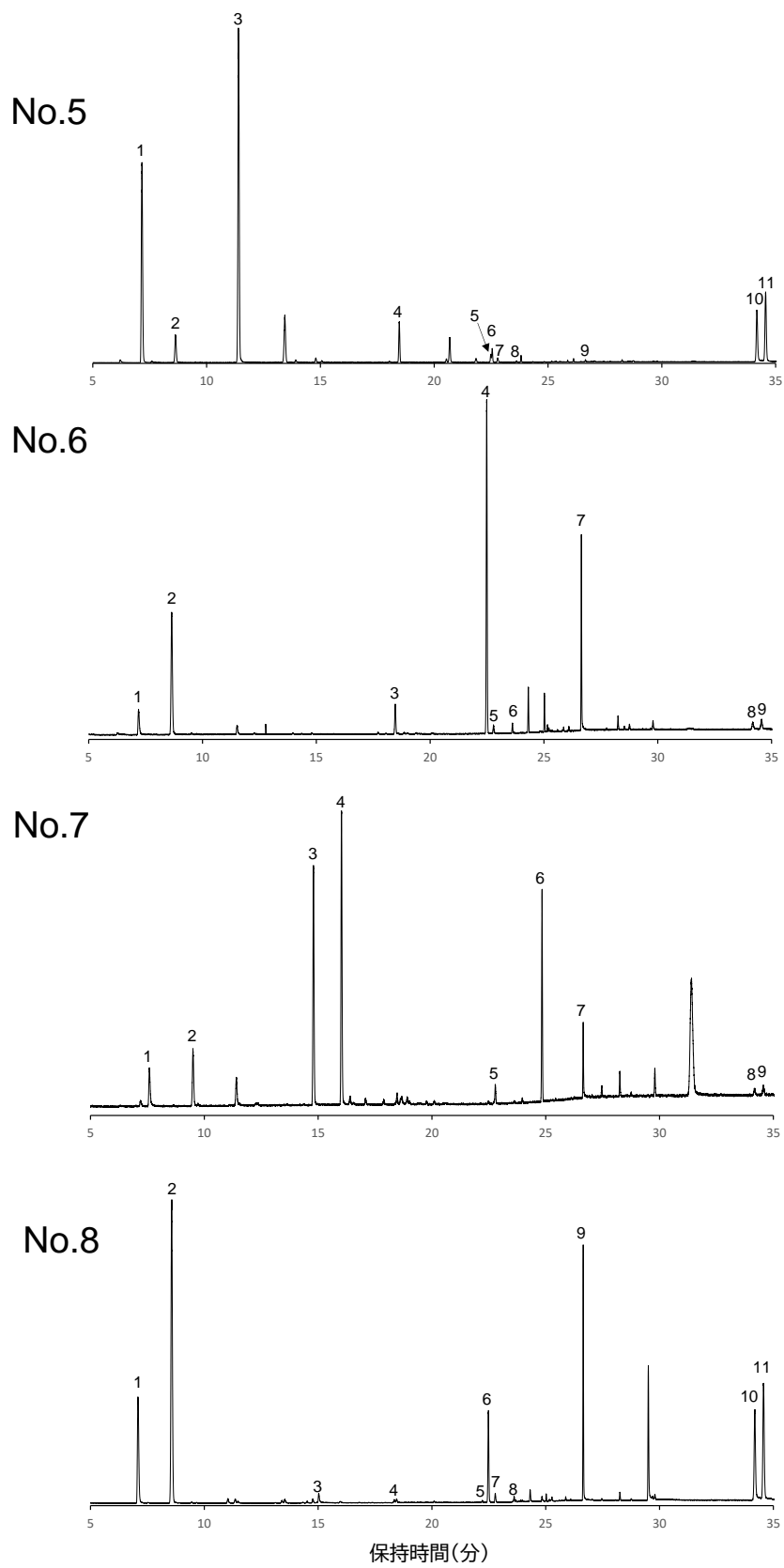
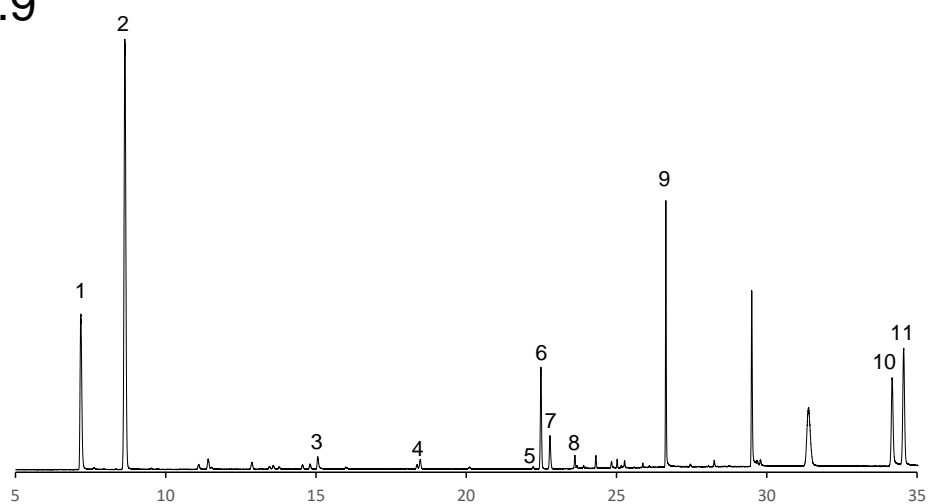
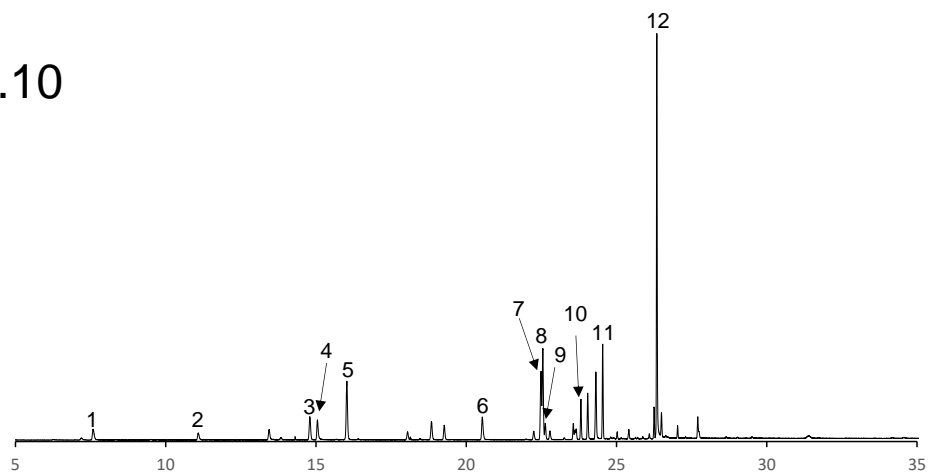


図2. HS-GC/MSで得られたマスクロマトグラム (番号は表6参照) (続き)

No.9



No.10



保持時間(分)

図2. HS-GC/MSで得られたマスクロマトグラム (番号は表6参照) (続き)