

ポジティブリスト制度施行に伴う分析法の開発

研究分担者 六鹿元雄 国立医薬品食品衛生研究所

研究要旨

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

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

研究協力者

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

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

A. 研究目的

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

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

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

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

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

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

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

B. 研究方法

1. 参加メーカー

GC-MSおよびLC-MS/MSの分析は以下の

表1 参加メーカー名

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

○：参加、—：不参加

分析機器メーカーが実施した（表1）。

2. 試薬・標準品

1) 試薬

分析に用いる試薬は各メーカーが通常使用するものを用いた（非公開）。

2) 標準品

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

3. GC-MS の測定

1) 測定溶液の調製

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

2) 装置

表3 各メーカーの使用機種

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

—：不参加

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

3) 測定条件

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

注入口温度：250°C以上

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

カラム温度：50°C以下-20°C/min-320°C（20 min）

キャリアーガス：He

キャリアーガス流量：1 mL/min 程度（定流量、定線速度もしくは定圧）

インターフェース温度：280°C程度

注入量：1 µL（スプリットレスもしくはスプリット）

イオン化電圧：70 eV

検出モード：SCAN（範囲指定はしない）および SIM（物質ごとに設定）

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

4) 測定

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

5) データの報告

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

4. LC-MS/MS の測定

1) 測定溶液の調製

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

2) 装置

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

3) 測定条件

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

カラム温度 : 40°C

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

注入量 : 0.2 ~ 10 µL

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

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

4) 測定

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

5) データの報告

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

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

5. 紫外可視吸収スペクトルの測定

紫外可視吸収スペクトルは (一財) 日本食品分析センターにて測定した。

1) 測定溶液の調製

各試薬をメタノールまたはアセトニトリルで適宜希釈した溶液を測定溶液とした。

2) 装置および測定条件

装置 : UV-1800 (株式会社島津製作所製)

光源 : タングステンヨウ素ランプ

測定波長 : 200~700 nm

スリット幅 : 1 nm

吸収セル : 石英セル、光路長 10 mm

6. 分析情報のまとめ

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

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

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

なお、データが得られなかった場合やデー

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

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

C. 研究結果および考察

1. 対象化合物

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

2. GC-MS

1) 測定条件

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

2) 測定結果

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

①マススペクトル

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

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

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

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

② RI

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

3) 測定限界

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

3. LC-MS/MS

1) 測定条件

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

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

2) 測定結果

収集した 228 物質の標準品のうち、メタノールまたはアセトニトリルに溶解した 204 物質を測定対象とした。

① マススペクトル (プリカーサーおよびフラグメントイオン)

全てのメーカーで Pos もしくは Neg でマススペクトルが取得できたのは 95 物質あった。3 メーカー以上で取得できたものを加えると 154 物質となり約 75% に相当した。これらのプリカーサーイオンは、ほとんどの場合が $[M+H]^+$ または $[M+NH_4]^+$ に相当するイオンであった。また、これらのプリカーサーイオンから生成したプロダクトイオンは強度比は異なっていたが、大部分はメーカー間で共通していた。一方、2-ブロモ-2-ブロモメチルグルタロニトリル (R1-MD-207) については、プロダクトイオンは共通であったが、得られたマススペクトルはデータが取得できたメーカーで全て異なっていた。また、ポリオキシエチレン (20) ソルビタントリオレート (R1-MD-186) やポリオキシエチレン (20) ソルビタントリステアレート (R1-MD-187) 等はポリマー構造の物質であるためプリカーサーイオンはメーカー間で異なっていたが、フラグメントイオンの多くは同じであった。

全メーカーでマススペクトルが得られなかったのは 25 物質あり、これらは 2-ブタノン (化合物番号: R1-MD-3)、トルエン (R1-MD-

62) などの分子量が小さいもの、エチレングリコール (R1-MD-51) やメシチレン (1,3,5-トリメチルベンゼン、R1-MD-60) などのイオン化しにくいもの、ジチオシアン酸メチレン (R1-MD-170) 等の水系溶媒に溶解しにくいもの等であった。また、一部の分析機器メーカーだけが検出できたものは、検出されたイオン強度が低く、測定限界が高いものが多かった。本検討では物質ごとに測定条件の最適化を行っていないため、これらについては測定条件を最適化することによりマススペクトルが得られる可能性がある。

また、2-(メチルアミノ)エタノール (R1-MD-64) や(2-ベンゾチアゾリルチオ)酢酸 (R1-MD-169) 等は GC-MS のマススペクトルは得られなかったが、LC-MS/MS では全メーカーで得られた。反対に、*p*-ベンジルオキシフェノール (R1-MD-44) やメシチレン (R1-MD-60) は LC-MS/MS では全メーカーでマススペクトルは得られなかったが、GC-MS では全メーカーでマ

ススペクトルが得られた。このように、化合物によってはどちらかでは検出されないものがあった。一方エチレングリコール (R1-MD-51) 等のようにいずれにおいてもマススペクトルが得られない化合物もあった。

2) 測定限界

およそ 110 物質について測定限界を決定した。本検討では、物質ごとに測定条件の最適化を行っていない。そのため、一部極端に高い数値となっているメーカーの結果が反映された場合もあり、参考情報として扱うこととし有効数字は切り上げて一桁とした。

4. 紫外可視吸収スペクトル

収集した 228 物質の標準品のうち、メタノールまたはアセトニトリルに溶解した 213 物質の紫外可視吸収スペクトルを測定した。

得られた紫外可視吸収スペクトルの代表例を図 1 に示した。

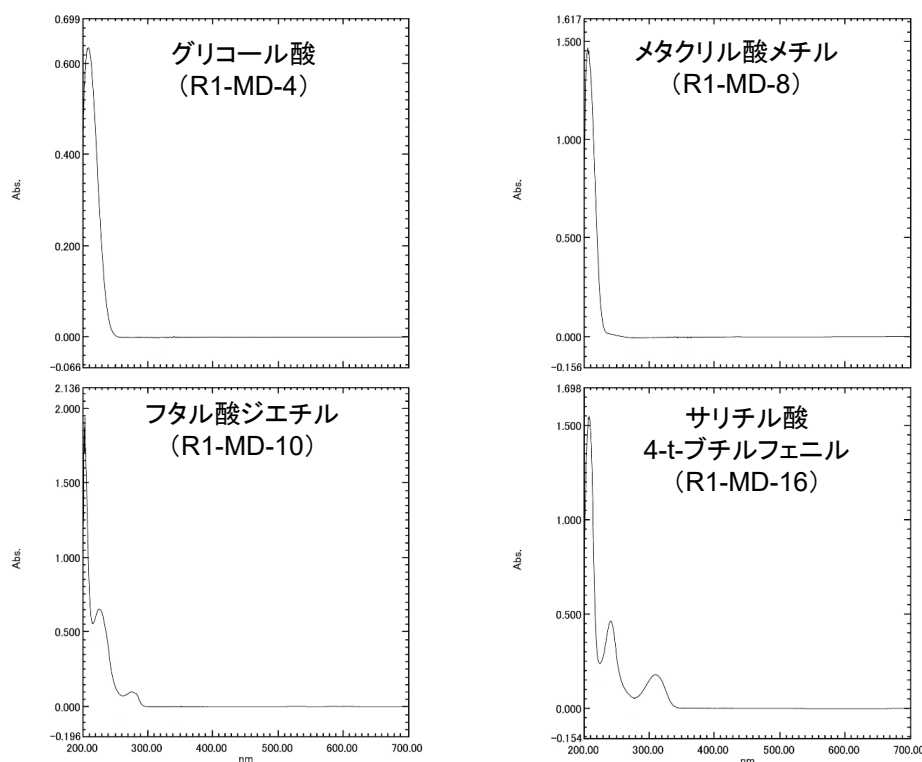


図 1 代表的な紫外可視吸収スペクトル

グリコール酸 (R1-MD-4) やメタクリル酸メチル (R1-MD-8) のように特徴的な吸収スペクトルを示さない化合物もあったが、フタル酸ジエチル (R1-MD-10) やサリチル酸 4-t-ブチルフェニル (R1-MD-16) など分子内に芳香族環を有する化合物は特徴的な吸収を示した。これらの紫外可視吸収スペクトルはLC-UV測定の際の化合物同定のための参考情報となりえると考えられた。

5. 分析情報の整理

得られた分析情報は、化合物ごとに化合物基礎情報、PL 規制情報とともに公開を目的とした表としてまとめた (別添3)。各情報の項目は以下の通りとした。

○ 化合物基礎情報

- ・本研究における番号
- ・CAS No. (登録番号)
- ・組成式
- ・分子量
- ・物質名 (和名・英名)
- ・構造式 (不明の場合は「不明」とした)

○ PL 規制情報

- ・通し番号
- ・区別使用制限
- ・特記事項

ただし、いずれも令和4年3月時点のもの。

○ 分析情報

① GC-MS

- ・データ：元にしたデータ数
- ・定量イオン (m/z)
- ・定性イオン (m/z)：最大3つ
- ・測定限界 (ng)
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・特記事項

② LC-MS/MS

- ・パターン：メーカー間で検出されたイオン

パターンが異なる場合に分けて示した。

- ・データ：元にしたデータ数
- ・プリカーサーイオン (m/z)
- ・プロダクトイオン (m/z)：最大3つ
- ・測定限界 (ng)
- ・特記事項

③ 紫外可視吸収スペクトル

データが得られなかった場合は N/A とした。

また、食品に残留する農薬、飼料添加物又は動物用医薬品の成分である物質の試験法⁵⁾のGC/MSによる農薬等の一斉試験法 (農産物)⁶⁾やLC/MSによる農薬等の一斉試験法 I (農産物)⁷⁾などを参考に、化合物ごとの「食品用器具・容器包装のPL 収載物質の分析情報」の表も作成した (別添4)。記載順はPLの通し番号順とし、項目は以下の通りとした。

- ・PLの通し番号 (いずれも令和4年3月時点のもの)
- ・化合物名 (和名)
- ・Cas No.
- ・検出イオン (定量イオンおよび確認イオン)
- ・測定限界
- ・RI (GC-MSのみ)

D. 結論

PL制度施行に伴う物質の同定や品質確認を目的として、PL 収載物質 (候補物質も含む) 約 220 物質を対象に、GC-MS および LC-MS/MS 分析を行うための情報を国内の主要分析機器メーカーの協力を得て収集し、公開データベースを作成した。

これらの情報を活用することで、標準品がただちに入手出来ない場合でも物質の推定または同定の一助となることが期待される。また、測定したい化合物がGC-MSとLC-MS/MSのどちらを使用したらより高感度に測定でき

るか、どの程度の濃度まで測定できるかの参考になる。さらには、国内の主要分析機器メーカーから得たデータを元に行っていることから、試験所が所有するメーカーを問わず活用でき、非常に有用なデータベースであると考えられる。

E. 参考文献

- 1) 別表第 1 (ポジティブリスト)、<https://www.mhlw.go.jp/content/11130500/000625490.pdf> (最終アクセス日 令和 4 年 3 月 31 日)
- 2) 六鹿元雄ら、合成樹脂製器具・容器包装の製造に使用される化学物質の分析法に関する検討、平成 29 年度厚生労働科学研究費補助金 総括・分担研究報告書、103-128 (2018)
- 3) 六鹿元雄ら、合成樹脂製器具・容器包装の製造に使用される化学物質の分析法に関する検討、平成 30 年度厚生労働科学研究費補助金 総括・分担研究報告書、85-117 (2019)
- 4) 六鹿元雄、ポジティブリスト制度施行に伴う分析法の開発、令和 2 年度厚生労働科学研究費補助金 総括・分担研究報告書、90-118 (2021)
- 5) 厚生労働省医薬食品局食品安全部長通知 (平成 17 年 1 月 24 日 食安発第 0124001 号) 食品に残留する農薬、飼料添加物又は動物用医薬品の成分である物質の試験法について (2005)
- 6) GC/MS による農薬等の一斉試験法 (農産物)、別表、<https://www.mhlw.go.jp/file/06-Seisakujouhou-11130500-Shokuhinzenbu/0000152045.pdf> (最終アクセス日 令和 4 年 3 月 31 日)
- 7) LC/MS による農薬等の一斉試験法 I (農産物)、別表 1、https://www.mhlw.go.jp/stf/seisakunitsuite/bunya/kenkou_iryuu/shokuhin/zanryu/zanryu3/siken.html (最終アクセス日、令和 4 年 3 月 31 日)

表2 対象とした化合物情報

番号	物質名 (和名)	物質名 (英名)	CAS No.	メーカー名*	純度(%)
R1-MD-1	リン酸トリエチル	Triethyl Phosphate	78-40-0	A	> 97
R1-MD-2	トリス(2-エチルヘキシル)ホスファート	Tris(2-ethylhexyl) phosphate	78-42-2	B	> 98
R1-MD-3	2-ブタノン	2-Butanone	78-93-3	A	> 99
R1-MD-4	グリコール酸	Glycolic Acid	79-14-1	A	> 97
R1-MD-5	2,5-ジ4-ペンテルヒドロキノン	2,5-Di-4-pentylhydroquinone	79-74-3	C	> 94
R1-MD-6	4,4'-イソプロピリデンジフェノール	4,4'-Isopropylidenediphenol	80-05-7	A	> 95
R1-MD-7	p-ペンテルフェノール	p-Pentylphenol	80-46-6	A	> 97
R1-MD-8	メタクリル酸メチル, モノマー	Methyl Methacrylate, Monomer	80-62-6	A	> 98
R1-MD-9	フタル酸ジシクロヘキシル	Dicyclohexyl Phthalate	84-61-7	A	> 99
R1-MD-10	フタル酸ジエチル	Diethyl Phthalate	84-66-2	A	> 98
R1-MD-11	フタル酸ジブチル	Dibutyl Phthalate	84-74-2	A	> 98
R1-MD-12	フタル酸ジヘキシル	Phthalic Acid Dihexyl Ester	84-75-3	D	98
R1-MD-13	4,4'-ブチリデンビス(6-tert-ブチル-3-メチルフェノール)	4,4'-butylidenebis(2-t-butyl-5-methylphenol)	85-60-9	A	> 95
R1-MD-14	フタル酸ベンジルブチル	Benzyl Butyl Phthalate	85-68-7	A	> 95
R1-MD-15	ブチルブチルブチルグリコラート	Butyl Phthalyl Butyl Glycolate	85-70-1	D	95
R1-MD-16	サリチル酸4-tert-ブチルフェニル	4-tert-butylphenyl Salicylate	87-18-3	D	> 98
R1-MD-17	1-ビニル-2-ピロリドン	1-Vinyl-2-pyrrolidone	88-12-0	A	> 98
R1-MD-18	o-トルエンスルホンアミド	o-Toluenesulfonamide	88-19-7	A	> 98
R1-MD-19	2,2'-メチレンビス(6-tert-ブチル-4-エチルフェノール)	2,2'-Methylenabis(6-t-butyl-4-ethylphenol)	88-24-4	D	> 98
R1-MD-20	o-アミノベンズアミド	o-Aminobenzamide	88-68-6	C	> 97
R1-MD-21	ピロメリット酸無水物	Pyromellitic Dianhydride	89-32-7	D	> 98
R1-MD-22	o-ヒドロキシビフェニル	o-Hydroxybiphenyl	90-43-7	A	> 99
R1-MD-23	ベンゾグアナミン	Benzoguanamine	91-76-9	D	> 99
R1-MD-24	フェノチアジン	Phenothiazine	92-84-2	A	> 99
R1-MD-25	N,N-ジエタノールオレイン酸アミド	N,N-Diethanololeamide	93-83-4	C	不明
R1-MD-26	p-ヒドロキシ安息香酸プロピル	Propyl p-Hydroxybenzoate	94-13-3	A	> 95
R1-MD-27	p-ヒドロキシ安息香酸ブチル	Butyl p-Hydroxybenzoate	94-26-8	A	> 98
R1-MD-28	1H-ベンゾトリアゾール	1H-Benzotriazole	95-14-7	A	> 98
R1-MD-29	メチルヒドロキノン	Methylhydroquinone	95-71-6	A	> 98
R1-MD-30	4,4'-チオビス(2-tert-ブチル-5-メチルフェノール)	4,4'-Thiobis(2-t-butyl-5-methylphenol)	96-69-5	A	> 98
R1-MD-31	2,4-ジ4-tert-ブチルフェノール	2,4-Di-t-butylphenol	96-76-4	D	> 97
R1-MD-32	4-tert-ブチルピロカテコール	4-t-Butylpyrocatechol	98-29-3	A	> 99
R1-MD-33	α-テルピネオール	α-Terpinol	98-55-5	D	> 95
R1-MD-34	p-ヒドロキシ安息香酸メチル	Methyl p-Hydroxybenzoate	99-76-3	A	> 99
R1-MD-35	N,N-ジエチルエタノールアミン	N,N-Diethylethanolamine	100-37-8	A	> 97
R1-MD-36	ベンジルアルコール	Benzyl Alcohol	100-51-6	A	> 99
R1-MD-37	ベンズアルデヒド	Benzaldehyde	100-52-7	A	> 98
R1-MD-38	ヘキサメチレンテトラミン	Hexamethylenetetramine	100-97-0	A	> 98
R1-MD-39	トリフェニルホスフィット	Triphenyl Phosphite	101-02-0	A	> 95
R1-MD-40	1,3-ジフェニル-2-チオ尿素	1,3-Diphenyl-2-thiourea	102-08-9	A	> 97
R1-MD-41	1,1',1'',1'''-(エチレンジトリロ)テトラキス(2-プロパノール)	1,1',1'',1'''-(Ethylenedinitrilo)tetraakis(2-propanol)	102-60-3	A	> 95
R1-MD-42	グリセロール三酢酸	Glycerol Triacetate	102-78-1	A	> 98
R1-MD-43	2-(ジブチルアミノ)エタノール	N,N-Dibutylethanolamine	102-81-8	D	> 99
R1-MD-44	p-ベンジルオキシフェノール	p-Benzoyloxyphenol	103-16-2	A	> 99
R1-MD-45	アゼライン酸ビス(2-エチルヘキシル)	Bis(2-ethylhexyl) Azelate	103-24-2	D	> 98
R1-MD-46	N,N-ジメチルベンジルアミン	N,N-Dimethylbenzylamine	103-83-3	A	> 98
R1-MD-47	ケイ皮酸アルデヒド	Cinnamic aldehyde	104-55-2	E	> 99
R1-MD-48	ε-カプロラクタム	ε-Caprolactam	105-60-2	A	> 98
R1-MD-49	フマル酸ジブチル	Dibutyl Fumarate	105-75-9	A	> 98
R1-MD-50	メタクリル酸グリシジル	Glycidyl Methacrylate	106-91-2	A	> 95
R1-MD-51	エチレングリコール	Ethylene Glycol	107-21-1	A	> 99.5
R1-MD-52	2-メチル-2,4-ペンタジオール	2-Methyl-2,4-pentanediol	107-41-5	A	> 99
R1-MD-53	3,5-ジメチル-1-ヘキシン-3-オール	3,5-Dimethyl-1-hexyn-3-ol	107-54-0	A	> 95
R1-MD-54	1-メトキシ-2-プロパノール	1-Methoxy-2-propanol	107-98-2	A	> 98
R1-MD-55	2-ジメチルアミノエタノール	2-Dimethylaminoethanol	108-01-0	A	> 99
R1-MD-56	4-メチル-2-ペンタノン	4-Methyl-2-pentanone	108-10-1	A	> 99.5
R1-MD-57	無水酢酸	Acetic Anhydride	108-24-7	A	> 97
R1-MD-58	無水マレイン酸	Maleic Anhydride	108-31-6	A	> 99
R1-MD-59	酢酸2-メトキシ-1-メチルエチル	2-Methoxy-1-methylethyl Acetate	108-65-6	A	> 97
R1-MD-60	メシチレン	Mesitylene	108-67-8	A	> 97
R1-MD-61	メラミン	Melamine	108-78-1	A	> 99
R1-MD-62	トルエン	Toluene	108-88-3	A	> 99.5
R1-MD-63	セバシン酸ジブチル	Dibutyl Sebacate	109-43-3	A	> 97
R1-MD-64	2-(メチルアミノ)エタノール	2-(Methylamino)ethanol	109-83-1	A	> 99
R1-MD-65	コハク酸二ナトリウム	Disodium Succinate	150-90-3	A	> 97
R1-MD-66	コハク酸	Succinic Acid	110-15-6	A	> 99.5
R1-MD-67	フマル酸	Fumaric Acid	110-17-8	A	> 98
R1-MD-68	N-オレオイルサルコシン	2-(N-Methyloleamido)acetic acid	110-25-8	B	95
R1-MD-69	1,4-ブタンジオール	1,4-Butanediol	110-63-4	A	> 98
R1-MD-70	シクロヘキサン	Cyclohexane	110-82-7	A	> 99.5
R1-MD-71	3,3'-チオジプロピオン酸	3,3'-Thiodipropionic Acid	111-17-1	D	> 99
R1-MD-72	2,2'-イミノジエタノール	2,2'-Iminodiethanol	111-42-2	A	> 99
R1-MD-73	2-(アリロキシ)エタノール	2-(Allyloxy)ethanol	111-45-5	A	> 98
R1-MD-74	ジエチレングリコール	Diethylene Glycol	111-46-6	A	> 99
R1-MD-75	2-ブトキシエタノール	2-Butoxyethanol	111-76-2	A	> 99
R1-MD-76	2-(2-メトキシエトキシ)エタノール	2-(2-Methoxyethoxy)ethanol	111-77-3	A	> 98
R1-MD-77	1-オクタニオール	1-Octanethiol	111-88-6	D	> 95
R1-MD-78	トリエチレンテトラミン(エチレンアミン混合物)	Triethylenetetramine (mixture of ethyleneamine)	112-24-3	A	不明
R1-MD-79	3,6-ジオキサ-1,8-オクタジオール	3,6-Dioxo-1,8-octanediol	112-27-6	A	> 95
R1-MD-80	1-ドデカンチオール	1-Dodecanethiol	112-55-0	A	> 98

表2 対象とした化合物情報 (続き)

番号	物質名 (和名)	物質名 (英名)	CAS No.	メーカー名*	純度(%)
R1-MD-81	ステアリン酸メチル	Methyl Stearate	112-61-8	D	> 97
R1-MD-82	リノール酸メチル	Methyl Linoleate	112-63-0	C	> 98
R1-MD-83	1-オクタセセン	1-Octadecene	112-88-9	A	> 90
R1-MD-84	ペンタエリトリトール	Pentaerythritol	115-77-5	D	> 95
R1-MD-85	フタル酸ビス(2-エチルヘキシル)	Bis(2-ethylhexyl) Phthalate	117-81-7	A	> 97
R1-MD-86	フタル酸ジ-n-オクチル	Di-n-octyl Phthalate	117-84-0	D	98
R1-MD-87	サリチル酸フェニル	Phenyl Salicylate	118-55-8	A	> 98
R1-MD-88	4,4'-メチレンビス(2,6-ジ-n-ブチルフェニル)	4,4'-Methylenebis(2,6-di-n-butylphenol)	118-82-1	D	98
R1-MD-89	サリチル酸メチル	Methyl Salicylate	119-36-8	A	> 98
R1-MD-90	2,2'-メチレンビス(6-n-ブチル-4-メチルフェニル)	2,2'-Methylenebis(6-n-butyl-4-methylphenol)	119-47-1	A	> 99
R1-MD-91	ベンゾイン	Benzoin	119-53-9	A	> 98
R1-MD-92	ベンゾフェノン	Benzophenone	119-61-9	A	> 98
R1-MD-93	p-ヒドロキシ安息香酸エチル	Ethyl p-Hydroxybenzoate	120-47-8	A	> 99
R1-MD-94	バニリン	Vanillin	121-33-5	A	> 98
R1-MD-95	トリイソプロパノールアミン	Trisopropanolamine	122-20-3	A	> 95
R1-MD-96	アゾジカルボンアミド	Azodicarbonamide	123-77-3	A	> 95
R1-MD-97	アジピン酸	Adipic Acid	124-04-9	A	> 99.5
R1-MD-98	リン酸トリブチル	Tributyl Phosphate	126-73-8	A	> 97
R1-MD-99	2,4,7,9-テトラメチル-5-デシネ-4,7-ジオール	2,4,7,9-Tetramethyl-5-decyne-4,7-diol	126-86-3	A	> 97
R1-MD-100	2,6-ジ-n-ブチル-4-メチルフェニル	2,6-Di-n-butyl-4-methylphenol	128-37-0	A	> 98
R1-MD-101	2,2'-ジヒドロキシ-4-メトキシベンゾフェノン	2,2'-Dihydroxy-4-methoxybenzophenone	131-53-3	F	98
R1-MD-102	2-ヒドロキシ-4-メトキシベンゾフェノン	2-Hydroxy-4-methoxybenzophenone	131-57-7	A	> 98
R1-MD-103	ジブチルジチオカルバミン酸亜鉛	Zinc Dibutyldithiocarbamate	136-23-2	A	> 95
R1-MD-104	N-ドデカノールサルコシン酸ナトリウム	Sodium N-Dodecanoylsarcosinate	137-16-6	A	> 95
R1-MD-105	フマル酸ビス(2-エチルヘキシル)	Bis(2-ethylhexyl) Fumarate	141-02-6	C	> 97
R1-MD-106	2-アミノエタノール	2-Aminoethanol	141-43-5	A	> 99
R1-MD-107	マロン酸	Malonic Acid	141-82-2	A	> 98
R1-MD-108	ヨードアセトアミド	Iodoacetamide	144-48-9	A	> 95
R1-MD-109	2-(4-チアゾリル)ベンゾイミダゾール	2-(4-Thiazolyl)benzimidazole	148-79-8	D	> 98
R1-MD-110	p-メトキシフェニル	p-Methoxyphenol	150-76-5	A	> 99
R1-MD-111	2-メルカプトベンゾチアゾール亜鉛	2-Mercaptobenzothiazole Zinc Salt	155-04-4	C	> 97
R1-MD-112	1,2,4-トリアゾール	1,2,4-Triazole	288-88-0	C	> 97
R1-MD-113	グルコン酸カルシウム水和物	Calcium Gluconate Monohydrate	299-28-5	A	99-101
R1-MD-114	リノレン酸メチル、混合物	Methyl Linolenate, mixture	301-00-8	C	97-103
R1-MD-115	オレアミド	Oleamide	301-02-0	A	95.5
R1-MD-116	2-エチルヘキサノ酸スズ(II)	Tin(II) 2-Ethylhexanoate	301-10-0	A	> 90
R1-MD-117	ジシアノジアミド	Dicyanodiamide	461-58-5	A	> 90
R1-MD-119	リン酸トリメチル	trimethyl phosphate	512-56-1	A	> 99
R1-MD-120	チオシアン酸ナトリウム	Sodium Thiocyanate	540-72-7	A	> 99
R1-MD-121	デカメチルシクロペンタシロキサン	Decamethylcyclotetrasiloxane	541-02-6	C	> 95
R1-MD-122	安息香酸リチウム	Lithium Benzoate	553-54-8	G	> 99
R1-MD-123	ニ安息香酸亜鉛	Zinc Dibenzoate	553-72-0	A	95-102
R1-MD-124	オクタメチルシクロテトラシロキサン	Octamethylcyclotetrasiloxane	556-67-2	D	98
R1-MD-125	マルチトール	Maltitol	585-88-6	D	95
R1-MD-127	トリフェニルホスフィン	Triphenylphosphine	603-35-0	A	> 97
R1-MD-128	トリフェニルアンチモン	Triphenylantimony	603-36-1	D	> 95
R1-MD-129	ジグリセリン	Diglycerol	627-82-7	A	94.3
R1-MD-130	1-ヘキサデセン	1-Hexadecene	629-73-2	A	> 90
R1-MD-131	2-メチylimidazole	2-Methylimidazole	693-98-1	A	> 98
R1-MD-132	イソシアヌル酸トリリス(2-ヒドロキシエチル)	Tris(2-hydroxyethyl) Isocyanurate	839-90-7	A	> 97
R1-MD-133	ジエチルホスホノ酢酸エチル	Ethyl Diethylphosphonoacetate	867-13-0	A	> 97
R1-MD-134	2-フェニルインドール	2-Phenylindole	948-65-2	A	98-102
R1-MD-135	マレイン酸ジアリル	Diallyl maleate	999-21-3	D	> 97
R1-MD-136	1,1,1,3,3,3-ヘキサメチルジシラザン	1,1,1,3,3,3-Hexamethylsilylazane	999-97-3	A	> 96
R1-MD-137	アジポジヒドラジド	Adipodihydrazide	1071-93-8	A	> 97
R1-MD-138	ニメタクリル酸1,3-ブタンジオール	1,3-Butanediol Dimethacrylate	1189-08-8	A	> 95
R1-MD-139	リン酸2-エチルヘキシルジフェニル	2-Ethylhexyl Diphenyl Phosphate	1241-94-7	A	> 90
R1-MD-140	リン酸トリトリル	Triaryl Phosphate	1330-78-5	A	> 98
R1-MD-141	ナフテン酸マンガン (Mn 約6%)	Manganese Naphthenate (Mn ca. 6%)	1336-93-2	D	> 6
R1-MD-142	2,4,6-トリリス(3,5-ジ-n-ブチル-4'-ヒドロキシベンジル)メチレン	2,4,6-Tris(3,5-di-n-butyl-4'-hydroxybenzyl)mesitylene	1709-70-2	D	95
R1-MD-143	3-(2-アミノエチルアミノ)プロピルトリメトキシシラン	3-(2-Aminoethylamino)propyltrimethoxysilane	1760-24-3	D	97
R1-MD-144	2-ヒドロキシ-4-(オクチロキシ)ベンゾフェノン	2-Hydroxy-4-(octyloxy)benzophenone	1843-05-6	A	> 99
R1-MD-145	トブチルヒドロキノン	t-Butylhydroquinone	1948-33-0	A	> 98
R1-MD-146	3-(3,5-ジ-n-ブチル-4-ヒドロキシフェニル)プロピオン酸オクタデシル	Octadecyl 3-(3,5-Di-n-butyl-4-hydroxyphenyl)propionate	2082-79-3	D	> 98
R1-MD-147	メタンスルホン酸ナトリウム	Sodium Methanesulfonate	2386-57-4	C	> 96
R1-MD-148	2-(2H-ベンゾトリアゾール-2-イル)-p-クレゾール	2-(2H-Benzotriazol-2-yl)-p-cresol	2440-22-4	A	> 97
R1-MD-149	3-グリシドキシプロピルトリメトキシシラン	3-Glycidyloxypropyltrimethoxysilane	2530-83-8	D	97
R1-MD-150	1,2-ベンジソチアゾール-3(2H)-オン	1,2-Benzisothiazol-3(2H)-one	2634-33-5	F	> 98
R1-MD-151	N,N-ジメチルアクリルアミド	N,N-Dimethylacrylamide	2680-03-7	A	> 98
R1-MD-152	2-メチル-4-イソチアゾリン-3-オン, 50% aqueous solution	2-Methyl-4-isothiazoline-3-one, 50% aqueous solution	2682-20-4	B	50% aqueous solution
R1-MD-153	エチドロン酸	Etidronate	2809-21-4	H	98
R1-MD-154	3-アミノメチル-3,5,5-トリメチルシクロヘキシルアミン(cis-, trans-混合物)	3-Aminomethyl-3,5,5-trimethylcyclohexylamine (mixture of cis- and trans-)	2855-13-2	A	> 98
R1-MD-155	ジアセトンアクリルアミド	Diacetone Acrylamide	2873-97-4	A	> 98
R1-MD-156	3-(2-アミノエチルアミノ)プロピルジメトキシシラン	3-(2-Aminoethylamino)propylmethyldimethoxysilane	3069-29-2	G	97
R1-MD-157	ジシクロヘキシルアミン亜硝酸塩	Dicyclohexylamine Nitrite	3129-91-7	A	> 95
R1-MD-158	2-(2H-ベンゾトリアゾール-2-イル)-4-(1,1,3,3-テトラメチルブチル)フェニル	2-(2H-Benzotriazol-2-yl)-4-(1,1,3,3-tetramethylbutyl)phenol	3147-75-9	A	> 97
R1-MD-159	トリアクリル酸ペンタエリスリトール	2-(Acryloyloxy)ethyl-2-(hydroxymethyl)propane-1,3-diol diacrylate	3524-68-3	B	95
R1-MD-160	フタル酸ジ-n-ブチル	Diheptyl phthalate	3648-21-3	I	97

表2 対象とした化合物情報 (続き)

番号	物質名 (和名)	物質名 (英名)	CAS No.	メーカー名*	純度(%)
R1-MD-161	2-(5-クロロ-2-ベンゾリチアゾール)-6-tert-ブチル-p-クレゾール	2-(5-Chloro-2-benzotriazolyl)-6-tert-butyl-p-cresol	3896-11-5	D	> 98
R1-MD-162	5-スルホイツフタル酸ジメチルナトリウム	Sodium Dimethyl 5-Sulfisophthalate	3965-55-7	D	> 98
R1-MD-163	2,6-ジ-tert-ブチル-4-エチルフェノール	2,6-Di-tert-butyl-4-ethylphenol	4130-42-1	D	96
R1-MD-164	コハク酸ジヒドラジド	Succinic Dihydrazide	4146-43-4	D	> 97
R1-MD-165	3,5-ジ-tert-ブチル-4-ヒドロキシ安息香酸2,4-ジ-tert-ブチルフェニル	2,4-Di-tert-butylphenyl 3,5-Di-tert-butyl-4-hydroxybenzoate	4221-80-1	A	> 97
R1-MD-166	(3-メルカプトプロピル)トリメチルシラン	(3-Mercaptopropyl)trimethoxysilane	4420-74-0	D	96
R1-MD-167	L(+)-アルギニン	L(+)-Arginine	74-79-3	A	> 98
R1-MD-168	2-シアノ-3,3-ジフェニルアクリル酸2-エチルヘキシル	2-Ethylhexyl 2-Cyano-3,3-diphenylacrylate	6197-30-4	D	98
R1-MD-169	(2-ベンゾチアゾリルチオ)酢酸	(2-Benzothiazolylthio)acetic Acid	6295-57-4	D	95
R1-MD-170	ジチオシアン酸メチレン	Methylene Dithiocyanate	6317-18-6	D	98
R1-MD-171	1,8-ジアザビシクロ[5.4.0]ウンデカ-7-エン	1,8-Diazabicyclo[5.4.0]undec-7-ene	6674-22-2	A	> 97
R1-MD-172	ペンタエリトリートラキス[3-(3,5-ジ-tert-ブチル-4-ヒドロキシフェニル)プロピオネート]	Pentaerythritol Tetrakis[3-(3,5-di-tert-butyl-4-hydroxyphenyl)propionate]	6683-19-8	D	> 95
R1-MD-173	2,2,4-トリメチル-1,3-ペンタジオールジイソブテラート	2,2,4-Trimethyl-1,3-pentanediol Diisobutyrate	6846-50-0	D	> 98.5
R1-MD-175	2,5-ビス(5-tert-ブチル-2-ペンソキサゾリル)チオフェン	2,5-Bis(5-tert-butyl-2-benzoxazolyl)thiophene	7128-64-5	C	> 97
R1-MD-177	蜜ロウ, 白色, ペレット	Bees Wax, White Pellets	8012-89-3	A	なし
R1-MD-178	カルナバワックス	Carnauba wax	8015-86-9	G	95
R1-MD-179	ポリエチレン	Polyethylene	9002-88-4	J	100
R1-MD-180	ヒドロキシプロピルメチルセルロース	Hydroxypropyl methylcellulose	9004-65-3	G	< 100
R1-MD-181	0.5w/v% メチルセルロース400溶液	0.5w/v% Methyl Cellulose 400 Solution	9004-67-5	A	0.5w/v%
R1-MD-183	ポリソルベート 20	Polysorbate 20	9005-64-5	G	>95
R1-MD-184	ポリソルベート 80	Polysorbate 80	9005-65-6	G	>95
R1-MD-185	ポリソルベート 60	Polysorbate 60	9005-67-8	G	100
R1-MD-186	ポリオキシエチレン(20)ソルビタントリオレート	Polyoxyethylene(20) Sorbitan Trioleate	9005-70-3	A	なし
R1-MD-187	ポリオキシエチレン(20)ソルビタントリステアレート	Polyoxyethylene(20) Sorbitan Tristearate(Tween® 65)	9005-71-4	C	なし
R1-MD-188	ナフチン酸亜鉛 (亜鉛 約8%)	Zinc Naphthenate (Zn ca. 8%)	12001-85-3	D	7.5-8.5 (as Zn)
R1-MD-189	ジアクリル酸1,6-ヘキサジオール	1,6-Hexanediol diacrylate	13048-33-4	G	99
R1-MD-190	ジメチルピリチオン	Zinc Pyrrithione	13463-41-7	D	> 98
R1-MD-191	2,2-アゾビス(2-メチルブチロニトリル)	2,2-Azobis(2-methylbutyronitrile)	13472-08-7	A	> 98
R1-MD-192	ステアリン酸コバルト(II)	Cobalt(II) Stearate	13586-84-0	A	7.5-9.5 (as Co)
R1-MD-193	アクリル酸2-イソシアトエチル	2-Isocyanatoethyl Acrylate	13641-96-8	C	> 97
R1-MD-194	3-アミノプロピルトリメチルシラン	3-Aminopropyltrimethoxysilane	13822-56-5	C	> 100
R1-MD-195	ジエチルジチオカルバミド酸亜鉛	Zinc Diethylthiocarbamate	14324-55-1	A	97
R1-MD-196	N,O-ジステアリン酸エタノールアミン	Ethanolamine N,O-Distearate	14351-40-7	C	> 97
R1-MD-197	アクリル酸亜鉛	Zinc acrylate	14643-87-9	G	< 100
R1-MD-198	ビス(2-エチルヘキサノ酸)酸化ジルコニウム(IV)・ミネラルスピリット溶液(Zr:12%)	Zirconium(IV) Bis(2-Ethylhexanoate) Oxide, Mineral Spirit Solution (Zr:12%)	22464-99-9	A	11.7-12.3
R1-MD-199	2(3)-tert-ブチル-4-メトキシフェノール	2(3)-tert-Butyl-4-methoxyphenol	25013-16-5	G	96
R1-MD-200	1-ドデカンチオール	1-Dodecanethiol	25103-58-6	A	98-105
R1-MD-201	フタル酸ジイソデシル	Diisodecyl Phthalate	26761-40-0	A	> 97
R1-MD-203	テトラキス[3-(4-ドデシルチオ)プロピオネート]ペンタエリトリール	Pentaerythritol Tetrakis[3-(dodecylthio)propionate]	29598-76-3	C	> 97
R1-MD-204	亜リン酸トリブチル(2,4-ジ-tert-ブチルフェニル)	Tri(2,4-di-tert-butylphenyl)phosphite	31570-04-4	K	98
R1-MD-205	D(-)ソルビトール	D(-)-Sorbitol	50-70-4	A	> 98
R1-MD-206	ジプロピレングリコールモノメチルエーテル(異性体混合物)	Dipropylene Glycol Monomethyl Ether(mixture of isomers)	34590-94-8	A	> 95
R1-MD-207	2-ブロモ-2-ブロモメチルグルタロニトリル	2-Bromo-2-bromomethylglutaronitrile	35691-65-7	F	99
R1-MD-208	イソシアヌル酸トリス(4-tert-ブチル-3-ヒドロキシ-2,6-ジメチルベンジル)	Tris(4-tert-butyl-3-hydroxy-2,6-dimethylbenzyl) isocyanurate	40601-76-1	F	98
R1-MD-209	2-ブロモ-2-ニトロ-1,3-プロパジオール	2-Bromo-2-nitro-1,3-propanediol	52-51-7	A	> 98
R1-MD-211	セバシン酸ビス(2,2,6,6-テトラメチル-4-ピペリジル)	Bis(2,2,6,6-tetramethyl-4-piperidyl) Sebacate	52829-07-9	C	> 97
R1-MD-212	グリセリン	Glycerol	56-81-5	A	> 99
R1-MD-213	ナフチン酸コバルト(コバルト 約8%)	Cobalt Naphthenate (Co ca. 8%)	61789-51-3	D	(Co ca. 8%)
R1-MD-214	尿素	urea	57-13-6	A	> 99
R1-MD-215	プロピレングリコール	Propylene Glycol	57-55-6	A	> 99
R1-MD-216	3,5-ビス-tert-ブチル-4-ヒドロキシ安息香酸ヘキサデシル	3,5-Di-tert-butyl-4-hydroxybenzoic acid hexadecyl ester	67845-93-6	F	98
R1-MD-217	ビタミンE, Natural	Vitamin E, Natural	59-02-9	L	97
R1-MD-218	トリブチリン	Tributyrin	60-01-05	A	> 97
R1-MD-219	2-(2H-ベンゾトリアゾール-2-イル)-4,6-ビス(1-メチル-1-フェニルエチル)フェノール	2-(2H-Benzotriazol-2-yl)-4,6-bis(1-methyl-1-phenylethyl)phenol	70321-86-7	H	98
R1-MD-220	2-ヒドロキシ-4-(2-ヒドロキシエトキシ)-2-メチルプロピオフェノン	2-Hydroxy-4-(2-hydroxyethoxy)-2-methylpropiophenone	106797-53-9	D	98
R1-MD-221	2-(4,6-ジフェニル-1,3,5-トリアジン-2-イル)-5-[(ヘキシルオキシ)フェノール]	2-(4,6-Diphenyl-1,3,5-triazine-2-yl)-5-[(hexyloxy)phenol]	147315-50-2	H	97
R1-MD-222	1-エチル-3-メチルイミダゾリウムエチル硫酸塩	1-Ethyl-3-methylimidazolium Ethyl Sulfate	342573-75-5	C	> 96
R1-MD-223	サリチル酸	salicylic acid	69-72-7	A	> 99.5
R1-MD-224	p-トルエンスルホンアミド	p-Toluenesulfonamide	70-55-3	A	> 98
R1-MD-225	ジクロロメタン	Dichloromethane	75-09-2	A	> 99.5
R1-MD-226	t-ブチルアルコール	t-Butyl Alcohol	75-65-0	A	> 99
R1-MD-227	2,2'-メチレンビス[6-(1-メチルシクロヘキシル)4-メチルフェノール]	2,2'-Methylenebis[6-(1-methylcyclohexyl)-4-methylpheno]l	77-62-3	C	> 95
R1-MD-228	O-アセチルクエン酸トリエチル	Triethyl O-Acetylcitrate	77-89-4	D	> 97
R1-MD-229	O-アセチルクエン酸トリブチル	Tributyl O-Acetylcitrate	77-90-7	A	> 95
R1-MD-230	クエン酸トリエチル	Triethyl Citrate	77-93-0	A	> 99
R1-MD-231	クエン酸トリブチル	Tributyl Citrate	77-94-1	D	> 98
R1-MD-232	10% テトラエチルアンモニウムヒドロキシド溶液	10% Tetraethylammonium Hydroxide Solution	77-98-5	A	10-11
R1-MD-233	1,1,1-トリス(ヒドロキシメチル)プロパン	1,1,1-Tris(hydroxymethyl)propane	77-99-6	A	> 97
R1-MD-234	トリエトキシビニルシラン	Triethoxyvinylsilane	78-08-0	D	98
R1-MD-235	オルトケイ酸テトラエチル	Tetraethyl Orthosilicate	78-10-4	A	> 95

*A: 富士フイルム和光純薬株式会社, B: Fluorochem Ltd., C: 富士フイルムフコケミカル(株), D: 東京化成工業株式会社, E: MP Biochemicals, F: Combi-Blocks Inc., G: Alfa Aesar, H: Toronto Research Chemicals Inc., I: Sigma, J: Scientific Polymer Products, Inc., K: STREM, L: LKT Laboratories, Inc.

別添 1 結果報告シート (GC-MS 用、一部)

結果報告シート (GC-MS)		機頭名
1. 化合物情報		
通し番号	235	
化合物名(和名)	オキシトリチロキシル	
分子番号	(No. R1-MD-235)	
化合物名(英名)	Tetraethyl Orthosilicate	
CAS No.	78-10-4	
分子量	208	
2. 測定条件		
機器情報	メーカー	
	製品名	
カラム情報		
カラム名	メーカー	
	製品名	
カラムサイズ	長さ(m)	
	内径(mm)	
	膜厚(µm)	
GC条件		
キャリアガス		
ガス流量	(µL)	
注入量	(µL)	
注入口温度	(°C)	
注入方式		
オーブ条件		
MS条件*1		
測定モード	EI or CI etc.	
イオン化エネルギー	(eV)	
イオンコレクタ温度	(°C)	
イオン源温度	(°C)	
チューニング法		
3. 検出条件		
保持時間	(min)	
測定質量範囲(scan)	(m/z)	
モニター(定量)イオン(SIM)	(m/z)	
モニターイオン以外の検出イオン	(m/z)	
定量下限値*2	(µg/ml)	#DIV/0!
4. 質量スペクトル		
		Conc.
5. スキャングラフ		
SCAN	Conc.	S/N
6. 特記事項		
7. 検量線		
SIM	Conc.	µg/mL
		S/N
検量線範囲		

別添3 公開データベース (例)

◎化合物基礎情報

番号*	R1-MD-1	CAS登録番号	78-40-0	構造 
組成式	C6H15O4P	分子量	182	
物質名	和名	りん酸トリエチル		
	英名	Triethyl Phosphate		

*番号は本研究における番号

◎ポジティブリスト情報*

通し 番号	区分別使用制限 (重量%)							特記事項
	区分1	区分2	区分3	区分4	区分5	区分6	区分7	
1628	0.5	—	0.05	—	—	—	0.05	

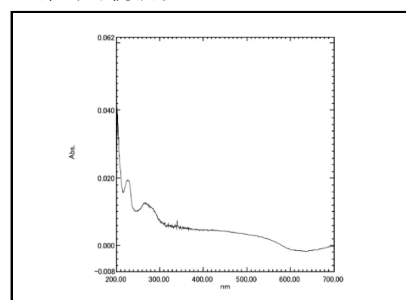
*令和4年3月時点

◎分析情報

OGC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
4	99	155	127	109	0.003
RI	特記情報				
1119 ± 4 (4)					

○紫外可視吸収スペクトル



OLC-MS/MS

パターン	ポジティブモード							ネガティブモード						
	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)	データ	プリカー サー イオン	プロダクトイオン				測定 限界 (ng)
			定量	定性						定量	定性			
A	5	183	99	155	81	127	1.1	0	N/A					N/A
B														
C														
特記 情報														

☆LC-MS/MS および GC/MS の表の説明

- ・パターン：装置メーカー間で検出されたイオンパターンが異なる場合に分けて示した。
- ・データ：元にしたデータ数
- ・イオン：単位は m/z
- ・測定限界 (ng)：測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3~5メーカーで求めた値の中で最も高い値を示した。
- ・RI：平均値 ± 標準偏差 (データ数)
- ・データが得られなかった場合やデータを示すのに不十分と判断した場合は「該当なし・適用不可」とし、N/A (not applicable) とした。
- ・GC-MS ではメタノールまたはアセトニトリル、LC-MS/MS ではアセトンまたはヘキサンに溶解しなかった場合は「不溶」とした。

別添 4 食品用器具・容器包装の PL 収載物質の分析情報 (続き)

通し 番号 ¹⁾	化合物名(和名)	CAS No.	GC-MS ²⁾				LC-MS/MS ²⁾					測定限界 (ng) ⁴⁾		
			検出イオン(m/z)				Retention index ³⁾	測定限界 (ng) ⁴⁾	検出イオン(m/z)					
			82	55	67	99			1581 ± 1 (3)	0.003	717		747	763
41	ジテトラリン酸1,6-ヘキサジオール	13048-33-4	82	55	67	99	1581 ± 1 (3)	0.003	+227	83	55	73	155	0.7
44	テトラリン酸亜鉛	14643-87-9	N/A				+224	152	207	108	71	N/A		
63	テジピン酸	124-04-9	100	87	110	128	N/A	N/A	+147	129	111	101	83	20
72	テジホピドラジド	1071-93-8	不溶				+175	143	115	111	125	30		
82	ジシクロヘキシルアミン亜硝酸塩	3129-91-7	不溶				+182	100	83	55	2			
97	N-オレオイルサルコニン	110-25-8	N/A				+354	90	44	121	0.06			
97	N-ドデカノイルサルコニン酸ナトリウム	137-16-6	不溶				+272	90	44	57	123	0.5		
103	O-アセチルケエン酸トリエチル	77-89-4	157	203	213	115	1737 ± 9 (4)	0.0005	+319	157	213	273	203	0.4
105	O-アセチルケエン酸トリアチル	77-90-7	185	259	129	157	2246 ± 9 (4)	0.0005	+403	129	185	139	157	0.5
118	アセラン酸ビス(2-エチルヘキシル)	103-24-2	171	283	152	189	2701 ± 5 (4)	0.001	+413	171	125	189	281	0.1
119	アジカルホンプラミド	123-77-3	不溶											
120	2,2'-アジビス(2-メチルブチロニトリル)	13472-08-7	107	135	83	68	1252 ± 3 (4)	0.008	+210	100	138	82	110	N/A
124	o-アミノベンズアミド	88-66-6	119	136	92	65	1543 ± 8 (4)	0.03	+137	120	92	65	9	
126	2-アミノエタノール	141-43-5	N/A				+62	44	45	27	30			
127	3-(2-アミノエチルアミノ)プロピルメチルジメチルアミン	3069-29-2	144	231	105	176	1569 ± 5 (3)	0.03	+207	158	143	105	126	N/A
138	3-アミノプロピルトリメチルアミン	13822-56-5	121	91	84	70	N/A	0.007	+180	116	148	114	91	N/A
140	3-アミノチル-3,5,5-トリメチルシクロヘキシルアミン(cis-, trans-混合物)	2855-13-2	N/A				+171	154	95	137	81	400		
145	4-アミノブチノール	80-46-6	135	107	164		1401 ± 3 (3)	N/A	-163	133	93			N/A
152	2-(アミノオキシ)エタノール	111-45-5	N/A				+103	59	41	85	N/A			
164	垂リン酸トリス(2,4-ジエチルフェニル)	31570-04-4	441	646	308	147	3416 ± 31 (4)	0.002						
165	垂リン酸トリフェニル	101-02-0	217	310	152	153	2282 ± 12 (4)	0.0004	+311	153	216	169	199	50
172	L(+)-アルギニン	74-79-3	不溶											
183	1-オクタノール	111-88-6	146	56	112		1131 ± 5 (4)	0.03*						
183	1-ドデカノール	112-55-0	202	168	111		1547 ± 7 (4)	0.007						
183	トドデカノール	25103-58-6	169	57	71	113	N/A	N/A						

別添 4 食品用器具・容器包装の PL 収載物質の分析情報 (続き)

通し 番号 ¹⁾	化合物名(和名)	CAS No.	GC-MS ²⁾				LC-MS/MS ²⁾						
			検出イオン(m/z)			Retention index ³⁾	測定限界 (ng) ⁴⁾	トリカーブ ⁵⁾		検出イオン(m/z)			測定限界 (ng) ⁴⁾
			120	138	92			64	N/A	N/A	93	65	
610	サリチル酸	69-72-7	120	138	92	64	N/A	N/A	N/A	93	65	75	N/A
612	サリチル酸フェニル	118-55-8	121	93	65		1763 ± 15 (3)	0.0008	+215	121	65	93	N/A
613	サリチル酸4-エチルフェニル	87-18-3	121	135	270		2128 ± 11 (4)	0.06	+271	121	215	57	N/A
614	サリチル酸メチル	119-36-8	120	152	92		1200 ± 6 (4)	0.001	+153	121		93	65
651	1,8-ジテラピシクロ[5.4.0]ウンデカ-7-エン	6674-22-2	151	123	96	137	1441 ± 15 (4)	0.5	+153	96	125	111	69
652	ジテラピシクロ[5.4.0]ウンデカ-7-エン	2873-97-4	112	126	154	58	1243 ± 3 (4)	0.008	+170	99	72	112	58
656	ジテラピシクロ	461-58-5					N/A		+85	68	43		30
658	2-シアノ-3,3-ジフェニルアクリル酸2-エチルヘキシル	6197-30-4	204	232	250	360	2667 ± 7 (4)	0.004	+362	250	232	204	176
660	ペンタテラピシクロ	91-76-9	187	103	144		2039 ± 12 (4)	0.002	+188	104	77	85	146
662	2,5-ジ- <i>tert</i> -ブチルピロキノン	79-74-3	221	250			1968 ± 4 (4)	0.009	-249	219	149	191	30
672	2,2'-イミジエタノール	111-42-2					N/A		+106	88	70	45	1
674	N,N-ジエチルエタノールアミン	100-37-8	86	58	102	117	898 ± 3 (3)	N/A	+118	100	72	74	58
675	ジエチルジチオカルバミド酸亜鉛	14324-55-1					不溶						400
676	ジエチルンダリコール	111-46-6	45	75			964 ± 4 (4)	0.2*	+124	107	45	89	400
680	2-(2-メトキシエトキシ)エタノール	111-77-3	59	45	90		935 ± 2 (4)	0.04	+121	59	89	103	7
692	ジグリセリン	627-82-7					N/A		+167	75	131	119	30
710	N,O-ジステアリルジ酸エタノールアミン	14351-40-7					不溶						N/A
716	2-メチル-2,4-ペンタンジオール	107-41-5	59	85	103		926 ± 4 (4)	0.06	+119	101	57	83	N/A
717	2,2'-ジヒドロキシ-4-オキシペンゾフェノン	131-53-3	244	227	121		2181 ± 21 (4)	0.03	+245	121	151	93	4
723	1,3-ジフェニル-2-チオ尿素	102-08-9					N/A		+229	94	136	77	6
724	2-(4,6-ジフェニル-1,3,5-トリアジン-2-イル)-5-(4-ヘキシル)オキシフェノール	147315-50-2	425	341	313	135	4009 ± 12 (3)	0.01					20
727	2-(ジフェニルアミノ)エタノール	102-81-8	142	130	100	88	1250 ± 2 (4)	0.05	+174	118	100	57	156
729	2,6-ジ- <i>tert</i> -ブチル-4-エチルフェノール	4130-42-1	219	191	234	159	1561 ± 3 (4)	0.0004	-233	187	218	202	159
730	ジフェニルジチオカルバミド酸亜鉛	136-23-2					N/A		+472	172	116	57	70
									+473				

別添 4 食品用器具・容器包装の PL 収載物質の分析情報 (続き)

通し 番号 ¹⁾	化合物名 (和名)	CAS No.	GC-MS ²⁾					LC-MS/MS ²⁾					測定限界 (ng) ⁴⁾	
			検出イオン (m/z)					検出イオン (m/z)						
			Retention index ³⁾	測定限界 (ng) ⁴⁾	トリカーサー ⁵⁾	クロダクト	Retention index ³⁾	測定限界 (ng) ⁴⁾	トリカーサー ⁵⁾	クロダクト				
734	2,4-ジヒドロキシフェニール	96-76-4	191	206	163	1511 ± 2 (4)	0.0009	-205	189	149	125		N/A	
								-205	189	151	130	167	N/A	
								-205	189	121	113		N/A	
736	2,6-ジヒドロキシ-4-メチルフェニール	128-37-0	205	220	177	145	1511 ± 4 (4)	0.0006	-219	203	86		N/A	
738	ジクロロペンタグリコールモノメチルエーテル (異性体混合物)	34590-94-8	103	73	59	45	1000 ± 2 (4)	0.04	+149	73	131	59	80	
									+284	71	97	209	N/A	
740	2-クロロ-2-クロロメチルグルタロニトリル	35691-65-7	187	185	106	66	1518 ± 8 (4)	0.4	+284	32	29		N/A	
									+284	18	723		N/A	
745	オレフィン ¹⁾	301-02-0	59	72	126	112	2362 ± 11 (4)	0.05	+282	97	83	265	247	4
750	ポリソルベート 20 ⁶⁾	9005-64-5	N/A					+605	227	133	89		N/A	
			N/A					+1244	227	287	177		N/A	
750	ポリソルベート 80 ⁶⁾	9005-65-6	N/A					+629	283	133	89	239	N/A	
			N/A					+689	309	133	89	177	N/A	
			N/A					+1326	283	177	415		N/A	
			N/A					+562	133	283	89	177	N/A	
			N/A					+703	283	133	89	177	N/A	
750	ポリソルベート 60 ⁶⁾	9005-67-8	N/A					+1328	311	287	331	177	N/A	
			N/A					+826	309	133	195		N/A	
750	ポリオキシエチレン(20)ソルビタートポリオレート ⁶⁾	9005-70-3	N/A					+760	309	133	265	277	N/A	
			N/A					+1855	309	441			N/A	
			N/A					+653	311	283	133	177	N/A	
			N/A					+654	311	133	177		N/A	
			N/A					+1861	311	443			N/A	
753	グリセロール三酢酸	102-76-1	103	145	43		1338 ± 8 (4)	0.001	+219	159	117	43	99	2

別添 4 食品用器具・容器包装の PL 収載物質の分析情報 (続き)

通し 番号 ¹⁾	化合物名(和名)	CAS No.	GC-MS ²⁾				LC-MS/MS ²⁾							
			検出イオン(m/z)		Retention index ³⁾	測定限界 (ng) ⁴⁾	フリッカー ⁵⁾	検出イオン(m/z)			測定限界 (ng) ⁴⁾			
			1)	2)				1)	2)	3)				
753	トリチリン	60-01-5	<u>71</u>	201	143	131	1837 ± 5 (4)	0.0007	+303	<u>215</u>	71	43		0.5
761	リノール酸メチル	112-63-0	<u>263</u>	67	81	294	2094 ± 3 (4)	0.0008	+295	<u>263</u>	245	221		300
761	リノレン酸メチル、混合物	301-00-8	<u>79</u>	95	121	222	2098 ± 8 (4)	0.01	+293	<u>109</u>	123	261	243	20
764	ステアリン酸メチル	112-61-8	<u>74</u>	<u>87</u>	143	255	2126 ± 2 (4)	0.001	+299	<u>43</u>	57	103	117	N/A
775	N,N-ジメチルアクリルアミド	2680-03-7	<u>98</u>	55	72	58	943 ± 2 (4)	N/A	+100	<u>55</u>	46	72	58	20
778	2,ジメチルアミノエタノール	108-01-0					N/A		+90	<u>72</u>	45	57	70	3
796	チカメチルシクロペンタンキサン	541-02-6	<u>355</u>	<u>267</u>	73		1135 ± 12 (4)	0.0008						
796	オクタメチルシクロトランロキサン	556-67-2	<u>281</u>	265	249	193	984 ± 9 (4)	0.0008						
808	3,5-ジメチル-1-ヘキシン-3-オール	107-54-0	<u>69</u>	111	43	84	N/A	0.002	+144	<u>127</u>	109	67		N/A
809	N,N-ジメチルベンジルアミン	103-83-3	<u>135</u>	91	58		1045 ± 5 (4)	0.02	+136	<u>91</u>	65	44		70
853	10% トロラエチルアソモニウムピロキシド溶液	77-98-5					N/A		+130	<u>86</u>	100	58	101	3
920	ステアリン酸コバルト(II)	13586-84-0					不溶							
932	5-アルホイタル酸ジメチルトリウム	3965-55-7					N/A		+273	<u>150</u>	209	214	80	N/A
947	セビン酸ジメチル	109-43-3	<u>185</u>	241	199		2170 ± 3 (4)	0.0007	+315	<u>185</u>	241	139	121	2
948	セビン酸ピエス(2,2,6,6-テトラメチル-4-ピペリジン)	52829-07-9					N/A		+481	<u>342</u>	140	123	84	0.3
958	D(-)ソルビトール	50-70-4					不溶		-181	<u>89</u>	101	119	131	N/A
972	シクロヘキサン	110-82-7					N/A							
982	2-(4-チアソリル)ベンゾイミダゾール	148-79-8	<u>201</u>	<u>174</u>	129		2092 ± 28 (4)	0.02	+202	<u>175</u>	131	92	65	2
984	チオシアニ酸トリウム	540-72-7					N/A	N/A	-58	<u>26</u>	58			N/A
985	3,3-チオジプロピオン酸	111-17-1	<u>178</u>	132	114		N/A	N/A	+196	<u>161</u>	179	89	143	N/A
988	4,4'-チオピエス(2,4-チル-5-メチルフェニル)	96-69-5	358	343	136		2785 ± 6 (3)	0.004	+359	<u>195</u>	247	139	303	N/A
									-357	<u>194</u>	179	163		3
1006	ネトキサス[3-(4'-チンシルチオ)プロピオン酸]ベンタエリトール	29598-76-3					N/A							
1008	ベンタエリトールネトキサス[3-(3,5-ジメチル-4-ピロキソニル)プロピオン酸]	6683-19-8					N/A		+1195	<u>219</u>	563	163	619	0.1
1009	1,1',1'',1'''-(エチレンジニトリロ)ネトキサス(2-プロパノール)	102-60-3	<u>146</u>	160			N/A	N/A	+293	<u>160</u>	142	102	84	2

別添 4 食品用器具・容器包装の PL 収載物質の分析情報 (続き)

通し 番号 ¹⁾	化合物名 (和名)	CAS No.	GC-MS ²⁾				LC-MS/MS ²⁾							
			検出イオン (m/z)				Retention index ³⁾	測定限界 (ng) ⁴⁾	検出イオン (m/z)					
			トリカーサー ⁵⁾		プロダクト				測定限界 (ng) ⁴⁾					
1019	2,4,7,9-テトラオキサフル-5-フェンチン-4,7-ジオール	126-86-3	109	151	43	169	1408 ± 1 (4)	0.001		+244	153	191	135	209
1023	α-テルピネオール	98-55-5	136	93	121	136	1201 ± 8 (4)	0.002	+155	137	81			N/A
1024	ピタミル	59-02-9	430	165	205	121	3143 ± 10 (4)	0.05	+431	165	137	111	97	0.7
1050	トリテトリル酸ベンタエリスリトール	3524-68-3	55	127	81	196	1938 ± 2 (3)	0.004*	+299	227	83	125	281	2
1053	トリテトリル酸ベンタエリスリトール	288-88-0	69	42	70		963 ± 6 (4)	0.04	+70	43	28	42		60
1054	1,2,4,4-トリテトリル	122-20-3	146	158	88	98	1435 ± 10 (3)	0.4	+192	174	98	156	116	2
1056	トリテトリル酸ベンタエリスリトール	112-27-6	89	45	75	58	1223 ± 1 (4)	N/A	+151	89	45	133	107	7
1061	3,6-ジオキサ-1,8-オクタジオール	112-24-3	N/A					N/A						
1064	トリエチレンチトラミン(エチレンチトラミン混合物)	78-08-0	145	135	175	163	951 ± 4 (4)	0.005	+191	145	107	135	163	N/A
1067	トリエチレンチトラミン	603-36-1	198	154	352	275	2289 ± 22 (4)	0.0009	+370	155	197	77		N/A
1080	トリエチレンチトラミン	603-35-0	262	183	108		2180 ± 26 (3)	0.0006	+263	183	152	185		N/A
1081	トリエチレンチトラミン	1709-70-2	N/A					N/A						
1086	2,4,6-トリメチル-3,5-ジメチル-4-ヒドロキシベンジルメチレン	108-67-8	105	120	91		973 ± 6 (4)	0.002	+135	99	81	117	69	2
1089	メチレン	77-99-6	86	57	71	55	1266 ± 8 (4)	0.2	+197	133	165			N/A
1093	1,1,1-トリメチル-2-ヒドロキシエチルアルコール	4420-74-0	164	121	91	123	1195 ± 6 (4)	0.006	+393	121	361	163	197	N/A
1096	3-メチルカトロールトリメチレン	1760-24-3	N/A					N/A						
1098	3-(2-アミノエチル)アミノプロピルトリメチレン	2530-83-8	121	147	91	107	1451 ± 2 (4)	0.0008	+237	205	133	173	163	9
1099	3-ジメチルオキシプロピルトリメチレン	108-88-3	91	65	51		N/A	N/A	+237	133	107			N/A
1103	トルエン	12001-85-3	N/A					N/A						
1121	ナフテン酸亜鉛 (亜鉛 約8%)	61789-51-3	N/A					不溶						
1122	ナフテン酸コバルト (コバルト 約8%)	1336-93-2	N/A					不溶						
1125	ナフテン酸マンガン (Mn 約6%)	57-13-6	60	44			N/A	N/A	+61	44	29	43		20
1138	尿素													

別添 4 食品用器具・容器包装の PL 収載物質の分析情報 (続き)

通し 番号 ¹⁾	化合物名 (和名)	CAS No.	GC-MS ²⁾					LC-MS/MS ²⁾						
			検出イオン(m/z)		Retention index ³⁾	測定限界 (ng) ⁴⁾	検出イオン(m/z)		測定限界 (ng) ⁴⁾					
			152	151			123	109		1402 ± 9 (4)	0.007	トリカーサー ⁵⁾	137	136
1156	パニリン	121-33-5	152	151	123	109	1402 ± 9 (4)	0.007	+153	93	125	65	110	90
1210	4,4'-ジヒドロキシ-2,2'-ジフェニルプロパン	80-05-7	213	228	119		2191 ± 11 (3)	0.0007	-227	212	133	211	93	200
1216	2,5-ビス(6-tertブチル-2-ベンゾキソリル)チオフェン	7128-64-5	415	200	267		3895 ± 26 (4)	0.01						
1224	4-ヒドロキシ安息香酸プロピル	94-13-3	121	138	180	93	1625 ± 1 (3)	0.0004	-179	92	136	137	93	N/A
1225	p-ヒドロキシ安息香酸エチル	120-47-8	121	138	166	93	1521 ± 5 (4)	0.005	-165	92	137	65		20
1226	4-ヒドロキシ安息香酸ブチル	94-26-8	121	138	194	93	1730 ± 3 (3)	0.0008	-193	92	137	136	93	N/A
1227	p-ヒドロキシ安息香酸メチル	99-76-3	121	152	93	65	1454 ± 0 (3)	0.01	-151	92	136	121		N/A
1228	エチロキシ酸	2809-21-4					N/A							
1236	2-ヒドロキシ-4-(オクチルオキシ)ベンゾフェノン	1843-05-6	213	326	137	105	2785 ± 22 (4)	0.01	+327	137	105	215	77	0.5
1237	3,5-ジ-tertブチル-4-ヒドロキシ安息香酸2,4-ジ-tertブチルフェニル	4221-80-1	233	217	175	190	2894 ± 4 (3)	0.0007	+439	233	383	217	149	0.7
1239	3,5-ビス-tertブチル-4-ヒドロキシ安息香酸ヘキサデシル	67845-93-6	459	474	235	250	3303 ± 4 (4)	0.02	+475	251	195	139	57	0.3
1242	3-(3,5-ジ-tertブチル-4-ヒドロキシフェニル)プロピオン酸オクタデシル	2082-79-3	531	516	219	147	3615 ± 18 (4)	0.02	+548	149	419	167		N/A
1253	2-ヒドロキシ-4-(2-ヒドロキシエトキシ)2-メチルプロピオフェノン	106797-53-9	165	121	93	181	1915 ± 10 (4)	0.04	+225	179	135	107	77	0.5
1254	2-ヒドロキシ-2-フェニルアセトフェノン	119-53-9	107	105	77		1830 ± 14 (3)	0.01	+213	195	167	165	152	3
1255	2-(5-クロロ-2-ベンゾトリアリル)6-tertブチル-プロピル	3886-11-5	300	315	119	272	2571 ± 24 (4)	0.001	+316	260	107	154	57	N/A
1260	ヒドロキシプロピルメチルセルロース	9004-65-3					不溶							
1267	2-(2H-ベンゾトリアリル-2-(1H)-p-トルゾール	2440-22-4	225	168	154	196	2090 ± 24 (4)	0.002	+226	120	107	183	77	6
1269	2-ヒドロキシ-4-tertベンゾフェノン	131-57-7	227	151	77	105	2048 ± 20 (4)	0.009	+229	151	105	77	95	4
1272	1-フェニル-2-ピロリドン	88-12-0	111	56	82		1105 ± 5 (4)	0.004	+112	69	84	41	56	2
1280	ジソクサリチオン	13463-41-7					不溶							
1286	2-フェニルイソブチール	948-65-2	193	165	89	96	2078 ± 24 (4)	0.005	+194	167	152	116	166	3
1289	2-フェニルフェニール	90-43-7	120	141	115	169	1531 ± 13 (3)	0.0002	-169	115	141	93	65	N/A

別添 4 食品用器具・容器包装の PL 収載物質の分析情報 (続き)

通し 番号 ¹⁾	化合物名 (和名)	CAS No.	GC/MS ²⁾					LC/MS/MS ²⁾						
			検出イオン (m/z)			Retention index ³⁾	測定限界 (ng) ⁴⁾	検出イオン (m/z)			測定限界 (ng) ⁴⁾			
			グリカーサ ⁵⁾	プロダクト	グリカーサ ⁵⁾			プロダクト						
1298	フェリチジン	92-84-2	199	167	154	139	2087 ± 26 (3)	0.0003	+199 (200)	167 (166)	154 (155)	139 (140)	127 (126)	30
1304	トコチラルコロール	75-65-0	N/A					N/A						
1306	2-タタノ	78-93-3	N/A					N/A						
1310	タタル酸ジイソデシル	26761-40-0	307	149	167	141	N/A	0.1	+447	149	141	71	289	1
1312	タタル酸ジエチル	84-66-2	149	177	105		1595 ± 3 (4)	0.0004	+223	149	177	121	93	20
1313	タタル酸ジ-n-オクタチル	117-84-0	229	149	167		2735 ± 6 (4)	0.002	+391	149	261	121	93	6
1314	タタル酸ジシクロヘキシル	84-61-7	149	167	249		2544 ± 14 (3)	0.0007	+331	149	249	167	231	0.03
1316	タタル酸ジブチル	84-74-2	149	223	205		1964 ± 5 (4)	0.0004	+279	149	205	121	93	4
1317	タタル酸ジヘキシル	84-75-3	149	251	233		2348 ± 5 (4)	0.0005	+335	149	233	121	93	3
1318	タタル酸ジヘプタチル	3648-21-3	149	265	247	104	2337 ± 10 (4)	0.007	+363	149	247	121	57	2
1320	タタル酸ドデカチル(2-エチルヘキシル)	117-81-7	149	167	279		2542 ± 3 (4)	0.006	+391	149	167	279	113	20
1322	タタル酸ペンタデシルチル	85-66-7	149	91	206		2363 ± 9 (4)	0.001	+313	91	149	205	239	6
1323	チタルタリルチルグリコラート	85-70-1	149	263	133	207	2313 ± 6 (4)	0.001	+337	149	263	205	207	2
1329	1,4-ジオクタジオール	110-63-4	71	57	42	44	947 ± 4 (4)	0.07	+91	73	55	43	200	
1334	4,4'-ジチリデンビス(2-トコチル-5-メチルフェノール)	85-60-9	339	148	177	382	2695 ± 7 (3)	0.01	+384	219	177	163		0.3
1338	4-トコチルピロカチロール	98-29-3	151	166	123		1509 ± 1 (4)	0.08	-165	149	133	121	108	N/A
1341	2(3)-トコチル-4-メチルフェノール	25013-16-5	165	180	137	150	1488 ± 3 (4)	0.0008	-179	164				N/A
1343	トコチルヒドロキノン	1948-33-0	123	151	166	77	1549 ± 6 (4)	0.009	-165	108	149	135	121	N/A
1356	2-トコチルエタノール	111-76-2	57	87	45	75	905 ± 1 (4)	0.05	+119	53	57	45		N/A
1357	チタル酸	110-17-8	98	45			N/A	N/A	-115	71				70
1359	チタル酸ジブチル	105-75-9	155	117	173		1583 ± 1 (4)	0.001	+229	117	99	145	89	N/A
1360	チタル酸ビス(2-エチルヘキシル)	141-02-6	112	100	211	70	2222 ± 5 (4)	0.007	+358	229	71	113	99	N/A
1366	チロピリンチリコロール	57-55-6	N/A					N/A						
1368	1-メチル-2-チロピリン	107-98-2	N/A					N/A						

別添 4 食品用器具・容器包装の PL 収載物質の分析情報 (続き)

通し 番号 ¹⁾	化合物名(和名)	CAS No.	GC-MS ²⁾				LC-MS/MS ²⁾								
			検出イオン(m/z)		Retention index ³⁾	測定限界 (ng) ⁴⁾	リカーサー ⁵⁾	検出イオン(m/z)			測定限界 (ng) ⁴⁾				
								プロダクト							
1373	2-フロモ-2-ニトロ-1,3-ジオロベンジオール	52-51-7	132	169	107	123	1259 ± 8 (4)	0.6		-246	170	216	127		N/A
										-244	168	214	125		N/A
										-198	79	73			N/A
1376	1-ヘキサデセン	629-73-2	83	97	111	125	1591 ± 6 (4)	0.0006							N/A
1379	1,1,1,3,3,3-ヘキサメチルジシロザン	999-97-3	146	130	100		N/A	N/A							N/A
1382	ヘキサメチレンテトラミン	100-97-0	140	112	85		1240 ± 14 (4)	0.02		+141	112	85	42	98	3
1392	ベンジルトルコール	100-51-6	108	79	77		1038 ± 2 (4)	0.01		+91	65	73			N/A
1393	p-ベンジルオキシフェノール	103-16-2	91	200	65		1892 ± 10 (4)	0.002							N/A
1396	ベンズアルデヒド	100-52-7	106	105	72		966 ± 6 (4)	0.04		+107	79	72			N/A
1397	1,2-ベンジジチフェニル-3(2H)-オン	2634-33-5	151	96	123	108	1553 ± 15 (4)	0.1		+152	109	134	105	77	20
1400	2-ベンジチフェニルチオ酢酸	6295-57-4					N/A			+226	180	136	167	208	3
1401	1H-ベンゾトリフェニル	95-14-7	119	91	64		1470 ± 4 (3)	0.006		+120	65	92			6
1402	2-(2H-ベンゾトリフェニル-2-イル)4(1,1,3,3-チオチオチル)フェノール	3147-75-9	252	323	105	224	2598 ± 27 (4)	0.002		+324	212	57	92	134	1
1403	2-(2H-ベンゾトリフェニル-2-イル)4,6-ビス(1-メチル-1-フェニルエチル)フェノール	70321-86-7	432	447	342	356	3629 ± 12 (4)	0.01		+448	370	119	292	91	0.1
1408	ベンタエリトール	115-77-5					不溶			+137	119	71	101		N/A
1429	ポリエチレン	9002-88-4					不溶								
1437	アルコール	585-88-6					不溶								
1446	ラレイン酸ジメチル	999-21-3	99	139	82	54	1319 ± 2 (4)	0.03		+197	139	41	81	90	2
1451	マロン酸	141-82-2					N/A			-103	59	41			N/A
1455	蜜ろう, 白色, ヘリット	8012-89-3					不溶								
1456	ピロキソント酸無水物	89-32-7	174	102	74		1773 ± 1 (3)	0.2		+283	251	207	221		N/A
1459	無水マレイン酸	108-31-6	54	98	44		N/A	500		+99	71	81	45	53	500
1465	メタクリル酸グリンジル	106-91-2	69	41	56		1067 ± 1 (4)	0.007		+143	69	87	41	125	300
1471	ニメタクリル酸1,3-ジオクソール	1189-08-8	69	141	87	95	1434 ± 2 (4)	0.001		+227	141	87	55	69	3
1474	メタクリル酸メチル, モノマ	80-62-6					N/A			+101	73	69			N/A

別添 4 食品用器具・容器包装の PL 収載物質の分析情報 (続き)

通し 番号 ^{*1}	化合物名 (和名)	CAS No.	GC-MS ^{*2}				LC-MS/MS ^{*2}							
			検出イオン (m/z)			Retention Index ^{*3}	測定限界 (ng) ^{*4}	検出イオン (m/z)		測定限界 (ng) ^{*4}				
			トリカーサー ^{*5}	プロダクト	トリカーサー ^{*5}			プロダクト						
1476	メタンサルホニル酸ナトリウム	2386-57-4	不溶				80	64			N/A			
1478	2-(メチルアミノ)エタノール	109-83-1	N/A				58	45	56		4			
1479	2-メチル-4-ヒドロキシピリン-3-オン, 50% aqueous solution	2682-20-4	115	87	58	57	1174 ± 10 (3)	0.01	+116	101	71	85	58	200
1480	4-メチル-2-ピリタロン	108-10-1	N/A				52							N/A
1481	2-メチルイミダゾール	693-98-1	82	41			1005 ± 1 (3)	0.07	+83	42	56	68		20
1490	0.5M/1% メチルセルロース400溶液	9004-67-5	N/A				N/A							
1492	メチルヒドロキノン	95-71-6	124	95	107		1342 ± 1 (3)	0.001	-123	111				N/A
1499	2-メチルベンゼンサルホニル酸ナトリウム	88-19-7	90	106	171	137	1636 ± 7 (3)	0.0006	+172	91	155	65		200
1500	p-トルエンサルホニル酸ナトリウム	70-55-3	171	155	91	107	1674 ± 9 (4)	0.01	+172	155	91	65		2
1505	ジチオシアン酸メチルン	6317-18-6	72	130	45	58	1273 ± 4 (4)	0.03		N/A				
1506	2,2'-メチレンジス(6-ヒドロキシ-4-エチルピロエーテル)	88-24-4	175	191	368	175	2517 ± 7 (4)	0.007	+386	191	257	135	313	0.2
1508	4,4'-メチレンジス(2,6-ジヒドロピロエーテル)	118-82-1	409	424	367	219	2653 ± 7 (4)	0.0009	+442	219	163	203	147	0.3
1514	2,2'-メチレンジス[6-(1-メチルピクロヘキシル)4-メチルピロエーテル]	77-62-3	420	217	324	204	3286 ± 17 (4)	0.02	+421	217	121	229		0.01
1516	2,2'-メチレンジス(6-ヒドロキシ-4-メチルピロエーテル)	119-47-1	177	161	340	149	N/A	N/A	+358	177	285	229	121	N/A
1518	p-ホキシフェノール	150-76-5	109	124	81	53	1215 ± 3 (4)	0.001		N/A				
1521	メラミン	108-78-1	不溶				不溶							
1524	2-メルカプトベンゾチアゾール重鉛	155-04-4	不溶				不溶							
1550	ヨードアセトナトリウム	144-48-9	185	127	58	142	1123 ± 7 (3)	0.1	+186	59	43			2000
1611	リン酸2-エチルヘキシルジエニル	1241-94-7	251	170	94	362	2431 ± 11 (4)	0.003	+363	251	77	215	152	1
1628	リン酸トリエチル	78-40-0	99	155	127	109	1119 ± 4 (4)	1	+183	99	155	81	127	1
1629	トリス(2-エチルヘキシル)ホスファート	78-42-2	99	133	211	71	2458 ± 14 (4)	0.0008	+435	99	113	211	323	0.6
1633	リン酸トリドリル	1330-78-5	368	243	165	261	2674 ± 20 (3)	0.003	+369	91	165	243	196	0.7
1635	リン酸トリブチル	126-73-8	99	155	211	125	1641 ± 1 (4)	0.0007	+267	99	155	211	81	1
1636	リン酸トリスチル	512-56-1	110	140	79	95	930 ± 2 (4)	0.002	+141	109	79	95		4

別添 4 食品用器具・容器包装の PL 収載物質の分析情報 (続き)

通し 番号 ^{*1}	化合物名 (和名)	CAS No.	GC-MS ^{*2}			LC-MS/MS ^{*2}					
			検出イオン (m/z)	Retention index ^{*3}	測定限界 (ng) ^{*4}	検出イオン (m/z)				測定限界 (ng) ^{*4}	
						フリッカーサー ^{*5}	106	309	88		70
無し	N,N-ジエタノールオレイン酸アミド	93-83-4		N/A		+370	106	309	88	70	2
無し	コハク酸ジヒドРАЗド	4146-43-4		不溶							N/A
無し	アクリル酸2-インブチルエチル	13641-96-8		N/A							N/A
無し	ジクロロメタン	75-09-2		N/A							N/A

*1: 令和4年3月時点での通し番号

*2: 下線が定量イオン、斜体は検出されない可能性があるイオンを示した。

*3: 平均値 ± SD (データ数)

*4: 測定限界は各測定法において標準溶液を注入したときの S/N=10 相当の値であり、3-5-メーカーの機種で求めた値の中で最も高い値を示した。

*5: +Oはポジティブモード、-Oはネガティブモードでの結果を示している。また、*酸アミンを移動相に使用する場合、ポジティブモードのフリッカーサーイオンは [M+NH4]⁺ で検出される場合もある。

*6: ポリマーのためフリッカーサーイオンは他にも複数検出される。プロダクトイオンは共通のものが多い。