

<その1>ポジティブリスト収載物質の分析情報の収集

研究分担者	藤原 恒司	国立医薬品食品衛生研究所
研究代表者	六鹿 元雄	国立医薬品食品衛生研究所
研究協力者	市川 千種	株式会社島津製作所
研究協力者	緒方 幸恵	株式会社エービー・サイエックス
研究協力者	小林 竜太	日本ウォーターズ株式会社
研究協力者	野上 知花	アジレント・テクノロジー株式会社
研究協力者	濱坂 友子	サーモフィッシャーサイエンティフィック株式会社

A. 研究目的

平成30年6月の改正食品衛生法の公布により、令和2年6月に食品用器具・容器包装の材質である合成樹脂について、ポジティブリスト（PL）制度が導入された。このPL制度における経過措置は令和7年5月末に終了し、同年6月より完全施行される。完全施行時において、第2表に収載される添加剤は840物質となる予定であるが、多くの物質については、物質の同定や確認を目的とした分析法が十分に整備されているとはいえない。そこで我々はPL制度を運用する際の原材料および製品の検査・監視等に資することを目的として、PL制度に関連する化学物質の分析に関する情報を収集してきた¹⁻⁵⁾。これまでにGC/MS、ヘッドスペースGC/MS、およびLC/MS/MSを用いて定性・定量を行うための保持時間、マススペクトル等の情報を収集した。また、GC/MSまたはLC-MS/MS装置を販売している各種分析メーカーの協力のもと、PL収載物質のうち228物質を対象として、約150種の物質について保持時間、リテンションインデックス、マススペクトル、紫外可視吸収スペクトル等の情報を収集した。さらに、GC/MSについては昨今のヘリウム不足を考慮し、48物質について水素キャリアによる分析を別途検討した。そこで今年度はPL収載物質のうち、分析情報が未収集

の80物質を対象としてLC/MS/MSによる保持時間、マススペクトル等の情報を収集した。

B. 研究方法

1. 参加メーカー

測定はアジレント・テクノロジー株式会社、株式会社エービー・サイエックス、サーモフィッシャーサイエンティフィック株式会社、株式会社島津製作所および日本ウォーターズ株式会社（五十音順）の5社にて行った。

2. 試薬等

本研究で対象とした80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1に示した。これら標準品のメタノール溶液（10 µg/mL）を調製して、各メーカーに配布した。分析に用いる試薬は、各メーカーが通常業務において使用するものを用いた。

3. LC-MS/MSの測定

1) 測定溶液の調製

各標準品のメタノール溶液（10 mg/mL）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。

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 5mM ギ酸アンモニウム/水溶液

B 液 5mM 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プロダクトイオンスペクトル、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。

C. 研修結果および考察

1. 対象物質

PL 収載物質のうち、LC/MS/MS による分析情報が未収集であり、かつ、メタノールに可溶性 80 物質を選択した (表 1)。

2. 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 3. 3) 測定条件** に示した。

3. 測定結果

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)

報告されたデータのうち、各全てのメーカーからポジティブもしくはネガティブイオンでマススペクトルが取得できたと報告されたのは 18 物質であり、少なくとも 1 社からマススペクトルが取得できたと報告されたのは 63 物質であった。これらのうち、6 物質についてはポジティブ

イオンとネガティブイオンの両方が報告されたが、52物質はポジティブイオンのみ、5物質はネガティブイオンのみであった。また、7物質（通し番号：118b、149、156、163a、163b、174a、347）は重合体であり、いずれも1社以上から重合体に由来すると考えられるポジティブイオンが報告された。重合体以外のポジティブイオンについては、19物質でプロトン付加体とアンモニウム付加体の両方が報告されたが、24物質はプロトン付加体のみ、3物質はアンモニウムイオン付加体のみが報告された。一方、エタノール（90）、エチレングリコール（106）、クエン酸（261）やテトラヒドロフラン（477）といった分析カラムに保持されにくい物質や、高級アルコール（390a～390h）等の17物質は、マスペクトルが得られなかった。

2) 定量下限値

ポジティブもしくはネガティブイオンでマスペクトルが取得できた63物質のうち、定量下限値が報告された物質は62物質であった。このうち、アセチルアセトン（21）、2,5-ジ-tert-ブチルヒドロキノン（368）、酒石酸（411）は、報告された定量下限値が1000 ng以上であり、いずれも1社のみでの報告であったことから、今回の条件では検出が困難と考えられた。一方、イソソルビド（82）、エトキシ化処理されたソルビタンのパルミチン酸のエステル（149）、エトキシ化処理された4-tert-オクチルフェノール（174a）、L-グルタミン酸（275）、グルタル酸ジメチル（277）、N,N-ジエチル-アニリン（329）、N,N-ジメチル-シクロヘキシルアミン（399）、2,5-ジメチル-2,5-ビス（tert-ブチルペルオキシ）ヘキサシ（405）、トリエチルアミン（503）の9物質は、メーカー間で定量下限値に差がみられた。これらは装置や測定条件によって検出感度が大きく変わると考えられた。本研究における測定条件は物質ごとに最適化された

ものではなく、広範の物質を網羅的に測定するための条件であるため、定量下限値は参考値となる。

3. 分析情報の整理

得られた分析情報は化合物毎に化合物基礎情報をまとめ、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2）。各情報の項目は以下の通りとした。

○化合物基礎情報

- ・本研究における化合物番号
- ・CAS No.
- ・組成式
- ・分子量
- ・物質名（和名・英名）
- ・構造式（重合体等、不明の場合は「不明」と記載した）

○PL規制情報

- ・通し番号
- ・区分別使用制限
- ・特記事項

ただし、いずれも令和5年3月時点のもの。

○分析情報

- ・プリカーサーイオン (m/z)
- ・プロダクトイオン (m/z)：定量イオン1つ、定性イオン最大3つ
- ・定量下限値 (ng)：有効数字1桁
- ・特記事項

また、令和3年度の厚生労働科学研究⁴⁾に引き続き、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3）。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5年3月時点のもの）
- ・化合物名（和名）
- ・CAS No.

- ・検出イオン（定量および確認イオン）
- ・定量下限値

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、80 種の PL 収載物質を対象として LC/MS/MS 分析の情報を収集し、63 物質についてマススペクトル、定量下限値等の情報を得た。今後、これまでに蓄積した情報はデータベースとしてまとめ、公開する予定であり、本データベースを活用することで、標準品の入手が困難な場合であっても PL 収載物質の迅速な推定・同定が可能となることが期待される。

E. 参考文献

- 1) 平成 29 年度厚生労働科学研究費補助金食品の安全確保推進研究事業 食品用器具・容器包装等に使用される化学物質に関する研究 総括・分担研究報告書、p 103–128 (2018)
- 2) 平成 30 年度厚生労働科学研究費補助金食品の安全確保推進研究事業 食品用器具・容器包装等に使用される化学物質に関する研究 総括・分担研究報告書、p 85–117 (2019)
- 3) 令和 2 年度厚生労働科学研究費補助金食品の安全確保推進研究事業 食品用器具・容器包装等の安全性確保に資する研究 総括・分担研究報告書、p 90–118 (2021)
- 4) 令和 3 年度厚生労働科学研究費補助金食品の安全確保推進研究事業 食品用器具・容器包装等の安全性確保に資する研究 総括・分担研究報告書、p 132–157 (2022)
- 5) 令和 4 年度厚生労働科学研究費補助金食品の安全確保推進研究事業 食品用器具・容器包装等の安全性確保に資する研究 総括・分担研究報告書、p 13–27 (2023)

表1 本研究で対象とした物質の情報

通し番号	化合物番号	化合物名 Compound name	CAS No.	メーカー名	純度 (%)
2	R5-M2	アクリル酸 2-エチルヘキシル 2-ethylhexyl acrylate	103-11-7	A	> 99
8	R5-M8	アクリル酸ブチル butyl acrylate	141-32-2	A	> 99
15a	R5-M15a	アジピン酸ジ(2-エチルヘキシル) bis(2-ethylhexyl) adipate	103-23-1	B	> 99
15b	R5-M15b	アジピン酸ジオクチル dioctyl adipate	123-79-5	C	> 98
15c	R5-M15c	アジピン酸ジイソブチル diisobutyl adipate	141-04-8	A	> 99
15d	R5-M15d	アジピン酸ジイソデシル diisodecyl adipate	27178-16-1	A	不明
15e	R5-M15e	アジピン酸ジイソノニル diisononyl adipate	33703-08-1	B	不明
21	R5-M21	アセチルアセトン acetylacetone	123-54-6	B	> 99
27	R5-M27	アセチルリシノール酸メチル methyl acetyricoleate	140-03-4	A	> 80
39	R5-M39	3-アミノプロピルトリエトキシラン 3-aminopropyltriethoxysilane	919-30-2	A	> 98
42	R5-M42	2-アミノ-2-メチル-1-プロパノール 2-amino-2-methyl-1-propanol	124-68-5	B	> 93
58	R5-M58	アルキルスルホン酸 alkylsulfonic acid	5324-84-5	A	> 98
67	R5-M67	安息香酸 benzoic acid	65-85-0	D	> 99.5
70	R5-M70	安息香酸及びジエチレングリコールのジエステル diethylene glycol dibenzoate	120-55-8	E	> 97
71	R5-M71	安息香酸及びジプロピレングリコールのジエステル di(propylene glycol) dibenzoate	27138-31-4	E	80
82	R5-M82	イソソルビド isosorbide	652-67-5	A	> 98
89	R5-M89	2-イミダゾリジノン 2-imidazolidinone	120-93-4	A	> 97
90	R5-M90	エタノール ethanol	64-17-5	B	> 99.5
93	R5-M93	2, 2'-エチリデンビス(4, 6-ジ-tert-ブチルフェノール) 2,2'-ethyldenebis(4,6-di-tert-butylphenol)	35958-30-6	E	> 99
96	R5-M96	2-エチルヘキサノール酸及びトリエチレングリコールのジエステル triethylene glycol bis(2-ethylhexanoate)	94-28-0	F	97
105	R5-M105	N-エチル-メチルベンゼンスルホン酸アミド N-ethyl-methylbenzenesulfonamide	80-39-7	A	> 98
106	R5-M106	エチレングリコール ethylene glycol	107-21-1	B	> 99.5
118a	R5-M118a	テトラエチレングリコール tetraethylene glycol	112-60-7	A	> 95
118b	R5-M118b	エチレングリコール単独重合体 polyethylene glycol	25322-68-3	A	不明
149	R5-M149	エトキシ化処理されたソルビタンのパルミチン酸のエステル polyoxyethylene sorbitan monopalmitate	9005-66-7	A	不明
156	R5-M156	プロポキシ化処理されたブタノール polypropylene glycol monobutyl ether	9003-13-8	B	不明
163a	R5-M163a	エトキシ化処理されたラウリルアルコール polyethylene glycol monododecyl ether	9002-92-0	A	不明
163b	R5-M163b	エトキシ化処理されたオレイルアルコール polyethylene glycol monooleyl ether	9004-98-2	A	不明
174	R5-M174a	エトキシ化処理された4-tert-オクチルフェノール polyethylene glycol mono-4-octylphenyl ether	9002-93-1	A	不明
227	R5-M227	エリソルビン酸 erythorbic acid	89-65-6	A	> 98
228	R5-M228	塩化コリン choline chloride	67-48-1	A	> 98
229	R5-M229	塩化ベンゾイル benzoyl chloride	98-88-4	A	> 98
239	R5-M239	オクチルホスホン酸 octylphosphonic acid	4724-48-5	A	> 98
259	R5-M259	リン酸トリ(ブトキシエチル) tris(2-butoxyethyl) phosphate	78-51-3	A	> 95
261	R5-M261	クエン酸 citric acid	77-92-9	A	> 98
270b	R5-M270b	ラウリン酸とグリセロールのモノエステル glycerol monolaurate	142-18-7	A	> 98
270c	R5-M270c	酢酸とグリセロールのジエステル glycerol diacetate	25395-31-7	A	不明
270d	R5-M270d	オクタン酸とグリセロールのモノエステル glycerol monoctanoate	26402-26-6	A	> 98
275	R5-M275	L-グルタミン酸 L-glutamic acid	138-15-8	A	> 98
277	R5-M277	グルタル酸ジメチル dimethyl glutarate	1119-40-0	A	> 98
278	R5-M278	2-クロロアセタミド 2-chloroacetamide	79-07-2	B	> 95
281	R5-M281	クロロベンゼン chlorobenzene	108-90-7	B	> 99
283	R5-M283	4-クロロ-3-メチルフェノール 4-chloro-3-methylphenol	59-50-7	B	> 98
290	R5-M290	酢酸 2-(2-エトキシエトキシ)エチル 2-(2-ethoxyethoxy)ethyl acetate	112-15-2	A	> 99
298	R5-M298	酢酸 2-(2-ブトキシエトキシ)エチル 2-(2-butoxyethoxy)ethyl acetate	124-17-4	A	> 98
309	R5-M309	シアヌル酸トリアリル triaryl cyanurate	101-37-1	A	> 98
313	R5-M313	2-シアノ-3, 3-ジフェニルアクリル酸エチル ethyl 2-cyano-3,3-diphenylacrylate	5232-99-5	A	> 98
329	R5-M329	N, N-ジエチル-アエリリン N,N-diethyl-aniline	91-66-7	A	> 99

表1 本研究で対象とした物質の情報 (続き)

通し番号	化合物番号	化合物名 Compound name	CAS No.	メーカー名	純度 (%)
334	R5-M334	ジエチレングリコールのモノエチルエーテル monoethyl ether of diethylene glycol	111-90-0	A	> 99
335	R5-M335	ジエチレングリコールのモノフェニルエーテル monophenyl ether of diethylene glycol	104-68-7	A	> 98
336	R5-M336	ジエチレングリコールのモノブチルエーテル monobutyl ether of diethylene glycol	112-34-5	A	> 99
344	R5-M344	4, 4'-シクロヘキシリデンビス (2-シクロヘキシルフェノール) 1,1-Bis(3-cyclohexyl-4-hydroxyphenyl)cyclohexane	4221-68-5	A	> 98
347	R5-M347	N, N'-ビス (2, 2, 6, 6-テトラメチル-4-ピペリジン) -ヘキサメチレンジアミンを主な構成成分とする重合体 polymer mainly composed of 2,4-dichloro-6-(4-morpholinyl)-1,3,5-triazine / N,N'-bis(2,2,6,6-tetramethyl-4-piperidyl)-hexamethylenediamine	82451-48-7	G	不明
357	R5-M357	N, N'-ジフェニルエチレンジアミン N,N'-diphenylethylenediamine	150-61-8	A	> 98
368	R5-M368	2, 5-ジ-tert-ブチルヒドロキノン 2,5-di-tert-butylhydroquinone	88-58-4	A	> 98
371	R5-M371	ジ-tert-ブチルペルオキシド di-tert-butyl peroxide	110-05-4	E	98
373a	R5-M373a	ジプロピレングリコール dipropylene glycol	110-98-5	H	不明
373b	R5-M373b	ジプロピレングリコール (構造異性体混合物) dipropylene glycol	25265-71-8	A	> 95
382	R5-M382a	エルカミド erucamide	112-84-5	A	> 85
390	R5-M390a	オクタノール octanol	111-87-5	A	> 99.5
390	R5-M390b	デカノール decanol	112-30-1	A	> 98
390	R5-M390c	ドデカノール 1-dodecanol	112-53-8	A	> 99
390	R5-M390d	トリデカノール 1-tridecanol	112-70-9	A	> 98
390	R5-M390e	テトラデカノール 1-tetradecanol	112-72-1	A	> 98
390	R5-M390f	ステアリアルコール 1-octadecanol	112-92-5	A	> 98
390	R5-M390g	トリデカノール (構造異性体混合物) tridecanol	26248-42-0	A	不明
390	R5-M390h	セチルアルコール 1-hexadecanol	36653-82-4	A	> 98
392	R5-M392	N, N-ジメチルアニリン N,N-dimethylaniline	121-69-7	B	> 99
399	R5-M399	N, N-ジメチルシクロヘキシルアミン N,N-dimethylcyclohexylamine	98-94-2	A	> 98
401	R5-M401a	ジメチルシロキサン重合体 (環状 6 量体) dodecamethylcyclohexasiloxane	540-97-6	A	> 97
405	R5-M405	2, 5-ジメチル-2, 5-ビス (tert-ブチルペルオキシ) ヘキサン 2,5-dimethyl-2,5-bis(tert-butylperoxy)hexane	78-63-7	D	90
407	R5-M407	N, N-ジメチル-1, 3-プロパンジアミン N,N-dimethyl-1,3-propanediamine	109-55-7	A	> 99
411	R5-M411	酒石酸 tartaric acid	87-69-4	B	> 99.5
448	R5-M448	セバシン酸ジ (2-エチルヘキシル) bis(2-ethylhexyl)sebacate	122-62-3	A	> 98
456	R5-M456	ソルビン酸 sorbic acid	110-44-1	A	> 99
468	R5-M468	1, 10-デカンジカルボン酸 1,12-dodecanedioic acid	693-23-2	A	> 99
477	R5-M477	テトラヒドロフラン tetrahydrofuran	109-99-9	B	> 99.8
487	R5-M487	4- (1, 1, 3, 3-テトラメチルブチル) フェノール 4-(1,1,3,3-tetramethylbutyl)phenol	140-66-9	A	> 95
501	R5-M501	トリエチルアミン triethanamine	102-71-6	A	> 98
503	R5-M503	トリメチルアミン trimethylamine	121-44-8	B	> 99

A : 東京化成工業 (株)

B : 富士フイルム和光純薬 (株)

C : AK Scientific

D : SIGMA

E : Aldrich

F : ACROS

G : サンケミカル (株)

H : Toronto Research Chemicals Inc.

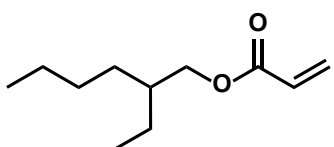
別添1 結果報告シート

結果報告シート(LC-MS/MS)		ポジティブモード											ネガティブモード																																																																																						
機関名		5. 検出条件*1											5. 検出条件*1																																																																																						
1. 化合物情報 <table border="1" style="width:100%; border-collapse: collapse;"> <tr><td>通し番号</td><td style="text-align: center;">118</td></tr> <tr><td>化合物名(和名)</td><td>エチレンジグリコール単独重合体</td></tr> <tr><td>ラベル番号</td><td>(No. R5-M118b)</td></tr> <tr><td>化合物名(英名)</td><td>polyethyleneglycol</td></tr> <tr><td>CAS No.</td><td>25322-68-3</td></tr> <tr><td>分子量</td><td>-</td></tr> </table>		通し番号	118	化合物名(和名)	エチレンジグリコール単独重合体	ラベル番号	(No. R5-M118b)	化合物名(英名)	polyethyleneglycol	CAS No.	25322-68-3	分子量	-	<table border="1" style="width:100%; border-collapse: collapse;"> <tr><th rowspan="2">プリカーサーイオン (m/z)</th><th colspan="10">プロダクトイオン (m/z)</th></tr> <tr><th>定量イオン (m/z)</th><th>DP (V)</th><th>CE (V)</th><th>定量下限値 (ng)</th><th>定性イオン1</th><th>DP (V)</th><th>CE (V)</th><th>定性イオン2</th><th>DP (V)</th><th>CE (V)</th></tr> <tr><td></td><td></td><td></td><td></td><td>#DIV/0!</td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td></tr> </table>											プリカーサーイオン (m/z)	プロダクトイオン (m/z)										定量イオン (m/z)	DP (V)	CE (V)	定量下限値 (ng)	定性イオン1	DP (V)	CE (V)	定性イオン2	DP (V)	CE (V)					#DIV/0!							<table border="1" style="width:100%; border-collapse: collapse;"> <tr><th rowspan="2">プリカーサーイオン (m/z)</th><th colspan="10">プロダクトイオン (m/z)</th></tr> <tr><th>定量イオン (m/z)</th><th>DP (V)</th><th>CE (V)</th><th>定量下限値 (ng)</th><th>定性イオン1</th><th>DP (V)</th><th>CE (V)</th><th>定性イオン2</th><th>DP (V)</th><th>CE (V)</th></tr> <tr><td></td><td></td><td></td><td></td><td>#DIV/0!</td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td></tr> </table>											プリカーサーイオン (m/z)	プロダクトイオン (m/z)										定量イオン (m/z)	DP (V)	CE (V)	定量下限値 (ng)	定性イオン1	DP (V)	CE (V)	定性イオン2	DP (V)	CE (V)					#DIV/0!						
通し番号	118																																																																																																		
化合物名(和名)	エチレンジグリコール単独重合体																																																																																																		
ラベル番号	(No. R5-M118b)																																																																																																		
化合物名(英名)	polyethyleneglycol																																																																																																		
CAS No.	25322-68-3																																																																																																		
分子量	-																																																																																																		
プリカーサーイオン (m/z)	プロダクトイオン (m/z)																																																																																																		
	定量イオン (m/z)	DP (V)	CE (V)	定量下限値 (ng)	定性イオン1	DP (V)	CE (V)	定性イオン2	DP (V)	CE (V)																																																																																									
				#DIV/0!																																																																																															
プリカーサーイオン (m/z)	プロダクトイオン (m/z)																																																																																																		
	定量イオン (m/z)	DP (V)	CE (V)	定量下限値 (ng)	定性イオン1	DP (V)	CE (V)	定性イオン2	DP (V)	CE (V)																																																																																									
				#DIV/0!																																																																																															
2. 測定条件 <table border="1" style="width:100%; border-collapse: collapse;"> <tr><td colspan="2">機器情報</td></tr> <tr><td>メーカー</td><td></td></tr> <tr><td>製品名</td><td></td></tr> <tr><td colspan="2">カラム情報</td></tr> <tr><td>カラム名</td><td>メーカー</td></tr> <tr><td>製品名</td><td></td></tr> <tr><td>カラムサイズ</td><td>長さ(mm)</td></tr> <tr><td></td><td>内径(mm)</td></tr> <tr><td></td><td>粒子径(μm)</td></tr> <tr><td colspan="2">LC条件</td></tr> <tr><td>流速</td><td>(mL/min)</td></tr> <tr><td>注入量</td><td>(μL)</td></tr> <tr><td>カラム温度</td><td>(℃)</td></tr> <tr><td>移動相条件</td><td>移動相A</td></tr> <tr><td></td><td>移動相B</td></tr> <tr><td colspan="2">グラジエント条件</td></tr> <tr><td colspan="2">MS条件*1</td></tr> <tr><td>イオン化方式</td><td>ESI or APCI or APGC etc.</td></tr> <tr><td>測定モード</td><td>(+) or (-)</td></tr> <tr><td>キャピラリー電圧</td><td>(kV)</td></tr> <tr><td>コロン電圧</td><td>(V)</td></tr> <tr><td>イオン源温度</td><td>(℃)</td></tr> <tr><td>脱溶媒ガス種類</td><td></td></tr> <tr><td>脱溶媒ガス温度</td><td>(℃)</td></tr> <tr><td>脱溶媒ガス流量</td><td>(L/hr) or (L/min)</td></tr> <tr><td>コロンガス流量</td><td>(L/hr)</td></tr> <tr><td>コロン電流</td><td>(μA) *APCIの場合</td></tr> </table>		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(mm)		内径(mm)		粒子径(μm)	LC条件		流速	(mL/min)	注入量	(μL)	カラム温度	(℃)	移動相条件	移動相A		移動相B	グラジエント条件		MS条件*1		イオン化方式	ESI or APCI or APGC etc.	測定モード	(+) or (-)	キャピラリー電圧	(kV)	コロン電圧	(V)	イオン源温度	(℃)	脱溶媒ガス種類		脱溶媒ガス温度	(℃)	脱溶媒ガス流量	(L/hr) or (L/min)	コロンガス流量	(L/hr)	コロン電流	(μA) *APCIの場合	6. マススペクトル プリカーサーイオン SCAN Conc. プロダクトイオン SCAN											6. マススペクトル プリカーサーイオン SCAN Conc. プロダクトイオン SCAN																																
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(mm)																																																																																																		
	内径(mm)																																																																																																		
	粒子径(μm)																																																																																																		
LC条件																																																																																																			
流速	(mL/min)																																																																																																		
注入量	(μL)																																																																																																		
カラム温度	(℃)																																																																																																		
移動相条件	移動相A																																																																																																		
	移動相B																																																																																																		
グラジエント条件																																																																																																			
MS条件*1																																																																																																			
イオン化方式	ESI or APCI or APGC etc.																																																																																																		
測定モード	(+) or (-)																																																																																																		
キャピラリー電圧	(kV)																																																																																																		
コロン電圧	(V)																																																																																																		
イオン源温度	(℃)																																																																																																		
脱溶媒ガス種類																																																																																																			
脱溶媒ガス温度	(℃)																																																																																																		
脱溶媒ガス流量	(L/hr) or (L/min)																																																																																																		
コロンガス流量	(L/hr)																																																																																																		
コロン電流	(μA) *APCIの場合																																																																																																		
3. 検出条件 <table border="1" style="width:100%; border-collapse: collapse;"> <tr><td>保持時間 (min)</td><td></td></tr> <tr><td>測定質量範囲(scan)</td><td>プリカーサーイオン (m/z)</td></tr> <tr><td></td><td>プロダクトイオン (m/z)</td></tr> </table>		保持時間 (min)		測定質量範囲(scan)	プリカーサーイオン (m/z)		プロダクトイオン (m/z)	7. マスクロマトグラム MRM Conc. μg/mL S/N											7. マスクロマトグラム MRM Conc. μg/mL S/N																																																																																
保持時間 (min)																																																																																																			
測定質量範囲(scan)	プリカーサーイオン (m/z)																																																																																																		
	プロダクトイオン (m/z)																																																																																																		
4. その他特記事項 <div style="border: 1px solid black; height: 20px;"></div>		8. 特記事項					9. 検量線						8. 特記事項					9. 検量線																																																																																	

*1 機器に固有の設定がある場合は項目を修正又は追加し、設定値と単位を記入する
 *2 定量イオンにおける検出下限値

別添2 公開データベース (例)

◎化合物基礎情報

CAS登録番号	103-11-7	通し番号	2	構造 
組成式	C11H20O2	分子量	184	
物質名	和名 アクリル酸2-エチルヘキシル			
	英名 2-ethylhexyl acrylate			

◎分析情報☆

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	1	185	55	57			10							
B														
C														
特記情報														

OGC/MS

データ	定量イオン	定性イオン			測定限界 (ng)
RI	特記情報				

○紫外可視吸収スペクトル



☆各分析情報の表の説明

- ・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 (Retention index)：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N/A (not applicable) (該当なし・適用不可) とした。
- ・LC-MS/MS ではメタノールまたはアセトニトリル、GC-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3 食品用器具・容器包装の PL 収載物質の分析情報

通し番号 ^a	化合物名 (和名)	CAS No.	検出イオン (m/z)					定量下限値 ^c (ng)
			プリカーサー ^d	プロダクト ^b				
2	アクリル酸 2-エチルヘキシル	103-11-7	+185	<u>55</u>	57			10
8	アクリル酸ブチル	141-32-2	+129	<u>55</u>	59			60
15a	アジピン酸ジ (2-エチルヘキシル)	103-23-1	+371	<u>83</u>	55			40
			+371	<u>129</u>	147	<i>111</i>		
15b	アジピン酸ジオクチル	123-79-5	+371	<u>129</u>	259	147	111	50
			+371	<u>147</u>	129	111		
15c	アジピン酸ジイソブチル	141-04-8	+259	<u>129</u>	185	111		2
			+259	<u>185</u>	129	111		
15d	アジピン酸ジイソデシル	27178-16-1	+427	<u>129</u>	269	85		10
			+427	<u>269</u>	129	<i>111</i>		
15e	アジピン酸ジイソノニル	33703-08-1	+399	<u>129</u>	255	71		80
			+399	<u>255</u>	129	<i>111</i>		
21	アセチルアセトン	123-54-6	+118	<u>101</u>	43			2000
27	アセチルリシノール酸メチル	140-03-4	+355	<u>295</u>	263	55		200
			+372	<u>263</u>	295			
			+372	<u>295</u>	355			
39	3-アミノプロピルトリエトキシシラン	919-30-2	N/A					
42	2-アミノ-2-メチル-1-プロパノール	124-68-5	+90	<u>55</u>	73	58	45	70
			+90	<u>73</u>	55	43		
58	アルキルスルホン酸	5324-84-5	-193	<u>80</u>	81	65		0.3
67	安息香酸	65-85-0	-121	<u>77</u>	120			100
70	安息香酸及びジエチレングリコールのジエステル	120-55-8	+315	<u>149</u>	105	77		10
			+332	<u>149</u>	315	105		
71	安息香酸及びジプロピレングリコールのジエステル	27138-31-4	+343	<u>163</u>	105	77		10
			+360	<u>163</u>	343			
82	イソソルビド	652-67-5	+147	<u>69</u>	85	55		800
89	2-イミダゾリジノン	120-93-4	+87	<u>59</u>				90
			+87	<u>44</u>	70	59	42	
90	エタノール	64-17-5	N/A					
93	2, 2'-エチリデンビス (4, 6-ジ-tert-ブチルフェノール)	35958-30-6	-437	<u>205</u>	231	189		50
			+456	<u>177</u>	57			
			+456	<u>233</u>	177	57		
96	2-エチルヘキサ酸及びトリエチレングリコールのジエステル	94-28-0	+403	<u>171</u>	57	73		4
			+420	<u>57</u>	73			
			+420	<u>171</u>	403			

別添3 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 ^a	化合物名 (和名)	CAS No.	検出イオン (m/z)					定量下限値 ^c (ng)
			プリカーサー ^d	プロダクト ^b				
105	N-エチル-メチルベンゼンスルホン酸アミド	80-39-7	+200	<u>91</u>	155	65		70
			+200	<u>155</u>	91	65		
			+217	<u>155</u>	91			
106	エチレングリコール	107-21-1	N/A					
118a	テトラエチレングリコール	112-60-7	+195	<u>89</u>	133	<u>107</u>	45	100
			+212	<u>89</u>	133			
118b	エチレングリコール単独重合体	25322-68-3	+195	<u>89</u>	133	107		0.01
149	エトキシシラ化処理されたソルピタンのパルミチン酸のエステル	9005-66-7	+845	<u>283</u>				10000
			+519	<u>89</u>	283	133		
156	プロポキシシラ化処理されたブタノール	9003-13-8	+657	<u>57</u>	59	157		5
			+773	<u>157</u>	215	115		
163a	エトキシシラ化処理されたラウリルアルコール	9002-92-0	+618	<u>89</u>	133	57		2
			+640	<u>133</u>	177			
163b	エトキシシラ化処理されたオレイルアルコール	9004-98-2	+595	<u>578</u>	133			300
			+638	<u>89</u>	133	97		
174	エトキシシラ化処理された4-tert-オクチルフェノール	9002-93-1	+620	<u>89</u>	133	57		1000
			+621	<u>603</u>	277	133		
227	エリソルビン酸	89-65-6	+175	<u>63</u>	90			100
228	塩化コリン	67-48-1	+104	<u>60</u>	58	45		20
229	塩化ベンゾイル	98-88-4	N/A					
239	オクチルホスホン酸	4724-48-5	-193	<u>79</u>	94	63		10
			+195	<u>69</u>	125	57		
			+212	<u>195</u>				
259	リン酸トリ (ブトキシエチル)	78-51-3	+399	<u>299</u>	199	101	57	6
			+399	<u>57</u>	199	101		
261	クエン酸	77-92-9	N/A					
270b	ラウリン酸とグリセロールのモノエステル	142-18-7	+275	<u>257</u>	183	95	57	100
			+292	<u>257</u>				
270c	酢酸とグリセロールのジエステル	25395-31-7	+177	<u>159</u>	117	57		200
			+194	<u>159</u>	177			
270d	オクタン酸とグリセロールのモノエステル	26402-26-6	+219	<u>57</u>	201	127		100
			+219	<u>127</u>	109	57		
			+219	<u>201</u>	127	57		
			+236	<u>201</u>	127			
275	L-グルタミン酸	138-15-8	+148	<u>84</u>	130	102		3000

別添3 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 ^a	化合物名 (和名)	CAS No.	検出イオン (m/z)						定量下限値 ^c (ng)
			プリカーサー ^d	プロダクト ^b					
277	グルタル酸ジメチル	1119-40-0	+161	<u>129</u>	101	59			800
			+161	<u>101</u>	129	59			
278	2-クロロアセタミド	79-07-2	N/A						
281	クロロベンゼン	108-90-7	N/A						
283	4-クロロ-3-メチルフェノール	59-50-7	-141	<u>105</u>	77	63			90
290	酢酸2-(2-エトキシエトキシ)エチル	112-15-2	+177	<u>43</u>					5
			+177	<u>87</u>	117	73			
			+194	<u>87</u>					
298	酢酸2-(2-ブトキシエトキシ)エチル	124-17-4	+205	<u>87</u>	89	57			2
			+222	<u>87</u>	43				
309	シアヌル酸トリアリル	101-37-1	+250	<u>81</u>	170	79			0.07
313	2-シアノ-3,3-ジフェニルアクリル酸エチル	5232-99-5	+278	<u>232</u>	250	204	105		20
			+295	<u>232</u>	250				
329	N,N-ジエチル-アニリン	91-66-7	+150	<u>106</u>	122	121	77		2000
334	ジエチレングリコールのモノエチルエーテル	111-90-0	+135	<u>73</u>	117	89	45		100
			+152	<u>73</u>	89				
335	ジエチレングリコールのモノフェニルエーテル	104-68-7	+183	<u>89</u>	121	77			80
			+183	<u>121</u>	89	77			
			+200	<u>121</u>	89				
336	ジエチレングリコールのモノブチルエーテル	112-34-5	+163	<u>107</u>	89	57			80
			+180	<u>107</u>	89				
344	4,4'-シクロヘキシリデンビス(2-シクロヘキシルフェノール)	4221-68-5	-431	<u>255</u>	387	361			1
			+450	<u>257</u>	189	175			
347	2,4-ジクロロ-6-(4-モルホリニル)-1,3,5-トリアジン及びN,N'-ビス(2,2,6,6-テトラメチル-4-ピペリジニル)-ヘキサメチレンジアミンを主な構成成分とする重合体	82451-48-7	+448	<u>58</u>	141	140			30
357	N,N'-ジフェニル-エチレンジアミン	150-61-8	+213	<u>120</u>	118	77	51		4
368	2,5-ジ-tert-ブチルヒドロキノン	88-58-4	-221	<u>220</u>	205	164			40000
371	ジ-tert-ブチルペルオキシド	110-05-4	N/A						
373a	ジプロピレングリコール	110-98-5	+135	<u>59</u>	117	77			100
			+152	<u>59</u>	117				
373b	ジプロピレングリコール (構造異性体混合物)	25265-71-8	+135	<u>59</u>	117	77	31		30
			+152	<u>59</u>	117				
382	エルカミド	112-84-5	+338	<u>69</u>	57	55			200
			+338	<u>321</u>	303	111			

別添3 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 ^a	化合物名（和名）	CAS No.	検出イオン（m/z）						定量下限値 ^c （ng）
			プリカーサー ^d	プロダクト ^b					
390	オクタノール	111-87-5	N/A						
390	デカノール	112-30-1	N/A						
390	ドデカノール	112-53-8	N/A						
390	トリデカノール	112-70-9	N/A						
390	テトラデカノール	112-72-1	N/A						
390	ステアリルアルコール	112-92-5	N/A						
390	トリデカノール（構造異性体混合物）	26248-42-0	N/A						
390	セチルアルコール	36653-82-4	N/A						
392	N, N-ジメチル-アニリン	121-69-7	+122	<u>107</u>	106	77			50
399	N, N-ジメチル-シクロヘキシルアミン	98-94-2	+128	<u>55</u>	83	53	46		4000
401	ジメチルシロキサン重合体（環状6量体）	540-97-6	+445	<u>73</u>	341	147			10
			+462	<u>341</u>	429	341			
405	2, 5-ジメチル-2, 5-ビス（tert-ブチルペルオキシ）ヘキサン	78-63-7	+308	<u>73</u>	201	95			6000
			+308	<u>201</u>	162	111			
407	N, N-ジメチル-1, 3-プロパンジアミン	109-55-7	+103	<u>86</u>	58	30			100
411	酒石酸	87-69-4	-149	<u>87</u>	103	73			1000
448	セバシン酸ジ（2-エチルヘキシル）	122-62-3	+427	<u>185</u>	315	185	71	57	10
456	ソルビン酸	110-44-1	+113	<u>95</u>	67	57			40
468	1, 10-デカンジカルボン酸	693-23-2	+229	<u>211</u>	167	165			10
			+248	<u>213</u>	231				
477	テトラヒドロフラン	109-99-9	N/A						
487	4-（1, 1, 3, 3-テトラメチルブチル）フェノール	140-66-9	+205	<u>134</u>	133	117			
501	トリエタノールアミン	102-71-6	+150	<u>132</u>	88	70			30
			+150	<u>70</u>	132	88			
503	トリエチルアミン	121-44-8	+102	<u>58</u>	74	46			600
			+102	<u>74</u>	58	72			

^a：令和6年3月時点での通し番号

^b：下線は定量イオン、斜体は検出されない可能性があるイオン

^c：定量下限値は標準溶液を注入した時のS/N=10に相当する値であり、各メーカーが報告した値の中で最も高い値を示した。

^d：数値に併記した+はポジティブイオンモードで測定されたことを示し、-はネガティブイオンモードで測定されたことを示した。