

<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（4）

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	岸 映里	（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	浅川大地	大阪市立環境科学研究センター
研究協力者	岩越景子	東京都健康安全研究センター
研究協力者	宮川弘之	東京都健康安全研究センター
研究協力者	大野浩之	名古屋市衛生研究所
研究協力者	小澤敦揮	名古屋市衛生研究所
研究協力者	佐藤 環	福岡県保健環境研究所
研究協力者	風間貴充	（一財）日本食品分析センター
研究協力者	竹田美穂	（一財）日本食品分析センター
研究協力者	石井進之輔	（一財）日本穀物検定協会
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	藤原恒司	国立医薬品食品衛生研究所

A. 研究目的

合成樹脂製の器具・容器包装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、合成樹脂や添加剤等の分解物、不純物、副生成物、汚染物質といった非意図的添加物質（Non-Intentionally Added Substance : NIAS）が含まれる可能性がある。我々はこれまで合成樹脂製器具・容器包装に含有される NIAS の調査を行ってきた。その結果、多くの化合物が検出され、その推定・同定やそれらが意図的添加物質か NIAS かを判別するためには合成樹脂製器具・容器包装から検出される物質のデータベースが必要であると考えられた。

我々は昨年度、NIAS について報告された 41 報について調査を行い、12 種類の樹脂、多層フィルム、接着剤等から検出が報告されたのべ 1421 化合物について分析情報を含むデータベースを作成した¹⁾。その結果、報告論文が多かったポリプロピレン（PP）、ポリエチレン（PE）、ポリエチレンテレフタレート（PET）および多層フィルム（ポリウレタン

接着剤）については 100~200 化合物を収載することができたが、その他の樹脂では情報が少ないものもあった。

そこで、今年度は情報量が少ない樹脂についてさらに調査を行うとともに、LC-QTOFMS 用ライブラリーの整備が不十分であることから、精密質量データが報告されている論文については樹脂の種類に関わらず調査対象論文とし、データベースを拡充した。

また、令和 3 年度にモデル試料を用いて行った検討²⁾において同定できなかった化合物について、昨年度作成したデータベースを用いて候補化合物を絞り込み、標準品による同定を行いデータベースの有用性を検証した。

B. 研究方法

1. 調査対象論文

昨年度論文数が少なかったポリスチレン（PS）およびポリアミド（PA）を対象とした論文や、精密質量データが報告されている論文を主とする 41 文献を対象とした（表 1）。

2. データベース作成のための項目の抽出

各論文より以下の項目を抽出し、データベースとしてまとめた。なお、ソフトは Microsoft Excel を用いた。

材質情報：樹脂名等、リサイクル材使用の有無

化合物情報：検出化合物名、別名（商品名や略称等を含む）、CAS No.、分子量、分子式、由来の推測

測定溶液：抽出液、溶出液等

測定条件：測定機器、イオン化法、 m/z 、(LC-MS の場合はイオンモード、イオンタイプ、マスフラグメント)

その他：同定時の標準品使用の有無、RI 情報等

3. データベースの有用性の検証

1) 試薬等

メタノール：LC/MS 用、>99.8%、関東化学株式会社製

酢酸アンモニウム溶液 (1 mol/L)：高速液体クロマトグラフ用、富士フイルム和光純薬株式会社製

2) 装置

液体クロマトグラフ-四重極飛行時間型質量分析装置 (LC-QTOFMS)：LC ExionLC AD、QTOFMS X500R、株式会社エービー・サイエックス製

3) 測定および解析条件

令和3年度²⁾と同様とした。

C. 研究結果および考察

1. 調査対象論文の概要

調査対象論文の概要を表 1 に示した。昨年度は海外の学術雑誌に掲載された論文のみを対象としたが、PS などは国内において多く報

告されていたことから、今年度は国内の学術雑誌に掲載された論文も対象とした（海外：30 報、国内：11 報）。

41 報において、試験対象としていた樹脂は PS 及び PA のほか、PE、PP、PET、ポリカーボネート (PC)、ポリ塩化ビニル (PVC)、ポリブチレンテレフタレート (PBT)、ポリシクロヘキシレンジメチレンテレフタレート (PCT)、メラミン樹脂 (MF)、AS 樹脂 (AS)、ABS 樹脂 (ABS)、ポリウレタン (PU)、熱可塑性ポリウレタン (TPU)、アクリル系樹脂 (AA)、ポリアミド (PI)、シリコーン樹脂 (SI)、ポリ乳酸 (PLA)、テレフタル酸・シクロヘキサジメタノール・2,2,4,4-テトラメチル-1,3-シクロブタンジオール共重合体 (PCTG) および生分解性ポリエチレン (Biodegradable-PE) の 20 種類であった。上記の樹脂を組み合わせた多層フィルムを対象とした報告も 1 報あった。また、使用済みプラスチックの有効利用や資源循環のため、食品用途にもリサイクルプラスチックの使用が進められており、これら (リサイクル PE、PET、PS) に含有されている化合物に関する報告も 7 報と比較的多かった。

測定装置としては、GC-MS、HS-SPME-GC-MS、GC-TOFMS、GCxGC、LC-MS、LC-MS/MS、LC-QTOFMS、LC-Orbitrap HRMS 等の多種多様の装置が用いられていた。検出化合物の推定や同定方法として、GC-MS では主に NIST や Wiley を用いてライブラリー検索を行っており、検出化合物の保持時間を基準化合物 (n -アルカン) の保持時間により指標化した RI を用いて同定している報告も 2 報あった。LC-QTOFMS や LC-Orbitrap HRMS では、ChemSpider、SciFinder、Extractables & Leachables (E&L) database、MS-DIAL などのほか、“database of Chemicals associated with Plastic Packaging (CPPdb)” や、“Food Contact

表1-1 データベースに掲載した論文一覧およびその概要

論文 No.	著者	雑誌	年	巻・ページ等	対象樹脂	測定装置	解析ソフト・ライブラリ等
2023-01	Genualdira	Food Additives & Contaminants: Part A	2014	31, 723-733	PS	HS-SPME-GC-MS	—
2023-02	Songら	Food Packaging and Shelf Life	2019	20, 100318	PS	HS-SPME-GC-MS	ChemStation, NIST
2023-03	Vilaplanaら	Polymer Degradation and Stability	2010	95, 172-186	Virgin and recycled PS	GC-MS	NIST
2023-04	Pajaro-Castroら	Ambiente e Agua - An Interdisciplinary Journal of Applied Science	2014	9, 610-620	PS	GC-MS	NIST
2023-05	Packら	Food Packaging and Shelf Life	2021	30, 100736	PE-coated paper, PP, PS	GC-MS	—
2023-06	Songら	Journal of Agricultural and Food Chemistry	2022	70, 9499-9508	PA	LC-IMS-QTOF	CPPdb, FCCdb, In-house library
2023-07	Huら	Food Chemistry	2021	345, 128625	PA	UPLC-QTOFMS	UNIFI
2023-08	Abeら	PLOS ONE	2016	11, e0159547	PA	LC-QTOFMS	—
2023-09	Tsochatzisら	Food Packaging and Shelf Life	2023	35, 101015	PA	LC-QTOFMS	—
2023-10	Perezら	Food Chemistry	2021	362, 129902	PA, PP, SI	CE-MS/MS	Action 2.9.29.368.534 June/2015
2023-11	Yusàら	International Journal of Analytical Chemistry	2021	On line journal	PC	LC-Orbitrap Tribrid HRMS	AcquireX, Compound Discover
2023-12	Bignardiら	Food Control	2017	71, 329-335	PC	UHPLC-HRMS	XCalibur
2023-13	Oliveiraら	Food Research International	2019	123, 529-537	PP, PCTG, SI	UPLC-QTOFMS	Chemspider, Scifinder, MassFragment software
2023-14	Mirallesら	Toxics	2021	9, 283	Recycled PE	GC-Orbitrap HRMS	Compound Discover, NIST, E&L HRMS database, GC Orbitrap Contaminants, GC Orbitrap Flavor and Fragrance database, GC Orbitrap Metabolomics library, Home-made database
2023-15	Yusàら	Microchemical Journal	2020	158, 105256	Recycled PE	LC-Orbitrap Tribrid HRMS	mzCloud(ddMS2), ChemSpider, E&L database
2023-16	Chenら	Food Packaging and Shelf Life	2021	30, 100762	PE	GC-MS	MS-DIAL, NIST
2023-17	Tislerら	Journal of Hazardous Materials	2022	429, 128331	PE, Biodegradable PE	UPLC-QTOFMS	UNIFI, CPPdb, plastic additives by ECHA, Pubchem, MassBank libraries
2023-18	Suら	Analytical Chemistry	2023	95, 8780-8788	Recycled PE	UPLC-QTOFMS	MS-DIAL, In-House MS/MS Library, MS-CleanR, MS-FINDER, MRMPROBS
2023-19	Jeonら	Food Science and Technology	2007	40, 151-156	PE	GC-MS	HP-ChemStation, Wiley
2023-20	Bourgesら	Packaging Technology and Science	1992	5, 205-209	PP, PE	LC-UV	—
2023-21	Castilloら	Polymer Degradation and Stability	2013	98, 1679-1687	PP	Online HPLC-GC-FID, GC-TOFMS	Palisade 600k
2023-22	Heら	Journal of Hazardous Materials	2021	417, 126074	PP, AS, PCTG	UPLC-QTOFMS	MassHunter Qualitative Analysis
2023-23	Bourgesら	Packaging Technology and Science	1992	5, 197-204	PP	LC-UV	—
2023-24	Alinら	Agricultural and Food Chemistry	2011	59, 5418-5427	PP	GC-MS, ESI-MS	NIST
2023-25	Biedermanら	Polymer Degradation and Stability	2014	99, 262-273	PE	GCxGC-FID, TOFMS	GC Image software

表1-2 データベースに収載した論文一覧およびその概要

論文 No.	著者	雑誌	年	巻・ページ等	対象樹脂	測定装置	解析ソフト・ライブラリ等
2023-26	Suら	Resources, Conservation and Recycling	2021	167, 105365	Recycled PE	DI-SPME-GC-MS, APGC-QTOFMS	MS-DIAL, NIST, MetaboAnalyst
2023-27	Haoら	Food Additives & Contaminants: Part A	2023	40, 1114-1130	Virgin and recycled PET	UPLC-QTOFMS	MassHunter Qualitative Analysis
2023-28	Ozakiら	Food Chemistry	2022	397, 133758	PET	HS-GC-MS, PT-GC-MS	—
2023-29	Abeら	Food Chemistry	2021	344, 128708	PET	LC-MS/MS	—
2023-30	Kimら	Food Packaging and Shelf Life	2023	35, 101037	PP, PE, MF, PC, PET, PS, PCT, ABS, AS, AA, PU, TPU, PLA, PBT, FR, PVC, PA, PI, Multi-layer film packaging material	UHPLC-MS/MS, UPLC-QTOFMS, GC-MS	MassHunter, NIST/EPA/NIH mass spectral library
2023-J01	河村ら	食品衛生学雑誌	1998	39, 199-205	PS	GC-FID	—
2023-J02	河村ら	食品衛生学雑誌	1998	39, 110-119	PS	GC-MS	NBS, Wiley
2023-J03	山田ら	分析化学	2000	49, 493-501	PS	GC-MS	—
2023-J04	尾崎ら	食品衛生学雑誌	2015	56, 166-172	PS	HS-GC-FID	—
2023-J05	六鹿ら	食品衛生学雑誌	2010	51, 228-236	PA	Pyrolysis-GC-MS, LC-MS/MS	—
2023-J06	岩越ら	食品衛生学雑誌	2023	64, 101-107	PE	LC-TOFMS, LC-MS/MS	UNIFI, E&L HRMS Library
2023-J07	河村ら	食品衛生学雑誌	2000	41, 154-161	PP	GC-MS, LC-UV	—
2023-J08	尾崎ら	生活衛生	2005	49, 357-364	PP	GC-MS, LC-MS	—
2023-J09	六鹿ら	日本食品化学学会誌	2003	10, 138-144	PET	LC-MS, LC-UV, HS-GC-MS	—
2023-J10	河村ら	食品衛生学雑誌	2005	46, 13-20	Recycled PET	HS-GC-MS	—
2023-J11	杉田ら	食品衛生学雑誌	1995	36, 263-268	PS	GC-FID, GC-MS	—

Chemicals Database (FCCdb)”を用いている報告があった。

2. データベースの概要

41報より抽出した情報を Microsoft Excel を用いてデータベースとしてまとめた（データベース参照）。収載した化合物数はのべ 1924 化合物（重複を除くと 1207 化合物）であった。

そのうち、標準品を用いて同定されていたのは 298 化合物であった。昨年度分と合わせると 413 化合物となり、本データベースを用いて各機関で検出したピークのマススペクトル等を比較および確認する際には、標準品を用いて同定された情報を参照することにより、

より精度の高い情報を得ることができると考えられた。また、*n*-アルカンを指標にした RI は 532 化合物であった。昨年度分と合わせると 602 化合物となり、GC-MS を用いて分析した際に参照できると考えられた。

表 2 に材質ごとの論文数や化合物数を示した。昨年度論文数が少なく、今年度重点的に論文を収集した PS および PA の論文数はそれぞれ 11 報および 7 報であり、それぞれ 186 および 135 化合物の情報が得られた。その他、PE、PP、PET は論文数が 6~12 と多く、63~759 化合物の情報が得られた。その他の樹脂については論文数が 1~3 報（2~34 化合物）であった。

表2 データベースに収載した材質一覧および報告化合物数

分類	材質		報告論文数 (R5)	報告化合物数 (のべ) (R5)	化合物数			
	名称	略称			R4	R5	R4 + R5	
樹脂	ポリエチレン	PE	12	848	96	759	767	
	ポリプロピレン	PP	11	319	152	256	319	
	ポリスチレン	PS	11	259	30	186	199	
	ポリアミド	PA	7	162	14	135	136	
	ポリエチレンテレフタレート	PET	6	76	122	63	177	
	ポリカーボネート	PC	3	37	28	33	61	
	生分解性ポリエチレン	Biodegradable-PE	1	34	0	34	34	
	ポリ塩化ビニル	PVC	1	23	65	23	86	
	テレフタル酸・シクロヘキサンジメタノール・2,2,4,4-テトラメチル-1,3-シクロブタンジオール共重合体	PCTG	2	22	0	20	20	
	シリコーン樹脂	SI	2	21	28	21	49	
	熱可塑性ポリウレタン	TPU	1	19	0	19	19	
	メラミン樹脂	MF	1	16	0	16	16	
	AS樹脂	AS	2	15	0	15	15	
	ポリ乳酸	PLA	1	13	7	13	20	
	ABS樹脂	ABS	1	12	0	12	12	
	ポリウレタン	PU	1	9	143	9	149	
	ポリシクロヘキシレンジメチレンテレフタレート	PCT	1	8	0	8	8	
	ポリブチレンテレフタレート	PBT	1	7	29	7	36	
	アクリル系樹脂	AA	1	7	0	7	7	
	ポイイミド	PI	1	2	0	2	2	
	ポリエチレン酢酸ビニル	PEVA	-	-	106	-	106	
	多層フィルム	接着剤：ポリウレタン	MLfilm-PU	-	-	189	-	189
		接着剤：不明	MLfilm	1	15	97	15	110
	接着剤	アクリル系樹脂	AA	-	-	6	-	6
		非晶質ポリオレフィン	APAO	-	-	7	-	7
		材質不明	Adh-unknown	-	-	5	-	5
コーティング	缶内面コーティング	Can-coating	-	-	50	-	50	
	UVニス	UV-varnish	-	-	22	-	22	
添加剤		Additives	-	-	67	-	67	
	合計 (のべ)		-	1924	-	-	-	

表3 データベースを用いて絞り込んだ候補化合物のLC-QTOFMS分析結果

検出されたペレット もしくは試験片*	検出化合物					候補化合物					検出化合物との 一致/不一致
	RT	RI	m/z	分子式	イオンタイプ	化合物名	CAS	RT	RI	RI比	
試験片1-2、2-2	13.8	663	229.2164	C ₁₄ H ₂₈ O ₂	[M+H] ⁺	Ethyl laurate	106-33-2	14.9	725	1.09	×
試験片1-3、2-3	17.0	796	311.3134	C ₂₀ H ₃₈ O ₂	[M+H] ⁺	Vinyl stearate	111-63-7	-	-	-	×
試験片1-3、2-3	19.2	848	313.3292	C ₂₀ H ₄₀ O ₂	[M+H] ⁺	Butyl palmitate	111-06-8	22.7	922	1.09	×
ペレット2	27.3	980	492.4407	C ₃₁ H ₅₄ O ₃	[M+NH ₄] ⁺	Octadecyl 3-(3-(tert-butyl)-4-hydroxyphenyl) propanoate	110729-26-5	28.9	>1000	-	×

*試験片1-2、2-2：PP製ペレット1および2にモノパルミチンを添加した試験片
試験片1-3、2-3：PP製ペレット1および2にエルカ酸アミドを添加した試験片

昨年度作成したデータベースの化合物情報と合わせるとのべ3345化合物となった。特に、PE、PP、PS、PA、PET、PU、ポリエチレン酢酸ビニル (PEVA)、多層フィルム (接着剤：PU) および多層フィルム (接着剤：不明) については100~800化合物と比較的多くの情報を収載することができた。

3. データベースの有用性

令和3年度にモデル試料を用いて行った検討²⁾においてLC-QTOFMSで同定できなかった化合物について、昨年度作成したデータベースを用いて候補化合物を絞り込み、標準品による同定を試みた。候補化合物は、まず推定された分子式で検索し、検出モードやフラグメント情報があるものについてはフラグメント情報を参考に絞り込みを行った。このうち、標準品が入手できた4種類の化合物について分析を行った。

表3に結果を示した。モノパルミチンを添加した試験片において未同定であった $C_{14}H_{28}O_2$ (RI: 663) について“ethyl laurate”との比較を行ったが、フラグメントおよびRIが一致しなかった。また、エルカ酸アミドを添加した試験片において未同定であった $C_{20}H_{40}O_2$ (RI: 848) について“butyl palmitate”との比較を行ったが、フラグメントおよびRIが一致しなかった。同試験片において未同定であった $C_{20}H_{38}O_2$ (RI: 796) について“vinyl stearate”との比較を行ったが、本分析条件で検出されず、一致しなかった。ペレット2において未同定であった $C_{31}H_{54}O_3$ (RI: 980) について“octadecyl 3-(3-(*tert*-butyl)-4-hydroxyphenyl)propanoate”との比較を行ったところ、フラグメントは近似していたが、RIは一致しなかった。

以上よりいずれの候補化合物も検出化合物と一致しなかったが、今年度作成したデータ

ベースを用いて推定された分子式を検索したところ、新たに数化合物が候補化合物として挙げられた。これらが検出化合物と一致するかは標準品を用いた検討が必要だが、データベースに収載する化合物数が多いほどより多くの候補化合物を挙げることができることから、今年度化合物情報を追加したことによって本データベースの有用性をより高めることができたと考えられた。

D. 結論

昨年度に引き続き、NIASについて報告された41報について調査を行い、検出が報告された化合物について分析情報を含むデータベースを作成した。データベースは昨年度と同様にMicrosoft Excelを用いて作成し、20種類の樹脂から検出が報告されたのべ1924化合物を収載した。昨年度、論文数が少なかったPSおよびPAについても100~200化合物を収載することができた。

昨年度分と合わせると、調査論文は82報となり、収載した情報はのべ3345化合物となった。PE、PP、PS、PA、PET、多層フィルム等の使用量が多い樹脂を中心にデータベースを拡充することができた。

今後、精密質量データが報告されている論文については引き続きデータベースに追加することでより有用なデータベースになることが期待されるとともに、本データベースの公開方法を検討していく必要があると考えられた。

E. 参考文献

- 1) 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・容器包装等の衛生的な製造管理等の推進に資する研究 総括・分担研究報告書、p.38-54 (2023)

- 2) 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.77-102 (2022)

データベース抜粋 (PA、PS)

論文No.	材質	化合物名	別名 (商品名や略称等含む)	CAS No.	MW	分子式	標準品による同定	測定機器	m/z	イオン化法	pos/neg	イオンタイプ	MS fragment-1	MS fragment-2	MS fragment-3	MS fragment-4	MS fragment-5	MS fragment-6	RI	測定溶液	Possible origin	リサイクル材使用の記載
2023-06	PA	1,8,15,22,29,36-Hexaazacyclotetracontane-2,7,16,21,30,35-hexone	PA66 trimer	4174-07-6	679	C36H66N6O6	○	LC-IMS-QTOF	701.4939	ESI	positive	[M+Na] ⁺	182.1537	552.4489						溶出液	PA66 trimer	
2023-10	PA	4,4'-Diaminodiphenylmethane	4,4'-Methylenedianiline	101-77-9	198	C13H14N2	○	CE-MS/MS	199.2	ESI	positive	[M+H] ⁺	106.1	89.3						溶出液	Comonomer to increase stability at high temperature, or used to produce azo dyes (black color)	
2023-06	PA	Bis(2-ethylhexyl) adipate	DEHA	103-23-1	371	C22H42O4	○	LC-IMS-QTOF	393.2973	ESI	positive	[M+Na] ⁺	147.0656							溶出液	Plasticizer	
2023-30	PS	2-Ethylhexanol	2-Ethyl-1-hexanol	104-76-7	130	C8H18O	○	GC-MS		EI			57	41	55					溶出液	Monomer impurities	
2023-05	PA	Caprolactam		105-60-2	113	C6H11NO	○	LC-MS/MS	114.3	ESI	positive	[M+H] ⁺	114.3							溶出液	PA monomer	
2023-06	PA	4,4'-Methylenebis(3-chloro-2,6-diethylaniline)		106246-33-7	379	C21H28Cl2N2	○	LC-IMS-QTOF	379.17	ESI	positive	[M+H] ⁺	196.0888							溶出液	Curing agent	
2023-05	PA	4-Chloroaniline		106-47-8	128	C6H6ClN	○	LC-MS/MS	127.9	ESI	positive	[M+H] ⁺	92.9							溶出液	Primary aromatic amines (PAAs)	
2023-02	PS	1,3-Diphenylpropane	Benzene, 1,1'-(1,3-propanediyl)bis-	1081-75-0	196	C15H16	○	GC-MS		EI			92	105	196	77	65	51		抽出液	Thermal decomposition products of PS	
2023-30	PS	Phenol		108-95-2	94	C6H6O	○	GC-MS		EI			94	66	65					溶出液	Residual monomer	
2023-30	PS	Methyl stearate		112-61-8	299	C19H38O2	○	GC-MS		EI			74	87	43					溶出液	Degradation of Irganox 1076	
2023-30	PS	1-Octadecanol	Octadecan-1-ol	112-92-5	270	C18H38O	○	GC-MS		EI			55	83	69					溶出液	Degradation of Irganox 1076	
2023-05	PA	1,6-Hexamethylenediamine		124-09-4	116	C6H16N2	○	LC-MS/MS	117.0	ESI	positive	[M+H] ⁺	99.9							溶出液	PA monomer	
2023-05	PS	2,6-Di-tert-butyl-4-methylphenol	BHT	128-37-0	220	C15H24O	○	GC-MS		EI			57	220	205					溶出液	Additive	
2023-30	PS	2,6-Di-tert-butyl-4-methylphenol	BHT	128-37-0	220	C15H24O	○	GC-MS		EI			205	57	220					溶出液	Degradation of Irganox 1010, Irganox	
2023-05	PA	1-Naphthylamine		134-32-7	143	C10H9N	○	LC-MS/MS	144.0	ESI	positive	[M+H] ⁺	126.9							溶出液	Primary aromatic amines (PAAs)	
2023-06	PA	3,5-Di-tert-butyl-4-hydroxyacetophenone	Ethanone, 1-[3,5-bis(1,1-dimethylethyl)-4-hydroxyphenyl]	14035-33-7	248	C16H24O2	○	LC-IMS-QTOF	247.1703	ESI	negative	[M-H] ⁻	96.9597							溶出液	Degradation product	
2023-10	PET	Ethyl acetate	Acetic acid ethyl ester	141-78-6	88	C4H8O2	○	HS-GC-MS		EI										HS	Derived from filled food	○
2023-06	PA	Bis(2-ethylhexyl) maleate	DOM	142-16-5	341	C20H36O4	○	LC-IMS-QTOF	363.2502	ESI	positive	[M+Na] ⁺	251.051	319.1945						溶出液	Plasticizer	
2023-06	PA	Heptapropylene glycol	PPG7	14362-16-4	425	C21H44O8	○	LC-IMS-QTOF	447.2927	ESI	positive	[M+Na] ⁺	339.2615							溶出液	PPG oligomer	
2023-06	PA	3,5-Di-tert-butyl-4-hydroxybenzaldehyde	BHT-OCH	1620-98-0	234	C15H22O2	○	LC-IMS-QTOF	233.1544	ESI	negative	[M-H] ⁻	217.1235							溶出液	Degradation product	
2023-02	PS	2,4-Diphenyl-1-butene		16606-47-6	208	C16H16	-	GC-MS		EI			91	104	208	130	65	77		抽出液	Styrene dimer	
2023-03	PS	2,4-Diphenyl-1-butene		16606-47-6	208	C16H16	○	GC-MS		EI			91	130	208					抽出液	Styrene oligomer	
2023-02	PS	2,4,6-Triphenyl-1-hexene		18964-53-9	312	C24H24	-	GC-MS		EI			91	117	207	194	65			抽出液	Styrene trimer	
2023-03	PS	2,4,6-Triphenyl-1-hexene		18964-53-9	312	C24H24	○	GC-MS		EI			91	117	207	312				抽出液	Styrene oligomer	
2023-02	PS	Benzene, 1,1'-(1,2-cyclobutanediyl)bis-, trans-	trans-1,2-diphenylcyclobutane	20071-09-4	208	C16H16	-	GC-MS		EI			104	78	51					抽出液	Styrene dimer	
2023-03	PS	Benzene, 1,1'-(1,2-cyclobutanediyl)bis-, trans-	trans-1,2-diphenylcyclobutane	20071-09-4	208	C16H16	○	GC-MS		EI			104	208						抽出液	Styrene oligomer	
2023-06	PA	3,5-Di-tert-butyl-4-hydroxyphenylpropionic acid	Irganox 1310	20170-32-5	278	C17H26O3	○	LC-IMS-QTOF	277.1808	ESI	negative	[M-H] ⁻	175.1127	205.1595	119.0502	233.1908				溶出液	Degradation product	
2023-30	PS	3-(3',5'-Di-tert-butyl-4'-hydroxyphenyl)propionic acid	Irganox 1076	2082-79-3	531	C35H62O3	○	LC-MS/MS	530.4699	ESI	negative	[M-H] ⁻	529.50	267.30						溶出液	Antioxidant	
2023-06	PA	Nonapropylene glycol	PPG9	2172326-56-4	541	C27H56O10	○	LC-IMS-QTOF	563.3756	ESI	positive	[M+Na] ⁺	175.1327							溶出液	PPG oligomer	
2023-06	PA	N,N'-(Hexane-1,6-diyl)bis(3,5-di-tert-butyl-4-	Irganox 1098	23128-74-7	637	C40H64N2O4	○	LC-IMS-QTOF	637.4941	ESI	positive	[M+H] ⁺	304.2273	377.3165						溶出液	Antioxidant	
2023-03	PS	Styrene dimer		25247-68-1	208	C16H16	-	GC-MS		EI			77	91	103	117	130			マイクロ波溶媒抽出	Dimer	
2023-02	PS	1a-Phenyl-4a-(1'-phenylethyl)tetralin		26681-79-8	312	C24H24	-	GC-MS		EI			207	91	129	45	105	59		抽出液	Styrene trimer	
2023-02	PS	1a-Phenyl-4e-(1'-phenylethyl)tetralin		26681-79-8	312	C24H24	-	GC-MS		EI			207	91	129	45	105	59		抽出液	Styrene trimer	
2023-02	PS	1e-Phenyl-4a-(1'-phenylethyl)tetralin		26681-79-8	312	C24H24	-	GC-MS		EI			207	91	129	45	105	59		抽出液	Styrene trimer	
2023-02	PS	1e-Phenyl-4e-(1'-phenylethyl)tetralin		26681-79-8	312	C24H24	-	GC-MS		EI			207	91	129	45	105	59		抽出液	Styrene trimer	
2023-03	PS	1-Phenyl-4-(1'-phenylethyl)tetralin		26681-79-8	312	C24H24	○	GC-MS		EI			91	129	207					抽出液	Styrene oligomer	
2023-02	PS	1,3,5-Triphenylcyclohexane	Cyclohexane, 1,3,5-triphenyl-	28336-57-4	312	C24H24	-	GC-MS		EI			104	208	78					抽出液	Styrene trimer	
2023-05	PS	4-Propylbenzaldehyde	Benzaldehyde, 4-propyl-	28785-06-0	148	C10H12O	○	GC-MS		EI			148	119	91					溶出液	Additives degradation products	