

令和5年度厚生労働科学研究費補助金(健康安全・危機管理対策総合研究事業)  
分担研究報告書

資機材等で留意すべき化学物質リストの作成と分析方法の検討

研究分担者 小林憲弘 国立医薬品食品衛生研究所・生活衛生化学部・第3室長  
研究協力者 土屋裕子 国立医薬品食品衛生研究所・生活衛生化学部・第3室  
研究協力者 六鹿元雄 国立医薬品食品衛生研究所・食品添加物部・第3室長

研究要旨

本邦の水道用資機材・給水装置等（以下、資機材等）の安全性は、厚生労働省「給水装置の構造及び材質の基準に関する省令」や日本水道協会が定める自主規格<sup>1)</sup>等の関連制度によって担保されているが、近年は資機材等の技術革新により、新素材が使用された製品や新機能を有する製品が開発され、国内外で流通している。

そのため、資機材等に未規制の化学物質が使用され、水道水への浸出による健康上の懸念が生じた際にも、速やかに安全性を評価できる体系的な手法を構築するとともに、認証制度の見直しも含めた現行の資機材等の監視体制をさらに充実させる必要がある。

そこで本研究では、本邦および海外で水道用資機材等に使用される化学物質に関する調査・情報収集を行い、それらから水道水への浸出性の観点で留意すべき化学物質群のリストを作成することを目的とした。また、リストの各化学物質を対象に分析方法の情報収集を行い、水質分析が可能と考えられる化学物質を物理化学的性質および分析方法別にグループ化し、設定したグループ毎に一斉分析法を検討した。

告示法が示されていない浸出基準項目等を対象に、より迅速・簡便かつ高精度な分析方法が確立できるかどうかを検討した。各検討対象物質の定量および確認イオンを決定後、LC/MS/MS一斉分析条件を検討した。LCカラム及び移動相条件は、逆相カラムとミックスモードカラムの2通りを検討した。いずれのカラムを用いた検討においても、分析対象とした各物質それぞれのピークと、水道水に含まれるマトリックス成分がクロマト上で分離できる条件を設定した。

検討対象物質とした選定した13項目のLC/MS/MSによる分析条件を確立した。分析条件によって、測定対象物質の感度に大きな違いがみられた。分析条件1（逆相カラムによる分析）では、アクリル酸の感度が悪く、1 mg/Lの標準液においてもピークを確認することができなかった。一方、分析条件2（ミックスモードカラムによる分析）では、トリエチレンテトラミン（エチレンアミン混合物）のピークを確認することができなかった。

全体的に、ミックスモードカラムによる分析の方が良好な感度が得られており、トリエチレンテトラミンと N,N-ジメチルホルムアミドを除く 11 物質において、良好な感度が得られたものの、測定対象とする物質によって、分析条件を使い分けることが望ましいと考えられた。

今後は、水道水あるいは模擬水道水を用いて確立した分析方法の妥当性評価を行い、各物質の水道水中における分析可能な濃度（定量下限）や分析精度について定量的に明らかにする必要があると考えられる。

## A.研究目的

本邦の水道用資機材・給水装置等（以下、資機材等）の安全性は、厚生労働省「給水装置の構造及び材質の基準に関する省令」<sup>1)</sup>や日本水道協会が定める自主規格（以下、JWWA K139 規格）<sup>2)</sup>等の関連制度によって担保されている。しかし、近年は資機材等の技術革新により、新素材が使用された製品や新機能を有する製品が開発され、国内外で流通している。

そのため、資機材等に未規制の化学物質が使用され、水道水への浸出による健康上の懸念が生じた際にも、速やかに安全性を評価できる体系的な手法を構築するとともに、認証制度の見直しも含めた現行の資機材等の監視体制をさらに充実させる必要がある。

そこで本研究では、本邦および海外で水道用資機材等に使用される化学物質に関する調査・情報収集を行い、それらから水道水への浸出性の観点で留意すべき化学物質群のリストを作成することを目的とした。

次に、リストの各化学物質を対象に分析方法の情報収集を行い、水質分析が可能と考えられる化学物質を物理化学的性質および分析方法別にグループ化し、設定したグループ毎に一斉分析法を検討した。

## B.研究方法

### （1）資機材等で留意すべき化学物質群のリスト作成

厚生労働省の「給水装置の構造及び材質の基準に関する省令」<sup>1)</sup>で示されている「浸出性能の基準」に関する分析手法は、「資機材等の材質に関する試験」<sup>3)</sup>で名称が示されている。これらの基準の中で、水道水質検査の標準検査方法（いわゆる告示法）<sup>4)</sup>が示され

ている基準項目については、告示法に従うこととなっているが、告示法が示されていない基準項目の具体的な分析手順詳については、「給水装置の構造及び材質の基準に関する省令の一部を改正する省令及び給水装置の構造及び材質の基準に係る試験の一部改正について 別添 1 浸出用液の調製における水質の確認方法及び浸出液の分析方法」<sup>5)</sup>に示されている。

上記の告示法が示されていない基準項目を対象に、より迅速・簡便かつ高精度な分析方法が確立できるかどうかを検討した。

一方、JWWA 規格 K139<sup>2)</sup>では、塗料に含まれる組成の衛生性を評価し、安全と判断されたものを規定している。衛生性の評価は、人への有害性に関する「毒性調査」及び「溶出量調査」を実施することにより判断するが、昨今、人に対する毒性に関する評価値が定まっていない物質や、溶出試験方法が定まっていない物質が新たに組成として申請されるようになり、衛生性の評価が非常に困難な状況にある。分析方法が確立していない物質に関しては、水に対象物質が溶出しても濃度を検知することができないため、安全性の評価が難しい。この課題に対しては、塗料に含まれる対象とする組成が、一定の期間に全量が溶出すると仮定し算出される水道水中の濃度により、衛生性を評価している。

浸出試験の方法は、JWWA Z 108（水道用資機材-浸出試験方法）<sup>6)</sup>によって行い、その分析手法は JWWA Z 110（水道用資機材-浸出液の分析方法）<sup>7)</sup>により行うこととなっているが、分析方法が確立していない物質に関して、新規に分析法を設定することができれば、全量が溶出した場合を仮定した配合率の上限値の見直しに寄与することができると考

えられるため、JWWA 規格 K139 に記載の組成の中で、特に配合率の規定があるものを中心に、分析可能と考えられる物質を抽出した。

## (2) 化学物質群のグループ化および一斉分析法の検討

検討対象とした物質の標準品を購入し、標準液を調製して LC/MS/MS による分析条件を検討した。

また、移動相に用いた酢酸、酢酸アンモニウムは特級を、アセトニトリルは高速液体クロマトグラフ用（いずれも富士フイルム和光純薬）を用いた。また、精製水は Milli-Q Advantage A10（メルク）により水道水を精製して使用した。

最初に、LC/MS/MS（Prominence UFLC-LCMS8055, 島津製作所）によるモニターイオンの設定と分析条件の最適化を行なった。

選択反応モニタリング（SRM）における測定条件検討においては、最初に検討対象物質の標準液をエレクトロスプレーイオン化

（ESI）法によるポジティブモード（ESI+）及びネガティブモード（ESI-）の全イオン検出（Scan）モードで測定を行なってマススペクトルを取得し、最も強度の高いイオンをプリカーサイオンとして選択した。次に、選択したプリカーサイオンから得られる強度の高いプロダクトイオンを定量イオンおよび確認（定性）イオンとして選択した。選択イオンモニタリング（SIM）で測定する場合は、上記で選択したプリカーサイオンを定量イオンとした。

各検討対象物質の定量および確認イオンを決定後、LC/MS/MS 一斉分析条件を検討し

た。LC カラム及び移動相条件は、下記の 2 通りを検討した。

最初に、次に、逆相カラムである InertSustain C18 (4.6×150 mm, 3 μm, ジーエルサイエンス)を、移動相には 200 mmol/L 酢酸アンモニウム/0.5%酢酸溶液とアセトニトリルを用いて、移動相のグラジエント等の LC 条件を検討した。

次に、逆相と陰イオン交換の両方の機能を持つ多孔性シリカビーズに陰イオン交換の機能を持つナノポリマーを被覆したミックスマードカラムである Acclaim Trinity P1

(3.0×100 mm, 粒径 3 μm, Thermo Scientific) を、移動相には 5 mM 酢酸アンモニウム水溶液と 5 mM 酢酸アンモニウムメタノール溶液を用いて、移動相のグラジエント等の LC 条件を検討し、定量下限、キャリーオーバー等について評価した。

いずれのカラムを用いた検討においても、分析対象とした各物質それぞれのピークと、水道水に含まれるマトリックス成分がクロマト上で分離できる条件を設定した。

検討対象とした項目の中で、目標値等が示されている項目は存在しないが、水道用資機材の進出基準として 2,6-トルエンジアミンは 0.002 mg/L、2,6-トルエンジアミンは 0.001 mg/L が設定されている<sup>1)</sup>。また、アクリル酸については 1 mg/L の目標値案が示されている。これらのうち最小値の 0.001 mg/L (1 μg/L) の 1/10 である 0.1 μg/L の分析が可能かどうかを検証するため、検量線の濃度範囲は 0.05, 0.1, 0.2, 0.5, 1, 2 μg/L の 6 点を設定した。

## C.研究結果及び考察

### (1) 資機材等で留意すべき化学物質群のリスト作成

浸出基準項目の中で告示法が示されていないものを表 1 に、水道用資機材の浸出試験方法 (JWWA Z 108: 2016) に示されている独自項目を表 2 に整理した。

これらの項目の分析方法を調査した結果、アミン類 (トリエチレンテトラミン, *N,N*-ジメチルアニリン, 2,4-トルエンジアミン, 2,6-トルエンジアミン) 及びアクリル酸については、直接注入-LC/MS/MS による分析が可能と考えられた。

エピクロロヒドリン, 酢酸ビニル, スチレン, 1,2-ブタジエン, 1,3-ブタジエンについては、既にパージ・トラップ (PT) -GC/MS あるいはヘッドスペース (HS) -GC/MS による分析方法が資機材試験方法通知<sup>5)</sup>の別紙方法 2 あるいは別紙方法 3 に示されており、それら以外に有用な分析方法が検索できなかったため、検討対象外とした。また、ヒドラジンについては、直接注入-LC/MS/MS では極めて感度が低く、ベンズアルデヒドによる誘導体化後に GC/MS あるいは LC/MS/MS により測定する方法が報告されており、直接注入-LC/MS/MS による上記のアミン類及びアクリル酸との同時分析は難しいと考えられた。

JWWA 規格 K139 に「添加剤」として記載されている組成を表 3 に、同規格に「溶剤」として記載されている組成を表 4 にまとめた。上記で選定したアミン類及びアクリル酸の LC/MS/MS 一斉分析法を検討する際に、これらと同時に分析が可能であると考えられる項目が幾つか抽出された。

なお、これら以外にも、「樹脂」, 「改質剤」, 「顔料」として記載されている組成が

多数存在するが、それらは不溶性物質が多いため、溶出する可能性は極めて低く、新たに分析方法を検討する必要性も低いと考えられた。

以上より、検討対象とする物質をまとめたものを表 5 に示す。最終的に、表 5 に示した 13 物質を対象に、LC/MS/MS による分析条件を検討し、分析方法を確立した。

### (2) 化学物質群のグループ化および一斉分析法の検討

分析条件の最適化により決定した、検討対象とした 13 物質の測定モードとモニターイオンを表 6 に示す。アクリル酸のみが ESI ネガティブモードで、他の 12 物質は全て ESI ポジティブモードでモニターイオンが設定できた。トリエチレンテトラミン以外は、ESI ポジティブモードでは水素付加[M+H]<sup>+</sup>, ESI ネガティブイオンモードでは水素脱離[M-H]<sup>-</sup>イオンがプリカーサイオンとして選択された。本研究で用いたトリエチレンテトラミン標準液 (和光純薬) は、エチレンアミン混合物として販売されており、製品規格書にはトリエチレンテトラミン及びアミノエチルピペラジン等の高沸点エチレンアミンの混合物であると記載されていることから、これらのモニターイオンを選択したものと考えられる。

検討対象物質の LC 条件と保持時間・定量下限をまとめたものを表 7 に示す。また、それぞれの分析条件における検討対象物質の一斉分析条件によるクロマトグラムを図 1 及び図 2 に示す。分析条件によって、測定対象物質の感度に大きな違いがみられた。分析条件 1 (逆相カラムによる分析) では、アクリル酸の感度が悪く、1 mg/L の標準液においてもピークを確認することができなかった。一

方、分析条件2（ミックスモードカラムによる分析）では、トリエチレンテトラミン（エチレンアミン混合物）のピークを確認することができなかった。トリエチレンテトラミンは分析条件1においても感度が悪く、2 µg/Lの標準液の測定においてピークを確認できなかった。全体的に、分析条件2（ミックスモードカラムによる分析）の方が良好な感度が得られており、トリエチレンテトラミンとN,N-ジメチルホルムアミドを除く11物質において、定量下限が低い値であった。ただし、分析条件2では2,4-トルエンジアミンと2,6-トルエンジアミンのピークが分離できず、両者を合わせた定量となった。

以上のことから、全体的に、分析条件2（ミックスモードカラムによる分析）の方が良好な感度が得られるものの、測定対象とする物質によって、分析条件を使い分けることが望ましいと考えられた。

#### D.結論

「水道施設の技術的基準を定める省令」において溶出基準が定められている物質の中で、分析方法に検討の余地があるもの、JWAA規格K139において「添加剤」や「溶剤」として記載されている組成の中で、分析方法が確立していない物質の中から13物質を選定し、L/MS/MSによる分析方法の検討を行った。

各検討対象物質の定量および確認イオンを決定後、LC/MS/MS一斉分析条件を検討した。LCカラム及び移動相条件は、逆相カラムとミックスモードカラムの2通りを検討した。

全体的に、分析条件2（ミックスモードカラムによる分析）の方が良好な感度が得られ

るものの、測定対象とする物質によって、分析条件を使い分けることが望ましいと考えられた。

今後は、水道水あるいは模擬水道水を用いて確立した分析方法の妥当性評価を行い、各物質の水道水中における分析可能な濃度（定量下限）や分析精度について定量的に明らかにする必要があると考えられる。

#### E.引用文献

- 1) 厚生労働省（2019）給水装置の構造及び材質の基準に関する省令（平成9年3月19日 厚生省令第14号[最終改正平成21年3月6日 厚生労働省令第27号]）
- 2) 日本水道協会（2023）水道用ダクタイル鋳鉄管合成樹脂塗料 JWAA K139：2023.
- 3) 厚生労働省（2023）資機材等の材質に関する試験（平成12年2月23日厚生省告示第45号[最終改正令和5年3月24日厚生労働省告示第85号]）  
<https://www.env.go.jp/content/900547738.pdf>
- 4) 厚生労働省（2024）水質基準に関する省令の規定に基づき厚生労働大臣が定める方法（平成15年7月22日厚生労働省告示第261号[最終改正令和6年3月21日厚生労働省告示第99号]）  
<https://www.env.go.jp/content/900547779.pdf>
- 5) 厚生労働省（2023）給水装置の構造及び材質の基準に関する省令の一部を改正する省令及び給水装置の構造及び材質の基準に係る試験の一部改正について 別添1 浸出用液の調製における水質の確認方法及び浸出液の分析方法（平成16年2月9日健水発第0209003号〔最終改正 令和5年3月24日薬生水発0324第1号〕）  
<https://www.env.go.jp/content/900547568.pdf>

6) 日本水道協会（2016）水道用資機材-浸出  
試験方法 JWVA Z108：2016

7) 日本水道協会（2016）水道用資機材-浸出  
液の分析方法 JWVA Z110：2016

#### F.研究発表

1.論文発表該当なし

2.学会発表該当なし

#### G.知的財産権の出願・登録状況(予定も含む)

1.特許取得:該当なし

2.実用新案登録:該当なし

3.その他:該当なし

表1 資機材等の材質に関する試験（平成12年厚生省告示第45号）に示されている項目

化合物	分析方法	出典(資機材試験方法通知)	備考	考えられる分析法
アミン類	溶媒抽出-吸光光度法	別紙方法4	トリエチレンテトラミン	直接注入-LC/MS/MS
エピクロロヒドリン	PT-GC/MS	別紙方法2		
酢酸ビニル	PT-GC/MS, HS-GC/MS	別紙方法2, 3		
N,N-ジメチルアニリン	PT-GC/MS, HS-GC/MS	別紙方法2, 3		直接注入-LC/MS/MS
スチレン	PT-GC/MS, HS-GC/MS	別紙方法2, 3		
2,4-トルエンジアミン	固相抽出-GC/MS	別紙方法5		直接注入-LC/MS/MS
2,6-トルエンジアミン	固相抽出-GC/MS	別紙方法5		直接注入-LC/MS/MS
1,2-ブタジエン	PT-GC/MS, HS-GC/MS	別紙方法2, 3		
1,3-ブタジエン	PT-GC/MS, HS-GC/MS	別紙方法2, 3		

表2 水道用資機材の浸出試験方法（JWWA Z 108: 2016）における独自項目

化合物	分析方法	出典	備考	考えられる分析法
ヒドラジン	吸光光度法	JWWA Z 110 付属書D	要検討項目	誘導体化-LC/MS/MS 誘導体化-LC/MS/MS
アクリル酸	HPLC法	JWWA Z 110 付属書E	要検討項目	直接注入-LC/MS/MS



表3 水道用資機材の浸出試験方法 (JWWA Z 108: 2016) における独自項目

化合物	考えられる分析法
アクリル系共重合体, アクリル酸とマレイン酸コポリマーとのナトリウム塩, アクリル重合体, オルガノシラン, ジメチルポリシロキサン, アマイドワックス, キサンタンガム, 変性セルロース化合物, セルロースアセテートブチレート, ヒドロキシエチルセルロース, ステアリン酸アルミニウム, ナフテン酸コバルト, ナフテン酸亜鉛, ミネラルオイル, ワセリン, ドデシルベンゼンスルホン酸ナトリウム, ポリ(オキシエチレン)アルキルエーテル, ポリオキシアルキレン脂肪酸エステル, 1,2-ベンズイソチアゾリン-3-オン, 2-メチル-4-イソチアゾリン-3-オン, 5-クロロ-2-メチル-4-イソチアゾリン-3-オン, ブロモニトロアルコール化合物, フタル酸ジシクロヘキシル, メチルエチルケトオキシム, アンモニア水, ゼオライト, シリコンオイル, 有機ベントナイト, 酸化ポリエチレン, シランカップリング剤, 水添ひまし油ワックス, 2,4,6-トリス(ジメチルアミノメチル)フェノール, 水酸化ナトリウム, フタル酸ジブチル, p-メンタジエン類, 硫酸エステル型アニオン系界面活性剤*, シクロヘキサノール*, 特殊ポリカルボン酸アンモニウム塩, ウレタン変性ポリエーテル, ジブチルビス[(1-オキソドデシル)オキシ]スズ*, 亜硝酸ナトリウム*, フタル酸ジオクチル	
N,N-ジメチルアミノエタノール(別名:2-ジメチルアミノエタノール), トリエチルアミン, メチルエタノールアミン(別名:2-(メチルアミノ)エタノール)*, モノエタノールアミン(別名:2-アミノエタノール), ジエタノールアミン(別名:2,2'-イミノジエタノール)*, トリエタノールアミン(別名:2,2',2''-ニトリロトリエタノール)*, 2-アミノ-2-メチル-1-プロパノール*	直接注入- LC/MS/MS

「\*」は配合率の規定があるもの

表 4 水道用資機材の浸出試験方法 (JWWA Z 108: 2016) における独自項目

化合物	考えられる分析法
1-ブタノール, 2-プロパノール, イソブチルアルコール, エタノール, エチレングリコールモノブチルエーテル, キシレン, ジエチレングリコールモノブチルエーテル, トルエン, プロピレングリコール, プロピレングリコールモノメチルエーテル, ジプロピレングリコールモノメチルエーテル, 2,2,4-トリメチル-1,3-ペンタンジオールモノイソブチレート*, ナフテン系炭化水素 (C9~C10), ベンジルアルコール, ミネラルスピリット, メチルイソブチルケトン, メチルエチルケトン, モノエチレングリコール, 酢酸エチル, 酢酸ブチル, 低沸点芳香族ナフサ, エチルベンゼン, アセトン, n-ヘキサン, ジイソブチルケトン, プロピレングリコールモノメチルエーテルアセテート, ジエチレングリコールジエチルエーテル, エチレングリコールモノフェニルエーテル*, エチレングリコールモノプロピルエーテル, ポリ(オキシエチレン)ニルフェニルエーテル, メタノール, 2-メトキシ-1-プロパノール, ジエチレングリコールジメチルエーテル, トリエチレングリコールモノブチルエーテル*, ジエチレングリコールジブチルエーテル*, ジエチレングリコールモノブチルエーテルアセテート*, エチレングリコールモノ-2-エチルヘキシルエーテル, ジエチレングリコールモノ-2-エチルヘキシルエーテル*, プロピレングリコールモノブチルエーテル, ジプロピレングリコールモノブチルエーテル, ジプロピレングリコールジメチルエーテル, ジメチルエーテル, 液化石油ガス及び水	
N,N-ジメチルホルムアミド	直接注入-LC/MS/MS

「\*」は配合率の規定があるもの

表 5 検討対象物質まとめ

分類		項目名
1	資機材等の材質に関する試験(平成 12 年厚生省告示第 45 号)に示されている項目	アミン類(トリエチレンテトラミン) N,N-ジメチルアニリン 2,4-トルエンジアミン 2,6-トルエンジアミン
1	水道用資機材の浸出試験方法(JWWA Z 108: 2016)における独自項目	アクリル酸
2	JWWA 規格 K139 に「添加剤」として記載されている組成	N,N-ジメチルアミノエタノール(別名:2-ジメチルアミノエタノール) トリエチルアミン メチルエタノールアミン(別名:2-(メチルアミノ)エタノール) モノエタノールアミン(別名:2-アミノエタノール) ジエタノールアミン(別名:2,2'-イミノジエタノール) トリエタノールアミン(別名:2,2',2''-ニトロトリエタノール) 2-アミノ-2-メチル-1-プロパノール
3	JWWA 規格 K139 に「溶剤」として記載されている組成	N,N-ジメチルホルムアミド

表 6 検討対象物質の測定モードとモニターイオン

#	化合物	CAS RN	分子式	分子量	測定モード	モニターイオン(m/z)
1	トリエチレンテトラミン	112-24-3	C <sub>6</sub> H <sub>18</sub> N <sub>4</sub>	146.23		249>203, 147>87, 249>186
2	<i>N,N</i> -ジメチルアニリン	121-69-7	C <sub>8</sub> H <sub>11</sub> N	121.18	ESI+	122>106, 122>107
3	2,4-トルエンジアミン(2,4-ジアミノトルエン)	95-80-7	C <sub>7</sub> H <sub>10</sub> N <sub>2</sub>	122.17	ESI+	123>77, 123>108, 123>106
4	2,6-トルエンジアミン(2,6-ジアミノトルエン)	823-40-5	C <sub>7</sub> H <sub>10</sub> N <sub>2</sub>	122.17	ESI+	123>77, 123>108, 123>106
5	アクリル酸	79-10-7	C <sub>3</sub> H <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	72.06	ESI-	71>71
6	<i>N,N</i> -ジメチルアミノエタノール(2-ジメチルアミノエタノール)	108-01-0	C <sub>4</sub> H <sub>11</sub> NO	89.14	ESI+	90>72, 90>42, 90>45
7	トリエチルアミン	121-44-8	C <sub>6</sub> H <sub>15</sub> N	101.19	ESI+	102>58, 102>43, 102>58
8	<i>N</i> -メチルエタノールアミン(2-(メチルアミノ)エタノール)	109-83-1	C <sub>3</sub> H <sub>9</sub> NO	75.11	ESI+	76>58, 76>45, 76>30
9	モノエタノールアミン(2-アミノエタノール)	141-43-5	C <sub>2</sub> H <sub>7</sub> NO	61.08	ESI+	62>44, 62>45, 62>27
10	ジエタノールアミン(2,2'-イミノジエタノール)	111-42-2	C <sub>4</sub> H <sub>11</sub> NO <sub>2</sub>	105.14	ESI+	106>88, 106>70, 106>45
11	トリエタノールアミン(2,2',2''-ニトリロトリエタノール)	102-71-6	C <sub>6</sub> H <sub>15</sub> NO <sub>3</sub>	149.19	ESI+	150>70, 150>132, 150>88
12	2-アミノ-2-メチル-1-プロパノール	124-68-5	C <sub>4</sub> H <sub>11</sub> NO	89.14	ESI+	90>55, 90>73
13	<i>N,N</i> -ジメチルホルムアミド	68-12-2	C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> NO	73.09	ESI+	74>46, 74>42, 74>30

表 7 検討対象物質の LC 条件と保持時間・定量下限

		分析条件 1	分析条件 2
LC 条件	LC カラム	InertSustain C18 (150 mm×4.6 mm, 3 μL, ジーエルサイエンス)	Acclaim Trinity P1 (100 mm×3.0 mm, 3 μL, Thermofisher)
	移動相 A	0.1%ギ酸水溶液	100mM 酢酸アンモニウム 0.5%酢酸溶液
	移動相 B	0.1%ギ酸アセトリニリル	アセトニトリル
	移動相条件	B:1% (0-5 min) - 100% (15-17.5 min) - 1% (17.5-30 min)	95% (0-10 min) - 5% (15-20 min) - 95% (20-30 min)
	流速	0.50 mL/min	0.30 mL/min
	カラム温度	40°C	35°C
	サンプル温度	5°C	5°C
	注入量	100 μL	100 μL
MS 条件	イオン化電圧	+4.5 kV	+4.5 kV
	ネブライザーガス流量	3 L/min	3 L/min
	ドライイングガス流量	10 L/min	10 L/min
	ヒーティングガス流量	10 L/min	10 L/min
	インターフェイス電圧	4.0 kV	4.0 kV
	インターフェイス温度	300°C	300°C
	脱溶媒温度	526°C	526°C
	DL 温度	250°C	250°C
	ヒートブロック温度	400°C	400°C
	コンバージョンダイノード電圧	10 kV	10 kV

	CID ガス圧力	270 kPa	270 kPa
保持時間 (min)	トリエチレンテトラミン	4.90	-
	<i>N,N</i> -ジメチルアニリン	10.82	3.2
	2,4-トルエンジアミン	7.30	4.5
	2,6-トルエンジアミン	4.93	4.5
	アクリル酸	-	11.2
	<i>N,N</i> -ジメチルアミノエタノール	3.22	6.0
	トリエチルアミン	7.20	4.5
	<i>N</i> -メチルエタノールアミン	3.12	10.6
	モノエタノールアミン	3.02	11.3
	ジエタノールアミン	3.29	10.6
	トリエタノールアミン	3.26	4.5
	2-アミノ-2-メチル-1-プロパノール	3.80	10.4
	<i>N,N</i> -ジメチルホルムアミド	8.10	7.5
定量下限 (mg/L)	トリエチレンテトラミン	>2	-
	<i>N,N</i> -ジメチルアニリン	0.05	0.05
	2,4-トルエンジアミン	0.05	0.05
	2,6-トルエンジアミン	0.05	0.05
	アクリル酸	-	5
	<i>N,N</i> -ジメチルアミノエタノール	0.05	0.05
	トリエチルアミン	2	0.05

	<i>N</i> -メチルエタノールアミン	0.2	0.05
	モノエタノールアミン	0.5	0.2
	ジエタノールアミン	0.5	0.05
	トリエタノールアミン	0.05	0.05
	2-アミノ-2-メチル-1-プロパノール	0.05	0.05
	<i>N,N</i> -ジメチルホルムアミド	0.5	2

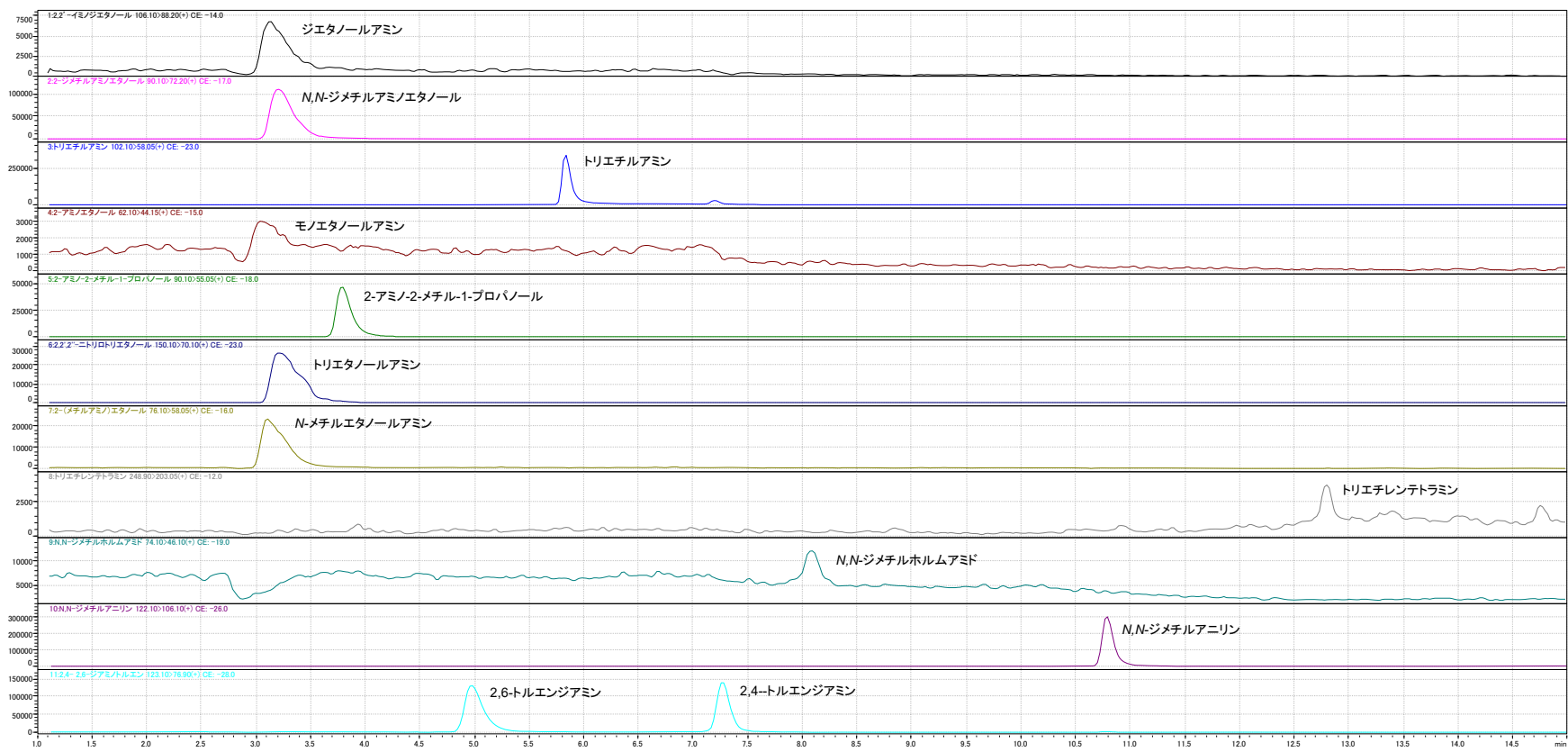


図 1. 分析条件 1 (逆相カラム) での LC/MS/MS クロマトグラム



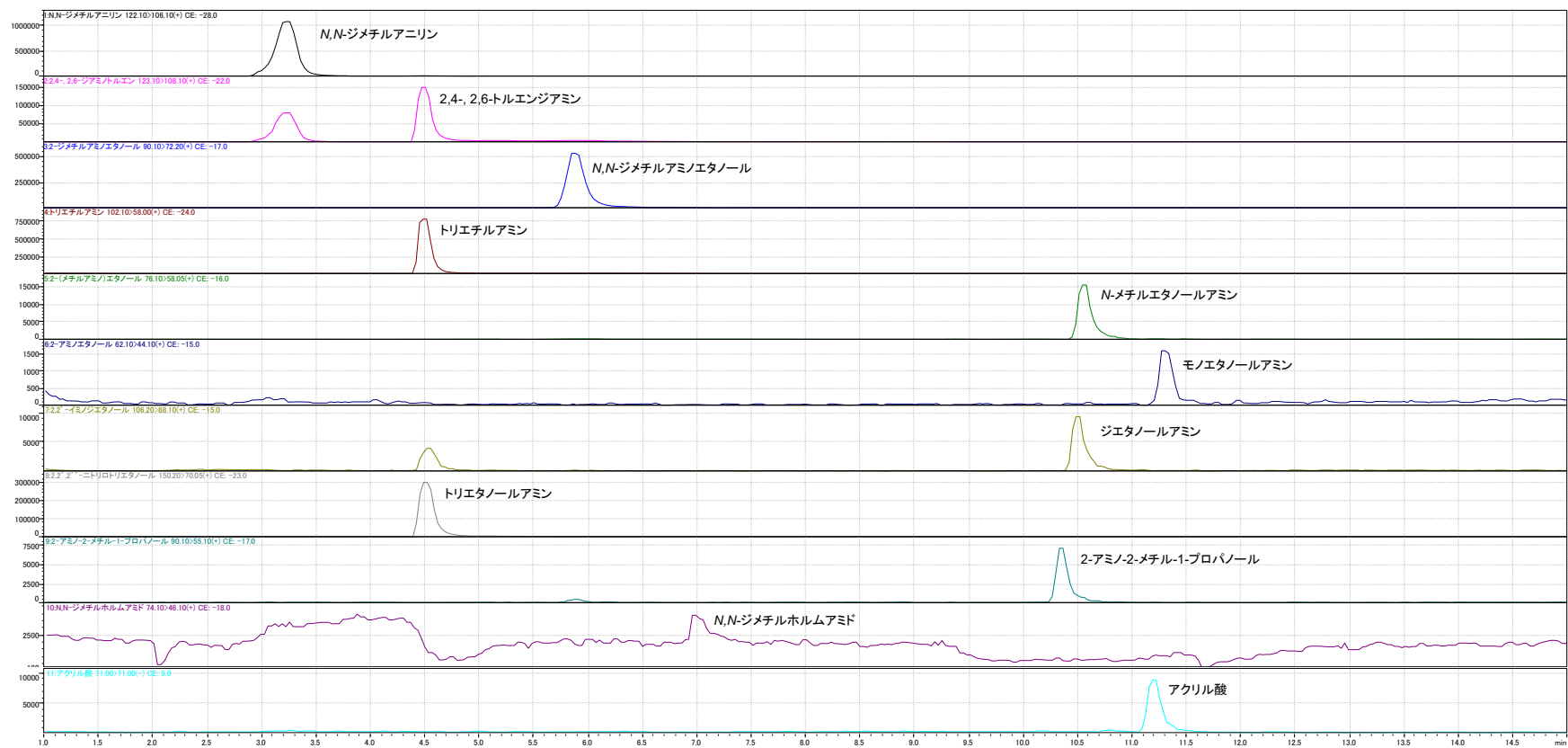


図 2. 分析条件 2 (ミックスモードカラム) での LC/MS/MS クロマトグラム