

<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	風間 春奈	アジレント・テクノロジー株式会社
研究協力者	山本 五秋	サーモフィッシャーサイエンティフィック株式会社
研究協力者	市川 千種	株式会社島津製作所
研究協力者	生方 正章	日本電子株式会社

A. 研究目的

合成樹脂製の器具・容器包装製品の製造には耐久性の向上等を目的として様々な添加剤が使用される。これらの添加剤の使用に関して、米国や欧州連合（EU）等では食品用の合成樹脂製品に使用できる添加剤を管理する、いわゆるポジティブリスト制度によりその安全性が担保されている。我が国平成 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、安全性を評価した物質のみ使用可能とするポジティブリスト制度が導入され、食品用器具・容器包装の安全性をより一層高める効果が期待されている。本制度におけるポジティブリスト（以下、合成樹脂 PL）は、令和 5 年 11 月 30 日に食品、添加物等の規格基準の一部を改正する件（令和 5 年厚生労働省告示第 324 号）によって再整理されたものが示されている。現在のところ、我が国で使用が許可される添加剤は 840 物質であるが、合成樹脂製品中に含まれるこれらの物質を同定するための分析法の整備は未だ不十分である。そこで我々はポジティブリスト制度の運用に資する研究として、これらの物質の分析に関する情報を収集してきた¹⁻⁶⁾。平成 29 年～令和 2 年度の研究では GC/MS、ヘッドスペース GC/MS、及び 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¹⁻³⁾、令和 3 年度の研究では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、GC/MS 及び LC/MS/MS を用いて約 150 種の物質を対象に保持時間、リテンションインデックス（RI）、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⁴⁾。令和 4 年度の研究では昨今のヘリウム不足を考慮し、令和 3 年度に研究対象とした物質のうち 48 物質について水素キャリアーによる GC/MS 分析を検討した⁵⁾。さらに、令和 5 年度は 80 物質を対象として LC/MS/MS における保持時間及びマススペクトル等の情報を取得した⁶⁾。本研究ではさらなる情報の収集のため、各種分析メーカーの協力のもと、PL 収載物質のうち分析情報が未収集の 75 物質を対象としてヘリウムキャリアーによる GC/MS の RI 及び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（AG）、サーモフィッシャーサイエンティフィック株式会社（TH）、島津サイエンス株式会社（SZ）及び日本電子株式会社（JE）（五十音順）の 4 社にて行った。

2. 試薬等

本研究で対象とした 75 物質の標準品の物質名（和名及び英名）、CAS RN[®]、試薬メーカー及び純度を表 1 に示した。これら標準品のアセトン溶液（10 及び 1000 µg/mL）を調製して各メーカーに配布した。分析に用いる溶媒等の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. GC-MS による測定

1) 測定溶液の調製

各標準品のアセトン溶液を 0.01、0.02、0.05、0.1、0.2、0.5 及び 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

各メーカーが保有する一般的な EI イオン源を備えた GC-MS を用いた。各メーカーの使用機種を表 2 に示した。

表 2 各分析メーカーの使用機種

メーカー	機種
AG	8890-5977C
TH	TSQ 9610
SZ	GCMS-QP2020 NX
JE	JMS-Q1600GC

3) 測定条件

測定条件は原則以下の通りとした。ただし、必要に応じて適宜最適化してもよいこととした。

注入口温度：250℃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℃以下-20℃/min-320℃（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℃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）及び 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

10 µg/mL の標準溶液を SCAN モードで測定し、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 モードにより測定溶液を測定した。マススペクトルが得られなかった場合は、任意で測定条件の最適化及び再測定を行うこととした。

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 及び 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。

C. 結果及び考察

1. 対象物質

ポジティブリスト収載物質のうち、GC-MS による分析情報が未収集であり、かつ、アセトンに可溶な 75 物質を対象物質として選択した（表 1）。

2. 測定条件

対象物質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。

3. 測定結果

1) マススペクトル

対象物質とした75物質のうち、すべてのメーカーでマススペクトルが取得できたものは48物質あった。4メーカー中3メーカー以上でマススペクトルを取得できた物質は57物質であり、全体の約75%に相当した。一方、すべてのメーカーでマススペクトルが得られなかった物質は、エタノール（通し番号：90）、オクチルホスホン酸（通し番号：239）の2物質であった。エタノールは溶媒として用いたアセトンと共溶出したため検出が困難であったのに対し、オクチルホスホン酸は分析カラムやGC条件が本物質の測定に適していなかったためと考えられた。すなわち、73物質については、いずれかのメーカーでマススペクトルを取得できた。このうち、5物質（通し番号：39、49、389、407、592）では対象物質と測定溶液の調製で用いたアセトンが反応して生成したと考えられる物質も検出された。また、亜リン酸トリス（4-ノニルフェニル）（通し番号：46）やイソシアヌル酸1, 3, 5-トリス（4-ヒドロキシ-3, 5-ジ-tert-ブチルベンジル）（通し番号：80）では測定時に分解を起こしていると考えられる物質も検出され、安息香酸及びジプロピレングリコールからなるジエステル（通し番号：71）、トリプロピレングリコール（通し番号：528）及びトリプロピレングリコールのモノメチルエーテ

ル（通し番号：529）では異性体と考えられる物質が検出された。通し番号347のような重合体では、未反応原料と考えられる物質が検出された。

2) RI

RI情報は最大4メーカーの結果から求めた。その結果、71物質についてRI情報を得ることができ、得られたRIは600~5300の間に含まれていた。令和3年度の研究⁴⁾の通り、得られたRIは異なる分析条件間ではほぼ同程度の値を示したが、3-アミノプロピルトリエトキシシラン（通し番号：39、RI：1252~1569）、2-アミノ-2-メチル-1-プロパノール（通し番号：42、RI：634~832）、イソシアヌル酸1, 3, 5-トリス（4-ヒドロキシ-3, 5-ジ-tert-ブチルベンジル）（通し番号：80、RI：1485~3776）、ステアリルアミン（通し番号：389、RI：2067~2480）、2, 2-ビス（ヒドロキシメチル）-プロピオン酸（通し番号：593、RI：1245~1572）及びビニルトリメトキシシラン（通し番号：638、RI：685~1042）のようにRIが大きく異なる物質も存在した。これらの物質は、実際に製品の分析を行う際に備えて、予め分析機関ごとにデータを取得しておく必要があると考えられた。

3) 測定限界

69物質について測定限界を推定した。ただし、これらの値は装置の種類や状態、測定条件等によって変化するため、参考情報として、有効数字一桁の値として示した。

3. 分析情報の整理

得られた分析情報は物質ごとに化合物基礎情報としてまとめ、公開を目的としたシートとしてまとめた（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

- ・ポジティブリストの通し番号
- ・CAS RN[®]
- ・組成式
- ・分子量
- ・物質名（和名・英名）
- ・構造式（重合体等で不明な場合は「不明」と記載した）

○分析情報

（GC-MS の場合）

- ・定量イオン（ m/z ）
- ・定性イオン（ m/z ）
- ・測定限界（ng）
- ・特記事項

また、令和5年度の厚生労働科学研究⁶⁾に引き続き、物質ごとの「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）。記載順はポジティブリストの通し番号順とし、項目は以下の通りとした。

- ・ポジティブリストの通し番号
- ・物質名（和名）
- ・CAS RN[®]
- ・検出イオン（定量及び確認イオン）
- ・RI
- ・測定限界（ng）

D. 結論

ポジティブリスト制度施行に伴う物質の同定や品質確認を目的として、75種のポジティブリスト収載物質を対象としてGC-MS分析の情報を収集し、73物質についてマススペクトル、測定限界等の情報を得た。今後、これまでに蓄積した情報をデータベースとして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ポジティブリスト対象物質の迅速な推定・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）
- 6) 令和5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 15–26（2024）

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 (%)
1	A-001	アクリル酸イソブチル	106-63-8	A	>99.0
2	A-002	アクリル酸2-エチルヘキシル	103-11-7	A	>99.0
8	A-008	アクリル酸ブチル	141-32-2	A	>99.0
27	A-027	アセチルリシノール酸メチル	140-03-4	A	>80.0
39	A-039	3-アミノプロピルトリエトキシシラン	919-30-2	A	>98.0
42	A-042	2-アミノ-2-メチル-1-プロパノール	124-68-5	B	>93.0
46	A-046	垂リン酸トリス (4-ノニルフェニル)	26523-78-4	C	-
70	A-070	安息香酸及びジエチレングリコールからなるジエステル	120-55-8	A	>97.0
71	A-071	安息香酸及びジプロピレングリコールからなるジエステル	27138-31-4	C	>98.0
80	A-080	イソシアヌル酸 1, 3, 5-トリス (4-ヒドロキシ-3, 5-ジ-tert-ブチルベンジル)	27676-62-6	D	>98.0
82	A-082	イソソルビド	652-67-5	A	>98.0
89	A-089	2-イミダゾリジノン	120-93-4	A	>97.0
90	A-090	エタノール	64-17-5	B	>99.5
93	A-093	2, 2'-エチリデンビス (4, 6-ジ-tert-ブチルフェノール)	35958-30-6	C	>99.0
96	A-096	2-エチルヘキサノ酸及びトリエチレングリコールからなるジエステル	94-28-0	E	>97.0
105	A-105	N-エチル-メチルベンゼンスルホン酸アミド	80-39-7	A	>98.0
229	A-229	塩化ベンゾイル	98-88-4	A	>98.0
239	A-239	オクチルホスホン酸	4724-48-5	A	>98.0
259	A-259	リン酸トリス (2-ブトキシエチル)	78-51-3	A	>95.0
261	A-261	クエン酸	77-92-9	A	>98.0
277	A-277	グルタル酸ジメチル	1119-40-0	A	>98.0
278	A-278	2-クロロアセタミド	79-07-2	B	>95.0
283	A-283	4-クロロ-3-メチルフェノール	59-50-7	B	>98.0
290	A-290	酢酸2-(2-エトキシエトキシ)エチル	112-15-2	A	>99.0
292	A-292	酢酸D-α-トコフェリル	58-95-7	A	>96.0
298	A-298	酢酸2-(2-ブトキシエトキシ)エチル	124-17-4	A	>98.0
309	A-309	シアヌル酸トリアリル	101-37-1	A	>97.0
313	A-313	2-シアノ-3, 3-ジフェニルアクリル酸エチル	5232-99-5	A	>98.0
322	A-322	ジ-tert-ドデシルジスルフィド	27458-90-8	A	-
329	A-329	N, N-ジエチル-アニリン	91-66-7	A	>99.0
334	A-334	ジエチレングリコールのモノエチルエーテル	111-90-0	A	>99.0
335	A-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	A	>98.0
336	A-336	ジエチレングリコールのモノブチルエーテル	112-34-5	A	>99.0
344	A-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	A	>98.0
347	A-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	F	-
357	A-357	N, N'-ジフェニル-エチレンジアミン	150-61-8	A	>98.0
368	A-368	2, 5-ジ-tert-ブチルヒドロキノン	88-58-4	A	-
371	A-371	ジ-tert-ブチルペロキシド	110-05-4	C	>98.0
389	A-389	ステアリルアミン	124-30-1	A	-
392	A-392	N, N-ジメチル-アニリン	121-69-7	B	>99.0
399	A-399	N, N-ジメチル-シクロヘキシルアミン	98-94-2	A	>98.0
405	A-405	2, 5-ジメチル-2, 5-ビス (tert-ブチルペロキシ) ヘキサン	78-63-7	C	>90.0
407	A-407	N, N-ジメチル-1, 3-プロパンジアミン	109-55-7	A	>99.0
448	A-448	セバシン酸ビス (2-エチルヘキシル)	122-62-3	A	>96.0
456	A-456	ソルビン酸	110-44-1	A	>99.0
465	A-465	3, 3'-チオジプロピオン酸ジアルキル	123-28-4	A	-
468	A-468	1, 10-デカンジカルボン酸	693-23-2	A	>99.0
477	A-477	テトラヒドロフラン	109-99-9	B	-
483	A-483	N, N, N', N'-テトラメチル-チウラムジスルフィド	137-26-8	A	-
487	A-487	4-(1, 1, 3, 3-テトラメチルブチル) フェノール	140-66-9	A	-
490	A-490	テレフタル酸ビス (2-エチルヘキシル)	6422-86-2	E	>98.0
501	A-501	トリエタノールアミン	102-71-6	A	>98.0
503	A-503	トリエチルアミン	121-44-8	B	-
520	A-520	1, 1, 3-トリス (4-ヒドロキシ-5-tert-ブチル-2-メチルフェニル) ブタン	1843-03-4	C	-
528	A-528	トリプロピレングリコール	24800-44-0	A	>98.0
529	A-529	トリプロピレングリコールのモノメチルエーテル	25498-49-1	A	>93.0
530	A-530	トリフルオロ酢酸	76-05-1	B	-
540	A-540	トリメリット酸トリス (2-エチルヘキシル)	3319-31-1	A	-
552	A-552	β-ナフトール	135-19-3	A	>99.0
569	A-569	2, 4-ビス (オクチルチオ) -6-(4-ヒドロキシ-3, 5-ジ-tert-ブチルアニリノ) -1, 3, 5-トリアジン	991-84-4	G	-
571	A-571	N, N'-ビス (サリチリデン) -1, 2-プロパンジアミン	94-91-7	A	>98.0
572	A-572	N, N'-ビス (2, 6-ジイソプロピルフェニル) -カルボジイミド	2162-74-5	A	>98.0
575	A-575	2-[4, 6-ビス (2, 4-ジメチルフェニル) -1, 3, 5-トリアジン-2-イル] -5-オクチルオキシフェノール	2725-22-6	A	>97.0
578	A-578	4, 4'-ビス (α, α-ジメチルベンジル) ジフェニルアミン	10081-67-1	A	>98.0
587	A-587	N, N-ビス (2-ヒドロキシエチル) -ラウリン酸アミド	120-40-1	B	-
589	A-589	ビス [3-(4-ヒドロキシ-3, 5-ジ-tert-ブチルフェニル) プロピオン酸] チオジエチレン	41484-35-9	A	>98.0
592	A-592	ビス (2-ヒドロキシプロピル) アミン	110-97-4	A	>90.0
593	A-593	2, 2-ビス (ヒドロキシメチル) プロピオン酸	4767-03-7	A	>97.0
614	A-614	2-(2'-ヒドロキシ-3', 5'-ジ-tert-ブチルフェニル) -5-クロロベンゾトリアゾール	3864-99-1	A	-
622	A-622	12-ヒドロキステアリン酸	106-14-9	A	>75.0
629	A-629	3-(4-ヒドロキシ-3-tert-ブチル-5-メチルフェニル) プロピオン酸及びトリエチレングリコールからなるジエステル	36443-68-2	G	-
634	A-634	4-ヒドロキシメチル-2, 6-ジ-tert-ブチルフェノール	88-26-6	A	-
637	A-637	ヒドロキノン	123-31-9	A	>99.0
638	A-638	ビニルトリメトキシシラン	2768-02-7	A	>98.0
661	A-661	フタル酸エチルエトキシカルボニルメチル	84-72-0	A	>93.0

A: 東京化成工業 (株)、B: 富士フイルム和光純薬株式会社、C: Aldrich、D: AK Scientific Inc.、E: ACROS、F: サンケミカル (株)、G: 加商株式会社

別添 1 結果報告シート

結果報告シート(GC-MS)			
		機関名	
1. 化合物情報			
通し番号	1		
化合物名(和名)	アクリル酸イソブチル		
ラベル番号	R6-A001		
化合物名(英名)	isobutyl acrylate		
CAS No.	106-63-8		
分子量	128		
		C7H12O2	
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			
キャリアーガス			
ガス流量			
注入量	(μL)		
注入口温度	(℃)		
注入方式			
オープン条件			
MS条件 *1			
測定モード	EI or CI etc.		
イオン化エネルギー	(eV)		
インターフェース温度	(℃)		
イオン源温度	(℃)		
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	(m/z)		
検出イオン			
定量下限値*2	(μg/mL)		
	#DIV/0!		
4. マススペクトル			
			Conc.
5. マスクロマトグラム			
SCAN	Conc.	S/N	
SIM	Conc.	μg/mL	S/N
6. 特記事項			
7. 検量線			
検量線範囲			

*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

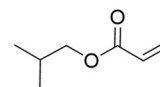
*2 定量イオンにおける検出下限値

別添2 公開データベース (例)

◎化合物基礎情報

CAS登録番号		106-63-8	通し番号	1	構造
組成式		C7H12O2	分子量	128.17	
物質名	和名	アクリル酸イソブチル			
	英名	2-Propenoic acid, 2-methylpropyl ester			

CC(C)COC(=O)C=C



◎分析情報☆

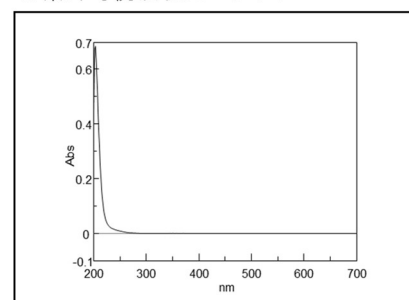
OLC-MS/MS

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														
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)
4	55	56	73	85	0.006
RI	特記情報				
856 ± 37 (4)					

○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 RN [®]	検出イオン ^b (<i>m/z</i>)								RI	検出限界 ^c (ng)
1	アクリル酸イソブチル	106-63-8	<u>55</u>	56 [*]	73	85 [*]					812~902	0.006
2	アクリル酸2-エチルヘキシル	103-11-7	<u>55</u>	57 [*]	<u>70</u>	83 [*]	112 [*]				1222~1345	0.01
8	アクリル酸ブチル	141-32-2	<u>55</u>	56 [*]	73	85 [*]					895~985	0.03
27	アセチルリシノール酸メチル	140-03-4	<u>43</u> [*]	<u>67</u> [*]	81 [*]	96 [*]	150 [*]	262 [*]	263 [*]	<u>294</u> [*]	2344~2598	0.1
39	3-アミノプロピルトリエトキシシラン	919-30-2	<u>70</u> [*]	71 [*]	84 [*]	119 [*]	<u>134</u> [*]	163 [*]	175 [*]		1252~1569	0.01
42	2-アミノ-2-メチル-1-プロパノール	124-68-5	41 [*]	42	<u>58</u> [*]	72 [*]	<u>114</u> [*]				634~832	0.2
46	垂リン酸トリス（4-ノニルフェニル）	26523-78-4	107 [*]	<u>135</u>	136 [*]	149 [*]	191 [*]	220 [*]			1718~1874	0.08
70	安息香酸及びジエチレングリコールからなるジエステル	120-55-8	77 [*]	<u>105</u>	<u>149</u>	150 [*]					2488~2741	0.04
71	安息香酸及びジプロピレングリコールからなるジエステル	27138-31-4	77	<u>105</u>	163						2465~2515	0.03
80	イソシアヌル酸1, 3, 5-トリス（4-ヒドロキシ-3, 5-ジ-tert-ブチルベンジル）	27676-62-6	<u>161</u> [*]	175 [*]	<u>203</u>	218 [*]	219 [*]	332 [*]	565 [*]		1485~3776	0.03
82	イソソルビド	652-67-5	44 [*]	58 [*]	69	<u>86</u>	103 [*]	146 [*]			1289~1412	0.05
89	2-イミダゾリジノン	120-93-4	30 [*]	42 [*]	58 [*]	<u>85</u> [*]	<u>86</u>				1231~1351	0.02
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	191 [*]	204 [*]	217	<u>233</u>	438 [*]				2443~2702	0.007
96	2-エチルヘキサノ酸及びトリエチレングリコールからなるジエステル	94-28-0	<u>57</u> [*]	99 [*]	127	<u>171</u>	214 [*]				2451~2718	0.02
105	N-エチル-メチルベンゼンスルホン酸アミド	80-39-7	<u>91</u>	155	184	<u>199</u> [*]					1726~1891	0.02
229	塩化ベンゾイル	98-88-4	51 [*]	77	<u>105</u>	140 [*]					1082~1182	1
239	オクチルホスホン酸	4724-48-5	N/A								—	—
259	リン酸トリス（2-ブトキシエチル）	78-51-3	56 [*]	<u>57</u>	85 [*]	125 [*]	<u>199</u> [*]	227 [*]	299 [*]		2386~2647	0.03
261	クエン酸	77-92-9	N/A								—	—
277	グルタル酸ジメチル	1119-40-0	59	<u>100</u>	101 [*]	<u>129</u>					1130~1242	0.03
278	2-クロロアセタミド	79-07-2	30 [*]	<u>44</u> [*]	49 [*]	58 [*]	<u>93</u>	95			895~992	0.2
283	4-クロロ-3-メチルフェノール	59-50-7	77	<u>107</u>	142	144 [*]					1285~1412	0.01
290	酢酸2-（2-エトキシエトキシ）エチル	112-15-2	<u>43</u> [*]	59 [*]	72	<u>87</u>					1172~1291	0.1
292	酢酸D-α-トコフェリル	58-95-7	164 [*]	<u>165</u>	207	<u>430</u> [*]	431 [*]	472 [*]			3192~3516	0.5
298	酢酸2-（2-ブトキシエトキシ）エチル	124-17-4	43 [*]	56 [*]	<u>57</u>	<u>87</u>	101 [*]				1351~1490	0.05
309	シアヌル酸トリアリル	101-37-1	39 [*]	<u>41</u> [*]	70 [*]	<u>82</u>	83 [*]	125 [*]	208 [*]		1776~1960	0.05
313	2-シアノ-3, 3-ジフェニルアクリル酸エチル	5232-99-5	<u>204</u> [*]	232	248 [*]	<u>277</u>					2167~2387	0.01

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 ^b (m/z)								RI	検出限界 ^c (ng)
322	ジ-tert-ドデシルジスルフィド	27458-90-8	<u>57</u>	71	85	99*	155*	<u>169*</u>			2404~2699	0.06
329	N, N-ジエチル-アニリン	91-66-7	106	<u>134</u>	149*						1224~1342	0.002
334	ジエチレングリコールのモノエチルエーテル	111-90-0	<u>45*</u>	<u>59</u>	72	73*	<u>104*</u>				998~1098	0.02
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	<u>45*</u>	<u>94</u>	77*	182					1512~1661	0.003
336	ジエチレングリコールのモノブチルエーテル	112-34-5	41*	<u>45*</u>	56*	<u>57*</u>	75*	87*	100*	101*	1184~1299	0.09
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	<u>225*</u>	255*	307*	349*	<u>432</u>				3694~4226	0.1
347	2, 4-ジクロロ-6-(4-モルホリル)-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	58*	<u>98*</u>	124*	141*	237*	279*	306*	<u>336*</u>	2673	0.04
357	N, N'-ジフェニル-エチレンジアミン	150-61-8	77*	<u>106</u>	107	212*					2131~2328	0.006
368	2, 5-ジ-tert-ブチルヒドロキノン	88-58-4	57*	<u>207</u>	208*	<u>222</u>					1788~1974	0.02
371	ジ-tert-ブチルペルオキシド	110-05-4	43	<u>57</u>	58						747	0.1
389	ステアリルアミン	124-30-1	<u>30*</u>	<u>71*</u>	86*	100*	112*	114*	126*	<u>294*</u>	2067~2480	0.05
392	N, N-ジメチル-アニリン	121-69-7	77*	104*	<u>120</u>	121					1094~1197	0.003
399	N, N-ジメチル-シクロヘキシルアミン	98-94-2	71*	<u>84</u>	<u>127</u>						982~1079	0.006
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	<u>11*</u>	41*	<u>43</u>	69*	73*				1346	0.1
407	N, N-ジメチル-1, 3-プロパンジアミン	109-55-7	58	<u>71</u>	72						1040~1138	0.1
448	セバシン酸ビス(2-エチルヘキシル)	122-62-3	57*	70*	71*	112*	<u>185</u>	203*	297*		2783~3091	0.1
456	ソルビン酸	110-44-1	41*	67	<u>97</u>	<u>112</u>					1058~1276	0.9
465	3, 3'-チオジプロピオン酸ジアルキル	123-28-4	43*	<u>55</u>	57*	69*	<u>143*</u>	178*	329*	514*	3616~4083	0.6
468	1, 10-デカンジカルボン酸	693-23-2	55	84	<u>98</u>	112*	194*				1891~2159	-
477	テトラヒドロフラン	109-99-9	41*	<u>42</u>	43*	<u>71</u>	<u>72*</u>				627~671	0.05
483	N, N, N', N'-テトラメチル-チウラムジスルフィド	137-26-8	42*	44*	73*	<u>88</u>	144*	208*			1622~1774	0.01
487	4-(1, 1, 3, 3-テトラメチルブチル)フェノール	140-66-9	41*	107	<u>135</u>	136*	206*				1606~1764	0.002
490	テレフタル酸ビス(2-エチルヘキシル)	6422-86-2	<u>70</u>	112*	149*	167*	<u>261*</u>	<u>279*</u>			2735~3032	0.1
501	トリエタノールアミン	102-71-6	43*	56*	74	<u>118</u>					1403~1613	-
503	トリエチルアミン	121-44-8	<u>30*</u>	58*	<u>86*</u>	101					673~695	0.01
520	1, 1, 3-トリス(4-ヒドロキシ-5-tert-ブチル-2-メチルフェニル)ブタン	1843-03-4	57*	191*	205*	<u>339</u>	340*	544*			3724~4286	0.03

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 ^b (<i>m/z</i>)								RI	検出限界 ^c (ng)
528	トリブロピレングリコール	24800-44-0	31*	45*	<u>59</u>	103	117*	161*			1304~1434	0.03
529	トリブロピレングリコールのモノメチルエーテル	25498-49-1	45*	<u>59</u>	73*	103*	117*	161*			1274~1409	0.03
530	トリフルオロ酢酸	76-05-1	<u>45</u>	69	85						1066	2
540	トリメリット酸トリス（2-エチルヘキシル）	3319-31-1	57*	113*	193*	<u>305</u>	323*	<u>435</u> *			3423~3795	0.03
552	β-ナフトール	135-19-3	89*	115	116*	<u>144</u>					1529~1676	0.008
569	2, 4-ビス（オクチルチオ）-6-（4-ヒドロキシ-3, 5-ジ-tert-ブチルアニリノ）-1, 3, 5-トリアジン	991-84-4	41*	<u>56</u> *	70*	476*	541*	<u>588</u> *			4870	0.5
571	N, N'-ビス（サリチリデン）-1, 2-プロパンジアミン	94-91-7	<u>121</u>	148	<u>161</u>	282*					2452~2689	0.2
572	N, N'-ビス（2, 6-ジイソプロピルフェニル）-カルボジイミド	2162-74-5	319	<u>347</u>	<u>362</u>						2356~2603	0.009
575	2-[4, 6-ビス（2, 4-ジメチルフェニル）-1, 3, 5-トリアジン-2-イル]-5-オクチルオキシフェノール	2725-22-6	132	397	<u>509</u>						5299	0.001
578	4, 4'-ビス（α, α-ジメチルベンジル）ジフェニルアミン	10081-67-1	188*	374*	<u>390</u>	391*	405				3641~4120	0.007
587	N, N-ビス（2-ヒドロキシエチル）-ラウリン酸アミド	120-40-1	<u>74</u> *	99*	112*	<u>114</u> *	244*	256*			2226~2441	0.04
589	ビス〔3-（4-ヒドロキシ-3, 5-ジ-tert-ブチルフェニル）プロピオン酸〕チオジエチレン	41484-35-9	57*	147*	<u>219</u> *	249*	<u>277</u> *	304*	642*		4750	0.2
592	ビス（2-ヒドロキシプロピル）アミン	110-97-4	42*	<u>70</u>	<u>88</u> *	118*	128*	158*			1123~1245	0.1
593	2, 2-ビス（ヒドロキシメチル）プロピオン酸	4767-03-7	31*	41*	68*	<u>86</u>	104*				1245~1572	-
614	2-（2'-ヒドロキシ-3', 5'-ジ-tert-ブチルフェニル）-5-クロロベンゾトリアゾール	3864-99-1	<u>342</u>	343*	344	357*					2678~2950	0.007
622	12-ヒドロキステアリン酸	106-14-9	<u>55</u>	69*	97	<u>197</u>					2345~2596	0.3
629	3-（4-ヒドロキシ-3-tert-ブチル-5-メチルフェニル）プロピオン酸及びトリエチレングリコールからなるジエステル	36443-68-2	121*	<u>149</u> *	161*	164*	177*	<u>190</u> *	<u>368</u> *	586*	4534	0.3
634	4-ヒドロキシメチル-2, 6-ジ-tert-ブチルフェノール	88-26-6	57*	100*	193*	<u>221</u>	236*				1759~1936	0.01
637	ヒドロキノン	123-31-9	39*	53*	81	82*	<u>110</u>				1257~1388	0.04
638	ビニルトリメトキシシラン	2768-02-7	91	107*	118*	<u>121</u>	133*				685~1042	0.005
661	フタル酸エチルエトキシカルボニルメチル	84-72-0	<u>149</u>	177	235						1933~2133	0.03

^a：ポジティブリストの通し番号

^b：下線は定量イオンとして推奨されるイオンの候補であり、検出されない可能性のあるイオンには*を示した。

^c：測定限界は、S/N=10に相当する装置に注入された物質の重量であり、各メーカーが報告した値の中で最も高い値を示した。