

<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（5）

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	牛山温子	川崎市健康安全研究所
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・容器包装は基ポリマーや添加剤等、様々な化合物を用いて製造される。最終製品には、これらの意図的に使用された物質に加え、合成樹脂や添加剤等の分解物、不純物、副生成物、汚染物質等の非意図的添加物質（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について包括的なデータベースの構築が不可欠であると考えられた。

我々はこれまで NIAS について報告された 82 報について調査を行い、21 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 3345 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) 2)}。特に、ポリエチレン（PE）、ポリプロピレン（PP）、ポリスチレン（PS）、ポリアミド（PA）、ポリエチレンテレフタレート（PET）、ポリウレタン（PU）、

ポリエチレン酢酸ビニル（PEVA）及び多層フィルムについては 100～800 化合物と多くの情報を収載することができた。

今年度は、データベースをさらに有用なものにするため、精密質量データが報告されている論文を主に調査対象論文とし、データベースを拡充した。

B. 研究方法

1. 調査対象論文

精密質量データが報告されている論文を主とする 21 報を対象とした（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、リテンションインデックス (RI) 情報等

C. 研究結果及び考察

1. 調査対象論文の概要

今年度は海外の学術雑誌に掲載された論文 21 報を対象とし、その概要を表 1 に示した。対象としていた樹脂は PE、PP、PS、PET、PU、PEVA のほか、ポリ塩化ビニル (PVC)、ポリ乳酸 (PLA)、シリコン樹脂 (SI)、ポリブチレンテレフタレート (PBT) 及び澱粉ベースのバイオポリマー (Starch-based BP) の 11 種類であった。上記の樹脂に PA、エチレン・ビニルアルコール共重合樹脂 (EVOH)、塩化ビニル・酢酸ビニル共重合樹脂 (VP)、アルミニウム (AL) を組み合わせた多層フィルムを対象とした報告も 4 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いる背景から、リサイクル PE、PP、PET 及び PBT 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、SPME-GC-MS、GC-TOFMS、GC-QTOFMS、GCxGC-TOFMS、GC-Orbitrap HRMS、LC-HRMS、LC-MS/MS、LC-TOFMS、LC-QTOFMS、LC-IMS-QTOFMS、ASAP-QTOFMS、MALDI-TOFMS 等が用いられていた。精密質量データが報告されている論文を主に収集したことから、検出器として TOFMS を用いた報告が多かった。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が 5 報あった。LC-QTOFMS や LC-Orbitrap HRMS では、ChemSpider や MS-DIAL のほか、PCDL Library や様々なオンラインデータベースを用いていた。

2. 今年度の調査結果

調査対象論文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)。収載した化合物情報数はのべ 1562 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のべ 155 化合物であった。昨年度までに作成したデータベース情報^{1) 2)} と合わせるとのべ 996 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及び確認する際には、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 はのべ 186 化合物について得られた。昨年度までの情報と合わせるとのべ 900 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。

材質ごとの論文数や化合物数を表 2 に示した。今年度は精密質量データを報告している論文を主として収集したため、器具・容器包装に汎用されている PE、PP、PET 及び多層フィルムについての論文が主体となり、これらの論文からのべ 120~281 化合物の情報が得られた。その他、PVC 及び PU は各 2 報であったが、それぞれのべ 209 及び 162 化合物と比較的多くの情報が得られた。その他の樹脂については論文数が 1~2 報 (のべ 1~90 化合物) であった。

3. データベースの全体概要

令和 4 年度から今年度までの 3 年間にわた

る論文調査の結果を取りまとめた。

海外及び国内の学術雑誌に掲載された 103 報（海外雑誌：92 報、国内雑誌：11 報）について論文調査を行い、のべ4906化合物の分析情報を含むデータベースを作成した。特に、PE、PP、PS、PA、PET、PVC、SI、PLA、PU、PEVA、多層フィルム（接着剤：PU）及び多層フィルム（接着剤：不明）についてはのべ 110～1250 化合物と多くの情報を収載することができた。これらは器具・容器包装の原材料として汎用されていることから、データベースにおいて参照される頻度も高いと考えられた。また、リサイクルプラスチックに関しても、PE、PP、PS、PET 及び PBT に関してのべ1154化合物の情報を得ることができた。

精密質量データはのべ2050化合物について収載した。LC-TOFMS 等を用いて得た精密質量データは化合物の同定に非常に有用であるが、装置や分析条件により変動しやすいという課題がある。また、ライブラリーは整備が進められている段階であり、現時点では十分とは言えない。本データベースは様々な装置や分析条件で得られた精密質量データを参照することができるため、化合物の推定・同定において非常に有用であると考えられた。

従来、器具・容器包装等から検出される化合物に関する調査は特定の材質や製品を対象として行われることが多い。そのため、目的の化合物に関する情報を検索・抽出するには多くの論文を確認する必要があり、多大な時間と労力を要する。これらの化合物情報をデータベース化することにより、迅速かつ効率的な検索及び調査が可能となった。

検査機関及び研究機関においては、合成樹脂製品から検出された化合物情報をデータベースで検索することにより化合物の推定・同定だけでなく、それらが意図的添加物質か

NIAS かの判別の一助となることが期待される。さらに、データベースへの収載頻度が高い化合物に関しては、使用頻度が高く、ばく露量も多い可能性が示唆される。そのため、安全性評価を含めた規制検討の実施など、合成樹脂製器具・容器包装の安全性向上にも寄与できると考えられる。

D. 結論

今年度も引き続き NIAS について報告された 21 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、11 種類の樹脂から検出が報告されたのべ1562化合物を収載した。

昨年度までのデータベースと合わせると、調査論文は 103 報となり、収載化合物はのべ4906 化合物となった。その中で、のべ 2050 化合物について精密質量データを収載することができた。本データベースを利用することにより、合成樹脂製品から検出された NIAS の推定及び同定の一助となるだけでなく、合成樹脂製器具・容器包装の安全性の確保や規制検討など、様々な場面での活用が期待される。

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 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.57-64 (2024)

表1 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
2024-01	Colomboら	Food Packaging and Shelf Life	2024	41, 101227	Virgin and recycled PET	MALDI-TOFMS, LC-TOFMS	Masshunter, ACD/Labs, Mass Profiler Professional software, PCDL Library
2024-02	Díaz-Galiano ら	Food Chemistry	2023	417, 135852	PP	LC-HRMS	Compound Discoverer, mzCloud, ChemSpider, Online databases**, Mass Frontier Spectral Interpretation Software, Compound Discoverer, HighChem Fragmentation Library
2024-03	Veraら	Food Chemistry	2022	366, 130592	PEVA	LC-IMS-QTOFMS, GC-MS	UNIFI, Chemspider, NIST, WILEY
2024-04	Stevensら	Environment International	2024	189, 108791	PE, PET, PP, PS, PU, PVC	LC-QTOFMS	Progenesis QI, MassBank, Plastchem report
2024-05	Paivaら	Food Chemistry	2021	350, 129250	Virgin and recycled PP	SPME-GC-MS	NIST, Flavornet, Pherobase, VCF online, FlavorDB
2024-06	Veraら	Food Packaging and Shelf Life	2023	35, 101020	Recycled PE	SPME-GC-MS	NIST, WILEY
2024-07	Aznarら	Food Packaging and Shelf Life	2023	40, 101196	PE	SPME-GC-MS	NIST, Flavornet, ChemSpider, Toxtree software
2024-08	Liら	Food Chemistry	2024	454, 139837	PP, PS, PLA	GC-Orbitrap HRMS	NIST
2024-09	Diamantidouら	Foods	2023	12, 2739	Virgin and recycled PET	LC-QTOFMS	—
2024-10	Ubedaら	Analytical and Bioanalytical Chemistry	2018	410, 2377–2384	Virgin and recycled PET	LC-QTOFMS	MassLynx, MassFragment Software
2024-11	Carrero-Carraleroら	Talanta	2019	195, 800-806	PP	GC×GC-TOFMS	—
2024-12	Kirchkesznerら	Microchemical Journal	2022	181, 107772	PP	GC-MS, GC-TOFMS	NIST
2024-13	Chenら	Journal of Hazardous Materials	2022	423, 127165	Virgin and recycled PE	LC-QTOFMS	MS-DIAL, MSP spectral kit, PubChem
2024-14	Chertaら	Food Chemistry	2015	188, 301-308	PP/EVOH/PP, PP/AL/PP	GC-QTOFMS	NIST
2024-15	Ubedaら	Analytical and Bioanalytical Chemistry	2019	411, 3521–3532	PLA	LC-QTOFMS	MassFragment, ChemDraw Ultra. UNIFI
2024-16	Osorioら	Analytical and Bioanalytical Chemistry	2022	414, 1335–1345	PLA, Starch-based BP	LC-QTOFMS, DART-MS, ASAP-QTOFMS	MassLynx
2024-17	Estremeraら	Food Packaging and Shelf Life	2024	43, 101297	PP/PA, PE/PA	SPME-GC-MS, LC-IMS-QTOFMS	NIST, UNIFI, In house library
2024-18	Bhattaraiら	European Food Research and Technology	2024	250, 533–545	Virgin and recycled PET, PBT	LC-QTOFMS, GC-QTOFMS	MetaboScape, Met-Frag, PubChem, ChemSpider, Masshunter, WILEY, NIST, MS Interpreter, PubChem
2024-19	Lestido-Cardamaら	Polymers	2023	15, 2656	PE, VP, PS/PET, PP/PS, PP/PP, PP, PE/PA	LC-MS/MS	—
2024-20	Wronaら	Food Packaging and Shelf Life	2024	45, 101334	SI	SPME-GC-MS	NIST, WILEY
2024-21	Stevensら	Environmental Science & Technology	2024	58, 4859-4871	PP, PET, PE, PU, PVC, PET/PE, PU/PE	LC-QTOFMS	ToxCast, TOX21, PubChem

*PE: polyethylene, PP: polypropylene, PS: polystyrene, PA: polyamide, PET: polyethylene terephthalate, PU: polyurethane, PEVA: poly(ethylene-vinyl acetate), PVC: polyvinyl chloride, PLA: polylactic acid, SI: silicone resin, PBT: polybutylene terephthalate, Starch-based BP: starch-based biopolymer, EVOH: ethylene vinyl-alcohol copolymer, VP: polyvinyl chloride–vinyl acetate copolymer, AL: aluminum

*Alfa Chemistry, CAS Common Chemistry, ChemBank, EPA DSSTox, EPA Toxcast, Excipients Browser, Exposome Explorer, MassBank, Merck Millipore, PurePEG, Sigma-Aldrich, Springer Materials, Submitted chemical data, TCI and Toronto Research Chemicals,

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		化合物数（のべ）			
	名称	略称	R6	合計 R4-R6	R4	R5	R6	合計 R4-R6
樹脂	ポリエチレン	PE	5	23	121	848	281	1250
	ポリプロピレン	PP	5	26	199	319	244	762
	ポリスチレン	PS	2	16	37	259	27	323
	ポリアミド	PA	—	9	16	162	—	178
	ポリエチレンテレフタレート	PET	6	22	132	76	120	328
	ポリカーボネート	PC	—	4	28	37	—	65
	生分解性ポリエチレン	Biodegradable-PE	—	1	—	34	—	34
	ポリ塩化ビニル	PVC	2	6	74	23	209	306
	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	—	22
	シリコン樹脂	SI	1	4	28	21	72	121
	熱可塑性ポリウレタン	TPU	—	1	—	19	—	19
	メラミン樹脂	MF	—	1	—	16	—	16
	AS樹脂	AS	—	2	—	15	—	15
	ポリ乳酸	PLA	2	4	7	13	90	110
	ABS樹脂	ABS	—	1	—	12	—	12
	ポリウレタン	PU	2	7	147	9	162	318
	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	—	8
	ポリブチレンテレフタレート	PBT	1	3	29	7	1	37
	アクリル系樹脂	AA	—	2	—	7	—	7
	ポリイミド	PI	—	1	—	2	—	2
	ポリエチレン酢酸ビニル	PEVA	1	2	106	—	49	155
	澱粉ベースのバイオポリマー	Starch-based BP	1	1	—	—	52	52
	材質特定できず*	—	1	1	—	—	85	85
多層フィルム	接着剤：ポリウレタン	MLfilm-PU	—	9	233	—	—	233
	接着剤：不明	MLfilm	5	8	100	15	168	283
接着剤	アクリル系樹脂	AA	—	2	6	—	—	6
	非晶質ポリオレフィン	APAO	—	1	7	—	—	7
コーティング	材質不明	Adh-unknown	—	1	5	—	—	5
	缶内面コーティング	Can-coating	—	1	51	—	—	51
添加剤	UVニス	UV-varnish	—	1	27	—	—	27
		Additives	1	2	67	—	2	69
合計（のべ）			—	—	1420	1924	1562	4906

*PP, PS, PLAについて検討

データベース抜粋

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
2024-13	PE	4-Acetylanisole	1-(4-Methoxyphenyl)ethanone	100-06-1	150	C9H10O2	-	LC-QTOFMS	173.0783	-	postive	[M+Na]+	84.959		
2024-18	PET	Terephthalic acid		100-21-0	166	C8H6O4	-	LC-QTOFMS	165.018	ESI	negative	[M-H]-	121.029		
2024-13	PE	Benzaldehyde		100-52-7	106	C7H6O	-	LC-QTOFMS	107.0494	-	postive	[M+H]+	79.0000		
2024-19	MLfilm	2,2 -(Octadecylimino) diethanol	N,N-bis(2-hydroxyethyl) octadecylamine	10213-78-2	358	C22H47NO2	○	LC-MS/MS	359.1	ESI	postive	[M+H]+	88.1	341.1	
2024-13	PE	Triethanolamine		102-71-6	149	C6H15NO3	-	LC-QTOFMS	150.1126	-	postive	[M+H]+	132.1018	70.0672	88.0742
2024-13	PE	Ethyl 4-(dimethylamino)benzoate	4-Dimethylaminobenzoic acid ethyl ester	10287-53-3	193	C11H15NO2	-	LC-QTOFMS	194.1176	-	postive	[M+H]+	166.0869	134.06	179.0929
2024-13	PE	Melamine		108-78-1	126	C3H6N6	-	LC-QTOFMS	127.0729	-	postive	[M+H]+	85.0509		
2024-03	PEVA	2-[2-[2-(2-Methylprop-2-enoyloxy)ethoxy]ethoxy]ethyl 2-methylprop-2-enoate	Triethylene glycol dimethacrylate	109-16-0	286	C14H22O6	○	LC-IMS-QTOF	309.1317	ESI	postive	[M+Na]+	229.0707		
2024-03	PEVA	N,N'-Ethylenebis(stearamide)		110-30-5	593	C38H76N2O2	○	LC-IMS-QTOF	593.5993	ESI	postive	[M+H]+	327.336	310.3095	282.2779
2024-03	PEVA	Ethylenebis(oleamide)	EBO	110-31-6	589	C38H72N2O2	○	LC-IMS-QTOF	589.5676	ESI	postive	[M+H]+	573.5354	325.3219	308.2954
2024-13	PE	Diethanolamine		111-42-2	105	C4H11NO2	-	LC-QTOFMS	106.0864	-	postive	[M+H]+	88.0762	70.0647	
2024-13	PE	Erucamide	13-Docosenamide, (Z)-	112-84-5	338	C22H43NO	-	LC-QTOFMS	338.3421	-	postive	[M+H]+	97.1007	303.3026	21.3147
2024-19	MLfilm	Stearylamine	Octadecylamine	124-30-1	270	C18H39N	○	LC-MS/MS	270.3	ESI	postive	[M+H]+	57.2	71.2	
2024-13	PE	Tributyl phosphate		126-73-8	266	C12H27O4P	-	LC-QTOFMS	267.1736	-	postive	[M+H]+	98.9843	155.0466	211.1097
2024-13	PE	4-Hydroxymandelonitrile		13093-65-7	149	C8H7NO2	-	LC-QTOFMS	150.0267	-	postive	[M+H]+	122.0970	94.0655	
2024-13	PE	Oxybenzone		131-57-7	228	C14H12O3	-	LC-QTOFMS	229.0861	-	postive	[M+H]+	151.0386	105.0331	
2024-13	PE	N,N-Diethyl-3-methylbenzamide		134-62-3	191	C12H17NO	-	LC-QTOFMS	192.1395	-	postive	[M+H]+	119.0489	72.0811	
2024-13	PE	Tris(1-chloro-2-propyl)phosphate	TCPP	13674-84-5	328	C9H18Cl3O4P	-	LC-QTOFMS	327.0083	-	postive	[M+H]+	98.9842	174.9918	
2024-02	MLfilm	Heptapropylene glycol	PPG n7	14362-16-4	425	C21H44O8	○	LC-Orbitrap MS	442.3376	ESI	postive	[M+NH4]+	57.0335	59.0491	99.0802
2024-13	PE	DL-3-Aminoisobutyric acid		144-90-1	103	C4H9NO2	-	LC-QTOFMS	104.1074	-	postive	[M+H]+	86.0964		
2024-13	PE	3-Methyloxyindole		1504-06-9	147	C9H9NO	-	LC-QTOFMS	148.1123	-	postive	[M+H]+	133.0885		
2024-19	MLfilm	N,N-bis(2-hydroxyethyl) dodecylamine	2-[Dodecyl(2-hydroxyethyl)amino]ethanol, Lauryldiethanolamine	1541-67-9	273	C16H35NO2	○	LC-MS/MS	274	ESI	postive	[M+H]+	88	256	
2024-18	PET	Linear trimer 2 series	TPA3-EG2-DEG+H2O	16033-73-1	638	C32H30O14	○	LC-QTOFMS	656.198	ESI	postive	[M+NH4]+	385.092	237.076	193.049
2024-18	PET	Cyclic tetramer 1 series	(TPA-EG)4	16104-96-4	768	C40H32O16	-	LC-QTOFMS	786.203	ESI	postive	[M+NH4]+	769.176	385.091	193.049
2024-18	PET	Cyclic pentamer 1 series	(TPA-EG)5	16104-97-5	960	C50H40O20	-	LC-QTOFMS	978.246	ESI	postive	[M+NH4]+	961.219	385.092	193.05
2024-18	PET	3,6,9,16,19,22-Hexaoxatricyclo[22.2.2.21.1,14]triaconta-	Cyclic dimer 3 series, (TPA + DEG)2	16104-98-6	472	C24H24O10	-	LC-QTOFMS	473.145	ESI	postive	[M+H]+	429.119	403.102	385.091
2024-13	PE	N,N-Dimethyldodecylamine N-oxide	Lauramine oxide	1643-20-5	229	C14H31NO	-	LC-QTOFMS	230.2479	-	postive	[M+H]+	58.065		
2024-18	PET	First series linear trimer	(TPA-EG)3, (TPA-EG)3+H2O, H-[TPA-EG]3-OH	16958-96-6	594	C30H26O13	-	LC-QTOFMS	612.172	ESI	postive	[M+NH4]+	385.092	193.05	429.118
2024-03	PEVA	3-(3',5'-Di-tert-butyl-4'-hydroxyphenyl)propionic acid stearyl	Irganox 1076	2082-79-3	531	C35H62O3	○	LC-IMS-QTOF	553.4596	ESI	postive	[M+Na]+	311.2945	283.2632	163.1117
2024-13	PE	7,8-Dihydroxy-4-methylcoumarin		2107-77-9	192	C10H8O4	-	LC-QTOFMS	215.0697	-	postive	[M+Na]+	177.054		
2024-02	MLfilm	Pentapropylene glycol	PPG n5	21482-12-2	308	C15H32O6	-	LC-Orbitrap MS	309.2273	ESI	postive	[M+H]+	57.0335	59.0491	99.0802
2024-02	MLfilm	Nonapropylene glycol	PPG n9	2172326-56-4	541	C27H56O10	-	LC-Orbitrap MS	558.4211	ESI	postive	[M+NH4]+	59.0491	97.0648	99.0802
2024-18	PET	Second series cyclic tetramer	C(TPA + EG)3 + (TPA + DEG), TPA4-EG3-DEG	2222729-29-3	812	C42H36O17	-	LC-QTOFMS	830.229	ESI	postive	[M+NH4]+	813.202	193.049	385.091
2024-04	PU	(1R,2R,4R)-1,2,7,7-Tetramethylbicyclo[2.2.1]heptan-2-ol	2-Methylisoborneol	2371-42-8	168	C11H20O	-	LC-QTOFMS	151.148599	ESI	postive	[M+H2O]+			
2024-02	MLfilm	Decapropylene glycol	PPG n10	2413933-22- 7	599	C30H62O11	-	LC-Orbitrap MS	616.463	ESI	postive	[M+NH4]+	97.0648	99.0802	115.0754
2024-18	PET	3,6,13,16-tetraoxatricyclo[16.2.2.2(8,11)]tetracos-	Ethylene Terephthalate Cyclic Dimer, Cyclic dimer 1 series, (TPA-EG)2	24388-68-9	384	C20H16O8	○	LC-QTOFMS	385.092	ESI	postive	[M+H]+	359.076	341.066	193.049
2024-02	MLfilm	Tetrapropylene glycol	PPG n4	24800-25-7	250	C12H26O5	-	LC-Orbitrap MS	251.1853	ESI	postive	[M+H]+	57.0335	59.0491	95.049
2024-13	PE	Hexaethylene glycol	PEG6	2615-15-8	282	C12H26O7	-	LC-QTOFMS	283.1751	-	postive	[M+H]+	89.0598	133.0853	177.1136
2024-13	PE	Octhilinone		26530-20-1	213	C11H19NOS	-	LC-QTOFMS	214.1261	-	postive	[M+H]+	102.0011	57.0698	71.0856
2024-18	PET	2,3-Benzofuran	Coumarone	271-89-6	118	C8H6O	-	LC-QTOFMS	119.049	ESI	postive	[M+H]+	116.108	91.054	
2024-13	PE	Oleamide	9-Octadecenamide	301-02-0	282	C18H35NO	-	LC-QTOFMS	282.2812	-	postive	[M+H]+	265.2532	247.2432	266.2553
2024-19	MLfilm	2-(Octadecylamino)ethanol		31314-15-5	314	C20H43NO	○	LC-MS/MS	314.3	ESI	postive	[M+H]+	296.3	57.2	