

＜その８＞ 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	阿部 裕	国立医薬品食品衛生研究所
研究協力者	山口 未来	国立医薬品食品衛生研究所
研究協力者	近藤 翠	国立医薬品食品衛生研究所
研究協力者	酒井 信夫	国立医薬品食品衛生研究所
研究協力者	六鹿 元雄	名古屋市衛生研究所
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	鈴木 悦子	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	山岸 陽子	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伴い、令和 2 年 6 月より、食品用器具・容器包装の材質である合成樹脂を対象としたポジティブリスト制度が導入された。本制度の経過措置は令和 7 年 5 月末をもって終了し、同年 6 月から完全施行された。完全施行時点において、第 2 表に収載される添加剤は 840 物質に及ぶが、多くの物質については、同定・確認を目的とした分析法が十分に整備されているとは言い難い状況にある。

このような背景を踏まえ、本研究では、ポジティブリスト制度の適切な運用に資することを目的として、原材料および製品の検査・監視等に必要な分析情報の収集を行ってきた¹⁻⁷⁾。これまでに、GC/MS、ヘッドスペース GC/MS および LC/MS/MS を用いた定性・定量分析に必要な保持時間やマススペクトル等の基礎情報を整備するとともに、分析機器メーカーの協力のもと、ポジティブリスト収載物質を対象として、保持時間、リテンションインデックス、マススペクトルおよび紫外可視吸収スペクトル等の情報を収集してきた。

本年度は、これまで分析情報が未整備であつ

たポジティブリスト収載物質 46 物質を対象として、LC/MS/MS による保持時間およびマススペクトル等の分析情報の収集を実施した。

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（アジレント社、AG）、エービー・サイエックス株式会社（サイエックス社、SX）、サーモフィッシャーサイエンティフィック株式会社（サーモ社、TH）、株式会社島津製作所（島津製作所、SZ）および日本ウォーターズ株式会社（ウォーターズ社、WA）の 5 社（五十音順）の協力により実施した。

2. 試薬等

本研究で対象とした 46 物質の標準品について、物質名（和名および英名）、CAS 番号、試薬メーカーおよび純度を表 1 に示した。これら標準品については、メタノール溶液（10 mg/mL）を調製し、各参加メーカーに配布した。分析に使用する溶媒および試薬は、各メーカーが通常の実験業務において使用しているものを用いた。

3. LC-MS/MS による測定

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、メタノールまたはアセトニトリルで段階希釈し、測定溶液とした。

2) 装置

四重極型タンデム質量計を接続した LC-MS/MS を用いた。液体クロマトグラフは、高速または超高速タイプ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とおりとし、その他の条件については各メーカーにおいて最適化した。

カラム：C18 系または C8 系カラム

カラム温度：40℃

移動相：A 液 5 mM ギ酸アンモニウム溶液

B 液 5 mM 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：各装置における一般的な条件

検出モード：SCAN および多重反応モニタリング (Multi Reaction Monitoring; MRM)

4) 測定

原則として、ポジティブモード (ESI (+), Pos) の SCAN モードにより、10 µg/mL の標準溶液を測定した。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およびプロダクトイオンを選択した上で、MRM モードによる測定を実施した。

本研究では多種の化合物を対象とするため、各化合物に対するコリジョンエネルギー等の詳

細な最適化は行わないこととした。また、Pos で測定できた場合は、ネガティブモード (ESI (-), Neg) での測定は実施しなかった。

一方、Pos においてマススペクトルが得られなかった場合は、Neg モードで測定を行い、マススペクトルが得られた場合には、Pos モードと同様に MRM モードによる測定を実施した。なお、Neg モードにおいてもマススペクトルが得られなかった場合には、条件最適化等の追加検討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、マススペクトルまたは MS/MS スペクトル、マスクロマトグラム (SCAN および MRM)、検量線および測定限界等について、別添 1 の結果報告シートに記載し、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について、そのピークの S/N および注入量に基づき、S/N=10 に相当する量 (ng) を計算することにより求めた。

C. 研究結果及び考察

1. 対象物質

ポジティブリスト収載物質のうち、LC/MS/MS による分析情報が未収集であり、かつ、メタノールに可溶な 46 物質を選択した (表 1)。

2. 測定条件

多様な性質を有する化合物に対応するため、LC 条件は広範な物質に対応可能な設定とした。特に、カラムは逆相系の C18 または C8 のいずれも使用可能とし、サイズやメーカー等については規定しなかった。また、MS/MS 条件については、装置仕様により設定可能な項目が異な

ることから、必要最低限の条件のみを統一し、それ以外は各メーカーにおいて最適化した。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）

全メーカーにおいて、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物質は 30 物質であり、少なくとも 1 社からマススペクトルが取得された物質は 44 物質であった。

これら 44 物質のうち、17 物質ではポジティブイオンおよびネガティブイオンの両方が報告され、23 物質はポジティブイオンのみ、4 物質はネガティブイオンのみであった。これらのうち、プロピレングリコール単独重合体（通し番号 704）のマススペクトルでは、全てのメーカーにおいて、プロピレングリコールに由来する $m/z = 58$ のシグナルパターンが確認された。重合体以外のポジティブイオンについては、プロトン付加体およびアンモニウム付加体が報告された。

一方、通し番号 318 のジ亜リン酸ジステアリルペンタエリスリチルおよび通し番号 766 の 2-メチルオキシランは、いずれもマススペクトルが得られなかった。前者については、高疎水性かつ ESI でイオン化しにくい構造に加え、亜リン酸エステルとしての酸化又は加水分解による不安定性、さらには過度の保持や吸着の影響が考えられた。後者については、低分子・高揮発性で逆相 LC における保持が極めて弱く、かつ安定なイオンを形成しにくいことに加え、揮散又は加水分解による測定溶液中濃度の低下が要因として考えられた。

2) 定量下限値

マススペクトルが取得できた 44 物質のうち、42 物質について定量下限値が報告された。

このうち、通し番号 689 の *tert*-ブチルヒドロペルオキシドについては定量下限値が 10,000 ng 以上、通し番号 756 の無水フタル酸については 1,000 ng 以上と高値を示した。特に前者については単一メーカーからの報告に限られていたことから、本測定条件においては十分な検出感度が得られていない可能性が示唆された。なお、これらの物質については、過酸化物としての不安定性や加水分解挙動等の影響により、イオン化効率や測定時の実効濃度が低下した可能性も考えられた。

一方、通し番号 387 のステアリン酸のリチウム塩、通し番号 552 の β -ナフトール、通し番号 752 の無水コハク酸の 3 物質については、メーカー間で定量下限値に差異が認められた。これらは装置仕様や測定条件の違いにより感度が大きく変動する物質と考えられた。特に、金属塩（ステアリン酸リチウム）におけるイオン化挙動の複雑さ、フェノール類（ β -ナフトール）のイオン化モード依存性、ならびに無水物（無水コハク酸）の加水分解挙動等が、感度のばらつきに影響した可能性が考えられた。

なお、本研究における測定条件は個別最適化を目的としたものではなく、多様な物質を網羅的に評価するための条件であることから、得られた定量下限値は参考値として位置付けられる。

4. 分析情報の整理

得られた分析情報については、化合物ごと基礎情報およびポジティブリスト規制情報と併せて公開を目的としたデータ表としてまとめた（別添 2）。各情報の項目は以下のとおりである。

○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）

○ポジティブリスト規制情報

- ・通し番号
- ・区分別使用制限
- ・特記事項

（いずれも令和8年3月時点の情報）

○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種、定性イオン最大3種
- ・定量下限値 (ng)：有効数字1桁
- ・特記事項

さらに、令和5年度の厚生労働科学研究⁶⁾に引き続き、「食品用器具・容器包装のポジティブリスト収載物質の分析情報」として、ポジティブリスト通し番号順に整理したLC/MS/MSデータ一覧表も作成した（別添3）。記載項目は以下のとおりである。

- ・ポジティブリストの通し番号（いずれも令和8年3月時点）
- ・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

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、46種のポジティブリスト収載物質を対象にLC/MS/MS分析の情報を収集し、44物質についてマスペクトルおよび定量下限値等の情報を取得した。

本年までにLC/MS/MS分析のデータ取得は111物質、GC/MS分析のデータ取得は63物質となった。今後、これまでに蓄積した分析情報をデータベースとして体系的に整理し、公開する予定である。本データベースを活用することにより、標準品の入手が困難な場合であっても、ポジティブリスト収載物質の迅速な推定および同定が可能となり、制度運用における分析基盤の強化に寄与す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 健康安全確保総合研究分野 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 99-124 (2018)
- 2) 平成30年度 厚生労働科学研究費補助金 健康安全確保総合研究分野 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 健康安全確保総合研究分野 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 健康安全確保総合研究分野 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 健康安全確保総合研究分野 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 13-22 (2023)
- 6) 令和5年度 厚生労働科学研究費補助金 健康安全確保総合研究分野 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 15-26 (2024)

7) 令和 6 年度 食品衛生基準科学研究費補助金

食品安全科学研究 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 18-27 (2025)

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 (%)
80	R7-M080	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) 1,3,5-Triazine-2,4,6-(1H,3H,5H)-trione, 1,3,5-tris[[3,5-bis(1,1-dimethylethyl)-4-hydroxyphenyl]methyl]-	27676-62-6	D	> 99
315	R7-M315	2, 4-ジアミノ-6-ヒドロキシピリミジン 4(3H)-Pyrimidinone, 2,6-diamino-	56-06-4	A	> 99
318	R7-M318	ジ垂リン酸ジステアシルペンタエリスリチル 2,4,8,10-Tetraoxa-3,9-diphosphaspiro[5.5]undecane, 3,9-bis(octadecyloxy)-	3806-34-6	B	> 95
344	R7-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) Phenol, 4,4'-cyclohexylidenebis[2-cyclohexyl]-	4221-68-5	A	> 98
387	R7-M387	ステアリン酸のリチウム塩 Octadecanoic acid, lithium salt (1:1)	4485-12-5	A	> 99
393	R7-M393	N, N-ジメチル-6-アミノウラシル 2,4(1H,3H)-Pyrimidinedione, 6-amino-1,3-dimethyl-	6642-31-5	A	> 98
465	R7-M465	3, 3'-チオジプロピオン酸ジアルキル Propanoic acid, 3,3'-thiobis-, 1,1'-didodecyl ester	123-28-4	A	不明
483	R7-M483	N, N, N', N'-テトラメチル-チウラムジスルフィド Thioperoxydicarbonic diamide ([[(H2N)C(S)]2S2), N,N,N',N'-tetramethyl-	137-26-8	A	不明
490	R7-M490	テレフタル酸ビス (2-エチルヘキシル) 1,4-Benzenedicarboxylic acid, 1,4-bis(2-ethylhexyl) ester	6422-86-2	E	> 98
520	R7-M520	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 Phenol, 4,4',4''-(1-methyl-1-propanyl-3-ylidene)tris[2-(1,1-dimethylethyl)-5-methyl-	1843-03-4	C	不明
528	R7-M528	トリプロピレングリコール Propanol, [(1-methyl-1,2-ethanediyl)bis(oxy)]bis-	24800-44-0	A	> 98
529	R7-M529	トリプロピレングリコールのモノメチルエーテル Propanol, [2-(2-methoxymethylethoxy)methylethoxy]-	25498-49-1	A	> 93
532	R7-M532	N, N, N-トリメチルベンジルアンモニウム塩化物 Benzenemethanaminium, N,N,N-trimethyl-, chloride (1:1)	56-93-9	A	> 99
540	R7-M540	トリメリット酸トリス (2-エチルヘキシル) 1,2,4-Benzenetricarboxylic acid, 1,2,4-tris(2-ethylhexyl) ester	3319-31-1	A	不明
552	R7-M552	β-ナフトール 2-Naphthalenol	135-19-3	A	> 99
563	R7-M563	1-バルミチルピリジニウムの塩化物 Pyridinium, 1-hexadecyl-, chloride (1:1)	123-03-5	B	不明
569	R7-M569	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 Phenol, 4-[[4,6-bis(octylthio)-1,3,5-triazin-2-yl]amino]-2,6-bis(1,1-dimethylethyl)-	991-84-4	G	不明
571	R7-M571	N, N'-ビス (サリチリデン) -1, 2-プロパンジアミン Phenol, 2,2'-[(1-methyl-1,2-ethanediyl)bis(nitriomethylidene)]bis-	94-91-7	A	> 98
572	R7-M572	N, N'-ビス (2, 6-ジイソプロピルフェニル) -カルボジイミド Benzenamine, N,N'-methanetetraylbis[2,6-bis(1-methylethyl)-	2162-74-5	A	> 98
578	R7-M578	4, 4'-ビス (α, α-ジメチルベンジル) ジフェニルアミン Benzenamine, 4-(1-methyl-1-phenylethyl)-N-[4-(1-methyl-1-phenylethyl)phenyl]-	10081-67-1	A	> 98
587	R7-M587	N, N-ビス (2-ヒドロキシエチル) -ラウリン酸アミド Dodecanamide, N,N-bis(2-hydroxyethyl)-	120-40-1	B	不明
589	R7-M589	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] チオジェチレン Benzenepropanoic acid, 3,5-bis(1,1-dimethylethyl)-4-hydroxy-, 1,1'-(thiodi-2,1-ethanediyl) ester	41484-35-9	A	> 98
592	R7-M592	ビス (2-ヒドロキシプロピル) アミン 2-Propanol, 1,1'-iminobis-	110-97-4	A	> 90

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.、I : Combi-Brocks Inc.

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 (%)
593	R7-M593	2, 2-ビス (ヒドロキシメチル) プロピオン酸 Propanoic acid, 3-hydroxy-2-(hydroxymethyl)-2-methyl-	4767-03-7	A	> 97
614	R7-M614	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 Phenol, 2-(5-chloro-2H-benzotriazol-2-yl)-4,6-bis(1,1-dimethylethyl)-	3864-99-1	A	不明
622	R7-M622	12-ヒドロキシステアリン酸 Octadecanoic acid, 12-hydroxy-	106-14-9	A	> 75
629	R7-M629	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 Benzenepropanoic acid, 3-(1,1-dimethylethyl)-4-hydroxy-5-methyl-, 1,1'-[1,2-ethanediylbis(oxy-2,1-ethanediyl)] ester	36443-68-2	G	不明
634	R7-M634	4-ヒドロキシメチル-2, 6-ジ-tert-ブチルフェノール Benzenemethanol, 3,5-bis(1,1-dimethylethyl)-4-hydroxy-	88-26-6	A	不明
637	R7-M637	ヒドロキノン 1,4-Benzenediol	123-31-9	A	> 99
638	R7-M638	ビニルトリメトキシシラン Silane, ethenyltrimethoxy-	2768-2-7	A	> 98
661	R7-M661	フタル酸エチルエトキシカルボニルメチル 1,2-Benzenedicarboxylic acid, 1-(2-ethoxy-2-oxoethyl) 2-ethyl ester	84-72-0	A	> 93
663	R7-M663	フタル酸ジイソブチル 1,2-Benzenedicarboxylic acid, 1,2-bis(2-methylpropyl) ester	84-69-5	A	不明
672	R7-M672	フタル酸ビス (2-ブトキシエチル) 1,2-Benzenedicarboxylic acid, 1,2-bis(2-butoxyethyl) ester	117-83-9	A	> 85
686	R7-M686	N-ブチル-カルバミン酸 3-ヨード-2-プロピニル Carbamic acid, N-butyl-, 3-iodo-2-propyn-1-yl ester	55406-53-6	A	> 97
689	R7-M689	tert-ブチルヒドロペルオキシド Hydroperoxide, 1,1-dimethylethyl	75-91-2	A	不明
690	R7-M690	N-ブチル-ベンゼンスルホン酸アミド Benzenesulfonamide, N-butyl-	3622-84-2	A	不明
704	R7-M704	プロピレングリコール単独重合体 Poly[oxy(methyl-1,2-ethanediyl)], α -hydro- ω -hydroxy-	25322-69-4	B	不明
713	R7-M713	ヘキサメチレンジイソシアネート Hexane, 1,6-diisocyanato-	822-06-0	B	> 95
715	R7-M715	N, N'-ヘキサメチレンビス [3- (4-ヒドロキシ-3, 5-ジ-tert-ブチルフェニル) プロピオン酸アミド] Benzenepropanamide, N,N'-1,6-hexanediylbis[3,5-bis(1,1-dimethylethyl)-4-hydroxy-	23128-74-7	I	> 98
744	R7-M744	マレイン酸 2-Butenedioic acid (2Z)-	110-16-7	A	> 99
747	R7-M747	マレイン酸ジブチル 2-Butenedioic acid (2Z)-, 1,4-diethyl ester	105-76-0	A	> 95
750	R7-M750	マレイン酸ビス (2-エチルヘキシル) 2-Butenedioic acid (2Z)-, 1,4-bis(2-ethylhexyl) ester	142-16-5	A	> 93
752	R7-M752	無水コハク酸 2,5-Furandione, dihydro-	108-30-5	A	> 95
756	R7-M756	無水フタル酸 1,3-Isobenzofurandione	85-44-9	A	> 98
762	R7-M762	メタクリル酸 3- (トリメトキシシリル) プロピル 2-Propenoic acid, 2-methyl-, 3-(trimethoxysilyl)propyl ester	2530-85-0	A	> 98
766	R7-M766	2-メチルオキシラン Oxirane, 2-methyl-	75-56-9	A	> 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.、I : Combi-Brocks Inc.

表2 各メーカーが設定した装置条件および測定条件

参加メーカー		アジレント・テクノロジー株式会社 (AG)	エーピー・サイエックス株式会社 (SX)	サーモフィッシャーサイエンティフィック株式会社 (TH)
装置	メーカー	Agilent	SCIEX	サーモフィッシャーサイエンティフィック株式会社
	製品名	6475A	QTRAP4500	TSQ Fortis Plus
カラム	メーカー	Agilent	Phenomenex	サーモフィッシャーサイエンティフィック株式会社
	製品名	InfinityLab Poroshell HPH-C18	Kinetex Polar C18	Acclaim™ 120 C18
	サイズ	2.1 × 100 mm	3.0 × 100 mm	2.1 × 100 mm
	粒子径	2.7 μm	2.6 μm	3 μm
LC条件	流量	0.3 mL/min	0.4 mL/min	0.4 mL/min
	注入量	1 μL	5 μL	1 μL
	カラム温度	40°C	40°C	40°C
	移動相条件	5 %B (0 min) → 100 %B (20 min) → 100 %B (30 min)	5% → 100% B (0-10 min), 100% B (10-15 min)	5% → 100% B (0-10 min), 100% B (10-16 min)
	移動相A	5 mM ギ酸アンモニウム	5 mmol/L ギ酸アンモニウムを含む超純水	5 mmol/L ギ酸アンモニウム/水溶液
	移動相B	5 mM ギ酸アンモニウム/メタノール	5 mmol/L ギ酸アンモニウムを含むメタノール	5 mmol/L ギ酸アンモニウム/メタノール溶液
MS条件	測定モード	ESI (+)	ESI (+), ESI (-)	ESI (+), ESI (-)
	検出モード	SCANおよびMulti Reaction Monitoring (MRM) モード	SCANおよびMulti Reaction Monitoring (MRM) モード	SCANおよびMulti Reaction Monitoring (MRM) モード
	その他各種装置条件	一般的な測定条件	一般的な測定条件	一般的な測定条件
参加メーカー		株式会社島津製作所 (SZ)	日本ウォーターズ株式会社 (WA)	
装置	メーカー	株式会社島津製作所	Waters	
	製品名	Nexera X3/LCMS-8045RX	H-Class / Xevo TQ-S micro	
カラム	メーカー	株式会社島津製作所	Waters	
	製品名	Shim-pack Scepter C18-120	ACQUITY UPLC BEH C8	
	サイズ	2.1 × 100 mm	2.1 × 50 mm	
	粒子径	3 μm	1.7 μm	
LC条件	流量	0.2 mL/min	0.35 mL/min	
	注入量	0.2 ~ 10 μL	2 μL	
	カラム温度	40°C	40°C	
	移動相条件	5% B (0-2 min), 5 → 100% B (2-10 min), 100% B (10-15 min)	1 → 99% B (0-3 min), 99% B (3-8 min)	
	移動相A	5 mmol/L ギ酸アンモニウム水溶液	5 mmol/L ギ酸アンモニウム水溶液	
	移動相B	5 mmol/L ギ酸アンモニウムメタノール	5 mmol/L ギ酸アンモニウムメタノール	
MS条件	測定モード	ESI (+), ESI (-)	ESI (+), ESI (-)	
	検出モード	SCANおよびMulti Reaction Monitoring (MRM) モード	SCANおよびMulti Reaction Monitoring (MRM) モード	
	その他各種装置条件	一般的な測定条件	一般的な測定条件	

別添 1 結果報告シート

結果報告シート(LC-MS/MS)

機関名

1. 化合物情報

通し番号	315
化合物名(和名)	2, 4 - ジアミノ - 6 - ヒドロキシピリミジン
ラベル番号	(No.R7-M315)
化合物名(英名)	4(3H)-Pyrimidinone, 2,6-diamino-
CAS No.	56-06-4
分子量	126

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(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 (-)

キャビタリー電圧

(kV)

コーン電圧

(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)

コーンガス流量

(L/hr)

コロナ電流

(μA) *APCIの場合

3. 検出条件

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

ボシティブモード

5. 検出条件*1

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!						

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

7. マスクロマトグラム

MRM

Conc.

μg/mL

S/N

8. 特記事項

9. 検量線

ネガティブモード

5. 検出条件*1

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!						

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

7. マスクロマトグラム

MRM

Conc.

μg/mL

S/N

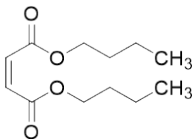
8. 特記事項

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		105-76-0	通し番号	747	構造	
組成式		C12H20O4	分子量	228		
物質名	和名	マレイン酸ジブチル				
	英名	2-Butenedioic acid (2Z)-, 1,4-dibutyl ester				

◎分析情報☆

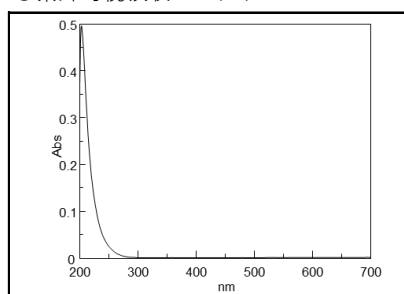
OLC-MS/MS

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	5	229	99	117	57		0.5							
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。

<データについて>

取得機関について

当データベースにおけるデータは、分析機器会社等（以降、機関とする）と国立医薬品食品衛生研究所とが共同で取得したものです。各機関の同意を得てデータベースに掲載しています。

分析条件について

LC-MS/MS および GC-MS データ取得における代表的な分析条件を以下に示します。軽微な変更は可能とし、また、記載していない条件は各機関で個別に設定して測定しました。

OLC-MS/MS

- ・カラム：C18 または C8
- ・移動相：5 mM ギ酸アンモニウム/水溶液（A液）、5 mM ギ酸アンモニウム/メタノール溶液（B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 μ L
- ・イオン化モード：ESI (+), ESI (-)
- ・検出モード：フルスキャンおよび Multi Reaction Monitoring (MRM)

OGC-MS

- ・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 μ m）
- ・カラム温度：50°C 以下-20°C/min-320°C（20min）
- ・キャリアーガスおよび流量：He、1 mL/min（定流量、定線速度または定圧）
- ・注入量：1 μ L
- ・イオン化電圧：70 eV
- ・検出モード：スキャンおよび Selected Ion Monitoring (SIM)
- ・チューニング：オートチューンまたは Decafluoro-triphenylphosphine (DFTPP) 法

データのまとめについて

公開されている情報は、各機関において取得したデータを基に、公開を目的として国立医薬品食品衛生研究所にて取りまとめたものです。とりまとめの方法については以下の通りです。

OLC-MS/MS および GC-MS 共通

- ・1 化合物につき 1 種の定量イオンおよび 1~3 種の確認イオンを選択しています。
ただし、その組み合わせが明確に異なっていた場合はパターンA、B 等として複数の組み合わせを示しています。
- ・測定限界は MRM モードまたは 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シグナルノイズ比（S/N）と、その時の注入量から、S/N=10 となる量（ng）を計算で求めています。また、3機関以上から情報が得られた場合に、その中で最も高い数値を示すこととし、それ以外の場合は N/A (not applicable) (該当なし・適用不可) としています。
- ・データが得られなかった場合や、データを示すための情報が不十分と判断した場合も N/A としています。

OLC-MS/MS

- ・MS 条件は各化合物について最適化していませんので、測定限界が高い数値となっている場合があります。
- ・原則としてポジティブモードでデータが得られた場合はネガティブモードでの測定は行っていません。
ただし、機関によって異なりますので、両方のデータが記載されている場合もあります。

別添 3 食品用器具・容器包装のポジティブリスト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	55	57				10
8	アクリル酸ブチル	141-32-2	+129	55	59				60
15a	アジピン酸ジ（2－エチルヘキシル）	103-23-1	+371	83	55				40
			+371	129	147	111			
15b	アジピン酸ジオクチル	123-79-5	+371	129	259	147	111		50
			+371	147	129	111			
15c	アジピン酸ジイソブチル	141-04-8	+259	129	185	111			2
			+259	185	129	111			
15d	アジピン酸ジイソデシル	27178-16-1	+427	129	269	85			10
			+427	269	129	111			
15e	アジピン酸ジイソノニル	33703-08-1	+399	129	255	71			80
			+399	255	129	111			
21	アセチルアセトン	123-54-6	+118	101	43				2000
27	アセチルリシノール酸メチル	140-03-4	+355	295	263	55			200
			+372	263	295				
			+372	295	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	55	73	58	45		70
			+90	73	55	43			
58	アルキルスルホン酸	5324-84-5	-193	80	81	65			0.3
67	安息香酸	65-85-0	-121	77	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	149	105	77			10
			+332	149	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	163	105	77			10
			+360	163	343				
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	+801	219	203	163			0.004
			+802	219	784	203			
			+807	807	219	152			
82	イソソルピド	652-67-5	+147	69	85	55			800
89	2－イミダゾリジノン	120-93-4	+87	59					90
			+87	44	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	205	231	189			50
			+456	177	57				
			+456	233	177	57			

別添3 食品用器具・容器包装のポジティブリスト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（ <i>m/z</i> ）						定量下限値 ^c (ng)
			プリカーサー ^d	プロダクト ^b					
96	2-エチルヘキサン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				
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>	<u>45</u>		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	エトキシシラ処理されたソルビ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	<u>57</u>		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				

別添3 食品用器具・容器包装のポジティブリスト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（ <i>m/z</i> ）						定量下限値 ^c (ng)
			プリカーサー ^d	プロダクト ^b					
275	L-グルタミン酸	138-15-8	+148	84	130	102			3000
277	グルタル酸ジメチル	1119-40-0	+161	129	101	59			800
			+161	101	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	105	77	63			90
290	酢酸2-（2-エトキシエトキシ）エチル	112-15-2	+177	43					5
			+177	87	117	73			
			+194	87					
298	酢酸2-（2-ブトキシエトキシ）エチル	124-17-4	+205	87	89	57			2
			+222	87	43				
309	シアヌル酸トリアリル	101-37-1	+250	81	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	232	250	204	105		20
			+295	232	250				
315	2,4-ジアミノ-6-ヒドロキシピリミジン	56-06-4	-125	83					30
			+127	60	68	85			
			+127	68	85	60	30		
			+127	85					
318	ジ垂リン酸ジステアリルペンタエリスリチル	3806-34-6	N/A						
329	N,N-ジエチル-アニリン	91-66-7	+150	106	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	73	117	89	45		100
			+152	73	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	89	121	77			80
			+183	121	89	77			
			+200	121	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	107	89	57			80
			+180	107	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	255	387	361			30
			-477	431					
			+433	350	308				
			+450	257	189	175			
347	2,4-ジクロロ-6-（4-ホルホルニル）-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	58	141	140			30
357	N,N'-ジフェニル-エチレンジアミン	150-61-8	+213	120	118	77	51		4
368	2,5-ジ-tert-ブチルヒドロキノン	88-58-4	-221	220	205	164			40000
371	ジ-tert-ブチルペルオキシド	110-05-4	N/A						

別添3 食品用器具・容器包装のポジティブリスト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（ <i>m/z</i> ）						定量下限値 ^c （ng）
			プリカーサー ^d	プロダクト ^b					
373a	ジブロピレングリコール	110-98-5	+135	59	117	77			100
			+152	59	117				
373b	ジブロピレングリコール（構造異性体混合物）	25265-71-8	+135	59	117	77	31		30
			+152	59	117				
382	エルカミド	112-84-5	+338	69	57	55			200
			+338	321	303	111			
387	ステアリン酸のリチウム塩	4485-12-5	-283	251	267				1000
			-283	283	265				
			+283	283	265				
390	オクタノール	111-87-5	N/A						
	デカノール	112-30-1	N/A						
	ドデカノール	112-53-8	N/A						
	トリデカノール	112-70-9	N/A						
	テトラデカノール	112-72-1	N/A						
	ステアリルアルコール	112-92-5	N/A						
	トリデカノール（構造異性体混合物）	26248-42-0	N/A						
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	107	106	77			50
393	N，N－ジメチル－6－アミノウラシル	6642-31-5	-154	40	97				2
			+156	42	57				
			+156	57	82	42			
			+156	82	99	57			
			+156	99	89	82			
399	N，N－ジメチル－シクロヘキシルアミン	98-94-2	+128	55	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	73	341	147			10
			+462	341	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	73	201	95			6000
			+308	201	162	111			
407	N，N－ジメチル－1，3－プロパンジアミン	109-55-7	+103	86	58	30			100
411	酒石酸	87-69-4	-149	87	103	73			1000
448	セバシン酸ジ（2－エチルヘキシル）	122-62-3	+427	185	315	185	71	57	10
456	ソルビン酸	110-44-1	+113	95	67	57			40
465	3，3'－チオジブロピオン酸ジアルキル	123-28-4	+515	143	329	55			0.3
			+532	143	329	115	55		
			+533	515	329	143			
468	1，10－デカンジカルボン酸	693-23-2	+229	211	167	165			10
			+248	213	231				

別添3 食品用器具・容器包装のポジティブリスト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（ <i>m/z</i> ）						定量下限値 ^c （ng）
			プリカーサー ^d	プロダクト ^b					
477	テトラヒドロフラン	109-99-9	N/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	+241	88	196	120	73	44	0.05
487	4-（1, 1, 3, 3-テトラメチルブチル）フェノール	140-66-9	+205	134	133	117			
490	テレフタル酸ビス（2-エチルヘキシル）	6422-86-2	+391	167	279	71			0.4
			+391	279	167	149			
			+391	359	327				
			+408	279	167				
501	トリエタノールアミン	102-71-6	+150	132	88	70			30
			+150	70	132	88			
503	トリエチルアミン	121-44-8	+102	58	74	46			600
			+102	74	58	72			
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	-543	337	338	281			2
			-543	338	281				
			+562	191	381	135			
528	トリプロピレングリコール	24800-44-0	+193	59	161	117	57	31	6
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	+207	73	175	131	45		0.9
532	N, N, N-トリメチル-ベンジルアンモニウムの塩化物	56-93-9	+150	91	65	58			0.4
			+186						
540	トリメリット酸トリアルキル	3319-31-1	+547	193	305	113			0.5
			+547	305	323	193			
552	β-ナフトール	135-19-3	-143	115					300
			+143	115					
563	1-パルミチルピリジニウムの塩化物	123-03-5	+304	80	71	57	43	41	8
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	-587	58	474				4
			+589	250	533	289			
			+589	289	306	250	233		
			+589	477	533				
571	N, N'-ビス（サリチリデン）-1, 2-プロパンジアミン	94-91-7	-281	120					40
			+283	145	162	107			
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	+363	186	170	146			0.05
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	+406	196	391	119	91		0.04
587	N, N-ビス（2-ヒドロキシエチル）-脂肪酸アミド	120-40-1	+288	105	88				0.2
			+288	106	277	227	88	70	
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	-641	423	381	277	83		4
			-642	423					
			+660	249	309	193			
			+660	309	249	193			
592	ビス（2-ヒドロキシプロピル）アミン	110-97-4	+134	98	116	41			2

別添3 食品用器具・容器包装のポジティブリスト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（ <i>m/z</i> ）						定量下限値 ^c （ng）
			プリカーサー ^d	プロダクト ^b					
593	2， 2－ビス（ヒドロキシメチル）プロピオン酸	4767-03-7	-133	85	103	71	41		2
			+133	85	103				
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	+358	57	302				3
			+358	302	246	154	57		
622	12－ヒドロキシステアリン酸	106-14-9	-299	113					30
			-299	253					
			-299	281	253	169	113		
			+283	71	57				
			+318	283	121				
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	-585	367	409	233			0.7
			-585	409	367				
			+604	177	263	207			
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	-235	160	217				5
			-235	217	160	145			
			-236	219	161	146			
			+219	203	105				
			+236	218	161	146			
637	ヒドロキノン	123-31-9	+111	69					-
			+111	55					
638	ビニルトリメトキシシラン	2768-2-7	-147	62					-
			+149	149					
661	フタル酸エチルエトキシカルボニルメチル	84-72-0	+281	149	177				0.2
			+281	177	235	149			
			+298	149	281	177			
			+298	177					
663	フタル酸ジイソブチル	84-69-5	+279	57					1
			+279	149	205	121	57		
672	フタル酸ビス（2－ブトキシエチル）	117-83-9	+367	101	57				0.1
			+367	249	101	57	45		
			+384	101	249	45			
686	N－ブチル－カルバミン酸3－ヨード－2－プロピニル	55406-53-6	+282	57	165	100			30
			+282	165	57	41			
689	tert－ブチルヒドロペルオキシド	75-91-2	-89	89					10000
690	N－ブチル－ベンゼンスルホン酸アミド	3622-84-2	+91	55					20
			-212	65					
			+214	77	158	141			
			+214	158	141	77			

別添3 食品用器具・容器包装のポジティブリスト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					
704	プロピレングリコール単独重合体	25322-69-4	+367	<u>117</u>	175	59			2
			+384	<u>59</u>	175	117			
			+442	<u>59</u>	175	117			
			+442	<u>425</u>	117	59			
			+500	<u>59</u>	175	117			
			+501	<u>484</u>					
713	ヘキサメチレンジイソシアネート	822-06-0	+169	<u>126</u>	98	83	55		0.3
715	N，N'-ヘキサメチレン-ビス〔3－（4－ヒドロキシ－3，5－ジ-tert－ブチルフェニル） プロピオン酸アミド〕	23128-74-7	+637	<u>100</u>	525	321			0.07
			+637	<u>321</u>	582	525			
			+637	<u>525</u>					
			+638	<u>100</u>	321				
			+638	<u>581</u>	525	321			
744	マレイン酸	110-16-7	-115	<u>71</u>	27				50
			-115	<u>115</u>	71				
			+115	<u>71</u>					
747	マレイン酸ジブチル	105-76-0	+229	<u>99</u>	117	57			0.5
750	マレイン酸ビス（2－エチルヘキシル）	142-16-5	+341	<u>117</u>	229	99			8
			+358	<u>341</u>	117	99			
			+363	<u>251</u>	139	23			
752	無水コハク酸	108-30-5	-99	<u>55</u>					500
			-117	<u>73</u>	99				
			+101	<u>73</u>	55	43			
756	無水フタル酸	85-44-9	-165	<u>121</u>	77				1000
			+149	<u>65</u>	121	93			
762	メタクリル酸3－（トリメトキシシリル）プロピル	2530-85-0	+249	<u>131</u>	177	121			7
			+249	<u>175</u>	217	69			
			+249	<u>217</u>					
			+266	<u>217</u>					
766	2－メチルオキシラン	75-56-9	N/A						

令和7年度の分析対象化合物

^a：令和8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。