

## <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<sup>1)</sup>。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<sup>2)</sup>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<sup>2)</sup>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)、ポリイミド (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 |
|        | 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      |
| 樹脂     | 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     |
|        | アクリル系樹脂  | AA               | -          | -                | 6    | -   | 6       |
| 接着剤    | 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<br>もしくは試験片* | 検出化合物 |     |          |  |                                   | 候補化合物  |             |      |       |      | 検出化合物との<br>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 <sub>14</sub> H <sub>28</sub> O <sub>2</sub> | [M+H] <sup>+</sup>                | Ethyl laurate  | 106-33-2    | 14.9 | 725   | 1.09 | ×                 |
| 試験片1-3、2-3            | 17.0  | 796 | 311.3134 | C <sub>20</sub> H <sub>38</sub> O <sub>2</sub> | [M+H] <sup>+</sup>                | Vinyl stearate   | 111-63-7    | -    | -     | -    | ×                 |
| 試験片1-3、2-3            | 19.2  | 848 | 313.3292 | C <sub>20</sub> H <sub>40</sub> O <sub>2</sub> | [M+H] <sup>+</sup>                | Butyl palmitate  | 111-06-8    | 22.7 | 922   | 1.09 | ×                 |
| ペレット2                 | 27.3  | 980 | 492.4407 | C <sub>31</sub> H <sub>54</sub> O <sub>3</sub> | [M+NH <sub>4</sub> ] <sup>+</sup> | 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<sup>2)</sup>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<sub>14</sub>H<sub>28</sub>O<sub>2</sub> (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<sub>20</sub>H<sub>40</sub>O<sub>2</sub> (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<sub>20</sub>H<sub>38</sub>O<sub>2</sub> (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<sub>31</sub>H<sub>54</sub>O<sub>3</sub> (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<br>(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] <sup>+</sup> | 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] <sup>+</sup>  | 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] <sup>+</sup> | 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] <sup>+</sup>  | 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] <sup>+</sup>  | 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] <sup>+</sup>  | 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] <sup>+</sup>  | 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] <sup>+</sup>  | 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] <sup>-</sup>  | 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] <sup>+</sup> | 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] <sup>+</sup> | 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] <sup>-</sup>  | 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] <sup>-</sup>  | 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] <sup>-</sup>  | 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] <sup>+</sup> | 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] <sup>+</sup>  | 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   |             |