定量的ノンターゲット分析を基にした再生プラスチックに含まれる化学物質の包括的なリスクスクリーニング手法の開発

静岡県立大学 UNIVERSITY OF SHIZUOKA

研究代表者：徳村 雅弘（静岡県立大学 食品栄養科学部）　研究分担者：榎本 剛司（静岡県立大学 食品栄養科学部）

tokumura@u-shizuoka-ken.ac.jp

再生プラスチック中に存在する化学物質の課題

再生プラスチックに関する取り組み[1,2]

・ELV規則案（欧州）
→新車の生産に20%以上の再生プラスチックが必要

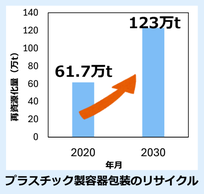
・ICCM（国際化学物質管理会議）
→安全な化学物質の利用でサーキュラーエコノミーを実現
→製品の全ライフサイクルにて化学物質管理を推進

プラスチック資源循環戦略

2030年
2020年時点からリサイクル量を倍増

2035年
プラスチックを100%リユース・リサイクル

義務化が進んでいる



プラスチック製容器包装のリサイクル

自動車向け再生プラスチック市場構築に向けた課題

・品質が低く，バラツキが大きい
・懸念化学物質等規制への対応に向けた体制が不足している

再生プラスチックの特徴

漁具類（沖縄県 八重山漁港）

・強度の観点から高頻度に交換される
・漁網やテグスが毎年50トン以上廃棄されている

再生プラスチックに含まれる化学物質を網羅的に分析する手法の開発が求められている

ノンターゲット分析

ノンターゲット分析とは？

事前に測定対象を決めず，サンプルに含まれる多種類の化学物質を定性・定量分析する手法

	ABS樹脂の玩具5)	リサイクルペットボトル6)	河川堆積物7)
分析機器	GC-MS	GC×GC-MS	GC-MS
検出数（定性）	83種類	27種類	57種類
定量	なし	標準物質を用いた定量	なし

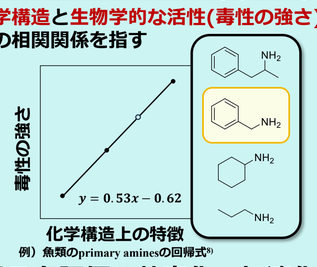
濃度はどの程度か？
ハザード情報は明らかなのか？

化学物質の種類が多く，定量分析とハザード評価が追いつかない

毒性予測（*in silico*）手法

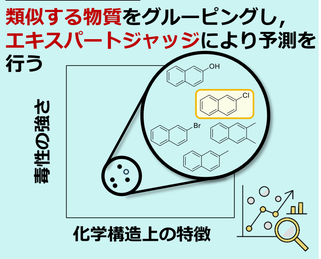
定量的構造活性相関（QSAR）

化学構造と生物学的な活性(毒性の強さ)との相関関係を指す



Read-across

類似する物質をグルーピングし，エキスパートジャッジにより予測を行う



リスク評価の効率化，加速化，動物実験の削減につながる

EU REACH，米国環境保護庁（US EPA）：使用が推奨されている
環境省，厚生労働省：使用が検討されている

有害性評価支援システム統合プラットフォーム(HESS)

化学物質をグルーピングし，対象物質の反復投与毒性をRead-acrossで予測することを支援するシステム

Ecological Structure Activity Relationships (ECOSAR)

米国環境保護庁（EPA）が開発した，魚類，ミジンコおよび藻類に対する毒性をQSARで予測するためのシステム

短時間でスクリーニング用の毒性値を予測する手法の開発が求められている

本研究の目的

再生プラスチック製品に含まれる化学物質の網羅的な定性・定量分析 × HESSとECOSARを用いた毒性ポテンシャルの推定 ＝ 網羅的なリスクポテンシャルの予測 → 再生プラスチックの安全性評価に資する情報が得られる

定性・定量分析及びリスクスクリーニング方法

サンプル

IEC62321-8 Py-GC/MS法に準拠10)

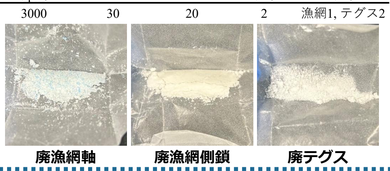
八重山漁港（沖縄県）　リサイクル利用が期待

・モズク養殖に使用された廃漁網（軸・側鎖）
・マグロ漁用に使用された廃テグス

凍結粉砕

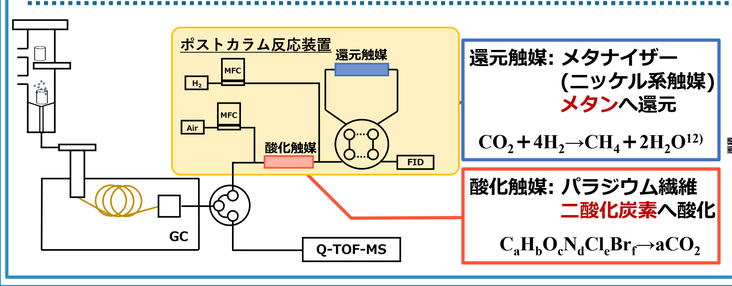
サンプルを10 mm程度にプレカットし，液体窒素を用いて冷却後，凍結粉砕

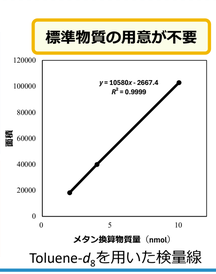
回転速度（rpm）	粉砕時間（s）	停止時間（s）	サイクル（回）	繰り返し回数（回）
3000	30	20	2	漁網1, テグス2



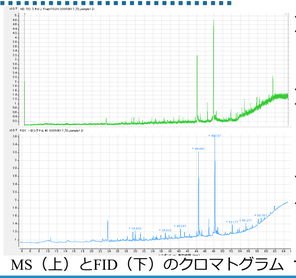
qNTA（分析）

ポストカラム反応熱分解ガスクロマトグラフ四重極飛行時間型質量分析計（Py-GC-Q-TOF-MS/PR-FID）を用いて定量的ノンターゲット分析（$n = 2$）





Toluene-d_8を用いた検量線


MS（上）とFID（下）のクロマトグラム

分析条件

Pyrolyzer		EGA/PY3030D (FRONTIER LAB)
Double-shot Analysis	Initial	100 ℃
	Rate	20 ℃ min^{-1}
	Final	260 ℃ (5 min)
Single-shot Analysis	Temp	600 ℃ (0.2 min)
GC		7890B (Agilent Technologies)
Column		InertCap 5MS (Length: 60 m, I.D.: 0.25 mm, Film thickness: 0.25 μm)
Carrier gas		He: 1 mL min^{-1}
Oven		40℃ (3 min)-5 ℃ min^{-1}-300℃ (5 min)
FID		
Temp.		300℃
H_2		40 mL min^{-1}
Air		400 mL min^{-1}
Make up		42 ml min^{-1}
Q-TOF-MS		7200
Ion source temperature		300 ℃
GC-ITF temperature		300 ℃
Ionization		EI+
Mode		SCAN
SCAN area		m/z 33-500
PR		TE-1100 (HORIBA STEC, Co., Ltd.)
O_2		1.0 mL min^{-1}
H_2		3.0 mL min^{-1}
Catalyst temperature		600℃
Valve temperature		150℃

曝露性ランクの推定13)

EPI Suiteを用いて蒸気圧，皮膚透過係数，有機炭素・水分配係数を推定

ヒト

・経気曝露ランク
濃度ランク × 揮発性ランク（蒸気圧）
・経皮曝露ランク
濃度ランク × 皮膚透過性ランク（皮膚透過係数）
・経口曝露ランク
濃度ランク × 吸着性ランク（有機炭素・水分配係数）

水生生物

・曝露ランク
濃度ランク × 溶出性ランク（有機炭素・水分配係数）

点数	濃度 (ng mg^{-1})	揮発性	皮膚透過性	吸着性	溶出性
3	1.0×10^3~	2.0~	100~	1.0×10^6~	~1.0×10^4
2	10~1.0×10^3	2.0×10^{-8}~2.0	1.0~100	1.0×10^4~1.0×10^8	1.0×10^4~1.0×10^8
1	~10	~2.0×10^{-8}	~1.0	~1.0×10^4	1.0×10^8~

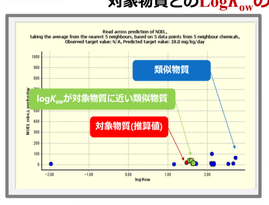
A	B	C	D	E
9点	6点	3,4点	2点	1点

有害性ランクの推定13)

HESSを用いてヒトの毒性ポテンシャル，ECOSARを用いて水生生物の毒性ポテンシャルを予測

HESS

Tanimoto係数上位20物質中から，対象物質とのLogK_{ow}の差0.50以下の平均



→ $NOEL_p$

ChV：慢性毒性
NOEL：無影響濃度
$NOEL_p$：毒性ポテンシャル

A	B	C	D	E
10未満	10以上 200未満	200以上 500未満	500以上 1000未満	1000以上

ECOSAR 例）Hexane

Organism	Duration	End point	Concentration (mg L^{-1})
Fish	-	ChV	0.555
Daphnid	-	ChV	0.428
Green Algae	-	ChV	1.31

最小値 → $NOEC_p$

ChV：慢性毒性，NOEC：水生生物の無影響濃度，$NOEC_p$：毒性ポテンシャル

A	B	C	D	E
1.0×10^{-10}未満	1.0×10^{-10}以上 1.0×10^{-8}未満	1.0×10^{-8}以上 1.0×10^{-5}未満	1.0×10^{-5}以上 1.0×10^{-2}未満	1.0×10^{-2}以上

製品中に存在する化学物質の定性・定量分析結果

上表：廃漁網軸，中表：廃漁網側鎖，下表：廃テグス（$n = 2$）

○ 香料　◎ 用途情報が少ない物質　◎ ポリマーの熱分解生成物　＊ピークが重なり，合算量として定量された濃度

ID	化合物	SMILES	類似度 (-)	濃度 (ng mg^{-1})	蒸気圧 (mm Hg at 25 deg C)	皮膚透過係数 (cm h^{-1})	K_{oc} (L kg^{-1})	用途
	2,4-Dimethylhept-1-ene	CCCC(C)CC(=C)C						ポリプロピレンの熱分解生成物
001	1-(1,2-Oxazol-5-yl)propan-2-one	CC(=O)CC1=CC=NO1	79	46	0.67	2.0×10^{-4}	8.9	-
002	2-Methyltetrahydrofuran-2-carbaldehyde	CC1(CCCO1)C=O	80	31	2.9	5.8×10^{-4}	6.1	-
003	1-(Octyldisulfanyl)octane	S(SCCCCCCCC)CCCCCCCC	94	16	3.1×10^{-5}	24	3.9×10^{6}	香料15)
004	5-Isopropyl-4-(trifluoromethyl)pyrimidin-2(1*H*)-one	O=C1NC=CC(C(F)(F)F)=C1	83	21	5.2×10^{-3}	5.6×10^{-4}	20	-
005	*n*-Hexacosane	CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC	87	14	5.3×10^{-6}	7.1×10^{3}	2.4×10^{11}	多くの天然物に含まれる14)，家具15)
006	2-(1-Phenylethyl)phenol	OC1=CC=CC=C1C(C2=CC=CC=C2)C	90	13	4.9×10^{-5}	3.3×10^{-2}	1.3×10^{3}	紫外線吸収剤14)
007	Tetradecane	CCCCCCCCCCCCCC	88	27	3.7×10^{-2}	7.4	1.8×10^{6}	香料，溶剤14)
008	Hexadecanoic acid	CCCCCCCCCCCCCCCC(=O)O	89	430	5.5×10^{-5}	3.3	1.3×10^{4}	洗剤，軟化剤14)
009	Octadecane	CCCCCCCCCCCCCCCCCCCC	86	20	3.1×10^{-4}	230	6.6×10^{8}	香料，溶媒14)
010	Hexacosan-1-ol	CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCO	92	46	2.2×10^{-9}	610	9.1×10^{6}	潤滑剤，溶媒14)
011	Octadecanoic acid	CCCCCCCCCCCCCCCCCC(=O)O	90	510	8.3×10^{-6}	12	5.1×10^{4}	プラスチック添加剤14)
012	Decanamide	CCCCCCCCCC(=O)N	70	30*	1.3×10^{-4}	1.2×10^{-2}	2.8×10^{2}	-
013	2-Ethoxyethyl (*E*)-3-(4-methoxyphenyl)prop-2-enoat	CCOCCOC(=O)/C=C/C1=CC=C(C=C1)OC	73	27	3.4×10^{-4}	3.6×10^{3}	2.0×10^{2}	紫外線カット剤14)
014	Tricosane	CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC	84	30	3.5×10^{-5}	1.3×10^{3}	1.3×10^{10}	香料14)
015	Tetracosane	CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC	72	14	1.7×10^{-5}	2.3×10^{3}	3.4×10^{10}	有機合成原料14)
016	Bis(2-ethylhexyl) benzene-1,2-dicarboxylate	CCCCC(CC)COC(=O)C1=CC=CC=C1C(=O)OCC(CC)CCCC	75	9.4	2.0×10^{-5}	1.1	9.9×10^{4}	可塑剤14)
017	Icosane	CCCCCCCCCCCCCCCCCCCC	81	20	3.1×10^{-4}	230	6.6×10^{8}	可塑剤14)
018	(6*E*,10*E*,14*E*,18*E*)-2,6,10,15,19,23-Hexamethyltetracosa-2,6,10,14,18,22-hexaene	CC(=CCC/C(=C/CC/C(=C/CC/C=C(/CC/C=C(/CCC=C(C)C)¥C)¥C)/C)/C)C	84	19	1.1×10^{-6}	1.9×10^{4}	1.8×10^{12}	有機着色剤14)
019	6-Acetyl-1-[(tert-butyldimethylsilyl)oxy]-7-(trimethylsilyl)-2,2-dimethyl-5,6-dihydro-2*H*-indene	CC(=O)C1CC2=C(C1C(C)(C)C)C=C(C=C2O[Si](C(C)(C)C)(C)C)[Si](C)(C)C	70	-	4.2×10^{-7}	18	2.8×10^{6}	-

ID	化合物	SMILES	類似度 (-)	濃度 (ng mg^{-1})	蒸気圧 (mm Hg at 25 deg C)	皮膚透過係数 (cm h^{-1})	K_{oc} (L kg^{-1})	用途
	Azepan-2-one	C1CCC(CC1)N.C1CCC(=O)NCC1						ナイロン6の熱分解生成物
001	Sodium 2-propyl-4,5-dihydro-1,3-oxazole-4-carboxylate	CCC1=NC(CC1)C(=O)[O-].[Na+]	87	59	1.7×10^{-9}	4.7×10^{-5}	0.44	-
002	7-Hexyloxepan-2-one	CCCCCCC1CCCCC(=O)O1	89	230	9.3×10^{-4}	2.7×10^{-2}	6.7×10^{2}	香料14)
003	2-(1-Phenylethyl)phenol	CC(C1=CC=CC=C1)C2=CC=CC=C2O	94	6.0	4.9×10^{-5}	3.3×10^{-2}	1.3×10^{3}	-
004	(1*S*,4*S*,4a*S*,10a*S*)-1,4,11,11-Tetramethyl-1,4-methano-1,2,3,4,4a,5,6,7,8,9,10,10a-dodecahydrocycloocta[d]pyridazine	C[C@@]12CC[C@@H]3[C@@H](CC[C@]1(C)C3)CN=N2	85	8.6	6.1×10^{-3}	0.37	1.7×10^{4}	-
005	2,6,10,14-Tetramethylhexadecane	CCC(C)CCCC(C)CCCC(C)CCCC(C)C	95	20	3.3×10^{-3}	1.5×10^{2}	3.7×10^{8}	有機合成中間体16)
006	Hexadecanoic acid	CCCCCCCCCCCCCCCC(=O)O	91	170	5.5×10^{-5}	3.3	1.3×10^{4}	洗剤，軟化剤14)
007	3-Methylundecane	CCCCCCCCC(C)CC	89	9.2	0.70	2.2	2.2×10^{5}	-
008	*N*-Butylbenzenesulfonamide	CCCCNS(=O)(=O)C1=CC=CC=C1	92	81*	1.4×10^{-4}	3.4×10^{-3}	2.2×10^{2}	可塑剤14)
009	Hexadecanoic acid	CCCCCCCCCCCCCCCC(=O)O	89	310	5.5×10^{-5}	3.3	1.3×10^{4}	洗剤，軟化剤14)
010	Octadecanoic acid	CCCCCCCCCCCCCCCCCC(=O)O	89	140	8.3×10^{-6}	12	5.1×10^{4}	プラスチック添加剤14)
011	Octadecan-1-ol	CCCCCCCCCCCCCCCCCCO	89	7.3	1.8×10^{-6}	6.4	6.1×10^{4}	建設資材，軟化剤14)
012	2-Ethoxyethyl (*E*)-3-(4-methoxyphenyl)prop-2-enoat	CCOCCOC(=O)/C=C/C1=CC=C(C=C1)OC	74	6.2	3.4×10^{-4}	3.6×10^{-3}	2.0×10^{2}	紫外線カット剤14)
014	3-Ethyl-2,2,5,5-tetramethylhexane	CCC(CC(C)(C)C)C(C)(C)C	73	47*	4.8	1.5	1.4×10^{5}	-
015	Hexadecane	CCCCCCCCCCCCCCCC	91	54*	7.0×10^{-3}	24	1.3×10^{7}	溶媒14)
016	Octadecane	CCCCCCCCCCCCCCCCCC	86	29	1.5×10^{-3}	74	9.3×10^{7}	香料，溶媒14)
017	Tetracosane	CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC	84	14	1.7×10^{-5}	2.3×10^{3}	3.4×10^{10}	有機合成原料14)
018	(Z)-1-[(t-Butyldimethylsilyl)oxy]-5-iodo-4-pentene	CC(C)(C)[Si](C)(C)OCCC(=O)C=C	76	-	0.11	1.5×10^{-2}	8.5×10^{2}	-
019	Tetradecane	CCCCCCCCCCCCCC	88	17	3.7×10^{-2}	7.4	1.8×10^{6}	香料，溶剤14)

ID	化合物	SMILES	類似度 (-)	濃度 (ng mg^{-1})	蒸気圧 (mm Hg at 25 deg C)	皮膚透過係数 (cm h^{-1})	K_{oc} (L kg^{-1})	用途
	Azepan-2-one	C1CCC(CC1)N.C1CCC(=O)NCC1						ナイロン6の熱分解生成物
001	Methyl prop-2-enoate	COC(=O)C=C	71	1900	87	1.8×10^{-3}	20	香料14)
002	2,4-Ditert-butylphenol	CC(C)(C)C1=CC(=C(C=C1)O)C(C)(C)C	91	110	2.7×10^{-3}	0.31	9.2×10^{3}	酸化防止剤14)
003	*N*-Butylbenzenesulfonamide	CCCCNS(=O)(=O)C1=CC=CC=C1	88	31	1.4×10^{-4}	3.4×10^{-3}	2.2×10^{2}	可塑剤14)
004	Azacyclotridecan-2-one	C1CCCCCC(=O)NCCCCC1	88	280	3.7×10^{-6}	1.1×10^{-2}	3.3×10^{2}	ポリアミド重合用モノマー，化粧品14)
005	*N*-(Cyclohexylmethyl)-N-propan-2-ylpropan-2-amine	CC(C)N(CC1CCCCC1)C(C)C	73	33	8.3×10^{-2}	0.14	2.6×10^{3}	-
006	tetracosane	CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC	94	9.7	1.7×10^{-5}	2.3×10^{3}	3.4×10^{10}	有機合成原料14)
007	Phenyl 4-[bis(ethoxycarbonyl)but-3-ynyl]-2,3,4-trideoxy-α-L-threo-pent-2-enopyranoside	CCOC(=O)C(CC#C)C(COC1=CC=CC=C1)C=C[C@H]1O[C@H](CO)[C@@H](O)[C@H]1O	91	-	8.1×10^{-15}	2.8×10^{-4}	18	-
008	*N*-(propan-2-yl)-1,7-dimethyl-4-aza-2,6,13-trioxapentacyclo[5.5.1.0³,¹¹.0⁵,⁹.0⁸,¹²]tridecane	CC(C)N1CC2OC3C(C1)OC4C(C3)OC2C4	82	66	4.4×10^{-4}	1.2×10^{-5}	0.90	-

検出数

廃漁網軸　：19種類
廃漁網側鎖：19種類
廃テグス　：8種類

・廃漁網は軸と側鎖でポリマーが異なっていた
→リサイクル時には分ける必要がある
・プラスチック添加剤や可塑剤が多く検出された
・香料成分や用途情報が不明な化学物質が複数検出された
→海洋中で付着，紫外線によって非意図的に生成，パイロライザーの熱抽出工程で非意図的に生成した可能性

本手法では各化学物質の標準試薬を用いずに定量できた

使用ステージと廃棄ステージの安全性評価

廃漁網（軸）

経気曝露

		有害性ランク A	B	C	D	E
曝露性ランク	A	0	0	0	0	0
	B	0	0	1	0	0
	C	0	7	4	3	0
	D	0	2	0	0	0
	E	0	0	0	0	0

経皮曝露

		有害性ランク A	B	C	D	E
曝露性ランク	A	0	0	0	0	0
	B	0	4	1	1	0
	C	0	0	3	1	0
	D	0	5	1	1	0
	E	0	0	0	0	0

経口曝露

		有害性ランク A	B	C	D	E
曝露性ランク	A	0	0	0	0	0
	B	0	3	1	1	0
	C	0	1	3	1	0
	D	0	5	1	1	0
	E	0	0	0	0	0

廃漁網（側鎖）

経気曝露

		有害性ランク A	B	C	D	E
曝露性ランク	A	0	0	0	0	0
	B	0	1	0	0	1
	C	0	3	4	2	2
	D	2	2	0	1	0
	E	0	0	0	0	0

経皮曝露

		有害性ランク A	B	C	D	E
曝露性ランク	A	0	0	0	0	0
	B	0	1	1	0	1
	C	0	1	3	2	2
	D	1	2	0	1	0
	E	1	2	0	0	0

経口曝露

		有害性ランク A	B	C	D	E
曝露性ランク	A	0	0	0	0	0
	B	0	1	1	1	2
	C	0	1	3	1	1
	D	2	2	0	1	0
	E	0	2	0	0	0

テグス

経気曝露

		有害性ランク A	B	C	D	E
曝露性ランク	A	0	1	0	0	0
	B	0	0	0	0	0
	C	0	3	2	1	0
	D	0	0	0	0	0
	E	0	0	0	0	0

経皮曝露

		有害性ランク A	B	C	D	E
曝露性ランク	A	0	0	0	0	0
	B	0	0	0	0	0
	C	0	2	0	0	0
	D	0	2	2	1	0
	E	0	0	0	0	0

経口曝露

		有害性ランク A	B	C	D	E
曝露性ランク	A	0	0	0	0	0
	B	0	0	0	0	0
	C	0	0	1	0	2
	D	0	0	0	0	5
	E	0	0	0	0	0

水生生物の曝露

		有害性ランク A	B	C	D	E
曝露性ランク	A	0	0	0	0	0
	B	0	1	4	2	0
	C	0	0	1	2	2
	D	0	0	0	1	6
	E	0	0	0	0	0

		有害性ランク A	B	C	D	E
曝露性ランク	A	0	0	0	0	0
	B	0	1	2	2	0
	C	0	0	0	3	3
	D	0	0	0	2	4
	E	0	0	0	0	2

		有害性ランク A	B	C	D	E
曝露性ランク	A	0	0	0	0	0
	B	0	0	0	0	0
	C	0	0	1	0	2
	D	0	0	0	0	5
	E	0	0	0	0	0

曝露性ランク，有害性ランクは推算値であるため，一般的なリスク評価とは異なることに留意する必要がある

リスクの可能性がある化学物質

	化合物	CAS No.	濃度 (ng mg^{-1})	用途
廃漁網軸	Hexacosan-1-ol	506-52-5	46	潤滑剤，溶媒15)
	Tricosane	638-67-5	30	香料14)
	Tetracosane	646-31-1	14	有機合成原料14)
	Icosane	112-95-8	20	可塑剤14)
廃漁網側鎖	Tetracosane	646-31-1	14	有機合成原料14)
	3-Ethyl-2,2,5,5-tetramethylhexane	120362-92-7	47	-
	N-Butylbenzenesulfonamide	2000238-49-1	81*	可塑剤14)
	Heptacosane	593-49-7	65	-
廃テグス	Methyl prop-2-enoate	96-33-3	1900	香料14)

＊ピークが重なり，合算量として定量された濃度

- 3製品の中では廃テグスが比較的安全な品質であることが確認された
- 廃漁網軸・廃漁網側鎖では曝露性ランク，有害性ランクともに高い化学物質が検出された
- 曝露性ランクと有害性ランクを考慮し，リサイクル後の用途を決定する

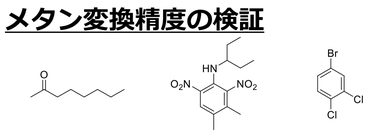
リサイクル後の使用用途の選定に資する情報が得られた

今後の展望

バージン材とリサイクル材の比較

- 検出される化学物質や濃度にどの程度差が生じるか比較

メタン変換精度の検証



- 含窒素化合物，含酸素化合物など50物質は十分な精度で定量できることが検証されている11)
- VOCやSVOC，PBDEについて検証

リサイクルプラスチックの匂い抽出

- qNTAを用いた再生プラスチック原料の品質安定化
- 超臨界二酸化炭素を用いた臭気物質抽出技術の活用17)

まとめ

- Py-GC-Q-TOF-MS/PR-FIDを用いることで非意図的な副生成物など，各化学物質の標準試薬を用いることなく定量分析を行うことができた
- 用途情報が不明な化学物質や香料成分が検出された
- 再生プラスチックのグレード分けに資する情報が得られた
- 廃漁網をリサイクルする際には強度低下を防ぐために軸と側鎖で分ける必要があることが示唆された
- 本手法により，低品質の再生プラスチック原料においてもリサイクル量を増加できる可能性がある

参考文献

1) 府川, 日本エネルギー学会機関誌えねるみくす, **99**, 2–9, 2020. 2) 環境省, 第3節 海洋プラスチックごみ汚染・生物多様性の損失. 3) OECD, Plastic leakage to the environment – projections. 4)Hahladakis et al., *J. Hazard. Mater*, **344**, 179–199, 2018. 5) Wu et al., *J. Chromatogr. A*, **1711**, 2023. 6) Dimitrov et al., *Polym. Degrad. Stab.*, **98**, 972–979, 2013. 7) Faure et al., *J. Anal. Appl. Pyrolysis*, **57**, 187–202, 2001. 8) 吉岡ら, 国立環境研究所 セミナー. 9) Lin et al., *Japanese Journal of Risk Analysis*, **21**, 23–31, 2011. 10) JAIMA, RoHS指令規制物質の分析. 11) 渡邊, 計測と制御, 60, 554-558, 2021. 12) 森ら, 日本化学会誌, 11, 1443-1448, 1979. 13) 小林, 室内環境中の未規制物質の網羅的解析に関する研究. 14) National Institutes of Health, PubChem. 15) U.S. Environmental Protection Agency, CompTox Chemicals Dashboard. 16) Chemicalbook. 17) 三原, 岐阜県産業技術センター研究報告, **10**, 2016.