

# 有機化学物質のスクリーニングに関する研究の動向

愛知県環境調査センター 水環境部 ○川口 豊太、竹内 優一郎、久保田 亨

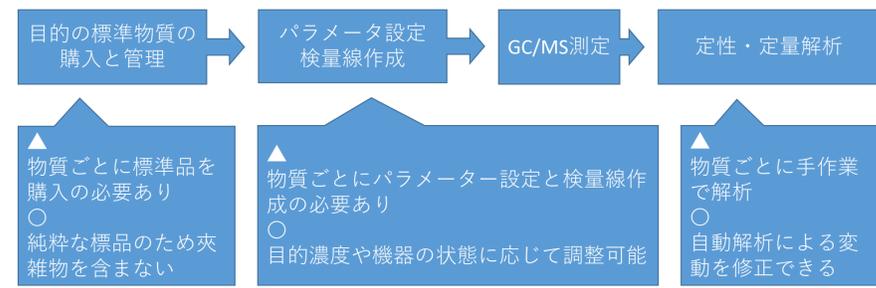
## はじめに

- ▶ 現在流通している化学物質は多岐にわたっており、その使用・廃棄によっては人の健康や生態系に影響を及ぼす恐れがある
- ▶ 自然災害等により工業地帯が被災した場合、様々な化学物質が同時に排出されることが懸念される
- ▶ 大気・水環境において、どの化学物質が、どの程度の濃度あるのか、一斉にかつ迅速に把握できる分析法の開発が必要

GC/MSで測定可能な化学物質に係る同時分析方法を検討する

## AIQS (全自動同定定量システム) の開発

▶ 化学物質の分析の流れ



▶ AIQS (全自動同定定量システム) の分析の流れ



▶ AIQSとは

GC/MSのパラメーターを一定にそろえることにより、個々の標準物質を用いずに、物質の同定と半定量が可能となるシステム

▶ AIQSの開発で一定にそろえるべき条件とそれに必要なデータ

- ① 保持時間
  - ⇒ 相対保持時間で揃える
  - ⇒ リテンションタイムロッキングで揃える
- ② 検量線
  - ⇒ 測定対象物質と内標準物質の定量イオン比を揃える
- ③ 質量スペクトル
  - ⇒ 測定対象物質ごとに干渉しない定量イオン (フラグメントイオン) のm/z設定
  - ⇒ 測定対象物質と内標準物質の定量イオン比と質量スペクトルが一定となるパラメーター調整

## 機種非依存型AIQS開発に向けた基礎検討

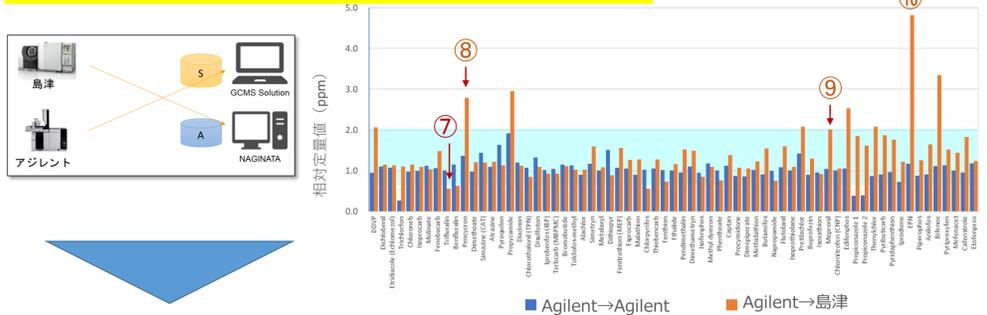
過去に国立環境研究所等が、既存のAIQS(GCMS Solution(島津), NAGINATA(Agilent))を利用し分析をした結果

▶ 同一試料を標準仕様のAIQSでそれぞれ測定した場合の値の比較



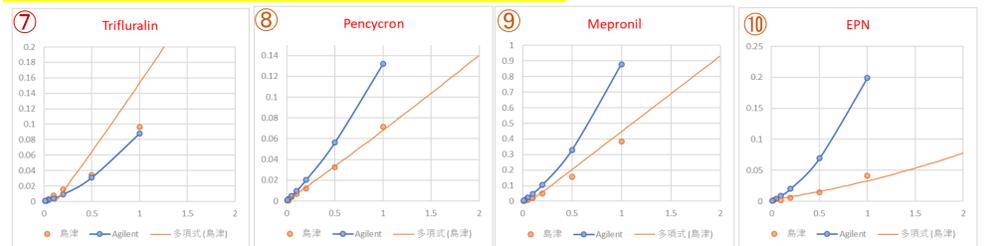
- ✓ 概ね 倍半分に収まる
- ✓ 島津の高沸点側が高い傾向
- ✓ いくつか規定濃度から外れるものもある

▶ 他社のAIQSを使用して読み込み、測定した場合



- ✓ Agilent→島津で解析すると、高沸点側で高濃度になる傾向

▶ AIQS測定データでの同定定量結果の比較



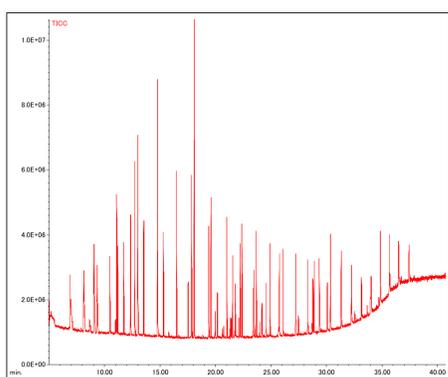
- ✓ 両者のデータベースに収載されている検量線が異なる
- ✓ 各機関ごとの装置間誤差の可能性も

◆ 各GC/MSメーカーごとの解析ソフトに互換性がなく、検量線も異なっている

◆ 各研究室の装置ごとに状態（注入口、カラムの汚染状態、感度、保持時間等）が異なっており、AIQSで解析するためには装置状態が一定レベル以上である必要がある。

⇒ 互換性のあるソフト開発と装置間誤差の確認が必要

## クライテリアサンプル溶液の測定結果と今後の課題



クライテリアサンプル溶液のクロマトグラム

- ▶ クライテリアサンプル溶液 ⇒ 装置のレベル試験液で、約50種の化学物質が含まれている

System Performance Report		
測定日	20190813040950-0000	
データファイル名	D:\MassHunter\GCMS\1\data\NAGINATA\クライテリア愛知県20190813	
測定方法名		
サンプル名	クライテリア測定	
一般情報	0	
バイアル番号		
オペレータ名	Mon Aug 19 14:03:49 2019	
解析日時	C:\Chemplus\QSR\F\k>Data\AIQS-Criteria.cri 2018/08/16 10:10	
クライテリアデータベース名		
NAGINATAチューニング日時		
解析結果		
注入口・ライナー	Captafol	PASS
	Isoxathion	PASS
カラム(注入口側)	2,4-Dichloroaniline	PASS
	2,4-Dinitroaniline	PASS
	Pentachlorophenol	RF
	Simazine (GAT)	PASS
カラム(MS側)	Fenitrothion (MEP)	PASS
その他(感度等)	2,6-Dichlorophenol	PASS
	2,6-Dimethylaniline	RF
	Benzo[h]thiazole	PASS
	Butyl benzyl phthalate	PASS
	Diethyl phthalate	PASS
保持時間	Chlorpyrifos-methyl	PASS
内部標準物質	1,4-Dichlorobenzene-d4	PASS
	4-Chlorotoluene-d4	PASS
	Aceraphthene-d10	PASS
	Chrysene-d12	PASS
	Fluoranthene-d10	PASS
	Naphthalene-d8	PASS
	Perylene-d12	PASS
	Phenanthrene-d10	PASS

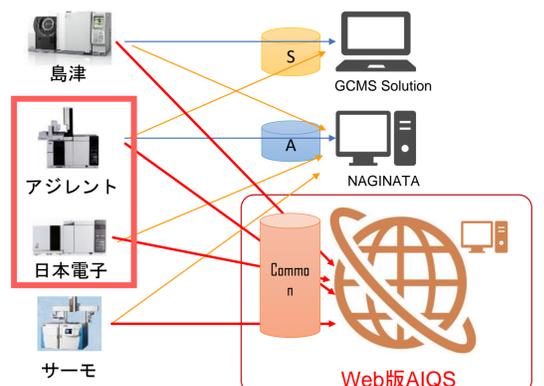
NAGINATA(AIQSの一種)による解析結果

▶ 愛知県環境調査センターにおけるクライテリアサンプル溶液測定結果

- ⇒ 装置の状態は良好
- 注入口・ライナー・カラム・絶対感度・保持時間・内標準物質の、それぞれの状態を判断できる化学物質が皆基準以上に検出できていた。

- ◆ チェックスタンダードの測定
- ◆ 既存データベースの修正
- ◆ 一般環境試料の測定

- ◆ Web版AIQSの作成
- ◆ Web版AIQSによる解析
- ◆ 共通環境試料の測定 etc...



本研究は、国立環境研究所と複数の地方環境研究所等の研究者が参加して実施するⅡ型共同研究「災害時等の緊急調査を想定したGC/MSによる化学物質の網羅的簡易迅速測定法の開発」と内容が類似していることから、同研究に参加し、連動して進めていきます。