

環境汚染物質の微量分析・リスク把握

MS 技術研究委員会

1. 活動領域

本研究委員会は、質量分析 (MS) を用いた環境中化学物質の微量分析技術の開発と活用を目的に活動している。得られた成果の普及や関連情報の共有を目的に Web サーバーを開設し (<https://ee-net.ne.jp/ms/>)、発表内容の公開、メーリングリストによるリアルタイムな情報交換、電子シンポジウム (e-シンポ) の開催等を行っている。

2. 発表の概要

今回は、口頭7題およびポスター8題の発表があった。

(1) 口頭発表

八十島 (島津テクノリサーチ) らは、海洋生分解性プラスチックの Poly (3-hydroxybutyrate-co-3-hydroxyhexanoate) を海水で生分解した試料とアルカリ加水分解した試料を LC Orbitrap MS で分析し、検出された中間生成物の存在比率からアルカリ加水分解で実海水での分解を模擬できる可能性を示唆した。市原 (大阪市環科研セ) らは、AIQS-LC における HILIC モード開発のため、32 種類の高極性物質を 5 種類の HILIC カラムで分析したところ、いずれのカラムでもピーク形状の崩れた物質が数種存在していた。そのため、金属吸着対策のなされたカラムの使用などによる改善が期待される。宮脇 (北九州市大) らは、AIQS-LC の装置状態をチェックする装置性能評価物質選定のため 15 種類の候補物質に対して劣化させたカラムで分析し、そのピーク形状やエリア値等の変化から、数種類の有用な物質を選定できた。選定に向け引き続き検証を進める予定である。門上 (北九州市大) らは、LC-QTOF-MS による汚染懸念物質の迅速かつ低コストでの発見を可能にするため、10000 物質を対象に全国 10 河川水のサスペクトスクリーニングを進め、日常的に使用される物質を中心に 187 物質が 2 河川以上から仮同定できた。藤井 (東京工大) らは、FT-ICR MS を用いた PFAS の超高分解能質量分析を通じて、高精度で CF₂ の質量差を検出し、質量差ネットワーク解析を用いた PFAS の網羅的検出技術を構築した。安田 (アジレント) らは、Agilent PFAS Database を用いた PFAS のターゲットスクリーニングの有用性を検証するため、簡易前処理した河川水を LC-MS/MS で分析後、MRM データベースを通じて解析したところ 11 種の PFAS を検出、定量でき、その有効性を実証できた。中田 (神奈川大) らは、標準物質の入手が困難な代謝物 *O*-desmethyl tramadol (ODT) の水環境中の存在量を Tramadol の検量線を用いて半定量し、下水処理場の影響を受けた河川では、ODT は Tramadol と同程度以上の濃度で存在していることを確認した。

(2) ポスター発表

姉崎 (北海道道総研) は、ポリ塩化ジベンゾフラン類 (PCDFs) の測定に影響を与えるポリ塩化ジフェニルエーテル (PCDEs) について底質試料を用いた除去検討を行ったところ、活性炭分散シリカゲルによる精製におい

て 25% ジクロロメタン/ヘキサン分画を行うこと、または HPLC (活性炭カラム) で処理を行うことで (ほぼ) 完全に除去できることを示した。坂井 (GL サイエンス) らは、全自動固相抽出装置を用いた多環芳香族炭化水素 (PAHs) の前処理と水素キャリアによる GC/MS 分析の検討を行い、試料水への 15% アセトン添加により、PAHs の吸着損失を防ぎつつ自動固相抽出処理できることを確認した。大方 (滋賀県大) らは、AIQS-LC のデータベース拡充のため、医薬品の Carbamazepin や農薬の Thiuram など計 31 物質を新たに追加登録した。今後、水質汚濁に係る環境基準項目や PRTR・事故対応物質を追加する予定である。伊藤 (岩手県環境研セ) らは、AIQS データを活用した未知物質推定の汎用性を高めるため、機械学習による保持指標予測の検討を行った。*N*-alkylpyridinium sulfonates (NAPS) を保持指標標準とし、機械学習を用いたところ、予測精度が高いモデルを確立することができ、今後、ノンターゲット分析による未知物質推定等に活用する予定である。小野 (大阪府環農水研) らは、グラフサンプリング (GS) と水相パッシブサンプリング (PS)、定量分析とターゲットスクリーニング分析 (TS (AIQS-GC/LC)) でそれぞれ有機化学物質を網羅的に測定し、手法の比較をしたところ、高頻度で検出した物質について従来の GS×定量分析と PS×TS とで概ね一致することを報告した。高原 (GL サイエンス) らは、有機フッ素化合物 (PFASs) 40 成分を対象に、グラフアイトカーボン (GCB) とポリマー系陰イオン交換固相 (WAX) を積層したカラムを用いて、環境試料の前処理方法について基礎評価を行った。その結果、InertSep WAX FF/GCB 積層カラムによって、試料の濃縮とクリーンアップの同時処理ができたが、鎖長の長い一部の PFAS が GCB に吸着するため、今後溶出条件の検討を実施予定である。西野 (東京都環科研) らは、LC-MS/MS を用いて東京都内の河川と下水処理場におけるスルファ系抗生物質の濃度実態と下水処理場内での挙動について調査した。その結果、下水等の排水がある河川ではスルファメトキサゾールとスルファピリジンが検出されたが、PNEC の超過はなかった。また、下水処理工程においてスルファピリジンは濃度が上昇するのに対し、サラゾスルファピリジンは濃度が減少する傾向があることを確認した。中野 (大阪大環安研管セ) は、計算化学を用いて PCB 異性体のエナンチオ選択的な毒性メカニズムを評価し、とくに PCB95 が大脳海馬に影響を与え、神経機能に悪影響を及ぼすことを示した。このメカニズムの理解は健康リスク評価において重要である。

今年も現地開催にてポスター発表も行うことができた。以上のように多様な研究分野から多くの発表演題が集まり、また、質問や討議に関しても活発で有意義な情報交換を行うことができた。

(兵庫県環境研究センター 松村千里)