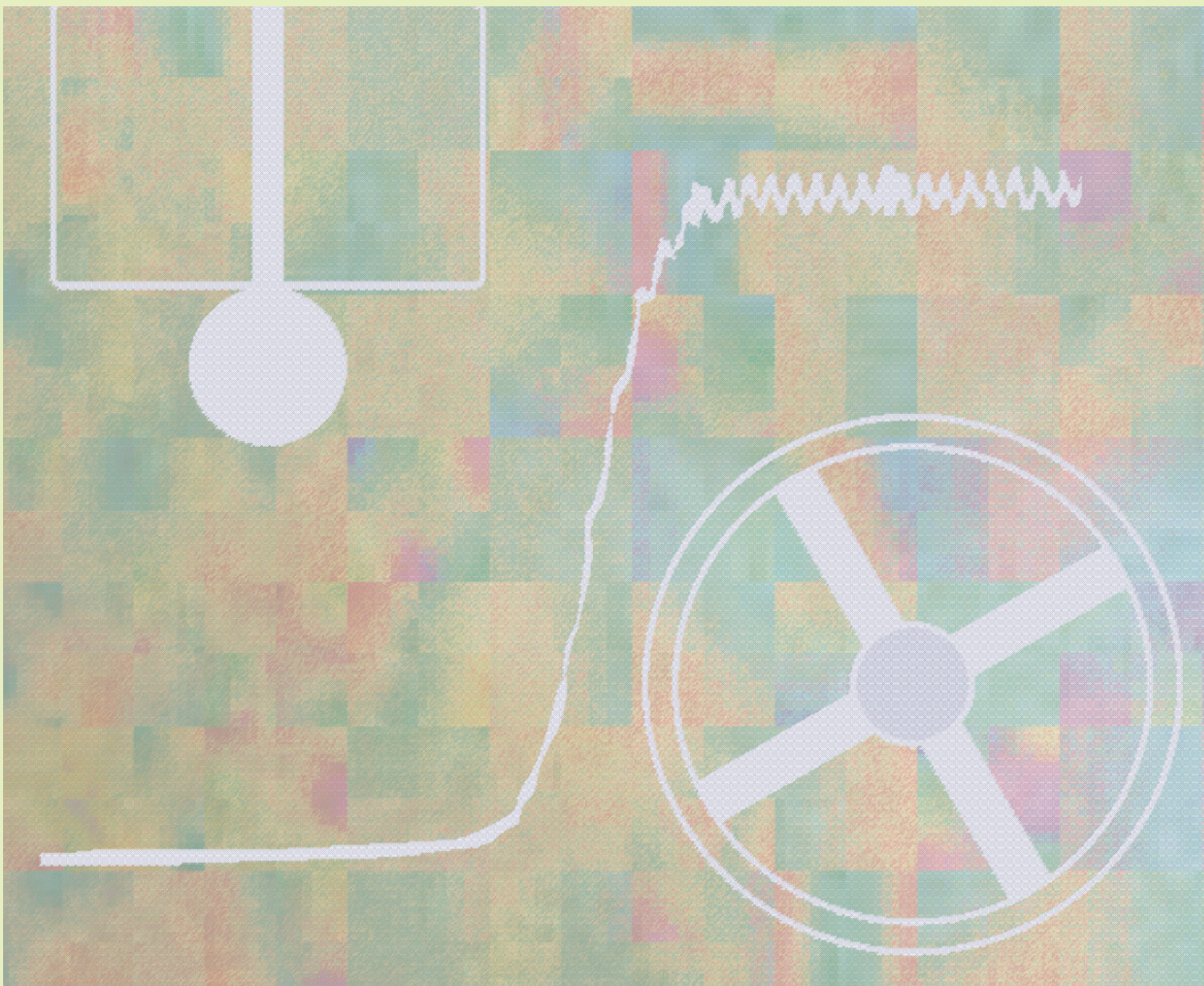


ぶんせき ⑤

Bunseki 2023

The Japan Society for Analytical Chemistry



赤外ラマン顕微鏡

Infrared / Raman Microscope

AIRsight



Raman and FTIR microscopy In perfect harmony

赤外分光法とラマン分光法

相補的な分子情報を得る2つの分析手法を融合した赤外ラマン顕微鏡
観察から解析まで簡単にできるシンプルなシステムで効率的な分析作業をサポートします。

Same position

サンプルを移動させることなく、
極微小部の同一箇所における観察、
赤外およびラマン測定が可能

Smart software

ソフトウェア上で
赤外測定とラマン測定を
簡単に切り替え可能

Single system

1台分の設置スペースで
赤外測定とラマン測定が可能



ぶんせき Bunseki 2023 Contents 5

目次

とびら	5年一貫教育による高度専門人材の育成 — 16歳からの分析化学— ／上條 利夫 173
入門講座	分離技術：原理から最新技術まで 液体クロマトグラフィー (2) ／波川 雅美 174
展 望	薬学分析化学教育における法中毒学の必要性と今後の展開 ／永澤 明佳 182
講 義	高分子材料の寿命評価法／仲山 和海 188
ミニファイル	マイクロ・ナノの分析化学 ナノ粒子の抽出化学／中川 太一, 高貝 慶隆 194
話 題	引っかけ刺激を検出して光る材料 —「役割分担」による新たな設計指針—／吉田 将己 196
技術紹介	GC-TOFMS 及び機械学習を用いた構造解析手法 —未知物質解析ソフトウェア msFineAnalysis AI の紹介—／生方 正章 198
トピックス	クライオレーザーアブレーション ICP-MS による血液中微量元素の直接分析／榎納 好岐 205 ヤヌス粒子の熱泳動に対する基材表面の効果／岡本 行広 205 窒素ガスプラズマを用いた レーザーアブレーション ICP-MS の性能評価／黒木 康生 206
リレーエッセイ	応用研究 vs. 開発研究, 業務ミッションの三位一体／瀬戸 康雄 207
ロータリー	————— 208 談話室：気づかない不確かさ要因と分析の精確さ／インフォメーション：近畿支部 だより；高分子分析研究懇談会第413回例会；第381回ガスクロマトグラフィー 研究懇談会講演会；第380回液体クロマトグラフィー研究懇談会／執筆者のプロ フィール

〔論文誌目次〕	213	〔広告索引〕	A5
〔お知らせ〕	M1	〔ガイド〕	A6
〔カレンダー〕	iii		

計測技術セミナー

(公社)日本分析化学会と共催

分析化学における不確かさ研修プログラム

セミナーの特徴

楽しく！ 簡単に！ わかりやすく！

受講者全員に目が届く
少数定員

講義と演習を
繰り返すので身に着く

受講者全員に
受講証明書を発行

未経験者でも
簡単に不確かさの計算が
できるようになる

複数の講師が対応

受講者一人一人の
理解度を確認しながら
進めるので安心！

社員教育として
活用できる！

難しい数式や
偏微分は使いません！

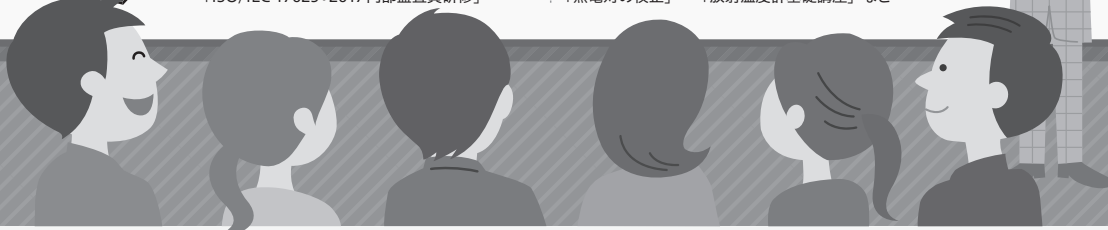
発言・質問
しやすい！

その他、JEMICで開催しているセミナー

開催例

「知っておきたい不確かさの評価法 応用編」
「不確かさ評価に必要な統計的手法」
「事例で学ぶ不確かさ：電気編」
「事例で学ぶ不確かさ：温度編」
「ISO/IEC 17025：2017内部監査員研修」

「ISO/JIS Q 10012計測器管理規格の解説と活用」
「質量計の校正と不確かさ評価」
「一次元寸法測定器の校正と不確かさ評価」
「温度測定の基本」「抵抗温度計の校正」
「熱電対の校正」「放射温度計基礎講座」など



問い合わせ先

日本電気計器検定所 (JEMIC) セミナー事務局

〒108-0023 東京都港区芝浦4-15-7

TEL：03-3451-1205 / E-Mail：kosyukai-tyk@jemic.go.jp

セミナー詳細はこちら▶ https://www.jemic.go.jp/gizyutu/j_keisoku.html



標準器・計測器の校正試験については下記へお問い合わせください

日本電気計器検定所 <https://www.jemic.go.jp/>

- **JEMIC** は、電気、磁気、温度、湿度、光、時間、長さ、質量、圧力、トルクのJCSS校正を行っています。
- **JEMIC** が発行する国際MRA対応JCSS認定シンボル付き校正証明書は、品質システムの国際規格ISO 90005、自動車業界の国際的な品質マネジメントシステム規格IATF 16949の要求に対応できます。

企業ニーズに応えるネットワークと、永年にわたる研究を基盤とする実績。校正試験のことなら、**JEMIC**にご相談ください。

校正試験実施・窓口

- **本社**
〒108-0023 東京都港区芝浦4-15-7
Tel.03-3451-6760 Fax.03-3451-6910
- **中部支社**
〒487-0014 愛知県春日井市気噴町3-5-7
Tel.0568-53-6336 Fax.0568-53-6337
- **関西支社**
〒531-0077 大阪府北区大淀北1-6-110
Tel.06-6451-2356 Fax.06-6451-2360
- **九州支社**
〒815-0032 福岡市南区塩原2-1-40
Tel.092-541-3033 Fax.092-541-3036

JEMICのネットワーク・代表電話

- **本社**
03-3451-1181
- **北海道支社**
011-668-2437
- **東北支社**
022-786-5031
- **中部支社**
0568-53-6331
- **北陸支社**
076-248-1257
- **関西支社**
06-6451-2355
- **関西支社京都事業所**
075-681-1701
- **中国支社**
082-503-1251
- **四国支社**
0877-33-4040
- **九州支社**
092-541-3031
- **沖縄支社**
098-934-1491



JEMICイメージキャラクター「ミクちゃん」

カレンダー

2023 年

5 月	10 日	2023 年度液体クロマトグラフィー (LC) 分析士三段認証試験 [五反田文化会館].....(4 号	M1)
	12 日	23-1 NMR 研究会「新たな機能の創成を目指した分子設計と特性解析」 〔東京海洋大学楽水会館大会議室〕.....(4 号	M3)
	12 日	プラズマ分光分析研究会第 119 回講演会 「プラズマ分光・質量分析法での検出下限値はどこまで下がるのか?」 〔東京電機大学東京千住キャンパス 5 号館 2 階 5203 セミナー室及び Zoom〕.....(M	6)
	16 日	2023 年度 LC/MS 分析士三段認証試験 [五反田文化会館].....(4 号	M1)
	19 日	第 7 回マイクロ電子天びんセミナー (初心者および中級者のためのはかり取り講習) [オンライン].....(3 号	M2)
	19 日	第 19 回生涯分析談話会へのお誘い [未定].....(3 号	M3)
	20・21 日	第 83 回分析化学討論会 [富山大学五福キャンパス].....(3 号	M5)
	23~26 日	第 58 回真空技術基礎講習会 [大阪産業技術研究所本部・和泉センター].....(M	6)
	24 日	第 247 回西山記念技術講座「サステナブルな社会を支える高機能厚板の技術進展と将来展望」 〔大阪/CIVI 研修センター新大阪東 7 階 E705 会議室〕.....(4 号	M3)
	25 日	第 383 回液体クロマトグラフィー研究懇談会 [Zoom オンライン会場].....(4 号	M2)
	26・27 日	第 40 回無機・分析化学コロキウム [協同の杜 JA 研修所].....(M	2)
	30・31 日	第 39 回希土類討論会 [札幌コンベンションセンター].....(12 号	M3)
	31~6/2 日	電子機器トータルソリューション展 2023 [東京ビックサイト東展示棟].....(3 号	M4)
6 月	2 日	日本アミノ酸学会第 7 回産官学連携シンポジウム 「日本のたんぱく質栄養～新知見と次世代への提案」 [東京大学農学部弥生講堂一条ホール].....(M	6)
	5 日	2023 年度液体クロマトグラフィー分析士四段認証試験 [日本分析化学会会議室].....(M	1)
	6 日	2023 年度液体クロマトグラフィー分析士五段認証試験 [日本分析化学会会議室].....(M	1)
	6 日	第 248 回西山記念技術講座「サステナブルな社会を支える高機能厚板の技術進展と将来展望」 〔東京/鉄鋼会館会議室ハイブリット開催〕.....(4 号	M3)
	12 日	2023 年度 LC/MS 分析士四段認証試験 [日本分析化学会会議室].....(M	1)
	12 日	2023 年度 LC/MS 分析士五段認証試験 [日本分析化学会会議室].....(M	2)
	14 日	23-2 ポリマーフロンティア 21 「地球環境にやさしい高分子・プラスチック材料の循環利用技術」 [オンライン開催].....(4 号	M3)
	16 日	2023 年度「ぶんせき講習会」(基礎編その 2) 化学分析の基礎講座～実験用基本器具, マイクロピペット, 電子天びん, および pHメーターの原理と使い方 [株堀場テクノサービス新本社ビル].....(M	2)
	17・18 日	第 20 回ホスト・ゲスト・超分子化学シンポジウム [東京都立大学南大沢キャンパス].....(2 号	M2)
	19・20 日	第 29 回化学安全講習会 [19 日オンライン, 20 日大阪科学技術センター].....(M	3)
	20 日	第 384 回液体クロマトグラフィー研究懇談会 [Zoom オンライン会場].....(M	3)
	22・23 日	第 90 回日本分析化学会有機微量分析研究懇談会・第 122 回計測自動制御学会化学量計測部会・ 第 40 回合同シンポジウム [オンライン].....(M	4)
	23 日	第 382 回ガスクロマトグラフィー研究会講演会 [北とびあ].....(M	5)
	26~28 日	日本顕微鏡学会第 79 回学術講演会 [くにびきメッセ].....(3 号	M4)
	26~30 日	第 43 回国際分光学会, 第 5 回レーザーブレイクダウン分光学会アジアシンポジウム Colloquium Spectroscopicum Internationale XLII The 5 th Asian Symposium on Laser Induced Breakdown Spectroscopy [徳島大学].....(8 号	M8)
7 月	5~7 日	第 60 回アイソトープ・放射線研究発表会 [東京都内会場 (予定)].....(2 号	M2)
	7 日	北陸地区講演会 [金沢大学自然科学系図書館棟 1 階大会議室].....(M	5)
	9~14 日	第 13 回国際膜会議 The 13th International Congress on Membranes and Membrane Processes [幕張メッセ].....(2 号	M2)
	23~28 日	第 31 回光化学国際会議 31st International Conference on Photochemistry (ICP2023) [札幌パークホテル].....(9 号	M7)
	25 日	第 33 回環境工学総合シンポジウム 2023 [くにびきメッセ].....(3 号	M5)
	28・29 日	第 35 回倍バイオメディカル分析科学シンポジウム (BMAS2023) [北海道大学学術交流会館].....(3 号	M5)
	30~8/4 日	第 26 回 IUPAC 化学熱力学国際会議 26th International Conference on CHEMICAL THERMODYNAMICS (ICCT-2023) [千里ライフサイエンスセンター].....(M	6)
9 月	3 日	日本化学会北海道支部 2023 年夏季研究発表会 創立 75 周年記念大会 [北海道教育大学旭川校].....(4 号	M3)
	20・21 日	第 39 回シンクロ放射線シンポジウム [名古屋国際会議場].....(4 号	M4)
	13~15 日	日本分析化学会第 72 年会 [熊本城ホール].....(M	1)
	15・16 日	第 34 回日本微量元素学会学術集会 [三鷹産業プラザ].....(M	6)
10 月	25~27 日	第 72 回ネットワークポリマー講演討論会 〔東京工業大学すずかけ台キャンパスすずかけ台大学会館〕.....(M	6)
11 月	9・10 日	第 28 回高分子分析討論会 (高分子の分析及びキャラクターゼーション) [つくば国際会議場].....(M	5)

各種標準物質 (RM, CRM)

お探しの標準物質がございましたらお申しつけください！

PFAS関連 (EPA 1633対応など)、RoHS (MCCPs, TBBPA)、REACH規則 (PAHs) など取り扱っております。
核燃料関連 (ウラン、トリウム、プルトニウム)、環境中放射能標準物質などもございます。

ICP-OES/ICP-MS AAS/IC	固体発光分光分析 蛍光X線/ガス分析	物理特性/熱特性	有機標準物質
<ul style="list-style-type: none"> 無機標準液/オイル標準液 鉄・非鉄各種金属 工業製品 (石炭、セメント、セラミックス等) 環境物質 (土壌、水、堆積物、岩石等) 乳製品、魚肉、穀物等 	<ul style="list-style-type: none"> 鉄・非鉄各種金属 工業製品 (石炭、セメント、セラミックス等) 環境物質 (土壌、水、堆積物、岩石等) 乳製品、魚肉、穀物等 	<ul style="list-style-type: none"> X線回折装置用 Si powder, Si nitride, 等 粒度分布計用 熱分析用 DSC (In, Pb, 等) 粘度測定用 膜厚分析用 	<ul style="list-style-type: none"> 製薬標準物質 SPEX, LGC, EP, USP, TRC, MOLCAN 認証有機標準液 ダイオキシン類/PCB 有機元素計用標準

SPEX社 前処理機 (フリーザーミル・ボールミル)

凍結粉碎機 (Freezer/Mill)

粉碎容器にインバクター (粉碎棒) とサンプルを一緒に入れ、液体窒素にてサンプルを常時凍結させて運転を開始します。

インバクターを磁化させ、往復運動させる事による衝撃でサンプルを粉碎します。
やわらかいサンプルや熱に弱い生体サンプルに最適です。

〈サンプル例〉プラスチック、ゴム、生体サンプルなど、
〈使用例〉ICP, XRF, GC, LCの前処理 DNA/RNAの抽出の前処理

ボールミル (Mixer/Mill)

SPEX独自の8の字運動により、効率的な粉碎、混合が可能。
サンプルに合った粉碎容器、ボールを選択可能。

〈サンプル例〉岩石、植物、錠剤、合金など
〈使用例〉ICP, XRFの前処理 メカニカルアロイイング



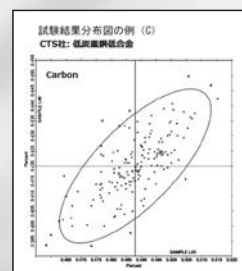
海外技能試験輸入代行サービス

技能試験とは・・・

技能試験提供機関が提供する未知サンプルを分析することによって、分析者の分析技能を測るテストです。
分析能力に関して中立的な評価が得られ、国内外の参加試験所と分析能力の比較が出来ます。
国内では毒物劇物取締法など特殊な法令に沿った通関手続きが必要でございます。
当社はコンプライアンスを遵守し、ノウハウを活かし、輸入の代行を致します。

〈サンプル例〉

金属材料中元素分析、フタル酸エステル類、物性試験 (引張・曲げ・硬さ)
ニッケル溶出試験、医薬品、化粧品、環境分野、オイル、食品、玩具規制専用試験など



YouTubeチャンネル【西進商事公式】

弊社取り扱い製品の情報を公開中です。(順次アップロード予定)



SEISHIN

標準物質専門商社

西進商事株式会社

<https://www.seishin-syoji.co.jp/>

本社 〒650-0047 神戸市中央区港島南町1丁目4番地4号
TEL.(078)303-3810 FAX.(078)303-3822
東京支店 〒105-0012 東京都港区芝大門2丁目12番地7号 (RBM芝パークビル)
TEL.(03)3459-7491 FAX.(03)3459-7499
名古屋営業所 〒450-0003 名古屋市中村区名駅南1丁目24番地30 (名古屋三井ビル本館)
TEL.(052)586-4741 FAX.(052)586-4796
北海道営業所 〒060-0002 札幌市中央区北二条西1丁目10番地 (ピア2・1ビル)
TEL.(011)221-2171 FAX.(011)221-2010

ESIイオン源一体型 マイクロチップ・キャピラリー電気泳動装置

ZipChip™



お使いのMSが高速CE-ESI/MSになります！

ZipChip™プラットフォームは、キャピラリー電気泳動 (CE) とエレクトロスプレーイオン化 (ESI) を一つのマイクロ流体チップに統合し質量分析計にスプレーするシステムです。

広範囲の生体試料の調整、分離、イオン化を迅速に行い試料を質量分析計へ直接導入可能です。

CE/ESIチップはユニット内にクリップで装着するだけです。分析時間は通常3分程度で完了し、ほとんどのLCよりも短時間でより良い分離品質を得ることができます。

シンプルなワークフローと複数のキットオプションにより、多数のバイオセラピー、メタボローム、およびプロテオミクスのアプリケーションをサポートします。

ZipChip™の特徴

- 迅速な分析時間 (ほとんどの分析時間は2~3分)
- 高感度・高安定のナノレベルスプレー
- 少ない試料消費 (ピコグラム~ナノグラム)
- オンラインの脱塩により、サンプル調整が最小限



アプリ別に便利な分析キットが用意されています。

- ペプチド用 ● インタクトタンパク質用
- ネイティブタンパク質用
- 代謝物 (アミノ酸) 用 ● オリゴ核酸用

下記メーカーの質量分析計でご使用いただけます。

- ThermoFisher Scientific社
- Bruker社 ● SCIEX社

(対応モデル名・型式につきましては別途ご照会ください。)



標準物質



標準物質とは

分析機器の校正、性能向上
分析技術の進歩、確立
分析対象物の値づけ

に用いられます。

より正確な分析データを求めるには、高い信頼性のある標準物質を御使用下さい。

標準物質は以下の分野に数多くあります。

- | | | |
|------------|-------------|----------|
| ・環境、生体、食物 | ・ガラス、セラミックス | ・粘度、密度 |
| ・石炭、石油(燃料) | ・有機、無機分析 | ・比表面積、粒径 |
| ・残留農薬 | ・薬局方試料、臨床化学 | ・X線分析各種 |
| ・金属、鉱石、鉱物 | ・抗血清 | ・放射能、核物質 |
| ・ガス分析 | ・高分子(ポリマー) | ・光学分析各種 |
| ・安定同位体 | ・熱分析各種 | ・度量衡 |

☆世界の代表的な標準物質製造・作成者一覧☆

NIST(NBS)/NATIONAL INSTITUTE OF STD. & TEC.	標準物質一般
LGC/LABORATORY OF THE GOVERNMENT CHEMIST.	標準物質一般
BCR/COMMUNITY BUREAU OF REFERENCE	標準物質一般
BAS/BUREAU OF ANALYSED SAMPLES LTD.	金属
SP ² /SCIENTIFIC POLYMER PRODUCTS INC.	ポリマー
PL/POLYMER LABORATORIES LTD.	ポリマー
μM/MICRO MATTER CO.	けい光X線用薄膜
IAEA/INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY	生体・環境
NANOGEN/NANOGENS INTERNATIONAL	農薬(溶液、原体)
CANMET/CANADA CENTRE FOR MINERAL & ENERGY TEC.	鉱石・鉱物
NRCC/NATIONAL RESEARCH COUNCIL CANADA	水質環境用標準物質
ONL/OAK RIDGE NATIONAL LABORATORY	安定同位体
KENT/KENT LABORATORYS	抗血清
DSC/DUKE SCIENTIFIC CORPORATION	球型、表面積
EP/EUROPEAN PHARMACOPOEIA	医薬品
USP/U.S.P. REFERENCE STANDARDS	医薬品
BP/BRITISH PHARMACOPOEIA	医薬品
NIES/国立環境研究所	環境・生体

ここに記載されている他にも、多数の標準物質を取り扱っております。
カタログ及び資料希望、お問い合わせについては下記へご連絡下さい。

GSC 株式会社 ゼネラルサイエンスコーポレーション

〒170-0005 東京都豊島区南大塚3丁目11番地8号 TEL.03-5927-8356 (代) FAX.03-5927-8357
ホームページアドレス <http://www.shibayama.co.jp> e-mail アドレス gsc@shibayama.co.jp

リサーチグレードでありながら、 ダウンサイジングを追求

FT/IR-4X は、小型の筐体でありながら堅牢性を誇り、性能、機能、拡張性はリサーチグレードクラスであり、高分解、高 S/N、高感度検出器、測定波数拡張、マルチチャンネル顕微鏡、ラピッドスキャンに対応しています。試料室は大型装置と変わらない幅 200 mm あり、サードパーティー製を含む大型付属品も使用できます。



Fourier Transform Infrared Spectrometer
フーリエ変換赤外分光光度計

FT/IR-4X

「複合分析」が手軽に

赤外 × ラマン複合分析システム

異物の定性分析に効果的な FTIR とラマン分光光度計の複合分析が、低価格でコンパクトになりました。
赤外／ラマン測定ともに前処理は不要で、試料を動かさずに簡単な操作で測定手法を切換えることができます。



ラマン測定を、手の中に。

PR-1s/PR-1w は、手のひらに収まる超小型ラマン分光光度計です。測定波数範囲とレーザー出力の異なる 2つのモデルをラインアップしています。測定対象の自由度が高く、専用試料室やバイアルホルダーも用意しており、シンプルで手軽なラマン測定を実現します。



Palmtop Raman Spectrometer
パームトップラマン分光光度計

PR-1s/PR-1w

光と技術で未来を見つめる

日本分光

日本分光株式会社

〒192-8537 東京都八王子市石川町2967-5
TEL 042(646)4111(内)
FAX 042(646)4120

日本分光の最新情報はこちらから

<https://www.jasco.co.jp>

日本分光HP



JASCO

Jasco は日本分光株式会社の登録商標です。
本広告に記載されている装置の外観および各仕様は、
改訂のため予告なく変更することがあります。

分析業界のコストカッター ディスポチューブでらくらく粉砕!!

立体8の字[®]原理による **秒速粉砕機** **マルチビーズショッカー[®]**

Ⓐ 卓上型・省スペース × 極静音 MB3000シリーズ



豊富な種類の粉砕容器

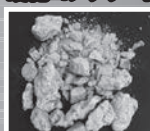
2ml ~ 最大 100ml チューブまで
ラインナップ!!

粉砕チューブ一例

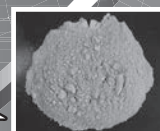


各サンプル量に合わせた最適粉砕を実現!
タングステンカーバイド、チタン、メノウ、酸化ジルコニウム、
PTFE など豊富なラインナップ!

硬化コンクリート



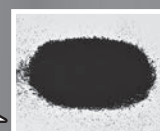
粉砕時間
60秒
常温



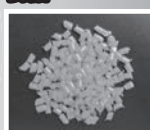
ゴム



粉砕時間
10秒
液体窒素
条件下



樹脂



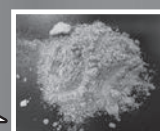
粉砕時間
10秒
液体窒素
条件下



植物生葉



粉砕時間
10秒
液体窒素
条件下



CE ヨーロッパ安全基準適合



アプリケーションラボ完成!

テスト粉砕とデモは無料で実施します。
遠慮なくお問合せ下さい!



SINCE1953:お陰様で創業70周年

製造発売元 **安井器械株式会社** 本社・工場 〒534-0027 大阪市都島区中野町2-2-8

TEL.06-4801-4831 FAX.06-6353-0217
E-mail:s@yasuikikai.co.jp http://www.yasuikikai.co.jp

©2023 Yasui Kikai Corporation, all rights reserved

221216

5年一貫教育による高度専門人材の育成 — 16歳からの分析化学 —



上 條 利 夫

日本分析化学会の皆様は、高専という組織を知っていますでしょうか。工業高等専門学校、いわゆる“高専”と呼ばれる組織は、中学生を卒業してすぐに入学、15歳から20歳の5年間で高校および大学で学修する内容を履修します。実験・実習を重視した専門教育を実施する点も大きな特徴です。一般的に大学では大学2年生、すなわち19もしくは20歳にて分析化学の授業を受けることになりますが、化学系のある高専の場合では、高専2年生の16もしくは17歳にて実施されています。中学を出て、1年間高校の化学を勉強して、物質質量などの化学の基礎を勉強してすぐに分析化学を勉強するという状況です。

高専には高校のように学習指導要領はなく、特に10年以上前までの高専では、各高専が各々特色のある授業を実施しておりました。しかし、平成30年の入学から国立高専を卒業したらこの能力は必ず身につけている、というモデルコアカリキュラム(MCC)が制定され、現在は高専の違いでまったく授業内容が異なるということはなくなりました。分析化学に関していえば、「化学反応(沈殿形成、錯体形成、電離など)や物理現象による状態変化について説明でき、必要な定量計算ができる。標準的な機器分析の目的や特徴を理解し、分析対象に応じて選択することができる。分析実験や機器分析実験で、あるいはそれを併用することで実践力を獲得させることが望ましい」と設定されています。これはあくまですべての高専に実施されるべき最低限の能力水準・修得内容である「コア」であり、このコアに追加して各高専の特色・高度化の指針となる「モデル」が設定されています。

高専(高校)2年生16歳の段階でこれらの習得は非常に困難を極めますが、高専の実験・実習を重視した教育も相まって授業による座学での知識を同時期に並行して実験・実習によって効率的かつ効果的に習得できる教育システムになっていると感じています。新型コロナウイルスの感染拡大に伴い、一時オンライン授業・オンデマンド授業が導入されるようになりましたが、実験・実習のオンラインの実施は、あくまで実施により見かけの知識を増やすだけにとどまり、実体験に基づく習得にはまだまだ及ばないと感じています。一方で、これからの若い世代の人たちはオンラインやオンデマンド授業での知識習得が当たり前になっていくようにも感じます。

このコロナ禍において、大学の先生方のオンデマンドでの授業内容がYouTubeにて公開されるようになったのは、コロナにより教育方法が見直された一例ともいえることができると思います。YouTubeでの配信映像を完全な授業の代替にするのではなく、知識のフォローアップや知識拡大のために利用することができるのは非常に有益であると感じています。分析化学会でも有名分析化学者と有名人などが一緒にコラボする分析化学の紹介動画を投稿していただくというのはどうでしょうか。分析化学会員の増加の一助になるかもしれません。分析化学は化学を専門とする教育機関ではじめに学ぶ専門教育ですから、その科目を担当する先生たちが使用したいような動画でしたら多くの化学系の学生に浸透していくのではないのでしょうか。

(Toshio KAMIYO, 鶴岡工業高等専門学校, 日本分析化学会東北支部幹事)

液体クロマトグラフィー (2)

渋川 雅美

前号では、最近の研究によって明らかにされたアルキル結合型シリカ充填剤表面に形成される固定相の構造に基づいて逆相液体クロマトグラフィー (reversed-phase liquid chromatography, RPLC) における分離機構を解説した。本号では、引き続き充填剤表面の修飾基の構造や移動相組成によって RPLC における溶質の保持挙動がどのように変化するかについて述べる。また、ピークの広がりや歪みがどのようにして生じるのかについて議論する。さらに、液体クロマトグラフィーにおいて分離選択性の向上を目的に利用される化学反応 (二次的平衡) の導入についても解説する。

であるが、両者の溶質保持選択性は全く異なる。このため、これら二つの固定相の相対的な大きさによって、分離選択性すなわち化合物の溶出順が異なることになる。

純水を移動相としたときの水/アルキル結合層界面への種々の化合物の分配係数 (D_{IW}) を C_8 シリカと C_{18} シリカについて測定し、両者を比較した結果を図 1 に示す¹⁾。二つの充填剤は同じシリカ基材を用い、同じ方法でエンドキャップされたものである。両者の D_{IW} はほぼ等しいことから、少なくともオクチル基以上の鎖長を持つアルキル基で修飾されたシリカ充填剤では、界面

4・3 化学結合型シリカカラムを用いた RPLC における溶質保持に及ぼす修飾基の構造および移動相組成の効果

4・3・1 表面修飾アルキル基の鎖長

前号で述べたように、アルキル結合型シリカカラムを用いた RPLC において主たる固定相として機能するのは、移動相/アルキル結合層界面とアルキル結合層内部

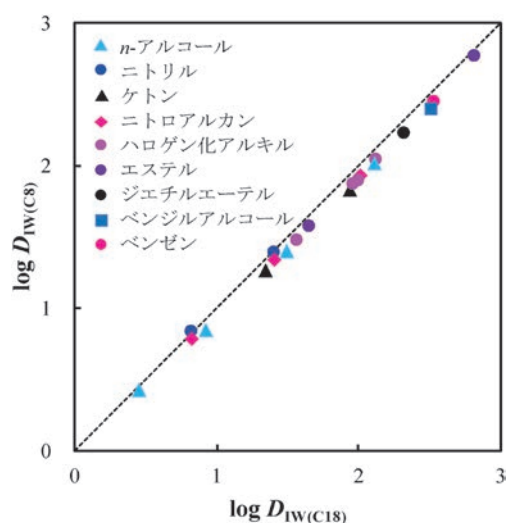


図 1 C_8 シリカカラム (L-column2 C8) および C_{18} シリカカラム (L-column2 ODS) における移動相 (水) から水/アルキル結合層界面への分配係数の比較¹⁾

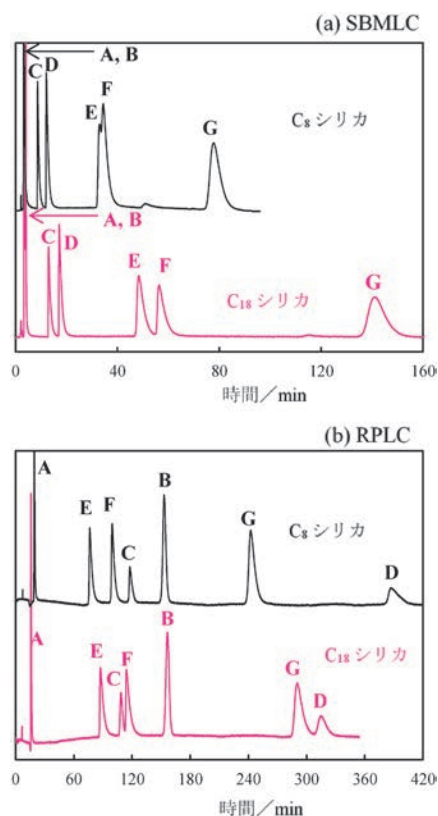


図 2 C_8 (L-column2 C8) および C_{18} シリカカラム (L-column2 ODS) を用いた SBMLC および RPLC における有機化合物のクロマトグラム¹⁾

カラムサイズ: 4.6 mm×150 mm. 移動相: 純水. 温度: 25 °C. 流量: 0.6 mL min⁻¹. 検出器: 示差屈折率検出器. 試料化合物: A, プロピオニトリル; B, ベンジルアルコール; C, ジエチルエーテル; D, 酢酸イソプロピル; E, プロモエタン; F, クロロホルム; G, ベンゼン.

の溶質保持選択性には差がないと言える。

C₈ シリカカラムと C₁₈ シリカカラムを用いた RPLC における有機化合物のクロマトグラムを、表面気泡変調液体クロマトグラフィー (surface-bubble-modulated liquid chromatography, SBMLC) モードにしたときのクロマトグラムと比較して図 2 に示す¹⁾。RPLC では充填剤細孔内が水で満たされているのに対して、SBMLC では充填剤の細孔内部は気体 (水蒸気) が占めているので (前号を参照)¹⁾²⁾、水とアルキル結合層との界面の面積は無視できるほど小さい。したがって、RPLC では移動相/アルキル結合層界面とアルキル結合層内部の両方が固定相として機能するのに対して、SBMLC ではアルキル結合層のみが固定相として働くことになる。ここで用いた有機化合物はいずれも揮発性があるので、気相空間を通して水とアルキル結合層間を移動するが、これらの化合物の気相への分配は非常に小さく、無視できる。図 2 からわかるように、SBMLC では C₈ シリカカラムと C₁₈ シリカカラムとで試料化合物の溶出順に変化がない。これは、どちらも基本的にアルキル結合層内部への分配だけで溶質の保持が決まるためである。保持体積が C₈ シリカカラムよりも C₁₈ シリカカラムのほうが大きいのは、C₁₈ シリカの方がアルキル結合層の体積が大きいことによる。これらの充填剤の炭素含有量 (シリカの単位重量当たりの炭素重量) を比較すると、C₈ シリカが 10 % であるのに対して C₁₈ シリカは 17 % である。

一方、これに対して RPLC では両カラムにおける試料化合物の溶出順が異なっている。ジエチルエーテル、ベンジルアルコール、酢酸イソプロピルなどの保持時間は SBMLC と比べて著しく大きくなっているが、これはこれらの化合物の界面への分配係数 (D_{IW}) が大きいことによる。これら親水基を持つ化合物の中には、C₈ シリカカラムのほうが C₁₈ シリカカラムよりも保持時間が大きくなり、二つのカラムで他の化合物との溶出順が異なるものがある。これは C₈ シリカのほうがアルキル結合層の厚さが小さく、またそのために水と接する表面積 (界面の面積) が大きいことによる。実際に測定されたカラム当たりの表面積は、C₁₈ シリカカラムが 234 m² であるのに対して、C₈ シリカカラムは 292 m² であった¹⁾。以上の結果から、アルキル基の修飾密度に大きな差がなければ、疎水性化合物の保持体積はアルキル鎖長が大きくなるにしたがって大きくなるが、親水基を持つ化合物は逆に小さくなるのがわかる。

4・3・2 表面修飾基の化学構造

RPLC に用いられる化学結合型シリカの疎水性修飾基としては、アルキル基のほかにフェニルアルキル基やフッ化炭素基などがある。修飾基が変わると、結合層自体はもちろん移動相との界面における溶質保持選択性も変化する。フェニルヘキシルシリカカラムを用いた

RPLC では、フェニル基が移動相と接触し、ヘキシル基が結合層内部を占めるので、結合層への溶質の分配係数は C₁₈ シリカカラムと同程度である。これに対して、水/フェニル基界面の界面張力は水/アルキル基界面と比べて小さいため、界面への分配係数は小さくなるという違いが生じる³⁾。

4・3・3 移動相中の有機溶媒濃度

すでに述べたように、RPLC では水とメタノールまたはアセトニトリルなどの極性有機溶媒との混合溶媒を移動相として用いて溶質の保持体積を調節することが多い。一般に有機溶媒濃度が大きいほど溶質の保持体積は小さくなるが、その変化の程度は溶質によって異なり、有機溶媒濃度によって溶出順が変わることもある。これは移動相/アルキル結合層界面とアルキル結合層内部への溶質分子の分配の有機溶媒濃度依存性が異なるためである。

SBMLC および RPLC における有機化合物のクロマトグラムが移動相中のアセトニトリル濃度によってどのように変化するかを図 3 に示す⁴⁾。図 3 (a) からわか

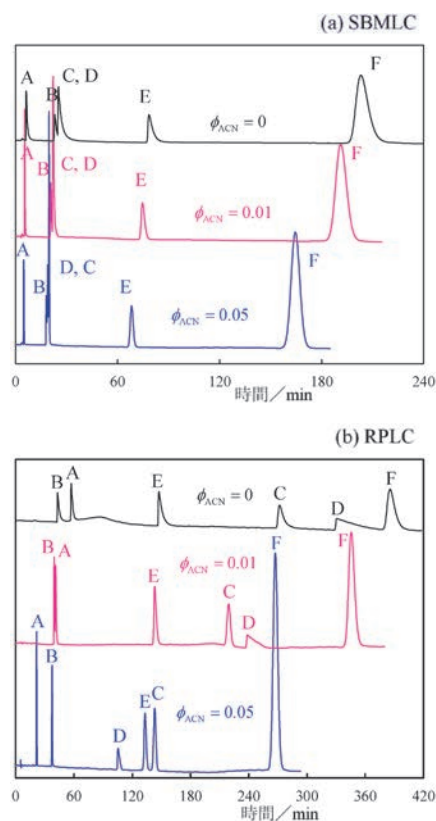


図 3 C₁₈ シリカカラム (Capcell Pak C18 UG120) を用いた SBMLC および RPLC における有機化合物のクロマトグラムのアセトニトリル濃度による変化⁴⁾

カラムサイズ: 4.6 mm×250 mm. 移動相: 0, 1, 5 % (v/v) アセトニトリル/水混合溶媒. 温度: 25 °C. 流量: 0.5 mL min⁻¹. 検出器: 紫外吸光検出器 (190 nm). 試料化合物: A, 2-ブタノン; B, ジクロロメタン; C, 1-ニトロブタン; D, 酢酸イソプロピル; E, クロロホルム; F, ベンゼン.

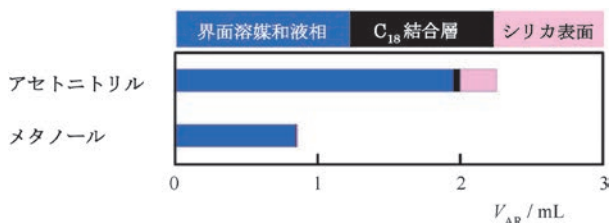


図4 ODS カラム (L-column2 ODS, 4.6 mm×150 mm) におけるアセトニトリルとメタノールの補正保持体積への各固定相 (界面溶媒和液相, C₁₈ 結合層, シリカ基材表面) の寄与¹⁾

移動相: 水, 温度: 25 °C.

るように, 移動相/アルキル結合層界面の寄与が無視でき, アルキル結合層内部への分配だけで溶質の保持が起こる SBMLC では, 低濃度のアセトニトリルの添加による保持時間の変化は小さく, 溶出順もほぼ同じである. これに対して RPLC においては, 2-ブタノン, 1-ニトロブタン, 酢酸イソプロピルなどの親水基を持つ化合物は, 少量のアセトニトリルの添加で保持時間が著しく小さくなり, ジクロロメタンやクロロホルムと溶出順が逆転する (図3 (b)). これは, RPLC では親水基を持つ化合物の保持への移動相/アルキル結合層界面の寄与が大きく (前号図11), かつその分配係数のアセトニトリル濃度依存性が大きいことによる.

RPLC の三つの固定相 (水/アルキル結合層界面 (界面溶媒和液相), アルキル結合層内部, シリカ表面) におけるアセトニトリルの補正保持体積, $V_{AR} (=V_R - V_m)$, をメタノールと比較して図4に示す (V_R と V_m は, それぞれ溶質の保持体積と移動相体積を指す). 前号でも述べたように, アセトニトリルとメタノールはともにアルキル結合層内部へはほとんど分配せず, 主に界面に保持される. したがって, 移動相にこれらの有機溶媒が添加されると, 親水基を持つ化合物は界面への保持の割合が大きいため, 保持体積が減少することになる. 移動相中の有機溶媒濃度が大きくなると, 移動相とアルキル結合層内部との間の分配係数も小さくなるが, その効果は低濃度域では界面への分配係数の減少に比べて小さい. このため, 上述したような溶出順の逆転が起こるのである. 有機溶媒濃度がさらに大きくなると, 界面への保持の割合は次第に小さくなっていき, 移動相とアルキル結合層内部との間の分配の寄与が相対的に大きくなる.

このように, 移動相/アルキル結合層界面とアルキル結合層内部とでは, 移動相からそれぞれの固定相への溶質の分配係数の有機溶媒濃度依存性が異なるので, 全濃度範囲にわたって単純な関係式で表すことは難しいが, 有機溶媒が比較的低濃度である場合については, 保持係数 (k) と有機溶媒濃度の関係が経験的に次式によって表されることが知られている^{5)~7)}.

$$\log k = \log k_w - S\phi_0 \dots \dots \dots (1)$$

ここで, k_w は純水を移動相としたときの溶質の保持係数であり, ϕ_0 は移動相中の有機溶媒の体積分率である. また, S は溶質と有機溶媒の種類で決まる係数で, RPLC における溶媒強度として用いることができる.

5 溶質バンド (ピーク) の広がり形状

5.1 バンドの広がりをもたらす要因

前号で述べたように, クロマトグラフィーにおける分離の効率は, ピーク幅の大きさとピークの中心がどれだけ離れているかによって決まる. ここでは, カラム内でのバンドの広がりを引き起こす三つの主要な要因について述べる. ただし, カラム外すなわち, インジェクターや検出器セル, 配管内部, およびそれらの結合部での溶質バンドの広がりも無視できないことに注意する必要がある.

(1) 通常拡散

カラム内の溶質は, 濃度の高い領域から低い領域へと拡散してゆく. この拡散はカラム内のいずれの方向に向かっても起こるが, 問題となるのは移動相および固定相中でのカラム長さ方向の拡散である. ガスクロマトグラフィーとは異なり, 液体クロマトグラフィーでは移動相での拡散だけではなく, 固定相における通常拡散の寄与も大きい場合がある. 拡散は時間の経過とともに進行するので, この原因によるバンドの広がりや移動相の流量が小さいほど増大する.

(2) 多流路拡散

中空キャピラリーカラムを用いる場合を除いては, 移動相は充填剤粒子の間をぬって流れてゆく. したがって, 大きさや形の異なった粒子が不規則に充填されたカラム内には, それぞれ流速の異なった多くの流路が生じる. 狭く曲がりくねった流路をたどった分子は, 広く流れの速い流路を通った分子よりも遅れてカラム内を移動することになり, その結果, 溶質分子の集合体としてのバンドは広がることになる. このような原因によるバンドの広がりや, 充填剤の形状や粒子径および粒子径分布, さらにカラム充填状態の均一性によって左右される. 真球状で粒子径が小さく, かつ粒子径分布も狭い充填剤ほど, 多流路拡散によるバンドの広がりや抑制され, 高い理論段数が得られる.

(3) 物質移動

移動相と固定相との間を移動する溶質分子の速度は有限であり, 移動相は常に流れ続けているため, 移動相内と固定相内のカラム長さ方向の溶質濃度分布にはずれが生じることになる. すなわち, バンドの先端部では $c_s < K_D c_m$ となるのに対してバンド後部では $c_s > K_D c_m$ となる (ここで c_m と c_s は, それぞれ移動相および固定相中での溶質の濃度, また K_D は分配係数である). その結果,

先端部の移動速度はバンドの平均速度よりも大きく、逆に後部の移動速度はバンドの平均速度よりも小さくなり、そのためバンド全体としては幅が拡大することになる。この原因によるバンドの拡大の程度は、両相間の物質移動速度が小さいほど、また移動相流量が大きいほど増大する。

クロマトグラフィーにおけるバンドの広がりには、上に挙げた三つの要因がそれぞれ独立に作用する結果生じるものとして、理論段高さ（1理論段当たりのカラム長さ、 H ）について次のような理論式が導かれる⁸⁾⁹⁾。

$$H = \frac{L}{N} = 2\lambda d_p + \frac{2\gamma_m D_m}{u} + \frac{2\gamma_s D_s}{u} \left(\frac{1-R}{R} \right) + \frac{qR(1-R)d_s^2}{D_s} u \dots\dots\dots (2)$$

ここで L はカラム長さ、 D_m および D_s はそれぞれ移動相および固定相における溶質の拡散係数、 d_p および d_s は充填剤粒子の直径および固定相の厚さ、 λ 、 γ 、 q はそれぞれカラム充填状態、拡散経路、および固定相構造の不規則性を示す係数、そして u は移動相の線速度 (mm s^{-1}) である。また R は、溶質バンドの線速度 (u_R) と移動相の線速度の比であり、移動率または移動度比と呼ばれるが、式 (3) に示すように、全溶質量に対する移動相に存在する溶質量の比と言い換えることもできる。

$$R = \frac{u_R}{u} = \frac{c_m V_m}{c_m V_m + c_s V_s} \dots\dots\dots (3)$$

ここで、 V_m と V_s はカラム内の移動相体積および固定相体積である。式 (2) の右辺第1項は多流路拡散、第2項と第3項はそれぞれ移動相と固定相における通常拡散、そして第4項は物質移動の理論段高さに対する寄与を示している。特定の溶質、カラムおよび移動相に対しては D_m 、 D_s 、 R 、 d_p 、 d_s 、 λ 、 γ 、 q は定数とみなせるので、式 (2) は次のように簡略化できる。

$$H = A + \frac{B}{u} + Cu \dots\dots\dots (4)$$

ここで A 、 B 、 C は定数である。

移動相の線速度に対する理論段高さの依存性 (van Deemter プロットと呼ばれる) を図5に示す。流速が小さい場合には通常拡散がバンドの広がりに大きく寄与するが、流速が大きくなると物質移動の影響が大きくなるのがわかる。また、 $u = (B/C)^{1/2}$ のとき理論段高さが最小となり、最も高い分離度を得られることになる。式 (2) および図5からわかるように、粒子径および固定相の厚さが小さいほど高理論段数を得ることができ、流速の増大に伴う理論段高さの増加も小さい。

Knox は、式 (2) および式 (4) の第1項は実際には

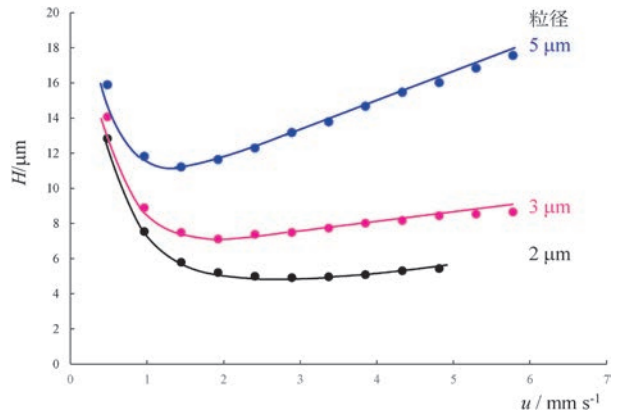


図5 van Deemter プロット

カラム：L-column2 ODS (2.1 mm×50 mm)，移動相：アセトニトリル/水 (50：50)，温度：25℃，試料注入体積：0.5 mL，試料：ナフタレン。(一般財団法人化学物質評価研究機構提供データ)

u に依存する ($Au^{1/3}$) こと、およびカラム充填が均一でない場合にその効果が大きくなることを示している¹⁰⁾。より均一に充填されたカラムや一般的な構造を持つモノリス型カラムは、カラム効率を高めることにつながると考えられる。

5.2 テーリングとリーディング

クロマトグラム上のピークは幅が広がるだけでなく、対称性が崩れて歪んだ形になることがある。ピークが後方に尾を引く形をテーリング、逆に前方に裾が伸びた形をリーディングまたはフロンティングという。これらの非対称ピークを生じる原因は数多くあり、特定することが難しい場合もあるが、比較的多いのは、カラムに注入される試料量が大きすぎて分配あるいは吸着等温線の直線範囲を逸脱する場合であろう。図6に示したように、等温線が上に凸であるときは試料濃度が大きくなるほど分配係数が小さくなるので、濃度がより高いバンド中心

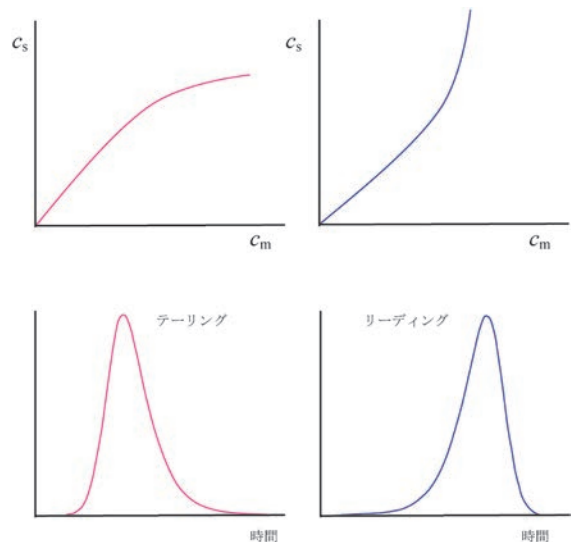


図6 分配等温線 (上図) とピーク形状 (下図)

部がカラム内を速く移動し、ピークはテーリングを示す。逆に等温線が下に凸であるときは、ピークはリーディングを示すことになる。

カラム内に複数の固定相（分配または吸着部位）が存在するとき、その中に溶質保持容量（固定相体積または面積）が小さく、物質移動速度が極端に小さいものがあると、顕著なテーリングを生じることがある。化学結合型シリカカラムを用いた RPLC においてよく見られるピークテーリングは、これによるものと考えられている。例えば、図 2 および図 3 において、ジエチルエーテル、酢酸イソプロピル、クロロホルムなどのピークは、純水を移動相とした系では特に明らかなテーリングを示していることがわかる。蛍光相関分光法を用いた研究などによって、オクタデシル（C₁₈）基を表面化学修飾したシリカ粒子（ODS）表面には溶質分子の脱着速度が非常に小さい部位がわずかではあるが存在することが明らかになっており、これが RPLC におけるテーリングの原因となっていると考えられている^{11)~13)}。また、この部位は残存シラノール基であると一般に推測されている^{11)~13)}。

図 3 (b) は、移動相にアセトニトリルを添加していくと、テーリングが小さくなり、ピークの対称性が良くなることを示している。図 4 からわかるように、アセトニトリルは水/アルキル結合層界面に次いでシリカ表面に多く（長時間）保持される。一方、メタノールのシリカ表面への保持は小さい。メタノールは 5 % 添加しても各化合物のピーク形状にほとんど影響を与えないことから、アセトニトリルがシリカ表面に吸着することによって、テーリングが抑制されたものと推定される⁴⁾。なお、図 3 (b) では、特に純水系で測定した酢酸イソプロピルのピークテーリングが顕著であるが、これはこのときの検出条件では感度が低かったため、試料濃度を高くしたことにより等温線の直線範囲から逸脱したことが主な原因である（図 6）。

5.3 化学反応によるバンド拡大

溶質がカラム内で化学反応を起こして、異なる化学種への可逆的な変換が起こるとき、バンドの広がりが生じることがある⁸⁾¹⁴⁾¹⁵⁾。一例として、ジペプチドの一種である L-アラニル-L-プロリン (Ala-Pro) の RPLC におけるクロマトグラムの温度依存性を図 7 に示す¹⁵⁾。低温では二つのピークが明確に分離しているのに対して、温度が上昇するにしたがってピークが融合し、40 °C 以上では一つのピークしか観測されなくなることがわかる。また、さらに高温にするとピーク幅が小さくなっている。これは、Ala-Pro には *trans* 体と *cis* 体が存在し、溶液中および界面溶媒和液相中で異性化反応を起こしていることによる。低温では異性化反応速度が小さいので、保持時間の小さい *trans* 体と大きい *cis* 体が分離して

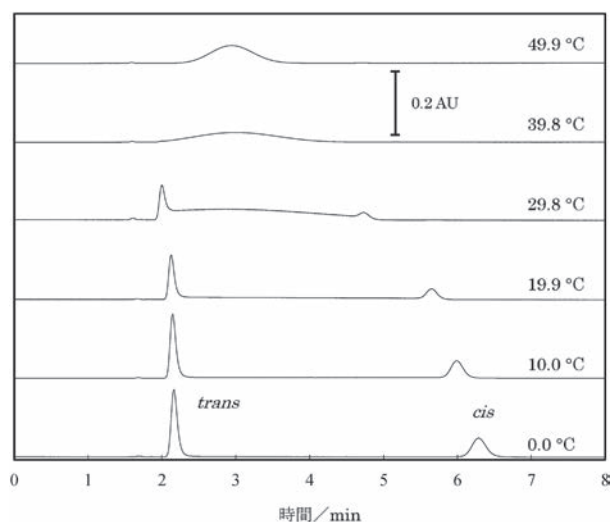


図 7 RPLC における Ala-Pro のクロマトグラムの温度変化¹⁵⁾
カラム：L-column ODS (4.6 mm×100 mm), 移動相：0.10 mol L⁻¹ リン酸緩衝液 (pH 7.0), 流量：0.65 mL min⁻¹, 検出：紫外吸光検出器 (205 nm)。

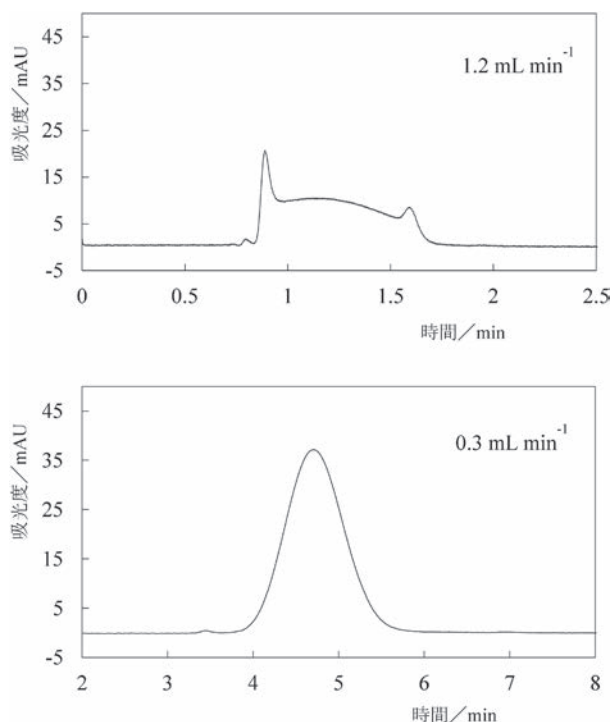


図 8 RPLC における Ala-Pro のピーク形状の流量による変化¹⁵⁾

カラム：PRP-1 (4.1 mm×150 mm), 移動相：0.10 mol L⁻¹ リン酸緩衝液 (pH 7.0), 温度 39.9 °C, 検出：紫外吸光検出器 (205 nm)。

カラムから溶出するが、温度が高くなると反応速度が大きくなり、ついには二つの異性体の平衡混合物が一つのピークとして観測されるようになるのである。このとき、理論段高さは移動相の線速度 u に比例して大きくなる。したがって、その寄与は式 (4) の C 項に含まれることになる^{8)14)~16)}。しかし、移動相の流量が大きくなると、ピークが分裂するようになる（図 8）¹⁵⁾¹⁶⁾。

6 二次的化学平衡による分離選択性の制御

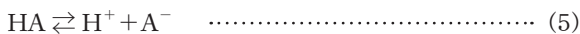
6.1 二次的化学平衡

高速液体クロマトグラフィー (high-performance liquid chromatography, HPLC) により試料成分を分離するには、各成分の分配係数 (保持係数) に十分な差が必要である。理論段数が 10000 のカラムで、分離したい 2 成分の保持係数の平均が 5.0 のとき、分離係数 (α) が 1.1 以上であれば、分離度 (R_s) が 1.8 以上となり、ほぼ完全分離が達成できるようになることが前号の式 (6) よりわかる。これは HPLC が高い分離能を持っていることを示しているが、各種の異性体のように構造が非常に似かよった物質どうしを分離するには十分でないことがある。このようなとき、カラム内の分離場に化学反応を導入して高度な分離を達成することができる。これは HPLC に限られたものではなく、溶媒抽出やイオン交換でも用いられる方法であるが、HPLC においては、移動相と固定相との間の分配 (吸着) 平衡に対比して、導入される化学平衡を二次的平衡と呼ぶことがある¹⁷⁾。

6.2 酸塩基平衡を利用した分離

二次的平衡として、RPLC やイオン交換クロマトグラフィーにおいて最もよく用いられる酸塩基平衡を取り上げて説明する。RPLC においては、移動相に疎水性の大きな対イオンが加えられていないかぎり、電荷を持つ化学種、すなわちイオンは固定相に対する親和性が小さく、中性の化学種よりも保持が圧倒的に小さくなる。したがって、移動相の pH を変えることによって酸性化合物や塩基性化合物の荷電状態を変化させることができれば、たとえ中性の状態や完全にイオン化した状態では相互分離できない場合でも、両者が平衡混合物として存在する pH 領域で容易に分離できるようになる。

一塩基酸, HA, を例にとると、その解離平衡は次のように書くことができる。



ここで、 A^- は酸 HA の共役塩基である。また、酸解離定数は次式で表される。

$$K_a = \frac{[\text{H}^+][\text{A}^-]}{[\text{HA}]} \quad \dots \dots \dots (6)$$

水溶液中での酸塩基反応 (プロトン移動反応) の速度は各化学種の移動相/固定相間の物質移動速度に比べて極めて大きく、酸とその共役塩基とが HPLC カラム内での溶出過程において分離されることはない。すなわち、両者は常に平衡混合物として 1 つのバンドの中に存在しており、酸塩基反応によるピーク幅の拡大などは起こらない。したがって、実際に測定される保持係数、 k_A ,

は次のように表される。

$$k_A = \frac{V_s}{V_m} \left(\frac{[\text{HA}]_s + [\text{A}^-]_s}{[\text{HA}]_m + [\text{A}^-]_m} \right) = \frac{k_0[\text{H}^+]_m + k_{-1}K_a}{K_a + [\text{H}^+]_m} \quad \dots (7)$$

ここで、 k_0 と k_{-1} はそれぞれ HA および A^- がそれぞれ単独で存在するときに得られる保持係数であり、下付きの m と s はそれぞれ移動相と固定相の値であることを示す。

図 9 に、酸型と塩基型の保持係数が等しく、 $\text{p}K_a$ だけがわずかに異なる二つの仮想的弱酸の RPLC における保持係数と pH の関係を示す¹⁷⁾。この図からわかるように、分離したい化合物の $\text{p}K_a$ に差があれば、それらの保持係数の pH 依存性を利用して分離を達成することができる。二つの一塩基酸 A と B の k_0 と k_{-1} が互いに等しい場合、分離係数が最大となる pH、 pH_{opt} は次式で与えられる¹⁷⁾。

$$\text{pH}_{\text{opt}} = \frac{\text{p}K_{a,A} + \text{p}K_{a,B}}{2} + \frac{1}{2} \log \frac{k_0}{k_{-1}} \quad \dots \dots \dots (8)$$

ここで $\text{p}K_{a,A}$ および $\text{p}K_{a,B}$ はそれぞれの酸の $\text{p}K_a$ である。

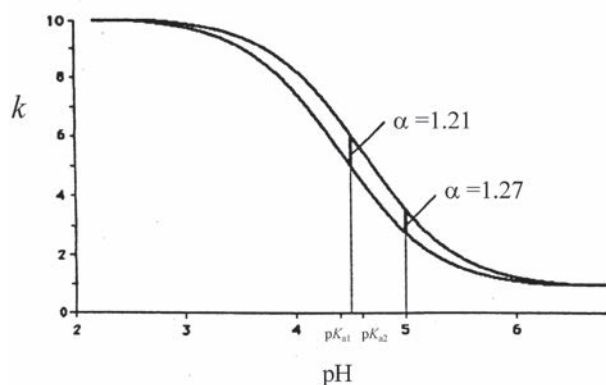


図 9 逆相 HPLC における二つの仮想的弱酸の保持係数の pH 依存性¹⁷⁾
 $\text{p}K_{a1} = 4.4$, $\text{p}K_{a2} = 4.6$

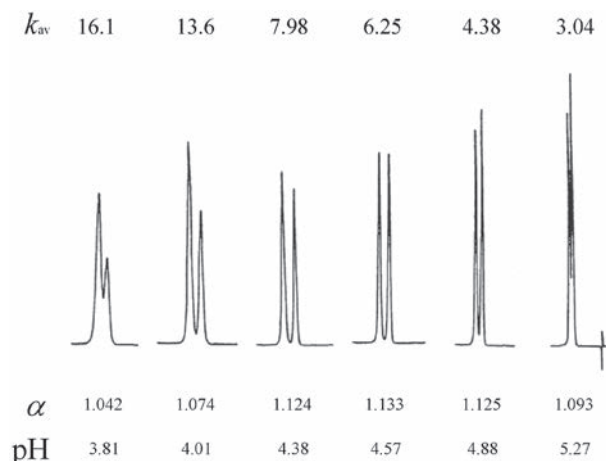


図 10 3-クロロ安息香酸 ($\text{p}K_a = 3.68$) と 4-クロロ安息香酸 ($\text{p}K_a = 3.85$) の分離¹⁷⁾

図 10 に 3-クロロ安息香酸 ($pK_a=3.68$) と 4-クロロ安息香酸 ($pK_a=3.85$) の分離例を示す¹⁷⁾. 式 (8) から予測される pH で最も良い分離が得られていることがわかる. また Tanaka らは, 安息香酸のカルボキシ基の酸解離定数, およびアニリンのアミノ基の塩基解離定数が, それぞれの官能基中の酸素同位体 (^{16}O , ^{17}O , ^{18}O) および窒素同位体 (^{14}N , ^{15}N) によってわずかに異なることを利用して, この方法による各同位体化合物の分離ができることを報告している^{18)~20)}.

酸塩基反応のほかにも, イオン交換クロマトグラフィーによる金属イオンの分離には錯形成反応が用いられるなど, 種々の化学反応が二次的平衡として HPLC 分離に利用されている. しかし溶液内化学反応を二次的平衡として導入する場合には, 5・3 に述べたように, 反応速度が十分に大きくないとピーク幅が大きくなったり, 複数のピークが現れたりすることがあることに留意しなくてはならない.

7 おわりに

RPLC における溶質の分離機構を中心に, 2号にわたって液体クロマトグラフィーの基礎を解説してきた. クロマトグラフィーは, 溶媒抽出やイオン交換, 固相抽出などで一般に用いられるバッチ法と呼ばれる 1 段階分離に対して, 多段階の分離法とみなすことができる. 現在の HPLC では, 150 mm のカラムで 10000 を超える理論段数 (すなわちバッチ法による 10000 回の分離) を得ることは比較的容易であるので, それに相当する回数の分離が, カラムを試料成分が通過する間に行われていることになる. それでも, 目的とする分離を達成するには, 適切なカラムと移動相の選択をはじめ, 多くの条件を最適化しなくてはならない. そのためには, 各種の液体クロマトグラフィーの分離機構を正しく理解することが重要である.

逆相シリカ充填剤を用いた RPLC では, 一般に化学修飾された疎水基が親水性の移動相溶媒とは混和せず, 単独の固定相として機能すると近似でき, 移動相中の成分は疎水基表面に移動相とは異なる界面溶媒和液相を形成して, これも独立の固定相として作用する. 前号の図 7, 8, 10 に示されているように, 溶媒和液相の厚さは, およそ 1~2 nm 程度と非常に小さいが, 界面の面積は大きいので, 溶質分子の保持体積への寄与は非常に大きくなる. これは特に移動相液体と充填剤の極性の差が大きいときの特徴である.

一方, 修飾基や充填剤の基材自体が移動相溶媒と親和性が大きく, 互いに混和 (溶解) する場合は様相が大きく異なる. たとえば, デキストランゲルやポリアクリルアミドゲルを充填剤とし, 水溶液を移動相とするクロマトグラフィーについて考えてみよう. デキストランやポリアクリルアミドは 3 次元架橋されているので水に完

全に溶解はしないものの, 膨潤して高分子水溶液相を形成する. このカラム内に固定された高分子水溶液相は, バルク水溶液とは溶質分子との親和性が異なるので固定相として働き, 移動相水溶液との間に溶質の分配が生じる²¹⁾. 高分子水溶液相中の高分子濃度が大きいほど (一般には架橋度が大きいほど高分子濃度が大きくなる), バルク水溶液相との物性の差が大きくなるので, 二つの溶質の分離係数は大きくなる. 同様のことはポリスチレンゲルや酢酸ビニルゲルを充填剤とし, 有機溶媒を移動相とするクロマトグラフィーにおいても起こる²²⁾²³⁾. これらは, 一般に水溶液系および有機溶媒系サイズ排除クロマトグラフィーとして使用される系であるが, 常に分配の寄与があることを忘れてはならない. このように, 液体クロマトグラフィーにおける分離場は, 充填剤の表面または基材そのものと移動相成分との相互作用に依存して, その構成が多様に変化する. 一般に固定相は複数存在することが多く, また, そこで溶質間の分離を引き起こす作用 (分離機構) も一つだけとは限らない. このため, 目的の分離を達成するためのカラムと移動相の選択は容易でないことが多いが, 逆に困難な分離も可能になることがある. 予想しなかった分離挙動やピーク形状が観測されたときには, ミクロの視点で試料成分分子やイオンが置かれている分離場と, そこで起こっている反応を考えてみるのが重要である.

文 献

- 1) K. Nakamura, S. Saito, M. Shibukawa : *J. Phys. Chem. C*, **122**, 4409 (2018).
- 2) K. Nakamura, H. Nakamura, S. Saito, M. Shibukawa : *Anal. Chem.*, **87**, 1180 (2015).
- 3) K. Nakamura, S. Saito, M. Shibukawa : *J. Chromatogr. A*, **1628**, 461450 (2020).
- 4) K. Nakamura, R. Ubukata, H. Mizuno, S. Saito, M. Shibukawa : *J. Phys. Chem. C*, **122**, 28674 (2018).
- 5) L. R. Snyder, J. W. Dolan, J. R. Gant : *J. Chromatogr.*, **165**, 3 (1979).
- 6) P. J. Schoenmakers, H. A. H. Billiet, L. De Galan : *Chromatographia*, **15**, 205 (1982).
- 7) A. Jouyban, S. Soltani, A. Shayanfar, A. Pappa-Louisi : *J. Chromatogr. A*, **1218**, 6454 (2011).
- 8) J. C. Giddings : "Dynamics of Chromatography, Part 1, Principles and Theory", (1965), (Marcel Dekker, New York).
- 9) 津田孝雄 : "クロマトグラフィー第 2 版一分離のしくみと応用", (1995), (丸善).
- 10) J. H. Knox : *J. Chromatogr. A*, **960**, 7 (2002).
- 11) M. J. Wirth, R. W. P. Fairbank, H. O. Fatunmbi : *Science*, **275**, 44 (1997).
- 12) M. D. Ludes, M. J. Wirth : *Anal. Chem.*, **74**, 386 (2002).
- 13) L. Kisley, C. F. Landes : *Anal. Chem.*, **87**, 83 (2015).
- 14) J. H. Knox, M. Shibukawa : *J. Chromatogr.*, **545**, 123 (1991).
- 15) M. Shibukawa, A. Miyake, S. Eda, S. Saito : *Anal. Chem.*, **87**, 9280 (2015).
- 16) 洪川雅美 : *ぶんせき (Bunseki)*, **2017**, 140.
- 17) J. P. Foley, W. E. May : *Anal. Chem.*, **59**, 102 (1987).
- 18) N. Tanaka, M. Araki : *J. Am. Chem. Soc.*, **107**, 7780 (1985).

- 19) N. Tanaka, A. Yamaguchi, M. Araki : *J. Am. Chem. Soc.*, **107**, 7781 (1985).
 20) N. Tanaka, M. Araki, K. Kimata : *J. Chromatogr.*, **352**, 31 (1986).
 21) 渋川雅美 : 分析化学 (*Bunseki Kagaku*), **55**, 149 (2006).
 22) M. Yamamoto, Y. Yamamoto : *Anal. Chim. Acta*, **87**, 375 (1976).
 23) K. Saitoh, N. Suzuki : *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **51**, 116 (1978).



渋川 雅美 (Masami SHIBUKAWA)
 埼玉大学 (〒338-8570 さいたま市桜区下大久保 255). 東京都立大学大学院理学研究科博士課程化学専攻. 理学博士. 《現在の研究テーマ》SBMLC による気体および VOC の分離, 疎水界面水の構造解析. 《主な著書》“分析化学改訂版”. (裳華房). 《趣味》ジョギング.
 E-mail : sibukawa@mail.saitama-u.ac.jp

日本分析化学会の機関月刊誌『ぶんせき』の再録集 vol. 2 が出版されました！ 初学者必見！ 正しく分析するための 241 ページです。

本書は書籍化の第二弾として、「入門講座」から分析試料の取り扱いや前処理に関する記事、合計 36 本を再録しました。『ぶんせき』では、分析化学の初学者から専門家まで幅広い会員に向けて、多くの有用な情報を提供し続けています。これまで掲載された記事には、分析化学諸分野の入門的な概説や分析操作の基礎といった、いつの時代でも必要となる手ほどきや現役の研究者・技術者の実体験など、分析のノウハウが詰まっています。

本書は下記の二章だてとなっています。

〈1 章 分析における試料前処理の基礎知識〉

- | | |
|----------------------------------|-----------------------------------|
| 1. 土壌中重金属分析のための前処理法 | 11. 大気中揮発性有機化合物分析のための前処理 |
| 2. 岩石試料の分析のための前処理法 | 12. 放射性核種分析のための前処理法 |
| 3. プラスチック試料の分析のための前処理法 | 13. 脂質分析のための前処理法 |
| 4. 金属試料分析のための前処理 | 14. 糖鎖分析のための試料前処理 |
| 5. 分析試料としての水産生物の特徴と取り扱い | 15. イムノアッセイのための前処理法 |
| 6. 食品分析のための前処理法 | 16. 加速器質量分析における超高感度核種分析のための試料前処理法 |
| 7. Dried blood spot 法による血液試料の前処理 | 17. 生元素安定同位体比分析のための試料前処理法 |
| 8. 生体試料のための前処理法 (液-液抽出) | 18. セラミックス試料分析のための前処理法 |
| 9. 生体試料のための前処理法 (固相抽出) | |
| 10. 環境水試料の分析のための前処理法 | |

〈2 章 分析試料の正しい取り扱いかた〉

- | | |
|---------------------------|--------------------|
| 1. 生体 (血液) | 10. 岩石 |
| 2. 生体 (毛髪) | 11. 食品 (農産物の残留農薬) |
| 3. 金属 (非鉄金属) | 12. ガラス |
| 4. 金属 (鉄鋼) | 13. 環境 (陸水) |
| 5. 食品 (酒類) | 14. 温泉付随ガス |
| 6. 医薬品 (原薬・中間体・原料) | 15. 透過電子顕微鏡観察の試料調整 |
| 7. 海水 (微量金属) | 16. 環境 (ダイオキシン類) |
| 8. 考古資料 | 17. 高分子材料 |
| 9. 海底下の試料 (地球深部の堆積物および岩石) | 18. 沈降粒子 |

なお、『ぶんせき』掲載時から数年が経過しているため、記事の中には執筆者の所属も含め、部分的に現在の状況とは異なる内容を含むものがあるかもしれません。本書では、各記事の『ぶんせき』掲載年を明記することで、再録にともなう本文改稿を割愛しました。これらの点については、執筆者および読者の方々にご了承いただきたく、お願い申し上げます。

本シリーズが化学分析の虎の巻として多くの方に活用されることを願ってやみません。

薬学分析化学教育における 法中毒学の必要性と今後の展開

高度な専門性を要し、特殊性がある分析を実施する法中毒学は、薬物にかかわる様々な基礎研究及び教育を行い、実務としても生体試料中の医薬品・毒物分析を行っている薬学部における分析化学教育のもと教育・研究・実務が行われるのが望ましい。しかし、現状、薬学部において法中毒学にかかわる教育・研究・実務はほとんど行われていない。本稿では、法中毒学及び法中毒学にて行われる分析について紹介すると共に、薬学部の分析化学教育における法中毒学の必要性及び今後の展開について考えていく。

永 澤 明 佳

1 はじめに

法中毒学とは、毒物学および分析化学、薬理学、臨床化学など様々な学問を応用し、死亡、中毒、薬物使用に関する医学的または法的な調査を支援する学問である。法中毒学は、死体に限らず生体も対象とし、試料も血液や尿だけでなく筋肉や肝臓、脳などの組織、さらには骨など様々であり、これら生体試料に含まれる薬物や化学物質を多種多様な分析装置を用いて明確に識別し、正確にその量を測定する必要がある。得られた結果は死因究明や犯罪への関与など法的な判定に使用され、個人や社会に及ぼす影響が大きいことから、その分析には正確性、妥当性、信頼性が不可欠である。また、法中毒学者には、これら分析を正確に行うだけでなく、分析から得られた結果について、薬物動態、代謝、相互作用、副作用や薬物の安定性など様々な薬学的要因に加えて死後起こりうる現象についても考慮し、得られた結果について正しい評価を行う専門性が求められる。そのため、法中毒学においては薬学教育を基盤とした研究・実務・人材育成などが行われることが望ましい。しかし、現在、薬学部において法中毒学に関する教育はほとんど行われていない。さらに、薬毒物の関与を法的に調査する機関の一つに大学の医学部に所属する法医学教室や、東京や大阪などごく一部の大都市に設置されている監察医務院などの法医学施設があるが、全国的に見ても薬毒物分析が行われているのは全体の約半数にも満たないのが現状であり、法中毒学者の不足やそれに伴う分析の量や質の低下は法医学において大きな問題となっている。これら問題を受け、千葉大学では2014年に医学部内に法中毒学

を含む6部門からなるセンターを立ち上げ、法医学における薬毒物分析及び人材の育成を強化した。さらに、2021年、閣議決定された死因究明等推進計画法において、薬学教育における死因究明等に関する教育の必要性や他施設・他学部間の連携の強化について初めて言及されることとなった。この直前である2021年4月、千葉大学は薬学研究院に本邦初の法中毒学を掲げる研究室を開設した。また、2024版に改訂予定である薬学教育モデル・コアカリキュラムにおいて、死因究明における薬学学修者の果たすべき役割が明記された。これにより、大学内における法医学と法中毒学すなわち医薬の分業・連携を通じた死因究明に関する実務・研究・教育の実施が可能になり、加えて後継者育成の推進が期待されることとなった。本稿では、法中毒学にて行われる分析について紹介すると共に、薬学部の分析化学教育における法中毒学の必要性及び今後の展開について考えていく。

2 法中毒学の専門性と特殊性

毒性学では薬物や化学物質が生体に及ぼす影響を研究する。法中毒学では薬物や化学物質により生じた有害事象だけでなく、その結果が法的に問題となる可能性のある事例を取り扱う実学的側面を持つ。中毒や死亡の原因となりうる薬毒物は、医薬品、工業製品、自然毒また一般家庭用品と幅広く、特別な毒物でなくとも日常使用している様々なものが使用方法・使用量次第で毒となりうる。また、近年では、一時期流行した危険ドラッグだけでなく、ベンゾジアゼピン系睡眠薬や向精神薬など既存の化合物の構造を一部変えたデザイナードラッグや、通常のドーピング検査で検出されないよう作られたデザイナースteroidが流行し問題となっており、未知の構造を持つ薬物も多数存在する。これら薬毒物を見逃すことなく検出するためには、薬毒物の性質に合わせた最適な

Necessity and Future Development of Forensic Toxicology in the Education of Analytical Chemistry in the Faculty of Pharmaceutical Sciences.

分析機器を選択し、これら分析機器の原理や問題点などを理解した上で分析を実施することができる専門知識及び技術が必要となる¹⁾。さらに法医解剖では、高度の腐敗など死体の状況によっては、通常臨床で取り扱う血液や尿の採取ができないことも多く、毛髪、体液、臓器、胃内容物、筋肉、脂肪や骨など様々な試料を用いて検査を行わねばならず、複雑なマトリックスに適した分析法を生体試料ごとに検討していく必要がある。さらに、これら検体は死後変化の影響を受けるため、血液を用いることができる場合でも生前においては考えられないような濃度変化が起きていることがある。薬物を高濃度含有した胃から薬物が浸潤し血液に拡散する死後拡散や、死後のpH変化に伴うタンパク質結合率変化などにより血管周辺臓器などから血中に再分布していく死後再分布では、死亡時と比較し濃度が大きく上昇してしまうことがある²⁾³⁾。逆に、死後血液中で細菌が繁殖することや、死後もしばらく活性が失われない酵素により薬物が分解されてしまうこと、更には溶血により放出されたヘモグロビンが触媒する酸化反応など生前では起こりえない死後代謝が起これること、薬物の濃度が低下したり検出が難しくなることもある⁴⁾⁵⁾。このように死後にはさまざまな要因によって濃度変化がおこることから、これら現象を理解した上で正確性や再現性のある定量分析を行い、正しい濃度評価を行う必要がある。

3 法中毒学の現状

上述のように、高度な専門性及び特殊性を要することから、薬物にかかわる様々な基礎研究及び教育を通じた継続的な研鑽^{けんさん}が必要である。実務としても生体試料中の医薬品分析や毒性評価を行っている薬学部で実施し、医学部における法医学教室と連携して行っていくのが適していると考えられる。実際、我が国の法中毒学の嚆矢となる衛生裁判化学講座は、明治26年(1893年)に初めて東京帝国大学医科大学薬学科に生薬学、薬化学と合わせて設置され、法中毒学の実務を担当していた。これに先立ち1888年に東京帝国大学医科大学に裁判医学講座(1891年に法医学講座に改称)が開講されていたこ

とから、この当時は法医学と衛生裁判化学が連携して解剖結果と薬物検査の結果に基づく鑑定を行い、死因の判定は大学内における医薬の分業・連携の上で実施されていた⁶⁾⁷⁾。しかしながら現在衛生裁判化学は衛生化学となり、実務を行う際の予算の問題や、薬学における研究業績評価や教育内容の点から鑑定業務に携わらなくなり、法中毒学に関する教育・研究はほとんど行われなくなった。そして、現在法中毒学は法医学領域の一部として取り扱われ、実務としての薬毒物検査は法医学教室において実施されているものの、その質と量には機関ごとに大きな開きがある。また、法中毒学に関する基礎研究は、法中毒専任の教員が在籍する一部の大学において行われている。

4 法中毒学分析の実際と課題

法医学で主に行われている法医解剖では、肉眼解剖に加え病理組織検査、CTなどを用いた画像検査、生化学検査、薬毒物検査といった様々な医学的検査が実施され、これらの結果を総合的に判断することで正しい死因究明が可能となる。特に違法薬物を含む薬毒物使用の有無や薬物中毒は外表所見や解剖検査など肉眼的検査からの判断が困難であり、分析結果次第では死因が大きく変わることや新たに事件性が生じることもある。そのため薬毒物検査は死因診断においても社会の治安維持の観点においても非常に重要である(図1)。

しかし、日本では警察取り扱い死体の9割程度は、初動一日程度で死体の外表検査、薬物簡易検査キット、状況調査などから犯罪性なしと診断され、解剖すら実施されていないのが現状である。また、日本で警察が死因判定のために主に用いている薬物簡易検査キット(DRIVEN-FLOW[®]やIVeX-screenなど)は、本来、救急救命の現場において意識障害のある患者に対し適切な治療を迅速に施すためや、覚醒剤や大麻、睡眠薬などのいわゆる乱用薬物使用の有無を短時間で判定するために開発されたものである。これらは定量性に乏しく、また偽陽性や偽陰性の頻度が高いことが問題となっている。さらに、シアン化合物などの化学物質、医薬品、テトロ



図1 死因究明における薬毒物検査の重要性

ドトキシシンやトリカプトなどの自然毒といった多くの薬物の検出はできず、死因判定を目的とする検査としては不十分である。実際、シアン化合物が関与した殺人を複数例見逃したとされる「関西連続青酸死事件」では、検視時の薬物検査が問題となったことから、予算を増額して検査の拡充を図った。しかし、この変更は実際に現場で行われているシアン化合物の検査に、口元における唾液を利用してのpH試験紙の変色検討や検知管の導入を追加したのみであり、検視後の法医解剖の必要性を正しく判断できる薬物検査ではなかった。さらに、警察の判断により犯罪性が否定され、法医解剖が行われなかった約9割程度の非犯罪性死体においても、検体を警察が保管・検査することは警察行政の性質上困難とされている。海外における土葬文化では、死亡後薬物使用が疑われた場合には、掘り起こした遺体からサンプルを採取し、薬物検査を実施することも可能である。一方、日本ではほとんどすべての遺体が火葬されてしまうことから、薬物が関与した犯罪を証明することは不可能になる。真の犯罪見逃しを防止し、正しい死因究明を行うためには、初動段階で犯罪が疑われない場合においても機器分析を用いた薬物検査が実施できる体制を構築すべきである。

法中毒学では解剖検体だけではなく生体試料も分析対象となる。飲酒や違法薬物が絡んだ事件・事故の裁判では、当事者の血中アルコール濃度や薬物濃度による行動能力や責任能力への影響の評価が求められる。また、薬物を使用したレイプ事件では、被害者の薬物の影響下における記憶障害や危険回避能力の評価が求められる場合がある。このような法的手続きの中で、医学的評価が論点となりうる事項に対し、医師による当事者診察に加えて薬物分析を行い、科学的根拠に基づく評価を行うことは、当事者の人権擁護につながり、社会の安心・安全に寄与すると言える。このように生きている人間に関して医学的に公正な判断を下す学問である「臨床法医学」は、欧州やオーストラリアでは確立された一つの分野として認識されており、法中毒学者との連携のもと生体鑑定が実施されている。また、アルコール・薬物が人間のパフォーマンスと行動に及ぼす影響およびその使用による医学的・法的影響を扱う法中毒学の一領域とも言える「Human Performance Toxicology」が発展しており、薬物とアルコールの使用に関する社会的調査や、危険運転・殺人・性的暴行を含む薬物に関連する犯罪に加えて、航空機・自動車・船舶の衝突事故などの捜査などが実施されている。さらに競技スポーツでは、アスリートの健康と福祉を守り、公平で均等な競技水準を維持し、公営競技の公正性を維持するためのドーピングに関する規則が設けられている。これらドーピング検査も、国際オリンピック委員、世界アンチ・ドーピング機構、国際競馬統括団体連合と連携し、法中毒学者が生体試料の分

析を実施している。日本における臨床法医学は発展途上であり、一部の法医学教室が個別で活動するのみであり、実務的、法的にもまとまった体系を構築するには至っていない。そのため、現在日本においては、臨床法医学で問題となりうる生体試料を、専門家である法中毒学者が分析し評価することはほとんどない。臨床法医学における薬物分析は、正確性、妥当性、信頼性が不可欠であり、専門性の高い薬物分析が求められる。これらが未発達な状況では、客観的・公平性に欠けた医学的判断に基づいた診断が行われている可能性がある。今後日本においても、海外を参考に臨床法医学と法中毒学との連携を強化し、生体試料の分析を実施していく必要がある。

法医解剖に伴う薬物検査費用は大学間での格差が認められる。かつて司法解剖は執刀医への謝金のみで行われていたが、国立大学の法人化後、警察庁によって検査経費が予算化された。これに伴い、解剖数が比較的多く、かつ積極的に薬物検査を導入してきた法医学教室では予算規模の大きさから高額な分析装置を購入し、検査担当者を雇用できた。一方、解剖数が少なかったり、薬物検査導入に消極的であった法医学教室では分析装置の購入及び検査担当者の雇用ができず、旧態依然として薬物検査ができない状況にある。また、現在多くの大学の法中毒学部門は医学部法医学講座の一部となっており、医学部の限られた定員では、解剖を行える医師の雇用が優先され、薬物の検査担当者の雇用は後回しになりがちである。2019年、日本法医学会内で開催されている法医学中毒勉強会にて、全国の監察医務院2施設を含む法医学関連機関92施設を対象とした薬物検査状況調査（矢島ら、未出版データ）において、回答が得られた49施設のうち、薬物検査ができる教職員が在籍している施設は46機関であり、分析実施機関の6割以上で1人体制を敷いていることが報告された。分析者の身分は6割以上を助教及び技術職員が占め、技術職員のみで検査を実施している機関も少なくないと報告している。さらに、一部の教員は薬学や化学を専門としているものの、それまで全く違う分野を担当していた職員が一から技術を習得していくことも多い。検査内容に関しては、アルコール検査、一酸化炭素検査、一般的薬物スクリーニング検査や定量検査などの基本的な検査は多くの施設が自施設で実施可能であるのに対し、シアン化物検査や硫化水素検査など特殊な検査になるほど実施率が低下する傾向が見られ、自施設にて検査できない検査については30%程度が他大学、残り70%程度が科捜研への委託を行っていた。最も重要な点としてアンケートの回答を得られなかった43機関では薬物検査が実施されていない可能性が高く、薬物検査実施率の低さ及び検査担当者の不足が露呈し問題となった。

このような多くの問題の解決に向け、千葉大学では、

2014年より、医学部内にて法病理学、法中毒学、法遺伝学、法歯科学、法医画像診断学、臨床法医学の6部門からなる千葉大学附属法医学教育研究センターを立ち上げた。これにより今まで法医学教室が持っていた大学規定の雇用枠を超え、各部門において、それぞれ専門家の雇用・人材育成及び研究教育が可能となった。さらに、各部門間における密な連携により、現在、小児科、産婦人科、救急科などの臨床科との協力のもと虐待や小児の事故等の薬物検査の実施、警察と協力しての運転時や犯罪時の処方薬の分析及び影響の検討、また、検視時に犯罪性が曖昧な事例における死後画像診断と薬物検査による犯罪性遺体のスクリーニングなど様々な検査が実施され、法中毒学の業務も拡大されつつある。しかしながら、あくまで医学部内に設置されていることから、臨床各科や元々法医学と関係のあった他機関との連携と比較して、特に法中毒学部門の薬物分析との連携に関しては課題が残されていた。医学教育モデル・コアカリキュラムでは分析化学を取り扱うことはなく、医学部では系統立てた分離や計量計測を学修する機会がない。一方、薬学部においても法医学における薬物分析の認知は低く、薬学生の将来の選択肢に上がりにくい。これらの理由から、薬学部と医学部の双方において専門家の育成が難しい状況である。千葉大学においては、大学内で薬学と医学すなわち法中毒学と法医学との連携が可能になったものの、全国的には法医学分野の医薬連携はほとんど行われていない。

5 法中毒学の取り組みと今後の展開

2020年4月に死因究明等推進基本法が施行され、厚生労働大臣を本部長とする死因究明等推進本部において、法医学における薬物検査の在り方を含めた今後の日本の死因究明の在り方が議論され始めた。そして2021年6月に死因究明等推進計画が閣議決定され、死因究明等が適切に実施されるための人員確保、その資質の向上が求められることとなり、その中で初めて薬学教育における死因究明等に関する内容の充実が求められる文言が明記された。さらには、死因究明等の質の向上及び体制強化を図るためには、大学の教育・研究体制を充実することが不可欠であり、大学間や学部間の連携を強化し、死因究明に関する教育・研究拠点の整備・拡大を図っていくことも今後の重要な課題として挙げられた。このような動きを受けて薬学部における法中毒学設置の必要性が示され、閣議決定がされる直前の2021年4月に、千葉大学附属法医学教育研究センター法中毒学部門を基盤として、千葉大学大学院薬学研究院・薬学部に日本で初めて法中毒学を掲げる研究室が新規に開講された。これにより法医学における死因判定が大学内における医薬の分業・連携の上で再び実施でき、加えて法中毒学の後継者育成の推進が期待されることとなった。

現在、千葉大学大学院薬学研究院法中毒学研究室は2名の教員体制である。実務面では医学研究院法医学教室と分析機器や人材を一体的に運用し、法医解剖、近隣警察医の検案に伴う薬物分析や生体鑑定に伴う薬物分析を実施している。初年度より薬学部における分析化学、衛生薬学の講義及び実習を担当し、分析化学実習では実際に法医学の実務や警察による検視でも用いられる簡易検査キットを用い、偽陽性や偽陰性が起きてしまう原理やそれが検視やその後の解剖検査にどのような影響を与えるかなど実際の問題について考察を促すような内容を取り入れている。また、法医学教室と連携して法医解剖見学を実施した際には、多数の薬学部生の参加があり、潜在的な関心の高さがうかがわれた。このように法医学教室と連携することで、これまで実際に法医学及び法中毒学の現場に触れることが少なかった薬学部生が、薬物分析や研究の実際に触れることが可能になり、法中毒学へより興味を持ちやすくなる環境が整いつつある。しかし、研究室の開設だけでは人材の育成は難しい。過去に衛生裁判化学から衛生化学へ変遷していく過程でも、一部では法中毒学にかかわる教育研究は継続されていたものの、現在では法中毒学の教育がほぼゼロの状態まで衰退してしまっている。様々な要因が絡んでの結果ではあるが、その原因の一つに薬学教育モデル・コアカリキュラムの影響があげられる。近年、科学を基盤として医療に貢献する薬剤師の職責に求められる薬学の知識や技能が専門化かつ高度化しており、限られた大学教育の中でこれら膨大な知識や技能を網羅して習得することは困難となってきた。そのため、将来どのような分野に進んだ場合においても共通に必要な薬剤師の基本手的な資質と能力を習得し、そのうえで生涯にわたって常に研鑽し社会に貢献できるように、薬学部生が身に付けていくべき必須の能力(知識・技術・態度)の到達目標を分かりやすく提示したものが現行の薬学教育モデル・コアカリキュラムである。薬学教育モデル・コアカリキュラムは、はじめ薬学部6年制を見据えて2001年に私立薬科大学協会と国公立大学薬学部長会議の下で策定が行われ、これを2002年に薬学会が整理統合した。初期の薬学教育モデル・コアカリキュラムでは、薬学専門教育における「化学物質の分析」に関するカリキュラムにて、一般的目標としての化学物質の検出と定量の基礎知識及び技術の習得に加え、【分析技術の臨床応用】の一つとして【薬物分析】の項目が掲げられており、乱用薬物などを含む中毒原因物質の生体試料の取り扱いや分析に関する到達目標が設定されていた。しかし、2013年改訂版においては、「化学物質の分析」から薬物分析の項目に関する部分が削除され、中毒原因物質の試験法や分析に関する内容が「衛生薬学」のカリキュラム内の目標へと変更されて、現在に至る。現在、2021年の死因究明等推進計画の閣議決定を受け、

薬学教育モデル・コアカリキュラムの改訂が検討されており、その素案における「衛生薬学」のカリキュラム案にて、新たに死因究明に関するカリキュラムが追加される予定となった⁸⁾。その具体的学修目標として、「死因究明に関する社会的な影響、国際的な動向の解析、関連する規制・制度、及び関連法規の理解のもとに、実効性のある薬学的アプローチを立案する」、また、学修項目として、【死因究明における毒性学・法中毒学的アプローチ】と、具体的な法中毒学教育内容が掲げられることとなり、さらには、臨床薬学教育内において、ドーピング防止等にむけた教育についても含まれている。この改訂により、今後、全国の薬学部・薬科大学における教育・研究・実務の一体的な実施のもと、継続的かつ恒常的な人材育成及びより専門性の高い薬毒物分析の実施などが期待されることとなった。法中毒学にかかわる分析の今後の発展のためにも、今後、これら死因究明にかかわる教育を維持していきながら、分析化学のカリキュラム内にて、法中毒に関する分析に必要な知識及び技術の習得が可能になるようなカリキュラム設定を目指していきたい。

千葉大学では法医学分野の医薬連携が果たされたことによって、研究面でもメリットが生まれている。すなわち、これまで千葉大学法医学教育研究センター法中毒部門が所有していた分析機器に加え、薬学研究院が所有する共同利用機器も制約なく利用できるようになり、研究の幅が広がっている。

法医学先進国であるスウェーデンでは、政府に法医学を振興し、鑑定実務を遂行するための部局（Rättsmedicinalverket, RMV；national board of forensic medicine, 国立法医学局）があり、スウェーデン内の6か所の解剖施設を統括しつつ警察取り扱い死体の約9割を解剖し、薬毒物検査については1施設に集約して実施している。さらには薬物分析担当者を実務家としてRMVに所属させながらカロリンスカ大学やリンショーピン大学などの教員を兼務させ、法中毒学の教育研究を行っている。また、もう一つの法医学先進地域であるオーストラリア・ビクトリア州にあるビクトリア州法医学研究所（Victorian institute of forensic medicine, VIFM）では、警察取り扱い死体の半数程度を解剖し、RMVと同等規模の設備と人員を有する薬物部門にて、解剖実施事例だけでなく、非解剖事例についても薬物分析をおこなっている。VIFMにおいても、薬物部門の主任がMonash大学法医学教授を兼任し法中毒学者育成プログラムを開講するなどしている。RMV、VIFMいずれの機関でも、一つの機関内に多数かつ多様な質量分析装置を備え、それぞれの機器の特性に合わせて使い分けることにより、様々な薬毒物を検出できる分析法が確立されている。さらに、国や学会機関により分析法や、分析者の質が管理され、常に一定の結果が得られるよう、分析システムが管理され

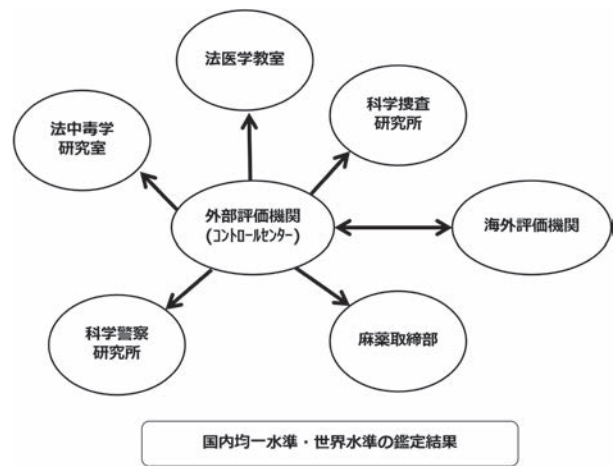


図2 分析システム管理組織図の理想

ている。これら先進国と比較し、日本の法中毒学は、近年大きく発展しつつあるものの、まだまだ後塵を拝しているのが現実である。日本においても将来的には法医学及び法中毒学の先進国と同様に、国家的規模の支援並びに先導の下に、分析センターの拠点化、また、法医学関連施設だけでなく、科学警察研究所、科学捜査研究所や麻薬取締部など、薬毒物分析を実施する関連機関と連携し、これら施設間での分析及び分析者の質を、国内・国外の管理機関と連携し管理していき（図2）、国内均一水準・世界水準の鑑定結果を得られる分析システムを構築していく必要があるのではないだろうか。

6 さ い ご に

近年の著しい分析機器の発達に伴い、法中毒学も世界的に見て大きく発展してきている。しかしながら、日本では、法医学・法中毒学にかかわる制度の不備や分析者の不足などから、法中毒学はいまだ発展途上であると言わざるを得ない。今回の死因究明等推進計画の閣議決定、また今後予定されている薬学教育モデル・コアカリキュラムの改訂は今後の法中毒学の発展に寄与する重要な動きであり、これらの動きを逃すことなく、本邦の法中毒学の研究・教育・実務を大きく発展させることに貢献したいと考えている。

文 献

- 1) 山岸由和, 永澤明佳, 小椋康光, 岩瀬博太郎: *ぶんせき (Bunseki)*, **2022**, 567.
- 2) S. Nagasawa, N. Katagiri, A. Nara, F. Chiba, Y. Kubo, S. Torimitsu, D. Yajima, M. Akutsu, H. Iwase: *Forensic Sci. Int.*, **266**, 1 (2016).
- 3) S. Nagasawa, R. Yamguchi, K. Saka, S. Torimitsu, F. Chiba, D. Yajima, G. Inokuchi, A. Motomura, K. Kira, Y. Yamagishi, Y. Ogra, H. Iwase: *Forensic Toxicology*, **40**, 173 (2021).
- 4) Y. Yamagishi, S. Nagasawa, H. Iwase, Y. Ogra: *J Toxicol Sci.*, **47**, 13 (2022).
- 5) Y. Yamagishi, S. Nagasawa, H. Iwase, Y. Ogra: *Chem Res Toxicol.*, **35**, 1110 (2022)

- 6) 狐塚 寛, 鶴飼茂夫, 黒岩幸雄編: “考える裁判化学”, (廣川書店), (1998).
- 7) 警視庁刑事局, 司法解剖の実施. 平成 26 年度警視庁行政事業レビュー資料.
- 8) 文部科学省: 参考資料: 薬学教育モデル・コアカリキュラム令和 4 年度改訂版 (素案).



永澤 明佳 (Sayaka NAGASAWA)

千葉大学大学院医学研究院法医学, 千葉大学大学院薬学研究院法中毒学 (〒260-8670 千葉県千葉市中央区亥鼻 1-8-1). 千葉大学大学院医学薬学府博士課程修了. 博士 (医学)・薬剤師. 《現在の研究テーマ》薬物死後再分布のメカニズム解析, 死後検体中のインスリン製剤分析法の開発. 《趣味》映画鑑賞.

E-mail: nagasawa.s@chiba-u.jp

日本分析化学会の機関月刊誌『ぶんせき』の再録集 vol. 3 が出版されました！ 初学者必見！ 質量分析・同位体分析の基礎が詰まった 293 ページです。

本書は書籍化の第三弾として、「入門講座」から、質量分析・同位体分析の基礎となる記事、合計 42 本を再録しました。『ぶんせき』では、分析化学の初学者から専門家まで幅広い会員に向けて、多くの有用な情報を提供し続けています。これまで掲載された記事には、分析化学諸分野の入門的な概説や分析操作の基礎といった、いつの時代でも必要となる手ほどきや現役の研究者・技術者の実体験など、分析のノウハウが詰まっています。

〈2003 年掲載 1 章 質量分析の基礎知識〉

- | | |
|--------------------|--------------------------|
| 1. 総論 | 7. 無機材料の質量分析 |
| 2. 装置 | 8. 生体高分子の質量分析 |
| 3. 無機物質のイオン化法 | 9. 医学, 薬学分野における質量分析法 |
| 4. 有機化合物のイオン化法 | 10. 食品分野における質量分析法 |
| 5. ハイフェネーテッド質量分析 I | 11. 薬毒物検査, 鑑識分野における質量分析法 |
| 6. タンデムマススペクトロメトリー | 12. 環境化学分野における質量分析法 |

〈2009 年掲載 2 章 質量分析装置のためのイオン化法〉

- | | |
|-----------------------|---------------------|
| 1. 総論 | 7. レーザー脱離イオン化 |
| 2. GC/MS のためのイオン化法 | 8. イオン付着質量分析 |
| 3. エレクトロスプレーイオン化—原理編— | 9. リアルタイム直接質量分析 |
| 4. エレクトロスプレーイオン化—応用編— | 10. 誘導結合プラズマによるイオン化 |
| 5. 大気圧化学イオン化 | 11. スタティック SIMS |
| 6. 大気圧光イオン化 | 12. 次世代を担う新たなイオン化法 |

〈2002 年掲載 3 章 同位体比分析〉

- | | |
|------------------|------------------|
| 1. 同位体比の定義と標準 | 4. 同位体比を測るための分析法 |
| 2. 同位体比測定の精度と確度 | 5. 生元素の同位体比と環境化学 |
| 3. 同位体比を測るための前処理 | 6. 重元素の同位体比 |

〈2016 年掲載 4 章 精密同位体分析〉

- | | |
|------------------------------------|---------------------------------------|
| 1. 同位体分析の基本的原理 | 8. 小型加速器質量分析装置の進歩と環境・地球化学研究への応用 |
| 2. 表面電離型質量分析計の原理 | 9. 二次イオン質量分析装置の原理 |
| 3. 表面電離型質量分析計の特性とその応用 | 10. 二次イオン質量分析計を用いた高精度局所同位体比分析手法の開発と応用 |
| 4. ICP 質量分析法による高精度同位体分析の測定原理 | 11. 精密同位体分析のための標準物質 |
| 5. マルチコレクター ICP 質量分析装置による金属安定同位体分析 | 12. 質量分析を用いた化合物同定における同位体情報の活用 |
| 6. 加速器質量分析装置の原理 | |
| 7. 加速器質量分析の応用 | |

なお『ぶんせき』掲載時から古いものでは 20 年が経過しており、執筆者の所属も含め現在の状況とは異なる内容を含む記事もありますが、『ぶんせき』掲載年を明記することで再録にともなう本文改稿を割愛しました。これらの点については、執筆者および読者の方々にご了承いただきたく、お願い申し上げます。

高分子材料の寿命評価法

高分子材料はポリマー、添加剤の種類や使用環境などによって劣化速度は一律ではないものの必ず劣化が進行し、金属材料や無機材料と比べると比較的短命である。このため、高分子材料の寿命が製品全体の寿命を左右することも多い。したがって、高分子材料の寿命の把握と長寿命化材料の開発などのために寿命評価は欠かすことができない。本稿では寿命予測モデルを解説し、予測結果の信頼性を高めるために必要な寿命評価法の注意点と劣化度の定量法について解説する。

仲山 和 海

1 製品寿命

ゴム、プラスチックをはじめとする高分子材料は金属材料、無機材料と比べると、本質的に軽量で物性の設計範囲が広く、加工温度が低いため成形が容易であり、その特徴を活かして種々の製品の機能を担う部品や構造材など多様な用途で使用されている。一方で高分子材料は可燃性と劣化が生じやすいことが弱点として挙げられ、有用な高分子材料を活用するためにはこれらの弱点を抑えるあるいはリスクを回避した使用方法を取り入れる必要がある。燃焼については難燃剤の添加やポリ塩化ビニル（PVC）などの難燃性の高いポリマーを選択することで材料面での対策ができる。劣化に関しては酸化防止剤、紫外線吸収剤などの劣化防止用添加剤の添加や劣化因子に強いポリマーを選択することで対策を施し寿命を長くすることができる。それでも図1に示すように高分子材料は徐々に劣化によりその特性が損なわれ寿命を迎え、高分子材料の寿命が工業製品の寿命を決定することも多い。故に寿命評価の重要度や期待は大きいものの、寿命を左右する劣化現象に変動要因が多いため、画一的あるいは完全な寿命予測法が存在しない。しかしな

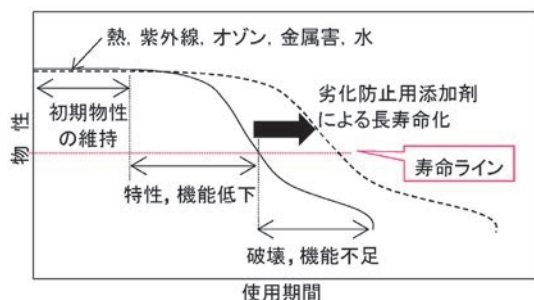


図1 高分子材料の劣化の進行と寿命到達の模式図

がら、寿命評価の手法や条件（寿命予測のモデル、劣化度の定量法、促進劣化処理条件、寿命ラインなど）を選択し、設定することができれば予測結果の精度を高めることができ、意味のある寿命評価にすることが可能になる。本稿では寿命予測モデルと予測結果の信頼性を高めるために必要な寿命評価法の注意点と劣化度の定量法について解説する。

1.1 寿命の定義

材料、製品の寿命は状況や見方によって定義が変わり、商品的寿命と機能的寿命に大別される。商品的寿命は汚れ、傷、変色などの外観の変化、流行、新製品登場などの嗜好の変化、時代の流れなどの理由によって、製品や材料としての機能は維持していても使用されなくなり寿命を迎えるものである。商品的寿命も考慮しなければ高品質化が過剰になりコスト増を招くため、製品開発のうえで重要である。機能的寿命は製品として使用できる期間で、材料の劣化に強く依存し、機能性の低下、破壊、変形などによって決まる。技術者が寿命評価の対象とするのは機能的寿命で、以降では機能的寿命について述べる。

1.2 寿命予測モデル

寿命評価を行う際には同一条件で加速試験を行い、試料間の優劣を比べることもできるが、寿命予測モデルを適用して耐久回数や時間を推定することも広く行われている。このとき寿命予測モデルが劣化現象に適合している必要がある。

1.2.1 クリープ破壊の予測モデル ラーソン・ミラー式

クリープ破壊に対してはラーソン・ミラー式が選択される。プラスチック材料では温度または応力が高いほどクリープ変形が起こりやすく、破壊に至るまでの時間が

短い。ラーソン・ミラー式を式 (1.1) に示す^{1)~3)}。
ラーソン・ミラー式では温度と応力とクリープ破壊時間の関係が表されている。

$$T(C + \log t) = Q \dots\dots\dots (1.1)$$

T は絶対温度, C は定数, t は破壊時間, Q はラーソン・ミラー定数で応力によって決まる。

1・2・2 疲労破壊の予測モデル マイナーの累積損傷則

疲労破壊に対してはマイナーの累積損傷則 (通常、マイナー則と呼ばれる) が選択される²⁾³⁾。金属では広く適用できるが、ゴム、プラスチックの場合は必ずしも適用できるとは限らない。マイナー則では縦軸に応力振幅と横軸に破壊に至るまでの繰返し数の関係を示した $S-N$ 線図を作成する。 $S-N$ 線図を図 2 に例示する。通常、横軸は対数軸、縦軸は線形軸か対数軸とし、 $S-N$ 線図は直線関係で表される。応力振幅 σ_i が n_i 回加えられ、 N_i 回に達したときに破壊することを意味しており、いくつかの応力振幅 $\sigma_1, \sigma_2, \dots$ がそれぞれ n_1, n_2, \dots 回繰返し付与され、累積損傷度 $D = \sum (n_i/N_i)$ が 1 に達すると破壊するモデルである。

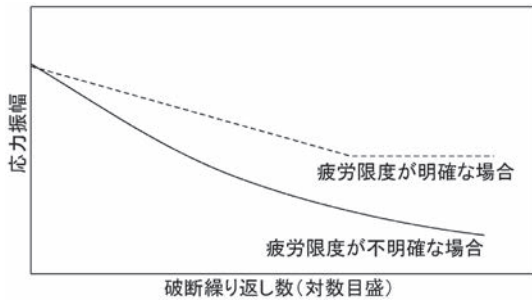


図 2 疲労試験における $S-N$ 線図

1・2・3 化学的劣化に対する予測モデル アレニウスモデルとアイリングモデル

アレニウス法は熱や光、酸素などの使用環境に存在する劣化因子によって生じる化学的な劣化現象に対する代表的な寿命予測法で、温度上昇によって劣化の進行が促進されることを活用する。温度以外の促進因子で加速した促進劣化試験ではこのモデルから明らかに外れることになる。ポリマーの劣化反応が次の式 (1.2) に示すアレニウス式に従い生じるとする¹⁾⁴⁾。

$$k = Ae^{-E_a/RT} \dots\dots\dots (1.2)$$

ここで k は反応速度定数, A は頻度因子, E_a は活性化エネルギー, R は気体定数である。両辺の対数をとると式 (1.3) が得られる。

$$\ln k = \ln A - \frac{E_a}{RT} \dots\dots\dots (1.3)$$

一定の劣化反応が進んだとき、寿命に達すると考えると寿命は k の逆数に比例するため、式 (1.4) が得られる。

$$\ln L = A' + \frac{B'}{T} \dots\dots\dots (1.4)$$

ここで L は寿命 (寿命ラインの特性値に達する時間), A', B' は定数である。促進試験で得られた寿命の対数と促進試験温度の逆数をプロット (アレニウスプロット) し、実環境温度に外挿することで寿命を予測できる。

アレニウス法による寿命予測の実際の手順は、まず、三水準以上の熱劣化処理温度で劣化速度を調べる。劣化指標としては、引張試験による弾性率、引張強さ、切断時伸び、化学分析による酸化劣化度、分子量など複数の指標を用いて適切な指標を見出す必要がある。図 3 に加硫ゴムを熱劣化処理し、硬さを劣化指標とした例を示す⁵⁾。次に回帰式などを用いて、設定した寿命ラインに至るまでの時間 L を各処理温度 T に対して求める。そして、図 4 のように $1/T$ と $\ln L$ の関係をプロットし、線形近似式より使用温度まで直線を外挿し寿命を算出する⁵⁾。

アレニウスモデルの反応速度論をより一般的にしたものがアイリングモデルである¹⁾⁴⁾。アイリングモデルでは温度以外の劣化に対するストレスの影響が考慮される。ストレスは濃度、電圧、湿度、応力などである。

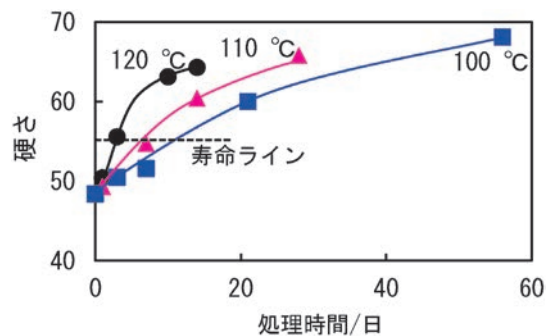


図 3 加硫ゴムの熱劣化処理による硬さ変化⁵⁾

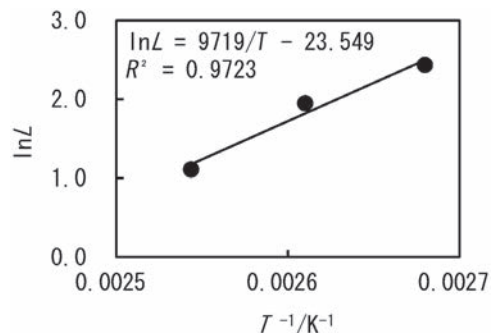


図 4 アレニウス法に基づく $1/T - \ln L$ プロット⁵⁾

$$k = a(k_B T/h) e^{-E_a/k_B T} S^n \dots\dots\dots (1.5)$$

$$\approx A e^{-E_a/k_B T} S^n \dots\dots\dots (1.6)$$

a , n は定数, k_B はボルツマン定数, h はプランク定数, E_a は活性化エネルギー, S は温度以外のストレスである. 両辺の対数をとると, 式 (1.7) が得られる.

$$\ln k = \ln A - \frac{E_a}{k_B T} + n \ln S \dots\dots\dots (1.7)$$

一定の劣化反応が進んだとき, 寿命に達すると考えると寿命は k の逆数に比例し, 一定温度では式 (1.8) が得られる.

$$\ln L = A' - n' \ln S \dots\dots\dots (1.8)$$

n' は定数である. 促進試験で得られた寿命の対数とストレス, 例えば, 濃度, 応力, 湿度などの対数をアレニウス法と同様の要領でプロットし, 実環境のストレスの強さに外挿することで, 寿命を予測できる. 得られた寿命予測値は実験温度での予測値になる.

アイリング法による寿命予測の実際の手順は, まず三水準以上のストレス条件で劣化速度を調べる. 次に回帰式などを用いて, 設定した寿命ラインに至るまでの時間 L を各ストレス S に対して求める. そして, $\ln S$ と $\ln L$ の関係をプロットし, 線形近似式より使用環境のストレスまで直線を外挿し寿命を算出する.

1.3 寿命予測の注意点

寿命予測の上でポイントとなるのは, 寿命予測の特性値の決定 (どの特性値で寿命を予測するかで, 寿命予測値は大きく変わる), 寿命ラインの決定 (どの程度特性が低下したところを寿命とするかで, 寿命予測値は大きく変わる) と, 促進劣化処理条件の決定である. 促進劣化処理条件は, 市場回収品などで劣化評価を行い, 実環境での劣化因子を特定し, この劣化因子を過酷にしたものである. このため, 促進劣化処理条件は実環境と異なり, 加えて, 実環境ではその他の因子も関与しているために, 促進劣化処理によって実際の劣化現象と特性変化を完全に再現することはできず, 寿命予測には誤差が生じる. これは, 寿命予測モデルが単一の化学反応を対象とした化学反応速度論を適用していることに起因している. すなわち, 加熱による促進劣化はほとんどの化学反応を促進するため最も有効な促進法であるが, 加熱によってすべての劣化にかかわる反応及び変化が一律に促進されるわけではないために, 寿命予測結果と市場での寿命にはかい離が生じる. 例えば, 高温のみで生じる反応が促進劣化処理で生じ, 市場環境と劣化反応が異なることがかい離の原因になる. また, 酸素や水などの劣化因子の浸透領域が促進処理条件と市場環境で異なることもかい離の原因として挙げられる. 図 5 に高温で酸化

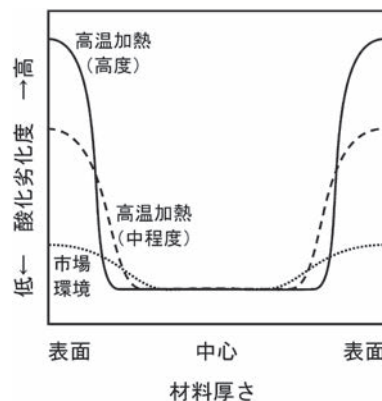


図 5 市場環境と熱による促進劣化時で生じる酸化劣化のかい離状況模式図⁵⁾

劣化を促進させた場合と市場環境で生じる酸化劣化とのかい離状況を模式図に示した⁵⁾. 高温での熱劣化においては反応速度が加速されるために表面付近で酸素が速やかに消費されて激しく酸化劣化が生じるものの中心部では酸素濃度が低く酸化が進行しなくなる. 一方, 市場環境では酸素が内部にも拡散し表面付近の酸化劣化はそれほど高くはならないが酸化劣化層が深くなる. これらのかい離原因をできる限り回避し, より正確な寿命予測値を得て, 寿命評価法の信頼性を高めるためのポイントとして次の事項が挙げられる.

- (i) 促進劣化処理の妥当性を化学分析により検証する必要がある.
- (ii) なるべく実際の条件に近い温度で促進試験を実施する.
- (iii) 予測された劣化速度と市場での実際の劣化速度を比較し補正する.

寿命予測結果は絶対値ではなくあくまでも予測値で使用環境にも寿命は影響を受けるため, 生物の寿命と同様で正確に知ることは不可能であるが, 寿命予測技術は耐久性向上を定量的に確認するには効果的で, 寿命予測結果にかい離が生じることまで正しく理解することで極めて有効な寿命評価技術になる.

2 寿命評価のための分析法

表 1 に高分子材料の主な劣化分析法を示す⁵⁾. 高分子材料の劣化時に生じる変化は多様であるためにその変化に応じた分析法を選択する必要がある. ここではいくつか劣化分析法を取り上げて得られる情報や分析上の注意点を解説する.

表 1 高分子材料の主な劣化分析法⁵⁾

項目	分析法
劣化構造解析, 劣化度	フーリエ変換赤外分光分析 (FT-IR) X線光電子分光分析 (XPS) 核磁気共鳴 (NMR)
劣化誘引元素	電子線マイクロアナリシス (EPMA)
ラジカル種及び濃度	電子スピン共鳴 (ESR)
熱分解速度	熱重量測定 (TG)
酸化開始温度	示差走査熱量測定 (DSC)
架橋度	示差走査熱量測定 (DSC) パルス法核磁気共鳴 (TD-NMR)
劣化による分子量変化 (低分子量成分)	ゲル浸透クロマトグラフィー (GPC)
老化防止剤などの配合剤	ガスクロマトグラフィー質量分析 (GC/MS) 液体クロマトグラフィー質量分析 (LC/MS)

2.1 劣化分析法

2.1.1 フーリエ変換赤外分光分析 (FT-IR) による劣化分析法

FT-IR ではポリマーの劣化により変化する官能基 (カルボニル基, ヒドロキシ基, カルボキシ基, 二重結合) を定性的, 定量的に検出することが可能で, 劣化検出法として多用される手法である. 酸化劣化などの劣化現象は一般に表面から進行するため, 表面分析法である全反射法 (ATR) が有効である. 注意すべき点は分析深さが数 μm オーダーの表面になるため, 表面付着物の存在がデータを左右することである. 目には見えなくてもプラスチック表面には滑剤, 離型剤, ブルーム物 (又はブリード物), ゴム表面にはこれらに加えて老化防止剤, 加硫促進剤のブルーム物が存在することが多く, 溶剤で拭き取るなど適正な処理を行わなければ, ポリマー表面の劣化度を定量的に評価できなくなる.

図 6^{5)~7)} には FT-IR の顕微 ATR 法で過酸化物質架橋剤のジクミルペルオキシド (DCP) で架橋したエチレンプロピレンゴム (EPDM) の表面の酸化劣化度合いを測定した結果を示す. 50°C で 40 日間熱劣化処理した

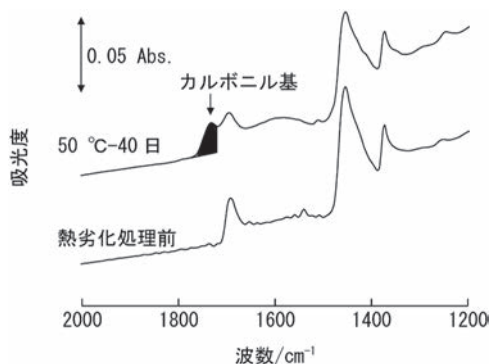


図 6 DCP 架橋 EPDM の FT-IR-ATR による劣化分析^{5~7)}

EPDM では, 未処理では認められない 1730 cm^{-1} のカルボニル基による吸収が出現し, 酸化劣化が進行している. FT-IR 法で劣化度を定量化するには測定ごとに吸光度の絶対値が変化するため, 劣化による変化の少ないピークを基準として劣化によるピーク強度を求める. 図 6 の例では 1375 cm^{-1} の吸収 (A1375) を基準ピークとし 1730 cm^{-1} の吸収 (A1730) の比 A1730/A1375 を求めて劣化度を定量化する.

2.1.2 示差走査熱量測定 (DSC) を用いた酸化開始温度 (IOT) による劣化分析法

高分子の劣化時に生じる自動酸化反応の過程でヒドロペルオキシ基が蓄積された状態にある加硫ゴム及びプラスチックが DSC 中で加熱されると, より少ないエネルギーで急激な酸化反応が生じる. この酸化反応が開始する温度を図 7^{5)~7)} のように IOT (initial oxidation temperature) と呼び, IOT は劣化の進行に伴って, 低温側にシフトし, 劣化の指標になる⁸⁾⁹⁾.

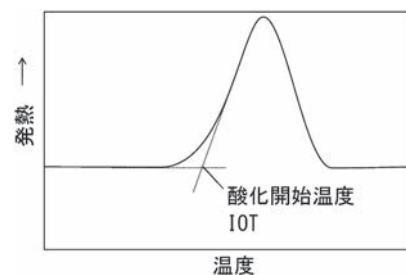


図 7 酸化開始温度測定模式図^{5)~7)}

2.1.3 ゲル浸透クロマトグラフィー (GPC) による劣化分析法

ポリマーは酸化劣化, 加水分解, 疲労劣化など劣化過程で, 架橋反応と分子鎖切断反応が進行する. すなわち, ポリマーは劣化により平均分子量, 分子量分布が変化する. 分子量は材料強度に強く影響を与えるため, 分子量変化により劣化度を定量化するのは効果的である.

図 8 にポリカーボネート (PC), 低密度ポリエチレン

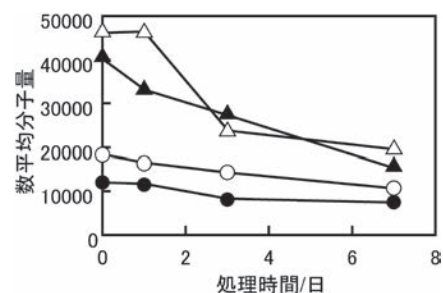


図 8 各種プラスチック試料の光劣化処理による数平均分子量の変化⁵⁾¹⁰⁾

○ PC, ● LDPE, △ PP, ▲ PS

(LDPE), ポリプロピレン (PP), ポリスチレン (PS) について, キセノンウェザーメーターで光劣化処理後に GPC 測定を行い, 光劣化処理に伴う数平均分子量の変化を調べた結果を示す⁵⁾¹⁰⁾. PC, LDPE, PP, PS の数平均分子量は処理時間の経過とともに低下しており, 分子鎖切断を伴いながら劣化が進行していることがわかる.

2・1・4 電子スピン共鳴 (ESR) 法による劣化分析法

ESR 法は不対電子を対象とする分析法でラジカルや遷移金属が測定対象になる. 多くの劣化因子においてラジカルの発生が劣化に関与し, ラジカル量は劣化過程で発生したラジカルを反映して, 劣化度を示すケースがあることから, ESR は劣化検出法としても有効である. ただし, ラジカルの寿命はポリマー種, 酸化防止剤の種類と量, その置かれる環境によって影響を受け, また, ラジカルは発生と消滅を繰り返しているなどの理由により, ラジカル量が劣化度を直接示さないこともあることを注意すべきである.

図 9 にポリカーボネートの光劣化処理前後の ESR スペクトルを示す⁵⁾¹⁰⁾. 処理時間が 0, 1, 3, 7 日と経過すると $g=2.004$ 付近のピークが増大し, 劣化の進行過程でラジカルが発生, 蓄積されていることがわかる. 試料の誘電損失が大きくなるとピーク強度は低下するため, 標準試料のマンガンマーカの強度を基準として定量的扱いを行うのが望ましい. ラジカル量を有機ラジカルのピーク高さ/マンガンマーカ (3rd) のピーク高さにより相対ラジカル量として計算し, 各種プラスチック試料の光劣化処理によるラジカル量の変化を比較した結果を図 10 に示す⁵⁾¹⁰⁾. 光劣化処理時間の経過とともにラジカル量が顕著に増加したのは PC と PS で, LDPE, PP ではほとんど増加は認められなかった. PC と PS ではラジカルを生じやすく, その他はラジカルが生じにくいということではなく, 測定試料中に存在するラジカル

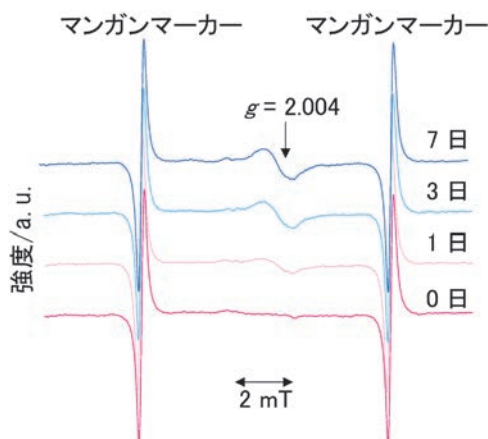


図 9 ポリカーボネートの光劣化処理前後の ESR スペクトル⁵⁾¹⁰⁾

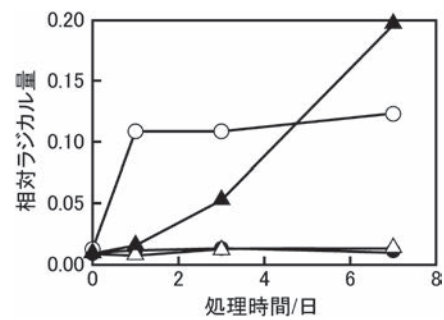


図 10 各種プラスチック試料の光劣化処理によるラジカル量の変化⁵⁾¹⁰⁾

○ PC, ● LDPE, △ PP, ▲ PS

量の差異があらわれている. すなわち, PC と PS では生成したラジカルが比較的安定な構造であることを示している.

2・2 熱分析を用いた速度論解析による耐熱性評価

劣化は化学的構造変化を伴うという観点により, アレニウス式を用いた化学反応の速度論解析を活用して寿命を予測することが広く行われているが, 同様の取り扱いで熱重量測定 (TG), DSC などの熱分析を用いて化学反応の速度論解析を行うことで耐熱性を評価することが可能である. アレニウス式を用いた寿命予測と同じく, 劣化要因が温度のみであること, 劣化反応が単一の素反応であること, 拡散律速ではないこと, 加えて熱分析時の試料の温度分布が無視できることなどいくつかの仮定の下での解析になるが, 短時間評価法としての利便性は極めて高いため, 代表的方法を簡単に紹介する. しかし, 条件のある取り扱いのもとで成立するものであるため, 速度論の扱いを理解した上で活用するべきで, 少なくとも活性化エネルギー E_a が一定になる反応領域であることは確認すべきである. 詳細は良書¹¹⁾¹²⁾を参考されたい.

2・2・1 等温法による耐熱評価

一定温度 T で劣化が進行し材料の特性値が C に至り, 同時に化学的構造あるいは物理的構造が変化する. 構造量を x とし, 通常速度式に従うとすると変化速度は式 (2.1) で与えられる¹¹⁾¹²⁾.

$$\frac{dx}{dt} = Ae^{-E_a/RT} g(x) \dots\dots\dots (2.1)$$

この変化が材料特性値 C の変化をもたらす, 特性値 C に至った時の構造変化は劣化温度 T が変化しても一定と考えると, 等温下である構造変化量及び特性値 C に達する時間 t は式 (2.2) で与えられる¹²⁾.

$$\ln t = \frac{E_a}{RT} + \text{Const.} \dots\dots\dots (2.2)$$

したがって、横軸に $1/T$ を縦軸に $\ln t$ をとることで、活性化エネルギー E_a が求まり、任意の温度での定温反応時間を算出できる。すなわち、複数の高温の保持温度 T で熱分析を行い、一定の構造変化量までの時間 t を測定することで、低温下での定温反応時間を求めることができる。

2.2.2 昇温法による耐熱評価

温度が変化する系では式 (2.1) の右辺は温度 T の時間変化が分かれば積分可能で、この積分値が決まれば、特性値も決まる。すなわち積分値は劣化の尺度であり、劣化反応が定温反応であれ、非定温反応であれ積分値が等しければ劣化による特性変化も等しい。熱分析の昇温過程において、昇温速度 Φ_1 で温度 T_1 に至ったときに特性値 C になり、昇温速度 Φ_2 では同じ C になるときの温度が T_2 であった場合、式 (2.3) の関係が得られる¹¹⁾¹²⁾。ただし、構造変化は単一の過程で進行する場合である。

$$\log \Phi_1 + 0.4567 \frac{E_a}{RT_1} = \log \Phi_2 + 0.4567 \frac{E_a}{RT_2} \dots (2.3)$$

縦軸に熱分析測定時の昇温速度 Φ の対数 ($\log \Phi$) を、横軸にある重量減少率に達するまでの絶対温度 T の逆数 ($1/T$) をとることで E_a が得られ、これは小澤-Flynn-Wall 法と呼ばれる方法である。さらに、式 (2.4) の関係から定温反応時間 t を求めることができる。

$$t = \frac{10^{(-2.315 - 0.4567 \frac{E_a}{RT_m}) E_a}}{\Phi_m R e^{-\frac{E_a}{RT}}} \dots (2.4)$$

ここで、 Φ_m と T_m はそれぞれ熱分析時の昇温速度とある重量減少率に達した時の絶対温度測定値である。すなわち、複数の昇温速度 Φ で熱分析を行い、一定の反応量に至る温度 T を測定することで、式 (2.3) から活性化エネルギー E_a が求まり、式 (2.4) から任意の温度での定温反応時間 t を簡便に求めることができる。

3 おわりに

寿命予測から得られる結果はあくまでも一定の予測法

で得られた予測寿命で、使用環境のばらつきや変化、製品個々のばらつき、促進条件と使用環境とのかい離などによって必ず現実の寿命と差異が生じる。寿命予測の実験を実施する人の視点では測定値のばらつきが予測値に影響することを実感していると察する。しかし、推定寿命〇年と数値化された予測結果は技術者・研究者の手を離れると強力な説得力を持って活用される。故に技術者・研究者は寿命予測結果を用いて適切な寿命評価結果をまとめる工夫も必要である。本稿が適切な寿命評価の一助になれば幸いである。

文 献

- 1) 早川 淨：“高分子材料の寿命とその予測”，早川淨編，p.34, (1989), (アイピーシー)。
- 2) 田村 優，岡本直樹：“ゴム・樹脂製品における故障解析と寿命予測”，田村優編，p.171, (2002), (日本テクノセンター)。
- 3) 成澤郁夫：“高分子の寿命予測と長寿命化技術”，大澤善次郎，成澤郁夫編，p.30 (2007), (エヌ・ティー・エス)。
- 4) 下村一普：“ゴム・樹脂製品における故障解析と寿命予測”，田村優編，p.197, (2002), (日本テクノセンター)。
- 5) 仲山和海：接着の技術誌，41 (4), 1 (2022)。
- 6) 仲山和海：日本ゴム協会誌，88, 221 (2015)。
- 7) 仲山和海：日本画像学会誌，56, 42 (2017)。
- 8) 仲山和海，渡邊智子，大武義人，古川睦久：日本ゴム協会誌，81, 447 (2008)。
- 9) 仲山和海，渡邊智子，大武義人，古川睦久：日本ゴム協会誌，81, 467 (2008)。
- 10) 仲山和海：日本電子 news, 50, 13 (2018)。
- 11) 小澤丈夫：“熱分析”，神戸博太郎編，p.88 (1975), (講談社)。
- 12) 小澤丈夫：“高分子の寿命予測と長寿命化技術”，大澤善次郎，成澤郁夫編，p.321 (2007), (エヌ・ティー・エス)。



仲山 和海 (Kazumi NAKAYAMA)
 一般財団法人化学物質評価研究機構東京事業所高分子技術部技術第三課長
 (〒345-0043 埼玉県北葛飾郡杉戸町下高野 1600 番地)。長崎大学大学院生産科学研究科博士後期課程修了。博士 (工学)。
 《現在の研究テーマ》高分子材料の劣化と解析。
 E-mail : nakayama-kazumi@ceri.jp

ナノ粒子の抽出化学

1 ナノ粒子およびその抽出

ナノ粒子 (NPs) は、粒径が 1~100 nm 程度の物質であり、独特な特性を示し、幅広い領域で活用されている¹⁾。その一方で、近年、NPs 材料の回収・再利用などの観点から、コロイド分散する NPs を抽出する技術も大きな関心が寄せられている。また、環境中の希薄な NPs を調査するため、NPs を分析対象とした前段濃縮の需要も増えてきている。古典的には、NPs の抽出分離として遠心分離法やフィルタリングろ過法が知られている。しかし、NPs は高濃度になると凝集体の形成や形状が変化するなど、本来の性質・状態が失われる。NPs の抽出や濃縮では、凝集を回避することが不可避な課題であり、これを回避する方法として、近年、イオン液体や界面活性剤を利用した溶媒抽出法に基づく抽出法が報告されている。このミニファイルではその幾つかを紹介する。

2 イオン液体による溶媒抽出

イオン液体は、アニオンとカチオンから構成される塩で、強い静電的相互作用、低い蒸気圧、優れた熱安定性のため機能性溶媒として期待されている。NPs の分散媒としてイオン液体を利用する研究例だけでなく、NPs をイオン液体中へ抽出分離する研究例も多くある。例えば、Wei らは²⁾、イオン液体を用いる金ナノ粒子 (Au-NPs) と Au ナノロッドの抽出を報告している。彼らはイオン液体に 1-butyl-3-methylimidazolium hexafluorophosphate ($[\text{C}_4\text{MIM}]^+[\text{PF}_6]^-$) を用い、また、カチオン性界面活性剤の tetradecyltrimethylammonium bromide (TTAB) を添加して Au-NPs とともに攪拌することで、Au-NPs を形状や粒径を変えずに、水相からイオン液体相へ完全に移行させることに成功した。このようなイオン液体による抽出メカニズムは、NPs とイオン液体の静電的相互作用または疎水性相互作用によって説明される

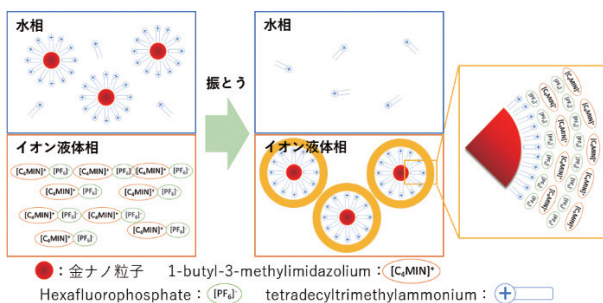


図1 イオン液体による金ナノ粒子抽出

ことが多い。この事例における抽出機構を図1に示す。NPs 表面に界面活性剤 TTAB の疎水基が結合し、プラスに帯電した親水基が水相側に向くことで水相では分散性を維持していると考えられる。イオン液体による抽出を行ったとき、 $[\text{C}_4\text{MIM}]^+$ と $[\text{PF}_6]^-$ が NPs 表面を層状に覆うことで、マイクロでは帯電状態を保つため凝集を防ぐものの、マクロでは見かけ上、電荷を相殺できるため無電荷状の物質としてイオン液体相に抽出することができる。

この事例からも分かるように、NPs のイオン液体相への安定した抽出は、ナノ粒子表面の帯電状態 (ゼータ電位) が関係していることがわかる。

Au-NPs 以外にもカチオン性安定剤で被覆された CdTe-NPs のイオン液体抽出が報告されている³⁾。また、チオール基を有するイオン液体を使用することで、Au-NPs 表面にイオン液体を直接配位させて、効率的に抽出した例もある⁴⁾。

3 界面活性剤を用いた抽出

NPs の安定剤としてイオン性界面活性剤の利用、特に上述のようなカチオン性界面活性剤を利用する例が多い。対比して、NPs を抽出する場合には、非イオン性界面活性剤を利用する例が多い (まだ例は少ないが両性イオン界面活性剤を用いる報告もある)。

一部の非イオン性界面活性剤には、曇点 (cloud point, CP) と呼ぶ特徴的な相転移温度があり、水相に溶解している界面活性剤が CP を境に急激に溶解度が低下して界面活性剤が分離する現象がある。分離した相は、水に不溶性液体相 (界面活性剤相) を形成し、水相に溶解していた溶質は界面活性剤 (もしくはミセル) との親和性に応じて分離した相に抽出される。この抽出法を曇点抽出法 (CPE) と呼ぶ。トリトン X-114 (Tx-114, 図2) の場合、CP は 23 °C であり、CP 以上に加熱することで相分離する。

Liu らは⁵⁾、Tx-114 を用いて様々な NPs 分散液 (CdSe/ZnS, Fe_3O_4 , TiO_2 , Ag, Au, フラーレンおよびカーボンナノチューブ) の CPE を実施した。NPs は分散剤によって分散状態を保っている。すなわち、親水性となっているため NPs を溶媒抽出することは難しい。

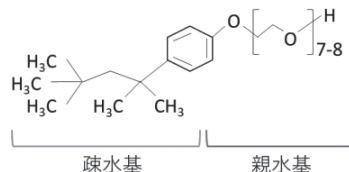


図2 トリトン X-114 の構造式

同様に、抽出後、NPsが帯電状態を失うと凝集することが一般的であった。この報告によって、Tx-114による保護が単分散を保ちつつ抽出できる因子であること、さらに、NPsの表面電位が抽出挙動に影響することを指摘している(図3)。

CPEは、イオン液体による溶媒抽出と比較して、抽出相体積を微量(数 μL)に制御できるため、高倍率濃縮が可能となる。この特徴を利用してCPEは、希薄な環境水中のNPsを高倍率濃縮するために活用されている。例えば、環境水中のNPsの人体・生態への影響が懸念されているが、それを正しく評価するためには、粒状や粒子径に影響を与えずに高倍率に濃縮する必要がある。Liuらは、環境水中(湖水、河川水)のAg-NPsに対してTx-114によるCPEを行った⁶⁾。CPEは濃縮だけでなく、遊離のAgイオンとAg-NPsを識別するために利用されている⁷⁾。すなわち、AgイオンはCPEで抽出されず、その一方で、NPsはCPEで抽出されて分離できることを報告した。計測は誘導結合プラズマ質量分析計を利用しており、今後、CPEはイオン成分とNPsの分離にもさらに貢献できそうである。

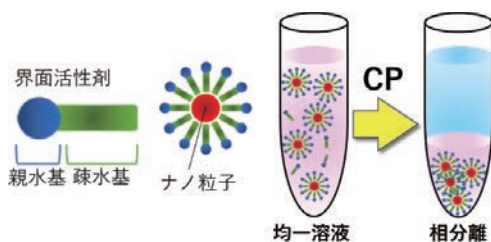


図3 NPsの曇点抽出

4 界面活性剤によるNPsのワンポット抽出

近年、溶液中に可溶するイオンからNPsを合成し、同時に抽出を行うワンポット抽出が報告されている。この方法は、可能な限り整った粒径の調整と高濃度なNPs分散液の調製に役立つため、分析化学の素子としてだけでなく工業材料としても有益である。従来エマルジョン法なども知られているが、今回は界面活性剤のCPEを利用する方法を紹介したい。

一部の両性イオン界面活性剤(図4: $\text{C}_{10}\text{APSO}_4$)は、先述したCPを有し相分離現象を生じるものがある。

特筆すべきは、先述のTx-114は低温で均一溶液、高温で相分離を引き起こすが、 $\text{C}_{10}\text{APSO}_4$ はその逆である。この特性を利用して、NPs合成と抽出をワンポットで行う抽出合成が報告された⁸⁾。抽出メカニズムは、非イオン性界面活性剤と異なり、図5のようなナノ粒子表面と親水基の静電的相互作用による被覆が、提示されている⁹⁾。

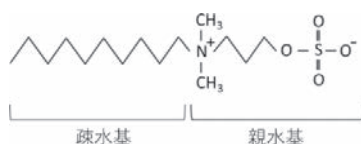


図4 両性イオン界面活性剤(3-(decyldimethyl ammonio)-propyl sulfate, $\text{C}_{10}\text{APSO}_4$)

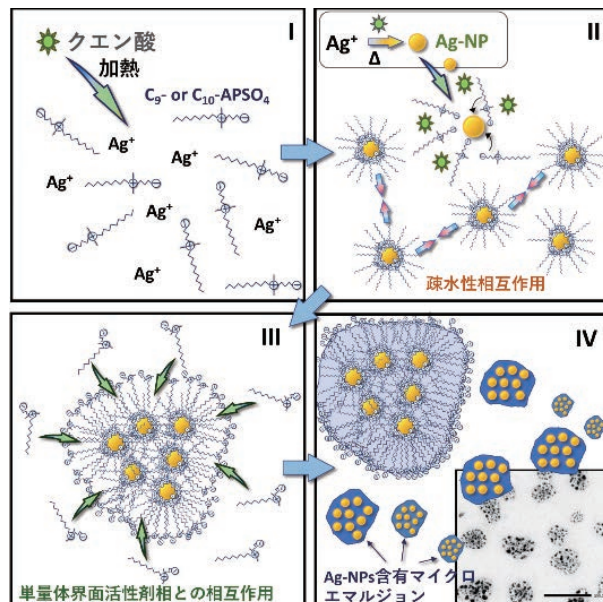


図5 両性イオン界面活性剤によるAg-NPs合成⁹⁾

この方法は、合成後のNPsから界面活性剤を取り除く必要があり、実用性には課題が残っているが、粒径および粒状が整った高濃度NPsが短時間で合成できるためメリットは大きく、今後の進展に期待が持てる。

5 おわりに

産業・学術の両面において、NPsの重要性やその位置づけは今後も大きくなると考えられる。NPsの分析技術の進展が今後のNPsの進展に直結することは予想に難くない。そのなかで、NPsの抽出分離技術の開発、ならびに、NPsと様々な化学物質との相互作用の創出は、NPsの新しい機能材料の開発や宇宙や深海・原子力分野をはじめとする広義の環境動態把握への貢献、さらには、医学などのセンシングの一助となりうる。

文献

- 1) A. Henglein : *Chem. Rev.*, **89**, 1861 (1989).
- 2) G. T. Wei, Z. Y. Yang, C. Y. Lee, H. Y. Yang, C. R. C. Wang : *J. Am. Chem. Soc.*, **126**, 5036 (2004).
- 3) T. Nakashima, T. Kawai : *Chem. Comm.*, **12**, 1643 (2005).
- 4) H. Itoh, K. Naka, Y. Chujo : *J. Am. Chem. Soc.*, **126**, 3026 (2004).
- 5) J. F. Liu, R. Liu, Y. G. Yin, G. B. Jiang : *Chem. Comm.*, **12**, 1514 (2009).
- 6) J. F. Liu, J. B. Chao, R. Liu, Z. Q. Tan, Y. G. Yin, Y. Wu, G. B. Jiang : *Anal. Chem.*, **81**, 6496 (2009).
- 7) W. J. Wei, Y. Yang, X. Y. Li, P. Huang, Q. Wang, P. J. Yang : *Talanta*, **239**, 123117 (2022).
- 8) Y. Takagai, R. Miura, A. Endo, W. L. Hinze : *Chem. Comm.*, **65**, 10000 (2016).
- 9) T. Nakagawa, A. Hibara, W. L. Hinze, Y. Takagai : *RSC Adv.*, **10**, 34161 (2020).

福島大学共生システム理工学類 中川 太一
福島大学共生システム理工学類・
福島大学環境放射能研究所 高貝 慶隆

引っかき刺激を検出して光る材料 —「役割分担」による新たな 設計指針—



吉田 将己

1 はじめに

「引っかく」「こする」などの機械的刺激を材料に与えることで光る現象をトリボルミネッセンス (TL, 摩擦発光) またはメカノルミネッセンス (ML, 応力発光) という¹⁾²⁾。400 年以上前に哲学者 Francis Bacon によって偶然発見されたというこの現象は、その歴史の古さにもかかわらず近年まであまり日の目を見ていなかった。これは、後述のように TL 発現のメカニズムには未解明な点が多く、戦略的な開発が困難であったためだと考えられる。しかし近年、TL 活性な材料は機械的な力によって材料が受けるダメージや歪みの大きさを可視化するセンサーとしての観点から急速に注目を集めている²⁾。このような TL 活性な材料は主にその材質によって無機材料と分子性材料とに大別することができる。特に、有機分子や金属錯体の結晶を用いた分子性 TL 材料は分子修飾により TL 特性をファインチューニングすることが可能なため、高機能性 TL 材料の基盤としてさらなる発展が期待される³⁾。

この分子性 TL 材料の TL メカニズムは、結晶の圧電効果や破碎に伴う電荷分離によって励起状態が生じることで発光が起こると説明されることが多い³⁾。そのため、分子性 TL 材料の多くは結晶中で反転対称性のないパッキング構造をとり、それに由来する圧電性を示すとされる。言い換えるならば、これまで分子性 TL 材料の代表的な設計指針とされてきたのが「圧電性と発光性との両立」であった。しかしながら、結晶中のパッキング構造を支配する分子間相互作用はいまだ精密制御が困難であり、目的どおりに圧電性を示す結晶が得られるかどうかは偶然に大きく左右される。さらに、このメカニズムでは説明がつかない中心対称性をもつ結晶構造をとる分子性 TL 材料も数多く知られており⁴⁾⁵⁾、そのメカニズムにはいまだ不明瞭な点が多い。そのため、分子性 TL 材料を開発する上ではいまだに戦略的・汎用的な設計指針が確立されておらず、いわばセレンディピティにまかされた「出たところ勝負」の現象論にとどまる研究も多い。

Materials for Detecting Scratches as Light –New Design Concept Based on the “Role-separation” Approach–.

これが分子性 TL 材料の開発を長らく妨げている要因の一つだと考えられる。

2 ホスト - ゲスト結晶によるアプローチ

上述のように長らく現象論から抜け出せていなかった分子性 TL 材料の開発に対し、Chi らは初めて戦略的で明快な設計指針の開拓に成功した⁶⁾。それは「圧電性と発光性とを、ホスト結晶とゲスト分子とに役割分担して担わせる」という戦略である。確かに TL のメカニズムを考えれば圧電性と発光性とを一つの分子で両立する必要は必ずしも無いのだが、従来の固定観念にとらわれずその点に気がついた彼らの発想の転換力には驚かざるを得ない。

具体的には、彼らは分子 1 の結晶 (図 1) などの様々な圧電性結晶をホストとし、ここに蛍光性の有機分子を少量ドーブした共結晶を作製した。この結晶自身は発光性を示さないが、機械的刺激により電荷分離を起こし分子 1 の励起状態を結晶内で生じさせるため、その励起エネルギーがドーブした蛍光性有機分子へと移動できる。その結果、ホスト結晶・ゲスト分子のいずれも単独では TL を示さないにもかかわらず、共結晶化することで明瞭な TL が観測された。さらに、驚くべきことに、有機分子に替えてリン光性金属錯体であるイリジウム (III) 錯体や無機ナノ粒子である CdSe 量子ドットをゲストとしてドーブした際にも同様の TL が観測された。この、有機分子から無機ナノ粒子まで適用可能な汎用性の高さは、長らく戦略的な設計指針が見いだされてこなかった TL 材料の開発においてブレイクスルーのトリガーとなりうる結果であると考えられる。

3 ポリマーへのドーブによるアプローチ

Khusnutdinova らは、さらに簡便で画期的な方法を開発した⁷⁾⁸⁾。それは「静電気を帯びやすいポリマー内に発光性の分子をドーブする」という、驚くほどシンプルかつ汎用性の高い方法である。彼らはもともと発光性の銅 (I) 錯体を用いた機能性ポリマーの開発をしていたが、その過程で銅 (I) 錯体 2 (図 2(a)) やその誘導体をドーブしたポリメタクリル酸メチル (PMMA) 薄膜が TL を示すことを見いだした⁷⁾。これは、PMMA 薄膜が結

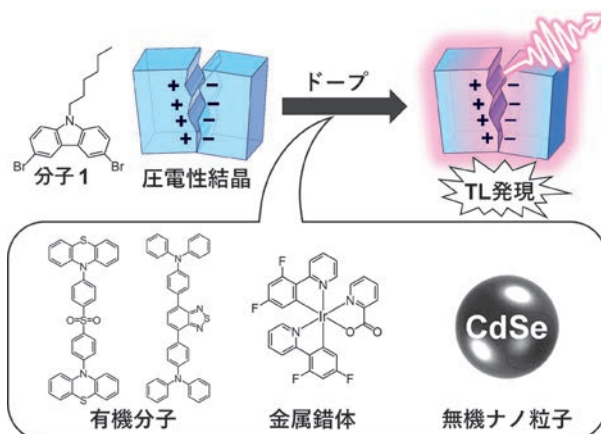


図 1 圧電性結晶へのゲストのドーブによる TL 発現

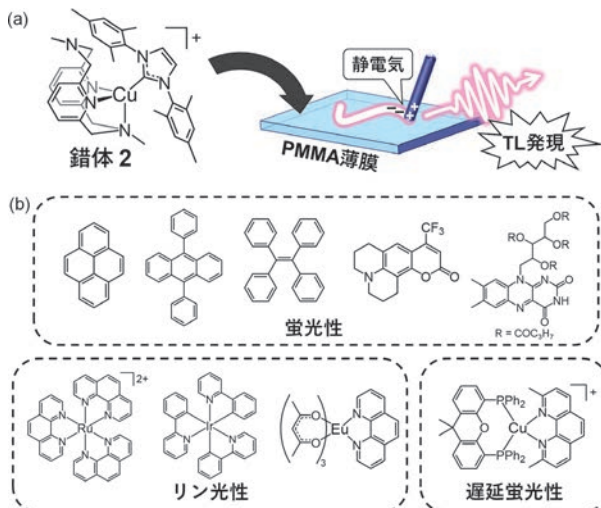


図 2 (a) ポリマーへのゲストのドーピングによる TL 発現, (b) ドープされた発光性分子の一覧

晶ですらないアモルファスであることを考えると、「結晶中におけるパッキング構造が重要である」という従来の常識を大きく覆す驚くべき発見である。そこで、そのメカニズムを解明するためにさまざまな雰囲気下で TL 測定を行った。その結果、窒素やアルゴン、ヘリウム雰囲気下では錯体 2 由来の発光に加えてそれぞれのガスの放電由来する発光も観測された一方で、この TL は空気下や絶縁性の高い気体である SF₆ 雰囲気下では消光されることが分かった。これらの結果から、ホストである PMMA を引っかくことで発生した静電気が錯体 2 を励起し、TL を発生させているというメカニズムが解明された。

ここで重要なのは、前述の Chi らの研究と同様に、錯体 2 はあくまで「静電気によって生じた電荷分離状態を発光につなげる」という役割を担っているのみだという点である。言い換えれば、この錯体 2 ではなくとも発光性分子であれば同じ役割を果たせるということになる。実際に、彼らは錯体 2 に替えて様々な発光性分子を PMMA 薄膜にドーピングし同様の測定を行った⁸⁾。その結果、用いる発光性分子の構造（有機分子・金属錯体）や特性（蛍光性・リン光性・遅延蛍光性）にかかわらず（図 2(b)）、作製したすべての薄膜においてドーピングした分子に由来する明瞭な TL を観測することに成功した。また、PMMA に替えて他の汎用的なポリマーを用いた際にも明瞭な TL が観測された。特に、空気によって TL が消光されていた初報⁷⁾に対し、ポリマーとしてポリビスフェノール A カーボネート（PBAC）を用いることで湿度 40 % の空気下でも TL を発現することに成功したのは応用面からも重要な進歩である。

4 おわりに

以上、本稿では機械的刺激を検出して光る分子性 TL 材料の開発に関する最近の研究動向を簡単に紹介した。これらの研究成果から重要な点を抽出すると、TL 発現を自在に設計するためには「機械的刺激で電荷分離を起こしやすいホスト」および「よく光るゲスト」が必要である、と単純化することができる。もちろん、このホスト・ゲストを用いたアプローチには溶解度や相分離の問題などからゲストのドーピング量が制限されるなどの課題も残されている。また、分析手法としての観点からは、力の強さと発光強度の相関の定量化も必須の課題である。しかし、長らくセレンディピティに大きく依存していた分子性 TL 材料の開発において、「電荷分離と発光の役割分担」という戦略的で汎用的な設計指針を打ち立てたこれらの成果はこの分野における大きなブレイクスルーのきっかけになりうると言える。これらの研究を契機にこの分野がさらに発展し、引っかき刺激や機械的ダメージを自在に可視化してカラフルに光る新たな機能性材料の開発につながることを期待したい。

文 献

- 1) J. I. Zink : *Acc. Chem. Res.*, **11**, 289 (1978).
- 2) Y. Xie, Z. Li : *Chem*, **4**, 943 (2018).
- 3) Y. Zhuang, R.-J. Xie : *Adv. Mater.*, **33**, 2005925 (2021).
- 4) H.-Y. Wong, W.-S. Lo, W. T. K. Chan, G.-L. Law : *Inorg. Chem.*, **56**, 5135 (2017).
- 5) J. Chen, Q. Zhang, F.-K. Zheng, Z.-F. Liu, S.-H. Wang, A. Q. Wu, G.-C. Guo : *Dalton Trans.*, **44**, 3289 (2015).
- 6) W. Li, Q. Huang, Z. Yang, X. Zhang, D. Ma, J. Zhao, C. Xu, Z. Mao, Y. Zhang, Z. Chi : *Angew. Chem. Int. Ed.*, **59**, 22645 (2020).
- 7) A. Karimata, P. H. Patil, R. R. Fayzullin, E. Khaskin, S. Lapointe, J. R. Khusnutdinova : *Chem. Sci.*, **11**, 10814 (2020).
- 8) A. Karimata, R. R. Fayzullin, J. R. Khusnutdinova : *ACS Macro Lett.*, **11**, 1028 (2022).



吉田 将己 (Masaki YOSHIDA)

関西学院大学生命環境学部 (〒669-1330 兵庫県三田市学園上ヶ原 1 番)。九州大学大学院理学府化学専攻博士後期課程修了。博士 (理学)。《現在の研究テーマ》外部刺激を可視化する金属錯体結晶の開発。
E-mail : masaki.yoshida@kwansei.ac.jp

GC-TOFMS 及び機械学習を用いた構造解析手法

—未知物質解析ソフトウェア msFineAnalysis AI の紹介—

生 方 正 章

1 はじめに

GC-MS で広く使用されている電子イオン化法 (EI) はハードなイオン化法に分類される。EI 法はその他のイオン化法に比べてフラグメントイオンが多く観測されるが、それらフラグメントイオンは化合物の構造情報に富み、またそのパターン (相対強度比) は構造特有のものであり、再現性も高い。GC-MS 定性分析においては標準品の EI マススペクトルを収録したデータベース (DB) との比較検索¹⁾ が始めに行われることがほとんどである。

アメリカ国立標準技術研究所 (NIST) が発表している最新 DB には約 30 万化合物の EI マススペクトルが収録されている。これに対して、アメリカ国立衛生研究所が管理している DB (PubChem) では、2023 年現在 1 億個を超える化合物が登録されている²⁾。PubChem には様々な情報が収録されているが、EI マススペクトルは収録されていない。つまり、存在が報告されている化合物の大半における EI マススペクトルは未知ということになる。GC-MS 測定で得られたデータに対して NIST DB 検索を実施しても同定できないことが多々散見されるが、これは実在する化合物数と、NIST に代表される EI マススペクトル DB に登録されている化合物数との大きなギャップに起因する。

DB 未登録の化合物に対しては、分子イオンやプロトン付加分子を与えやすいソフトなイオン化法と精密質量測定ができる飛行時間型質量分析計 (TOFMS) の組み合わせが有用である。電界イオン化法 (FI) などのソフトイオン化法にて分子イオンを観測し、更に精密質量に対して組成推定を行うことで、DB 未登録の未知化合物であってもその分子式を決定できる³⁾。筆者らは EI 法とソフトイオン化法で得た二つのマススペクトルを用いた定性解析手法を“統合解析”とし、今までにも高分子材料の統合解析事例を幾つか報告してきた⁴⁾⁵⁾。

TOFMS を用いた統合解析ではフラグメントイオンの組成式も得られるため、部分構造情報を得ることができ、部分構造情報と分子式情報を組み合わせることで化合物の構造解析が可能になる。しかしながら、最終的な

構造推定については解析者自身による考察が必要であり、その作業には質量分析や化学に関する知見と多くの時間が求められた。

今回筆者らは、GC-MS データを用いた手動構造解析の困難さの課題解決として、機械学習によるマススペクトル予測を組み込んだ網羅的な構造解析手法を開発した。本解析手法では上述した統合解析で得た情報と機械学習モデルにより得た予測マススペクトルとを用いて構造を推定する。

本稿では、開発した構造解析手法及び高分子材料への適用例について紹介すると共に、本手法をソフトウェア機能として搭載した msFineAnalysis AI (日本電子社製) 上での動作などについても紹介する。

2 機械学習を用いた構造解析手法

今回開発した構造解析手法では、特性が異なる二つの機械学習モデルを用いている。それぞれのモデルでは EI マススペクトル予測と、部分構造予測が可能であり、前者の予測では深層学習を、後者の予測では回帰を採用している。それぞれの概要を以下に示す。

2-1 深層学習モデルによる EI マススペクトル予測

EI マススペクトルの予測には、深層学習の一つであるグラフコンボリューションネットワーク (GCN)⁶⁾ をモデルとして採用している。今回使用したモデルでは、以下の処理により、構造式から EI マススペクトルを予測することを実現した。

①構造式がグラフデータに変換される (図 1)。グラフデータでは、原子はノードとして、結合はエッジとして扱われる。更に、ノードは原子の元素種の情報を、エッジは結合の種類を、それぞれ特徴ベクトルとして保持する。

②グラフデータに変換された構造式に対して、モデルは図 2 上の左で描かれている畳み込み (コンボリューション, Convolution) を行う。畳み込みを行うことで各ノードは、隣接しているノード及びエッジの情報を取捨選択する。畳み込みを繰り返すことで、モデルが原子

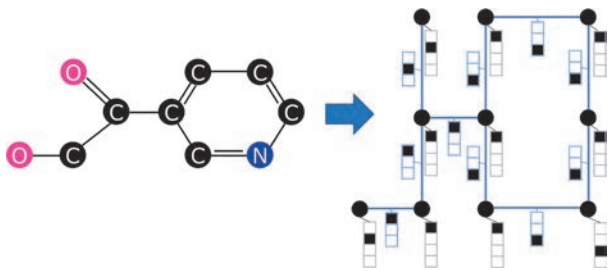


図1 構造式のグラフデータへの変換

の繋がりをブロックとして認識できるようになる。

③モデルは図2上の右で描かれている各原子の集約(プーリング, Pooling)を行う。これにより構造式の特徴が捉えられ、モデルがマススペクトルの予測を行うことが可能となる。

モデルの学習には、NIST作成のEIマススペクトルデータベース“NIST20”登録化合物の90%にあたる27万化合物の構造式とマススペクトルを使用した。残りの1万化合物は過学習に陥らないようにするための進捗監視に使用し、残りの2万化合物は予測精度の評価に使用した。精度を評価する指標は、予測したEIマススペクトルとNIST 20に登録されているEIマススペクトルのコサイン類似度とした。評価の結果、90%を

超える化合物でコサイン類似度が0.4を超えており、全体の平均値としては0.72となった。以上から高い精度でマススペクトルを再現できることが確認された⁷⁾。

ソフトウェアには構築したモデルは搭載しておらず、事前に用意した化学構造式約1億個と、これらから生成した1億の予測EIマススペクトルをDB(AIライブラリーと呼称)として内包している。これにより、従来のDB検索と同様の作業で、構造式を得ることが可能となった。また特徴の一つとして、統合解析により決定された分子式による絞り込みがある。予測EIマススペクトルと実測EIマススペクトルとの比較の前に、統合解析により決定された分子式が構造式候補を絞り込む。これにより、1億の構造式候補を1万以下まで絞り込むことが可能であり、効率的かつ高精度な構造解析が可能となっている。以上の作業・解析はすべてソフトウェアにて自動で実施される。

2・2 ロジスティック回帰モデルによる部分構造予測

部分構造予測では古典的な機械学習の一つであるロジスティック回帰をモデルとして採用している。このモデルでは、以下の処理により実測の精密質量マススペクトルから部分構造の有無を予測している。

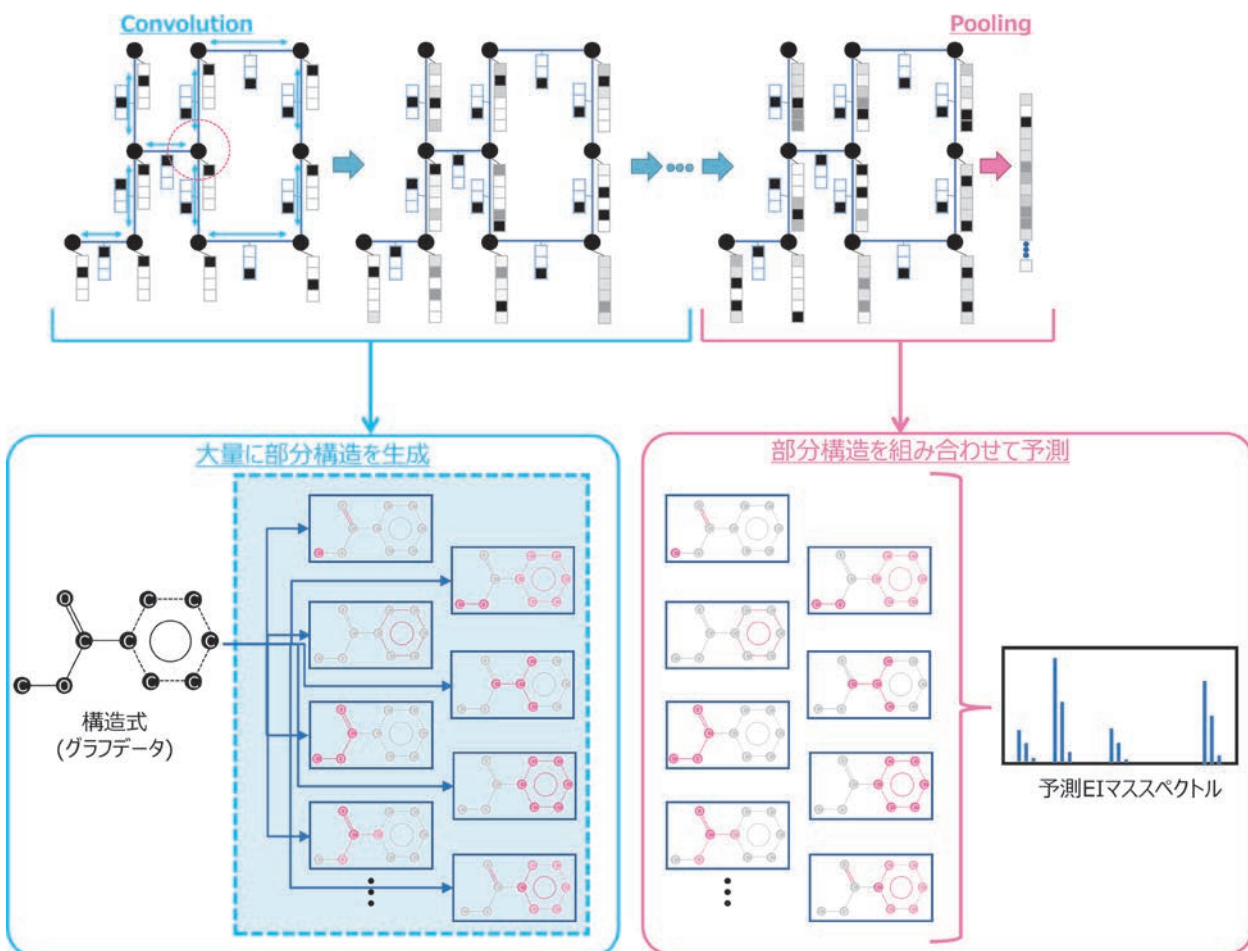


図2 グラフコンボリューションネットワークによるEIマススペクトル予測

①実測の精密質量マススペクトルに対し、精密質量を元にフラグメントイオン及びニュートラルロスの組成を決定する。

②フラグメント及びニュートラルロスの各組成式に対する強度情報を特徴として採用する。

③特徴を組み合わせてモデルが部分構造の有無を予測する。

モデルの学習には、高分解能型 GC-TOFMS で測定した実測の精密質量マススペクトルおよそ 1000 と、対応する構造式を使用した。このデータを用いて、様々な官能基や部分構造に対してモデルを構築し、精度の評価を行ったところ、ベンゼン環やメチルエステル基を代表とした 48 個の部分構造について高精度で予測できることが確認された⁷⁾。

ソフトウェアでは 48 個の部分構造に対して有無を予測した結果を確認できる。更に、その予測の根拠となる

寄与が大きいピーク（例えば、ベンゼン環であれば C_6H_5 のフラグメント）を確認することも可能となっている。本手法だけでは構造式を決定することはできないが、AI ライブラリーで得られた構造式候補と比較・対比を行うことで、構造解析を理解・解釈しながら行うことが可能となっている。

二つの機械学習モデルを用いた構造解析手法概要を図 3 に示す。また msFineAnalysis AI における構造解析結果画面を図 4 に示す。

3 高分子材料分析への適用例

3-1 熱分解 GC-MS 法による高分子材料分析

高分子材料の分析手法は種々存在するが、その中でも熱分解 GC-MS 法⁸⁾は、ポリマー解析及び添加剤解析において有用な手法として活用されている。熱分解 GC-MS 法は、パイロライザーといわれる加熱電気炉内で、固体であるポリマー材料を 600 度程度の高温にさ

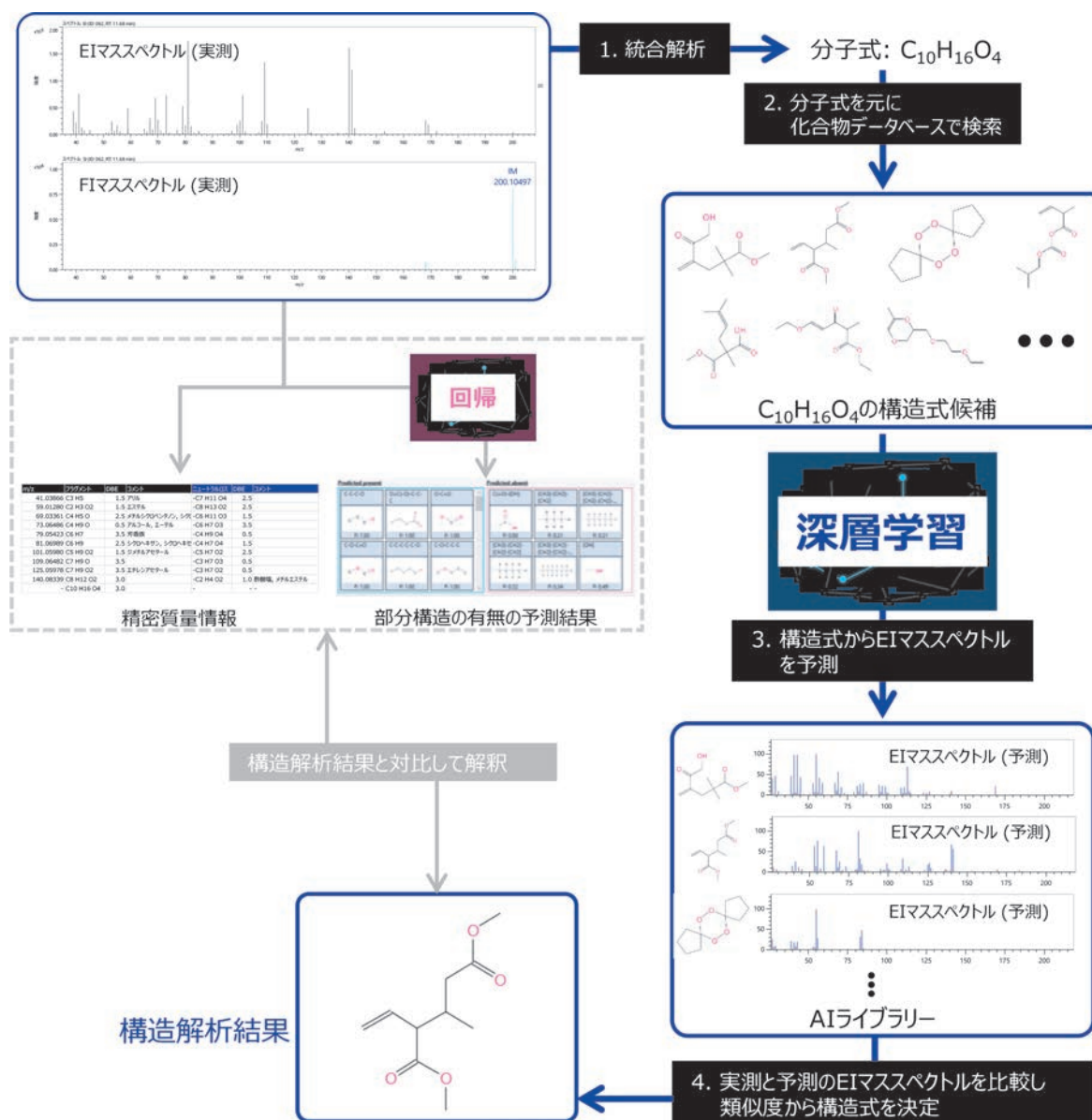


図 3 二つの機械学習モデルを用いた構造解析手法概要

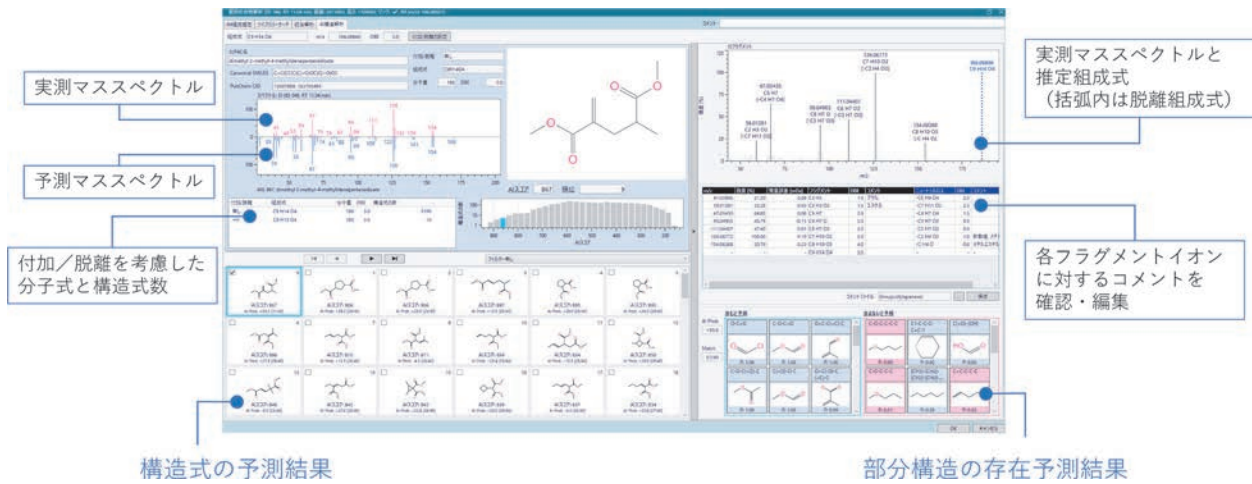


図 4 構造解析結果画面



図 5 高分解能型 GC-TOFMS, JMS-T2000GC (日本電子社製)

らすことで熱分解させ、モノマー、ダイマー、トライマーといったオリゴマー成分として検出する手法である。

熱分解 GC-MS 法では、重合開始剤、ポリマー構造、添加剤などの情報が得られる一方で、検出される熱分解生成物の多くが市販のマススペクトル DB に収録されていないため、検出された熱分解生成物の同定に課題があった。

そこで今回開発した構造解析手法を熱分解 GC-MS 法で観測された成分に適用し、その有用性について検討した。

3.2 熱分解 GC-TOFMS 法によるアクリル樹脂分析

試料は市販のアクリル樹脂（メタクリル酸メチルとアクリル酸メチルの共重合体）を用い、試料量は GC/EI 測定では 0.2 mg、GC/FI 測定では 0.9 mg とした。試料前処理装置として熱分解装置 PY-3030（フロンティアラボ社製）を使用した。GC-MS としては高分解能型

表 1 測定条件

Pyrolysis conditions	
Pyrolyzer	EGA/PY-3030D (Frontier Lab)
Pyrolysis Temperature	600 °C
GC conditions	
Gas Chromatograph	8890 GC (Agilent Technologies)
Column	ZB-5MSi (Phenomenex) 30 m×0.25 mm, 0.25 μm
Oven Temperature	40 °C (2 min) -10 °C /min -320 °C (15 min)
Injection Mode	Split mode (100:1)
Carrier flow	He : 1.0 mL/min
MS conditions	
Spectrometer	JMS-T2000GC (JEOL Ltd.)
Ion Source	EI/FI combination ion source
Ionization	EI+ : 70 eV, 300 μA FI+ : -10 kV, 40 mA/30 msec
Mass Range	m/z 35 ~ 800
Data processing condition	
Software	msFineAnalysis AI (JEOL Ltd.)
Library database	NIST20, AI Library (JEOL Ltd.)

GC-TOFMS である JMS-T2000GC（日本電子社製、図 5）を用い、イオン源には EI/FI 共用イオン源を用いた。得られた GC/EI 及び GC/FI データに対し msFineAnalysis AI（日本電子製）にて、統合解析及び構造解析を実施した。測定条件を表 1 に示す。

図 6 に得られた TIC クロマトグラムを示す。モノマー成分であるアクリル酸メチルとメタクリル酸メチルが強く検出されており、またポリマー構造を反映するダイマー成分とトライマー成分を数多く検出した。デコンボリューション検出により、161 化合物を熱分解生成物として検出したが、市販 DB 検索の結果、うち 106 化合物の類似度スコアは 750 以下と低く、それらは未知物質であると推定された。

図 7 にモノマー、ダイマー、トライマー成分と考え

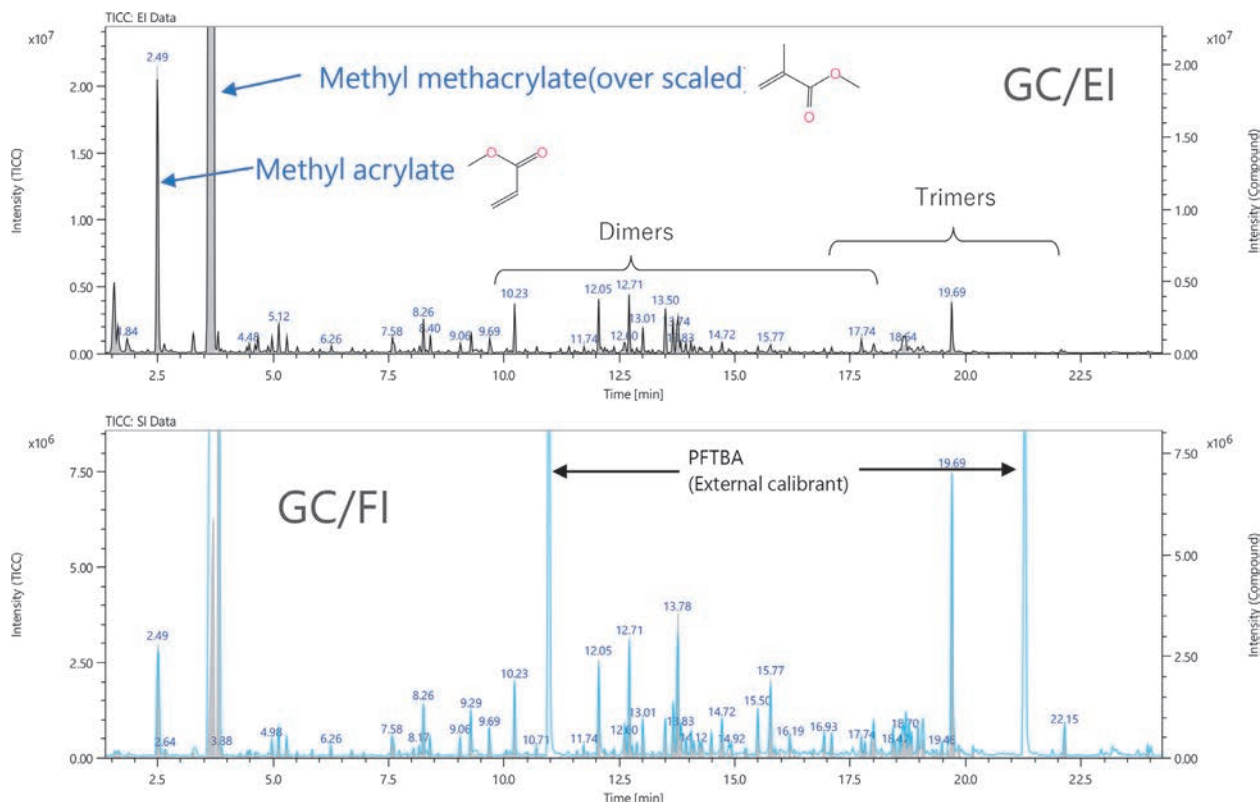


図6 アクリル樹脂の熱分解 GC-TOFMS TIC クロマトグラム
上段：GC/EI, 下段：GC/FI

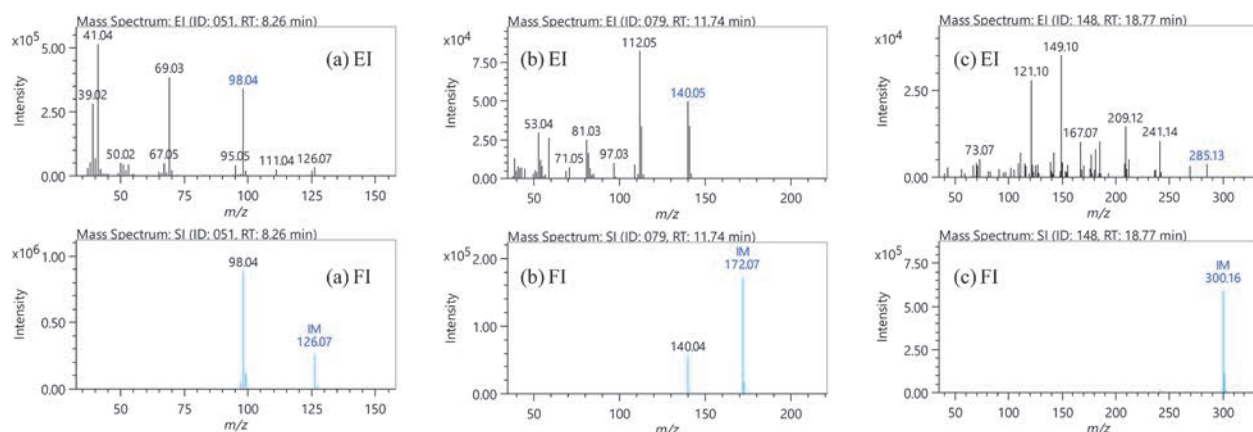


図7 アクリル樹脂熱分解生成物の (a) EI 及び (b) FI マスペクトル
左：モノマー, 中央：ダイマー, 右：トリマー

られるマスペクトルを示す。図7に示すように、EI法では分子イオンが弱い、もしくは観測されない化合物が今回の測定データ中において散見されており、熱分解生成物の解析には分子イオンを生じやすいソフトイオン化法が必須であることがわかる。

3.3 参考文献掲載構造式との比較

観測されたアクリル樹脂熱分解生成物のうち、市販DBに未登録で、且つ参考文献⁸⁾で構造式が提案されている4成分について、msFineAnalysis AIによる構造解析を実施し、その効果を検討した。図8にこれら4成分の実測 EI マスペクトル (上段、黒) と、参考文献

で提案されている構造式 (スペクトル右横) とその予測 EI マスペクトル (下段、赤) を示す。

表2に構造解析の結果を示す。msFineAnalysis AIでは実測 EI マスペクトルと予測 EI マスペクトル間で、コサイン類似度を使ったスコア (最高 999) を計算している。表中の“AI score”が上記類似度を示しており、“Rank”が図8掲載の構造式の順位、“Total”が構造式候補数 (異性体) を示している。上述した通り、ソフトイオン化法で得られた分子イオンと、統合解析により決定した分子式を使い、異性体だけをはじめに抽出しているが、この異性体数が表中の Total に該当する。今回解析した4成分においては、すべてスコア 750 以

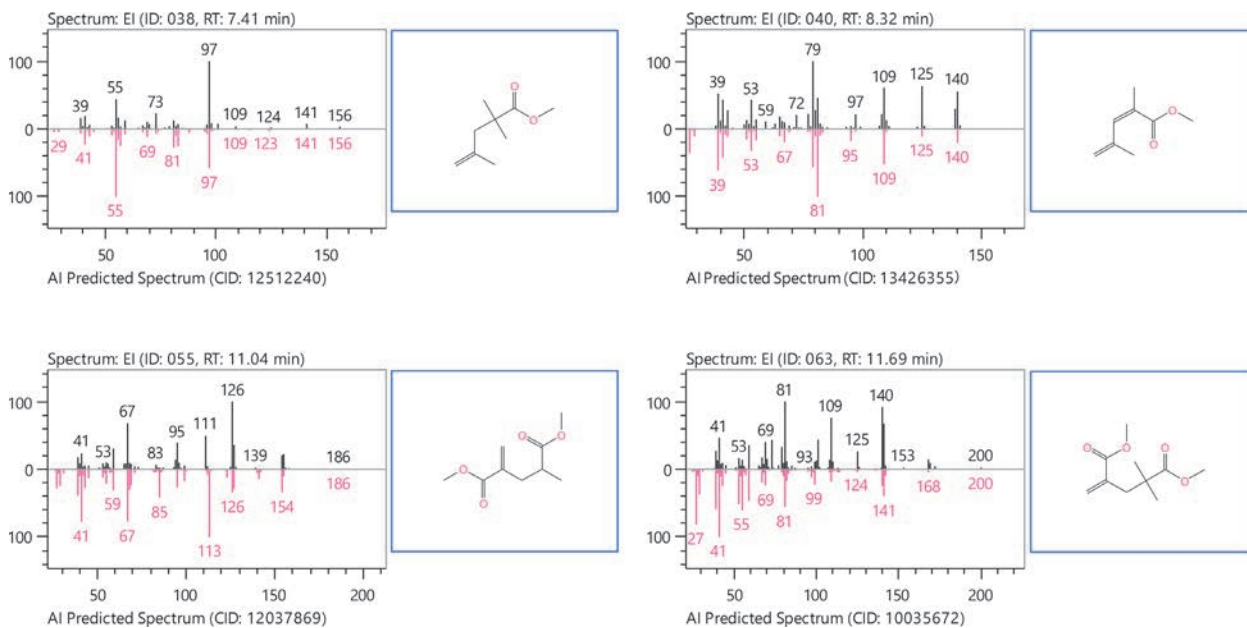


図 8 アクリル樹脂の熱分解生成物解析結果

上段：実測 EI マススペクトル，下段：論文掲載構造式（スペクトル右）からの予測 EI マススペクトル

表 2 構造解析結果

msFineAnalysis AI result						
ID	RT (min)	IUPAC name	PubChem CID	AI Score	Rank	Total
038	7.41	Methyl 2,2,4-trimethylpent-4-enoate	12512240	872	2	5548
040	8.32	Methyl 2,4-dimethylpenta-2,4-dienoate	71327190	865	18	3769
055	11.04	Dimethyl 2-methyl-4-methylidenepentanedioate	12037869	753	37	3109
063	11.69	Dimethyl 2,2-dimethyl-4-methylidenepentanedioate	10035672	825	9	3732

上が得られており高い類似性を示した。図 8 に示す通り、実測で観測されているフラグメントイオンと、予測されているフラグメントイオンはよく一致していた。また、構造式候補数はいずれも 3000 を超えていたが、4 成分中 3 成分において参考文献で提案されている構造式が上位 1% の候補として得られており、熱分解生成物の構造解析においても本手法が有効であることが示唆された。

4 おわりに

本稿では、GC-TOFMS 及び機械学習を用いた構造解析手法と、高分子材料分析の適用例について報告した。高分解能型 GC-TOFMS では精密質量測定が可能であり、未知物質であってもイオンの組成式情報から、原理的には構造解析が可能であった。しかし、手動での構造解析には多くの知見や時間が必要であり、その点を課題と捉え、今回の構造解析手法を開発した。今回開発した構造解析手法では、未知物質の推定構造式を短時間・自動で提供することが可能である。無論、すべての推定構造式が正しいということではなく、サンプル情報や今までの測定・分析・解析の知見をもって正しい構造式を選択する必要は依然としてある。ただ、ゼロから構造式を構

築する時間と、機械学習モデルが予測した推定構造式をベースとして正しい構造式を考察するのでは、その作業量と時間の差は歴然である。今回開発した構造解析手法が多くの GC-MS ユーザーが課題として抱える未知物質同定の一つの手法として活用されることを期待したい。

文 献

- 1) S. E. Stein : *J Am Soc Mass Spectrom.*, **5**, 316 (1994).
- 2) U.S. National Library of Medicine, National Institutes of Health, National Center for Biotechnology Information : "PubChem" <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>, (2023 年 2 月 22 日, 最終確認).
- 3) M. Ubukata, A. Kubo, K. Nagatomo, T. Hizume, H. Ishioka, A. J. Dane, R. B. Cody, Y. Ueda : *Rapid Commun Mass Spectrom.*, **34**, e8829 (2020).
- 4) 生方正章, 久保 歩, 長友健治, 佐藤貴弥 : 第 23 回高分子分析討論会要旨集, III-06 (2018).
- 5) 久保 歩, 生方正章, 長友健治 : 第 24 回高分子分析討論会要旨集, III-10 (2019).
- 6) J. Gilmer, S. S. Schoenholz, P. F. Riley, O. Vinyals, G. E. Dahl : *Proceedings of the 34th International Conference on Machine Learning.*, p1263 (2017).
- 7) 久保 歩 : 日本電子 news, **55**, 34 (2023).
- 8) S. Tsuge, H. Ohtani, C. Watanabe : "Pyrolysis - GC/MS Data Book of Synthetic Polymers", (2011), (Elsevier, Amsterdam).



生方 正章 (Masaaki UBUKATA)
日本電子株式会社 MS 事業ユニット
(〒196-8558 東京都昭島市武蔵野 3-1-2).
横浜国立大学大学院工学部博士課程後期
課程終了. 博士 (工学). 《現在の研究テーマ》GC-TOFMS を用いた未知物質解析手法開発.
E-mail : mubukata@jeol.co.jp

会社ホームページ URL :

<https://www.jeol.co.jp/>

関連製品ページ URL :

<https://www.jeol.co.jp/products/scientific/gcms/>

<https://www.jeol.co.jp/products/scientific/gcms/JMS-T2000GC.html>

https://www.jeol.co.jp/products/scientific/ms_software/msfineanalysis-ai.html

原 稿 募 集

「技術紹介」の原稿を募集しています

対象：以下のような分析機器、分析手法に関する紹介・解説記事

- 1) 分析機器の特徴や性能および機器開発に関わる技術,
- 2) 分析手法の特徴および手法開発に関わる技術,
- 3) 分析機器および分析手法の応用例,
- 4) 分析に必要な試薬や水および雰囲気などに関する情報・解説,
- 5) 前処理や試料の取扱い等に関する情報・解説・注意事項,
- 6) その他、分析機器の性能を十分に引き出すために有用な情報など

報など

新規性：本記事の内容に関しては、新規性は一切問いません。新規の装置や技術である必要はなく、既存の装置や技術に関わるもので構いません。また、社会的要求が高いテーマや関連技術については、データや知見の追加などにより繰り返し紹介していただいても構いません。

お問い合わせ先：

日本分析化学会『ぶんせき』編集委員会

[E-mail : bunsetki@jsac.or.jp]

クライオレーザーアブレーションICP-MS による血液中微量元素の直接分析

血液中の微量元素分析は、生体必須微量元素の検査や重金属暴露評価のために用いられている。血液中の微量元素の分析では、酸分解後に誘導結合プラズマ質量分析法 (ICP-MS) によって測定する手法が用いられているが、分析に最低でも数時間以上を要する。また、元素ごとに安定して溶存できる溶媒が異なるため、複数元素の分析においては、複数メソッドの併用が必要となる場合がある。

レーザーアブレーション ICP-MS (LA-ICP-MS) は、キャリアガスが流れる試料室中でパルスレーザーアブレーションにより試料を気化し、ICP-MS に導入して元素を測定する分析手法である。LA-ICP-MS では、通常溶液化が必要な固体試料を直接 ICP-MS に導入できるため前処理がほぼ不要である。加えて、湿式ではメソッドを替える必要のある複数元素の分析も同時測定が可能である。LA-ICP-MS は、一般的に固体試料に対して用いられている手法であるが、液体試料も固体化することにより分析対象とすることができる。

先行研究では、血液を紙にスポットして固体化することで、液体である血液を分析する方法が提案されている¹⁾。一方で、スポット内部で二次元的に元素の不均一化が生じる可能性や、試料とともに紙も同時に気化されるため、紙由来のバックグラウンド上昇について課題があった。

Liらは、液体試料を凍結させた状態で分析可能なクライオ LA-ICP-MS を開発し、血液の分析に適応した²⁾。彼らの開発した装置は、レーザーアブレーション装置の試料室内の試料ホルダー下部にペルチエ素子を用いた冷却機構を搭載し、試料を -20 度まで冷却できる。そのため前処理は試料ホルダーへの約 $10 \mu\text{L}$ の液体試料をピペットで滴下するのみであり、簡便に測定が可能である。加えて、液体試料自体を固体化するため、従来法の紙を用いた手法に比べてバックグラウンドの増加の影響を低減できる。測定は1試料あたり1分以内で行うことができ、現行の酸分解による前処理を要する手法に比べて大幅な迅速化が達成されている。この手法ではマイクロウェルプレートで直接分析することができるため、疫学調査などの膨大な数の試料の分析に有効であると考えられる。

- 1) M. Aramendía, L. Rello, S. Bérail, A. Donnard, C. Pécheyran, M. Resano : *J. Anal. At. Spectrom.*, **30**, 296 (2015).
- 2) F. Li, X. Lei, H. Li, H. Cui, W. Guo, L. Jin, S. Hu : *J. Anal. At. Spectrom.*, **38**, 90 (2023).

[国立研究開発法人産業技術総合研究所 横納 好岐]

アクティブマターは、自らが駆動する能力を有しており、材料自体の研究はもちろん、アクティブマターを物質輸送材料として用いる応用研究が注目されている¹⁾。

アクティブマターの駆動原理の一つとして、熱泳動がある。これは、例えば、ポリスチレン (Ps) 粒子の表面半分を金 (Au) で蒸着した二つの異なる表面を持つヤナス (Au-Ps) 粒子に、金のプラズモン吸収付近の波長のレーザーを照射すると、粒子近傍に不均一な温度勾配が形成される。この結果、粒子が泳動するという原理である。そして、熱泳動は、光のオン・オフで動きを制御可能である利点を有しているため、物質輸送法としての利用が期待される。

ところで、コロイド粒子をマイクロ閉鎖空間 (引用文献 2 では直径 $25 \mu\text{m}$ のキャピラリー) に封入した際に、コロイド粒子は基材表面の影響により、特定の位置に集積化するといった、特異な現象を示すことがある²⁾。このため、熱泳動を示すアクティブマターを研究する際には、アクティブマターを封入している基材表面が熱泳動に及ぼす影響を明らかにする必要がある。

Klitzing らは、poly (*N*-isopropylacrylamide) (PNIPAM) ブラシを固定化した基材を作製し、ヤナス (Au-Ps) 粒子の熱泳動に対する基材表面の効果を調べた³⁾。その結果、(i) 未処理のガラス表面近傍での熱泳動速度と比較し、PNIPAM の固定化表面近傍での熱泳動速度は向上した。そして、レーザー強度の上昇に伴い、速度も増加した。(ii) 熱泳動速度は、PNIPAM ブラシの厚さにより影響された。今回の場合では、ブラシの厚さが増加すると、粒子とブラシとの摩擦力が増加し、泳動速度が低下した。という結果を得ている。そして、これらの結果を、(i) の結果に関しては、基材の濡れ性 (親水性)、電気二重層内のイオン濃度、基材や粒子の表面荷電状態の検討から、thermo-osmotic flow が関与し、(ii) の結果に関しては、表面粗さが熱泳動に関与すると述べている。

ここで、熱泳動を分析科学へ利用するために、「粒子を一方向に一定時間泳動させるための手法とは?」、「溶液の組成/粒子サイズ/粒子濃度の影響は?」などなど、分析科学を研究する者として、疑問が尽きない。熱泳動自体に関して、未知な点が多く、分離や分析への応用には依然として障壁があると個人的には思う。しかし、熱泳動を自在に制御可能とすれば、これを活用した新たな分析科学の手法に繋がるのではないだろうか?

- 1) M. Guix, S. M. Weiz, O. G. Schmidt, M. M-Sánchez : *Part. Part. Syst. Charact.*, **35**, 1700382 (2018).
- 2) W. R. Bowen, J. Wilson : *Colloids and Surfaces A: Physicochem. Eng. Aspects*, **213**, 59 (2003).
- 3) M. Heidari, A. Bregulla, S. M. Landin, F. Cichos, R. von Klitzing : *Langmuir*, **36**, 7775 (2020).

[大阪大学大学院基礎工学研究科 岡本 行広]

窒素ガスプラズマを用いた レーザーアブレーションICP-MSの性能評価

レーザーアブレーション誘導結合プラズマ質量分析計(LA-ICP-MS)は、固体物質中の化学組成・同位体組成分析を高感度かつ迅速に行う手法として広く利用されている。ICP-MSは様々な形態の試料が導入可能であり、LAは固体物質から放出された微粒子(エアロゾル)をキャリアガスでICP-MSへ搬送し測定するドライな試料導入法である。

ICPは様々な気体で生成することができるが、元素分析計ではアルゴン(Ar)ガスのICPをイオン源・励起源として使用している。Ar-ICPは大気圧下において非常に高温で保持できるため、イオン化効率が高いという特長を持つ。一方で、ガス消費量が多くランニングコストが高い。 $^{40}\text{Ar}^+$ 、 $^{80}\text{Ar}_2^+$ や Ar^+ に由来する多原子イオンが対象元素に干渉するため、四重極型ICP-MSでは、質量分析計前段にコリジョン・リアクションセルを配置し、不活性ガスや反応性ガスを用いて干渉を抑制・回避する手段を装置側で講じなければならないといった課題もある。Arから窒素(N_2)に代替したプラズマの開発も行われており、従来のファッセル型ICPトーチを用いたマイクロ波誘導結合プラズマは1500 W程度で

作動できるようになっている。

液体導入法が N_2 -ICPのイオン化効率を低下させる要因と考えたGüntherらは、ドライな試料導入法であるLAを組み合わせたLA-(N_2 -ICP)-MSで検証を行った¹⁾。窒化物クラスターイオンやガス不純物の影響でAl, Si, PやSnのLODは低下したが、多くの元素は同程度のLODを達成した。 N_2 -ICP-MSはAr-ICP-MSと比較し、プラズマ種に由来する干渉が著しく少ないことを実証した。Arを使用しないため、特に m/z 80以下の質量域で様々な同位体が恩恵を受けており、K, Ca, Ti, Cr, Mn, SeのLODは2~10倍ほど改善された。

ICP-MSによる化学物質の元素分析は、固体試料を破碎、酸・有機溶媒などにより、分解・溶液化した後に液体導入法で測定するのが主流であった。直接測定するLA-ICP-MSは、有害物質である酸・有機溶媒を用いる化学処理が不要であるため、人体および環境への環境負担を低減できる利点がある。LA-(N_2 -ICP)-MSはランニングコストの面で優れているだけでなく、分析上問題となる干渉の低減にも効果が見込める。次世代の装置開発と分析技術の確立へと繋がる^{つな}ことが期待される。

1) C. Neff, P. Becker, B. Hattendorf, D. Günther : *J. Anal. At. Spectrom.*, **36**, 1750 (2021).

[サーモフィッシャーサイエンティフィック株式会社
黒木 康生]

原 稿 募 集

ロータリー欄の原稿を募集しています

内容

談話室：分析化学、分析方法・技術、本会事業(会誌、各種会合など)に関する提案、意見、質問などを自由な立場で記述したもの。

インフォメーション：支部関係行事、研究懇談会、国際会議、分析化学に関連する各種会合の報告、分析化学に関するニュースなどを簡潔にまとめたもの。

掲示板：分析化学に関連する他学協会、国公立機関の主催する講習会、シンポジウムなどの予告・お知らせを要約したもの。

執筆上の注意

1) 原稿量は1200~2400字(但し、掲示板は

400字)とします。2) 図・文献は、原則として使用しないでください。3) 表は、必要最小限にとどめてください。4) インフォメーションは要点のみを記述してください。5) 談話室は、自由投稿欄です。積極的発言を大いに歓迎します。

◇採用の可否は編集委員会にご一任ください。原稿の送付および問い合わせは下記へお願いします。

〒141-0031 東京都品川区西五反田1-26-2

五反田サンハイツ304号

(公社)日本分析化学会「ぶんせき」編集委員会

[E-mail : bunseki@jsac.or.jp]



応用研究 vs. 開発研究，業務ミッションの三位一体

法中^{つな}毒繋がり(株)バイオデザインの安部学術マネージャーから、シニア研究者の瀬戸がバトンを受けました。話題を2点に絞って、自己紹介を兼ねて執筆します。大学院修士課程までと3年間の医学部助手時代には、微生物・免疫・生化学の研究をし、酸素電極や可視分光光度計をアッセイに使いましたので、分析化学のユーザーでしたが、その後、警察庁科学警察研究所(科警研)に入省し、毒物の毒性、代謝、分析を研究業務とし、学位取得(酵素阻害機構)、米国1年留学(P450代謝化学)を除いて、分析化学が主要な研究です。若いころは、分析化学会は敷居が高く、揮発性毒物の分析法を研究していた発表の場は法中毒学会、薬学会、後に法科学技術学会でした。既存の分析法や分析機器を使って実鑑定で使えるよう分析条件を改良する応用研究で、*J. Chromatogr.*を中心に論文投稿しました。昔は手法が熟達し分析機器が使いこなせ、有用な測定データをまとめれば *Anal. Chem.* にも応用論文として掲載されましたが、昨今はどの分析系ジャーナルも新規・新奇な分析法開発・装置作製成果がなければ門前払いです。編集部の立場になれば、興味をひきやすい論文を掲載するのは当たり前でしょう。validationは必須で、機械学習・第一原理計算も取り入れなければ採択に不利になるご時世です。しかし、日々使える分析法を発表することは分析業界的には証拠として使えるものであり実務上重要です。ただ、論文に採択されるためにはデータに一貫性が必要で、実験しただけのまとまっていないデータが埋もれており、私も世に出ないデータが山ほどあります。方法改良だけの論文は採択されにくく、行き場がなく折角出したデータも日の目を見ません。初期の科警研時代は競争的資金獲得もおぼつかなく、スケールの小さい個人商店研究でした。

その後、1990年代に起こったサリン事件などの鑑定に携わり、新設の化学兵器対応の研究室を立ち上げ、テロ対処に係る分析法の開発を進めましたが、通常入手が困難な分析標的の標準品である実剤を調達しました。すると、警察・警備など危機管理ミッション部門からラボ分析よりも現場検知の開発を要望され、技術・装置シーズを持つ企業・アカデミズムとの共同研究が立ち上がり、現場検知法開発に方向転換しました。初期には、現有の現場検知器(イオンモビリティスペクトロメーターなど)の性能評価を論文化しました。実際に装置が

使えるかどうかは現場では必須の情報ですが、ジャーナル編集者から装置評価は研究ではないと投稿論文のRejectが続く肩身の狭い状況でした。もっぱら分析化学誌(お世話になりました)に掲載されました。研究を継続するとノウハウ・知見が蓄積し、分析系の英文誌にも掲載されはじめました。加えて、政府の大型競争的資金に支えられて、官の行政ニーズ・現場ニーズ・標品・施設、アカデミズムの特異・得意シーズ、企業の製造力を基に、欧米の先進国と戦える共同研究成果が出て、*Anal. Chem.* などにも掲載できました。科警研だけでは新奇な成果は出ないところ、アウトソーシングの威力です。大学・企業にとっては手に入らない標品を使えるwin-win関係です。現在は、理研SPring-8で放射光を用いた法科学技術を開発中で、この年で悪戦苦闘です。

分析化学に携わる皆様の業務は、大きく「研究」、「教育」、「検査」の三つに分かれます。科警研の業務は、都道府県警察の科学捜査研究所(科捜研)職員への研修(教育・指導)、鑑定、研究です。加えて、警察機動隊、消防隊、海上保安官、自衛隊のテロ対処初動措置隊に対して現場検知訓練も実施していました。研修・訓練では、犯罪現場に近い科捜研職員やテロ現場で対処する初動措置隊員に教育し安全安心な社会を支える職員を育てる責務を実感するのみならず、肌身で現場のニーズを拾い上げ、研究開発に繋がりました。また、研究で出た成果を研修で伝えられ実践されることは合理的です。科警研の鑑定は、科捜研では手に負えない重要・重大な事件に関して警察本部長などから囑託されるものが多いです。科捜研職員や刑事事件を担当する現場捜査員から聞き取りし、ルーチン検査技術では対応できない場合には関連分析法の調査を実施し、検討実験も含めて大掛かりな鑑定となります。そのような鑑定書は論文に匹敵するものかもしれません。現場捜査ニーズを組み入れ、実際の鑑定で不可能であったことなど反省を通して、「研究」では新しい技術開発を提案します。現場を意識した研究・研修・鑑定の3業務が一体となっていることが科警研の特殊性で、研究以外の業務が多いという制約がある反面、共同研究で外部技術シーズを取り入れれば研究を有利に展開することが可能です。次は、分野の異なる高知大学教授の上田忠治先生につなぎます。

〔理化学研究所 瀬戸 康雄〕



談 話 室

気づかない不確かさ要因と分析の精確さ

タイトルから毛嫌いなしないで最後まで読んでほしい。本稿の行きつく結論は、「計量トレーサビリティや不確かさを考えると、分析の結果を向上させるための近道になるかも」である。

学生のころ筆者は、ピコ秒やフェムト秒レーザーを用いた界面和周波発生による表面分析を行っていた。そのときの意気込みは、「勘と腕で世界初のスーパーデータを出す！」であった。細かいことを考えるより、実際に手を動かしている自分が感じる感覚を頼りに最適条件を見つけたり、創意工夫するのが近道だと思っていた。しかしあるとき実験に行き詰ってしまい、アプローチの方法や行く先を見失ってしまった。幸運なことに、当時の指導教官がとても論理的な積み上げをする方で、あっという間に問題点を指摘し、最適なアプローチの道を見いだしてしまった。今もあのときの指導教官のような思考ができないので恥ずかしいばかりである。そこで、最初に示した主旨、「計量トレーサビリティや不確かさを考えると、分析の結果を向上させるための近道になるかも」である。

少しだけ計量トレーサビリティについて説明させてほしい。計量トレーサビリティとは、「個々の校正が不確かさに寄与する、切れ目なく連鎖した、文書化された校正を通して、測定結果を参照基準に関係付けることができる測定結果の性質」(JIS Z 8103: 2019) である。ここで読むのを止めないでほしい。筆者の現在の専門から一つ例を挙げよう。研究室でJIS 特級の塩酸を購入することがあるはずである。この品質は、JIS K 8180: 2021 (塩酸 (試薬)) に書かれている。その塩酸の濃度は、「1 mol/Lの水酸化ナトリウム溶液を使って中和滴定で求める」と書かれている。このことは、塩酸の酸としての濃度は、水酸化ナトリウム溶液のアルカリとしての濃度に計量トレーサビリティがあるといえる (逆に、塩酸に含まれる塩化物イオンや水酸化ナトリウムに含まれるナトリウムイオンには計量トレーサビリティに関する関係がなく測定されていないので使うことができない)。では、水酸化ナトリウムの試薬の純度はどうやって決めるだろうか。これは、JIS K 8576: 2019 (水酸化ナトリウム (試薬)) に、「1 mol/Lの塩酸を使って中和滴定で求める」と書かれている。この話には少しトリックがあるのだが、自分が何を基準に何を分析しているかを注意深く認識していないと、得られた結果の信頼性が無い、世界的・普遍的

に比較可能でないデータになっている可能性があり、せっかく大事なデータを取っても足元をすくわれかねない。

計量トレーサビリティと不確かさ (と分析結果へのその寄与率) は、分析結果をより向上させ、問題点をあぶり出すための一つのヒントになるかもしれない。電子天びんを考えてみよう。約1 Lの水を電子天びんに載せたとき、(容器を除いて) 1000 gと表示されたとしよう。この1000 gの計量トレーサビリティはどこにあるだろうか。一見、天びんが直接質量を表示しているように見えるが、天びんが示している数値は質量ではなく重量に相当するものであり、天びんが置いてある場所の重力加速度等、複数の要因に影響を受けている。そして、その計量トレーサビリティは、この天びんに1000 gを覚え込ませた標準分銅の質量にたどれる。比較対象は標準分銅なので、今測定している水と標準分銅の違いは重要な不確かさ要因になる。天びんの主な不確かさ要因には、標準分銅の不確かさ、それを用いて天びんを点検・校正したときの測定の不確かさ、天びんの繰り返し測定能力等はあるようである。さらに、100 gの質量の分銅を複数載せていった場合、きっちり100 gずつ表示値は増えていかない、つまり、非直線性もある。静電気の影響も大きい。あと、標準分銅と水は大きく密度が異なる。密度が異なれば浮力が異なる。浮力は、空気の密度と試料の密度に依存するから、空気の気温、気圧、湿度に影響される。計量トレーサビリティは、温度計、気圧計、湿度計、試料としての水の密度にもつながっている。そして、1000 gと表示されている水の場合、浮力を補正すると、その質量は1001 gくらいになる。きっちりした分析をする場合、これを考慮しないと結構大きい差になる。天びんの水平性ばかり気にしてはダメである。天びんを点検・校正して富士山の頂上にもって行くと、同じ試料でも表示される数値は変わってしまう。

次にキレート形成反応を用いた亜鉛の純度決定を考えよう。様々な不確かさ要因があるが、筆者の研究グループで頭を悩ませていた大きな不確かさ要因は亜鉛の原子量の不確かさであった。2013年のIUPACの原子量表によると、亜鉛の原子量は65.38 (2) と書いてある。単純に0.02を65.38で割ると、0.03%にもなるのである。滴定はしっかりやるととても良い結果が得られるので、原子量の確定できない不確かさは、滴定における最大の要因であった。最大の要因を解決すれば分析結果は大きく向上するはずなので、すなわち、手元にある亜鉛試料の同位体比を測定して自分たちで原子量を算出すれば、この部分の不確かさを大きく減少させることができるのである。

少し的外れな部分はあったように思うが、困ったときは、計量トレーサビリティや不確かさ、その結果への寄与率に思いを馳せるのはいかがであろうか。思いがけない問題解決ルートが見つかるかもしれない。いまだに直感で勝負している筆者自身への戒めでもある。

[国立研究開発法人産業技術総合研究所 朝海 敏昭]

◆
近畿支部だより

— 2021 年度後半から 2022 年度の活動報告—

2021 年度後半から 2022 年度における近畿支部の活動をご報告申し上げます。なお、日本分析化学会近畿支部では、支部での活動の詳細を「ぶんせきニュース」という形で年 2~3 回発行してお伝えしております。日本分析化学会近畿支部の Web サイト上 (<http://www.bunkin.org>) で公開しており、学会会員のみならずどなたでも閲覧可能ですので、ぜひご覧ください。

2021 年度下期に近畿支部が関連した最大の行事は第 70 年会 (2021 年 9 月 22 日~24 日、実行委員長：大塚利行先生 (神戸大院理)) の企画と運営です。2021 年の段階ではまだまだ新型コロナウイルスへの脅威が続いており、現地での対面開催は中止され、代わりにオンラインでの開催となりました。大塚先生をはじめとする年会実行委員会の先生方が中心となって年会の準備・運営を進めてくださいました。近畿支部における初めてのオンライン開催の年会のため暗中模索の状態での準備でした。先行の第 69 年会の実行委員会 (大谷肇委員長) の皆様や、2021 年 5 月開催の第 81 回討論会の実行委員会 (遠藤昌敏委員長) の皆様の強力なサポートのお陰で、特に大きなトラブルもなく成功裏に年会を終えることができました。

2022 年度においても、新型コロナウイルス感染症の脅威は続いており、世界最大の感染者数を記録する期間もありました。そのため、一部の支部活動は中止することを余儀なくされました。一方で、With コロナの生活様式も浸透し始め、感染予防策を試行錯誤しながらハイブリッドや対面で実施する行事の件数も増加してきました。2022 年度に実施された近畿支部の行事は、支部講演会 (全 3 回)、ぶんせき講習会 (基礎編、実践編、発展編の全 3 回)、提案公募型セミナー (全 1 回)、若手夏季セミナー (ぶんせき秘帖) です。ぶんせき講習会基礎編以外の行事はハイブリッドもしくは対面で開催することができました。オンラインで実施となったぶんせき講習会基礎編は分析技術・研究業務に携わることになった新社会人の方々や研究室に配属になったばかりの学生の方々を主な対象としています。この会は分析化学の基礎である数値データの取り扱いおよび統計的な考え方を分かりやすく解説することを目的としており、座学が中心です。オンライン化によって近畿以外の地域の方々も参加できるようになり、今回は全体の参加者 (56 名) のうち約 35% を占めました。ポストコロナによって普及したオンラインセミナーの形式をうまく活用できた事例と思います。

また、近畿支部が主催する若手夏季セミナー (通称：ぶんせき秘帖) についてご紹介いたします。この行事は、分析に関係する若手研究者同士の交流を目的に、2007 年に第一回が開催されて以来、毎年夏季に宿泊を伴って開催されます。近畿圏内の分析化学に関する研究室に所属する学生たちがアンダーワールフに集い、自身の研究成果や同年代の学生たちの研究発表

を聞き、自由に議論や交流ができる場として、近畿支部が主催する重要な行事の一つになっています。2022 年度は 3 年ぶりに、通常通り対面形式で株式会社島津製作所本社 (京都市) にて開催されました (2022 年 8 月 4 日~5 日、参加者 68 名)。今年の夏季セミナーでは、島津製作所代表取締役会長の上田輝久氏による特別講演を始めとした 7 件の依頼講演、学生による 40 件のポスター発表、島津製作所三条工場の見学などが行われました。これは実行委員長である久保拓也先生 (京大院理) のリーダーシップの下、マスク着用とアルコール消毒など、新型コロナウイルス感染症への万全な対策を徹底し、参加者の方々の対策への惜しみない協力によって実現されました。参加された方々からは「やはり対面での交流はオンラインとは異なる充実感が生まれる」との声が聞かれ、次年度以降は、感染症への対策が緩和され、より活発な交流が進むことが期待できます。

近畿支部は、2023 年度に創設 70 周年を迎えます。実行委員長である森内隆代先生 (大阪工大) を中心に、近畿支部所属の先生方が一体となって 2023 年 6 月 24 日に実施予定の創設 70 周年記念事業の準備を進めております。この行事では、学生のポスター発表に加えて分析化学の夢や将来を語り合うパネルディスカッションを企画しております。また、2024 年度に開催される第 84 回分析化学討論会は前田耕治先生 (京都工繊大) を実行委員長に迎えて、京都工芸繊維大学で開催される予定です。すでに、2023 年 3 月に第 1 回の実行委員会が開催され、近畿支部らしい討論会が開催できるように準備を進めている状況です。学会員の皆様方と京都の地でお会いできることを楽しみにしております。

〔近畿支部常任幹事、

兵庫県立大学大学院理学研究科 鈴木 雅登〕

◆
高分子分析研究懇談会第 413 回例会

高分子分析研究懇談会 第 413 回例会が 2023 年 2 月 20 日 (月) に、明治大学駿河台校舎アカデミーコモン 309B にて対面・Web のハイブリッド式で開催された。今回の例会では、~「劣化」分析・解析のアプローチを考える~をテーマとして、高分子劣化に関する先進的な研究を行われている講師 2 名をお招きし、最近の研究成果についてご講演いただいた。また、招待講演後には対面および Web の両方で参加者による意見交換会を実施した。今回の例会では、対面で 32 名、Web で 41 名、合計 73 名が参加された。

1 件目の招待講演では、産業総合研究所の新澤英之先生より、「高分子の劣化診断のための先端計測・評価技術」と題して、最近の劣化関係の測定手法について広くご紹介いただいた。赤外分光法や質量分析 (MS) で得られるデータに対してインフォマティクス分析を実施することで、スペクトルを眺めるだけでは劣化・未劣化の識別が困難である試料に関しても、劣化試料と未劣化試料を明確かつ容易に特定できることが示された。特に、劣化ポリプロピレンの近赤外スペクトルから回帰分析を用いて予測した破断伸びの値が、実際の破断伸びと非常に高い精度で一致するという結果は、劣化状態の診断におけるイ

ンフォマティクス解析の重要性を端的に物語っていた。また、廉価な近赤外カメラを用いた場合でも、解析方法を工夫することで材料の透明性や色味、外観形状、および吸湿具合の検知が可能であり、使用済みプラスチックの分別検査に利用可能であることもご紹介いただいた。

2 件目の招待講演は、名古屋大学で日本学術振興会特別研究員 PD としてご研究されている石田崇人先生による、「熱硬化性樹脂のマルチスケール劣化解析：物理およびインフォマティクスを駆使した劣化画像把握」と題したご講演であった。高分子劣化の基礎論から出発し、劣化解析に広く用いられている分析技術や解析・計算に関する研究の現状を纏めて頂いた。特に解析・計算に関する研究は現状、限定的かつ各論的な議論にとどまっており、今後の発展が必要不可欠であることを再確認することができた。また、エポキシ樹脂の熱酸化劣化について質量分析と主成分分析を組み合わせることで、劣化過程で生じる分子鎖構造とネットワーク構造の変化をワンストップで議論可能となることをご紹介いただいた。加えて、ウレタン架橋樹脂のネットワーク寿命について、反応速度論モデル（ミクロ）と統計力学モデル（メソ）がある程度合致し、接続可能であるという結果をご紹介いただいた。

招待講演の後には、小グループに分かれての意見交換会が実施され、前半後半でグループを入れ替え、各 30 分ずつ参加者が自由に議論を行った。特に、今回の例会でテーマとなった「劣化」に関する今後の課題や新しい測定手法を中心に議論が行われていた。

例会の最後には、来年度開催予定の第 414 回例会および総会を高分子分析研究懇談会の 60 周年記念大会として実施すること、および 60 周年記念誌に掲載する記事および写真を募集することが菅沼運営委員長および佐藤企画委員長から報告され、第 413 回例会は閉会となった。

〔北陸先端科学技術大学院大学 木田 拓充〕



第 381 回ガスクロマトグラフィー研究懇談会 講演会

2023 年 2 月 17 日（金）に、標記講演会を開催しました。当初は対面形式での開催を模索していましたが、準備段階での 1 月中において、新型コロナウイルス第 8 波による感染者数および季節性インフルエンザによる感染者数がどちらも増加しており、同時流行への対策の観点からオンライン開催形式となりました。講演主題は「持続可能な社会に役立つガスクロマトグラフィー第 3 回」で、近年注目されている SDGs をテーマとした講演会をシリーズ化しており、実験室の効率よい運営、多彩なデータ処理機能やデータ処理ソフトウェアの理解と使い方を話題として取り上げられました。2013 年から引き続き課題となっているヘリウムガスの供給に関連したガスクロマトグラフィー分野での取り組みなども交え、1 件の招待講演と 6 件の主題講演にて広く話題提供されました。当日は、50 名以上の方に講演会へ参加していただきました。

招待講演では、(国研)産業技術総合研究所の羽成修康様より「短鎖塩素化パラフィン分析におけるガスクロマトグラフ質量

分析計の分解能差の影響」と題して講演をいただきました。塩素化パラフィン類の定量に係る国際規格がすでに制定されていますが、実際の定量操作にはさまざまな困難があるとのことです。共同分析の結果を例に用いて、質量分析計の分解能差で比較した結果が紹介されました。妨害物質の影響を排除するためには高分解能が必要といわれており、共同分析の結果もこのことを示していました。また、高分解能測定機器を使用すれば十分というわけではなく、分析結果は試料組成の影響も受けるので、高分解能測定機器分析法の妥当性確認も必要ということでした。

主題講演は、テーマが二つに大きく分けられ、合わせて 6 件の講演が行われました。主題講演の 1 テーマ目は「GC、GC/MS 分析におけるデータ解析について」と題して、4 題の講演が行われました。1 題目は、日本電子(株)の生方正章様より「GC-TOFMS 及び機械学習を用いた構造解析手法の開発と応用」と題して講演いただきました。GC/MS での定性分析において、データベース（ライブラリ）に非掲載の物質の構造解析には、多くの知見と経験、時間が必要です。同社は AI を活用してこの作業を自動化するためのシステムを開発し、このシステムを用いて材料中の未知物質の構造解析を迅速に行った例が示されました。

2 題目は、(株)島津製作所の中村元哉様より「最新のクロマトグラムの波形処理について」と題して講演いただきました。分析者の取り扱う解析データ数が増加、また解析対象ピーク数も増加することで、波形処理パラメータ変更時の管理コストが増加し、波形処理の自動化・簡素化が求められています。同社は AI を活用した波形処理アルゴリズムを開発し、熟練技術者の波形処理を再現いたしました。従来では波形処理・同定処理に 113 分を要していた作業時間が、このアルゴリズムを活用することで同定処理のみの 32 分に低減した例が示されました。

3 題目は、アジレント・テクノロジー(株)の風間春奈様より「快適なラボワークを支える Agilent OpenLab CDS 2 ソフトウェアのご提案」と題して講演いただきました。複数の分析機器の使用環境下では、分析機器毎にソフトウェアの操作性などが異なっています。このような環境下での、データ解析とレポート生成に要する時間の低減を実現する一つの解として、同社のソフトウェアが紹介されました。ユーザーインターフェースデザインを工夫するとともに、GC や LC からシングル MS までの装置管理を可能とし、他社製分析機器の制御を可能とすることで、ソフトウェア操作法習得のハードル、習得に要する時間の低減を目指したとのことです。使用時においても、必要時に必要な情報のみを表示することで、ユーザーの負担軽減に貢献できるとのことです。

4 題目は、西川計測(株)の山上仰様より「マルチベンダー GC/MS データ解析用ソフトウェア AXEL のご紹介」と題して講演をいただきました。複数メーカーの装置運用時では、装置間の互換性、操作性の違いの問題があります。また、同一 PC 上でのデータ解析の場合には、動作安定性の問題もあります。このような問題を解決する一つの解として、同社のソフトウェアが紹介されました。AIA 形式のデータを活用して、装置によらないデータ解析を実現しています。また、MS スペクトルの結果と Retention Index を組み合わせたデータベース、文献値

掲載の Retention Index を収録したデータベースを提供しており、これを活用することで定性分析の精度を上げることが可能とのことです。

主題講演の2テーマ目は「ヘリウム供給問題への対策」と題して、2題の講演が行われました。1題目は、ムラタ計測器サービス㈱の大塚克弘様より「窒素をキャリアガスとした LPGC/MS とその応用」と題して講演をいただきました。常圧条件時における窒素キャリアガスでの最適線速度は、ヘリウムキャリアガスでのものの二分の一から三分の一程度です。低圧（真空）下では、最適線速度は常圧条件時の2倍から3倍となります。カラム入口側に抵抗管を付けたメガボアカラムでカラム出口を質量分析計に接続してそのメガボアカラム内を真空にし、これを活用することで、窒素をキャリアガスとした場合であっても適切な分離を行いつつ測定時間の短縮も実現できたとのことです。ヘリウムキャリアガスと比べると、質量分析計のイオン化が阻害され感度は落ちてしまうものの、メガボアカラムを用いるので試料導入量が増やせるとのことです。また、検量線の直線性やピーク形状は問題ないとのことです。なお、公定法での GC/MS 測定ではヘリウム以外のキャリアガスを認めていないので、それを認めていただけるよう活動を行っていくとのことです。

2題目は、ジーエルサイエンス㈱の伊藤深雪様より「代替キャリアガス使用上のポイント、節ガス対策、分析への応用例」と題して講演いただきました。ガスクロマトグラフィーのキャリアガスとして使用されるヘリウムの代替ガスとして、主に窒素や水素を取り上げて、各ガス種の特徴を説明いただきました。そして、分析装置での代替ガスへの切り替え手順と、実際の測定操作に係る注意点を説明いただきました。代替キャリアガスが使用できない場合には、スプリットガスでのガス使用量の低減方法などについて紹介いただきました。合わせて、マイクロ GC といったガス使用量が小さい測定装置の使用も提案いただきました。

今回は、多彩なデータ処理機能やデータ処理のソフトウェアの理解と使い方についての話題が提供されました。ガスクロマトグラフィーの世界にも AI が応用され、データ解析に係る省力化が進みつつあります。ソフトウェア技術の進歩に驚くとともに、ソフトウェアを正しく活用するための技術習得が、分析者に対する新たな課題になるものと感じております。合わせて、昨今のヘリウム供給不足に関連した発表もありましたので、ヘリウム供給問題に悩まれている参加者にとっては、参考になったのではないのでしょうか。

最後に、講演会の開催運営にあたり、事務委託とオンライン開催を支えて頂いた（一財）大気環境総合センターの皆様に、この場を借りて感謝いたします。

〔(国研)産業技術総合研究所 渡邊 卓朗〕



第380回液体クロマトグラフィー研究懇談会

標記研究懇談会が2023年2月22日（水）にZoomによるオンライン形式にて開催された。「微量成分分析における定量のコツ」を講演主題とし、幅広い分野において年々増加傾向に

ある、極めて微量な成分を高い精度で定量することへの要求に応え、微量成分分析の基礎的な知見から実相までの6つの講演が行われた。

以下、各講演の一部を紹介し、所感を記す。

1. 微量成分分析に適したサンプル前処理法

（日本ウォーターズ㈱ 島崎裕紀氏）

血漿サンプルを対象にマトリックス効果原因物質であるリン脂質を取り除く前処理方法として、除タンパク、固相抽出（SPE）を挙げ、マトリックス効果の定量的比較を紹介。結果として、SPEの方がリン脂質の除去能力がより高いことが示された。特に、逆相固相と陽イオン交換固相を組み合わせたミックスモード SPE の除去能力が高いことが興味深い。また微量サンプルの取り扱いとして、同社が提供するサンプル容量25~375 μL のチッププレートを使用することで SPE 後の濃縮操作を省略できることを紹介。バイアルへの成分吸着の課題は、超高純度 PP 製バイアルの使用で改善可能であることを紹介。

マトリックス効果原因物質の除去の知見は、リン脂質に限らず、高い疎水性やイオン性官能基を多く含む工業用ポリマー等にも応用できると考える。特にミックスモード SPE と、酸性・塩基性化合物のサンプル調製~抽出のプロトコルは実用的であった。ミックスモード固相の SPE を所有していない場合でも、逆相固相とイオン交換固相の SPE を組み合わせることですぐに試行可能であり、興味深い手法であると感じた。また微量成分の検出において容器への吸着は十分に考慮するべきである。分析に使用されるバイアルはガラス製が基本であるが、高純度 PP 製の選択肢を持つことは重要であると感じた。

2. HPLC の感度性能に関する最適条件の検討

（アジレント・テクノロジー㈱ 熊谷浩樹氏）

UV 検出における高感度化のノウハウの紹介と、同社が提供するハードウェアとソフトウェアの組み合わせによるリニアリティレンジの拡大について紹介。

講演で紹介されたハードウェアとソフトウェアによる高感度化とリニアリティレンジの拡大を実施するには投資が必要であるが、操作の簡易化、測定の高効率化、操作誤差の低減は大変魅力的であった。また講演のノウハウは、日常業務において測定条件を検討する際に大変有益であった。

3. HPLC の感度性能に関する最適条件の検討

（㈱日立ハイテクサイエンス 清水克敏氏）

検出器の感度性能の指標として、新たにカラム長 L と移動相の流速 N で示される高長積 $\Sigma = L^2/N$ を定義。導入した成分がカラムによって裾を持つピーク形状を成し、その分散 σ^2 は、定数 $e^2(k+1)^2$ とカラム断面積 S と高長積 Σ で示される $\sigma^2 = e^2(k+1)^2 \cdot S^2 \cdot \Sigma$ で導出されることを紹介。分散が小さいシャープなピークを得るには、カラム断面積とカラム長が小さいセミアミクロ LC が有用であることを理論的に示した。

経験的に知られるセミアミクロ LC の利用による感度の向上を理論的に示したことが素晴らしく、背後にある莫大な実験の数々に感嘆した。

4. 微量成分分析を目的とした、システムスケールダウンの基礎

(日本分光㈱ 寺田明孝氏)

システムスケールダウンにおける基本的ではあるが重要なノウハウを多数紹介。その中でも興味深いと感じたノウハウを記す。ピーク強度を得ようとサンプル溶液の注入量を増量すると、サンプルの一部は溶媒と共にホールドアップタイムで溶出しうするため、前処理として濃縮が有用である。注入量の精度は、サンプルループの全容量を注入するより半分以下の容量以下の部分注入が良好である。対して再現性は、全容量で注入する方が良好である。

講演で紹介されたノウハウは基本的ではあるが有用な知見であり、講演の参加者にはぜひとも真似していただきたい。

5. LC/MS/MS における C5 アシルカルニチンの異性体判別

(㈱島津製作所 渡邊 淳氏)

LC/MS/MS を用いた新生児の先天性代謝異常症の診断について、短時間でのマススクリーニングを可能とした例を紹介。イソ吉草酸血症のバイオマーカーであるイソパレルカルニチンと偽陽性の原因物質である異性体のピバロイルカルニチンの識

別を検討した例であった。容易ではあるが分析時間が長いカラム分離による識別ではなく、LC/MS/MS のフラグメンテーションで生成したフラグメントイオンを利用したスコアによる短時間での識別を提案していた。

製品の品質管理など日常的に行われる分析においても分析の短時間化は重要であり、講演で紹介されたスコアを用いた識別は有用な方法であると考えられる。

最後に中村 洋委員長 (東京理科大学) より、総括講演が行われた。講演は、各講演それぞれに対する Q & A の形式で進められた。

本例会の参加者数は 42 名と多くの方に参加していただき、研究・開発の一助となったと思われ、オーガナイザーとして大変うれしく思う。今後も当研究懇談会の繁栄および液体クロマトグラフィーに関わる研究の発展を切に願う。

最後に本例会の演者の皆様、準備に向けご尽力・ご協力いただきました役員の方々に御礼申し上げます。

(東洋合成工業㈱ 加藤 幸一郎)

執筆者のプロフィール

(とびら)

上條 利夫 (Toshio KAMIJO)

鶴岡工業高等専門学校 (〒997-8511 山形県鶴岡市井岡字沢田 104)。東北大学大学院理学研究科化学専攻。博士 (理学)。《現在の研究テーマ》イオン液体を用いた機能性 (低摩擦・抗ウイルス) 材料の開発と評価。《主な著書》“Industrial Applications of Ionic Liquid”, (Intech)。《趣味》スキー、書道、温泉巡り、美術館巡り。

E-mail : kamijo@tsuruoka-nct.ac.jp

(ミニファイル)

中川 太一 (Taichi NAKAGAWA)

福島大学共生システム理工学類。 (〒960-1296 福島県福島市金谷川 1 番地)。福島大学大学院共生システム理工学研究科博士後期課程共生システム理工学専攻修了。博士 (理工学)。《現在の研究テーマ》液液抽出によるナノ微粒子の抽出・分離。《趣味》ランニング。

高貝 慶隆 (Yoshitaka TAKAGAI)

福島大学共生システム理工学類、福島大学環境放射能研究所 (兼務)。 (〒960-1296 福島市金谷川 1 番地)。茨城大学大学院理工学研究科博士後期課程修了。博士 (工学)。《現在の研究テーマ》濃縮分離法と高感度分析、ナノ微粒粒子制御、放射性核種の分析方法の開

発。《主な著書》“Agricultural Implications of the Fukushima Nuclear Accident (III)”, (分担執筆)。 (2019)。 (Springer)。《趣味》釣り、剣道、庭仕事、ネコ。

(トピックス)

横納 好岐 (Yoshiki MAKINO)

国立研究開発法人産業技術総合研究所環境創生研究部門環境計測技術研究グループ (〒305-8569 茨城県つくば市小野川 16-1)。東京大学大学院理学系研究科地球惑星科学専攻修了。博士 (理学)。《現在の研究テーマ》固体の微量元素分析技術の開発。

岡本 行広 (Yukihiro OKAMOTO)

大阪大学大学院基礎工学研究科物質創成専攻化学工学領域 (〒560-8531 大阪府豊中市待兼山町 1-3)。京都大学大学院工学研究科材料化学専攻博士後期課程。博士 (工学)。《現在の研究テーマ》リビドナノテクノロジーを活用した分離分析法。《主な著書》「ナノバイオデバイスによる分析・診断医学構築と予防早期医療創成」。岡本行広、馬場嘉信，“化学フロンティア 新しい地平をひらく分析手法の最前線”。 (化学同人)。《趣味》旅行。

E-mail : okamoto.yukihiro.es@osaka-u.ac.jp

黒木 康生 (Yasuo KUROKI)

サーモフィッシャーサイエンティフィック株式会社 (〒221-0022 神奈川県横浜市神奈

川区守屋町 3-9 C 棟)。首都大学東京大学院。《現在の研究テーマ》レーザーアブレーション-ICP-MS/OES による固体試料の多角的分析手法の開発。

E-mail : Yasuo.kuroki@thermofisher.com

(リレーエッセイ)

瀬戸 康雄 (Yasuo SETO)

理化学研究所放射光科学研究センター利用技術開拓研究部門法科学研究グループ (〒679-5148 兵庫県佐用郡佐用町光都 1-1-1)。東京大学大学院。農学博士。《現在の研究テーマ》放射光を利用した法科学分析法の開発。《主な著書》“薬毒物試験法と注解 2017”。 (部分執筆)。日本薬学会編。 (2017)。 (東京化学同人)。《趣味》ランニング。

E-mail : seto.y@spring8.or.jp

(ロータリー・談話室)

朝海 敏昭 (Toshiaki ASAKAI)

国立研究開発法人産業技術総合研究所計量標準総合センター (〒305-8563 茨城県つくば市梅園 1-1-1)。東京工業大学大学院総合理工学研究科修士課程修了。博士 (工学)。《現在の研究テーマ》電気化学的手法を用いた化学標準の確立。《主な著書》“標準物質活用ガイド”。 (分担執筆)。 (丸善)。《趣味》散歩、映画・演劇鑑賞。

E-mail : t-asakai@aist.go.jp

目 次

総合論文

- 皮膚メラニンラジカルの非侵襲計測に向けた ESR 非破壊測定技術開発 中川公一 147
イオン認識化合物の分子設計とセンサへの応用
..... 森内(川上)隆代・藤森啓一・平原将也・浦濱圭彬 155

報 文

- 単一レクチン種を用いるサンドイッチ Enzyme-Linked Lectin Assay による
高分子多糖類の新規定量技術の開発
..... 大島俊文・中山 魁・高林久美子・岩木実里・宇部那菜・中島章裕 167

報 文 (若手初論文)

- 養老川河口干潟還元有機泥中の多環芳香族炭化水素の特徴
..... 大坂雄一郎・小野里磨優・西垣敦子 175
HILIC カラムを用いるアスコルビン酸の迅速定量法の開発と
開封後の医薬品製剤・清涼飲料水の光安定性
..... 邑岡美嘉・橋本真梨子・岡崎真優・上野茉莉・川畑公平・西 博行 183

アナリティカルレポート (若手初論文)

- カーボンナノチューブ長さ測定への画像解析の適用
— オープンソースモジュールを活用したプログラムの適用性評価 —
..... 則武彩乃・眞貝 孟・舌古裕美子・岩瀬勝則 191

- “第 22 回若手研究者の初論文特集” 募集のお知らせ 197
「分析化学」 年間特集 “流” の論文募集 198
「分析化学産業技術論文賞」のご案内 200
テンプレートによる投稿要領 201
「分析化学」に投稿される皆様へ 202

「分析化学」誌ホームページ URL=<https://www.jsac.jp/~wabnsk/index.html>

㊤ 〈学術著作権協会委託〉 本誌からの複写許諾は、(公社)日本複写権センターと包括複写許諾契約を締結されている企業の従業員以外は、一般社団法人学術著作権協会 (〒107-0052 東京都港区赤坂 9-6-41 乃木坂ビル 3 階, FAX : 03-3475-5619, E-mail : info@jaacc.jp) から受けてください。

◇今年の入社式はマスク着用なしも多かったと聞きました。コロナ禍となって3年、5月8日から第5類へ移行とのこと、混乱した日々もこのまま収束することを願ってやみません。5月20日(土)、21日(日)の第83回分析化学討論会は、富山大学五福キャンパスでオンサイト開催の予定です。現地で皆さまが再会できることを願っております。

◇本号の「リレーエッセイ」は、科捜研における分析業務について瀬戸先生が執筆されています。サリン事件への対応をはじめとしたテロ対処に係る分析法開発のお話を読みながら、安心安全な社会の実現には、分析技術が深く関連していることを改めて実感しました。

◇一昨年から掲載されている「技術紹介」では、製品紹介のみならず、新たな使用方法、より高精度な測定を目指す手順など、実践的な方法を紹介する記事が掲載されています。ホームページにも項目ごとに整理・蓄積されていますので、ご利用いただくと共に、ご投稿のご検討もよろしくお願い申し上げます。

(Y. I.)

〈とびら〉

分析化学誌をぜひご活用ください……………水口 仁志

〈入門講座〉 分離技術：原理から最新技術まで

イオンクロマトグラフィー……………森 勝伸

〈講 義〉

実験室の安全 ―リスクと対策―……………町田 基

〈ミニファイル〉 マイクロ・ナノの分析化学

マイクロ流体チップを用いた細胞の分離……………田中 陽

〈話 題〉

オンライン試料濃縮による

ナノ微粒子のキャピラリー電気泳動分析……………北川 文彦

◇ 編 集 委 員 ◇

〈委員長〉 四宮 一 総 (日 大 薬)		
〈副委員長〉 東海林 敦 (東京薬科大薬)		
〈理 事〉 津越 敬 寿 (産業技術総合研究所)		
〈幹 事〉 市場 有 子 (ライオン(株))	稲川 有 徳 (宇都宮大院地域創生科学)	坂 牧 寛 (化学物質評価研究機構)
	村居 景 太 (株共立理化学研究所)	
〈委 員〉 岩井 貴 弘 (株日立製作所)	糟野 潤 (龍谷大先端理工)	久保田 哲央 (アジレント・テクノロジーズ)
	坂 真 智子 (株エスコ)	島田 健 吾 (石福金属興業(株))
	古賀 舞 都 (農 研 機 構)	高橋 あか ね (オルガノ(株))
	末吉 健 志 (大阪公立大院工)	野間 誠 司 (佐賀大農)
	永谷 広 久 (金沢大院自然科学)	野間 誠 司 (佐賀大農)
	原賀 智 子 (日本原子力研究開発機構)	福 島 健 (東 邦 大 薬)
	三浦 篤 志 (北 大 院 理)	宮下 振 一 (産業技術総合研究所)
	盛田 伸 一 (東 北 大 院 理)	森 山 孝 男 (株リガク)
		山崎 由 貴 (国立医薬品食品衛生研)

☑ 複写される方へ

日本分析化学会は学術著作権協会(学著協)に複写に関する権利委託をしていますので、本誌に掲載された著作物を複写する場合は、学著協より許諾を受けて複写してください。

〒107-0052 東京都港区赤坂9-6-41 乃木坂ビル3階
一般社団法人 学術著作権協会

FAX: 03-3475-5619 E-mail: info@jaacc.jp

なお、複写以外の許諾(著作物の転載願い等)は、学著協では扱っていませんので、直接日本分析化学会へお尋ねください。

ぶんせき 2023年 第5号 (通巻581)

2023年5月1日印刷

2023年5月5日発行

定価1,000円

編集兼発行人 公益社団法人 日本分析化学会

印刷所 〒173-0025 東京都板橋区熊野町13-11

株式会社 双文社印刷

発行所 〒141-0031 東京都品川区西五反田1-26-2

五反田サンハイツ304号

公益社団法人 日本分析化学会

電 話 総務・会員・会計: 03-3490-3351

編集: 03-3490-3537

FAX: 03-3490-3572 振替口座: 00110-8-180512

© 2023, The Japan Society for Analytical Chemistry

購読料は会費に含まれています。

日本分析化学会第72年会

【日本分析化学会第72年会実行委員会 Web サイト】

<https://confit.atlas.jp/jsac72nenkai>

【日本分析化学会第72年会講演申込スケジュール】

- ・講演申込締切：2023年6月7日（水）（厳守）
- ・講演要旨締切：2023年7月5日（水）（厳守）

2023年度液体クロマトグラフィー分析士
四段認証試験

下記要領で実施する予定ですので、お知らせいたします。

日時 2023年6月5日（月）14時～15時30分

会場 日本分析化学会会議室〔東京都品川区西五反田1-26-2
五反田サンハイツ303号室〕

四段資格のイメージ 「学会発表、投稿を通して、技術的議論が行え、講習会の講師が務まるレベル。また、当該分析・測定技術に関する英語の文献を適切に理解し、博士の学位に相当する学識経験を有する。」

分析士四段認証試験 分析士四段試験では書類選考試験（事前提出）と筆記試験（記述式）とを総合して合否を決定します。書類選考用資料には、①氏名、②生年月日、③現職、④学歴、⑤職歴、⑥LCに関する研究・業務経験、⑦論文発表（適当数）、⑧口頭発表（適当数）、⑨学位の有無、⑩LC分析士三段の登録番号、⑪その他、特記事項、をこの順で記載し、申込締切日までに下記資料送付先にお送りください（お送りいただいた資料は本認証試験以外の目的には使用しません）。筆記試験には、1) 英文和訳問題、2) 与えられた課題に対してご自身の考えを問う問題、の2題が出題され90分以内に解答していただきます。

受験料 8,800円（合格者は登録料5,500円を別途申し受けま
す）

受験資格 受験できる方はこれまでに行われたLC分析士三段試験に合格し、登録された方に限ります。

申込方法 受験料を銀行振込後、書類選考用資料を資料送付先にお送りください。

申込締切 5月25日（木）

振込銀行口座 りそな銀行五反田支店普通預金0802349 名義：（公社）日本分析化学会液体クロマトグラフィー研究懇談会。なお、一度振込いただいた受験料は返却しません。試験が中止された場合は、次回の受験料を免除します。

資料送付先・問合せ先 日本分析化学会液体クロマトグラフィー研究懇談会・分析士認証試験係
[E-mail : nakamura@jsac.or.jp]

2023年度液体クロマトグラフィー分析士
五段認証試験

下記要領で実施する予定ですので、お知らせいたします。

日時 2023年6月6日（火）14時～15時30分

会場 日本分析化学会会議室〔東京都品川区西五反田1-26-2
五反田サンハイツ303号室〕

五段資格のイメージ 「分析士を育成・指導できるレベル（師範）。論文の査読・指導、学位論文の審査、国際会議において存在価値が評価される質疑応答ができる。」

分析士五段認証試験 分析士五段試験では書類選考試験（事前提出）、筆記試験（記述式）及び面接試験を総合して合否を決定します。書類選考用資料には、①氏名、②生年月日、③

現職、④学歴、⑤職歴、⑥LCに関する研究・業務経験、⑦論文発表（適当数）、⑧学位の有無、⑨講習会・講演会における講師等の実績、⑩論文査読の経験、⑪学位論文審査の経験、⑫組織委員・実行委員等の実績、⑬国際会議における座長・依頼講演等の実績、⑭LC分析士四段の登録番号、⑮その他、特記事項、をこの順で記載し、申込締切日までに下記資料送付先にお送りください（お送りいただいた資料は本認証試験以外の目的には使用しません）。筆記試験には、与えられた課題に対してご自身の考えを問う問題が出題され45分以内に解答していただきます。面接試験は筆記試験後に30分程度行います。

受験料 9,900円（合格者は登録料6,600円を別途申し受けま
す）

受験資格 受験できる方はこれまでに行われたLC分析士四段試験に合格し、登録された方に限ります。

申込方法 受験料の銀行振込後、書類選考用資料を資料送付先にお送りください。

申込締切 5月26日（金）

振込銀行口座 りそな銀行五反田支店普通預金0802349 名義：（公社）日本分析化学会液体クロマトグラフィー研究懇談会。なお、試験が中止された場合は、次回の受験料を免除します。

資料送付先・問合せ先 （公社）日本分析化学会液体クロマトグラフィー研究懇談会・分析士認証試験係
[E-mail : nakamura@jsac.or.jp]

2023年度LC/MS分析士
四段認証試験実施のお知らせ

下記要領で実施する予定ですので、お知らせいたします。

日時 2023年6月12日（月）10時～11時30分

会場 日本分析化学会会議室〔東京都品川区西五反田1-26-2
五反田サンハイツ303号室〕

四段資格のイメージ 「学会発表、投稿を通して、技術的議論が行え、講習会の講師が務まるレベル。また、当該分析・測定技術に関する英語の文献を適切に理解し、博士の学位に相当する学識経験を有する。」

分析士四段認証試験 分析士四段試験では書類選考試験（事前提出）と筆記試験（記述式）とを総合して合否を決定します。書類選考用資料には、①氏名、②生年月日、③現職、④学歴、⑤職歴、⑥LC/MSに関する研究・業務経験、⑦論文発表（適当数）、⑧口頭発表（適当数）、⑨学位の有無、⑩LC/MS分析士三段の登録番号、その他、特記事項、をこの順で記載し、申込締切日までに下記資料送付先にお送りください（お送りいただいた資料は本認証試験以外の目的には使用しません）。筆記試験には、1) 英文和訳問題、2) 与えられた課題に対してご自身の考えを問う問題、の2題が出題され90分以内に解答していただきます。

受験料 8,800円（合格者は登録料5,500円を別途申し受けま
す）

受験資格 受験できる方はこれまでに行われたLC/MS分析士三段試験に合格し、登録された方に限ります。

申込方法 受験料を銀行振込後、書類選考用資料を資料送付先にお送りください。

申込締切 6月2日（金）

振込銀行口座 りそな銀行五反田支店普通預金0802349 名義：（公社）日本分析化学会液体クロマトグラフィー研究懇談会。なお、一度振込いただいた受験料は返却しません。試験が中止された場合は、次回の受験料を免除します。

資料送付先・問合せ先 （公社）日本分析化学会液体クロマトグラフィー研究懇談会・分析士認証試験係

[E-mail : nakamura@jsac.or.jp]

第40回無機・分析化学コロキウム

2023年度LC/MS分析士
五段認証試験実施のお知らせ

下記要領で実施する予定ですので、お知らせいたします。

日時 2023年6月12日(月)14時~15時30分
会場 日本分析化学会会議室〔東京都品川区西五反田1-26-2
五反田サンハイツ303号室〕

五段資格のイメージ「分析士を育成・指導できるレベル(師範)。論文の査読・指導、学位論文の審査、国際会議において存在価値が評価される質疑応答ができる。」

分析士五段認証試験 分析士五段試験では書類選考試験(事前提出)、筆記試験(記述式)及び面接試験を総合して合否を決定します。書類選考用資料(体裁は自由)には、①氏名、②生年月日、③現職、④学歴、⑤職歴、⑥LC/MSに関する研究・業務経験、⑦論文発表(適当数)、⑧学位の有無、⑨講習会・講演会における講師等の実績、⑩論文査読の経験、⑪学位論文審査の経験、⑫組織委員・実行委員等の実績、⑬国際会議における座長・依頼講演等の実績、⑭LC/MS分析士四段の登録番号、⑮その他、特記事項、をこの順で記載し、申込締切日までに下記資料送付先にお送りください(お送りいただいた資料は本認証試験以外の目的には使用しません)。筆記試験には、与えられた課題に対してご自身の考えを問う問題、が出題され45分以内に解答していただきます。面接試験は筆記試験後に30分程度行います。

受験料 9,900円(合格者は登録料6,600円を別途申し受けます)

受験資格 受験できる方はこれまでに行われたLC/MS分析士四段試験に合格、登録された方に限ります。

申込方法 受験料を銀行振込後、書類選考用資料を資料送付先にお送りください。

申込締切 6月2日(金)

振込銀行口座 りそな銀行五反田支店普通預金0802349 名義:(公社)日本分析化学会液体クロマトグラフィー研究懇談会。なお、一度振込いただいた受験料は返却しません。試験が中止された場合は、次回の受験料を免除します。

資料送付先・問合せ先 (公社)日本分析化学会液体クロマトグラフィー研究懇談会・分析士認証試験係
[E-mail : nakamura@jsac.or.jp]

2023年マイスター認定のお知らせ

LC研究懇談会は、①分析士五段の資格を5年以上保持、②分析士五段としての社会的貢献が顕著、③LC研究懇談会の個人会員、の3条件を満たした方を、マイスターとして認定する制度を2023年から始めました。推薦いただいた方々を認定委員会で検討の結果、下記の方々を2023年マイスターとして認定したことをお知らせいたします。

LC研究懇談会

LCマイスター

第001号(LC)中村 洋(東京理科大学)、
第002号(LC)三上博久(株島津総合サービス)

LC/MSマイスター

第001号(MS)中村 洋(東京理科大学)、
第002号(MS)竹澤正明(株東レリサーチセンター)主催 (公社)日本化学会東北支部
共催 (公社)日本分析化学会東北支部
会期 2023年5月26日(金)・27日(土)
会場 協同の社JA研修所〔山形市東古123、交通:山形駅西口からバス利用、替所・下原・西滝の平方面、「飯塚橋」下車徒歩約12分〕
<https://www.nokyo.or.jp/kyodo/k-top>
招待講演
1. 山形大学で進める加速器研究の最前線 (山形大理) 門叶冬樹
2. 奇妙な原子、ミュオン原子の形成過程とその応用 (大阪大放射線科学基盤機構) 二宮和彦

依頼講演

1. 微小タンパク質液滴からのアミロイド核生成速度の計測 (東北大多元研) 福山真央
-
2. 高曲率性脂質膜を標的とした分子ツールの設計と応用 (東北大理) 佐藤雄介
-
3. 光で動く分子マシンとその活用 (東北大理) 豊田良順
-
- 他4件

参加費 一般:14,000円、学生:7,000円(夕・朝食付き、宿泊料込み)

参加申込締切 定員(100名)になり次第、締切といたします。

参加申込方法 E-mailにて下記へお問い合わせください。

申込・問合せ先 東北大学理学研究科化学専攻 山下琢磨
[電話:022-795-6597, E-mail: tyamashita@tohoku.ac.jp]

2023年度「ぶんせき講習会」(基礎編その2)

化学分析の基礎講座~実験用基本器具、マイクロピペット、電子天びん、およびpHメーターの原理と使い方

主催 (公社)日本分析化学会近畿支部、近畿分析技術研究懇談会

協賛 (公社)化学工学会関西支部、(一社)近畿化学協会、(公社)日本化学会近畿支部、(公社)有機合成化学協会関西支部、(公社)高分子学会関西支部、(一社)日本鉄鋼協会関西支部(公社)日本金属学会関西支部関西分析研究会

化学分析のみならず、合成・物性測定など化学実験や培養などのバイオ実験を行う上で、試薬の秤量や調合は実験の質を左右する重要なファクターになります。最近では機器のデジタル表示やパソコンの普及により、これらの操作における測定値は容易に得られるようになりましたが、正しい値や信頼性のある値を得るためには、実験器具の適切な使い方や、機器の正しい校正法や操作方法を理解・修得することが必要です。そこで、本講習会では、主に初心者(研究室配属直後の学生や新入社員)や基礎から学びなおしたい人を対象に、化学実験の基礎となる秤量・調合・溶液調製をより適切に行えるための講義と実習を企画しました。ピペット・メスフラスコなどの実験用基本器具、マイクロピペット、電子天びんおよびpHメーターの基本操作を原理も含めて習得できます。

期日 2023年6月16日(金)9.50~17.15(受付9.30~)

会場 (株堀場テクノサービス新本社ビル〔京都市南区吉祥院宮の東町2、電話:075-313-8125、交通:阪急京都線「西京極」駅下車徒歩15分、またはJR東海道本線「西大路」駅下車徒歩13分。詳細は下記URL参照

<https://www.horiba.com/jpn/company/group-companies/asia/japan/horiba-techno-service-co-ltd/kyoto/>

講習内容 実験用基本器具、マイクロピペット、電子天びん、

および pH メーターの原理と使い方

対象者 学生や新入社員および基礎から学びなおしたい方

講習プログラム

0. はじめに (9:50~10:00) (関西学院大学) 壺井基裕
1. 講義「実験用基本器具の原理と取扱い方」(10:00~10:30)
(神戸大院海事) 堀田弘樹
 - ・ ガラス製体積計 (測容器) の取扱い~受用, 出用各器具の取扱い~
 - ・ 標準溶液の調製
2. 「マイクロピペットの取扱い方と管理方法 (実習付き)」
(10:40~11:40) (エー・アンド・デイ) 相良 卓
 - ・ マイクロピペットの規格, 構造, 選択, 基本的な操作方法, 維持管理
 - ・ 精度よく分注するために~揮発性のある液体, 粘性のある液体の分注方法~
 - ・ 電動ピペット操作方法~通常分注と連続分注~
3. 「電子天びんの原理と取扱い方 (実習付き)」
(12:40~14:30) (島津製作所) 浜本 弘
 - ・ 電子天びんの据付, 感度調整
 - ・ 天びんの環境や測定目的に応じた使い方
 - ・ 天びんの点検方法
 - ・ 応用測定
 - ・ 天びんの取扱い
4. 「pH メーターの原理と取扱い方 (実習付き)」
(14:40~16:30) (堀場アドバンスドテクノ) 桑本恵子
 - ・ pH とは
 - ・ pH を測るには
 - ・ 測定した pH 値の不確かさ
 - ・ 電極のメンテナンス方法
 - ・ サンプルに適した pH 電極の選び方
5. (株)堀場テクノサービス Analytical solution plaza 見学
(16:45~17:15)

*参加者には事前に電子メールにて PDF 資料を送付します。
*当日はテキストの配布は行いませんので, 各自で PDF を印刷しての持参, あるいはタブレット等での準備をお願いします。

*主催者側で昼食を用意します。

参加費 主催・協賛団体所属会員: 7,000 円, 学生: 4,000 円, 会員外: 11,000 円

申込締切 6月9日(金), 定員(20名)。お申込受付は先着順とし, 定員になり次第, 締め切ります。6月10日以降のキャンセルは不可。

申込方法 参加を希望される方は, 近畿支部 HP (<http://www.bunkin.org/>) から本講習会のページに入ってください, 【参加申込フォーム】にて Web からお申し込みください。

*お申込み後, 自動返信メールが届きましたら, 開催日までに参加費のお支払いをお願いいたします。参加費は銀行口座(りそな銀行御堂筋支店 普通預金 No.2340726, 名義:公益社団法人日本分析化学会近畿支部)にお振り込みください。

*参加証と会場案内図・テキストダウンロード情報などをメールにて送付します。当日, この参加証を持参してください。

*コロナウィルスの感染状況により中止する可能性があります。変更などの詳細は, 近畿支部 HP にてご確認ください。

申込先 〒550-0004 大阪市西区靱本町1-8-4 大阪科学技術センター6階 (公社)日本分析化学会近畿支部 [電話:06-6441-5531, FAX:06-6443-6685, E-mail:mail@bunkin.org, 近畿支部 HP: <http://www.bunkin.org/>]

問合せ先 関西学院大学 壺井基裕
[E-mail: tsuboimot@kwansei.ac.jp]

第29回化学安全講習会

主催 (公社)日本化学会近畿支部
協賛 (公社)日本分析化学会近畿支部ほか

期日 2023年6月19日(月)・20日(火)

開催形式 19日オンライン, 20日対面

プログラム

第1日(10:00~16:00)・オンライン

1. 化学物質の発火・爆発危険性について
(産総研) 松永猛裕
2. 労働安全衛生規則等の一部を改正する省令(令和4年厚生労働省令第91号(令和4年5月31日))への対応について~住友化学における取り組みの紹介~
(住友化学) 稲若邦文
3. 化学プラントとリスクアセスメント
(京葉人材育成会) 中村昌允

第2日(10:00~16:30)・大阪科学技術センター

4. 事故事例から考える実験室・作業場の安全管理
(阪大安全衛生管理部) 山本 仁
5. 実験室・作業場における化学物質のリスクアセスメント
(阪大安全衛生管理部) 山本 仁
6. 実験で解説する静電気による火災・爆発を防止するための安全対策
(SL 経営) 蒲池正之介

参加費・申込方法 詳細は

<https://kinki.chemistry.or.jp/csjevent/anzen23.html>
をご参照ください。

申込締切 6月2日(金)

問合せ先 〒550-0004 大阪市西区靱本町1-8-4 日本化学会近畿支部 [電話:06-6441-5531, E-mail: csjevent@kinki.chemistry.or.jp]

第384回液体クロマトグラフィー研究懇談会

主催 (公社)日本分析化学会液体クロマトグラフィー(LC)研究懇談会

後援 (公社)日本薬学会, (公社)日本化学会, (公社)日本農芸化学会, (公社)日本分析化学会

LC及びLC/MS分析に用いられる装置やその関連技術(カラムや前処理システム, ソフトウェア等)は, 日進月歩で発展しています。本例会では, それらの技術進歩及び実現事例等について紹介していただきます。

期日 2023年6月20日(火)13:00~17:10

会場 Zoom オンライン会場

講演主題 LC及びLC/MS分析における装置と関連技術の発展

講演

講演主題概説(オーガナイザー)(13:00~13:05)
(東ソー(株)) 伊藤誠治
(LC分析士五段, LC/MS分析士二段)

1. 高速・高分離を実現するためのLCおよびカラムの発展
(13:05~13:45) (日本ウォーターズ(株)) 島崎裕紀
(LC分析士三段, LC/MS分析士二段)
2. LCからLC/MS分析へのシームレスな移行を実現する装置と最新ソフトウェア(13:45~14:25)
(株)島津製作所 荒尾洋平(LC/MS分析士初段)
3. LC/MS分析における装置と関連技術の発展
(14:25~15:05)

(エムエス・ソリューションズ(株)/プレッパーズ/
浜松医科大学) 高橋 豊
(LC分析士二段, LC/MS分析士五段)

休憩 (15.05~15.20)

4. バイオコンパチブル LC の進歩—ハードウェアとアプリケーション (15.20~16.00)

(アジレント・テクノロジー(株) 熊谷浩樹
(LC 分析士四段, LC/MS 分析士二段)

5. SEC 装置とアプリケーションの進歩 (16.00~16.35)

(東ソー(株) 伊藤誠治
(LC 分析士五段, LC/MS 分析士二段)

6. 総括「LC 及び LC/MS 分析における装置と関連技術の発展」(16.35~17.10)

(東京理科大学) 中村 洋
(LC マイスター, LC/MS マイスター)

参加費 LC 研究懇談会・個人会員:1,000 円, 後援学会・会員:3,000 円, その他:4,000 円, 学生:1,000 円. 参加申込締切日後の受付はできませんので, ご了承ください.

情報交換会 終了後, 講師を囲んで情報交換会を開催します(会費 1,000 円). 参加申込締切後のご参加はできませんので, ご了承ください.

申込締切日 6 月 13 日 (火) (入金締切時刻:15 時まで)

申込方法

- 参加希望者は, 下記申込先にアクセスし, 氏名, 勤務先(電話番号), LC 会員・協賛学会会員・その他の別および情報交換会参加の有無を明記のうえ, お申込みください. なお, 参加者名と振込者名が違う場合は, 参加申込書の連絡事項欄に振込者名を明記してください.
- お申込みが完了した場合には, 登録されたアドレス宛に「第 384 回液体クロマトグラフィー研究懇談会申込み受付(自動返信)」のメールが届きます. メールが届かない場合は, 世話人までお問い合わせください.
- 申込み受付のメールを受領後, 必ず期限内に参加費の納入を行ってください. 期限内に参加費納入が確認できない場合, 参加申込みを無効とし参加 URL を発行しませんので, 十分ご注意ください. なお, 一旦納入された参加費は, 返金いたしません.
- 参加費の納入が確認できた方には, 2023 年 5 月 19 日以降に①例会サイト入場 URL と②「視聴者用操作マニュアル」をお送りします. また, 情報交換会参加費納入者には, ③情報交換会サイト入場 URL をお知らせいたします. なお, 請求書と領収書の発行はいたしておりません. 領収書は, 振込時に金融機関が発行する振込票等をもって替えさせていただきます.

液体クロマトグラフィー研究懇談会(例会)参加費送金時のご注意

例会参加費, 情報交換会参加費を送金される場合, 下記を禁止しておりますので, ご理解のほどよろしくお願いいたします.

- 複数例会の参加費の同時振込
(→例会ごとに振り込んでください)
- 複数参加者の参加費の同時振込
(→参加者ごとに振り込んでください)
- 年会費や他の費用との合算振込
(→費目ごとに振り込んでください)

申込先 <https://forms.gle/kT5nwwVq1qx7VKKQ8>

銀行送金先 りそな銀行五反田支店(普通)1754341 口座名義:シャ)ニホンブンセキカガクカイ(公益社団法人日本分析化学会・液体クロマトグラフィー研究懇談会)

問合先 (公社)日本分析化学会・液体クロマトグラフィー研究懇談会 世話人 東ソー(株) 伊藤誠治
[E-mail: seiji-ito-pn@tosoh.co.jp]

第 90 回日本分析化学会有機微量分析研究懇談会 第 122 回計測自動制御学会力学量計測部会 第 40 回合同シンポジウム

主催 (公社)日本分析化学会有機微量分析研究懇談会

共催 (公社)計測自動制御学会力学量計測部会

協賛 (公社)日本分析化学会, (公社)日本化学会, (公社)日本薬学会

期日 2023 年 6 月 22 日 (木)・23 日 (金)

会場 オンライン

プログラム

1 日目 (22 日)

10:10~11:10 Oral Presentation 1

OG-01 新しい 1 キログラムの作り方 (産業技術総合研究所) ○倉本直樹, 水島茂喜, 狩野祐也, 藤田一慧, 大田由一, 張ルウルウ, 東 康史, 黒河 明, 大久保章, 稲場 肇

OG-02 使用環境が電子天びんを用いた計量に与える影響と想定されるリスクに応じたサンプル量の最適化 (ザルトリウス・ジャパン) 原 茉純, 矢倉峰伯, ○五味淳, 松岡広一

OG-03 定量 NMR 法によるフェノール化合物の純度測定における水酸基シグナルの活用 (日本食品分析センター) ○加藤 毅, 山本佳奈, 水口恵美子, 笛木周平

11:20~12:00 Oral Presentation 2

OG-04 ハロゲン定量のためのルーチン分析法について (静岡県立大学) ○佐藤綾子

OG-05 イオンクロマトグラフィーによる千葉県下のかん水および温泉水中のヨウ素の分析 (日本大学¹, 日本大学習志野高等学校², ナックテクノサービス³) ○吉川賢治¹, 井上みどり², 遠山岳史¹, 長嶋 潜³

12:00~14:10 休憩・ランチタイム企画

14:10~15:10 Oral Presentation 3

OY-01 可動式マイクロプラズマトーチを搭載した薄層クロマトグラフィー用コンピュータ数値制御原子発光プレートリーダーの試作 (日本大学) ○吉田直樹, 伊東良晴, 中釜達朗

OY-02 新規ビス (12-クラウン-4) 誘導体の合成とイオンセンサーへの応用 (千葉大学) ○井野喜康, 若林宏斗, 勝田正一

OY-03 簡易オートメーションシステムを用いた β カルボリン類における結晶多形制御 (千葉大学) ○近藤俊, 榎飛雄真

15:20~16:20 Plenary Lecture 1

PL-01 化学技術者教育を志向した分析システムの開発 (日本大学) 中釜達朗

2 日目 (23 日)

10:05~11:05 Oral Presentation 4

OY-04 Pyrrolic 窒素が制御された炭素材料の合成 (千葉大学) ○佐藤有紗, 郷田 隼, 佐藤智司, 山田泰弘

OY-05 ピリジニック窒素を含有する構造制御された炭素材料の合成 (千葉大学¹, 日本触媒²) ○蒲 荔芝¹, 山本うらら¹, 郷田 隼², 佐藤智司¹, 山田泰弘¹

OY-06 含窒素官能基が制御された炭素材料の合成 (千葉大学) ○根岸佑衣, 郷田 隼, 佐藤智司, 山田泰弘

11:15~11:55 Oral Presentation 5

OY-07 エチニル基含有芳香族化合物による含窒素炭素材料の構造制御 (千葉大学) ○近藤 烈, 郷田 隼, 佐藤智司, 山田泰弘

OY-08 含窒素炭素材料における 1,10-Phenanthroline 骨格の制御と解析 (千葉大学) ○鈴木峻伸, 田口廣臣, 佐藤智司, 山田泰弘

11:55~14:00 休憩・ランチタイム企画

14:00~15:00 Oral Presentation 5

OG-06 有機元素分析の標準試料に求められる性質とは
(標準試料ワーキンググループ報告: 関連分析法検討
チーム) (埼玉大学¹, 東京大学², 明星大学³) ○加藤美
佐¹, 坂本和子², 上本道久³

OG-07 有機化合物を俯瞰し, 代表する化合物を見出す
(有機元素分析用標準試料ワーキンググループ報告: ラ
インナップ検討チーム) (東京大学¹, 埼玉大学², 岩手
大学³, 山形大学⁴, 日本大学⁵, 明星大学⁶) ○坂本和
子¹, 佐藤重矢子², 水戸部祐子³, 水沼里美⁴, 高木美
緒⁵, 上本道久⁶

OG-08 有機元素分析値の取り扱い法アップデートのた
めの文献調査 (標準試料ワーキンググループ報告: 数値
表現・統計方法検討チーム) (東京大学¹, 愛媛大学²,
明星大学³) ○坂本和子¹, 鎌田浩子², 上本道久³

15:10~16:10 Plenary Lecture 2

PL-02 分離法・分析法としての液液抽出の新たな可能性
(千葉大学) 勝田正一

参加登録費 主催・共催および協賛学会会員: 3,000円 (5月
19日(金)まで), 3,500円 (5月20日(土)以降), 非会
員: 5,000円, 学生: 2,000円, 講演要旨集のみ (送料込):
3,000円

申込・問合せ先 〒263-8522 千葉県稲毛区弥生町1-33 千葉大
学共用機器センター 榊飛雄真

[電話: 043-290-3810, E-mail: orgmicro-sympo@jsac.jp]

ホームページ

<http://www.jsac.or.jp/~orgmicro/sympo2023>

第382回ガスクロマトグラフィー研究会講演会

主催 ガスクロマトグラフィー研究懇談会

期日 2023年6月23日(金) 13:00~17:00

会場 北とびあ [東京都北区王子1-11-1]

講演主題 試料前処理・導入法の最新技術と基礎を学ぶ

参加費 GC研究懇談会会員: 無料, GC研究懇談会会員外:
3,000円, 学生: 1,000円

詳細はガスクロマトグラフィー研究懇談会のwebページに掲
載いたします。

(<http://www.jsac.or.jp/~gc/>)

北陸地区講演会

主催 (公社)日本分析化学会中部支部

期日 2023年7月7日(金) 14時~17時

会場 金沢大学自然科学系図書館棟1階大会議室 [金沢市角間
町, 交通 バスを利用する場合: JR金沢駅兼六園口(東口)
6番乗り場より乗車, 「金沢大学自然研前」下車]

講演

1. イオン化効率向上を戦略とするESI-MSの高感度化とバ
イオマーカ分析への応用 (岐阜薬大) 江坂幸宏
2. 海洋植物プランクトンに対する銅毒性の化学的評価法
(金沢大理工) 黄 国宏
3. ナノ・マイクロポアセンサを用いたイオン電流計測に基
づく単一微粒子分析
(名古屋大未来社会創造機構) 有馬彰秀

参加費 無料

意見交換会等 講演会終了後金沢駅周辺で行います。詳細(会
場, 会費等)につきましてはお問い合わせください。参加希

望者は6月16日(金)までに, E-mailにて下記の申込先ま
でお申し込みください。なお, 件名に「講演会」または「意
見交換会」を入れてください。

申込・問合せ先 〒920-1192 石川県金沢市角間町 金沢大学理
工研究域物質化学系 西山嘉男 [電話: 076-264-5704,
E-mail: yosil166@se.kanazawa-u.ac.jp]

第28回高分子分析討論会 (高分子の分析及びキャラクタリゼーション) —研究発表募集—

主催 (公社)日本分析化学会高分子分析研究懇談会

高分子分析・特性解析全般に関する討論です。高分子分析は
物性発現機構を解明し, 構造設計の指針を得る基盤であり, そ
の重要な認識は高まっています。高分子分析・キャラクタリ
ゼーションを対象とした本討論会の内容は, 化学的手法, 分光
学的手法, 各種クロマトグラフ法, 熱分析法などによる組成,
分子構造, 高次構造, 構造と物性の相関, 物性発現機構, 重合
機構等の解析に関する基本原理, 手法開発, 解析実例などに及
びます。

期日 2023年11月9日(木)・10日(金)

会場 つくば国際会議場 [茨城県つくば市竹園2-20-3, 交
通: つくばエクスプレス「つくば」駅徒歩10分]

<http://www.epochal.or.jp/>

発表形式 (COVID-19の感染状況によって変更になる場合が
あります)

討論を重視するため, 発表はすべてポスター発表のみとし,
これに先立って2分半の口頭による概要説明を行います。こ
のほか特別講演を予定しています。優秀なポスターへの表
彰を予定しております。

研究発表会申込方法

1. 発表内容には既発表のものを含んでいても構いません。
また, 新しい試みであれば, 研究途中のものでも差し支
えありません。
2. 高分子分析研究懇談会ホームページからお申し込みくだ
さい。ホームページからの申し込みができない場合には,
下記に問い合わせてください。
3. 講演要旨執筆要領はホームページに掲載します。
4. ポスター発表のプログラム編成は実行委員会に一任願
います。

発表申込締切 7月7日(金)

発表要旨締切 8月25日(金)

研究発表申込先 高分子分析研究懇談会ホームページ
(<http://www.pacd.jp/>)

参加費 予約登録 (10月13日締切): 一般10,000円,
学生2,000円, 当日登録 (10月13日以降):
一般14,000円, 学生3,000円

発表者は第28回高分子分析討論会の参加登録もお願いいた
します。

問合せ先 〒214-8571 神奈川県川崎市多摩区東三田1-1-1
明治大学理工学部 応用化学科 本多貴之

[電話: 044-934-7212, E-mail: pacd-touron@pacd.jp]

——以下の各件は本会が共催・協賛・
後援等をする行事です——

◎詳細は主催者のホームページ等でご確認ください。

プラズマ分光分析研究会第119回講演会
—プラズマ分光・質量分析法での検出下限値は
どこまで下がるのか?—

主催 プラズマ分光分析研究会
期日 2023年5月12日(金)
会場 東京電機大学東京千住キャンパス5号館2階5203セミ
ナー室およびZoomによるオンライン
ホームページ <https://plasma-dg.jp/>
連絡先 プラズマ分光分析研究会事務局 梅村知也
〔電話・FAX: 042-816-3001, E-mail: office@plasma-dg.jp〕

第58回真空技術基礎講習会

主催 (公社)日本表面真空学会
期日 2023年5月23日(火)~26日(金)
会場 大阪産業技術研究所本部・和泉センター
ホームページ <https://www.jvss.jp/>
連絡先 〒113-0033 東京都文京区本郷5-25-16 石川ビル5
階 (公社)日本表面真空学会〔電話: 03-3812-0266,
FAX: 03-3812-2897, E-mail: office@jvss.jp〕

日本アミノ酸学会第7回産官学連携シンポジウム
「日本のたんぱく質栄養~新知見と次世代への提案」

主催 日本アミノ酸学会
期日 2023年6月2日(金)
会場 東京大学農学部弥生講堂一条ホール
ホームページ <http://www.asas.or.jp/jsaas/>
連絡先 第7回産官学連携シンポジウム実行委員長 木ノ内俊
〔電話: 080-8077-3144, E-mail: toshi.kinouchi@meiji.com〕

第26回IUPAC化学熱力学国際会議
26th International Conference on
CHEMICAL THERMODYNAMICS (ICCT-2023)

主催 日本熱測定学会及びInternational Association of
Chemical Thermodynamics (IACT)
期日 2023年7月30日(日)~8月4日(金)
会場 千里ライフサイエンスセンター
ホームページ
<https://www.chem.sci.osaka-u.ac.jp/lab/micro/ICCT2023/>
連絡先 〒101-0032 東京都千代田区岩本町1-6-7 宮澤ビ
ル601 日本熱測定学会
〔E-mail: icct2023_office@chem.sci.osaka-u.ac.jp〕

第34回日本微量元素学会学術集会

主催 (一社)日本微量元素学会
期日 2023年9月15日(金)・16日(土)
会場 三鷹産業プラザ
ホームページ <http://brte2023.kenkyuukai.jp/>
連絡先 〒202-8585 東京都西東京市新町1-1-20 武蔵野大
学薬学部 生命分析化学研究室 第34回日本微量元素学
会学術集会事務局〔電話: 042-468-9335, E-mail: BRTE2023
@musashino-u.ac.jp〕

第72回ネットワークポリマー講演討論会

主催 合成樹脂工業協会
期日 2023年10月25日(水)~27日(金)
会場 東京工業大学すずかけ台キャンパスすずかけ台学生会館
(すずかけホール)
ホームページ <https://www.jtpia.jp/>
連絡先 〒101-0044 東京都千代田区鍛冶町1-10-4 丸石ビ
ルディング6F 合成樹脂工業協会 ネットワークポリマー
講演討論会事務局〔電話: 03-5298-8003, FAX: 03-5298-
8004, E-mail: atsushi.otaki@jtpia.jp〕

「分析化学討論会」特集の論文募集

「分析化学」編集委員会

「分析化学」誌では、毎年第12号に分析化学討論会特集号と
して、分析化学討論会の討論主題に関連した論文を掲載してお
ります。第83回分析化学討論会では、「生命を観る・測るバイ
オ分析の最前線」、「“Next Gen”化学センシング~次世代化学
センシングの方法論・デバイス開発の最前線~」、「流れ分析法
の新展開と社会への貢献」、「より迅速で、より簡便な分析化学
を目指して」、「未来の「食」と「薬」を創る分析化学」の5
テーマを討論主題として取り上げました。

一方、新型コロナウイルス感染症は、発生から3年余り経た
今年5月によりやく5類感染症へと引き下げられました。こ
の間、世界中で人々の生活に大きな変化をもたらしました。

そこで2023年度の分析化学討論会特集号では、5つの討論
主題を「ポストコロナ時代の分析化学」と位置づけ、第83回
分析化学討論会で設けた討論主題5テーマに関する論文を広く
募集します。多数のご投稿をお待ちしております。詳細は「分
析化学」72巻6号及びホームページをご覧ください。

特集論文の題目:「ポストコロナ時代の分析化学」

特集論文の対象: 第83回分析化学討論会討論主題の下記5
テーマに関する論文。(討論会での発表の有無は問わない)

「生命を観る・測るバイオ分析の最前線」、「“Next Gen”化
学センシング~次世代化学センシングの方法論・デバイス開
発の最前線~」、「流れ分析法の新展開と社会への貢献」、「よ
り迅速で、より簡便な分析化学を目指して」、「未来の「食」
と「薬」を創る分析化学」

特集論文の申込締切: 2023年7月7日(金)

特集論文の原稿締切: 2023年8月11日(金)

「分析化学」 年間特集 “分” の論文募集

「分析化学」編集委員会

「分析化学」では2010年より「年間特集」を企画し、節目の15年目に当たる2024年は「分」をテーマとすることと致しました。

本特集では「分」をキーワードとして、基礎・応用を含めた分析化学の“最新の知見”はもちろん、総合論文や分析化学総説といった形で現在の分析化学の“研究の背景”についても広く募集し、分析化学が担う役割を社会に向けて発信することを目的としています。本特集に関わる論文はすべての論文種目で年間を通じてご投稿いただくことが可能で、審査を通過した論文は単行の特集号を除く「分析化学」第73巻(2024年)合併号の冒頭に掲載する予定です。国内外、産学官を問わず、「分」に関わる分析化学の研究・開発に従事されている多くの皆様方からの投稿をお待ちしておりますので、是非この機会をご活用ください。なお、詳細は「分析化学」誌の6号及びホームページをご参照ください。

特集論文の対象：「分」に関連した分析化学的な基礎・応用研究に関する論文。例を以下に示します。

- 1) 環境水や体液といった液体試料を分析するための前処理分離に関する研究、2) さまざまな物質中から測定対象物質を分離抽出する技術に関する研究、3) 環境からの有害物質の除去・有用物質の回収に関する研究、4) クロマトグラフィーに関する基礎・応用研究、5) 分離のシミュレーションを活用した分析化学的研究、6) 生体サンプル中のバイオマーカー検出に関する研究。

特集論文申込締切：2023年7月21日(金) (第1期)

特集論文原稿締切：2023年8月18日(金) (第1期)

初めて書く論文は母語の日本語で！
“第22回若手研究者の初論文特集”
募集のお知らせ

「分析化学」編集委員会

「分析化学」編集委員会では、2023年(第72巻)に第22回「若手研究者の初論文特集」を企画します。卒研究生、修士・博士課程院生並びに若手研究者の方々にとって、ご自分の研究成果を日本語で投稿できるよい機会です。なお、2019年より本特集を年間特集とし、都合の良いときに執筆して投稿できるようにしました。年間を通して論文原稿を受け付け、審査を経て掲載可になり次第随時掲載いたしますので、奮ってご投稿ください。

なお、詳細は「分析化学」誌HPをご参照ください。

『ぶんせき』再録集 vol. 1~3 出版のお知らせ

ぶんせき誌の過去記事の有効利用の一環として、記事をまとめて書籍化するという試みを行っています。2021年5月10日に、『ぶんせき』再録集 vol. 1 が出版されました。この巻には、2011年から2020年まで、10年間分の〈ミニファイル〉の記事が詰まっています。たっぷり256ページ、2,750円(税込み)のお値打ち本です。多岐にわたる『知って得する分析化学の豆知識』を堪能できます。本書は下記10章からなり、それぞれに12から14の話題が集められています。

1. 実験器具に用いられる素材の特徴
2. 分析がかかわる資格
3. 顕微鏡と画像データ処理

4. 最新のweb文献検索データベース
5. ポータブル型分析装置
6. 分析化学と材料物性
7. 分析化学者のための多変量解析入門
8. 土壌分析
9. サンプルング
10. 前処理に必要な器具や装置の正しい使用方法

過去のミニファイルをファイリングしておきたいときに、初学者への参考書をお探しのときに、また、非学会員の方に分析化学会のアピールをしたいときに、ぜひご活用ください。本書はアマゾンオンデマンド出版サービスを利用して出版した書籍ですので、書店には並びません。アマゾンサイトからのネット注文のみとなりますので、ご注意ください。ネットで「ぶんせき再録集」と入力して検索しても、すぐに出てきます。詳しくは「ぶんせき」誌ホームページをご確認ください。



日本分析化学会の機関月刊誌『ぶんせき』の再録集 vol. 2 が出版されました！初学者必見！正しく分析するための241ページです。

本書は書籍化の第二弾として、「入門講座」から分析試料の取り扱いや前処理に関する記事、合計36本を再録しました。

『ぶんせき』では、分析化学の初学者から専門家まで幅広い会員に向けて、多くの有用な情報を提供し続けています。これまで掲載された記事には、分析化学諸分野の入門的な概説や分析操作の基礎といった、いつの時代でも必要となる手ほどきや現役の研究者・技術者の実体験など、分析のノウハウが詰まっています。

本書は下記の二章だてとなっています。

- 〈1章 分析における試料前処理の基礎知識〉
 1. 土壌中重金属分析のための前処理法
 2. 岩石試料の分析のための前処理法
 3. プラスチック試料の分析のための前処理法
 4. 金属試料分析のための前処理
 5. 分析試料としての水産生物の特徴と取り扱い
 6. 食品分析のための前処理法
 7. Dried blood spot 法による血液試料の前処理
 8. 生体試料のための前処理法(液-液抽出)
 9. 生体試料のための前処理法(固相抽出)
 10. 環境水試料の分析のための前処理法
 11. 大気中揮発性有機化合物分析のための前処理
 12. 放射性核種分析のための前処理法
 13. 脂質分析のための前処理法
 14. 糖鎖分析のための試料前処理
 15. イムノアッセイのための前処理法
 16. 加速器質量分析における超高感度核種分析のための試料前処理法
 17. 生元素安定同位体比分析のための試料前処理法
 18. セラミックス試料分析のための前処理法
- 〈2章 分析試料の正しい取り扱いかた〉
 1. 生体(血液)
 2. 生体(毛髪)
 3. 金属(非鉄金属)
 4. 金属(鉄鋼)
 5. 食品(酒類)
 6. 医薬品(原薬・中間体・原料)
 7. 海水(微量金属)
 8. 考古資料
 9. 海底下の試料(地球深部の堆積物および岩石)
 10. 岩石
 11. 食品(農産物の残留農薬)
 12. ガラス
 13. 環境(陸水)

14. 温泉付随ガス
15. 透過電子顕微鏡観察の試料調整
16. 環境（ダイオキシン類）
17. 高分子材料
18. 沈降粒子

なお、『ぶんせき』掲載時から数年が経過しているため、記事の中には執筆者の所属も含め、部分的に現在の状況とは異なる内容を含むものがあるかもしれません。本書では、各記事の『ぶんせき』掲載年を明記することで、再録にともなう本文改稿を割愛しました。これらの点については、執筆者および読者の方々にご了承いただきたく、お願い申し上げます。

本シリーズが化学分析の虎の巻として多くの方に活用されることを願ってやみません。



日本分析化学会の機関月刊誌『ぶんせき』の再録集 vol. 3 が出版されました！初学者必見！質量分析・同位体分析の基礎が詰まった 293 ページです。

本書は書籍化の第三弾として、「入門講座」から、質量分析・同位体分析の基礎となる記事、合計 42 本を再録しました。

『ぶんせき』では、分析化学の初学者から専門家まで幅広い会員に向けて、多くの有用な情報を提供し続けています。これまで掲載された記事には、分析化学諸分野の入門的な概説や分析操作の基礎といった、いつの時代でも必要となる手ほどきや現役の研究者・技術者の実体験など、分析のノウハウが詰まっています。

〈2003 年掲載 1 章 質量分析の基礎知識〉

1. 総論
2. 装置
3. 無機物質のイオン化法
4. 有機化合物のイオン化法
5. ハイフェネーテッド質量分析 I
6. タンデムマススペクトロメトリー
7. 無機材料の質量分析
8. 生体高分子の質量分析
9. 医学、薬学分野における質量分析法
10. 食品分野における質量分析法
11. 薬毒物検査、鑑識分野における質量分析法
12. 環境化学分野における質量分析法

〈2009 年掲載 2 章 質量分析装置のためのイオン化法〉

1. 総論
2. GC/MS のためのイオン化法
3. エレクトロスプレーイオン化—原理編—
4. エレクトロスプレーイオン化—応用編—
5. 大気圧化学イオン化
6. 大気圧光イオン化
7. レーザー脱離イオン化
8. イオン付着質量分析
9. リアルタイム直接質量分析
10. 誘導結合プラズマによるイオン化
11. スタティック SIMS
12. 次世代を担う新たなイオン化法

〈2002 年掲載 3 章 同位体比分析〉

1. 同位体比の定義と標準
2. 同位体比測定の精度と確度
3. 同位体比を測るための前処理法
4. 同位体比を測るための分析法
5. 生元素の同位体比と環境化学
6. 重元素の同位体比

〈2016 年掲載 4 章 精密同位体分析〉

1. 同位体分析の基本原理
2. 表面電離型質量分析計の原理
3. 表面電離型質量分析計の特性とその応用

4. ICP 質量分析法による高精度同位体分析の測定原理
 5. マルチコレクター ICP 質量分析装置による金属安定同位体分析
 6. 加速器質量分析装置の原理
 7. 加速器質量分析の応用
 8. 小型加速器質量分析装置の進歩と環境・地球化学研究への応用
 9. 二次イオン質量分析装置の原理
 10. 二次イオン質量分析計を用いた高精度局所同位体比分析手法の開発と応用
 11. 精密同位体分析のための標準物質
 12. 質量分析を用いた化合物同定における同位体情報の活用
- なお『ぶんせき』掲載時から古いものでは 20 年が経過しており、執筆者の所属も含め現在の状況とは異なる内容を含む記事もありますが、『ぶんせき』掲載年を明記することで再録にともなう本文改稿を割愛しました。これらの点については、執筆者および読者の方々にご了承いただきたく、お願い申し上げます。

「分析化学」の掲載料についてのお知らせ

「分析化学」誌では、2020 年 4 月より論文掲載料を以下の計算式にしたがってお支払いいただき、pdf ファイルを進呈することにいたしました。なお、論文の別刷を希望される場合は、別途別刷頒布料金をお支払いいただくことにより購入することができます。

掲載料金計算式（ P ：印刷ページ数）（単位：円）

会員の場合： $30,000 + 5,000 \times (P - 4)$ （印刷ページ数が 14 ページ以上は一律 80,000 円）

会員外の場合： $40,000 + 5,000 \times (P - 4)$ （印刷ページ数が 14 ページ以上は一律 90,000 円）

* 上記に消費税がかかります。

【ア行】

アジレント・テクノロジー(株)・・・表紙 4
(株)エス・ティ・ジャパン…………… A1

【サ行】

(株)島津製作所……………表紙 2
西進商事(株)…………… カレンダー裏
(株)ゼネラルサイエンス
コーポレーション…………… A2

【ナ行】

日本電気計器検定所…………… 目次裏
日本電子(株)……………表紙 3
日本分光(株)…………… A3

【ハ行】

ビー・エー・エス(株)…………… A9
(株)日立ハイテクサイエンス…………… A10
フロンティア・ラボ(株)…………… A8

【ヤ行】

安井器械(株)…………… A4
製品紹介ガイド…………… A6～7

新規会員募集中!!

日本分析化学会は、研究者・技術者が一体となって組織化された分析化学分野では世界最大級の学会です。今後ますますハイテク化していく生活・産業活動を支えるため、本学会ではその技術力の進歩・発展に活発に貢献しております。この度、さらに幅広く事業を拡大していくため広く会員拡充を図ることになりました。この好機に多数特典のある本会会員への入会をお知り合いにぜひお勧め下さい。

公益社団法人 **日本分析化学会** 会員係

〒141-0031 東京都品川区西五反田1-26-2 五反田サンハイツ304号
TEL : 03-3490-3351 FAX:03-3490-3572
E-MAIL : memb@jsac.or.jp

<h2 style="text-align: center;">原子スペクトル分析</h2>	<p>高速液体クロマトグラフ Chromaster 5610 質量検出器 (MS Detector) (株)日立ハイテクサイエンス https://www.hitachi-hightech.com/hhs/ E-mail: hhs-info.fy.ml@hitachi-hightech.com</p>
<p>各種水銀測定装置 日本インスツルメンツ(株) 電話072-694-5195 営業グループ https://www.hg-nic.co.jp</p>	<p>ムロマックミニカラム 精度の高いクロマトグラフィー ムロマックガラスカラム イオン交換反応を可視化 室町ケミカル(株) 電話 03-3525-4792 https://www.muro-chem.co.jp/</p>
<h2 style="text-align: center;">分子スペクトル分析</h2>	<h2 style="text-align: center;">電気化学分析</h2>
<p>FTIR用アクセサリーの輸入・製造の総合会社 市販品から特注まであらゆるニーズに対応 (株)システムズエンジニアリング https://www.systems-eng.co.jp/ E-mail: info@systems-eng.co.jp</p>	<p>電位差自動滴定装置 カールフィッシャー水分計 最大5検体同時測定, FDA Par11対応, DI 対策も安心 メトロームジャパン(株) 電話 03-4571-1743 https://www.metrohm.jp</p>
<p>紫外可視近赤外分光光度計 UH4150 AD+ 高感度分光蛍光光度計 F-7100 (株)日立ハイテクサイエンス https://www.hitachi-hightech.com/hhs/ E-mail: hhs-info.fy.ml@hitachi-hightech.com</p>	<h2 style="text-align: center;">質量分析</h2>
<p>フーリエ変換赤外分光光度計 FT/IR-4X リサーチグレードでありながら、ダウンサイジングを追求 日本分光(株) 電話 042-646-4111(代) https://www.jasco.co.jp</p>	<p>MALDI-TOF(/TOF), ESI-QTOF, FT-ICR, LC-MS/MS, GC-MS/MS ブルカー・ジャパン(株) ダルトニクス事業部 電話 045-440-0471 E-mail: info.BDAL.JP@bruker.com</p>
<h2 style="text-align: center;">レーザー分光分析</h2>	<h2 style="text-align: center;">熱分析</h2>
<p>レーザーアブレーション LIBS 装置 J200 伯東(株)システムプロダクツカンパニー 電話 03-3355-7645 https://www.g5-hakuto.jp E-mail: info@g5-hakuto.jp</p>	<p>小型反応熱量計 SuperCRC 少量で高感度・高精度な反応熱量測定を実現 最適化・スケールアップ・安全性評価 (株)東京インスツルメンツ 電話 03-3686-4711 https://www.tokyoinst.co.jp</p>
<h2 style="text-align: center;">NMR・ESR・磁気分析</h2>	<h2 style="text-align: center;">分析装置・関連機器</h2>
<p>NMR スペクトル解析ソフトウェア Mnova (株)リアクト 担当: 化学事業部 梅本 電話 045-567-6633 E-mail: umemoto@react-corp.com https://www.react-corp.com/</p>	<p>ユニット機器型フローインジェクション分析システム AQLA-700 測定項目やご使用環境にあわせて機器の組合せが可能 (株)アクアラボ 電話 042-548-2878 http://www.aqualab.co.jp</p>
<h2 style="text-align: center;">クロマトグラフィー</h2>	<p>XRF分析用ガラスビードの作製及びICP分析のアルカリ融 解処理には、高周波溶融装置ビード&フューズサンブラ (株)アメナテック http://www.amena.co.jp</p>
<p>ナノカラムからセミ分取カラムまで、豊富なサイズ 逆相 HPLC 用カラム L-column シリーズ GC 用大口径中空カラム G-column 一般財団法人化学物質評価研究機構 クロマト技術部 www.cerij.or.jp E-mail: chromat@ceri.jp</p>	<p>英国エレメンタルマイクロアナリシス社製 CHNOS 有機・無機・同位体微量分析用 消耗品・標準物質等 アルファサイエンス(株) http://www.alphascience.jp/ 電話 03-3814-1374 FAX 03-3814-2357 E-mail: alpha@m2.pbc.ne.jp</p>
<p>UV吸収のない化合物までしっかりフラクション UVとELSDを内蔵した一体型ダブルトリガー分取装置 日本ビュッヒ(株) 電話 03-3821-4777 https://www.buchi.com/ja</p>	<p>モジュール式ラマンシステム RAMAN-QE 高感度の小型ファイバ分光器、励起用レーザー、各種ラ マンプローブを組み合わせたコンパクトなシステムです。 励起レーザー選択や光学系のカスタマイズもご相談ください。 オーシャンフォトニクス(株) https://www.oceanphotonics.com</p>

電位差自動滴定装置・カールフィッシャー水分計・密度比重計・屈折計・粘度計・水銀測定装置・熱計測機器・大気分析装置・水質分析装置・排ガス分析装置 京都電子工業(株) 東京支店 03-5227-3151 https://www.kem.kyoto/
オンライン・プロセス分析計 滴定・水分・イオンクロマト・近赤外・VA/CVS メトロームジャパン(株) ※デモ機あります。 https://www.metrohm.jp
秒速粉碎機 マルチピースショッカー® ディスポ容器で岩石・樹脂・生体等の凍結粉碎も可能。 分析感度UP, 時間短縮, 経費節減に貢献。 安井器械(株) 商品開発部 http://www.yasuikikai.co.jp/
研究室用設備機器
グローブボックスシステム MBRAUN 社製 有機溶媒精製装置 MBRAUN 社製 (株)ブライト 本社 048-450-5770 大阪 072-861-0881 https://www.bright-jp.com E-mail: info@bright-jp.com
試薬・標準試料
認証標準物質 (CRM), HPLC・LC/MS 関連 超高純度試薬 (Ultrapur, Primepure®) 関東化学(株) 電話 03-6214-1090 https://www.kanto.co.jp
研究・産業用の金属/合金/ポリマー/ガラス等 8 万点 取扱サプライヤー GOODFELLOW CAMBRIDGE LTD 日本代表事務所 電話 03-5579-9285 E-mail: info-jp@goodfellow.com https://www.goodfellow-japan.jp
X 線回折実験等に使える『高度精製タンパク質試料』 グルコースイソメラーゼ, α アミラーゼほか (株)コンフォーカルサイエンス 電話 03-3864-6606 http://www.confsci.co.jp
信頼性確保に重要な認証標準物質 (CRM) 標準物質のご用命は シグマアルドリッチジャパン(同) テクニカルサービス 電話 03-4531-1140 E-mail: jpts@merckgroup.com
標準物質は当社にお任せください! 海外 (NIST, IRMM, BAS, MBH, Brammer, Alcoa 等) 国内 (日本分析化学会, 産総研, 日環協等) 各種標準物質を幅広く, また, 分析関連消耗品も各種取り 扱っております。是非, ご相談ください! 西進商事(株) https://www.seishin-syoji.co.jp
RESEARCH POLYMERS (株)ゼネラルサイエンス コーポレーション 電話 03-5927-8356(代) FAX 03-5927-8357 https://www.shibayama.co.jp E-mail: gsc@shibayama.co.jp
お求めの混合標準液を混合成分から検索できる! 農薬・動物用医薬品 混合標準液検索 WEBページで「和光 農薬 検索」で検索! 試薬でお困りの際は当社HPをご覧ください。 富士フィルム和光純薬(株)

薄層クロマトグラフィー (TLC) のリーディングカンパニーとして最高レベルの品質と豊富な担体・サイズ・支持体のプレートをご用意しています。 メルク(株) テクニカルサービス 電話 03-4531-1140 E-mail: jpts@merckgroup.com
書籍
Pythonで始める 機器分析データの解析とケモメトリックス 森田成昭 著 A5判 216頁 定価3,300円 (税込) (株)オーム社 https://www.ohmsha.co.jp
基本分析化学 ―イオン平衡から機器分析法まで― 北条正司, 一色健司 編著 B5判 260頁 定価3,520円 (税込) 三共出版(株) 電話 03-3264-5711 https://www.sankyoshuppan.co.jp/
Primary大学テキスト これだけはおさえたい化学 改訂版 大野公一・村田滋・齊藤幸一 他著 B5判 248頁 フルカラー 定価2,530円 (税込) 大学初年次での化学を想定。高校の復習から大学に必要な知識へのテキスト。 実教出版(株) 電話03-3238-7766 https://www.jikkyo.co.jp/
Pyrolysis-GC/MS Data Book of Synthetic Polymers 合成高分子の熱分解 GC/MS ハンドブック Tsuge, Ohtani, Watanabe 著 定価31,900円 (税込) 163種の合成高分子の熱分解 GC/MS, また 33種の縮合系 高分子には反応熱分解 GC/MS も測定したデータ集。 (株)デジタルデータマネジメント 電話 03-5641-1771
TOF-SIMS: Surface Analysis by Mass Spectrometry John C. Vickerman and David Briggs 著 B5・定価51,700円 (税込) 二次イオン質量分析法の装置と試料の取扱い, 二次イオン 形成のメカニズム, データ解析アプリケーション例など (株)デジタルデータマネジメント 電話 03-5641-1771
Surface Analysis by Auger and X Ray Photoelectron Spectroscopy David Briggs and John T. Grant 著 B5・定価51,700円 (税込) 表面分析に欠かせない AES と XPS 法の原理, 装置, 試料の扱い, 電子移動と表面感度, 数量化, イメージング, スペクトルの解釈など。 (SurfaceSpectra, Ltd.) (株)デジタルデータマネジメント 電話 03-5641-1771
改訂6版 分析化学データブック 日本分析化学会編 ポケット判 260頁 定価1,980円(税込) 丸善出版(株) 電話 03-3512-3256 https://www.maruzen-publishing.co.jp
不確かさセミナー
演習中心で解り易いと評判の「不確かさ」セミナー 開催中! 日本電気計器検定所 (JEMIC) 電話 03-3451-1205 https://www.jemic.go.jp E-Mail: kosyukai-tyk@jemic.go.jp
「本ガイド欄」の掲載については下記にご連絡ください。 株明報社 電話 03-3546-1337 FAX 03-3546-6306 E-mail: info@meihosha.co.jp

高分子材料分析の強力な戦力！

マルチショット・パイロライザー EGA/PY-3030D

未知試料へ多面的にアプローチ

- 室温から1050°Cまでの幅広い温度領域を任意設定
- 発生ガス分析や瞬間熱分析などの組み合わせにより未知試料を多面的に分析

前処理なしで迅速に分析

- あらゆる形態のポリマー試料を煩雑な前処理なしで簡単・迅速に分析

高性能で高信頼

- サーモグラムとパイログラムの高い再現性を保証



豊富な周辺装置

新製品

目的に合わせて選べる周辺装置で分析業務をサポート

メンテナンス性が向上！
より使いやすくなった

自動分析用オートサンプラー AS-2020E

ライブラリー登録数が大幅増！
ポリマー・添加剤を瞬時に同定できる
マススペクトル検索ソフトウェア F-Search

簡単操作でパワフル！
各種試料の粉碎・攪拌・分散に最適な
卓上可搬型 凍結粉碎装置 IQ MILL-2070

微量ポリマーの検出感度が大幅向上！
スプリットレス熱分解用オプション装置 MFS-2015E



製品情報

最新のアプリケーション

300報を超える多彩なアプリケーションでユーザーをサポート

- Py-GC/MS分析における水素キャリアーガスの影響
- 微量マイクロプラスチックの分析

ほか



テクニカルノート

フロンティア・ラボ株式会社

お気軽にお問い合わせください
www.frontier-lab.com/jp info@frontier-lab.com

高性能の熱分解装置と金属キャピラリーカラムの開発・製品化に専念して、洗練された製品をお届けしています

BAS

光学式酸素モニターシステム

基本機能の光学式酸素モニタリングに加えて、温度およびpH(一部機種のみ)の同時測定が可能

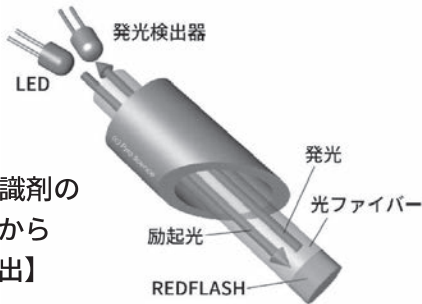
BAS FireSting



- 一台で最大4チャンネル対応。項目の組合せは自由
- 気相および液相での測定に利用できます
- 酸素濃度測定は広い濃度範囲で対応可能
- 非接触型など様々なタイプのセンサーをラインナップ



FireSting O2-C 酸素モニター(4ch)



【REDFLASH標識剤の発光寿命検出から酸素濃度を算出】



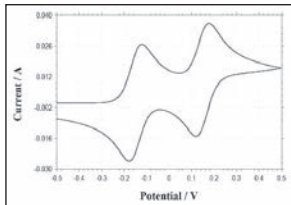
【センサー付きバイアル内部の酸素濃度を外側から測定可能】

分光電気化学測定

BAS SEC2020

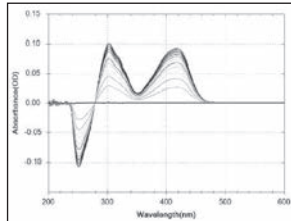


CV測定



※測定データはイメージです。

吸光度測定



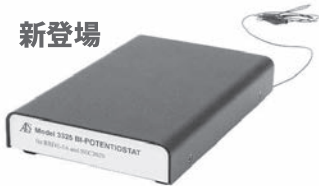
+

分光電気化学測定とは「分光法」と「電気化学的手法」を組み合わせた測定方法です。

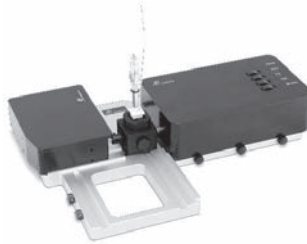
同時に測定を行うことで、より正確な実験データが得られます。

測定装置からセルなどの消耗品まで、すべてBASの開発品のため初めてのお客様でも簡単に測定が行えます。

新登場



モデル3325
バイポテンショスタット



SEC2020スペクトロメーターシステム

● 製品の外観、仕様は改良のため予告なく変更される場合があります。

予算申請などですぐ見積書が必要なときに!

インターネット環境があればいつでもご自身でご確認いただける

WEB見積書サービスが便利です!!



BAS

ビー・イー・エス株式会社

本社 〒131-0033 東京都墨田区向島 1-28-12
東京営業所 TEL: 03-3624-0331 FAX: 03-3624-3387
大阪営業所 TEL: 06-6308-1867 FAX: 06-6308-6890

実験用途に適したサンプリングアクセサリも豊富にラインアップしています。詳しくはホームページまで!!

BAS 光ファイバー

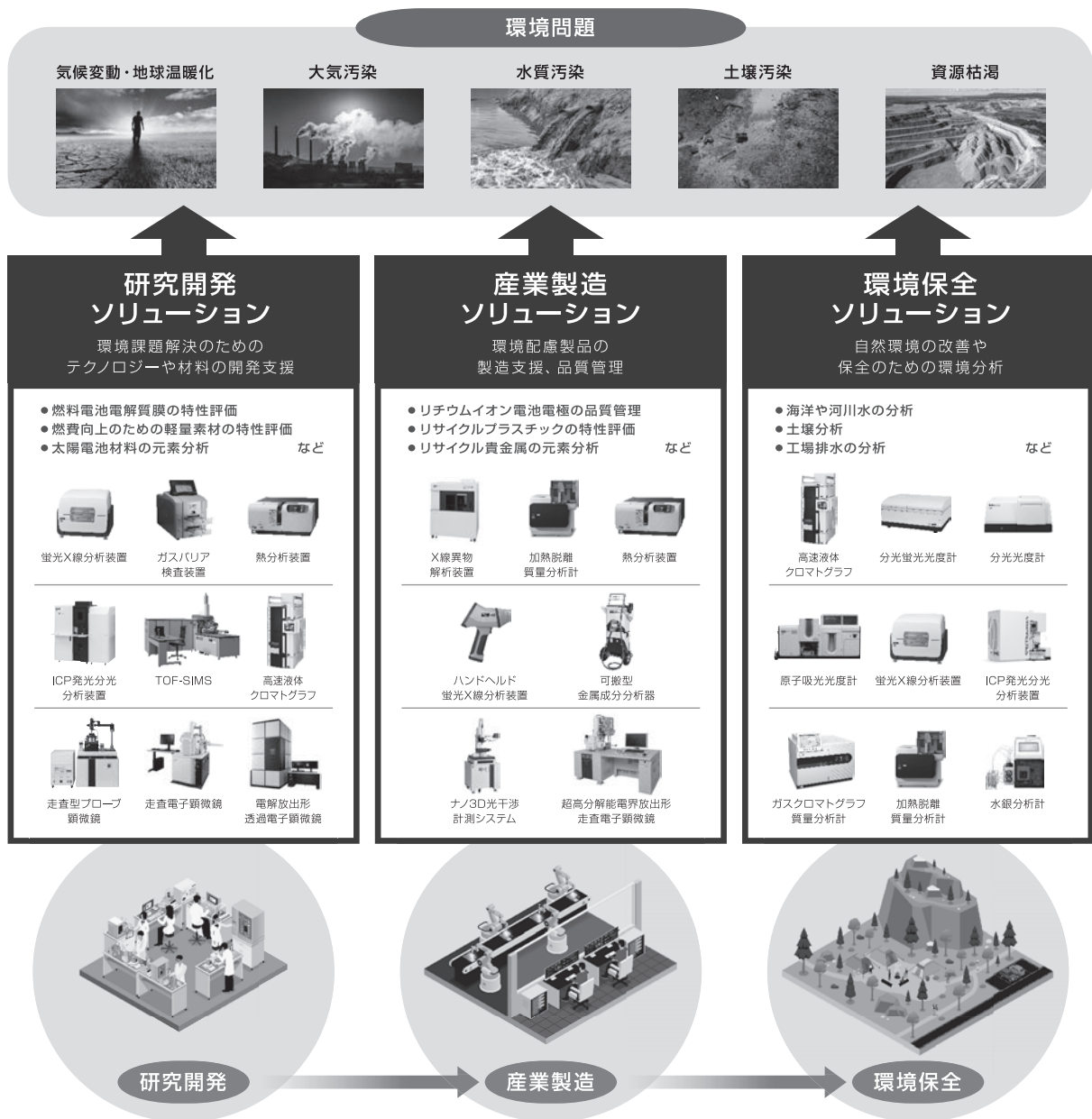


製品情報・技術情報などBASの最新情報はメールニュースで随時配信しております。配信ご希望の方はお気軽にお問合せ下さい⇒E-mail: sp2@bas.co.jp

持続可能な将来を支える日立ハイテクの先端機器

HITACHI High-Tech's advanced instruments support sustainable future.

自然環境と社会発展が共存するサステナブル社会の構築を目指し、
私たち日立ハイテクは、機器分析で、
“研究開発”、“産業製造”、“環境保全”を支援します。



◎株式会社 日立ハイテク ◎株式会社 日立ハイテクサイエンス

本社 〒105-6409 東京都港区虎ノ門一丁目17番1号 虎ノ門ヒルズ ビジネスタワー 電話03-3504-6111

インターネットでも製品紹介しております。

URL www.hitachi-hightech.com/jp/science/

JMS-T2000GC AccuTOF™ GC-Alpha

ガスクロマトグラフ飛行時間質量分析計

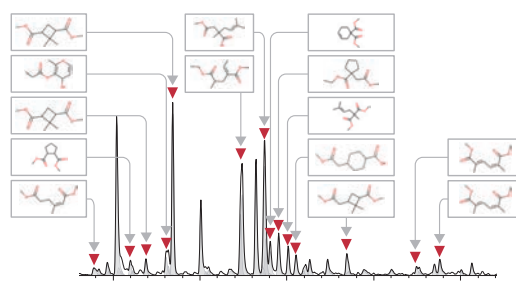
高性能でありながら簡単・迅速をコンセプトに性能と機能を追求した究極の GC-MS システムです。マルチイオン化と自動構造解析ソフトウェア msFineAnalysis AI ソフトウェアにより未知物質解析に威力を発揮します。



msFineAnalysis AI

未知物質構造解析ソフトウェア

EI データとソフトイオン化データを組み合わせた JMS-T2000GC AccuTOF™ GC-Alpha 専用の未知物質構造解析ソフトウェアです。先進の AI テクノロジーが今までにない GC-MS による自動構造解析を可能にしました。



msFineAnalysis AI を使えば、全ての検出成分の構造式（予測）が自動で得られます。



JMS-Q1600GC UltraQuad™ SQ-Zeta

ガスクロマトグラフ四重極質量分析計

日本電子で培ってきた QMS 技術を結集させた 6 世代目のハイエンド GC-QMS です。オプションとして CI イオン源の他に EI/PI 共用イオン源もご用意し、幅広い分析ニーズに対応します。



msFineAnalysis iQ

GC-MS 統合定性解析ソフトウェア

EI マススペクトルを用いたライブラリー検索と、ソフトイオン化による分子量確認を組み合わせた自動統合定性解析ソフトウェアです。従来のライブラリー検索だけの定性解析結果に比べ、化合物同定確度を大幅に向上させることが可能です。



クロマトグラム情報 統合解析結果 (ライブラリー検索+分子イオン確認) スペクトル情報
統合解析結果画面



新たな選択肢：認定整備済機器

『認定整備済機器』をご存じですか？

アジレント認定整備済機器は、持続可能性の追求とリサイクルを進めるうえで重要な取り組みの1つです。

アジレントの認定整備済機器は、優れた品質だけでなく、新しい機器と同様の据付、サポートサービス、および12か月の保証付きです。

機器の導入検討の際に、もう一つの選択肢として是非ご検討ください。



アジレント 認定整備済機器



<https://aglt.co/Vn45>

アジレント・テクノロジー株式会社

DE02622367

〒192-8510 東京都八王子市高倉町9-1

フリーダイヤル 0120-477-111

www.agilent.com/chem/jp