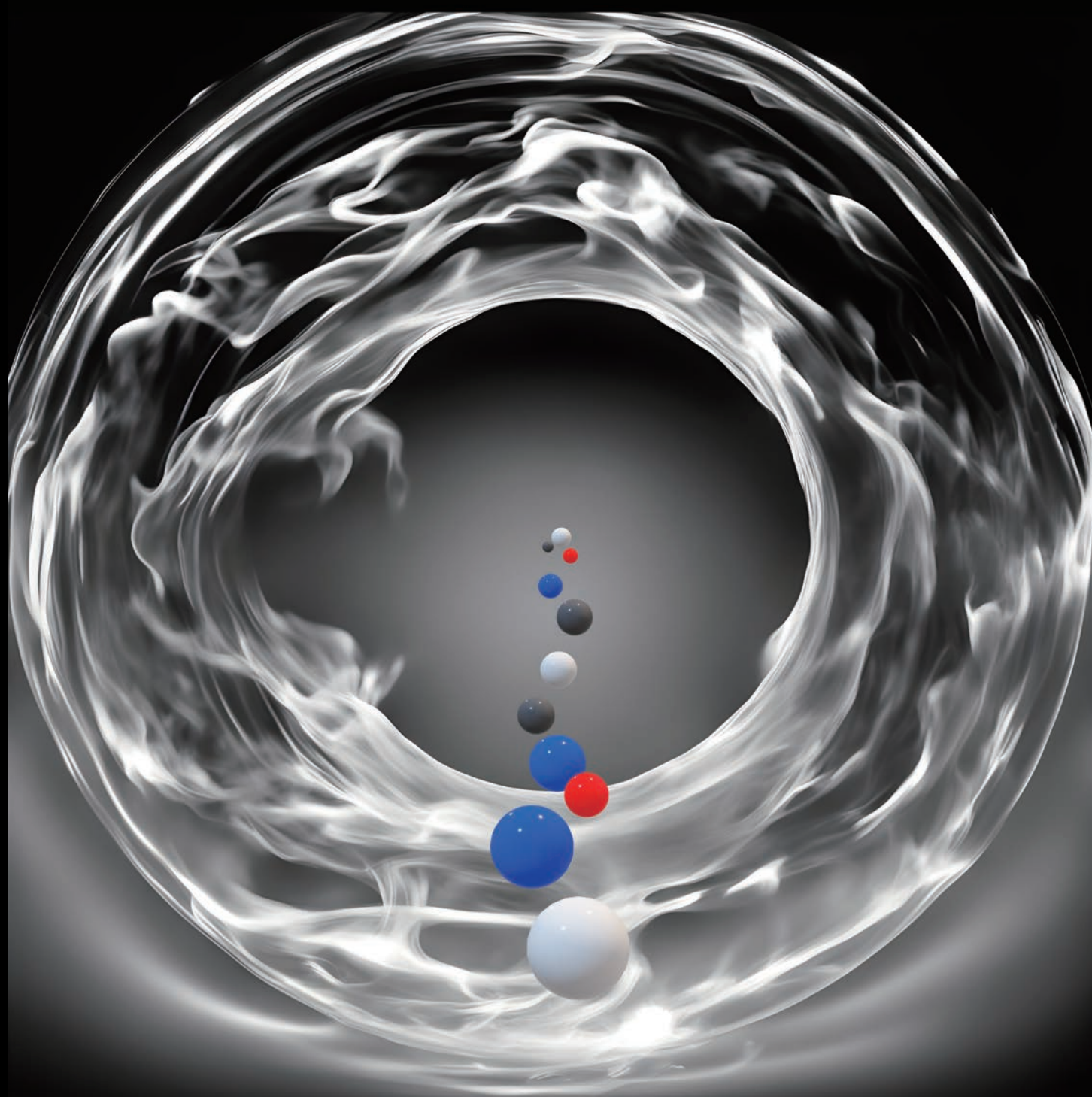


ぶんせき ④

Bunseki 2024

The Japan Society for Analytical Chemistry



日本分析化学会

<https://www.jsac.jp>

ムロマックミニカラムの使用例(公開論文・文献より)

1. 環境分野：海水、雨水など環境試料の分析用途
2. 鉱業分野：岩石、鉱物、石英などの組成分析
3. 農業分野：植物などの分析
4. 生化学分野：タンパク質、生体などの精製研究
5. 原子力分野：高レベル廃棄物の処理法研究(詳細はお問い合わせください)

ムロマック® ミニカラム

ムロマック®ミニカラムはカラムと液溜槽がポリプロピレンにより一体成型されていて、丈夫で耐薬品性に優れています。小さなカラムながら濾槽が効率良く試料中の物質を吸着できるように設計されており、リークやテリングの少ない精度の高いクロマトグラフィーが可能です。

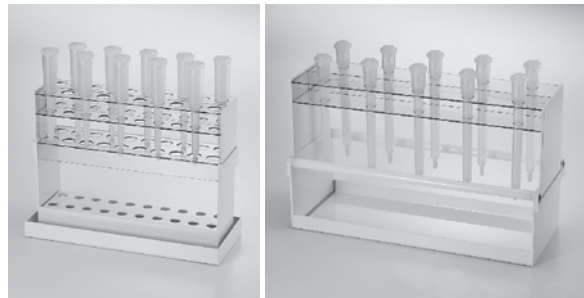


種類	内径(mm)	長さ(mm)	容量(mL)	液溜槽容量(mL)
S	5.0~5.5	50	1.0	8.0
M	6.5~8.5	5.8	2.5	10.0
L	10.0~11.0	118	10.0	5.0*1

*1. 連結キャップを使って50ml注射器を接続すると便利です。

ムロマック® ミニカラムスタンド

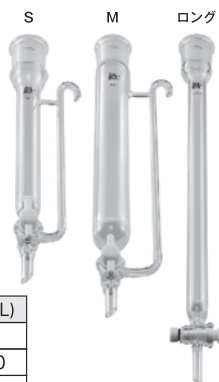
カラムSまたはM用のスタンドは、直径15~16.5mm、長さ100~165mmの試験管を20本立てることができます。カラムL用スタンドのトレイには100mLのビーカー又は三角フラスコを10個並べることができます。



種類	横(cm)	縦(cm)	高さ(cm)	立数
S・M共用	26.5	7.0	20.5	20本
L用	36.5	14.5	22.5	10本

ムロマック® ガラスカラム

ムロマック®ガラスカラムはガラス製で耐薬品性に優れ、鮮明にイオン交換反応を可視化します。イオン交換樹脂の初期検討後、樹脂量を多くして使用することでより正確なデータを取ることが可能です。枝管付きタイプはムロマック分液ロートを使用することで液枯れしません。また、ライフ試験など樹脂層高を上げて試験を行う場合は細長カラムを使用することで正確なデータを取得できます。



種類	横(cm)	縦(cm)	容量(mL)
S	8	28	30.0
M	8.5	32.5	100.0
ロング	5	43	40.0

ムロマック® 分液ロート

[各ガラスカラム対応]

ムロマック®分液ロートはガラス製で耐薬品性に優れ、ムロマック®ガラスカラム(S・M・ロング各種)に互換性のあるすり合わせ規格を有しています。



種類	容量(mL)
S	500
M	1000

お問合せ先

室町ケミカル株式会社 <https://www.muro-chem.co.jp>

[東京] TEL. 03-3525-4792 [大阪] TEL. 06-6393-0007 [本社] TEL. 0944-41-2131

ぶんせき Bunseki 2024 Contents

4

目次

とびら	『All in all it was all just bricks in the wall』／山本 雅博 121
入門講座	データ解析：定量・定性からビッグデータの解析まで 機械学習入門／松本 博士 122
ミニファイル	非破壊・固体分析 走査電子誘電率顕微鏡／小椋 俊彦 129
話 題	鉛同位体比を用いた大気エアロゾルの発生源解析／山本 祐平 131
技術紹介	ガラス表面から深さ方向のスズ価数分析方法の開発／西條 佳孝 133
トピックス	機械学習による高速液体クロマトグラフィーの 保持時間予測／坂牧 寛 138 温故知新：キャピラリー電気泳動による医薬品と タンパク質との相互作用解析／岡本 行広 138
こんにちは	警察庁科学警察研究所・法科学第三部を訪ねて／福島 健・島田 健吾 139
リレーエッセイ	新年の博物館もうで／中西 淳 142
論文賞	2023 年「分析化学」若手初論文賞受賞者 143 2023 年「分析化学」産業技術論文賞受賞論文 144
ロータリー	145 談話室：知ってしまった分析化学者は…／インフォメーション：理事会だより（2023 年度第 5 回）；熱分析研究懇談会と高分子分析研究懇談会（417 回）の合同例会；第 391 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〕	149	〔広告索引〕	A5
〔お知らせ〕	M1	〔ガイド〕	A6
〔カレンダー〕	iii		



日本分析化学会 第84回分析化学討論会

2024年5月18日(土)～19日(日)

京都工芸繊維大学松ヶ崎キャンパス

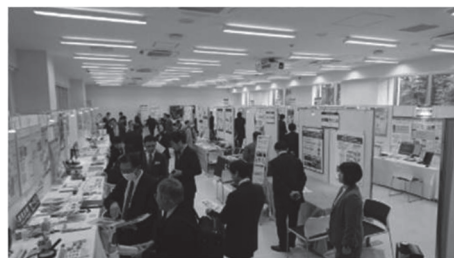
主催:公益社団法人日本分析化学会

協賛:国立大学京都工芸繊維大学

最先端の分析機器、研究装置などを展示！

■ 付設展示会 (ポスター会場内)

5月18日(土) 9:30～17:00 予定
5月19日(日) 9:30～14:00 予定



新製品や最新技術情報を詳しく解説！

■ ランチョンセミナー (討論会会場) お弁当+ドリンク付

5月18日(土) 12:10～13:00 予定
5月19日(日) 12:10～13:00 予定



詳しくは大会ホームページをご覧ください。

<https://confit.atlas.jp/guide/event/jsac84touron/top>

展示会、ランチョンセミナーの開催時間は変更になる場合がございます。

■企画・運営
公益社団法人日本分析化学会 指定広告代理店
株式会社 明報社

カレンダー

2024年

4月	5日	2024年度第1回近畿支部講演会〔大阪科学技術センター7階700号室〕……………(2号 M1)
	23日	第394回液体クロマトグラフィー研究懇談会 〔島津製作所殿町事業所/Shimadzu Tokyo Innovation Plaza〕……………(M 1)
	26日	日本分析化学会第13回定時総会〔Web会議(日本分析化学会会議室)〕……………(3号 M2)
5月	10日	2024年度「ぶんせき講習会」(基礎編その1) 「分析における統計手法～統計の基礎と統計手法の実際について～」〔オンライン〕……………(M 2)
	16・17日	第40回希土類討論会〔松山市立子規記念博物館〕……………(12号 M1)
	17日	プラズマ分光分析研究会第122回講演会野々瀬菜穂子先生記念講演会 〔京都大学百周年時計台記念館国際交流ホールおよびオンライン〕……………(M 6)
	18日	第21回生涯分析談話会へのお誘い〔京都工芸繊維大学松ヶ崎キャンパス〕……………(3号 M4)
	18・19日	第84回分析化学討論会〔京都工芸繊維大学松ヶ崎キャンパス〕……………(2号 M3)
	22～24日	ナノ学会第22回大会〔東北大学新青葉山キャンパス〕……………(M 6)
	29日	第395回液体クロマトグラフィー研究懇談会〔栗田工業 Kurita Innovation Hub 講堂A〕……………(M 3)
	30日	2024年度液体クロマトグラフィー(LC)分析士二段認証試験 〔①東京会場：島津製作所東京支社；②京都会場：島津製作所本社研修センター〕……………(1号 M5)
6月	3～5日	日本顕微鏡学会第80回学術講演会〔幕張メッセ・国際会議場〕……………(3号 M4)
	12～14日	電子機器トータルソリューション展2024〔東京ビックサイト東展示棟〕……………(3号 M4)
	13～15日	みる・はかる・未来につなぐ科学機器展東海サイエンスパーク2024〔名古屋国際会議場〕……………(1号 M7)
	18日	2024年度液体クロマトグラフィー(LC)分析士初段認証試験 〔①東京会場：島津製作所東京支社；②京都会場：島津製作所本社研修センター〕……………(2号 M2)
7月	4日	第29回LC研究懇談会特別講演会・見学会 〔東京都農林水産振興財団・農業総合研究センター〕……………(M 4)
	11～13日	有機微量分析研究懇談会・創立70周年記念大会シンポジウム・ 第91回日本分析化学会有機微量分析研究懇談会・ 第125回計測自動制御学会力学量計測部会・ 第41回合同シンポジウム〔岐阜大学講堂・工学部他〕……………(1号 M6)
	17～19日	第34回環境工学総合シンポジウム2024〔高野山大学〕……………(3号 M4)
	24～26日	HPLC & LC/MS 講習会2024〔島津製作所殿町事業所 MainHall (4階)ほか〕……………(M 4)
9月	11～13日	日本分析化学会第73年会〔名古屋工業大学〕……………(M 1)
10月	23～25日	第46回溶液化学シンポジウム〔千葉大学けやき会館〕……………(3号 M5)
11月	17～22日	第9回実用表面分析国際シンポジウム 9th International Symposium on Practical Surface Analysis (PSA-24) 〔Paradise Hotel Busan パラダイスホテル釜山〕……………(1号 M7)

＜マグネシウム認証標準物質 7 種類の頒布開始＞

日本分析化学会は、実試料の分析時への妥当性確認などのために高純度マグネシウム認証標準物質として JAC 0141, JSAC 0142 及び JAC 0143 を開発し、汎用マグネシウム合金認証標準物質として JAC 0151, JSAC 0152, JSAC 0153 及び JAC 0154 を開発した。マグネシウム中の成分分析における機器の校正及び分析結果のバリデーションに使用することを目的としたものである。

◇微量元素分析用 高純度マグネシウム認証標準物質◇

[JAC 0141～JAC 0143 (ディスク状 3種類)]

JIS H 2150 に準拠したインゴットからビレットを作製し、押し出し加工により丸棒にし、ディスク状に切り出した標準物質で 3～6 元素を認証した。

直径 50 mm 厚さ 20 mm のディスク状：表面を平滑に研磨仕上げ

単位 (µg/g)

	Mg 純度(%)	Al, Si, Mn	Ca, Zn, Fe	Cu, Ni, Pb	Li, Ga, Ce
JSAC 0141	99.9	100 ~ 200	10 ~ 100	1 ~ 10	0.1 ~ 1
JSAC 0142	99.95	50 ~ 100	10 ~ 50	0.5 ~ 5	0.1 ~ 1
JSAC 0143	99.99	5 ~ 20	5 ~ 20	0.5 ~ 5	0.1 ~ 1

◇汎用マグネシウム合金認証標準物質◇

[JAC 0151～JAC 0154 (ディスク状 4種類)]

JIS H 4203 に準拠したマグネシウム合金を連続鋳造で作製したビレットを押し出し加工により丸棒にし、ディスク状に切り出した標準物質で Al, Mn, Zn を主成分に他 3～7 元素を認証した。

直径 50 mm 厚さ 20 mm のディスク状：表面を平滑に研磨仕上げ

	Al (質量分率%)	Mn (質量分率%)	Zn (質量分率%)	Si, Fe, Cu, Ni (µg/g)	Ca, Ga, Pb, La, Ce (µg/g)
JSAC 0151	3	0.5	1	10 ~ 100	1 ~ 10
JSAC 0152	6	0.5	1	10 ~ 100	1 ~ 10
JSAC 0153	9	0.3	1	10 ~ 100	1 ~ 10
JSAC 0154	6	0.3	0.05	10 ~ 100	1 ~ 10

◇ 頒布方法：真空パックした標準物質(a)をプラスチックケースに入れて頒布します(b)



(a)



(b)

◇ 頒布価格：試料 1 ディスクにつき

本会団体会員：40,000 円, それ以外：60,000 円 (送料込み、消費税別)
7 ディスクセット購入の場合は 10 %引きとします。

見積及び頒布問合せ先 〒105-0012 東京都港区芝大門 2-12-7 (RBM 芝パークビル)

西進商事 (株) 東京支店 [電話：03-3459-7491, FAX：03-3459-7499,

E-mail：info@seishinsyoji.co.jp, URL：http://www.seishinsyoji.co.jp/]

技術問合せ先 〒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 標準物質委員会 事務局 [電話：03-3490-3352, FAX：03-3490-3572,

E-mail：crmpt@ml.jsac.or.jp, URL：https://www.jsac.jp/]



FRONTIER LAB

パワフル粉碎とシンプル操作の卓上可搬型

新製品

迅速凍結粉碎装置 IQ MILL-2070

機器分析の試料前処理に最適 - 各種試料の粉碎・攪拌・分散に特化

IQ MILL-2070 の特長

● 使いやすいシンプル操作

- ✓ 簡単な操作でサンプルの粉碎が可能
設定項目は、粉碎速度、粉碎時間、サイクル数、サイクル間の停止時間です。回転ノブとタッチパネルで簡単に設定できます。

● 短時間で効率的に微粉碎

- ✓ パワフルな衝撃と剪断力で粉碎時間を数秒へ大幅短縮
高弾性ベルトを用いた高速上下ねじれ®運動による粉碎方式を採用しており、試料の迅速粉碎が可能です。 特許第7064786号
- ✓ 粉碎時の静かな作動音
粉碎時に発生する音は55 dB程度で通常会話を妨げません。
- ✓ 同一プログラムで最大3試料の同時粉碎が可能
最大3本の試料容器が収納可能なホルダーを搭載しており、より効率的な粉碎が可能です。

● 省エネの試料冷却キット付属

- ✓ 液体窒素の消費量は300 mL程度 (試料と粉碎子入りの試料容器1個の場合)
標準付属の試料冷却キットには冷媒容器、 tong、試料冷却ホルダーが含まれます。
- ✓ 冷媒を使わない室温粉碎も可能

通常会話を妨げない
静音設計



仕様

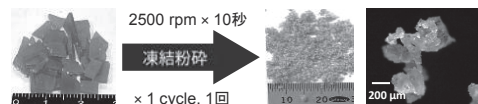
粉碎温度	室温あるいは冷媒（液体窒素等）を用いる試料冷却	
粉碎設定	回転数 (rpm)	50 から 最大 3000 (無段階設定)
	回転時間 (秒)	10 から 60 (10 秒毎)
	回転サイクル間の待ち時間 (秒)	10 から 600 (10 秒毎)
	回転サイクル数	1 から 10 (1サイクル毎)
安全装置	マイクロスイッチと手動ロック方式による誤動作防止	
本体寸法、重量	幅 270 × 奥行 340 × 高さ 300 (mm), 約 12 kg	
電源 (50/60 Hz)	AC 100/120 V あるいは 200/240 V (450 VA)	

高速上下ねじれ®運動



試料容器内における粉碎子の高速上下ねじれ®運動により試料を短時間で効率的に粉碎します。

粉碎例：ポリイソブレン (0.53 g)



40種以上の粉碎応用例をウェブサイトから閲覧可能！

フロンティア・ラボ 株式会社

ご購入検討時にテスト粉碎を承ります。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

分析化学DVDシリーズ

- 最新技術と装置による映像と解説書を収録
- 日本語版 / English Version 収録



好評
発売中

1～3巻

監修：公益社団法人日本分析化学会

定価 (各巻)
 [一般] 35,000円 (税別)
 [(公社)日本分析化学会会員] 30,000円 (税別)

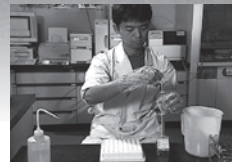
1巻
30分

分析および分析値の信頼性 —信頼性保証の確立に向けて—

- | | |
|-----------------------|------------------|
| 1. 分析値の信頼性を確保するには | 5. トレーサビリティと標準物質 |
| 2. GLPでの品質保証をえるためには | 6. 外部査察 |
| 3. 分析機器 / 分析法のバリデーション | |
| 4. コンピュータシステムバリデーション | |



[1巻] 分析機器 / 分析法のバリデーション

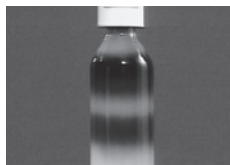


[1巻] トレーサビリティと標準物質

2巻
30分

高速液体クロマトグラフィー HPLC

- | | |
|---------------------|-------------|
| 1. 高速液体クロマトグラフィーとは？ | 5. 試料溶液の調製 |
| 2. クロマトグラフィーの原理 | 6. 操作法 |
| 3. カラム | 7. データ解析 |
| 4. HPLC装置 | 8. 定性と定量の方法 |



[2巻] 高速液体クロマトグラフィーとは？

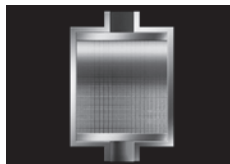


[2巻] HPLC装置

3巻
34分

高速液体クロマトグラフィー質量分析法 LC-MS

- | | |
|---------------|-----------|
| 1. LC-MSの原理 | 5. メンテナンス |
| 2. LC-MS装置の構成 | 6. 試料の前処理 |
| 3. LC-MS装置の各部 | 7. データ解析 |
| 4. 測定時の注意事項 | 8. 応用編 |



[3巻] LC-MSの原理



[3巻] 応用編

お問い合わせ・ご注文は

(公社)日本分析化学会 DVD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

Mail dvds@jsac.or.jp



多彩な機能で品質管理や 研究開発をサポート

自動滴定装置

AUT-801



2系列同時滴定に対応

デュアルシステム



2系列の滴定画面を同時に表示に対応

シングルシステム時は、
600データを本体にメモリー可能

各種滴定法に合わせた電極類をご用意

ターンテーブル(オプション)接続による
省力化を実現



広範な分野での分析ニーズにお応えします

食品分野

化学・分析分野

メッキ分野

電気・鉄鋼・金属分野

環境分野

石油分野

薬品・化粧品・香料分野



食品



石油



薬品・化粧品・香料

東亜ディーケーケー株式会社

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

本社 / 〒169-8648 東京都新宿区高田馬場1-29-10 TEL.03(3202)0219

●東京:03(3202)0226 ●大阪:06(6312)5100 ●札幌:011(726)9859 ●仙台:022(353)6591 ●千葉:0436(23)7531
●名古屋:052(485)8175 ●広島:082(568)5860 ●四国:087(831)3450 ●九州:093(551)2727



LC-CollectIR

LC-CollectIRは、高い効率にGPCで分離された成分から移動相溶媒を蒸発させ溶質成分のみをFTIR用の「Geディスク」、PyroGC/MS用の「熱分解試料カップ」またはMALDI-MS用「ステンレスディスク」に捕集するシステムです。GPCにより分離された混合物の各成分についてオフラインでの測定が可能になります。FT-IR分光測定やMALDI-MSにより簡単に迅速な分子量分布における共重合体の組成変化解析や、PGC/MSによる構造解析の研究に最適です。さらに簡易分取装置として使用できるため、従来の分取法と比べ、大幅な時間短縮とコストの削減が可能になります。

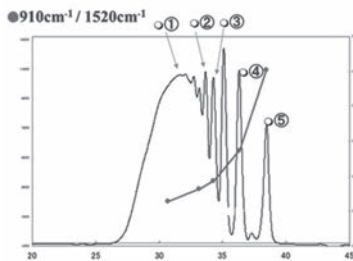


応用例

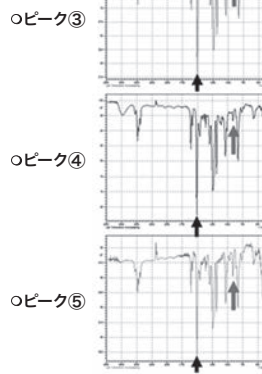
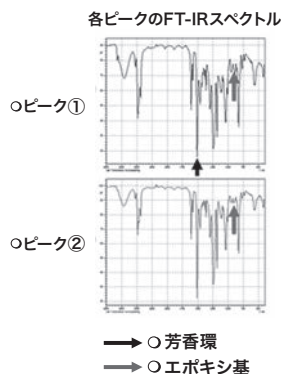
- 混合物の分離と各成分の簡単に迅速な構造解析
- 樹脂の末端や内部構造の推定
- 分子量分布における、共重合体の組成変化
- 分子量が近似した物質の分子構造の区別
- 微細構造解析および樹脂の混合系の判別
- 簡易分取装置としての利用

GPC-IR測定

BPA型エポキシ樹脂のFTIRによる組成分析



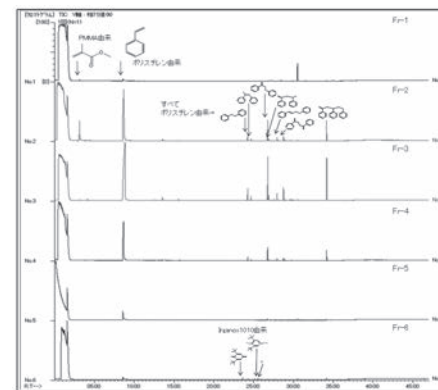
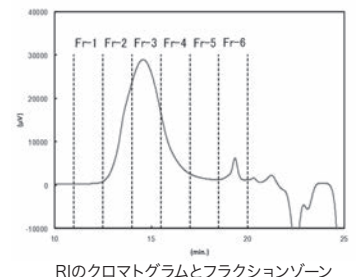
本システムでは、GPCフラクション毎の赤外スペクトルを測定可能です。得られたスペクトルから官能基の比等をクロマトグラムにオーバーラップさせた解析も可能です。



GPC-PyroGC/MS測定

ポリマーブレンドと添加剤の測定

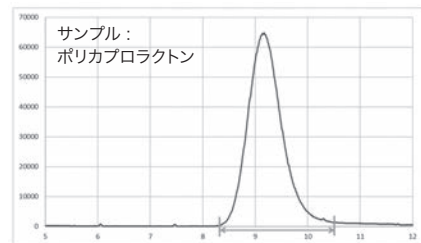
GPCからのフラクションを熱分解装置用試料カップにトラップする事で、GPCの溶出時間ゾーン毎にPyroGC/MS測定が可能となります。得られたスペクトルの解析により、使用されているポリマーの種類や割合が解ります。また、数%程しか使用されていない添加剤の特定も可能です。



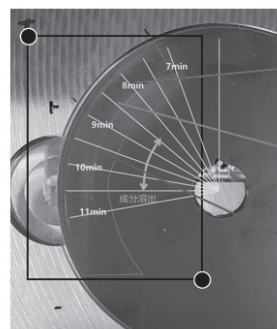
各分取フラクションの熱分解GC/MS結果

GPC-MALDI-MS測定

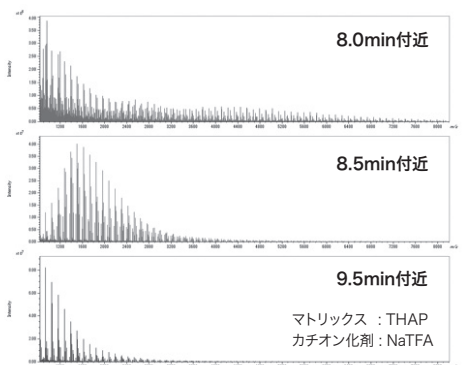
MALDI-MSイメージング測定



GPCからステンレスプレートに直接サンプリングした上からマトリックス溶液とカチオン化剤溶液を混合してスプレーし、MALDI-TOFMSによりマスマイミメージング測定を実施しました。



データは日本電子製JMS-S3000にて取得





『All in all it was all just bricks in the wall』¹⁾

山本 雅博

「バブル崩壊後の日本の経済を日本人自らが選択して新自由主義に改造する方向へと導いていった」²⁾ のとほぼ同時に、日本の学术界においては「選択と集中」により国内では勝ち組と負け組に分かれたが、国際的には日本全体が負け組となってしまった。「日本のメーカーの製品は世界市場から消え、日本の科学技術力は低下の一途で、大学では学生が学問していない、どこか、大学の研究者がろくに学問を修めていない」²⁾ とまで厳しい指摘がなされている。分析化学会の近畿支部の若手の集まりでも、大学は何故こうなったのか？と意見を求められたが、大学にずっと籍をおいていたものとして、責任の一端があることは間違いない。

人、資金、時間という量的なものをご支援いただきたいという学术界からの声は多くの学会誌の巻頭言等で提言されているが、これまでの流れを断ち切らない限りV字回復は望めそうにない。「儲かる大学」、「国立大法人改革等」の政策が矢継ぎ早にでてくるところをみると、この流れは継続し、少子化との相乗効果により学术界は加速度的に^{ちやうらく}凋落していくことになるのかもしれない。

分析化学は、化学（科学）において極めて重要な分野であり、近代科学の手法である「仮説を実験で実証してゆく」ための第一関門をなすものである。したがって、どこの研究室にも既に機器分析装置はあたりまえの存在として既にビルトインされており、多くの研究者は通常のユーザーとして使っていることが多い。そのためであろうか、分析あるいは分析化学は研究者の意識のなかで、最先端あるいは最重要な研究の分野ではないように見られていることさえある。我々分析化学者は、分析手法の原理から装置開発までを担っており、原理のサイエンス、装置のエレクトロニクス、解析の統計分析学等すべてを熟知していないといけない。しかし、ESI マスのイオン化過程のようによくわからないけどもイオン化され実際に分析されているという例もあり、最も大事な原理は完全には確立しているとはいえない。ただ、むしろそこに希望がある。「選択と集中」からたとえ外れたとしても、「生き抜く創造性にこそ希望はある」³⁾ ののではないだろうか？ 閉塞感しかないこの時代に「壁のなかのただの一つのレンガ」¹⁾ にすぎないのか？ それとも自らの壁を壊して多くの人々との交流のなかで something new を創造していくことができるのか？ それが分析化学のポイントであるような気がしてならない。

分析化学会近畿支部では、支部創設 70 周年記念の記念会を 2023 年 6 月末に開催し、支部会員の 1/10 以上が集まって、コロナ後の再会と支部の今後の展望について話し合った。このような機会が、我々が生き抜く創造を生む土台となることを祈願してやまない。

[YAMAMOTO Masahiro, 日本分析化学会近畿支部長, 理事]

- 1) Pink Floyd: *The wall* (1980). (ピンク・フロイドのアルバム「The Wall」の収録曲の一節。“結局すべて、それは壁の中のレンガだった”の和訳がある)。
- 2) 田中宏和：世に倦む日日 (ブログ)「勝ち組」による「負け組」への暴力」2023 年 11 月 8 日。
- 3) 吉見俊哉：“敗者としての東京”，(筑摩書房) (2023)。

機械学習入門

松本 博士

1 機械学習とは

機械学習は、現代の技術で非常に重要な役割を果たしているが、その歴史は意外に古い。機械学習の歴史は20世紀初頭に遡り、進化し始めた統計学が後の発展の基盤となった。1940年代、アラン・チューリングがコンピュータの概念を開発し、将来的にコンピュータが人間のように思考できるかを考察した¹⁾。1950年代、彼はマシンが人間のように思考できるかを判定する「チューリングテスト」を提唱した。1952年、IBMの研究者アーサー・サミュエルが、チェッカー（アメリカンチェス）をプレイするコンピュータプログラムを開発した²⁾。これは、コンピュータが性能を改善するために学習する最初の例とされている。1960年代から1970年代、機械学習の研究はいくつかの異なるアプローチに分かれた。一部の研究者は人間の脳の動作に焦点を当て、脳の神経細胞（ニューロン）を模倣したニューラルネットワークモデルを開発した³⁾⁴⁾。他方、一部の研究者は統計学や確率論に基づいたアプローチに焦点を当てた。1980年代、コンピュータの計算能力が向上し、大量のデータを扱えるようになったことで、機械学習のアルゴリズムの実用化が進んだ。1990年代から2000年代、インターネットの普及によりデータ量が急増し、機械学習の発展を加速させる要因となった。特に、2000年代後半から2010年代、機械学習はスパムメールのフィルタリング、ウェブ検索、広告のターゲティング、音声認識、画像認識など、多くの実用的なアプリケーションに取り入れられた^{5)~8)}。機械学習の歴史は、統計学、コンピュータサイエンス、人工知能、情報工学など、多くの分野と深く結びついている。本稿では、初めて機械学習を学ぶ研究者を対象にその概念や基本的な技術を紹介した後、応用的な技術について記した。そして分析領域への応用例と、よく用いられるツール・プラットフォーム等についても記したので、興味を持った人は試していただきたい。

2 基本的なアルゴリズム

ここでは機械学習で一般的に用いられる基本的なアルゴリズムについて紹介する。これらのアルゴリズムを理解することで、機械学習の様々な問題に対して効果的な解を見つけることが可能となる。

2.1 回帰

回帰とは、データのパターンを解析し、そのパターンを用いて未知のデータを予測する手法の一つである。例えば、家の広さや築年数などの情報から、その家の価格を予測することが可能である。回帰の根本的な考え方は、データ間に存在する「関係」を特定することである。例えば、家の価格は、その家の広さ、築年数、場所などによって変動する。これらの要因と家の価格の間には、特定の「関係」が存在する。回帰分析を用いることで、これらの要因の影響を数値化し、その数値を使って新しいデータの家の価格を予測することが可能になる。

回帰分析には、いくつかの種類があるが、最も基本的で一般的なのが「線形回帰」である。線形回帰は、データの関係が直線的であると仮定し、その直線の方程式を求める方法である。この直線の方程式を用いることで、新しいデータの予測値を計算することができる。ただし、現実のデータは、必ずしも直線的な関係になるとは限らない。そのため、線形回帰だけでは解決できない問題も多く存在する。そのような場合には、決定木、サポートベクターマシン（support vector machine, SVM）、そしてニューラルネットワーク（neural network, NN）を用いることができる。

決定木はデータを特定の基準で分割し、枝分かれさせていき、最終的に葉に分類する。これにより、データの中に潜んでいるパターンや関連性を見つけることができる（図1）。このパターンや関連性を用いて、新しいデータの予測が可能になる。適切な分割基準を選び、過学習に注意することが重要である。

SVMは、データを分析し、分類や回帰の問題を解くための手法である。SVMは、あるデータの集団について、あるグループと別のグループを最もうまく分ける境

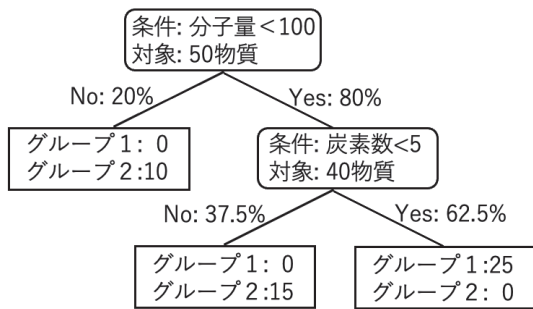


図1 決定木で特徴的なパターンを見いだした例

実験結果に二つの傾向がみられた構造の異なる50種の物質(傾向ごとにグループ1,2と命名し、各グループ25物質で構成)について各物質の特徴をもとに解析. グループ1は分子量<100かつ炭素数<5の特徴を持つ物質からなることが示された.

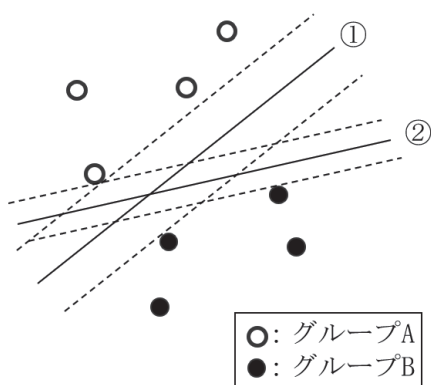


図2 SVMによる境界線の例

①と②は2グループ間で取りうる境界線を示し、各境界のマージンは破線で示した. ②に比べて①のマージンの方が広いため①の境界線が最終的に採用される.

境界線(または境界面)を見つける. SVMの特徴は、この分ける線を見つける際に「マージン」を最大化することである. マージンとは、分ける線から最も近いデータポイントまでの距離を指す. このマージンを最大化することで、新しいデータに対しても、うまく分類ができるモデルを作成することができる(図2). SVMは、線形だけでなく非線形のデータにも適用することができる. これは、特定の計算(カーネルトリック)を行うことで、非線形データを高次元空間に変換し、2次元では非線形のデータも高次元の空間では線形の境界を見つけることで実現される.

NNは、人間の脳が情報を処理する方法にインスパイアされたコンピュータプログラム的一种である. 人間の脳は、たくさんの神経細胞である「ニューロン」で構成されている. これらのニューロンが互いにつながり、情報を送受信することで私たちが考えたり、学んだりすることができる. このように、ニューロンからニューロンへとデータが流れることで、最終的にはデータ間の複雑な関係を把握し、予測を行うことができる(図3).

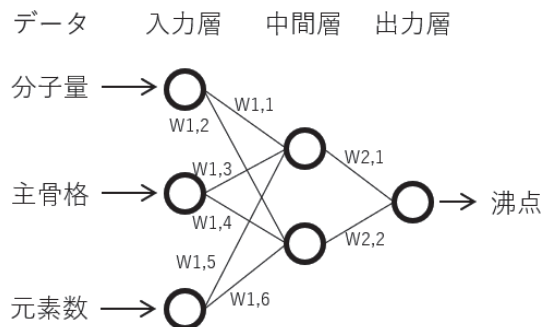


図3 沸点を予測するNNモデルの例

図中の丸印はニューロンを現わす入力したデータ(分子量, 主骨格, 元素数)を基に最適な重み(W)を決定し、沸点を出力する.

回帰分析は、ビジネスや科学研究、経済学など、様々な分野で使われている. 例えば、企業は、過去の売上データから未来の売上を予測するために回帰分析を使う. また、研究者は、気温や湿度などのデータから、農作物の収穫量を予測するために回帰分析を使うことがある. 回帰分析は、データのパターンを見つけ出し、未来を予測するための強力なツールである. ただし、使う際には、データの特性或問題の性質に合わせて、適切な種類の回帰分析を選ぶことが大切である.

2.2 分類

分類とは、データがどのグループに属するかを予測する手法である. 事前に大量のラベル付きデータ(どのグループに属するか事前にわかっているデータ)を使って分類モデルを作成し、そのモデルを使って新しいデータのグループを予測する. 例えば、メールがスパムかそうでないか、画像が犬か猫か、などである. よく用いられる手法としては、決定木、サポートベクターマシン、ナイーブベイズ、k近傍法、ランダムフォレストなどがある.

ナイーブベイズは、学習データを用いて事前確率と条件付き確率を計算し、それらの情報をもとに新しいデータが属する確率が最も高いグループを予測する. ナイーブベイズは、そのシンプルな仕組みにより計算量が少なく、大量のデータを高速に処理することができる. そのため、スパムメールのフィルタリング、文章の分類、顧客のセグメンテーションなど、様々な分野で広く使われている.

k近傍法は、特定のデータがどのカテゴリーに属するかを判定するための、シンプルで直感的な分類手法である. 最初に「k」という値を決める. この「k」は、学習データをプロットした空間において予測したいデータの周辺で最も近い距離に位置するデータの個数を表す. 例えば、kが3の場合、予測したいデータの周辺で最も近い三つのデータを指す. 次に、予測したいデータが入

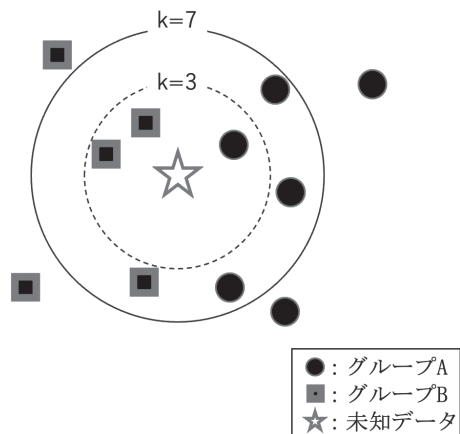


図4 k近傍法で未知データを分類した結果
k=3の時はグループB, k=7の時はグループAに分類された。

力された時、そのデータの周辺で最も近い「k」個のデータを、既存の学習データの中から見つける。そして、その「k」個のデータの中で最も多く存在するカテゴリーを、予測したいデータのグループとして決定する。例えば、kが3で、最も近い三つのデータが、「犬」が二つ、「猫」が一つであれば、予測したいデータのグループは「犬」となる。k近傍法は、そのシンプルさと直感性から、分類問題を解く手法として広く使われている。ただし、データの量が多くなると計算量が増え、計算に時間がかかる欠点がある。また、「k」の値の選択がモデルの性能に大きな影響を与えるため、適切な「k」の値を選ぶことが重要である（図4）。

ランダムフォレストは、決定木を多数作成し、それぞれの決定木でデータを分類する。そして、最も多くの決定木が選んだグループを、最終的な予測結果とする。例えば、ランダムフォレストで生成した100個の決定木のうち、60個の決定木が「晴れ」と予測し、40個の決定木が「雨」と予測した場合、最終的な予測結果は「晴れ」となる。ランダムフォレストのメリットは、多数の決定木を使うことで、一つ一つの決定木の過ちを補うことができ、全体として高い予測精度を得ることができる点である。また、ランダムフォレストは、各決定木の作成において、データの一部をランダムに選び、また、分類に使う特徴もランダムに選ぶため、過学習を防ぐことができる。ただし、本手法は多数の決定木を作成するため、計算量が大きく、計算に時間がかかるという欠点がある。

2.3 クラスタリング

大量のデータをいくつかのグループに分ける方法としてクラスタリングがある。これは、似たようなデータを一緒にグループ化することで、データの中に隠れたパターンを見つけるのに役立つ。スーパーマーケットの販売データを例に考える。販売データには、それぞれの商

品を買ったお客さんの情報が記録されている。このデータをクラスタリングすることで、お客さんをいくつかのグループ、例えば、「子供のいる家庭」、「健康志向の人」、「お菓子好きの人」などのグループに分けることができる。この解析によって、スーパーマーケットは、それぞれのグループに対して適した商品を提供したり、効果的なマーケティングを行ったりすることができる。

クラスタリングは、教師なし学習の一種である。教師なし学習とは、データにラベル（答え）が付いていない場合の学習方法である。クラスタリングのアルゴリズムが、データの特徴を分析し、データを自動的にグループに分ける。

クラスタリングの一般的な方法の一つは、k-means法である。k-means法では、最初に「k」という値を決める。この「k」は、学習データをいくつかのグループに分けるかを表す。例えば、kが3の場合、データは三つのグループに分けられる。次に、学習データの中からランダムに「k」個のデータを選び、それぞれをグループの中心とする。そして、残りのデータは、三つの中心のどれに最も近いかを計算し、その中心のグループに分類する。これを繰り返し行い、最終的にデータがグループに分類される。

以上のように、クラスタリングは、似たようなデータを一緒にグループ化することで、データの中に隠れたパターンを見つけるのに役立つ方法である。ただし、適切な「k」の値を選ぶことが重要であり、また、クラスタリングの結果は、データの特徴によって異なるため、結果の解釈に注意が必要である。

2.4 次元削減

次元削減は、データの特徴を減らす方法である。これは、大量のデータを扱う際に、データを簡単に分析しやすくするために使われる。あるお店の売上データを例に考える。このデータには、商品の色、サイズ、価格、販売数、季節など、たくさんの特徴が含まれている。しかし、これらの特徴の中でも、売上に影響を与える重要な特徴と、それほど重要でない特徴がある。次元削減を使うことで、データの特徴の中でも、最も重要な特徴だけを取り出し、分析の際に使う特徴を減らすことができる。次元削減の一般的な方法の一つは、主成分分析（principal component analysis, PCA）である。PCAでは、データの特徴の中でも、最も重要な特徴を取り出す。これによって、データの特徴を減らすことができる。また、PCAは、データの特徴が多く、データの分布が複雑な場合にも、データを簡単に理解するのに役立つ。ただし、次元削減を行う際には、重要な特徴を取り除かないよう注意が必要である（図5）。

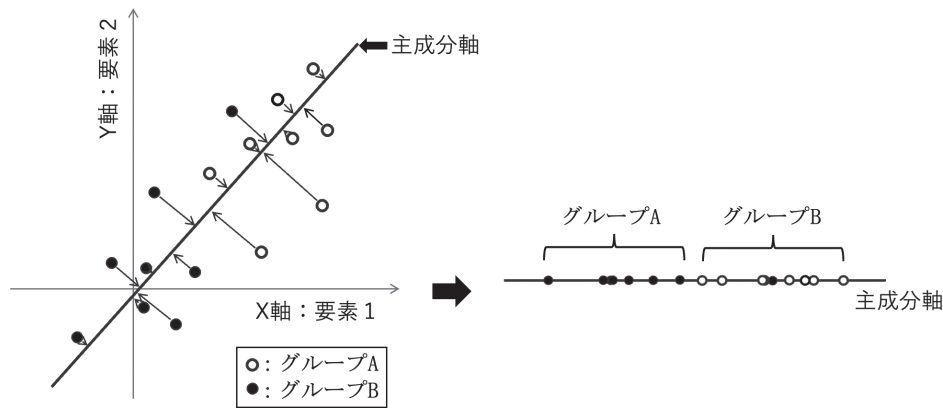


図5 PCAの解析結果例

要素1と2からなる二次元データを主成分軸に写し、1次元に次元を削減したまた、次元が減っても元のデータが持つ特徴（ここではグループAとBの分布）は保存されている。

2.5 最適化

最適化とは、予測モデルを最良の状態にするための方法を見つけることである。前述した機械学習のアルゴリズム（今後モデルと呼ぶ）は、色々な設定値を持っている（k近傍法やk-means法のkもその一つ）。これらの設定値をうまく選ぶことで、モデルの性能が良くなる。最適化の目的は、これらの設定値をうまく選び、モデルの性能を最も良くすることである。最適化は、以下のように進行する。まず、モデルのパラメータを初期設定する。次に、パラメータの値を少しずつ変えながら、モデルの性能が改善されるかどうかを確認する。性能が改善される場合は、そのパラメータで最適化の検討を進める。性能が改善されない場合は、他のパラメータを試す。そして、モデルの性能が十分に良くなったと判断された場合、最適化を終了する。このプロセスを通じて、私たちはモデルの性能を向上させ、より良い予測結果を得ることができる。

2.6 画像認識

画像認識はコンピューターが写真や映像の中の物体や人物、場面などを認識する技術で、スマートフォンのカメラアプリで顔を認識してピントを合わせる機能や、セキュリティカメラが不審な動きを検出する機能などに使われている。一方、機械学習はコンピューターに大量のデータを与え、そのデータの中にあるパターンを学ばせる方法で、コンピューターは与えられたデータから学んだ知識を使って、新しいデータに対しても適切な判断や予測を行うことができる。画像認識の技術はこの機械学習の方法を使って進化しており、コンピューターに大量の写真や映像を与え、その中にある物体や人物、場面などのパターンを学ばせることで、新しい写真や映像の中の物体や人物、場面などを認識することができる。

3 データの前処理

機械学習モデルの性能は、供給されるデータの質に大きく依存する。そのため、データの前処理は、機械学習を用いた研究において非常に重要なステップである。以下に、データの前処理の重要性についていくつかのポイントを挙げる。

3.1 欠損値の取り扱い

欠損値は、データセットの特定の項目やフィールドが空白または不在の場合に発生する。これは、データ収集過程でのエラーや、情報が利用できなかったためなど、様々な理由で発生する。

データの前処理の重要なステップの一つである欠損値の取り扱いには、いくつかの一般的な方法がある。最も簡単な方法は、特定の行または列に欠損値が含まれている場合、その行または列を完全に削除することである。ただし、この方法ではデータが大量に失われる可能性がある。次に、欠損値をその列の平均値、中央値、またはモード（最頻値）で置き換える方法がある。これは数値データに対して一般的に使用される。また、前方埋め（前の行の値で欠損値を埋める）または後方埋め（次の行の値で欠損値を埋める）を使用して、欠損値を埋めることもできる。さらに、欠損値を含む列の他の値から、欠損値を予測するための統計的手法を使用する補間の方法がある。その他、欠損値をゼロまたは特定の値で置き換える方法もある。これらの方法はそれぞれ長所と短所を持っているため、データの性質、欠損値の発生パターン、データセットのサイズによって、適切な方法を選択するための慎重な検討が必要である。

3.2 ノイズの除去

ノイズの除去は、データをクリーニングし、不要な変動やエラーを取り除く過程である。ノイズは、センサー

エラー、人為的なミス、データの変換や伝送中のエラーなど、多くの理由でデータに含まれる。ノイズの除去は、データの質を向上させ、機械学習モデルのパフォーマンスを向上させるために重要である。ノイズの除去にはいくつかの手法がある。一つ目は、フィルタリングである。これは、データの平滑化を行う過程で、突出した値や不規則な変動を取り除く。例えば、移動平均フィルタは、データポイントの周囲の値の平均を取ることで、ノイズを減らす。二つ目は、データ変換である。これは、データを別の形式に変換することで、ノイズを取り除く方法である。例えば、対数変換は、データのスケールを変更し、ノイズを減らす効果がある。ノイズの除去の後には、データの品質が向上したことを確認するため、可視化や統計的な分析を行うことが重要である。

3.3 スケーリング

スケーリングとは、データの範囲を変更し、データの各特徴量が同じ尺度で比較されることを保証するプロセスである。機械学習の多くのアルゴリズムは、データの特徴量が同じ尺度であることを前提としている。例えば、k近傍法、サポートベクターマシン、ニューラルネットワークなどがそれにあたる。データの特徴量が異なる尺度で混在すると、尺度が大きい特徴量が、モデルの学習において過度に影響を与えることになる。例えば、ある特徴量の範囲が0から1で、他の特徴量の範囲が0から1000である場合、範囲が0から1000の特徴量が、モデルの学習において、過度に影響を与えることになる。主な手法として正規化と標準化がある。正規化はデータの範囲を0から1に変更する。具体的には、データの各特徴量から、その特徴量の最小値を引き、最大値と最小値の差で割る。標準化はデータの平均を0、標準偏差を1に変更する。具体的には、データの各特徴量から、その特徴量の平均を引き、標準偏差で割る。スケーリングの後には、データの分布を確認し、適切にスケーリングされたことを確認する。スケーリングは、データの前処理の一部であり、他の前処理の手順と組み合わせられて行われることが一般的である。

3.4 特徴選択

特徴選択は、データの中から重要な情報だけを取り出す作業である。これを行うことで、計算量を減らし、且つ予測モデルの性能を良くすることができる。

再帰的特徴消去 (recursive feature elimination, RFE) は、データの中から重要な特徴だけを選び出す方法の一つである。学習データにはたくさんの特徴が含まれているが、その中でも特定の特徴だけが目的の予測に重要で、他はあまり重要でない、ということがよくある。しかし、どの特徴が重要で、どの特徴が重要でないかを人間が一つ一つ確認するのは非常に大変である。そこで、

RFEを使う。RFEは、コンピューターにデータの特徴を選ばせる方法の一つである。まず、RFEは、学習データのすべての特徴を使ってモデルを作成する。そして、そのモデルの中で、それぞれの特徴の重要度を計算する。次に、一番重要度が低い特徴をデータから取り除く。そして、残った特徴だけを使って、再度モデルを作成する。そして、またそれぞれの特徴の重要度を計算し、一番重要度が低い特徴を取り除く。これを繰り返し、指定した数の特徴だけを残すまで行う。そして、その選ばれた特徴だけを使って、最終的なモデルを作成する。RFEは、人間が特徴を選ぶ手間を省き、コンピューターに自動的に選ばせることができるため、非常に便利な方法である。ただし、どの特徴が重要であるかは、データやモデルによって異なるため、RFEを使った結果をそのまま信じるのではなく、必ず他の方法とも比較して、最終的な判断を下すことが大切である。

LASSO回帰は、モデルの中で、予測に用いる各特徴の重要度に応じて係数を変化させ、重要ではない特徴の影響を小さくすることで、モデルの計算から不要な特徴を取り除く。デメリットとしては、LASSO回帰に入力するパラメータにより、各特徴の重要度が変化するため、選択される特徴が変わってしまう点が挙げられる。また、学習データ中に同じ傾向を示す特徴が複数存在する場合、本手法はその中から一つしか選ばない。これは、本当は重要な特徴が取り除かれる可能性があることを意味する。

4 モデルの評価とチューニング

4.1 モデルの評価

モデルの評価は、作成したモデルがどれほど良い予測をするかを確認するための非常に重要な段階である。モデルを評価する際、まず、モデルの学習に使用していないデータ、つまり、テストデータを使用してモデルの性能を評価する。これは、モデルが未知の新しいデータである必要がある。次に、評価指標を使用してモデルの性能を数値化する。様々な評価指標があるが、問題の性質や目的によって、最適な評価指標が異なる。たとえば、分類問題の場合、一般的な評価指標には、正確度、適合率、再現率、F1スコアなどがある。一方、回帰問題の場合、平均絶対誤差、平均二乗誤差、R2スコア (決定係数) などがよく使用される。さらに、交差検証という手法を使用して、データを複数のサブセットに分割し、それぞれのサブセットをテストデータとして使用してモデルの性能を評価することもある。たとえば、k分割交差検証では、データをk個のサブセットに分割し、k回モデルの評価を行い、k回の評価結果の平均を取ってモデルの性能を評価する。モデルの評価は、モデルの性能を適切に評価し、過学習や未学習を避けるために重要である。

4.2 チューニング

モデルのチューニングとは、モデルの性能を向上させるために、モデルのパラメータを調整することである。モデルには、学習時にデータから学習されるパラメータと、事前に設定されるハイパーパラメータの2種類のパラメータがある。モデルのチューニングでは、主にハイパーパラメータを調整する。ハイパーパラメータは、モデルの学習方法を制御するためのパラメータで、例えば、決定木の深さ、ニューラルネットワークの層の数やノードの数、サポートベクターマシンの正則化項の強さなどがある。ハイパーパラメータの値によって、モデルの性能は大きく変わる。ハイパーパラメータの最適な値を探すために、いくつかの方法がある。グリッドサーチは、あらかじめ設定したハイパーパラメータの値の組み合わせをすべて試し、最も性能の良いハイパーパラメータの組み合わせを選ぶ。ランダムサーチは、ハイパーパラメータの値をランダムに選び、性能を評価し、最も性能の良いハイパーパラメータの組み合わせを選ぶ。ベイズ最適化は、ハイパーパラメータの値を順次選び、それまでの評価結果から次に試すハイパーパラメータの値を決定し、最も性能の良いハイパーパラメータの組み合わせを選ぶ。モデルのチューニングは、モデルの性能を最大化するために欠かせない作業であるが、計算リソースや時間がかかるため、適切な方法を選び、効率的に進めることが大切である。

5 機械学習のフレームワークとツール

機械学習のフレームワークとツールは、機械学習モデルの開発、トレーニング、評価を効率的に行うためのソフトウェアツールである。一般的な機械学習のフレームワークとツールについて紹介する。

5.1 TensorFlow

Googleが開発したオープンソースの機械学習ライブラリである。機械学習のモデルを構築、トレーニング、実用環境へ展開するための多くのツールが用意されている。

5.2 Keras

TensorFlowの上に構築された、NNのライブラリである。モデルの構築、トレーニング、評価をシンプルに行える。NNモデルを作成するための多くのビルディングブロック（例：層、損失関数、最適化ツールなど）を提供しており、これらを自由に組み合わせることができる。

5.3 PyTorch

Facebookが開発したオープンソースの機械学習ライブラリである。動的計算グラフを使用しており、デバッ

グやモデルの変更が容易になる。

5.4 Scikit-learn

Scikit-learnは、Pythonのオープンソースライブラリで、機械学習の分類、回帰、クラスタリング、次元削減、モデル選択、前処理といったさまざまなアルゴリズムを実装し、効率的に利用できるようになっている。

5.5 Pandas

Pythonのデータ解析ライブラリで、多くの便利な機能を提供している。まず、データフレームという2次元のラベル付きデータ構造を中心に、データの読み書き、前処理、結合、統計解析を効率的に行うことができる。具体的には、CSV、エクセル、SQLデータベース、JSONなど様々なファイル形式のデータを簡単に読み込み、それらの形式でデータを書き出すことができる。また、データの欠損値を補完したり、データをフィルタリング、並び替え、集計したりといった前処理も簡単に行える。さらに、異なるデータソースから得られたデータフレーム同士をキーによって結合し、効率的に分析することができる。平均、標準偏差、最大値、最小値などの基本的な統計量の計算やヒストグラムの作成など、統計解析も行える。

5.6 NumPy

Pythonで数値計算を効率的に行うためのライブラリである。このライブラリを使うことで高速で効率的な数値計算が可能となる。NumPyは、数値データを効率的に扱うための多次元配列(ndarray)と、これに対する数学的な演算を用意している。たとえば、ベクトルや行列のような数値データを配列として作成し、これらの配列に対して、加算、減算、乗算、除算といった基本的な演算だけでなく、行列の積、逆行列、固有値、統計量の計算、ソートなどの高度な演算も効率的に行うことができる。また、ランダムな数の生成、フーリエ変換、線形代数の計算などの機能も提供されている。

6 分析領域への応用例

分析化学の分野においても機械学習を活用した研究例が報告されている。Melnikovらは、メタボロミクスの分析プラットフォームとして使用されている液体クロマトグラフィー質量分析計(LC-MS)のデータ処理に関連した研究について報告している(9)。LC-MSの生データには何千ものMSスペクトルが含まれているため、手作業によるデータ処理はほぼ不可能である。著者らはLC-MSデータのピーク検出と統合の問題を解決するための新しいアルゴリズム peakonlyを開発した。このアルゴリズムでは、畳み込みニューラルネットワーク(convolutional neural network, CNN)を用いることで

未処理の LC-MS データにおけるピーク検出と統合の問題を解決した。また、Endersらは、気相 FTIR スペクトル中の官能基の存在を同定するために、CNNを用いた機械学習アルゴリズムにより、一般化可能なモデルを開発した¹⁰⁾。NIST スペクトルデータベース内の 8728 個の気相有機分子から強度-波数データを取得し、データを画像に変換した。15 種類の官能基モデルにより、未知のスペクトルを効果的に分類し、スペクトルの解釈を容易に行うことが可能となった。

7 その他の考慮すべきこと

機械学習の利用には、数々の倫理的な問題が関連している。まず、データのプライバシーは非常に重要なポイントで、人々の個人情報を取り扱う際は、そのデータの安全性とプライバシーを確保することが求められる。また、データのバイアスも重要な問題で、もしデータが偏っていれば、そのデータを基に学習したモデルも偏った結果を出す恐れがある。さらに、モデルが意図しない結果を出す可能性も考慮する必要がある。例えば、自動運転車の場合、事故を起こす可能性があるという問題が挙げられる。また、モデルがどのように結果を導いたのかを人間に分かりやすく説明すること、つまり、モデルの説明可能性も重要なポイントである。そして、最後に、モデルの使用目的についても考慮する必要がある。悪意を持ってモデルが使われる可能性もあるため、そのリスクについても考慮する必要がある。

8 最後に

近年、機械学習の学習環境は著しく進化している。かつては、機械学習を学びたいと考えても、高性能なコンピューター、大量のデータ、専門知識が必要で、アクセスの障壁が高かったが、現在では YouTube の解説動画を通じて気軽に学べるようになった。さらに、Google や Microsoft などの大手企業も、機械学習に関連する無料教材を公開している¹¹⁾¹²⁾。また、Kaggle という実践的な学習ができるプラットフォームも利用可能である¹³⁾。Kaggle では、機械学習のコンペティションが提供され、

実際のデータを使ってモデルを作成し、他の参加者と競いながら学べる。さらに、Google Colaboratory のようなクラウドベースの解析環境も提供されている¹⁴⁾。これらの環境を利用すれば、高性能なコンピューターを持っていなくても、インターネットさえあれば、クラウド上で機械学習のモデルを学ぶことや実践することが可能である。

文 献

- 1) A. M. Turing : *Mind*, **59**, 433 (1950).
- 2) A. L. Samuel : *IBM Journal*, **3**, 211 (1959).
- 3) F. Rosenblatt : "Principles of Xenrodyntntics : Perceptrons end the Theory of Bruin Mechanisms". (1961), (Spartan Books), (Washington, D. C.).
- 4) H. D. Block : *Rev. mod. Phys.*, **34**, 123 (1962).
- 5) B. Enrico, A. Bryl : *Artif. Intell. Rev.*, **29**, 63 (2008).
- 6) A. Lacerda, M. Cristo, M. A. Gonçalves, W. Fan, N. Ziviani, B. Ribeiro-Neto : *In Proceedings of the 29th annual international ACM SIGIR conference on Research and development in information retrieval*, p. 549 (2006).
- 7) S. K. Gaikwad, B. W. Gawali, P. Yannawar : *Int J. Comput. Appl.*, **10**, 16 (2010).
- 8) F. Khan, R. K. Krishna : *Int. j. eng. res.gen. sci.*, **3**, 2, (2015).
- 9) A. D. Melnikov, Y. P. Tsentlovich, V. V. Yanshole : *Anal. Chem.*, **92**, 588 (2020).
- 10) A. A. Enders, N. M. North, C. M. Fensore, J. Velez-Alvarez, H. C. Allen : *Anal. Chem.*, **93**, 9711 (2021).
- 11) Tensorflow : <<https://www.tensorflow.org/>>, (accessed 2023. 10. 06).
- 12) Microsoft, <<https://github.com/microsoft/ML-For-Beginners>>, (accessed 2023. 10. 06).
- 13) Kaggle : <<https://www.kaggle.com/>>, (accessed 2023. 10. 06).
- 14) Google Colaboratory : <<https://colab.google/>>, (accessed 2023. 10. 02).



松本 博士 (MATSUMOTO Hiroshi)
ダイキン工業株式会社化学事業部プロセス
技術部 (〒314-0255 茨城県神栖市砂山
21). 名古屋市立大学大学院医学研究科博
士課程修了。博士 (医学)。

走査電子誘電率顕微鏡

1 はじめに

水溶液中の生物試料や有機材料、ナノ粒子を直接観察し分析することは、生物機能の解明や新たな高機能材料の開発に結び付く。一般的な光学顕微鏡では、溶液中の試料を観察可能であるが、その空間分解能は光の回折限界により約 200 nm に制限される。一方、電子顕微鏡の空間分解能は数 nm 以下と極めて高く、ナノレベルの微細構造も観察可能である。しかし、プローブとして電子線を使用するため、^{きょうたい}筐体内部を真空にする必要があり、溶液中の試料をそのまま導入し観察することは困難である。そのため、溶液試料を大気圧状態で封入し観察する液体観察用の試料ホルダが開発されてきた^{1)~3)}。一般的に金属粒子等の観察では、試料に直接電子線を照射し高いコントラストで観察することが可能である。しかし、有機材料や生物試料では水と比重が近く、高いコントラストでの観察は困難である。さらに、電子線が直接照射されるため電子線ダメージも大きな問題となる。こうした問題を克服するため、著者らの研究グループでは、電子線の照射に伴う電位変化を検出し観察する走査電子誘電率顕微鏡 (SE-ADM) の開発を進めている⁴⁾⁵⁾。本稿では、この装置の概要について解説する。

2 走査電子誘電率顕微鏡の概要

従来の透過電子や反射電子による観察方法では、試料に電子線を直接照射することが必要となり、電子線ダメージや低コントラストの問題が生じる。これまで著者らは、低加速の電子線を観察窓の薄膜に照射・吸収させて、この電位変化を検出することで、水溶液中の試料の誘電率の違いを観察する新たな観察技術の開発を行ってきた (図 1)⁴⁾⁵⁾。本装置では、電子線を試料ホルダ上部の窒化シリコン (SiN) 薄膜のタングステン層に照射し、薄膜内に局所的な電位変化を生じさせる。この電位変化は、水溶液中の試料を透過し、下側の測定端子により検出される。こうした電位変化の透過状況は、物質の比誘電率により異なる。水は比誘電率が 80 と高いため電位変化を良く透過する。一方、生物試料や有機材料は、2 ~ 3 と低く透過が阻害される⁴⁾⁵⁾。こうした比誘電率に起因する電位変化の透過の違いを検出することで、極めて高いコントラストで水溶液中の試料の直接観察が可能となる (図 1)。また、入射電子は、ほぼすべてタングステン層と SiN 薄膜で散乱・吸収されるため、試料への電子線ダメージも極めて少ない⁴⁾⁵⁾。著者らのグルー

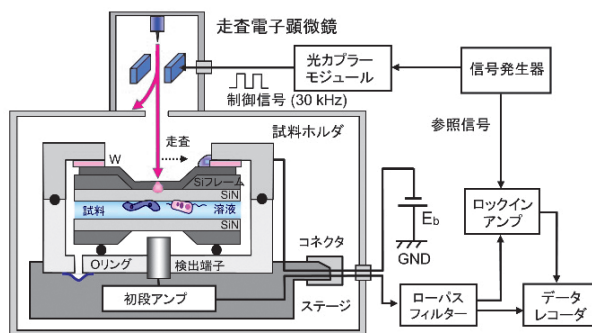


図 1 SE-ADM の概要
(文献 5 より一部改変して転載)

プでは、SE-ADM を用いて、溶液中の生物試料やナノ粒子等を直接観察し、その構造や分散状態の解析を進めて来た。以下に本方法による観察結果を紹介する。

3 溶液中のナノ粒子の直接観察

著者らはこれまで、SE-ADM を用いて水溶液中のナノ粒子の直接観察を行ってきた。例えば、大気中の汚染物質である PM2.5 は、カーボンや金属酸化物、有機物が凝集した粒子である。こうした PM2.5 を溶液中で直接観察したところ、100 nm 程の小さな粒子が葡萄の房状に凝集していることが確認された (図 2a, b)⁶⁾。PM2.5 は炭素や酸化金属等の比較的軽い元素が主成分のため、従来の方法では水溶液中で直接観察することは困難であった。これ以外にも直径が数 μm で厚さが数 nm と極めて薄い粘土粒子を水溶液中で直接観察することにも成功している⁷⁾。この観察では粘土粒子のシート状の構造

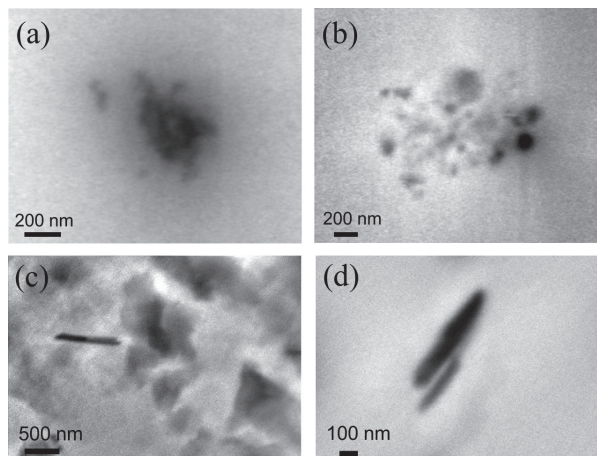


図 2 SE-ADM による溶液中の PM2.5 と粘土粒子の直接観察
(a), (b) 溶液中の PM2.5 の観察画像, (c), (d) 溶液中の粘土粒子の画像 (文献 6, 7 より一部改変して転載)。

だけでなく、巻物状に巻き込まれて円筒形をした粘土粒子も観察された (図 2c, d)⁷⁾。

4 生物試料の液中観察

生物試料を電子顕微鏡で観察するためには、試料の固定化と脱水処理、さらには重金属による染色等の様々な処理が必要となる。一方、SE-ADM を用いることでこうした処理を行う必要が無く、直接溶液の状態を観察することが可能となる。細胞機能を解析するためには、培養液中の生きた細胞を直接観察することが望ましい。著者らはこれまで培養細胞を SE-ADM により観察するための独自の培養ディッシュを開発し、生きた細胞を直接高分解能で観察することに成功した⁸⁾⁹⁾。市販の培養ディッシュ下部の中央部を四角く切り抜き、ここに SiN 薄膜をはめ込む形で付着させ細胞を培養する⁸⁾。これにより、SiN 薄膜上に細胞が培養され、ほぼ一層の細胞シート状に増殖する。培養細胞を観察するには、ディッシュ下部の SiN 薄膜をアルミホルダごと取り外し、上下反転させた後に培養液を含む形で下部の SiN 薄膜の間に挟み込む。この状態で密閉し、電顕内部に設置し SE-ADM による観察を行った⁸⁾⁹⁾。図 3 は、上皮細胞を SiN 膜上に培養し、後から PM2.5 を添加した時の細胞の状態を観察した結果である⁶⁾。細胞核は、直径が 10 μm 程の楕円形をしており、その周辺に複雑な細胞内部の微細構造が観察された (図 3a, b)⁶⁾。細胞核の周辺には、通常の細胞では見られない黒い粒子の凝集体が多数観察される。こうした箇所を一万倍の高倍率で観察すると PM2.5 の黒い粒子が細胞内の膜構造により包み込まれていることが確認された (図 3c, d)⁶⁾。これ以外にも骨を形成する骨芽細胞やメラニン色素を生成する細胞の直接観察を行い細胞機能の解析を進めている¹⁰⁾¹¹⁾。

さらに著者らは、細胞生物由来試料として牛乳の直接

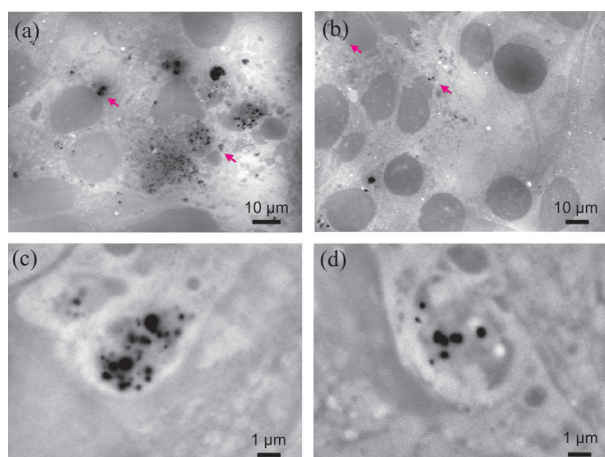


図 3 SE-ADM による培養細胞の直接観察

(a), (b) 培養細胞に PM2.5 を添加した観察結果, (c), (d) 細胞内の PM2.5 粒子の画像 (文献 6 より一部改変して転載)。

観察を行った。通常の牛乳は、牛乳脂肪とタンパク質を多く含むカゼインミセルが水溶液に懸濁した状態となっている¹²⁾¹³⁾。SE-ADM を用いることで、こうした脂質やタンパク質の粒子が懸濁されたエマルジョン試料を直接観察することが可能となる¹⁴⁾。

5 おわりに

本稿では、溶液中の様々な試料を解析するための新たな観察方法として、SE-ADM の概要とその観察結果を報告した。本システムでは、溶液中の非染色・非固定の培養細胞やバクテリア、エマルジョン等をナノレベルの高分解能で直接観察することが可能である。SE-ADM では、電子線を試料に直接照射しないため、電子線ダメージを低く抑えることができる。さらに溶液中の生物試料を極めて高いコントラストで観察が可能である。空間分解能も 4.5 nm まで向上しており、液中試料を高分解能で観察することができる。最近では、SE-ADM をベースに交流のインピーダンス成分を計測可能な走査電子インピーダンス顕微鏡の開発も並行して進めている¹⁵⁾¹⁶⁾。この方法では、入力信号の周波数を変化させることで、インピーダンスの周波数スペクトル成分を解析でき、組成分析への応用が期待される。本方法を用いることで溶液中の有機材料やナノ粒子、油液中改質剤等の観察や分析への活用が期待される。

文 献

- 1) F. Nagata, I. Ishikawa : *Jpn. J. Appl. Phys.*, **11**, 1239 (1972).
- 2) D.F. Parsons : *Science*, **186**, 407 (1974).
- 3) S. Thiberge, A. Nechushtan, D. Sprinzak, O. Gileadi, V. Behar, O. Zik, Y. Chowes, S. Michaeli, J. Schlessinger, W. Moses : *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, **101**, 3346 (2004).
- 4) T. Ogura : *PLOS ONE*, **9**, e92780 (2014).
- 5) T. Ogura : *Biochem. Biophys. Res. Commun.*, **459**, 521 (2015).
- 6) T. Okada, T. Iwayama, S. Murakami, M. Torimura, T. Ogura : *Sci. Rep.*, **11**, 228 (2021).
- 7) T. Ogura, T. Okada, M. Hatano, M. Nakamura, T. Agemura : *Microscopy & Microanalysis*, **29**, 1037 (2023).
- 8) T. Okada, T. Ogura : *Sci. Rep.*, **6**, 29169 (2016).
- 9) T. Okada, T. Ogura : *Sci. Rep.*, **7**, 43025 (2017).
- 10) T. Iwayama, T. Okada, T. Ueda, K. Tomita, S. Matsumoto, M. Takedachi, S. Wakisaka, T. Noda, T. Ogura, T. Okano, P. Fratzi, T. Ogura, S. Murakami : *Science Advances*, **5**, eaax0672 (2019).
- 11) T. Okada, T. Iwayama, T. Ogura, S. Murakami, T. Ogura : *Comp. Struct. Biotech. J.*, **21**, 506 (2023).
- 12) S. Gallier, D. Gragson, R. Jimenez-Flores, D. Everett : *J. Dairy Sci.*, **58**, 4350 (2010).
- 13) D. J. McMahon, B. S. Oommen : *J. Agric. Food Chem.*, **91**, 1709 (2008).
- 14) T. Ogura, T. Okada : *Biochem. Biophys. Res. Commun.*, **491**, 1021 (2017).
- 15) T. Ogura : *PLOS ONE*, **14**, e0221296 (2019).
- 16) T. Ogura : *PLOS ONE*, **17**, e0263098 (2021).

[国立研究開発法人産業技術総合研究所 小椋 俊彦]

鉛同位体比を用いた 大気エアロゾルの発生源解析



山本 祐平

1 はじめに

PM2.5 に代表される大気エアロゾルは、健康影響が懸念され、その発生源を把握することは対策に必須である¹⁾。大気エアロゾルのうち蓄積モードと呼ばれる粒径 0.1~2 μm の粒子は、滞留時間が長いこと長距離輸送される。蓄積モードの粒子は人為起源が多く、環境分析上重要な研究対象である。本稿では、大気エアロゾルの発生源解析ツールとして用いられる鉛同位体比について、最近の研究例を踏まえながら基本的な考え方を紹介する。

鉛は ²⁰⁴Pb, ²⁰⁶Pb, ²⁰⁷Pb, ²⁰⁸Pb の安定同位体を持つ。一般に原子番号の大きい元素の同位体比は、相対質量差が小さいため変動幅が小さくなるが、鉛は ²⁰⁴Pb 以外放射壊変由来であるため同位体比の変動幅が大きい。また同位体分別が質量数に依存しないため、例えば ²⁰⁷Pb/²⁰⁶Pb と ²⁰⁸Pb/²⁰⁶Pb が独立の変数として扱える。そのため異同識別のトレーサーとして適している。

大気エアロゾル中の鉛濃度は 0.1~100 μg m⁻³ 程度で、微量な成分である。鉛の大気への主な排出源は化石燃料燃焼、金属精錬、ゴミ焼却など人為活動に集中している。鉛は輸送途上で化学種の変化や分別が起こりにくいこと、発生源の情報が保持されやすい。以上の理由により鉛同位体比は人為起源大気エアロゾルの発生源解析に有用である²⁾。

2 寄与率推定

複数の発生源からの寄与を持つ未知試料中の任意の成分 Y_j の組成は以下の式で記述できる³⁾。

$$Y_j = \sum_k p_k \mu_{jk} \dots \dots \dots (1)$$

ここで μ_{jk} は発生源が持つ成分の値で、p_k は各発生源の寄与率である。この式が成立するためには、(i) すべて

の発生源の μ_{jk} が既知である、(ii) 輸送途中で成分のロスがない、(iii) μ_{jk} は一定である、(iv) 各成分の p_k の総和は一定である、(v) 各発生源の μ_{jk} は互いに異なる値を持つことが必要である。これらが満たされた条件下で p_k を決定することが発生源解析の基本的な原理である。しかし大気エアロゾルの鉛同位体比では上記の条件が満たされないケースは多く、寄与率の計算に不確かさが含まれる。

最も単純な手法は、2種の鉛同位体比の数値比較による定性的な寄与の示唆である。(図 1a) 同位体測定に誘導結合プラズマ質量分析計 (ICP-MS) を使う場合、相対的に測定精度が低い。特に ²⁰⁴Pb は存在割合が低く且つ ²⁰⁴Hg の質量干渉があるため深刻である。近年では、リアクションセルや多重四重極を用いた干渉イオン除去技術の向上により ICP-MS でも ²⁰⁴Pb の測定精度が向上している⁴⁾。

マルチコレクター型 (MC) ICP-MS や表面電離型質量分析計 (TIMS) を用いて精度良く鉛同位体比を得られる場合、次に課題となるのは、寄与のある発生源が既知である点である。大気エアロゾルについてすべての発生源が明確であることは稀だが、有力な発生源が近距離にある場合、寄与の小さい発生源を無視して単純化できる。また複数の類似した発生源の μ_{jk} を平均化して数を減じて単純化する例もある⁵⁾。考慮する発生源数が少ない場合、独立した二つの同位体比が同じ寄与率で未知試料の同位体比を構成するという考えに基づく指紋法が有効である。

$$\left(\frac{^{207}\text{Pb}}{^{206}\text{Pb}}\right)_{\text{sample}} = p_1 \left(\frac{^{207}\text{Pb}}{^{206}\text{Pb}}\right)_1 + p_2 \left(\frac{^{207}\text{Pb}}{^{206}\text{Pb}}\right)_2 \dots \dots \dots (2)$$

$$\left(\frac{^{208}\text{Pb}}{^{206}\text{Pb}}\right)_{\text{sample}} = p_1 \left(\frac{^{208}\text{Pb}}{^{206}\text{Pb}}\right)_1 + p_2 \left(\frac{^{208}\text{Pb}}{^{206}\text{Pb}}\right)_2 \dots \dots \dots (3)$$

$$p_1 + p_2 \dots + p_i = 1 \dots \dots \dots (4)$$

ここで (²⁰⁷Pb/²⁰⁶Pb)_i は任意の発生源の同位体比であり、p_i は発生源からの寄与率である。存在割合の大きい ²⁰⁶Pb, ²⁰⁷Pb, ²⁰⁸Pb が用いられることが多い。二つの比によるダイアグラム上で、未知試料の同位体比は理想的には発生源の同位体比が描く図形の内部にプロットされ

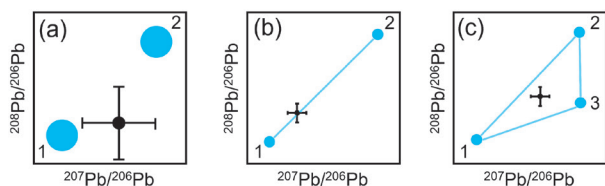


図 1 鉛同位体比 (a) 定性的な寄与の示唆, (b) 二つの発生源から寄与, (c) 三つの発生源からの寄与
黒丸：未知試料。青丸：発生源。

Source analysis of atmospheric aerosols using lead isotopes.

る。発生源の数が二つであれば直線、三つであれば三角形となる (図 1b, c)。

2.1 発生源の同位体比に関する注意点

長距離輸送の寄与が無視できない場合、風上に位置する地点の大気エアロゾルの鉛同位体比を発生源の値として使用する。一般には、後方流跡線解析⁶⁾を用いて空気塊の移動経路を推計し、経路上の都市について大気エアロゾル中の鉛同位体比の文献値を収集する。日本が観測地点である場合、中国、韓国、ロシアの都市大気が対象となる。このとき注意すべき点として大気エアロゾルの鉛同位体比は時間的に変動する値であること、エアロゾルの採取・分析手法によって鉛同位体比にバイアスがかかることが挙げられる。

大気相は気象条件や人為活動の変動により定常状態にないため、どのような時間スケールであっても変動を伴う観測値を示す。一方、大気エアロゾルは任意の期間で採取され、その鉛同位体比は採取期間の平均化した値を示す。短期的な変動は試料数が多くなれば変動を把握でき、適切な代表値を発生源の同位体比として選択できる。他方、年スケールの長期的変動には、環境政策の転換のような政治的要因と、エネルギーシフトのような経済的要因が反映される。例として2000年を境に中国では有鉛ガソリンが禁止され、大気エアロゾル中の鉛の主な発生源がガソリン燃焼から石炭燃焼にシフトしていった。それに伴い鉛同位体比がシフトしたことが報告されている⁷⁾。したがって寄与率算出に年代の離れた文献値を用いることは適切でない。また金属精錬が盛んな都市では、鉛鉱石の同位体比が大気エアロゾルに影響することが報告されている⁸⁾。

大気エアロゾルの地表面への降下は、水分を伴う湿性沈着と伴わない乾性沈着に大別され、それぞれの採取・分析手法は異なる。この沈着の種別、粒径にも注意を払うべきである。湿性沈着試料は、採取された溶液試料をメンブレンフィルターでろ過したろ液を分析することが一般的である。一方乾性沈着試料は、分級装置によって粒径別に分けられた後にフィルター上に捕集された粒子をバルク分析することが多い。粒径分類はPM_{2.5}、PM₁₀、全粒子と様々である。エアロゾルの粒径と水溶性は発生源と密接に関連しており、人為起源エアロゾルは相対的に粒径が小さく水溶性が高い。そのため沈着の種別、粒径が同じデータを用いることが理想的である。しかし完全に同じ条件のデータを得ることは困難であり、なるべく条件の近いものを採用する機会が多い。その場合は種別、粒径によって鉛同位体比にバイアスがかかることを考慮する必要がある。試料採取と分析の容易さから乾性沈着の報告例が多く、湿性沈着のデータは相対的に少ない。

2.2 統計的手法による発生源解析

考慮すべき発生源が多く、発生源の鉛同位体比が変動を持つ場合、指紋法の適用は難しい。その場合でもなるべく信頼性の高い発生源解析を行うために、統計的手法を用いた寄与率推定が用いられる。Chenら⁵⁾は、中国山西省長治市の大気エアロゾル (PM_{2.5}) を採取し、また発生源候補として土壌、自動車排ガス、ディーゼル排ガス、石炭火力発電排ガス、家庭用石炭燃焼排ガス、コークス加工排ガス、製鉄排ガスを収集し、それらの鉛存在量をMC-ICP-MSで測定し、²⁰⁶Pb/²⁰⁷Pbと²⁰⁸Pb/²⁰⁷Pbを得た。MixSIARモデルと呼ばれるベイズ混合モデルを用いた統計処理により各発生源からの寄与率を推計している。ここで各発生源の μ_{jk} は季節変動によって分散を伴う値として扱い、自身のデータと文献値を用いて値を最適化している。

3 おわりに

鉛同位体比を用いた大気エアロゾルの発生源推定の基本的な考え方と注意点を解説し、それを踏まえた最近の研究例を紹介した。鉛は重金属の中で特異的な同位体分別を示すため、今後も解析ツールとして有効活用されると期待される。一方で人為活動に由来する指標は、政治的・経済的理由によって化学とは無関係に推移するため、逐次情報を更新する必要がある。

文 献

- 1) 環境省：微小粒子状物質健康影響評価検討会報告書 (2008)。
- 2) M. Momarek, V. Ettler, V. Chrastry, M. Mihaljevic : *Environ. Inter.*, **34**, 562 (2008)。
- 3) B.C. Stock, A.L. Jackson, E.J. Ward, A.C. Parnell, D.L. Phillips, B.X. Semmens : *PeerJ*, **6**, e5096 (2018)。
- 4) M. Grotti, M.A. Vecchio, D. Gobato, M. Mataloni, F. Ardini : *J. Anal. At. Spectrom.*, **38**, 1057 (2023)。
- 5) H. Chen, Y. Yan, D. Hu, L. Peng, C. Wang : *Atmos. Environ.*, **294**, 119503 (2023)。
- 6) J. Zeng, Y. Tohjima, Y. Fujimoto, H. Mukai, M. Katsumoto : *Atmos. Environ.*, **37**, 1911 (2003)。
- 7) X.Y. Bi, Z.G. Li, S.X. Wang, L. Zhang, R. Xu, J.L. Liu, H.M. Yang, M.Z. Guo : *Environ. Sci. Technol.*, **51**, 13502 (2017)。
- 8) D. Widory, X. Liu, S. Dong : *Atmos. Environ.*, **44**, 3679 (2010)。



山本 祐平 (YAMAMOTO Yuhei)
徳島大学大学院社会産業理工学研究部
(〒770-8506 徳島県徳島市南常三島町 2-1)。
広島大学大学院理学研究科地球惑星システム学専攻博士課程後期修了。博士(理学)。
《現在の研究テーマ》環境中の粒子に含まれる重金属の挙動解明。
E-mail : yamamoto.yuhei@tokushima-u.ac.jp

ガラス表面から深さ方向のスズ価数分析方法の開発

西條 佳孝

1 緒 言

1.1 ガラス中の微量元素

ガラスは幅広い組成、物性を持ち、様々な産業分野で使用される汎用性の高い材料である。ガラスは、その主成分に加えて、微量成分が透明度¹⁾、色²⁾、フォトルミネッセンス³⁾、結晶化⁴⁾、そして製造特性^{5)~7)}など様々な特性に影響を与える。微量成分としては意図して添加されるものの他に、原材料や製造工程で使用する材料由来の不純物として混入するものもある。

1.2 ガラス中の微量の多価元素

ガラスに添加される、もしくは意図せず混入する微量元素が複数の価数を取り得る多価元素の場合、価数ごとにガラスに与える特性が変化する。したがって、実際のガラス製造において所望のガラス特性を達成するためには、ガラス中の多価元素の価数別の濃度を調整する必要がある。そのためには、多価元素の価数別の濃度を定量できる信頼性の高い方法が求められる。

1.3 ガラスに混入する多価元素：スズ

ガラスの製造工程で混入する多価元素の一つにスズがある。スズは、板状のガラスを量産する技術の一つであるフロート法に用いられる元素である。フロート法は N_2/H_2 ガスを流した還元性雰囲気下で熔融ガラスを熔融スズの上に浮かべることで板状のガラスを成形する方法である⁸⁾。従来のソーダライムシリケートガラス⁸⁾に加え、ホウケイ酸ガラス⁹⁾、フラットパネルディスプレイガラス¹⁰⁾、導光板ガラス¹⁾、化学強化用ガラス¹¹⁾などの高品質なガラスがフロート法で製造されている。熔融スズは、熔融スズと接するガラス面（本報告では Tin 面と呼称する）に侵入することが知られており¹²⁾、Tin 面は熔融スズと接しない面（本報告では Air 面と呼称する）とは異なる性質を示す^{13)~18)}。高品質なガラス表面を実現するためには、ガラス Tin 面と熔融スズの間での反応を詳細に理解する必要がある。先行研究では、Tin 面に侵入したスズがガラス内の多価元素と反応することで、ガラスの深さ方向に複雑な Sn 濃度プロファイルお

よび酸化還元プロファイルを示すことが明らかになっている^{12)19)~22)}。これらのプロファイルは、以下に示す拡散-反応モデルにて説明されている^{14)16)19)~21)23)}。

a) 熔融ガラスがフロートバスに入る際、熔融スズを通過した雰囲気中の水素がガラス Tin 面に侵入し¹⁹⁾、Tin 面表層の Fe^{3+} および S^{6+} が Fe^{2+} および S^{2-} に還元される。これにより、Tin 面の表面には Fe^{3+} や S^{6+} を含まない還元層が形成される。ガラスに侵入可能な Sn^{2+} は二つの方法で生成されると言われている。一つはフロートバス内の少量の残留酸素により熔融スズ (Sn^0) が酸化されること¹⁹⁾、もう一つは熔融スズ (Sn^0) とガラス Tin 面表面の Fe^{3+} や S^{6+} との酸化還元反応により熔融スズ (Sn^0) が酸化されることである¹⁶⁾²¹⁾。生成したこれらの Sn^{2+} は、二つの Na^+ 、または Fe^{2+} とのイオン交換反応により、Tin 面の表層に侵入する。

b) Tin 面の表層に侵入した Sn^{2+} は、ガラスメルト内部でのイオン交換反応により、ガラス内部に拡散する¹⁶⁾¹⁹⁾²⁰⁾²³⁾。したがって、 Sn^{2+} の拡散係数に従った深さ方向濃度プロファイルを示す。

c) ガラスメルトに拡散した Sn^{2+} は、ガラスメルト深部で Fe^{3+} ^{19)~24)} もしくは S^{6+} ²²⁾ との酸化還元反応によって Sn^{4+} に酸化される。生成した Sn^{4+} は、その拡散係数に従って拡散する。 Sn^{4+} の拡散係数は、 Sn^{2+} の拡散係数よりも小さい¹⁴⁾。これらの結果、還元層内では、 Sn^{4+} が存在せず、 Sn^{2+} の拡散係数に従った深さ方向濃度プロファイルを示すが、より深い領域では、 Sn^{4+} の拡散係数に対応する深さ方向濃度プロファイルを示す。

d) 深さ方向の Total Sn 濃度プロファイルは、 Sn^{2+} および Sn^{4+} の濃度プロファイルを足し合わせたものとなる。その結果、 Sn^{4+} が生成した深さで tin hump と呼ばれるサテライトピークが生成する。Tin hump より浅い部分は還元層、tin hump より深い部分は酸化層と呼称される。

以上のように Tin 面に侵入した Sn はガラス内部で酸化還元反応を受けるため、Tin 面表面から深さ方向の total Sn 濃度プロファイルだけでなく、 Sn^{2+} 、 Sn^{4+} 、および $Sn^{2+}/total Sn$ の割合で定義される Sn redox の深さ方向プロファイルも重要である。したがって、ガラス表

面に侵入したスズの価数別の濃度を定量できる信頼性の高い方法が求められる。

1.4 ガラス Tin 面表面に侵入したスズの価数別の濃度の定量方法

Tin 面の深さ方向の total Sn 濃度プロファイルの測定方法としては、EPMA¹²⁾¹⁶⁾²²⁾²⁵⁾²⁶⁾、XRF²⁵⁾、二次イオン質量分析法 (secondary ion mass spectrometry, SIMS)¹⁹⁾、XPS¹⁴⁾²⁵⁾²⁷⁾、およびラザフォード後方散乱分光法 (Rutherford backscattering spectrometry, RBS)¹⁶⁾²⁸⁾ があげられる。

同様に Tin 面の深さ方向の Sn redox プロファイルの測定方法としては、透過型メスバウアー分光法 (transmittance Mössbauer spectroscopy, TMS)²⁵⁾²⁶⁾²⁹⁾、内部変換電子メスバウアー分光法 (conversion electron Mössbauer spectroscopy, CEMS)¹⁶⁾²⁰⁾²¹⁾²³⁾²⁶⁾³⁰⁾ 放射光 XAFS²²⁾ があげられる。

ただし、深さ方向の Sn redox プロファイルを測定するこれらの方法は、定量性に欠ける、機器や設備の使用が制限される、という問題がある。メスバウアー分光法で Sn redox を定量的に決定するためには Sn²⁺ および Sn⁴⁺ イオンのデバイ温度の正確な測定が必要となる。デバイ温度を正確に決定するには、異なる温度で複数の測定を実行する必要がある、分析時間が長くなる。Williams らの報告²⁶⁾ では、フロートガラス Tin 面の最表面の Sn⁴⁺ のデバイ温度と、ガラス内部の Sn⁴⁺ のデバイ温度が異なることが指摘されている。これは深さ方向の Sn redox プロファイルを定量的に決定するためには、デバイ温度を各深さで測定する必要があることを示しており、事実上測定は不可能と言える。なお CEMS の深さ分解能は 2 μm 程度と言われている²⁶⁾³¹⁾。XAFS に関して Flank ら²²⁾ はガラス Tin 面の深さ方向の価数分析を行ったが、これは定量的ではなく Sn 価数の変化のトレンドを示したのみである。また、サンプル調製に使用された接着剤のためにサンプルの最表面数 μm 部分は明確に分析できなかった。また放射光施設を使用する必要があるため、日常的な測定はできない。一方で XAFS を用いた測定では、深さの分解能は 1 μm と高い。

1.5 新たに提案する方法

1.4 までで述べたように、これまでフロートガラス Tin 面の Sn²⁺、Sn⁴⁺、および Sn redox の深さプロファイルを定量的に測定する方法は示されていない。さらに、実際のガラス製造に活用することを考えると、実験室で一般的に使用される装置を使用してこれらを測定できることが好ましい。そのため、ここでは Saijo らが開発したバルクガラスに適用したスズの価数分析方法³²⁾ と、Akiyama らがフロートガラスの Air 面表層の Fe²⁺ および total Fe 濃度を定量するために使用したステップ

エッチング技術³³⁾を組み合わせた新しい方法を提案し、その結果について先行研究と比較および議論する³⁴⁾³⁵⁾。

2 実験

2.1 試料

AGC 製の板厚 3.2 mm のソーダライムシリケートガラスを用いた。組成は 71SiO₂-13Na₂O-9CaO-5MgO-2Al₂O₃ (mass%) であり、微量添加物として 0.5 mass% Fe₂O₃ および 0.2 mass% SO₃ を含有する。また密度は 2.50 g/cm³ である。

2.2 装置および使用機器

エッチングのための超音波洗浄機として AS ONE (株) 製 VS-100III を用いた。ガラス試料のマスクングには TERAOKA (株) 製ポリイミドテープ (Kapton[®] フィルム粘着テープ 650S #50) を使用した。試薬を容器に加えるために、コック付き 100 mL ポリプロピレン (PP) 製分液ロートを使用した。有機溶媒抽出のため、100 mL ガラス分液ロートを用いた。分解溶液を移す際にテルモ (株) 製 10 mL シリンジおよび東洋濾紙 (株) 製孔径 0.45 μm のシリンジフィルターを用いた。各元素の定量には日立ハイテック (株) 製 ICP-AES SPS5520 を使用した。

2.3 試薬

関東化学 (株) 製の原子吸光法用のフッ化水素酸 (50 mass%)、塩酸 (36 mass%)、および過塩素酸 (60 mass%)、鹿特級の混合キシレン、ホウ酸、およびアスコルビン酸、Sn、Si 標準液 (1g/L)、富士フィルム和光純薬 (株) 製の和光 1 級の N,N-ジエチルジチオカルバミン酸ジエチルアンモニウム、AGC (株) 製の CYTOP[®] CTL-809M を使用した。超純水は減圧攪拌法にて 2 時間以上脱気したものをを用いた。

2.4 分析方法

ガラスカッターを用いて試料を 4 cm×4 cm の大きさの小片に切断し、分析面である Tin 面にカプトンテープを貼付した。カプトンテープ貼付面以外のすべての面に CYTOP[®] を塗布し、焼成 (50 °C×1 h → 80 °C×1 h → 150 °C×1 h) し、冷却した後にカプトンテープを除去した。試料をポリエチレン袋に入れ、5 mass% アスコルビン酸 1 mL と、1.4 mol/L HF および 0.12 mol/L HCl の混合液 10 mL を加えた。サンプルとエッチング液を含むポリエチレン袋を、水道水を満たしたガラス製ビーカーに入れた。Sn²⁺ の酸化を防ぐために、ガラスべルに窒素ガスを通じ、不活性雰囲気を保った。エッチングに使用される実験装置の概略図を図 1 に示す。本エッチングは、必要なエッチング深さに応じて、28 kHz で超音波を印加しながら、2~4 分間行った。なお必要なエッチング時間は事前に同条件でエッチング

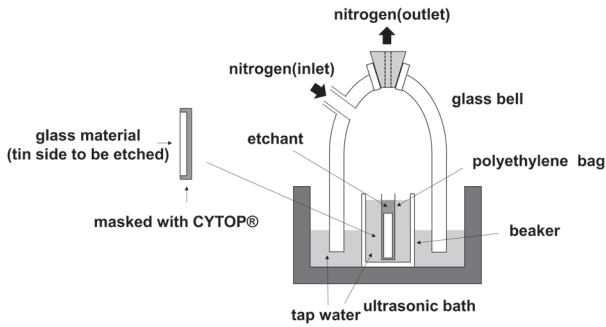


図1 実験装置の概略図

レート进行调查したうえで決定した。所定の時間のエッチングが終了した後、エッチング液を30 mL ポリプロピレンカップに移した。4 mass% ホウ酸5 mLを試料が含まれるポリエチレン袋に加え、試料を洗浄した後に同じ30 mL ポリプロピレンカップに加えた。この操作はSn²⁺の空気酸化を防ぐため素早く行い、2回繰り返した。その後、超純水にて同様に試料を洗浄した後、30 mLに定容した。本溶液にはガラス試料に含まれていたtotal Snが含有されるため、total Sn溶液と呼称する。

次に以下の操作にてSnの価数分離を行った。シリンジを用いtotal Sn溶液から約10 mLを2回採取した。20 mLのtotal Sn溶液を、0.1 mass% DDTC キシレン溶液5 mLを添加した100 mLのガラス製分液ロートにシリンジフィルターを使用して添加した。素早くロートを1分間振とうし、total Sn溶液中のSn²⁺を有機相に抽出した。この抽出手順は新しい有機相を用い、繰り返し2回行った。その後、ロート内の下層の水相を採取した。本溶液にはガラス試料に含まれていたSn⁴⁺が含有されるため、Sn⁴⁺溶液と呼称する。

Total Sn溶液、およびSn⁴⁺溶液中のSn、またtotal Sn溶液中のSiをICP発光分光法にて定量した。定量の際は、溶液のマトリックス(HF, HCl, ホウ酸、およ

表1 ICP発光分光法の測定条件

RF power	1.2 kW
Plasma gas flow	15.0 L/min
Auxiliary gas flow	1.5 L/min
Nebulizer gas pressure	0.75 MPa
Emission line	Sn (II) : 189.927 nm Si (I) : 251.612 nm

び超純水)を合わせた標準溶液を用いた。ICP発光分光法の条件を表1に示す。Sn redox および板状ガラスのエッチング深さはそれぞれ式(1)および(2)に従って算出した。

$$\text{Sn redox (\%)} = \frac{\text{Sn}^{2+}(\text{as SnO}_2 \text{ mass\%})}{\text{Total Sn (as SnO}_2 \text{ mass\%)}} \times 100 \dots\dots\dots (1)$$

$$\text{Etching depth (\mu m)} =$$

$$\frac{\text{Si in solution total Sn} \left(\frac{\mu\text{g}}{\text{mL}} \right) \times 30 (\text{mL}) \times 2.14}{\text{Area of sample (cm}^2) \times 2.50 \left(\frac{\text{g}}{\text{cm}^3} \right) \times 71 (\text{SiO}_2 \text{ mass\%})} \dots (2)$$

なおブランクテストとして空操作を4回繰り返し行い、空試験値の平均およびその標準偏差(σ)を算出した。定量下限値を空試験値の平均に10σを加えたものとした。

3 結 果

図2に試料のTin面から深さ方向に対するtotal Sn, Sn⁴⁺, Sn²⁺濃度、およびSn redoxを示す。Total Sn濃度は最表面で約1.4 mass%であり、最表面から深さ方向に急激に減少し、7~8 μm深さでピークを示した。この内部のピークはいわゆるスズのサテライトピーク(tin hump)で、その濃度は約0.6 mass%であった。Total

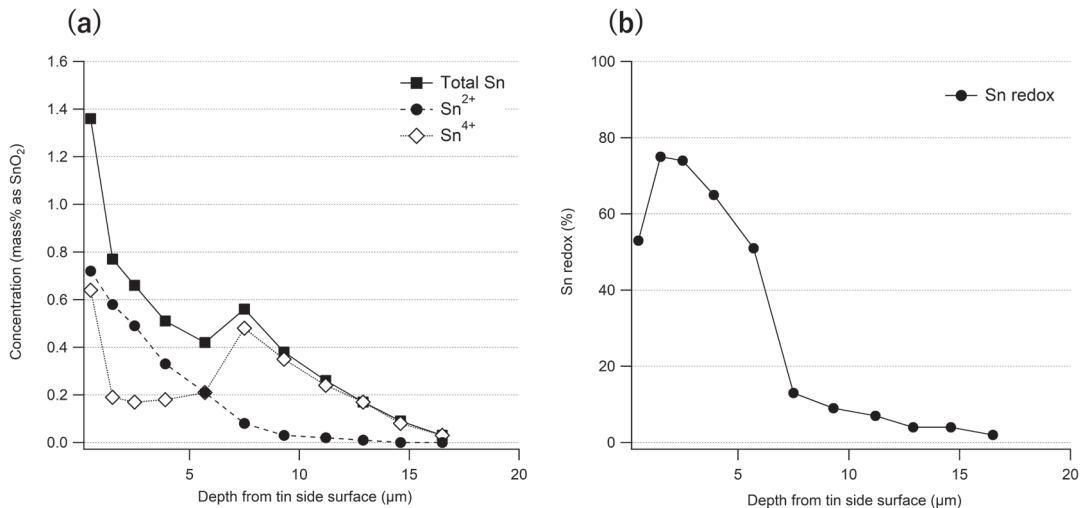


図2 試料のTin面から深さ方向に対する (a) total Sn, Sn⁴⁺, Sn²⁺濃度 (as SnO₂ mass%), および (b) Sn redox (%)

Sn 濃度は tin hump より深い部分で緩やかに減少し、深さ 17 μm で 0.05 mass% 未満であった。Sn²⁺濃度は表面から単純に減少し、内部にピークは見られなかった。一方で Sn⁴⁺濃度は複雑なプロファイルを示した。最初のピークは最も外側の表面にあり、2 番目のピークは 7~8 μm 深さにあり、tin hump の深さと一致した。これらの結果から計算された Sn redox プロファイルは、最表面で 53 % の値を示し、その後、深さ 1.5 μm で最大値である 75 % まで増加し、6 μm で 51 % まで徐々に減少し、その後 7~8 μm 深さで 13 % まで急激に減少した。この深さは、tin hump の深さと一致していた。Tin hump より深い部分では、Sn redox は 10 % 未満まで徐々に減少した。Tin hump より浅い部分はいわゆる還元層であり、tin hump より深い部分はいわゆる酸化層であると言える。

ブランケットテストより、今回の条件 (16(4×4) cm^2) のガラスを 1 μm 深さでエッチングしたとき、total Sn および Sn⁴⁺ の定量下限値はいずれも 0.02 mass% (as SnO₂) であった。

4 考 察

最表面の Sn⁴⁺ピークは、ガラスがフロートバスから酸化雰囲気 (大気) に晒される際に Sn²⁺が低温酸化することに起因し生成すると説明されている¹⁷⁾²³⁾²⁶⁾。Total Sn に対する Sn²⁺もしくは Sn⁴⁺の割合については、最表面を除く tin hump よりも浅い領域では、Sn²⁺が多く (Sn redox が高く)、tin hump より深い部分では、total Sn の約 90 % が Sn⁴⁺である (Sn redox が約 10 % と低い) ことが定量的に明らかとなった。これは先行研究^{19)~23)25)26)29)}の結果と定性的に一致しており、従来示された拡散および酸化還元メカニズムを支持する。

一方で、本研究では、tin hump よりも浅い還元層領域に一定量の Sn⁴⁺が存在することを明らかにした。Johnson ら²⁵⁾も同じ結果を確認しているが、明確な説明はなかった。還元層領域に一定量の Sn⁴⁺が存在することは、Sn²⁺の侵入速度が、還元雰囲気によって表面からガラス中の多価元素 (主に Fe³⁺および S⁶⁺) が還元される速度よりも高い場合に説明できるとされている³⁶⁾。これは、最終的に tin hump が形成される深さより浅い領域に存在していた Fe³⁺および S⁶⁺により、侵入してきた Sn²⁺が酸化されることによって、Sn⁴⁺が生成可能ということを示す。

本研究ではフロートガラス Tin 面の詳細な深さ方向 Sn プロファイル (価数ごと、redox 換算) を高い定量分解能と深さ分解能で明らかにしたが、フロートガラス Tin 面の Sn プロファイルは一般に製造条件に複雑に影響を受ける。例として下記があげられる。

- ・ガラスの母組成
- ・フロートバス内の雰囲気 (酸素濃度を含む、また場

所ごとの違いも含む)

- ・ガラスの厚さ (フロートバス内の滞留時間、延伸、または圧縮効果)
- ・ガラス中の多価元素の種類および濃度
- ・各温度での Sn²⁺と Sn⁴⁺の拡散係数

したがって、本研究で新たにフロートガラス Tin 面の深さ方向 Sn プロファイルを Sn²⁺と Sn⁴⁺に分けて定量的な議論ができるようになったものの、フロートガラス Tin 面に侵入した Sn のプロファイルの形成メカニズム、またフロートガラスの Tin 面における多種の多価元素間の酸化還元機構を完全に理解するにはまだ十分ではない。フロートガラスの Tin 面における Sn プロファイル形成メカニズムおよび多種の多価元素間の酸化還元機構をより深く理解するためには、ガラス Tin 面の深さ方向の価数別の Fe および S の分析方法を開発し実試料に適用し、さらにそれらの結果を用いてシミュレーションを行う必要があると考えている。これにより、tin hump よりも浅い還元層領域に一定量存在する Sn⁴⁺の生成理由についても考察が可能になる。

ここで本方法について先行研究例と比較を行う。第 1 章で述べたように、先行研究の方法 (TMS, CEMS, および XAFS) では実質的に深さ方向の Sn 価数ごとの定量化はできない。そのため、本研究にて提案された方法が既存の方法と比較して最も定量的であることは明らかである。深さ方向分解能に関しては、本方法によるエッチング深さは、エッチング時間によって変えることができる。1 μm 深さでエッチングしたとき、total Sn および Sn⁴⁺の定量下限値はいずれも 0.02 mass% (as SnO₂) であるため、0.1 μm 深さでエッチングした際の total Sn および Sn⁴⁺の定量下限値はいずれも 0.2 mass% (as SnO₂) となる。よって、total Sn および Sn⁴⁺が 0.2 mass% (as SnO₂) 以上存在する際は、エッチング量を 0.1 μm まで低減しても深さ方向に定量分析することが可能である。したがって本方法は先行研究例の中で深さ方向分解能が最も良い XAFS (深さ方向分解能 1 μm) よりも良い (小さい) 深さ方向分解能を持つ。さらに、XAFS は放射光施設を利用するため実験に至るまでに時間を要すること、TMS や CEMS は分析自体に長時間を要することに対して、本方法は 1 サンプルあたり 3 日で分析可能であるため、分析にかかる時間は先行研究例と比較し有利である。また本方法は一般的に使用される装置と機器のみを使用するため、一般の実験室で実行可能である。

5 結 言

酸化鉄を含むソーダライムシリケートガラス中の価数ごとのスズ濃度を定量する方法とステップエッチング法を組み合わせることで、フロートガラス Tin 面から深さ方向の total Sn および Sn⁴⁺濃度プロファイルを分析

するための新しい化学分析法を開発し、フロートガラス Tin 面表面からの深さ方向の total Sn, Sn⁴⁺, Sn²⁺, および Sn redox の定量的な濃度プロファイルを得た。今回分析されたフロートガラス試料は, tin hump より浅い部分が還元層であること, tin hump より深い部分が酸化層であること, Tin 面の最表面は酸化していることを明らかとした。これらの結果は, 先行研究の結果を支持した。さらに, 最表面の最初のピークと, tin hump と一致する深さ 7~8 μm の 2 番目のピークからなる, 複雑な Sn⁴⁺ 濃度プロファイルを明らかにした。

本方法は既存の方法よりも優れた深さ分解能を持つ, 定量的な深さ方向の Sn の価数別の分析方法である。本方法を活用することで, フロートガラスへのスズの侵入に関する詳細な情報を得ることができ, フロート法による高品質なガラスの製造に大きく貢献できる。

謝辞 本研究を進めるうえで多大なご指導を賜った京都大学大学院工学研究科材料化学専攻三浦清貴教授, 下間靖彦准教授, 清水雅弘助教に, ここに謝意を表す。

文 献

- 1) Y. Arai, M. Inoue, K. Ishikawa, T. Yokote, Y. Kondo, K. Mori : *SID Symposium Digest of Technical Papers*, **48**, 1663 (2017).
- 2) W. A. Wely : "Coloured Glasses", (1981), (Society of Glass Technology, Sheffield).
- 3) M. R. Cicconi, A. Veber, D. de Ligny, J. Rocherullé, R. Lebullenger, F. Tessier : *J. Lumin.*, **183**, 53 (2017).
- 4) G. H. Beall : *Annu. Rev. Mater. Sci.*, **22**, 91 (1992).
- 5) D. B. Dingwell : *Am. Mineral.*, **76**, 9 (1991).
- 6) D. B. Dingwell : *Am. Mineral.*, **74**, 9 (1989).
- 7) H. Tokunaga : *NEW GLASS*, **34**, 14 (2019).
- 8) L. A. B. Pilkington : *P. Roy. Soc. A-Math. Phys.*, **314**, 1 (1969).
- 9) T. Kloss, G. Lautenschlaeger, K. Schneider : *Glass Technol.*, **41**, 177 (2000).
- 10) K. Maeda : *Journal of the Japan Society for Precision Engineering*, **70**, 466 (2004).
- 11) K. Hayashi, J. Endo, S. Akiba, T. Nakashima : *Proceedings of the International Display Workshops*, 1705 (2011).
- 12) J. S. Sieger : *J. Non. Cryst. Solids*, **19**, 213 (1975).
- 13) Y. Hayashi, Y. Fukuda, M. Kudo : *Surf. Sci.*, **872**, 507 (2002).
- 14) Y. Hayashi, K. Matsumoto, M. Kudo : *Glass Technol.*, **42**, 130 (2001).
- 15) Y. Hayashi, R. Akiyama, M. Kudo : *Surf. Interface Anal.*, **31**, 87 (2001).
- 16) G. H. Frischat : *Comptes. Rendus. Chimie.*, **5**, 759 (2002).
- 17) K. F. E. Williams, M. F. Thomas, J. Greengrass, J. M. Bradshaw : *Glass Technol.*, **40**, 103 (1999).
- 18) S. Takeda : *J. Non. Cryst. Solids*, **352**, 3910 (2006).
- 19) Y. Hayashi, K. Matsumoto, M. Kudo : *J. Non. Cryst. Solids*, **282**, 188 (2001).
- 20) G. H. Frischat, C. Müller-Fildebrandt, D. Moseler, G. Heide : *J. Non. Cryst. Solids*, **283**, 246 (2001).
- 21) W. Meisel : *Glass Sci. Technol.*, **72**, 291 (1999).
- 22) A. M. Flank, P. Lagarde, J. Jupille, H. Montigaud : *J. Non. Cryst. Solids*, **357**, 3200 (2011).
- 23) Y. Hayashi, K. Matsumoto, M. Kudo : *Hyomen Kagaku*, **22**, 412 (2001).
- 24) A. Kumar, S. P. Singh, R. Pyare : *Glastech. Ber.*, **64**, 106 (1991).
- 25) K. F. E. Williams, C. E. Johnson, B. P. Tilley, D. Gelder, J. A. Johnson : *J. Non. Cryst. Solids*, **211**, 164 (1997).
- 26) K. F. E. Williams, C. E. Johnson, O. Nikolov, M. F. Thomas, J. A. Johnson, J. Greengrass : *J. Non. Cryst. Solids*, **242**, 183 (1998).
- 27) W. E. Baitinger, P. W. French, E. L. Swarts : *J. Non. Cryst. Solids*, **749**, 38 (1980).
- 28) P. D. Townsend, N. Can, J. Chandler, B. W. Farmery, R. Lopez-Heredero, A. Peto, L. Salvin, D. Underdown, B. Yang : *J. Non. Cryst. Solids*, **223**, 73 (1998).
- 29) J. A. Johnson, C. E. Johnson, K. F. E. Williams, D. Holland, M. M. Karim : *Hyperfine Interact.*, **95**, 41 (1995).
- 30) G. Principi, A. Maddalena, A. Gupta, F. Geotti-Bianchini, S. Hreglich, M. Verità : *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B*, **76**, 215 (1993).
- 31) J. A. Johnson, C. E. Johnson : *J. Phys. : Condens. Matter*, **17**, R381 (2005).
- 32) Y. Saijo, M. Murata, T. Kajihara, H. Hijiya, Y. Suzuki, R. Akiyama, M. Shimizu, Y. Shimotsuma, K. Miura : *Anal. Sci.*, **38**, 881 (2022).
- 33) R. Akiyama, N. Kanno, Y. Suzuki, K. Yamamoto : *Glass Technol-Part A*, **56**, 37 (2015).
- 34) Y. Saijo, Y. Suzuki, R. Akiyama, M. Shimizu, Y. Shimotsuma, K. Miura : *J. Non. Cryst. Solids*, **592**, 121752 (2022).
- 35) Y. Saijo : *AGC Research Report*, **70**, 30 (2023).
- 36) Q. Zhang, Z. Chen, Z. Li : *Appl. Therm. Eng.*, **31**, 1272 (2011).



西條 佳孝 (SAIJO Yoshitaka)

AGC 株式会社先端基盤研究所共通基盤技術部分析科学チーム (〒230-0045 横浜市鶴見区末広町 1-1)。京都大学大学院工学研究科材料化学専攻博士後期課程修了。博士 (工学)。《現在の研究テーマ》ガラス中の多価元素の価数分析技術開発。
E-mail : yoshitaka.saijo@agc.com

会社ホームページ URL :

<https://www.agc.com>

機械学習による高速液体クロマトグラフィーの保持時間予測

高速液体クロマトグラフィーの保持時間の予測は、チャレンジングな課題である。これは、試料、固定相、移動相間の相互作用が単一ではなく、複数の相互作用から成り立っているからである。汎用的なシリカ系の C18 固定相の主な相互作用は、疎水性相互作用である。しかし、その表面にわずかに存在する酸性の官能基であるシラノール基と異なる相互作用が働く。中性からアルカリ性の移動相において、陽イオン交換能が生じ、酸性の移動相においては、水素結合が生じる。これにより、保持の遅延が生じる場合がある。さらに、C18 の官能基密度、基材シリカの比表面積や細孔径により保持は大きく異なる。つまり、同じ C18 カラムでもブランドやメーカーが異なれば、保持時間の予測は困難である。

Choi¹⁾らは、液体クロマトグラフィー質量分析法 (LC/MS) により試料をダンシルクロリドで誘導体化したダンシル化合物の保持時間予測モデルを開発した。化合物の誘導体化により、C18 カラムとダンシル基との疎水性相互作用の影響が相対的に大きくなる。これにより、保持時間の予測精度を高めた。このベースとなるのは、315 種のダンシル化合物を分析し、得られた保持時間と分子記述子計算ソフトウェアである mordred²⁾ から算出された記述子である。保持時間を用いて記述子を 1613 から 58 に絞り込み、機械学習モデルを構築した。さらに、LC/MS の精密質量を利用することで、未知化合物の同定を強力にサポートした。これらにより、ダンシル化合物の保持時間を予測するためのグラフィカルユーザーインターフェース (GUI) を備えたスタンドアロンのソフトウェアを開発することに成功した。この保持時間予測モデルは、使いやすい GUI に組み込まれており、精密質量とともに未知の保持時間を持つターゲットのダンシル化代謝物の識別に使用することができる。開発したソフトウェアが健康な妊娠女性の尿サンプルから薬物の代謝物を識別するのに役立つことが示された。

このような機械学習の技術による保持予測は、複雑なデータセットを処理し、ほとんどのクロマトグラフィー技術で化合物の同定と分離という重要なタスクを容易にする能力であり、今後も指数関数的に成長する。

- 1) E. Choi, W. J. Yoo, H.-Y. Jang, T.-Y. Jamg, S. K. Lee, H. B. Oh : *J. Chromatogr. A*, **1705**, 464167 (2023).
- 2) H. Moriwaki, Y. Tian, N. Kawashita, T. Takagi : *J. Cheminform.*, **10**, 4 (2018).

〔化学物質評価研究機構 坂牧 寛〕

温故知新：キャピラリー電気泳動による

医薬品とタンパク質との相互作用解析

医薬品と血漿タンパク質との相互作用は、薬物動態や薬力学に大いに影響する。このため、医薬品開発において定量的かつ定性的な相互作用解析は重要である。定量的な相互作用解析には、液体クロマトグラフィー、表面プラズモン共鳴法、等温滴定型カロリメトリーをはじめ実に様々な手法を利用可能である。

これら手法の中で、キャピラリー電気泳動 (capillary electrophoresis, CE) は、平衡論に基づく定量的な相互作用 (結合定数) 解析が可能であり、(1) リガンド/アクセプターの固定化を要せず、少ない試料消費量で相互作用を解析可能である。(2) 試料が混合物の場合でも、成分分離が可能であれば、混合物中の各成分との相互作用解析が可能である。(3) mobility shift assay, frontal analysis をはじめ様々な相互作用解析法および解析例がある。という特徴を有している¹⁾。

Deeb らのグループはこの様な CE の特徴に着目し、血清アルブミン (serum albumin, SA) を用いて、医薬品エナンチオマーの分離、そして SA と医薬品エナンチオマーとの結合定数の評価を mobility shift assay にて評価している²⁾。Amlodipine および Verapamil 両エナンチオマーを SA によって分離後、SA と Amlodipine のエナンチオマーとの結合定数 (K_a) の解析に成功した (K_a : 2.2×10^4 , 2.5×10^4 [M^{-1}])。一方、Verapamil に関しては相互作用が極端に弱いため、エナンチオマー分離を達成したが、理論式に従う測定結果を得られなかったと報告している。この結果から、CE の mobility shift assay は、 $K_a > 10^4$ [M^{-1}] の弱い相互作用を解析可能であると判断できる。

1980 年代以降、CE に関する基礎研究が始まり、40 年近く経た現在、CE による相互作用解析は完成された感が筆者にあった。しかし、今回紹介した CE による結合定数の解析に加え、結合サイト数の解析や、CE による速度論解析も報告されている³⁾。また、ソフトウェアによるデータ処理の高性能化は⁴⁾、CE による相互作用の解析精度の向上、ならびに測定から解析までのスループット化も可能だと考えられる。この様な状況および、CE による相互作用解析の例は枚挙に暇がないほどであることを考えると、今後、CE をベースとする新規の相互作用解析法、既存の相互作用解析法の高性能化、CE による相互作用解析例の益々の増加が期待される。

- 1) M. Olabi, M. Stein, H. Wätzig : *Methods*, **146**, 76 (2018).
- 2) R. Rati, H. Wätzig, M. Stein, S. E. Deeb : *J. SepSci.*, **43**, 3960 (2020).
- 3) A. T. H. Le, S. M. Krylova, S. N. Krylov : *Anal. Chem.*, **91**, 8532 (2019).
- 4) P. Dubský, M. Ůrdögová, M. Malý, M. Riesová : *J. Chromatogr. A*, **1445**, 158 (2016).

〔大阪大学大学院基礎工学研究科 岡本 行広〕

こんにちは



警察庁科学警察研究所・ 法科学第三部を訪ねて

〈はじめに〉

2023年8月1日に、千葉県柏市にある警察庁・科学警察研究所（以下、科警研と略）法科学第三部を訪問した。柏の葉キャンパス駅（つくばエクスプレス）からバスに5分ほど乗車し、科警研に到着した（写真1）。当日の訪問取材は午前11時に法科学第三部主任研究官鈴木康弘氏にお会いし、鈴木氏より科警研について紹介して頂いた。

科警研設立の歴史から説明があり、科警研は昭和23年5月に国家地方警察本部刑事部鑑識課に科学捜査研究所の設置に始まる。昭和34年4月に科学警察研究所に改称。平成11年2月に東京都千代田区から現在の柏市に移転した。取材した法科学第三部は、平成6～7年のサリン事件が契機となり、平成8年5月に設置された。

科警研と科学捜査研究所（以下、科捜研と略）の違いについても分かりやすく説明して頂いた。科捜研は各都道府県警察刑事部に設置されているが、科警研は警察庁の附属機関として千葉県柏市の1か所のみとなる。全国にある科捜研で直接できない、方法がない案件を科警研で担い、また、科捜研の研究員に技術研修を行い、各



写真1 千葉県柏市にある科学警察研究所



写真2 広報資料室にあるパネルの一部
昭和の時代からの重大事件の当時の写真や記事がありました。

都道府県警察の科学捜査技術の向上を図っている。

当日の取材は午前11時から昼食の休憩を挟み、夕方まで取材を行った。はじめに昭和～平成の時代に起きた重大事件の当時の写真などが並べられている広報資料室内（写真2）を見学させて頂き、化学第五研究室、化学第四研究室、化学第一研究室、化学第三研究室、化学第二研究室の順で見学した。

〈取材内容〉

最初に取材させて頂いた化学第五研究室では、化学テロで使用される危険性があり、殺傷力が高い化学兵器用剤を分析研究対象としている。化学兵器用剤とは、揮発性神経剤サリン、難揮発性神経剤 VX、ノビチヨクなどを指す。警察庁技官（研究室長）宮口一氏、同（研究員）山口晃巨氏より、高速液体クロマトグラフィー—高分解能質量分析装置が稼働している研究室（写真3、4）で説明して頂いた。山口氏が2022年に発表した論文は、ノビチヨクの分解物を対象とした新規 LC-MS/MS 法の開発で、犯罪に使われる毒物やその生体内代謝物は水溶性が高いために、プレカラム誘導体化を行ってから逆相分配クロマトグラフィーで分析するなど、試料分析の基礎的な前処理技術が役立つことが示されている。

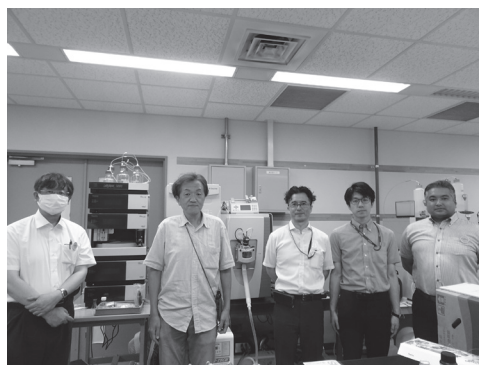


写真3 法科学化学第五研究室の皆さんと撮影
（左から筆者、鈴木氏、宮口氏、山口氏、島田委員）

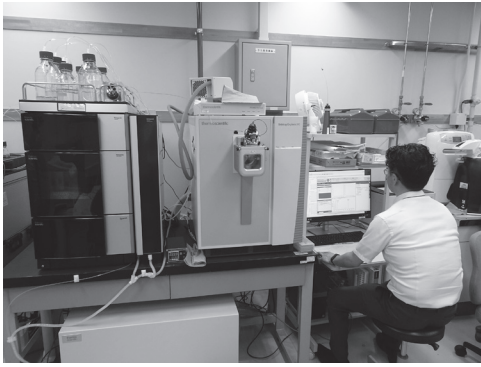


写真4 高分解能質量分析装置を操作している宮口氏

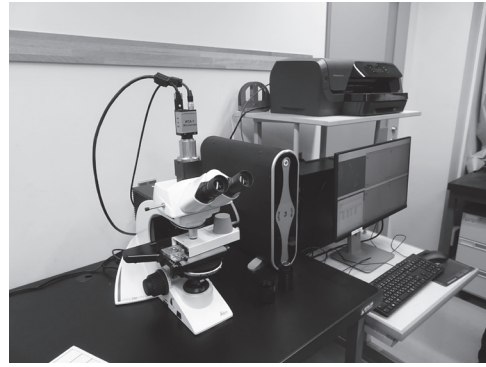


写真5 融沸点・屈折率自動測定装置（化学第三研究室）
NHKEテレ サイエンスZEROで紹介されました。

論文にはすべての実験中、保護グローブ着用の記述があり、危険な神経剤を扱うため、安全性配慮は欠かせない。また、化学テロが起きた現場で使われた神経剤を、オンサイトで簡易に検知可能な紙製検査チップ（北海道大学大学院/渡慶次研究室と共同研究）の開発や化学兵器禁止機関（OPCW）が実施している技能試験に、科警研は毎回参加し、高度な分析技能の維持を図っている説明があった。

次に、化学第四研究室の警察庁技官（研究室長）柘浩一郎氏、同（主任研究官）吉川ひとみ氏より、犯行の物的な証拠となり得る土壌、土砂や植物片、種子、花粉などの微細証拠物鑑定について説明して頂いた。化学第四研究室で確立された鑑定検査方法のワークフローの説明があり、微細な証拠物が「異同識別」に役立つ。ここで「異同識別」とは、例えば容疑者の指紋と犯罪の証拠品（例えば凶器）に付着した指紋が同一であるか否かを特定する作業などを言う。「鑑定検査の結果、AとBは同一と考えても矛盾がない。」と表現することが印象に残った。尚、説明して頂いた吉川ひとみ氏は日本分析化学会関東支部2022年度新世紀賞（題目「植物DNA解析の犯罪捜査への応用に関する研究」）を受賞されている。

次に取材した化学第一研究室では、大麻、覚醒剤、麻薬、向精神薬、医薬品などの薬物、特に乱用薬物の分析法開発、応用などをテーマとしている。危険ドラッグなどの新規乱用薬物については、標準品が市販されていない場合が多いため、多くの標準品を化学合成しているとのことであった。犯行に薬物が使われた際の摂取証明のために、薬物の体内動態（代謝や分布）の研究も進めていて、その一つとして薬物の毛髪移行について研究が行われており、学会や論文で発表されている。時間の経過とともに伸びる毛髪を0.4mmずつ毛髪の端から順に切り取り、毛髪の成長速度に合わせて細断することで、乱用薬物の摂取日時を特定できる技術である。毛髪を0.4mmずつ細断するごとに、その断片を一つずつ試料容器に入れ、乱用薬物を抽出しているとのこと、緻密かつ膨大な量を処理されていることをお聞きした。化学第一

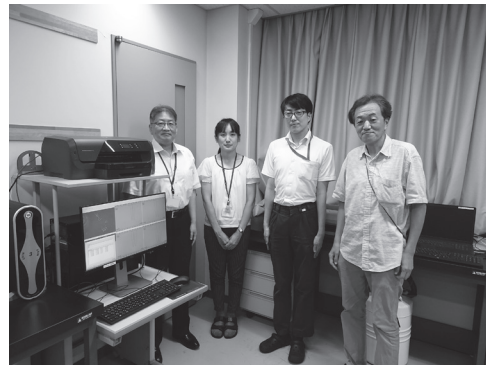


写真6 左から笠松氏、板宮氏、松岡氏、鈴木氏（化学第三研究室）。

笠松氏は、サイエンスZERO（NHKEテレ）で融沸点・屈折率自動測定装置を使ったガラスの異同識別を説明されました。

研究室も、高速液体クロマトグラフィーや質量分析装置がメインに使われている。

この他にも化学第一研究室では超臨界クロマトグラフィーの特性を生かしたメタンフェタミン中のエフェドリン光学異性体分析が、押収された覚醒剤のロット識別に役立つ説明があった。

次に取材した化学第三研究室では、微細な証拠物（ガラス破片、単繊維などの工業製品）を「異同識別」に使う鑑定検査法をテーマとしている。室長 笠松正昭氏より単繊維のスペクトル測定に基づく「異同識別」や融沸点・屈折率自動測定装置（写真5, 6）の説明があった。微細なガラス片の屈折率は、ガラスごとに異なるので、容疑者の衣服に付着した微細なガラス片が犯罪の証拠物になる。丁度、訪問取材した日から5日目、8月6日放送のサイエンスZERO（NHKEテレ）の番組で紹介された（「潜入！科学警察研究所“科学捜査”で事件を解決せよ」）。

最後に取材した化学第二研究室では、研究室長の太田彦人氏より、質量分析装置が稼働している横で説明して頂いた（写真7）。平成6年に起きた松本サリン事件、翌年の地下鉄サリン事件、そして犯行に使われたサリンの分析について、一般人が目にすることはなかった当時



写真7 質量分析装置 (化学第二研究室)
当日は、右側のPC画面を使って説明して頂きました。

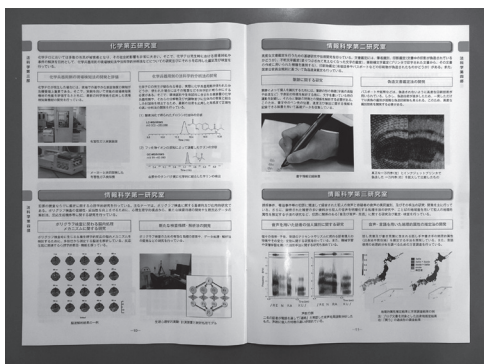


写真8 科警研パンフレットの一コマ。
筆跡や偽造文書鑑定の研究も行われています。

の現場写真を交えながら、丁寧に分かりやすく説明して頂いた。化学第二研究室では、農薬や毒キノコ、毒草の鑑定検査も行い、また、司法解剖で採取された体液試料を科警研で調べる際には、微量になることもあるそうで、科警研では高度な分析技術力が要求されている。取

材当日は、ニュースで報道されている除草剤散布の有無を科捜研が調査するため、除草剤の分析指導も行ったとのことである。このように現実に行き起きている事件に絡む化学物質の鑑定、検査のための研究が、科警研および科捜研ではリアルタイムで行われている。

〈おわりに〉

当日の取材は、予定の終了時間をオーバーして、熱心に説明して頂いた。科警研の取材を通して、筆者が最も印象に残った事柄は、警察捜査の最前線で、クロマトグラフィーや質量分析装置が毎日稼働し、捜査にフル活用されている点である。筆者は、薬学部で次世代を担う学生を教育する立場にあるが、科警研の研究所員に薬学出身の方も多しとお聞きし、学部生、大学院生の講義の中でクロマトグラフィーや質量分析装置が、警察の捜査に日々役立っていることを伝えていきたい。

また、取材日に頂いた科警研のパンフレット(写真8)を見ると、科警研には生物、物理、火災、爆発、情報科学など多岐にわたる研究室があり、我々の日常で身近に起こり得る様々な危険について深く研究されていることがわかる。科警研の取材では、秘匿事項があるため、見聞きしたすべてを記事にできていないが、分析化学と実社会との繋がりが十分に感じられた訪問取材であった。

最後になりましたが、8月の暑い中、「ぶんせき」誌取材を快く受けてくださいました科警研法科学第三部の皆様、長時間にわたり、各研究室をご案内して頂きました法科学第三部付主任研究官 鈴木康弘氏に厚く御礼申し上げます。

〔東邦大学薬学部 福島 健〕
〔石福金属興業株式会社 島田 健吾〕



新年の博物館もうで

愛媛大学の座古 保先生よりバトンを受け継ぎました。物質・材料研究機構（NIMS）の中西 淳です。以前にぶんせき誌の編集委員を担当していたときに、勝手にリレーエッセイは若い人が書くものと思っておりましてので、逃げ切れたと安心していたのですが、座古先生から有難い（？）お声がけをいただき観念しました。自分の年齢にもなるプライベートをさらけ出すにもなかなか気が憚りますが、筆を執ることに致しました。まとまりのない駄文をご容赦下さい。

この原稿がぶんせき誌に掲載されるのは、新年度が始まる4月頃とのこと。私はその3か月前の正月休みにこの原稿を書いています。少し季節外れで恐縮ですが、会員の皆さんは、年始めに毎年決まって行う行事などがありますか？親戚巡り、家族サービス、初詣、初売りでの買い物、連日連夜の暴飲暴食などの定番（？）や、研究者ならではの論文・審査作業など、人それぞれの行事があるのではないのでしょうか？

さて私はと言うと、ここ数年の新年の恒例行事は「博物館に初もうで」であります。何を隠そうトーハク（東京国立博物館）が新年の集客のために行っているイベント名そのままなのですが、常設展の入場料千円で、新春特別の国宝の公開や、干支にちなんだ美術品や工芸品などちょっとした展示などが見られ、穏やかな心持ちで新年を迎えることができます。特に今年はコロナが5類に移行されて初めての正月休みということで、外国人観光客も多く、漸く日常が戻ってきたことを嬉しく感じておりました。

博物館では、展示品自体はさることながら、そこに訪れる多種多様な入場者を観察するのもなかなか面白いものです。作品にかじり付くように接近して写真を撮りまくる人や、腰掛けに座って遠くからじっと一つの作品を見つめ続ける人、二人で論評する夫婦など、本当に人それぞれです。今風の格好をしたお洒落な若い女性が、和風な蒔絵経箱を見ながら一生懸命メモ書きする姿を見かけ、自身のデザインの参考にしているのかなと勝手に想像しておりました。なるほど、ここから仕事のインスピレーションを得るのもアリだなと。

ということで完全に私の妄想はじまりで（笑）、日本の考古における道具の発展の経緯を見ながら科学に思いを馳せることにしました。注目ポイントは最近気になっている積層造形技術との関係です。

最初に目にしたのは旧・新石器時代の狩猟道具です。当初は打製石器と呼ばれる石をたたいて（削って）つくるシンプルなものだったのですが、より機能的な形にするため、擦って成形する磨製石器へと移っていったそうです。どうやら削ってモノを作るという考えは、人類にとって極めて自然な発想のようです。

次に現れるのが縄文・弥生などの食・祭事用の土器たち。粘土から器の形を作り、素焼きして出来上がります。ここで驚いたのがその粘土のくみ上げ方です。現代の陶芸体験などでは、粘土の塊をろくろで回しながら溝を付けて成形するなど、「削られる」ことで陶器が作られます。それに対して当時の土器は、紐状に伸ばした粘土紐を輪積みし、それを繰り返して行くことで器の形を作っていたそうです。この方法などはまさしく積層造形の作り方そのものです！モノ作りの革命とも呼ばれる積層造形技術ではありますが、実はそのハシリは土器時代から始まっていた？と勝手に想像して一人で盛り上がっておりました（笑）

弥生時代の後半になってくると、今度は銅器などの金属製の考古品が現れてきます。これらは、石や粘土などを彫って鋳型を作り、そこに溶解した金属を流し込んで、模様・形状を転写することで鋳造されます。ポリジメチルシロキサン（PDMS）マイクロデバイスなどと同じ方法ですね。現代の主要なモノ作り技術の根幹がこのころに確立されたようです。

それ以降は、あまりモノ作りの手法に大きな変化がないように見えました。石・木製の仏像や近代芸術の彫刻なども、基本は彫って・削ってモノをつくるという観点では違いがなさそうです。ズブの素人である私の独断と偏見に基づいた解釈なので、芸術を生業にしている方からすると見当外れかもしれません。ごめんなさい。ただ、こういった異文化に触れながら、好き勝手な想像を巡らせるのも新春の行事として楽しいものだなと満足しながら博物館を後にしたのでした。

さて次号ですが、バイオマテリアル関係でいろいろと交流させて頂いている慶應大学の長瀬健一先生に引き受けて頂くことになりました。長瀬先生、急なお願いにもかかわらずご快諾頂き本当にありがとうございます。それではどうぞよろしくお願いいたします。

〔国立研究開発法人物質・材料研究機構 中西 淳〕

受賞者名：北條 三奈

受賞論文題名：紫外線照射下での光分解反応速度の違いに基づく
遊離塩素と結合塩素の FIA 同時定量

掲載ページ：「分析化学」第 72 巻第 1・2 号，25-32 ページ



北條 三奈¹，河野 俊貴²，棚田 智大²，飯山 真充³，高柳 俊夫⁴，水口 仁志^{*4}

(¹徳島大学大学院創成科学研究科理工学専攻応用化学システムコース，²徳島大学理工学部理工学科応用化学システムコース，³野村マイクロ・サイエンス株式会社，⁴徳島大学大学院社会産業理工学研究部理工学域応用化学系)

「分析化学」編集委員会では、「分析化学」誌の若手研究者の初論文特集に掲載された論文の中から、最も優れていると認められる論文の筆頭著者に、編集委員長名で「分析化学」若手初論文賞を授与しています。本年度は多くの優れた論文の中から受賞論文 1 編を選考しました。その受賞者として、北條三奈君が選定されましたので、お知らせいたします。

【選定理由】

今日の急速な経済発展と人口増加に伴い、衛生的な水の確保は世界的に喫緊の課題となっている。水道水をはじめとする公共用水の消毒には主に塩素が用いられる。残留塩素は、次亜塩素酸のような遊離残留塩素と、クロラミンなどの結合残留塩素に大別される。前者は強い酸化力を持ち、安価で取り扱いが容易であることから消毒剤として広く用いられ、後者は、比較的長い期間活性が持続するため細菌の復活増殖や再汚染の防止に有用である。日本では、水道法施行規則第 17 条により、給水栓において遊離残留塩素が 0.1 mg L^{-1} (結合残留塩素の場合は 0.4 mg L^{-1}) 以上保持するよう定められている。また、残留塩素は水質管理目標設定項目にも指定されており、その目標値は 1.0 mg L^{-1} 以下である。このように、残留塩素濃度を適切に管理することは、人々が生活する上での衛生環境の向上と快適性の確保には不可欠である。

フローインジェクション分析 (FIA) は、分析の自動化や多くの試料を短時間で処理する分析用途に向いており、残留塩素の定量分析に関してもいくつかの報告例がある。例えば、ジエチル-*p*-フェニレンジアミン (DPD) と、遊離塩素や結合塩素との反応速度の違いに基づく段階的な吸光度変化から分別定量する手法や、残留塩素とヨウ化物イオンとの反応で生成するヨウ素から間接的にアンペロメトリー検出する手法が報告されている。しかしながら前者では検出器を二つ使用する不便性があり、後者では遊離塩素と結合塩素を分別することができなかった。

そこで本論文の著者らは、遊離塩素と結合塩素の間の光分解反応の速度差に着目し、この性質を利用することで分別定量が可能であると考えた。本研究で提案する手法では、試料注入口の下流に、ブラックライト照射と光照射の無い流路への分岐が設けられた。それぞれの流路の後段でヨウ化物イオンを含む溶液と合流させ、各流路を経由した試料に由来する独立したカソードピークを時間差で検出する。各塩素化合物の濃度は、ピーク強度との関係から予め作成した線型方程式を用いて分別定量する。次亜塩素酸イオンおよびクロラミン T を用いて当該 FIA 装置の動作を確認したところ、それぞれ良好な回収率が得られ、一度の試料注入で同時定量できることが実証された。本研究で提案する手法は、飲料水の衛生管理に広く活用できる技術として期待できる。

以上の理由により、本論文を 2023 年「分析化学」若手初論文賞受賞論文に値するものと認め、選定した。

〔「分析化学」若手初論文賞選考委員会〕

【受賞者のコメント】

このたびは「分析化学」若手初論文賞に選定していただき、編集委員をはじめとする関係者の皆様に厚く御礼申し上げます。まさか受賞できるとは思っていなかったもので、ご連絡をいただいたときは驚きました。3 年間の研究成果がこのような形で評価していただけたこと、大変嬉しく思っております。今回の受賞にあたり、熱心にご指導ならびにご助言をいただきました水口仁志先生、高柳俊夫先生に、心より御礼申し上げます。

本研究では、光照射流路と光照射のない流路への分岐を備えた FIA システムの構築やキャリアー溶液および反応試薬溶液の条件検討に苦労しました。しかし、ピーク分離に成功し、次亜塩素酸イオンとクロラミン T の同時定量ができたときは非常に嬉しく、大きな達成感を得ることができました。本研究で得た経験を活かして、今後も分析化学の発展に少しでも貢献できるよう、日々精進してまいります。

受賞論文題名：生物発光式エンドトキシン検出法の開発及び 透析液測定への応用

所載ページ：「分析化学」第 72 巻第 7・8 号，289-298 ページ



八幡 悟史¹，野田 健一¹，下村 亜依¹，小田 侑¹，荒川 智¹，八谷 宏光¹，黒田 章夫²

(¹東亜ディーケーケー株式会社，²広島大学大学院統合生命科学研究科)

「分析化学」編集委員会では、「分析化学」誌に掲載された論文の中から、独創性があり、実用的にも優れた分析技術や測定機器、並びに科学技術や産業の発展に貢献すると認められる論文の著者全員に、編集委員長名で「分析化学」産業技術論文賞を授与することにしています。本年度は多くの優れた論文の中から受賞論文として、上記の論文が選定されましたので、お知らせいたします。

【選定理由】

エンドトキシン（以下 ET）はグラム陰性菌の細胞壁に存在し、菌が死んだ際に溶液中に放出される。血中に入ると発熱やショック症状を引き起こすことがあるため、日本薬局方をはじめとする国内外の薬局方や透析液水質基準などで管理基準値が定められている。特に、透析治療に用いる透析液の管理基準値は 0.001 EU mL⁻¹（EU：endotoxin unit）未満であり、低濃度で管理されている。従来から、カプトガニの血液製剤であるライセート試薬を使用するゲル化法、比濁法、比色法の 3 法が検出法として用いられているが、これらでは分析時間が非常に長いという問題が存在していた。加えて、近年ではオンライン HDF 治療が普及してきており、透析液中 ET 濃度をより低濃度で管理することの必要性が高まっている。このため、迅速で高感度な新たな検出法が望まれていた。

著者らは、エラーブローン PCR 法を用いて、天然ルシフェラーゼにランダムに変異を導入することで、ルシフェラーゼの改良に成功した。従来の 12 倍以上の発光量を呈する、423、436、530 部位を変異させた 3 重変異体を開発した。この高輝度ルシフェラーゼと従来法でも使用しているライセート試薬を組み合わせ、生物発光式エンドトキシン検出法を開発し、迅速かつ高感度測定を可能とした。透析液中の塩化物イオンによる阻害を受けにくくする必要もあり、塩耐性を示す二つの変異（288 部位と 488 部位）を発見した。それらを組み合わせた 2 重変異体を調製し、より高い耐性を示すことを見出すことで、耐塩性ルシフェラーゼ CR を開発した。このルシフェラーゼ CR を用いることで、透析液中の成分の影響を受けずにエンドトキシンを測定することが可能となった。

この生物発光を用いたエンドトキシン測定法において、耐塩性ルシフェラーゼ CR を含む発光試薬とライセート試薬を別々に凍結乾燥した試薬キットと、透析用 ET 検出装置を開発した。ライセート試薬を含む試薬チューブに試料液を注入し、装置へセットすることで自動的に測定する装置である。比濁法や比色法などの従来法よりも短い測定時間：20 分間で検出限界 0.0003 EU mL⁻¹ を実現しており、透析液測定における管理基準値：0.001 EU mL⁻¹ 未満にも十分対応可能な性能である。医療関連 6 機関が実施した評価試験でも良好な結果を確認している。

より小型でシンプルな装置を目指し、37℃でも活性を維持できる耐熱性ルシフェラーゼを開発し、ライセート試薬、ルシフェラーゼを含むすべての試薬を 1 つの試薬チューブに入れた試薬キットとしての装置化も行った。測定時間：10 分間で検出限界 0.001 EU mL⁻¹ と良好な性能を実現している。

エンドトキシン測定にルシフェラーゼの発光反応を応用して迅速で高感度な ET 検出を可能にした、透析液の水質管理などで広く利用されている新技術に関する論文である。

本論文を 2023 年「分析化学」産業技術論文賞受賞論文に値するものと認め、選定した。

〔「分析化学」産業技術論文賞選考委員会〕

【代表著者のコメント】

この度は「分析化学」産業技術論文賞に選定いただき、誠にありがとうございます。編集委員会の先生方をはじめとする関係各位に対し、著者一同、厚く御礼申し上げます。

エンドトキシンは医療の分野で測定が必須の項目です。従来法では低濃度ほど長い測定時間が必要であり、長年にわたって迅速で高感度な測定法が求められていました。本論文では、エンドトキシンを迅速かつ高感度に測定することを目指して行った、ルシフェラーゼの改良と装置開発に関する成果を報告しました。変異型ルシフェラーゼは、エンドトキシン測定に限らず、様々な分析対象物の迅速測定や高感度測定へ応用することができます。今後も医療の安全や分析化学の発展に少しでも貢献できればと考えております。

知ってしまった分析化学者は…

水銀汚染と聞くと、まず、水俣病を思い浮かべる方は多いのではないだろうか。「水俣病は、アセトアルデヒド製造工程で副生され、工場排水とともに排出されたメチル水銀化合物が海洋生態系を通じて濃縮された魚介類を食べることによって起こった中枢神経系の病気である」とする政府公式見解が出されたのは1968年で、水俣病公式発見とされる1956年から12年も経過していた。ちょうどこの年は、硫酸水銀を触媒として用いたアセトアルデヒド生産が終了した年でもあった。1956年以降、工場は生産量を増大させ、それに伴って患者の発生数も増大した。工場が操業を止めず、水俣病の被害が拡大した背景には、工場排水が疑われていたものの、原因物質の特定に時間を要したことで、原因企業等に反論の余地を与えたことがあったかも知れない。（この間、原因企業では自社の工場排水を猫に与えると発症することを確認していたが、公表はしていない）。最終的には工場のヘドロと水俣湾産魚介類からメチル水銀化合物が検出されたことが決め手となった。分離・精製・検出を担う分析化学が重要な役割を果たした事例の一つと言える。水俣湾では、1977年から1990年にかけて行われた環境修復事業により、25 mg/kg以上の水銀を含む底質が浚渫され、埋め立てられた。現在は、再び水俣病が起こるような状況には全くないが、埋め立て地内の水銀や、表層底質に自然レベル（0.07 mg/kg）の数十倍の濃度で残留する水銀の動きには引き続き注意を払う必要があると考えている。さて、水俣の教訓に基づき、世界的な水銀の使用や取引にかかわる規制を定めた「水銀に関する水俣条約」が、2017年に発効した。国連環境計画（UNEP, 2013）の世界の水銀排出状況によると、排出量の約4割を小規模金採掘活動（ASGM）が占めている。常温で液体、多種の金属とアマルガムを生成するという水銀の特徴を利用し、ASGMでは、金鉱石から水銀を用いて金を抽出している。初めての調査地点となったインドネシア西ジャワ州では、グルンドゥンと呼ばれる器具で金の抽出を行っていた。これは、長さ約80 cm、直径約40 cmの鉄製ドラムを連結したもので、その中に、砕いた金鉱石と鉄の棒、そして、金属水銀を入れて、2～3日間連続回転させた後、内容物を水で洗い流してたらいに集め、さらに、水をざぶざぶ流して、鉱滓を洗い流す。すると、比重の重い水銀（アマルガム）が残るので、これをおけに移して、水で洗いながら石や砂を丁寧に取り除き、布

に移して絞ると余分の水銀が布を通してポロポロと除かれ、布の中に金アマルガムが残る。そのアマルガムをバーナーで炙ると、水銀は気化して除かれ、金が手に入る。作業者は、加熱中は着ているTシャツの胸元を引っ張って口と鼻を覆ったりしているが、発生した水銀蒸気をほぼそのまま吸入することになる。初めて現地で一通りの作業に立ち会った際、加熱中に口の中で水銀の味を感じ、頭が痛くなってきて、このままいたら危険だと思ったことを覚えている。そして、これらの作業を通じて水銀は、何の処理をされることなく、周辺へ流れ出ていく。乾季に測定された河川水中最高水銀濃度は0.60 mg/Lで、日本の環境基準の1200倍にもなるものだった。また、この集落での調査中に宿泊したお宅の軒下にポンプを設置し2日間にわたって2時間ごとに捕集した大気中水銀濃度の最も高い値は、10 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ を超えており、二日間の平均は約4 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ と、大気中水銀濃度の長期暴露に対する指針値0.040 $\mu\text{g}/\text{m}^3$ の約100倍の濃度だった。それも当然で、集落内の至る所に作業場があり、一晩中、あちこちからキュルキュルキュル…とグルンドゥンが回転する音が聞こえてきて、静かになるのは停電中だけだった。子ども達は、素っ裸でこの川に飛び込んで遊んだり、赤ちゃんを抱えた母親が洗濯したり、作業場では子ども達が追いかけてっこをしたりして、水銀を考えなければ、日常のほのほのした風景がそこにあった。そんな風景を前に、知ってしまった分析化学者はどうすればよいのか…。せめて、作業にかかわっている人たちに、子ども達や妊婦さんを作業場に入れないようにしてはどうかと伝えることくらいしかできなかったが、「自分は、14歳の時から10年近く作業にかかわっているので、（今はまだ何も無いが）この先はどうなるのか」と不安を訴える人もいて、一緒にいた奥さんが心配そうに寄り添っていたのが印象に残っている。中途半端に不安を与えただけだったかも知れないが、いずれ司直の手が入って、何らかの是正が勧告されたときに、それを受け入れやすい土壌を作ることにつながるかも知れないと思っている。周辺集落の世話役の立場の人たちに集まってもらって話をした時には、「自分は今住んでいるところから動くことはできない。このまま生活していて大丈夫なのか？」という声もあった。心配な人には髪の毛を採取させてもらい、次に来たときにその結果を返すと約束して、日本へ戻ったが、数カ月後にインドネシアへ調査で戻った時は、測定結果を住民に返すという話が、カウンターパートの上司の耳に入り、暴動が起こる可能性があるという理由でストップがかかってしまった。水銀という特異な元素の環境挙動を明らかにすることを目的として研究を続けてきたが、そこには社会があり人々の営みがあることは心に留めておかなければならない。ASGM集落に警察の取締が入っても、逃げた人たちは、結局広大な熱帯雨林のどこか別の場所で、採掘を始めるそうだ。脱ASGM作業者を受け入れ、ASGMにかかわらなくて済む経済基盤を社会として構築するなどの対策がない限り根本的な解決は難しいと思える。できることは限られているが、研究活動を通じて科学・技術・文化の進展および人類の福祉に寄与することを目的とする分析化学会の一員として、確実な分析データを積み重ね、それを共有することで、社会的な枠組みづくりに少しでも貢献できればと考えている。

〔鹿児島大学学術研究院理工学域理学系 富安 卓滋〕

理事会だより (2023年度第5回)

2023年度関東支部長を拝命し、今年度から支部担当理事を務めております。2023年も理事会はオンラインで開催されておりますが、9月に熊本で開催されました年会時に理事の皆様と直接お会いすることができました。オンラインは良さもありますが、直に顔を合わせて話をすると受け取れる情報量が多いことを改めて感じました。

2023年度第5回理事会は、12月18日にオンラインにて開催されました。第4回理事会議事録確認に始まり、本部活動・組織運営(キャッシュフロー、第3四半期決算、収支見込、2024年度予算素案、2024~2025年度代議員候補者及び選挙規則、年会討論会会計のための本部銀行口座開設、会計処理規定改定案、定款改訂案、旅費規程改訂、役員職務分担)、広報事業・会員管理(HP更新、会員現況・入退会状況)、学会合事業(第72年会報告、第84回分析化学討論会進捗報告、第73年会進捗報告、第85回分析化学討論会進捗報告、2025年ASIANALYSIS XVII開催、他学協会からの協賛等名義申請)、学術振興(学会賞等審査委員選出進捗、男女共同参画推進委員会、姓名の英文表記について、女性Analyst賞規定改訂、奨励賞規程改訂)、社会活動(標準物質委員会からの提案、産官学連携委員会について)、及びインボイス制度に関連する電子帳票保存制度対応状況などが審議・報告されました。盛り沢山な内容であったこともあり19時近くまで議論が続きました。オンラインでは帰りの電車の時刻を気にする必要がないので、長くなりがちでしょうか。さて、今回の理事会で、年会及び討論会実行委員会で使用できる銀行口座が本部で開設されたことが報告されました。近年、実行委員会をみなし法人として新しく銀行口座を開設することが大変厳しくなっていた状況でした。これまでも実行委員の皆様がご苦勞されていたことと拝察いたします。事務局の皆様のご尽力で突破していただけたのは本当にありがたいことです。感謝申し上げます。必ずしもこの口座を使用する必要はないとのことですが、年会及び討論会として2口座ずつ(奇数年、偶数年に対応)準備いただきました。ネット銀行口座なので全国どこでも対応できる点も便利です。まずは第73年会で利用いたします。また、会員現況の報告として会費未納入のため、退会になる会員のリストが提示されました。本会定款によると、第13条に支払義務を1年以上履行しなかったときは、会員資格を喪失すると記載されています。メール及び郵便で本部から連絡を入れていただいておりますが、埋もれてしまっていないでしょうか。もし、思い当たる節がございましたら、ぜひ会費納入をよろしく願いいたします。理事会での議題は多岐に渡り、本会の活動の広さを再認識しています。分析手法はあらゆる場面で使われていますので、多少なりとも分析に関わっている方はとても多いはずで、そのような方々にも本会に興味を持っていただけるようになると、さらに発展できると思います。皆様のご協力をよろしくお願いいたします。

〔関東支部担当理事 安田 純子(株式会社コーセー)〕

熱分析研究懇談会と

高分子分析研究懇談会(417回)の合同例会

熱分析研究懇談会と高分子分析研究懇談会(417回)の合同例会が2023年12月22日に明治大学駿河台校舎グローバルホールにてリアル形式で開催された。プログラムは午前2公演、午後2講演の合計4講演で熱分析研究懇談会・高分子分析研究懇談会合わせて52名の参加があった。最初に熱分析研究懇談会の西本右子委員長(神奈川大学)より開会の挨拶があった。

引き続き阿部陽香先生(産業技術総合研究所)に「比熱容量・熱伝導率に関する熱物性計測技術の開発」の演題でご講演いただいた。比熱容量と熱伝導率は、熱膨張率、熱拡散率とともに、物質・材料の熱特性を評価するために不可欠な物性値であり、特に環境・エネルギー分野を中心とした材料開発において求められる蓄熱性や断熱・遮熱性等を決定する役割を担っている。測定対象の種類や形態が多様化する近年では、実測値の信頼性の向上が求められている。比熱容量測定について、一般的に広く使用されている示差走査熱量計による比較測定法と、絶対測定法である断熱法について講演いただき熱伝導率については、新しい定常法での装置開発と測定例をご紹介いただいた。

2件目は「高分子分解酵素資源の開拓」で飯塚怜先生(東京大学大学院理学系研究科)にご講演いただいた。現在産業利用されている酵素の多くは微生物由来であり、有用な酵素は新規の微生物から発見されることが多いが環境中の99%以上の微生物が難培養性微生物とされている。微生物の分離・培養を行わずに、環境中に存在する微生物群集のゲノムを抽出し、その中から標的とする酵素遺伝子を取得する方法にメタゲノム法が利用されているがこの方法は、培養法では得られない新規の酵素遺伝子が取得できる反面、多大な時間・労力・コストを要することに加え、それに見合うだけ成果が得られないことが問題となっている。講演では培養を介さずに微生物一細胞の酵素を「見える化」し、その遺伝子を取得する方法として、環境中の微生物を一細胞単位で微小な油中水滴に封入する発光基質を用いた方法をご紹介いただいた。さらに、ハイドロゲルを封入した油中水滴は外力による変形を受けにくいので、油中水滴内でハイドロゲルが酵素により分解されると外力により油中水滴が変形しやすくなる特性を利用した事例をご紹介いただいた。

午後からの3件目は「蓄熱性低分子の示す冷結晶化の熱分析および結晶構造解析」の演題で本田暁紀先生(中央大学理工学部応用化学科)にご講演いただいた。蓄熱材料としては基礎研究の段階ではあるものの、社会排熱の大半を占める低温排熱の蓄熱材料として期待される冷結晶化低分子についてご紹介いただいた。冷却時の結晶化を遅延させる分子設計によってアルキル基を導入したジケトピロピロール(DPP)色素において冷結晶化が発現することを発見し、色素分子の冷結晶化に着目した第一報となった。芳香環の運動性やアルキル基の柔軟性に着目し、アゾ色素系においても冷結晶化分子を発見することに成功し、金属錯体の系においては、各種置換基を有する分子を

合成して比較を行うことで、分子の立体障害が重要であることが判明した。また、核酸塩基の系において相補的な水素結合を形成する塩基対を混合すると冷結晶化が生じる事例をご紹介いただいた。

最後に4件目は青柳将先生（産業技術総合研究所）に「樹脂・ゴム材料の化学構造と耐久性を評価する「材料診断」」でご講演いただいた。樹脂やゴム材料はさまざまな外観や物性を作り出すことができるため、あらゆる産業において、なくてはならない材料となっている。製品の特性向上や不具合に対応するためには、適切な分析によりその発現メカニズムを理解し、鍵となるパラメータを把握することが重要であり化学構造に基づく「材料診断プロセス診断」による解決をするための先端計測機器やインフォマティクス技術を活用した化学構造解析や耐久性評価に関する材料診断技術の開発例を紹介いただいた。リサイクルPPについて10種を熱分解GC/MS、FT-IR、熱分析によって計測しマルチデータを統合、データインフォマティクスによって解析し由来の異なるポリプロピレン再生樹脂の品質判定に成功した。また添加剤の迅速分析についてリサイクル材の品質保証に必要な分析解析を簡略化し使いこなし技術の事例としてDARTによる簡易質量分析技術とインフォマティクス解析技術を組み合わせた事例をご紹介いただいた。

講演後は懇親会も開催した。熱分析研究懇談会と高分子分析研究懇談会の垣根を超えた活発な交流となり大変有意義な時間となった。

〔日本分析工業(株) 鈴木〕



第391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、2024年1月24日に栗田工業(株)（東京都昭島市）にて開催された。講演主題は「材料分析における検出器の有効活用」として六つの講演が行われた。機能性材料の分析では、より複雑な組成を含む合成高分子やそれに含まれる添加剤の解析等にLCは欠かせない技術である。このような材料分析においては、様々な検出器を駆使し、定性から定量まで幅広く対応することが求められている。本例会では、材料分析における検出器の選定のポイントや活用方法、実際の分析事例についてご講演いただいた。参加者は19名であった。

講演に先立ち、オーガナイザーである筆者より、講演主題概説についての紹介を行った後、6名の講師による講演が行われた。

1演題目は、日本ウォーターズ(株)の島崎裕紀氏より「有機材料分析における検出器選択のポイント」と題する講演があった。有機材料の物性や分析目的はさまざまであり、検出器のほかにも適切な前処理方法を選択する必要がある旨の説明と、SECに複数の検出器を併用したポリマー分析事例についての紹介があった。

2演題目は、アジレント・テクノロジー(株)の飯室龍之介氏より「添加剤/界面活性剤分析における検出器の使い分け」と題する講演があった。汎用検出器の特徴や、目的に応じた検出器の選択に関する解説と、LC/MSを用いた最新の界面活性剤の分析事例についての紹介があった。

3演題目は、東ソー(株)の伊藤誠治氏より「高分子材料/製品分析におけるHPLCの活用事例」と題する講演があった。高分子材料を評価する目的のうち、構造解析に用いられる手法としてSEC-IRやSEC-MALS、成分分離に用いられる手法としてICやSECが挙げられ、それぞれを用いたときの分析事例について紹介があった。

4演題目は、日本電子(株)の佐藤貴弥氏より「材料分析における高分解能質量分析計とKMD解析の最新動向」と題する講演があった。クロマトグラフィーとKendrick Mass Defect (KMD)解析を組み合わせたポリマーの分析として、SEC分画とMALDI-TOFMSを組み合わせてポリマーの組成及び末端構造を解析した事例について紹介があった。

5演題目は、栗田工業(株)の榎本幹司氏より「PFAS分析条件の検討事例」と題する講演があった。欧米を中心に規制強化が加速されるなか、PFOS、PFAS、PFHxSの分析条件検討結果と、煩雑な前処理を効率よく行うための工夫について紹介があった。

6演題目は、東京理科大学の中村 洋先生より「材料分析における検出器の有効活用」総括が行われた。各講師への質問や補足の後、全体についてのまとめがなされた。

講演の休憩時間中に、栗田工業(株)様の研究所「Kurita Innovation Hub」の見学会が開催された。該社は社内外の交流・協働を通じたイノベーション創出の加速を積極的に推進している旨の説明と、分析実験室および水のろ過設備の見学があった。

その後、講師を囲んでの情報交換会が行われ、和やかな雰囲気の中意見交換が行われた。参加者は12名であった。研究所見学という新たな試みもあり、話も弾み参加者同士の親睦が深められた。

最後に、会場をご提供、研究所見学会を開催いただいた栗田工業(株)様、ご多忙にもかかわらず講演していただいた講師の皆様、ご多忙にもかかわらず講演していただいた講師の皆様、ご多忙にもかかわらず講演していただいた講師の皆様、運営にご協力いただいた役員の皆様、御礼申し上げます。

〔出光興産(株) 村上 祐子〕

執筆者のプロフィール

(とびら)

山本 雅博 (YAMAMOTO Masahiro)

甲南大学理工学部機能分子化学科 (〒658-8501 兵庫県神戸市東灘区岡本 8-9-1). 京都大学大学院工学研究科工業化学専攻修士課程修了. 工学博士. 《現在の研究テーマ》第一原理計算をベースとした電気化学デバイスの物性評価. 《主な著書》“実験データを正しく扱うために”, 前田耕治, 山本雅博, 加納健司, (化学同人). 《趣味》プログレッシブロック鑑賞.

(ミニファイル)

小椋 俊彦 (OGURA Toshihiko)

国立研究開発法人産業技術総合研究所 (〒305-8566 茨城県つくば市東 1-1-1 中央第 6 事業所). 豊橋技術科学大学大学院工学研究科博士課程システム情報工学専攻修了. 工学博士. 《現在の研究テーマ》溶液中の生物試料や材料試料の高分解能観察技術の開発. 《趣味》音楽鑑賞.

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

(トピックス)

坂牧 寛 (SAKAMAKI Hiroshi)

一般財団法人化学物質評価研究機構 (〒345-0043 埼玉県北葛飾郡杉戸町下高野 1600 番地). 岐阜大学大学院工学研究科. 博士 (工学). 《現在の研究テーマ》オリゴスクレオチドの分析法開発. 《主な著書》“医療/化粧品分野での HPLC・GC 分析テクニックと分析事例”. (分担執筆), (技術情報協会). 《趣味》マラソン, スキー.

E-mail : sakamaki-hiroshi@ceri.jp

岡本 行広 (OKAMOTO Yukihiko)

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: 新しい地平をひらく分析手法の最前線 (化学フロンティア), (化学同人). 《趣味》旅行.

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

(リレーエッセイ)

中西 淳 (NAKANISHI Jun)

国立研究開発法人物質・材料研究機構高分子・バイオ材料研究センター (〒305-0044 茨城県つくば市並木 1-1). 東京大学大学院理学系研究科化学専攻博士課程修了. 博士 (理学). 《現在の研究テーマ》メカノバイオリジーのための機能性材料の開発. 《主な著書》“Material-based Mechanobiology”, (Royal Society of Chemistry), (2022). 《趣味》カレー.

(ロータリー・談話室)

富安 卓滋 (TOMIYASU Takashi)

鹿児島大学学術研究院理工学域理学院 (〒890-0065 鹿児島市郡元 1-21-35). 鹿児島大学大学院理学研究科修士課程化学専攻修了. 博士 (理学). 《現在の研究テーマ》水銀, ヒ素, セレンなど微量元素の環境挙動の解明. 《趣味》美味しいビールを飲むこと.

E-mail : tomy@sci.kagoshima-u.ac.jp

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 : bunseki@jsac.or.jp]

目 次

年間特集「分」：報 文

- 四国山岳地域における渓流水中硫酸イオンの長距離輸送及び国内起源に基づく
地質環境画分と大気降下物画分の推計法
…………… 今井昭二・山本祐平・長崎昌太・黒谷 功・上井優佑・奥田桂子・中尾佑子 131

年間特集「分」：ノ ー ト

- ショウガの加熱調理における主要成分濃度及び抗酸化能への影響
…………… 伊藤里恵・坂本真央・藤本友紀・吉村吉博・斉藤貢一・穂山 浩 141

総合論文

- 因子分析と X 線吸収分光 —化学種・化合物同定への応用— …………… 池田篤史 147
生体イメージングのための近赤外光を吸収する白金(II)錯体プローブ …………… 鈴木敦子 161
工業用無補充式セルフクリーニング pH 電極の製品開発
…………… 西尾友志・室賀樹興・高味拓永・橋本忠範・石原 篤 171

技術論文

- 親水性-親油性バランス型充填剤を用いる簡便な固相抽出精製による
二枚貝中オカダ酸群の精密定量
…………… 鳥居塚 南・上原由理香・長谷川守文・渡辺卓穂・鎗田 孝 185

技術論文 (若手初論文)

- 高濃度界面活性剤含有試料中の香料の定量分析法開発 I
—柔軟仕上げ剤— …………… 佐藤惇志・筒井拓也・埴原鉦行 193

アナリティカルレポート

- マグネシウム及びマグネシウム合金標準物質 (JSAC 0141-0143, JSAC 0151-0154) の開発
…………… 上本道久・菊池鉄男・佐々木美波・中村利廣・駒井 浩・川田 哲・
野呂純二・藤本京子・板橋大輔・小沢 洋・小島勇夫・柿田和俊・大澤隆雄 201
候補標準物質を用いる中鎖塩素化パラフィン分析法の比較研究 …………… 羽成修康・中野 武 213

- 「分析化学討論会」特集の論文募集 …………… 219

- 「分析化学」年間特集“分”の論文募集 …………… 220

- “第23回若手研究者の初論文特集”募集のお知らせ …………… 222

- テンプレートによる投稿要領 …………… 223

- 「分析化学」に投稿される皆様へ …………… 224

「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。

◇毎年4月は新年度の始まり。桜が咲き、研究室や職場の環境が変わって、新鮮な日々を過ごされている方も多いのではないでしょうか。中には今号から「ぶんせき」誌を読み始めた、という方もいらっしゃるかもしれません。“初めまして”の方、これからよろしくお願ひ致します。諸先輩方の努力を引き継ぎ、分析化学者の皆様に役に立つ情報をお届けできればと思います。

◇「とびら」では、近畿支部長の山本雅博先生に『All in all it was all just bricks in the wall』と題し、これからの分析化学者の心構えを示して頂きました。「リレーエッセイ」では物質・材料研究機構 中西淳先生に「新年の博物館もうで」と題し魅力的な博物館での鑑賞法をご教示頂きました。他にも入門講座・トピックス・話題・技術紹介など、多様な記事がございます。お目当て以外の記事にも目を通してみると、新しい発見やヒントになることがあるかもしれません。

◇読者の皆様、今「暑い」と感じているのでしょうか？ それとも「寒い」と感じているのでしょうか？ この時期は寒暖差が激しく、嵐や花粉もあり、意外に厳しい季節です。予報等から天候を適切に「分析」頂き、服装ほかの対策をなさって、体調を崩さぬようお過ごし下さい。

[H. T.]

〈とびら〉

災害時における分析化学を考える……………大江 知行

〈入門講座〉 データ解析：定量・定性からビッグデータの解析まで
クロマトグラフィーの基礎

～定量・定性からデータ解析まで～……………藤崎 真一

〈ミニファイル〉 非破壊・固体分析

フーリエ変換赤外分光法……………新居田 恭弘

◇ 編 集 委 員 ◇

- | | | |
|----------------------------|----------------------|-----------------------|
| 〈委員長〉 四宮 一 総 (元 日 大 薬) | | |
| 〈副委員長〉 市場 有 子 (ライオン(株)) | | |
| 〈理 事〉 津越 敬 寿 (産業技術総合研究所) | | |
| 〈幹 事〉 稲川 有 徳 (宇都宮大院地域創生科学) | 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) |
| | 橋本 剛 (上智大理工) | |
| 〈委 員〉 石橋 千 英 (愛媛大院理工) | 上田 忠 治 (高知大農林海洋科学) | 岡崎 琢 也 (東京都立大都市環境科学) |
| | 岡林 識 起 (関西学院大生命環境) | 勝又 英之 (三重大院工) |
| | 古賀 舞 都 (農研機構) | 坂 真 智子 (株 エ ス コ) |
| | 東海林 敦 (東京薬科大薬) | 末吉 健志 (大阪公立大院工) |
| | 高橋 豊 (EMIS・ソリューションズ) | 谷合 哲行 (千葉工業大先進工) |
| | 原田 誠 (東工大理) | 半田友衣子 (埼玉大工) |
| | 三原 義 広 (北海道科学大薬) | 盛田 伸一 (東北大院理) |
| | 山崎 由 貴 (国立医薬品食品衛生研) | |
| | | 北牧 祐子 (産業技術総合研究所) |
| | | 島田 健吾 (石福金属興業(株)) |
| | | 高橋 幸奈 (九州大カーボンニュートン) |
| | | 原賀 智子 (日本原子力研究開発機構) |
| | | 福島 健 (東邦大薬) |
| | | 山口 浩輝 (味の素(株)) |

☒ 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(著作物の転載願ひ等)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 2024年 第4号 (通巻592)

2024年4月1日印刷

2024年4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

© 2024, 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73年会

日本分析化学会第73年会を以下のように開催します。本年会の講演申込及び講演要旨の入力は、Webからオンラインで申込者に行っていただきます。また、講演要旨集はWeb上の電子配布といたします。講演要旨は1講演あたりA4判1ページです。講演募集の詳細は本誌5月号の「お知らせ」及び第73年会ホームページでお知らせします。講演および参加の申込については、以下のスケジュールで予定しています。

記

年会期日 2024年9月11日(水)～13日(金)
 年会会場 名古屋工業大学〔愛知県名古屋市昭和区御器所町〕
 懇親会 2024年9月12日(木)
 懇親会会場 名古屋市公会堂
 〔愛知県名古屋市昭和区鶴舞1-1-3〕
 講演申込・参加登録開始 4月24日(水)
 講演申込締切 6月5日(水)
 要旨本文締切 7月3日(水)
 事前参加登録締切 8月28日(水)
 参加登録費 予約：会員12,000円、学生会員4,000円、会員外21,000円、会員外学生7,000円〔当日：会員15,000円、学生会員6,000円、会員外24,000円、会員外学生8,000円〕
 懇親会参加費 予約：一般10,000円、学生4,000円〔当日：一般12,000円、学生5,000円〕
 シンポジウム
 1. 「文科省科研費学術変革領域研究(B)「細胞から環境水へと繋ぐスケール横断分析」網羅的的化学情報の取得を可能とするセンサの実現」
 2. 産業界シンポジウム
 3. 大谷肇前会長を偲んで
 詳細は、第73年会ホームページをご覧ください。

日本分析化学会創立60周年記念事業 「試料分析講座」新刊刊行 ならびに会員特別価格のご案内

創立60周年記念事業の一環として「試料分析講座」を刊行してまいりました。すでに「創業における分析化学—開発タイムラインにそった全過程」「鉄鋼分析」「食品分析」「元素の分析」「脂質分析」「アミノ酸・生体アミン分析」「タンパク質分析」「高分子分析」「半導体・電子材料分析」「糖質分析」は丸善出版から刊行されております。このたび最新刊の「ビタミン・ミネラル」が刊行され、会員の皆様に下記のとおり特別価格を設けておりますので、ぜひこの機会をご利用ください。

1. 書籍の概要・会員特別価格

●試料分析講座 ビタミン・ミネラル

A5判、256ページ、本体価格5,400円→会員特別価格4,860円(税別)

ISBN 978-4-621-30889-9

本書の概要：

ビタミンとミネラルはいずれもヒトの生体機能維持に必須の五大栄養素であり、広範な分野でそれらの測定が求められています。

本書では、ビタミンとミネラルの分析法を、実務に役立つ観点で詳細に解説。ビタミンの分析では、微生物学的定量法と、高速液体クロマトグラフィーなどを用いた一斉分析の手法を説明しています。ミネラルの分析では、栄養表示基準に採用されている吸光光度法、原子吸光分析法、誘導結合プラズマ発

光分析法に加え、ICP質量分析法をはじめとするさまざまな高感度・高選択的機器分析法を取り上げました。さらに、生体内ミネラルのケミカルスペシエーションやイメージング、メタロミクスについても詳述しました。

食品・生体試料の分析に関わる学生・技術者・研究者必携の一冊です。

おもな目次：

- 概説
 ビタミンの種類と生体内での役割/ビタミンの分析法/ミネラル(無機質)の種類と生体内での役割/ミネラルの分析法/生体内ミネラル研究の新展開
- ビタミン・ミネラル分析のための試料前処理
 ビタミン分析のための試料前処理/ミネラルおよび生体無機イオン分析のための試料前処理
- 脂溶性ビタミン
 高速液体クロマトグラフィーによる一斉分析/キャピラリー電気泳動による一斉分析/脂溶性ビタミンの個別分析法
- 水溶性ビタミン
 高速液体クロマトグラフィーによる一斉分析/キャピラリー電気泳動による一斉分析/水溶性ビタミンの個別分析法
- その他のビタミン様作用因子
 ユビキノン/必須脂肪酸/カルニチン/myo-イノシトール/コリン/p-アミノ安息香酸/ビタミンP/ビタミンU
- ミネラル・生体無機イオン
 陽イオン/陰イオン
- 生体内金属のスペシエーション
 はじめに/ヒ素化合物/セレン化合物/その他
- ミネラルイメージング技術
 はじめに/蛍光イメージング/おわりに
- 金属をめぐる最近の話題
 メタロミクスの新展開/安定同位体元素を用いた微量元素のメタボロミクス研究

また、試料分析講座シリーズ既刊および『分析化学便覧』『分析化学データブック』など関連書籍も、10～30%引きの特別価格にて購入可能です。詳細は下記URLよりご確認ください。

2. お申込み方法・詳細

<https://www.maruzen-publishing.co.jp/contents/jsac2024/form.html> をご覧ください。

ID : jsac2024 パスワード : cabc4RuG

申込期限：2024年4月15日(月)注文分まで

※お申込みには、日本分析化学会の会員番号の入力が必要です。

※別途送料(全国一律500円+税)がかかります。

※上記URLは3月1日付のメールマガジンでもご案内しています。

3. 注文の問合せ先

丸善出版(株)営業部〔〒101-0051 東京都千代田区神田神保町2-17 神田神保町ビル6階、電話：03-3512-3256、E-mail : pub_sales_1@maruzen.co.jp〕

第394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(申請中)、(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

お知らせ

我々を取り巻く環境は日々変化しており、未知の化学物質の脅威や新たなリスク管理の必要性に対応した法規制は強化される傾向にあります。それに伴い、試験に用いる水や試薬の品質やトレーサビリティ、適切な前処理法、最適な分離及び検出法、等の環境分析に関わる各要素の重要性も高まっています。本例会では、これらの種々の要素に関する技術開発やノウハウ、及び分析事例についてご紹介いただきます。

期日 2024年4月23日(火) 13.00~17.15

会場 ㈱島津製作所殿町事業所/Shimadzu Tokyo Innovation Plaza〔神奈川県川崎市川崎区殿町3-25-40、交通：①京急大師線「小島新田」駅より徒歩12分、②京浜急行電鉄・東京モノレール「天空橋」駅よりバス/タクシー10分、バス：大109大師橋駅前「殿町三丁目」下車、③JR「川崎」駅よりタクシー約20分

<https://www.shimadzu.co.jp/aboutus/company/access/tonomachi.html>

講演主題 環境分析に関わる種々の技術～水、試薬、前処理、分離、検出～

講演

講演主題概説(オーガナイザー)(13.00~13.05)

(東ソー㈱)伊藤誠治

(LC分析士五段、LC/MS分析士二段)

1. 環境分析における超純水の重要性とその精製方法
(13.05~13.35)

(メルク㈱)石井直恵

(LC分析士二段)

2. JCSS制度における標準物質について
(13.35~14.05)

(関東化学㈱)坂本和則

(LC分析士二段)

3. 水道法関連分析に用いるJCSS標準液の開発
(14.05~14.35)

((一財)化学物質評価研究機構)坂牧 寛

(LC分析士二段、LCMS分析士初段)

4. 環境分析のための前処理における注意点と改善点
(14.35~15.05)

(ジールサイエンス㈱)坂井拓斗

(2024年度LC分析士初段取得予定)

休憩(15.05~15.20)

5. 様々なマトリックスでのPFASの前処理とLC/MS分析の事例紹介(15.20~15.50)

(アジレント・テクノロジー㈱)山下和之

(LC分析士初段)

6. LC-MS/MSを用いた蜂蜜中の農薬成分とその代謝物の同時測定(15.50~16.20)

(㈱島津製作所)渡邊 淳

(LC分析士初段)

7. 残留移動性有機化合物(PMOCs)の分析法の検討
(16.20~16.45)

(東ソー㈱)伊藤誠治

(LC分析士五段、LC/MS分析士二段)

8. 総括「環境分析に関わる種々の技術～水、試薬、前処理、分離、検出～」(16.45~17.15)

(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 ①LC研究懇談会・個人会員、学生：1,000円、②LC研究懇談会・団体会員：2,000円、③後援学会・個人会員：3,000円、④後援学会・団体会員：4,000円、⑤その他：5,000円

参加申込締切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5,000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 4月16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研究懇談会・個人会員、協賛学会・個人会員、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欄に「第394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、必ず期限内に研究懇談会参加費、情報交換会費の納入を行ってください。期限内に納入が確認できない場合、お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。当日払いは受け付けません。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、2024年4月17日以降に要旨集をメールにてお送りいたします。必要に応じてプリントアウトしてご参加ください。なお、請求書の発行はいたしておりません。

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/XFbdKuGQMds0q84E7>

(学生申込者は、所属欄に大学名、学部、学年を記載)

銀行送金先 りそな銀行五反田支店(普通)1754341、口座名義：シヤ)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㈱ 伊藤誠治
[E-mail: seiji-ito-pn@tosoh.co.jp]

2024年度「ぶんせき講習会」(基礎編その1)

「分析における統計手法

～統計の基礎と統計手法の実際について～」

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、(公社)日本金属学会関西支部、関西分析研究会

近年の分析機器は高性能化が進み、その操作は簡便化しています。このため初心者でも測定が容易となった反面、分析機器がブラックボックス化し、コンピュータ処理された数値として測定データが出力されることが多いため、その値が意味あるものかを吟味することや有効数字を考慮することが少なくなったように見受けられます。

そこで本講習会では、主に分析初心者および統計に関して再度学習したい方を対象に、分析化学の基礎である「有効数字、

測定データの統計処理」の講義と演習を企画しました。これにより統計に関する基礎を習得できます。

期日 2024年5月10日(金) 9.45~16.30

会場 Cisco Webex を用いたオンライン開催

※近畿圏内に限らず全国からのご参加をお待ちしております。

講習内容 統計に関する基礎的な演習と講義

対象者 これから分析化学に携わる初心者(新入社員あるいは研究室配属直後の学生)や「有効数字、測定データの統計処理」を学び直したい方

講習プログラム

本講習会の開催にあたって(9.45~10.00)

1. データ取扱いの初歩—計測と有効数字—(10.00~10.50)
(阪公大院工)末吉健志
2. 繰り返しデータの統計の基礎—誤差と信頼区間—
(11.10~12.10)
(京大院工)横山悠子
3. 各種検定の考え方と実際(13.30~15.00)
(神大院海)貝野友祐
4. 最小二乗法によるデータ解析(15.20~16.30)
(高エネ研)武智英明

*参加者には事前に電子メールにてPDF資料(当日のテキストと演習問題を含む)のダウンロード方法に関する案内および受講方法の詳細を記したメールを送付します。

*演習問題は、当日に講師がオンライン講習にて解答を解説します。

*各自ご用意いただくPCにウェブミーティングソフトのCisco Webexをインストールください。お申込みいただいたメールアドレスにWebexミーティング招待状を送付します。当日はWebexの招待メールからミーティングルームにログインしてください。

*講習会の約1週間前に接続テストを実施します。ご自身のパソコンでWebexを利用可能かご確認ください。

*演習問題では、関数電卓を使用いたしますので、各自でご用意ください。なお、書籍「実験データを正しく扱うために」(化学同人)を参考図書としています。

申込締切 4月26日(金)、定員(100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。4月26日以降のキャンセルは不可。

参加費 主催・協賛団体所属会員6,000円、学生2,500円、会員外10,000円

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.234072 6、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。

申込先 〒550-0004 大阪市西区朝本町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/>]

問合先 山本茂樹(大阪大学)

[E-mail:ysigeki@chem.sci.osaka-u.ac.jp]

第395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(申請中)、(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シニアクラブ

HPLCカラムは、試料に含まれる化合物を分離するための重要な部分です。その選択は、分析の精度と効率に大きく影響します。カラムは、内径、長さ、粒子径などの物理的特性と、逆相、順相、サイズ排除などの分離モードによって分類され、これらの特性は、分離の効率や感度などに影響を与えます。そこで、本例会では、各分離モードのカラムにフォーカスした基礎的な内容を中心にご講演いただきます。ぜひこの機会にご参加いただき、皆様のご活躍の一助となれば幸いです。

期日 2024年5月29日(水) 13.00~16.50

会場 栗田工業(株)/Kurita Innovation Hub 講堂A [東京都昭島市拜島町3993-15、交通:JR「昭島」駅より徒歩7分

https://www.kurita.co.jp/aboutus/pdf/KIH_accessmap_jp.pdf

講演主題 HPLCカラムの基礎知識

講演

講演主題概説(オーガナイザー)(13.00~13.10)

((一財)化学物質評価研究機構)坂牧 寛

(LC分析士二段、LCMS分析士初段)

1. 充填剤の物理的特性と分離挙動との関係(13.10~13.40)
(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. C18カラムの基礎とトラブルシューティング
(13.40~14.10)

((一財)化学物質評価研究機構)坂牧 寛

(LC分析士二段、LCMS分析士初段)

3. ODS以外の逆相固定相の特性と選び方(14.10~14.40)
(ジーエルサイエンス(株)太田茂徳
(LC分析士初段)

休憩(14.40~15.20)

休憩時間中に30分程度のKurita Innovation Hub内の研究施設プチ見学会を開催します。参加は任意ですので、希望者はぜひご参加ください。詳細につきましては、当日アナウンスいたします。

4. HILICカラムの種類と特徴(15.20~15.50)
(株)クロマニックテクノロジーズ)小山隆次
(LC分析士二段、LC/MS分析士初段)
5. SECカラムの基礎と応用例(15.50~16.20)
(東ソー(株)伊藤誠治
(LC分析士五段、LC/MS分析士二段)

6. 総括「HPLCカラムの基礎知識」(16.20~16.50)
(東京理科大学)中村 洋
(LCマイスター、LC/MSマイスター)

情報交換会(17.00~19.00)、申込者のみ

参加費 ①LC研究懇談会・個人会員、学生:1,000円、②LC研究懇談会・団体会員:2,000円、③後援学会・個人会員:3,000円、④後援学会・団体会員:4,000円、⑤その他:5,000円。参加申込締切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5,000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 5月22日(水)(入金締切時刻:15時まで)

申込方法

1. 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研究懇談会・個人会員、協賛学会・個人会員、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。
2. お申込みが完了した場合には、登録されたアドレス欄に「第395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、①入力したご自分のアドレスに間違いがないか、②迷惑メールフォルダーをご確認のうえ、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、必ず期限内に研究懇談会参加費、情報交換会費の納入を行ってください。期限内に納入が確認できない場合、お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。当日払いは受け付けません。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、2024年5月23日以降に要旨集をメールにてお送りいたします。必要に応じてプリントアウトしてご参加ください。なお、請求書の発行はいたしていません。

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/zvEt9UR5HwdEwP428>

（学生申込者は、所属欄に大学名、学部、学年を記載）

銀行送金先 りそな銀行五反田支店（普通）1754341、口座名義：シヤ）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 世話人（一財）化学物質評価研究機構 坂牧 寛
〔E-mail：sakamaki-hiroshi@ceri.jp〕

第29回 LC 研究懇談会特別講演会・見学会

主催 （公社）日本分析化学会 LC 研究懇談会
後援 （公社）日本化学会、（公社）日本薬学会、（公社）日本農芸化学会、（公社）日本分析化学会、LC シニアクラブ

期日 2024年7月4日（木）

会場 東京都農林水産振興財団・農業総合研究センター〔東京都立川市富士見町3-8-1、交通：JR 青梅線「西立川」駅南口下車、徒歩7分〕

<https://www.tokyo-aff.or.jp/>

スケジュール

13.00～13.30 受付
司会：現地世話人 松下裕美（東京都農林水産振興財団）

13.30～13.35 LC 研究懇談会・委員長挨拶
中村 洋（東京理科大学）

13.35～14.05 施設の概要説明（東京都農林水産振興財団）

14.10～15.10 見学会（施設園場のご案内）

15.10～15.20 記念撮影

15.30～16.00

講演1 地域特産作物等農業適用拡大試験について
（東京都農林水産振興財団）松下裕美

16.00～16.30

講演2 機能性食品の開発における分析法
（ハウス食品グループ本社株）神山和夫

17.30～19.30 情報交換会（JR 立川駅付近）

19.30 解散

参加費 5,000円（税込み10%）。当日お支払ください。

定員 20名（定員になり次第、締め切らせていただきます）。

申込方法

- 参加希望者は、下記申込先にアクセスし、氏名、メールアドレス、勤務先、電話番号、などを明記のうえ、お申込みください。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29回 LC 研究懇談会特別講演会・見学会申込み受付（自動返信）」のメールが届きます。メールが届かない場合は、問合せ先までご連絡ください。
- 申込受付メールを受領後、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ますので、十分ご注意ください。一旦納入された参加費は、返金いたしません。なお、請求書の発行はいたしていません。

申込期限 2024年6月21日（金）（入金締切時刻：15時）

申込先 <https://forms.gle/GypTmiZyKpaerDQ3A>

銀行送金先 りそな銀行五反田支店（普通）0802349、口座名義：シヤ）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〕

問合せ先 （公社）日本分析化学会・LC 研究懇談会
〔E-mail：nakamura@jsac.or.jp〕

HPLC & LC/MS 講習会 2024

主催 （公社）日本分析化学会・LC 研究懇談会

後援 （公社）日本薬学会（申請中）、（公社）日本化学会、（公社）日本分析化学会 LC シニアクラブ

協賛 アジレント・テクノロジー株、関東化学株、ジーエルサイエンス株、株島津製作所、株東レリサーチセンター、東ソー株、日本ウォーターズ株、日本分光株、株日立ハイテクサイエンス

HPLC、LC/MS の初心者・中級者を対象とし、基礎から最近のトレンドまでを講義と実習で学びます。規定の講習を終えた方には、受講証を差し上げます。また、希望者には実力判定試験を受験する機会が付与され（無料）、合格者には2024年度 LC 分析士初段または LC/MS 分析士初段認証試験の筆記試験が免除される特典があります。

開催日 2024年7月24日（水）～26日（金）

会場 講義、総合討論：株島津製作所殿町事業所 Main Hall（4階）〔神奈川県川崎市川崎区殿町3-25-40、交通：①京急大師線「小島新田」駅より徒歩12分、②京浜急行電鉄・東京モノレール「天空橋」駅よりバス/タクシー10分、バス：大109 大師橋駅前行「殿町三丁目」下車、③JR「川崎」駅よりタクシー約20分〕

<https://www.shimadzu.co.jp/aboutus/company/access/tonomachi.html>

実習、実力判定試験：川崎生命科学・環境研究センター（LiSE）大会議室（1階）〔講義会場より徒歩5分〕

<https://kawasaki-lise.jp/>

昼食、情報交換会：LiSE 1階あんてろーぷ（フォルテ）

講習プログラム

1日目（講義と情報交換会）

9.00～9.15 ガイダンス（オーガナイザー）中村 洋

9.15～9.45 講義1 概論（東京理科大学）中村 洋

9.45～10.35 講義2 試薬・有機溶媒・水
（関東化学株）坂本和則

10.35～11.25 講義3 前処理
（（一社）臨床検査基準測定機構）岡橋美貴子

11.25～12.25 昼休み

12.30～13.30 講義4 分離（東ソー株）伊藤誠治

13.30～14.30 講義5 検出

(株島津総合サービス・リサーチセンター) 三上博久
 14.30～14.45 休憩
 14.45～15.45 講義 6 LC/MS
 (株東レリサーチセンター) 竹澤正明
 15.45～16.45 講義 7 トラブル解決法
 (LC シニアクラブ) 熊谷浩樹
 17.00～19.00 情報交換会
 2日目・3日目(実習, 実力判定試験, 総合討論)
 9.00～14.50
 4班に分かれ, 以下の4種類の実習(各140分)を2
 日間で受講します。

実習 A-1

検出器の使い方: フォトダイオードアレイ検出器
 (株島津製作所)

実習講師: 野村文子, 実習補助員: 向井美樹
 フォトダイオードアレイ検出器(PDA検出器)を用いると, 一度の分析でUVスペクトル情報を取り込むことができます。したがって, 通常的时间-吸光度の二次元データに加えて波長軸を含む三次元データを取り扱うことができ, 分析後にさまざまな解析が可能となります。本実習では, 着色料(食品添加物)の分析を例に取り, フォトダイオードアレイ検出器の基本操作と機能(ピーク純度の検定, スペクトルによるピーク同定など)について, 実際の分析データを基にして学んでいただきます。また, PDA検出器の能力をさらに高める最新のピーク解析技術についてもご紹介いたします。

実習 A-2

検出器の使い方: 蛍光検出器
 (日本分光株)

実習講師: 寺田明孝, 実習補助員: 佐藤泰世
 蛍光物質を高感度かつ選択的に検出する蛍光検出器は, HPLCにおける微量成分の高感度検出や蛍光誘導体化した成分の測定等に多く使用されています。実習では, 検出器の光学系やセルの実物をご覧いただくだけでなく, 実際にフローインジェクション分析法による自然蛍光物質のスペクトル測定を行っていただきます。その他, 蛍光検出器の原理と特徴, 励起・蛍光波長の設定, 誘導体化法, 測定時における留意点等について学んでいただきます。

実習 B

カラム分離とデータ解析
 (株日立ハイテクサイエンス)

実習講師: 清水克敏, 実習補助員: 宮野桃子
 使用頻度が高い逆相系のカラムを用い, 目的成分が分離する移動相条件を検討します。
 移動相条件が分離・保持時間に影響を与えること, 最適条件を設定するためのポイントを学びます。取得したクロマトグラムを使用し, ベースライン補正方法と定量の実際, カラムの性能評価を実習していただきます。

実習 C

固相抽出～オフラインからオンラインまで
 (日本ウォーターズ株)

実習講師: 島崎裕紀
 LC/MS/MSなど分析装置の感度と選択性の向上が目まじしい今日においても信頼性の高い分析を行うためにはサンプル前処理が必要な場合が少なくありません。特に医薬品バイオアナリシス, 食品分析, 環境分析など複雑なサンプルマトリクス中の微量成分を分析する場合はサンプル前処理が成功の鍵となります。本実習では幅広く使用されている固相抽出について色素サンプルを使用し受講者全員に

前処理を体験していただきます。また, カラムスイッチング技術を使用したオンライン固相抽出法についても紹介します。

実習 D

LC/MSの使い方
 (アジレント・テクノロジー株)

実習講師: 滝埜昌彦, 実習補助員: 城代 航
 タンDEM四重極質量分析計を用いたLC/MS/MSシステムは, 通常のマスペクトルの測定に加え, プロダクトイオンスペクトルやプリカーサーイオンスペクトルの測定が可能です。近年では, 特にSRMモードを用いた選択性の高い高感度分析が可能であり, さまざまな試料中の微量成分の定量分析に使用されています。本実習では, 合成抗菌剤の一斉分析を例に取り, 測定条件の最適化方法, SRM法を用いた定量分析法について学んでいただきます。

なお, 有機溶媒等を使用しますので, 安全めがねを各自お持ちください。実習用の白衣はなくても結構です。実習Bでは, 計算機(またはスマホ等)を使用しますので, 各自ご持参ください。また, 実習に当たっては十分な安全対策を講じておりますが, 講習会への行き帰り及び講習・実習中の事故等については, 免責とさせていただきます。必要と思われる方はご自身での保険加入をお願いいたします。

2日目

15.15～15.45 実力判定試験(無料・マークシート方式, 希望者のみ, LCコースまたはLC/MSコースのいずれかを受験)

受験希望者はB2～B6の黒鉛筆と消しゴムを持参ください。実力判定試験の合格者は, LC分析士初段またはLC/MS分析士初段認証試験合格者と同等の実力を有するとみなされます。後日, 初段試験の受験料と登録費を支払われた方には, 当該資格の登録証が送付されます。

3日目

15.10～16.10 総合討論

16.15～16.30 受講証授与

日程	2日目午前	2日目午後	3日目午前	3日目午後
時間	9.00～11.20	12.30～14.50	9.00～11.20	12.30～14.50
実習A	1班	4班	3班	2班
実習B	2班	1班	4班	3班
実習C	3班	2班	1班	4班
実習D	4班	3班	2班	1班

募集定員 50名

参加費用 40,000円(LC研究懇談会・個人会員), 45,000円(LC研究懇談会・団体会員), 50,000円(後援学会・個人会員), 55,000円(後援学会・団体会員), 60,000円(その他)

参加方法 LC研究懇談会のホームページなどから, 以下のURLにお申し込みください。

<https://forms.gle/5vC9gLLwJmM9K7>

参加申込・振込期日 7月8日(月)(15時)

参加費振込先 りそな銀行五反田支店, 普通口座, 口座番号: 0802349

(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
 コウシャ ニホンブンセキカガクカイエキタイクロマトグラフィーケンキュウコンダンカイ

連絡先 ご質問・総合討論で議論したい事柄などを下記へお知らせください。LC研究懇談会

[E-mail: nakamura@jsac.or.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122回講演会

野々瀬菜穂子先生記念講演会

主催 プラズマ分光分析研究会
 期日 2024年5月17日(金)
 会場 京都大学百周年時計台記念館国際交流ホールおよびオンライン
 ホームページ <https://plasma240517.peatix.com>
 連絡先 〒192-0392 東京都八王子市堀之内1432-1 東京薬科大学生命科学部 分子生命科学科生命分析化学研究室内
 プラズマ分光分析研究会事務局 大関杏子
 [電話: 042-816-3001, E-mail: office@plasma-dg.jp]

ナノ学会第22回大会

The 22nd Annual Meeting of the Society of
 Nano Science and Technology

主催 ナノ学会
 期日 2024年5月22日(水)~24日(金)
 会場 東北大学新青葉山キャンパス
 ホームページ
<https://www.medphys.med.tohoku.ac.jp/nano22/index.html>
 連絡先 ナノ学会第22回大会実行委員会
 [E-mail: gonda@med.tohoku.ac.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84回分析化学討論会では、「文化財をはかる、なおす、まもる分析化学」、「環境調和・資源循環型社会の創生と分析化学」、「ものづくりを支える分析化学」、「宇宙と分析化学」、「生命の活動を知る分析化学」の5テーマを討論主題として取り上げました。

近年の大きな話題として、2022年11月のChatGPT公開が挙げられ、その後も、急激な速度で生成AI技術が進化しています。生成AIは、既存のビッグデータを学習することで、新たな知見を加速度的に生み出しており、一部の領域ではすでに人間の能力を超えています。一方で、測る技術である分析化学によって、新規データの取得や生成AIデータの検証なども可能であり、生成AIと分析化学は相補的な関係とも捉えることができます。また、分析化学は、文化財・環境・モノづくり・生命・宇宙などの幅広い分野に関連しており、これからの社会を変革していくために、分析化学が先頭に立ってその役割を果たしていくことが強く求められています。

そこで、2024年度の分析化学討論会特集号では、生成AIと一緒に考え、5つの討論主題を「フロンティアとしての分析化学：文化財から宇宙まで」としてテーマにしました。本テーマにおいて、第84回分析化学討論会で設けた5つの討論主題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」73巻4・5号及びホームページをご

覧ください。

特集論文の申込締切：2024年7月12日(金)

特集論文の原稿締切：2024年8月9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10・11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。

特集論文原稿締切：2024年4月26日(金) (第3期)

初めて書く論文は母語の日本語で！

“第23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、2024年(第73巻)に第23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。

【ア行】	【ナ行】	製品紹介ガイド…………… A6~7
(株)エス・ティ・ジャパン…………… A4	日本分光(株)…………… 表紙 4	
【サ行】	【ハ行】	
(株)島津製作所…………… 表紙 3	フロンティア・ラボ(株)…………… A1	
【タ行】	【マ行】	
東亜ディーケーケー(株)…………… A3	室町ケミカル(株)…………… 表紙 2	

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

原子スペクトル分析

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>

分子スペクトル分析

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

複数の手法で同一試料を測定できる「複合分析」が手軽に
フーリエ変換赤外分光光度計FT/IR-4X+
パームトップラマン分光光度計PR-1
日本分光(株) <https://www.jasco.co.jp>

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

レーザー分光分析

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 E-mail: LA-LIBS@hakuto.co.jp
<https://www.process.hakuto.co.jp/product/2562/>

質量分析

様々な分析ニーズに応える、
質量分析計 (GC-MS, MALDI-TOFMS, LC-MS) を
使用したソリューションをご提案いたします。
日本電子(株) 電話 03-6262-3575
<https://www.jeol.co.jp/>

MALDI-TOF (/TOF), 迅速微生物同定, 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

熱分析

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>

クロマトグラフィー

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@cerij.jp

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

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/>

電気化学分析

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>

分析装置・関連機器

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>

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menaテック
<http://www.amena.co.jp>

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.alphasience.jp/>
電話 03-3814-1374 FAX 03-3814-2357
E-mail: alpha@m2.pbc.ne.jp

高性能 HPLC/GPC-FTIR インターフェースシステム
新型 LC-CollectIR
(株)エス・ティ・ジャパン
東京 03-3666-2561 大阪 072-835-1881
<https://www.stjapan.co.jp/>

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
ンプロープ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>

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/>

<p>高品質・高精度・高耐圧 NSプランジャーポンプシリーズ 日本精密科学(株) 電話 03-3964-1198 https://nihon-exa-sci.com</p>
<p>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</p>
<p>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 https://www.yasuikikai.co.jp/</p>
<h2>研究室用設備機器</h2>
<p>分析用超純水のことなら何でもエルガにご相談ください 世界第2位のラボ用超純水装置メーカー エルガラボウォーター ヴェオリア・ジェネッツ(株) エルガ・ラボウォーター事業部 e-mail: jp.elga.all.groups@veolia.com https://www.elgalabwater.com</p>
<p>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</p>
<h2>試薬・標準試料</h2>
<p>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</p>
<p>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</p>
<p>X線/中性子解析向けタンパク質結晶作成をあなたのラボで 『C-Kit Ground Pro』XRD:¥50,400 (税抜), ND:¥151,200 (税抜) (株)コンフォーカルサイエンス 電話 03-5809-1561 http://www.confsci.co.jp</p>
<p>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</p>
<p>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</p>
<p>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。 富士フイルム和光純薬(株)</p>

<h2>書籍</h2>
<p>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</p>
<p>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/</p>
<p>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/</p>
<p>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</p>
<p>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</p>
<p>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</p>
<p>第3巻「永久磁石の保磁力と関連する技術課題」 徳永雅亮, 山本日登志 著 B5判・118頁, 定価: ¥2,300+送料 ネオジコンサル 電話 090-2204-7294 https://hitoshiad26.sakura.ne.jp</p>
<p>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</p>
<h2>セミナー・試験</h2>
<p>海外技能試験の輸入代行サービス 西進商事(株) 神戸 078-303-3810 東京 03-3459-7491 https://www.seishin-syoji.co.jp/</p>
<p>演習中心で解り易いと評判の「不確かさ」セミナー開催。 オンラインでの参加も可能になりました! 日本電気計器検定所 (JEMIC) 電話 03-3451-1205 https://www.jemic.go.jp E-Mail: kosyukai-tky@jemic.go.jp</p>
<p>「本ガイド欄」への掲載については下記にお問合せください。 (株)明報社 電話 03-3546-1337 E-mail: info@meihosha.co.jp</p>

放射能測定信頼性を確保する放射能標準物質を開発 —牛肉および魚類放射能分析用認証標準物質—

(公社)日本分析化学会では、2011年3月の原発事故により広く飛散した放射性物質の放射能濃度を信頼性高く定量するための認証標準物質を開発し頒布中である。開発された標準物質は、国内の信頼ある分析機関の計量トレーサビリティが確保された測定機により求められた値に基づく共同分析により JIS Q0035(ISO ガイド 35)に準拠して認証値および不確かさが決定された。

1) 放射能分析用牛肉認証標準物質

(低濃度 : JSAC 0753, 0754, 高濃度 : JSAC 0751, 0752)

○認証値と拡張不確かさ U (包含係数 $k = 2$) 基準日 : 2012年11月19日

	低濃度	高濃度
^{134}Cs 放射能濃度 (Bq/kg) :	63 ± 6	174 ± 12
^{137}Cs 放射能濃度 (Bq/kg) :	106 ± 9	297 ± 20
^{40}K 放射能濃度 (Bq/kg) :	283 ± 54	276 ± 46

○充填容器と価格

JSAC 0753, 0751:100 ml 容器用 20,000 円, JSAC 0754, 752:1 L 容器用 100,000 円 (価格はいずれも本体価格、送料込み・消費税別)

2) 放射能分析用魚類認証標準物質

(魚肉 : JSAC 0781, 0782, 0783, 魚骨 : JSAC 0784, 0785)

○認証値と拡張不確かさ U (包含係数 $k = 2$) 基準日 : 2014年11月1日

	魚肉	魚骨
^{134}Cs 放射能濃度 (Bq/kg) :	62 ± 5	141 ± 10
^{137}Cs 放射能濃度 (Bq/kg) :	196 ± 14	445 ± 29
^{40}K 放射能濃度 (Bq/kg) :	349 ± 29	783 ± 43
^{90}Sr 放射能濃度 (Bq/kg) :	—	11.5 ± 1.2

○充填容器と価格

JSAC 0781:U8 容器(50 mm 高さ) 20,000 円, JSAC 0782, 0785:100 mL 容器 20,000 円, JSAC 0783:1 L 容器 100,000 円, JSAC 0784:U8 容器は 1 回 5,000 円のレンタル品(価格はいずれも本体価格、送料込み・消費税別)

* 内容に関する問い合わせ先 : (公社)日本分析化学会 標準物質係 TEL : 03-3490-3351, FAX : 03-3490-3572, E-mail : crmpt@ml.jsac.or.jp, <http://www.jsac.jp/srm/srm.html/>

* 頒布に関する問い合わせ先 : 西進商事(株)東京支店, TEL : 03-3459-7491, FAX : 03-3459-7499, E-mail : info@seishin-syoji.co.jp, <http://www.seishin-syoji.co.jp/>



写真左 ポリエチレン袋に装填された牛肉認証標準物質



写真右 U8 容器(50 mm 高さ), 100 mL 容器, 1 L 容器に充填された魚肉認証標準物質



ガスクロマトグラフ質量分析計
GCMS-QP2050

Excellence Redefined



分析業務を取り巻く事業環境やニーズは時代とともに大きく変わってきています。

GCMS-QP2050は、島津製作所が誇る技術を集約した、これからも時代をリードする新世代のガスクロマトグラフ質量分析計です。圧倒的な信頼性と安定性を誇るハードウェアと、優れた操作性と卓越した自動化技術を搭載したソフトウェアにより、新しい価値を提供します。

Minimum Maintenance, Maximum Progress

最小限のメンテナンスで最大限の成果

Simple Operation, Confident Results

シンプルな操作で確実な分析結果

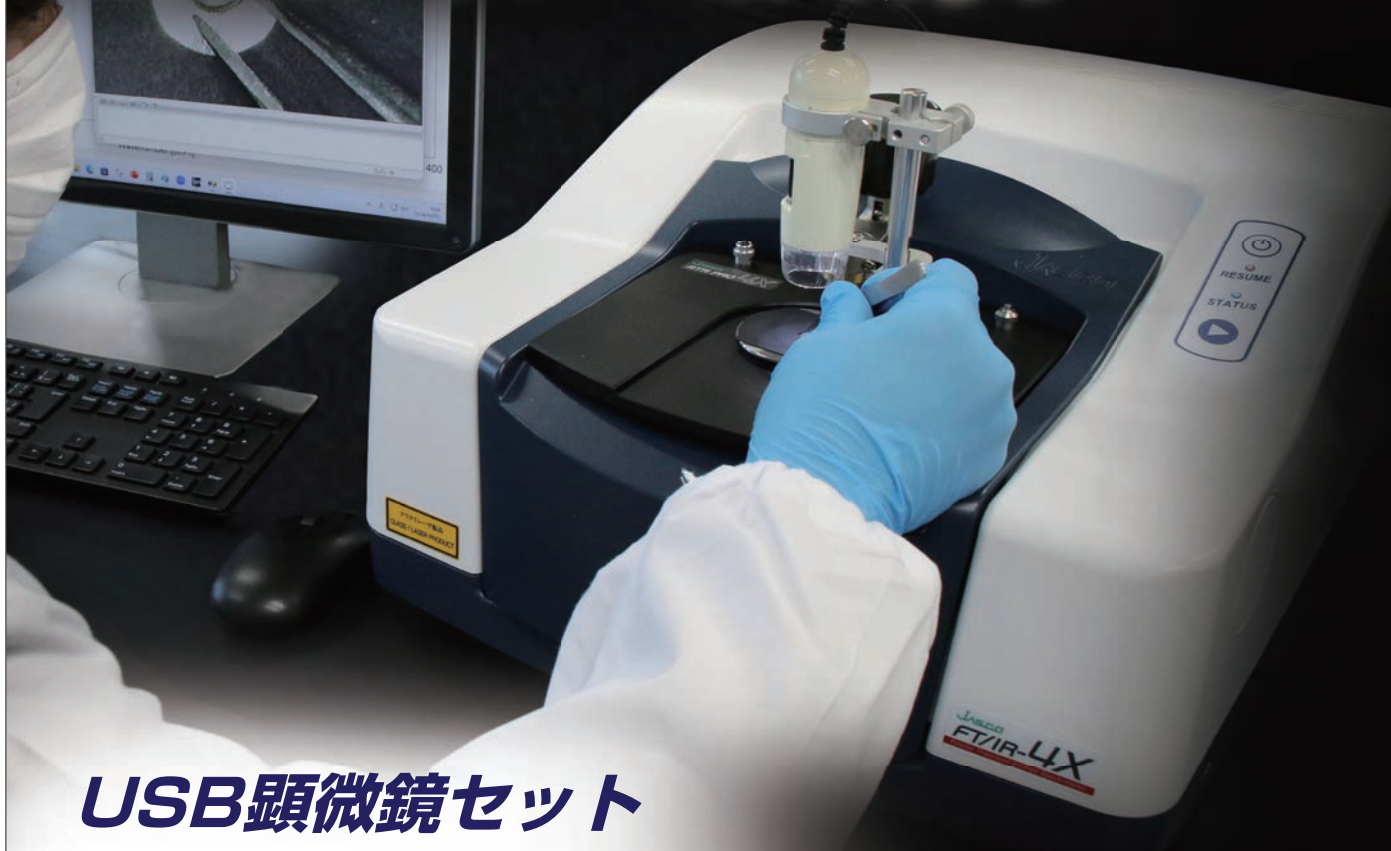
One Instrument, Infinite Possibilities

1台の装置に無限の可能性

詳しい製品情報はこちら

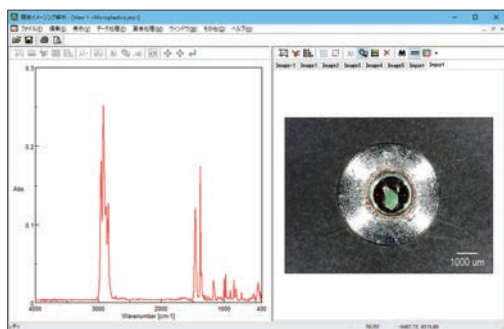


サンプル画像を ATRプリズム上で見る



USB顕微鏡セット

USB顕微鏡セットは、測定前のサンプル画像をATRプリズム上で取得し、スペクトルと画像データを一つのファイルに保存可能です。スペクトルマネージャーでサンプルサイズの計測も行え、小さなサンプルも拡大された観察画像で取扱えます。



スペクトルと画像をセットで保存

「スペクトル」、「ATRプリズムに密着したサンプル画像*」、「USB顕微鏡で取得した密着前のサンプル画像」を、一つのファイルに保存できます。

* ATR PRO 4X VIEW の場合



特長

- ・移動の時間削減：測定前に試料画像をATRプリズム上で取得
- ・作業が簡単：小さな試料も拡大された観察画像で取扱いが簡単
- ・確実な紐付け：スペクトルと画像データを1つのファイルに保存
- ・便利な機能：ソフトウェア上で試料サイズを計測

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(代)
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、
改善のため予告なく変更することがあります。

ぶんせき・分析化学
広告掲載のお問い合わせは

取报社 (株) 明報社へ

〒104-0061 東京都中央区銀座7-12-4 (友野本社ビル)
電話 東京 (03) 3546-1337(代) FAX 東京 (03) 3546-6306
URL: <http://meihosha.co.jp> E-mail: info@meihosha.co.jp