

### 食品中に含まれる揮発性フェノールの DART 質量分析

食品中の揮発性成分は、その香りや味に重要な役割を果たしており、品質評価や管理において重要な指標となる。近年、揮発性成分の定量には、GC-MS が広く用いられている。一般的に GC-MS では、干渉物を除去し、分析対象となる揮発性成分を濃縮するための抽出過程が必要であり、ヘッドスペース-固相マイクロ抽出法 (HS-SPME) は簡便な抽出法として知られている。しかし、HS-SPME-GC-MS 分析は、SPME と GC 分離に時間を要するために迅速性に欠けるという課題がある。

こうした課題を改善する為に、SPMESH とリアルタイム直接分析質量分析法 (DART-MS) を組み合わせた HS-SPMESH-DART-MS 分析が提案された<sup>1)</sup>。SPMESH は、薄層マイクロ抽出 (TFME) の一種であり、マルチウェルプレート上に配置することで、あらかじめ充填されたサンプルウェルからヘッドスペースの揮発性成分を抽出することができる。他の TFME 技術と同様に、体積に対する表面積の比が大きいため、従来の SPME と比較して、抽出速度や抽出量の増大が期待できる。また、DART-MS は、通常必要とされるクロマトグラフィーによる分離を行わずに、分析対象物を直接イオン化し、分析する迅速な分析法として知られている。これらを組み合わせた HS-SPMESH-DART-MS だが、低揮発性成分の SPMESH への抽出には時間を要するほか、試料の直接分析に伴う同重体干渉により、分析精度が低下することも報告されている。

そこで Bates らは、重水素化無水酢酸により揮発性フェノールを誘導体化することで、SPMESH への抽出を容易にし、DART-MS における同重体干渉を抑制することを可能にした<sup>3)</sup>。揮発性フェノールは、食品や飲料において好ましくない香りとされるため、品質管理の観点から測定されているが、一般的に揮発性が低く、分析は容易ではない。このような分析対象物において、ぶどうジュースやワインなどのマトリックス存在下で、同重体干渉を軽減させ、再現性が高い堅牢な分析を実現した。また分析の所要時間は、24 サンプルで約 80 分、1 サンプルあたり約 3.5 分である。これは、1 サンプルあたり 40~60 分を必要とする従来の SPME-GC-MS 分析と比較しても、迅速だと言える。

今後、抽出技術や誘導体化技術のさらなる改良が進むことにより、DART-MS を用いた食品中の揮発性成分の堅牢かつ迅速な定性・定量が可能になることを期待したい。

- 1) J.A. Jastrzemski, G.L. Sacks : *Anal. Chem.*, **88**, 8617 (2016).
- 2) J.P. Rafson, G.L. Sacks : *J. Agric. Food Chem.*, **69**, 12344 (2021).
- 3) T.L. Bates, G.L. Sacks : *Analytica Chimica Acta*, **1275**, 341577 (2023).

[九州大学大学院生物資源環境科学府 宮原 辰梧]

### 水質状況モニタリングのための数理データサイエンスを用いた分析技術

水は地域社会や国を維持する上で重要な役割を果たしており、飲料水のみならずさまざまな産業において欠かせない重要要素である。水は上水、中水、下水の 3 種類に区分されている。特に上水用の水源は河川水のほか、ダム湖水、湖沼水、地下水などが挙げられる。上水道では、人体に有害な物質が許容値以下であることなど、チェック項目をクリアした水のみが供給されている。水質パラメータや貯水池の水質汚染物質を正確かつ迅速に推定および識別する必要があることから、近年では、水質検査に関する研究開発では、数理データサイエンスや人工知能技術を活用した取り組みが行われている。

Zhang らは、安心安全な飲料水の確保を目的として、貯水池の水質状況のモニタリングに関する研究を行った<sup>1)</sup>。貯水池の水質保全では、カビ臭物質発生の原因の一つとされている放線菌群集の検査が重要である。このため、季節ごとの放線菌群集の多様性と構成の変化を調査することと、放線菌群集の構成とさまざまな水質の関係を探ることを目的として、多変量解析およびバイオインフォマティクスによる解析を行った。実験では、まず、採水したサンプルの物理特性 (水温、濁度、pH、電気伝導率、溶存酸素濃度など) の調査を行い、また、放線菌群集の DNA 抽出およびシーケンシングを行い、その後、統計分析を行った。

1 年間のサンプルを用いて水質と放線菌群集の構成の傾向を観察したところ、春夏秋冬の四つの季節ごとで放線菌群集構成における種の分布が変化することが示された。特に、冬が放線菌群集の構成が多様となり、一方で夏に最も多様性が低くなった。さらに、水温が低くなる冬に溶存酸素濃度や濁度による水質変化が大きくなり水質が富栄養化していることが示され、それに応じて放線菌群集も増加することが統計的に明らかとなった。

上記は数理データサイエンスを水質状況のモニタリングに活用した研究事例の一つである。今回取り上げた数理データサイエンスや人工知能技術は異種で複雑な大量のデータを扱うことが得意であることから、分析化学のみならず他の様々な分野においても応用が期待できる。

- 1) H. Zhang, S. Pan, B. Ma, T. Huang, D. B. Kosolapov, M. Ma, X. Liu, H. Liu, X. Liu : *J. Environ. Sci.*, **137**, 1 (2024).

[室蘭工業大学 鈴木 元樹]