

# 環境ノンターゲット分析手法とデータ解析プログラムの開発

SATテクノロジー・ショーケース2026

## ■ はじめに

近年、化学物質の数は指数関数的に増加しており、日々の人間活動を通して多様な化学物質が環境中に排出されていると推測される。国際条約等で規制されている化学物質については監視体制が構築されているものの、対象物質は全体のごく一部に過ぎない。従来のターゲット分析法は、試料前処理において対象外の物質を出来る限り除去して測定を行うため、対象物質の高感度・高精度な定量が行えるものの、対象外の物質を探索(スクリーニング)する目的には適していない。そのため、多様な化学物質を包括的にスクリーニングすることが可能な網羅的分析手法の開発と環境分野への応用が世界的に進められている。

国立環境研究所では、これまで包括的二次元ガスクロマトグラフと高分解能飛行時間型質量分析計を組み合わせた装置(GC×GC-HRToFMS)を用いて、環境ノンターゲット分析手法とデータ解析プログラムの開発を行ってきた。本発表では、その概要と応用例について紹介する。

## ■ 活動内容

### 1. 環境ノンターゲット分析手法の構築

GC×GC-HRToFMS は、性質の異なる2本のGCカラムによる二次元高分離と幅広い質量範囲(例えば $m/z$  33-1000)での精密質量スペクトルの取得が可能である。2次元マップの位置情報を用いた化合物の物性予測や1次元目カラムの保持指標の利用も可能であることから、これらの特長を最大限に活かした手法の構築を行った(図1)<sup>(1)</sup>。

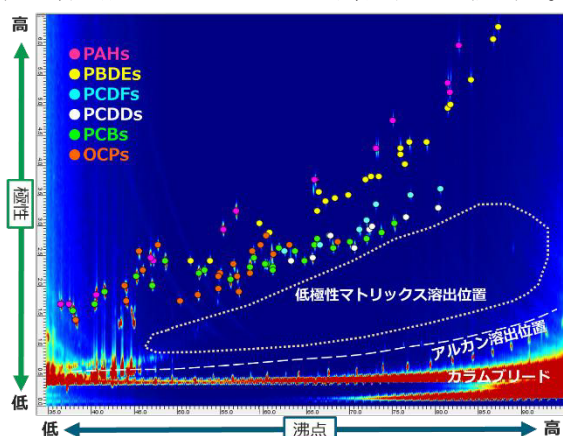


図1 GC×GC-HRToFMSによる2次元マップの一例

### 2. データ解析プログラムの開発<sup>(2)(3)</sup>

本手法では、1回の測定で分離・検出されるピークの数 は数千本にもなるため、1データあたりの情報量は膨大である。得られた精密質量スペクトルデータを効率よく解析するため、以下のデータ解析用自作プログラムを使用した。

#### ● ComEX

化合物の組成式(例えば $C_{12}Cl_{10}$ )を入力すると理論上の正確な同位体精密質量が計算され、一致する精密質量スペクトルのみを抽出または除去することが可能なプログラム。

#### ● MDF

様々な質量精度(質量分解能)条件下で取得された測定データから、質量欠損範囲内の精密質量スペクトルを抽出するプログラム。質量欠損は、質量過剰が負の値となる状態を指し(実際の質量 < 質量数)、質量数が $^{12}C$ を超える核種および原子は質量欠損を示す。

### 3. 日本海堆積物コア試料への応用

愛媛大学生物環境試料バンク(es-BANK)に保存されていた日本海堆積物コア試料をGC×GC-HRToFMSにて測定し、ComEXやMDFを用いて解析した。その結果、PCBsなどの人為起源有機ハロゲン化合物だけでなく、天然起源の有機ハロゲン化合物(HNPs)を複数検出した。図2に例として $C_9H_3N_2ClBr_6$ の各精密質量スペクトルを示す((a)未処理、(b)MDF処理後、(c) $C_9H_3N_2ClBr_6$ に相当する同位体精密質量スペクトルをComEXで抽出)。開発したプログラムを用いることにより、微量の有機ハロゲン化合物を高選択的に抽出・同定することが可能であった。

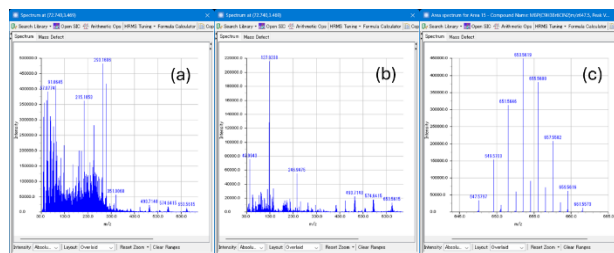


図2 HNP( $C_9H_3N_2ClBr_6$ )の精密質量スペクトル

## ■ 関連情報等(特許関係、施設)

(1) Ieda T. et al., *Talanta*, 194 (2019) 461, (2) Hashimoto S. et al., *J. Chromatogr. A*, 1282 (2013) 183, (3) [https://www.nies.go.jp/risk\\_health/analysis/gcgcms.html](https://www.nies.go.jp/risk_health/analysis/gcgcms.html)

代表発表者 家田 曜世(いえだ てるよ)  
所 属 国立研究開発法人国立環境研究所  
環境リスク・健康領域 基盤計測センター  
問合せ先 〒305-8506 茨城県つくば市小野川 16-2  
TEL: 029-850-2326  
ieda.teruyo@nies.go.jp

■ キーワード: (1) ノンターゲット分析  
(2) 有機ハロゲン化合物  
(3) 精密質量スペクトル

■ 共同研究者: 橋本 俊次(国立研究開発法人国立環境研究所)、国末 達也(愛媛大学 沿岸環境科学研究センター)