

[自主研究]

漏洩事故を想定した有害化学物質のスクリーニング分析法の開発

大塚宜寿 菱毛康太郎 堀井勇一 竹峰秀祐 野村篤朗 渡辺洋一

1 目的

工場・事業場で取り扱われる有害化学物質が、災害や事故によって水環境へ大量に流出した場合、ヒトに対する健康被害や生態系への悪影響が懸念される。近年、化学物質排出把握管理促進法(化管法)や埼玉県生活環境保全条例(県条例)により、一定規模以上の事業場における有害化学物質の排出・移動量や取扱量が把握できるようになった。そのため、事故等によって漏洩する化学物質の種類、量はある程度予想できるが、これら化学物質の多くは、分析の公定法が確立されておらず、漏洩時のリスク評価が困難である。また、緊急時に効率的にリスクを把握し、対策につなげるためには、様々な物質を一斉かつ迅速に分析することが求められる。本研究では、化学物質の漏洩事故等を想定し、県内でリスクが高いと考えられる化管法の対象物質について、物性に応じて系統化した迅速スクリーニング分析法を検討する。また、物質の同定率を向上させるデータ解析手法についても併せて検討する。

2 方法

埼玉県内においてリスクが高い化合物について分析法を検討する。なお、化管法の対象には、有機化合物だけでなく、金属元素およびその化合物もあり、それらにも対応できるスクリーニング分析法を整備する。

過去の分析例や物性等から適当と考えられる分析機器で分析法の検討を行う。分析機器は、ヘッドスペースGC(HSGC)/MS、GC/MS、LC/QTOFMS、ICP/MSを用いることを想定している。自動同定・半定量できるデータベースを整える。なお、スクリーニング分析が不可能な物質(誘導体化が必要な物質)は、個別分析法の情報収集に努める。

加えて、環境試料のGC/MSやLC/QTOFMS測定データから、非負値行列因子分解(NMF)という多変量解析手法を用いて、自動でピークを検出してスペクトルを取得し、ライブラリ検索を行って物質の同定率を向上させるデータ解析方法についても検討する。

3 結果

3.1 検討物質の選定

PRTR制度の462物質についてヒトおよび水生生物の毒性と県内の取扱量を掛け合わせリスクの大きさとし順位を算出した。ヒトへのリスク上位100物質と水生生物のリスクの上位100物質から重複する物質を整理し、約150物質を分析法の検討対象物質とした。

3.2 分析機器の選択

検討対象物質について過去の分析例(環境省化学物質環境実態調査で開発した分析法および公定法等)や物性(Log Pow, pKa)、分子構造から測定機器候補を選定した。金属およびその化合物はICP/MSで金属元素として測定することとした。

3.3 標準試薬調製

検討対象物質の内、70物質程度を購入し、最適と考えられる溶媒で溶解もしくは希釈し、標準試薬を調製した。

3.4 自動定量データベースシステムの検討

自動定量データベースシステム(AIQS-GC、AIQS-LC)について今回想定しているスクリーニング分析法への利用可能性について検討した。調製した標準物質の中でAIQS-GC、AIQS-LCに登録されている物質について、その定量性について確認し、問題ないこと(調製濃度と定量値の乖離が50~150%)を確認した。

3.5 NMFの検討結果

NMFは、対象とするデータに含まれる物質を指定する必要がある。物質数を1から順に増加させてNMFを行い、情報量基準を用いることで物質数を決定できることがわかった。

4 今後の研究計画

令和4~5年度:

- ① 80物質程度の標準試薬を購入し、標準液を調製する。
- ② 標準品を分析し、検量線等のデータを収集し、データベース化する。
- ③ 引き続き自動定量データベースシステム(AIQS-LC、AIQS-GC)の利用可能性について検討する。また、AIQS-LC、AIQS-GCの精度管理事業に参加する。
- ④ 前処理法の検討を行う。
- ⑤ NMFを用いた解析手法を検討する。

令和5~6年度:

- ⑥ 河川で調査を実施し平常時の濃度を把握する。
- ⑦ NMFを用いた解析手法を実試料に適用する。
- ⑧ 分析マニュアルを作成する。

表1 物質と想定する測定法および前処理法

分類	高揮発性物質	中揮発性物質	難揮発性物質	金属
測定法	HSGC/MS	GC/MS	LC/QTOFMS	ICP/MS
前処理法	なし	固相抽出	固相抽出 or ろ過のみ	酸分解