

# 情報科学の援用による多様な化学物質の包括的・即応的環境計測

(独)日本学術振興会科学研究費（令和5～7年度）

大塚宜寿、竹峰秀祐

共同研究機関：(国研)国立環境研究所(代表：橋本俊次)、  
(国研)理化学研究所、名古屋市立大学、公立鳥取環境大学、  
北九州市立大学、千葉大学、(国研)産業技術総合研究所

## 1 研究背景と目的

本研究は、多様化する化学物質による環境汚染実態を把握し、包括的な化学物質の管理や対策に資するため、我が国と国際的な包括的化学物質監視に貢献する、即応的・先駆的な包括的環境計測とその解析の仕組みを先端的な統計学・情報(計算)科学的手法を取り込むことで開発・構築するものである。質量分析を中心に様々な各種計測を加えた包括分析を行うことで、有機化合物だけでなく無機物質を含む広範囲な化学種の検出を目指し、そのカバー範囲や再現性等の検証は複数の協力機関が参加する共通試料分析により実施する。また、人工知能や計算科学的手法を投入することにより、包括的分析データから原因物質に係る有意成分を抽出し、その構造や物性を予測する一連の解析手法を開発する。収集した包括データのイベントドリブンな解析やデータドリブンな解析による物質探索を可能にし、最終的には、環境異常事象の要因(化学物質・化学種)を特定・推定するための即応的・実践的かつ先駆的な手順を提案する。

## 2 結果

サブテーマ1：国立環境研究所が企画した多種多様な物質(金属、VOC、フェノール、かび臭、農薬、洗剤等)の共同分析に参加した。自主研究で開発したスクリーニング分析法(ヘッドスペース(HS)GC/MS、GC/MS、LC/QTOFMS、ICP/MS等を利用する方法)で共同分析試料を分析したところ、今回対象となった全ての物質を検出できることを確認した。

サブテーマ2：ブランク試料で検出されたピークの質量スペクトルをデータベース化した。これをNMFで得られたピークのライブラリ検索において、併用することにより、物質推定の精度向上を図ることができた。

サブテーマ3：令和5年度の植樹帯中の除草剤の特定に係る分析では、LC/QTOFMSを利用し、ノンターゲットスクリーニングやサスペクトスクリーニングに係るデータ解析を行った。これらのデータ解析手法について、方法論として整理する必要があることを確認した。