

研究課題番号	【5-2302】
研究領域	安全確保領域
研究課題	「データ非依存型取得法による環境汚染物質の定量デジタルアーカイブ手法の開発」
研究代表者（所属）	中島大介（国立環境研究所）
研究期間	2023年度～2025年度
研究キーワード	網羅分析, DIA（データ非依存型取得法）, AIQS-LC, マルチターゲット分析, 遡及解析

研究概要と進捗状況（中間の2024年度時点）

○目標

- ・装置性能評価法等、AIQS-LCの規格を策定する。
- ・AIQS-LCの解析支援ソフトを開発する。
- ・新たに100物質の質量スペクトル、検量線情報をデータベースに収載する。
- ・AIQS-LCの国際的なDIAの状況に対する位置づけを評価する。

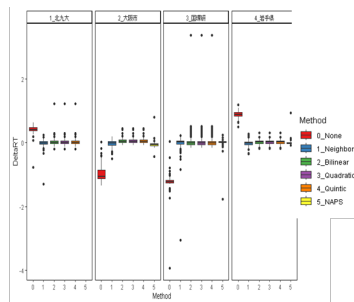
以上の成果からDIA法による環境試料のデータアーカイブの有効性と改善点について整理し、環境行政における活用可能性を提案する。

○進捗状況

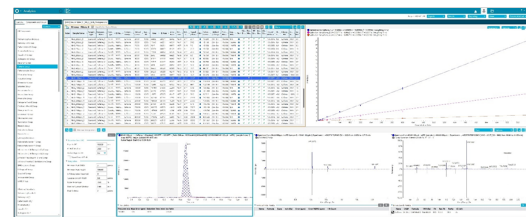
DIAによる環境調査における以下の4つの課題を実施、順調に進捗中

- (1) 装置性能の**規格化**：新たにネガティブモード測定条件を開発、内標準を選定。性能評価のパラメータと基準値の開発に着手。
- (2) **実用化**に向けた解析支援ソフトウェアの開発：解析の加速化のための保持時間補正法、保持指標法を開発、それらを組み込むソフト機能仕様を策定。
- (3) **実装**に向けたデータベース構築と取得データの検証：追加候補物質を地環研からの要望に基づき選定。これまでに71物質を登録（目標：1年目20）。
- (4) DIA測定の**高度化・汎用化**：
＜高度化＞広範囲の高極性物質を測定可能なHILICモードの条件検討が進捗。
＜汎用化＞AIQS-LCが提供されている現行装置（X500R）以外の装置、他社装置での測定可能性を検証。共通化に向けた課題を抽出。

Norman等の情報収集をしつつAIQS-LCの政策活用、国際的位置付けの検討を継続。



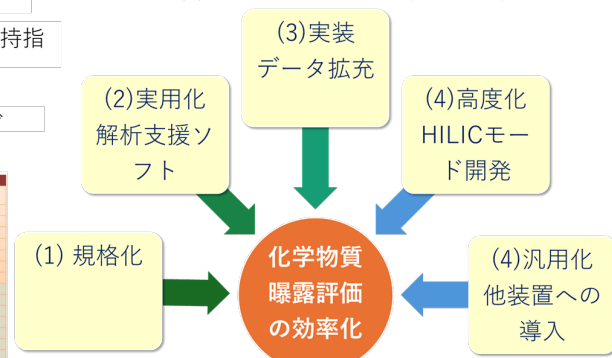
(2) 各保持時間(RT)補正法、保持指標法と実測RTの乖離



(3) 追加登録結果の例（Caffeine）

(1) AIQS-LCネガティブモード
(2) の測定条件

項目	Scie X500R
カラム	ジェエルサイエンス QDS-4 (150mm, 2.1mm, 3μm)
カラム温度	40℃
流速	0.3 mL/min
移動相	A: 5mM 酢酸アンモニウム (超純水) B: 5mM 酢酸アンモニウム (メタノール)
グラジエント条件	時間[分] 0 30 40 40.01 50 B[%] 5 95 95 5
注入量	2 μL
イオン源温度	400℃
イオン化	ESI-negative
検出モード	Swath
TOF MS (スキャン範囲)	50-1000 Da, 0.1 s
TOF MS/MS	50-1000 Da X 22, 0.07s
CE / CES	35/30 V
サイクルタイム	1.64s



環境政策等への貢献

- データ非依存型取得法を用いる化学物質スクリーニング分析法の策定に貢献
- 将来的な環境実態調査の効率化に貢献
- 平時データのアーカイブ法の提案により、災害時等の化学物質スクリーニング調査の際の平時データ活用に貢献