

# データベースを用いた有機化合物の迅速な定性分析手法の検討 緊急時の油類の分類および定性分析

財団法人 島根県環境保健公社

石原 正彦 ○園山 雅幸

## 1. はじめに

水質管理において、水質事故への迅速な対応は極めて重要である。中でも油の流出事故は頻度も高く、早期の原因究明が求められる。一般に油分をはじめ有機化合物の同定には、GC/MS Scan 法による測定を行い、保持時間（指標）・マススペクトルをもとに定性を行うという手法が用いられる。さらに油分については、炭化水素化合物に由来するピークのパターンを、各種油類のパターンと比較・参照し、分類する方法が用いられる（ピークパターン解析法）。しかし、これらの手法は解析において、非常に熟練と時間を要するため、更なる効率化・簡素化が望まれる。

近年 Scan データの解析を支援するデータベースが開発されており、上述のような緊急時における定性分析の効率化を期待することができる。今回、油類（鉱物油）の定性分析法として、データベースを用いた測定手法を検討したところ、迅速性をはじめとした本法の有用性が示唆された。

## 2. 実験および考察

### 2-1 本法に用いたデータベースおよび分析・解析条件

検討に使用したデータベースの概要および分析条件を Fig.1 に示す。データベースには、本分析条件下における有機化合物約 600 種についての保持時間・マススペクトル、および内部標準法を用いた検量線情報がデータベース化されている。Fig.1 に示した保持時間が固定（リテンションタイムロッキング）となるような GC/MS 分析条件で Scan 測定し、データベースによる解析処理を行うことで速やかに定性・定量処理ができるというものである。本法では、データベースによる解析処理を行い、鉱物油の代表的な構成成分である、直鎖型飽和炭化水素（n-パラフィン）および多環芳香族（PAHs）の定性結果をもとに油類の分類を行うこととした。

### 2-2 各種鉱物油（参照試料）データの採取

実試料の定性の際に比較・参照データとして用いるため燃料、潤滑油およびグリースとして代表的な鉱物油を本分析条件下で測定し、データベースによる解析処理を行った。解析結果において最も高い強度を示した n-パラフィンを 100 とし、各 n-パラフィン（C<sub>10</sub>～C<sub>33</sub>）についてそれぞれ強度比を算出しプロットした（Fig.3）。

Fig. 3 の分布図において、燃料系鉱物油である A 重油と軽油の n-パラフィンの分布は酷似していたが、A 重油に含まれる PAHs の定性結果に着目することで容易に分類が可能であった。その他についても、

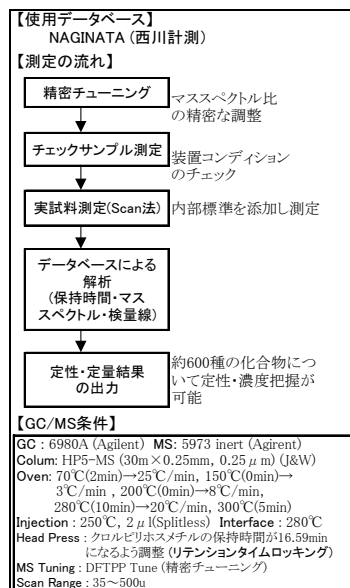


Fig. 1 データベースの概要および分析条件

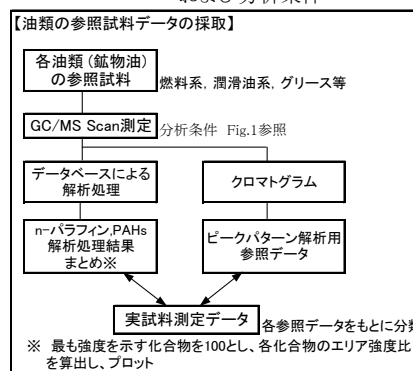


Fig. 2 参照試料データ採取および分類の方法

## データベースを用いた有機化合物の迅速な定性分析手法の検討 緊急時の油類の分類における定性分析

Fig.3 の分布の傾向から分類が可能であった。これらの参照データをもとに実試料中の油類の分類を行うこととした。本法における分類方法の概要を Fig.2 に示す。

### 2-3 模擬試料への適用例

模擬試料を用い、本法の実試料測定への適用性を検証した。水道原水（ダム水）に低粘性潤滑油（スピンドル油）を添加し、本法により測定・解析を行った。なお、前処理は、溶媒抽出法を用いた。解析を行った結果、低粘性潤滑油の参照試料であるミシン油と n-パラフィンの分布が非常に類似しており、的確かつ容易に分類が行えた。概要および結果を Fig.4 に示す。また、データベースによる解析結果において、試料中に含まれていた2種の農薬成分についても同時に定性処理されていた。このように、データベースを用いた解析を行うことで、油類の分類に限らずその他の成分の同時モニタリングおよび定性処理も可能で、本法の有用性の一つであるといえる。本法の利点・有用性を Fig.5 に示す。

本適用例のみならず現在、本法を水質、土壌および食品試料にも適用しており、同様な有用性が得られている。また、従来のピークパターン分析法と併せて用いることにより、効率的な油類の分類が可能となっているところである。

### 3. まとめ

GC/MS Scan 法による油類（鉱物油）の迅速な定性分析法として、データベースを用いた手法を適用した結果、本法の迅速性および簡便性が認められた。さらに本法は、油類に限らず試料中に含まれる成分の包括的な把握が可能であり、緊急を要する際の定性分析として非常に有用な一手法であることが示唆された。今後は、鉱物油のみならず本法で測定可能な油類について、参照データを充実させるとともに、他の有機化合物への適用性についても検証していく予定である。

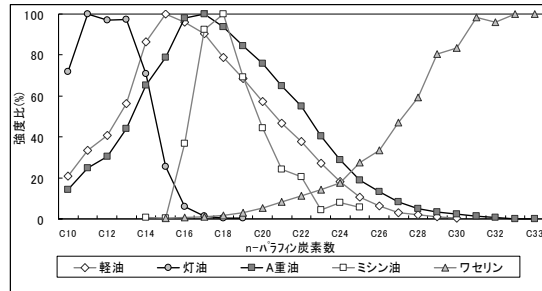


Fig. 3 代表的な鉱物油（参照試料）の n-パラフィンの強度分布

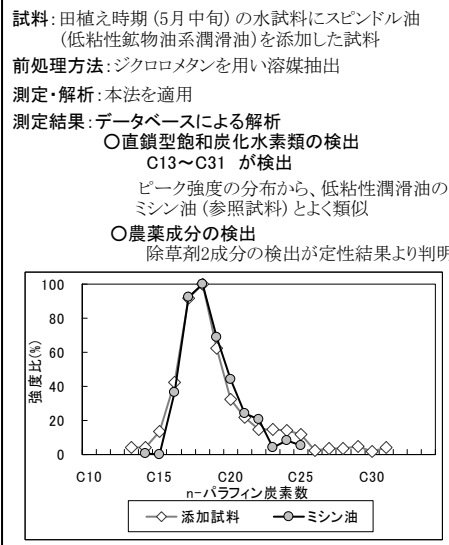


Fig. 4 本法の適用例の概要と結果

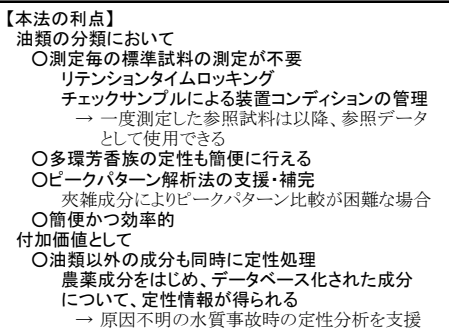


Fig. 5 本法の利点・有用性

