

科学研究費助成事業 研究成果報告書

令和 2 年 7 月 8 日現在

機関番号：82626

研究種目：若手研究(A)

研究期間：2015～2018

課題番号：15H05340

研究課題名(和文) 複雑混合物のリスク評価に向けた暴露評価手法開発

研究課題名(英文) Development of exposure assessment of complex mixtures toward the risk assessment

研究代表者

頭士 泰之 (Zushi, Yasuyuki)

国立研究開発法人産業技術総合研究所・エネルギー・環境領域・主任研究員

研究者番号：80611780

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 18,700,000円

研究成果の概要(和文)：本課題において、複雑混合物の暴露評価手法およびリスク評価法の開発に取り組んだ。本課題遂行により、GCxGCによる網羅分析手法をベースとした製品混合物の物性推定、環境動態、暴露評価にかかわる要素技術を開発した。また混合物中の非極性物質について生物への蓄積などのリスクスクリーニングを行う事も可能となった。環境混合物についても検出パターンに応じ分類を行う手法を作成し、環境リスクの評価を行う上で有用なツールとして利用可能とした。これらのうち主要技術は本課題において開発したウェブプラットフォームにより利用可能な状況となっている。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本課題では従来のリスク評価プロセスでは限界がある複雑混合物について新たなアプローチの構築に取り組んだ。具体的には先端分析装置であるGCxGCにLFER理論を取り入れた物性予測手法を構築し、新たな評価アプローチを提案した。GCxGCの利用により、的確な物質の組成把握が可能となり、このGCxGCデータ解析手法を用いる事により、混合物に対して暴露評価やリスク評価を行う先事例を示すことが出来た。この取組みの達成により、従来では科学的根拠が欠如したまま国際的な規制対象としての検討が進められている複雑混合物の取扱い現状に対して、科学的根拠を持った評価法の新たなアプローチを例示する事ができると考える。

研究成果の概要(英文)：Methods for exposure assessment and risk assessment for complex mixtures have been developed in this study. Through the research activity, key technologies which use comprehensive analytical instrument GCxGC, including physico-chemical property estimation, environmental fate, and exposure assessment for technical mixture have been developed. It has also become possible to perform risk screening on bioaccumulation for non-polar substances in the mixture. A method for classifying environmental mixtures according to their detection patterns which will be useful for risk analysis have been developed. The software tool has been available via the website. Most of technologies developed in this study are built in a web platform developed in this study as well, and can easily applied to mixture assessments.

研究分野：環境化学

キーワード：複雑混合物 GCxGC 2次元GC 物性推定 リスク評価 暴露評価 環境運命

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

我々の身の回りの製品や、工業用品・農薬など含む産業目的の製品には、特性付与などのため多くの量及び種類の化学物質が利用されている。

化学物質は我々の生活に密接に関わることから、その負の側面を認識しながら利用するべく産業界においても「リスク評価」という考えが徐々に導入されてきている。このリスク評価は物質個別に実施が進んでいる。

しかしながら、化学物質が利用される製品の多くは単一物質のみを含むわけではなく、さらには製造過程において化学反応を含む様々な処理プロセスを経る事もあるため、実際の製品中には非常に複雑な組成の化学物質が混合物として含まれることになる。この複雑組成をした「製品中混合物」の取扱いも実際の局面においてリスク評価の実施を困難なものとしている一要因と言える。

欧州の REACH 規制においては上市される混合物に対しリスク評価を行う事が求められているが、科学的根拠に基づいたリスク評価が綿密に行われているとは言い難く、リスクに基づく合理的な舵取りではなく規制強化を強く推し進める方向性がとられている。

また環境中に排出されたあるいは循環する化学物質も、さらに複雑な組成の混合物として存在することになるが、これら「環境中混合物」も実際の我々が被るリスクとは関係なく、単体ごと個別にリスク評価がなされている。

このような状況においても、複雑混合物の問題に対して科学的側面に立脚したリスク評価法を構築しようとする動きは国内外併せてもわずかである。

2. 研究の目的

本研究において、複雑混合物のリスク評価法の構築の一環として、これらに対する暴露評価手法の構築を目指す。この取り組みにおいては、石油関連製品を事例として取り上げ、その有効性を示す。

従来のリスク評価プロセスでは、注目対象物質を特定せずに評価を行う形は想定されていない。つまり今回注目する石油関連製品中の複雑混合物に対して、一つ一つの成分の詳細情報を必要とする従来手法は適用できない。これに対し本研究では、2次元ガスクロマトグラフィー(GC×GC)を利用した複雑混合物のリスク評価アプローチの構築への寄与を目指す。化学物質の網羅分析装置として期待される GC×GC を利用することで、混合物中成分の詳細情報が得ることが可能となり、この情報を活用した新たな混合物リスク評価アプローチの提案が期待できる。本研究では、石油関連製品中の複雑混合物を事例とし、暴露評価法の構築を目指す。また併せて、より複雑な組成をした環境混合物にも適用可能な手法を模索する。

3. 研究の方法

(1) 高分離能を有する網羅分析装置である GC×GC を利用して製品中混合物についてエンジンオイルを対象とし、自動車走行距離に応じて試料収集を行った。この試料に対し、試料前処理方法や成分分離など測定手法の構築を行った。

(2) GC×GC 測定により得られたデータに対し、試料中の炭素、水素、ハロゲン類から構成される非極性成分を中心に、暴露評価に必要な検出成分の物性推定手法の構築を行った。物性推定手法については、LFER 理論に基づき GC×GC 測定データの保持時間から水-オクタノール分配係数($\log K_{ow}$)や生物濃縮係数などが推定可能とするよう構築を行った。本手法で用いる推定式のパラメータキャリブレーションのため非極性成分を中心に標準物質の GC×GC 測定を行い、保持時間情報を収集した。尚、非極性成分以外は本推定手法の対象外となるため、燃焼反応物を含むエンジンオイル試料中のこれら成分を LC 分画により化学的に分離する手法を検討し適用した。

(3) 物性推定に重要となる保持時間については、測定回、装置状態や試料マトリックスの性状により変動する事があるため、GC×GC 生データに対しマーカーとなるピークを元にデータアライメントを行い、保持時間補正する技術およびそれらを簡易に実行できるソフトウェア作製を行った。

(4) 製品混合物に対し、非極性成分以外にも沢山の成分を含む環境混合物についての評価方法創出のため、GC×GC データに対し検出パターンに応じた試料分類できるデータ解析手法の作製を行った。

(5) 先に開発した物性推定手法で得られるパラメータを元にフガシティモデルを利用し、各混合物中成分がどの様な環境動態を示し、生物の暴露あるいは環境運命に至るのかを評価する手法の構築に取り組んだ。さらに、これをエンジンオイルの測定データに適用した。

(6) 本課題遂行を通じて開発した物性推定、環境動態解析、暴露評価について、専門家以外に対する可用性向上に向けて取り組みを行った。具体的には GC×GC データをロードし、データに対し簡単な操作で解析実行できるウェブプラットフォームの構築に取り組んだ。

4. 研究成果

(1) エンジンオイルのサンプリング及び GC×GC の分析

製品混合物の対象として選定した自動車のエンジンオイルについて、走行距離に応じた試料採取を同一の自動車に対し連続的に行った。試料は新品のものから走行距離 11,000 km 超のものまでの範囲のものが収集された(図 1)。試料の前処理方法は、ヘキサン抽出および吸着剤の異な

る固相抽出など複数の方法について検討を行った。最終的には、混合物の網羅分析を行う目的に照らしつつ前処理後の試料性状を確認し、成分の逸失が最小限となるヘキサン抽出のみによるものとした。試料の GC×GC 測定については、1st カラムに非極性カラムである DB-1ht を使い 2nd カラムに 50% 程度のジフェニルポリシロキサンを含み中程度の極性を示すカラム BPX-50 を用いた。2 つのカラムの接続部分に熱モジュレータを設置し 2 次元分離を行う構成とした。検出器には四重極型質量分析計を用い、Scan モード測定を行った。

収集した試料について GC×GC 測定を実施した所、走行距離が長くなるに従って複数のピークが 2 次元クロマトグラム上に現れ、燃焼由来の成分が生成している事が確かめられた (図 1)。

質量分析計により得られるマススペクトルから、これらピークの多くは発がん性物質示す種も含む多環芳香族類である事が確かめられた。本測定により、エンジンオイルは製品使用に伴い、化学組成が変性することで評価がより困難な複雑混合物となり得る事が明らかとなった。

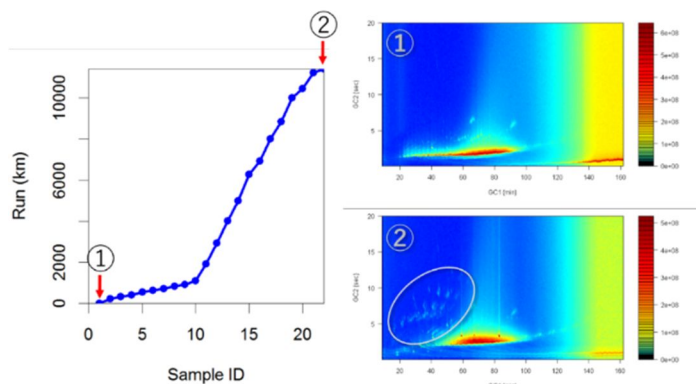


図 1 エンジンオイルの測定距離ごと試料採取の状況と GC×GC による測定結果

(2) GC×GC データにおける物性推定手法

GC×GC 測定で得られた各ピークの保持時間に基づき、それらピークの物性を推定する手法を構築した。GC 測定における化学物質のカラム保持時間、言い換えれば溶出時間は、オープン温度を一定とした場合、カラムの液相と化学物質自体の相互作用の強さによって決まる。オープン温度が昇温プログラムで一定でない場合でもアルカンの保持時間による規格化を行うことで得られる保持指標から相互作用の強さを把握できる。保持時間は、2 次元クロマトグラムの場合は溶出座標として捉えられ、同様に規格化して用いる事が出来る。

この相互作用の強さは 2 相分配の強さを示しており、この強さの度合いは各 2 相系に当てはまる係数を用いる事で $\log K_{ow}$ や $\log K_{aw}$ に変換することが可能である。これら係数を用いた物性推定式は LFER 理論から導かれる pp-LFER 式の変換により、下記の通りとなる。

$$\log K_{xy,i} = \lambda_1 u_{1,i} + \lambda_2 u_{2,i} + \lambda_3 \dots (1)$$

ここで $\log K_{xy,i}$ は成分 i の相 x と相 y における分配係数、 u_1 と u_2 はそれぞれ 1 次元目と 2 次元目の保持指標である。 λ は系により決まるシステム係数で、推定式を立式する際には多数の物質の保持指標データを用いたパラメタリゼーションにより算出される。

標準物質 70 程度を GC×GC 測定し、保持指標を得て式 (1) のパラメタリゼーションを行い、非極性成分について 12 種の物性を推定可能とした。本手法にて $\log K_{ow}$ の値を推定した所、EPIsuite や Absolv など異なるモデル推定による値や実験値と比較しても同程度の精度で推定可能であった。また他のモデルでは推定する成分の分子式が情報として必要であるが、本手法では測定により得られた保持指標のみで推定可能である事から、必ずしも含有成分が同定できない複雑混合物のようなケースにおいても利点がある事が明らかとなった。

さらに、式 1 により GC×GC クロマトグラム上の各保持時間から各物性値を求めた。これら物性値の内、化学物質の環境

動態に関わるものとその値の範囲について、合致するクロマトグラム範囲をプロットした。この範囲に含まれる成分は当該の環境動態を示すものと考えることができ、より注意深く調べる必要があるものとなる。これを適用することで、エンジンオイル試料の GC×GC 測定データにおいて、水生生物に蓄積しやすい成分が現れる領域を示すことが出来

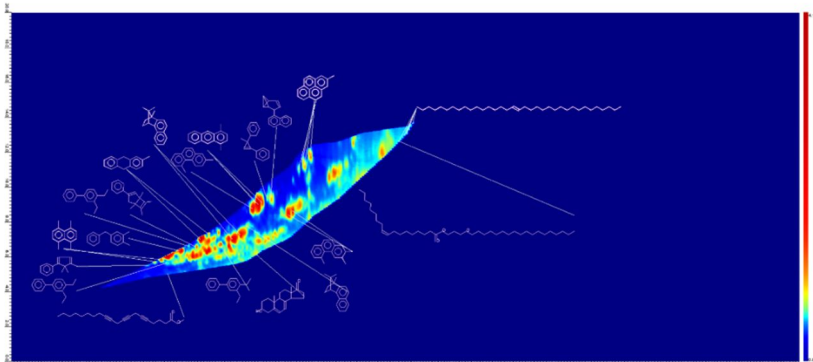


図 2 水生生物蓄積ポテンシャルを示すエンジンオイル試料中の成分

た(図2)使用して劣化したエンジンオイルには物性推定の適用範囲外の成分が含まれていたが、LC分画により非極性成分のみを化学分離し、そのフラクションをGC×GC測定して解析データとした。この領域は、 $(5 < \log Kow < 7)$ かつ $(-4 < \log Kaw < -1)$ の物性範囲で形成される。この領域に現れる成分は水生生物蓄積ポテンシャルを有するものと言える。質量分析計で得られたスペクトル情報の解析から、この試料中の水生生物蓄積ポテンシャルを有する成分として多感芳香族や脂肪族やアルキル化多感芳香族化合物などが挙げられた。他にも越境汚染ポテンシャルや陸生成物蓄積ポテンシャルやヒト蓄積ポテンシャルなどについても解析が可能となった。このように暴露評価に必要な物性の推定、混合物中の高暴露につながりやすい成分の評価、リスクポテンシャルの評価などの解析が可能であった。今後は非極性成分以外への適用範囲拡張や推定できる物性の種類の拡大が求められる。

(3) GC×GC-MS で得られるクロマトグラムの保持時間補正手法

GC×GCの保持指標から物性値を推定する事、環境動態や生物への蓄積リスクを推定することが可能であった。この推定精度の向上にはGC×GC測定における正確な保持時間の取得が欠かせない。しかしながらGC測定においてはガス圧、昇温制御、カラムの状態、試料マトリクス of 性状などにより保持時間が変動する事があり、特にGC×GCの場合、微細なガス圧変動や温度変化に2次元目の保持時間の影響を受けやすく、推定精度の劣化の大きな要因となり得る。そこでGC×GCの保持時間を補正する手法を開発した。本手法は、試料へのスパイクとして溶出座標が既知となる標準物質を用いる。基準となる2次元クロマトグラム上と補正したい2次元クロマトグラム上のこれらスパイクの溶出座標をマーカーとして紐付けに用い、各マーカーのズレの大きさに基づきその周辺画像を補正する。周辺画像の補正の度合いは、1次元目方向については前後のマーカーの1次元目の保持時間のズレを線形補間して決定し、2次元目方向については近傍のマーカーのズレの大きさをボロノイ分割による重みづけを利用して非線形補間して決定する。このアルゴリズムにより2次元クロマトグラムの全領域を補正することが出来る。本手法はGC×GC-MSのデータにも適用することができ、補正前後のマススペクトル情報やピーク体積に大きく影響なく保持時間が補正できることを確認した。この手法はソフトウェアGC Imageなどで簡便に利用可能となっており、またプログラムのソースコードも公開しており個別の改良や各種データ解析手法との併用もできるようになっている。

(4) NMFを用いたGC×GC検出パターンに基づく環境混合物の分類手法

製品混合物と比較し、環境混合物には実に様々な成分が含まれ、非極性物質に適用が可能なGC×GCの物性推定手法が適用できないケースが多い。そこで、環境混合物に対して非負制約因子分解法(NMF)を適用し、GC×GCの検出パターンを抽出しそれに基づく分類手法を考案し、環境混合物の評価手法に資する技術として開発を行った。東京湾流域から広く河川水を試料収集してGC×GCで測定を行い、そのデータを手法開発の基礎とした。NMFは、多変数から成る複数のデータに対し、負値とならないよう制約を加えたアルゴリズムにより、下記の式(2)の両辺の差が最小となるよう繰り返し演算を行い、もともとのインプットデータ数より少ない数となる因子と重みのデータマトリクスに分解する機械学習手法である。

$$X \approx WH \dots(2)$$

$$\min_{W, H \geq 0} [D(X, WH) + R(W, H)]$$

ここで、Xは得られているデータマトリクス、Hは分解後の因子を表すデータマトリクス、Wは各因子の重み係数となるデータマトリクスである。

このデータ解析法を用いると、注目する因子に試料ごとに割り当てられた重みをかける事で、その試料における注目因子のみを割り出して抽出することが可能である。

具体的には、各試料のGC×GCデータについて、各保持時間におけるシグナル強度をインプットとし、NMFにより分解することで、因子つまり特徴的なパターンと試料ごとに異なる重みを得ることができる。これらを用いる事で、東京湾流域河川の代表的な混合物特徴が得られ、また河川ごと特徴に応じた分類が可能となる。開発した手法は、新しく得た未知の試料についても、既知試料デー

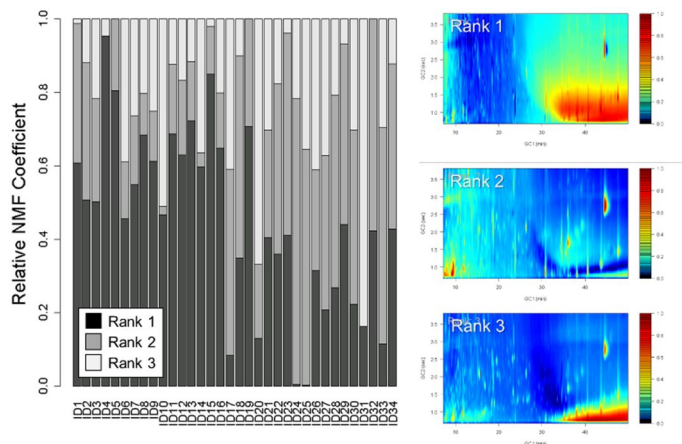


図3 NMFにより得られる混合物特徴パターンと各試料の混合物特徴の強度に基づく分類

タの NMF により得た各因子の特徴パターンとのコサイン距離に基づく類似度を算出することで、迅速に分類することが出来る。これを適用した結果、東京湾河川水は、アルカン類、テルペン類、芳香族類を主として含むもの、これらに加え農薬類、リン系難燃剤も含むもの、テルペン類、芳香族類、工業系物質を含むものの大きく3つに分類することができ、各河川の特徴を明らかにすることが出来た(図3)。本手法についてもソースコードを公開しており、利用可能となっている。

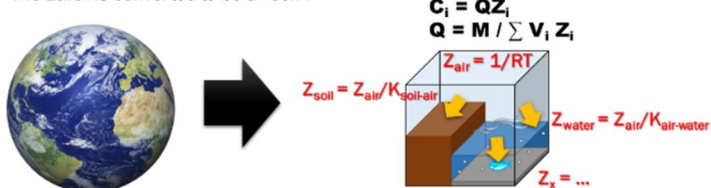
(5) GC×GC とフガシティモデルによる混合物中成分の環境動態解析手法

フガシティモデルは、対象とする物質の散逸力を仮定し、その物質が散逸力に従って各媒体に移行する量や傾向、全体のマスバランスを推定するものである。その際に各媒体量の情報が必要となるため、複雑系をワンボックスのように捉え単純化したワンコンパートメントモデルが用いられる。媒体間の移行傾向を示すパラメータとして、対象とする物質の2相分配係数が必要である。尚フガシティモデルには定常状態を予測するもの、非定常状態を予測するものなどいくつかのレベルがあるが、ここではフガシティモデルのレベルIを実装した。

本研究においては、ワンコンパートメントのフガシティモデルを作成し(図4) GC×GC で推定した物性値パラメータを直接取り込むことで、その物質の環境動態や環境運命、生物の暴露評価を行う事が出来るようにした。コンパートメントとしては、全球レベル、国内レベルの2つで推定可能とした。開発した GC×GC のクロマトグラム上での物性推定手法と組み合わせることで、測定した混合物中の非極性成分に対し、ダイレクトに環境動態や生物の暴露傾向を推定する手法を構築することができた。本成果については、国際会議にて発表を行った。今後はGC×GCクロマトグラム上で簡易に定量を行えるようにし、その情報をこのフガシティモデルに伝播してより定量的な情報を提供可能とするといった機能拡張が考えられる。またより複雑なフガシティモデルの実装も考えられる。

One compartment model:

The Earth is converted to be a "box".



	Height (m)	Area (m ²)	Density (kg/m ³)	Volume (m ³)
Air	1000	5×10 ¹⁴	1	5×10 ¹⁷
Water	200	4×10 ¹⁴	1000	7×10 ¹⁶
Soil	0.1	2×10 ¹⁴	2400	2×10 ¹³
Sediment	0.01	4×10 ¹⁴	2400	4×10 ¹²
SS	-	-	1500	2×10 ¹¹
Fish	-	-	1000	5×10 ⁸

図4 物性値を用いたワンコンパートメントのフガシティモデルによる環境運命予測

Q: フガシティ(散逸力: 物質を気体状態としたときの圧力のようなもの), M: 系内に流入した物質質量, Vi: 媒体iの体積, Ki,j: 物質の媒体iと媒体jにおける2相分配係数, Zi: 媒体iのフガシティ容量, Ci: 媒体iにおける物質濃度(Q×Ziで求められる)

(6) GC×GC による混合物解析手法の可用性を高めるためのウェブプラットフォーム

開発してきた手法は、プログラムコードを公開し広く使えるように整備を進めてきたところであるが、各自の目的に合わせた改変や組み込みなどが可能である一方、プログラミングに詳しくないコミュニティには利用に対して敷居となってしまいうる可能性がある。このことは GC×GC 測定を利用して混合物をリスク評価しようとする本手法の活用における障壁となりうる。そこで混合物の暴露評価やリスク評価への活用を見据え、ウェブ上で簡単に利用できるようインターフェースを作製した(図5)。これをプラットフォームとして利用することで、GC×GC という最先端装置を保有していないコミュニティにおいても、これらプラットフォーム上にアップロードされたデータについて簡便に表示し、解析することが出来る。個別にデータを保有している場合もアップロードして解析を行う事が出来る。解析ツールには質量イオン抽出、ピークリスト作成、スペクトルサーチ、物性推定、リスクポテンシャル領域描画、3Dクロマトグラム表示などを実装した。

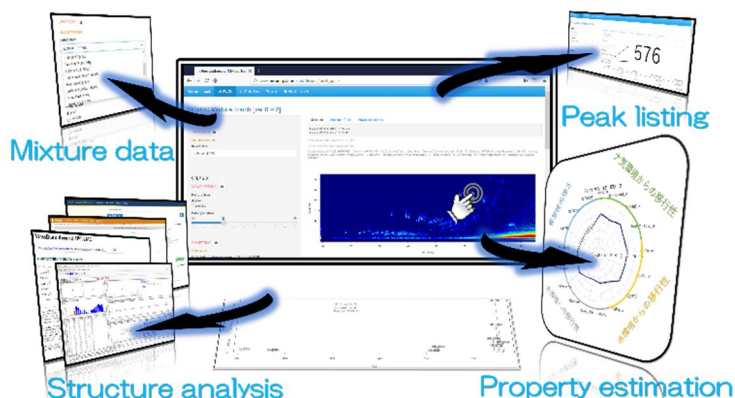


図5 混合物の解析を行えるウェブプラットフォーム

Mixture Touch

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計11件（うち査読付論文 9件 / うち国際共著 4件 / うちオープンアクセス 4件）

1. 著者名 Zushi Yasuyuki, Gros Jonas, Tao Qingping, Reichenbach Stephen E., Hashimoto Shunji, Arey J.Samuel	4. 巻 1508
2. 論文標題 Pixel-by-pixel correction of retention time shifts in chromatograms from comprehensive two-dimensional gas chromatography coupled to high resolution time-of-flight mass spectrometry	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Journal of Chromatography A	6. 最初と最後の頁 121 ~ 129
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) https://doi.org/10.1016/j.chroma.2017.05.065	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する
1. 著者名 Zushi Yasuyuki, Hashimoto Shunji	4. 巻 90
2. 論文標題 Direct Classification of GC × GC-Analyzed Complex Mixtures Using Non-Negative Matrix Factorization-Based Feature Extraction	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Analytical Chemistry	6. 最初と最後の頁 3819 ~ 3825
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.analchem.7b04313	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Zushi Yasuyuki, Hashimoto Shunji, Tanabe Kiyoshi	4. 巻 156
2. 論文標題 Nontarget approach for environmental monitoring by GC × GC-HRTOFMS in the Tokyo Bay basin	5. 発行年 2016年
3. 雑誌名 Chemosphere	6. 最初と最後の頁 398 ~ 406
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2016.04.131	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Masunaga Shigeki, Zushi Yasuyuki	4. 巻 1244
2. 論文標題 Status and Trends of Perfluoroalkyl Substances in Japan with Special Emphasis on the Tokyo Bay Basin	5. 発行年 2016年
3. 雑誌名 ASC Symposium Series	6. 最初と最後の頁 157 ~ 179
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/bk-2016-1244.ch007	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Zushi Yasuyuki, Yamamoto Atsushi, Tsunemi Kiyotaka, Masunaga Shigeki	4. 巻 24
2. 論文標題 Revaluation of stockpile amount of PFOS-containing aqueous film-forming foam in Japan: gaps and pitfalls in the stockpile survey	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Environ. Sci. Pollut. Res.	6. 最初と最後の頁 6736 ~ 6745
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s11356-017-8374-1	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 頭士泰之	4. 巻 26
2. 論文標題 私たちの身の回りに存在する化学物質 ~ 東京湾流域を対象とした網羅的分析の実施事例 ~	5. 発行年 2016年
3. 雑誌名 Safety & Sustainability News letter	6. 最初と最後の頁 3
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Shunji Hashimoto, Yasuyuki Zushi, Yoshikatsu Takazawa, Teruyo Ieda, Akihiro Fushimi, Kiyoshi Tanabe, Yasuyuki Shibata	4. 巻 -
2. 論文標題 Selective and comprehensive analysis of organohalogen compounds by GCxGC-HRToFMS and MS/MS	5. 発行年 2015年
3. 雑誌名 Environmental Science and Pollution Research	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s11356-015-5059-5	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Takeo Sakurai, Shigeko Serizawa, Jun Kobayashi, Keita Kodama, Jeong-Hoon Lee, Hideaki Maki, Yasuyuki Zushi, Janice Beltran Sevilla-Nastor, Yoshitaka Imaizumi, Noriyuki Suzuki, Toshihiro Horiguchi, Hiroaki Shiraishi	4. 巻 539
2. 論文標題 Temporal trends for inflow of perfluorooctanesulfonate (PFOS) and perfluorooctanoate (PFOA) to Tokyo Bay, Japan, estimated by a receptor-oriented approach	5. 発行年 2015年
3. 雑誌名 Science of The Total Environment	6. 最初と最後の頁 277-285
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.scitotenv.2015.08.142	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Zushi Yasuyuki, Yamatori Yuki, Nagata Jun, Nabi Deedar	4. 巻 669
2. 論文標題 Comprehensive two-dimensional gas-chromatography-based property estimation to assess the fate and behavior of complex mixtures: A case study of vehicle engine oil	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Science of The Total Environment	6. 最初と最後の頁 739 ~ 745
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.scitotenv.2019.03.157	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Zushi Yasuyuki, Hanari Nobuyasu, Nabi Deedar, Lin Bin-Le	4. 巻 5
2. 論文標題 Mixture Touch: A Web Platform for the Evaluation of Complex Chemical Mixtures	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 ACS Omega	6. 最初と最後の頁 8121 ~ 8126
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsomega.0c00340	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 頭土 泰之, 山取 由樹, 羽成 修康, 恒見 清孝, 永田 淳, 長尾 優, 廣岡 恵, 田中 幸樹	4. 巻 C146-0387
2. 論文標題 順相LCを利用した複雑混合物中成分の分画とGC×GCによる混合物評価法への応用	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 島津製作所 テクニカルレポート	6. 最初と最後の頁 1-4
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

〔学会発表〕 計28件 (うち招待講演 4件 / うち国際学会 7件)

1. 発表者名 頭土 泰之, 山取 由樹, Deedar Nabi, 永田 淳
2. 発表標題 ノンターゲット分析による環境試料中の成分網羅的分析手法の検討
3. 学会等名 日本水環境学会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 頭士 泰之
2. 発表標題 各種質量分析データに適用可能なNMFによるクロマトピークデコンボリューション手法
3. 学会等名 統計学的アプローチによる問題解決のための環境化学分析の最適化・高度化に関する研究集会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Zushi Yasuyuki, Nagata Jun, Deedar Nabi
2. 発表標題 GCxGC-based property estimation for risk assessment of complex petrochemical mixture including the generated compounds in the engine oils
3. 学会等名 SETAC North America Focused Topic Meeting (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 黒田 啓介, 小林 淳, 高澤 嘉一, 頭士 泰之, 白石 不二雄, 山崎 美穂, 中島 大介
2. 発表標題 2016 年熊本地震後の熊本市の地下水・表流水水質 バイオアッセイを用いた追跡調査
3. 学会等名 日本水環境学会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 黒田 啓介, 小林 淳, 高澤 嘉一, 頭士 泰之, 白石 不二雄, 山崎 美穂, 中島 大介
2. 発表標題 2016 年熊本地震後の地下水水質と汚染: バイオアッセイによる評価
3. 学会等名 日本地下水学会2017年春季講演会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 橋本 俊次, 家田 曜世, 高澤 嘉一, 頭士 泰之, 大塚 宜寿
2. 発表標題 GCxGC-HRTOFMSによるノンターゲットモニタリングのための各種ソフトウェアの改良
3. 学会等名 第26回環境化学討論会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 頭士 泰之, 橋本 俊次
2. 発表標題 逆解析アプローチによる環境混合物評価手法の検討 - 混合物分析画像のパターン認識による分類と因果解析 -
3. 学会等名 第26回環境化学討論会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 黒田 啓介, 小林 淳, 高澤 嘉一, 頭士 泰之, 白石 不二雄, 山崎 美穂, 中島 大介
2. 発表標題 酵母アッセイを用いた熊本市における地下水汚染のスクリーニング
3. 学会等名 第26回環境化学討論会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 黒田 啓介, 小林 淳, 高澤 嘉一, 頭士 泰之, 白石 不二雄, 山崎 美穂, 中島 大介
2. 発表標題 Rapid screening of groundwater pollution after an earthquake by recombinant yeast assays
3. 学会等名 10th Micropol & Ecohazard Conference (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Nabi D., Zushi Yasuyuki., Samanipour S., Ahmad F., Arey S., Aeppli C.
2. 発表標題 Passive sampling and GCGC: When two marry to give better understanding of transport behaviour and fate of micropollutants in environmental waters
3. 学会等名 9th International Passive Sampling Workshop and Symposium (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 頭士泰之, 山取由樹, 加茂将史, 恒見清孝
2. 発表標題 複雑混合物のリスク評価のための手法提案
3. 学会等名 環境化学討論会
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 頭士泰之, 山取由樹, 恒見清孝, 梶原秀夫, 東野晴行
2. 発表標題 室内製品暴露評価ツール(ICET)を用いた日常生活における暴露評価 - 難燃剤を事例として -
3. 学会等名 日本リスク研究学会
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 頭士 泰之, 山取 由樹, 永田 淳, 加茂 将史, 恒見 清孝
2. 発表標題 複数物質・複雑混合物への暴露に対するリスク評価手法の開発に向けて
3. 学会等名 日本リスク研究学会
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 橋本俊次, 家田曜世, 高澤嘉一, 田邊 潔, 柴田康行, 頭士 泰之
2. 発表標題 GCxGC-HRTofMSによる環境ノンターゲット分析の試み
3. 学会等名 質量分析総合討論会
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 橋本俊次, 家田曜世, 高澤嘉一, 田邊 潔, 柴田康行, 頭士 泰之
2. 発表標題 GC x GC-HRTOFMSによるノンターゲットモニタリングのための差の解析法の検討
3. 学会等名 環境化学討論会
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 家田曜世, 橋本俊次, 高澤嘉一, 田邊 潔, 頭士 泰之, 柴田康行, 前川文彦, 佐野一広, 鈴木剛, 中山祥嗣, 磯部友彦, Tin-Tin-Win-Shwe, 川嶋貴治
2. 発表標題 GC x GC-HRTOFMSによる多成分網羅分析 - ソフトウェアによる化合物の自動検出とマトリックスの影響評価 -
3. 学会等名 環境化学討論会
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 黒田啓介, 小林淳, 中島大介, 白石不二雄, 山崎美穂, 高澤嘉一, 頭士 泰之
2. 発表標題 熊本市における地震後の地下水水質
3. 学会等名 日本水環境学会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 頭土泰之
2. 発表標題 日本環境化学会25周年記念パネルディスカッション
3. 学会等名 環境化学討論会（招待講演）
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 頭土泰之
2. 発表標題 MSデータベースを利用した網羅分析事例の紹介と環境リスク解析への展望
3. 学会等名 日本水環境学会シンポジウム（招待講演）
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 頭土泰之
2. 発表標題 2次元GC計測を用いた複雑混合物スクリーニング評価、
3. 学会等名 化学物質の安全管理に関するシンポジウム（招待講演）
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 家田曜世，橋本俊次，高澤嘉一，田邊潔，頭土泰之，柴田康行，前川文彦，佐野一広，鈴木剛，中山祥嗣，磯部友彦，Tin-Tin-Win-Shwe，川嶋貴治
2. 発表標題 COMPREHENSIVE ANALYSIS OF HOUSE DUST USING GC×GC-HRTOFMS AND IN-HOUSE SOFTWARE
3. 学会等名 Dioxin 2016（国際学会）
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 Yasuyuki Zushi, Atsushi Yamamoto, Shiho Kitai, Shigeki Masunaga, Hideya Kawasaki, Ryuichi Arakawa
2. 発表標題 Exploring chemical markers for environmental release of perfluorooctane sulfonate in aqueous fire-fighting foams using comprehensive analysis with high resolution mass spectrometry
3. 学会等名 ACS 2016 (国際学会)
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 頭士泰之、橋本俊次、田邊潔
2. 発表標題 ノンターゲット分析とGISを組み合わせた環境中存在物質の排出源解析
3. 学会等名 第24回環境化学討論会
4. 発表年 2015年

1. 発表者名 Yasuyuki Zushi, Shunji Hashimoto, Kiyoshi Tanabe
2. 発表標題 Non-target analysis by GC × GC-HRTOFMS and its application to emission source analysis of the detected contaminants using GIS
3. 学会等名 SETAC North America 2015 (国際学会)
4. 発表年 2015年

1. 発表者名 頭士泰之、羽成修康、林彬勲
2. 発表標題 Mixture Touch: 環境混合物を診るためのウェブプラットフォーム
3. 学会等名 日本水環境学会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 頭士泰之, 羽成修康, 林彬勲
2. 発表標題 混合物ウェブプラットフォーム(Mixture Touch)を利用した塩素化パラフィンリスク評価手法の検討
3. 学会等名 日本環境化学会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 頭士泰之
2. 発表標題 ウェブプラットフォーム(Mixture Touch)におけるデータ解析手法実装の試み
3. 学会等名 統計学的アプローチによる問題解決のための環境化学分析の最適化・高度化に関する研究集会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Yasuyuki Zushi
2. 発表標題 Mixture Touch: A Web Platform for Assessments of Complex Mixtures Using Comprehensive Two-Dimensional Gas Chromatography Coupled with Mass Spectrometry (GC×GC-MS)
3. 学会等名 ICCA- LRI Workshop (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

〔図書〕 計1件

1. 著者名 頭士 泰之 (分担執筆)	4. 発行年 2017年
2. 出版社 技術情報協会	5. 総ページ数 654
3. 書名 製品含有化学物質の リスク管理、情報伝達の効率化 - 規制対応/リスクアセスメント/調査・顧客対応	

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
--	---------------------------	-----------------------	----