

平成 29 年 6 月 20 日現在

機関番号：82101

研究種目：基盤研究(A) (一般)

研究期間：2014～2016

課題番号：26241026

研究課題名(和文)精密質量データ解析法の開発と環境化学物質モニタリングへの応用

研究課題名(英文)Development of analysis method of accurate mass data for monitoring chemicals in environment

研究代表者

橋本 俊次 (HASHIMOTO, Shunji)

国立研究開発法人国立環境研究所・環境計測研究センター・室長

研究者番号：80321719

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 23,600,000円

研究成果の概要(和文)：固相吸着法などで採取した大気や水試料を加熱脱着法により直接、測定装置に導入することで、迅速かつ網羅的な分析を可能にした。膨大な種類の化学物質を分離測定するために多次元ガスクロマトグラフィ-飛行時間型質量分析法を用いた。測定データから任意の物質情報を抽出あるいは除去する手法を開発し、特に質量欠損の利用は、炭化水素由来のマススペクトルをほぼ完全に除去可能にした。未知物質の同定には質量分解能3万程度の測定が有効であった。非負制限因子分解(NMF)法の応用により、連続するモニタリングデータから差を検出する手法を開発した。また、データ比較のためには必須の保持時間合わせの手法も新たに開発した。

研究成果の概要(英文)：Air or water samples collected onto solid phase sampler were directly introduced into an instrument by thermal desorption due to achieve rapid and non-targeted analysis. A comprehensive gas chromatography-high resolution time-of-flight mass spectrometry (GC×GC-HRToFMS) was effective for precious separation of huge number of chemicals in samples. Exact mass measurement made it possible to select chemicals by post data processing such as mass defect filtration that was especially effective to remove hydrocarbons from a data. And reliable estimation of unknown chemicals required above 30,000 of mass resolution. Non-negative matrix factorization (NMF) was applied to detection of data difference and compensation method of retention times of each two-dimensional chromatograms from GC×GC-HRToFMS, which was essential to data comparison, was also developed in this study. Consequently, rapid and informative non-targeted environmental monitoring method was developed based on GC-HRToFMS.

研究分野：環境リスク、環境分析

キーワード：環境モニタリング 精密質量 ノンターゲット分析 網羅分析 迅速分析 未知物質 インフォマティクス

### 1. 研究開始当初の背景

2012年5月に発生した利根川水系のホルムアルデヒド高濃度汚染事件では、1都4県という広範囲で取水停止や断水を引き起し、原因物質と排出業者の特定には10日を要した。このような事例に対応するには、高頻度なモニタリングと定常状態の把握、規制項目にとらわれない化学物質情報の把握、発生源情報の把握と整理、連絡体制・ネットワークの整備が重要であることが改めて浮き彫りになった。例えば、廃棄物最終処分場を含む処理施設の排水基準項目は限定的であり、多様化する化学物質に対応しきれない。これを補うために導入が予定されている全排水毒性試験(WET)ではリスクの全てを明らかにできる訳ではなく、原因物質の特定を行うことは困難である。また、気化した物質のリスクを評価できるほどの大気モニタリングが実施されることは極めて稀である。従って、リスク管理の観点からも、常時流出している化学物質の全体像の解明や異常時に増える物質の種類や傾向を把握することが求められている。

これまでの化学分析はターゲット分析が主流で、測定対象以外の物質を除去する「精製」が必須であったが、多様化する物質に対応するため、近年、様々な分野で「ノンターゲット分析」が注目されつつある。今尚、全ての化学物質を検出できる万能な方法は実現していないが、環境リスクの把握という観点からは、試料の精製を行わない網羅的分析は理想的であるといえる。ノンターゲット分析の普及の期待は、特に、飛行時間型質量分析計(ToFMS)の進歩に負うところが大きい。近年登場した高分解能(HR)ToFMSは、一般に普及している四重極型(qMS)の数千~数万倍の質量情報、二重収束型質量分析計(DFMS)の数十~百倍の時間分解能で常に全質量範囲測定を行えるなど高性能である。環境分野では、主にLC-HRToFMSが用いられており、GC-HRToFMSの利用は始まったばかりであるが、最新型の検出器[1]の採用による短所の克服、DFMSの数分の一程度の装置価格や消費電力から、GC-HRToFMSの本格的普及が始まるのは時間の問題といえる。

従って、このHRToFMSの性能を最大限に活用した分析による情報蓄積を進める一方で、精密質量ライブラリやその検索法のような基盤の他にも、GC-HRToFMS測定から得られる膨大な情報を効果的に活用する手法の開発や環境の整備を急ぐ必要がある。

さらに環境分野では、未知物質の質量スペクトルを探索可能な試料測定データのアーカイブやその探索法、試料群の化学物質組成を特徴付けられるようなデータ解析法、迅速な異常検出ができるモニタリング法、迅速で高精度な汚染実態把握と発生源解析などの応用的活用法の開発と充実が期待されている。

### 2. 研究の目的

本研究では、ガスクロマトグラフ-高分解能飛行時間型質量分析計(GC-HRToFMS)の環境分野への活用とその高度化を図るために、GC-HRToFMSの能力を最大限活用した物質の検索・同定が可能な高精度な網羅的分析法や、物質組成や量の変化を高感度に検出・識別できる精密質量データの解析法を提案し、測定データからの物質の発掘や検索・同定において精密質量データを用いることの優位性を明らかにすることを目的とした。ケーススタディとして、廃棄物処分場、環境監視地点などにおける大気および水環境中の化学物質の網羅的モニタリングおよび異常検出とその原因解析を行い、提案する手法の妥当性と有用性について評価を試みた。

### 3. 研究の方法

(1) 網羅分析のためのサンプリング法の検討

#### ① ミニポンプによる大気捕集

場所を選ばず、高頻度、あるいは長期間の大気モニタリングに備えるため、省電力駆動のミニポンプによる大気捕集法を検討した。

使用したポンプは、柴田科学製ミニポンプMP-Σ300、Σ-100HNII、MP-W5Pのいずれかで、検討した捕集管は、ゲステル製Tenax-TA、carboxen1000&CabopacB(TDU用)であった。また破かの確認のため、2本の捕集管を直列につなぎ、流速を0.5あるいは0.3L/分として、24時間から7日間の大気捕集を行った。

大気捕集は、札幌、岩見沢、北見、帯広、加須市、つくば市、富士山山頂において実施した。

#### ② 樹脂皮膜攪拌子による水質試料の分配抽出

高頻度のモニタリングに対応し、水質中の広範囲の化学物質を網羅的に抽出する手法として、樹脂皮膜攪拌子による分配抽出法を採用し、その条件検討を行った。

使用した攪拌子は、ポリジメチルシロキサン(PDMS)皮膜を施した磁性攪拌子で、ゲステル製Twister(長さ20mm、膜厚0.5mm)で、NaCl、アセトンの添加量、回転数、抽出時間を変え、標準試薬の回収率を比較した。

回収率に用いた標準試薬は、残留性有機汚染物質(POPs)のLGC製Pesticide-Mix 1037および農薬混合標準液(和光純薬製PL1-1)で、POPs各10ng/ml、農薬各20ng/mlのアセトン溶液を100μlを水試料50mlに直接添加した。

#### (2) GCxGC-HRToFMSによる測定条件の検討

環境中の幅広い物質を同時に測定するため、高分離で質量分解能の高い多次元ガスクロマトグラフ-高分解能飛行時間型質量分析計(GCxGC-HRToFMS)を測定に用いた。

測定にあたり、一次元目のカラムは、GLサイエンス製InertCap 5MS/Sil(長さ45m、内径0.25mm、膜厚0.1μm)とし、二次元目のカ

ラムは、SGE 製 BPX-50 (長さ 1.5m, 内径 0.1 mm, 膜厚 0.1 $\mu$ m) あるいはスペルコ製 IL-59 (長さ 1.5m, 内径 0.1 mm, 膜厚 0.08 $\mu$ m) の二種類について検討した。

測定には、Zoex2006 GCxGC モジュレーターを内蔵したアジレント 7890GC、日本電子 JMS-T100GC 4G (NIES 仕様) を用いた。主な条件は、質量分解能：10,000 (半値幅)、データ採取周期：33Hz、イオン化電圧：70eV、イオン化電流：600 $\mu$ A の EI 法により測定した。

### (3) HRTofMS 測定データ解析

測定データは、MassCenter (日本電子製) でマスペクトルをバー型 (重心法) した後、NetCDF 型式に変換した。変換後のデータを VisualStudio (マイクロソフト製) あるいは R (フリーウェア) で作成した各種自作ソフトウェア (表 1) にて処理を行った。

データの表示と検索：処理データは、GCImage (GCImage 製) により表示と比較を、MS Search 2.0 (NIST 製) により NIST 11 あるいは NIST14 マスペクトルライブラリによる検索を行った。

表 1 本研究で使用・開発した自作ソフトウェア

ソフト名	概要	HP 公開
CBEEx (MDF 含む)	同位体組成に基づき Cl, Br を含むマスペクトルを抽出する	公開中
NLSim	任意の質量差のマスフラグメントを検索し合致するマスペクトルを抽出する (中性ロスキャンを模擬)	未公開
MolCalc	指定した質量数に近い組成式と精密質量、誤差を計算する (候補組成のリストアップ)	未公開
T-SEN	マスペクトルと保持時間情報に基づき物質を自動検索、自動定量を行う	公開中
ComSpec	マスペクトルに基づき物質を自動検索、自動定量を行う	公開中
NMFwithDBcreator	非負値行列因子分解 (NMF) による GCxGC クロマトグラムピークのデコンボリューションを行う	公開中
DataNMF ※	GC(xGC)-HR(TOF)MS データの特徴づけを行い、差 (異常値) の検出を支援	未公開
ChlorineFunc.plugin	同位体組成に基づき Cl, Br を含むマスペクトルを抽出する	
NIES-BlobMS Table.plugin	GCImage 上で指定したピークのマスペクトル情報を多形式でエクスポートする	
(GCImage に機能追加) ※	GCImage 上で GCxGC クロマトグラムピークの保持時間合わせを行う	製品公開予定
ComEX2, comEX3	組成式から同位体を含む精密質量マスペクトルを生成し、データから一致するマスペクトルを抽出あるいは除去する	未公開

※ 本課題で開発したソフトウェア、その他のソフトウェアも本課題で使用。

## 4. 研究成果

### (1) サンプリング法

#### ① 大気の捕集

本研究における平常時の大気試料採取を実施した。試料採取に参加している他機関との整合性をとるため、研究代表者から指示された捕集管、吸引速度、吸引時間等の採取条件で行った。

2本連結した捕集管の通気抵抗は大きく、吸引力の強い柴田科学製ミニポンプ MP- $\Sigma$  100HN II を使用することとし、これにより 168 時間採取が可能となった。しかし、人為的汚染の影響の少ないと想定される富士山頂での採取を試みたところ、気圧が低くポンプに負荷がかかりすぎて採取が継続できない場合があった。また、研究で使用する測定機器では捕集管から脱着させた物質をすべて導入することができるが、捕集管に通気した大気試料の量は 5m<sup>3</sup> 程度でしかなく、さらに試料量を少なくすることは望ましくないと考えられた。

#### ② 水質試料の抽出

ポリジメチルシロキサン攪拌子 (ゲステル製 Twister) によるスターバー抽出により、広範囲のオクタノール水分配係数 (Kow) を持つ物質を水試料から回収する条件について検討した。水試料量 50ml、室温 (25 $^{\circ}$ C 前後) を基本とし、アセトン及び NaCl 添加、回転数、抽出時間を変え実験を行った。その結果、室温 (25 $^{\circ}$ C 前後)、回転数 1500rpm 程度、24 時間抽出、20% (重量比) の NaCl と 10% (容量比) のアセトン添加の条件で、Kow0.72~7.4 の POPs 類およびポジティブリスト農薬の 70-80% をカバーする抽出を可能にした。

### (2) 測定法

この研究では、測定データを直接比較することで差の検出などを試みるため、測定条件は極力単純でバラツキの要因の少ないものを選択した。前処理を省いた網羅分析のためには高分離性能を有した GCxGC-HRTofMS を採用し、GC カラムは GCxGC 分析では一般的で汎用性のある 5%-フェニルメチルシリコーン系 (微極性) と 50%-フェニルメチルシリコーン系 (中極性) の組み合わせとした。また、カラムの昇温は、測定対象物質の物性計算や保持時間補正が容易になるように定率昇温とした。

### (3) 精密質量解析法の検証

#### ① 「GCxGC-HRTofMS による網羅分析データからの有機ハロゲン化合物の選択的抽出」

網羅分析による環境モニタリングにおける精密質量測定の有効性を示すため、精密質量を活用したデータ解析法を開発し検証を行った。

膨大な GCxGC-HRTofMS 測定データから任意の物質情報を得る方法の一つとして、HRTofMS 測定データから特定のマスペクト

ル情報を抽出する複数のソフトウェアを開発した。(3. 研究の方法 (3) HRTofMS 測定データ解析 参照)

「CBEx」は、データ中の全てのマススペクトルを検索し、その中から塩素あるいは臭素の同位体を含むマススペクトルのみを抽出するプログラムで、信号強度による足きり、質量範囲制限、同位体比許容範囲、抽出質量精度(質量分解能)、模擬中性ロススキャン、質量過小フィルターの設定が可能である。

3.6m3の室内大気をTenax管で捕集したものをTD-GC×GC-HRTofMSで直接測定した二次元トータルイオンクロマトグラム(2D-TIC)からGCImageにより685のピーク(プロブ)を検出した。このデータからCBExにより抽出質量精度(MA)条件を変えつつ3~10塩素化合物をターゲットとしてデータ抽出を行ったところ、質量精度を上げるほど抽出されるピーク数が減少した。MA:0.01uの場合、塩素化合物とみられるマススペクトルを有すピークが多数抽出され、作成したプログラムが機能していることが確認できた。

また、得られたマススペクトルからは共溶出が疑われ、質量範囲の制限や質量過小フィルターなどの処理が特に有効であることも明らかになった。これらは、整数質量の測定データでは行えない解析であり、環境分析(モニタリング)において、精密質量測定の優位性を示す好例と言える。

②「精密質量データによる環境中の物質検索と未知物質の同定」

高分解能質量分析計を用いて、環境試料や製品中に含まれる化学物質の物質検索と未知物質の同定を行った。対象を限定しない分析手法によって、特定の構造を持つ物質群の検索や環境中に存在しているこれまでの環境規制・管理の枠組みから漏れている物質を同定することができた。今回、ThermoFisherのExactive、SciexのX500Rといった高分解能質量分析を環境試料に適用することで、これまで環境汚染物質として考えられていなかった物質も含め多くの物質を同定することができた。分解能は3万程度あれば解析に耐えうるデータが得られると考えられた。対象を限定しない分析手法はこれまでの化学物質規制・管理の取組みを補完できることができる手法となりうると考えられる。

(4) モニタリングデータの差の検出法の開発

①「GCxGC-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」

問題の発生をいち早くあるいは事前に検知し、迅速で的確な対応な対策を講じることにより、被害の拡大を最小限にあるいは未然に防止することが重要である。異常の検出のためには、平常(異常でない)時の状態を把握し、平常と異常の定義をする必要があり、データの蓄積と解析、差の検出法の開発が重要になる。その内の差の検出法の一つとして、

非負値行列因子分解(NMF)法を応用した。モニタリングで得られた時系列データや比較試験におけるデータ群の解析に対応するため、複数データの同一ピークあるいは同一保持時間近傍のデータについてNMFを行い、各因子の寄与率をデータ毎に示すことによって、成分の変動や差の比較を行うという手法である。この手法では、成分の同定を行うことなく迅速に差の検出が可能になる上に、異常検出後に成分の精密質量スペクトル情報から変動物質の同定も可能である。

埼玉県下の施設放水の6回分(数日間隔)、繰り返し数5のSBSE-TDU-GCxGC-HRTofMSによる計30件の測定データについて、開発した手法により差の検出を試みた結果、比較データ領域(二次元クロマトグラム上の任意の位置を表す)を広くした場合、マススペクトルの分離が不十分になるため、個別性分の同定は困難であった。比較データ領域を任意のピーク頂点に限定した場合には、データ間の差の大きさに応じ成分が分離され、なおかつ、分離成分の同定も可能であった。したがって、データの差の検出法として、NMF法の有効性が確認できた。しかしながら、繰り返し測定のバラツキや装置の状態の変動が差の検出に大きく影響していることも明らかになった。試料中に含まれる物質の差を正確に捕捉するためには、抽出操作や測定の変動を抑えるか補正する方法をさらに検討する必要があると認められた。

②「GCxGC-HRTofMSの測定データにおける化合物保持時間のシフト補正法の開発」

モニタリングデータの差を検出するためには、データの相互比較を行う必要がある。クロマトグラムデータを扱う場合、同一物質の保持時間は一致していなければならない。

そこで、GCxGC-HRTofMSのデータを直接補正可能とする化合物保持時間のシフト補正法の開発を行った。この補正法は、補正したいターゲットクロマトグラムと参照先のリファレンスクロマトグラムの両方について、アラインメントポイントと呼ばれる参照点の座標を結び付け保持時間のズレを修正し、その参照点間の領域については線形補間とボロノイ分割法を利用したSibson自然近傍法での非線形補間により、画素単位で補正するものである。この開発した補正法について、GCオープン温度を変更することにより人工的に保持時間変化させたデータおよびカラム劣化による保持時間変化の生じたデータに対し処理を実行し、補正前後でのピーク体積の変化、マススペクトルの変化、保持時間の補正の程度、について評価を行った。結果として、人工的な保持時間変化などわずかな変化には従来アルゴリズムを利用した開発手法が適用可能である事、カラム劣化による保持時間補正には新規開発アルゴリズムの利用が有効である事が示された。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 (計 6 件)

① Zushi, Y., Yamamoto, A., Tsunemi, K., Masunaga, S., Revaluation of stockpile amount of PFOS-containing aqueous film-forming foam in Japan: gaps and pitfalls in the stockpile survey, *Environ. Sci. Pollut. Res.*, 査読有, 24, 6736-6745, 2017

DOI :10.1007/s11356-017-8374-1

② Zushi, Y., Hashimoto, S., Tanabe, K., Nontarget approach for environmental monitoring by GC x GC-HRTOFMS in the Tokyo Bay basin, *Chemosphere*, 査読有, 156, 398-406, 2016

DOI: 10.1016/j.chemosphere.2016.04.131

③ Yamamoto, A., Matsumoto, N., Kawasaki, H., Arakawa, R., Identification of Anthropogenic Compounds in Urban Environments and Evaluation of Automated Methods for Reading Fragmentation, A Case of River Water, *Mass Spectrom*, 査読有, 5, A0045, 2016

DOI: 10.5702/massspectrometry.A0045

④ Hashimoto, S., Zushi, Y., Takazawa, Y., Ieda, T., Fushimi, A., Tanabe, K., Shibata, Y., Selective and comprehensive analysis of organohalogen compounds by GCxGC-HRTOFMS and MS/MS, *Environmental Science and Pollution Research*, 査読有, 1-12, 2015

DOI: 10.1007/s11356-015-5059-5

⑤ Zushi, Y., Hashimoto, S., Tanabe, K., Global Spectral Deconvolution Based on Non-Negative Matrix Factorization in GCxGC-HRTOFMS, *Analytical Chemistry*, 査読有, 87, 1829-1838, 2015

DOI: 10.021/ac5038544

⑥ Yamamoto, A., Hisatomi, H., Ando, T., Takemine, S., Terao, T., Tojo, T., Yagi, M., Ono, D., Kawasaki, H., Arakawa, R., Use of high-resolution mass spectrometry to identify precursors and biodegradation products of perfluorinated and polyfluorinated compounds in end-user products, *Anal. Bioanal. Chem.*, 査読有, 406, 4745-4755, 2014

DOI: 10.1007/s00216-014-7862-0

〔学会発表〕 (計 15 件)

① Hashimoto, S., Ieda, T., Takazawa, Y., Tanabe, K., Shibata, Y., Zushi, Y., Data Processing Based on Exact Mass Spectra for Non-Target Monitoring by Using GCxGC/HRTOFMS, 36th International Symposium on Halogenated Persistent

Organic Pollutants(国際学会), 2016 年 08 月 28 日~09 月 02 日, Florence, Italy

② Ieda, T., Hashimoto, S., Takazawa, Y., Tanabe, K., Zushi, Y., Shibata, Y., Maekawa, F., Sano, K., Suzuki, G., Nakayama, S., Isobe, T., Tin-Tin-Win-Shwe, Kawashima, T., Comprehensive analysis of house dust using GCxGC-HRTOFMS and in-house software, 36th International Symposium on Halogenated Persistent Organic Pollutants(国際学会), 2016 年 08 月 28 日~09 月 02 日, Florence, Italy

③ Yamamoto, A., Matsumoto, N., Kawasaki, H., Arakawa, R., Reading of accurate mass spectra to find anthropogenic substances in the environment, 21st International Mass Spectrometry Conference(国際学会), 2016 年 08 月 20 日~26 日, Toronto, Canada

④ 橋本俊次, 高澤嘉一, 田邊潔, 柴田康行, 頭士泰之, 大塚宜寿, GCxGC-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, 第 25 回環境化学討論会, 2016 年 06 月 08 日~10 日, 新潟コンベンションセンター(新潟)

⑤ 頭士泰之, 山取由樹, 加茂将史, 恒見清孝, 複雑混合物のリスク評価のための手法提案, 第 25 回環境化学討論会, 2016 年 06 月 08 日~10 日, 新潟コンベンションセンター(新潟)

⑥ 大塚宜寿, 蓑毛康太朗, 茂木守, 野尻喜好, 堀井勇一, ネオニコチノイド系殺虫剤の埼玉県からの流出量の推計, 第 25 回環境化学討論会, 2016 年 06 月 08 日~10 日, 新潟コンベンションセンター(新潟)

⑦ 大塚宜寿, 竹峰秀祐, 蓑毛康太朗, 野尻喜好, 茂木守, 堀井勇一, 埼玉県の野通川におけるネオニコチノイド系殺虫剤の季節変動, 第 25 回環境化学討論会, 2016 年 06 月 08 日~10 日, 新潟コンベンションセンター(新潟)

⑧ Hashimoto, S., Ieda, T., Takazawa, Y., Tanabe, K., Shibata, Y., Zushi, Y., Selective and Comprehensive Analysis of Organohalogenes by GCxGC-HRTOFMS, International Network of Environmental Forensics Conference (The INEF2015)(国際学会), 2015 年 08 月 03 日~06 日, Victoria College, Toronto, Canada

⑨ 橋本俊次, 家田曜世, 高澤嘉一, 田邊潔, 柴田康行, 佐々木裕子, 頭士泰之, 各種イオン化法とソフトウェアを用いた GCxGC-HRTOFMS による環境試料中のハロゲン

化合物検索の検討, 第24回環境化学討論会, 2015年06月24日~26日, 札幌コンベンションセンター, 札幌

⑩ 頭土泰之, 橋本俊次, 田邊潔, 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, 第24回環境化学討論会, 2015年06月24日~26日, 札幌コンベンションセンター, 札幌

⑪ 高澤嘉一, 家田曜世, 橋本俊次, 田邊潔, 柴田康行, 頭土泰之, 災害時における大気中有害化学物質の探索的・迅速サンプリング手法の予備的検討, 第24回環境化学討論会, 2015年06月24日~26日, 札幌コンベンションセンター, 札幌

⑫ 家田曜世, 高澤嘉一, 橋本俊次, 田邊潔, 柴田康行, 災害時におけるGCxGC-HRTOF-MSを用いた多成分網羅分析手法の適用—基礎検討—, 第24回環境化学討論会, 2015年06月24日~26日, 札幌コンベンションセンター, 札幌

⑬ Zushi, Y., Hashimoto, S., Tanabe, K., Non-target analysis by GCxGC-HRTOFMS and its application to emission source analysis of the detected contaminants using GIS, SETAC North America 36th Annual Meeting (国際学会), 2015年11月01日~05日, Salt Palace Convention Center, Salt Lake City, USA

⑭ 橋本俊次, 家田曜世, 高澤嘉一, 田邊潔, 柴田康行, 頭土泰之, GCxGC-HRTOFMSによる環境ノンターゲット分析の試み, 第64回質量分析総合討論会, 2015年05月18日~20日, ホテル阪急エキスポパーク (大阪)

⑮ Yamamoto, A., Kitai, S., Zushi, Y., Masunaga, S., Kawasaki, H., Arakawa, R., Identification of chemical structures of polyfluoroalkyl substances in fire extinguishing chemicals by using high resolution mass spectrometry, 20th International Mass Spectrometry Conference, 2014年08月24日~29日, Geneva, Swiss

[その他]

ホームページ等

国立環境研究所 HP 「GC×GC-MS データ解析ツール」

[http://www.nies.go.jp/analysis/download\\_s.html](http://www.nies.go.jp/analysis/download_s.html)

## 6. 研究組織

### (1) 研究代表者

橋本 俊次 (HASHIMOTO, Shunji)

国立環境研究所・環境計測研究センター・

室長

研究者番号: 80321719

### (2) 研究分担者

① 高澤 嘉一 (TAKAZAWA, Yoshikatsu)  
国立研究開発法人国立環境研究所・環境計測研究センター・主任研究員

研究者番号: 40391122

② 田邊 潔 (TANABE, Kiyoshi)

国立研究開発法人国立環境研究所・環境計測研究センター・フェロー

研究者番号: 60150174

③ 頭土 泰之 (ZUSHI, Yasuyuki)

国立研究開発法人産業技術総合研究所・排出曝露解析グループ・研究員

研究者番号: 80611780

④ 大塚 宜寿 (OHTSUKA, Nobutoshi)

埼玉県環境科学国際センター・化学物質放射線担当・担当部長

研究者番号: 30415393

⑤ 山本 敦史 (YAMAMOTO, Atsushi)

公立大学法人公立鳥取環境大学・環境学部・講師

研究者番号: 40332449

⑥ 柏木 宣久 (KASHIWAGI, Nobuhisa)

大学共同利用機関法人統計数理研究所・モデリング研究科・名誉教授

研究者番号: 50150032

### (3) 連携研究者

姉崎 克典 (ANAZAKI, Katsunori)

北海道立総合研究機構・環境・地質研究本部・環境科学研究センター・環境保全部・研究主任

研究者番号: 20442634

大原 俊彦 (OOHARA, Toshihiko)

広島県立総合技術研究所・保健環境センター・環境研究部・研究部長

研究者番号: 20419930

### (4) 研究協力

半野 勝正 (HANNO, Katsumasa)

千葉県環境研究センター・水質環境研究室・室長