



ケーススタディ：アジレント認定整備済機器 6470B トリプル  
四重極 LC/MS および 1290 Infinity II UHPLC

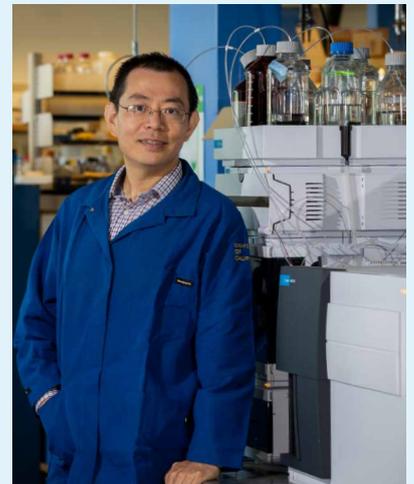
## 水質汚染の研究を成功に導く リーダーシップ

### PFAS に対処する

ペルフルオロアルキル化合物およびポリフルオロアルキル化合物 (PFAS) は、広く使用されている多くの消費財に含まれる合成化学物質で、化学的に安定性が高く、難分解性であることから、飲料水を含む環境中に残留しています。<sup>1</sup> 米国環境保護庁 (EPA) により、高濃度の PFAS が動物や人間に有害な健康リスクをもたらすことが明らかになっています。<sup>1</sup> そのため、水源から PFAS 化学物質を除去し、除去後に消滅させる効果的な方法を見出す研究が重要になっています。

カリフォルニア大学リバーサイド校 (UCR) 化学環境工学科准教授の Jinyong Liu 博士は、水質汚染物質の除去と分解の研究に注力しています。具体的には、Liu 博士と彼のラボ (「環境のための化学」、Liu ラボ) では、PFAS や過塩素酸塩、塩素酸、臭素酸塩、硝酸などの有毒なオキシアニオンを分解する方法を研究しています。

Liu 博士と彼のチームは、PFAS 化学物質を分解する革新的な技術を開発し、その構造と反応性の関係、分解メカニズムとパスウェイ、性能向上に関する一連の論文を、『Environmental Science & Technology』誌と『Nature Water』誌に発表しました。<sup>2, 3</sup> この技術の有効性をさらに証明するために、PFAS 化学物質とその分解成分を低濃度で検出する分析能力を実証することがチームには求められていました。



Jinyong Liu 博士

准教授  
化学環境工学科  
カリフォルニア大学、リバーサイド校

Liu ラボでは、主に液体クロマトグラフィー / 質量分析法 (LC/MS) を使用して、PFAS の同定と定量を行っています。Jinyu Gao 博士は Liu ラボの博士研究員であり、質量分析計のスーパーユーザーでもあります。Gao 博士は、変換生成物の分析にイオンラップ質量分析計を使用していましたが、低濃度の分析対象物を検出するのは困難であると気付いていました。Liu 博士と Gao 博士は、水の処理後の残留 PFAS が安全な排出のための閾値を下回っていることを確認する必要がありました。Liu 博士は、「この目的のためにはトリプル四重極 LC/MS が必要でした。アジレント製品を購入する絶好の機会となりました」と話します。

## 手頃な価格の優れた製品

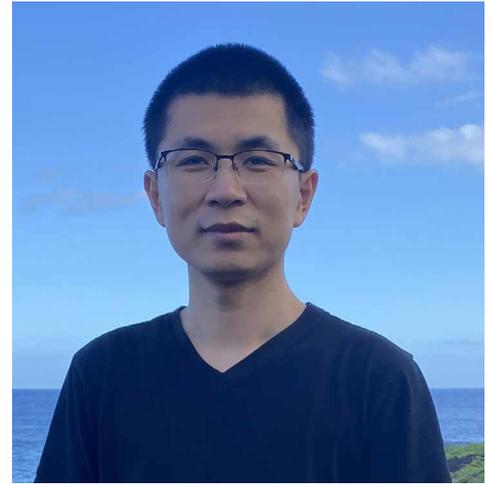
Liu 博士は、研究にトリプル四重極質量分析計が必要だと判断し、アジレントを含む 3 社に見積もりを依頼しました。しかし、Liu 博士は、予算内で質量分析計を購入できるか懸念していました。「当初は不可能だと思っていました」と、Liu 博士は述べています。状況を理解したアジレントのアカウントマネージャーは、要求仕様と予算に合うソリューションとして、アジレント認定整備済機器を提案しました。

Liu 博士らは、認定整備済の Agilent 6470B トリプル四重極 LC/MS および 1290 Infinity II UHPLC を評価しました。**アジレント認定整備済機器**では、流路内でサンプルが触れる内部コンポーネントはすべて新しいコンポーネントと交換されるか、または新品と同じ仕様に合格するよう確実にクリーニングされます。アジレント認定整備済機器には 1 年間の保証も付いています。評価にあたり、Liu 博士と Gao 博士は、認定整備済 6470B トリプル四重極 LC/MS および 1290 Infinity II UHPLC は、その外観も性能も新品同様であったと述べています。さらに、アジレントの担当者は、システムコストの一部として、**拡張延長保証**を含めることを勧めました。総合的な評価を行った結果、Liu 博士に残された疑問は 1 つだけでした。「採用しない理由があるのだろうか」。アジレントは、見積期間中に最良のオファーと柔軟な購入オプションを提示し、サービスコストを最小限に抑える保証を提供しました。Liu 博士と UCR の教員陣は、アジレントのシステムが自分たちのラボにとって最良の選択肢だと判断しました。

ラボ専用のトリプル四重極質量分析計を購入する以前は、外部のコントラクトラボにサンプル評価を依頼していたため、その費用の捻出に毎年数万ドルもの予算を組む必要がありました。しかし、現在では自身のラボでの試験が可能になり、運用コストも削減され、投資による効果が現れています。

「研究目的のためにトリプル四重極 LC/MS が必要でした。  
アジレント製品を購入する絶好の機会となりました。」

- **Jinyong Liu 博士**  
准教授、  
化学環境工学科  
カリフォルニア大学、リバーサイド校



Jinyu Gao 博士、Liu ラボ博士研究員

## 低濃度での正確な検出

Liu ラボでは、2023 年 5 月からアジレント認定整備済機器 6470B LC/TQ および 1290 UHPLC を使用し、微量の PFAS 検出で目的の感度を達成しています。2022 年、EPA は 0.004 ng/L ( $4 \times 10^{-6}$  ppb、0.004 ppt) の PFAS 規制値を提案しましたが、多くの科学者が、この濃度を問題なく測定することはできないことに気付きました。2023 年、EPA は、EPA1633 メソッドによる測定での 4 ng/L (0.004 ppb、4 ppt) の規制値を提案しました。<sup>4</sup>Gao 博士は、6470B LC/TQ を使用することにより、50 ng/L (0.05 ppb、50 ppt) ~ 1,000 ng/L (1 ppb、1,000 ppt) という低い検出限界において、さまざまな PFAS の構造を検出しています。Liu 博士と Gao 博士は、アジレントの認定整備済機器システムと高速な固相抽出（ターゲット PFAS を濃縮する一方で、不要な化学種のシステムへの混入を防ぐために必要）により、現在の EPA 要件の濃度範囲内で PFAS を容易に検出できるようになっています。

EPA は、現在は検出閾値を 4 ng/L まで下げることが要求していませんが、Liu 博士と Gao 博士は、将来的にはそのように変更される可能性があるかと予測しています。また、両博士は、現在 2 人が評価しているよりも多くの PFAS の構造を評価するように、EPA が要求してくるだろうとも予測しています。EPA の要件に先駆けて、Liu ラボではすでに、まったく新しい PFAS の構造を低い検出限界で同定する能力を実証しています。

Liu 博士ともう 1 人の博士課程学生（Zekun Liu 博士）は、2022 年に発表した論文において、最適化された UV/硫酸塩・ヨウ化物（UV/S + I）システムが、合成廃水からペルフルオロスルホン酸塩（PFSA）とペルフルオロカルボン酸塩（PFCA）を 99.7% 超、また濃縮 PFAS 混合物を 90% 超除去したことを示しました。<sup>2</sup>このような結果により、Liu ラボは、PFAS 研究の最前線に位置すると見なされています。<sup>5~9</sup> Liu 博士は、「私たちはすでに、環境化学と汚染物質分解において、非常に強力な能力を確立しています。PFAS がどのように分解されるのかを理解し、より大幅な分解を達成する方法を知ることにおいて、私たちはこの分野をリードしていると考えています」と述べています。

## パートナーシップと教育

PFAS 研究において、このような強力な科学的リーダーシップを持つ Liu 博士が、業界の複数のメンバーとパートナーシップを締結したことは驚くことではありません。これまでの実験のほとんどは、合成水サンプルを使用したラボ内で完結する研究でしたが、Liu 博士、Gao 博士、そしてもう 1 人の博士研究員の Dandan Rao 博士は、業界のパートナーから提供された実際の水サンプルの評価を開始しました。

Liu 博士らの大学のラボは、水資源管理と工学、水質汚染、気候変動などの分野で革新的な研究を行っている、環境、工学、建設会社と協力しています。これらの協力者は、PFAS の分解と分析のために、イオン交換や泡沫分離などの地下水浄化システムから得られた、分析困難な廃水サンプルを Liu ラボに送っています。Liu 博士と彼のラボのメンバーは、今後、より多くの業界パートナーと協力することにより、サービスベースの試験が増加することを期待しています。

Liu 博士と彼の同僚たちは、実験全体を通して、ラボのメンバーが質量分析計を実際に操作することがいかに有益な経験であるかに気づきました。さまざまな質量分析計を操作する実践的な知識があれば、ラボの大学院生が就職を勝ち取る際に強みになるからです。Liu 博士は、自身のラボが、博士課程の学生が質量分析について学び、機器を利用するためのトレーニングセンターとなり、彼らのキャリアの準備と発展に役に立つことを期待しています。

## 結論

Liu 博士と彼の同僚にとって、影響の大きい環境研究を行っていくためには、ラボに適した機器を入手することが重要でした。当初は、トリプル四重極質量分析計を購入する余裕はないように思われましたが、アジレントの担当者は、アジレント認定整備済機器 6470B LC/TQ および 1290 UHPLC による実効性のある解決策を提案しました。その結果、Liu 博士と彼のラボは影響力の大きい研究を続け、環境の水質改善に貢献することにより、偉大な科学の力を人々の暮らしに役立てています。

## 参考文献

1. US EPA, O. A. PFAS Explained. **2016**, <https://www.epa.gov/pfas/pfas-explained> (accessed 2023-09-18).
2. Liu, Z.; Chen, Z.; Gao, J.; Yu, Y.; Men, Y.; Gu, C.; Liu, J. Accelerated Degradation of Perfluorosulfonates and Perfluorocarboxylates by UV/Sulfite + Iodide: Reaction Mechanisms and System Efficiencies. *Environ.Sci.Technol.* **2022**, *56* (6), 3699–3709. <https://doi.org/10.1021/acs.est.1c07608>.
3. Gao, J.; Liu, Z.; Chen, Z.; Rao, D.; Che, S.; Gu, C.; Men, Y.; Huang, J.; Liu, J. Photochemical Degradation Pathways and Near-Complete Defluorination of Chlorinated Polyfluoroalkyl Substances. *Nat Water* **2023**, *1* (4), 381–390. <https://doi.org/10.1038/s44221-023-00046-z>.
4. Surface Water. *Analysis of per- and polyfluoroalkyl substances (PFAS) in aqueous, solid, biosolids, and tissue samples by LC-MS/MS*. Epa.gov. [https://www.epa.gov/system/files/documents/2022-12/3rd%20Draft%20Method%201633%20December%202022%2012-20-22\\_508.pdf](https://www.epa.gov/system/files/documents/2022-12/3rd%20Draft%20Method%201633%20December%202022%2012-20-22_508.pdf) (accessed 2023-10-23).
5. Gao, J.; Liu, Z.; Bentel, M. J.; Yu, Y.; Men, Y.; Liu, J. Defluorination of Omega-Hydroperfluorocarboxylates ( $\omega$ -HPFCAs): Distinct Reactivities from Perfluoro and Fluorotelomeric Carboxylates. *Environ.Sci.Technol.* **2021**, *55* (20), 14146–14155. <https://doi.org/10.1021/acs.est.1c04429>.
6. Liu, Z.; Bentel, M. J.; Yu, Y.; Ren, C.; Gao, J.; Pulikkal, V. F.; Sun, M.; Men, Y.; Liu, J. Near-Quantitative Defluorination of Perfluorinated and Fluorotelomer Carboxylates and Sulfonates with Integrated Oxidation and Reduction. *Environ.Sci.Technol.* **2021**, *55* (10), 7052–7062. <https://doi.org/10.1021/acs.est.1c00353>.
7. Bentel, M. J.; Liu, Z.; Yu, Y.; Gao, J.; Men, Y.; Liu, J. Enhanced Degradation of Perfluorocarboxylic Acids (PFCAs) by UV/Sulfite Treatment: Reaction Mechanisms and System Efficiencies at PH 12. *Environ.Sci.Technol.Lett.* **2020**, *7* (5), 351–357. <https://doi.org/10.1021/acs.estlett.0c00236>.
8. Bentel, M. J.; Yu, Y.; Xu, L.; Kwon, H.; Li, Z.; Wong, B. M.; Men, Y.; Liu, J. Degradation of Perfluoroalkyl Ether Carboxylic Acids with Hydrated Electrons: Structure–Reactivity Relationships and Environmental Implications. *Environ.Sci.Technol.* **2020**, *54* (4), 2489–2499. <https://doi.org/10.1021/acs.est.9b05869>.
9. Bentel, M. J.; Yu, Y.; Xu, L.; Li, Z.; Wong, B. M.; Men, Y.; Liu, J. Defluorination of Per- and Polyfluoroalkyl Substances (PFASs) with Hydrated Electrons: Structural Dependence and Implications to PFAS Remediation and Management. *Environ.Sci.Technol.* **2019**, *53* (7), 3718–3728. <https://doi.org/10.1021/acs.est.8b06648>.

アジレント認定整備済機器の詳細は[こちら](#)をご覧ください

ホームページ

[www.agilent.com/chem/jp](http://www.agilent.com/chem/jp)

カスタムコンタクトセンタ

**0120-477-111**

[email\\_japan@agilent.com](mailto:email_japan@agilent.com)

本製品は一般的な実験用途での使用を想定しており、医薬品医療機器等法に基づく登録を行っておりません。本文書に記載の情報、説明、製品仕様等は予告なしに変更されることがあります。

DE17372236

アジレント・テクノロジー株式会社

© Agilent Technologies, Inc. 2023

Printed in Japan, December 12, 2023

5994-6991JAJP