

## 論文審査の要旨

報告番号	理工研 第502号	氏名	新福 優太
審査委員	主査	高梨 啓和	
	副査	金子 芳郎	中島 常憲
学位論文題目		高分解能質量分析と多変量解析の組み合わせによる 水道水生ぐさ臭原因物質の探索と構造推定 (Exploration and Structural Elucidation of the Causative Substance of Fishy Smell in Raw Water for Taps Using the Combination of High Resolution Mass Spectrometry and Multivariate Analysis)	
審査要旨	<p>提出された学位論文および論文目録等を基に学位論文審査を実施した。本論文は、水道水異臭味の一つである生ぐさ臭に着目し、その原因物質の探索および構造推定を実施したものであり、全文7章より構成されている。</p> <p>第1章は緒論であり、日本の上水道における生物障害、とくに異臭味被害の発生状況と、これらを管理するための法体系を整理している。また、異臭味被害は、閉鎖性水域における藻類の増殖が主原因となって引き起こされること、生ぐさ臭は被害件数が多いにもかかわらず十分に実態が解明されていないこと、それゆえに基準項目化されるに至っていないことなどを述べている。以上を踏まえ、生ぐさ臭原因物質を解明することを本研究の目的としている。</p> <p>第2章では、2,4-ジニトロフェニルヒドラジン (DNPH) により誘導体化した試料を想定した選択的な精製方法の開発について述べている。検討の結果、弱陽イオン交換カラムを用いる固相抽出法によって、未反応DNPHを選択的に除去しつつDNPH誘導体を回収可能な精製方法を確立している。また、量子化学計算によって、フェニル基同士の<math>\pi</math>-<math>\pi</math>スタッキングが精製に寄与していることを示唆している。</p> <p>第3章では、水道原水試料、および、生ぐさ臭原因生物の一種である <i>Uroglena americana</i> の培養液試料の高分解能質量分析結果に対して多変量解析を適用し、水道水生ぐさ臭原因物質の探索を実施している。探索の結果、1物質 (以下、FX) を生ぐさ臭原因物質の候補として抽出している。精密質量および天然同位体パターンを解析した結果、DNPHによる誘導体化を受ける前のFXの分子式を<math>C_{13}H_{20}O_3</math>と推定している。FXは、水道原水試料と培養液試料の両方で共通して検出されたため、生ぐさ臭原因物質としての蓋然性が高いものと考えられる。</p> <p>第4章では、におい嗅ぎガスクロマトグラフィーを用いてFXの臭気の有無を確認している。3名のパネルによる確認の結果、3名全員が保持時間10.1-10.6分に臭気を検知したことを確認した。また、FXの分子量関連イオンが保持時間10.4分で検出されたことから、FXが有臭成分であることが確認された。</p> <p>第5章では、高分解能質量分析によるFXの部分的な構造推定を実施している。開設ジェネラルフラグメンテーションルール (GFR) および閉殻GFRによる構造推定の結果、FXはメトキシクロヘキセノンおよび末端アルキルケトンを有することが示唆された。得られた部分的な構造推定結果を統合し、さらにアルキルケトンの分岐および分子中の不斉点について考慮した結果、FXの全体構造14種が推定されたことを述べている。</p> <p>第6章では、第2章から第5章までの研究結果に鑑みて、今後の本研究の展望を考察している。</p> <p>第7章では、本研究で得られた結果を総括している。</p> <p>以上本論文は、水道水生ぐさ臭原因物質を探索するとともにその全体構造を推定した。これは、水道工学、および、環境質量分析学の発展に大きく貢献し、工学的に高く評価できる。よって審査委員会は、博士 (工学) の学位論文として合格と判定する。</p>		