

最終試験結果の要旨

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
<p>令和4年2月4日16時より、主査、副査およびその他12名の聴講者出席の下に学位論文の最終試験が開催され、本研究の背景、手法、得られた成果等について質疑応答がなされた（コロナ禍の拡大に伴うオンライン開催）。主な内容を以下に示す。下記のように、申請者からは、すべての質問に対して適切な回答を得ることができた。</p> <p>【質問1】 選択的精製において、固相に吸着したのは未反応DNPHまたは誘導体のどちらか。</p> <p>【回答1】 未反応DNPHである。誘導体が固相に吸着した場合、未反応DNPHを除去できずに精製できなくなる。</p> <p>【質問2】 量子化学計算によってπ-πスタッキングが選択的精製に寄与したことを示唆しているが、弱陽イオン交換カラムのカルボン酸部位とDNPH間のイオン交換作用によって精製がなされたのか。</p> <p>【回答2】 イオン交換作用が精製に寄与したとは考えにくい。カルボン酸を有する別のイオン交換カラムで精製した結果、DNPHはまったく除去されなかった。また、イオン交換のモードが異なる強陰イオン交換カラムにおいても理想的な精製結果が得られた。これらの事実から、本研究でのDNPHの選択的精製にはイオン交換作用は関与していないものと推察される。</p> <p>【質問3】 DNPH誘導体の加水分解速度を検討する際、試料溶液のpHは中性だったのか。また、中性であるならば、弱陽イオン交換カラムのカルボン酸部位はイオン化された状態であると想定しているのか。</p> <p>【回答3】 試料溶液は酸性である。加水分解速度の検討実験においては、DNPH誘導体化が酸性条件下で進行することを考慮して、試料にリン酸水溶液を添加した。よって、弱陽イオン交換カラムのカルボン酸部位は解離しておらず、非解離の状態を選択的精製が行われたと考えられる。</p> <p>【質問4】 ホルムアルデヒドのDNPH誘導体（C1-DNPH）の加水分解は、反応開始から4-5時間程度が経過した時点で停止しているように見えるが、この結果に対する考察はあるか。</p> <p>【回答4】 C1-DNPHが加水分解を受けると、反応生成物としてホルムアルデヒドおよびDNPHが生成する。その結果、生成物であるホルムアルデヒドとDNPHの反応は平衡状態になると考えている。</p> <p>【質問5】 不斉点を考慮して全体構造を推定しているが、量子化学計算による候補構造の絞り込みは有効か。</p> <p>【回答5】 有効である。不斉点に由来する分子内の局所的な立体構造の差は、分子全体のコンフォメーションにも大きく影響する場合があります。これによってフラグメンテーションの反応進行の可否が決定される場合があるため、光学異性体についても量子化学計算により絞り込みは有効である。</p> <p>【質問6】 量子化学計算により、FXのアルキルケトンが枝分かれする構造を否定したが、これはなぜか。</p> <p>【回答6】 アルキルケトンの炭素数が5の構造を始原系として計算した場合には、プロダクトイオンとしてm/z 99のイオンが生成しないことが確認された。一方で、m/z 99のイオンは、FXの実測マススペクトルで再現性良く検出されていた。すなわち、計算結果と実験結果との整合性が見られなかったため、アルキルケトンの炭素数が5である構造は否定された。</p> <p>【質問7】 量子化学計算により、FXの全体構造を確定させることは可能か。</p> <p>【回答7】 不可能である。標準物質を用いたCochromatographyなどが必要である。</p> <p>【質問8】 プログラマブル温度気化注入口（PTV）を用いる大量注入の実験条件を確立する目的は何か。</p> <p>【回答8】 FXの検出状況を全国各地の水道事業体でモニタリングできるようにするためである。本研究においては、固相抽出により試料を濃縮して分析しているが、水質検査には簡便性・迅速性が求められるため、前処理法の負担を削減する必要がある。PTVによる大量注入を用いる実験条件が確立できれば、固相抽出を行わずとも、簡便かつ高感度でFXを分析可能になると期待される。</p> <p>以上により審査委員会は、申請者が博士（工学）の学位を授与するに十分な学力と見識を有すると判定した。</p>			