

## 私と Chemometrics

立教大学理学部 成澤 芳男

巻頭言を書いてほしいと依頼されたときは簡単にお引き受けしましたが、いざ期限が迫ってくると何を書いたらよいのか困惑してしまいました。そこで私が F I A に関わりを持つことになった頃のことを書いて責任を果たしたいと思います。

私が F I A に興味を持ったのは、今から 10 年位前に千葉大学の黒田六郎教授（当時）のところに研究上のことで伺った時からです。分析関係の研究に興味を持ち、筑波の国立公害研究所に見学に行った際、生物標準試料を分析してみようということになりました。そんなとき JASCO の FIU-300 という装置を購入し、シリカとリンとヒ素の同時分析に着手しました。シリカの公定分析は大変面倒です。日本においては岡山大学、現在は徳島大学の伊永隆史先生がレーザー光源を用い、長吸収セルを装着した F I A 装置を開発し、シリカの微量分析を行っておりました。しかしこれらの元素の同時定量法は F I A ではあまり良い方法がなく、これらの元素がアルカリ溶融で陰イオンになることを利用して、モリブデン酸アンモニウムにより発色させて同時定量法することを検討しました。

私は学生時代研究室でほとんど分析関係の仕事をしたことはなく、ポーラログラフィーで電極反応の研究をしていました。分析関係の研究としては、希土類元素のポーラログラフィーで還元波が生じるのですが、金属まで還元されて希土類元素がアマルガムとして析出するのかどうかということが問題になり、当時アメリカから帰国した教授が日本で最初に放射化分析を導入したばかりのときでしたので、電解前の水銀滴と電解後の水銀滴を東海村の原子炉で照射し、直ちに持ち帰り、大学の放射化分析実験室で分析をしたことがあります。両者に有意の差は認められず、還元波は希土類元素の還元ではないという結論になりました。立教大学に着任してからは、溶液内反応の研究をしており、ストップドフロー法によるクロム(II)錯体の酸化反応の研究をしていましたが、解析はアナログコンピュータを用いるもので、これは今から思うと Chemometrics の研究であったのかと思います。F I A によるシリカとリンの分析に関心を持ったのは、やはりフロー系の反応ということで共通点があるので必然であったような気がします。しかしそのような状況で実際の試料を分析することは、私にとって大変な研究でした。私はその後分析関係の論文も少々書きましたが、分析化学というものが大変難しい学問分野であり、技術者であると同時に研究者であるという条件を備えていなければならないということを分析化学の専門書で読んだことがあり、実感しました。

私はフロー系の分散の研究をすることになり、コンピュータ解析を行って、*Analytica Chimica Acta* 誌に 1995 年に発表しましたが、論文は Chemometrics に分類されました。今年 10 月 26, 27 日立教大学において化学ソフトウェア学会'96 研究討論会を開催した際、お茶の水女子大学藤枝修子教授が「ケモメトリックスの現状とソフトウェア」について特別講演をされ、我が国においてもこの分野の研究が増えてきたように思います。そのときの講演要旨集の残部がありますのでご希望の方はご一報下さい。また定常状態流れ系を用いる新しい滴定法の開発と自動化の研究も行っておりますが、今後は計測関係でも益々コンピュータを利用する時代がくるものと思っております。