

FIAによる主成分分析への期待

山梨大学教育学部化学教室 山根 兵

フローインジェクション分析法(FIA)は1975年にRuzickaとHansenによって報告されて以来、Technicon AutoAnalyzer方式とは異なった、空気分節を用いない連続流れ分析系の優れた特徴と可能性が認識され、今日までめざましい発展をとげつつある。FIAが応用されたり、研究対象となった分野は各種工業(材料分析、品質や工程の管理等)、臨床化学、環境化学、食品化学、農業その他と広範囲にわたっており、分析対象成分も有機から無機成分まで、また、対象となる成分の濃度も極微量から%オーダーまで多岐にわたっている。まさに、溶液状態で分析できる試料のあらゆる範囲におよんでいるといっても過言ではない。このようにFIAが広がった理由の一つとして、従来の化学分析法には、熟練が必要、感度が不十分、時間がかかる、など様々な限界があり、新しい分析手法の出現を期待するという背景があったことも事実で、化学分析の迅速、簡便化や自動化に適したシステムとの期待が持たれているからだと思われる。FIAが注目されたもう一つの特長は簡便な分析法でありながら精度も優れていることで、これは今なおFIAの大きなセールスポイントの一つとなっていることはご存じのとおりである。しかしながら、FIAの現状はそんなに簡便で高精度なものとなっているであろうか。簡便性については色々な視点での議論があるであろうから別の機会にゆずるとして、今回はFIAの精度と主成分分析への応用について日頃感じているところを述べさせて頂く。確かにFIAに関する多くの論文(筆者のものも含めて)では1%前後の相対標準偏差が示され、精度が優れていると記載されていることを良く見かける。しかしながら、このような値をもって精度が極めて良いとするのは微量成分を対象とした場合、あるいは3桁の精度(分析値)であっても迅速性や簡便性に重点を置いた試料のときであろう。もしも、セメント中のカルシウムのような主成分を問題にするときは4桁の分析精度(分析値)が要求されるので、これでは不十分であり、相対標準偏差でいえば前述の値の1/10程度にまで下げる努力が必要である。このような主成分を他の最新の高感度機器で分析しようとするならば、高濃度の試料溶液を希釈して測定することになるが、高倍率希釈による誤差の導入の可能性は捨て切れないし、最新の機器分析といえども通常は相対標準偏差1%前後の精度であって前述のレベルの精度を達成するのは結構苦しいところである。機器分析が発達した今日であっても、数千万円という機器といえども主成分分析は苦手であって、高精度が要求されると、からきしダメなのである(少しオーバーな言い方であるが)。クーロメトリー等の一部の方法を除いて、主成分分析には熟練や手間を要する滴定法や重量分析などの化学分析法に頼らざるを得ない状況は、実は今も昔とあまり変わってはいないといわれている。そこで思うのであるが、高精度な分析法(あるいは、原理的に高精度

が期待できる)といわれるFIAによって簡便に主成分分析が出来るようにならないものであろうか。そもそも、筆者の知る限りでは、これまでのFIA研究は微量成分を対象にしたものが多く、主成分分析へのFIAの適用研究は非常に少ない。FIAでの分析精度に関与する因子には、送液の流量精度や検出器の精度、これらが複合してのベースラインノイズ等々色々あり、現在の測定機器の精度から考えても3桁が限界という説もないわけではないが、高精度を確保するための何か良いアイデアや工夫の余地はもうないのであろうか。FIAは他の機器分析法にくらべてもある程度の精度が楽に得られるということに満足しないで、化学反応と計測を一体化した分析システムとしての潜在的に持つ優れた特長を再認識して、FIAの主成分分析法としての可能性を真剣に考えて見ることも結構興味深く、また、大事なことではないかと思う次第である。FIAの研究報告のなかにはすでに0.X%の相対標準偏差が達成された例もあるので、少し身びいきかもしれないが、もう一息のところまで来ているという感じもある。主成分を高精度に定量出来るような研究をしているといっても、数pptレベルの極微量成分を簡単に検出定量するための研究というほどには注目されなまいだろうし、研究費の獲得には遠いかもしれないが、どちらも同じように重要な意味を持つことに大きな違いはない。筆者が最近関係している鉄鋼分野においても主成分分析まで可能な分析手法の開発が重要な話題となっている。FIAに関係する方々がこの方面にも関心をもたれ、主成分分析に関する研究が進展することを期待する。