

解明に向けた取り組み：CEMS の Imma Ferrer 博士と Michael Thurman 博士へのインタビュー

気候変動、人口増加、都市拡大、資源の枯渇、温室効果ガスの排出などの問題に関連して国際的な圧力が高まっている現在、「環境保護」という概念は無数の意味を帯びるようになってきました。その意味の定義に関わらず、「環境保護」というフレーズは、これまで以上に重要なものとして人々の意識に上るようになっており、緊迫感が高まっています。

実際のところ、関心の対象が何であれ「環境保護」は実行に移すべきですが、何から始めたら良いのでしょうか？その回答は、Imma Ferrer 博士と Michael Thurman 博士にとって、コロラド州の高山地帯の溪流を流れる水のようにクリアでした。コロラド州ボルダーにあるコロラド大学の環境質量分析センター（CEMS）に所属する両博士は、環境水化学分析のための新しい手法の開発に取り組んでいます。CEMS では「水に含まれる医薬品、ホルモン、その他の有機汚染物質の検出、これらの化合物除去手法の有効性の評価」に注力しています。これは、環境水質に対する人為的影響を解明したいという両者の熱意の中核となっています。

科学の領域だけでなく、ラボ外でも人生のパートナーであるこの活動的な科学者コンビに、技術的な進歩がどのように両者の取り組みに影響を及ぼすか、そして両者の取り組みが、重要な問題への回答にどのように影響を及ぼすかについて、アジレントは話を伺いました。



Imma Ferrer 博士

研究科学者
コロラド大学、CEMS
米国



Michael Thurman 博士

研究科学者
コロラド大学、CEMS
米国

アジレント：科学の分野に入ったきっかけは？

Thurman 博士：「私は宇宙開発競争の時代に育ちました。当時、科学は大切に、科学者は重要視されていました。科学に対するこのような見方と、屋外で過ごすことが好きだったことが相まって、地球化学の博士の道へと自然と導かれました」

Ferrer 博士：「私は違う経路をたどりました。大都市で育ったので、主に学校で科学に触れました。常に科学に興味があり、非常に優れた先生方に恵まれました。特に大学でそうでした。また、私の姉が化学者になったことで、彼女と同じ道を歩もうと思うようになりました」

アジレント：ラボに分析機器を提供しているアジレントとのパートナーシップについてはどのようにお考えですか？

Thurman 博士：「2003年に同僚から、アジレントとのコラボレーションについて提案されました。それは素晴らしいアイデアだと思いました。なぜなら、1985年に最初の Hewlett Packard の質量分析機器を私が入手し、1998年には Imma (Ferrer 博士) がシングル四重極を入手しており、すでに非公式にはアジレントと長年にわたり協力関係にあったからです」

Ferrer 博士：「これまでの約10年の間に、公式のコラボレーションの一環として、アジレントは私たちのラボに機器を提供したり、新たなモデルに交換したりしてくれました。また、サービスやサポートも利用できました。しかし、機器は非常に堅牢なため、その必要はほぼありませんでした」

アジレント：その間に、どのような課題に直面しましたか？

Ferrer 博士：「当初は、顧客から、『水サンプルに含まれるものについて、できるだけ解明してほしい』というような依頼を受けていました。したがって、課題は、顧客にとって関心のある重要な化合物を絞り込むこと、そしてもちろん、実際に含まれる化合物を明らかにすることでした」

Thurman 博士：「2004年にベンチトップ型の精密質量機器が登場しましたが、実際のところ、それに使用できるツールがありませんでした。ソフトウェアの開発は始まったばかりでした。私たちは、同位体間隔に関するアジレントの特許を含め、この分野でたくさんの革新的な取り組みをこなし、アジレントのアプリケーションノートに30件ほど執筆または共同執筆しました。現在はソフトウェアの高性能なツールがあります。しかし私たちは、自分たちのスタイルとやり方も生み出してきました。その過程でさまざまにソフトウェアが開発されてきたように思います。」

私たちの現在の課題は『ビッグデータ』です。機器からたくさんの情報が得られますが、それをどのように扱うべきでしょうか？」

Ferrer 博士：「サンプルがラボに届いてから、1日以内で測定することが可能です。しかし、1つのサンプルからデータを抽出するために、数週間から数か月かかる場合もあります。このプロセスではソフトウェアが非常に重要な部分を占めます」

アジレント：ラボでは、データ抽出、分析、同定機能が1つの効率的なツールに統合された、Agilent MassHunter Explorer ソフトウェアを使用して重要な情報を得ていますね。どのように作業に取り入れていますか？

Ferrer 博士：「以前は、個々のサンプルに取り組む必要がありましたが、MassHunter Explorer ソフトウェアにより、一度ですべてを確認できます。それぞれのサンプルを個別に調べているとは分からないつながりを理解できるようになりました」

Thurman 博士：「MassHunter Explorer ソフトウェアにより、個々のサンプルから全体像へ、すばやく移ることができます。関連性をもって大量のデータを調べることが可能です。したがって、できるだけ迅速に回答を得られるように選択できます。これにより、作業の重要性が維持されます。人々はすぐに回答を得たいと思っていて、『1～2年後にお答えできると思います』などは聞きたくないのです。」

Imma は興味深い取り組みを行っています。後で再分析できるように、冷凍庫で多数の抽出物を保存しています。古いサンプルを新しいソフトウェアで調べることができます。これは非常に有効なやり方です。MassHunter Explorer のような新しいツールが登場したときに、データファイルだけでなく、サンプルそのものを遡及的に調査することができるのです」

Ferrer 博士：「特定のサンプルには、数千または数万ものいわゆる『特長』があります。これらの一部は常に存在するバックグラウンドイオンであるため、重要なものに絞り込む必要があります。ソフトウェアにより、はるかに少数の、特に重要な化合物にすばやく焦点を当てることができます」

Thurman 博士：「ソフトウェアによって直感的に感じていることを実行できますが、データでそれを示せることはすばらしいです。例えば、どれが汚染物質を含まない『天然の』サンプルで、どれが汚染されているサンプルかは見当が付きません。このソフトウェアを使用して、サンプリングや地質学に基づく直感的な仮説をデータで確認できます。ソフトウェアでこれらを分析できるのです。重要性の判断に役立つさまざまな統計パッケージがあります。したがって、これらのサンプルを詳細に調べることが可能です」

Ferrer 博士：「これまでこの種の分析には、いわゆる『ピーククリッキング』が数多く伴っていました。これは有効ですが、回答を得るのに時間がかかり、すべてを把握するのが困難でした」

Thurman 博士：「25 年前の時点で、唯一の方法はターゲット分析でした。標準を用意し、サンプルを分析し、特定の化合物を探します。現在、ラボが精密質量解析でこのような種類のソフトウェアツールを使っていないなら、非常に不利でしょう」

アジレント：MassHunter Explorer はどのように期待を満たし、あるいはそれを上回っていますか？

Ferrer 博士：「期待以上だと感じています。以前は、サンプルを測定し、データを解析してから、レポートを作成していました。現在、公開すべき興味深い成果が数多く上がっています。作成しなければならないレポートがたまっている状態です」

Thurman 博士：「どのようにすばらしいのかを説明しましょう。セント・ヘレンズ山が噴火したとき、同僚が現場でサンプルを収集し、フリーズドライにしました。私たちはおよそ 1 年前にその中から複数サンプルを分析し、住宅火災から見つかった汚染物質と同じ化合物をいくつか確認しました。突然、まったく不明だったこれらの化合物と異性体で、予想外のつながりが明らかになったのです。計画から脱線し、執筆が追いつかなくなってしまうほど、とても驚くべきことです」

アジレント：現在はどのようなことに興味がありますか？

Ferrer 博士：「現在利用できる新しいツールは、このようにすばらしい知見をもたらしています。存在する個々の化合物の検出のみに注力するのではなく、ついに、健康や環境保護のような大きな疑問に取り組むことができるようになりました」

Thurman 博士：「私たちは、これらの重要な疑問の回答となる興味深い結果を得られる地点にいますが、非常に多くのデータがあり、数多くの執筆物が出ているため、騒音を排除することは容易ではないかもしれません。私たちとアジレントのように、業界におけるコラボレーションは、人々との出会い、アイデアや経験を交換する新たな機会になります。このような協調関係は、予測できなかった方向へと私たちを導く可能性を秘めています」

ホームページ

www.agilent.com/chem/jp

カスタムコンタクトセンター

0120-477-111

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。

DE97930836

アジレント・テクノロジー株式会社

© Agilent Technologies, Inc. 2023

Printed in Japan, May 23, 2023

5994-6176JAJP