

2008年 4 月30日

機能材料工学専攻	学籍番号	059202
申請者氏名	Noel Samson Quiming	

指導教員氏名	齊戸美弘 平田幸夫
--------	--------------

論 文 要 旨(博士)

論文題目	Analysis of Polar Compounds by Hydrophilic Interaction Chromatography --A Chemometric Approach-- (親水性相互作用クロマトグラフィーによる極性化合物の分析 --ケモメトリック アプローチ--)
------	--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------

(要旨 1, 200字程度)

親水性相互作用クロマトグラフィー(Hydrophilic Interaction Chromatography; HILIC)は、極性化合物の保持に関して、従来の疎水性相互作用に基づく逆相クロマトグラフィーにおける選択性とは異なる選択性を示す。HILIC の使用は現在のところ一般的ではないものの、多くの極性化合物から成る複雑な混合物の分析に必要な技術であることから、最近その使用が拡大しつつある。HILIC の使用が拡大しつつあるもう一つの理由は、液体クロマトグラフィー(Liquid Chromatography; LC)と質量分析計(Mass Spectrometer; MS)の複合化システムの使用が、徐々に広がりつつあることである。高いアセトニトリル濃度で、あまり塩を加える必要の無い水系溶媒は、液体クロマトグラフィー/質量分析計の主要なインターフェイスであるエレクトロスプレー(Electrospray)インターフェイスには理想的な溶離液である。HILIC はクーロン力に基づく相互作用が存在しない電荷を持たない溶質の分離に適しているものの、現在では、殆どの極性化合物に応用されている。

本博士学位論文では、以下の3つのグループの化合物、(1)アドレノレセプター作用薬および拮抗薬、(2)ジンセンノサイドおよび(3)尿酸およびメチル尿酸に対する HILIC の応用について検討した。各々の溶質グループのクロマトグラフィーデータを解析するために、ケモメトリクス手法である、多重線形回帰(Multiple Linear Regression; MLR)および人工ニューラルネットワーク(Artificial Neural Networks; ANN)等を用いた。

第一章では、使用したクロマトグラフィーシステム、溶質ならびにケモメトリクス手法について簡単に述べるとともに、本研究全体の概要について述べる。

第二章では、HILIC における、アドレノレセプター作用薬および拮抗薬の保持予測モデルについて述べる。ジオールカラム、ポリビニルアルコール結合型カラム、非修飾シリカカラムにおける保持予測モデルの作成には、MLR および ANN を用いた。MLR に基づくモデルと ANN に基づくモデルの違いについても、第二章において述べる。

第三章では、ポリビニルアルコール結合型固定相におけるジンセンノサイド類の保持挙動について述べるとともに、これらの化合物の低温分離における保持予測モデルについても検討した結果を述べる。

第四章では、セントラルコンポジットデザイン(Central Composite Design; CCD)に基づき、ジオールカラムにおける尿酸およびメチル尿酸の保持に対する、各種クロマトグラフィーパラメーターの影響に関する検討を行った結果について述べる。

最後に、第五章では、本学位論文の結論を述べる。