

研究成果報告書

(国立情報学研究所の民間助成研究成果概要データベース・登録原稿)

研究テーマ (和文) AB		高分子消毒副生成物のバーチャル化			
研究テーマ (欧文) AZ		Visualization of High Molecular Weight Disinfection By-products			
研究氏 代 表 名 者	カナ CC	姓)エチゴ	名)シンヤ	研究期間 B	2005 ~ 2007 年
	漢字 CB	越後	信哉	報告年度 YR	2007 年
	ローマ字 CZ	Echigo	Shinya	研究機関名	京都大学大学院
研究代表者 CD 所属機関・職名		京都大学大学院工学研究科・講師			
概要 EA (600 字~800 字程度にまとめてください。)					
<p>高分子の消毒副生成物の化学構造とその生成反応を理解するためには前駆体である溶存化合物の化学構造と、その化学構造と消毒剤(塩素)との化学反応を理解する必要がある。そこで本研究では、分光学的手法により河川水中高分子溶存有機物およびその塩素処理生成物の化学構造に関する情報を収集するとともに、計算機化学的手法をもちいて水中における溶存有機物と塩素の反応を再現するための基礎的な技術の整備を行った。</p> <p>実験では、ナノろ過膜により 1000 Da 以上の有機物を回収する方法を確立し、淀川の河川水約 650 L から 240 mg as C の溶存有機物を回収することができた。原水 DOC と比較すると約 20% が 1000 Da 以上の高分子化合物であることがわかった。このうち約半分を pH 7 にて塩素処理した。塩素処理後再び脱塩(低分子化合物の除去)をおこなった結果、炭素の収支から塩素処理により低分子化が進み約 10% が 1000 Da 以下の分子となることがわかった。また、反応前後の有機物を ^{13}C CP/MAS NMR により分析した結果、淀川溶存有機物の高分子分画は主として炭水化物により構成されており、芳香族化合物の比率は極めて低いことが判明した。また、塩素処理を行っても、この基本構造が変化することはなく糖鎖等の炭水化物を中心とした構造は概ね維持されているものと考えられた。ただし、NMR スペクトルの差分から化学シフト 40-60 ppm の脂肪族炭素、およびアミノ基が減少し、170 ppm 付近のカルボキシル基が増加することが確認された。これは NMR による世界初の高分子消毒副生成物の化学構造に関する情報である。</p> <p>計算機化学アプローチでは半経験的分子軌道法である MOPAC を用いて塩素と溶存有機物の化学構造の反応を計算機上で再現を試みた。この結果、反応には水分子がリング状に水素結合した構造が不可欠であることを明らかにした。また、溶存有機物を構成する各化学構造の塩素への反応性予測の可能性を示した。</p>					
キーワード FA	高分子消毒副生成物	溶存有機物	核磁気共鳴分光分析	計算化学	

(以下は記入しないでください。)

助成財団コード TA					研究課題番号 AA								
研究機関番号 AC					シート番号								

発表文献（この研究を発表した雑誌・図書について記入してください。）									
雑誌	論文標題 ^{GB}								
	著者名 ^{GA}		雑誌名 ^{GC}						
	ページ ^{GF}	～	発行年 ^{GE}					巻号 ^{GD}	
雑誌	論文標題 ^{GB}								
	著者名 ^{GA}		雑誌名 ^{GC}						
	ページ ^{GF}	～	発行年 ^{GE}					巻号 ^{GD}	
雑誌	論文標題 ^{GB}								
	著者名 ^{GA}		雑誌名 ^{GC}						
	ページ ^{GF}	～	発行年 ^{GE}					巻号 ^{GD}	
図書	著者名 ^{HA}	伊藤禎彦, 越後信哉							
	書名 ^{HC}	水の消毒副生成物（仮題）							
	出版者 ^{HB}	技法堂出版	発行年 ^{HD}					総ページ ^{HE}	
図書	著者名 ^{HA}								
	書名 ^{HC}								
	出版者 ^{HB}		発行年 ^{HD}					総ページ ^{HE}	

欧文概要 EZ

Structural information on high molecular disinfection by-products (DBPs) and their precursors was collected by the combination of membrane fractionation technique and spectroscopic analysis (mainly NMR). Also, computational visualization of the reaction between chlorine and high molecular weight natural organic matter was attempted.

We collected approximately 240 mg(as C) of high molecular weight organic matter (higher than 1000 Da) from 650 L of Yodo river water by a nano-filtration system. From the carbon balance, high molecular weight fraction accounted for approximately 20% of dissolved organic matter of this river. With chlorination, approximately 10% of carbon was converted to low molecular weight compounds. Also, ¹³C CP/MAS NMR analysis revealed that carbohydrate was the major component of the high molecular weight fraction. With chlorination, we observed increase in carboxylic carbon contents and decrease in aliphatic carbon and proteins while the main structure of hydrocarbon appeared to be intact. This is the first report on the chemical structure of high molecular weight DBPs by NMR.

In addition to spectral information on high molecular weight DBPs, we showed the possibility of visualizing the reaction between chlorine and the major chemical structure in dissolved organic matter by molecular orbital method.