

# メタボローム 解析



既知化合物の同定から未知化合物の構造推定まで。

## ■GC-MS 基本解析

一次代謝物のうち高極性化合物対象

## ■GC-MS 脂肪酸解析

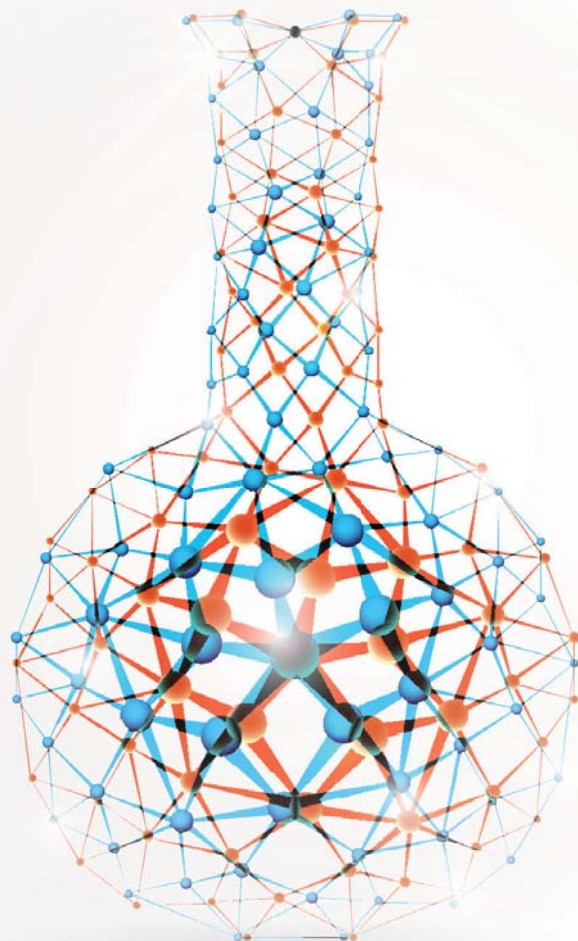
一次代謝物のうち低極性化合物(脂肪酸)対象

## ■LC-MS 基本解析

中(高)極性化合物対象

## ■LC-MS 脂質解析

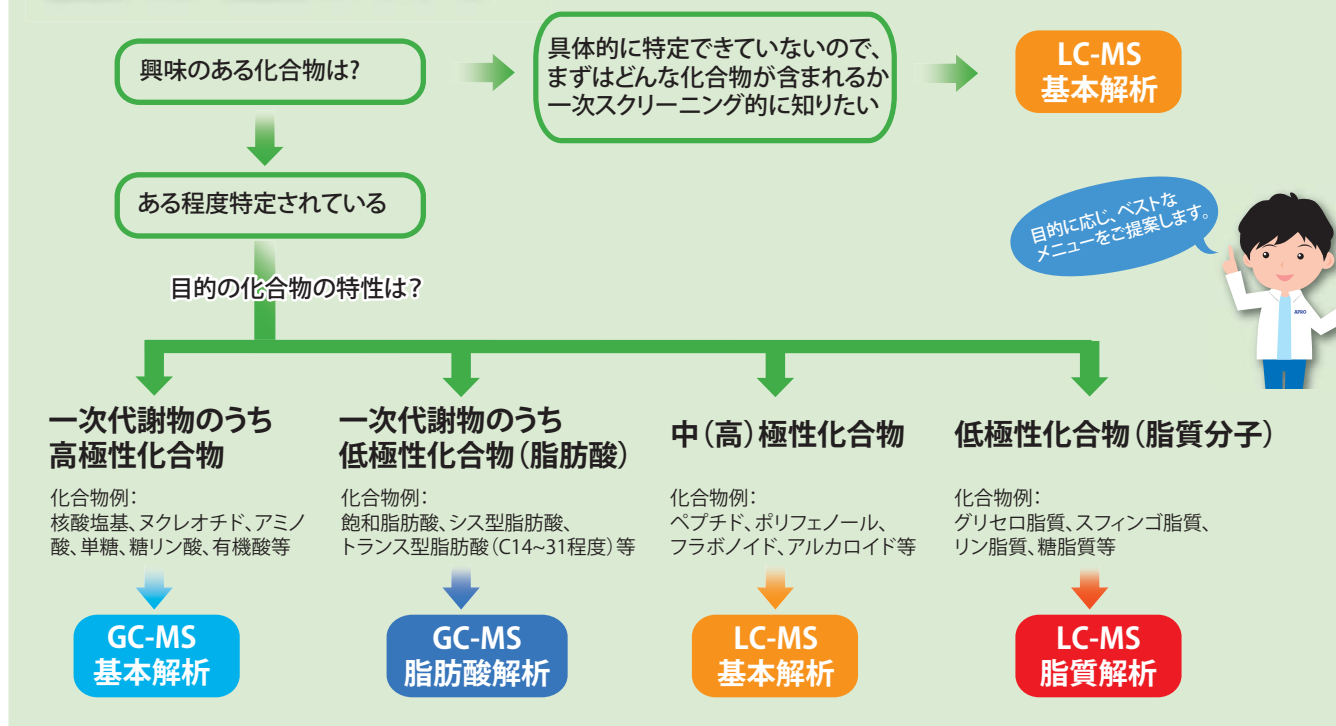
低極性化合物(脂質分子)対象



## メタボローム解析とは

生体内には、核酸やタンパク質のような高分子の化合物のほか、糖や有機酸、アミノ酸、脂肪酸などの低分子化合物も数多く存在しています。これらの多くは代謝によって作り出された代謝産物（メタボライト）であり、このような生体内に存在する代謝産物を網羅的に解析することがメタボローム解析です。細胞の活動を理解する上で、これまでDNA配列の網羅的解析（ゲノム解析）、mRNA の網羅的解析（トランスクリプトーム解析）、タンパク質の網羅的解析（プロテオーム解析）が盛んに行われてきましたが、さらにメタボローム解析にて、多くの代謝産物と遺伝子発現を検出し、それらを関連付けることにより、従来の生物学では達成が難しかった現象の解明に役立てることが可能です。アプロサイエンスでは、高精度の質量分析装置と豊富なデータを基にした独自の解析ソフトならびに目的に応じた解析ソフトを駆使し、既知化合物の同定のみでなく、未知化合物の構造推定も承ります。本サービスはかすず DNA 研究所よりご提供いたします。

### 解析メニュー選択フローチャート



### 各解析メニューの特徴

	新規・既知化合物対応		対象化合物			特徴
	既知	未知	高極性 (有機酸・アミノ酸など)	中極性 (ポリフェノールなど)	低極性 (脂質)	
<b>GC-MS 基本解析</b>	○	△	○	×	×	揮発性の高極性成分を対象に、428個の標品データと照合することで同定。検量線による定量も可能。ただし、標品データにヒットしない化合物については得られる情報が少ない。
<b>GC-MS 脂肪酸解析</b>	○	△	×	×	○	揮発性の低極性成分を対象に、50個の標品データと照合することで同定。検量線による定量も可能。ただし、標品データにヒットしない化合物については得られる情報が少ない。
<b>LC-MS 基本解析</b>	△	○	△	○	×	中極性の化合物を対象に、1ピークごとに化合物同定のための質量分析情報を付与。未知化合物でも精密質量情報により組成式の予測が可能。
<b>LC-MS 脂質解析</b>	△	○	×	×	○	低極性化合物 (脂質) を対象に、大量同定が可能。未知化合物であっても対応可能。

## GC-MS 基本解析

有機酸、アミノ酸等の一次代謝物、計428化合物を対象にした網羅的な同定が可能です。検出されたデータをGC/MS代謝成分データベース (Shimadzu社製) にて解析し、ヒットしたものの他、検出された全ピーク情報についてご報告いたします。多検体解析にお勧めの価格設定です。

### サンプル形態・必要量

- 生体試料や培養細胞、植物等からの化合物抽出より実施いたします。50-150mg 程度を目安にご提供ください。
- 抽出液をご提供いただく場合、0.1 ~ 1 mL 程度が目安となります。

### 分析装置

GC-MS : Shimadzu社製 GCMS-QP2010-Ultra

### 価格

9 試料※ : ¥483,000 (税別) ~

※ 1 試料からでも承ります。詳しくはお問い合わせください。

## GC-MS 脂肪酸解析

脂肪酸、計50化合物を対象にした分析です。検出データをGC/MS代謝成分データベース (Shimadzu社製) にて解析し、ヒットしたものの他、検出された全ピーク情報についてご報告いたします。多検体解析にお勧めの価格設定です。

### サンプル形態・必要量

- 生体試料や培養細胞、植物等からの化合物抽出より実施いたします。50-150mg 程度を目安にご提供ください。
- 抽出液をご提供いただく場合、0.1 ~ 1 mL 程度が目安となります。

### 分析装置

GC-MS : Shimadzu社製 GCMS-QP2010-Ultra

### 価格

9 試料※ : ¥483,000 (税別) ~

※ 1 試料からでも承ります。詳しくはお問い合わせください。

## LC-MS 基本解析

サンプル中に含まれる中(高)極性の化合物(ポリフェノール等)を対象に、検出データを独自の解析ソフト(PowerGet)にて解析します。精度の質量データと豊富な情報(組成式候補、MSMS情報、複数DB検索、標品照合)により、未知化合物であっても化合物推定ができます。また、t-検定や多変量解析(主成分分析)により、サンプル群に特徴的な成分を見出すことも可能です。

### サンプル形態・必要量

- 生体試料や培養細胞、植物等からの化合物抽出より実施いたします。50-150mg 程度を目安にご提供ください。
- 抽出液をご提供いただく場合、0.1 ~ 1 mL 程度が目安となります。

### 分析装置

LC : Agilent 社製1200 series

質量分析計 : Thermo Fisher Scientific社製 LTQ Orbitrap XL

### 価格

1 試料※ : ¥230,000 (税別) ~

※ 詳しくはお問い合わせください。

ピークアライメント番号  
データベース検索結果へのリンク  
MSMSデータへのリンク  
溶出時間  
検出質量 m/z  
化合物質量演算値  
ピーク強度全サンプル平均値  
推定分子式  
推定イオン化モード  
サンプル別ピーク強度

No.	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M
1	No.	DB	MS2	Ave. RT. (Ave)	mass	Ave. mass	Ave. mass	Ident	Annotation	Prepared	io	RH0001	RH0001x10
2	0	DB		10.1	223.0642	222.0569	8835	C9H1853	[M + H] <sup>+</sup>			8835	
3	2	DB		10.11	187.0238	186.0165	15541	C7H6O6	[M + H] <sup>+</sup>			15541	
4	9	DB		10.11	205.0919	204.0846	23673	C10H16O8	[M + H] <sup>+</sup>			23673	
5	5	DB	1.87	10.11	222.0609	221.0536	72669	C7H11N1	[M + H] <sup>+</sup>			126300	19037
6	6	DB		10.12	252.217	251.2097	1000	Unknown	F [M + H] <sup>+</sup>			1000	
7	9	DB	1.93	10.16	210.0609	192.027	708973	C6H8O7	[M + NH4] <sup>+</sup>			1136572	195535
8	10	DB		10.16	402.0878	401.0805	16376		[M + H] <sup>+</sup>			16376	
9	11	DB	1.75	10.16	193.0249	192.0271	178952	C6H8O7	[M + H] <sup>+</sup>			308459	37601
10	12	DB	0.9	10.16	238.0922	237.0949	85900	C9H15N1	[M + H] <sup>+</sup>			137928	22543
11	13	DB		10.16	212.0078	211.0005	18512	Unknown	F [M + H] <sup>+</sup>			32824	4200
12	14	DB		10.16	215.0163	192.0271	41207	C6H8O7	[M + Na] <sup>+</sup>			63399	19015
13	15	DB	1.47	10.16	175.0238	174.0165	79200	C6H8O6	[M + H] <sup>+</sup>			139587	12590
14	16	DB		10.17	230.9902	192.027	55976	C6H8O7	[M + K] <sup>+</sup>			55976	
15	21	DB		10.18	408.0194	408.0121	32450		[M + H] <sup>+</sup>			32450	
16	24	DB		10.18	308.0213	307.014	16437	C7H11O6	[M + H] <sup>+</sup>			16437	
17	26	DB		10.18	147.0288	146.0216	12353	C5H6O5	[M + H] <sup>+</sup>			12353	
18	35	DB		10.28	235.1726	234.1653	8879	C12H26O2	[M + H] <sup>+</sup>			8879	
19	45	DB		10.36	199.1778	198.1705	7208	Unknown	F [M + H] <sup>+</sup>			7208	
20	52	DB		10.44	436.3422	435.3349	2232	C26H45N1	[M + H] <sup>+</sup>			2232	
21	60	DB		10.5	188.0919	187.0845	4833	C8H13N1	[M + H] <sup>+</sup>			4833	
22	69	DB		10.88	188.0478	187.0406	5239	Unknown	F [M + H] <sup>+</sup>			5239	
23	71	DB		10.58	408.3536	408.3463	8853		[M + H] <sup>+</sup>			18282	
24	73	DB		10.6	204.2067	203.1995	4345	Unknown	F [M + H] <sup>+</sup>			4345	
25	78	DB		10.71	436.3421	435.3349	2634	C26H45N1	[M + H] <sup>+</sup>			3553	
26	84	DB		10.79	189.0626	187.0188	3440	Unknown	F [M + H] <sup>+</sup>			3440	
27	85	DB		10.79	252.217	251.2099	6527	Unknown	F [M + H] <sup>+</sup>			6527	
28	91	DB		10.86	189.0116	187.0067	5958	Unknown	F [M + H] <sup>+</sup>			5958	

精密質量データ例

## LC-MS 脂質解析

サンプル中に含まれる全低極性化合物(脂質分子)を対象とした分析です。得られたデータを SIEVE (Thermo Fisher Scientific社製) を用いて確認した後、Lipid Search (三井情報社製) を用いて脂質分子を網羅的に検索し、一括で同定・定量します。既知の脂質だけでなく、未知の脂質についても構造推定ができます。また、高精度な定量値の算出により、複数サンプル間の定量値の比較解析も可能です。

### サンプル形態・必要量

- 生体試料や培養細胞、植物等からの化合物抽出より実施いたします。50-150mg 程度を目安にご提供ください。
- 抽出液をご提供いただく場合、0.1 ~ 1 mL 程度が目安となります。

### 分析装置

LC : Agilent 社製1200 series

質量分析計 : Thermo Fisher Scientific社製 LTQ Orbitrap XL

### 価格

1 試料※ : ¥311,000 (税別) ~

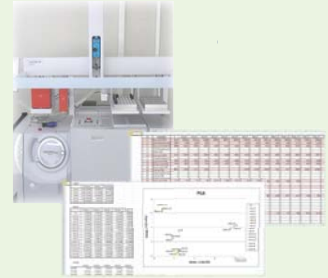
※ 詳しくはお問い合わせください。

# メタボローム解析 活用例



## 品種間・産地間・栽培方法・加工方法による「成分的な差」を可視化。

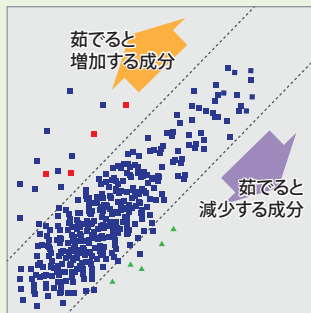
「全成分指紋解析<sup>®</sup>」は、機能性などに関わる様々な成分を網羅的に検出、数値化する最新科学分析手法「メタボローム解析」を基盤にした分析手法です。現在、データベース (Dictionary of Natural Products) には天然に存在する既知化合物が17万種類登録されていますが、植物材料を分析するとその数倍の化合物が検出されます。これらの種類やその分布特徴をソフトウェアで解析する事により、加工方法や保存方法、保存期間、生産地や生産方法などの違いによって生じている成分の量的変化・質的分布が数値で示されるのです。商品が持つ特徴が、まるで「人の指紋」のように際立ちます。



## 「他農園との栽培方法の違い」「加工方法のひと工夫」がもたらす違いを数値化。

### 【実施例】加工方法によって変化する成分

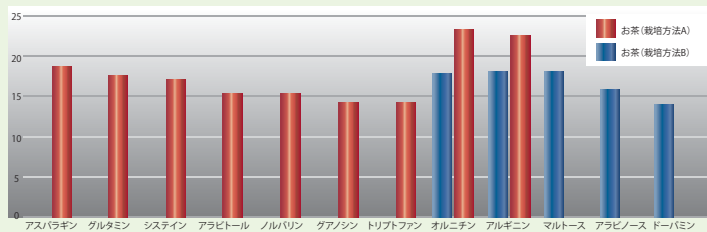
茹でる前後のかぼちゃの成分を網羅的に解析し、比較しました。ここから、栄養成分の保持や旨み成分の変化などを読み取ります。



この図は、実際のデータを基にしたイメージ図です。

### 【実施例】高級お茶飲料の成分的特徴

独自の栽培方法によるお茶葉から、特殊な抽出方法を用いて製造した場合、一般的な方法に比べて成分組成に多くの差異が見られました。



## 機能性成分探索を低コスト化・短時間化

例えば、従来の手法では約170種類の機能性成分について分析可能ですが、1成分ごと別々に検出するため費用も時間もかかります。一方、全成分指紋解析<sup>®</sup>では、機能性成分をはじめ栄養価、色、食味、食感、香りなどに関わる様々な成分を一斉に検出し、検出した成分の組成式を明示します。注目している成分の組成式をこの得られた分析結果と照合することにより、ご依頼の商品に注目している成分が含まれるかが分かります。

事前の打ち合わせ(コンサルティング)、サンプルの前処理、分析、解析・データ取りまとめまでまずはご相談ください。



## 株式会社 アプロサイエンス

お問合せ: tel.088-683-7211 ✉ info@aprosci.com

<http://aproscience.com/>

本社 千771-0360 徳島県鳴門市瀬戸町明神字板屋島124-4 TEL:088-683-7211 FAX:088-683-7212  
東京営業所 千101-0051 東京都千代田区神田神保町2-34-7 TEL:03-6272-9301 FAX:03-6272-9302

販売店