

## Smart Metabolites Database を用いた食品分析における効率的なデータ解析

谷口 百優、中筋 悠斗

### ユーザーベネフィット

- ◆ Smart Metabolites Database Ver.2は、MRMを用いた高感度なワイドターゲット分析が可能です。
- ◆ サンプルの種類に応じて分析/解析対象とする成分を絞り込むことができ、データ解析時間を削減しながら信頼性の高い結果を得ることができます。

### ■はじめに

メタボロミクスは、クロマトグラフ-質量分析計などの分析装置を用いて生体サンプル中の成分を網羅的に解析する技術です。食品分野においては新規機能性食品開発や食品官能性能解析を目的として種々の食材や食品へ応用されています。複数サンプルの成分データを多変量解析に供することで、各サンプルの成分プロファイルの特徴を調査することができます。しかしながら、その際には膨大なクロマトグラムデータを扱う必要があり、データ解析には大きな労力を費やします。

そこで本稿では、食品分析においてSmart Metabolites Database Ver.2を用いることで、熟練者でなくても簡単に効率よくデータ解析ができる方法をご紹介します。

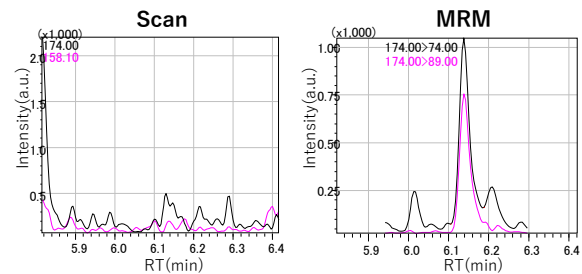


図2 レモン中のPyruvic acid(TMS誘導体化物)のクロマトグラム

### ■MRMモードを用いたワイドターゲット分析

一般的に、メタボロミクス解析においてはScanモードを用いたノンターゲット分析が使用されます。しかしながらその場合、複数サンプルの膨大なクロマトグラムデータを扱うことになり、データ解析には長い時間と高いスキル、経験を要します。また、未知の化合物を探索できますが、労力を費やしてデータを解析しても同定できず有益な情報を得られない場合があります。

Smart Metabolites Database Ver.2では、生体サンプルにおいて重要な機能を担うことが知られている540種の親水性低分子成分の一斉分析メソッドを簡単に作成できます(図1)。幅広い成分の保持指標とマススペクトルが登録されており、これらを用いて成分の有無を自動で判別します。ターゲット分析ならではのデータ解析の簡便さを活かしながら豊富な代謝物情報を取得することができます。食品サンプルでは呈味成分や機能性成分を幅広く分析・解析することができます。また、各成分に特徴的なイオンだけを検出するMRMモードを用いることで、夾雑物やノイズなどに起因するピークが減り、Scanモードよりも高感度な検出が可能になります(図2)。



図1 Smart Metabolites Database Ver.2の分析フロー

### ■フィルター機能を用いた対象成分の絞り込み

サンプルの原材料によって含有される成分の種類は異なります。Smart Metabolites Database Ver.2には、多岐にわたる生体サンプルから検出される540成分の情報が登録されています。そのため、ある特定の食品を分析して検出される成分数は、登録されている全成分数に対して20%程度しかない場合があります。検出されたピークが目的とする成分由来であるかどうかを適切に判断する必要があり、労力を要するだけでなく偽陽性リスクに繋がる可能性もあります。そこでSmart Metabolites Database Ver.2では、特定の試料素材でより効率よく、かつ偽陽性リスクを低減してデータ解析ができるように“フィルター機能”を搭載しています(図3)。フィルターの種類は、植物(食品)・動物(食品)・尿・血液・細胞の計5種があり、測定する試料素材に応じて選択します。Smart Database™のフィルターを使用して分析対象成分数を絞る方法と、全成分の測定は行いますがLabSolutions Insight™のフラグ機能を使用して解析対象成分数を絞る方法があります。フィルター機能を使用すれば、分析または解析する対象をその試料素材群で検出された報告がある成分のみに絞ることができます。



図3 フィルター機能の概要

## ■ フィルター機能の食品分析への適用

Smart Metabolites Database Ver.2 に搭載されたフィルター機能の有効性について、加工食品や発酵食品を含む様々な食品サンプルで評価しました。フィルターの種類はサンプルの原材料に応じて選択しました。ただし、コーンスープなどの植物(コーン)と動物(牛乳)の両方を原材料とする場合は、植物(食品)と動物(食品)フィルターを併用しました。食品サンプルに応じたフィルター機能を使用した結果とフィルター機能を使用しない結果(540成分の一斉分析)について、検出された成分数を比較しました。表1に分析条件を、表2に検出成分の比較結果を示します。

検出割合は、フィルターを使用しないで検出された化合物数を基準としてフィルター機能を用いた各サンプルで検出された化合物数の比率として算出しました。フィルター機能を使用した検出割合は、いずれの食品サンプルにおいても90%以上検出することができました。

また、カニとカニカマ3製品について、フィルター機能を使用して得た成分データを主成分分析(PCA)に供しました。図4に示した通り、フィルター機能を使用しても各サンプルの成分プロファイルの差異を可視化することができ、より本物に類似した代替食品を開発するための手がかりを得ることができました。

表1 装置構成および分析条件

GC-MS	: GCMS-TQ8050 NX
オートインジェクタ	: AOC-20i / 20s
カラム	: BPX5 (30 m × 0.25 mm I.D. 0.25 μm)
[GC条件]	
注入モード	: スプリット
スプリット比	: 30
キャリアガス	: He
キャリアガス制御	: 線速度 (39.0 cm/sec)
注入量	: 1 μL
気化室温度	: 250°C
カラムオープン温度	: 60°C (2 min) → 15°C/min → 330°C (3 min)
[MS条件]	
イオン源温度	: 200°C
インターフェイス温度	: 280°C
データ採取モード	: MRM

表2 加工食品・発酵食品の成分分析におけるフィルター機能の有無の比較

サンプル	豆乳	ビール	コーヒー	チーズ	ナンブラー	コーンスープ	カニカマ
フィルター種類	植物(食品)	植物(食品)	植物(食品)	動物(食品)	動物(食品)	植物(食品) + 動物(食品) *2	植物(食品) + 動物(食品) *2
検出数 (フィルター無)	87	95	89	100	132	104	102
検出数 (フィルター有)	85	93	84	92	119	101	99
検出割合 (%) *1	98	98	94	92	90	97	97

\*1 検出割合 = 検出数(フィルター有)/検出数(フィルター無) × 100 (%)

\*2 測定対象成分イメージは図3の弁図におけるオレンジ部と緑部の和集合

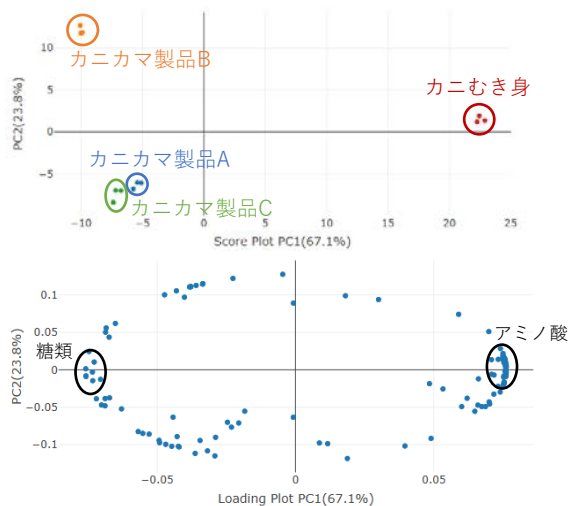


図4 カニとカニカマ(3製品)の主成分分析(PCA)の結果

<謝辞>

本測定を行うにあたりご協力いただいた大阪大学大学院工学研究科 福崎英一郎教授、大阪大学・島津分析イノベーション協働研究所 飯田順子教授に感謝いたします。

GCMS-TQ、Smart Metabolites Database、Smart DatabaseおよびLabSolutions Insightは、株式会社島津製作所またはその関係会社の日本およびその他の国における商標です。

# 株式会社 島津製作所

01-00388-JP 初版発行：2022年 4月

島津コールセンター ☎ 0120-131691

本文中に記載されている会社名および製品名は、各社の商標および登録商標です。本文中では「TM」、「®」を明記していません。

本資料は発行時の情報に基づいて作成されており、予告なく改訂することがあります。

最新版は、島津製作所>分析計測機器の以下のサイトより閲覧できます。

<https://www.an.shimadzu.co.jp/apl/index.htm>

会員制情報サービス Shim-Solutions Club にご登録いただけますと、毎月の最新情報をメールでご案内します。

新規登録は、<https://solutions.shimadzu.co.jp/> よりお願いします。

© Shimadzu Corporation, 2022