

Application
Data Sheet

No. 103

GC-MS

Gas Chromatograph Mass Spectrometer

GC-MSを用いたヒトES細胞抽出物の代謝物分析

Analysis of Metabolites Extracted from Human Embryonic Stem Cells
using GC-MS

生体機能を維持する際に生じる様々な代謝物の網羅的な解析を行うメタボローム解析は、疾患バイオマーカー探索等の研究に幅広く用いられています。これらの研究を行なうためには、生体試料に含まれる代謝物を同定する必要があります。

本アプリケーションデータシートでは、血液、尿、細胞等の生体サンプルに含まれる代謝物を中心に登録したSmart Metabolites Databaseに含まれるスキャンメソッドを用いて、ヒトES細胞抽出物に含まれる代謝物を同定した結果を紹介いたします。

分析条件

Dish (60 mm) より回収したヒトES細胞抽出物をトリメチルシリル (TMS) 化しました。細胞からの代謝物の抽出、誘導体化の詳細な手順は島津評論, 70, 123-131, 2014 (C297-0471) を参照ください。Table 1 に示した条件で GCMS-TQ8040 の Q3 スキャンモードで分析しました。

Table 1 分析条件

GC-MS	:GCMS-TQ8040		
カラム	:DB-5 (長さ30m, 0.25mm I.D., df=1.00 μm)		
ガラスインサート	:スプリットレスインサート ウール入り (PN:221-48876-03)		
[GC]		[MS]	
気化室温度	:280°C	インターフェース温度	:280°C
カラムオープン温度	:100°C(4分)→(4°C/分)→320°C(8分)	イオン源温度	:200°C
注入モード	:スプリットレス	データ採取時間	:4-67 分
キャリアガス制御	:線速度 (39.0 cm/秒)	測定モード	:Scan
注入量	:1 μL	質量範囲	:m/z 45-600
		イベント時間	:0.3 秒

分析結果

分析の結果、得られたトータルイオンカレントクロマトグラム (TIC) を Fig. 1 に、また、同定された代謝物を Table 2 に示します。ヒトES細胞の抽出物から、内部標準として添加した 2-Isopropylmalic acid を含む 124 種の TMS 誘導体化代謝物を同定することができました。

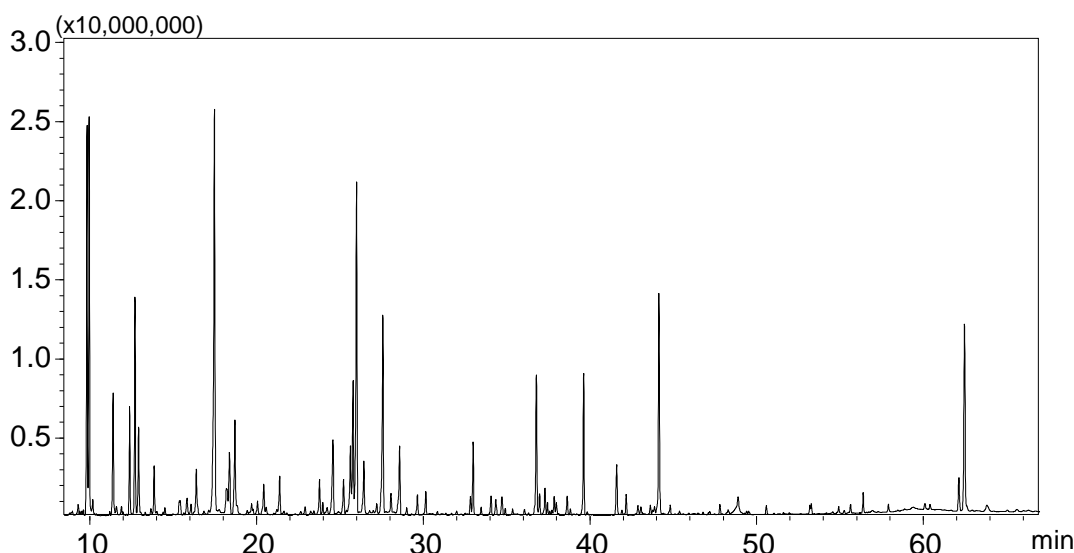


Fig. 1 ヒトES細胞抽出物に含まれる代謝成分のトータルイオンカレントクロマトグラム (TIC)

Table 2 同定されたTMS誘導体化代謝物一覧※

1	Adenine-2TMS	43	Glycine-2TMS	85	Octadecanol-TMS
2	Adenosine monophosphate-5TMS	44	Glycine-3TMS	86	Octenedioic acid-2TMS
3	Adenosine-4TMS	45	Glycolic acid-2TMS	87	Oleic acid-TMS
4	Alanine-2TMS	46	Glycyl-Glycine-4TMS	88	O-Phosphoethanolamine-4TMS
5	Allose-meto-5TMS(2)	47	Histidine-3TMS	89	O-Phospho-Serine-4TMS
6	4-Aminobutyric acid-2TMS	48	Homocysteine-3TMS	90	Ornithine-3TMS
7	4-Aminobutyric acid-3TMS	49	2-Hydroxyadipic acid-3TMS	91	Ornithine-4TMS
8	3-Aminopropanoic acid-3TMS	50	3-Hydroxybutyric acid-2TMS	92	Oxalic acid-2TMS
9	Arachidonic acid-TMS	51	2-Hydroxyglutaric acid-3TMS	93	5-Oxoproline-2TMS
10	Arginine-3TMS	52	3-Hydroxyglutaric acid-3TMS	94	Palmitic acid-TMS
11	Ascorbic acid-4TMS	53	2-Hydroxyisobutyric acid-2TMS	95	Palmitoleic acid-TMS
12	Asparagine-3TMS	54	3-Hydroxyisobutyric acid-2TMS	96	Pantothenic acid-3TMS
13	Aspartic acid-3TMS	55	3-Hydroxypropionic acid-2TMS	97	Phenylalanine-2TMS
14	Benzoic acid-TMS	56	Hypotaurine-3TMS	98	Phosphoenolpyruvic acid-3TMS
15	Cholesterol-TMS	57	Inositol phosphate-7TMS	99	3-Phosphoglyceric acid-4TMS
16	Citric acid-4TMS	58	Inositol-6TMS(2)	100	Phosphoric acid-3TMS
17	Cystamine-nTMS	59	Isocitric acid-4TMS	101	Proline-2TMS
18	Cystathionine-4TMS	60	2-Isopropylmalic acid-3TMS	102	Putrescine-4TMS
19	Cysteine-3TMS	61	2-Ketoglutaric acid-meto-2TMS	103	Pyridoxine-3TMS
20	Dihydroxyacetone phosphate-meto-3TMS(1)	62	Kynurenine-3TMS	104	Pyruvic acid-meto-TMS
21	Dihydroxyacetone phosphate-meto-3TMS(2)	63	Lactic acid-2TMS	105	Ribitol-5TMS
22	Elaidic acid-TMS	64	Lauric acid-TMS	106	Ribonic acid-5TMS
23	Erythrose-meto-3TMS(1)	65	Leucine-2TMS	107	Ribose-4TMS(2)
24	Fructose 1-phosphate-meto-6TMS(1)	66	Lysine-4TMS	108	Ribulose 5-phosphate-meto-5TMS(1)
25	Fructose 6-phosphate-meto-6TMS	67	Maleic acid-2TMS	109	Saccharopine-4TMS
26	Fructose-meto-5TMS(2)	68	Malic acid-3TMS	110	Serine-3TMS
27	Fumaric acid-2TMS	69	Mannose 6-phosphate-meto-6TMS(1)	111	Sorbitol-6TMS
28	Galacturonic acid-5TMS(2)	70	Mannose 6-phosphate-meto-6TMS(2)	112	Sorbose-meto-5TMS(1)
29	Galacturonic acid-meto-5TMS(1)	71	Mannose-5TMS(1)	113	Stearic acid-TMS
30	Galacturonic acid-meto-5TMS(2)	72	Mannose-meto-5TMS(2)	114	Succinic acid-2TMS
31	Glucaric acid-6TMS	73	Margaric acid-TMS	115	Threonic acid-4TMS
32	Glucose 6-phosphate-meto-6TMS(1)	74	Methionine-2TMS	116	Threonine-3TMS
33	Glucose-5TMS(2)	75	3-Methylglutaconic acid(Z)-2TMS	117	Thymine-2TMS
34	Glucose-meto-5TMS(1)	76	7-Methylguanine-2TMS	118	Trehalose-8TMS
35	Glucose-meto-5TMS(2)	77	Monostearin-2TMS	119	Tyrosine-3TMS
36	Glucuronic acid lactone-3TMS(2)	78	Myristic acid-TMS	120	Urea-2TMS
37	Glucuronic acid-meto-5TMS(1)	79	N-Acetylaspartic acid-2TMS	121	Ureidosuccinic acid-3TMS
38	Glutamic acid-3TMS	80	N-Acetylaspartic acid-3TMS	122	Valine-2TMS
39	Glutamine-3TMS	81	N-Acetylglutamine-3TMS	123	Xylitol-5TMS
40	Glutamine-4TMS	82	N-Acetylmannosamine-meto-4TMS(2)	124	Xylulose-meto-4TMS
41	Glycerol 3-phosphate-4TMS	83	Niacinamide-TMS		
42	Glycerol-3TMS	84	Nonanoic acid-TMS		

※:TMS, meto はそれぞれトリメチルシリル化、メキシム化されていることを示します。

注記:ヒトES細胞は、京都大学 物質-細胞統合システム 饗庭一博先生、中辻憲夫先生にご提供いただきました。