

LabSolutions™ LCMS用

# LC/MS/MS MRM ライブラリ リン脂質プロファイリング

## Question :

生体中のさまざまなリン脂質のプロファイリングをトリプル四重極型質量分析計で実施したいのですが、適切な測定プラットフォームはありませんか？

## Solution :

LCMS-8060NXとMRMライブラリ リン脂質プロファイリングをご利用ください。



LCMS-8060NX

本MRMライブラリは、C14～C22からなる脂肪酸を含んだリン脂質を分析対象としており、生体中の主要なリン脂質の網羅的解析としてリン脂質クラス決定メソッドを、またその分析結果から推定される脂肪酸組成決定メソッドとして最大867成分のMRMトランジションを含んでいます。本ライブラリでは、1回目の分析としてリン脂質クラス決定メソッドを行い、検出されたリン脂質ピークから予想される脂肪酸組成決定メソッドを編集して2回目の分析を行うことで、リン脂質のプロファイリングを行います。

## 分析対象となるリン脂質

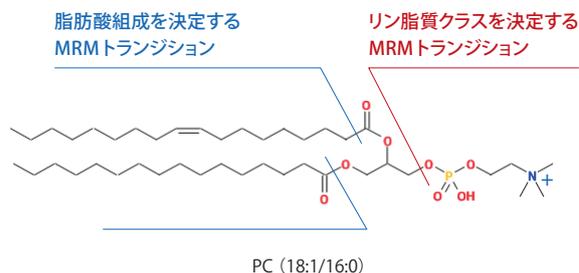
MRMライブラリに登録されているリン脂質は、下記の表に示した炭素数・二重結合の組み合わせを持つ脂肪酸組成を対象としており、リン脂質としてはLyso体を含むホスファチジルコリン (PC)、ホスファチジルエタノールアミン (PE)、ホスファチジルグリセロール (PG)、ホスファチジルイノシトール (PI)、ホスファチジルセリン (PS)、スフィンゴミエリン (SM) がその分析対象となります。

		二重結合数					
炭素数	C14:0	C14:1					
	C16:0	C16:1					
	C18:0	C18:1	C18:2	C18:3			
	C20:0	C20:1	C20:2	C20:3	C20:4	C20:5	
	C22:0	C22:1	C22:6				

## MRMトランジションの構成

リン脂質の特徴的なヘッドグループに着目して、MRMトランジションに利用したリン脂質クラス決定メソッドと脂肪酸組成の組み合わせからなる脂肪酸組成決定メソッドがライブラリに含まれています。

下図は、PC (18:1/16:0) を同定する際に必要となる、それぞれのMRMトランジションを示しています。これらのMRMトランジションによる分析結果を組み合わせることで、リン脂質を帰属することができます。



# LC/MS/MS MRM ライブラリ リン脂質プロファイリング

## Step 1

### リン脂質クラス決定メソッドによる一斉分析

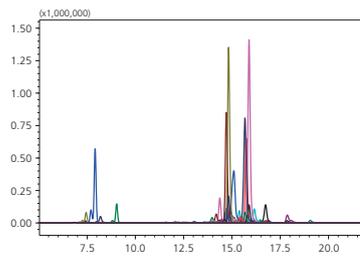
リン脂質クラス決定メソッドは、リン脂質の特徴的なヘッドグループを利用することで、主要なリン脂質クラスを決定するとともに、C14～C22からなる脂肪酸を含むリン脂質を分析対象としており、生体中の主なリン脂質の網羅的解析に対応しています。

タイプ	イベント	マス	化合物名, m/z	時間 (2.000 min - 24.000 min)
MRM	1	-	LP(14:0) 443.26>313.10	
MRM	2	+	LP(14:0) 445.26>283.15	
MRM	3	-	LP(16:0) 443.26>309.25	
MRM	4	+	LP(16:0) 445.26>285.25	
MRM	5	-	LP(18:0) 443.26>315.15	
MRM	6	+	LP(18:0) 445.26>287.25	
MRM	7	-	LP(18:1) 443.26>315.15	
MRM	8	+	LP(18:1) 445.26>287.25	
MRM	9	-	LP(20:0) 443.26>321.15	
MRM	10	+	LP(20:0) 445.26>293.25	
MRM	11	-	LP(20:1) 443.26>321.15	
MRM	12	+	LP(20:1) 445.26>293.25	
MRM	436	-	PE(18:2) 889.80>541.00	
MRM	437	-	PE(20:0) 911.80>541.00	
MRM	438	-	PE(18:0) 887.80>541.00	
MRM	439	-	PE(16:0) 865.80>541.00	
MRM	440	-	PE(20:1) 913.80>541.00	
MRM	441	-	PE(20:0) 911.80>541.00	
MRM	442	-	PE(18:0) 889.80>541.00	

## Step 2

### ピーク同定処理

リン脂質クラス決定メソッドで検出されたリン脂質ピークの同定処理を行います。この時点では検出したリン脂質の構造情報として、リン脂質のクラス (PC、PE、PG、PI、PS、SM) と構成している脂肪酸の炭素数および二重結合の総数が予想されます。次のステップで脂肪酸組成決定メソッドの組み合わせを行います。



## Step 3

PC(36:1) 788.6>184.1 (+)

- PC(36:1) 788.6>184.1 (+)
- PC(14:0/22:1) 832.6>227.2 (-), 337.3 (-)
- PC(14:1/22:0) 832.6>225.2 (-), 339.3 (-)
- PC(16:0/20:1) 832.6>255.2 (-), 309.3 (-)
- PC(16:1/20:0) 832.6>253.2 (-), 311.3 (-)
- PC(18:0/18:1) 832.6>283.3 (-), 281.3 (-)

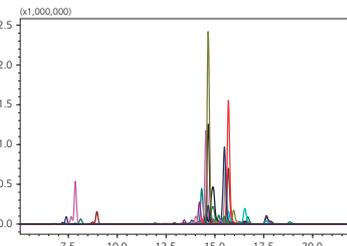
### MRM Event-Link Editor 脂肪酸組成決定メソッドの編集

製品に付属している本ソフトウェアを使用することで、1回目の分析で検出されたリン脂質ピークに対して予想される脂肪酸組成の組み合わせを 867 MRM トランジションから編集することができます。

## Step 4

### 脂肪酸組成決定メソッドによる一斉分析

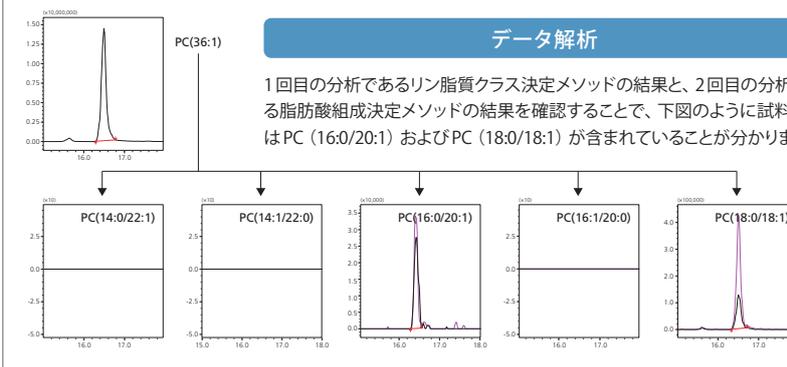
MRM Event-Link Editor で編集した脂肪酸組成決定メソッドを使って、2回目の分析を同一試料に対して行います。1回目と2回目の分析結果に基づいて、リン脂質のプロファイリングができます。



## Step 5

### データ解析

1回目の分析であるリン脂質クラス決定メソッドの結果と、2回目の分析である脂肪酸組成決定メソッドの結果を確認することで、下図のように試料中には PC (16:0/20:1) および PC (18:0/18:1) が含まれていることがわかります。



### 注意事項

1. LabSolutions LCMS は Ver. 5.109 以降、LabSolutions Insight™ は Ver. 3.8SP1 以降が必要です。
2. 本メソッドパッケージは研究用です。臨床診断用途で使用することはできません。

LabSolutions、LCMS 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。

本文書に記載されている会社名、製品名、サービスマークおよびロゴは、各社の商標および登録商標です。

なお、本文中では「TM」、「®」を明記していない場合があります。

本製品は、医薬品医療機器法に基づく医療機器として承認・認証等を受けておりません。

治療診断目的およびその手続き上での使用はできません。

トラブル解消のため補修用部品・消耗品は純正部品をご採用ください。

外観および仕様は、改良のため予告なく変更することがありますのでご了承ください。

# 株式会社 島津製作所

分析計測事業部 604-8511 京都市中京区西ノ京桑原町1  
<https://www.an.shimadzu.co.jp/>

東京支社 (官公庁担当) (03) 3219-5631 (大学担当) (03) 3219-5616 (会社担当) (03) 3219-5622	郡山営業所 (024) 939-3790 つくば支店 (官公庁・大学担当) (029) 851-8511 (会社担当) (029) 851-8515	静岡支店 (054) 285-0124 名古屋支店 (官公庁・大学担当) (052) 565-7521 (会社担当) (052) 565-7531	四国支店 (087) 823-6623 広島支店 (082) 236-9652 九州支店 (官公庁・大学担当) (092) 283-3332 (会社担当) (092) 283-3334
関西支社 (官公庁・大学担当) (06) 6373-6541 (会社担当) (06) 6373-6556	北関東支店 (官公庁・大学担当) (048) 646-0095 (会社担当) (048) 646-0081	京都支店 (官公庁・大学担当) (075) 823-1604 (会社担当) (075) 823-1603	
札幌支店 (011) 700-6605 東北支店 (022) 221-6231	横浜支店 (官公庁・大学担当) (045) 311-4106 (会社担当) (045) 311-4615	神戸支店 (078) 331-9665 岡山営業所 (086) 221-2511	島津コールセンター ☎ 0120-131691 (操作・分析に関する相談窓口) IP電話等:(075) 813-1691