

メタボロミクスの「身近」な活用事例と 最新メソッドパッケージのご紹介

株式会社島津製作所 分析計測事業部

本日の内容

- ・メタボロミクスとは
- ・メソッドパッケージとは
- ・アプリケーションのご紹介

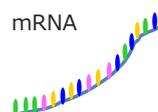
メタボロミクスとは？

オミクス…生体中に存在する分子全体を網羅的に研究する学問分野

遺伝子 → **ゲノミクス**



転写物 → **トランスクリプトミクス**



タンパク質 → **プロテオミクス**



代謝物 → **メタボロミクス**



3

どんなことが期待されるか？

- ・疾患モデルマウスにおける代謝物変動⇒治療・診断への応用
- ・培養細胞の増殖、細胞の分化状態を代謝物量比で判定
- ・植物、微生物からのバイオマス産生を最適化
- ・食品や農産物の美味しさ、機能性評価

4

島津 トリプル四重極LCMSの特長

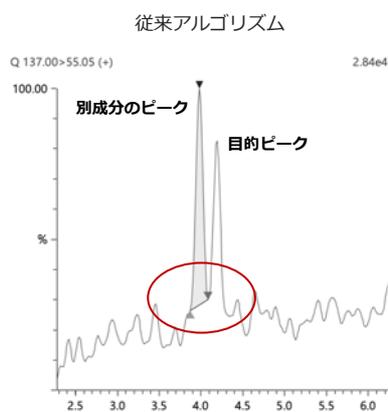
1. 高感度・高速検出
2. 卓越した頑健性
3. Analytical Intelligence機能



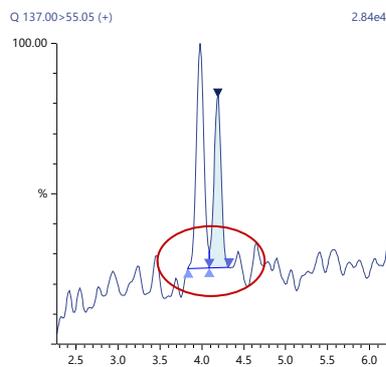
SHIMADZU

最新AIでピークを波形処理！

熟練者の波形処理を**機械学習**させ開発



Peakintelligence™



熟練者の波形処理を実現

Peakintelligence は島津製作所と富士通の共同研究開発製品です

6

SHIMADZU

最新AIでピークを波形処理！

熟練者の波形処理を**機械学習**させ開発

ANALYTICAL INTELLIGENCE

約1/3以下に低減

従来アルゴリズム Peakintelligence

※弊社テストデータを用いた結果です。

波形処理の**標準化**とともに、波形処理の**手間・時間を削減**

Peakintelligence は島津製作所と富士通の共同研究開発製品です

7

SHIMADZU

統計解析から可視化までトータルサポート！

マルチオミクス解析パッケージ

ANALYTICAL INTELLIGENCE

効果的なオミクスデータ解析フローを
大阪大学、システム・バイオロジー研究機構と共同で開発

GARUDA PLATFORM

<http://www.garuda-alliance.org/>

代謝経路上に可視化

2群間の差の可視化

相関関係の可視化

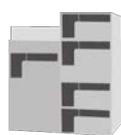
8

本日の内容

- ・メタボロミクスとは
- ・メソッドパッケージとは
- ・アプリケーションのご紹介

9

Ready to use ! メソッドパッケージ



LC条件



残留農薬

動物用医薬品

薬毒物



MS条件

検出器	検出波長	検出感度	検出下限
1	210nm	10000	0.1
2	210nm	10000	0.1
3	210nm	10000	0.1
4	210nm	10000	0.1
5	210nm	10000	0.1
6	210nm	10000	0.1
7	210nm	10000	0.1
8	210nm	10000	0.1
9	210nm	10000	0.1
10	210nm	10000	0.1

代謝物

脂質

分析条件を検討することなく、**すぐに分析**できます

10

SHIMADZU

メタボロミクス系のメソッドパッケージ

NEW!



LC/MS/MSメソッドパッケージ
一次代謝物 Ver. 3



LC/MS/MSメソッドパッケージ
細胞培養プロファイリング Ver. 2



LC/MS/MSメソッドパッケージ
短鎖脂肪酸

NEW!



LC/MS/MSメソッドパッケージ
胆汁酸 Ver. 2



LC/MS/MSMRMライブラリ
リン脂質プロファイリング



LC/MS/MSメソッドパッケージ
脂質メディエーター Ver. 3

11

SHIMADZU

LC/MS/MSメソッドパッケージ 一次代謝物 Ver.3 主要な親水性代謝物の測定ならコレ！

NEW!



2つのメソッドで包括的に親水性代謝物を測定

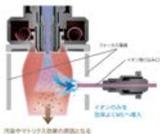
- ・非イオン対試薬メソッドによる **141成分** 一斉分析
- ・イオン対試薬メソッドによる **112成分** 一斉分析

最新のHPLC、LCMSに対応

- ・高感度と頑健性を両立した分析が可能
- ＊最新の **IonFocus** にも対応

簡単に代謝物マッピング

- ・マルチオミクス解析パッケージにより、**代謝変動** を簡単に確認




12



LC/MS/MSメソッドパッケージ 細胞培養プロファイリング Ver.2

培養上清中の成分を一斉分析！

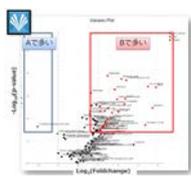


培養上清中の成分を高速一斉分析

- 1サンプルあたり **20分以内** で **125成分** を分析
- 培地分析に最適化されたメソッド
→ 高濃度成分（グルコースやアミノ酸など）と微量成分（ビタミンなど）の同時分析が可能

データ解析サポート

- マルチオミクス解析パッケージにより、**時系列変化** やVolcano Plotによる **2群間比較** が可能

13



LC/MS/MSメソッドパッケージ 短鎖脂肪酸

高感度に短鎖脂肪酸・有機酸を測定！

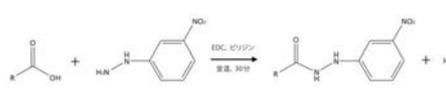


短鎖脂肪酸・有機酸を一斉分析

- 短鎖脂肪酸（C2～C5）および有機酸、**22成分** を **高感度** で一斉分析

前処理プロトコルの紹介

- 3-ニトロフェニルヒドラジン（3-NPH）による誘導体化を含む前処理プロトコルを紹介



試料中の誘導体化スクリーニング

- ニュートラルロススキャン、プロダクトイオンスキャンのメソッドも収載

14

SHIMADZU

LC/MS/MSメソッドパッケージ 胆汁酸 Ver.2
主要な胆汁酸を網羅的に測定！

NEW!

SHIMADZU
Excellence in Science

LabSolutions™ LIMS用
LC/MS/MSメソッドパッケージ
胆汁酸 Ver.2



胆汁酸の成分分析と代謝経路の解析に不可欠な胆汁酸の網羅的な測定を実現します。

胆汁酸の成分分析は、胆汁酸の代謝経路の解析に不可欠な胆汁酸の網羅的な測定を実現します。胆汁酸の成分分析は、胆汁酸の代謝経路の解析に不可欠な胆汁酸の網羅的な測定を実現します。胆汁酸の成分分析は、胆汁酸の代謝経路の解析に不可欠な胆汁酸の網羅的な測定を実現します。

胆汁酸の成分分析は、胆汁酸の代謝経路の解析に不可欠な胆汁酸の網羅的な測定を実現します。胆汁酸の成分分析は、胆汁酸の代謝経路の解析に不可欠な胆汁酸の網羅的な測定を実現します。胆汁酸の成分分析は、胆汁酸の代謝経路の解析に不可欠な胆汁酸の網羅的な測定を実現します。

胆汁酸を高速一斉分析

- ・生体内の胆汁酸代謝、代謝異常症、関連疾患の研究で重要となる一次胆汁酸、二次胆汁酸を含む **49成分** の胆汁酸をわずか **10分** で分析

前処理から解析までサポート

- ・血清、血漿、尿、糞便の生体サンプルに対応
- ・手動前処理・自動前処理に対応

安定同位体による高い定量精度

- ・Alsachim社の安定同位体試薬を内部標準に用いた前処理、定量法に対応

SHIMADZU

【参考】島津グループの安定同位体標識化試薬

安定同位体試薬

^{13}C , ^{15}N , ^2H による安定同位体標識化試薬
 5000種以上の化合物を**1mg**から供給可能
 分析検査証 (Certificate of Analysis) と
精密秤量も付属しています

受託合成サービス

長年蓄積した、高い同位体標識化技術を用い
 ご要望の化合物を**高純度**で合成可能です

ALSACHIM
a Shimadzu Group Company

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

SHIMADZU

ALSACHIM試薬は『島津G L C』サイトで検索

SHIMADZU | 株式会社 島津ジーエルシー

製品情報 | 分野別アプリケーション | 便利コンテンツ | 会社案内 | 採用情報 | お問い合わせ

TOP > 製品情報 > 安定同位体試薬 / 誘導体化試薬 > アルガシム社製 安定同位体試薬

安定同位体試薬
アルガシム社製 安定同位体試薬

ALSACHIM
Shimadzu Group Company

島津ジーエルシーは、島津グループ会社である安定同位体試薬メーカー ALSACHIM社製を扱い、日本のお客様にお届けいたします。くわしくは当社までお問い合わせください。(一部お問い合わせをしない試薬もございます)

お客様専用お問い合わせ | 販売店様専用お問い合わせ

製品検索

CAS番号や品名、PINなどをご入力ください

新型コロナウイルス治療薬候補分析用試薬 ※掲載は一部です。

すべての試薬は、分光分析、保存条件、有効期限・再分析日、さらに、LC-MSによる純度や質量同位体比としての純度とNMRスペクトルを記載した分析検量表 (CoA) とをご用意いたします。【アルガシム社webページへはこちら】

詳細は、ALSACHIM社 web にてご確認ください。【アルガシム社webページへはこちら】

弊社で取り扱いのALSACHIM社製試薬は試薬製品であり、試験・研究目的での使用に限られ、体外診断、医薬品、食品、化粧品などの目的、および人への使用はできません。その他製品に関するFAQは【こちら】

CAS. No.や
化合物名などで検索が可能

検索に掛からない化合物も
随時情報更新されますので、
お気軽にお問い合わせください

17

SHIMADZU

LC/MS/MSメソッドパッケージ 脂質メディエーター Ver.3 脂質メディエーターを網羅的に測定！

SHIMADZU
Excellence in Science

LabSolutions™ LCMS用
LC/MS/MSメソッドパッケージ
脂質メディエーター Ver. 3

Question
脂質の異なる脂質メディエーター関連物質の分析
分析を可能にする。効率よく分析結果を
報告する必要がある。どうすればいいか？

Solution
LCMS-8050/8060/8070/8080/8090/8100/8110/8120
LabSolutions™ LCMS用メソッドパッケージ

"Ready to Use Method" をご提供します
脂質メディエーター関連物質は、分析対象が非常に多岐にわたります。また、分析対象物質の構造が類似しているため、分析結果の信頼性を確保することが困難です。本メソッドパッケージは、分析対象物質の構造的特徴に基づいて、分析結果の信頼性を確保するためのメソッドを提供します。また、分析結果の信頼性を確保するためのメソッドを提供します。

脂質メディエーター関連物質の分析を可能にする
本メソッドパッケージは、分析対象物質の構造的特徴に基づいて、分析結果の信頼性を確保するためのメソッドを提供します。また、分析結果の信頼性を確保するためのメソッドを提供します。

世界最大規模の一斉分析メソッド

- ・エイコサノイド類、多価不飽和脂肪酸代謝物を
はじめとする脂質メディエーター **196成分** を登録

99 Arachidonic Acids related substances	26 EPA related substances	23 DHA related substances
11 Ethanolami de related substances	37 Others	18 ITSD

内部標準物質で補正

- ・196成分をその特性に応じてグループに分類し、
グループ毎に**18種類**の内部標準物質で補正可能

18

SHIMADZU
LC/MS/MS MRMライブラリ リン脂質プロファイリング
リン脂質の網羅的プロファイリングにはコレ！



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:
 生体由来試料からリン脂質の網羅的プロファイリングが可能な製品はありますか？

Solution:
 LCMS-8060/8050シリーズ、GCMS-10シリーズと、Metabolites Method Package Suiteをご利用ください。

■ MRMライブラリは、20~422成分の脂質標準物質を収録しており、生体由来試料中の脂質成分を網羅的に検出・定量することができます。また、生体由来試料中の脂質成分を網羅的に検出・定量するためのMRMライブラリを提供しています。脂質成分の網羅的プロファイリングが可能です。

■ MRMライブラリは、20~422成分の脂質標準物質を収録しており、生体由来試料中の脂質成分を網羅的に検出・定量することができます。また、生体由来試料中の脂質成分を網羅的に検出・定量するためのMRMライブラリを提供しています。脂質成分の網羅的プロファイリングが可能です。

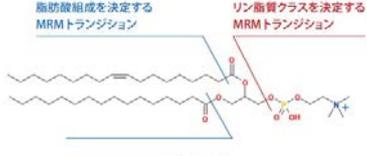
■ MRMライブラリは、20~422成分の脂質標準物質を収録しており、生体由来試料中の脂質成分を網羅的に検出・定量することができます。また、生体由来試料中の脂質成分を網羅的に検出・定量するためのMRMライブラリを提供しています。脂質成分の網羅的プロファイリングが可能です。

リン脂質のプロファイリングが可能

- リン脂質クラス決定メソッド (**422成分**) と脂肪酸組成決定メソッド (**867成分**) を組み合わせることで、試料中のリン脂質をプロファイリング

生体中の主要なリン脂質成分に対応

- 炭素数C14~22、二重結合を0~6まで含む脂肪酸からなるPC, PE, PG, PI, PS, SMのジアシルおよびリソ体リン脂質のうち、生体で主要なリン脂質に対応



脂肪酸組成を決定する MRMトランジション

リン脂質クラスを決定する MRMトランジション

PC (18:1/16:0)

19

SHIMADZU
Metabolites Method Package Suite
どのメソッドパッケージが迷ったら...



LabSolutions™ LCMS, GCMSolution™用
Metabolites Method Package Suite

Question:
 さまざまな代謝物の情報を、トリプル質量分析計も取り入れて検索したいのですが、適切なソフトウェアはありますか？

Solution:
 LCMS-8060/8050シリーズ、GCMS-10シリーズと、Metabolites Method Package Suiteをご利用ください。

■ 複数の「Ready to Use Method」を登録し、延べ1918成分以上の代謝物分析を可能にします。

■ 複数の「Ready to Use Method」を登録し、延べ1918成分以上の代謝物分析を可能にします。

■ 複数の「Ready to Use Method」を登録し、延べ1918成分以上の代謝物分析を可能にします。

延べ1918成分の代謝物情報が登録

- 7つのメタボロミクス/代謝物分析に関連するメソッド製品をまとめ、**特別価格**を設定

本製品に含まれるLC/MS/MSメソッドパッケージ/データベース/MRMライブラリ

LC/MS/MSメソッドパッケージ

- 一次代謝物
- 短鎖脂肪酸
- DLアミノ酸
- 胆汁酸
- 糖質メディエーター

LC/MS/MS MRMライブラリ

- リン脂質プロファイリング

GC/MS (GC/MS/MS) Smart Metabolites Database

マルチオミクス解析パッケージも付属



20

本日の内容

- ・メタボロミクスとは
- ・メソッドパッケージとは
- ・アプリケーションのご紹介

21

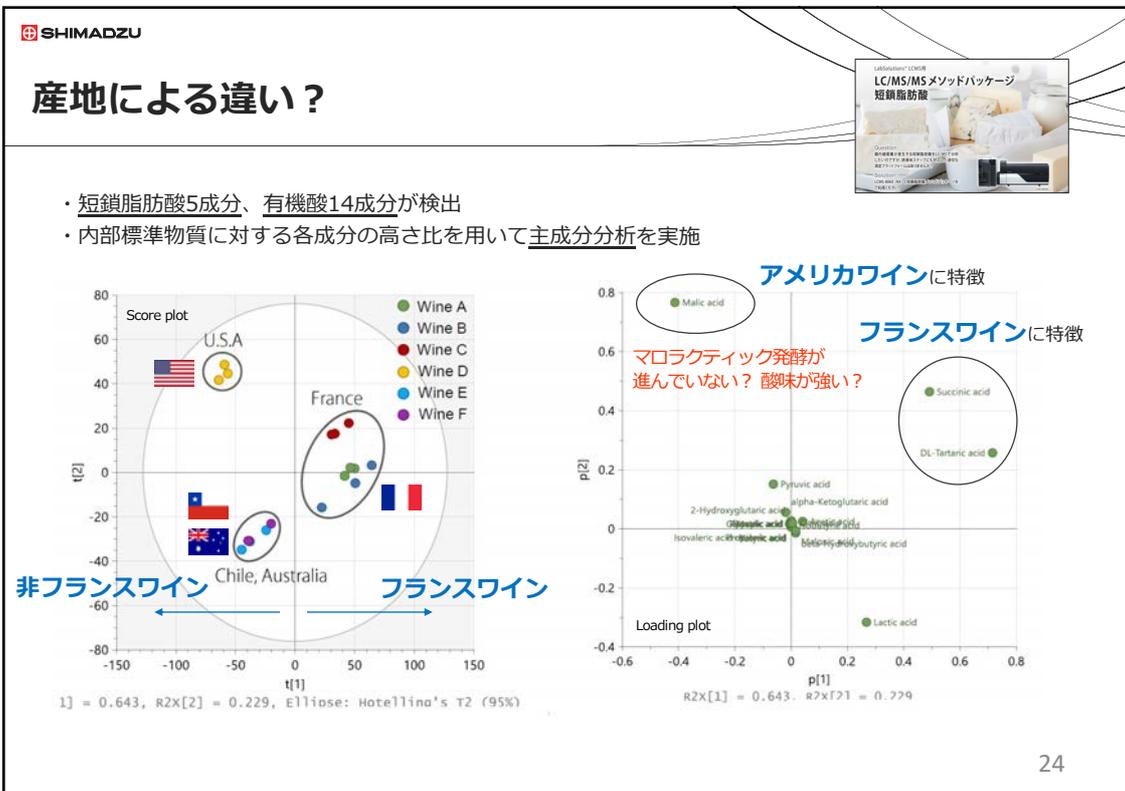
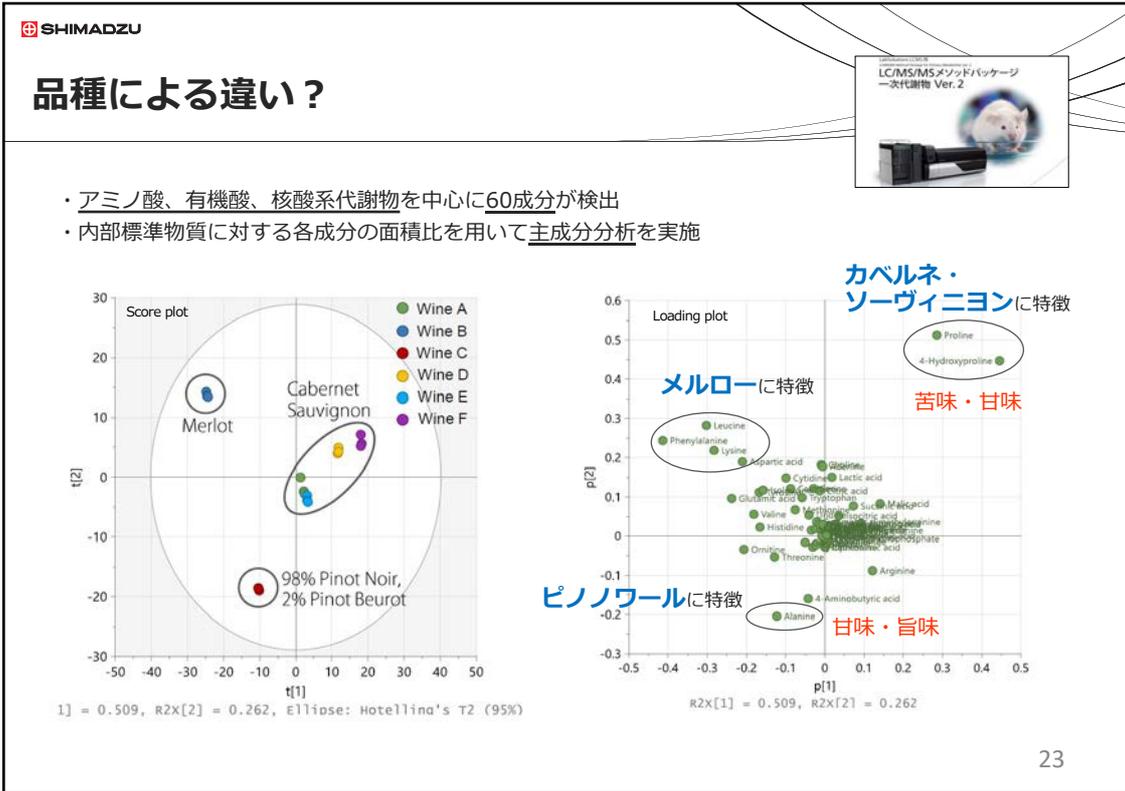
ワインをメタボロミクス

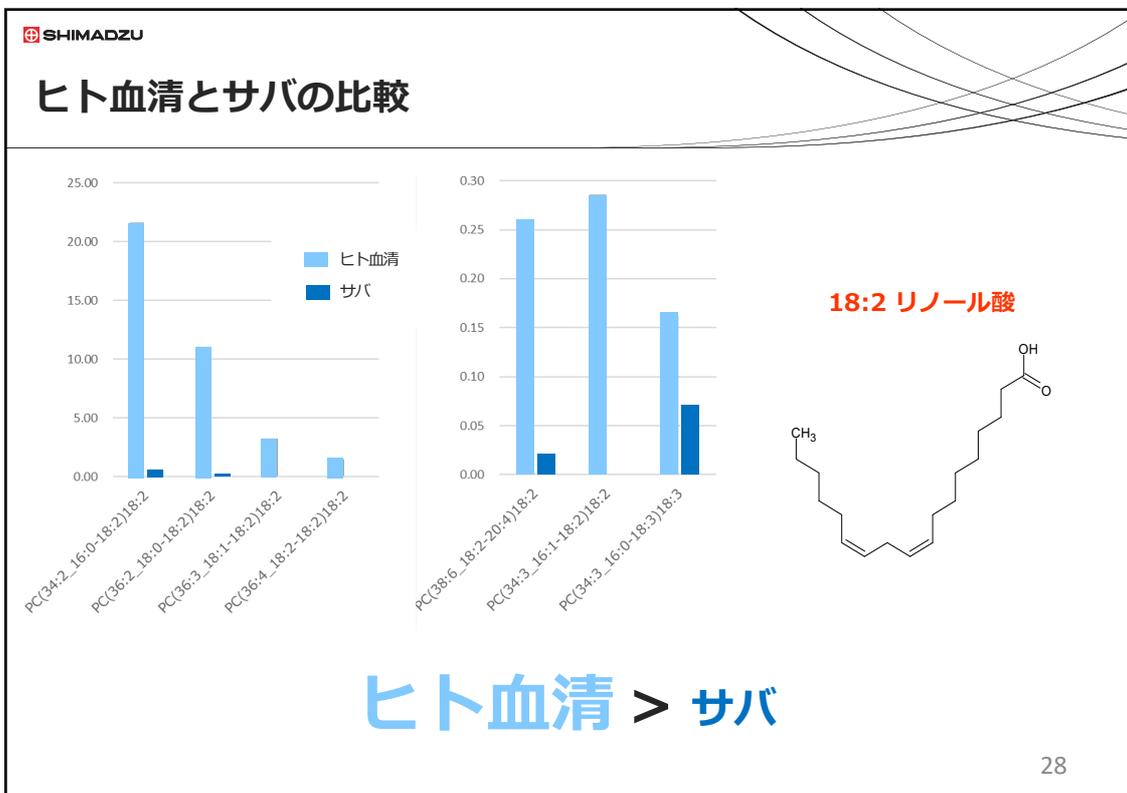
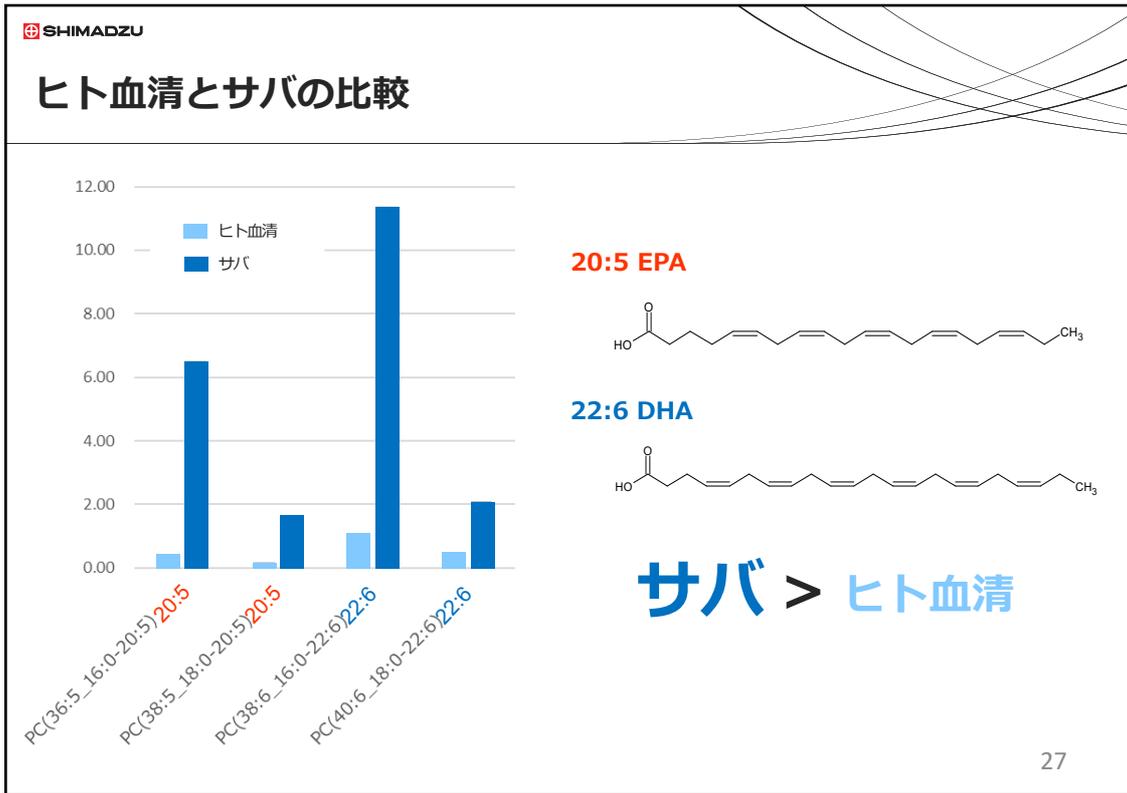
産地、ブドウ品種が異なる以下の6種類の赤ワインをサンプルとした

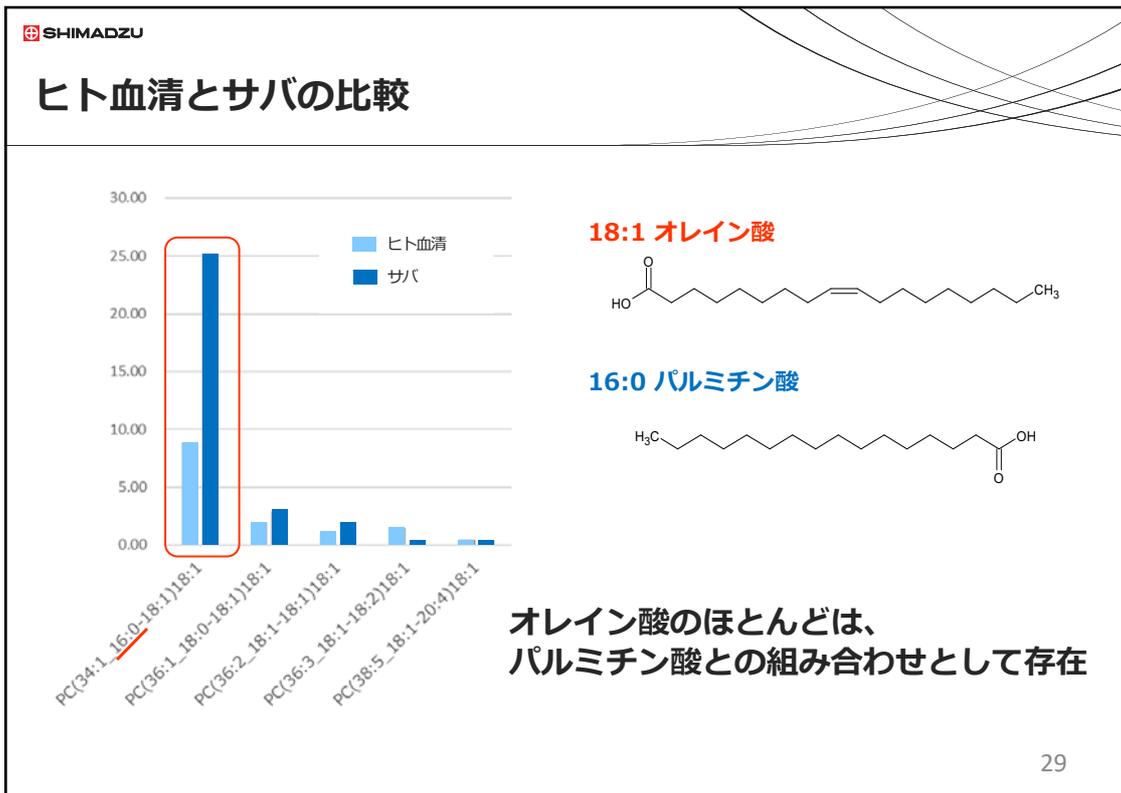


	産地	ブドウの品種
ワインA	フランス 	カベルネ・ソーヴィニオン
ワインB		メルロー
ワインC		98%ピノ・ノワール, 2%ピノ・ブーロ
ワインD	アメリカ 	カベルネ・ソーヴィニオン
ワインE	チリ 	カベルネ・ソーヴィニオン
ワインF	オーストラリア 	カベルネ・ソーヴィニオン

22







- SHIMADZU
- ### まとめ
- メタボロミクス
 - **代謝物を網羅的に測定・研究！**
 - 様々な分野への応用が可能！**
 - メタボロミクスに最適なMS
 - **高速性、頑健性、データ解析が重要！**
 - メソッドパッケージ
 - **メタボロミクス初心者の方でも、
すぐにメタボロミクスを始めて頂けます！**
- 30