

¹H-NMR スペクトルを用いた甘草のメタボローム解析

○若菜 大悟¹, 丸山 卓郎¹, 内山 奈穂子¹, 山本 豊², 合田 幸広¹ (¹国立衛研,
²栃本天海堂)

【目的】近年, 多量のデータを網羅的に取得し解析を行うオーム科学が発展し, 活用されている. 我々は, 生薬・漢方製剤の品質管理・品質評価へのオーム科学応用について検討を行っている*. 本研究では, カンゾウ (甘草) を対象とし ¹H-NMR スペクトルの網羅的データ解析を行ったので報告する.

【方法】東北, 西北甘草各 13 及び 8 ロットに関して, 各試料粉末を 10 mg 量り, 溶媒を加え 30 分振とう抽出後, 遠心分離し, 上清を試験溶液とした. NMR は ECA-800 (JEOL) を用い, データを ALICE2 for Metabolome (JEOL) で処理し, pirouette (Infometrix) を用い多変量解析を行った.

【結果・考察】主成分分析 (PCA) を用いたダイナミックレンジの検討を行ったところ, 試料粉末 1 mg ~ 20 mg を溶媒 1 mL で抽出した濃度範囲で, 濃度と ¹H-NMR スペクトルの積分値間に良い直線性が得られる事を確認した. ロット内のバラツキを確認するため, 両甘草ともに 1 ロットずつ PCA を行った. その結果, 東北甘草では, ① 全体的に抽出量の少ない群, ② 4.6 ppm および 8.0 ppm 付近のピークが大きい群, ③ 1.8 ppm, 2.0 ppm およびスクロース由来のピークが大きい群, が観測された. 西北甘草では ④ 6.9 ppm, 7.4 ppm に特徴的なピークが見られる群, ⑤ ③と同じく 1.8 ppm, 2.0 ppm およびスクロースのピークが大きい群, ⑥ 1.7 ppm, 2.7 ppm および 2.8 ppm のピークが大きい群, ⑦ 原点付近で特記すべき点がない群, が観測された. しかし, 両者を同時に解析した場合, ロット内で複数の群が形成されたにもかかわらず, 両甘草は分類可能であった. 今後, さらにロット数を増やし検討を行う予定である.

*日本生薬学会第 57 年会, 日本生薬学会第 58 年会