

# 27L-pm12

ノンターゲットメタボロミクスにおける高精度分析法の開発

○上田 一樹<sup>1</sup>, 小林 勇太<sup>1</sup>, 水野 初<sup>1</sup>, 轟木 堅一郎<sup>1</sup>, 関 俊哲<sup>1</sup>, 津山 尚宏<sup>2</sup>, 豊岡 利正<sup>1</sup>  
(<sup>1</sup>静岡県大薬, <sup>2</sup>福島県立医科大学)

【目的】LC-MS によるノンターゲット分析では、イオン化の際にマトリックス効果の影響を受けるため、測定データ間のばらつきが大きくなり、精度の高いデータを得ることは難しい。一方、測定対象代謝物を予め決めるターゲット分析では、ターゲット物質の安定同位体標識体を内部標準物質として添加するため、測定間のばらつきを補正した高精度な結果を得ることができる。そこで我々は、ノンターゲット分析の高精度化を実現するために、<sup>15</sup>N 含有培地、<sup>13</sup>C 含有培地でそれぞれ培養した単細胞緑藻類であるクロレラから抽出した <sup>15</sup>N 標識化代謝物、<sup>13</sup>C 標識化代謝物を内部標準として用いる分析法を検討・開発した。さらに本方法をヒト唾液メタボロミクスに応用し、唾液サンプル間の高精度化を目指した。

【方法】クロレラ乾燥粉末にメタノールを加え、<sup>15</sup>N 標識化代謝物、<sup>13</sup>C 標識化代謝物を超音波抽出した。得られた抽出液を LC-MS (Q Exactive) を用いて分析した。得られたデータは、MZmine2 にて解析し、精密質量から組成式を推測し、<sup>15</sup>N 標識化および <sup>13</sup>C 標識化代謝物ピークを検出した。さらにこれらのピークについて MS/MS フラグメントパターンによる同定を行い、内部標準物質として使用可能な <sup>15</sup>N・<sup>13</sup>C 標識化代謝物ピークを決定した。

【結果・考察】LC-MS の結果より、<sup>15</sup>N 標識クロレラ抽出液からは、アミノ酸、核酸塩基、リン脂質などの代謝物が検出された。また <sup>13</sup>C 標識クロレラ抽出液からは、糖類、有機酸、脂肪酸などが検出された。これらの標識化代謝物が内部標準物質として適切かどうか調べるため、標識化クロレラ抽出液を唾液に添加し、唾液中代謝物ピークをクロレラ抽出液由来のピークで補正したところ、多くの代謝物で補正前に比べてサンプル間のばらつきを低下させることができた。