

SL-1 生体ラマンビッグデータのハイパースペクトル解析 Hyper-spectral Analysis of Raman Big Data from Biosystems

濱口 宏夫 (Hiro-o HAMAGUCHI)

台湾交通大理 (Department of Applied Chemistry, School of Science, National Chiao Tung University, Taiwan (1001 University Road, Hsinchu, Taiwan))

ラマン分光の生命科学応用が急速な広がりを見せている。ラマン分光のハードウェアは成熟しつつあり、光ファイバーを用いた人体内部の計測や、製剤過程のプロセス監視などが現実的となっている。一方、ソフトウェアにはまだ大きな課題が一つ残されている。ラマンスペクトルから、**自動的かつ客観的**に目的情報を引き出すプロトコルが確立されていないことである。今回の講演では、筆者等が最近取り組んでいる交互最小自乗多変量スペクトル解析 MCR-ALS (Multivariate Curve Resolution Alternating Least Squares) を用いたラマンビッグデータ自動解析の試みを紹介する [1]。

MCR-ALS 法の詳細と他の応用例は講演で述べることとし、ここではヒト白血球の結果を示す。好中球、好酸球、リンパ球および単球の 4 種、46 個の白血球から合計 16400 個のラマンスペクトルを測定し、MCR-ALS 解析を適用した結果、図 1 に示す 8 個の主要スペクトル成分とその空間分布を得た。スペクトル成分 **1** は、タンパク質と核酸のピークからなり、その空間分布 **1** は核の形状を表す。この形状から核を染色することなく白血球を識別することができる。スペクトル成分 **2** は好中球と単球に存在するミエロペルオキシダーゼ、**3** は好酸球にのみ存在するエオジノフィルペルオキシダーゼ、**4** は好酸球の一部に存在するアラキドン酸、**5** はリンパ球の一部に存在するカロテノイド、**6** と **7** はタンパク質、核酸、脂質等、**8** は水に対応する。**4** のアラキドン酸は、体内における炎症のマーカーとなる物質で、炎症による好酸球の活性化診断を可能にする。また、リンパ球中のカロテノイド **5** は、癌との関連が指摘されており、血液のラマン分析による癌診断につながる可能性がある。

ヒト白血球についてはこのように、MCR-ALS 解析が極めて有効に働き、その最適条件が求められている。したがって、以降の未知白血球試料の解析は、完全に**自動的かつ客観的**に行うことができる。

(1) "Molecular component distribution imaging of living cells by multivariate curve resolution analysis of space-resolved Raman spectra", Masahiro Ando and Hiro-o Hamaguchi, *J. Biomedical Optics*, **19**, 011016 (2014).

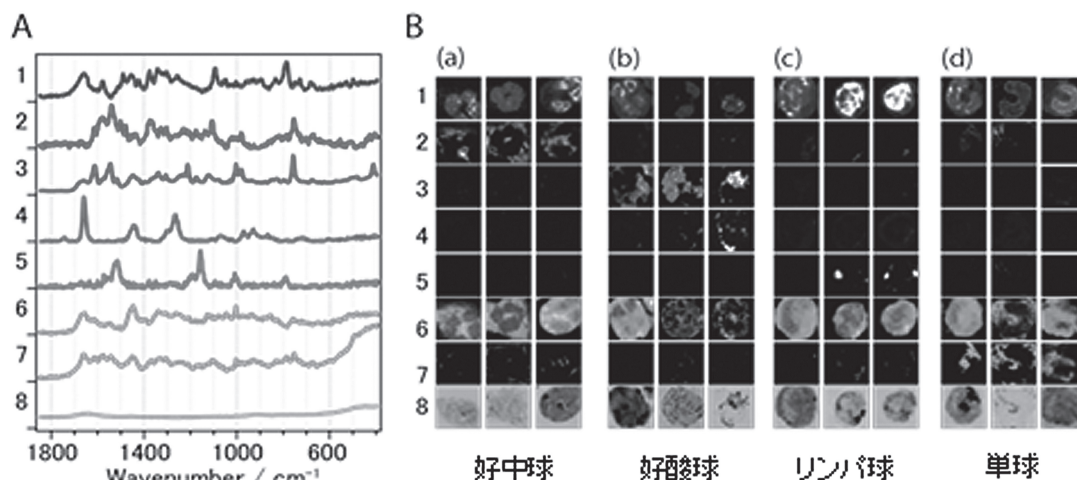


図 1. (A) MCR-ALS 解析による 8 個の主要成分スペクトル、(B) その空間分布。空間分布は好中球 (a)、好酸球 (b)、リンパ球 (c) および単球 (d) についてそれぞれ 3 個ずつ示してある。