

新技術説明会

2024年9月06日，幕張メッセ

メタバローム分析最前線!自動化トータルソリューション

固相誘導体化法とその応用

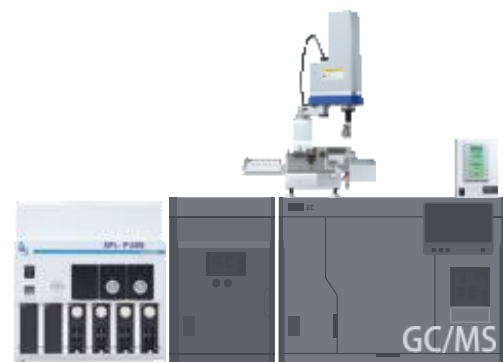


オンラインSPEシリーズ

固相抽出からGC・LC測定までを完全自動化。測定装置の切り替えも可能な前処理システム。



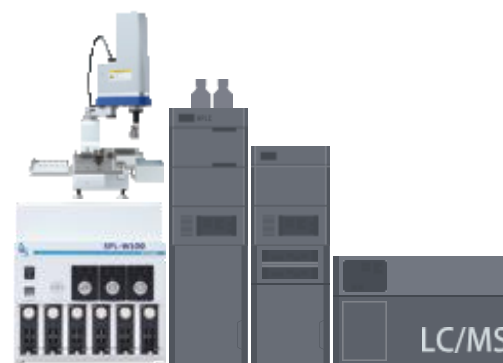
+ GC



SPE-GC/MS

SPL-P100
SPL-M100
SPL-P100FE
SPL-M100FE

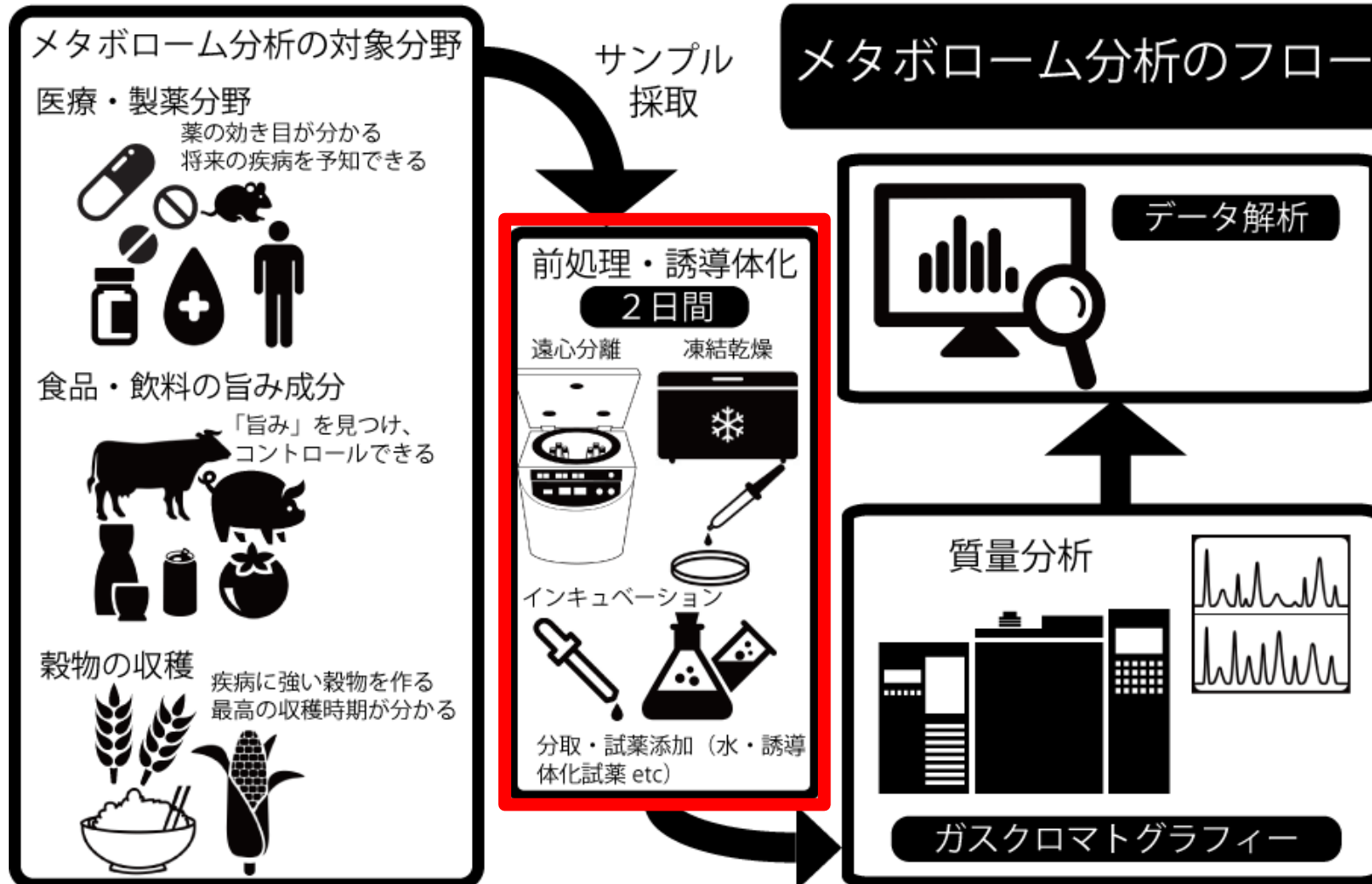
+ LC



SPE-LC/MS

SPL-W100
SPL-E100

メタボロミクスの現状



メタボローム分析は生命科学の研究開発において重要な役割を担っているが・・・

■ メタボローム分析の「課題」

- ・ 前処理が煩雑で2日間かかる。
- ・ 前処理は手作業が多い。
- ・ 人による精度のバラツキ
- ・ 操作ミスを起こしやすい。
- ・ 検体数が多い。

目標

誰でも運用できるメタボローム分析を提供することによって、本来の研究開発の加速を目指す。

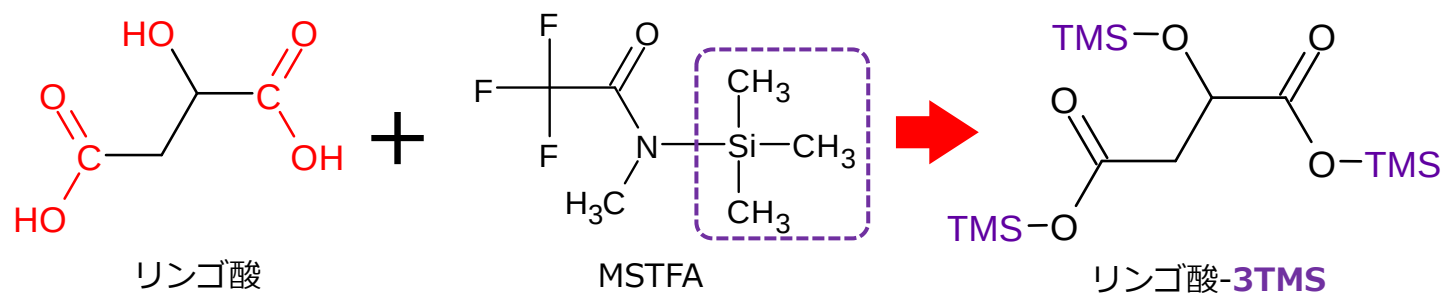
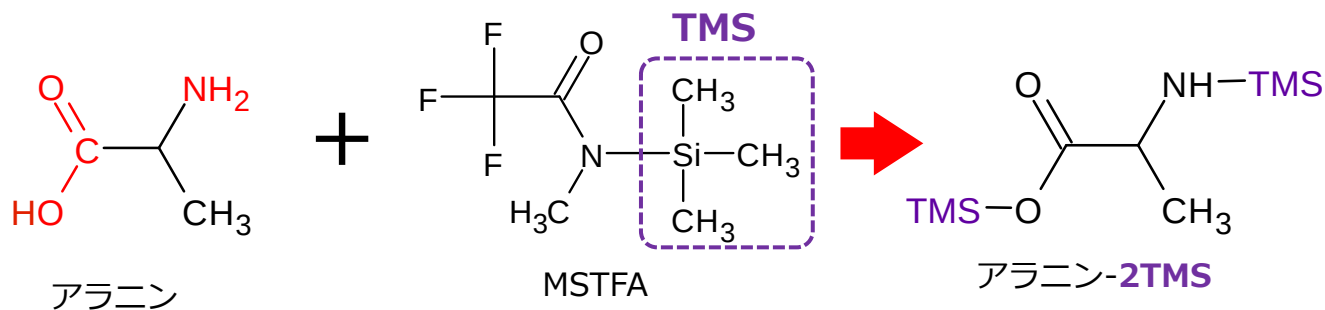
アミノ酸と有機酸のTMS化

TMS化：反応する官能基 $-\text{OH} > -\text{Phenol} > -\text{COOH} > -\text{NH}_2$

反応するアミンについて： $\text{R}-\text{NH}_2 > \text{R}-\text{NH}-\text{R}$

参考文献：

小川茂, ぶんせき, 2006, 7, 332-336

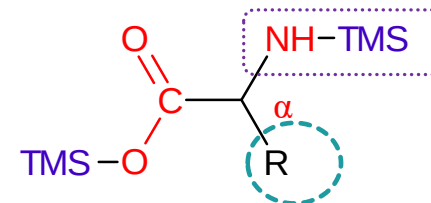


TMS化により揮発しにくい目的成分を気化しやすい物質に変化させることで、GCMSでの測定が可能となる。

★アミノ酸のTMS化について

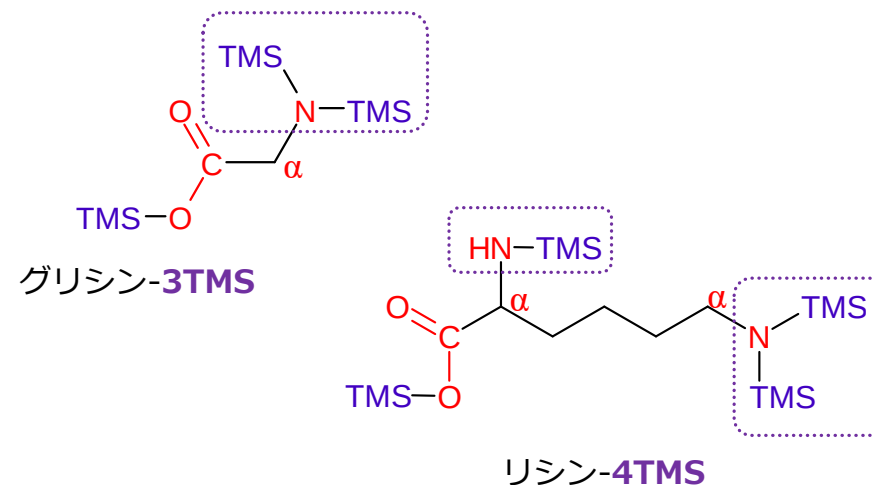
■ α 炭素にRが結合している場合

アミンには**1つのTMS**しか結合しない。

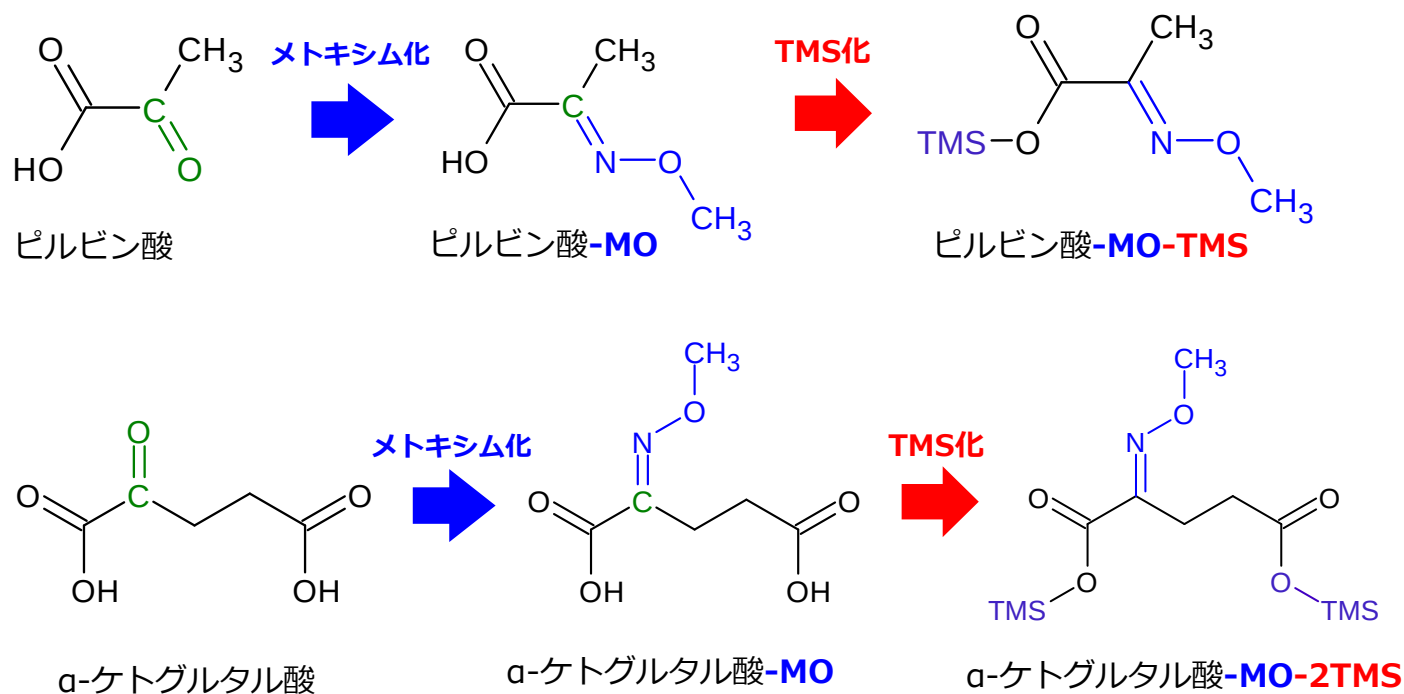
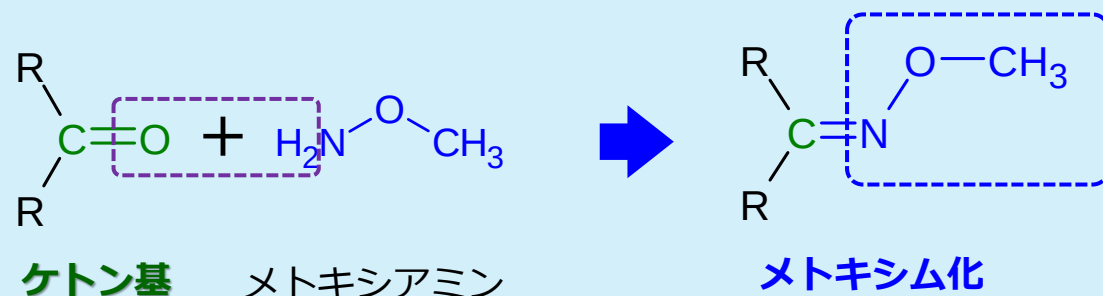


■ α 炭素にRが結合していない場合

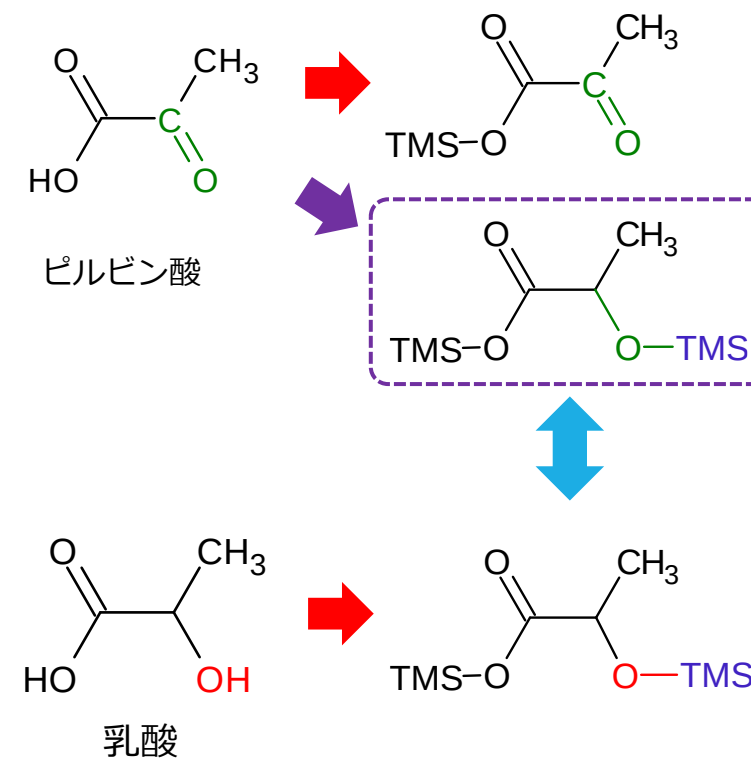
アミンには**2つのTMS**が結合する。



メトキシム化について

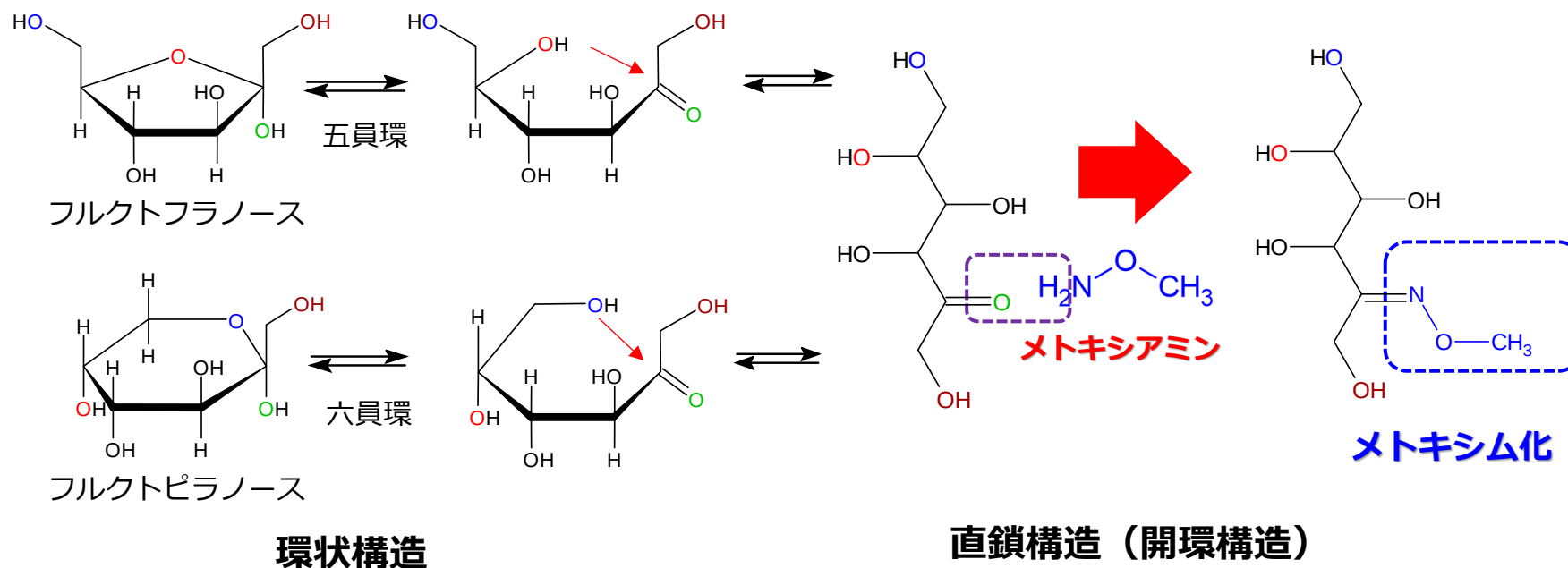


■ メトキシム化しなかったら

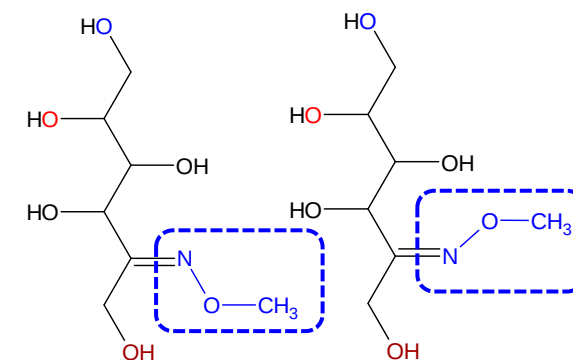


糖類の異性体とメトキシム化

■フルクトースの場合



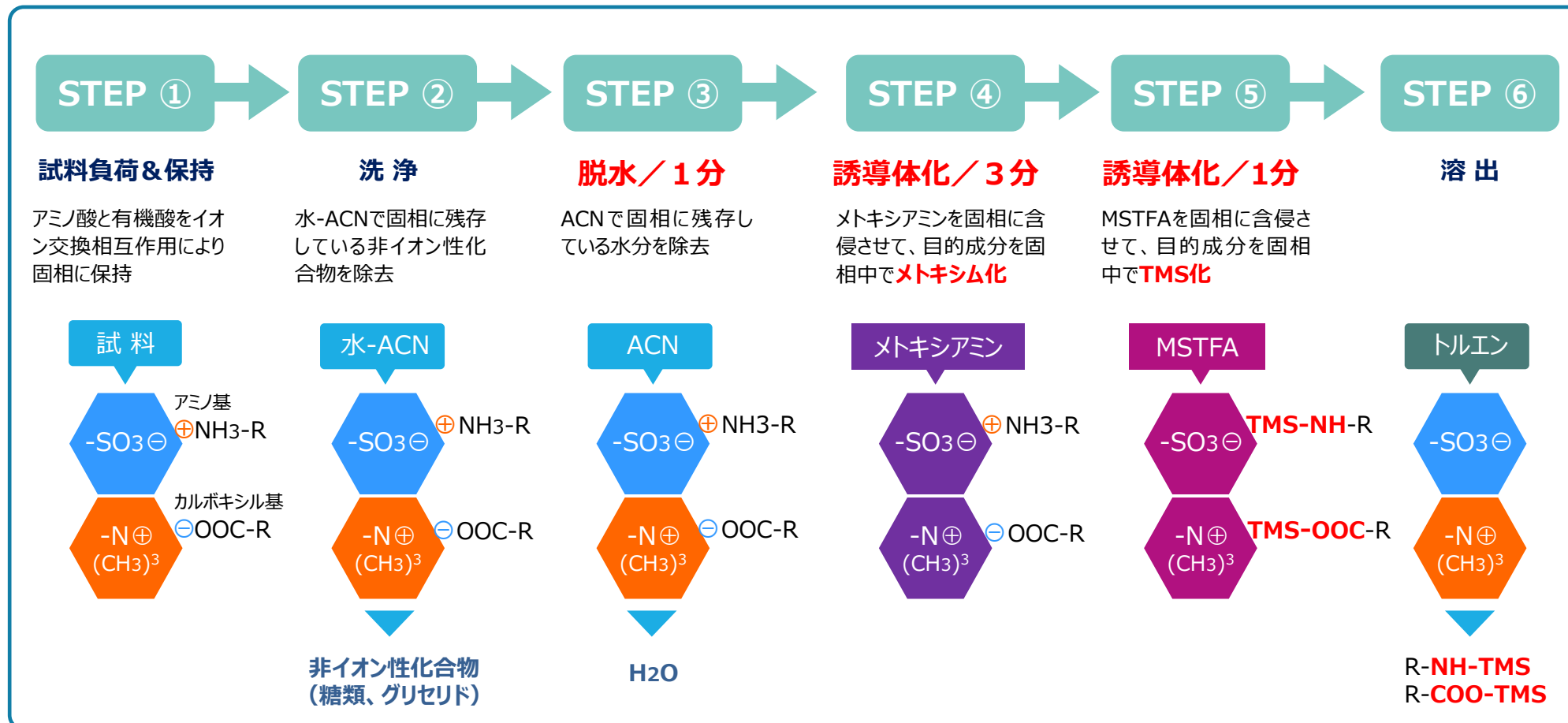
■メトキシム化では
2本のピークが出現しやすい



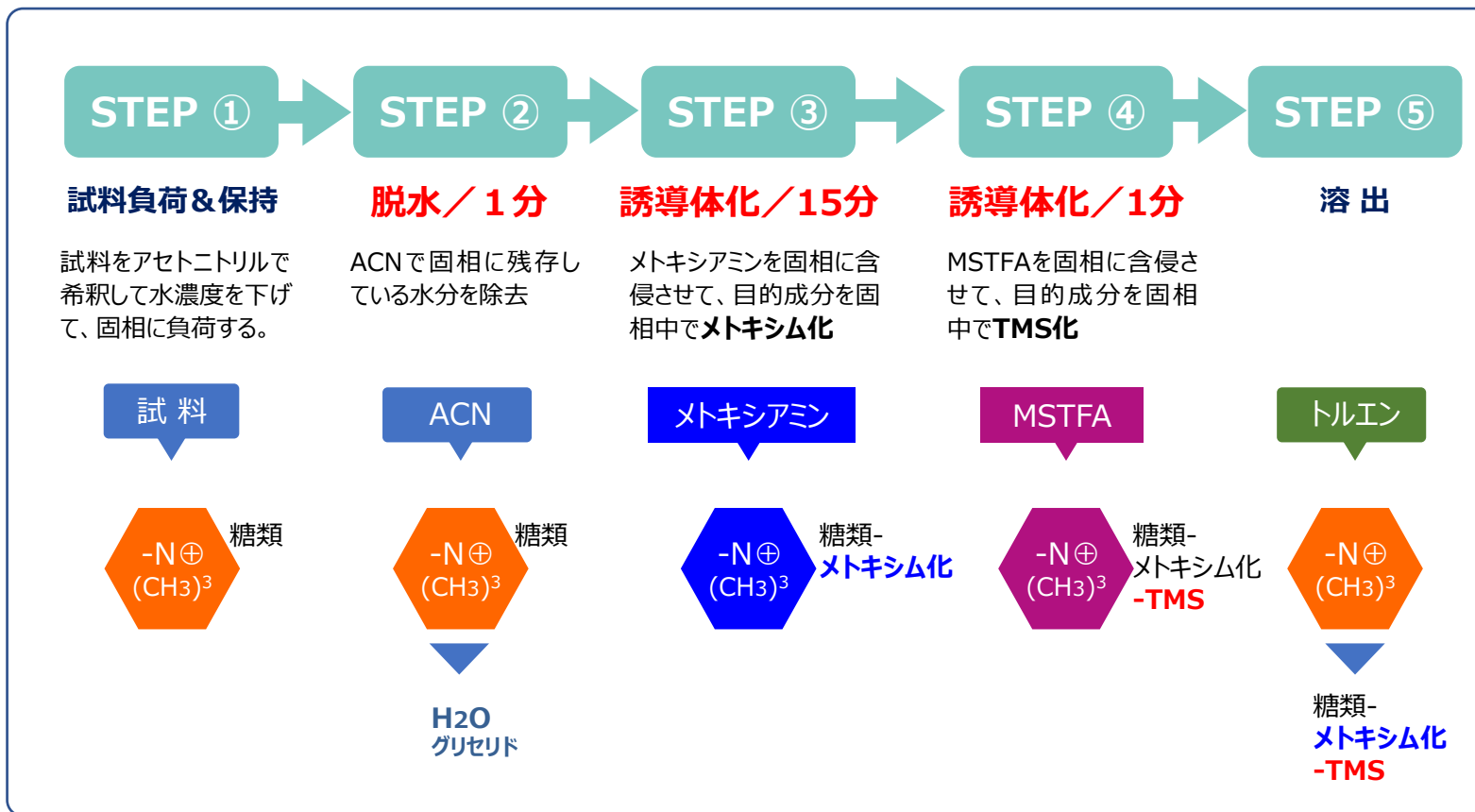
糖類は多くの異性体を持つため、そのままTMS化するとピークがいくつも出現してしまう。

メトキシム化することで環状構造になることを防ぎ、直鎖構造に絞り込むことができる。

固相誘導体化法：アミノ酸/有機酸

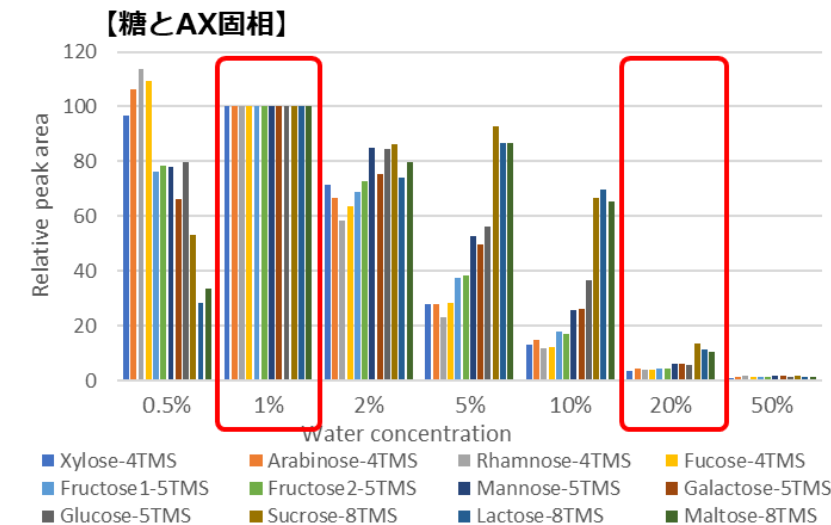


固相誘導体化法：糖類



特許登録：(株)アイスティサイエンス

■ 試料負荷時の水濃度と固相への保持について



■ メトキシアミンによる誘導体化反応時間

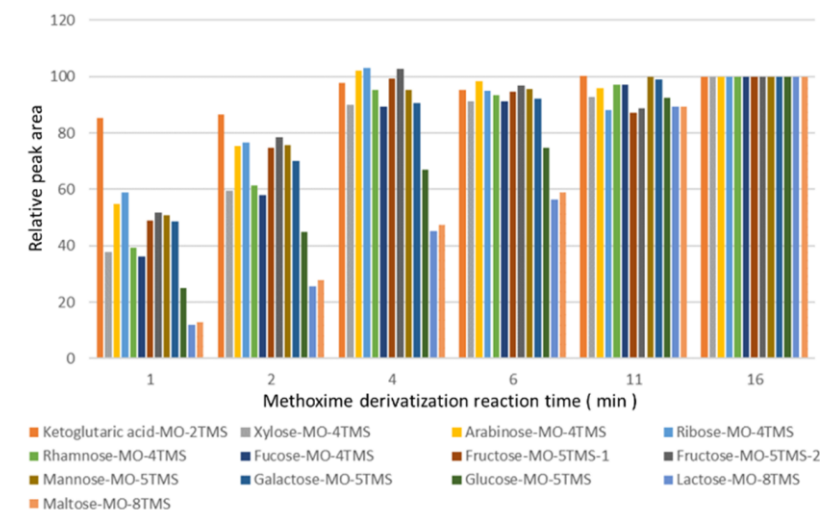


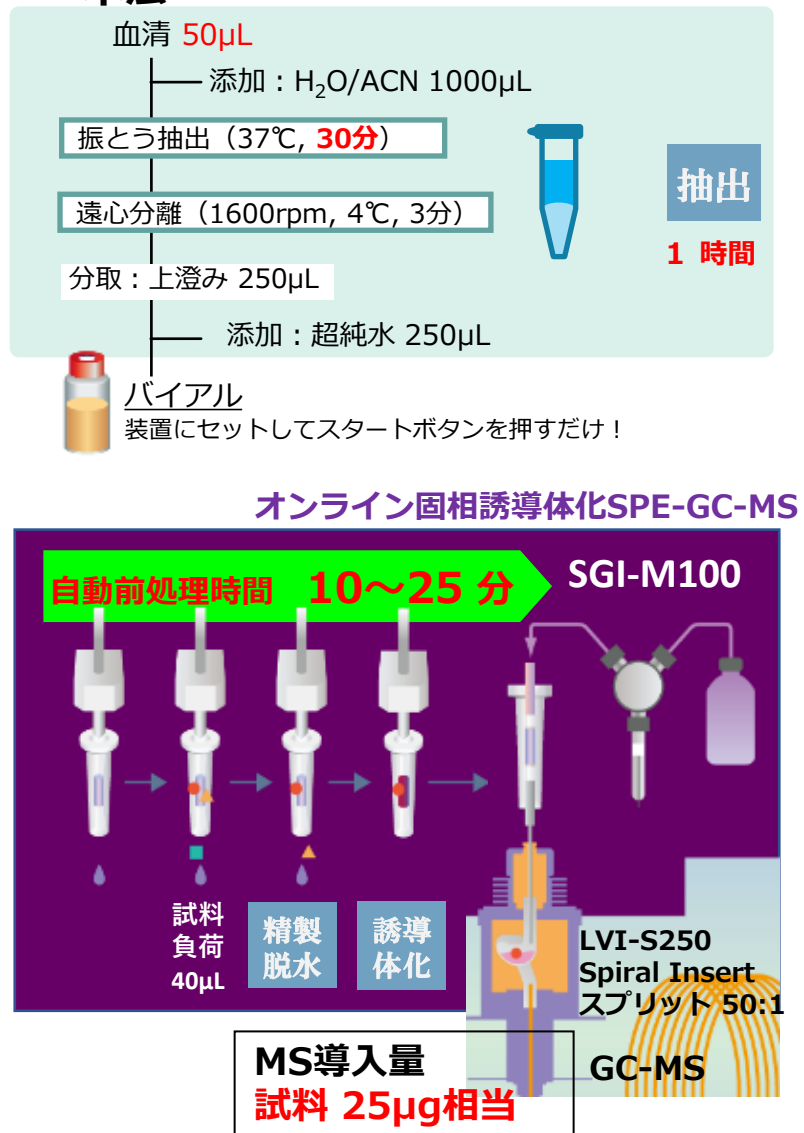
Fig. 3. Relations of methoxyamine derivatization reaction time in sorbent and the relative peak area

従来法と本法の前処理比較

■ 従来法

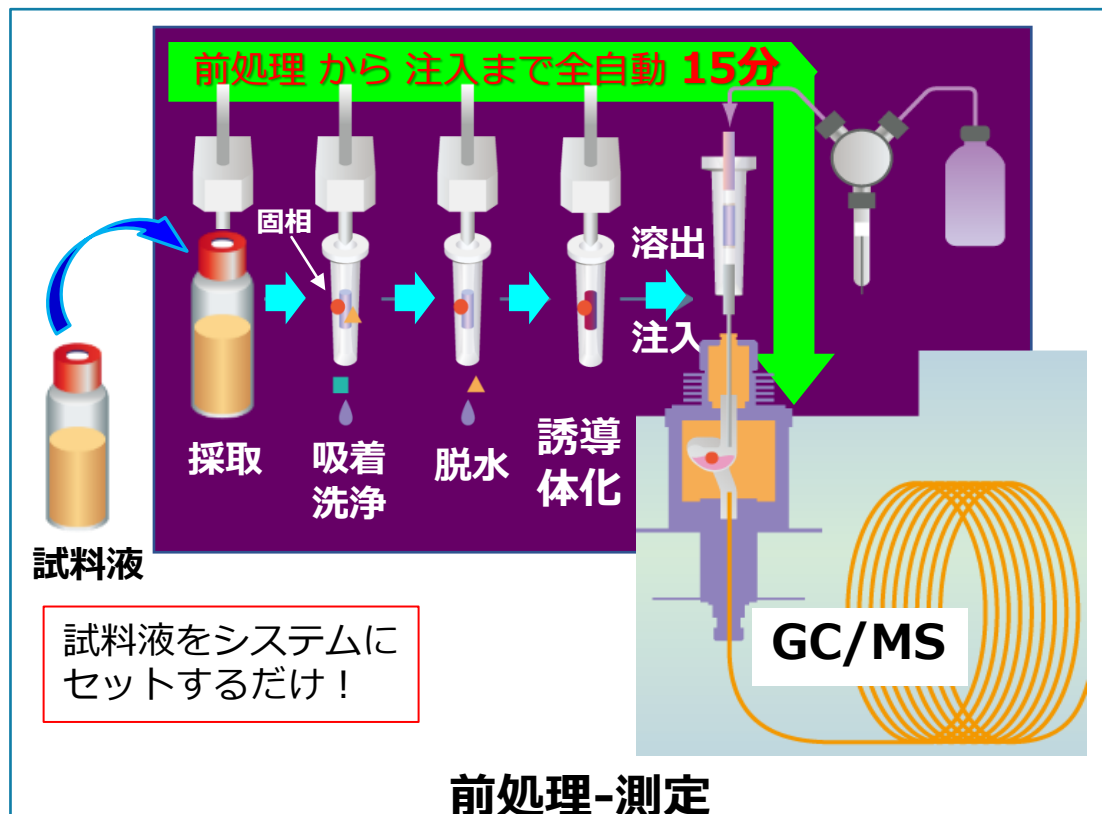


■ 本法



革新性2 固相からの溶出液を直接GCへ全量注入する「オンラインSPE-GC」の発明（特許）

■ 本システムによるメタボローム分析



オンライン化：前処理と測定機器を接続して一体化する技術

測定している間に次の検体を前処理する（併行稼働）ことで多検体を迅速に分析できる。

■ 本システムによる社会的効果

- 分析の時間短縮により研究**スピード**が上がる。
- 分析の精度向上により**正確な評価**ができる。
- 分析のハイスループットにより**多くの情報**を得られる。



社会の研究/開発、
産業発展に大きく貢献

ポイント①

前処理から測定まで**完全自動化**

ポイント②

自動化による**分析精度の向上**

ポイント③

溶出液の全量注入による**高感度化**

ポイント④

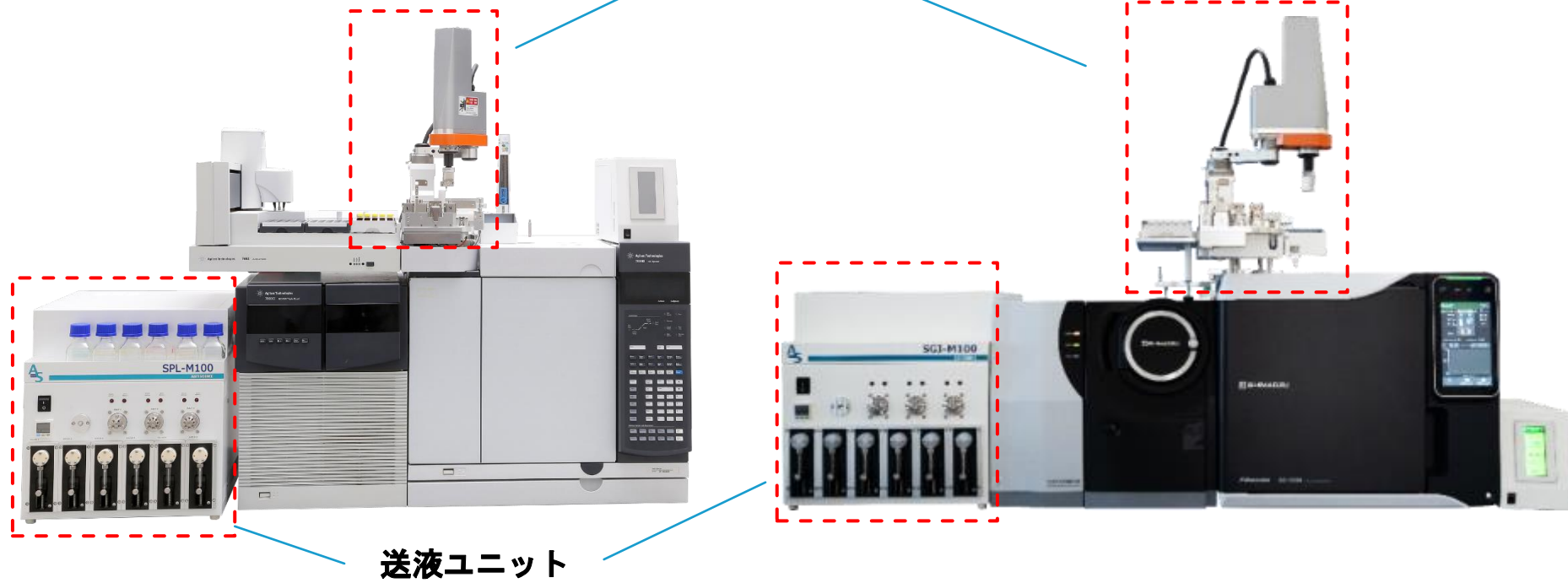
誘導体化からGC注入までの**時間が一定**

ポイント⑤

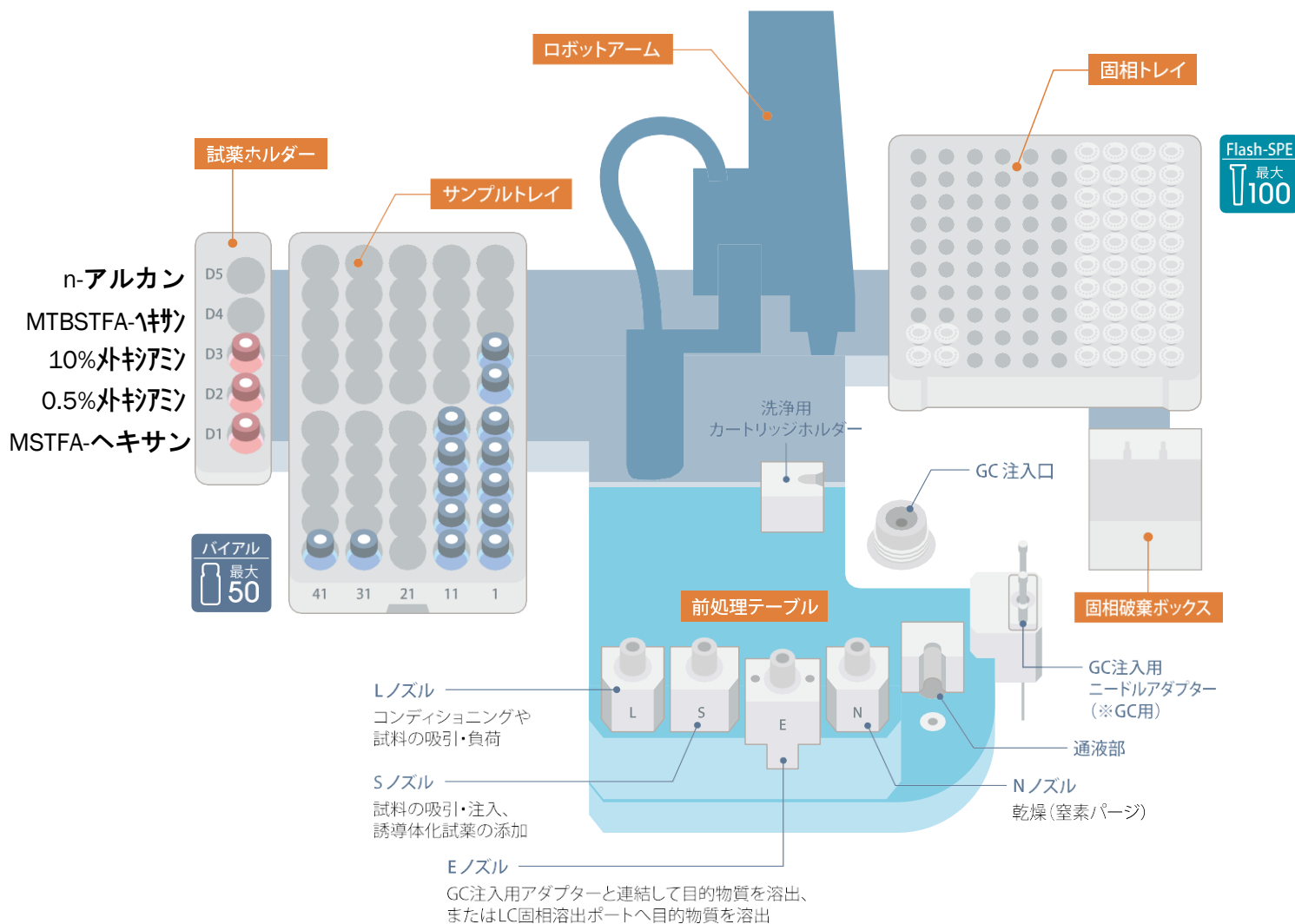
多検体の**ハイスループット**

オンラインSPE-GC-MSシステム

前処理ユニット



前処理ユニット



Flash-SPE：特許取得 オンライン専用カートリッジ



- 試料や溶液がスムーズに流れる直線的構造
- 通期乾燥が速い
- 自動化に最適化されたシンプルな構造
- 2 ～ 5 mg 少量の固相充填量
- 上下両端から配管やニードルの連結が可能

溶出溶媒を通液

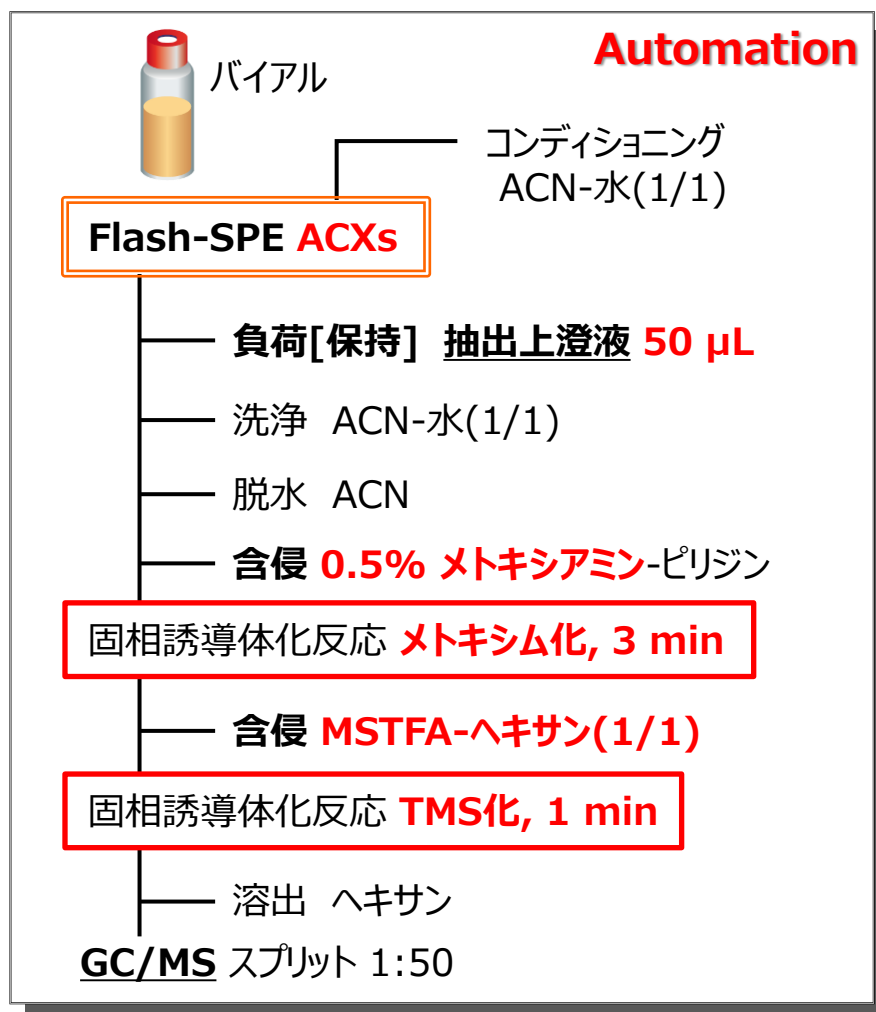


固相カートリッジ

ニードル

前処理フロー

■ アミノ酸/有機酸



アミノ酸/有機酸、糖類

SPE-GC Interface SPL-M100 (AiSTI Science)

SPE Cartridge	Flash-ACX
Sampling Volume	50 µL

PTV Injector

Insert Type	Spiral Insert
Injector Temp.	220°C (0.5min)-50°C/min-290°C(16min)

LVI-S250 (AiSTI Science)

Insert Type	Spiral Insert
Injector Temp.	220°C (0.5min)-50°C/min-290°C(16min)

GC

Inlet Mode	Split 1:50
Flow Mode	Constant Flow, 1 ml/min
Pre-Column	0.25mm i.d. x 1m
Column	Vf-5ms, 0.25mm i.d. x 30m, df;0.25µm
Oven Temp.	100°C(2min) -10°C/min-220°C-30°C/min-310°C(4.7min)

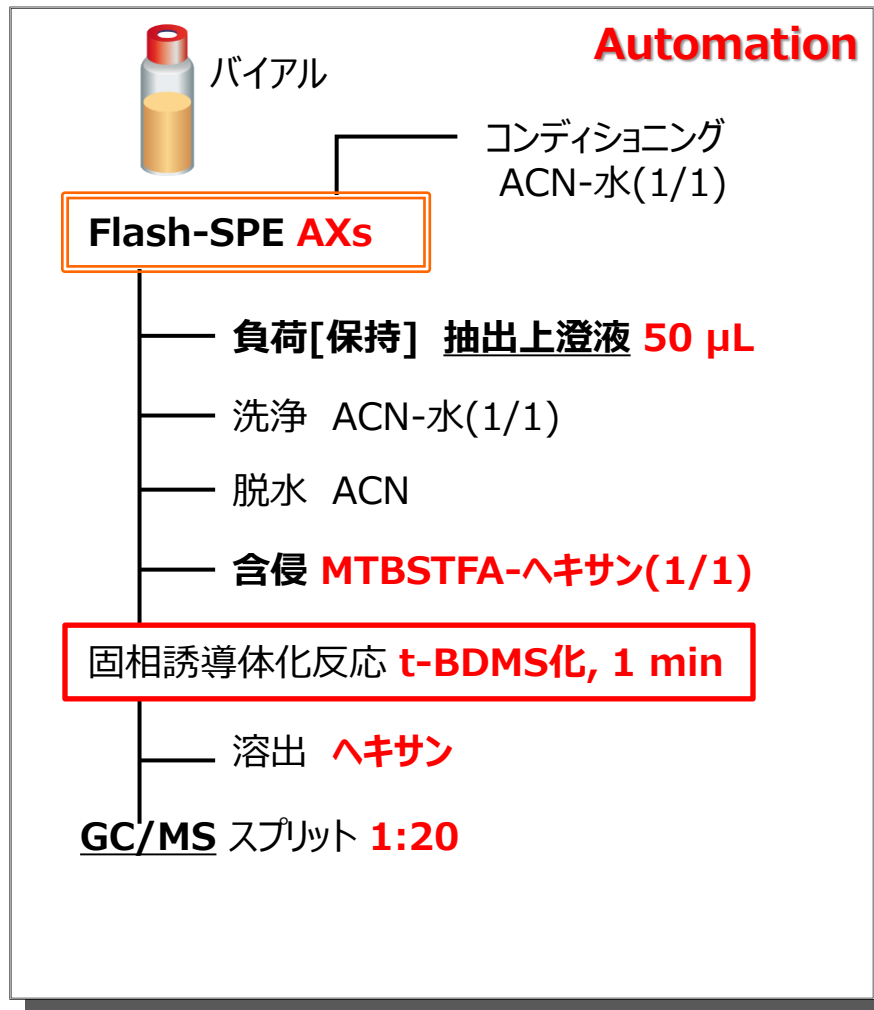
Trans. Line Temp. 290°C

MS

MS Method	SCAN, m/z;70-470
-----------	------------------

短鎖脂肪酸の

■ 短鎖脂肪酸



SPE-GC/MS

SPE-GC Interface SPL-M100 (AiSTI Science)

SPE Cartridge	Flash-ACX
Sampling Volume	50 µL

PTV Injector

Insert Type	Spiral Insert
Injector Temp.	220°C (0.5min)-25°C/min-290°C(16min)

LVI-S250 (AiSTI Science)

GC

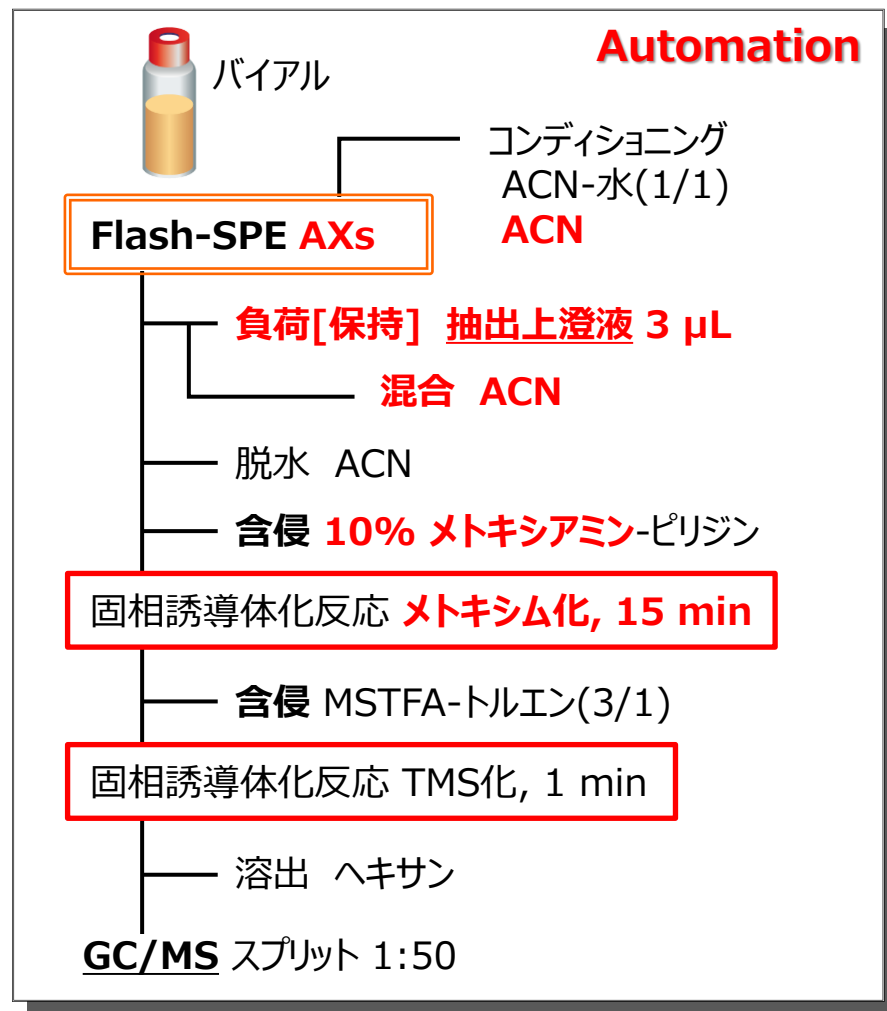
Inlet Mode	Split 1:20
Flow Mode	Constant Flow, 1 ml/min
Pre-Column	0.25mm i.d. x 1m
Column	Vf-5ms, 0.25mm i.d. x 30m, df;0.25µm
Oven Temp.	60°C(3min) -10°C/min-100°C-20°C/min-310°C(4min)
Trans. Line Temp.	290°C

MS

MS Method	SCAN, m/z;70-470
-----------	------------------

前処理フロー

■ 糖類



アミノ酸/有機酸、糖類

SPE-GC Interface SPL-M100 (AiSTI Science)

SPE Cartridge

Flash-ACX

Sampling Volume

50 µL

PTV Injector

Insert Type

Spiral Insert

Injector Temp.

220°C(0.5min)-50°C/min-290°C(16min)

GC

Inlet Mode

Split 1:50

Flow Mode

Constant Flow, 1 ml/min

Pre-Column

0.25mm i.d. x 1m

Column

Vf-5ms, 0.25mm i.d. x 30m, df;0.25µm

Oven Temp.

100°C(2min)-10°C/min-220°C-30°C/min-

310°C(4.7min)

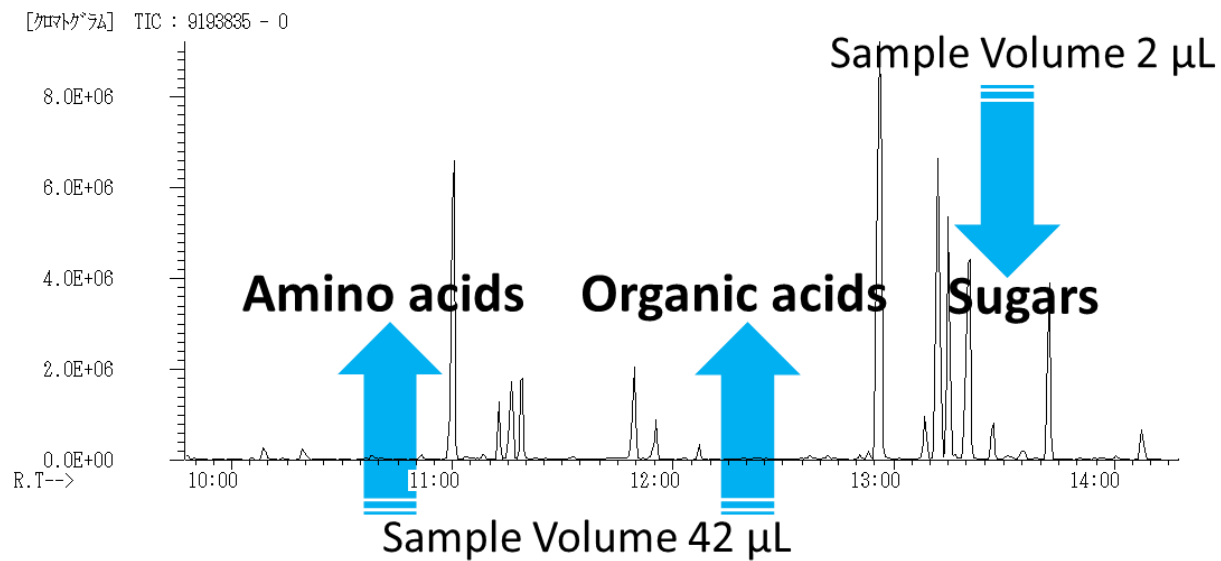
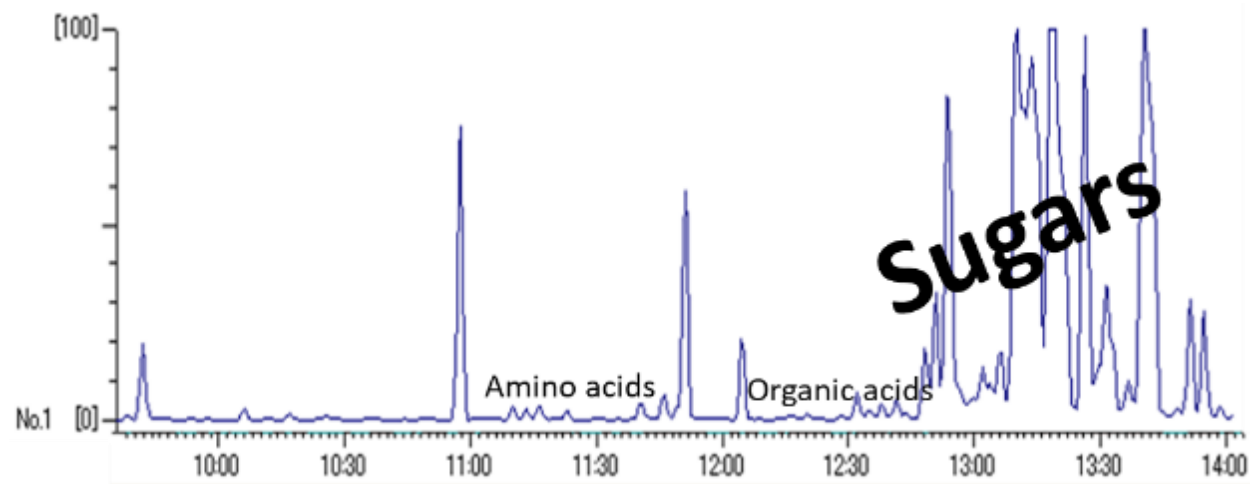
Trans. Line Temp. 290°C

MS

MS Method

SCAN, m/z;70-470

糖類を多く含む試料の分析の課題と対策



2 段階試料負荷による野菜ジュースの分析

試料採取 野菜ジュース 50 μL

— 添加 水 150 μL

手振とう

— 添加 ACN 800 μL

振とう (37 $^{\circ}\text{C}$, 1 min)

遠心分離 14000 rpm, 3 min

— 添加 0.1N NaOH

抽出上澄液



1 回目負荷

2 回目負荷

■ アミノ酸/有機酸/糖類 Automation

Flash-SPE ACXs

コンディショニング
ACN-水(1/1)

負荷[保持] **抽出上澄液 50 μL**

— 洗浄 ACN-水(1/1)

— 脱水 ACN

負荷[保持] **抽出上澄液 3 μL**

— 混合 ACN

— 脱水 ACN

— 含侵 **10% メトキシアミン**-ピリジン

固相誘導体化反応 メトキシ化, 15 min

— 含侵 MSTFA-ヘキサン(4/1)

固相誘導体化反応 TMS化, 1 min

— 溶出 ヘキサン or トルエン

GC/MS スプリット 1:50

野菜ジュースのSCAN-TIC

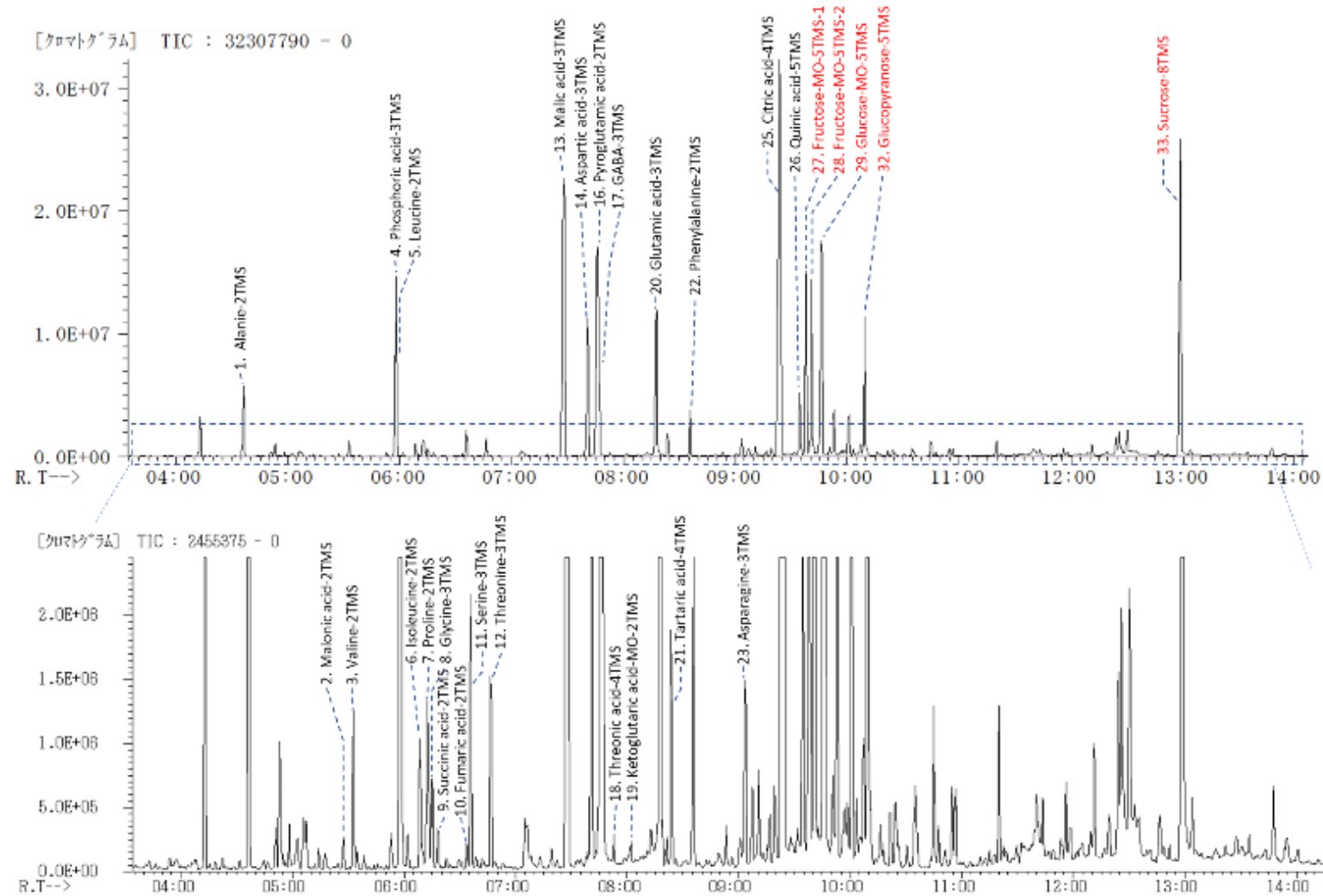
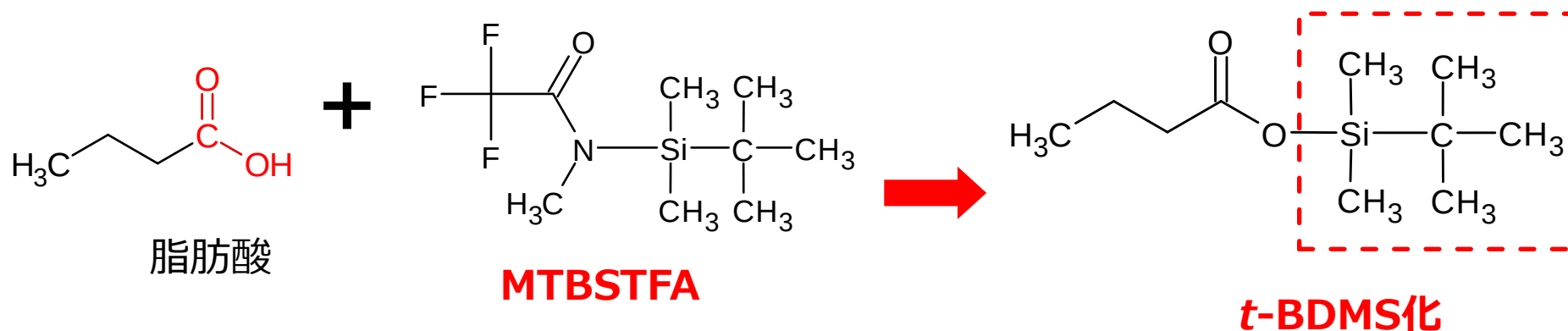


Fig. 4. The SCAN total ion chromatogram of the Vegetable juice using SPE-GC-MS system with automated solid-phase derivatization method

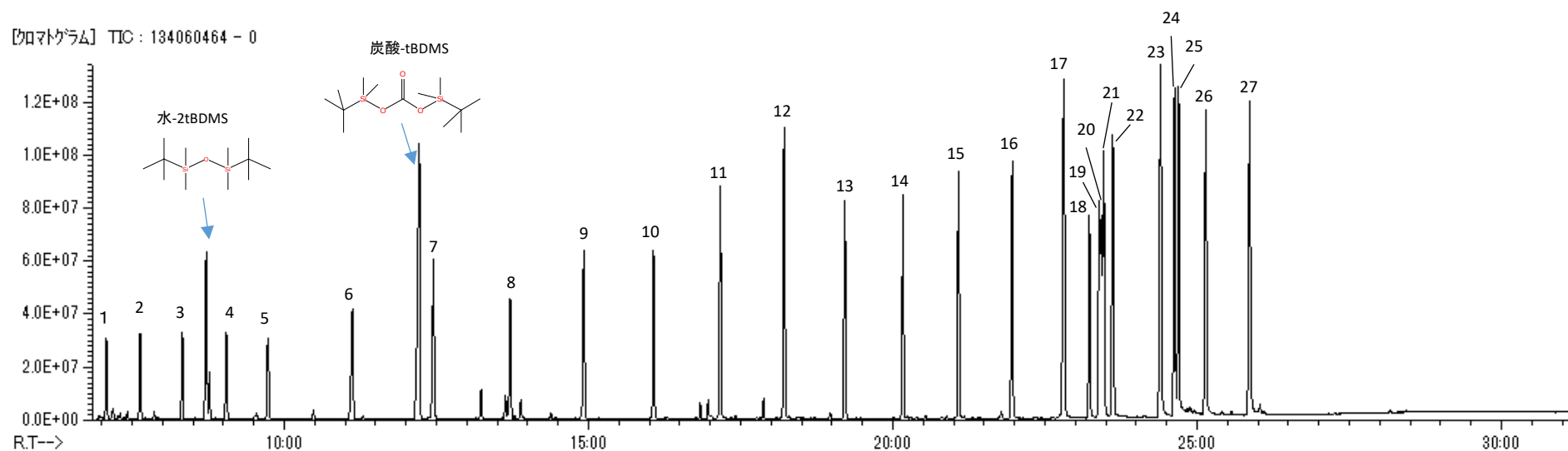
短鎖脂肪酸の T-BDMS誘導体化

t-BDMS(**t**-Butyl **DiM**ethyl **S**ilyl)化



- t-BDMS化はTMS化より質量数が大きくなり、分析しやすくなる。
- TMS 誘導体は加水分解されやすいのに対し, t-BDMS 誘導体は加水分解に対し安定している。
- 分子量に近いところでのフラグメントイオンを得られるため解析しやすい。

短鎖・中鎖・長鎖脂肪酸：TBDMS化



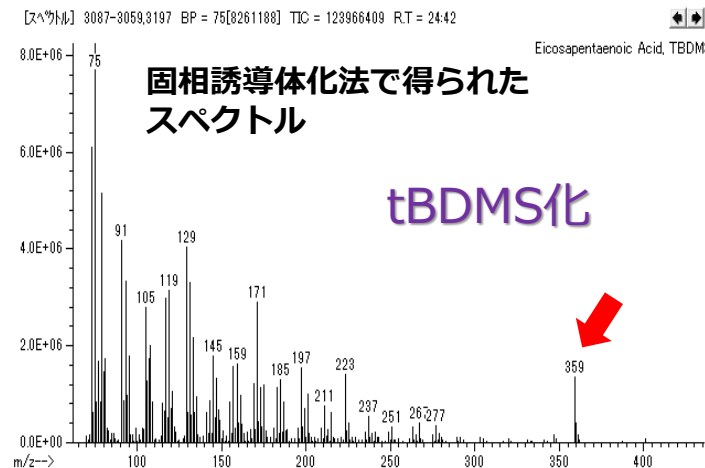
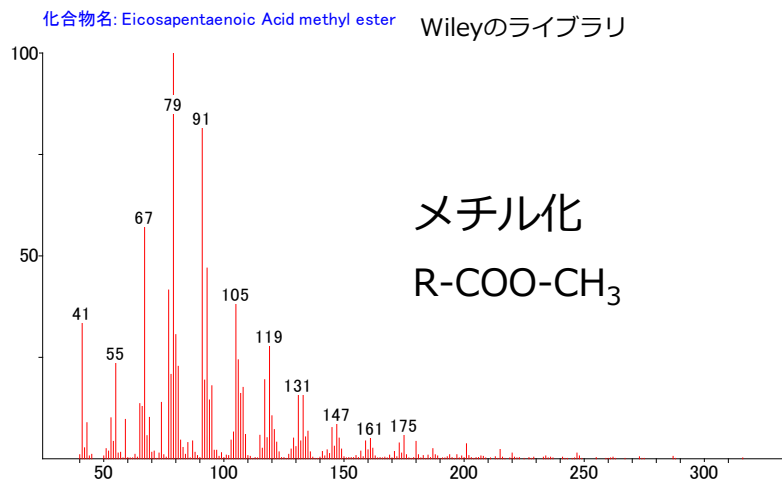
No.	R.T. min	慣用名	IUPAC	略称	和名
1	7.07	Propionic acid	Propanoic acid	3:0	プロピオン酸
2	7.62	Isobutyric acid	2-methylpropanoic acid		イソ酪酸
3	8.32	Butyric acid	Butanoic acid	4:0	酪酸
4	9.05	Isovaleric acid	3-methylbutanoic acid		イソ吉草酸
5	9.72	Valeric acid	Pentanoic acid	5:0	吉草酸
6	11.12	Caproic acid	Hexanoic acid	6:0	カプロン酸
7	12.43	Enanthic acid	Heptanoic acid	7:0	エナント酸
8	13.70	Caprylic acid	Octanoic acid	8:0	カプリル酸
9	14.90	Pelargonic acid	Nonanoic acid	9:0	ベラルゴン酸
10	16.05	Capric acid	Decanoic acid	10:0	カプリン酸
11	17.15	Undecylic acid	Undecanoic acid	11:0	ウンデシル酸
12	18.20	Lauric acid	Dodecanoic acid	12:0	ラウリン酸
13	19.20	Tridecylic acid	Tridecanoic acid	13:0	トリデシル酸
14	20.15	Myristic acid	Tetradecanoic acid	14:0	ミリスチン酸
15	21.07	Pentadecanoic acid	Pentadecylic acid	15:0	ペンタデカン酸

No.	R.T. min	慣用名	IUPAC	略称	和名
16	21.95	Palmitic acid	Hexadecanoic acid	16:0	パルミチン酸
17	22.78	Margaric acid	Heptadecanoic acid	17:0	マルガリン酸
18	23.22	γ -Linolenic acid		18:3(n-6)	γ -リノレン酸
19	23.38	Linoleic acid		18:2(n-6)	リノール酸
20	23.43	Oleic acid		18:1(n-9)	オレイン酸
21	23.47	α -Linolenic acid		18:3(n-3)	α -リノレン酸
22	23.58	Stearic acid	Octadecanoic acid	18:0	ステアリン酸
23	24.37	Nonadecylic acid	Nonadecanoic acid	19:0	ノナデシル酸
24	24.62	Arachidonic acid		20:4(n-6)	アラキドン酸
25	24.68	Eicosapentaenoic acid	Icosapentaenoic acid	20:5(n-3)	エイコサペンタエン酸
26	25.12	Arachidic acid	Eicosanoic acid	20:0	アラキジン酸
27	25.83	Heneicosanoic acid	Heneicosanoic acid	21:0	ヘンイコシル酸

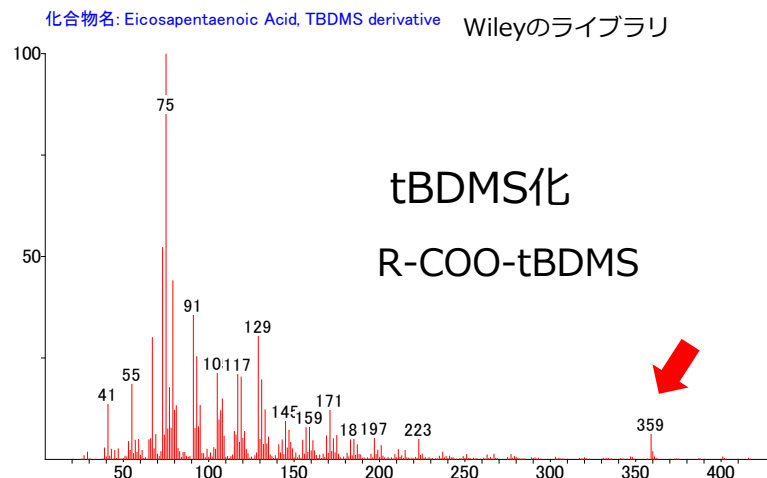
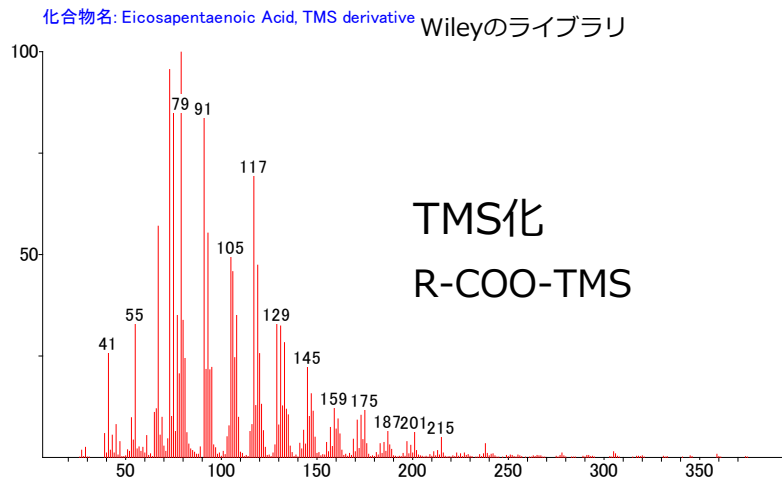
全て -tBDMS

高度不飽和脂肪酸の誘導体化の比較

EPA（エイコサペンタエン酸）をメチル化、TMS化、tBDMS化した時のスペクトル比較



tBDMS化はメチル化やTMS化と比較して、高い質量域でフラグメントイオンを持つため、定性が上がり、分析精度が上がる。



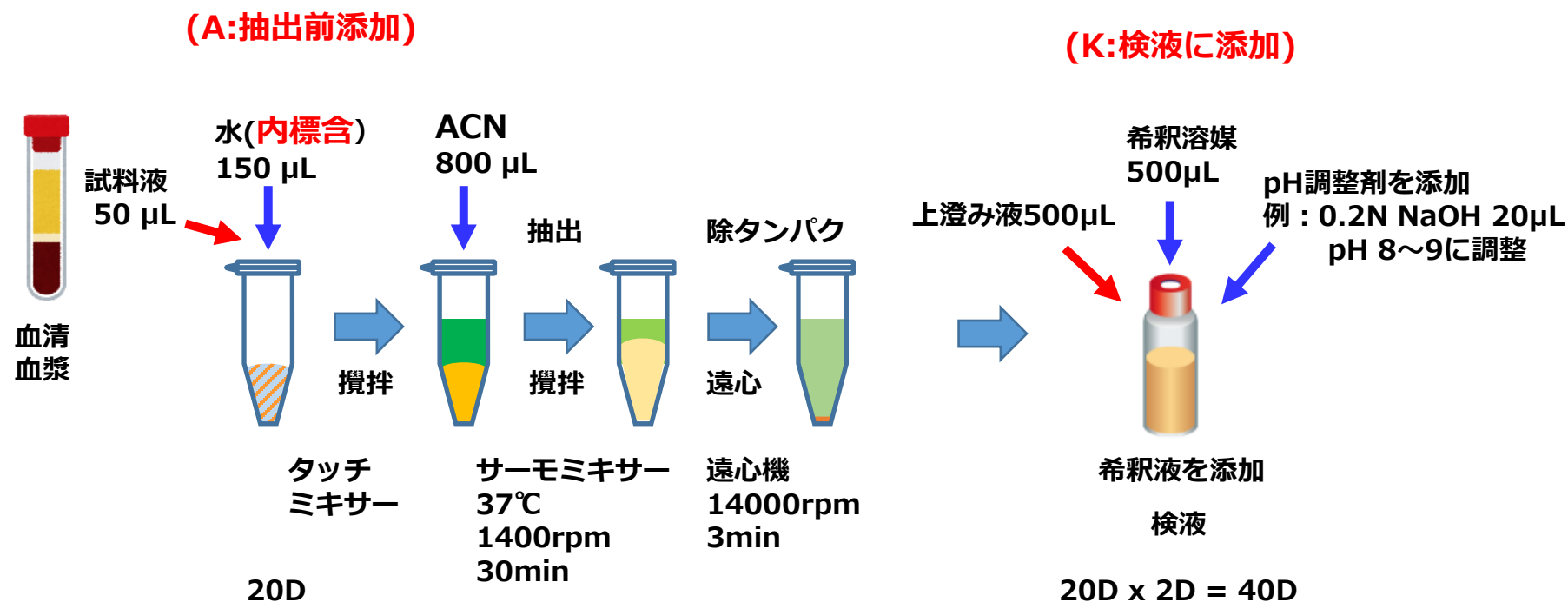
【テーマ】

【2-1】サンプリング／抽出方法の確立

【3-1】内部標準物質の選定

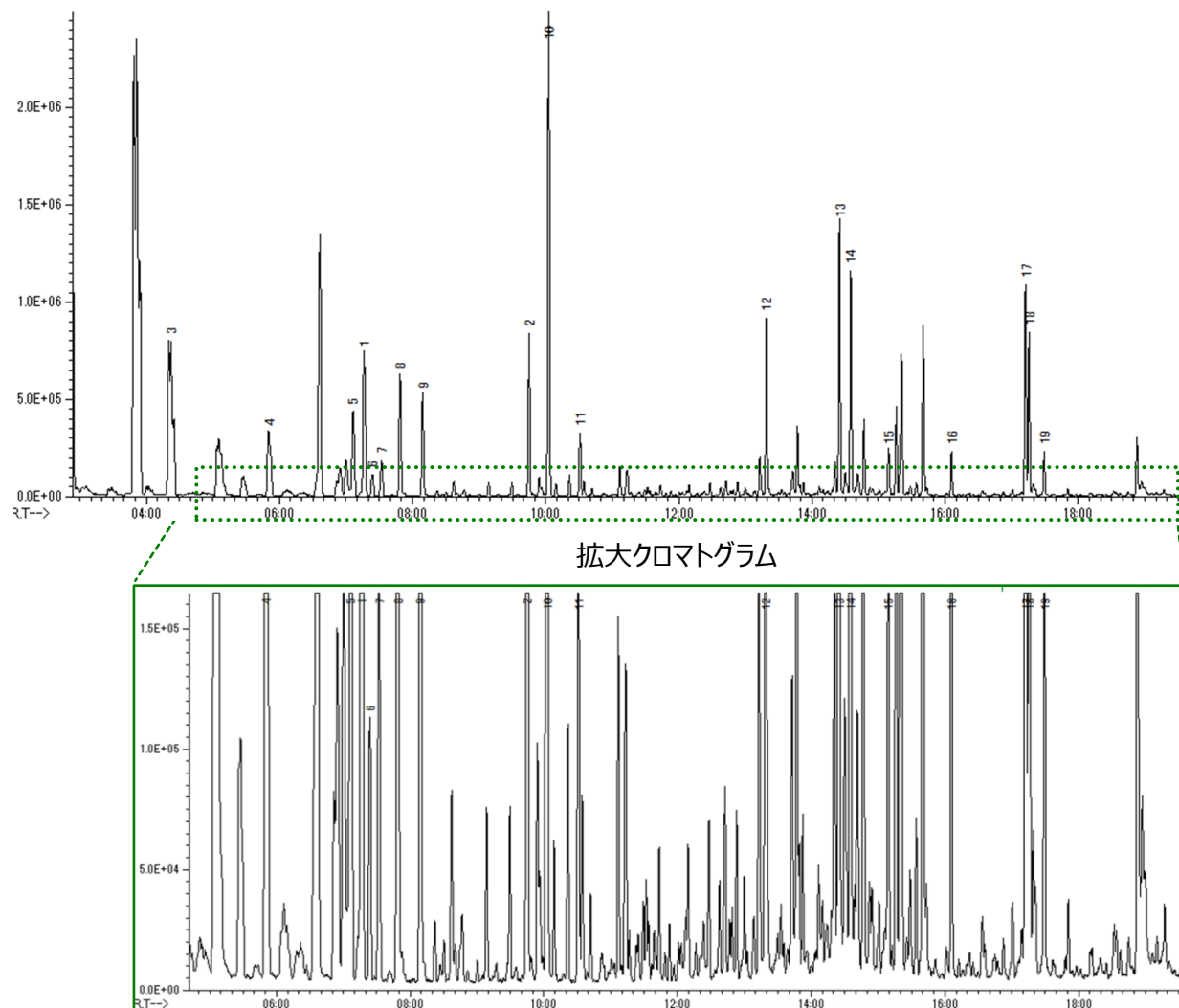
【3-2】各生体試料における妥当性評価試験（添加回収試験、再現性）による評価

血清/血漿 の抽出方法と内標添加（添加回収試験）

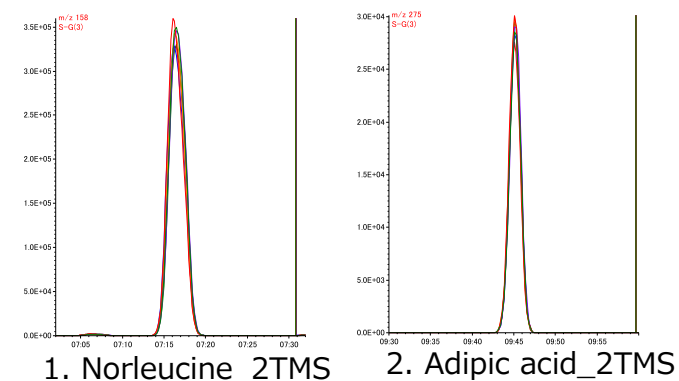


血清_M01

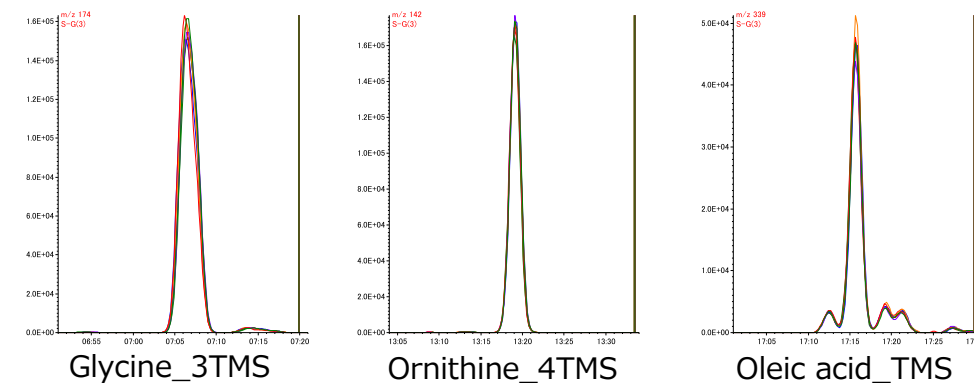
■ 本法による血清のSCANトータルイオンクロマトグラム



■ 血清に添加した内標の定量イオンクロマトグラムの重ね描き(n=7)



■ 血清から検出された成分の定量イオンクロマトグラムの重ね描き(n=7)



血清_M01

■ 内標による添加回収試験の結果

サンプル	No.	Norleucine_2TMS	Adipic acid_2TMS
内標	S1	1,309,000	76,220
バイアル中20μM	S2	1,315,000	76,540
	S3	1,331,000	75,590
	S4	1,264,000	75,570
	S5	1,305,000	73,340
	<i>Ave.</i>	<i>1,304,800</i>	<i>75,452</i>
	RSD, %	1.9	1.7
血清50μL	血清-K1	1,158,000	86,250
20D x 2D =40 D	血清-K2	1,220,000	85,480
	血清-K3	1,229,000	84,950
内標	血清-K4	1,204,000	89,980
除タンパク後添加	血清-K5	1,186,000	91,570
バイアル中20μM	<i>Ave.</i>	<i>1,199,400</i>	<i>87,646</i>
	RSD, %	2.4	3.4
(K/Sx100)	REC, %	92	116
血清50μL	血清_A1	1,064,000	66,510
20D x 2D =40 D	血清_A2	1,010,000	66,890
内標	血清_A3	1,023,000	63,600
血清に添加	血清_A4	974,600	64,240
試料中800μM	血清_A5	1,028,000	62,160
(バイアル中20μM)	<i>Ave.</i>	<i>1,019,920</i>	<i>64,680</i>
	RSD, %	3.2	3.1
(A/Sx100)	回収率, %	78	86
(A/Kx100)	回収率, %	85	74

■ 血清から検出された成分のピーク面積値とその再現性 (n=5 ; RSD,%)

No.	化合物名	血清-1	血清-2	血清-3	血清-4	血清-5	<i>Ave.</i>	RSD, %
1	Alanine_2TMS	334,600	350,200	355,900	354,900	346,900	<i>348,500</i>	2.5
2	Valine_2TMS	243,400	249,100	252,400	250,000	240,600	<i>247,100</i>	2.0
3	Glycine_3TMS	41,200	45,320	44,200	41,390	41,800	<i>42,782</i>	4.4
4	Serine_3TMS	43,120	45,950	45,350	42,740	44,340	<i>44,300</i>	3.1
5	Aspartic acid_3TMS	20,790	20,680	18,860	21,390	25,040	<i>21,352</i>	10.6
6	Threonic acid_4TMS	16,010	17,030	16,220	19,310	20,380	<i>17,790</i>	11.0
7	Glutamic acid_3TMS	56,340	51,980	52,690	51,270	54,720	<i>53,400</i>	3.9
8	L-Glutamine_3TMS	61,450	60,640	62,000	65,270	66,760	<i>63,224</i>	4.2
9	Myristic acid_TMS	25,350	25,520	25,690	25,130	25,660	<i>25,470</i>	0.9
10	L-Lysine_4TMS	19,610	22,540	21,750	21,620	22,150	<i>21,534</i>	5.3
11	Tyrosine_3TMS	73,360	72,320	75,530	71,580	78,300	<i>74,218</i>	3.7
12	Palmitate_TMS	653,500	659,600	653,400	639,400	647,500	<i>650,680</i>	1.2
13	Linoleic acid_TMS	103,700	107,100	107,000	108,100	101,300	<i>105,440</i>	2.7
14	Oleic acid_TMS	109,200	117,900	116,900	114,200	111,500	<i>113,940</i>	3.2
15	Stearic acid_TMS	308,600	310,500	307,700	305,100	312,100	<i>308,800</i>	0.9
16	Arachidonic acid_TMS	18,280	17,290	17,470	17,450	17,750	<i>17,648</i>	2.2

アミノ酸、有機酸メソッドでの再現性、耐久性試験

	RT	マウス血清 Lot.1 100回		マウス血清 Lot.2 100回	
		average	%RSD	average	%RSD
Lactic acid 2TMS	2.74	1688847	5.0	1853041	6.2
Alanine 2TMS	3.06	587522	2.7	740790	2.2
Malonic acid 2TMS	3.79	31366	3.8	40091	3.8
Valine 2TMS	3.87	237318	2.5	298638	2.2
Benzoic Acid, TMS	4.13	7221	8.7	7318	8.5
Leucine 2TMS	4.27	469204	2.6	590823	2.0
Isoleucine 2TMS	4.42	102421	2.4	130129	2.2
Proline 2TMS	4.46	309139	3.9	407225	2.4
Maleic acid 2TMS	4.50	69701	4.1	88390	4.0
Glycine 3TMS	4.51	294420	4.2	370639	4.0
Succinic acid 2TMS	4.57	54141	2.0	66357	2.1
Serine 3TMS	4.87	185988	3.3	233449	3.8
Threonine 3TMS	5.04	86354	3.3	107792	3.9
Malic acid 2TMS	5.69	1857	7.2	2407	6.7
Methionine 2TMS	5.89	23333	11.8	32971	9.8
Aspartic acid 3TMS	5.89	101645	2.8	128257	6.2
Glutamic acid 3TMS	6.49	428765	5.8	552463	6.5
Phenylalanine 2TMS	6.53	102432	3.2	132811	2.7
Citric acid 4TMS	7.57	47365	4.0	59399	5.5
Lysine 4TMS	8.10	71583	4.4	95368	5.6
Tyrosine 3TMS	8.19	196160	3.5	248644	4.6
Palmitelaidic acid, TMS	8.60	26320	6.7	25599	6.5
Palmitic Acid, TMS	8.69	168891	4.2	169496	4.2
Cysteine 3TMS	9.62	5876	9.5	9146	8.4

マウス血清 Lot.1を100回連続測定し、その1週間後マウス血清 Lot.2を100回連続測定しました。

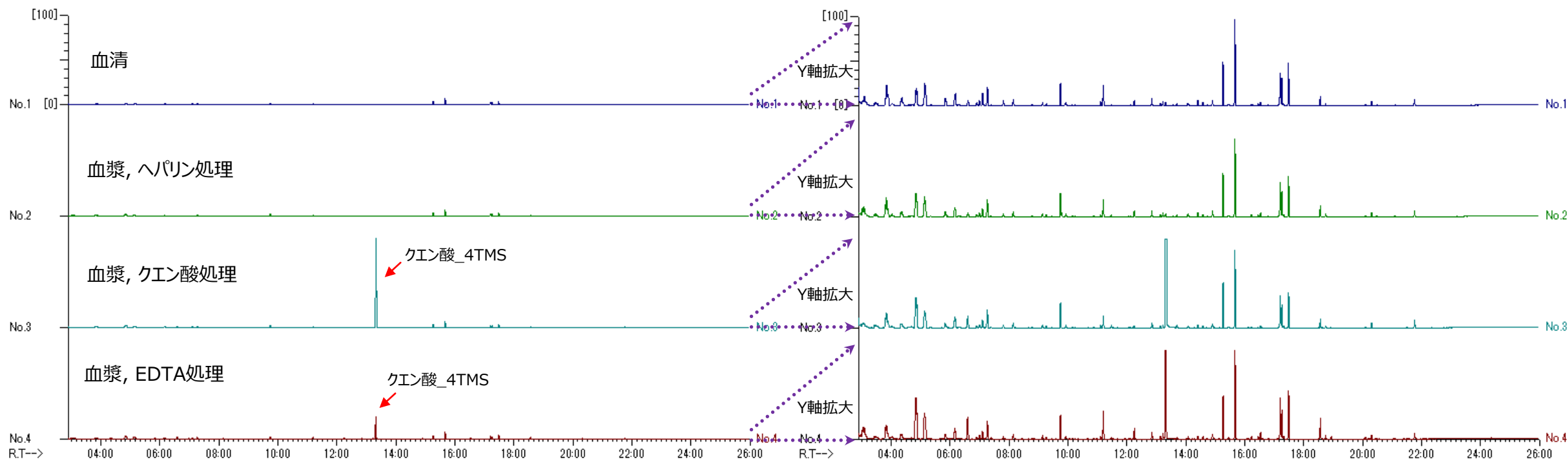
インサート、ガードチップ、カラム等の交換、イオン源の洗浄等のメンテナンスはしていません。

ピーク面積値（絶対値）の結果です。

内標による補正はしていません。

【参考資料】
第15回メタボロームシンポジウム
アジレント・テクノロジー杉立氏
発表資料（共同研究）

血清と血漿

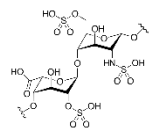


クエン酸処理およびEDTA処理からクエン酸-4TMSが大量に検出された。

血漿の抗凝固剤として、使用しているヘパリンやクエン酸、EDTAが固相のイオン吸着して、目的成分の固相の保持力を弱める可能性がある。

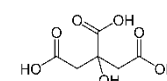
ヘパリン

血中のアンチトロンビンと結合して複合体を形成してトロンビン活性を阻害することで凝固反応の進行を阻止します。



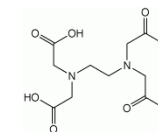
クエン酸ナトリウム

カルシウムイオンと錯体を生じることにより血中のカルシウムを除去して抗凝固作用を示します。

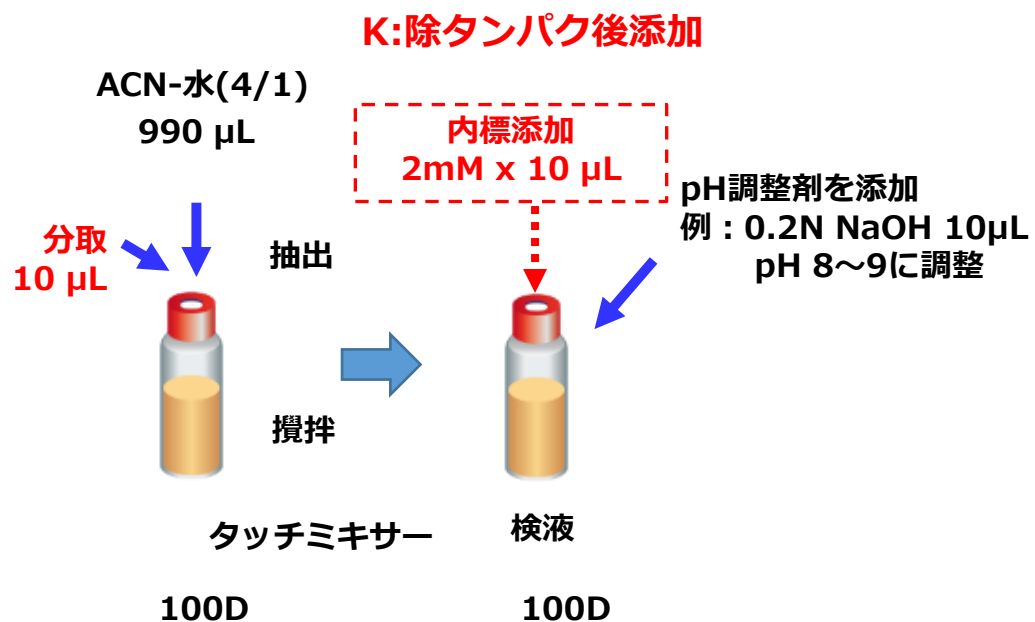
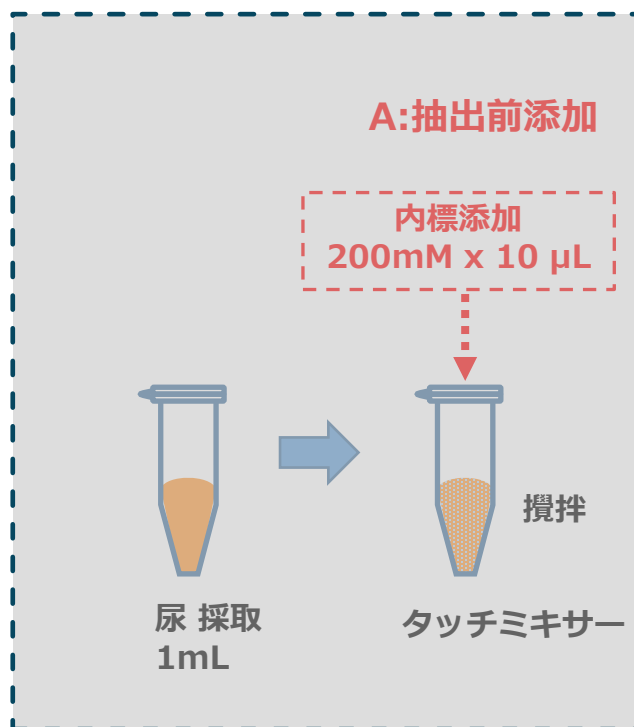


EDTA

カルシウムイオンをキレートすることにより抗凝固作用を示します。

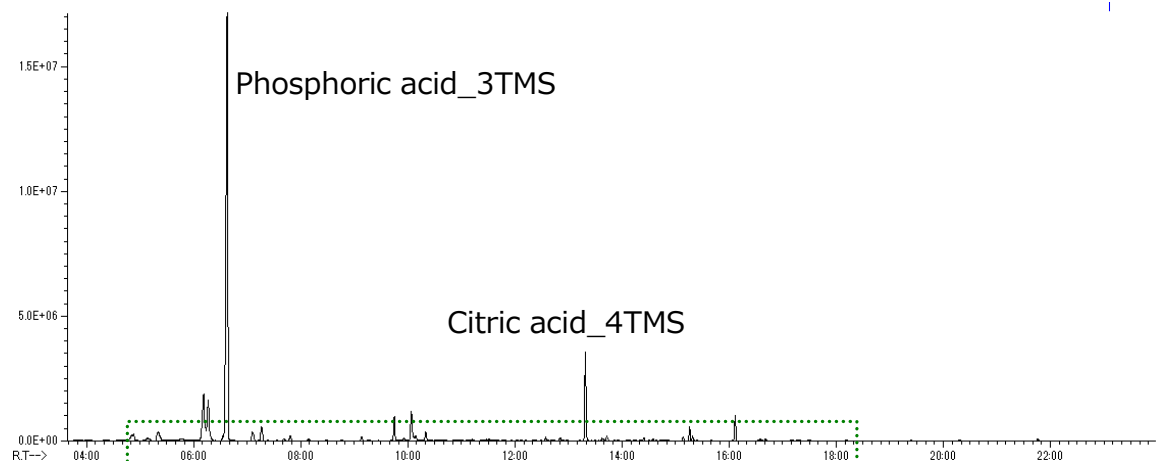


尿の抽出方法と内標添加（添加回収試験）

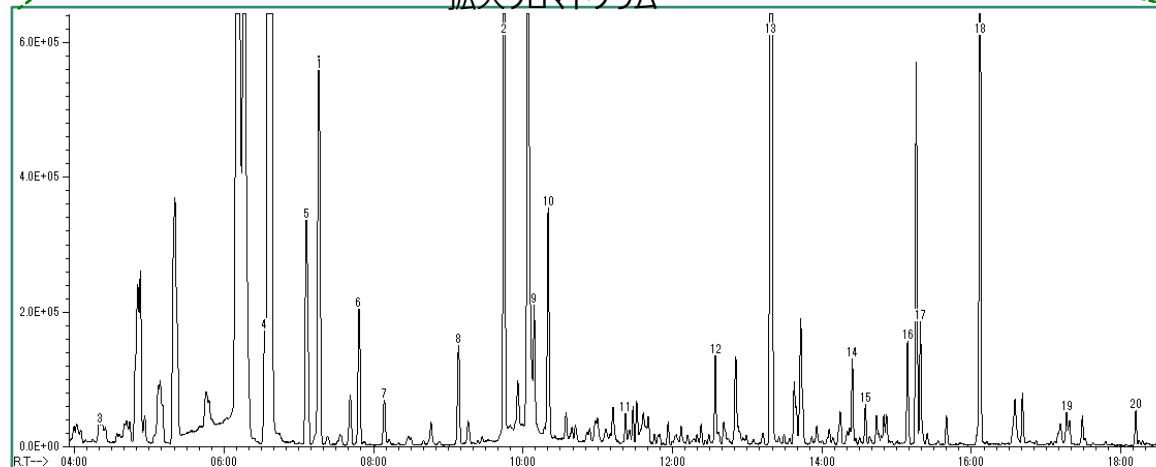


尿_M01

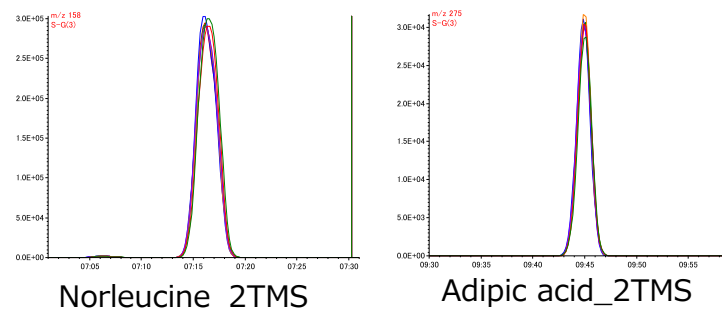
■ 本法による尿のSCANトータルイオンクロマトグラム



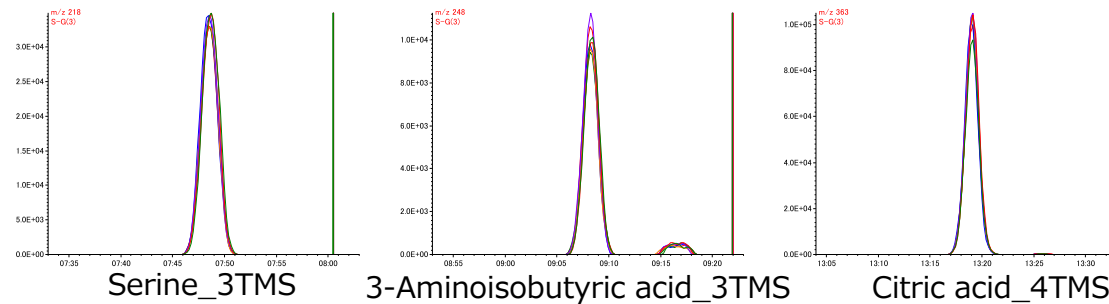
拡大クロマトグラム



■ 尿に添加した内標の定量イオンクロマトグラムの重ね描き(n=7)



■ 尿から検出された成分の定量イオンクロマトグラムの重ね描き(n=7)



尿_M01

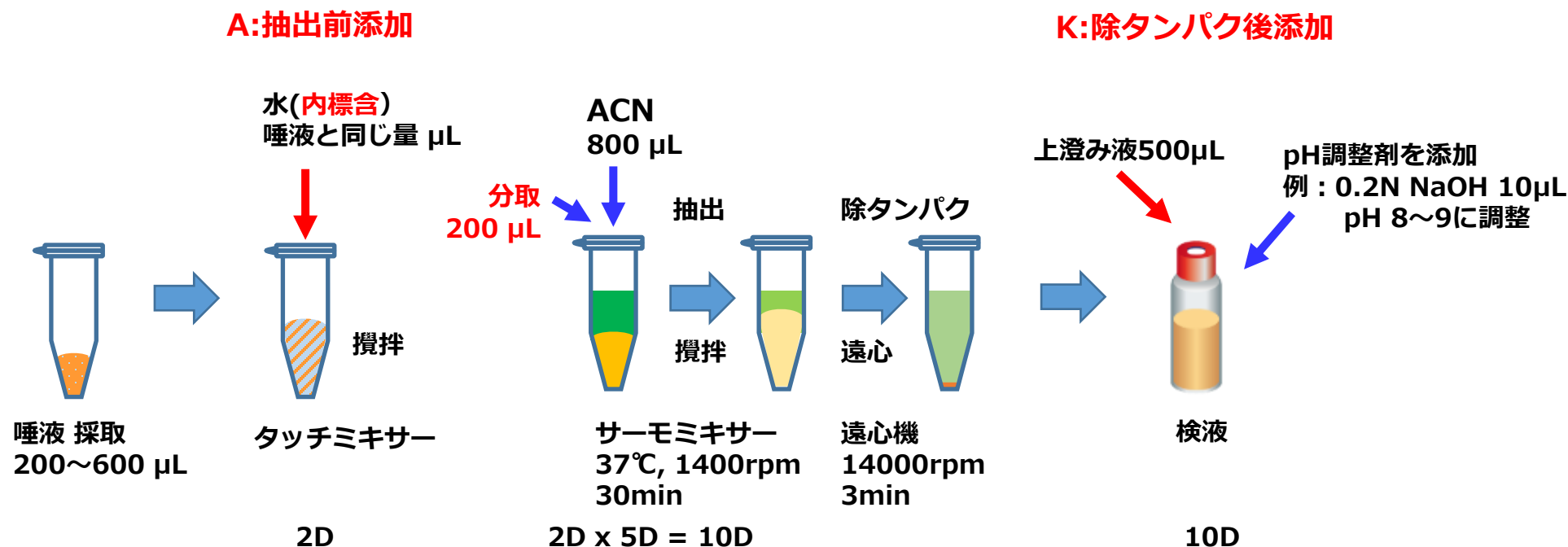
■ 内標による添加回収試験の結果

サンプル	No.	Norleucine_2TMS	Adipic acid_2TMS
内標 STD バイアル中20μM	S1	1,284,451	84,108
	S2	1,243,248	77,955
	S3	1,169,708	73,754
	S4	1,183,814	73,368
	S5	1,131,803	73,641
	Ave.	1,202,605	76,565
	RSD, %	5.1	6.0
尿10μL	尿-K1	1,400,444	99,683
100D	尿-K2	1,415,794	98,689
	尿-K3	1,395,904	99,474
内標	尿-K4	1,415,822	98,843
抽出後添加	尿-K5	1,391,498	96,746
バイアル中20μM	Ave.	1,403,892	98,687
	RSD, %	0.8	1.2
(K/Sx100)	REC, %	117	129
尿10μL	尿_A1	1,451,203	106,679
100D	尿_A2	1,521,654	103,472
内標	尿_A3	1,477,161	99,614
尿に添加	尿_A4	1,434,121	100,407
試料中2mM	尿_A5	1,533,918	98,048
(バイアル中20μM)	Ave.	1,483,611	101,644
	RSD, %	2.9	3.4
(A/Sx100)	回収率, %	123	133
(A/Kx100)	回収率, %	106	103

■ 尿から検出された主成分のピーク面積値とその再現性 (n=5 ; RSD,%)

No.	化合物名	尿-1	尿-2	尿-3	尿-4	尿-5	Ave.	RSD, %
1	Alanine_2TMS	180,899	188,241	182,938	187,713	183,349	184,628	1.7
2	Ethanolamine_3TMS	486,231	499,319	511,776	491,099	499,867	497,658	2.0
3	Glycine_3TMS	113,691	111,586	113,681	113,461	115,306	113,545	1.2
4	Serine_3TMS	137,104	142,004	135,803	142,205	140,908	139,605	2.1
5	Threonine_3TMS	12,057	13,193	12,294	12,865	12,957	12,673	3.8
6	3-Aminoisobutyric acid_3	35,108	34,875	34,061	39,025	35,149	35,644	5.4
7	Threonic acid_4TMS	46,558	43,938	43,553	46,164	45,096	45,062	2.9
8	Creatine_3TMS	71,004	68,064	69,480	69,156	73,464	70,234	3.0
9	p-Hydroxyphenylactic aci	7,510	7,593	7,418	7,995	8,074	7,718	3.8
10	Aconitic acid_3TMS	18,060	17,740	18,623	18,335	17,708	18,093	2.2
11	Citric acid_4TMS	319,248	313,843	321,899	328,974	324,604	321,714	1.8
12	L-Lysine_4TMS	26,531	26,314	27,691	25,908	27,728	26,834	3.1
13	Tyrosine_3TMS	67,041	67,289	65,806	67,529	66,123	66,758	1.1
14	Gluconic acid_6TMS	23,901	21,094	22,881	23,351	20,520	22,349	6.6
15	Glucopyranuronic acid_5 ⁻	90,468	97,764	91,691	99,144	93,550	94,523	4.0
16	Uric acid-4TMS	358,265	365,984	362,302	356,388	382,576	365,103	2.9

唾液の抽出方法と内標添加（添加回収試験）



■ 唾液の組成・化学

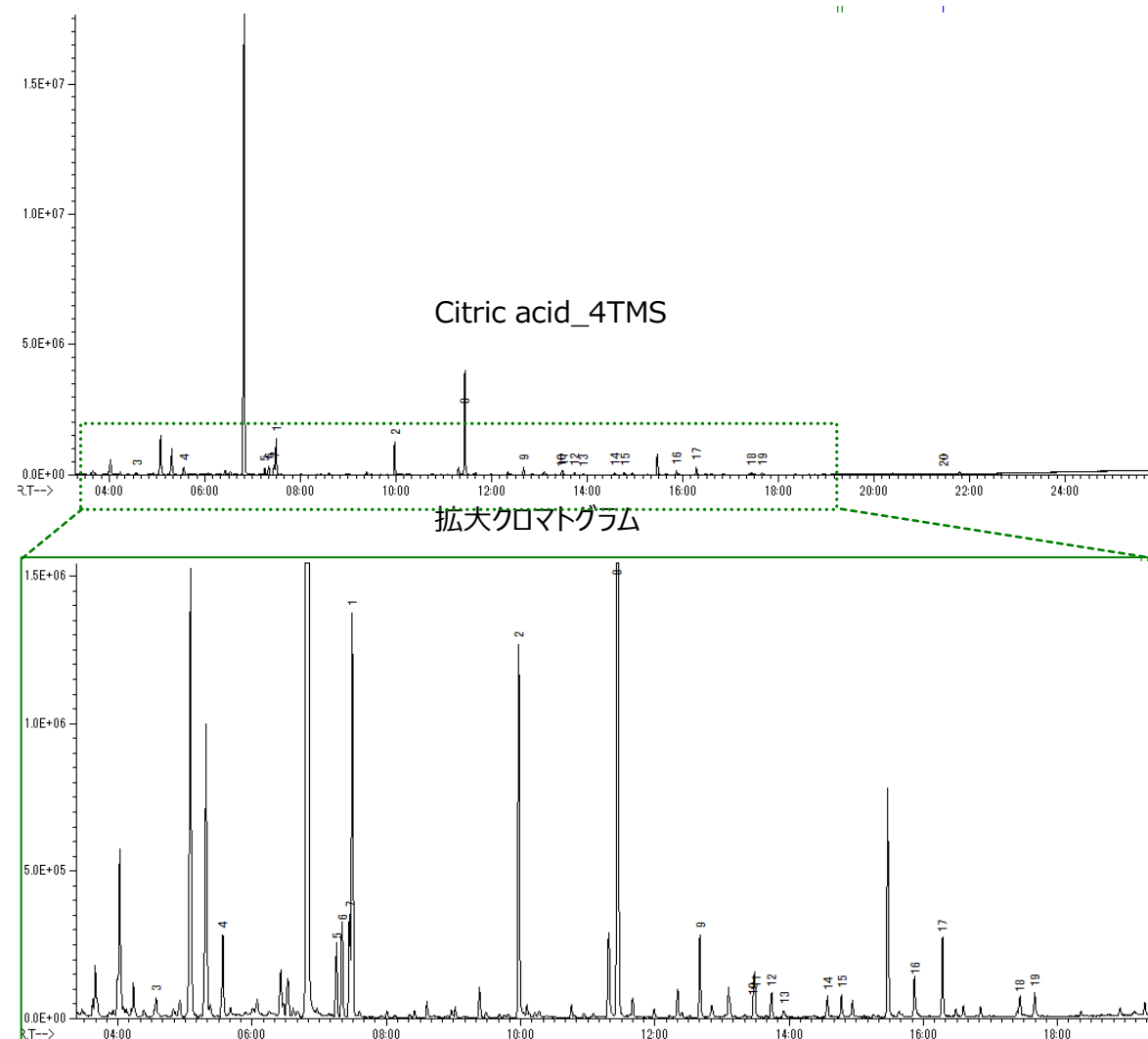
- ① 物性 比重: 1.000–1.008 pH: 6.2–7.6 (平均=6.8)
浸透圧: 他の組織液に比べて低張 (1/2以下)

② 組成

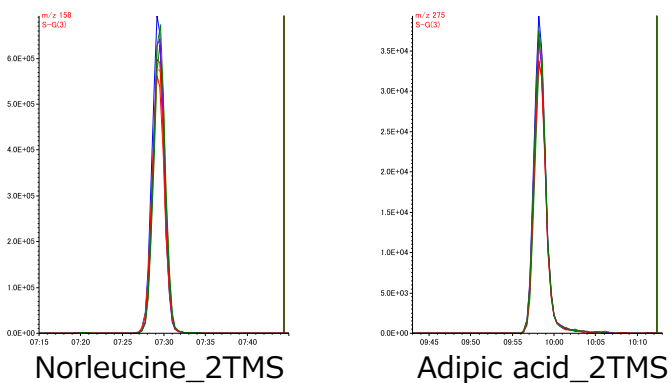
- 1) 水分 (99.5%)
- 2) 有機成分 唾液アミラーゼ、マルターゼ、血清アルブミン、血清グロブリン、ムチン、尿酸、尿素
- 3) 無機成分 Na、K、Cl、重炭酸ナトリウム、炭酸カルシウム、リン酸カルシウム、リン酸ナトリウム

唾液_M01

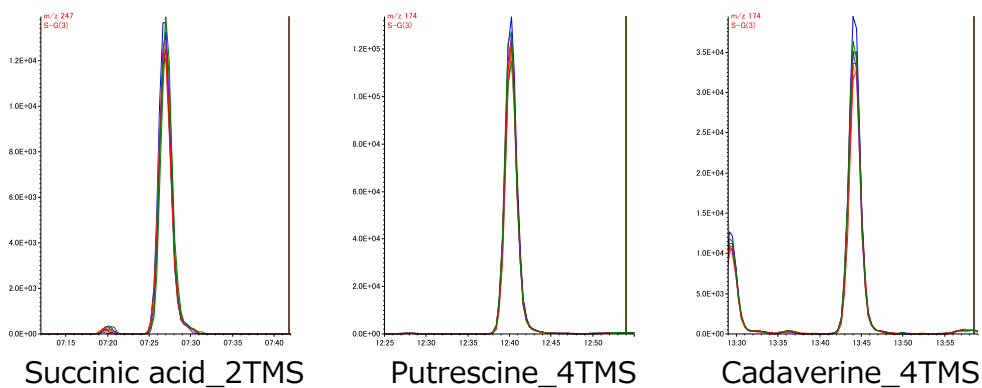
■ 本法による唾液のSCANトータルイオンクロマトグラム



■ 唾液に添加した内標の定量イオンクロマトグラムの重ね描き(n=7)



■ 唾液から検出された成分の定量イオンクロマトグラムの重ね描き(n=7)



唾液_M01

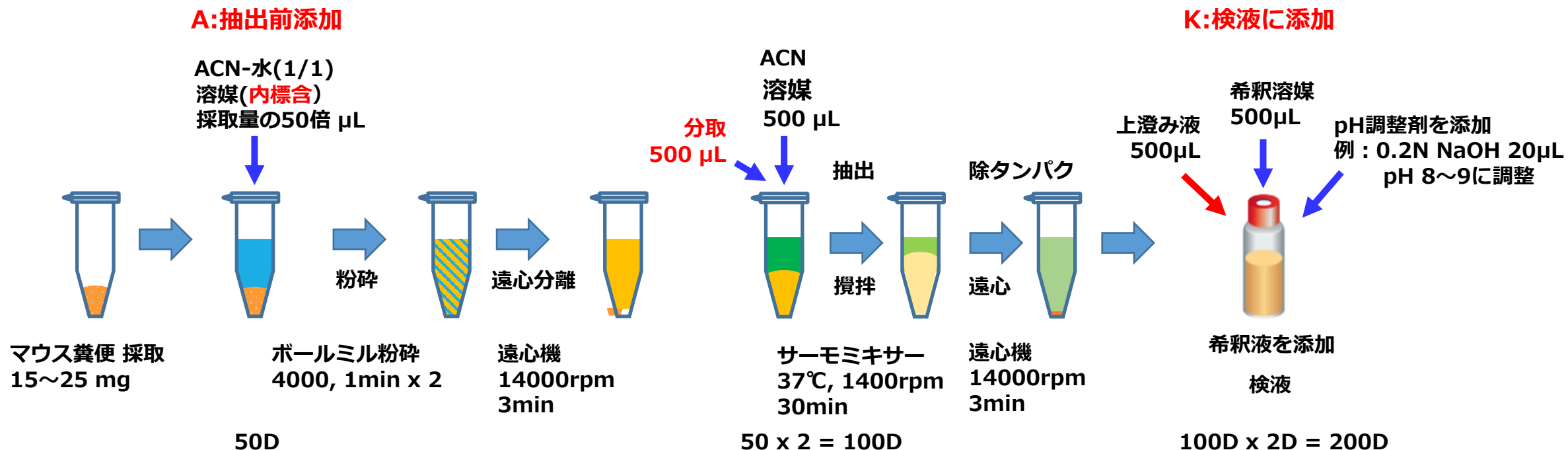
■ 内標による添加回収試験の結果

サンプル	No.	Norleucine_2TMS	Adipic acid_2TMS
内標	S1	2,448,000	111,000
バイアル中20μM	S2	2,374,000	110,200
	S3	2,313,000	102,700
	S4	2,383,000	110,300
	S5	2,349,000	103,400
	Ave.	2,373,400	107,520
	RSD, %	2.1	3.8
唾液	唾液-K1	2,310,000	126,700
10D	唾液-K2	2,025,000	115,300
	唾液-K3	2,134,000	117,700
内標	唾液-K4	2,063,000	109,300
除タンパク後添加	唾液-K5	2,197,000	120,900
バイアル中20μM	Ave.	2,145,800	117,980
	RSD, %	5.3	5.5
	(K/Sx100) REC, %	90	110
唾液	唾液_A1	1,978,000	121,700
10D	唾液_A2	1,961,000	113,900
内標	唾液_A3	2,080,000	122,200
唾液に添加	唾液_A4	1,968,000	111,400
試料中200μM	唾液_A5	2,054,000	122,300
(バイアル中20μM)	Ave.	2,008,200	118,300
	RSD, %	2.7	4.4
	(A/Sx100) 回収率, %	85	110
	(A/Kx100) 回収率, %	94	100

■ 唾液 から検出された主成分のピーク面積値とその再現性 (n=5 ; RSD,%)

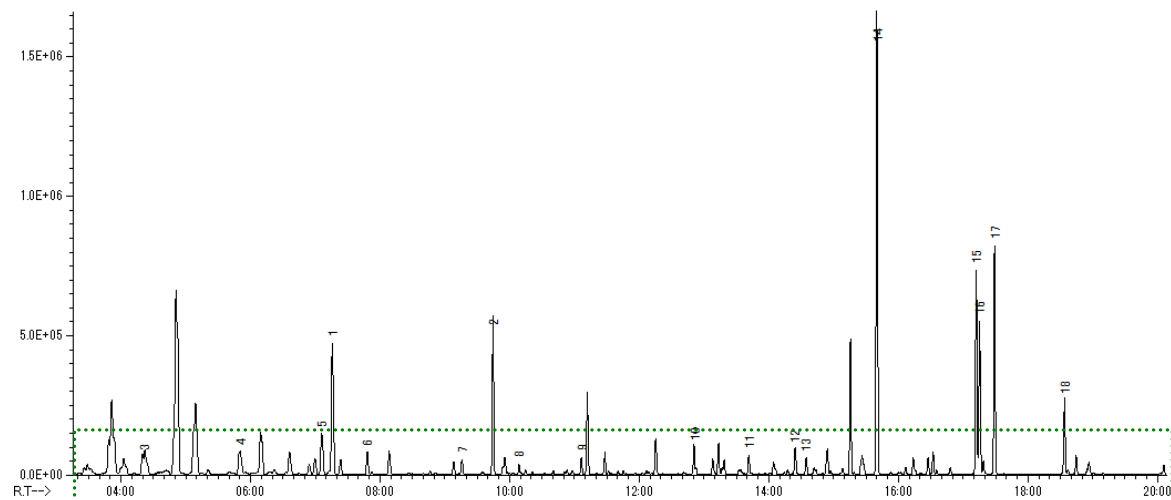
No.	化合物名	唾液-1	唾液-2	唾液-3	唾液-4	唾液-5	Ave.	RSD, %
1	Alanine_2TMS	124,100	108,500	112,100	113,300	114,200	114,440	5.1
2	Urea_3TMS	59,950	53,270	65,700	54,050	70,000	60,594	12.0
3	Proline_2TMS	481,000	418,600	437,000	432,700	454,600	444,780	5.4
4	Glycine_3TMS	354,300	319,700	323,500	322,100	340,900	332,100	4.5
5	Succinic acid_2TMS	49,020	46,330	45,910	44,520	46,790	46,514	3.5
6	5-Aminovaleric acid_3TMS	4,982,000	4,212,000	4,519,000	4,623,000	4,786,000	4,624,400	6.3
7	Putrescine_4TMS	457,300	404,100	422,900	413,200	438,100	427,120	4.9
8	Citric acid_4TMS	9,392	8,965	8,049	8,148	7,767	8,464	8.1
9	Ornithine_4TMS	74,060	62,220	63,890	63,740	68,900	66,562	7.3
10	Cadaverine_4TMS	131,400	113,400	119,100	116,700	124,200	120,960	5.8
11	Myristic acid_TMS	15,190	14,160	14,430	12,530	14,170	14,096	6.9
12	Lysine_4TMS	15,050	12,850	13,010	13,890	14,080	13,776	6.5
13	Tyrosine_3TMS	105,300	90,520	96,260	91,420	96,840	96,068	6.1
14	Palmitic acid_TMS	73,910	72,730	74,010	63,600	75,890	72,028	6.7
15	Uritic acid_4MS	122,400	105,400	111,000	111,300	108,700	111,760	5.7
16	Oleic Acid_TMS	17,690	18,570	16,440	15,330	16,250	16,856	7.6
17	Stearic acid_TMS	40,930	39,760	38,730	34,410	39,650	38,696	6.5

糞便（マウス）の抽出方法と内標添加（添加回収試験）

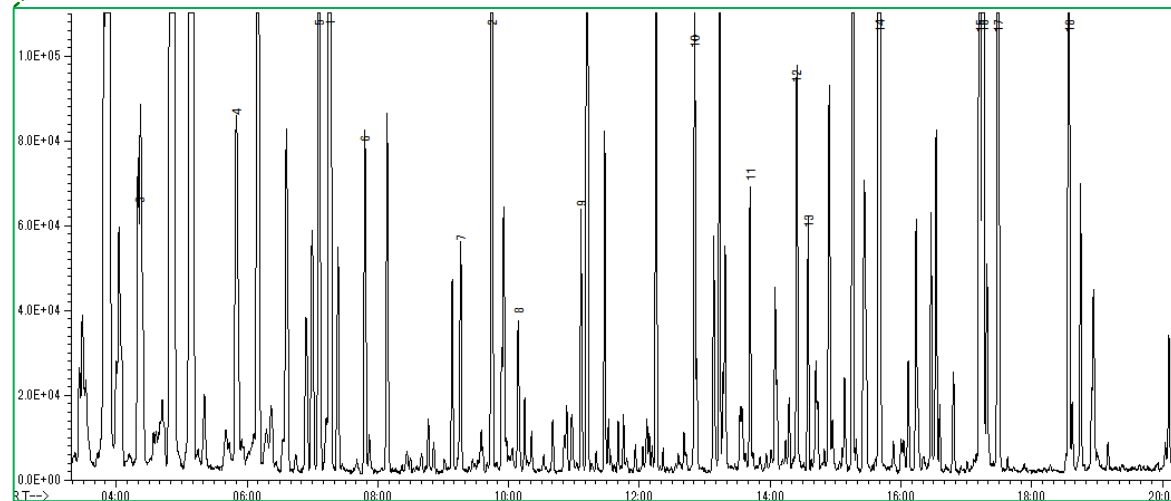


糞便（マウス）_M01

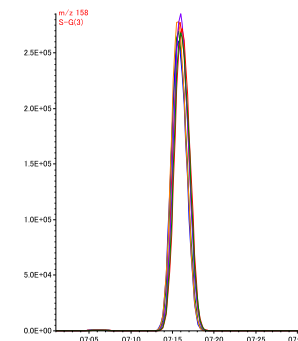
■ 本法によるマウス糞便のSCANトータルイオンクロマトグラム



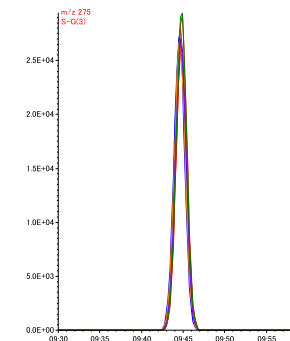
拡大クロマトグラム



■ マウス糞便に添加した内標の定量イオンクロマトグラムの重ね描き(n=7)

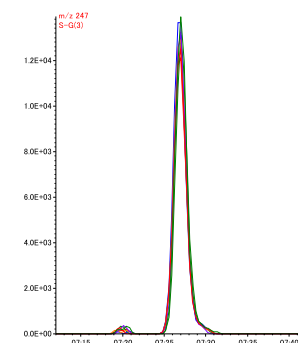


Norleucine_2TMS

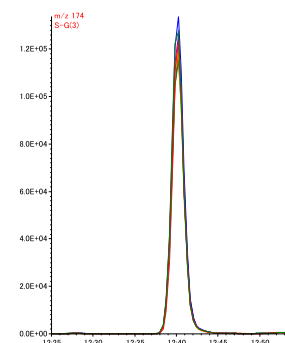


Adipic acid_2TMS

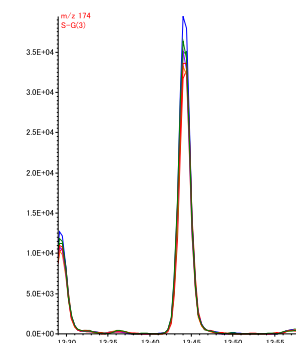
■ マウス糞便から検出された成分の定量イオンクロマトグラムの重ね描き(n=7)



Glycine_3TMS



L-Lysine_4TMS



Arachidonic acid_TMS

糞便（マウス） M01

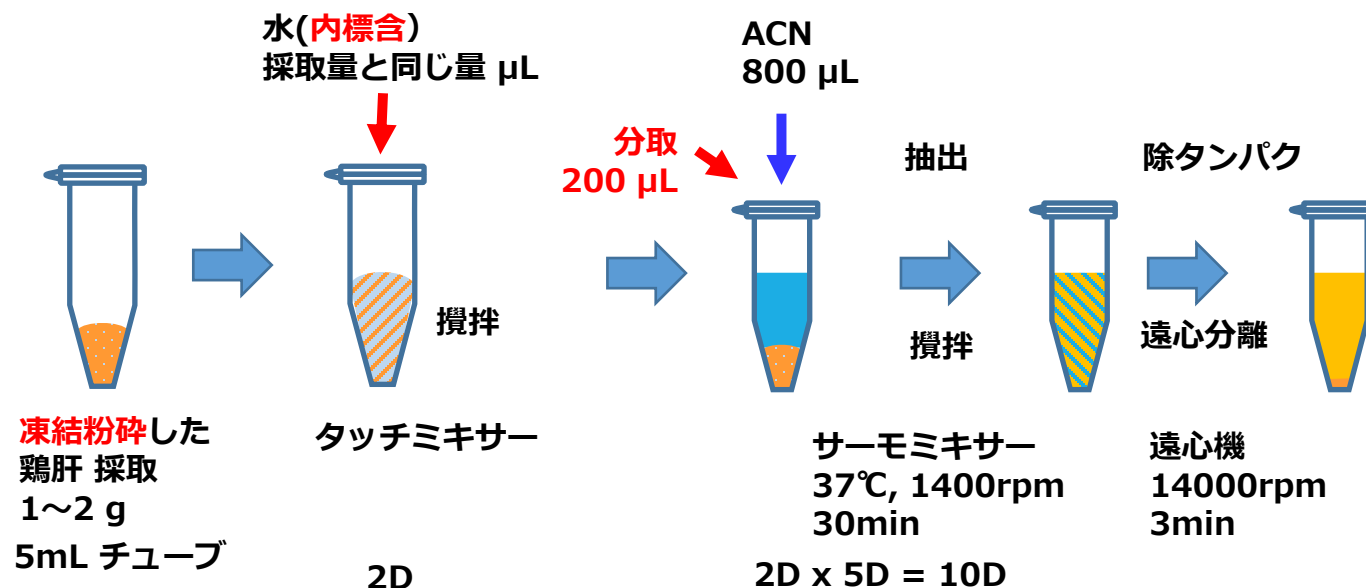
■ 内標による添加回収試験の結果

サンプル	No.	Norleucine_2TMS	Adipic acid_2TMS
内標	S1	1,431,000	83,510
バイアル中20μM	S2	1,409,000	80,230
	S3	1,371,000	79,830
	S4	1,327,000	74,290
	S5	1,292,000	75,900
	Ave.	1,366,000	78,752
	RSD, %	4.2	4.7
マウス糞便	糞便-K1	1,556,000	94,920
200D	糞便-K2	1,597,000	93,000
	糞便-K3	1,607,000	95,600
内標	糞便-K4	1,638,000	96,670
除タンパク後添加	糞便-K5	1,612,000	97,420
バイアル中20μM	Ave.	1,602,000	95,522
	RSD, %	1.9	1.8
(K/Sx100)	REC, %	117	121
マウス糞便	糞便_A1	1,864,000	95,250
200D	糞便_A2	1,876,000	106,400
内標	糞便_A3	1,869,000	103,300
糞便に添加	糞便_A4	1,937,000	107,900
試料中2mM	糞便_A5	1,926,000	107,700
(バイアル中20μM)	Ave.	1,894,400	104,110
	RSD, %	1.8	5.1
(A/Sx100)	回収率, %	139	132
(A/Kx100)	回収率, %	118	109

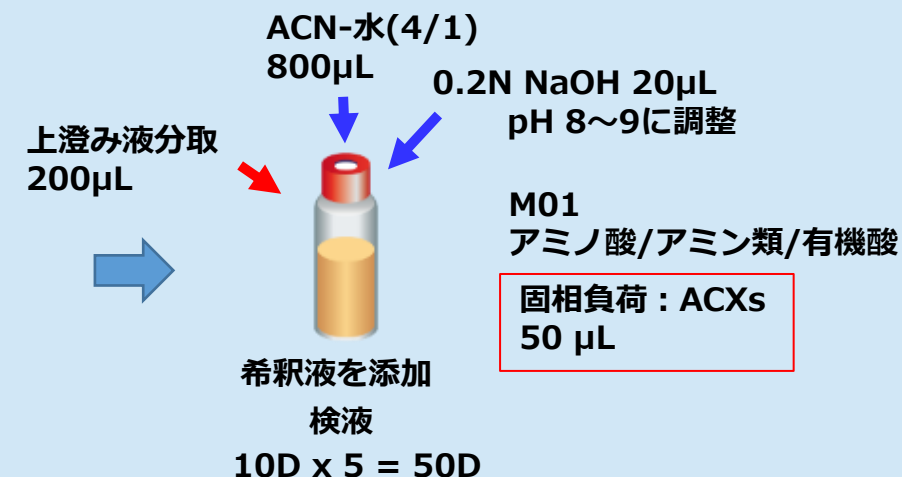
■ 糞便（マウス） から検出された主成分のピーク面積値とその再現性（n=5 ; RSD,%）

No.	化合物名	糞便-1	糞便-2	糞便-3	糞便-4	糞便-5	Ave.	RSD, %
1	Alanine_2TMS	3,665,000	3,692,000	3,688,000	3,774,000	3,788,000	3,721,400	1.5
2	Valine_2TMS	1,036,000	1,049,000	1,044,000	1,072,000	1,077,000	1,055,600	1.7
3	Glycine_3TMS	834,500	821,000	828,300	830,500	868,700	836,600	2.2
4	Glyceric acid_3TMS	46,900	55,450	59,530	66,660	67,390	59,186	14.3
5	Uracil_2TMS	170,700	186,000	175,700	181,500	182,500	179,280	3.4
6	Serine_3TMS	379,400	396,500	395,100	406,400	408,100	397,100	2.9
7	Threonine_3TMS	266,400	266,800	273,900	273,700	276,600	271,480	1.7
8	γ-Aminobutyric acid_3TMS	599,200	598,900	595,000	596,000	615,400	600,900	1.4
9	Phenethylamine_2TMS	424,000	444,700	430,100	430,200	438,600	433,520	1.9
10	Ornithine_4TMS	529,800	538,400	553,400	554,100	580,800	551,300	3.5
11	Lysine_4TMS	336,000	352,900	369,600	371,000	393,200	364,540	5.9
12	Gluconic acid_6TMS	44,270	47,430	47,080	50,950	49,490	47,844	5.3
13	Isoferulic acid_2TMS	85,120	93,230	93,490	96,300	96,570	92,942	5.0
14	Stearolic acid_TMS	156,300	170,600	168,000	167,200	163,500	165,120	3.4
15	Oleic acid_TMS	160,500	174,900	161,500	168,800	169,000	166,940	3.6
16	Stearic acid_TMS	81,640	96,580	90,460	89,640	89,500	89,564	5.9

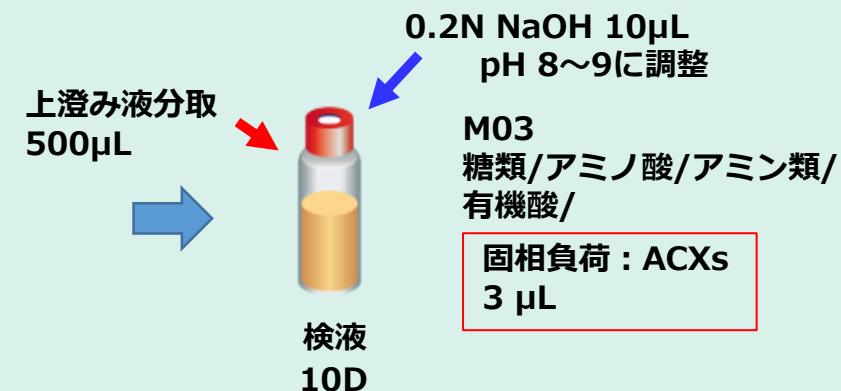
肝臓（鶏レバー）の抽出方法



■ アミノ酸/アミン類/有機酸等

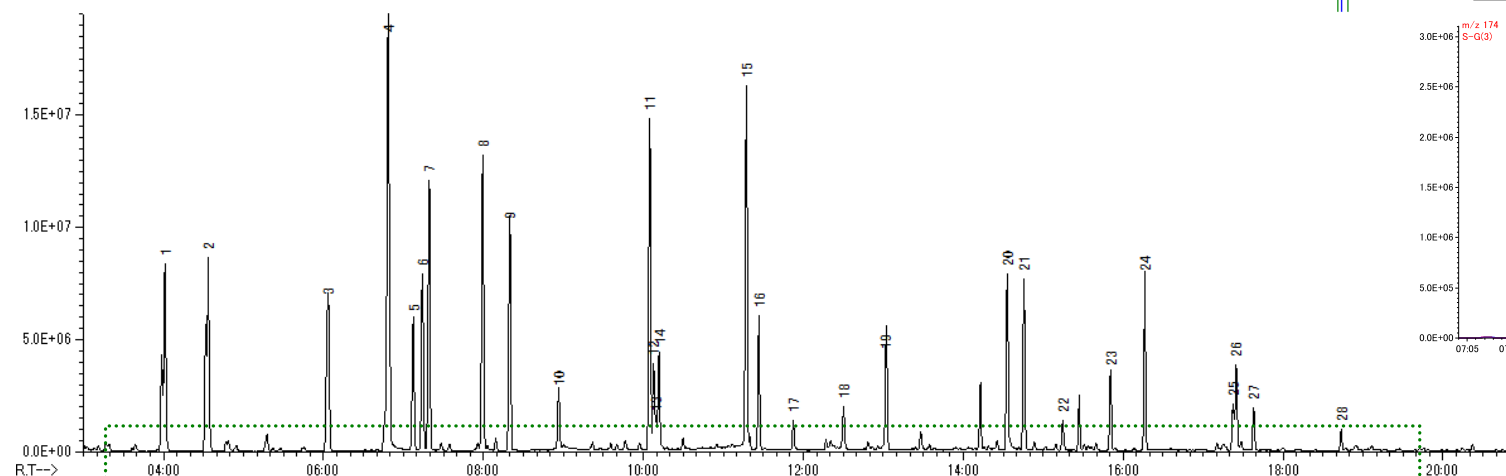


■ 糖類を含むアミノ酸/アミン類/有機酸等

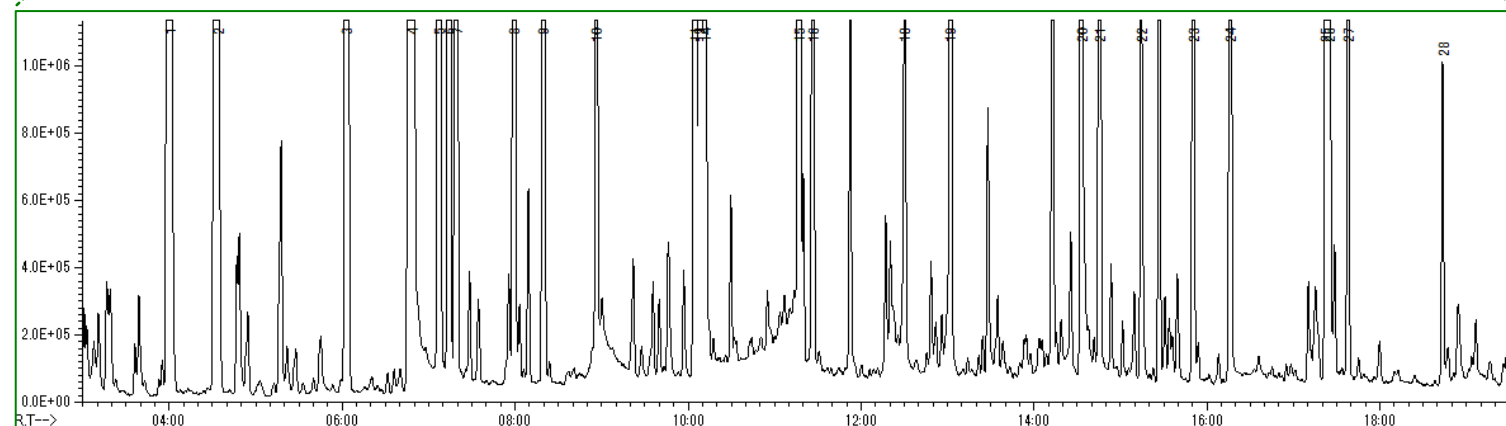


鶏肝_M01-ACXs

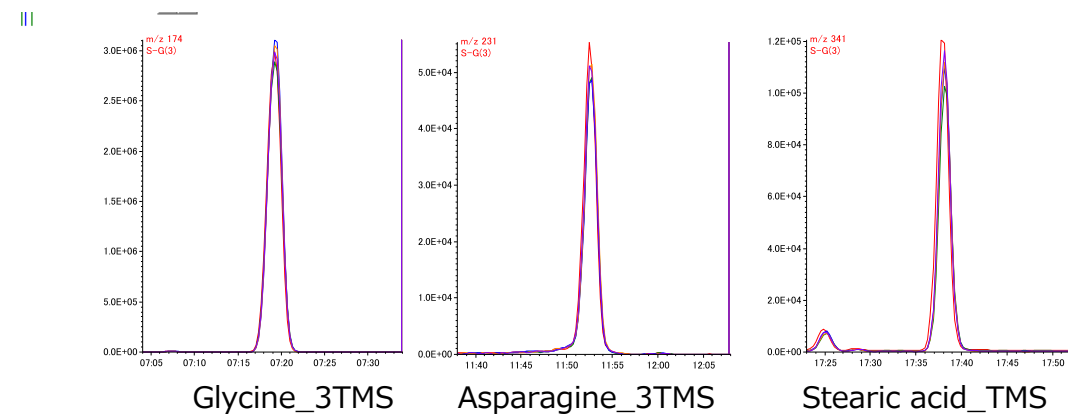
■ 本法による**鶏肝**のSCANトータルイオンクロマトグラム



拡大クロマトグラム



■ 鶏肝から検出された成分の定量イオンクロマトグラムの重ね描き(n=7)



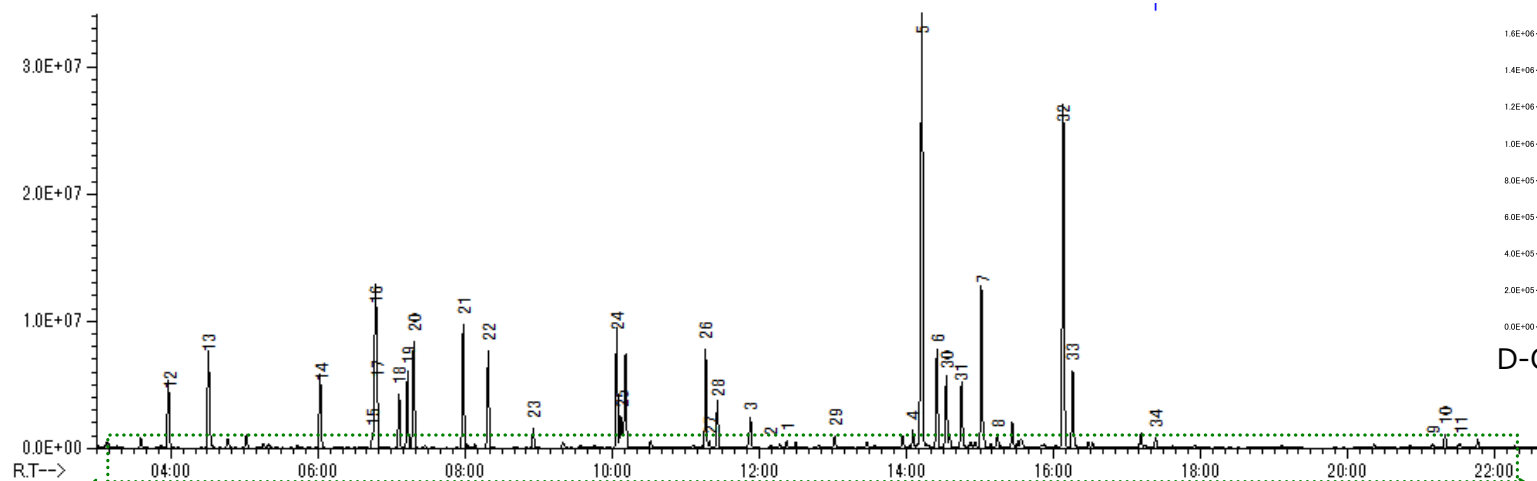
鶏肝_M01-ACXs

■ 鶏肝 から検出された主成分のピーク面積値とその再現性 (n=5 ; RSD,%)

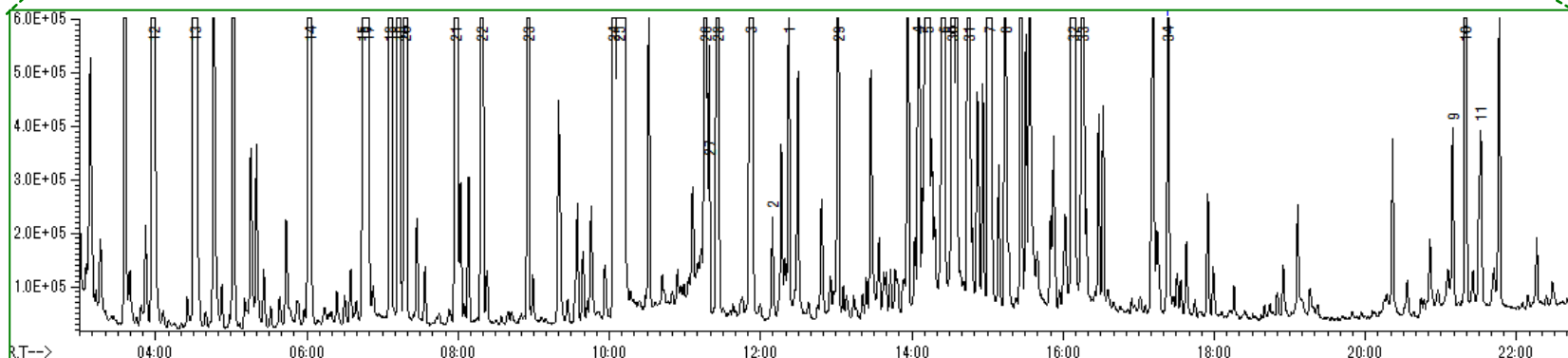
No.	化合物名	鶏肝-1	鶏肝-2	鶏肝-3	鶏肝-4	鶏肝-5	Ave.	RSD, %
1	Lactic acid_2TMS	9,262,000	8,665,000	9,610,000	8,632,000	9,583,000	9,150,400	5.2
2	Alanine_2TMS	18,330,000	17,960,000	18,290,000	18,100,000	18,150,000	18,166,000	0.8
3	Valine_2TMS	11,330,000	11,100,000	11,340,000	11,280,000	11,340,000	11,278,000	0.9
4	Phosphate_3TMS	13,080,000	14,290,000	15,760,000	15,190,000	15,900,000	14,844,000	7.9
5	Isoleucine_2TMS	7,530,000	7,478,000	7,716,000	7,693,000	7,683,000	7,620,000	1.4
6	Proline_2TMS	13,220,000	13,140,000	13,420,000	13,360,000	13,450,000	13,318,000	1.0
7	Glycine_3TMS	11,330,000	11,300,000	11,770,000	11,600,000	11,440,000	11,488,000	1.7
8	Serine_3TMS	4,217,000	4,070,000	4,218,000	4,167,000	4,180,000	4,170,400	1.4
9	Threonine_3TMS	2,152,000	2,096,000	2,153,000	2,152,000	2,145,000	2,139,600	1.1
10	beta-Alanine_3TMS	1,152,000	1,125,000	1,193,000	1,174,000	1,161,000	1,161,000	2.2
11	Aspartic acid_3TMS	8,020,000	7,178,000	7,640,000	7,525,000	7,633,000	7,599,200	4.0
12	Methionine_2TMS	2,438,000	2,365,000	2,490,000	2,486,000	2,490,000	2,453,800	2.2
13	Hydroxyproline_3TMS	37,220	34,980	39,910	36,090	36,810	37,002	5.0
14	Pyroglutamic acid_2TMS	4,924,000	4,513,000	4,615,000	4,781,000	4,571,000	4,680,800	3.6
15	Glutamic acid_3TMS	8,770,000	7,753,000	8,353,000	8,250,000	8,426,000	8,310,400	4.4
16	Phenylalanine_2TMS	2,531,000	2,438,000	2,570,000	2,541,000	2,575,000	2,531,000	2.2
17	Asparagine_3TMS	173,700	163,500	158,000	170,000	169,100	166,860	3.7
18	Glutamine-TMS	529,400	583,500	634,500	518,900	643,500	581,960	9.9
19	L-Glutamine-3TMS	3,871,000	3,613,000	3,810,000	3,810,000	3,906,000	3,802,000	3.0
20	Lysine_4TMS	523,000	481,100	535,400	523,600	524,500	517,520	4.1
21	Tyrosine_3TMS	6,123,000	5,808,000	6,279,000	6,303,000	6,438,000	6,190,200	3.9
22	Gluconic acid_6TMS	198,100	157,500	190,100	171,900	195,200	182,560	9.5
23	Palmitic acid-TMS	843,200	724,400	808,800	788,200	825,600	798,040	5.8
24	Uric acid-4TMS	3,099,000	2,251,000	2,557,000	2,424,000	2,676,000	2,601,400	12.3
25	Linoleic acid-TMS	95,410	76,620	81,480	76,570	84,040	82,824	9.3
26	Oleic acid-TMS	341,900	280,500	310,400	286,900	323,400	308,620	8.2
27	Stearic acid-TMS	385,000	325,700	348,700	349,900	360,000	353,860	6.1
28	Arachidonic acid-TMS	31,050	25,380	26,610	24,410	26,570	26,804	9.5

鶏肝_M03-ACXs

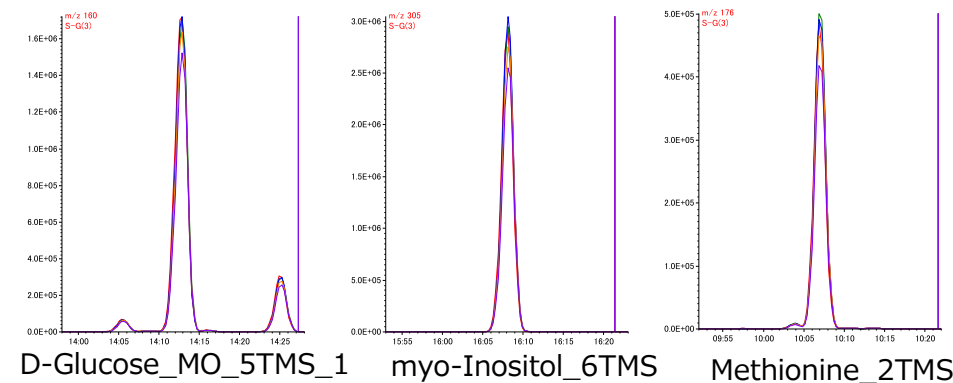
■ 本法による鶏肝のSCANトータルイオンクロマトグラム



拡大クロマトグラム



■ 鶏肝から検出された成分の定量イオンクロマトグラムの重ね描き(n=7)



鶏肝_M03-ACXs

■ 鶏肝 から検出された主成分のピーク面積値とその再現性（n=5；RSD,%）

No.	化合物名	鶏肝-1	鶏肝-2	鶏肝-3	鶏肝-4	鶏肝-5	Ave	RSD, %
1	Ribitol_5TMS	182,900	160,200	177,600	169,400	164,200	170,860	5.5
2	Xylitol_5TMS	51,370	44,760	45,670	46,560	41,050	45,882	8.1
3	Taurine, 3TMS derivative	813,700	882,400	850,200	751,100	585,200	776,520	15.1
4	Mannose_MO_5TMS	210,200	202,500	202,000	192,700	175,600	196,600	6.8
5	D-Glucose_MO_5TMS_1	6,177,000	5,915,000	5,963,000	5,676,000	5,246,000	5,795,400	6.1
6	D-Glucose_MO_5TMS_2	1,029,000	987,400	1,011,000	945,000	872,900	969,060	6.4
7	Glucopyranose_5TMS	8,402,000	8,561,000	8,817,000	8,816,000	8,178,000	8,554,800	3.2
8	Gluconic acid_6TMS	124,600	134,100	138,500	123,700	110,800	126,340	8.5
9	Alpha-Lactose_8TMS	200,200	216,200	204,900	220,400	197,700	207,880	4.8
10	Alpha-Lactose_MO_8TMS	37,260	39,490	37,910	36,580	31,720	36,592	8.0
11	D-Maltose_MO_8TMS	15,260	15,440	16,170	15,520	13,650	15,208	6.2
12	Lactic acid_2TMS	3,151,000	3,033,000	3,472,000	3,216,000	2,880,000	3,150,400	7.0
13	Alanine_2TMS	11,400,000	11,720,000	11,850,000	11,350,000	10,090,000	11,282,000	6.2
14	Valine_2TMS	6,894,000	7,271,000	7,415,000	7,093,000	6,305,000	6,995,600	6.2
15	Ethanolamine_3TMS	927,200	992,600	979,400	935,000	831,500	933,140	6.8
16	Phosphate_3TMS	9,444,000	9,136,000	9,640,000	8,855,000	7,804,000	8,975,800	8.0
17	Leucine_2TMS	8,941,000	9,494,000	9,764,000	9,375,000	8,400,000	9,194,800	5.8
18	Isoleucine_2TMS	4,564,000	4,861,000	4,967,000	4,739,000	4,176,000	4,661,400	6.6
19	Proline_2TMS	8,875,000	8,960,000	9,154,000	8,752,000	7,847,000	8,717,600	5.8
20	Glycine_3TMS	7,160,000	7,530,000	7,345,000	7,278,000	6,527,000	7,168,000	5.3
21	Serine_3TMS	2,886,000	2,888,000	2,953,000	2,820,000	2,512,000	2,811,800	6.2
22	Threonine_3TMS	1,503,000	1,497,000	1,544,000	1,477,000	1,307,000	1,465,600	6.3
23	beta-Alanine_3TMS	613,500	670,300	624,900	644,600	577,500	626,160	5.5
24	Aspartic acid_3TMS	5,001,000	4,890,000	5,037,000	4,788,000	4,220,000	4,787,200	6.9
25	Methionine_2TMS	1,559,000	1,640,000	1,626,000	1,561,000	1,374,000	1,552,000	6.8
26	Glutamic acid_3TMS	3,920,000	4,041,000	4,325,000	3,846,000	3,373,000	3,901,000	8.9
27	Asparagine_4TMS	174,800	167,600	150,200	145,000	126,500	152,820	12.5
28	Phenylalanine_2TMS	1,829,000	1,941,000	1,964,000	1,868,000	1,638,000	1,848,000	7.0
29	L-Glutamine_3TMS	215,300	263,200	241,500	242,400	181,600	228,800	13.7
30	Lysine_4TMS	434,900	442,100	419,500	400,100	321,100	403,540	12.1
31	Tyrosine_3TMS	4,209,000	4,444,000	4,472,000	4,192,000	3,640,000	4,191,400	8.0
32	myo-Inositol_6TMS	9,829,000	9,871,000	10,220,000	9,450,000	8,635,000	9,601,000	6.3
33	Uric acid_4TMS	2,326,000	2,510,000	2,626,000	2,412,000	2,058,000	2,386,400	9.0
34	L-Tryptophan_3TMS	902,100	901,100	939,900	970,700	811,300	905,020	6.6

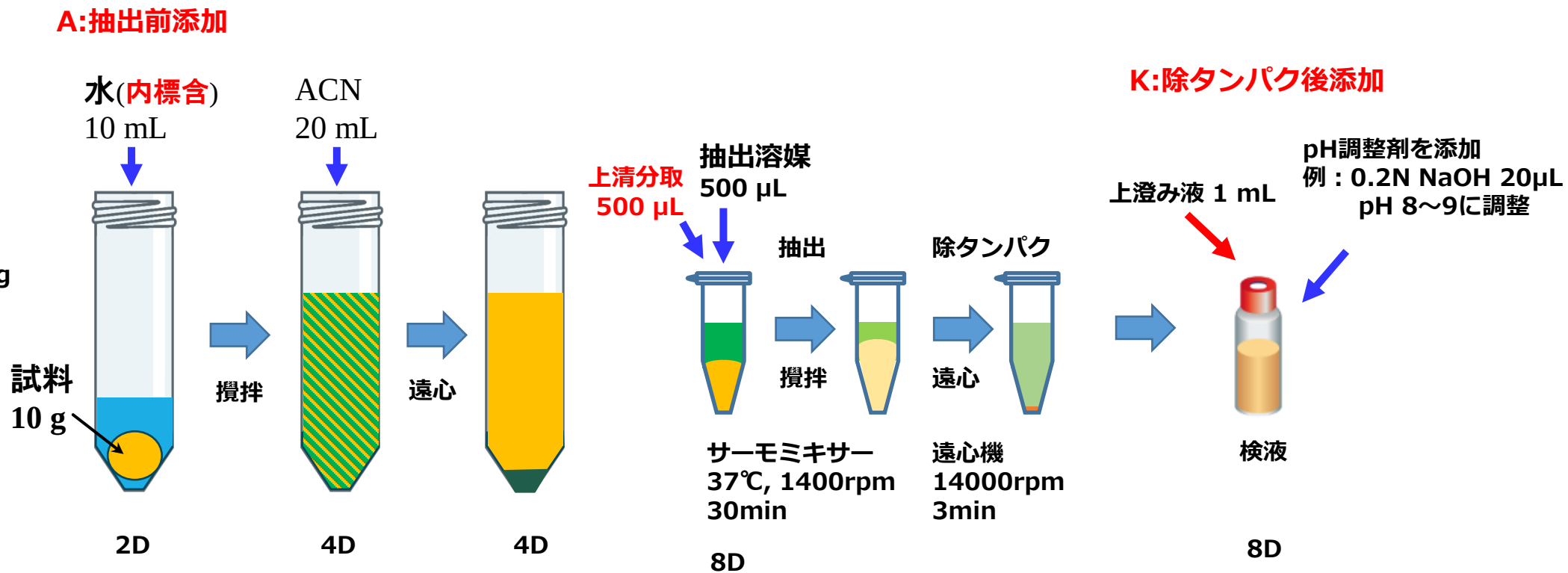
M03のメソッドは負荷量が少ないが、肝臓のような代謝物の濃度が高い試料においては糖類以外のアミノ酸/アミン類/有機酸類も同時に分析できる。

ほうれん草

ドライアイス
凍結粉碎



ほうれん草 100~200g



各農作物のSCAN-TIC

A. ほうれん草

ほうれん草には**シュウ酸**が多く含まれており、体内でカルシウムと結合し腎臓や尿路に結石を引き起こすことがある。

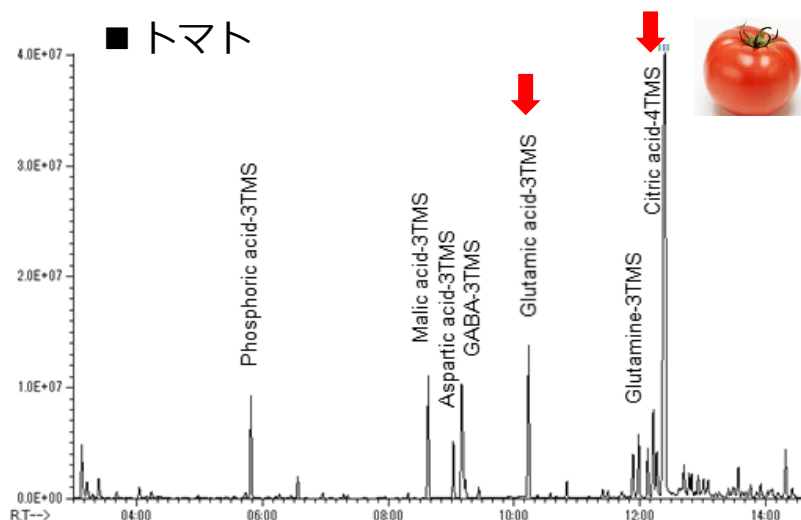
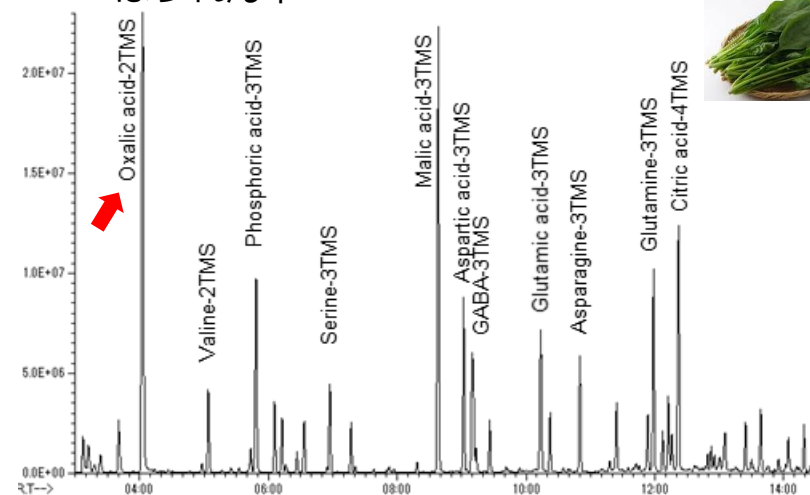
B. トマト

グルタミン酸の濃度が非常に高いためうま味があること、**酸味**・水分があることから、ケチャップ、トマトソース、ピザソースなどに用いられる。

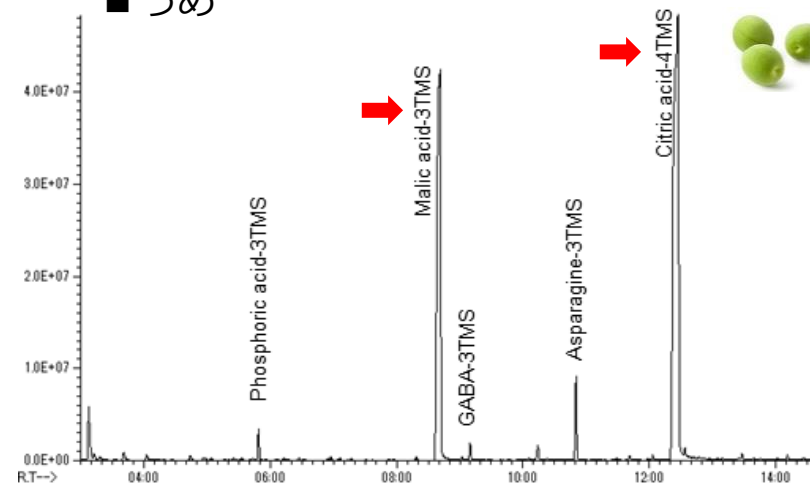
C. うめ

強い酸味が特徴であり、**クエン酸**をはじめとする**有機酸**などを多く含む。

■ ほうれん草



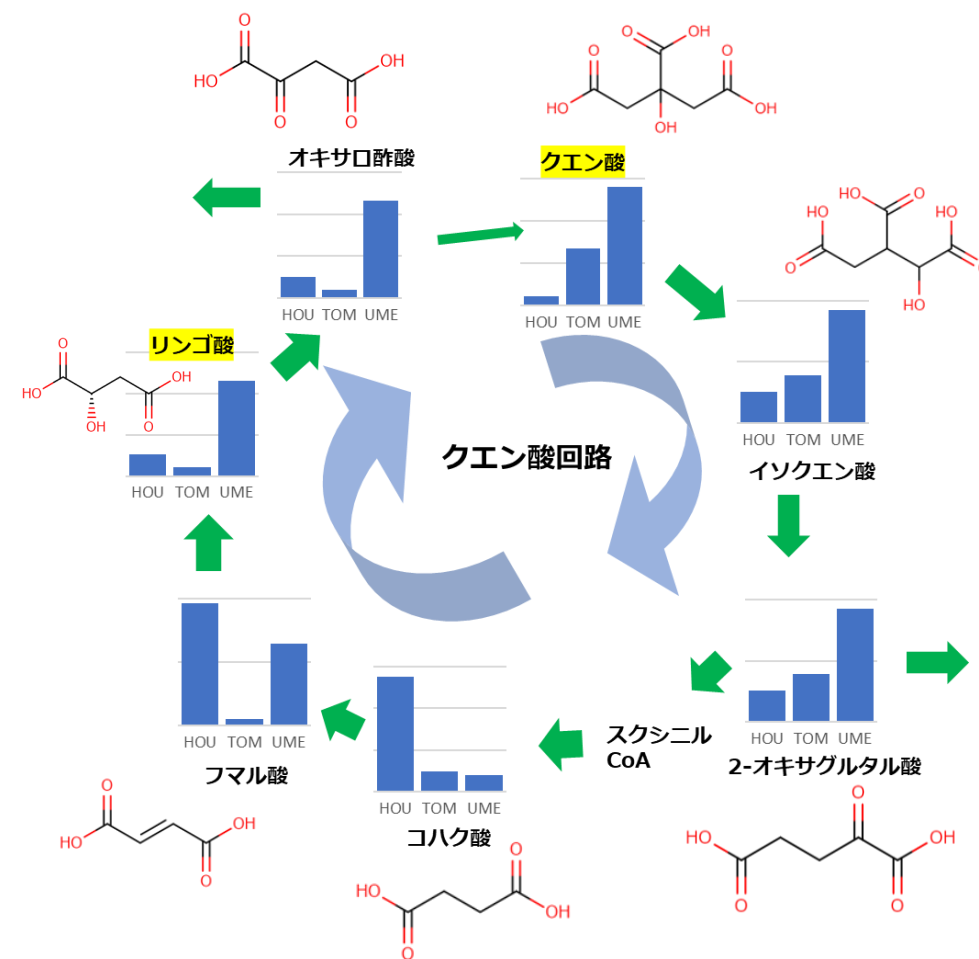
■ うめ



各農作物の成分量比較と代謝マップ



代謝マップ解析



ご清聴ありがとうございました

ホームページにて製品情報・技術情報を多数公開中！！
詳細は下記フォームよりお問い合わせください



株式会社
アイスティサイエンス

Tel.073-475-0033

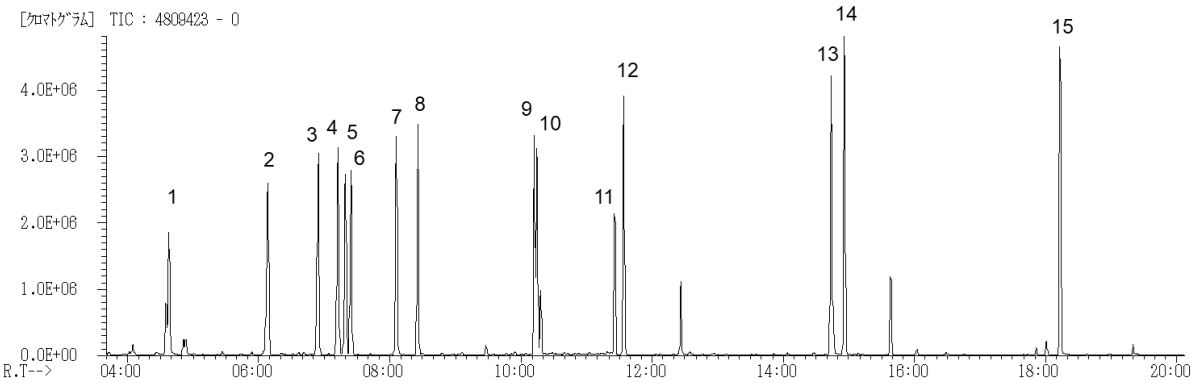
イベント

サポートお問い合わせ

その他お問い合わせ

Metabolomics ソリューション 製品情報 分析方法 アプリケーションノート ピックアップ 会社概要 テクニカルサポート

AMI-a : アミノ酸_M01



1. Alanine_2TMS

2. Valine_2TMS

3. Leucine_2TMS

4. Isoleucine_2TMS

5. Proline_2TMS
6. Glycine_3TMS

7. Serine_3TMS

8. Threonine_3TMS

9. Aspartic acid_3TMS

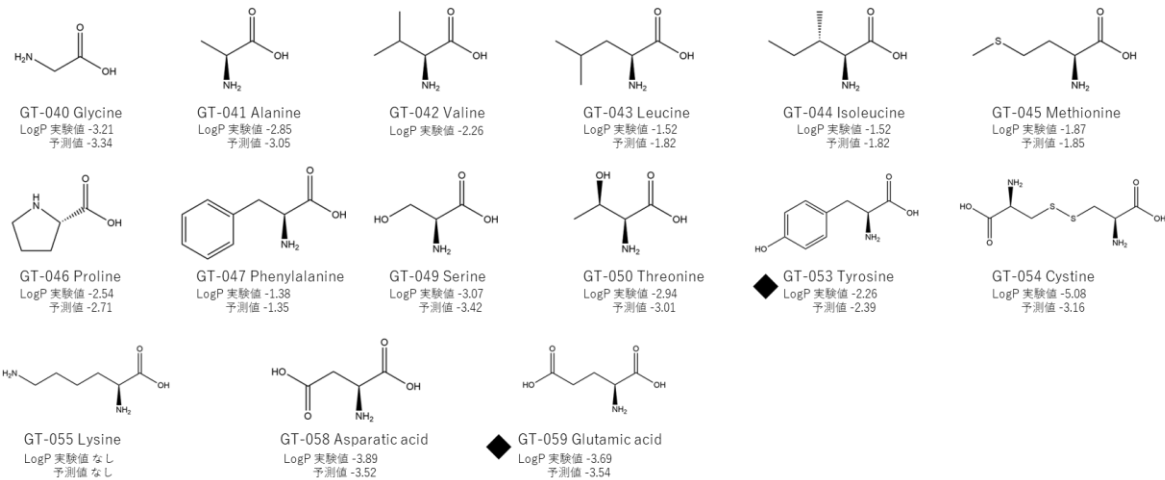
10. Methionine_2TMS
11. Glutamic acid_3TMS

12. Phenylalanine_2TMS

13. Lysine_4TMS

14. Tyrosine_3TMS

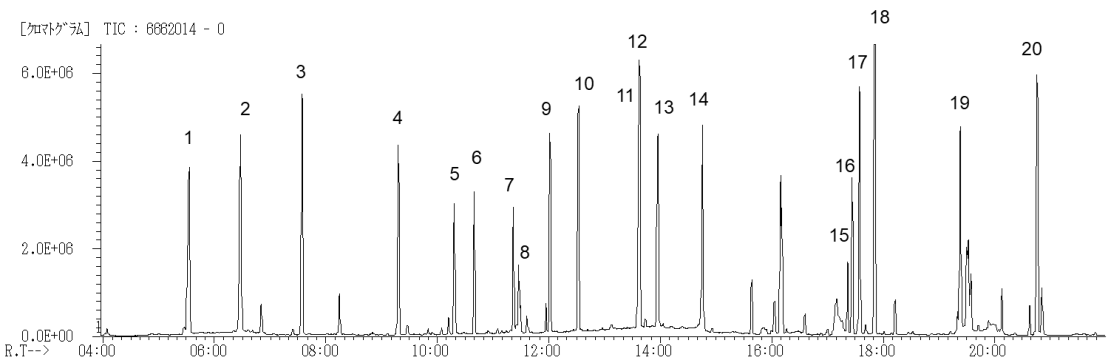
15. Cystine_4TMS



表_AMI-a : アミノ酸

No.	化合物名	R.T.	1	2	3	4	5	Ave.	RSD, %
1	Alanine_2TMS	4.55	802,832	817,531	732,544	775,824	831,589	792,064	4.9
2	Valine_2TMS	6.06	3,591,370	3,629,894	3,319,408	3,473,831	3,729,776	3,548,856	4.4
3	Leucine_2TMS	6.83	2,213,169	2,249,855	2,105,931	2,183,361	2,334,882	2,217,440	3.8
4	Isoleucine_2TMS	7.13	3,738,161	3,790,007	3,542,350	3,663,707	3,861,347	3,719,114	3.3
5	Proline_2TMS	7.25	956,654	961,079	918,084	941,870	984,186	952,375	2.6
6	Glycine_3TMS	7.33	2,808,783	2,918,169	2,459,952	2,628,385	2,888,259	2,740,710	7.1
7	Serine_3TMS	8.00	7,763,664	8,059,147	7,532,763	7,711,065	8,072,794	7,827,887	3.0
8	Threonine_3TMS	8.34	1,739,589	1,723,224	1,703,222	1,708,164	1,776,198	1,730,079	1.7
9	Aspartic acid_3TMS	10.09	6,527,293	6,650,381	6,517,626	6,722,409	6,722,599	6,628,062	1.5
10	Methionine_2TMS	10.15	7,793,726	7,840,096	7,610,430	7,786,053	7,960,758	7,798,213	1.6
11	Glutamic acid_3TMS	11.30	4,596,786	4,670,466	4,532,071	4,707,336	4,740,145	4,649,361	1.8
12	Phenylalanine_2TMS	11.47	11,239,855	11,204,092	10,781,683	11,097,483	11,365,016	11,137,626	2.0
13	Lysine_4TMS	14.56	1,340,927	1,417,428	1,165,242	1,275,161	1,333,363	1,306,424	7.2
14	Tyrosine_3TMS	14.77	1,072,458	1,109,330	1,045,253	1,041,861	1,081,999	1,070,180	2.6
15	Cystine_4TMS	18.03	2,042,569	2,239,865	2,278,338	2,170,613	2,275,472	2,201,371	4.5

AMI-b



1. 2-Aminobutyric acid_2TMS

2. Norvaline_2TMS

3. Norleucine_2TMS

4. Homoserine_3TMS

5. Pyroglutamic acid_2TMS

6. Cysteine_3TMS

7. Ornithine_3TMS
8. Asparagine_4TMS

9. Asparagine_3TMS

10. 2-Amino adipic acid_3TMS

11. 1-Methylhistidine_2TMS

12. Ornithine_4TMS

13. Hydroxylysine_4TMS

14. Histidine_3TMS
15. Kynurenine_3TMS

16. Tryptophan_2TMS

17. Tryptophan_3TMS

18. Monoiodotyrosine_3TMS

19. 5-Hydroxytryptophan_4TMS

20. Diiodotyrosine_3TMS

表 AMI-b : アミノ酸

No.	化合物名	R.T.	1	2	3	4	5	Ave.	RSD, %
1	2-Aminobutyric acid_2TMS	5.46	13,893,724	15,185,544	14,629,398	16,570,209	16,446,824	15,345,140	7.5
2	Norvaline_2TMS	6.38	1,316,549	1,418,969	1,377,495	1,492,265	1,490,704	1,419,196	5.3
3	Norleucine_2TMS	7.48	2,193,073	2,356,645	2,283,788	2,422,924	2,448,210	2,340,928	4.5
4	N-Acetylglycine_2TMS	8.16	19,218	22,232	20,665	22,003	23,669	21,557	7.8
5	Homoserine_3TMS	9.18	8,379,281	9,021,891	8,819,072	9,270,085	9,532,107	9,004,487	4.9
6	Cysteine_3TMS	10.55	5,987,094	6,591,387	6,428,657	6,692,471	6,808,687	6,501,659	4.9
7	Homocystein_3TMS	11.82	1,085,544	1,247,565	1,261,098	1,291,509	1,346,187	1,246,381	7.8
8	Asparagine_3TMS	11.90	2,402,941	2,870,884	2,788,789	2,853,637	2,951,976	2,773,645	7.8
9	2-Amino adipic acid_3TMS	12.38	3,731,228	4,275,808	4,107,060	4,193,893	4,292,998	4,120,197	5.6
10	1-Methylhistidine_2TMS	13.47	3,523,710	3,310,223	3,241,314	3,664,413	3,811,372	3,510,206	6.8
11	Ornithine_4TMS	13.49	10,291,325	10,618,887	10,348,884	10,624,538	10,546,991	10,486,125	1.5
13	Hydroxylysine_4TMS	13.80	6,520,886	6,499,460	6,167,369	6,682,811	6,446,601	6,463,425	2.9
14	Histidine_3TMS	14.61	21,218,704	22,237,610	22,542,256	22,736,127	22,303,950	22,207,729	2.6
15	Kynurenine_3TMS	17.19	265,930	276,859	288,000	252,137	288,788	274,343	5.7
16	Tryptophan_3TMS	17.42	14,872,232	15,724,933	14,925,653	14,894,097	15,411,955	15,165,774	2.5
17	Monoiodotyrosine_3TMS	17.68	20,382,812	21,268,852	23,071,057	19,576,498	21,095,380	21,078,920	6.2
18	5-Hydroxytryptophan_4TMS	19.18	12,760,710	13,102,550	14,184,216	10,573,410	13,363,654	12,796,917	10.5
19	Diiodotyrosine_3TMS	20.59	18,009,631	16,676,765	20,271,255	14,509,440	18,650,377	17,623,494	12.3

Cc1ccc(C(C(=O)O)N)cc1

○ GT-048 Tryptophan
LogP 実験値 -1.06
予測値 -1.1

Cc1ccc(C(C(=O)O)N)cc1

○ GT-051 Asparagin
LogP 実験値 -3.82
予測値 -3.36

Cc1ccc(C(C(=O)O)N)cc1

× GT-056 Arginine
LogP 実験値 -0.59
予測値 -0.59

Cc1ccc(C(C(=O)O)N)cc1

○ GT-057 Histidine
LogP 実験値 -3.32
予測値 -2.67

Cc1ccc(C(C(=O)O)N)cc1

○ GT-061 Norvaline
LogP 実験値 なし
予測値 -2.04

Cc1ccc(C(C(=O)O)N)cc1

△ GT-066 Citrulline
LogP 実験値 -3.19
予測値 -3.27

Cc1ccc(C(C(=O)O)N)cc1

○ GT-067 Homoserine
LogP 実験値 -1.289 (est)
予測値 -3.31

Cc1ccc(C(C(=O)O)N)cc1

○ GT-070 Ornithine
LogP 実験値 -4.22
予測値 -3.64

Cc1ccc(C(C(=O)O)N)cc1

× GT-196 Carnosine
LogP 実験値 なし
予測値 -2.96

Cc1ccc(C(C(=O)O)N)cc1

○ GT-197 5-Hydroxytryptophan
LogP 実験値 -2.051
予測値 なし

Cc1ccc(C(C(=O)O)N)cc1

△ GT-239 1Methylhistidine
LogP 実験値 なし
予測値 -2.95

Cc1ccc(C(C(=O)O)N)cc1

○ GT-240 Diiodotyrosine
LogP 実験値 なし
予測値 -0.7

Cc1ccc(C(C(=O)O)N)cc1

× GT-242 3-Methylhistidine
LogP 実験値 なし
予測値 -2.89

Cc1ccc(C(C(=O)O)N)cc1

△ GT-243 Kynurenine
LogP 実験値 なし
予測値 -1.93

Cc1ccc(C(C(=O)O)N)cc1

○ GT-244 Hydroxylysine
LogP 実験値 -3.77

Cc1ccc(C(C(=O)O)N)cc1

○ GT-277 Glutathione disulfide, Oxidized glutathione
LogP 実験値 なし
予測値 -3.6

Cc1ccc(C(C(=O)O)N)cc1

○ GT-279 Cystein
LogP 実験値 -2.49
予測値 -2.57

Cc1ccc(C(C(=O)O)N)cc1

○ GT-291 Monoiodotyrosine
LogP 実験値 なし
予測値 -1.5

Cc1ccc(C(C(=O)O)N)cc1

○ GT-329 Homocysteine
LogP 実験値 なし
予測値 -2.29

Cc1ccc(C(C(=O)O)N)cc1

○ GT-344 2-Amino adipic acid
LogP 実験値 なし
予測値 -3.43

Cc1ccc(C(C(=O)O)N)cc1

△ GT-336 N-Acetylglycine
LogP 実験値 NA
予測値 -0.89

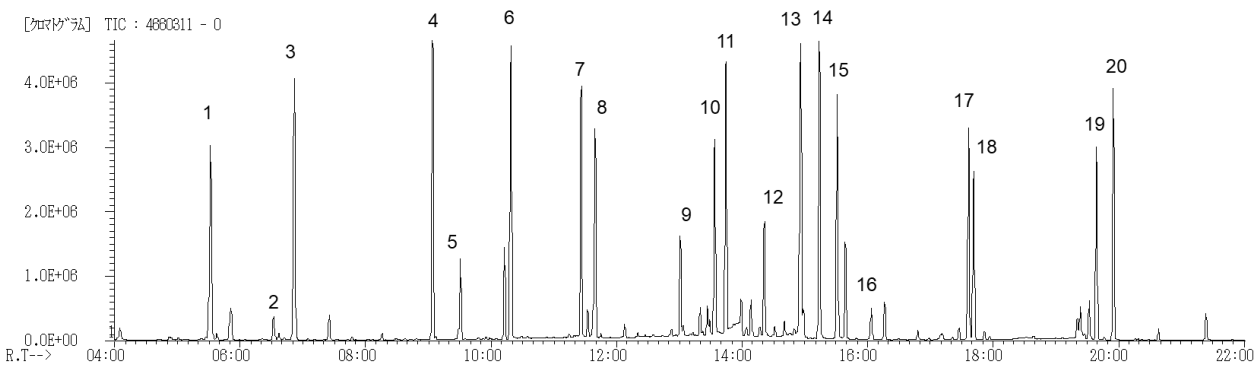
Cc1ccc(C(C(=O)O)N)cc1

○ GT-337 L-Norleucine
LogP 実験値 -1.53
予測値 -1.74

Cc1ccc(C(C(=O)O)N)cc1

○ GT-397 2-Aminobutyric acid
LogP 実験値 -0.064 (est)
予測値 -2.6

AMI-c



1. N-Methylalanine_2TMS

2. Urea_2TMS

3. Ethanolamine_3TMS

4. beta-Alanine_3TMS

5. Cysteamine_2TMS

6. Pyroglutamic acid_2TMS

7. Anthranilic acid_2TMS
8. Alanyl-glycine_2TMS

9. N-Acetylglutamine_3TMS

10. Glycylglycine_4TMS

11. Glycylglycine_3TMS

12. Allantoic acid_4TMS from Allantoin

13. Carbamoylaspartic acid_3TMS?

14. N2-acetylornithine_3TMS
15. N2-acetylornithine_4TMS

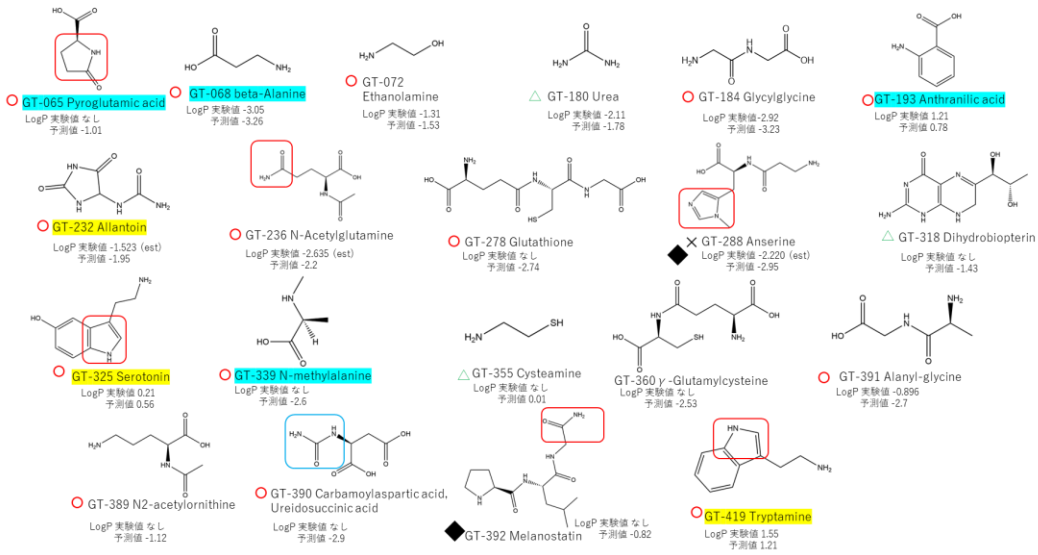
16. Cysteinylglycine_3TMS from Glutathione

17. Tryptamine_2TMS

18. Tryptamine_3TMS

19. Serotonin_4TMS

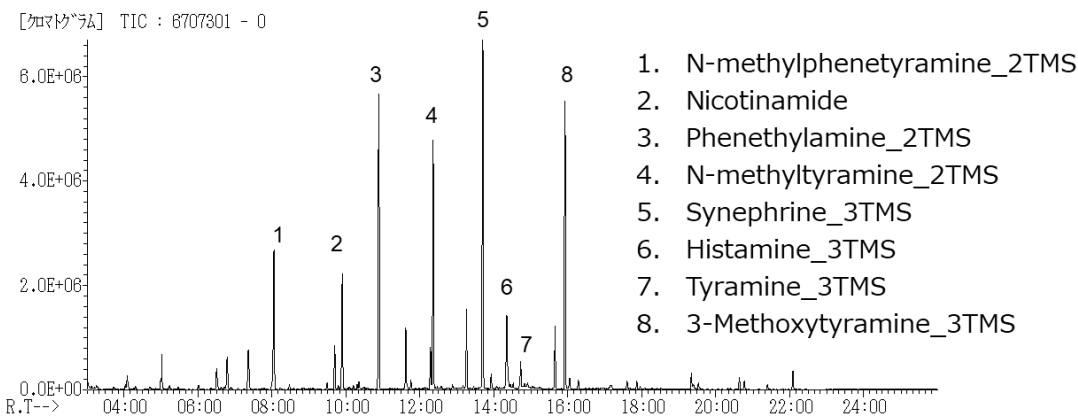
20. Serotonin_3TMS



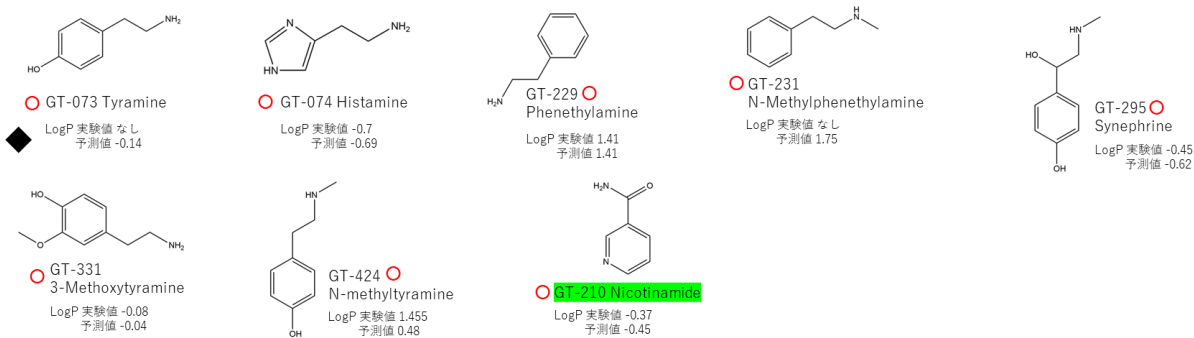
表_再現性 AMI-c : アミン類

No.	化合物名	R.T.	1	2	3	4	5	Ave.	RSD, %
1	Ethanolamine_3TMS	6.77	18,344,706	18,760,519	17,493,780	18,264,949	18,666,774	18,306,146	2.7
2	Urea_2TMS	6.42	690,645	579,267	584,437	564,301	633,860	610,502	8.5
3	Glycylglycine_4TMS	13.43	1,541,266	1,571,535	1,556,764	1,586,196	1,559,257	1,563,004	1.1
4	Glycylglycine_3TMS	13.61	1,327,178	1,354,191	1,250,947	1,262,621	1,312,559	1,301,499	3.4
5	N-Acetylglutamine_3TMS	14.78	420,759	432,628	429,408	399,770	427,147	421,942	3.1
6	Cysteinylglycine_3TMS	15.89	3,019,529	2,489,121	2,751,910	2,256,685	3,068,761	2,717,201	12.8
7	Dihydrobiopterin_3TMS	19.24	5,848,796	5,778,198	5,706,179	5,644,822	6,021,197	5,799,838	2.5
8	Homocystine_4TMS	19.75	3,498,198	3,219,955	3,289,689	3,301,934	3,598,633	3,381,682	4.7
9	Cysteamine_3TMS	17.29	94,133	91,817	83,811	82,150	93,900	89,162	6.4
10	N2-acetylornithine_3TMS	15.06	1,970,654	1,967,240	1,885,782	1,987,581	2,086,716	1,979,595	3.6
11	Carbamoylaspartic acid_3TMS	14.76	7,586,962	7,531,401	6,395,636	6,573,139	6,651,960	6,947,820	8.1
12	Alanyl-glycine_2TMS	11.54	12,926,251	13,317,262	12,414,240	12,247,814	12,971,402	12,775,394	3.4

AMI-Ph フェニルアミン



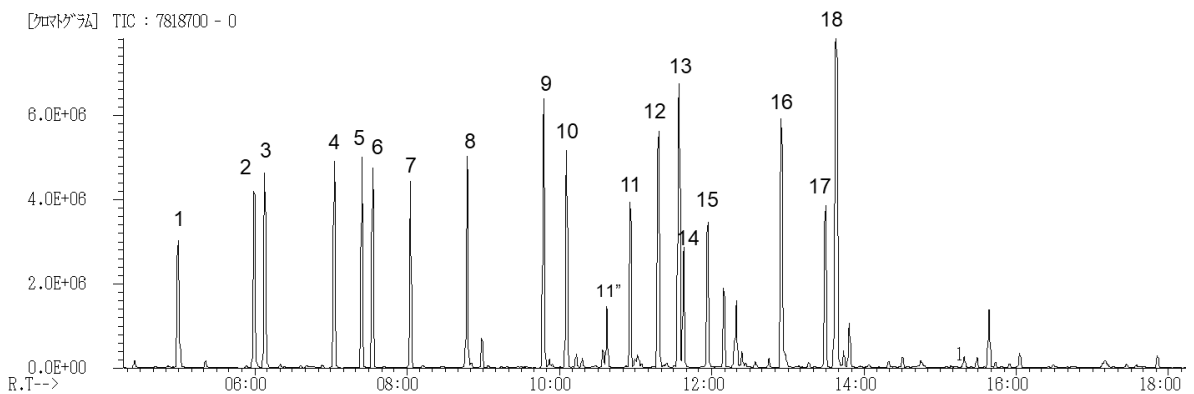
AMI-Ph Amin phenol



表_再現性_AMI-Ph：フェニルアミン

No.	化合物名	R.T.	1	2	3	4	5	Ave.	RSD, %
1	N-Methylphenethylamine_TMS	7.96	463,810	471,893	444,920	437,078	430,605	446,856	3.9
2	Phenethylamine_2TMS	10.79	1,318,447	1,344,021	1,308,183	1,256,777	1,323,297	1,256,652	2.6
3	N-methyltyramine_2TMS	12.22	25,625,193	25,880,808	25,300,589	25,211,575	25,535,564	25,392,688	1.0
4	Synephrine_3TMS	13.57	32,193,361	32,378,988	32,226,363	32,164,405	32,014,646	32,326,063	0.4
5	Histamine_3TMS	14.19	1,998,477	2,137,927	1,922,344	1,945,651	1,888,379	1,975,412	4.9
6	Tyramine_3TMS	14.56	305,431	324,406	293,501	267,934	308,192	280,249	7.5
7	3-Methoxytyramine_3TMS	15.78	17,834,727	18,284,298	17,197,268	16,484,524	17,616,675	17,005,718	4.0

CA-a



1. Oxalic acid_2TMS

2. Malonic acid_2TMS

3. Methylmalonic acid_2TMS

4. Ethylmalonic acid_2TMS

5. Succinic acid_2TMS

6. Maleic acid_2TMS

7. Fumaric acid_2TMS
8. Glutaric acid_2TMS

9. Malic acid_3TMS

10. Adipic acid_2TMS

11. α-Ketoglutaric acid_MO_2TMS

12. Pimelic acid_2TMS

13. Tartaric acid_4TMS

14. 2-Oxoadipic acid_MO_2TMS_1
15. 2-Oxoadipic acid_MO_2TMS_2

16. cis-Aconitic acid_3TMS

17. Azelaic acid_2TMS

18. Citric acid_4TMS

19. Isocitric acid_4TMS

表 再現性 CA-a : 多価カルボン酸

No.	化合物名	R.T.	1	2	3	4	5	Ave.	RSD, %
1	Oxalic acid_2TMS	4.92	9,943,140	10,352,653	11,218,900	10,561,913	10,063,981	10,428,117	4.8
2	Malonic acid_2TMS	5.91	10,509,952	11,392,003	12,288,369	10,947,571	10,738,511	11,175,281	6.3
3	Methylmalonic acid_2TMS	6.05	7,788,860	8,277,635	8,811,077	7,699,592	7,881,064	8,091,646	5.7
4	Ethylmalonic acid_2TMS	6.96	8,070,804	8,687,938	9,130,957	8,242,890	8,317,484	8,490,015	5.0
5	Succinic acid_2TMS	7.32	15,721,066	16,533,034	17,249,408	16,724,182	16,359,986	16,517,535	3.4
6	Maleic acid_2TMS	7.32	15,721,066	16,533,034	17,249,408	16,724,182	16,359,986	16,517,535	3.4
7	Fumaric acid_2TMS	7.94	1,982,777	2,161,887	2,222,840	2,013,810	2,057,158	2,087,694	4.9
8	Glutaric acid_2TMS	8.67	62,832	58,095	58,763	55,724	64,602	60,003	6.0
9	Malic acid_3TMS	9.68	883,090	924,614	964,449	847,797	875,247	899,039	5.1
10	Oxoglutaric acid_1MO_2TMS	10.81	1,709,241	1,817,472	1,921,656	1,793,265	1,760,990	1,800,525	4.4
11	Tartaric acid_4TMS	11.46	4,139,548	4,335,777	4,389,332	4,292,087	4,283,021	4,287,953	2.2
12	cis-Aconitic acid_3TMS	12.77	2,463,603	2,679,704	2,753,197	2,617,098	2,659,192	2,634,559	4.1
13	Citric acid_4TMS	13.49	2,391,420	2,521,056	2,565,280	2,513,430	2,490,961	2,496,429	2.6
14	Isocitric acid_4TMS	13.50	1,184,986	1,238,951	1,246,978	1,205,836	1,219,018	1,219,154	2.1

CA-a Carboxylic acid

多価カルボン酸

○GT-001 Citric acid
LogP 実験値 -1.64
予測値 -1.33

○GT-003 Succinic acid
LogP 実験値 -0.59
予測値 -0.53

○GT-004 Fumaric Acid
LogP 実験値 0.46
予測値 0.21

○GT-005 Maleic acid
LogP 実験値 -0.48
予測値 0.21

○GT-007 Oxalic acid
LogP 実験値 なし
予測値 -0.51

○GT-008 Malonic acid
LogP 実験値 -0.81
予測値 -0.6

○GT-009 Adipic acid, Hexanedioic acid
LogP 実験値 0.08
予測値 0.13

○GT-011 cis-Aconitic acid
LogP 実験値 -0.14
予測値 -0.41

△GT-012 Azelaic acid
LogP 実験値 1.57
予測値 1.37

○GT-013 Ethylmalonic acid
LogP 実験値 なし
予測値 0.43

○GT-016 Glutaric acid
LogP 実験値 -0.29
予測値 なし

○GT-017 Methylmalonic acid
LogP 実験値 なし
予測値 0.17

○GT-031 Malic acid
LogP 実験値 なし
予測値 -0.87

○GT-032 L-Tartaric acid
LogP 実験値 なし
予測値 -1.27

○GT-206 Isocitric acid
LogP 実験値 なし
予測値 -0.35

○GT-382 Pimelic acid
LogP 実験値 0.61
予測値 0.51

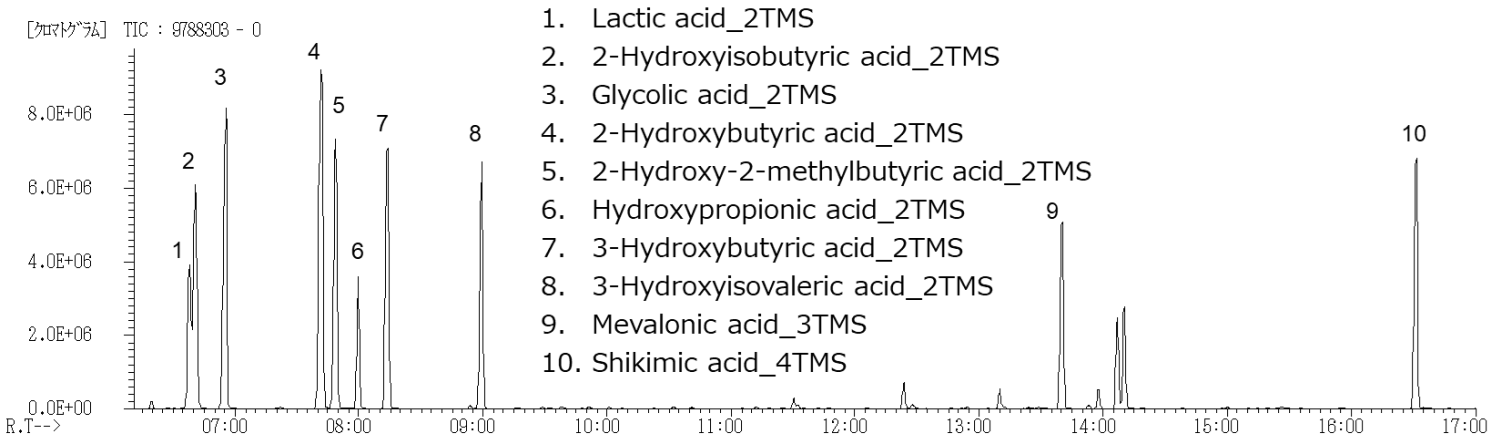
◆GT-014 Oxaloacetic acid
LogP 実験値 なし
予測値 -0.68

○GT-033 α-Ketoglutaric acid, 2-Oxoglutaric acid
LogP 実験値 なし
予測値 -0.6

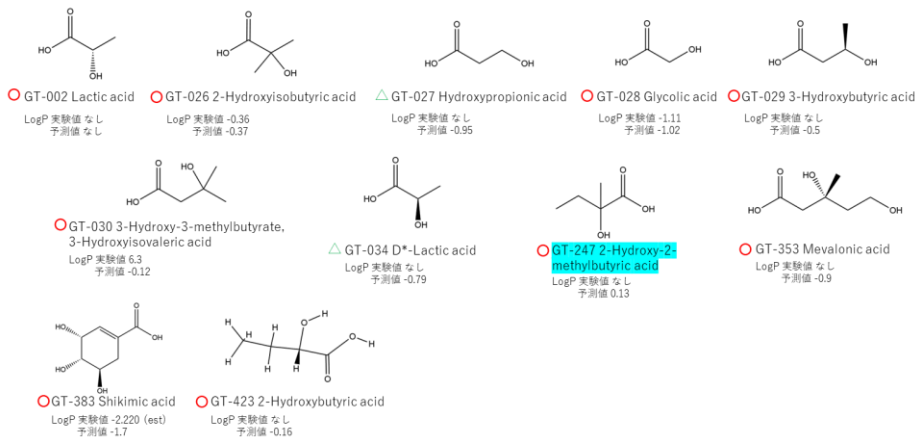
○GT-287 2-Oxoadipic acid
LogP 実験値 なし
予測値 -0.37

慣用名	IUPAC名	示性式	構造式
シュウ酸	エタン二酸	HOOC-COOH	
マロン酸	プロパン二酸	HOOC-CH ₂ -COOH	
コハク酸	ブタン二酸	HOOC-(CH ₂) ₂ -COOH	
グルタル酸	ペンタン二酸	HOOC-(CH ₂) ₃ -COOH	
アジピン酸	ヘキサン二酸	HOOC-(CH ₂) ₄ -COOH	
ピメリン酸	ヘプタン二酸	HOOC-(CH ₂) ₅ -COOH	
スベリン酸	オクタン二酸	HOOC-(CH ₂) ₆ -COOH	
アゼライン酸	ノナン二酸	HOOC-(CH ₂) ₇ -COOH	
セバシン酸	デカン二酸	HOOC-(CH ₂) ₈ -COOH	

CAH

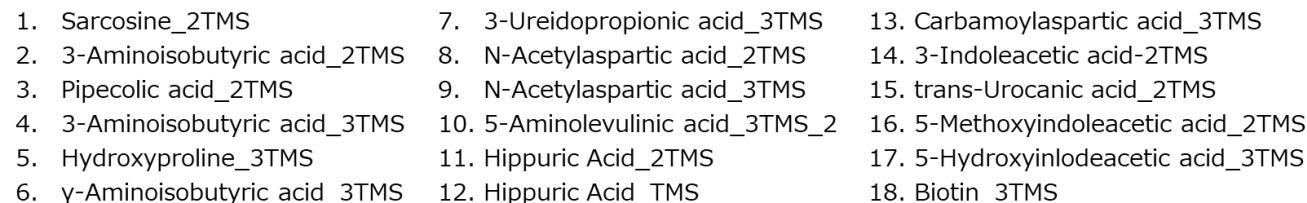


CAH *Hydroxy carboxylic acid* Hydroxy acid ヒドロキシ酸

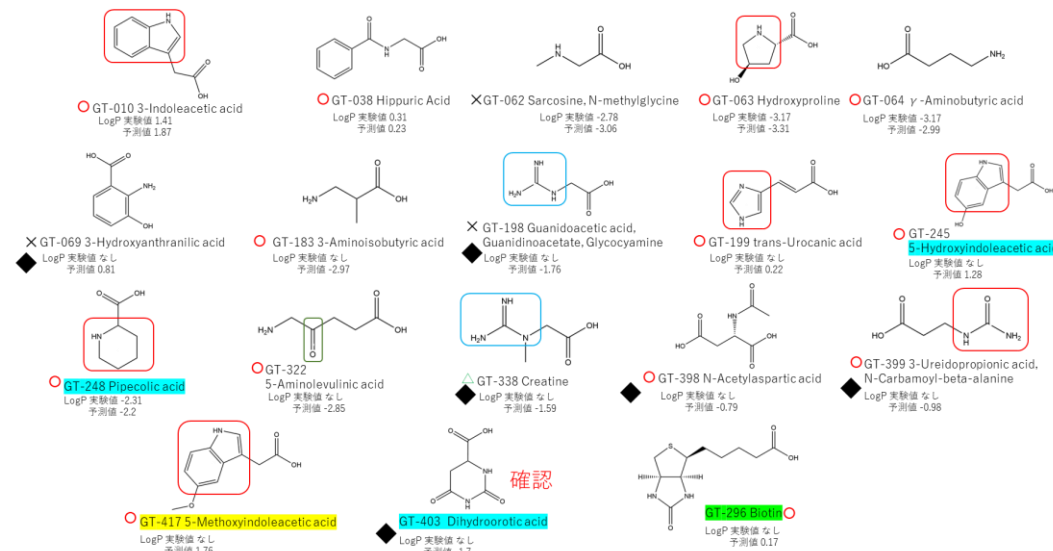


表_再現性_CAH : ヒドロキシカルボン酸

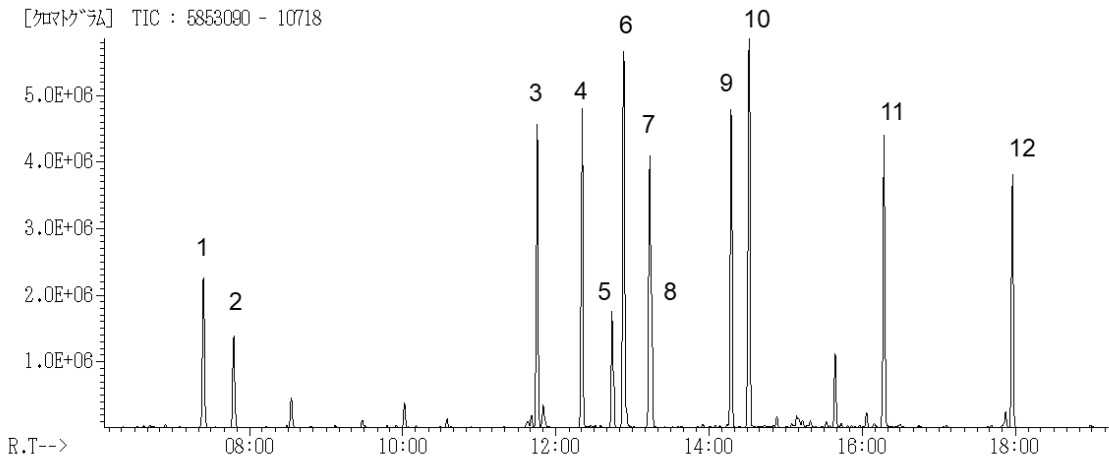
No.	化合物名	R.T.	1	2	3	4	5	Ave.	RSD, %
1	Lactic acid_2TMS	4.02	2,179,270	2,155,987	2,170,626	2,039,549	2,112,845	2,131,655	2.7
2	2-Hydroxyisobutyric acid_2TMS	4.07	9,073,543	8,679,555	9,067,649	8,501,693	8,554,651	8,775,418	3.2
3	Glycolic acid_2TMS	4.22	2,096,196	2,114,024	2,103,154	1,926,768	2,072,207	2,062,470	3.8
4	2-Hydroxybutyric acid_2TMS	4.85	1,001,395	1,006,548	1,005,822	945,431	977,707	987,381	2.7
5	2-Hydroxy-2-methylbutyric acid_2TMS	4.98	10,460,436	10,508,356	10,509,124	10,013,274	10,319,530	10,362,144	2.0
6	Hydroxypropionic acid_2TMS	5.10	417,058	376,897	423,239	368,993	390,226	395,283	6.1
7	3-Hydroxybutyric acid_2TMS	5.30	1,068,153	977,559	1,084,657	959,660	994,517	1,016,909	5.5
8	3-Hydroxyisovaleric acid_2TMS	6.00	6,071,185	6,091,554	6,088,039	5,835,981	6,042,343	6,025,820	1.8
9	Mevalonic acid_3TMS	10.55	1,379,059	1,457,631	1,436,280	1,230,160	1,433,676	1,387,361	6.7



No.	化合物名	R.T.	1	2	3	4	5	Ave.	RSD, %
1	Sarcosine_2TMS	5.03	20,812,681	22,477,835	20,481,562	20,134,599	20,954,283	20,972,192	4.3
2	3-Amino isobutyric acid_2TMS_1	6.00	8,591,636	9,124,213	7,988,069	8,117,773	7,643,440	8,293,026	6.9
3	Pipecolic acid_2TMS	8.18	24,715,369	25,477,409	24,362,624	24,385,715	24,788,323	24,745,888	1.8
4	3-Aminoisobutyric acid_3TMS_2	9.36	4,325,675	4,781,121	4,620,749	4,597,183	5,239,881	4,712,922	7.1
5	Hydroxyproline_3TMS	10.19	14,438,786	14,853,365	14,156,068	14,299,998	14,823,725	14,514,388	2.2
6	4-Aminobutanoic acid_3TMS	10.27	3,346,571	3,504,624	3,335,640	3,355,525	3,416,827	3,391,837	2.1
7	Creatinine_3TMS	10.58	345,238	465,007	358,921	343,326	363,135	375,125	13.6
8	N-Acetylaspartic acid_3TMS	11.84	2,764,409	2,750,160	2,791,349	2,810,813	2,700,955	2,763,537	1.5
9	5-Aminolevulinic acid_3TMS	12.53	11,800,475	12,192,653	11,478,918	11,431,940	11,573,288	11,695,455	2.7
10	N-Carbamoylaspartate_3TMS	13.32	136,431	134,438	135,660	163,713	159,086	145,866	9.8
11	Hippuric acid_TMS	13.96	595,557	569,188	576,440	558,265	570,175	573,925	2.4
12	Carbamoylaspartic acid_3TMS	14.77	3,909,251	3,618,707	3,842,100	3,839,872	3,803,670	3,802,720	2.9
13	Urocanic acid_2TMS	15.52	4,132,971	3,699,605	4,017,909	4,056,313	4,043,889	3,990,137	4.2



CA-Ph

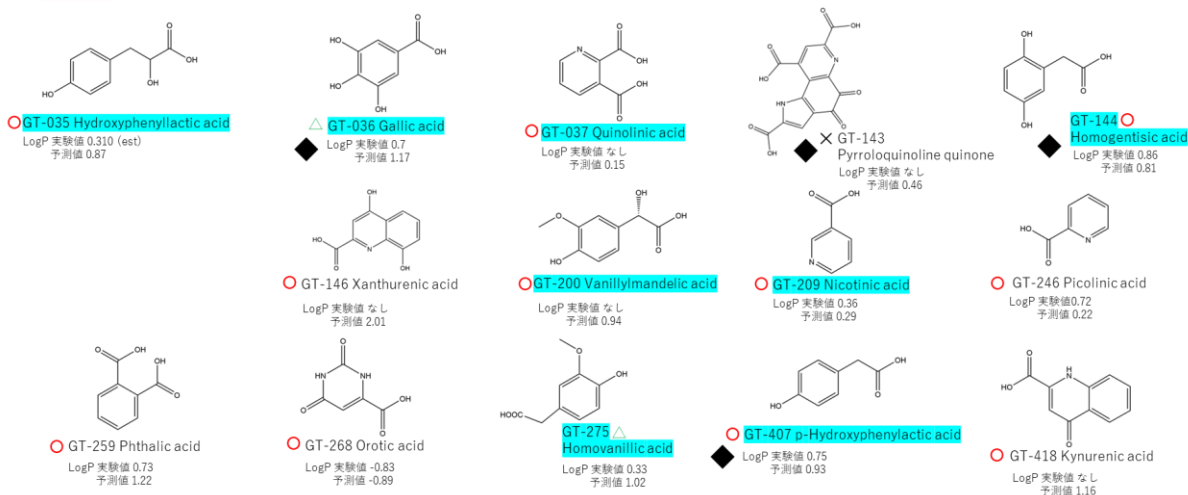


1. Nicotinic acid_1TMS
2. Picolinic acid_1TMS
3. p-Hydroxyphenyllactic acid_2TMS
4. Phthalic acid_2TMS
5. Quinolinic acid_2TMS
6. Orotic acid_3TMS
7. Homovanillic acid_2TMS
8. 4-Hydroxyphenylpyruvic acid_3TMS
9. Vanillylmandelic acid_3TMS
10. Hydroxyphenyllactic acid_3TMS
11. Kynurenic acid_2TMS
12. Xanthurenic acid_3TMS

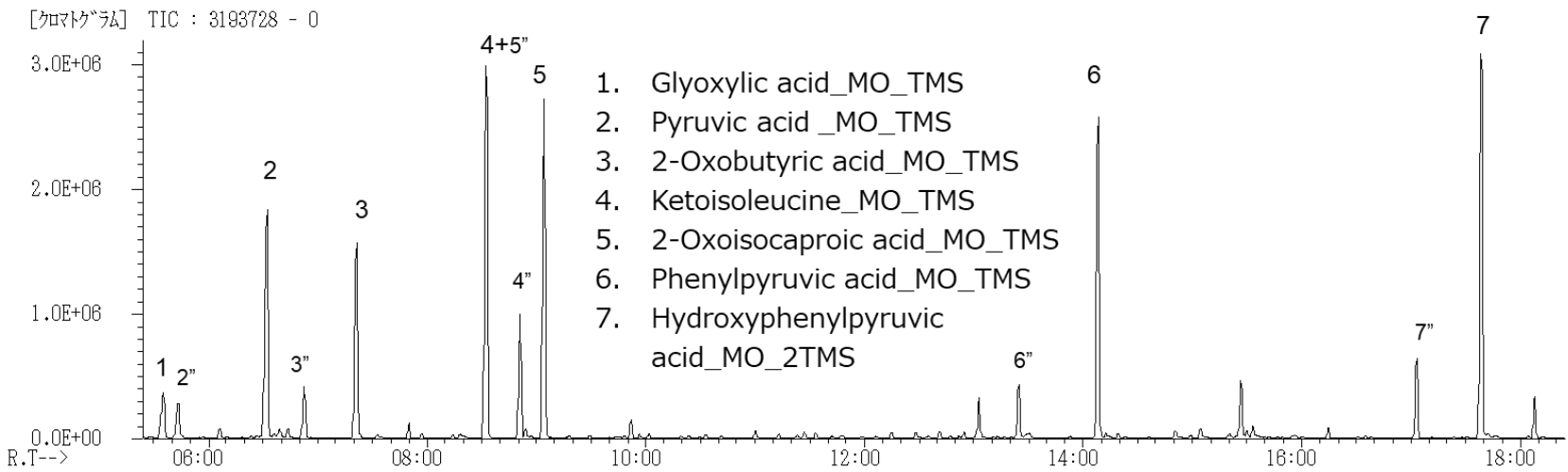
表_再現性_CA-Ph：フェニルカルボン酸

No.	化合物名	R.T.	1	2	3	4	5	Ave.	RSD, %
1	Nicotinic acid_1TMS	7.30	3,733,663	3,820,368	3,979,643	3,846,166	4,337,747	3,943,517	6.0
2	Picolinic acid_1TMS	7.68	2,299,373	2,587,753	2,726,380	2,467,222	2,907,282	2,597,602	9.0
3	Phthalic acid_2TMS	12.21	1,209,674	1,101,627	1,242,071	1,108,491	1,210,249	1,174,422	5.5
4	Quinolinic acid_2TMS	12.61	480,559	429,683	535,066	446,930	508,346	480,117	9.0
5	Orotic acid_3TMS	12.72	2,156,913	2,092,817	2,221,464	2,038,913	2,181,858	2,138,393	3.4
6	Homovanillic acid_2TMS	13.07	843,073	792,983	834,418	758,351	838,233	813,412	4.5
7	4-Hydroxyphenylpyruvic acid_3TMS	13.09	6,431,379	5,943,755	6,491,735	5,825,926	6,340,672	6,206,693	4.9
8	Vanillylmandelic acid_3TMS	14.12	10,434,889	9,741,687	10,463,928	9,410,660	10,351,492	10,080,531	4.7
9	Hydroxyphenyllactic acid_3TMS	14.37	10,714,726	9,883,815	10,709,181	9,660,998	10,395,885	10,272,921	4.7
10	Kynurenic acid_2TMS	16.13	2,663,197	2,721,943	3,114,844	2,627,813	2,889,710	2,803,501	7.2
11	Xanthurenic acid_3TMS	17.79	5,905,495	5,696,766	6,387,825	5,433,458	5,678,212	5,820,351	6.2

CA-Ph *Carboxylic acid, (Phenyl, Phenol-)*



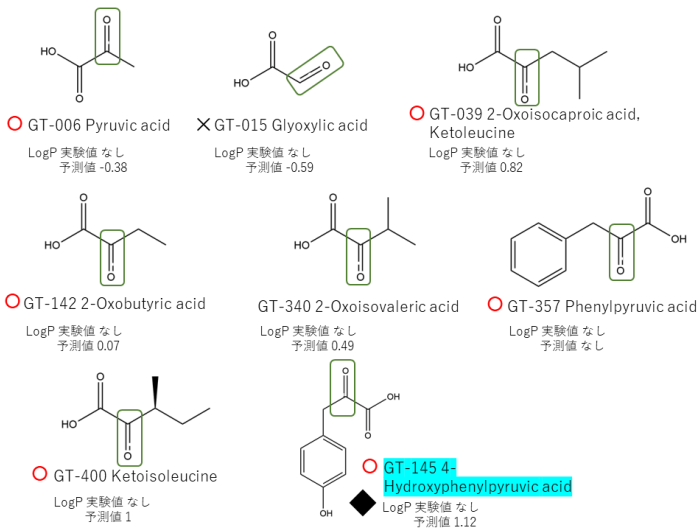
CAMO



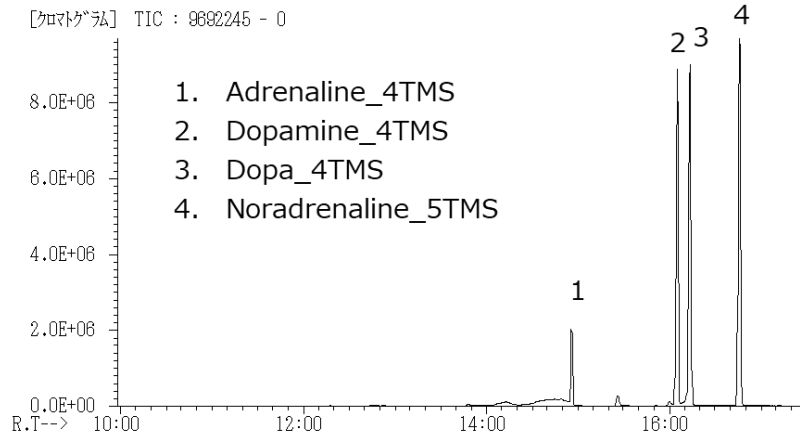
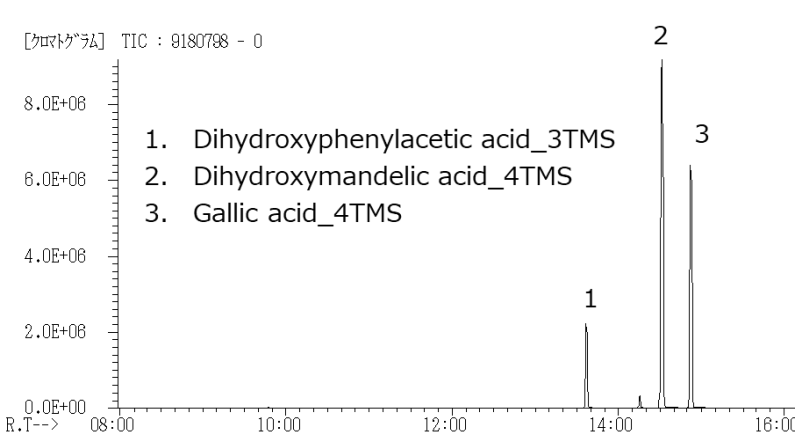
表_再現性_CAMO：ケト酸

No.	化合物名	R.T.	1	2	3	4	5	Ave.	RSD, %
1	Glyoxylic acid_1MO_1TMS	5.49	2,845	3,464	2,681	3,535	3,485	3,202	12.7
2	Pyruvic acid_1MO_1TMS_min	5.62	96,571	100,362	106,375	100,974	93,644	99,585	4.8
3	Pyruvic acid_1MO_1TMS	6.43	826,560	829,050	851,202	925,370	847,341	855,905	4.7
4	2-Oxobutyric acid_1MO_1TMS_min	6.78	73,312	75,095	76,994	77,698	69,937	74,607	4.2
5	2-Oxobutyric acid_1MO_1TMS	7.26	469,012	484,814	489,761	523,995	481,695	489,855	4.2
6	2-Oxisocaproic acid_1MO_1TMS_min	8.44	144,242	152,525	144,462	160,830	145,066	149,425	4.9
7	2-Oxisocaproic acid_1MO_1TMS	8.45	25,946	26,208	26,633	27,101	25,926	26,363	1.9
8	Ketoisoleucine_1MO_1TMS	8.76	241,498	253,689	242,484	267,380	238,804	248,771	4.8
9	Ketoisoleucine_1MO_1TMS_min	8.97	234,790	244,491	246,735	259,714	238,877	244,921	3.9
10	Phenylpyruvic acid_1MO_1TMS	14.02	15,421	14,930	15,955	15,574	14,717	15,319	3.3

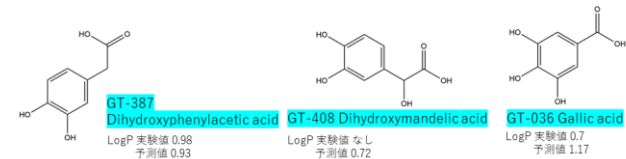
CAMO Carboxylic acid Mono Oxo Keto acid ケト酸



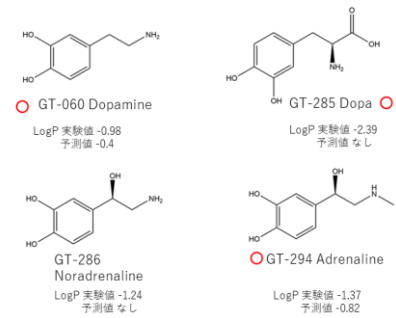
CT カテコール



CA-CT Carboxylic acid Catechol

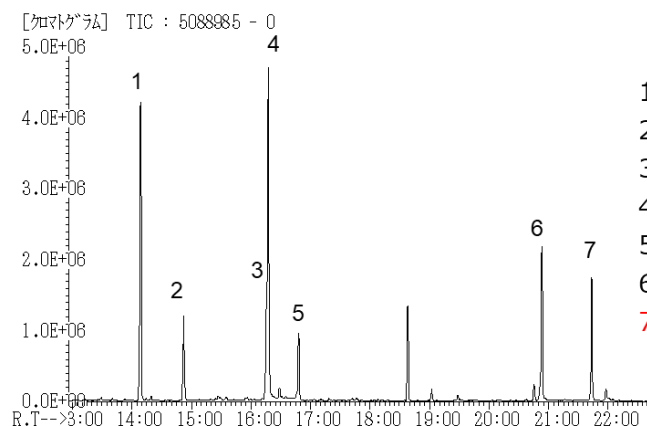


AMI-CT Amin Catechol

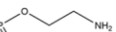


表_再現性_CT : カテコール

No.	化合物名	R.T.	1	2	3	4	5	Ave.	RSD, %
1	Dihydroxyphenylacetic acid_3TMS	13.61	496,624	526,315	448,026	519,329	473,843	492,827	6.6
2	Dihydroxymandelic acid_4TMS	14.52	14,155,906	14,464,432	13,622,344	14,169,638	14,107,401	14,103,944	2.2
3	Gallic acid_4TMS	14.87	1,870,532	1,908,201	1,665,419	1,807,102	1,719,294	1,794,110	5.7
4	Adrenaline_4TMS	20.38	793,933	888,157	966,398	1,038,550	1,039,344	945,276	11.1
5	Dopamine, 4TMS	20.51	11,116,183	11,918,724	12,462,944	12,577,662	12,340,505	12,083,204	4.9
6	Dopa_4TMS	20.60	1,235,279	1,373,241	1,401,476	1,443,503	1,321,740	1,355,048	5.9
7	Noradrenaline_5TMS	20.74	2,973,261	3,223,618	3,386,937	3,412,434	3,302,497	3,259,749	5.4

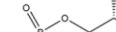


1. 3-Phosphohydroxypyruvic acid_MO_3TMS
2. Pyrophosphoric acid_4TMS
3. phosphoethanolamine_4TMS
4. phosphoserine_3TMS
5. Phosphoserine_4TMS
6. Pyridoxal phosphate_MO_2TMS
7. Pyridoxal phosphate_MO_3TMS



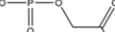
○ GT-192
Phosphoethanolamine

LogP 実験値 なし
予測値 -1.54



○ GT-321 Phosphoserine

LogP 実験値 なし
予測値 -2.32



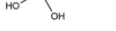
○ GT-358
3-Phosphohydroxypyruvic acid

LogP 実験値 なし
予測値 -1.8



GT-409 ○
Pyrophosphoric acid

LogP 実験値 なし
予測値 なし

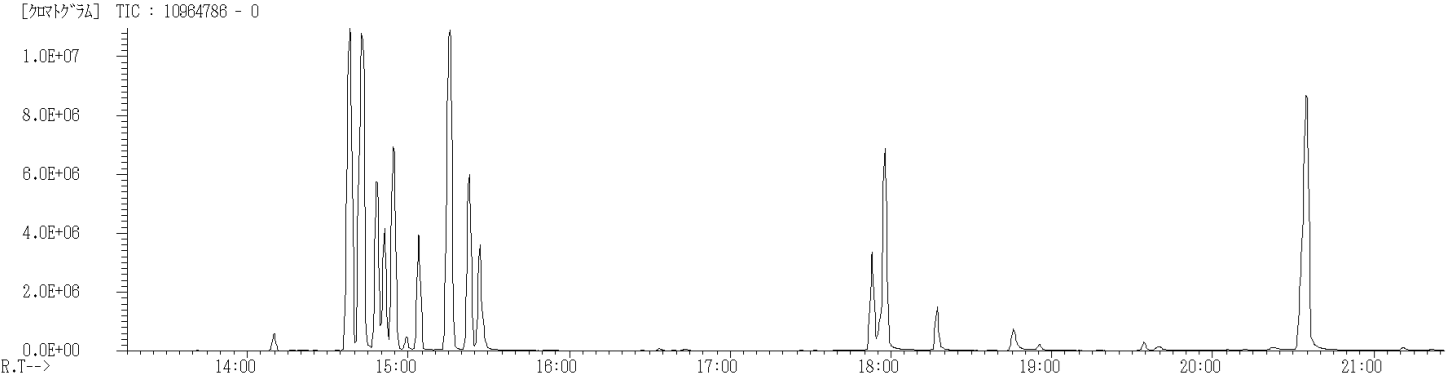


GT-428 Pyridoxal phosphate ○

LogP 実験値 なし
予測値 -0.55

No.	化合物名	R.T.	1	2	3	4	5	Ave.	RSD, %
1	Phosphohydroxypyruvic acid_MO_3TMS	11.00	3,003,944	3,066,799	3,246,702	3,078,713	2,868,768	3,052,985	4.5
2	Pyrophosphoric acid_4TMS	11.72	4,790,266	5,010,384	5,504,588	5,125,832	4,574,256	5,001,065	7.0
3	Phosphoserine_4TMS	13.65	4,008,687	4,328,789	4,525,860	4,217,400	3,949,273	4,206,002	5.6
4	Pyridoxal phosphate_MO_3TMS	18.55	380,875	404,220	304,887	287,860	318,400	339,248	14.9

SUC 糖酸



1. Threonic acid_4TMS

2. Glucuronic acid_MO_5TMS_1

3. Galacturonic acid_MO_5TMS_1

4. Glucuronic acid_MO_5TMS_2

5. Glucaric acid-g-lactone_6TMS_1
6. Galacturonic acid_MO_5TMS_2

7. Glucaric acid-g-lactone_6TMS_2

8. Gluconic acid_6TMS

9. Glucaric acid_6TMS

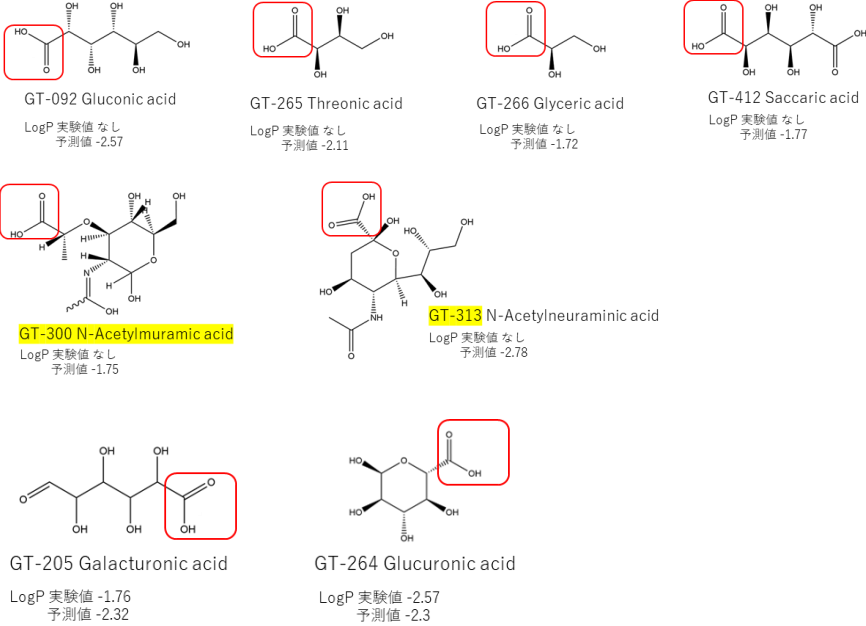
10. Glucuronic acid_5TMS
11. N-Acetylmuramic acid_MO_4TMS

12. N-Acetylmuramic acid_4TMS_1

13. N-Acetylmuramic acid_4TMS_2

14. N-Acetylneuraminic acid_6TMS

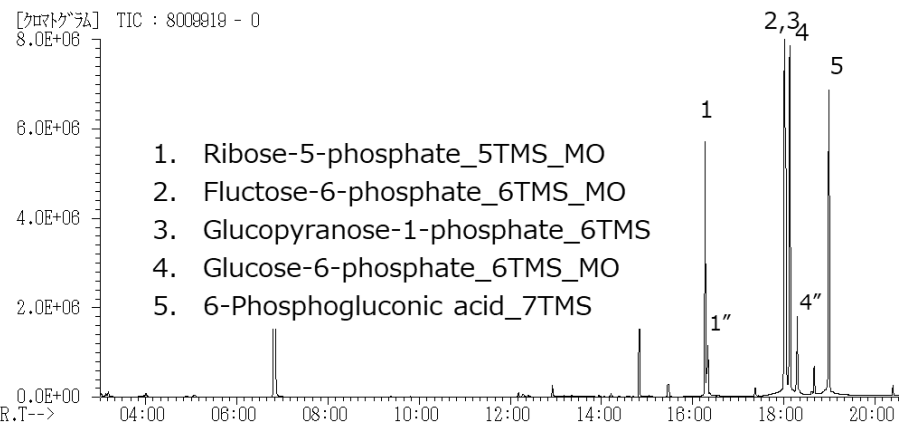
SUC Sugar Carboxylic acid Sugar acid



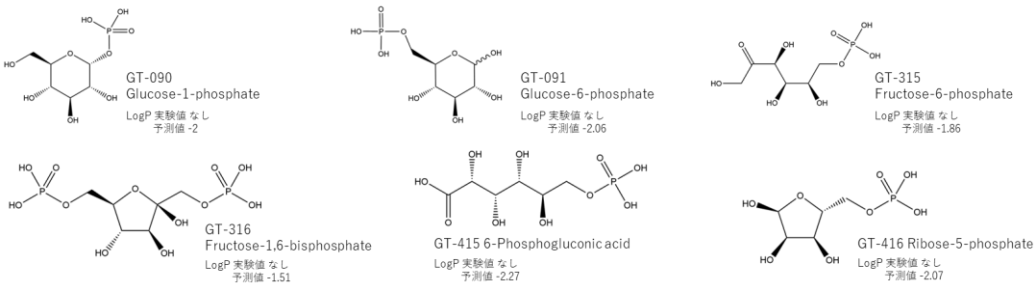
表_再現性_SUC : 糖酸

No.	化合物名	R.T.	1	2	3	4	5	Ave.	RSD, %
1	Glyceric acid_3TMS	7.58	127,748	133,450	149,880	141,482	157,036	141,919	8.4
2	Threonic acid_4TMS	10.50	3,445,900	3,528,828	3,755,918	3,513,631	3,861,043	3,621,064	4.9
3	Glucuronic acid_MO_5TMS_1	14.64	8,337,789	8,806,405	8,998,579	8,626,982	9,522,127	8,858,376	5.0
4	Galacturonic acid_MO_5TMS_1	14.71	8,838,634	9,059,858	9,420,600	8,943,348	9,810,475	9,214,583	4.3
5	Glucuronic acid_MO_5TMS_2	14.80	2,977,251	3,217,878	3,467,699	3,083,125	3,579,213	3,265,033	7.8
6	Glucaric acid-g-lactone_6TMS_1	14.85	48,852	55,785	55,432	51,985	64,356	55,282	10.5
7	Galacturonic acid_MO_5TMS_2	14.91	4,389,581	4,653,193	4,788,035	4,449,686	5,056,689	4,667,437	5.8
8	Glucaric acid-g-lactone_6TMS_2	15.06	88,399	101,727	97,683	93,326	112,975	98,822	9.5
9	Gluconic acid_6TMS	15.26	4,204,101	4,287,047	4,400,279	4,198,552	4,568,564	4,331,709	3.6
10	Glucaric acid_6TMS	15.38	3,906,980	4,083,474	4,154,786	4,024,927	4,390,317	4,112,097	4.4
11	Glucuronic acid_5TMS	15.44	938,523	1,016,732	1,050,778	886,537	1,135,721	1,005,658	9.7
12	N-Acetylmuramic acid_MO_4TMS	17.88	238,034	286,293	267,473	271,680	285,641	269,824	7.3
13	N-Acetylmuramic acid_4TMS_1	17.96	2,338,480	2,502,815	2,521,352	2,416,398	2,653,616	2,486,532	4.8
14	N-Acetylmuramic acid_4TMS_2	18.28	337,965	324,089	368,166	338,053	364,341	346,523	5.5
15	N-Acetylneuraminic acid_6TMS	20.58	2,343,414	2,578,746	2,437,382	2,510,327	2,783,646	2,530,703	6.6

SUP Sugar phosphates 糖リン



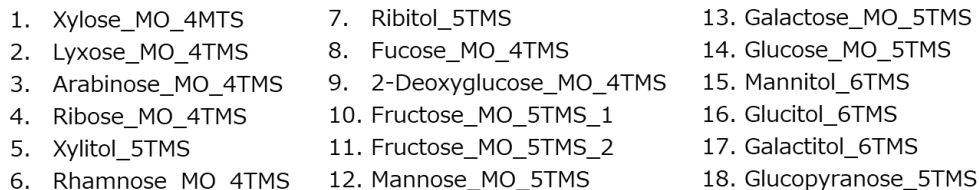
SUP Sugar phosphates 糖リン酸



表_再現性_SUP : 糖リン酸

No.	化合物名	R.T.	1	2	3	4	5	Ave.	RSD, %
1	Ribose-5-phosphate_5TMS_MO-1	16.27	5,851,551	5,864,746	6,166,775	6,143,855	5,510,602	5,907,506	4.5
2	Fluctose-6-phosphate_6TMS_MO	18.01	752,734	760,737	807,194	821,845	659,901	760,482	8.3
3	Glucopyranose-1-phosphate_6TMS	18.04	890,166	692,220	801,522	703,313	819,918	781,428	10.7
4	Glucose-6-phosphate_6TMS_MO-1	18.14	1,973,857	2,001,738	2,123,570	2,121,921	1,798,984	2,004,014	6.7
5	Glucopyranose-6-phosphate_6TMS	18.66	1,946,212	1,803,026	1,740,427	1,774,688	1,494,559	1,751,782	9.3
6	6-Phosphogluconic acid_7TMS	18.98	265,661	271,071	273,788	281,219	261,165	270,581	2.8

[知マトグラム] TIC : 8338199 - 0

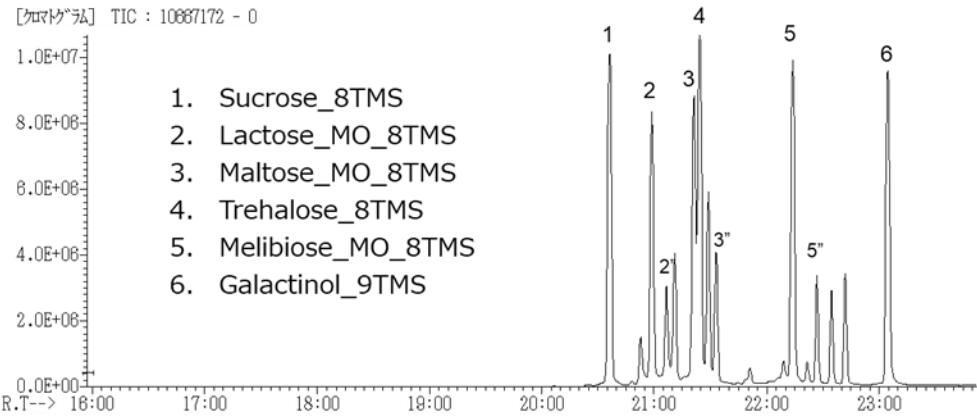


表_再現性_SUG1：糖類

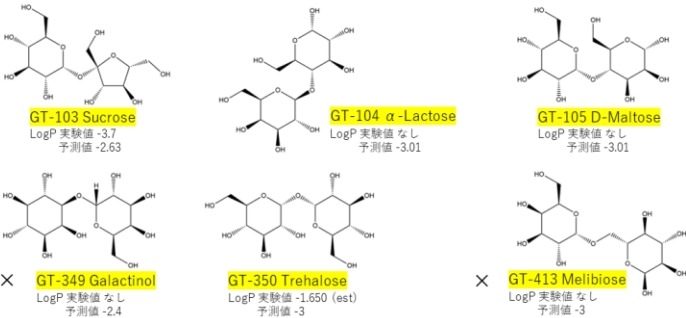
No.	化合物名	R.T.	1	2	3	4	5	Ave.	RSD, %
1	Xylose_MO_4TMS	11.62	248,298	302,403	309,064	288,476	296,128	288,874	8.3
2	Lyxose_MO_4TMS	11.68	168,231	213,635	210,824	202,041	200,069	198,960	9.1
3	Arabinose_MO_4TMS	11.70	468,912	600,741	601,535	577,757	573,160	564,421	9.7
4	Ribose_MO_4TMS	11.87	112,266	154,818	158,010	150,041	148,310	144,689	12.8
5	Xylitol_5TMS	12.17	440,783	479,113	487,919	484,797	482,799	475,082	4.1
6	Rhamnose_MO_4TMS	12.33	141,072	192,753	190,964	177,873	182,074	176,947	11.9
7	Ribitol_5TMS	12.39	699,514	760,896	760,796	750,284	777,086	749,715	4.0
8	Fucose_MO_4TMS	12.43	143,271	188,881	189,779	182,123	180,900	176,991	10.9
9	2-Deoxyglucose_1MO_4TMS	13.15	163,411	202,607	202,956	193,183	198,039	192,039	8.6
10	Fructose_MO_5TMS_1	13.96	476,984	549,084	550,100	534,450	543,704	530,864	5.8
11	Fructose_MO_5TMS_2	14.06	467,733	535,613	537,083	514,619	527,279	516,465	5.6
12	Mannose_MO_5TMS	14.11	1,022,883	1,100,093	1,085,759	1,073,290	1,095,482	1,075,501	2.9
13	Galactose_MO_5TMS	14.16	695,787	744,259	735,491	722,556	735,204	726,659	2.6
14	Galactose_1MO_5TMS	14.22	867,189	914,458	911,887	904,440	897,246	899,044	2.1
15	Mannitol_6TMS	14.54	3,447,215	3,527,191	3,508,891	3,501,682	3,603,874	3,517,771	1.6
16	Glucitol_6TMS	14.61	3,077,260	3,172,167	3,093,691	3,138,494	3,194,061	3,135,135	1.6
17	Galactitol_6TMS	14.66	1,530,232	1,558,919	1,635,385	1,594,436	1,583,477	1,580,490	2.5
18	Glucopyranose_5TMS	15.04	1,307,324	1,489,829	1,476,693	1,412,542	1,317,424	1,400,762	6.1
19	Gluconic acid_6TMS	15.25	2,725,202	2,774,830	2,740,392	2,705,259	2,768,751	2,742,887	1.1
20	Myo-Inositol_6TMS	16.15	3,884,840	4,113,416	4,050,001	4,076,196	4,118,061	4,048,503	2.4

GT-095 D-Xylose LogP 実験値 -2.57	GT-096 L-Arabinose LogP 実験値 -3.02 予測値 -2.57	GT-097 Rhamnose LogP 実験値 -2.459 (est) 予測値 -2.39	GT-098 L-Fucose LogP 実験値 -2.01 予測値 -2.39	GT-099 D-Fructose LogP 実験値 -2.1 予測値 -2.45	GT-100 Mannose LogP 実験値 -2.1 予測値 -2.57	GT-101 Galactose LogP 実験値 なし 予測値 -2.57
GT-102 D-Glucose LogP 実験値 -3.24 予測値 -2.57	GT-106 Ribitol LogP 実験値 -3.770 (est) 予測値 -2.53	GT-107 Ribose LogP 実験値 -2.32 予測値 -2.65	GT-108 2-Deoxyglucose LogP 実験値 -1.95 予測値 -1.95	GT-109 Glucitol, Sorbitol LogP 実験値 -2.2 予測値 -2.68	GT-137 Inositol LogP 実験値 -2.1 予測値 -2.59	
GT-139 Dihydroxyacetone LogP 実験値 なし 予測値 -1.65	GT-140 Mannitol LogP 実験値 -3.1 予測値 -2.68	GT-141 Galactitol LogP 実験値 -3.1 予測値 -2.68	GT-257 Glycerol LogP 実験値 -1.76 予測値 -1.9	GT-301 N-Acetylgalactosamine LogP 実験値 なし 予測値 -2.5		
314 Cetylmannosamine LogP 実験値 -3.22 予測値 -2.6	GT-341 Guconolactone LogP 実験値 -2.16 予測値 -2.16	GT-348 N-Acetylglucosamine LogP 実験値 -2.114 (est) 予測値 -2.6	GT-410 Xylitol LogP 実験値 なし 予測値 -2.5	GT-414 Lyxose LogP 実験値 なし 予測値 -	GT-426 Ribulose LogP 実験値 なし 予測値 -2.2	

SUG2 二糖



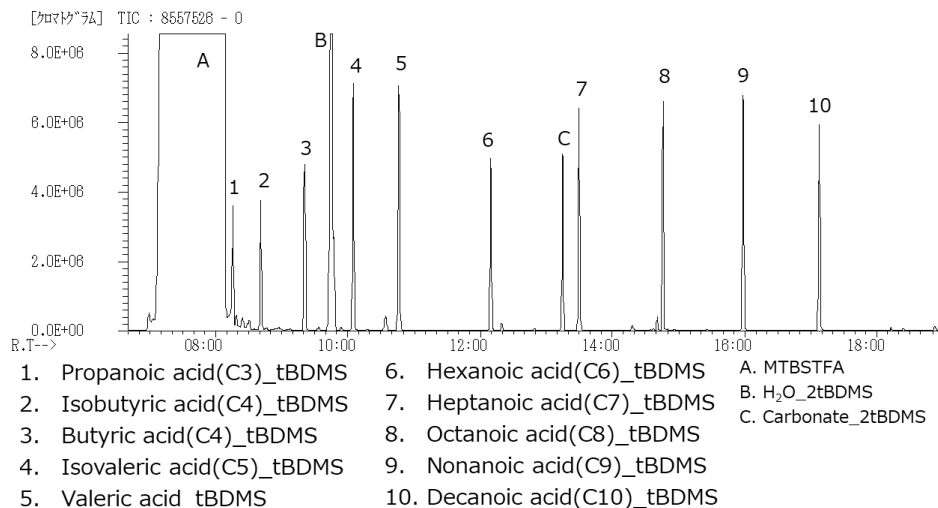
SUG-2 Sugars 2 糖類 disaccharide



表_再現性_SUG2 : 二糖類

No.	化合物名	R.T.	1	2	3	4	5	Ave.	RSD, %
1	Sucrose_8TMS	20.60	10,003,313	9,935,049	9,873,568	9,893,165	9,937,164	9,928,452	0.5
2	Lactose_MO_8TMS	20.98	3,827,723	3,633,226	3,647,506	3,759,077	3,991,702	3,771,847	3.9
3	Maltose_MO_8TMS	21.35	345,993	366,708	361,098	377,548	362,474	362,764	3.1
4	Melibiose_MO_8TMS	22.23	4,045,429	4,175,706	4,142,826	4,392,971	4,374,655	4,226,317	3.6
5	Trehalose_8TMS	21.41	11,481,413	11,470,223	10,914,657	11,314,490	10,862,185	11,208,594	2.7
6	Galactinol_9TMS	23.07	960,372	1,001,380	1,057,224	1,098,547	1,044,601	1,032,425	5.1

FAS 短鎖脂肪酸



FAS *Short-chain fatty acid*

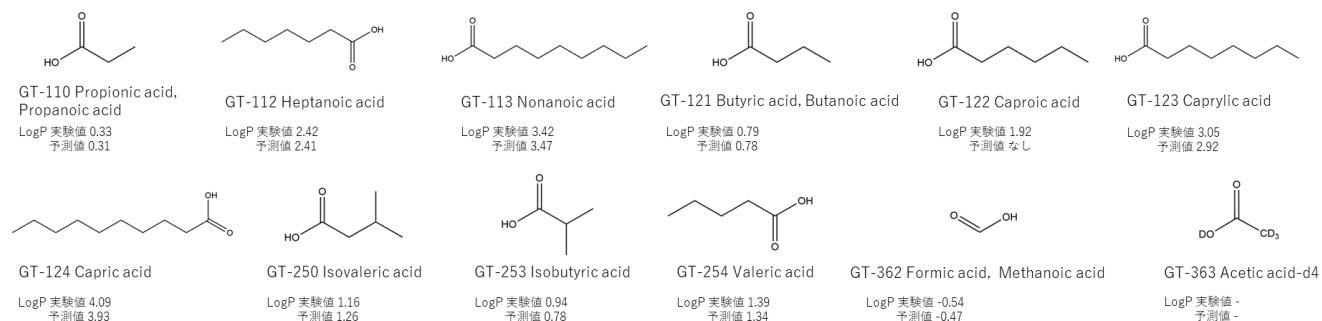
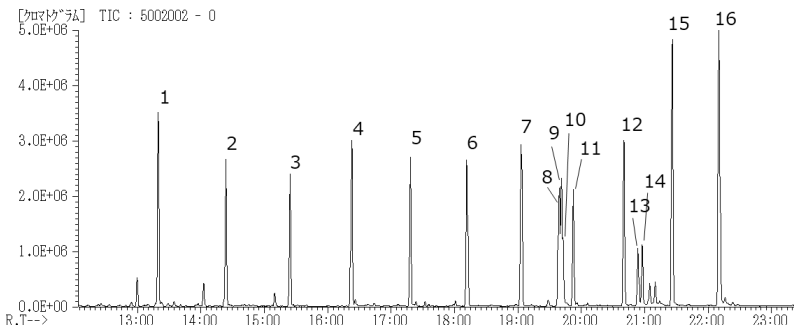


表 再現性 FAS-TBDMS：短鎖脂肪酸

No.	化合物名	R.T.	1	2	3	4	5	Ave.	RSD, %
1	Propanoic acid(C3)_TBDMS	8.29	3,674,070	3,504,187	3,596,934	3,613,648	3,610,507	3,599,869	1.7
2	Isobutyric acid(C4)_TBDMS	8.70	3,994,737	3,883,407	3,864,466	3,732,625	3,915,069	3,878,061	2.5
3	Butyric acid(C4)_TBDMS	9.35	5,319,010	5,150,826	5,171,800	4,969,255	5,283,020	5,178,782	2.6
4	Isovaleric acid(C5)_TBDMS	10.08	8,236,176	8,098,595	8,163,346	7,833,654	8,268,749	8,120,104	2.1
5	Valeric acid(C5)_TBDMS	10.77	8,048,085	7,955,544	7,921,482	7,665,091	8,097,484	7,937,537	2.1
6	Hexanoic acid(C6)_TBDMS	12.15	4,825,589	4,541,783	4,628,252	4,415,722	4,772,135	4,636,696	3.6
7	Heptanoic acid(C7)_TBDMS	13.49	6,737,284	6,440,789	6,586,940	6,307,049	6,639,650	6,542,342	2.6
8	Octanoic acid(C8)_TBDMS	14.76	7,243,155	6,900,143	7,099,700	6,759,648	7,141,986	7,028,926	2.8
9	Nonanoic acid(C9)_TBDMS	15.97	7,623,083	7,243,060	7,433,591	7,068,038	7,540,454	7,381,645	3.1
10	Decanoic acid(C10)_TBDMS	17.12	6,888,168	6,382,034	6,668,002	6,301,372	6,793,857	6,606,687	3.9

FAS Short-chain fatty acid 長鎖脂肪酸



- 1. Undecanoic acid(C11)_tBTMS
- 2. Dodecanoic acid(C12)_tBTMS
- 3. Tridecanoic acid(C13)_tBTMS
- 4. Myristic acid(C14)_tBTMS
- 5. Pentadecanoic acid(C15)_tBTMS
- 6. Palmitic acid(C16)_tBTMS
- 7. Heptadecanoic acid(C17)_tBTMS
- 8. Linoleic acid(C18:2, n-6)_tBTMS
- 9. Oleic acid(C18:1, n-9)_tBTMS
- 10. alpha-Linolenic acid_tBDMS
- 11. Stearic acid(C18)_tBTMS
- 12. Nonadecanoic acid(C19)_tBTMS
- 13. Arachidonic acid_tBTMS
- 14. Eicosapentaeoic acid_tBDMS
- 15. Arachidic acid(C20)_tBTMS
- 16. Heneicosanoic acid(C21)_tBTMS

表_再現性_FAL-TBDMS : 長鎖脂肪酸

No.	化合物名	R.T.	1	2	3	4	5	Ave.	RSD, %
1	Undecanoic acid(C11)_TBDMS	13.13	7,494,804	7,522,533	7,558,154	7,653,739	7,551,625	7,556,171	0.8
2	Dodecanoic acid(C12)_TBDMS	14.18	6,003,243	6,086,137	6,198,462	6,210,092	6,105,717	6,120,730	1.4
3	Tridecanoic acid(C13)_TBDMS	15.18	5,237,794	5,296,868	5,497,139	5,436,812	5,393,945	5,372,512	2.0
4	Myristic acid(C14)_TBDMS	16.13	5,404,223	5,409,284	5,679,440	5,582,506	5,517,962	5,518,683	2.1
5	Pentadecanoic acid(C15)_TBDMS	17.05	6,961,708	6,992,809	7,259,680	7,174,255	7,088,103	7,095,311	1.7
6	Palmitic acid(C16)_TBDMS	17.93	6,094,745	6,109,000	6,303,236	6,246,944	6,107,141	6,172,213	1.6
7	Heptadecanoic acid(C17)_TBDMS	18.78	7,336,665	7,390,807	7,449,100	7,377,792	7,326,247	7,376,122	0.7
8	Linoleic acid(C18:2, n-6)_TBDMS	19.37	2,876,496	2,881,345	2,925,406	2,920,864	2,858,675	2,892,557	1.0
9	Oleic acid(C18:1, n-9)_TBDMS	19.40	6,584,812	6,632,990	6,688,628	6,562,417	6,482,581	6,590,286	1.2
10	alpha-Linolenic acid(C18:3, n-3)_TBDMS	19.44	452,503	452,716	470,732	467,685	454,659	459,659	1.9
11	Stearic acid(C18)_TBDMS	19.59	9,485,392	9,586,204	9,602,528	9,602,052	9,409,053	9,537,046	0.9
12	Nonadecanoic acid(C19)_TBDMS	20.37	7,826,358	7,921,720	7,914,408	7,958,999	7,855,882	7,895,473	0.7
13	Arachidonic acid(C20:4,n-6)_TBDMS	20.60	62,630	64,751	64,356	66,219	63,488	64,289	2.1
14	Eicosapentaeoic acid(C20:5, n-3)_TBDMS	20.78	72,187	75,886	75,547	78,331	74,078	75,206	3.0
15	Arachidic acid(C20)_TBDMS	21.13	13,407,465	13,933,843	13,914,731	13,965,805	13,887,480	13,821,865	1.7
16	Heneicosanoic acid(C21)_TBDMS	21.85	12,275,878	12,814,041	12,646,064	12,947,627	12,632,916	12,663,305	2.0

FAL Long-chain fatty acid

CCCCCCCCCCCCCCCC(=O)O

GT-019 Linoleic acid

LogP 実験値 7.05
予測値 7.06

CCCCCCCCCCCCCCCC(=O)O

GT-020 Oleic acid

LogP 実験値 なし
予測値 7.68

CCCCCCCCCCCCCCCC(=O)O

GT-021 Lauric acid

LogP 実験値 4.6
予測値 5.13

CCCCCCCCCCCCCCCC(=O)O

GT-022 Myristic acid

LogP 実験値 6.11
予測値 6.1

CCCCCCCCCCCCCCCC(=O)O

GT-023 Stearic acid, Octadecanoic acid

LogP 実験値 8.23
予測値 8.02

CCCCCCCCCCCCCCCC(=O)O

GT-024 Palmitic acid, Hexadecanoic acid

LogP 実験値 7.17
予測値 7.23

CCCCCCCCCCCCCCCC(=O)O

GT-025 Margaric acid

LogP 実験値 7.320 (est)
予測値 7.66

CCCCCCCCCCCCCCCC(=O)O

GT-114 Undecanoic acid

LogP 実験値 4.42
予測値 4.49

CCCCCCCCCCCCCCCC(=O)O

GT-115 Tridecanoic acid

LogP 実験値 なし
予測値 5.57

CCCCCCCCCCCCCCCC(=O)O

GT-116 Pentadecanoic acid

LogP 実験値 なし
予測値 6.65

CCCCCCCCCCCCCCCC(=O)O

GT-118 Nonadecanoic acid

LogP 実験値 8.339 (est)
予測値 8.42

CCCCCCCCCCCCCCCC(=O)O

GT-119 Heneicosanoic acid

LogP 実験値 9.810 (est)
予測値 8.97

CCCCCCCCCCCCCCCC(=O)O

GT-126 Arachidic acid

LogP 実験値 9.29
予測値 8.53

CCCCCCCCCCCCCCCC(=O)O

GT-147 Arachidonic acid

LogP 実験値 6.98
予測値 6.8

CCCCCCCCCCCCCCCC(=O)O

GT-148 Eicosapentaenoic acid

LogP 実験値 なし
予測値 6.53

CCCCCCCCCCCCCCCC(=O)O

GT-149 α-Linolenic acid

LogP 実験値 6.46
予測値 6.62

CCCCCCCCCCCCCCCC(=O)O

GT-150 γ-Linolenic acid

LogP 実験値 なし
予測値 6.59

CCCCCCCCCCCCCCCC(=O)O

GT-181 Palmitoleic acid

LogP 実験値 6.402 (est)
予測値 6.71

CCCCCCCCCCCCCCCC(=O)O

GT-312 Docosahexaenoic acid (n-3)

LogP 実験値 なし
予測値 6.83

CCCCCCCCCCCCCCCC(=O)O

GT-346 Cerotic acid

LogP 実験値 なし
予測値 9.87

CCCCCCCCCCCCCCCC(=O)O

GT-347 Lignoceric acid

LogP 実験値 11.400 (est)
予測値 9.56

CCCCCCCCCCCCCCCC(=O)O

GT-420 Docosapentaenoic acid (n-3), Clupanodonic acid

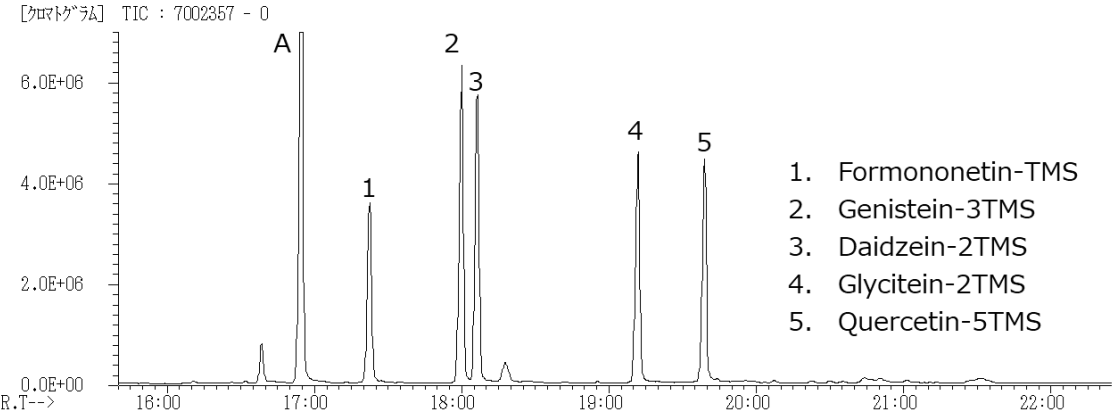
LogP 実験値 なし
予測値 7.08

CCCCCCCCCCCCCCCC(=O)O

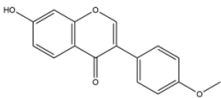
GT-421 Dihomo-γ-linolenic acid

LogP 実験値 なし
予測値 7.24

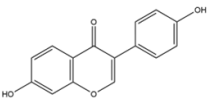
FLV フラボノイド



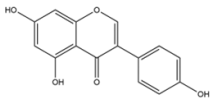
FLV *Flavonoid*



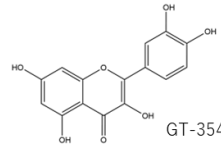
GT-271 Formononetin
LogP 実験値 2.960 (est)
予測値 3.56



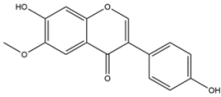
GT-272 Daidzein
LogP 実験値 2.632 (est)
予測値 3.3



GT-293 Genistein
LogP 実験値 なし
予測値 3.04



GT-354 Quercetin
LogP 実験値 1.989 (est)
予測値 1.81

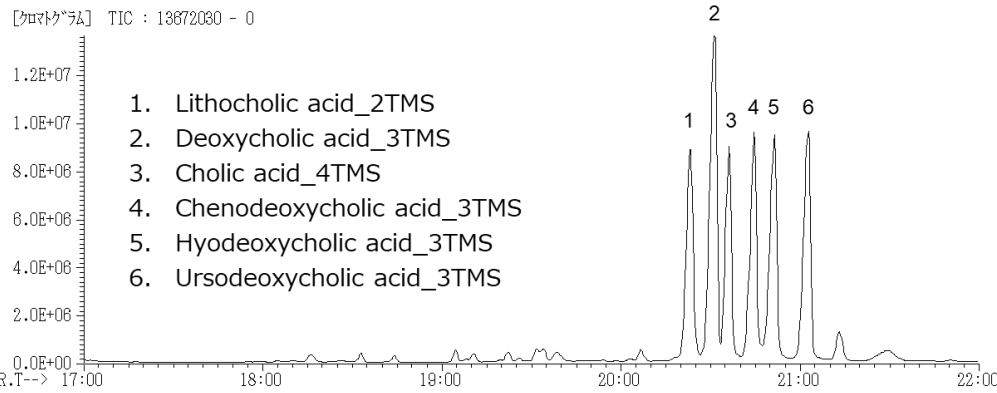


GT-385 Glycitein
LogP 実験値 2.570 (est)
予測値 3.35

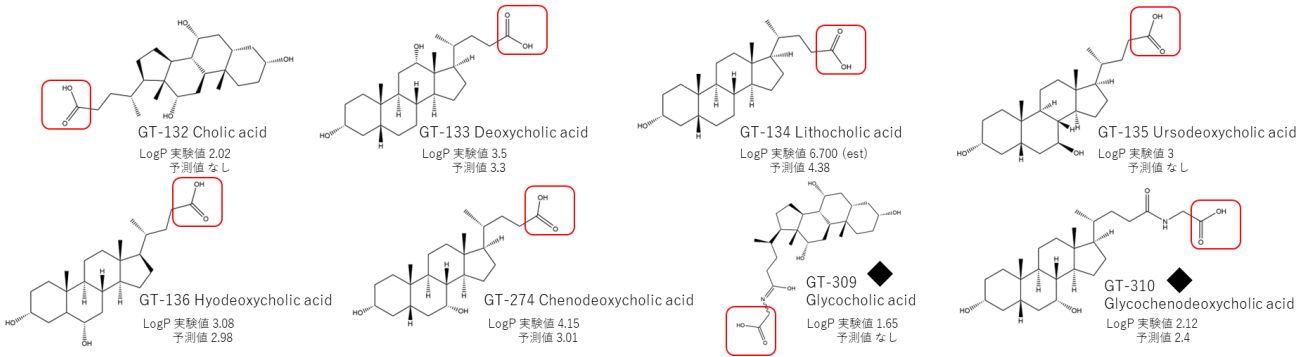
表_再現性_FLV_C18-LVI : フラボノイド

No.	化合物名	R.T.	1	2	3	4	5	Ave.	RSD, %
1	Formononetin_1TMS	17.38	3,894,950	4,191,455	4,270,895	4,116,528	4,185,590	4,131,884	3.5
2	Daidzein_2TMS	18.01	5,707,424	6,216,385	6,293,668	6,158,590	6,226,683	6,120,550	3.9
3	Genistein_3TMS	18.11	7,759,318	8,602,114	8,746,482	8,171,287	8,450,726	8,345,985	4.7
4	Glycitein_2TMS	19.20	3,455,355	3,645,061	3,780,713	3,638,914	3,730,026	3,650,014	3.4
5	Quercetin_5TMS	19.65	4,684,417	5,276,126	5,330,278	4,879,004	4,993,379	5,032,641	5.4

BA 胆汁酸



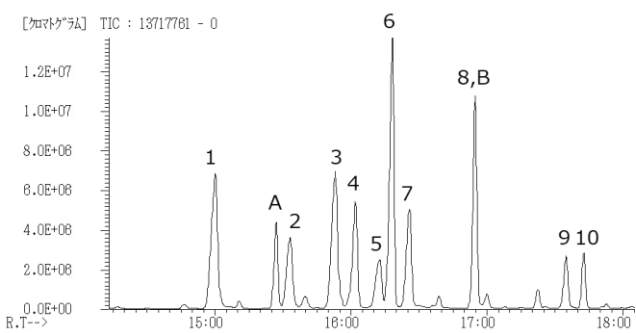
ST-BA Steroid bile acid 胆汁酸



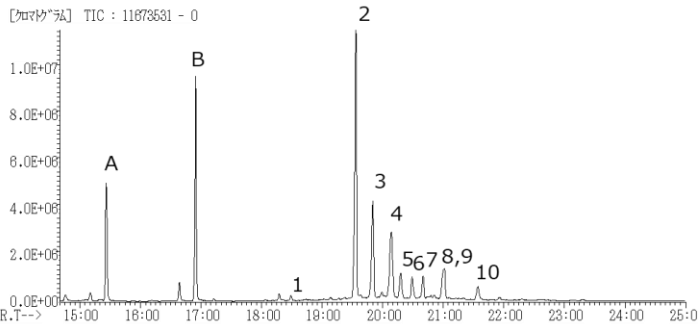
表_再現性_BA_C18-LVI : 胆汁酸

No.	化合物名	R.T.	1	2	3	4	5	Ave.	RSD, %
1	Lithocholic acid_2TMS	20.38	793,933	888,157	966,398	1,038,550	1,039,344	945,276	11.1
2	Deoxycholic acid_3TMS	20.51	11,116,183	11,918,724	12,462,944	12,577,662	12,340,505	12,083,204	4.9
3	Cholic acid_4TMS	20.60	1,235,279	1,373,241	1,401,476	1,443,503	1,321,740	1,355,048	5.9
4	Chenodeoxycholic acid_3TMS	20.74	2,973,261	3,223,618	3,386,937	3,412,434	3,302,497	3,259,749	5.4
5	Hyodeoxycholic acid_3TMS	20.86	4,318,201	4,514,286	4,837,318	4,809,507	4,745,835	4,645,029	4.8
6	Ursodeoxycholic acid_3TMS	21.04	2,091,900	2,193,254	2,340,821	2,360,256	2,330,481	2,263,342	5.1

ST ステロイド



- 1. Androsterone_TMS
- 2. Dehydroepiandrosterone_MS
- 3. Dihydrotestosterone_TMS
- 4. Estrone_TMS
- 5. Androstenedione
- 6. Estradiol_2TMS
- 7. Testosterone_TMS
- 8. Pregnenolone_TMS
- 9. Progesterone
- 10. Estriol_3TMS



- 1. Cholecalciferol_TMS
- 2. Cholesterol_TMS
- 3. Brassicasterol_TMS
- 4. Ergosterol_TMS
- 5. Campesterol_TMS
- 6. Stigmasterol_TMS
- 7. Dihydrolanosterol_TMS
- 8. β-Sitosterol_TMS
- 9. Lanosterol_TMS
- 10. 7-Dehydrocholesterol_TMS

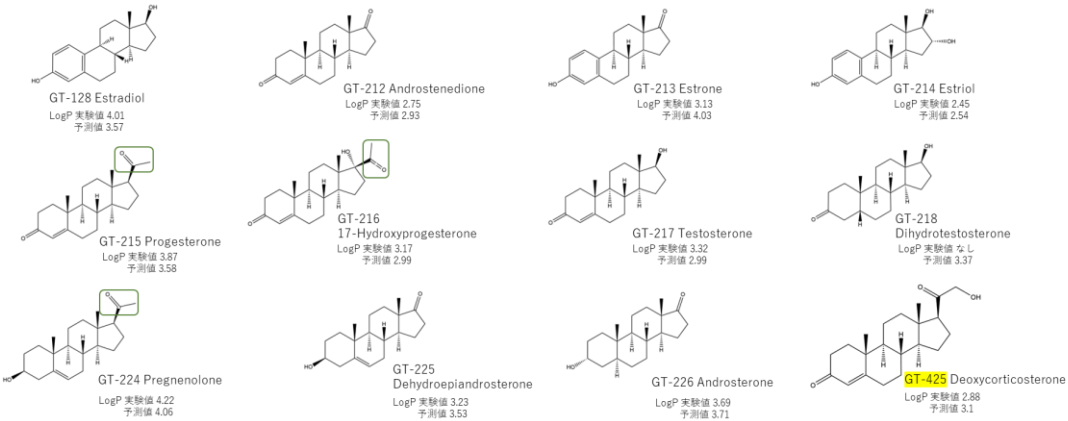
表_再現性 ST1_C18-LVI：ステロール類

No.	化合物名	R.T.	1	2	3	4	5	Ave.	RSD, %
1	Androsterone_1TMS	15.00	2,078,256	2,149,119	2,189,782	2,233,481	2,208,902	2,171,908	2.8
2	Dehydroepiandrosterone_1TMS	15.55	740,330	765,759	789,446	804,322	775,332	775,038	3.1
3	Dihydrotestosterone_1TMS	15.88	1,690,622	1,744,293	1,792,527	1,791,793	1,761,319	1,756,111	2.4
4	Estrone_1TMS	16.03	2,937,132	3,053,592	3,104,218	3,181,117	3,125,249	3,080,262	3.0
5	Androstenedione	16.20	683,194	708,199	728,784	742,341	701,104	712,724	3.3
6	Estradiol_2TMS	16.30	6,943,268	7,040,173	7,217,689	7,237,531	7,231,862	7,134,105	1.9
7	Testosterone_1TMS	16.43	978,241	1,017,035	1,030,022	1,051,787	1,026,696	1,020,756	2.6
8	Pregnenolone_1TMS	16.90	437,282	455,410	459,074	460,908	452,367	453,008	2.1
9	Progesterone	17.58	442,939	471,360	478,838	487,064	455,850	467,210	3.8
10	Estriol_3TMS	17.71	342,510	407,719	323,455	376,567	393,063	368,663	9.5

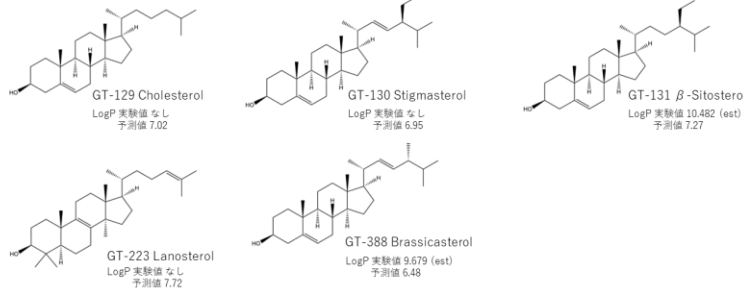
表_再現性 ST2_C18-LVI：ステロール類

No.	化合物名	R.T.	1	2	3	4	5	Ave.	RSD, %
1	Cholecalciferol_TMS	18.48	73,079	78,006	78,527	77,208	82,207	77,805	4.2
2	Cholesterol_TMS	19.56	1,173,763	1,195,227	1,212,258	1,246,055	1,267,542	1,218,969	3.1
3	Brassicasterol_TMS	19.84	353,142	349,506	369,203	368,242	376,642	363,347	3.2
4	Ergosterol_TMS	20.14	1,674,901	1,648,068	1,726,200	1,715,249	1,789,812	1,710,846	3.2
5	Campesterol_TMS	20.30	119,419	121,039	122,552	119,673	127,061	121,949	2.6
6	Stigmasterol_TMS	20.49	82,553	80,577	83,437	86,839	86,564	83,994	3.2
7	Dihydrolanosterol_TMS	20.66	502,706	508,470	520,817	532,219	530,910	519,024	2.5
8	beta-Sitosterol_TMS	20.99	183,588	180,516	190,384	198,372	194,678	189,508	3.9
9	Lanosterol_TMS	21.02	414,387	428,956	434,889	438,872	440,339	431,489	2.4
10	7-Dehydrocholesterol_TMS	21.57	139,966	123,239	136,148	141,179	138,781	135,863	5.4

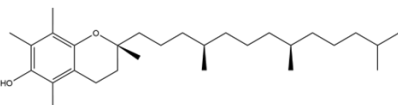
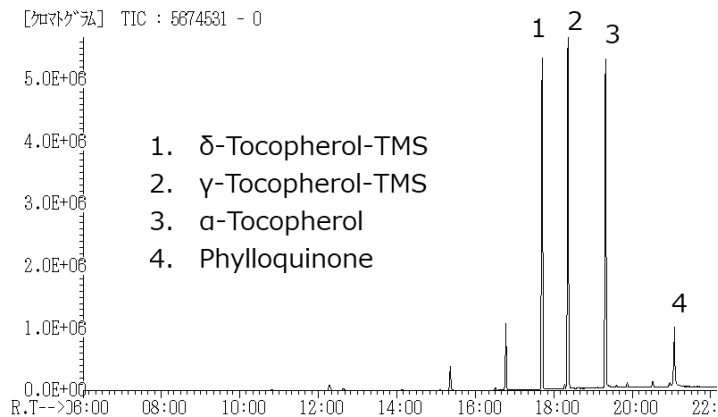
ST-1 Steroid ステロイド-中疎水性



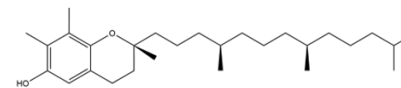
ST-2 Steroid ステロイド-疎水性



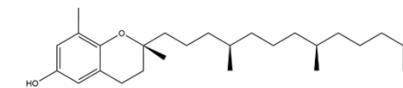
V-DK 疎水性ビタミン



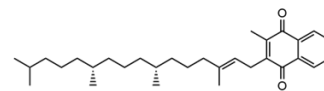
LogP 実験値 なし
予測値 8.84



LogP 実験値 4.352 (est)
予測値 8.81



LogP 実験値 10.493 (est)
予測値 8.76



LogP 実験値 なし
予測値 8.48

表 再現性 V-DK C18-LVI：疎水性ビタミン

No.	化合物名	R.T.	1	2	3	4	5	Ave.	RSD, %
1	d-Tocopherol-TMS	17.78	5,002,069	5,047,905	4,824,699	4,690,155	5,177,281	4,948,422	3.9
2	g-Tocopherol-TMS	18.46	9,037,019	9,158,248	8,666,767	8,472,281	9,333,972	8,933,657	4.0
3	a-Tocopherol-TMS	19.42	7,788,946	7,974,370	7,633,498	7,389,515	8,115,507	7,780,367	3.7
4	Phytonadione	21.03	729,470	703,378	639,736	682,515	767,920	704,604	6.9