

京都大学北部キャンパス機器分析拠点セミナーシリーズ第5回  
「食と健康」のための統合オミクスシステム

誘導結合プラズマ質量分析計(ICP-MS)



農学研究科 応用生物学専攻  
動物栄養科学分野  
友永 省三

機器の紹介

サーモフィッシャーサイエンティフィック社  
・誘導結合プラズマ質量分析計 シングル四重極ICP-MS iCAP RQ  
・原子吸光分析装置 Model: iCE 3300-Uni  
・HPLC/UHPLCシステム Ultimate 3000 ダイオードアレイ

・必須金属類や有害金属のppbレベルを下回る高い感度と幅広い濃度範囲での分析が可能であり、多種の金属類の同時分析が可能。

・コリジョンリアクションセルが搭載されており、すべての金属類をヘリウム運動エネルギー弁別 (He KED) モードで測定することで、複数の多原子干渉を除去可能。

・金属類によっては、安定同位体の測定も可能であり、安定同位体金属を in vivo トレーサーとして用いる試験が可能。

・液体クロマトグラフも接続可能となっており、生体成分などに含まれる金属類の形態ごとの分析も可能。

・原則として、利用者自身が前処理、機器操作およびデータ解析を行う。

## 使用料金

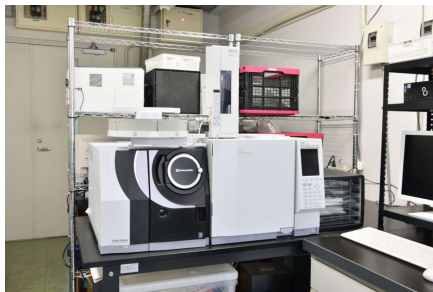
設備名称	利用単位	単価		
		第4条第1号 に掲げる者	第4条第2号 に掲げる者	第4条第3号 に掲げる者
サーモフィッシャー株式会社 製 シングル四重極誘導結合 プラズマ質量分析計	1時間あたり (設備利用)	4,830円	5,580円	10,500円

第4条 設備を利用できる者は、次の各号のいずれかに該当する者とする。

- (1) 京都大学（以下「**本学**」という。）の教職員又は学生
- (2) 国、地方公共団体、国立大学法人若しくは大学共同利用機関法人、独立行政法人又は教育研究を事業目的とする法人若しくは団体に所属する者のうち、当該設備の使用責任者又は当該設備の使用責任者が所属する研究室の構成員と共同研究を行うもの
- (3) 企業等において研究開発に従事する者のうち、当該設備の使用責任者又は当該設備の使用責任者が所属する研究室の構成員と共同研究を行うもの

京都大学北部キャンパス機器分析拠点セミナーシリーズ第5回  
「食と健康」のための統合オミクスシステム

### トリプル四重極ガスクロマトグラフ質量分析計 (GC-MS/MS)



農学研究科 応用生物科学専攻  
動物栄養科学分野

友永 省三

## 機器の紹介

島津製作所  
トリプル四重極型ガスクロマトグラフ質量分析計 GCMS-TQ8050

- ・低分子代謝物質（アミノ酸、有機酸、脂肪酸など）の分析を行うことができる。
- ・イオン化法は、EI、PCIおよびNCIに対応しており、SCAN、SIMおよびMRMモードが利用可能である。
- ・代謝物質および環境汚染物質の分析に対応したメソッドパッケージを備えている。
- ・原則として、利用者自身が前処理、機器操作およびデータ解析を行う。  
(学内利用者は一部工程の受託が可能な場合がある)

## ソフトウェアの紹介

◎使用可能なメソッドパッケージソフトウェア（島津製作所GC-MS 専用）

- ・ Smart Metabolites Database  
メタボロミクス用のSCAN、SIM およびMRMメソッド。  
親水性低分子代謝物質のアンターゲット分析とターゲット分析（アミノ酸、脂肪酸）

- ・ Smart Environmental Database  
環境汚染物質分析用のMRMメソッド

- ・ Quick-DBGC/MS 残留農薬分析用データベース Ver.2  
食品中残留農薬分析用のMRMメソッド

◎関連するフリーソフトウェア

- ・ MS-DIAL : GC-MSのSCANデータなど  
[http://prime.psc.riken.jp/Metabolomics\\_Software/MS-DIAL/](http://prime.psc.riken.jp/Metabolomics_Software/MS-DIAL/)
- ・ MRMPROBS : GC-MSのMRMデータなど  
[http://prime.psc.riken.jp/Metabolomics\\_Software/MRMPROBS/index.html](http://prime.psc.riken.jp/Metabolomics_Software/MRMPROBS/index.html)

## Smart Metabolites Database

### a) トリメチルシリル化誘導体による有機酸・脂肪酸・アミノ酸・糖類分析メソッドファイル

ファイル名(.qgm)	モード	カラム	登録数	内容
OA_TMS_DB5_37min_V3_Scan	スキャン	DB-5	568	推奨 (分析時間 37分) スプリットレス分析に対応
OA_TMS_DB5_67min_V3_Scan				分離向上 (分析時間 67分) スプリットレス分析に対応
OA_TMS_BPX5_23min_V3_Scan		BPX5	481	分析時間 23分 スプリット分析のみ対応
OA_TMS_DB5_37min_V3_MRM	MRM	DB-5	467	推奨 (分析時間 37分) スプリットレス分析に対応
OA_TMS_DB5_67min_V3_MRM				分離向上 (分析時間 67分) スプリットレス分析に対応
OA_TMS_BPX5_23min_V3_MRM		BPX5	475	分析時間 23分 スプリット分析のみ対応
OA_TMS_DB5_37min_V3_HC	スキャン	DB-5	25	保持時間修正メソッド OA_TMS_DB5_37min_V3_Scan, MRM
OA_TMS_DB5_67min_V3_HC				保持時間修正メソッド OA_TMS_DB5_67min_V3_Scan, MRM
OA_TMS_BPX5_23min_V3_HC		BPX5		保持時間修正メソッド OA_TMS_BPX5_23min_V3_Scan, MRM

## Smart Metabolites Database

### b) メチルエステル化誘導体による脂肪酸分析メソッドファイル

ファイル名(.qgm)	モード	カラム	登録数	内容
FA_ME_DB5MS_EI_V3_Scan	スキャン	DB-5MS	50	極長鎖脂肪酸(C31:0)まで対応 EI法
FA_ME_DB5MS_PCI_V3_Scan				極長鎖脂肪酸(C31:0)まで対応 PCI法
FA_ME_SP2560_EI_V3_Scan		SP2560	38	高分離対応 EI法
FA_ME_SP2560_PCI_V3_Scan				高分離対応 PCI法

ファイル名(.qgm)	モード	カラム	登録数	内容
FA_ME_DB5MS_EI_V3_MRM	MRM	DB-5MS	50	極長鎖脂肪酸(C31:0)まで対応 EI法
FA_ME_DB5MS_PCI_V3_MRM				極長鎖脂肪酸(C31:0)まで対応 PCI法
FA_ME_SP2560_EI_V3_MRM		SP2560	38	高分離対応 EI法
FA_ME_SP2560_PCI_V3_MRM				高分離対応 PCI法
FA_ME_DB5MS_EI_V3_HC	スキャン	DB-5MS	27	保持時間修正メソッド FA_ME_DB5MS_EI_V3_Scan, MRM FA_ME_DB5MS_PCI_V3_Scan, MRM
FA_ME_SP2560_EI_V3_HC		SP2560	24	保持時間修正メソッド FA_ME_SP2560_EI_V3_Scan, MRM FA_ME_SP2560_PCI_V3_Scan, MRM

## Smart Metabolites Database

### c) EZ:faast™ アミノ酸分析メソッドファイル

ファイル名(.qgm)	モード	カラム	登録数	内容
AA_EZFAAST_V3_230V_Scan			33	分析時間:7分 高速昇温:GC 230 V仕様
AA_EZFAAST_V3_100V_Scan	スキャン	ZB-AAA		分析時間:14分 標準昇温:GC 100 V仕様
AA_EZFAAST_V3_HC_230V			20	保持時間修正メソッド AA_EZFAAST_V3_230V_Scan
AA_EZFAAST_V3_HC_100V				保持時間修正メソッド AA_EZFAAST_V3_100V_Scan

## ソフトウェアの紹介

### ◎使用可能なメソッドパッケージ (島津製作所GC-MS 専用)

#### ・ Smart Metabolites Database

メタボロミクス用のSCAN、SIM およびMRM メソッド。  
親水性低分子代謝物質のアンターゲット分析とターゲット分析 (アミノ酸、脂肪酸)

#### ・ Smart Environmental Database

環境汚染物質分析用のMRMメソッド

#### ・ Quick-DBGC/MS 残留農薬分析用データベース Ver.2

食品中残留農薬分析用のMRMメソッド

### ◎関連するフリーソフトウェア

#### ・ MS-DIAL : GC-MSのSCANデータなど

[http://prime.psc.riken.jp/Metabolomics\\_Software/MS-DIAL/](http://prime.psc.riken.jp/Metabolomics_Software/MS-DIAL/)

#### ・ MRMPROBS : GC-MSのMRMデータなど

[http://prime.psc.riken.jp/Metabolomics\\_Software/MRMPROBS/index.html](http://prime.psc.riken.jp/Metabolomics_Software/MRMPROBS/index.html)

## Smart Environmental Database

・ 定量用データベースおよびメソッドパッケージ。  
最適化された分析条件が登録されている。

・ 環境および食品試料中の環境汚染物質の分析には、  
夾雑物との高い質量分離と高感度で検出可能な  
選択性の高いMRM分析が有効。MRM分析には  
トランジションの設定が必要だが、500以上の  
環境汚染物質の最適なトランジションが登録されて  
おり、煩雑な設定作業を行うことなく分析可能。

### a) ホリ塩化ビフェニル分析用

ファイル名	内容
AART_SmartDatabase_PCBs.qgm	保持時間修正用メソッドファイル
SmartDatabase_TQ_PCBs.qgm	データベースからメソッドファイルを作成する際のテンプレートメソッドファイル
SmartDatabase_PCBs.xism	Smart MRM で使用するデータベースファイル

### b) 農薬系殺菌剤分析用

ファイル名	内容
AART_SmartDatabase_BFRs.qgm	保持時間修正用メソッドファイル
SmartDatabase_TQ_BFRs.qgm	データベースからメソッドファイルを作成する際のテンプレートメソッドファイル
SmartDatabase_BFRs.xism	Smart MRM で使用するデータベースファイル

### c) ダイオキシン分析用

ファイル名	内容
AART_SmartDatabase_DXNs.qgm	保持時間修正用メソッドファイル
SmartDatabase_TQ_DXNs.qgm	データベースからメソッドファイルを作成する際のテンプレートメソッドファイル
SmartDatabase_DXNs.xism	Smart MRM で使用するデータベースファイル

### d) 多環芳香族炭化水素分析用

ファイル名	内容
AART_SmartDatabase_PAHs.qgm	保持時間修正用メソッドファイル
SmartDatabase_TQ_PAHs.qgm	データベースからメソッドファイルを作成する際のテンプレートメソッドファイル
SmartDatabase_PAHs.xism	Smart MRM で使用するデータベースファイル

### e) 有機塩素系農薬分析用

ファイル名	内容
AART_SmartDatabase_OCPs.qgm	保持時間修正用メソッドファイル
SmartDatabase_TQ_OCPs.qgm	データベースからメソッドファイルを作成する際のテンプレートメソッドファイル
SmartDatabase_OCPs.xism	Smart MRM で使用するデータベースファイル

## ソフトウェアの紹介

### ◎使用可能なメソッドパッケージ（島津製作所GC-MS 専用）

- Smart Metabolites Database  
メタボロミクス用のSCAN、SIM およびMRMメソッド。  
親水性低分子代謝物質のアンターゲット分析とターゲット分析（アミノ酸、脂肪酸）

- Smart Environmental Database  
環境汚染物質分析用のMRMメソッド

- Quick-DBGC/MS 残留農薬分析用データベース Ver.2  
食品中残留農薬分析用のMRMメソッド

### ◎関連するフリーソフトウェア

- MS-DIAL : GC-MSのSCANデータなど  
[http://prime.psc.riken.jp/Metabolomics\\_Software/MS-DIAL/](http://prime.psc.riken.jp/Metabolomics_Software/MS-DIAL/)

- MRMPROBS : GC-MSのMRMデータなど  
[http://prime.psc.riken.jp/Metabolomics\\_Software/MRMPROBS/index.html](http://prime.psc.riken.jp/Metabolomics_Software/MRMPROBS/index.html)

## Quick-DBGC/MS 残留農薬分析用データベース Ver.2

- **スクリーニング用データベース**。定量用データベースに加えて検量線情報が登録されており、標準試料を分析することなく**大まかな定量値**を得ることが可能。

- ポジティブリスト制度の導入による対象農薬の増加に伴い、分析に必要な農薬標準試料が増加しており、標準試料の管理業務や購入コストの増加が課題となっている。本製品は、農薬サロゲートを内部標準物質に使用した検量線が登録されたGC-MS（/MS）用データベースであり、**標準試料を使用せずに残留農薬をスクリーニングできる**。MRMモードの対象農薬数は491成分。

## ソフトウェアの紹介

### ◎使用可能なメソッドパッケージ（島津製作所GC-MS 専用）

- Smart Metabolites Database  
メタボロミクス用のSCAN、SIM およびMRMメソッド。  
親水性低分子代謝物質のアンターゲット分析とターゲット分析（アミノ酸、脂肪酸）

- Smart Environmental Database  
環境汚染物質分析用のMRMメソッド

- Quick-DBGC/MS 残留農薬分析用データベース Ver.2  
食品中残留農薬分析用のMRMメソッド

### ◎関連するフリーソフトウェア

- MS-DIAL : GC-MSのSCANデータなど

[http://prime.psc.riken.jp/Metabolomics\\_Software/MS-DIAL/](http://prime.psc.riken.jp/Metabolomics_Software/MS-DIAL/)

- MRMPROBS : GC-MSのMRMデータなど

[http://prime.psc.riken.jp/Metabolomics\\_Software/MRMPROBS/index.html](http://prime.psc.riken.jp/Metabolomics_Software/MRMPROBS/index.html)

## ノンターゲットメタボロミクスに有用なMS-DIAL



Brief Communication | Published: 27 November 2017

### Identifying metabolites by integrating metabolome databases with mass spectrometry cheminformatics

Zijuan Lai, Hiroshi Tsugawa, Gert Wohlgemuth, Sajjan Mehta, Matthew Mueller, Yuxuan Zheng, Atsushi Ogiwara, John Meissen, Megan Showalter, Kohel Takeuchi, Tobias Kind, Peter Beal, Masanori Arita & Oliver Fiehn

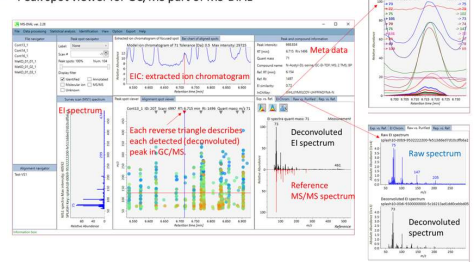
Nature Methods 15, 53–56(2018) | Cite this article

3508 Accesses | 55 Citations | 83 Altmetric | Metrics

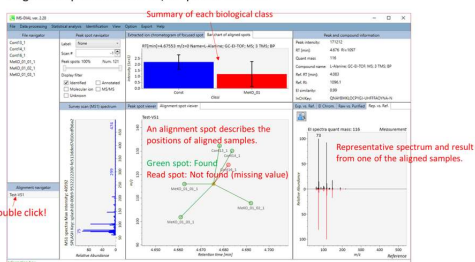
### Abstract

Novel metabolites distinct from canonical pathways can be identified through the integration of three cheminformatics tools: BinVestigate, which queries the BinBase gas chromatography–mass spectrometry (GC-MS) metabolome database to match unknowns with biological metadata across over 110,000 samples; MS-DIAL 2.0, a software tool for chromatographic deconvolution of high-resolution GC-MS or liquid chromatography–mass spectrometry (LC-MS); and MS-FINDER 2.0, a structure-elucidation program that uses a combination of 14 metabolome databases in addition to an enzyme promiscuity library. We showcase our workflow by annotating N-methyl-uridine monophosphate (UMP), lysomonogalactosyl-monopalmitin, N-methylalanine, and two propofol derivatives.

### Peak spot viewer for GC/MS part of MS-DIAL










### Alignment spot viewer for GC/MS part of MS-DIAL



<http://prime.psc.riken.jp/compms/msdial/main.html>



## MS-DIALに対応したフリーのデータベース

All records with Kovats RI (9062 unique compounds)	EI-MS	28,220 records	
Fiehn BinBase DB (Rtx5-Sil MS, predicted Kovats RI)	EI-MS	1,021 records	
RIKEN DB (Rtx5-Sil MS, Kovats RI)	EI-MS	241 records	
Kazusa DB (Rtx5-Sil MS, Kovats RI)	EI-MS	273 records	
GL-Science DB (InertCap 5MS-NP, Kovats RI)	EI-MS	494 records	
Osaka Univ. DB (CPSil-8CB, Kovats RI)	EI-MS	430 records	
MoNA volatile (Kovats RI)	EI-MS	212 records	

<http://prime.psc.riken.jp/compms/msdial/main.html#MSP>

## ターゲットメタボロミクスに有用なMRM-PROBS



MRMPROBS



### Objective

MRMPROBS is launched as a universal program for targeted metabolomics using not only multiple reaction monitoring (MRM)- or selected reaction monitoring (SRM) but also SCAN and data independent MS/MS acquisition (DIA) data. Our objective is to develop a data processing tool for widely targeted metabolomics by means of mass spectrometers such as QqQ-MS, DIA-MS, and just single Q-MS. Although the strategy became increasingly popular for the simultaneous analysis of up to several hundred metabolites at high sensitivity, selectivity, and quantitative capability, software development for the data analysis of MRM transitions lags behind in metabolomics: data assessment usually relies on manual evaluation due to the lack of automated probabilistic measures. Here, we developed a software program, MRMPROBS (Multiple Reaction Monitoring based PROBABILISTIC System for widely targeted metabolomics), written in C# language for widely targeted metabolomics. It evaluates the metabolite peaks by posterior probability, defined as the odds ratio by means of a newly optimized multivariate logistic regression model, and visualizes large-scale MS data sets with user-friendly graphical user interfaces to allow data curation and statistical analyses.



<http://prime.psc.riken.jp/compms/mrmprobs/main.html>

## 使用料金

設備名称	利用単位	単価		
		第4条第1号に掲げる者	第4条第2号に掲げる者	第4条第3号に掲げる者
株式会社島津製作所製 トリプル四重極型 ガスクロマトグラフ 質量分析計	1時間あたり (設備利用)	850円	1,020円	2,200円

第4条 設備を利用できる者は、次の各号のいずれかに該当する者とする。

- (1) 京都大学（以下「本学」という。）の教職員又は学生
- (2) 国、地方公共団体、国立大学法人若しくは大学共同利用機関法人、独立行政法人又は教育研究を事業目的とする法人若しくは団体に所属する者のうち、当該設備の使用責任者又は当該設備の使用責任者が所属する研究室の構成員と共同研究を行うもの
- (3) 企業等において研究開発に従事する者のうち、当該設備の使用責任者又は当該設備の使用責任者が所属する研究室の構成員と共同研究を行うもの

## 使用料金

設備名称	委託内容	利用単位	委託料単価
			第4条第1号に掲げる者
株式会社島津製作所製 トリプル四重極型 ガスクロマトグラフ 質量分析計	親水性代謝物の アンターゲット 分析	1回あたり	68,400円

・ 16サンプル（固定）

・ Smart Metabolites Database  
メタボロミクス用のMRMメソッド、親水性低分子代謝物質の分析

第4条 設備を利用できる者は、次の各号のいずれかに該当する者とする。

- (1) 京都大学（以下「本学」という。）の教職員又は学生