

**環境資源科学研究センター 技術支援**

「FTICR-MS を用いたメタボローム解析」支援について (ver.1.0)

理化学研究所

環境資源科学研究センター

統合メタボロミクス研究グループ

**主旨**

理化学研究所環境資源科学研究センターは、研究技術支援の1つとして、「FTICR-MS を用いたメタボローム解析」を共同研究として実施させていただきます。以下の注意点をよくお読みいただいたうえで担当者までお問い合わせください。

**対象代謝物**

二次代謝産物

**使用機器**

- フーリエ変換イオンサイクロトロン共鳴-質量分析 (FTICR-MS) 装置  
MS 部 Solarix 7.0 T (Bruker)  
イオン源 (ESI および MALDI)
- 液体クロマトグラフィー-フォトダイオードアレイ (LC) 装置  
LC-PDA 部 HPLC 1260 (Agilent)

**必要なもの**

消耗品

- 2 ml チューブ (SARSTEDT Safe-seal micro tube 2mL, PP for extraction)
- ジルコニアビーズ (アズワン 5-4060-13 ジルコニアボール (φ 5mm) YTZ-5)

**支援技術**

- LC-ESI-FTICR-MS による含硫黄代謝物を標的としたメタボローム解析
- ESI-FTICR-MS による含硫黄代謝物を標的としたメタボローム解析
- ESI-FTICR-MS によるメタボローム解析
- MALDI-FTICR-MS によるメタボローム解析
- MALDI-FTICR-MS によるイメージング質量分析

**研究支援の流れ**

- ① 研究支援の事前連絡 (貴研究室 → 当グループ担当者)

- ② 事前打ち合わせ（目的、対象、サンプル数、納期の確認など）
- ③ 利用申請書提出（貴研究室 → 当グループ、事務局）
- ④ 共同研究開始
- ⑤ 植物サンプルの授受における確認書の作成（必須）
- ⑥ 植物サンプルの授受における確認書、予備実験サンプル、本番サンプル、サンプルシートの提供（貴研究室 → 当グループ担当者）
- ⑦ 測定結果（当グループ担当者 → 貴研究室）
- ⑧ 結果の解釈（貴研究室→当グループ）
- ⑨ データの解釈のフィードバック
- ⑩ 論文化の相談

## サンプルの送付

- ① 手順の確認

### 参考動画

Annotation of Plant Gene Function via Combined Genomics, Metabolomics and Informatics

Takayuki Tohge and Alisdair R. Fernie

Max-Planck-Institut Molekulare Pflanzenphysiologie

J Vis Exp. 64, e3487 (2012) , doi: 10.3791/3487

<http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pmc/articles/PMC3476379/>

- ② サンプルング

ジルコニアビーズ入り 2 ml チューブに必要量（20-100 mg fresh weight / 2-20 mg dry weight）

サンプルング（反復は 3-6）

- ③ サンプルシートの作成（下記参照のこと）

例)

Tube No.	Name	replicate	weight (mg)
1	Col-0	1	70.1
2		2	56.6
3		3	61.3
4		4	80.4
5		5	45.1
6		6	66.9
7	Mutant1-1	1	
8		2	
9		3	
10		4	
11		5	
12		6	
13	Mutant1-2	1	
14		2	
15		3	
16		4	
17		5	
18		6	

- ④ 植物サンプルの授受における確認書の作成

- ⑤ 送付

発泡スチロール箱に十分な量のドライアイスを入れてクール便で送付（乾燥体のものは通常便）

時間指定：正午前後

サンプルシートは別途メールにて中林にお送りください。

〒230-0045 横浜市鶴見区末広町 1-7-22  
理化学研究所環境資源科学研究センター 中央棟7階 C719  
統合メタボロミクス研究グループ 中林 亮 宛

#### **納期**

納期は、出来るだけ対応させていただきますが、機器の予約状況によって異なりますので、ご理解いただいたうえでご利用下さい。

#### **お願い**

生データの容量が大きいため外付けハードディスクをご用意いただく場合があります。

#### **お断りする分析依頼**

- 極性溶媒と逆相カラムを用いた分析となりますので、その範疇ではない代謝物の分析 (LC-ESI-FTICR-MS)
- 物理的に抽出が出来ないサンプルの分析 (全ての技術支援)
- サンプル数が多い分析 (全ての技術支援)
- 顕微鏡用スライドガラスに載らない大きさの植物切片の分析 (イメージング質量分析)
- スクリーニング分析 (全ての技術支援)
- 明確な研究目的が無いサンプル分析

#### **費用負担**

指定のチューブとビーズはご購入くださいますようお願いいたします。

送付にかかる費用はご負担ください。

#### **共著のお願い**

解析結果を用いた発表をする場合 (学会発表, 論文) は、下記関係者を共著者としていただきますようお願い致します。

中林 亮<sup>1</sup>, 斉藤 和季<sup>1,2</sup>

1 理研 CSRS

2 千葉大大学院薬学研究院

## 実績

### 原著

1. Ryo Nakabayashi\*, Hiroshi Tsugawa\*, Tetsuya Mori, Kazuki Saito  
\* equal contribution  
Automation of chemical assignment for identifying molecular formula of S-containing metabolites by combining metabolomics and chemoinformatics with  $^{34}\text{S}$  labeling.  
*Metabolomics*, 12, 168 (2016)
2. Ryo Nakabayashi, Hiroshi Tsugawa, Mariko Kitajima, Hiromitsu Takayama, Kazuki Saito  
Boosting Sensitivity in Liquid Chromatography-Fourier Transform Ion Cyclotron Resonance-Tandem Mass Spectrometry for Product Ion Analysis of Monoterpene Indole Alkaloids.  
*Front. Plant Sci.*, 17, 1127 (2016)
3. Ryo Nakabayashi, Yuji Sawada, Morihiro Aoyagi, Yutaka Yamada, Masami Yokota Hirai, Tetsuya Sakurai, Takahiro Kamoi, Daryl D. Rowan, Kazuki Saito  
Chemical assignment of structural isomers of sulfur-containing metabolites in garlic by liquid chromatography–Fourier transform ion cyclotron resonance–mass spectrometry.  
*J. Nutr.*, 146, 397S-402S (2016)
4. Naoko Yoshimoto, Misato Onuma, Shinya Mizuno, Yuka Sugino, Ryo Nakabayashi, Shinsuke Imai, Tadimitsu Tsuneyoshi, Shin-ichiro Sumi, Kazuki Saito  
Identification of a flavin-containing S-oxygenating monooxygenase involved in alliin biosynthesis in garlic.  
*Plant J.*, 83, 941-951 (2015)
5. Ryo Nakabayashi, Zhigang Yang, Tomoko Nishizawa, Tetsuya Mori, Kazuki Saito  
Top-down Targeted Metabolomics Reveals a Sulfur-Containing Metabolite with Inhibitory Activity against Angiotensin-Converting Enzyme in *Asparagus officinalis*.  
*J. Nat. Prod.*, 78, 1179-1183 (2015)
6. Ryo Nakabayashi, Yuji Sawada, Yutaka Yamada, Makoto Suzuki, Masami Yokota Hirai, Tetsuya Sakurai, and Kazuki Saito  
Combination of Liquid Chromatography-Fourier Transform-Ion Cyclotron Resonance-Mass Spectrometry with  $^{13}\text{C}$ -labeling for Chemical Assignment of Sulfur-containing Metabolites in Onion Bulbs.  
*Anal. Chem.*, 85, 1310-1315 (2013)

### 総説

1. Ryo Nakabayashi and Kazuki Saito  
Ultrahigh resolution metabolomics for S-containing metabolites

*Curr. Opin. Biotechnol.*, in press.

2. Ryo Nakabayashi and Kazuki Saito

Metabolomics for Unknown Plant Metabolites

*Anal. Bioanal. Chem.*, 405, 5005-5011 (2013)

**連絡先**

中林 亮 (ryo.nakabayashi\_at\_riken.jp) 統合メタボロミクス研究グループ 研究員

斉藤 和季 (kazuki.saito\_at\_riken.jp) 統合メタボロミクス研究グループ グループディレクター

\_at\_を@に置き換えて下さい。