SHIMADZU
Excellence in Science

Application News

No. 01-00388-ENK

GC-MS, GCMS-TQ™ Series, Smart Metabolites Database™

Smart Metabolites Database를 이용한 식품 시료의 효율적인 데이터 분석

Efficient Data Analysis for Food Samples by Using Smart Metabolites Database

사용자 활용 포인트

- ◆ Smart Metabolites Database Ver. 2는 MRM 기반 분석으로 고감도의 다성분 동시 분석이 가능하다.
- ◆ 시료 유형에 따라 분석 성분 및 분석 방법이 다르게 설정된 효율적인 분석을 수행하여 높은 신뢰도의 데이터 획득이 가능하다.

■ 서론

대사체학(Metabolomics)은 GC-MS를 포함한 기타 분석 장비를 사용하여 생물학적 시료의 성분을 종합적으로 분석하는 기술이다. 식품 과학 분야에서 대사체학은 다양한 식품 시료와 제품을 조사하여 새로운 기능성 식품을 개발하고 식품 관능적 특성을 평가하는데 사용된다. 또한 다변량 분석을 접목하면 여러 시료의 성분 데이터 분석을 통해 각 시료의 구성 성분 프로파일에서 고유한 특징을 식별할 수 있다. 해당 데이터 분석 접근 방식은 데이터 해석을 위한 전문 지식과 방대한 양의 데이터 처리 시간 등이 요구되기 때문에 높은 수준의 분석 기술력과 더불어 그에 맞는 노동과 시간이 필요하다.

본 뉴스레터에서는 Smart Metabolites Database Ver. 2를 식품 분석에 이용해 분석의 숙련도와 기술력에 상관없이 손쉽게 효율적인 데이터 분석을 수행할 수 있는 방법을 소개한다.

■ MRM모드를 이용한 고감도의 다성분 분석

일반적으로 대게 분석 장비를 이용한 일반적인 성분 분석은 Scan 모드를 사용하여 알려지지 않은 화합물들을 스크리닝하는 방식으로 분석한다. 이 분석방식은 다량의 시료에서 생성된 방대한 양의 데이터를 생성하게 되어 이를 해석하는 데 시험자의 숙련도, 경험 및 기술과 더불어 적지 않은 노동과 시간이 필요하다. 심지어는 오랜 시간과 노력을 투자하더라도 모든 구성 성분을 제대로 식별하거나 유용한 정보를 생성하지 못 할 수도 있다.

Smart Metabolites Database Ver.2에는 생물학적 시료 중 친수성 저분자 구조를 가진 기능성 성분에 대한 분석 정보를 제공하며, 해당 성분의 Retention index와 Mass spectrum 등의 정보도 포함하고 있다. 이를 통해 단순화된 분석 과정(그림 1)을 거쳐 수백개의 성분에 대한 정보를 효율적으로 획득할 수 있다. 분석은 GC-MS/MS의 MRM 모드를 이용한다. 일반적으로 MRM 모드는 Scan 모드(그림 2)보다 분석의 방해 물질 및 노이즈 피크를 줄여 타겟(target) 성분을 낮은 농도 수준까지 분석할 수 있는 장점이 있다.

그림 1. Smart Metabolites Database Ver. 2 분석 순서

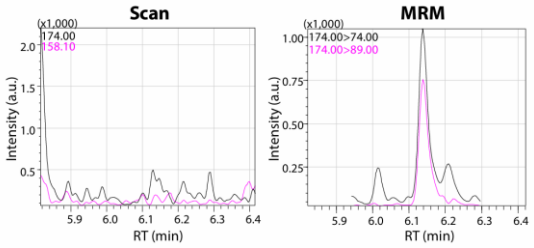

그림 2. 레몬 중 Pyruvic Acid (TMS-유도체화) 분석

■ 원료를 적용한 필터 기능

Smart Metabolites Database Ver. 2에는 다양한 생물학적 시료에서 검출된 540가지 성분에 대한 정보가 포함되어 있다. 하지만 실제 식품 단일 시료를 측정해보면 해당 성분 중 약 20 % 정도만 검출 및 확인이 된다. 이는 식품 시료 중 구성 성분은 식품의 원료에 따라 크게 달라지기 때문이다.

Smart Metabolites Database Ver. 2에는 과거에 보고된 분석을 기반으로 유사한 시료에서 감지된 구성 성분만을 한정하여 분석 할 수 있는 필터 기능이 포함되어 있다. 필터 기능에 포함된 5가지의 원료 구성은 식물(식품), 동물(식품), 소변, 혈액 및 세포로 분석자는 크게 두가지 방식으로 분석을 진행할 수 있다. 첫번째는 필터 없이 모든 구성 성분을 포함한 분석을 진행한 후, LabSolutions Insight™ 내 플래그 기능을 사용하여 성분의 수를 좁히는 방법이고, 두번째는 분석 전에 미리 필터를 적용하여 분석 대상 구성 성분을 제한한 채로 분석을 진행하는 방법이다(그림 3).

일반적으로 Scan 모드를 이용한 논타겟 (non-target) 분석에서의 데이터의 결과 해석에서는 검출된 피크가 분석 목적과 유의성이 있는 지를 판단해야 하며, 동시에 위양성 결과가 나타날 수 있는 위험성에 대해서도 감안을 해야 한다. 하지만 해당 데이터베이스 내 내장된 필터 기능을 이용하면 특정 시료에서만 검출되는 구성 성분으로 분석 성분을 제한해주기 때문에 위양성 결과 도출의 위험율을 크게 줄일 수 있다.

그림 3. Smart Metabolites Database Ver. 2 내 필터기능

■ 필터 기능을 적용한 식품의 구성 성분 분석

기기 분석은 표 1의 분석 조건을 이용했다. 가공식품과 발효식품을 포함한 다양한 식품 시료를 Smart Metabolites Database Ver.2에 포함된 필터를 사용하여 분석하였다. 적용된 필터는 시료의 원료를 참고하여 선택한다. 시료에 식물과 동물성 재료가 모두 포함된 경우(예: 옥수수 수프의 식물(옥수수)과 동물(우유))에는 식물(식품) 및 동물(식품) 필터를 모두 적용했다.

식품 시료를 기준으로 필터를 적용 한 후 검출된 성분 수를 필터 기능을 적용하지 않았을 때(540개 성분에 대한 동시분석)와 비교했다. 표 2에는 각 분석에서 검출된 성분 수와 해당 두 분석의 검출 비율(%)도 함께 확인할 수 있다.

검출 비율은 필터 기능을 적용했을 때 검출된 성분 수를 필터기능을 적용하지 않고 검출했을 때 성분 수를 나눈 값이다. 검출 비율은 필터를 사용했을 때 모든 식품 시료에서 90% 이상이 검출되었다. 필터를 적용 했을 때 실제 게 시료와 모조 게 시료에서 얻은 성분 데이터를 이용해 주 성분 분석(Principal component analysis, PCA)을 수행하였다. 그림 4에서 볼 수 있듯, 필터를 적용하면 각 시료의 성분 프로필 간의 차이를 눈으로 확인 할 수 있으며, 이는 모조 식품 개발 시 유용한 정보로 이용될 수 있다.

표 1. 장비 구성 및 분석 조건

GC-MS	GCMS-TQ8050NX
Autoinjector	: AOCTM-20i/20s
Column	: BPX5 (30m ×0.25 mm, I.D. 0.25 μm)
[GC Conditions]	
Injection Mode	: Split
Split Ratio	: 30
Carrier gas	: He
Carrier gas Control	: Constant linear velocity (39.0 cm/sec)
Injection Volume	: 1 μL
Injection Temp.	: 250 °C
Column Oven Temp.	: 60 °C (2 min) →15 °C/min →330 °C (3 min)
[MS Conditions]	
Ion Source Temp.	: 250 °C
Interface Temp.	: 280 °C
Data Acquisition Mode	: MRM

표 2. 가공 및 발표 식품의 필터 기능 적용 유무에 따른 성분 분석

시료	두유	맥주	커피	치즈	태국 생선 소스	콘 수프	모조 게
필터 종류	식물 (식품)			동물 (식품)		식물 (식품) + 동물(식품)*2	
검출 성분 수 (필터 미적용)	87	95	89	100	132	104	102
검출 성분 수 (필터 적용)	85	93	84	92	119	101	99
검출 비율 (%)*2	98	98	94	92	90	97	97

*1 검출 비율 (%) = 검출된 성분 수(필터 있음) / 검출된 성분 수(필터 없음) × 100
*2 분석 대상 성분 = 그림 3의 벤 다이어그램에서 주황색과 녹색 집합의 합집합

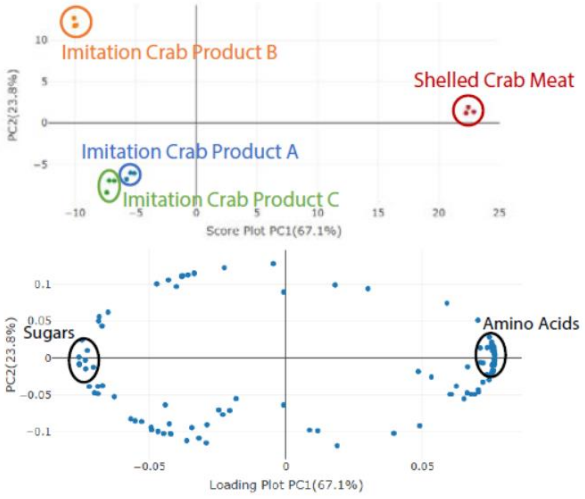

그림 4. 실제 게와 모조 게의 주성분 분석 (3 제품)

■ 결론

GC-MS/MS의 MRM 모드 기반의 Smart Metabolites Database Ver.2를 이용하면 모든 생물학적 시료에 존재하는 것으로 알려진 540가지 성분을 고감도로 동시 분석할 수 있다. 해당 데이터베이스 내의 필터 기능을 이용하면 자동으로 타겟 성분을 선택하고 MRM 분석 방법을 생성해주기 때문에 효율적이고 고감도 분석을 진행 할 수 있습니다.

GCMS-TQ, Smart Metabolites Database, Smart Database, LabSolutions Insight 및 AOC는 일본 및 기타 국가에서 Shimadzu Corporation 및 그 계열사의 상표입니다.

Shimadzu Corporation
www.shimadzu.com/an/
Shimadzu Scientific Korea
www.shimadzu.co.kr

For Research Use Only. Not for use in diagnostic procedures. Not available in the USA, Canada, and China. This publication may contain references to products that are not available in your country. Please contact us to check the availability of these products in your country.

The content of this publication shall not be reproduced, altered or sold for any commercial purpose without the written approval of Shimadzu. Company names, products/service names and logos used in this publication are trademarks and trade names of Shimadzu Corporation, its subsidiaries or its affiliates, whether or not they are used with trademark symbol "TM" or "®".
Third-party trademarks and trade names may be used in this publication to refer to either the entities or their products/services, whether or not they are used with trademark symbol "TM" or "®".
Shimadzu disclaims any proprietary interest in trademarks and trade names other than its own.

The information contained herein is provided to you "as is" without warranty of any kind including without limitation warranties as to its accuracy or completeness. Shimadzu does not assume any responsibility or liability for any damage, whether direct or indirect, relating to the use of this publication. This publication is based upon the information available to Shimadzu on or before the date of publication, and subject to change without notice.

Copyright © 2024 SHIMADZU group. All rights reserved.

01-00388-ENK