

メタボローム解析試験報告書
(Basic Scan)

CE-TOFMS による卵黄のメタボローム解析

試験委託者：オリジンバイオテクノロジー株式会社

報告書番号：ORIGH-HMT-001

報告日：2018年02月22日



ヒューマン・メタボローム・テクノロジー株式会社

本報告は 36 頁で構成 (表紙を含む)

目次

1. 試験目的	4
2. 要約	4
3. 材料及び方法	5
3-1 試料	5
3-2 前処理	5
4. 測定	6
5. データ処理及び解析	7
5-1 データ処理	7
5-2 候補代謝物質検索	7
5-3 対象代謝化合物の定量	7
5-4 代謝経路の描画	7
6. 結果	8
6-1 候補代謝物質検索	8
6-2 群間比較	8
6-3 対象代謝化合物の定量	8
6-4 代謝経路の描画	14
7. 参考文献、資料	24
8. データ、記録、資料、試料の保管場所	25

表 1 試料の情報	5
表 2 候補化合物が絞り込まれた代謝物質	9
表 3 対象代謝化合物の定量	12
図 1 代謝物質の経路図	15
図 2 代謝物質の経路図 (中心炭素代謝)	16
図 3 代謝物質の経路図 (尿素回路と関連アミノ酸の代謝)	17
図 4 代謝物質の経路図 (脂質代謝とアミノ酸の代謝)	18
図 5 代謝物質の経路図 (分岐鎖アミノ酸, 芳香族アミノ酸の代謝)	19
図 6 代謝物質の経路図 (核酸の代謝)	20
図 7 代謝物質の経路図 (補酵素の代謝)	21
図 8 代謝経路図に描画されなかった代謝物質	22

1. 試験目的

CE-TOFMS を用いて卵黄の代謝物質を解析し、変動を捉える。

2. 要約

オリジンバイオテクノロジー株式会社（本報告書では、以下「オリジンバイオテクノロジー」と表記する。）より送付された卵黄 2 検体について、CE-TOFMS^{†1}のカチオンモード、アニオンモードによる測定を実施した。本試験では、HMT 代謝物質ライブラリ及び Known-Unknown ピークライブラリに登録された物質を対象として解析を行った。この結果、130（カチオン 97, アニオン 33）のピークが検出された。

^{†1} CE-TOFMS: キャピラリー電気泳動-飛行時間型質量分析計

3. 材料及び方法

3-1 試料

オリジンバイオテクノロジーにて、卵黄試料を採取した。表 1 に示す試料が HMT に送付された。

表 1 試料の情報

試料名	試料量 (mg) †	群名	希釈倍率 (Cation) §	希釈倍率 (Anion) §
A01-1	43.2	Control-Y	2	1
B01-1	47.4	ErgoEgg-Y	2	1

† HMT にて秤量した値

§ 測定時の希釈倍率

3-2 前処理

卵黄試料を受領後、HMT にて試料を採取した。試料と、1,500 μ L の 50%アセトニトリル水溶液(v/v) (内部標準物質濃度：10 μ M) を破碎用チューブに加え、冷却下にて破碎機を用いて破碎 (1,500 rpm, 120 秒 \times 1 回) した。組織破碎後、遠心 (2,300 \times g, 4°C, 5 分) を行った。遠心後、上澄みを限外ろ過チューブ (ウルトラフリーMC PLHCC, HMT, 遠心式フィルターユニット 5 kDa) に 400 μ L 移し取った。これを遠心 (9,100 \times g, 4°C, 120 分) し、限外ろ過処理を行った。ろ液を乾固させ、再び 50 μ L の Milli-Q 水に溶解して測定に供した。

4. 測定

本試験ではカチオンモード、アニオンモードの測定を以下に示す条件^{1,3)}で行った。得られたピーク強度、形状から判断して、測定には表 1 に示した希釈倍率にて測定を行った。

陽イオン性代謝物質（カチオンモード）

装置

Agilent CE-TOFMS system（Agilent Technologies 社） 3号機

Capillary: Fused silica capillary i.d. 50 μm \times 80 cm

測定条件

Run buffer:	Cation Buffer Solution (p/n : H3301-1001)
Rinse buffer:	Cation Buffer Solution (p/n : H3301-1001)
Sample injection:	Pressure injection 50 mbar, 10 sec
CE voltage:	Positive, 27 kV
MS ionization:	ESI Positive
MS capillary voltage:	4,000 V
MS scan range:	m/z 50-1,000
Sheath liquid:	HMT Sheath Liquid (p/n : H3301-1020)

陰イオン性代謝物質（アニオンモード）

装置

Agilent CE-TOFMS system（Agilent Technologies 社） 1号機

Capillary: Fused silica capillary i.d. 50 μm \times 80 cm

測定条件

Run buffer:	Anion Buffer Solution (p/n : H3302-1021)
Rinse buffer:	Anion Buffer Solution (p/n : H3302-1021)
Sample injection:	Pressure injection 50 mbar, 25 sec
CE voltage:	Positive, 30 kV
MS ionization:	ESI Negative
MS capillary voltage:	3,500 V
MS scan range:	m/z 50-1,000
Sheath liquid:	HMT Sheath Liquid (p/n : H3301-1020)

5. データ処理及び解析

5-1 データ処理

CE-TOFMS で検出されたピークは、自動積分ソフトウェアの MasterHands ver.2.17.1.11 (慶應義塾大学開発) を用いて、シグナル/ノイズ (S/N) 比が 3 以上のピークを自動抽出し、質量電荷比 (m/z)、ピーク面積値、泳動時間 (Migration time: MT) を得た。得られたピーク面積値は下記の式¹²を用いて相対面積値に変換した。また、これらのデータには Na^+ や K^+ などのアダクトイオン及び、脱水、脱アンモニウムなどのフラグメントイオンが含まれているので、これらの分子量関連イオンを削除した。しかし、物質特異的なアダクトやフラグメントも存在するため、すべてを精査することはできなかった。精査したピークについて、 m/z と MT の値をもとに、各試料間のピークの照合・整列化を行った。

$$^{12} \text{相対面積値} = \frac{\text{目的ピーク的面積値}}{\text{内部標準物質の面積値} \times \text{試料量}}$$

5-2 候補代謝物質検索

検出されたピークに対して m/z と MT の値をもとに HMT 代謝物質ライブラリ及び Known-Unknown ライブラリに登録された全物質との照合、検索を行った。Known-Unknown ピークの詳細については Appendix 資料に示す。検索のための許容誤差は MT で $\pm 0.5 \text{ min}$ 、 m/z では $\pm 10 \text{ ppm}$ ¹³ とした。なお、候補が絞り込めず、複数のピークに同一の候補代謝物質が付与された場合は、枝番を付与して表記した。

$$^{13} \text{質量誤差 (ppm)} = \frac{\text{実測値} - \text{理論値}}{\text{実測値}} \times 10^6$$

5-3 対象代謝化合物の定量

対象代謝化合物について解析を行った。検量線は内部標準物質により補正したピーク面積を用い、各物質について $100 \mu\text{M}$ の一点検量 (内部標準物質 $200 \mu\text{M}$) として濃度を算出した。

5-4 代謝経路の描画

代謝物質定量データの代謝経路マップへの描画を実施した。代謝経路の描画には、VANTED (Visualization and Analysis of Networks containing Experimental Data)⁴⁾を用いた。描画に用いた代謝物質の名称には、一部 HMT 化合物データベースとは異なる略称を用いている。尚、代謝経路はヒトで確認された酵素を基に作成している。

6. 結果

解析結果に関するご案内

- ・ 報告書の内容や用語に関する解説を記載した「メタボローム解析試験データ解説書」を CD-R に同梱しております。ぜひご利用ください。
- ・ 解析結果の数値データは添付「メタボローム解析試験測定データ」(Windows Excel 形式) に同梱されております。ファイル操作に関して「解説書」をご参照の上ご利用ください。

6-1 候補代謝物質検索

卵黄について CE-TOFMS によるメタボローム解析を行った。HMT 代謝物質ライブラリ及び Known-Unknown ライブラリに登録された物質の m/z 及び MT の値から 130 (カチオン 97, アニオン 33) ピークに候補化合物が付与された (表 2)。これらについては、別途添付するエクセルファイルを参照することにより確認することができる。

6-2 群間比較

候補化合物が絞り込まれた 130 ピークについて、各群の相対面積値比の算出を実施した (表 2)。

6-3 対象代謝化合物の定量

対象代謝化合物のうち、検出された 50 (カチオン 39, アニオン 11) 物質のピークについて定量値を算出した (表 3)。

解析結果 表 に関する注意点

- ・ ピーク ID は、測定モードの頭文字と通し番号で構成され、対象ピークが C (カチオン)、A (アニオン)、N (ネガティブ)、P (ポジティブ) モードで検出されたことを示します。
 - ・ HMT DB は、検出ピークの m/z と検出時間 (MT/RT)、または m/z から各種データベースに照合し、得られた候補化合物名とデータベース ID を示します。
対象ピークの検出強度が飽和している場合は、 ^{13}C 同位体イオンピークを解析対象としています。(該当ピークがある場合は、表下の備考欄に記載されます。)
 - ・ ピークの検出値 (Relative Area) は、検出ピーク面積値を 内部標準物質 及び 試料量で補正した数値を示します。N.D. (Not Detected) は検出限界以下であったことを示します。
 - ・ Comparative analysis (表右の着色列) は指定された 2 群間の比較解析結果を示します。N.A. (Not Available) は情報不足により算出不可であったことを示します。
- Ratio** : 2 群間の検出値平均の比を示します。群表記の左側を分子、右側を分母として算出し、 <1 及び $1<$ は、一方の群では検出限界以下であったことを示します。
- p-value** : t-検定の p 値 とその範囲記号 (* <0.05 , ** <0.01 , *** <0.001) を示します。

なお、記載の詳細については「メタボローム解析試験データ解説書」をご参照ください。

表 2 候補化合物が絞り込まれた代謝物質 (その 1)

ID	HMT DB †	Relative Area		Comparative Analysis
		Control-Y	ErgoEgg-Y	Ratio ‡
		A01-1	B01-1	ErgoEgg-Y vs Control-Y
C_0072	1-Methylhistidine 3-Methylhistidine	1.8E-03	1.8E-03	1.0
C_0017	2-Aminoisobutyric acid 2-Aminobutyric acid	1.4E-03	1.5E-03	1.1
A_0019	2-Hydroxyglutaric acid	5.6E-05	7.5E-05	1.4
C_0025	3-Amino-2-piperidone	1.6E-04	2.0E-04	1.2
C_0015	3-Aminoisobutyric acid	9.4E-05	1.1E-04	1.2
A_0005	3-Hydroxybutyric acid	1.4E-04	2.3E-04	1.6
C_0063	4-(β-Acetylaminoethyl)imidazole	N.D.	7.5E-05	1<
C_0054	4-Guanidinobutyric acid	N.D.	1.3E-04	1<
C_0067	5-Hydroxylysine	5.0E-05	7.3E-05	1.5
A_0012	5-Oxoproline	1.1E-02	1.3E-02	1.2
C_0009	Ala	9.0E-02	9.4E-02	1.0
C_0032	Anserine_divalent	3.3E-04	3.2E-04	1.0
C_0075	Arg	1.7E-01	1.7E-01	1.0
C_0107	Arg-Glu	2.2E-04	1.7E-04	0.8
A_0042	Ascorbate 2-sulfate	5.5E-05	6.7E-05	1.2
C_0044	Asn	5.9E-02	5.9E-02	1.0
C_0047	Asp	1.2E-01	1.1E-01	0.9
C_0013	Azetidine 2-carboxylic acid	5.4E-04	3.5E-04	0.6
C_0028	Betaine	9.3E-03	1.3E-02	1.4
C_0088	Carboxymethyllysine	8.9E-05	7.4E-05	0.8
C_0066	Carnitine	5.6E-03	4.8E-03	0.8
C_0092	Carnosine	1.1E-04	1.5E-04	1.3
A_0065	Cholic acid	2.8E-05	3.6E-05	1.3
C_0019	Choline	1.3E-02	1.4E-02	1.1
A_0029	cis-Aconitic acid	5.8E-04	5.4E-04	0.9
A_0033	Citric acid	6.8E-03	6.1E-03	0.9
C_0076	Citrulline	5.3E-04	5.8E-04	1.1
C_0040	Creatine	1.1E-02	1.4E-02	1.2
C_0024	Creatinine	2.5E-03	2.6E-03	1.0
C_0033	Cys	8.3E-04	6.9E-04	0.8
C_0091	Cystathionine	3.4E-04	2.5E-04	0.7
C_0096	Cystine	3.4E-03	3.5E-03	1.0
C_0098	Cytidine	1.0E-04	1.3E-04	1.3
C_0022	Cytosine	N.D.	1.0E-04	1<
C_0100	Dyphylline	2.1E-03	1.7E-03	0.8
C_0052	Ectoine	N.D.	8.5E-05	1<
C_0093	Ergothioneine	N.D.	1.3E-03	1<
C_0002	Ethanolamine	6.3E-03	6.4E-03	1.0
A_0016	Ethanolamine phosphate	2.5E-04	2.6E-04	1.0
A_0007	Fumaric acid	1.5E-04	1.3E-04	0.9
C_0018	GABA	1.6E-04	2.9E-04	1.8
C_0057	Gln	8.4E-02	8.6E-02	1.0
C_0059	Glu	2.8E-01	3.0E-01	1.1
C_0105	Glu-Glu	1.6E-04	2.2E-04	1.4
A_0036	Gluconic acid	1.1E-04	1.3E-04	1.2
A_0035	Glucuronic acid Galacturonic acid	9.3E-05	7.3E-05	0.8
C_0004	Gly	5.4E-02	5.7E-02	1.1
C_0084	Gly-Asp	N.D.	7.6E-05	1<
C_0043	Gly-Gly	1.5E-04	2.7E-04	1.8
C_0081	Gly-Leu	1.6E-04	1.8E-04	1.1
C_0012	Glycerol	7.6E-03	5.8E-03	0.8
A_0027	Glycerol 3-phosphate	6.0E-05	8.3E-05	1.4
C_0101	Glycerophosphocholine	3.6E-03	7.8E-03	2.2
C_0014	Hexylamine	1.1E-04	8.3E-05	0.8
C_0064	His	4.3E-02	4.1E-02	1.0
C_0083	Homocitrulline	6.3E-05	9.7E-05	1.6
C_0030	Homoserine	1.3E-04	1.2E-04	1.0
C_0039	Hydroxyproline	1.6E-03	1.9E-03	1.2
C_0021	Hypotaurine	3.2E-04	4.1E-04	1.3
C_0049	Hypoxanthine	8.2E-04	9.2E-04	1.1

IDは測定モードの頭文字と通し番号からなり、Cはカチオンモード、Aはアニオンモードを示す。

N.D.: Not Detected. 検出対象であるが、検出限界以下であった。

N.A.: Not Available. 計算対象であるが、データ不足のため計算不可であった。

† 検出ピークのm/zとMTからHMTデータベースに照合し得られた候補化合物を示す。

‡ 2群間の検出平均値の比は、後者を分母として算出している。

Compound nameでソート(昇順)している。

表 2 候補化合物が絞り込まれた代謝物質 (その 2)

ID	HMT DB [†] Compound name	Relative Area		Comparative Analysis
		Control-Y	ErgoEgg-Y	Ratio [‡]
		A01-1	B01-1	ErgoEgg-Y vs Control-Y
C_0041	Ile	2.2E-01	2.2E-01	1.0
A_0011	Isothionic acid	2.0E-04	1.3E-04	0.6
A_0034	Isocitric acid	3.4E-04	2.9E-04	0.9
C_0006	Isopropanolamine	1.0E-04	1.1E-04	1.1
A_0004	Lactic acid	1.0E-02	1.2E-02	1.1
C_0042	Leu	4.3E-01	4.4E-01	1.0
C_0058	Lys	1.8E-01	1.8E-01	1.0
A_0013	Malic acid	4.0E-03	3.3E-03	0.8
C_0060	Met	5.9E-02	5.8E-02	1.0
C_0068	Methionine sulfoxide	7.6E-04	6.6E-04	0.9
C_0016	<i>N,N</i> -Dimethylglycine	4.9E-04	5.5E-04	1.1
A_0030	<i>N</i> -Acetylaspartic acid	7.0E-04	9.0E-04	1.3
C_0090	<i>N</i> -Acetylgalactosamine <i>N</i> -Acetylmannosamine <i>N</i> -Acetylglucosamine	2.4E-03	3.0E-03	1.2
C_0080	<i>N</i> -Acetylysine	8.1E-05	1.3E-04	1.7
A_0049	<i>N</i> -Acetylneuraminic acid	2.9E-04	2.3E-04	0.8
C_0073	<i>N</i> -Acetylornithine	9.6E-05	1.4E-04	1.4
C_0074	<i>N</i> ⁵ -Ethylglutamine	5.5E-04	6.8E-04	1.2
C_0082	<i>N</i> ⁶ -Acetylysine	3.1E-04	3.1E-04	1.0
C_0034	Nicotinamide	6.6E-05	5.9E-05	0.9
C_0086	<i>O</i> -Acetylcarnitine	1.8E-03	1.4E-03	0.8
C_0065	<i>O</i> -Acetylhomoserine 2-Aminoacidipic acid	8.2E-05	1.3E-04	1.6
C_0045	Ornithine	5.3E-03	4.3E-03	0.8
A_0015	<i>p</i> -Toluic acid <i>m</i> -Toluic acid <i>o</i> -Toluic acid	3.6E-05	9.2E-05	2.5
A_0038	Pantothenic acid	5.2E-03	5.6E-03	1.1
A_0020	Pelargonic acid	4.1E-05	3.0E-05	0.7
C_0069	Phe	2.2E-01	2.2E-01	1.0
C_0079	Phosphorylcholine	3.4E-03	4.1E-03	1.2
C_0038	Pipecolic acid	N.D.	9.9E-05	1<
C_0007	Piperidine	N.D.	2.4E-04	1<
C_0026	Pro	1.4E-01	1.4E-01	1.0
C_0008	Putrescine	2.4E-04	1.6E-04	0.7
C_0070	Pyridoxal	4.5E-05	5.0E-05	1.1
C_0071	Pyridoxamine	9.8E-05	1.1E-04	1.1
A_0003	Pyruvic acid	2.8E-04	3.9E-04	1.4
C_0111	Riboflavin	1.0E-03	7.4E-04	0.7
C_0010	Sarcosine	2.2E-04	1.2E-04	0.6
C_0020	Ser	1.2E-01	1.2E-01	1.0
C_0094	Ser-Glu	9.7E-05	1.3E-04	1.4
C_0056	Spermidine	1.6E-04	1.2E-04	0.8
C_0053	Stachydrine	9.7E-04	1.0E-03	1.1
A_0009	Succinic acid	3.2E-04	3.5E-04	1.1
A_0046	Sulfotyrosine	3.3E-05	5.2E-05	1.6
C_0035	Taurine	1.6E-03	1.3E-03	0.8
A_0075	Taurocholic acid	1.7E-03	3.3E-03	2.0
A_0021	Terephthalic acid	5.9E-05	6.3E-05	1.1
C_0077	Theobromine	3.0E-03	3.0E-03	1.0
C_0102	Thiamine	4.9E-04	9.4E-04	1.9
C_0046	Thiaproline	N.D.	1.5E-04	1<
C_0029	Thr	1.2E-01	1.2E-01	1.0
C_0095	Thr-Asp	2.3E-04	2.7E-04	1.2
A_0014	Threonic acid	3.5E-04	4.3E-04	1.2
C_0061	Triethanolamine	8.6E-05	7.2E-05	0.8
C_0005	Trimethylamine <i>N</i> -oxide	2.2E-04	3.7E-04	1.7
C_0087	Trp	3.1E-02	3.6E-02	1.1
C_0078	Tyr	1.5E-01	1.5E-01	1.0
C_0001	Urea	9.8E-03	1.2E-02	1.2
A_0024	Uric acid	4.6E-04	5.7E-04	1.2
C_0099	Uridine	3.3E-04	5.0E-04	1.5
C_0027	Val	2.0E-01	1.9E-01	1.0
A_0010	XA0003	9.2E-05	9.2E-05	1.0

IDは測定モードの頭文字と通し番号からなり、Cはカチオンモード、Aはアニオンモードを示す。

N.D.: Not Detected. 検出対象であるが、検出限界以下であった。

NA: Not Available. 計算対象であるが、データ不足のため計算不可であった。

[†]検出ピークのm/zとMTからHMTデータベースに照合し得られた候補化合物を示す。[‡]2群間の検出平均値の比は、後者を分母として算出している。

Compound nameでソート(昇順)している。

表 2 候補化合物が絞り込まれた代謝物質 (その 3)

ID	HMT DB †	Relative Area		Comparative Analysis
		Control-Y	ErgoEgg-Y	Ratio ‡
		A01-1	B01-1	ErgoEgg-Y vs Control-Y
A_0017	XA0004	2.1E-05	1.8E-05	0.9
A_0022	XA0012	5.2E-05	4.1E-05	0.8
A_0028	XA0013	1.6E-04	1.8E-04	1.1
A_0041	XA0033	5.6E-04	6.5E-04	1.2
C_0003	XC0001	1.1E-04	3.6E-04	3.4
C_0037	XC0016	1.8E-04	2.3E-04	1.3
C_0089	XC0061	9.7E-05	5.7E-05	0.6
C_0110	XC0126	1.1E-04	N.D.	<1
C_0011	β-Ala	1.6E-03	2.3E-03	1.5
C_0055	γ-Butyrobetaine	5.5E-04	4.7E-04	0.9

IDは測定モードの頭文字と通し番号からなり、Cはカチオンモード、Aはアニオンモードを示す。

N.D.: Not Detected. 検出対象であるが、検出限界以下であった。

NA: Not Available. 計算対象であるが、データ不足のため計算不可であった。

† 検出ピークのm/zとMTからHMTデータベースに照合し得られた候補化合物を示す。

‡ 2群間の検出平均値の比は、後者を分母として算出している。

Compound nameでソート(昇順)している。

表 3 対象代謝化合物の定量（その 1）

ID	Metabolite	Concentration (nmol/g)	
		Control-Y	ErgoEgg-Y
		A01-1	B01-1
A_0006	2-Hydroxybutyric acid	N.D.	N.D.
A_0018	2-Oxoglutaric acid	N.D.	N.D.
A_0008	2-Oxoisovaleric acid	N.D.	N.D.
A_0031	2-Phosphoglyceric acid	N.D.	N.D.
A_0005	3-Hydroxybutyric acid	9.3	15
A_0032	3-Phosphoglyceric acid	N.D.	N.D.
A_0047	6-Phosphogluconic acid	N.D.	N.D.
A_0064	Acetyl CoA_divalent	N.D.	N.D.
C_0048	Adenine	N.D.	N.D.
C_0103	Adenosine	N.D.	N.D.
A_0067	ADP	N.D.	N.D.
C_0009	Ala	1,333	1,381
A_0056	AMP	N.D.	N.D.
C_0050	Anthranilic acid	N.D.	N.D.
C_0075	Arg	2,094	2,108
C_0044	Asn	1,106	1,109
C_0047	Asp	2,050	1,900
A_0074	ATP	N.D.	N.D.
C_0028	Betaine	104	145
C_0031	Betaine aldehyde_+H ₂ O	N.D.	N.D.
A_0053	cAMP	N.D.	N.D.
C_0092	Carnosine	1.7	2.3
A_0062	CDP	N.D.	N.D.
A_0055	cGMP	N.D.	N.D.
C_0019	Choline	140	150
A_0029	cis-Aconitic acid	13	12
A_0033	Citric acid	215	190
C_0076	Citrulline	7.4	8.2
A_0051	CMP	N.D.	N.D.
A_0059	CoA_divalent	N.D.	N.D.
C_0040	Creatine	117	141
C_0024	Creatinine	33	35
A_0071	CTP	N.D.	N.D.
C_0033	Cys	17	14
C_0098	Cytidine	1.4	1.7
C_0022	Cytosine	N.D.	1.9
A_0073	dATP	N.D.	N.D.
A_0069	dCTP	N.D.	N.D.
A_0025	Dihydroxyacetone phosphate	N.D.	N.D.
A_0061	dTDP	N.D.	N.D.
A_0050	dTMP	N.D.	N.D.
A_0070	dTTP	N.D.	N.D.
A_0037	Erythrose 4-phosphate	N.D.	N.D.
A_0054	Fructose 1,6-diphosphate	N.D.	N.D.
A_0045	Fructose 6-phosphate	N.D.	N.D.
A_0007	Fumaric acid	11	10
C_0018	GABA	2.1	3.8
A_0068	GDP	N.D.	N.D.
C_0057	Gln	1,433	1,478
C_0059	Glu	5,474	5,762
A_0036	Gluconic acid	4.8	5.7
A_0044	Glucose 1-phosphate	N.D.	N.D.
A_0043	Glucose 6-phosphate	N.D.	N.D.
C_0109	Glutathione (GSH)	N.D.	N.D.
C_0108	Glutathione (GSSG)_divalent	N.D.	N.D.
C_0004	Gly	1,537	1,616
A_0026	Glyceraldehyde 3-phosphate	N.D.	N.D.
A_0027	Glycerol 3-phosphate	4.4	6.0
A_0002	Glycolic acid	N.D.	N.D.
A_0001	Glyoxylic acid	N.D.	N.D.

IDは測定モードの頭文字と通し番号からなり、Cはカチオンモード、Aはアニオンモードを示す。

N.D.: Not Detected. 解析対象であるが、検出限界以下であった。

N.A.: Not Available. 計算対象であるが、データ不足のため計算不可であった。

Compound nameでソート(昇順)している。

表 3 対象代謝化合物の定量 (その 2)

ID	Metabolite	Concentration (nmol/g)	
		Control-Y	ErgoEgg-Y
		A01-1	B01-1
A_0058	GMP	N.D.	N.D.
A_0076	GTP	N.D.	N.D.
C_0062	Guanine	N.D.	N.D.
C_0106	Guanosine	N.D.	N.D.
C_0064	His	572	554
C_0030	Homoserine	1.9	1.8
C_0039	Hydroxyproline	21	26
C_0049	Hypoxanthine	17	19
C_0041	Ile	1,310	1,319
A_0057	IMP	N.D.	N.D.
C_0104	Inosine	N.D.	N.D.
A_0034	Isocitric acid	9.5	8.2
A_0004	Lactic acid	626	712
C_0042	Leu	2,394	2,443
C_0058	Lys	3,179	3,075
A_0013	Malic acid	121	99
A_0066	Malonyl CoA_divalent	N.D.	N.D.
C_0060	Met	673	668
C_0016	N,N-Dimethylglycine	6.2	7.0
A_0077	NAD ⁺	N.D.	N.D.
A_0078	NADP ⁺	N.D.	N.D.
C_0045	Ornithine	76	61
C_0069	Phe	1,621	1,650
A_0023	Phosphoenolpyruvic acid	N.D.	N.D.
C_0026	Pro	1,504	1,469
A_0060	PRPP	N.D.	N.D.
C_0008	Putrescine	5.1	3.4
A_0003	Pyruvic acid	34	48
A_0040	Ribose 5-phosphate	N.D.	N.D.
A_0039	Ribulose 5-phosphate	N.D.	N.D.
C_0112	S-Adenosylmethionine	N.D.	N.D.
C_0010	Sarcosine	3.1	1.8
A_0048	Sedoheptulose 7-phosphate	N.D.	N.D.
C_0020	Ser	2,122	2,100
C_0056	Spermidine	1.8	1.4
C_0085	Spermine	N.D.	N.D.
A_0009	Succinic acid	15	16
C_0029	Thr	1,931	1,956
C_0097	Thymidine	N.D.	N.D.
C_0036	Thymine	N.D.	N.D.
C_0087	Trp	364	413
C_0078	Tyr	1,784	1,818
C_0051	Tyramine	N.D.	N.D.
A_0063	UDP	N.D.	N.D.
A_0052	UMP	N.D.	N.D.
C_0023	Uracil	N.D.	N.D.
C_0099	Uridine	17	25
A_0072	UTP	N.D.	N.D.
C_0027	Val	1,683	1,615
C_0011	β -Ala	30	45

IDは測定モードの頭文字と通し番号からなり、Cはカチオンモード、Aはアニオンモードを示す。

N.D.: Not Detected. 解析対象であるが、検出限界以下であった。

N.A.: Not Available. 計算対象であるが、データ不足のため計算不可であった。

Compound nameでソート(昇順)している。

6-4 代謝経路の描画

検出されたピークを候補化合物にもとづいて解糖系/糖新生、ペントースリン酸経路、クエン酸回路、尿素回路、プリン・ピリミジン代謝、補酵素代謝及び各種アミノ酸代謝経路に分類し、代謝経路上に描画した（図 1～8）。略称を用いた物質に関しては、HMT 代謝物質ライブラリでの名称との対応を Appendix 資料に示す。

解析結果 代謝経路 に関する注意点

個別のグラフ図は、CD-R に同梱されております。

- ・ 縦軸は比較群（及び比較時点）ごとの検出値平均と標準分散（エラーバー）を示します。
- ・ 代謝経路及び機能分類はヒトの遺伝子情報に基づいて構成されています。
- ・ 「代謝経路図に描画されなかった代謝物質」の略称に関しては、CD-R に保存されたエクセルファイルをご参照ください。

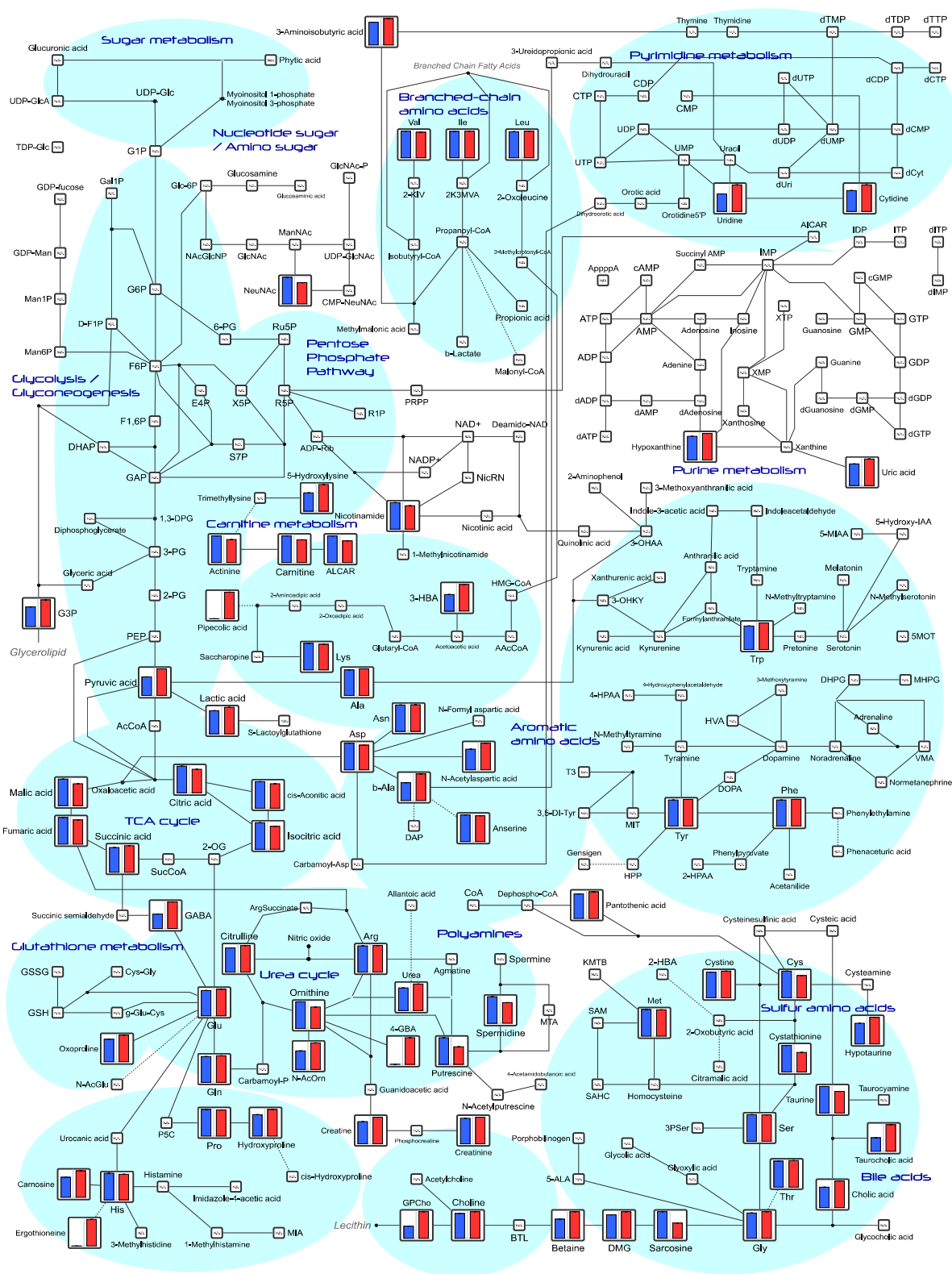


図 1 代謝物質の経路図

HMT 代謝物質ライブラリに登録されている代謝物質のうち、本試験で検出された物質を代謝経路に描画した。グラフは左から順に Control-Y (青色)、ErgoEgg-Y (赤色) の相対面積値を示す。N.D. : Not Detected.

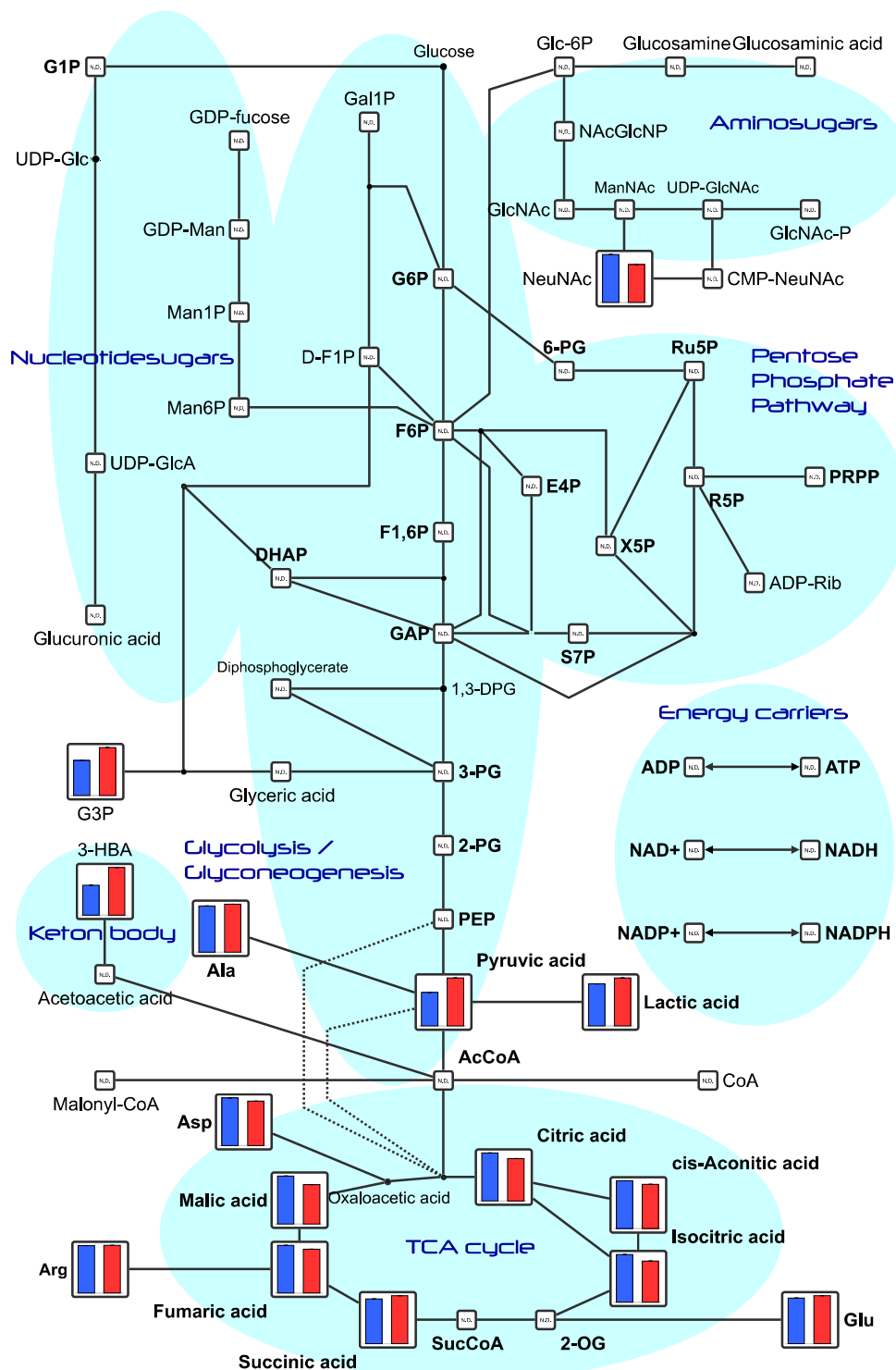


図2 代謝物質の経路図（中心炭素代謝）

HMT 代謝物質ライブラリに登録されている代謝物質のうち、本試験で検出された物質を代謝経路に描画した。グラフは左から順に Control-Y (青色)、ErgoEgg-Y (赤色)の相対面積値を示す。N.D.: Not Detected.

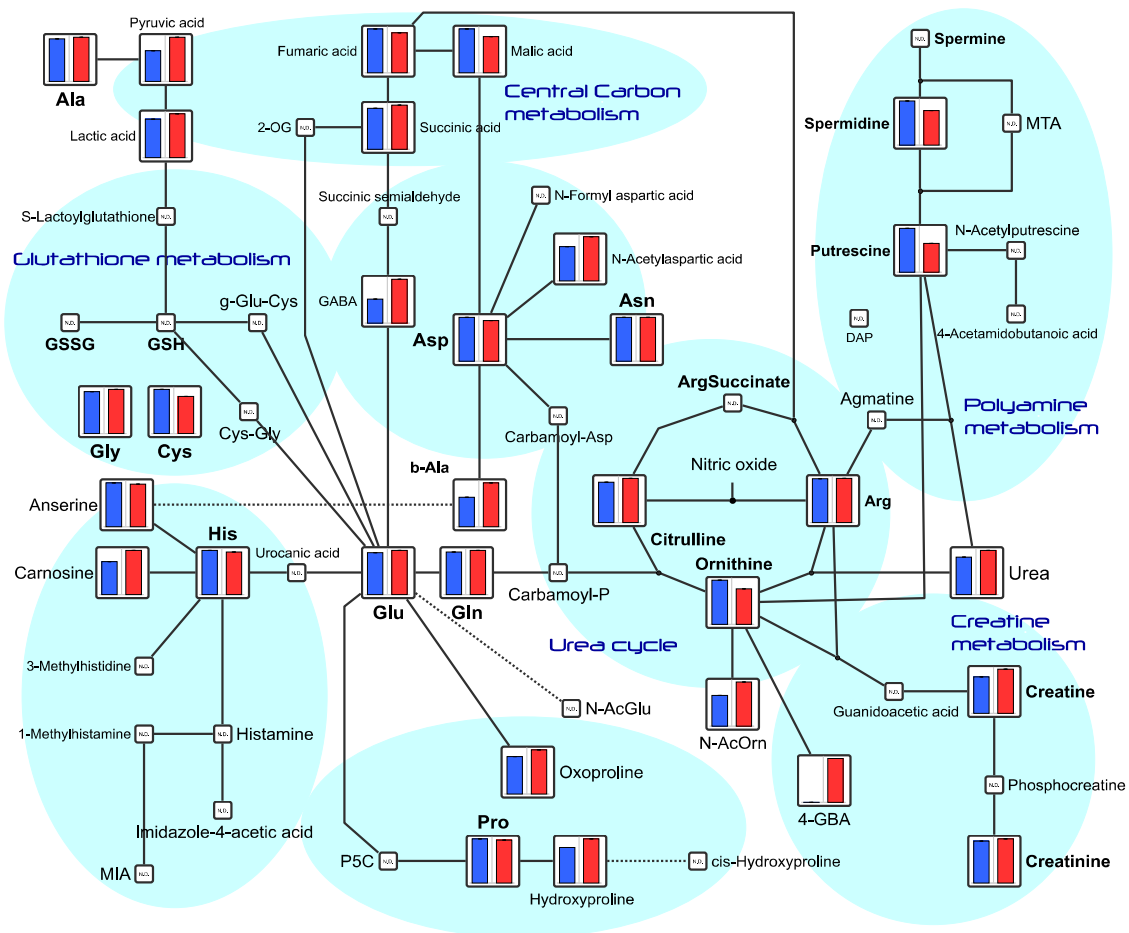


図3 代謝物質の経路図（尿素回路と関連アミノ酸の代謝）

HMT 代謝物質ライブラリに登録されている代謝物質のうち、本試験で検出された物質を代謝経路に描画した。グラフは左から順に Control-Y(青色)、ErgoEgg-Y(赤色)の相対面積値を示す。N.D. : Not Detected.

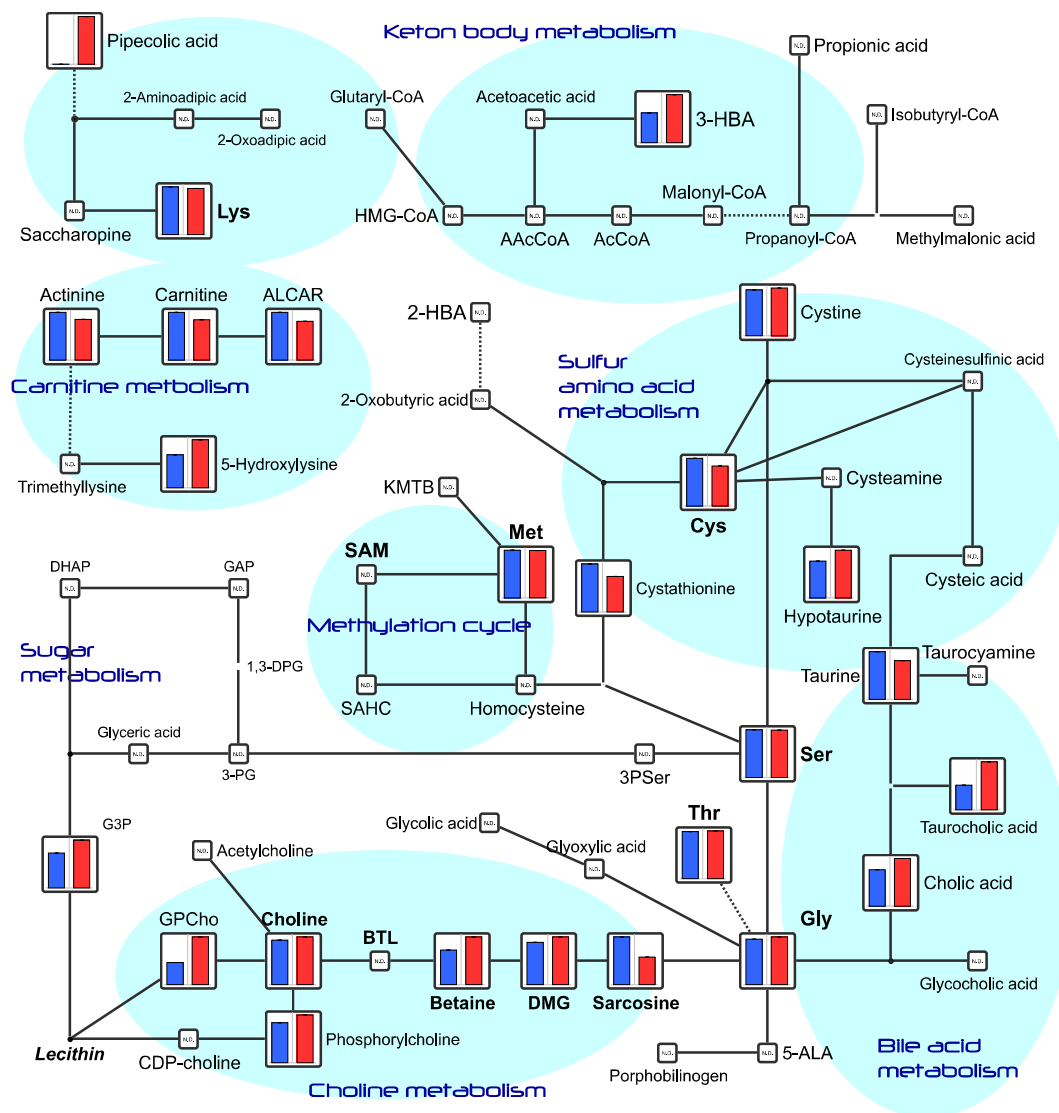


図 4 代謝物質の経路図（脂質代謝とアミノ酸の代謝）

HMT 代謝物質ライブラリに登録されている代謝物質のうち、本試験で検出された物質を代謝経路に描画した。グラフは左から順に Control-Y (青色)、ErgoEgg-Y (赤色)の相対面積値を示す。N.D. : Not Detected.

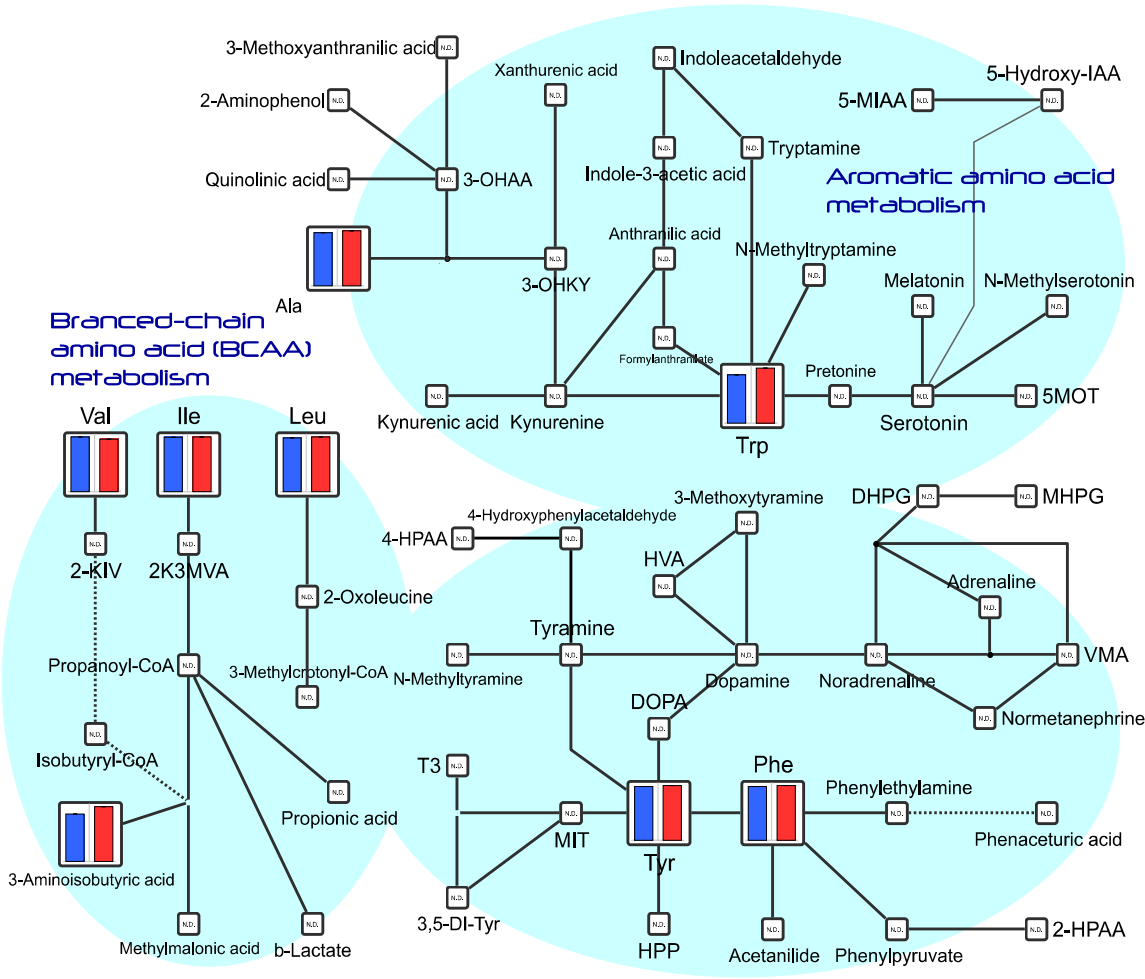


図5 代謝物質の経路図 (分岐鎖アミノ酸, 芳香族アミノ酸の代謝)

HMT 代謝物質ライブラリに登録されている代謝物質のうち、本試験で検出された物質を代謝経路に描画した。グラフは左から順に Control-Y (青色)、ErgoEgg-Y (赤色)の相対面積値を示す。N.D. : Not Detected.

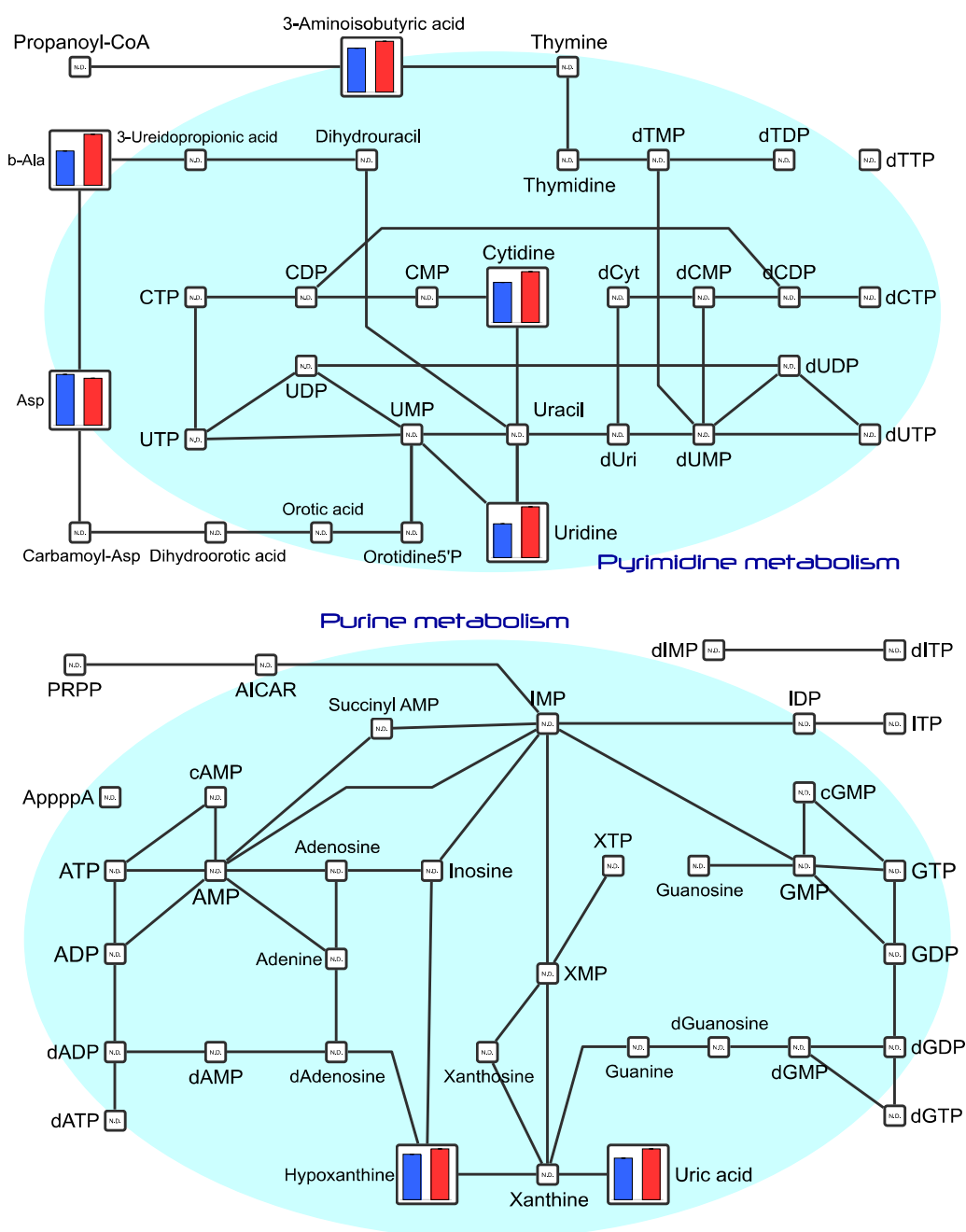
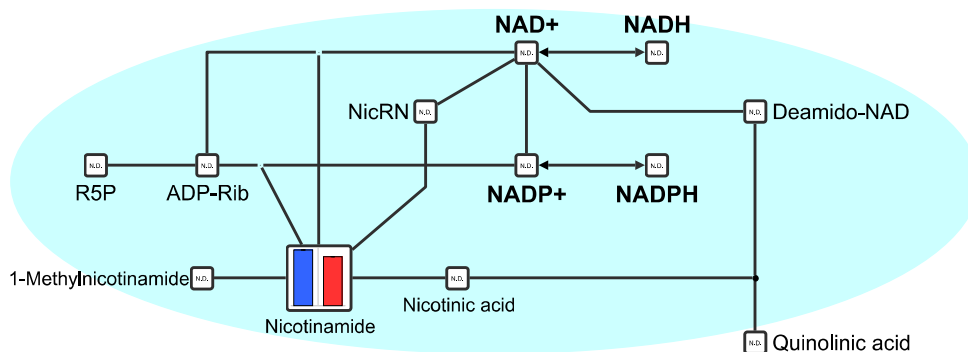


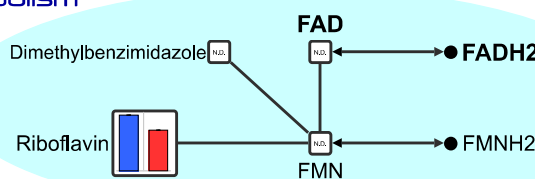
図6 代謝物質の経路図（核酸の代謝）

HMT 代謝物質ライブラリに登録されている代謝物質のうち、本試験で検出された物質を代謝経路に描画した。グラフは左から順に Control-Y(青色)、ErgoEgg-Y(赤色)の相対面積値を示す。N.D.: Not Detected.

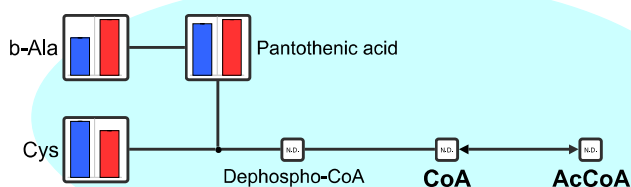
Nicotinamide metabolism



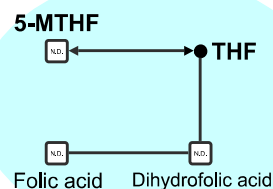
Riboflavin metabolism



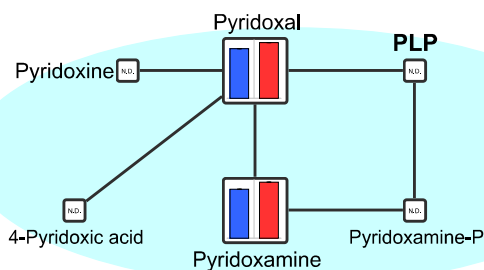
CoA metabolism



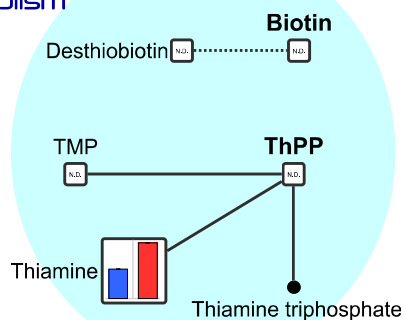
Folate metabolism



Vitamin B6 metabolism



Biotin & Thiamine metabolism



Vitamin C metabolism

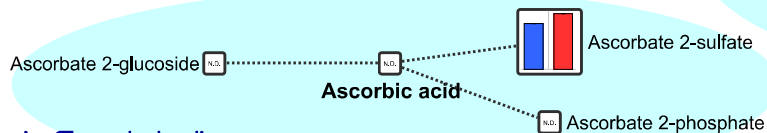


図7 代謝物質の経路図（補酵素の代謝）

HMT 代謝物質ライブラリに登録されている代謝物質のうち、本試験で検出された物質を代謝経路に描画した。グラフは左から順に Control-Y(青色)、ErgoEgg-Y(赤色)の相対面積値を示す。N.D. : Not Detected.

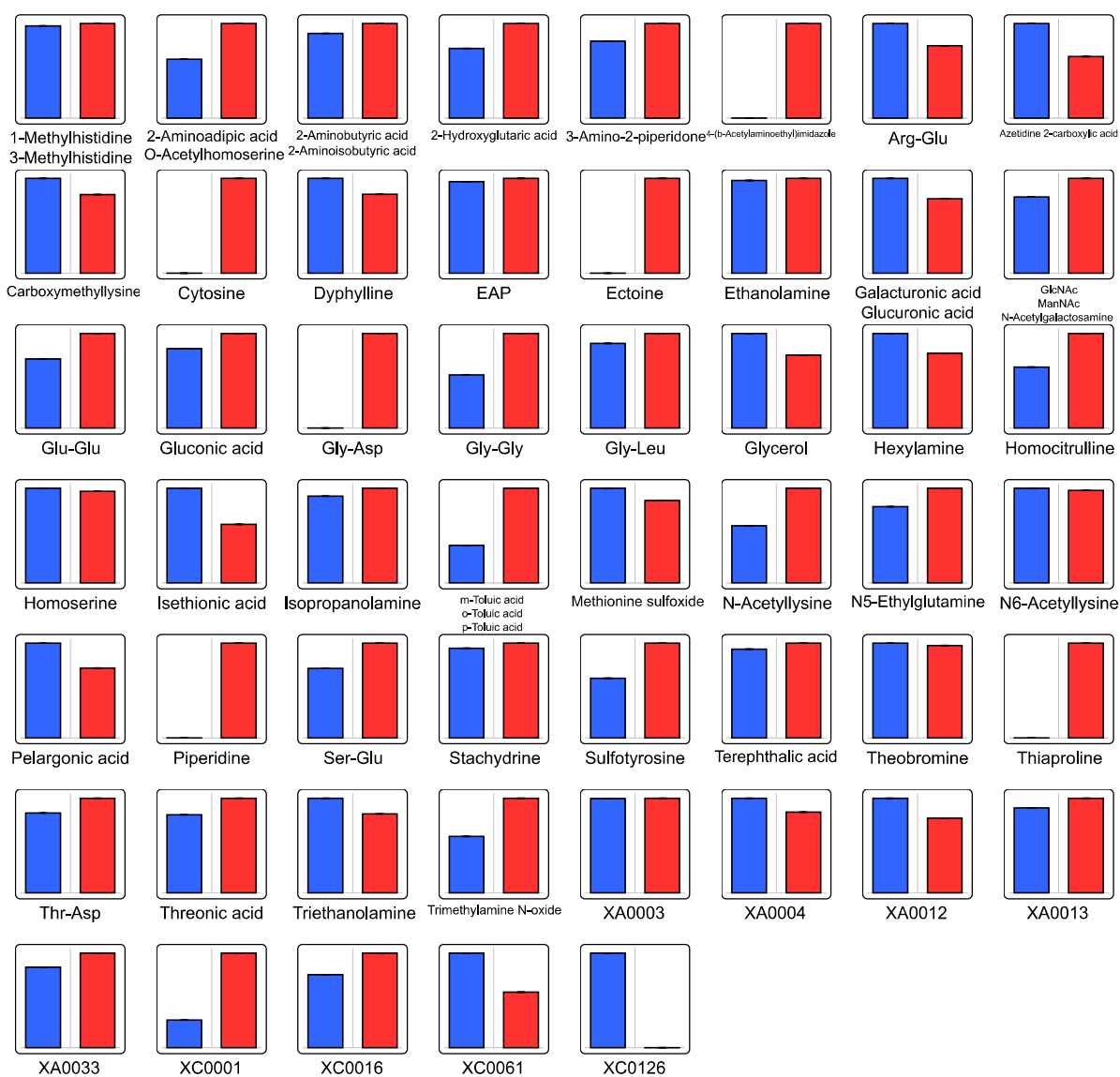


図 8 代謝経路図に描画されなかった代謝物質

HMT 代謝物質ライブラリに登録されているが、代謝経路に描画されなかった物質を示す。グラフは左から順に Control-Y (青色)、ErgoEgg-Y (赤色) の相対面積値を示す。

～ ご参考情報 ～

KEGG 代謝経路 / HMDB 物性分類

添付エクセルファイルの末尾シートには「KEGG 代謝経路分類」及び「HMDB 物性分類」が収録されております。これは、各データベースに登録された代謝経路及び生物学機能にもとづいた分類結果を示したものであり、複数の変化が得られた代謝経路・機能を探査する上でご利用いただけます。

ヒト検体での代謝産物の平均値のご案内

いくつかの主要な代謝物に関しては、公的な代謝産物データベースである The Human Metabolome Database (HMDB: <http://www.hmdb.ca/>)に平均値データが寄託されております。

1. web ページ上部の Search box に対象の代謝物名を入力
2. Normal Concentrations の項目を確認（血液、CSF、糞便、唾液、尿などの情報）

こちらのサイトのデータをご確認いただくとコントロール群の代謝物量の分散のイメージをおおよそ捉えていただけるかと思しますので、ご利用ください。

代謝物質データベース Metaboard

HMT の受託解析をご利用いただいたユーザー様用に、代謝物質データベースを公開しております。主要代謝物質の概要、代謝経路、検出実績、分子情報など、解析結果の解釈にお役立ていただける情報を無料でご利用いただけます。

下記の URL よりサイトに移動していただき、記載された ID、パスワードをご入力ください。

URL : <http://humanmetabolome.com/metaboard/>
 ID : meta
 パスワード : board



7. 参考文献、資料

- 1) T. Soga, D. N. Heiger: Amino acid analysis by capillary electrophoresis electrospray ionization mass spectrometry. *Anal.Chem.* **72**: 1236-1241, 2000.
- 2) T. Soga, Y. Ueno, H. Naraoka, Y. Ohashi, M. Tomita et al.: Simultaneous determination of anionic intermediates for *Bacillus subtilis* metabolic pathways by capillary electrophoresis electrospray ionization mass spectrometry. *Anal.Chem.* **74**: 2233-2239, 2002.
- 3) T. Soga, Y. Ohashi, Y. Ueno, H. Naraoka, M. Tomita et al.: Quantitative metabolome analysis using capillary electrophoresis mass spectrometry. *J. Proteome Res.* **2**: 488-494, 2003.
- 4) <http://vanted.ipk-gatersleben.de/>

8. データ、記録、資料、試料の保管場所

データ、記録、資料については、以下の保管場所に最終報告書提出後1年間保管する。試料については6箇月間保存とする。なお、試料返却が必要な場合は、試験終了後試料返却を行う。ただし、データ再解析時はこの限りではない。

資料の保管場所

ヒューマン・メタボローム・テクノロジーズ株式会社 データ・資料保管庫

保管内容

- ・ 契約書
- ・ 解析試験スケジュール
- ・ 試料調製記録
- ・ 分析スケジュール
- ・ 分析条件
- ・ 分析結果
- ・ 解析経過
- ・ 最終報告書

その他本試験に関わるデータ、記録、資料

電子媒体の保管場所

ヒューマン・メタボローム・テクノロジーズ株式会社 データサーバー

保管内容

- ・ 分析データ
- ・ 分析結果

試料の保管場所

ヒューマン・メタボローム・テクノロジーズ株式会社 試料保管室（-80℃冷凍庫内）

保管内容

試験終了後6箇月間保存する。

(問合せ先) ヒューマン・メタボローム・テクノロジーズ株式会社
メタボローム解析事業部
〒997-0052 山形県鶴岡市覚岸寺水上 246-2
E-mail: tsuruoka@humanmetabolome.com
Tel: 0235-25-1447

Appendix 1-1. 代謝経路図の情報

Candidates [†]	Pathway Label [‡]	Pathway Index [§]
1,3-Diaminopropane	DAP	尿素回路と関連アミノ酸の代謝
1-Methyl-4-imidazoleacetic acid	MIA	尿素回路と関連アミノ酸の代謝
1-Methylhistamine	1-Methylhistamine	尿素回路と関連アミノ酸の代謝
1-Methylnicotinamide	1-Methylnicotinamide	補酵素の代謝
1-Pyrroline 5-carboxylic acid	P5C	尿素回路と関連アミノ酸の代謝
2,3-Diphosphoglyceric acid	Diphosphoglycerate	中心炭素代謝
2,5-Dihydroxybenzoic acid	Gensigen	全体マップのみ
2-Amino adipic acid	2-Amino adipic acid	脂質代謝とアミノ酸の代謝
2'-Deoxyadenosine	dAdenosine	核酸の代謝
2'-Deoxycytidine	dCyt	核酸の代謝
2'-Deoxyguanosine	dGuanosine	核酸の代謝
2'-Deoxyuridine	dUri	核酸の代謝
2-Hydroxybutyric acid	2-HBA	脂質代謝とアミノ酸の代謝
2-Oxo adipic acid	2-Oxo adipic acid	脂質代謝とアミノ酸の代謝
2-Oxo butyric acid	2-Oxo butyric acid	脂質代謝とアミノ酸の代謝
2-Oxoglutaric acid	2-OG	中心炭素代謝／尿素回路と関連アミノ酸の代謝
2-Oxoisovaleric acid	2-KIV	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
2-Phenylethylamine	Phenylethylamine	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
2-Phosphoglyceric acid	2-PG	中心炭素代謝
3,3',5-Triiodothyronine	T3	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
3,4-Dihydroxyphenylglycol	DHPG	全体マップのみ
3,5-Diiodotyrosine	3,5-DI-Tyr	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
3-Aminoisobutyric acid	3-Aminoisobutyric acid	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝／核酸の代謝
3'-Dephospho CoA	Dephospho-CoA	補酵素の代謝
3-Hydroxyanthranilic acid	3-OHAA	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
3-Hydroxybutyric acid	3-HBA	中心炭素代謝／脂質代謝とアミノ酸の代謝
3-Hydroxykynurenine	3-OHKY	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
3-Hydroxypropionic acid	b-Lactate	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
3-Iodotyrosine	MIT	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
3-Methoxy-4-hydroxyphenylethyleneglycol	MHPG	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
3-Methoxyanthranilic acid	3-Methoxyanthranilic acid	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
3-Methoxytyramine	3-Methoxytyramine	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
3-Methyl-2-oxovaleric acid	2K3MVA	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
3-Methylcrotonyl CoA_divalent	3-Methylcrotonyl-CoA	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
3-Methylhistidine	3-Methylhistidine	尿素回路と関連アミノ酸の代謝
3-Phosphoglyceric acid	3-PG	中心炭素代謝／脂質代謝とアミノ酸の代謝
3-Ureidopropionic acid	3-Ureidopropionic acid	核酸の代謝
4-Acetamidobutanoic acid	4-Acetamidobutanoic acid	全体マップのみ
4-Guanidinobutyric acid	4-GBA	尿素回路と関連アミノ酸の代謝
4-Hydroxyphenylacetaldehyde	4-Hydroxyphenylacetaldehyde	全体マップのみ
4-Methyl-2-oxovaleric acid	2-Oxoleucine	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
4-Methylthio-2-oxobutyric acid	KMTB	脂質代謝とアミノ酸の代謝
4-Pyridoxic acid	4-Pyridoxic acid	補酵素の代謝
5,6-Dimethylbenzimidazole	Dimethylbenzimidazole	補酵素の代謝
5-Amino-4-oxovaleric acid	5-ALA	脂質代謝とアミノ酸の代謝
5-Aminoimidazole-4-carboxamide ribotide	AICAR	核酸の代謝
5'-Deoxy-5'-methylthioadenosine	MTA	尿素回路と関連アミノ酸の代謝
5-Hydroxyindoleacetic acid	5-Hydroxy-IAA	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
5-Hydroxylysine	5-Hydroxylysine	脂質代謝とアミノ酸の代謝
5-Hydroxytryptophan	Pretinine	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
5-Methoxyindoleacetic acid	5-MIAA	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
5-Methoxytryptamine	5MOT	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
5-Methyltetrahydrofolic acid	5-MTHF	補酵素の代謝
5-Oxoproline	Oxoproline	尿素回路と関連アミノ酸の代謝
6-Phosphogluconic acid	6-PG	中心炭素代謝
7,8-Dihydrofolic acid	Dihydrofolic acid	補酵素の代謝
Acetanilide	Acetanilide	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
Acetoacetic acid	Acetoacetic acid	中心炭素代謝／脂質代謝とアミノ酸の代謝
Acetoacetyl CoA_divalent	AAcCoA	脂質代謝とアミノ酸の代謝
Acetyl CoA_divalent	AcCoA	中心炭素代謝／脂質代謝とアミノ酸の代謝／補酵素の代謝
Acetylcholine	Acetylcholine	脂質代謝とアミノ酸の代謝
Adenine	Adenine	核酸の代謝
Adenosine	Adenosine	核酸の代謝
Adenylosuccinic acid	Succinyl AMP	核酸の代謝
ADP	ADP	中心炭素代謝／核酸の代謝
ADP-ribose	ADP-Rib	中心炭素代謝／補酵素の代謝
Adrenaline	Adrenaline	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
Agmatine	Agmatine	尿素回路と関連アミノ酸の代謝
Ala	Ala	中心炭素代謝／尿素回路と関連アミノ酸の代謝／分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
Allantoic acid	Allantoic acid	全体マップのみ

[†] HMTデータベースに登録された代謝物質のうち、代謝経路情報がある物質を示す(本試験で検出されなかった代謝物質も含む)

[‡] 代謝経路上で標記する、簡略化した代謝物質名を示す

[§] 代謝物質の主な代謝経路を示す

Appendix 1-1. 代謝経路図の情報

Candidates [†]	Pathway Label [‡]	Pathway Index [§]
AMP	AMP	核酸の代謝
Anserine_divalent	Anserine	尿素回路と関連アミノ酸の代謝
Anthranilic acid	Anthranilic acid	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
Arg	Arg	中心炭素代謝／尿素回路と関連アミノ酸の代謝
Argininosuccinic acid	ArgSuccinate	尿素回路と関連アミノ酸の代謝
Ascorbate 2-glucoside	Ascorbate 2-glucoside	補酵素の代謝
Ascorbate 2-phosphate	Ascorbate 2-phosphate	補酵素の代謝
Ascorbate 2-sulfate	Ascorbate 2-sulfate	補酵素の代謝
Ascorbic acid	Ascorbic acid	補酵素の代謝
Asn	Asn	尿素回路と関連アミノ酸の代謝
Asp	Asp	中心炭素代謝／尿素回路と関連アミノ酸の代謝／核酸の代謝
ATP	ATP	中心炭素代謝／核酸の代謝
Betaine	Betaine	脂質代謝とアミノ酸の代謝
Betaine aldehyde_+H ₂ O	BTL	脂質代謝とアミノ酸の代謝
Biotin	Biotin	補酵素の代謝
cAMP	cAMP	核酸の代謝
Carbamoylphosphate	Carbamoyl-P	尿素回路と関連アミノ酸の代謝
Carnitine	Carnitine	脂質代謝とアミノ酸の代謝
Carnosine	Carnosine	尿素回路と関連アミノ酸の代謝
CDP	CDP	核酸の代謝
CDP-choline	CDP-choline	脂質代謝とアミノ酸の代謝
cGMP	cGMP	核酸の代謝
Cholic acid	Cholic acid	脂質代謝とアミノ酸の代謝
Choline	Choline	脂質代謝とアミノ酸の代謝
cis-Aconitic acid	cis-Aconitic acid	中心炭素代謝
cis-Hydroxyproline	cis-Hydroxyproline	尿素回路と関連アミノ酸の代謝
Citramalic acid	Citramalic acid	全体マップのみ
Citric acid	Citric acid	中心炭素代謝
Citrulline	Citrulline	尿素回路と関連アミノ酸の代謝
CMP	CMP	核酸の代謝
CMP-N-acetylneuraminate	CMP-NeuNAc	中心炭素代謝
CoA_divalent	CoA	中心炭素代謝／補酵素の代謝
Creatine	Creatine	尿素回路と関連アミノ酸の代謝
Creatinine	Creatinine	尿素回路と関連アミノ酸の代謝
CTP	CTP	核酸の代謝
Cys	Cys	尿素回路と関連アミノ酸の代謝／脂質代謝とアミノ酸の代謝／補酵素の代謝
Cys-Gly	Cys-Gly	尿素回路と関連アミノ酸の代謝
Cystathionine	Cystathionine	脂質代謝とアミノ酸の代謝
Cysteamine	Cysteamine	脂質代謝とアミノ酸の代謝
Cysteic acid	Cysteic acid	脂質代謝とアミノ酸の代謝
Cysteinesulfinic acid	Cysteinesulfinic acid	脂質代謝とアミノ酸の代謝
Cystine	Cystine	脂質代謝とアミノ酸の代謝
Cytidine	Cytidine	核酸の代謝
dADP	dADP	核酸の代謝
dAMP	dAMP	核酸の代謝
dATP	dATP	核酸の代謝
dCDP	dCDP	核酸の代謝
dCMP	dCMP	核酸の代謝
dCTP	dCTP	核酸の代謝
Deamido-NAD [†]	Deamido-NAD	補酵素の代謝
Desthiobiotin	Desthiobiotin	補酵素の代謝
dGDP	dGDP	核酸の代謝
dGMP	dGMP	核酸の代謝
dGTP	dGTP	核酸の代謝
Dihydroorotic acid	Dihydroorotic acid	核酸の代謝
Dihydrouracil	Dihydrouracil	核酸の代謝
Dihydroxyacetone phosphate	DHAP	中心炭素代謝／脂質代謝とアミノ酸の代謝
dIMP	dIMP	核酸の代謝
dITP	dITP	核酸の代謝
DOPA	DOPA	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
Dopamine	Dopamine	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
dTDP	dTDP	核酸の代謝
dTDP-glucose	TDP-Glc	全体マップのみ
dTMP	dTMP	核酸の代謝
dTTP	dTTP	核酸の代謝
dUDP	dUDP	核酸の代謝
dUMP	dUMP	核酸の代謝
dUTP	dUTP	核酸の代謝
Ergothioneine	Ergothioneine	全体マップのみ
Erythrose 4-phosphate	E4P	中心炭素代謝

[†] HMTデータベースに登録された代謝物質のうち、代謝経路情報がある物質を示す(本試験で検出されなかった代謝物質も含む)

[‡] 代謝経路上で標記する、簡略化した代謝物質名を示す

[§] 代謝物質の主な代謝経路を示す

Appendix 1-1. 代謝経路図の情報

Candidates [†]	Pathway Label [‡]	Pathway Index [§]
FAD_divalent	FAD	補酵素の代謝
FMN	FMN	補酵素の代謝
Folic acid	Folic acid	補酵素の代謝
Formylanthranilic acid	Formylanthranilate	全体マップのみ
Fructose 1,6-diphosphate	F1,6P	中心炭素代謝
Fructose 1-phosphate	D-F1P	中心炭素代謝
Fructose 6-phosphate	F6P	中心炭素代謝
Fumaric acid	Fumaric acid	中心炭素代謝／尿素回路と関連アミノ酸の代謝
GABA	GABA	尿素回路と関連アミノ酸の代謝
Galactose 1-phosphate	Gal1P	中心炭素代謝
GDP	GDP	核酸の代謝
GDP-fucose	GDP-fucose	中心炭素代謝
GDP-mannose	GDP-Man	中心炭素代謝
Gln	Gln	尿素回路と関連アミノ酸の代謝
Glu	Glu	中心炭素代謝／尿素回路と関連アミノ酸の代謝
Glucosamine	Glucosamine	中心炭素代謝
Glucosamine 6-phosphate	Glc-6P	中心炭素代謝
Glucosaminic acid	Glucosaminic acid	中心炭素代謝
Glucose 1-phosphate	G1P	中心炭素代謝
Glucose 6-phosphate	G6P	中心炭素代謝
Glucuronic acid	Glucuronic acid	中心炭素代謝
Glutaryl CoA_divalent	Glutaryl-CoA	脂質代謝とアミノ酸の代謝
Glutathione (GSH)	GSH	尿素回路と関連アミノ酸の代謝
Glutathione (GSSG)_divalent	GSSG	尿素回路と関連アミノ酸の代謝
Gly	Gly	尿素回路と関連アミノ酸の代謝／脂質代謝とアミノ酸の代謝
Glyceraldehyde 3-phosphate	GAP	中心炭素代謝／脂質代謝とアミノ酸の代謝
Glyceric acid	Glyceric acid	中心炭素代謝／脂質代謝とアミノ酸の代謝
Glycerol 3-phosphate	G3P	中心炭素代謝／脂質代謝とアミノ酸の代謝
Glycerophosphocholine	GPCho	脂質代謝とアミノ酸の代謝
Glycocholic acid	Glycocholic acid	脂質代謝とアミノ酸の代謝
Glycolic acid	Glycolic acid	脂質代謝とアミノ酸の代謝
Glyoxylic acid	Glyoxylic acid	脂質代謝とアミノ酸の代謝
GMP	GMP	核酸の代謝
GTP	GTP	核酸の代謝
Guanidoacetic acid	Guanidoacetic acid	尿素回路と関連アミノ酸の代謝
Guanine	Guanine	核酸の代謝
Guanosine	Guanosine	核酸の代謝
His	His	尿素回路と関連アミノ酸の代謝
Histamine	Histamine	尿素回路と関連アミノ酸の代謝
HMG CoA_divalent	HMG-CoA	脂質代謝とアミノ酸の代謝
Homocysteine	Homocysteine	脂質代謝とアミノ酸の代謝
Homovanillic acid	HVA	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
Hydroxyproline	Hydroxyproline	尿素回路と関連アミノ酸の代謝
Hypotaurine	Hypotaurine	脂質代謝とアミノ酸の代謝
Hypoxanthine	Hypoxanthine	核酸の代謝
IDP	IDP	核酸の代謝
Ile	Ile	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
Imidazole-4-acetic acid	Imidazole-4-acetic acid	尿素回路と関連アミノ酸の代謝
IMP	IMP	核酸の代謝
Indole-3-acetaldehyde	Indole-3-acetaldehyde	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
Indole-3-acetic acid	Indole-3-acetic acid	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
Inosine	Inosine	核酸の代謝
Isobutyryl CoA_divalent	Isobutyryl-CoA	脂質代謝とアミノ酸の代謝／分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
Isocitric acid	Isocitric acid	中心炭素代謝
ITP	ITP	核酸の代謝
Kynurenic acid	Kynurenic acid	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
Kynurenine	Kynurenine	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
Lactic acid	Lactic acid	中心炭素代謝／尿素回路と関連アミノ酸の代謝
Leu	Leu	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
Lys	Lys	脂質代謝とアミノ酸の代謝
Malic acid	Malic acid	中心炭素代謝／尿素回路と関連アミノ酸の代謝
Malonyl CoA_divalent	Malonyl-CoA	中心炭素代謝／脂質代謝とアミノ酸の代謝
Mannose 1-phosphate	Man1P	中心炭素代謝
Mannose 6-phosphate	Man6P	中心炭素代謝
Melatonin	Melatonin	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
Met	Met	脂質代謝とアミノ酸の代謝
Methylmalonic acid	Methylmalonic acid	脂質代謝とアミノ酸の代謝／分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
N,N-Dimethylglycine	DMG	脂質代謝とアミノ酸の代謝
N ⁶ ,N ⁶ ,N ⁶ -Trimethyllysine	Trimethyllysine	脂質代謝とアミノ酸の代謝
N-Acetylaspartic acid	N-Acetylaspartic acid	尿素回路と関連アミノ酸の代謝

[†] HMTデータベースに登録された代謝物質のうち、代謝経路情報がある物質を示す(本試験で検出されなかった代謝物質も含む)

[‡] 代謝経路上で標記する。簡略化した代謝物質名を示す

[§] 代謝物質の主な代謝経路を示す

Appendix 1-1. 代謝経路図の情報

Candidates [†]	Pathway Label [‡]	Pathway Index [§]
<i>N</i> -Acetylglucosamine	GlcNAc	中心炭素代謝
<i>N</i> -Acetylglucosamine 1-phosphate	GlcNAc-P	中心炭素代謝
<i>N</i> -Acetylglucosamine 6-phosphate	NACGlcNP	中心炭素代謝
<i>N</i> -Acetylglutamic acid	N-AcGlu	尿素回路と関連アミノ酸の代謝
<i>N</i> -Acetylmannosamine	ManNAc	中心炭素代謝
<i>N</i> -Acetyneuraminic acid	NeuNAc	中心炭素代謝
<i>N</i> -Acetylornithine	N-AcOrn	尿素回路と関連アミノ酸の代謝
<i>N</i> -Acetylputrescine	N-Acetylputrescine	尿素回路と関連アミノ酸の代謝
NAD ⁺	NAD ⁺	中心炭素代謝／補酵素の代謝
NADH	NADH	中心炭素代謝／補酵素の代謝
NADP ⁺	NADP ⁺	中心炭素代謝／補酵素の代謝
NADPH _{divalent}	NADPH	中心炭素代謝／補酵素の代謝
<i>N</i> -Carbamoylaspartic acid	Carbamoyl-Asp	尿素回路と関連アミノ酸の代謝／核酸の代謝
<i>N</i> -Formylaspartic acid	N-Formyl aspartic acid	尿素回路と関連アミノ酸の代謝
Nicotinamide	Nicotinamide	補酵素の代謝
Nicotinic acid	Nicotinic acid	補酵素の代謝
<i>N</i> -Methylserotonin	N-Methylserotonin	全体マップのみ
<i>N</i> -Methyltryptamine	N-Methyltryptamine	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
<i>N</i> -Methyltyramine	N-Methyltyramine	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
NMN	NicRN	補酵素の代謝
Noradrenaline	Noradrenaline	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
Normetanephrine	Normetanephrine	全体マップのみ
<i>O</i> -Acetylcarnitine	ALCAR	脂質代謝とアミノ酸の代謝
<i>o</i> -Aminophenol	2-Aminophenol	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
<i>o</i> -Hydroxyphenylacetic acid	2-HPAA	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
<i>O</i> -Phosphoserine	3PSer	脂質代謝とアミノ酸の代謝
Ornithine	Ornithine	尿素回路と関連アミノ酸の代謝
Orotic acid	Orotic acid	核酸の代謝
Orotidine 5'-monophosphate	Orotidine5P	核酸の代謝
P ¹ , P ⁴ -D(adenosine-5') tetraphosphate _{divalent}	AppppA	核酸の代謝
Pantothenic acid	Pantothenic acid	補酵素の代謝
Phe	Phe	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
Phenaceturic acid	Phenaceturic acid	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
Phenylpyruvic acid	Phenylpyruvate	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
Phosphocreatine	Phosphocreatine	尿素回路と関連アミノ酸の代謝
Phosphoenolpyruvic acid	PEP	中心炭素代謝
Phosphorylcholine	Phosphorylcholine	脂質代謝とアミノ酸の代謝
<i>p</i> -Hydroxyphenylacetic acid	4-HPAA	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
<i>p</i> -Hydroxyphenylpyruvic acid	HPP	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
Phytic acid _{divalent}	Phytic acid	全体マップのみ
Pipecolic acid	Pipecolic acid	脂質代謝とアミノ酸の代謝
Porphobilinogen	Porphobilinogen	脂質代謝とアミノ酸の代謝
Pro	Pro	尿素回路と関連アミノ酸の代謝
Propionic acid	Propionic acid	脂質代謝とアミノ酸の代謝／分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
Propionyl CoA _{divalent}	Propanoyl-CoA	脂質代謝とアミノ酸の代謝／分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝／核酸の代謝
PRPP	PRPP	中心炭素代謝／核酸の代謝
Putrescine	Putrescine	尿素回路と関連アミノ酸の代謝
Pyridoxal	Pyridoxal	補酵素の代謝
Pyridoxal 5-phosphate	PLP	補酵素の代謝
Pyridoxamine	Pyridoxamine	補酵素の代謝
Pyridoxamine 5'-phosphate	Pyridoxamine-P	補酵素の代謝
Pyridoxine	Pyridoxine	補酵素の代謝
Pyruvic acid	Pyruvic acid	中心炭素代謝／尿素回路と関連アミノ酸の代謝／脂質代謝とアミノ酸の代謝
Quinolinic acid	Quinolinic acid	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝／補酵素の代謝
Riboflavin	Riboflavin	補酵素の代謝
Ribose 1-phosphate	R1P	全体マップのみ
Ribose 5-phosphate	R5P	中心炭素代謝／補酵素の代謝
Ribulose 5-phosphate	Ru5P	中心炭素代謝
Saccharopine	Saccharopine	脂質代謝とアミノ酸の代謝
<i>S</i> -Adenosylhomocysteine	SAHC	脂質代謝とアミノ酸の代謝
<i>S</i> -Adenosylmethionine	SAM	脂質代謝とアミノ酸の代謝
Sarcosine	Sarcosine	脂質代謝とアミノ酸の代謝
Sedoheptulose 7-phosphate	S7P	中心炭素代謝
Ser	Ser	脂質代謝とアミノ酸の代謝
Serotonin	Serotonin	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
<i>S</i> -Lactoylglutathione	<i>S</i> -Lactoylglutathione	尿素回路と関連アミノ酸の代謝
Spermidine	Spermidine	尿素回路と関連アミノ酸の代謝
Spermine	Spermine	尿素回路と関連アミノ酸の代謝
Succinic acid	Succinic acid	中心炭素代謝／尿素回路と関連アミノ酸の代謝
Succinic semialdehyde	Succinic semialdehyde	尿素回路と関連アミノ酸の代謝

[†] HMTデータベースに登録された代謝物質のうち、代謝経路情報がある物質を示す(本試験で検出されなかった代謝物質も含む)

[‡] 代謝経路上で標記する、簡略化した代謝物質名を示す

[§] 代謝物質の主な代謝経路を示す

Appendix 1-1. 代謝経路図の情報

Candidates [†]	Pathway Label [‡]	Pathway Index [§]
Succinyl CoA _{divalent}	SucCoA	中心炭素代謝
Taurine	Taurine	脂質代謝とアミノ酸の代謝
Taurocholic acid	Taurocholic acid	脂質代謝とアミノ酸の代謝
Taurocyamine	Taurocyamine	脂質代謝とアミノ酸の代謝
Thiamine	Thiamine	補酵素の代謝
Thiamine diphosphate	ThPP	補酵素の代謝
Thiamine phosphate	TMP	補酵素の代謝
Thr	Thr	脂質代謝とアミノ酸の代謝
Thymidine	Thymidine	核酸の代謝
Thymine	Thymine	核酸の代謝
Trp	Trp	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
Tryptamine	Tryptamine	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
Tyr	Tyr	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
Tyramine	Tyramine	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
UDP	UDP	核酸の代謝
UDP-glucose	UDP-Glc	中心炭素代謝
UDP-glucuronic acid	UDP-GlcA	中心炭素代謝
UDP-N-acetylglucosamine	UDP-GlcNAc	中心炭素代謝
UMP	UMP	核酸の代謝
Uracil	Uracil	核酸の代謝
Urea	Urea	尿素回路と関連アミノ酸の代謝
Uric acid	Uric acid	核酸の代謝
Uridine	Uridine	核酸の代謝
Urocanic acid	Urocanic acid	尿素回路と関連アミノ酸の代謝
UTP	UTP	核酸の代謝
Val	Val	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
Vanillylmandelic acid	VMA	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
Xanthine	Xanthine	核酸の代謝
Xanthosine	Xanthosine	核酸の代謝
Xanthurenic acid	Xanthurenic acid	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
XMP	XMP	核酸の代謝
XTP	XTP	核酸の代謝
Xylulose 5-phosphate	X5P	中心炭素代謝
β-Ala	b-Ala	尿素回路と関連アミノ酸の代謝／核酸の代謝／補酵素の代謝
γ-Butyrobetaine	Actinine	脂質代謝とアミノ酸の代謝
γ-Glu-Cys	g-Glu-Cys	尿素回路と関連アミノ酸の代謝

[†] HMTデータベースに登録された代謝物質のうち、代謝経路情報がある物質を示す(本試験で検出されなかった代謝物質も含む)

[‡] 代謝経路上で標記する、簡略化した代謝物質名を示す

[§] 代謝物質の主な代謝経路を示す

Appendix 1-2. 代謝経路図の情報

Pathway Label [‡]	Candidates [†]	Pathway Index [§]
1-Methylhistamine	1-Methylhistamine	尿素回路と関連アミノ酸の代謝
1-Methylnicotinamide	1-Methylnicotinamide	補酵素の代謝
2-Amino adipic acid	2-Amino adipic acid	脂質代謝とアミノ酸の代謝
2-Aminophenol	o-Aminophenol	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
2-HBA	2-Hydroxybutyric acid	脂質代謝とアミノ酸の代謝
2-HPAA	o-Hydroxyphenylacetic acid	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
2K3MVA	Methyl-2-oxovaleric acid	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
2-KIV	2-Oxoisovaleric acid	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
2-OG	2-Oxoglutaric acid	中心炭素代謝／尿素回路と関連アミノ酸の代謝
2-Oxo adipic acid	2-Oxo adipic acid	脂質代謝とアミノ酸の代謝
2-Oxobutyric acid	2-Oxobutyric acid	脂質代謝とアミノ酸の代謝
2-Oxoleucine	4-Methyl-2-oxovaleric acid	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
2-PG	2-Phosphoglyceric acid	中心炭素代謝
3,5-DI-Tyr	3,5-Diiodotyrosine	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
3-Aminoisobutyric acid	3-Aminoisobutyric acid	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝／核酸の代謝
3-HBA	3-Hydroxybutyric acid	中心炭素代謝／脂質代謝とアミノ酸の代謝
3-Methoxyanthranilic acid	3-Methoxyanthranilic acid	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
3-Methoxytyramine	3-Methoxytyramine	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
3-Methylcrotonyl-CoA	3-Methylcrotonyl CoA_divalent	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
3-Methylhistidine	3-Methylhistidine	尿素回路と関連アミノ酸の代謝
3-OHAA	3-Hydroxyanthranilic acid	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
3-OHKY	3-Hydroxykynurenine	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
3-PG	3-Phosphoglyceric acid	中心炭素代謝／脂質代謝とアミノ酸の代謝
3PSer	O-Phosphoserine	脂質代謝とアミノ酸の代謝
3-Ureidopropionic acid	3-Ureidopropionic acid	核酸の代謝
4-Acetamidobutanoic acid	4-Acetamidobutanoic acid	全体マップのみ
4-GBA	4-Guanidinobutyric acid	尿素回路と関連アミノ酸の代謝
4-HPAA	p-Hydroxyphenylacetic acid	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
4-Hydroxyphenylacetaldehyde	4-Hydroxyphenylacetaldehyde	全体マップのみ
4-Pyridoxic acid	4-Pyridoxic acid	補酵素の代謝
5-ALA	5-Amino-4-oxovaleric acid	脂質代謝とアミノ酸の代謝
5-Hydroxy-IAA	5-Hydroxyindoleacetic acid	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
5-Hydroxylysine	5-Hydroxylysine	脂質代謝とアミノ酸の代謝
5-MIAA	5-Methoxyindoleacetic acid	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
5MOT	5-Methoxytryptamine	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
5-MTHF	5-Methyltetrahydrofolic acid	補酵素の代謝
6-PG	6-Phosphogluconic acid	中心炭素代謝
AAcCoA	Acetoacetyl CoA_divalent	脂質代謝とアミノ酸の代謝
AcCoA	Acetyl CoA_divalent	中心炭素代謝／脂質代謝とアミノ酸の代謝／補酵素の代謝
Acetanilide	Acetanilide	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
Acetoacetic acid	Acetoacetic acid	中心炭素代謝／脂質代謝とアミノ酸の代謝
Acetylcholine	Acetylcholine	脂質代謝とアミノ酸の代謝
Actinine	γ-Butyrobetaine	脂質代謝とアミノ酸の代謝
Adenine	Adenine	核酸の代謝
Adenosine	Adenosine	核酸の代謝
ADP	ADP	中心炭素代謝／核酸の代謝
ADP-Rib	ADP-ribose	中心炭素代謝／補酵素の代謝
Adrenaline	Adrenaline	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
Agmatine	Agmatine	尿素回路と関連アミノ酸の代謝
ALCAR	5-Aminoimidazole-4-carboxamide ribotide	核酸の代謝
Ala	Ala	中心炭素代謝／尿素回路と関連アミノ酸の代謝／分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
ALCAR	O-Acetylcarnitine	脂質代謝とアミノ酸の代謝
Allantoic acid	Allantoic acid	全体マップのみ
AMP	AMP	核酸の代謝
Anserine	Anserine_divalent	尿素回路と関連アミノ酸の代謝
Anthranilic acid	Anthranilic acid	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
AppppA	P ¹ , P ⁴ -Di(adenosine-5') tetraphosphate_divalent	核酸の代謝
Arg	Arg	中心炭素代謝／尿素回路と関連アミノ酸の代謝
ArgSuccinate	Argininosuccinic acid	尿素回路と関連アミノ酸の代謝
Ascorbate 2-glucoside	Ascorbate 2-glucoside	補酵素の代謝
Ascorbate 2-phosphate	Ascorbate 2-phosphate	補酵素の代謝
Ascorbate 2-sulfate	Ascorbate 2-sulfate	補酵素の代謝
Ascorbic acid	Ascorbic acid	補酵素の代謝
Asn	Asn	尿素回路と関連アミノ酸の代謝
Asp	Asp	中心炭素代謝／尿素回路と関連アミノ酸の代謝／核酸の代謝
ATP	ATP	中心炭素代謝／核酸の代謝
b-Ala	β-Ala	尿素回路と関連アミノ酸の代謝／核酸の代謝／補酵素の代謝
Betaine	Betaine	脂質代謝とアミノ酸の代謝
Biotin	Biotin	補酵素の代謝
b-Lactate	3-Hydroxypropionic acid	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝

‡ 代謝経路上で表記する、簡略化した代謝物質名を示す

† HMTデータベースに登録された代謝物質のうち、代謝経路情報がある物質を示す(本試験で検出されなかった代謝物質も含む)

§ 代謝物質の主な代謝経路を示す

Appendix 1-2. 代謝経路図の情報

Pathway Label [‡]	Candidates [†]	Pathway Index [§]
BTL	Betaine aldehyde_+H ₂ O	脂質代謝とアミノ酸の代謝
cAMP	cAMP	核酸の代謝
Carbamoyl-Asp	<i>N</i> -Carbamoylaspartic acid	尿素回路と関連アミノ酸の代謝／核酸の代謝
Carbamoyl-P	Carbamoylphosphate	尿素回路と関連アミノ酸の代謝
Carnitine	Carnitine	脂質代謝とアミノ酸の代謝
Carnosine	Carnosine	尿素回路と関連アミノ酸の代謝
CDP	CDP	核酸の代謝
CDP-choline	CDP-choline	脂質代謝とアミノ酸の代謝
cGMP	cGMP	核酸の代謝
Cholic acid	Cholic acid	脂質代謝とアミノ酸の代謝
Choline	Choline	脂質代謝とアミノ酸の代謝
cis-Aconitic acid	cis-Aconitic acid	中心炭素代謝
cis-Hydroxyproline	cis-Hydroxyproline	尿素回路と関連アミノ酸の代謝
Citramalic acid	Citramalic acid	全体マップのみ
Citric acid	Citric acid	中心炭素代謝
Citrulline	Citrulline	尿素回路と関連アミノ酸の代謝
CMP	CMP	核酸の代謝
CMP-NeuNAC	CMP- <i>N</i> -acetylneuraminate	中心炭素代謝
CoA	CoA_divalent	中心炭素代謝／補酵素の代謝
Creatine	Creatine	尿素回路と関連アミノ酸の代謝
Creatinine	Creatinine	尿素回路と関連アミノ酸の代謝
CTP	CTP	核酸の代謝
Cys	Cys	尿素回路と関連アミノ酸の代謝／脂質代謝とアミノ酸の代謝／補酵素の代謝
Cys-Gly	Cys-Gly	尿素回路と関連アミノ酸の代謝
Cystathionine	Cystathionine	脂質代謝とアミノ酸の代謝
Cysteamine	Cysteamine	脂質代謝とアミノ酸の代謝
Cysteic acid	Cysteic acid	脂質代謝とアミノ酸の代謝
Cysteinesulfinic acid	Cysteinesulfinic acid	脂質代謝とアミノ酸の代謝
Cystine	Cystine	脂質代謝とアミノ酸の代謝
Cytidine	Cytidine	核酸の代謝
dAdenosine	2'-Deoxyadenosine	核酸の代謝
dADP	dADP	核酸の代謝
dAMP	dAMP	核酸の代謝
DAP	1,3-Diaminopropane	尿素回路と関連アミノ酸の代謝
dATP	dATP	核酸の代謝
dCDP	dCDP	核酸の代謝
dCMP	dCMP	核酸の代謝
dCTP	dCTP	核酸の代謝
dCyt	2'-Deoxycytidine	核酸の代謝
Deamido-NAD	Deamido-NAD ⁺	補酵素の代謝
Dephospho-CoA	3'-Dephospho CoA	補酵素の代謝
Desthiobiotin	Desthiobiotin	補酵素の代謝
D-F1P	Fructose 1-phosphate	中心炭素代謝
dGDP	dGDP	核酸の代謝
dGMP	dGMP	核酸の代謝
dGTP	dGTP	核酸の代謝
dGuanosine	2'-Deoxyguanosine	核酸の代謝
DHAP	Dihydroxyacetone phosphate	中心炭素代謝／脂質代謝とアミノ酸の代謝
DHPG	3,4-Dihydroxyphenylglycol	全体マップのみ
Dihydrofolic acid	7,8-Dihydrofolic acid	補酵素の代謝
Dihydroorotic acid	Dihydroorotic acid	核酸の代謝
Dihydrouracil	Dihydrouracil	核酸の代謝
Dimethylbenzimidazole	5,6-Dimethylbenzimidazole	補酵素の代謝
dIMP	dIMP	核酸の代謝
Diphosphoglycerate	2,3-Diphosphoglyceric acid	中心炭素代謝
dITP	dITP	核酸の代謝
DMG	<i>N,N</i> -Dimethylglycine	脂質代謝とアミノ酸の代謝
DOPA	DOPA	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
Dopamine	Dopamine	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
dTDP	dTDP	核酸の代謝
dTMP	dTMP	核酸の代謝
dTTP	dTTP	核酸の代謝
dUDP	dUDP	核酸の代謝
dUMP	dUMP	核酸の代謝
dUri	2'-Deoxyuridine	核酸の代謝
dUTP	dUTP	核酸の代謝
E4P	Erythrose 4-phosphate	中心炭素代謝
Ergothioneine	Ergothioneine	全体マップのみ
F1,6P	Fructose 1,6-diphosphate	中心炭素代謝
F6P	Fructose 6-phosphate	中心炭素代謝

‡ 代謝経路上で標記する、簡略化した代謝物質名を示す

† HMTデータベースに登録された代謝物質のうち、代謝経路情報がある物質を示す(本試験で検出されなかった代謝物質も含む)

§ 代謝物質の主な代謝経路を示す

Appendix 1-2. 代謝経路図の情報

Pathway Label [‡]	Candidates [†]	Pathway Index [§]
FAD	FAD_divalent	補酵素の代謝
FMN	FMN	補酵素の代謝
Folic acid	Folic acid	補酵素の代謝
Formylanthranilate	Formylanthranilic acid	全体マップのみ
Fumaric acid	Fumaric acid	中心炭素代謝／尿素回路と関連アミノ酸の代謝
G1P	Glucose 1-phosphate	中心炭素代謝
G3P	Glycerol 3-phosphate	中心炭素代謝／脂質代謝とアミノ酸の代謝
G6P	Glucose 6-phosphate	中心炭素代謝
GABA	GABA	尿素回路と関連アミノ酸の代謝
Gal1P	Galactose 1-phosphate	中心炭素代謝
GAP	Glyceraldehyde 3-phosphate	中心炭素代謝／脂質代謝とアミノ酸の代謝
GDP	GDP	核酸の代謝
GDP-fucose	GDP-fucose	中心炭素代謝
GDP-Man	GDP-mannose	中心炭素代謝
Gensigen	2,5-Dihydroxybenzoic acid	全体マップのみ
g-Glu-Cys	γ-Glu-Cys	尿素回路と関連アミノ酸の代謝
Glc-6P	Glucosamine 6-phosphate	中心炭素代謝
GlcNAc	N-Acetylglucosamine	中心炭素代謝
GlcNAc-P	N-Acetylglucosamine 1-phosphate	中心炭素代謝
Gln	Gln	尿素回路と関連アミノ酸の代謝
Glu	Glu	中心炭素代謝／尿素回路と関連アミノ酸の代謝
Glucosamine	Glucosamine	中心炭素代謝
Glucosaminic acid	Glucosaminic acid	中心炭素代謝
Glucuronic acid	Glucuronic acid	中心炭素代謝
Glutaryl-CoA	Glutaryl CoA_divalent	脂質代謝とアミノ酸の代謝
Gly	Gly	尿素回路と関連アミノ酸の代謝／脂質代謝とアミノ酸の代謝
Glyceric acid	Glyceric acid	中心炭素代謝／脂質代謝とアミノ酸の代謝
Glycocholic acid	Glycocholic acid	脂質代謝とアミノ酸の代謝
Glycolic acid	Glycolic acid	脂質代謝とアミノ酸の代謝
Glyoxylic acid	Glyoxylic acid	脂質代謝とアミノ酸の代謝
GMP	GMP	核酸の代謝
GPCho	Glycerophosphocholine	脂質代謝とアミノ酸の代謝
GSH	Glutathione (GSH)	尿素回路と関連アミノ酸の代謝
GSSG	Glutathione (GSSG)_divalent	尿素回路と関連アミノ酸の代謝
GTP	GTP	核酸の代謝
Guanidoacetic acid	Guanidoacetic acid	尿素回路と関連アミノ酸の代謝
Guanine	Guanine	核酸の代謝
Guanosine	Guanosine	核酸の代謝
His	His	尿素回路と関連アミノ酸の代謝
Histamine	Histamine	尿素回路と関連アミノ酸の代謝
HMG-CoA	HMG CoA_divalent	脂質代謝とアミノ酸の代謝
Homocysteine	Homocysteine	脂質代謝とアミノ酸の代謝
HPP	p-Hydroxyphenylpyruvic acid	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
HVA	Homovanillic acid	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
Hydroxyproline	Hydroxyproline	尿素回路と関連アミノ酸の代謝
Hypotaurine	Hypotaurine	脂質代謝とアミノ酸の代謝
Hypoxanthine	Hypoxanthine	核酸の代謝
IDP	IDP	核酸の代謝
Ile	Ile	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
Imidazole-4-acetic acid	Imidazole-4-acetic acid	尿素回路と関連アミノ酸の代謝
IMP	IMP	核酸の代謝
Indole-3-acetic acid	Indole-3-acetic acid	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
Indoleacetaldehyde	Indole-3-acetaldehyde	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
Inosine	Inosine	核酸の代謝
Isobutyryl-CoA	Isobutyryl CoA_divalent	脂質代謝とアミノ酸の代謝／分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
Isocitric acid	Isocitric acid	中心炭素代謝
ITP	ITP	核酸の代謝
KMTB	4-Methylthio-2-oxobutyric acid	脂質代謝とアミノ酸の代謝
Kynurenic acid	Kynurenic acid	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
Kynurenine	Kynurenine	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
Lactic acid	Lactic acid	中心炭素代謝／尿素回路と関連アミノ酸の代謝
Leu	Leu	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
Lys	Lys	脂質代謝とアミノ酸の代謝
Malic acid	Malic acid	中心炭素代謝／尿素回路と関連アミノ酸の代謝
Malonyl-CoA	Malonyl CoA_divalent	中心炭素代謝／脂質代謝とアミノ酸の代謝
Man1P	Mannose 1-phosphate	中心炭素代謝
Man6P	Mannose 6-phosphate	中心炭素代謝
ManNAc	N-Acetylmannosamine	中心炭素代謝
Melatonin	Melatonin	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
Met	Met	脂質代謝とアミノ酸の代謝

‡ 代謝経路上で標記する、簡略化した代謝物質名を示す

† HMTデータベースに登録された代謝物質のうち、代謝経路情報がある物質を示す（本試験で検出されなかった代謝物質も含む）

§ 代謝物質の主な代謝経路を示す

Appendix 1-2. 代謝経路図の情報

Pathway Label [‡]	Candidates [†]	Pathway Index [§]
Methylmalonic acid	Methylmalonic acid	脂質代謝とアミノ酸の代謝／分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
MHPG	3-Methoxy-4-hydroxyphenylethyleneglycol	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
MA	1-Methyl-4-imidazoleacetic acid	尿素回路と関連アミノ酸の代謝
MIT	3-Iodotyrosine	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
MTA	5'-Deoxy-5'-methylthioadenosine	尿素回路と関連アミノ酸の代謝
N-Acetylaspartic acid	N-Acetylaspartic acid	尿素回路と関連アミノ酸の代謝
N-Acetylputrescine	N-Acetylputrescine	尿素回路と関連アミノ酸の代謝
NAcGlcNP	N-Acetylglucosamine 6-phosphate	中心炭素代謝
N-AcGlu	N-Acetylglutamic acid	尿素回路と関連アミノ酸の代謝
N-AcOrn	N-Acetylornithine	尿素回路と関連アミノ酸の代謝
NAD ⁺	NAD ⁺	中心炭素代謝／補酵素の代謝
NADH	NADH	中心炭素代謝／補酵素の代謝
NADP ⁺	NADP ⁺	中心炭素代謝／補酵素の代謝
NADPH	NADPH_divalent	中心炭素代謝／補酵素の代謝
NeuNAc	N-Acetylneuraminic acid	中心炭素代謝
N-Formyl aspartic acid	N-Formylaspartic acid	尿素回路と関連アミノ酸の代謝
Nicotinamide	Nicotinamide	補酵素の代謝
Nicotinic acid	Nicotinic acid	補酵素の代謝
NicRN	NMN	補酵素の代謝
N-Methylserotonin	N-Methylserotonin	全体マップのみ
N-Methyltryptamine	N-Methyltryptamine	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
N-Methyltyramine	N-Methyltyramine	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
Noradrenaline	Noradrenaline	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
Normetanephrine	Normetanephrine	全体マップのみ
Ornithine	Ornithine	尿素回路と関連アミノ酸の代謝
Orotic acid	Orotic acid	核酸の代謝
Orotidine5P	Orotidine 5'-monophosphate	核酸の代謝
Oxoproline	5-Oxoproline	尿素回路と関連アミノ酸の代謝
P5C	1-Pyrroline 5-carboxylic acid	尿素回路と関連アミノ酸の代謝
Pantothenic acid	Pantothenic acid	補酵素の代謝
PEP	Phosphoenolpyruvic acid	中心炭素代謝
Phe	Phe	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
Phenaceturic acid	Phenaceturic acid	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
Phenylethylamine	2-Phenylethylamine	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
Phenylpyruvate	Phenylpyruvic acid	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
Phosphocreatine	Phosphocreatine	尿素回路と関連アミノ酸の代謝
Phosphorylcholine	Phosphorylcholine	脂質代謝とアミノ酸の代謝
Phytic acid	Phytic acid_divalent	全体マップのみ
Pipecolic acid	Pipecolic acid	脂質代謝とアミノ酸の代謝
PLP	Pyridoxal 5-phosphate	補酵素の代謝
Porphobilinogen	Porphobilinogen	脂質代謝とアミノ酸の代謝
Pretonine	5-Hydroxytryptophan	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
Pro	Pro	尿素回路と関連アミノ酸の代謝
Propanoyl-CoA	Propionyl CoA_divalent	脂質代謝とアミノ酸の代謝／分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝／核酸の代謝
Propionic acid	Propionic acid	脂質代謝とアミノ酸の代謝／分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
PRPP	PRPP	中心炭素代謝／核酸の代謝
Putrescine	Putrescine	尿素回路と関連アミノ酸の代謝
Pyridoxal	Pyridoxal	補酵素の代謝
Pyridoxamine	Pyridoxamine	補酵素の代謝
Pyridoxamine-P	Pyridoxamine 5'-phosphate	補酵素の代謝
Pyridoxine	Pyridoxine	補酵素の代謝
Pyruvic acid	Pyruvic acid	中心炭素代謝／尿素回路と関連アミノ酸の代謝／脂質代謝とアミノ酸の代謝
Quinolinic acid	Quinolinic acid	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝／補酵素の代謝
R1P	Ribose 1-phosphate	全体マップのみ
R5P	Ribose 5-phosphate	中心炭素代謝／補酵素の代謝
Riboflavin	Riboflavin	補酵素の代謝
Ru5P	Ribulose 5-phosphate	中心炭素代謝
S7P	Sedoheptulose 7-phosphate	中心炭素代謝
Saccharopine	Saccharopine	脂質代謝とアミノ酸の代謝
SAHC	S-Adenosylhomocysteine	脂質代謝とアミノ酸の代謝
SAM	S-Adenosylmethionine	脂質代謝とアミノ酸の代謝
Sarcosine	Sarcosine	脂質代謝とアミノ酸の代謝
Ser	Ser	脂質代謝とアミノ酸の代謝
Serotonin	Serotonin	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
S-Lactoylglutathione	S-Lactoylglutathione	尿素回路と関連アミノ酸の代謝
Spermidine	Spermidine	尿素回路と関連アミノ酸の代謝
Spermine	Spermine	尿素回路と関連アミノ酸の代謝
Succinic acid	Succinic acid	中心炭素代謝／尿素回路と関連アミノ酸の代謝
Succinic semialdehyde	Succinic semialdehyde	尿素回路と関連アミノ酸の代謝
Succinyl AMP	Adenylosuccinic acid	核酸の代謝

‡ 代謝経路上で表記する、簡略化した代謝物質名を示す

† HMTデータベースに登録された代謝物質のうち、代謝経路情報がある物質を示す(本試験で検出されなかった代謝物質も含む)

§ 代謝物質の主な代謝経路を示す

Appendix 1-2. 代謝経路図の情報

Pathway Label [‡]	Candidates [†]	Pathway Index [§]
SucCoA	Succinyl CoA_divalent	中心炭素代謝
T3	3,3',5-Triiodothyronine	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
Taurine	Taurine	脂質代謝とアミノ酸の代謝
Taurocholic acid	Taurocholic acid	脂質代謝とアミノ酸の代謝
Taurocyamine	Taurocyamine	脂質代謝とアミノ酸の代謝
TDP-Glc	dTDP-glucose	全体マップのみ
Thiamine	Thiamine	補酵素の代謝
ThPP	Thiamine diphosphate	補酵素の代謝
Thr	Thr	脂質代謝とアミノ酸の代謝
Thymidine	Thymidine	核酸の代謝
Thymine	Thymine	核酸の代謝
TMP	Thiamine phosphate	補酵素の代謝
Trimethyllysine	<i>N</i> ⁶ , <i>N</i> ⁵ , <i>N</i> ⁶ -Trimethyllysine	脂質代謝とアミノ酸の代謝
Trp	Trp	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
Tryptamine	Tryptamine	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
Tyr	Tyr	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
Tyramine	Tyramine	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
UDP	UDP	核酸の代謝
UDP-Glc	UDP-glucose	中心炭素代謝
UDP-GlcA	UDP-glucuronic acid	中心炭素代謝
UDP-GlcNAc	UDP- <i>N</i> -acetylglucosamine	中心炭素代謝
UMP	UMP	核酸の代謝
Uracil	Uracil	核酸の代謝
Urea	Urea	尿素回路と関連アミノ酸の代謝
Uric acid	Uric acid	核酸の代謝
Uridine	Uridine	核酸の代謝
Urocanic acid	Urocanic acid	尿素回路と関連アミノ酸の代謝
UTP	UTP	核酸の代謝
Val	Val	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
VMA	Vanillylmandelic acid	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
X5P	Xylulose 5-phosphate	中心炭素代謝
Xanthine	Xanthine	核酸の代謝
Xanthosine	Xanthosine	核酸の代謝
Xanthurenic acid	Xanthurenic acid	分岐鎖アミノ酸、芳香族アミノ酸の代謝
XMP	XMP	核酸の代謝
XTP	XTP	核酸の代謝

‡ 代謝経路上で標記する、簡略化した代謝物質名を示す

† HMT データベースに登録された代謝物質のうち、代謝経路情報がある物質を示す(本試験で検出されなかった代謝物質も含む)

§ 代謝物質の主な代謝経路を示す

Appendix 2. Known-Unknown ピークについて

CE-TOFMS の測定結果において、候補化合物名に「XA~~~~, XC~~~~ (ID) 」と記載されているピーク (Known-Unknown ピーク) は、HMT の測定実績において複数の生体試料種から検出が確認されているピークを示す。このうち、比較的多くの試料種から検出され、また候補代謝分子の分子式が予測されるものを下表に示す。

HMT ID	Peak ID	Mode	推定分子式	推定分子式より求めた 精密質量	KEGGデータベースサーチ	HMDBデータベースサーチ
M90002	XA0002	Anion	CH ₅ O ₄ P	111.993	C06455	
M90003	XA0003	Anion	C ₂ H ₆ O ₄ S	125.999	C05123	HMDB03903
M90004	XA0004	Anion	C ₅ H ₇ NO ₄	145.038	C00940; C05572	HMDB01552
M90012	XA0012	Anion	C ₄ H ₉ NO ₄ S	167.025		HMDB06462
M90013	XA0013	Anion	C ₆ H ₆ O ₄ S	173.999	C00850; C02180; C12849	
M90017	XA0017	Anion	C ₉ H ₁₇ NO ₃	187.121	C12029; C01092	
M90019	XA0019	Anion	C ₆ H ₆ O ₇	192.027	C00451; C04617; C04575; C02780; C03921; C00679; C03600; C00158; C00311	HMDB06511; HMDB00094; HMDB05971; HMDB00193; HMDB01874
M90027	XA0027	Anion	C ₁₄ H ₂₈ O ₂	228.208	C06424	HMDB02221; HMDB00806
M90033	XA0033	Anion	C ₉ H ₁₃ N ₃ O ₅	243.087	C00475; C02961; C05711	HMDB00089
M90035	XA0035	Anion	C ₆ H ₆ O ₉ S	255.988	C02812	
M90036	XA0036	Anion	C ₆ H ₆ O ₉ S	255.988	C02812	
M90055	XA0055	Anion	C ₇ H ₁₆ O ₁₃ P ₂	370.006	C00447; C11472	
M90065	XA0065	Anion	C ₁₁ H ₂₀ N ₄ O ₁₁ P ₂	446.060	C00570	HMDB01564
M90079	XC0001	Cation	C ₄ H ₉ N	71.073	C12244	
M90094	XC0016	Cation	C ₅ H ₈ N ₂ O ₂	128.058	C00906; C05717; C05715	HMDB00079
M90095	XC0017	Cation	C ₅ H ₁₁ N ₃ O	129.089	C02647	
M90107	XC0029	Cation	C ₇ H ₁₃ NO ₂	143.094	C10172	HMDB04827
M90118	XC0040	Cation	C ₆ H ₁₁ N ₃ O ₃	173.079	C03771	HMDB04225
M90139	XC0061	Cation	C ₁₀ H ₁₉ NO ₄	217.130	C03017	HMDB00824
M90143	XC0065	Cation	C ₁₁ H ₁₂ N ₂ O ₃	220.083	C00643; C01017; C09985	HMDB00472
M90149	XC0071	Cation	C ₁₀ H ₂₃ N ₃ O ₃	233.172		HMDB11140
M90167	XC0089	Cation	C ₁₁ H ₁₄ N ₂ O ₅	254.089	C16582; C16584	
M90198	XC0120	Cation	C ₈ H ₁₅ N ₃ O ₅ S ₂	297.044		HMDB00709
M90204	XC0126	Cation	C ₁₁ H ₁₉ NO ₉	309.104	C00270; C03525	HMDB00773; HMDB00230
M90210	XC0132	Cation	C ₁₂ H ₂₄ N ₂ O ₈	324.152		HMDB00600
M90215	XC0137	Cation	C ₁₂ H ₁₉ N ₃ O ₇ S	349.093	C14871	