

# $^1\text{H-NMR}$ と近赤外分光法を用いた糖代謝測定

— 近赤外分光法の定量原理解明を目指して —

## 成果の特徴

- 果実の糖度測定などに使われている近赤外分光法では、目的成分の定量を行う際に検量モデルと呼ばれる変換式が用いられており、この変換式には目的成分以外の代謝物の情報が含まれている場合があります。
- NMRメタボロミクスとの組み合わせにより、近赤外分光法の検量モデルに含まれる代謝物の推定が可能です。

## 成果の内容

- 代謝物が近赤外分光法に与える影響を調べる手法を開発するため、酵母抽出液の振動解糖反応を近赤外分光法で計測するモデルを作成しました（図1）。
- $^1\text{H-NMR}$ と近赤外分光法を用いたリアルタイム測定をそれぞれ実施し、 $^1\text{H-NMR}$ スペクトルから得られた代謝物の振動の位相関係を基に、近赤外スペクトルから算出した検量モデルを構成するスコアが示す代謝物を推定しました（図2）。

## 実験方法

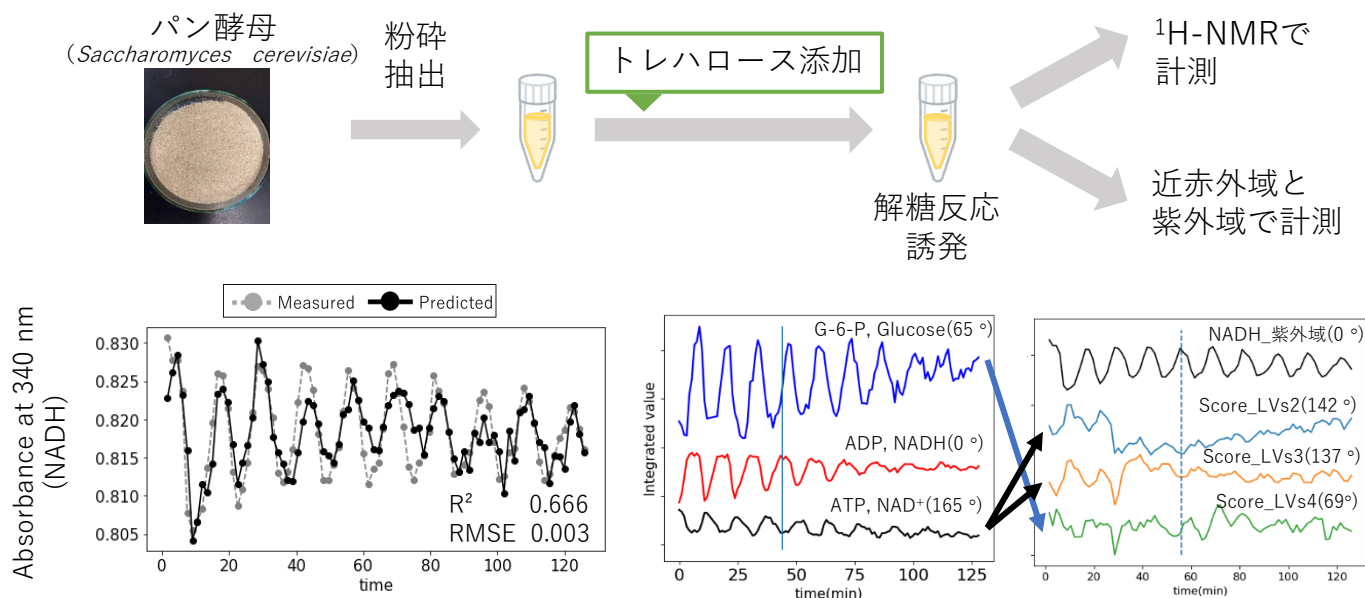


図1. NADHの実測値（紫外域）と近赤外スペクトルから得られた予測結果（PLS回帰, LVs=5）

図2.  $^1\text{H-NMR}$ スペクトルから得られた積分値の経時変化（左図）およびPLS回帰で得られたスコアの経時変化（右図）。括弧内の数値はNADHを基準としたときの位相差を示す。

## 想定される用途・連携希望先

- 今後、スコアと対応するスペクトルが各代謝物のスペクトルと一致するかの確認を、モデル代謝物の計測や量子化学計算を用いて行う予定です。
- 自動的に算出される検量モデルの科学的裏付けにつながります。