

発明の名称

アシル基を含む対象化合物の構造推定方法

発明の背景発明の分野5 **【 0 0 0 1 】**

本開示は、アシル基を含む対象化合物の構造推定方法に関する。

関連技術の説明**【 0 0 0 2 】**

10 トリアシルグリセロール（TAG）とは、1分子のグリセロールに3分子の脂肪酸がエステル結合した化合物であり、単純脂質に属する中性脂肪の1つである。TAGは、食用油脂の主成分であり、例えば、植物油、バター、マーガリン、牛乳、牛肉、豚肉、鳥肉、大豆、及びナッツ類に含まれている。TAGの構成比率はその由来によって異なっている。例えば、植物由来の油脂であるオリーブオイルは、TAGを構成する脂肪酸として、オレイン酸（C18：1；炭素数18、二重結合数1）の含有量が高く、大豆油ではリノール酸（C18：2；炭素数18、二重結合数2）の含有量が高い。また、チョコレート

15 の原料であるカカオ脂は、飽和脂肪酸に属するパルミチン酸（C16：0；炭素数16、二重結合数0）、ステアリン酸（C18：0；炭素数18、二重結合数0）、及びオレイン酸が、TAGを構成する脂肪酸として主に含まれている。すなわち、TAGを構成する脂肪酸（アシル基）の種類と比率を分析すると、油脂の種類を推定できるため、TAGを構成する脂肪酸を特定する方法の確立が求められている。

20

【 0 0 0 3 】

例えば、特許文献1（特許第7019281号公報）には、脂肪酸残基の総数（総炭素数）が互いに同じである2つ以上の異なるトリアシルグリセロールを含む組成物のトリアシルグリセロール組成を分析するための方法であって、以下のステップ（a）および（b）を含む方法が開示されている。

25

（a）質量分析により、各トリアシルグリセロールを、対応するジアシルグリセロールおよび脂肪酸のフラグメントに分解する、

（b）質量分析により、ステップ（a）で検出された各ジアシルグリセロールを、対応する脂肪酸のフラグメントに分解する。

30 発明の概要**【 0 0 0 4 】**

しかしながら、特許文献1に記載の方法では工数がかかるため、より簡便に分析できる方法が望まれている。また、TAGにおける脂肪酸の組み合わせは膨大であり（少なくとも3000通り以上であり）、TAGを分析するのに先立って、想定される組み合わせに対応する標準品を全て揃えるのは容易ではない。そのため、想定される脂肪酸の組み合わせに対応する標準品がなくても、TAGを構成する脂肪酸を推定する方法が望まれている。

35

【 0 0 0 5 】

本発明は上記事情に鑑みてなされたものであり、アシル基を含む対象化合物における、アシル基の総炭素数及びアシル基の炭素－炭素二重結合の総数を簡便に推定する方法を提供することを目的とする。

40

【 0 0 0 6 】

本発明者らは、鋭意研究を行った結果、クロマトグラフ分析における保持時間と、対象化合物におけるアシル基の総炭素数及びアシル基の炭素－炭素二重結合の総数との間に相関関係があることを見だし、本発明を完成させた。

45

【 0 0 0 7 】

本発明の第1の態様は、直鎖のアシル基を含む対象化合物における、構造推定方法であって、

前記対象化合物を含む試料を、クロマトグラフによって分析し、保持時間を求める工程と、

50

以下の式 1 及び式 2 :

$$N = f(T) \quad \dots (式 1)$$

$$T = t / D^m \quad \dots (式 2)$$

- (式 1 中、N は前記アシル基における総炭素数を示し、 $f(T)$ は前記対象化合物に対応する飽和化合物の同族体から導かれる関数であって前記総炭素数と保持時間との相関を表す関数を示し、式 2 中、 t は前記保持時間を示し、 D は炭素-炭素二重結合に由来する係数を示し、 m は炭素-炭素二重結合の総数を示す。)
- に基づいて、前記保持時間から、前記対象化合物における前記アシル基の総炭素数及び炭素-炭素二重結合の総数の組み合わせを推定する工程と、
- を含む、構造推定方法、に関する。

【0008】

- 本発明の第 2 の態様は、コンピュータに第 1 の態様に係る構造推定方法を実行させるために用いられるデータベースを記録した、コンピュータで読み取り可能な記録媒体であって、
- 前記データベースは、
- 前記クロマトグラフの分析条件と、
- 前記分析条件で前記同族体を分析したときに導かれる関数 $f(T)$ 及び炭素-炭素二重結合に由来する係数 D と、
- を関連付けて格納している、記録媒体に関する。

【0009】

本発明によれば、アシル基を含む対象化合物における、アシル基の総炭素数及びアシル基の炭素-炭素二重結合の総数を簡便に推定する方法を提供することが可能になる。

図面の簡単な説明

【0010】

- 【図 1】図 1 は、超臨界流体クロマトグラフで完全飽和のトリアシルグリセロールを分析した結果を示すグラフ（左）と、当該分析の結果に基づいて、トリアシルグリセロールにおけるアシル基の総炭素数（横軸）と保持時間（縦軸）との相関を示すグラフ（右）である。左のグラフにおいて、横軸は保持時間（分）を示し、縦軸は検出強度を示す。

- 【図 2】図 2 は、超臨界流体クロマトグラフでトリアシルグリセロールを分析した結果を示すグラフ（左）と、当該分析の結果に基づいて、トリアシルグリセロールにおけるアシル基の炭素-炭素二重結合の総数と保持時間との相関を示す表（右）である。

【図 3】図 3 は、超臨界流体クロマトグラフでトリアシルグリセロールを分析した結果を示すグラフである。

好ましい実施の形態の説明

【0011】

- 以下、本発明の一実施形態（以下「本実施形態」と記す。）について説明する。ただし、本実施形態はこれに限定されるものではない。本明細書において「A～Z」という形式の表記は、範囲の上限下限（すなわち A 以上 Z 以下）を意味し、A において単位の記載がなく、Z においてのみ単位が記載されている場合、A の単位と Z の単位とは同じである。

【0012】

《直鎖のアシル基を含む対象化合物における、構造推定方法》

- 本発明の第 1 の態様は、直鎖のアシル基を含む対象化合物における、構造推定方法であって、
- 上記対象化合物を含む試料を、クロマトグラフによって分析し、保持時間を求める工程と、

以下の式 1 及び式 2 :

$$N = f(T) \quad \dots (式 1)$$

$$T = t / D^m \quad \dots (式 2)$$

- (式 1 中、N は上記アシル基における総炭素数を示し、 $f(T)$ は上記対象化合物に対応

する飽和化合物の同族体から導かれる関数であって上記総炭素数と保持時間との相関を表す関数を示し、式 2 中、 t は上記保持時間を示し、 D は炭素－炭素二重結合に由来する係数を示し、 m は炭素－炭素二重結合の総数を示す。）

- 5 に基づいて、上記保持時間から、上記対象化合物における上記アシル基の総炭素数及び炭素－炭素二重結合の総数の組み合わせを推定する工程と、を含む、構造推定方法、に関する。

【0013】

- ＜対象化合物を含む試料を、クロマトグラフによって分析し、保持時間を求める工程＞
本工程では、対象化合物を含む試料を、クロマトグラフによって分析し、保持時間を求
10 める。上記対象化合物は、直鎖のアシル基を含む。ここで「保持時間」とは、溶質がクロマトグラフのカラム中に注入されてから溶離するまでに要した時間を意味する。

【0014】

（対象化合物）

- 本実施形態において、対象化合物は、直鎖のアシル基を少なくとも 1 つ含む化合物であ
15 れば特に制限はなく、分析対象の化合物となりうる。上記アシル基は、直鎖の飽和アシル基であってもよいし、直鎖の不飽和アシル基であってもよい。上記アシル基 1 つあたりの炭素数は、2 以上 30 以下であってもよいし、6 以上 24 以下であってもよい。上記アシル基 1 つあたりの炭素－炭素二重結合の数は、0 以上 6 以下であってもよいし、0 以上 3 以下であってもよい。上記対象化合物における上記アシル基の数は、1 以上 3 以下であ
20 ってもよいし、1 以上 2 以下であってもよい。

【0015】

- 上記対象化合物としては、例えば、トリアシルグリセロール（以下、「TAG」と表記する場合がある。）、ジアシルグリセロール、モノアシルグリセロール、ステロール脂質、グリセロリン脂質、スフィンゴリン脂質等が挙げられる。本実施形態の一側面において
25 、上記対象化合物は、トリアシルグリセロールであることが好ましい。

【0016】

- 本実施形態において、対象化合物を含む試料は、特に制限されないが、液体であってもよいし、固体であってもよい。クロマトグラフによる分析を行いやすくする観点から上記試料は液体であることが好ましい。本実施形態の一側面において、上記試料は、生体由来
30 であってもよいし、食品由来であってもよい。

【0017】

- 本実施形態においてクロマトグラフは、特に制限はなく公知のクロマトグラフを用いることができる。上記クロマトグラフとしては、例えば、液体クロマトグラフ、超臨界流体クロマトグラフが挙げられる。本実施形態の一側面において、クロマトグラフは、液体ク
35 ロマトグラフ又は超臨界流体クロマトグラフであることが好ましい。

【0018】

本実施形態において、クロマトグラフによる分析の条件は、特に制限されず適宜設定可能である。例えば、後述する実施例に記載の分析条件が挙げられる。

【0019】

- 40 ＜保持時間から、対象化合物におけるアシル基の総炭素数及び炭素－炭素二重結合の総数の組み合わせを推定する工程＞

本工程では、以下の式 1 及び式 2 に基づいて、上記保持時間から、上記対象化合物における上記アシル基の総炭素数及び炭素－炭素二重結合の総数の組み合わせを推定する。

$$N = f(T) \quad \dots (\text{式 1})$$

45 $T = t / D^m \quad \dots (\text{式 2})$

【0020】

（式 1：アシル基における総炭素数 N と、対象化合物に対応する飽和化合物における保持時間 T との相関を表す関数）

- 上記式 1 中、 N は上記アシル基における総炭素数を示し、 $f(T)$ は上記対象化合物に対応する飽和化合物の同族体から導かれる関数であって上記総炭素数 N と上記飽和化合物
50

における保持時間 T との相関を表す関数を示す。

【0021】

本実施形態において、「 $N = f(T)$ 」とは、対象化合物に対応する飽和化合物における保持時間 T が定まれば、対応するアシル基における総炭素数 N が一つに定まることを意味している。対応するアシル基における総炭素数 N は、対象化合物に対応する飽和化合物における保持時間 T の関数である、と把握することもできる。このとき、 $f(T)$ は、数式で表されてもよいし、数式で表されなくてもよい。本実施形態の一側面において、 $f(T)$ が数式で表される場合、その数式は直線で近似される式（一次関数）であってもよいし、スプライン曲線で近似される式（二次関数等）であってもよい。

【0022】

本実施形態において、 $f(T)$ は上記対象化合物に対応する飽和化合物の同族体から導かれる関数である。ここで、「対象化合物に対応する飽和化合物」とは、対象化合物におけるアシル基の炭素－炭素二重結合のすべてを単結合に変えた化合物を意味する。上記対象化合物におけるアシル基が炭素－炭素二重結合を有さない場合、上記対象化合物と上記対象化合物に対応する飽和化合物は、同一の化合物となる。本実施形態において「飽和化合物の同族体」とは、当該飽和化合物を基準に、アシル基の炭素数が異なっている一群の化合物を意味する。

【0023】

本実施形態の一側面において、上記対象化合物、上記対象化合物に対応する飽和化合物及び上記飽和化合物の同族体とは、主となる化学構造が同一である。ここで、「主となる化学構造」とは、上記対象化合物におけるアシル基以外の化学構造を意味する。例えば、対象化合物がトリアシルグリセロールである場合、主となる化学構造は、グリセロールに由来する化学構造となる。上記対象化合物における主となる化学構造は、分析を開始する段階で標的とする化学構造を決定しているため、予め特定されている。例えば、トリアシルグリセロールを対象化合物として分析する場合、トリアシルグリセロールを標的と選んだ段階で、すでに主となる化学構造はグリセロールに由来する化学構造と特定できる。

【0024】

本実施形態において、「アシル基における総炭素数」とは、対象化合物において結合しているアシル基それぞれの炭素数の総和を意味する。

【0025】

本実施形態において、 $f(T)$ における T は、上記対象化合物に対応する飽和化合物における保持時間を意味する。当該飽和化合物における保持時間 T は、後述する式 2 によって算出される。

【0026】

$f(T)$ は、例えば以下の手順で導くことができる。まず、上述の飽和化合物の同族体を二種以上準備する。このときの同族体は、アシル基における総炭素数 N が既知である化合物を準備する。準備した同族体をクロマトグラフによって分析して各同族体に対応する保持時間 T を求める。上述のアシル基における総炭素数 N と、対応する保持時間 T との相関をプロットすることで、 $f(T)$ を導く（例えば、図 1 の右のグラフ）。得られたプロットに基づいて、近似式を求めて $f(T)$ を表す式としてもよい。すなわち、本実施形態の一側面において、式 1 における $f(T)$ は、2 種以上の同族体から導かれる関数であることが好ましい。

【0027】

（式 2：対象化合物における保持時間 t と、当該対象化合物に対応する飽和化合物における保持時間 T との関係式）

上記式 2 中、 t は対象化合物における保持時間を示し、 D は炭素－炭素二重結合に由来する係数を示し、 m は炭素－炭素二重結合の総数を示す。

【0028】

従来、トリアシルグリセロールのアシル基における総炭素数が同じである場合、アシル基における炭素－炭素二重結合の総数が増えると、保持時間が減少する傾向であることは

知られていたが、具体的な法則性までは知られていなかった。本発明者らは、鋭意研究を重ねた結果、トリアシルグリセロールのアシル基における総炭素数が同じである場合、上記飽和化合物における保持時間 T は、上記対象化合物における保持時間 t に比例し、比例定数は $(1/D^m)$ であることをはじめて見いだした。上記式1及び式2に基づいて、保持時間 t から、アシル基を含む対象化合物における、アシル基の総炭素数 N 及びアシル基の炭素－炭素二重結合の総数 m の組み合わせを簡便に推定することが可能になった。

【0029】

炭素－炭素二重結合に由来する係数 D は、0を超えて1未満である。本実施形態の一側面において、炭素－炭素二重結合が1つ増加することによる保持時間の減少割合が、炭素－炭素二重結合の総数によらず一定である場合、本実施形態に係る構造推定方法を好適に用いることができる。炭素－炭素二重結合に由来する係数 D は、例えば、以下の様にして求めることができる。まず、主となる化学構造が同一であり、かつアシル基における総炭素数が同じである化合物であって、アシル基における炭素－炭素二重結合の総数が異なる2種以上の化合物を準備する。準備した化合物それぞれをクロマトグラフによって分析して各化合物に対応する保持時間を求める。上述のアシル基における炭素－炭素二重結合の総数と対応する保持時間とから、上記炭素－炭素二重結合が1つ増加することによる保持時間の減少割合をそれぞれ求める。求められた減少割合のばらつきが小さいとき、求められた減少割合の平均値を D とする。一方で、求められた減少割合のばらつきが大きく、且つより少ない不飽和度を有する対象化合物における分析の正確性を向上させたいときは、上記炭素－炭素二重結合の総数が0から1に増加することによる保持時間の減少割合を D とする。

【0030】

本実施形態において、式2における炭素－炭素二重結合の総数 m は、特に制限されないが、0以上6以下であってもよい。このような範囲にすることで、本実施形態の構造推定方法を好適に用いることができる。

【0031】

上述の式1及び式2を用いることで、対象化合物における保持時間 t と、想定される炭素－炭素二重結合の総数 m とから、対象化合物における上記アシル基の総炭素数 N を求めることができる。すなわち、対象化合物における保持時間 t から、対象化合物におけるアシル基の総炭素数 N 及び炭素－炭素二重結合の総数 m の組み合わせを推定することができる。本実施形態において「推定する」とは、考えられる上記組み合わせの候補を絞り込むことも含まれる。例えば、トリアシルグリセロールの場合、3つのアシル基が結合しており、それぞれのアシル基として、主に28種類の化学構造が知られている（表1参照）。この場合、3つのアシル基の組み合わせとして、3276通りが考えられる。本実施形態に係る構造推定方法を使用すれば、想定される炭素－炭素二重結合の総数 m に対してアシル基の総炭素数 N が一つに定まり、分析対象のトリアシルグリセロールの候補を大幅に絞り込むことが可能になる。

【0032】

【表1】

総炭素数	二重結合の総数	略称
6	0	6:0
8	0	8:0
10	0	10:0
12	0	12:0
14	0	14:0
14	1	14:1
16	0	16:0
16	1	16:1
18	0	18:0
18	1	18:1
18	2	18:2
18	3	18:3
18	4	18:4
20	0	20:0
20	1	20:1
20	2	20:2
20	3	20:3
20	4	20:4
20	5	20:5
22	0	22:0
22	1	22:1
22	2	22:2
22	3	22:3
22	4	22:4
22	5	22:5
22	6	22:6
24	0	24:0
24	1	24:1

【 0 0 3 3 】

<その他工程>

- 本実施形態の一側面において、上記対象化合物を質量分析装置で分析する工程を更に含むことが好ましい。

【 0 0 3 4 】

質量分析装置によるイオン化の方法は特に限定されず、マトリックス支援レーザー脱離イオン化（MALDI）法、エレクトロスプレー（ESI）法、ナノエレクトロスプレーイオン化（nano-ESI）法等を用いることができる。本実施形態において、イオン化の方法は、ESI法であることが好ましい。質量分析におけるイオン化では、正イオンモードおよび負イオンモードのいずれを用いてもよい。質量分析は、多段階で行ってもよい。

【0035】

上記質量分析装置としては、例えば、フーリエ変換型質量分析装置、飛行時間型（Q-TOF型）質量分析装置、トリプル四重極型質量分析装置、シングル四重極型質量分析装置等が挙げられる。本実施形態において、既知の成分について短時間で精度良く分析する観点から、上記質量分析装置は、トリプル四重極型質量分析装置であることが好ましい。

【0036】

本実施形態の一側面において、対象化合物を含む試料を、クロマトグラフによって分析することと、上記対象化合物を質量分析装置で分析することとは連続して実施してもよい。例えば、液体クロマトグラフトンデム型質量分析装置を用いることで、両工程を連続して実施してもよい。上記液体クロマトグラフトンデム型質量分析装置は、典型的には、液体クロマトグラフトリプル四重極型質量分析装置、又は、液体クロマトグラフトンデム／飛行時間型（Q-TOF型）質量分析装置である。通常、こうした液体クロマトグラフトンデム型質量分析装置では、液体クロマトグラフで分離されたあとの溶出液中の成分毎に、検出感度ができるだけ高くなるように、つまりは最良な状態になるように、分析パラメータが定められる。

【0037】

以上、本発明の第1の態様に係る構造推定方法を説明した。当該構造推定方法は、測定者が直接行ってもよいし、コンピュータに実行させてもよい。

【0038】

《コンピュータで読み取り可能な記録媒体》

本発明の第2の態様は、コンピュータに第1の態様に係る構造推定方法を実行させるために用いられるデータベースを記録した、コンピュータで読み取り可能な記録媒体であって、

上記データベースは、

上記クロマトグラフの分析条件と、

上記分析条件で上記同族体を分析したときに導かれる関数 $f(T)$ 及び炭素-炭素二重結合に由来する係数 D と、
を関連付けて格納している、記録媒体に関する。

【0039】

上記クロマトグラフの分析条件としては、例えば、移動相の種類、移動相の流速、移動相のグラジエント条件、固定相の種類、測定温度、圧力等が挙げられる。

【0040】

データベースに格納されているその他の情報としては、例えば、分析対象の質量情報、保持時間の情報、検出器信号の強度等が挙げられる。

【0041】

記録媒体としては、一般的に用いられている記録媒体であれば特に制限されないが、例えば、光ディスク（CD-ROM、DVD-ROM、BD-ROM等）、光磁気ディスク、フラッシュメモリ等が挙げられる。

実施例

【0042】

以下、実施例を挙げて本発明をより詳細に説明するが、本発明はこれらに限定されるものではない。

【0043】

＜実験1：アシル基における総炭素数 N と保持時間 T との相関関係＞

アシル基における総炭素数Nと保持時間Tとの相関関係を調べるため、以下の実験を行った。まず、下記に示すトリアシルグリセロール（以下、「TAG」と表記する場合がある。）の標準品を準備した。いずれの標準品もアシル基の炭素－炭素二重結合の総数が0である化合物（飽和化合物）を用いた。

5 (トリアシルグリセロールの標準品)

飽和トリアシルグリセロール混合標品（総炭素数26から54）

【0044】

上記標準品それぞれを超臨界流体クロマトグラフ（株式会社島津製作所製、製品名：Nexera UC）で分析して保持時間を求めた。このときの分析条件は以下の通りである。

10 (超臨界流体クロマトグラフの分析条件)

Column: Shim-pack XR-ODSIII, 150×2.0 mm I.D., 2.2 μm

Flow Rate: 0.8 mL/min

Modifier (Pump B): Acetonitrile

Time program B conc. 10%

15 Back Pressure Regulator: 10 MPa

Oven Temperature: 25 °C

Injection Volume: 0.5 μL

LCMS-8050 and Interface conditions

20 Make-up solvent: 0.2 mL/min (Methanol with 10 mM ammonium acetate)

Interface: DUIS

MS Mode: Positive mode

Block Temperature: 40 °C

DL Temperature: 235 °C

25 Nebulizing Gas Flow: 2 L/min

Drying Gas Flow: 10 L/min

Heating Gas Flow: 10 L/min

【0045】

超臨界流体クロマトグラフで完全飽和のトリアシルグリセロールを分析した結果を示すグラフ（左）と、当該分析の結果に基づいて、トリアシルグリセロールにおけるアシル基の総炭素数（横軸）と保持時間（縦軸）との相関を示すグラフ（右）とを図1に示す。図1の右グラフにおいて、丸いプロットはトリアシルグリセロールの標準品の測定結果を示し、バツ印のプロットは $N = f(T)$ の関数によって得られた保持予測を示す。図1の右グラフから、トリアシルグリセロールにおけるアシル基の総炭素数Nは、保持時間Tの関数であることが分かった。当該グラフを最小二乗法で近似したところ、以下の式1'が導き出せた。

$$N = f(T) = 0.0000271053186070559 \times (T^4) - 0.00363140807472355 \times (T^3) + 0.186952207220782 \times (T^2) - 4.24830631212859 \times (T) + 36.3581033113478 \quad \dots \text{(式1')}$$

【0046】

40 <実験2：アシル基における炭素－炭素二重結合の総数mと保持時間tとの相関関係>
アシル基における炭素－炭素二重結合の総数mと保持時間tとの相関関係を調べるため、以下の実験を行った。まず、下記に示すトリアシルグリセロールの標準品を準備した。いずれの標準品もアシル基の総炭素数が48である化合物を用いた。

(トリアシルグリセロールの標準品)

45 (48:0)、(48:1)、(48:2)及び(48:3)で示されるトリアシルグリセロールの混合試料

【0047】

上記標準品それぞれを超臨界流体クロマトグラフ（株式会社島津製作所製、製品名：Nexera UC）で分析して保持時間を求めた。このときの分析条件は実験1と同じ条件である。

50

【 0 0 4 8 】

超臨界流体クロマトグラフでトリアシルグリセロールを分析した結果を示すグラフ（左）と、当該分析の結果に基づいて、トリアシルグリセロールにおけるアシル基の炭素－炭素二重結合の総数と保持時間との相関を示す表（右）とを図 2 に示す。図 2 の表から、トリアシルグリセロールにおけるアシル基の炭素－炭素二重結合の総数 m が 1 つ増えるごとに、保持時間 t が 0.83 ～ 0.88 倍の割合で減少することが分かった。当該表から以下の式 2' が導かれた。式 2' 中、 T は上記標準品（対象化合物）に対応する飽和化合物における保持時間を意味する。 t 及び m それぞれは、上記標準品（対象化合物）における保持時間及びアシル基の炭素－炭素二重結合の総数を意味する。 D は上記炭素－炭素二重結合が 1 つ増加することによる保持時間の減少割合（炭素－炭素二重結合に由来する係数）を意味する。言い換えると、上記標準品に対応する飽和化合物における保持時間 T は、上記標準品における保持時間 t に比例し、比例定数は $(1/D^m)$ 、 $D = 0.83 \sim 0.88$ ）であることが分かった。

$$T = t / D^m \quad \cdots \text{（式 2'）}$$

【 0 0 4 9 】

<実験 3：保持時間の推定>

実験 1 及び実験 2 の結果に基づいて、 N が 52 であり、 m が 2 であるトリアシルグリセロール（TAG（52：2））の保持時間を推定した。炭素－炭素二重結合の総数が増加することによって保持時間が変化する事象は、アシル基の総炭素数が増加することによって保持時間が変化する事象とは独立しているため、 $N = 48$ の場合（実験 2）も $N = 52$ の場合（実験 3）も、ある程度同様な D の値を使用できると考えられる。事前に、TAG（52：2）に対応する飽和化合物（TAG（52：0））の保持時間を求めたところ、8.55 分であった。実験 2 より、炭素－炭素二重結合の総数が 0 から 1 に増加することによる保持時間の減少割合は 0.83 であるため、TAG（52：2）の保持時間は、5.89（分）と推定された。

【 0 0 5 0 】

一方、実験 1 と同じ条件で、超臨界流体クロマトグラフによって TAG（52：2）を分析したところ、保持時間が 5.862 分となり、上述の推定された保持時間とほぼ一致した（図 3）。

【 0 0 5 1 】

以上、実験 1 ～ 実験 3 の結果から、上述の式 1 及び式 2 を用いることによって、対象化合物の保持時間 t から、アシル基を含む対象化合物における、アシル基の総炭素数及びアシル基の炭素－炭素二重結合の総数の組み合わせを簡便に推定できることが分かった。

【 0 0 5 2 】

[態様]

【 0 0 5 3 】

上述した複数の例示的な実施形態は、以下の態様の具体例であることが当業者により理解される。

【 0 0 5 4 】

（第 1 項）一態様にかかる構造推定方法は、

直鎖のアシル基を含む対象化合物における、構造推定方法であって、前記対象化合物を含む試料を、クロマトグラフによって分析し、保持時間を求める工程と、以下の式 1 及び式 2：

$$N = f(T) \quad \cdots \text{（式 1）}$$

$$T = t / D^m \quad \cdots \text{（式 2）}$$

（式 1 中、 N は前記アシル基における総炭素数を示し、 $f(T)$ は前記対象化合物に対応する飽和化合物の同族体から導かれる関数であって前記総炭素数と保持時間との相関を表す関数を示し、式 2 中、 t は前記保持時間を示し、 D は炭素－炭素二重結合に由来する係数を示し、 m は炭素－炭素二重結合の総数を示す。）に基づいて、前記保持時間から、前記対象化合物における前記アシル基の総炭素数及び炭素－炭素二重結合の総数の組み合わせ

せを推定する工程と、を含む。第1項に記載の構造推定方法によれば、アシル基を含む対象化合物における、アシル基の総炭素数及びアシル基の炭素－炭素二重結合の総数を簡便に推定する方法を提供することが可能になる。

【0055】

- 5 (第2項) 第1項に記載の構造推定方法において、前記対象化合物は、トリアシルグリセロールである。第2項に記載の構造推定方法によれば、トリアシルグリセロールの化学構造を簡便に推定することが可能になる。

【0056】

- 10 (第3項) 第1項又は第2項に記載の構造推定方法において、式1における前記 $f(T)$ は、2種以上の前記同族体から導かれる関数である。第3項に記載の構造推定方法によれば、アシル基を含む対象化合物における、アシル基の総炭素数及びアシル基の炭素－炭素二重結合の総数を簡便に、かつ精度良く推定できる。

【0057】

- 15 (第4項) 第1項～第3項のいずれかに記載の構造推定方法において、前記クロマトグラフは、液体クロマトグラフ又は超臨界流体クロマトグラフである。第4項に記載の構造推定方法によれば、アシル基を含む対象化合物における、アシル基の総炭素数及びアシル基の炭素－炭素二重結合の総数を簡便に、かつ精度良く推定できる。

【0058】

- 20 (第5項) 第1項～第4項のいずれかに記載の構造推定方法において、前記対象化合物を質量分析装置で分析する工程を更に含む。第5項に記載の構造推定方法によれば、アシル基を含む対象化合物における、アシル基の総炭素数及びアシル基の炭素－炭素二重結合の総数を簡便に推定できることに加えて、より詳細な構造情報を取得できる。

【0059】

- 25 (第6項) 第5項に記載の構造推定方法において、前記質量分析装置は、トリプル四重極型質量分析装置である。第6項に記載の構造推定方法によれば、アシル基を含む対象化合物における、アシル基の総炭素数及びアシル基の炭素－炭素二重結合の総数を簡便に推定できることに加えて、より詳細な構造情報を取得できる。

【0060】

- 30 (第7項) 一態様にかかる記録媒体は、
コンピュータに第1項～第6項のいずれかに記載の構造推定方法を実行させるために用いられるデータベースを記録した、コンピュータで読み取り可能な記録媒体であって、
前記データベースは、
前記クロマトグラフの分析条件と、
前記分析条件で前記同族体を分析したときに導かれる関数 $f(T)$ 及び炭素－炭素二
35 重結合に由来する係数 D と、
を関連付けて格納している。第7項に記載の記録媒体によれば、コンピュータに第1項～第6項のいずれかに記載の構造推定方法を実行させることが可能になる。

【0061】

- 40 以上のように本発明の実施形態及び実施例について説明を行なったが、上述の各実施形態及び各実施例の構成を適宜組み合わせることも当初から予定している。

【0062】

- 45 今回開示された実施の形態及び実施例はすべての点で例示であって、制限的なものではないと考えられるべきである。本発明の範囲は上記した実施の形態及び実施例ではなく特許請求の範囲によって示され、特許請求の範囲と均等の意味、および範囲内でのすべての変更が含まれることが意図される。

クレーム：

【請求項 1】

直鎖のアシル基を含む対象化合物における、構造推定方法であって、
前記対象化合物を含む試料を、クロマトグラフによって分析し、保持時間を求める工程
と、

以下の式 1 及び式 2：

$$N = f(T) \quad \dots \text{(式 1)}$$

$$T = t / D^m \quad \dots \text{(式 2)}$$

(式 1 中、N は前記アシル基における総炭素数を示し、f (T) は前記対象化合物に対応
する飽和化合物の同族体から導かれる関数であって前記総炭素数と保持時間との相関を表
す関数を示し、式 2 中、t は前記保持時間を示し、D は炭素－炭素二重結合に由来する係
数を示し、m は炭素－炭素二重結合の総数を示す。)

に基づいて、前記保持時間から、前記対象化合物における前記アシル基の総炭素数及び炭
素－炭素二重結合の総数の組み合わせを推定する工程と、

を含む、構造推定方法。

【請求項 2】

前記対象化合物は、トリアシルグリセロールである、請求項 1 に記載の構造推定方法。

【請求項 3】

式 1 における前記 f (T) は、2 種以上の前記同族体から導かれる関数である、請求項
1 又は請求項 2 に記載の構造推定方法。

【請求項 4】

前記クロマトグラフは、液体クロマトグラフ又は超臨界流体クロマトグラフである、請
求項 1 ～請求項 3 のいずれか一項に記載の構造推定方法。

【請求項 5】

前記対象化合物を質量分析装置で分析する工程を更に含む、請求項 1 ～請求項 4 のい
ずれか一項に記載の構造推定方法。

【請求項 6】

前記質量分析装置は、トリプル四重極型質量分析装置である、請求項 5 に記載の構造推
定方法。

【請求項 7】

コンピュータに請求項 1 ～請求項 6 のいずれか一項に記載の構造推定方法を実行させる
ために用いられるデータベースを記録した、コンピュータで読み取り可能な記録媒体であ
って、

前記データベースは、

前記クロマトグラフの分析条件と、

前記分析条件で前記同族体を分析したときに導かれる関数 f (T) 及び炭素－炭素二
重結合に由来する係数 D と、
を関連付けて格納している、記録媒体。

アブストラクト：

直鎖のアシル基を含む対象化合物における、構造推定方法であって、前記対象化合物を含む試料を、クロマトグラフによって分析し、保持時間を求める工程と、

以下の式 1 及び式 2：

$$5 \quad N = f(T) \quad \dots (\text{式 1})$$

$$T = t / D^m \quad \dots (\text{式 2})$$

(式 1 中、N は前記アシル基における総炭素数を示し、 $f(T)$ は前記対象化合物に対応する飽和化合物の同族体から導かれる関数であって前記総炭素数と保持時間との相関を表す関数を示し、式 2 中、 t は前記保持時間を示し、 D は炭素－炭素二重結合に由来する係数を示し、 m は炭素－炭素二重結合の総数を示す。) に基づいて、前記保持時間から、前記対象化合物における前記アシル基の総炭素数及び炭素－炭素二重結合の総数の組み合わせを推定する工程と、を含む、構造推定方法。