

# GERSTEL MPS-TDU/CIS - Agilent GCMS와 MPP를 이용한 대사체학 기반 분석기법으로 대체육과 일반육의 비교

## 저자

김병호  
한국애질런트테크놀로지스 (주)

## 개요

대체육은 비 동물성 재료로 모양과 식감을 고기와 유사하게 만든 식재료입니다. 대체육은 고기에 비해 동물성 지방을 함유하고 있지 않아 콜레스테롤이나 포화지방산과 관련된 심혈관계 질환 등의 예방에 도움이 되며, 동물성 고기에 없는 섬유질, 비타민, 미네랄 등을 풍부하게 함유시킬 수 있습니다. 오래전부터 채식주의자들을 대상으로 콩고기, 밀고기 등의 대체육이 생산되어 왔으며, 근래에 들어 PBM(Plant Based Meat)과 Cell Based Meat(CBM) 등의 대체육 시장이 매우 빠르게 성장하고 있습니다. 일부 선진국에서는 이미 식물성 대체육과 배양육을 구분해 생산 과정에 대한 규제 및 감독을 진행하고 각종 제도 마련에 나서고 있습니다. 우리나라는 아직 시작단계로 식약처에서는 2022년 12월 대체식품의 정의와 기준 신설을 위한 식품의 기준 및 규격 고시 개정안을 행정예고 했으며, 2024년까지 대체육에 대한 건전성 검토 및 안전성 평가 기반을 마련할 계획이라고 밝힌 바 있습니다.

이러한 대체육 개발 및 평가를 위해서 여러가지 분석기법이 활용되고 있습니다. 영양소 (아미노산, 지방산, 미네랄, 당, 비타민 등)의 분석, 품질(향미, 원산지, 인증 등)관련 분석, 그리고 안전성(농약, 중금속 등) 평가와 관련된 분석으로 LC, GC, ICP 등 다양한 분석장비가 활용될 수 있습니다. 특히 GCMS를 이용한 대사체학 기반 분석기법은 아미노산, 지방산, 당 등의 1차 대사물질의 분석은 물론 원산지 및 향미 등에 대한 분석에 활용될 수 있으며, MPP를 활용한 분석 데이터의 통계적 해석으로 주요성분의 스크리닝 및 판별분석, 마커성분 발굴 등 대체육 연구에 매우 유용하게 응용될 수 있습니다.

본 응용자료에서는 GERSTEL MPS-TDU/CIS-Agilent GCMS와 MPP를 이용하여 대체육과 일반육을 비교 분석하고, 주성분 분석을 통한 판별 및 마커성분을 발굴하는 분석기법을 소개해 드리고자 합니다.

이와 같은 분석기법은 대체육의 개발단계는 물론 생산단계의 품질관리까지 영양소의 프로파일링 및 향미 등에 대한 많은 분석정보를 얻을 수 있으므로 대체육 연구에 매우 유용한 분석기법이라 할 수 있습니다.

## 서론

크로마토그래피와 통계학적 데이터 해석을 통한 대사체학 기반의 분석기법은 이미 많이 사용되고 있지만, 대체육에 이러한 분석기법의 적용은 아직 많지 않습니다. GCMS를 이용하여 지방산, 아미노산, 당류와 같은 영양성분의 분석은 물론 맛과 냄새 등에 대한 분석도 할 수 있기 때문에 우리가 GCMS 분석을 통해 대체육에서 얻을 수 있는 정보는 매우 중요하고 많습니다. GCMS로 분석된 데이터에서 우리는 이미 알려진 주요 성분들의 검출 및 정량에 관심을 갖고 있지만, 이와 더불어 그 외 검출되는 수많은 성분(peak)들에 대해서 통계학적 해석을 통해 의미 있는 정보들을 얻을 수 있습니다.

본 응용자료에서는 대체육과 일반육을 GERSTEL MPS-TDU/CIS 전처리장비를 이용하여, Agilent 8890 GC -5977 MS(scan mode)로 분석하고, MPP를 통해 peak align 및 PCA(주성분분석) 등의 통계분석을 진행하였습니다. MPP 통계분석으로 각 시료의 판별분석이 가능하고 이때 그룹간 차이나는 성분에 대한 확인도 가능합니다. 이와 같은 대사체학 기반 분석기법은 본 응용자료에서와 같이 대체육과 일반육의 차이를 규명하기 위한 연구 뿐만 아니라 대체육의 판별, 제조공정 상의 차이, 조리법의 차이 등 다양한 연구에 활용할 수 있습니다.

## 실험

### 분석 장비 및 소프트웨어

- GERSTEL MPS-TDU/CIS
- Agilent 8890 GC - 5977 MS
- Agilent MassHunter Unknowns Analysis, 버전 10.2.
- GERSTEL AromaOffice
- Agilent Mass profiler Professional(MPP) 소프트웨어, 버전 15.01.

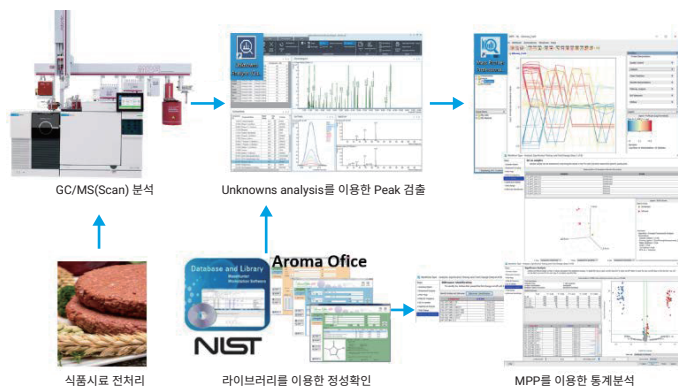


그림 1. GCMS를 이용한 대사체학 기반 분석법의 워크플로.

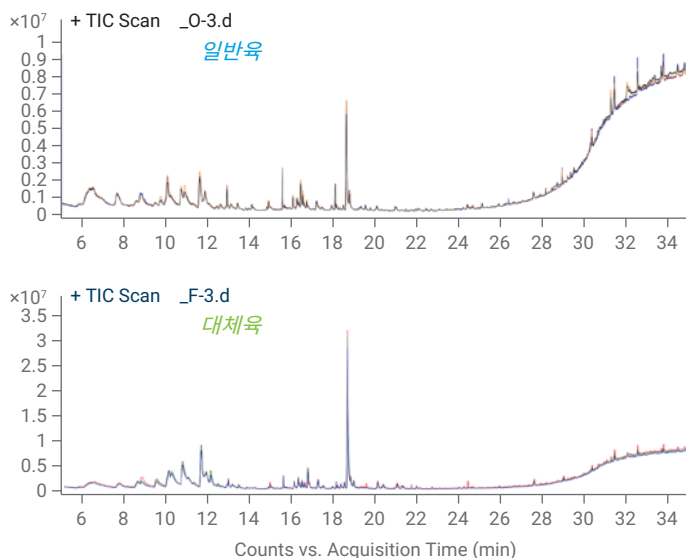


그림 2. 대체육과 일반육 시료의 TIC 크로마토그램.

HSSE(Twister)를 이용하여 대체육과 일반육 시료를 각 3반복 분석하여 얻어진 크로마토그램(TIC)입니다. 3반복 분석은 단지 통계적 처리를 위해 수행되었습니다. 다변량통계분석을 이용한 시료그룹 간 차이의 확인을 위해서는 각 그룹 내 시료의 개수를 늘려서 통계적으로 그룹간 차이를 확인할 수 있습니다.

### MPP를 이용한 주성분 분석

위에 그림 2와 같이 대체육과 일반육 시료를 분석한 데이터는 MassHunter의 Unknowns analysis 소프트웨어를 이용하여 피크를 검출한 후 MPP 소프트웨어를 통해 주성분 분석(PCA)을 진행하였습니다. 아래 그림 3의 PCA 3D Loading plot에서 확인할 수 있듯이 X축 방향으로 대체육(F)과 일반육(O)의 차이를 확인할 수 있습니다.

### PCA 3D Plot \_by Unknowns Analysis peaks

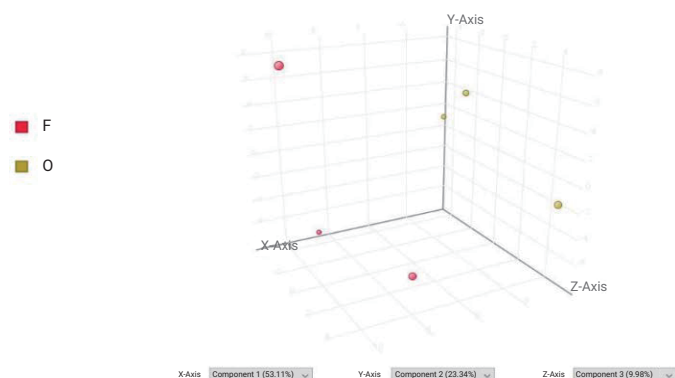


그림 3. 미지성분 분석 피크 검출을 통한 대체육과 일반육의 PCA 3D Loading plot.

추가적으로 향미 성분에 의한 차이를 확인해 보기 위해 GERSTEL AromaOffice의 Library Database를 이용하여 검출된 여러 피크 중 향미성분으로 검색되는 피크만 필터링하고, 이렇게 필터링된 향미성분 피크만 MPP를 통해 주성분분석을 진행하였습니다. 그림 4의 PCA 3D Loading plot과 같이 대체육과 일반육이 향미성분에 의해서도 차이가 있음을 확인할 수 있습니다.

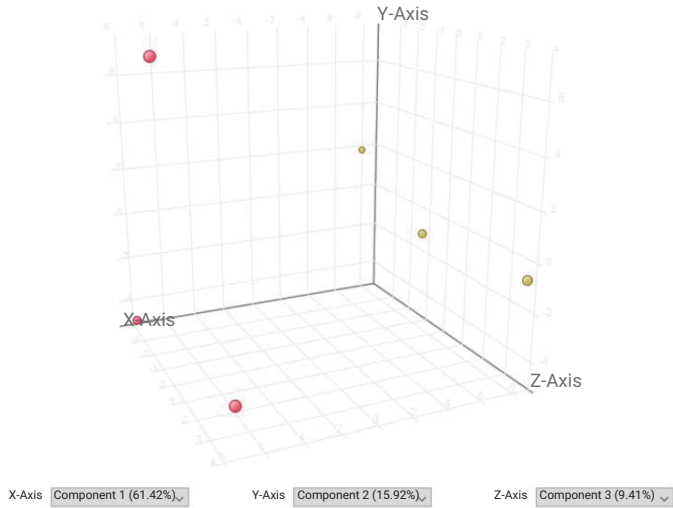


그림 4. 향미성분 분석 피크 검출을 통한 대체육과 일반육의 PCA 3D Loading plot(GERSTEL AromaOffice).

### 차이 나는 성분의 확인

아래의 그림 5는 GERSTEL AromaOffice의 Library search를 통해 확인된 향미성분으로 주성분분석을 하였을 때 유의한 차이를 보이는 피크를 MPP에서 p-value와 Fold change값으로 구분한 결과를 보여줍니다.

대체육과 일반육에서 큰 차이를 보이는 향미성분 43개가 확인되었습니다. 파란색으로 표시된 성분들은 일반육에서 특이성이 있는 향미성분들이고, 빨간색으로 표시된 성분들은 대체육에서 특이성이 있는 향미성분들입니다. 이 결과는 대체육과 일반육의 맛 차이를 연구하는데 유용한 정보로 활용될 수 있습니다.

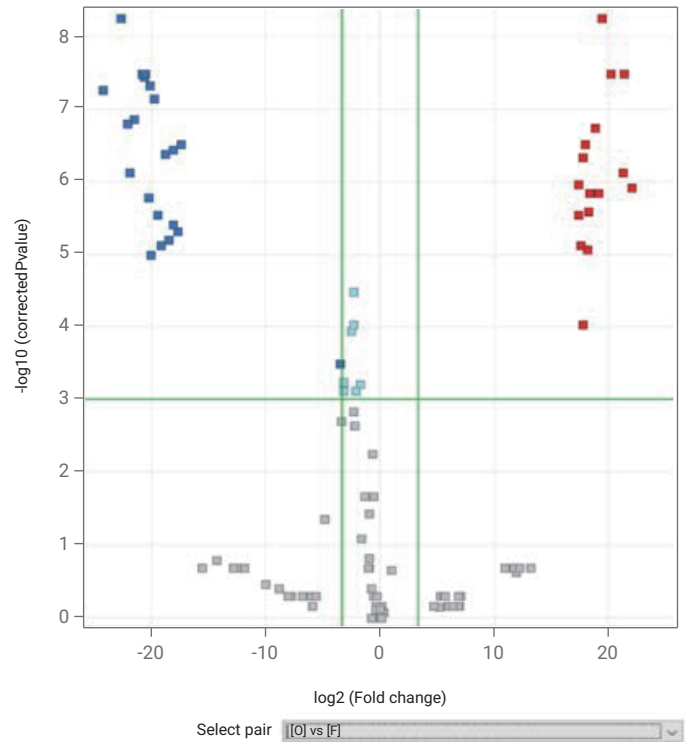


그림 5. 향미성분들 중 차이 나는 피크의 정성확인.

### 결론 및 고찰

GERSTEL MPS-TDU/CIS-Agilent GCMS 및 MPP 소프트웨어를 이용한 대사체학 기반 분석기법으로 대체육과 일반육 시료를 비교해 보았습니다. 대체육 시료의 판별 및 차이 나는 성분의 확인에 매우 유용하였으며, 특히 향미성분에 의한 판별 및 차이 나는 성분의 확인은 대체육과 일반육의 맛 차이를 연구하는데 유용한 정보를 제공합니다. 이와 같은 분석기법은 주로 판별 및 마커성분 발굴에 응용될 수 있으며, 대체육의 종류, 원료, 생산, 가공, 조리에 이르기까지 매우 많은 단계에서 연구에 활용할 수 있습니다.

서론에서 언급한 바와 같이 GCMS를 이용하여 지방산, 아미노산, 당류와 같은 영양성분의 분석은 물론 맛과 냄새 등의 분석을 할 수 있기 때문에 MPP 소프트웨어를 통한 통계적 데이터 해석과 결합된 대사체학 기반 분석기법은 대체육 연구에 매우 다양하게 활용될 수 있을 것으로 사료됩니다.

### 감사의 글

이 응용자료는 영인과학에서 분석한 데이터를 사용하였으며, 도움을 주신 영인과학 담당자분들께 깊은 감사를 전합니다.

## 참고 문헌

1. Stephan van Vliet, James Bain, Demetrius Hill, Michael Muehlbauer, Carl Pieper, and Kim Huffman, Frederick D. Provenza, Scott Kronberg, Stephan Baumann, Tarun Anumol., Comparing the Chemical Profiles of Plant-Based and Traditional Meats Using GC/MS-Based metabolomics. Agilent Technologies application note, 5994-5034EN, 2022.
2. 김병호, 7250 GC-QTOF를 이용한 Metabolite Profiling. Agilent Technologies application report, 2020.
3. Yufeng Zhang, Lay Peng Tan, Analysis of Coffee Aroma
4. Components with Agilent PAL3 Autosampler and 7010B GC/TQ, Agilent Technologies application note, 5994-5458EN, 2022.
5. Toh Seok Hwa, Upendra Khurana, Tarun Anumol, Daniel Cuthbertson., LC/Q-TOF Analysis and Nontargeted
6. Chemometric Profiling of Meats and Plant-Based Alternatives., Agilent Technologies application note, 5994-5130EN, 2022.
7. Beata Miko ajczak, Emilia Fornal, Magdalena Montowska, LC-QTOFMS/MS Identification of Specific
8. Non-Meat Proteins and Peptides in Beef Burgers., Journal of Molecules, 2019.
9. Stephan vanVliet, James R. Bain, Michael J.Muehlbauer, Frederick D. Provenza, Scott L. Kronberg, Carl F. Pieper, Kim M. Huffman., metabolomics comparison of plant-based meat and grass-fed meat indicates large nutritional differences despite comparable Nutrition Facts panels., nature, 2021.
10. John R. Stuff, Jackie A. Whitecavage., Solid Phase Micro-Extraction (SPME) Coupled with Selectable 1D/2D GC-MS
11. for the Determination of Food Product Flavors., Gerstel Inc., application note, 9/2012.
12. Oliver Fiehn, Joachim Kopka, Richard N. Trethewey, and Lothar Willmitzer., Identification of Uncommon Plant Metabolites Based on Calculation of Elemental Compositions Using Gas Chromatography and Quadrupole Mass Spectrometry., Analytical Chemistry, 2000.
13. Wang, H. M et al., Recommendations for Improving Identification and Quantification in Non-Targeted, GC-MS-Based Metabolomic Profiling of Human Plasma., Metabolites, 2017.

<http://www.agilent.com>

DE97411703

이 정보는 사전 고지 없이 변경될 수 있습니다.

©Agilent Technologies, Inc.2023  
2023년 5월 12일, 한국에서 발행  
5994-6344KOKR

한국애질런트테크놀로지스(주)  
대한민국 서울특별시 서초구 강남대로 369,  
A+ 에셋타워 9층, 06621  
전화: 82-80-004-5090 (고객지원센터)  
팩스: 82-2-3452-2451  
이메일: korea-inquiry\_lsca@agilent.com

