

# Agilent 5975 GC/MSD と MPP ソフトウェアによるカモミールの PLS 判別予測モデルの構築と市販の花 およびエッセンシャルオイルへの適用

## アプリケーションノート

食品試験・農業

### 著者

Mei Wang, Bharathi Avula,  
Yan-Hong Wang, Jianping Zhao,  
Amar G.Chittiboyina, Cristina Avonto,  
Jon F. Parcher, Vijayasankar Raman, and  
Ikhlas A. Khan  
National Center for Natural Products  
Research,  
University of Mississippi  
University, MS  
USA  
Jerry A. Zweigenbaum and  
Philip L. Wylie  
Agilent Technologies, Inc.  
Wilmington, DE  
USA

### 概要

市販のハーブ製品の製造に使用されるカモミールの由来を確認するために、統計モデルを開発しました。このモデルは、Agilent 7890 GC および Agilent 5975 GC/MSD によって得られた正確な測定結果を使用して開発したものです。サンプルの品質管理は主成分分析 (PCA) によって行い、PLS 判別分析 (PLS-DA) に基づくサンプルクラス予測モデルを構築しました。カモミールが含まれる 35 種類の市販品と 11 種類のエッセンシャルオイルに、この PLS 判別予測モデルを適用しました。



**Agilent Technologies**

## はじめに

世界で最も広く使用されている薬用植物の1つであるカモミールは、睡眠障害、下痢、疝痛、創傷、粘膜炎、湿疹の緩和に有効であることが報告されています [1, 2]。また、抗アレルギー性、抗菌性、抗炎症性、鎮痙性など、カモミールにはこれ以外の薬効もあります [3]。ただし、発疹、喉の腫れ、息切れ、アナフィラキシーなどのアレルギー反応についての報告もあります。

残念ながら、カモミールには一般に承認されている有効性がないため、そのような定義のはっきりしない天然物を含むハーブ医薬品の品質、安全性、効能を測定し、管理することは困難です。実際に、ハーブカモミール製品の販売促進の最も大きな障害の1つとして偽和物混入が挙げられます。

このアプリケーションノートでは、市販品で最もよく使用されている種類のカモミール、ドイツカミツレ (*Matricaria chamomilla* L. syn: *M. recutita* L.)、ローマカミツレ (*Chamaemelum nobile* (L.) All. syn: *Anthemis nobilis* L.) および菊花 (*Chrysanthemum morifolium* Ramat.) の化学組成について最近発表された研究 [4] の内容を説明します。ガスクロマトグラフィー/質量分析計 (GC/MS) メソッドを開発し、認証済み植物、市販品、およびエッセンシャルオイルを含むさまざまなカモミールサンプルのノンターゲット、揮発性、無極性化合物分析に適用しました。

このメソッドでは Agilent 7890 GC と Agilent 5975 GC/MSD を使用してデータを取得しました。自動データ処理手順と各種の基準を採用したデータフィルタを使用することで、さまざまな入力の管理、リテンションタイムの調整、およびデータ整理を行いました。対象サンプルを分類、判別するモデルを PLS-DA を使用して構築しました。このモデルを使用して、カモミールが含まれると表示された市販サンプルを評価しました。各種のカモミールと相関関係がある主要なマーカー化合物が同定されました。

## 実験方法

### サンプル

調べたサンプルには 27 種類の認証済み植物、35 種類の固形の市販品、11 種類のエッセンシャルオイルが含まれていました。すべてのサンプルの化学種は、NCNPR (National Center for Natural Products Research)、ミシシッピ大学の植物リポジトリに寄託されています (NCNPR アクセションコードを付けて文書化) [4]。

### 試薬および標準物質

試薬および標準物質は [4] の説明に従って入手し、使用しました。

### 装置

この実験は、Agilent 7693A オートサンブラを備え、Agilent 5975 GC/MSD システムに結合された Agilent 7890 GC で実行しました。機器の設定条件を表 1 に示します。

表 1. GC および質量分析計条件

#### GC 条件

プレカラム	なし
分析カラム	Agilent J&W HP-5MS 30 m × 0.25 mm, 0.25 μm 5 % フェニルメチルシリコン (p/n 19091S-133)
注入温度	250 °C
注入モード	スプリット比を 25:1 に設定
オープンプログラム	45 °C で 2 分 1.5 °C/min で 45~100 °C 2 °C/min で 100~200 °C
カラム流量	1 mL/min 定流量
キャリアガス	ヘリウム
トランスファーライン温度	280 °C
GC 実行時間	90 分

#### MS 条件

イオン化モード	電子衝撃、70 eV
イオン源温度	230 °C
溶媒遅延時間	5 分
取り込みモード	スキャン (40~550 amu)

## サンプル前処理

固体サンプルは、均一のマトリックスが得られるように細かく碎き、ホモジナイズしました。約 1 g の微粉体を正確に計量し、4 mL の *n*-ヘキサンに分散させ、1 時間超音波処理しました。上清を Millex GV (0.22 μm) フィルタでろ過してから GC/MS 分析を行いました。エッセンシャルオイルでは、10 μL のサンプルを 1 mL の *n*-ヘキサンで希釈しました。選択した内部標準のトリデカン (*n*-C<sub>13</sub>H<sub>28</sub>) を各サンプル溶液に加え、最終濃度を 90 μg/mL にしました。

## データ処理と統計解析

Agilent MSD Productivity ChemStation ソフトウェア (E.02.02) を使用して GC/MS データを取得しました。NIST 自動質量スペクトルデコンボリューションおよび同定ソフトウェア (AMDIS) を使用して GC/MS データを抽出しました。同一の溶出プロファイルと類似したスペクトルデータを持つイオンとしてエンティティを同定し、リテンションタイム (*t<sub>R</sub>*)、ピーク強度、および *m/z* によって特性評価しました。

各サンプルの ELU ファイル (AMDIS により作成) を、複数のサンプルクラス予測 (SCP) アルゴリズム機能を有する Mass Profiler Professional (MPP) ソフトウェアにインポートしました。最小のアバundance設定である 5,000 カウントを使用し、5~90 分のリテンションタイムウィンドウ内でさらに分析するエンティティを選択しました。0.15 分の許容リテンションタイムウィンドウとスペクトルパターンの類似性を使用して、サンプルセット全体でエンティティを調整しました。各化合物のアバundanceの違いを説明できるように、内部標準を使用してピーク強度を正規化しました。

サンプルおよびパラメータ値内での存在 (フラグによりフィルタ)、発生頻度 (頻度によりフィルタ)、クラス内の対応するエンティティのアバundance (サンプル変動によるフィルタ)、および変動の一元配置分散分析 (ANOVA) の結果に基づいてエンティティの次元を段階的に縮小しました。サンプルデータの品質管理に PCA を使用し、PLS-DA に基づくサンプルクラス予測モデルを構築しました。

モデル構築で使用した認証済み植物サンプルに加えて、既知のラベル付き市販品サンプルを含む 12 個の一連のサンプルを使用し、モデルを検証するためにクロスバリデーションを実行しました。

## 結果と考察

### データ取り込み

特定のグループの対象化合物が事前に定義されていないため、ノンターゲット分析をスキャンモードで実行し、得られた情報を最大化しました。認証済みカモミール植物サンプルの GC/MS 分析で大量の化合物が検出されました。特定の種類のカモミール植物サンプルは成分の濃度にわずかな違いはありましたが、同種のカモミールから得られたクロマトグラフィーパターンには一貫性がありました。種類の異なるカモミールは化学プロファイルに明確な違いを示しました (図 1)。

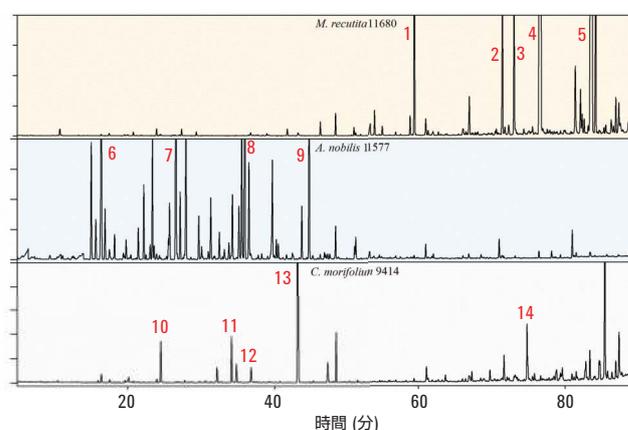


図 1. ドイツカミツレ (上部パネル)、ローマカミツレ (中央パネル)、菊花 (下部パネル) の一般的なクロマトグラム。種類の異なるカモミールで同定された主な化合物: (1) ファルネセン、(2) ビサボロールオキサイド B、(3) a-ビサボロール、(4) ビサボロールオキサイド A、(5) cis-エニン-ジシクロエーテル、(6) a-ピネン、(7) 2-ブテン酸、3-メチル-、ブチルエステル、(8) 2-ブテン酸、3-メチル-、3-メチルブチルエステル、(9) 2-ブテン酸、3-メチル-、ヘキサデシルエステル、(10) ユーカリプトール、(11) トリメチルシクロヘキサナルデヒド、(12) ボルネオール、(13) 酢酸ピネン、(14) ランセオール

## データマイニング

5,000 カウントの強度閾値を使用したところ、MPP ソフトウェアにより合計で 2,560 種類のエンティティが得られました。段階的なフィルタ手順を使用して、さまざまな種類のカモミールを表す最も特徴的なマーカー化合物を同定し、PCA および PLS-DA の前にデータの次元を縮小しました。この手順の最初のステップは「フラグによるフィルタ」でした。フラグは、サンプル内部でのエンティティの質を表す属性で、エンティティが各サンプル内に「存在する」ものとして、または「限界値」として検出されたことを示します。すべてのサンプルに存在するエンティティはその後の分析では除去され、各サンプルに固有のエンティティだけが選択されました。

第 2 のフィルタ、「頻度によるフィルタ」ステップでは、少なくとも 1 つのサンプルグループ (すべてのローマカミツレサンプルなど) 内のサンプルの少なくとも 100 % に存在しないエンティティを除去しました。第 3 のフィルタ、「サンプル変動によるフィルタ」ステップでは、アバダンスレベルの変動係数 (CV) 25 % 未満でエンティティをフィルタ処理しました。

最後のフィルタステップでは、one way ANOVA を使用し、各エンティティについて計算した p-値に基づいて最も再現性の高いデータを選択しました。対応する変動の差異の統計的優位性が 95 % のエンティティだけがフィルタを通過するように 0.05 の p-値カットオフを使用しました。

フィルタ手順の前の最初のエンティティの数は 2,560 でしたが、段階的なフィルタによってこの数が 50 まで減少しました。フィルタプロセスによって最も識別力のあるエンティティだけが予測モデルの構築に使用されました。

## 計量化学分析

PCA は、データの識別力を維持しながらデータ次元の縮小を実施できる数学的メソッドです。PCA は、サンプル間の違いを検出し、グループの関連性を確認し、グループの分離に対する化合物の相対的寄与を調べるアプローチです (条件またはグループを使用しない)。PCA の適用後はデータの変動の 74 % を主成分 1 (PC1) によって説明できるようになり、ローマカミツレ、ドイツカミツレ、および菊花が良好に分離されました (図 2A)。さらに 22 % の変動が PC2 で検出され、菊花がドイツカミツレからさらに分離されました。菊花サンプルは PC3 内では大きい変動がありますが、主成分は変動全体の 1.5 % を占めるだけでした。したがって、PCA を使用して、データクラスタを視覚的に示し、品

質管理の手段として異常値を排除できます。このデータセットをフィルタリングで処理し、次に PCA QA/QC 分析を使用して、サンプル予測モデルを作成しました。

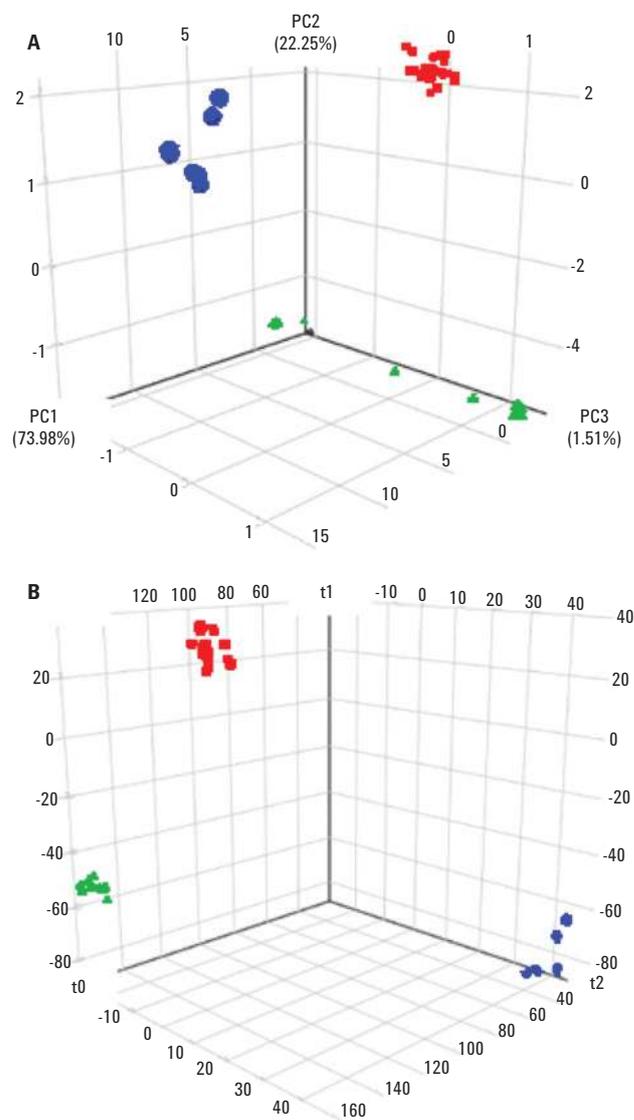


図 2. スコアプロットは (■) ドイツカミツレ、(●) ローマカミツレおよび (▲) 菊花。(A) PCA。(B) PLS-DA。

## クラス予測モデル

サンプル予測モデルを構築するためにいくつかの手法を開発しました。MPP ソフトウェアは、サンプル予測モデルを構築するための 5 つのアルゴリズム、PLS-DA、サポートベクターマシン (SVM)、単純ベイズ (NB)、決定木 (DT)、およびニューラルネットワーク (NN) が利用できます。PLS-DA は回帰に基づく確立された方法で、特に測定された変数よりもサンプルの数が少ない場合に適用されます。観測値グループ間の区分を際立たせるため、またクラス間の分離を最大化するために頻繁に用いられます。この実験では、カモミールの分類と識別用の統計モデルを構築するためには PLS-DA が最良のアルゴリズムであることがわかりました。

予測モデルを構築するための最初のステップは、15 種類のドイツカミツレ、8 種類の菊花、4 種類のローマカミツレサンプルを含む認証済み植物サンプルのデータを使用してモデルの構築をすることです。モデルの構築に使用した 6 つの認証済みサンプルと 6 つの市販サンプルを検証に使用しました。これは正しい統計手順です (K-分割交差検証) [5]。

このモデルを使用したサンプルの分類の結果を表 2 にまとめます。モデルの構築および検証の際に正しく分類されるサンプルの割合を、それぞれ認識能力および予測能力ごとに示します。検証手順を使用して、5 つのアルゴリズムから生成された最も適切なモデルを選択しました。モデルの構築と検証の結果の違いはオーバーフィッティングを示すことがあります。この結果は、モデルの構築および検証中に間違っ分類されたサンプルがないことを示しています。3 種類のカモミールは良好に分離されました。

表 2. カモミール分類モデルの構築および検証の結果

	ドイツカミツレ	ローマカミツレ	菊花	精度 (%)
<b>モデルの構築</b>				
ドイツカミツレ	15	0	0	100.0
ローマカミツレ	0	4	0	100.0
菊花	0	0	8	100.0
認識能力 (%)	-	-	-	100.0
<b>モデルの検証</b>				
ドイツカミツレ	4	0	0	100.0
ローマカミツレ	0	4	0	100.0
菊花	0	0	4	100.0
予測能力 (%)	-	-	-	100.0

図 2B に示す PLS-DA t-スコアプロットは、ソフトウェアのティーチング支援機能が使え、モデルをデータに「フィット」させる条件を使用しています。t-スコアプロットは、各グループのサンプルがどの程度良好に分離されているかを視覚的に表します。PCA と PLS-DA の両方のスコアプロットは類似していますが、PCA はデータの構造を明らかにし、PLS-DA はモデルがどの程度データにフィットしているかを示します。図 2B は良好な分離を示しており (特に菊花は密にまとまっている)、このモデルが 3 種類のカモミールを予測できることを示しています。

## カモミールサンプルの分類

35 種類の固体サンプルと 11 種類のカモミールエッセンシャルオイルを、検証済みの PLS-DA モデルを使用して分類し、判別しました。固体サンプルにはカモミールの花、抽出物、茶、花および葉、ハーブカモミールを含むサプリメント、およびフルーツティーが含まれます。予測結果を「信頼度尺度」の形式で表しました (表 3)。0.7 を超える範囲の信頼度尺度は、サンプルが指定された種類のカモミールに所属することを高いレベルの確実性で示し、0.5~0.7 の信頼度尺度は問題があるサンプルの分類を示します。0.5 未満の信頼度尺度は、サンプルの間違った分類や処理、偽和物混入、または不純物の可能性を示します。信頼度尺度が 0.6 未満のすべてのサンプルをさらなる調査の対象として選択しました。いくつかのエッセンシャルオイルサンプルをローマカミツレ由来のものとして分類しました。ただし、市販の固体サンプルには、このモデルによってローマカミツレを含むものとして分類されたものはありませんでした。

モデル予測の結果は、異常値であるサンプル 2061、3998、9384、および 9425 を除きラベルと一致していました。不明なラベルが付いた米国のすべてのカモミールティーまたは抽出物がドイツカミツレと同定されたため、この結果は、米国市場で使用されている主な種類のカモミールがドイツカミツレであることを示しています。これに対し、中国から購入したすべてのカモミールサンプルは菊花カモミールと同定されました。エッセンシャルオイルは蒸気蒸留により取得し、固体サンプルはヘキサンで抽出したにもかかわらず、PLS-DA モデルはすべてのカモミールエッセンシャルオイルサンプルについて優れた予測結果を示しました (表 3)。

表 3. 市販品およびエッセンシャルオイルの PLS-DA サンプルクラス予測モデルから得られたカモミールの種類の予測結果

番号	NCPR アクセッション コード	ラベルからの製品情報	予測	信頼度尺度
<b>食品メーカー、薬局、およびオンラインで購入した固形の市販サンプル</b>				
1	2061	ローマカミツレ	ドイツカミツレ	0.47
2	3670	カモミールの花	ドイツカミツレ	0.92
3	3998	カモミール抽出物	ドイツカミツレ	0.53
4	4903	カモミール粉末	ドイツカミツレ	0.90
5	5770	カモミール粉末	ドイツカミツレ	0.93
6	7359	カモミール粉末	ドイツカミツレ	0.81
7	9357	カモミールの花	ドイツカミツレ	0.82
8	9359	カモミールの花	ドイツカミツレ	0.84
9	9361	カモミールの花および葉のサプリメント	ドイツカミツレ	0.76
10	9362	カモミールの花	ドイツカミツレ	0.84
11	9364	カモミールの花	ドイツカミツレ	0.92
12	9365	カモミールの花 (バルク)、ドイツカミツレ	ドイツカミツレ	0.65
13	9367	カモミールの花、ハーブサプリメント	ドイツカミツレ	0.68
14	9382	カモミールオーガニックティー (葉および花)	ドイツカミツレ	0.94
15	9383	ハーブカモミールおよびフルーツティー (ローズヒップ、カモミール、オレンジピール、レモンピール、レモンマートル)	ドイツカミツレ	0.72
16	9384	カモミールハーブティー	ドイツカミツレ	0.58
17	9385	オーガニックティー	ドイツカミツレ	0.81
18	9386	カモミールティー	ドイツカミツレ	0.75
19	9387	カモミールハーブティー	ドイツカミツレ	0.91
20	9388	カモミールハーブサプリメント	ドイツカミツレ	0.89
21	9389	カモミールハーブティー	ドイツカミツレ	0.61
22	9390	カモミールハーブティー	ドイツカミツレ	0.92
23	9391	カモミールハーブティー	ドイツカミツレ	0.77
24	9393	ドイツカミツレの花全体	ドイツカミツレ	0.87
25	9422	カモミールハーブサプリメント	菊花	0.80
26	9423	カモミールハーブサプリメント	菊花	0.83
27	9424	カモミールハーブサプリメント	菊花	0.84
28	9425	カモミールハーブサプリメント	菊花	0.60
29	9426	カモミールハーブサプリメント	菊花	0.86
30	9427	カモミールハーブサプリメント	菊花	0.78
31	9428	カモミールハーブサプリメント	菊花	0.82
32	9429	カモミールハーブサプリメント	菊花	0.81
33	9430	カモミールハーブサプリメント	菊花	0.77
34	9431	カモミールハーブサプリメント	菊花	0.72
35	9432	カモミールハーブサプリメント	菊花	0.99

次のページに続く

表 3. 市販品およびエッセンシャルオイルの PLS-DA サンプルクラス予測モデルから得られたカモミールの種類の予測結果 (続き)

番号	NCPR アクセッション コード	ラベルからの製品情報	予測	信頼度尺度
<b>植物サンプル蒸気蒸留によって得られた、またはさまざまな場所から購入したカモミールエッセンシャルオイル</b>				
1	9254E	カモミールオイル (Anthemis nobilis)、植物から蒸気蒸留 (9254)	ローマカミツレ	0.72
2	9359E	カモミールオイル (Matricaria recutita)、植物から蒸気蒸留 (9359)	ドイツカミツレ	0.76
3	9362E	カモミールオイル (Matricaria recutita)、植物から蒸気蒸留 (9362)	ドイツカミツレ	0.71
4	11577E	カモミールオイル (Anthemis nobilis)、植物から蒸気蒸留 (11577)	ローマカミツレ	0.70
5	11680E	カモミールオイル (Matricaria recutita)、植物から蒸気蒸留 (11680)	ドイツカミツレ	0.77
6	11681E	カモミールオイル (Matricaria recutita)、植物から蒸気蒸留 (11681)	ドイツカミツレ	0.89
7	9368	カモミールエッセンシャルオイル (Anthemis nobilis)	ローマカミツレ	0.70
8	9369	カモミールオイル、ドイツカミツレ	ドイツカミツレ	0.91
9	9370	カモミールエッセンシャルオイル (Anthemis nobilis)	ローマカミツレ	0.76
10	9380	カモミールエッセンシャルオイル (Chamaemelum nobilis)	ローマカミツレ	0.69
11	9381	ローマカミツレエッセンシャルオイル	ローマカミツレ	0.73

このモデルでは、それぞれが3種類の各カモミールに固有のエンティティからなる3つのグループを使用しました。この3つのグループと、これらのオーバーラップが最小限であることを示すベン図を図3に示します。各種類のカモミールに含まれるこれらのエンティティに対応する主要化合物を同定し、表4に示しました。これらの化合物は、カモミールの成分として以前の文献で報告されている化合物と一致していました。

このタイプのモデルは、多くの天然物やサプリメントの品質管理に非常に有効です。サンプルを自動的にクラス分類することができます。

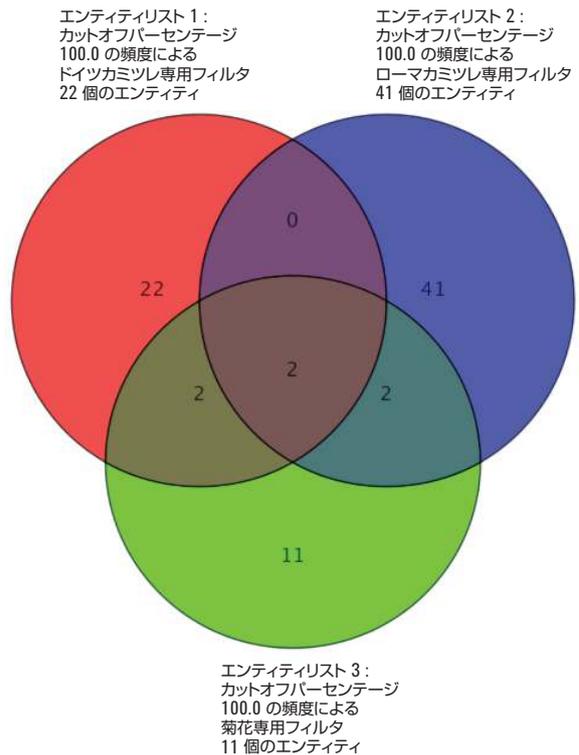


図 3. カモミールサンプルのベン図

表 4. カモミールのクラス予測モデルの構成で一時的に同定された主要なマーカー化合物

エンティティ	<i>m/z</i>	<i>t<sub>R</sub></i> (分)	化合物の同定*	分子量	CAS 番号
<b>ローマカミツレ</b>					
1	71.0	15.10	イソブチル酸、イソブチルエステル <sup>a</sup>	144	97-85-8
2	93.0	16.43	1 <i>R</i> - $\alpha$ -ピネン <sup>a, b</sup>	136	7785-70-8
3	71.0	23.42	イソブチル酸、2-メチルブチルエステル <sup>a</sup>	158	2445-69-4
4	55.0、83.0	26.64	2-ブチル酸、3-メチル-, ブチルエステル <sup>a</sup>	156	54056-51-8
5	70.0	34.33	trans-(-)-ピノカルベオール <sup>a</sup>	152	547-61-5
6	55.0、83.0、100.0	36.01	2-ブチル酸、3-メチル-, 3-メチルブチルエステル <sup>a</sup>	170	56922-73-7
7	81.0	36.58	ピノカルボン	150	30460-92-5
8	83.0	39.75	3-メチル-2-ブテン酸、3-メチルブタ-2-エニルエステル	168	299309
9	100.0	44.75	2-ブチル酸、3-メチル-, ヘキサデシルエステル <sup>a</sup>	324	60129-26-2
<b>ドイツカミツレ</b>					
1	205.0	66.94	スパツレノール <sup>a, b</sup>	220	77171-55-2
2	143.0	71.43	$\alpha$ -ピサポロールオキシド B <sup>a, b</sup>	238	26184-88-3
3	93.0、141.0	73.04	$\alpha$ -ピサポロール <sup>a, b</sup>	222	515-69-5
4	176.0	75.07	クマリン、7-メトキシ-	176	531-59-9
5	143.0	76.07	ピサポロールオキシド A <sup>a, b</sup>	238	22567-36-8
6	143.0	81.36	$\alpha$ -ピサポロールオキシド A 誘導体 <sup>c</sup>		
7	143.0	82.30	$\alpha$ -ピサポロールオキシド A 誘導体 <sup>c</sup>		
8	128.0	83.70	E-1,6-ジオキサスピロ[4.4]non-3-エン、2-(2,4-ヘキサジイニリデン)- <sup>b</sup>	200	50257-98-2
9	200.0	84.10	Z-1,6-ジオキサスピロ[4.4]non-3-エン、2-(2,4-ヘキサジイニリデン)- <sup>b</sup>	200	4575-53-5
<b>菊花</b>					
1	95.0	36.82	ボルネオール <sup>b</sup>	154	10385-78-1
2	132.0	61.06	$\alpha$ -クルクメン <sup>a</sup>	202	644-30-4
3	91.0	67.27	カリオフィレンオキシド <sup>a</sup>	220	1139-30-6
4	105.0、121.0	69.75	アロアロマデンドレンオキシド <sup>a</sup>	220	156128
5	204.0	71.69	オイデスマン-7(11)-エン-4 - オール <sup>a</sup>	222	473-04-1
6	69.0	79.61	イソアロアロマデンドレンエポキシド	220	159366
7	109.0	85.38	シクロプロパンメタノール、 $\alpha$ ,2-ジメチル-2-(4-メチル-3-ペンテニル)-、[1 $\alpha$ ( <i>R'</i> ),2 $\alpha$ ]- <sup>c</sup>	182	121959-70-4

\* データベース検索により同定。

<sup>a</sup> 相対リテンションインデックスと文献の比較により同定。

<sup>b</sup> 参照標準物質により同定。

<sup>c</sup> データベースとの一致率により同定。

## 結論

Agilent 7890 GC および Agilent 5975C GC/MSD を使用したノンターゲット GC/MS 分析によって、カモミールなどの天然物を分類し、判別するために必要な情報豊富なデータが得られます。Agilent MSD Productivity ChemStation および Agilent Mass Profiler Professional ソフトウェアを使用すると、自動的なデータマイニングとデータ処理により最も特徴的なマーカー化合物を検出し、市販品の原料が主な 3 種類のカモミールのどれであるかを予測するための実用性ある正確な PLS 判別予測モデルを構築できます。このモデルは、カモミール由来の製品を判別することで、その品質、安全性、効能を向上するとともに、偽和物混入や代用物の使用を検出することができます。

## 参考文献

1. D.L.McKay and J.B.Blumberg “A review of the bioactivity and potential health benefits of chamomile tea (*Matricaria recutita* L.)” *Phytotherapy Research* **20**, 519–530 (2006).
2. S. Petronilho, *et al.* “*In vitro* and *in vivo* studies of natural products:A challenge for their valuation.The case study of chamomile (*Matricaria recutita* L.)” *Industrial Crops and Products* **40**, 1–12 (2012).
3. G.E.Buono-Core, *et al.* “Structural elucidation of bioactive principles in floral extracts of German chamomile (*Matricaria recutita* L.)” *Journal of the Chilean Chemical Society* **56**, 549–553 (2011).
4. M. Wang, *et al.* “An integrated approach utilising chemometrics and GC/MS for classification of chamomile flowers, essential oils and commercial products” *Food Chem* **152**, 391–398 (2014).
5. L.A.Berrueta, R.M.Alonso-Salces, K. Heberger “Supervised pattern recognition in food analysis” *J. Chromatogr A* **1158**, 196–214 (2007).

## 詳細情報

これらのデータは一般的な結果を示したものです。アジレントの製品とサービスの詳細については、アジレントの Web サイト ([www.agilent.com/chem/jp](http://www.agilent.com/chem/jp)) をご覧ください。

[www.agilent.com/chem/jp](http://www.agilent.com/chem/jp)

アジレントは、本文書に誤りが発見された場合、また、本文書の使用により付随的または間接的に生じる損害について一切免責とさせていただきます。

本資料に記載の情報、説明、製品仕様等は予告なしに変更されることがあります。

アジレント・テクノロジー株式会社

© Agilent Technologies, Inc. 2014

Printed in Japan

February 17, 2014

5991-3969JAJP



**Agilent Technologies**