

図1 トマトジュースの分析結果 (TIC)
茶：サンプル1、青：サンプル2、ピンク：サンプル3

■多変量解析

AnalyzerPro (SpectralWorks社) は、当社GC-MSで取得したデータの直接読み込みから、デコンボリューション、ピーク検出、ライブラリ検索、アラインメントを行い、サンプル間の差を比較することが出来るソフトウェアです。多変量解析には、主成分分析 (PCA) と、2群間比較用に Volcano Plotを行うことができ、統計的に有意な差のある成分を探索することが可能です。

AnalyzerProによる解析には、各サンプルごとに3回取得したデータを使用し、検出された化合物の強度はp-プロモルデオロベンゼンを内部標準物質として正規化しました。使用したトマトジュースはサンプル1~3としました。サンプル1のみ食塩が添加されており、サンプル3は品種を特長として販売されているプレミアム系商品でした。

3種類のトマトジュースから得られた結果を用いて主成分分析 (Principal Component Analysis : PCA) を行いました。主成分分析には、少なくとも1つのサンプルにおいて、必ず検出された成分を利用することを条件として解析を行いました。主成分分析のScore Plot (図3) 及びLoading Plot (図4) の結果をそれぞれ示します。第一主成分 (横軸) が58.5%、第二主成分が (縦軸) 16.2%であり、各サンプルは明確に分離していることから、それぞれのサンプルは区別できることが確認されました。

Loading Plotにおいて第一主成分が正の成分は、サンプル3に多く含まれる傾向にあり、第一主成分が負の成分ではサンプル1と2に多い傾向にあります。正の成分に着目すると、サンプル3ではフラン類やテルペン類など、多くの成分が他の2つのサンプルよりも多く含まれている傾向にあることが示唆されました。負の成分については、Benzyl nitrileなどが確認されました。

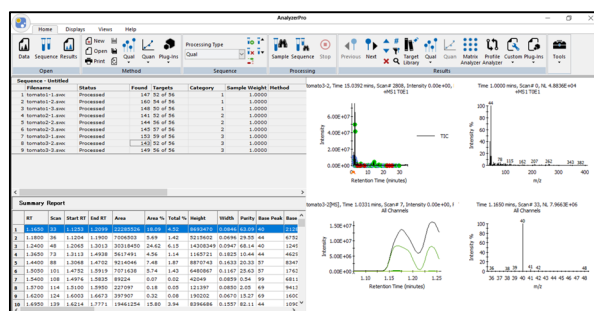


図2 AnalyzerPro(Ver. 6.0)の解析画面

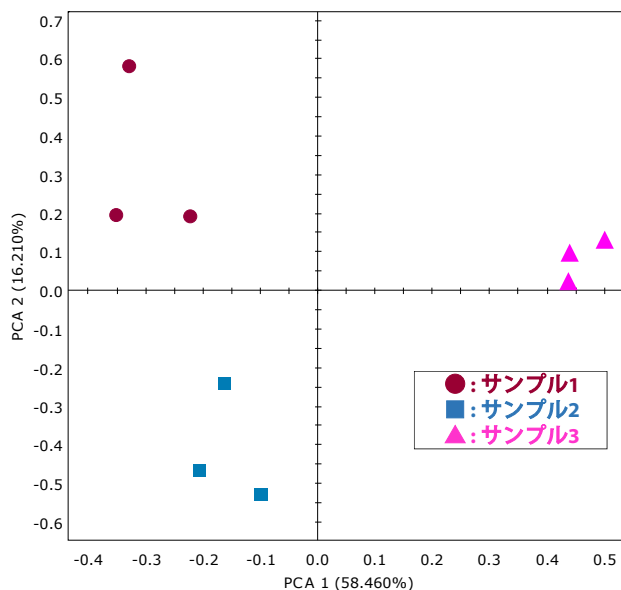


図3 主成分分析 (PCA) Score Plot

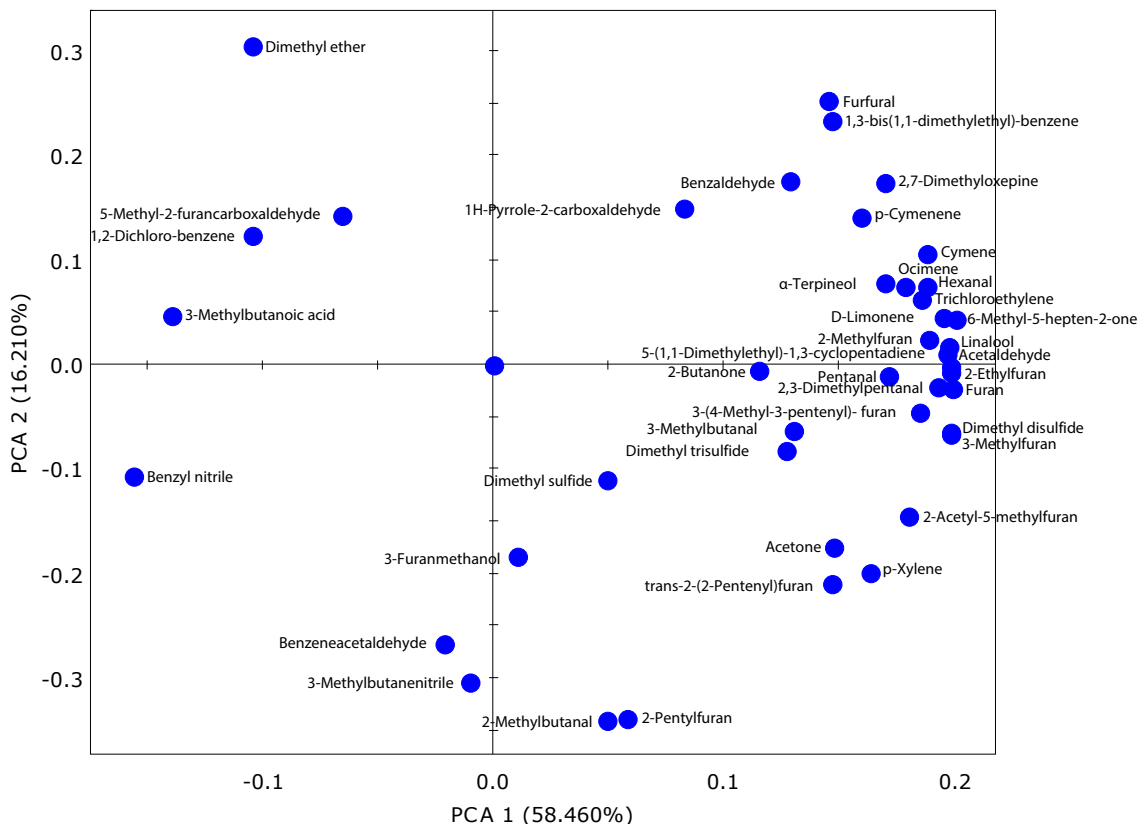


図4 主成分分析 (PCA) Loading Plot

Loading Plotでは、サンプル3の影響が強く出ているため、それぞれのサンプルの差を詳細に確認するために、Volcano Plotによる2群比較を行いました。Volcano Plotでは、各サンプルの平均面積値の除算とt検定により、差が大きくかつ統計的に有意な差がある成分を見つけることが出来ます。

まず、主成分分析の第一主成分では共に負に分布したサンプル1とサンプル2の比較を行った結果を示します (図5)。

緑色のプロットはp-value < 0.05の成分で、灰色でプロットされているものは、p-value > 0.05の成分です。

p > 0.05から、アルデヒド類やテルペン類を始めとした多くの成分に有意な差があまりないことが示唆されました。

p < 0.05の成分は甘い香りを有するフラン類で、それらはサンプル2に多い傾向が示唆されましたが、顕著な差は見られませんでした。

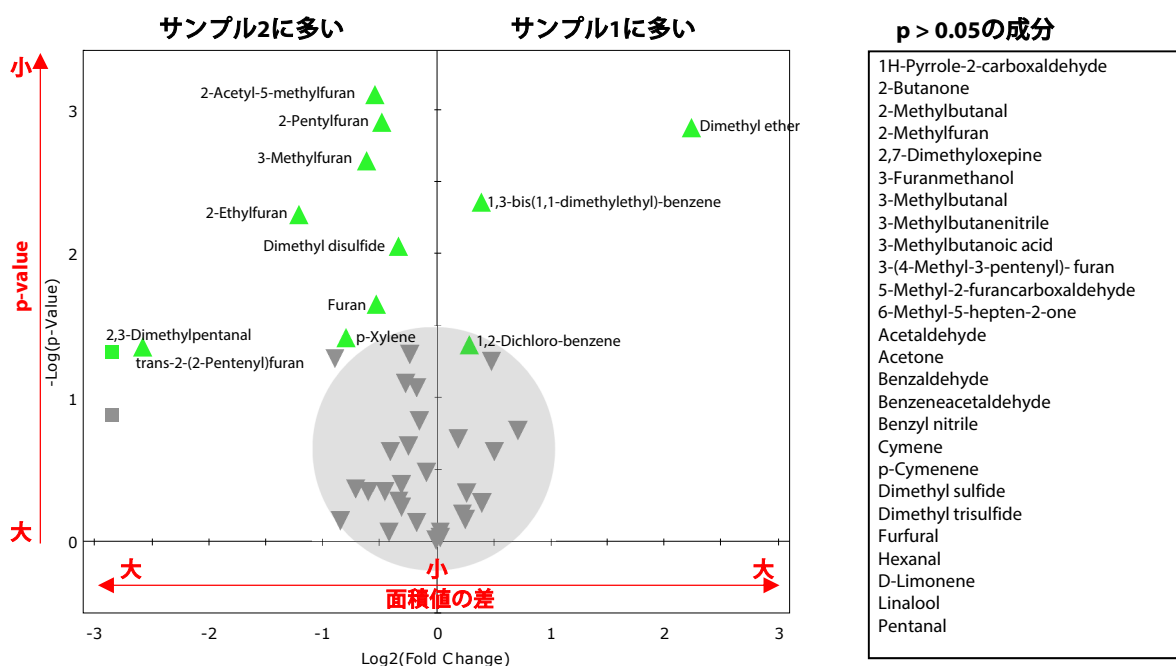
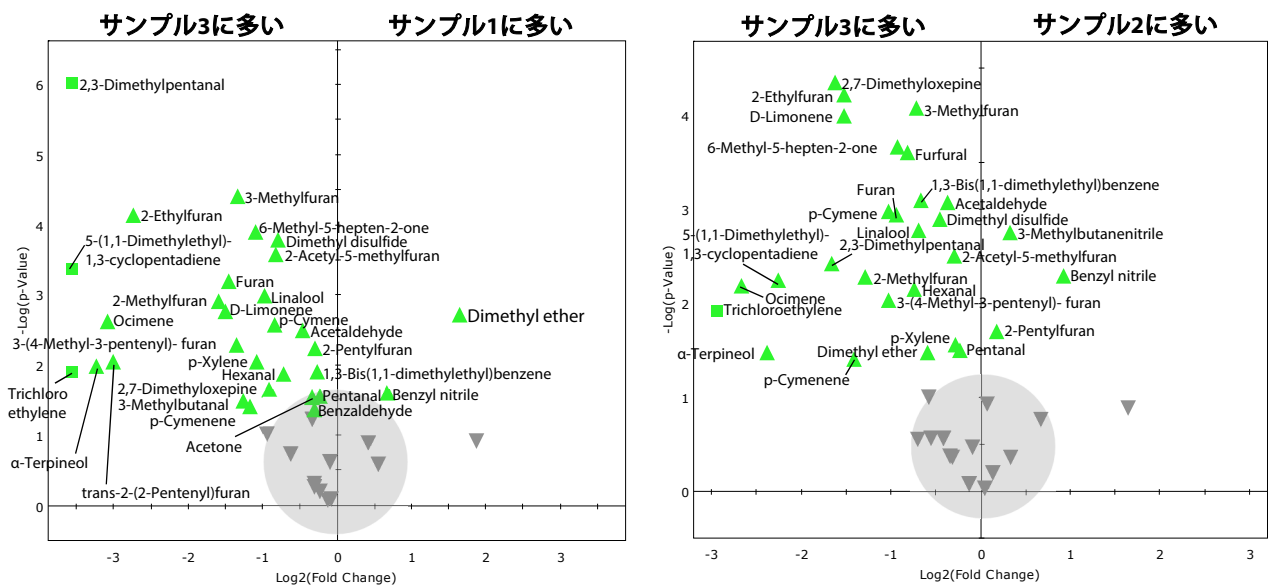


図5 Volcano Plotによる2群比較 (サンプル1と2)
(緑色: p<0.05、灰色: p>0.05、△、▽: 両方のサンプルに含まれる。□: 一方のサンプルに含まれる。)



p > 0.05の成分

1H-Pyrrole-2-carboxaldehyde	Benzeneacetaldehyde
1,2-Dichloro-benzene	Dimethyl sulfide
2-Methylbutanal	Dimethyl trisulfide
2-Butanone	3-Methylbutanenitrile
3-Methylbutanoic acid	Furfural
3-Furanmethanol	
5-Methyl-2-furancarboxaldehyde	

p > 0.05の成分

1H-Pyrrole-2-carboxaldehyde	Benzeneacetaldehyde
1,2-Dichloro-benzene	Dimethyl sulfide
2-Methylbutanal	Dimethyl trisulfide
2-Butanone	3-Methylbutanal
3-Methylbutanoic acid	Acetone
3-Furanmethanol	Benzaldehyde
5-Methyl-2-furancarboxaldehyde	trans-2-(2-Pentenyl)furan

図6 Volcano Plotによる2群比較
 左：サンプル1とサンプル3の比較。右：サンプル2とサンプル3の比較
 (緑色：p<0.05、灰色：p>0.05、△、▽：両方のサンプルに含まれる。□：一方のサンプルに含まれる。)

またサンプル1と3及び、サンプル2と3を比較した結果を図6に示します。主成分分析の結果と同じく、サンプル3は多くの成分が他の2つのサンプルよりも多く含まれている傾向にあることが示唆されました。p < 0.05の成分のうち、面積値の差が大きい成分に着目すると、D-Limoneneを始めとしたモノテルペン類やフラン類が多く含まれている傾向にありました。モノテルペン類は香り立ちであるトップノートで、印象の強い爽やかな香りに寄与することが知られています。

■まとめ

HSによる香気成分の捕集と、AnalyzerProによるノンターゲットな多変量解析により、トマトジュースの製品間で特徴的な成分を探索することが出来ました。品種・製造方法の違いが香気成分に与える影響について客観的に評価することができます。

GCMS、GCMS-QPは、株式会社島津製作所の日本およびその他の国における商標です。
 AnalyzerProはSpectralWorks Ltd.の日本およびその他の国における商標です。
 Stabilwaxは、Restek Corporationの米国およびその他の国における商標または登録商標です。
 TenaxはBuchen B.V.の商標です。

株式会社 島津製作所 分析計測事業部
 グローバルアプリケーション開発センター

初版発行：2020年11月

島津コールセンター ☎ 0120-131691

本文中に記載されている会社名および製品名は、各社の商標および登録商標です。
 本文中では「TM」、「®」を明記していません。

改訂版は会員制サイト Solutions Navigator で閲覧できます。
<https://solutions.shimadzu.co.jp/solnavi/solnavi.htm>
 閲覧には、会員制情報サービス Shim-Solutions Club に登録してください。
<https://solutions.shimadzu.co.jp/>

本資料は発行時の情報に基づいて作成されており、予告なく改訂することがあります。

© Shimadzu Corporation, 2020