

Application News

No.C134A

LC/MS
Liquid Chromatography Mass Spectrometry

5種類のビール系飲料の多成分解析評価

Classification of Five Types of Beer by Multi-Component Analysis

これまで食品の品質を定量的に評価する手法としては、風味や味覚といった要素を官能試験で数値化する方法が広く行われてきました。最近では、食品中の含有成分を網羅的に解析するメタボロミクスデータを官能試験の分析結果と組み合わせることで、より多くの情報量を入力しようとする試みも行われています。また多岐にわたる含有成分の違いを見つけ出すためには、網羅的な分析データに対して多変量解析を組み合わせていることが、有効な選択肢となります。このような多変量解析とメタボロミクスとの組み合わせは、品質評価や品質改良、さらには優れた機能性食品の開発への応用にも期待がもたれています。本稿では、5種類の市販ビール（2種類のラガービール：ブランドAとブランドB、エールビール、発泡酒、ノンアルコールビール）を試料として、一次代謝物メソッドパッケージを用いたトリプル四重極型質量分析装置（LCMS-8060）による一斉分析を行い、得られた分析データセットに対して Traverse MS™ ソフトウェアによる主成分分析を行いました。その結果、5種類のビールは含有成分の違いにより分類されるとともに、各ビールを特徴づける成分が確認されました。さらに階層的クラスター解析を実施することで、これら5種類のビールがどのように分類されるかを評価しました。

T. Hattori T. Nakanishi

Table 1 分析条件
Analytical Conditions
LC 分析条件

Column	: RP column
Mobile Phase A	: 0.1 % Formic acid - Water
Mobile Phase B	: 0.1 % Formic acid - Acetonitrile
Flow Rate	: 0.25 mL/min
Mode	: Gradient elution

MS 分析条件

Ionization Method	: ESI(+)/(-)
Nebulizing Gas Flow	: 2 L/min
Heating Gas Flow	: 10 L/min
Drying Gas Flow	: 10 L/min
Probe Voltage	: 4 kV(+)/-3 kV(-)
Interface Temperature	: 300 °C
DL Temperature	: 250 °C
Block Heater Temperature	: 400 °C

■ ビールの試料調製および分析

Sample Preparation and Analysis of Beer

脱気したビールの 0.2 mL を試料として、内部標準物質の添加後に分子量カットフィルターによる限外濾過を行いました。濾液を回収して 200 倍に希釈した後、LC/MS による一斉分析を行いました。LC/MS の分析は、一次代謝物メソッドパッケージの分析条件に従って行いました。その分析条件を Table 1 に示します。また 5 種類のビールのうち、ラガービール A、発泡酒、ノンアルコールビールを試料とした際の MRM クロマトグラムを Fig. 1 に示します。ここに示すように、分析対象であるアミノ酸をはじめとするさまざまなビール中成分が、各ビールによって大きく異なっていることがわかります。

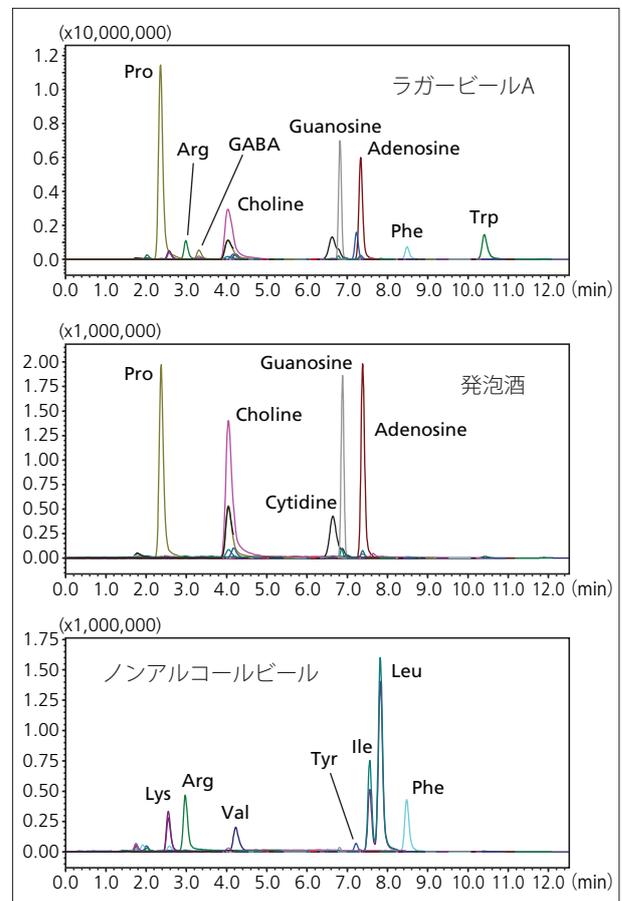


Fig. 1 3種類のビールのMRMクロマトグラム
MRM Chromatograms of Three Types of Beer

■ Traverse MS™ ソフトウェアによる多変量解析

Multivariate Analysis by Traverse MS™ Software

次に各成分の内部標準物質に対する面積比（58 成分）を用いて、5 種類のビールに対する主成分分析（Principal Component Analysis）を Traverse MS™ ソフトウェアによって行いました。各ビール中に含まれる成分量の違いを反映した主成分分析の結果が Fig. 2 です。Fig. 2 では Score plot と Loading plot の結果をそれぞれ示しています。Score plot の結果からは、5 種類のビールが十分に分離していることが確認されました。また Loading plot からは、それぞれのビールに含まれる特徴的な成分を特定することができました。成分の違いとして、いくつかのアミノ酸およびヌクレオシドが特に顕著であることが確認されました。

次に、検出された成分の面積比を用いて 5 種類のビールに対する階層的クラスター解析（Hierarchical Clustering Analysis）を Traverse MS™ ソフトウェアにて実施しました。その結果を Fig. 3 に示します。ここではサンプル間の面積比正規化を Autoscaling により行いました。Fig. 3 に示されるように、ラガービールとエールビールが比較的近い集団として分類されており、発泡酒とノンアルコールビールが近いカテゴリーとして分類されています。階層的クラスター解析を行うことで、各ビールの成分による類似度を視覚的に表示することができます。このように食品中成分を網羅的に分析することで、どのような成分が食品の品質や機能に影響しているかを、多変量解析と組み合わせることでより簡単に評価できるようになります。このような網羅的な一斉分析法と多変量解析との組み合わせは、今後の食品の品質評価において、ますます拡がりを見せていくことが期待されます。

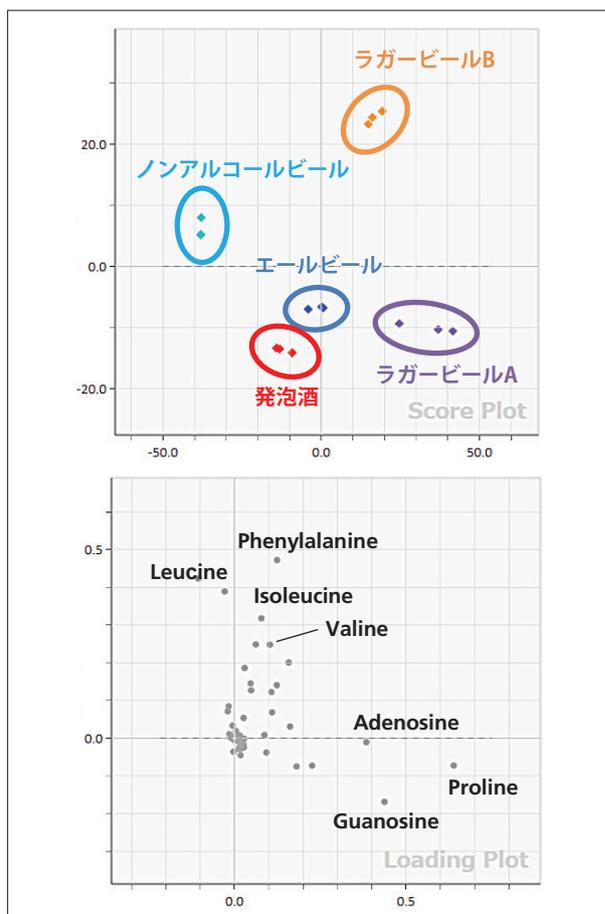


Fig. 2 5 種類のビールの主成分分析
Principal Component Analysis of Five Types of Beer

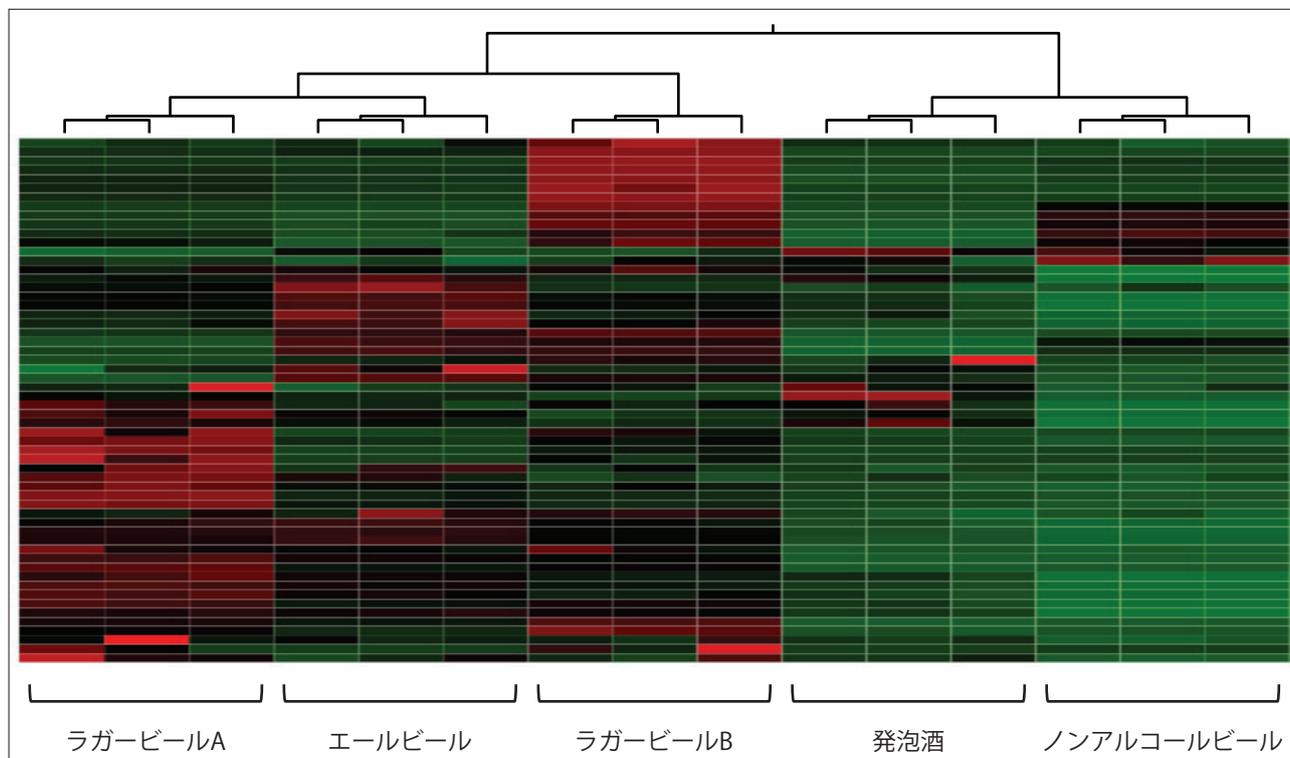


Fig. 3 5 種類のビールの階層的クラスター解析
Hierarchical Clustering Analysis of Five Types of Beer

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

A改訂版発行：2016年7月
初版発行：2016年4月
島津コールセンター ☎ 0120-131691
(075)813-1691

※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。
改訂版は下記の会員制 Web Solutions Navigator で閲覧できます。
<https://solutions.shimadzu.co.jp/solnavi/solnavi.htm>

会員制情報サービス「Shim-Solutions Club」にご登録ください。
<https://solutions.shimadzu.co.jp/>
会員制Webの閲覧だけでなく、いろいろな情報サービスが受けられます。