

## Application News

トリプル四重極型ガスクロマトグラフ質量分析計 GCMS-TQ™ 8040 NX  
エネルギー分散型蛍光X線分析装置 EDX-7200

# GC/MSとEDXによる2種類のコーヒー豆製品の類似度評価

中川 裕貴、守屋 宏一

### ユーザーベネフィット

- ◆ Smart Aroma Database™を用いることで、Scanモードでは検出困難な低濃度の香気成分をMRMモードによる高感度測定で検出できます。
- ◆ EDXは、そのままもしくは簡単な前処理で食品中のミネラルの分析ができます。

### ■はじめに

コーヒーは飲み物として重要な役割を果たしています。コーヒー豆の生産は、主にブラジルやコロンビアなどの南アメリカ諸国で行われています。これらの国々は温暖な気候と豊富な降水量に恵まれた環境で、高品質なコーヒー豆を栽培しています。一方で、コーヒーの消費国は生産国とは異なります。欧米諸国では、コーヒー文化が根付いており、多様なコーヒー製品（深煎りやラテアートなど）が楽しめます。地理的や文化的な違いを超えて、生産国や消費国の両方でコーヒー豆の品質を保証することは消費者にとって重要です。

コーヒー豆の品質向上と安全性を確保するためには、豆の食感、味、風味だけでなく、元素分析の重要性を再認識する必要があります。コーヒー豆に含まれる元素は微量ですが、その影響は小さくありません。例えば、コーヒー豆に含まれる鉄分が多いと、酸化しやすくなり、風味が劣化する可能性があります。また、亜鉛や銅が過剰に含まれていると、摂取することで身体に悪影響を及ぼすことがあります。さらに、有毒性のあるカドミウムは土壌や水からコーヒーの木のような植物に吸収されやすく、摂取した際に体内に蓄積されると健康リスクを引き起こす可能性があります。また味や風味の観点では、金属容器や調理器具がコーヒー豆と接触する際、金属イオンが溶け出し、コーヒーの風味や品質を変化させる可能性があります。このため、コーヒー豆の含有元素を定期的に検査し、安全基準を満たしているかを確認することが重要です。

本報では2種類の市販のコーヒー豆をエネルギー分散型蛍光X線分析装置EDX-7200と、AOC-6000Plusを搭載したガスクロマトグラフ質量分析計GCMS-TQ8040 NXを用いて測定した例をご紹介します（図1）。

### ■実験

2種類の市販コーヒー豆を用意し、風味測定はSmart Aroma Databaseに沿ってSPMEにより476成分、味測定はSmart Metabolites Database™ Ver.2と前処理ハンドブックに沿ってアミノ酸、脂肪酸、有機酸、糖など502成分をGC/MSで測定しました。元素分析は表1記載の条件でEDXで実施し、FP法で定量値を算出しました。

各測定をn=1で実施したため、解析では主成分分析やボルケーノプロットによるマーカー探索ではなく、類似度などを算出しました。

表1 EDXの分析条件

元素	: $^{11}\text{Na}$ - $^{92}\text{U}$
分析グループ	: 定性定量
検出器	: SDD
X線管球	: Rhターゲット
管電圧	: 15 [kV] (Na-S)、(Cl-V) 50 [kV] (Cr-Fe)、(Ni-Nb, As, Pb)、(Mo-Xe)
管電流	: Auto [μA]
コリメータ	: 10 [mmφ]
1次フィルタ	: なし (Na-S)、#2 (Cl-V)、#3 (Cr-Fe)、 #4 (Ni-Nb, As, Pb)、#1 (Mo-Xe)
雰囲気	: ヘリウム
積分時間	: 100 [秒] × 5 (Na-S)、(Cl-V) (Cr-Fe)、(Ni-Nb, As, Pb)、(Mo-Xe)
デッドタイム	: 最大30 [%]

### ■結果

味、風味、元素分析すべてにおいて、コーヒー豆AとBで同等の化合物や元素が検出されました（表2）。一方で、コーヒー豆Bは味、風味ともに10倍以上の面積差で高く検出された成分が多いことがわかりました。

表2 測定結果

	味 (502成分)	風味 (476成分)	元素 (82元素)
Aでの検出数	235	194	14
Bでの検出数	230	188	14
Aのみで検出	15	35	0
Bのみで検出	20	24	0
Aで10倍多く検出	4	9	1
Bで10倍多く検出	21	28	0



図1 EDX-7200 (左) とGCMS-TQ™8040 NX (右)

表3 EDXの測定結果\* (ppm)

	K	Mg	S	Ca	P	Cl	Fe
コーヒー豆A	21996.3	1786.4	1384.9	1528.7	1085.6	141.2	38.8
コーヒー豆B	21270.1	1669.4	1219.4	1174.6	1069.9	164.3	37.5
	Mn	Rb	Br	Cu	Zn	Sr	Ni
コーヒー豆A	37.8	16.9	0.2	17.6	6.6	4.1	1.2
コーヒー豆B	31.4	16.4	16.1	16.0	5.5	3.0	1.4

\*CH<sub>2</sub>Oバランスとして定量計算しました。

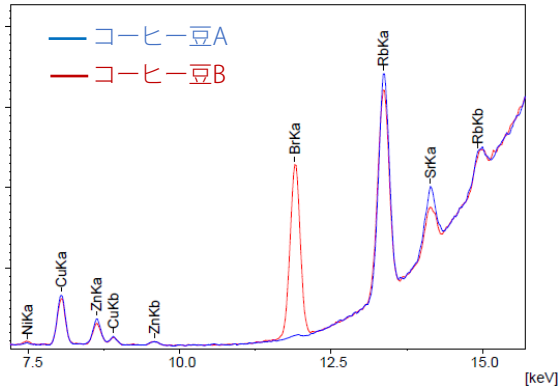


図2 臭素近傍のプロファイル重ね合わせ

検出された元素はカリウムやマグネシウム、亜鉛といったミネラルで、食の安全性に関わるヒ素や鉛、カドミウムといった有害重金属は含まれません。コーヒー豆Bで特異的に高く検出された臭素（コーヒー豆Aは0.2 ppm、Bは16.1 ppm）は味や風味に影響を及ぼす可能性が知られています（表3、図2）。臭素は元素としては刺激臭となり、有機臭素化合物としては各化合物構造で風味が異なります（例：プロモプロパンは甘い香り、ジプロモベンゼンは薬品臭など）。

$$\text{類似度} = \left[ 1 - \frac{\sum |\text{面積値}_A - \text{面積値}_B|}{\sum (\text{面積値}_A + \text{面積値}_B)} \right] \times 100$$

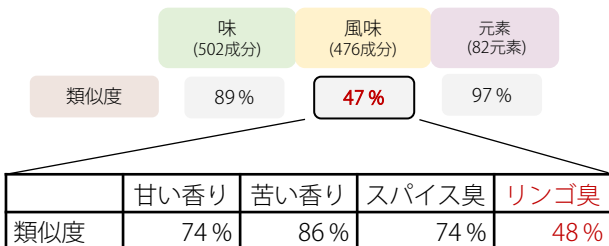


図3 コーヒー豆AとBの類似度計算

コーヒー豆AとBの類似度を図3に示す計算式で算出すると、2種類の豆の味と含有元素は類似度が高い一方で、風味の類似度が低いことがわかりました。そこでSmart Aroma Databaseに収録されている官能情報を基にクラス分け（甘い香り、苦い香りなど）し、各クラスで類似度を計算するとリンゴ臭でAとBには差異がありました。その中でも、メチル-2-メチルブチレートとイソ吉草酸メチルがコーヒー豆Aで特異的に高く検出されました（図4）。なお、今回は図3で示すにおい以外にも森林のような香りやシナモンのような香りなど様々な官能情報があるため、代表的なものみの類似度を算出しました。

メチル-2-メチルブチレート

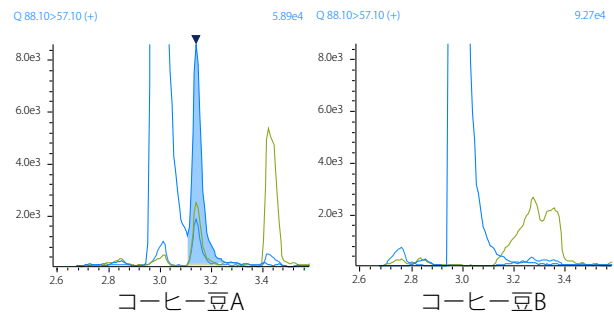


図4 風味に関するクロマトグラム例

## ■まとめ

2種類の市販コーヒー豆をGCMSとEDXで多角的に評価したところ、各検体で250弱の味成分、200弱の風味成分、14の元素を検出しました。

本報のように、n数や試料が少ない（2種類でn=1）場合、複数の変数間の関係を分析しパターンや傾向を把握する主成分分析やボルケーノプロットなどの多変量解析を実施することは困難です。しかし、データが少ない場合でも、類似度などの計算やSmart Aroma Databaseに収録されている官能情報など質的な分析を活用することで、有益な情報を得ることができます。

### <関連アプリケーション>

1. 粒子径分布測定装置とGC-MSによる野菜ジュース製品の品質評価 [Application News No.01-00691-jp](https://www.shimadzu.co.jp/application-news/01-00691-jp)

GCMS-TQ、Smart Aroma Database、Smart Metabolites Databaseは、株式会社島津製作所またはその関係会社の日本およびその他の国における商標です。

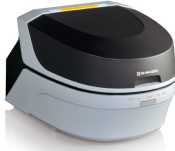
▶ アンケート

**関連製品** 一部の製品は新しいモデルにアップデートされている場合があります。



▶ GCMS-TQ™ 8040 NX

トリプル四重極型 ガスクロマトグラフ質量分析計



▶ EDX-7200

エネルギー分散型蛍光X線分析装置  
EDX-7200

## 関連分野

▶ 食品・飲料

▶ フードメタボロミクス

▶ 価格お問い合わせ

▶ 製品お問い合わせ

▶ 技術お問い合わせ

▶ その他お問い合わせ