

## Application News

ガスクロマトグラフ質量分析計 GCMS-QP™2050  
ヘッドスペースサンプラ HS-20 NX

# Smart Aroma Database™を用いた リンゴの香気成分分析

漆崎 文彩<sup>1</sup>、河添 雅弘<sup>2</sup>  
1 島津製作所、2 島津テクノロジー

### ユーザーベネフィット

- ◆ 香気成分データベースのSmart Aroma Databaseを用いることで、簡便な香気成分の定性分析が可能です。
- ◆ ヘッドスペースサンプラHS-20 NXを用いることで、生のリンゴの香気成分を高感度かつ簡便に分析できます。
- ◆ 多変量解析により、サンプル間の香気成分の差を客観的に評価できます。

### ■はじめに

果物の香気成分は、その風味や味いを決定する重要な要素の一つであり、消費者にとって果物を選ぶ際の大きな判断材料となります。香気成分は、果物の種類や品種、成熟度、生産地、栽培環境などによって異なり、これらの要因が複雑に絡み合うことで、個々の果物が持つ独特な風味が形成されます。このため、香気成分の分析は、果物の品質管理や新しい品種の開発において重要な役割を果たします。

果物の香気成分を構成する化合物は、揮発性成分や不揮発性成分を含む多様なものであり、その数は数十から数百におよぶことがあります。これらの成分は、アルコール類、エステル類、ケトン類、酸類など、さまざまな化学構造を持ち、果物の香りに寄与しています。このような香りと香気成分の関係性を客観的に評価するためには、ガスクロマトグラフィー質量分析法 (GC/MS法) が有効です。

本稿では、ガスクロマトグラフ質量分析計 GCMS-QP2050 とヘッドスペースサンプラ HS-20 NX を組み合わせて使用し (図1)、リンゴに含まれる香気成分を分析した例を紹介します。



図1 GCMS-QP™2050とHS-20 NX

### ■ 試料前処理および分析条件

市販のリンゴ3種類 (サンふじ1種類、ジョナゴールド2種類) をサンプルとして用意しました。

リンゴの皮を剥いて可食部をおろし金で擦りおろし、ヘッドスペースGCMS用の20 mL容量クランプ式バイアル瓶に各1 g、リンゴ1種につき5サンプルずつ分取して密栓しました。酸化等による成分変化を防ぐため、サンプリングはリンゴを冷やしながらか素早く行いました。

装置構成と分析条件を表1に示します。ヘッドスペースサンプラ HS-20 NX のトラップモデルでは、電子冷却トラップを内蔵しており、香気成分を濃縮した高感度な分析が可能です。水分を含むサンプルにおいても、低沸点から高沸点の化合物を濃縮して分析することができます。

表1 装置構成と分析条件

<b>装置構成</b>	
GCMS	: GCMS-QP2050
ヘッドスペースサンプラ	: HS-20 NX
カラム	: InertCap® Pure-Wax (30 m, 0.25 mm I.D., df=0.25 µm) Cat No. 1010-68142
データベース	: Smart Aroma Database
<b>HS条件</b>	
モード	: トラップ (トラップ管: TENAX®TA)
オープン温度	: 40 °C
サンプルライン温度	: 100 °C
トランスファーライン温度	: 100 °C
トラップ冷却温度	: -10 °C
トラップ加熱温度	: 280 °C
トラップ待機温度	: 25 °C
バイアル攪拌	: 5
マルチインジェクション回数	: 5
バイアル加圧用ガス圧力	: 80 kPa
ドライバージ用ガス圧力	: 60 kPa
バイアル保温時間	: 30 min
バイアル加圧時間	: 1 min
加圧平衡化時間	: 0.1 min
ロード時間	: 1 min
ロード平衡化時間	: 0.1 min
ドライバージ時間	: 1 min
注入時間	: 3 min
ニードルフラッシュ時間	: 5 min
サンプル封入量	: 1 g
<b>GC条件</b>	
キャリアガス	: He
キャリアガス制御	: 圧力
注入方法	: スプリット
スプリット比	: 10
オープン温度	: 50 °C (5 min) → (10 °C/min) → 250 °C (10分)
<b>MS条件</b>	
イオン源温度	: 200 °C
インターフェース温度	: 250 °C
イオン化法	: EI
測定モード	: スキャン ( $m/z$ 35 ~ 400)
イベント時間	: 0.3 sec

### ■ 分析結果

得られた結果をSmart Aroma Databaseを用いて解析したところ、3種のリンゴから合わせて20種の香気成分が同定されました。同定された香気成分を表2に示します。

表2 同定されたリンゴの香気成分

Ethyl acetate	Butyl 2-methyl butyrate
Propyl acetate	1-Pentanol
Butyl acetate	Hexyl acetate
Hexanal	1-Hexanol
Isobutanol	<i>trans</i> -2-Hexen-1-ol
2-Methylbutyl acetate	Hexyl butyrate
1-Butanol	Hexyl 2-methylbutanoate
Pentyl acetate	Sulcatol
<i>trans</i> -2-Hexanal	Estragole
Buthyl butyrate	alpha-Farnesene

## ■多変量解析結果

3種類のリンゴ、1種につき5サンプル(計15サンプル)を1回ずつ測定したデータを使用し、多変量解析ソフトSIMCA17®(インフォコム社)を用いて主成分分析(Principal Component Analysis: PCA)および階層的クラスタリング解析を行いました。主成分分析のスコアプロット(図2)、ローディングプロット(図3)、および階層的クラスタリングのデンドログラム(図4)をそれぞれ示します。

PCAスコアプロットより、第一主成分(横軸)の寄与率は85.6%、第二主成分の寄与率は10.2%、合計95.8%であり、リンゴの種類ごとにプロットが明確に分離していることから、3種のリンゴの香りに差異があることがわかりました。また、階層的クラスタリング解析の結果からは、ジョナゴールド(A)と(B)は香気成分の構成が比較的近いことがわかります。

ジョナゴールド(A)に相対的に多く含有される香気成分と、Smart Aroma Databaseに登録されたそれぞれの香気成分の官能情報を表3に示します。

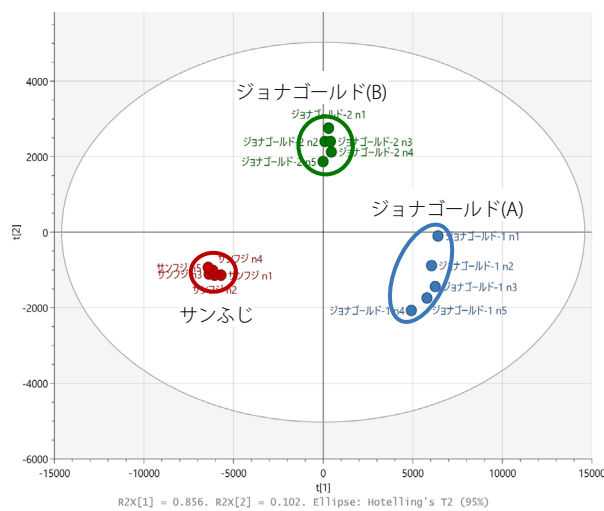


図2 PCAスコアプロット

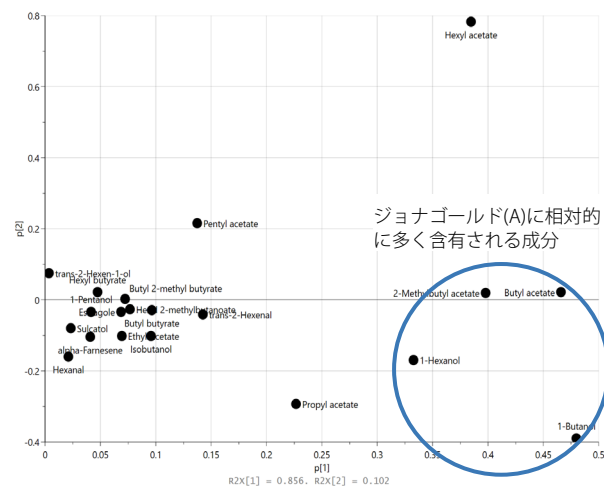


図3 PCAローディングプロット

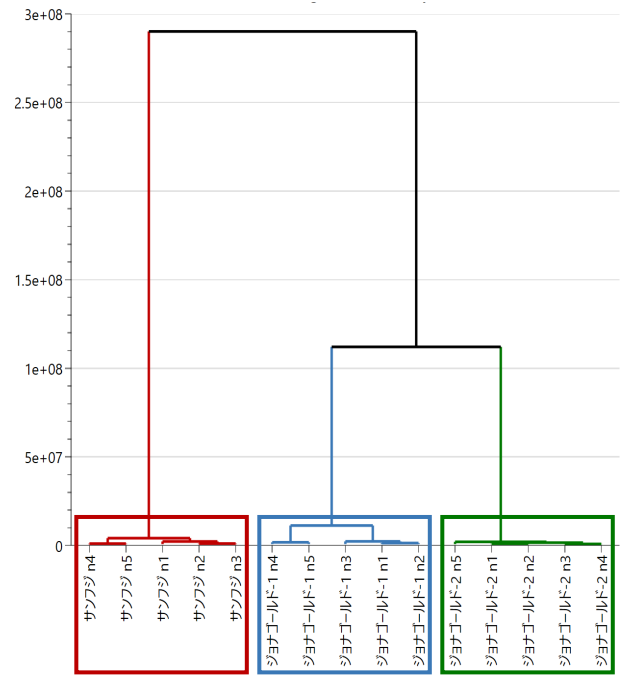


図4 階層的クラスタリングのデンドログラム

表3 ジョナゴールド(A)に相対的に多く含有される香気成分

香気成分	Smart Aroma Databaseに登録された官能情報
Butyl acetate	pear
1-Butanol	medicine, fruit
1-Hexanol	resin, flower, green
2-Methylbutyl acetate	fruit

## ■まとめ

ガスクロマトグラフ質量分析計 GCMS-QP2050を用いた市販のリンゴ3種の香気成分を分析しました。ヘッドスペースサンブラ HS-20 NXを用いることで高感度に、Smart Aroma Databaseを用いることで簡便に、生のリンゴの香気成分を分析することができました。

果物の種類や品種、成熟度、生産地、栽培環境などによる香気成分の差を科学的に解析することは、品質管理や新しい品種の開発に有益であると考えます。

GCMS-QP、Smart Aroma 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。InertCapは、ジーエルサイエンス株式会社の日本における登録商標です。TENAXは、Buchem BVの登録商標です。SIMCAは、Sartorius Stedim Biotech社の登録商標です。

› 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-QP™2050  
ガスクロマトグラフ質量分析計



› HS-20 NXシリーズ  
ヘッドスペースサンプラ



› Smart Aroma  
Database™  
GC-MS(/MS)香気分析用データベース

## 関連分野

› 食品・飲料

› におい、香り分析

› 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