

多変量解析を用いたチョコレートの香気成分解析

はじめに

チョコレートの香りは数百種類にも及ぶ揮発性物質が複雑に相互作用することで生み出される、多次元的な感覚情報です。その複雑さゆえ、どの成分が香りの知覚に重要な役割を担っているのか、また、それらがどのように作用して特有の香りを創り出しているのかを解明することは、容易ではありません。



多変量解析は、このような複雑なデータ構造を解析するための強力な統計学的ツールです。ガスクロマトグラフ質量分析計(GC-MS:

Gas Chromatograph-Mass Spectrometer)などの測定により得られた香気成分のデータを多変量解析にかけることで、主要な香気成分の特定、成分間の相関関係の解明、香りのプロファイリングなどが可能となり、香りのメカニズムの解明に貢献します。これにより、香りの品質管理、製品開発、官能評価との連携など、多岐にわたる応用が期待できます。

「香りの個性を際立たせたい」、「新しい香りを開発したい」といった課題を、当財団の多変量解析による香気成分解析が強力にサポートします。

チョコレートを用いた分析事例

風味の異なるチョコレート3種類を準備し、固相マイクロ抽出(SPME)法を用いたGC-MS測定を各チョコレートについて5回繰り返し行いました。

得られたデータについて、多変量解析ソフトウェア Mass Profiler Professional(MPP)を用いて解析した結果、チョコレートの香りに寄与する香気成分の特定ができましたので紹介します。

多変量解析の結果

●試料 A の特徴香の解析

スコアプロット(図-1)において、試料間の違いを可視化することができました。

第1主成分を示す横軸の正と負において、試料 A と試料 B 及び C に分布が分かれました。

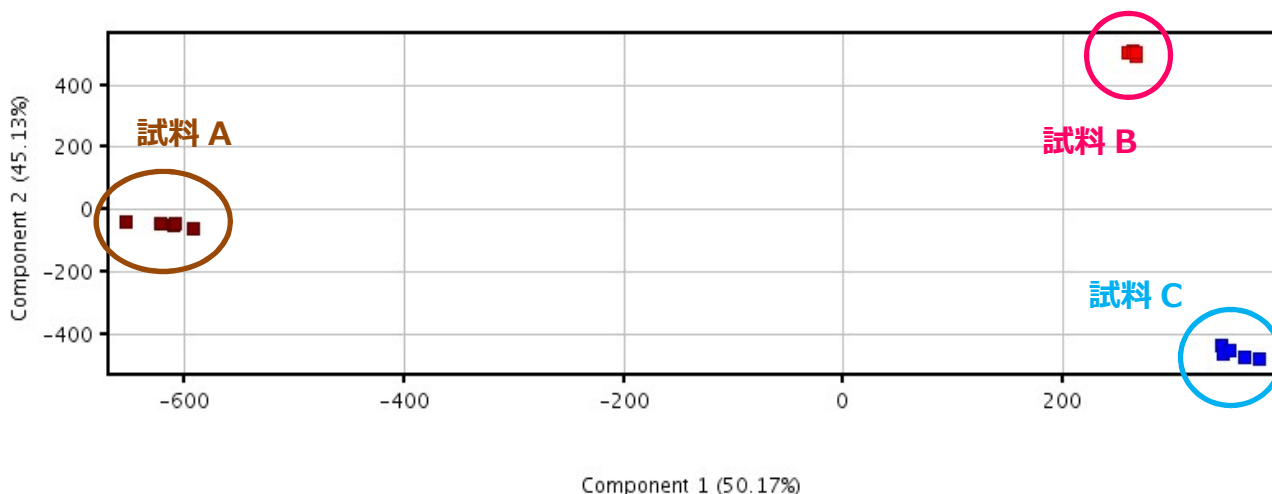


図-1 スコアプロット

そこで、ローディングプロット(図-2)から、試料 A に特徴的な香气成分の検索を行ったところ、表-1 に示したような特徴的な香气成分を確認することができました。

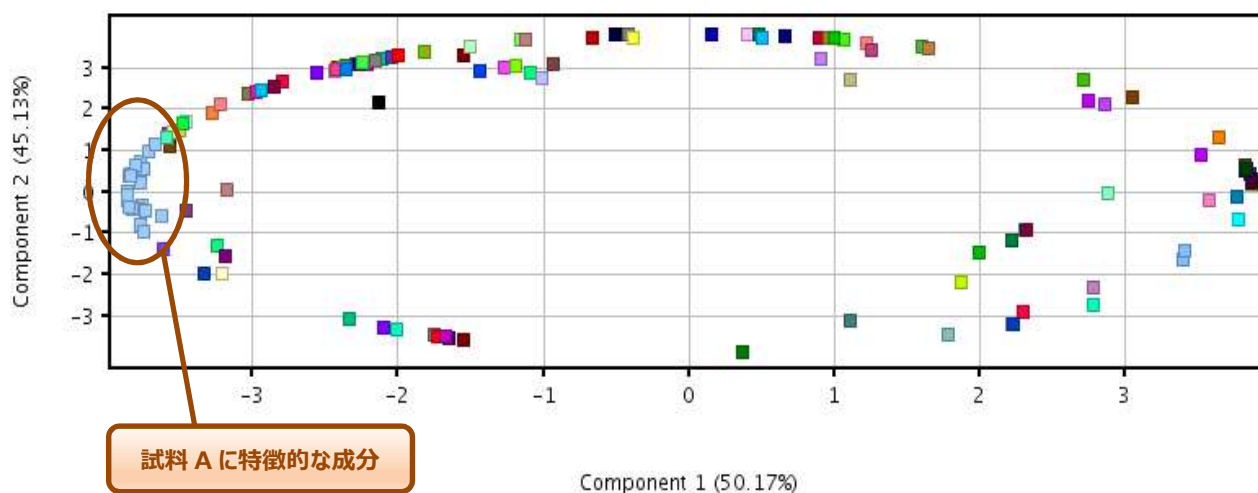


図-2 ローディングプロット

表-1 試料 A に特徴的な香り成分

物質名	においの質
2,5-ジメチルピラジン	ナッツ様
2,6-ジメチルピラジン	ナッツ様
フルフラール	アーモンド様
フルフリルアルコール	香ばしい

試料 A は、試料 B 及び C と比較するとナッツのような香ばしい香気が感じられました。
 参考に、表-1 の香り成分について、各々の抽出イオンクロマトグラムの重ね書きを図-3 に示しました。

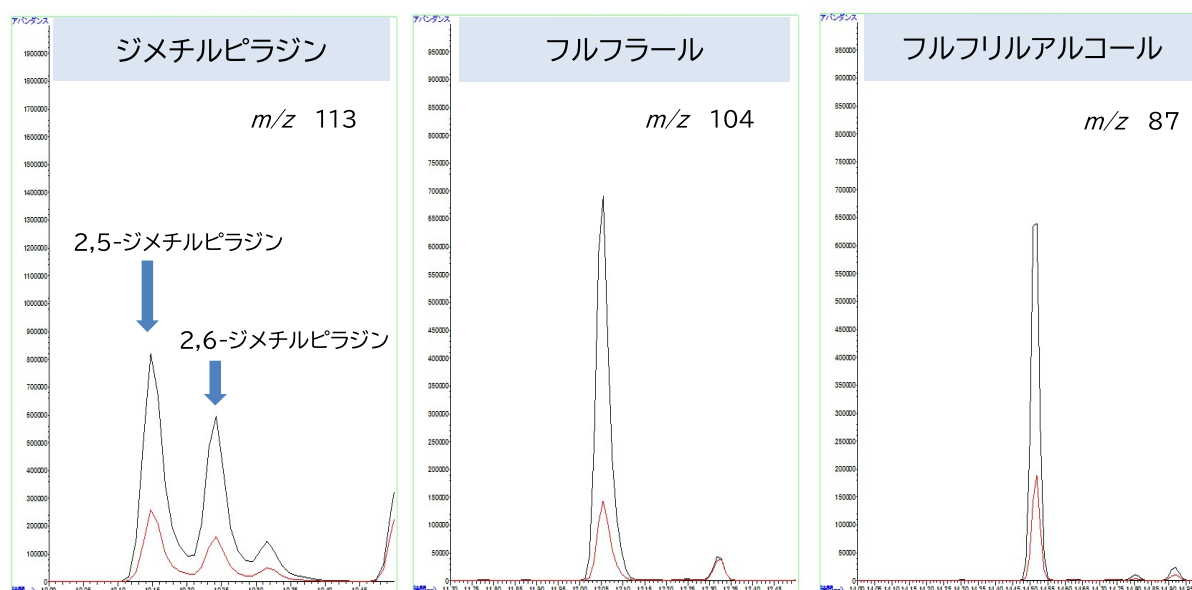


図-3 試料 A に特徴的な香り成分の抽出イオンクロマトグラムの一例
 (黒色:試料 A, 赤色:試料 C)

●試料 B の特徴香の解析

主成分分析により, 試料 A に特徴的な香気成分を確認することができましたが, 試料 B については特徴的な香気成分を特定するに至りませんでした。そこで, 試料 B 及び C について Volcano Plot を用いて解析しました(図-4)。

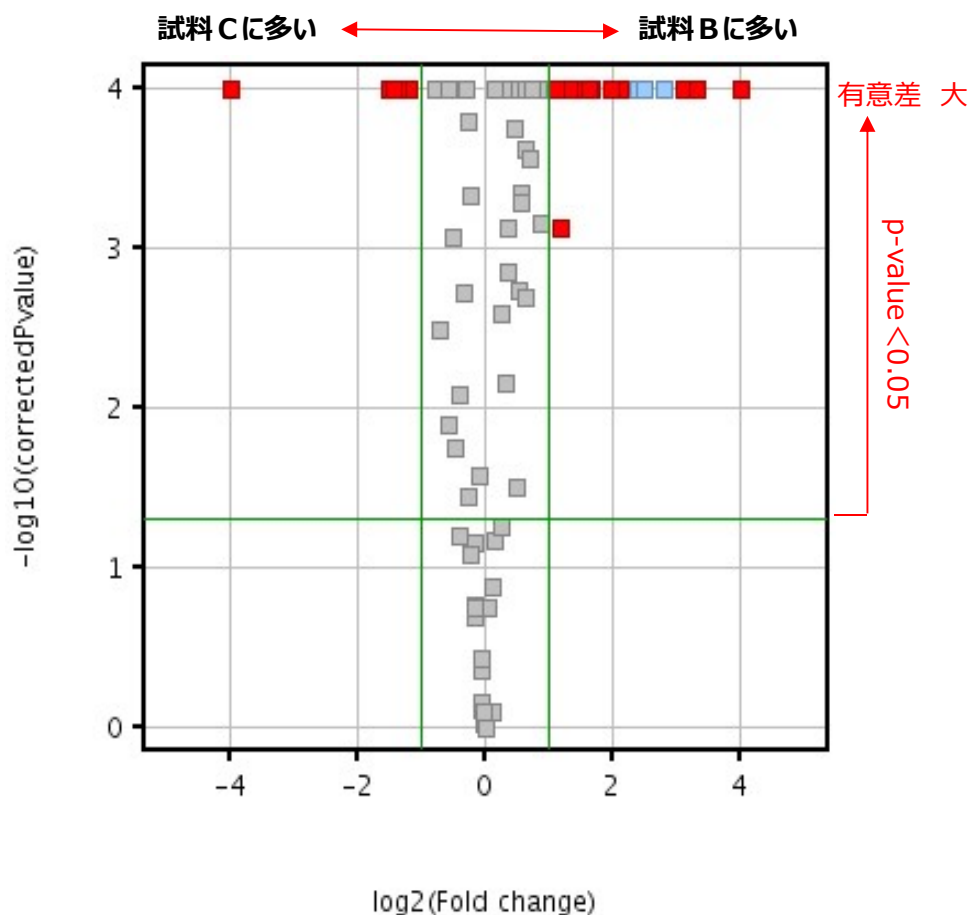


図-4 試料 B 及び C の Volcano Plot

Volcano Plot により, 試料 C と比較して試料 B に差のある成分を確認することができました。赤色のプロットはピークの大きさの平均値が 2 倍以上の差があり, かつ $p\text{-value} < 0.05$ (統計的有意差がある) の成分です。そのうち, 水色のプロットで示した成分は, 果実臭を有する香気成分でした(表-2)。

表-2 試料 B に特徴的な香り成分

物質名	においの質
ヘプタン酸エチル	パイナップル様の果実臭
酢酸 2-フェニルエチル	フルーティ, フローラル
酢酸イソアミル	バナナ様の果実臭

試料 B は試料 C と比較すると果実のような甘くさわやかな香りが感じられました。

参考に、表-2 の香り成分について、各々の抽出イオンクロマトグラムの重ね書きを図-5 に示しました。

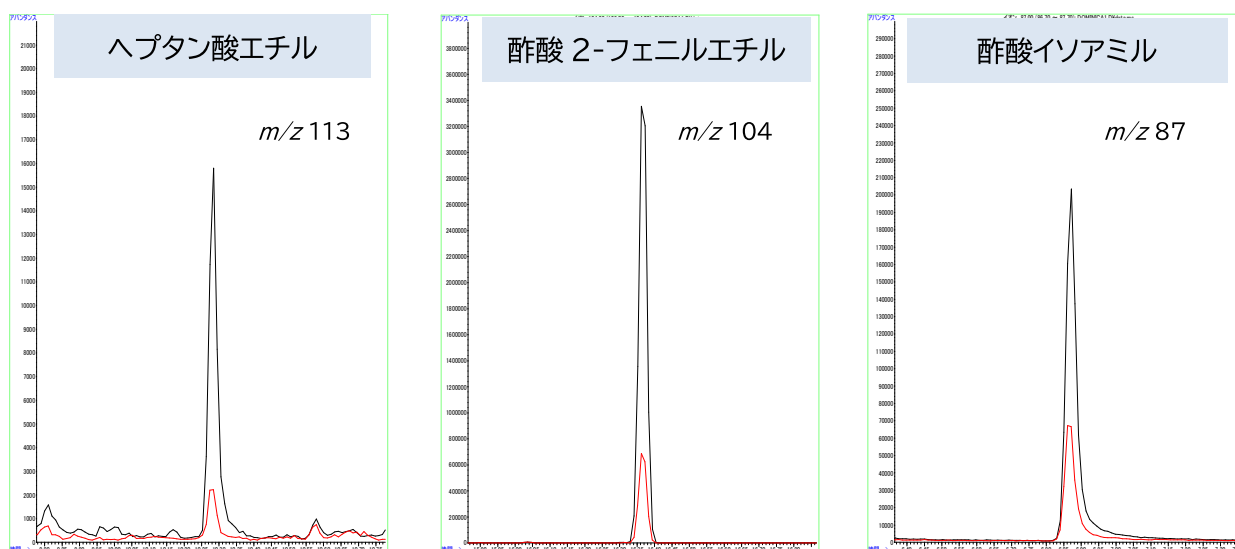


図-5 試料 B に特徴的な香り成分の抽出イオンクロマトグラムの一例
(黒色:試料 B, 赤色:試料 C)

まとめ

多変量解析を用いることで、チョコレートの香り成分を視覚的に特徴付けし、各チョコレートの持つ特徴的な香り成分を特定することができました。

こうした製品間の違いの要因となっている香り成分の特定は、お客様の商品開発や品質管理などにおいて新たなアプローチのひとつとしてご利用いただけます。なお、同一試料間でのばらつきや分析感度などにより、比較試料間で明確な差が出ない場合は、十分な特徴付けが難しい場合もございます。まずは、お客様の課題やご要望をお聞かせください。専門のスタッフが丁寧に対応いたします。

お客様の「おいしい!」に関する課題解決をサポートいたします。 まずはお気軽にご相談ください。

一般財団法人日本食品分析センター 二次機能分析窓口 nijikinou@jfri.or.jp