

多変量解析を用いた緑茶の香気成分解析

はじめに

緑茶の香りは非常に多くの揮発性物質の相互作用により生み出される、繊細で奥深い感覚情報です。例えば、青葉のような香り、花のような香り、果実のような香りなど、緑茶には様々な香りの表現がありますが、それらを構成する香気成分や相互作用の複雑さゆえ、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緑茶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膨大な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(例えば、産地ごとの香りの違いの分析や、経時変化による香りの劣化の評価)、製品開

発(新しい香りのブレンドの設計や、特定の香りを強調した製品の開発)、官能評価との連携(パネルによる評価と客観的なデータとの比較)など、多岐にわたる応用が期待できます。お客様の課題について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。

茶葉を用いた分析事例

緑茶には爽やかな独特の良い香りがありますが、烏龍茶や紅茶と比較すると香り成分は微量です。そのため、緑茶の香気成分を解析するには高感度な分析法が要求されます。今回は、操作が簡便で高感度分析が可能な固相マイクロ抽出(SPME 法)を前処理に用いました。

試料には市販の緑茶 4 種類を各茶葉に示された抽出方法に従って淹れた抽出液を用いました。試料について、固相マイクロ抽出(SPME)法を用いた GC-MS 測定を各々5 回繰り返して行い、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)を用いて解析を行いました。今回は、「主成分分析」と「クラスター分析」の2 種類の手法を用いて多変量解析を実施し、さらに、特徴的な香気成分について定量試験を行いました。特徴的な香りを有する茶葉について、その香りに寄与する香気成分を特定することができましたので紹介します。

多変量解析の結果

あらかじめ、検査員が官能評価をした各試料の香りの特徴を、参考として以下に示しました。

試料 A: フローラルな香り

試料 B: さわやかで濃厚な香り

試料 C 及び D: すっきりとした香り

●主成分分析

主成分分析は多変量解析の中で最も広く用いられている手法の一つで、データの次元(変数の数)を減らすことを目的としています。主成分分析は、元の変量を新しい一連の変量(これらを主成分と呼びます)に変換する手法です。

主成分分析の結果、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~D で分布が分かれたことから、第1主成分には試料 A と試料 B~D の香気成分の違いが寄与していると考えられました。

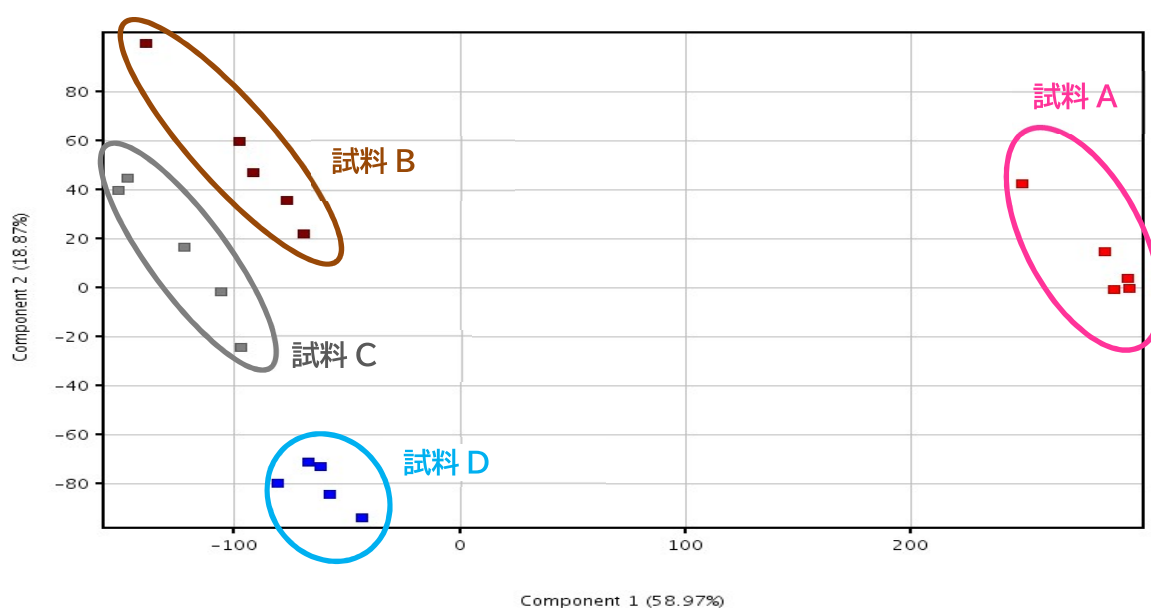


図-1 試料 A~D のスコアプロット

そこで、ローディングプロット(図-2)から、試料 A に特徴的な香気成分の検索を行ったところ、官能評価と一致する香気を有する成分(表-1)を確認することができました。

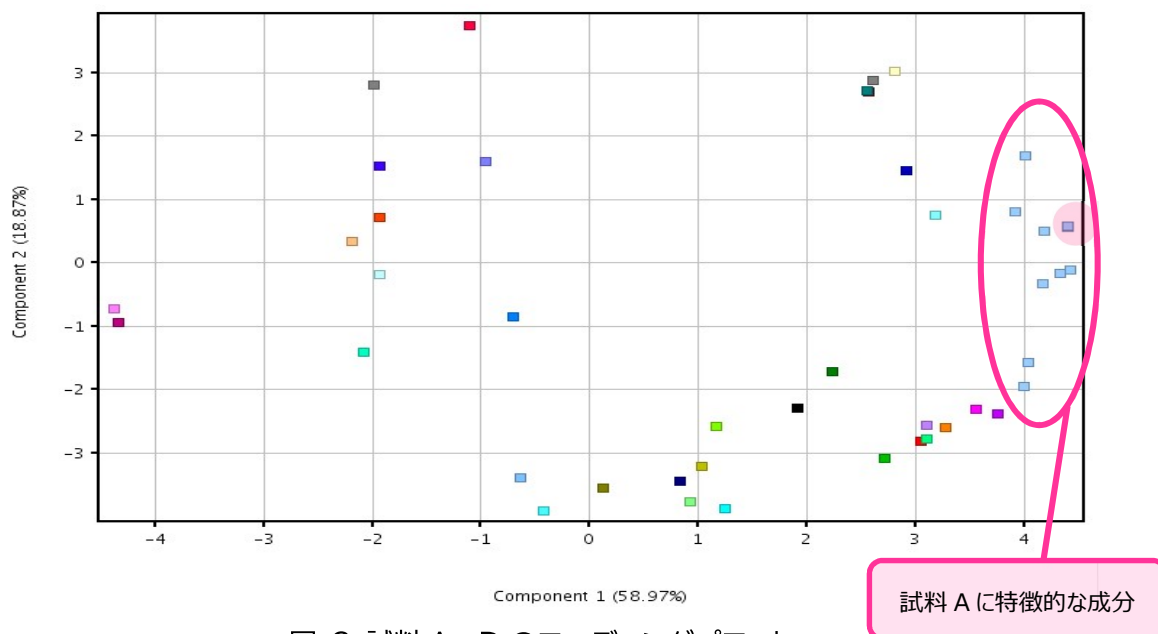


表-1 試料 A に特徴的な香り成分

物質名	においの特徴
アントラニル酸メチル	ジャスミン様・マスカット様
ヘキサン酸エチル	果実(パイナップル・バナナ)様
ヘキサン酸ヘキシル	ハーブ様・果実様

●クラスター分析

クラスター分析はデータを類似した特徴を持つグループにまとめる手法です。データ間の相似性や距離を計算し、それに基づいてデータをクラスターに分類します。クラスター分析の目的は、データの内部構造やパターンを把握することにあります。クラスター分析を通じて、データの相関関係や類似性を見つけることができます。

クラスター分析の結果、クラスタツリー(図-3)から、試料 C と D は類似しており、試料 A はほかの 3 種と比べて質の異なる香りを持つということが明らかになりました。これは、検査員が実施した官能評価と同様の傾向を示しました。

また、特徴的な階層(図-3 中の緑色囲み部分)について、物質の検索を行った結果、表-1 と同様の特徴的な香り成分を確認することができました。

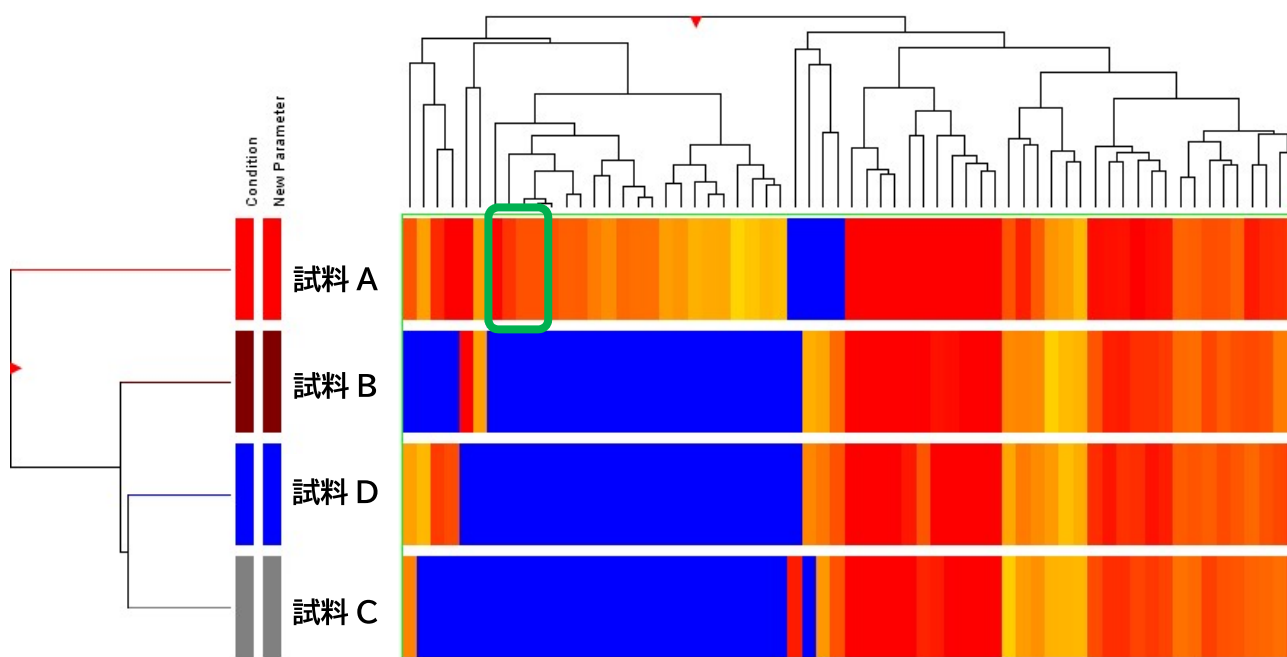


図-3 クラスタツリー

参考に、表-1 の香気成分の抽出イオンクロマトグラムの重ね書きを図-4 に示しました。

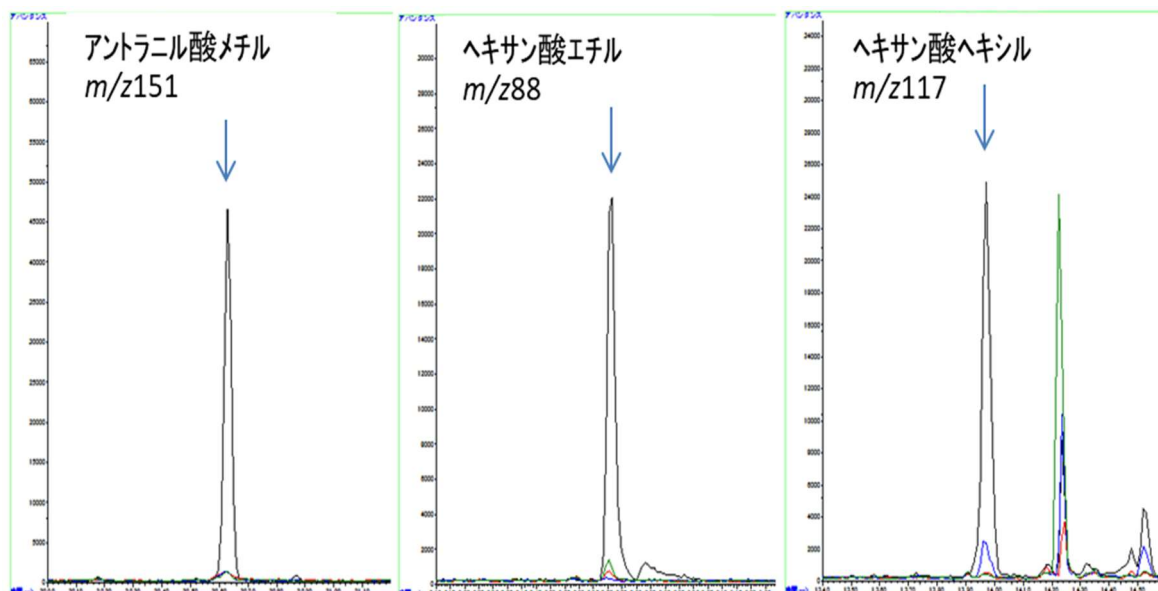


図-4 試料 A に特徴的な香気成分の抽出イオンクロマトグラムの一例
(黒色:試料 A, 青色:試料 B, 緑色:試料 C, 赤色:試料 D)

●定量試験

試料 A～D について、表-1 の香気成分濃度を GC-MS により定量した結果を表-3 に示します。
ジャスミンやマスカット様のにおいの特徴を有するアントラニル酸メチルが試料 A から検出されました。
そのにおいの特徴から、試料 A の香りに寄与する香気成分であると考えられました。

表-3 試料 A～D 中の香気成分濃度（定量下限:0.01 ppm）

	アントラニル酸メチル	ヘキサン酸エチル	ヘキサン酸ヘキシル
試料 A	0.02 ppm	<0.01 ppm	<0.01 ppm
試料 B	<0.01 ppm	<0.01 ppm	<0.01 ppm
試料 C	<0.01 ppm	<0.01 ppm	<0.01 ppm
試料 D	<0.01 ppm	<0.01 ppm	<0.01 ppm

まとめ

多変量解析を用いることで、緑茶の香気成分を視覚的に特徴付けし、香気成分を特定することができました。加えて、これらの香気成分について個別に定量試験を行い、含有量を調査しました。

特徴的な香気成分の含有量を把握することで、お客様の商品開発や品質管理において、これまで官能評価が主流であった分野に新たなアプローチをご提供することができます。

なお、同一試料間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。

本試験はお客様と打ち合わせをしながら進める試験ですので、まずはご相談からお気軽にお問い合わせください。専門のスタッフが対応いたしますので、お客様の課題やご要望をどうぞお聞かせください。



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@jfrl.or.jp