

2025年8月28日(木) 15:00 ~ 17:30 H会場(3F 137)

[2Hp01-10] 食品分析

座長:高橋 洋武 ((一財) 日本食品検査)、若山 正隆 (愛媛大学)、佐川 岳人 (エスビー食品㈱)

15:45 ~ 16:00

[2Hp04] GC-O-TOFMSと機械学習を用いた漬物の香気成分の構造解析*渡邊 直美¹、窪田 梓¹、阿部 吉雄¹、岩淵 晴男¹、生方 正章¹ (1. 日本電子株式会社)

キーワード：食品分析、香気成分分析、GC-O-TOFMS、機械学習、ソフトイオン化

【目的】

ガスクロマトグラフィー質量分析(GC-MS)法は、食品等の香気成分分析の定性分析や異臭分析で活用されている。GC-MSを用いた食品中香気成分の定性分析では、NIST等の市販マススペクトルデータベース(DB)を用いて化合物同定を行うことが一般的である。一方、DB未登録の香気成分の同定をGC-MSデータだけで行うことは難しく課題であった。本発表では、食品の香気成分についてヘッドスペース-固相マイクロ抽出(HS-SPME)によるにおい嗅ぎガスクロマトグラフィー飛行時間質量分析法(GC-O-TOFMS)にて測定し、EI/FI法による統合解析及び機械学習を用いた構造解析を実施した事例について紹介する。

【方法】

市販の白菜の漬物を試料とした。試料前処理装置はHS-SPMEオートサンプラーHT2850T (HTA S.R.L.製)を使用し、高質量分解能GC-TOFMS JMS-T2000GC(日本電子製)に、におい嗅ぎシステムOP275(GL Sciences製)を接続し、GC/EI及びGC/FI測定と、におい嗅ぎ測定を実施した。構造解析は、msFineAnalysis AI(日本電子製)を用いて実施した。

【結果】

TICCで強く確認された4成分(a-d)について統合解析を実施したところ、成分a, c, dはアブラナ科の野菜に含まれるイソチオシアネート化合物(3-Butenyl isothiocyanate, 2-Phenylethyl isothiocyanate, 5-Methylthiopentyl isothiocyanate)であることが分かった。成分bについては組成式が C_6H_9NS と得られたが、NIST DB検索で候補1位であったCyclopentyl isothiocyanate [C_6H_9NS]は類似度632と低くNIST DB未登録化合物と考えられた。成分a, c, dはイソチオシアネート基を官能基として有しており、成分bは類似度が低いながらも上述した候補1位の化合物は同官能基を有していたことから、その構造にはイソチオシアネートを有すると推察した。機械学習を用いた構造解析により推定されたイソチオシアネート基を有していた構造式候補から、EIマススペクトルのフラグメントパターンの解釈に妥当性のあった4-Pentenyl isothiocyanateを成分bとして推定した。GC-Oの結果では、成分bは甘めの独特なハーブ様であった。HS-SPMEを用いたGC-O-TOFMSと機械学習による構造解析を用いることで、DB未登録の香気成分について、その構造式を推定することができた。