

# 市販緑茶飲料の違いを調べることは可能か？

## －Q Exactive™ Focusを用いた主成分分析－

高橋洋武, 佐野勇氣, 佐藤信彦, 橋田規, 照井善光  
(一般財団法人日本食品検査)



### はじめに

近年、多くの緑茶飲料が市販されており、誰でも手軽に利用することが可能となっている。その一方で、選択肢が多すぎて、何を基準に商品を選べば良いか迷ってしまう場合も少なくない。価格やメーカーブランドを基準に選択するだけでなく、緑茶中に含まれている機能性成分等によって商品の特徴がわかれば、商品を選択する上で参考になりやすい。

そこで、高分解能Orbitrapを搭載したQ Exactive™ Focus四重極/Orbitrapハイブリッド質量分析計LC/MSシステムを用いて、市販されている緑茶飲料の商品間の差異を決定づけている物質の抽出が可能であるか試みた。

### 方法

#### 【試料】

対象とした試料は、市販されているペットボトル緑茶飲料を無作為に選んだ計8商品とした。

それぞれ1番から8番までの番号をつけて、分析に供した。

#### 【分析条件：LC条件】

##### 逆相モード

装置：UltiMate 3000 (Thermo Fisher Scientific製)

分析カラム：CAPCELLPAK C18 MG III

内径2.0 mm, 長さ150 mm, 粒径3 μm (資生堂製)

移動相：A；アセトニトリル, B；20 mmol/L酢酸アンモニウム溶液

流速：0.3 mL/min

##### HILICモード

装置：UltiMate 3000 (Thermo Fisher Scientific製)

分析カラム：TSK Amide-80

内径2.0 mm, 長さ150 mm, 粒径5 μm (東ソー製)

移動相：A；20 mmol/L酢酸アンモニウム溶液, B；アセトニトリル

流速：0.3 mL/min

#### 【分析条件：MS条件】

装置：Q Exactive™ Focus (Thermo Fisher Scientific製)

イオン化モード：ESI, positive ionモード及びnegative ionモード

測定モード：Full MS及びddMS<sup>2</sup>

MS範囲： $m/z$  50~750

分解能：70,000 ( $m/z$  200における値)

#### 【解析ソフト】

Compound Discoverer 2.0 (Thermo Fisher Scientific製)

### 結果と考察

8商品の測定結果から主成分分析 (principal component analysis, PCA) を行った。逆相モードから得られたPCAプロットを図1, HILICモードから得られたPCAプロットを図2に示した。

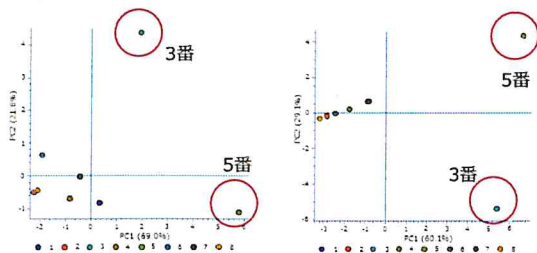


図1 逆相モードのPCAプロット

図2 HILICモードのPCAプロット

図1, 図2より3番と5番の商品がその他の商品から大きく離れてプロットされていることから、3番と5番の商品は、他の商品と比べて大きく差異があることが示唆された。

よって、3番と5番以外の商品をAグループ、3番の商品をBグループ、5番の商品をCグループとして、再度主成分分析を行い、PCAプロットを作成した (図3, 図4)。

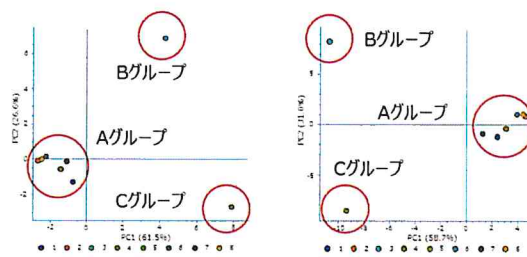


図3 逆相モードのPCAプロット (グループ化後)

図4 HILICモードのPCAプロット (グループ化後)

BグループとAグループ, CグループとAグループで比較したときに、大きな差が認められた化合物を抽出し、データベースと照合した結果と合わせて表1に示した。また、解析画面の一例を図5に示した。

表1 Bグループ-Cグループの各モードから抽出したピークのリスト (上：逆相モード, 下：HILICモード)

保持時間 (分)	面積比 (B/A) **1	面積比 (C/A) **1	精密質量 **3	組成式 **3	データベースでヒットした化合物の有無 **4	トクホ商品に使用されていると思われる化合物 **5
1.1	32	10				
1.1	22	8				
2.9	6	12				
1.2	3	5				
6.7	2	73				
6.6	1	487				
20.5	127	66				
16.1	61	16				
13.9	12	1				
18.6	12	5				
1.5	9	12				
9.0	4	9				
9.6	4	9				
14.4	4	8				
15.6	2	6				
10.1	2	14				
7.3	1	95				
10.1	1	109				
1.9	1	59				

- Bグループの面積比の平均とAグループの面積比の平均で除した値
- Cグループの面積比の平均とAグループの面積比の平均で除した値
- 質量の特定も助けのために、一部表記を省略した。判別が可能であったものは記載した。
- ※4 解析画面に使用しているデータベースでヒットした場合は「○」、外部データベースでヒットした場合は「◇」



図5 解析画面の一例

Bグループ, Cグループはどちらも特定保健用食品 (トクホ) であり, Aグループにはトクホは含まれていないことから、主成分分析によって、トクホとそれ以外の商品にグループ分けすることができた。

また、表1に示したように、トクホ商品に使用されていると思われる化合物をそれぞれ複数検出することができた。今回の結果から、同じ種類の商品間の差異を抽出し、商品の持つ特徴を簡便に明らかにすることができる可能性が示唆された。

### まとめ

高分解能Q Exactive™ Focus四重極/Orbitrapハイブリッド質量分析計LC/MSシステムを用いて、市販緑茶飲料8商品の主成分分析を行い、トクホとそれ以外の商品で大きな差が認められた。

今後の展望として、緑茶飲料だけでなく、様々な食品間で主成分分析を行い、機能性成分等の商品の特徴を明らかにし、消費者が商品を選択するときに参考にしやすい分析方法の開発を進め、消費者や製造者に対して提案していきたい。

謝辞 サーマフィッシャーサイエンティフィック株式会社の博倉篤尚氏から、解析を行う上で有益なご助言を頂いた。ここに感謝の意を表する。