

# [ケモメトリクス] 植物油脂の異同識別

## 【はじめに】

アプリケーションシート No.Q001では植物油脂の構成成分の多くを分子イオンスペクトルとして検出できる例を報告しました。植物油脂は、一部を除いてトリアシルグリセロールが主成分であり、油脂種によっては、そのマススペクトルパターンが類似する場合があります。そのような場合にも、分子イオンスペクトルとして検出する IAMS では、それぞれのマススペクトルパターンを詳細に見比べると個々の植物油脂種を識別することができますが、その操作が煩雑になる場合があります。

ここでは、得られたマススペクトルデータを主成分分析 (PCA)やクラスター分析を行なうことで、個々の植物油脂を容易に識別できる例を示します。

## 【解析データ】

解析に使用するデータは、アプリケーションシート No.Q001で測定した9種の植物油脂(長鎖脂肪酸TAGを主成分とした植物油脂7種、中鎖脂肪酸TAGを主成分とした植物油脂1種、長鎖脂肪酸DAGを主成分とした植物油脂1種)を用いています。[TAG:トリアシルグリセロール、DAG:ジアシルグリセロール]

## 【解析手順】

解析にはフリー解析ソフトウェア<R>を使用しています。アプリケーションシート No.Q001に記載の測定条件で、各植物油脂の測定を行いました。また、質量分析装置の日間変動の影響評価に加えて、異なるロット試料でのデータ再現性をチェックするため、9種10検体の植物油脂の測定は異なる測定日で計3セットの測定を行った結果を用いています。

解析に際しては、内部標準ガス由来のシグナルを除去した後に、各植物油脂のマススペクトル毎に最大値を1として規格化を行なうことで、異なる測定日の感度変化の影響を除外しています。ノイズ除去等の他の前処理は行なわず、0分から約8分30秒までの領域の平均マススペクトルデータ (m/z:50~1,000)を解析に使用しました。

1日目	
No.	試料名
1	オリーブ油-1
2	胡麻油-1
3	スイートアーモンド油1
4	スイートアーモンド油(新)-1
5	大豆油-1
6	ぶどう種子油-1
7	菜種油-1
8	アルガン油-1
9	ジアシルグリセロール油1
10	オリーブ油'-1
11	ココナッツ油-1
12	オリーブ油''-1

2日目	
No.	試料名
1	オリーブ油-2
2	アルガン油-2
3	胡麻油-2
4	菜種油-2
5	オリーブ油'-2
6	スイートアーモンド油(新)-2
7	スイートアーモンド油2
8	大豆油-2
9	ジアシルグリセロール油2
10	オリーブ油''-2
11	ぶどう種子油-2
12	ココナッツ油-2
13	オリーブ油'''-2

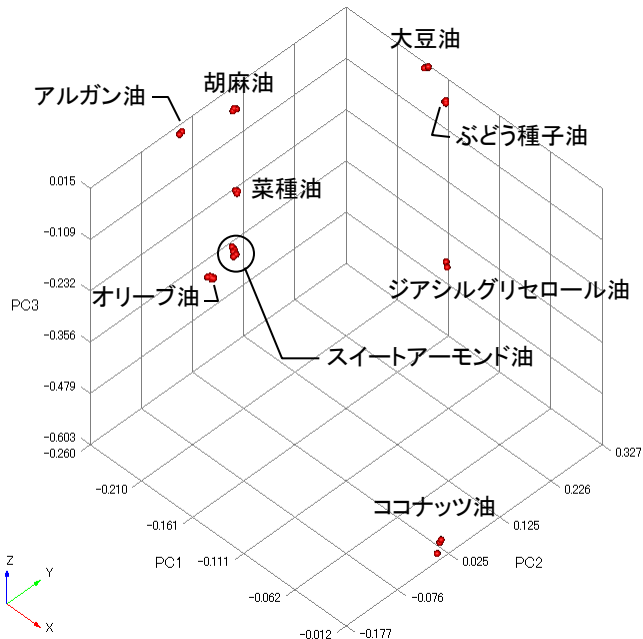
3日目	
No.	試料名
1	オリーブ油-3
2	ぶどう種子油-3
3	菜種油-3
4	スイートアーモンド油3
5	オリーブ油'-3
6	ジアシルグリセロール油3
7	胡麻油-3
8	アルガン油-3
9	大豆油-3
10	オリーブ油''-3
11	スイートアーモンド油(新)-3
12	ココナッツ油-3

※「スイートアーモンド油」と「スイートアーモンド油 (新)」は異なるロットの植物油脂

# 【解析結果】

以下にはPCAでの解析結果とクラスター分析の結果を示しています。装置感度の日間変動の影響を受けることなく、各植物油脂を識別することができました。また、スイートアーモンド油の異なるロットについても、類似した油脂として判定されています。今回検討した植物油脂のマスペクトルデータでは熱抽出成分と熱分解成分が混在するものですが、事前にデータベースを構築することで、各植物油脂の異同識別が効果的に行なえることがわかりました。

PCAやクラスター分析による異同識別は今回の植物油脂に係らず事前にデータベースを構築することで、樹脂・塗料・接着剤・香料・潤滑剤などの様々な製品にも適用することが可能と考えられます。



## 主成分分析(PCA)

	PC1	PC2	PC3
寄与率	62.3%	14.6%	12.4%
累積寄与率	62.3%	76.9%	89.3%

## クラスター分析:デンドログラム(樹状図)

Cluster Dendrogram

