

FT-IRによるペクチンの分子構造解析

ユニテックフーズ株式会社 ○坂井二千佳, 樋口侑夏, 浅野桃子

Corporate Website ➔ <http://www.unitecfoods.co.jp/>



Introduction1



背景

リンゴや柑橘などの果実に含まれる増粘多糖類である**ペクチン**は、ジャムなどのゲル化に活用される。ペクチンはカルボキシ基を持つガラクトuron酸が重合した主鎖をもつ。加工の過程などにより一部のカルボキシ基はメチルエステル化やアミド化され、分子鎖に占めるそのガラクトuron酸の割合をそれぞれ**Degree of Esterification: DE**および**Degree of amidation: DA**という。ペクチンはDEによりHigh methoxyl: HMペクチン ($DE \geq 50$)とLow methoxyl: LMペクチン ($DE < 50$)に大別され、ゲル化機構が異なる。

LMペクチンはカルボキシ基同士がカルシウムなどの金属イオンにより架橋されネットワークを形成することでゲル化するため、DEやDAによってゲル化性質が大きく異なる。そのため**DEおよびDAは非常に重要なゲル化指標**となる。

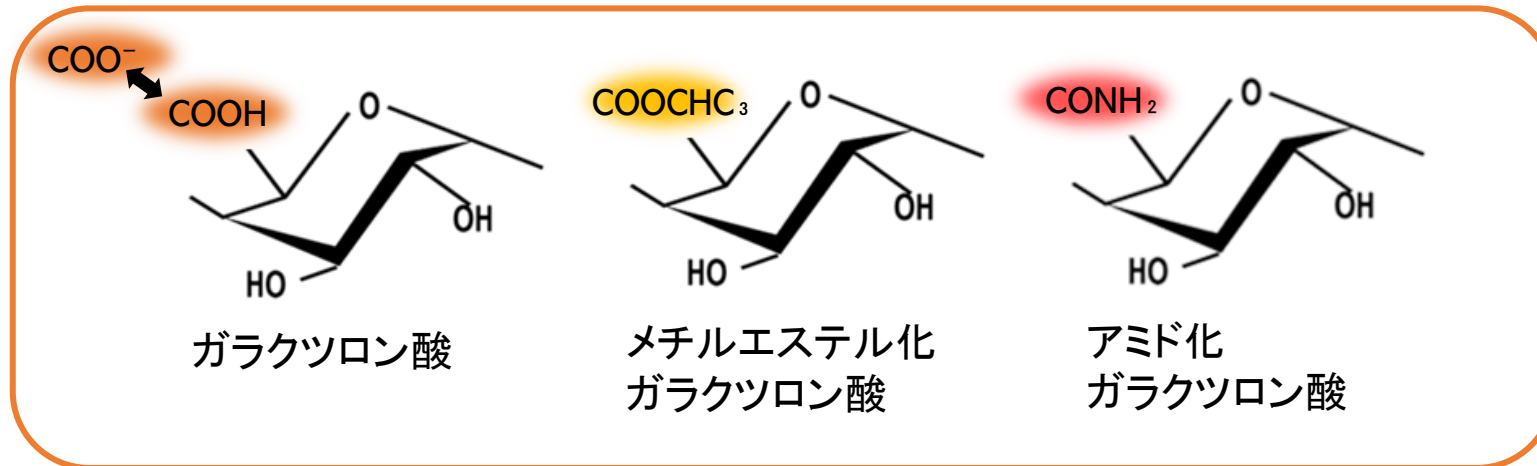


図1. ペクチン主鎖の構成要素

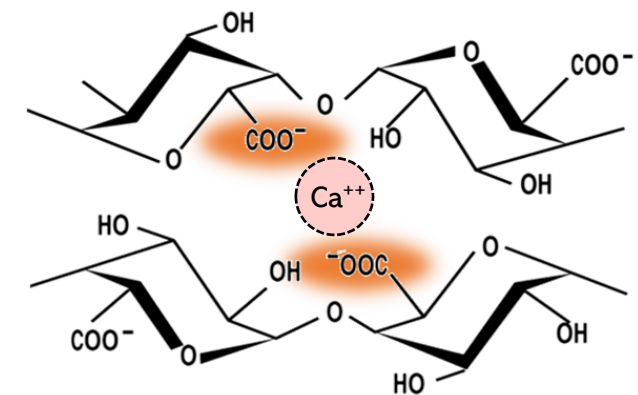


図2. LMペクチンのゲル化モデル

Introduction2

課題

重要なゲル化指標であるDEおよびDAだが、一般的にDEは滴定法や比色法などにより測定され、DAは燃焼法などの窒素含量測定により推定される。

しかし、これらの方法は作業時間の長さや、作業者の技量による測定結果ブレなどに課題がある。

目的

迅速で簡便なDEおよびDAの推定手法を開発する

6分の2のガラクトuron酸がメチルエステル化 DE=33
6分の1のガラクトuron酸がアミド化 DA=17

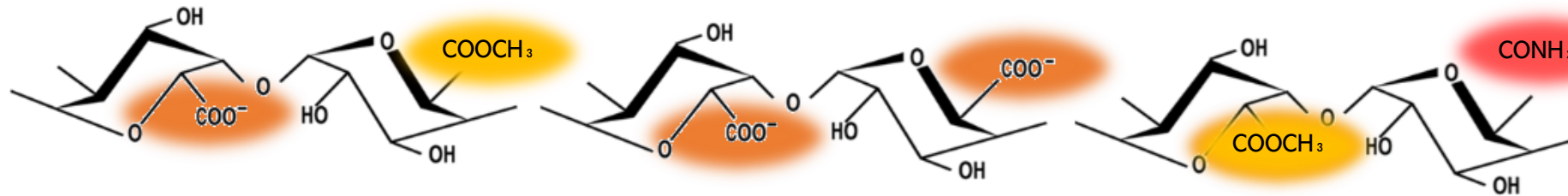


図3. LMペクチンの分子構造モデル

Materials & Methods

フーリエ変換赤外分光光度計 (FT-IR)

物質に赤外光を照射し、物質特有の分子の振動や回転の動きに応じた波長の吸収を測定する。物質の化学構造や状態に関する情報を得ることができるため、成分同定や異物分析などに利用される。

* メリット *
測定が簡便
粉体で測定可能

使用データ

【説明変数】ペクチン33種類の $800\text{-}1850\text{cm}^{-1}$ のスペクトルデータ (1050ポイント)

【目的変数】実験により得られたDE (中和滴定法実測値) および窒素量 (燃焼法実測値)



PLS回帰による解析

モデルの応答: NIPALS
行 数: 49

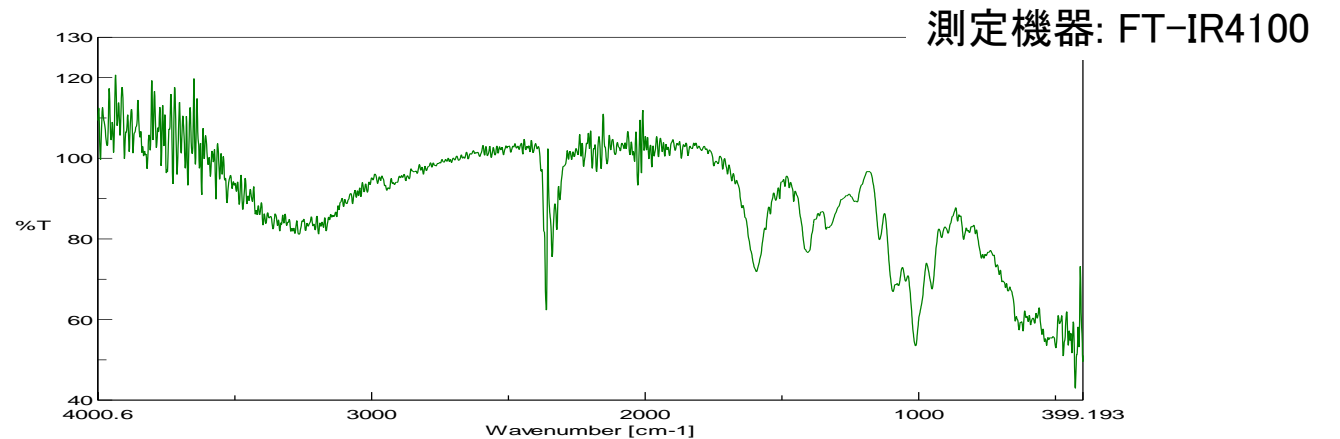


図4. ペクチンのFT-IRスペクトル例

Results1

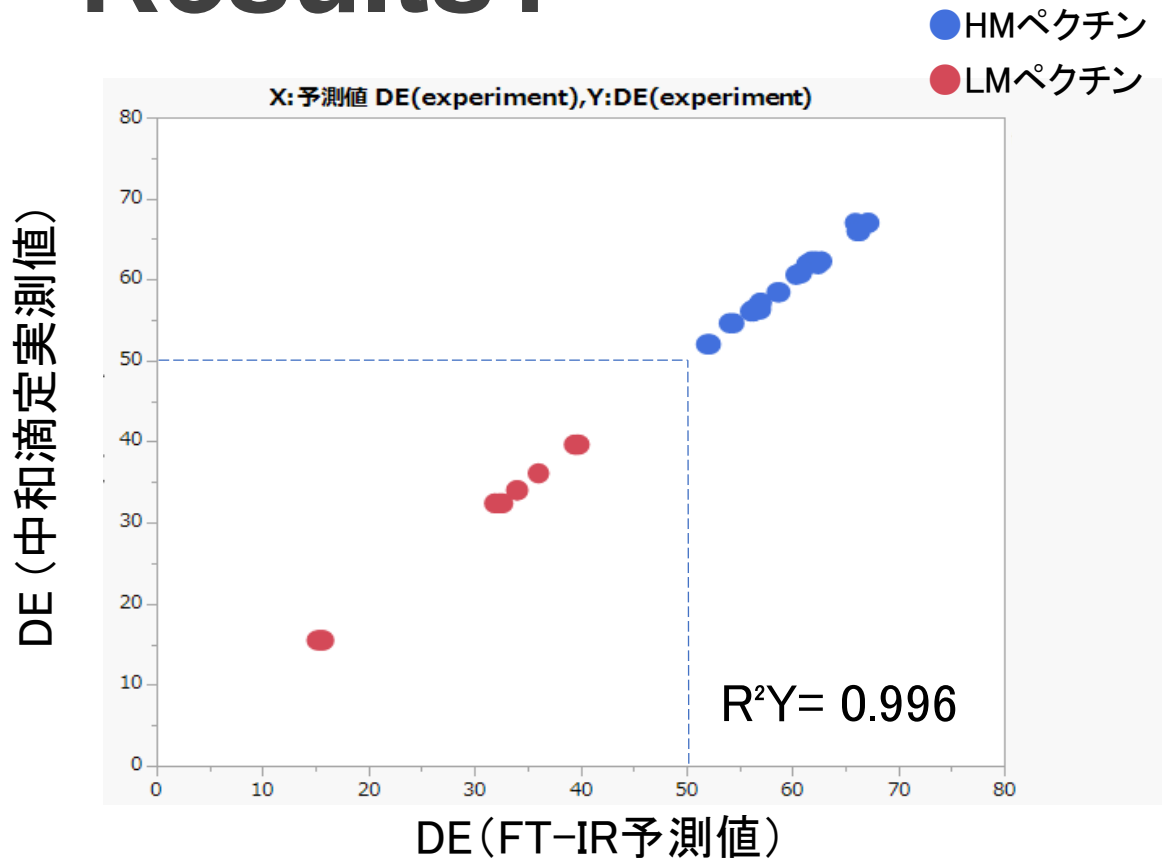


図5. 滴定実測値と予測値の相関

- 非常に精度の高いDE予測モデルが得られた。

各スペクトルから予測される分子構造¹⁾

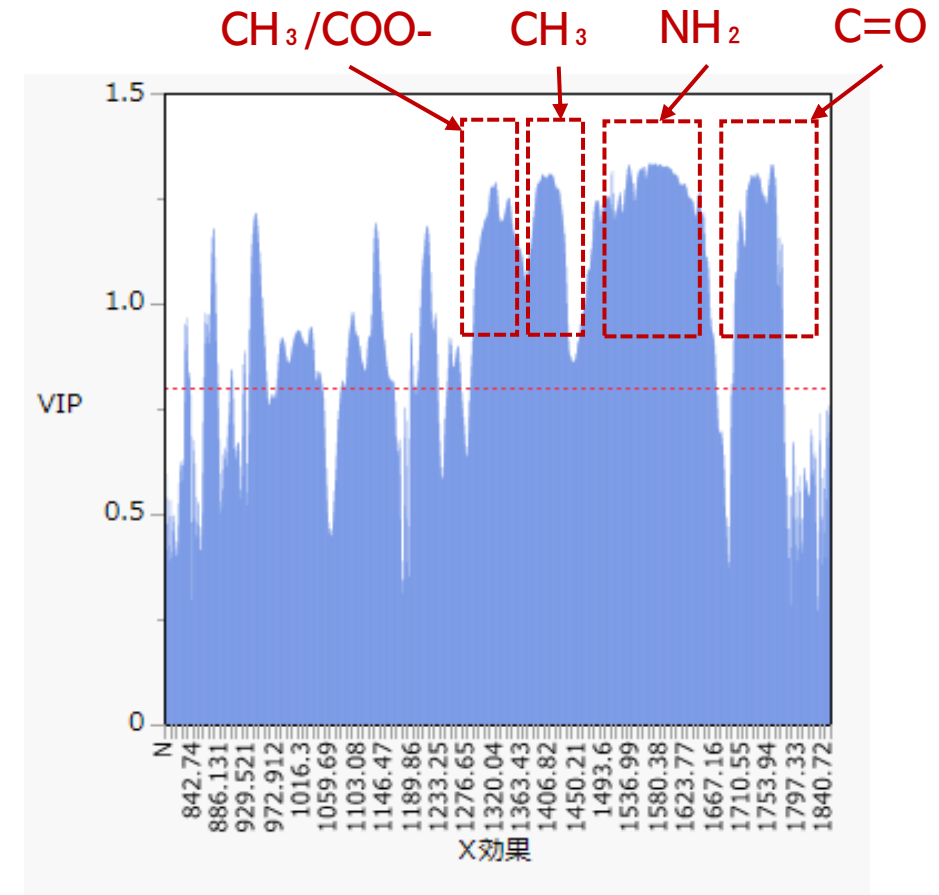


図6. 変数重要度のプロット

- VIPの高いスペクトルよりモデルの確からしさを確認できた。

1) Søren Balling Engelsen. (1996) *Carbohydrate Polymers* 30(1):9-24

Results2

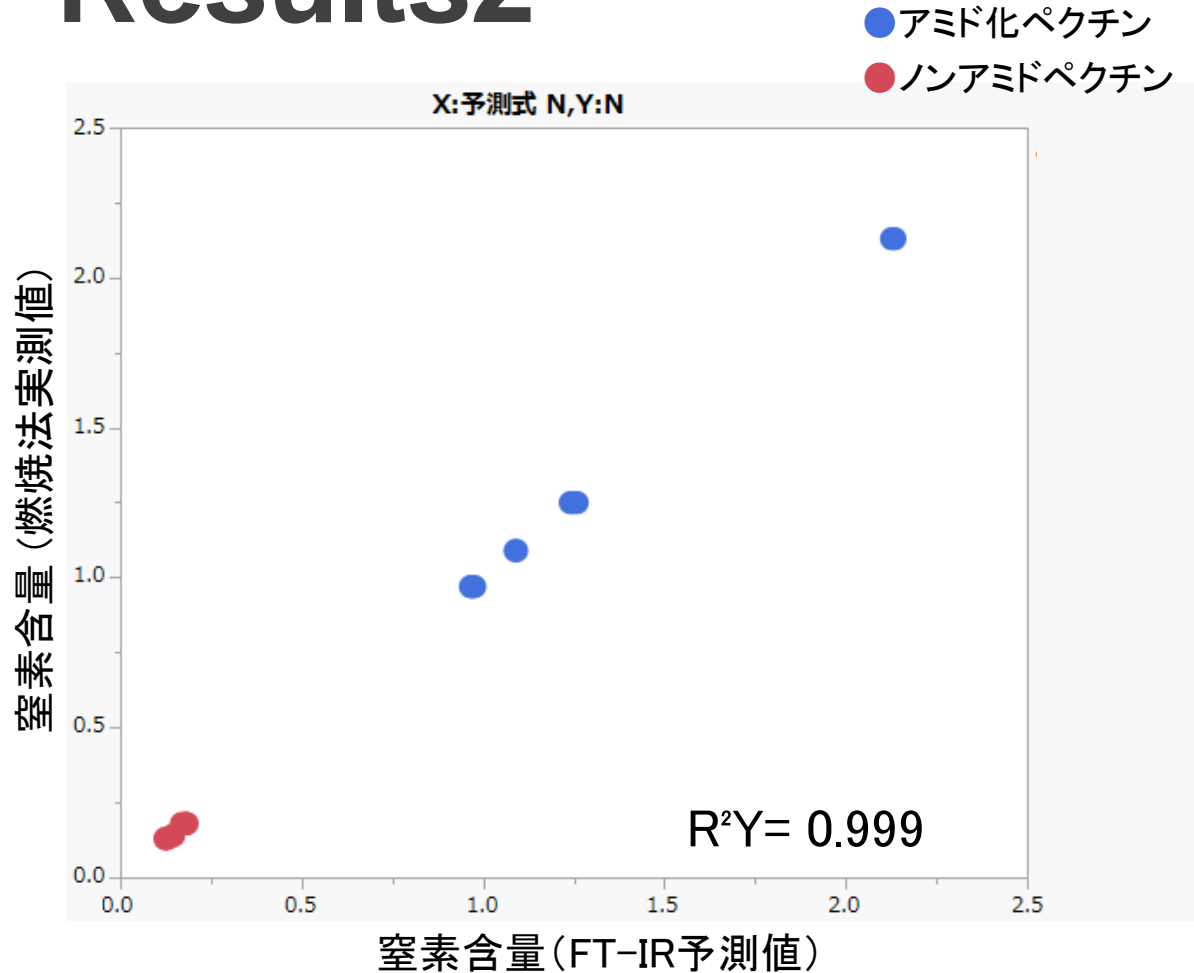


図7. 燃烧法実測値と予測値の相関

- 窒素量についても精度の高い予測モデルを得ることができた。

各スペクトルから予測される分子構造¹⁾

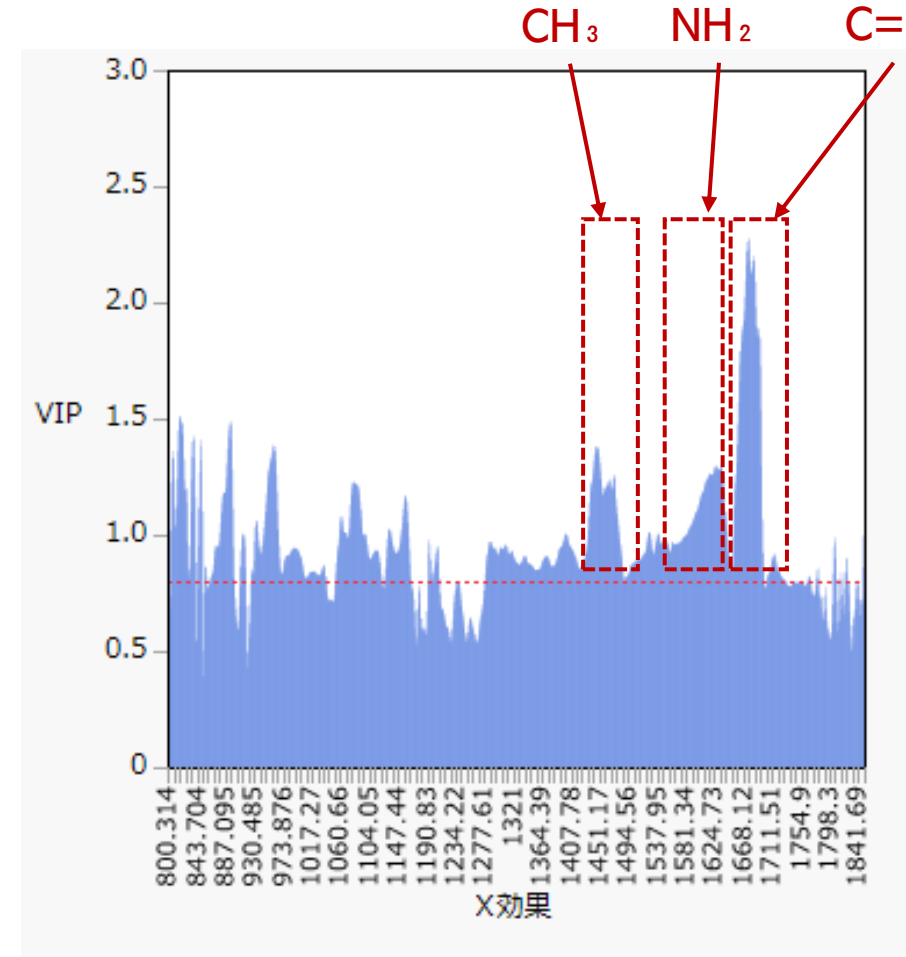


図8. 変数重要度のプロット

1) Søren Balling Engelsen. (1996) *Carbohydrate Polymers* 30(1):9-24

Conclusion

- FT-IRスペクトル測定で得られたデータを用い、JMPでPLS回帰を行うことにより、迅速で簡便にDEおよび窒素量の予測が可能となった。
これにより、粉体のままペクチンのゲル化性を推測できる。
- ペクチンだけでなく、メチルセルロースなどのセルロース誘導体の官能基の推定にも応用できる。



弊社の統計解析活用事例

JMPユーザー事例: https://www.jmp.com/ja_jp/customer-stories/unitecfoods.html