

本分析は Alpha MOS USA のラボで実施されました。

キーワード

大麻、臭気分析、電子嗅覚システム、高速 GC、味覚分析、電子味覚システム

アプリケーションのベネフィット

- においと味の高速かつ高度な分析
- 化学的および官能的な特性評価

目的

一部の国では、大麻は慢性疼痛、癌性疼痛、うつ病、不安障害、睡眠障害、神経障害などの治療に医療用として使用されています。



本研究では、高速ガスクロマトグラフを基盤としたフラッシュ GC ノーズ Heracles NEO と電子味覚システム ASTREE を用いて、医療用として栽培される大麻の花の官能特性を迅速に評価することを提案します。

サンプルと測定条件

サンプル

同じ生産者の医療用大麻の花 3サンプル（表1）を、フラッシュGCノーズ Heracles NEOと電子味覚システム ASTREEで分析しました。

表 1. サンプルセット

コード	株	フレーバー	コメント
MHG1	The Guice	レモン/フルーティー	ベストセラー
MHP2	Platinum GSC	甘い/土の様な/フローラル	好評
MHJ3	Lavender Jones	フローラル/土の様な	最も人気がない

フラッシュ GC ノーズ Heracles NEO

超高速 GC 技術を基盤としたフラッシュ GC ノーズ Heracles NEO（図 1）には、極性の異なる 2 種類のメタルキャピラリーカラムが並行に配置され（本研究では、微極性の MXT-5 と低/中極性の MXT-1701, 長さ 10m, 内径 180 μ m Restek を使用）、各々に水素炎イオン化検出器（FID）が接続されています。同時に 2 つのクロマトグラムが得られるため、保持指標データによる化合物検索の際、より明確な絞り込みが可能となります。また、ペルチエ式クーラー（0-280 $^{\circ}$ C）により温度制御された固相吸着トラップが内蔵されているため、低分子の揮発性化合物の効果的なプレ濃縮を実現し、優れた感度が得られます。カラムの高速昇温（最大 600 $^{\circ}$ C/分）により、2~3 分程度で測定結果が得られ、分析サイクルは 5~9 分程度です。



図 1: 超高速 GC 技術を基盤としたフラッシュ GC ノーズ Heracles NEO

装置本体には、サンプリングと注入の自動化のためにオートサンプラ（PAL3 RSI, CTC Analytics）が据え付けられています。操作はソフトウェア AlphaSoft を介して行います。AlphaSoft は、クロマトグラフィー機能に加え、サンプル比較のためのフィンガープリント分析、定量・定性モデル、品質管理チャートの構築など、データを視覚化するための様々な多変量解析ツールも備えています。

AroChembase: 官能的特徴づけのための保持指標&においライブラリ

本試験で用いられた Heracles NEO には、保持指標 & においライブラリ AroChemBase (Alpha MOS, France) が追加されています。ライブラリには、化合物ごとの名称、分子式、CAS 番号、分子量、保持指標といった化学情報に加え、官能記述子や閾値情報、加えて関連する文献情報まで含まれています。AroChemBase によって、Heracles のクロマトグラムから化合物の予備スクリーニングを行い、官能的特徴の情報を得ることができます。

電子味覚システム ASTREE

電子味覚システム ASTREE (図 2)は、液体センサーアレイを基盤とし、各センサーと参照電極間の電位差の計測を原理としています。個々のセンサーは、固有の有機膜を持ち、膜固有の規則に従って溶液中の化学物質と相互作用します。測定データは、ソフトウェアによって全体的な味覚のフィンガープリントとして処理されます。味ランキングモジュールを使用すると、塩味、うま味、酸味を直接ランク付けできます。



図 2 : 電子味覚システム ASTREE

におい分析

測定条件

本分析に最適化された測定条件は表 2 のとおりです。

表 2 : Heracles NEO 分析パラメータ

パラメータ	値
サンプル量	0.25 g
バイアルサイズ	20 mL
データ取得時間	150 s
インキュベーション温度	50℃
インキュベーション時間	20 min
ヘッドスペース注入量	5mL

最初に、保持時間を保持指標に変換するために、n-アルカン (n-ヘキサン から n-ヘキサデカン) の標準混合液を測定しています。

揮発性成分のプロファイル

医療用大麻の花サンプルのにおいプロファイルの比較を図 3 に示します。クロマトグラムは、量的および質的な違いが示されました。

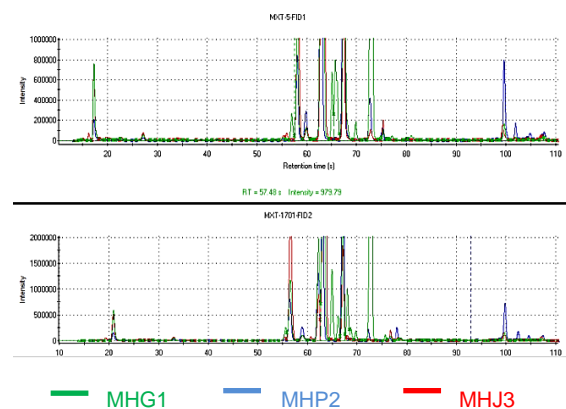


図 3 : Heracles NEO による医療用大麻サンプルの揮発性成分プロファイル

サンプル間の識別に寄与するピークを選択した上で、主成分分析に基づく香りマップを作成しました (図 4)。3つの大麻サンプルは、そのにおいプロファイルに基づいて明確に識別されました。

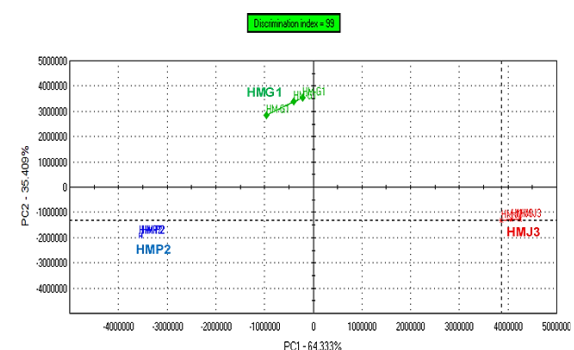


図 4 : Heracles NEO の選択ピークデータの主成分分析 (PCA) に基づく医療用大麻サンプルのにおいマップ

品質管理

HMG1 を基準品質とし、統計的品質管理法に基づく品質管理モデルを構築しました（図 5）。グラフ上では、他の 2 つのサンプルは、基準品質の許容幅（緑のバンド）に対して外れ値を示し、基準品質とは一致しないことがわかりました。

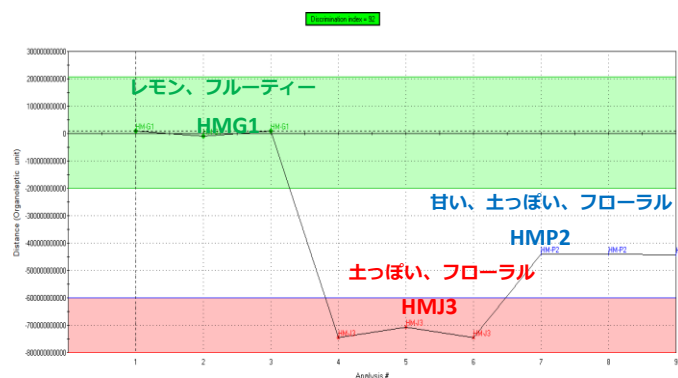


図 5：医療用大麻の品質管理モデル

AroChemBase による揮発性化合物の推定

医療用大麻サンプルに含まれる最も識別性の高い揮発性化合物の性質を、その保持指標と AroChemBase データベースを用いて調査しました。また、主要な化合物の相対的な強度を決定しました（表 3）。最も識別性の高い化合物は、エステル類、テルペン類、ケトン類等でした。

- HMG1 は、「フルーティ」、「レモン」といった記述子で特徴づけられる α -pinene, β -phellandrene, 1-methyl-4-isopropenyl-1-cyclohexene の強度が他サンプルよりも強くなっていました。
- HMP2 は、「甘い」、「フローラル」といった記述子で特徴づけられる γ -decalactone, isopentyl salicylate, piperonyl acetate を特に多く含んでいました。
- HMJ3 は、「土の様な」、「フローラル」といった記述子を有する methyl 3-hexenoate, methyl hexanoate, 2-methylpentanal, 2-heptenal などの化合物が他サンプルより優位でした。

AroChemBase が提供する定量化および官能的な説明は、官能評価パネルによるコメントと相関がみられました。

表 3：医療用大麻の花サンプルで最も識別性の高い揮発性化合物（識別力 > 0.97）

Columns			Area peak x 10-2		
MXT5 ±20	MXT1701 ± 20		HMG1	HMP2	HMJ3
747	837	2-methylpentanal (earthy, fruity...)	23	7	149
816	/	2-hydroxy-3-pentanone (earthy.)	0	1	27
871	918	ethyl isovalerate (fruity...); ethylbenzene (floral...)	12	1	36
924	988	methyl hexanoate (fruity...); methyl 3-hexenoate (earthy...)	200	124	628
938	945	alpha-pinene (terpenic, lime...)	1253	51	56
950	1062	2-heptenal (earthy, grassy, sulfurous...)	6738	4660	16365
967	994	beta-pinene (green, terpenic...)	772	1733	865
1026	1061	beta-phellandrene (fruity...); 1-methyl-4-isopropenyl-1-cyclohexene (lemon...)	8218	282	274
1048	1061	limonene (citrus, fruity...)	15782	26440	9384
1106	1158	p-menthatriene (terpenic...)	34198	2374	644
1464	/	gamma-decalactone (sweet, lactone...)	783	4012	878
1498	1733	delta-decalactone (sweet, coconut...)	159	843	159
1516	/	piperonyl acetate (floral...)	22	122	36
1538	/	Isopentyl salicylate (floral, sweet...)	133	591	269

味覚分析

分析条件

サンプルは、味覚センサーセット#6 を搭載した電子味覚システム ASTREE で分析しました。分析条件は次の表の通りです。

表 4 : ASTREE 分析パラメータ

パラメータ	値
サンプル量	25 ml
測定間隔	180 s
データ取得時間	120 s

全体的な味の比較

ASTREE の測定に基づき、主成分分析 (PCA - 図 6) を使用して、全体的な味のマップを構築したところ、3 サンプル間で明らかな味の違いが認められました。

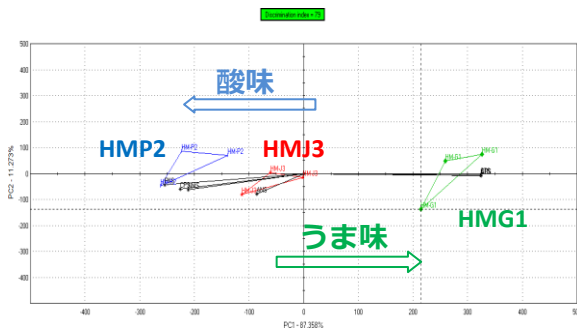


図 6: 医療用大麻サンプルの味マップ

味の特徴の比較

電子味覚システムの7本のセンサーのそれぞれで観察された信号は、3つの大麻サンプル間の違いを示しています (図 7)。

味の比較では、HMG1 が大麻のサンプルの中で最も酸味が弱く、うま味が強いことがわかりました。

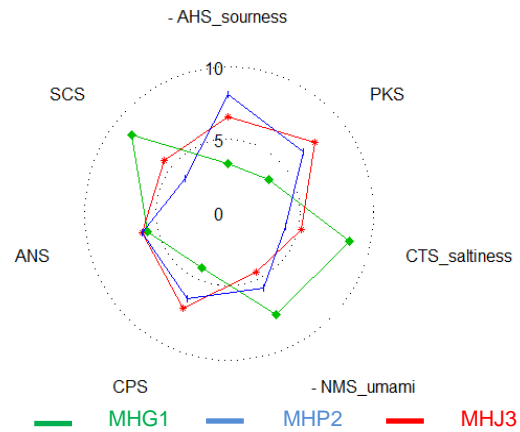


図 7a: ASTREE 7 センサーの信号によるレーダーチャート

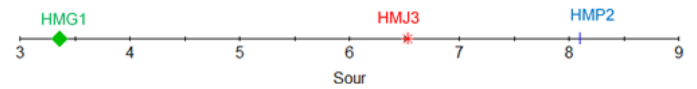


図 7b: 医療用大麻サンプルの酸味強度ランキング

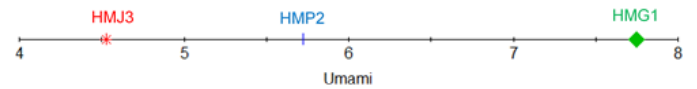


図 7c: 医療用大麻サンプルのうま味強度ランキング

医療用大麻の官能分析

フラッシュ GC ノーズ Heracles NEO と電子味覚システム ASTREE から生成されたデータは、多変量解析を利用できるように単一のライブラリに統合することができます。統合データの解析によって、大麻サンプルの官能マップが得られました (図 8)。

Discrimination index = 99

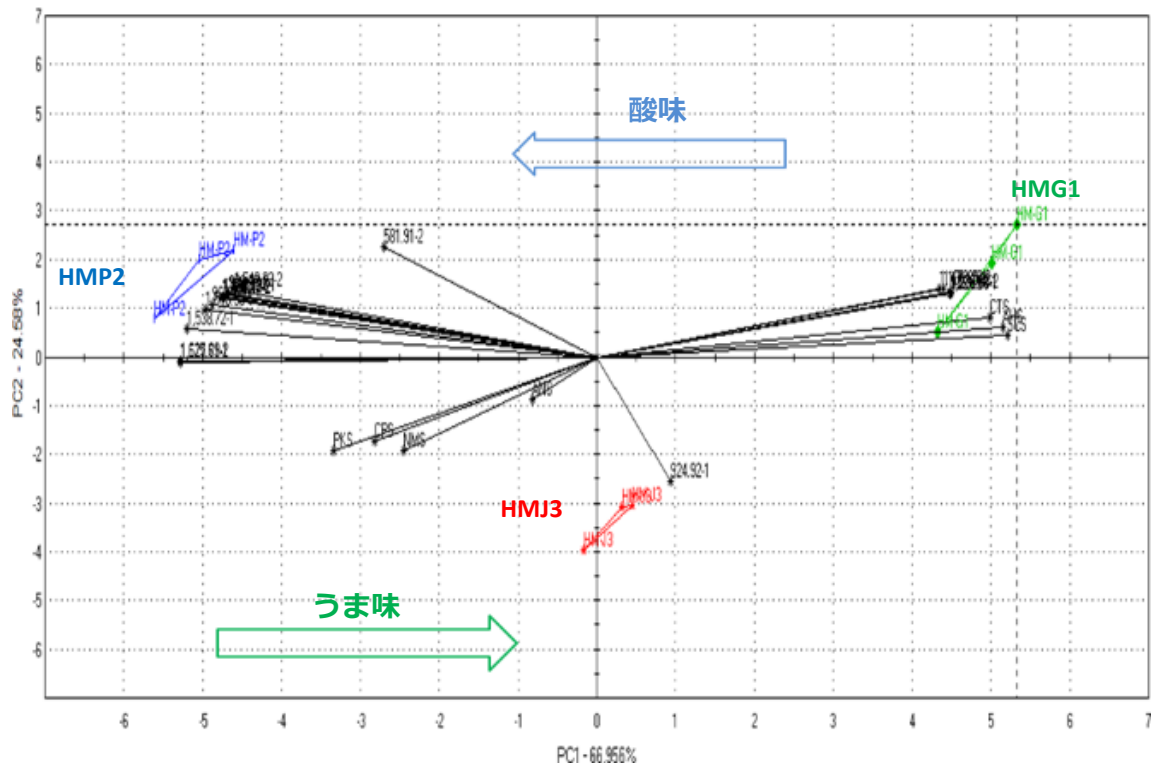


図 8: Heracles NEO および ASTREE データを使用した主成分分析 (PCA) に基づく医療用大麻サンプルの官能マップ

結論

医療用大麻の感覚プロファイルは、フラッシュ GC ノーズ Heracles NEO と 電子味覚システム ASTREE を使用して評価されました。サンプル間において味に明確な違いが見られました。どちらの機器も、パネルの風味認識に合致したデータを生成します。

製薬業界において、フラッシュ GC ノーズ Heracles NEO および 電子味覚システム ASTREE は、製品開発目的でさまざまな用途に使用されています。

- 競合製品/ジェネリック製品の官能プロファイリングまたはベンチマーク
- 味・臭いマスキング効果試験
- 製剤の味に近いプラセボの開発

本資料は発行時の情報に基づいて作成されており、予告なく改訂することがあります。 2023年6月