## ラマン分光—PLS 回帰によるカラメル反応の追跡

(日大工¹) ○矢吹 泰斗¹・内藤 瞭太¹・小林 厚志¹・沼田 靖¹

Tracking of Caramel Reaction by Raman Spectroscopy-PLS Regression (¹College of Engineering, Nihon University) ○ Taito Yabuki,¹ Ryouta Naitou,¹ Atsushi Kobayashi,¹ Yasushi Numata¹

Caramel reaction is one of the browning reactions without enzymes. This is a reaction in which only sugars are heated to produce sugar dehydrates and complex polymerized products. In the food industry, the unique aromas and bitterness produced by this reaction are used in a variety of dishes. The chemical nature of this reaction has been studied for a long time, but the reaction mechanism has not been fully elucidated<sup>1)</sup>.

The quantitative analysis has been carried out by Raman spectroscopy in our laboratory. In the present study, D-glucose was heated and quantified the concentration change of the sugar using Raman spectroscopy and PLS regression to track the caramel reaction.

A decrease in the amount of glucose was observed until 3 hours after the start of the reaction, then amount of glucose unexpectedly started to increase. However, no new peaks appeared in the Raman spectrum, suggesting that structural analogues of glucose may have been formed.

The UV absorption spectrum showed new absorption bands at 229 nm and 288 nm. The intensity ratios of these two absorption bands are different with respect to the reaction time, indicating the formation of different molecules. We are currently investigating the identification of this molecule.

Keywords: Raman spectroscopy; Partial least squares regression; Glucose; Caramel reaction;

酵素が関与しない褐変反応の要因として代表的なものの一つに、カラメル反応がある。この反応は糖類のみを加熱することで糖脱水物や複雑な重合物を生じる反応である。食品工業ではこの反応で生じた特有の芳香や苦味を、様々な料理に利用している。また、この反応の化学的本態は古くから研究されているが、反応機構は十分に解明されていない<sup>1)</sup>。

当研究室はラマン分光法と部分的最小二乗(Partial Least Squares: PLS)回帰を用いて、種々の糖分子の定量を行ってきた。そこで本研究ではカラメルの研究がスクロースに集中していることや、複雑な重合物が生成されることを鑑み、分子の結合が最も単純である単糖のD-グルコースを加熱し、ラマン分光法とPLS回帰を用いて糖の濃度変化を定量してカラメル反応を追跡した。その結果、反応開始3時間まではグルコースの減少が観測されたが、それ以降予測に反してその量が増加に転じた。しかしながら、ラマンスペクトル中には新たなピークは現れておらず、グルコースの構造類似体が生成している可能性がある。

紫外吸収スペクトルを測定したところ、229 nm と 288 nm に新たな吸収帯が観測された。この 2 つの吸収帯の強度比は反応時間に対して異なるため、違う分子が生成していることがわかった。目下この分子の同定について検討しているところである。
1) Kitaoka and Suzuki, Bulletin of the Shimane Agricultural College, 15, 19-24, (1967).