

ラマン分光法によるケルセチンとその配糖体ルチンの定量分析

(日大工¹) ○渡部 菜月¹・横山 達紀¹・矢吹 泰斗¹・沼田 靖¹

Quantitative analysis of quercetin and rutin with Raman spectroscopy

(¹College of Engineering, Nihon University) ○Natsuki Watabe,¹ Tatsuki Yokoyama,¹ Taito Yabuki,¹ Yasushi Numata¹

Quercetin, one of the polyphenols, is a beneficial molecule for human health. It is known to be abundantly contained in the outer peels of onions. However, most of it is discarded. If the valuable components can be extracted from the food waste, the waste would be reduced. The Raman spectroscopy that can be used for in-situ measurement was suitable for the concentration track.

In the previous study, the extracted quercetin was determined with Raman spectroscopy¹⁾. The only peak at 600 cm⁻¹ was used for quantification. However, the rutin, glucoside of quercetin, may be included in the extracted solution. Since similar structural compounds have close vibrational energies, it is difficult to determine the single peak. In such cases, multivariate analysis has been widely used. In the present study, the Raman spectra of quercetin and rutin in several concentrations were measured, and the Partial Least Squares (PLS) model was made. Then the concentration of the mixed solutions of quercetin and rutin were determined using the PLS regression model. The obtained values were in good agreement with the concentrations determined from the masses. Now, we are quantifying the extracted solution.

Keywords: Raman spectroscopy; Partial least squares regression; Similar structure compound

ケルセチンはポリフェノールの一種で人体に有用な成分であることが知られている。それはタマネギの外皮に多く含まれているが、そのほとんどは廃棄されてしまっている。このような食品廃棄物から有用成分を取り出し利用できれば、食品廃棄物の量を減らすことができる。有効成分を抽出する際の濃度管理にはその場測定が可能であるラマン分光法が適していると考えた。

当研究室ではラマン分光法を用いて、タマネギの外皮から抽出されたケルセチンの定量を行った¹⁾。この時、定量に用いたのはケルセチンの 600 cm⁻¹ の振動ピークである。しかしながら抽出されたケルセチン溶液の中にはケルセチンの配糖体であるルチンも含まれている可能性がある。構造類似化合物は近い振動エネルギー準位を持つため、単一のピークのみで定量するのは困難である。このような場合、多変量解析が広く行われている。本研究ではまず種々の濃度のケルセチン、ルチンのラマンスペクトルを測定し、部分最小二乗 (Partial Least Squares: PLS) 回帰モデルを作った。次にそのモデルを使っていろいろな濃度で混合した溶液のラマンスペクトルから濃度を決定したところ、仕込み質量から求められた濃度とよく一致していた。目下、実サンプルの定量を行っているところである。

1) Numata, Tanaka. Food Chemistry. 126, 751-755, (2011).