

食品成分の分子間相互作用の解明 —水中でのカテキン類の複合体形成—

技術の特徴

・複雑系である食品中において、成分は分子間で相互作用を起こしていると考えられます。そしてその相互作用は、食品の官能的な特性に実際に影響を与える事例があることから、品質を考える上で重要な現象ですが、一部の色素以外の多様な物質や、相互作用の詳細に関する研究報告は乏しい状態です。そこで、食品成分の分子間相互作用について解明に取り組んでいます。

研究の内容

緑茶に含まれるポリフェノールのカテキン類について、自己会合、カテキン類同士の分子間相互作用の定量的な解析と、カテキン複合体の構造解析を行いました。

表1 NMR滴定データから算出された水中、300 Kにおけるカテキン類の自己会合定数 (M^{-1})

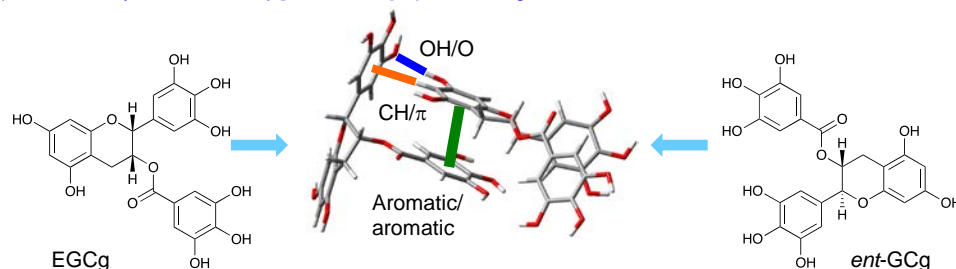
Gallate-type				Non-gallate-type			
2,3-cis		2,3-trans		2,3-cis		2,3-trans	
EGCg	ECg	ent-GCg	ent-Cg	EGC	EC	ent-GC	ent-C
10.2 ± 1.0	9.8 ± 1.1	13.3 ± 1.1	20.2 ± 1.1	3.3 ± 1.1	2.1 ± 1.1	2.1 ± 1.1	4.4 ± 1.2

表2 NMR滴定データから算出された水中、300 KにおけるEGCgと他のカテキンの会合定数 (M^{-1})

Gallate-type			Non-gallate-type				
2,3-cis		2,3-trans		2,3-cis		2,3-trans	
EGCg	ent-GCg	ent-Cg	EGC	EC	ent-GC	ent-C	
26.8 ± 1.1	56.3 ± 1.0	50.2 ± 1.0	11.6 ± 1.0	13.4 ± 1.0	9.9 ± 1.1	14.6 ± 1.1	

Reprinted with permission from Ujihara and Hayashi, *J. Nat. Prod.* **2016**, *79*, 66–73. Copyright 2015, American Chemical Society and American Society of Pharmacognosy.

カテキン類は水中で、単体、ホモ二量体(自己会合)、ヘテロ二量体の化学形態で存在すること、自己会合、ヘテロ会合とも、
2,3-trans体ガレート型カテキン > 2,3-cis体ガレート型カテキン > 非ガレート型カテキン
の順で起こしやすいことが明らかになりました。



Reprinted with permission from Ujihara and Hayashi, *J. Nat. Prod.* **2016**, *79*, 66–73. Copyright 2015, American Chemical Society and American Society of Pharmacognosy.

図1 二次元NMRスペクトルと量子化学計算により推測したEGCg/ent-GCg複合体の構造

今後の展開

さらに多くの食品成分、特に官能特性に関与する物質の複合体形成の解析、多成分系での解析法の開発

参 考

Ujihara and Hayashi, *J. Nat. Prod.* **2016**, *79*, 66–73.