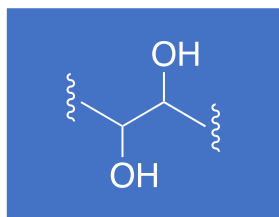


食品成分の3次元分子構造の理論的解析

－1,2-ジオール構造の配座安定性の起源－

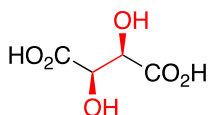
成果の特徴

- 食品成分の性質に影響する3次元分子構造（配座）を推定することができます。
- 1,2-ジオール構造の配座はゴーシュ型が優先することが知られています。本研究では、結合軌道の観点からその新たな起源を発見しました。

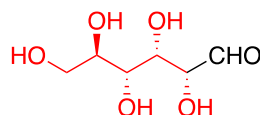


1,2-ジオール構造

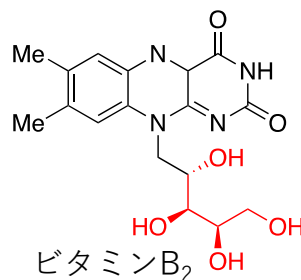
食品成分に見られる1,2-ジオール構造の例



L-酒石酸



D-グルコース

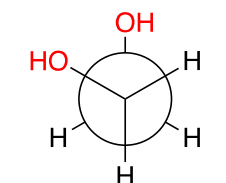


ビタミンB₂

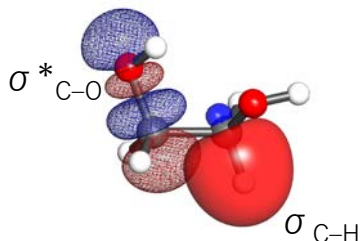
従来の代表的説明

σ 結合性軌道
 σ^* 反結合性軌道

アンチ型の $\sigma_{C-O}^*/\sigma_{C-O}$ 相互作用よりも大きな安定化効果

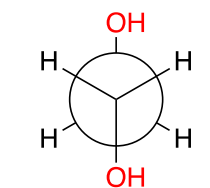
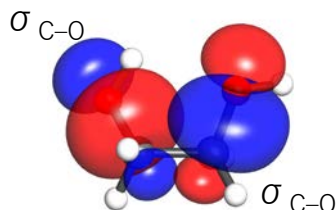


ゴーシュ型配座

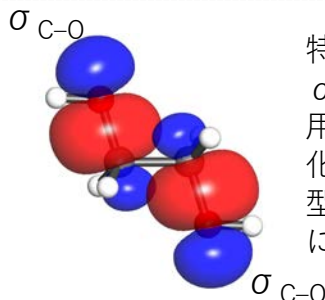
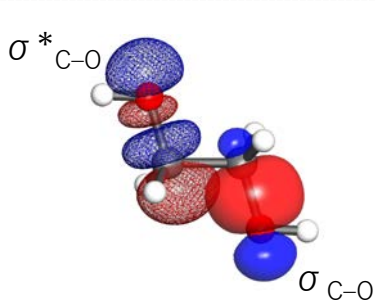


新解釈

回転軸周りの6本の結合についてそれらの結合軌道全ての組み合わせを考慮



アンチ型配座



特にアンチ型の $\sigma_{C-O}/\sigma_{C-O}$ 相互作用の大きな不安定化効果がゴーシュ型を相対的に安定にする

Reused with permission from *J. Phys. Chem. A* **2017**, *121*, 8484–8494.
Copyright 2017, The American Chemical Society.

成果の活用

本研究の成果とそのアプローチは、今後さらに複雑な分子の3次元構造の理解に応用され、食品の味、色、香りを制御する技術またはそれらを検知する技術の開発に貢献します。

関連論文 *J. Phys. Chem. A* **2017**, *121*, 8484–8494.