

量子化学計算による食品成分の物性予測

－明示的な溶媒分子モデルによる高精度化－

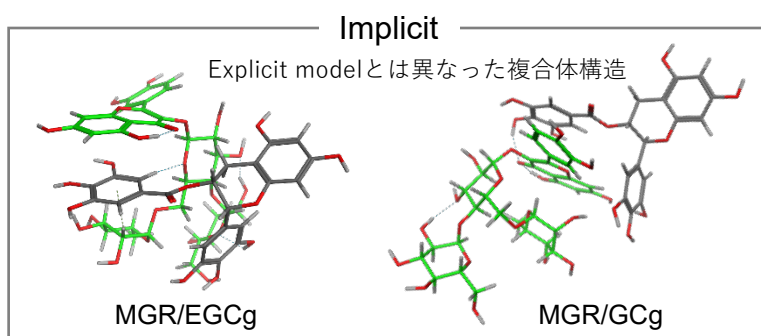
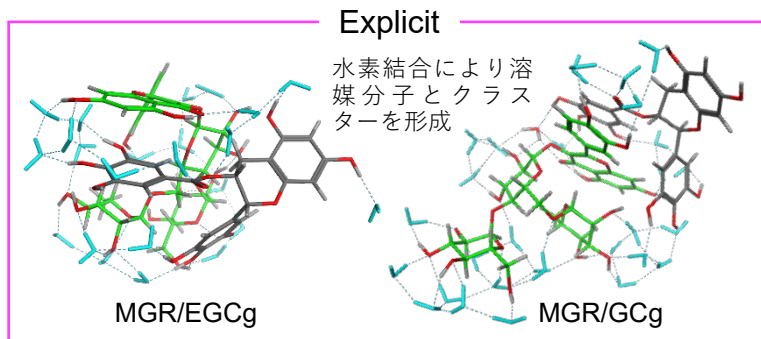
成果の特徴

- 量子化学計算を用いて水中における食品成分の物性を予測する際に、溶媒である水分子を明示し(Explicit model)、溶質分子と同様の理論レベルで取り扱うことによって、溶媒効果を連続誘電体として考慮する一般的なモデル(Implicit model)を使用するよりも高精度な結果を得ることが期待できます。

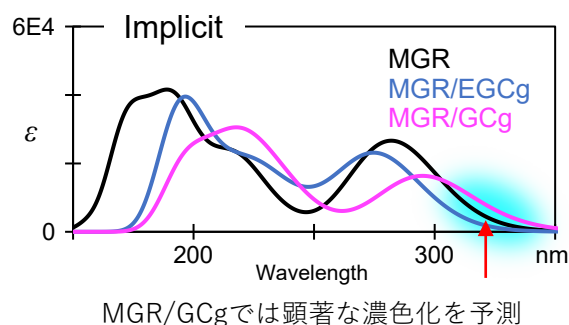
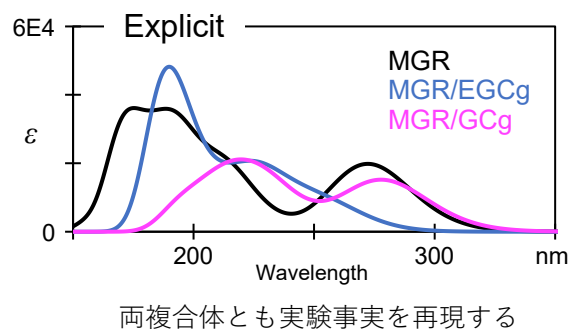
成果の内容

実験事実：モノグルコシルルチン(MGR)は水中にてガレート型カテキン(EGCg、GCg)と複合体を形成することにより、その黄色が淡色化する。

分子動力学計算とDFT計算(M06-2X/6-31G(d))を併用した複合体構造の最適化



TD-DFT計算による吸光スペクトルの予測(LC-PBEPBE/6-31G(d,p))



溶媒分子を明示的に扱ったモデルは実験事実と同様の結果が得られる

▶ 信頼性の高い予測モデル

想定される用途・連携希望先

食品の品質に関する学術研究、品質評価または制御技術の開発、品質予測のためのビッグデータ構築のツールとして幅広い利用が想定されます。

参考

Ujihara, T.; Hayashi, N. *J. Nat. Prod.* **2019**, 82, 28.

担当研究者：○氏原 ともみ、林 宣之
所 属：食品研究部門
食品流通・安全研究領域