

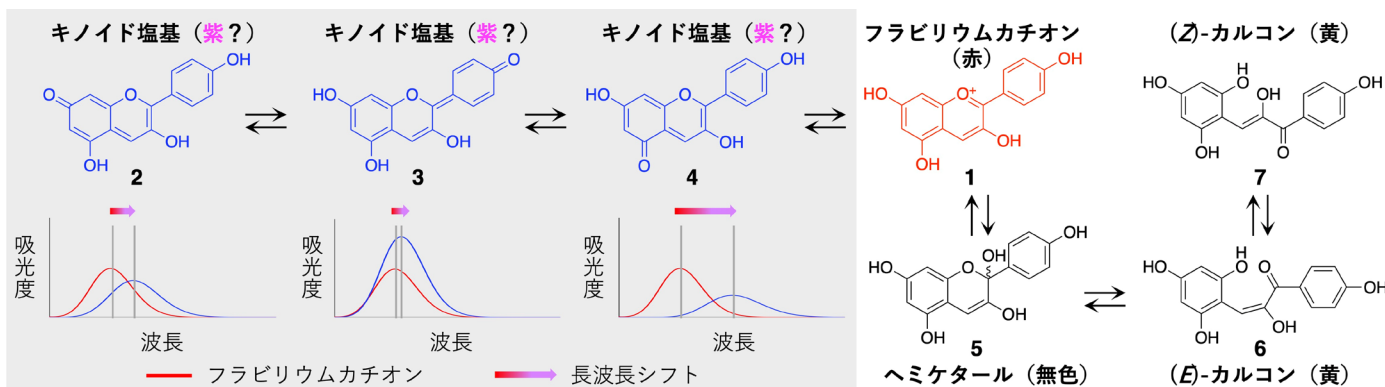
アントシアニジンの本当の色

— 量子化学で食品成分の物性を解く —

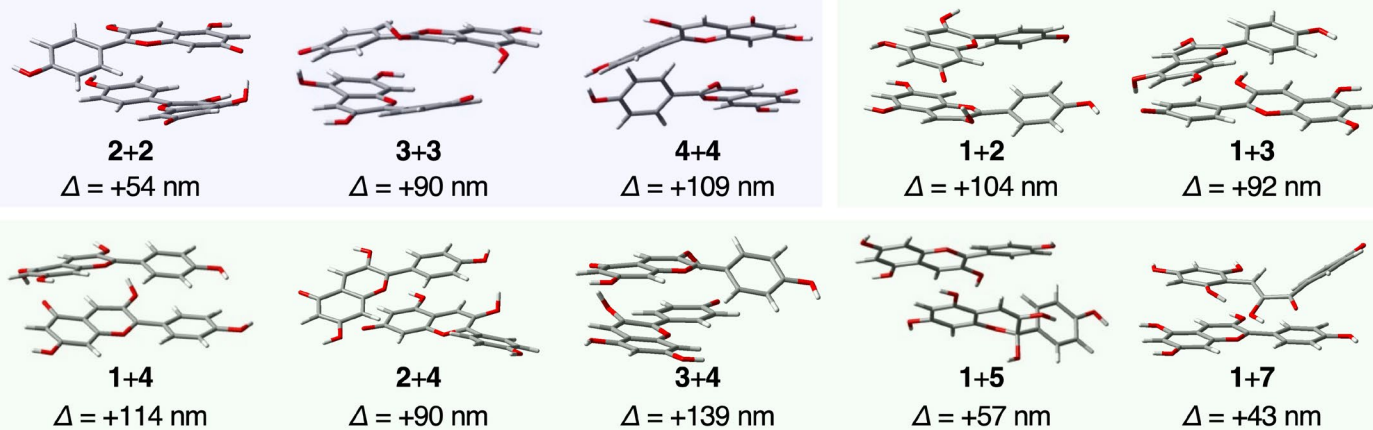
成果の特徴

- ・農産物・食品の重要な色素成分アントシアニン類の発色団であるアントシアニジンのキノイド塩基の色を量子化学計算によって明らかにしました。
- ・これまでキノイド塩基の色と信じられてきた色は、系内に共存する分子種間の相互作用を含むアントシアニン水溶液の色であることがわかりました。
- ・分子種の組み合わせによって、色相と色調を制御できる可能性があります。

成果の内容



弱酸性条件下で存在するペラルゴニジン由来の分子種（単量体）とTD-DFT [ω B97X-D/6-31++G(d,p)]によって推定されるキノイド塩基とフラビリウムカチオンの各単量体の吸光スペクトル（電子スペクトル）



フラビリウムカチオン**1**を基準に顕著な最長波長シフト (Δ) が予想される1:1複合体構造

想定される用途・連携希望先

農産物や食品の品質（色味）制御への利用が想定されます。

参考

Hayashi, N.; Ujihara, T. *J. Org. Chem.* **2025**, *90*, 9408–9416.

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