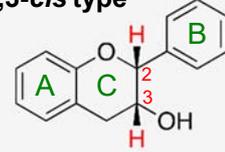


フラバン-3-オール類の水中構造 —DFT計算による解析—

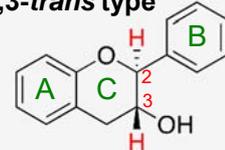
技術の特徴

- (1) **フラバン-3-オール類**は、嗜好料作物(チャ、カカオ)、果実、野菜などに含まれる**ポリフェノール**で、**カテキン類**が有名です。
- (2) 分子は原子間の一重結合の回転によって、様々な**三次元構造**をとることができます。**溶液中における分子構造**やその**存在率**を知ることは、食品の特質や利用を考えていく上で極めて重要です。化学構造式や含有量を解明するだけでは十分ではありません。
- (3) これらの三次元構造を含む分子の性質は、その電子状態の解析から予想することができます。
- (4) **密度汎関数法(DFT法)**は、分子の電子状態を解析するためのコストパフォーマンスの高い方法です。

2,3-cis type

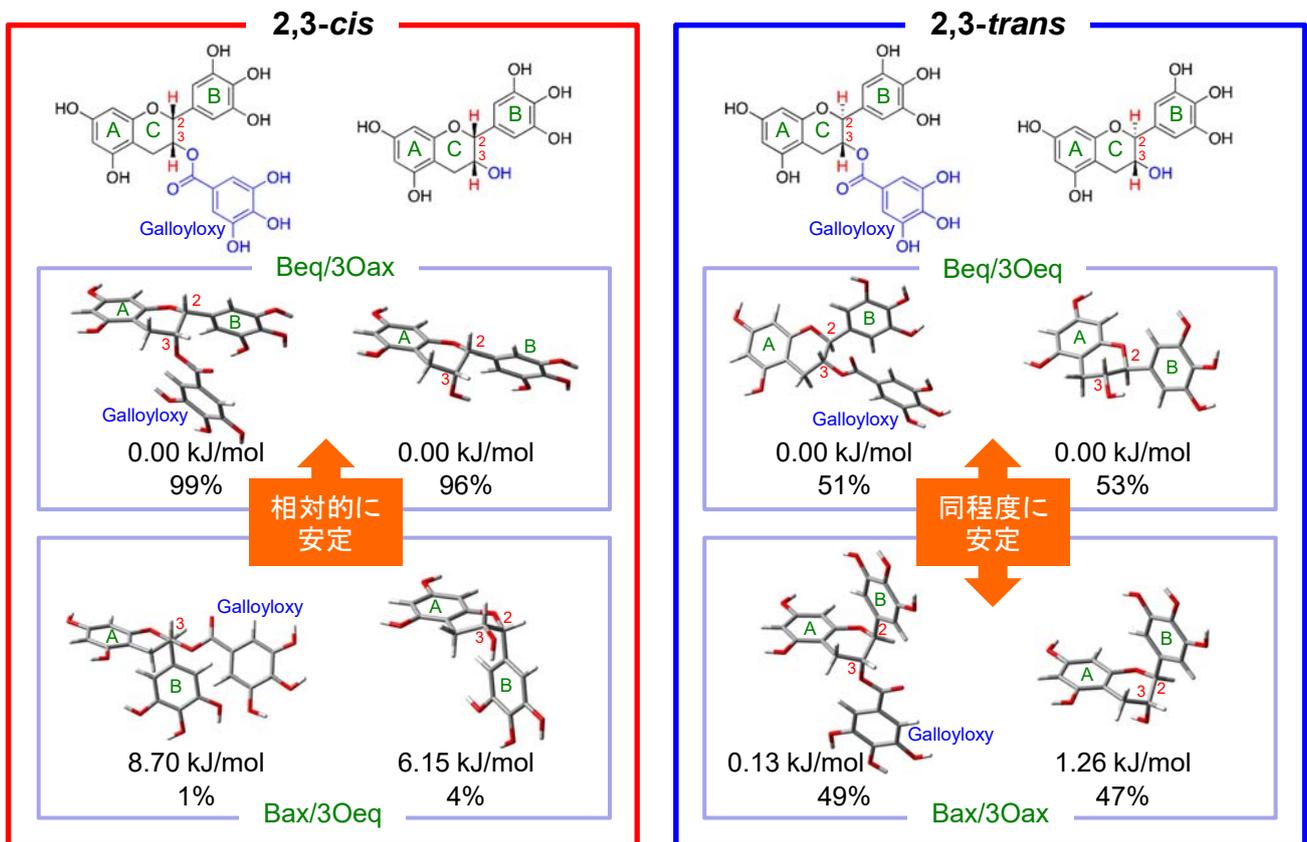


2,3-trans type



フラバン-3-オール類
の基本骨格

研究の内容



M06-2X/6-311++G(2df,2pd)//M06-2X/6-311G(d,p)レベルの計算による最適化構造とGibbsエネルギー(存在率はC2/C3に関して同じ立体配座を持つ全てのコンホマーの合計値)

今後の展開: 成分間相互作用に基づいた分子レベルでの食品の品質特性の解明

参 考: Hayashi, N.; Ujihara, T. *J. Nat. Prod.* **2017**, *80*, 319–327.



農研機構
食品研究部門

代表研究者: 林 宣之
所 属: 食品分析研究領域
分析基盤ユニット

問い合わせ先: 交流チーム: 029-838-7980