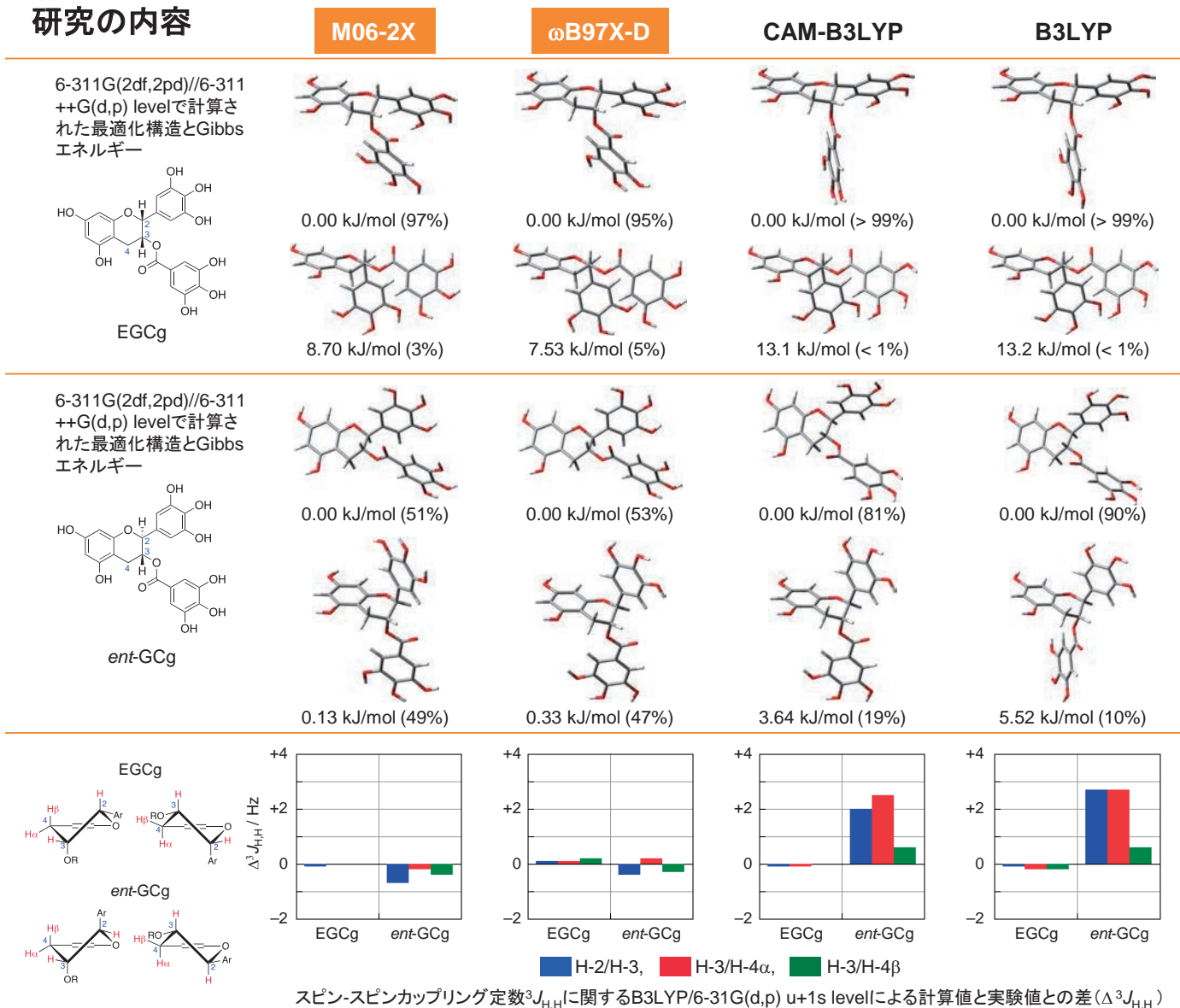


# 計算化学を用いた食品成分の三次元構造解析 —DFT計算における分散力補正の効果—

## 技術の特徴

- ・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。これらの**分子構造**や**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とても重要です。
- ・これらの分子の性質は、量子化学計算による電子状態の解析から予想することができます。
- ・**DFT法**は、*ab initio*法に比べ、コストパフォーマンスの高い量子化学計算法です。
- ・複合体構造だけではなく、**単分子構造のシミュレーション**においても、**分散力補正**された交換相関関数を用いたDFT計算によって、より高精度の結果が期待できます。

## 研究の内容



## 今後の展開 参 考

分子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と制御  
Hayashi, N.; Ujihara, T. *J. Nat. Prod.* **2017**, *80*, 319–327.

(Modified and reprinted with permission from *J. Nat. Prod.* **2017**, *80*, 319–327. Copyright 2017 American Chemical Society.)



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