

## ルチン色素水溶液の深色化機構の解明

ーカフェインとの複合体形成による分子軌道の非局在化ー

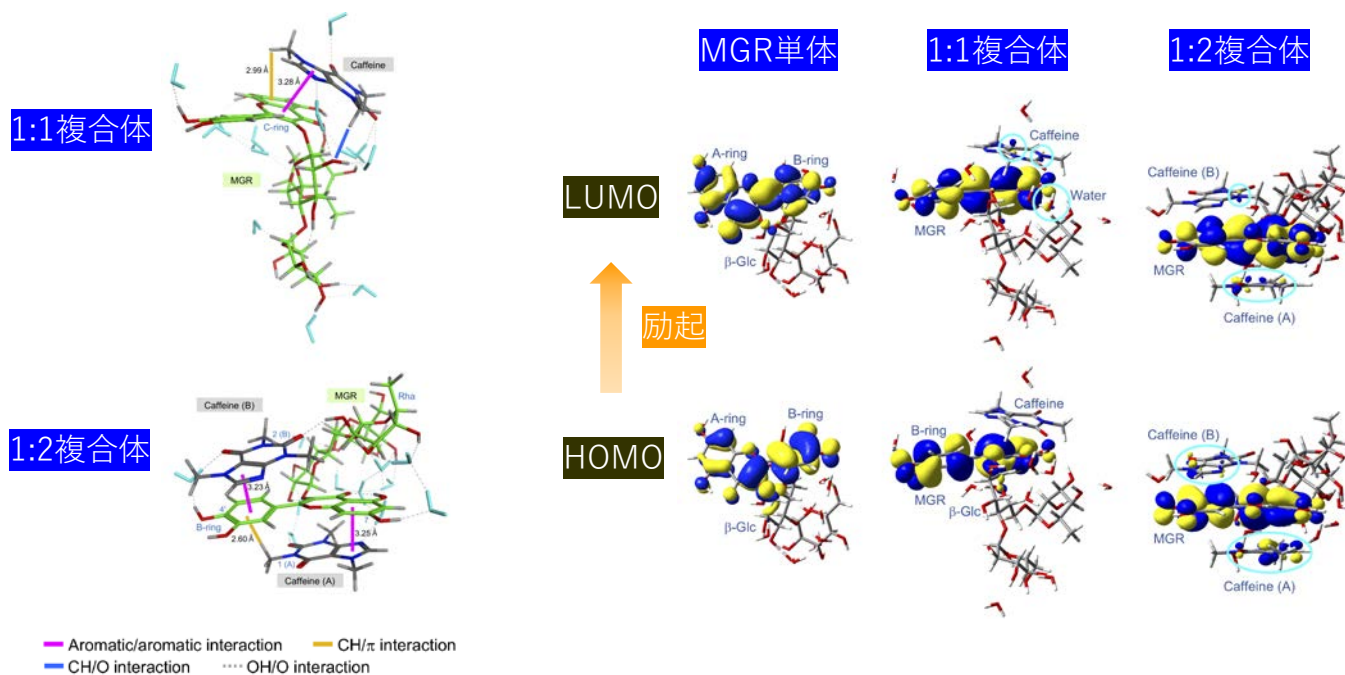
## 成果の特徴

- 食品中では多くの化学成分が共存し、それらの成分同士の相互作用は品質に影響を与えます。食品の品質をより深く理解し、新たな品質制御技術につなげるために、成分間相互作用を理論的に把握するアプローチは有用です。
- ルチン色素（MGR）の水溶液にカフェインを添加すると、複合体形成による深色効果が見られます。食品の色制御技術につながる知見を得るために、この現象を計算化学を用いて詳しく解析しました。

## 成果の内容

水中でルチン色素とカフェインは1:1および1:2複合体を形成しますが、これらは直接の分子間相互作用に加え水分子を介する架橋構造によって安定化されます。

複合体では、発色に関わる分子軌道が色素分子からカフェイン分子・水分子にも非局在化しています（水色の丸）。これにより励起エネルギーが低下し、深色化が起きたと考えられます。



Reused with permission from *J. Agric. Food Chem.* 2020, 68, 323–331. Copyright 2020, The American Chemical Society.

## 成果の活用

本研究の成果は、食品の色をニーズに応じて自在に制御する実用技術への発展が期待されます。

関連論文 Ujihara & Hayashi, *J. Agric. Food Chem.* 2020, 68, 323–331.