

カテキン構造の配座安定性と分子軌道

結合軌道間相互作用の相反する役割

成果の特徴

- 食品の味、香り、色、働きを考える上で、成分分子の配座は重要な要素です。分子の配座は電子構造と密接な関係にあり、その性質に大きく関わるためです。
- カテキン類（フラバン-3-オール）は一見すると不思議な配座安定性を示しますが、それを定性的に予測したり、その理由を説明することは困難です。
- カテキン構造の配座安定性の特徴は結合軌道間相互作用に基づいて解釈できます。
- 通常は不安定化要因が支配的となるゴーシュ関係にあるビシナル位(隣接炭素上)の置換基間の相互作用が生む大きな安定化効果は大変興味深い知見といえます。

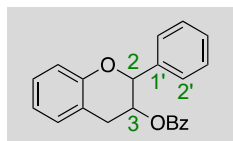
成果の内容

相対的
安定性

安定配座

不安定配座

結合軌道間
相互作用



2,3-*cis*-benzoyloxy



2,3-*trans*-benzoyloxy

2,3-*cis*-hydroxy

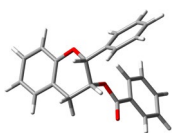
2,3-*trans*-hydroxy

2eq/3ax

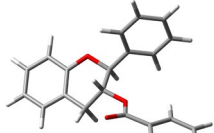
2eq/3eq

2eq/3ax

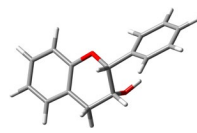
2eq/3eq



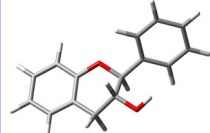
0.00 kJ/mol



0.00 kJ/mol



0.00 kJ/mol



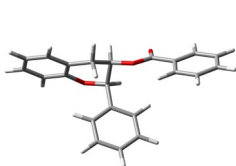
0.00 kJ/mol

2ax/eq

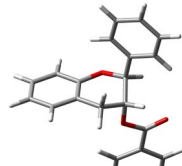
2ax/ax

2ax/eq

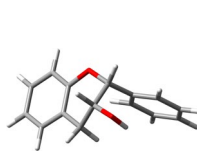
2ax/ax



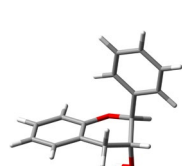
1.44 kJ/mol



-4.73 kJ/mol



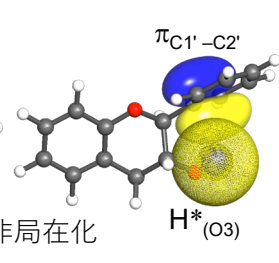
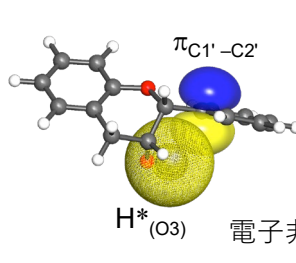
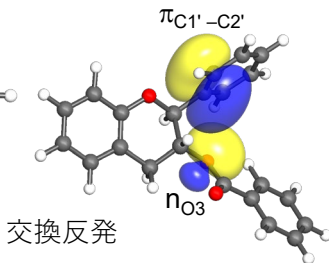
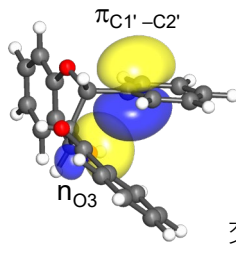
1.68 kJ/mol



1.61 kJ/mol

不安定化効果

安定化効果



成果の活用

食品成分分子の配座と分子軌道に関する情報は、それらを検知するセンサの分子設計や食品の品質制御技術の開発に役立てられます。

参考文献：Hayashi, N.; Ujihara, T.; Ikeda, H. *Comput. Theor. Chem.* **2021**, *1203*, 113362.