

水中のEGCg/カフェイン複合体構造

NMRと計算化学を併用した高精度解析

成果の特徴

- 多数の化合物が共存する食品中では、それらが相互作用し、品質に影響を与えます。その影響を正確に評価するためには、成分間相互作用を正確に理解することが必要です。
- 水中における分子構造と分子間相互作用を知ることは容易ではありません。しかし、実験的手法と理論的手法を併用することにより、それらを高精度に解析することが可能となります。

成果の内容

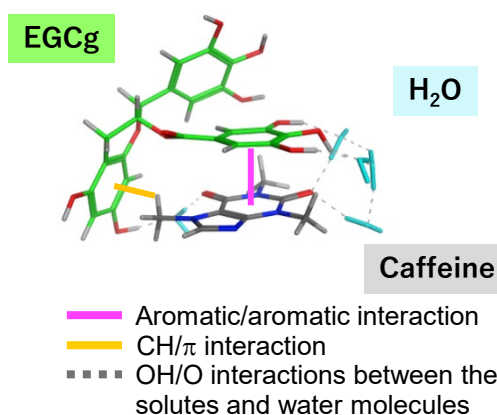
ポリフェノールとカフェインの複合体形成は、白色沈殿が生じるクリームダウン現象等が良く知られています。しかし、**水中の複合体構造**については十分に理解されていません。今回は、NMR実験と計算化学シミュレーションを併用したアプローチにより、水中での**EGCg(カテキン)とカフェインの複合体構造**が解明できました。

(1) 複合体中の成分組成 (化学量論)

食品成分間のように中程度の強さで結合した複合体に対しては、Jobプロットは満足する化学量論比を与えません^a。¹H NMR滴定プロットのカーブフィッティングによって得られる**EGCg/カフェイン複合体の化学量論比=1:1、結合定数=68.8**です。

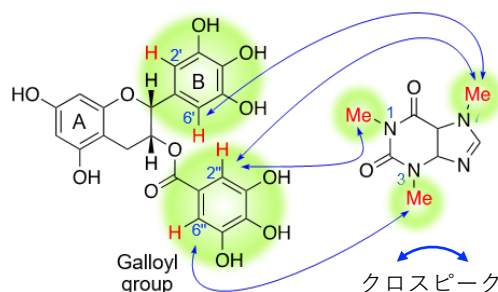
(a) Ulatowski *et al.* *J. Org. Chem.* **2016**, *81*, 1746.

(2) 化学計算による複合体構造^b



(b) Reused from *J. Mol. Struct.* **2021**, *1238*, 130434.

(3) NOESY実験結果^b



EGCg/カフェイン複合体の**水中構造^b**と**結晶中の部分構造^c**との類似性が明らかになりました。

(c) Ishizu *et al.* *Chem. Pharm. Bull.* **2016**, *64*, 676.

成果の活用

この成果は、成分間の相互作用を考慮した食品の品質評価法・品質制御法の開発につながることを期待されます。

関連論文 Ujihara & Hayashi, *J. Mol. Struct.* **2021**, *1238*, 130434.