

# 複合体形成に伴う色素の呈色変化機構

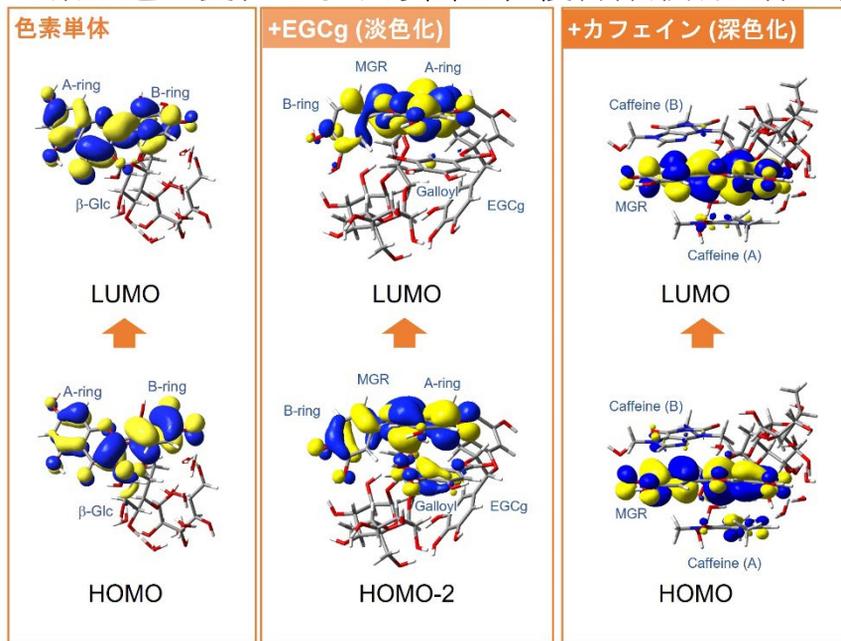
## －分子軌道の変化が呈色に与える影響－

### 成果の特徴

- 食品に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。
- 複合体形成により呈色が変わるルチン色素について、その機構を明らかにしました。

### 成果の内容

ルチン色素にEGCgを添加すると淡色化を、カフェインを添加すると深色化を示します。同じ色素が逆の変化を示す原因は、複合体形成に伴う分子軌道の変化です。



HOMO = 最高被占軌道, LUMO = 最低空軌道

Reused with permission from *J. Nat. Prod.* 2019, 82, 2–8. Copyright 2019, The American Chemical Society and American Society of Pharmacognosy, and *J. Agric. Food Chem.* 2020, 68, 323–331. Copyright 2020, The American Chemical Society.

- カフェインとの複合体では、LUMOの分布がカフェインと溶媒分子(水)にも広がり、この非局在化によって電子の励起エネルギーが低下し深色化（エネルギーがより低い長波長の光を吸収）します。
- EGCgとの複合体では、励起に関わる軌道がよりエネルギー準位の低いHOMO-2になり、電子の励起に高いエネルギーが必要となることに加え、HOMO-2とLUMOがより離れて分布するために電子の遷移確率が低下して淡色化現象が起こります。

### 成果の活用

本成果は、食品の色を自在に制御し、ニーズに応じた品質の食品を提供可能とする実用技術への発展が期待されます。

### 参考

Ujihara & Hayashi, *J. Nat. Prod.* **2019**, 82, 2–8., *J. Agric. Food Chem.* **2020**, 68, 323–331.