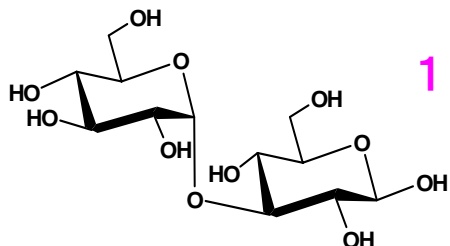


岡山理科大学直島好伸研究室・日本食品化工株式会社

# オリゴ糖の甘味や苦味の体験と 分子計算による機能の理解

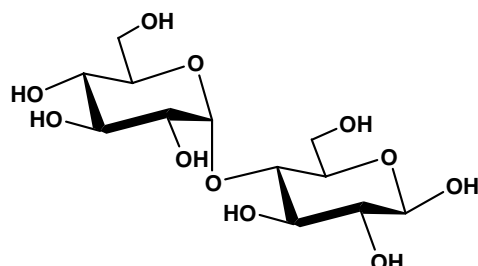
**Keywords** : 糖・食品・医薬品・生体分子・バイオテクノロジー・シミュレーション

《 分子計算シミュレーションにより糖質の甘味や苦味の機能を解析する 》

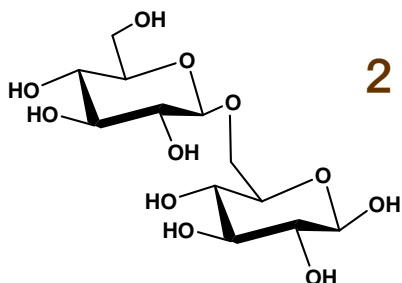


ニゲロース (α-1,3 結合)

## 1. 甘い糖



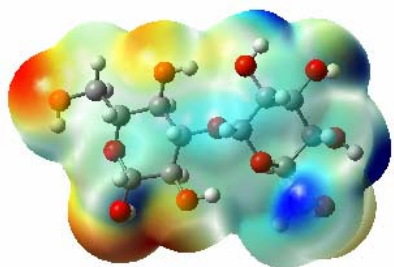
マルトース (α-1,4 結合)



## 2. 苦い糖

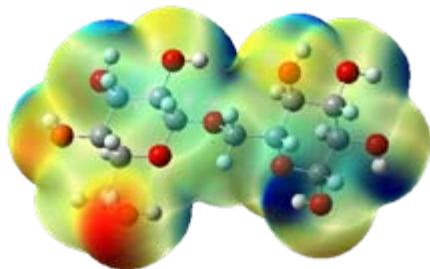
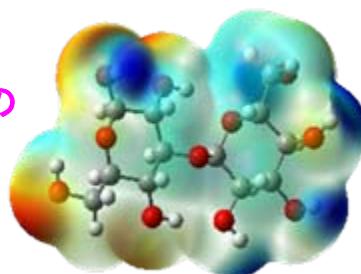
ゲンチオビオース (β-1,6 結合)  
糖質としては珍しく苦味を持つ

### グルコ2糖の量子化学計算 HF/6-31G\* - 静電ポテンシャルの算出



## 3. 甘い糖の 電荷の分布

◆ニゲロースは、還元糖側にマイナス(赤色)の電荷、非還元糖側に  
プラス(青色)の電荷が偏っている



## 4. 苦い糖の 電荷の分布

■ゲンチオビオースは、プラス(青色)に帯電している領域が多く、  
マイナス(赤色)に帯電している領域は非常に少ない

コンピュータシミュレーションは、糖質の機能を理解、予測し、  
高付加価値製品の開発、生産に繋がる重要な基幹技術と言える