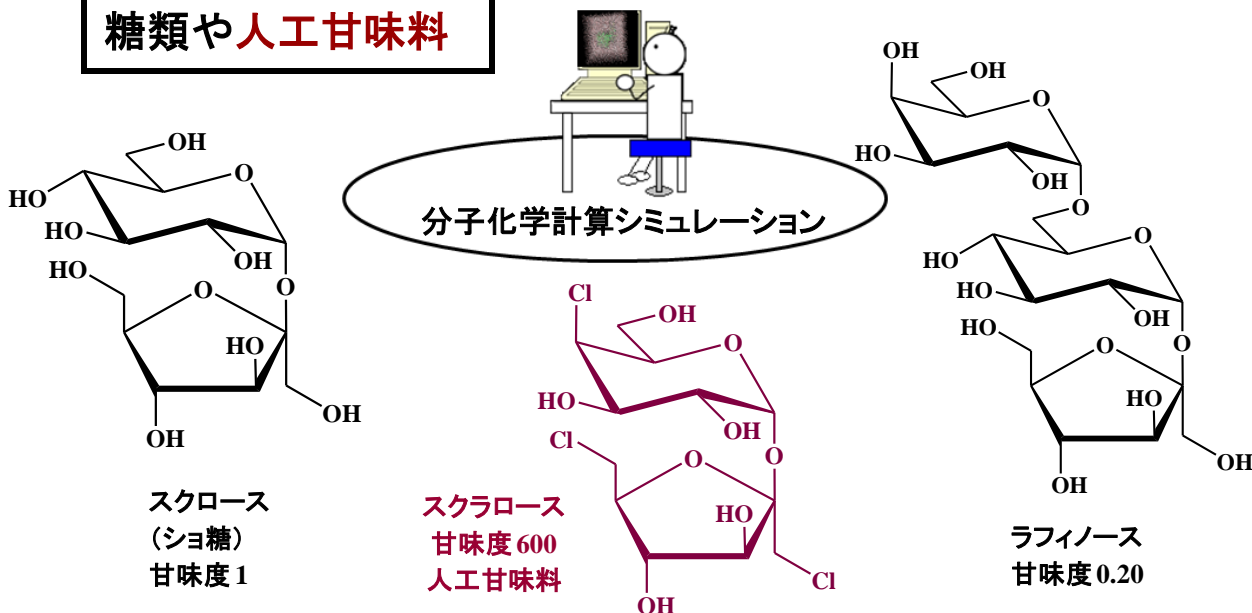


岡山理科大学直島好伸研究室・日本食品化工株式会社

新たな糖質甘味剤の開発に挑む 分子計算シミュレーション

Keywords :シミュレーション・生体分子・食品・甘味剤・バイオテクノロジー
《分子化学計算シミュレーションにより糖質の甘味のメカニズム解明に挑む》

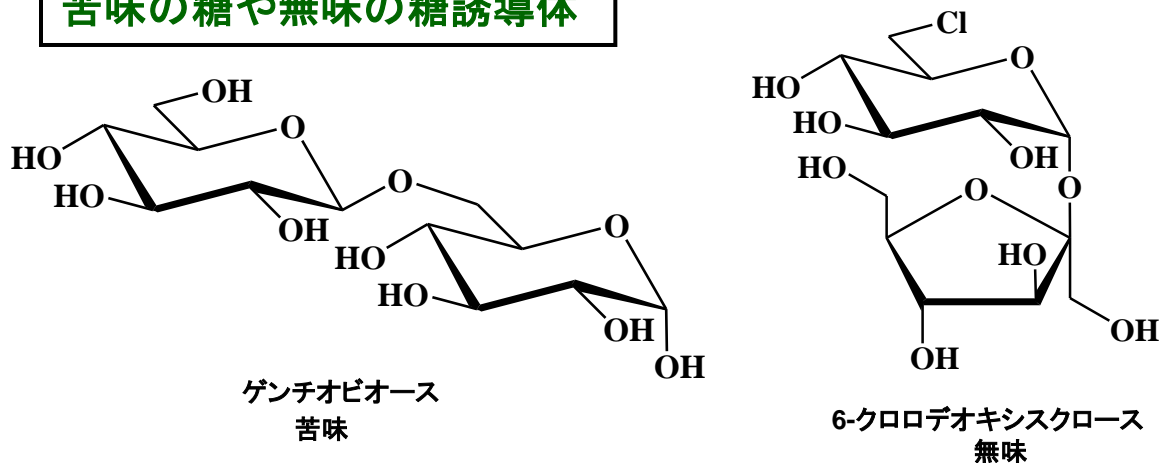
糖類や人工甘味料



◆全電子量子化学計算 — 静電ポテンシャルマップを算出し、分子中の正と負の電荷分布の類似性や違いを探る。マップは色分けされ、通常青色の部分は正の電荷に富んだ領域を、赤色の部分は負の電荷に富んだ領域を表している。

◆甘味受容体タンパク質と糖類との生体分子相互作用計算

苦味の糖や無味の糖誘導体



コンピュータシミュレーションにより、甘みを呈する糖と苦味や無味の糖の正負の電荷分布の間に、明らかな違いを見出した