

直島好伸、矢城陽一郎(岡山理科大学)、日本食品化工株式会社

甘味糖質や甘味タンパク質の 全電子量子化学シミュレーション — 新たな甘味剤の開発を目指して —

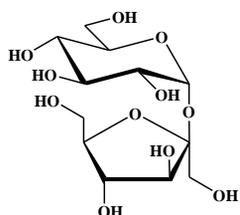
Keywords :シミュレーション・生体分子・食品・甘味剤・バイオテクノロジー

新機能物質の創成

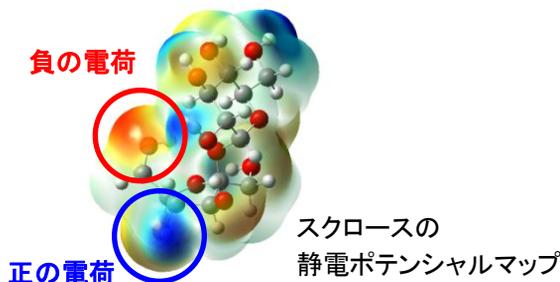
生物実験から、シミュレーションによる新機能物質の創成へ

～ 糖質・甘味タンパク質の甘味のメカニズム解明に挑む ～

甘味の糖と苦味の糖

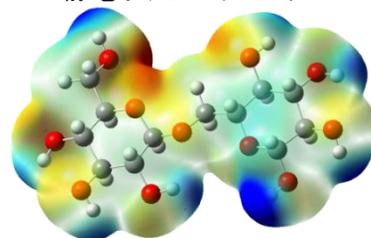


スクロース(ショ糖)
甘味度 1



スクロースの
静電ポテンシャルマップ

ゲンチオビオース(苦味の糖)
の静電ポテンシャルマップ



コンピュータシミュレーションにより、
甘みの糖と苦味の糖の電荷分布の間に、
明らかな違いを見出した



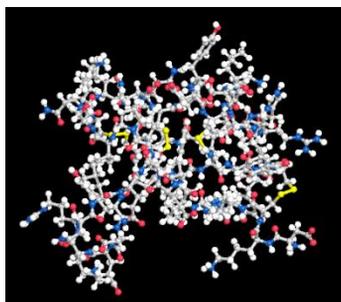
甘味の糖: 正と負の電荷が偏在している
苦味の糖: 正の電荷を帯びた部分が多く、
負の電荷を帯びた部分が少ない

◆全電子量子化学計算

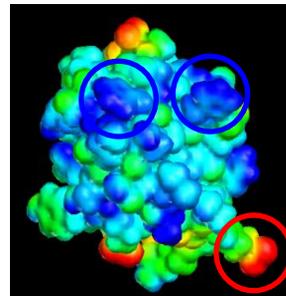
電子状態や静電ポテンシャルマップを算出し、分子中の電荷分布の類似性や違いを探る

タンパク質の全電子量子化学シミュレーション

甘味タンパク質ブラゼイン(計算中)



インスリン単量体の静電ポテンシャルマップ



タンパク質全体を一つの
分子として取り扱い、その
全電子の計算を電子相関
効果を取り込みながら精
密に計算する

◆甘味受容体タンパク質との生体分子相互作用計算

連絡先 直島好伸研究室 TEL: 086-256-9639 E-mail: naoshima@sp.ous.ac.jp

矢城陽一郎研究室 TEL: 086-256-9653 E-mail: yagi@sp.ous.ac.jp

日本食品化工(株) E-mail: yoshinori.fujimoto@nisshoku.co.jp 担当: 藤本佳則