

スクロースのクロロデオキシ誘導体のコンフォメーションと 甘味度の相関性

¹明星大理工

○鈴木陽子¹, 和泉くるみ¹

Correlation of conformation of galactosucrose derivative and degree of sweetness

○Yoko Suzuki¹, Kurumi Waizumi¹

¹Department of Physics, Meisei University, Japan

【Abstract】 It is experimentally known that the sweetness of sucrose can be controlled by replacement of the hydroxyl groups in sucrose by chloro groups. For example, 4, 1, 6'-trichloro-4, 1, 6'-trideoxy-galacto-sucrose (sucralose) is 650 times sweeter than sucrose. In order to study the origin of the difference in sweetness, we calculated the potential energy surfaces of sucrose, sucralose, and 4-chloro-4deoxy-galactosucrose by changing the dihedral angles around the glycosidic bonds. (4-chloro-4deoxy-galactosucrose is 5 times sweeter than sucrose.) The calculations were performed by B3LYP/6-311G(2d,p). The effect of solvent water was taken into account by PCM. The minimum point of the potential energy surface of 4-chloro-4-deoxy-galactosucrose is closer to that of sucrose than that of sucralose. The result suggests a relation between the conformation and sweetness of galactosucrose derivatives.

【序】 人工甘味料のスクラロースは、スクロース（ショ糖）におけるピラノース環の4位とフラノイド環の1'および2'位にある水酸基をクロロ基に置換したものであり、前者の甘味度は後者の甘味度の650倍となっている[1]。この甘味度の違いの原因として2つの糖の構造の違いが考えられるが、実際、X線構造[2,3]を比べると、グリコシド結合のまわりの2面角が大きく違っている。また、これとは別に、クロロ基を増やすことによって、甘味度が増すことも分かっている。そこで、本研究では、スクロースのクロロデオキシ誘導体のコンフォメーションを計算により調べ、甘味度との相関性について考察する。

【方法 (実験・理論)】

スクロースの誘導体である 4-クロロ-4-デオキシ-ガラクトスクロースの構造を、B3LYP/6-311G(2d,p)の密度汎関数計算により解析した。水の溶媒効果は連続誘電体モデル PCM により取り入れた。

【結果・考察】

グリコシド結合の周りに2面角 ψ と ϕ (図参照)を変化させ、エネルギーが極小となる組み合わせを調べたところ、4-クロロ-4-デオキシ-ガラクトスクロースはスクラロースよりスクロースのほうに近いという結果が得られた。一方、甘味度は4-クロロ-4-デオキシ-ガラクトスクロースはスクロースの5倍であり、構造がスクラロースよりスクロースのほうに近いということとコンシステントになる。

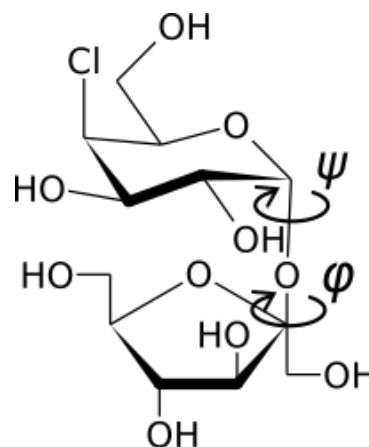


Fig. 1. 4-クロロ-4-デオキシ-ガラクトスクロースの構造.

【参考文献】

- [1] T. Suzmi, L. Hough, M. Tsuboi, T. Machinami, and N. Watanabe, *J. Carbohydr. Chem.* **13**, 1079 (1994).
- [2] D. M. M. Jaradat, S. Mebs, L. Chęcińska, and P. Lugar, *Carbohydr. Res.* **342**, 1480 (2007).
- [3] J.A. Kanters, R. L. Scherrenberg, B. R. Leeftang, J. Kroon, and M. Mathrouti, *Carbohydr Res.*, **180**, 175 (1988)