

結晶中の分子歪みがもたらすカロテノイド色素の色調変化

Correlation between molecular distortion and color in carotenoids crystals

海洋研究開発機構 [○]鈴木 龍樹, 岡田 賢, 出口 茂

JAMSTEC, [○]Ryuju Suzuki, Satoshi Okada, Shigeru Deguchi

E-mail: ryujus@jamstec.go.jp

世界的な健康・安全志向の高まりから、食用色素では合成色素から天然色素への転換が強く求められている。天然色素にはカロテノイド系やポルフィリン系など難水溶性化合物群も多いため、食品添加に向けた製剤化手法としては、ナノ結晶化した分散系を用いることが一般的である。中でも、カロテノイド色素ナノ結晶は、黄色から赤色の食品着色料として広く利用されているが、サイズや形状と光学特性との相関関係が明らかになっていないため、ナノ結晶における細かい色調制御は依然として困難を極めている。そこで本研究では、カロテノイド色素ナノ結晶について、構造特性と光学特性の相関解明を目的とした。

有機化合物の溶解度差を利用したナノ粒子化手法である「再沈法」¹⁾によりカロテノイド色素 (Fig. 1) のナノ結晶化を行った。実際には、カロテノイド色素 (リコペン、 β -カロテン、ルテイン、アスタキサンチン) の THF 溶液をそれぞれ調製し、激しく攪拌した水中に注入することでカロテノイド色素のナノ結晶分散液を得た。いずれのカロテノイド色素も粒径が 50 nm 程度の粒子として得られ、安定剤なしでも優れた分散安定性を示した。さらに、粉末法 X 線回折 (XRD) 測定から、 β -カロテンナノ結晶は結晶性であることが示唆されたが、単結晶における結晶構造 (空間群: P21/c) の XRD パターンとは異なっていた。また、 β -カロテンナノ粒子は 400 nm 付近に極大ピークを持つ吸収スペクトルを示し、THF 溶液やバルク結晶と比べても大幅に短波長シフトしていた (Fig. 2)。他のカロテノイド色素の吸収スペクトルも同様の傾向を示した。この波長シフトは、ナノ結晶中におけるカロテノイド色素分子の会合状態がバルク結晶とは異なることに起因すると計算により推測されている

²⁾。しかしながら長いポリエン鎖を有するカロテノイド色素では、ナノ結晶中で分子が歪んだ結果、有効 π 共役長が短縮され、吸収スペクトルが短波長シフトすることも考えられる。当日は、DFT 計算による分子歪みを考慮したシミュレーション結果も踏まえてカロテノイド色素の色調を議論する予定である。

本研究は JST 研究成果最適展開支援プログラム (A-STEP) の助成を受けて行なった。

[1] H. Kasai *et al.*, *Jpn. J. Appl. Phys.*, **31**, L1132 (1992).

[2] H. Auweterm *et al.*, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **38**, 2188 (1999).

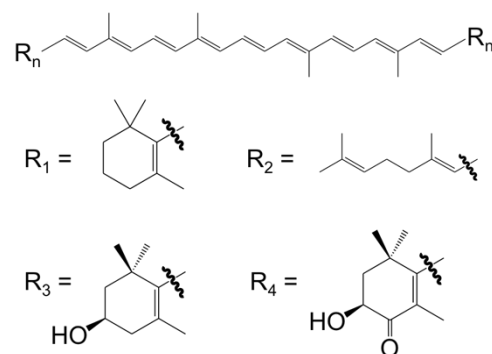


Fig. 1 カロテノイド色素の化学構造 ($R_1 = \beta$ -カロテン、 $R_2 =$ リコペン、 $R_3 =$ ルテイン、 $R_4 =$ アスタキサンチン)

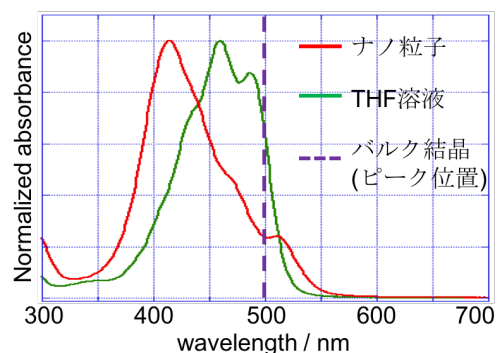


Fig. 2 β -カロテンの吸収スペクトル