

令和 3 年 4 月 23 日現在

機関番号：16301

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2018～2020

課題番号：18K05518

研究課題名(和文)食品の抗酸化能力を評価する方法の実用化に向けた研究

研究課題名(英文) A Study on Practical Use of Antioxidative Absorption Capacity Assay Method for Foods

研究代表者

長岡 伸一 (Nagaoka, Shin-ichi)

愛媛大学・理工学研究科(理学系)・教授

研究者番号：30164403

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,400,000円

研究成果の概要(和文)：我々は、様々な抗酸化物質や食品成分が活性酸素の一つであるフリーラジカルを消去する能力を評価する方法(ARAC法)、同様に一重項酸素を消去する能力を評価する方法(SOAC法)、フリーラジカルにより酸化されたビタミンEを再生する能力を評価する方法(ATREC法)を開発してきた。本研究では、これらの方法を食品の抗酸化活性の評価方法として実用化することを目的とした。

各種食用油のARAC値とSOAC値を求め、抗酸化活性の原因物質や添加物との相乗効果を解明した。様々な物質や食品のARAC, SOAC, ATREC値のデータベースを構築して公表した。機械学習を用いて、これらの値を予測した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

老化防止に役立つと言われる抗酸化力(活性酸素・フリーラジカル消去能)の情報については、国内外を問わず半数近い消費者が食品表示に取り入れてほしいと期待しているが、健康の増進や老化防止に貢献しているとされる種々の食品に含まれる機能物質について、統一基準で汎用的に適用できる抗酸化活性の評価方法は未だに確立されていなかった。

我々が開発したARAC, SOAC, ATREC法により、総合的な食品の抗酸化活性評価方法の実用化が可能になり、食品の正確な抗酸化活性の表示に寄与することができる。そうした食品表示を通して、高い抗酸化活性を持つ高付加価値を有する商品の開発を誘導することができる。

研究成果の概要(英文)： An aroxyl radical absorption capacity assay-method (ARAC assay method), a singlet oxygen absorption capacity assay-method (SOAC assay method), and an alfa-tocopherol-recycling capacity assay-method (ATREC assay method) were developed as practical assay methods of antioxidant activities for various antioxidants and foods. Here, free radical such as aroxyl radicals and singlet oxygen are reactive oxygen species.

The ARAC and SOAC values of eight vegetable oils were obtained, and its causative agents were elucidated. The synergistic effects caused by contained antioxidants such as vitamin E together with an added antioxidant such as ubiquinol-10 were clarified. The data obtained here were summarized as a database and available as AbsorptionCapacity.accdb on our website at [http://chem.sci.ehime-u.ac.jp/~struct1/int\\_naga.pdf](http://chem.sci.ehime-u.ac.jp/~struct1/int_naga.pdf). A deep-learning of the values given in the database allowed us to predict the ARAC and SOAC values.

研究分野：反応化学

キーワード：食品機能 抗酸化活性 ラジカル消去反応 一重項酸素消去反応

### 1. 研究開始当初の背景

哺乳類では体重あたりの酸素消費量が増加するのに反比例して寿命が短くなる(図 1 [1])。こうした寿命を縮める酸素の副作用は酸素から生じる活性酸素・フリーラジカルによって生成した脂質過酸化ラジカル(LOO●)が引き起こしていると考えられている。ビタミン E(α-トコフェロール、α-TocH)などの天然抗酸化剤は、生体中の色々な組織に存在し、こうした活性酸素・フリーラジカルを消去し、α-TocH が LOO●によって酸化されてしまえば元のα-TocH に再生して老化を防いでいる(図 2)。国内外を問わず半数近い消費者が抗酸化力の情報を食品表示に取り入れてほしいと期待しているが[2]、老化防止に貢献している種々の食品や含まれる物質の抗酸化活性を評価する実用的で汎用的な方法は未だに確立していなかった。

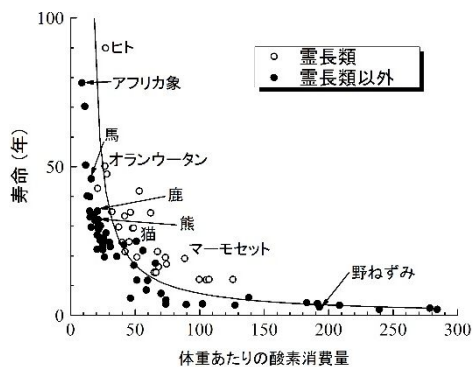


図 1 哺乳類の酸素消費量と寿命の関係[1]

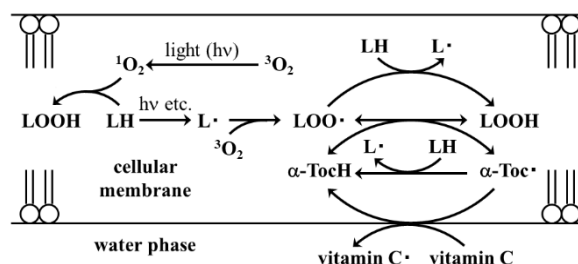


図 2 細胞膜中での LOO●の生成と抗酸化反応、及び酸化されたα-TocH のビタミン C による再生

### 2. 研究の目的

本研究では(図 3)、我々が開発してきた様々な食品や抗酸化物質が活性酸素の一つであるフリーラジカルを消滅させる能力を評価する実用的で汎用的な方法(Aroxyl Radical Absorption Capacity (ARAC)法[3])、同様に一重項酸素を消滅させる能力を評価する方法 (Singlet Oxygen Absorption Capacity (SOAC)法[4])、フリーラジカルにより酸化されたα-TocH を再生する能力を評価する方法 (Alfa-Tocopherol REcycling Capacity (ATREC)法[5])を新たな食品の抗酸化活性の分析方法へ発展させることを目的とした。ARAC, SOAC, ATREC 法は、いずれも抗酸化などの化学反応の速度と直接結びつけることができる。また、食品の上記の三個の抗酸化能力は有機的にリンクして直接比較できなければならないが、α-TocH に関わる反応速度の比を指標としているので比較が容易であり、抗酸化活性の分析方法の統合に適している。



図 3 研究の目的

そして最終的には三つの方法を統合して総合的な食品の抗酸化活性評価方法の実用化へ発展させて、食品の正確な抗酸化活性の世界的標準となるような表示に寄与することを目指した。総合的な食品の抗酸化活性は多くの要素が複雑に絡み合っていて評価が難しいが、様々な実験条件に基づく結果をデータベース化して、その結果をディープ・ラーニング(機械学習)を用いて評価して、確度の高い評価結果を得て食品機能表示に反映させることを目指した。

### 3. 研究の方法

ARAC 法では、シングルミキシングストップフロー分光法を用い、フリーラジカルとしては合成したアロキシルラジカル(ArO●)を使って、様々な抗酸化剤や食品のフリーラジカル消去速度( $k_s$ , 単位は純物質なら  $M^{-1}s^{-1}$ 、混合物なら  $Lg^{-1}s^{-1}$ 、以下同様)を求める。例としてα-TocH が ArO●を消去してα-トコフェロキシルラジカル(α-Toc●)が生成する時の吸収スペクトルの時間変化を図 4 に示す。こうして求められたサンプルの  $k_s$  と α-TocH の  $k_s$  の値の比を ARAC 値とする[3]。

SOAC 法では、吸光分光法を用いて図 5 のような競争反応を利用して、一重項酸素消去速度( $k_Q$ )を求める。求められたサンプルの  $k_Q$  と α-TocH の  $k_Q$  の値の比を SOAC 値とする[4]。SOAC 値はレーザー分光を用いても得られる[6]。

ATREC 法では、ダブルミキシングストップフロー分光法を用い、ビタミン E 再生速度( $k_r$ )

を求める[5]。例として 5-メチルピロガロールが $\alpha$ -Toc $\cdot$ と反応して $\alpha$ -TocH を再生する時の吸収スペクトルの時間変化を図 6 に示す。サンプルの  $k_r$  とビタミン C の  $k_r$  の値の比を ATREC 値とする。

機械学習では、階層型ニューラルネットワーク[7]を用いて leave-one-out を行った。フリーラジカルと一重項酸素消去反応は電子移動が重要な役割を果たし[8,9]、フリーラジカル消去反応ではさらにトンネル効果が寄与すると考えられるため[8]、抗酸化剤の酸化電位やトンネル効果の有無及び溶媒の屈折率や比誘電率や水素結合の有無と ARAC 値と SOAC 値には因果関係があると見なして、 $N$ 組のデータから 1 組を除いた  $N-1$  組のデータから求めた規則を用いて、除いた 1 組のデータを予測し、予測が正しいかどうかを検討した。こうした操作を  $N$  組全てについて行った。

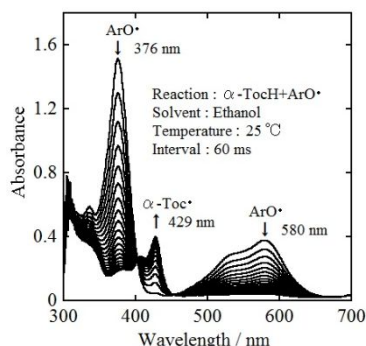


図 4 ARAC 測定法

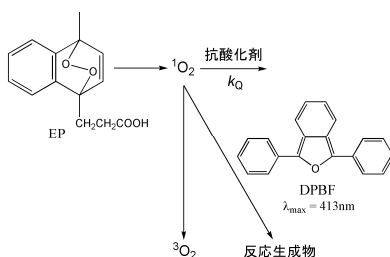


図 5 SOAC 測定法

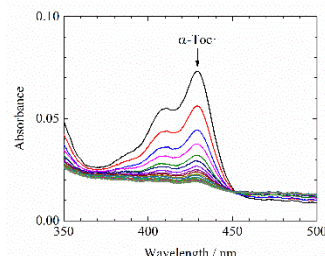


図 6 ATREC 測定法[5]

#### 4. 研究成果

##### (1) ARAC 法、SOAC 法、ATREC 法の実用化に向けた発展

###### 食品での抗酸化活性の解析

市販の 8 種類の植物性食用油(米ぬか油、ゴマ油、エゴマ油、グレープシード油、菜種油、エクストラバージンオリーブ油、オリーブ油、ベニバナ油)によるフリーラジカル消去速度( $k_s$ (Obsd.));  $\alpha$ -TocH の値との比が ARAC 値)や一重項酸素消去速度( $k_Q$ (Obsd.));  $\alpha$ -TocH の値との比が SOAC 値)を測定して、それらの値が元々含有していたり食品添加物として添加されていたりするビタミン E 類による消去速度と含有量[10]によって説明することができるかどうかを検討した。

図 7 に食用油の  $k_s$ (Obsd.)とビタミン E 類の  $k_s$  と含有量から予想されるフリーラジカル消去速度( $k_s$ (Calcd.))の比較を示す[11]。 $k_s$ (Calcd.)は、ビタミン E 類の分子ごとに  $k_s$  と食用油中の濃度比の積を取って足し合わせた値である。図 8 には同様に一重項酸素消去における  $k_Q$ (Obsd.)と予想値( $k_Q$ (Calcd.))の比較を示す[11]。フリーラジカル消去において得られた  $k_s$ (Obsd.)は、食用油に含有されるビタミン E 類による消去速度と濃度でほぼ説明することができたが、一重項酸素消去における  $k_Q$ (Calcd.)は  $k_Q$ (Obsd.)よりもかなり小さい値となり、 $k_Q$ (Obsd.)が含有されるビタミン E 類による消去速度と濃度だけでは説明できないことが分かった。このことから食用油におけるフリーラジカル消去にはビタミン E 類以外の抗酸化剤はあまり寄与していないが、一重項酸素消去にはビタミン E 類だけではなくて含有する脂肪酸やカロテノイドも大きく寄与していると考えられる。

次に、食用油にユビキノール-10(還元型コエンザイム Q10、UQ10H2)やエピガロカテキンガレート(EGCG)を添加してフリーラジカル消去速度  $k_{sOil}$  を測定した。そして、食用油に UQ10H2 や EGCG を添加した場合に、元々含有しているビタミン E 類[10]と添加した抗酸化剤のフリーラジカル消去活性の単なる和になるのか、それとも抗酸化剤同士が相互作用し合ってフリーラジカル消去において相乗効果を示すかどうかを検討した。

図 9 は、 $\alpha$ -TocH の濃度 [ $\alpha$ -TocH] を変化させたときのフリーラジカル消去における一次反応速度  $k_{obsd}$  の変化を示す[12]。 $[\alpha$ -TocH] が増加するにつれて  $k_{obsd}$  は増加した。 $[\alpha$ -TocH] の増加に対する  $k_{obsd}$  の増加の傾きが二次反応速度  $k_s$  であり、図 9 のグラフの傾きや  $k_s$  は ARAC 値に比例

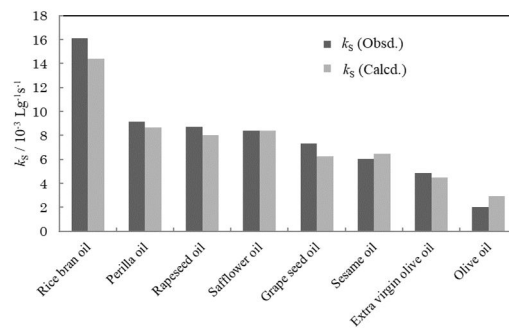


図 7  $k_s$ (Obsd.)と  $k_s$ (Calcd.)の比較[11]

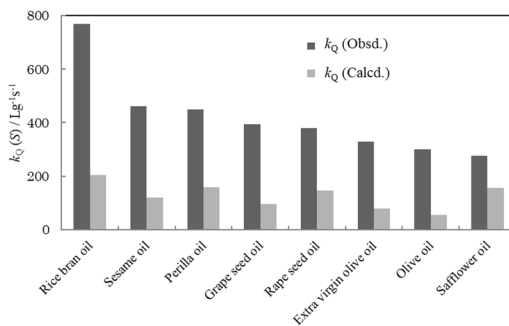


図 8  $k_Q$ (Obsd.)と  $k_Q$ (Calcd.)の比較[11]

する。図 9 の白丸は $\alpha$ -TocH 単独の結果、黒丸は  $UQ_{10}H_2$  を添加して $\alpha$ -TocH と共存させた結果を示す。また、点線は $\alpha$ -TocH の  $k_s$  および  $UQ_{10}H_2$  の  $k_s$  と添加量から予想される  $k_{obsd}$  の変化を示す。もし仮に  $\alpha$ -TocH と  $UQ_{10}H_2$  がフリーラジカル消去において互いに相互作用せず、それぞれ単独にフリーラジカルを消去していると仮定すれば、黒丸は点線の上に乗る、黒丸における増加の傾き(二次反応速度  $k_s^{TocH(+UQ_{10}H_2)}$ )は、点線の傾きや白丸における増加の傾き(二次反応速度  $k_s^{TocH(alone)}$ )と一致するはずである。しかし、黒丸の値は点線の値よりも大きく、 $k_s^{TocH(+UQ_{10}H_2)}$  は  $k_s^{TocH(alone)}$  よりも約 20% 大きくなった。このことは、 $\alpha$ -TocH と  $UQ_{10}H_2$  がフリーラジカルをそれぞれ単独に消去しているだけではなく、互いに相互作用してフリーラジカル消去を行い、相乗効果を発現していることを示している。同様の相乗効果は他のビタミン E 類でも観測され、 $\gamma$ -TocH では相乗効果が 50% 以上に達することが分かった。

次に、食用油に含まれる単一の抗酸化剤だけではなく、食用油全体と添加した  $UQ_{10}H_2$  のフリーラジカル消去における相乗効果を検討した。食用油におけるフリーラジカル消去は、含有するビタミン E 類が主として行っていると考えられているが[11]、そうしたビタミン E 類を含む食用油[10]に  $UQ_{10}H_2$  を添加した場合も図 9 と同様な相乗効果が観測された[12]。

図 10 は、食用油単独のフリーラジカル消去における二次反応速度(黒い棒グラフ、 $k_s^{Oil(alone)}$ )と食用油に  $UQ_{10}H_2$  を添加した場合の食用油自体による二次反応速度(白い棒グラフ、 $k_s^{Oil(+UQ_{10}H_2)}$ )の比較を示す[12]。食用油に含有されているビタミン E 類[10]などによる黒い棒グラフの値よりも  $UQ_{10}H_2$  を加えた場合の食用油自体による白い棒グラフの値は 24~54% だけ大きい値を示した。食用油に  $UQ_{10}H_2$  を添加すると、食用油に元々含まれる抗酸化剤であるビタミン E 類[10]などと添加した抗酸化剤  $UQ_{10}H_2$  のフリーラジカル消去活性の単なる和ではなく、抗酸化剤同士が相互作用し合ってフリーラジカル消去において 24~54% もの相乗効果を示すことが分かった。ビタミン E 類やそれらを含む食用油[10]に緑茶に含まれる EGCG を添加した場合も図 9, 10 と同様の相乗効果が観測された。複数の成分の抗酸化能力にもいわゆる「食べ合わせ」のいいものがあることが示唆された。こうした相乗効果は、 $\alpha$ -TocH などによるフリーラジカル消去によって生じた $\alpha$ -Toc $\cdot$ などを  $UQ_{10}H_2$  や EGCG が $\alpha$ -TocH などに再生しているために現れると考えられる。

#### ヒトの生体内環境に近い条件下での測定

で述べた相乗効果は、日本赤十字社から提供されたヒト血清(受付番号 30J0027)と EGCG やビタミン C の共存下でも観測された[13]。

#### データベースの構築

得られた結果を元にして各種抗酸化剤や食品の ARAC、SOAC、ATREC 値のデータベースを更新して、以下のウェブで一般に公開している。[http://chem.sci.ehime-u.ac.jp/~struct1/int\\_naga.pdf](http://chem.sci.ehime-u.ac.jp/~struct1/int_naga.pdf) に添付された AbsorptionCapacity.accdb、及びエクセルファイルの形としては <https://researchmap.jp/read0171451/works> である。

#### その他

ARAC 法に関しては、 $\alpha$ -TocH とカテキン類の共存下でも相乗効果が観測された[14]。 $\alpha$ -TocH の抗酸化活性への水による溶媒効果を明らかにした[15]。

パーム油や大豆油の SOAC 値を得た[16]。パーム油を精製してビタミン E 類の濃度を高めると、一重項酸素消去反応速度は含まれるビタミン E 類の濃度にそれぞれの反応速度を掛けた値の和とほぼ等しくなった。

食用油に含まれる脂肪酸の一重項酸素消去が SOAC 値に寄与していることを明らかにした[17]。

フラボン類の ARAC 値、SOAC 値、励起状態分子内プロトン移動活性の相関における置換基効果と溶媒効果を明らかにした[18]。ヒドロキシアントラキノン類についても同様な溶媒効果が見られた。

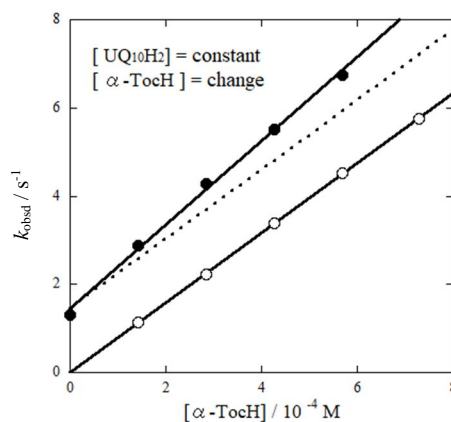


図 9  $k_{obsd}$  と  $[\alpha$ -TocH] の関係[12]。白丸は  $\alpha$ -TocH 単独の結果、黒丸は  $UQ_{10}H_2$  を添加して  $\alpha$ -TocH と共存させた結果、点線は  $\alpha$ -TocH の  $k_s$  および  $UQ_{10}H_2$  の  $k_s$  と添加量から予想される  $k_{obsd}$  の変化を示す。

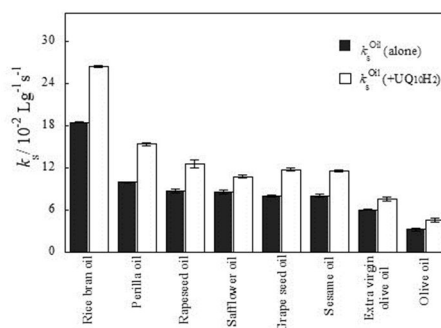


図 10  $k_s^{Oil(alone)}$  と  $k_s^{Oil(+UQ_{10}H_2)}$  の比較[12]

## (2) ARAC 値、SOAC 値、ATREC 値の解釈と予測 機械学習

図 11 は、階層型ニューラルネットワーク[7]を用いた機械学習 leave-one-out で予測した ARAC 値 (ARAC (Calcd.))と実測値 (ARAC (Obsd.))の関係を示す。概ね ARAC (Calcd.)は ARAC (Obsd.)と相関しているが、立体効果のある抗酸化剤の予測値は実測値と相関の程度が低かった。トンネル効果は ARAC 値に影響するが[8]、トンネル効果を示す抗酸化剤の ARAC 値は機械学習によってうまく予測されている。SOAC 値も同様のプロットが得られたが(図 12)、実測値が少ないのでさらなる実験が必要であろう。

### その他

フリーラジカルと一重項酸素消去反応は電子移動が重要な役割を果たすと考えられるので[8,9]、カテキン類のイオン化エネルギーを配座解析と密度汎関数法を用いて計算し、概ね SOAC 値と相関することが分かった[19]。カテキン類の B 環からの水素移動のしやすさが ARAC 値と ATREC 値を増大させるが、水素移動のしやすさは必ずしもイオン化エネルギーに反映されないため、ARAC 値と ATREC 値との相関の程度は SOAC 値よりも低かった。得られたカテキン類のイオン化エネルギーは、酸化電位と良い相関を示した。

本研究成果などに基づき、仙台で開催された第 30 回ビタミン E 研究会にて研究代表者が第 31 回ビタミン E 研究会の代表世話人に選ばれ、2020 年 1 月 10 - 11 日に愛媛大学城北キャンパスでの開催を主宰した。また、城西大学で招待講演を行った。

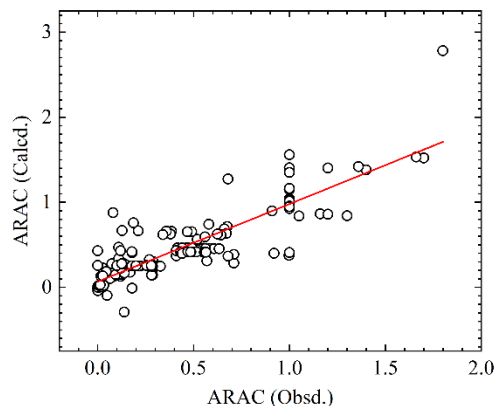


図 11 leave-one-out を用いた ARAC 値の予測

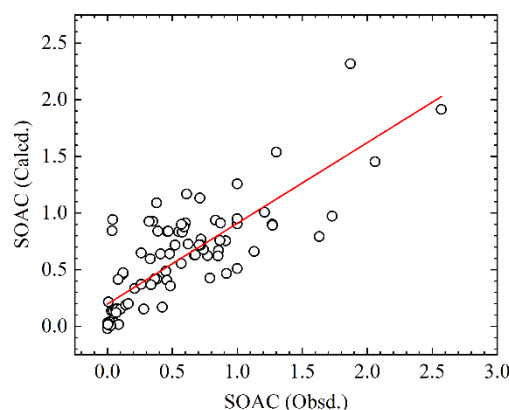


図 12 leave-one-out を用いた SOAC 値の予測

### <引用文献>

- R. G. Cutler, *Free Radicals in Biology IV*, edited by W. A. Pryor, Academic Press, 1984, pp. 371-428.
- 後藤一寿、沖智之、日本フードシステム学会 2011 大会、3-5.
- S. Nagaoka et al., *J. Agric. Food Chem.* **61**, 10054-10062 (2013)など.
- K. Mukai et al., *J. Agric. Food Chem.* **65**, 784-792 (2017)など.
- S. Nagaoka et al., *RSC Adv.* **6**, 47325-47336 (2016).
- S. Nagaoka et al., *J. Phys. Chem. A* **121**, 8069-8079 (2017)など.
- 市川紘、階層型ニューラルネットワーク、共立出版、1993.
- S. Nagaoka et al., *J. Phys. Chem.* **96**, 2754-2761 (1992).
- M. J. Thomas and C. S. Foote, *Photochem. Photobiol.* **27**, 683-693 (1978).
- K. Mukai et al., *J. Am. Oil Chem. Soc.* **95**, 731-742 (2018).
- K. Mukai et al., *J. Oleo Sci.* **68**, 21-31 (2019).
- K. Mukai et al., *J. Oleo Sci.* **69**, 1241-1255 (2020).
- 中村悠他、第 31 回ビタミン E 研究会(2020 年)、P-8.
- K. Mukai et al., *Int. J. Chem. Kinet.* **51**, 643-656 (2019).
- 野本七帆他、第 31 回ビタミン E 研究会(2020 年)、P-9.
- K. Mukai et al., *Lipids* **53**, 601-613 (2018).
- K. Mukai et al., *J. Oleo Sci.* **69**, 7-22 (2020).
- S. Nagaoka et al., *J. Photochem. Photobiol. A* **409**, 113122 (10 pages) (2021).
- S. Nagaoka et al., *Chem. Phys.* **522**, 77-83 (2019).

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計15件（うち査読付論文 15件 / うち国際共著 0件 / うちオープンアクセス 4件）

1. 著者名 Nagaoka Shin-ichi, Bandoh Yuki, Matsuhiroya Satoki, Inoue Kazumasa, Nagashima Umpei, Ohara Keishi	4. 巻 409
2. 論文標題 Activity correlation among singlet-oxygen quenching, free-radical scavenging and excited-state proton-transfer in hydroxyflavones: Substituent and solvent effects	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry	6. 最初と最後の頁 113122 ~ 113122
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jphotochem.2020.113122	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Shinde Yoshikazu, Yamamoto Shutaro, Mukai Kazuo, Nagaoka Shin-ichi	4. 巻 49
2. 論文標題 Investigation of Intramolecular Proton Transfer in Ionic States of o-Hydroxybenzaldehyde Derivatives by Using Electron Spin Resonance Spectroscopy and Computational Chemistry	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Chemistry Letters	6. 最初と最後の頁 1399 ~ 1402
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1246/cl.200549	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Mukai Kazuo, Maruoka Yasuhiro, Kitagaki Saya, Nagaoka Shin-ichi	4. 巻 69
2. 論文標題 Finding of Remarkable Synergistic Effect on the Aroxyl-Radical-Scavenging Rates (ks) under the Coexistence of Vitamin E Homologues (or Vegetable Oils) and Ubiquinol-10: Proposal of A New Mechanism to Explain An Increase of ks Value	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of Oleo Science	6. 最初と最後の頁 1241 ~ 1255
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.5650/jos.ess20091	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 Nagaoka Shin-ichi, Yamasaki Yoshinori, Teramae Hiroyuki, Nagashima Umpei, Kokubo Tatsunobu	4. 巻 97
2. 論文標題 Addition to "Practical Training in Simple Hueckel Theory: Matrix Diagonalization via Tridiagonalization, Cyclobutadiene, and Visualization of Molecular Orbitals"	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of Chemical Education	6. 最初と最後の頁 2373 ~ 2374
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jchemed.0c00857	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Nagaoka Shin-ichi, Takahashi Osamu, Hikosaka Yasumasa	4. 巻 534
2. 論文標題 Site-specificity reduction during Auger decay following Si:2p photoionization in Cl <sub>3</sub> SiSi(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> vapor: An interatomic-Coulombic-decay-like process	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 110756 ~ 110756
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.chemphys.2020.110756	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Sato Hisako, Takimoto Kazuyoshi, Kato Masaru, Nagaoka Shin-ichi, Tamura Kenji, Yamagishi Akihiko	4. 巻 93
2. 論文標題 Real-Time Monitoring of Low Pressure Oxygen Molecules over Wide Temperature Range: Feasibility of Ultrathin Hybrid Films of Iridium(III) Complexes and Clay Nanosheets	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Bulletin of the Chemical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 194 ~ 199
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1246/bcsj.20190277	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 KOKUBO Tatsunobu, NAGAOKA Shin-ich, TERAMAE Hiroyuki, NAGASHIMA Umpei	4. 巻 18
2. 論文標題 For a Super-High-Speed Cluster Type Parallel Computer (K Computer), Acceleration of General-Purpose Molecular Dynamics Program LAMMPS.	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of Computer Chemistry, Japan	6. 最初と最後の頁 169 ~ 175
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2477/jccj.2019-0008	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Mukai Kazuo, Hirata Masayuki, Ito Junya, Shiomi Taiki, Nakagawa Kiyotaka, Nagaoka Shin-ichi	4. 巻 69
2. 論文標題 Kinetic Study of Singlet-Oxygen Quenching and Aroxyl-Radical Scavenging Activities of Vitamin E Homologs and Fatty Acids Present in Vegetable Oils	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of Oleo Science	6. 最初と最後の頁 7 ~ 22
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.5650/jos.ess19217	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Mukai Kazuo, Nagai Kanae, Ouchi Aya, Suzuki Tomomi, Izumisawa Katsuhiro, Nagaoka Shin Ichi	4. 巻 51
2. 論文標題 Finding of remarkable synergistic effect on the aroxyl radical scavenging rates under the coexistence of tocopherol and catechins	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 International Journal of Chemical Kinetics	6. 最初と最後の頁 643 ~ 656
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/kin.21284	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Nagaoka Shin-ichi, Nakayama Naofumi, Teramae Hiroyuki, Nagashima Umpei	4. 巻 522
2. 論文標題 Correlations of computational ionization energy with experimental oxidation potential and with antioxidant efficiencies in catechins	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 77 ~ 83
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.chemphys.2019.02.002	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Kakiuchi Takuhiro, Ikeda Kyouhei, Mase Kazuhiko, Nagaoka Shin-ichi	4. 巻 681
2. 論文標題 Local valence electronic states of silicon (sub)oxides on HfO <sub>2</sub> /Si-(sub)oxide/Si(110) and HfSi <sub>2</sub> /Si-(sub)oxide/Si(110) Islands	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Surface Science	6. 最初と最後の頁 9 ~ 17
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.susc.2018.10.024	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Mukai Kazuo, Ohara Ayaka, Ito Junya, Hirata Masayuki, Kobayashi Eri, Nakagawa Kiyotaka, Nagaoka Shin-ichi	4. 巻 68
2. 論文標題 Kinetic Study of the Quenching Reaction of Singlet Oxygen by Eight Vegetable Oils in Solution	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of Oleo Science	6. 最初と最後の頁 21 ~ 31
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.5650/jos.ess18179	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -



1. 著者名 Nagaoka Shin-ichi, Kokubo Tatsunobu, Teramae Hiroyuki, Nagashima Umpei	4. 巻 95
2. 論文標題 Practical Training in Simple Hueckel Theory: Matrix Diagonalization for Highly Symmetric Molecules and Visualization of Molecular Orbitals	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of Chemical Education	6. 最初と最後の頁 1579 ~ 1586
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jchemed.8b00244	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Mukai Kazuo, Ishikawa Eri, Ouchi Aya, Nagaoka Shin-ichi, Abe Koichi, Suzuki Tomomi, Izumisawa Katsuhiro	4. 巻 53
2. 論文標題 Measurements of Singlet Oxygen-Quenching Activity of Vitamin E Homologs and Palm Oil and Soybean Extracts in a Micellar Solution	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Lipids	6. 最初と最後の頁 601 ~ 613
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/lipd.12053	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Mukai Kazuo, Bandoh Yuki, Ito Junya, Kobayashi Eri, Nakagawa Kiyotaka, Nagaoka Shin-ichi	4. 巻 95
2. 論文標題 Kinetic Study of the Scavenging Reaction of the Aroxyl Radical by Eight Kinds of Vegetable Oils in Solution	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of the American Oil Chemists' Society	6. 最初と最後の頁 731 ~ 742
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/aocs.12076	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計8件 (うち招待講演 1件 / うち国際学会 0件)

1. 発表者名 向井和男、大内 綾、永井かなえ、北垣沙耶、丸岡靖大、中村 悠、長岡伸一
2. 発表標題 ビタミンEと他の抗酸化剤共存によるラジカル消去速度の増加とメカニズム
3. 学会等名 第31回ビタミンE研究会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 丸岡靖大、北垣沙耶、長岡伸一、向井和男
2. 発表標題 ユビキノール-10の添加による植物油の抗酸化活性への相乗効果
3. 学会等名 第31回ビタミンE研究会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 中村悠、谷口裕樹、長岡伸一、向井和男
2. 発表標題 ビタミンEとC(&カテキン)のミセル溶液中における相乗効果の速度論的研究
3. 学会等名 第31回ビタミンE研究会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 野本七帆、井上和優、小原敬士、長岡伸一
2. 発表標題 エタノール中のトコフェロール類の一重項酸素消去速度に対する水の添加の効果
3. 学会等名 第31回ビタミンE研究会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 長岡伸一
2. 発表標題 第31回ビタミンE研究会について
3. 学会等名 第30回ビタミンE研究会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 長岡伸一、小久保達伸、寺前裕之、長嶋雲兵
2. 発表標題 エクセルマクロを用いたヒュッケル法の実習 - 対称分子の対角化と分子軌道の描画 -
3. 学会等名 2018年日本化学会中国四国支部大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 長岡伸一
2. 発表標題 食品が活性酸素・フリーラジカルを消滅させる能力を評価する方法の開発
3. 学会等名 城西大学セミナー（招待講演）
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 長岡伸一、寺前裕之、小久保達信、長嶋雲兵
2. 発表標題 対称性の高い固有ベクトルを得る新規固有値固有ベクトル計算のアルゴリズム
3. 学会等名 日本コンピュータ化学会2018春季年会
4. 発表年 2018年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

<p>AbsorptionCapacity.accdb  <a href="http://chem.sci.ehime-u.ac.jp/~struct1/int_naga.pdf">http://chem.sci.ehime-u.ac.jp/~struct1/int_naga.pdf</a>  Q_Data_final.xlsx  <a href="https://researchmap.jp/read0171451/works/31323940">https://researchmap.jp/read0171451/works/31323940</a>  上記ウェブはARAC、SOAC、ATREC値のデータベースである。int_naga.pdfにアクセスファイルを添付している。researchmapはアクセスファイルを添付できないのでエクセルファイルを添付している。</p>
---

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
連携研究者	小原 敬士  (Ohara Keishi)  (10284390)	愛媛大学・理工学研究科(理学系)・教授    (16301)	
連携研究者	長嶋 雲兵  (Nagashima Umpei)  (90164417)	横浜市立大学・生命ナノシステム科学研究科・客員教授    (22701)	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関