

ガロカテキン -3-O- ガレート・カフェイン錯体の 立体化学構造と分子間相互作用

堤 広之、佐藤 隆、石津 隆

Chemical and Pharmaceutical Bulletin, **59** (1), 100-105 (2011)

Stereochemical structure and intermolecular interaction of complexes of (-)-gallocatechin-3-O-gallate and caffeine

Hiroyuki Tsutsumi, Takashi Sato, Takashi Ishizu

ABSTRACT: A suspension containing an equimolecular amount of (-)-gallocatechin-3-O-gallate (GCg) and caffeine in water was heated at 90 °C for 30 min to give a 1:2 complex of GCg and caffeine. X-Ray crystallographic analysis of crystal of the 1:2 complex showed that π - π interactions formed between the A, B' rings of GCg and the two six-membered rings of caffeine. Whereas, the same suspension was heated at 90 °C for 30 s to give a sticky substance, which contained GCg, caffeine, and water at a molar ratio of 1:1:22 based on measurement of the integral volume of ¹H-NMR signals. The sticky substance crystallized slowly to give a 2:2 complex of GCg and caffeine. X-Ray crystallographic analysis of crystal of the 2:2 complex showed that the A and C rings of GCg moieties faced each other, and face-to-face π - π interactions formed between the B ring of GCg and caffeine, the B' ring of GCg and caffeine.

抄録 ガロカテキン -3-O- ガレート (GCg) とカフェインの懸濁液を 90°C で 30 分温めると 1 : 2 GCg・カフェイン錯体結晶が得られる。X 線結晶構造解析により、この結晶は 1 : 2 GCg・カフェイン錯体であり、GCg の A、B' 環とカフェインの六員環との間に π - π 相互作用が存在していた。一方、同じ懸濁液を 90°C、30 秒温めたところ、GCg、カフェインと水を 1 : 1 : 22 の比率で含む粘着状物質を得た。この粘着状物質のゆっくり結晶化して得られた結晶の X 線結晶構造解析を行ったところ、この結晶は 2 : 2 GCg・カフェイン錯体であり、GCg の B 環とカフェイン、GCg の B' 環とカフェインとの間で face-to-face π - π 相互作用を形成していた。