

カフェイン、各種シクロデキストリンと茶カテキン類が  
形成する錯体の立体配置研究

石津 隆、梶谷真也、堤 広之、佐藤 隆、  
山本英二\*、平田千賀子

*Planta Medica*, 77, 1099-1109 (2011)

**Configurational studies of complexes  
of tea catechins with caffeine and various cyclodextrins**

Takashi Ishizu, Shinya Kajitani, Hiroyuki Tsutsumi, Takashi Sato,  
Hideji Yamamoto\*, Chikako Hirata

**ABSTRACT:** A suspension of an equimolecular amount of *ent*-galliccatechin-3-*O*-gallate (*ent*GCg) and caffeine in water afforded two kinds of crystals, which were 1:2 and 2:2 complexes of *ent*GCg and caffeine. The stereochemical structures and intermolecular interactions between *ent*GCg and caffeine were determined by X-ray crystallographic analysis. The crystal structure of *ent*GCg was determined and compared with those of the 1:2 and 2:2 complexes. Epigallocatechin-3-*O*-gallate (EGCg) formed a 1:1 complex with  $\beta$ -cyclodextrin (CD), in which the aromatic A ring and a part of the heterocyclic C ring were included by the wide secondary hydroxyl group side of the  $\beta$ -CD cavity in aqueous solution, while the B rings and 3-*O*-gallate groups (B' rings) were left outside the cavity. In contrast, *ent*GCg formed a 1:2 complex with  $\beta$ -CD, in which the aromatic A and B rings of *ent*GCg were included by two molecules of  $\beta$ -CD.

**抄録** 等モルの *ent*-ガロカテキン-3-*O*-ガレート (*ent*GCg) とカフェインから成る懸濁液から 1:2 と 2:2 *ent*GCg・カフェイン錯体の 2つの結晶が得られる。X線結晶構造解析により立体化学構造と *ent*GCg とカフェインの分子間相互作用が決められ、それぞれの *ent*GCg 部位と *ent*GCg 単独の立体化学構造の比較がなされた。水溶液中において、エピガロカテキン-3-*O*-ガレート (EGCg) は  $\beta$ -シクロデキストリン (CD) と 1:1 錯体を形成する。その際、A 環と C 環の一部は  $\beta$ -CD によって包接される。一方、*ent*GCg は  $\beta$ -CD と 1:2 錯体を形成し、A 環と B 環が 2つの  $\beta$ -CD によって包接される。

\* Department of Applied Biological Science, Faculty of Engineering, Fukuyama University  
福山大学生命工学部