

堤 広之、木下吉史、佐藤 隆、石津 隆

Chemical and Pharmaceutical Bulletin, **59** (8), 1008-1015 (2011)

**Configurational studies of complexes of various tea catechins
and caffeine in crystal state**

Hiroyuki Tsutsumi, Yoshifumi Kinoshita, Takashi Sato, Takashi Ishizu

ABSTRACT: Crystals of the complexes of (+)-catechin (CA) of non-galloylated catechin and (-)-catechin-3-*O*-gallate (Cg) of galloylated catechin with caffeine were prepared, and their stereochemical structures and intermolecular interactions were determined by X-ray crystallographic analysis. CA formed a 1:1 complex with caffeine by intermolecular hydrogen bonds, whereas Cg formed a 1:2 complex with caffeine, which was formed by face-to-face and offset π - π interactions and intermolecular hydrogen bonds. A solution of two kinds of non-galloylated catechin, CA and (-)-epicatechin (EC), and caffeine (molar ratio 1:1:2) in water afforded a 1:1:2 complex, the crystal structure of which had two layers, one layer in which CA and caffeine formed alternate lines and an other layer in which EC and caffeine formed alternate lines. The 1:1:2 complex was formed by offset π - π and CH- π interactions and intermolecular hydrogen bonds.

抄録 非ガレートカテキン類の(+)-カテキン (CA)、ガレートカテキン類の(-)-カテキン-3-*O*-ガレート (Cg) とカフェインの結晶が調製され、X線結晶構造解析により、その立体化学構造と分子間相互作用が決められた。CAはカフェインと分子間水素結合により1:1錯体を形成し、Cgはface-to-face π - π 相互作用と分子間水素結合により1:2錯体を形成した。非ガレートカテキン類であるCA、エピカテキン (EC) とカフェインがモル比1:1:2で存在する溶液から1:1:2錯体結晶が得られ、その結晶構造はCAとカフェインから成る層とECとカフェインから成る層の2層で構成されていた。またこの錯体はoffset π - π 相互作用、CH- π 相互作用と分子間水素結合から形成されていた。