

1:2 と 2:2 錯体の結晶構造における ガロカテキнгаレートとカフェイン間の相互作用

石津 隆、堤 広之、佐藤 隆

Tetrahedron Letters, **50**, 4121-4124 (2009)

Interaction between gallic catechin gallate and caffeine in crystal structure of 1:2 and 2:2 complexes

Takashi Ishizu, Hiroyuki Tsutsumi and Takashi Sato

ABSTRACT: A suspension of (-)-gallic catechin gallate (GCg) and caffeine in water afforded two kinds of complexes, the 1:2 and 2:2 complexes of GCg and caffeine. The crystal structures of the two complexes were determined by X-ray crystallography. The driving force for the formation of the 1:2 and 2:2 complexes was thought to be mainly π - π interactions between the A, B' rings of GCg and the six-membered rings of caffeine, and those between the B ring of GCg and caffeine, the B' ring of GCg and caffeine, and the A rings of GCgs, respectively.

抄録 水における (-)-ガロカテキнгаレートとカフェインの懸濁液から 1:2 と 2:2 の GCg・カフェイン錯体 2 種類が得られた。2 つの錯体の結晶構造は X 線結晶構造解析によって決められた。1:2, 2:2GCg・カフェイン錯体を形成するドライビングフォースは、それぞれ主に GCg の A, B' 環とカフェインの 6 員環との間の π - π 相互作用と GCg の B 環とカフェイン、GCg の B' 環とカフェイン、そして GCg の A 環同士との間の π - π 相互作用であると考えられた。