

茶カテキン類・カフェイン錯体の立体化学構造研究

堤 広之

YAKUGAKU ZASSHI, **132** (8), 925-931 (2012)

Study of Stereochemical Structure of Complex of Tea Catechin and Caffeine

Hiroyuki Tsutsumi

ABSTRACT: Two crystals of a complex of (-)-galliccatechin-3-*O*-gallate (GCg) with caffeine and crystals of the complexes of (+)-catechin (CA) and (-)-catechin-3-*O*-gallate (Cg) with caffeine were prepared, and their stereochemical structures and intermolecular interactions were determined by X-ray crystallographic analysis. GCg formed 1:2 and 2:2 complexes with caffeine, and π - π interactions formed between the aromatic rings of GCg and caffeine in both complexes. Also, CA of non-galloylated catechins formed a 1:1 complex with caffeine by intermolecular hydrogen bonds, whereas Cg of galloylated catechins formed a 1:2 complex with caffeine, which was formed by face-to-face and offset π - π interactions and intermolecular hydrogen bonds.

抄録 2つの(-)-ガロカテキン-3-*O*-ガレート (GCg)・カフェイン錯体結晶、(+)-カテキン (CA)・カフェイン錯体結晶と(-)-カテキン-3-*O*-ガレート (Cg)・カフェイン錯体結晶を作成し、X線結晶構造解析によりそれぞれの立体化学構造と分子間相互作用が決められた。GCgはカフェインと1:2、2:2錯体を形成し、どちらの錯体においても、GCgとカフェインの芳香環との間では π - π 相互作用が形成されていた。非ガレートカテキン類であるCAは分子間水素結合を形成することによってカフェインと1:1錯体を形成していたが、一方でガレート型カテキン類であるCGはカフェインと1:2錯体を形成し、その際 face-to-face π - π 相互作用、offset π - π 相互作用と分子間水素結合が形成されていた。