

溶液中における β -シクロデキストリンと(+)-カテキンおよび(-)-エピカテキンの包接錯体のNMRによる構造研究

石津 隆、近都加奈子、山本英二

J. Phys. Chem. B, **103**(42), 8992–8997 (1999)

NMR Study of the Solution Structures of the Inclusion Complexes of β -Cyclodextrin with (+)-Catechin and (-)-Epicatechin

Takashi Ishizu, Kanako Kintsu, and Hideji Yamamoto

ABSTRACT The probable structures of the inclusion complexes of β -cyclodextrin (β -CD) with (+)-catechin (CA) and (-)-epicatechin (EC) in D_2O at 35 °C were investigated using NMR. In the β -CD · CA inclusion complex, a large portion of the flavonoid skeleton was included in the β -CD cavity and the axis of $C_{1'}$ – $C_{4'}$ of the B ring inclined to the molecular axis of β -CD, and the CA molecule fitted tightly with β -CD. In the β -CD · EC inclusion complex, the B ring was included deeply in the β -CD cavity from the secondary hydroxyl group side and the A ring was left outside the cavity near the secondary hydroxyl group side and EC molecule fitted loosely.

抄録 35°C、重水中における β -シクロデキストリン(β -CD)と(+)-カテキン(CA)および(-)-エピカテキン(EC)の包接錯体の構造をNMRを用いて調べた。 β -CDとCAの包接錯体は、フラボノイド骨格の大部分が β -CD空洞内に取り込まれ、B環の $C_{1'}$ – $C_{4'}$ 軸は β -CDの分子軸に対して傾いている。そしてCA分子は β -CD空洞内にしっかりと包接していると考えられる。

それに対して、 β -CDとECの包接錯体では、B環が二級水酸基側から深く β -CDの空洞内に入り、A環は空洞外の二級水酸基側の近くに位置していると考えられる。そしてEC分子は β -CD空洞内にゆるく包接してしていると考えられる。