

# 水溶液中における $\beta$ -シクロデキストリンと (-)-エピガロカテキンガレートの包接錯体の構造と相互作用

石津 隆、平田千賀子、山本英二、原野一誠\*

*Magnetic Resonance in Chemistry*, **44**, 776-783 (2006).

## Structure and Intramolecular Flexibility of $\beta$ -Cyclodextrin Complex with (-)-Epigallocatechin Gallate in Aqueous Solvent

Takashi Ishizu, Chikako Hirata, Hideji Yamamoto, Kazunobu Harano\*

**ABSTRACT** : The probable structure of the inclusion complex of  $\beta$ -cyclodextrin ( $\beta$ -CD) and (-)-epigallocatechin gallate (EGCg) in  $D_2O$  was investigated using several NMR techniques. EGCg formed a 1:1 complex with  $\beta$ -CD, in which the A ring and a portion of the C ring of EGCg were included at the head of the phenolic hydroxyl group attached to C7 of EGCg into the  $\beta$ -CD cavity from the wide secondary hydroxyl group side. In the 1:1 complex with  $\beta$ -CD, EGCg maintained the conformation in which the B and B' rings of EGCg took pseudoequatorial and pseudoaxial positions with respect to the C ring, respectively. The structure of the inclusion complexes of  $\beta$ -CD and EGCg obtained from NMR experiments supported well that determined from AM1 semiempirical SCF MO calculations.

**抄録** NMRによるいくつかの手法を用いて、水溶液中における $\beta$ -シクロデキストリン( $\beta$ -CD)と(-)-エピガロカテキンガレート(EGCg)の包接錯体の構造を調べた。EGCgは $\beta$ -CDと1:1の包接錯体をつくり、EGCgのA環とC環の一部が $\beta$ -CDの第二級水酸基側の入り口から、C7を先頭にして $\beta$ -CDの孔の内部に入っていることが判った。また、1:1の包接錯体形成時、EGCgのB環はC環に対してプソイドエカトリアル、B'環はプソイドアキシアルという単独時におけるコンホメーションを維持したままであるということが判った。この1:1の包接錯体の構造はAM1 SCF MO計算の結果からも支持された。

\* Faculty of Pharmaceutical Sciences, Sojo University

崇城大学 薬学部