

水溶液中における
シクロデキストリンとガレートカテキン類からなる
包接錯体の NMR スペクトルの評価：空洞サイズの依存

石津 隆、堤 広之、山本英二、原野一誠*

Magnetic Resonance in Chemistry, **47**(4), 283-287 (2009)

**NMR spectroscopic characterization of
inclusion complexes comprising cyclodextrins and galled catechins
in aqueous solution: cavity size dependency**

Takashi Ishizu, Hiroyuki Tsutsumi, Hideji Yamamoto and Kazunobu Harano*

ABSTRACT: The structure of inclusion complexes of γ -cyclodextrin (γ -CD), (-)-gallic catechin gallate (GCg), and (-)-epigallocatechin gallate (EGCg) in D₂O was investigated using several NMR techniques. GCg formed a 1:1 inclusion complex with γ -CD in which the A and C rings of GCg were inserted deep at the head of the A ring into the γ -CD cavity from the wide secondary hydroxyl group side. In the 1:1 inclusion complex with GCg and γ -CD, the GCg moiety maintained a conformation in which the B and B' rings of GCg took both pseudoequatorial positions with respect to the C ring. The structure of the inclusion complex of GCg and γ -CD obtained from NMR experiments supported well that determined from PM6 semiempirical SCF MO calculations. However, ¹H NMR experiments suggested that EGCg did not form any inclusion complex with γ -CD in D₂O. The marked difference between GCg and EGCg in inclusion behavior toward γ -CD may be explained in terms of the stabilization energy calculated with the PM6 method.

抄録 D₂O 中における γ -シクロデキストリンとガロカテキンガレート (GCg)、エピガロカテキンガレート (EGCg) の包接錯体の構造は、いくつかの NMR の手法により調べられた。GCg は γ -CD の空洞に、広い 2 級水酸基側から深く入りこみ 1:1 包接錯体を形成していた。GCg と γ -CD の 1:1 包接錯体において、GCg 部位は GCg の B 環と B' 環のどちらも C 環に対してプソイドアキシャル位をとったコンホメーションを維持していた。NMR から得られた GCg と γ -CD の包接錯体の構造は PM6 反経験的 SCF MO 計算から決められたものをよく支持するものであった。しかし、D₂O 中において EGCg は γ -CD と包接錯体を形成しなかった。 γ -CD の包接挙動において GCg と EGCg の顕著な違いは PM6 を用いて計算された安定定数から説明されるかもしれない。

* Faculty of Pharmaceutical Sciences, Sojo University
崇城大学薬学部