

(-)-ガロカテキン-3-*O*-ガレートの結晶構造における offset $\pi - \pi$ 相互作用

堤 広之、佐藤 隆、石津 隆

Chemical and Pharmaceutical Bulletin, **58** (4), 572-574 (2010)

Offset π - π interaction in crystal structure of (-)-gallocatechin-3-*O*-gallate

Hiroyuki Tsutsumi, Takashi Sato, and Takashi Ishizu

ABSTRACT: The single crystal of (-)-gallocatechin-3-*O*-gallate (GCg) was prepared using a solution containing an equimolecular amount of GCg and (-)-epigallocatechin-3-*O*-gallate (EGCg) in water. The crystal structure of GCg determined by X-ray crystallographic analysis was monoclinic with the space group $P2_1$ at 223 K. Offset π - π interactions formed between the A and A rings, B and B rings, and gallate and gallate rings of GCg, and five intermolecular hydrogen bonds formed between GCgs, GCg and water. The B ring of GCg bonded to C2 was in the axial position and the gallate ring of GCg bonded to C3 was in the pseudoaxial position with respect to the C ring of GCg.

抄録 (-)-ガロカテキン-3-*O*-ガレート (GCg) の単結晶は GCg と (-)-エピガロカテキン-3-*O*-ガレート (EGCg) を等モル含んだ水溶液を用いて作成された。X線結晶構造解析により GCg の結晶構造は 223K で空間群 $P2_1$ の単斜晶系であった。offset π - π 相互作用は GCg の A 環と A 環、B 環と B 環、ガレート環とガレート環の間、5 つの分子間水素結合は GCg 同士と GCg と水の間形成されていた。C2 に結合している B 環、C3 に結合している GCg のガレート環は GCg の C 環に対してアキシアル配座とプソイドアキシアル配座をとっていた。