

エピガロカテキン -3-*O*- ガレート・カフェイン錯体の 立体化学構造

堤 広之、佐藤 隆、石津 隆

Chemistry Letters, **41** (12), 1669-1671 (2012)

Stereochemical Structure of the Complex of (-)-Epigallocatechin-3-*O*-Gallate and Caffeine

Hiroyuki Tsutsumi, Takashi Sato, and Takashi Ishizu

ABSTRACT: Stereochemical structure of a 2:2 complex of (-)-epigallocatechin-3-*O*-gallate (EGCg) and caffeine, which was main content of a crude precipitate formed by creaming, was determined by X-ray crystallographic analysis, and intermolecular interactions forming between EGCg and caffeine moieties were elucidated. Stereochemical structure and intermolecular interactions of a 2:2 complex of EGCg and nicotinamide was also determined.

抄録 クリーミングダウンによって形成される粗沈殿の主な成分である (-)-エピガロカテキン -3-*O*-ガレート (EGCg) とカフェインの 2 : 2 錯体の立体化学構造が X 線結晶構造解析により決定され、さらに EGCg とカフェインの間で形成される分子間相互作用についても明らかにされた。また、2 : 2 EGCg・ニコチンアミド錯体の立体化学構造と分子間相互作用も決定された。