

# (-)-エピガロカテキン-3-O-ガレートによる クリーミングダウン現象を用いた分子補足

堤 広之、佐藤 彩乃、富士野 覚、藤岡 侑祐、石津 隆

*Chem.Pharm.Bull.* **67(5)**, 501-504 (2019).

## Molecular Capture Using the Precipitate of Creaming-Down by (-)-Epigallocatechin-3-O-gallate

Hiroyuki Tsutsumi, Ayano Sato, Satoru Fujino, Yusuke Fujioka, Takashi Ishizu

**ABSTRACT:** An aqueous solution of equimolecular amounts of 2-chloropyrimidine and (-)-epigallocatechin-3-O-gallate (EGCg) afforded a colorless block crystal, which was determined to be a 2:2 complex of 2-chloropyrimidine and EGCg by X-ray crystallographic analysis. The 2:2 complex was formed by the cooperative effect of three intermolecular interactions,  $\pi$ - $\pi$  and CH- $\pi$  interactions, and intermolecular hydrogen bonds. Upon formation of the 2:2 complex, a 2-chloropyrimidine molecule was captured by a hydrophobic space formed by the three aromatic rings of A, B, and B' rings of two EGCg molecules.

The molecular capture abilities of various heterocyclic compounds using EGCg were evaluated by ratio of the heterocyclic compounds included in the precipitates of complex of EGCg to the heterocyclic compounds used. The amount of the heterocyclic compounds was measured by an integrated value of corresponding proton signals in the quantitative  $^1\text{H}$  NMR spectrum.

抄録 等量の2-クロロピリミジンと(-)-エピガロカテキン-3-O-ガレート(EGCg)の水溶液から無色の結晶が得られた。その結晶はX線結晶構造解析により、2-クロロピリミジンとEGCgの2:2錯体であることが分かった。その2:2錯体は $\pi$ - $\pi$ 相互作用、CH- $\pi$ 相互作用、分子間水素結合により形成されていた。その2:2錯体形成の際、2-クロロピリミジン分子は2分子のEGCgのA、B、B'環という3つの芳香環によってつくられる疎水性空間によって補足されていた。

EGCgを用いた種々のヘテロ環化合物の分子補足能が、用いたヘテロ環化合物の量に対するEGCgとの錯体の沈殿中に含まれるヘテロ環化合物の量によって算出された。ヘテロ環化合物の量は、定量 $^1\text{H}$  NMRスペクトルにおける対応するシグナルの積分値の測定によって求められた。