

非エピ型カテキンを用いたテアシネンシン合成

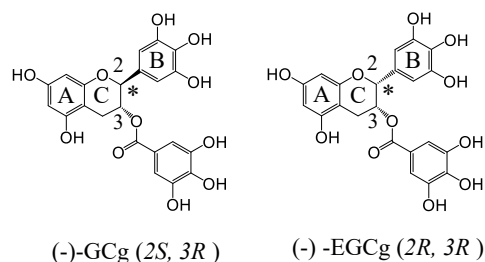
(長岡高専¹) ○櫻井凜¹・大矢理賀¹・奥村寿子¹

Chemical Synthesis of Theasinensin from Non-Epicatechin (¹*National Institute of Technology(KOSEN), Nagaoka College*) ○Rin Sakurai,¹ Rika Oya,¹ Hisako Okumura¹

Theasinensins (TSs) are dimers formed through the oxidative polymerization of catechins. Catechins include stereoisomeric epi-form catechins and non-epi-form catechins that differ in physiological activity, such as inhibition of cholesterol absorption. Catechin stereoisomerism is expected to influence the physical properties and physiological activities of TSs. In this study, we synthesized TSs using the non-epi-form catechin (-)-Gallocatechin gallate (GCg), identified the various TSs produced, and investigated the reaction conditions affecting the production rate. Additionally, we compared the structures of all the stereoisomers predicted using quantum chemical calculations. The results of synthesis using (-)-GCg revealed the formation of two types of TS atropisomers from (-)-GCg. The TS formation rate was maximized by adding two equivalents of copper(II) chloride and 50% methanol to (-)-GCg. The stable TS conformations predicted through quantum calculations differed for each isomer. No difference was observed in the total energy of the isomers; however, differences were found in their volume and area values. In conclusion, two types of TS were successfully synthesized using (-)-GCg, and it was evident that the optimum synthesis conditions and physical properties of TSs synthesized from (-)-GCg differed from those obtained when using the epi-form catechin (-)-Epigallocatechin gallate (EGCg).

Keywords : Theasinensin, Non-epi-form catechin, Stereoisomer, LC-MS, epimer

テアシネンシン(TS)は、カテキンが酸化重合した二量体である。カテキンには立体異性の異なるエピ型カテキンと非エピ型カテキンがあり、コレステロール吸収抑制効果などの生理活性に違いが生じることが分かっている¹⁾。TS についてもカテキンの立体異性から生じる物性値や生理活性への影響が予想される。本研究では、非エピ型カテキンの(-)-Gallocatechin gallate(GCg)を用いた TS の合成を行い、生成した各種 TS の同定および生成率に影響を与える条件について検討した。また、予想されるすべての立体異性体の構造を量子化学計算により予測し、異性体間の差異について考察した。(-)-GCg を用いた合成の結果、アトロプ異性体の 2 種類の TS の生成を確認した。また、TS 生成率が最も高い値となるのは(-)-GCg に対する塩化銅(II)の量が 2 当量、MeOH 濃度が 50%の条件であることが示された。量子計算結果による TS の安定立体構造は各異性体で異なっており、異性体の全エネルギーに差は見られなかったが、体積値および面積値に違いが生じた。以上の結論として、(-)-GCg から 2 種類の TS を合成するとともに、(-)-GCg とエピ型カテキンの(-)-Epigallocatechin gallate(EGCg)では最適な合成条件や物性値が異なることが明らかとなった。



1) I. Ikeda *et al.*, *J. Agric. Food Chem.*, **2003**, *51*, 7303.