

Hess, K. et al., Ber., 1917, 50, 1192, (分離)
Mortimer, P.I. et al., J.C.S., 1957, 3967, (分離)
Franck, B., Chem. Ber., 1958, 91, 2803, (分離)
Kuwata, S., Bull. Chem. Soc. Jpn., 1960, 33, 1668; 1672, (分離, 構造決定, 成書)
Khanna, K.L. et al., J. Pharm. Sci., 1962, 51, 1194, (分離)
Drillien, G. et al., Bull. Soc. Chim. Fr., 1963, 2393, (レビュー)
Fitch, W.L. et al., J.O.C., 1974, 39, 2974, (分離, 誘導体)
Krasnov, E.A. et al., Khim. Prir. Soedin., 1977, 585; Chem. Nat. Compd. (Engl. Transl.), 492, (分離, 誘導体)
Nagasaka, T. et al., Heterocycles, 1989, 29, 155, (合成法, IR, H-NMR)

***RTECS (化学物質毒性データ) ***

生体影響物質 :天然物.

健康障害に関するデータ

急性毒性に関するデータ

《試験方法》 認知されている最小致死量(LDL₀)試験.

曝露経路 :経口投与.

被験動物 :げっ歯類-マウス

投与量・期間: 225 mg/kg

毒性影響 :致死量以外に毒性影響に関する報告はない.

参考文献

HCACAV Helvetica Chimica Acta. (Verlag Helvetica Chimica Acta, Postfach, CH-4002 Basel, Switzerland) V.1- 1918- [Vol.,頁,年(19-)]45,729,1962

《試験方法》 認知されている最小致死量(LDL₀)試験.

曝露経路 :静脈注射

被験動物 :ほ乳類-イヌ.

投与量・期間: 10 mg/kg

毒性影響 :致死量以外に毒性影響に関する報告はない.

参考文献

85IXA4 "Structure et Activite Pharmacodynamique des Medicaments du Systeme Nerveux Vegetatif," Bovet, D., and F. Bovet-Nitti, New York, S. Karger, 1948 [Vol.,頁,年(19-)]-,588,1948

《試験方法》 認知されている最小致死量(LDL₀)試験.

曝露経路 :静脈注射

被験動物 :げっ歯類-ウサギ.

投与量・期間: 10 mg/kg

毒性影響 :致死量以外に毒性影響に関する報告はない.

参考文献

85IXA4 "Structure et Activite Pharmacodynamique des Medicaments du Systeme Nerveux Vegetatif," Bovet, D., and F. Bovet-Nitti, New York, S. Karger, 1948 [Vol.,頁,年(19-)]-,588,1948

《試験方法》 認知されている最小致死量(LDL₀)試験.

曝露経路 :静脈注射

被験動物 :げっ歯類-モルモット.

投与量・期間: 400 mg/kg

毒性影響 :致死量以外に毒性影響に関する報告はない.

参考文献

HBAMAK "Abdernalden's Handbuch der Biologischen Arbeitsmethoden." (Leipzig, Ger. Dem. Rep.) [Vol.,頁,年(19-)]4,1289,1935

《試験方法》 認知されている最小致死量(LDL₀)試験.

曝露経路 :静脈注射

被験動物 :鳥類-ハト

投与量・期間: 140 mg/kg

毒性影響 :致死量以外に毒性影響に関する報告はない.

参考文献

HBAMAK "Abdernalden's Handbuch der Biologischen Arbeitsmethoden." (Leipzig, Ger. Dem. Rep.) [Vol.,頁,年(19-)]4,1289,1935

§ Pelletierine; (±)-form

[CAS No.] 539-00-4

[化合物分類] アルカロイド化合物 (Simple piperidine alkaloid)

[構造式]

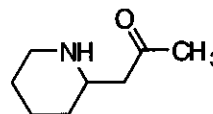
[基原] 次の植物から得られるアルカロイド: *Punica granatum*, *Duboisia myoporoides*, *Sedum acre* (ザクロ科, ナス科, ベンケイソウ科)

[沸点] Bp_{14} 91-92 °C

[PKa 値] pK_a 9.45 (15 °C)

[その他のデータ] 空気中で容易に酸化される

[化学物質毒性データ総覧 (RTECS) 登録番号] RX9635000



-----文献-----

Hess, K. et al., Ber., 1917, 50, 1192, (分離)

Mortimer, P.I. et al., J.C.S., 1957, 3967, (分離)

Franck, B., Chem. Ber., 1958, 91, 2803, (分離)

Kuwata, S., Bull. Chem. Soc. Jpn., 1960, 33, 1668; 1672, (分離, 構造決定, 成書)

Khanna, K.L. et al., J. Pharm. Sci., 1962, 51, 1194, (分離)

Drillien, G. et al., Bull. Soc. Chim. Fr., 1963, 2393, (レビュー)

Fitch, W.L. et al., J.O.C., 1974, 39, 2974, (分離, 誘導体)

Krasnov, E.A. et al., Khim. Prir. Soedin., 1977, 585; Chem. Nat. Compd. (Engl. Transl.), 492, (分離, 誘導体)

RTECS (化学物質毒性データ)

生体影響物質 : 医薬品.

健康障害に関するデータ

急性毒性に関するデータ

<<試験方法>> 認知されている最小致死量 (LDL₀) 試験.

曝露経路 : 静脈注射

被験動物 : げっ歯類-ウサギ.

投与量・期間: 40 mg/kg

毒性影響 : 致死量以外に毒性影響に関する報告はない.

参照文献

85KYAH "Merck Index; an Encyclopedia of Chemicals, 医薬品, and Biologicals", 11th ed., Rahway, NJ 07065, Merck & Co., Inc. 1989 [Vol., 頁, 年 (19-)] 11, 1119, 1989

§ Pelletierine; (±)-form, N-Me

[化学名・別名] Methylisopelletierine. α -N-Methylpelletierin- β -one. Methylpelletierine

[化合物分類] アルカロイド化合物 (Simple piperidine alkaloid)

[構造式]

[分子式] C₉H₁₇NO

[分子量] 155.239

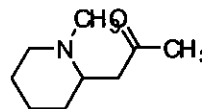
[正確な分子量] 155.131014

[基原] 次の植物から得られるアルカロイド: *Punica granatum*, *Lupinus formosus*, *Sedum purpureum*, *Sedum hybridum*, *Sedum aizoon* (マメ科, ベンケイソウ科)

[沸点] Bp_{26} 114-117 °C

[溶解性] 水と混合する

[その他のデータ] 強い塩基性.



-----文献-----

Hess, K. et al., Ber., 1917, 50, 1192, (分離)

Mortimer, P.I. et al., J.C.S., 1957, 3967, (分離)

Franck, B., Chem. Ber., 1958, 91, 2803, (分離)

Kuwata, S., Bull. Chem. Soc. Jpn., 1960, 33, 1668; 1672, (分離, 構造決定, 成書)

Khanna, K.L. et al., J. Pharm. Sci., 1962, 51, 1194, (分離)

Drillien, G. et al., Bull. Soc. Chim. Fr., 1963, 2393, (レビュー)

Beyerman, H.C. et al., Rec. Trav. Chim. (J. R. Neth. Chem. Soc.), 1967, 86, 80, (絶対構造)

Fitch, W.L. et al., J.O.C., 1974, 39, 2974, (分離, 誘導体)

Hanaoka, M. et al., Yakugaku Zasshi, 1974, 94, 531; CA, 81, 13670r, (合成法)

Krasnov, E.A. et al., Khim. Prir. Soedin., 1977, 585; Chem. Nat. Compd. (Engl. Transl.), 492, (分離, 誘導体)

§ Punicacortein A

[CAS No.] 103488-35-3

[化合物分類] タンニン化合物 (Hexahydroxydiphenoyl ester tannin)

[構造式]

[分子式] $C_{27}H_{22}O_{18}$

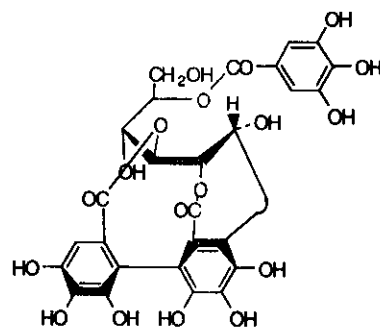
[分子量] 634.46

[正確な分子量] 634.08062

[基原] 次の植物の樹皮から分離: *Punica granatum*

[性状] 褐色の無定型粉末 + 1/2 · H₂O

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{28} -73.8$ (c, 0.6 in MeOH)



-----文献-----

Tanaka, T. et al., Chem. Pharm. Bull., 1986, 34, 656, (構造決定, H-NMR, C13-NMR)

Nonaka, G.-I. et al., Chem. Pharm. Bull., 1990, 38, 2151; 1991, 39, 884, (構造決定, H-NMR, C13-NMR, 絶対構造)

§ Punicacortein A; 5-O-Degalloyl, 6-O-galloyl

[化学名・別名] Punicacortein B

[CAS No.] 103488-36-4

[化合物分類] タンニン化合物 (Hexahydroxydiphenoyl ester tannin)

[構造式]

[分子式] $C_{27}H_{22}O_{18}$

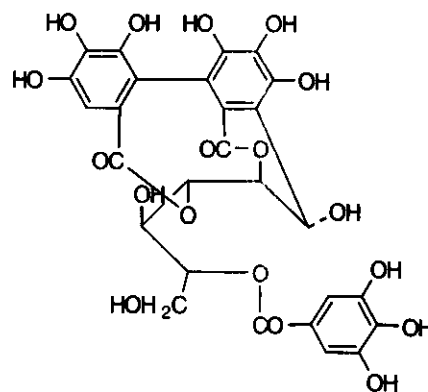
[分子量] 634.46

[正確な分子量] 634.08062

[基原] 次の植物の樹皮から分離: *Punica granatum*

[性状] 褐色の無定型粉末 + 1/2 · H₂O

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{28} +11.9$ (c, 0.5 in MeOH)



-----文献-----

Tanaka, T. et al., Chem. Pharm. Bull., 1986, 34, 656, (構造決定, H-NMR, C13-NMR)

Nonaka, G.-I. et al., Chem. Pharm. Bull., 1990, 38, 2151; 1991, 39, 884, (構造決定, H-NMR, C13-NMR, 絶対構造)

§ Punicacortein D

[CAS No.] 103616-63-3

[化合物分類] タンニン化合物 (Gallagyl ester tannin)

[構造式]

[分子式] $C_{48}H_{28}O_{30}$

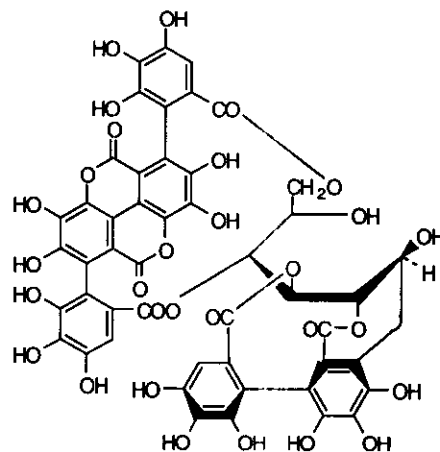
[分子量] 1084.731

[正確な分子量] 1084.06655

[基原] *Punica granatum* の樹皮から得られる主なタンニン成分

[性状] 黄色の無定型粉末 · 五水和物

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{24} -96.1$ (c, 0.6 in H₂O)



-----文献-----

Tanaka, T. et al., Chem. Pharm. Bull., 1986, 34, 656, (構造決定, H-NMR, C13-NMR)

Nonaka, G.-I. et al., Chem. Pharm. Bull., 1990, 38, 215, (絶対構造)

Nonaka, G.-I., J. Nat. Prod., 1990, 53, 587, (anti-HIV activity)

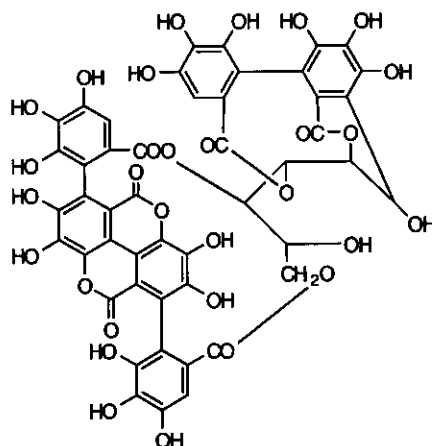
§ Punicacortein D; 1-Epimer

[化学名・別名] Punicacortein C

[CAS No.] 103488-37-5

[化合物分類] 薬物: 抗ウイルス物質 (Antiviral agent), 薬物: 抗 HIV 薬 (Anti-HIV agent), タンニン化合物 (Gallagyl ester tannin)

[構造式]



[分子式] $C_{48}H_{28}O_{30}$

[分子量] 1084.731

[正確な分子量] 1084.06655

[基原] *Punica granatum*

[用途] 抗 HIV 活性を示す

[性状] 黄色の無定型粉末・一水和物

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{28} -37.7$ (c, 1.2 in H_2O)

[Log P 計算値] Log p-0.1 (未確認値) (計算値)

-----文献-----

Tanaka, T. et al., Chem. Pharm. Bull., 1986, 34, 656, (構造決定, H-NMR, C13-NMR)

Nonaka, G.-I. et al., Chem. Pharm. Bull., 1990, 38, 215, (絶対構造)

Nonaka, G.-I., J. Nat. Prod., 1990, 53, 587, (anti-HIV activity)

§ Punicalagin

[化学名・別名] 2,3-(S)-Hexahydroxydiphenoyl-4,6-(S,S)-gallagylglucose

[CAS No.] 65995-63-3

[化合物分類] タンニン化合物 (Hexahydroxydiphenoyl ester tannin), 薬物: 抗 HIV 薬 (Anti-HIV agent), タンニン化合物 (Gallagyl ester tannin)

[構造式]

[分子式] $C_{48}H_{28}O_{30}$

[分子量] 1084.731

[正確な分子量] 1084.06655

[一般的性質] 等量の anomer の混合物

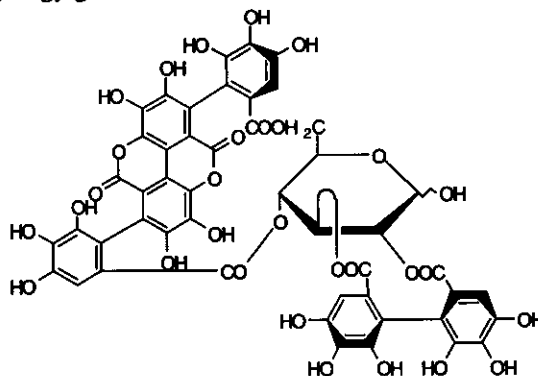
[基原] *Terminalia oblongata*, *Punica granatum*

[用途] 抗 HIV 活性を示す. Toxic to sheep and cattle

[性状] 黄色の無定型粉末・一水和物

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{20} -181$ (c, 1.0 in H_2O). $[\alpha]_D^{28} +3.8$ (c, 0.9 in MeOH)

[UV]: [neutral] λ_{max} 217 (ϵ 60000); 261 (ϵ 55000); 375 (ϵ 12200) (MeOH)



-----文献-----

Mayer, W. et al., Annalen, 1977, 1976, (分離)

Tanaka, T. et al., Chem. Pharm. Bull., 1986, 34, 650, (分離)

Liu, T. et al., Chem. Pharm. Bull., 1990, 38, 3004, (分離)

Nonaka, G.-I., J. Nat. Prod., 1990, 53, 587, (anti-HIV activity)

Doig, A.J. et al., J.C.S. Perkin 1, 1990, 2317, (分離, H-NMR, C13-NMR, Mas)

Jossang, A. et al., J. Nat. Prod., 1994, 57, 732, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ Punicalin

[化学名・別名] 4,6-Gallagylglucose

[CAS No.] 65995-64-4

[化合物分類] 薬物: 抗 HIV 薬 (Anti-HIV agent), タンニン化合物 (Gallagyl ester tannin)

[構造式]

[分子式] $C_{34}H_{22}O_{22}$

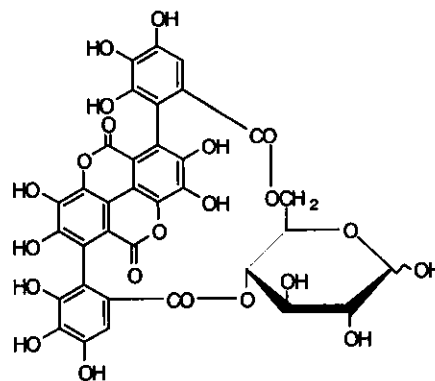
[分子量] 782.535

[正確な分子量] 782.06028

[一般的性質] Anomeric mixt.

[基原] pomegranate, *Punica granatum*

[用途] 抗 HIV 活性を示す



[性状] 黄色の無定型粉末・一水和物

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{25} -81.1$ (c, 0.6 in H₂O)

[UV]: [neutral] λ_{max} 216 (ϵ 74131); 258 (ϵ 67610); 329 (ϵ 14125) (MeOH)

-----文献-----

Mayer, W. et al., *Annalen*, 1977, 1976, (分離, 構造決定)

Tanaka, T. et al., *Chem. Pharm. Bull.*, 1986, 34, 650, (構造決定)

Nonaka, G.I., *J. Nat. Prod.*, 1990, 53, 587, (anti-HIV activity)

Jossang, A. et al., *J. Nat. Prod.*, 1994, 57, 732, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ Punicalin; 2-O-(3,4,5-Trihydroxybenzoyl)

[化学名・別名] 2-O-Galloylpunicalin

[CAS No.] 103488-45-5

[化合物分類] タンニン化合物

(Gallagyl ester tannin)

[構造式]

[分子式] C₄₁H₂₆O₂₆

[分子量] 934.641

[正確な分子量] 934.07124

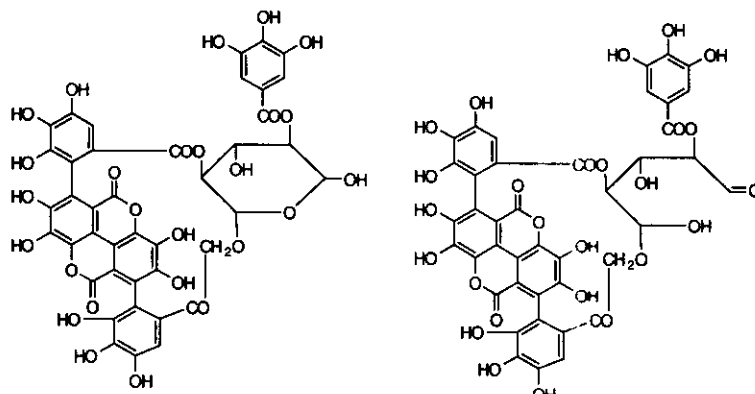
[基原] 次の植物の樹皮から分離:

Punica granatum

[性状] 黄色結晶粉末 (H₂O)

[融点] Mp 255 °C で分解

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{25} +3.8$ (c, 0.9 in MeOH)



-----文献-----

Mayer, W. et al., *Annalen*, 1977, 1976, (分離, 構造決定)

Tanaka, T. et al., *Chem. Pharm. Bull.*, 1986, 34, 650, (構造決定)

Nonaka, G.I., *J. Nat. Prod.*, 1990, 53, 587, (anti-HIV activity)

Jossang, A. et al., *J. Nat. Prod.*, 1994, 57, 732, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ Punigluconin

[化学名・別名] 2,3-Di-O-galloyl-4,6-(S)-hexahydroxydiphenoylgluconic acid

[CAS No.] 103488-38-6

[化合物分類] タンニン化合物 (Hexahydroxydiphenoyl ester tannin)

[構造式]

[分子式] C₃₄H₂₆O₂₃

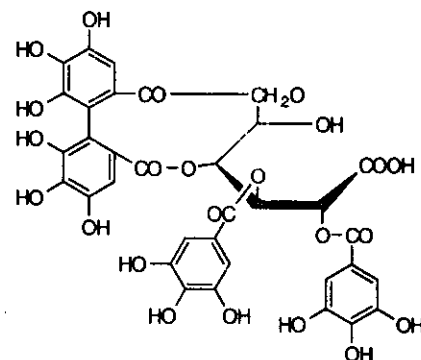
[分子量] 802.566

[正確な分子量] 802.086495

[基原] *Punica granatum* の樹皮から分離される主なタンニン

[性状] 褐色無定型の粉末・二水和物

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{25} +45.5$ (c, 0.7 in MeOH)



-----文献-----

Tanaka, T. et al., *Chem. Pharm. Bull.*, 1986, 34, 656, (構造決定, H-NMR, C13-NMR)

§ 2,3,4,5-Tetrahydro-6-(1-propenyl) pyridine

[化学名・別名] 2-(1-Propenyl)- Δ^1 -piperidine

[CAS No.] 16543-92-3

[その他の CAS No.] 16543-93-4

[化合物分類] アルカロイド化合物 (Miscellaneous pyridine alkaloid)

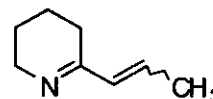
[構造式]

[分子式] C₈H₁₃N

[分子量] 123.197

[正確な分子量] 123.104799

[一般的性質] Incorr. named as 2-(2-propenyl)- Δ^1 -piperidine in the lit.



[基原] 次の植物の葉から得られるアルカロイド: *Punica granatum* (ザクロ) (ザクロ科)

[性状] 結晶 (as hydrochloride)

[融点] Mp 112-114 °C (hydrochloride)

[その他のデータ] 不安定, 塩酸塩はしめった空气中で分解する

-----文献-----

Roberts, M.F. et al., *Phytochemistry*, 1967, 6, 711, (分離, IR, H-NMR, 構造決定)

§ 1,2,4-Trigalloylglucose; β-D-Pyranose-form

[化合物分類] タンニン化合物 (Simple gallate ester tannin)

[基原] *Punica granatum* の葉

[性状] 無定形の粉末

[UV]: [neutral] λ_{max} 277 (MeOH)

-----文献-----

Nonaka, G.-I. et al., *Chem. Pharm. Bull.*, 1987, 35, 3127, (分離, UV, H-NMR, C13-NMR)

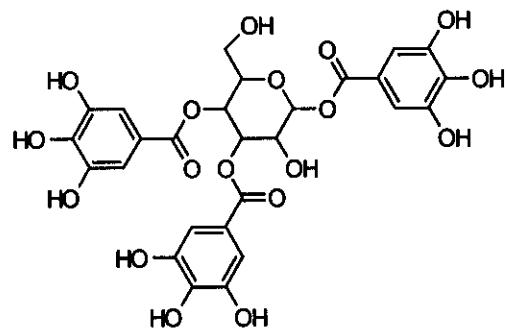
Hussein, S.A.M. et al., *Phytochemistry*, 1997, 45, 819, (分離, UV, H-NMR, C13-NMR)

§ 1,3,4-Trigalloylglucose; β-D-Pyranose-form

[CAS No.] 193484-86-5

[化合物分類] タンニン化合物 (Simple gallate ester tannin)

[構造式]



[基原] *Punica granatum* の葉

[性状] 無定形の粉末

[UV]: [neutral] λ_{max} 277 (MeOH)

-----文献-----

Hussein, S.A.M. et al., *Phytochemistry*, 1997, 45, 819, (分離, UV, H-NMR, C13-NMR)

*****サケカス (Pressed sake cake) *****

§ § 清酒粕。

*****ササ (Sasa, Bamboo grass) *****

§ § イネ科クマザサ (*Sasa veitchii* Rehder (*S. albo-marginata* Makino et Shibata ; *Bambusa veitchii* Carriere)) の葉部, 果実。

本調査研究では研究報告ない。

*****ササクサ (Sasakusa) *****

§ § イネ科コササクサ (*Lophatherum gracile* Brongniart) の茎葉。

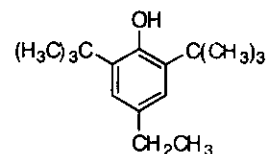
本調査研究では研究報告ない。

*****サーチ (Sea buckthorn) *****

§ § グミ科サーチ (*Hippophae rhamnoides* L.) の果実 (乾燥)。

§ 2,6-Di-*tert*-butyl-4-ethylphenol (旧 CAS 名)

[CAS No.] 4130-42-1
[化合物分類] 単環芳香族 (Simple phenol)
[構造式]



[分子式] $C_{10}H_{14}O$

[分子量] 234.381

[正確な分子量] 234.198365

[基原] *Hippophae rhamnoides*, *Theobroma* sp., マンゴー, 緑茶の葉, 藍藻植物の代謝物の構成成分として報告がある

[用途] 抗酸化剤

[性状] 結晶 (EtOH 溶液)

[融点] Mp 43.5-45 °C

[沸点] Bp₁₀ 134 °C

-----文献-----

Afanasiev, I.D. et al., CA, 1967, 67, 32392, (合成法)

U.S. Pat., 1975, 3 919 333; CA, 84, 43611, (合成法)

Koutek, B. et al., Coll. Czech. Chem. Comm., 1976, 41, 2250, (合成法)

Pang, X. et al., Chin. Chem. Lett., 1991, 2, 387, (生育)

§ 9,12-Dihydroxy-15-nonadecenoic acid

[CAS No.] 105798-59-2

[化合物分類] 脂肪族化合物 (Oxylipins (including Eicosanoid) 脂肪族化合物 (Unbranched alkenic carboxylic acids and lactone))

[構造式] $H_3CCH_2CH_2CH=CHCH_2CH_2CH(OH)CH_2CH_2CH(OH)(CH_2)_7COOH$

[分子式] $C_{19}H_{36}O_4$

[分子量] 328.491

[正確な分子量] 328.26136

[基原] *Hippophae rhamnoides* の種子オイル. 次に示す物質の成分: Cu Liu Guo (Sha Ji)

-----文献-----

Zhmyrko, T.G. et al., Khim. Prir. Soedin., 1986, 161-168; 1989, 626-634

§ 4,8-Dimethyltridecane

[CAS No.] 55030-62-1

[化合物分類] 脂肪族化合物 (Branched aliphatic hydrocarbon)

[構造式] $H_3C(CH_2)_4CH(CH_3)(CH_2)_3CH(CH_3)CH_2CH_2CH_3$

[分子式] $C_{15}H_{32}$

[分子量] 212.418

[正確な分子量] 212.2504

[基原] *Citrus ladanifolius*, *Hippophae rhamnoides*

-----文献-----

Simon-Fuentes, A. et al., An. Quim., Ser. C, 1987, 83, 201, (分離)

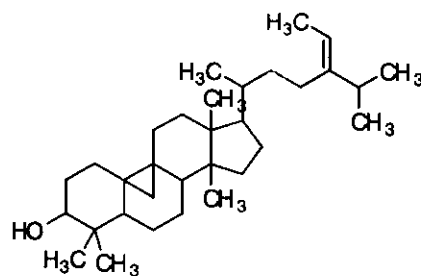
Chen, Y. et al., CA, 1991, 115, 56998s, (分離)

§ 24-Ethylidene-3-cycloartanol; (3β,24Z)-form

[CAS No.] 115713-25-2

[化合物分類] テルペノイド (Cycloartane triterpenoid)

[構造式]



[基原] *Hippophae rhamnoides*, *Neolitsea sericea*

-----文献-----

Akihisa, T. et al., Phytochemistry, 1992, 31, 1741, (分離)

Glazunova, E.M. et al., Khim. Prir. Soedin., 1994, 30, 294; Chem. Nat. Compd. (Engl. Transl.), 1994, 30, 271, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ 3-Glucopyranosyloxy-4',5,7-trihydroxy-3'-methoxyflavone; 6''-O- α -L-Arabinopyranosyl

[CAS No.] 75909-23-8

[化合物分類] フラボノイド (Flavonols; 5 × O-置換基)

[構造式]

[分子式] $C_{27}H_{30}O_{16}$

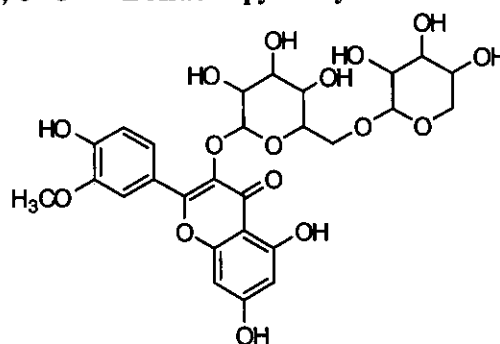
[分子量] 610.524

[正確な分子量] 610.15339

[基原] 次の植物から分離: *Papaver orientale*, *Hippophae rhamnoides*, *Festuca arundinacea*

[融点] Mp 206-208 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{22}$ -22 (c, 1 in DMSO)



-----文献-----

The Flavonoids: Advances in Research since 1980, (Ed. Harborne, J.B.), Chapman and Hall, London, 1988

Sakar, M.K. et al., *Planta Med.*, 1980, 40, 193, (6''-arabinosyl)

Elgamal, M.H.A. et al., *Fitoterapia*, 1998, 69, 549, (Isorhamnetin 3-glucoside, H-NMR, C13-NMR)

§ 3-Glucopyranosyloxy-4',5,7-trihydroxy-3'-methoxyflavone; 2''-O- β -D-Glucopyranosyl

[化学名・別名] Isorhamnetin 3-sophoroside

[CAS No.] 74137-43-2

[化合物分類] フラボノイド (Flavonols; 5 × O-置換基)

[構造式]

[分子式] $C_{28}H_{32}O_{17}$

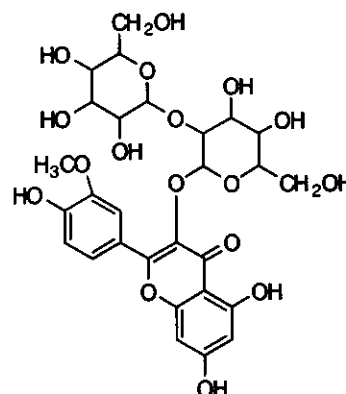
[分子量] 640.551

[正確な分子量] 640.163955

[基原] 次の植物から分離: *Hippophae rhamnoides*

[融点] Mp 179-181 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{20}$ -70 (c, 0.1 in DMF)



-----文献-----

The Flavonoids: Advances in Research since 1980, (Ed. Harborne, J.B.), Chapman and Hall, London, 1988

Rahman, W. et al., *J.O.C.*, 1962, 27, 153, (分離, 構造決定)

Elgamal, M.H.A. et al., *Fitoterapia*, 1998, 69, 549, (Isorhamnetin 3-glucoside, H-NMR, C13-NMR)

Beck, M.-A. et al., *Phytochemistry*, 1999, 50, 329, (rhamnosylrhamnosyl)

§ 3-Glucopyranosyloxy-4',5,7-trihydroxy-3'-methoxyflavone; 2''-O- β -D-Glucopyranosyl, 7-O- α -L-rhamnopyranoside

[CAS No.] 41328-75-0

[化合物分類] フラボノイド (Flavonols; 5 × O-置換基)

[構造式]

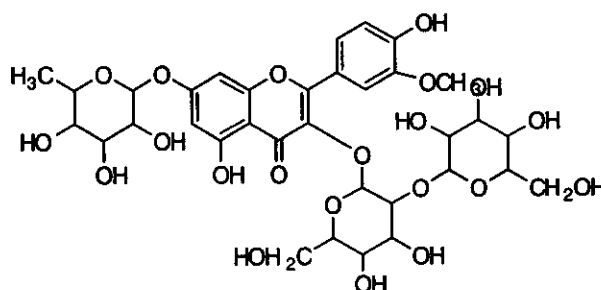
[分子式] $C_{34}H_{42}O_{21}$

[分子量] 786.693

[正確な分子量] 786.221865

[基原] 次の植物から分離: *Hippophae rhamnoides*

[融点] Mp 256-257 °C



-----文献-----

The Flavonoids: Advances in Research since 1980, (Ed. Harborne, J.B.), Chapman and Hall, London, 1988

Krishnamurti, M. et al., *Indian J. Chem.*, 1965, 3, 270, (3,7-diglucoside)

Elgamal, M.H.A. et al., *Fitoterapia*, 1998, 69, 549, (Isorhamnetin 3-glucoside, H-NMR, C13-NMR)

Beck, M.-A. et al., *Phytochemistry*, 1999, 50, 329, (rhamnosylrhamnosyl)

§ Harmalol

[化学名・別名] 4,9-Dihydro-1-methyl-3H-pyrido[3,4-b]indol-7-ol (CAS 名).

3,4-Dihydro-7-hydroxy-1-methyl- β -carboline

[CAS No.] 525-57-5

[関連 CAS No.] 6028-07-5

[化合物分類] アルカロイド化合物 (β -Carboline alkaloid) 薬物: 中枢神経興奮薬 (Central stimulant)

[構造式]

[分子式] $C_{12}H_{12}N_2O$

[分子量] 200.24

[正確な分子量] 200.094963

[基原] 次の植物から得られるアルカロイド: *Peganum harmala*, *Passiflora incarnata*, *Amsonia tabernaemontana*, *Apocynum cannabinum*, *Hippophae rhamnoides* (ハマビシ科, トケイソウ科, キョウチクトウ科, グミ科)

[用途] 伝統的なウールの染料. 中枢神経興奮作用物質.

[性状] 微小橙-黄色もしくは赤色針状結晶・三水和物 (EtOH 溶液)

[融点] Mp 100-105 °C

[溶解性] アセトン, クロロホルムに可溶; 水に難溶

[Log P 計算値] Log P 1.31 (未確認値) (計算値)

[UV]: [neutral] λ_{max} 218; 260; 376 (MeOH)

[その他のデータ] 空气中で容易に酸化される

[傷害・毒性] 50%致死量 (LD₅₀) (マウス, 腹膜内) 175 mg/kg

-----文献-----

Fischer, O., Ber., 1889, 22, 637, (合成法)

Konovalova, R. et al., Arch. Pharm. (Weinheim, Ger.), 1935, 273, 156, (合成法)

Allen, J.R.F. et al., Phytochemistry, 1980, 19, 1573, (生育, 成書)

Coune, C.A. et al., Phytochemistry, 1980, 19, 2009, (C13-NMR)

Verpoorte, R. et al., Org. Magn. Reson., 1984, 22, 328, (C13-NMR)

§ 1-Hexacosene

[CAS No.] 18835-33-1

[化合物分類] 脂肪族化合物 (Unbranched alkenic hydrocarbon)

[構造式] $H_3C(CH_2)_{23}CH=CH_2$

[分子式] $C_{26}H_{52}$

[分子量] 364.697

[正確な分子量] 364.4069

[基原] *Acanthopanax giraldii*, *Aralia elata*, *Hippophae rhamnoides*, *Chlorella* sp. を含む種々の海藻

-----文献-----

Dreisbach, R.R., Adv. Chem. Ser., 1959, 22, 1, (性質)

Streibl, M. et al., Coll. Czech. Chem. Comm., 1964, 29, 2522, (合成法)

Watanabe, S. et al., Z. Naturforsch., C, 1975, 30, 825, (分離)

Tembe, G.L. et al., Ind. Eng. Chem. Res., 1991, 30, 2247, (合成法)

Nesterov, G.A. et al., J. Mol. Catal., 1991, 66, 367, (合成法)

§ 11-Hexacosyne

[CAS No.] 34291-69-5

[化合物分類] 脂肪族化合物 (Acetylenic hydrocarbon)

[構造式] $H_3C(CH_2)_{13}C \equiv C(CH_2)_9CH_3$

[分子式] $C_{26}H_{50}$

[分子量] 362.681

[正確な分子量] 362.39125

[基原] *Hippophae rhamnoides* の種子オイル

[融点] Mp 29.5-30 °C

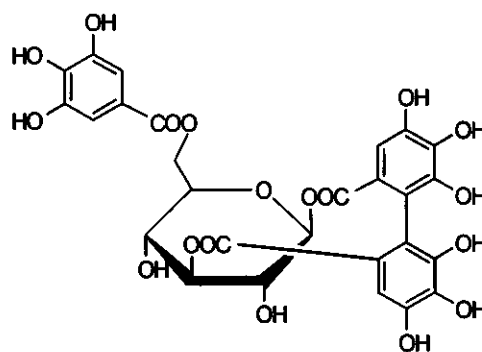
-----文献-----

Luftmann, H. et al., Org. Mass Spectrom., 1971, 5, 1073, (合成法, Mas)

Yin, F. et al., CA, 1990, 113, 112482s, (分離)

§ 1,3-Hexahydroxydiphenylglucose; β -D-Pyranose-form, 6-O-(3,4,5-Trihydroxybenzoyl)

[化学名・別名] Hiporhamnin. Hipporhamnin
 [CAS No.] 114216-46-5
 [化合物分類] タンニン化合物 (Hexahydroxydiphenoyl ester tannin)
 [構造式]



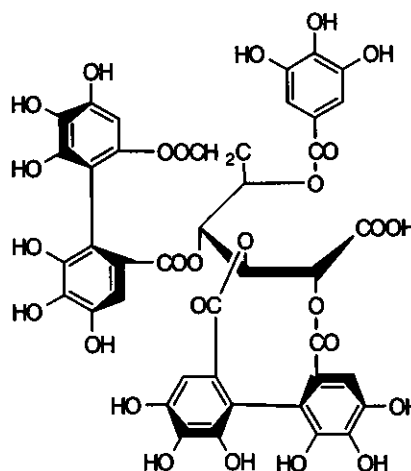
[分子式] $C_{27}H_{22}O_{18}$
 [分子量] 634.46
 [正確な分子量] 634.08062
 [基原] *Hippophae rhamnoides*
 [溶解性] 水に可溶

-----文献-----

Malhotra, S. et al., Curr. Sci., 1983, 52, 583, (分離)
 Sheichenko, O.P. et al., Khim. Prir. Soedin., 1987, 902, (Hiporhamnin)

§ Hippophaenin A

[化学名・別名] 2,3,4,6-Di-O-(S)-hexahydroxydiphenoyl-5-O-galloylgluconic acid
 [CAS No.] 133379-12-1
 [化合物分類] タンニン化合物 (Hexahydroxydiphenoyl ester tannin)
 [構造式]



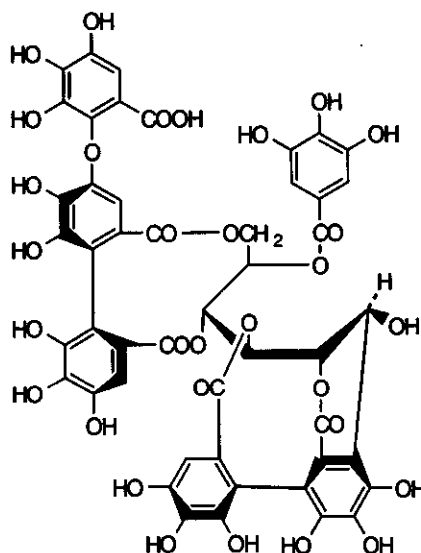
[分子式] $C_{41}H_{28}O_{27}$
 [分子量] 952.656
 [正確な分子量] 952.081805
 [基原] *Hippophae rhamnoides*
 [性状] 淡褐色の無定型粉末
 [比旋光度]: $[\alpha]_D^{20} +41.7$ (c, 0.5 in MeOH)

-----文献-----

Yoshida, T. et al., Phytochemistry, 1991, 30, 663, (構造決定, UV, CD, H-NMR, C13-NMR)

§ Hippophaenin B

[CAS No.] 133379-13-2
 [化合物分類] タンニン化合物 (Hexahydroxydiphenoyl ester tannin), タンニン化合物 (Valoneoyl ester tannin)
 [構造式]



[分子式] $C_{48}H_{32}O_{31}$
 [分子量] 1104.762
 [正確な分子量] 1104.092765
 [基原] 次の植物の葉から分離: *Hippophae rhamnoides*
 [性状] 淡褐色の無定型粉末
 [比旋光度]: $[\alpha]_D^{20} +47.2$ (c, 0.5 in MeOH)

-----文献-----

Yoshida, T. et al., Phytochemistry, 1991, 30, 663, (構造決定, UV, CD, H-NMR, C13-NMR)

§ 13-Hydroxy-9,11-hexadecadienoic acid

[CAS No.] 105798-58-1

[化合物分類] 脂肪族化合物 (Unbranched alkenic carboxylic acids and lactone)

[構造式] $\text{H}_3\text{CCH}_2\text{CH}_2\text{CH}(\text{OH})\text{CH}=\text{CHCH}=\text{CH}(\text{CH}_2)_7\text{COOH}$

[分子式] $\text{C}_{16}\text{H}_{28}\text{O}_3$

[分子量] 268.395

[正確な分子量] 268.203845

[基原] *Hippophae rhamnoides* の種子オイル. 次に示す物質の成分: Cu Liu Guo (Sha Ji)

-----文献-----

Zhmyrko, T.G. et al., Khim. Prir. Soedin., 1986, 161-168

§ 7-Hydroxy-1-methyl-β-carboline

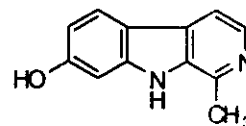
[化学名・別名] 1-Methyl-9H-pyrido[3,4-b]indol-7-ol (CAS 名). Harmol. 7-Hydroxyharman

[CAS No.] 487-03-6

[関連 CAS No.] 28090-85-9

[化合物分類] アルカロイド化合物 (β-Carboline alkaloid)

[構造式]



[分子式] $\text{C}_{12}\text{H}_{10}\text{N}_2\text{O}$

[分子量] 198.224

[正確な分子量] 198.079313

[基原] 次の植物から得られるアルカロイド: *Carex brevicollis*, *Elaeagnus angustifolia*, *Hippophae rhamnoides*, *Banisteriopsis caapi*, *Banisteriopsis inebrians*, *Peganum harmala*, *Tribulus terrestris*, *Zygophyllum fabago*, *Passiflora incarnata* (カヤツリグサ科, グミ科, キントラノオ科, ハマビシ科, トケイソウ科)

[融点] Mp 304-307 °C

[溶解性] クロロホルム, アセトン, 塩基に可溶; 水に難溶

[UV]: [neutral] λ max 210 ; 240 ; 300 ; 325 (MeOH)

-----文献-----

Borkowski, B., CA, 1960, 54, 15844e

Lutomski, J., CA, 1960, 54, 16751f; 1961, 55, 21479a

Ayer, W.A. et al., Can. J. Chem., 1970, 48, 1980, (Tetrahydroharmol)

Ribas, I. et al., CA, 1972, 77, 123811n

Allen, J.R.F. et al., Phytochemistry, 1980, 19, 1573, (レビュー, 成書)

§ 9-Hydroxy-10,12-pentadecadienoic acid

[CAS No.] 105798-57-0

[化合物分類] 脂肪族化合物 (Unbranched alkenic carboxylic acids and lactone), 脂肪族化合物 (Oxylipins (including Eicosanoid))

[構造式] $\text{H}_3\text{CCH}_2\text{CH}=\text{CHCH}=\text{CHCH}(\text{OH})(\text{CH}_2)_7\text{COOH}$

[分子式] $\text{C}_{15}\text{H}_{26}\text{O}_3$

[分子量] 254.369

[正確な分子量] 254.188195

[基原] *Hippophae rhamnoides* の種子オイル.

-----文献-----

Zhmyrko, T.G. et al., Khim. Prir. Soedin., 1986, 161-168

§ 11-Hydroxy-9-tridecenoic acid

[CAS No.] 105798-56-9

[化合物分類] 脂肪族化合物 (Unbranched alkenic carboxylic acids and lactone)

[構造式] $\text{H}_3\text{CCH}_2\text{CH}(\text{OH})\text{CH}=\text{CH}(\text{CH}_2)_7\text{COOH}$

[分子式] $\text{C}_{13}\text{H}_{24}\text{O}_3$

[分子量] 228.331

[基原] *Hippophae rhamnoides* の種子オイル.

-----文献-----

Zhmyrko, T.G. et al., Khim. Prir. Soedin., 1986, 161-168; 1989, 626-634

§ 3,4',5,7-Tetrahydroxy-3'-methoxyflavone; 7-O- α -L-Rhamnopyranoside

[化学名・別名] Isorhamnetin 7-rhamnoside
[CAS No.] 17331-72-5
[化合物分類] フラボノイド (Flavonols; 5 × O-置換基)
[構造式]

[分子式] $C_{22}H_{22}O_{11}$

[分子量] 462.409

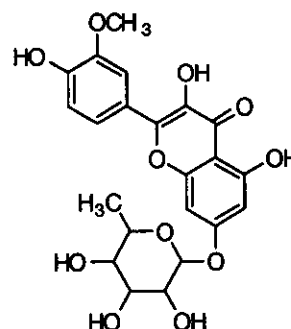
[正確な分子量] 462.116215

[基原] 次の植物から分離: *Astragalus centralpinus*, *Hippophae rhamnoides*,

Raphanus raphanistrum, *Sedum caucasicum*

[融点] Mp 248-250 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{20}$ -122 (EtOH)



-----文献-----

The Flavonoids: Advances in Research since 1980, (Ed. Harborne, J.B.), Chapman and Hall, London, 1988
Karrer, W. et al., Konstitution und Vorkommen der Organischen Pflanzenstoffe, 2nd edn., Birkhauser Verlag, Basel, 1972, no. 1539, (生育)
Zaitsev, V.G. et al., Khim. Prir. Soedin., 1983, 19, 527; 1984, 20, 661; Chem. Nat. Compd. (Engl. Transl.), 1983, 19, 499; 1984, 20, 628, (7-rhamnoside)

§ 1-Tridecene

[化学名・別名] 1-Tridecene

[CAS No.] 2437-56-1

[その他の CAS No.] 25377-82-6

[化合物分類] 脂肪族化合物 (Unbranched alkenic hydrocarbon)

[構造式] $H_3C(CH_2)_{10}CH=CH_2$

[分子式] $C_{13}H_{26}$

[分子量] 182.348

[正確な分子量] 182.20345

[基原] *Centaurea solstitialis*, *Hippophae rhamnoides*, ココナツツ, その他の植物種

[融点] 凝固点: -13 °C

[沸点] Bp_{10} 102-103 °C

[傷害・毒性] 50%致死量 (LD50) (マウス, 経口) 10000 mg/kg

[化学物質毒性データ総覧 (RTECS) 登録番号] YD4595000

-----文献-----

Aldrich Library of FT-IR Spectra, 1st edn., 1985, 1, 15B, (IR)
Aldrich Library of ^{13}C and 1H FT NMR Spectra, 1992, 1, 20B, (NMR)
Aldrich Library of FT-IR Spectra: Vapor Phase, 1989, 3, 20B, (IR)
Kozacik, A.P. et al., J.A.C.S., 1938, 60, 2436, (合成法)
Hoebold, W. et al., J. Prakt. Chem., 1975, 317, 1054, (^{13}C -NMR)
Schmidt, A.W. et al., Chem. Ber., 1977, 74, 1313, (合成法)
Binder, R.G. et al., J. Agric. Food Chem., 1990, 38, 764; 1245, (分離)

RTECS (化学物質毒性データ)

健康障害に関するデータ

急性毒性に関するデータ

<<試験方法>> LD50 試験 (50%致死量試験).

曝露経路 : 経口投与.

被験動物 : げっ歯類-マウス

投与量・期間 : 10 gm/kg

毒性影響 : 致死量以外に毒性影響に関する報告はない.

参照文献

GISAAA Gigena i Sanitariya. For English translation, see HYSAAV. (V/O Mezhdunarodnaya Kniga, 113095 Moscow, USSR) V.1- 1936- [Vol.,頁,年(19-)] 46(1),94,1981

米国に於ける状況

EPA TSCA Section 8(b) CHEMICAL INVENTORY

§ 2,6,11-Trimethyldodecane

[CAS No.] 31295-56-4

[化合物分類] 脂肪族化合物 (Branched aliphatic hydrocarbon)

[構造式] $(\text{H}_3\text{C})_2\text{CH}(\text{CH}_2)_3\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2(\text{CH}_2)_3\text{CH}(\text{CH}_3)_2$

[分子式] $\text{C}_{15}\text{H}_{32}$

[分子量] 212.418

[正確な分子量] 212.2504

[基原] *Ephedra equisetina* のオイル, *Hippophae rhamnoides* and *Virola odorata*

-----文献-----

Cu, J.Q. et al., *Phytochemistry*, 1992, 31, 571, (生育)

*****サッサfras (Sassafras) *****

§ § クスノキ科サッサfras (*Sassafras albidum* (Nuttall) Nes) の葉, 樹皮および根。

§ Apiole

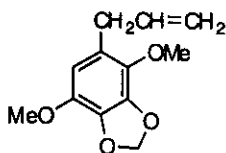
[化学名・別名] 4,7-Dimethoxy-5-(2-propenyl)-1,3-benzodioxole (CAS 名).

2,5-Dimethoxy-3,4-methylenedioxy-1-allylbenzene. Parsley apiole. Parsley camphor

[CAS No.] 523-80-8

[化合物分類] 薬物: 利尿薬 (Diuretic), 単環芳香族 (Simple phenylpropanoid) 薬物: 解熱薬 (Antipyretic), 薬物: 殺虫剤 (Insecticide)

[構造式]



[分子式] $\text{C}_{12}\text{H}_{14}\text{O}_4$

[分子量] 222.24

[正確な分子量] 222.08921

[基原] *Petroselinum* spp., *Heracleum pyrenaicum*, *Sassafras albidum*, *Anethum graveolens* に存在

[用途] 解熱, 利尿, 殺虫剤

[性状] 針状結晶

[融点] Mp 30 °C

[沸点] Bp 294 °C. Bp₃₃ 179 °C

[濃度] d^{20}_4 1.015

[Log P 計算値] Log P 2.5 (計算値)

[UV]: [neutral] λ_{max} 280 (溶媒の報告はない)

[化学物質毒性データ総覧 (RTECS) 登録番号] CY2500000

-----文献-----

Sethi, M.L. et al., *Phytochemistry*, 1976, 15, 1773, (分離)

Goeckeritz, D. et al., *Pharmazie*, 1979, 34, 426, (分離)

Santos, B.V. de O. et al., *Phytochemistry*, 1998, 49, 1381, (分離, UV, H-NMR, C13-NMR)

Benevides, P.J.C. et al., *Phytochemistry*, 1999, 52, 339, (分離, H-NMR)

Atta-ur-Rahman et al., *Phytochemistry*, 1999, 52, 495, (分離, H-NMR, Mas)

Lewis, R.J., *Sax's Dangerous Properties of Industrial Materials*, 8th edn., Van Nostrand Reinhold, 1992, AGE500

***RTECS (化学物質毒性データ) ***

生体影響物質 : 医薬品. 変異原物質. 天然物.

健康障害に関するデータ

急性毒性に関するデータ

<<試験方法>> 認知されている最小致死量 (LDLo) 試験.

曝露経路 : 皮下投与.

被験動物 : げっ歯類-マウス

投与量・期間 : 1 gm/kg

毒性影響 : 致死量以外に毒性影響に関する報告はない.

参照文献

BSIBAC Bolletino della Societe Italiana di Biologia Sperimentale. (Casa Editrice Idelson, Via A. de Gasperi, 55, 80133 Naples, Italy) V.2- 1927- [Vol.,頁,年(19-)]14,291,1939

<<試験方法>> 認知されている最小致死量(LDL)試験.

曝露経路 : 皮下投与.

被験動物 : 両生類-カエル.

投与量・期間 : 1515 mg/kg

毒性影響 : [末梢神経と感覚] 感覚変化を伴うまたは伴わない痙性麻痺.
[行動] 睡眠時間の変化(立ち直り反射の変化を含む).
[肺,胸郭,または呼吸] その他の変化.

参照文献

AEXPBL Archiv fuer Experimentelle Pathologie und Pharmakologie. (Leipzig, Ger. Dem. Rep.) V.1-109, 1873-1925. For publisher information, see NSAPCC. [Vol.,頁,年(19-)]35,342,1895

変異原性に関するデータ

<<試験方法>> DNA adduct

曝露経路 : 腹腔内投与

試験系 : げっ歯類-マウス

投与量・期間 : 400 mg/kg

参照文献

CRNGDP Carcinogenesis (London). (Oxford Univ. Press, Pinkhill House, Southfield Road, Eynsham, Oxford OX8 1JJ, UK) V.1- 1980- [Vol.,頁,年(19-)]5,1613,1984

米国に於ける状況

EPA TSCA Section 8(b) CHEMICAL INVENTORY

§ 3-(3,4-Methylenedioxyphenyl) propenal

[化学名・別名] 3-(1,3-Benzodioxol-5-yl)-2-propenal (CAS 名). 3,4-Methylenedioxypropenal (旧 CAS 名). 3-(3,4-Methylenedioxyphenyl) acrolein. Piperonylideneacetaldehyde. Piperonylacrolein

[CAS No.] 14756-00-4

[化合物分類] 単環芳香族 (Simple phenylpropanoid)

[構造式]

[分子式] C₁₀H₈O₃

[分子量] 176.171

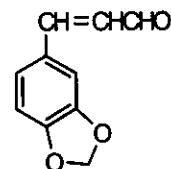
[正確な分子量] 176.047345

[基原] 樟脳オイルから分離される。また *Brombya platynema*, *Gmelina arborea*, *Licaria puchury-major*, *Sassafras albidum* から分離される。

[性状] 青白い黄色の針状結晶 (CH₂Cl₂/petrol)

[融点] Mp 84-85 °C

[沸点] Bp_{0.1} 110-112 °C



-----文献-----

Ikeda, T. et al., CA, 1942, 36, 6754, (分離)

Sethi, M.L. et al., Phytochemistry, 1976, 15, 1773, (分離)

Kulkarni, M.G. et al., Tet. Lett., 1990, 31, 4497, (合成法)

Parsons, I.C. et al., Phytochemistry, 1993, 33, 479, (分離, H-NMR)

§ 5-(2-Propenyl)-1,2,3-benzenetriol; 1,3-Di-Me ether

[化学名・別名] 2,6-Dimethoxy-4-(2-propenyl) phenol (CAS 名). 4-Allyl-2,6-dimethoxyphenol (旧 CAS 名).

Methoxyeugenol. 4-Allylsyringol

[CAS No.] 6627-88-9

[化合物分類] 単環芳香族 (Simple phenol), 単環芳香族 (Simple phenylpropanoid)

[構造式]

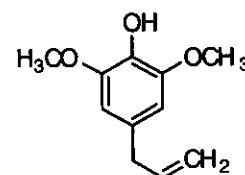
[分子式] C₁₁H₁₄O₃

[分子量] 194.23

[正確な分子量] 194.094295

[基原] *Sassafras albidum* 根のオイル, *Illicium anisatum*, *Myristica fragrans*, *Cinnamomum glanduiferum*

[性状] オイル



[沸点] Bp₁₀ 166-168 °C. Bp₂ 123-125 °C

-----文献-----

Sy, L.K. et al., *Phytochemistry*, 1997, 44, 1099, (Methoxyeugenol, H-NMR, C13-NMR)

§ 5-(2-Propenyl)-1,2,4-benzenetriol; 1,4-Di-Me ether

[化学名・別名] 2,5-Dimethoxy-4-(2-propenyl) phenol (CAS 名). 4-Allyl-2,5-dimethoxyphenol

[CAS No.] 90377-06-3

[化合物分類] 単環芳香族 (Simple phenylpropanoid)

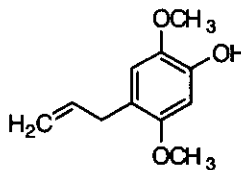
[構造式]

[分子式] C₁₁H₁₄O₃

[分子量] 194.23

[正確な分子量] 194.094295

[基原] *Pentacalia andicola*, *Piper divaricatum*, *Santolina chamaecyparissus*, *Sassafras albidum*



-----文献-----

Yakushijin, K. et al., *Chem. Pharm. Bull.*, 1983, 31, 2879, (Illicinol)

Kouno, I. et al., *Chem. Pharm. Bull.*, 1992, 40, 2461

Avella, E. et al., *Planta Med.*, 1994, 60, 195, (分離, 1,4-di-Me)

Jiang, Z.-H. et al., *Chem. Pharm. Bull.*, 1999, 47, 421

*****サフラン (Saffron) *****

§ § アヤメ科サフラン (*Crocus sativus* L.) の柱頭。

§ Astragalin; 2''-O-(6-O-Acetyl-β-D-glucopyranosyl)

[CAS No.] 133763-02-7

[化合物分類] フラボノイド (Flavonols; 4 × O-置換基)

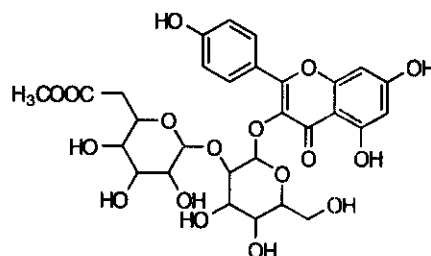
[構造式]

[分子式] C₂₉H₃₂O₁₇

[分子量] 652.562

[正確な分子量] 652.163955

[基原] *Crocus sativus* の花



-----文献-----

The Flavonoids: Advances in Research since 1980, (Ed. Harborne, J.B.), Chapman and Hall, London, 1988

Budzianowski, J., *Phytochemistry*, 1990, 29, 3643; 1991, 30, 1679, (誘導體)

Jung, K.Y. et al., *Phytochemistry*, 1993, 34, 1196, (誘導體)

Singab, A.N.B., *Phytochemistry*, 1998, 49, 2177, (2''-acetylramnosyl-6''-glucosyl)

§ Crocetin; (all-E)-form, Glucosyl methyl ester

[化学名・別名] Crocin 4

[CAS No.] 55750-86-2

[化合物分類] テルペノイド (Apocarotenoid)

[構造式]

[分子式] C₂₇H₃₆O₉

[分子量] 504.576

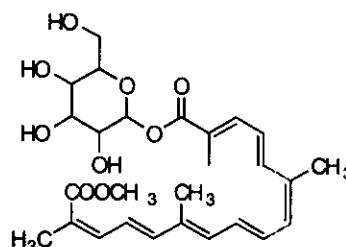
[正確な分子量] 504.235935

[基原] 次の植物から分離: Saffron (*Crocus sativus*)

[性状] 明赤色の微細プリズム結晶 (Me₂CO)

[融点] Mp 230-236 °C

[その他のデータ] λ_{max} 435, 460 nm (MeOH)



-----文献-----

Karrer, P. et al., *Helv. Chim. Acta*, 1932, 15, 1218; 1399, (構造決定)

Duquenois, P., *Bull. Soc. Pharm. Strasbourg*, 1972, 15, 149, (レビュー)

Pfander, H. et al., *Helv. Chim. Acta*, 1975, 58, 1608; 2233, (分離, 構造決定, 配糖体)

Pfander, H. et al., *J. Chromatogr.*, 1982, 234, 443, (HPLC)

Pfander, H. et al., *Phytochemistry*, 1982, 21, 1039, (合成)

Straub, O. et al., *Key to Carotenoids*, 2nd edn., Birkhauser Verlag, Basel and Boston, 1987, 538, (成書)

§ **Crocetin; (*all-E*)-form, Di-β-D-glucopyranosyl ester**

[CAS No.] 57710-64-2

[化合物分類] テルペノイド (Apocarotenoid)

[構造式]

[分子式] $C_{32}H_{44}O_{14}$

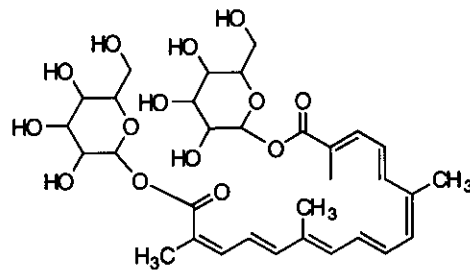
[分子量] 652.691

[正確な分子量] 652.27311

[基原] 次の植物から分離: *Crocus sativus*

[性状] ワインレッド色の結晶

[その他のデータ] λ_{max} 425, 447, 475 nm (Py)



-----文献-----

Duquenois, P., *Bull. Soc. Pharm. Strasbourg*, 1972, 15, 149, (レビュー)

Pfander, H. et al., *Helv. Chim. Acta*, 1975, 58, 1608; 2233, (分離, 構造決定, 配糖体)

Dhingra, V.K. et al., *Indian J. Chem.*, 1975, 13, 339, (配糖体)

Dhingra, V.K. et al., *Indian J. Chem., Sect. B*, 1976, 14, 231, (配糖体)

Pfander, H. et al., *J. Chromatogr.*, 1982, 234, 443, (HPLC)

Pfander, H. et al., *Phytochemistry*, 1982, 21, 1039, (合成)

Straub, O. et al., *Key to Carotenoids*, 2nd edn., Birkhauser Verlag, Basel and Boston, 1987, 538, (成書)

§ **Crocetin; (*all-E*)-form, β-D-Gentiobiosyl-β-D-glucopyranosyl ester**

[化学名・別名] Crocin 2

[CAS No.] 55750-84-0

[化合物分類] テルペノイド (Apocarotenoid)

[構造式]

[分子式] $C_{38}H_{54}O_{19}$

[分子量] 814.833

[正確な分子量] 814.325935

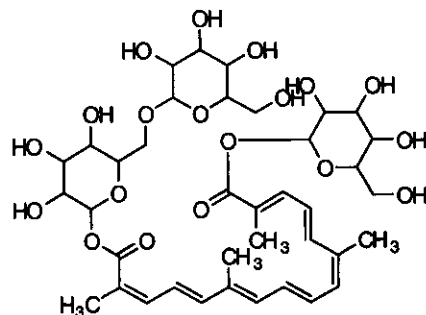
[基原] 次の植物から分離: *Crocus sativus*, *Nyctanthes arbor-tristis*

[性状] 暗赤色の長方形プリズム結晶 (MeOH)

[融点] Mp 208-210 °C

[UV]: [neutral] λ_{max} 410; 440 (ϵ 84000); 460 (EtOH)

[その他のデータ] λ_{max} 421, 443, 471 nm (Py)



-----文献-----

Karrer, P. et al., *Helv. Chim. Acta*, 1932, 15, 1218; 1399, (構造決定)

Duquenois, P., *Bull. Soc. Pharm. Strasbourg*, 1972, 15, 149, (レビュー)

Pfander, H. et al., *Helv. Chim. Acta*, 1975, 58, 1608; 2233, (分離, 構造決定, 配糖体)

Dhingra, V.K. et al., *Indian J. Chem.*, 1975, 13, 339, (配糖体)

Dhingra, V.K. et al., *Indian J. Chem., Sect. B*, 1976, 14, 231, (配糖体)

Pfander, H. et al., *Phytochemistry*, 1982, 21, 1039, (合成)

Straub, O. et al., *Key to Carotenoids*, 2nd edn., Birkhauser Verlag, Basel and Boston, 1987, 538, (成書)

§ **Dihydro-4-hydroxy-2(3H)-furanone; (S)-form, O-β-D-Glucopyranoside**

[化合物分類] 含酸素複素環式化合物 (Butanolide)

[構造式]

[分子量] 264.232

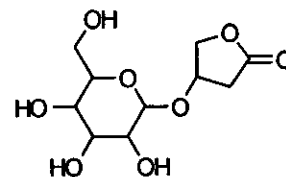
[正確な分子量] 264.08452

[基原] *Crocus sativus*

[性状] 針状結晶 (as tetra-Ac)

[融点] Mp 108-110 °C (tetra-Ac)

[比旋光度]: $[\alpha]_D -8.2$ (c, 0.08 in $CHCl_3$) (tetra-Ac)



-----文献-----

Moore, R.E. et al., *J.O.C.*, 1984, 49, 2484, (合成法, 分離)

Ainslie, R.D. et al., *Phytochemistry*, 1986, 25, 2654, (分離, H-NMR)
 Uchikawa, O. et al., *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, 1988, 61, 2025, (合成法, IR, H-NMR, C13-NMR, 成書)
 Sugita, Y. et al., *J.C.S. Perkin 1*, 1992, 2855, (S-form)
 Gao, W.-Y. et al., *Planta Med.*, 1999, 65, 425, (S-form glucoside)

§ 3,8-Dihydroxy-1-methylantraquinone-2-carboxylic acid

[化学名・別名] 9,10-Dihydro-3,8-dihydroxy-1-methyl-9,10-dioxo-2-anthracenecarboxylic acid (CAS 名)

[CAS No.] 69119-31-9

[化合物分類] 多環芳香族 (9,10-Anthraquinones; 2 × O-置換基)

[構造式]

[分子式] C₁₆H₁₀O₆

[分子量] 298.251

[正確な分子量] 298.04774

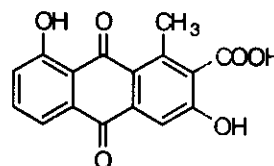
[基原] 次の植物から分離: いくつかの *Streptomyces* spp. *Crocus sativus* の成分

[性状] 橙色もしくは黄色の針状結晶 (AcOH or CHCl₃/MeOH/cyclohexane)

[融点] Mp 248-250 °C (241-244 °C)

[溶解性] メタノール, クロロホルムに可溶; 水に難溶

[UV]: [neutral] λ_{max} 207 (ε 13900); 278 (ε 13800); 407 (ε 3400) (MeOH) [base] λ_{max} 244 (ε 8900); 314 (ε 10700); 392 (ε 2200); 506 (ε 3100) (MeOH-NAOH)



-----文献-----

Yagi, A. et al., *Chem. Pharm. Bull.*, 1974, 22, 1159, (分離, 誘導體)

Yagi, A. et al., *Phytochemistry*, 1978, 17, 895, (生合成, 誘導體)

Roberge, G. et al., *Synthesis*, 1979, 148, (合成法, 誘導體)

Krupa, J. et al., *Annalen*, 1989, 699, (分離)

Uno, H. et al., *Chem. Lett.*, 2000, 1014, (合成法)

§ 3,8-Dihydroxy-1-methylantraquinone-2-carboxylic acid; 3-Me ether

[化学名・別名] 8-Hydroxy-3-methoxy-1-methylantraquinone-2-carboxylic acid

[CAS No.] 176327-86-9

[化合物分類] 多環芳香族 (9,10-Anthraquinones; 2 × O-置換基)

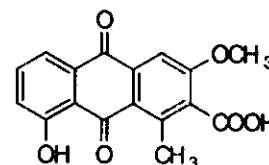
[構造式]

[分子式] C₁₇H₁₂O₆

[分子量] 312.278

[正確な分子量] 312.06339

[基原] *Crocus sativus*



-----文献-----

Yagi, A. et al., *Chem. Pharm. Bull.*, 1974, 22, 1159, (分離, 誘導體)

Yagi, A. et al., *Phytochemistry*, 1978, 17, 895, (生合成, 誘導體)

Roberge, G. et al., *Synthesis*, 1979, 148, (合成法, 誘導體)

Krupa, J. et al., *Annalen*, 1989, 699, (分離)

Uno, H. et al., *Chem. Lett.*, 2000, 1014, (合成法)

§ 2-(4-Hydroxyphenyl) ethanol; 1-O- [α-L-Rhamnopyranosyl-(1 → 2)-β-D-glucopyranoside]

[化学名・別名] Crosatoside B

[CAS No.] 139742-28-2

[化合物分類] 単環芳香族 (Phenylacetic acid derivative)

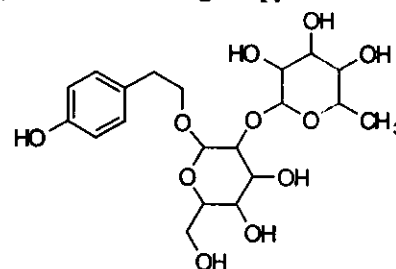
[構造式]

[分子式] C₂₀H₃₀O₁₁

[分子量] 446.45

[正確な分子量] 446.178815

[基原] 次の植物の花粉から分離: *Crocus sativus*



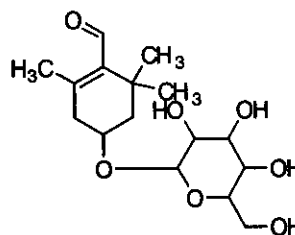
-----文献-----

Song, C. et al., *Huaxue Xuebao*, 1991, 49, 917, (Crosatoside B)

Yoshikawa, K. et al., *Nat. Med. (Tokyo)*, 1996, 50, 176; *CA*, 125, 81942h, (C13-NMR, 誘導體)

§ 4-Hydroxy-2,6,6-trimethyl-1-cyclohexenecarboxaldehyde; *O*-β-D-Glucopyranoside

[化学名・別名] Picrocrocin. Safranbitter. Saffronbitter
 [化合物分類] テルペノイド (Other cyclohexane monoterpeneid)
 [構造式]
 [分子式] C₁₆H₂₆O₇
 [分子量] 330.377
 [正確な分子量] 330.167855
 [基原] 次の植物から分離:saffron (stamens of *Crocus sativu*)
 [性状] 結晶 (MeOH/CHCl₃/Et₂O)
 [融点] Mp 156 °C
 [比旋光度]: [α]_D²⁰ -58 (H₂O)
 [UV]: [neutral] λ_{max} 250 (ε 10100) (MeOH)

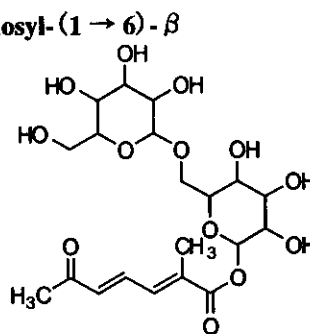


-----文献-----

Duquenois, P., Bull. Soc. Pharm. Strasbourg, 1972, 155, 149, (レビュー)
 Buchecker, R. et al., Helv. Chim. Acta, 1973, 56, 1121, (構造決定)

§ 2-Methyl-6-oxo-2,4-heptadienoic acid; (2*E*,4*E*)-form, [β-D-Glucopyranosyl-(1 → 6)-β-D-glucopyranosyl] ester

[化合物分類] 脂肪族化合物 (Other unbranched alkenic ester)
 [構造式]
 [分子式] C₂₀H₃₀O₁₃
 [分子量] 478.449
 [正確な分子量] 478.168645
 [基原] saffron (*Crocus sativu*)
 [UV]: [neutral] λ_{max} 283 (MeOH) (per-Ac)

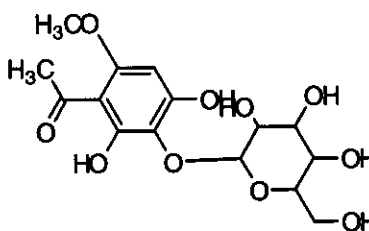


-----文献-----

Straubinger, M. et al., J. Agric. Food Chem., 1997, 45, 1678, (分離, エステル)

§ 2',3',4',6'-Tetrahydroxyacetophenone; 6'-Me ether, 3'-*O*-β-D-glucopyranoside

[CAS No.] 241814-63-1
 [化合物分類] 単環芳香族 (Simple aryl ketone)
 [構造式]
 [分子式] C₁₅H₂₀O₁₀
 [分子量] 360.317
 [正確な分子量] 360.10565
 [基原] *Crocus sativus*
 [性状] 針状結晶
 [融点] Mp 188-189 °C
 [比旋光度]: [α]_D +83.5 (c, 0.08 in MeOH)

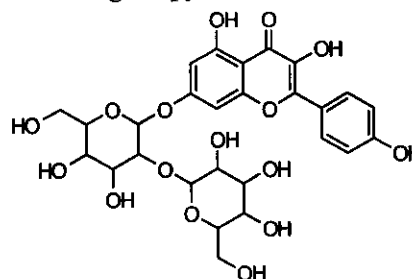


-----文献-----

Bargellini, G. et al., Gazz. Chim. Ital., 1911, 41, 18; 1919, 49, 47; 1934, 64, 192
 Rycroft, D.S. et al., Phytochemistry, 1998, 48, 1351, (分離, 誘導体)
 Gao, W.-Y. et al., Planta Med., 1999, 65, 425, (6'-Me 3'-glucoside)

§ 3,4',5,7-Tetrahydroxyflavone; 7-*O*-[β-D-Glucopyranosyl-(1 → 2)-β-D-glucopyranoside]

[化学名・別名] Kaempferol 7-sophoroside
 [化合物分類] フラボノイド (Flavonols; 4 × O-置換基)
 [構造式]
 [分子式] C₂₇H₃₀O₁₆
 [分子量] 610.524
 [正確な分子量] 610.15339
 [基原] saffron (*Crocus sativu*)
 [比旋光度]: [α]_D -33 (c, 0.1 in MeOH) (as octa-Ac)

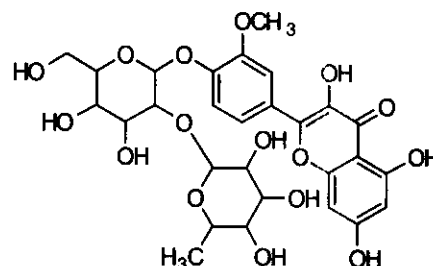


-----文献-----

- Karrer, W. et al., *Konstitution und Vorkommen der Organischen Pflanzenstoffe*, 2nd edn., Birkhauser Verlag, Basel, 1972, nos. 1497; 1498; 1504
 The Flavonoids: *Advances in Research since 1980*, (Ed. Harborne, J.B.), Chapman and Hall, London, 1988
 Z. Naturforsch., B, 1993, 48, 1398, (3-rutinoside 7-sophoroside)
 Straubinger, M. et al., *Nat. Prod. Lett.*, 1997, 10, 213, (7-sophoroside)

§ 3,4',5,7-Tetrahydroxy-3'-methoxyflavone; 4'-O-[α -L-Rhamnopyranosyl-(1 \rightarrow 2)- β -D-glucopyranoside]

- [化学名・別名] Crosatoside A
 [CAS No.] 139742-27-1
 [化合物分類] フラボノイド (Flavonols; 5 \times O-置換基)
 [構造式]
 [分子式] $C_{28}H_{32}O_{16}$
 [分子量] 624.551
 [正確な分子量] 624.16904
 [基原] 次の植物から分離: *Crocus sativus*

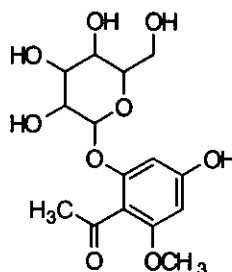


-----文献-----

- Karrer, W. et al., *Konstitution und Vorkommen der Organischen Pflanzenstoffe*, 2nd edn., Birkhauser Verlag, Basel, 1972, no. 1539, (生育)
 The Flavonoids: *Advances in Research since 1980*, (Ed. Harborne, J.B.), Chapman and Hall, London, 1988
 Song, C. et al., *Huaxue Xuebao*, 1991, 49, 917; CA, 116, 148197d, (Crosatoside A)

§ 2',4',6'-Trihydroxyacetophenone; 2'-Me ether, 6'-O- β -D-glucopyranoside

- [化合物分類] 単環芳香族 (Simple aryl ketone)
 [構造式]
 [分子式] $C_{15}H_{20}O_9$
 [分子量] 344.318
 [正確な分子量] 344.110735
 [基原] *Crocus sativus*
 [性状] 針状結晶
 [融点] Mp 158-160 $^{\circ}C$
 [比旋光度]: $[\alpha]_D +48.7$ (c, 0.05 in MeOH)



-----文献-----

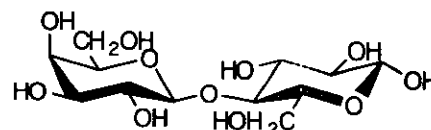
- Yenesew, A. et al., *Phytochemistry*, 1994, 37, 525, (2'-Me ether)
 Gao, W.-Y. et al., *Planta Med.*, 1999, 65, 425, (2'-Me, 6'-glucoside)

*****サボジラ (Sapodilla) *****

§ § アカテツ科サボジラ (*Achras sapota* Linne) の果実。

§ Lactose

- [化学名・別名] 4-O- β -D-Galactopyranosyl-D-glucose (CAS 名) (旧 CAS 名). Milk sugar. Lactobiose. Tablettose. Lactin
 [CAS No.] 63-42-3
 [関連 CAS No.] 10039-26-6
 [化合物分類] 炭水化物 (Disaccharide), 薬物: (Excipient)
 [構造式]
 [分子式] $C_{12}H_{22}O_{11}$
 [分子量] 342.299
 [正確な分子量] 342.116215
 [基原] ほ乳類の乳 (ヒト:6-7%, ウシ:4-5%), *Achras sapota* の果実, 少数のその他の植物に存在する.
 Nutrient. Obt. industrially from whey



[用途]生産原料として極めて貴重である。
[その他のデータ]ショ糖の0.68倍の甘さ
[傷害・毒性]催奇形性物質。
[化学物質毒性データ総覧(RTECS)登録番号]OD9625000

-----文献-----

Clamp, J.R. et al., Adv. Carbohydr. Chem., 1961, 16, 159, (レビュー)
Chumbalov, T.K. et al., Khim. Prir. Soedin., 1966, 2, 284; Chem. Nat. Compd. (Engl. Transl.), 1966, 2, 230, (分離)
Hough, L. et al., Pure Appl. Chem., 1977, 49, 1069, (レビュー)
Thelwall, L.A.W., Dev. Food Carbohydr., Applied Science Publ., 1980, 2, 275, (レビュー)
Brittain, H.G. et al., Anal. Profiles Drug Subst., 1991, 20, 369, (レビュー)
LAR000

***RTECS (化学物質毒性データ) ***

生体影響物質 : 催腫瘍物質. 生殖影響物質. 天然物.

§ *proto-Quercitol*; (+)-form

[化学名・別名]2-Deoxy-D-*chiro*-inositol. 1 L-1,3,4/2,5-Cyclohexanepentol. Acorn sugar

[CAS No.]488-73-3

[化合物分類]炭水化物(Cyclitol)

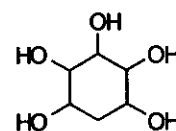
[構造式]

[基原] *Quercus* spp. オーク樹皮, *Chamaerops humilis* の葉, *Mimusops elengi* と *Achras sapota* の種子

[性状]プリズム結晶(H₂O)

[融点]Mp 235-237 °C

[比旋光度]:[α]_D²⁰ +25.6 (H₂O)



-----文献-----

Bauer, K.H. et al., Arch. Pharm. (Weinheim, Ger.), 1942, 280, 37, (分離)
Angyal, S.J. et al., Carbohydr. Res., 1982, 100, 43; 101, 209, (C13-NMR, stereoisomer)
Nishimura, H. et al., Chem. Pharm. Bull., 1984, 32, 1741, (gallate)
Ishimaru, K. et al., Phytochemistry, 1987, 26, 1501, (gallate)
Salamci, E. et al., J.O.C., 1997, 62, 2453, ((±)-form, 合成法, 成書, H-NMR, C13-NMR, IR)

§ 2,3,6,23-Tetrahydroxy-12-oleanen-28-oic acid; (2β,3β,6β)-form

[化学名・別名]Protobassic acid

[CAS No.]37905-13-8

[化合物分類]テルペノイド(Oleanane triterpenoid)

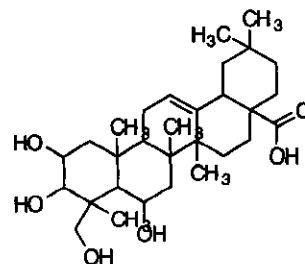
[構造式]

[基原] *Madhuca longifolia*, *Mimusops littoralis*, *Achras sapota*

[性状]結晶(MeOH)

[融点]Mp 310-312 °C

[比旋光度]:[α]_D +22.7 (c, 0.11 in Py)



-----文献-----

Yosioka, I. et al., Tetrahedron, 1974, 30, 707, (Protobassic acid)

§ 2,3,16,23-Tetrahydroxy-12-oleanen-28-oic acid; (2β,3β,16α)-form

[化学名・別名]Polygalacic acid. Virgaureagenin G

[CAS No.]22338-71-2

[化合物分類]テルペノイド(Oleanane triterpenoid)

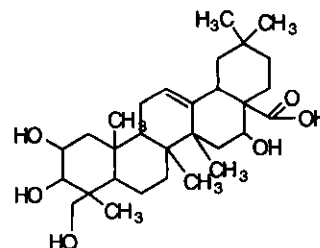
[構造式]

[基原] *Polygala paenea*, *Solidago virgaurea*, *Platycodon grandiflorum*, *Achras sapota*

[性状]結晶(EtOH)

[融点]Mp 308 °C

[比旋光度]:[α]_D²⁵ +45 (Py)



-----文献-----

Hiller, K. et al., Pharmazie, 1987, 42, 541; 744; 1988, 43, 850, (Virgaureasaponin)