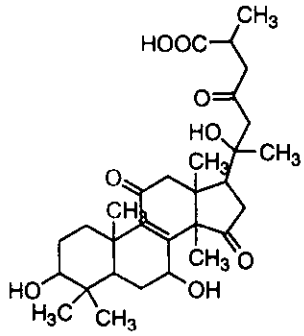
[化学名・別名]Ganoderic acid I
[CAS No.]98665-20-4
[化合物分類]テルペノイド(Lanostane triterpenoid)
[構造式]



[基原]*Ganoderma lucidum*

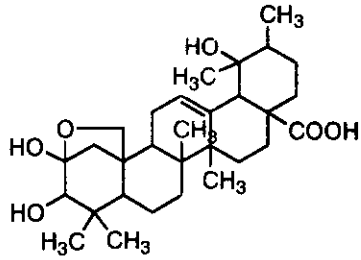
----------文献----------

Kikuchi, T. et al., Chem. Pharm. Bull., 1985, 33, 2628

***********サンザシ（Hawthorn）***********

§§バラ科サンザシ(*Crataegus cuneata* Siebold et Zuccarini)の果実，葉。

§ 2,25-Epoxy-2,3,19-trihydroxy-12-ursen-28-oic acid; (2 α,3 β,19 α)-form
[化学名・別名]Cuneataol
[CAS No.]252209-78-2
[化合物分類]テルペノイド(Ursane triterpenoid)
[構造式]

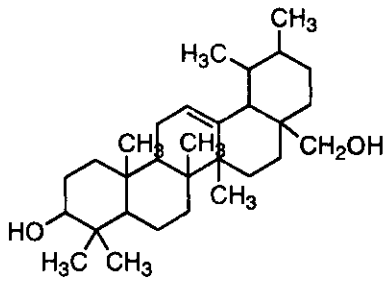


[基原]*Crataegus cuneata*
[性状]無定型の粉末
[比旋光度]:[α]$_D^{30}$ +32.1 (c, 0.1 in MeOH)

----------文献----------

Ikeda, T. et al., Chem. Pharm. Bull., 1999, 47, 1487,（分離, H-NMR, C13-NMR）

§ 12-Ursene-3,28-diol; 3 β-form
[化学名・別名]Uvaol
[CAS No.]545-46-0
[化合物分類]テルペノイド(Ursane triterpenoid)
[構造式]



[基原]*Arctostaphylos columbiana*, *Arctostaphylos patula*, *Arctostaphylos uva-ursi*, *Leucothoe keiskei*, *Crataegus cuneata*, *Osmanthus fragrans*, *Ilex latifolia*, その他. またオリーブオイル
[性状]結晶(CH_2Cl_2/MeOH)
[融点]Mp 232-233 ℃
[比旋光度]:[α]$_D$ +70 (c, 0.93 in $CHCl_3$)
[UV]:[neutral] λ $_{max}$ 205 (MeOH)
[その他のデータ]薬理的活性な異性体

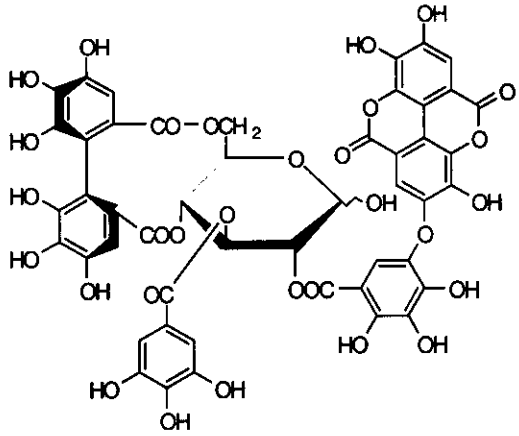
----------文献----------

Dutta, P.K. et al., Phytochemistry, 1972, 11, 1180,（Epiuvaol）
Siddiqui, S. et al., J. Nat. Prod., 1986, 49, 1086,（C13-NMR）
Chatterjee, K.S. et al., J. Indian Chem. Soc., 1988, 65, 458,（分離）
Dehmlow, E.V. et al., J. Chem. Res., Synop., 1998, 252,（Uvaol, H-NMR, C13-NMR）

***********サンシュユ（Sanshuyu）***********

§§ミズキ科サンシュユ(*Cornus officinalis* Siebold et Zuccarini)の果実。

§ Cornusiin B



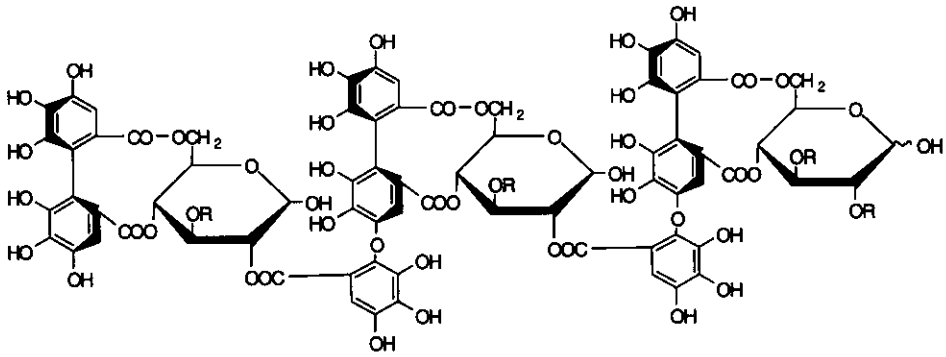
[CAS No.]95263-70-0
[化合物分類]タンニン化合物(Valoneoyl dilactone tannin), タンニン化合物(Hexahydroxydiphenoyl ester tannin)
[構造式]
[分子式]$C_{48}H_{30}O_{30}$
[分子量]1086.747
[正確な分子量]1086.0822
[一般的性質]等量の α-, β-anomer の混合物
[基原]次の植物から分離:*Cornus officinalis* の果実と *Oenothera erythrosepala* の葉
[性状]淡褐色の無定型粉末・八水和物
[比旋光度]:$[\alpha]_D^{20}$ +63 (c, 0.5 in MeOH)

----------文献----------

Okuda, T. et al., Chem. Pharm. Bull., 1984, 32, 4662, (構造決定)
Hatano, T. et al., Chem. Pharm. Bull., 1989, 37, 2083, (UV, CD, IR, H-NMR)
Hatano, T. et al., J.C.S. Perkin 1, 1990, 2735, (分離)

§ Cornusiin C

[CAS No.]108906-53-2
[化合物分類]タンニン化合物(Valoneoyl ester tannin), タンニン化合物(Hexahydroxydiphenoyl ester tannin)
[構造式]



R = 3,4,5-Trihydroxybenzoyl

[分子式]$C_{102}H_{74}O_{66}$
[分子量]2355.667
[正確な分子量]2354.24344
[一般的性質]等量の α-, β-anomer の混合物
[基原]*Cornus officinalis* の果実と *Trapa japonica* から分離されるタンニン化合物
[用途]試験管内では抗腫瘍活性を示す
[性状]灰白色の無定型粉末 ・十二あるいは十四水和物
[比旋光度]:$[\alpha]_D^{20}$ +25 (c, 0.3 in MeOH)

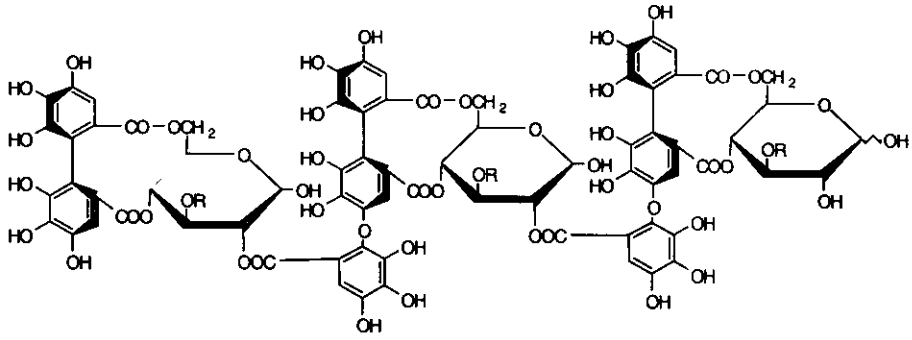
----------文献----------

Miyamoto, K. et al., Chem. Pharm. Bull., 1987, 35, 814, (薬理)
Hatano, T. et al., Chem. Pharm. Bull., 1989, 37, 2083, (構造決定, UV, IR, CD, H-NMR, C13-NMR)
Hatano, T. et al., Chem. Pharm. Bull., 1990, 38, 2707, (Trapanin A)

§ Cornusiin C; 2-*O*-Degalloyl

[化学名・別名]Cornusiin F

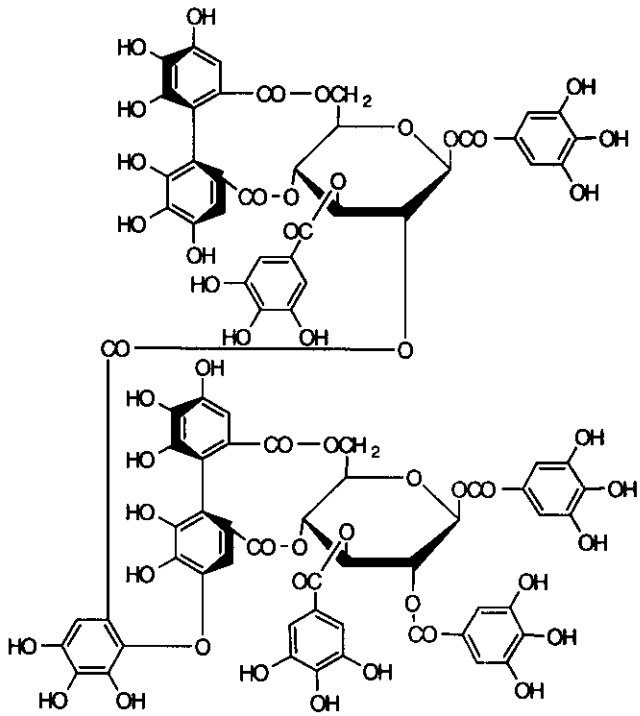
[CAS No.]126594-59-0
[化合物分類]タンニン化合物(Hexahydroxydiphenoyl ester tannin), タンニン化合物(Valoneoyl ester tannin)
[分子式]$C_{95}H_{70}O_{62}$
[分子量]2203.561
[正確な分子量]2202.23248
[基原]次の植物の果実から分離: *Cornus officinalis*
[性状]灰白色の無定型粉末・十二水和物
[比旋光度]:$[\alpha]_D^{20}$ +18 (c, 1.0 in MeOH)
[構造式]



----------文献----------

Miyamoto, K. et al., Chem. Pharm. Bull., 1987, 35, 814, (薬理)
Hatano, T. et al., Chem. Pharm. Bull., 1989, 37, 2083, (構造決定, UV, IR, CD, H-NMR, C13-NMR)
Hatano, T. et al., Chem. Pharm. Bull., 1990, 38, 2707, (Trapanin A)

§ Cornusiin E
[CAS No.]126594-58-9
[化合物分類]タンニン化合物(Valoneoyl ester tannin), タンニン化合物(Hexahydroxydiphenoyl ester tannin)
[構造式]

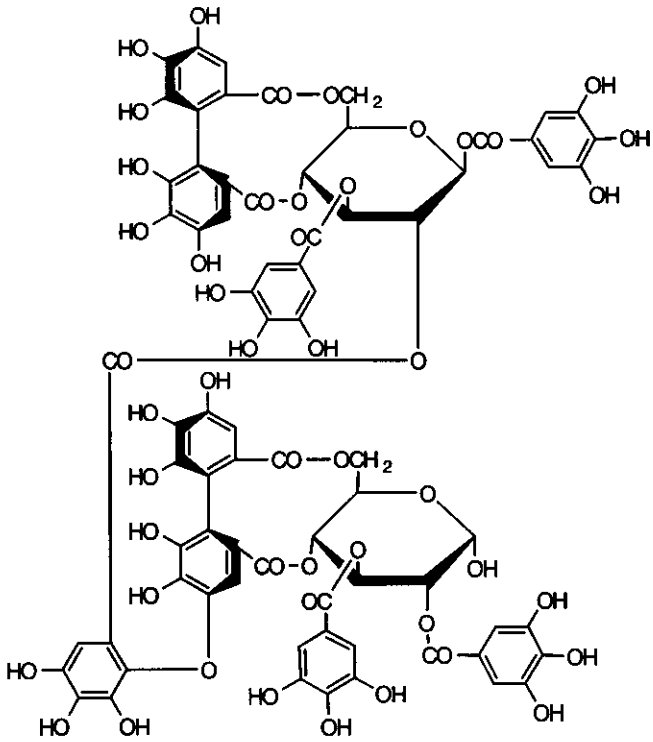


[分子式]$C_{82}H_{58}O_{52}$
[分子量]1875.329
[正確な分子量]1874.18943
[基原]A dimeric tannin component of the fruit of *Cornus officinalis*
[性状]灰白色の無定型粉末・十六水和物
[比旋光度]:$[\alpha]_D^{20}$ +67 (c, 0.8 in MeOH)

----------文献----------

Okuda, T. et al., Chem. Pharm. Bull., 1984, 32, 4662, (Cornusiin A)
Miyamoto, K. et al., Chem. Pharm. Bull., 1987, 35, 814, (薬理)
Hatano, T. et al., Chem. Pharm. Bull., 1988, 36, 2017; 1989, 37, 2083; 2665, (構造決定, UV, IR, C13-NMR, H-NMR)

§ Cornusiin E; 1-*O*-Degalloyl
[化学名・別名]Cornusiin D
[CAS No.]126594-57-8
[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]

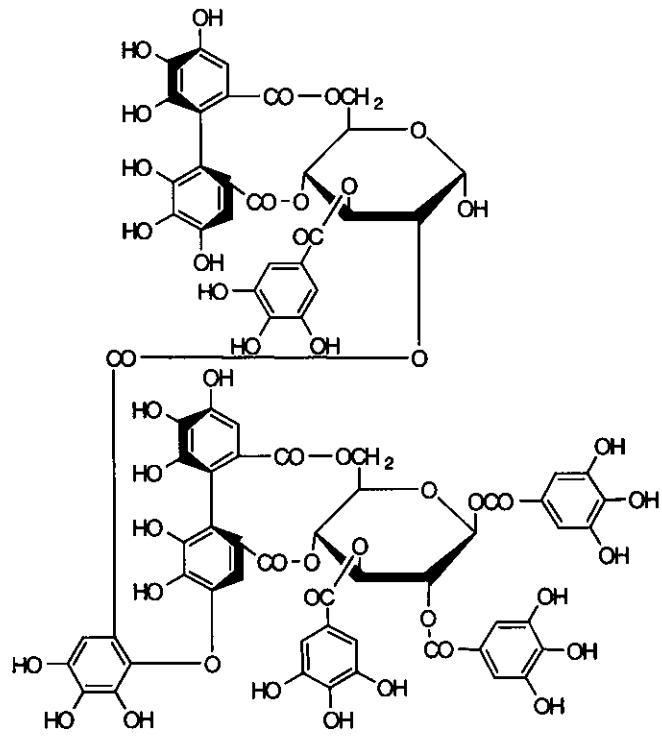


[分子式]$C_{75}H_{54}O_{48}$
[分子量]1723.223
[正確な分子量]1722.17847
[基原]次の植物の果実から分離: *Cornus officinalis*
[性状]灰白色の粉末・一水和物
[比旋光度]:$[\alpha]_D^{20}$ +97 (c, 1.0 in MeOH)
[その他のデータ]等量の α-, β-anomer の混合物

----------文献----------

Okuda, T. et al., Chem. Pharm. Bull., 1984, 32, 4662, (Cornusiin A)
Miyamoto, K. et al., Chem. Pharm. Bull., 1987, 35, 814, (薬理)
Hatano, T. et al., Chem. Pharm. Bull., 1988, 36, 2017; 1989, 37, 2083; 2665, (構造決定, UV, IR, C13-NMR, H-NMR)

§ Cornusiin E; 1'-*O*-Degalloyl
[化学名・別名]Camptothin B
[CAS No.]105581-33-7
[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]



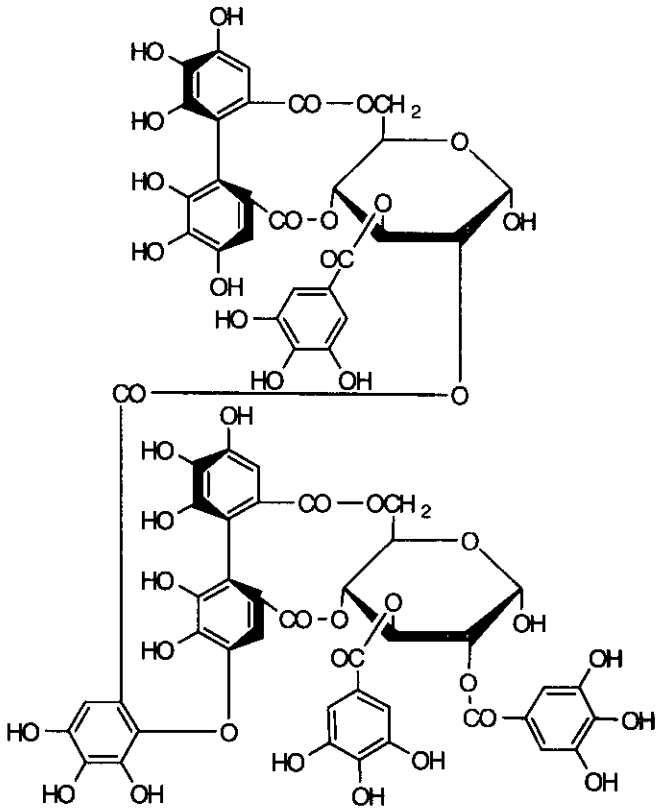
[分子式]$C_{75}H_{54}O_{48}$
[分子量]1723.223
[正確な分子量]1722.17847
[基原]次の植物から分離: *Camptotheca acuminata* の葉, *Cornus officinalis* の果実, *Trapa japonica*
[性状]灰白色の無定型粉末・六水和物
[比旋光度]:$[\alpha]_D^{20}$ +48 (c, 0.5 in MeOH)
[その他のデータ]等量の anomer の混合物

----------文献----------

Okuda, T. et al., Chem. Pharm. Bull., 1984, 32, 4662, (Cornusiin A)
Yoshida, T. et al., Chem. Pharm. Bull., 1990, 38, 1211, (Eucalbanin B, 構造決定, UV, CD, H-NMR,

C13-NMR)

§ Cornusiin E; 1,1'-Bis-*O*-degalloyl
[化学名・別名]Cornusiin A. Eucalbanin B
[CAS No.]95263-69-7
[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]

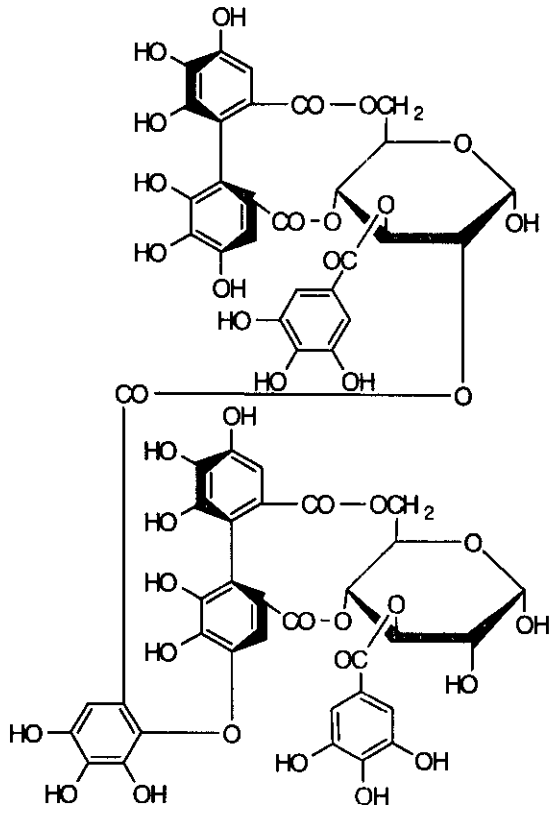


[分子式]$C_{68}H_{50}O_{44}$
[分子量]1571.117
[正確な分子量]1570.16751
[基原]*Cornus officinalis* の果実と *E*ucalyptus alba の主なタンニン成分
[用途]Shows significant antitumour activity
[性状]灰白色の粉末・一水和物
[比旋光度]:$[\alpha]_D^{20}$ +78 (c, 1.0 in MeOH)
[溶解性]メタノール, ブタノール, EtOAc に可溶; 水に難溶
[UV]:[neutral] λ_{max} 218 (ε 142000); 271 (ε 65600) (MeOH)
[その他のデータ]anomers の混合物

----------文献----------

Okuda, T. et al., Chem. Pharm. Bull., 1984, 32, 4662, (Cornusiin A)
Miyamoto, K. et al., Chem. Pharm. Bull., 1987, 35, 814, (薬理)
Hatano, T. et al., Chem. Pharm. Bull., 1988, 36, 2017; 1989, 37, 2083; 2665, (構造決定, UV, IR, C13-NMR, H-NMR)
Yoshida, T. et al., Chem. Pharm. Bull., 1990, 38, 1211, (Eucalbanin B, 構造決定, UV, CD, H-NMR, C13-NMR)

§ Cornusiin E; 1,1',2-Tris-*O*-degalloyl
[化学名・別名]Camptothin A
[CAS No.]105581-32-6
[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]



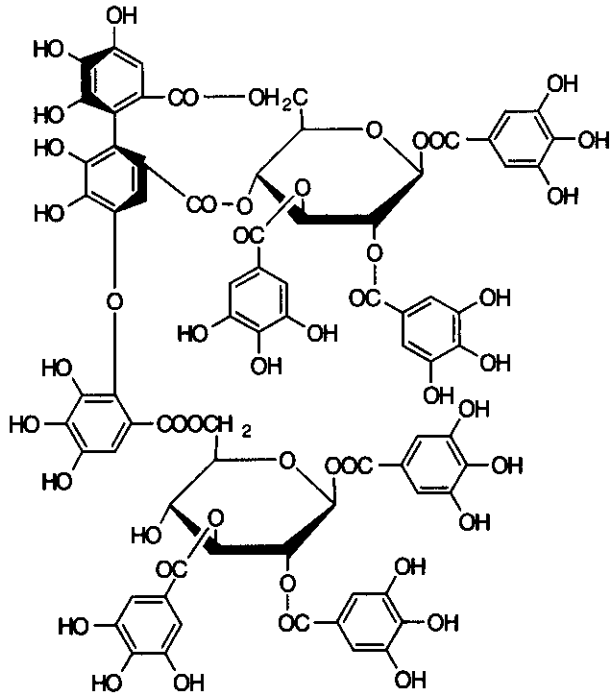
[分子式]$C_{61}H_{46}O_{40}$
[分子量]1419.01
[正確な分子量]1418.15655
[基原]次の植物から分離: *Camptotheca acuminata* の葉, *Cornus officinalis* の果実
[性状]灰白色の無定型粉末・六水和物
[比旋光度]:$[\alpha]_D^{20}$ +46 (c, 1.0 in MeOH)
[その他のデータ]等量の anomer 混合物

----------文献----------

Okuda, T. et al., Chem. Pharm. Bull., 1984, 32, 4662,（Cornusiin A）
Miyamoto, K. et al., Chem. Pharm. Bull., 1987, 35, 814,（薬理）
Hatano, T. et al., Chem. Pharm. Bull., 1988, 36, 2017; 1989, 37, 2083; 2665,（構造決定, UV, IR, C13-NMR, H-NMR）
Yoshida, T. et al., Chem. Pharm. Bull., 1990, 38, 1211,（Eucalbanin B, 構造決定, UV, CD, H-NMR, C13-NMR）

§ Cornusiin G

[CAS No.] 131189-58-7
[化合物分類] タンニン化合物（Valoneoyl ester tannin）
[構造式]



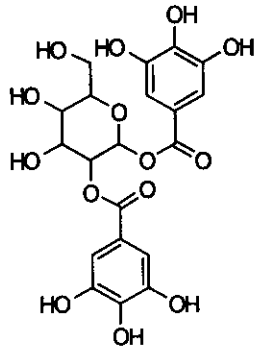
[分子式] $C_{75}H_{56}O_{48}$
[分子量] 1725.239
[正確な分子量] 1724.19412
[基原] *Cornus officinalis*
[性状] 灰白色の無定型粉末
[比旋光度]: $[\alpha]_D^{21}$ +25（c, 1.0 in MeOH）

----------文献----------

Hatano, T. et al., Phytochemistry, 1990, 29, 2979,（構造決定, UV, CD, H-NMR, C13-NMR）

§ 1,2-Digalloylglucose; β-D-Pyranose-form

[CAS No.] 115713-50-3
[化合物分類] タンニン化合物（Simple gallate ester tannin）
[構造式]

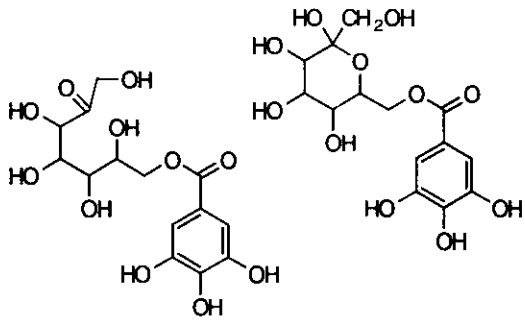


[基原] 次の植物から分離:*Rheum* sp., *Cornus officinalis*
[性状] 針状結晶・二水和物（H_2O）
[融点] Mp 169-170 ℃
[比旋光度]: $[\alpha]_D^{17}$ -79.1（c, 0.64 in Me_2CO）

----------文献----------

Kashiwada, Y. et al., Phytochemistry, 1988, 27, 1473,（構造決定, H-NMR, C13-NMR）
Lee, S.H. et al., Phytochemistry, 1989, 28, 3469,（H-NMR）

§ *altro*-2-Heptulose; D-form, 7-(3,4,5-Trihydroxybenzoyl)



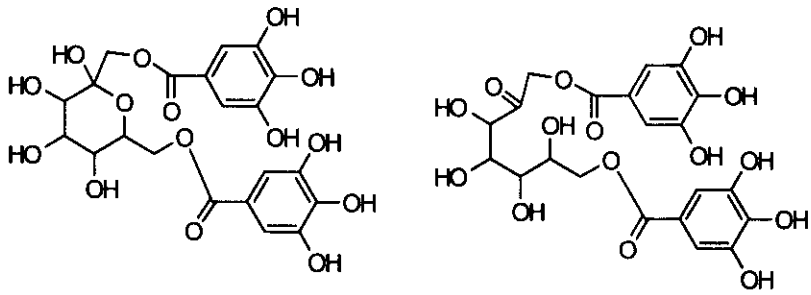
[化学名・別名]1-*O*-Galloyl-D-sedoheptulose
[CAS No.]233690-85-2
[化合物分類]タンニン化合物(Simple gallate ester tannin)
[構造式]
[分子式]$C_{14}H_{18}O_{11}$
[分子量]362.29
[正確な分子量]362.084915
[基原]*Cornus officinalis* の果実
[融点]Mp 192-194 ℃
[比旋光度]:[α]$_D$ +16.2 (c, 0.4 in MeOH)
[UV]:[neutral] λ $_{max}$ 218 (log ε 4.71); 275 (log ε 4.33) (MeOH)

----------文献----------

Ettel, V., Coll. Czech. Chem. Comm., 1932, 4, 504, (構造決定)
Pratt, J.W. et al., J.A.C.S., 1952, 74, 2200, (分離)
Hough, L. et al., J.C.S., 1953, 342, (合成法)
Richtmyer, N.K. et al., J.A.C.S., 1956, 78, 4717, (分離)
Richtmyer, N.K., Methods Carbohydr. Chem., 1962, 1, 167, (分離)
Hipps, P.P. et al., Carbohydr. Res., 1981, 96, 1, (生育)
Franke, F.P. et al., Carbohydr. Res., 1984, 125, 177, (合成法, C13-NMR, 7-phosphate)
Lee, S.H. et al., Phytochemistry, 1989, 28, 3469, (Digalloylsedoheptulose)
Li, X.-C. et al., Phytochemistry, 2000, 53, 1033, (7-Caffeoylsedoheptulose)

§ *altro*-2-Heptulose; D-form, 1,7-Bis(3,4,5-trihydroxybenzoyl)

[化学名・別名]1,7-Di-*O*-galloyl-D-sedoheptulose
[化合物分類]タンニン化合物(Simple gallate ester tannin)
[構造式]



[分子式]$C_{21}H_{22}O_{15}$
[分子量]514.396
[正確な分子量]514.095875
[基原]*Cornus officinalis*
[性状]淡褐色無定型の粉末・二水和物
[比旋光度]:[α]$_D^{20}$ +0.4 (c, 0.8 in MeOH)

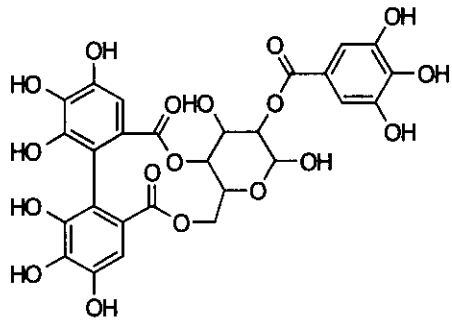
----------文献----------

Pratt, J.W. et al., J.A.C.S., 1952, 74, 2200, (分離)
Richtmyer, N.K. et al., J.A.C.S., 1956, 78, 4717, (分離)
Richtmyer, N.K., Methods Carbohydr. Chem., 1962, 1, 167, (分離)
Lee, S.H. et al., Phytochemistry, 1989, 28, 3469, (Digalloylsedoheptulose)
Li, X.-C. et al., Phytochemistry, 2000, 53, 1033, (7-Caffeoylsedoheptulose)

§ 4,6-Hexahydroxydiphenoylglucose; (*S*)$_{axial}$-D-Pyranose-form, 2-*O*-(3,4,5-Trihydroxybenzoyl)

[化学名・別名]2-*O*-Galloyl-4,6-(*S*)-hexahydroxydiphenoyl-D-glucopyranose. Hippomanin A

[CAS No.]52934-78-8
[化合物分類]タンニン化合物(Hexahydroxydiphenoyl ester tannin)
[構造式]

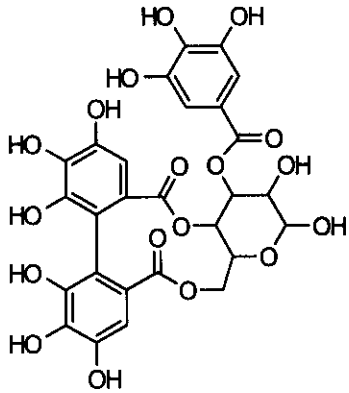


[分子式]$C_{27}H_{22}O_{18}$
[分子量]634.46
[正確な分子量]634.08062
[基原]*Hippomane mancinella*, *Cornus officinalis*
[性状]青白い黄色の結晶粉末
[融点]Mp 81-85 ℃
[比旋光度]:$[\alpha]_D^{26}$ +62.1 (c, 0.63 in Me_2CO)

----------文献----------

Rao, K.V., J. Nat. Prod., 1977, 40, 169, (Hippomanin A)
Lee, S.-H. et al., Phytochemistry, 1989, 28, 3469; 1990, 29, 3621, (Hippomanin A, Eugeniin, 構造決定, H-NMR)
Khanbabaee, K. et al., J. Prakt. Chem., 1999, 341, 159, (Hippomanin A, Gemin D, 合成法, IR, UV, H-NMR, C13-NMR)

§ 4,6-Hexahydroxydiphenoylglucose; (*S*)$_{axial}$-D-Pyranose-form, 3-*O*-(3,4,5-Trihydroxybenzoyl)
[化学名・別名]3-*O*-Galloyl-4,6-(*S*)-hexahydroxydiphenoyl-D-glucopyranose. Gemin D
[CAS No.]84744-46-7
[化合物分類]タンニン化合物(Hexahydroxydiphenoyl ester tannin)
[構造式]



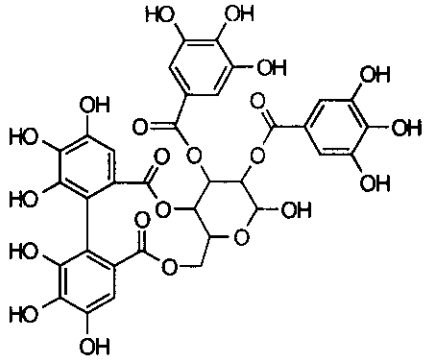
[分子式]$C_{27}H_{22}O_{18}$
[分子量]634.46
[正確な分子量]634.08062
[基原]次の植物から分離:*Geum japonicum*, *Cornus officinalis*, *Alnus japonica*
[性状]灰白色の無定型粉末 ・二水和物
[比旋光度]:$[\alpha]_D^{20}$ +40 (c, 0.9 in Me_2CO)
[その他のデータ]等量のα-, β-anomer の混合物

----------文献----------

Yoshida, T., Chem. Pharm. Bull., 1982, 30, 4245, (Gemin D)
Yoshida, T. et al., Phytochemistry, 1985, 24, 1401, (Gemin D)
Khanbabaee, K. et al., J. Prakt. Chem., 1999, 341, 159, (Hippomanin A, Gemin D, 合成法, IR, UV, H-NMR, C13-NMR)

§ 4,6-Hexahydroxydiphenoylglucose; (*S*)$_{axial}$-D-Pyranose-form, 2,3-Bis-(3,4,5-trihydroxybenzoyl)
[化学名・別名]2,3-Di-*O*-galloyl-4,6-(*S*)-hexahydroxydiphenoyl-D-glucopyranose. Tellimagrandin I. Cornustannin 3. Colinin. Collinin
[CAS No.]30737-92-9
[化合物分類]タンニン化合物(Hexahydroxydiphenoyl ester tannin)

[構造式]

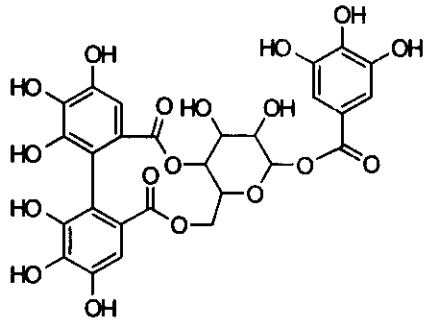


[分子式] $C_{34}H_{26}O_{22}$
[分子量] 786.566
[正確な分子量] 786.09158
[基原] 次の植物から分離されたタンニン; *Tellima grandiflora*, *Casuarina stricta*, *Cornus officinalis*, *Stachyurus praecox*
[性状] 淡褐色の無定型粉末・一水和物
[比旋光度]: $[\alpha]_D^{20}$ +121.4 (c, 1.3 in MeOH)
[その他のデータ] 等量の α-, β-anomer の混合物

----------文献----------

Chumbalov, T.K. et al., Khim. Prir. Soedin., 1970, 6, 496; Chem. Nat. Compd. (Engl. Transl.), 1970, 6, 523, (Collinin)
Gupta, R.K. et al., J.C.S. Perkin 1, 1982, 2525, (Tellimagrandins, 生育, H-NMR, C13-NMR)
Feldman, K.S. et al., J.A.C.S., 1994, 116, 1742, (合成法, Tellimagrandin I)
Nelson, T.D. et al., J.O.C., 1994, 59, 2577, (合成法, Tellimagrandin)
Feldman, K.S. et al., J.O.C., 1999, 64, 209, (合成法, Tellimagrandin II)

§ 4,6-Hexahydroxydiphenoylglucose; (*S*)$_{axial}$-α-D-Pyranose-form, 1-*O*-(3,4,5-Trihydroxybenzoyl)
[化学名・別名] 1-*O*-Galloyl-4,6-(*S*)-hexahydroxydiphenoyl-α-D-glucopyranose
[CAS No.] 126721-55-9
[化合物分類] タンニン化合物(Hexahydroxydiphenoyl ester tannin)
[構造式]

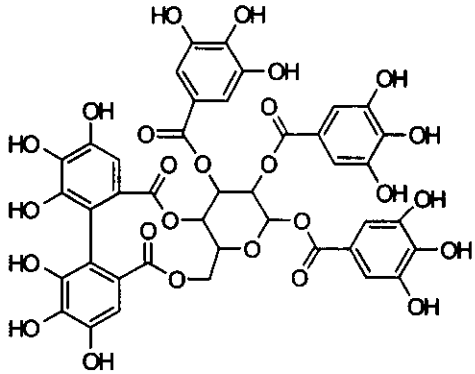


[分子量] 634.46
[正確な分子量] 634.08062
[基原] 次の植物の葉から分離: *Cornus officinalis*
[性状] 褐色無定型の粉末
[比旋光度]: $[\alpha]_D^{22}$ +54.9 (c, 0.4 in Me_2CO)

----------文献----------

Wilkins, C.K. et al., Phytochemistry, 1976, 15, 211, (Tellimagrandin)
Gupta, R.K. et al., J.C.S. Perkin 1, 1982, 2525, (Tellimagrandins, 生育, H-NMR, C13-NMR)
El-Mousallamy, A.M.D. et al., Phytochemistry, 1991, 30, 3767, (構造決定, UV, H-NMR, C13-NMR)
Feldman, K.S. et al., J.A.C.S., 1994, 116, 1742, (合成法, Tellimagrandin I)
Itoh, A. et al., J. Nat. Prod., 2000, 63, 95, (分離, 2-(hydroxymethyl)phenyl glycoside)

§ 4,6-Hexahydroxydiphenoylglucose; (*S*)$_{axial}$-β-D-pyranose-form, 1,2,3-Tris-(3,4,5-trihydroxybenzoyl)
[化学名・別名] 1,2,3-Tri-*O*-galloyl-4,6-(*S*)-hexahydroxydiphenoyl-β-D-glucopyranose. Tellimagrandin II. Eugeniin. Cornustannin 2
[CAS No.] 58970-75-5
[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), 薬物: 抗ウイルス物質(Antiviral agent)
[構造式]



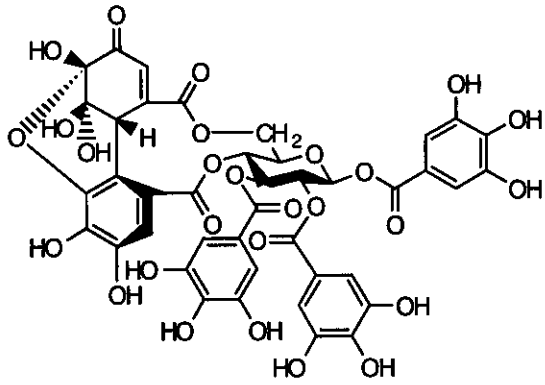
[分子式] $C_{41}H_{30}O_{26}$
[分子量] 938.672
[正確な分子量] 938.10254
[基原] 次の植物から分離:*Cornus officinalis* の果実, *Tellima grandiflora*, *Eugenia caryophyllata*, *Euphorbia thymifolia*, *Rosa canina*, *Cornus alba*, *Filipendula ulmaria*, *Epilobium angustifolium*, *Quercus*, *Fuchsia* spp., その他多くの種

[用途]抗ウイルス剤
[性状]淡褐色の無定型粉末・一水和物
[比旋光度]:[α]$_D^{20}$ +62.2 (c, 0.8 in Me_2CO). [α]$_D^{20}$ +10 (c, 0.85 in MeOH)
[Log P 計算値]Log P 1.92 (計算値)
[その他のデータ]物理的性質は Eugeniin に似ている

----------文献----------

Wilkins, C.K. et al., Phytochemistry, 1976, 15, 211, (Tellimagrandin)
Gupta, R.K. et al., J.C.S. Perkin 1, 1982, 2525, (Tellimagrandins, 生育, H-NMR, C13-NMR)
Feldman, K.S. et al., J.O.C., 1999, 64, 209, (合成法, Tellimagrandin II)

§ Isoterchebin
[化学名・別名]1,2,3-Tri-*O*-galloyl-4,6-*O*-dehydrohexahydroxydiphenoyl-β-D-glucopyranose. Cornustannin 1
[CAS No.]58690-20-3
[化合物分類]タンニン化合物
(Dehydrohexahydroxydiphenoyl ester tannin)
[構造式]



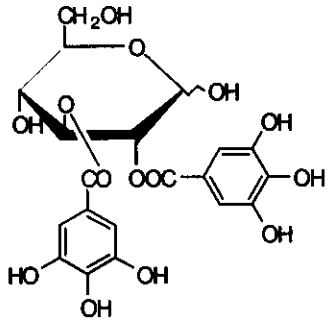
Skeletal type: ellagitannin

[分子式]$C_{41}H_{30}O_{27}$
[分子量]954.672
[正確な分子量]954.097455
[基原]次の植物から分離:*Cytinus hypocistis*, *Cornus officinalis*
[性状]吸湿性の塊・六水和物あるいは黄色結晶・四水和物
[比旋光度]:[α]$_D^{23}$ +103 (c, 1.0 in EtOH)

----------文献----------

Fürstenwerth, H. et al., Annalen, 1976, 112, (分離, H-NMR)
Nonaka, G. et al., Chem. Pharm. Bull., 1981, 29, 1184, (Trapain)
Okuda, T. et al., Heterocycles, 1981, 16, 1321, (構造決定, H-NMR, C13-NMR)

§ Nilocitin
[化学名・別名]2,3-Bis(3,4,5-trihydroxybenzoyl)-D-glucose(CAS 名). 2,3-Digalloylglucose
[CAS No.]88943-00-4
[化合物分類]タンニン化合物(Simple gallate ester tannin)
[構造式]



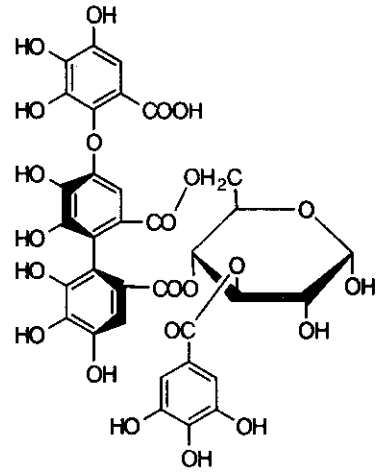
[分子式]$C_{20}H_{20}O_{14}$
[分子量]484.37
[正確な分子量]484.08531
[一般的性質]Exists in soln. with an α:β ratio of 3:2
[基原]次の植物から分離:*Tamarix nilotica* の花, *Cornus officinalis* と *Ephedra alata* の果実
[性状]無定型の褐色粉末・二水和物
[比旋光度]:[α]$_D^{20}$ +87 (c, 1.0 in MeOH)

----------文献----------

Okuda, T. et al., Chem. Pharm. Bull., 1984, 32, 4662, (構造決定, H-NMR)
Nawar, M.A.M. et al., Tet. Lett., 1984, 25, 49, (分離, H-NMR, C13-NMR)
Nawar, M.A.M. et al., Phytochemistry, 1985, 24, 878
Hatano, T. et al., Chem. Pharm. Bull., 1988, 36, 3920, (構造決定, H-NMR)
Lee, S.-H. et al., Phytochemistry, 1989, 28, 3469, (H-NMR)

§ Rugosin A; 1,2-Di-*O*-degalloyl
[化学名・別名]Coriariin F
[CAS No.]107110-48-5

[化合物分類]タンニン化合物(Valoneoyl ester tannin)
[構造式]

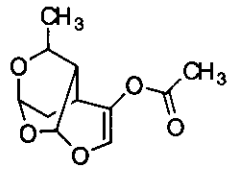


[分子式]$C_{34}H_{26}O_{23}$
[分子量]802.566
[正確な分子量]802.086495
[基原]次の植物の葉から分離: *Coriaria japonica, Cornus officinalis*
[性状]灰白色の無定型粉末・七水和物
[比旋光度]:[α]$_D^{20}$ +82 (c, 0.1 in MeOH)

----------文献----------

Okuda, T. et al., Chem. Pharm. Bull., 1982, 30, 4230
Hatano, T. et al., Chem. Pharm. Bull., 1986, 34, 4533; 1989, 36, 3920; 1990, 38, 3308, (UV, CD, H-NMR, C13-NMR, 構造決定)
Lee, M.W. et al., Phytochemistry, 1992, 31, 2835
Yoshida, T. et al., Phytochemistry, 1993, 32, 1287, (Loropetalin A)

§ Sarracenin; 4-Epimer
[化学名・別名]Dehydromorroniaglycone
[CAS No.]163959-61-3
[化合物分類]テルペノイド(Secoiridoid monoterpenoid)
[構造式]

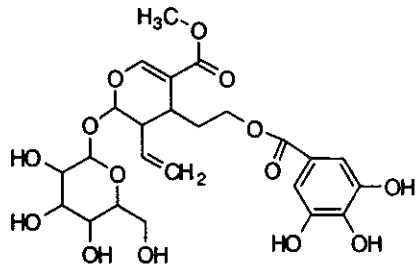


[分子式]$C_{11}H_{14}O_5$
[分子量]226.229
[正確な分子量]226.084125
[基原]*Cornus officinalis*. 次に示す物質の成分 : Shan Zhu Yu
[性状]結晶
[融点]Mp 119-120 ℃
[比旋光度]:[α]$_D^{21}$ -47.2 (c, 0.05 in EtOH)

----------文献----------

Miles, D.H. et al. , J.A.C.S. , 1976, 98 , 1569, (cryst struct) Tietze, L.-F. et al. , Angew. Chem., Int. Ed. , 1982, 21 , 70, (synth) Gross, P.M. et al. , J.A.C.S. , 1982, 104 , 1132, (synth) Takano, S. et al. , Tet. Lett. , 1983, 24 , 401, (synth) Xu, L. et al. , Zhongcaoyao , 1995, 26 , 62-65, (Dehydromorroniaglycone) Chang, M.-Y. et al. , J.O.C. , 1997, 62 , 641, (synth) Tai, H.-M. et al. , J.O.C. , 1999, 64 , 659-662, (synth)

§ Secologanol; 7-*O*-(3,4,5-Trihydroxybenzoyl)
[化学名・別名]Cornuside. 7-Galloylsecologanol
[CAS No.]131189-57-6
[化合物分類]テルペノイド(Secoiridoid monoterpenoid)
[構造式]



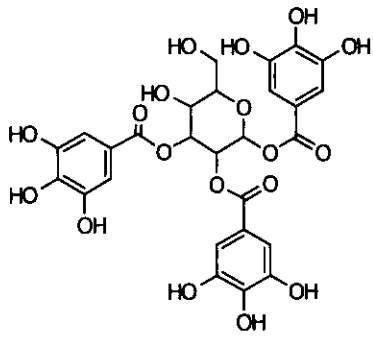
[分子式]$C_{24}H_{30}O_{14}$
[分子量]542.493
[正確な分子量]542.16356
[基原]次の植物の果実から分離: *Cornus officinalis*
[性状]灰白色の粉末
[比旋光度]:[α]$_D^{21}$ -91 (c, 1.0 in MeOH)

----------文献----------

Hatano, T. et al., Phytochemistry, 1990, 29, 2925, (Cornuside)

§ 1,2,3-Trigalloylglucose; β-D-Pyranose-form

[CAS No.]84415-91-8
[化合物分類]タンニン化合物(Simple gallate ester tannin)
[構造式]

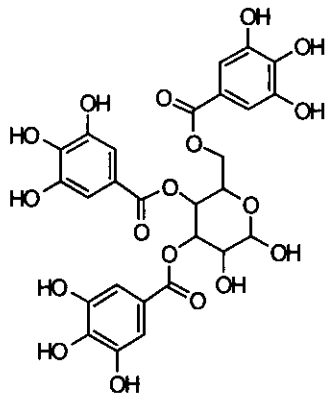


[分子量]636.476
[基原]次の植物から分離:*Euphorbia thymifolia*, *Coriaria japonica*, *Rosa rugosa*, *Cornus officinalis*
[性状]淡褐色の無定型粉末
[比旋光度]:[α]$_D^{20}$ +28.6 (c, 0.7 in Me_2CO)
[UV]:[neutral] λ $_{max}$278 (ε 34852) (MeOH)

----------文献----------

Okuda, T. et al., Chem. Pharm. Bull., 1982, 30, 4230, (分離)
Nishizawa, K. et al., Phytochemistry, 1990, 29, 2491, (UV, IR, H-NMR, C13-NMR)
Lee, S.-H. et al., Phytochemistry, 1990, 29, 3621, (H-NMR)
Xu, H.-X. et al., Heterocycles, 1994, 38, 167, (Geponin)
Nawwar, M.A.M. et al., Phytochemistry, 1994, 36, 793, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ 3,4,6-Trigalloylglucose; D-Pyranose-form
[CAS No.]99523-99-6
[化合物分類]タンニン化合物(Simple gallate ester tannin)
[構造式]



[基原]次の植物から分離: *Heuchera cylindrica*, *Cornus officinalis*
[性状]灰白色の無定型粉末・一水和物
[比旋光度]:[α]$_D^{20}$ -77.4 (c, 1.06 in MeOH)
[その他のデータ]等量のα-, β-anomer の混合物

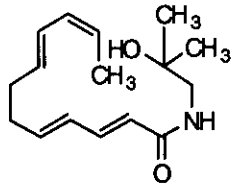
----------文献----------

Tanaka, T. et al., Chem. Pharm. Bull., 1984, 32, 117, (誘導体)
Wilkins, C., Phytochemistry, 1988, 27, 2317, (構造決定, CD, H-NMR)
Lee, S.H. et al., Phytochemistry, 1989, 28, 3469, (H-NMR)

***********サンショウ (Japanese pepper) **********

§§ ミカン科サンショウ(*Zanthoxylum piperitum* de Candolle)の葉または果実。

§ 2,4,8,10-Dodecatetraenoic acid; *N*-2-Hydroxy-2-methylpropylamide
[化学名・別名]Sanshoamide
[化合物分類]脂肪族化合物(Unbranched alkenic carboxylic acids and lactone), アルカロイド化合物(Simple isobutylamide alkaloid)
[構造式]

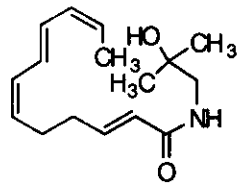


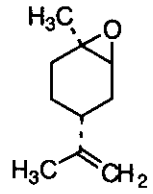
[分子式]$C_{16}H_{25}NO_2$
[分子量]263.379
[正確な分子量]263.188529
[基原]次の植物の新鮮な未熟果実から得られるアルカロイド: *Zanthoxylum piperitum* (ミカン科)
[性状]針状結晶(C_6H_6)
[融点]Mp 110-111 ℃

----------文献----------

Aihara, T. et al., Yakugaku Zasshi, 1951, 71, 1112
Yasuda, I. et al., Chem. Pharm. Bull., 1981, 29, 564, (isobutylamide)

Herz, W. et al., Phytochemistry, 1985, 24, 173,（isobutylamide）

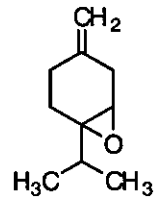
§ 2,6,8,10-Dodecatetraenoic acid;（2*E*,6*Z*,8*E*,10*E*）-form, 2-Hydroxy-2-methylpropylamide
[化学名・別名]Hydroxy-α-sanshool
[CAS No.]83883-10-7
[化合物分類]脂肪族化合物(Unbranched alkenic carboxylic acids and lactone), アルカロイド化合物(Simple isobutylamide alkaloid)
[構造式]

[分子式]$C_{16}H_{25}NO_2$
[分子量]263.379
[正確な分子量]263.188529
[基原]*Zanthoxylum piperitum*, *Zanthoxylum planispinum*（ミカン科）
[性状]不安定なオイル
[UV]:[neutral] λ max 260（ε 22400); 269（ε 29200); 280（ε 23200)(EtOH)
----------文献----------
Crombie, L., J.C.S., 1952, 2997; 1955, 995; 1957, 2760,（分離, UV, IR, 構造決定）
Crombie, L., Nature (London), 1954, 174, 833
Sonnet, P.E., J.O.C., 1969, 34, 1147,（合成法, UV）
Yasuda, I. et al., Phytochemistry, 1982, 21, 1295,（分離, H-NMR, C13-NMR, Mass, 生育）
Mizutani, K. et al., Chem. Pharm. Bull., 1988, 36, 2362,（分離, IR, H-NMR, C13-NMR）
Nakamura, N. et al., Chem. Pharm. Bull., 1988, 36, 2647,（IR）

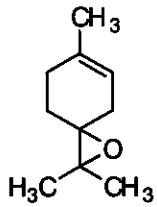
§ 1,2-Epoxy-*p*-menth-8-ene(旧 CAS 名)
[化学名・別名]1-Methyl-4-(1-methylethenyl)-7-oxabicyclo[4.1.0]heptane(CAS 名). Limonene oxide
[CAS No.]1195-92-2
[関連 CAS No.]10373-59-8, 13837-75-7, 26767-54-4
[化合物分類]テルペノイド(*p*-Menthane monoterpenoid)
[構造式]

(1*R*,2*S*,4*R*)-form
[分子式]$C_{10}H_{16}O$
[分子量]152.236
[正確な分子量]152.120115
[基原]次の植物から分離: *Cymbopogon* spp.のオイル, オレンジ(*Citrus sinensi*), サンショウ(*Zanthoxylum piperitum*), その他. Epoxidn. prod. of JFH51-A
[その他のデータ]立体異性体の大部分は分化しない; 混合物として存在し, 分離は困難.
[傷害・毒性]変異原性
[化学物質毒性データ総覧(RTECS)登録番号]RN8761000
----------文献----------
Newhall, W.F., J.O.C., 1964, 29, 185,（合成法, 構造）
Nigam, M.C. et al., Can. J. Chem., 1965, 43, 521,（分離）
Royals, E.E. et al., J.O.C., 1966, 31, 1937,（合成法）
Sakai, T. et al., Bull. Chem. Soc. Jpn., 1968, 41, 1945,（分離）
Aitens, J.A. et al., ACS Symp. Ser., 1985, 286, 335,（polym）
Baptistella, L.H.B. et al., Annalen, 1994, 785,（1*S*2*R*4*S*-form: 合成法, H-NMR）
dos Santos, A.G. et al., Synth. Commun., 1996, 26, 2651,（1*S*2*R*4*R*-form: 合成法, IR, H-NMR, C13-NMR, Mas）

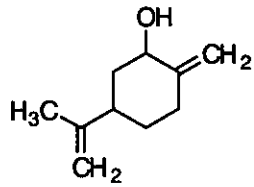
RTECS（化学物質毒性データ）
健康障害に関するデータ
急性毒性に関するデータ

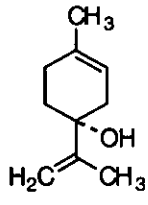
〈〈試験方法〉〉LD50 試験(50%致死量試験).
曝露経路　：経口投与.
被験動物　：げっ歯類-マウス
投与量・期間：2700 uL/kg
毒性影響　：致死量以外に毒性影響に関する報告はない.
参照文献
IYKEDH Iyakuhin Kenkyu. Study of Medical Supplies. (Nippon Koteisho Kyokai, 12-15, 2-chome,

Shibuya, Shibuya-ku, Tokyo 150, Japan) V.1- 1970- [Vol.,頁,年(19-)]9,518,1978
〈〈試験方法〉〉 LD50 試験(50%致死量試験).
曝露経路：筋肉内投与.
被験動物 ：げっ歯類-マウス
投与量・期間：100 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
JSICAZ Journal of Scientific and Industrial Research, Section C: Biological Sciences. (New Delhi, India) V.14-21, 1955-62. For publisher information, see IJEBA6. [Vol.,頁,年(19-)]21,342,1962
米国に於ける状況
EPA TSCA Section 8(b) CHEMICAL INVENTORY

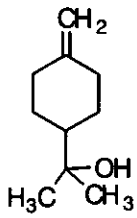
§ 3,4-Epoxy-*p*-menth-1(7)-ene
[化学名・別名]4-Methylene-1-(1-methylethyl)-7-oxabicyclo[4.1.0]heptane
[CAS No.]21391-86-6
[化合物分類]テルペノイド(*p*-Menthane monoterpenoid)
[構造式]

[分子式]$C_{10}H_{16}O$
[分子量]152.236
正確な分子量 152.120115
[基原]次の植物から分離:*Zanthoxylum piperitum*
----------文献----------
Sakai, T. et al., Bull. Chem. Soc. Jpn., 1968, 41, 1945, (分離)
Ashraf, M. et al., Pak. J. Sci. Ind. Res., 1980, 23, 70

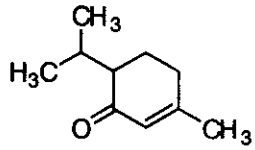
§ 4,8-Epoxy-*p*-menth-1-ene
[化学名・別名]Terpinolene oxide
[CAS No.]4584-23-0
[化合物分類]テルペノイド(*p*-Menthane monoterpenoid)
[構造式]

[分子式]$C_{10}H_{16}O$
[分子量]152.236
[正確な分子量]152.120115
[基原]次の植物から分離:*Zanthoxylum piperitum*
----------文献----------
Sakai, T. et al., Bull. Chem. Soc. Jpn., 1968, 41, 1945, (分離)
Roy, A. et al., J. Sci. Ind. Res., 1997, 56, 513, (レビュー)

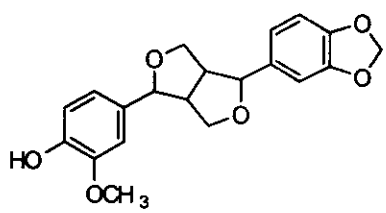
§ *p*-Mentha-1(7),8-dien-2-ol; (2*S*,4*R*)-form
[CAS No.]2102-62-7
[化合物分類]テルペノイド(*p*-Menthane monoterpenoid)
[構造式]

[基原]次の植物から分離:*Cymbopogon densiflorus*, *Zanthoxylum piperitum*
----------文献----------
Ohloff, G. et al., Angew. Chem., 1961, 73, 578, (合成法)
Sakai, T. et al., Bull. Chem. Soc. Jpn., 1968, 41, 1945, (分離)

§ *p*-Mentha-1,8-dien-4-ol
[化学名・別名]4-Methyl-1-(1-methylethenyl)-3-cyclohexen-1-ol(CAS 名)
[CAS No.]3419-02-1
[関連 CAS No.]73069-45-1
[化合物分類] テルペノイド(*p*-Menthane monoterpenoid)
[構造式]

(*R*)-form
[分子式]$C_{10}H_{16}O$
[分子量]152.236

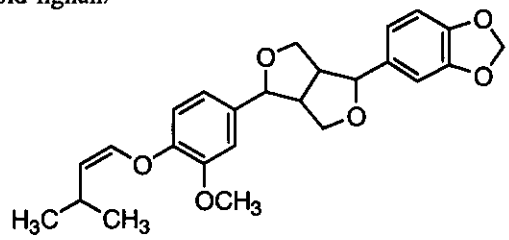
[正確な分子量]152.120115
[基原]次の植物から分離:サンショウ(*Zanthoxylum piperitum*), ユズ(*Citrus juno*), スペアミント(*Mentha spicata*)オイル
----------文献----------
Sakai, T. et al., Bull. Chem. Soc. Jpn., 1968, 41, 1945, (分離)
Birch, A.J. et al., Aust. J. Chem., 1969, 22, 2037, (合成法)
Jensen, H.P. et al., J.O.C., 1975, 40, 264, (合成法)
Bohlmann, F. et al., Org. Magn. Reson., 1975, 7, 426, (C13-NMR)
Naya, Y. et al., Heterocycles, 1978, 10, 29, (分離)
Delay, F. et al., Helv. Chim. Acta, 1979, 62, 2168, (合成法, H-NMR)

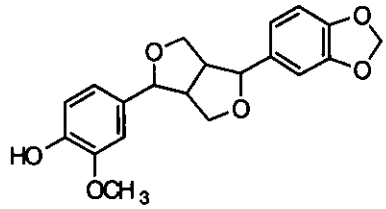
§ *p*-Menth-1(7)-en-8-ol
[化学名・別名] α,α-Dimethyl-4-methylenecyclohexanemethanol. δ-Terpineol
[CAS No.]17023-62-0
[関連 CAS No.]8000-41-7, 8007-35-0, 62395-45-3
[その他の CAS No.]7299-42-5
[化合物分類]テルペノイド(*p*-Menthane monoterpenoid)
[構造式]

[分子式]$C_{10}H_{18}O$
[分子量]154.252
[正確な分子量]154.135765
[基原]次の植物から分離:*Umbellularia californica*, *Amomum* spp., *Zanthoxylum piperitum*
[性状]オイル
----------文献----------
Mitzner, B.M. et al., J.O.C., 1966, 31, 2022
Lawrence, B.M. et al., Phytochemistry, 1974, 13, 2009, (分離)
Bull, S.D. et al., Aust. J. Chem., 1992, 45, 2077; 1993, 46, 1869, (合成法, 性質, 成書)

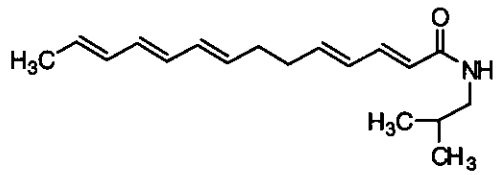
§ *p*-Menth-1-en-3-one; (*R*)-form
[CAS No.]4573-50-6
[化合物分類]テルペノイド(*p*-Menthane monoterpenoid)
[構造式]

[基原]*Eucalyptus dives* オイルとその他の *E*ucalyptus spp., *Mentha* spp., *Zanthoxylum piperitum* のオイル
[沸点]Bp_{15} 110.5 ℃
[比旋光度]:$[\alpha]_D^{20}$ -51.53
----------文献----------
Thomas, A.F. et al., J.C.S.(B), 1967, 392, (Mas)
Nagasawa, T. et al., Agric. Biol. Chem., 1975, 39, 2083, (絶対構造)
Bohlmann, F. et al., Org. Magn. Reson., 1975, 7, 426, (C13-NMR)
Opdyke, D.L.J., Food Cosmet. Toxicol., 1978, 16, 863, (レビュー, 毒性)
Burbott, A.J. et al., Phytochemistry, 1983, 22, 2227, (分離, UV, CD, 絶対構造)
Kuwahara, Y. et al., Agric. Biol. Chem., 1987, 51, 3441, (分離)
Garcez, F.R. et al., Phytochemistry, 1988, 27, 1079, (分離)
Lewis, R.J., Sax's Dangerous Properties of Industrial Materials, 8th edn., Van Nostrand Reinhold, 1992, MCF250

§ Piperitol; (-)-form
[CAS No.]54983-96-9
[化合物分類]リグナン化合物(Simple furofuranoid lignan)
[構造式]

[基原]*Zanthoxylum piperitum*
[性状]シロップ
[比旋光度]:$[\alpha]_D$ -66.3 ($CHCl_3$)
----------文献----------
Abe, F. et al., Chem. Pharm. Bull., 1973, 21, 1617; 1974, 22, 2650, (Piperitol, Xanthoxylol)

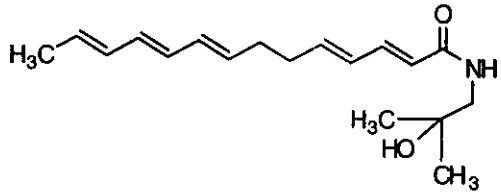
Dominguez, X. et al., Rev. Latinoam. Quim., 1973, 4, 155, (分離)
Brieskorn, C.H. et al., Tet. Lett., 1976, 2221, (分離)
Pelter, A. et al., Tetrahedron, 1976, 32, 2783, (構造)
Vaquette, J. et al., Planta Med., 1979, 35, 42, (分離)
Chiung, Y.-M. et al., J. Antibiot., 1994, 47, 487, (6-Hydroxypiperitol)
Perez, C. et al., Phytochemistry, 1995, 40, 1511, (Demethylpiperitol)

§ Piperitol; (-)-form, *O*-(3-Methyl-2-butenyl)
[CAS No.]54631-93-5
[その他の CAS No.]54615-53-1, 157659-20-6
[化合物分類]リグナン化合物(Simple furofuranoid lignan)
[構造式]

[分子量]424.493
[正確な分子量]424.18859
[基原]*Zanthoxylum piperitum*
[性状]針状結晶
[融点]Mp 58-59 ℃
[比旋光度]:[α]$_D^{20}$ -45.7 (c, 5.4 in $CHCl_3$)
[UV]:[neutral] λ $_{max}$ 234 (log ε 4.26); 284 (log ε 3.95) (MeOH)
----------文献----------
Arruda, M.S.P. et al., Phytochemistry, 1994, 36, 1303, (2-Hydroxy-3-methyl-3-butenyl ether)

§ Piperitol; (-)-form, 7-Epimer
[化学名・別名]Xanthoxylol
[CAS No.]54983-95-8
[化合物分類]リグナン化合物(Simple furofuranoid lignan)
[構造式]

[分子式]$C_{20}H_{20}O_6$
[分子量]356.374
[正確な分子量]356.12599
[基原]次の植物から分離:*Zanthoxylum piperitum*, *Zanthoxylum aeanthapodium*
[性状]結晶
[融点]Mp 140-142 ℃
[比旋光度]:[α]$_D$ -117 ($CHCl_3$)
----------文献----------
Abe, F. et al., Chem. Pharm. Bull., 1973, 21, 1617; 1974, 22, 2650, (Piperitol, Xanthoxylol)

§ 2,4,8,10,12-Tetradecapentaenoic acid; (2*E*,4*E*,8*Z*,10*E*,12*E*)-form, 2-Methylpropylamide
[化学名・別名]*N*-Isobutyl-2,4,8,10,12-tetradecapentaenamide. γ-Sanshool
[CAS No.]78886-65-4
[化合物分類]脂肪族化合物(Unbranched alkenic carboxylic acids and lactone), アルカロイド化合物(Simple isobutylamide alkaloid)
[構造式]

[分子式]$C_{18}H_{27}NO$
[分子量]273.417
[正確な分子量]273.209264
[基原]*Zanthoxylum ailanthoides*, *Zanthoxylum piperitum*, その他の *Zanthoxylum* spp.(ミカン科)
[性状]針状結晶(hexane)
[融点]Mp 88-89 ℃
[UV]:[neutral] λ $_{max}$ 260 (ε 48000); 272 (ε 57000); 280 (ε 45000) (EtOH)
----------文献----------
Yasuda, I. et al., Chem. Pharm. Bull., 1981, 29, 1791, (γ-Sanshool, Hydroxy-γ-sanshool)
Xiong, Q. et al., Phytochemistry, 1997, 46, 1123, (分離, H-NMR, C13-NMR, Mas)

§ 2,4,8,10,12-Tetradecapentaenoic acid; (2*E*,4*E*,8*Z*,10*E*,12*E*)-form, 2-Hydroxy-2- methylpropylamide
[化学名・別名]Hydroxy-γ-sanshool
[CAS No.]78886-66-5
[化合物分類]アルカロイド化合物(Simple isobutylamide alkaloid)脂肪族化合物(Unbranched alkenic carboxylic acids and lactone)
[構造式]



[分子式]$C_{18}H_{27}NO_2$
[分子量]289.417
[正確な分子量]289.204179
[基原]*Zanthoxylum ailanthoides*, *Zanthoxylum bungeanum*, *Zanthoxylum piperitum*(ミカン科)
[性状]針状結晶($CHCl_3$)
[融点]Mp 122-123 ℃

----------文献----------

Yasuda, I. et al., Chem. Pharm. Bull., 1981, 29, 1791,(γ-Sanshool, Hydroxy-γ-sanshool)
Crombie, L. et al., Tet. Lett., 1985, 26, 2481,(合成法)
Xiong, Q. et al., Phytochemistry, 1997, 46, 1123,(分離, H-NMR, C13-NMR, Mas)

***********サンタハーブ(Santa herb)***********

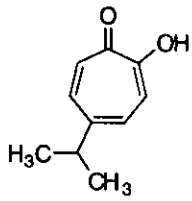
§§ハゼリソウ科イエルバサンタ(*Eriodictyon carifornicum* Torrey(*E. glutinosum* Bentham))の茎葉。

本調査研究では研究報告ない。

***********サンダラック(Sandarac)***********

§§マツ科カクミヒバ(*Tetraclinis articulata* Master)の樹脂。

§ 2-Hydroxy-5-isopropyl-2,4,6-cycloheptatrien-1-one
[化学名・別名]2-Hydroxy-5-(1-methylethyl)-2,4,6-cycloheptatrien-1-one(CAS 名). 5-Isopropyltropolone. γ-Thujaplicin
[CAS No.]672-76-4
[化合物分類]テルペノイド(Cycloheptane monoterpenoid)
[構造式]



[分子式]$C_{10}H_{12}O_2$
[分子量]164.204
[正確な分子量]164.08373
[基原]*Cupressus stephensonii* と *Thuja plicata* の心材, その他の *Thuja* spp., その他の *Cupressus* spp., *Tetraclinis articulata*, *Libocedrus decurrens*, その他
[用途]抗カビ剤
[性状]針状結晶(petrol)
[融点]Mp 82 ℃
[PKa 値]pK_{a1} 6.85 (25 ℃, I 20.)
[UV]:[neutral] λ_{max} 240 ; 330 (EtOH)
[傷害・毒性]50 %致死量(LD50)(マウス, 腹腔内投与) 162 mg/kg; BERDY HAZD : 50 %致死量(LD50)(マウス, 腹腔内投与) 162 mg/kg
[化学物質毒性データ総覧(RTECS)登録番号]GU4580000

----------文献----------

Erdtman, H. et al., Acta Chem. Scand., 1948, 2, 625,(分離, 構造決定)
Cook, J.W. et al., J.C.S., 1951, 695,(合成法)
Zavarin, E. et al., J.O.C., 1959, 24, 1318,(分離)
Chow, Y.-L. et al., Acta Chem. Scand., 1962, 16, 1291,(分離)

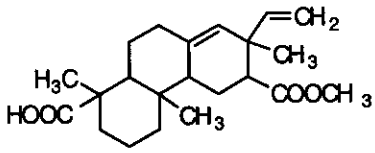
Berg, J.-E. et al., Acta Cryst. B, 1976, 32, 3121,（結晶構造）
Takaya, H. et al., J.A.C.S., 1978, 100, 1778,（合成法）
Lewis, R.J., Sax's Dangerous Properties of Industrial Materials, 8th edn., Van Nostrand Reinhold, 1992,
TFV750

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　：腹腔内投与
被験動物　：げっ歯類-マウス
投与量・期間：162 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
JAPMA8 Journal of the American Pharmaceutical Association, Scientific Edition. (Washington, DC)
V.29-49, 1940-60. For publisher information, see JPMSAE. [Vol.,頁,年(19-)]48,722,1959

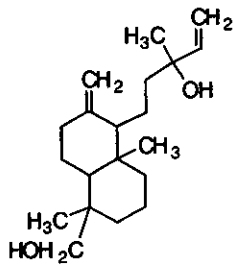
〈〈試験方法〉〉 認知されている最小致死量(LDLo)試験.
曝露経路　：静脈注射
被験動物　：両生類-カエル.
投与量・期間：100 mg/kg
毒性影響　：致死量以外に毒性影響に関する報告はない.
参照文献
JAPMA8 Journal of the American Pharmaceutical Association, Scientific Edition. (Washington, DC)
V.29-49, 1940-60. For publisher information, see JPMSAE. [Vol.,頁,年(19-)]48,722,1959

米国に於ける状況
EPA TSCA Section 8(b) CHEMICAL INVENTORY

§ 8(14),15-Isopimaradiene-12,18-diol; 12 β-form, 18-Carboxylic acid, 12-Ac
[化学名・別名]12 β-Acetoxysandaracopimaric acid
[化合物分類]テルペノイド(Isopimarane diterpenoid)
[構造式]


[分子式]$C_{22}H_{32}O_4$
[分子量]360.492
[正確な分子量]360.23006
[基原]*Tetraclinis articulata*
[性状]結晶
[融点]Mp 140.5-141.5 ℃. Mp 156-158.5 ℃. Mp 170 ℃ (trimorph.)
[比旋光度]:[α]$_D$ -50 (EtOH)

----------文献----------
Ap Simon, J.W. et al., Can. J. Chem., 1961, 39, 2543,（構造決定）
Lapasset, J. et al., Acta Cryst. B, 1972, 28, 3321,（結晶構造）
Delgado, G. et al., J. Chem. Res., Synop., 1986, 286,（分離）

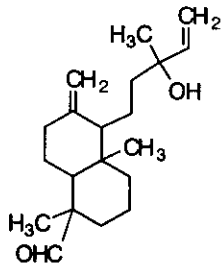
§ 8(17),14-Labdadiene-13,19-diol; (13*R*)-form
[化学名・別名]Torulosol
[CAS No.]1908-44-7
[化合物分類]テルペノイド(Labdane diterpenoid)
[構造式]


[基原]*Cupressus torulosa* と *Tetraclinis articulata* と *Dacrydium biforme* を含むその他の木部
[性状]結晶(diisopropyl ether)
[融点]Mp 110-111 ℃
[比旋光度]:[α]$_D$ +31 (c, 2 in $CHCl_3$)

----------文献----------
Enzell, C., Acta Chem. Scand., 1961, 15, 1303,（構造決定）

Barreto, H.S. et al., Acta Chem. Scand., 1961, 15, 1313, (分離)
Gough, L.J., Chem. Ind. (London), 1964, 2059, (分離, acid)
Schmidt, E.N. et al., Khim. Prir. Soedin., 1967, 3, 61; Chem. Nat. Compd. (Engl. Transl.), 1967, 3, 51, (分離)
Carman, R.M. et al., Aust. J. Chem., 1973, 26, 209
Caputo, R. et al., Tetrahedron, 1973, 29, 2047, (合成法)
Caputo, R. et al., Phytochemistry, 1974, 13, 471, (分離)
Su, W.-C. et al., Phytochemistry, 1994, 37, 1109, (分離, H-NMR, C13-NMR)

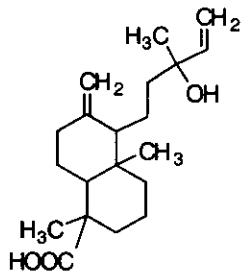
§ 8(17),14-Labdadiene-13,19-diol; (13*R*)-form, 19-Aldehyde



[化学名・別名]13*R*-Hydroxy-8(17),14-labdadien-19-al. Torulosal
[CAS No.]1857-21-2
[化合物分類]テルペノイド(Labdane diterpenoid)
[構造式]
[分子式]$C_{20}H_{32}O_2$
[分子量]304.472
[正確な分子量]304.24023
[基原]*Cupressus torulosa* の心材, *Araucaria cooki*, *Tetraclinis articulata*, *Dacrydium biforme*
[性状]不安定なオイル
[比旋光度]:[α]$_D$ +29 ($CHCl_3$)
[屈折率]n^{25}_D 1.521

----------文献----------
Enzell, C., Acta Chem. Scand., 1961, 15, 1303, (構造決定)
Barreto, H.S. et al., Acta Chem. Scand., 1961, 15, 1313, (分離)
Gough, L.J., Chem. Ind. (London), 1964, 2059, (分離, acid)
Schmidt, E.N. et al., Khim. Prir. Soedin., 1967, 3, 61; Chem. Nat. Compd. (Engl. Transl.), 1967, 3, 51, (分離)
Carman, R.M. et al., Aust. J. Chem., 1973, 26, 209
Caputo, R. et al., Tetrahedron, 1973, 29, 2047, (合成法)
Caputo, R. et al., Phytochemistry, 1974, 13, 471, (分離)
Su, W.-C. et al., Phytochemistry, 1994, 37, 1109, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ 8(17),14-Labdadiene-13,19-diol; (13*R*)-form, 19-Carboxylic acid

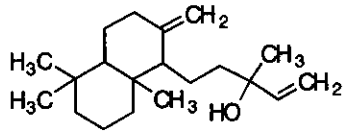


[化学名・別名]13*R*-Hydroxy-8(17),14-labdadien-19-oic acid. Cupressic acid. Torulosic acid
[CAS No.]1909-90-6
[化合物分類]テルペノイド(Labdane diterpenoid)
[構造式]
[分子式]$C_{20}H_{32}O_3$
[分子量]320.471
[正確な分子量]320.235145
[基原]*Cupressus* spp.と *Tetraclinis articulata* の樹脂の副成分
[性状]結晶(as Me ester)
[融点]Mp 70-71 ℃ (Me ester)
[比旋光度]:[α]$_D$ +52.3 (c, 1.3 in $CHCl_3$) (Me ester)
[その他のデータ]おそらく非天然物

----------文献----------
Enzell, C., Acta Chem. Scand., 1961, 15, 1303, (構造決定)
Barreto, H.S. et al., Acta Chem. Scand., 1961, 15, 1313, (分離)
Gough, L.J., Chem. Ind. (London), 1964, 2059, (分離, acid)
Schmidt, E.N. et al., Khim. Prir. Soedin., 1967, 3, 61; Chem. Nat. Compd. (Engl. Transl.), 1967, 3, 51, (分離)
Carman, R.M. et al., Aust. J. Chem., 1973, 26, 209
Caputo, R. et al., Tetrahedron, 1973, 29, 2047, (合成法)
Caputo, R. et al., Phytochemistry, 1974, 13, 471, (分離)

Su, W.-C. et al., Phytochemistry, 1994, 37, 1109,（分離, H-NMR, C13-NMR）

§ 8(17),14-Labdadien-13-ol; (13*R*)-form



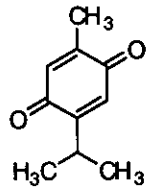
[化学名・別名]Manool
[CAS No.]596-85-0
[化合物分類]テルペノイド(Labdane diterpenoid)
[構造式]
[基原]*Dacrydium biforme*, *Dacrydium kirkii*, *Dacrydium bidwilli*, *Cupressus sempervirens*, *Cupressus torulosa*, *Tetraclinis articulata*
[性状]結晶
[融点]Mp 53 ℃
[沸点]$Bp_{0.2}$ 144-145 ℃
[比旋光度]:$[\alpha]_D^{19}$ +30.4

----------文献----------

Rowe, J.W. et al., J.O.C., 1964, 29, 1554,（分離）
Hugel, G. et al., Tetrahedron, Suppl., No. 8, 1966, 203,（分離）
Shimada, K. et al., Chem. Pharm. Bull., 1979, 27, 1881,（分離, H-NMR）
Ulubelen, A. et al., Phytochemistry, 1994, 36, 971,（Manool, H-NMR, C13-NMR）

§ *p*-Mentha-3,6-diene-2,5-dione(旧 CAS 名)

[化学名・別名]2-Methyl-5-(1-methylethyl)-2,5-cyclohexadiene-1,4-dione(CAS 名).
2-Isopropyl-5-methyl-1,4-benzoquinone. *p*-Cymene-2,5-dione. Thymoquinone. Thymoil
[CAS No.]490-91-5



[化合物分類]テルペノイド(*p*-Menthane monoterpenoid)
[構造式]
[分子式]$C_{10}H_{12}O_2$
[分子量]164.204
[正確な分子量]164.08373
[基原]*Callitris quadrivalvis* と *Monarda fistulosa* の木部に存在する. また *Juniperus cedrus*, *Tetraclinis articulata*, *Nepeta leucophylla* からも得られる. *Nigella sativa* (24%)の種子油の主成分
[性状]浸透性の臭気を持つ明るい黄色の結晶 (pentane)
[融点]Mp 44-45 ℃
[溶解性]メタノール, エーテルに可溶; クロロホルムに易溶; 水に難溶
[UV]:[neutral] λ_{max} 276 (ε 2610); 282 (ε 2450) (EtOH)
[その他のデータ]水蒸気蒸留で得られる
[傷害・毒性]50 %致死量(LD50)(ラット, 腹腔内投与) 10 mg/kg
[化学物質毒性データ総覧(RTECS)登録番号]GU5330000

----------文献----------

Aldrich Library of 13C and 1H FT NMR Spectra, 1992, 1, 714A,（NMR）
Aldrich Library of FT-IR Spectra: Vapor Phase, 1989, 3, 543B,（IR）
Henderson, G.G. et al., J.C.S., 1910, 1659,（合成法）
Org. Synth., Coll. Vol., 1, 1932, 498; 511,（合成法）
Flaig, W. et al., Z. Naturforsch., B, 1955, 10, 668,（UV）
Flaig, W. et al., Annalen, 1959, 626, 215,（IR）
El-Dakhakhny, M., Planta Med., 1963, 11, 465,（分離）
Norris, R.K. et al., Aust. J. Chem., 1966, 19, 617,（H-NMR）
Jacobsen, N., J.C.S. Perkin 2, 1979, 569,（合成法, H-NMR, Mas）
Liebeskind, L.S. et al., J.O.C., 1992, 57, 4345,（合成法, H-NMR, IR）
Lewis, R.J., Sax's Dangerous Properties of Industrial Materials, 8th edn., Van Nostrand Reinhold, 1992, IQF000

RTECS（化学物質毒性データ）

生体影響物質　　：変異原物質

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).