

§ 1(10),4,7(11)-Germacatrien-8-one; (1(10)E,4E)-form

[化学名・別名] Germacrone. Germacrol (obsol.)

[CAS No.] 6902-91-6

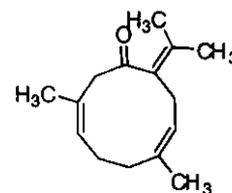
[化合物分類] テルペノイド (Simple germacrane sesquiterpenoid)

[構造式]

[基原] 次の植物から得られるオイル: *Geranium macrorrhizum*, *Rhododendron adamsii*

[性状] 結晶 (MeOH)

[融点] Mp 56-57 °C



-----文献-----

Ognajanov, I. et al., Coll. Czech. Chem. Comm., 1958, 23, 2033, (分離, 構造決定)

Yoshihara, M. et al., Chem. Pharm. Bull., 1984, 32, 2059, (結晶構造, epoxide)

Ulubelen, A. et al., Phytochemistry, 1987, 26, 312, (分離)

§ 2',3,4',5,5',7-Hexahydroxyflavone

[化学名・別名] 3,5,7-Trihydroxy-2-(2,4,5-trihydroxyphenyl)-4H-1-benzopyran-4-one (CAS 名)

2',4',5,5',7-Pentahydroxyflavonol. 5'-Hydroxymorin

[CAS No.] 37751-25-0

[化合物分類] フラボノイド (Flavonol; 6 × O-置換基)

[構造式]

[分子式] C₁₅H₁₀O₈

[分子量] 318.239

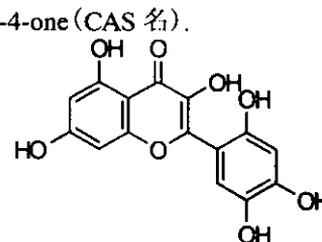
[正確な分子量] 318.03757

[基原] 次の植物から分離: *Distemonanthus benthamianus*, *Geranium macrorrhizum*

[性状] 黄色の結晶

[融点] Mp 350 °C

[その他のデータ] 310 °C で黒変



-----文献-----

King, F.E. et al., J.C.S., 1954, 4587, (分離)

Jain, A.C. et al., Indian J. Chem., 1966, 4, 365, (合成法, UV)

Shimizu, M. et al., Yakugaku Zasshi, 1969, 89, 129, (分離)

Braz Filho, R. et al., Phytochemistry, 1971, 10, 2433, (分離, UV, IR)

Malan, E. et al., J.C.S. Perkin 1, 1979, 2696, (分離, UV, H-NMR, Mas)

Collins, F.W. et al., Z. Naturforsch., C, 1981, 36, 730, (分離, UV, Mas)

Li, R.Z. et al., Phytochemistry, 1987, 26, 2831, (分離)

Yu, S. et al., Phytochemistry, 1988, 27, 171, (分離)

*****スネークルート (Snakeroot, Serpentry) *****

§ § ウマノスズクサ科バージニアスネークルート (*Aristolochia serpentaria* L.) の根。

§ Aristored

[化合物分類] アルカロイド化合物 (Alkaloid 構造は一部又は全てが未知), アルカロイド化合物 (Aristolactam alkaloid)

[構造式]

[分子式] C₁₉H₁₃NO₆

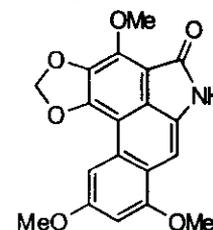
[分子量] 353.331

[正確な分子量] 353.089939

[基原] 次の植物から得られるアルカロイド: *Aristolochia reticulata*, *Aristolochia serpentaria*, と *Aristolochia bracteata* (ウマノスズクサ科) の根

[性状] 赤色の針状結晶 (EtOH)

[融点] Mp 286.5-287.5 °C



-----文献-----

Coutts, R.T. et al., J.C.S., 1957, 4120, (分離, UV)

Jagannadha Rao, K.V., *Curr. Sci.*, 1958, 27, 168; *CA*, 52, 20421f; *J. Sci. Ind. Res., Sect. B*, 1959, 18, 245; *CA*, 54, 14373a, (分離)
 Coutts, R.T. et al., *J. Pharm. Pharmacol.*, 1959, 11, 607, (分離)

§ 1 (10),4,11-Germacatrien-15,6-olide; (1 (10) E,6 β)-form

[化学名・別名] Aristolactone

[CAS No.] 6790-85-8

[化合物分類] テルペノイド (Simple germacrane sesquiterpenoid)

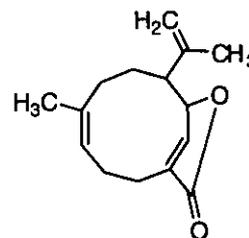
[構造式]

[基原] *Aristolochia reticulata*, *Aristolochia serpentaria*

[性状] 結晶 (Me₂CO 溶液)

[融点] Mp 110-111 °C

[比旋光度]: [α]_D¹⁴ +156.4 (c, 1 in EtOH)



-----文献-----

Martin-Smith, M. et al., *Tet. Lett.*, 1964, 2391, (分離)
 Ferguson, G. et al., *J. Chem. Res., Synop.*, 1982, 304, (結晶構造)
 Marshall, J.A. et al., *J.O.C.*, 1987, 52, 3883, (合成法)
 Marshall, J.A. et al., *Tet. Lett.*, 1987, 28, 723; 3323, (合成法, 絶対構造)

§ § ウマノスズクサ科カナダサイシン (*Asarum canadense* L.) の根。

§ 8-Methoxy-3,4-methylenedioxy-10-nitro-1-phenanthrenecarboxylic acid

[化学名・別名] 8-Methoxy-6-nitrophenanthro [3,4-d]-1,3-dioxole-5-carboxylic acid (CAS 名). Aristolochic acid I. Aristolochic acid A. Aristolochic acid. Isoaristolochic acid. Aristolochin. Aristinic acid. Aristolochia yellow. *Descrescept. Tardolyt. TR 1736*

[CAS No.] 313-67-7

[関連 CAS No.] 10190-99-5

[化合物分類] 薬物: 抗菌性剤 (Antibacterial agent), 薬物: 抗炎症薬 (Antiinflammatory agent), 薬物: 消毒薬 (Antiseptic), 薬物: ホスホリパーゼ抑制薬 (Phospholipase inhibitor), アルカロイド化合物 (Aristolochic acid alkaloid)

[構造式]

[分子式] C₁₇H₁₁NO₇

[分子量] 341.276

[正確な分子量] 341.053554

[基原] 次の植物から得られるアルカロイド: 広範囲の *Aristolochia* spp. また, the Chinese drug *Fang-chi*, *Asarum canadense* var. *reflexum*, *Bragantia wallichii*,

and in the butterflies *Pachlioptera aristolochiae*, *Battus archidamas* (ウマノスズクサ科) から見つかる

[用途] ホスホリパーゼ A₂ 抑制薬. 抗腫瘍薬, 消毒薬, 殺菌剤. 抗炎症薬

[性状] 結晶 (DMF/EtOH, EtOH or MeOH/Et₂O)

[融点] Mp 281-286 °C で分解 (271-273 °C, 275-278 °C)

[溶解性] BERDY SOL: メタノール, エタノール, 塩基に可溶; ヘキサン, 水に難溶

[Log P 計算値] Log P 3.48 (計算値)

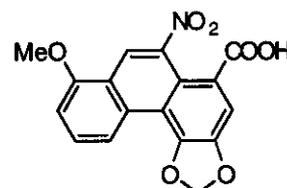
[UV]: [base] λ_{max} 241 (ε); 305 (ε); 340 (ε); 450 (ε) (EtOH/NaOH) [neutral] λ_{max} 221 (ε 29500); 255 (ε 32400); 283 (ε); 314 (ε 11200); 389 (ε 6030) (EtOH) [neutral] λ_{max} 223 (ε 1174); 227 (ε 1148); 250 (ε 1445); 318 (ε 478); 390 (ε 251) (MeOH) [neutral] λ_{max} 221 (ε 29500); 250 (ε 32200); 317 (ε 11200); 390 (ε 6000) (EtOH)

[傷害・毒性] 腎臓毒. 発ガン物質. 50%致死量 (LD₅₀) (ラット, 経口) 184 mg/kg. 50%致死量 (LD₅₀) (ラット, 静脈内投与) 74 mg/kg

[化学物質毒性データ総覧 (RTEC) 登録番号] CF3325000

-----文献-----

Krishnaswamy, P.R. et al., *J. Indian Chem. Soc.*, 1935, 12, 476, (分離)
 Munjunath, B.L. et al., *J. Indian Chem. Soc.*, 1938, 15, 646, (分離)
 Pailer, M. et al., *Monatsh. Chem.*, 1956, 87, 249; 1957, 88, 367, (分離. IR, UV, 構造決定)
 Doskotch, R.W. et al., *J. Nat. Prod.*, 1967, 30, 141, (分離)



a. Euw, J. et al., *Isr. J. Chem.*, 1968, 6, 659, (分離, Mas)
 Kupchan, S.M. et al., *J.O.C.*, 1968, 33, 3735, (分離, H-NMR)
 Comer, F. et al., *Can. J. Chem.*, 1969, 47, 481, (分離, 合成)
 Priestap, H.A. et al., *An. Asoc. Quim. Argent.*, 1971, 59, 245; *CA*, 76, 43943w, (分離, UV, IR) Pakrashi, S.C. et al., *Phytochemistry*, 1977, 16, 1103, (分離, IR, Mass, 構造決定, エステル)
 Priestap, H.A. et al., *Phytochemistry*, 1982, 21, 2755, (分離, エステル)
 Urz acute u a, A. et al., *Coll. Czech. Chem. Comm.*, 1983, 48, 1513, (分離, UV, H-NMR, Mas)
 De Pascual Teresa, J. et al., *Phytochemistry*, 1983, 22, 2745, (分離, IR, H-NMR, Mass, 合成法)
 Rosenthal, M.D. et al., *Biochim. Biophys. Acta*, 1989, 1001, 1, (薬理)
 Schmeiser, H.H. et al., *Cancer Res.*, 1990, 50, 5464, (毒性)
 Mengs, U. et al., *Arch. Toxicol.*, 1993, 67, 307, (毒性)
 Moreno, J.J., *Immunopharmacology*, 1993, 26, 1, (薬理)
 Martindale, *The Extra Pharmacopoeia*, 30th edn., Pharmaceutical Press, 1993, 1411
 Leu, Y.-L. et al., *Phytochemistry*, 1998, 48, 734, (分離, UV, H-NMR, Mas)
 Lewis, R.J., *Sax's Dangerous Properties of Industrial Materials*, 8th edn., Van Nostrand Reinhold, 1992, AQY250

RTECS (化学物質毒性データ)

生体影響物質 : 催腫瘍物質. 医薬品. 変異原物質. ヒト有害物質. 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 : 静脈注射

被験動物 : ヒト-男性

投与量・期間 : 3 mg/kg/2 日間間欠投与

毒性影響 : [腎臓・尿路・膀胱] 尿細管の変化(急性腎不全, 急性尿細管壊死を含む).

参考文献

CNCRA6 Cancer Chemotherapy Reports. (Bethesda, MD) V.1-52, 1959-68. For publisher information, see CTRRDO. [Vol.,頁,年(19-)]42,35,1964

<<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-ラット.

投与量・期間 : 184 mg/kg

毒性影響 : [行動] 傾眠(全身活動度の低下).
 [行動] 運動失調
 [肺, 胸郭, または呼吸] 呼吸困難.

参考文献

ARTODN Archives of Toxicology. (Springer-Verlag, Heidelberger Pl. 3, D-1000 Berlin 33, Fed. Rep. Ger.) V.32- 1974- [Vol.,頁,年(19-)]59,328,1987

<<試験方法>> LD50 試験(50%致死量試験).

曝露経路 : 静脈注射

被験動物 : げっ歯類-ラット.

投与量・期間 : 74 mg/kg

毒性影響 : [行動] 傾眠(全身活動度の低下).
 [行動] 運動失調
 [肺, 胸郭, または呼吸] 呼吸困難.

参考文献

ARTODN Archives of Toxicology. (Springer-Verlag, Heidelberger Pl. 3, D-1000 Berlin 33, Fed. Rep. Ger.) V.32- 1974- [Vol.,頁,年(19-)]59,328,1987

<<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 : 55900 ug/kg

毒性影響 : [行動] 傾眠(全身活動度の低下).
 [行動] 運動失調

〔肺, 胸郭, または呼吸〕呼吸困難.

参照文献

ARTODN Archives of Toxicology. (Springer-Verlag, Heidelberger Pl. 3, D-1000 Berlin 33, Fed. Rep. Ger.) V.32- 1974- [Vol.,頁,年(19-)]59,328,1987

<<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 : 14320 ug/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

KIHSDM Guangxi Yixue. Kuanghsi Medicine. (China International Book Trading Corp., POB 2820, Beijing, Peop. Rep. China) V.?- 1979- [Vol.,頁,年(19-)](6),2,1981

<<試験方法>> LD50 試験(50%致死量試験).

曝露経路 : 静脈注射

被験動物 : げっ歯類-マウス

投与量・期間 : 38400 ug/kg

毒性影響 : 〔行動〕傾眠(全身活動度の低下).

〔行動〕運動失調

〔肺, 胸郭, または呼吸〕呼吸困難.

参照文献

ARTODN Archives of Toxicology. (Springer-Verlag, Heidelberger Pl. 3, D-1000 Berlin 33, Fed. Rep. Ger.) V.32- 1974- [Vol.,頁,年(19-)]59,328,1987

<<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 : ほ乳類-ネコ.

投与量・期間 : 40 mg/kg

毒性影響 : 〔血管〕自律性の切断を伴わない血圧上昇.

〔肺, 胸郭, または呼吸〕呼吸抑制.

〔肺, 胸郭, または呼吸〕呼吸刺激.

参照文献

FATOAO Farmakologiya i Toksikologiya (Moscow). For English translation, see PHTXA6 and RPTOAN. (V/O Mezhdunarodnaya Kniga, 113095 Moscow, USSR) V.2- 1939- [Vol.,頁,年(19-)] 28,74,1965

<<試験方法>> 認知されている最小致死量(LDLo)試験.

曝露経路 : 腹腔内投与

被験動物 : げっ歯類-ウサギ.

投与量・期間 : 1500 ug/kg

毒性影響 : 〔行動〕傾眠(全身活動度の低下).

〔行動〕筋脱力.

〔栄養と総代謝〕体重減少または体重増加.

参照文献

FATOAO Farmakologiya i Toksikologiya (Moscow). For English translation, see PHTXA6 and RPTOAN. (V/O Mezhdunarodnaya Kniga, 113095 Moscow, USSR) V.2- 1939- [Vol.,頁,年(19-)] 28,74,1965

その他の多回投与試験

<<試験方法>> 最小毒性量(TDLo)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 : 22 mg/kg/11 日間間欠投与

毒性影響 : 〔血液〕その他の血球数の変化(特定されていない).

〔皮膚と付属器官〕その他の皮膚炎.(全身ばく露後)

参照文献

AMPIAF Acta Medica Philippina. (Univ. of the Philippines, College of Medicine and the Institute of Public Health, 547 Pedro Gil St., Manila D-406, Philippine) V.1-19, 1939-63; Series 2: V.1- 1964- [Vol.,頁,年(19-)]6,139,1970

催腫瘍性に関するデータ

<<試験方法>> 最小毒性量(TDLo)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 : 105 mg/kg/3 週間継続投与

毒性影響 : (催腫瘍性) RTECS 基準による, 不確実な催腫瘍性物質
〔肺,胸郭,または呼吸〕腫瘍
〔胃腸〕腫瘍

参照文献

ARTODN Archives of Toxicology. (Springer-Verlag, Heidelberger Pl. 3, D-1000 Berlin 33, Fed. Rep. Ger.) V.32- 1974- [Vol.,頁,年(19-)]61,504,1988

変異原性に関するデータ

<<試験方法>> 微生物を用いた突然変異試験.

試験系 : 大腸菌 Salmonella typhimurium.

投与量・期間 : 50 ug/plate

参照文献

CALEDQ Cancer Letters (Shannon, Ireland). (Elsevier Scientific Pub. Ireland Ltd., POB 85, Limerick, Ireland) V.1- 1975- [Vol.,頁,年(19-)]55,7,1990

<<試験方法>> 微生物を用いた突然変異試験.

試験系 : 大腸菌 Salmonella typhimurium.

投与量・期間 : 200 ug/plate

参照文献

MUREAV Mutation Research. (Elsevier Science Pub. B.V., POB 211, 1000 AE Amsterdam, Netherland) V.1- 1964- [Vol.,頁,年(19-)]113,259,1983

<<試験方法>> 変異原試験-通常の試験法.

試験系 : 大腸菌 Escherichia coli

投与量・期間 : 760 ng/tube

参照文献

MUREAV Mutation Research. (Elsevier Science Pub. B.V., POB 211, 1000 AE Amsterdam, Netherland) V.1- 1964- [Vol.,頁,年(19-)]445,81,1999

<<試験方法>> 性染色体の喪失及び不分離試験.

曝露経路 : 経口投与.

試験系 : 昆虫-キイロシヨウジョウバエ.

投与量・期間 : 50 umol/L

参照文献

ARTODN Archives of Toxicology. (Springer-Verlag, Heidelberger Pl. 3, D-1000 Berlin 33, Fed. Rep. Ger.) V.32- 1974- [Vol.,頁,年(19-)]56,158,1985

<<試験方法>> 細胞遺伝学分析試験

試験系 : ヒトリンパ球

投与量・期間 : 1 mg/L

参照文献

HUGEDQ Human Genetics. (Springer-Verlag New York, Inc., Service Center, 44 Hartz Way, Secaucus, NJ 07094) V.31- 1976- [Vol.,頁,年(19-)]64,131,1983

<<試験方法>> 姉妹染色分体交換試験

試験系 : ヒトリンパ球

投与量・期間 : 5 mg/L

参照文献

HUGEDQ Human Genetics. (Springer-Verlag New York, Inc., Service Center, 44 Hartz Way, Secaucus, NJ 07094) V.31- 1976- [Vol.,頁,年(19-)]64,131,1983

<<試験方法>> DNA adduct

曝露経路 : 経口投与.

試験系 : げっ歯類-ラット.

投与量・期間 : 40 mg/kg/2 週間(間欠的投与)

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-)]15,1187,1994

<<試験方法>> ほ乳類体細胞の突然変異試験.

曝露経路 : 経口投与.

試験系 : げっ歯類-ラット.

投与量・期間 : 45 mg/kg

参考文献

MUREAV Mutation Research. (Elsevier Science Pub. B.V., POB 211, 1000 AE Amsterdam, Netherland) V.1- 1964- [Vol.,頁,年(19-)]143,143,1985

<<試験方法>> ほ乳類体細胞の突然変異試験.

試験系 : げっ歯類-ラット線維芽細胞.

投与量・期間 : 20 mg/L

参考文献

EMMUEG Environmental and Molecular Mutagenesis (Alan R. Liss, Inc., 41 E. 11th St., New York, NY 10003) V.10- 1987- [Vol.,頁,年(19-)]10,275,1987

<<試験方法>> ほ乳類体細胞の突然変異試験.

曝露経路 : 皮下投与.

試験系 : げっ歯類-ラット.

投与量・期間 : 320 ug/kg

参考文献

EMMUEG Environmental and Molecular Mutagenesis (Alan R. Liss, Inc., 41 E. 11th St., New York, NY 10003) V.10- 1987- [Vol.,頁,年(19-)]10,275,1987

<<試験方法>> ほ乳類体細胞の突然変異試験.

試験系 : げっ歯類-マウス白血球.

投与量・期間 : 50 umol/L

参考文献

MUREAV Mutation Research. (Elsevier Science Pub. B.V., POB 211, 1000 AE Amsterdam, Netherland) V.1- 1964- [Vol.,頁,年(19-)]206,447,1988

§ 2',4,4',6'-Tetrahydroxychalcone; 2'-O-β-D-Glucopyranoside, 4'-O-[β-D-glucopyranosyl-(1→6)-β-D-glucopyranoside]

[化合物分類]フラボノイド (Chalcone flavonoids; 4 × O-置換基)

[構造式]

[分子式] C₃₃H₄₂O₂₀

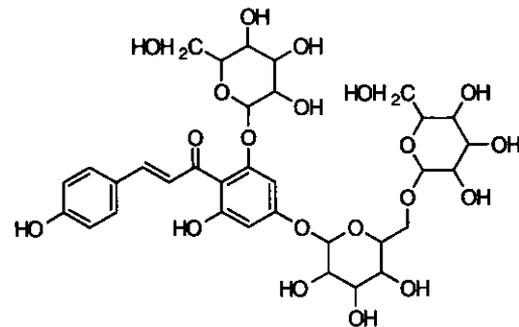
[分子量] 758.683

[正確な分子量] 758.22695

[基原] *Asarum canadense*

[性状] 黄色の粉末

[UV]: [neutral] λ_{max} 243 (sh) (); 368 () (MeOH)



-----文献-----

- Guise, G.B. et al., Aust. J. Chem., 1962, 15, 314, (分離, 誘導體)
Lam, J. et al., Phytochemistry, 1975, 14, 1621, (分離, 誘導體)
De Vlaming, P. et al., Phytochemistry, 1976, 15, 348, (分離)
Imperato, F., Phytochemistry, 1978, 17, 822; 1982, 21, 480, (配糖体)
Becker, H. et al., Z. Naturforsch., C, 1978, 33, 771, (配糖体)
Bohlmann, L. et al., Phytochemistry, 1979, 18, 889; 1338, (分離)
Wollenweber, E. et al., Z. Naturforsch., C, 1979, 34, 1289, (分離)
Hunt, G.M. et al., Phytochemistry, 1980, 19, 1415, (分離)
Fukunaga, T. et al., Chem. Pharm. Bull., 1987, 35, 3292, (C13-NMR, 誘導體)
Mizuno, M. et al., Phytochemistry, 1987, 26, 2071, (誘導體)
Lin, L.-C. et al., Chin. Pharm. J. (Taipei), 1995, 47, 501, (2',4'-diglucoside)

§ 2',4,4',6'-Tetrahydroxychalcone; 2',4'-Di-O-β

-D-glucopyranoside

[CAS No.] 6198-23-8

[化合物分類]フラボノイド (Chalcone flavonoids; 4 × O-置換基)

[構造式]

[分子式] C₂₇H₃₂O₁₅

[分子量] 596.541

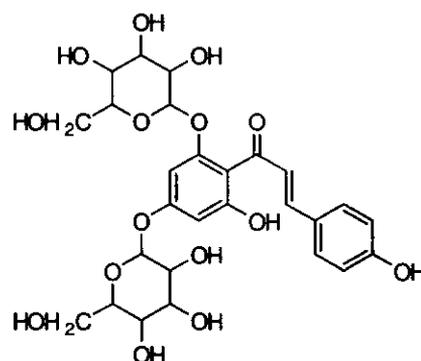
[正確な分子量] 596.174125

[基原] 次の植物の根: *Asarum macranthum*, *Asarum canadense*

[性状] 黄色の粉末

[融点] Mp 191 °C

[UV]: [neutral] λ_{max} 243 (sh) (); 368 () (MeOH)



-----文献-----

Guisse, G.B. et al., *Aust. J. Chem.*, 1962, 15, 314, (分離, 誘導体)

Lam, J. et al., *Phytochemistry*, 1975, 14, 1621, (分離, 誘導体)

De Vlaming, P. et al., *Phytochemistry*, 1976, 15, 348, (分離)

Imperato, F., *Phytochemistry*, 1978, 17, 822; 1982, 21, 480, (配糖体)

Becker, H. et al., *Z. Naturforsch., C*, 1978, 33, 771, (配糖体)

Bohlmann, L. et al., *Phytochemistry*, 1979, 18, 889; 1338, (分離)

Wollenweber, E. et al., *Z. Naturforsch., C*, 1979, 34, 1289, (分離)

Hunt, G.M. et al., *Phytochemistry*, 1980, 19, 1415, (分離)

Fukunaga, T. et al., *Chem. Pharm. Bull.*, 1987, 35, 3292, (C13-NMR, 誘導体)

Mizuno, M. et al., *Phytochemistry*, 1987, 26, 2071, (誘導体)

Lin, L.-C. et al., *Chin. Pharm. J. (Taipei)*, 1995, 47, 501, (2',4'-diglucoside)

*****スパイクナード (Spikenard) *****

§ § オミナエシ科スパイクナード (*Nardostachys jatamansi* de Candolle) の根茎。

§ 9-Aristolene; (-)-form

[化学名・別名] Aristolene

[CAS No.] 6831-16-9

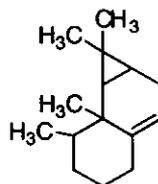
[化合物分類]テルペノイド (Aristolane sesquiterpenoid)

[構造式]

[基原] *Nardostachys jatamansi*

[性状] オイル

[比旋光度]: [α]_D -98.7 (neat)



-----文献-----

Pesnelle, P. et al., *Bull. Soc. Chim. Fr.*, 1963, 912, (分離)

Carboni, S. et al., *Tet. Lett.*, 1965, 3017, (分離)

Weinheimer, A.J., *Chem. Comm.*, 1968, 1070, (分離)

Hirota, H. et al., *Tetrahedron*, 1996, 52, 2359, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ 1(10)-Aristolene-4-ol; 4 β-form

[化学名・別名] Calarenol

[CAS No.] 13971-62-5

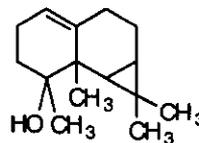
[化合物分類]テルペノイド (Aristolane sesquiterpenoid)

[構造式]

[基原] *Nardostachys jatamansi*.

[沸点] Bp_{0.1} 120-125 °C

[比旋光度]: [α]_D²⁰ +47.9



-----文献-----

Sastry, S.D. et al., *CA*, 1967, 67, 14779f, (分離)

§ 1 (10)-Aristolene-2-one

[CAS No.] 28398-06-3

[化合物分類] テルペノイド (Aristolane sesquiterpenoid)

[構造式]

[分子式] $C_{15}H_{22}O$

[分子量] 218.338

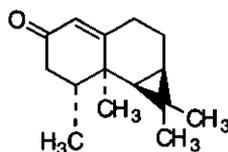
[正確な分子量] 218.167065

[基原] *Aristolochia longa*, *Nardostachys jatamansi*, *Prostanthera rotundifolia*

[性状] 塊

[融点] Mp 41 °C

[UV]: [neutral] λ_{max} 243 (ϵ 5330); 310 (ϵ 30) (MeOH)



-----文献-----

Fernandez, A. et al., *Phytochemistry*, 1983, 22, 2753, (分離, H-NMR)

Dellar, J.E. et al., *Phytochemistry*, 1994, 36, 957, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ 4 (15), 11-Eudesmadien-2-ol; 2 α -form

[化学名・別名] Jatamol A

[CAS No.] 136581-65-2

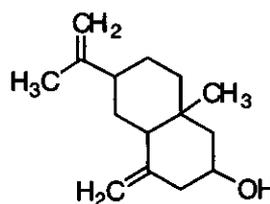
[化合物分類] テルペノイド (Simple eudesmane sesquiterpenoid)

[構造式]

[基原] *Nardostachys jatamansi*

[性状] オイル

[比旋光度]: $[\alpha]_D +19.7$ (c, 6.0 in CHCl₃)



-----文献-----

Bagchi, A. et al., *Planta Med.*, 1991, 57, 282, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ 4 (15), 11-Eudesmadien-2-ol; 2 α -form, 2-(3-Hydroxy-3-methylbutanoyl)

[化学名・別名] Jatamol B

[CAS No.] 136581-66-3

[化合物分類] テルペノイド (Simple eudesmane sesquiterpenoid)

[構造式]

[分子式] $C_{20}H_{32}O_3$

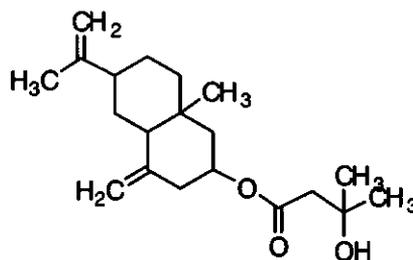
[分子量] 320.471

[正確な分子量] 320.235145

[基原] *Nardostachys jatamansi*

[性状] オイル

[比旋光度]: $[\alpha]_D +19.2$ (c, 0.6 in CHCl₃)



-----文献-----

Bagchi, A. et al., *Planta Med.*, 1991, 57, 282, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ 7,9-Guaiadien-14-oic acid; (1 β , 4 α , 5 β)-form

[化学名・別名] Jatamansic acid

[CAS No.] 54928-04-0

[化合物分類] テルペノイド (Simple guaiane sesquiterpenoid)

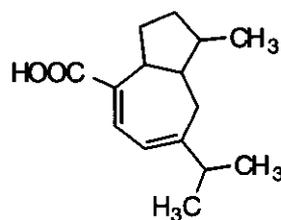
[構造式]

[基原] *Nardostachys jatamansi*

[性状] 結晶 (EtOH)

[融点] Mp 123 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D -394$ (CHCl₃)



-----文献-----

Rücker, G. et al., *Phytochemistry*, 1993, 33, 141, (H-NMR, C13-NMR, 結晶構造)

§ 10 (14)-Guaiene-4-ol

[化学名・別名] Nardol

[CAS No.] 6090-27-3

[化合物分類] テルペノイド (Simple guaiane sesquiterpenoid), 薬物: 抗腫瘍薬 (Antineoplastic agent)

[構造式]

[分子式] $C_{15}H_{26}O$

[分子量] 222.37

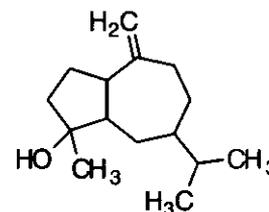
[基原] *Nardostachys jatamansi*, Japanese valerian (*Valeriana* sp.)

[用途] 抗腫瘍薬

[沸点] $Bp_{0.5}$ 120-125 °C (bath)

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{27}$ -10.17 (c, 2.36 in $CHCl_3$). $[\alpha]_D$ +5.4

[Log P 計算値] Log P 4.7 (計算値)



-----文献-----

Sastry, S.D. et al., Tet. Lett., 1966, 1035, (分離, 構造決定)

Hikino, H. et al., Yakugaku Zasshi, 1974, 95, 243, (分離)

§ 8-Hydroxypinoresinol

[化学名・別名] 2,6-Bis(4-hydroxy-3-methoxyphenyl)-3,7-dioxabicyclo[3.3.0]octan-1-ol.

4,4',8-Trihydroxy-3,3'-dimethoxy-7,9':7,9-diepoxy lignan.

1-Hydroxypinoresinol

[CAS No.] 81426-17-7

[化合物分類] リグナン化合物 (Side-chain oxygenated furofuranoid lignan)

[構造式]

[分子式] $C_{20}H_{22}O_7$

[分子量] 374.39

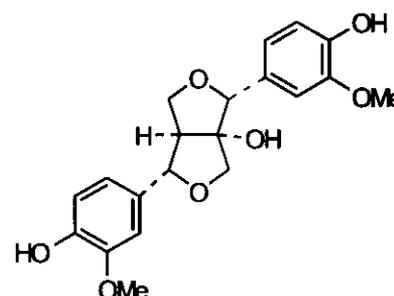
[正確な分子量] 374.136555

[基原] *Olea europaea* の樹皮, *Nardostachys jatamansi* の根

[性状] 結晶粉末

[融点] Mp 183-185 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{15}$ +39 (c, 0.65 in EtOH)



-----文献-----

Tsukamoto, H. et al., Chem. Pharm. Bull., 1984, 32, 2730; 4482; 1985, 33, 1232

Deyama, T. et al., Chem. Pharm. Bull., 1986, 34, 523, (4-glucoside)

Macias, F.A. et al., Acta Cryst. C, 1992, 48, 2240, (結晶構造)

Joshi, R.K. et al., Fitoterapia, 1998, 69, 275, (H-NMR, C13-NMR)

§ Lomatin; (R)-form

[CAS No.] 19380-05-3

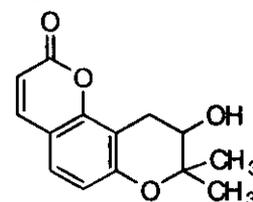
[化合物分類] ベンゾピラノイド (Dihydropyrano coumarin), ベンゾピラノイド (7-Oxygenated coumarins, 8-substituted)

[構造式]

[基原] 次の植物から分離: *Lomatium nuttallii*, *Nardostachys jatamansi*, *Libanotis buchtormensis*

[融点] Mp 182.5-183.5 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{23}$ +74.8 (EtOH)



-----文献-----

Perelson, M.E. et al., Dokl. Akad. Nauk SSSR, Ser. Khim., 1964, 159, 154, (Xanthogalin)

Seshadri, T.R. et al., Tet. Lett., 1964, 3367, (分離)

Shanbhag, S.N. et al., Tetrahedron, 1964, 20, 2605; 1965, 21, 3591, (分離)

Bohlmann, F. et al., Chem. Ber., 1968, 101, 2741; 1971, 104, 3229, (分離, 合成法, 誘導體)

Ermatov, N.E. et al., Khim. Prir. Soedin., 1968, 4, 145; Chem. Nat. Compd. (Engl. Transl.), 1968, 4, 125, (分離)

Bohlmann, F. et al., Chem. Ber., 1975, 108, 433, (分離)

Skaltsounis, A.-L. et al., Heterocycles, 1992, 34, 121, (合成法, 分割)

§ Lomatin; (R)-form, O-Angeloyl

[化学名・別名] Selinidin. Jatamansin. Xanthogalin

[CAS No.] 19427-82-8

[化合物分類] ベンゾピラノイド (Dihydropyranocoumarin), ベンゾピラノイド (7-Oxygenated coumarins, 8-substituted)

[構造式]

[分子式] $C_{19}H_{20}O_5$

[分子量] 328.364

[正確な分子量] 328.131075

[基原] 次の植物から分離: *Selinum vaginatum*, *Ligusticum elatum*, *Lomatium columbianum*, *Nardostachys jatamansi*, *Xanthogalum*

purpurascens

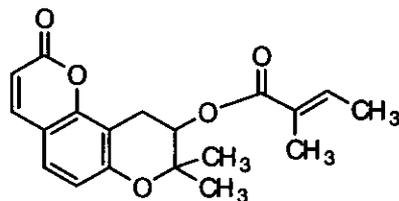
[性状] 結晶 (Et₂O/petrol)

[融点] Mp 100-102.5 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{29} +20.3$ (c, 1.474 in dioxan). $[\alpha]_D -24$ (CHCl₃). $[\alpha]_D^{16} -41.4$ (c, 1.6 in CHCl₃)

-----文献-----

Perelson, M.E. et al., Dokl. Akad. Nauk SSSR, Ser. Khim., 1964, 159, 154, (Xanthogalin)



§ Maaliol

[化学名・別名] Maaliolcohol

[CAS No.] 527-90-2

[化合物分類] テルペノイド (Cycloodesmane sesquiterpenoid)

[構造式]

[分子式] $C_{15}H_{26}O$

[分子量] 222.37

[正確な分子量] 222.198365

[基原] *Nardostachys jatamansi*, *Valeriana officinalis*, *Valeriana wallichii*, *Eriostemon myoporoides*, *Prostanthera prunelloides*, *Canarium samoense*, その他

[性状] 結晶 (EtOH)

[融点] Mp 103.5-105 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D +18.4$ (c, 1.1 in EtOH)

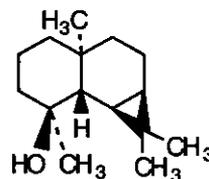
-----文献-----

Büchi, G. et al., Tet. Lett., 1962, 827, (絶対構造)

Asakawa, Y. et al., Phytochemistry, 1980, 19, 2141, (*ent*-Maaliol)

Nishiya, K. et al., Phytochemistry, 1992, 31, 3511, (分離, H-NMR, C13-NMR)

Weyerstahl, P. et al., Annalen, 1995, 1039, (4-Epimaaliol)



§ Nardostachysin

[CAS No.] 307305-50-6

[化合物分類] テルペノイド (Iridoid monoterpene), テルペノイド (Simple guaiene sesquiterpene)

[構造式]

[分子式] $C_{25}H_{34}O_6$

[分子量] 430.54

[正確な分子量] 430.23554

[基原] *Nardostachys jatamansi*

[性状] 結晶

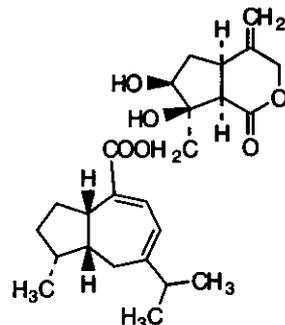
[融点] Mp 192 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{23} -148$ (c, 0.1 in MeOH)

[UV]: [neutral] $\lambda_{max} 215$ (log ϵ 3.2) (MeOH)

-----文献-----

Chatterjee, A. et al., J. Nat. Prod., 2000, 63, 1531-1533, (分離, H-NMR, C13-NMR)



§ 9-Patchoulene

[化学名・別名] α -Patchoulene

[CAS No.] 560-32-7

[化合物分類] テルペノイド (Patchoulane sesquiterpenoid)

[構造式]

[分子式] $C_{15}H_{24}$

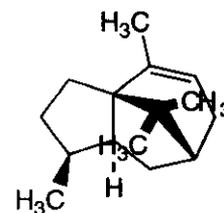
[分子量] 204.355

[正確な分子量] 204.1878

[基原] 次の植物の精油から分離, 例えば, *Parabenzoin trilobium*, *Nardostachys jatamansi*, パチョリオイル

[沸点] $Bp_{0.14}$ 53.5-54.5 °C

[その他のデータ] 沸点は γ -patchoulene の混合物のものである



-----文献-----

Tsubaki, N. et al., *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, 1967, 40, 597, (分離)

Ruecker, G. et al., *Phytochemistry*, 1976, 15, 224, (分離, Mas)

Akhila, A. et al., *Phytochemistry*, 1987, 26, 2705, (合成)

§ Pinoresinol; (+)-form

[CAS No.] 487-36-5

[化合物分類] リグナン化合物 (Simple furofuranoid lignan)

[構造式]

[基原] 色々な *Picea*, *Pinus* または *Abies spp* に存在. また *Nardostachys jatamansi* の根からも得られる

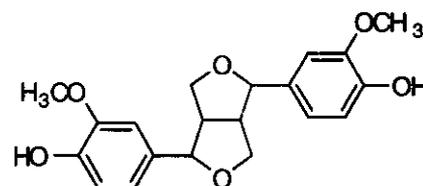
[性状] 結晶 (EtOH 溶液)

[融点] Mp 122 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{21} +84.4$ (Me₂CO)

[溶解性] BERDY SOL: メタノール, エーテルに可溶; 水に難溶

[UV]: [neutral] λ_{max} 232 (ϵ 15500); 282 (ϵ 6300) (MeOH) [neutral] λ_{max} 230 (ϵ 14800); 280 (ϵ 6620) (EtOH)



-----文献-----

Casabuono, A.C. et al., *Phytochemistry*, 1994, 35, 479, ((-)-Pinoresinol)

Lee, S.-J. et al., *Planta Med.*, 1999, 65, 658, (Hibiscuside)

§ Spirojatamol

[CAS No.] 128487-46-7

[化合物分類] テルペノイド (Miscellaneous spirosesquiterpenoid)

[構造式]

[分子式] $C_{15}H_{26}O$

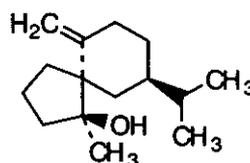
[分子量] 222.37

[正確な分子量] 222.198365

[基原] *Nardostachys jatamansi* の根

[性状] 粘調性のオイル

[比旋光度]: $[\alpha]_D +18$ (c, 4.20 in CHCl₃)



-----文献-----

Bagchi, A. et al., *Tetrahedron*, 1990, 46, 1523, (分離, 構造決定)

Tokunaga, Y. et al., *J.C.S. Perkin 1*, 1997, 189, (合成法)

Srikrishna, A. et al., *Tetrahedron*, 1997, 53, 1439, (合成法)

Sattekkau, T. et al., *Tet. Lett.*, 1998, 39, 9647, (合成法)

§ Valeranone; (-)-form

[CAS No.] 5090-54-0

[化合物分類]テルペノイド (Valerane sesquiterpenoid), 薬物: 中枢神経抑制薬 (Central depressant)

[構造式]

[基原] *Valeriana officinalis* と *Nardostachys jatamansi* の根

[性状] オイル

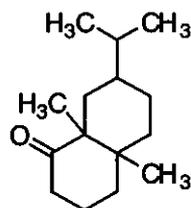
[比旋光度]: $[\alpha]_D^{20} -51.9$ (c, 0.3 in CHCl_3)

[Log P 計算値] Log P 4.78 (計算値)

[その他のデータ] 薬理的活性な異性体

[傷害・毒性] 50%致死量 (LD_{50}) (マウス, 腹腔内投与) 350 mg/kg

[化学物質毒性データ総覧 (RTEC) 登録番号] QK5075000



-----文献-----

Klyne, W. et al., Tet. Lett., 1964, 1443, (絶対構造)

Banerjee, D.K., J. Indian Chem. Soc., 1972, 49, 1, (レビュー)

***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>> LD_{50} 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: 350 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

IJMRAQ Indian Journal of Medical Research. (Indian Council of Medical Research, Ansari Nagar, New Delhi 110 029, India) V.1- 1913- [Vol.,頁,年(19-)]46,782,1958

<<試験方法>> LD_{50} 試験 (50%致死量試験).

曝露経路 : 腹腔内投与

被験動物 : 哺乳動物-種未特定.

投与量・期間: 580 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

29ZRAX "Pharmacology of Oriental Plants," Chen, K.K., and B. Mukerji, Oxford, UK, Pergamon Press Ltd., 1965 [Vol.,頁,年(19-)],51,1965

*****スピネル (Spinel) *****

§ § セリ科 (*Meum athamanticum* Jacquin) の根。

該当物質なし

*****スプリース (Spruce) *****

§ § マツ科カナダツガ (*Tsuga canadensis* Carriere (*Picea canadensis* Linne)) の枝葉または樹皮。

該当物質なし

*****スペアミント (Spearmint) *****

§ § シソ科スペアミント (*Mentha spicata* L.) の茎葉または全草。

§ Jasmolone; *O*-β-D-Glucopyranoside

[化合物分類] 脂肪族化合物 (Monocarbocyclic aldehyde and ketone)

[構造式]

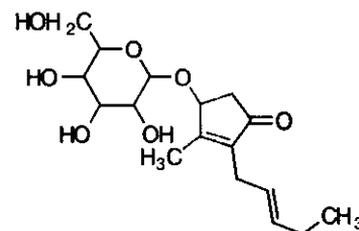
[分子式] C₁₇H₂₆O₇

[分子量] 342.388

[正確な分子量] 342.167855

[基原] *Mentha spicata* var. *crispa*

[比旋光度]: [α]_D²¹ -25 (c, 0.2 in MeOH)



-----文献-----

Takahashi, T. et al., Chem. Lett., 1981, 1189, (合成法)

Yamamura, S. et al., Phytochemistry, 1998, 48, 131, (分離, 配糖体)

§ *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 monoterpene)

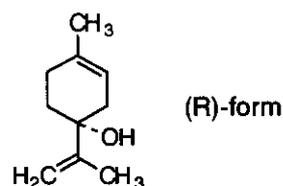
[構造式]

[分子式] C₁₀H₁₆O

[分子量] 152.236

[正確な分子量] 152.120115

[基原] 次の植物から分離: Japanese pepper (*Zanthoxylum piperitum*), ユズ (*Citrus junos*), 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)

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)

§ 3-Octanol; (-)-form, *O*-β-D-Glucopyranoside

[CAS No.] 129742-31-0

[化合物分類] 脂肪族化合物 (Saturated unbranched alcohol)

[構造式]

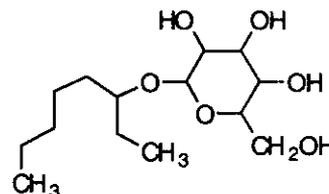
[分子式] C₁₁H₂₄O₆

[分子量] 292.372

[正確な分子量] 292.18859

[基原] スペアミント (*Mentha spicata* var. *crispa*)

[比旋光度]: [α]_D²¹ -29 (c, 0.2 in MeOH)



-----文献-----

Fried, J. et al., J.A.C.S., 1972, 94, 4342, (絶対構造)

Karrer, W. et al., Konstitution und Vorkommen der Organischen Pflanzenstoffe, 2nd edn., Birkhauser Verlag, Basel, 1972, no. 78, (生育)

Opdyke, D.L.J., Food Cosmet. Toxicol., 1979, 17, 881, (レビュー, 毒性)

Brand, J.M. et al., J. Chem. Ecol., 1987, 13, 357, (分離)

Shimizu, S. et al., J. Essent. Oil Res., 1990, 2, 81, (配糖体)

Encyclopedia of Food and Color Additives, (ed. Burdock, G.A.), CRC Press, 1997, 2011, (生育, 性質)

Yamamura, S. et al., Phytochemistry, 1998, 48, 131, (配糖体, 分離)

Lewis, R.J., Sax's Dangerous Properties of Industrial Materials, 8th edn., Van Nostrand Reinhold, 1992, OCY100

§ 1-Octen-3-ol; (*R*)-form, *O*-β-D-Glucopyranoside

[CAS No.] 209863-00-3

[その他の CAS No.] 74356-49-3

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

[構造式]

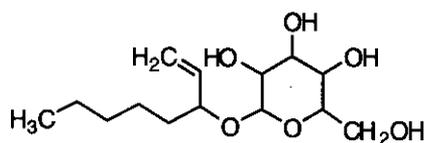
[分子式] C₁₄H₂₆O₆

[分子量] 290.356

[正確な分子量] 290.17294

[基原] スペアミント (*Mentha spicata* var. *crispa*)

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{25} +10$ (c, 0.5 in MeOH)



-----文献-----

Honkanen, E. et al., Acta Chem. Scand., 1963, 17, 858, (分離)

McGahren, W.J. et al., J.O.C., 1977, 42, 1659, (絶対構造)

Whitfield, F.B. et al., Aust. J. Chem., 1982, 35, 373, (分離)

Dittmer, D.C. et al., J.O.C., 1993, 58, 718, (合成法, H-NMR, C13-NMR, 成書)

Toyota, M. et al., Phytochemistry, 1993, 32, 1235, (分離, Ac)

Encyclopedia of Food and Color Additives, (ed. Burdock, G.A.), CRC Press, 1997, 2018; 2023, (生育, 性質, Ac)

Yamamura, S. et al., Phytochemistry, 1998, 48, 131, (配糖体)

Lewis, R.J., Sax's Dangerous Properties of Industrial Materials, 8th edn., Van Nostrand Reinhold, 1992, ODW000

§ 1-Octen-3-ol; (R)-form, O-[β-D-Xylopyranosyl-(1 → 6)-β-D-glucopyranoside]

[CAS No.] 209863-01-4

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

[構造式]

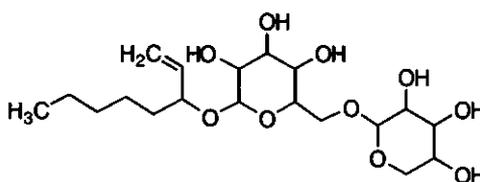
[分子式] C₁₉H₃₄O₁₀

[分子量] 422.472

[正確な分子量] 422.2152

[基原] スペアミント (*Mentha spicata* var. *crispa*)

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{25} -60$ (c, 0.1 in MeOH)



-----文献-----

Honkanen, E. et al., Acta Chem. Scand., 1963, 17, 858, (分離)

Whitfield, F.B. et al., Aust. J. Chem., 1982, 35, 373, (分離)

Dittmer, D.C. et al., J.O.C., 1993, 58, 718, (合成法, H-NMR, C13-NMR, 成書)

Toyota, M. et al., Phytochemistry, 1993, 32, 1235, (分離, Ac)

Encyclopedia of Food and Color Additives, (ed. Burdock, G.A.), CRC Press, 1997, 2018; 2023, (生育, 性質, Ac)

Yamamura, S. et al., Phytochemistry, 1998, 48, 131, (配糖体)

Lewis, R.J., Sax's Dangerous Properties of Industrial Materials, 8th edn., Van Nostrand Reinhold, 1992, ODW000

§ 4-(2-Propenyl)-1,2-benzenediol; 1-O-β-D-Glucopyranoside

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

[構造式]

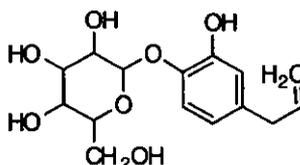
[分子式] C₁₅H₂₀O₇

[分子量] 312.319

[正確な分子量] 312.120905

[基原] *Mentha spicata* var. *crispa*

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{25} -52.6$ (c, 0.2 in MeOH)



-----文献-----

Karrer, W. et al., Konstitution und Vorkommen der Organischen Pflanzenstoffe, 2nd edn., Birkhaumluser Verlag, Basel, 1972, no. 190, (生育, 誘導体)

Evans, P.H. et al., J. Agric. Food Chem., 1984, 32, 1254, (分離, di-Ac)

Yamamura, S. et al., Phytochemistry, 1998, 48, 131, (1-glucoside)

Lewis, R.J., Sax's Dangerous Properties of Industrial Materials, 8th edn., Van Nostrand Reinhold, 1992, AGE250

§ § シソ科 (*Mentha cardiaca* Gerard ex Baker) の茎葉または全草。
該当物質なし

*****スベリヒユ (Suberihyu, Pigweed) *****

§ § スベリヒユ科スベリヒユ (*Portulaca oleracea* L.) の全草。

§ 2-Butyl-1-octanol

[化学名・別名] 5-Hydroxymethylundecane

[CAS No.] 3913-02-8

[関連 CAS No.] 35467-05-1

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

[構造式]

[分子式] $C_{12}H_{26}O$

[分子量] 186.337

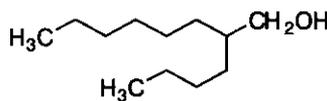
[正確な分子量] 186.198365

[基原] *Changium smyrnioides*, *Humulus lupulus*, *Lonicera japonica*, *Portulaca oleracea*

[沸点] Bp_{12} 131-133 °C

[濃度] $d^{16.5}_4$ 0.84

[屈折率] n^{16}_D 1.4435



-----文献-----

Paterson, I. et al., Tet. Lett., 1979, 2179, (合成法)

Krupcik, J. et al., Coll. Czech. Chem. Comm., 1985, 50, 1808, (ガスクロマト)

Rzama, A. et al., Phytochemistry, 1995, 38, 1375, (分離)

§ 6-Hydroxy-2,6-dimethyl-1,7-octadien-3-one; (-)-form, O-β-D-Glucopyranoside

[化学名・別名] Portuloside A

[CAS No.] 179983-86-9

[化合物分類] テルペノイド (Acyclic monoterpene)

[構造式]

[分子式] $C_{16}H_{26}O_7$

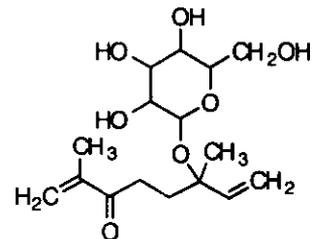
[分子量] 330.377

[正確な分子量] 330.167855

[基原] *Portulaca oleracea*

[性状] オイル

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{26}$ -19.6 (c, 0.5 in $CHCl_3$)



-----文献-----

Sakai, N. et al., Phytochemistry, 1996, 42, 1625, (分離, H-NMR, C13-NMR, 合成法)

§ Norepinephrine, INN

[化学名・別名] 4-(2-Amino-1-hydroxyethyl)-1,2-benzenediol (CAS 名). α-(Aminomethyl)

-3,4-dihydroxybenzyl alcohol (旧 CAS 名). 2-Amino-1-(3,4-dihydroxyphenyl) ethanol. 4-(β-Amino-α

-hydroxyethyl) catechol. Noradrenaline, BAN. Arterenol

[関連 CAS No.] 5794-08-1, 69815-49-2

[化合物分類] アルカロイド化合物 (Simple tyramine alkaloid), 薬物: α-アドレナリン受容体作用薬 (α-Adrenoceptor agonist), 薬物: β-アドレナリン受容体作用薬 (β-Adrenoceptor agonist), 薬物: 交感神経作用薬 (Sympathomimetic agent), 薬物: 血管収縮 (Vasoconstrictor)

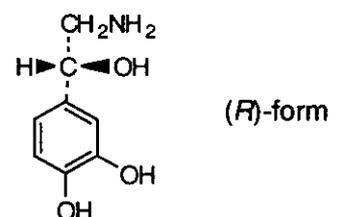
[構造式]

[分子式] $C_8H_{11}NO_3$

[分子量] 169.18

[正確な分子量] 169.073894

[基原] 次の植物に含まれるアルカロイド: *Albizzia julibrissin*, *Mimosa pudica*, *Phaseolus multiflorus*, *Samanea saman*, *Musa paradisiaca*, *Musa*



sapientium, *Passiflora quadrangularis*, *Portulaca oleracea*, *Prunus domestica*, *Citrus sinensis*, *Aconitum napellus*, *Aconitum paniculatum*, *Solanum tuberosum* (マメ科, バショウ科, トケイソウ科, スベリヒユ科, パラ科, ミカン科, キンボウゲ科, ナス科)

[用途] α, β -アドレナリン作用薬, 気管拡張薬, 交感神経遮断薬, 昇圧薬

[Log P 計算値] Log P -0.99 (計算値)

-----文献-----

Biel, J.H. et al., J.A.C.S., 1954, 76, 3149, (合成法, 薬理)

Waalkes, T.P. et al., Science (Washington, D.C.), 1958, 127, 648, (分離)

Levy, B. et al., Drill's Pharmacol. Med., 4th edn., McGraw-Hill, New York, 1971, 627, (レビュー, 薬理)

Karlson, P. et al., Hoppe Seyler's Z. Physiol. Chem., 1972, 327, 86, (分離, 合成法, N-Ac)

Smith, T.A., Phytochemistry, 1977, 16, 9, (生育, 成書)

Wilson, T.D. et al., Anal. Profiles Drug Subst., 1982, 11, 555, (レビュー)

§ Oleracins

[化合物分類] アルカロイド化合物 (Betalain alkaloid), アルカロイド化合物 (Alkaloid 構造は一部又は全てが未知)

[一般的性質] 構造は未知

[基原] Betacyanin pigments from *Portulaca oleracea* (スベリヒユ科) の茎

-----文献-----

Piattelli, M. et al., Phytochemistry, 1964, 3, 547

*****スローベリー (Sloe berry) *****

§ § パラ科スローベリー (*Prunus spinosa* L.) の果実, 葉または花。

§ 5,6-Epoxy-7-megastigmene-3,9-diol; (3 $\alpha, 5 \alpha, 6 \alpha, 7E, 9 \xi$)-form, 3-O- β -D-Glucopyranoside

[CAS No.] 143775-71-7

[化合物分類] テルペノイド (Megastigmane norterpeneoid)

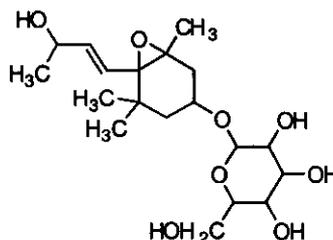
[構造式]

[分子式] $C_{19}H_{32}O_8$

[分子量] 388.457

[正確な分子量] 388.20972

[基原] 次の植物から分離: sloe tree (*Prunus spinosa*)



-----文献-----

Della Greca, M. et al., J. Nat. Prod., 1990, 53, 972, (分離, H-NMR, C13-NMR)

Humpf, H.-U. et al., J. Agric. Food Chem., 1992, 40, 1898, (分離, 配糖体)

Winterhalter, P. et al., Nat. Prod. Lett., 1994, 4, 57, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ 5-Megastigmene-3,9-diol; (3 $\xi, 9 \xi$)-form, 3-O- β -D-Glucopyranoside

[CAS No.] 143775-68-2

[化合物分類] テルペノイド (Megastigmane norterpeneoid)

[構造式]

[分子式] $C_{19}H_{34}O_7$

[分子量] 374.473

[正確な分子量] 374.230455

[基原] 次の植物から分離: sloe tree (*Prunus spinosa*), *Prunus prostata*

[用途] Potential aroma compd.

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{20}$ -83.6 (c, 0.5 in MeOH)

-----文献-----

Humpf, H.-U. et al., J. Agric. Food Chem., 1992, 40, 1898, (分離, glycoside)

Bilia, A.R. et al., J. Nat. Prod., 1993, 56, 2142, (分離, H-NMR, C13-NMR)

Otsuka, H. et al., *Phytochemistry*, 1994, 37, 461, (Linarionosides, 分離, H-NMR, C13-NMR)
Lin, T.-C. et al., *Phytochemistry*, 1999, 51, 793, (*Chamaecyparis formosensis* constii)
Ngo, K.-S. et al., *Tetrahedron*, 1999, 55, 759, (*Tsangane* L)

§ **Procyanidin A₁; (2*S*,2'*R*,3*S*,3'*R*,4)-form**

[化学名・別名] Proanthocyanidin A₁. *ent*-Epicatechin-(2 α → 7,4 α → 8)-epicatechin

[CAS No.] 111466-30-9

[化合物分類] フラボノイド (Proanthocyanidin flavonoid), フラボノイド (Biflavonoid and polyflavonoid)

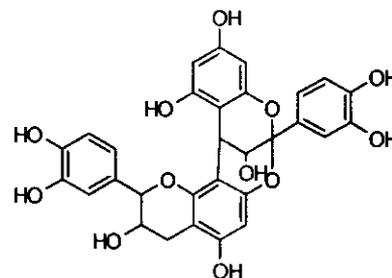
[構造式]

[基原] 次の植物から分離: *Ephedra* sp. また *Prunus spinosa* からも得られる

[性状] 微細結晶・二水和物 (H₂O)

[融点] Mp 300 °C

[比旋光度]: [α]_D²⁶ -111 (c, 1.6 in MeOH)



-----文献-----

Mayer, W. et al., *Tet. Lett.*, 1966, 429, (分離)

Jacques, D. et al., *J.C.S. Perkin 1*, 1974, 2663, (C13-NMR, H-NMR, 構造決定, 成書)

Nonaka, G. et al., *J.C.S. Perkin 1*, 1983, 2139, (合成法, C13-NMR, 成書)

Karchesy, J.J. et al., *J. Agric. Food Chem.*, 1986, 34, 966, (分離)

Nonaka, G. et al., *Chem. Pharm. Bull.*, 1987, 35, 149, (分離, C13-NMR, 構造決定)

Kolodziej, H. et al., *Phytochemistry*, 1991, 30, 2041, (分離)

Baldeacute, A.M. et al., *Phytochemistry*, 1991, 30, 337; 4129, (分離, Pavetannin A₂)

Crespo Irizar, A. et al., *Spectroscopy (Amsterdam)*, 1992, 10, 17, (分離, 絶対構造)

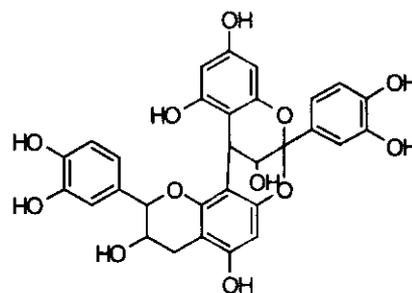
§ **Procyanidin A₁; (2*S*,2'*R*,3*S*,3'*S*,4)-form**

[化学名・別名] Pavetannin A₂. *ent*-Epicatechin-(2 α → 7,4 α → 8)-catechin

[CAS No.] 130853-74-6

[化合物分類] フラボノイド (Biflavonoid and polyflavonoid), フラボノイド (Proanthocyanidin flavonoid)

[構造式]



[基原] 次の植物から分離: *Prunus spinosa*, *Ephedra* sp., *Pavetta owariensis*

-----文献-----

Mayer, W. et al., *Tet. Lett.*, 1966, 429, (分離)

Jacques, D. et al., *J.C.S. Perkin 1*, 1974, 2663, (C13-NMR, H-NMR, 構造決定, 成書)

Ohtsuka, H. et al., *Yakugaku Zasshi*, 1982, 102, 162, (結晶構造)

Nonaka, G. et al., *J.C.S. Perkin 1*, 1983, 2139, (合成法, C13-NMR, 成書)

Van Rooyen, P.H. et al., *S. Afr. J. Chem.*, 1983, 36, 49, (分離, 結晶構造)

Morimoto, S. et al., *Chem. Pharm. Bull.*, 1986, 34, 633; 643, (分離)

Karchesy, J.J. et al., *J. Agric. Food Chem.*, 1986, 34, 966, (分離)

Nonaka, G. et al., *Chem. Pharm. Bull.*, 1987, 35, 149, (分離, C13-NMR, 構造決定)

Kolodziej, H. et al., *Phytochemistry*, 1991, 30, 2041, (分離)

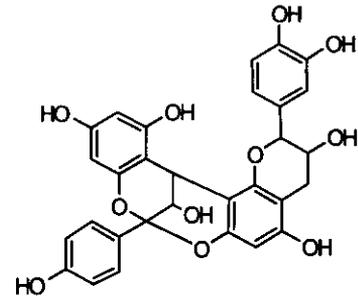
Crespo Irizar, A. et al., *Spectroscopy (Amsterdam)*, 1992, 10, 17, (分離, 絶対構造)

§ **3,4',5,7-Tetrahydroxyflavan (2 → 7,4 → 8)-3,3',5,5',7-pentahydroxyflavan; (2*S*,2'*R*,3*S*,3'*R*,4)-form**

[CAS No.] 148843-32-7

[化合物分類] フラボノイド (Proanthocyanidin flavonoid)

[構造式]



[基原] the branches of *Prunus spinosa*

-----文献-----

Gonzalez Gonzalez, A. et al., Rev. Latinoam. Quim., 1991, 22, 91, (分離)

§ 3,4',5,7-Tetrahydroxyflavone; 3-O- α -L-Arabinofuranoside, 7-O- α -L-rhamnofuranoside

[化学名・別名] Kaempferol 3-arabinofuranoside 7-rhamnofuranoside. Ternoside

[CAS No.] 27509-67-7

[化合物分類] 薬物: 抗炎症薬 (Antiinflammatory agent), フラボノイド (Flavonol; 4 × O-置換基)

[構造式]

[分子式] $C_{26}H_{28}O_{14}$

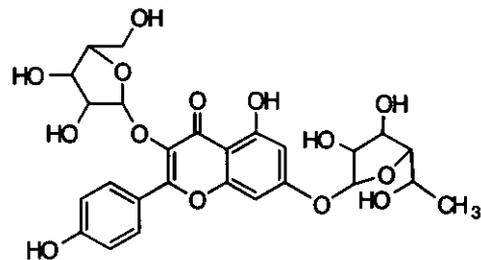
[分子量] 564.499

[正確な分子量] 564.14791

[基原] 次の植物から分離: *Prunus spinosa*

[用途] 強い抗炎症作用。

[Log P 計算値] Log P -3.14 (未確認値) (計算値)



-----文献-----

Makarov, V.A. et al., Khim. Prir. Soedin., 1969, 5, 345, (Ternoside)

Karrer, W. et al., Konstitution und Vorkommen der Organischen Pflanzenstoffe, 2nd edn., Birkhaumluser Verlag, Basel, 1972, nos. 1497; 1498; 1504

Takagi, S. et al., Yakugaku Zasshi, 1977, 97, 1369, (配糖体)

IARC Monog., 1983, 31, 171; Suppl. 7, 65, (毒性, レビュー)

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

§ 3,4',5,7-Tetrahydroxyflavone; 3-O- α -L-Rhamnofuranoside

[化学名・別名] Kaempferol 3-O- α -L-rhamnofuranoside

[CAS No.] 5041-73-6

[化合物分類] フラボノイド (Flavonol; 4 × O-置換基)

[構造式]

[分子式] $C_{27}H_{26}O_{10}$

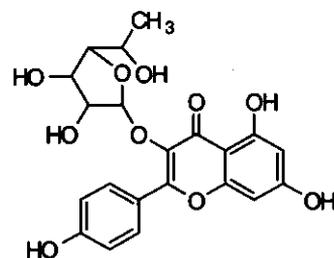
[分子量] 432.383

[正確な分子量] 432.10565

[基原] *Aesculus hippocastanum*, *Carduus nutans*, *Galega* sp., *Prunus spinosa*, *Spiraea* sp.

[融点] Mp 172-175 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D -170$



-----文献-----

Harborne, J.B. et al., Experientia, 1963, 19, 7, (誘導体)

Makarov, V.A. et al., Khim. Prir. Soedin., 1969, 5, 345, (Ternoside)

Karrer, W. et al., Konstitution und Vorkommen der Organischen Pflanzenstoffe, 2nd edn., Birkhaumluser Verlag, Basel, 1972, nos. 1497; 1498; 1504

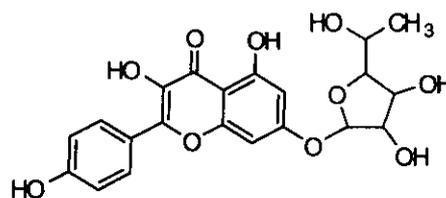
IARC Monog., 1983, 31, 171; Suppl. 7, 65, (毒性, レビュー)

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

§ 3,4',5,7-Tetrahydroxyflavone; 7-O-L-Rhamnofuranoside

[化学名・別名] α -Rhamnorobin. Kaempferol 7-rhamnofuranoside

[CAS No.] 5041-74-7
[化合物分類] フラボノイド (Flavonol; 4 × O-置換基)
[構造式]



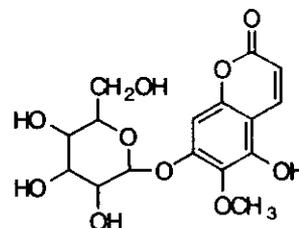
[分子式] C₂₁H₂₀O₁₀
[分子量] 432.383
[正確な分子量] 432.10565
[基原] 次の植物から分離: *Phaseolus atropurpureum*, *Prunus spinosa*, *Robinia* spp., その他
[性状] 淡黄色の針状結晶
[融点] Mp 231-234 °C (222-224 °C)
[比旋光度]: [α]_D -147 (c, 1.04 in EtOH)

-----文献-----

Rahman, W. et al., *Naturwissenschaften*, 1966, 53, 385, (3-rhamnosylglucoside)
Makarov, V.A. et al., *Khim. Prir. Soedin.*, 1969, 5, 345, (Ternoside)
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

§ 5,6,7-Trihydroxy-2H-1-benzopyran-2-one; 6-Me ether, 7-O-β-D-glucopyranoside

[化学名・別名] 7-Glucosyloxy-5-hydroxy-6-methoxycoumarin
[CAS No.] 141238-32-6
[化合物分類] ベンゾピラノイド (5,6,7-Trioxxygenated coumarin)
[構造式]



[分子式] C₁₆H₁₈O₁₀
[分子量] 370.312
[正確な分子量] 370.09
[基原] 次の植物から分離: *Prunus spinosa*
[性状] 結晶
[融点] Mp 135 °C

-----文献-----

Artem'eva, M.V. et al., *Khim. Prir. Soedin.*, 1973, 9, 493; *Chem. Nat. Compd. (Engl. Transl.)*, 1973, 9, 465, (分離)

*****セイボリー (Savory) *****

§ § シソ科キダチハッカ (*Satureia hortensis* L. (*S. laxiflora* C. Koch ; *S. pachyphylla* C. Koch)) の茎葉
または全草。
該当物質なし

§ § シソ科ウインターセイボリー (*Satureia montana* L. (*S. obovata* Lagasca ; *S. illyrica* Host)) の茎葉
または全草。
該当物質なし

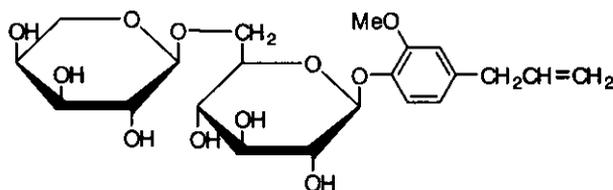
*****セイヨウダイコンソウ (Avens, Herb bennet) *****

§ § バラ科 (*Geum urbanum* L.) の全草。

§ Gein (旧 CAS 名)

[化学名・別名] 2-Methoxy-4-(2-propenyl) phenyl 6-O-α-L-arabinopyranosyl-β-D-glucopyranoside (CAS

名). Geoside. Eugenol vicanoside
 [CAS No.] 585-90-0
 [化合物分類] 炭水化物 (Disaccharide)
 [構造式]
 [分子式] $C_{27}H_{36}O_{11}$
 [分子量] 458.461



[正確な分子量] 458.178815
 [基原] 次の植物の根から分離: *Geum urbanum*
 [用途] Stimulates the growth of *Avena* coleoptile sections
 [融点] Mp 146-147 °C (monohydrate). Mp 183-184 °C (anhyd)
 [比旋光度]: $[\alpha]_D^{20}$ -55 (Me₂CO)

-----文献-----

Herissey, H. et al., C. R. Hebd. Seances Acad. Sci., 1926, 183, 1307
 Chaudhury, D.N. et al., J.C.S., 1949, 2054, (合成法)
 Psenak, M. et al., Planta Med., 1970, 19, 154, (分離)

§ § バラ科 (*Geum rivale* L.) の全草。
 該当物質なし

*****セイヨウナナカマド (Rowan tree, European mountain ash) *****

§ § バラ科西洋ナナカマド (*Sorbus aucuparia* L.) の葉及び果実。

§ 2,3',4',5'-Biphenyltetrol; 3',5'-Di-Me ether

[化学名・別名] 2,4'-Dihydroxy-3',5'-dimethoxybiphenyl. 2'-Hydroxyaucuparin
 [CAS No.] 98211-57-5

[化合物分類] 単環芳香族 (Biphenyl)

[構造式]

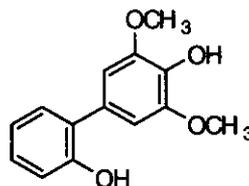
[分子式] $C_{14}H_{10}O_4$

[分子量] 246.262

[正確な分子量] 246.08921

[基原] *Salix caprea*, *Sorbus aucuparia*

[用途] ファイトアレキシン



-----文献-----

Malterud, K.E. et al., Z. Naturforsch., B, 1985, 40, 83, (2'-Hydroxyaucuparin)
 Kokubun, T. et al., Phytochemistry, 1995, 40, 57, (分離)
 Borejsza-Wysocki, W. et al., Phytochemistry, 1999, 50, 231, (分離, H-NMR, C13-NMR, Mas)

§ 2,3',4',5'-Biphenyltetrol; 2,3',5'-Tri-Me ether

[化学名・別名] 2,6-Dimethoxy-4-(2-methoxyphenyl) phenol. 4-Hydroxy-2',3,5-trimethoxybiphenyl.

2-Methoxyaucuparin

[CAS No.] 3810-90-0

[化合物分類] 単環芳香族 (Biphenyl)

[構造式]

[分子式] $C_{15}H_{10}O_5$

[分子量] 260.289

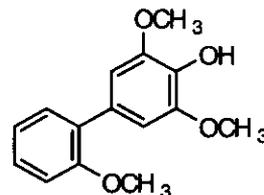
[正確な分子量] 260.10486

[基原] *Sorbus aucuparia* の心材, *Sorbus decora*, *Photinia glabra*

[用途] ファイトアレキシン

[融点] Mp 120-122 °C. Mp 206-207 (178-180 °C) °C で昇華

[UV]: [neutral] λ_{max} 268 (ϵ 12590); 288 () (MeOH) [neutral] λ_{max} 265 (ϵ 12500); 286 (ϵ 9600) (EtOH) [base] λ_{max} 304 () (MeOH-NaOH)



-----文献-----