

Bilia, A.R. et al., J. Nat. Prod., 1994, 57, 333, (Corosolic acid glucosyl ester)

§ 7-Hydroxy-6-methoxy-2H-1-benzopyran-2-one (CAS 名)

[化学名・別名] 7-Hydroxy-6-methoxycoumarin. Scopoletin. Aesculetin 6-methyl ether. Chrysotropic acid. Gelseminic acid. β -Methylaesculetin. Buxuletin. Escopoletin. Scopoletol. Baogongteng B

[CAS No.] 92-61-5

[関連 CAS No.] 13544-37-1, 73435-97-9

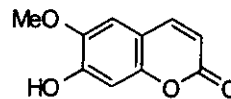
[化合物分類] ベンゾピラノイド (6,7-Dioxygenated coumarin), 薬物: 鎮痙薬 (Antispasmodic)

[構造式]

[分子式] $C_{10}H_8O_4$

[分子量] 192.171

[正確な分子量] 192.04226



[基原] 植物界に広く存在する, 例えば, *Gelsemium sempervirens* の根, *Atropa belladonna*, *Convolvulus scammonia*, *Ipomoea orizabensis*, *Prunus serotina*, *Fabiana imbricata*, また *Diospyros* spp., *Peucedanum* spp., *Heracleum* spp., *Skimmia* spp から得られる. *Angelica acutiloba*

[用途] 鎮痙剤

[性状] 針状結晶もしくはプリズム結晶 (EtOH)

[融点] Mp 204 °C

[溶解性] BERDY SOL: メタノール, クロロホルムに可溶

[Log P 計算値] Log P 1.33 (計算値)

[UV]: [neutral] λ_{max} 229 (ϵ 13800); 252 (ϵ 9120); 260 (sh) (ϵ 8710); 297 (ϵ 9550); 344 (ϵ 13500) (MeOH) [neutral] λ_{max} 230 (); 255 (); 295 (); 345 () (MeOH) [neutral] λ_{max} 228 (ϵ 23000); 254 (ϵ 7600); 297 (ϵ 8700); 345 (ϵ 20500) (EtOH)

[傷害・毒性] 50%致死量 (LD₅₀) (ラット, 経口) 3800 mg/kg

[化学物質毒性データ総覧 (RTEC) 登録番号] GN6930000

-----文献-----

Karrer, W. et al., *Konstitution und Vorkommen der Organischen Pflanzenstoffe*, 2nd edn., Birkhäuser Verlag, Basel, 1972, nos. 1328; 1329, (生育)

Andrianova, V.B. et al., *Khim. Prir. Soedin.*, 1975, 11, 89; *Chem. Nat. Compd. (Engl. Transl.)*, 1975, 11, 91, (Scopoletin, 分離)

RTECS (化学物質毒性データ)

生体影響物質 : 医薬品.

健康障害に関するデータ

急性毒性に関するデータ

<<試験方法>> 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 : 3800 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

AIPTAK Archives Internationales de Pharmacodynamie et de Therapie. (Heymans Institute of Pharmacology, De Pintelaan 185, B-9000 Ghent, Belgium) V.4- 1898- [Vol.,頁,年(19-)] 210,27,1974

<<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 : 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

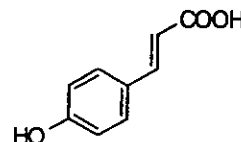
ARZNAD Arzneimittel-Forschung. 医薬品. Research. (Editio Cantor Verlag, Postfach 1255, W-7960 Aulendorf, Fed. Rep. Ger.) V.1- 1951- [Vol.,頁,年(19-)] 18,1330,1968

§ 3-(4-Hydroxyphenyl)-2-propenoic acid; (R)-form

[CAS No.] 501-98-4

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

[構造式]



[基原] 広く植物に存在する, 例えば, *Prunus serotina* の皮, and from *Trifolium pratense*, *Daviesia latifolia*. 多くの配糖体として存在する.

[性状] 結晶・一水和物(冷水), 無水結晶(温水)

[融点] Mp 210-213 °C

[溶解性] エーテル, 熱エタノールに可溶; ベンゼンに難溶; 石油エーテルに不溶; BERDY SOL: メタノール, エーテルに可溶; ヘキサン, クロロホルムに難溶

[PKa 値] pK_{a1} 4.64; pK_{a2} 9.45 (25 °C)

[UV]: [neutral] λ_{max} 225 (); 290 (); 310 () (MeOH) [neutral] λ_{max} 223 (ε 14450); 286 (ε 19000) (EtOH)

[化学物質毒性データ総覧(RTEC)登録番号] GD9095000

-----文献-----

C.Djerassi et al., Dictionary of Natural Products, Chapman, Hall, 2002

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 : 2850 mg/kg

毒性影響 : [行動] 傾眠(全身活動度の低下).
[肺, 胸郭, または呼吸] 呼吸抑制.

参照文献

GNRIDX Gendai no Rinsho. (Tokyo, Japan) V.1-10, 1967-76(?). [Vol., 頁, 年(19-)] 3,675, 1969

<<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 : 1160 mg/kg

毒性影響 : [行動] 傾眠(全身活動度の低下).
[肺, 胸郭, または呼吸] 呼吸抑制.

参照文献

GNRIDX Gendai no Rinsho. (Tokyo, Japan) V.1-10, 1967-76(?). [Vol., 頁, 年(19-)] 3,675, 1969

§ § パラ科チヨークチェリー(*Prunus virginiana* L.) の樹皮。

該当物質なし

*****チガヤ (Chigaya) *****

§ § イネ科チガヤ(*Imperata cylindrica* Beauvois var. *koenigii* Durant et Schinz) の根。

該当物質なし

*****チコリ (Chicory) *****

§ § キク科チコリ(*Cichorium intybus* L.) の根茎を焙煎したもの。

§ Chicoric acid; (2R,3R)-form

[CAS No.] 70831-56-0

[化合物分類] 炭水化物(Aldaric acid)

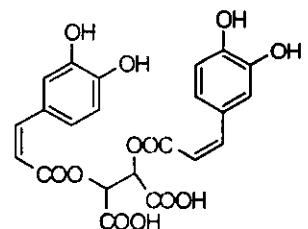
[構造式]

[基原] チコリー(*Cichorium intybu*) と *Cichorium endivia* の葉の成分。

Posidonia oceanica, *Onychium japonicum*, *Echinacea purpurea* に存在する

[性状] 絹のような針状結晶

[融点] Mp 206 °C



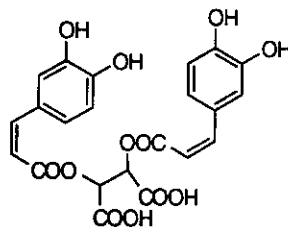
[比旋光度]: $[\alpha]_D -384$ (c, 1.07 in MeOH)
[溶解性]BERDY SOL: メタノール, EtOAc に可溶; 水に難溶
[UV]:[neutral] λ_{max} 318 (MeOH)

-----文献-----

Scarpati, M.L. et al., *Tetrahedron*, 1958, 4, 43, (分離, 構造決定, 合成法)
Woeldecke, M. et al., *Z. Naturforsch., C*, 1974, 29, 360, (分離)
Cariello, L. et al., *Comp. Biochem. Physiol., B: Comp. Biochem.*, 1979, 62, 159, (分離)
Becker, H., *Z. Naturforsch., C*, 1985, 40, 585, (分離)
Soicke, H. et al., *Planta Med.*, 1988, 54, 175, (分離)
Veit, M. et al., *Phytochemistry*, 1991, 30, 527, (分離, 構造決定)

§ Chicoric acid; (2*S*,3)-form

[化合物分類]炭水化物 (Aldaric acid)
[構造式]
[基原]次の植物から分離: チコリー (*Cichorium intybu*)
[性状]針状結晶 (H₂O)
[融点]Mp 206 °C
[比旋光度]: $[\alpha]_D +384$ (c, 1.55 in MeOH)

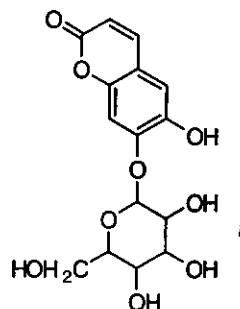


-----文献-----

Scarpati, M.L. et al., *Tetrahedron*, 1958, 4, 43, (分離, 構造決定, 合成法)
Woeldecke, M. et al., *Z. Naturforsch., C*, 1974, 29, 360, (分離)
Cariello, L. et al., *Comp. Biochem. Physiol., B: Comp. Biochem.*, 1979, 62, 159, (分離)
Becker, H., *Z. Naturforsch., C*, 1985, 40, 585, (分離)
Soicke, H. et al., *Planta Med.*, 1988, 54, 175, (分離)
Veit, M. et al., *Phytochemistry*, 1991, 30, 527, (分離, 構造決定)

§ 6,7-Dihydroxy-2*H*-1-benzopyran-2-one; 7-*O*-β-D-Glucopyranoside

[化学名・別名]Cichoriin. 6-Hydroxyskimmmin. Cichotioside
[CAS No.]531-58-8
[化合物分類]ベンゾピラノイド (6,7-Dioxygenated coumarin)
[構造式]
[分子式]C₁₅H₁₆O₉
[分子量]340.286
[正確な分子量]340.079435
[基原]*Fraxinus ornus* と *Solanum pinnatisectum* の花に含まれる。また, *Cichorium ntybus* にも含まれる
[融点]Mp 213-214 °C
[比旋光度]: $[\alpha]_D^{20} -104$ (dioxan)

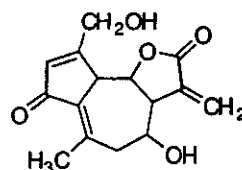


-----文献-----

Karrer, W. et al., *Konstitution und Vorkommen der Organischen Pflanzenstoffe*, 2nd edn., Birkhäuser Verlag, Basel, 1972, nos. 1325-1327, (生育)
Murray, R.D.H. et al., *The Natural Coumarins*, J. Wiley, 1982, (生育, レビュー)
Lewis, R.J., *Sax's Dangerous Properties of Industrial Materials*, 8th edn., Van Nostrand Reinhold, 1992, DRS800

§ 8,15-Dihydroxy-2-oxo-1(10),3,11(13)-guaiatrien-12,6-olide; (5α,6α,8α)-form

[化学名・別名]Lactucin
[CAS No.]1891-29-8
[化合物分類]テルペノイド (12,6-Guaianolide sesquiterpenoid)
[構造式]
[基原]*Lactuca virosa*, *Lactuca serriola*. また *Cichorium intybus* から得られる
[性状]結晶 (Me₂CO)
[融点]Mp 224-228 °C
[比旋光度]: $[\alpha]_D +49$ (c, 0.9 in MeOH)
[UV]:[neutral] λ_{max} 257 (ε 14000) (EtOH)

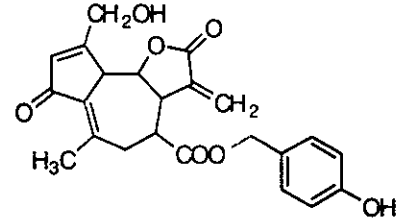


-----文献-----

- Khalil, A.T. et al., *Planta Med.*, 1991, 57, 190, (Lactucin, Lactucopicrin, 11,13-Dihydrolactucopicrin)
 Kisiel, W. et al., *Phytochemistry*, 1997, 45, 365, (*Lactuca tatarica* constit)
 Kisiel, W. et al., *Phytochemistry*, 1997, 46, 1241, (*Lactuca virosa* ester)

§ 8,15-Dihydroxy-2-oxo-1(10),3,11(13)-guaiatrien-12,6-olide; (5 α ,6 α ,8 α)-form, 8-(4-Hydroxyphenylacetyl)

[化学名・別名] Lactupicrin. Lactucopicrin. Intybin
 [CAS No.] 65725-11-3
 [化合物分類] テルペノイド (12,6-Guaianolide sesquiterpenoid)



[構造式]
 [分子式] C₂₃H₃₂O₇
 [分子量] 410.423
 [正確な分子量] 410.136555

[基原] *Lactuca serriola*, *Lactuca floridana*. また *Lactuca virosa*, *Lactuca sativa*, *Cichorium intybus*, *Cichorium endivia*, *Sonchus palustris* から得られる

[融点] Mp 132-178 °C (分解)
 [比旋光度]: [α]_D +73 (Py)

-----文献-----

- Khalil, A.T. et al., *Planta Med.*, 1991, 57, 190, (Lactucin, Lactucopicrin, 11,13-Dihydrolactucopicrin)
 Kisiel, W. et al., *Phytochemistry*, 1997, 45, 365, (*Lactuca tatarica* constit)
 Kisiel, W. et al., *Phytochemistry*, 1997, 46, 1241, (*Lactuca virosa* ester)

§ 3,3',4',5,5',7-Hexahydroxyflavylium (1+); 3,5-Bis-O-(malonyl-β-D-glucopyranoside)

[化学名・別名] Delphinidin 3,5-di(malonylglucoside)
 [CAS No.] 104078-09-3

[化合物分類] フラボノイド (Anthocyanidin and anthocyanins; 6 × O-置換基), フラボノイド (Flavonoid)
 構造は一部又は全てが未知

[構造式] 有効な構造式はない
 [分子式] C₂₃H₃₃O₂₃⁽⁺⁾
 [分子量] 799.626
 [正確な分子量] 799.15692

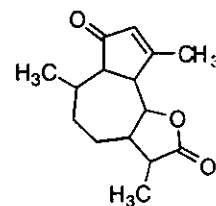
[基原] 次の植物から分離: *Cichorium intybus*

-----文献-----

- Pratt, D.D. et al., *J.C.S.*, 1925, 127, 166, (分離)
 Reynolds, T.M. et al., *J.C.S.*, 1934, 1235, (分離)
 Carmack, M. et al., *J.A.C.S.*, 1959, 81, 4110, (分離)
 Karrer, W. et al., *Konstitution und Vorkommen der Organischen Pflanzenstoffe*, 2nd edn., Birkhäuser Verlag, Basel, 1972, nos. 1727; 1730; 1734; 1735; 1737; 1739, (Delphinidin, Myrtilin B, Hibiscin, Nasunin A, Gentianin, Delphinin)
 Iacobucci, G.A. et al., *Tetrahedron*, 1983, 39, 3005, (レビュー)
 The Flavonoids: *Advances in Research since 1980*, (Ed. Harborne, J.B.), Chapman and Hall, London, 1988
 Norbaek, R. et al., *Phytochemistry*, 1999, 50, 325, (3-glucoside 5-malonylglucoside)

§ 2-Oxo-3-guaien-12,6-olide; (1β,5α,6α,10β,11α)-form

[化学名・別名] Cichoralexin
 [CAS No.] 132296-37-8
 [化合物分類] テルペノイド (12,6-Guaianolide sesquiterpenoid)
 [構造式]



[基原] *Cichorium intybus* へ次の菌を接種: *Pseudomonas cichorii*

[用途] ファイトアレキシン
 [性状] 結晶 (hexane)
 [融点] Mp 145-146 °C
 [UV]: [neutral] λ_{max} 225 (ε 12900) (MeOH)

-----文献-----

Monde, K. et al., *Phytochemistry*, 1990, 29, 3449, (Cichoralexin)
 Banerjee, A.K. et al., *Tetrahedron*, 1993, 49, 4761, (合成法, レビュー)

§ Tartaric acid; (2S,3)-form, Mono-(3,4-dihydroxycinnamoyl)

[化学名・別名] Monocaffeoyl(-)-tartaric acid

[化合物分類] 炭水化物 (Aldaric acid)

[構造式]

[分子式] C₁₅H₁₂O₈

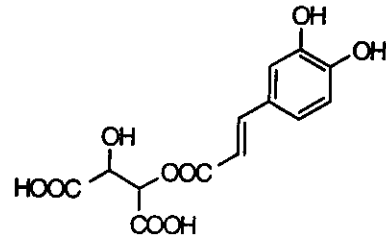
[分子量] 312.232

[正確な分子量] 312.048135

[基原] 次の植物から分離: チコリー (*Cichorium intybu*)

[融点] Mp 146-147 °C

[比旋光度]: [α]_D +37 (H₂O)



-----文献-----

Scarpati, M.L. et al., *Ric. Sci.*, 1960, 30, 1746, (Monocaffeoyl(-) tartaric acid)
 Kirk-Othmer *Encycl. Chem. Technol.*, 4th edn., Wiley, 1991, 13, 1071, (レビュー)
 Bretherick, L., *Handbook of Reactive Chemical Hazards*, 2nd edn., Butterworths, 1979, 486
 Lewis, R.J., *Sax's Dangerous Properties of Industrial Materials*, 8th edn., Van Nostrand Reinhold, 1992, DCH000; TAF750

*****チーズ (Cheese) *****

§ § 家畜の乳汁 (「ミルク」の項参照) を加工して得られたチーズ。

*****チチタケ (Chichitake) *****

§ § ベニタケ科チチタケ (*Lactarius volemus* (Fr.) Fr.) の子実体。

§ D-glycero-D-manno-Heptitol (CAS 名) (旧 CAS 名)

[化学名・別名] D-glycero-D-talo-Heptitol. Volemitol. α-Sedoheptitol. β-Mannoheptitol

[CAS No.] 488-38-0

[関連 CAS No.] 30635-52-0

[化合物分類] 炭水化物 (Higher alditol)

[構造式]

[分子式] C₇H₁₆O₇

[分子量] 212.199

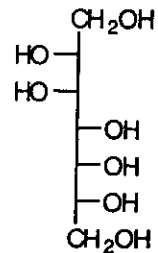
[正確な分子量] 212.089605

[基原] キノコ類: *Lactarius volemus*, in roots of *Primulae* and in lipopolysaccharides from *E. coli*. また紅藻類にも存在する。植物に広く分布する

[性状] 針状結晶 (EtOH)

[融点] Mp 152-153 °C

[比旋光度]: [α]_D²⁰ +2.2 (H₂O)



-----文献-----

La Forge, F.B. et al., *J. Biol. Chem.*, 1917, 30, 61; 1920, 42, 375; 1928, 79, 1, (分離, tribenzylidene)
 Maclay, W.D. et al., *J.O.C.*, 1944, 9, 293, (生育, 合成法, hepta-Ac)
 Merrill, A.T. et al., *J.A.C.S.*, 1947, 69, 70, (合成法, hepta-Ac)
 Adams, G.A. et al., *Can. J. Microbiol.*, 1967, 13, 1605, (分離, ガスクロマト)

§ Volemolide

[化学名・別名] 17R-Methylincisterol

[CAS No.] 125974-96-1

[化合物分類]ステロイド (Ergostane steroids;excluding withanolide and brassinolide) . (C28).

[構造式]

[分子式] $C_{28}H_{44}O_3$

[分子量] 346.509

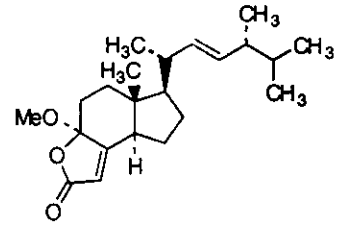
[正確な分子量] 346.250795

[基原] *Lactarius volemus* と海綿: *Dictyonella incisa* の成分

[性状] 針状結晶

[融点] Mp 61-62 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{25} +215$ (c, 0.1 in $CHCl_3$)



-----文献-----

Ciminiello, P. et al., J.A.C.S., 1990, 112, 3505, (分離, UV, IR, H-NMR, C13-NMR, Mas)

Kobata, K. et al., Biosci., Biotechnol., Biochem., 1994, 58, 1542, (分離, H-NMR, C13-NMR)

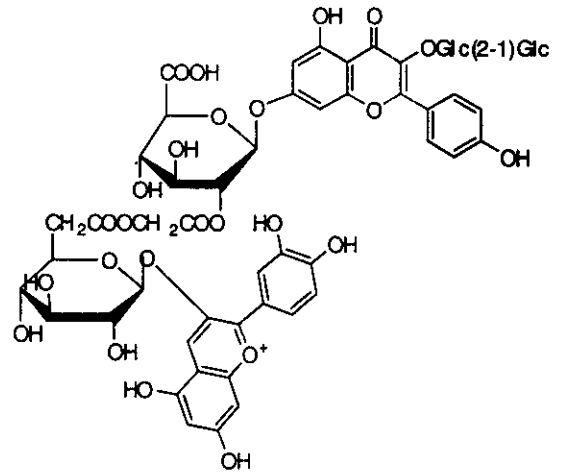
*****チャイブ (Chive) *****

§ § ユリ科エゾネギ (*Allium schoenoprasum* L.) の全草。

§ *Allium schoenoprasum* Anthocyanin-flavonol

[化合物分類]フラボノイド (Anthocyanidin and anthocyanins; 5 × O-置換基), フラボノイド (Flavonol; 4 × O-置換基), フラボノイド (Biflavonoid and polyflavonoid)

[構造式]



[分子式] $C_{57}H_{59}O_{35}^{(+)}$

[分子量] 1304.072

[正確な分子量] 1303.2837

[基原] *Allium schoenoprasum* の花の成分

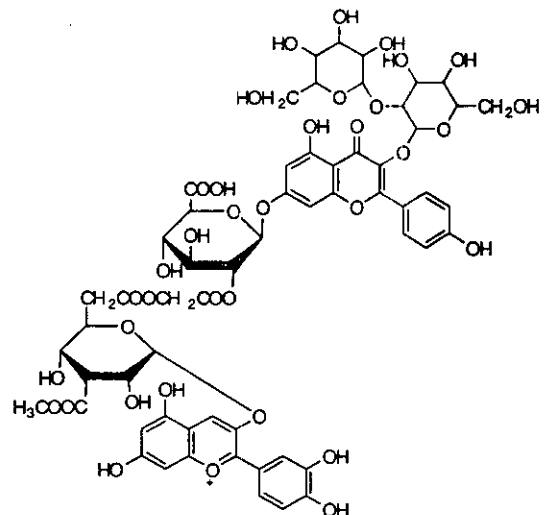
-----文献-----

Fossen, T. et al., Phytochemistry, 2000, 54, 317

§ *Allium schoenoprasum* Anthocyanin-flavonol; 3''-Ac

[化合物分類]フラボノイド (Biflavonoid and polyflavonoid), フラボノイド (Anthocyanidin and anthocyanins; 5 × O-置換基), フラボノイド (Flavonol; 4 × O-置換基)

[構造式]



[分子式] $C_{59}H_{61}O_{36}^{(+)}$

[分子量] 1346.109

[正確な分子量] 1345.294265

[基原] *Allium schoenoprasum* の花の成分

-----文献-----

Fossen, T. et al., *Phytochemistry*, 2000, 54, 317

§ *N,N'*-Bis(γ -glutamyl)-3,3'-(1,2-propylenedithio) dialanine

[化学名・別名] *N,N'*-[Propylenebis[thio(1-carboxyethylene)]] diglutamine

[化合物分類] アミノ酸とペプチド (Miscellaneous modified aminoacid)

[構造式]

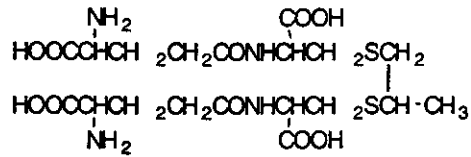
[分子式] $C_{19}H_{32}N_4O_{10}S_2$

[分子量] 540.615

[正確な分子量] 540.155986

[基原] エゾネギ (*Allium schoenoprasum*)

[性状] 結晶 (Me₂CO 溶液)



-----文献-----

Matikkala, E.J. et al., *Acta Chem. Scand.*, 1963, 17, 1799, (分離)

§ *N*- γ -Glutamylcysteine; L-L-form, S-Propyl

[化学名・別名] *N*- γ -Glutamyl-S-propylcysteine

[CAS No.] 91212-00-9

[化合物分類] アミノ酸とペプチド (Dipeptide)

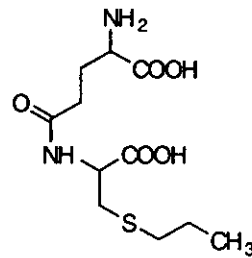
[構造式]

[分子式] $C_{11}H_{20}N_2O_3S$

[分子量] 292.355

[正確な分子量] 292.109293

[基原] 次の植物から分離: *Allium sativum*, *Allium schoenoprasum*



-----文献-----

Matikkala, E.J. et al., *Acta Chem. Scand.*, 1962, 16, 2461; 1963, 17, 1799, (S-propenyl, S-propyl, 分離)

Muetsch-Eckner, M. et al., *Phytochemistry*, 1992, 31, 2389, (分離, 誘導體)

Enneking, D. et al., *Phytochemistry*, 1998, 48, 643, (S-vinyl, 分離)

§ *N*- γ -Glutamylcysteine; L-L-form, S-(2-Propenyl)

[化学名・別名] *N*- γ -Glutamyl-S-allylcysteine

[化合物分類] アミノ酸とペプチド (Dipeptide)

[構造式]

[分子式] $C_{11}H_{18}N_2O_3S$

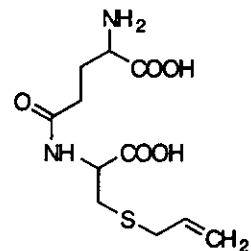
[分子量] 290.34

[正確な分子量] 290.093643

[基原] 次の植物から分離: ニンニク, エゾネギ (*Allium sativum*, *Allium schoenoprasum*)

[融点] Mp 156-158.5 °C で分解

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{25} -17.1$ (H₂O)



-----文献-----

Zacharius, R.M. et al., *Arch. Biochem. Biophys.*, 1958, 73, 281; 1959, 80, 199, (分離, 合成法, 誘導體)

Matikkala, E.J. et al., *Acta Chem. Scand.*, 1962, 16, 2461; 1963, 17, 1799, (S-propenyl, S-propyl, 分離)

Muetsch-Eckner, M. et al., *Phytochemistry*, 1992, 31, 2389, (分離, 誘導體)

Enneking, D. et al., *Phytochemistry*, 1998, 48, 643, (S-vinyl, 分離)

§ *N*- γ -Glutamylcysteine; L-L-form, Disulfide

[化学名・別名] γ -Glutamylcysteine (2 \rightarrow 2') disulfide (CAS 名). *N,N'*-Bis(γ -glutamyl) cystine. *N*- γ

-Glutamylcystine

[CAS No.] 23052-19-9

[化合物分類] アミノ酸とペプチド (Dipeptide)

[構造式]

[分子式] C₁₆H₂₆N₄O₁₀S₂

[分子量] 498.534

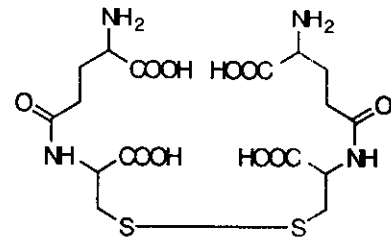
[正確な分子量] 498.109036

[基原] 次の植物から分離: エゾネギ (*Allium schoenoprasum*)

[性状] 結晶 (Me₂CO 溶液) もしくは無定型の粉末

[比旋光度]: [α]_D -120

[その他のデータ] 約 187 °C で分解



-----文献-----

Thompson, G.A., Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A., 1975, 72, 1985, (disulfide)

Aoyagi, Y. et al., Nippon Nogei Kagaku Kaishi, 1980, 54, 283; CA, 93, 68939p, (disulfide)

§ 2-Methyl-2-butenal; (E)-form

[化学名・別名] Tiglic aldehyde. Tiglaldehyde

[CAS No.] 497-03-0

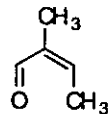
[化合物分類] 脂肪族化合物 (Branched aliphatic aldehyde and ketone), テルペノイド (Hemiterpenoid)

[構造式]

[基原] 次の植物から分離: *Allium schoenoprasum* (エゾネギ)

[沸点] Bp 116.5-117.5 °C. Bp₁₁₉ 63.2-65 °C

[溶解性] 水に難溶



-----文献-----

C.Djerassi et al., Dictionary of Natural Products, Chapman, Hall, 2002

Wahlroos, O. et al., Acta Chem. Scand., 1965, 19, 1327, (分離)

§ 2-Methyl-2-pentenal (CAS 名)

[化学名・別名] 3-Ethyl-2-methylacraldehyde. 2-Propylidenepropionaldehyde

[CAS No.] 623-36-9

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

[構造式]

[分子式] C₆H₁₀O

[分子量] 98.144

[正確な分子量] 98.073165

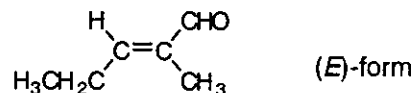
[基原] タマネギ (*Allium cepa*) とエゾネギの葉 (*Allium schoenoprasum*) の成分

[性状] 刺激臭を持つ液体

[その他のデータ] n_D 1.4465

[傷害・毒性] 眼と皮膚を刺激する. 50 % 致死量 (LD₅₀) (ラット, 経口) 4290 mg/kg

[化学物質毒性データ総覧 (RTEC) 登録番号] SB2100000



-----文献-----

C.Djerassi et al., Dictionary of Natural Products, Chapman, Hall, 2002

Virtanen, A.I. et al., Acta Chem. Scand., 1961, 15, 1280; 1965, 19, 1327, (分離)

Lewis, R.J., Sax's Dangerous Properties of Industrial Materials, 8th edn., Van Nostrand Reinhold, 1992, MNJ750

RTECS (化学物質毒性データ)

生体影響物質 : 一時刺激物質

健康障害に関するデータ

皮膚/眼の刺激に関するデータ

<<試験方法>> 標準ドライズ試験.

曝露経路 : 皮膚への塗布

被験動物 : げっ歯類-ウサギ.

投与量・期間 : 500 mg/24 時間

反応の症度 : 中等度.

参照文献

85JCAE "Prehled Prumyslove Toxikologie; Organicke Latky," Marhold, J., Prague, Czechoslovakia, Avicenum, 1986 [Vol.,頁,年(19-)],273,1986

<<試験方法>> 標準ドライブ試験.

曝露経路 : 眼中への塗布
被験動物 : げっ歯類-ウサギ.
投与量・期間 : 20 mg/24 時間
反応の症度 : 軽度

参照文献

85JCAE "Prehled Prumyslove Toxikologie; Organicke Latky," Marhold, J., Prague, Czechoslovakia, Avicenum, 1986 [Vol.,頁,年(19-)],273,1986

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-ラット.
投与量・期間 : 4290 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

AMIHBC AMA Archives of Industrial Hygiene and Occupational Medicine. (Chicago, IL) V.2-10, 1950-54. For publisher information, [Vol.,頁,年(19-)] 10,61,1954

<<試験方法>> LC50 試験 (50%致死濃度試験).

曝露経路 : 吸入.
被験動物 : げっ歯類-ラット.
投与量・期間 : 2000 ppm/4 時間
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

AMIHBC AMA Archives of Industrial Hygiene and Occupational Medicine. (Chicago, IL) V.2-10, 1950-54. For publisher information, [Vol.,頁,年(19-)] 10,61,1954

<<試験方法>> LD50 試験 (50%致死量試験).

曝露経路 : 皮膚への塗布
被験動物 : げっ歯類-ウサギ.
投与量・期間 : 4500 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

AMIHBC AMA Archives of Industrial Hygiene and Occupational Medicine. (Chicago, IL) V.2-10, 1950-54. For publisher information, [Vol.,頁,年(19-)] 10,61,1954

§ 1-Pentanesulfenothioic acid (CAS 名)

[化学名・別名] Pentyl hydrodisulfide

[CAS No.] 86849-52-7

[構造式] $H_3C(CH_2)_4SSH$

[分子式] $C_5H_{12}S_2$

[分子量] 136.282

[基原] *Allium schoenoprasum*

[性状] 液体

-----文献-----

Kameoka, H. et al., Phytochemistry, 1983, 22, 294

*****チャービル (Chervil) *****

§ § セリ科チャービル (*Anthriscus cerefolium* L. Hoffm. (*Scandix cerefolium* Linne ; *Chaerofolium cerefolium* (L.) Schinz)) の茎葉。

該当物質なし

§ § セリ科スイートチャービル (*Myrrhis odorata* (L.) Scopoli) の茎葉。
該当物質なし

*****チャンパカ (Champac) *****

§ § モクレン科キンコウボク (*Michelia champaca* L.) の花, 葉, 樹皮。

§ 4,5-Epoxy-1(10),11(13)-germacradien-12,6-olide; (1(10)*E*,4 α ,5 β ,6 α)-form

[化学名・別名] Parthenolide

[CAS No.] 20554-84-1

[化合物分類] テルペノイド (12,6-Germacranolide sesquiterpenoid), 薬物: 抗腫瘍薬 (Antineoplastic agent), 薬物: 5-ヒドキシトリプトアミン受容体拮抗薬 (5-Hydroxytryptamine receptor antagonist)

[構造式]

[基原] *Chrysanthemum parthenium* (feverfew), *Michelia champaca*

[用途] 抗腫瘍薬

[性状] 結晶 (diisopropyl ether)

[融点] Mp 116.5-117 °C

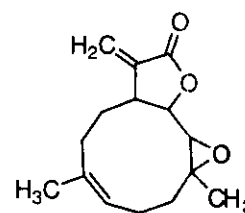
[比旋光度]: $[\alpha]_D^{20}$ -81.4 (c, 1.04 in CHCl₃)

[Log P 計算値] Log P 2.35 (計算値)

[UV]: [neutral] λ_{max} 214 (ϵ 16600) (MeOH)

[傷害・毒性] 変異原性作用を有する

[化学物質毒性データ総覧 (RTEC) 登録番号] LY4220000



-----文献-----

Jacobsson, U. et al., *Phytochemistry*, 1995, 39, 839, (Parthenolide, H-NMR, C13-NMR)

Hendriks, H. et al., *Planta Med.*, 1997, 63, 356, (Parthenolide, 分離)

***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

変異原性に関するデータ

<<試験方法>> DNA 損傷.

試験系 : ヒト HeLa 細胞.

投与量・期間: 202 μ mol/L

参照文献

BCPCA6 *Biochemical Pharmacology*. (Pergamon Press Inc., Maxwell House, Fairview Park, Elmsford, NY 10523) V.1- 1958- [Vol.,頁,年(19-)] 30,3005,1981

<<試験方法>> DNA 阻害.

試験系 : ヒト HeLa 細胞.

投与量・期間: 202 μ mol/L

参照文献

BCPCA6 *Biochemical Pharmacology*. (Pergamon Press Inc., Maxwell House, Fairview Park, Elmsford, NY 10523) V.1- 1958- [Vol.,頁,年(19-)] 30,3005,1981

§ 3-Methyl-4-decen-1-ol; (±)-(E)-form

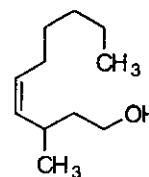
[CAS No.] 24404-71-5

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

[構造式]

[基原] nutmeg (*Mace* sp.), *Michelia champaca*

[性状] オイル



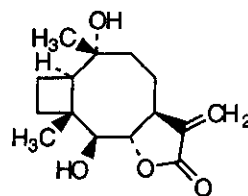
-----文献-----

Schenk, H.P. et al., *J. Chromatogr.*, 1981, 204, 391, (分離)

Kang, S.H. et al., *Nat. Prod. Lett.*, 1996, 9, 13, (合成法)

§ Michampanolide

[CAS No.] 166546-93-6
[化合物分類] テルペノイド (Miscellaneous bicyclic sesquiterpenoid)
[構造式]
[分子式] $C_{15}H_{22}O_4$
[分子量] 266.336
[正確な分子量] 266.15181
[基原] *Michelia champaca*
[性状] 板状結晶 (EtOAc/MeOH)
[融点] Mp 206 °C
[比旋光度]: $[\alpha]_D^{27} -33$ (c, 0.42 in $CHCl_3$)

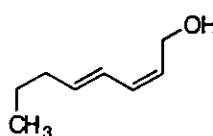


-----文献-----

Jacobsson, U. et al., *Phytochemistry*, 1995, 39, 839, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ 2,4-Octadien-1-ol; (2E,4E)-form

[CAS No.] 18409-20-6
[化合物分類] 脂肪族化合物 (Unbranched alkenic alcohol)
[構造式]
[基原] *Michelia champaca* の花の成分
[性状] Mobile liq. with pleasant fruity odour
[沸点] Bp: 70-73 °C
[屈折率] n_D^{25} 1.4865



-----文献-----

Games, D.E. et al., *Experientia*, 1973, 29, 532, (分離)

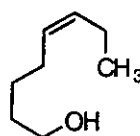
Staddon, B.W. et al., *Comp. Biochem. Physiol., B: Comp. Biochem.*, 1985, 80, 235, (分離, Ac)

Kaiser, R., *J. Essent. Oil Res.*, 1991, 3, 129, (分離)

Bellina, F. et al., *Synth. Commun.*, 1996, 26, 3297, (合成法, H-NMR)

§ 5-Octen-1-ol; (Z)-form

[CAS No.] 64275-73-6
[化合物分類] 脂肪族化合物 (Unbranched alkenic alcohol)
[構造式]
[基原] リンゴ, パナナ, *Michelia champaca*
[沸点] Bp₁₂ 96-98 °C



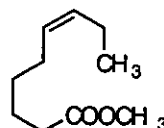
-----文献-----

Yajima, I. et al., *Agric. Biol. Chem.*, 1984, 48, 849, (分離, 合成法, IR, H-NMR, Mas)

Kaiser, R. et al., *J. Essent. Oil Res.*, 1991, 3, 129, (分離)

§ 5-Octen-1-ol; (Z)-form, Ac

[CAS No.] 71978-00-2
[化合物分類] 脂肪族化合物 (Unbranched alkenic acetate)
[構造式]
[分子量] 170.251
[正確な分子量] 170.13068
[基原] パナナ, *Michelia champaca*
[性状] オイル



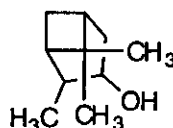
-----文献-----

Yajima, I. et al., *Agric. Biol. Chem.*, 1984, 48, 849, (分離, 合成法, IR, H-NMR, Mas)

Kaiser, R. et al., *J. Essent. Oil Res.*, 1991, 3, 129, (分離)

§ 3-Pinanol; (1S,2R,3R,5R)-form

[化学名・別名] (-)-Pinocamphenol
[CAS No.] 35997-96-7
[化合物分類] 脂肪族化合物 (Branched aliphatic acetate)
[構造式]



[基原] *Hyssopus officinalis* のオイル, *Michelia champaca*, *Perovskia angustifolia* に存在する
[性状] 結晶 (hexane)
[融点] Mp 67 °C
[沸点] Bp 217 °C
[比旋光度]: $[\alpha]_D^{25} -57.2$ (c, 0.33 in MeOH)

-----文献-----

Hückel, W. et al., *Annalen*, 1966, 697, 69, (合成法, 構造, 成書)
Banthorpe, D.V. et al., *Chem. Rev.*, 1966, 66, 643, (レビュー)
Org. Synth., Coll. Vol., 9, 1998, 522, (Isopinocampheol, 合成法, IR, H-NMR, C13-NMR)
Wang, Z.-M. et al., *Tetrahedron: Asymmetry*, 1999, 10, 667, (合成法)

§ § モクレン科ギンコウボク (*Michelia alba de Candolle*) の花, 葉, 樹皮。

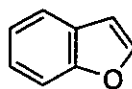
§ Benzofuran (CAS 名)

[化学名・別名] Coumarone. Benzo[b]furan. Benzofurfuran. 1-Oxaindene. 1-Oxindene

[CAS No.] 271-89-6

[化合物分類] ベンゾフラノイド (Benzofuran)

[構造式]



[分子式] C₈H₆O

[分子量] 118.135

[正確な分子量] 118.041865

[基原] *Coix lachryma-jobi*, *Gentiana lutea*, *Michelia alba*, *Trilisa odoratissima*

[性状] オイル

[沸点] Bp₇₃₅ 166.5-168 °C. Bp₈₀ 97.5-99 °C

[濃度] d₄¹⁵ 1.078

[その他のデータ] 水蒸気蒸留で得られる。アルカリで安定し、硫酸によって重合される

[傷害・毒性] 50%致死量 (LD₅₀) (マウス, 腹腔内) 500 mg/kg

[化学物質毒性データ総覧 (RTEC) 登録番号] DF6423800

-----文献-----

Appleton, R.A. et al., *Phytochemistry*, 1971, 10, 447-449, (分離)
Cagniant, P. et al., *Adv. Heterocycl. Chem.*, 1975, 18, 337, (レビュー)
Kreher, R.P. et al., *Chem. Ber.*, 1991, 124, 645, (成書)
Lewis, R.J., *Sax's Dangerous Properties of Industrial Materials*, 8th edn., Van Nostrand Reinhold, 1992, BCK250

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

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 : 500 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

EJMCA5 *European Journal of Medicinal Chemistry--Chimie Therapeutique*. (Editions Scientifiques Elsevier, 29 rue Buffon, F-75005, Paris, France) V.9- 1974- [Vol.,頁,年(19-)]12,383,1977

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 : 経口投与.

被験動物 : げっ歯類-ラット.

投与量・期間 : 7 gm/kg/14 日間間欠投与

毒性影響 : 慢性毒性に関するデータ : 死亡.

参考文献

NTPTR* *National Toxicology Program Technical Report Series*. (Research Triangle Park, NC 27709)

No.206- [Vol.,頁,年(19-)]NTP-TR-370,1989

<<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-ラット.

投与量・期間 : 16250 mg/kg/13 週間間欠投与

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).

[腎臓・尿路・膀胱] 尿細管と糸球体の両方の変化.

参考文献

NTPTR* National Toxicology Program Technical Report Series. (Research Triangle Park, NC 27709)

No.206- [Vol.,頁,年(19-)]NTP-TR-370,1989

<<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 : 32500 mg/kg/13 週間間欠投与

毒性影響 : 慢性毒性に関するデータ : 死亡.

参考文献

NTPTR* National Toxicology Program Technical Report Series. (Research Triangle Park, NC 27709)

No.206- [Vol.,頁,年(19-)]NTP-TR-370,1989

<<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 : 437 mg/kg/14 日間間欠投与

毒性影響 : 慢性毒性に関するデータ : 死亡.

参考文献

NTPTR* National Toxicology Program Technical Report Series. (Research Triangle Park, NC 27709)

No.206- [Vol.,頁,年(19-)]NTP-TR-370,1989

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-ラット.

投与量・期間 : 61800 mg/kg/2 年間継続投与

毒性影響 : [催腫瘍性] RTECS 基準による発がん性.

[腎臓・尿路・膀胱] 腎臓腫瘍.

参考文献

NTPTR* National Toxicology Program Technical Report Series. (Research Triangle Park, NC 27709)

No.206- [Vol.,頁,年(19-)]NTP-TR-370,1989

<<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 : 30900 mg/kg/2 年間継続投与

毒性影響 : [催腫瘍性] RTECS 基準による発がん性.

[胃腸] 腫瘍

[肝臓] 腫瘍.

参考文献

NTPTR* National Toxicology Program Technical Report Series. (Research Triangle Park, NC 27709)

No.206- [Vol.,頁,年(19-)]NTP-TR-370,1989

変異原性に関するデータ

<<試験方法>> 変異原試験-通常の試験法.

曝露経路 : 経口投与.

試験系 : げっ歯類-マウス

投与量・期間 : 100 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-)]343,157,1995

〈〈試験方法〉〉 ほ乳類体細胞の突然変異試験.

試験系 : げっ歯類-マウスリンパ球.

投与量・期間 : 100 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-)]11,91,1988

〈〈試験方法〉〉 姉妹染色分体交換試験

試験系 : げっ歯類-マウス白血球.

投与量・期間 : 199 mg/L

参考文献

NTPTR* National Toxicology Program Technical Report Series. (Research Triangle Park, NC 27709) No.206- [Vol.,頁,年(19-)]NTP-TR-370,1989

*** REVIEWS ***

IARC Cancer Review:Animal Sufficient Evidence

IMEMDT IARC Monographs on the Evaluation of Carcinogenic Risk of Chemicals to Man. (WHO Publications Centre USA, 49 Sheridan Ave., Albany, NY 12210) V.1-1972- [Vol.,頁,年(19-)]63,431,1995

IARC Cancer Review:Human Inadequate Evidence

IMEMDT IARC Monographs on the Evaluation of Carcinogenic Risk of Chemicals to Man. (WHO Publications Centre USA, 49 Sheridan Ave., Albany, NY 12210) V.1-1972- [Vol.,頁,年(19-)]63,431,1995

IARC Cancer Review:Group 2B

IMEMDT IARC Monographs on the Evaluation of Carcinogenic Risk of Chemicals to Man. (WHO Publications Centre USA, 49 Sheridan Ave., Albany, NY 12210) V.1-1972- [Vol.,頁,年(19-)]63,431,1995

§ Salicifoline

[化学名・別名] 3-Hydroxy-4-methoxy- *N,N,N*-trimethylbenzeneethanaminium (CAS 名)

[CAS No.] 6882-07-1

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

[構造式]

[分子式] $C_{12}H_{16}NO_2^{(+)}$

[分子量] 210.295

[正確な分子量] 210.149404

[基原] 次の植物から得られるアルカロイド: *Magnolia grandiflora* の根, *Magnolia kobus*, *Magnolia denudata*, *Magnolia stellata*, *Michelia alba* (モクレン科)

-----文献-----

Tomita, M. et al., *Yakugaku Zasshi*, 1952, 72, 197; 727; 760; 1256.; CA, 47, 1627; 12288; 12409; 48, 2639, (分離, 構造決定, 合成法)

Nakano, T. et al., *Pharm. Bull.*, 1954, 2, 321; 1956, 4, 409

Yang, T.H. et al., *Yakugaku Zasshi*, 1962, 82, 811; CA, 58, 7991, (分離)

§ 2,3,5-Trimethyl-2-cyclopenten-1-one; (±)-form

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

[構造式]

[基原] *Campsis grandiflora* と *Michelia alba* の花と葉のオイルの微量成分.

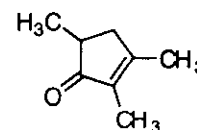
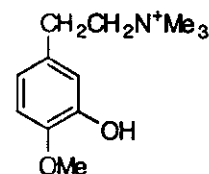
[性状] 液体

[沸点] Bp_{102} 57-58 °C

-----文献-----

Yates, P. et al., *Can. J. Chem.*, 1987, 65, 1695, (合成法, C13-NMR, H-NMR, gc)

Ueyama, Y. et al., *Flavour Fragrance J.*, 1989, 4, 103, (分離)



*****チュペローズ (Tuberose) *****

§ § ヒガンバナ科ゲッカコウ (*Polyanthes tuberosa* L.) の花。
該当物質なし

*****チヨウセンゴミシ (Chosengomishi) *****

§ § マツブサ科チヨウセンゴミシ (*Schisandra chinensis* Baillon) の果実。

§ 1,7(14),10-Bisabolatriene; (-)-form

[CAS No.] 18663-67-7

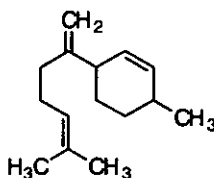
[化合物分類] テルペノイド (Bisabolane sesquiterpenoid)

[構造式]

[基原] *Schisandra chinensis*. Component of Wu Ling Zhi

[比旋光度]: $[\alpha]_D -154.8$ (c, 0.31 in CHCl_3)

[UV]: [neutral] λ_{\max} 206 (ϵ 7800) (hexane)



-----文献-----

Ohta, Y. et al., Tet. Lett., 1968, 1251-1254, (分離)

§ 2,7(14)-Chamigradien-15-al

[化学名・別名] Chamigrenal

[CAS No.] 19912-84-6

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

[構造式]

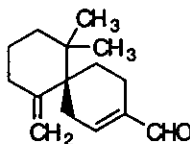
[分子式] $\text{C}_{15}\text{H}_{22}\text{O}$

[分子量] 218.338

[正確な分子量] 218.167065

[基原] *Schisandra chinensis*

[比旋光度]: $[\alpha]_D -80.5$ (c, 0.6 in CHCl_3)



-----文献-----

Ohta, Y. et al., Tet. Lett., 1968, 2483

§ 2,7-Chamigradiene

[化学名・別名] α -Chamigrene

[CAS No.] 19912-83-5

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

[構造式]

[分子式] $\text{C}_{15}\text{H}_{24}$

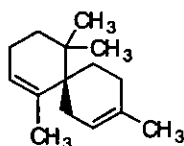
[分子量] 204.355

[正確な分子量] 204.1878

[基原] *Schisandra chinensis*

[性状] オイル

[比旋光度]: $[\alpha]_D -30$ (c 0.36 in CHCl_3)



-----文献-----

Suzuki, M. et al., Tetrahedron, 1979, 35, 823, (絶対構造)

Plamondon, J. et al., Tet. Lett., 1991, 32, 589, (合成法)

Wang, J.J. et al., Chin. Chem. Lett., 1997, 8, 865, (合成法)

§ Rubschisandrin; (-)-form, 3'-O-De-Me

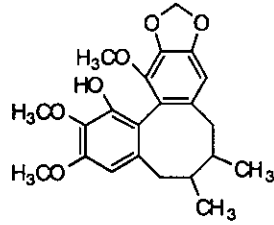
[化学名・別名] Gomisin L1

[CAS No.] 82425-43-2

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

[構造式]

[分子式] C₂₂H₂₆O₆
 [分子量] 386.444
 [正確な分子量] 386.17294
 [基原] 次の植物から分離: *Schisandra chinensis*
 [性状] プリズム結晶 (Et₂O/hexane)
 [融点] Mp 194-196 °C
 [比旋光度]: [α]_D²⁴ -53.5 (c, 1.70 in CHCl₃)

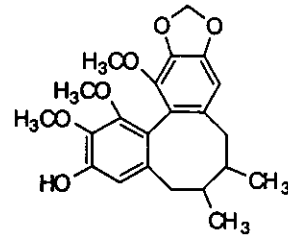


-----文献-----

Ikeya, Y. et al., Chem. Pharm. Bull., 1982, 30, 132, (分離, C13-NMR, 構造決定, CD)
 Tan, R. et al., Planta Med., 1984, 50, 414, (Angeloylgomisin M1)
 Li, N.L. et al., Planta Med., 1985, 51, 297, (分離, Mas)
 Wang, H.-J. et al., Yaoxue Xuebao, 1985, 20, 832, (分離, CD)

§ **Rubschisandrin; (-)-form, 5'-O-De-Me**

[化学名・別名] Gomisin L2
 [CAS No.] 82425-44-3
 [化合物分類] リグナン化合物 (Dibenzocyclooctadiene lignan)
 [構造式]
 [分子式] C₂₂H₂₆O₆
 [分子量] 386.444
 [正確な分子量] 386.17294
 [基原] 次の植物から分離: *Schisandra chinensis*
 [性状] 無定形の粉末
 [比旋光度]: [α]_D²⁴ -98.1 (c, 0.52 in CHCl₃)

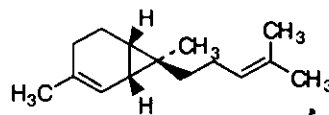


-----文献-----

Ikeya, Y. et al., Chem. Pharm. Bull., 1982, 30, 132, (分離, C13-NMR, 構造決定, CD)
 Tan, R. et al., Planta Med., 1984, 50, 414, (Angeloylgomisin M1)
 Li, N.L. et al., Planta Med., 1985, 51, 297, (分離, Mas)
 Wang, H.-J. et al., Yaoxue Xuebao, 1985, 20, 832, (分離, CD)

§ **Sesquicarene**

[CAS No.] 20479-23-6
 [化合物分類] テルペノイド (Cyclobisabolane sesquiterpenoid)
 [構造式]
 [分子式] C₁₅H₂₄
 [分子量] 204.355
 [正確な分子量] 204.1878
 [基原] *Schisandra chinensis*
 [性状] オイル
 [比旋光度]: [α]_D²⁵ -76.9 (c, 0.82 in CHCl₃)



-----文献-----

Ohta, Y. et al., Tet. Lett., 1968, 1251, (分離, 構造決定)
 Bohlmann, F. et al., Phytochemistry, 1979, 18, 1749, (分離, Isosesquicarene)
 Uyehara, T. et al., Bull. Chem. Soc. Jpn., 1985, 58, 211; 861, (合成法)
 Johnson, C.R. et al., J.O.C., 1987, 52, 1493, (合成法)

*****チラータ (Chirata) *****

§ § リンドウ科チラータ (*Swertia chirata* Buch.-Ham.) の根と茎葉。

§ **Chiratanin**

[CAS No.] 109237-38-9

[化合物分類] 単環芳香族 (Xanthone; 4 × O-置換基)

[構造式]

[分子式] C₃₀H₂₂O₁₃

[分子量] 590.496

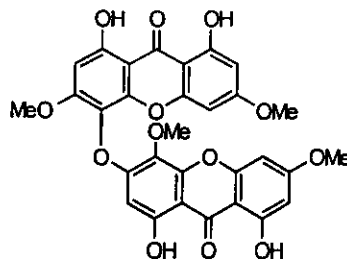
[正確な分子量] 590.106045

[基原] *Swertia chirata*

[性状] 黄色の針状結晶

[融点] Mp 152 °C

[UV]: [neutral] λ_{max} 217 (ε 832000); 256 (ε 372000); 308 (ε 81280); 360 (sh) (ε 16218) (MeOH)



-----文献-----

Mandal, S. et al., Tet. Lett., 1987, 28, 1309

§ 16-Chiraten-3-ol; 3 β-form

[化学名・別名] Chiratenol

[CAS No.] 132865-97-5

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

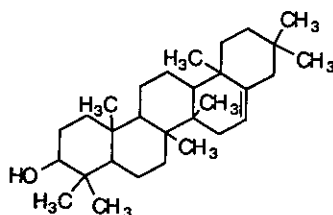
[構造式]

[基原] *Swertia chirata*

[性状] 結晶

[融点] Mp 237-238 °C

[比旋光度]: [α]_D²⁵ +68.7 (c, 0.2 in CHCl₃)



-----文献-----

Chakravarty, A.K. et al., Tet. Lett., 1990, 31, 7649

§ Pichierenol

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

[構造式]

[分子式] C₃₀H₅₀O

[分子量] 426.724

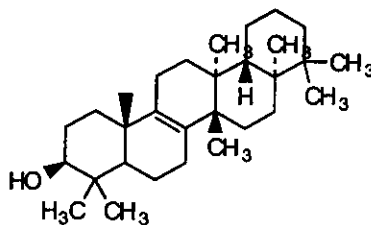
[正確な分子量] 426.386165

[基原] *Swertia chirata*, *Picris hieracioides*

[性状] 結晶

[融点] Mp 248.5-249.5 °C

[比旋光度]: [α]_D -44.3 (CHCl₃)



-----文献-----

Chakravarty, A.K. et al., Indian J. Chem., Sect. B, 1992, 31, 70, (Pichierenol)

Shiojima, K. et al., Chem. Pharm. Bull., 1995, 43, 1634, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ 7,9(11)-Swertadien-3-ol; 3 β-form

[CAS No.] 139339-29-0

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

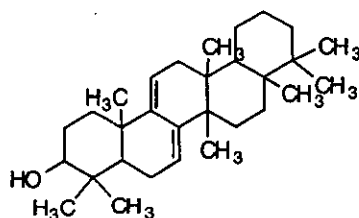
[構造式]

[基原] *Swertia chirata*

[性状] 結晶 (as acetate)

[融点] Mp 230-231 °C (Ac)

[比旋光度]: [α]_D -160.8 (c, 0.2 in CHCl₃) (Ac)

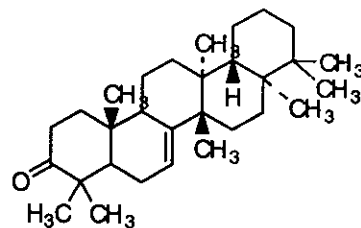


-----文献-----

Chakravarty, A.K. et al., Indian J. Chem., Sect. B, 1992, 31, 70, (分離, H-NMR)

§ Swertanone

[CAS No.] 121703-52-4
 [化合物分類]テルペノイド (Miscellaneous triterpenoid)
 [構造式]
 [分子式] $C_{30}H_{48}O$
 [分子量] 424.709
 [正確な分子量] 424.370515
 [基原] *Swertia chirata*
 [性状] 結晶
 [融点] Mp 270-272 °C
 [比旋光度]: $[\alpha]_D^{25} -98.12$

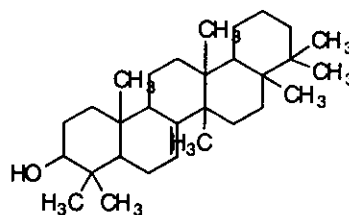


-----文献-----

Chakravarty, A.K. et al., Chem. Comm., 1989, 438, (分離, H-NMR, C13-NMR, 結晶構造)
 Chakravarty, A.K. et al., Phytochemistry, 1991, 30, 4087, (Swertenol)
 Shiojima, K. et al., Chem. Pharm. Bull., 1995, 43, 1634, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ Swertanone; 3 α -Alcohol

[化学名・別名] Swertenol
 [化合物分類]テルペノイド (Miscellaneous triterpenoid)
 [構造式]
 [分子式] $C_{30}H_{50}O$
 [分子量] 426.724
 [正確な分子量] 426.386165
 [基原] *Swertia chirata*
 [性状] 結晶 (CHCl₃/petrol)
 [融点] Mp 270-272 °C

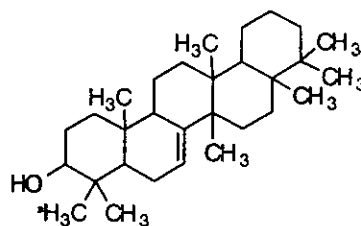


-----文献-----

Chakravarty, A.K. et al., Phytochemistry, 1991, 30, 4087, (Swertenol)

§ Swertanone; 3 β -Alcohol

[CAS No.] 121703-53-5
 [化合物分類]テルペノイド (Miscellaneous triterpenoid)
 [構造式]
 [分子式] $C_{30}H_{50}O$
 [分子量] 426.724
 [正確な分子量] 426.386165
 [基原] *Swertia chirata*
 [性状] 結晶 (CHCl₃/petrol)
 [比旋光度]: $[\alpha]_D -69$ (c, 0.38 in CHCl₃)

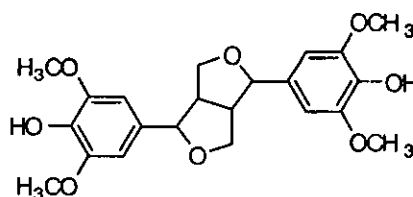


-----文献-----

Chakravarty, A.K. et al., Chem. Comm., 1989, 438, (分離, H-NMR, C13-NMR, 結晶構造)
 Chakravarty, A.K. et al., Phytochemistry, 1991, 30, 4087, (Swertenol)
 Shiojima, K. et al., Chem. Pharm. Bull., 1995, 43, 1634, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ Syringaresinol; (-)-form

[CAS No.] 6216-81-5
 [化合物分類]リグナン化合物 (Simple furofuranoid lignan)
 [構造式]
 [基原] 次の植物から分離: *Swertia chirata*
 [性状] プリズム結晶
 [融点] Mp 185-186 °C (175-176 °C)
 [比旋光度]: $[\alpha]_D -5.2$ (CHCl₃)
 [UV]: [neutral] λ_{max} 206 (); 220 (); 271 () (MeOH)



-----文献-----

Kinjo, J. et al., Chem. Pharm. Bull., 1991, 39, 1623, ((-)-Syringaresinol glycoside)
 hakravarty, A.K. et al., Indian J. Chem., Sect. B, 1994, 33, 405, (分離, (-)-form)

Das, B. et al., *Fitoterapia*, 1999, 70, 101, (Syringaresinol, H-NMR)

§ § リンドウ科センブリ (*Swertia japonica* Makino) の根と茎葉。

§ 1,2,3,5-Benzenetetro; 1,3-Di-Me ether, 2-O-β-D-glucopyranoside

[化学名・別名] 4-Hydroxy-2,6-dimethoxyphenyl glucoside. Leonuriside A

[CAS No.] 121748-12-7

[化合物分類] 単環芳香族 (Simple phenol), 炭水化物 (Disaccharide)

[構造式]

[分子式] C₁₄H₂₀O₉

[分子量] 332.307

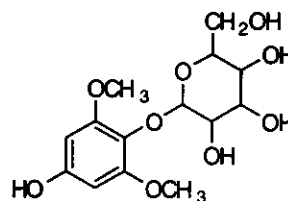
[正確な分子量] 332.110735

[基原] *Coix lachryma-jobi*, *Leonurus japonicus*, *Prunus* sp., *Salix sachalinensis*, *Swertia japonica*

[性状] 針状結晶 (Me₂CO 溶液)

[融点] Mp 232-234 °C

[比旋光度]: [α]_D²⁵ -44.4 (c, 0.2 in Me₂CO/MeOH)



-----文献-----

Otsuka, H. et al., *Phytochemistry*, 1989, 28, 883; 1990, 29, 3823, (Leonuriside A)

Sugaya, K. et al., *CA*, 1999, 130, 279238e, (Leonuriside A)

§ Erythrocentaurin

[化学名・別名] 3,4-Dihydro-1-oxo-1H-2-benzopyran-5-carboxaldehyde.

3,4-Dihydro-5-isocoumarincarboxaldehyde. 5-Formyl-1,2-dihydroisocoumarin

[CAS No.] 50276-98-7

[化合物分類] ベンゾピラノイド (Isocoumarin)

[構造式]

[分子式] C₁₀H₈O₃

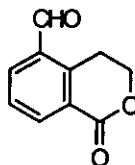
[分子量] 176.171

[正確な分子量] 176.047345

[基原] *Anthocleista ambesiaca*, *Swertia japonica*

[性状] 結晶

[融点] Mp 140-141 °C



-----文献-----

Kubota, T. et al., *Chem. Ind. (London)*, 1958, 230, (分離, 構造決定)

Wenkert, E. et al., *J.O.C.*, 1964, 29, 2534, (合成法)

Chapelle, J.P., *Phytochemistry*, 1973, 12, 1191, (分離)

§ 3-Ethenyl-3,4-dihydro-2H-pyran-4-ethanol; (3R,4R)

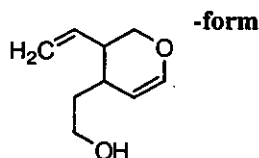
[化学名・別名] Swertiol

[CAS No.] 88806-69-3

[化合物分類] 含酸素複素環式化合物 (Pyran)

[構造式]

[基原] *Swertia japonica*



-----文献-----

Sakai, T. et al., *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, 1983, 56, 3477, (分離, H-NMR, C13-NMR, 構造決定)

§ 3-Ethenyl-3,4-dihydro-2H-pyran-4-ethanol; (3S,4R)-form

[化学名・別名] Isoswertiol

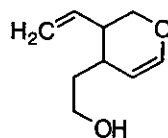
[CAS No.] 88806-68-2

[化合物分類] 含酸素複素環式化合物 (Pyran)

[構造式]

[基原] *Swertia japonica*

[比旋光度]: [α]_D²⁵ +54.2 (c, 0.66 in MeOH)



-----文献-----

Sakai, T. et al., Bull. Chem. Soc. Jpn., 1983, 56, 3477, (分離, H-NMR, C13-NMR, 構造決定)

§ Loganic acid; 7-Epimer, 7-O-(3-hydroxybenzoyl)

[化学名・別名] Swertiaside A. Swertiaside

[CAS No.] 96087-14-8

[化合物分類] テルペノイド (Iridoid monoterpeneoid)

[構造式]

[分子式] $C_{23}H_{28}O_{12}$

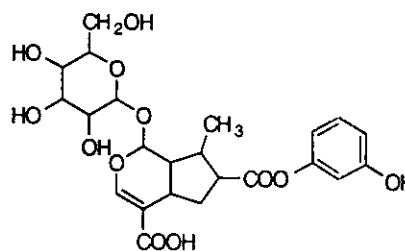
[分子量] 496.467

[正確な分子量] 496.15808

[基原] *Swertia japonica*

[性状] 無定型

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{25} -109.1$ (c, 3.17 in MeOH)



-----文献-----

Birch, A.J. et al., J.C.S., 1961, 1407, (構造決定)

Bentley, T.W. et al., J.C.S. (C), 1967, 2234, (Mas)

Ikeshiro, Y. et al., Planta Med., 1984, 50, 485; 1987, 158, (Swertiaside A, Senburiside II)

§ Loganic acid; 7-Epimer, 7-O-3-[(3-hydroxybenzoyl) oxy] benzoyl

[化学名・別名] Senburiside II

[CAS No.] 109770-92-5

[化合物分類] テルペノイド (Iridoid monoterpeneoid)

[構造式]

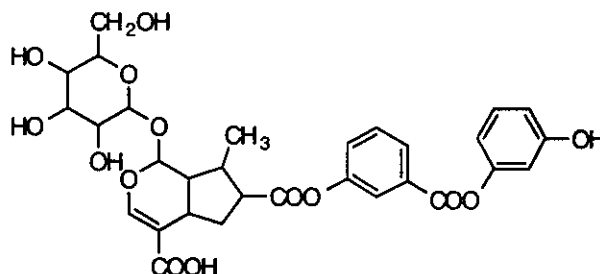
[分子式] $C_{30}H_{32}O_{14}$

[分子量] 616.574

[正確な分子量] 616.17921

[基原] *Swertia japonica*

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{25} -88.6$ (c, 0.79 in MeOH)



-----文献-----

Ikeshiro, Y. et al., Planta Med., 1984, 50, 485; 1987, 158, (Swertiaside A, Senburiside II)

§ Senburiside I

[CAS No.] 100648-42-8

[化合物分類] テルペノイド (Iridoid monoterpeneoid)

[構造式]

[分子式] $C_{34}H_{38}O_{16}$

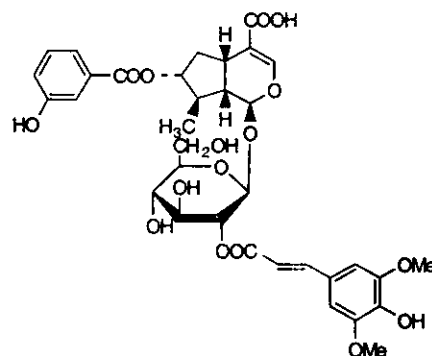
[分子量] 702.665

[正確な分子量] 702.21599

[基原] *Swertia japonica*

[性状] 無定型

[比旋光度]: $[\alpha]_D -93.9$ (MeOH)



-----文献-----

Ikeshiro, Y. et al., Planta Med., 1985, 51, 390, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ Sweroside

[CAS No.] 14215-86-2

[化合物分類] テルペノイド (Secoiridoid monoterpeneoid)

[構造式]

[分子式] $C_{16}H_{22}O_9$

[分子量] 358.344

[正確な分子量] 358.126385

[基原] *Swertia japonica*, *Gentiana rhodantha*

[性状] 粉末

[融点] Mp 106-109 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{26} -236$ (H₂O). $[\alpha]_D^{25} -157.6$ (c, 8.5 in MeOH)

