

[化学名・別名] Camelliagenin A. Barrigenol A. Theasapogenol D.
Camelliasapogenol I. Dihydropriverogenin A. Proschwalligenin PA₂.
Theasapogenin I

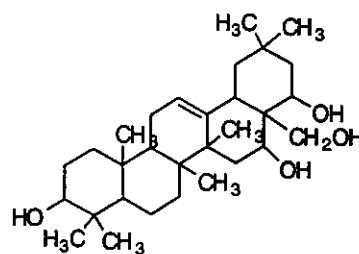
[CAS No.] 53227-91-1
[化合物分類] テルペノイド (Oleanane triterpenoid)
[構造式]

[基原] 次の植物から得られるサポゲニン: *Camellia japonica* の種子,
Pittosporum brevicalyx, *Schima wallichii*, その他

[性状] 結晶

[融点] Mp 290-293 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{20} +20$ (EtOH)



-----文献-----

Ogino, T. et al., Chem. Pharm. Bull., 1968, 16, 1846, (Camelliagenin A 16-cinnamate)

Higuchi, R. et al., Phytochemistry, 1983, 22, 1235, (16-O-Acetylcamelliagenin A)

Yoshikawa, M. et al., Chem. Pharm. Bull., 1996, 44, 1899; 1998, 46, 1102, (Camelliasaponins, Alternoside)

§ 12-Oleanene-3,16,22,28-tetrol; (3 β,16 α,22 α)-form, 22-Angeloyl, 3-O- [β-D-galactopyranosyl-(1 → 2)- [β-D-glucopyranosyl-(1 → 2)- α-L-arabinopyranosyl-(1 → 3)]- β-D-glucuronopyranoside]

[化学名・別名] Camelliasaponin A₁

[CAS No.] 183020-18-0

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

[構造式]

[分子式] C₅₈H₉₂O₂₅

[分子量] 1189.35

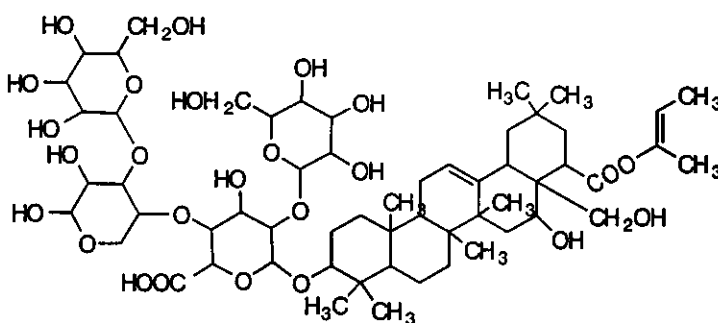
[正確な分子量] 1188.592775

[基原] *Camellia japonica*

[性状] 結晶 (MeOH 溶液)

[融点] Mp 185.8-187 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{25} +22.9$ (c, 0.2 in MeOH)



-----文献-----

Higuchi, R. et al., Phytochemistry, 1983, 22, 1235, (16-O-Acetylcamelliagenin A)

Yoshikawa, M. et al., Chem. Pharm. Bull., 1996, 44, 1899; 1998, 46, 1102, (Camelliasaponins, Alternoside)

§ 12-Oleanene-3,16,22,28-tetrol; (3 β,16 α,22 α)-form, 22-Tigloyl, 3-O- [β-D-galactopyranosyl-(1 → 2)- [β-D-glucopyranosyl-(1 → 2)- α-L-arabinopyranosyl-(1 → 3)]- β-D-glucuronopyranoside]

[化学名・別名] Camelliasaponin A₂

[CAS No.] 183183-15-5

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

[構造式]

[分子式] C₅₈H₉₂O₂₅

[分子量] 1189.35

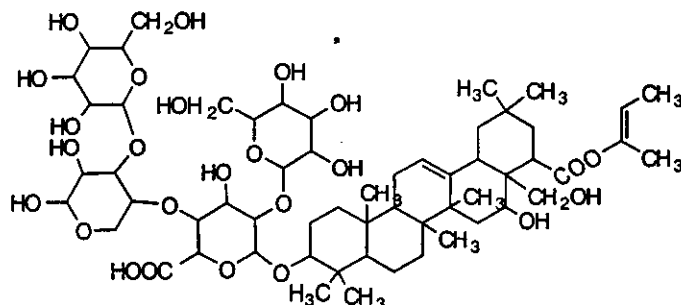
[正確な分子量] 1188.592775

[基原] *Camellia japonica*

[性状] 結晶 (MeOH 溶液)

[融点] Mp 215.3-217.2 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{25} +8$ (c, 1 in MeOH)



-----文献-----

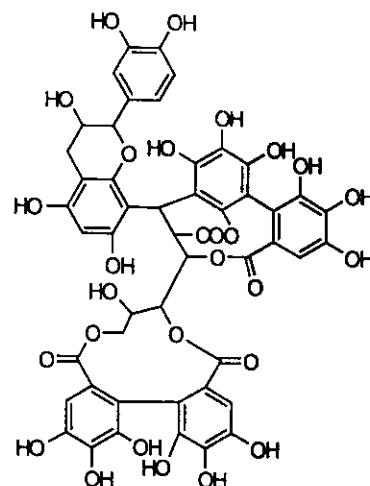
Ogino, T. et al., Chem. Pharm. Bull., 1968, 16, 1846, (Camelliagenin A 16-cinnamate)

Higuchi, R. et al., Phytochemistry, 1983, 22, 1235, (16-O-Acetylcamelliagenin A)

Yoshikawa, M. et al., Chem. Pharm. Bull., 1996, 44, 1899; 1998, 46, 1102, (Camelliasaponins, Alternoside)

§ Stenophyllanin C; 3'-Epimer

[化学名・別名] Camelliatannin A
 [CAS No.] 138256-93-6
 [化合物分類] フラボノイド (Flavan-3-ol), タンニン化合物
 (Dehydrohexahydroxydiphenoyl ester tannin)
 [構造式]



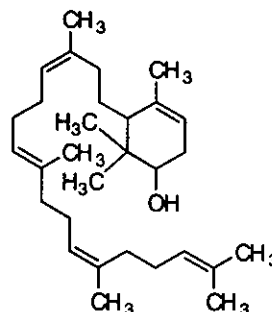
[分子式] $C_{49}H_{36}O_{27}$
 [分子量] 1056.807
 [正確な分子量] 1056.144405
 [基原] 次の植物の葉から分離: *Camellia japonica*
 [性状] 灰白色の粉末・七水和物
 [比旋光度]: $[\alpha]_D^{20} +68$ (c, 1.2 in MeOH)

-----文献-----

Nonaka, G.-I. et al., J.C.S. Perkin 1, 1985, 163, (構造決定, H-NMR, C13-NMR)
 Nonaka, G.-I. et al., Chem. Pharm. Bull., 1990, 38, 2151, (絶対構造)
 Tanaka, T. et al., Chem. Pharm. Bull., 1992, 40, 2092, (Guajavin A)
 Tanaka, T. et al., Chem. Pharm. Bull., 1993, 41, 1708, (Strobilanin)

§ § ツバキ科サザンカ (*Camellia sasanqua* Thunberg) の花または種子。

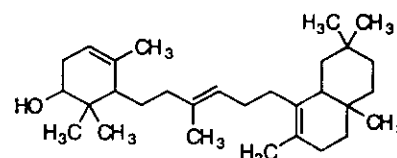
§ Achilleol A; $\Delta^{1(10)}$ -Isomer
 [化学名・別名] Camelliol C
 [CAS No.] 220359-76-2
 [化合物分類] テルペノイド (Miscellaneous triterpenoid)
 [構造式]
 [分子式] $C_{30}H_{50}O$
 [分子量] 426.724
 [正確な分子量] 426.386165
 [基原] サザンカオイル (*Camellia sasanqua*)
 [性状] ガム
 [比旋光度]: $[\alpha]_D^{25} -12.9$ (c, 0.2 in $CHCl_3$)



-----文献-----

Barrero, A.F. et al., Tet. Lett., 1989, 30, 3351, (Achilleol A)
 Barrero, A.F. et al., Phytochemistry, 1998, 48, 1237, (ester)
 Akihisa, T. et al., J. Nat. Prod., 1999, 62, 265, (Camelliol C)
 Joubert, B.M. et al., Org. Lett., 2000, 2, 339, (生合成)

§ Achilleol B; $\Delta^{1(10)}$ -Isomer, 18-epimer
 [化学名・別名] Camelliol A
 [CAS No.] 220359-69-3
 [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] サザンカオイル (*Camellia sasanqua*)
 [性状] ガム
 [比旋光度]: $[\alpha]_D^{25} +4$ (c, 0.2 in $CHCl_3$)



-----文献-----

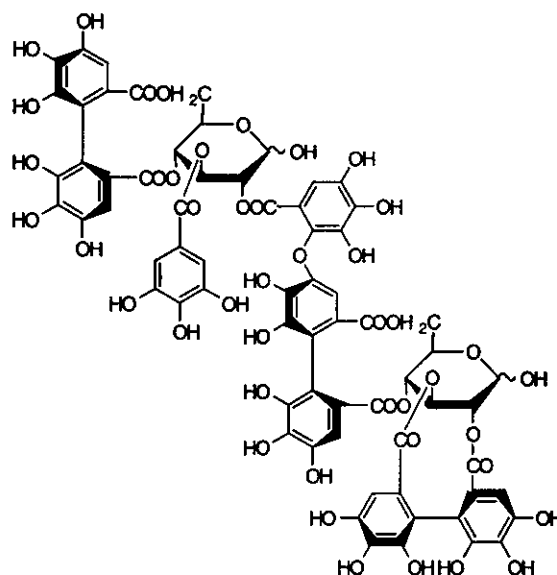
Barrero, A.F. et al., Tetrahedron, 1990, 46, 8161, (分離, IR, H-NMR, C13-NMR, Mas)
 Akihisa, T. et al., J. Nat. Prod., 1999, 62, 265, (Camelliol A)

§ Camelliin A

[CAS No.] 132731-66-9

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

[構造式]



[分子式] $C_{68}H_{46}O_{44}$

[分子量] 1569.101

[正確な分子量] 1568.15186

[一般的性質] 等量の α -, β -anomer の混合物

[基原] 次の植物の花蕾から分離: *Camellia japonica*,

Camellia sasanqua

[性状] 淡褐色の無定型粉末・十水和物

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{20} +53$ (c, 0.5 in MeOH)

-----文献-----

Yoshida, T. et al., Chem. Pharm. Bull., 1990, 38, 2681, (構造決定, CD, H-NMR, C13-NMR)

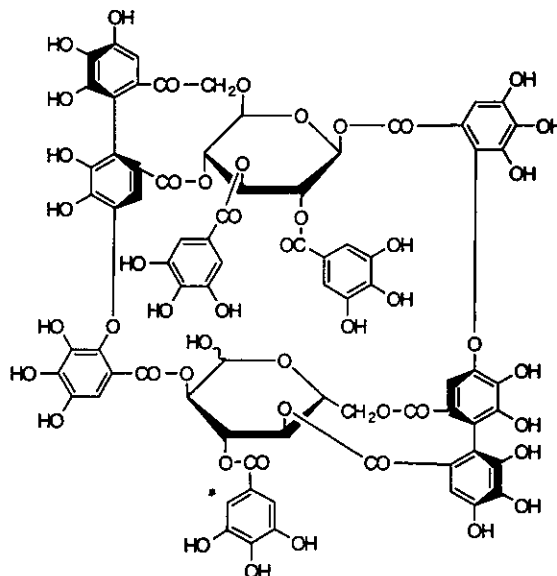
Yoshida, T. et al., Phytochemistry, 1994, 37, 241, (Camellioferin A)

§ Camelliin B

[CAS No.] 126347-60-2

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

[構造式]



[分子式] $C_{75}H_{52}O_{48}$

[分子量] 1721.207

[正確な分子量] 1720.16282

[一般的性質] 等量の α -, β -anomer の混合物 (4:1)

[基原] 次の植物から分離: *Camellia japonica* と *Camellia sasanqua* の花蕾, *Schima wallichii* のドライフラワー

[性状] 灰白色の無定型粉末・十五水和物

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{20} -24$ (c, 0.8 in MeOH)

[UV]: [neutral] λ_{max} 224 (ϵ 115000); 276 (ϵ 60000) (MeOH)

-----文献-----

Yoshida, T. et al., Chem. Pharm. Bull., 1989, 37, 3174; 1990, 38, 1211; 2681; 1991, 39, 2247, (分離, UV, CD, H-NMR, C13-NMR, 薬理)

§ Camelliol B

[CAS No.] 220359-72-8

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

[構造式]

[分子式] $C_{30}H_{52}O$

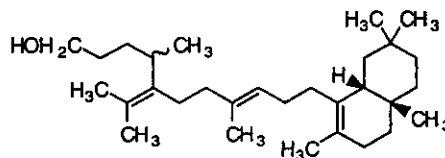
[分子量] 428.74

[正確な分子量] 428.401815

[基原] サザンカオイル (*Camellia sasanqua*)

[性状] ガム

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{25} +1.7$ (c, 0.4 in $CHCl_3$)



[その他のデータ] 化学構造は Achilleol B と似ている

-----文献-----

Akihisa, T. et al., J. Nat. Prod., 1999, 62, 265, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ Helianol; 20-Epimer

[化学名・別名] 19(10 → 9)-Abeo-3,4-secoeupha-4,24-dien-3-ol. Isohelianol

[CAS No.] 203570-12-1

[化合物分類] テルペノイド (Tirucallane/euphane triterpenoid)

[構造式]

[分子式] C₃₀H₅₂O

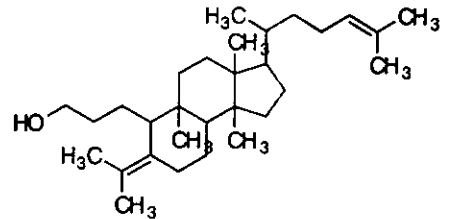
[分子量] 428.74

[正確な分子量] 428.401815

[基原] *Camellia sasanqua*

[性状] 無定型の塊

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{25} +34.6$ (c, 0.3 in CHCl₃)



-----文献-----

Akihisa, T. et al., Chem. Pharm. Bull., 1996, 44, 1255, (分離, H-NMR, C13-NMR)

Akihisa, T. et al., J. Nat. Prod., 1998, 61, 409, (分離, H-NMR, C13-NMR, 構造決定)

§ 2-Methoxy-4-(2-propenyl) phenol; O- $[\beta$ -D-Xylopyranosyl-(1 → 6)- β -D-glucopyranoside]

[化学名・別名] Sasanquin. Eugenol β -primeveroside

[CAS No.] 18604-54-1

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

[構造式]

[分子式] C₂₁H₃₀O₁₁

[分子量] 458.461

[正確な分子量] 458.178815

[基原] 次の植物から分離: *Camellia sasanqua* の葉, *Camellia hiemalis*, *Camellia vernalis*, *Camellia japonica*

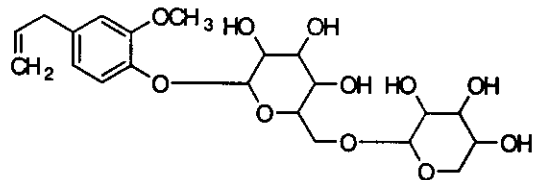
[性状] 針状結晶

[融点] Mp 200-201 °C (197-198 °C)

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{25} -82.5$ (c, 1.7 in H₂O)

[溶解性] 水に極めて易溶

[その他のデータ] 苦味を呈する



-----文献-----

Yamada, T. et al., Agric. Biol. Chem., 1967, 31, 85; 1076, (Sasanquin)

Parks, C.R. et al., CA, 1981, 95, 93943j, (Sasanquin)

IARC Monog., 1985, 36, 75; Suppl., 7, 63, (レビュー, 毒性)

Lewis, R.J., Food Additives Handbook, Van Nostrand Reinhold International, New York, 1989, EQR500; EQS000

§ 12-Oleanene-3,16,21,22,23,28-hexol; (3 β , 16 α , 21 β , 22 α)-form, 23-Aldehyde

[化学名・別名] 3 β , 16 α , 21 β , 22 α , 28-Pentahydroxy-12-oleanen-23-al. Theasapogenol E. Camelliagenin E

[CAS No.] 15399-41-4

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

[構造式]

[分子式] $C_{30}H_{48}O_6$

[分子量] 504.706

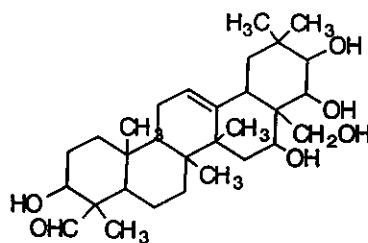
[正確な分子量] 504.34509

[基原] 次の植物から得られるサポゲニン: *Thea sinensis* の種子,
Camellia sasanqua, *Polemonium* spp., その他の植物

[性状] 結晶

[融点] Mp 270-273 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D +640$ (Py)



-----文献-----

Yosioka, I. et al., Chem. Pharm. Bull., 1971, 19, 1186, (Theasapogenol E)

Kitagawa, I. et al., Chem. Pharm. Bull., 1998, 46, 1901, (Theasaponins E₁ and E₂)

§ 12-Oleanene-3,16,21,22,24,28-hexol; (3 β,16 α,21 β,22 α)-form, 24-Aldehyde

[化学名・別名] 3,16,21,22,28-Pentahydroxy-12-oleanen-24-al. Camelliagenin D

[CAS No.] 25122-87-6

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

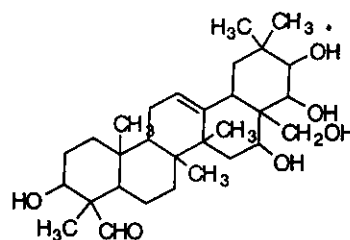
[構造式]

[基原] 次の植物の種子から分離: *Camellia sinensis*, *Camellia sasanqua*

[性状] 結晶

[融点] Mp 250-258 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D +39.2$



-----文献-----

Ito, S. et al., Tet. Lett., 1967, 1127, (Camelliagenin D)

Tetenyi, P. et al., Plant. Med. Phytother., 1977, 11, 158; 174, (Escin, 薬理, レビュー)

Annoni, F. et al., Arzneimittel-Forsch., 1979, 29, 672, (薬理, 毒性)

Lewis, R.J., Sax's Dangerous Properties of Industrial Materials, 8th edn., Van Nostrand Reinhold, 1992, EDK875

§ 12-Oleanene-3,16,22,23,28-pentol; (3 β,16 α,22 α)-form, 23-Aldehyde

[化学名・別名] 3 β,16 α,22 α,28-Tetrahydroxy-12-oleanen-23-al. Camelliagenin B. Camelliasapogenol II

[CAS No.] 14511-74-1

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

[構造式]

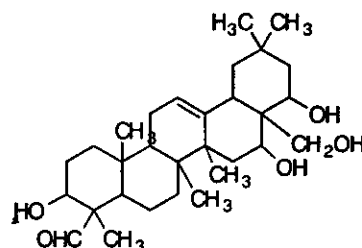
[基原] 次の植物から得られるサポゲニン: *Camellia japonica* の種子,

Camellia sasanqua

[性状] 結晶

[融点] Mp 200-205 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D +48$



-----文献-----

Yoshikawa, M. et al., Chem. Pharm. Bull., 1994, 42, 743; 1996, 44, 1899, (Camelliasaponin)

§ 12-Oleanene-3,22,28-triol; (3 β,22 α)-form

[化学名・別名] 22 α-Hydroxyerythrodiol

[CAS No.] 20475-26-7

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

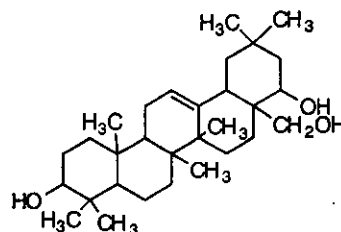
[構造式]

[基原] *Camellia sasanqua*, *Harpullia pendula*, *Eryngium maritimum*

[性状] 結晶 (MeOH)

[融点] Mp 279-282 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{20} +37$ (c, 1 in Py)



-----文献-----

Yosioka, I. et al., Chem. Pharm. Bull., 1972, 20, 1237, (構造決定)

Tori, K. et al., Tet. Lett., 1974, 4227, (C13-NMR)

Cherry, R.F. et al., Aust. J. Chem., 1977, 30, 1397, (分離)

Parente, J.F. et al., Ann. Acad. Bras. Cienc., 1980, 52, 503; CA, 94, 99764c, (Derrissaponin)

§ Sasanquol

[CAS No.] 211183-83-4

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

[構造式]

[分子式] $C_{30}H_{52}O$

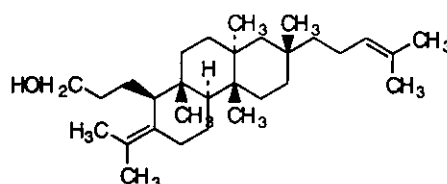
[分子量] 428.74

[正確な分子量] 428.401815

[基原] *Camellia sasanqua*

[性状] 針状結晶

[融点] Mp 89-91 °C



-----文献-----

Akihisa, T. et al., Phytochemistry, 1998, 48, 301, (分離, H-NMR, C13-NMR)

*****ツユクサ (Tsuyukusa) *****

§ § ツユクサ科ツユクサ (*Commelina communis* L.) の茎葉。

§ 2,6-Bis(hydroxymethyl)-3,4,5-piperidinetriol; (2R,3R,4R,5S,6R)-form, 7-O-β-D-Glucopyranoside

[化学名・別名] 1"-O-β-D-Glucopyranosyl-α-homonojirimycin. MDL 25637. 2,6-Dideoxy-7-O-β-D-glucopyranosyl-2,6-imino-D-glycero-L-gulo-heptitol (CAS名)

[CAS No.] 104343-33-1

[化合物分類] 薬物: 抗高血糖症薬 (Antihyperglycaemic agent), アルカロイド化合物 (Simple piperidine alkaloid), AF8900

[構造式]

[分子式] $C_{13}H_{25}NO_{10}$

[分子量] 355.341

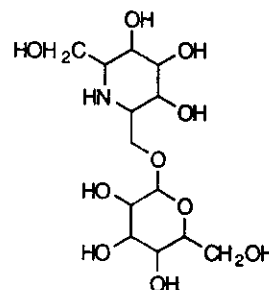
[正確な分子量] 355.147849

[基原] *Commelina communis*, *Aglaonema treubii*, *Hyacinthus orientalis*, *Lobelia sessilifolia*

[性状] 無定型の粉末・一水和物

[融点] Mp 84-86 °C. Mp 131-134 °C (as hydrochloride). Mp 216-219 synthetic °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{20} +20$ (c, 0.5 in H₂O). $[\alpha]_D +24.7$ (c, 0.7 in H₂O). $[\alpha]_D +27.5$ (c, 1 in H₂O)



-----文献-----

Liu, P.S., J.O.C., 1987, 52, 4717, (α-Homonojirimycin, H-NMR, Mass, 誘導体, 合成法)

Kite, G.C. et al., Tet. Lett., 1988, 29, 6483, (分離, C13-NMR)

Bruce, T. et al., Tetrahedron, 1992, 48, 10191, (α-Homomannojoirrimycin, 6-Epi-α-homomannojoirrimycin, 合成法, H-NMR, C13-NMR, 生化学)

Holt, K.E. et al., J.C.S. Perkin 1, 1994, 231, (α-Homomannojoirrimycin, β-Homonojoirrimycin, 合成法, H-NMR, 生化学)

Asano, N. et al., J. Nat. Prod., 1997, 60, 98; 1998, 61, 625, (分離, H-NMR, C13-NMR)

Shilvlock, J.P. et al., Tetrahedron: Asymmetry, 1998, 9, 3505, (α-Homomannojoirrimycin, β-Homomannojoirrimycin, 合成法, H-NMR)

Martin, O.R. et al., Bioorg. Med. Chem. Lett., 1999, 9, 3171, (stereochem)

Kim, H.S. et al., Planta Med., 1999, 65, 437, (分離)

§ Commelinin

[CAS No.] 60800-56-8

[構造式] 不明

[分子式] $C_{402}H_{414}Mg_2O_{222}$

[分子量] 8846.169

[正確な分子量] 8840.080764

[一般的性質] Supramolecular pigment composed of six molecules of Malonylawobanin, six of Flavocommelin and two Mg²⁺ ions

[基原] 次の植物の花から分離: *Commelina communis*

-----文献-----

Kondo, T. et al., J.A.C.S., 1994, 116, 7457, (構造決定, 成書)

§ 3,3',4',5,5',7-Hexahydroxyflavylium (1+); 3-O-[4-Hydroxycinnamoyl-(→ 6)-β-D-glucopyranoside], 5-O-(6-O-malonyl-β-D-glucopyranoside)

[化学名・別名] Malonylawobanin

[CAS No.] 88399-23-9

[化合物分類] フラボノイド (Anthocyanidin and anthocyanin; 6 × O-置換基)

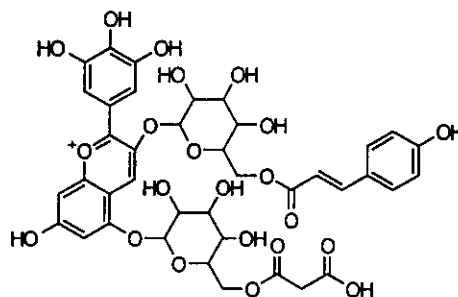
[構造式]

[分子式] C₃₉H₃₉O₂₂⁽⁺⁾

[分子量] 859.724

[正確な分子量] 859.193305

[基原] 次の植物から分離: *Commelina communis*



-----文献-----

Goto, T. et al., Tet. Lett., 1978, 2413; 1982, 23, 3695; 1983, 24, 2181; 4863; 1986, 27, 1801, (Awobanin, Violanin, Gentiodelphin, Platyconin, Malonylawobanin)

Ishikawa, T. et al., Phytochemistry, 1999, 52, 517, (Acetylmalonylawobanin, Malonylawobanin)

§ Swertisin; 4'-O-β-D-Glucopyranoside

[化学名・別名] Flavocommelin

[CAS No.] 16049-42-6

[化合物分類] フラボノイド (Flavone; 3 × O-置換基)

[構造式]

[分子式] C₂₈H₃₂O₁₅

[分子量] 608.552

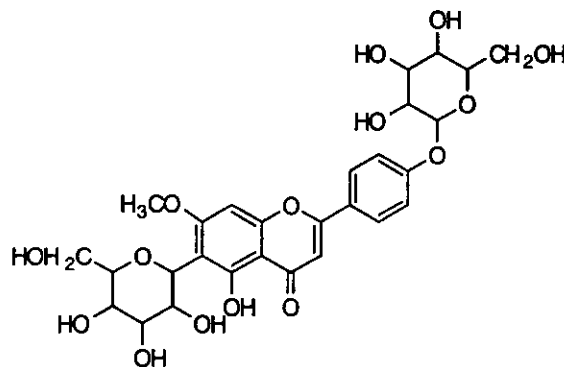
[正確な分子量] 608.174125

[基原] 次の植物から分離: *Commelina communis*

[性状] 黄色の結晶

[融点] Mp 216-217 °C

[比旋光度]: [α]_D²⁰ -40.9 (c, 4.425 in Py)



-----文献-----

Takeda, K. et al., CA, 1966, 67, 99951, (Flavocommelin)

McCormick, S. et al., Phytochemistry, 1983, 22, 798, (Flavocummelin)

*****ツリガネニンジン (Tsuriganeninjin) *****

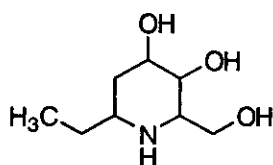
§ § キキョウ科ツリガネニンジン (*Adenophora triphylla* A. de Candolle var. *japonica* Hara) の根。

§ 6-Ethyl-2-hydroxymethyl-3,4-piperidinediol; (2R*,3R*,4R*,6R*)-form

[化学名・別名] 1 α-C-Ethylfagomine

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

[構造式]



[基原] 次の

植物から得られるアルカロイド: *Adenophora triphylla* var.

japonica

[用途] 牛の肝臓の β-ガラクトシダーゼを抑制する

[比旋光度]: $[\alpha]_D +45.7$ (c, 0.71 in H₂O)

-----文献-----

Asano, N. et al., *Phytochemistry*, 2000, 53, 379

§ 2-Hydroxymethyl-5-(1-hydroxypentyl)-3,4-pyrrolidinediol; (2*R**,3*R**,4*R**,5*R**,6 ξ)-form

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

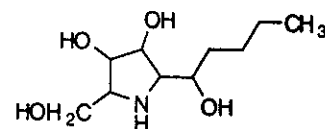
[構造式]

[基原]次の植物から得られるアルカロイド: *Adenophora triphylla* var. *japonica*

[比旋光度]: $[\alpha]_D +174.3$ (c, 0.32 in H₂O)

-----文献-----

Asano, N. et al., *Phytochemistry*, 2000, 53, 379



§ § キキョウ科サイヨウシヤジン (*Adenophora triphylla* A. de Candolle) の根。

§ 24-Ethylcycloart-25-en-3-ol; (3 β ,24)-form

[化学名・別名]Polysthicol

[CAS No.] 76236-10-7

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

[構造式]

[基原]*Polystichum aculeatum*, また *Adenophora triphylla*, *Neolitsea aciculata*

[性状]Glass

[比旋光度]: $[\alpha]_D +42$ (CHCl₃)

-----文献-----

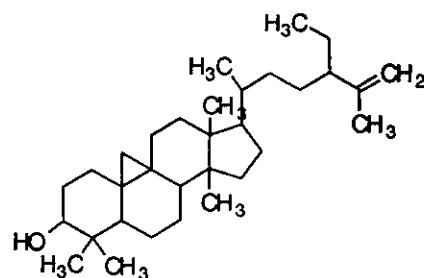
Laonigro, G. et al., *Tet. Lett.*, 1980, 3109

Konno, C. et al., *Planta Med.*, 1981, 42, 268, (Triphyllol)

Ageta, H. et al., *Phytochemistry*, 1984, 23, 2875, (Cyclomargenol)

Yano, K. et al., *Phytochemistry*, 1992, 31, 2093, (分離)

Desoky, E.K., *Indian J. Chem., Sect. B*, 1996, 35, 1113, (分離, Ac)



§ 24-Ethylcycloart-25-en-3-ol; (3 β ,20*S*,24 ξ)-form

[化学名・別名]Triphyllol

[CAS No.] 79199-90-9

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

[構造式]

[基原]次の植物から分離: *Adenophora triphylla*

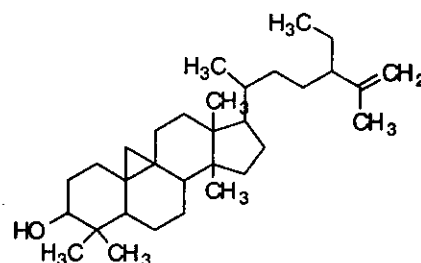
[性状]針状結晶 (EtOH)

[融点]Mp 127-133 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D +44.8$ (c, 0.13 in CHCl₃)

-----文献-----

Konno, C. et al., *Planta Med.*, 1981, 42, 268, (Triphyllol)



§ 6-Ethyl-2-hydroxymethyl-3,4-piperidinediol; (2*R**,3*R**,4*R**,6*R**)-form

[化学名・別名]1 α -C-Ethylfagomine

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

[構造式]

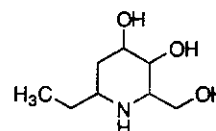
[基原]次の植物から得られるアルカロイド: *Adenophora triphylla* var. *japonica*

[用途]牛の肝臓の β -ガラクトシダーゼを抑制する

[比旋光度]: $[\alpha]_D +45.7$ (c, 0.71 in H₂O)

-----文献-----

Asano, N. et al., *Phytochemistry*, 2000, 53, 379

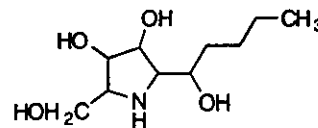


§ 2-Hydroxymethyl-5-(1-hydroxypentyl)-3,4-pyrrolidinediol; (2*R**,3*R**,4*R**,5*R**,6*ε*)-form

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

[基原] 次の植物から得られるアルカロイド: *Adenophora triphylla* var. *japonica*

[構造式]



[比旋光度]: $[\alpha]_D^{25} +174.3$ (c, 0.32 in H₂O)

-----文献-----

Asano, N. et al., *Phytochemistry*, 2000, 53, 379

§ § キキョウ科マルバノニンジン (*Adenophora stricta* Miquel) の根。

該当物質なし

*****ツルドクダミ (Tsurudokudami) *****

§ § タデ科ツルドクダミ (*Polygonum multiflorum* Thunberg et Murray) の根。

§ 3-Acetyl-5,7-dihydroxy-2-methyl-1,4-naphthoquinone, 7-Me ether, 5-O-β-D-glucopyranoside

[化合物分類] 多環芳香族 (Naphthoquinone; 2 × O-置換基)

[構造式]

[分子式] C₂₀H₂₂O₁₀

[分子量] 422.388

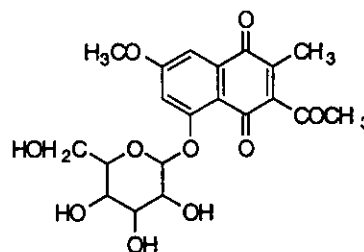
[正確な分子量] 422.1213

[基原] *Polygonum multiflorum*

[性状] 結晶 (MeOH)

[融点] Mp 164-165 °C

[UV]: [neutral] λ_{max} 215 (log ε 4.44); 267 (log ε 4.28) (MeOH)



-----文献-----

Mammo, W. et al., *Phytochemistry*, 1992, 31, 3577-3581, (分離)

Chen, W. et al., *Yaoxue Xuebao*, 2000, 35, 273-276, (7-Me-5-glucoside)

§ 2-Amino-2-hydroxy-3-(1*H*-indol-3-yl) propanoic acid; (*R*)-form, Me ester

[CAS No.] 205107-12-6

[化合物分類] アミノ酸とペプチド (Non-protein α-aminoacid)

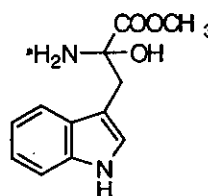
[構造式]

[分子式] C₁₂H₁₄N₂O₃

[分子量] 234.254

[正確な分子量] 234.100443

[基原] *Polygonum multiflorum* の根



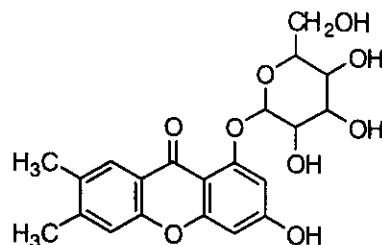
-----文献-----

Yang, X. et al., *Zhongcaoyao*, 1998, 29, 5; *CA*, 128, 248403j, (分離)

§ 1,3-Dihydroxy-6,7-dimethylxanthone; 1-O-β-D-Glucopyranoside

[化学名・別名] Polygonimitin B

[CAS No.] 156980-62-0
 [化合物分類] 単環芳香族 (Xanthone; 4 × O-置換基)
 [構造式]
 [分子式] C₂₁H₂₂O₉
 [分子量] 418.399
 [正確な分子量] 418.126385
 [基原] *Polygonum multiflorum* の根
 [融点] Mp 262-265 °C
 [UV]: [neutral] λ_{max} 241 (); 275 (); 345 (); 349 () (EtOH)

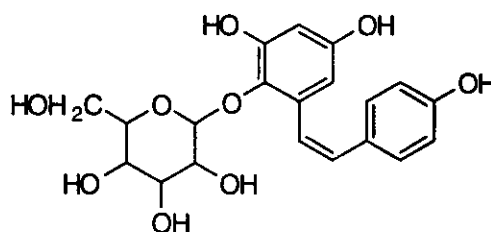


-----文献-----

Zhou, L.X. et al., Yaoxue Xuebao, 1994, 29, 107

§ 1-(4-Hydroxyphenyl)-2-(2,3,5-trihydroxyphenyl) ethylene; 2-O-β-D-Glucopyranoside

[CAS No.] 82373-94-2
 [化合物分類] 単環芳香族 (Stilbene), 薬物: ATP-ase 抑制薬 (ATPase inhibitor)
 [構造式]
 [分子式] C₂₀H₂₂O₉
 [分子量] 406.388
 [正確な分子量] 406.126385
 [基原] *Polygonum multiflorum*
 [用途] カルシウム ATP アーゼ抑制因子
 [性状] 青白い黄色の粉末
 [比旋光度]: [α]_D²⁰ +73 (c, 0.63 in Me₂CO)

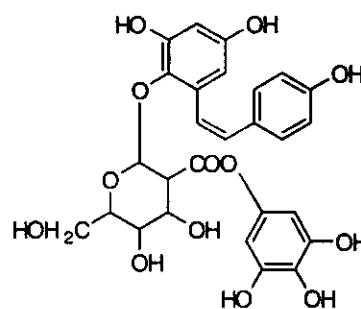


-----文献-----

Nonaka, G. et al., Phytochemistry, 1982, 21, 429, (構造決定, IR, H-NMR, C13-NMR)
 Grech, J.N. et al., J. Nat. Prod., 1994, 57, 1682, (2-glucoside)
 Zhou, L.X. et al., Yaoxue Xuebao, 1994, 29, 107, (Polygonimitin C)
 Zheng, S. et al., Indian J. Chem., Sect. B, 1997, 36, 955, (2-glucoside 3-rhamnoside)

§ 1-(4-Hydroxyphenyl)-2-(2,3,5-trihydroxyphenyl) ethylene; 2-O-[3,4,5-Trihydroxybenzoyl-(→2)-β-D-glucopyranoside]

[CAS No.] 82344-85-2
 [化合物分類] タンニン化合物 (Simple gallate ester tannin), 単環芳香族 (Stilbene)
 [構造式]
 [分子式] C₂₇H₂₆O₁₃
 [分子量] 558.495
 [正確な分子量] 558.137345
 [基原] 次の植物の根から分離: *Polygonum multiflorum*
 [性状] 淡褐色の針状結晶 + 1/2H₂O (H₂O)
 [融点] Mp 182-184 °C
 [比旋光度]: [α]_D²³ -29.9 (c, 0.19 in Me₂CO)



-----文献-----

Nonaka, G. et al., Phytochemistry, 1982, 21, 429, (構造決定, IR, H-NMR, C13-NMR)
 Grech, J.N. et al., J. Nat. Prod., 1994, 57, 1682, (2-glucoside)
 Zhou, L.X. et al., Yaoxue Xuebao, 1994, 29, 107, (Polygonimitin C)
 Zheng, S. et al., Indian J. Chem., Sect. B, 1997, 36, 955, (2-glucoside 3-rhamnoside)

§ 1-(4-Hydroxyphenyl)-2-(2,3,5-trihydroxyphenyl) ethylene; 2-O-[3,4,5-Trihydroxybenzoyl-(→3)-β

-D-glucopyranoside]

[CAS No.] 82344-86-3

[化合物分類] 単環芳香族 (Stilbene), タンニン化合物 (Simple gallate ester tannin)

[構造式]

[分子式] $C_{27}H_{26}O_{13}$

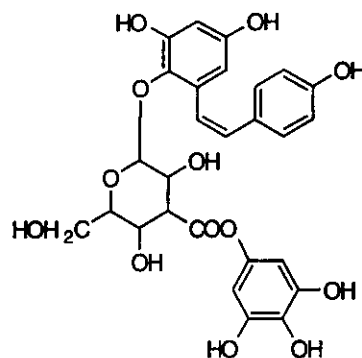
[分子量] 558.495

[正確な分子量] 558.137345

[基原] 次の植物の根から分離: *Polygonum multiflorum*

[性状] 淡褐色の無定型粉末

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{25} +11.7$ (c, 0.14 in Me:CO)



-----文献-----

Nonaka, G. et al., *Phytochemistry*, 1982, 21, 429, (構造決定, IR, H-NMR, C13-NMR)

Grech, J.N. et al., *J. Nat. Prod.*, 1994, 57, 1682, (2-glucoside)

Zhou, L.X. et al., *Yaoxue Xuebao*, 1994, 29, 107, (Polygonimitin C)

Zheng, S. et al., *Indian J. Chem., Sect. B*, 1997, 36, 955, (2-glucoside 3-rhamnoside)

§ 1-(4-Hydroxyphenyl)-2-(2,3,5-trihydroxyphenyl) ethylene; 2,3-Di-O-β-D-glucopyranoside

[化学名・別名] Polygonimitin C

[CAS No.] 156980-61-9

[化合物分類] 単環芳香族 (Stilbene)

[構造式]

[分子式] $C_{28}H_{28}O_{14}$

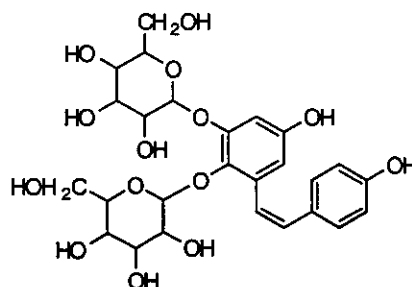
[分子量] 568.53

[正確な分子量] 568.17921

[基原] *Polygonum multiflorum* の根

[性状] 結晶

[融点] Mp 265-267 °C



-----文献-----

Zhou, L.X. et al., *Yaoxue Xuebao*, 1994, 29, 107, (Polygonimitin C)

§ 1-(4-Hydroxyphenyl)-2-(2,4,6-trihydroxyphenyl) ethylene; (E)-form, 2-O-β-D-Glucopyranoside

[CAS No.] 162107-29-1

[化合物分類] 単環芳香族 (Stilbene)

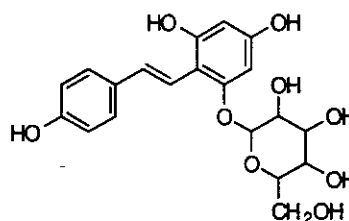
[構造式]

[分子式] $C_{28}H_{28}O_9$

[分子量] 406.388

[正確な分子量] 406.126385

[基原] *Polygonum multiflorum* の塊茎



-----文献-----

Grech, J.N. et al., *J. Nat. Prod.*, 1994, 57, 1682, (2-glucoside)

§ Ligustilide; 6,7-Dihydro, 6R*,7R*-dihydroxy, (E)-isomer

[化学名・別名] (E)-6,7-trans-Dihydroxyligustilide

[化合物分類] ベンゾフラノイド (Isobenzofuran)

[構造式]

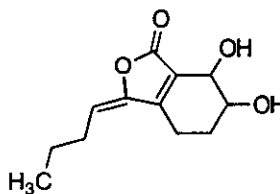
[分子式] $C_{12}H_{16}O_4$

[分子量] 224.256

[正確な分子量] 224.10486

[基原] *Polygonum multiflorum*

[用途] カルシウム ATP アーゼ抑制因子



-----文献-----

Grech, J.N. et al., *J. Nat. Prod.*, 1994, 57, 1682, (E-Dihydroxyligustilide)

§ Ligustilide; 6,7-Dihydro, 6R*,7S*-dihydroxy, (E)-isomer

[化学名・別名] (E)-6,7-cis-Dihydroxyligustilide

[化合物分類] ベンゾフラノイド (Isobenzofuran)

[構造式]

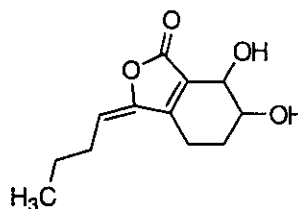
[分子式] C₁₂H₁₆O₄

[分子量] 224.256

[正確な分子量] 224.10486

[基原] *Polygonum multiflorum*

[用途] カルシウム ATP アーゼ抑制因子



-----文献-----

Grech, J.N. et al., J. Nat. Prod., 1994, 57, 1682, (E-Dihydroxyligustilide)

§ 3,3',4',5,7-Pentahydroxyflavan; (2S,3R)-form, 3-O-(3,4,5-Trihydroxybenzoyl)

[化学名・別名] 3-O-Galloyl-*ent*-catechin

[化合物分類] タンニン化合物 (Simple gallate ester tannin), フラボノイド (Flavan-3-ol)

[構造式]

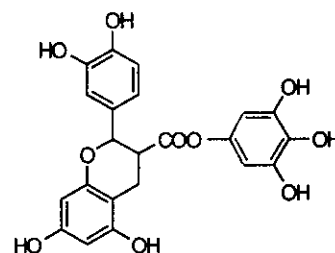
[分子式] C₂₂H₁₈O₁₀

[分子量] 442.378

[正確な分子量] 442.09

[基原] 次の植物から分離: *Polygonum multiflorum* の根

[比旋光度]: [α]_D -51.5 (c, 0.2 in EtOH)



-----文献-----

Karrer, W. et al., Konstitution und Vorkommen der Organischen Pflanzenstoffe, 2nd edn., Birkhäuser Verlag, Basel, 1972, nos. 1762-1764, (生育)

Coxon, D.T. et al., Tetrahedron, 1972, 28, 2819, (3,5-Digalloylepicatechin)

Spek, A.L. et al., Acta Cryst. C, 1984, 40, 2068, (結晶構造, Epicatechin)

Foo, L.Y. et al., Phytochemistry, 1985, 24, 1495; 1987, 26, 2825; 1989, 28, 1237, (Phylloflavan, Epicatechin 7-glucoside)

Murakami, T. et al., Yakugaku Zasshi, 1985, 105, 649, (epicatechin alloside)

Perrissoud, D., Prog. Clin. Biol. Res., 1986, 213, 559, (レビュー, 薬理)

Hashimoto, F. et al., Chem. Pharm. Bull., 1987, 35, 611, (Epicatechin deriv)

Nakane, H., Biochemistry, 1990, 29, 2841, (Epicatechin gallate, anti-HIV activity)

Lewis, R.J., Sax's Dangerous Properties of Industrial Materials, 8th edn., Van Nostrand Reinhold, 1992, CCP875

§ 3,3',4',5,7-Pentahydroxyflavan; (2S,3)-form

[化学名・別名] (+)-*cis*-form. *ent*-Epicatechin. Catechin C

[CAS No.] 35323-91-2

[化合物分類] フラボノイド (Flavan-3-ol)

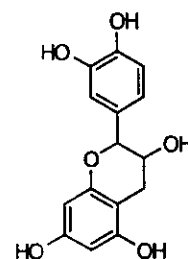
[構造式]

[基原] 次の植物から分離: *Dryas octopetala*, *Polygonum multiflorum*, *Uncaria gambir*, その他の植物属

[性状] 棒状の結晶 (H₂O)

[融点] Mp 235-237 °C

[比旋光度]: [α]_D²⁰ +59 (c, 2 in Me₂CO 溶液)



-----文献-----

Karrer, W. et al., Konstitution und Vorkommen der Organischen Pflanzenstoffe, 2nd edn., Birkhäuser Verlag, Basel, 1972, nos. 1762-1764, (生育)

Coxon, D.T. et al., Tetrahedron, 1972, 28, 2819, (3,5-Digalloylepicatechin)

Spek, A.L. et al., Acta Cryst. C, 1984, 40, 2068, (結晶構造, Epicatechin)

Foo, L.Y. et al., Phytochemistry, 1985, 24, 1495; 1987, 26, 2825; 1989, 28, 1237, (Phylloflavan, Epicatechin 7-glucoside)

Murakami, T. et al., Yakugaku Zasshi, 1985, 105, 649, (epicatechin alloside)

Perrissoud, D., Prog. Clin. Biol. Res., 1986, 213, 559, (レビュー, 薬理)
 Hashimoto, F. et al., Chem. Pharm. Bull., 1987, 35, 611, (Epicatechin deriv)
 Nakane, H., Biochemistry, 1990, 29, 2841, (Epicatechin gallate, anti-HIV activity)
 Lewis, R.J., Sax's Dangerous Properties of Industrial Materials, 8th edn., Van Nostrand Reinhold, 1992,

§ 3,3',4',5,7-Pentahydroxyflavan (4 → 8) -3,3',4',5,7-pentahydroxyflavan; (2R,2'R,3R,3'R,4R) -form, 3,3'-Bis (3,4,5-trihydroxybenzoyl)

[化学名・別名] 3,3'-Digalloylprocyanidin B₂

[CAS No.] 79907-44-1

[化合物分類] フラボノイド (Proanthocyanidin flavonoid), タンニン化合物 (Simple gallate ester tannin)

[構造式]

[分子式] C₄₄H₃₄O₂₀

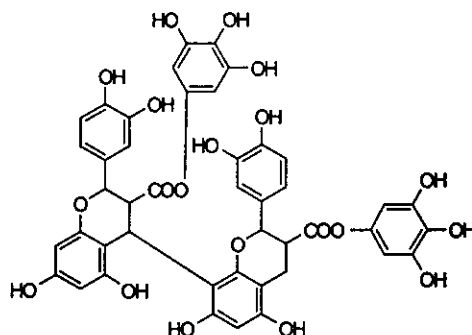
[分子量] 882.741

[正確な分子量] 882.16435

[基原] 次の植物から分離: *Polygonum multiflorum*, *Rheum rhizome*, *Thea sinensis*

[性状] 淡褐色の無定型粉末 + 1・1/2H₂O

[比旋光度]: [α]_D²² -95.2 (c, 1.1 in Me₂CO)



-----文献-----

Nonaka, G. et al., Chem. Pharm. Bull., 1981, 29, 2862; 1983, 31, 3906, (gallate)

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

Saijo, R. et al., Phytochemistry, 1989, 28, 2443, (H-NMR, gallate)

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

[化学名・別名] 3-Galloylprocyanidin B₂

[化合物分類] タンニン化合物 (Simple gallate ester tannin), フラボノイド (Proanthocyanidin flavonoid)

[構造式]

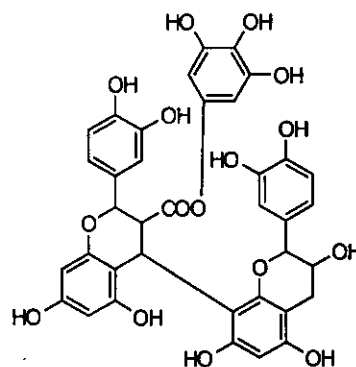
[分子式] C₃₇H₃₀O₁₆

[分子量] 730.634

[正確な分子量] 730.15339

[基原] 次の植物から分離: *Polygonum multiflorum*, *Rheum rhizome*

[比旋光度]: [α]_D²¹ -21 (Me₂CO)



-----文献-----

Tanaka, T. et al., Phytochemistry, 1983, 22, 2575, (3-Galloylprocyanidin B₂)

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

Saijo, R. et al., Phytochemistry, 1989, 28, 2443, (H-NMR, gallate)

§ Schaftoside; 4''-Epimer

[化学名・別名] Isocorymboside. 8-α-L-Arabinopyranosyl-6-β-D-galactopyranosylapigenin

[CAS No.] 83856-66-0
[その他の CAS No.] 65634-13-1
[化合物分類] フラボノイド (Flavone; 3 × O-置換基)

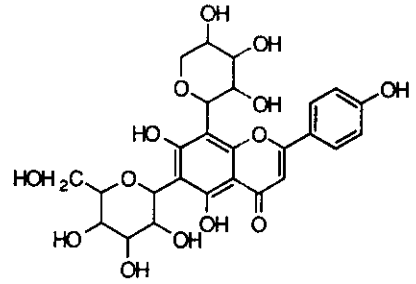
[構造式]

[基原] 次の植物から分離: *Polygonum multiflorum*, *Cerastium arvense*

[性状] 黄色の針状結晶 (H₂O)

[融点] Mp 219-222 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{20} +109$ (c, 2 in ν MSO 溶液)



-----文献-----

Chopin, M.J. et al., *Phytochemistry*, 1974, 13, 2583; 1977, 16, 1999, (Schaftoside, Isocorymboside)

§ 2',3',4',6'-Tetrahydroxyacetophenone; 3'-O-β-D-Glucopyranoside

[化学名・別名] Polygoacetophenoside

[CAS No.] 110906-84-8

[化合物分類] 単環芳香族 (Simple aryl ketone)

[構造式]

[分子式] C₁₄H₁₈O₁₀

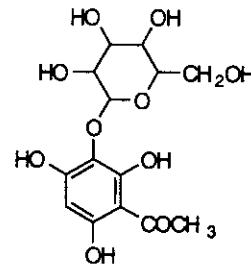
[分子量] 346.29

[正確な分子量] 346.09

[基原] 次の植物の塊茎から分離: *Polygonum multiflorum*

[性状] 板状結晶 (EtOH)

[融点] Mp 214-216 °C



-----文献-----

Yoshizaki, M. et al., *Planta Med.*, 1987, 53, 273, (Polygoacetophenoside)

*****ディアタング (Deer-tongue) *****

§ § キク科ニオイリアトリス (*Trilisa odoratissima* Cassini) の葉。

§ 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*, *Michalia alba*, *Trilisa odoratissima*

[性状] オイル

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

[濃度] d₁₅¹⁵ 1.078

[その他のデータ] 水蒸気蒸留で得られる。硫酸によって重合されたアルカリ中でも安定

[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, (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.

参照文献

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.

参照文献

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.

参照文献

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.

参照文献

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.

参照文献

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.

参照文献

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.

参照文献

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
参照文献

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
参照文献

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
参照文献

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

*****ティスル (Thistle) *****

§ § キク科サントリソウ (*Cnicus benedictus* L.) の茎葉, 花, 果実。
「欧州アザミ」参照

*****ディタニー (Dittany) *****

§ § ミカン科ヨウシュハクセン (*Dictamnus albus* L.) の全草または根。

§ 5,7-Dihydroxy-3',4'-dimethoxyflavone; 7-O-β-D-Glucuronoside, Me ester

[CAS No.] 126005-95-6

[化合物分類] フラボノイド (Flavone; 4 × O-置換基)

[構造式]

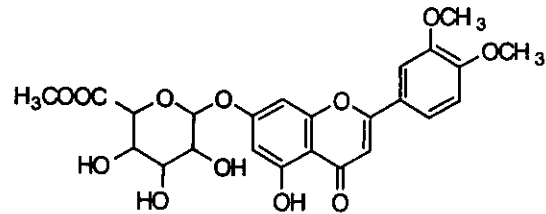
[分子式] C₂₄H₂₄O₁₂

[分子量] 504.446

[正確な分子量] 504.12678

[基原] 次の植物から分離: *Dictamnus albus*

[性状] 黄色の塊



-----文献-----

- Volk, O.H. et al., *Z. Naturforsch., B*, 1968, 23, 1017, (Linoside)
 Adinarayana, D. et al., *Phytochemistry*, 1980, 19, 480, (7-glucuronoside)
 Liu, Y.-L. et al., *Phytochemistry*, 1981, 20, 1389; 1982, 21, 209, (分離)
 Nakanishi, T. et al., *J. Nat. Prod.*, 1985, 48, 491, (分離)
 Wollenweber, E. et al., *Z. Naturforsch., C*, 1986, 41, 87, (分離)
 Souleles, C., *J. Nat. Prod.*, 1987, 52, 1311, (7-glucuronoside ester)

§ Fraxinellone

[CAS No.] 28808-62-0

[化合物分類] テルペノイド (Ring cleaved tetranortriterpenoid)

[構造式]

[分子式] C₁₄H₁₆O₃

[分子量] 232.279

[正確な分子量] 232.109945

[一般的性質] Degraded terpenoid lacking rings A and B. Terpenoid numbering shown

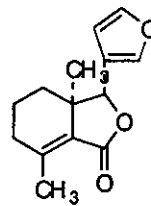
[基原] *Dictamnus albus*

[性状] 結晶 (EtOH/Et₂O)

[融点] Mp 116 °C

[比旋光度]: [α]_D²² -44 (EtOH)

[化学物質毒性データ総覧 (RTEC) 登録番号] TI3767000



-----文献-----

- Blaise, A.J. et al., *Phytochemistry*, 1985, 24, 2379, (分離, H-NMR, C13-NMR, Isofraxinellone)
 Woo, W.S. et al., *Planta Med.*, 1987, 53, 399, (分離, 用途)
 Okamura, H. et al., *Tet. Lett.*, 1997, 38, 263, (合成法, Isofraxinellone)
 Nakatani, M. et al., *Phytochemistry*, 1998, 49, 1773, (12 α-Acetoxyfraxinellone)
 Lewis, R.J., *Sax's Dangerous Properties of Industrial Materials*, 8th edn., Van Nostrand Reinhold, 1992, FOM200

RTECS (化学物質毒性データ)

生体影響物質 : 生殖影響物質. 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>> 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 : 274 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

PLMEAA *Planta Medica*. (Georg Thieme Verlag, Postfach 732, D-7000 Stuttgart 1, Fed. Rep. Ger.)

V.1- 1953- [Vol.,頁,年(19-)] 53,399,1987

<<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-ラット.

投与量・期間 : 116 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

PLMEAA *Planta Medica*. (Georg Thieme Verlag, Postfach 732, D-7000 Stuttgart 1, Fed. Rep. Ger.)

V.1- 1953- [Vol.,頁,年(19-)]53,399,1987
 <<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: 430 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

PLMEAA Planta Medica. (Georg Thieme Verlag, Postfach 732, D-7000 Stuttgart 1, Fed. Rep. Ger.)

V.1- 1953- [Vol.,頁,年(19-)]53,399,1987
 <<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: 355 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

PLMEAA Planta Medica. (Georg Thieme Verlag, Postfach 732, D-7000 Stuttgart 1, Fed. Rep. Ger.)

V.1- 1953- [Vol.,頁,年(19-)]53,399,1987
 生殖に関するデータ

<<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 : 424 mg/kg
 雌雄投与期間: 雌 5-8 日間(交配後)
 毒性影響 : [生殖] [受精能] 雌受精能の指標(たとえば精子陽性の雌のうち妊娠した雌の数, 交配させた雌のうち妊娠した雌の数)
 参考文献

PLMEAA Planta Medica. (Georg Thieme Verlag, Postfach 732, D-7000 Stuttgart 1, Fed. Rep. Ger.)

V.1- 1953- [Vol.,頁,年(19-)]53,399,1987

§ 4'-Hydroxy-3,5,7-trimethoxyflavone

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

[CAS No.] 59259-80-2

[化合物分類] フラボノイド(Flavonol; 4 × O-置換基)

[構造式]

[分子式] C₁₈H₁₆O₆

[分子量] 328.321

[正確な分子量] 328.09469

[基原] *Dictamnus albus*, *Brickelliastrum fendleri*, *Ericameria diffusa*

[性状] 結晶 (EtOH 溶液)

[融点] Mp 280-281 °C (273-275 °C)

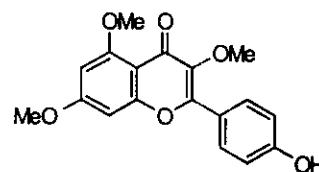
[UV]: [neutral] λ_{max} 257 (sh) (); 263 (); 336 () (MeOH)

-----文献-----

Urbatsch, L.E. et al., *Phytochemistry*, 1976, 15, 440, (分離, UV, H-NMR, Mas)

Bulinska-Radomska, Z. et al., *J. Nat. Prod.*, 1985, 48, 144, (分離)

Souleles, C., *Planta Med.*, 1989, 55, 402, (分離)



§ Isodictamnine

[化学名・別名] 9-Methylfuro[2,3-b]quinolin-4(9H)-one (CAS 名)

[CAS No.] 484-74-2

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

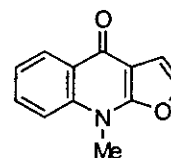
[構造式]

[分子式] C₁₂H₉NO₂

[分子量] 199.209

[正確な分子量] 199.063329

[基原] 次の植物から得られるアルカロイド: *Helietta longifoliata* の幹樹皮, *Dictamnus albus* (ミカン科)



の根皮

[融点] Mp 186-187 °C

-----文献-----

Mammarella, C.A. et al., An. Assoc. Quim. Argent., 1971, 59, 239; CA, 76, 43980f, (分離, Mass, H-NMR)
Kuo, S.C. et al., J. Het. Chem., 1991, 28, 955, (合成法)

§ Isomaculosidine

[化学名・別名] 6,8-Dimethoxy-9-methylfuro[2,3-*b*]quinolin-4(9*H*)-one (CAS 名).

6,8-Dimethoxyisodictamnine

[CAS No.] 518-96-7

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

[構造式]

[分子式] C₁₄H₁₃NO₄

[分子量] 259.261

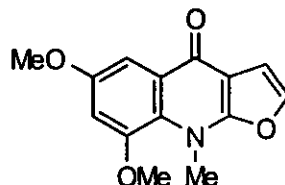
[正確な分子量] 259.084459

[基原] *Dictamnus albus* (ミカン科) の根から得られるアルカロイド. Also obt. by heating

4,6,8-Trimethoxyfuro[2,3-*b*]quinoline at 100 °C with a large excess of MeI and *Dictamnus caucasicus*

[性状] 針状結晶 (EtOH, CHCl₃/hexane or C₆H₆)

[融点] Mp 170-172 °C (167-168 °C)



-----文献-----

Brown, R.F.C. et al., Aust. J. Chem., 1954, 7, 181

Kikvidze, I.M. et al., Khim. Prir. Soedin., 1971, 7, 675; Chem. Nat. Compd. (Engl. Transl.), 1971, 7, 659, (分離)

Storer, R. et al., Tetrahedron, 1973, 29, 1217, (分離, UV, H-NMR)

Tsung-Ping Lin et al., J. Nat. Prod., 1987, 50, 631, (合成法, UV, IR, H-NMR, C13-NMR)

Wu, T.-S. et al., Phytochemistry, 1999, 50, 509, (Iso-γ-fagarine)

§ 4-Methoxyfuro[2,3-*b*]quinoline (CAS 名)

[化学名・別名] Dictamnine

[CAS No.] 484-29-7

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

[構造式]

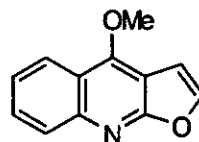
[分子式] C₁₂H₉NO₂

[分子量] 199.209

[正確な分子量] 199.063329

[基原] 次の植物から得られるアルカロイド: *Dictamnus albus*, ミカン科属の中に広く分布する

[融点] Mp 132-133 °C



-----文献-----

Asahina, Y. et al., Ber., 1930, 63, 2045, (分離)

Narasimhan, N.S. et al., Tetrahedron, 1974, 30, 4153, (合成法)

Lin, T.P. et al., Hua Hsueh, 1986, 44, 96; CA, 106, 30033n, (O-Ethylindictamnine)

§ Preskimmianine

[化学名・別名] 3-(3,3-Dimethylallyl)-4,7,8-trimethoxy-2(1*H*)-quinolinone. 4,7,8-Trimethoxy-3-prenyl-2(1*H*)-quinolinone. Dasycarpamine

[CAS No.] 38695-41-9

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

[構造式]

[分子式] C₁₇H₂₁NO₄

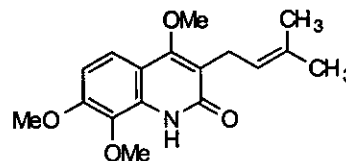
[分子量] 303.357

[正確な分子量] 303.147059

[基原] 次の植物から得られるアルカロイド: *Dictamnus albus* と *Dictamnus dasycarpus* の根 (ミカン科)

[性状] 結晶 (C₆H₆)

[融点] Mp 151-152 °C



-----文献-----

Storer, R. et al., Tetrahedron, 1973, 29, 1217, (IR, UV, H-NMR, Mass, 分離, 合成法)
Ayafor, J.F. et al., Phytochemistry, 1982, 21, 2733, (誘導體)
Ramesh, M. et al., Tetrahedron, 1984, 40, 4041-4049, (合成法, H-NMR)

§ § ミカン科ハクセン (*Dictamnus dasycarpus* Turczaninow (*D. albus* L. ssp. *dasycarpus* (Turczaninow) Kitagawa)) の全草または根。
該当物質なし

§ § ミカン科 (*Dictamnus angustifolium* G. Don) の全草または根。
該当物質なし

*****ディル (Dill) *****

§ § セリ科イノンド (*Anethum graveolens* L.) の種子, 茎葉または全草。

§ Apiole

[化学名・別名] 4,7-Dimethoxy-5-(2-propenyl)-1,3-benzodioxole (CAS 名).
2,5-Dimethoxy-3,4-methylenedioxy-1-allylbenzene. Parsley apiole. Parsley camphor
[CAS No.] 523-80-8

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

[構造式]

[分子式] C₁₂H₁₄O₄

[分子量] 222.24

[正確な分子量] 222.08921

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

[用途] 解熱薬, 利尿剤, 殺虫剤

[性状] 針状結晶

[融点] Mp 30 °C

[沸点] Bp 294 °C. Bp₃ 179 °C

[濃度] d₂₀ 1.015

[Log P 計算値] Log P 2.5 (計算値)

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

[化学物質毒性データ総覧 (RTEC) 登録番号] CY2500000



-----文献-----

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

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

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

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

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

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

***RTECS (化学物質毒性データ) ***

生体影響物質 : 医薬品. 変異原物質. 天然物.

健康障害に関するデータ

急性毒性に関するデータ

<<試験方法>> 認知されている最小致死量 (LDLo) 試験.

曝露経路 : 皮下投与.

被験動物 : げっ歯類-マウス

投与量・期間 : 1 gm/kg

毒性影響 : 致死量以外に毒性影響に関する報告はない.