

[基原] *Pinus sibirica* と *Pinus koraiensis* のオレオレジン

[性状] 微細な針状結晶 (petrol)

[融点] Mp 83-84 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_{D25} +24$ (MeOH)

-----文献-----

Raldugin, V.A. et al., *Khim. Prir. Soedin.*, 1970, 6, 541; *Chem. Nat. Compd.* (Engl. Transl.), 559, (分離, 構造決定, 合成法)

Calderón, J.S. et al., *Phytochemistry*, 1987, 26, 2639, (分離)

Kuo, Y.-H. et al., *Heterocycles*, 1990, 31, 1705, (15-Hydroxypinusolidic acid)

§ 18-Nor-4(19),8,11,13-abietatetraene

[化学名・別名] 19-Nordehydro-4(18)-abietene

[CAS No.] 22478-62-2

[化合物分類] テルペノイド (Nor- and homoabietane diterpenoid)

[構造式]

[分子式] $C_{19}H_{26}$

[分子量] 254.414

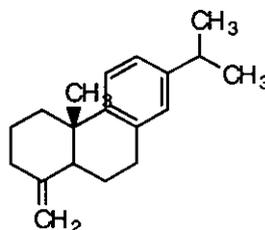
[正確な分子量] 254.20345

[基原] 次の植物のオレオレジンから分離: *Pinus koraiensis*

[性状] ワックス様の結晶

[比旋光度]: $[\alpha]_{D24} +147$ (c, 0.88 in MeOH)

[屈折率] $n_D^{25} 1.534$



-----文献-----

Bennett, C.R. et al., *Aust. J. Chem.*, 1969, 22, 1711, (合成法)

Raldugin, V.A. et al., *Khim. Prir. Soedin.*, 1971, 7, 595; *Chem. Nat. Compd.* (Engl. Transl.), 1971, 7, 574, (分離)

*****ナットウ (Natto) *****

§ § マメ科ダイズ (*Glycine max* Merrill) を納豆菌 (*Bacillus natto* Sawamura) により発酵させたもの。

「ダイズ」参照

*****ナツメ (Jujube) *****

§ § クロウメモドキ科ナツメ (*Zizyphus jujuba* Miller var. *inermis* Rehder) の果実。

§ Adouetine X

[化学名・別名] 2-(Dimethylamino)-4-methyl-N-[3-(1-methylethyl)-7-(1-methylpropyl)

-5,8-dioxo-2-oxa-6,9-diazabicyclo[10.2.2]-hexadeca-10,12,14,15-tetraen-4-yl] pentanamide (CAS 名).

Ceanothamine B

[CAS No.] 19542-37-1

[化合物分類] アルカロイド化合物 (Peptide alkaloid)

[構造式]

[分子式] $C_{28}H_{44}N_4O_4$

[分子量] 500.68

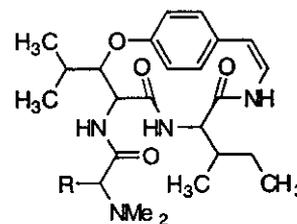
[正確な分子量] 500.336256

[基原] 次の植物から得られるアルカロイド: *Waltheria americana*, *Ceanothus americanus* の根皮, *Zizyphus jujuba* var. *inermis*, *Alphitonia macrocarpa* の葉 (アオギリ科, クロウメモドキ科)

[性状] 針状結晶 (MeOH or CH_2Cl_2 /EtOAc)

[融点] Mp 279-280.5 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_{D25} -370$ (c, 0.205 in $CHCl_3$)



R = $CH_2CH(CH_3)_2$

-----文献-----

- Païs, M. et al., Ann. Pharm. Fr., 1963, 21, 139; CA, 59, 5215c, (分離, IR, H-NMR)
 Warnhoff, E.W. et al., Can. J. Chem., 1965, 43, 2594, (分離, UV, Mass, H-NMR)
 Servis, R.E. et al., J.A.C.S., 1969, 91, 5619, (分離, Mas)
 Branch, G.B. et al., Aust. J. Chem., 1972, 25, 2209, (分離)
 Otsuka, H. et al., Phytochemistry, 1974, 13, 2016, (分離, IR, H-NMR, Mas)

§ Daechuine S3

[CAS No.] 123089-20-3

[化合物分類] アルカロイド化合物 (Peptide alkaloid)

[構造式]

[分子式] $C_{35}H_{53}N_5O_6$

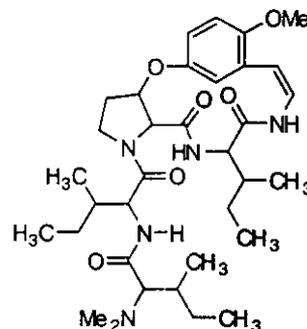
[分子量] 627.823

[正確な分子量] 627.399585

[基原] 次の植物から得られるアルカロイド: Daechu tree (*Zizyphus jujuba* var. *inermi*) の茎皮 (クロウメモドキ科)

[融点] Mp 192-194 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D -440$



-----文献-----

- Han, B.H. et al., Pure Appl. Chem., 1989, 61, 443

§ Daechuine S7

[CAS No.] 123089-22-5

[化合物分類] アルカロイド化合物 (Peptide alkaloid)

[構造式]

[分子式] $C_{28}H_{42}N_4O_5$

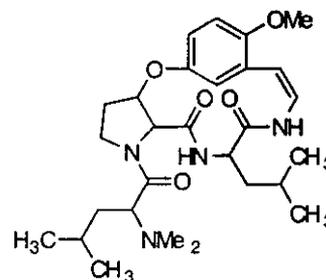
[分子量] 514.664

[正確な分子量] 514.315521

[基原] 次の植物から得られるアルカロイド: Daechu tree (*Zizyphus jujuba* var. *inermi*) の茎皮 (クロウメモドキ科)

[融点] Mp 158 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D -648.3$



-----文献-----

- Han, B.H. et al., Pure Appl. Chem., 1989, 61, 443

§ Daechuine S8-1

[CAS No.] 123089-23-6

[化合物分類] アルカロイド化合物 (Peptide alkaloid)

[構造式]

[分子式] $C_{34}H_{53}N_5O_6$

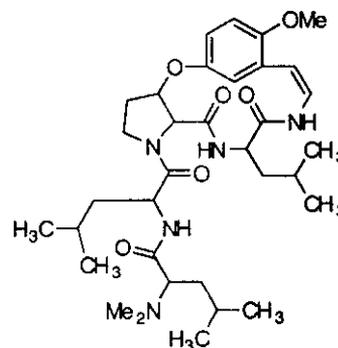
[分子量] 627.823

[正確な分子量] 627.399585

[基原] 次の植物から得られるアルカロイド: Daechu tree (*Zizyphus jujuba* var. *inermi*) の茎皮 (クロウメモドキ科)

[融点] Mp 185-188 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D -218.2$



-----文献-----

- Han, B.H. et al., Pure Appl. Chem., 1989, 61, 443

§ Franganine

[化学名・別名] Daechuine S4

[CAS No.] 19526-08-0

[化合物分類] アルカロイド化合物 (Peptide alkaloid)

[構造式]

[分子式] $C_{29}H_{44}N_4O_4$

[分子量] 500.68

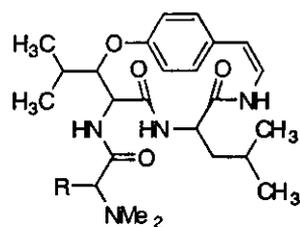
[正確な分子量] 500.336256

[基原] 次の植物から得られるアルカロイド: *Rhamnus frangula* の樹皮, *Euonymus europaeus* の根と根皮, *Melochia corchorifolia* (クロウメモドキ科, ニシキギ科, Sterculiaceae). また *Daechu tree* (*Zizyphus jujuba* var. *inermis*) の茎皮からも分離される (クロウメモドキ科)

[性状] 針状結晶 (petrol)

[融点] Mp 248 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_{D22} -302$ (c, 0.1 in CHCl₃)



R = (H₃C)₂CHCH₂-

-----文献-----

Tschesche, R. et al., Tet. Lett., 1968, 2993; 3817, (分離, H-NMR, Mass, 構造決定)

Bishay, D.W. et al., Phytochemistry, 1973, 12, 693, (UV, IR, Mas)

Han, B.H. et al., Pure Appl. Chem., 1989, 61, 443

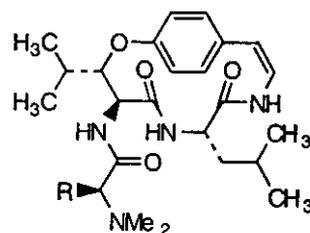
§ Franguloline

[化学名・別名] Sanjoinine A. Daechuine S1

[CAS No.] 19526-09-1

[化合物分類] アルカロイド化合物 (Peptide alkaloid)

[構造式]



R = PhCH₂-

[分子式] C₃₁H₄₂N₄O₄

[分子量] 534.697

[正確な分子量] 534.320606

[基原] 次の植物から得られるアルカロイド: *Rhamnus frangula* の葉, *Euonymus europaeus*, *Melochia pyramidata*, *Melochia corchorifolia*, *Discaria longispina* の根, *Zizyphus mauritiana* の樹皮, *Zizyphus nummularia* の根皮. また *Sanjoin* (*Zizyphus vulgaris* var. *spinosa* の種子), *Daechu tree* (*Zizyphus jujuba* var. *inermis*) の茎皮からも分離される (クロウメモドキ科, ニシキギ科, アオギリ科)

[用途] 強い鎮静活性を示す

[性状] 針状結晶 (EtOH 溶液もしくは CH₂Cl₂/MeOH/Et₂O)

[融点] Mp 244 °C (234-236 °C)

[比旋光度]: $[\alpha]_{D22} -299$ (c, 0.1 in CHCl₃)

-----文献-----

Tschesche, R. et al., Tet. Lett., 1968, 2993; 3817; 1972, 2609, (分離, H-NMR, Mass, 生育, 構造決定)

Mascaretti, O.A. et al., Phytochemistry, 1972, 11, 1133, (分離)

Tschesche, R. et al., Tetrahedron, 1975, 31, 2944, (分離)

Lagarias, J.C. et al., J. Nat. Prod., 1979, 42, 663, (分離, Mas)

Medina, E. et al., Annalen, 1981, 538, (分離, IR, H-NMR, Mas)

Han, B.H. et al., Pure Appl. Chem., 1989, 61, 443, (分離)

§ Frangulanine

[化学名・別名] 2-(Dimethylamino)-3-methyl-N-[3-(1-methylethyl)-7-(2-methylpropyl)]

-5,8-dioxo-2-oxa-6,9-diazabicyclo[10.2.2]hexadeca-10,12,14,15-tetraen-4-yl] pentanamide (CAS 名).

Ceanothamine A. Daechuine S2

[CAS No.] 25350-22-5

[化合物分類] アルカロイド化合物 (Peptide alkaloid)

[構造式]

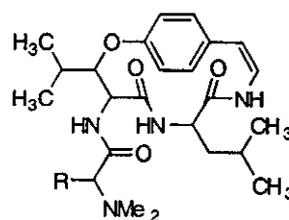
[分子式] C₂₈H₄₄N₄O₄

[分子量] 500.68

[正確な分子量] 500.336256

[基原] 次の植物から得られるアルカロイド: *Rhamnus frangula* と *Zizyphus sativa* の樹皮, *Discaria longispina* の根, *Ceanothus americanus* の根皮, *Hovenia dulcis*, *Hovenia tomentella*, *Zizyphus jujuba* var. *inermis*, *Euonymus europaeus* (クロウメモドキ科, ニシキギ科)

[性状] 針状結晶 (CHCl₃/petrol, MeOH or CH₂Cl₂/EtOAc)



R = H₃CCH₂CH(CH₃)-

[融点] Mp 276-279 °C (275-276 °C)
[比旋光度]: $[\alpha]_{D20} -288$ (c, 0.1 in CHCl₃)

-----文献-----

Warnhoff, E.W. et al., Can. J. Chem., 1965, 43, 2594, (分離, UV, H-NMR, Mas)
Tschesche, R. et al., Chem. Ber., 1967, 100, 3937, (分離, UV, CD, IR, H-NMR, Mass, 構造決定)
Mascaretti, O.A. et al., Phytochemistry, 1972, 11, 1133, (分離, IR)
Takai, M. et al., Phytochemistry, 1973, 12, 2985, (分離, IR, H-NMR, Mass, 誘導体)
Otsuka, H. et al., Phytochemistry, 1974, 13, 2016, (生育)
Takai, M. et al., Chem. Pharm. Bull., 1975, 23, 2556; 1976, 24, 2181, (H-NMR, conformn, 結晶構造)
Tschesche, R. et al., Phytochemistry, 1979, 18, 702, (分離)
Schmidt, U. et al., Chem. Comm., 1991, 1002, (合成法)

§ Maltoxazine

[化学名・別名] 1,2,3,3a,6,7-Hexahydrocyclopenta[d]pyrrolo[2,1-b][1,3]oxazin-8(5H)-one (CAS 名).
8-Oxo-1,2,3,3a,5,6,7,8-octahydrocyclopenta[d]pyrrolo[2,1-b][1,3]oxazine. Daechualkaloid A
[CAS No.] 80933-73-9

[その他の CAS No.] 111261-77-9

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

[構造式]

[分子式] C₁₀H₁₃NO₂

[分子量] 179.218

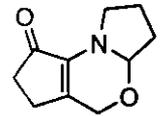
[正確な分子量] 179.097629

[基原] 麦芽から分離される芳香物質. *Zizyphus jujuba* var. *inermis* の果実から得られるアルカロイド(ク
ロウメドキ科)

[性状] 無定型

[融点] Mp 52 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_{D22} +0.3$ (c, 0.82 in CHCl₃)



-----文献-----

Tressl, R. et al., Helv. Chim. Acta, 1982, 65, 483, (Maltoxazine)
Han, B.H. et al., Tet. Lett., 1987, 28, 3957, (Daechualkaloid A)

§ Melonovine A; Stereoisomer (2)

[化学名・別名] Daechuine S5

[化合物分類] アルカロイド化合物 (Peptide alkaloid)

[構造式]

[分子式] C₂₇H₄₂N₄O₄

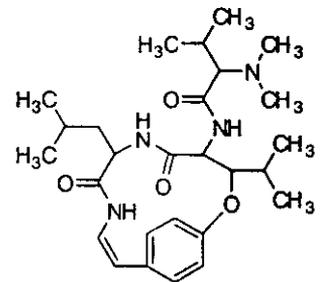
[分子量] 486.653

[正確な分子量] 486.320606

[基原] 次の植物から得られるアルカロイド: *Zizyphus jujuba* var. *inermis* の
茎皮(クロウメドキ科)

[融点] Mp 233-235 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D -421.3$



-----文献-----

Kapadia, G.J. et al., Phytochemistry, 1977, 16, 1431, (分離, IR, H-NMR, Mass, 構造決定)
Tschesche, R. et al., Phytochemistry, 1980, 19, 1000, (Pubescine A)
Han, B. et al., Pure Appl. Chem., 1989, 61, 443, (Daechuine S5)

§ Mucronine D

[化学名・別名] Daechuine S9

[CAS No.] 38496-00-3

[化合物分類] アルカロイド化合物 (Peptide alkaloid)

[構造式]

[分子式] $C_{37}H_{51}N_5O_6$

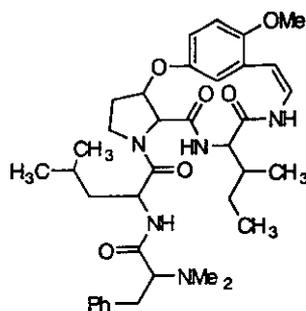
[分子量] 661.84

[正確な分子量] 661.383935

[基原] 次の植物から得られるアルカロイド: *Zizyphus mucronata* と *Zizyphus sativa* の樹皮, *Zizyphus nummularia* の根皮, *Zizyphus jujuba* と *Zizyphus jujuba* var. *inermis* の茎皮 (クロウメモドキ科)

[性状] 無定型

[比旋光度]: $[\alpha]_{D20} -487$ (c, 0.12 in $CHCl_3$)



-----文献-----

Tschesche, R. et al., Chem. Ber., 1972, 105, 3106; 1974, 107, 3180, (分離, UV, CD, IR, H-NMR, Mass, 構造決定)

Tschesche, R. et al., Phytochemistry, 1976, 15, 541; 1979, 18, 702, (分離)

Han, B.H. et al., Pure Appl. Chem., 1989, 61, 443

Barboni, L. et al., Phytochemistry, 1994, 35, 1579, (O-Demethylmucronine D)

§ Nummularine R; Stereoisomer (?)

[化学名・別名] Daechuine S10

[化合物分類] アルカロイド化合物 (Peptide alkaloid)

[構造式]

[分子式] $C_{33}H_{41}N_5O_5$

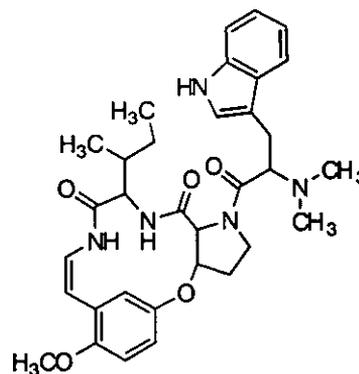
[分子量] 587.717

[正確な分子量] 587.31077

[基原] 次の植物から得られるアルカロイド: *Zizyphus jujuba* var. *inermis* の茎皮 (クロウメモドキ科)

[融点] Mp 126-128 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D -381.5$



-----文献-----

Devi, S. et al., Phytochemistry, 1987, 26, 3374, (Nummularine R)

Han, B.H. et al., Pure Appl. Chem., 1989, 61, 443, (Daechuine S10)

§ Paliurine E

[化学名・別名] Daechuine S6

[CAS No.] 123089-21-4

[化合物分類] アルカロイド化合物 (Peptide alkaloid)

[構造式]

[分子式] $C_{31}H_{40}N_4O_5$

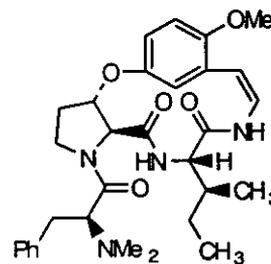
[分子量] 548.681

[正確な分子量] 548.299871

[基原] 次の植物から得られるアルカロイド: Daechu tree (*Zizyphus jujuba* var. *inermis*) の茎皮, *Paliurus ramossissimus* (クロウメモドキ科)

[融点] Mp 192 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D -393.5$



-----文献-----

Han, B.H., Arch. Pharmacol. Res., 1987, 10, 208, (分離, 性質)

Han, B.H. et al., Pure Appl. Chem., 1989, 61, 443

Ghedira, K. et al., Phytochemistry, 1995, 38, 767, (Lotusine F)

Lin, H.-Y. et al., J. Nat. Prod., 2000, 63, 1338-1343, (Paliurine E)

§ Paliurine E; O-De-Me

[化学名・別名] Daechuine S26. Daechucyclopeptide I

[CAS No.] 115610-63-4

[化合物分類] アルカロイド化合物 (Peptide alkaloid)

[構造式]

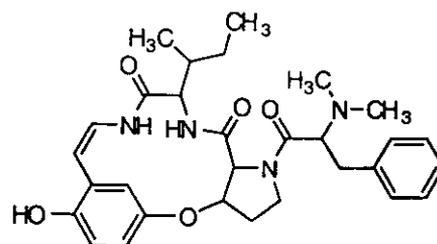
[分子式] C₃₀H₃₈N₂O₅

[分子量] 534.654

[正確な分子量] 534.284221

[基原] 次の植物から得られるアルカロイド: *Zizyphus jujuba* var. *inermis* の茎皮(クロウメモドキ科)

[融点] Mp 114 °C



-----文献-----

Han, B.H., Arch. Pharmacol Res., 1987, 10, 208, (分離, 性質)

Han, B.H. et al., Pure Appl. Chem., 1989, 61, 443

Ghedira, K. et al., Phytochemistry, 1995, 38, 767, (Lotusine F)

Lin, H.-Y. et al., J. Nat. Prod., 2000, 63, 1338-1343, (Paliurine E)

§ Zizyphusine;

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

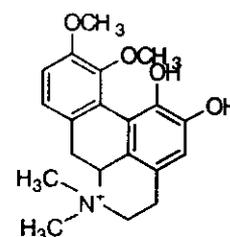
[構造式]

[基原] 次の植物の種子から得られるアルカロイド: *Zizyphus vulgaris* var. *spinosa* と *Zizyphus jujuba* var. *inermis* (クロウメモドキ科)

[用途] 鎮静に活性を示す。

[融点] Mp 214-216 °C

[比旋光度]: [α]_D +317



-----文献-----

Han, B.H. et al., Arch. Pharmacol Res., 1987, 10, 203; 208

Han, B.H. et al., Pure Appl. Chem., 1989, 61, 443

§ § クロウメモドキ科サネブトナツメ (*Zizyphus jujuba* Miller var. *spinosa* H. H. HU) の果実。
該当物質なし

*****ナツメグ (Nutmeg, Mace) *****

§ § ニクズク科ニクズク (*Myristica fragrans* Houttuyn) の種子の核仁または仮種皮。

§ 2-(4-Allyl-2,6-dihydroxyphenoxy)-1-(3,4-dihydroxyphenyl)-1-propanol; (R*, S*)-form, 3,3',5'-Tri-Me ether

[化学名・別名] α-[1-[2,6-Dimethoxy-4-(2-propenyl)phenoxy]ethyl]

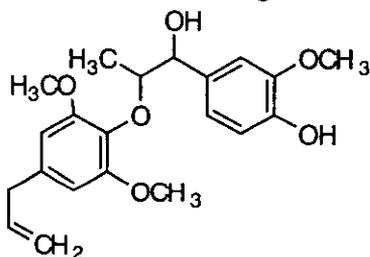
-4-hydroxy-3-methoxybenzenemethanol (CAS 名). 2-(4-Allyl-2,6-dimethoxyphenoxy)-1-

(4-hydroxy-3-methoxyphenyl)-1-propanol

[CAS No.] 52190-21-3

[化合物分類] リグナン化合物 (Neolignan)

[構造式]



[分子式]

C₂₁H₂₆O₆

[分子量]

374.433

[正確な分子量] 374.17294

[基原] *Myristica fragrans* の種子の核仁

[融点] Mp 96.5-97.5 °C

-----文献-----

Isogai, A. et al., Agric. Biol. Chem., 1973, 37, 1479, (分離, IR, UV, H-NMR, Mas)

Forrest, J.E., J.C.S. Perkin 1, 1974, 205, (分離, UV, H-NMR, Mas)

Kasahara, H. et al., Phytochemistry, 1995, 40, 1515, (絶対構造)

§ 2-(4-Allyl-2,6-dihydroxyphenoxy)-1-(3,4-dihydroxyphenyl)-1-propanol; (*R**, *S**)-form, 3,3',5,5'-Tetra-Me ether

[化学名・別名] 2-(4-Allyl-2,6-dimethoxyphenoxy)-1-(3,4-dimethoxyphenyl)-1-propanol

[CAS No.] 41535-92-6

[化合物分類] リグナン化合物 (Neolignan)

[構造式]

[分子式] $C_{22}H_{26}O_6$

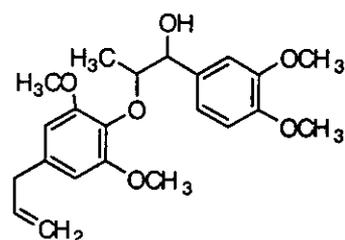
[分子量] 388.46

[正確な分子量] 388.18859

[基原] *Myristica fragrans*

[性状] 結晶

[融点] Mp 65-66 °C



-----文献-----

Isogai, A. et al., Agric. Biol. Chem., 1973, 37, 1479, (分離, IR, UV, H-NMR, Mas)

Forrest, J.E., J.C.S. Perkin 1, 1974, 205, (分離, UV, H-NMR, Mas)

Kasahara, H. et al., Phytochemistry, 1995, 40, 1515, (絶対構造)

§ 2-(4-Allyl-2,6-dihydroxyphenoxy)-1-(3,4-dihydroxyphenyl)-1-propanol; (*R**, *S**)-form, 3,4-Methylene, 3',5'-di-Me ether

[化学名・別名] 2-(4-Allyl-2,6-dimethoxyphenoxy)-1-(3,4-methylenedioxyphenyl)-1-propanol

[CAS No.] 50354-29-5

[化合物分類] リグナン化合物 (Neolignan)

[構造式]

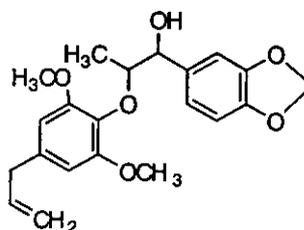
[分子式] $C_{21}H_{24}O_6$

[分子量] 372.417

[正確な分子量] 372.15729

[基原] *Myristica fragrans*

[性状] オイル



-----文献-----

Isogai, A. et al., Agric. Biol. Chem., 1973, 37, 1479, (分離, IR, UV, H-NMR, Mas)

Forrest, J.E., J.C.S. Perkin 1, 1974, 205, (分離, UV, H-NMR, Mas)

Kasahara, H. et al., Phytochemistry, 1995, 40, 1515, (絶対構造)

§ 2-(4-Allyl-2,6-dihydroxyphenoxy)-1-(3,4-dihydroxyphenyl)-1-propanol; (*R**, *S**)-form, 3,4-Methylene, 3',5'-di-Me ether, Ac

[化合物分類] リグナン化合物 (Neolignan)

[構造式]

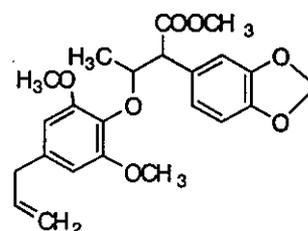
[分子式] $C_{23}H_{26}O_7$

[分子量] 414.454

[正確な分子量] 414.167855

[基原] *Myristica fragrans*

[性状] オイル



-----文献-----

Isogai, A. et al., Agric. Biol. Chem., 1973, 37, 1479, (分離, IR, UV, H-NMR, Mas)

Forrest, J.E., J.C.S. Perkin 1, 1974, 205, (分離, UV, H-NMR, Mas)

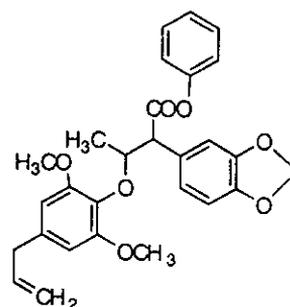
Kasahara, H. et al., Phytochemistry, 1995, 40, 1515, (絶対構造)

§ 2-(4-Allyl-2,6-dihydroxyphenoxy)-1-(3,4-dihydroxyphenyl)-1-propanol; (*R**, *S**)-form, 3,4-Methylene, 3',5'-di-Me ether, benzoyl

[化合物分類] リグナン化合物 (Neolignan)

[構造式]

[分子式] $C_{23}H_{28}O_7$
[分子量] 476.525
[正確な分子量] 476.183505
[基原] *Myristica fragrans*
[性状] オイル

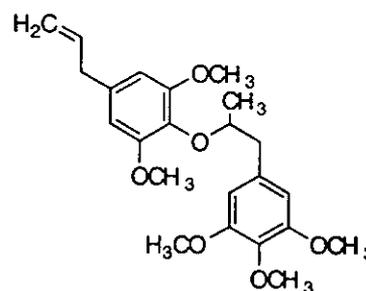


-----文献-----

Isogai, A. et al., *Agric. Biol. Chem.*, 1973, 37, 1479, (分離, IR, UV, H-NMR, Mas)
Forrest, J.E., *J.C.S. Perkin 1*, 1974, 205, (分離, UV, H-NMR, Mas)
Kasahara, H. et al., *Phytochemistry*, 1995, 40, 1515, (絶対構造)

§ 2-(4-Allyl-2,6-dihydroxyphenoxy)-1-(3,4,5-trihydroxyphenyl) propane; Penta-Me ether

[化学名・別名] Virolongin B. β -O-Dilignol
[CAS No.] 124151-41-3
[化合物分類] リグナン化合物 (Neolignan)
[構造式]
[分子式] $C_{23}H_{20}O_6$
[分子量] 402.486
[正確な分子量] 402.20424
[基原] *Virola carinata*, *Myristica fragrans*
[用途] カイコの幼虫の成長を阻害する
[性状] オイル

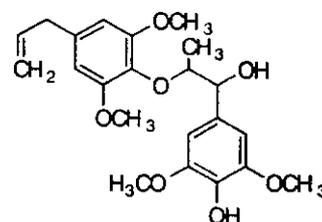


-----文献-----

Isogai, A. et al., *Agric. Biol. Chem.*, 1973, 37, 193; 889; 1479, (分離, 構造決定)
Forrest, J.E. et al., *J.C.S. Perkin 1*, 1974, 205, (分離, 合成法, 構造決定)
Calvacante, S.H. et al., *Phytochemistry*, 1985, 24, 1051, (分離)
Muhammed, I. et al., *J. Nat. Prod.*, 1989, 52, 1177, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ 2-(4-Allyl-2,6-dihydroxyphenoxy)-1-(3,4,5-trihydroxyphenyl)-1-propanol; 3,3',4,5'-Tetra-Me ether

[化学名・別名] 2-(4-Allyl-2,6-dimethoxyphenoxy)-1-(3-hydroxy-4,5-dimethoxyphenyl)-1-propanol
[CAS No.] 108907-57-9
[化合物分類] リグナン化合物 (Neolignan)
[構造式]
[分子式] $C_{27}H_{28}O_7$
[分子量] 404.459
[正確な分子量] 404.183505
[基原] *Myristica fragrans* のオイル
[性状] オイル



-----文献-----

Isogai, A. et al., *Agric. Biol. Chem.*, 1973, 37, 193; 889; 1479
Forrest, J.E. et al., *J.C.S. Perkin 1*, 1974, 205
Hattori, H. et al., *Chem. Pharm. Bull.*, 1987, 35, 668
Zacchino, S.A. et al., *J. Nat. Prod.*, 1988, 51, 1261, (合成法, IR, H-NMR, C13-NMR, Mas)

§ 2-(4-Allyl-2,6-dihydroxyphenoxy)-1-(3,4,5-trihydroxyphenyl)-1-propanol; 3,3',5,5'-Tetra-Me ether

[化学名・別名] 2-(4-Allyl-2,6-dimethoxyphenoxy)-1-(4-hydroxy-3,5-dimethoxyphenyl)-1-propanol

[CAS No.] 108907-53-5

[化合物分類] リグナン化合物 (Neolignan)

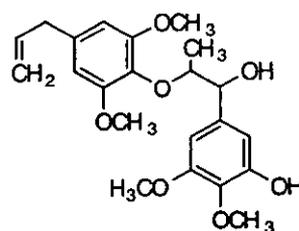
[構造式]

[分子式] $C_{23}H_{30}O_7$

[分子量] 404.459

[正確な分子量] 404.183505

[基原] *Myristica fragrans* のオイル



-----文献-----

Isogai, A. et al., Agric. Biol. Chem., 1973, 37, 193; 889; 1479

Forrest, J.E. et al., J.C.S. Perkin 1, 1974, 205

Hattori, H. et al., Chem. Pharm. Bull., 1987, 35, 668

§ 2-(4-Allyl-2,6-dihydroxyphenoxy)-1-(3,4,5-trihydroxyphenyl)-1-propanol; Penta-Me ether

[化学名・別名] 2-(4-Allyl-2,6-dimethoxyphenoxy)-1-(3,4,5-trimethoxyphenyl)-1-propanol

[CAS No.] 41551-58-0

[化合物分類] リグナン化合物 (Neolignan)

[構造式]

[分子式] $C_{23}H_{30}O_7$

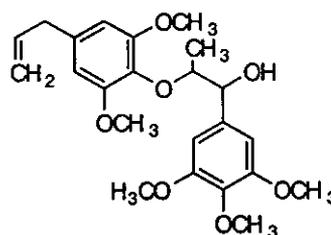
[分子量] 418.486

[正確な分子量] 418.199155

[基原] *Myristica fragrans*

[用途] カイコの幼虫の成長を阻害する

[融点] Mp 70-72 °C (66-66.5 °C)



-----文献-----

Isogai, A. et al., Agric. Biol. Chem., 1973, 37, 193; 889; 1479

Forrest, J.E. et al., J.C.S. Perkin 1, 1974, 205

Hattori, H. et al., Chem. Pharm. Bull., 1987, 35, 668

§ 2-(4-Allyl-2-hydroxyphenoxy)-1-(3,4-dihydroxyphenyl)-1-propanol; 2',3-Di-Me ether

[化学名・別名] 2-(4-Allyl-2-methoxyphenoxy)-1-(4-hydroxy-3-methoxyphenyl)-1-propanol

[CAS No.] 108907-55-7

[化合物分類] リグナン化合物 (Neolignan)

[構造式]

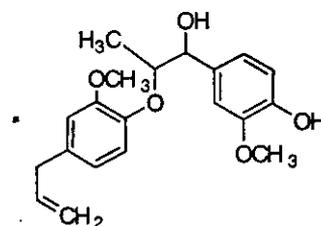
[分子式] $C_{20}H_{24}O_5$

[分子量] 344.407

[正確な分子量] 344.162375

[基原] *Myristica fragrans* のオイル

[性状] オイル



-----文献-----

Hattori, M. et al., Chem. Pharm. Bull., 1987, 35, 668

§ 3,4:3',4'-Bis(methylenedioxy)lignan; (2R,3R)-form, 7S-Hydroxy

[化学名・別名] 7-Hydroxyaustrobailignan 5

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

[構造式]

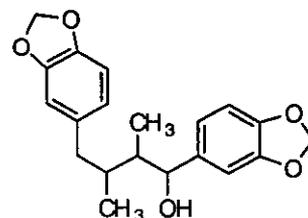
[分子式] $C_{20}H_{22}O_5$

[分子量] 342.391

[正確な分子量] 342.146725

[基原] 次の植物から分離: *Myristica fragrans*

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{25} -24.7$ (c, 0.47 in $CHCl_3$)



-----文献-----

Hattori, M. et al., Chem. Pharm. Bull., 1988, 36, 648, (7-Hydroxyaustrobailignan 5)

§ Dehydroguaiaretic acid; 7 α , 8 β -Dihydro

[化学名・別名] 1,2-Dihydrodehydroguaiaretic acid. 4,4'-Dihydroxy-3,3'-dimethoxy-2,7'-cyclo lign-7-ene.

Myrisfransin

[CAS No.] 135962-21-9

[その他の CAS No.] 180470-31-9

[化合物分類] リグナン化合物 (Apolignan)

[構造式]

[分子式] $C_{20}H_{22}O_4$

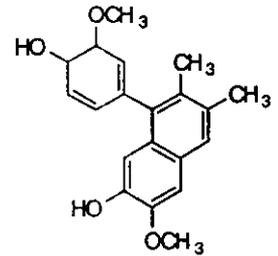
[分子量] 326.391

[正確な分子量] 326.15181

[基原] *Knema furfuracea*, *Myristica fragrans*

[性状] ガム

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{25} +39.95$ (c, 0.39 in $CHCl_3$)



-----文献-----

Miyazawa, M. et al., Nat. Prod. Lett., 1996, 8, 25, (Myrisfransin)

§ 2,3-Dihydro-7-methoxy-2-(3-methoxy-4,5-methylenedioxyphenyl)-3-methyl-5-(1-propenyl) benzofuran

[CAS No.] 50354-06-8

[化合物分類] リグナン化合物 (Neolignan)

[構造式]

[分子式] $C_{21}H_{22}O_5$

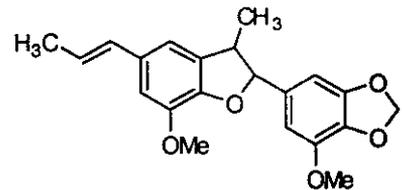
[分子量] 354.402

[正確な分子量] 354.146725

[基原] 次の植物から分離: *Myristica fragrans* の種子の核仁

[性状] オイル

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{25} +43.5$ (c, 1.65 in $CHCl_3$)



-----文献-----

Isogai, A. et al., Agric. Biol. Chem., 1973, 37, 889; 1479, (分離)

§ 4,4'-Dihydroxy-3,3'-dimethoxy-7,7'-epoxylignan; (7*R**,7'*R**,8*R**,8'*R**)-form

[化学名・別名] (2 α , 3 β , 4 α , 5 β)-form. Fragransin A₂

[CAS No.] 112652-46-7

[化合物分類] リグナン化合物 (7,7'-Epoxytetrahydrofuranoid lignan)

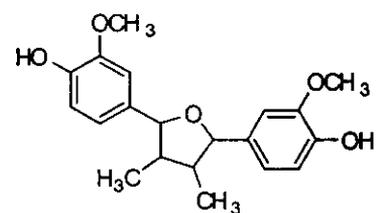
[構造式]

[基原] 次の植物から分離: arils of *Myristica fragrans*, *Myristica dactyloides*

[性状] 結晶

[融点] Mp 200-202 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D +79$ ($CHCl_3$)



-----文献-----

Hattori, M. et al., Chem. Pharm. Bull., 1987, 35, 3315, (Fragransin A₂)

§ 2-(3,4-Dihydroxyphenyl)-2,3-dihydro-3-methyl-5-(1-propenyl) benzofuran; (7'*S*,8')-form, 3'-Me ether

[CAS No.] 119555-99-6

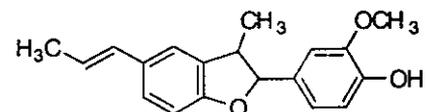
[化合物分類] リグナン化合物 (Neolignan)

[構造式]

[分子量] 296.365

[正確な分子量] 296.141245

[基原] *Myristica fragrans* の種子



-----文献-----

Achenbach, H. et al., Phytochemistry, 1987, 26, 1159, (分離)

Shin, K.H. et al., Arch. Pharmacol Res., 1988, 11, 240, (分離)

Benevides, P.J.C. et al., Phytochemistry, 1999, 52, 339, (分離, UV, IR, CD, H-NMR, C13-NMR, Mas)

§ 2-(3,4-Dihydroxyphenyl)-5-(1,2-dihydroxypropyl)-2,3-dihydro-6-hydroxy-3-methylbenzofuran; (7ξ,7'R,8ξ,8'R)-form, 3',5,7-Tri-Me ether

[化学名・別名] Fragransol A

[CAS No.] 114394-19-3

[化合物分類] リグナン化合物 (Neolignan)

[構造式]

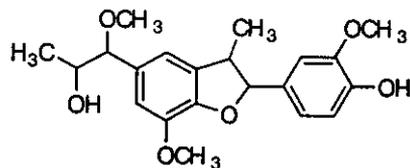
[分子式] C₂₁H₂₆O₆

[分子量] 374.433

[正確な分子量] 374.17294

[基原] *Myristica fragrans*

[性状] オイル



-----文献-----

Hada, S. et al., Phytochemistry, 1988, 27, 563, (Fragransol)

Nascimento, I.R. et al., Phytochemistry, 1999, 52, 345, (Licarinediol)

Tsai, I.L. et al., Planta Med., 2000, 66, 403, (Machilusol)

§ Fragransol B

[CAS No.] 114394-20-6

[化合物分類] フラボノイド (2-Arylbenzofuran flavonoid)

[構造式]

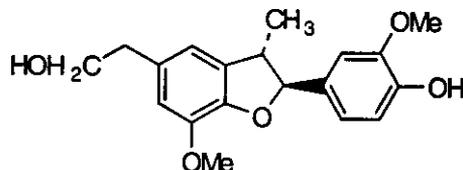
[分子式] C₁₉H₂₂O₅

[分子量] 330.38

[正確な分子量] 330.146725

[基原] *Myristica fragrans*

[性状] オイル



-----文献-----

Hada, S. et al., Phytochemistry, 1988, 27, 563, (分離)

Juhász, L. et al., J. Nat. Prod., 2000, 63, 866, (合成法, H-NMR, C13-NMR)

§ Fragransol C

[CAS No.] 114926-96-4

[化合物分類] リグナン化合物 (Neolignan)

[構造式]

[分子式] C₂₁H₂₄O₅

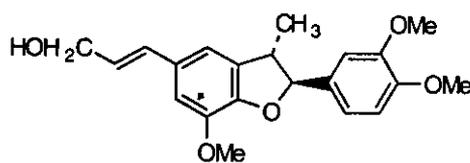
[分子量] 356.418

[正確な分子量] 356.162375

[基原] *Myristica fragrans*

[性状] オイル

[比旋光度]: [α]_D -44 (c, 0.1 in CHCl₃)



-----文献-----

Hattori, M. et al., Chem. Pharm. Bull., 1988, 36, 648, (分離)

Juhász, L. et al., J. Nat. Prod., 2000, 63, 866, (合成法, H-NMR, C13-NMR)

§ Fragransol D

[CAS No.] 114892-43-2

[化合物分類] リグナン化合物 (Neolignan)

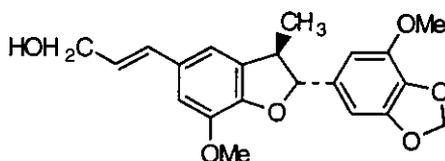
[構造式]

[分子式] C₂₁H₂₂O₆

[分子量] 370.401

[正確な分子量] 370.14164

[基原] *Myristica fragrans*



[性状] オイル
[比旋光度]: $[\alpha]_D^{25} +47.6$ (c, 1 in CHCl₃)

-----文献-----

Hattori, M. et al., Chem. Pharm. Bull., 1988, 36, 648, (Fragransol D)

§ Guaiacin

[化学名・別名] 5,6,7,8-Tetrahydro-8-(4-hydroxy-3-methoxyphenyl)-3-methoxy-6,7-dimethyl-2-naphthalenol
(CAS名). 4,4'-Dihydroxy-3',5'-dimethoxy-2,7'-cyclo lignan

[CAS No.] 36531-08-5

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

[構造式]

[分子式] C₂₀H₂₄O₄

[分子量] 328.407

[正確な分子量] 328.16746

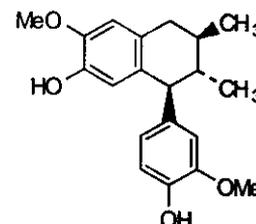
[一般的性質] Lignan numbering shown

[基原] *Machilus edulis*, *Guaiacum officinale*, *Osteophloeum platyspermum*, *Saururus cernuus*, *Virola carinata*, *Myristica fragrans*

[性状] 結晶 (C₆H₆)

[融点] Mp 204-206 °C (198-200 °C)

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{25} +46$ (CHCl₃)



-----文献-----

King, F.E. et al., J.C.S., 1964, 4011, (分離)

Majumder, P.L. et al., Phytochemistry, 1972, 11, 811, (分離)

Gottlieb, O.R. et al., Phytochemistry, 1976, 15, 773

§ 3,3',4,4',5,5'-Hexahydroxy-7,7'-epoxylignan; (7R,7'R,8R,8'R)-form, 3,3',5,5'-Tetra-Me ether

[化学名・別名] 4,4'-Dihydroxy-3,3',5,5'-tetramethoxy-7,7'-epoxylignan. Fragransin B:

[CAS No.] 112572-55-1

[化合物分類] リグナン化合物 (7,7'-Epoxytetrahydrofuranoid lignan)

[構造式]

[分子式] C₂₂H₂₈O₇

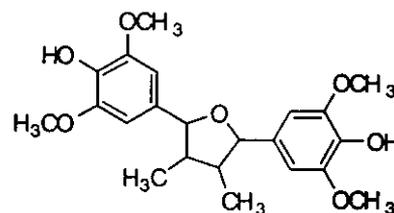
[分子量] 404.459

[正確な分子量] 404.183505

[基原] 次の植物から分離: *Myristica fragrans*

[性状] オイル

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{25} 0$ (CHCl₃)



-----文献-----

Hattori, M. et al., Chem. Pharm. Bull., 1987, 35, 3315, (Fragransin)

§ 3,3',4,4',5,5'-Hexahydroxy-7,7'-epoxylignan; (7R*,7'S*,8R*,8'S*)-form, 3,3',5,5'-Tetra-Me ether

[化学名・別名] Fragransin B:

[CAS No.] 112516-03-7

[化合物分類] リグナン化合物 (7,7'-Epoxytetrahydrofuranoid lignan)

[構造式]

[分子式] C₂₂H₂₈O₇

[分子量] 404.459

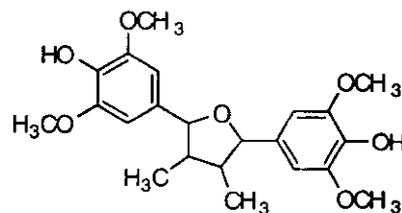
[正確な分子量] 404.183505

[基原] 次の植物から分離: *Myristica fragrans*

[性状] 結晶

[融点] Mp 100-102 °C

[その他のデータ] 光学不活性 (meso-)



-----文献-----

Hattori, M. et al., Chem. Pharm. Bull., 1987, 35, 3315, (Fragransin)

§ 3,3',4,4',5,5'-Hexahydroxy-7,7'-epoxylignan; (7R*,7'S*,8S*,8'S*)-form, 3,3',5,5'-Tetra-Me ether

[化学名・別名]Fragransin B₁

[CAS No.]112572-56-2

[化合物分類]リグナン化合物(7,7'-Epoxytetrahydrofuranoid lignan)

[構造式]

[分子式]C₂₂H₂₈O₇

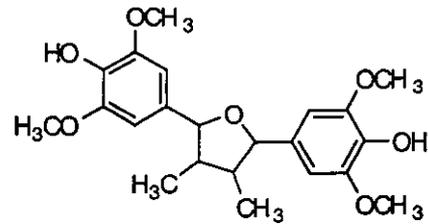
[分子量]404.459

[正確な分子量]404.183505

[基原]次の植物から分離: *Myristica fragrans*

[性状]オイル

[比旋光度]:[α]_D +12.5 (c, 1.02 in CHCl₃)



-----文献-----

Hattori, M. et al., Chem. Pharm. Bull., 1987, 35, 3315, (Fragransin)

§ 4-Hydroxy-3-methoxy-3',4'-methylenedioxy-7,7'-epoxylignan; (7R,7'S,8S,8')-form

[化学名・別名]Austrobailignan 7

[CAS No.]55890-25-0

[化合物分類]リグナン化合物(7,7'-Epoxytetrahydrofuranoid lignan)

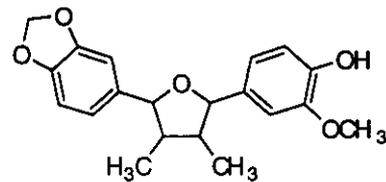
[構造式]

[基原]*Austrobaileya scandens*, メース(*Myristica fragran*)

[性状]青白い黄色のガム

[沸点]Bp_{0.02} 130 °C

[比旋光度]:[α]_D²⁵ +12 (c, 2.9 in CHCl₃)



-----文献-----

Murphy, S.T. et al., Aust. J. Chem., 1975, 28, 81, (分離, 構造決定)

Hada, S. et al., Phytochemistry, 1988, 27, 563, (Fragransin E₁)

Urzua, A. et al., Phytochemistry, 1993, 34, 874, (分離)

Gonzalez-Coloma, A. et al., Phytochemistry, 1994, 35, 607, (分離)

Prasad, A.K. et al., Tetrahedron, 1994, 50, 10579, (分離, 誘導体)

De Almeida Blumenthal, E.E. et al., Phytochemistry, 1997, 46, 745, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ 4-Hydroxy-3-methoxy-3',4'-methylenedioxy-7,7'-epoxylignan; (7R*,7'S*,8R*,8'S*)-form

[化学名・別名]Machilin F. Fragransin E₁. 3-Epiaustrobailignan 7

[CAS No.]114488-90-3

[化合物分類]リグナン化合物(7,7'-Epoxytetrahydrofuranoid lignan)

[構造式]

[分子式]C₂₀H₂₂O₅

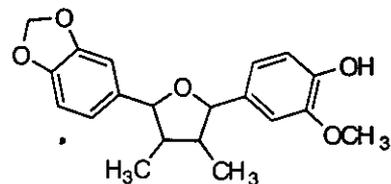
[分子量]342.391

[正確な分子量]342.146725

[基原]メース(*Myristica fragran*), *Machilus thunbergii*, *Aristolochia chilensis*

[性状]オイル

[その他のデータ]絶対構造は未知 (quasi-meso)



-----文献-----

Hada, S. et al., Phytochemistry, 1988, 27, 563, (Fragransin E₁)

§ Myristicanol A

[CAS No.] 114892-44-3

[化合物分類] リグナン化合物 (Neolignan)

[構造式]

[分子式] $C_{23}H_{30}O_8$

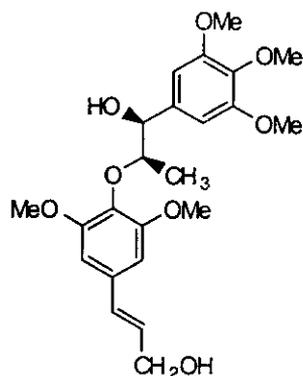
[分子量] 434.485

[正確な分子量] 434.19407

[基原] the arils of *Myristica fragrans* (mace)

[性状] オイル

[その他のデータ] Polysyphorin に類似



Relative configuration

-----文献-----

Hattori, M. et al., Chem. Pharm. Bull., 1988, 36, 648, (分離, IR, H-NMR, C13-NMR, Mas)

§ Myristicanol A; 3'-Demethoxy

[化学名・別名] Myristicanol B

[CAS No.] 114912-33-3

[化合物分類] リグナン化合物 (Neolignan)

[構造式]

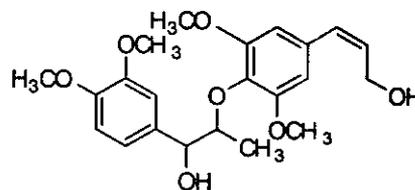
[分子式] $C_{22}H_{28}O_7$

[分子量] 404.459

[正確な分子量] 404.183505

[基原] the arils of *Myristica fragrans*

[性状] オイル



-----文献-----

Hattori, M. et al., Chem. Pharm. Bull., 1988, 36, 648, (分離, IR, H-NMR, C13-NMR, Mas)

§ Otobain; (-)-form, 7-Oxo

[化学名・別名] Otobanone. 7-OxoOtobain

[CAS No.] 34426-79-4

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

[構造式]

[分子式] $C_{20}H_{18}O_5$

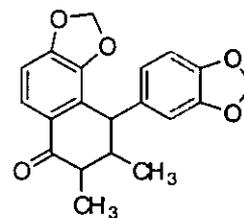
[分子量] 338.359

[正確な分子量] 338.115425

[基原] 次の植物から分離: *Myristica simarum*, ナツメグ (*Myristica fragran*)

[融点] Mp 175-176 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D -27.1$ (c, 0.7 in $CHCl_3$)



-----文献-----

Gilchrist, T. et al., J.C.S., 1962, 1780, (分離)

Klyne, W. et al., J.C.S. (C), 1966, 893, (絶対構造)

Kuo, Y.H. et al., Experientia, 1976, 32, 828, (分離)

Kuo, Y.H. et al., Chem. Pharm. Bull., 1989, 37, 2310, (分離, H-NMR)

§ 3,3',4,4',5-Pentahydroxy-7,7'-epoxylignan; (7R*,7'R*,8R*,8'R*)-form, 3,3',5-Tri-Me ether

[化学名・別名] Frangansin C₂

[CAS No.] 112572-54-0

[化合物分類] リグナン化合物 (7,7'-Epoxytetrahydrofuranoid lignan)

[構造式]

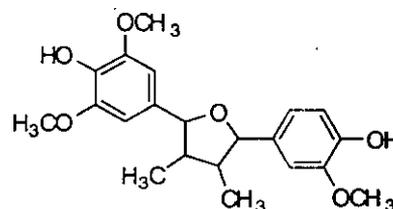
[分子式] $C_{21}H_{26}O_8$

[分子量] 374.433

[正確な分子量] 374.17294

[基原] 次の植物から分離: *Myristica fragrans*

[性状] オイル



[比旋光度]: $[\alpha]_D +20.2$ (c, 0.11 in CHCl₃)

-----文献-----

Hattori, M. et al., Chem. Pharm. Bull., 1987, 35, 3315

Hada, S. et al., Phytochemistry, 1988, 27, 563

Shimomura, H. et al., Phytochemistry, 1988, 27, 634

Lopes, N.P. et al., Phytochemistry, 1996, 43, 1089

§ 3,3',4,4',5-Pentahydroxy-7,7'-epoxylignan; (7*R**,7'*S**,8*S**,8'*S**)-form, 3,3',4',5-Tetra-Me ether

[化学名・別名]Fragransin D₂

[CAS No.]114422-24-1

[化合物分類]リグナン化合物(7,7'-Epoxytetrahydrofuranoid lignan)

[構造式]

[分子式]C₂₂H₂₈O₆

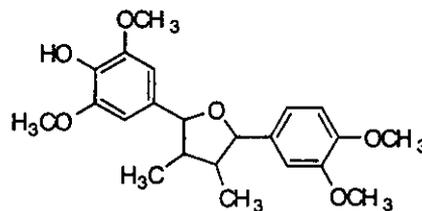
[分子量]388.46

[正確な分子量]388.18859

[基原]Myristica fragrans

[性状]オイル

[比旋光度]: $[\alpha]_D +11.45$ (c, 0.262 in CHCl₃)



-----文献-----

Hattori, M. et al., Chem. Pharm. Bull., 1987, 35, 3315

Hada, S. et al., Phytochemistry, 1988, 27, 563

Shimomura, H. et al., Phytochemistry, 1988, 27, 634

Lopes, N.P. et al., Phytochemistry, 1996, 43, 1089

§ 3,3',4,4',5-Pentahydroxy-7,7'-epoxylignan; (7*R**,7'*S**,8*S**,8'*S**)-form, 3,3',5-Tri-Me ether

[化学名・別名]Fragransin C₂

[CAS No.]112503-91-0

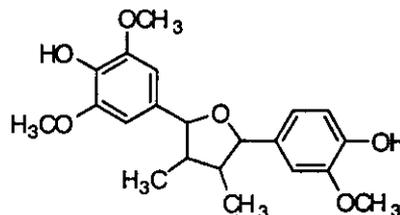
[化合物分類]リグナン化合物(7,7'-Epoxytetrahydrofuranoid lignan)

[構造式]

[基原]Myristica fragrans

[性状]オイル

[比旋光度]: $[\alpha]_D +7.2$ (c, 0.24 in CHCl₃)



-----文献-----

Hattori, M. et al., Chem. Pharm. Bull., 1987, 35, 3315

Hada, S. et al., Phytochemistry, 1988, 27, 563

Shimomura, H. et al., Phytochemistry, 1988, 27, 634

Lopes, N.P. et al., Phytochemistry, 1996, 43, 1089

§ 3,3',4,4',5-Pentahydroxy-7,7'-epoxylignan; (7*R**,7'*S**,8*S**,8'*R**)-form, 3,3',4,5-Tetra-Me ether

[化学名・別名]Fragransin D₂

[CAS No.]114422-23-0

[化合物分類]リグナン化合物(7,7'-Epoxytetrahydrofuranoid lignan)

[構造式]

[分子式]C₂₂H₂₈O₆

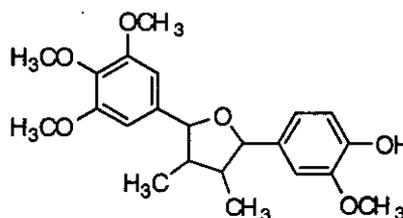
[分子量]388.46

[正確な分子量]388.18859

[基原]Myristica fragrans

[性状]オイル

[比旋光度]: $[\alpha]_D +30.49$ (c, 0.106 in CHCl₃)



-----文献-----

Hattori, M. et al., Chem. Pharm. Bull., 1987, 35, 3315

Hada, S. et al., Phytochemistry, 1988, 27, 563

Shimomura, H. et al., Phytochemistry, 1988, 27, 634

Lopes, N.P. et al., Phytochemistry, 1996, 43, 1089

§ 3,3',4,4',5-Pentahydroxy-7,7'-epoxylignan; (7*R**,7'*S**,8*R**,8'*R**)-form, 3,3',5-Tri-Me ether

[化学名・別名] Fragransin C₃

[CAS No.] 112572-53-9

[化合物分類] リグナン化合物 (7,7'-Epoxytetrahydrofuranoid lignan)

[構造式]

[分子式] C₂₁H₂₆O₆

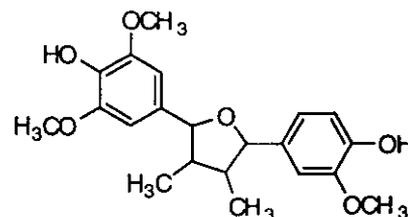
[分子量] 374.433

[正確な分子量] 374.17294

[基原] *Myristica fragrans*

[性状] オイル

[比旋光度]: [α]_D +19.6 (c, 0.29 in CHCl₃)



-----文献-----

Hattori, M. et al., Chem. Pharm. Bull., 1987, 35, 3315

Hada, S. et al., Phytochemistry, 1988, 27, 563

Shimomura, H. et al., Phytochemistry, 1988, 27, 634

Lopes, N.P. et al., Phytochemistry, 1996, 43, 1089

§ 3,3',4,4',5-Pentahydroxy-7,7'-epoxylignan; (7*R**,7'*S**,8*R**,8'*S**)-form, 3,3',5-Tri-Me ether

[化学名・別名] 4,4'-Dihydroxy-3,3',5-trimethoxy-7,7'-epoxylignan. Fragransin C₁. Machilin H

[CAS No.] 112572-57-3

[化合物分類] リグナン化合物 (7,7'-Epoxytetrahydrofuranoid lignan)

[構造式]

[分子式] C₂₁H₂₆O₆

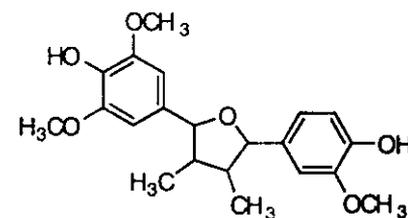
[分子量] 374.433

[正確な分子量] 374.17294

[基原] 次の植物から分離: *Myristica fragrans*, *Machilus thunbergii*

[性状] オイル

[比旋光度]: [α]_D +3.8 (c, 0.60 in CHCl₃). [α]_D +8.8 (c, 0.37 in CHCl₃)



-----文献-----

Hattori, M. et al., Chem. Pharm. Bull., 1987, 35, 3315

Hada, S. et al., Phytochemistry, 1988, 27, 563

Shimomura, H. et al., Phytochemistry, 1988, 27, 634

Lopes, N.P. et al., Phytochemistry, 1996, 43, 1089

§ 3,3',4,4',5-Pentahydroxy-7,7'-epoxylignan; (7*R**,7'*S**,8*R**,8'*S**)-form, 3,3',4,5-Tetra-Me ether

[化学名・別名] 4'-Hydroxy-3,3',4,5-tetramethoxy-7,7'-epoxylignan. Fragransin D₁

[CAS No.] 114394-21-7

[化合物分類] リグナン化合物 (7,7'-Epoxytetrahydrofuranoid lignan)

[構造式]

[分子式] C₂₂H₂₈O₆

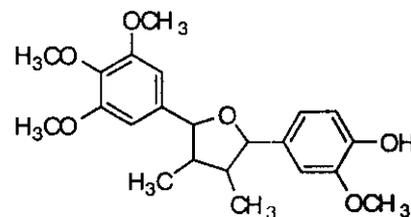
[分子量] 388.46

[正確な分子量] 388.18859

[基原] *Myristica fragrans*

[性状] オイル

[比旋光度]: [α]_D +18.38 (c, 0.136 in CHCl₃)



-----文献-----

Hattori, M. et al., Chem. Pharm. Bull., 1987, 35, 3315

Hada, S. et al., Phytochemistry, 1988, 27, 563

Shimomura, H. et al., Phytochemistry, 1988, 27, 634

Lopes, N.P. et al., Phytochemistry, 1996, 43, 1089

§ 5-(1-Propenyl)-1,2,3-benzenetriol; (E)-form, 1,2-Methylene, 3-Me ether

[化学名・別名] 4-Methoxy-6-(1-propenyl)-1,3-benzodioxole (CAS 名). 1-Methoxy-2,3-methylenedioxy-5-(1-propenyl) benzene. Isomyristicin

[CAS No.] 487-62-7

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

[構造式]

[分子式] $C_{11}H_{12}O_3$

[分子量] 192.214

[正確な分子量] 192.078645

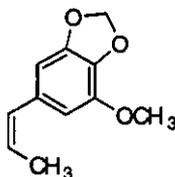
[基原] イノンド *Anethum graveolens* のオイル, ナツメグ, *Myristica fragrans*, *Petroselinum crispum* に見られる

[性状] 針状結晶もしくはプリズム結晶 (EtOH)

[融点] Mp 44-45 °C

[沸点] Bp₁₈ 166 °C

[屈折率] n_D^{25} 1.5655



-----文献-----

Thoms, H., Ber., 1903, 36, 3446, (Isomyristicin, 合成法)

Shulgin, A.T. et al., Nature (London), 1963, 197, 379, (Isomyristicin, 分離)

§ 5-(1-Propenyl)-1,2,3-benzenetriol; (Z)-form, 1,2-Methylene, 3-Me ether

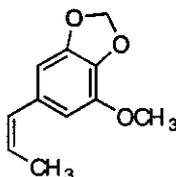
[化合物分類] 単環芳香族 (Simple phenylpropanoid)

[構造式]

[分子量] 192.214

[正確な分子量] 192.078645

[基原] ナツメグ (*Myristica fragran*) に存在する



-----文献-----

Shulgin, A.T. et al., Nature (London), 1963, 197, 379, (Isomyristicin, 分離)

Shulgin, A.T. et al., Naturwissenschaften, 1964, 51, 360, (分離)

Sammy, G.M. et al., Chem. Ind. (London), 1968, 1279, (分離)

Achenbach, H. et al., Phytochemistry, 1992, 31, 4263, (分離, C13-NMR)

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

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

Methoxyeugenol. 4-Allylsyringol

[CAS No.] 6627-88-9

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

[構造式]

[分子式] $C_{11}H_{14}O_3$

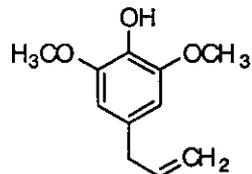
[分子量] 194.23

[正確な分子量] 194.094295

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

[性状] オイル

[沸点] Bp₁₀ 166-168 °C. Bp₂ 123-125 °C



-----文献-----

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

Bezabih, M. et al., Phytochemistry, 1997, 46, 1063, (1-Me ether)

Kitajima, J. et al., Chem. Pharm. Bull., 1998, 46, 1587, (2-Me 1-glucoside)

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

[化学名・別名] 1,2,3-Trimethoxy-5-(2-propenyl) benzene (CAS 名). 5-Allyl-1,2,3-trimethoxybenzene.

Elemicin

[CAS No.] 487-11-6

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

[構造式]

[分子式] $C_{12}H_{16}O_3$

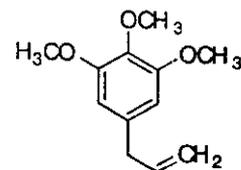
[分子量] 208.257

[正確な分子量] 208.109945

[基原] エレミオイル. 多くの植物属に存在する. 例えば, *Cymbopogon* spp., *Canarium commune*, *Boronia* spp., *Myristica fragrans* (ナツメグ)

[性状] オイル

[沸点] Bp_{10} 144-147 °C



-----文献-----

Semmler, F.W., Ber., 1908, 41, 1918, (分離, Elemicin)

Mauthner, F., Annalen, 1917, 44, 252, (分離, Elemicin)

Giesbrecht, A.M. et al., Phytochemistry, 1974, 13, 2285, (分離, Elemicin)

Achenbach, H. et al., Phytochemistry, 1992, 31, 4263, (分離, C^{13} -NMR, Elemicin)

§ Safrole

[化学名・別名] 5-(2-Propenyl)-1,3-benzodioxole (CAS 名). 4-Allyl-1,2-(methylenedioxy) benzene (旧 CAS 名). 3,4-Methylenedioxyallylbenzene. Allylcatechol methylene ether

[CAS No.] 94-59-7

[化合物分類] 単環芳香族 (Simple phenylpropanoid), 薬物: 消毒薬 (Antiseptic), 薬物: 駆風薬 (Carminative), 薬物: 外皮用剤 (Dermatological agent)

[構造式]

[分子式] $C_{10}H_{10}O_2$

[分子量] 162.188

[正確な分子量] 162.06808

[基原] 数種の精油, 特に *Sassafras officinale*. また, *Illicium* spp., *Myristica fragrans*, *Nemuaron humboldtii*, その他からも得られる

[用途] 麻酔作用を示す. 局所的な鎮痙作用, 駆風作用. 香水成分製造の中間物質.

[性状] プリズム結晶

[融点] 凝固点: 11.2 °C

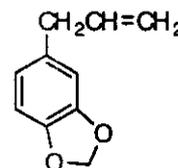
[沸点] Bp 231.5-232 °C. Bp_0 104-105 °C

[屈折率] n_D^{20} 1.5383

[Log P 計算値] Log P 2.57 (計算値)

[傷害・毒性] ヒトへの発ガンの可能性. 皮膚を刺激する. 50%致死量 (LD_{50}) (ラット, 経口) 1950 mg/kg. 発ガン物質. 影響の報告がある. 肝細胞毒

[化学物質毒性データ総覧 (RTEC) 登録番号] CY2800000



-----文献-----

Hickey, M.J., J.O.C., 1948, 13, 448, (分離)

Della, E.W. et al., Aust. J. Chem., 1961, 14, 663, (分離)

Opdyke, D.L.J., Food Cosmet. Toxicol., 1974, 12, 983, (レビュー, 毒性)

IARC Monog., 1976, 10, 231; Suppl., 7, 71, (レビュー, 毒性)

Fiedler, H.P., Drugs Made Ger., 1981, 24, 163, (レビュー)

Ioannides, C. et al., Food Cosmet. Toxicol., 1981, 19, 657, (レビュー)

Howes, A.J. et al., Food Chem. Toxicol., 1990, 28, 537, (cytotoxicity, genotoxicity)

Martindale, The Extra Pharmacopoeia, 30th edn., Pharmaceutical Press, 1993, 1410

Abel, G., Adverse Eff. Herb. Drugs, 1997, 3, 105; 123, (レビュー)

Lewis, R.J., Sax's Dangerous Properties of Industrial Materials, 8th edn., Van Nostrand Reinhold, 1992, SAD000

RTECS (化学物質毒性データ)

生体影響物質 : 催腫瘍物質. 変異原物質. 生殖影響物質. 天然物. 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 : 軽度
参照文献

FCTXAV Food and Cosmetics Toxicology. (London, UK) V.1-19, 1963-81. For publisher information, see FCTOD7. [Vol.,頁,年(19-)]12,983,1974

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 : 1950 mg/kg
毒性影響 : [行動] 傾眠(全身活動度の低下).
参照文献

TXAPA9 Toxicology and Applied Pharmacology. (Academic Press, Inc., 1 E. First St., Duluth, MN 55802) V.1- 1959- [Vol.,頁,年(19-)]7,18,1965

<<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 : 2350 mg/kg
毒性影響 : [行動] 傾眠(全身活動度の低下).
[行動] 運動失調

参照文献

FCTXAV Food and Cosmetics Toxicology. (London, UK) V.1-19, 1963-81. For publisher information, see FCTOD7. [Vol.,頁,年(19-)]2,327,1964

<<試験方法>> LD50 試験(50%致死量試験).

曝露経路 : 皮下投与.
被験動物 : げっ歯類-マウス
投与量・期間 : 1020 mg/kg
毒性影響 : [行動] 興奮.
参照文献

SIZSAR Sapporo Igaku Zasshi. Sapporo Medical Journal. (Sapporo Igaku Daigaku, Nishi-17-chome, Minami-1-jo, Chuo-ku, Sapporo 060, Japan) V.3- 1952- [Vol.,頁,年(19-)]3,73,1952

<<試験方法>> 認知されている最小致死量(LDLo)試験.

曝露経路 : 経口投与.
被験動物 : げっ歯類-ウサギ.
投与量・期間 : 1 gm/kg
毒性影響 : [末梢神経と感覚] 感覚変化を伴うまたは伴わない痙性麻痺.
[行動] 運動失調
[腎臓・尿路・膀胱] 尿成分のその他の変化.

参照文献

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

<<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 : >5 gm/kg
毒性影響 : 致死量以外に毒性影響に関する報告はない.
参照文献

FCTXAV Food and Cosmetics Toxicology. (London, UK) V.1-19, 1963-81. For publisher information, see FCTOD7. [Vol.,頁,年(19-)]12,983,1974

<<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-ウサギ.
投与量・期間 : 1 gm/kg

毒性影響 : [末梢神経と感覚] 感覚変化を伴うまたは伴わない痙性麻痺。
[行動] 傾眠(全身活動度の低下)。
[栄養と総代謝] 体温低下。

参考文献

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

<<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 : げっ歯類-ウサギ。
投与量・期間 : 200 mg/kg
毒性影響 : [血管] 自律性の切断を伴わない血圧上昇。
[血管] 自律性の切断を伴わない血圧の低下。

参考文献

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

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 : 74375 ug/kg/85週間継続投与
毒性影響 : [肝臓] その他の変化。
[肝臓] 肝臓重量の変化。

参考文献

TXCYAC Toxicology. (Elsevier Scientific Pub. Ireland, Ltd., POB 85, Limerick, Ireland) V.1- 1973-
[Vol.,頁,年(19-)]7,307,1977

<<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 : 15 gm/kg/60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

TXAPA9 Toxicology and Applied Pharmacology. (Academic Press, Inc., 1 E. First St., Duluth, MN
55802) V.1- 1959- [Vol.,頁,年(19-)]7,18,1965

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 : 200 gm/kg/94W-C
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

CNREA8 Cancer Research. (Public Ledger Building, Suit 816, 6th & Chestnut Sts., Philadelphia, PA
19106) V.1- 1941- [Vol.,頁,年(19-)]37,1883,1977

<<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 : 22 gm/kg/90週間間欠投与
毒性影響 : [催腫瘍性] RTECS 基準による発がん性。
[肝臓] 腫瘍。

参考文献

CNREA8 Cancer Research. (Public Ledger Building, Suit 816, 6th & Chestnut Sts., Philadelphia, PA
19106) V.1- 1941- [Vol.,頁,年(19-)]39,4378,1979

<<試験方法>> 最小毒性量(TDLo)試験。

曝露経路 : 経口投与。