

Hashimoto, Y. et al., *Phytochemistry*, 1975, 14, 1633, (oxide)  
Shoemaker, D.W. et al., *J. Chromatogr.*, 1979, 174, 159, (ガスクロマト, Mass)  
Siddiqui, S. et al., *Heterocycles*, 1989, 29, 521, (分離, UV, IR, H-NMR, Mass, 成書, Norharmine)  
Martindale, *The Extra Pharmacopoeia*, 30th edn., Pharmaceutical Press, 1993, 1376  
Lewis, R.J., *Sax's Dangerous Properties of Industrial Materials*, 8th edn., Van Nostrand Reinhold, 1992, HAI500

\*\*\*RTECS (化学物質毒性データ)\*\*\*

生体影響物質 : 医薬品. ヒト. 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>> 最小毒性量(TDLo)試験.

曝露経路 : 筋肉内投与.

被験動物 : ヒト-男性

投与量・期間 : 3 mg/kg

毒性影響 : {行動} 睡眠.

{行動} 振戦.

{胃腸} 嘔気または嘔吐

参考文献

AEPPAE Naunyn-Schmiedeberg's Archiv fuer Experimentelle Pathologie und Pharmakologie. (Berlin, Ger.) V.110-253, 1925-66. For publisher information, see NSAPCC. [Vol.,頁,年(19-)]129,133,1928

<<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-ラット.

投与量・期間 : 200 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

PSCBAY Psychopharmacology Service Center, Bulletin. (Bethesda, MD) V.1-3, 1961-65. For publisher information, see PSYBB9. [Vol.,頁,年(19-)]2,17,1963

<<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 : 243 mg/kg

毒性影響 : {行動} 興奮.

{皮膚と付属器官} 毛髪.

参考文献

PCJOAU Pharmaceutical Chemistry Journal (English Translation). Translation of KHFZAN. (Plenum Pub. Corp., 233 Spring St., New York, NY 10013) No.1- 1967- [Vol.,頁,年(19-)]10,1171,1976

<<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-マウス

投与量・期間 : 50 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

AEPPAE Naunyn-Schmiedeberg's Archiv fuer Experimentelle Pathologie und Pharmakologie. (Berlin, Ger.) V.110-253, 1925-66. For publisher information, see NSAPCC. [Vol.,頁,年(19-)]129,133,1928

<<試験方法>> 認知されている最小致死量(LDLo)試験.

曝露経路 : 静脈注射

被験動物 : ほ乳類-ネコ.

投与量・期間 : 10 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

AEPPAE Naunyn-Schmiedeberg's Archiv fuer Experimentelle Pathologie und Pharmakologie. (Berlin, Ger.) V.110-253, 1925-66. For publisher information, see NSAPCC. [Vol.,頁,年(19-)]129,133,1928

<<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 : 200 mg/kg  
毒性影響 : [知覚組織と特異感覚] [眼] 散瞳(瞳孔の拡大).  
[肺,胸郭,または呼吸] 呼吸困難.

参照文献

AEPPAE Naunyn-Schmiedeberg's Archiv fuer Experimentelle Pathologie und Pharmakologie. (Berlin, Ger.) V.110-253, 1925-66. For publisher information, see NSAPCC. [Vol.,頁,年(19-)] 129,133,1928  
《試験方法》 認知されている最小致死量(LDL<sub>0</sub>)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 : 60 mg/kg  
毒性影響 : [知覚組織と特異感覚] [眼] 散瞳(瞳孔の拡大).  
[行動] 興奮.  
[行動] 運動失調

参照文献

NEPHBW Neuropharmacology. (Pergamon Press Ltd., Headington Hill Hall, Oxford OX3 OBW, UK) V.9- 1970- [Vol.,頁,年(19-)] 10,15,1971

《試験方法》 認知されている最小致死量(LDL<sub>0</sub>)試験.

曝露経路 : 皮下投与.  
被験動物 : げっ歯類-モルモット.  
投与量・期間 : 100 mg/kg  
毒性影響 : 致死量以外に毒性影響に関する報告はない.

参照文献

AEPPAE Naunyn-Schmiedeberg's Archiv fuer Experimentelle Pathologie und Pharmakologie. (Berlin, Ger.) V.110-253, 1925-66. For publisher information, see NSAPCC. [Vol.,頁,年(19-)] 129,133,1928  
《試験方法》 認知されている最小致死量(LDL<sub>0</sub>)試験.

曝露経路 : 皮下投与.  
被験動物 : 両生類-カエル.  
投与量・期間 : 300 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

QJPPAL Quarterly Journal of Pharmacy & Pharmacology. (London, UK) V.2-21, 1929-48. For publisher information, see JPPMAB. [Vol.,頁,年(19-)] 9,37,1936

\*\*\* REVIEWS \*\*\*

毒性に関するレビュー

PISDDJ Pacific Information Service on Street 医薬品.s. (J.K. Brown, School of Pharmacy, Univ. of the Pacific, Stockton, CA 95211) V.1- 1972(?) - [Vol.,頁,年(19-)] 5(3-6),-,1977

毒性に関するレビュー

CTOXAO Clinical Toxicology. (New York, NY) V.1-18, 1968-81. For publisher information, see JTCTDW. [Vol.,頁,年(19-)] 12,1,1978

§ 3-Methyl-2-buten-1-ol; O-[ $\alpha$ -L-Arabinopyranosyl-(1  $\rightarrow$  6)- $\beta$ -D-glucopyranoside]

[CAS No.] 175737-84-5

[化合物分類]テルペノイド(Hemiterpenoids)

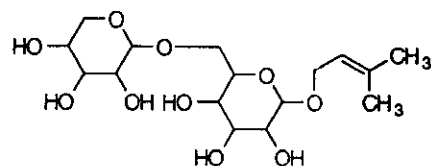
[構造式]

[分子式] C<sub>16</sub>H<sub>28</sub>O<sub>10</sub>

[分子量] 380.391

[正確な分子量] 380.16825

[基原] *Passiflora edulis* の果実(トケイソウ科)



-----文献-----

Naves, Y.-R. et al., Bull. Soc. Chim. Fr., 1971, 886, (分離)  
Opdyke, D.L.J., Food Cosmet. Toxicol., 1979, 17, 895, (レビュー, 毒性)  
English, S. et al., Phytochemistry, 1992, 31, 1255, (ferulate)  
Amoros, M. et al., J. Nat. Prod., 1994, 57, 644, (caffeate)  
Carpita, A. et al., Synth. Commun., 1994, 24, 3167, (Ac)

Ramalingam, K. et al., *Synth. Commun.*, 1995, 25, 743, (ethers)  
 Chassagne, D. et al., *Phytochemistry*, 1996, 41, 1497, (6-arabinosylglucoside)  
 Baltenweck-Guyot, R. et al., *J. Nat. Prod.*, 1997, 60, 1326, (6-apiofuranosylglucoside)  
 Kitajima, J. et al., *Chem. Pharm. Bull.*, 1998, 46, 1643, (Prenyl glucoside)  
 Ono, M. et al., *Phytochemistry*, 1999, 51, 819, (6-apiofuranosylglucoside)  
 Lewis, R.J., *Sax's Dangerous Properties of Industrial Materials*, 8th edn., Van Nostrand Reinhold, 1992, DOQ350; MHU110

§ 2-Methyl-4-propyl-1,3-oxathiane (CAS 名)

[CAS No.] 67715-80-4

[関連 CAS No.] 90243-45-1, 90243-48-4, 94669-62-2, 94669-63-3, 107436-63-5, 107436-64-6, 107436-65-7, 107436-66-8

[化合物分類] 脂肪族化合物 (Simple heteroalicyclics (1 × S))

[構造式]

[分子式] C<sub>8</sub>H<sub>16</sub>OS

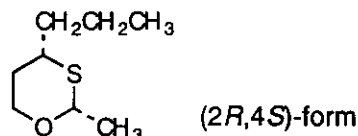
[分子量] 160.28

[正確な分子量] 160.092185

[基原] 次の植物から分離: パッションフルーツ *Passiflora edulis* の果汁

[用途] 感覚器官に影響を与える重要な化合物

[沸点] Bp<sub>12</sub> 85-86 °C



-----文献-----

Ger. Pat., 1976, 2 534 162; CA, 85, 37096s

Winter, M. et al., *Helv. Chim. Acta*, 1976, 59, 1613, (分離, 合成法, H-NMR, Mass)

Pickenhagen, W. et al., *Helv. Chim. Acta*, 1984, 67, 947, (合成法)

Singer, G. et al., *Annalen*, 1987, 451, (酸化物)

§ 1,3,16,20,24-Pentahydroxy-24-(hydroxymethyl) cycloartan-28-oic acid; (1 α,3 β,16 β,20S,24S)-form

[化学名・別名] Cyclopassifloic acid E

[CAS No.] 301540-74-9

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

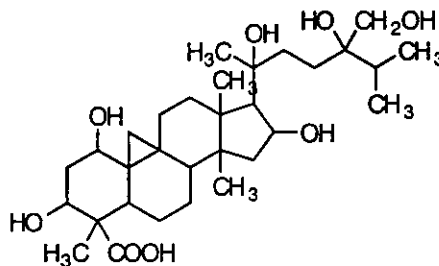
[構造式]

[基原] *Passiflora edulis*

[性状] 針状結晶

[融点] Mp 227-228 °C

[比旋光度]: [α]<sub>D</sub><sup>25</sup> +41.2 (0.9 in MeOH)



-----文献-----

Yoshikawa, K. et al., *J. Nat. Prod.*, 2000, 63, 1377-1380, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ 1,3,16,20,24-Pentahydroxy-24-(hydroxymethyl) cycloartan-28-oic acid; (1 α,3 β,16 β,20S,24S)-form, 28-O-β-D-Glucopyranosyl ester

[化学名・別名] Cyclopassifloside VII

[CAS No.] 301540-80-7

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

[構造式]

[分子式] C<sub>37</sub>H<sub>62</sub>O<sub>13</sub>

[分子量] 714.889

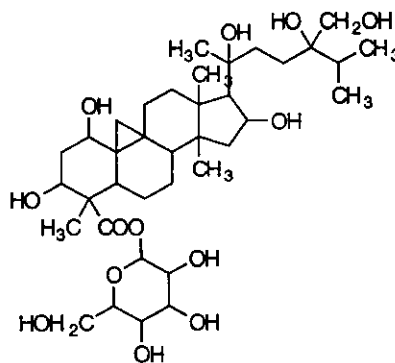
[正確な分子量] 714.419045

[基原] *Passiflora edulis*

[性状] 針状結晶

[融点] Mp 163-165 °C

[比旋光度]: [α]<sub>D</sub><sup>25</sup> +35.6 (c, 1.5 in MeOH)



-----文献-----

Yoshikawa, K. et al., *J. Nat. Prod.*, 2000, 63, 1377-1380, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ 1,3,16,24-Tetrahydroxy-24-(hydroxymethyl) cycloartan-28-oic acid; (1  $\alpha$ ,3  $\beta$ ,16  $\alpha$ ,24S)-form

[化学名・別名] Cyclotricuspidogenin C. Cyclopassifloic acid G

[CAS No.] 239794-30-0

[その他の CAS No.] 301540-77-2

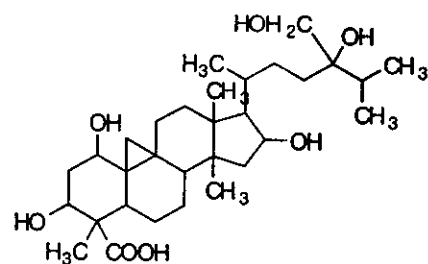
[化合物分類] テルペノイド (Cycloartane triterpenoids)

[構造式]

[基原] Genin from *Trichosanthes tricuspidata* と *Passiflora edulis* から分離

[性状] 針状結晶

[比旋光度]:  $[\alpha]_D^{23} +12.1$  (c, 1 in MeOH).  $[\alpha]_D^{25} +39.3$  (c, 3.0 in MeOH)



-----文献-----

Kasai, R. et al., *Phytochemistry*, 1999, 51, 803-808, (Cyclotricuspidogenins, Cyclotricuspidosides)

Yoshikawa, K. et al., *J. Nat. Prod.*, 2000, 63, 1377-1380, (Cyclopassifloic acids, Cyclopassiflosides)

§ 1,3,16,24-Tetrahydroxy-24-(hydroxymethyl) cycloartan-28-oic acid; (1  $\alpha$ ,3  $\beta$ ,16  $\alpha$ ,24S)-form, 28-O- $\beta$ -D-Glucopyranosyl ester

[化学名・別名] Cyclopassifloside X

[CAS No.] 301540-82-9

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

[構造式]

[分子式]  $C_{37}H_{62}O_{12}$

[分子量] 698.89

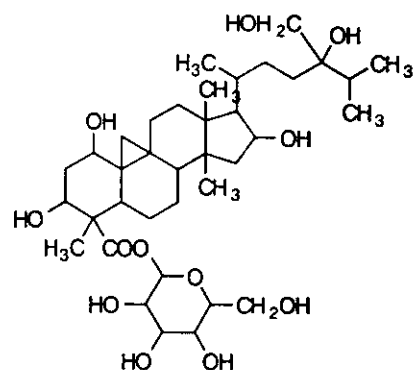
[正確な分子量] 698.42413

[基原] *Passiflora edulis*

[性状] 針状結晶

[融点] Mp 167-169 °C

[比旋光度]:  $[\alpha]_D^{25} +36.8$  (c, 2.1 in MeOH)



-----文献-----

Kasai, R. et al., *Phytochemistry*, 1999, 51, 803-808, (Cyclotricuspidogenins, Cyclotricuspidosides)

Yoshikawa, K. et al., *J. Nat. Prod.*, 2000, 63, 1377-1380, (Cyclopassifloic acids, Cyclopassiflosides)

§ 1,3,16,24-Tetrahydroxy-24-(hydroxymethyl) cycloartan-28-oic acid; (1  $\alpha$ ,3  $\beta$ ,16  $\alpha$ ,24S)-form, 31-O- $\beta$ -D-Glucopyranoside, 28-O- $\beta$ -D-glucopyranosyl ester

[化学名・別名] Cyclotricuspidoside C. Cyclopassifloside XI

[CAS No.] 239794-23-1

[その他の CAS No.] 301644-34-8

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

[構造式]

[分子式]  $C_{43}H_{72}O_{17}$

[分子量] 861.032

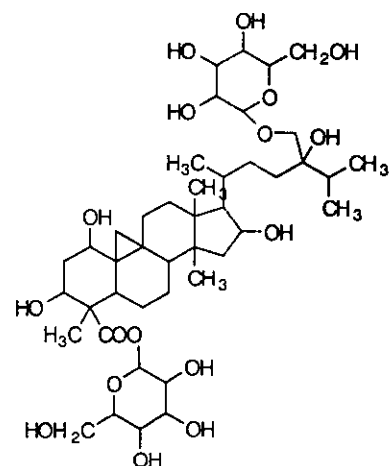
[正確な分子量] 860.476955

[基原] *Trichosanthes tricuspidata*, *Passiflora edulis*

[性状] 針状結晶

[融点] Mp 171-173 °C

[比旋光度]:  $[\alpha]_D^{23} +28.2$  (c, 1 in MeOH).  $[\alpha]_D^{25} +13.6$  (c, 2.7 in MeOH)



-----文献-----

Kasai, R. et al., *Phytochemistry*, 1999, 51, 803-808, (Cyclotricuspidogenins, Cyclotricuspidosides)

Yoshikawa, K. et al., *J. Nat. Prod.*, 2000, 63, 1377-1380, (Cyclopassifloic acids, Cyclopassiflosides)

§ 1,3,16,24-Tetrahydroxy-24-(hydroxymethyl) cycloartan-28-oic acid; (1  $\alpha$ ,3  $\beta$ ,16  $\beta$ ,24S)-form

[化学名・別名] Cyclotricuspidogenin B. Cyclopassifloic acid F

[CAS No.] 239794-27-5

[その他の CAS No.] 301540-76-1

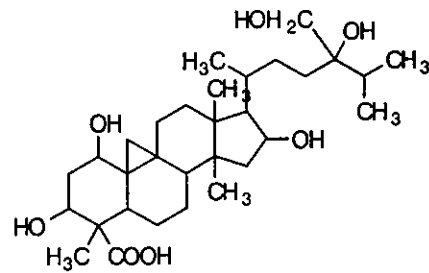
[化合物分類]テルペノイド (Cycloartane triterpenoids)

[構造式]

[基原] Genin from *Trichosanthes tricuspidata* と *Passiflora edulis* から分離

[性状] 無定型の結晶

[比旋光度]:  $[\alpha]_D^{25} +17$  (c, 0.8 in MeOH).  $[\alpha]_D^{25} +48.2$  (c, 5.1 in MeOH)



-----文献-----

Kasai, R. et al., *Phytochemistry*, 1999, 51, 803-808, (Cyclotricuspidogenins, Cyclotricuspidosides)

Yoshikawa, K. et al., *J. Nat. Prod.*, 2000, 63, 1377-1380, (Cyclopassifloic acids, Cyclopassiflosides)

§ 1,3,16,24-Tetrahydroxy-24-(hydroxymethyl) cycloartan-28-oic acid; (1  $\alpha$ , 3  $\beta$ , 16  $\beta$ , 24S)-form, 28-O- $\beta$ -D-Glucopyranosyl ester

[化学名・別名] Cyclopassifloside VIII

[CAS No.] 301540-81-8

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

[構造式]

[分子式]  $C_{37}H_{62}O_{12}$

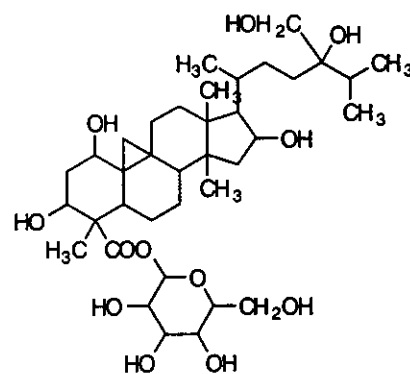
[分子量] 698.89

[正確な分子量] 698.42413

[基原] *Passiflora edulis*

[性状] 無定型の塊

[比旋光度]:  $[\alpha]_D^{25} +38.6$  (c, 1.3 in MeOH)



-----文献-----

Kasai, R. et al., *Phytochemistry*, 1999, 51, 803-808, (Cyclotricuspidogenins, Cyclotricuspidosides)

Yoshikawa, K. et al., *J. Nat. Prod.*, 2000, 63, 1377-1380, (Cyclopassifloic acids, Cyclopassiflosides)

§ 1,3,16,24-Tetrahydroxy-24-(hydroxymethyl) cycloartan-28-oic acid; (1  $\alpha$ , 3  $\beta$ , 16  $\beta$ , 24S)-form, 31-O- $\beta$ -D-Glucopyranoside, 28-O- $\beta$ -D-glucopyranosyl ester

[化学名・別名] Cyclotricuspidoside B. Cyclopassifloside IX

[CAS No.] 239794-22-0

[その他の CAS No.] 301644-33-7

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

[構造式]

[分子式]  $C_{35}H_{57}O_{17}$

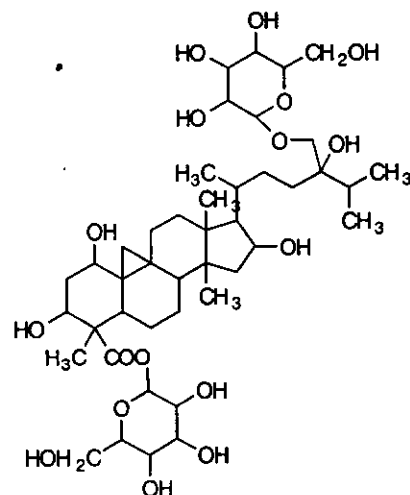
[分子量] 861.032

[正確な分子量] 860.476955

[基原] *Trichosanthes tricuspidata*, *Passiflora edulis*

[性状] 無定型の塊

[比旋光度]:  $[\alpha]_D^{25} +35.9$  (c, 1 in MeOH).  $[\alpha]_D^{25} +19$  (c, 1.3 in MeOH)



-----文献-----

Kasai, R. et al., *Phytochemistry*, 1999, 51, 803-808, (Cyclotricuspidogenins, Cyclotricuspidosides)

Yoshikawa, K. et al., *J. Nat. Prod.*, 2000, 63, 1377-1380, (Cyclopassifloic acids, Cyclopassiflosides)

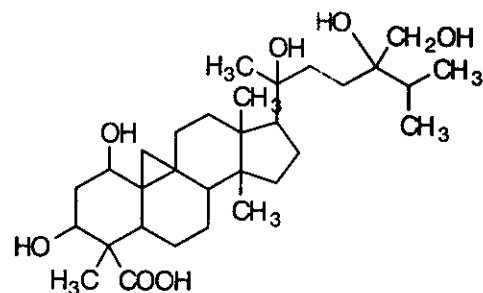
§ 1,3,20,24-Tetrahydroxy-24-(hydroxymethyl) cycloartan-28-oic acid; (1  $\alpha$ ,3  $\beta$ ,20S,24S)-form

[化学名・別名] Cyclopassifloic acid C

[CAS No.] 292167-36-3

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

[構造式]



[基原] *Passiflora edulis*

[性状] 無定型の粉末

[比旋光度]:  $[\alpha]_D^{25} +23.8$  (c, 2.1 in MeOH)

-----文献-----

Yoshikawa, K. et al., J. Nat. Prod., 2000, 63, 1229-1234, (分離, H-NMR, C13-NMR)

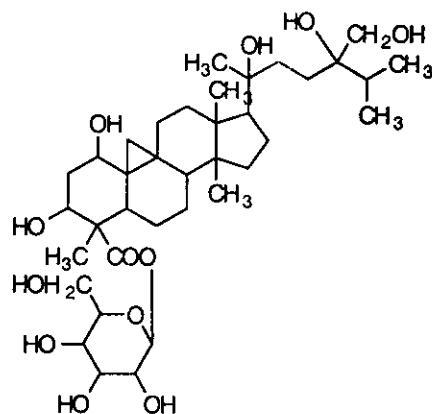
§ 1,3,20,24-Tetrahydroxy-24-(hydroxymethyl) cycloartan-28-oic acid; (1  $\alpha$ ,3  $\beta$ ,20S,24S)-form, 28-O- $\beta$ -D-Glucopyranosyl ester

[化学名・別名] Cyclopassifloside IV

[CAS No.] 292167-41-0

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

[構造式]



[分子式]  $C_{37}H_{62}O_{12}$

[分子量] 698.89

[正確な分子量] 698.42413

[基原] *Passiflora edulis*

[性状] 無定型の塊

[比旋光度]:  $[\alpha]_D^{25} +33.1$  (c, 6.3 in MeOH)

-----文献-----

Yoshikawa, K. et al., J. Nat. Prod., 2000, 63, 1229-1234, (分離, H-NMR, C13-NMR)

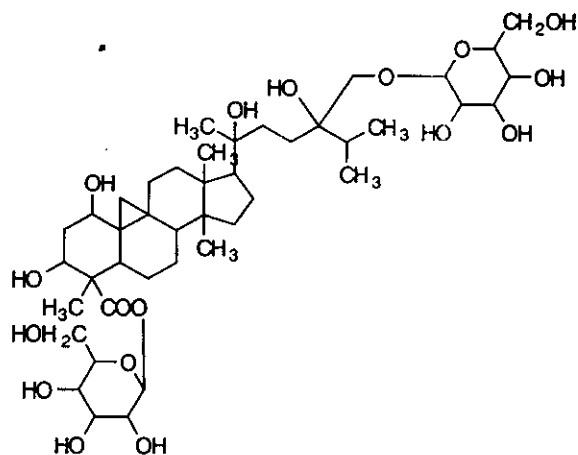
§ 1,3,20,24-Tetrahydroxy-24-(hydroxymethyl) cycloartan-28-oic acid; (1  $\alpha$ ,3  $\beta$ ,20S,24S)-form, 31-O- $\beta$ -D-Glucopyranoside, 28-O- $\beta$ -D-glucopyranosyl ester

[化学名・別名] Cyclopassifloside V

[CAS No.] 292167-42-1

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

[構造式]



[分子式]  $C_{43}H_{72}O_{17}$

[分子量] 861.032

[正確な分子量] 860.476955

[基原] *Passiflora edulis*

[性状] 無定型の塊

[比旋光度]:  $[\alpha]_D^{25} +16.5$  (c, 6.8 in MeOH)

-----文献-----

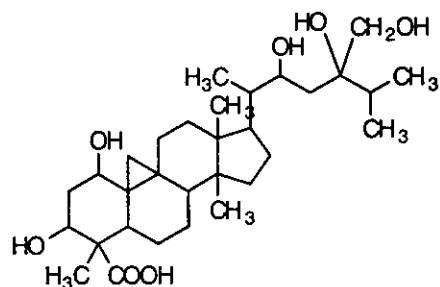
Yoshikawa, K. et al., J. Nat. Prod., 2000, 63, 1229-1234, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ 1,3,22,24-Tetrahydroxy-24-(hydroxymethyl) cycloartan-28-oic acid; (1  $\alpha$ ,3  $\beta$ ,22R,24S)-form

[化学名・別名] Cyclopassifloic acid A

[CAS No.] 292167-34-1  
[化合物分類] テルペノイド (Cycloartane triterpenoids)  
[構造式]

[基原] *Passiflora edulis*  
[性状] 針状結晶  
[融点] Mp 229-231 °C  
[比旋光度]:  $[\alpha]_D^{25} +56.6$  (c, 1.5 in MeOH)



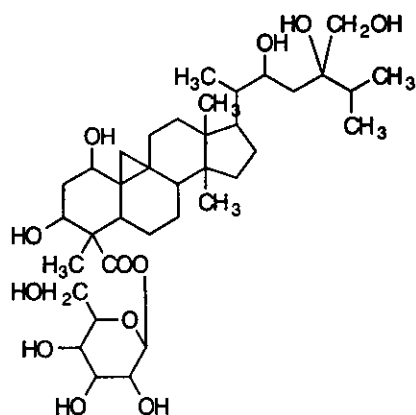
-----文献-----

Yoshikawa, K. et al., J. Nat. Prod., 2000, 63, 1229-1234, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ 1,3,22,24-Tetrahydroxy-24-(hydroxymethyl) cycloartan-28-oic acid; (1  $\alpha$ , 3  $\beta$ , 22R, 24S)-form, 28-O- $\beta$ -D-Glucopyranosyl ester

[化学名・別名] Cyclopassifloside I  
[CAS No.] 292167-38-5  
[化合物分類] テルペノイド (Cycloartane triterpenoids)  
[構造式]

[分子式]  $C_{57}H_{92}O_{12}$   
[分子量] 698.89  
[正確な分子量] 698.42413  
[基原] *Passiflora edulis*  
[性状] 無定型の塊  
[比旋光度]:  $[\alpha]_D^{25} +54.5$  (c, 0.2 in MeOH)



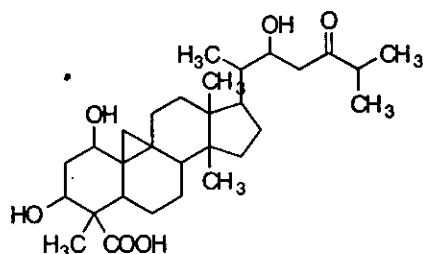
-----文献-----

Yoshikawa, K. et al., J. Nat. Prod., 2000, 63, 1229-1234, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ 1,3,22-Trihydroxy-24-oxocycloartan-28-oic acid; (1  $\alpha$ , 3  $\beta$ , 22R)-form

[化学名・別名] Cyclopassifloic acid D  
[CAS No.] 292167-37-4  
[化合物分類] テルペノイド (Cycloartane triterpenoids)  
[構造式]

[基原] *Passiflora edulis*  
[性状] 針状結晶  
[融点] Mp 202-203 °C  
[比旋光度]:  $[\alpha]_D^{25} +48.3$  (c, 0.4 in MeOH)

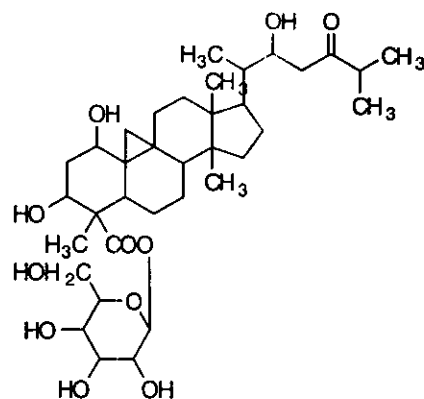


-----文献-----

Yoshikawa, K. et al., J. Nat. Prod., 2000, 63, 1229-1234, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ 1,3,22-Trihydroxy-24-oxocycloartan-28-oic acid; (1  $\alpha$ , 3  $\beta$ , 22R)-form, 28-O- $\beta$ -D-Glucopyranosyl ester

[化学名・別名] Cyclopassifloside VI  
[CAS No.] 292167-43-2  
[化合物分類] テルペノイド (Cycloartane triterpenoids)  
[構造式]



[分子式]  $C_{36}H_{58}O_{11}$   
[分子量] 666.848  
[正確な分子量] 666.397915  
[基原] *Passiflora edulis*  
[性状] 無定型の塊  
[比旋光度]:  $[\alpha]_D^{25} +36.2$  (c, 2.6 in MeOH)

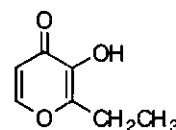
-----文献-----

Yoshikawa, K. et al., J. Nat. Prod., 2000, 63, 1229-1234, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ § トケイソウ科チャボトケイソウ (*Passiflora incarnata* L.) の果実, 花および葉。

§ 2-Ethyl-3-hydroxy-4H-pyran-4-one (CAS 名)

[化学名・別名] Ethylmaltol. Veltol plus. E637. FEMA 3487  
[CAS No.] 4940-11-8  
[化合物分類] 含酸素複素環式化合物 (4-Pyrones), 薬物: (Excipient)  
[構造式]



[分子式]  $C_7H_{10}O_3$   
[分子量] 140.138  
[正確な分子量] 140.047345  
[基原] maypop (*Passiflora incarnata*)  
[用途] 香り増進と香料, 甘味料, 4 - 6 x potency of 3-Hydroxy-2-methyl-4H-pyran-4-one. Pharmaceutical excipient. 生体内で鉄吸収を高める  
[性状] 果物のような味とカラメルのような臭いの甘味を持つ結晶  
[融点] Mp 90-91 °C  
[傷害・毒性] 50 % 致死量 (LD<sub>50</sub>) (ラット, 経口) 1150 mg/kg  
[化学物質毒性データ総覧 (RTECS) 登録番号] UQ0840000

-----文献-----

Aoyagi, N. et al., Chem. Pharm. Bull., 1974, 22, 1008, (分離, 薬理)  
Opdyke, D.L.J., Food Cosmet. Toxicol., (Suppl.), 1975, 13, 805, (毒性, レビュー)  
Levey, J.A. et al., Biochem. Pharmacol., 1988, 37, 2051, (薬理)  
Lewis, R.J., Food Additives Handbook, Van Nostrand Reinhold International, New York, 1989, EMA600  
Georgiadis, M. et al., Org. Prep. Proced. Int., 1992, 24, 95, (合成法)  
Handbook of Pharmaceutical Excipients, 2nd edn., (eds. Wade, A. et al), American Pharmaceutical Association/Pharmaceutical Press, 1994, 180  
Brown, S.D. et al., Acta Cryst. C, 1995, 51, 1335, (結晶構造)  
Lewis, R.J., Sax's Dangerous Properties of Industrial Materials, 8th edn., Van Nostrand Reinhold, 1992, EMA600

\*\*\*RTECS (化学物質毒性データ) \*\*\*

生体影響物質 : 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>> 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 : 1150 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

TXAPA9 Toxicology and Applied Pharmacology. (Academic Press, Inc., 1 E. First St., Duluth, MN



55802) V.1- 1959- [Vol.,頁,年(19-)]15,604,1969

<<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 : 780 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

TXAPA9 Toxicology and Applied Pharmacology. (Academic Press, Inc., 1 E. First St., Duluth, MN

55802) V.1- 1959- [Vol.,頁,年(19-)]15,604,1969

<<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 : 910 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

CPBTAL Chemical and Pharmaceutical Bulletin. (Japan Pub. Trading Co., USA, 1255 Howard St., San Francisco, CA 94103) V.6- 1958- [Vol.,頁,年(19-)]22,1008,1974

<<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.

参考文献

FCTXAV Food and Cosmetics Toxicology. (London, UK) V.1-19, 1963-81. For publisher information, see FCTOD7. [Vol.,頁,年(19-)]13,805,1975

<<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 : 鳥類-ニワトリ

投与量・期間 : 1270 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

TXAPA9 Toxicology and Applied Pharmacology. (Academic Press, Inc., 1 E. First St., Duluth, MN 55802) V.1- 1959- [Vol.,頁,年(19-)]15,604,1969

\*\*\*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 : 90 gm/kg/90 日間間欠投与

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

参考文献

TXAPA9 Toxicology and Applied Pharmacology. (Academic Press, Inc.; 1 E. First St., Duluth, MN 55802) V.1- 1959- [Vol.,頁,年(19-)]15,604,1969

\*\*\*変異原性に関するデータ\*\*\*

<<試験方法>> 微生物を用いた突然変異試験.

試験系 : 大腸菌 Salmonella typhimurium.

投与量・期間 : 2 mg/plate

参考文献

MUREAV Mutation Research. (Elsevier Science Pub. B.V., POB 211, 1000 AE Amsterdam, Netherlands) V.1- 1964- [Vol.,頁,年(19-)]67,367,1979

\*\*\*米国N I O S H基準の発展とサーベランス\*\*\*

米国N I O S H職業暴露調査データ

全米職業曝露調査(NOES)-米国全国職業ばく露調査(1983)

全米職業曝露調査(NOES) Hazard Code - T2072

No. of Facilities: 193 (評価)

No. of Industries: 6  
No. of Occupations: 8  
No. of Employees: 4632 (評価)  
No. of Female Employees: 1504 (評価)

\*\*\*米国に於ける状況\*\*\*

EPA TSCA Section 8(b) CHEMICAL INVENTORY

§ Harmalol (旧 CAS)

[化学名・別名] 4,9-Dihydro-1-methyl-3H-pyrido[3,4-b]indol-7-ol (CAS 名).

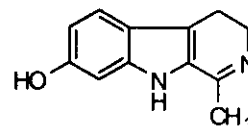
3,4-Dihydro-7-hydroxy-1-methyl-β-carboline

[CAS No.] 525-57-5

[関連 CAS No.] 6028-07-5

[化合物分類] アルカロイド化合物 (β-Carboline alkaloids), 薬物: 中枢神経興奮薬 (Central stimulants)

[構造式]



[分子式] C<sub>12</sub>H<sub>11</sub>N<sub>2</sub>O

[分子量] 200.24

[正確な分子量] 200.094963

[基原] 次の植物から得られるアルカロイド: *Peganum harmala*, *Passiflora incarnata*, *Amsonia tabernaemontana*, *Apocynum cannabinum*, *Hippophae rhamnoides* (ハマビシ科, トケイソウ科, キョウチクトウ科, グミ科)

[用途] 伝統的なウールの染料. 中枢神経興奮薬.

[性状] 明るい橙色-黄色もしくは赤色の針状結晶・三水和物 (EtOH 溶液)

[融点] Mp 100-105 °C

[溶解度] アセトン, クロロホルムに可溶; 水に難溶

[Log P 計算値] Log P 1.31 (未確認値) (計算値)

[UV]: [neutral] λ<sub>max</sub> 218 (); 260 (); 376 () (MeOH)

[その他のデータ] 空気中で酸化されやすい

[傷害・毒性] 50% 致死量 (LD<sub>50</sub>) (マウス, 腹膜内) 175 mg/kg

-----文献-----

Fischer, O., Ber., 1889, 22, 637, (合成法)

Konovalova, R. et al., Arch. Pharm. (Weinheim, Ger.), 1935, 273, 156, (合成法)

Allen, J.R.F. et al., Phytochemistry, 1980, 19, 1573, (生育, 成書)

Coune, C.A. et al., Phytochemistry, 1980, 19, 2009, (C13-NMR)

Verpoorte, R. et al., Org. Magn. Reson., 1984, 22, 328, (C13-NMR)

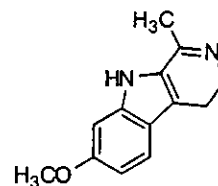
§ Harmalol; Me ether

[化学名・別名] 4,9-Dihydro-7-methoxy-1-methyl-3H-pyrido[3,4-b]indole. 3,4-Dihydro-7-methoxy-1-methyl-β-carboline. Harmaline. Dihydroharmine. Harmidine

[CAS No.] 304-21-2

[化合物分類] 薬物: 中枢神経興奮薬 (Central stimulants), 薬物: 抗パーキンソン薬 (Antiparkinsonian agents), アルカロイド化合物 (β-Carboline alkaloids)

[構造式]



[分子式] C<sub>13</sub>H<sub>13</sub>N<sub>2</sub>O

[分子量] 214.266

[正確な分子量] 214.110613

[基原] 次の植物から得られるアルカロイド: *Peganum harmala*, *Passiflora incarnata*, *Banisteria caapi*, いくつかの *Banisteriopsis* spp. (ハマビシ科, トケイソウ科, キントラノオ科)

[用途] 中枢神経興奮薬. 強い抗パーキンソン作用. Component of a S. 南アメリカの幻覚を起こさせる飲み物の成分

[融点] Mp 250-251 °C (227-229 °C)

[溶解性] エーテルに可溶

[Log P 計算値] Log P 1.91 (未確認値) (計算値)

[UV]:[neutral]  $\lambda_{\max}$  218 ( $\epsilon$  17700); 260 ( $\epsilon$  7950); 376 ( $\epsilon$  10050) (MeOH)

[傷害・毒性] 50%致死量(LD<sub>50</sub>) (ラット, 皮下) 120 mg/kg

[化学物質毒性データ総覧(RTECS)登録番号] UU9800000

-----文献-----

Fischer, O., Ber., 1889, 22, 637, (合成法)

Konovalova, R. et al., Arch. Pharm. (Weinheim, Ger.), 1935, 273, 156, (合成法)

Allen, J.R.F. et al., Phytochemistry, 1980, 19, 1573, (生育, 成書)

Coune, C.A. et al., Phytochemistry, 1980, 19, 2009, (C13-NMR)

Verpoorte, R. et al., Org. Magn. Reson., 1984, 22, 328, (C13-NMR)

\*\*\*RTECS (化学物質毒性データ)\*\*\*

\*\*\*健康障害に関するデータ\*\*\*

\*\*\*急性毒性に関するデータ\*\*\*

<<試験方法>> LD50 試験 (50%致死量試験).

曝露経路 : 皮下投与.

被験動物 : げっ歯類-ラット.

投与量・期間 : 120 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

VHTODE Veterinary and Human Toxicology. (American College of Veterinary and Comparative Toxicology, Publication Office, Comparative Toxicology, Manhattan, KS 66506) V.19- 1977- [Vol., 頁, 年(19-)] 33, 276, 1991

<<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 : 120 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

PSCBAY Psychopharmacology Service Center, Bulletin. (Bethesda, MD) V.1-3, 1961-65. For publisher information, see PSYBB9. [Vol., 頁, 年(19-)] 2, 17, 1963

<<試験方法>> 認知されている最小致死量(LDL<sub>0</sub>)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 : 20 mg/kg

毒性影響 : [知覚組織と特異感覚] [眼] 散瞳(瞳孔の拡大).  
[行動] 興奮.  
[行動] 運動失調

参照文献

NEPHBW Neuropharmacology. (Pergamon Press Ltd., Headington Hill Hall, Oxford OX3 0BW, UK) V.9- 1970- [Vol., 頁, 年(19-)] 10, 15, 1971

\*\*\* REVIEWS \*\*\*

毒性に関するレビュー

PISDDJ Pacific Information Service on Street 医薬品.s. (J.K. Brown, School of Pharmacy, Univ. of the Pacific, Stockton, CA 95211) V.1- 1972(?) - [Vol., 頁, 年(19-)] 5(3-6), -, 1977

毒性に関するレビュー

CTOXAO Clinical Toxicology. (New York, NY) V.1-18, 1968-81. For publisher information, see JTCTDW. [Vol., 頁, 年(19-)] 12, 1, 1978

### § 7-Hydroxy-1-methyl- $\beta$ -carboline

[化学名・別名] 1-Methyl-9H-pyrido[3,4-b]indol-7-ol (CAS 名). Harmol. 7-Hydroxyharman

[CAS No.] 487-03-6

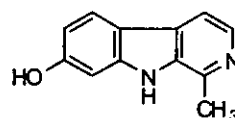
[関連 CAS No.] 28090-85-9

[化合物分類] アルカロイド化合物 ( $\beta$ -Carboline alkaloids)

[構造式]

[分子式] C<sub>12</sub>H<sub>10</sub>N<sub>2</sub>O

[分子量] 198.224



[正確な分子量] 198.079313

[基原] 次の植物から得られるアルカロイド: *Carex brevicollis*, *Elaeagnus angustifolia*, *Hippophae rhamnoides*, *Banisteriopsis caapi*, *Banisteriopsis inebrians*, *Peganum harmala*, *Tribulus terrestris*, *Zygophyllum fabago*, *Passiflora incarnata* (カヤツリグサ科, グミ科, キントラノオ科, ハマビシ科, トケイソウ科)

[融点] Mp 304-307 °C

[溶解性] BERDY SOL: クロロホルム, アセトン, 塩基に可溶; 水に難溶

[UV]: [neutral]  $\lambda_{max}$  210 (); 240 (); 300 (); 325 () (MeOH)

-----文献-----

Borkowski, B., CA, 1960, 54, 15844e

Lutowski, J., CA, 1960, 54, 16751f; 1961, 55, 21479a

Ayer, W.A. et al., Can. J. Chem., 1970, 48, 1980, (Tetrahydroharmol)

Ribas, I. et al., CA, 1972, 77, 123811n

Allen, J.R.F. et al., Phytochemistry, 1980, 19, 1573, (レビュー, 成書)

### § 1-Methyl- $\beta$ -carboline

[化学名・別名] 1-Methyl-9H-pyrido[3,4-b]indole (CAS 名). Harman. Loturine. Passiflorine. Zygofabagine. Aribine

[CAS No.] 486-84-0

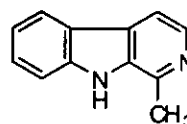
[化合物分類] アルカロイド化合物 ( $\beta$ -Carboline alkaloids), 薬物: 鎮静剤 (Sedatives)

[構造式]

[分子式] C<sub>12</sub>H<sub>10</sub>N<sub>2</sub>

[分子量] 182.224

[正確な分子量] 182.084398



[基原] 次の植物から得られるアルカロイド: *Arariba rubra* (アカネ科), *Passiflora incarnata* (トケイソウ科), その他多くの *Passiflora* spp., いくつかの科の広範囲にわたる種. またタバコの煙にも見られる. *Nocardia* sp. と *Streptomyces* sp. によって作られる

[用途] 細胞毒 intercalating agent. 植物の成長及び酵素抑制因子. 鎮静剤

[融点] Mp 237-238 °C (228 °C)

[Log P 計算値] Log P 3.06 (計算値)

[傷害・毒性] 50%致死量 (LD<sub>50</sub>) (マウス, 腹腔内投与) 50 mg/kg

[化学物質毒性データ総覧 (RTECS) 登録番号] UV0280000

-----文献-----

Bächli, E. et al., Helv. Chim. Acta, 1957, 40, 1167, (分離, UV, IR)

Phillipson, J.D. et al., J. Chromatogr., 1975, 105, 163, (tlc, ガスクロマト, UV, Mass)

Yomosa, K. et al., Agric. Biol. Chem., 1987, 51, 921, (分離, 成書)

Hardiman, J. et al., Bioorg. Chem., 1987, 15, 213, (結晶構造)

Rocca, P. et al., Tetrahedron, 1993, 49, 3325, (合成法)

生体影響物質 : 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 : 50 mg/kg

毒性影響 : [行動] 睡眠時間の変化 (立ち直り反射の変化を含む).

参照文献

AIPTAK Archives Internationales de Pharmacodynamie et de Therapie. (Heymans Institute of Pharmacology, De Pintelaan 185, B-9000 Ghent, Belgium) V.4- 1898- [Vol., 頁, 年 (19-)] 149, 164, 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-ウサギ.

投与量・期間 : 200 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

PSCBAY Psychopharmacology Service Center, Bulletin. (Bethesda, MD) V.1-3, 1961-65. For publisher information, see PSYBB9. [Vol.,頁,年(19-)]2,17,1963

\*\*\*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.

試験系 : 大腸菌 *Salmonella typhimurium*.

投与量・期間: 100 mg/L

参照文献

MUREAV Mutation Research. (Elsevier Science Pub. B.V., POB 211, 1000 AE Amsterdam, Netherlands) V.1- 1964- [Vol.,頁,年(19-)]208,39,1988

<<試験方法>> 微生物を用いた突然変異試験.

試験系 : 大腸菌 *Escherichia coli*

投与量・期間: 150 mg/L

参照文献

MUREAV Mutation Research. (Elsevier Science Pub. B.V., POB 211, 1000 AE Amsterdam, Netherlands) V.1- 1964- [Vol.,頁,年(19-)]208,39,1988

<<試験方法>> DNA 阻害.

試験系 : ヒトの細胞(種は未特定).

投与量・期間: 200 umol/L

参照文献

BBRCA9 Biochemical and Biophysical Research Communications. (Academic Press, Inc., 1 E. First St., Duluth, MN 55802) V.1- 1959- [Vol.,頁,年(19-)]86,124,1979

<<試験方法>> 姉妹染色分体交換試験

試験系 : ヒトリンパ球

投与量・期間: 50 umol/L

参照文献

MUREAV Mutation Research. (Elsevier Science Pub. B.V., POB 211, 1000 AE Amsterdam, Netherlands) V.1- 1964- [Vol.,頁,年(19-)]90,433,1981

<<試験方法>> DNA adduct

曝露経路 : 経口投与.

試験系 : げっ歯類-マウス

投与量・期間: 1400 mg/kg/4W (連続的投与)

参照文献

CALEDQ Cancer Letters (Shannon, Ireland). (Elsevier Scientific Pub. Ireland Ltd., POB 85, Limerick, Ireland) V.1- 1975- [Vol.,頁,年(19-)]42,179,1988

<<試験方法>> ほ乳類体細胞の突然変異試験.

試験系 : げっ歯類-ハムスター肺

投与量・期間: 100 mg/L

参照文献

CALEDQ Cancer Letters (Shannon, Ireland). (Elsevier Scientific Pub. Ireland Ltd., POB 85, Limerick, Ireland) V.1- 1975- [Vol.,頁,年(19-)]17,249,1983

§ Orientin

[化学名・別名] 8-β-D-Glucopyranosyl-3',4',5,7-tetrahydroxyflavone. 8-β-D-Glucopyranosylluteolin.

8-Glucosylluteolin. Lutexin

[CAS No.] 28608-75-5

[化合物分類] フラボノイド (Flavones; 4 × O-置換基)

[構造式]

[分子式] C<sub>21</sub>H<sub>20</sub>O<sub>11</sub>

[分子量] 448.382

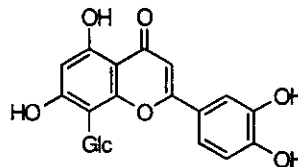
[正確な分子量] 448.100565

[基原] 次の植物から分離: *Polygonum orientale*, *Hordeum vulgare*, *Cyathea*, *Silene*, *Adonis* spp, ヤシ科.

*Passiflora incarnata*

[性状] 青白い黄色の結晶 (EtOH 溶液)

[融点] Mp 265-267 °C で分解



[比旋光度]: $[\alpha]_D^{20} +18.4$  (c, 1.4 in Py)  
[化学物質毒性データ総覧(RTECS)登録番号]DJ3009300

-----文献-----

- Siekel, W. et al., J.O.C., 1959, 24, 1995, (分離)  
Koeppen, H. et al., Biochem. J., 1962, 83, 507; 1965, 97, 444, (分離, 合成法)  
Horowitz, S. et al., Chem. Ind. (London), 1964, 499, (分離)  
Seshadri, R. et al., Indian J. Chem., 1974, 12, 783, (分離)  
Zemtsova, G.N. et al., Khim. Prir. Soedin., 1975, 11, 516; Chem. Nat. Compd. (Engl. Transl.), 1975, 11, 538, (分離)  
Yoshizaki, M. et al., Chem. Pharm. Bull., 1977, 25, 3408, (分離)  
Komissarenko, N.F. et al., Khim. Prir. Soedin., 1977, 13, 287; Chem. Nat. Compd. (Engl. Transl.), 1977, 13, 252, (分離)

\*\*\*RTECS (化学物質毒性データ)\*\*\*

生体影響物質 : 変異原物質

\*\*\*健康障害に関するデータ\*\*\*

\*\*\*変異原性に関するデータ\*\*\*

<<試験方法>> 小核試験.

試験系 : ヒトリンパ球

投与量・期間: 100 mg/L

参照文献

MUREAV Mutation Research. (Elsevier Science Pub. B.V., POB 211, 1000 AE Amsterdam, Netherlands) V.1- 1964- [Vol.,頁,年(19-)]246,205,1991

<<試験方法>> 姉妹染色分体交換試験

試験系 : ヒトリンパ球

投与量・期間: 50 mg/L

参照文献

MUREAV Mutation Research. (Elsevier Science Pub. B.V., POB 211, 1000 AE Amsterdam, Netherlands) V.1- 1964- [Vol.,頁,年(19-)]246,205,1991

§ Schaftoside; 1''',4'''-Diepimer

[化学名・別名]6-β-D-Glucopyranosyl-8-β-D-ribosepyranosylapigenin

[CAS No.]207461-10-7

[化合物分類]フラボノイド(Flavones; 3 × O-置換基)

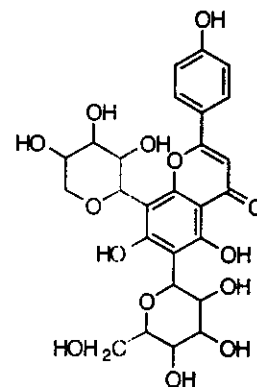
[構造式]

[分子式]C<sub>26</sub>H<sub>28</sub>O<sub>14</sub>

[分子量]564.499

[正確な分子量]564.14791

[基原] *Passiflora incarnata*



-----文献-----

Chimichi, S. et al., Nat. Prod. Lett., 1998, 11, 225, (1''',4'''-diepimer)

§ Vitexin; 4'-O-α-L-Rhamnopyranoside

[CAS No.]32426-34-9

[化合物分類]フラボノイド(Flavones; 3 × O-置換基)

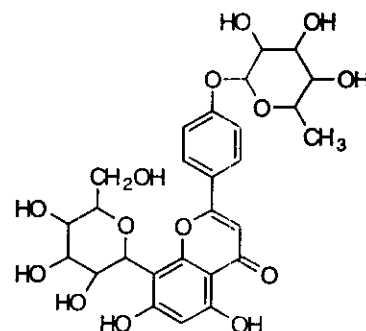
[構造式]

[分子式]C<sub>27</sub>H<sub>30</sub>O<sub>14</sub>

[分子量]578.526

[正確な分子量]578.16356

[基原] *Crataegus monogyna*, *Crataegus oxyacantha*, *Passiflora incarnata*



-----文献-----

Chopin, J. et al., *Phytochemistry*, 1977, 16, 2041; 1978, 17, 299, (2"-rhamnosylvitexin, 2"-rhamnosylisoswertisin)

§ § トケイソウ科オオナガミクダモノケイソウ (*Passiflora quadrangularis* L.) の果実, 花および葉。

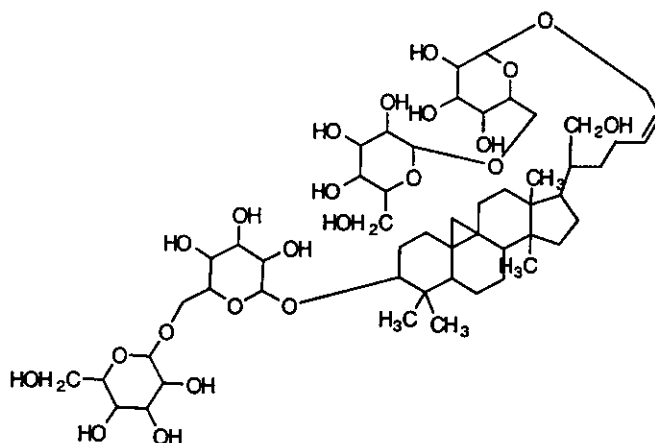
§ **Cycloart-24-ene-3,21,26-triol; (3  $\beta$ ,24Z)-form, 3,26-Di-O-gentibioside**

[化学名・別名] *Quadranguloside*

[CAS No.] 100182-36-3

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

[構造式]



[分子式]  $C_{54}H_{90}O_{23}$

[分子量] 1107.291

[正確な分子量] 1106.587295

[基原] *Passiflora quadrangularis*

[性状] 無定形の粉末

[融点] Mp 164-165 °C で分解

[比旋光度]:  $[\alpha]_D^{25} -11$  (c, 0.89 in MeOH)

-----文献-----

Orsini, F. et al., *Phytochemistry*, 1986, 25, 191

§ **2,6-Dimethyl-2,5-heptadienoic acid; (E)-form**

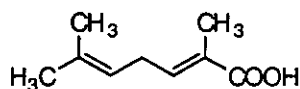
[CAS No.] 261949-42-2

[化合物分類] テルペノイド (Acyclic monoterpenoids)

[構造式]

[基原] *Passiflora quadrangularis*

[性状] オイル



-----文献-----

Osorio, C. et al., *Phytochemistry*, 2000, 53, 97-101, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ **2,6-Dimethyl-2,5-heptadienoic acid; (E)-form,  $\beta$ -D-Glucopyranosyl ester**

[CAS No.] 261949-43-3

[化合物分類] テルペノイド (Acyclic monoterpenoids)

[構造式]

[分子式]  $C_{15}H_{24}O_7$

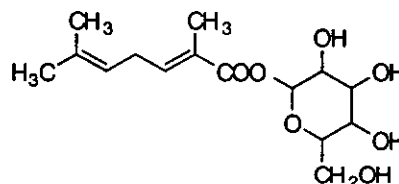
[分子量] 316.35

[正確な分子量] 316.152205

[基原] *Passiflora quadrangularis*

[性状] オイル

[比旋光度]:  $[\alpha]_D^{25} +12.6$  (c, 0.78 in MeOH)



-----文献-----

Osorio, C. et al., *Phytochemistry*, 2000, 53, 97-101, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ 2,6-Dimethyl-5,7-octadiene-2,3-diol; (*S,E*)-form

[CAS No.] 261917-31-1

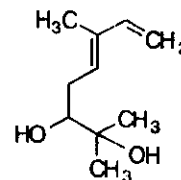
[化合物分類] テルペノイド (Acyclic monoterpenoids)

[構造式]

[基原] 次の植物から分離: *Passiflora quadrangularis*

[性状] オイル

[比旋光度]:  $[\alpha]_D^{25} -19.7$  (c, 0.62 in  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ ) (80% o.p.)



-----文献-----

Tsankova, E. et al., *Phytochemistry*, 1983, 22, 1285, (*Z*-form)

Osorio, C. et al., *Phytochemistry*, 2000, 53, 97, (*S,E*-form)

§ 3,7-Dimethyl-3-octene-1,2,6,7-tetrol

[CAS No.] 261949-44-4

[その他の CAS No.] 260355-82-6, 260355-87-1

[化合物分類] テルペノイド (Acyclic monoterpenoids)

[構造式]

[分子式]  $\text{C}_{10}\text{H}_{20}\text{O}_4$

[分子量] 204.266

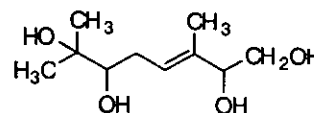
[正確な分子量] 204.13616

[基原] *Passiflora quadrangularis*

[性状] オイル

[比旋光度]:  $[\alpha]_D^{25} -11.9$  (c, 0.67 in MeOH)

[その他のデータ] 立体異性体の混合物



-----文献-----

Osorio, C. et al., *Tetrahedron: Asymmetry*, 1999, 10, 4313, (stereochem)

Osorio, C. et al., *Phytochemistry*, 2000, 53, 97, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ Norepinephrine, INN

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

-3,4-dihydroxybenzyl alcohol (旧 CAS 名). 2-Amino-1-(3,4-dihydroxyphenyl) ethanol. 4-( $\beta$ -Amino- $\alpha$

-hydroxyethyl) catechol. Noradrenaline, BAN. Arterenol

[関連 CAS No.] 5794-08-1, 69815-49-2

[化合物分類] アルカロイド化合物 (Simple tyramine alkaloids), 薬物:  $\alpha$ -アドレナリン受容体作用薬 ( $\alpha$ -Adrenoceptor agonists), 薬物:  $\beta$ -アドレナリン受容体作用薬 ( $\beta$ -Adrenoceptor agonists), 薬物: 交感神経作用薬 (Sympathomimetic agents), 薬物: 血管収縮 (Vasoconstrictors)

[構造式]

[分子式]  $\text{C}_8\text{H}_{11}\text{NO}_3$

[分子量] 169.18

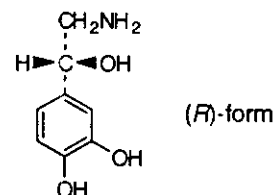
[正確な分子量] 169.073894

[基原] 次の植物のアルカロイド: *Albizia julibrissin*, *Mimosa pudica*, *Phaseolus multiflorus*, *Samanea saman*, *Musa paradisiaca*, *Musa sapientium*, *Passiflora quadrangularis*, *Portulaca oleracea*, *Prunus domestica*, *Citrus sinensis*, *Aconitum napellus*, *Aconitum paniculatum*, *Solanum tuberosum* (マメ科, バショ

ウ科, トケイソウ科, スベリヒユ科, バラ科, ミカン科, キンポウゲ科, ナス科)

[用途]  $\alpha$ ,  $\beta$ -アドレナリン受容体作用薬, 気管拡張薬, 交感神経遮断薬, 昇圧薬

[Log P 計算値] Log P -0.99 (計算値)



-----文献-----

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

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

Pratesi, P. et al., *J.C.S.*, 1959, 4062, (絶対構造)

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

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

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

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



§ 3,3',4',5,7-Pentahydroxy-5'-methoxyflavylium (1+)

[化学名・別名] 2-(3,4-Dihydroxy-5-methoxyphenyl)-3,5,7-trihydroxy-1-benzopyrylium (1+) (CAS 名).

Petunidin. Myrtillidin. Petunidol

[CAS No.] 13270-60-5

[その他の CAS No.] 1429-30-7

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

[構造式]

[分子式] C<sub>16</sub>H<sub>13</sub>O<sub>7</sub><sup>(+)</sup>

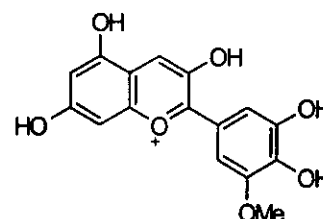
[分子量] 317.274

[正確な分子量] 317.06613

[基原] 次の植物から分離: コケモモ, *Gladiolus atrovioleaceus*, *Amomum subulatum*, *Passiflora quadrangularis*, *Cactus opuntia* の果実. その他多くの植物に存在する

[性状] 灰色-褐色の葉状結晶もしくはプリズム結晶 (HCl 溶液) (as chloride)

[その他のデータ] いくつかの水和物を形成する



-----文献-----

Bell, J.C. et al., J.C.S., 1934, 1604, (分離)

Karrer, W. et al., Konstitution und Vorkommen der Organischen Pflanzenstoffe, 2nd edn., Birkhäuser Verlag,

Billot, J. et al., Phytochemistry, 1974, 13, 2886, (分離)

Iacobucci, G.A. et al., Tetrahedron, 1983, 39, 3005, (レビュー)

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

\*\*\*\*\*ハツタケ (Hatsutake) \*\*\*\*\*

§ § ペニタケ科ハツタケ (*Lactarius hatsudake* Tanaka) の子実体。

該当物質なし

§ § ペニタケ科アカハツタケ (*Lactarius deliciosus* Fr.) の子実体。

§ 3,4-Dihydro-2,2-dimethyl-4-oxo-2H-1-benzopyran-6-carboxaldehyde

[化学名・別名] 6-Formyl-2,2-dimethyl-4-chromanone. Lactarochromal

[CAS No.] 143260-32-6

[化合物分類] ベンゾピラノイド (1-Benzopyrans)

[構造式]

[分子式] C<sub>12</sub>H<sub>12</sub>O<sub>3</sub>

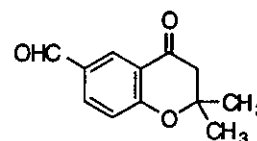
[分子量] 204.225

[正確な分子量] 204.078645

[基原] 次の植物の代謝物: *Lactarius deliciosus*

[性状] 針状結晶

[融点] Mp 87-91 °C



-----文献-----

Ayer, W.A. et al., J. Nat. Prod., 1994, 57, 839, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ 2,2-Dimethyl-2H-1-benzopyran-6-carboxylic acid

[化学名・別名] 2,2-Dimethyl-6-chromenecarboxylic acid. Anofinic acid

[CAS No.] 34818-56-9

[化合物分類] ベンゾピラノイド (1-Benzopyrans)

[構造式]

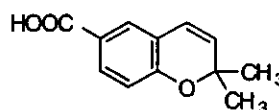
[分子式] C<sub>12</sub>H<sub>12</sub>O<sub>3</sub>

[分子量] 204.225

[正確な分子量] 204.078645

[基原] *Anodendron affine*, *Curvuleria fallax*, *Lactarius deliciosus* の代謝物

[性状] 結晶 (hexane/C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>)



[融点] Mp 160 °C

-----文献-----

- Shima, K. et al., Yakugaku Zasshi, 1971, 91, 1124, (分離, 合成法)  
Diaz, D.P.P. et al., Phytochemistry, 1987, 26, 809, (分離)  
Alberola, A. et al., Heterocycles, 1994, 38, 819, (合成法, H-NMR, Mass)  
Ayer, W.A. et al., J. Nat. Prod., 1994, 57, 839, (分離, C13-NMR)  
Cristina, D. et al., Phytochemistry, 1999, 51, 899, (分離, UV, IR, H-NMR, C13-NMR)

§ 1,4-Dimethyl-7-(1-methylethenyl) azulene (CAS 名)

[化学名・別名] 7-Isopropenyl-1,4-dimethylazulene. Lactarazulene

[CAS No.] 489-85-0

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

[構造式]

[分子式] C<sub>15</sub>H<sub>16</sub>

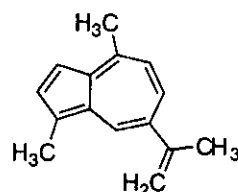
[分子量] 196.291

[正確な分子量] 196.1252

[基原] *Lactarius deliciosus*

[性状] 青色の液体

[沸点] Bp<sub>0.01</sub> 85-90 °C



-----文献-----

Syorm, F. et al., Coll. Czech. Chem. Comm., 1954, 19, 357

§ 3-(Hydroxyacetyl)-1H-indole

[化学名・別名] 2-Hydroxy-1-(1H-indol-3-yl) ethanone (CAS 名). Hydroxymethyl indol-3-yl ketone (旧 CAS 名)

[CAS No.] 2400-51-3

[関連 CAS No.] 34951-71-8, 34951-79-6

[化合物分類] アルカロイド化合物 (Nitrogenous marine toxins), アルカロイド化合物 (Simple indole alkaloids)

[構造式]

[分子式] C<sub>10</sub>H<sub>9</sub>NO<sub>2</sub>

[分子量] 175.187

[正確な分子量] 175.063329

[基原] 次の植物から得られるアルカロイド: 紅藻類 *Prionitis lanceolata*. また海綿類 *Tedania ignis*, カビ類 *Lactarius deliciosus* の液体培養物からも得られる

[用途] 植物生育制御. 中枢神経興奮薬

[性状] 針状結晶 (EtOAc); 結晶 (H<sub>2</sub>O or C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>)

[融点] Mp 162-163 °C. Mp 173-174 °C

[UV]: [neutral] λ<sub>max</sub> 212 (ε 10232); 240 (ε 5500); 294 (ε 4466) (MeOH)

[化学物質毒性データ総覧 (RTECS) 登録番号] KM5779000

-----文献-----

- Bernart, M. et al., Phytochemistry, 1990, 29, 3697, (分離)  
Kobayashi, J. et al., Tetrahedron, 1990, 46, 7699, (Hyrtiosin A)  
Dillman, R.L. et al., J. Nat. Prod., 1991, 54, 1056, (分離, UV, H-NMR, C13-NMR, Mass)  
Ayer, W.A. et al., J. Nat. Prod., 1994, 57, 839, (分離, H-NMR, Mass, 構造決定)  
Boumhlendorf, B. et al., Annalen, 1996, 49, (分離, IR, H-NMR, C13-NMR, Mass)

\*\*\*RTECS (化学物質毒性データ)\*\*\*

生体影響物質 : 医薬品.

\*\*\*健康障害に関するデータ\*\*\*

\*\*\*急性毒性に関するデータ\*\*\*

<<試験方法>> 認知されている最小致死量 (LDLo) 試験.

曝露経路 : 腹腔内投与

被験動物 : げっ歯類-マウス

投与量・期間 : >700 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

PCJOAU Pharmaceutical Chemistry Journal (English Translation). Translation of KHFZAN. (Plenum Pub. Corp., 233 Spring St., New York, NY 10013) No.1- 1967- [Vol.,頁,年(19-)]6,33,1972

§ Lactarofulvene

[化学名・別名] 1,6-Dihydro-7-isopropenyl-4-methyl-1-methyleneazulene (旧 CAS 名).

1,6-Dihydro-4-methyl-1-methylene-7-(1-methylethenyl) azulene

[CAS No.] 18454-60-9

[化合物分類] テルペノイド (Simple guaianes sesquiterpenoids)

[構造式]

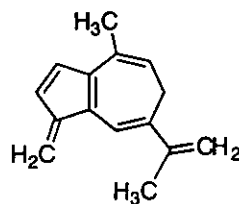
[分子式] C<sub>15</sub>H<sub>16</sub>

[分子量] 196.291

[正確な分子量] 196.1252

[基原] *Lactarius deliciosus*

[性状] 不安定な橙色の液体



-----文献-----

Betelli, D.J. et al., Tetrahedron, 1968, 24, 2079

§ 4-Methyl-7-(1-methylethenyl)-1-azulenecarboxaldehyde

[化学名・別名] 7-Isopropenyl-4-methyl-1-azulenecarboxaldehyde. 1-Formyl-7-isopropenyl-4-methylazulene.

1,3,5,7,9,11-Guaiahexaen-15-al. Lactaroviolin. Delicial

[CAS No.] 85-33-6

[化合物分類] テルペノイド (Simple guaianes sesquiterpenoids)

[構造式]

[分子式] C<sub>15</sub>H<sub>14</sub>O

[分子量] 210.275

[正確な分子量] 210.104465

[基原] *Lactarius deliciosus*

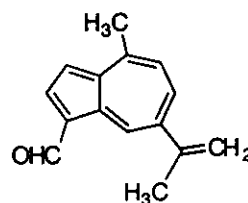
[用途] 主に *Mycobacterium tuberculosis* に対して抗菌活性

[性状] 紫色-赤色結晶 (petrol)

[融点] Mp 58 °C

[溶解性] BERDY SOL: メタノール, エーテルに可溶; ヘキサンに易溶; 水に難溶

[UV]: [neutral] λ<sub>max</sub> 242 (ε 33900); 315 (ε 30900); 398 (ε 12600); 527 (ε 912) (EtOH)



-----文献-----

Heilbronner, E. et al., Helv. Chim. Acta, 1954, 37, 2018, (構造決定)

Soyrm, F. et al., Coll. Czech. Chem. Comm., 1955, 20, 227, (構造決定)

Meache, D. et al., Helv. Chim. Acta, 1967, 50, 1178, (H-NMR)

Koul, S.K. et al., Phytochemistry, 1985, 24, 181, (11,12-dihydro)

Bergendorff, O. et al., Phytochemistry, 1988, 27, 97, (分離, UV, IR, H-NMR, C13-NMR)

Anke, H. et al., Food Chem. Toxicol., 1989, 27, 393, (薬理)

\*\*\*\*\*バッファローベリー (Buffaloberry) \*\*\*\*\*

§ § グミ科バッファローベリー (*Shepherdia argentea* Nuttall)

§ 7-Hydroxy-1-methyl-β-carboline; 1,2,3,4-Tetrahydro

[化学名・別名] Tetrahydroharmol. 2,3,4,9-Tetrahydro-1-methyl-1H-pyrido[3,4-b]indol-7-ol (旧 CAS 名).

1,2,3,4-Tetrahydro-7-hydroxy-1-methyl- $\beta$ -carboline

[CAS No.] 17952-75-9

[化合物分類] アルカロイド化合物 ( $\beta$ -Carboline alkaloids)

[構造式]

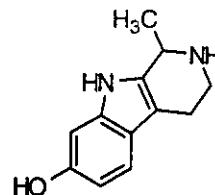
[分子式]  $C_{12}H_{11}N_2O$

[分子量] 202.255

[正確な分子量] 202.110613

[基原] 次の植物から得られるアルカロイド: *Elaeagnus angustifolia*, *Shepherdia argentea*, *Shepherdia canadensis* (グミ科)

[融点] Mp 254-255 °C



-----文献-----

Borkowski, B., CA, 1960, 54, 15844e

Lutomski, J., CA, 1960, 54, 16751f; 1961, 55, 21479a

Ayer, W.A. et al., Can. J. Chem., 1970, 48, 1980, (Tetrahydroharmol)

Ribas, I. et al., CA, 1972, 77, 123811n

Allen, J.R.F. et al., Phytochemistry, 1980, 19, 1573, (レビュー, 成書)

### § Shephagenin A

[CAS No.] 182166-71-8

[化合物分類] タンニン化合物 (Hexahydroxydiphenoyl ester tannins), タンニン化合物 (Valoneoyl ester tannins)

[構造式]

[分子式]  $C_{48}H_{32}O_{32}$

[分子量] 1120.762

[正確な分子量] 1120.08768

[基原] *Shepherdia argentea*

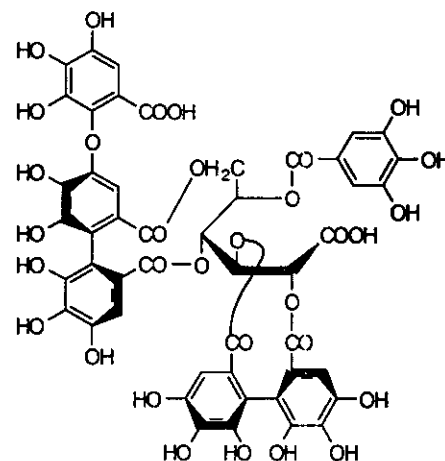
[性状] 灰白色の粉末・六水和物

[比旋光度]:  $[\alpha]_D +116$  (c, 1 in MeOH)

[UV]: [neutral]  $\lambda_{max}$  229 (log  $\epsilon$  4.93); 277 (log  $\epsilon$  4.59)

(MeOH) [neutral]  $\lambda_{max}$  229 ( $\epsilon$  85100); 277 ( $\epsilon$  38900)

(MeOH)



-----文献-----

Yoshida, T. et al., Chem. Pharm. Bull., 1996, 44, 1436, (分離, UV, CD, H-NMR, C13-NMR)

### § Shephagenin B

[CAS No.] 182166-72-9

[化合物分類] タンニン化合物 (Hexahydroxydiphenoyl ester tannins)

[構造式]

[分子式]  $C_{34}H_{26}O_{23}$

[分子量] 802.566

[正確な分子量] 802.086495

[基原] *Shepherdia argentea*

[性状] 灰白色の粉末

[比旋光度]:  $[\alpha]_D +142.5$  (c, 0.4 in MeOH)

[UV]: [neutral]  $\lambda_{max}$  218 (log  $\epsilon$  4.77); 268 (log  $\epsilon$  4.38)

