

Neocryptoxanthin. β -Krypoxanthin. Cryptoxanthol

[CAS No.] 472-70-8

[化合物分類] テルペノイド (Tetraterpenoids)

[構造式]

[分子式] $C_{40}H_{56}O$

[分子量] 552.882

[正確な分子量] 552.433115

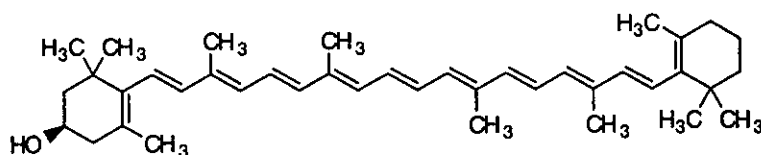
[基原] 次の植物から分離: *Carica*

papaya その他多くの高等植物, またカビ, 珪藻土 藍藻植物, 及び魚卵から得られる

[性状] 結晶 ($C_6H_6/EtOH$), 金属様のプリズム晶, もしくは針状結晶 (C_6H_6)

[融点] Mp 172-173 °C (169 °C)

[UV]: [neutral] λ_{max} 452 (); 480 () (溶媒の報告はない)



-----文献-----

Pfander, H., *Chimia*, 1972, 27, 103, (分離)

Karrer, W. et al., *Konstitution und Vorkommen der Organischen Pflanzenstoffe*, 2nd edn., Birkhäuser Verlag, Basel, 1972, no. 1837, (生育)

Matsuno, T. et al., *Comp. Biochem. Physiol., B: Comp. Biochem.*, 1986, 83, 335, (分離)

Straub, O. et al., *Key to Carotenoids*, 2nd edn., Birkhauser Verlag, Basel and Boston, 1987, 55, (成書)

§ Isopropylcyclohexane (旧 CAS 名)

[化学名・別名] (1-Methylethyl) cyclohexane (CAS 名). 2-Cyclohexylpropane

[CAS No.] 696-29-7

[化合物分類] テルペノイド (p-Menthane monoterpenoids)

[構造式]

[分子式] C_9H_{18}

[分子量] 126.241

[正確な分子量] 126.14085

[基原] *Carica papaya*

[性状] オイル様の液体

[融点] 凝固点: Fp -89.8 °C

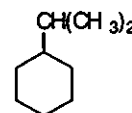
[沸点] Bp 154.7 °C (150-153 °C)

[濃度] d^{20}_D 0.802

[屈折率] n^{20}_D 1.441

[傷害・毒性] 自然発火点: 248/283 °C

[化学物質毒性データ総覧 (RTECS) 登録番号] GV5030000



-----文献-----

Adv. Chem. Ser., 1955, 15, 452, (性質)

Adams, J.Q. et al., *Prepr.- Am. Chem. Soc., Div. Pet. Chem.*, 1972, 17, C4, (C13-NMR)

Green, M.M. et al., *Adv. Mass Spectrom.*, 1978, 7A, 149, (Mass)

Miller, L.L. et al., *J.O.C.*, 1978, 43, 2059, (合成法)

§ Papain, USAN

[化学名・別名] Caroid. Papayotin. Vegetable pepsin. Arbuz. Nematolyt. Summetrin. Tromasin. Velardon.

Vermizym

[CAS No.] 9001-73-4

[化合物分類] 薬物: 抗炎症薬 (Antiinflammatory agents), 薬物: 駆虫薬 (Anthelmintics), 薬物: 消化剤 (Digestive agents), アミノ酸とペプチド (Enzymes)

[構造式] 不明

[基原] 次の植物から精製されたタンパク分解物質: *Carica papaya*

[用途] Antioedemic, 抗炎症薬. タンパク質酵素は癒着の予防, 生体内タンパク消化に用いる. コンタクトレンズの脱タンパク質錠剤として市販される

[その他のデータ] Panafil の構成成分

[化学物質毒性データ総覧 (RTECS) 登録番号] RU4950000

-----文献-----

Zoch, E., *Arzneim.-Forsch.*, 1969, 19, 1593, (レビュー, isoln, 用途)

Arnon, R., Methods Enzymol., 1970, 19, 226, (レビュー)
Liener, I.E., Adv. Chem. Ser., 1974, 136, 202, (レビュー, 性質, 用途)
Kamphius, I.G. et al., J. Mol. Biol., 1984, 179, 233, (結晶構造)
Martindale, The Extra Pharmacopoeia, 30th edn., Pharmaceutical Press, 1993, 1398
Lewis, R.J., Sax's Dangerous Properties of Industrial Materials, 8th edn., Van Nostrand Reinhold, 1992, PAG500

RTECS (化学物質毒性データ)

生体影響物質 : 医薬品, 生殖影響物質, 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 (TDL₀) 試験.

曝露経路 : 経口投与.

被験動物 : ヒト-男性

投与量・期間 : 71 mg/kg

毒性影響 : [胃腸] 食道の構造または機能の変化.

参考文献

JCGADC Journal of Clinical Gastroenterology. (Raven Press, 1185 Ave. of the Americas, New York, NY 10036) [Vol.,頁,年(19-)]9,127,1987

<<試験方法>> LD₅₀ 試験 (50%致死量試験).

曝露経路 : 経口投与.

被験動物 : げっ歯類-ラット.

投与量・期間 : >4 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

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-)]159,126,1966

<<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 : 12500 mg/kg

毒性影響 : [肺, 胸郭, または呼吸] 呼吸困難.

[胃腸] 運動亢進, 下痢.

[皮膚と付属器官] 毛髪.

参考文献

NYKZAU Nippon Yakurigaku Zasshi. Japanese Journal of Pharmacology. (Nippon Yakuri Gakkai, c/o Kyoto Daigaku Igakubu Yakurigaku Kyoshitsu, Konoe-cho, Yoshida, Sakyo-ku, Kyoto 606, Japan) V.40- 1944- [Vol.,頁,年(19-)]51,27,1955

<<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 : 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

TOXIA6 Toxicon. (Pergamon Press Ltd., Headington Hill Hall, Oxford OX3 OBW, UK) V.1- 1962- [Vol.,頁,年(19-)]19,851,1981

その他の多回投与試験

<<試験方法>> 認知されている最小毒性濃度 (TCL₀) 試験.

曝露経路 : 吸入.

被験動物 : げっ歯類-ラット.

投与量・期間 : 3 pph/1 時間/4 週間間欠投与

毒性影響 : [肺, 胸郭, または呼吸] 肺気腫.

慢性毒性に関するデータ : 死亡.

参考文献

PSEBAA Proceedings of the Society for Experimental Biology and Medicine. (Academic Press, Inc., 1 E. First St., Duluth, MN 55802) V.1- 1903/04- [Vol.,頁,年(19-)]134,157,1970

<<試験方法>> 最小毒性量(TDLo)試験.

曝露経路 : Intratracheal

被験動物 : げっ歯類-ラット.

投与量・期間 : 800 ug/kg/4 週間間欠投与

毒性影響 : [肺, 胸郭, または呼吸] 肺気腫.

慢性毒性に関するデータ : 死亡.

参照文献

PSEBAA Proceedings of the Society for Experimental Biology and Medicine. (Academic Press, Inc., 1 E. First St., Duluth, MN 55802) V.1- 1903/04- [Vol.,頁,年(19-)]134,157,1970

生殖に関するデータ

<<試験方法>> 最小毒性量(TDLo)試験.

曝露経路 : 経口投与.

被験動物 : げっ歯類-ラット.

投与 : 750 mg/kg

雌雄投与期間 : 雌 13 日間(交配後)

毒性影響 : [生殖] [特定の発育異常]その他の発育異常.

参照文献

IJMRAQ Indian Journal of Medical Research. (Indian Council of Medical Research, Ansari Nagar, New Delhi 110 029, India) V.1- 1913- [Vol.,頁,年(19-)]67,499,1978

<<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 : 750 mg/kg

雌雄投与期間 : 雌 8-17 日間(交配後)

毒性影響 : [生殖] [特定の発育異常]筋肉骨格系.

参照文献

IJEB6 Indian Journal of Experimental Biology. (Publications & Information Directorate, CSIR, Hillside Rd., New Delhi 110 012, India) V.1- 1963- [Vol.,頁,年(19-)]18,953,1980

<<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 : 1500 mg/kg

雌雄投与期間 : 雌 10-11 日間(交配後)

毒性影響 : [生殖] [特定の発育異常]中枢神経系.

参照文献

JAINAA Journal of the Anatomical Society of India. (Dept. of Anatomy, Medical College, Aurangabad 431 001, India) V.1- 1952- [Vol.,頁,年(19-)]29,82,1980

<<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 : 750 mg/kg

雌雄投与期間 : 雌 8 日間(交配後)n

毒性影響 : [生殖] [特定の発育異常]肝胆系.
[生殖] [特定の発育異常]泌尿生殖系.

参照文献

IJMRAQ Indian Journal of Medical Research. (Indian Council of Medical Research, Ansari Nagar, New Delhi 110 029, India) V.1- 1913- [Vol.,頁,年(19-)]72,300,1980

<<試験方法>> 最小毒性量(TDLo)試験.

曝露経路 : 腹腔内投与

被験動物 : げっ歯類-ラット.

投与 : 375 mg/kg

雌雄投与期間 : 雌 8 日間(交配後)

毒性影響 : [生殖] [特定の発育異常]肝胆系.
[生殖] [特定の発育異常]泌尿生殖系.

参照文献

IJMRAQ Indian Journal of Medical Research. (Indian Council of Medical Research, Ansari Nagar, New Delhi 110 029, India) V.1- 1913- [Vol.,頁,年(19-)]72,300,1980

<<試験方法>> 最小毒性量(TDLo)試験.

曝露経路 : 腹腔内投与

被験動物 : げっ歯類-ラット.

投与 : 375 mg/kg

雌雄投与期間: 雌 12 日間(交配後)

毒性影響 : [生殖] [受精能への影響] 着床後死亡率.(たとえば着床総数当たりの着床の死亡および/または吸収)

[生殖] [特定の発育異常] その他の発育異常.

[生殖] [胚または胎仔に対する影響] 胎仔の死亡.

参考文献

IJMRAQ Indian Journal of Medical Research. (Indian Council of Medical Research, Ansari Nagar, New Delhi 110 029, India) V.1- 1913- [Vol.,頁,年(19-)]67,499,1978

<<試験方法>> 最小毒性量(TDLo)試験.

曝露経路 : 腹腔内投与

被験動物 : げっ歯類-ラット.

投与 : 375 mg/kg

雌雄投与期間: 雌 12 日間(交配後)

毒性影響 : [生殖] [特定の発育異常] 恒常性.

参考文献

IJMRAQ Indian Journal of Medical Research. (Indian Council of Medical Research, Ansari Nagar, New Delhi 110 029, India) V.1- 1913- [Vol.,頁,年(19-)]67,499,1978

<<試験方法>> 最小毒性量(TDLo)試験.

曝露経路 : 腹腔内投与

被験動物 : げっ歯類-ラット.

投与 : 375 mg/kg

雌雄投与期間: 雌 8-17 日間(交配後)

毒性影響 : [生殖] [特定の発育異常] 筋肉骨格系.

参考文献

IJEBA6 Indian Journal of Experimental Biology. (Publications & Information Directorate, CSIR, Hillside Rd., New Delhi 110 012, India) V.1- 1963- [Vol.,頁,年(19-)]18,953,1980

<<試験方法>> 最小毒性量(TDLo)試験.

曝露経路 : 腹腔内投与

被験動物 : げっ歯類-ラット.

投与 : 750 mg/kg

雌雄投与期間: 雌 8 日間(交配後)

毒性影響 : [生殖] [特定の発育異常] 中枢神経系.*

参考文献

JAINAA Journal of the Anatomical Society of India. (Dept. of Anatomy, Medical College, Aurangabad 431 001, India) V.1- 1952- [Vol.,頁,年(19-)]29,82,1980

<<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-ウサギ.

投与 : 500 mg/kg

雌雄投与期間: 雌 16-18 日間(交配後)

毒性影響 : [生殖] [受精能への影響] 着床後死亡率.(たとえば着床総数当たりの着床の死亡および/または吸収)

[生殖] [新生児への影響] 離乳または乳汁分泌指数(たとえば4日目
に生存した仔のうち離乳時にも生存した仔の数).

参考文献

JAINAA Journal of the Anatomical Society of India. (Dept. of Anatomy, Medical College, Aurangabad 431 001, India) V.1- 1952- [Vol.,頁,年(19-)]28,6,1979

<<試験方法>> 最小毒性量(TDLo)試験.

曝露経路 : 腹腔内投与

被験動物 : げっ歯類-ウサギ.
投与 : 500 mg/kg
雌雄投与期間: 雌 17日間(交配後)
毒性影響 : [生殖] [受精能への影響] 着床後死亡率.(たとえば着床総数当たり
の着床の死亡および/または吸収)
[生殖] [新生児への影響] 離乳または乳汁分泌指数(たとえば4日目に
生存した仔のうち離乳時にも生存した仔の数).

参考文献

JAINAA Journal of the Anatomical Society of India. (Dept. of Anatomy, Medical College, Aurangabad
431 001, India) V.1- 1952- [Vol.,頁,年(19-)]28,6,1979

米国NIOSH基準の発展とサーベランス

米国NIOSH職業暴露調査データ

全米労働有害性調査(NOHS)米国全国職業ハザード調査.(1974)

NOHS Hazard Code - 80474

No. of Facilities: 3537 (評価)

No. of Industries: 28

No. of Occupations: 77

No. of Employees: 46199 (評価)

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 - 80474

No. of Facilities: 431 (評価)

No. of Industries: 6

No. of Occupations: 15

No. of Employees: 8042 (評価)

No. of Female Employees: 3088 (評価)

米国に於ける状況

EPA TSCA Section 8(b) CHEMICAL INVENTORY

§ 2-Propanol(CAS名)

[化学名・別名] Isopropanol. 2-Hydroxypropane. Isopropyl alcohol, USAN. Alcojel. Avantin. Bowsteral.

Hartasol. Petrohol. Propol. Takineocol

[CAS No.] 67-63-0

[関連 CAS No.] 3979-51-9, 6831-82-9, 15520-32-8

[その他の CAS No.] 62309-51-7

[化合物分類] 脂肪族化合物(Saturated unbranched alcohols), 薬物: 抗菌性剤(Antibacterial agents), 薬物:
(Excipient)

[構造式] $\text{H}_3\text{CCH}(\text{OH})\text{CH}_3$

[分子式] $\text{C}_3\text{H}_8\text{O}$

[分子量] 60.096

[正確な分子量] 60.057515

[基原] 果実香気に存在する, 例えば, *Carica papaya*. Manuf. by catalytic hydration of propylene

[用途] クレオソート, 樹脂, ガム, インク, オイル, ローション等の溶媒として広く用いられる. 不凍液
の混合物に, また食品保存料の抽出溶媒として使われる. 局部的抗伝染病. 医薬品として(溶剤). Used
to prepare isopropyl esters of carboxylic acids for gc anal. Important industrial chemical, USA production in
1999 0.73 million tons

[性状] 液体

[融点] 凝固点: F_p -89.5 °C. 融点: M_p -88.5 °C

[沸点] B_p 82.5 °C

[溶解性] 水に可溶

[濃度] d^{20}_4 0.786

[PKa 値] pK_a 17.1 pK_b -4.7 (base)

[屈折率] n^{20}_D 1.3776

[Log P 計算値] Log P 0.07 (計算値)

[その他のデータ] 水と共沸混合物を作る ctg. 12.1% H_2O . 溶液中から塩析で分離できる. Hibistat の構
成成分

[傷害・毒性]発火しやすい, 発火点: 12 °C, 自然発火点: 399 °C. 過酸化に成りやすい. 眼, 皮膚, 呼吸器管を刺激. 液体が眼にふれると焼け付くような痛みを覚え角膜に重度損傷を及ぼす. 強い四塩化炭素様の毒性を示す. 中枢神経抑制薬. OES: long-term 400 ppm; short-term 500 ppm (sk)
[化学物質毒性データ総覧(RTECS)登録番号]NT8050000

-----文献-----

Hatch, L.F., Isopropyl Alcohol, McGraw-Hill, N.Y., 1961, (成書)
Katague, D.B. et al., J. Pharm. Sci., 1965, 54, 891, (分離)
IARC Monog., 1977, 15, 223; Suppl. 7, 229; Suppl. 6, 351, (レビュー, 毒性)
Kirk-Othmer Encycl. Chem. Technol., 3rd edn., Wiley, 1978, 19, 198, (レビュー, 成書)

RTECS (化学物質毒性データ)

生体影響物質 : 農芸化学. 催腫瘍物質. 医薬品. 変異原物質. 生殖影響物質. ヒト. 一時刺激物質.

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

[化学名・別名] 2,4'-Dihydroxy-3',5'-dimethoxyacetophenone. α -Hydroxyacetosyringone. Danielone
[CAS No.] 90426-22-5

[化合物分類] 単環芳香族 (Simple aryl ketones)

[構造式]

[分子式] C₁₀H₁₀O₅

[分子量] 212.202

[正確な分子量] 212.068475

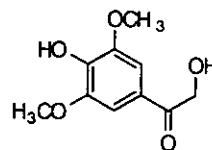
[基原] 次の植物の果実から分離されるファイトアレキシン: *Carica papaya*

[用途] 抗カビ作用を示す

[性状] 粉末

[融点] Mp 145 °C

[UV]: [neutral] λ_{max} 227 (); 298 (MeOH) [neutral] λ_{max} 227 (); 298 (MeOH)



-----文献-----

Pratt, D.D. et al., J.C.S., 1925, 166
Levy, L.F. et al., J.C.S., 1931, 2701
Reynolds, T.M. et al., J.C.S., 1934, 1039
Echeverri, F. et al., Phytochemistry, 1997, 44, 255, (Danielone)
Luis, J.G. et al., J. Chem. Res., Synop., 1999, 220, (Danielone, 合成法)

*****バーベリー (Barberry) *****

§ § メギ科セイヨウメギ (*Berberis vulgaris* L.) の果実, 茎または根。

§ Bargustanine

[CAS No.] 169626-12-4

[化合物分類] アルカロイド化合物
(Secobisbenzylisoquinoline alkaloids)

[構造式]

[分子式] C₂₉H₃₃N₂O₇

[分子量] 522.597

[正確な分子量] 522.236603

[基原] 次の植物の根から得られるアルカロイド:

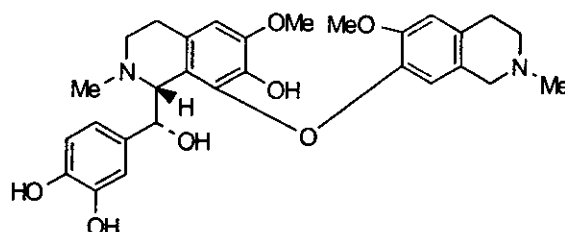
Berberis vulgaris

[性状] 結晶 (MeOH)

[融点] Mp 193-194 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{20}$ +114.2 (c, 0.3 in MeOH)

[UV]: [neutral] λ_{max} 218 (sh) (log ϵ 4.85); 286 (log ϵ 3.98) (EtOH)



-----文献-----

Karimov, A. et al., Khim. Prir. Soedin., 1993, 29, 44; Chem. Nat. Compd. (Engl. Transl.), 1993, 29, 35

§ Berberrubine

[化学名・別名]Chileninone

[CAS No.]17388-19-1

[化合物分類]アルカロイド化合物(Protoberberine alkaloids)

[構造式]

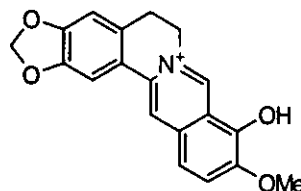
[分子式] $C_{19}H_{16}NO_4^{(+)}$

[分子量]322.34

[正確な分子量]322.107934

[基原]次の植物から得られるアルカロイド: *Berberis actinacantha* の小枝, *Berberis darwinii* と *Berberis valdiviana* の茎. また *Berberis vulgaris*, *Thalictrum polygamum*, *Fibraurea chloroleuca* から得られる(メギ科, キンボウゲ科, ツツラフジ科)

[性状]深紅色の無定型の塊 (as chloride)



-----文献-----

Späth, E. et al., *Monatsh. Chem.*, 1929, 52, 117

Garbo, S.A. et al., *J. Nat. Prod.*, 1973, 36, 349, (分離)

Siwon, J. et al., *Planta Med.*, 1981, 41, 65, (生育)

Valencia, E. et al., *Tetrahedron*, 1984, 40, 3957, (分離, UV, IR, H-NMR, Mass)

Shamma, M. et al., *J. Nat. Prod.*, 1986, 49, 398, (構造決定)

§ Bervulcine

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

[分子式] $C_{18}H_{19}NO_3$

[分子量]297.353

[正確な分子量]297.136494

[一般的性質]構造は未知

[基原]次の植物から得られるアルカロイド: *Berberis vulgaris* (メギ科)

[融点]Mp 125-126 °Cで分解

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{25} -185$ (c, 0.2 in $CHCl_3$)

-----文献-----

Doumlpe, W., *Naturwissenschaften*, 1963, 50, 595

§ Lambertine

[化学名・別名]Dihydroberberine

[CAS No.]120834-89-1

[化合物分類]アルカロイド化合物(Protoberberine alkaloids)

[構造式]

[分子式] $C_{20}H_{19}NO_4$

[分子量]337.374

[正確な分子量]337.131409

[基原]次の植物から得られるアルカロイド: *Berberis lambertii*, *Berberis chitria*, *Berberis vulgaris* (メギ科)

[性状]黄色の針状結晶 (MeOH or Me:CO)

[融点]Mp 163-164 °C

[UV]:[neutral] λ_{max} 280 (log ϵ 4.21); 368 (log ϵ 4.3) (溶媒の報告はない)

-----文献-----

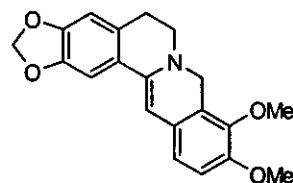
Chatterjee, R. et al., *J. Indian Chem. Soc.*, 1955, 32, 609, (分離, UV, 構造決定, 合成法)

Onda, M. et al., *Chem. Pharm. Bull.*, 1974, 22, 2365, (誘導体, 合成法)

Dobhal, M.P. et al., *Pharmazie*, 1988, 43, 659, (分離, H-NMR, C13-NMR)

Yusupov, M.M. et al., *Khim. Prir. Soedin.*, 1990, 26, 128; *Chem. Nat. Compd. (Engl. Transl.)*, 105, 106, (分離)

Yusupov, M.M. et al., *Khim. Prir. Soedin.*, 1993, 29, 53; *Chem. Nat. Compd. (Engl. Transl.)*, 1993, 29, 43, (Didhydromethylberberine, 分離, 誘導体)



§ Oxyacanthine

[化学名・別名] 6,6',7-Trimethoxy-2,2'-dimethoxyacanthan-12'-ol (CAS 名)

[CAS No.] 548-40-3

[化合物分類] アルカロイド化合物 (Bisbenzylisoquinoline alkaloids; two ether links), 薬物: 抗菌性剤 (Antibacterial agents), 薬物: 抗腫瘍薬 (Antineoplastic agents), 薬物: 抗結核薬 (Antitubercular agents)

[構造式]

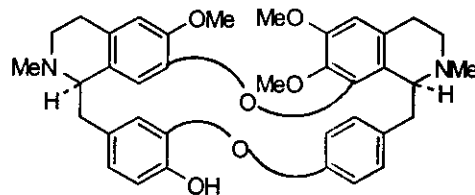
[分子式] $C_{37}H_{40}N_2O_6$

[分子量] 608.733

[正確な分子量] 608.288638

[基原] 次の植物から得られるアルカロイド: 広範囲の

Berberis, *Mahonia* spp., 次の植物を含む; *Berberis aquifolium*, *Berberis floribunda*, *Berberis integerrima*, *Berberis julianae*, *Berberis lambertii*, *Berberis oblonga*, *Berberis orthobotrys*, *Berberis thunbergii*, *Berberis tschonoskyana*, *Berberis vulgaris*, *Mahonia acanthifolia*, *Mahonia borealis*, *Mahonia fortunei*, *Mahonia griffithi*, *Mahonia leschenaultii*, *Mahonia manipurensis*, *Mahonia repens*, *Mahonia sikkimensis*, *Mahonia simonsii*; また次の植物にも見られる: *Albertisia papuana*, *Cocculus laeabe*, *Magnolia compressa*, *Thalictrum lucidum*, *Xanthorhiza simplicissima* (メギ科, ツツラフジ科, モクレン科, キンボウゲ科)



[用途] 抗菌, 抗結核活性を示し, *in vitro* で HeLa-S₃ 細胞に対して抗腫瘍活性を示す. Symphatholytic agent, アドレナリン拮抗薬, 血管拡張剤

[性状] 結晶 (petrol)

[融点] Mp 212-214 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{25} +285.6$ (c, 0.5 in CHCl₃)

[Log P 計算値] Log P 7.72 (未確認値) (計算値)

[UV]: [neutral] λ_{max} 223 (); 283 () (MeOH)

[その他のデータ] Repandine の異性体

[傷害・毒性] BERDY HAZD : 50 % 致死量 (LD₅₀) (マウス, 腹膜内) 50 mg/kg

[化学物質毒性データ総覧 (RTECS) 登録番号] RR6475000

-----文献-----

Fujita, E., *Yakugaku Zasshi*, 1952, 72, 213; *CA*, 47, 6429a, (構造決定)

Knapp, J.E. et al., *J. Pharm. Sci.*, 1967, 56, 139, (分離, UV, IR, H-NMR, 構造決定)

Kuroda, H. et al., *Chem. Pharm. Bull.*, 1976, 24, 2413, (薬理)

Karimov, A. et al., *Khim. Prir. Soedin.*, 1977, 13, 80; *Chem. Nat. Compd. (Engl. Transl.)*, 1977, 13, 68, (Oblongamine)

Bhakuni, D.S. et al., *J.C.S. Perkin 1*, 1978, 1318, (合成)

Herath, W.H.M.W. et al., *J. Nat. Prod.*, 1987, 50, 721, (2'-Noroxyacanthine)

Siv acute y, J. et al., *Acta Cryst. C*, 1996, 52, 1479, (結晶構造)

***RTECS (化学物質毒性データ) ***

生体影響物質 : 医薬品. 天然物.

健康障害に関するデータ

急性毒性に関するデータ

<<試験方法>> 認知されている最小致死量 (LDLo) 試験.

曝露経路 : 腹腔内投与

被験動物 : げっ歯類-ラット.

投与量・期間 : 250 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

NCNSA6 National Academy of Sciences, National Research Council, Chemical-Biological Coordination Center, Review. (Washington, DC) [Vol.,頁,年(19-)] 5,17,1953

<<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 : 致死量以外に毒性影響に関する報告はない.

参照文献

CPBTAL Chemical and Pharmaceutical Bulletin. (Japan Pub. Trading Co., USA, 1255 Howard St., San Francisco, CA 94103) V.6- 1958- [Vol.,頁,年(19-)] 24,2413,1976

§ Secoobaberine; (S)-form, O¹²¹ -De-Me, carboxylic acid, Me ester

[化学名・別名] Tejedine

[化合物分類] アルカロイド化合物 (Secobisbenzylisoquinoline alkaloids)

[構造式]

[分子式] C₃₈H₄₀N₂O₉

[分子量] 668.742

[正確な分子量] 668.273383

[基原] 次の植物から得られるアルカロイド: *Berberis vulgaris*

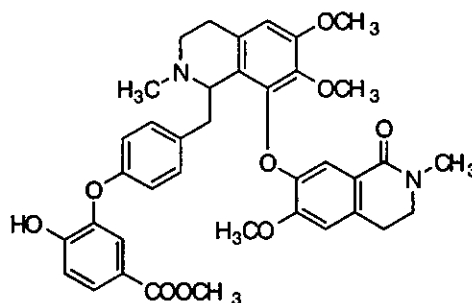
ssp. *australis*

[性状] 無定形の粉末

[融点] Mp 132-134 °C

[比旋光度]: [α]_D -40.6 (c, 0.06 in MeOH)

[UV]: [neutral] λ_{max} 206 (log ε 4.83); 224 (log ε 4.79); 260 (log ε 4.36); 292 (log ε 3.99) (MeOH)



-----文献-----

Suau, R. et al., *Phytochemistry*, 1998, 49, 2545, (Tejedine)

§ Vulracine

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

[構造式] 不明

[分子式] C₁₈H₁₉NO₃

[分子量] 297.353

[正確な分子量] 297.136494

[一般的性質] 構造は未知

[基原] 次の植物から得られるアルカロイド: *Berberis vulgaris* (メギ科)

[性状] 微細針状結晶 (Me₂CO)

[融点] Mp 164 °C

[比旋光度]: [α]_D²⁴ -114 (c, 0.2 in CHCl₃)

-----文献-----

Doumlpke, W., *Naturwissenschaften*, 1963, 50, 595

§ § メギ科メギ (*Berberis thunbergii* de Candolle) の果実, 茎または根。

§ Isotetrandrine

[化学名・別名] O-Methylberbamine

[CAS No.] 477-57-6

[化合物分類] アルカロイド化合物 (Bisbenzylisoquinoline alkaloids; two ether links), 薬物: 抗高血圧薬 (Antihypertensive agents), 薬物: 抗炎症薬 (Antiinflammatory agents), 薬物: 抗腫瘍薬 (Antineoplastic agents)

[構造式]

[分子式] C₃₈H₄₂N₂O₆

[分子量] 622.76

[正確な分子量] 622.304288

[一般的性質] Tetrandrine の立体異性体

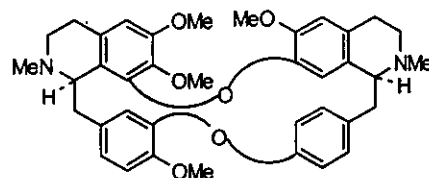
[基原] 次の植物から得られるアルカロイド: *Atherosperma moschatum*, *Berberis empetrifolia*, *Berberis kawakamii*, *Berberis mingetsensis*, *Berberis morrisonensis*, *Berberis poiretii*, *Berberis thunbergii*, *Cyclea barbata*, *Doryphora aromatica*, *Isopyrum thalictroides*, *Laurelia sempervirens*, *Limaciopsis loangensis*, *Mahonia japonica*, *Mahonia lomariifolia*, *Mahonia morrisonensis*, *Mahonia philippinensis*, *Pycnarrhena australiana*, *Pycnarrhena manillensis*, *Stephania cepharantha*, *Stephania elegans*, *Thalictrum foetidum*, *Tiliacora funifera*, *Triclisia gillettii* (アセロスペルマ科, メギ科, ツツラフジ科, キンボウゲ科)

[用途] *in vitro* で HeLa 細胞と Ehrlich ascites に対して抗腫瘍性を示す。抗炎症薬, 抗高血圧薬

[性状] プリズム結晶 (MeOH)

[融点] Mp 182-183 °C

[比旋光度]: [α]_D²⁰ +150.7 (c, 0.85 in CHCl₃)



[Log P 計算値] Log P 8.3 (未確認値) (計算値)
 [UV]: [neutral] λ_{max} 218 (ϵ 31600); 240 (sh) (ϵ 15800); 282 (ϵ 12600) (MeOH) (Derep)
 [傷害・毒性] 50%致死量(LD₅₀) (マウス, 経口) 6400 mg/kg. 50%致死量(LD₅₀) (マウス, 腹腔内投与) 160 mg/kg
 [化学物質毒性データ総覧(RTECS)登録番号] NX7285000

-----文献-----

Bick, I.R.C. et al., Aust. J. Chem., 1956, 9, 111; 1980, 33, 225, (分離, 合成法)
 Tomita, M. et al., Yakugaku Zasshi, 1960, 80, 845; CA, 54, 23187h, (分離)
 Yang, T.-H. et al., Yakugaku Zasshi, 1960, 80, 847; CA, 54, 23187i, (分離)
 Sioumis, A.A. et al., Aust. J. Chem., 1972, 25, 2251, (分離)
 Tackie, A.N. et al., J. Nat. Prod., 1974, 37, 1, (分離, UV, H-NMR, Mass)
 Ayim, J.S.K. et al., J. Nat. Prod., 1977, 40, 561, (分離)
 Moulis, C., J. Nat. Prod., 1981, 44, 101, (分離, UV, IR, H-NMR, Mass)
 Singh, R.S. et al., J. Nat. Prod., 1981, 44, 664, (分離, UV, H-NMR, Mass)
 Buck, K.T., Alkaloids (N.Y.), 1987, 30, 62; 119, (レビュー, 毒性)

RTECS (化学物質毒性データ)

生体影響物質 : 医薬品.

健康障害に関するデータ

急性毒性に関するデータ

<<試験方法>> LD50 試験 (50%致死量試験).

曝露経路 : 経口投与.

被験動物 : げっ歯類-マウス

投与量・期間 : 6400 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

NYKZAU Nippon Yakurigaku Zasshi. Japanese Journal of Pharmacology. (Nippon Yakuri Gakkai, c/o Kyoto Daigaku Igakubu Yakurigaku Kyoshitsu, Konoe-cho, Yoshida, Sakyo-ku, Kyoto 606, Japan) V.40-1944- [Vol.,頁,年(19-)] 65(5),176S,1969

<<試験方法>> LD50 試験 (50%致死量試験).

曝露経路 : 腹腔内投与

被験動物 : げっ歯類-マウス

投与量・期間 : 160 mg/kg

毒性影響 : [催腫瘍性] 抗がん剤として有効.

参照文献

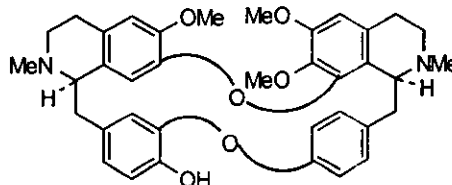
CPBTAL Chemical and Pharmaceutical Bulletin. (Japan Pub. Trading Co., USA, 1255 Howard St., San Francisco, CA 94103) V.6- 1958- [Vol.,頁,年(19-)] 24,2413,1976

§ Oxyacanthine

[化学名・別名] 6,6',7-Trimethoxy-2,2'-dimethoxyacanthan-12'-ol (CAS 名)

[CAS No.] 548-40-3

[化合物分類] アルカロイド化合物 (Bisbenzylisoquinoline alkaloids; two ether links), 薬物: 抗菌性剤 (Antibacterial agents), 薬物: 抗腫瘍薬 (Antineoplastic agents), 薬物: 抗結核薬 (Antitubercular agents)
 [構造式]



[分子式] C₃₇H₄₆N₂O₆

[分子量] 608.733

[正確な分子量] 608.288638

[基原] 次の植物から得られるアルカロイド: 広範囲の *Berberis*, *Mahonia* spp., 次の植物を含む; *Berberis aquifolium*, *Berberis floribunda*, *Berberis integerrima*, *Berberis julianae*, *Berberis lambertii*, *Berberis oblonga*, *Berberis orthobotrys*, *Berberis thunbergii*, *Berberis tschonoskyana*, *Berberis vulgaris*, *Mahonia acanthifolia*, *Mahonia borealis*, *Mahonia fortunei*, *Mahonia griffithii*, *Mahonia leschenaultii*, *Mahonia manipurensis*, *Mahonia repens*, *Mahonia sikkimensis* and *Mahonia simonsii*; また次の植物にも見られる: *Albertisia papuana*, *Cocculus leaebe*, *Magnolia compressa*, *Thalictrum lucidum*, *Xanthorrhiza simplicissima* (メギ科, ツツラフジ科, モクレン科, キンポウゲ科)

[用途] 抗菌, 抗結核活性を示し, *in vitro* で HeLa-S₃ 細胞に対して抗腫瘍活性を示す. Symphatholytic agent, アドレナリン拮抗薬, 血管拡張剤

[性状] 結晶 (petrol)

[融点] Mp 212-214 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{29} +285.6$ (c, 0.5 in CHCl₃)

[Log P 計算値] Log P 7.72 (未確認値) (計算値)

[その他のデータ] Repandine の異性体

[UV]: [neutral] λ_{max} 223 (); 283 () (MeOH)

[その他のデータ] Repandine の異性体

[傷害・毒性] BERDY HAZD : 50 % 致死量 (LD₅₀) (マウス, 腹膜内) 50 mg/kg

-----文献-----

Fujita, E., Yakugaku Zasshi, 1952, 72, 213; CA, 47, 6429a, (構造決定)

Knapp, J.E. et al., J. Pharm. Sci., 1967, 56, 139, (分離, UV, IR, H-NMR, 構造決定)

Kuroda, H. et al., Chem. Pharm. Bull., 1976, 24, 2413, (薬理)

Karimov, A. et al., Khim. Prirod. Soedin., 1977, 13, 80; Chem. Nat. Compd. (Engl. Transl.), 1977, 13, 68, (Oblongamine)

Bhakuni, D.S. et al., J.C.S. Perkin 1, 1978, 1318, (合成)

Herath, W.H.M.W. et al., J. Nat. Prod., 1987, 50, 721, (2'-Noroxyacanthine)

Siv acute y, J. et al., Acta Cryst. C, 1996, 52, 1479, (結晶構造)

§ § メギ科ヒロハヘビノボラス (*Berberis amurensis* Ruprecht var. *japonica* Rehder) の果実, 茎または根。

該当物質なし

*****ハマゴウ (Hamago) *****

§ § クマツラ科ニンジンボク (*Vitex cannabifolia* Siebold et Zuccarini) の果実または茎葉。

§ 6,9-Dihydroxy-13-labden-15,16-olide; (6 β , 8 α H, 9 α)-form, 6-Ac

[化学名・別名] 6 β -Acetoxy-9 α -hydroxy-13-labden-15,16-olide. Vitexilactone

[CAS No.] 61263-49-8

[化合物分類] テルペノイド (Labdane diterpenoids)

[構造式]

[分子式] C₂₂H₃₄O₅

[分子量] 378.508

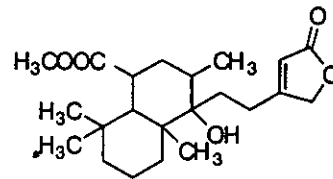
[正確な分子量] 378.240625

[基原] *Vitex cannabifolia* の葉

[性状] 結晶 (MeOH)

[融点] Mp 150-151 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{25} -12.6$ (c, 1.23 in CHCl₃)



-----文献-----

Taguchi, H., Chem. Pharm. Bull., 1976, 24, 1668

Hoberg, E. et al., Phytochemistry, 1999, 52, 1555, (C13-NMR)

§ Nishindaside

[CAS No.] 88204-92-6

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

[構造式]

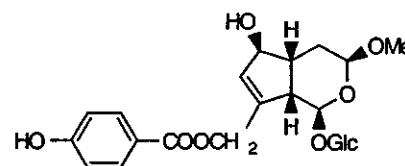
[分子式] C₂₃H₃₀O₁₂

[分子量] 498.483

[正確な分子量] 498.17373

[一般的性質] 立体構造は改正された (1993)

[基原] *Vitex negundo*, *Vitex cannabifolia*



[性状] 無定型の粉末

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{25}$ -49 (c, 0.16 in MeOH). $[\alpha]_D^{25}$ -83.5 (c, 1 in MeOH)

-----文献-----

Dutta, P.K. et al., Tetrahedron, 1983, 39, 3067, (分離, H-NMR, C13-NMR)

Iwagawa, T. et al., Phytochemistry, 1993, 32, 453, (分離, H-NMR, 構造決定, 誘導体)

§ Nishindaside; 3-Epimer

[化学名・別名] Isonishindaside

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

[構造式]

[分子式] $C_{23}H_{36}O_{12}$

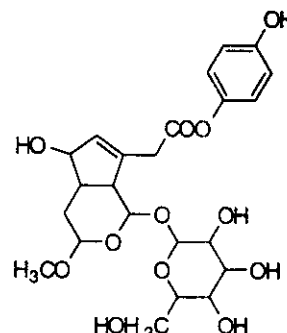
[分子量] 498.483

[正確な分子量] 498.17373

[基原] *Vitex cannabifolia*

[性状] 無定型の粉末

[比旋光度]: $[\alpha]_D$ -120 (c, 0.083 in MeOH)



-----文献-----

Dutta, P.K. et al., Tetrahedron, 1983, 39, 3067, (分離, H-NMR, C13-NMR)

Iwagawa, T. et al., Phytochemistry, 1993, 32, 453, (分離, H-NMR, 構造決定, 誘導体)

§ § クマツヅラ科ハマゴウ (*Vitex rotundifolia* L.) の果実または茎葉。

§ Aucubigenin; 10-O-(4-Hydroxy-3-methoxybenzoyl), 1-O-β-D-glucopyranoside

[化学名・別名] 10-O-Vanilloylaucubin. VR-I

[CAS No.] 193969-08-3

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

[構造式]

[分子式] $C_{23}H_{34}O_{12}$

[分子量] 496.467

[正確な分子量] 496.15808

[基原] *Vitex rotundifolia*

[性状] 粉末

[融点] Mp 108-110 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{25}$ -66.1 (c, 4.3 in MeOH). $[\alpha]_D^{22}$ -73 (c, 0.11 in MeOH)

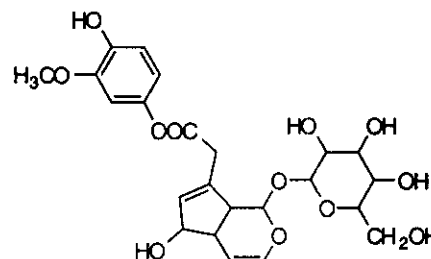
[UV]: [neutral] λ_{max} 219 (log ϵ 4.3); 264 (log ϵ 4.07); 291 (log ϵ 3.82) (MeOH)

-----文献-----

Karrer, W. et al., Konstitution und Vorkommen der Organischen Pflanzenstoffe, 2nd edn., Birkhäuser Verlag, Basel, 1972, no. 1791, (生育)

Ono, M. et al., Chem. Pharm. Bull., 1997, 45, 1094, (VR-I)

Okuyama, E. et al., Chem. Pharm. Bull., 1998, 46, 655, (10-Vanilloylaucubin)



§ 9,13:15,16-Diepoxy-6,15-labdane-10,13-diol; (6β,8α,9α,13R,15R)-form, 15-Me ether, 6-Ac

[CAS No.] 248925-22-6

[化合物分類] テルペノイド (Labdane diterpenoids)

[構造式]

[分子式] $C_{25}H_{38}O_5$

[分子量] 394.55

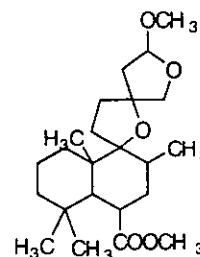
[正確な分子量] 394.271925

[基原] *Vitex rotundifolia*

[性状] 針状結晶 (EtOAc/hexane)

[融点] Mp 116-117 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{17}$ -64.7 (c, 0.8 in Me₂CO)



-----文献-----

Ono, M. et al., J. Nat. Prod., 1999, 62, 1532, (分離, H-NMR, C13-NMR, 結晶構造)

§ 9,13:15,16-Diepoxy-6,15-labdanediol; (6 β,8 α,9 α,13R,15S)-form, 15-Me ether, 6-Ac

[CAS No.] 248925-23-7

[化合物分類]テルペノイド (Labdane diterpenoids)

[構造式]

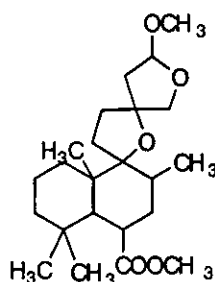
[分子量] 394.55

[正確な分子量] 394.271925

[基原] *Vitex rotundifolia*

[性状] シロップ

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{17} +55.9$ (c, 1.6 in Me₂CO)



-----文献-----

Ono, M. et al., J. Nat. Prod., 1999, 62, 1532, (分離, H-NMR, C13-NMR, 結晶構造)

§ 9,13:15,16-Diepoxy-6,15-labdanediol; (6 β,8 α,9 α,13S,15R)-form, 15-Me ether, 6-Ac

[CAS No.] 248925-25-9

[化合物分類]テルペノイド (Labdane diterpenoids)

[構造式]

[分子量] 394.55

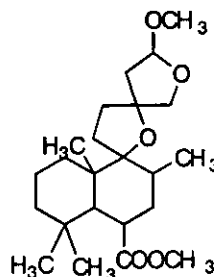
[正確な分子量] 394.271925

[基原] *Vitex rotundifolia*

[性状] 針状結晶 (EtOAc/hexane)

[融点] Mp 166-168 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{17} +60.6$ (c, 0.8 in Me₂CO)



-----文献-----

Ono, M. et al., J. Nat. Prod., 1999, 62, 1532, (分離, H-NMR, C13-NMR, 結晶構造)

§ 9,13:15,16-Diepoxy-6,15-labdanediol; (6 β,8 α,9 α,13S,15S)-form, 15-Me ether, 6-Ac

[CAS No.] 248925-24-8

[化合物分類]テルペノイド (Labdane diterpenoids)

[構造式]

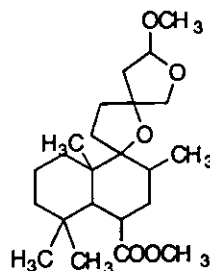
[分子量] 394.55

[正確な分子量] 394.271925

[基原] *Vitex rotundifolia*

[性状] シロップ

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{17} -70.9$ (c, 1.3 in Me₂CO)



-----文献-----

Ono, M. et al., J. Nat. Prod., 1999, 62, 1532, (分離, H-NMR, C13-NMR, 結晶構造)

§ 9,13:15,16-Diepoxy-6,15,16-labdanetriol; (6 β,8 α,9 α,13S,15R,16R)-form, 15,16-Di-Me ether, 6-Ac

[CAS No.] 248925-27-1

[化合物分類]テルペノイド (Labdane diterpenoids)

[構造式]

[分子式] C₂₄H₄₀O₆

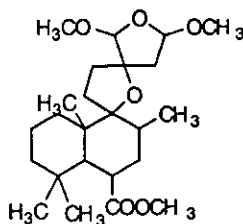
[分子量] 424.576

[正確な分子量] 424.28249

[基原] *Vitex rotundifolia*

[性状] シロップ

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{17} -79.7$ (c, 1.5 in Me₂CO)



-----文献-----

Ono, M. et al., J. Nat. Prod., 1999, 62, 1532, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ 9,13:15,16-Diepoxy-6,15,16-labdanetriol; (6 β,8 α,9 α,13S,15R,16S)-form, 15,16-Di-Me ether, 6-Ac

[CAS No.] 248925-29-3

[化合物分類]テルペノイド (Labdane diterpenoids)

[構造式]

[分子量] 424.576

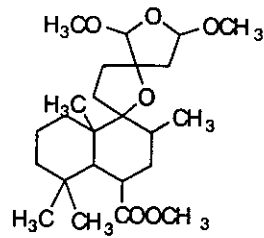
[正確な分子量] 424.28249

[基原] *Vitex rotundifolia*

[性状] 針状結晶 (EtOAc/hexane)

[融点] Mp 96-97 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{17} -19.5$ (c, 2.1 in Me₂CO)



-----文献-----

Ono, M. et al., J. Nat. Prod., 1999, 62, 1532, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ 9,13:15,16-Diepoxy-6,15,16-labdane-6-yl acetate; (6 β, 8 α, 9 α, 13S, 15S, 16R)-form, 15,16-Di-Me ether, 6-Ac

[CAS No.] 248925-26-0

[化合物分類]テルペノイド (Labdane diterpenoids)

[構造式]

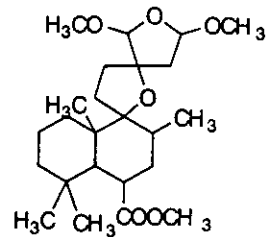
[分子量] 424.576

[正確な分子量] 424.28249

[基原] *Vitex rotundifolia*

[性状] シロップ

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{17} +17.4$ (c, 0.7 in Me₂CO)



-----文献-----

Ono, M. et al., J. Nat. Prod., 1999, 62, 1532, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ 9,13:15,16-Diepoxy-6,15,16-labdane-6-yl acetate; (6 β, 8 α, 9 α, 13S, 15S, 16S)-form, 15,16-Di-Me ether, 6-Ac

[CAS No.] 248925-28-2

[化合物分類]テルペノイド (Labdane diterpenoids)

[構造式]

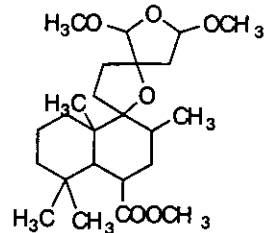
[分子量] 424.576

[正確な分子量] 424.28249

[基原] *Vitex rotundifolia*

[性状] 粉末

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{17} +67.5$ (c, 1.3 in Me₂CO)



-----文献-----

Ono, M. et al., J. Nat. Prod., 1999, 62, 1532, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ 4-(3,4-Dihydroxyphenyl)-2-butanone; 4-O-[4-Hydroxybenzoyl-(→2)-β-D-glucopyranoside]

[化学名・別名] Vitexfolin C

[構造式]

[分子式] C₂₃H₂₆O₁₀

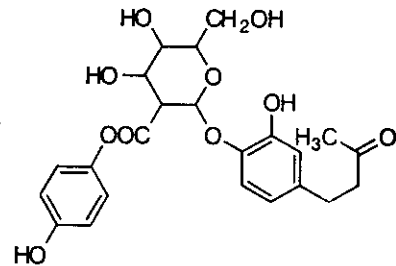
[分子量] 462.452

[正確な分子量] 462.1526

[基原] *Vitex rotundifolia* の乾燥果実

[性状] 無定型の黄色粉末

[UV]: [neutral] λ_{max} 260 (); 272 (sh) (); 325 (sh) () (EtOH)



-----文献-----

Opdyke, D.L.J., Food Cosmet. Toxicol., (suppl.), 1976, 14, 847, (methylene ether, レビュー, 性質)

Okuyama, E. et al., Chem. Pharm. Bull., 1998, 46, 655, (Vitexfolins)

§ 4-(3,4-Dihydroxyphenyl)-2-butanone; 4-O-[3,4-Dihydroxy-E-cinnamoyl-(→6)-β-D-glucopyranoside]

[化学名・別名] Vitexfolin A

[CAS No.] 64703-96-4

[構造式]

[分子式] $C_{25}H_{28}O_{11}$

[分子量] 504.49

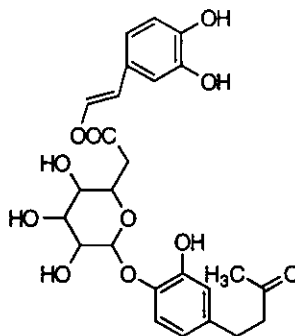
[正確な分子量] 504.163165

[基原] *Pinus contorta*, *Vitex rotundifolia* の乾燥果実

[性状] 暗黄色の粉末

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{27} -18$ (c, 0.1 in MeOH)

[UV]: [neutral] λ_{max} 217 (log ϵ 4.32); 246 (log ϵ 4.01); 287 (log ϵ 4.04); 304 (sh) (log ϵ 4.08); 330 (log ϵ 4.2) (MeOH)



-----文献-----

Okuyama, E. et al., Chem. Pharm. Bull., 1998, 46, 655, (Vitexfolins)

§ 4-(3,4-Dihydroxyphenyl)-2-butanone; 4-O-[3,4-Dihydroxy-Z-cinnamoyl-(→6)-β-D-glucopyranoside]

[化学名・別名] Vitexfolin B

[構造式]

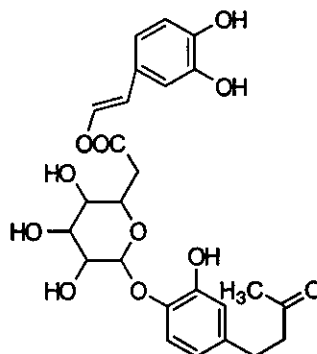
[分子式] $C_{25}H_{28}O_{11}$

[分子量] 504.49

[正確な分子量] 504.163165

[基原] *Vitex rotundifolia* の乾燥果実

[その他のデータ] 不安定



-----文献-----

Opdyke, D.L.J., Food Cosmet. Toxicol., (suppl.), 1976, 14, 847, (methylene ether, レビュー, 性質)

Okuyama, E. et al., Chem. Pharm. Bull., 1998, 46, 655, (Vitexfolins)

§ 15,16-Epoxy-13(16),14-labdadiene-6,9-diol; (6β,8α,9α)-form, 6-Ac

[化学名・別名] Rotundifuran

[CAS No.] 50656-65-0

[化合物分類] テルペノイド (Labdane diterpenoids)

[構造式]

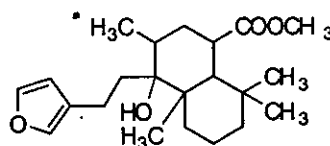
[分子式] $C_{22}H_{34}O_4$

[分子量] 362.508

[正確な分子量] 362.24571

[基原] *Vitex rotundifolia*

[性状] 粘ちょう性のオイル



-----文献-----

Asaka, Y. et al., Chem. Lett., 1973, 937

Dominguez, X.A. et al., Rev. Latinoam. Quim., 1975, 6, 159, (分離, C13-NMR)

§ Eucommiol; 1-Carboxylic acid

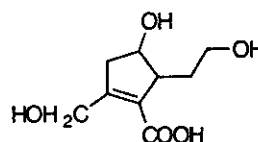
[化学名・別名] 1-Oxoeucommiol. Crescentin II

[CAS No.] 183744-45-8

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

[構造式]

[分子式] $C_9H_{14}O_5$



[分子量]202.207
[正確な分子量]202.084125
[基原] *Vitex rotundifolia*, *Crescentia cujete*
[性状] オイルもしくは粉末
[比旋光度]: $[\alpha]_D^{28} -23.4$ (c, 0.7 in MeOH) (-21)

-----文献-----

Kaneko, T. et al., *Phytochemistry*, 1997, 46, 907, (Crescentins)

§ 2-Formyl-3-methyl-2-cyclopentene-1-acetaldehyde; (*R*)-form

[CAS No.] 64274-27-7

[化合物分類] テルペノイド (Iridoid monoterpenoids), 脂肪族化合物 (Monocarbocyclic aldehydes and ketones)

[構造式]

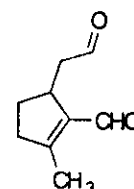
[基原] *Vitex rotundifolia* (クマツヅラ科) と *Alberta magna* の葉

[用途] 強い昆虫駆虫剤

[性状] オイル

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{25} +39.3$ (c, 1 in CHCl₃), $[\alpha]_D^{22} +81.2$ (c, 0.75 in CHCl₃)

[UV]: [neutral] λ_{max} 250 (ϵ 11000) (CHCl₃)



-----文献-----

Bianco, A. et al., *Tetrahedron*, 1977, 33, 851, (合成法)

Watanabe, K. et al., *Biosci., Biotechnol., Biochem.*, 1995, 59, 1979, (分離, H-NMR, C13-NMR, 絶対構造)

Takikawa, H. et al., *Eur. J. Org. Chem.*, 1998, 229, (合成法)

Drewes, S.E. et al., *Phytochemistry*, 1998, 47, 991, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ Glucose; β -D-Pyranose-form, 2-O-(4-Hydroxybenzoyl), 1-O-(4-hydroxy-3-methoxybenzoyl)

[化学名・別名] 2-(4-Hydroxybenzoyl)-1-vanilloylglucose

[構造式]

[分子式] C₂₁H₂₂O₁₁

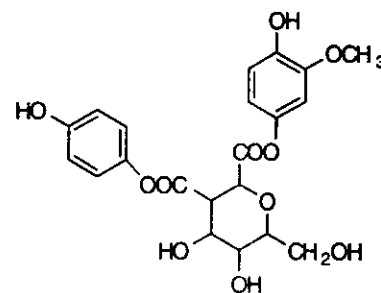
[分子量] 450.398

[正確な分子量] 450.116215

[基原] *Vitex rotundifolia* の乾燥果実

[性状] 無定形の粉末

[UV]: [neutral] λ_{max} 217 (sh) (); 225 (sh) (); 261 (); 299 (sh) () (MeOH)



-----文献-----

Saha, H. et al., *J.C.S.*, 1922, 121, 1044, (分離, DL-form)

Percival, E., *Structural Carbohydr. Chem.*, (Miller, J.G., Ed.), 1962, 51, (レビュー)

Hough, L. et al., *Rodd's Chem. Carbon Compd.* (2nd edn.), 1967, 1F, 237, (生育, 分離)

Wander, J.D. et al., *Adv. Carbohydr. Chem. Biochem.*, 1976, 32, 15, (レビュー)

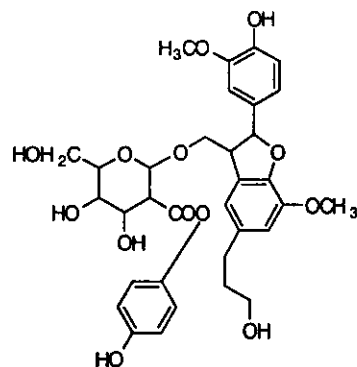
Dziedzic, S.Z. et al., *Glucose Syrups: Sci. Technol.*, Elsevier, 1984, (レビュー)

Kieboom, A.P.G. et al., *Rec. Trav. Chim. (J. R. Neth. Chem. Soc.)*, 1984, 103, 1, (レビュー, 用途)

Mikamo, M., *Carbohydr. Res.*, 1989, 191, 150, (合成法, 成書, 2,3,4,6-tetra-Ac)

Okuyama, E. et al., *Chem. Pharm. Bull.*, 1998, 46, 655, (分離, UV, H-NMR, C13-NMR)

§ 3',4',5,9,9'-Pentahydroxy-4,7'-epoxylignan; (7' ξ, 8' ξ)-form, 3',
5-Di-Me ether, 9'-O-[4-hydroxybenzoyl-(→ 2)-β-D-glucopyranoside]
[化合物分類] リグナン化合物 (Neolignans)
[構造式]



[分子式] C₃₃H₃₈O₁₃

[分子量] 642.655

[正確な分子量] 642.231245

[基原] *Vitex rotundifolia* の乾燥果実

[性状] 無定型の粉末

[比旋光度]: [α]_D²⁵ -30 (c, 0.1 in MeOH)

[UV]: [neutral] λ_{max} 238 (log ε 4.26); 260 (log ε 4.23); 276 (sh) (log ε 4.1) (EtOH)

-----文献-----

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

Lundgren, L.N. et al., Acta Chem. Scand., Ser. B, 1985, 39, 241, (分離, 構造決定)

Abe, F. et al., Chem. Pharm. Bull., 1986, 34, 4340, (分離, 誘導体, H-NMR)

Pieters, L. et al., J. Nat. Prod., 1993, 56, 899, (分離, 誘導体)

Kouno, I. et al., Phytochemistry, 1993, 32, 1573, (分離, H-NMR, C13-NMR)

Hanewa, F. et al., Phytochemistry, 1997, 45, 589, (Vladinol F, 分離, C13-NMR)

§ Prerotundifuran

[化学名・別名] 9 α, 13 R : 15, 16-Diepoxy-14-labden-6 β -ol

[CAS No.] 50656-73-0

[化合物分類] テルペノイド (Labdane diterpenoids)

[構造式]

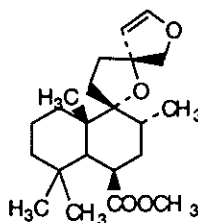
[分子式] C₂₇H₃₄O₄

[分子量] 362.508

[正確な分子量] 362.24571

[基原] *Vitex rotundifolia*

[融点] Mp 204-205 °C



-----文献-----

Asaka, Y. et al., Chem. Lett., 1973, 937

Hirotsu, K. et al., Chem. Lett., 1973, 1035, (結晶構造)

§ 3,3',4,4'-Tetrahydroxy-2,7'-cyclo ligna-7,7'-dien-9,9'-olide; 3,3',4'-Tri-Me ether

[化学名・別名] 4-Hydroxy-3,3',4'-trimethoxy-2,7'-cyclo ligna-7,7'-dien-9,9'-olide

[化合物分類] リグナン化合物 (Naphthalenoid lignans)

[構造式]

[分子式] C₂₁H₁₈O₆

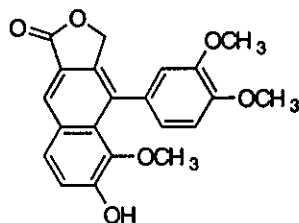
[分子量] 366.37

[正確な分子量] 366.11034

[基原] *Vitex rotundifolia* の根

[性状] 無定型の茶色の塊

[UV]: [neutral] λ_{max} 260 (log ε 4.4); 329 (log ε 3.6) (dioxane)



-----文献-----

Burden, R.S. et al., J.C.S. (C), 1969, 693, (分離, 構造, Helioxanthin)

Holmes, T.L. et al., J.C.S. (C), 1971, 2091, (合成法, Helioxanthin)

Stevenson, R. et al., J. Nat. Prod., 1989, 52, 367, (合成法, Helioxanthin)

Trujillo, J.M. et al., Phytochemistry, 1990, 29, 2991-2993, (Elenoside)

Navarro, E., J. Nat. Prod., 2001, 64, 134-135, (Elenoside, activity)

Kawazoe, K. et al., J. Nat. Prod., 2001, 64, 588-591, (3,3',4'-tri-Me ether)

§ 3',4,4',5-Tetrahydroxy-2,7'-cyclo ligna-7,7'-dien-9,9'-olide; 3',4',5-Tri-Me ether

[化学名・別名] 4-Hydroxy-3',4',5-trimethoxy-2,7'-cyclo ligna-7,7'-dien-9,9'-olide

[化合物分類] リグナン化合物 (Naphthalenoid lignans)

[構造式]

[分子式] $C_{21}H_{18}O_6$

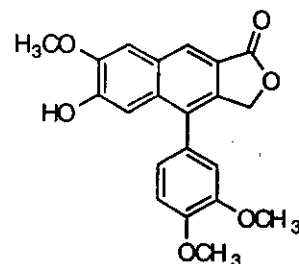
[分子量] 366.37

[正確な分子量] 366.11034

[基原] *Vitex rotundifolia* の根

[性状] 黄色がかったオイル

[UV]: [neutral] λ_{max} 257 (log ϵ 4.6); 319 (log ϵ 4) (dioxane)



-----文献-----

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

Kawazoe, K. et al., J. Nat. Prod., 2001, 64, 588-591, (3',4',5-tri-Me ether)

§ 3,6,9-Trihydroxy-13-labden-16,15-olide; (3 β , 6 β , 8 α , 9 α)-form, 3-O- β -D-Glucopyranoside, 6-Ac

[化学名・別名] Viteoside A

[CAS No.] 209899-63-8

[化合物分類] テルペノイド (Labdane diterpenoids)

[構造式]

[分子式] $C_{28}H_{44}O_{11}$

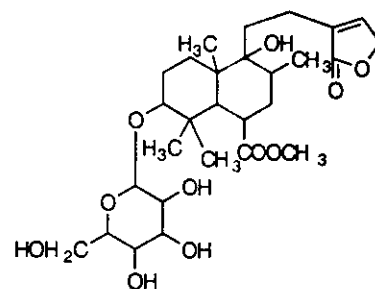
[分子量] 556.649

[正確な分子量] 556.288365

[基原] *Vitex rotundifolia*

[性状] 粉末

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{27}$ -20.4 (c, 0.5 in MeOH)



-----文献-----

Ono, M. et al., Phytochemistry, 1998, 48, 207, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ Viteolide I

[化学名・別名] Viteoid I

[CAS No.] 193969-04-9

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

[構造式]

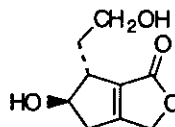
[分子式] $C_9H_{12}O_4$

[分子量] 184.191

[基原] *Vitex rotundifolia*

[性状] オイル

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{27}$ -30.4 (c, 1.3 in MeOH)



-----文献-----

Ono, M. et al., Chem. Pharm. Bull., 1997, 45, 1094, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ Viteolide I

[化学名・別名] Viteoid I

[CAS No.] 193969-04-9

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

[構造式]

[分子式] $C_9H_{12}O_4$

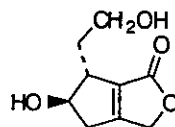
[分子量] 184.191

[正確な分子量] 184.07356

[基原] *Vitex rotundifolia*

[性状] オイル

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{27}$ -30.4 (c, 1.3 in MeOH)



-----文献-----

Ono, M. et al., Chem. Pharm. Bull., 1997, 45, 1094, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ Viteolide II

[化学名・別名] Viteoid II
[CAS No.] 193969-06-1
[化合物分類] テルペノイド (Iridoid monoterpeneoids)
[構造式]
[分子式] $C_9H_{12}O_4$
[分子量] 184.191
[正確な分子量] 184.07356
[基原] *Vitex rotundifolia*
[性状] オイル
[比旋光度]: $[\alpha]_D^{28} -68.1$ (c, 0.4 in MeOH)

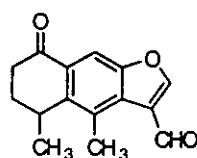


-----文献-----

Ono, M. et al., Chem. Pharm. Bull., 1997, 45, 1094, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ Viteralone; (R)-form

[CAS No.] 93290-66-5
[化合物分類] テルペノイド (Cacalol sesquiterpenoids)
[構造式]
[基原] *Vitex rotundifolia*
[性状] 結晶
[融点] Mp 153-154 °C
[比旋光度]: $[\alpha]_D -3.4$ (c, 0.4 in $CHCl_3$)



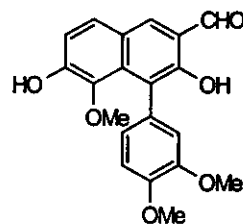
-----文献-----

Vishnoi, S.P. et al., Phytochemistry, 1983, 22, 597

Tada, H. et al., Heterocycles, 1984, 22, 2203

§ Vitrofolal B

[化学名・別名] 4-(3,4-Dimethoxyphenyl)-3,6-dihydroxy-5-methoxy-2-naphthalenecarboxaldehyde
[化合物分類] リグナン化合物 (Naphthalenoid lignans), リグナン化合物 (Norlignans)
[構造式]



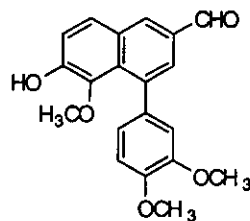
[分子式] $C_{20}H_{18}O_6$
[分子量] 354.359
[正確な分子量] 354.11034
[基原] *Vitex rotundifolia* の根
[性状] 無定形の黄色粉末
[UV]: [neutral] λ_{max} 206 (log ϵ 4.3); 283 (log ϵ 4.2); 338 (log ϵ 3.8) (MeOH)

-----文献-----

Kawazoe, K. et al., Phytochemistry, 1999, 52, 1657

§ Vitrofolal B; 3-Deoxy

[化学名・別名] 4-(3,4-Dimethoxyphenyl)-6-hydroxy-5-methoxy-2-naphthalenecarboxaldehyde. Vitrofolal A
[化合物分類] リグナン化合物 (Norlignans), リグナン化合物 (Naphthalenoid lignans)
[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] *Vitex rotundifolia* の根
[性状] 無定形の黄色粉末
[UV]: [neutral] λ_{max} 208 (log ϵ 4.6); 224 (log ϵ 4.5); 269 (log ϵ 4.5); 329 (log ϵ 4) (MeOH)

-----文献-----

Kawazoe, K. et al., Phytochemistry, 1999, 52, 1657

§ Vitrofolal C

[化合物分類] リグナン化合物 (Norlignans)

[構造式]

[分子式] $C_{21}H_{18}O_6$

[分子量] 366.37

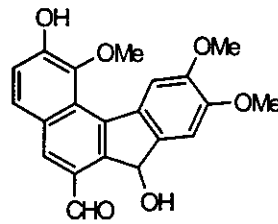
[正確な分子量] 366.11034

[基原] *Vitex rotundifolia* の根

[性状] 無定形の赤い粉末

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{25} +3.7$ (c, 0.53 in $CHCl_3$)

[UV]: [neutral] λ_{max} 237 (log ϵ 4.5); 365 (log ϵ 4) (MeOH)



-----文献-----

Kawazoe, K. et al., *Phytochemistry*, 1999, 52, 1657

§ § クマツヅラ科ミツバハマゴウ (*Vitex trifolia* L.) の果実または茎葉。

該当物質なし

*****ハマスゲ (Hamasuge) *****

§ § カヤツリグサ科ハマスゲ (*Cyperus rotundus* L.) の根。

§ 3(4 → 5)-Abeo-4,11:4,12-diepoxy-3-eudesmanol

[CAS No.] 210106-16-4

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

[構造式]

[分子式] $C_{15}H_{24}O_3$

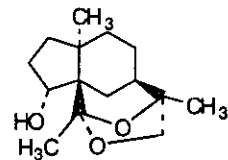
[分子量] 252.353

[正確な分子量] 252.172545

[基原] *Cyperus rotundus*

[性状] オイル

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{25} +15$ (c, 0.04 in $CHCl_3$)



-----文献-----

Ohira, S. et al., *Phytochemistry*, 1998, 47, 1577

§ 2,4(15)-Copadiene; (1 α , 6 α , 7 α H)-form

[化学名・別名] Copadiene

[CAS No.] 27597-38-2

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

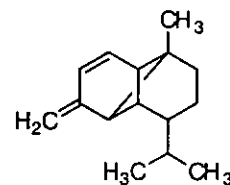
[構造式]

[基原] *Cyperus rotundus* の精油

[性状] オイル

[沸点] Bp_i 130-140 °C (bath)

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{25} +17.3$ ($CHCl_3$)



-----文献-----

Kapadia, V.H. et al., *Tet. Lett.*, 1967, 4661

§ 3-Copaen-2-one; (1 α H, 6 α H, 7 β H)-form

[化学名・別名] Mustakone

[CAS No.] 1209-91-2

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

[構造式]

[基原] *Cyperus rotundus*, *Cyperus articulatus*

[性状] オイル

[沸点] Bp_i 128-129 °C

