

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{25} -42.5$ (c, 1.85 in CHCl_3)

-----文献-----

Kapadia, V.H. et al., *Tetrahedron*, 1965, 21, 607, (分離)

Nyasse, B., *Phytochemistry*, 1988, 27, 3319, (分離, H-NMR)

§ Cyperolone

[CAS No.] 13741-46-3

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

[構造式]

[分子式] $\text{C}_{15}\text{H}_{24}\text{O}_2$

[分子量] 236.353

[正確な分子量] 236.17763

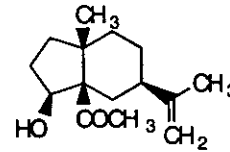
[基原] *Cyperus rotundus*

[性状] 結晶・一水和物

[融点] Mp 41-42 °C

[沸点] Bp_{0.1} 120 °C (bath)

[比旋光度]: $[\alpha]_D +31.4$ (CHCl_3)



-----文献-----

Hikino, H. et al., *Chem. Pharm. Bull.*, 1966, 14, 1439; 1441; 1967, 15, 1349, (分離, IR, H-NMR, ORD, 構造決定, 合成法)

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

§ 2,3'-Dihydroxy-4-methoxy-5',6-dimethyldiphenyl ether

[化学名・別名] 2-(3-Hydroxy-5-methylphenoxy)-5-methoxy-3-methylphenol (CAS 名). Cyperine. LL-V125 α. Antibiotic LL-V125 α

[CAS No.] 33716-82-4

[化合物分類] 単環芳香族 (Diphenyl ethers)

[構造式]

[分子式] $\text{C}_{15}\text{H}_{16}\text{O}_4$

[分子量] 260.289

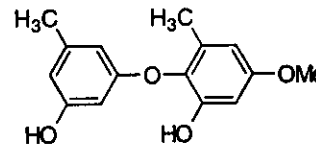
[正確な分子量] 260.10486

[基原] 次の植物の代謝物: *Cyperus rotundus* と *Preussia fleischhakkii* の菌類の病原体, from a fungus of the order of Sphaeropsidales. *Ascochyta cypericola*

[用途] 植物毒. 強い抗カビ作用

[性状] 結晶 (CHCl_3 /petrol)

[融点] Mp 121.5-122.5 °C



-----文献-----

McGahren, W.J. et al., *J.O.C.*, 1970, 35, 2433

Cannon, J.R. et al., *J.C.S. Perkin 1*, 1972, 1200, (分離, 構造決定, 合成法)

Weber, H.A. et al., *J. Nat. Prod.*, 1988, 51, 879, (H-NMR, C13-NMR)

Stierle, A. et al., *Phytochemistry*, 1991, 30, 2191, (分離, H-NMR)

§ 10,11-Epidioxycalamene

[化学名・別名] 10,12-Peroxycalamenene

[CAS No.] 168207-85-0

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

[構造式]

[分子式] $\text{C}_{15}\text{H}_{20}\text{O}_2$

[分子量] 232.322

[正確な分子量] 232.14633

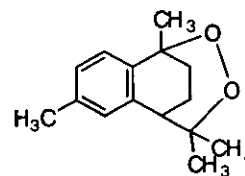
[基原] *Cyperus rotundus*

[用途] 抗マラリア作用を示す.

[性状] 針状結晶 (hexane)

[融点] Mp 67-68.5 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{20} -67.2$ (c, 0.28 in CHCl_3)



-----文献-----

Thebtaranonth, C. et al., *Phytochemistry*, 1995, 40, 125, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ 4(15),11-Eudesmadiene; (5 α ,7 β ,10 β)-form

[化学名・別名] β -Selinene. Cyperene II

[CAS No.] 17066-67-0

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

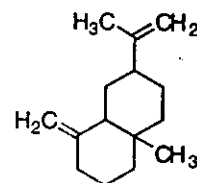
[構造式]

[基原] セロリオイル。また *Cyperus rotundus*, *Humulus lupulus* から得られる

[性状] オイル

[沸点] Bp₆ 121-122 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D +61$



-----文献-----

Itokawa, H. et al., *Chem. Pharm. Bull.*, 1987, 35, 2860, (β -Selinene, H-NMR, C13-NMR)

§ 4,11-Eudesmadien-3-ol; 3 α -form

[化学名・別名] Cyperol

[CAS No.] 20084-99-5

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

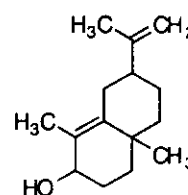
[構造式]

[基原] *Cyperus rotundus*

[性状] 結晶 (petrol)

[融点] Mp 111.5-112 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D +131.4$ (c, 6.2 in CHCl₃)



-----文献-----

Hikino, H. et al., *Chem. Pharm. Bull.*, 1967, 15, 1929

Hikino, H. et al., *Phytochemistry*, 1976, 15, 1265, (epoxide)

§ 4,11-Eudesmadien-3-ol; 3 α -form, 4 α ,5 α -Epoxide

[化学名・別名] 4 α ,5 α -Epoxy-11-eudesmen-3 α -ol

[CAS No.] 61248-42-8

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

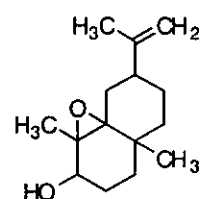
[構造式]

[基原] *Cyperus rotundus*

[性状] 結晶 (petrol)

[融点] Mp 61.5 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D +37.3$ (c, 4.7 in CHCl₃)



-----文献-----

Hikino, H. et al., *Chem. Pharm. Bull.*, 1967, 15, 1929

Hikino, H. et al., *Phytochemistry*, 1976, 15, 1265, (epoxide)

§ 4(15),11-Eudesmadien-3-ol; 3 α -form

[化学名・別名] Isocyperol

[CAS No.] 20085-00-1

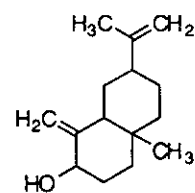
[化合物分類] テルペノイド (Simple eudesmane sesquiterpenoids)

[構造式]

[基原] *Cyperus rotundus*

[性状] オイル

[比旋光度]: $[\alpha]_D -5.4$ (c, 4.5 in CHCl₃)



-----文献-----

Hikino, H. et al., *Chem. Pharm. Bull.*, 1967, 15, 1929

§ 4,11-Eudesmadien-3-one; (+)-form

[CAS No.] 473-08-5

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

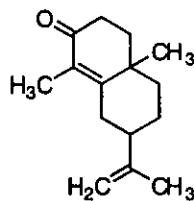
[構造式]

[基原] *Cyperus rotundus*, *Cyperus scariosus*, *Juniperus horizontalis*

[沸点] Bp 177 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{25} +138$

[UV]: [neutral] λ_{max} 248 () (EtOH)



-----文献-----

Adamson, P.S. et al., J.C.S., 1937, 1576, (構造決定)

Naves, Y.-R., Bull. Soc. Chim. Fr., 1954, 332, (分離)

Sannai, A. et al., Phytochemistry, 1982, 21, 2986, (Dehydro- α -cyperone)

Jakupovic, J. et al., Phytochemistry, 1988, 27, 1129, (12-Hydroxy- α -cyperone)

Asakawa, Y. et al., Phytochemistry, 1990, 29, 1577, (*ent*- α -Cyperone)

Banerjee, A.K. et al., Tetrahedron, 1993, 49, 4761, (合成法, レビュー)

Xiong, Z. et al., Tetrahedron: Asymmetry, 1996, 7, 2607, (合成法)

§ 1(5),11-Guaiadiene; 1 α ,5 α -Epoxide

[化学名・別名] 1 α ,5 α -Epoxy-11-guaiene. Epoxyguaiene

[CAS No.] 10410-05-6

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

[構造式]

[分子式] C₁₅H₂₄O

[分子量] 220.354

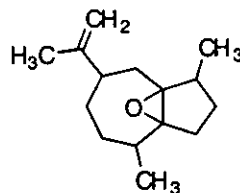
[正確な分子量] 220.182715

[基原] *Cyperus rotundus* の精油

[性状] オイル

[沸点] Bp, 102-104 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{25} +11$



-----文献-----

Takeda, K. et al., Tetrahedron, 1961, 13, (分離, 構造決定)

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

§ 1(5),11-Guaiadien-2-one; (4 β ,7 β ,10 β)-form

[化学名・別名] Rotundone

[CAS No.] 18374-76-0

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

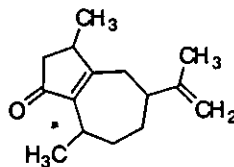
[構造式]

[基原] *Cyperus rotundus* の精油

[性状] オイル

[沸点] Bp, 128-129 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{25} -92.7$



-----文献-----

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

Paknikar, S.K. et al., Indian J. Chem., Sect. B, 1983, 22, 1060, (合成法)

§ 5-Hydroxy-3,11-eudesmadien-2-one; 5 α -form

[化学名・別名] α -Rotunol

[CAS No.] 24405-56-9

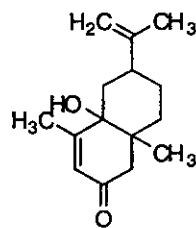
[化合物分類]テルペノイド (Simple eudesmane sesquiterpenoids)

[構造式]

[基原] 塊茎 of nut grass, *Cyperus rotundus*

[性状] 結晶 (Et₂O)

[融点] Mp 87.5-88.5 °C



-----文献-----

Hikino, H. et al., Tetrahedron, 1971, 27, 4831, (分離, 構造決定)
Murai, A. et al., J.A.C.S., 1978, 100, 7751, (合成法)
Murai, A. et al., Bull. Chem. Soc. Jpn., 1982, 55, 1195, (合成法)

§ 5-Hydroxy-3,11-eudesmadien-2-one; 5 β -form

[化学名・別名] β -Rotunol

[CAS No.] 24405-57-0

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

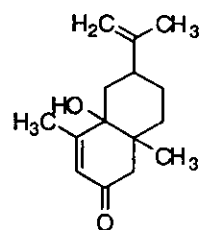
[構造式]

[基原] 塊茎 (nut grass) *Cyperus rotundus*

[性状] 結晶 (Et₂O)

[融点] Mp 118-119 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{25} +44.8$ (c, 5.8 in CHCl₃)



-----文献-----

Hikino, H. et al., Tetrahedron, 1971, 27, 4831, (分離, 構造決定)
Murai, A. et al., J.A.C.S., 1978, 100, 7751, (合成法)
Murai, A. et al., Bull. Chem. Soc. Jpn., 1982, 55, 1195, (合成法)

§ Isokobusone

[化学名・別名] 6-Hydroxy-15-nor-7(14)-caryophyllen-3-one

[CAS No.] 24173-72-6

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

[構造式]

[分子式] C₁₅H₂₂O₂

[分子量] 222.327

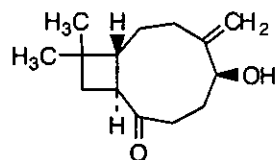
[正確な分子量] 222.16198

[基原] *Cyperus rotundus*, *Sindora sumatrana*

[性状] 結晶 (Et₂O)

[融点] Mp 108-109 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{25} -40.1$ (c, 3.1 in CHCl₃)



-----文献-----

Hikino, H. et al., Chem. Pharm. Bull., 1969, 17, 1390
Heymann, H. et al., Chem. Pharm. Bull., 1994, 42, 138, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ Kobusone

[化学名・別名] 6,7-Epoxy-15-nor-3-caryophyllanone. Caryophyllene keto epoxide

[CAS No.] 24173-71-5

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

[構造式]

[分子式] C₁₅H₂₂O₂

[分子量] 222.327

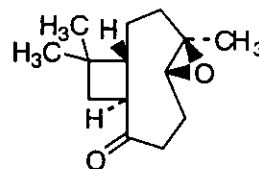
[正確な分子量] 222.16198

[基原] *Cyperus rotundus*. また, ラベンダーオイル, *Sindora sumatrana* にも存在する

[性状] 結晶 (petrol)

[融点] Mp 60-61 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{25} -142.2$ (c, 3.6 in CHCl₃)



-----文献-----

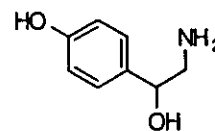
Barton, D.H.R. et al., J.C.S., 1957, 2988, (合成法)
Hikino, H. et al., Chem. Pharm. Bull., 1969, 17, 1390, (分離, 構造決定)
Kaiser, R. et al., Helv. Chim. Acta, 1983, 66, 1843, (分離)
Heymann, H. et al., Chem. Pharm. Bull., 1994, 42, 138, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ Octopamine; (R)-form

[CAS No.] 876-04-0

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

[構造式]



[基原] 次の植物から得られるアルカロイド: *Capsicum frutescens*, *Citrus* spp.,

Cyperus rotundus, *Cyperus papyrus* (ナス科, ミカン科, カヤツリグサ科). 多くの動物組織に存在;

Octopus vulgaris の唾液腺の後部において高い濃度で見つかる

[用途] 無脊椎動物の神経伝達物質. In vertebrates, prob. a cotransmitter with noradrenaline. アドレナリン

[性状] 結晶 (H₂O)

[融点] Mp 160 °C (約)

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{25} -37.4$ (c, 1 in H₂O). $[\alpha]_D -56$ (c, 1 in 1 M HCl)

-----文献-----

Kappe, T. et al., J. Med. Chem., 1964, 7, 569, (分割)

Hengstmann, J.H. et al., Naunyn-Schmiedeberg's Arch. Pharmacol., 1974, 283, 93, (代謝)

Axelrod, J. et al., Nature (London), 1977, 265, 501, (レビュー)

Redouane, K. et al., Agressologie, 1984, 25, 3, (レビュー)

Negwer, M., Organic-Chemical Drugs and their Synonyms, 6th edn., Akademie-Verlag, 1987, 945

Midgley, J.M. et al., J.C.S. Perkin 2, 1989, 963, (結晶構造, 絶対構造, 成書)

§ 4-Patchoulen-6-ol; 6 β-form, Ketone

[化学名・別名] 4-Patchoulen-6-one. Patchoulenone. Narucinone

[CAS No.] 5986-54-9

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

[構造式]

[分子式] C₁₅H₂₂O

[分子量] 218.338

[正確な分子量] 218.167065

[基原] *Cyperus rotundus*, *Uvaria narum*

[性状] 結晶 (MeOH)

[融点] Mp 52.5 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D -97.1$ (c, 8 in CHCl₃)

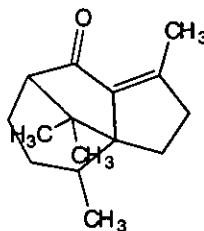
[UV]: [neutral] λ_{max} (MeOH)

[その他のデータ] Narucinone の構造は 1992 年に改正された

-----文献-----

Hisham, A. et al., Magn. Reson. Chem., 1992, 30, 295, (Narucinone)

Achenbach, H. et al., Phytochemistry, 1995, 38, 1037, (Patchoulenone, H-NMR, C13-NMR)



§ 4-Patchoulen-15-ol; Deoxy

[化学名・別名] 4-Patchoulene. Cyperene. Cyperene I. 4-Isopatchoulene

[CAS No.] 2387-78-2

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

[構造式]

[分子式] C₁₅H₂₄

[分子量] 204.355

[正確な分子量] 204.1878

[基原] 次の植物から分離: *Cyperus rotundus*, その他の植物

[沸点] Bp₅ 104 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{20} -20$ (neat)

[その他のデータ] $n_D^{20} 1.5058$

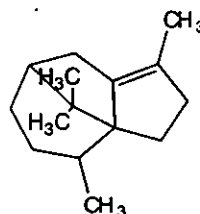
-----文献-----

Trivedi, B. et al., Tet. Lett., 1964, 1197, (Cyperene)

§ 4-Patchoulen-3-one

[化学名・別名] Cyperotundone. Cyperenone. Articulone. Isopatchoulene

[CAS No.] 3466-15-7



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

[構造式]

[分子式] $C_{15}H_{22}O$

[分子量] 218.338

[正確な分子量] 218.167065

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

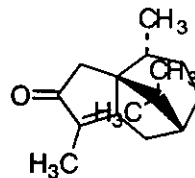
[性状] 結晶 (petrol)

[融点] Mp 46-47.5 °C

[沸点] Bp_{0.5} 136-138 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D +40.4$ (c, 3.2 in $CHCl_3$)

[UV]: [neutral] λ_{max} 244 () (EtOH)



-----文献-----

Hikino, H. et al., *Tetrahedron*, 1967, 23, 2169, (構造決定)

Hikino, H. et al., *Chem. Pharm. Bull.*, 1968, 66, 43, (合成法)

Neville, G.A. et al., *Tetrahedron*, 1968, 24, 3891, (H-NMR, Mass, 成書)

Singh, P. et al., *Phytochemistry*, 1985, 24, 1525, (誘導體)

Ybarra, M.I. et al., *Phytochemistry*, 1992, 31, 3627, (8-Hydroxycyperotundone)

§ Rotundine B

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

[構造式]

[分子式] $C_{15}H_{23}NO$

[分子量] 233.353

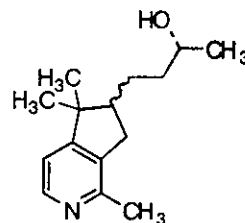
[正確な分子量] 233.177964

[基原] 次の植物の根茎から得られるアルカロイド: *Cyperus rotundus*

[性状] オイル

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{25} -14.7$ (c, 0.15 in $CHCl_3$)

[UV]: [neutral] λ_{max} 264 (log ϵ 3.4) (MeOH)



-----文献-----

Jeong, S.-J. et al., *J. Nat. Prod.*, 2000, 63, 673

§ Rotundine B; 13-Ketone

[化学名・別名] Rotundine A

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

[構造式]

[分子式] $C_{15}H_{21}NO$

[分子量] 231.337

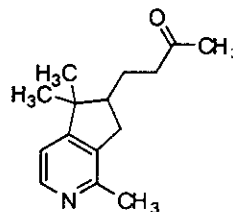
[正確な分子量] 231.162314

[基原] 次の植物の根茎から得られるアルカロイド: *Cyperus rotundus*

[性状] オイル

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{27} -12.3$ (c, 0.31 in $CHCl_3$)

[UV]: [neutral] λ_{max} 260 (log ϵ 3.15) (MeOH)



-----文献-----

Jeong, S.-J. et al., *J. Nat. Prod.*, 2000, 63, 673

§ Rotundine B; 6-Epimer

[化学名・別名] Rotundine C

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

[構造式]

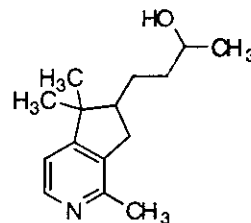
[分子式] $C_{15}H_{23}NO$

[分子量] 233.353

[正確な分子量] 233.177964

[基原] 次の植物の根茎から得られるアルカロイド: *Cyperus rotundus*

[性状] オイル



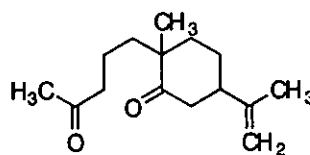
[比旋光度]: $[\alpha]_D^{25} -10.2$ (c, 0.11 in CHCl₃)
[UV]: [neutral] $\lambda_{max} 262$ (log ϵ 3.48) (MeOH)

-----文献-----

Jeong, S.-J. et al., J. Nat. Prod., 2000, 63, 673

§ 4,5-Seco-11-eudesmene-4,5-dione; 10 α -form

[CAS No.] 210106-14-2
[化合物分類] テルペノイド (Trichothecane sesquiterpenoids)
[構造式]
[基原] *Cyperus rotundus*
[性状] オイル
[比旋光度]: $[\alpha]_D^{21} +90$ (c, 0.21 in CHCl₃)

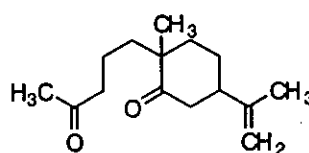


-----文献-----

Ohira, S. et al., Phytochemistry, 1998, 47, 1577-1581, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ 4,5-Seco-11-eudesmene-4,5-dione; 10 β -form

[CAS No.] 210106-15-3
[化合物分類] テルペノイド (Trichothecane sesquiterpenoids)
[構造式]
[基原] *Cyperus rotundus*
[性状] オイル
[比旋光度]: $[\alpha]_D^{21} +39$ (c, 0.33 in CHCl₃)

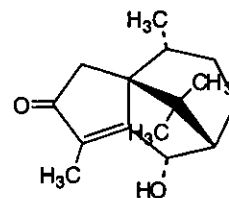


-----文献-----

Ohira, S. et al., Phytochemistry, 1998, 47, 1577-1581, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ Sugeonol

[CAS No.] 19419-58-0
[化合物分類] テルペノイド (Seco-, cyclo-, abeo- and norguaiene sesquiterpenoids)
[構造式]
[分子式] C₁₅H₂₂O₂
[分子量] 234.338
[正確な分子量] 234.16198
[基原] *Cyperus rotundus*
[性状] 針状結晶 (Et₂O)
[融点] Mp 181-182.5 °C
[比旋光度]: $[\alpha]_D +87.5$ (c, 3.8 in CHCl₃)

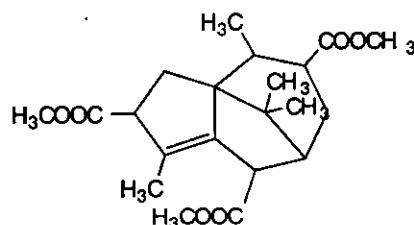


-----文献-----

Hikino, H. et al., Chem. Pharm. Bull., 1968, 16, 52; 1088, (分離, H-NMR) *

§ Sugetriol; Tri-Ac

[化学名・別名] Sugetriol triacetate
[CAS No.] 17928-62-0
[化合物分類] テルペノイド (Patchoulane sesquiterpenoids)
[構造式]
[分子式] C₂₁H₃₀O₆
[分子量] 378.464
[正確な分子量] 378.20424
[基原] *Cyperus rotundus*
[性状] 結晶
[融点] Mp 132 °C
[比旋光度]: $[\alpha]_D +60.5$ (CHCl₃)



-----文献-----

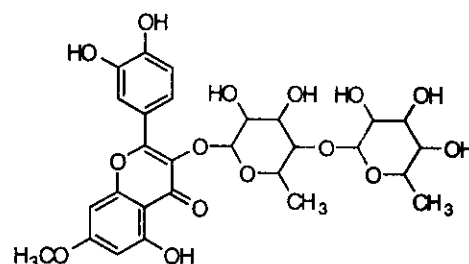
Hikino, H. et al., Chem. Pharm. Bull., 1967, 15, 1433, (分離, H-NMR)

§ 3,3',4',5'-Tetrahydroxy-7-methoxyflavone; 3-O-[α -L-Rhamnopyranosyl-(1 \rightarrow 4)- α

-L-rhamnopyranoside]

[化学名・別名] Rhamnetin 3-(4-rhamnosylrhamnoside)
[CAS No.] 105755-71-3
[化合物分類] フラボノイド (Flavonols; 5 × O-置換基)
[構造式]

[分子式] C₂₈H₃₂O₁₅
[分子量] 608.552
[正確な分子量] 608.174125
[基原] 次の植物から分離: *Cyperus rotundus*

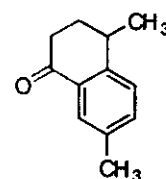


-----文献-----

Clark-Lewis, J.W. et al., *Aust. J. Chem.*, 1968, 21, 425, (Rhamnitrin)
Nuralieva, Zh.S. et al., *Khim. Prir. Soedin.*, 1969, 5, 369; *Chem. Nat. Compd. (Engl. Transl.)*, 1969, 5, 307, (Glucorhamnin)
The Flavonoids: Advances in Research since 1980, (Ed. Harborne, J.B.), Chapman and Hall, London, 1988

§ 11,12,13-Trinor-7-calamenone; (ξ)-form

[化合物分類] テルペノイド (Nor- and secocadinane sesquiterpenoids), 多環芳香族 (Naphthalenes)
[構造式]
[基原] *Cyperus rotundus*
[性状] オイル
[比旋光度]: [α]_D²⁰ +5.6 (c, 0.3 in CHCl₃)



-----文献-----

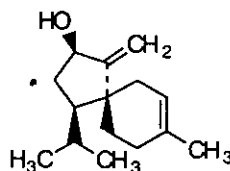
Johnson, W.S. et al., *J.A.C.S.*, 1947, 69, 792, (合成法)
Phillips, D.D., *J.A.C.S.*, 1955, 77, 3658, (合成法)
Kaiser, R. et al., *Helv. Chim. Acta*, 1983, 66, 1843, (分離)
El-Seedi, H. et al., *Phytochemistry*, 1994, 35, 1495, (分離, H-NMR, C13-NMR)
Thebtaranonth, C. et al., *Phytochemistry*, 1995, 40, 125, (分離, H-NMR, C13-NMR)

*****ハマナス (*Hamanasu, Rugosa rose*) *****

§ § バラ科ハマナス (*Rosa rugosa* Thunberg) の花。

§ 3,10(14)-Acoradien-9-ol

[化学名・別名] Rosaacorenol
[CAS No.] 138867-22-8
[化合物分類] テルペノイド (Acorane sesquiterpenoids)
[構造式]
[分子式] C₁₅H₂₄O
[分子量] 220.354
[正確な分子量] 220.182715
[基原] *Rosa rugosa*
[性状] シロップ

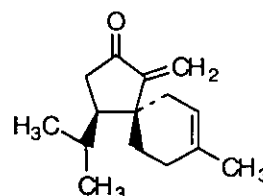


-----文献-----

Hashidoko, Y. et al., *Phytochemistry*, 1991, 30, 3729; 1993, 32, 387, (分離, 合成法, H-NMR, C13-NMR)

§ 3,10(14)-Acoradien-9-one

[化学名・別名] Rosacorenone
[CAS No.] 138867-41-1
[化合物分類] テルペノイド (Acorane sesquiterpenoids)
[構造式]
[分子式] C₁₅H₂₂O
[分子量] 218.338



[正確な分子量] 218.167065

[基原] *Rosa rugosa*

[性状] シロップ

-----文献-----

Hashidoko, Y. et al., *Phytochemistry*, 1991, 30, 3729, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ 2,10-Bisaboladien-7-ol; (6*R*,7*S*)-form

[化学名・別名] 6-Epi- α -bisabolol

[CAS No.] 76738-75-5

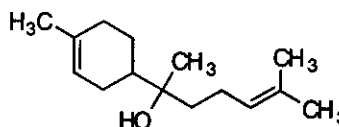
[化合物分類] テルペノイド (Bisabolane sesquiterpenoids)

[構造式]

[基原] *Rosa rugosa*

[性状] シロップ

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{23} +67.4$ (MeOH)



-----文献-----

Hashidoko, Y. et al., *Phytochemistry*, 1994, 35, 325, (6-Epi- α -bisabolol)

Hashidoko, Y. et al., *Biosci., Biotechnol., Biochem.*, 2000, 64, 907, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ 4,8-Daucadien-14-al

[化学名・別名] Daucenal

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

[構造式]

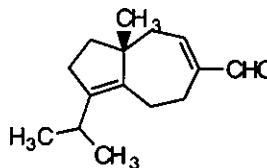
[分子式] $C_{15}H_{22}O$

[分子量] 218.338

[正確な分子量] 218.167065

[基原] *Rosa rugosa*

[性状] シロップ



-----文献-----

Miski, M. et al., *Phytochemistry*, 1985, 24, 1735, (誘導體)

Hashidoko, Y. et al., *Phytochemistry*, 1991, 30, 3729, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ 4,8-Daucadien-14-al; 4 α ,5 α -Epoxide

[化学名・別名] 4 α ,5 α -Epoxy-8-daucen-14-al. Epoxydaucenal A

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

[構造式]

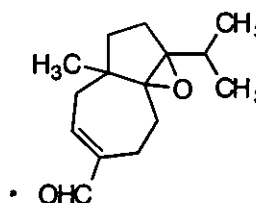
[分子式] $C_{15}H_{22}O_2$

[分子量] 234.338

[正確な分子量] 234.16198

[基原] *Rosa rugosa*

[性状] シロップ



-----文献-----

Miski, M. et al., *Phytochemistry*, 1985, 24, 1735, (誘導體)

Hashidoko, Y. et al., *Phytochemistry*, 1991, 30, 3729, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ 4,8-Daucadien-14-al; 4 β ,5 β -Epoxide

[化学名・別名] 4 β ,5 β -Epoxy-8-daucen-14-al. Epoxydaucenal B

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

[構造式]

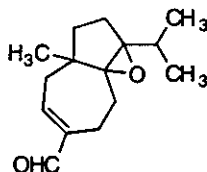
[分子式] $C_{15}H_{22}O_2$

[分子量] 234.338

[正確な分子量] 234.16198

[基原] *Rosa rugosa*

[性状] シロップ



-----文献-----

Miski, M. et al., *Phytochemistry*, 1985, 24, 1735, (誘導體)

Hashidoko, Y. et al., *Phytochemistry*, 1991, 30, 3729, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ 5,8-Daucadien-14-al

[化学名・別名] 1,4-Carotadienaldehyde

[CAS No.] 128718-21-8

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

[構造式]

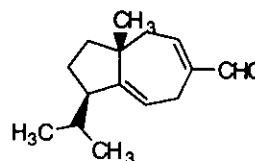
[分子式] $C_{15}H_{22}O$

[分子量] 218.338

[正確な分子量] 218.167065

[基原] *Rosa rugosa*

[性状] シロップ



-----文献-----

Hashidoko, Y. et al., *Phytochemistry*, 1990, 29, 867, (分離, H-NMR, C13-NMR, Mass)

Hashidoko, Y. et al., *Biosci., Biotechnol., Biochem.*, 1992, 56, 1892, (合成法)

§ 8,11-Daucadien-14-al

[化学名・別名] Isodaucenal

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

[構造式]

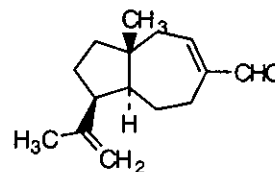
[分子式] $C_{15}H_{22}O$

[分子量] 218.338

[正確な分子量] 218.16705

[基原] *Rosa rugosa*

[性状] オイル



-----文献-----

Hashidoko, Y. et al., *Phytochemistry*, 1991, 30, 3729, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ 8,11-Daucadien-14-al; 14-Carboxylic acid

[化学名・別名] 8,11-Daucadien-14-oic acid

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

[構造式]

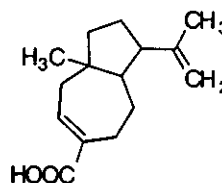
[分子式] $C_{15}H_{22}O_2$

[分子量] 234.338

[正確な分子量] 234.16198

[基原] *Rosa rugosa*

[性状] 粉末



-----文献-----

Hashidoko, Y. et al., *Phytochemistry*, 1991, 30, 3729, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ 8,11-Daucadien-4-ol; (4 α ,5 α)-form

[化学名・別名] 10-Hydroxyisodaucene

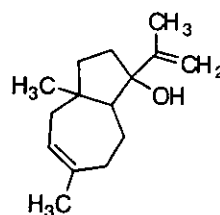
[CAS No.] 155260-69-8

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

[構造式]

[基原] *Rosa rugosa*

[性状] シロップ



-----文献-----

Hashidoko, Y. et al., *Phytochemistry*, 1994, 35, 325, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ 8,11-Daucadien-14-ol

[化学名・別名] Isodaucenol

[CAS No.] 147029-02-5

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

[構造式]

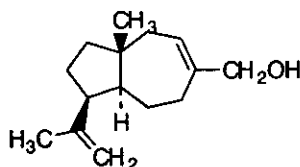
[分子式] C₁₅H₂₀O

[分子量] 220.354

[正確な分子量] 220.182715

[基原] *Rosa rugosa*

[性状] シロップ



-----文献-----

Hashidoko, Y. et al., *Phytochemistry*, 1993, 32, 387, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ 4,8,11-Daucatrien-14-al

[化学名・別名] 11,12-Dehydrodaucenal

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

[構造式]

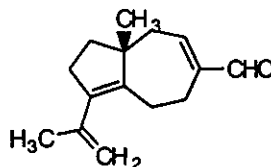
[分子式] C₁₅H₂₀O

[分子量] 216.322

[正確な分子量] 216.151415

[基原] *Rosa rugosa*

[性状] オイル



-----文献-----

Hashidoko, Y. et al., *Phytochemistry*, 1991, 30, 3729, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ 4,8,11-Daucatrien-14-al; 14-Carboxylic acid

[化学名・別名] 4,8,11-Daucatrien-14-oic acid

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

[構造式]

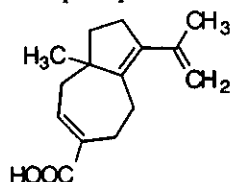
[分子式] C₁₅H₂₀O₂

[分子量] 232.322

[正確な分子量] 232.14633

[基原] *Rosa rugosa*

[性状] シロップ



-----文献-----

Hashidoko, Y. et al., *Phytochemistry*, 1991, 30, 3729, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ Dihydro-5-pentyl-2(3H)-furanone (CAS 名) (旧 CAS 名)

[化学名・別名] γ -Nonalactone. 4-Hydroxynonanoic acid γ -lactone. γ -Amylbutyrolactone.

1,4-Nonanolide. 5-Pentylidihydro-2(3H)-furanone. γ -Pelargonolactone. Apricolin. Prunolide. Cocos aldehyde (misleading). Aldehyde C₁₈ (misleading)

[CAS No.] 104-61-0

[関連 CAS No.] 82373-92-0

[化合物分類] 含酸素複素環式化合物 (Butanolides)

[構造式]

[分子式] C₉H₁₆O₂

[分子量] 156.224

[正確な分子量] 156.11503

[基原] 次の植物から分離: *Rosa rugosa* のエーテルオイル

[傷害・毒性] 皮膚を刺激する

[化学物質毒性データ総覧 (RTECS) 登録番号] LU3675000

-----文献-----

Sakai, T. et al., *CA*, 1962, 58, 8845, (分離)

Opdyke, D.L.J., *Food Cosmet. Toxicol.*, 1975, 13, 889, (レビュー, 毒性)

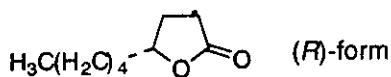
Cardellach, J. et al., *J. Het. Chem.*, 1984, 21, 377, (合成法, C13-NMR, 成書)

Ballini, R. et al., *Synthesis*, 1987, 711, (合成法, IR, H-NMR)

Lewis, R.J., *Food Additives Handbook*, Van Nostrand Reinhold International, New York, 1989, CNF250

Cardillo, R. et al., *J.O.C.*, 1991, 56, 5237, (合成法)

Yadav, J.S. et al., *Synth. Commun.*, 1993, 23, 2731, (合成法)



***RTECS (化学物質毒性データ) ***

生体影響物質 : 変異原物質, 一時刺激物質

健康障害に関するデータ

皮膚/眼の刺激に関するデータ

<<試験方法>> 標準ドライズ試験.

曝露経路 : 皮膚への塗布

被験動物 : げっ歯類-ウサギ.

投与量・期間 : 500 mg/24 時間

反応の症度 : 中等度.

参考文献

FCTXAV Food and Cosmetics Toxicology. (London, UK) V.1-19, 1963-81. For publisher information, see FCTOD7. [Vol.,頁,年(19-)]13,889,1975

<<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 : 100 mg/24 時間

反応の症度 : 重度

参考文献

CTOIDG Cosmetics and Toiletries. (Allured Pub. Corp., POB 318, Wheaton, IL 60189) V.91-1976- [Vol.,頁,年(19-)]94(8),41,1979

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 : 6600 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

FCTXAV Food and Cosmetics Toxicology. (London, UK) V.1-19, 1963-81. For publisher information, see FCTOD7. [Vol.,頁,年(19-)]13,889,1975

<<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-)]13,889,1975

<<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 : げっ歯類-モルモット.

投与量・期間 : 3440 mg/kg

毒性影響 : (行動) 傾眠(全身活動度の低下).

(胃腸) 唾液腺の構造又は機能の変化.

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-)]2,327,1964

変異原性に関するデータ

<<試験方法>> DNA 修復.

試験系 : 大腸菌 *Bacillus subtilis*

投与量・期間 : 20 mg/disc

参考文献

OIGZDE Osaka-shi Igakkai Zasshi. Journal of Osaka City Medical Association. (Osaka-shi Igakkai, c/o Osaka-shiritsu Daigaku Igakubu, 1-4-54 Asahi-cho, Abeno-ku, Osaka, 545, Japan) V.24- 1975- [Vol.,頁,年(19-)]34,267,1985

§ 7,10-Dihydroxy-2,11-bisaboladien-15-oic acid; Me ester

[化学名・別名] Bisaborosaol E

[CAS No.] 147029-04-7

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

[構造式]

[分子式] $C_{16}H_{26}O_4$

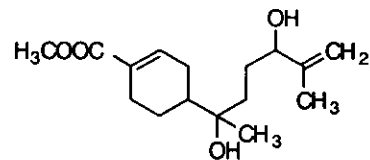
[分子量] 282.379

[正確な分子量] 282.18311

[基原] *Rosa rugosa*

[性状] シロップ

[その他のデータ] 10-epimers (E1 and E2) の混合物として分離



-----文献-----

Hashidoko, Y. et al., *Phytochemistry*, 1993, 32, 387, (分離, H-NMR)

§ 7,11-Dihydroxy-2,9-bisaboladien-15-oic acid; Me ester

[化学名・別名] Bisaborosaol F

[CAS No.] 147029-03-6

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

[構造式]

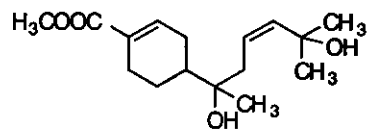
[分子式] $C_{16}H_{26}O_4$

[分子量] 282.379

[正確な分子量] 282.18311

[基原] *Rosa rugosa*

[性状] シロップ



-----文献-----

Hashidoko, Y. et al., *Phytochemistry*, 1993, 32, 387, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ 4,5-Dioxo-4,5-seco-8-daucen-14-al

[化学名・別名] Secocarotanal

[CAS No.] 147029-01-4

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

[構造式]

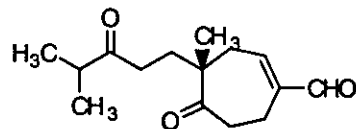
[分子式] $C_{15}H_{22}O_3$

[分子量] 250.337

[正確な分子量] 250.156895

[基原] *Rosa rugosa*

[性状] シロップ



-----文献-----

Hashidoko, Y. et al., *Phytochemistry*, 1993, 32, 387, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ 5,9-Epidioxy-7-daucen-6-ol; (5 α ,6 α ,9 α)-form

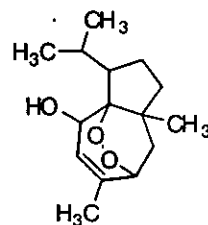
[CAS No.] 153141-13-0

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

[構造式]

[基原] *Rosa rugosa*

[性状] シロップ



-----文献-----

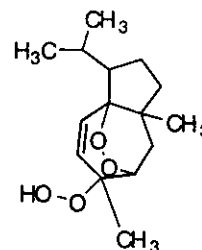
Hashidoko, Y. et al., *Phytochemistry*, 1994, 35, 325, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ 5,9-Epidioxy-8-hydroperoxy-6-daucene; (5 α ,8 α ,9 α)-form

[CAS No.] 153141-12-9

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

[構造式]



[基原] *Rosa rugosa*

[性状] シロップ

-----文献-----

Hashidoko, Y. et al., *Phytochemistry*, 1994, 35, 325, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ 4,5-Epoxy-7,9-daucadien-14-al; (4 α ,5 α)-form

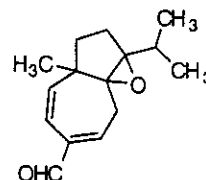
[化学名・別名] Carotarosal A

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

[構造式]

[基原] *Rosa rugosa*

[性状] オイル



-----文献-----

Hashidoko, Y. et al., *Phytochemistry*, 1991, 30, 3729, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ 5,9-Epoxy-6,9-dihydroxy-7-daucen-14-oic acid

[化学名・別名] Rugosic acid B

[CAS No.] 135404-54-5

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

[構造式]

[分子式] C₁₅H₂₂O₅

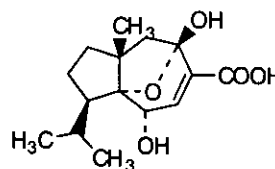
[分子量] 282.336

[正確な分子量] 282.146725

[基原] *Rosa rugosa*

[性状] 結晶

[融点] Mp 133-136 °C



-----文献-----

Hashidoko, Y. et al., *Agric. Biol. Chem.*, 1991, 55, 1049, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ 7,10-Epoxy-11-hydroxy-2-bisabolene-15-oic acid; Me ester

[化学名・別名] Bisaborosaol B1

[CAS No.] 135970-36-4

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

[構造式]

[分子式] C₁₅H₂₀O₄

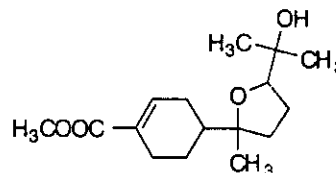
[分子量] 282.379

[正確な分子量] 282.18311

[基原] *Rosa rugosa*, *Podolepis rugata*

[性状] シロップ

[比旋光度]: [α]_D +63 (c, 0.19 in MeOH)



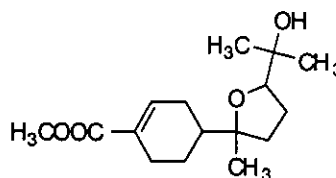
-----文献-----

Jaensch, M. et al., *Phytochemistry*, 1989, 28, 3497

Hashidoko, Y. et al., *Z. Naturforsch., C*, 1991, 46, 357, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ 7,10-Epoxy-11-hydroxy-2-bisabolene-15-oic acid; 10-Epimer, Me ester

[化学名・別名] Bisaborosol B2
 [CAS No.] 135970-37-5
 [化合物分類] テルペノイド (Bisabolane sesquiterpenoids)
 [構造式]
 [分子式] C₁₆H₂₆O₄
 [分子量] 282.379
 [正確な分子量] 282.18311
 [基原] *Rosa rugosa*
 [性状] シロップ
 [比旋光度]: [α]_D +68 (c, 0.2 in MeOH)



-----文献-----

Jaensch, M. et al., *Phytochemistry*, 1989, 28, 3497
 Hashidoko, Y. et al., *Z. Naturforsch., C*, 1991, 46, 357, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ 1-Heptanol (CAS 名)

[化学名・別名] Heptyl alcohol (旧 CAS 名). FEMA 2548
 [CAS No.] 111-70-6
 [化合物分類] 脂肪族化合物 (Saturated unbranched alcohols)
 [構造式] H₃C(CH₂)₅CH₂OH
 [分子式] C₇H₁₆O
 [分子量] 116.203
 [正確な分子量] 116.120115
 [基原] ある種の精油に見られる, 例えば, *Rosa rugosa* やカビ類 *Coriulus sanguineus*
 [用途] 単純なエステルは香料や香水に用いられる. 香気成分
 [性状] ピリッとしたスパイシーな辛みを持つ液体
 [融点] 凝固点: Fp-34.1 °C
 [沸点] Bp 176.3 °C. Bp₁₅ 78-79 °C
 [濃度] d₂₀ 0.82
 [屈折率] n_D²⁰ 1.4241
 [傷害・毒性] 50 %致死量 (LD₅₀) (ラット, 経口) 500 mg/kg. 発火点: 63/74 °C
 [化学物質毒性データ総覧 (RTECS) 登録番号] MK0350000

-----文献-----

Org. Synth., Coll. Vol., 1, 1932, 304, (合成法, 成書)
 Cambie, R.C. et al., *J.C.S. (C)*, 1966, 72, (分離)
 Burgess, A.R. et al., *J.C.S. (B)*, 1969, 341, (Mass)
 Opdyke, D.L.J., *Food Cosmet. Toxicol.*, 1975, 13, 697, (レビュー, 毒性)
 Bascetta, E. et al., *Chem. Phys. Lipids*, 1985, 36, 253, (C13-NMR)
 Encyclopedia of Food and Color Additives, (ed. Burdock, G.A.), CRC Press, 1997, 1277; 1278, (生育, 性質, Ac)

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

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 : 500 mg/kg
 毒性影響 : [肺, 胸郭, または呼吸] 急性肺水腫.
 参照文献

AMPMAR Archives des Maladies Professionnelles de Medecine du Travail et de Securite Sociale.
 (SPPIF, B.P.22, F-41353 Vineuil, France) V.7- 1946- [Vol.,頁,年(19-)]35,501,1974

<<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 : 1500 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

GISAAA Gigiena i Sanitariya. For English translation, see HYSAAV. (V/O Mezhdunarodnaya Kniga, 113095 Moscow, USSR) V.1- 1936- [Vol.,頁,年(19-)]31,16,1966

<<試験方法>> LC50 試験(50%致死濃度試験)。

曝露経路 : 吸入。

被験動物 : げっ歯類-マウス

投与量・期間 : 6600 mg/m³/2 時間

毒性影響 : 致死量以外に毒性影響に関する報告はない。

参照文献

85GMAT "Toxicometric Parameters of Industrial Toxic Chemicals Under Single Exposure," Izmerov, N.F., et al., Moscow, Centre of International Projects, GKNT, 1982 [Vol.,頁,年(19-)]-,72,1982

<<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-ウサギ。

投与量・期間 : 750 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

HYSAAV Hygiene and Sanitation (USSR). English translation of GISAAA. (Springfield, VA) 1964-71. Discontinued. [Vol.,頁,年(19-)]31(1-3),310,1966

<<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 : 2 gm/kg

毒性影響 : [肺, 胸郭, または呼吸] 急性肺水腫。

参照文献

AMPMAR Archives des Maladies Professionnelles de Medecine du Travail et de Securite Sociale. (SPPIF, B.P.22, F-41353 Vineuil, France) V.7- 1946- [Vol.,頁,年(19-)]35,501,1974

<<試験方法>> LC50 試験(50%致死濃度試験)。

曝露経路 : 吸入。

被験動物 : 哺乳動物-種未特定。

投与量・期間 : 6600 mg/m³

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

GISAAA Gigiena i Sanitariya. For English translation, see HYSAAV. (V/O Mezhdunarodnaya Kniga, 113095 Moscow, USSR) V.1- 1936- [Vol.,頁,年(19-)]51(5),61,1986

<<試験方法>> LD50 試験(50%致死量試験)。

曝露経路 : 報告なし。

被験動物 : 哺乳動物-種未特定。

投与量・期間 : 4350 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

GISAAA Gigiena i Sanitariya. For English translation, see HYSAAV. (V/O Mezhdunarodnaya Kniga, 113095 Moscow, USSR) V.1- 1936- [Vol.,頁,年(19-)]51(5),61,1986

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(TCLo)試験。

曝露経路 : 吸入。

被験動物 : げっ歯類-ラット。

投与量・期間 : 350 mg/m³/24/19 週間間欠投与

毒性影響 : [脳と外被] その他の変性性変化。

[心臓] その他の変化。

[肺,胸郭,または呼吸] その他の変化。

参照文献

NTIS** National Technical Information Service. (Springfield, VA 22161) Formerly U.S. Clearinghouse for Scientific & Technical Information. [Vol.,頁,年(19-)]PB234-882

<<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.

投与量・期間 : 9100 mg/kg/26 週間間欠投与

毒性影響 : [生化学][酵素の阻害・誘導・血液・組織中濃度の変化] 真のコリンエステラーゼ.

参照文献

GISAAA *Gigiiena i Sanitariya*. For English translation, see HYSAAV. (V/O *Mezhdunarodnaya Kniga*, 113095 Moscow, USSR) V.1- 1936- [Vol.,頁,年(19-)] 31(3),16,1966

変異原性に関するデータ

<<試験方法>> 性染色体の喪失及び不分離試験.

試験系 : げっ歯類-ハムスター肺

投与量・期間 : 2 mmol/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-)] 182,135,1987

§ 10-Hydroperoxy-7-hydroxy-2,11-bisaboladien-15-oic acid; Me ester

[化学名・別名] Bisaborosaol C1

[CAS No.] 135905-41-8

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

[構造式]

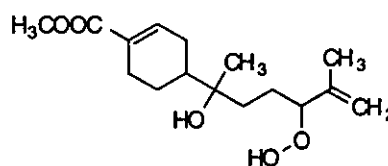
[分子式] $C_{16}H_{26}O_5$

[分子量] 298.378

[正確な分子量] 298.178025

[基原] *Rosa rugosa*

[性状] シロップ



-----文献-----

Hashidoko, Y. et al., *Z. Naturforsch., C*, 1991, 46, 357, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ 10-Hydroperoxy-7-hydroxy-2,11-bisaboladien-15-oic acid; 10-Epimer, Me ester

[化学名・別名] Bisaborosaol C2

[CAS No.] 135970-38-6

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

[構造式]

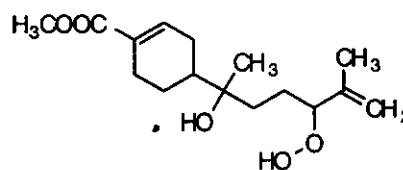
[分子式] $C_{16}H_{26}O_5$

[分子量] 298.378

[正確な分子量] 298.178025

[基原] *Rosa rugosa*

[性状] シロップ



-----文献-----

Hashidoko, Y. et al., *Z. Naturforsch., C*, 1991, 46, 357, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ 11-Hydroperoxy-7-hydroxy-2,9-bisaboladien-15-oic acid; (7 E, 9E)-form, Me ester

[化学名・別名] Bisaborosaol D

[CAS No.] 135905-42-9

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

[構造式]

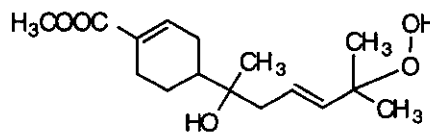
[分子式] $C_{16}H_{26}O_5$

[分子量] 298.378

[正確な分子量] 298.178025

[基原] *Rosa rugosa*

[性状] シロップ



-----文献-----

Hashidoko, Y. et al., *Z. Naturforsch., C*, 1991, 46, 357, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ 7-Hydroxy-2,10-bisaboladien-15-oic acid; (6*R*,7*S*)-form

[化学名・別名] Hamanasic acid A

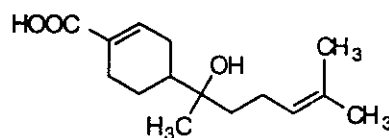
[CAS No.] 135905-44-1

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

[構造式]

[基原] 次の植物から分離: *Rosa rugosa*

[性状] シロップ



-----文献-----

Bohlmann, F. et al., *Phytochemistry*, 1980, 19, 2391, (分離, IR, H-NMR, Mass)

Jaensch, M. et al., *Phytochemistry*, 1989, 28, 3497, (分離, H-NMR)

Hashidoko, Y. et al., *Z. Naturforsch., C*, 1991, 46, 349, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ 7-Hydroxy-2,10-bisaboladien-15-oic acid; (6*R*,7*S*)-form, Me ester

[化学名・別名] Bisaborosaol A

[CAS No.] 135970-39-7

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

[構造式]

[分子式] C₁₆H₂₆O₃

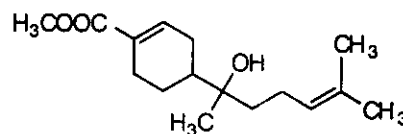
[分子量] 266.38

[正確な分子量] 266.188195

[基原] *Rosa rugosa*

[性状] シロップ

[比旋光度]: [α]_D +78 (c, 0.06 in Me₂CO)



-----文献-----

Bohlmann, F. et al., *Phytochemistry*, 1980, 19, 2391, (分離, IR, H-NMR, Mass)

Jaensch, M. et al., *Phytochemistry*, 1989, 28, 3497, (分離, H-NMR)

Hashidoko, Y. et al., *Z. Naturforsch., C*, 1991, 46, 349, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ 4-Hydroxy-8,11-daucadien-14-al; 4 ξ -form

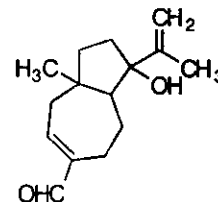
[化学名・別名] Hydroxyisodaucenal

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

[構造式]

[基原] *Rosa rugosa*

[性状] シロップ



-----文献-----

Hashidoko, Y. et al., *Phytochemistry*, 1991, 30, 3729, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ 11-Hydroxy-8-daucen-14-al

[化学名・別名] 11-Hydroxy-12-hydroisodaucenal

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

[構造式]

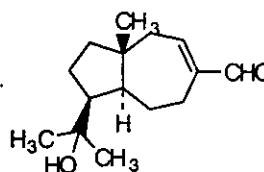
[分子式] C₁₅H₂₄O₂

[分子量] 236.353

[正確な分子量] 236.17763

[基原] *Rosa rugosa*

[性状] シロップ



-----文献-----

Hashidoko, Y. et al., *Phytochemistry*, 1991, 30, 3729, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ *p*-Menth-1-ene; (*R*)-form

[CAS No.] 1195-31-9

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

[構造式]

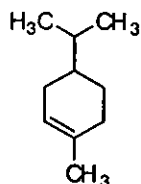
[基原] *Rosa rugosa* のオイル

[性状] オイル

[沸点] Bp 175-177 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{25} +118$ (neat)

[屈折率] $n_D^{25} 1.4557$



-----文献-----

Newhall, W.F., J.O.C., 1958, 23, 1274, (合成法)

Sakai, T. et al., Nippon Kagaku Kaishi, 1962, 83, 745, (分離)

Thomas, A.F. et al., Helv. Chim. Acta, 1964, 47, 475, (Mass)

Schnelle, F.J. et al., Planta Med., 1968, 16, 48, (分離)

Sakota, N. et al., Bull. Chem. Soc. Jpn., 1971, 44, 485, (絶対構造)

Choi, J. et al., Synthesis, 1996, 26, 597, (合成法, H-NMR, Mass)

§ 15-Nor-2,10-bisaboladien-7-ol

[CAS No.] 155260-68-7

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

[構造式]

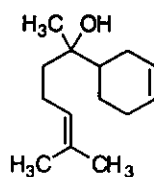
[分子式] C₁₄H₂₀O

[分子量] 208.343

[正確な分子量] 208.182715

[基原] *Rosa rugosa*

[性状] シロップ



-----文献-----

Hashidoko, Y. et al., Phytochemistry, 1994, 35, 325, (分離, H-NMR)

§ Rugosal A

[CAS No.] 121387-05-1

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

[構造式]

[分子式] C₁₅H₂₂O₄

[分子量] 266.336

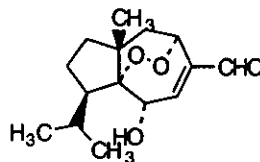
[正確な分子量] 266.15181

[基原] *Rosa rugosa* の傷ついた葉

[用途] 抗菌活性を示す

[性状] 針状結晶 (EtOAc/hexane)

[融点] Mp 145-147 °C



-----文献-----

Hashidoko, Y. et al., Agric. Biol. Chem., 1989, 53, 2505, (分離, 絶対構造)

Hashidoko, Y. et al., Phytochemistry, 1989, 28, 425

Hashidoko, Y. et al., Agric. Biol. Chem., 1991, 55, 1049, (Rugosic acid A)

§ Rugosal A; 14-Carboxylic acid

[化学名・別名] Rugosic acid A

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

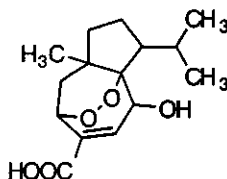
[構造式]

[分子式] C₁₅H₂₂O₅

[分子量] 282.336

[正確な分子量] 282.146725

[基原] *Rosa rugosa*



-----文献-----

Hashidoko, Y. et al., Agric. Biol. Chem., 1989, 53, 2505, (分離, 絶対構造)

Hashidoko, Y. et al., *Phytochemistry*, 1989, 28, 425

Hashidoko, Y. et al., *Agric. Biol. Chem.*, 1991, 55, 1049, (Rugosic acid A)

§ **Rugosal A; 14-Carboxylic acid, Me ester**

[化学名・別名] Methyl rugosate A

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

[構造式]

[分子式] $C_{16}H_{24}O_5$

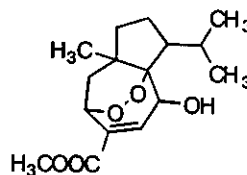
[分子量] 296.363

[正確な分子量] 296.162375

[基原] *Rosa rugosa*

[性状] 針状結晶

[融点] Mp 144-147 °C



-----文献-----

Hashidoko, Y. et al., *Agric. Biol. Chem.*, 1989, 53, 2505, (分離, 絶対構造)

Hashidoko, Y. et al., *Phytochemistry*, 1989, 28, 425

Hashidoko, Y. et al., *Agric. Biol. Chem.*, 1991, 55, 1049, (Rugosic acid A)

§ **Rugosal D**

[CAS No.] 147029-00-3

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

[構造式]

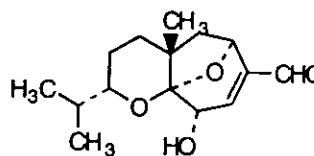
[分子式] $C_{15}H_{22}O_4$

[分子量] 266.336

[正確な分子量] 266.15181

[基原] *Rosa rugosa*

[性状] シロップ



-----文献-----

Hashidoko, Y. et al., *Phytochemistry*, 1993, 32, 387, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ **Rugosal D; 4-Epimer**

[化学名・別名] Epirugosal D

[CAS No.] 147126-85-0

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

[構造式]

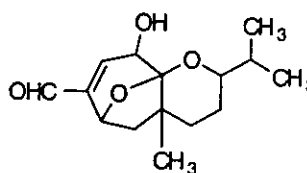
[分子式] $C_{15}H_{22}O_4$

[分子量] 266.336

[正確な分子量] 266.15181

[基原] *Rosa rugosa*

[性状] シロップ



-----文献-----

Hashidoko, Y. et al., *Phytochemistry*, 1993, 32, 387, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ **Rugosic acid D**

[CAS No.] 135404-56-7

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

[構造式]

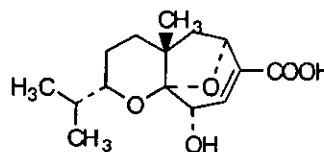
[分子式] $C_{15}H_{22}O_5$

[分子量] 282.336

[正確な分子量] 282.146725

[基原] *Rosa rugosa*

[性状] シロップ



-----文献-----

Hashidoko, Y. et al., *Agric. Biol. Chem.*, 1991, 55, 1049, (分離, H-NMR)