

[分子式] C₁₃H₁₂

[分子量] 168.238

[基原] 次の植物から分離: *Carthamus tinctorius*

-----文献-----

Sorensen, J.S. et al., Acta Chem. Scand., 1954, 8, 1741, (分離)

Ichihara, K. et al., Agric. Biol. Chem., 1975, 39, 1103, (分離, 構造決定, 成書)

Andersen, A.B. et al., Phytochemistry, 1977, 16, 1829, (分離)

Binder, R.G. et al., Phytochemistry, 1978, 17, 315, (分離, 構造決定, H-NMR, Mass)

Guillet, G. et al., Phytochemistry, 1997, 45, 695, (分離, UV, H-NMR, C13-NMR)

§ 1,3,5,11-Tridecatetraene-7,9-diyne; (3Z,5E,11E)-form

[CAS No.] 63366-82-5

[化合物分類] 脂肪族化合物 (Acetylenic hydrocarbons)

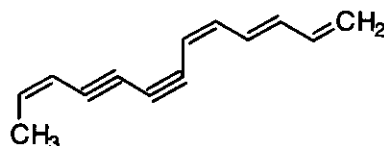
[構造式]

[分子式] C₁₃H₁₂

[分子量] 168.238

[基原] 次の植物から分離: *Carthamus tinctorius*

[性状] 黄色がかった粘稠性の液体



-----文献-----

Sorensen, J.S. et al., Acta Chem. Scand., 1954, 8, 1741, (分離)

Ichihara, K. et al., Agric. Biol. Chem., 1975, 39, 1103, (分離, 構造決定, 成書)

Andersen, A.B. et al., Phytochemistry, 1977, 16, 1829, (分離)

Binder, R.G. et al., Phytochemistry, 1978, 17, 315, (分離, 構造決定, H-NMR, Mass)

Guillet, G. et al., Phytochemistry, 1997, 45, 695, (分離, UV, H-NMR, C13-NMR)

§ 1,3,11-Tridecatriene-5,7,9-triyne

[CAS No.] 18668-89-8

[関連 CAS No.] 50739-51-0, 58998-11-1, 61434-49-9, 124604-44-0

[化合物分類] 脂肪族化合物 (Miscellaneous acetylenes)

[構造式] H₃CCH=CH(C≡C)₂CH=CHCH=CH₂

[分子式] C₁₃H₁₀

[分子量] 166.222

[基原] *Carthamus tinctorius*, *Bidens ferulaefolia*, *Centaurea* spp., *Dahlia* spp.

[性状] オイル

UV: [neutral] λ_{max} 224 ; 234 ; 243 ; 274 ; 289 ; 299 ; 310 ; 319 ; 331 ; 342 ; 354 ; 366 ; 382 (MeOH) (Berdy)

[その他のデータ] Partial stereochem. known for some isolates

-----文献-----

Sorensen, N.A. et al., Acta Chem. Scand., 1958, 12, 756; 1959, 13, 2101, (分離, 合成法)

Bohlmann, F. et al., Chem. Ber., 1958, 91, 1631; 1642; 1961, 94, 3179; 1964, 97, 1193; 2583; 1966, 99, 3433, (分離, 合成法, epoxide)

Chin, C. et al., J.C.S. (C), 1970, 314, (分離)

Lam, J., Planta Med., 1973, 24, 107, (分離)

Kenichi, I. et al., Agric. Biol. Chem., 1975, 39, 1103, (分離)

Kogiso, S. et al., Agric. Biol. Chem., 1976, 40, 2085, (分離, 構造決定, UV, IR, Mass, pmr activity)

Bedford, C.T. et al., J.C.S. Perkin 1, 1976, 735, (分離, 合成法)

Binder, R.G. et al., J. Agric. Food Chem., 1990, 38, 764; 1053; 1245, (分離)

§ 6,8-Tritriacontanediol; (6R*,8S*)-form

[化学名・別名] erythro-form

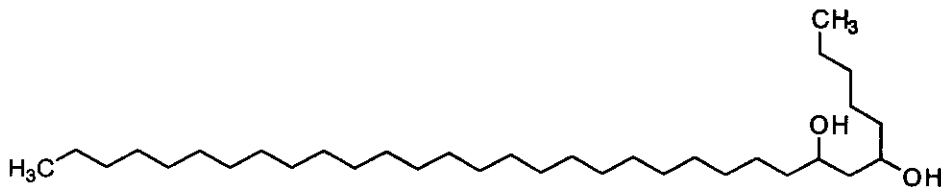
[CAS No.] 155800-90-1

[化合物分類] 脂肪族化合物 (Saturated unbranched alcohols)

[構造式]

[分子式] C₃₃H₆₈O₂

[分子量] 496.899



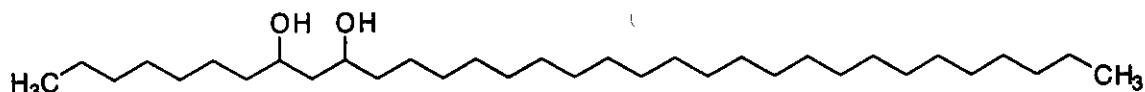
[基原] *Carthamus tinctorius* のドライフラワー(キク科)
[性状] 結晶 (Me₂CO/MeOH)
[融点] Mp 82-84 °C
[比旋光度]: $[\alpha]_D^{20} +0.3$ (c, 0.11 in CHCl₃)

-----文献-----

Akihisa, T. et al., *Phytochemistry*, 1994, 36, 105, (分離, Mass)

§ 8,10-Tritriacontanediol; (8*R**,10*S**)-form

[化学名・別名] *erythro*-form
[CAS No.] 193419-79-3
[化合物分類] 脂肪族化合物 (Saturated unbranched alcohols)
[構造式]



[分子式] C₃₃H₆₈O₂
[分子量] 496.899
[基原] *Carthamus tinctorius* のドライフラワー
[性状] 結晶 (Me₂CO/MeOH)
[融点] Mp 79-82 °C

-----文献-----

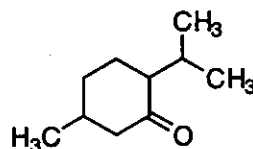
Akihisa, T. et al., *Phytochemistry*, 1997, 45, 725-728, (分離, Mass)

*****ペニーロイヤル (Pennyroyal) *****

§ § シソ科ペニーロイヤルミント (*Mentha pulegium* L.) の茎, 葉, または全草。

§ *p*-Menthan-3-one; (1*S*,4*S*)-form

[化学名・別名] (-)-Isomenthone
[CAS No.] 18309-28-9
[化合物分類] テルペノイド (*p*-Menthane monoterpenoids)
[構造式]



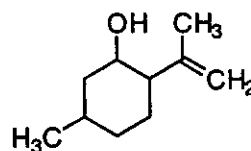
[分子式] C₁₀H₁₈O
[分子量] 154.252
[基原] 次の植物から分離: *Mentha arvensis* のオイル, *Mentha pulegium*, *Hedeoma pulegioides*, その他
[沸点] Bp₇ 79-80 °C
[比旋光度]: $[\alpha]_D^{20} -94.3$

-----文献-----

Opdyke, D.L.J., *Food Cosmet. Toxicol.*, 1976, 14, 315, (レビュー, 毒性, Isomenthone)

§ *p*-Menth-8-en-3-ol; (1*R*,3*R*,4*S*)-form

[化学名・別名] (-)-Isopulegol
[CAS No.] 89-79-2
[化合物分類] テルペノイド (*p*-Menthane monoterpenoids)
[構造式]



[分子式] C₁₀H₁₈O
[分子量] 154.252
[基原] 次の植物から分離: *Ceratocystis coerulescens* (カビ), また *Mentha pulegium*, その他の精油
[性状] オイル
[沸点] Bp₃ 65-66 °C
[比旋光度]: $[\alpha]_D^{25} -22.5$ (neat)
[販売元] Aldrich:43906-1; Fluka:59770

-----文献-----

Opdyke, D.L.J., *Food Cosmet. Toxicol.*, 1975, 13, 823, (レビュー, 毒性)

Proenca de Cunha, A. et al., *Bol. Fac. Farm., Univ. Coimbra, Ed. Cient.*, 1976, 1, 23-36; CA, 88, 78955b, (生育)

Koch, W.-G. et al., Z. Naturforsch., C, 1987, 42, 159, (分離)
Fenaroli's Handbook of Flavor Ingredients, 3rd edn., (ed. Burdock, G.A.), CRC Press, 1995, 2, 422; 423, (レビュー)

§ 3-Methylcyclohexanol (CAS 名)

[化学名・別名] Hexahydro-*m*-cresol

[CAS No.] 591-23-1

[関連 CAS No.] 25639-42-3

[その他の CAS No.] 25639-42-3

[化合物分類] 脂肪族化合物 (Monocarbocyclic alcohols)

[構造式]

[分子式] $C_7H_{14}O$

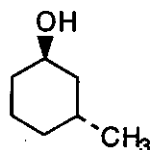
[分子量] 114.187

[基原] 次の植物のオイルから分離: *Mentha pulegium* (おそらく *trans*-form として)

[傷害・毒性] 発火温度: 約 70 °C, 自然発火温度: 295 °C

[化学物質毒性データ総覧 (RTECS) 登録番号] GW0200000

[販売元] Aldrich: 13973-4; Fluka: 66330



(1*R*,3*R*)-form

----- 文献 -----

Naves, Y.R., Helv. Chim. Acta, 1943, 26, 1992, (分離)

Hill, R.K. et al., J.O.C., 1967, 32, 2330, (構造)

Oritani, T. et al., Agric. Biol. Chem., 1973, 37, 1695, (合成法, 分割)

Yamaguchi, S. et al., Tet. Lett., 1977, 89, (構造)

Brown, H.C. et al., J.O.C., 1979, 44, 1910, (合成法)

***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 : 筋肉内投与.

被験動物 : げっ歯類-マウス.

投与量・期間 : 1 gm/kg

毒性影響 : 致死量以外に毒性影響に関する報告はない.

参照文献

Journal of Scientific and Industrial Research, Section C: Biological Sciences. (New Delhi, India) 21,342,1962

§ 2,4,4-Trimethylcyclopentanone (CAS 名) (旧 CAS 名)

[CAS No.] 4694-12-6

[化合物分類] 脂肪族化合物 (Monocarbocyclic aldehydes and ketones)

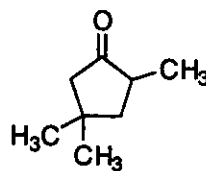
[構造式]

[分子式] $C_8H_{14}O$

[分子量] 126.198

[基原] 次の植物のオイルから分離: *Mentha pulegium*

[販売元] Aldrich: 39077-1



----- 文献 -----

Naves, Y.R., Helv. Chim. Acta, 1944, 27, 51, (分離)

Org. Synth., Coll. Vol., 4, 1963, 957, (合成法)

Stothers, J.B. et al., Can. J. Chem., 1974, 52, 308, (C13-NMR)

§ § シソ科アメリカンペニーロイヤル (*Hedeoma pulegioides* (L.) Persoon) の茎, 葉, または全草.

§ *p*-Menthane-3-one; (1*R*,4*R*)-form

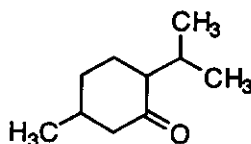
[化学名・別名] (+)-Isomenthone

[CAS No.] 1196-31-2

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

[構造式]

[分子式] $C_{10}H_{16}O$



[分子量] 154.252

[基原] ペニーロイヤルオイル (*Hedeoma pulegioides*), *Mentha arvensis*, *Pelargonium tomentosum*, その他の精油

[性状] オイル

[沸点] Bp 212 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{20} +95$

[屈折率] n_D^{20} 1.453

----- 文献 -----

Karrer, W. et al., *Konstitution und Vorkommen der Organischen Pflanzenstoffe*, 2nd edn., Birkhäuser Verlag, Basel, 1972, nos. 545; 546, (生育)

Opdyke, D.L.J., *Food Cosmet. Toxicol.*, 1976, 14, 315, (レビュー, 毒性, Isomenthone)

§ *p*-Menth-3-one; (1*S*,4*S*)-form

[化学名・別名] (-)-Isomenthone

[CAS No.] 18309-28-9

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

[構造式]

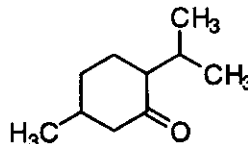
[分子式] $C_{10}H_{18}O$

[分子量] 154.252

[基原] 次の植物から分離: *Mentha arvensis* のオイル, *Mentha pulegium*, *Hedeoma pulegioides*, その他

[沸点] Bp 79-80 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{20} -94.3$



----- 文献 -----

Karrer, W. et al., *Konstitution und Vorkommen der Organischen Pflanzenstoffe*, 2nd edn., Birkhäuser Verlag, Basel, 1972, nos. 545; 546, (生育)

Opdyke, D.L.J., *Food Cosmet. Toxicol.*, 1976, 14, 315, (レビュー, 毒性, Isomenthone)

§ *p*-Menth-4(8)-en-3-one; (*R*)-form

[CAS No.] 89-82-7

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

[構造式]

[分子式] $C_{10}H_{16}O$

[分子量] 152.236

[基原] *Mentha* spp. のオイル, *Hedeoma pulegioides*, その他多くの精油

[用途] 香水及び香料原料

[性状] 心地よいペパーミント臭を持つオイル

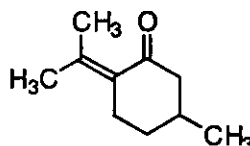
[沸点] Bp 224 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{20} +23$ (c, 5 in EtOH)

[濃度] d_4^{20} 0.936

[化学物質毒性データ総覧 (RTECS) 登録番号] OT0261000

[販売元] Aldrich:W29630-9; Fluka:82570



----- 文献 -----

Banthorpe, D.V. et al., *J.C.S. Perkin 1*, 1972, 1532, (分離, 生合成)

Karrer, W. et al., *Konstitution und Vorkommen der Organischen Pflanzenstoffe*, 2nd edn., Birkhäuser Verlag, Basel, 1972, no. 549, (生育)

Martindale, *The Extra Pharmacopoeia*, 30th edn., Pharmaceutical Press, 1993, 1407

RTECS (化学物質毒性データ)

生体影響物質 : 催腫瘍物質.

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>> 認知されている最低致死量に関する試験

曝露経路 : 静脈内投与.

被験動物 : ほ乳類-イヌ.

投与量・期間 : 330 mg/kg

毒性影響 : [心臓] 心拍数の変化.

[血管] 自律性の切断を伴わない血圧の低下.

参照文献

§ *p*-Menth-8-en-3-one; (1*R*,4*S*)-form

[化学名・別名] (-)-*trans*-form

[CAS No.] 57129-09-6

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

[構造式]

[分子式] C₁₀H₁₆O

[分子量] 152.236

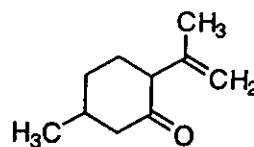
[基原] 次の植物から分離: *Hedeoma pulegioides* (ペニーロイヤル) のオイル, *Mentha* spp., その他, usually with Pulegone

[性状] オイル

[沸点] Bp₁₃ 98-100 °C

[比旋光度]: [α]_D²⁵ -7.9 (neat). [α]_D³² -13.5 (c, 1.04 in CHCl₃)

[屈折率] n_D²⁵ 1.467



----- 文献 -----

Ohloff, G. et al., Chem. Ber., 1962, 95, 1400, (合成法, 構造)

Watanabe, S., Bull. Chem. Soc. Jpn., 1973, 46, 1546, (合成法, CD)

Vig, O.P. et al., J. Indian Chem. Soc., 1976, 53, 50, (合成法)

§ 3-Methylcyclohexanone; (*R*)-form

[CAS No.] 13368-65-5

[化合物分類] 脂肪族化合物 (Monocarbocyclic aldehydes and ketones)

[構造式]

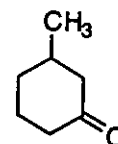
[分子式] C₇H₁₂O

[分子量] 112.171

[基原] 次の植物から分離: *Hedeoma pulegioides* (ペニーロイヤル) のオイル, *Mentha* spp., その他のオイル

[沸点] Bp 169 °C. Bp₁₂ 68-70 °C

[販売元] Aldrich: M3858-3



----- 文献 -----

Barrowcliff, M., J.C.S., 1907, 91, 875, (分離)

Eisenbraun, E.J. et al., J.A.C.S., 1955, 77, 3383, (絶対構造)

*****ペパーミント (Peppermint) *****

§ § シソ科セイヨウハッカ (*Mentha piperita* L.) の葉または地上部全草。

§ 4(1*S*),10(1*A*)-Bulgaradiene

[化学名・別名] ε-Bulgarene

[CAS No.] 15890-31-0

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

[構造式]

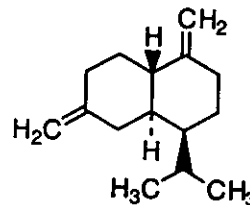
[分子式] C₁₅H₂₄

[分子量] 204.335

[基原] *Mentha piperita* のオイル

[沸点] Bp_{4.5} 107-115 °C

[比旋光度]: [α]_D²⁰ -17.1



----- 文献 -----

Linek, A. et al., Tet. Lett., 1968, 23, (分離, 構造決定)

Koster, F.-H. et al., Annalen, 1986, 78, (合成法, C13-NMR)

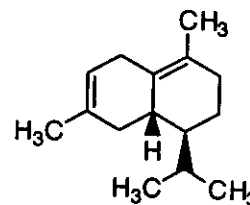
§ 1(10),3-Cadinadiene

[化学名・別名] ω-Cadinene

[その他の CAS No.] 29350-73-0

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

[構造式]



[分子式] $C_{15}H_{24}$
 [分子量] 204.355
 [基原] *Mentha piperita*
 [性状] オイル
 [沸点] $Bp_{4.5}$ 115-128 °C
 [比旋光度]: $[\alpha]_D^{20} +92$
 [その他のデータ] Originally named δ -Cadinene, which led to confusion with 1(10),4-Cadinadiene

-----文献-----

Connell, D.W. et al., Tet. Lett., 1968, 519
 Bülow, N. et al., Phytochemistry, 2000, 55, 141-168, (H-NMR, 成書)

§ 3 (15),6-Caryophylladien-4-ol

[化学名・別名] 6,10,10-Trimethyl-2-methylenebicyclo[7.2.0]undec-5-en-3-ol (CAS 名). β -Betulenol

[CAS No.] 487-87-6

[関連 CAS No.] 6040-49-9, 20296-32-6

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

[構造式]

[分子式] $C_{15}H_{24}O$

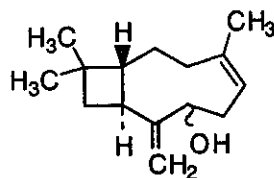
[分子量] 220.354

[基原] *Betula* spp. の精油, *Perovskia* spp., ペパーミントオイル (*Mentha piperita*), palmarosa

[性状] オイル

[沸点] Bp_{20} 157-158 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{20} -36$



Absolute configuration

-----文献-----

Holub, M. et al., Coll. Czech. Chem. Comm., 1959, 24, 3730, (構造決定)
 Treibs, W. et al., Annalen, 1960, 634, 124, (合成法)
 Naves, Y.R., Parfums, Cosmet. Savons Fr., 1970, 13, 354, (性質)

§ Cosmosiin; 4'-O-

(3,4-Dihydroxycinnamoyl)

[化学名・別名] Piperitoside

[CAS No.] 20196-92-3

[化合物分類] フラボノイド (Flavones; 3 × O-置換基)

[構造式]

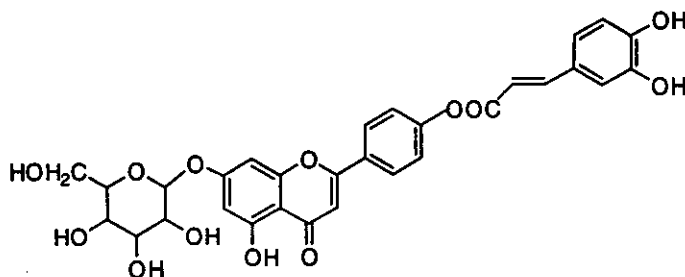
[分子式] $C_{30}H_{26}O_{13}$

[分子量] 594.528

[基原] 次の植物から分離: *Mentha piperita*

[融点] Mp 251-253 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{18} -63$



-----文献-----

Gella, E.V. et al., Farm. Zh. (Kiev), 1966, 21, 58-66; 1967, 22, 80-85; CA, 65, 13810; 68, 49985, (Menthoside, Piperitoside)

§ Cosmosiin; 6''-O- α -L-Rhamnopyranosyl, 4'-O-(3,4-dihydroxycinnamoyl)

[化学名・別名] Menthoside. Apigenin 7-O-rutinoside 4'-O-caffeate

[CAS No.] 14637-28-6

[化合物分類] フラボノイド

(Flavones; 3 × O-置換基)

[構造式]

[分子式] $C_{36}H_{36}O_{17}$

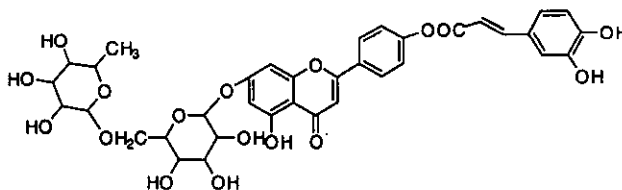
[分子量] 740.67

[基原] 次の植物から分離: *Mentha piperita*

[性状] 結晶 (EtOH)

[融点] Mp 271-273 °C

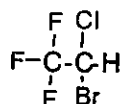
[比旋光度]: $[\alpha]_D^{18} -89$ (c, 0.1 in DMF)



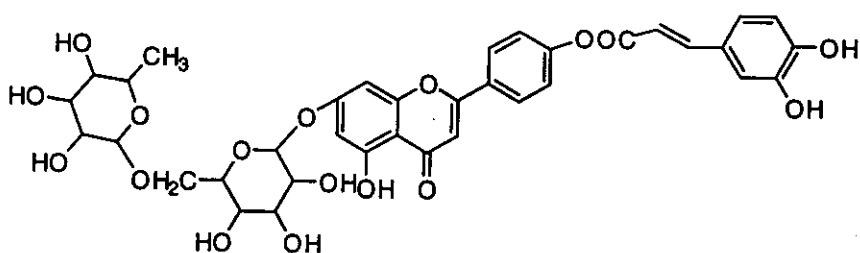
-----文献-----

Gella, E.V. et al., Farm. Zh. (Kiev), 1966, 21, 58-66; 1967, 22, 80-85; CA, 65, 13810; 68, 49985, (Menthoside, Piperitoside)

§ 3-(3,4-Dihydroxyphenyl)
-2-hydroxypropanoic acid;
(R)-form, 2-O-
(3,4-Dihydroxy-E-cinnamoyl)
[化学名・別名] Rosmarinic
acid. Labiatenic acid.
Rosemarinic acid
[CAS No.] 537-15-5
[その他の CAS No.]
20283-92-5



[化合物分類] 薬物: 血小板凝集阻害薬 (Platelet aggregation inhibiting agents), 単環芳香族 (Simple phenylpropanoids), 薬物: 抗 HIV 薬 (Anti-HIV agents), 薬物: 抗炎症薬 (Antiinflammatory agents), 薬物: (Antithrombotic agents), 薬物: 抗ウイルス物質 (Antiviral agents)



[構造式]

[分子式] C₁₈H₁₆O₆

[分子量] 360.32

[基原] *Rosmarinus officinalis*, *Melissa officinalis*, *Momordica balsamina*, *Mentha piperita*, *Salvia officinalis*, *Teucrium scorodonia*, *Sanicula europaea*, *Coleus blumei*, *Thymus* spp., その他の植物属

[用途] Exhibits antithrombotic and antiplatelet effects. 抗炎症作用. 抗 HIV, 抗菌, 抗カビ作用; 鎮吐剤, antigenotoxic activities etc. 植物成長抑制活性

[性状] 結晶・二水和物

[融点] Mp 204 °C で分解

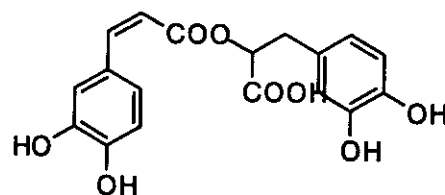
[比旋光度]: [α]_D²⁰ +145

[Log P 計算値] Log P 1.01 (計算値)

UV: [neutral] λ_{max} 230 ; 329 (MeOH) (Berdy)

[傷害・毒性] 50% 致死量 (LD₅₀) (マウス, 静脈内) 561 mg/kg

[化学物質毒性データ総覧 (RTECS) 登録番号] GD8990000



----- 文献 -----

- Schopf, C. et al., *Annalen*, 1940, 544, 30-62, (合成法, 3-Me ether)
Kelley, C.J. et al., *J.O.C.*, 1975, 40, 1804; 1976, 41, 449-455, (H-NMR, C13-NMR, Rosmarinic acid)
Pamham, M.J. et al., *Drugs of the Future*, 1985, 10, 756, (レビュー, Rosmarinic acid)
Englberger, W. et al., *Int. J. Immunopharmacol.*, 1988, 10, 729, (薬理, Rosmarinic acid)
Peake, P.W. et al., *Int. J. Immunopharmacol.*, 1991, 13, 853, (薬理, Rosmarinic acid)
Pabsch, K. et al., *Rec. Trav. Chim. (J. R. Neth. Chem. Soc.)*, 1991, 110, 199, (合成法, Rosmarinic acid)
Mahmood, N., *Antiviral Chem. Chemother.*, 1993, 4, 235, (anti-HIV activity, NMR, Mass, Rosmarinic acid)
Zou, Z.W. et al., *Yaoxue Xuebao*, 1993, 28, 241, (薬理, Rosmarinic acid)
Abraham, S.K., *Food Chem. Toxicol.*, 1996, 34, 15-20, (活性, Rosmarinic acid)
Binutu, O.A. et al., *Planta Med.*, 1996, 62, 352-353, (活性, Rosmarinic acid)
Robinson, W.E. et al., *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.*, 1996, 93, 6326-6331, (活性, Rosmarinic acid)
Eicher, T. et al., *Synthesis*, 1996, 755, (合成法, Rosmarinic acid)
Bogucki, D.E. et al., *Can. J. Chem.*, 1997, 75, 1783-1794, (合成法, Rosmarinic acid)
Reimann, E. et al., *Monatsh. Chem.*, 1997, 128, 995-1008; 1998, 129, 187-193, (合成法, Rosmarinic acid)
Kusano, G. et al., *Biol. Pharm. Bull.*, 1998, 21, 997-999, (活性, Rosmarinic acid)
Kuo, Y.-H. et al., *J. Chin. Chem. Soc. (Taipei)*, 2000, 47, 241-246, (methyl rosmarinate)
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 : 静脈内投与.

被験動物 : げっ歯類-マウス.

投与量・期間 : 561 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

Drugs of the Future. (J.R. Prous, S.A., Apartado de Correos 540, 08080 Barcelona, Spain) 10,756,1985

§ 5,7-Dihydroxy-3',4',6,8-tetramethoxyflavone

[化学名・別名] 2-(3,4-Dimethoxyphenyl)-5,7-dihydroxy-6,8-dimethoxy-4H-1-benzopyran-4-one (CAS 名).

Hymenoxin

[CAS No.] 56003-01-1

[化合物分類] フラボノイド (Flavones; 6 × O-置換基)

[構造式]

[分子式] C₁₉H₁₈O₈

[分子量] 374.346

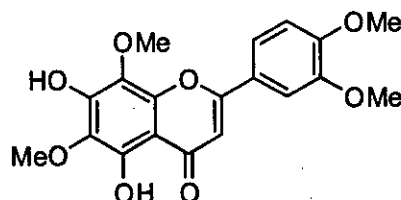
[基原] 次の植物から分離: *Hymenoxys* spp., *Helianthus* spp.,

Phoebanthus ternifolius, *Mentha piperita*

[性状] 黄色の結晶 (MeOH)

[融点] Mp 215-216 °C

UV: [neutral] λ_{max} 281 (ε 17400); 340 (ε 20300) (MeOH) (Berdy) [base] λ_{max} 253 ; 378 (MeOH-NAOH) (Berdy)



-----文献-----

Thomas, M.B. et al., J.O.C., 1967, 32, 3254, (分離, 合成法, UV, IR, H-NMR)

Waddell, T.G., Phytochemistry, 1973, 12, 2061, (分離, H-NMR, Mass)

Ohno, N. et al., Phytochemistry, 1981, 20, 2393, (分離)

Zakharova, O.I. et al., Khim. Priir. Soedin., 1982, 18, 652; 1983, 19, 645; Chem. Nat. Compd. (Engl. Transl.), 1982, 18, 619; 1983, 19, 611, (分離)

Herz, W. et al., Phytochemistry, 1983, 22, 2021, (分離)

Schilling, E. et al., Biochem. Syst. Ecol., 1985, 13, 403, (分離)

Chen, J. et al., J. Agric. Food Chem., 1998, 46, 1235-1238, (分離, UV, H-NMR, C13-NMR, Mass)

§ 1,2-Dinor-6,10-farnesadien-3-one; (E)-form

[化学名・別名] Geranylacetone. FEMA 3542

[CAS No.] 3796-70-1

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

[構造式]

[分子式] C₁₃H₂₂O

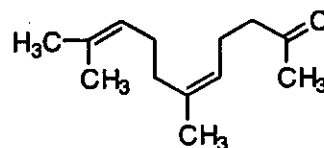
[分子量] 194.316

[基原] 次の植物を含む多くの精油: ペパーミント (*Mentha piperita*) and *Carolina vanilla* (*Carphephorus odoratissimus*). Chemical scent constit. of urine of red fox *Vulpes vulpes*

[用途] Intermed. in synth. of vitamins and sesquiterpene alcohols. 食品香料に用いられる。Has 幼若ホルモン活性

[沸点] Bp₁₀ 124 °C

[販売元] Aldrich:25071-6; Fluka:48805; Sigma:G8659



-----文献-----

Fujita, Y., Chem. Lett., 1978, 533-534, (合成法, E,Z-isomerisation)

Shimizu, I. et al., Tet. Lett., 1980, 21, 3199-3202, (合成法)

Tsuji, J., Pure Appl. Chem., 1982, 54, 197-206, (合成法)

Hajos, Z.G. et al., J.O.C., 1984, 49, 2600-2608, (合成法)

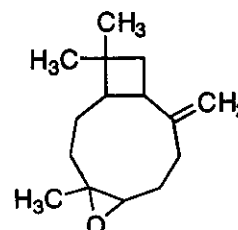
§ 6,7-Epoxy-3(15)-caryophyllene; (6R,7R)-form

[化学名・別名] Caryophyllene α-oxide

[CAS No.] 1139-30-6

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

[構造式]



[分子式] C₁₅H₂₄O

[分子量] 220.354

[基原] クロブオイル (*Eugenia caryophyllata*). また次の植物オイルからも得られる: *Betula alba*, *Mentha piperita*, その他. Major prod. of oxidn. of β-Caryophyllene

[性状] 結晶

[融点] Mp 63.5-64 °C

[比旋光度]: [α]_D²⁰ -79.4 (c, 2.32 in CHCl₃)

[傷害・毒性] Skin irritant. 50 %致死量 (LD₅₀) (ラット, 経口) >5000 mg/kg

[化学物質毒性データ総覧 (RTECS) 登録番号] RP5530000

[販売元] Aldrich: W50964-7; Fluka: 22076; Sigma: C5420

-----文献-----

Karrer, W. et al., *Konstitution und Vorkommen der Organischen Pflanzenstoffe*, 2nd edn., Birkhäuser Verlag, Basel, 1972, no. 1930, (生育)

Warnhoff, E.W. et al., *Can. J. Chem.*, 1973, 51, 3955, (合成法, H-NMR)

Gatilov, Yu.A. et al., *Khim. Priir. Soedin.*, 1982, 18, 715; *Chem. Nat. Compd. (Engl. Transl.)*, 677, (結晶構造, 成書)

Nishiya, K. et al., *Phytochemistry*, 1992, 31, 3511, (分離, H-NMR, C13-NMR)

Heymann, H. et al., *Chem. Pharm. Bull.*, 1994, 42, 138, (分離, H-NMR, C13-NMR)

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

RTECS (化学物質毒性データ)

生体影響物質 : 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 (Draize) 試験法.

曝露経路 : 皮膚への塗布

被験動物 : げっ歯類-ウサギ.

投与量・期間 : 500 mg/24 時間

反応の症度 : 軽度.

参照文献

Food and Chemical Toxicology. (Pergamon Press Inc., Maxwell House, Fairview Park, Elmsford, NY 10523) 21,661,1983

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 : >5 gm/kg

毒性影響 : 致死量以外に毒性影響に関する報告はない.

参照文献

Food and Chemical Toxicology. (Pergamon Press Inc., Maxwell House, Fairview Park, Elmsford, NY 10523) 21,661,1983

<<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 : 致死量以外に毒性影響に関する報告はない.

参照文献

Food and Chemical Toxicology. (Pergamon Press Inc., Maxwell House, Fairview Park, Elmsford, NY 10523) 21,661,1983

§ 3',4',5,6,7,8-Hexahydroxyflavone; 6,7,8-Tri-Me ether

[化学名・別名] 3',4',5-Trihydroxy-6,7,8-trimethoxyflavone.

Sideritiflavone

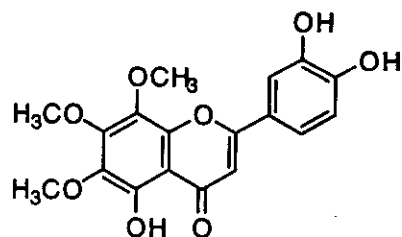
[CAS No.] 70360-12-2

[化合物分類] フラボノイド (Flavones; 6 × O-置換基)

[構造式]

[分子式] C₁₆H₁₆O₈

[分子量] 360.32



[基原] 次の植物から分離: *Sideritis* spp., *Baccharis* spp., *Mentha piperita*, *Pteronia incana*

[性状] 淡黄色の針状結晶 (EtOH)

[融点] Mp 197-198 °C

UV: [neutral] λ_{\max} 258 (ϵ 58894); 279 (ϵ 66070); 348 (ϵ 77624) (MeOH) (Berdy)

-----文献-----

Bhardwaj, D.K. et al., Indian J. Chem., Sect. B, 1981, 20, 800, (Sideritiflavone)

Jullien, F. et al., Phytochemistry, 1984, 23, 2972, (Sideritiflavone)

Silva, G.A.B. et al., J. Nat. Prod., 1985, 48, 861, (Sideritiflavone)

§ 3',4',5,6,7,8-Hexahydroxyflavone; 3',4',7,8-Tetra-Me ether

[化学名・別名] 5,6-Dihydroxy-3',4',7,8-tetramethoxyflavone. Pebrellin

[CAS No.] 13509-93-8

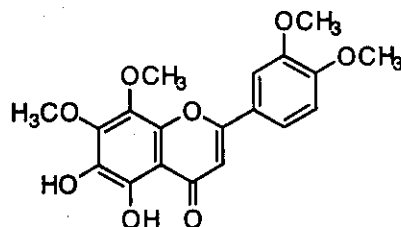
[化合物分類] フラボノイド (Flavones; 6 × O-置換基)

[構造式]

[分子式] $C_{19}H_{18}O_8$

[分子量] 374.346

[基原] *Mentha piperita*, *Thymus piperella*



-----文献-----

Barberan, F.A.T. et al., Planta Med., 1985, 452, (5,6-Dihydroxy-3',4',7,8-tetramethoxyflavone)

§ 3',4',5,6,7,8-Hexahydroxyflavone; 3',4',6,7,8-Penta-Me ether

[化学名・別名] 5-Hydroxy-3',4',6,7,8-pentamethoxyflavone.

Demethylnobiletin. 5-Desmethoxynobiletin (incorr.)

[CAS No.] 2174-59-6

[化合物分類] フラボノイド (Flavones; 6 × O-置換基)

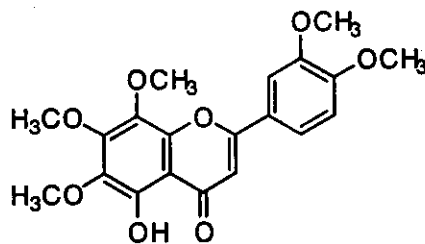
[構造式]

[分子式] $C_{20}H_{20}O_8$

[分子量] 388.373

[基原] 次の植物から分離: *Citrus* spp., *Sideritis* sp., *Heteropappus* sp., *Mentha piperita*, *Amaracus pampanini*, *Thymus* sp.

[融点] Mp 145-146 °C



-----文献-----

Sarin, P.S. et al., Tetrahedron, 1960, 8, 64, (Demethylnobiletin)

Tatum, J.H. et al., Phytochemistry, 1972, 11, 2283, (5-Desmethoxynobiletin)

Bohlmann, F. et al., Phytochemistry, 1985, 24, 1027, (5-Desmethoxynobiletin)

§ 4-Hydroxy-4-methyl-2-cyclohexen-1-one; (ξ)-form

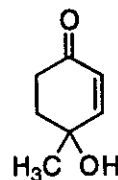
[化合物分類] 脂肪族化合物 (Monocarbocyclic aldehydes and ketones)

[構造式]

[分子式] $C_7H_{10}O_2$

[分子量] 126.155

[基原] *Jungermannia obovata*, *Nigella sativa*, ペパーミントオイル (*Mentha piperita*)



-----文献-----

Takahashi, K. et al., Agric. Biol. Chem., 1980, 44, 1535-1543, (分離, 合成法)

Bueno, A.B. et al., Tet. Lett., 1995, 36, 3737-3740, (合成法)

Buchanan, M.S. et al., J. Indian Chem. Soc., 1998, 75, 613-615

§ p-Menthan-3-ol; (1R,3R,4S)-form

[化学名・別名] (-)-Menthol. Levomenthol, BAN, INN. Menthacamphor. Peppermint camphor

[CAS No.] 2216-51-5

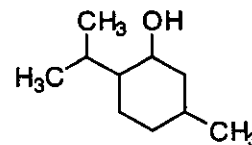
[化合物分類] 薬物: (Counter irritants), 薬物: 鎮痛薬 (Analgesics), 薬物: 局所麻酔 (Anaesthetics, local), テルペノイド (p-Menthane monoterpenoids), 薬物: 胆石破壊剤 (Gallstone dispersing agents), 薬物: 駆風薬 (Carminatives)

[構造式]

[分子式] $C_{10}H_{20}O$

[分子量] 156.267

[基原] Present in large amts. in ペパーミントオイル (*Mentha piperita*), またその他



の *Mentha* spp., *Artemisia* spp., *Glechoma hederacea*, その他. Prod. semisynthetically on industrial scale by catalytic asymm. cyclisation from open-chain achiral allylamine using Rh/BINAP catalytic system

[用途] 菓子類, 香水, メンソール系のタバコ, 吸入器等に用いられる. 軽い局所麻酔, 麻酔, antipruritic agent, 生体内の駆風作用物として用いられる. Counter-irritant. Used to determine the optical purity of amino acids. 香料原料

[性状] 強いペパーミント臭を持つ結晶 (MeOH)

[融点] Mp 42.5-43 °C

[沸点] Bp 216 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{20}$ -50 (c, 2 in CHCl₃)

[溶解性] 水にわずかに溶ける; 有機溶媒に溶ける

[Log P 計算値] Log P 3.23 (計算値)

[その他のデータ] Exists in four cryst. modifications; Mp given is the highest. Component of Larylgan

[傷害・毒性] 過敏症反応と接触性皮膚炎を引き起こす. 摂食により胃腸と中枢神経に影響がある. 50 % 致死量 (LD₅₀) (ラット, 経口) 3300 mg/kg

[化学物質毒性データ総覧 (RTECS) 登録番号] OT0700000

[販売元] Aldrich:M278-0; Fluka:63660; Sigma:M2258

-----文献-----

Katsuhara, J. et al., Bull. Chem. Soc. Jpn., 1966, 39, 617, (合成法, menthol)

Opdyke, D.L.J., Food Cosmet. Toxicol., 1976, 14, 471; 473, (レビュー, 毒性, menthol)

RTECS (化学物質毒性データ)

生体影響物質 : 変異原性物質. 天然物. 一時刺激物質.

健康障害に関するデータ

皮膚/眼の刺激に関するデータ

<<試験方法>> 標準ドライズ (Draize) 試験法.

曝露経路 : 眼への塗布.

被験動物 : げっ歯類-ウサギ.

投与量・期間: 1%

参考文献

Farmatsevtichnii Zhurnal (Kiev). (V/O Mezhdunarodnaya Kniga, 113095 Moscow, USSR) 17(3), 53, 1962

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: 3300 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

Nutrition Meetings Report Series. (Rome, Italy) No.?-57, 1948-77. Discontinued. 44A, 58, 1967

<<試験方法>> LD50 試験 (50%致死量試験).

曝露経路 : 腹腔内投与.

被験動物 : げっ歯類-ラット.

投与量・期間: 700 mg/kg

毒性影響 : [行動] 全身麻痺.
[行動] 睡眠時間の変化 (立ち直り反射の変化を含む).
[肺, 胸郭, または呼吸] 呼吸抑制.

参考文献

Journal of Pharmacy and Pharmacology. (Pharmaceutical Soc. of Great Britain, 1 Lambeth High St., London SE1 7JN, UK) 35, 110, 1983

<<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: 1 gm/kg

毒性影響 : 致死量以外に毒性影響に関する報告はない.

参考文献

FAO Nutrition Meetings Report Series. (Rome, Italy) 44A, 58, 1967

<<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：3400 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

Quarterly Journal of Pharmacy & Pharmacology. (London, UK) 5,233,1932

<<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：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。

参照文献

Farmatsevtichnii Zhurnal (Kiev). (V/O Mezhdunarodnaya Kniga, 113095 Moscow, USSR) 17(3),53,1962

<<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：5 gm/kg

毒性影響：致死量以外に毒性影響に関する報告はない。

参照文献

FAO Nutrition Meetings Report Series. (Rome, Italy) 44A,58,1967

<<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：ほ乳類-ネコ。

投与量・期間：800 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

FAONAU FAO Nutrition Meetings Report Series. (Rome, Italy) No.?-57, 1948-77. Discontinued.

[Vol.,頁,年(19-)]44A,58,1967

<<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：ほ乳類-ネコ。

投与量・期間：800 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

Nutrition Meetings Report Series. (Rome, Italy)44A,58,1967

<<試験方法>> 認知されている最低致死量に関する試験

曝露経路：静脈内投与。

被験動物：ほ乳類-ネコ。

投与量・期間：34 mg/kg

毒性影響：〔肺,胸郭,または呼吸〕呼吸抑制。

参照文献

Archives Internationales de Pharmacodynamie et de Therapie. (Heymans Institute of Pharmacology, De Pintelaan 185, B-9000 Ghent, Belgium) 63,43,1939

<<試験方法>> LD50 試験(50%致死量試験)。

曝露経路：皮膚への塗布

被験動物：げっ歯類-ウサギ。

投与量・期間：>5 gm/kg

毒性影響：致死量以外に毒性影響に関する報告はない。

参照文献

Food and Cosmetics Toxicology. (London, UK)14,471,1976

<<試験方法>> 認知されている最低致死量に関する試験

曝露経路：腹腔内投与。

被験動物：げっ歯類-ウサギ。

投与量・期間：2 gm/kg

毒性影響：致死量以外に毒性影響に関する報告はない。

参照文献

FAO Nutrition Meetings Report Series. (Rome, Italy)44A,58,1967

<<試験方法>> 認知されている最低致死量に関する試験

曝露経路：腹腔内投与。

被験動物 : げっ歯類-モルモット.
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

Archives Internationales de Pharmacodynamie et de Therapie. (Heymans Institute of Pharmacology, De Pintelaan 185, B-9000 Ghent, Belgium) 63,43,1939

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 : 10 mg/disc

参考文献

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) 34,267,1985

§ Menthofuran; (R)-form

[CAS No.]17957-94-7

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

[構造式]

[分子式] C₁₀H₁₄O

[分子量] 150.22

[基原] *Mentha piperita*, その他の *Mentha* spp. as minor but essential organoleptic. Also prepd. semisynthetically from p-Menth-4(8)-en-3-one

[用途] Used in peppermint oil formulations

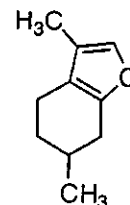
[性状] オイル

[沸点] Bp₁₈ 80 °C

[比旋光度]: [α]_D²⁵ +92.5

[濃度] d₁₅¹⁵, 0.965

[販売元] Fluka:63661



-----文献-----

Treibs, W., Ber., 1937, 70, 85, (絶対構造)

Eastman, R.H., J.A.C.S., 1950, 72, 5313, (分離)

§ 2-Methylbutanal; (S)-form

[CAS No.]1730-97-8

[化合物分類] 脂肪族化合物 (Branched aliphatic aldehydes and ketones)

[構造式]

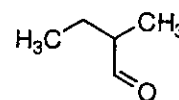
[分子式] C₅H₁₀O

[分子量] 86.133

[基原] チャ, コーヒー, ペパーミントオイル (*Mentha piperita*) に見られ, *Streptococcus lactis* と *Ceratocystis fagacearum* によって得られる

[沸点] Bp 90-92 °C

[比旋光度]: [α]_D²² +34.5 (neat)



-----文献-----

Opdyke, D.L.J., Food Chem. Toxicol., 1982, 20, 739, (レビュー, 毒性)

White, J.D. et al., J.A.C.S., 1995, 117, 1908, (合成法, IR, H-NMR, C13-NMR)

Shustov, G.V. et al., J.O.C., 1998, 63, 661-669, (S-form, CD)

Jauch, J. et al., Tetrahedron, 1999, 55, 9787-9792, (S-form, 合成法)

§ 5-(3,4-Methylenedioxyphenyl)-2,4-pentadienoic acid

[化学名・別名] 5-(1,3-Benzenedioxol-5-yl)-2,4-pentadienoic acid (CAS 名).

Piperic acid (旧 CAS 名). Piperinic acid. Piperonic acid

[CAS No.] 5285-18-7

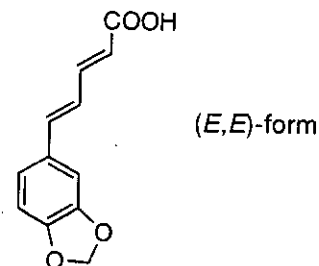
[化合物分類] 単環芳香族 (Miscellaneous aryl derivatives)

[構造式]

[分子式] C₁₂H₁₀O₄

[分子量] 218.209

[基原] 黒胡椒 (*Piper nigrum*), *Minthostachys verticillata*, *Mentha piperita*, その他



[化学名・別名] α -Methylcinnamaldehyde (旧 CAS 名), 2-Methyl-3-phenylacrolein. FEMA 2697

[CAS No.] 101-39-3

[化合物分類]

[構造式]

[分子式] $C_{10}H_{10}O$

[分子量] 146.188

[基原] ペパーミントオイル (*Mentha piperita*)

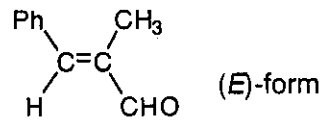
[用途] 香水及び香料原料

[性状] シナモン様の臭いとピリッとした臭いを持つ黄色のオイル

[傷害・毒性] 皮膚を刺激する. 50%致死量 (LD_{50}) (ラット, 経口) 2050 mg/kg

[化学物質毒性データ総覧 (RTECS) 登録番号] GD6600000

[販売元] Aldrich:11227-5



-----文献-----

Satsumabayashi, S. et al., Bull. Chem. Soc. Jpn., 1970, 43, 1586, (合成法, IR)

Sato, T. et al., J.A.C.S., 1977, 99, 5827, (合成法)

Lewis, R.J., Food Additives Handbook, Van Nostrand Reinhold International, New York, 1989, MIO000

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

RTECS (化学物質毒性データ)

生体影響物質 : 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 (Draize) 試験法.

曝露経路 : 皮膚への塗布

被験動物 : げっ歯類-モルモット.

投与量・期間 : 5%/2 週間投与

反応の症度 : 中等度.

参考文献

Acta Dermato-Venereologica. (Almqvist & Wiksell, POB 45150, S-10430 Stockholm, Sweden) 58,121,1978

急性毒性に関するデータ

<<試験方法>> LD_{50} 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 : 2050 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

Food and Cosmetics Toxicology. (London, UK) 13,853,1975

<<試験方法>> LD_{50} 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

Food and Cosmetics Toxicology. (London, UK) 13,853,1975

§ Mintlactone

[化学名・別名] 5,6,7,7a-Tetrahydro-3,6-dimethyl-2 (4H-isobenzofuranone (CAS 名).

p-Menth-4 (8)-en-9,3-olide

[CAS No.] 38049-04-6

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

[構造式]

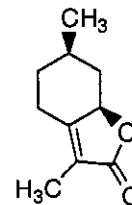
[分子式] $C_{10}H_{16}O_2$

[分子量] 166.219

[基原] *Mentha piperita* オイル

[性状] オイル

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{20} -51.8$ (c. 10 in EtOH)



-----文献-----

Takahashi, K. et al., Agric. Biol. Chem., 1980, 44, 1535, (分離)

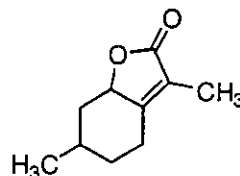
[分子式] $C_{10}H_{14}O_2$
[分子量] 166.219
[基原] *Mentha piperita* オイル
[性状] オイル
[比旋光度]: $[\alpha]_D^{20} -51.8$ (c, 10 in EtOH)

-----文献-----

Takahashi, K. et al., Agric. Biol. Chem., 1980, 44, 1535, (分離)
Ferraz, H.M.C. et al., J.O.C., 2000, 65, 2606-2607, (合成法)

§ Mintlactone; 3-Epimer

[化学名・別名] Isomintlactone
[CAS No.] 75684-66-1
[化合物分類] テルペノイド (p-Menthane monoterpenoids)
[構造式]
[分子式] $C_{10}H_{14}O_2$
[分子量] 166.219
[基原] *Mentha piperita*
[性状] 結晶
[融点] Mp 77-79 °C
[比旋光度]: $[\alpha]_D^{25} +76.9$ (c, 5 in EtOH)

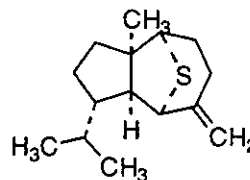


-----文献-----

Takahashi, K. et al., Agric. Biol. Chem., 1980, 44, 1535, (分離)
Ferraz, H.M.C. et al., J.O.C., 2000, 65, 2606-2607, (合成法)

§ Mintsulfide

[CAS No.] 72445-42-2
[化合物分類] テルペノイド (Isodaucane sesquiterpenoids)
[構造式]
[分子式] $C_{15}H_{24}S$
[分子量] 236.421
[基原] *Mentha piperita* オイル
[性状] 結晶 (MeOH)
[融点] Mp 64 °C
[比旋光度]: $[\alpha]_D^{25} -64.2$ (c, 10 in hexane)

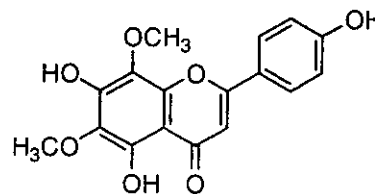


-----文献-----

Yoshida, T. et al., Chem. Comm., 1979, 512, (結晶構造)
Takahashi, K. et al., Agric. Biol. Chem., 1981, 45, 129, (分離, 合成法)
Bülow, N. et al., Phytochemistry, 2000, 55, 141-168, (H-NMR)

§ 4',5,6,7,8-Pentahydroxyflavone; 6,8-Di-Me ether

[化学名・別名] 4',5,7-Trihydroxy-6,8-dimethoxyflavone. Desmethoxysudachin. Demethoxysudachitin
[CAS No.] 4323-80-2
[化合物分類] フラボノイド (Flavones; 5 × O-置換基)
[構造式]
[分子式] $C_{17}H_{14}O_7$
[分子量] 330.393
[基原] 次の植物から分離: *Ambrosia deltoidea*, *Citrus sudachi*,
Hymenoxys scaposa, *Mentha piperita*
[性状] 結晶 (EtOH)
[融点] Mp 277-279 °C



-----文献-----

Lee, H.H. et al., J.C.S., 1964, 6255, (Desmethoxysudachin)
Thomas, M.B. et al., Phytochemistry, 1968, 7, 787, (Desmethoxysudachin)
Chhabra, S.C. et al., Indian J. Chem., Sect. B, 1971, 14, 651, (Desmethoxysudachin)
San Feliciano, A. et al., Phytochemistry, 1989, 28, 2717, (5,6,8-Trihydroxy-4',7-dimethoxyflavone)
Ward, R.S., Synthesis, 1992, 719, (レビュー, 合成法, 成書)

[CAS No.]16545-23-6

[化合物分類]フラボノイド (Flavones; 5 × O-置換基)

[構造式]

[分子式]C₁₈H₁₆O₇

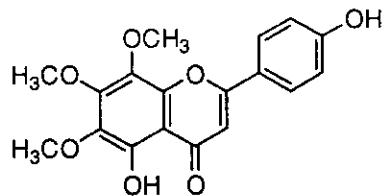
[分子量]344.32

[基原]次の植物から分離: *Ambrosia deltoidea*, *Baccharis* spp., *Citrus chi*, *Mentha piperita*, *Micromeria chamissonis*, *Sideritis* spp., *Thymus*

[性状]黄色の結晶 (MeOH)

[融点]Mp 227-230 °C

UV: [neutral] λ_{max} 282 (ε 18900); 296 (ε 18000); 336 (ε 24700) (MeOH) (Berdy) [base] λ_{max} 276 (ε 15100); 402 (ε 32500) (MeOH-NAOH) (Berdy)



suda
spp.

-----文献-----

Stout, G.H. et al., *Tetrahedron*, 1961, 14, 296, (Xanthomicrol)

Barberan, F.A.T. et al., *Phytochemistry*, 1985, 24, 1285, (Xanthomicrol)

§ 3',4',5,7-Tetrahydroxyflavanone; (S)-form, 7-O-[α hamnopyranosyl-(1 → 6)-β-D-glucopyranoside]

[化学名・別名]Eriocitrin. Eriodictioside

[CAS No.]13463-28-0

[化合物分類]フラボノイド (Flavones; 4 × O-置換基)

[構造式]

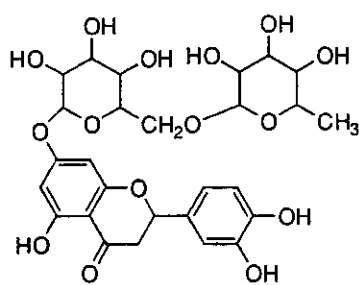
[分子式]C₂₇H₃₂O₁₅

[分子量]596.541

[基原]次の植物から分離: *Citrus* spp., *Mentha piperita*, *Myoporum tenuifolium*

[融点]Mp 167-172 °C

[比旋光度]:[α]_D²⁰ -62 (c, 1.4 in MeOH)



-L-R

-----文献-----

Horowitz, R.M. et al., *J.A.C.S.*, 1960, 82, 2803, (Eriocitrin)

Hoffman, B. et al., *Planta Med.*, 1984, 50, 361, (Eriocitrin)

§ 4',5,7-Trihydroxy-3',6,8-trimethoxyflavone

[化学名・別名]5,7-Dihydroxy-2-(4-hydroxy-3-methoxyphenyl)-6,8-dimethoxy-4H-1-benzopyran-4-one. Sudachitin.

Menthocubanone

[CAS No.]4281-28-1

[化合物分類]フラボノイド (Flavones; 6 × O-置換基)

[構造式]

[分子式]C₁₈H₁₆O₈

[分子量]360.32

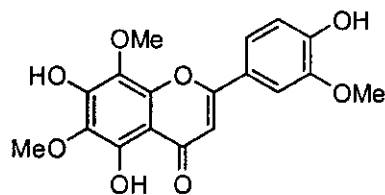
[基原]次の植物から分離: *Aegialophila pumila*, *Citrus* spp.,

rrezia sarothroides, *Helianthus strumosus*, *Artemisia klotzchiana*, *Mentha piperita*, *Trichophorum cespitosum*

[性状]黄色の針状結晶 (EtOAc/MeOH)

[融点]Mp 241-243 °C

[その他のデータ]Formerly thought to be Majoranin



Gutie

-----文献-----

Horie, T. et al., *Phytochemistry*, 1986, 25, 2621, (Sudachiins)

*****ヘビ (Snake) *****

§ § クサリヘビ科ハブ (*Trimeresurus gramineus* Shaw) の動物体。

§ Trigramin

[CAS No.]111019-84-2

[関連 CAS No.]117939-38-5, 127829-87-2, 127829-88-3, 127829-89-4

[化合物分類]アミノ酸とペプチド (Linear polypeptides)

[構造式]不明

[CAS No.]111019-84-2

[関連 CAS No.]117939-38-5, 127829-87-2, 127829-88-3, 127829-89-4

[化合物分類]アミノ酸とペプチド (Linear polypeptides)

[構造式]不明

[一般的性質]ペプチド. Struct. of a single chain of 72 amino acid residues with 6 intramolecular disulfide bridges

[基原]次の動物から分離: *Trimeresurus gramineus* の蛇毒

[用途]Specific inhibitor of fibrinogen binding to platelet receptors

-----文献-----

Huang, T.F. et al., J. Biol. Chem., 1987, 262, 16157, (分離)

Huang, T.F. et al., Biochemistry, 1989, 28, 661, (構造決定)

Dennis, M.S. et al., Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A., 1989, 87, 2471, (分離, 構造決定)

§ § クサリヘビ科マムシ (*Agkistrodon halys Pallas*) の動物体。

§ Bradykinin potentiator A (CAS 名)

[CAS No.]49642-16-2

[化合物分類]アミノ酸とペプチド (Oligopeptides (4-10 residues))

[構造式]H-5-Oxo-Pro-Gly-Arg-Pro-Pro-Gly-Pro-Pro-Ile-Pro-OH

[分子式]C₄₆H₇₁N₁₃O₁₂

[分子量]998.147

[基原]次の動物から分離: the venom of *Agkistrodon halys blomhofi*

-----文献-----

Kato, H. et al., Biochemistry, 1971, 10, 972, (分離, 構造決定)

Kato, H. et al., Experientia, 1973, 29, 574, (合成法, Mass, 構造決定)

§ Bradykinin potentiator B

[CAS No.]30892-86-5

[化合物分類]アミノ酸とペプチド (Linear polypeptides)

[構造式]5-OxoPro-Gly-Leu-Pro-Pro-Arg-Pro-Lys-Ile-Pro-Pro-OH

[分子式]C₅₆H₉₁N₁₃O₁₃

[分子量]1182.428

[基原]次の動物から分離: the venom of *Agkistrodon halys blomhofi*

[用途]Inhibitor of angiotensin-converting enzyme and bradykinin-destroying plasma kinases

[販売元]Sigma:B0507

-----文献-----

Kato, H. et al., Biochemistry, 1971, 10, 972, (分離, 構造決定)

Okada, K. et al., Chem. Pharm. Bull., 1973, 21, 2217, (Mass, 構造決定)

Kimura, T. et al., CA, 1975, 82, 98365, (合成法)

Kohmura, M. et al., Pept. Chem., 1988, 26, 7, (合成法, 性質) [00017446-1] V0

§ Bradykinin potentiator B; Bradykinin potentiator C

[化学名・別名]6-Glycine-8-L-prolinebradykinin potentiator B

[CAS No.]30953-20-9

[化合物分類]アミノ酸とペプチド (Cyclic oligo- and polypeptides)

[構造式]アミノ酸もしくはペプチド. 有効な構造式はない

[分子式]C₅₁H₇₇N₁₁O₁₃

[分子量]1052.235

[基原]*Agkistrodon halys blomhofi*

[用途]Similar biol. props. as B

[販売元]Sigma:B0632

-----文献-----

Kato, H. et al., Biochemistry, 1971, 10, 972, (分離, 構造決定)

Okada, K. et al., Chem. Pharm. Bull., 1973, 21, 2217, (Mass, 構造決定)

Kimura, T. et al., CA, 1975, 82, 98365, (合成法)

Kohmura, M. et al., Pept. Chem., 1988, 26, 7, (合成法, 性質)

[分子式] $C_{59}H_{83}N_{13}O_{16}$

[分子量] 1230.382

[基原] 次の動物から分離: the venom of *Agkistrodon halys blomhofi*

[用途] アンギオテンシン転換酵素阻害因子

[その他のデータ] Bradykinin potentiator D isol. but not characterised

-----文献-----

Kato, H. et al., *Biochemistry*, 1971, 10, 972, (分離)

Okada, K. et al., *Chem. Pharm. Bull.*, 1973, 21, 2217, (Mass, 構造決定)

§ Bradykinin-potentiating peptide BPP₁

[化学名・別名] 10 α -L-Proline bradykinin potentiator A (CAS 名)

[CAS No.] 83154-52-3

[化合物分類] アミノ酸とペプチド (Linear polypeptides)

[構造式] H-5-Oxo-Pro-Gly-Arg-Pro-Pro-Gly-Pro-Pro-Ile-Pro-Pro-OH

[分子式] $C_{51}H_{78}N_{14}O_{13}$

[分子量] 1095.263

[基原] 次の動物から分離: the venom of *Agkistrodon halys pallas*

-----文献-----

Chi, C.W. et al., *Agents Actions, Suppl.*, 1982, 9, 282, (分離, 構造決定)

Chi, C.W. et al., *Peptides (N.Y.)*, 1985, 6, 339, (構造決定, 性質)

§ Halysin

[CAS No.] 137544-79-7

[化合物分類] アミノ酸とペプチド (Linear polypeptides)

[構造式] 不明

[一般的性質] ペプチド. Struct. consists of a single chain of 71 amino acid residues including 12 cysteines. An RGD (Arg-Gly-Asp) sequence appears in the carboxy-terminal domain

[基原] 次の動物から分離: *Agkistrodon halys* (マムシ)の蛇毒

[用途] 強い血小板凝集阻害作用

-----文献-----

Huang, T.F. et al., *Biochem. Pharmacol.*, 1991, 42, 1209, (分離, 構造決定)

§ Pyroglutamylasparaginyltryptophan

[CAS No.] 7724-45-0

[化合物分類] アミノ酸とペプチド (Tripeptides)

[構造式] H-5-OxoPro-Asn-Trp-OH

[分子式] $C_{20}H_{23}N_5O_6$

[分子量] 429.432

[基原] the venom of the snakes *Agkistrodon halys blomhoffii* and *Trimeresurus* spp.

-----文献-----

Kato, H. et al., *Experientia*, 1966, 22, 49, (分離)

Maeda, I. et al., *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, 1993, 66, 1569, (分離, 合成法)

§ Pyroglutamylglutaminyltryptophan

[CAS No.] 7724-44-9

[化合物分類] アミノ酸とペプチド (Tripeptides)

[構造式] H-5-OxoPro-Gln-Trp-OH

[分子式] $C_{21}H_{25}N_5O_6$

[分子量] 443.458

[基原] the venom of the snakes *Agkistrodon halys blomhoffii* and *Trimeresurus* spp.

-----文献-----

Kato, H. et al., *Experientia*, 1966, 22, 49, (分離)

Maeda, I. et al., *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, 1993, 66, 1569, (分離, 合成法)

§ § コブラ科タイワンコブラ (*Naja naja atra* (Cantor))の動物体。

本調査研究では、成分に関する文献はなかった。

Maeda, I. et al., Bull. Chem. Soc. Jpn., 1993, 66, 1569, (分離, 合成法)

§ § コブラ科タイワンコブラ (*Naja naja atra* (Cantor)) の動物体。
本調査研究では、成分に関する文献はなかった。

§ § コブラ科インドコブラ (*Naja naja naja*) の動物体。
本調査研究では、成分に関する文献はなかった。

*****ペピーノ (Pepino) *****

§ § ナス科ペピーノ (*Solanum muricatum* Aiton) の果実。
本調査研究では、成分に関する文献はなかった。

*****ペプトン (Peptone) *****

§ § ペプトン (蛋白質のアルカリ, 酸または酵素による部分加水分解物である)。

*****ペリトリ (Pellitory) *****

§ § キク科 (*Anacyclus pyrethrum* (L.) Link) の根。

§ Anacycline; (E,E)-form

[CAS No.] 94413-18-0

[化合物分類] 脂肪族化合物 (Miscellaneous acetylenes), アルカロイド化合物 (Simple isobutylamide alkaloids)

[構造式]

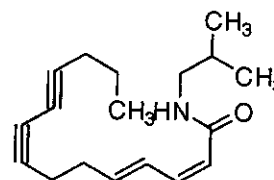
[分子式] $C_{18}H_{25}NO$

[分子量] 271.402

[基原] 次の植物の根から得られるアルカロイド: *Anacyclus pyrethrum* (キク科), *Achillea* spp.

[性状] 結晶 (Et:O/petrol)

[融点] Mp 122 °C



----- 文 献 -----

Crombie, L. et al., J.C.S., 1955, 999, (分離, UV, IR, 構造決定)

Jente, R. et al., Chem. Ber., 1972, 105, 1694, (分離, 合成法, IR, H-NMR, UV)

Kuropka, G. et al., Planta Med., 1987, 53, 440, (分離)

Greger, H. et al., Phytochemistry, 1989, 28, 2363, (分離)

§ Anacycline; (E,E)-form, N-Me

[化学名・別名] *N*-Methyl-*N*-(2-methylpropyl)-2,4-tetradecadiene-8,10-diynamide. *N*-Methylanacycline

[CAS No.] 38340-83-9

[化合物分類] 脂肪族化合物 (Miscellaneous acetylenes), アルカロイド化合物 (Simple isobutylamide alkaloids)

[構造式]

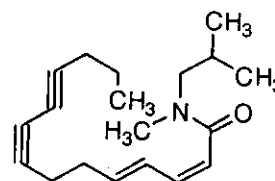
[分子式] $C_{19}H_{27}NO$

[分子量] 285.428

[基原] *Anacyclus pyrethrum* (キク科) の根

[性状] オイル

[その他のデータ] λ_{max} 251 nm



----- 文 献 -----

Crombie, L. et al., J.C.S., 1955, 999, (分離, UV, IR, 構造決定)

Bohlmann, F. et al., Chem. Ber., 1956, 89, 1276; 1970, 103, 2856; 1974, 107, 2120, (合成法, 生合成, UV, IR, Didehydroanacycline)

Jente, R. et al., Chem. Ber., 1972, 105, 1694, (分離, 合成法, IR, H-NMR, UV)

Kuropka, G. et al., Planta Med., 1987, 53, 440, (分離)

[化学名・別名] *N*-Methyl-*N*-(2-methylpropyl)-2,8-decadiene-4,6-diyamide

[CAS No.] 37064-13-4

[化合物分類] アルカロイド化合物 (Miscellaneous simple amide alkaloids)

[構造式]

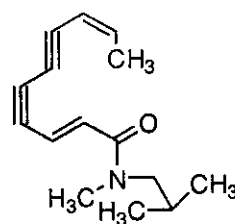
[分子式] $C_{15}H_{19}NO$

[分子量] 229.321

[基原] 次の植物から分離: *Anacyclus pyrethrum* (キク科) の根

[性状] オイル

[その他のデータ] λ_{max} 328, 306.5, 287 nm



-----文献-----

Bu'Lock, J.D. et al., J.C.S., 1957, 1607, (分離, 構造決定)

Bohlmann, F. et al., Chem. Ber., 1963, 96, 1485; 1964, 97, 1193; 1965, 98, 369; 1966, 99, 1642; 2096; 1967, 100, 611; 1982, 21, 167, (分離, H-NMR)

Jente, R. et al., Chem. Ber., 1972, 105, 1694, (分離, 構造決定, UV, Mass)

Bohlmann, F. et al., Phytochemistry, 1982, 21, 167, (分離)

Greger, H. et al., J. Nat. Prod., 1987, 50, 1100, (amides, 分離, 構造決定, IR, UV, Mass, H-NMR, C13-NMR)

§ 2,4-Decadienoic isobutylamide; (*E,E*)-form

[CAS No.] 18836-52-7

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

[構造式]

[分子式] $C_{14}H_{23}NO$

[分子量] 223.358

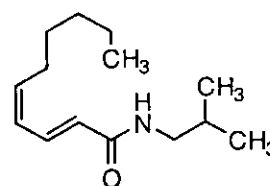
[基原] *Fagara xanthoxyloides*, *Piper sylvaticum*, *Piper nepalense*, その他数種の *Piper* spp., *Anacyclus pyrethrum*, *Achillea millefolium*, *Asiasarum heterotropoides* (ミカン科, コショウ科, キク科, ウマノスズクサ科)

[用途] Produces intense formication and local anaesthesia of the mucous membranes. 殺虫剤

[性状] 針状結晶 (petrol)

[融点] Mp 75 °C (69 °C). Mp 90-95 °C

[傷害・毒性] 皮膚を刺激



-----文献-----

Loder, J.W. et al., Aust. J. Chem., 1969, 22, 1531, (分離, UV, IR, Mass, 合成法)

Banerji, A. et al., Experientia, 1974, 30, 223, (分離, 構造決定)

Mahanta, P.K. et al., J. Pharm. Sci., 1974, 63, 1160, (分離, UV, IR)

Dasgupta, S. et al., Indian J. Chem., Sect. B, 1979, 17, 538, (分離, UV, IR, H-NMR, Mass)

Yasusa, I. et al., Chem. Pharm. Bull., 1981, 29, 564, (分離, UV, IR, H-NMR, C13-NMR, Mass)

§ 2-Decene-4,6-diyonic acid; (ξ)-form, 2-Methylpropylamide, *N*-Me

[化学名・別名] *N*-Methyl-*N*-(2-methylpropyl)-2-decene-4,6-diyamide

[CAS No.] 37064-12-3

[化合物分類] アルカロイド化合物 (Miscellaneous simple amide alkaloids)

[構造式]

[分子式] $C_{15}H_{21}NO$

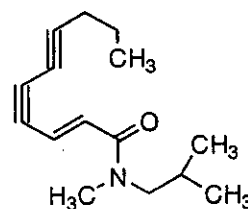
[分子量] 231.337

[基原] 次の植物の根から分離: *Anacyclus pyrethrum*

[性状] オイル

UV: [neutral] λ_{max} 252; 264; 281; 299 (溶媒に関する報告はない)

[その他のデータ] 立体化学は特定されていない



-----文献-----

Tronvold, G.M. et al., Acta Chem. Scand., 1953, 7, 1375, (分離)

Bohlmann, F. et al., Chem. Ber., 1969, 102, 1682; 1972, 105, 3587, (分離)

Jente, R. et al., Chem. Ber., 1972, 105, 1694, (分離, 構造決定, UV, Mass)

Davies, D.G. et al., J.C.S. Perkin 1, 1978, 1602, (分離, UV, Mass, H-NMR)

Bohlmann, F. et al., Phytochemistry, 1979, 18, 1011; 1367; 1519, (分離)

Carpita, A. et al., Gazz. Chim. Ital., 1987, 117, 481, (合成法)