

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)

§ 2-Decene-4,6,8-triynoic acid; (*E*)-form, 2-Methylpropylamide

[化学名・別名] Dehydromatricaric acid isobutylamide

[CAS No.] 37064-10-1

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

[構造式]

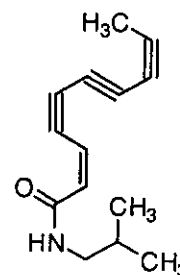
[分子式]  $C_{14}H_{19}NO$

[分子量] 213.279

[基原] 次の植物から分離: *Achillea spinulifolia*, *Achillea ptarmica*, *Achillea impatiens*,  
*Achillea sibirica*, *Anacyclus pyrethrum*, *Cladanthus arabicus*

[性状] 結晶 ( $CCl_4$ )

[融点] Mp 133-139 °C. Mp 144.5-145.5 °C



----- 文献 -----

Stauholt, K. et al., *Acta Chem. Scand.*, 1950, 4, 1567, (分離)

Sorensen, J.S. et al., *Acta Chem. Scand.*, 1954, 8, 26, (分離)

Gardner, J.N. et al., *J.C.S.*, 1960, 691, (分離)

Bohlmann, F. et al., *Chem. Ber.*, 1962, 95, 1742; 1973, 106, 1328, (分離, 構造決定, 合成法)

Hodge, P. et al., *J.C.S. (C)*, 1966, 1216, (成書)

Karrer, W. et al., *Konstitution und Vorkommen der Organischen Pflanzenstoffe*, 2nd edn., Birkhäuser Verlag, Basel, 1972, no. 770

Greger, H., *Phytochemistry*, 1978, 17, 86; 1982, 21, 1071, (分離, 構造決定)

Bohlmann, F. et al., *Phytochemistry*, 1979, 18, 1736; 1980, 19, 841; 2655, (分離)

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

Japan. Pat., 1991, 03 287532; CA, 116, 181120w, (分離)

Lu, T. et al., *Phytochemistry*, 1993, 32, 1483, (結晶構造)

§ 2,4-Dodecadienoic acid; (2*E*,4*E*)-form, 2-Methylpropylamide

[化学名・別名] 2,4-Dodecadienoic acid isobutylamide

[CAS No.] 24738-51-0

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

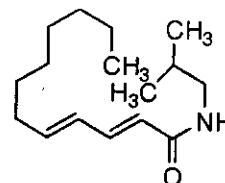
[構造式]

[分子式]  $C_{16}H_{29}NO$

[分子量] 251.411

[基原] 次の植物から得られるアルカロイド: *Anacyclus pyrethrum*, *Leucocyclus formosus* (キク科) (in admixture with homologues)

[融点] Mp 89-90 °C



----- 文献 -----

Holman, R.T. et al., *J. Am. Oil Chem. Soc.*, 1955, 32, 356, (分離)

Burden, R.S. et al., *J.C.S. (C)*, 1969, 2477, (分離, 合成法)

Greger, H. et al., *Phytochemistry*, 1981, 20, 2579, (分離, Mass, 構造決定)

Kiuchi, F. et al., *Chem. Pharm. Bull.*, 1988, 36, 2452, (pyrrolidide)

Abarbri, M. et al., *Synthesis*, 1996, 82, (合成法, IR, H-NMR, C13-NMR, Mass)

§ *N*-(4-Hydroxyphenethyl)-2,4-decadienamide; (*E,E*)-form

[CAS No.] 24738-52-1

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

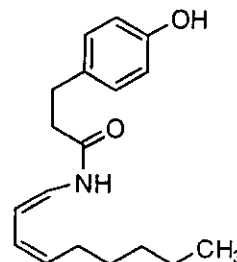
[構造式]

[分子式]  $C_{18}H_{29}NO_2$

[分子量] 287.401

[基原] *Anacyclus pyrethrum* (キク科) の根

[融点] Mp 132-133 °C



----- 文献 -----

Burden, R.S. et al., *J.C.S. (C)*, 1969, 2477, (分離, UV, IR, H-NMR, 構造決定, 合成法)

§ *N*-(4-Hydroxyphenethyl)-2,4-dodecadienamide; (*E,E*)-form

[CAS No.] 24738-53-2

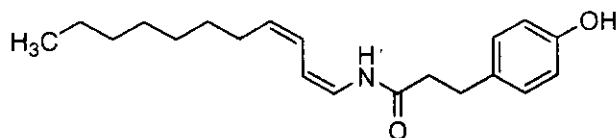
[構造式]

[分子式]  $C_{20}H_{29}NO_2$

[分子量] 315.455

[基原] *Anacyclus pyrethrum* (キク科) の根

[融点] Mp 140-141 °C



-----文献-----

Burden, R.S. et al., J.C.S. (C), 1969, 2477, (分離, 合成法)

§ *N*-(4-Hydroxyphenethyl)-2,4-tetradecadienamide; (*E,E*)-form

[CAS No.] 24738-54-3

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

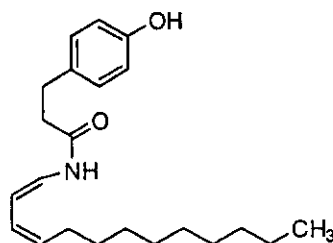
[構造式]

[分子式]  $C_{22}H_{33}NO_2$

[分子量] 343.508

[基原] *Anacyclus pyrethrum* (キク科) の根

[融点] Mp 141.5-142.5 °C



-----文献-----

Burden, R.S. et al., J.C.S. (C), 1969, 2477, (分離, 合成法)

§ 2,4-Tetradecadienoic acid; (2*E*,4*E*)-form, 2-Methylpropylamide

[化学名・別名] 2,4-Tetradecadienoic acid isobutylamide

[CAS No.] 13891-73-1

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

[構造式]

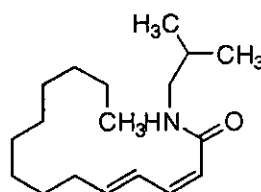
[分子式]  $C_{18}H_{33}NO$

[分子量] 279.465

[基原] 次の植物から得られるアルカロイド: *Chrysanthemum frutescens*, *Anacyclus pyrethrum*, *Leucocyclus formosus* (キク科) (in admixture with homologues)

[性状] 結晶 (petrol)

[融点] Mp 88 °C



-----文献-----

Bohlmann, F. et al., Chem. Ber., 1967, 100, 104; 1974, 107, 1038, (isobutylamide, piperidide)

Greger, H. et al., Phytochemistry, 1981, 20, 2579; 1984, 23, 1503-1505, (isobutylamide, pyrrolidide)

Tsuboi, S. et al., J.O.C., 1984, 49, 1204-1208, (合成法, amides)

§ 6-Tetradecene-8,10,12-triyn-3-ol; (-)-(*E*)-form

[化合物分類] 脂肪族化合物 (Acetylenic alcohols)

[構造式]

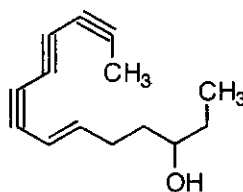
[分子式]  $C_{14}H_{16}O$

[分子量] 200.28

[基原] 次の植物から分離: *Anacyclus pyrethrum*, *Anthemis saguramica*

[性状] 結晶 (petrol)

[比旋光度]:  $[\alpha]_D^{22} -56$  (c, 0.25 in Et<sub>2</sub>O)



-----文献-----

Bohlmann, F. et al., Chem. Ber., 1965, 98, 1411; 1966, 99, 1642, (分離, UV, IR, H-NMR, ORD, 構造決定)

Wallinofer, B. et al., Phytochemistry, 1989, 28, 2687, (分離, IR, UV, H-NMR, CD, Mass)

Zdero, C. et al., Phytochemistry, 1990, 29, 189, (分離)

§ 2,4-Undecadiene-8,10-diynoic acid; (2*E*,4*E*)-form, 2-Phenylethylamide

[化学名・別名] *N*-(2-Phenylethyl)-2,4-undecadiene-8,10-diyamide

[CAS No.] 37064-11-2

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

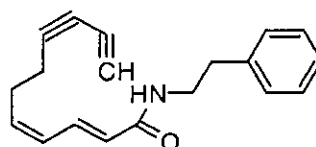
[構造式]

[分子式]  $C_{19}H_{19}NO$

[分子量] 277.365

[基原] 次の植物から分離: *Anacyclus pyrethrum* の根, *Achillea ptarmica*, *Achillea falcata*

[性状] 結晶 (Et<sub>2</sub>O/petrol)



[性状] 結晶 (Et<sub>2</sub>O/petrol)

[融点] Mp 117 °C

UV: [neutral] λ<sub>max</sub> 250 (溶媒に関する報告はない)

-----文献-----

Bohlmann, F. et al., Chem. Ber., 1966, 99, 3197; 1967, 100, 104; 3861; 1972, 105, 1694; 1973, 103, 1328; 1974, 107, 1038; 1975, 108, 739, (分離, 合成法, UV, IR, H-NMR)

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

Bohlmann, F. et al., Phytochemistry, 1980, 19, 1535, (分離)

Greger, H. et al., Phytochemistry, 1984, 23, 1503; 1989, 28, 2363, (分離)

Martin, R. et al., Phytochemistry, 1985, 24, 2295, (分離, Mass, H-NMR)

Kuropka, G. et al., Planta Med., 1986, 52, 244; 1987, 53, 440, (分離, UV, IR, H-NMR, Mass, 構造決定)

Hofer, O. et al., Tetrahedron, 1986, 42, 2707, (C13-NMR)

Bauer, R. et al., Phytochemistry, 1988, 27, 2339; 1989, 28, 505, (分離, H-NMR, Mass, IR, UV)

Binns, S.E. et al., Planta Med., 2000, 66, 241-242, (活性, 2-methylpropylamide)

§ § キク科 (*Anacyclus officinarum* Hayne) の根。

本調査研究では、成分に関する文献はなかった。

§ § キク科 (*Chrysanthemum partenium* (L.) Bernhardi) の根。

本調査研究では、成分に関する文献はなかった。

\*\*\*\*\*ベルガモット (Bergamot) \*\*\*\*\*

§ § ミカン科ベルガモット (*Citrus bergamia* Risso) の果実, 葉, 花など。

§ α-Bergamotene

[化学名・別名] Bergamotene

[CAS No.] 13474-59-4

[その他の CAS No.] 17699-05-7

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

[構造式]

[分子式] C<sub>15</sub>H<sub>24</sub>

[分子量] 204.355

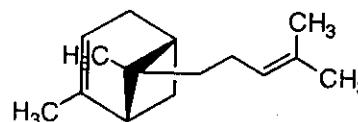
[基原] ニンジン (*Daucus carota*) のオイル, ベルガモット (*Citrus bergamia*), またライム (*Citrus aurantifolia*), シトロソ (*Citrus medica*), 綿の実 (*Gossypium hirsutum*) オイル

[性状] オイル

[比旋光度]: [α]<sub>D</sub><sup>20</sup> -44.1 (CHCl<sub>3</sub>)

[濃度] d<sub>4</sub><sup>20</sup> 0.855

[屈折率] n<sub>D</sub><sup>20</sup> 1.4904



-----文献-----

Kováts, E., Helv. Chim. Acta, 1963, 46, 2705, (H-NMR, Mass, 構造決定)

Larsen, S.D. et al., J.A.C.S., 1977, 99, 8015

§ Bergaptoi

[化学名・別名] 4-Hydroxy-7H-furo [3,2-g] [1] benzopyran-7-one (CAS 名). 4-Hydroxypsoralen

[CAS No.] 486-60-2

[化合物分類] ベンゾピラノイド (Furanocoumarins), ベンゾピラノイド (5,7-Dioxygenated coumarins)

[構造式]

[分子式] C<sub>11</sub>H<sub>6</sub>O<sub>4</sub>

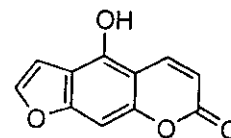
[分子量] 202.166

[基原] ベルガモットオイル (*Citrus bergamia*). またその他数種の *Citrus* spp. から

も得られる

[性状] 針状結晶 (EtOAc)

[融点] Mp 277-278 °C



-----文献-----

Baetcke, E. et al., Ber., 1912, 45, 3705, (構造決定)

Karrer, W. et al., Konstitution und Vorkommen der Organischen Pflanzenstoffe, 2nd edn., Birkhäuser Verlag, Basel, 1972, no. 1369, (生育, 誘導体)  
IARC Monog., 1986, 40, 327, (毒性, レビュー)  
McNeely, W. et al., Drugs, 1998, 56, 667-690, (レビュー, Me ether)

### § Bergaptol; Me ether

[化学名・別名] 4-Methoxy-7H-furo[3,2-g]benzopyran-7-one. Bergapten. Heraclin. Majudin

[CAS No.] 484-20-8

[化合物分類] 薬物: 抗炎症薬 (Antiinflammatory agents), ベンゾピラノイド (5,7-Dioxygenated coumarins), ベンゾピラノイド (Furanocoumarins), 薬物: 外用剤 (Dermatological agents), 薬物: 鎮痙薬 (Antispasmodics)

[構造式]

[分子式] C<sub>12</sub>H<sub>8</sub>O<sub>4</sub>

[分子量] 216.193

[基原] ベルガモットオイル (*Citrus bergamia*) の主成分, また *Heracleum nteum*, *Ammi majus* から得られる. ミカン科とセリ科に広く分布する

[用途] Antipsoriatic, 抗炎症, 抗ヒスタミン作用. 鎮痙作用を示す. Used in the treatment of vitiligo

[性状] 針状結晶 (EtOH)

[融点] Mp 188 °C

[溶解性] BERDY SOL: メタノール, エーテルに可溶; 水に難溶

[Log P 計算値] Log P 2.3 (計算値)

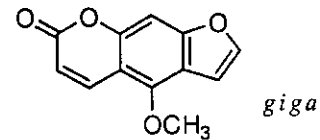
UV: [neutral] λ<sub>max</sub> 222 (ε 22600); 250 (ε 16500); 310 (ε 13600) (MeOH) (Berdy) [neutral] λ<sub>max</sub> 220 (ε 14100); 242 (ε 8000); 268 (ε 10700); 310 (ε 9100) (EtOH) (Berdy)

[その他のデータ] Pastinacin was impure Bergapten

[傷害・毒性] 皮膚の光過敏症. ヒトへの発ガンの可能性. 50%致死量 (LD<sub>50</sub>) (マウス, 経口) 8100 mg/kg

[化学物質毒性データ総覧 (RTECS) 登録番号] LV1300000

[販売元] Aldrich:27572-7; Fluka:65320; Sigma:M1648



-----文献-----

Socias, L. et al., Ber., 1934, 67, 59, (分離)

Karrer, W. et al., Konstitution und Vorkommen der Organischen Pflanzenstoffe, 2nd edn., Birkhäuser Verlag, Basel, 1972, no. 1369, (生育, 誘導体)

IARC Monog., 1986, 40, 327, (毒性, レビュー)

McNeely, W. et al., Drugs, 1998, 56, 667-690, (レビュー, Me ether)

MFN275

\*\*\*RTECS (化学物質毒性データ)\*\*\*

生体影響物質 : 催腫瘍物質. 変異原性物質. 生殖影響物質. 天然物.

\*\*\*健康障害に関するデータ\*\*\*

\*\*\*急性毒性に関するデータ\*\*\*

<<試験方法>> LD50 試験 (50%致死量試験).

曝露経路 : 経口投与.

被験動物 : げっ歯類-ラット.

投与量・期間 : >30 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

"Psoralens in Cosmetics and Dermatology, Proceedings of the International Symposium, Paris, 1981," Cahn, J., et al., eds., Paris, Pergamon Press France, 303,1981

<<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 : 8100 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

"Psoralens in Cosmetics and Dermatology, Proceedings of the International Symposium, Paris, 1981," Cahn, J., et al., eds., Paris, Pergamon Press France, 303,1981

<<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 : 9 gm/kg

被験動物 : げっ歯類-モルモット.  
投与量・期間 : 9 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

"Psoralens in Cosmetics and Dermatology, Proceedings of the International Symposium, Paris, 1981," Cahn, J., et al., eds., Paris, Pergamon Press France, 303,1981

\*\*\*その他の多回投与試験\*\*\*

<<試験方法>> 最小毒性量(TDLo).  
曝露経路 : 経口投与.  
被験動物 : げっ歯類-ラット.  
投与量・期間 : 204 gm/kg/52 週間間欠投与  
毒性影響 : [行動] 水分摂取.  
[内分泌] 甲状腺機能亢進の証拠.  
[栄養と総代謝] 体重減少または体重増加.

参考文献

"Psoralens in Cosmetics and Dermatology, Proceedings of the International Symposium, Paris, 1981," Cahn, J., et al., eds., Paris, Pergamon Press France, 303,1981

<<試験方法>> 最小毒性量(TDLo).  
曝露経路 : 経口投与.  
被験動物 : ほ乳類-イヌ.  
投与量・期間 : 800 mg/kg/8 日間間欠投与  
毒性影響 : [行動] 睡眠.  
[行動] 摂餌量(動物).  
[皮膚と付属器官] 刺激性皮膚炎(全身ばく露後).

参考文献

"Psoralens in Cosmetics and Dermatology, Proceedings of the International Symposium, Paris, 1981," Cahn, J., et al., eds., Paris, Pergamon Press France, 303,1981

<<試験方法>> 最小毒性量(TDLo).  
曝露経路 : 経口投与.  
被験動物 : ほ乳類-イヌ.  
投与量・期間 : 4368 mg/kg/13 週間間欠投与  
毒性影響 : [肝臓] その他の変化.  
[栄養と総代謝] 体重減少または体重増加.

参考文献

"Psoralens in Cosmetics and Dermatology, Proceedings of the International Symposium, Paris, 1981," Cahn, J., et al., eds., Paris, Pergamon Press France, 303,1981

\*\*\*生殖に関するデータ\*\*\*

<<試験方法>> 最小毒性量(TDLo).  
曝露経路 : 経口投与.  
被験動物 : げっ歯類-ラット.  
投与 : 5600 mg/kg  
雌雄投与期間 : 雌 6-15 日間(交配後)  
毒性影響 : [生殖] [受精能への影響] 着床前死亡率.  
[生殖] [胚または胎仔に対する影響] 胎仔毒性(死亡をのぞく.たとえば胎仔の発育阻害).

参考文献

"Psoralens in Cosmetics and Dermatology, Proceedings of the International Symposium, Paris, 1981," Cahn, J., et al., eds., Paris, Pergamon Press France, 303,1981

<<試験方法>> 最小毒性量(TDLo).  
曝露経路 : 経口投与.  
被験動物 : げっ歯類-ラット.  
投与 : 6720 mg/kg  
雌雄投与期間 : 雌 7-18 日間(交配後)  
毒性影響 : [生殖] [胚または胎仔に対する影響] 胎仔毒性(死亡をのぞく.たとえば胎仔の発育阻害).

参考文献

"Psoralens in Cosmetics and Dermatology, Proceedings of the International Symposium, Paris, 1981," Cahn,

《試験方法》 細胞遺伝学的分析.  
曝露経路 : 腹腔内投与.  
試験系 : げっ歯類-マウス.  
投与量・期間 : 900 mg/kg

参照文献

Environmental and Molecular Mutagenesis. (Alan R. Liss, Inc., 41 E. 11th St., New York, NY 10003) 25,302,1995

§ 3-Methyl-2-(2-pentenyl)-2-cyclopenten-1-one; (Z)-form

[CAS No.] 488-10-8

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

[構造式]

[分子式] C<sub>11</sub>H<sub>16</sub>O

[分子量] 164.247

[基原] オレンジとジャスミンの葉に存在. またペパーミントオイル, 緑茶, ベルガモット (*Citrus bergamia*) から得られる

[用途] 香水原料

[性状] オイル

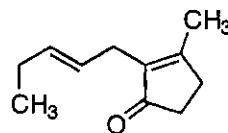
[沸点] Bp<sub>12</sub> 134-135 °C

[屈折率] n<sub>D</sub><sup>20</sup> 1.4979

[その他のデータ] 経口で低い毒性

[化学物質毒性データ総覧 (RTECS) 登録番号] GY7301000

[販売元] Aldrich:27744-4



-----文献-----

Aldrich Library of 13C and 1H FT NMR Spectra, 1992, 1, 689A, (NMR)

Ellison, R.A., Synthesis, 1973, 397, (合成法, レビュー)

Joulain, D., Parfums, Cosmet., Aromes, 1975, 33, (合成法, レビュー)

Opdyke, D.L.J., Food Cosmet. Toxicol., 1976, 14, 845, (レビュー, 毒性)

\*\*\*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 Cosmetics Toxicology. (London, UK) 17,845,1979

\*\*\*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 : 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) 17,845,1979

《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) 17,845,1979

§ 3-Methyl-2-pentyl-2-cyclopentenone (CAS 名)

[化学名・別名] Dihydrojasnone. Tetrahydropyrene. FEMA 3763

[CAS No.] 1128-08-1

§ 3-Methyl-2-pentyl-2-cyclopentenone (CAS 名)

[化学名・別名] Dihydrojasnone. Tetrahydropyrethron. FEMA 3763

[CAS No.] 1128-08-1

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

[構造式]

[分子式]  $C_{11}H_{18}O$

[分子量] 166.263

[基原] Identified in ベルガモットオレンジオイル (*Citrus bergamia*)

[用途] 香水原料. 香料原料

[性状] オイル

[沸点] Bp<sub>22</sub> 140-147 °C. Bp<sub>12</sub> 115-117 °C

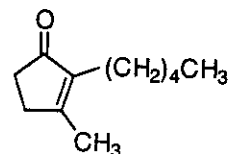
[濃度]  $d^{18}_4$  0.917

[屈折率]  $n^{20}_D$  1.4767

[傷害・毒性] Skin irritant. 50 %致死量 (LD<sub>50</sub>) (ラット, 経口) 2500 mg/kg

[化学物質毒性データ総覧 (RTECS) 登録番号] GY7302000

[販売元] Aldrich:W37630-2



-----文献-----

Opdyke, D.L.J., Food Cosmet. Toxicol., 1974, 12, 523, (レビュー, 毒性)

\*\*\*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

参照文献

Food and Cosmetics Toxicology. (London, UK) 12,523,1974

\*\*\*急性毒性に関するデータ\*\*\*

<<試験方法>> LD50 試験 (50%致死量試験).

曝露経路 : 経口投与.

被験動物 : げっ歯類-ラット.

投与量・期間 : 2500 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

Food and Cosmetics Toxicology. (London, UK) 12,523,1974

<<試験方法>> LD50 試験 (50%致死量試験).

曝露経路 : 皮膚への塗布

被験動物 : げっ歯類-ウサギ.

投与量・期間 : >5 gm/kg

毒性影響 : 致死量以外に毒性影響に関する報告はない.

参照文献

Food and Cosmetics Toxicology. (London, UK) 12,523,1974

§ 5-Octen-2-one

[CAS No.] 36359-70-3

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

[構造式]  $H_3CCH_2CH=CHCH_2CH_2COCH_3$

[分子式]  $C_8H_{14}O$

[分子量] 126.198

[基原] 次の植物から分離: *Citrus bergamia*, ブラックティ

-----文献-----

Sundt, E. et al., Helv. Chim. Acta, 1964, 47, 408, (分離, H-NMR, Mass)

McKenzie, T.C., Org. Prep. Proced. Int., 1987, 19, 435, (合成法)

§ Pentacosanoic acid

[CAS No.] 506-38-7

[分子量] 382.669

[基原] 次の植物基原から分離, 例えば, *Agave sisalana*, *Citrus bergamia*, *Shorea maranti*

[性状] 結晶 (Me<sub>2</sub>CO)

[融点] Mp 84-85 °C

[販売元] Rare Chemicals Library:S40969-3; Sigma:P8911

-----文献-----

Razafindrazaka, J. et al., Bull. Soc. Chim. Fr., 1963, 1633, (分離)

Sundt, E. et al., Helv. Chim. Acta, 1964, 47, 408, (分離)

### § Tricosanoic acid

[CAS No.] 2433-96-7

[化合物分類] 脂肪族化合物 (Saturated unbranched carboxylic acids and lactones)

[構造式] H<sub>3</sub>C(CH<sub>2</sub>)<sub>21</sub>COOH

[分子式] C<sub>23</sub>H<sub>46</sub>O<sub>2</sub>

[分子量] 354.615

[基原] いくつかの植物ワックスとオイル, 例えば, *Ulex europaeus*, *Shorea maranti*, *Pinus contorta*, *Citrus bergamia*

[性状] 結晶 (C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>)

[融点] Mp 79.1 °C

[販売元] Aldrich:21859-6; Fluka:91470; Sigma:T1508

-----文献-----

Cocker, W. et al., Perfum. Essent. Oil Res., 1963, 54, 235; 1964, 55, 442, (分離)

Rowe, J.W. et al., J.O.C., 1964, 29, 1554, (分離)

Marosi, L. et al., Annalen, 1973, 584, (結晶構造)

### § 3-(3,4,5-Trihydroxyphenyl)-2-propen-1-ol; (E)-form, 3',4',5'-Tri-Me ether, Ac

[CAS No.] 87200-84-8

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

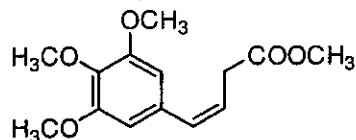
[構造式]

[分子式] C<sub>14</sub>H<sub>18</sub>O<sub>5</sub>

[分子量] 266.293

[基原] ベルガモット (*Citrus bergamia*) のオイル

[性状] オイル



-----文献-----

Ehret, C. et al., Phytochemistry, 1982, 21, 2984, (分離, 誘導体, Ac)

Mohammed, I. et al., J. Nat. Prod., 1985, 48, 328, (分離, H-NMR, C13-NMR)

San Feliciano, A. et al., J. Nat. Prod., 1986, 49, 677, (分離, 誘導体)

Ponpipom, M.M. et al., J. Med. Chem., 1987, 30, 136, (合成法)

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

Matsushita, H. et al., Phytochemistry, 1991, 30, 2025, (Icariside H<sub>1</sub>)

Comte, G. et al., Planta Med., 1996, 62, 88, (Juniperoside)

\*\*\*\*\*ベルガモットミント (Bergamot mint) \*\*\*\*\*

§ § シソ科ベルガモットハッカ (*Mentha citrata* Ehrhart) の全草。

### § 4-Isopropylidene-1-methyl-1-vinylcyclohexane

[化学名・別名] 1-Ethenyl-1-methyl-4-(1-methylethylidene) cyclohexane (CAS 名) .

nyl-*p*-menth-4(8)-ene

[CAS No.] 77820-38-3

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

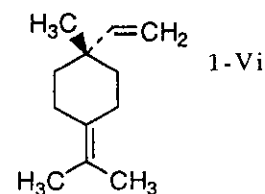
[構造式]

[分子式] C<sub>12</sub>H<sub>20</sub>

[分子量] 164.29

[基原] *Mentha citrata*

[性状] オイル



-----文献-----



[基原] *Mentha citrata*

[性状] オイル

-----文献-----

Singh, S.B. et al., *Phytochemistry*, 1980, 19, 2466

\*\*\*\*\*ペルーバルサム (Peru balsam) \*\*\*\*\*

§ § マメ科 (*Myroxylon pereirae* (Royle) Klotzsch (*Toluifera pereirae* (Royle) Baillon ; *M. balsamum* var. *pereirae* Royle Harms)) の樹脂。

本調査研究では、成分に関する文献はなかった。

\*\*\*\*\*ベルベナ (Verbena, Vervain) \*\*\*\*\*

§ § クマツツラ科ボウシュウボク (*Lippia citriodora* Kunth) の全草または花。

§ 3,7-Epoxycaryophyllane

[化学名・別名] Caryophyllane-2,6-oxide

[CAS No.] 60269-11-6

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

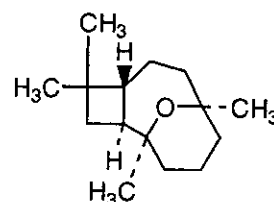
[構造式]

[分子式]  $C_{15}H_{26}O$

[分子量] 222.37

[基原] *Lippia citriodora*

[比旋光度]:  $[\alpha]_D -75.4$  (c, 1.1 in  $CHCl_3$ )



-----文献-----

Kaiser, R. et al., *Helv. Chim. Acta*, 1976, 59, 1803

§ 12-Oleanen-3-ol; 3  $\beta$ -form, Benzoyl

[CAS No.] 3607-93-0

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

[構造式]

[分子式]  $C_{37}H_{54}O_2$

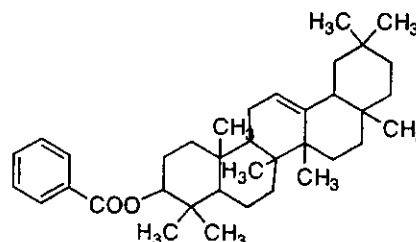
[分子量] 530.832

[基原] 次の植物から分離: *Lippia citriodora*, *Calotropis gigantea*

[性状] 結晶 (EtOAc)

[融点] Mp 234-235 °C

[比旋光度]:  $[\alpha]_D +98$



-----文献-----

Rao, C. et al., *Curr. Sci.*, 1979, 48, 534, (benzoate)

§ § クマツツラ科クマツツラ (*Verbena officinalis* L.) の全草または花。

§ Boschnaloside; 8-Epimer

[化学名・別名] Stanside. 5-Deoxystansioside

[CAS No.] 80734-66-3

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

[構造式]

[分子式]  $C_{16}H_{24}O_8$

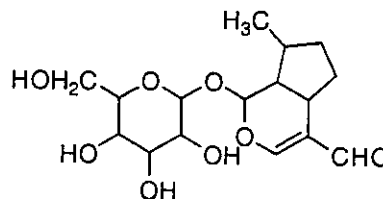
[分子量] 344.361

[基原] *Tecoma stans*, *Verbena officinalis*

[性状] 結晶 (EtOAc)

[融点] Mp 146-147 °C

[比旋光度]:  $[\alpha]_D -117$  (c, 2 in MeOH)



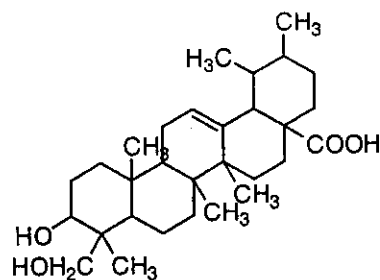
-----文献-----

Murai, F. et al., *Chem. Pharm. Bull.*, 1980, 28, 1730, (分離, 構造決定)

Bianco, A. et al., *Phytochemistry*, 1981, 20, 1871, (分離, H-NMR, C13-NMR, Stanside)

Damtoft, S. et al., *Phytochemistry*, 1981, 20, 2717, (分離, H-NMR, C13-NMR)

[CAS No.] 214850-81-4  
 [化合物分類] テルペノイド (Ursane triterpenoids)  
 [構造式]  
 [分子式] C<sub>30</sub>H<sub>48</sub>O<sub>4</sub>  
 [分子量] 472.707  
 [基原] *Verbena officinalis*  
 [性状] 結晶  
 [融点] Mp 242-244 °C  
 [比旋光度]:  $[\alpha]_D^{25} +44$  (c, 0.255 in MeOH)

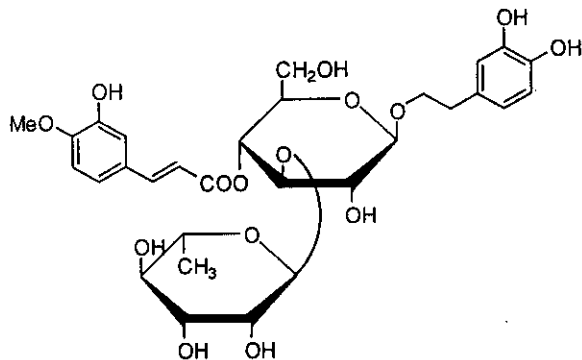


-----文献-----

Deepak, M. et al., *Phytochemistry*, 1998, 49, 269-271, (3  $\alpha$ -form)

### § Eukovoside

[CAS No.] 83475-36-9  
 [化合物分類] 炭水化物 (Disaccharides)  
 [構造式]



[分子式] C<sub>36</sub>H<sub>58</sub>O<sub>15</sub>  
 [分子量] 638.621  
 [基原] 次の植物から分離: *Euphrasia rostkoviana*,  
*ena officinalis*  
 [性状] 無定形の粉末  
 [比旋光度]:  $[\alpha]_D^{20} -93.6$  (c, 0.85 in MeOH)

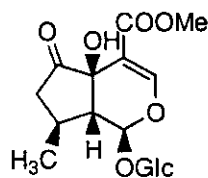
Verb

-----文献-----

Sticher, O. et al., *Helv. Chim. Acta*, 1982, 65, 1538, (分離, H-NMR, C13-NMR, Mass)  
 Bianco, A. et al., *J. Nat. Prod.*, 1984, 47, 901

### § Hastatoside

[CAS No.] 50816-24-5  
 [化合物分類] テルペノイド (Iridoid monoterpene)  
 [構造式]  
 [分子式] C<sub>17</sub>H<sub>24</sub>O<sub>11</sub>  
 [分子量] 404.37  
 [基原] *Verbena officinalis*, *Penstemon nitidus*  
 [比旋光度]:  $[\alpha]_D^{20} -320$  (H<sub>2</sub>O).  $[\alpha]_D -9.4$  (c, 0.77 in MeOH)  
 [その他のデータ] Samples not compared. Huge difference in reported opt. rotns.

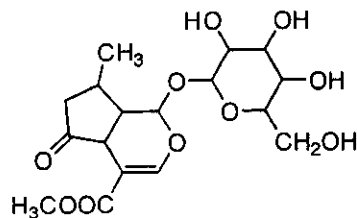


-----文献-----

Umehata, Y. et al., *Tet. Lett.*, 1975, 3195, (分離)  
 Zhang, C.-Z. et al., *Phytochemistry*, 1991, 30, 4156, (Dehydropenstemoside)  
 Teborg, D. et al., *Planta Med.*, 1991, 57, 184, (分離)

### § Verbenalol; O- $\beta$ -D-Glucopyranoside

[化学名・別名] Verbenalin. Verbenalol. Cornin  
 [CAS No.] 548-37-8  
 [化合物分類] テルペノイド (Iridoid monoterpene)  
 [構造式]  
 [分子式] C<sub>17</sub>H<sub>24</sub>O<sub>10</sub>  
 [分子量] 388.371



[基原] 次の植物から分離: *Verbena officinalis*, *Verbena stricta*, その他の *Verbena* spp., *Penstemon nitidus*, *Cornus florida*

[用途] 細胞成長抑制因子. 強い凝固作用.  
 [性状] 結晶  
 [融点] Mp 182.5 °C

[比旋光度]:  $[\alpha]_D -173$  (c, 3.98 in H<sub>2</sub>O)  
 [溶解性] BERDY SOL: メタノールに可溶; ヘキサンに難溶  
 UV: [neutral]  $\lambda_{max}$  240 (EtOH) (Berdy) [base]  $\lambda_{max}$  271 (NaOH) (Berdy)

[比旋光度]: $[\alpha]_D -173$  (c, 3.98 in H<sub>2</sub>O)  
 [溶解性]BERDY SOL: メタノールに可溶; ヘキサンに難溶  
 UV: [neutral]  $\lambda_{max}$  240 (EtOH) (Berdy) [base]  $\lambda_{max}$  271 (NaOH) (Berdy)

-----文献-----

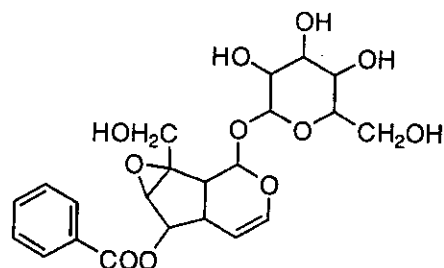
Büchi, G. et al., Tetrahedron, 1962, 18, 1049, (分離, 構造決定)  
 Teborg, D. et al., Planta Med., 1991, 57, 184, (10-Hydroxycornin)

\*\*\*\*\*ペロニカ (Veronica) \*\*\*\*\*

§ § ゴマノハグサ科ペロニカ (*Veronica officinalis* L.) の花または全草。

§ Catalpol; 6-O-Benzoyl

[化学名・別名] Veronicoside  
 [CAS No.] 50981-09-4  
 [化合物分類] テルペノイド (Iridoid monoterpenoids)  
 [構造式]  
 [分子式] C<sub>22</sub>H<sub>26</sub>O<sub>11</sub>  
 [分子量] 466.441  
 [基原] *Veronica officinalis*  
 [性状] 結晶 (MeOH)  
 [融点] Mp 168 °C



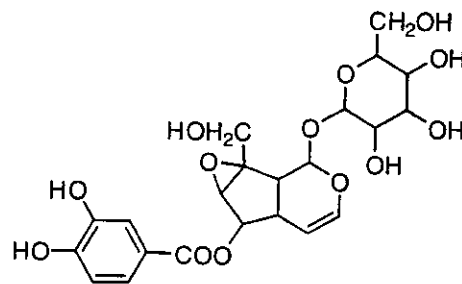
-----文献-----

Sticher, O. et al., Helv. Chim. Acta, 1979, 62, 530; 535, (Veronicoside, Verminoside, Minecoside)  
 El-Naggar, L.J. et al., J. Nat. Prod., 1980, 43, 649, (レビュー)

§ Catalpol; 6-(3,4-Dihydroxybenzoyl)

[化学名・別名] Verprosode  
 [CAS No.] 50932-20-2  
 [化合物分類] テルペノイド (Iridoid monoterpenoids)  
 [構造式]

[分子式] C<sub>22</sub>H<sub>26</sub>O<sub>13</sub>  
 [分子量] 498.44  
 [基原] *Veronica officinalis*  
 [性状] 無定型  
 [比旋光度]: $[\alpha]_D^{20} -164.8$  (c, 0.86 in MeOH)  
 [その他のデータ] May be 10-substd.

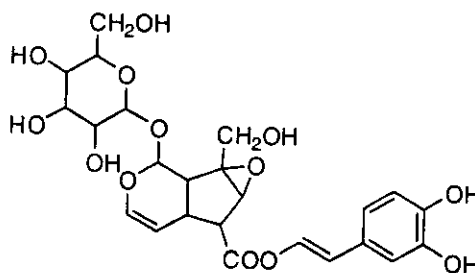


-----文献-----

Afifi-Yazar, F. uml U. et al., Helv. Chim. Acta, 1980, 63, 1905, (Verprosode)

§ Catalpol; 6-O-(3,4-Dihydroxycinnamoyl)

[化学名・別名] Verminoside  
 [CAS No.] 50932-19-9  
 [化合物分類] テルペノイド (Iridoid monoterpenoids)  
 [構造式]  
 [分子式] C<sub>24</sub>H<sub>28</sub>O<sub>13</sub>  
 [分子量] 524.477  
 [基原] *Veronica officinalis*  
 [性状] 無定型  
 [比旋光度]: $[\alpha]_D^{20} -180.8$  (c, 0.7 in MeOH)



-----文献-----

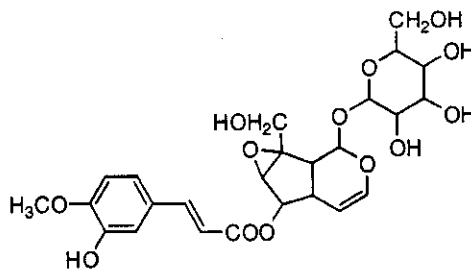
Sticher, O. et al., Helv. Chim. Acta, 1979, 62, 530; 535, (Veronicoside, Verminoside, Minecoside)

§ Catalpol; 6-O-(3-Hydroxy-4-methoxycinnamoyl)

[化学名・別名] Minecoside  
 [CAS No.] 51005-44-8

[構造式]

[分子式]  $C_{25}H_{30}O_{13}$   
[分子量] 538.504  
[基原] *Veronica officinalis*  
[性状] 結晶  
[融点] Mp 142 °C  
[比旋光度]:  $[\alpha]_D^{20} -182$  (c, 0.64 in MeOH)



-----文献-----

Sticher, O. et al., Helv. Chim. Acta, 1979, 62, 530; 535, (Veronicoside, Verminoside, Minecoside)

§ § ゴマノハグサ科 (*Veronica allioni*) の花または全草。  
本調査研究では、成分に関する文献はなかった。

§ § ゴマノハグサ科クガイソウ (*Veronicastrum sibiricum* (L.) Pennell var. *japonicum* (Nakai) Hara) の花または全草。  
本調査研究では、成分に関する文献はなかった。

\*\*\*\*\*ベンゾイン (Benzoin) \*\*\*\*\*

§ § エゴノキ科アンソクコウノキ (*Styrax benzoin* Dryander) の樹脂。

§ 3,6-Dihydroxy-12-oleanen-28-oic acid; (3 β, 6 β)-form

[化学名・別名] Sumaresinolic acid, Sumaresinol

[CAS No.] 559-64-8

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

[構造式]

[分子式]  $C_{30}H_{48}O_4$

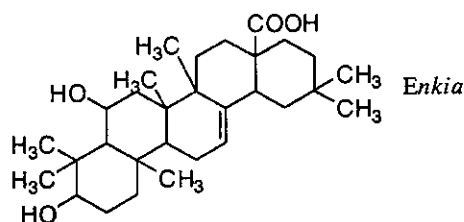
[分子量] 472.707

[基原] 次の植物から分離: Sumatra benzoin (*Styrax benzoin*), また *Enkianthus campanulatus*, *Orthopterygium huancuy*

[性状] 結晶 (EtOH 溶液)

[融点] Mp 298-299 °C

[比旋光度]:  $[\alpha]_D^{25} +102.2$  (CHCl<sub>3</sub>)



-----文献-----

Djerassi, C. et al., Helv. Chim. Acta, 1955, 38, 1304, (Sumaresinolic acid)

§ § エゴノキ科 (*Styrax paralleloneurum* Perkins) の樹脂。  
本調査研究では、成分に関する文献はなかった。

§ § エゴノキ科シャムベンゾイン (*Styrax tonkinensis* Pierre) の樹脂。  
本調査研究では、成分に関する文献はなかった。

\*\*\*\*\*ヘンナ (Henna) \*\*\*\*\*

§ § ミソハギ科ヘンナ (*Lawsonia inermis* L.) の花又は葉。

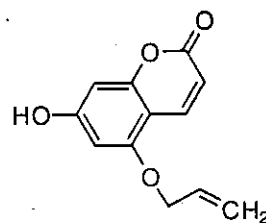
§ 5,7-Dihydroxy-2H-1-benzopyran-2-one; 5-O-(2-Propenyl)

[化学名・別名] 7-Hydroxy-5-(2-propenyloxy)-2H-1-benzopyran-2-one (CAS

5-Allyloxy-7-hydroxycoumarin, Lacoumarin

[CAS No.] 23053-60-3

[化合物分類] ベンゾピラノイド (5,7-Dioxygenated coumarins)



(名)

[化合物分類]ベンゾピラノイド (5,7-Dioxygenated coumarins)

[構造式]

[分子式]  $C_{13}H_{10}O_4$

[分子量] 218.209

[基原] *Lawsonia inermis*

[融点] Mp 162-164 °C

-----文献-----

Bhardwaj, D.K. et al., *Phytochemistry*, 1976, 15, 1789, (Lacoumarin)

§ 3,28-Dihydroxy-12,20-ursadien-23-oic acid; 3  $\beta$ -form

[化学名・別名] Lawnermis acid

[CAS No.] 191669-59-7

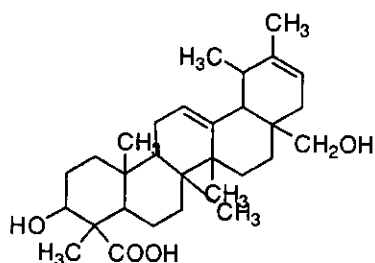
[化合物分類]テルペノイド (Ursane triterpenoids)

[構造式]

[分子式]  $C_{30}H_{46}O_4$

[分子量] 470.691

[基原] *Lawsonia inermis* の種子



-----文献-----

Handa, G. et al., *Indian J. Chem., Sect. B*, 1997, 36, 252-256, (分離, H-NMR, C13-NMR, Mass)

§ 3,28-Dihydroxy-12,20-ursadien-23-oic acid; 3  $\beta$ -form, Me ester

[CAS No.] 191608-73-8

[化合物分類]テルペノイド (Ursane triterpenoids)

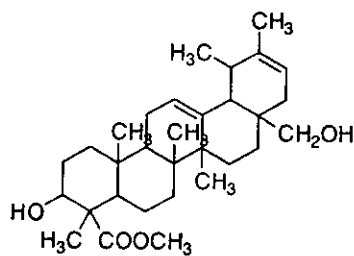
[構造式]

[分子式]  $C_{31}H_{48}O_4$

[分子量] 484.718

[基原] *Lawsonia inermis* の種子

[比旋光度]:  $[\alpha]_D^{26} +33$  (c, 0.6 in  $CHCl_3$ )



-----文献-----

Handa, G. et al., *Indian J. Chem., Sect. B*, 1997, 36, 252-256, (分離, H-NMR, C13-NMR, Mass)

§ 8-Hydroxy-2-methyl-1,4-naphthoquinone

[化学名・別名] 8-Hydroxy-2-methyl-1,4-naphthalenedione (CAS 名). Isoplumbagin

[CAS No.] 14777-17-4

[化合物分類]多環芳香族 (Naphthoquinones; 1 × O-置換基)

[構造式]

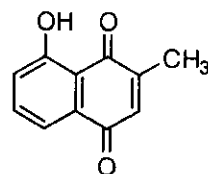
[分子式]  $C_{11}H_8O_3$

[分子量] 188.182

[基原] *Juglans regia*, *Juglans nigra*. また *Lawsonia inermis*

[性状] 橙色の結晶

[融点] Mp 67-68 °C



-----文献-----

Binder, R.G. et al., *Phytochemistry*, 1989, 28, 2799-2801, (分離, H-NMR, Mass)

Gupta, S. et al., *Phytochemistry*, 1993, 33, 723-724, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ 3,29-Lupanediol; (3  $\beta$ ,20S)-form

[化学名・別名] Wallichianol

[CAS No.] 65556-58-3

[化合物分類]テルペノイド (Lupane triterpenoids)

[構造式]

[分子式]  $C_{30}H_{52}O_2$

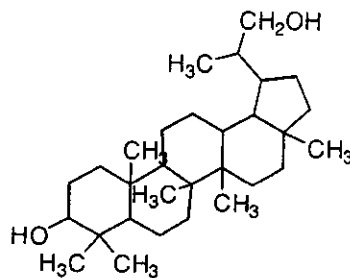
[分子量] 444.74

[基原] *Gymnosporia wallichiana*, *Lawsonia inermis*

[性状] 結晶 (EtOH)

[融点] Mp 266 °C

[比旋光度]:  $[\alpha]_D^{20} -5.79$  (c, 0.95 in  $CHCl_3$ )



-----文献-----

Corbett, R.E. et al., Aust. J. Chem., 1987, 40, 461, (分離, 成書)

§ 3-Methyl-1-nonacosanol

[CAS No.] 144751-00-8

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

[構造式]  $\text{H}_3\text{C}(\text{CH}_2)_{25}\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OH}$

[分子式]  $\text{C}_{30}\text{H}_{62}\text{O}$

[分子量] 438.819

[基原] *Lawsonia inermis* の茎皮

[融点] Mp 73-74 °C

-----文献-----

Gupta, S. et al., Indian J. Chem., Sect. B, 1992, 31, 705, (分離, IR, UV, H-NMR, Mass)

§ 1,2,4-Naphthalenetriol; 4-O-β-D-Glucopyranoside

[CAS No.] 26285-88-1

[化合物分類] 多環芳香族 (Naphthalenes)

[構造式]

[分子式]  $\text{C}_{16}\text{H}_{16}\text{O}_8$

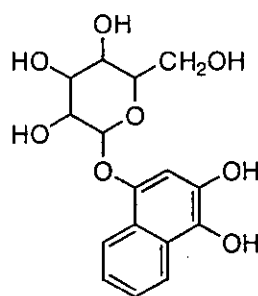
[分子量] 338.313

[基原] *Impatiens balsamina*, *Lawsonia inermis*

[性状] 不安定な無定型の粉末

[融点] Mp 83-85 °C (as hexaacetate)

[溶解性] BERDY SOL: 水に可溶; アセトン, ヘキサンに難溶



-----文献-----

Afzal, M. et al., Heterocycles, 1984, 22, 813, (4-glucoside)

§ 1,2,4-Naphthalenetriol; 1,4-Di-O-β-D-glucopyranoside

[化学名・別名] Lawsoniaside

[CAS No.] 116964-02-4

[化合物分類] 多環芳香族 (Naphthalenes)

[構造式]

[分子式]  $\text{C}_{22}\text{H}_{20}\text{O}_{13}$

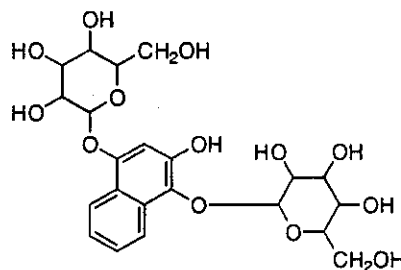
[分子量] 500.455

[基原] *Lawsonia inermis*

[性状] 針状結晶 + 1/2H<sub>2</sub>O (MeOH)

[融点] Mp 263-264 °C

[比旋光度]:  $[\alpha]_D^{25} -51.2$  (c, 0.49 in DMSO)



-----文献-----

Takeda, Y. et al., J. Nat. Prod., 1988, 51, 725, (Lawsoniaside)

§ Stigmast-5-ene-3,8-diol; (3β,8β,24R)-form

[化学名・別名] Lawsaritol A

[CAS No.] 158446-36-7

[化合物分類] ステロイド (Stigmastane steroids). (C<sub>29</sub>).

[構造式]

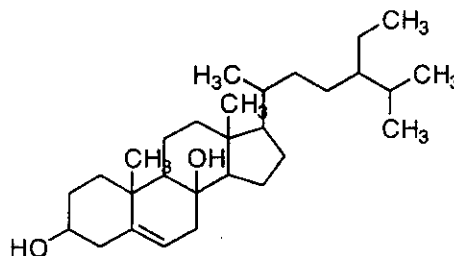
[分子式]  $\text{C}_{29}\text{H}_{50}\text{O}_2$

[分子量] 430.713

[基原] *Lawsonia inermis*

[性状] 結晶 (CHCl<sub>3</sub>/MeOH)

[融点] Mp 106-107 °C



-----文献-----

Gupta, S. et al., Nat. Prod. Lett., 1994, 4, 195, (分離, H-NMR, C13-NMR)

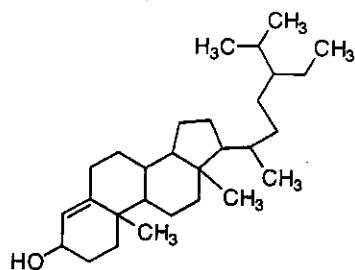
§ Stigmast-4-en-3-ol; (3β,24R)-form

[化学名・別名] β-Rosasterol. Lawsaritol

[CAS No.] 134876-41-8

[CAS No.] 134876-41-8  
[化合物分類] ステロイド (Stigmastane steroids). (C29).  
[構造式]

[分子式]  $C_{29}H_{50}O$   
[分子量] 414.713  
[基原] *Hibiscus rosasinensis*, *Lawsonia inermis*  
[性状] 結晶 (MeOH)  
[融点] Mp 124-125 °C

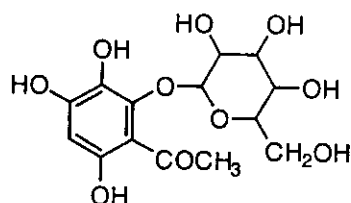


-----文献-----

Yu, D. et al., CA, 1991, 114, 244254z, (分離, H-NMR)  
Gupta, S. et al., Phytochemistry, 1992, 31, 2558, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ 2',3',4',6'-Tetrahydroxyacetophenone; 2'-O-β-D-Glucopyranoside

[化学名・別名] Lalioside  
[CAS No.] 116964-03-5  
[化合物分類] 単環芳香族 (Simple aryl ketones)  
[構造式]  
[分子式]  $C_{14}H_{18}O_{10}$   
[分子量] 346.29  
[基原] 次の植物から分離: *Lawsonia inermis*  
[用途] Plant shows antimicrobial and skin staining props.  
[性状] 無定型の粉末  
[比旋光度]:  $[\alpha]_D^{25} +62.5$  (c, 0.8 in MeOH)



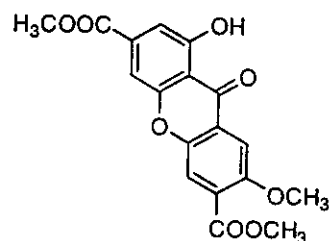
-----文献-----

Takeda, Y. et al., J. Nat. Prod., 1988, 51, 725, (Lalioside)

§ 1,3,6,7-Tetrahydroxyxanthone; 7-Me ether, 3,6-di-Ac

[化学名・別名] Laxanthone II  
[CAS No.] 64767-74-4  
[化合物分類] 単環芳香族 (Xanthenes; 4 × O-置換基)  
[構造式]

[分子式]  $C_{18}H_{14}O_8$   
[分子量] 358.304  
[基原] *Lawsonia inermis*  
[融点] Mp 180-181 °C

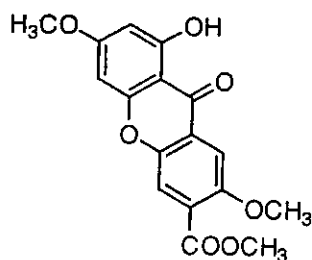


-----文献-----

Bhardwaj, D.K. et al., Phytochemistry, 1977, 16, 1616; 1978, 17, 1440, (Laxanthenes)

§ 1,3,6,7-Tetrahydroxyxanthone; 3,7-Di-Me ether, 6-Ac

[化学名・別名] Laxanthone III  
[CAS No.] 69618-06-0  
[化合物分類] 単環芳香族 (Xanthenes; 4 × O-置換基)  
[構造式]  
[分子式]  $C_{17}H_{14}O_7$   
[分子量] 330.293  
[基原] *Lawsonia inermis*  
[性状] 黄色の針状結晶 (EtOAc/petrol)  
[融点] Mp 210-211 °C



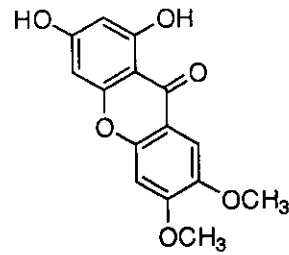
-----文献-----

Bhardwaj, D.K. et al., Phytochemistry, 1977, 16, 1616; 1978, 17, 1440, (Laxanthenes)

§ 1,3,6,7-Tetrahydroxyxanthone; 6,7-Di-Me ether

[化学名・別名] 1,3-Dihydroxy-6,7-dimethoxyxanthone. Laxanthone I

[化合物分類] 単環芳香族 (Xanthenes; 4 × O-置換基)  
[構造式]



[分子式]  $C_{15}H_{12}O_6$   
[分子量] 288.256  
[基原] *Lawsonia inermis*  
[融点] Mp 286-287 °C

-----文献-----

Bhardwaj, D.K. et al., *Phytochemistry*, 1977, 16, 1616; 1978, 17, 1440, (Laxanthenes)

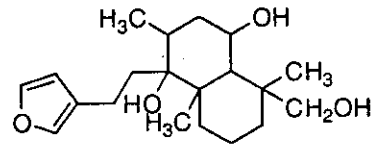
\*\*\*\*\*ボアドローズ (Rosewood) \*\*\*\*\*

§ § クスノキ科ボアドローズ (*Aniba rosaedora* Ducke) の材。  
本調査研究では、成分に関する文献はなかった。

\*\*\*\*\*ホアハウンド (Hoarhound) \*\*\*\*\*

§ § シソ科ニガハッカ (*Marrubium vulgare* L.) の茎, 葉。  
§ 15,16-Epoxy-13(16),14-labdadiene-6,9,19-triol; (6  $\beta$ , 9  $\alpha$ )-form  
[化学名・別名] Marrubenol, Marrubiol

[CAS No.] 560-58-7  
[化合物分類] テルペノイド (Labdane diterpenoids)  
[構造式]



[分子式]  $C_{20}H_{32}O_4$   
[分子量] 336.47  
[基原] *Marrubium vulgare*  
[性状] 結晶 (EtOH 溶液)  
[融点] Mp 138 °C  
[比旋光度]:  $[\alpha]_D^{25} +19.9$  (c, 1 in MeOH)

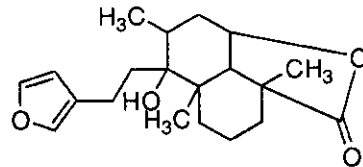
-----文献-----

Popa, D.P. et al., *Khim. Prir. Soedin.*, 1968, 4, 345; *Chem. Nat. Compd. (Engl. Transl.)*, 1968, 4, 291, (分離, Marrubiol)

§ 15,16-Epoxy-13(16),14-labdadiene-6,9,19-triol; (6  $\beta$ , 9  $\alpha$ )-form, 19-Carboxylic acid, 19  $\rightarrow$  6 lactone

[化学名・別名] 15,16-Epoxy-9  $\alpha$ -hydroxy-13(16),14-labdadien-19,6  $\beta$ -olide, Marrubiin, Marrubium bitter  
[CAS No.] 465-92-9

[化合物分類] テルペノイド (Labdane diterpenoids)  
[構造式]



[分子式]  $C_{20}H_{28}O_4$   
[分子量] 332.439  
[基原] 次の植物から分離: *Marrubium vulgare*, *Leonotis leonurus*  
[性状] 結晶 (EtOH)  
[融点] Mp 160 °C  
[比旋光度]:  $[\alpha]_D^{25} +33.3$  (c, 1 in  $CHCl_3$ )

-----文献-----

Reed, R.I. et al., *J.C.S.*, 1963, 5933, (Mass)

Popa, D.P. et al., *Khim. Prir. Soedin.*, 1968, 4, 345; *Chem. Nat. Compd. (Engl. Transl.)*, 1968, 4, 291, (分離, Marrubiol)

§ 4-Hydroxy-1,1-dimethylpyrrolidinium-2-carboxylate; (2S,4S)-form

[化学名・別名] Betonicine, Achillein

[CAS No.] 515-25-3

[化合物分類] アミノ酸とペプチド (Non-protein  $\alpha$ -aminoacids), アルカロイド化合物 (Simple pyrrolidine alkaloids)

[構造式]



[構造式]

[分子式]  $C_7H_{13}NO_3$

[分子量] 159.185

[基原] *Achillea millefolium*, *Betonica officinalis*, *Stachys sylvatica*, *Marrubium vulgare* (horehound) (キク科, シソ科)

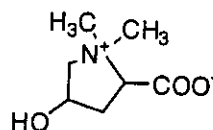
[用途] 強い抗炎症活性

[性状] プリズム結晶 (EtOH)

[融点] Mp 252 °C で分解 (244-245 °C)

[比旋光度]:  $[\alpha]_D^{25} -36.6$  (H<sub>2</sub>O)

[販売元] Sigma: B6138



----- 文献 -----

Schulze, E. et al., Hoppe Seyler's Z. Physiol. Chem., 1911, 76, 258; 1912, 79, 236, (分離)

Goodson, J.A. et al., J.C.S., 1919, 115, 923, (分離)

Paudler, W.W. et al., Chem. Ind. (London), 1963, 1693, (分離, 構造決定)

Mandava, N. et al., Annalen, 1970, 741, 167, (H-NMR, 構造)

Jones, G.P. et al., Acta Cryst. C, 1988, 44, 2208, (結晶構造)

§ 13-Labdene-8,15-diol; (5 $\beta$ ,8 $\alpha$ ,13E)-form

[化学名・別名] Vulgarol †

[CAS No.] 11056-03-4

[化合物分類] テルペノイド (Labdane diterpenoids)

[構造式]

[分子式]  $C_{20}H_{36}O_2$

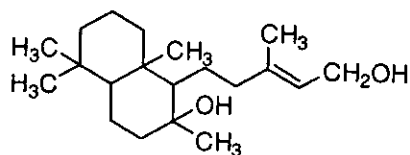
[分子量] 308.503

[基原] *Marrubium vulgare*

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

[融点] Mp 152-153 °C

[比旋光度]:  $[\alpha]_D^{20} 0$



----- 文献 -----

Popa, D.P. et al., Khim. Prir. Soedin., 1975, 11, 772; Chem. Nat. Compd. (Engl. Transl.), 1975, 11, 752, (Vulgarol)

§ Premarrubiin; (13R)-form

[CAS No.] 72059-02-0

[化合物分類] テルペノイド (Labdane diterpenoids)

[構造式]

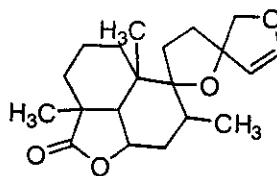
[分子式]  $C_{20}H_{36}O_4$

[分子量] 332.439

[基原] *Marrubium vulgare*

[性状] オイル

[比旋光度]:  $[\alpha]_D +29$  (c, 1 in CHCl<sub>3</sub>)



----- 文献 -----

Laonigro, G. et al., Gazz. Chim. Ital., 1979, 109, 145, (Premarrubiin)

Savona, G. et al., Phytochemistry, 1984, 23, 191, (Preperegrinine)

Habtemariam, S. et al., J. Nat. Prod., 1994, 57, 1570, (Epoxyabdanediolide)

§ Premarrubiin; (13S)-form

[CAS No.] 24703-43-3

[化合物分類] テルペノイド (Labdane diterpenoids)

[構造式]

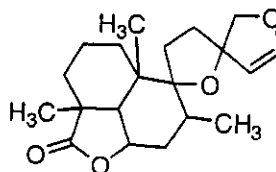
[分子式]  $C_{20}H_{36}O_4$

[分子量] 332.439

[基原] *Marrubium vulgare*

[性状] オイル

[比旋光度]:  $[\alpha]_D -41$  (c, 0.6 in EtOH)



----- 文献 -----

Laonigro, G. et al., Gazz. Chim. Ital., 1979, 109, 145, (Premarrubiin)

§ 4',5,7-Trihydroxyflavone; 7-O-(2-Hydroxypropanoyl)

[化学名・別名] Apigenin 7-lactate

[CAS No.] 126462-89-3

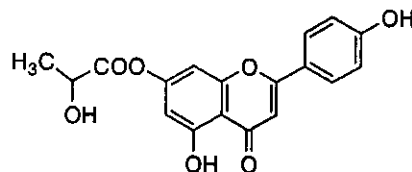
[化合物分類] フラボノイド (Flavones; 3 × O-置換基)

[構造式]

[分子式] C<sub>15</sub>H<sub>14</sub>O<sub>7</sub>

[分子量] 342.304

[基原] 次の植物から分離: *Marrubium vulgare*



-----文献-----

Nawwar, M.A.M. et al., *Phytochemistry*, 1989, 28, 3201, (7-lactates)

§ 4',5,7-Trihydroxyflavone; 7-O-(2-β-D-Glucopyranosyloxypropanoyl)

[化学名・別名] Apigenin 7-(2-glucosyllactate)

[CAS No.] 126394-94-3

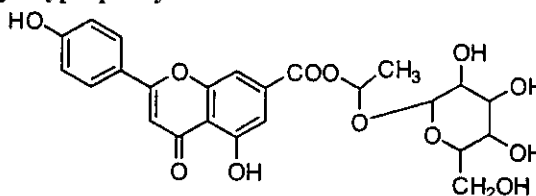
[化合物分類] フラボノイド (Flavones; 3 × O-置換基)

[構造式]

[分子式] C<sub>24</sub>H<sub>24</sub>O<sub>12</sub>

[分子量] 504.446

[基原] 次の植物から分離: *Marrubium vulgare*



-----文献-----

Karrer, W. et al., *Konstitution und Vorkommen der Organischen Pflanzenstoffe*, 2nd edn., Birkhäuser Verlag, Basel, 1972, 1449, (生育)

Besson, E. et al., *Phytochemistry*, 1984, 23, 159, (分離, 成書)

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

Nawwar, M.A.M. et al., *Phytochemistry*, 1989, 28, 3201, (7-lactates)

§ 4',5,7-Trihydroxyflavone; 7-O-(2-β-D-Glucuronopyranosyloxypropanoyl)

[化学名・別名] Apigenin 7-(2-glucuronosyllactate)

[CAS No.] 126394-92-1

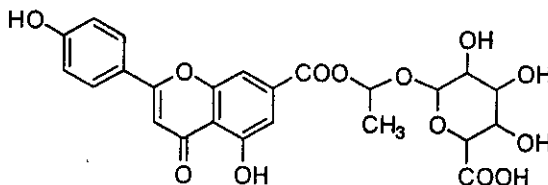
[化合物分類] フラボノイド (Flavones; 3 × O-置換基)

[構造式]

[分子式] C<sub>24</sub>H<sub>22</sub>O<sub>13</sub>

[分子量] 518.43

[基原] 次の植物から分離: *Marrubium vulgare*



-----文献-----

Chopin, J. et al., *C. R. Hebd. Seances Acad. Sci.*, 1969, 268, 980, (分離)

Wagner, H. et al., *Chem. Ber.*, 1969, 102, 2083; 1971, 104, 1704; 2681, (分離, 合成法, 誘導體, Rhoifolin)

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

Nawwar, M.A.M. et al., *Phytochemistry*, 1989, 28, 3201, (7-lactates)

\*\*\*\*\*ホウ (Haw) \*\*\*\*\*

§ § スイカズラ科ホウ (*Viburnum prunifolium* L.) の葉, または樹皮。

§ Amentoflavone

[化学名・別名] 4',4'',5,5'',7,7''-Hexahydroxy-3'',8-biflavone (旧 CAS 名). 4',5,7-Trihydroxyflavone (3'→ 8)-4',5,7-trihydroxyflavone. 3',8-Bi[4',5,7-trihydroxyflavone]

[CAS No.] 1617-53-4

[化合物分類] フラボノイド (Biflavonoids and polyflavonoids),

薬物: ブラジキシン受容体拮抗薬 (Bradykinin receptor antagonists)

[構造式]

[分子式] C<sub>30</sub>H<sub>18</sub>O<sub>10</sub>

[分子量] 538.466

[一般的性質] Numbering of the rings in the names of derivs. does not always follow the scheme shown here

[基原] *Metasequoia glyptostroboides* の葉, *Cryptomeria japonica*, *Amentotaxus formosana*, *Viburnum prunifolium*, *Psilotum triquetrum*, *Callitris*, *Cupressus*, *Juniperus* spp., その他多く

[用途] プラジキン拮抗薬

[性状] 黄色の結晶 (EtOH)

[融点] Mp 300 °C

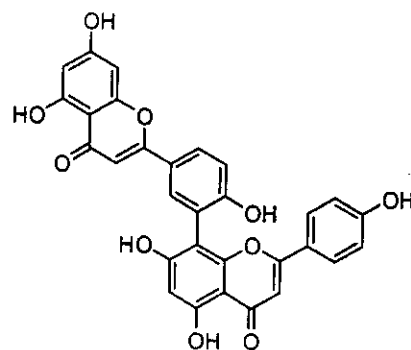
[比旋光度]:  $[\alpha]_D^{40} +9$

[溶解性] BERDY SOL: メタノール, クロロホルムに可溶; 水に難溶

[Log P 計算値] Log P 1.7 (計算値)

UV: [neutral]  $\lambda_{max}$  270 ( $\epsilon$  41600); 338 ( $\epsilon$  38900) (EtOH) (Berdy)

[その他のデータ] Opt. rotn. of derivs. is variable owing to atropisomerism



----- 文献 -----

Markham, K.R. et al., *Phytochemistry*, 1984, 23, 2053; 1987, 26, 3335; 1990, 29, 501, (glycosides, C13-NMR, 2,3-Dihydro-7-methylamentoflavone)

\*\*\*\*\*ホウキタケ (Houkitake) \*\*\*\*\*

§ § ホウキタケ科ホウキタケ (*Ramaria botrytis* (Pers.) Ricken) の子実体。

本調査研究では、成分に関する文献はなかった。

\*\*\*\*\*ホウショウ (Houshou) \*\*\*\*\*

§ § クスノキ科ホウショウ (*Cinnamomum camphora* Siebold var. *nominale* Hayata subvar. *hosho* Hatusima (*Cinnamomum camphora* Siebold var. *glaucescens* Alex. Braun ; *C. camphora* Siebold var. *linaloolifera* Fujita)) の枝, 葉。

本調査研究では、成分に関する文献はなかった。

\*\*\*\*\*ボウフウ (Saposhnikovia root) \*\*\*\*\*

§ § セリ科ボウフウ (*Ledebouriella seseloides* Wolff) の根及び根茎。

§ Hamaudol; (S)-form

[CAS No.] 735-46-6

[化合物分類] ベンゾピラノイド (Pyrano-1-benzopyrans)

[構造式]

[分子式]  $C_{15}H_{16}O_5$

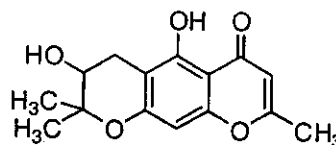
[分子量] 276.288

[基原] *Ledebouriella seseloides*, *Angelica japonica*, *Xanthogalum sachokianum*

[性状] 針状結晶 (EtOH)

[融点] Mp 202-202.5 °C

[比旋光度]:  $[\alpha]_D^{25} -22$  (c, 0.46 in  $CHCl_3$ )



----- 文献 -----

Sokolova, A.I. et al., *Khim. Prir. Soedin.*, 1970, 6, 468; *Chem. Nat. Compd. (Engl. Transl.)*, 1970, 6, 480, (分離)

Sasaki, H. et al., *Chem. Pharm. Bull.*, 1982, 30, 3555, (成書)

Huang, P. et al., *Zhongcaoyao*, 1997, 28, 579-581; *CA*, 128, 241785b, (分離, R-form)

Fujioka, T. et al., *Chem. Pharm. Bull.*, 1999, 47, 96-100, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ Hamaudol; (S)-form, 3-O- $\beta$ -D-Glucopyranoside

[CAS No.] 80681-44-3

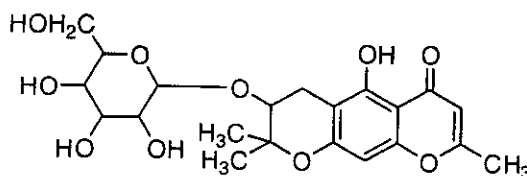
[化合物分類] ベンゾピラノイド (Pyrano-1-benzopyrans)

[構造式]

[分子式]  $C_{21}H_{26}O_{10}$

[分子量] 438.43

[基原] *Ledebouriella seseloides*



[比旋光度]:  $[\alpha]_D^{26} -48.5$  (c, 0.68 in CHCl<sub>3</sub>)

-----文献-----

Sokolova, A.I. et al., Khim. Prir. Soedin., 1970, 6, 468; Chem. Nat. Compd. (Engl. Transl.), 1970, 6, 480, (分離)  
Sasaki, H. et al., Chem. Pharm. Bull., 1982, 30, 3555, (成書)  
Huang, P. et al., Zhongcaoyao, 1997, 28, 579-581; CA, 128, 241785b, (分離, R-form)  
Fujioka, T. et al., Chem. Pharm. Bull., 1999, 47, 96-100, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ Hamaudol; (S)-form, 3-Ac

[CAS No.] 30358-88-4

[化合物分類] ベンゾピラノイド (Pyrano-1-benzopyrans)

[構造式]

[分子式] C<sub>17</sub>H<sub>18</sub>O<sub>6</sub>

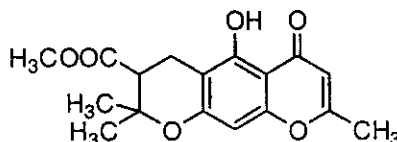
[分子量] 318.326

[基原] *Ledebouriella seseloides*, *Xanthogalum sachokianum*

[性状] 針状結晶 (EtOH)

[融点] Mp 129.5-130 °C

[比旋光度]:  $[\alpha]_D^{25} -28.4$  (c, 0.88 in CHCl<sub>3</sub>)



-----文献-----

Sokolova, A.I. et al., Khim. Prir. Soedin., 1970, 6, 468; Chem. Nat. Compd. (Engl. Transl.), 1970, 6, 480, (分離)  
Sasaki, H. et al., Chem. Pharm. Bull., 1982, 30, 3555, (成書)  
Huang, P. et al., Zhongcaoyao, 1997, 28, 579-581; CA, 128, 241785b, (分離, R-form)  
Fujioka, T. et al., Chem. Pharm. Bull., 1999, 47, 96-100, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ Hamaudol; (S)-form, 3-Angeloyl

[CAS No.] 84272-84-4

[化合物分類] ベンゾピラノイド (Pyrano-1-benzopyrans)

[構造式]

[分子式] C<sub>20</sub>H<sub>22</sub>O<sub>6</sub>

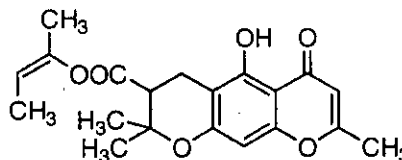
[分子量] 358.39

[基原] *Ledebouriella seseloides*

[性状] 針状結晶 (EtOH)

[融点] Mp 128-128.5 °C

[比旋光度]:  $[\alpha]_D^{25} -56.8$  (c, 2.19 in CHCl<sub>3</sub>)



-----文献-----

Sokolova, A.I. et al., Khim. Prir. Soedin., 1970, 6, 468; Chem. Nat. Compd. (Engl. Transl.), 1970, 6, 480, (分離)  
Sasaki, H. et al., Chem. Pharm. Bull., 1982, 30, 3555, (成書)  
Huang, P. et al., Zhongcaoyao, 1997, 28, 579-581; CA, 128, 241785b, (分離, R-form)  
Fujioka, T. et al., Chem. Pharm. Bull., 1999, 47, 96-100, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ Hamaudol; (S)-form, 13-Hydroxy, 3-angeloyl

[化学名・別名] *Ledebouriellol*

[CAS No.] 84272-83-3

[化合物分類] ベンゾピラノイド (Pyrano-1-benzopyrans)

[構造式]

[分子式] C<sub>20</sub>H<sub>22</sub>O<sub>7</sub>

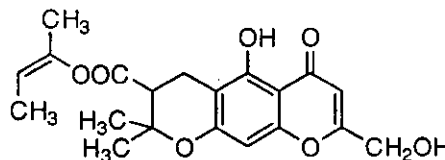
[分子量] 374.39

[基原] *Ledebouriella seseloides*

[性状] 針状結晶 (Me<sub>2</sub>CO/hexane)

[融点] Mp 97-99 °C

[比旋光度]:  $[\alpha]_D^{25} -41.8$  (c, 0.77 in CHCl<sub>3</sub>)



-----文献-----

Okuyama, E. et al., Chem. Pharm. Bull., 2001, 49, 154-160, (分離, Divaricatol, *Ledebouriellol*, 3-glucoside)