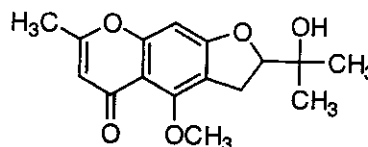


§ Visamminol; (S)-form, 5-Me ether

[CAS No.] 80681-42-1
[化合物分類] ベンゾピラノイド (Furo-1-benzopyrans)
[構造式]
[分子式] $C_{16}H_{16}O_5$
[分子量] 290.315
[基原] *Ledebouriella seseloides*
[性状] 針状結晶 (EtOAc/hexane)
[融点] Mp 141-142 °C
[比旋光度]: $[\alpha]_D^{25} +91.8$ (c, 0.90 in $CHCl_3$)

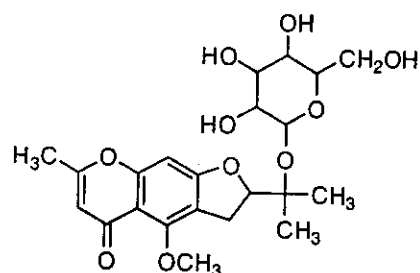


-----文献-----

Bencze, W. et al., *Helv. Chim. Acta*, 1956, 39, 923, (分離, 構造決定, UV, 誘導体)
Baba, K. et al., *Chem. Pharm. Bull.*, 1981, 29, 2565, (分離)
Sasaki, H. et al., *Chem. Pharm. Bull.*, 1982, 30, 3555, (分離)

§ Visamminol; (S)-form, 5-Me ether, 4'-O-β-D-glucopyranoside

[CAS No.] 84272-85-5
[化合物分類] ベンゾピラノイド (Furo-1-benzopyrans)
[構造式]
[分子式] $C_{22}H_{26}O_{10}$
[分子量] 452.457
[基原] *Ledebouriella seseloides*
[性状] 針状結晶 (H₂O)
[融点] Mp 151-156 °C
[比旋光度]: $[\alpha]_D^{25} +104$ (c, 0.05 in MeOH)



-----文献-----

Bencze, W. et al., *Helv. Chim. Acta*, 1956, 39, 923, (分離, 構造決定, UV, 誘導体)
Baba, K. et al., *Chem. Pharm. Bull.*, 1981, 29, 2565, (分離)
Sasaki, H. et al., *Chem. Pharm. Bull.*, 1982, 30, 3555, (分離)
Lemmich, J., *Phytochemistry*, 1995, 38, 427, (配糖体)

*****ホエイ (Whey) *****

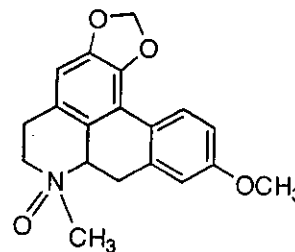
§ § 家畜の乳汁 (「ミルク」の項参照) を加工してチーズを得る際に生ずるホエイ。

*****ホオノキ (Honoki) *****

§ § モクレン科ホオノキ (*Magnolia obovata* Thunberg) の樹皮。

§ Anolobine; (R)-form, Me ether, N-Me, N-oxide

[化学名・別名] Isolaureline N-oxide
[CAS No.] 104385-28-6
[化合物分類] アルカロイド化合物 (Aporphine alkaloids)
[構造式]
[分子式] $C_{20}H_{19}NO_4$
[分子量] 325.363
[基原] 次の植物から得られるアルカロイド: *Magnolia obovata*



-----文献-----

Sturua, M. et al., *CA*, 1998, 128, 268208c, (Isolaureline N-oxide)

§ Anonaine; (R)-form, N-Ac

[化学名・別名] N-Acetylanonaine. 6-Acetyl-1,2-methylenedioxy-noraporphine
[CAS No.] 5894-74-6
[化合物分類] アルカロイド化合物 (Aporphine alkaloids)
[構造式]

[分子式] $C_{19}H_{17}NO_2$

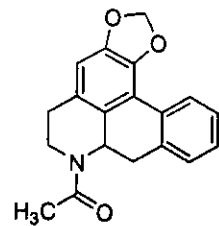
[分子量] 307.348

[基原] 次の植物から得られるアルカロイド: *Magnolia obovata* と *Liriodendron fera* の心材, *Zanthoxylum bungeanum* の根, *Zanthoxylum simulans* の根皮 (モクレンミカン科)

[性状] 結晶 (EtOH)

[融点] Mp 229-230 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{25} -356$ (c, 0.49 in $CHCl_3$)



tulipi
科,

-----文献-----

Hufford, C.D. et al., *Phytochemistry*, 1976, 15, 1169, (*N-Acetylanonaine*)

Sashida, Y. et al., *Yakugaku Zasshi*, 1976, 96, 659; *CA*, 88, 3043u, (*N-Acetylanonaine*)

Gray, A.I. et al., *Planta Med.*, 1980, 39, 209, (*N-Acetylanonaine*)

Ren, L. et al., *Yaoxue Xuebao*, 1981, 16, 672; *CA*, 96, 48974e, (*N-Acetylanonaine*)

§ *Caryolanemagnolol*

[CAS No.] 133056-11-8

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

[構造式]

[分子式] $C_{33}H_{42}O_3$

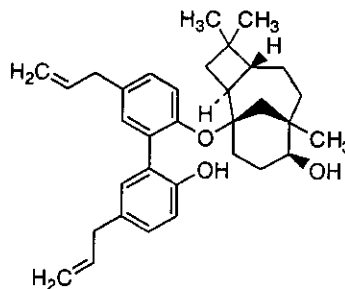
[分子量] 486.693

[基原] *Magnolia obovata*

[性状] オイル

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{25} +11.2$ (c, 1.85 in $CHCl_3$)

[その他のデータ] 化学構造は 3,6-*Caryolanediol*; (3 β , 6 β)-form と似ている



-----文献-----

Fukuyama, Y. et al., *Tetrahedron*, 1992, 48, 377, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ *Clovanemagnolol*

[CAS No.] 130756-35-3

[化合物分類] リグナン化合物 (*Neolignans*), テルペノイド (*Clovene sesquiterpenoids*)

[構造式]

[分子式] $C_{33}H_{42}O_3$

[分子量] 486.693

[基原] *Magnolia obovata* の樹皮

[用途] 神経親和性活性を示す

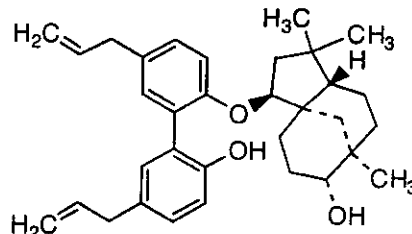
[性状] オイル

[比旋光度]: $[\alpha]_D +21$ (c, 1.5 in $CHCl_3$)

UV: [neutral] λ_{max} 204 (ϵ 4600); 208 (ϵ 41000); 286 (ϵ 5800) (EtOH) (Derep)

-----文献-----

Fukuyama, Y. et al., *Tetrahedron*, 1992, 48, 377, (分離, H-NMR, C13-NMR)



§ *Corytuberine*; (S)-form, N-Me

[化学名・別名] *Magnoflorine*. *Thalictrine*. *Esholine*. *Escholine*. *Corytuberine methosalt*

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

[構造式]

[分子式] $C_{20}H_{23}NO_4^{(+)}$

[分子量] 342.414

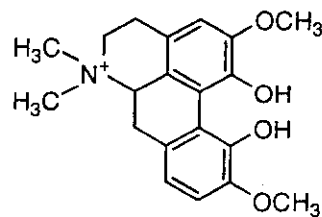
[基原] 次の植物から得られるアルカロイド: *Magnolia obovata* (モクレン *Aquilegia hybrida* (キンポウゲ科), また, バンレイシ科, メギ科, トウダイ科, ツツラフジ科, ケシ科, ミカン科, ウマノスズクサ科, ケマンソウ科, クメモドキ科

[用途] 弱いクラレー様の麻痺と血圧降下薬

[融点] Mp 248-249 °C (as iodide)

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{20} +193$ (c, 0.20 in MeOH) (iodide)

[その他のデータ] Iodide shows grinding-induced polymorphism. Many lit. references where *Magnoflorine* has



科),
グサ
ロウ

has supposedly been identified may be in error because of the similarity in props to *N,N*-Dimethylindcarpine

-----文献-----

- Nakano, T. et al., Chem. Pharm. Bull., 1954, 2, 329, (Magnoflorine)
Tomita, M. et al., Yakugaku Zasshi, 1957, 77, 157, (Magnoflorine)
Slavic, J. et al., Coll. Czech. Chem. Comm., 1973, 38, 3514, (Magnoflorine)
Dominguez, X.A. et al., Phytochemistry, 1974, 13, 680, (Magnoflorine)
Hoard, M.S. et al., Phytochemistry, 1996, 43, 1129, (polymorphism, Magnoflorine)
Barbosa-Filho, J.M. et al., Phytochemistry, 1997, 44, 959, (Magnoflorine, 分離, H-NMR, C13-NMR)

§ 2,3'-Dihydroxy-4,4'-di-2-propenyldiphenyl ether

[化学名・別名] 2-[3-Hydroxy-4-(2-propenyl) phenoxy] -5-(2-propenyl) phenol (CAS名), 4,4'-Diallyl-2,3'-dihydroxydiphenyl ether

[CAS No.] 135547-25-0

[化合物分類] 単環芳香族 (Diphenyl ethers), リグナン化合物 (Neolignans)

[構造式]

[分子式] $C_{18}H_{18}O_3$

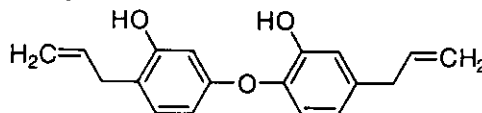
[分子量] 282.338

[基原] *Magnolia virginiana*, *Magnolia obovata*

[用途] 抗カビ, 細胞毒剤

[性状] 青白い黄色のオイル

UV: [neutral] λ_{max} 270 (ϵ 29900); 290 (ϵ 6210) (MeOH) [neutral] λ_{max} 270 (ϵ 29900); 290 (ϵ 6210) (MeOH) (Berdy) [base] λ_{max} 206 (ϵ 24300); 226 (ϵ 28200); 319 (ϵ 7780) (MeOH-NAOH) (Berdy)



-----文献-----

- Nitao, J.K. et al., Phytochemistry, 1991, 30, 2193-2195, (分離, UV, IR, H-NMR, C13-NMR)
Chandra, A. et al., Planta Med., 1995, 61, 192, (分離, 性質)

§ 2-(3,4-Dihydroxyphenyl) ethanol; 1-O-[3,4-Dihydroxy-E-cinnamoyl-(→3)-β-D-allopyranoside]

[化学名・別名] Sanangoside

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

[構造式]

[分子式] $C_{23}H_{26}O_{11}$

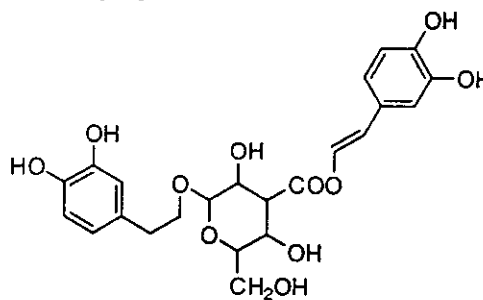
[分子量] 478.452

[基原] *Sanango racemosum*, *Magnolia obovata*

[用途] 抗腫瘍性を示す

[性状] 泡沫

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{25}$ -55 (c, 0.8 in MeOH)



-----文献-----

- Jensen, S.R. et al., Phytochemistry, 1996, 43, 777, (Sanangoside)

§ Eudeshonokiol A

[CAS No.] 126654-55-5

[化合物分類] テルペノイド (Simple eudesmane sesquiterpenoids), リグナン化合物 (Neolignans)

[構造式]

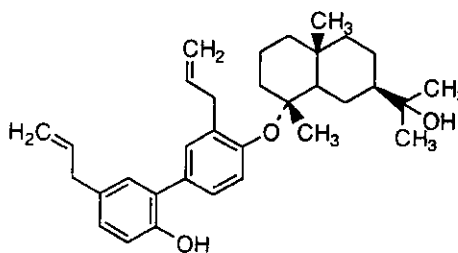
[分子式] $C_{25}H_{40}O_2$

[分子量] 488.709

[基原] *Magnolia obovata* の樹皮

[性状] オイル

[比旋光度]: $[\alpha]_D$ -48.6 (c. 0.45 in EtOH)



-----文献-----

- Fukuyama, Y. et al., Tetrahedron, 1992, 48, 377, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ Eudeshonokiol B

[CAS No.] 133056-10-7

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

[構造式]

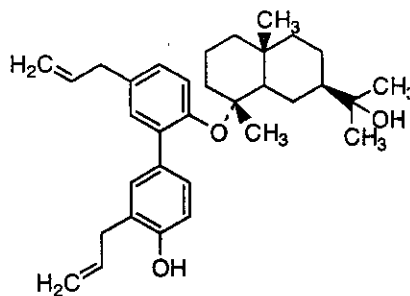
[分子式] $C_{33}H_{44}O_3$

[分子量] 488.709

[基原] *Magnolia obovata*

[性状] オイル

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{22} -71.7$ (c, 1.08 in $CHCl_3$)



-----文献-----

Fukuyama, Y. et al., Tetrahedron, 1992, 48, 377, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ Eudesmagnolol

[CAS No.] 126654-54-4

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

リグナン化合物 (Neolignans)

[構造式]

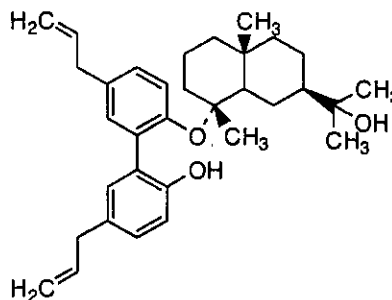
[分子式] $C_{33}H_{44}O_3$

[分子量] 488.709

[基原] *Magnolia obovata* の樹皮

[性状] オイル

[比旋光度]: $[\alpha]_D -74.8$ (c, 9.2 in $CHCl_3$)



-----文献-----

Fukuyama, Y. et al., Tetrahedron, 1992, 48, 377, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ Eudesobovatol A

[CAS No.] 125196-77-2

[化合物分類]テルペノイド

(Simple eudesmane sesquiterpenoids)

[構造式]

[分子式] $C_{33}H_{44}O_4$

[分子量] 504.708

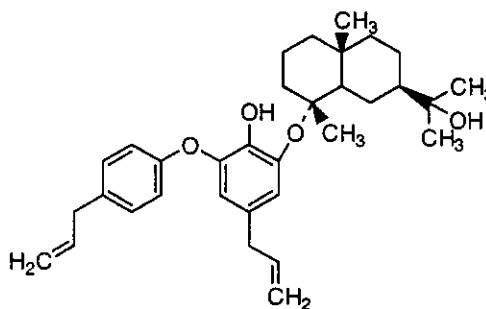
[基原] *Magnolia obovata*

[用途] 神経親和性作用

[性状] オイル

[比旋光度]: $[\alpha]_D -46.1$ (c, 2.5 in $CHCl_3$)

UV: [neutral] λ_{max} 208 (ϵ 58000); 274 (ϵ 7200); 281 (ϵ 6700) (EtOH) (Derep)



-----文献-----

Fukuyama, Y., Tetrahedron, 1992, 48, 377, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ Eudesobovatol B

[CAS No.] 125196-78-3

[化合物分類]テルペノイド

(Simple eudesmane sesquiterpenoids)

[構造式]

[分子式] $C_{33}H_{44}O_4$

[分子量] 504.708

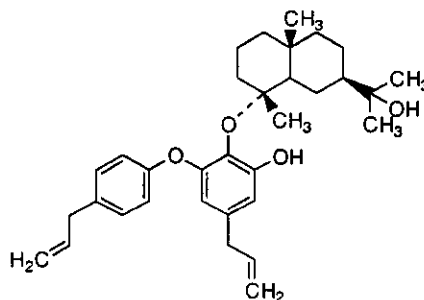
[基原] *Magnolia obovata*

[用途] 神経親和性作用

[性状] オイル

[比旋光度]: $[\alpha]_D -26.1$ (c, 1.15 in $CHCl_3$)

UV: [neutral] λ_{max} 208 (ϵ 58000); 274 (ϵ 7200); 281 (ϵ 6700) (EtOH) (Derep)



-----文献-----

Fukuyama, Y., Tetrahedron, 1992, 48, 377, (分離, H-NMR, C13-NMR)

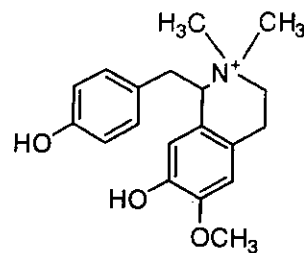
§ Higenamine; (R)-form, O⁶, N,N-Tri-Me

[化学名・別名] (-)-Magnocurarine

[CAS No.] 6801-40-7

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

[構造式]



[分子式] C₁₉H₂₄NO₃⁽⁺⁾

[分子量] 314.404

[基原] 次の植物から得られるアルカロイド: *Magnolia obovata*, その他数種の *Magnolia* spp., *Michelia fuscata* (モクレン科)

[用途] クラレー様の麻痺と神経節の防御薬. 鎮静作用

[融点] Mp 199-200 °C (as chloride)

[比旋光度]: [α]_D -91 (H₂O)

-----文献-----

Tomita, M. et al., *Yakugaku Zasshi*, 1951, 71, 1069; CA, 46, 5059, (Magnocurarine)

McKenzie, A.K. et al., *Aust. J. Chem.*, 1953, 6, 180, (Magnocurarine)

Albonico, S.M. et al., *J.C.S. (C)*, 1966, 1340, (UV, ORD, 絶対構造, Colletine, Magnocurarine)

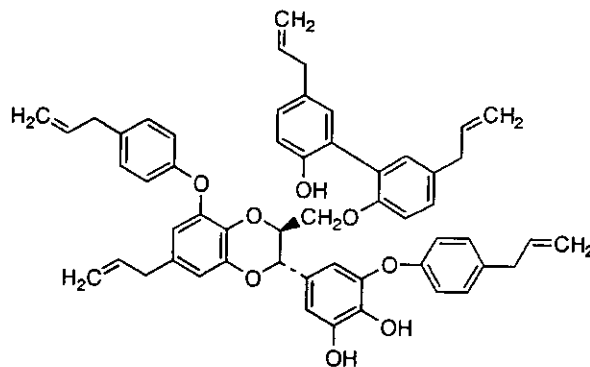
§ Magnolianin

[CAS No.] 147663-91-0

[化合物分類] リグナン化合物 (Neolignans),

単環芳香族 (Diphenyl ethers)

[構造式]



[分子式] C₃₄H₅₀O₈

[分子量] 826.984

[一般的性質] Trilignan

[基原] *Magnolia obovata* の樹皮

[用途] 強い 5-lipoxygenase 阻害因子

UV: [base] λ_{max} (溶媒の報告はない) (Derep) [neutral] λ_{max} 224 (ε 42800); 275 (ε 8300); 280 (ε 8300) (EtOH) (Derep)

[その他のデータ] ラセミ体

-----文献-----

Fukuyama, Y. et al., *Tet. Lett.*, 1993, 34, 1051, (分離, 構造決定)

§ Magnoloside A

[CAS No.] 113557-95-2

[化合物分類] AF9200, 炭水化物 (Disaccharides)

[構造式]

[分子式] C₂₉H₃₆O₁₅

[分子量] 624.594

[基原] 次の植物から分離: *Magnolia obovata* の乾燥樹皮のメタノール抽出物

[用途] *M. obovata* の樹皮は日本の漢方では神経症と胃腸の病訴の治療薬として用いる

[性状] 粉末

[比旋光度]: [α]_D²⁵ -36.8 (c, 0.82 in EtOH)

[溶解性] BERDY SOL: メタノール, クロロホルムに可溶

UV: [neutral] λ_{max} 217 (ε 15600); 240 (ε 8100); 290 (ε 9900); 330 (ε 13500) (EtOH) (Berdy)

-----文献-----

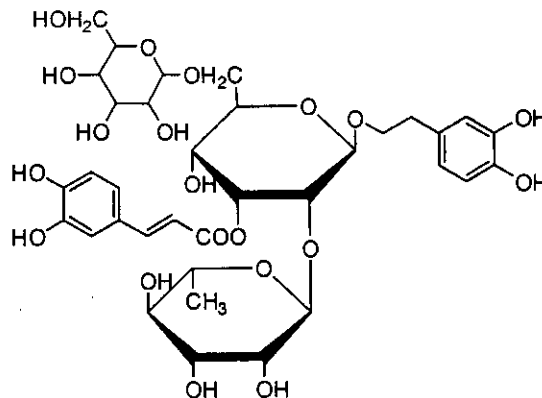
Hasegawa, T. et al., *Chem. Lett.*, 1988, 163, (分離, 構造決定, H-NMR, C13-NMR, IR, UV, Mass)

Hasegawa, T. et al., *Chem. Pharm. Bull.*, 1988, 36, 1245, (分離, C13-NMR)

Japan. Pat., 1988, 88 310 899; CA, 111, 102688h

§ Magnoloside A; 6-O-β-D-Glucopyranosyl

[化学名・別名] Magnolioside B
 [CAS No.] 116872-05-0
 [化合物分類] 炭水化物 (Oligosaccharides)
 [構造式]



[分子式] $C_{35}H_{46}O_{20}$
 [分子量] 786.736
 [基原] 次の植物から分離: *Magnolia obovata* の樹皮
 [比旋光度]: $[\alpha]_D -54.1$ (c, 0.92 in EtOH)
 [溶解性] BERDY SOL: メタノール, クロロホルムに可
 UV: [neutral] λ_{max} 218 (ϵ 18770); 242 (ϵ 9985); 290 (ϵ 12380); 330 (ϵ 17170) (EtOH) (Berdy)

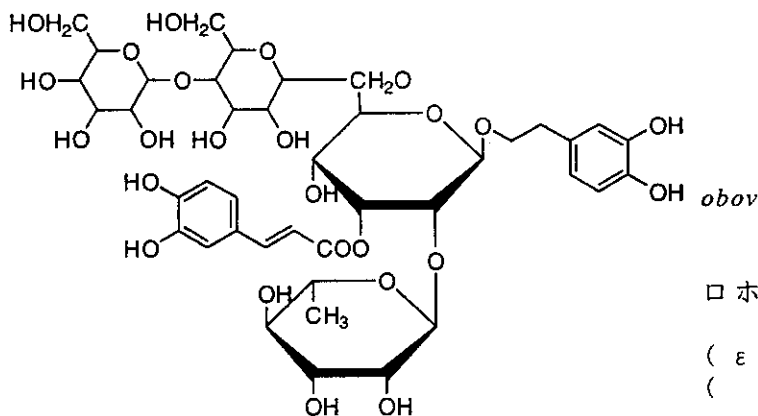
溶

-----文献-----

Hasegawa, T. et al., Chem. Lett., 1988, 163, (分離, 構造決定, H-NMR, C13-NMR, IR, UV, Mass)
 Hasegawa, T. et al., Chem. Pharm. Bull., 1988, 36, 1245, (分離, C13-NMR)
 Japan. Pat., 1988, 88 310 899; CA, 111, 102688h

§ Magnolioside A; 6-O- $[\beta$ -D-Glucopyranosyl(1 \rightarrow 4)- β -D-glucopyranosyl]

[化学名・別名] Magnolioside C
 [CAS No.] 116872-04-9
 [化合物分類] 炭水化物 (Oligosaccharides)
 [構造式]



[分子式] $C_{41}H_{56}O_{25}$
 [分子量] 948.878
 [基原] 次の植物から分離: *Magnolia obovata* の樹皮
 [比旋光度]: $[\alpha]_D -73.2$ (c, 0.41 in EtOH)
 [溶解性] BERDY SOL: メタノール, クロロホルムに可溶
 UV: [neutral] λ_{max} 218 (ϵ 16500); 244 (8880); 290 (ϵ 10740); 330 (ϵ 14950) EtOH) (Berdy)

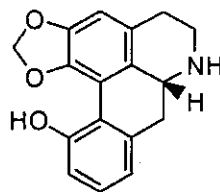
口ホ
(ϵ
(

-----文献-----

Hasegawa, T. et al., Chem. Lett., 1988, 163, (分離, 構造決定, H-NMR, C13-NMR, IR, UV, Mass)
 Hasegawa, T. et al., Chem. Pharm. Bull., 1988, 36, 1245, (分離, C13-NMR)
 Japan. Pat., 1988, 88 310 899; CA, 111, 102688h

§ Obovanine

[化学名・別名] 11-Hydroxy-1,2-methylenedioxy-noraporphine
 [CAS No.] 53254-79-8
 [化合物分類] アルカロイド化合物 (Aporphine alkaloids)
 [構造式]



[分子式] $C_{17}H_{13}NO_3$
 [分子量] 281.31
 [基原] 次の植物から得られるアルカロイド: *Magnolia obovata*, *Duguetia calycina* の茎皮, *Laurelia novae-zelandiae* の樹皮 (モクレン科, パンレイシ科, アセロスペルマ科)

-----文献-----

Ito, K. et al., Yakugaku Zasshi, 1974, 94, 729; CA, 81, 166344n, (分離, UV, IR, H-NMR, Mass, 構造決定)
 Roblot, F. et al., Plant. Med. Phytother., 1978, 12, 259; CA, 91, 2517b, (分離)
 Urz acute u a, A. et al., Phytochemistry, 1982, 21, 773, (分離, H-NMR, Mass)

§ Obovatal

[化学名・別名] 3-[3,4-Dihydroxy-5-[4-(2-propenyl) phenoxy] phenyl] -2-propenal (CAS名), 3,4-Dihydroxy-5-(4-allylphenoxy) cinnamaldehyde

[CAS No.] 83864-77-1

[化合物分類] 単環芳香族 (Diphenyl ethers)

[構造式]

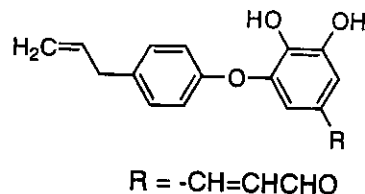
[分子式] $C_{18}H_{16}O_3$

[分子量] 296.322

[基原] *Magnolia obovata* の葉

[性状] 結晶 (Me₂CO)

[融点] Mp 160.5-162 °C



-----文献-----

Ito, K. et al., Chem. Pharm. Bull., 1982, 30, 3347

§ Obovatol

[化学名・別名] 5-(2-Propenyl) -3-[4-(2-propenyl) phenoxy] -1,2-benzenediol (CAS名), 4',5-Diallyl-2,3-dihydroxybiphenyl ether

[CAS No.] 83864-78-2

[化合物分類] 単環芳香族 (Diphenyl ethers)

[構造式]

[分子式] $C_{18}H_{18}O_3$

[分子量] 282.338

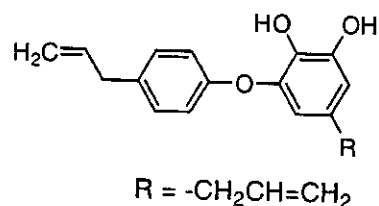
[基原] *Magnolia obovata* の葉

[用途] 抗菌剤

[性状] オイル

[溶解性] BERDY SOL: メタノール, クロロホルムに可溶; 水, ヘキサンに難溶

UV: [neutral] λ_{max} 206; 272 (MeOH) (Berdy)



-----文献-----

Ito, K. et al., Chem. Pharm. Bull., 1982, 30, 3347

Kwon, B.-M. et al., Planta Med., 1997, 63, 550-551, (分離, H-NMR, C13-NMR) v

*****ホースミント (Horsemint) *****

§ シソ科ヤマグルハッカ (*Monarda fistulosa* L.) の葉。

§ *p*-Mentha-3,6-diene-2,5-dione (旧 CAS 名)

[化学名・別名] 2-Methyl-5-(1-methylethyl) -2,5-cyclohexadiene-1,4-dione (CAS名), 2-Isopropyl-5-methyl-1,4-benzoquinone. *p*-Cymene-2,5-dione. Thymoquinone. Thymoil

[CAS No.] 490-91-5

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

[構造式]

[分子式] $C_{10}H_{12}O_2$

[分子量] 164.204

[基原] *Callitris quadrivalvis* と *Monarda fistulosa* の木部。また, *Juniperus cedrus*, *Tet*
raclinis articulata, *Nepeta leucophylla*. Major constit. of seed oil of *Nigella sativa* の種子オイルの主成分 (24%)

[性状] 浸透性の臭気を持つ淡黄色の結晶 (pentane)

[融点] Mp 44-45 °C

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

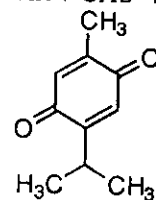
UV: [neutral] λ_{max} 276 (ϵ 2610); 282 (ϵ 2450) (EtOH) (Berdy)

[その他のデータ] 水蒸気蒸留で得られる

[傷害・毒性] 50%致死量 (LD₅₀) (ラット, 腹腔内) 10 mg/kg

[化学物質毒性データ総覧 (RTECS) 登録番号] GU5330000

[販売元] Aldrich: 27466-6; Sigma: T8146



-----文献-----

El-Dakhkhny, M., Planta Med., 1963, 11, 465, (分離)

Jacobsen, N., J.C.S. Perkin 2, 1979, 569, (合成法, H-NMR, Mass)

Liebeskind, L.S. et al., J.O.C., 1992, 57, 4345, (合成法, H-NMR, IR)

RTECS (化学物質毒性データ)

生体影響物質 : 変異原性物質.

健康障害に関するデータ

急性毒性に関するデータ

<<試験方法>> LD50 試験 (50%致死量試験).

曝露経路 : 腹腔内投与.

被験動物 : げっ歯類-ラット.

投与量・期間 : 10 mg/kg

毒性影響 : 致死量以外に毒性影響に関する報告はない.

参考文献

Arzneimittel-Forschung. Drug Research. (Editio Cantor Verlag, Postfach 1255, W-7960 Aulendorf, Fed. Rep. Ger.) 15,1227,1965

変異原性に関するデータ

<<試験方法>> 微生物を用いた突然変異試験.

試験系 : 大腸菌 *Salmonella typhimurium*

投与量・期間 : 20 nmol/plate

参考文献

Mutation Research. (Elsevier Science Pub. B.V., POB 211, 1000 AE Amsterdam, Netherlands) 347,37,1995

§ § シソ科ホースミント (*Monarda punctata* L.) の葉.

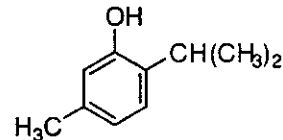
§ 2-Isopropyl-5-methylphenol

[化学名・別名] 5-Methyl-2-(1-methylethyl)phenol (CAS 名). *p*-Cymen-3-ol (旧 CAS 名). 3-Hydroxy-*p*-cymene. 3-Hydroxy-4-isopropyltoluene. 6-Isopropyl-*m*-cresol. *p*-Mentha-1,3,5-trien-3-ol. Thymol. *m*-Thymol. Thymianic acid (obsol.). Thymianic camphor (obsol.)

[CAS No.] 89-83-8

[化合物分類] 薬物: 消毒薬 (Antiseptics), 薬物: 抗菌性剤 (Antibacterial agents), 薬物: 抗カビ薬 (Antifungal agents), テルペノイド (*p*-Menthane monoterpenoids)

[構造式]



[分子式] C₁₀H₁₄O

[分子量] 150.22

[基原] 多くの精油に見られる. 特にシソ科に見られる. Rich sources are thyme

oil,

Ptychotis ajowan の種子オイル, *Monarda punctata* と *Ocimum* spp. のオイル

[用途] 香水及び香料原料. Gives red or orange products with Ti, W (in conc. H₂SO₄). 抗菌, 抗カビ作用を持つ鎮痙作用.

[性状] タイムの香りを持つ板状結晶 (EtOAc or AcOH or Me₂CO)

[融点] Mp 51.5 °C

[沸点] Bp 233.5 °C. Bp₁₀ 115 °C

[溶解性] BERDY SOL: メタノール, ヘキサンに可溶; 水, 酸に難溶

[PKa 値] pK_a 10.62 (20 °C)

[Log P 計算値] Log P 3.4 (計算値)

[傷害・毒性] 50 % 致死量 (LD₅₀) (ラット, 経口) 980 mg/kg

[化学物質毒性データ総覧 (RTECS) 登録番号] XP2275000

[販売元] Aldrich:11209-7; Fluka:89330; Sigma:T0501

-----文献-----

Fujita, Y., CA, 1947, 41, 3585, (分離, 誘導體)

Schulte, K.E. et al., Arch. Pharm. (Weinheim, Ger.), 1963, 296, 353, (分離, 合成法, 誘導體)

TFX810

RTECS (化学物質毒性データ)

生体影響物質 : 医薬品, 変異原性物質, 生殖影響物質.

健康障害に関するデータ

急性毒性に関するデータ

<<試験方法>> LD50 試験 (50%致死量試験).

曝露経路 : 経口投与.

被験動物 : げっ歯類-ラット.

曝露経路 : 経口投与.
被験動物 : げっ歯類-ラット.
投与量・期間 : 980 mg/kg
毒性影響 : [行動] 傾眠(全身活動度の低下).
[行動] 運動失調.
[行動] 昏睡.

参考文献

Food and Cosmetics Toxicology. (London, UK) 2,327,1964

<<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 : 皮下投与.
被験動物 : げっ歯類-ラット.
投与量・期間 : 1600 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

"Handbook of Toxicology," 4 vols., Philadelphia, W.B. Saunders Co.,5,172,1959

<<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 : 640 mg/kg
毒性影響 : [末梢神経と感覚] 感覚変化を伴うまたは伴わない痙性麻痺.
[肺,胸郭,または呼吸] 呼吸刺激.

参考文献

.Osaka Shiritsu Daigaku Igaku Zasshi. Journal of the Osaka City Medical Center. (Osaka, Japan) 5,111,1956

<<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 : 110 mg/kg
毒性影響 : [行動] 傾眠(全身活動度の低下).
[行動] 運動失調.

参考文献

Quarterly Journal of Crude Drug Research. (Lisse, Netherlands) 19,1,1981

<<試験方法>> LD50 試験(50%致死量試験).

曝露経路 : 皮下投与.
被験動物 : げっ歯類-マウス.
投与量・期間 : 243 mg/kg
毒性影響 : [行動] 傾眠(全身活動度の低下).
[皮膚と付属器官] 毛髪.

参考文献

Osaka Shiritsu Daigaku Igaku Zasshi. Journal of the Osaka City Medical Center. (Osaka, Japan) 5,111,1956

<<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 : 100 mg/kg
毒性影響 : [行動] 睡眠.

参考文献

Journal of Medicinal Chemistry. (American Chemical Soc., Distribution Office Dept. 223, POB POB 57136, West End Stn., Washington, DC 20037) 23,1350,1980

<<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-イス.
投与量・期間 : 150 mg/kg
毒性影響 : [肺,胸郭,または呼吸] 呼吸困難.

参考文献

Therapie. (Doin, Editeurs, 8. Place de l'Odeon, F-75006 Paris, France) 3,109,1948

<<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 : 経口投与.
被験動物 : ほ乳類-ネコ.

参照文献

"Handbook of Toxicology," 4 vols., Philadelphia, W.B. Saunders Co.,5,172,1959

<<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 : 経口投与.
被験動物 : げっ歯類-ウサギ.
投与量・期間 : 750 mg/kg
毒性影響 : 致死量以外に毒性影響に関する報告はない.

参照文献

Journal of Pharmacology and Experimental Therapeutics. (Williams & Wilkins Co., 428 E. Preston St., Baltimore, MD 21202) 17,261,1921

<<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 : げっ歯類-ウサギ.
投与量・期間 : 60 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

"Handbook of Toxicology," 4 vols., Philadelphia, W.B. Saunders Co.,5,172,1959

<<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 : 880 mg/kg
毒性影響 : [行動] 振戦.
[行動] 昏睡.
[胃腸] 胃炎.

参照文献

Food and Cosmetics Toxicology. (London, UK) 2,327,1964

<<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 : 300 mg/kg
毒性影響 : 致死量以外に毒性影響に関する報告はない.

参照文献

"Handbook of Toxicology," 4 vols., Philadelphia, W.B. Saunders Co.,5,172,1959

<<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 : 皮下投与.
被験動物 : げっ歯類-モルモット.
投与量・期間 : 1100 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

"Handbook of Toxicology," 4 vols., Philadelphia, W.B. Saunders Co.,5,172,1959

<<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 : 皮下投与.
被験動物 : 両生類-カエル.
投与量・期間 : 150 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

"Handbook of Toxicology," 4 vols., Philadelphia, W.B. Saunders Co.,5,172,1959

生殖に関するデータ

<<試験方法>> 最小毒性量(TDLo).

曝露経路 : 皮下投与.
被験動物 : げっ歯類-ラット.
投与量 : 20 mg/kg
雌雄投与期間 : 雌 4 日間(交配前)
毒性影響 : [生殖] [母系影響] 子宮, 頸管, 膈.

参照文献

Journal of Scientific and Industrial Research. Section C: Biological Sciences. (New Delhi, India) 19,264,1960

変異原性に関するデータ

Journal of Scientific and Industrial Research, Section C: Biological Sciences. (New Delhi, India) 19,264,1960

変異原性に関するデータ

<<試験方法>> 形態的形質変換.

試験系 : げっ歯類-ハムスター胚

投与量・期間 : 3 mg/L

参考文献

Shigaku. Ondotology. (Nippon Shika Daigaku Shigakkai, 1-9-20 Fujimi, Chiyodaku, Tokyo 102, Japan) 74,1365,1987

<<試験方法>> 不定期 DNA 合成.

試験系 : げっ歯類-ハムスター胚

投与量・期間 : 1 mg/L

参考文献

Shigaku. Ondotology. (Nippon Shika Daigaku Shigakkai, 1-9-20 Fujimi, Chiyodaku, Tokyo 102, Japan) 4,1365,1987

<<試験方法>> 姉妹染色分体交換.

試験系 : げっ歯類-ハムスター胚

投与量・期間 : 300 ug/L

参考文献

Shigaku. Ondotology. (Nippon Shika Daigaku Shigakkai, 1-9-20 Fujimi, Chiyodaku, Tokyo 102, Japan) 74,1365,1987

*** REVIEWS ***

TOXICOLOGY REVIEW

Journal of Reproductive Medicine. (2 Jacklynn Ct., St. Louis, MO 63132) 12,27,1974

§ § シソ科キハッカ (*Mentha sylvestris* L.) の葉.

§ 1,2-Epoxy-*p*-menthan-3-one (旧 CAS 名)

[化学名・別名] 6-Methyl-3-(1-methylethyl)-7-oxabicyclo[4.1.0]heptan-2-one (CAS 名). 2,3-Epoxy-6-isopropyl-3-methylcyclohexanone. Piperitone oxide

[CAS No.] 5286-38-4

[関連 CAS No.] 4713-37-5, 4713-38-6, 5056-09-7, 20303-83-7, 57130-28-6, 103476-50-2

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

[構造式]

[分子式] $C_{10}H_{16}O_2$

[分子量] 168.235

[一般的性質] 立体化学は明確ではない

[基原] 次の植物から分離: *Mentha sylvestris* のオイル, その他の精油

[性状] 結晶 (hexane)

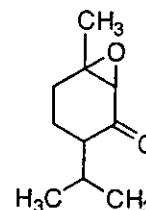
[融点] Mp 14.5-15.5 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{22}$ -177 (c, 0.96 in EtOH)

[濃度] d_{25}^{25} 1.01

[屈折率] n_D^{20} 1.4624

[その他のデータ] Poss. identical with Dihydrolippione



-----文献-----

Reitsema, R.H. et al., J.A.C.S., 1956, 78, 3792, (分離)

Nigam, I.C. et al., Can. J. Chem., 1963, 41, 1535, (生育)

Gacs-Baitz, E. et al., Org. Magn. Reson., 1984, 22, 738, (H-NMR, C13-NMR)

*****ホースラディッシュ (Horseradish) *****

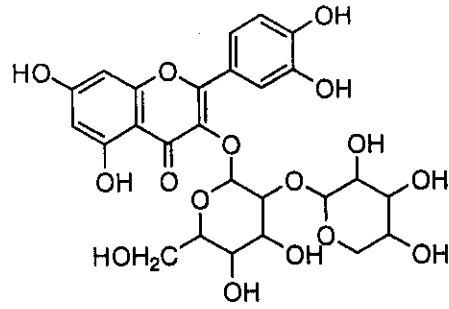
§ § アブラナ科セイヨウワサビ (*Armoracia rusticana* Gaertner, B. Meyer et Scherbius) の根茎.

§ Hyperin; 2'-*O*- β -D-Xylopyranosyl

[CAS No.] 83144-69-8

[化合物分類] フラボノイド (Flavonols; 5 × O-置換基)

[構造式]



[分子式] $C_{26}H_{28}O_{16}$

[分子量] 596.498

[基原] 次の植物から分離: *Armoracia rusticana*

-----文献-----

Larsen, L.M. et al., *Phytochemistry*, 1982, 21, 1029, (2"-xyloside)

§ 3,4',5,7-Tetrahydroxyflavone; 3-O-[β-D-Glucopyranosyl-β-D-xylofuranoside]

[化学名・別名] Rustoside †

[化合物分類] フラボノイド (Flavonoids 構造は一部又は全てが未知), フラボノイド (Flavonols; 4 × O-置換基)

[構造式] 有効な構造式はない

[分子式] $C_{26}H_{28}O_{15}$

[分子量] 580.498

[基原] 次の植物から分離: *Armoracia rusticana* の葉

-----文献-----

Karrer, W. et al., *Konstitution und Vorkommen der Organischen Pflanzenstoffe*, 2nd edn., Birkhäuser Verlag, Basel, 1972, nos. 1497; 1498; 1504

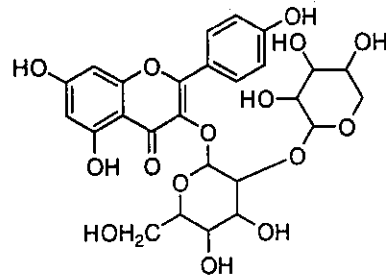
§ Trifolin; 2"-O-β-D-Xylopyranosyl

[化学名・別名] Rustoside

[CAS No.] 83144-68-7

[化合物分類] フラボノイド (Flavonols; 4 × O-置換基)

[構造式]



[分子式] $C_{26}H_{28}O_{15}$

[分子量] 580.498

[基原] 次の植物から分離: *Armoracia rusticana*

-----文献-----

Larsen, L.M. et al., *Phytochemistry*, 1982, 21, 1029, (2"-xylosyl)

Nakano, K. et al., *Phytochemistry*, 1983, 22, 1249, (6"-acetyl-arabinosyl)

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

*****ポタン (Mountan bark) *****

§ § キンボウゲ科ポタン (*Paeonia suffruticosa* Andrews) の根皮。

§ 2',4'-Dihydroxyacetophenone; 4'-Me ether, O-β-D-glucopyranoside

[化学名・別名] Glucopaeonol. Peonoside †

[CAS No.] 20309-70-0

[化合物分類] 単環芳香族 (Simple aryl ketones)

[構造式]

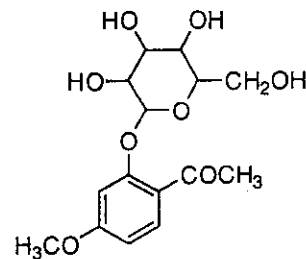
[分子式] $C_{15}H_{20}O_8$

[分子量] 328.318

[基原] 次の植物から分離: *Paeonia arborea* の種子, *Paeonia suffruticosa*

[融点] Mp 82-83 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{20}$ -39.33



-----文献-----

Kariyone, T. et al., *Yakugaku Zasshi*, 1956, 76, 920, (Paeonolide)

Kariyone, T. et al., Yakugaku Zasshi, 1956, 76, 920, (Paeonolide)

§ 2',4'-Dihydroxyacetophenone; 4'-Me ether, O-[α -L-arabinopyranosyl-(1 \rightarrow 6)- β -D-glucopyranoside]

[化学名・別名] Paeonolide. Peonolide

[CAS No.] 72520-92-4

[化合物分類] 単環芳香族 (Simple aryl ketones)

[構造式]

[分子式] $C_{20}H_{26}O_{12}$

[分子量] 460.434

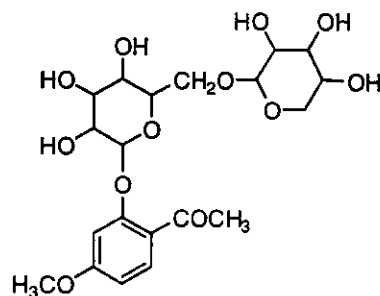
[基原] 次の植物から分離: *Paeonia suffruticosa*

[性状] 結晶 (EtOH/EtOAc)

[融点] Mp 157-158 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{20}$ -18.2

[その他のデータ] The (1 \rightarrow 6) linkage was not detd. by the original authors and is based on CA information



-----文献-----

Kariyone, T. et al., Yakugaku Zasshi, 1956, 76, 920, (Paeonolide)

§ 2',4'-Dihydroxyacetophenone; 4'-Me ether, O-[5-O-galloyl- β -D-apiofuranosyl-(1 \rightarrow 6)- β -D-glucopyranoside]

[化学名・別名] Suffruticoside A

[CAS No.] 145898-94-8

[化合物分類] 単環芳香族 (Simple aryl ketones)

[構造式]

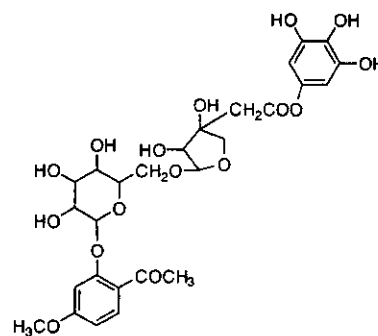
[分子式] $C_{27}H_{32}O_{16}$

[分子量] 612.54

[基原] *Paeonia suffruticosa*

[性状] 無定型の粉末

[比旋光度]: $[\alpha]_D$ -57.8 (c, 1.1 in MeOH)



-----文献-----

Matsuda, H. et al., Chem. Pharm. Bull., 2001, 49, 69-72, (Suffruticosides)

§ 2',4'-Dihydroxyacetophenone; 4'-Me ether, O-[β -D-apiofuranosyl-(1 \rightarrow 6)-4-O-galloyl- β -D-glucopyranoside]

[化学名・別名] Suffruticoside B

[CAS No.] 145898-95-9

[化合物分類] 単環芳香族 (Simple aryl ketones)

[構造式]

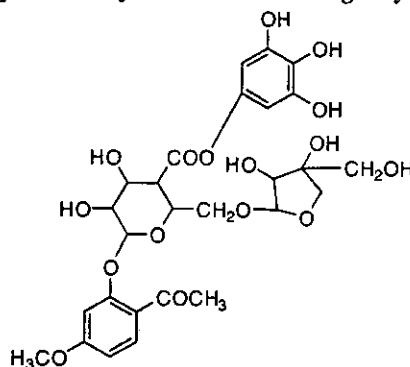
[分子式] $C_{27}H_{32}O_{16}$

[分子量] 612.54

[基原] *Paeonia suffruticosa*

[性状] 無定型の粉末

[比旋光度]: $[\alpha]_D$ -32.7 (c, 0.8 in MeOH)



-----文献-----

Matsuda, H. et al., Chem. Pharm. Bull., 2001, 49, 69-72, (Suffruticosides)

§ 2',4'-Dihydroxyacetophenone; 4'-Me ether, O-[4-O-galloyl- α -L-arabinopyranosyl-(1 \rightarrow 6)- β -D-glucopyranoside]

[化学名・別名] Suffruticoside C

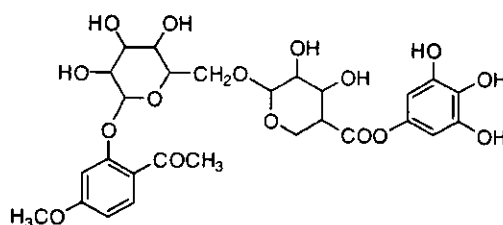
[CAS No.] 145898-96-0

[化合物分類] 単環芳香族 (Simple aryl ketones)

[構造式]

[分子式] $C_{27}H_{32}O_{16}$

[分子量] 612.54



-----文献-----

Matsuda, H. et al., Chem. Pharm. Bull., 2001, 49, 69-72, (Suffruticosides)

§ 2',4'-Dihydroxyacetophenone; 4'-Me ether, O-[α -L-arabinopyranosyl-(1 \rightarrow 6)-4-O-galloyl- β -D-glucopyranoside]

[化学名・別名] Suffruticoside D

[CAS No.] 145898-97-1

[化合物分類] 単環芳香族 (Simple aryl ketones)

[構造式]

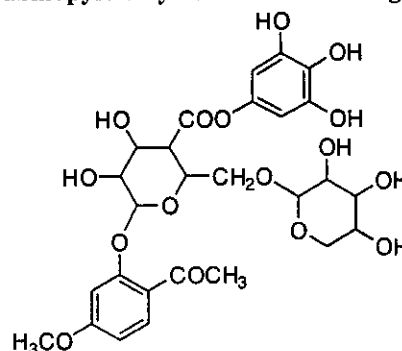
[分子式] $C_{27}H_{32}O_{16}$

[分子量] 612.54

[基原] *Paeonia suffruticosa*

[性状] 無定型の粉末

[比旋光度]: $[\alpha]_D -5.3$ (c, 0.4 in H₂O)



-----文献-----

Matsuda, H. et al., Chem. Pharm. Bull., 2001, 49, 69-72, (Suffruticosides)

§ 2',4'-Dihydroxyacetophenone; 4'-Me ether, O-[α -L-arabinopyranosyl-(1 \rightarrow 6)-[β -D-glucopyranosyl-(1 \rightarrow 3)]- β -D-glucopyranoside]

[化学名・別名] Suffruticoside E

[CAS No.] 145898-98-2

[化合物分類] 単環芳香族 (Simple aryl ketones)

[構造式]

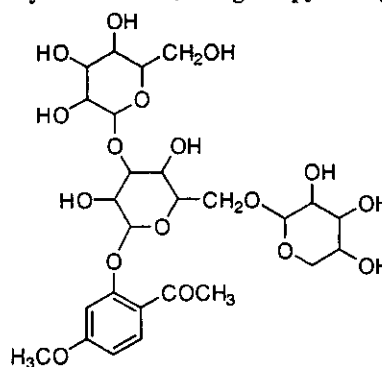
[分子式] $C_{26}H_{30}O_{17}$

[分子量] 622.576

[基原] *Paeonia suffruticosa*

[性状] 無定型の粉末

[比旋光度]: $[\alpha]_D -47.8$ (c, 0.49 in H₂O)



-----文献-----

Matsuda, H. et al., Chem. Pharm. Bull., 2001, 49, 69-72, (Suffruticosides)

§ 2',4'-Dihydroxyacetophenone; 4'-Me ether, O-[β -D-apiofuranosyl(1 \rightarrow 6)- β -D-glucopyranoside]

[化学名・別名] Apiopaeonoside

[CAS No.] 100291-86-9

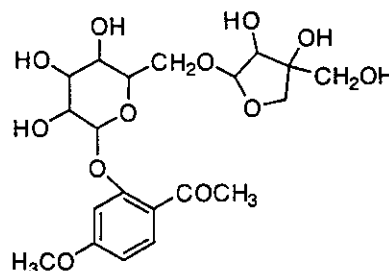
[化合物分類] 単環芳香族 (Simple aryl ketones)

[構造式]

[分子式] $C_{20}H_{28}O_{12}$

[分子量] 460.434

[基原] 次の植物から分離: *Paeonia suffruticosa* の根



-----文献-----

Yu, J. et al., Yaoxue Xuebao, 1986, 21, 191; CA, 105, 3559m, (Apiopaeonoside)

§ 2',5'-Dihydroxy-4'-methylacetophenone (旧 CAS 名)

[化学名・別名] 1-(2,5-Dihydroxy-4-methylphenyl) ethanone (CAS 名)

[CAS No.] 54698-17-8

[化合物分類] 単環芳香族 (Simple aryl ketones)

[構造式] 構造式は次の化合物と類似: 2',3'-Dihydroxy-4'-methylacetophenone

[分子式] $C_9H_{10}O_3$

[分子量] 166.176

[基原] *Paeonia suffruticosa*

[用途] 血小板凝集阻害

[性状] 金-黄色の板状結晶 (MeOH)

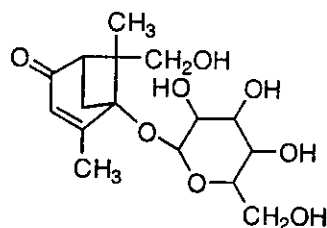
[基原] *Paeonia suffruticosa*
[用途] 血小板凝集阻害
[性状] 金-黄色の板状結晶 (MeOH)
[融点] Mp 147-147.5 °C

-----文献-----

Lin, H.-C. et al., *Planta Med.*, 1999, 65, 595-599, (分離)
Fuganti, C. et al., *J.C.S. Perkin 1*, 2000, 3758-3764, (Me ether, 合成法, IR, H-NMR, Mass)

§ **1,8-Dihydroxy-2-pinen-4-one; (1*S*,5*R*,6*R*)-form, 1-*O*-β-D-Glucopyranoside**

[化学名・別名] Mudanpioside F
[CAS No.] 172670-08-5
[化合物分類] テルペノイド (Pinane monoterpeneoids)
[構造式]
[分子式] C₁₆H₂₄O₈
[分子量] 344.361



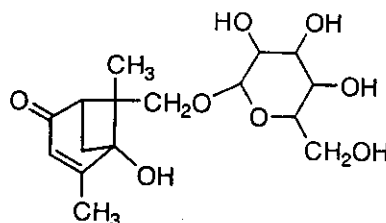
[基原] *Paeonia suffruticosa*, *Cnidium sialaifolium*
[性状] 結晶
[融点] Mp 166-169 °C (153-159 °C)
[比旋光度]: $[\alpha]_D +29.9$ (c, 0.7 in MeOH) (+3.3)

-----文献-----

Lin, H.-C. et al., *Phytochemistry*, 1996, 41, 237, (Mudanpioside F)

§ **1,8-Dihydroxy-2-pinen-4-one; (1*S*,5*R*,6*R*)-form, 8-*O*-β-D-Glucopyranoside**

[化学名・別名] Mudanpioside G
[CAS No.] 231280-70-9
[化合物分類] テルペノイド (Pinane monoterpeneoids)
[構造式]
[分子式] C₁₆H₂₄O₈
[分子量] 344.361



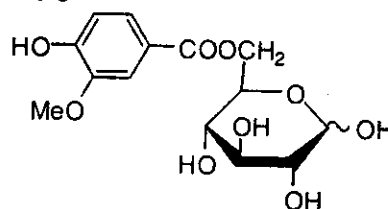
[基原] *Paeonia suffruticosa*
[性状] シロップ
[比旋光度]: $[\alpha]_D -46.8$ (c, 0.24 in MeOH)
UV: [neutral] λ_{max} 257 (log ϵ 3.8) (MeOH)

-----文献-----

Ding, H.-Y. et al., *Chem. Pharm. Bull.*, 1999, 47, 652-655, (Mudanpioside G)

§ **Mudanoside A**

[化学名・別名] 6-*O*-(4-Hydroxy-3-methoxybenzoyl) glucose. 6-*O*-Vanilloylglucose
[化合物分類] 単環芳香族 (Simple benzoic acids and esters)
[構造式]
[分子式] C₁₄H₁₈O₆
[分子量] 330.291



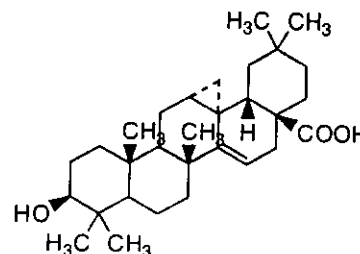
[基原] *Paeonia suffruticosa* の根皮
[性状] シロップ
[比旋光度]: $[\alpha]_D +24.6$ (c, 0.09 in MeOH)
UV: [neutral] λ_{max} 220 (log ϵ 4.1); 262 (log ϵ 3.9); 293 (log ϵ 3.6) (MeOH)

-----文献-----

Ding, H.-Y. et al., *Chem. Pharm. Bull.*, 1999, 47, 652-655

§ **Mudanpinoic acid**

[CAS No.] 203511-36-8
[化合物分類] テルペノイド
(Nor-, seco- and cyclotaraxerane triterpenoids)
[構造式]
[分子式] C₃₀H₄₆O₃
[分子量] 454.692
[基原] *Paeonia suffruticosa*



UV: [neutral] λ_{\max} 208 (log ϵ 3.83) (EtOH)

-----文献-----

Lin, H.-C. et al., J. Nat. Prod., 1998, 61, 343-346, (分離, H-NMR, C13-NMR, Mass, 結晶構造)

§ 11,13(18)-Oleanadiene-3,23,28-triol; 3 β -form, 28-Carboxylic acid

[化学名・別名] 3,23-Dihydroxy-11,13(18)-oleanadien-28-oic acid

[CAS No.] 84164-71-6

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

[構造式]

[分子式] $C_{30}H_{46}O_4$

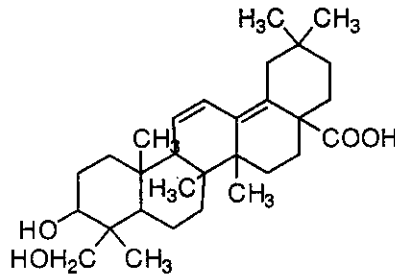
[分子量] 470.691

[基原] *Paeonia suffruticosa*

[性状] 粉末

[融点] Mp 273-276 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{21} +1.18$ (c, 0.51 in $CHCl_3$)



-----文献-----

Agarwal, S.K. et al., Indian J. Chem., 1974, 12, 907, (分離)

Wang, G. et al., Chin. Sci. Bull., 1994, 39, 1969-1972, (Cirensenosides)

Hartleb, I. et al., Phytochemistry, 1995, 38, 221, (Songarosaponin E)

Ikuta, A. et al., Phytochemistry, 1995, 38, 1203, (Carboxylic acid)

Bhandari, S.P.S. et al., Phytochemistry, 1997, 45, 1717-1719, (Scrokoelzicide B)

Anam, E.M. et al., Indian J. Chem., Sect. B, 1998, 37, 1310-1313, (Saikosaponin K)

§ Paeoniflorigenone; Debenzoyl

[化学名・別名] Paeonisuffral

[CAS No.] 149420-74-6

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

[構造式]

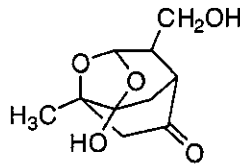
[分子式] $C_{10}H_{14}O_5$

[分子量] 214.218

[基原] *Paeonia suffruticosa*

[性状] 無定型の粉末

[比旋光度]: $[\alpha]_D +39.7$ (c, 0.6 in MeOH)



-----文献-----

Yoshikawa, M. et al., Chem. Pharm. Bull., 1993, 41, 630, (Paeonissuffral)

§ Paeoniflorigenone; Debenzoyl, 7-epimer

[化学名・別名] Isopaeonisuffral

[CAS No.] 158069-30-8

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

[構造式]

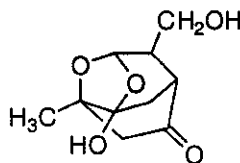
[分子式] $C_{10}H_{14}O_5$

[分子量] 214.218

[基原] *Paeonia suffruticosa*

[性状] 無定型の粉末

[比旋光度]: $[\alpha]_D -27.3$ (MeOH)



-----文献-----

Yoshikawa, M. et al., Chem. Pharm. Bull., 1994, 42, 736, (Isopaeonisuffral)

§ Paeoniflorin

[化学名・別名] Peoniflorin

[CAS No.] 23180-57-6

[化合物分類] 薬物: 鎮痙薬 (Antispasmodics), テルペノイド (Pinane monoterpenoids), 薬物: 抗炎症薬 (Antiinflammatory agents), 薬物: 抗利尿薬 (Antidiuretic agents), 薬物: 抗高血圧薬 (Antihypertensive agents)

[構造式]

[分子式] $C_{23}H_{28}O_{11}$

agents)

[構造式]

[分子式] $C_{25}H_{38}O_{11}$

[分子量] 480.468

[基原] *Paeonia albiflora*. また, *Paeonia japonica*, *Paeonia suffruticosa*, *Paeonia officinalis*

[用途] 抗炎症, 鎮痙薬, 抗高血圧薬, 強い抗利尿作用

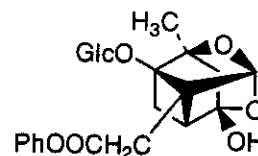
[性状] 無定型

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{25} -12.8$ (c, 4.6 in MeOH)

[Log P 計算値] Log P -2.88 (未確認値) (計算値)

UV: [neutral] λ_{max} 231 (11200); 267 (sh) (1410); 274 (1450); 281 (1200) (EtOH) (Derep)

[化学物質毒性データ総覧 (RTECS) 登録番号] RT1200000



-----文献-----

Aimi, N. et al., Tetrahedron, 1969, 25, 1825, (分離)

Kaneda, M. et al., Tetrahedron, 1972, 28, 4309, (Oxypaeoniflorin)

Nicolaou, K.C. et al., Classics in Total Synthesis, Targets, Strategies, Methods, VCH, 1996, 633, (成書, 合成法)

***RTECS (化学物質毒性データ) ***

生体影響物質 : 医薬品, 天然物.

健康障害に関するデータ

急性毒性に関するデータ

<<試験方法>> 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 : 3530 mg/kg

毒性影響 : [行動] 傾眠 (全身活動度の低下).

参考文献

Yakugaku Zasshi. Journal of Pharmacy. (Nippon Yakugakkai, 2-12-15 Shibuya, Shibuya-ku, Tokyo 150, Japan) 89,899,1969

<<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 : 9530 mg/kg

毒性影響 : [行動] 睡眠.

[行動] 傾眠 (全身活動度の低下).

参考文献

Yakugaku Zasshi. Journal of Pharmacy. (Nippon Yakugakkai, 2-12-15 Shibuya, Shibuya-ku, Tokyo 150, Japan) 89,899,1969

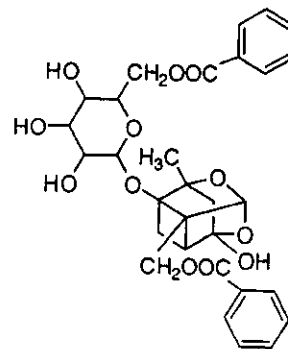
§ Paeoniflorin; 6'-O-Benzoyl

[化学名・別名] Benzoylpaeoniflorin

[CAS No.] 38642-49-8

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

[構造式]



[分子式] $C_{30}H_{32}O_{12}$

[分子量] 584.576

[基原] *Paeonia suffruticosa*

UV: [neutral] λ_{max} 230 (24000); 267 (sh) (1510); 274 (1820); 281 (1480) (EtOH) (Derep)

-----文献-----

Murakami, N. et al., Chem. Pharm. Bull., 1996, 44, 1279, (Oxybenzoylpaeoniflorin)

Nicolaou, K.C. et al., Classics in Total Synthesis, Targets, Strategies, Methods, VCH, 1996, 633, (成書, 合成法)

§ Paeoniflorin; 6'-(4-Hydroxybenzoyl)

[CAS No.]172760-03-1

[化合物分類]テルペノイド (Pinane monoterpenoids)

[構造式]

[分子式] $C_{30}H_{32}O_{13}$

[分子量] 600.575

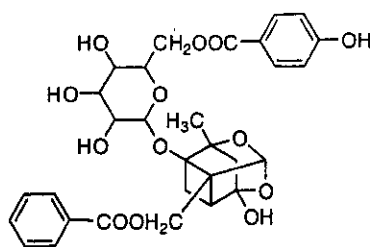
[基原] *Paeonia suffruticosa*, *Paeonia lactifolia*

[性状] 結晶

[融点] Mp 145-150 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D -24.9$ (c, 0.1 in MeOH)

UV: [neutral] λ_{max} 227 (log ϵ 4.1); 260 (log ϵ 4) (溶媒に関する報告はない)



-----文献-----

Kaneda, M. et al., Tetrahedron, 1972, 28, 4309, (Oxypaeoniflorin)

Murakami, N. et al., Chem. Pharm. Bull., 1996, 44, 1279, (Oxybenzoylpaeoniflorin)

Nicolaou, K.C. et al., Classics in Total Synthesis, Targets, Strategies, Methods, VCH, 1996, 633, (成書, 合成法)

§ Paeoniflorin; 6'-(4-Methoxybenzoyl)

[化学名・別名] Mudanpioside A

[CAS No.] 172705-22-5

[化合物分類]テルペノイド (Pinane monoterpenoids)

[構造式]

[分子式] $C_{31}H_{34}O_{13}$

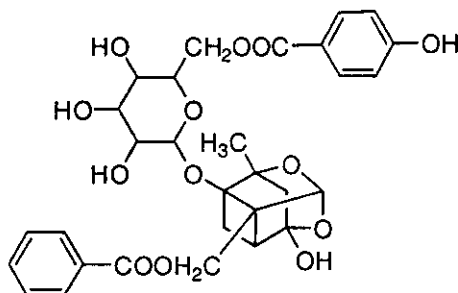
[分子量] 614.602

[基原] *Paeonia suffruticosa*

[性状] 結晶

[融点] Mp 115-121 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D -6.9$ (c, 0.06 in MeOH)



-----文献-----

Lin, H.-C. et al., Phytochemistry, 1996, 41, 237, (Mudanpiosides)

§ Paeoniflorin; 6'-O-(3,4,5-Trihydroxybenzoyl)

[化学名・別名] Galloylpaeoniflorin

[CAS No.] 122965-41-7

[化合物分類]テルペノイド (Pinane monoterpenoids)

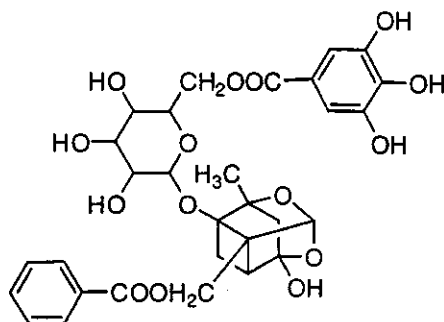
[構造式]

[分子式] $C_{30}H_{32}O_{15}$

[分子量] 632.574

[基原] *Paeonia suffruticosa*

[その他のデータ] Substituted in the glycosyl residue



-----文献-----

Nicolaou, K.C. et al., Classics in Total Synthesis, Targets, Strategies, Methods, VCH, 1996, 633, (成書, 合成法)

Lin, H.-C. et al., Phytochemistry, 1996, 41, 237, (Mudanpiosides)

§ Paeoniflorin; 8-O-Debenzoyl, 6'-O-benzoyl

[化学名・別名] Mudanpioside I

[CAS No.] 231280-72-1

[化合物分類]テルペノイド (Pinane monoterpenoids)

[構造式]

[分子式] $C_{23}H_{28}O_{11}$

[分子量] 480.468

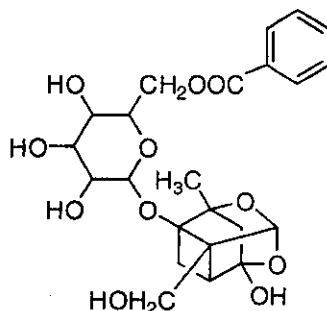
[基原] *Paeonia suffruticosa*

[性状] 粉末

[融点] Mp 123-125 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D -9.2$ (c, 0.38 in MeOH)

UV: [neutral] λ_{max} 230 (log ϵ 4.1) (MeOH)



-----文献-----

Lin, H.-C. et al., Phytochemistry, 1996, 41, 237, (Mudanpiosides)

UV: [neutral] λ_{\max} 230 (log ϵ 4.1) (MeOH)

-----文献-----

Lin, H.-C. et al., *Phytochemistry*, 1996, 41, 237, (Mudanpiosides)

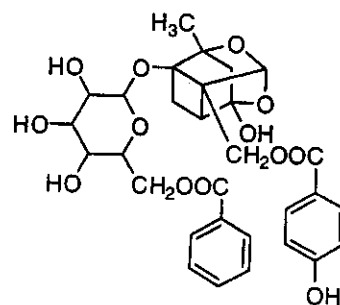
Ding, H.-Y. et al., *Chem. Pharm. Bull.*, 1999, 47, 652-655, (Mudanpiosides H and I)

§ **Paeoniflorin; 4''-Hydroxy, 6'-benzoyl**

[化学名・別名] Benzoyloxypaeoniflorin

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

[構造式]



[分子式] $C_{30}H_{32}O_{13}$

[分子量] 600.575

[基原] *Paeonia suffruticosa*

-----文献-----

Aimi, N. et al., *Tetrahedron*, 1969, 25, 1825, (分離)

Kaneda, M. et al., *Tetrahedron*, 1972, 28, 4309, (Oxypaeoniflorin)

Murakami, N. et al., *Chem. Pharm. Bull.*, 1996, 44, 1279, (Oxybenzoylpaeoniflorin)

Nicolaou, K.C. et al., *Classics in Total Synthesis, Targets, Strategies, Methods*, VCH, 1996, 633, (成書, 合成法)

§ **Paeoniflorin; 4''-Hydroxy, 6'-(4-hydroxybenzoyl)**

[化学名・別名] Mudanpioside H

[CAS No.] 231280-71-0

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

[構造式]

[分子式] $C_{30}H_{32}O_{14}$

[分子量] 616.574

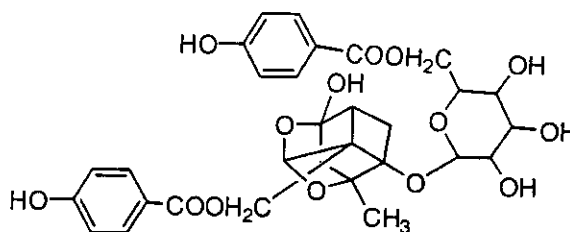
[基原] *Paeonia suffruticosa*

[性状] 粉末

[融点] Mp 159-161 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D -10.5$ (c, 0.23 in MeOH)

UV: [neutral] λ_{\max} 258 (log ϵ 4.5) (MeOH)



-----文献-----

Ding, H.-Y. et al., *Chem. Pharm. Bull.*, 1999, 47, 652-655, (Mudanpiosides H and I)

§ **Paeoniflorin; 4''-Hydroxy, 6'-(4-methoxybenzoyl)**

[化学名・別名] Mudanpioside B

[CAS No.] 172705-23-6

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

[構造式]

[分子式] $C_{31}H_{34}O_{14}$

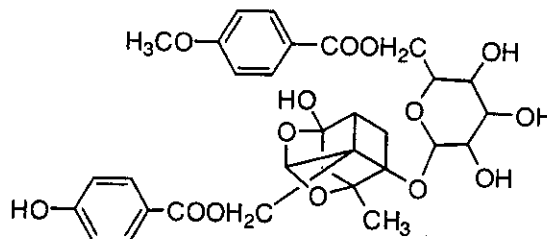
[分子量] 630.601

[基原] *Paeonia suffruticosa*

[性状] 結晶

[融点] Mp 140-144 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D -12.1$ (c, 0.06 in MeOH)



-----文献-----

Lin, H.-C. et al., *Phytochemistry*, 1996, 41, 237, (Mudanpiosides)

Ding, H.-Y. et al., *Chem. Pharm. Bull.*, 1999, 47, 652-655, (Mudanpiosides H and I)

§ **Paeoniflorin; 4''-Hydroxy, 6'-(3,4,5-trihydroxybenzoyl)**

[化学名・別名] Galloyloxypaeoniflorin

[CAS No.] 145898-93-7

[化合物分類] タンニン化合物 (Simple gallate ester tannins).

[構造式]

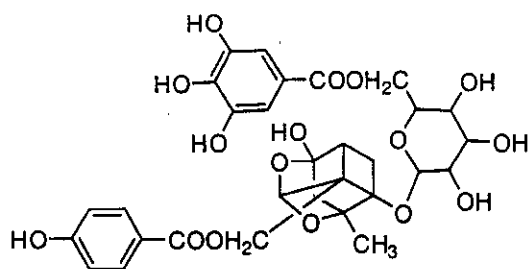
[分子式] $C_{30}H_{32}O_{16}$

[分子量] 648.573

[基原] *Paeonia suffruticosa*

[性状] 粉末

[比旋光度]: $[\alpha]_D -27.3$ (EtOH)



-----文献-----

Aimi, N. et al., *Tetrahedron*, 1969, 25, 1825, (分離)

Kaneda, M. et al., *Tetrahedron*, 1972, 28, 4309, (Oxypaeoniflorin)

Murakami, N. et al., *Chem. Pharm. Bull.*, 1996, 44, 1279, (Oxybenzoylpaeoniflorin)

Nicolaou, K.C. et al., *Classics in Total Synthesis, Targets, Strategies, Methods*, VCH, 1996, 633, (成書, 合成法)

§ Paeoniflorin; 4''-Methoxy

[化学名・別名] Mudanpioside D

[CAS No.] 172705-24-7

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

[構造式]

[分子式] $C_{24}H_{30}O_{12}$

[分子量] 510.494

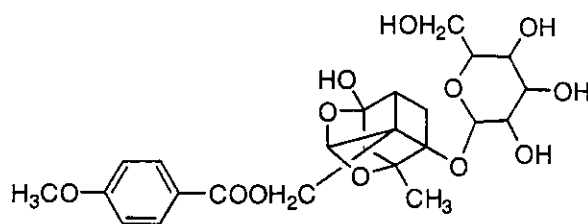
[基原] *Paeonia suffruticosa*

[性状] 結晶

[融点] Mp 122-127 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D -15.2$ (c, 0.1 in MeOH)

[その他のデータ] Conts. 4-methoxybenzoyl residue



-----文献-----

Lin, H.-C. et al., *Phytochemistry*, 1996, 41, 237, (Mudanpiosides)

§ Paeoniflorin; 3''-Methoxy, 4''-hydroxy

[化学名・別名] Mudanpioside E

[CAS No.] 172705-25-8

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

[構造式]

[分子式] $C_{24}H_{30}O_{13}$

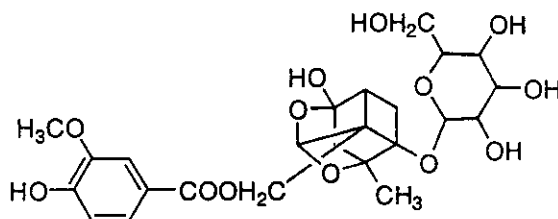
[分子量] 526.493

[基原] *Paeonia suffruticosa*

[性状] 結晶

[融点] Mp 134-140 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D -19.8$ (c, 0.1 in MeOH)



-----文献-----

Lin, H.-C. et al., *Phytochemistry*, 1996, 41, 237, (Mudanpiosides)

§ Paeoniisothujone

[CAS No.] 158204-37-6

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

[構造式]

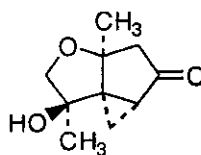
[分子式] $C_{10}H_{14}O_3$

[分子量] 182.219

[基原] *Paeonia suffruticosa*

[性状] 無定型の粉末

[比旋光度]: $[\alpha]_D -15.1$ (MeOH)



-----文献-----

Yoshikawa, M. et al., *Chem. Pharm. Bull.*, 1994, 42, 736, (分離, H-NMR, C13-NMR, 絶対構造)

§ Paeonisuffrone