

-----文献-----

Zincke, T., Annalen, 1902, 322, 224, (分離)  
 Ogawa, S., Bull. Chem. Soc. Jpn., 1927, 2, 25, (分離)  
 Karrer, W. et al., Konstitution und Vorkommen der Organischen Pflanzenstoffe, 2nd edn., Birkhäuser Verlag, Basel, 1972, nos. 951; 953; 955, (生育)

\*\*\*RTECS (化学物質毒性データ)\*\*\*

生体影響物質 : 医薬品.

\*\*\*健康障害に関するデータ\*\*\*

\*\*\*急性毒性に関するデータ\*\*\*

<<試験方法>> 認知されている最低致死量に関する試験

曝露経路 : 報告なし.

被験動物 : げっ歯類-ラット.

投与量・期間 : 200 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

Biochemical Pharmacology. (Pergamon Press Inc., Maxwell House, Fairview Park, Elmsford, NY 10523)  
 14,1325,1965

\*\*\*\*\*マツシユルム (Mushroom) \*\*\*\*\*

§ § マツタケ科ツクリタケ (*Agaricus bisporus* (Lange) Sing.) の子実体.

§ Agaritine; (S)-form

[化学名・別名] L-form

[化合物分類] アミノ酸とペプチド (Non-protein  $\alpha$ -aminoacids)

[構造式]

[分子式]  $C_{12}H_{17}N_3O_4$

[分子量] 267.2284

[基原] ハラタケ科のいくつかの植物成分, 特に *Agaricus bisporus*

[用途] Prevention of melanin formation. Tyrosinase inhibitor

[性状] 結晶 (EtOH/butanol)

[融点] Mp 205-209 °C で分解

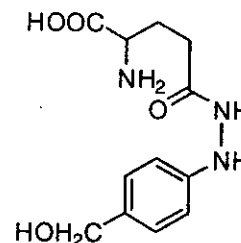
[比旋光度]:  $[\alpha]_D^{25} +7$  (c, 0.8 in H<sub>2</sub>O)

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

[PKa 値] pK<sub>a</sub> 8.86 (H<sub>2</sub>O)

UV: [neutral]  $\lambda_{max}$  237 ( $\epsilon$  12000); 280 ( $\epsilon$  1400) (H<sub>2</sub>O) (Berdy)

[傷害・毒性] A procarcinogen



-----文献-----

Daniels, E.G. et al., J.O.C., 1962, 27, 3229, (分離, 合成法)

Levenberg, B., J. Biol. Chem., 1964, 239, 2267, (分離, 構造決定)

Chauhan, Y.S. et al., J. Agric. Food Chem., 1984, 32, 676; 1985, 33, 817, (誘導体)

Datta, S. et al., Helv. Chim. Acta, 1987, 70, 1261, (合成法, IR, H-NMR, 成書)

§ Agaritine; (S)-form, 7'-Carboxylic acid

[化学名・別名] N<sup>2</sup>-( $\gamma$ -Glutamyl)-4-carboxyphenylhydrazine

[CAS No.] 69644-85-5

[化合物分類] アミノ酸とペプチド (Non-protein  $\alpha$ -aminoacids)

[構造式]

[分子式]  $C_{12}H_{15}N_3O_5$

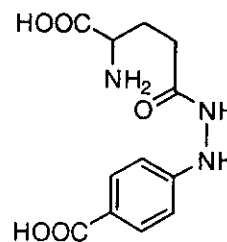
[分子量] 281.268

[基原] 次の植物から分離: *Agaricus bisporus*

[融点] Mp 175 °C

[その他のデータ] Anthglutin の異性体

[化学物質毒性データ総覧 (RTECS) 登録番号] MA0955600



-----文献-----

Daniels, E.G. et al., J.O.C., 1962, 27, 3229, (分離, 合成法)

Levenberg, B., J. Biol. Chem., 1964, 239, 2267, (分離, 構造決定)

-----文献-----

Weaver, R.F. et al., J. Biol. Chem., 1971, 246, 2013-2018, (分離, 合成法)

§ **Glutamine; (S)-form, N<sup>ε</sup>-(4-Hydroxyphenyl)**

[化学名・別名]  $\gamma$ -Glutaminy-4-hydroxybenzene

[CAS No.] 30382-24-2

[化合物分類] アミノ酸とペプチド (Non-protein  $\alpha$ -aminoacids)

[構造式]

[分子式] C<sub>11</sub>H<sub>14</sub>N<sub>2</sub>O<sub>4</sub>

[分子量] 238.243

[基原] 次の食用キノコのすべての組織から分離: *Agaricus bisporus*, *Agaricus hortensis*

[用途] 新生腫瘍阻害

[融点] Mp 231.5 °C (225-226 °C)

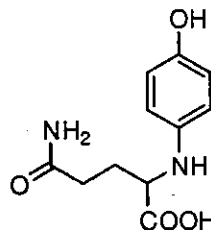
[比旋光度]:  $[\alpha]_D^{20} +30$  (1 M HCl)

[溶解性] BERDY SOL: 水に可溶; メタノールに易溶

UV: [neutral]  $\lambda_{max}$  246 (H<sub>2</sub>O) (Berdy) [acid]  $\lambda_{max}$  246 (HCl) (Berdy) [base]  $\lambda_{max}$  260 (NaOH) (Berdy)

[傷害・毒性] BERDY HAZD : 50 %致死量 (LD<sub>50</sub>) (マウス, 腹膜内) 5000 mg/kg

[化学物質毒性データ総覧 (RTECS) 登録番号] MA2276400



-----文献-----

Weaver, R.F. et al., J. Biol. Chem., 1971, 246, 2010, ( $\gamma$ -Glutaminy-4-hydroxybenzene)

Jaeger, P. et al., N. Engl. J. Med., 1986, 315, 1120, (レビュー)

Tachiki, T. et al., Prog. Ind. Microbiol., 1986, 24, 121, (レビュー, 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 : 5 gm/kg

毒性影響 : [免疫:含アレルギー] 免疫反応の低下.

参考文献

German Offenlegungsschrift Patent Document. (U.S. Patent and Trademark Office, Foreign Patents, Washington, DC 20231) 2810095

§ **2-Hydroxy-4-imino-2,5-cyclohexadienone**

[化学名・別名] 2-Hydroxy-1,4-benzoquinone-4-imine. 4-Amino-3,5-cyclohexadiene-1,2-dione. 490 Quinone

[CAS No.] 74331-93-4

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

[構造式]

[分子式] C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>NO<sub>2</sub>

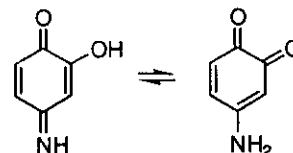
[分子量] 123.111

[一般的性質] Unstable except at high dilutions. Prob. exists as 4-amino tautomer

[基原] Red pigment found in the sporulating gill tissue of キノコ *Agaricus bisporus*

[用途] SH グループを含む酵素の強い阻害因子

[その他のデータ]  $\lambda_{max}$  490 nm



-----文献-----

Bockelheide, K. et al., J. Biol. Chem., 1980, 255, 4766

§ **10-Oxo-8-decenoic acid; (E)-form**

[CAS No.] 69152-89-2

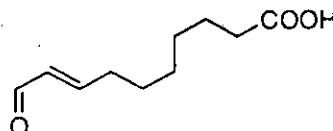
[化合物分類] 脂肪族化合物 (Unbranched alkenic carboxylic acids and lactones), 脂肪族化合物 (Unbranched alkenic aldehydes and ketones)

[構造式]

[分子式] C<sub>10</sub>H<sub>16</sub>O<sub>2</sub>

[分子量] 184.235

[基原] キノコ *Agaricus bisporus*, *Lepista nebularis*



§ 2-Hydroxy-4-imino-2,5-cyclohexadienone

[化学名・別名] 2-Hydroxy-1,4-benzoquinone-4-imine. 4-Amino-3,5-cyclohexadiene-1,2-dione. 490 Quinone

[CAS No.] 74331-93-4

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

[構造式]

[分子式]  $C_6H_5NO_2$

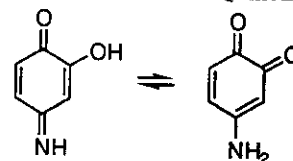
[分子量] 123.111

[一般的性質] Unstable except at high dilutions. Prob. exists as 4-amino tautomer

[基原] Red pigment found in the sporulating gill tissue of キノコ *Agaricus bisporus*

[用途] SH グループを含む酵素の強い阻害因子

[その他のデータ]  $\lambda_{max}$  490 nm



-----文献-----

Bockelheide, K. et al., J. Biol. Chem., 1980, 255, 4766

§ 10-Oxo-8-decenoic acid; (E)-form

[CAS No.] 69152-89-2

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

[構造式]

[分子式]  $C_{10}H_{18}O_2$

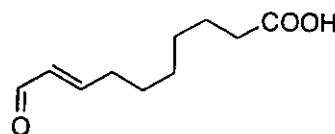
[分子量] 184.235

[基原] キノコ *Agaricus bisporus*, *Lepista nebularis*

[性状] 結晶 (EtOAc)

[融点] Mp 49-51 °C

[販売元] Sigma:O1261



-----文献-----

Mau, J.L. et al., Diss. Abstr. Int., B, 1992, 53, 2115, (分離)

Mau, J.L. et al., Phytochemistry, 1992, 31, 4059, (分離)

Pang, Z. et al., Acta Chem. Scand., 1994, 48, 408, (分離)

§ § マツタケ科ハラタケ (*Agaricus campestris* L.) の子実体。

§ Agaridoxin; (S)-form

[化学名・別名] L-form

[化合物分類] アミノ酸とペプチド (Non-protein  $\alpha$ -aminoacids)

[構造式]

[分子式]  $C_{11}H_{16}N_2O_5$

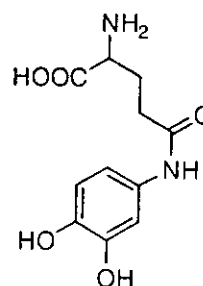
[分子量] 254.242

[基原] *Agaricus campestris*

[性状] 灰-白色の粉末 (MeOH 溶液)

[融点] Mp 220-221 °C

[その他のデータ] 空気中で黒変する



-----文献-----

Szent-Gyorgyi, A., J.O.C., 1976, 41, 1603, (合成法)

§ Agaritine; (S)-form, 7'-Aldehyde

[化学名・別名] *N*'-( $\gamma$ -Glutamyl)-4-formylphenylhydrazine. Agaritinal

[CAS No.] 114847-20-0

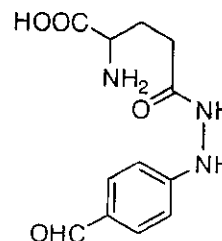
[化合物分類] アミノ酸とペプチド (Non-protein  $\alpha$ -aminoacids)

[構造式]

[分子式]  $C_{12}H_{15}N_3O_3$

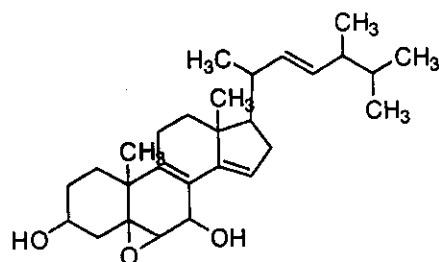
[分子量] 265.268

[基原] 次の植物から分離: *Agaricus campestris*



[化合物分類]ステロイド (Ergostane steroids;excluding withanolides and brassinolides). (C28).

[構造式]



[分子式]  $C_{28}H_{42}O_3$

[分子量] 426.638

[基原] *Tricholoma matsutake*

[性状] 無定形の粉末

[比旋光度]:  $[\alpha]_D^{25} -61.9$  (c, 0.1 in  $CHCl_3$ )

-----文献-----

Ohnuma, N. et al., Chem. Pharm. Bull., 2000, 48, 749-751, (分離, H-NMR, C13-NMR)

\*\*\*\*\*マツブサ (Matsubusa) \*\*\*\*\*

§ § ウリ科マツブサ (*Schisandra nigra* Maximowicz) の萜基。

### § 2-Dodecanone

[CAS No.] 6175-49-1

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

[構造式]  $H_3C(CH_2)_{10}COCH_3$

[分子式]  $C_{12}H_{24}O$

[分子量] 184.321

[基原] ヘンルーダオイル, 魚類揮発成分, トマト葉オイル, *Cannabis sativa* のオイル, またホップオイル (*Humulus lupulus*), oil of *Schisandra nigra* のオイルからも得られる

[用途] 抗カビ剤

[融点] Mp 21 °C

[沸点] Bp<sub>100</sub> 177-178 °C. Bp<sub>3.5</sub> 101 °C

[屈折率]  $n_D^{20}$  1.434

[販売元] Rare Chemicals Library:S55938-5; Other:PB D5607

-----文献-----

Hokanson, E.C. et al., J.O.C., 1985, 50, 462, (合成法, H-NMR)

McDowell, P.G. et al., Phytochemistry, 1988, 27, 2519, (分離)

### § 3,4-Secocycloartane-4(28),24-diene-3,26-dioic acid; (24Z)-form

[化学名・別名] Nigranoic acid

[CAS No.] 39111-07-4

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

[構造式]

[分子式]  $C_{30}H_{46}O_4$

[分子量] 470.691

[基原] *Schisandra sphaerandra*, *Schisandra nigra*

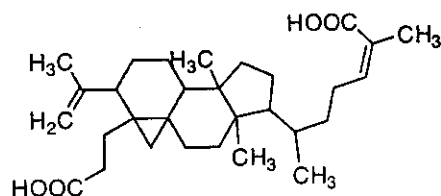
[性状] 針状結晶

[融点] Mp 128-130 °C

[比旋光度]:  $[\alpha]_D +61.5$  (c, 1.15 in MeOH)

-----文献-----

Sun, H. et al., J. Nat. Prod., 1996, 59, 525-527, (Nigranoic acid)



\*\*\*\*\*マツホド (Matsuhodo) \*\*\*\*\*

§ § サルノコシカケ科ブクリヨウキン (*Poria cocos* Wolf) の菌核。

Hokanson, E.C. et al., J.O.C., 1985, 50, 462. (合成法, H-NMR)  
McDowell, P.G. et al., Phytochemistry, 1988, 27, 2519, (分離)

§ 3,4-Secocycloarta-4(28),24-diene-3,26-dioic acid; (24Z)-form

[化学名・別名] Nigranoic acid

[CAS No.] 39111-07-4

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

[構造式]

[分子式]  $C_{30}H_{46}O_4$

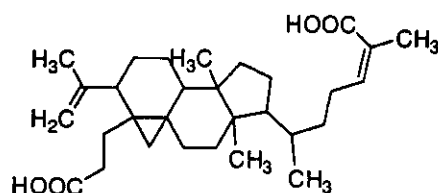
[分子量] 470.691

[基原] *Schisandra sphaerandra*, *Schisandra nigra*

[性状] 針状結晶

[融点] Mp 128-130 °C

[比旋光度]:  $[\alpha]_D^{25} +61.5$  (c, 1.15 in MeOH)



-----文献-----

Sun, H. et al., J. Nat. Prod., 1996, 59, 525-527, (Nigranoic acid)

\*\*\*\*\*マツホド (Matsuhodo) \*\*\*\*\*

§ § サルノコシカケ科ブクリョウキン (*Poria cocos* Wolf) の菌核。

§ 3,16-Dihydroxylanosta-8,24-dien-21-oic acid; (3 $\beta$ ,16 $\alpha$ )-form

[化学名・別名] 16 $\alpha$ -Hydroxytrametenolic acid

[CAS No.] 176390-68-4

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

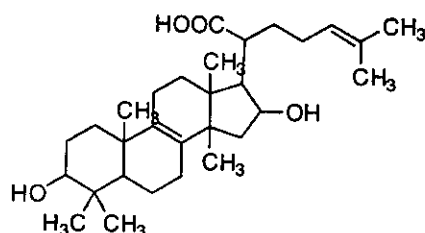
[構造式]

[分子式]  $C_{30}H_{48}O_4$

[分子量] 472.707

[基原] *Poria cocos*

[性状] 無定型の粉末



-----文献-----

Tai, T. et al., Phytochemistry, 1995, 40, 225, (分離, H-NMR, C13-NMR, Ac)

Nukaya, H. et al., Chem. Pharm. Bull., 1996, 44, 847-849, (分離, C13-NMR)

§ 3,16-Dihydroxylanosta-8,24-dien-21-oic acid; (3 $\beta$ ,16 $\alpha$ )-form, 3-Ac

[CAS No.] 168293-13-8

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

[構造式]

[分子式]  $C_{32}H_{50}O_5$

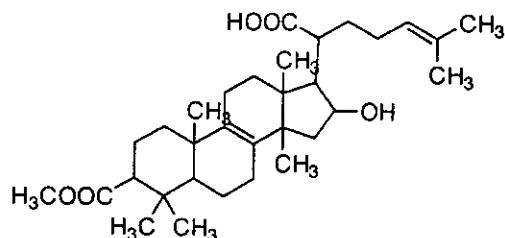
[分子量] 514.744

[基原] *Poria cocos*

[性状] 針状結晶 (MeOH)

[融点] Mp 300 °C

[比旋光度]:  $[\alpha]_D^{25} +7$  (c, 1 in Py)



-----文献-----

Tai, T. et al., Phytochemistry, 1995, 40, 225, (分離, H-NMR, C13-NMR, Ac)

Nukaya, H. et al., Chem. Pharm. Bull., 1996, 44, 847-849, (分離, C13-NMR)

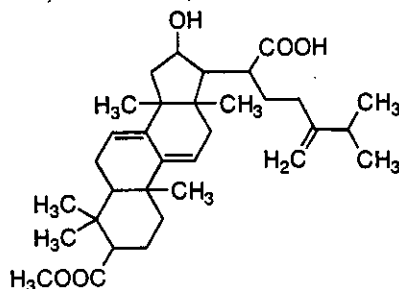
Rösecke, J. et al., Phytochemistry, 1999, 52, 1621-1627, (Pinicolic acid B)

Rösecke, J. et al., Phytochemistry, 2000, 54, 603-610, (Pinicolic acid E)

§ 3,16-Dihydroxylanosta-7,9(11),24-trien-21-oic acid; (3 $\beta$ ,16 $\alpha$ )-form

§ 3,16-Dihydroxy-24-methylenelanosta-7,9(11)-dien-21-oic acid; (3  $\alpha$ ,16  $\alpha$ )-form, 3-Ac

[化学名・別名] 3-Epidehydropachymic acid  
 [化合物分類] テルペノイド (Lanostane triterpenoids)  
 [構造式]  
 [分子式]  $C_{33}H_{50}O_5$   
 [分子量] 526.755  
 [基原] *Poria cocos*  
 [性状] 針状結晶 (MeOH)  
 [融点] Mp 274-275 °C  
 [比旋光度]:  $[\alpha]_D^{26} -8$  (c, 0.1 in Py)

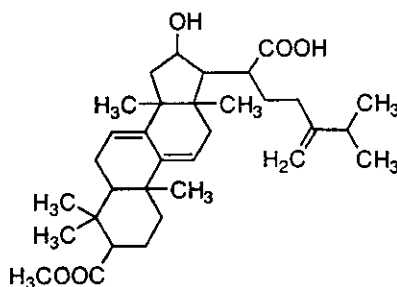


-----文献-----

Tai, T. et al., *Phytochemistry*, 1992, 31, 2554; 1995, 39, 1165; 40, 225, (Dehydropachymic acid, 3-Epidehydropachymic acid)

§ 3,16-Dihydroxy-24-methylenelanosta-7,9(11)-dien-21-oic acid; (3  $\beta$ ,16  $\alpha$ )-form, 3-Ac

[化学名・別名] Dehydropachymic acid  
 [CAS No.] 77012-31-8  
 [化合物分類] AJ1750, テルペノイド (Lanostane triterpenoids)  
 [構造式]  
 [分子式]  $C_{33}H_{50}O_5$   
 [分子量] 526.755  
 [基原] *Poria cocos*  
 [性状] 結晶 (MeOH)  
 [融点] Mp 268-270 °C  
 [比旋光度]:  $[\alpha]_D^{26} +41$  (c, 1 in Py)

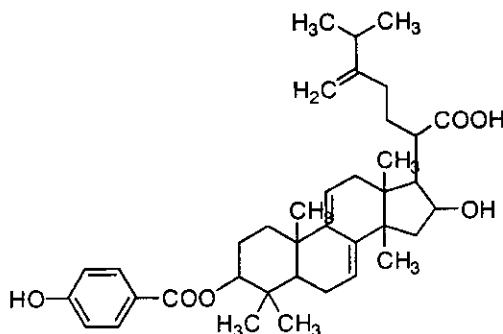


-----文献-----

Tai, T. et al., *Phytochemistry*, 1992, 31, 2554; 1995, 39, 1165; 40, 225, (Dehydropachymic acid, 3-Epidehydropachymic acid)

§ 3,16-Dihydroxy-24-methylenelanosta-7,9(11)-dien-21-oic acid; (3  $\beta$ ,16  $\alpha$ )-form, 3-(4-Hydroxybenzoyl)

[CAS No.] 213764-76-2  
 [化合物分類] テルペノイド (Lanostane triterpenoids)  
 [構造式]  
 [分子式]  $C_{38}H_{52}O_6$   
 [分子量] 604.825  
 [基原] *Poria cocos*  
 [性状] 針状結晶 (Py/hexane)  
 [融点] Mp 242-244 °C  
 [比旋光度]:  $[\alpha]_D +40$  (c, 0.2 in MeOH)  
 UV: [neutral]  $\lambda_{max}$  243 ; 251 (MeOH)



-----文献-----

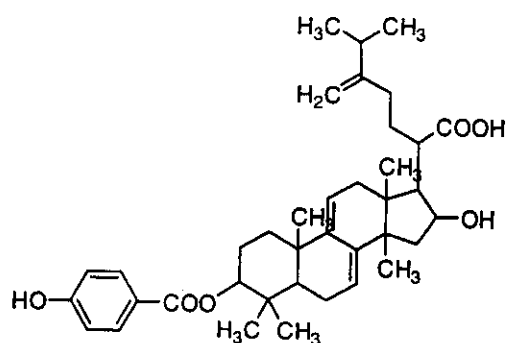
Yokoyama, A. et al., *Phytochemistry*, 1975, 14, 487, (成書, Polyporenic acid C)

Tai, T. et al., *Phytochemistry*, 1992, 31, 2554; 1995, 39, 1165; 40, 225, (Dehydropachymic acid, 3-Epidehydropachymic acid)

§ 3,16-Dihydroxy-24-methylenelanost-8-en-21-oic acid; (3  $\beta$ ,16  $\alpha$ )-form, 3-Ac

[CAS No.] 213764-76-2  
[化合物分類] テルペノイド (Lanostane triterpenoids)  
[構造式]

[分子式]  $C_{30}H_{52}O_6$   
[分子量] 604.825  
[基原] *Poria cocos*  
[性状] 針状結晶 (Py/hexane)  
[融点] Mp 242-244 °C  
[比旋光度]:  $[\alpha]_D^{25} +40$  (c, 0.2 in MeOH)  
UV: [neutral]  $\lambda_{max}$  243; 251 (MeOH)



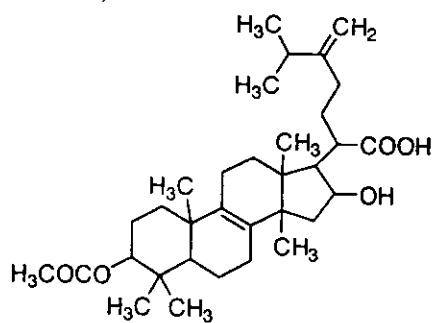
----- 文献 -----

Yokoyama, A. et al., *Phytochemistry*, 1975, 14, 487, (成書, Polyporenic acid C)  
Tai, T. et al., *Phytochemistry*, 1992, 31, 2554; 1995, 39, 1165; 40, 225, (Dehydropachymic acid, 3-Epidehydrotumulosic acid, 3-Epidehydropachymic acid)

§ 3,16-Dihydroxy-24-methylenelanost-8-en-21-oic acid; (3  $\beta$ , 16  $\alpha$ )-form, 3-Ac

[化学名・別名] Pachymic acid  
[CAS No.] 29070-92-6  
[化合物分類] テルペノイド (Lanostane triterpenoids)  
[構造式]

[分子式]  $C_{33}H_{54}O_5$   
[分子量] 528.771  
[基原] 次の植物から分離: *Poria cocos*, その他のカビ  
[用途] 抗炎症剤  
[融点] Mp 296-297 °C  
[比旋光度]:  $[\alpha]_D^{25} +17.7$  (Py)



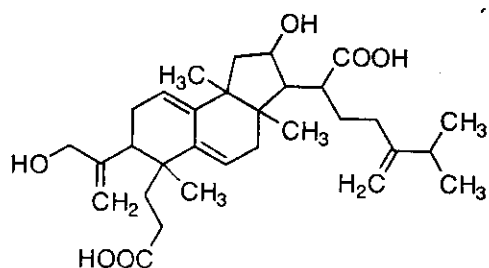
----- 文献 -----

Gine, E.M. et al., *Planta Med.*, 2000, 66, 221-224, (活性, Pachymic acid)

§ 16,28-Dihydroxy-24-methylene-3,4-secolanost-4(29),7,9(11)-triene-3,21-dioic acid; 16  $\alpha$ -form

[化学名・別名] Poricoic acid F  
[化合物分類] テルペノイド (Lanostane triterpenoids)  
[構造式]

[分子式]  $C_{31}H_{46}O_6$   
[分子量] 514.701  
[基原] *Poria cocos*  
[性状] 無定型の粉末 (as di-Me ester)  
[比旋光度]:  $[\alpha]_D^{25} +10$  (c, 0.1 in  $CHCl_3$ ) (di-Me ester)



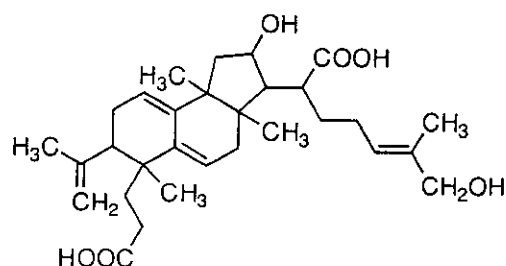
----- 文献 -----

Tai, T. et al., *Phytochemistry*, 1995, 39, 1165, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ 16,26-Dihydroxy-3,4-secolanosta-4(28),7,9(11),24-tetraene-3,21-dioic acid; (16  $\alpha$ , 24Z)-form

[化学名・別名] Poricoic acid E  
[化合物分類] テルペノイド (Lanostane triterpenoids)  
[構造式]

[分子式]  $C_{30}H_{48}O_6$   
[分子量] 500.674  
[基原] 次の植物から分離: *Poria cocos*  
[性状] 無定型の粉末  
[比旋光度]:  $[\alpha]_D^{25} +7$  (c, 1.0 in Py)



----- 文献 -----

Tai, T. et al., *Phytochemistry*, 1995, 39, 1165, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ 3-Hydroxylanosta-7,9(11),24-trien-21-oic acid; 3  $\beta$ -form

[CAS No.] 29220-16-4

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

[構造式]

[分子式]  $C_{30}H_{46}O_3$

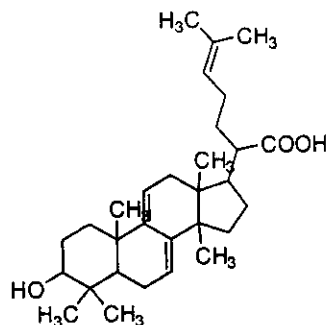
[分子量] 454.692

[基原] 次の植物の代謝物: *Poria cocos*

[性状] 結晶 (Et:O/2-propanol)

[融点] Mp 257-259 °C

[比旋光度]:  $[\alpha]_D^{25} +105$  (c, 0.1 in  $CHCl_3$ )



----- 文献 -----

Kanematsu, A. et al., Chem. Pharm. Bull., 1970, 18, 779

§ 3-Hydroxy-24-methylene-7,9(11)-lanostadien-21-oic acid; 3  $\beta$ -form

[化学名・別名] Dehydroeburicoic acid. Dehydroeburicollic acid

[CAS No.] 6879-05-6

[化合物分類] AJ1750, テルペノイド (Lanostane triterpenoids)

[構造式]

[分子式]  $C_{31}H_{48}O_3$

[分子量] 468.718

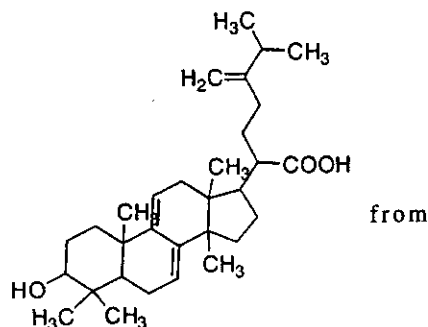
[基原] *Lentinus dactyloides*, *Antrodia cinnamomea*, *Fomes officinalis*. Also mycelia of *Poria cocos* and *Polyporus hispidus*

[性状] 結晶 (EtOAc)

[融点] Mp 286-288 °C

[比旋光度]:  $[\alpha]_D^{25} +40$  (c, 0.2 in  $CHCl_3$ ).  $[\alpha]_D^{25} +75$  (c, 0.11 in  $CHCl_3$ )

[その他のデータ] Agaricolic acid was a mixt. of mainly Dehydroeburicoic acid and Eburicoic acid



----- 文献 -----

Gascoigne, R.M. et al., J.C.S., 1953, 1830, (分離)

Cort, L.A. et al., J.C.S., 1954, 3713, (分離)

Schulte, K.E. et al., Tet. Lett., 1967, 4823, (分離)

Yang, S.-W. et al., Phytochemistry, 1996, 41, 1389-1392, (H-NMR, C13-NMR, Dehydroeburicoic acid)

§ Poricoic acid A

[化学名・別名] 16-Hydroxy-24-methylene-3,4-secolanosta-4(28),7,9(11)-triene-3,21-dioic acid

[CAS No.] 137551-38-3

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

[構造式]

[分子式]  $C_{31}H_{48}O_5$

[分子量] 498.701

[基原] *Poria cocos*

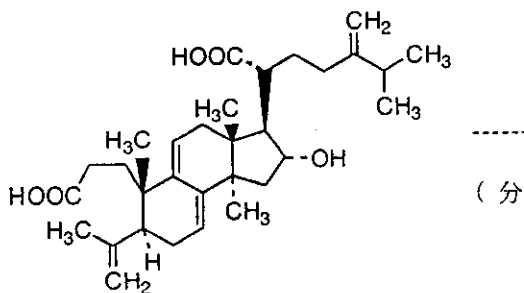
[性状] 結晶 (MeCN 溶液)

[融点] Mp 248-249 °C

[比旋光度]:  $[\alpha]_D^{26} +22$  (c, 1 in MeOH)

----- 文献 -----

Tai, T. et al., Phytochemistry, 1991, 30, 2796; 1993, 32, 1239, (分離, H-NMR, C13-NMR)



§ Poricoic acid A; 3-Me ester

[化学名・別名] Poricoic acid AM

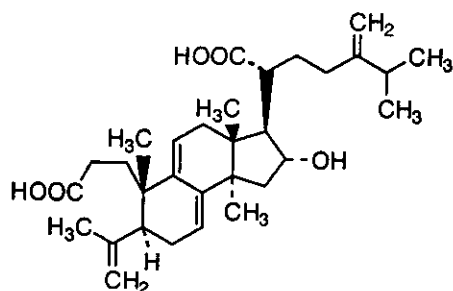
[化合物分類] テルペノイド (Lanostane triterpenoids)



[分子量] 498.701  
 [基原] *Poria cocos*  
 [性状] 結晶 (MeCN 溶液)  
 [融点] Mp 248-249 °C  
 [比旋光度]:  $[\alpha]_D^{26} +22$  (c, 1 in MeOH)

-----文献-----

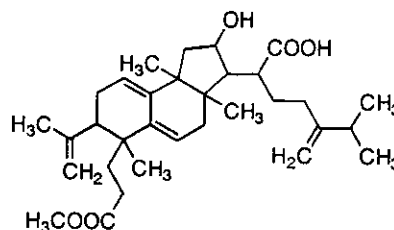
Tai, T. et al., *Phytochemistry*, 1991, 30, 2796; 1993, 32, 1239,  
 (分離, H-NMR, C13-NMR)



§ **Poricoic acid A; 3-Me ester**

[化学名・別名] Poricoic acid AM  
 [化合物分類] テルペノイド (Lanostane triterpenoids)

[構造式]  
 [分子式]  $C_{33}H_{48}O_5$   
 [分子量] 512.728  
 [基原] *Poria cocos*  
 [性状] 結晶 (MeOH/CHCl<sub>3</sub>)  
 [融点] Mp 220-222 °C  
 [比旋光度]:  $[\alpha]_D^{26} +21$  (c, 0.1 in MeOH)



-----文献-----

Tai, T. et al., *Phytochemistry*, 1991, 30, 2796; 1993, 32, 1239, (分離, H-NMR, C13-NMR)

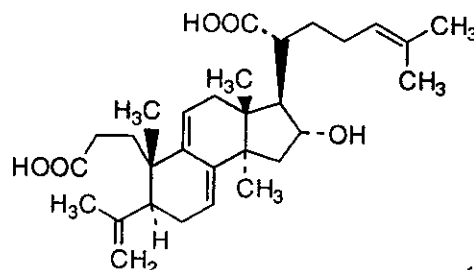
§ **Poricoic acid B**

[化学名・別名] 16-Hydroxy-3,4-secolanosta-4(28),7,9(11),  
 24-tetraene-3,21-dioic acid

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

[構造式]  
 [分子式]  $C_{30}H_{44}O_5$   
 [分子量] 484.675  
 [基原] *Poria cocos*  
 [性状] 無定型の粉末

[比旋光度]:  $[\alpha]_D^{26} +15$  (c, 1 in MeOH)



-----文献-----

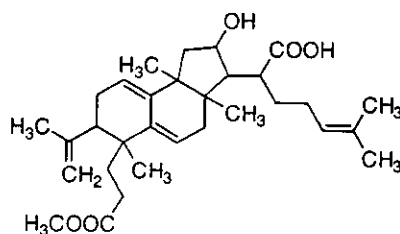
Tai, T. et al., *Phytochemistry*, 1991, 30, 2796; 1995, 39, 1165, (Poricoic acid B, Poricoic acid BM, 分離,  
 H-NMR, C13-NMR)

§ **Poricoic acid B; 3-Me ester**

[化学名・別名] Poricoic acid BM  
 [化合物分類] テルペノイド (Lanostane triterpenoids)

[構造式]  
 [分子式]  $C_{31}H_{46}O_5$   
 [分子量] 498.701  
 [天然基原] *Poria cocos*  
 [性状] 無定型の粉末

[比旋光度]:  $[\alpha]_D^{26} +12$  (c, 0.1 in CHCl<sub>3</sub>)



-----文献-----

Tai, T. et al., *Phytochemistry*, 1991, 30, 2796; 1995, 39, 1165, (Poricoic acid B, Poricoic acid BM, 分離,  
 H-NMR, C13-NMR)

§ **Poricoic acid C**

[化学名・別名] 24-Methylene-3,4-secolanosta-4(28),7,9(11)-triene-3,21-dioic acid

[構造式]

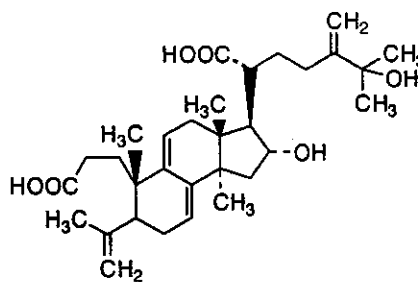
[分子式]  $C_{31}H_{46}O_6$

[分子量] 514.701

[天然基原] *Poria cocos*

[性状] 無定型の粉末

[比旋光度]:  $[\alpha]_D^{26} +11$  (c, 1 in MeOH)



-----文献-----

Tai, T. et al., *Phytochemistry*, 1993, 32, 1239, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ **Poricoic acid D; 3-Me ester**

[化学名・別名] Poricoic acid DM

[CAS No.] 151200-91-8

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

[構造式]

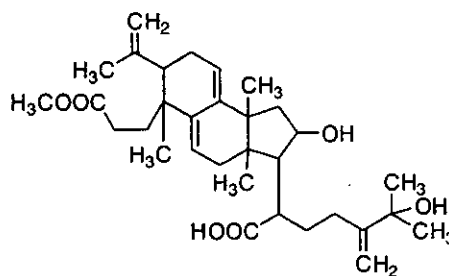
[分子式]  $C_{32}H_{48}O_6$

[分子量] 528.728

[天然基原] *Poria cocos*

[性状] 無定型の粉末

[比旋光度]:  $[\alpha]_D^{26} +25$  (c, 0.5 in MeOH)



-----文献-----

Tai, T. et al., *Phytochemistry*, 1993, 32, 1239, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ **3,6,16-Trihydroxy-24-methylenelanosta-7,9(11)-dien-21-oic acid; (3 $\beta$ ,6 $\alpha$ ,16 $\alpha$ )-form, 3-Ac**

[化学名・別名] 6 $\alpha$ -Hydroxydehydropachymic acid

[CAS No.] 176390-67-3

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

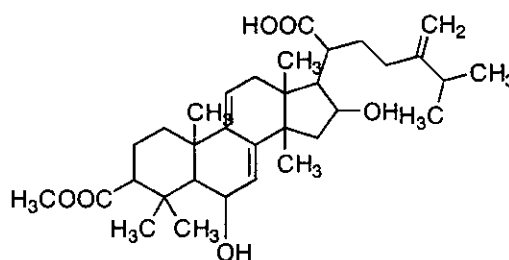
[構造式]

[分子式]  $C_{33}H_{50}O_6$

[分子量] 542.754

[天然基原] *Poria cocos*

[性状] 無定型の粉末



-----文献-----

Pinhey, J.T. et al., *Aust. J. Chem.*, 1971, 24, 609, (3-ketone)

Nukaya, H. et al., *Chem. Pharm. Bull.*, 1996, 44, 847-849, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ **3,16,25-Trihydroxy-24-methylenelanosta-7,9(11)-dien-21-oic acid; (3 $\alpha$ ,16 $\alpha$ )-form**

[CAS No.] 167775-55-5

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

[構造式]

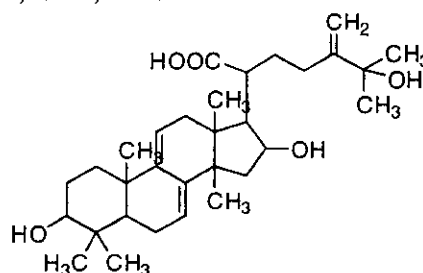
[分子式]  $C_{31}H_{48}O_6$

[分子量] 500.717

[天然基原] *Poria cocos*

[性状] 無定型の粉末 (as Me ester)

[比旋光度]:  $[\alpha]_D^{26} +22$  (c, 1 in  $CHCl_3$ ) (Me ester)



-----文献-----

Tai, T. et al., *Phytochemistry*, 1995, 39, 1165, (分離, H-NMR, C13-NMR)

\*\*\*\*\*マテチャ (Mate tea) \*\*\*\*\*

§ 3,16,25-Trihydroxy-24-methylenelanosta-7,9(11)-dien-21-oic acid; (3 $\alpha$ ,16 $\alpha$ )-form

[CAS No.] 167775-55-5

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

[構造式]

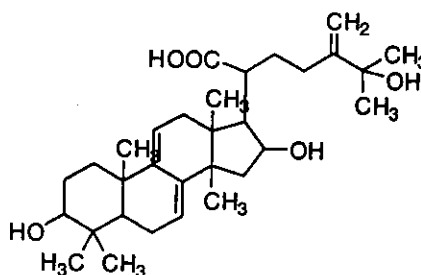
[分子式] C<sub>31</sub>H<sub>48</sub>O<sub>5</sub>

[分子量] 500.717

[天然基原] *Poria cocos*

[性状] 無定型の粉末 (as Me ester)

[比旋光度]: [α]<sub>D</sub><sup>26</sup> +22 (c, 1 in CHCl<sub>3</sub>) (Me ester)



-----文献-----

Tai, T. et al., *Phytochemistry*, 1995, 39, 1165, (分離, H-NMR, C13-NMR)

\*\*\*\*\*マテチャ (Mate tea) \*\*\*\*\*

§ §モチノキ科マテチャ (*Ilex paraguariensis* Saint Hilaire) の葉。

§ 3-Hydroxy-12-ursen-28-oic acid; 3 $\beta$ -form, 3-O-[ $\beta$ -D-Glucopyranosyl-(1 $\rightarrow$ 3)- $\alpha$ -L-arabinopyranoside], 28-O-[ $\beta$ -D-glucopyranosyl-(1 $\rightarrow$ 6)- $\beta$ -D-glucopyranosyl] ester

[化学名・別名] Matesaponin 3. Araliasaponin X

[CAS No.] 164178-28-3

[化合物分類]テルペノイド (Ursane triterpenoids)

[構造式]

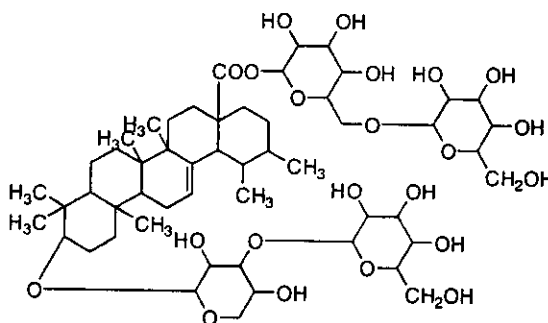
[分子式] C<sub>53</sub>H<sub>86</sub>O<sub>22</sub>

[分子量] 1075.249

[天然基原] *Ilex paraguariensis*, *Aralia decaisneana*

[性状] 粉末

[比旋光度]: [α]<sub>D</sub> +4.8 (c, 0.46 in Py)



-----文献-----

Gosmann, G. et al., *J. Nat. Prod.*, 1995, 58, 438, (Matesaponins)

Kraemer, K.H. et al., *Phytochemistry*, 1996, 42, 1119, (Matesaponin 5)

§ 3-Hydroxy-12-ursen-28-oic acid; 3 $\beta$ -form, 3-O-[ $\beta$ -D-Glucopyranosyl-(1 $\rightarrow$ 3)-[ $\alpha$ -L-rhamnopyranosyl-(1 $\rightarrow$ 2)]- $\alpha$ -L-arabinopyranoside], 28-O- $\beta$ -D-glucopyranosyl ester

[化学名・別名] Matesaponin 2

[CAS No.] 164178-27-2

[化合物分類]テルペノイド (Ursane triterpenoids)

[構造式]

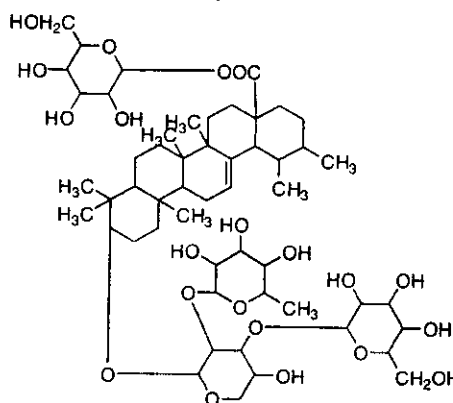
[分子式] C<sub>53</sub>H<sub>86</sub>O<sub>21</sub>

[分子量] 1059.25

[天然基原] *Ilex paraguariensis*

[性状] 粉末

[比旋光度]: [α]<sub>D</sub><sup>23</sup> +6.7 (c, 0.7 in Py)



-----文献-----

Gosmann, G. et al., *J. Nat. Prod.*, 1995, 58, 438, (Matesaponins)

Miyase, T. et al., *Phytochemistry*, 1996, 41, 1175; 1411, (*Fagonia arabica* saponin, Araliasaponins)

Kraemer, K.H. et al., *Phytochemistry*, 1996, 42, 1119, (Matesaponin 5)

§ 3-Hydroxy-12-ursen-28-oic acid; 3 $\beta$ -form, 3-O-[ $\beta$ -D-Glucopyranosyl-(1 $\rightarrow$ 3)-[ $\alpha$

Ruzicka, L. et al., *Helv. Chim. Acta*, 1945, 28, 199, (構造決定)  
 Mills, J.S. et al., *J.C.S.*, 1955, 3132, (Ursonic acid)  
 Gosmann, G. et al., *J. Nat. Prod.*, 1995, 58, 438, (Matesaponins)  
 Kraemer, K.H. et al., *Phytochemistry*, 1996, 42, 1119, (Matesaponin 5)

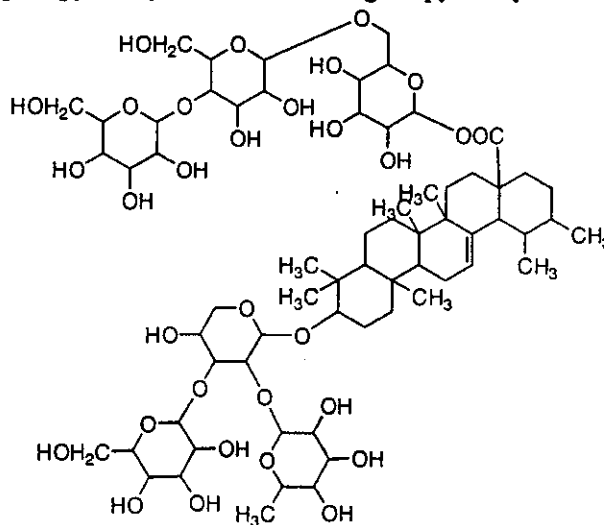
§ 3-Hydroxy-12-ursen-28-oic acid; 3  $\beta$ -form, 3-O-[ $\beta$ -D-Glucopyranosyl-(1  $\rightarrow$  3)-[ $\alpha$ -L-rhamnopyranosyl-(1  $\rightarrow$  2)]- $\alpha$ -L-arabinopyranoside], 28-O-[ $\beta$ -D-glucopyranosyl-(1  $\rightarrow$  4)- $\beta$ -D-glucopyranosyl-(1  $\rightarrow$  6)- $\beta$ -D-glucopyranosyl] ester

[化学名・別名] Matesaponin 5

[CAS No.] 178330-60-4

[化合物分類] テルペノイド (Ursane triterpenoids)

[構造式]



[分子式]  $C_{65}H_{106}O_{31}$

[分子量] 1383.534

[天然基原] *Ilex paraguariensis*

[性状] 無定型の粉末

[比旋光度]:  $[\alpha]_D^{25} +1.5$  (c, 1.9 in MeOH)

-----文献-----

Gosmann, G. et al., *J. Nat. Prod.*, 1995, 58, 438, (Matesaponins)

Kraemer, K.H. et al., *Phytochemistry*, 1996, 42, 1119, (Matesaponin 5)

\*\*\*\*\*マメ (Beans) \*\*\*\*\*

§ § マメ科ササゲ (*Vigna sinensis* Endlicher (*Vigna unguiculata* (Linne) Walpers ; *Dolichos sinensis* Linne)) の果実, 種子または発芽種子 (モヤシ)。

本調査研究では、成分に関する文献はなかった。

§ § マメ科シロエンドウ (*Pisum sativum* L.) の果実, 種子または発芽種子 (モヤシ)。

§ Abscisic acid; (S)-form, 13-Hydroxy, 3-alcohol

[化学名・別名] Pisumic acid

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

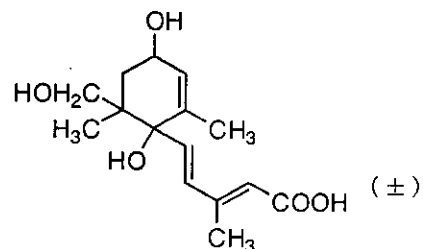
[構造式]

[分子式]  $C_{15}H_{22}O_5$

[分子量] 282.336

[天然基原] 次の植物から分離: エンドウ豆 (*Pisum sativum*) irrigated with -abscisic acid

[その他のデータ] 構造式は暫定的



-----文献-----

Tietz, D., *Physiol. Plant.*, 1985, 65, 171, (Pisumic acid)

§ 2-Aminobutanoic acid; (R)-form

[化学名・別名] D-form

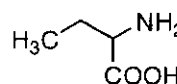
[CAS No.] 2623-91-8

[化合物分類] アミノ酸とペプチド (Non-protein  $\alpha$ -aminoacids)

[構造式]

[分子式]  $C_4H_9NO_2$

[分子量] 103.121



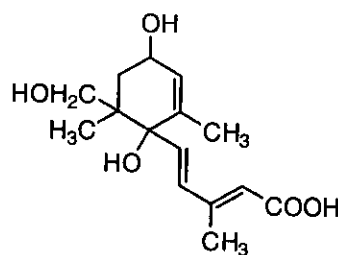
[化合物分類]テルペノイド (Cyclofarnesane sesquiterpenoids)  
[構造式]

[分子式]  $C_{15}H_{22}O_5$

[分子量] 282.336

[天然基原] 次の植物から分離: エンドウ豆 (*Pisum sativum*) irrigated with (±)-abscisic acid

[その他のデータ] 構造式は暫定的



-----文献-----

Tietz, D., *Physiol. Plant.*, 1985, 65, 171, (Pisumic acid)

### § 2-Aminobutanoic acid; (R)-form

[化学名・別名] D-form

[CAS No.] 2623-91-8

[化合物分類] アミノ酸とペプチド (Non-protein  $\alpha$ -aminoacids)

[構造式]

[分子式]  $C_4H_9NO_2$

[分子量] 103.121

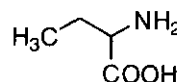
[天然基原] *Glycine max* 発芽種子, *Dolichos lablab*, *Canavalia gladiata*, *Arachis hypogaea*, *Pisum sativum*, *Phaseolus vulgaris* と *Vigna sesquipedalis* after hydrol.

[性状] 葉状結晶 (EtOH 溶液)

[融点] Mp 292 °C で分解

[比旋光度]:  $[\alpha]_D^{20} -7.86$  (H<sub>2</sub>O) (5 M HCl)

[販売元] Aldrich:11612-2; Fluka:7210; Sigma:A1629



-----文献-----

Compagnone, R.S. et al., *J.O.C.*, 1986, 51, 1713, (合成法, H-NMR)

Chenault, H.K. et al., *J.O.C.*, 1987, 52, 2608, (分割, H-NMR)

Stirling, I.R. et al., *J.C.S. Perkin 1*, 1997, 677-680, (合成法)

### § 3-Aminodihydro-2(3H)-furanone (CAS 名) (旧 CAS 名)

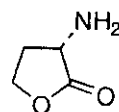
[化学名・別名] Homoserine lactone. 2-Amino-4-butanolide. 2-Amino-4-hydroxybutanoic acid lactone.  $\alpha$ -Amino- $\gamma$ -butyrolactone

[CAS No.] 1192-20-7

[関連 CAS No.] 2185-03-7, 51744-82-2

[化合物分類] 含酸素複素環式化合物 (Butanolides)

[構造式]



(S)-form

[分子式]  $C_4H_7NO_2$

[分子量] 101.105

[天然基原] *Pisum sativum* の発芽種子

-----文献-----

Staron, T. et al., *C. R. Hebd. Seances Acad. Sci.*, 1964, 259, 3114, (分離)

Saarivirta, M. et al., *Acta Chem. Scand.*, 1965, 19, 1008, (分離)

Natelson, S., *Microchem. J.*, 1982, 27, 466, (分離)

Japan. Pat., 1983, 83 096 079; CA, 99, 174212, (分離, UV, IR, H-NMR, C13-NMR, 誘導体)

### § $\alpha$ -Amino-2,5-dihydro-5-oxo-4-isoxazolepropanoic acid; (S)-form, N<sup>2</sup>- $\beta$ -D-Glucosyl

[CAS No.] 29790-46-3

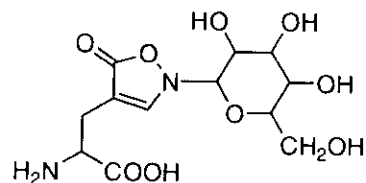
[化合物分類] アミノ酸とペプチド (Non-protein  $\alpha$ -aminoacids), アルカロイド化合物 (Isoazole alkaloids)

[構造式]

[分子式]  $C_{12}H_{18}N_2O_9$

[分子量] 334.282

[天然基原] 次の植物から分離: *Pisum sativum*, *Lathyrus odoratus*



-----文献-----

- Andrews, R.S., Nature (London), 1965, 205, 1213, (配糖体)  
 Fellman, J.H. et al., Biochim. Biophys. Acta, 1975, 381, 9, (分離, 誘導体)  
 Bartholini, G. et al., Pharmacol. Ther., Part B, 1975, 1, 407, (レビュー, 薬理)  
 Danishevsky, S. et al., Tetrahedron, 1981, 37, 4081, (合成法)  
 Laycock, M.V. et al., J. Nat. Prod., 1984, 47, 1033, (分離, sulfate)  
 Lee, M. et al., Chem. Pharm. Bull., 1987, 35, 235, (hplc, 成書, 分析)

§ 4-(2-Aminoethyl)phenol (CAS 名)

[化学名・別名] 4-Hydroxybenzeneethanamine. 2-(*p*-Hydroxyphenyl) ethylamine. 4-Hydroxyphenethylamine.

Tyramine. Tyrosamine

[CAS No.] 51-67-2

[関連 CAS No.] 20375-37-5, 70185-64-7

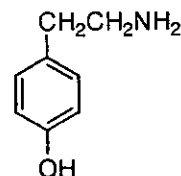
[化合物分類] アルカロイド化合物 (Simple tyramine alkaloids), 薬物: 診断薬 (Diagnostic agents), 薬物: 血管収縮 (Vasoconstrictors)

[構造式]

[分子式] C<sub>8</sub>H<sub>11</sub>NO

[分子量] 137.181

[天然基原] 生物起源のアミンに広く分布, 次のような数種の植物属に見られる; *Magnolia* and *Desmodium* spp., *Pisum sativum*, *Hordeum vulgare*, 腐敗した動物組織. パーキンソン病患者の尿. またウバタマ (*Lophophora williamsii*), その他の cacti (モクレン科, マメ科, イネ科, サボテン科) にも見られる. また次の植物からも分離される; *Actinodaphne* sp., *Cannabis sativa*, *Piper nigrum*, その他の植物属



Magnolia

[用途] 診断薬. 昇圧薬

[融点] Mp 164-164.5 °C (161 °C)

[PKa 値] pK<sub>a1</sub> 9.3; pK<sub>a2</sub> 10.9 (25 °C)

[Log P 計算値] Log P 0.62 (計算値)

[傷害・毒性] 50 %致死量 (LD<sub>50</sub>) (マウス, 静脈内) 229 mg/kg; BERDY HAZD : 50 %致死量 (LD<sub>50</sub>) (マウス, 静脈内) 229 mg/kg

[化学物質毒性データ総覧 (RTECS) 登録番号] SJ5950000

[販売元] Aldrich:T9034-4; Fluka:93810; Sigma:T7255

-----文献-----

Smith, T.A., Phytochemistry, 1977, 16, 9, (レビュー, 生育, 誘導体)

Nishioka, T. et al., Biosci., Biotechnol., Biochem., 1997, 61, 1138-1141, (*N-p*-Coumaroyltyramine, 分離, 合成法)

\*\*\*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.

\*\*\*健康障害に関するデータ\*\*\*

\*\*\*急性毒性に関するデータ\*\*\*

<<試験方法>> 認知されている最低致死量に関する試験

曝露経路 : 腹腔内投与.

被験動物 : げっ歯類-マウス.

投与量・期間 : 800 mg/kg

毒性影響 : 致死量以外に毒性影響に関する報告はない.

参考文献

Journal of Physiology. (Cambridge Univ. Press, 32 E. 57th St., New York, NY 10022) 76,224,1932

<<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-マウス.

投与量・期間 : 225 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

"Drug Dosages in Laboratory Animals - A Handbook," 1965

Naunyn-Schmiedeberg's Archiv fuer Experimentelle Pathologie und Pharmakologie. (Berlin, Ger.) 153,161,1930

\*\*\*変異原性に関するデータ\*\*\*

<<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-ラット.

\*\*\*急性毒性に関するデータ\*\*\*

《試験方法》 認知されている最低致死量に関する試験

曝露経路 : 腹腔内投与.

被験動物 : げっ歯類-マウス.

投与量・期間 : 800 mg/kg

毒性影響 : 致死量以外に毒性影響に関する報告はない.

参照文献

Journal of Physiology. (Cambridge Univ. Press, 32 E. 57th St., New York, NY 10022) 76,224,1932

《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-マウス.

投与量・期間 : 225 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

"Drug Dosages in Laboratory Animals - A Handbook," 1965

Naunyn-Schmiedeberg's Archiv fuer Experimentelle Pathologie und Pharmakologie. (Berlin, Ger.) 153,161,1930

\*\*\*変異原性に関するデータ\*\*\*

《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-ラット.

投与量・期間 : 686 mg/kg

参照文献

Mutation Research. (Elsevier Science Pub. B.V., POB 211, 1000 AE Amsterdam, Netherlands) 240,281,1990

§ 2-Amino-4-hydroxybutanoic acid; (S)-form, O-Ac

[化学名・別名] 4-Acetoxy-2-aminobutanoic acid. O-Acetylhomoserine. Homoserine acetate

[CAS No.] 7540-67-2

[化合物分類] アミノ酸とペプチド (Non-protein  $\alpha$ -aminoacids)

[構造式]

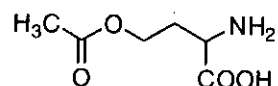
[分子式]  $C_6H_{11}NO_4$

[分子量] 161.157

[天然基原] エンドウ豆 (*Pisum sativum*) の緑の組織

[融点] Mp 200 °C

[比旋光度]:  $[\alpha]_D^{20} +4.5$  (c, 4 in H<sub>2</sub>O)



-----文献-----

de Wald, H.A. et al., J.A.C.S., 1959, 81, 4367, (acetate)

Lawrence, J.M., Phytochemistry, 1973, 12, 2207, (分離)

Curran, W.V., Prep. Biochem., 1981, 11, 269, (分割)

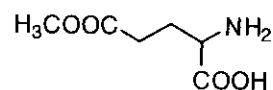
Shiraiwa, T. et al., Chem. Pharm. Bull., 1996, 44, 2322-2325, (R-form, S-form, 合成法)

§ 2-Amino-4-hydroxybutanoic acid; (±)-form, O-Ac

[CAS No.] 6232-10-6

[化合物分類] アミノ酸とペプチド (Non-protein  $\alpha$ -aminoacids)

[構造式]



[天然基原] Found in *Pisum sativum* along with the L-form

[性状] 板状結晶 (EtOH)

[融点] Mp 183-185 °C

-----文献-----

de Wald, H.A. et al., J.A.C.S., 1959, 81, 4367, (acetate)

Grobbelaar, N. et al., Phytochemistry, 1969, 8, 553, (acetate)

Lawrence, J.M., Phytochemistry, 1973, 12, 2207, (分離)

§ Aspartic acid; (S)-form, N-Benzoyl

[CAS No.] 4631-12-3

[化合物分類] アミノ酸とペプチド (Protein  $\alpha$ -aminoacids)

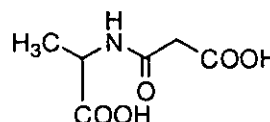
[分子式]  $C_{12}H_{13}NO_5$   
[分子量] 251.238  
[天然基原] エンドウ豆 (*Pisum sativum*)  
[融点] Mp 136 °C

-----文献-----

Takemoto, T. et al., Arch. Pharm. (Weinheim, Ger.), 1960, 293, 627, (分離, D-form)  
Greenstein, J.P. et al., Chemistry of the Amino Acids, Wiley, N.Y., 1961, 3, 1856; 2759, (レビュー)  
Karrer, W. et al., Konstitution und Vorkommen der Organischen Pflanzenstoffe, 2nd edn., Birkhäuser Verlag, Basel, 1972, no. 2369, (生育)  
Gianfagna, T.J. et al., Phytochemistry, 1980, 19, 959, (分離, N-benzoyl, N-phenylacetyl)  
The NMDA Receptor, (Eds. Collingridge, G.L. et al), Oxford University Press, 1994, (専門書)

§ N-(Carboxyacetyl) alanine; (R)-form

[化学名・別名] D-form  
[CAS No.] 19764-27-3  
[化合物分類] アミノ酸とペプチド (Non-protein  $\alpha$ -aminoacids)  
[構造式]  
[分子式]  $C_6H_9NO_3$   
[分子量] 175.141  
[天然基原] 次の植物から分離: *Pisum sativum* の発芽種子  
[融点] Mp 138-140 °C  
[比旋光度]:  $[\alpha]_D^{25} +33$  (c, 0.38 in H<sub>2</sub>O)

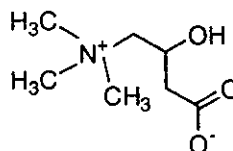


-----文献-----

Ogawa, T. et al., Biochim. Biophys. Acta, 1973, 297, 60, (分離, 構造決定, H-NMR, IR, Mass, 合成法)  
Fukuda, M. et al., Phytochemistry, 1973, 12, 2593, (分離)

§ Carnitine; (R)-form

[化学名・別名] L-form. Levocarnitine, BAN, INN, USAN  
[CAS No.] 541-15-1  
[化合物分類] アミノ酸とペプチド ( $\beta$ -Aminoacids)  
[構造式]  
[分子式]  $C_7H_{15}NO_3$   
[分子量] 161.2  
[天然基原] 筋のある筋, 肝臓, 乳清. また *Pisum sativum* の子葉に存在する  
[用途] Facilitator of long-chain fatty acids through mitochondrial membranes, thus allowing their metabolic oxidn. Regulator of blood lipid levels, used in sport and infant nutrition. Drug used to increase cardiac output and improve myocardial function; often administered after haemodialysis. Used to treat primary carnitine deficiency  
[性状] 高い吸湿性の塊 (EtOH/Me:CO)  
[融点] Mp 196-198 °C  
[比旋光度]:  $[\alpha]_D^{25} -31.3$  (c, 10 in H<sub>2</sub>O) (>99% op)  
UV: [neutral]  $\lambda_{max}$  (H<sub>2</sub>O) (Berdy)  
[傷害・毒性] 50%致死量 (LD<sub>50</sub>) (マウス, 皮下) 9000mg/kg  
[化学物質毒性データ総覧 (RTECS) 登録番号] BP2980000  
[販売元] Aldrich:43958-4; Fluka:22018; Sigma:C7393



-----文献-----

Carter, H.E. et al., Methods Enzymol., 1957, 3, 660, (分離)  
Bamji, M., Biochem. Rev., 1980, 50, 99, (レビュー)  
Frenkel, R.A. et al., Carnitine Biosynth., Metab., Funct. [Proc. Virginia Lazenby O'Hara Biochem. Symp.], Eds., Academic Press, N.Y., 1980, (専門書)  
Bremer, J., Physiol. Rev., 1983, 63, 1420, (レビュー)  
Reboucha, C.J. et al., Annu. Rev. Nutr., 1986, 6, 41, (レビュー)  
Goa, K.L. et al., Drugs, 1987, 34, 1, (レビュー)  
Voefray, R. et al., Helv. Chim. Acta, 1987, 70, 2058, (合成法, IR, H-NMR, 成書)  
Mancini, M. et al., Arzneimittel-Forsch., 1992, 42, 1101-1104, (propanoyl, 薬理, 成書)  
L-Carnitine and its Role in Medicine: From Function to Therapy, (Eds. Ferrari, R. et al), Academic Press, 1992, (専門書)  
Kasai, N. et al., Tet. Lett., 1992, 33, 1211, (合成法, 成書)



and improve myocardial function; often administered after haemodialysis. Used to treat primary carnitine deficiency

[性状] 高い吸湿性の塊 (EtOH/Me<sub>2</sub>CO)

[融点] Mp 196-198 °C

[比旋光度]:  $[\alpha]_D^{25}$  -31.3 (c, 10 in H<sub>2</sub>O) (>99% op)

UV: [neutral]  $\lambda_{max}$  (H<sub>2</sub>O) (Berdy)

[傷害・毒性] 50 %致死量 (LD<sub>50</sub>) (マウス, 皮下) 9000mg/kg

[化学物質毒性データ総覧 (RTECS) 登録番号] BP2980000

[販売元] Aldrich:43958-4; Fluka:22018; Sigma:C7393

-----文献-----

Carter, H.E. et al., *Methods Enzymol.*, 1957, 3, 660, (分離)

Bamji, M., *Biochem. Rev.*, 1980, 50, 99, (レビュー)

Frenkel, R.A. et al., *Carnitine Biosynth., Metab., Funct.* [Proc. Virginia Lazenby O'Hara Biochem. Symp.], Eds., Academic Press, N.Y., 1980, (専門書)

Bremer, J., *Physiol. Rev.*, 1983, 63, 1420, (レビュー)

Reboucha, C.J. et al., *Annu. Rev. Nutr.*, 1986, 6, 41, (レビュー)

Goa, K.L. et al., *Drugs*, 1987, 34, 1, (レビュー)

Voeffray, R. et al., *Helv. Chim. Acta*, 1987, 70, 2058, (合成法, IR, H-NMR, 成書)

Mancini, M. et al., *Arzneim.-Forsch.*, 1992, 42, 1101-1104, (propanoyl, 薬理, 成書)

*L-Carnitine and its Role in Medicine: From Function to Therapy*, (Eds. Ferrari, R. et al), Academic Press, 1992, (専門書)

Kasai, N. et al., *Tet. Lett.*, 1992, 33, 1211, (合成法, 成書)

Torielli, L. et al., *J. Cardiovasc. Pharmacol.*, 1995, 26, 372-380, (propanoyl, 薬理, 成書)

*The Carnitine System*, (Eds. De Jong, J.W. et al), Kluwer, 1995, (専門書)

Wiseman, L.R. et al., *Drugs Aging*, 1998, 12, 243-248, (propanoyl, レビュー)

\*\*\*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 : 皮下投与.

被験動物 : げっ歯類-マウス.

投与量・期間 : 9 gm/kg

毒性影響 : [知覚組織と特異感覚] (視覚) 流涙.  
[行動] 痙攣または発作閾値への影響.  
[胃腸] 唾液腺の構造又は機能の変化.

参照文献

*Acta Biologica et Medica Germanica*. (Berlin, Ger. Dem. Rep.) 35,645,1976

§ 4-Chloro-1H-indole-3-acetic acid

[CAS No.] 2519-61-1

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

[構造式]

[分子式] C<sub>10</sub>H<sub>8</sub>ClNO<sub>2</sub>

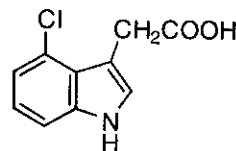
[分子量] 209.631

[天然基原] *Pisum sativum* と *Pinus sylvestris* の種子から得られるオーキシン

[性状] 結晶 (1,2-dichloroethane/EtOH)

[融点] Mp 179-180 °C

[販売元] Sigma:C0546



-----文献-----

Marumo, S. et al., *Nature* (London), 1968, 219, 959, (分離)

Magnus, V. et al., *Phytochemistry*, 1997, 46, 675-681, (分離)

§ 4-Chloro-1H-indole-3-acetic acid; Me ester

[CAS No.] 19077-78-2

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

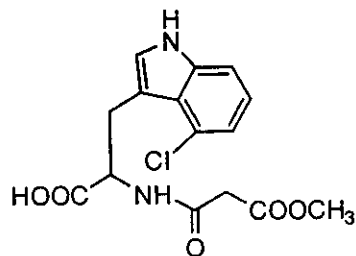
[構造式]

-----文献-----

Marumo, S. et al., *Planta*, 1970, 90, 208, (分離)  
 Japan. Pat., 1973, 73 98 091; CA, 80, 106876g, (分離)  
 Thiruvikraman, S.V. et al., *Tet. Lett.*, 1988, 29, 2339, (分離, 合成法)  
 Fock, A. et al., *Phytochemistry*, 1992, 31, 2327, (分離)  
 Lee, M. et al., *J. Het. Chem.*, 1994, 31, 711, (C13-NMR, H-NMR)

§ 4-Chlorotryptophan; (S)-form, N-(Carbomethoxyacetyl)  
 [化合物分類] アミノ酸とペプチド (Non-protein α-aminoacids)  
 [構造式]

[分子式] C<sub>15</sub>H<sub>15</sub>ClN<sub>2</sub>O<sub>3</sub>  
 [分子量] 338.747  
 [天然基原] 次の植物から分離: *Pisum sativum*

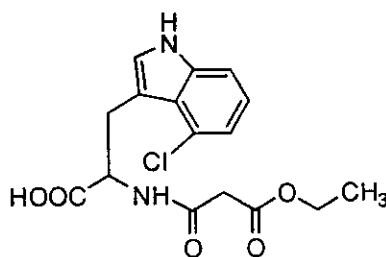


-----文献-----

Marumo, S. et al., *Planta*, 1970, 90, 208, (分離)  
 Japan. Pat., 1973, 73 98 091; CA, 80, 106876g, (分離)  
 Thiruvikraman, S.V. et al., *Tet. Lett.*, 1988, 29, 2339, (分離, 合成法)  
 Fock, A. et al., *Phytochemistry*, 1992, 31, 2327, (分離)

§ 4-Chlorotryptophan; (S)-form, N-(Ethyl ester)  
 [化合物分類] アミノ酸とペプチド (Non-protein α-aminoacids)  
 [構造式]

[分子式] C<sub>16</sub>H<sub>17</sub>ClN<sub>2</sub>O<sub>3</sub>  
 [分子量] 352.773  
 [天然基原] 次の植物から分離: *Pisum sativum*



-----文献-----

Marumo, S. et al., *Planta*, 1970, 90, 208, (分離)  
 Japan. Pat., 1973, 73 98 091; CA, 80, 106876g, (分離)  
 Thiruvikraman, S.V. et al., *Tet. Lett.*, 1988, 29, 2339, (分離, 合成法)  
 Fock, A. et al., *Phytochemistry*, 1992, 31, 2327, (分離)

§ Coumestrol

[化学名・別名] 3,9-Dihydroxy-6H-benzofuro[3,2-c][1]benzopyran-6-one (CAS 名). 3,9-Dihydroxycoumestan. 7,12-Dihydroxycoumestan (obsol.). 3,9-Dihydroxy-6-oxopterocarpen (obsol.). 6',7-Dihydroxybenzofuro[3',2',3,4] coumarin (obsol.). Coumestrol

[CAS No.] 479-13-0  
 [化合物分類] フラボノイド (Coumestan flavonoids), 薬物: 卵胞ホルモン (Estrogens)

[分子式] C<sub>15</sub>H<sub>8</sub>O<sub>5</sub>  
 [分子量] 268.225

[天然基原] 次の植物から分離: *Medicago* spp., *Glycine max*, *Astragalus sinicus*, *Centrosema pubescens*, *Dolichos biflorus*, *Melilotus alba*, *Phaseolus* spp. *Pisum sativum*, *Psoralea corylifolia*, *Trifolium* spp., *Trigonella corniculata*, *Vigna unguiculata* (すべてのマメ科, マメ亜科), また *Spinacea oleracea* (アカザ科), *Brassica oleracea* (アブラナ科) から得られる

[用途] 生体内でエストロゲン受容体とヒト乳房のガン細胞 (MCF-7) 結合する. エストロゲン薬

[融点] Mp 385 °C

[溶解性] BERDY SOL: 塩基に可溶; メタノール, クロロホルム, エーテルに易溶; 水, ベンゼン, 四塩化炭素, 酸に難溶

[Log P 計算値] Log P 3.12 (計算値)

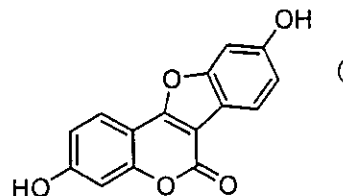
UV: [neutral] λ<sub>max</sub> 208 ; 243 ; 343 (MeOH) (Berdy) [neutral] λ<sub>max</sub> 243 ; 307 ; 343 (EtOH) (Berdy) [base] λ<sub>max</sub> 250 ; 280 ; 310 ; 385 (NaOH) (Berdy)

[その他のデータ] 325 °C で昇華. 青色の蛍光を示す

[傷害・毒性] 催奇形成作用に関する研究がある

[化学物質毒性データ総覧 (RTECS) 登録番号] DF8077000

[販売元] Fluka:27885



6',7-Dihydroxybenzofuro[3',2',3,4]coumarin (obsol.). Cumestrol

[CAS No.]479-13-0

[化合物分類]フラボノイド(Coumestan flavonoids), 薬物: 卵胞ホルモン (Estrogens)

[構造式]

[分子式]C<sub>15</sub>H<sub>8</sub>O<sub>5</sub>

[分子量]268.225

[天然基原]次の植物から分離: *Medicago* spp., *Glycine max*, *Astragalus sinicus*, *Centrosema pubescens*, *Dolichos biflorus*, *Melilotus alba*, *Phaseolus* spp. *Pisum sativum*, *Psoralea corylifolia*, *Trifolium* spp., *Trigonella corniculata*, *Vigna unguiculata* (すべてのマメ科, マメ亜科), また *Spinacea oleracea* (アカザ科), *Brassica oleracea* (アブラナ科)からも得られる

[用途]生体内でエストロゲン受容体とヒト乳房のガン細胞(MCF-7)結合する. エストロゲン薬

[融点]Mp 385 °C

[溶解性]BERDY SOL: 塩基に可溶; メタノール, クロロホルム, エーテルに易溶; 水, ベンゼン, 四塩化炭素, 酸に難溶

[Log P 計算値]Log P 3.12 (計算値)

UV: [neutral] λ<sub>max</sub> 208 ; 243 ; 343 (MeOH) (Berdy) [neutral] λ<sub>max</sub> 243 ; 307 ; 343 (EtOH) (Berdy)

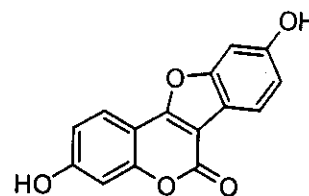
[base] λ<sub>max</sub> 250 ; 280 ; 310 ; 385 (NaOH) (Berdy)

[その他のデータ]325 °Cで昇華, 青色の蛍光を示す

[傷害・毒性]催奇形成作用に関する研究がある

[化学物質毒性データ総覧(RTECS)登録番号]DF8077000

[販売元]Fluka:27885



#### ----- 文 献 -----

Schauer, H., Dtsch. Apoth. -Ztg., 1964, 104, 987, (レビュー, 性質)

Harper, S.H. et al., J.C.S.(C), 1969, 1109, (Coumestrin)

Donnelly, D.M.X. et al., J.C.S. Perkin 1, 1973, 1737, (9-O-Methylcoumestrol)

Ingham, J.L., Prog. Chem. Org. Nat. Prod., 1983, 43, 1, (レビュー, 生育)

Jurd, L. et al., Aust. J. Chem., 1984, 37, 1127, (9-O-Methylcoumestrol)

\*\*\*RTECS (化学物質毒性データ)\*\*\*

生体影響物質 : 変異原性物質, 生殖影響物質.

\*\*\*健康障害に関するデータ\*\*\*

\*\*\*その他の多回投与試験\*\*\*

<<試験方法>> 最小毒性量(TDLo).

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 : 15 mg/kg/15 日間間欠投与

毒性影響 : [内分泌] その他の変化.

[血液] 血清成分の変化(たとえばTP, ビリルビン, コレステロール).

#### 参考文献

Toxicological Sciences. (Academic Press, 6277 Sea Harbor Dr., Orlando, FL 32887) 54,338,2000

\*\*\*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 : 2500 ug/kg

雌雄投与期間 : 産後 1-5 日間の授乳雌.

毒性影響 : [生殖] [母系影響] 子宮, 頸管, 膈.

[生殖] [母系影響] その他の影響.

[内分泌] エストロゲン.

#### 参考文献

Toxicologist. (Soc. of Toxicology, Inc., 475 Wolf Ledge Parkway, Akron, OH 44311) 12,432,1992

MD) V.1-46, 1942-87. [Vol.,頁,年(19-)]39,432,1980

<<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-マウス.

投与 : 35 gm/kg

雌雄投与期間 : 雌 14 日間(交配前)

§ Coumestrol; 9-Me ether

[化学名・別名] 9-O-Methylcoumestrol. 3-Hydroxy-9-methoxycoumestan

[CAS No.] 1690-62-6

[化合物分類] フラボノイド (Coumestan flavonoids)

[構造式]

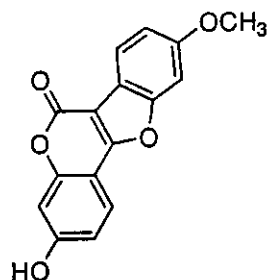
[分子式] C<sub>16</sub>H<sub>10</sub>O<sub>5</sub>

[分子量] 282.252

[天然基原] 次の植物から分離: *Cicer arietinum*, *Dalbergia oliveri*, *Dalbergia nsonii*, *Medicago* spp., *Myroxylon balsamum*, *Pisum sativum*, *Trifolium pratense*, *lium repens*, *Sophora tomentosa*

[性状] 針状結晶 (Me:CO/MeOH)

[融点] Mp 338-339 °C



steve  
Trifo

-----文献-----

Donnelly, D.M.X. et al., J.C.S. Perkin 1, 1973, 1737, (9-O-Methylcoumestrol)

Jurd, L. et al., Aust. J. Chem., 1984, 37, 1127, (9-O-Methylcoumestrol)

§ 1,3-Dihydro-3-hydroxy-2H-pyrrol-2-one; O-β-D-Glucopyranoside

[化学名・別名] Pisatoside

[CAS No.] 18814-39-6

[化合物分類] アルカロイド化合物 (Pyrrole alkaloids)

[構造式]

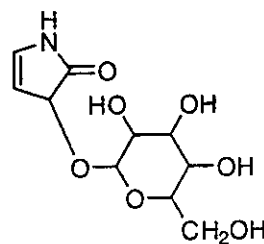
[分子式] C<sub>10</sub>H<sub>13</sub>NO<sub>7</sub>

[分子量] 261.231

[天然基原] 次の植物から分離: *Pisum sativum* の種子

[融点] Mp 104-107 °C

[比旋光度]: [α]<sub>D</sub><sup>20</sup> -4.9



-----文献-----

Kocourek, J. et al., Arch. Biochem. Biophys., 1967, 121, 531, (分離, 構造決定)

§ 1,5-Dihydro-5-hydroxy-2H-pyrrol-2-one; (R)-form

[CAS No.] 87710-47-2

[化合物分類] アルカロイド化合物 (Pyrrole alkaloids)

[構造式]

[分子式] C<sub>5</sub>H<sub>5</sub>NO<sub>2</sub>

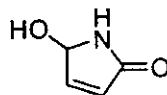
[分子量] 99.089

[天然基原] 次の植物に含まれるアルカロイド: 小さなエンドウ豆 (*Pisum sativum*) (マメ科) のシュート

[性状] プリズム結晶

[融点] Mp 103-105 °C

[比旋光度]: [α]<sub>D</sub><sup>23</sup> -12.6



-----文献-----

de Mayo, P. et al., Chem. Ind. (London), 1962, 1576, (合成法)

Liu, T.-Y. et al., Plant Physiol., 1970, 45, 424, (分離, 配糖体)

Farina, F. et al., Synthesis, 1973, 167, (合成法, 配糖体)

Masuko, M. et al., Phytochemistry, 1983, 22, 1278, (分離, UV, IR, H-NMR, C13-NMR, CD, 構造決定)

§ 1,5-Dihydro-5-hydroxy-2H-pyrrol-2-one; (R)-form, O-β-D-Glucopyranoside

[化学名・別名] Dihydromaleimide β-D-glucoside. Isosuccinimide β-D-glucoside

[CAS No.] 26696-59-3

[化合物分類] アルカロイド化合物 (Pyrrole alkaloids)

[構造式]

[分子式] C<sub>10</sub>H<sub>13</sub>NO<sub>7</sub>

[分子量] 261.231

[天然基原] 次の植物に含まれるアルカロイド: *Pisum sativum* (マメ科)

[性状] プリズム結晶

[融点] Mp 185-188 °C

[比旋光度]: [α]<sub>D</sub><sup>25</sup> -73.7

[その他のデータ] The identity (structural and stereochemical) of the various isolates of this glucoside is not

