

Fattorusso, E. et al., J. Agric. Food Chem., 2000, 48, 3455-3462, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ 3,6-Dihydroxyspirostan-2-one; (3 β ,5 α ,6 β ,25R)-form

[化学名・別名] Porrigenin B

[CAS No.] 196607-73-5

[化合物分類] ステロイド (Spirostane steroids). (C27).

[構造式]

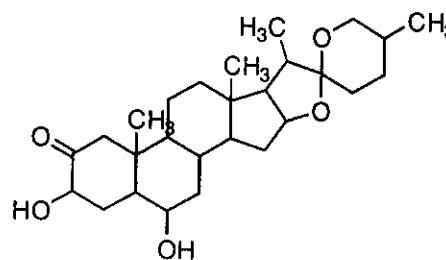
[分子式] C₂₇H₄₂O₅

[分子量] 446.626

[基原] *Allium porrum*

[性状] 粉末

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{25}$ -28 (c, 0.03 in CHCl₃/MeOH)



-----文献-----

Carotenuto, A. et al., J. Nat. Prod., 1997, 60, 1003-1007, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ 3,6-Dihydroxyspirostan-2-one; (3 β ,5 α ,6 β ,25S)-form

[化学名・別名] Neoporrigenin B

[CAS No.] 196607-74-6

[化合物分類] ステロイド (Spirostane steroids). (C27).

[構造式]

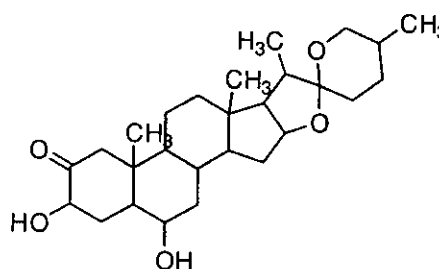
[分子式] C₂₇H₄₂O₅

[分子量] 446.626

[基原] *Allium porrum*

[性状] 粉末

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{25}$ -42 (c, 0.003 in CHCl₃/MeOH)



-----文献-----

Carotenuto, A. et al., J. Nat. Prod., 1997, 60, 1003-1007, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ 3,6-Dihydroxyspirostan-12-one; (3 β ,5 α ,6 β ,25R)-form

[化学名・別名] 12-Ketoporrigenin

[CAS No.] 189014-45-7

[化合物分類] ステロイド (Spirostane steroids). (C27).

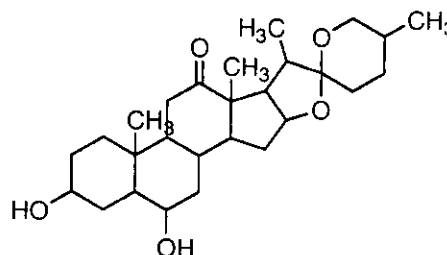
[構造式]

[分子式] C₂₇H₄₂O₅

[分子量] 446.626

[基原] *Allium porrum*

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{25}$ -13 (c, 0.03 in CHCl₃)



-----文献-----

Carotenuto, A. et al., Tetrahedron, 1997, 53, 3401-3406, (分離, H-NMR, C13-NMR)

Xu, Y.X. et al., Phytochemistry, 1998, 49, 199-201, (trione)

§ 3,6-Dihydroxyspirostan-12-one; (3 β ,5 α ,6 β ,25S)-form

[CAS No.] 189007-91-8

[化合物分類] ステロイド (Spirostane steroids). (C27).

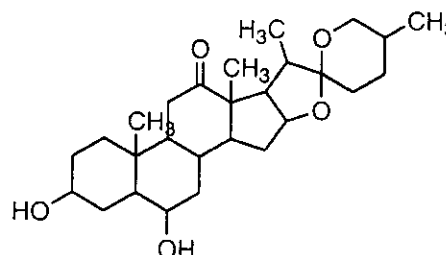
[構造式]

[分子式] C₂₇H₄₂O₅

[分子量] 446.626

[基原] *Allium porrum*

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{25}$ -31 (c, 0.003 in CHCl₃)



-----文献-----

Carotenuto, A. et al., Tetrahedron, 1997, 53, 3401-3406, (分離, H-NMR, C13-NMR)

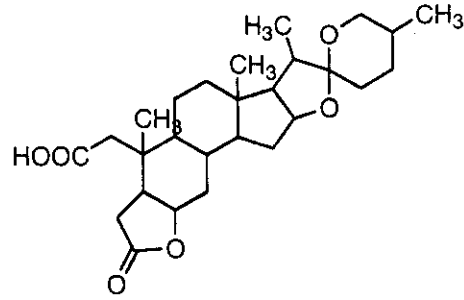
Xu, Y.X. et al., Phytochemistry, 1998, 49, 199-201, (trione)

§ 2,3-Secospirostan-3,6-olid-2-oic acid; (6 β ,25R)-form

[化学名・別名] 2,3-Secoporrigenin

[CAS No.] 189014-46-8

[化合物分類]ステロイド (Spirostane steroids). (C27).
[構造式]



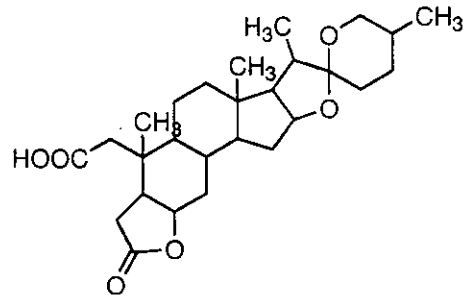
[分子式] C₂₇H₄₀O₆
[分子量] 460.609
[基原] *Allium porrum*
[比旋光度]: [α]_D²⁵ -16 (c, 0.03 in CHCl₃)

-----文献-----

Carotenuto, A et al., Tetrahedron, 1997, 53, 3401-3406, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ 2,3-Secospirostan-3,6-olid-2-oic acid; (6β,25S)-form

[CAS No.] 189007-92-9
[化合物分類]ステロイド (Spirostane steroids). (C27).
[構造式]



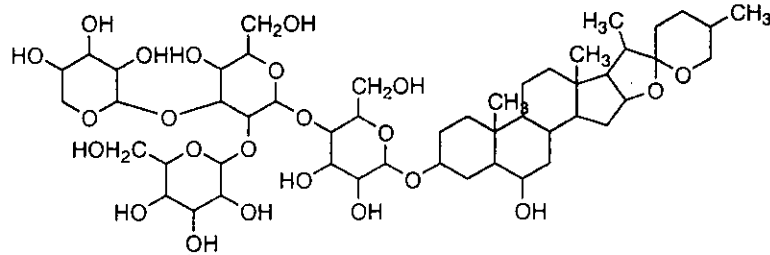
[分子式] C₂₇H₄₀O₆
[分子量] 460.609
[基原] *Allium porrum*
[比旋光度]: [α]_D²⁵ -28 (c, 0.003 in CHCl₃)

-----文献-----

Carotenuto, A et al., Tetrahedron, 1997, 53, 3401-3406, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ Spirostane-3,6-diol; (3β,5α,6β,25R)-form, 3-O-[β-D-Glucopyranosyl-(1→2)-[β-D-xylopyranosyl-(1→3)]-β-D-glucopyranosyl-(1→4)]-β-D-galactopyranoside

[CAS No.] 145594-56-5
[化合物分類]ステロイド (Spirostane steroids). (C27).
[構造式]



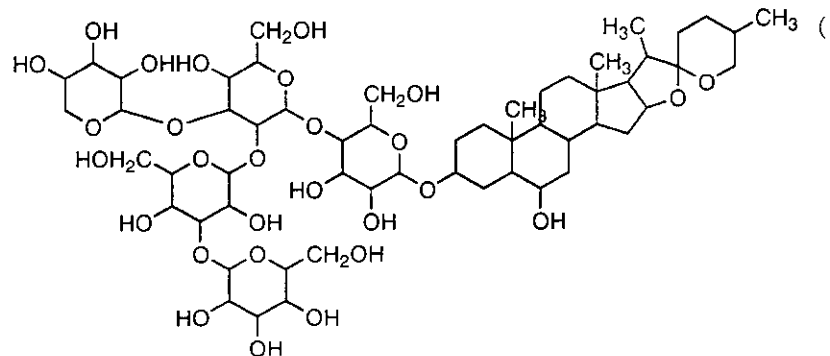
[分子式] C₅₀H₈₂O₂₃
[分子量] 1051.184
[基原] *Allium porrum*
[比旋光度]: [α]_D²⁵ -57 (MeOH)

-----文献-----

Blunden, G. et al., Steroids, 1980, 35, 503, (分離, IR, Mass, H-NMR, 3β5β6α25R-form)
Sharma, S.C. et al., Phytochemistry, 1982, 21, 1820, (合成法, IR, Mass, H-NMR, 3β5α6α25R-form)
Mahmood, U. et al., Phytochemistry, 1985, 24, 2456, (分離)
Agrawal, P.K. et al., Phytochemistry, 1985, 24, 2479, (C13-NMR, 3β5α6α25R-form)
Carotenuto, A. et al., Phytochemistry, 1999, 51, 1077-1082, (*Allium porrum* saponins)

§ Spirostane-3,6-diol; (3β,5α,6β,25R)-form, 3-O-[β-D-Glucopyranosyl-(1→3)]-β-D-glucopyranosyl-(1→2)-[β-D-xylopyranosyl-(1→3)]-β-D-glucopyranosyl-(1→4)]-β-D-galactopyranoside

[CAS No.] 244764-96-3
[化合物分類]ステロイド
Spirostane steroids). (C27).
[構造式]



[分子式] C₅₆H₉₂O₂₈
[分子量] 1213.326
[基原] *Allium porrum*
[比旋光度]: [α]_D²⁵ -56 (MeOH)

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{25}$ -56 (MeOH)

-----文献-----

- Wall, M.E. et al., J.A.C.S., 1955, 77, 5661, (合成法, 3 β 5 α 6 α 25R-form)
Chincharadze, D.G. et al., Khim. Prir. Soedin., 1979, 15, 509; Chem. Nat. Compd. (Engl. Transl.), 1979, 15, 442, (合成法, 3 β 5 α 6 β 25R-form)
Blunden, G. et al., Steroids, 1980, 35, 503, (分離, IR, Mass, H-NMR, 3 β 5 β 6 α 25R-form)
Sharma, S.C. et al., Phytochemistry, 1982, 21, 1820, (合成法, IR, Mass, H-NMR, 3 β 5 α 6 α 25R-form)
Agrawal, P.K. et al., Phytochemistry, 1985, 24, 2479, (C13-NMR, 3 β 5 α 6 α 25R-form)
Carotenuto, A. et al., Phytochemistry, 1999, 51, 1077-1082, (*Allium porrum* saponins)

§ Spirostane-2,3,6-triol; (2 β , 3 β , 5 α , 6 β , 25R)-form

[化学名・別名] Porrigenin A

[CAS No.] 196607-75-7

[化合物分類] ステロイド (Spirostane steroids). (C27).

[構造式]

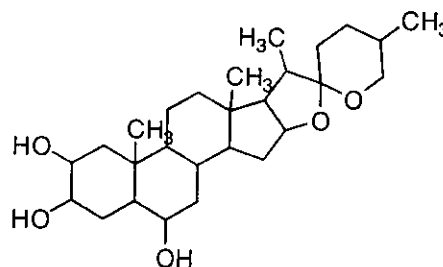
[分子式] C₂₇H₄₄O₅

[分子量] 448.642

[基原] *Allium porrum*

[性状] 粉末

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{25}$ -20 (c, 0.03 in CHCl₃)



-----文献-----

- Morita, T. et al., Chem. Pharm. Bull., 1988, 36, 3480-3483, (Ampeloside Bs, Aginoside progenin)
Carotenuto, A. et al., J. Nat. Prod., 1997, 60, 1003-1007, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ Spirostane-2,3,6-triol; (2 β , 3 β , 5 α , 6 β , 25S)-form

[化学名・別名] Neoporrigenin A

[CAS No.] 196607-76-8

[化合物分類] ステロイド (Spirostane steroids). (C27).

[構造式]

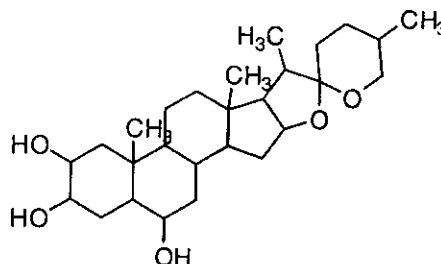
[分子式] C₂₇H₄₄O₅

[分子量] 448.642

[基原] *Allium porrum*

[性状] 粉末

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{25}$ -37 (c, 0.003 in CHCl₃)



-----文献-----

- Kel'ginbaev, A.N. et al., Khim. Prir. Soedin., 1974, 10, 801-802; 1975, 11, 521-522; 1976, 12, 480-486; Chem. Nat. Compd. (Engl. Transl.), 1974, 10, 829-830; 1975, 11, 546-547; 1976, 12, 422-426, (Neoagigenin, Agigenin, Gantogenin, Aginoside)
Pirtskhalava, G.V. et al., Khim. Prir. Soedin., 1977, 13, 532-533; 534-537; 1978, 14, 355-360; Chem. Nat. Compd. (Engl. Transl.), 1977, 13, 446-448; 1978, 14, 294-298; 459-460, (Neoagigenin 6-benzoate, Turosside A)
Carotenuto, A. et al., J. Nat. Prod., 1997, 60, 1003-1007, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ 2,6,7-Trihydroxy-9-methyl-4-dibenzofurancarboxylic acid; 7-Me ether

[化学名・別名] 2,6-Dihydroxy-7-methoxy-9-methyl-4-dibenzofurancarboxylic acid. Porric acid B

[CAS No.] 207285-02-7

[化合物分類] 単環芳香族 (Dibenzofurans)

[構造式]

[分子式] C₁₅H₁₂O₆

[分子量] 288.256

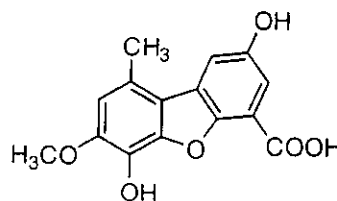
[基原] *Allium porrum* の球根

[用途] 抗カビ剤

[性状] 青白い黄色の結晶

[融点] Mp 217-219 °C

UV: [neutral] λ_{max} 210 ; 214 ; 238 ; 258 ; 334 (MeOH) [neutral] λ_{max} 210 ; 214 ; 238 ; 258 ; 334 (MeOH) (Berdy)



-----文献-----

§ 2,6,7-Trihydroxy-9-methyl-4-dibenzofurancarboxylic acid; 2,7-Di-Me ether

[化学名・別名] 6-Hydroxy-27-dimethoxy-9-methyl-4-dibenzofurancarboxylic acid. Porric acid A

[CAS No.] 207285-00-5

[化合物分類] 単環芳香族 (Dibenzofurans)

[構造式]

[分子式] $C_{16}H_{14}O_6$

[分子量] 302.283

[基原] *Allium porrum* の球根

[用途] 抗カビ剤

[性状] 青白い黄色の結晶

[融点] Mp 200-202 °C

UV: [neutral] λ_{max} 206 ; 238 ; 260 ; 338 (MeOH) [neutral] λ_{max} 206 ; 238 ; 260 ; 338 (MeOH) (Berdy)



-----文献-----

Carotenuto, A. et al., Eur. J. Org. Chem., 1998, 661-663, (分離, UV, H-NMR, C13-NMR)

*****リツェア (Litsea) *****

§ § クスノキ科タイワンヤマクロモジ (*Litsea cubeba* Persoon)

§ Lauroschoztine; (S)-form, N-Me

[化学名・別名] Xanthoplanine

[CAS No.] 6872-88-4

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

[構造式]

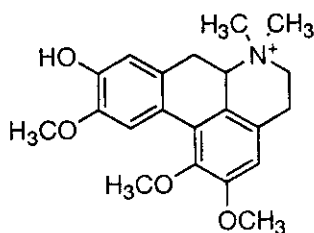
[分子式] $C_{21}H_{29}NO_4^{(+)}$

[分子量] 356.441

[基原] 次の植物から得られる 4 基のアルカロイド: *Zanthoxylum planispium*, *Fagara hyemalis*, *Fagara nigrescens*, *Hernandia ovigera* (ミカン科, ハスノハギリ科), *Litsea cubeba* (クスノキ科)

[融点] Mp 207-209 °C (as iodide)

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{21} +62$ (c, 0.83 in EtOH)



-----文献-----

Ishii, H. et al., Yakugaku Zasshi, 1961, 81, 238, (Xanthoplanine)

Albonico, S.M. et al., J.C.S.(C), 1966, 1340, (UV, ORD, Xanthoplanine)

Marsaioli, A.J. et al., Phytochemistry, 1979, 18, 165, (C13-NMR, Xanthoplanine)

Lee, S.S. et al., J. Nat. Prod., 1993, 56, 1971, (分離, UV, IR, H-NMR, Xanthoplanine)

§ Litcubine

[CAS No.] 172924-22-0

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

[構造式]

[分子式] $C_{19}H_{22}NO_4^{(+)}$

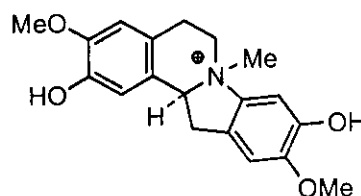
[分子量] 328.387

[基原] 次の植物から得られるアルカロイド: *Litsea cubeba* の根

[性状] 無定形の塊 (as perchlorate)

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{25.5} -111$ (c, 1.0 in MeOH)

UV: [neutral] λ_{max} 233 (sh) (log ϵ 4.06); 287 (log ϵ 3.96) (MeOH) [base] λ_{max} 249 (log ϵ 4.14); 304 (log ϵ 3.99) (MeOH + NaOH)



-----文献-----

Lee, S.S. et al., J. Nat. Prod., 1996, 59, 80-82

§ Litcubine; 10-O-De-Me

[化学名・別名] Litcubinine

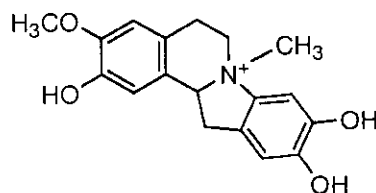
[CAS No.] 172924-24-2

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

[構造式]

[分子式] $C_{18}H_{20}NO_4^{(+)}$

[分子量] 314.36



[分子式] $C_{18}H_{20}NO_4^{+}$

[分子量] 314.36

[基原] 次の植物から得られるアルカロイド: *Litsea cubeba* の根

[性状] 無定形の塊 (as perchlorate)

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{25.5} -144$ (c, 0.5 in MeOH)

UV: [neutral] λ_{max} 234 (sh) (log ϵ 4.03); 290 (log ϵ 3.99) (MeOH) [base] λ_{max} 248 (log ϵ 4.1); 305 (log ϵ 4.08) (MeOH/NaOH)

-----文献-----

Lee, S.S. et al., J. Nat. Prod., 1996, 59, 80-82

§ Litebamine

[化学名・別名] 1,2,3,4-Tetrahydro-9,11-dimethoxy-2-methylnaphth[2,1-f]isoquinoline-8,12-diol (CAS 名)

[CAS No.] 137031-56-2

[化合物分類] アルカロイド化合物 (Phenanthrene alkaloids), アルカロイド化合物 (Miscellaneous isoquinoline alkaloids)

[構造式]

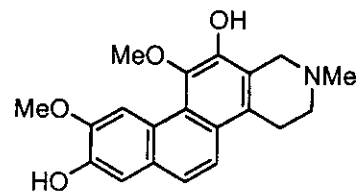
[分子式] $C_{20}H_{21}NO_4$

[分子量] 339.39

[基原] 次の植物から得られるアルカロイド: *Litsea cubeba* (クスノキ科)

[性状] 結晶 (MeOH)

[融点] Mp 218-220 °C



-----文献-----

Wu, Y.-C. et al., Tet. Lett., 1991, 32, 4169, (分離, H-NMR, C13-NMR, IR, UV, 構造決定)

Hara, H. et al., Tetrahedron, 1995, 51, 10189, (合成法)

§ Longifolidine; (R)-form, N-Me

[化学名・別名] 8-O-Methyloblongine

[CAS No.] 152230-58-5

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

[構造式]

[分子式] $C_{20}H_{26}NO_3^{+}$

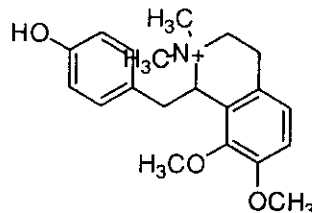
[分子量] 328.43

[基原] 次の植物から得られるアルカロイド: *Litsea cubeba* の茎

[性状] 無定形の塊 (as perchlorate)

[融点] Mp 102 °C (perchlorate)

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{24} -12$ (c, 1.0 in MeOH)



-----文献-----

Bick, I.R.C. et al., Aust. J. Chem., 1981, 34, 195, (分離, UV, IR, H-NMR, Mass, 構造決定)

Lee, S.S. et al., J. Nat. Prod., 1993, 56, 1971, (8-O-Methyloblongine)

§ p-Menthane-3,8-diol (旧 CAS 名)

[化学名・別名] 2-Hydroxy- α, α -4-trimethylcyclohexanemethanol (CAS 名), Menthoglycol, Isopulegol hydrate, Cubebaol

[CAS No.] 42822-86-6

[関連 CAS No.] 91739-73-0, 107133-84-6, 140924-71-6

[その他の CAS No.] 138663-70-4

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

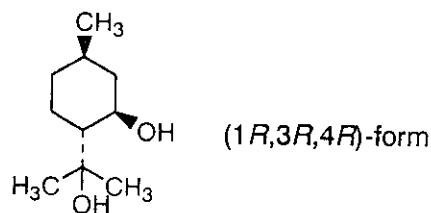
[構造式]

[分子式] $C_{10}H_{20}O_2$

[分子量] 172.267

[基原] *Litsea cubeba* の根

[用途] 昆虫の駆虫作用を示す



-----文献-----

Nishimura, H. et al., Agric. Biol. Chem., 1982, 46, 319-320; 2601-2604, (分離)

Nishimura, H., Fragrance J., 1985, 13, 160-162, (レビュー, 分離, 性質)

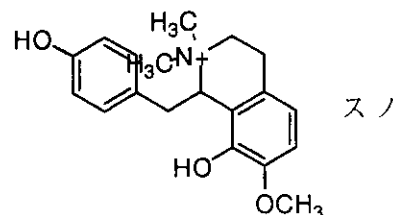
Chen, F. et al., CA, 1992, 116, 67006p, (分離)

[CAS No.] 152230-57-4
[その他の CAS No.] 152230-59-6
[化合物分類] アルカロイド化合物 (Benzyloisoquinoline alkaloids)

[構造式]
[分子式] $C_{19}H_{23}NO_3$
[分子量] 314.403

[基原] 次の植物から得られる 4 基のアルカロイド: *Litsea cubeba* の茎 (クスノキ科)

[性状] 無定型の塊 (as perchlorate)
[融点] Mp 109.5 °C (as perchlorate)
[比旋光度]: $[\alpha]_D^{25} -11$ (c, 1.0 in MeOH)



-----文献-----

Karimov, A. et al., *Khim. Prir. Soedin.*, 1976, 12, 117-118, (分離)
Dwuma-Badu, D. et al., *J. Nat. Prod.*, 1983, 46, 342, (分離, UV, IR, H-NMR, Mass, 構造決定, 合成法)
Lee, S.-S. et al., *J. Nat. Prod.*, 1993, 56, 1971, (Oblongine)

§ § クスノキ科アオモジ (*Lindera citriodora* (Siebold et Zuccarini) Hemsley) の果実。
本調査研究では、成分に関する文献はなかった。

*****リナロエ (Linaloe) *****

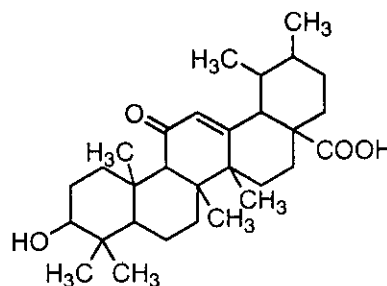
§ § カンラン科リナロエ (*Bursera delpechiana* Poisson) の材, 種子, または葉。

§ 3,11-Dihydroxy-12-ursen-28-oic acid; (3 β, 11 α)-form, 11-Ketone

[化学名・別名] 3-Hydroxy-11-oxo-12-ursen-28-oic acid. Obtusilin
[CAS No.] 105870-59-5

[化合物分類] テルペノイド (Ursane triterpenoids)
[構造式]

[分子式] $C_{30}H_{46}O_4$
[分子量] 470.691
[基原] *Plumeria obtusa*, *Bursera delpechiana*
[性状] 針状結晶 (MeOH) (as Me ester)
[融点] Mp 159-161 °C (Me ester)



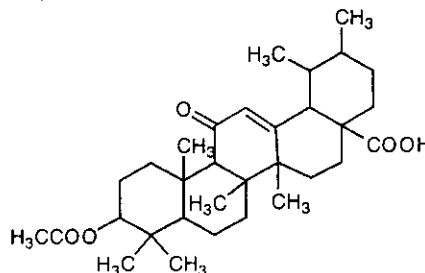
-----文献-----

Siddiqui, S. et al., *Phytochemistry*, 1990, 29, 3615, (分離, H-NMR, C13-NMR, Obtusilin)
Syamasundar, K.V. et al., *Phytochemistry*, 1991, 30, 362, (分離, H-NMR, C13-NMR, Obtusilin)
Luis, J.G. et al., *Nat. Prod. Lett.*, 1999, 13, 187-194, (3-ketone)

§ 3,11-Dihydroxy-12-ursen-28-oic acid; (3 β, 11 α)-form, 11-Ketone, 3-Ac

[化合物分類] テルペノイド (Ursane triterpenoids)
[構造式]

[分子式] $C_{32}H_{48}O_5$
[分子量] 512.728
[基原] *Bursera delpechiana*
[性状] 結晶 (MeOH) (as Me ester)
[融点] Mp 235-237 °C (Me ester)



-----文献-----

Siddiqui, S. et al., *Phytochemistry*, 1990, 29, 3615, (分離, H-NMR, C13-NMR, Obtusilin)
Syamasundar, K.V. et al., *Phytochemistry*, 1991, 30, 362, (分離, H-NMR, C13-NMR, Obtusilin)
Santos, G.G. et al., *Phytochemistry*, 1997, 44, 1309-1312, (分離, H-NMR, C13-NMR, 誘導體)
Luis, J.G. et al., *Nat. Prod. Lett.*, 1999, 13, 187-194, (3-ketone)

§ 11,12-Epoxy-3-hydroxy-28,13-ursanolide; (3 β, 11 α, 12 α, 13 β)-form, Ac

Luis, J.G. et al., Nat. Prod. Lett., 1999, 13, 187-194, (3-ketone)

§ 11,12-Epoxy-3-hydroxy-28,13-ursanolide; (3 β ,11 α ,12 α ,13 β)-form, Ac

[化合物分類]テルペノイド(Oleanane triterpenoids)

[構造式]

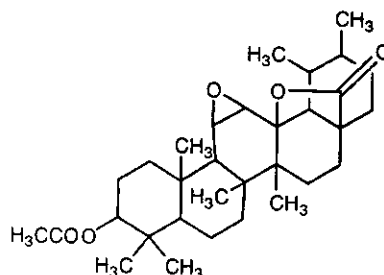
[分子式]C₃₂H₅₄O₅

[分子量]512.728

[基原]*Bursera delpechiana*

[性状]針状結晶(MeOH)

[融点]Mp 285-288 °C



-----文献-----

Begum, S. et al., J. Nat. Prod., 1993, 56, 613, (分離, H-NMR, C13-NMR, Mass)

Syamasundar, K.V. et al., Phytochemistry, 1995, 40, 337, (Acetate)

*****リュウガン (Longan) *****

§ § ムクロジ科リュウガン(*Euphoria longana* Steudel)の果実, 種子。

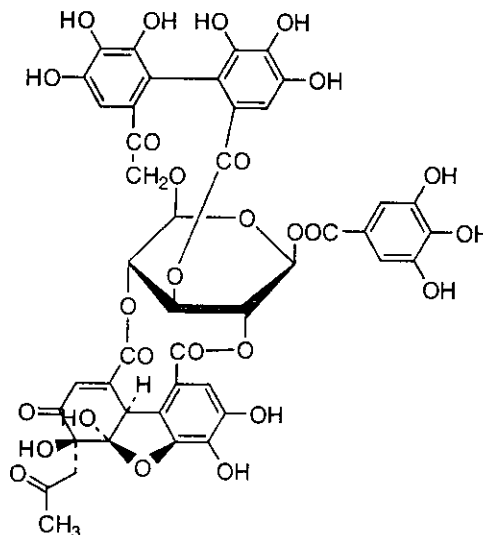
§ Phyllanthusiin D

[化学名・別名]Acetylgeraniin

[CAS No.]133145-19-4

[化合物分類]タンニン化合物(Dehydrohexahydroxydiphenoyl ester tannins), タンニン化合物(Hexahydroxydiphenoyl ester tannins)

[構造式]



[分子式]C₄₄H₃₂O₂₇

[分子量]992.721

[基原]次の植物から分離: *Phyllanthus flexuosus*, *Phyllanthus amarus*. また *Euphoria longana* の種子からも得られる

[性状]針状結晶・五水和物(MeOH 溶液)

[融点]Mp 245-247 °C (235-238 °C)

[比旋光度]:[α]_D²⁰ -93 (c, 1.0 in Me₂CO). [α]_D²⁰ -95.3 (c, 1 in MeOH)

-----文献-----

Yoshida, T. et al., Chem. Pharm. Bull., 1992, 40, 53

Foo, L.Y. et al., Phytochemistry, 1992, 31, 711, (分離, 構造決定)

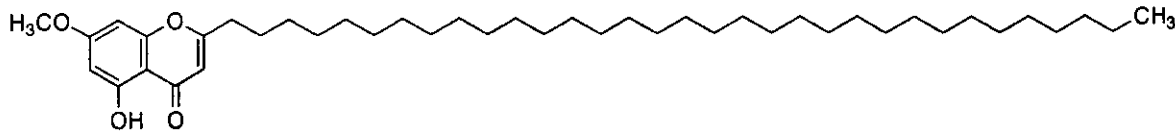
Hsu, F.-L. et al., Planta Med., 1994, 60, 297, (分離)

*****リュウゼツラン (Century Plant) *****

§ § ヒガンバナ科リュウゼツラン(*Agave americana* L.)の花茎、根及び葉。

§ 5,7-Dihydroxy-2-tritriacontyl-4H-1-benzopyran-4-one: 7-Me ether

[化学名・別名]5-Hydroxy-7-methoxy-2-tritriacontyl-4H-1-benzopyran-4-one(CAS 名), 5-Hydroxy-7-methoxy-2-tritriacontylchromone



[分子式]
C₃₃H₅₇
O₄

[分子量] 655.055

[基原] *Agave americana*

[用途] 抗菌活性を示す

[性状] 針状結晶 (CHCl₃/petrol)

[融点] Mp 83 °C

UV: [neutral] λ_{max} 251 (MeOH) (Berdy)

-----文献-----

Parmer, V.S. et al., Tetrahedron, 1992, 48, 1281

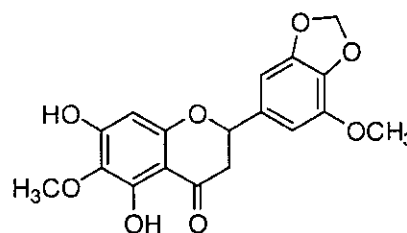
§ 3',4',5,5',6,7-Hexahydroxyflavanone; (S)-form, 3',6-Di-Me ether, 4',5'-methylene ether

[化学名・別名] 5,7-Dihydroxy-3',6-dimethoxy-4',5'-methylenedioxyflavanone. Agamanone

[CAS No.] 143381-59-3

[化合物分類] フラボノイド (Flavanones; 6 × O-置換基)

[構造式]



[分子式] C₁₉H₁₆O₈

[分子量] 360.32

[基原] 次の植物から分離: *Agave americana*

[性状] 結晶 (MeOH/CHCl₃)

[融点] Mp 237 °C

-----文献-----

Parmar, V.S. et al., Phytochemistry, 1992, 31, 2567, (Agamanone)

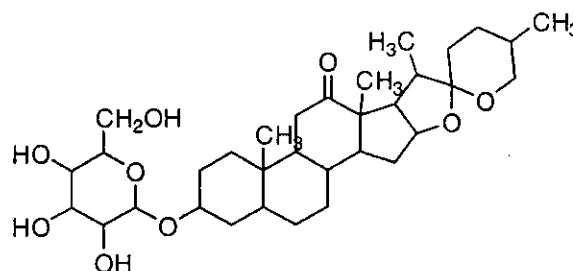
§ 3-Hydroxyspirostan-12-one; (3β,5α,25R)-form, 3-O-β-D-Galactopyranoside

[化学名・別名] Agavoside A. Agaveside A

[CAS No.] 56857-65-9

[化合物分類] ステロイド (Spirostane steroids). (C27).

[構造式]



[分子式] C₃₃H₅₂O₉

[分子量] 592.768

[基原] *Agave americana*

[性状] 無定型

[化学物質毒性データ総覧(RTECS)登録番号] WH1446000

-----文献-----

Karrer, W. et al., Konstitution und Vorkommen der Organischen Pflanzenstoffe, 2nd edn., Birkhäuser Verlag, Basel, 1972, no. 2115, (生育)

Kintya, P.K. et al., Khim. Prir. Soedin., 1975, 11, 104; Chem. Nat. Compd. (Engl. Transl.), 1975, 11, 121, (Agavasaponins)

Bodeiko, V.A. et al., Khim. Prir. Soedin., 1975, 11, 751; Chem. Nat. Compd. (Engl. Transl.), 1975, 11, 775, (Agavasaponins)

Kintya, P.K. et al., Tezisy Dokl. Vses. Simp. Bioorg. Khim., 1975, 1975, 20, (Agavosides)

RTECS (化学物質毒性データ)

生体影響物質 : 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>> LD10 - 致死量試験

曝露経路 : 腹腔内投与.

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》 LD10 - 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 : 40 mg/kg
毒性影響 : (催腫瘍性) 抗がん剤として有効.

参考文献

Pharmaceutical Chemistry Journal (English Translation). 11,749,1977

§ 3-Hydroxyspirostan-12-one; (3 β , 5 α , 25R)-form, 3-O-[β -D-Glucopyranosyl-(1 \rightarrow 4)- β -D-galactopyranoside]

[化学名・別名] Agavoside B. Agaveside B

[CAS No.] 56857-66-0

[化合物分類] ステロイド (Spirostane steroids). (C27).

[構造式]

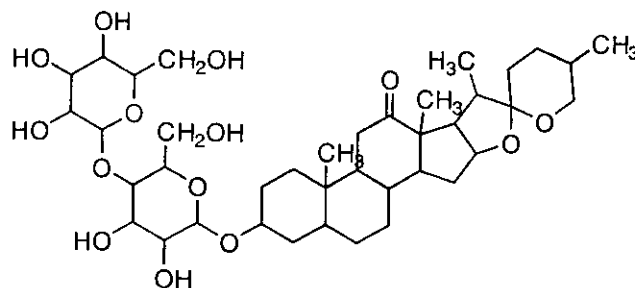
[分子式] C₃₉H₆₂O₁₄

[分子量] 754.91

[基原] *Agave americana*

[性状] 無定型

[化学物質毒性データ総覧 (RTECS) 登録番号] WH1447000



----- 文献 -----

Karrer, W. et al., Konstitution und Vorkommen der Organischen Pflanzenstoffe, 2nd edn., Birkhäuser Verlag.
Kintya, P.K. et al., Khim. Prir. Soedin., 1975, 11, 104; Chem. Nat. Compd. (Engl. Transl.), 1975, 11, 121, (Agavasaponins)

Bodeiko, V.A. et al., Khim. Prir. Soedin., 1975, 11, 751; Chem. Nat. Compd. (Engl. Transl.), 1975, 11, 775, (Agavasaponins)

Kintya, P.K. et al., Tezisy Dokl. Vses. Simp. Bioorg. Khim., 1975, 1975, 20, (Agavosides)

RTECS (化学物質毒性データ)

生体影響物質 : 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》 LD10 - 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 : 40 mg/kg
毒性影響 :

(催腫瘍性) 抗がん剤として有効.

参考文献

Pharmaceutical Chemistry Journal (English Translation). 11,749,1977

§ 3-Hydroxyspirostan-12-one; (3 β , 5 α , 25R)-form, 3-O-[β -D-Glucopyranosyl-(1 \rightarrow 4)- β -D-glucopyranosyl-(1 \rightarrow 4)- β -D-galactopyranoside]

[化学名・別名] Agavasaponin C. Agavoside C. Agavasaponin C. Agaveside C

[CAS No.] 56316-35-9

[化合物分類] ステロイド (Spirostane steroids). (C27).

[構造式]

[分子式] C₄₅H₇₂O₁₆

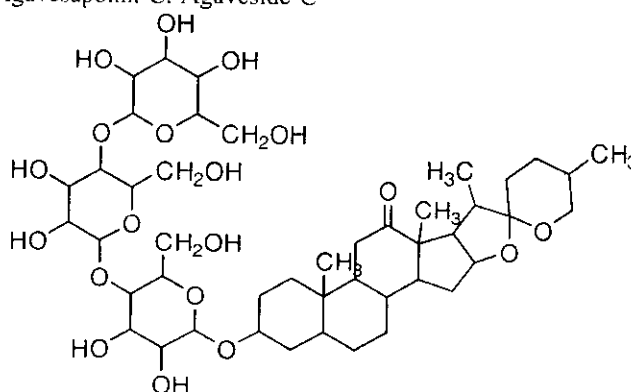
[分子量] 917.052

[基原] *Agave americana*

[性状] 結晶 (MeOH)

[融点] Mp 275 °C

[比旋光度]: [α]_D -55 (CHCl₃)



1972, no. 2115, (生育)

Kintya, P.K. et al., Khim. Prir. Soedin., 1975, 11, 104; Chem. Nat. Compd. (Engl. Transl.), 1975, 11, 121, (Agavasaponins)

Bodeiko, V.A. et al., Khim. Prir. Soedin., 1975, 11, 751; Chem. Nat. Compd. (Engl. Transl.), 1975, 11, 775, (Agavasaponins)

Kintya, P.K. et al., Tezisy Dokl. Vses. Simp. Bioorg. Khim., 1975, 1975, 20, (Agavosides)

RTECS (化学物質毒性データ)

生体影響物質 : 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>> LD10 - 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 : 10 mg/kg

毒性影響 :

[催腫瘍性] 抗がん剤として有効.

参照文献

Pharmaceutical Chemistry Journal (English Translation). 11,749,1977

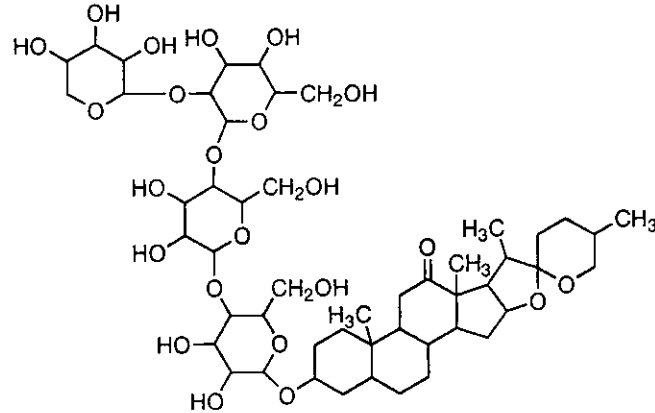
§ 3-Hydroxyspirostan-12-one; (3 β ,5 α ,25R)-form, 3-O-[\beta-D-Xylopyranosyl-(1 \rightarrow 2)-\beta-D-glucopyranosyl-(1 \rightarrow 4)-\beta-D-glucopyranosyl-(1 \rightarrow 4)-\beta-D-galactopyranoside]

[化学名・別名] Agavasaponin C'. Agavoside C'. Agavesaponin C'. Agaveside C'

[CAS No.] 58546-17-1

[化合物分類] ステロイド (Spirosterane steroids). (C27)

[構造式]



[分子式] C₅₀H₈₀O₂₃

[分子量] 1049.168

[基原] *Agave americana*

[融点] Mp 200-204 °C

[比旋光度]: [α]_D²⁰ -54 (c, 1.1 in CHCl₃)

[化学物質毒性データ総覧(RTECS)登録番号] WH1449000

-----文献-----

Karrer, W. et al., Konstitution und Vorkommen der Organischen Pflanzenstoffe, 2nd edn., Birkhäuser Verlag, Basel, 1972, no. 2115, (生育)

Kintya, P.K. et al., Khim. Prir. Soedin., 1975, 11, 104; Chem. Nat. Compd. (Engl. Transl.), 1975, 11, 121, (Agavasaponins)

Bodeiko, V.A. et al., Khim. Prir. Soedin., 1975, 11, 751; Chem. Nat. Compd. (Engl. Transl.), 1975, 11, 775, (Agavasaponins)

Kintya, P.K. et al., Tezisy Dokl. Vses. Simp. Bioorg. Khim., 1975, 1975, 20, (Agavosides)

RTECS (化学物質毒性データ)

生体影響物質 : 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>> LD10 - 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 : 20 mg/kg

毒性影響 : [催腫瘍性] 抗がん剤として有効.

参照文献

Pharmaceutical Chemistry Journal (English Translation). 11,749,1977

§ 3-Hydroxyspirostan-12-one; (3 β ,5 α ,25R)-form, 3-O-[\alpha-L-Rhamnopyranosyl-(1 \rightarrow 3)-[\beta

§ 3-Hydroxyspirostan-12-one; (3 β ,5 α ,25R)-form, 3-O-[α -L-Rhamnopyranosyl-(1 \rightarrow 3)-[β -D-xylopyranosyl-(1 \rightarrow 2)]- β -D-glucopyranosyl-(1 \rightarrow 4)- β -D-galactopyranoside]

[化学名・別名] Agavasaponin D. Agavoside D. Agavesaponin D. Agaveside D

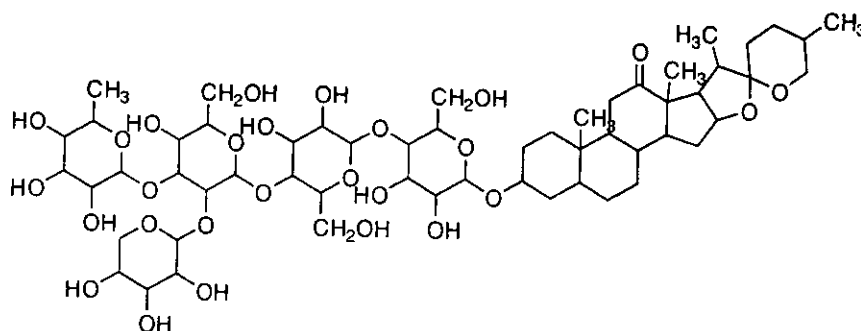
[CAS No.] 58546-18-2

[化合物分類] ステロイド

(Spirostane steroids).

(C27).

[構造式]



[分子式] C₅₆H₉₀O₂₇

[分子量] 1195.311

[基原] *Agave americana*

[融点] Mp 298-300 °C

[比旋光度]: [α]_D²⁰ -60 (c, 1.33 in MeOH)

[化学物質毒性データ総覧(RTECS)登録番号] WH1445000

----- 文献 -----

Karrer, W. et al., Konstitution und Vorkommen der Organischen Pflanzenstoffe, 2nd edn., Birkhäuser Verlag, Basel, 1972, no. 2115, (生育)

Kintya, P.K. et al., Khim. Prir. Soedin., 1975, 11, 104; Chem. Nat. Compd. (Engl. Transl.), 1975, 11, 121, (Agavasaponins)

Bodeiko, V.A. et al., Khim. Prir. Soedin., 1975, 11, 751; Chem. Nat. Compd. (Engl. Transl.), 1975, 11, 775, (Agavasaponins)

Kintya, P.K. et al., Tezisy Dokl. Vses. Simp. Bioorg. Khim., 1975, 1975, 20, (Agavosides)

RTECS (化学物質毒性データ)

生体影響物質 : 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>> LD10 - 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 : 7 mg/kg

毒性影響 :

[催腫瘍性] 抗がん剤として有効.

参照文献

Pharmaceutical Chemistry Journal (English Translation).11,749,1977

§ 3-Hydroxyspirostan-12-one; (3 β ,5 α ,25R)-form, 3-O-[α -L-Rhamnopyranosyl-(1 \rightarrow 4)- α -L-rhamnopyranosyl-(1 \rightarrow 3)-[β -D-xylopyranosyl-(1 \rightarrow 2)]- β -D-glucopyranosyl-(1 \rightarrow 4)- β -D-galactopyranoside]

[化学名・別名] Agavasaponin E. Agavoside E. Agavesaponin E. Agaveside E

[CAS No.]

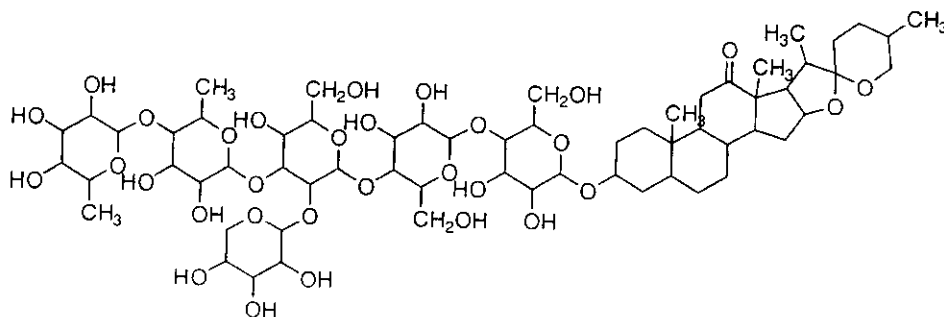
58546-19-3

[化合物分類] ステ

ロイド (Spirostane

steroids). (C27).

[構造式]



[分子式] C₆₂H₁₀₀O₃₁

[分子量] 1341.453

[基原] *Agave americana*

[化学物質毒性データ総覧 (RTECS) 登録番号] WH1444000

文献

Karrer, W. et al., *Konstitution und Vorkommen der Organischen Pflanzenstoffe*, 2nd edn., Birkhäuser Verlag, Basel, 1972, no. 2115, (生育)

Dawidar, A.M. et al., *J. Pharm. Sci.*, 1974, 63, 140, (Mass)

Kintya, P.K. et al., *Khim. Prir. Soedin.*, 1975, 11, 104; *Chem. Nat. Compd. (Engl. Transl.)*, 1975, 11, 121, (Agavasaponins)

Bodeiko, V.A. et al., *Khim. Prir. Soedin.*, 1975, 11, 751; *Chem. Nat. Compd. (Engl. Transl.)*, 1975, 11, 775, (Agavasaponins)

Kintya, P.K. et al., *Tezisy Dokl. Vses. Simp. Bioorg. Khim.*, 1975, 1975, 20, (Agavosides)

RTECS (化学物質毒性データ)

生体影響物質 : 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>> LD10 - 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 : 6 mg/kg

毒性影響 :

[催腫瘍性] 抗がん剤として有効.

参照文献

Pharmaceutical Chemistry Journal (English Translation), 11,749,1977

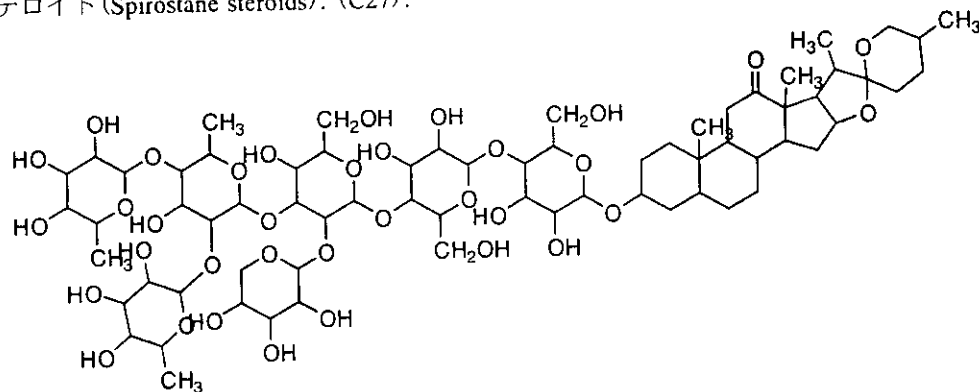
§ 3-Hydroxyspirostan-12-one; (3 β , 5 α , 25R)-form, 3-O-[α -L-Rhamnopyranosyl-(1 \rightarrow 2)]-[α -L-rhamnopyranosyl-(1 \rightarrow 4)]-[α -L-rhamnopyranosyl-(1 \rightarrow 3)]-[β -D-xylopyranosyl-(1 \rightarrow 2)]-[β -D-glucopyranosyl-(1 \rightarrow 4)]-[β -D-glucopyranosyl-(1 \rightarrow 4)]-[β -D-galactopyranoside]

[化学名・別名] Agavoside F. Agaveside F

[CAS No.] 58572-18-2

[化合物分類] ステロイド (Spirosterane steroids). (C27).

[構造式]



[分子式] C₆₈H₁₁₀O₃₅

[分子量] 1487.596

[基原] *Agave americana*

文献

Karrer, W. et al., *Konstitution und Vorkommen der Organischen Pflanzenstoffe*, 2nd edn., Birkhäuser Verlag, Basel, 1972, no. 2115, (生育)

Kintya, P.K. et al., *Khim. Prir. Soedin.*, 1975, 11, 104; *Chem. Nat. Compd. (Engl. Transl.)*, 1975, 11, 121, (Agavasaponins)

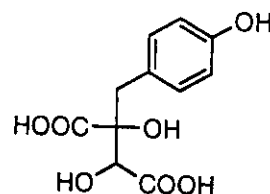
Bodeiko, V.A. et al., *Khim. Prir. Soedin.*, 1975, 11, 751; *Chem. Nat. Compd. (Engl. Transl.)*, 1975, 11, 775, (Agavasaponins)

Kintya, P.K. et al., *Tezisy Dokl. Vses. Simp. Bioorg. Khim.*, 1975, 1975, 20, (Agavosides)

§ Piscidic acid; (2R,3S)-form

[CAS No.] 35388-57-9

[CAS No.] 35388-57-9
[化合物分類] 炭水化物 (Aldaric acids)
[構造式]



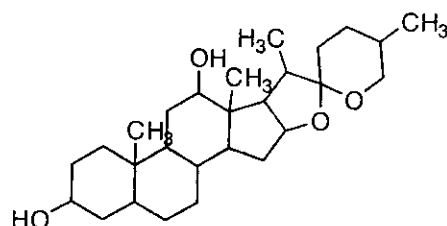
[分子式] $C_6H_{12}O_7$
[分子量] 256.212
[基原] 次の植物から分離: *Piscidia erythrina* の樹皮, *Narcissus poeticus*,
Cimicifuga simplex, *Agave americana*, *Opuntia ficus-indica*
[性状] 細長いプリズム結晶 (EtOAc/CHCl₃)
[融点] Mp 186-187 °C
[比旋光度]: $[\alpha]_D^{20} +42.8$ (c, 0.8 in MeOH)
UV: [neutral] λ_{max} 255 (log ϵ 3.88); 277 (log ϵ 3.17) (MeOH)

----- 文献 -----

Buckle, A.L.J. et al., J.C.S., 1954, 3981, (合成法)
Nordal, A. et al., Acta Chem. Scand., 1964, 18, 1979; 1966, 20, 1431, (分離)
Yoshihara, T. et al., Tet. Lett., 1971, 3809, (stereochem)
Takahira, M. et al., Phytochemistry, 1998, 49, 2115-2119, (分離, UV, H-NMR, C13-NMR, Mass)
Toshima, H. et al., Biosci., Biotechnol., Biochem., 1999, 63, 964-967; 1934-1941, (合成法)
Kruse, S.O. et al., Planta Med., 1999, 65, 763-764, (分離)

§ Spirostane-3,12-diol; (3 β ,5 α ,12 β ,25R)-form

[化学名・別名] Rockogenin, Rocogenin
[CAS No.] 16653-52-4
[化合物分類] ステロイド (Spirostane steroids). (C27).
[構造式]
[分子式] $C_{27}H_{46}O_4$
[分子量] 432.642
[基原] *Agave americana*, *Agave gracilipes*, *Yucca gloriosa*
[性状] 結晶 (MeOH), 針状結晶 (Me₂CO)
[融点] Mp 218-220 °C (208-210 °C)



----- 文献 -----

Kabasakalian, P. et al., J.O.C., 1961, 26, 1738, (合成法, 3 β ,5 α ,12 β ,25R-form)
Nussim, M. et al., J.O.C., 1964, 29, 1120, (合成法, 3 β ,5 α ,12 α ,25R-form)
González, A.G. et al., An. Quim., 1972, 68, 309, (分離)

§ 3,22,26-Trihydroxyfurostan-12-one; (3 β ,5 α ,22R,25R)-form, 3-O-[α -L-Rhamnopyranosyl-(1 \rightarrow 4)- α -L-rhamnopyranosyl-(1 \rightarrow 3)]-[β -D-xylopyranosyl-(1 \rightarrow 2)] β -D-glucopyranosyl-(1 \rightarrow 4)- β -D-glucopyranoside, 26-O- β -D-glucopyranoside

[化学名・別名] Agavasaponin H, Agavoside H
[CAS No.] 58546-21-7
[化合物分類] ステロイド (Furostane steroids). (C27).
[構造式]

[分子式]

$C_{66}H_{112}O_{37}$

[分子量]

1521.611

[基原] *Agave americana* の葉

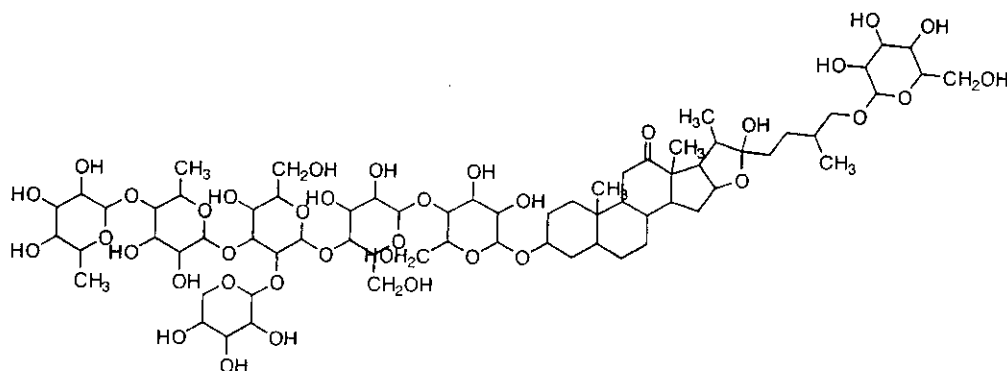
[融点] Mp

228-230 °C

[比旋光度]:

$[\alpha]_D^{20} -113$ (c, 0.62 in MeOH)

[化学物質毒性データ総覧 (RTECS) 登録番号] LV2980000



----- 文献 -----

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〉〉 LD10 (10% 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 : 10 mg/kg

毒性影響 : [催腫瘍性] 抗がん剤として有効.

参照文献

Pharmaceutical Chemistry Journal (English Translation). 11,749,1977

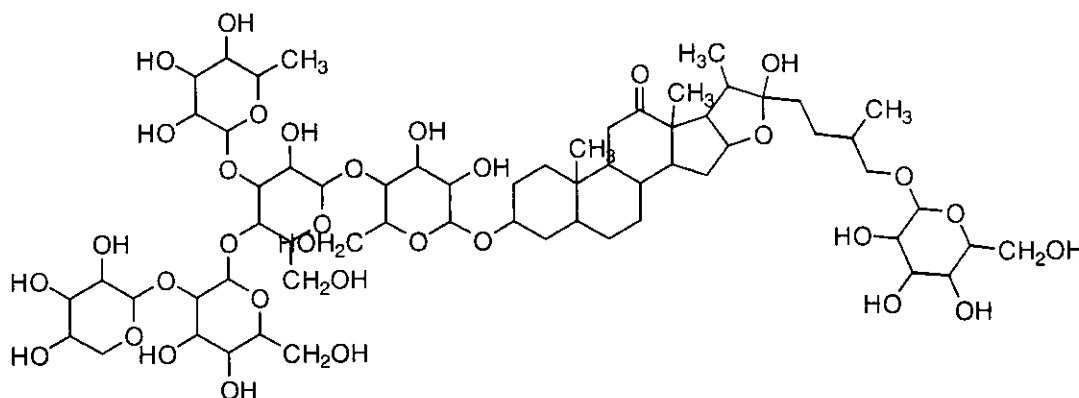
§ 3,22,26-Trihydroxyfurostan-12-one; (3 β ,5 α ,22R,25R)-form, 3-O-[α -L-Rhamnopyranosyl-(1 \rightarrow 3)[β -D-xylopyranosyl-(1 \rightarrow 2)- β -D-glucopyranosyl]-(1 \rightarrow 4)- β -D-glucopyranosyl-(1 \rightarrow 4)- β -D-galactopyranoside], 26-O- β -D-glucopyranoside

[化学名・別名] Agavoside G

[CAS No.] 58546-20-6

[化合物分類] ステロイド (Furostane steroids). (C27).

[構造式]



[分子式] C₅₂H₁₀₂O₃₃

[分子量] 1375.468

[基原] *Agave americana*

[融点] Mp 240-245 °C

[比旋光度]: [α]_D²⁰ -130 (c, 1.0 in MeOH)

-----文献-----

Wilkomirski, B. et al., *Phytochemistry*, 1975, 14, 2657, (Agavasaponin H)

Kintya, P.K. et al., *Khim. Prir. Soedin.*, 1976, 12, 486; *Chem. Nat. Compd. (Engl. Transl.)*, 1976, 12, 427, (Agavoside G)

Wu, G. et al., *Phytochemistry*, 1996, 42, 1677, (Tribulus terrestris saponin)

Wang, Y. et al., *Phytochemistry*, 1997, 45, 811-817, (Terrestrosin I)

§ 9,10,18-Trihydroxyoctadecanoic acid; (9S,10S)-form

[化学名・別名] Phloionolic acid. Floionolic acid

[CAS No.] 17705-68-9

[化合物分類] 脂肪族化合物

(Saturated unbranched carboxylic acids and lactones)

[構造式]

[分子式] C₁₈H₃₆O₃

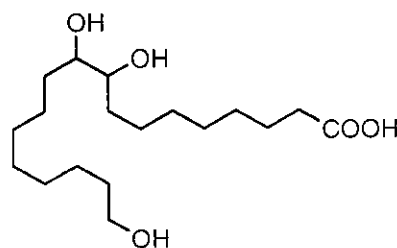
[分子量] 332.479

[基原] コルク, その他の植物, 例えば *Olea europaea*, *Agave americana*, *Chamaepeuce afra*, *Ligustrum japonicum*.

リンゴワックス and also cutins

[性状] 結晶 (MeOH)

[融点] Mp 104-105 °C



[融点] Mp 104-105 °C
[比旋光度]: $[\alpha]_D +22.75$
[PKa 値] pK_a 4.95
[その他のデータ] The (9R,10R)-(-) form has also been prepared

-----文献-----

Duhamel, L., Bull. Soc. Chim. Fr., 1965, 399, (構造決定)
Ames, D.E. et al., J.C.S. (C), 1967, 1556, (合成法)
Eglinton, G. et al., Phytochemistry, 1968, 7, 313, (Mass)
McGhie, J.F. et al., Chem. Ind. (London), 1972, 463, (stereochem)

*****リョウフンソウ (Ryofunso) *****

§ § シソ科リョウフンソウ (*Mesona chinensis* Benth.) の茎葉。
本調査研究では、成分に関する文献はなかった。

*****リョクチャ (Green tea) *****

§ § ツバキ科チャ (*Camellia sinensis* O. Kuntze) の枝葉。
「ウーロンチャ」参照

*****リンゴ (Apple) *****

§ § バラ科リンゴ (*Malus pumila* Miller) の果実。

§ 20-Hydroxyeicosanoic acid (CAS 名)

[CAS No.] 62643-46-3
[化合物分類] 脂肪族化合物 (Saturated unbranched carboxylic acids and lactones)
[構造式] HOCH₂(CH₂)₁₈COOH
[分子式] C₂₀H₄₀O₃
[分子量] 328.534
[基原] 次の植物から分離: *Carnauba* ワックス; *Malus pumila* の茎と根; *Dicranum elongatum*, *Eriophorum vaginatum*, *Pseudotsuga menziesii* の樹皮
[融点] Mp 97.4-97.8 °C

-----文献-----

Murry, K.E. et al., Aust. J. Chem., 1955, 8, 437, (分離)
Loveland, P.M. et al., Phytochemistry, 1972, 11, 3080, (分離)
Holloway, P.J., Phytochemistry, 1982, 21, 2517, (分離)
Karunen, P. et al., Phytochemistry, 1987, 26, 1728; 1988, 27, 2045, (分離)

§ 26-Hydroxyhexacosanoic acid (CAS 名)

[化学名・別名] 26-Hydroxycerotic acid. 26-Hydroxyceric acid. Corchorolic acid
[CAS No.] 506-47-8
[化合物分類] 脂肪族化合物 (Saturated unbranched alcohols)
[構造式] HOCH₂(CH₂)₂₄COOH
[分子式] C₂₆H₅₂O₃
[分子量] 412.695
[基原] 次の植物から分離: *Carnauba* ワックス, また *Eriophorum vaginatum*, *Malus pumila*, *Sphagnum fuscum*

-----文献-----

Soliman, G. et al., J.C.S., 1954, 1506, (分離)
Murry, K.E. et al., Aust. J. Chem., 1955, 8, 437, (分離)
Abrams, S.R., Chem. Phys. Lipids, 1981, 28, 379, (合成法)
Ekman, R. et al., Phytochemistry, 1982, 21, 121, (分離)
Holloway, P.J., Phytochemistry, 1982, 21, 2517, (分離)
Karunen, P. et al., Phytochemistry, 1988, 27, 2045, (分離)

§ 9-Octadecenedioic acid (CAS 名)

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

[構造式] $\text{HOOC}(\text{CH}_2)_7\text{CH}=\text{CH}(\text{CH}_2)_7\text{COOH}$

[分子式] $\text{C}_{18}\text{H}_{32}\text{O}_4$

[分子量] 312.448

[基原] ミズゴケ, マツ, トウヒ, 樺の樹皮; *Malus pumila* の根と茎のコレク, オークの液材から得られるコレク質

-----文献-----

Eglington, G. et al., *Phytochemistry*, 1968, 7, 313, (分離)

Subramanian, G.B.V. et al., *Indian J. Chem., Sect. B*, 1996, 35, 1043, (合成法)

§ **2,3,19-Trihydroxy-12-ursen-28-oic acid; (2 α ,3 β ,19 α)-form, 2-Ketone**

[化学名・別名] 3,19-Dihydroxy-2-oxo-12-ursen-28-oic acid. Pirolonic acid. 2-Oxopomolic acid

[CAS No.] 54963-52-9

[化合物分類] テルペノイド (Ursane triterpenoids)

[構造式]

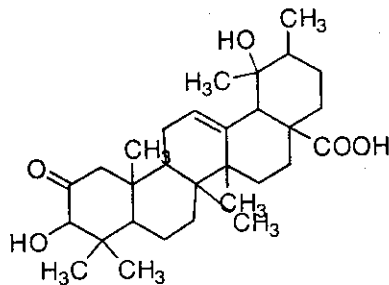
[分子式] $\text{C}_{30}\text{H}_{46}\text{O}_5$

[分子量] 486.69

[基原] *Chondrostereum purpureum* に感染した *Malus pumila* の木部

[性状] 無定型の塊

[融点] Mp 204-209 °C



-----文献-----

Kemp, M.S. et al., *J. Chem. Res., Miniprint*, 1985, 1846, (2-Oxopomolic acid)

*****リンデン (Linden) *****

§ § シナノキ科フユボダイジュ (*Tilia cordata* Miller) の葉または花。

§ **3,9-Epoxy-p-mentha-1,4(8)-diene**

[化学名・別名] Linden ether

[CAS No.] 132437-74-2

[関連 CAS No.] 125811-37-2

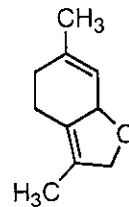
[化合物分類] テルペノイド (p-Menthane monoterpene)

[構造式]

[分子式] $\text{C}_{10}\text{H}_{14}\text{O}$

[分子量] 150.22

[基原] *Tilia cordata* の花, リンデンの蜜



-----文献-----

Blank, I. et al., *Helv. Chim. Acta*, 1990, 73, 1250, (分離, H-NMR, C13-NMR)

*****リンドウ (Gentian) *****

§ § リンドウ科リンドウ (*Gentiana scabra* Bunge var. *baergeri* Maximowicz) の根または全草。
本調査研究では、成分に関する文献はなかった。

§ § リンドウ科ゲンチアナ (*Gentiana lutea* L.) の根または全草。

§ **Gentiana Alkaloid V**

[化合物分類] アルカロイド化合物 (Alkaloids 構造は一部又は全てが未知), アルカロイド化合物 (Monoterpenoid alkaloids)

[構造式] 不明

[分子式] $\text{C}_{10}\text{H}_{15}\text{NO}$

[分子量] 175.187

[一般的性質] 構造は未知. Monoterpene alkaloid

[分子量] 175.187

[一般的性質] 構造は未知. Monoterpene alkaloid

[基原] 次の植物から得られるアルカロイド: *Gentiana asclepiadea*, *Gentiana bulgarica*, *Gentiana cruciata*, *Gentiana lutea*, *Gentiana punctata* (リンドウ科)

[融点] Mp 240 °C

-----文献-----

Marekov, N. et al., Dokl. Bolg. Akad. Nauk, 1965, 18, 999; CA, 64, 11270a, (分離, IR)

Cordell, G.A., Alkaloids (N.Y.), 1977, 16, 431, (レビュー)

§ *Gentiana* Alkaloid II

[化合物分類] アルカロイド化合物 (Monoterpenoid alkaloids), アルカロイド化合物 (Alkaloids 構造は一部又は全てが未知)

[構造式] 不明

[一般的性質] 構造は未知. Monoterpene alkaloid

[基原] 次の植物から得られるアルカロイド: *Gentiana asclepiadea*, *Gentiana bulgarica*, *Gentiana cruciata*, *Gentiana lutea*, *Gentiana punctata* (リンドウ科)

-----文献-----

Mollov, N.M. et al., Dokl. Bolg. Akad. Nauk, 1965, 18, 947; CA, 64, 10084h, (分離, IR)

Cordell, G.A., Alkaloids (N.Y.), 1977, 16, 431, (レビュー)

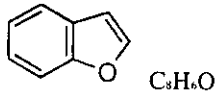
§ Benzofuran (CAS 名)

[化学名・別名] Coumarone. Benzo[b]furan. Benzofurfuran. 1-Oxaindene. 1-Oxindene

[CAS No.] 271-89-6

[化合物分類] ベンゾフラノイド (Benzofurans)

[構造式]



[分子式]

[分子量] 118.135

[基原] *Coix lachryma-jobi*, *Gentiana lutea*, *Michelia alba*, *Trilisa odoratissima*

[性状] オイル

[沸点] Bp₇₃₅ 166.5-168 °C. Bp₉₀ 97.5-99 °C

[濃度] d₁₅ 1.078

[その他のデータ] 水蒸気蒸留で得られる. Stable to alkalis, polymerised by H₂SO₄

[傷害・毒性] 50%致死量 (LD₅₀) (マウス, 腹腔内) 500 mg/kg

[化学物質毒性データ総覧 (RTECS) 登録番号] DF6423800

[販売元] Aldrich:B800-2; Fluka:28165; Sigma:B0139

-----文献-----

Appleton, R.A. et al., Phytochemistry, 1971, 10, 447-449, (分離)

Cagniant, P. et al., Adv. Heterocycl. Chem., 1975, 18, 337, (レビュー)

Kreher, R.P. et al., Chem. Ber., 1991, 124, 645, (成書)

RTECS (化学物質毒性データ)

生体影響物質 : 催腫瘍物質. 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>> 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 : 500 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

European Journal of Medicinal Chemistry--Chimie Therapeutique. 12,383,1977

その他の多回投与試験

<<試験方法>> 最小毒性量 (TDLo).

曝露経路 : 経口投与.

被験動物 : げっ歯類-ラット.

投与量・期間 : 7 gm/kg/14 日間間欠投与

毒性影響 : [慢性データ関連] 死亡

<<試験方法>> 最小毒性量(TDLo).

曝露経路 : 経口投与.

被験動物 : げっ歯類-ラット.

投与量・期間 : 16250 mg/kg/13週間間欠投与

毒性影響 : [腎臓・尿路・膀胱] 尿細管の変化(急性腎不全, 急性尿細管壊死を含む).
[腎臓・尿路・膀胱] 尿細管と糸球体の両方の変化.

参考文献

National Toxicology Program Technical Report Series.NTP-TR-370,1989

催腫瘍性に関するデータ

<<試験方法>> 最小毒性量(TDLo).

曝露経路 : 経口投与.

被験動物 : げっ歯類-ラット.

投与量・期間 : 61800 mg/kg/2Y-C

毒性影響 : [催腫瘍性] RTECS 基準による発がん性.
[腎臓・尿路・膀胱] 腎臓腫瘍.

参考文献

National Toxicology Program Technical Report Series.NTP-TR-370,1989

変異原性に関するデータ

<<試験方法>> 変異原試験-通常の試験法.

曝露経路 : 経口投与.

試験系 : げっ歯類-マウス.

投与量・期間 : 100 mg/kg

参考文献

Mutation Research.343,157,1995

<<試験方法>> ほ乳類の体細胞突然変異試験

試験系 : げっ歯類-マウスリンパ球

投与量・期間 : 100 mg/L

参考文献

Environmental and Molecular Mutagenesis. 11,91,1988

§ 2,3-Dihydroxybenzoic acid (CAS 名)

[化学名・別名] Pyrocatechuic acid (旧 CAS 名). Catechol-3-carboxylic acid. o -Pyrocatechuic acid

[CAS No.] 303-38-8

[関連 CAS No.] 13189-89-4, 66168-85-2, 67984-81-0

[化合物分類] 薬物: 抗炎症薬 (Antiinflammatory agents), 薬物: 解熱薬 (Antipyretics), 単環芳香族 (Simple benzoic acids and esters)

[構造式]

[分子式] C₇H₆O₄

[分子量] 154.122

[基原] 次の植物を含む種々の植物属に存在する *Erythraea centaurium*, *Gentiana lutea*.

Rhizobium spp. や *Penicillium roquefortii* によって生産される

[用途] Siderophore. 抗酸化剤

[性状] 結晶・一水和物 (H₂O)

[融点] Mp 204 °C (無水物)

[PKa 値] pKa, 2.91

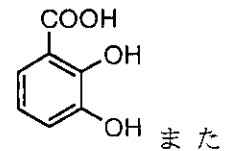
[Log P 計算値] Log P 1.06 UV: [neutral] λ_{max} 241 ; 307 (H₂O) (Berdy) [acid] λ_{max} 244 ; 316 (HCl) (Berdy)

[base] λ_{max} 254 ; 326 (NaOH) (Berdy)

[化学物質毒性データ総覧 (RTECS) 登録番号] DG8576490

[販売元] Aldrich:12620-9; Fluka:37528; Sigma:D5395

-----文献-----

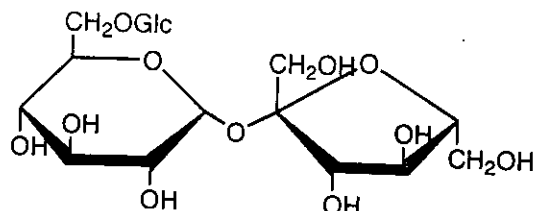


§ Gentianose

[化学名・別名] β-D-Fructofuranosyl O-β-D-glucopyranosyl-(1 → 6)-α-D-glucopyranoside (CAS 名) (旧 CAS 名). β-D-Glucopyranosyl-(1 → 6)-α-D-glucopyranosyl-(1 → 2)-β-D-fructofuranoside

[CAS No.] 25954-44-3

[化合物分類] AF9230, 炭水化物 (Oligosaccharides)
[構造式]



[分子式] $C_{18}H_{32}O_{16}$

[分子量] 504.441

[基原] ゲンチアナ属の多くの種の根から得られる

(*Gentiana lutea*, *Gentiana purpurea*, *Gentiana asclepiadea*, *Gentiana punctata*, *Gentiana cruciata*). Formed by the action of levansucrase on 6-O- β -D-Glucopyranosyl-D-glucose and Sucrose

[融点] Mp 212 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{25} +30.8$ (c, 0.5 in H₂O)

----- 文献 -----

Haworth, W.N. et al., J.C.S., 1923, 3120

Suami, T. et al., Carbohydr. Res., 1972, 21, 451, (合成法, H-NMR)

Samuelson, O., Methods Carbohydr. Chem., 1972, 6, 66, (chromatog)

§ Gentiatibetine

[化学名・別名] Gentiotibetine

[CAS No.] 26005-36-7

[化合物分類] アルカロイド化合物 (Secologanin-derived monoterpene alkaloids)

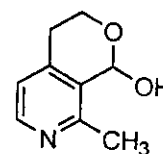
[構造式]

[分子式] $C_9H_{11}NO_2$

[分子量] 165.191

[基原] 次の植物から得られるアルカロイド: *Gentiana asclepiadea*, *Gentiana lutea*, *Gentiana olivieri*, *Gentiana punctata*, *Gentiana purpurea*, *Gentiana tibetica*, *Menyanthes trifoliata* (リンドウ科, ミツガシワ科)

[融点] Mp 161.5 °C



----- 文献 -----

Rulko, F. et al., Pol. J. Chem. (Rocz. Chem.), 1967, 41, 567, (UV, IR, H-NMR, Mass, 構造決定)

§ 1,3,7-Trihydroxyxanthone

[化学名・別名] 1,3,7-Trihydroxy-9H-xanthen-9-one (CAS 名). Gentisein

[CAS No.] 529-49-7

[化合物分類] 単環芳香族 (Xanthenes; 3 × O-置換基)

[構造式]

[分子式] $C_{13}H_8O_4$

[分子量] 244.203

[基原] 次の植物から分離: *Gentiana lutea*, *Haploclathra* sp., *Hypericum* spp., *Swertia* sp.

[性状] 橙-黄色の針状結晶 (MeOH)

[融点] Mp 321-323 °C

UV: [neutral] λ_{max} 204 (ϵ 8912); 237 (ϵ 19500); 260 (ϵ 24550); 310 (ϵ 7580); 374 (ϵ 2450) (MeOH) (Berdy)

[化学物質毒性データ総覧 (RTECS) 登録番号] ZD6122400

----- 文献 -----

Atkinson, J.E. et al., Tetrahedron, 1969, 25, 1507, (分離, 合成法)

Stout, G.H. et al., Tetrahedron, 1969, 25, 1961, (分離, 合成法)

Hostettmann, K. et al., Helv. Chim. Acta, 1974, 57, 1155, (分離)

Peres, V. et al., Phytochemistry, 1997, 44, 191, (レビュー, 生育)

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

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: 10 ug/plate

参照文献

Mutation Research.150.141,1985

§ 1,3,7-Trihydroxyxanthone; 3-Me ether

[化学名・別名] 1,7-Dihydroxy-3-methoxyxanthone. Gentisin. Gentianin †. Gentianic acid

[CAS No.] 437-50-3

[化合物分類] 単環芳香族 (Xanthenes; 3 × O-置換基)

[構造式]

[分子式] C₁₄H₁₀O₅

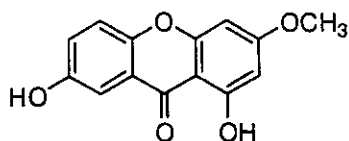
[分子量] 258.23

[基原] *Gentiana lutea* の根から得られる色素

[性状] 黄色の針状結晶

[融点] Mp 273-275 °C (266-267 °C)

[化学物質毒性データ総覧(RTECS)登録番号] ZD6034600



-----文献-----

Atkinson, J.E. et al., Tetrahedron, 1969, 25, 1507, (分離, 合成法)

Stout, G.H. et al., Tetrahedron, 1969, 25, 1961, (分離, 合成法)

Hostettmann, K. et al., Helv. Chim. Acta, 1974, 57, 1155, (分離)

Peres, V. et al., Phytochemistry, 1997, 44, 191, (レビュー, 生育)

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

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 : 5 ug/plate

参照文献

Mutation Research.116,103,1983

§ 1,3,7-Trihydroxyxanthone; 3-Me ether, 1-O-[β-D-xylopyranosyl-(1 → 6)-β-D-glucopyranoside]

[化学名・別名] 7-Hydroxy-3-methoxy-1-primeverosyloxyxanthone

[CAS No.] 85754-76-3

[化合物分類] 単環芳香族 (Xanthenes; 3 × O-置換基)

[構造式]

[分子式] C₂₃H₂₈O₁₄

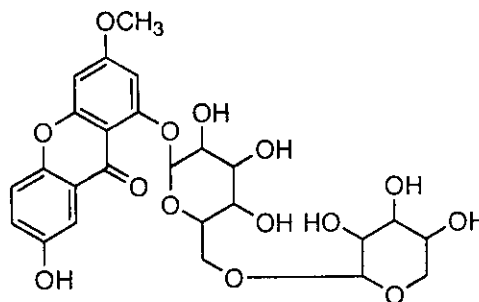
[分子量] 552.488

[基原] *Gentiana lutea*

[性状] 針状結晶

[融点] Mp 259-260 °C で分解

[比旋光度]: [α]_D²⁰ -81.5 (c, 0.4 in Py)



-----文献-----

Atkinson, J.E. et al., Tetrahedron, 1969, 25, 1507, (分離, 合成法)

Stout, G.H. et al., Tetrahedron, 1969, 25, 1961, (分離, 合成法)

Hostettmann, K. et al., Helv. Chim. Acta, 1974, 57, 1155, (分離)

Peres, V. et al., Phytochemistry, 1997, 44, 191, (レビュー, 生育)

§ 1,3,7-Trihydroxyxanthone; 3-Me ether, 7-O-[β-D-xylopyranosyl-(1 → 6)-β-D-glucopyranoside]

[化学名・別名]

roxy-3-methoxy-7-primeverosyloxyxanthone

[CAS No.] 85761-72-4

[化合物分類] 単環芳香族 (Xanthenes; 3 × O-置換基)

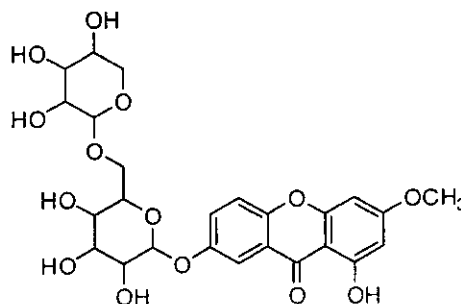
[構造式]

[分子式] C₂₃H₂₈O₁₄

[分子量] 552.488

[基原] *Gentiana lutea*

[性状] 針状結晶



1-Hyd