

§ Paeonisuffrone

[CAS No.] 149420-73-5

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

[構造式]

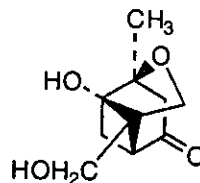
[分子式] $C_{10}H_{14}O_4$

[分子量] 198.218

[基原] *Paeonia suffruticosa*

[性状] 無定型の粉末

[比旋光度]: $[\alpha]_D -16.8$ (c, 1.5 in MeOH)



-----文献-----

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

Yoshikawa, M. et al., Chem. Pharm. Bull., 2000, 48, 1327-1331, (H-NMR, C13-NMR, 絶対構造)

§ Paeonisuffrone; 8-Deoxy

[化学名・別名] Deoxypaeonisuffrone

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

[構造式]

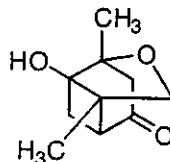
[分子式] $C_{10}H_{14}O_3$

[分子量] 182.219

[基原] *Paeonia suffruticosa*

[性状] 無定型の粉末

[比旋光度]: $[\alpha]_D -30$ (MeOH)



-----文献-----

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

Yoshikawa, M. et al., Chem. Pharm. Bull., 2000, 48, 1327-1331, (H-NMR, C13-NMR, 絶対構造)

§ Suffruticosol A

[CAS No.] 220936-82-3

[化合物分類] 単環芳香族 (Stilbene polymers)

[構造式]

[分子式] $C_{42}H_{32}O_9$

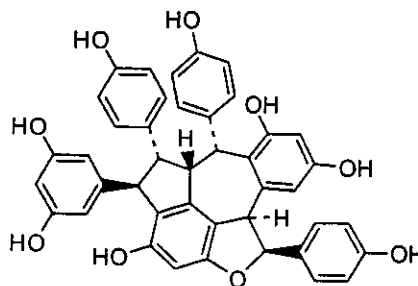
[分子量] 680.709

[一般的性質] Ampelopsin C に類似

[基原] *Paeonia suffruticosa* の種子

[性状] 無定型

UV: [neutral] λ_{max} 226 (log ϵ 4.12); 283 (log ϵ 3.43) (EtOH)



-----文献-----

Sarker, S.D. et al., Tetrahedron, 1999, 55, 513-524, (分離, UV, H-NMR, C13-NMR)

Tanaka, T. et al., Phytochemistry, 2000, 54, 63-69, (Vaticanol A)

§ Suffruticosol A; 7-Epimer

[化学名・別名] Suffruticosol B

[CAS No.] 220936-87-8

[化合物分類] 単環芳香族 (Stilbene polymers)

[構造式]

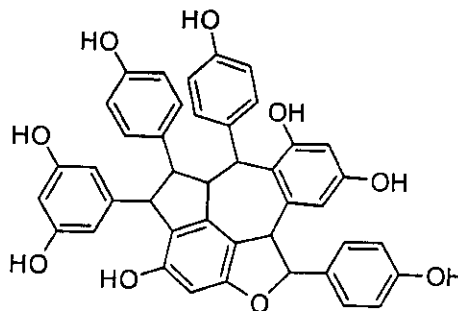
[分子式] $C_{42}H_{32}O_9$

[分子量] 680.709

[基原] *Paeonia suffruticosa* の種子

[性状] 無定型

UV: [neutral] λ_{max} 226 (log ϵ 4.1); 283 (log ϵ 3.46) (EtOH)



-----文献-----

Sarker, S.D. et al., Tetrahedron, 1999, 55, 513-524, (分離, UV, H-NMR, C13-NMR)

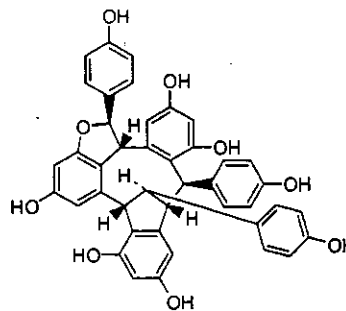
Tanaka, T. et al., Phytochemistry, 2000, 54, 63-69, (Vaticanol A)

§ Suffruticosol C

[化合物分類] 単環芳香族 (Stilbene polymers)
[構造式]

[分子式] $C_{42}H_{32}O_9$
[分子量] 680.709
[基原] *Paeonia suffruticosa* の種子
[性状] 無定型

UV: [neutral] λ_{max} 226 (log ϵ 4.08); 283 (log ϵ 3.42) (EtOH)



-----文献-----

Sarker, S.D. et al., Tetrahedron, 1999, 55, 513-524, (分離, UV, H-NMR, C13-NMR)

§ 2',3',4'-Trihydroxyacetophenone; 4'-Me ether

[化学名・別名] 2',3'-Dihydroxy-4'-methoxyacetophenone. 3'-Hydroxypaeonol

[CAS No.] 708-53-2

[化合物分類] 単環芳香族 (Simple aryl ketones)

[構造式]

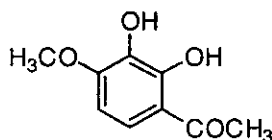
[分子式] $C_9H_{10}O_4$

[分子量] 182.176

[基原] *Paeonia broteroi* と *Paeonia suffruticosa* の根

[性状] 青白い黄色のプリズム結晶 (EtOH)

[融点] Mp 134 °C



-----文献-----

Berry, R.C. et al., Aust. J. Chem., 1977, 30, 1827-1835, (合成法, 4'-Me ether)

Lin, H.-C. et al., Planta Med., 1999, 65, 595-599, (分離, 4'-Me ether)

§ 2',4',5'-Trihydroxyacetophenone; 4'-Me ether

[化学名・別名] 2',5'-Dihydroxy-4'-methoxyacetophenone

[CAS No.] 22089-12-9

[化合物分類] 単環芳香族 (Simple aryl ketones)

[構造式]

[分子式] $C_9H_{10}O_4$

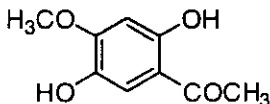
[分子量] 182.176

[基原] *Paeonia suffruticosa* の根

[用途] 血小板凝集阻害

[性状] 結晶 (H₂O)

[融点] Mp 164-165 °C



-----文献-----

Lin, H.-C. et al., Planta Med., 1999, 65, 595-599, (分離, 4'-Me ether)

§ 3,4,5-Trihydroxybenzoic acid; 3-O-[β-D-Apiofuranosyl-(1 → 6)-β-D-glucopyranoside]

[化学名・別名] Mudanoside B

[化合物分類] 単環芳香族 (Simple benzoic acids and esters)

[構造式]

[分子式] $C_{18}H_{24}O_{14}$

[分子量] 464.379

[基原] *Paeonia suffruticosa*

[性状] 青白い結晶 (MeOH 溶液)

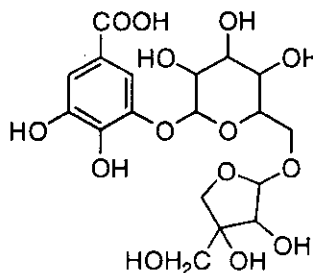
[融点] Mp 305-307 °C で分解

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{20}$ -66.2 (c, 0.1 in EtOH)

UV: [neutral] λ_{max} 218 (log ϵ 4.36); 275 (log ϵ 3.93) (EtOH)

-----文献-----

Lin, H.-C. et al., J. Nat. Prod., 1998, 61, 343-346, (Mudanoside B)



*****ホップ (Hop) *****

*****ホップ (Hop) *****

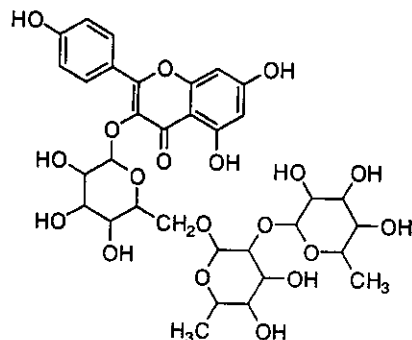
§ イラクサ科ホップ (*Humulus lupulus* L.) の雌花。

§ Astragalin; 6''-O-[α -L-Rhamnopyranosyl-(1 \rightarrow 2)- α -L-rhamnopyranosyl]

[CAS No.] 32602-83-8

[化合物分類] フラボノイド (Flavonoids; 4 × O-置換基)

[構造式]



[分子式] $C_{33}H_{40}O_{19}$

[分子量] 740.668

[基原] 次の植物から分離: *Humulus lupulus*

----- 文 献 -----

Egger, K., Z. Naturforsch., B, 1961, 16, 430, (Peonoside)

Pavlii, O.I. et al., Farm. Zh. (Kiev), 1967, 22, 50, (Sorboside)

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

Webby, R.F. et al., Phytochemistry, 1990, 29, 289, (Astragaline 6''-rhamnosylrhamnoside)

§ 2-Butanone (CAS 名)

[化学名・別名] Ethyl methyl ketone. 2-Oxobutane. Methyl ethyl ketone. MEK. FEMA 2710

[CAS No.] 78-93-3

[関連 CAS No.] 10341-59-0, 10341-63-6

[化合物分類] PA1650, 脂肪族化合物 (Saturated unbranched aldehydes and ketones)

[構造式] $H_3CCH_2COCH_3$

[分子式] C_4H_8O

[分子量] 72.107

[基原] 次の植物から分離: タバコ (*Nicotiana tabacum*), ホップオイル (*Humulus lupulus*), クローバー (*Trifolium repens*), チャ, トマト, 色々な果物とその他の野菜を基原とする。瓦斯状の 2-ブタノールを触媒反応での脱水素して製造される

[用途] Industrial solvent, particularly for coating systems, used in the manuf. of resins, lubricating oil refining and extraction of fats and oils. Reagent for sepn. of amines by glc. Used for extraction separation of Au. Forms a condensation polymer with formaldehyde. 香料原料

[性状] 液体

[融点] 凝固点: Fp-85.9 °C

[沸点] Bp 79.6 °C

[溶解性] 一部水と混和する

[濃度] d^{20}_4 0.805

[その他のデータ] n^{15}_D 1.3814. 水と混和した溶液は一定の沸点を示す, 沸点: Bp 73.4 °C, contg. 11.3% H₂O

[傷害・毒性] 発火しやすい, 発火温度: -1 °C. 過酸化に成りやすい. 皮膚, 眼, 呼吸域を刺激する. 吸入によって中程度の中樞神経系に頭痛, めまい等を生じる. 50% 致死量 (LD₅₀) (ラット, 経口) 2737 mg/kg. 催奇形性物質. OES: long-term 200 ppm; short-term 300 ppm (sk, revised)

[化学物質毒性データ総覧 (RTECS) 登録番号] EL6475000

[販売元] Aldrich: 44346-8; Fluka: 4385; Sigma: B0782; Supelco: R43-4105

----- 文 献 -----

Ullmann's Encycl. Ind. Chem., 5th Ed., VCH, Weinheim, 1985, A4, 475, (レビュー)

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. ヒト. 一時刺激物質.

健康障害に関するデータ

皮膚/眼の刺激に関するデータ

<<試験方法>> 標準ドライズ (Draize) 試験法.

曝露経路 : 皮膚への塗布

被験動物 : げっ歯類-ウサギ.

投与量・期間 : 402 mg/24 時間

Toxicology and Applied Pharmacology. (Academic Press, Inc., 1 E. First St., Duluth, MN 55802) 19,276,1971

<<試験方法>> 開放刺激試験.

曝露経路 : 皮膚への塗布
被験動物 : げっ歯類-ウサギ.
投与量・期間 : 13780 ug/24 時間
反応の症度 : 中等度.

急性毒性に関するデータ

<<試験方法>> 認知されている最低毒性(TCLO)に関する試験.

曝露経路 : 吸入.
被験動物 : ヒト
投与量・期間 : 100 ppm/5 ヶ月投与
毒性影響 : [知覚組織と特異感覚] (嗅覚)効果, その他特定すべき事象なし
[知覚組織と特異感覚] (視覚)結膜刺激.
[肺,胸郭,または呼吸] その他の変化.

参照文献

Journal of Industrial Hygiene and Toxicology. (Cambridge, MA) 25,282,1943

<<試験方法>> 認知されている最低致死量に関する試験

曝露経路 : 腹腔内投与.
被験動物 : げっ歯類-モルモット.
投与量・期間 : 2 gm/kg
毒性影響 : [肝臓] その他の変化.
[免疫:含アレルギー] その他の即時性(体液性): じんましん, アレルギー性鼻炎, 血清病
[生化学] [代謝(中間)]輸送を含む脂質.

参照文献

Food and Cosmetics Toxicology. (London, UK) 15,627,1977

その他の多回投与試験

<<試験方法>> 認知されている最低毒性(TCLO)に関する試験.

曝露経路 : 吸入.
被験動物 : げっ歯類-ラット.
投与量・期間 : 5000 ppm/6 時間/90 日間間欠投与
毒性影響 : [肝臓] 肝臓重量の変化.
[腎臓・尿路・膀胱] 尿量増加.
[生化学] [酵素の阻害・誘導・血液・組織中濃度の変化]トランスアミナーゼ.

<<試験方法>> 最小毒性量(TDLo).

曝露経路 : 皮下投与.
被験動物 : ほ乳類-ネコ.
投与量・期間 : 55500 mg/kg/37 週間間欠投与
毒性影響 : [慢性データ関連] 死亡

参照文献

Toxicology and Applied Pharmacology. (Academic Press, Inc., 1 E. First St., Duluth, MN 55802) 37,301,1976

生殖に関するデータ

<<試験方法>> 認知されている最低毒性(TCLO)に関する試験.

曝露経路 : 吸入.
被験動物 : げっ歯類-ラット.
投与 : 3000 ppm/7 時間
雌雄投与期間 : 雌 6-15 日間(交配後)
毒性影響 : [生殖] [特定の発育異常]頭骸と顔(鼻と舌を含む).
[生殖] [特定の発育異常]泌尿生殖系.
[生殖] [特定の発育異常]恒常性.

参照文献

Toxicology and Applied Pharmacology. (Academic Press, Inc., 1 E. First St., Duluth, MN 55802) 28,452,1974

変異原性に関するデータ

<<試験方法>> 性染色体の喪失及び不分離.

試験系 : 酵母 *Saccharomyces cerevisiae*

<<試験方法>> 性染色体の喪失及び不分離。

試験系 : 酵母 *Saccharomyces cerevisiae*

投与量・期間 : 33800 ppm

参考文献

Mutation Research. (Elsevier Science Pub. B.V., POB 211, 1000 AE Amsterdam, Netherlands) 149,339,1985

§ 2-Butyl-1-octanol

[化学名・別名] 5-Hydroxymethylundecane

[CAS No.] 3913-02-8

[関連 CAS No.] 35467-05-1

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

[構造式]

[分子式] $C_{12}H_{26}O$

[分子量] 186.337

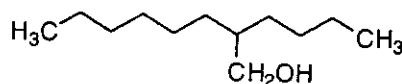
[基原] *Changium smyrnioides*, *Humulus lupulus*, *Lonicera japonica*, *Portulaca oleracea*

[沸点] Bp_{12} 131-133 °C

[濃度] $d^{16.5}$, 0.84

[屈折率] n_D^{16} 1.4435

[販売元] Aldrich:46446-5



-----文献-----

Krupcik, J. et al., Coll. Czech. Chem. Comm., 1985, 50, 1808, (ガスクロマト)

Rzama, A. et al., Phytochemistry, 1995, 38, 1375, (分離)

§ 4,9-Cadinadiene

[化学名・別名] α -Cadinene

[CAS No.] 24406-05-1

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

[構造式]

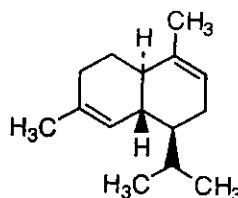
[分子式] $C_{15}H_{24}$

[分子量] 204.335

[基原] *Humulus lupulus*

[性状] オイル

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{24}$ -62.4 (c, 0.808 in $CHCl_3$)



-----文献-----

Naya, Y. et al., Bull. Chem. Soc. Jpn., 1969, 42, 1468, (分離, 構造決定)

Bülöw, N. et al., Phytochemistry, 2000, 55, 141-168, (H-NMR, C13-NMR)

§ γ -Calacorene; (S)-form

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

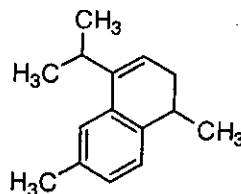
[構造式]

[分子式] $C_{15}H_{20}$

[分子量] 200.323

[基原] *Juniperus rigida*, *Humulus lupulus*

[性状] オイル



-----文献-----

Bowden, B.F. et al., Aust. J. Chem., 1986, 39, 103, (誘導体)

Na β , K. et al., J.C.S. Perkin 1, 1994, 3277; 1995, 3111, (生合成)

§ α -Camphorene

[化学名・別名] 4-(5-Methyl-1-methylene-4-hexenyl)-1-(4-methyl-3-pentenyl)cyclohexene (CAS 名).
Paracamphorene. *p*-Camphorene. Dimyrcene

[CAS No.] 532-87-6

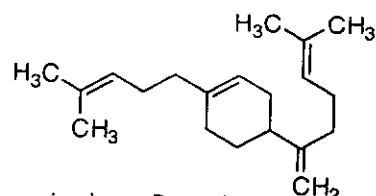
[化合物分類] テルペノイド (Miscellaneous monocyclic diterpenoids)

[構造式]

[分子式] $C_{20}H_{32}$

[分子量] 272.473

[基原] 樟脳オイル, *Humulus lupulus* のオイル. また, *Nothopanax simplex*, *Dacrydium bifforme*,



[沸点] Bp_{0.03} 110 °C

-----文献-----

Lammens, H. et al., Bull. Soc. Chim. Belg., 1968, 77, 497, (分離)
Vig, O.P. et al., J. Indian Chem. Soc., 1986, 63, 507, (合成法)

§ γ -Camphorene

[化学名・別名] m-Camphorene. Metacamphorene

[CAS No.] 20016-73-3

[化合物分類] テルペノイド (Miscellaneous monocyclic diterpenoids)

[構造式]

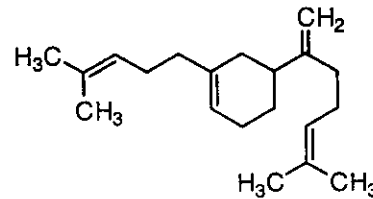
[分子式] C₂₀H₃₂

[分子量] 272.473

[基原] *Humulus lupulus* オイル

[性状] オイル

[沸点] Bp₁₅ 176-178 °C



-----文献-----

Lammens, H. et al., Bull. Soc. Chim. Belg., 1968, 77, 497

§ α -Corocalene

[化学名・別名] 1,2-Dihydro-3,8-dimethyl-5-(1-methylethyl)naphthalene.

1,2-Dihydro-5-isopropyl-3,8-dimethylnaphthalene

[CAS No.] 20129-39-9

[その他の CAS No.] 38599-17-6

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

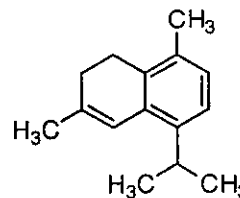
[構造式]

[分子式] C₁₅H₂₀

[分子量] 200.323

[基原] ホップオイル (*Humulus lupulus*)

[性状] オイル



-----文献-----

Naya, Y. et al., Bull. Chem. Soc. Jpn., 1969, 42, 2088

Ngo, K.-S. et al., J. Chem. Res., Synop., 1998, 80-81, (合成法, H-NMR, C13-NMR)

§ 4,8-Decadienoic acid; Me ester

[CAS No.] 1191-03-3

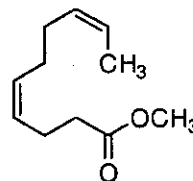
[化合物分類] 脂肪族化合物 (Unbranched alkenic methyl esters)

[構造式]

[分子式] C₁₁H₁₈O₂

[分子量] 182.262

[基原] ホップ (*Humulus lupulus*) の精油



-----文献-----

Buttery, R.G. et al., Chem. Ind. (London), 1963, 1981, (分離, IR, H-NMR)

Buttery, R.G. et al., J. Chromatogr., 1965, 18, 399, (chromatog)

Goliaszewski, A. et al., Tetrahedron, 1985, 41, 5779, (合成法, H-NMR, Mass)

§ 4-Deoxyadhumulone

[化学名・別名] 1-[2,4,6-Trihydroxy-3,5-bis(3-methyl-2-butenyl)phenyl]ethyl-1-butanone (CAS 名)

[CAS No.] 4374-92-9

[化合物分類] テルペノイド (Hop meroterpenoids)

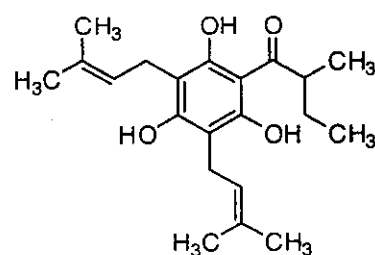
[構造式]

[分子式] C₂₁H₃₀O₄

[分子量] 346.466

[基原] 次の植物から分離: ホップ (*Humulus lupulus*)

[用途] 苦味成分



-2-m

[基原] 次の植物から分離: ホップ (*Humulus lupulus*)
[用途] 苦味成分
[性状] オイル

----- 文献 -----

Huebner, H. et al., Hoppe Seyler's Z. Physiol. Chem., 1961, 325, 224, (分離)
Collins, E. et al., J.C.S. Perkin 1, 1973, 419; 2013, (合成法)

§ 4-Deoxycohumulone

[化学名・別名] 2,4-Bis(3-methyl-2-butenyl)-6-(2-methyl-1-oxopropyl)-1,3,5-cyclohexanetrione (CAS 名).
2',4',6'-Trihydroxy-2-methyl-3',5'-bis(3-methyl-2-butenyl) propiophenone (旧 CAS 名). 3,5-Bis(3-methyl-2-butenyl) phlorisobutyrophenone

[CAS No.] 5880-42-2

[関連 CAS No.] 24945-89-9

[化合物分類] 単環芳香族 (Simple aryl ketones),
テルペノイド (Hop meroterpenoids)

[構造式]

[分子式] $C_{20}H_{28}O_4$

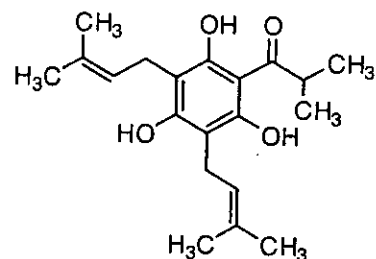
[分子量] 332.439

[基原] 次の植物から分離: ホップ (*Humulus lupulus*)

[用途] 苦味成分

[性状] 結晶 (pentane). 青白い黄色の結晶 ($CHCl_3$ /petrol)

[融点] Mp 88-89 °C



----- 文献 -----

Huebner, H. et al., Hoppe Seyler's Z. Physiol. Chem., 1961, 325, 224, (分離)
Fernandez, C.M., Chem. Comm., 1967, 1212, (分離)

§ 4-Deoxyhumulone

[化学名・別名] 3-Methyl-1-[2,4,6-trihydroxy-3,5-bis(3-methyl-2-butenyl) phenyl]-1-butanone (CAS 名).
3,5-Bis(3-methyl-2-butenyl) phlorisovalerophenone

[CAS No.] 4374-93-0

[化合物分類] 単環芳香族 (Simple aryl ketones),
テルペノイド (Hop meroterpenoids)

[構造式]

[分子式] $C_{21}H_{30}O_4$

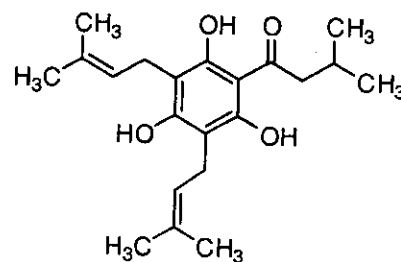
[分子量] 346.466

[一般的性質] Flavone

[基原] 次の植物から分離: ホップ (*Humulus lupulus*)

[性状] 結晶 (petrol)

[融点] Mp 83 °C



----- 文献 -----

Riedl, W. et al., Angew. Chem., 1958, 70, 343, (分離, 合成法)
Hübner, H. et al., Hoppe Seyler's Z. Physiol. Chem., 1961, 325, 224, (分離)

§ Dimethyl trisulfide (CAS 名)

[化学名・別名] Methyl trisulfide (旧 CAS 名). 2,3,4-Trithiapentane

[CAS No.] 3658-80-8

[化合物分類] 脂肪族化合物 (Disulfides, trisulfides)

[構造式] Me-S-S-S-Me

[分子式] $C_2H_6S_3$

[分子量] 126.267

[基原] ホップ (*Humulus lupulus*) の精油, ニンニク (*Allium sativum*), *Allium cepa*, *Allium ursinum*. Found in overcooked Brassica vegetables

[用途] An alarm pheromone in some ants

[沸点] Bp₃₀ 70-71 °C

[販売元] Aldrich: W32750-6

----- 文献 -----

Peppard, T.L. et al., Phytochemistry, 1977, 16, 2020-2021, (分離, Mass, ガスクロマト)

Kubec, R. et al., J. Agric. Food Chem., 1998, 46, 4334-4340, (formn)

§ 3'- (3,7-Dimethyl-2,6-octadienyl)-2',4,4',6'-tetrahydroxychalcone; (E,E)-form

[化学名・別名] 3'-Geranyl-2',4,4',6'-tetrahydroxychalcone

[CAS No.] 189299-03-4

[化合物分類] フラボノイド (Chalcone flavonoids; 4 × O-置換基)

[構造式]

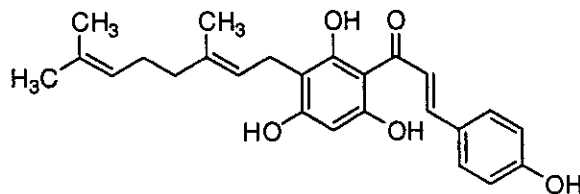
[分子式] C₂₅H₂₈O₅

[分子量] 408.493

[基原] ホップ (*Humulus lupulus*)

[性状] 黄色の粉末

UV: [neutral] λ_{max} 310 (sh); 367 (MeOH)



-----文献-----

Stevens, J.F. et al., Phytochemistry, 1997, 44, 1575, (分離, H-NMR, C13-NMR, Mass)

§ 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] H₃C(CH₂)₉COCH₃

[分子式] C₁₂H₂₄O

[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* オイル. またホップオイル (*Humulus lupulus*), *Schisandra nigra* のオイル

[用途] 抗カビ剤

[融点] Mp 21 °C

[沸点] Bp₁₀₀ 177-178 °C. Bp_{3.5} 101 °C

[屈折率] n_D²⁰ 1.434

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

-----文献-----

Yeo, A.N.H. et al., Chem. Comm., 1970, 987, (Mass)

Bente, P.F. et al., J. Phys. Chem., 1975, 79, 713, (Mass)

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)

§ 3,7(11)-Eudesmadiene

[化学名・別名] 3,7(11)-Selinadiene

[CAS No.] 6813-21-4

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

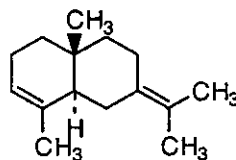
[構造式]

[分子式] C₁₅H₂₄

[分子量] 204.355

[基原] ホップ (*Humulus lupulus*) の精油

[性状] オイル



-----文献-----

Buttery, R.G. et al., Chem. Ind. (London), 1966, 1225, (分離, 構造決定)

§ 3,11-Eudesmadiene; (5 α,7 β,10 β)-form

[化学名・別名] α-Selinene. α-Eudesmene

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

[構造式]

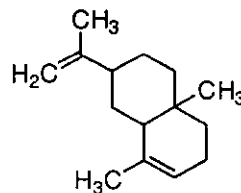
[分子式] C₁₅H₂₄

[分子量] 204.355

[基原] セロリオイル, その他色々な精油, 例えば, *Cannabis sativa*, *Humulus lupulus*, *Anthocephalus cadamba* (earlier isolates not separated from β-selinene). その他スハマソウからも得られる

[性状] オイル

[沸点] Bp 268-272 °C



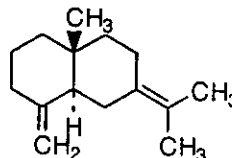
[性状] オイル
[沸点] Bp 268-272 °C
[比旋光度]: $[\alpha]_D^{20} -14.5$ (c, 1 in CHCl₃)

-----文献-----

Klein, E. et al., Tet. Lett., 1970, 279, (分離)
Maurer, B. et al., Helv. Chim. Acta, 1977, 60, 2177, (分離, H-NMR, IR)
Anderson, N.H. et al., Phytochemistry, 1977, 16, 1731, (分離)
Baker, R. et al., Tet. Lett., 1978, 4073, (分離)
Naya, Y. et al., Tet. Lett., 1982, 23, 3047, (分離)

§ 4(15),7(11)-Eudesmadiene

[化学名・別名] 4(15),7(11)-Selinadiene. γ -Selinene
[CAS No.] 515-17-3
[化合物分類] テルペノイド (Simple eudesmane sesquiterpenoids)
[構造式]
[分子式] C₁₅H₂₄
[分子量] 204.355
[基原] ホップ (*Humulus lupulus*) の精油
[性状] オイル
[比旋光度]: $[\alpha]_D +2.5$ (c, 0.12 in CHCl₃)

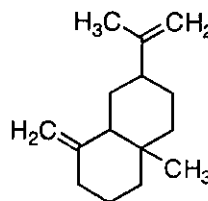


-----文献-----

Buttery, R.G. et al., Chem. Ind. (London), 1966, 1225, (分離)
Andersen, N.H. et al., Tet. Lett., 1970, 1759, (構造決定)

§ 4(15),11-Eudesmadiene; (5 α ,7 β ,10 β)-form

[化学名・別名] β -Selinene. Cyperene II
[CAS No.] 17066-67-0
[化合物分類] テルペノイド (Simple eudesmane sesquiterpenoids)
[構造式]
[分子式] C₁₅H₂₄
[分子量] 204.355
[基原] セロリオイル。また, *Cyperus rotundus*, *Humulus lupulus*
[性状] オイル
[沸点] Bp₆ 121-122 °C
[比旋光度]: $[\alpha]_D +61$



-----文献-----

Trivedi, B. et al., Coll. Czech. Chem. Comm., 1964, 29, 1675, (分離)
Dixit, S.M. et al., Chem. Ind. (London), 1967, 1256, (分離)
Govindachari, T.R. et al., Indian J. Chem., Sect. B, 1973, 11, 971, (分離, 構造決定)
Naya, Y. et al., Tet. Lett., 1982, 23, 3047, (分離)
Williams, H.J. et al., Phytochemistry, 1995, 40, 1633, (H-NMR, C13-NMR, Mass)
Raharivelomanana, P. et al., Phytochemistry, 1998, 47, 1085-1088, (C13-NMR)

§ 4-Heptenoic acid (CAS 名)

[化学名・別名] Hex-3-ene-1-carboxylic acid
[CAS No.] 35194-37-7
[関連 CAS No.] 80639-52-7
[化合物分類] 脂肪族化合物 (Unbranched alkenic carboxylic acids and lactones)
[構造式] H₃CCH₂CH=CHCH₂CH₂COOH
[分子式] C₇H₁₂O₂
[分子量] 128.171
[基原] *Humulus lupulus* のオイルのメチルエステルとして分離

-----文献-----

Buttery, R.G. et al., CA, 1965, 62, 1050, (分離)

§ 2-Hexadecanone

[化学名・別名] Methyl tetradecyl ketone

[構造式] $\text{H}_3\text{C}(\text{CH}_2)_5\text{COCH}_3$
[分子式] $\text{C}_{16}\text{H}_{32}\text{O}$
[分子量] 240.428
[基原] 次の植物から分離: ホップオイル (*Humulus lupulus*)
[性状] 結晶
[融点] Mp 43-43.5 °C
[沸点] Bp₁₀₀ 130-131 °C
[化学物質毒性データ総覧 (RTECS) 登録番号] MM0300000
[販売元] Aldrich:37418-0; Fluka:69250

-----文献-----

Aldrich Library of 13C and 1H FT NMR Spectra, 1992, 1, 642C, (NMR)
Jahnsen, V.J., Nature (London), 1962, 196, 474, (分離)

***RTECS (化学物質毒性データ) ***

生体影響物質 : 医薬品.

健康障害に関するデータ

急性毒性に関するデータ

<<試験方法>> LD50 試験 (50%致死量試験).

曝露経路 : 報告なし.

被験動物 : げっ歯類-マウス.

投与量・期間 : 1750 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 Medicinal Chemistry. (American Chemical Soc., Distribution Office Dept. 223, POB 57136, West End Stn., Washington, DC 20037) 19,219,1976

§ 2-Hexanone (CAS 名)

[化学名・別名] Butyl methyl ketone. Methyl butyl ketone

[CAS No.] 591-78-6

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

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

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

[分子量] 100.16

[基原] ホップオイル (*Humulus lupulus*), ポテト (*Solanum tuberosum*), アメリカホドイモ (*Arachis hypogaea*)

[性状] 液体

[沸点] Bp 127 °C

[濃度] d_4^{20} 0.83

[傷害・毒性] 可燃性, 発火温度: 23 °C, 自然発火温度: 423 °C. 眼と皮膚を刺激する. 慢性の暴露は末梢の神経症に発展する. 早い時期に頭痛と悪心が現れる. 50 %致死量 (LD₅₀) (ラット, 経口) 2590 mg/kg. OES: long-term 5 ppm (Sk)

[化学物質毒性データ総覧 (RTECS) 登録番号] MP1400000

[販売元] Aldrich:10300-4; Fluka:20270; Supelco:R43-4110

-----文献-----

Wagner, G., J. Prakt. Chem., 1891, 44, 259

Grignard, V. et al., C. R. Hebd. Seances Acad. Sci., 1926, 182, 299

Martindale, The Extra Pharmacopoeia, 30th edn., Pharmaceutical Press, 1993, 1104

Lewis, R.J., Sax's Dangerous Properties of Industrial Materials, 8th edn., Van Nostrand Reinhold, 1992, HEV000

Luxon, S.G., Hazards in the Chemical Laboratory, 5th edn., Royal Society of Chemistry, 1992, 672

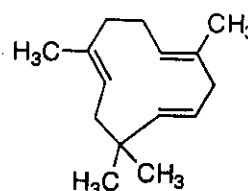
***RTECS (化学物質毒性データ) ***

生体影響物質 : 変異原性物質. 生殖影響物質. ヒト. 一時刺激物質.

§ 2,6,9-Humulatriene

[化学名・別名] 2,6,6,9-Tetramethyl-1,4,8-cycloundecatriene. α -Humulene. α -Caryophyllene (obsol.). Humulene

[CAS No.] 6753-98-6
[化合物分類] テルペノイド (Humulane sesquiterpenoids)
[構造式]



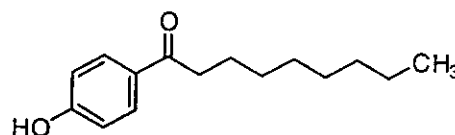
[分子式] $C_{15}H_{24}$
[分子量] 204.355
[一般的性質] Farnesane numbering shown
[基原] 次のものを含む多くの精油: ホップ (*Humulus lupulus*), クローブ (*Syzygium aromaticum*)
[性状] オイル
[沸点] B_{p10} 123 °C
[販売元] Fluka:53675; Sigma:H5887

-----文献-----

Karrer, W. et al., Konstitution und Vorkommen der Organischen Pflanzenstoffe, 2nd edn., Birkhäuser Verlag, Basel, 1972, no. 1929, (生育)
Cradwick, M.E. et al., J.C.S. Perkin 2, 1973, 404, (conformn)
Peppard, T.L. et al., J.C.S. Perkin 1, 1980, 311, (分離)

§ 1-(4-Hydroxyphenyl)-1-nonanone (CAS 名)

[化学名・別名] *p*-Hydroxynonanophenone
[CAS No.] 14392-69-9
[化合物分類] 脂肪族化合物 (Long-chain aromatic systems)
[構造式]
[分子式] $C_{15}H_{22}O_2$
[分子量] 234.338
[基原] *Humulus lupulus*
[性状] オイル
[販売元] Rare Chemicals Library:S55837-0

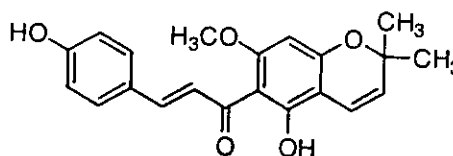


-----文献-----

Chandra, A. et al., Phytochemistry, 1991, 30, 495, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ Isobavachromene; 7-Methoxy

[化学名・別名] Dehydrocycloxanthohumol
[CAS No.] 189299-05-6
[化合物分類] フラボノイド (Chalcone flavonoids; 4 × O-置換基), フラボノイド (Cyclised C-isopentenylated flavonoids)
[構造式]
[分子式] $C_{27}H_{26}O_5$
[分子量] 352.386
[基原] ホップ (*Humulus lupulus*)
[性状] 赤色の針状結晶
UV: [neutral] λ_{max} 371 (MeOH)



-----文献-----

Stevens, J.F. et al., Phytochemistry, 1997, 44, 1575-1585, (Dehydrocycloxanthohumol)

§ 2-Methyldodecane

[CAS No.] 1560-97-0
[化合物分類] 脂肪族化合物 (Branched aliphatic hydrocarbons)
[構造式] $H_3C(CH_2)_9CH(CH_3)_2$
[分子式] $C_{13}H_{28}$
[分子量] 184.364
[基原] *Cicer arietinum*, *Eucalyptus rostrata*, *Humulus lupulus*
[沸点] B_p 229 °C. $B_{p10.5}$ 103 °C
[屈折率] n_D^{20} 1.4241

-----文献-----

Wollrab, V. et al., Coll. Czech. Chem. Comm., 1965, 30, 1670, (分離)
Rembold, H. et al., J. Agric. Food Chem., 1989, 37, 659, (分離)

§ 2-Methylheneicosane (CAS 名)

[化学名・別名] Isodocosane

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

[構造式] $\text{H}_3\text{C}(\text{CH}_2)_{18}\text{CH}(\text{CH}_3)_2$

[分子式] $\text{C}_{22}\text{H}_{46}$

[分子量] 310.605

[基原] オレンジオイル (*Citrus sinensis*), ホップ (*Humulus lupulus*)

-----文献-----

Wollrab, V. et al., Coll. Czech. Chem. Comm., 1965, 30, 1670, (分離)

Hunter, G.L.K. et al., Phytochemistry, 1966, 5, 807, (分離)

§ 3-Methylheptacosane (CAS 名)

[CAS No.] 14167-66-9

[関連 CAS No.] 55194-24-6

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

[構造式] $\text{H}_3\text{C}(\text{CH}_2)_{21}\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}_3$

[分子式] $\text{C}_{28}\text{H}_{58}$

[分子量] 394.766

[基原] 次の植物から分離: タバコ (*Nicotiana tabacum*), ホップオイル (*Humulus lupulus*), オレンジオイル (*Citrus sinensis*), 昆虫の上皮

[屈折率] n_D^{20} 1.4407

-----文献-----

Mold, J.D. et al., Biochemistry, 1963, 2, 605, (分離)

Wollrab, V. et al., Coll. Czech. Chem. Comm., 1965, 30, 1670, (分離)

Hunter, G.L.K. et al., Phytochemistry, 1966, 5, 807, (分離)

§ 6-Methylheptanoic acid (CAS 名)

[化学名・別名] Isooctanoic acid. Isocaprolic acid

[CAS No.] 929-10-2

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

[構造式] $(\text{H}_3\text{C})_2\text{CH}(\text{CH}_2)_4\text{COOH}$

[分子式] $\text{C}_8\text{H}_{16}\text{O}_2$

[分子量] 144.213

[基原] Obt. by hydrol. of polymyxin antibiotics. またホップオイル (*Humulus lupulus*) のメチルエステルとして存在する

[性状] 液体

[融点] Mp 0 °C

[沸点] Bp 232 °C (220 °C (分解)). Bp₁₄ 126-127 °C

[傷害・毒性] Fl.p. 132 °C (oc), 自然発火温度: 392 °C

-----文献-----

Levene, P.A. et al., J. Biol. Chem., 1916, 27, 452

Wilkinson, S. et al., Nature (London), 1963, 200, 1008, (分離)

§ 2-Methylhexacosane (CAS 名)

[化学名・別名] Isoheptacosane

[CAS No.] 1561-02-0

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

[構造式] $\text{H}_3\text{C}(\text{CH}_2)_{21}\text{CH}(\text{CH}_3)_2$

[分子式] $\text{C}_{27}\text{H}_{56}$

[分子量] 380.739

[基原] 次の植物から分離: ホップオイル (*Humulus lupulus*), オレンジオイル (*Citrus sinensis*), 昆虫の上皮

[性状] 結晶 (EtOAc)

[融点] Mp 49-50.5 °C

-----文献-----

Wollrab, V. et al., Coll. Czech. Chem. Comm., 1965, 30, 1670, (分離)

Hunter, G.L.K. et al., Phytochemistry, 1966, 5, 807, (分離)

Tsuda, Y. et al., Phytochemistry, 1981, 20, 505, (分離, 合成法)

Tsuda, Y. et al., *Phytochemistry*, 1981, 20, 505, (分離, 合成法)

§ 5-Methylhexanoic acid; Me ester

[CAS No.] 2177-83-5

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

[構造式]

[分子式] $C_8H_{16}O_2$

[分子量] 144.213

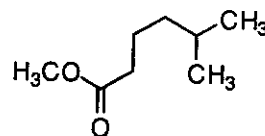
[基原] 次の植物から分離: ホップオイル (*Humulus lupulus*)

[性状] 液体

[沸点] Bp 166-167.5 °C

[濃度] d^{15}_4 0.884

[その他のデータ] n_D 1.4214



-----文献-----

Fenaroli's Handbook of Flavor Ingredients, 3rd edn., (ed. Burdock, G.A.), CRC Press, 1995, 2, 510
Encyclopedia of Food and Color Additives, (ed. Burdock, G.A.), CRC Press, 1997, 1776

§ 3-Methylpentacosane (CAS 名)

[CAS No.] 6902-54-1

[関連 CAS No.] 55194-22-4

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

[構造式] $H_3C(CH_2)_{21}CH(CH_3)CH_2CH_3$

[分子式] $C_{26}H_{54}$

[分子量] 366.713

[基原] 次の植物から分離: ホップオイル (*Humulus lupulus*), オレンジオイル (*Citrus sinensis*), 昆虫の上皮

[性状] 液体

[沸点] Bp₁₀ 248 °C

[屈折率] n_D^{20} 1.4391

-----文献-----

Wollrab, V. et al., *Coll. Czech. Chem. Comm.*, 1965, 30, 1670, (分離)

Hunter, G.L.K. et al., *Phytochemistry*, 1966, 5, 807, (分離)

Streibl, M. et al., *Fette, Seifen, Anstrichm.*, 1968, 70, 543; *CA*, 70, 30318x, (合成法)

§ 2-Methyltetracosane

[化学名・別名] Isopentacosane

[CAS No.] 1560-78-7

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

[構造式] $(H_3C)_2CH(CH_2)_{21}CH_3$

[分子式] $C_{25}H_{52}$

[分子量] 352.686

[基原] the cuticular hydrocarbons of the termite *Reticulitermes flavipes*. ホップ (*Humulus lupulus*), オレンジ (*Citrus sinensis*) のオイル

[融点] Mp 56 °C

-----文献-----

Streibl, M. et al., *Fette, Seifen, Anstrichm.*, 1968, 70, 543, (ガスクロマト)

Howard, R.W. et al., *J. Chem. Ecol.*, 1978, 4, 233, (ガスクロマト, Mass)

Tsuda, Y. et al., *Phytochemistry*, 1981, 20, 505, (分離, 合成法)

§ 2-Methyltetradecane

[化学名・別名] Isopentadecane

[CAS No.] 1560-95-8

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

[構造式] $(H_3C)_2CH(CH_2)_{11}CH_3$

[分子式] $C_{15}H_{32}$

[分子量] 212.418

[基原] *Hierochloe odorata*, *Humulus lupulus*, *Theobroma* sp.

[濃度] d^{20}_4 0.77
[屈折率] n^{20}_D 1.4304
[販売元] Other: PB M28400

-----文献-----

Ueyama, Y. et al., Flavour Fragrance J., 1991, 6, 63, (分離)
Garcia Martinez, A. et al., Tetrahedron, 1994, 50, 13231, (合成法, IR, H-NMR, C13-NMR, Mass)

§ 2-Methyltricosane

[CAS No.] 1928-30-9
[化合物分類] 脂肪族化合物 (Branched aliphatic hydrocarbons)
[構造式] $H_3C(CH_2)_{20}CH(CH_3)_2$
[分子式] $C_{24}H_{50}$
[分子量] 338.659
[基原] rose-petal leaf wax とホップ (*Humulus lupulus*) の微量成分
[融点] Mp 42 °C

-----文献-----

Wollrab, V. et al., Coll. Czech. Chem. Comm., 1965, 30, 1654; 1670, (ガスクロマト, IR)

§ 3-Methyltricosane (CAS 名)

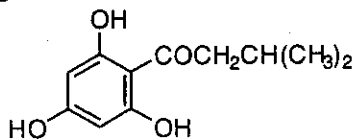
[CAS No.] 13410-45-2
[関連 CAS No.] 55194-20-2
[化合物分類] 脂肪族化合物 (Branched aliphatic hydrocarbons)
[構造式] $H_3C(CH_2)_{19}CH(CH_3)CH_2CH_3$
[分子式] $C_{24}H_{50}$
[分子量] 338.659
[基原] 次の植物から分離: ホップオイル (*Humulus lupulus*), オレンジオイル (*Citrus sinensis*), 昆虫の上皮
[沸点] Bp_{10} 233 °C
[屈折率] n^{50}_D 1.4375

-----文献-----

Wollrab, V. et al., Coll. Czech. Chem. Comm., 1965, 30, 1670, (分離)
Hunter, G.L.K. et al., Phytochemistry, 1966, 5, 807, (分離)

§ 3-Methyl-1-(2,4,6-trihydroxyphenyl)-1-butanone (CAS 名)

[化学名・別名] 2',4',6'-Trihydroxy-3-methylbutyrophenone (旧 CAS 名). 2,4,6-Trihydroxyisovalerophenone.
Phlorisovalerophenone
[CAS No.] 26103-97-9
[化合物分類] 単環芳香族 (Simple aryl ketones), 単環芳香族 (Acylphloroglucinols)
[構造式]
[分子式] $C_{11}H_{14}O_4$
[分子量] 210.229
[基原] *Humulus lupulus* (ホップ)
[融点] Mp 95 °C (一水和物). Mp 145 °C (無水物)

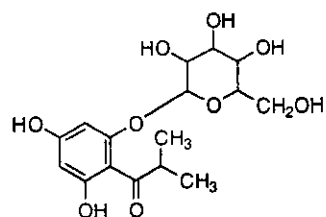


-----文献-----

Kenny, T.S. et al., J.C.S., 1939, 1601, (合成法)
Orth, W.A. et al., Annalen, 1963, 663, 74
Zuurbier, K.W.M. et al., Phytochemistry, 1995, 38, 77, (分離, 合成)

§ 2-Methyl-1-(2,4,6-trihydroxyphenyl)-1-propanone; 2-O-β

copyranoside
[CAS No.] 17004-75-0
[化合物分類] 単環芳香族 (Simple aryl ketones)
[構造式]
[分子式] $C_{16}H_{22}O_9$
[分子量] 358.344
[基原] ホップ (*Humulus lupulus*), *Helichrysum* sp.
[融点] Mp 118 °C



-Glu

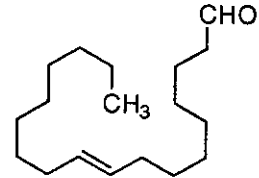
[分子量] 358.344
[基原] ホップ (*Humulus lupulus*), *Helichrysum* sp.
[融点] Mp 118 °C
[比旋光度]: $[\alpha]_D -59.8$

----- 文 献 -----

Bohlmann, F. et al., *Planta Med.*, 1984, 50, 174, (分離)
Jakupovic, J. et al., *Phytochemistry*, 1986, 25, 1133, (分離)
Bloor, S.J., *J. Nat. Prod.*, 1992, 55, 43, (誘導體)
Zuurbier, K.W.M. et al., *Phytochemistry*, 1995, 38, 77, (生合成)

§ 9-Octadecenal; (Z)-form

[化学名・別名] Oleic aldehyde
[CAS No.] 2423-10-1
[化合物分類] 脂肪族化合物 (Unbranched alkenic aldehydes and ketones)
[構造式]
[分子式] $C_{18}H_{34}O$
[分子量] 266.466



[基原] 次の動物の性へロモンから得られる: 南北トウモロコシキクイムシ (Southwestern corn borer) *Diatraea grandiosella*, 黄色茎キクイムシ (Yellow stem borer) *Scirpophaga incertulas*. 次の植物のオイルから分離: ホップ (*Humulus lupulus*, *Elaeagnus moorcraftii*). また種々の肉料理の芳香物質から得られる
[性状] 液体
[沸点] $Bp_{0.001}$ 108-110 °C

----- 文 献 -----

Valicenti, A.J. et al., *Chem. Phys. Lipids*, 1976, 17, 389
Mancuso, A.J. et al., *J.O.C.*, 1978, 43, 2480
Tatsuki, S. et al., *Appl. Entomol. Zool.*, 1985, 20, 357
Hedin, P.A. et al., *J. Chem. Ecol.*, 1986, 12, 2051, (分離)

§ Octane (CAS 名)

[CAS No.] 111-65-9
[関連 CAS No.] 17252-77-6
[化合物分類] 脂肪族化合物 (Saturated unbranched hydrocarbons)
[構造式] $H_3C(CH_2)_6CH_3$
[分子式] C_8H_{18}
[分子量] 114.23
[基原] *Pinus* spp. のオイル, ホップオイル (*Humulus lupulus*)
[性状] 液体
[融点] 凝固点: Fp -56.8 °C
[沸点] Bp 125.67 °C
[濃度] d^{20}_4 0.7025
[屈折率] n^{20}_D 1.3974

[傷害・毒性] 皮膚, 眼, 呼吸域を刺激する. 高濃度の蒸気は麻酔性がある. 発火しやすい, 発火温度: 13 °C, 自然発火温度: 206/210/220 °C. OES: long-term 300 ppm; short-term 375 ppm
[化学物質毒性データ総覧 (RTECS) 登録番号] RG8400000
[販売元] Aldrich: 41223-6; Fluka: 74823; Sigma: O2001; Supelco: R42-1008

----- 文 献 -----

Forziati, A.F. et al., *J. Res. Natl. Bur. Stand. (U.S.)*, 1946, 36, 129-136, (性質)
Low, L.K. et al., *Ethel Browning's Toxicity and Metabolism of Industrial Solvents*, 2nd edn., (ed. Snyder, R.), Elsevier, Volume 1, 1987, 307, (レビュー, 毒性)

RTECS (化学物質毒性データ)

健康障害に関するデータ

急性毒性に関するデータ

<<試験方法>> 認知されている最低致死量に関する試験

曝露経路 : 静脈内投与.

被験動物 : げっ歯類-マウス.

投与量・期間 : 428 mg/kg

毒性影響 : [行動] 睡眠時間の変化 (立ち直り反射の変化を含む).

<<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 : 5 mg/kg/7 日間間欠投与

毒性影響 : (肝臓) 肝臓重量の変化.

[生化学] [酵素の阻害・誘導・血液・組織中濃度の変化] ホスファターゼ.

[生化学] [酵素の阻害・誘導・血液・組織中濃度の変化] その他のオキシドレダクターゼ.

参考文献

Environmental Research. (Academic Press, Inc., 1 E. First St., Duluth, MN 55802) 22,271,1980

§ 2-Pentadecanone (CAS 名)

[CAS No.] 2345-28-0

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

[構造式] $H_3C(CH_2)_{12}COCH_3$

[分子式] $C_{15}H_{30}O$

[分子量] 226.401

[基原] 次の植物から分離: ホップ (*Humulus lupulus*), ココナッツ (*Cocos nucifera*), その他のオイル. Constit. of male mandibular gland secretions of the Hymenoptera *Philanthus basilaris* and *Philanthus bicinctus*

[融点] Mp 39 °C

[沸点] Bp 294 °C. Bp_{0.7} 104-106 °C

[販売元] Fluka:7653

-----文献-----

Rieche, A. et al., Z. Chem., 1964, 4, 177

Czech. Pat., 1969, 131 766; CA, 72, 132025

McDaniel, C.A. et al., J. Chem. Ecol., 1987, 13, 227

§ Pentane (CAS 名)

[CAS No.] 109-66-0

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

[構造式] $H_3CCH_2CH_2CH_2CH_3$

[分子式] C_5H_{12}

[分子量] 72.15

[基原] Found in petroleum, constit. of low-boiling petrol. また *Humulus lupulus* (ホップ) のオイルから分離される

[用途] ガソリンと溶け合う; 溶媒として使用される

[性状] 揮発性の液体

[融点] 凝固点: Fp-129 °C

[沸点] Bp 36 °C

[溶解性] 水に僅かに溶ける

[濃度] d^{20}_4 0.626

[屈折率] n^{20}_D 1.3577

[傷害・毒性] Extremely 可燃性, 発火温度: -49 °C, 自然発火温度: 243 °C. 高濃度は麻酔性がある. OES: long-term 600 ppm; short-term 750 ppm

[化学物質毒性データ総覧 (RTECS) 登録番号] RZ9450000

[販売元] Aldrich:41472-7; Fluka:76874; Sigma:P7964; Supelco:44-2746

-----文献-----

Buttery, R.G. et al., Nature (London), 1963, 200, 435, (分離)

Gallant, R.W., Hydrocarbon Process., 1967, 46, 121-129, (性質)

Low, L.K. et al., Ethel Browning's Toxicity and Metabolism of Industrial Solvents, 2nd edn., (ed. Snyder, R.), Elsevier, Volume 1, 1987, 279. (レビュー, 毒性)

RTECS (化学物質毒性データ)

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>> 認知された最小致死濃度 (LCLo) に関する試験

曝露経路 : 吸入.

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〉〉 認知された最小致死濃度 (LCLo) に関する試験

曝露経路 : 吸入.
被験動物 : げっ歯類-マウス.
投与量・期間 : 325 gm/m³/2 時間
毒性影響 : [行動] 興奮.

参考文献

Journal of Pharmacology and Experimental Therapeutics. (Williams & Wilkins Co., 428 E. Preston St., Baltimore, MD 21202) 58,74,1936

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 : 10 gm/kg/4 週間間欠投与
毒性影響 : [腎臓・尿路・膀胱] 腎臓重量の変化.
[栄養と総代謝] 体重減少または体重増加.
[慢性データ関連] 死亡

参考文献

Toxicology and Industrial Health. (Princeton Scientific Pub. Co., POB 2155, Princeton, NJ 08540) 1(3), 67, 1985

§ 5-Propyltridecane

[CAS No.] 55045-11-9

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

[構造式] $\text{H}_3\text{C}(\text{CH}_2)_7\text{CH}(\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3)(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$

[分子式] $\text{C}_{16}\text{H}_{34}$

[分子量] 226.445

[基原] *Codonopsis pilosula* とホップ (*Humulus lupulus*) の精油

----- 文 献 -----

Liu, G. et al., CA, 1987, 107, 64624s, (分離)

Tan, L. et al., CA, 1993, 118, 77081q, (分離)

§ Rutin; 2''-O- α -L-Rhamnopyranosyl

[化学名・別名] Manghaslin

[CAS No.] 55696-57-6

[化合物分類] フラボノイド (Flavonols; 5 × O-置換基)

[構造式]

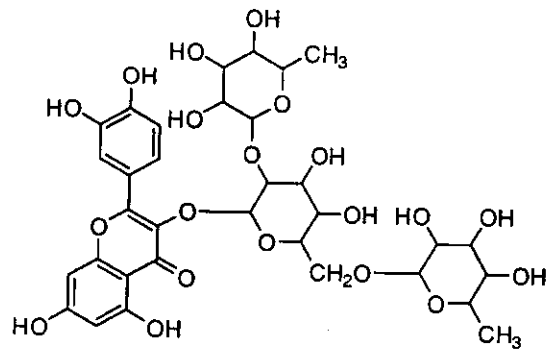
[分子式] $\text{C}_{33}\text{H}_{40}\text{O}_{20}$

[分子量] 756.667

[基原] 次の植物から分離: *Cerbera manghas*, *Solanum* spp., *Glycine max*, *Humulus lupulus*

[性状] 青白い黄色の針状結晶 + 1 · 1/2H₂O (MeOH/EtOH)

[融点] Mp 194-196 °C



----- 文 献 -----

Sakushima, A. et al., Chem. Pharm. Bull., 1980, 28, 1219, (Manghaslin)

§ Rutin; 2'''-O- α -L-Rhamnopyranosyl

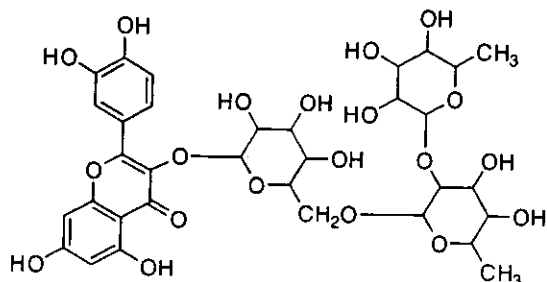
[CAS No.] 32453-37-5

[化合物分類] フラボノイド (Flavonols; 5 × O-置換基)

[構造式]

[分子式] $\text{C}_{33}\text{H}_{40}\text{O}_{20}$

[分子量] 756.667



Khalifa, T.I. et al., Anal. Profiles Drug Subst., 1983, 12, 623, (レビュー)

§ 2',4,4',6'-Tetrahydrochalcone; 2',6'-Di-Me ether

[化学名・別名] 4,4'-Dihydroxy-2',6'-dimethoxychalcone

[化合物分類] フラボノイド (Chalcone flavonoids; 4 × O-置換基)

[構造式]

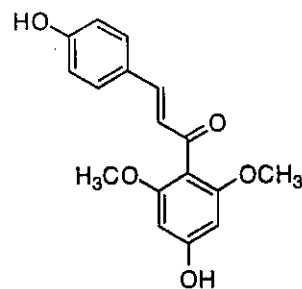
[分子式] C₁₇H₁₆O₅

[分子量] 300.31

[基原] 次の植物から分離: *Humulus lupulus*

[性状] 結晶 (EtOAc/hexane)

[融点] Mp 192-193 °C



-----文献-----

Sun, S.-S. et al., Phytochemistry, 1989, 27, 1776, (4,4'-Dihydroxy-2',6'-dimethoxychalcone)

§ 2',4,4',6'-Tetrahydroxy-3',5'-diprenylchalcone; (E)-form

[化合物分類] フラボノイド (Chalcone flavonoids; 4 × O-置換基)

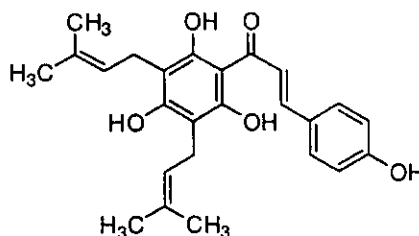
[構造式]

[分子式] C₂₅H₂₈O₅

[分子量] 408.493

[基原] ホップ (*Humulus lupulus*)

UV: [neutral] λ_{max} 371 (MeOH)



-----文献-----

Stevens, J.F. et al., Phytochemistry, 1997, 44, 1575-1585; 2000, 53, 759-775, (分離, H-NMR, C13-NMR, Mass)

§ 2',4,4',6'-Tetrahydroxy-3',5'-diprenylchalcone; (E)-form, 6'-Me ether

[化学名・別名] 2',4,4'-Trihydroxy-6'-methoxy-3',5'-diprenylchalcone. 5'-Prenylxanthohumol

[CAS No.] 189299-04-5

[化合物分類] フラボノイド (Chalcone flavonoids; 4 × O-置換基)

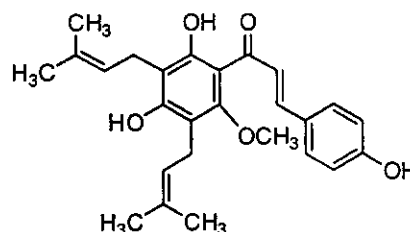
[構造式]

[分子式] C₂₆H₃₀O₅

[分子量] 422.52

[基原] *Humulus lupulus*

[性状] 暗黄色の粉末



-----文献-----

Stevens, J.F. et al., Phytochemistry, 1997, 44, 1575-1585; 2000, 53, 759-775, (分離, H-NMR, C13-NMR, Mass)

§ 3,4',5,7-Tetrahydroxyflavone; 3-O-[α-L-Rhamnopyranosyl-(1 → 2)-β-D-glucopyranoside]

[化学名・別名] Kaempferol 3-neohesperidoside

[CAS No.] 32602-81-6

[化合物分類] フラボノイド (Flavonols; 4 × O-置換基)

[構造式]

[分子式] C₂₇H₃₀O₁₅

[分子量] 594.525

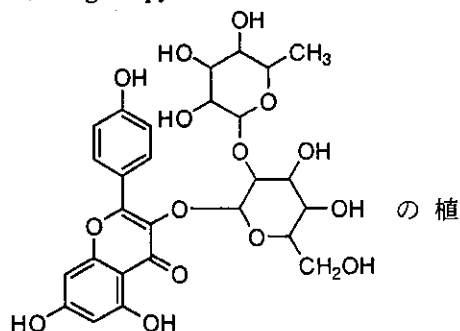
[基原] 次の植物から分離: *Humulus lupulus*, *Paris verticillata*, その他

物属

[性状] 青白い黄色の針状結晶

[融点] Mp 197-200 °C

[比旋光度]: [α]_D²² -58.8 (c, 1.36 in MeOH)



-----文献-----

Nakano, K. et al., Chem. Pharm. Bull., 1981, 29, 1445, (3-neohesperidoside)

§ 2',4,4',6'-Tetrahydroxy-3'-prenylchalcone

[化学名・別名] 3-(4-Hydroxyphenyl)-1-[2,4,6-trihydroxy-3-(3-methyl-2-butenyl)phenyl]-2-propen-1-one.

Desmethylxanthohumol

[CAS No.] 115063-39-3

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{22} -58.8$ (c, 1.36 in MeOH)

-----文献-----

Nakano, K. et al., Chem. Pharm. Bull., 1981, 29, 1445, (3-neohesperidoside)

§ 2',4,4',6'-Tetrahydroxy-3'-prenylchalcone

[化学名・別名] 3-(4-Hydroxyphenyl)-1-[2,4,6-trihydroxy-3-(3-methyl-2-butenyl)phenyl]-2-propen-1-one.

Desmethylxanthohumol

[CAS No.] 115063-39-3

[化合物分類] フラボノイド (Chalcone flavonoids; 4 × O-置換基)

[構造式]

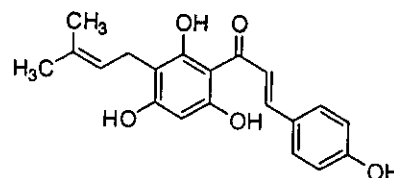
[分子式] $C_{20}H_{20}O_5$

[分子量] 340.375

[一般的性質] Chalcone numbering shown

[基原] *Humulus lupulus* (ホップ)

[用途] Inhibitor of diacylglycerol acyltransferase



-----文献-----

Orth, W.A. et al., Annalen, 1963, 663, 74-82, (構造決定)

Etteldorf, N. et al., Z. Naturforsch., C, 1999, 54, 610-612, (Dihydroxanthohumol)

§ 2',4,4',6'-Tetrahydroxy-3'-prenylchalcone; 4'-Me ether

[化学名・別名] 2',4,6'-Trihydroxy-4'-methoxy-3'-prenylchalcone. Xanthogalenol

[CAS No.] 265659-35-6

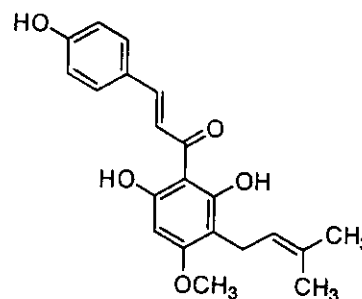
[化合物分類] フラボノイド (Chalcone flavonoids; 4 × O-置換基)

[構造式]

[分子式] $C_{21}H_{22}O_5$

[分子量] 354.402

[基原] 次の植物から分離: *Humulus lupulus*



-----文献-----

Verzele, M. et al., Bull. Soc. Chim. Belg., 1957, 66, 452-475, (分離, Xanthohumol)

Sun, S.-S. et al., Phytochemistry, 1989, 28, 1776-1777, (Xanthohumol, 4',6'-di-Me ether, 分離)

Etteldorf, N. et al., Z. Naturforsch., C, 1999, 54, 610-612, (Dihydroxanthohumol)

Stevens, J.F. et al., Phytochemistry, 2000, 53, 759-775, (Xanthohumol D, 分離, 生育)

§ 2',4,4',6'-Tetrahydroxy-3'-prenylchalcone; 6'-Me ether

[化学名・別名] 2',4,4'-Trihydroxy-6'-methoxy-3'-prenylchalcone. Xanthohumol

[CAS No.] 6754-58-1

[その他の CAS No.] 569-83-5

[化合物分類] フラボノイド (Chalcone flavonoids; 4 × O-置換基)

[構造式]

[分子式] $C_{21}H_{22}O_5$

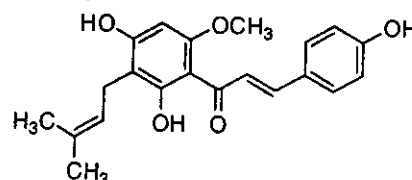
[分子量] 354.402

[基原] 次の植物から分離: *Humulus lupulus* (ホップ), *Sophora angustifolia*

[性状] 橙-黄色の結晶 (EtOH 溶液)

[融点] Mp 172 °C

[溶解性] BERDY SOL: メタノールに可溶; 水に難溶



-----文献-----

Verzele, M. et al., Bull. Soc. Chim. Belg., 1957, 66, 452-475, (分離, Xanthohumol)

Sun, S.-S. et al., Phytochemistry, 1989, 28, 1776-1777, (Xanthohumol, 4',6'-di-Me ether, 分離)

Tabata, N. et al., Phytochemistry, 1997, 46, 683-687, (Xanthohumol, 分離, H-NMR, C13-NMR)

Stevens, J.F. et al., Phytochemistry, 2000, 53, 759-775, (Xanthohumol D, 分離, 生育)

§ 2',4,4',6'-Tetrahydroxy-3'-prenylchalcone; 4',6'-Di-Me ether

[化学名・別名] 2',4-Dihydroxy-4',6'-dimethoxy-3'-prenylchalcone

-----文献-----

Verzele, M. et al., Bull. Soc. Chim. Belg., 1957, 66, 452-475, (分離, Xanthohumol)
Jain, A.C. et al., Tetrahedron, 1978, 34, 3563-3567, (4,4',6'-tri-Me ether, 2',4,4'-tri-Me ether, 合成法)
Sun, S.-S. et al., Phytochemistry, 1989, 28, 1776-1777, (Xanthohumol, 4',6'-di-Me ether, 分離)

§ 2',4,4',6'-Tetrahydroxy-3'-prenylchalcone; Δ^3 -Isomer, 2''-hydroxy, 6'-Me ether

[化学名・別名] Xanthohumol D

[CAS No.] 274675-25-1

[化合物分類] フラボノイド (Chalcone flavonoids; 4 × O-置換基)

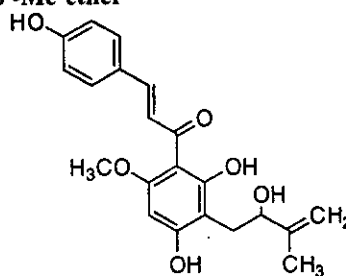
[構造式]

[分子式] $C_{21}H_{22}O_6$

[分子量] 370.401

[基原] 次の植物から分離: *Humulus lupulus*

UV: [neutral] λ_{max} 369 (log ϵ 4.42) (MeOH)



-----文献-----

Stevens, J.F. et al., Phytochemistry, 2000, 53, 759-775, (Xanthohumol D, 分離, 生育)

§ 2',4,4',6'-Tetrahydroxy-3'-prenylchalcone; α, β -Dihydro, 6'-Me ether

[化学名・別名] 2',4,4'-Trihydroxy-6'-methoxy-3'-prenyldihydrochalcone.

-Dihydroxanthohumol

[CAS No.] 102448-00-0

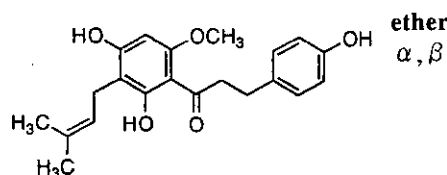
[化合物分類] フラボノイド (Dihydrochalcone flavonoids)

[構造式]

[分子式] $C_{21}H_{24}O_5$

[分子量] 356.418

[基原] ホップ (*Humulus lupulus*)



-----文献-----

Etteldorf, N. et al., Z. Naturforsch., C, 1999, 54, 610-612, (Dihydroxanthohumol)

§ 2,2,3,4-Tetramethylpentane

[CAS No.] 1186-53-4

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

[構造式] $(H_3C)_2CHCH(CH_3)C(CH_3)_3$

[分子式] C_8H_{20}

[分子量] 128.257

[基原] *Jasminum sambac*, *Humulus lupulus*, *Serratia marcescens*

-----文献-----

Hellman, S. et al., Chem. Ber., 1983, 116, 2219, (合成法, IR, H-NMR, C13-NMR, Mass)

Zhu, L. et al., Zhiwu Xuebao, 1984, 26, 189, (分離)

Tanaka, T., CA, 1990, 113, 187684t, (分離)

Yaws, C.L. et al., Hydrocarbon Process. Int. Ed., 1990, 69, 87

§ 4',5,7-Trihydroxy-6-prenylflavanone; (S)-form

[CAS No.] 68236-13-5

[化合物分類] フラボノイド (Flavanones; 3 × O-置換基)

[構造式]

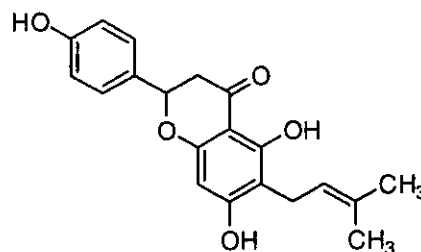
[分子式] $C_{20}H_{20}O_5$

[分子量] 340.375

[基原] 次の植物から分離: *Humulus lupulus*, *Wyethia angustifolia*, *Wyethia glabra*

[性状] 結晶 (Et₂O/hexane)

[融点] Mp 209-209.5 °C



-----文献-----

Mizobuchi, S. et al., Agric. Biol. Chem., 1984, 48, 2771, (分離, 成書)

Mahmoud, E.N. et al., J. Nat. Prod., 1985, 48, 648, (誘導體)

McCormick, S. et al., Phytochemistry, 1985, 24, 1614; 1986, 25, 1723, (分離)