

[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 (EtO/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)

§ 4',5,7-Trihydroxy-8-prenylflavanone; (S)-form, 5-Me ether

[化学名・別名]4',7-Dihydroxy-5-methoxy-8-prenylflavanone. Isoxanthohumol †. Humulol ‡

[CAS No.]70872-29-6

[化合物分類]フラボノイド (Flavanones; 3 × O-置換基)

[構造式]

[分子式]C₂₁H₂₂O₅

[分子量]354.402

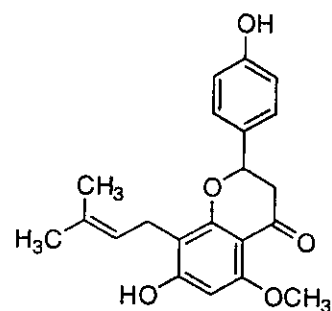
[基原]次の植物から分離: ホップ (*Humulus lupulus*), *Sophora angustifolia* の根

[性状]淡黄色の針状結晶 (AcOH)

[融点]Mp 198 °C

[溶解性]BERDY SOL: メタノールに可溶; 水に難溶

[その他のデータ]The name Humulol has historical precedence but Isoxanthohumol has been preferred to avoid confusion with 2,9-Humuladien-7-ol. However another nat. prod. has since been named Isoxanthohumol (2',4',6'-Trihydroxy-3'-prenylchalcone 参照)



-----文献-----

Komatsu, M. et al., *Yakugaku Zasshi*, 1970, 90, 463, (Isoxanthohumol)

§ 3,4,5-Trimethylbenzaldehyde

[化学名・別名]5-Aldehydohemimellitene

[CAS No.]5779-74-8

[化合物分類]単環芳香族 (Simple benzaldehydes)

[構造式]構造は次の化合物と類似: 2,3,4-Trimethylbenzaldehyde

[分子式]C₁₀H₁₂O

[分子量]148.204

[基原]ホップオイル (*Humulus lupulus*)

[性状]針状結晶 (EtOH 溶液)

[融点]Mp 52 °C

-----文献-----

Schwarz, H. et al., *Org. Mass Spectrom.*, 1972, 815, (Mass)

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

§ 2,2,4-Trimethyldecane

[CAS No.]62237-98-3

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

[構造式]H₃C(CH₂)₃CH(CH₃)CH₂C(CH₃)₂

[分子式]C₁₃H₂₈

[分子量]184.364

[基原]ホップ (*Humulus lupulus*) の精油

-----文献-----

Chen, J. et al., *CA*, 1993, 118, 165188k, (分離)

§ 3,6,10-Trimethyltetradecane

[CAS No.]146367-86-4

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

[その他の CAS No.] 30207-98-8

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

[構造式] $\text{H}_3\text{C}(\text{CH}_2)_9\text{CH}_2\text{OH}$

[分子式] $\text{C}_{11}\text{H}_{24}\text{O}$

[分子量] 172.31

[基原] 次の植物から分離: ホップオイル (*Humulus lupulus*). Acetate possibly a minor component of the sex pheromone of the female fruit tree leaf roller *Archips argyrospilus*

[用途] 香水原料, 香料原料

[性状] 液体もしくは結晶

[融点] Mp 19 °C (16.5 °C)

[沸点] Bp₁₅ 131 °C. Bp_a 123-125 °C

[濃度] d^{20}_4 0.833

[屈折率] n^{20}_D 1.4392

[傷害・毒性] 皮膚を刺激する. 50% 致死量 (LD₅₀) (ラット, 経口) 3000 mg/kg

[化学物質毒性データ総覧 (RTECS) 登録番号] YQ3155000

[販売元] Aldrich:U100-1; Fluka:94059; Sigma:U4376

-----文献-----

Jahnsen, V.J., Nature (London), 1962, 196, 474, (分離)

Opdyke, D.L.J., Food Cosmet. Toxicol., 1978, 16, 641, (レビュー, 毒性)

RTECS (化学物質毒性データ)

生体影響物質 : 農業化学品. 変異原性物質. 一時刺激物質.

健康障害に関するデータ

皮膚/眼の刺激に関するデータ

<<試験方法>> 標準ドライズ (Draize) 試験法.

曝露経路 : 皮膚への塗布

被験動物 : げっ歯類-ウサギ.

投与量・期間 : 500 mg/24 時間

反応の症度 : 軽度.

参考文献

Food and Cosmetics Toxicology. (London, UK) 16,641,1978

変異原性に関するデータ

<<試験方法>> DNA 修復.

試験系 : 大腸菌 *Bacillus subtilis*

投与量・期間 : 20 mg/disc

参考文献

Osaka-shi Igakkai Zasshi. Journal of Osaka City Medical Association. (Osaka-shi Igakkai, c/o Osaka-shiritsu Daigaku Igakubu, 1-4-54 Asahi-cho, Abeno-ku, Osaka, 545, Japan) 34,267,1985

EPA TSCA TEST SUBMISSION (TSCATS) DATA BASE, JANUARY 2001

§ Xanthohumol C

[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)

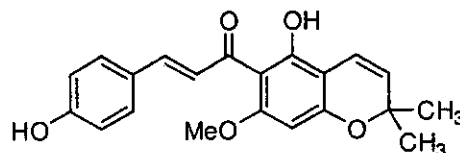
[構造式]

[分子式] $\text{C}_{21}\text{H}_{20}\text{O}_5$

[分子量] 352.386

[基原] ホップ (*Humulus lupulus*)

UV: [neutral] λ_{max} 285 ; 298 (sh); 371 (MeOH)



-----文献-----

Tabata, N. et al., Phytochemistry, 1997, 46, 683-687, (Xanthohumol B)

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

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

§ Xanthohumol C; 3,4-Dihydro, 3 ξ -hydroxy

[化学名・別名] Xanthohumol B. Dehydrocycloxanthohumol hydrate

[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]

-----文献-----

- Tabata, N. et al., *Phytochemistry*, 1997, 46, 683-687, (Xanthohumol B)
 Etteldorf, N. et al., *Z. Naturforsch., C*, 1999, 54, 610-612, (Isoxanthohumol B)
 Stevens, J.F. et al., *Phytochemistry*, 2000, 53, 759-775, (Xanthohumol C)

§ **Xanthohumol C; 3,4-Dihydro, 3 ξ -hydroxy**

[化学名・別名] Xanthohumol B. Dehydrocycloxanthohumol hydrate

[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]

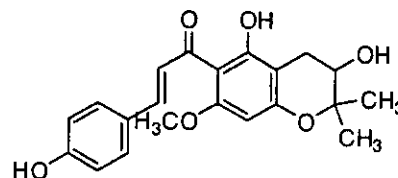
[分子式] C₂₇H₂₂O₆

[分子量] 370.401

[基原] ホップ (*Humulus lupulus*)

[用途] Inhibitor of diacylglycerol acyltransferase

UV: [neutral] λ_{max} 205 (log ε 4.47); 370 (log ε 4.35) (EtOH)



-----文献-----

- Tabata, N. et al., *Phytochemistry*, 1997, 46, 683-687, (Xanthohumol B)
 Etteldorf, N. et al., *Z. Naturforsch., C*, 1999, 54, 610-612, (Isoxanthohumol B)

§ **Xanthohumol C; 3,4-Dihydro, 4 ξ -hydroxy**

[化学名・別名] Isoxanthohumol B. Isodehydrocycloxanthohumol hydrate

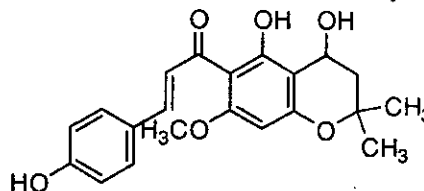
[化合物分類] フラボノイド (Chalcone flavonoids; 4 × O-置換基), フラボノイド (Cyclised C-isopentenylated flavonoids)

[構造式]

[分子式] C₂₇H₂₂O₆

[分子量] 370.401

[基原] ホップ: *Humulus lupulus*



-----文献-----

- Tabata, N. et al., *Phytochemistry*, 1997, 46, 683-687, (Xanthohumol B)
 Etteldorf, N. et al., *Z. Naturforsch., C*, 1999, 54, 610-612, (Isoxanthohumol B)
 Stevens, J.F. et al., *Phytochemistry*, 2000, 53, 759-775, (Xanthohumol C)

§ **Xanthohumol E**

[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)

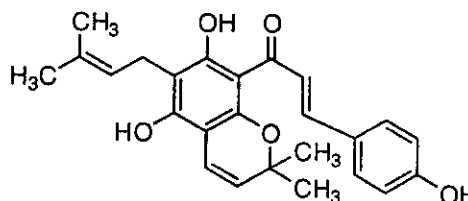
[構造式]

[分子式] C₂₅H₂₆O₅

[分子量] 406.477

[基原] *Humulus lupulus* (ホップ)

UV: [neutral] λ_{max} 369 (MeOH)



-----文献-----

- Stevens, J.F. et al., *Phytochemistry*, 2000, 53, 759- [00222038-9] V10

§ § イラクサ科 (*Humulus americanus* Nuttall) の雌花。

本調査研究では、成分に関する文献はなかった。

*****ポピー (Poppy) *****

§ § ケシ科ケシ (*Papaver somniferum* L.) の種子

[基原] 次の植物から得られるアルカロイド: *Argemone mexicana*, *Papaver somniferum* のカルス組織, *Glaucium flavum* var. *vestitum* の根(ケシ科). Also obt. by the base-catalysed condensation of sanguinarine with acetone
 [性状] 青白い黄色の針状結晶 (MeOH/CHCl₃)
 [融点] Mp 194-195.5 °C

-----文献-----

Furuya, T. et al., *Phytochemistry*, 1972, 11, 3041, (分離, UV, IR, H-NMR, Mass, 構造決定, 合成法)
 Döpke, W. et al., *Z. Chem.*, 1976, 16, 54, (生育, UV, IR, H-NMR, Mass, 構造決定)
 Castedo, L. et al., *Heterocycles*, 1981, 16, 533, (生育)

§ Codeine, BAN, USAN

[化学名・別名] 7,8-Didehydro-4,5-epoxy-3-methoxy-17-methylmorphinan-6-ol (CAS 名). Methylmorphine. Codicept. Kodein. Tussipan

[CAS No.] 76-57-3

[関連 CAS No.] 1420-53-7, 5913-76-8, 6059-47-8

[化合物分類] アルカロイド化合物 (Morphine alkaloids), 薬物: 鎮痛薬 (Analgesics), 薬物: 鎮咳薬 (Antitussives), 薬物: オピオイド受容体作用薬

(Opioid receptor agonists)

[構造式]

[分子式] C₁₈H₂₁NO₃

[分子量] 299.369

[基原] Opium alkaloid (*Papaver somniferum*) (含有量: 約 also obt. synthetically by methylation of Morphine (ケシ科))

[用途] Relatively nonaddictive analgesic. 鎮咳薬. 強い麻酔作用

[性状] プリズム結晶 (Et₂O or C₆H₆), 八面体もしくは菱形のプリズム結晶 + H₂O (H₂O)

[融点] Mp 155 °C

[比旋光度]: [α]_D -137.8 (EtOH)

[溶解性] エタノール, クロロホルム, アセトンに可溶; 四塩化炭素, 水に難溶

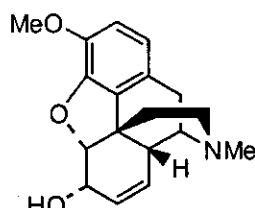
[Log P 計算値] Log P 0.82 (未確認値) (計算値)

[その他のデータ] Also used as complex with sulfonated styrene-divinylbenzene copolymer (Codeine polistirex, USAN)

[傷害・毒性] ヒトに関する研究報告がある. 催奇形性物質. 50%致死量 (LD₅₀) (ラット, 経口) 427 mg/kg

[化学物質毒性データ総覧 (RTECS) 登録番号] QD0893000

[販売元] Sigma: C5901



Absolute Configuration

1%),

-----文献-----

Bentley, K.W., *Chemistry of the Morphine Alkaloids*, Oxford Univ. Press, 1954, 57, (分離, 性質, UV, 合成法)
 Brochmann-Hanssen, E. et al., *J. Pharm. Sci.*, 1964, 53, 1549, (ガスクロマト, chromatog)

RTECS (化学物質毒性データ)

生体影響物質 : 医薬品, 生殖影響物質, ヒト.

健康障害に関するデータ

急性毒性に関するデータ

<<試験方法>> LD50 試験 (50%致死量試験).

曝露経路 : 経口投与.

被験動物 : げっ歯類-ラット.

投与量・期間 : 427 mg/kg

毒性影響 : [胃腸] 運動低下または便秘.

参考文献

Journal of Medicinal Chemistry. (American Chemical Soc., Distribution Office Dept. 223, POB 57136, West End Stn., Washington, DC 20037) 16,782,1973

<<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 : 60 mg/kg

毒性影響 : [行動] 傾眠 (全身活動度の低下).
 [行動] 痙攣または発作閾値への影響.
 [肺, 胸郭, または呼吸] 呼吸抑制.

参考文献

投与量・期間：427 mg/kg
毒性影響：〔胃腸〕運動低下または便秘。

参考文献

Journal of Medicinal Chemistry. (American Chemical Soc., Distribution Office Dept. 223, POB 57136, West End Stn., Washington, DC 20037) 16,782,1973

〈〈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：60 mg/kg
毒性影響：〔行動〕傾眠(全身活動度の低下)。
〔行動〕痙攣または発作閾値への影響。
〔肺,胸郭,または呼吸〕呼吸抑制。

参考文献

Annales Pharmaceutiques Francaises. (SPPIF, B.P.22, F-41353 Vineuil, France) 8,261,1950

〈〈試験方法〉〉 LD50 試験 (50%致死量試験)。

曝露経路：静脈内投与。
被験動物：げっ歯類-マウス。
投与量・期間：54 mg/kg
毒性影響：〔自律神経系〕平滑筋弛緩(メカニズム不明, 痙攣除去)

参考文献

Arzneimittel-Forschung. Drug Research. (Editio Cantor Verlag, Postfach 1255, W-7960 Aulendorf, Fed. Rep. Ger.) 16,617,1966

〈〈試験方法〉〉 LD50 試験 (50%致死量試験)。

曝露経路：静脈内投与。
被験動物：げっ歯類-ウサギ。
投与量・期間：34 mg/kg
毒性影響：〔行動〕傾眠(全身活動度の低下)。

参考文献

Experientia. (Birkhaeuser Verlag, POB 133, CH-4010 Basel, Switzerland) 18,446,1962

生殖に関するデータ

〈〈試験方法〉〉 最小毒性量 (TDLo)。

曝露経路：経口投与。
被験動物：げっ歯類-マウス。
投与：3 gm/kg
雌雄投与期間：雌 6-15 日間(交配後)
毒性影響：〔生殖〕〔胚または胎仔に対する影響〕胎仔毒性(死亡をのぞく。たとえば胎仔の発育阻害)。

参考文献

§ Codeine; N-Oxide

[化学名・別名] Codeine N-oxide. Codeigene. Codeine aminoxyde. Genocodein

[CAS No.] 3688-65-1

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

[構造式]

[分子式] C₁₈H₂₁NO₂

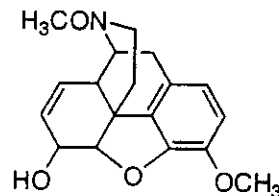
[分子量] 315.368

[基原] 次の植物から得られるアルカロイド: *Papaver somniferum* (ケシ科)

[性状] 板状結晶 (H₂O)

[融点] Mp 231-232 °C

[化学物質毒性データ総覧 (RTECS) 登録番号] QD1260000



----- 文 献 -----

Bentley, K.W., Chemistry of the Morphine Alkaloids, Oxford Univ. Press, 1954, 57, (分離, 性質, UV, 合成法)

***RTECS (化学物質毒性データ) ***

Fuganti, C. et al., J.C.S. Perkin 1, 2000, 3758-3764, (Me ether, 合成法, IR, H-NMR, Mass)

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

[化学名・別名] Mudanpioside F

[CAS No.] 172670-08-5

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

[構造式]

[分子式] C₁₆H₂₄O₈

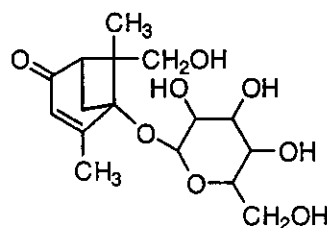
[分子量] 344.361

[基原] *Paeonia suffruticosa*, *Cnidium sialaifolium*

[性状] 結晶

[融点] Mp 166-169 °C (153-159 °C)

[比旋光度]: [α]_D +29.9 (c, 0.7 in MeOH) (+3.3)



-----文献-----

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

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

[化学名・別名] Mudanpioside G

[CAS No.] 231280-70-9

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

[構造式]

[分子式] C₁₆H₂₄O₈

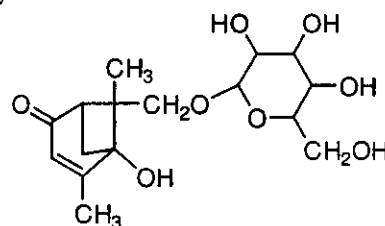
[分子量] 344.361

[基原] *Paeonia suffruticosa*

[性状] シロップ

[比旋光度]: [α]_D -46.8 (c, 0.24 in MeOH)

UV: [neutral] λ_{max} 257 (log ε 3.8) (MeOH)



-----文献-----

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

§ Mudanoside A

[化学名・別名] 6-O-(4-Hydroxy-3-methoxybenzoyl) glucose. 6-O-Vanilloylglucose

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

[構造式]

[分子式] C₁₄H₁₈O₆

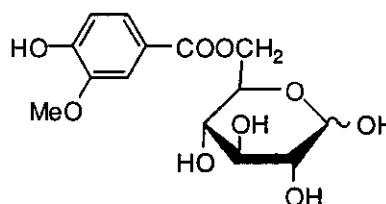
[分子量] 330.291

[基原] *Paeonia suffruticosa* の根皮

[性状] シロップ

[比旋光度]: [α]_D +24.6 (c, 0.09 in MeOH)

UV: [neutral] λ_{max} 220 (log ε 4.1); 262 (log ε 3.9); 293 (log ε 3.6) (MeOH)



-----文献-----

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

§ Mudanpinoic acid

[CAS No.] 203511-36-8

[化合物分類] テルペノイド (Nor-, seco- and cyclotaraxerane penoids)

[構造式]

[分子式] C₃₀H₄₆O₃

[分子量] 454.692

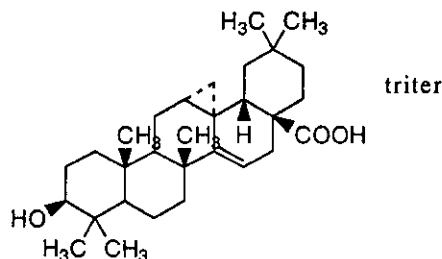
[基原] *Paeonia suffruticosa*

[性状] 結晶 (MeOH)

[融点] Mp 310-312 °C

[比旋光度]: [α]_D +20.6 (c, 0.07 in MeOH)

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



-----文献-----

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

§ **Mudanpinoic acid**

[CAS No.] 203511-36-8

[化合物分類] テルペノイド (Nor-, seco- and cyclotaraxerane triterpenoids)

[構造式]

[分子式] $C_{30}H_{46}O_3$

[分子量] 454.692

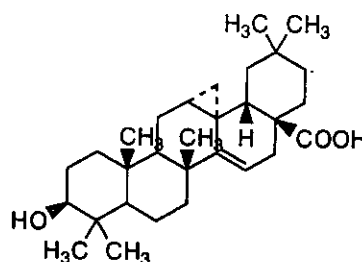
[基原] *Paeonia suffruticosa*

[性状] 結晶 (MeOH)

[融点] Mp 310-312 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D +20.6$ (c, 0.07 in MeOH)

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



-----文献-----

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

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

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

[CAS No.] 84164-71-6

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

[構造式]

[分子式] $C_{30}H_{48}O_4$

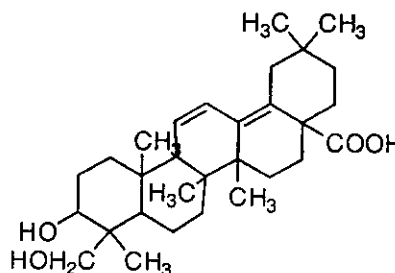
[分子量] 470.691

[基原] *Paeonia suffruticosa*

[性状] 粉末

[融点] Mp 273-276 °C

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



-----文献-----

Breton, J.L. et al., J.C.S., 1963, 1401

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

Singh, C., Indian J. Chem., Sect. B, 1981, 20, 919, (合成法)

§ **Paoniflorigenone; Debenzoyl**

[化学名・別名] Paeonisuffral

[CAS No.] 149420-74-6

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

[構造式]

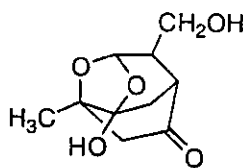
[分子式] $C_{10}H_{14}O_3$

[分子量] 214.218

[基原] *Paeonia suffruticosa*

[性状] 無定型の粉末

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



-----文献-----

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

§ **Paoniflorigenone; Debenzoyl, 7-epimer**

[化学名・別名] Isopaeonisuffral

[CAS No.] 158069-30-8

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

[構造式]

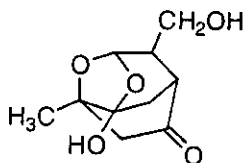
[分子式] $C_{10}H_{14}O_3$

[分子量] 214.218

[基原] *Paeonia suffruticosa*

[性状] 無定型の粉末

[比旋光度]: $[\alpha]_D -27.3$ (MeOH)



-----文献-----

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

UV: [neutral] λ_{\max} 231 (11200); 267 (sh) (1410); 274 (1450); 281 (1200) (EtOH) (Derep)
[化学物質毒性データ総覧(RTECS)登録番号]RT1200000

-----文献-----

Nicolaou, K.C. et al., *Classics in Total Synthesis, Targets, Strategies, Methods*, VCH, 1996, 633, (成書, 合成法)
RTECS (化学物質毒性データ)

生体影響物質 : 医薬品, 天然物.

健康障害に関するデータ

急性毒性に関するデータ

《試験方法》 LD50 試験(50%致死量試験).

曝露経路 : 腹腔内投与.

被験動物 : げっ歯類-マウス.

投与量・期間 : 3530 mg/kg

毒性影響 : [行動] 傾眠(全身活動度の低下).

参照文献

Yakugaku Zasshi. *Journal of Pharmacy*.89,899,1969

《試験方法》 LD50 試験(50%致死量試験).

曝露経路 : 静脈内投与.

被験動物 : げっ歯類-マウス.

投与量・期間 : 9530 mg/kg

毒性影響 : [行動] 睡眠.

[行動] 傾眠(全身活動度の低下).

参照文献

Yakugaku Zasshi. *Journal of Pharmacy*.89,899,1969

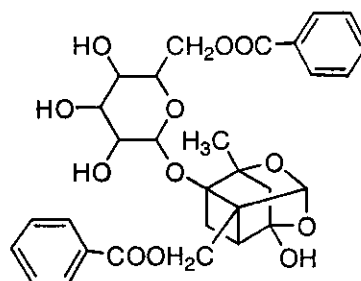
§ Paeoniflorin; 6'-O-Benzoyl

[化学名・別名] Benzoylpaeoniflorin

[CAS No.] 38642-49-8

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

[構造式]



[分子式] C₃₀H₃₂O₁₂

[分子量] 584.576

[基原] *Paeonia suffruticosa*

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

-----文献-----

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

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

§ Paeoniflorin; 6'-(4-Hydroxybenzoyl)

[化学名・別名] Mudanpioside C. Oxybenzoylpaeoniflorin

[CAS No.] 172760-03-1

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

[構造式]

[分子式] C₃₀H₃₂O₁₃

[分子量] 600.575

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

[性状] 結晶

[融点] Mp 145-150 °C

[比旋光度]: [α]_D -24.9 (c, 0.1 in MeOH)

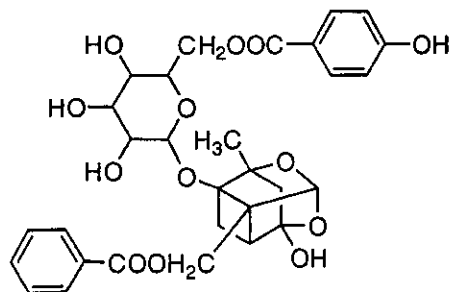
UV: [neutral] λ_{\max} 227 (log ϵ 4.1); 260 (log ϵ 4) (溶媒に関する報告はない)

-----文献-----

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

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

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



§ **Paeoniflorin; 6'-(4-Hydroxybenzoyl)**

[化学名・別名] Mudanpioside C. Oxybenzoylpaeoniflorin

[CAS No.] 172760-03-1

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

[構造式]

[分子式] $C_{30}H_{32}O_{13}$

[分子量] 600.575

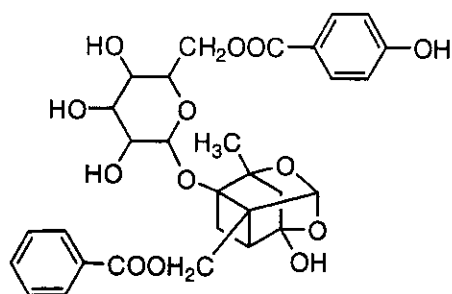
[基原] *Paeonia suffruticosa*, *Paeonia lactifolia*

[性状] 結晶

[融点] Mp 145-150 °C

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

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



-----文献-----

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

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

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

§ **Paeoniflorin; 6'-(4-Methoxybenzoyl)**

[化学名・別名] Mudanpioside A

[CAS No.] 172705-22-5

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

[構造式]

[分子式] $C_{31}H_{34}O_{13}$

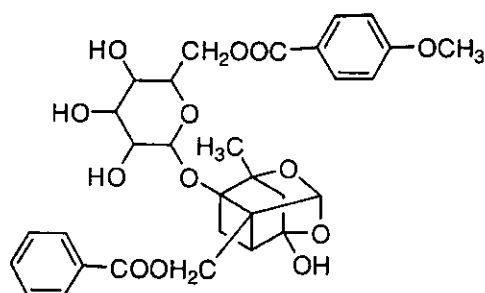
[分子量] 614.602

[基原] *Paeonia suffruticosa*

[性状] 結晶

[融点] Mp 115-121 °C

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



-----文献-----

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

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

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

[化学名・別名] Galloylpaeoniflorin

[CAS No.] 122965-41-7

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

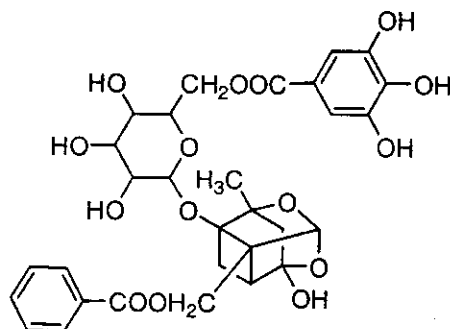
[構造式]

[分子式] $C_{30}H_{32}O_{15}$

[分子量] 632.574

[基原] *Paeonia suffruticosa*

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



-----文献-----

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

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

[化学名・別名] Mudanpioside I

[CAS No.] 231280-72-1

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

[構造式]

[分子式] $C_{27}H_{28}O_{11}$

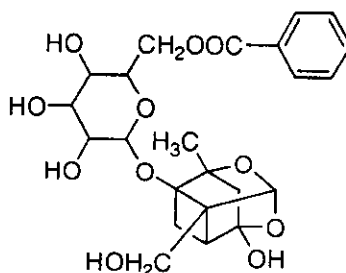
[分子量] 480.468

[基原] *Paeonia suffruticosa*

[性状] 粉末

[融点] Mp 123-125 °C

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



[化学名・別名]Mudanpioside H

[CAS No.]231280-71-0

[化合物分類]テルペノイド (Pinane monoterpenoids)

[構造式]

[分子式]C₃₀H₃₂O₁₄

[分子量]616.574

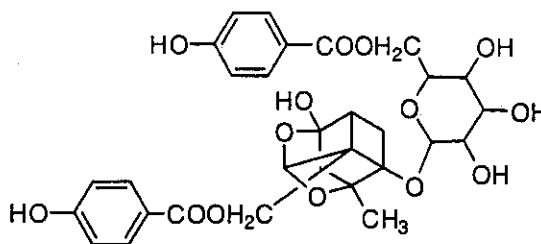
[基原]*Paeonia suffruticosa*

[性状]粉末

[融点]Mp 159-161 °C

[比旋光度]:[α]_D -10.5 (c, 0.23 in MeOH)

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



-----文献-----

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

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

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

[化学名・別名]Mudanpioside B

[CAS No.]172705-23-6

[化合物分類]テルペノイド (Pinane monoterpenoids)

[構造式]

[分子式]C₃₁H₃₄O₁₄

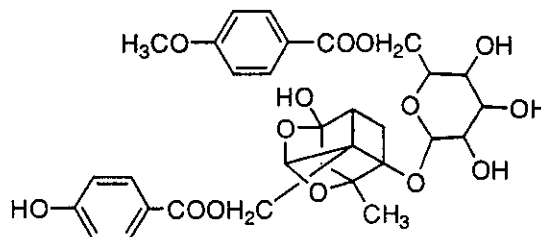
[分子量]630.601

[基原]*Paeonia suffruticosa*

[性状]結晶

[融点]Mp 140-144 °C

[比旋光度]:[α]_D -12.1 (c, 0.06 in MeOH)



-----文献-----

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

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

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

[化学名・別名]Galloyloxypaeoniflorin

[CAS No.]145898-93-7

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

テルペノイド (Pinane monoterpenoids)

[構造式]

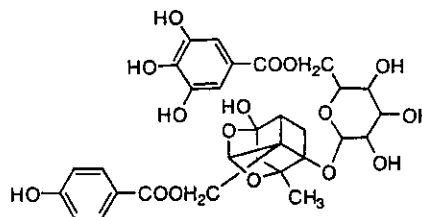
[分子式]C₃₀H₃₂O₁₆

[分子量]648.573

[基原]*Paeonia suffruticosa*

[性状]粉末

[比旋光度]:[α]_D -27.3 (EtOH)



-----文献-----

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

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

§ **Paeoniflorin; 4''-Methoxy**

[化学名・別名]Mudanpioside D

[CAS No.]172705-24-7

[化合物分類]テルペノイド (Pinane monoterpenoids)

[構造式]

[分子式]C₂₉H₃₀O₁₂

[分子量]510.494

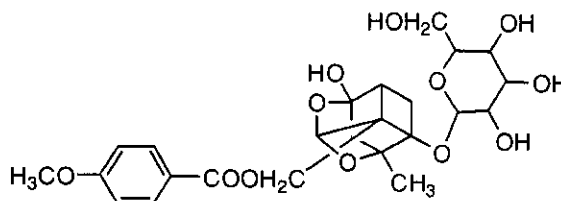
[基原]*Paeonia suffruticosa*

[性状]結晶

[融点]Mp 122-127 °C

[比旋光度]:[α]_D -15.2 (c. 0.1 in MeOH)

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



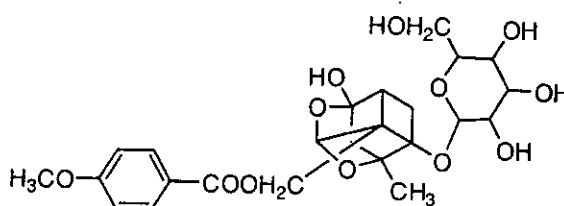
[分子式] $C_{30}H_{32}O_{16}$
[分子量] 648.573
[基原] *Paeonia suffruticosa*
[性状] 粉末
[比旋光度]: $[\alpha]_D -27.3$ (EtOH)

-----文献-----

Aimi, N. et al., *Tetrahedron*, 1969, 25, 1825, (分離)
Nicolaou, K.C. et al., *Classics in Total Synthesis, Targets, Strategies, Methods*, VCH, 1996, 633, (成書, 合成法)

§ Paeoniflorin; 4''-Methoxy

[化学名・別名] Mudanpioside D
[CAS No.] 172705-24-7
[化合物分類] テルペノイド (Pinane monoterpeneoids)
[構造式]
[分子式] $C_{24}H_{30}O_{12}$
[分子量] 510.494
[基原] *Paeonia suffruticosa*
[性状] 結晶
[融点] Mp 122-127 °C
[比旋光度]: $[\alpha]_D -15.2$ (c, 0.1 in MeOH)
[その他のデータ] Conts. 4-methoxybenzoyl residue

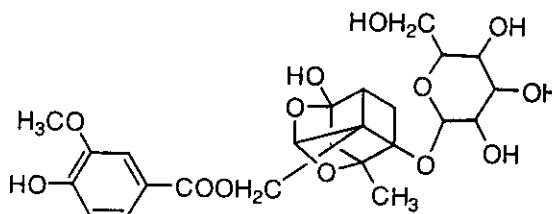


-----文献-----

Nicolaou, K.C. et al., *Classics in Total Synthesis, Targets, Strategies, Methods*, VCH, 1996, 633, (成書, 合成法)
Lin, H.-C. et al., *Phytochemistry*, 1996, 41, 237, (Mudanpiosides)

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

[化学名・別名] Mudanpioside E
[CAS No.] 172705-25-8
[化合物分類] テルペノイド (Pinane monoterpeneoids)
[構造式]
[分子式] $C_{24}H_{30}O_{13}$
[分子量] 526.493
[基原] *Paeonia suffruticosa*
[性状] 結晶
[融点] Mp 134-140 °C
[比旋光度]: $[\alpha]_D -19.8$ (c, 0.1 in MeOH)

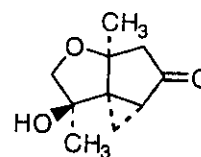


-----文献-----

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

§ Paeoniisothujone

[CAS No.] 158204-37-6
[化合物分類] テルペノイド (Thujane monoterpeneoids)
[構造式]
[分子式] $C_{10}H_{14}O_2$
[分子量] 182.219
[基原] *Paeonia suffruticosa*
[性状] 無定型の粉末
[比旋光度]: $[\alpha]_D -15.1$ (MeOH)



-----文献-----

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

§ Paeonisuffrone

[CAS No.] 149420-73-5
[化合物分類] テルペノイド (Pinane monoterpeneoids)
[構造式]

§ 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] $C_{42}H_{32}O_9$

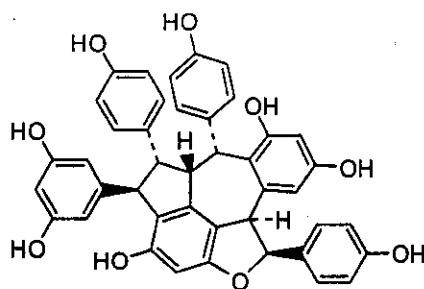
[分子量] 680.709

[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]

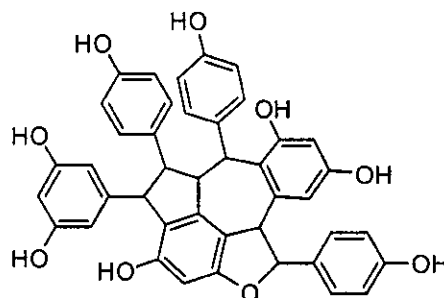
[分子式] $C_{42}H_{32}O_9$

[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

[CAS No.] 220936-94-7

[化合物分類] 単環芳香族 (Stilbene polymers)

[構造式]

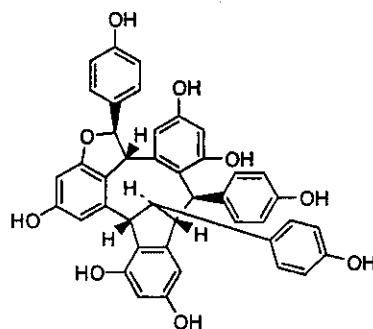
[分子式] $C_{42}H_{32}O_9$

[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

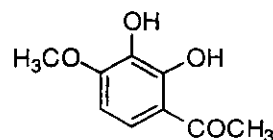
[化合物分類] 単環芳香族 (Simple aryl ketones)

[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



[分子式] $C_{22}H_{32}O_9$

[分子量] 680.709

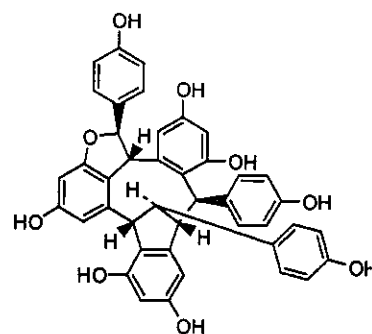
[基原] *Paeonia suffruticosa* の種子

[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] $C_9H_{10}O_3$

[分子量] 182.176

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

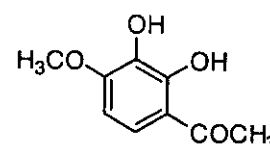
[性状] 青白い黄色のプリズム結晶 (EtOH)

[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] $C_9H_{10}O_3$

[分子量] 182.176

[基原] *Paeonia suffruticosa* の根

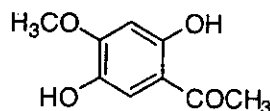
[用途] 血小板凝集阻害

[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-[\beta-D-Apiofuranosyl-(1 → 6)-\beta-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] $C_{18}H_{22}O_{14}$

[分子量] 464.379

[基原] *Paeonia suffruticosa*

[性状] 青白い結晶 (MeOH 溶液)

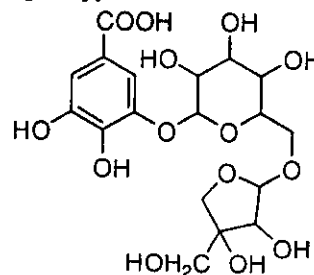
[融点] Mp 305-307 °C で分解

[比旋光度]: $[\alpha]_D -66.2$ (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)



[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] $\text{H}_3\text{CCH}_2\text{COCH}_3$

[分子式] $\text{C}_4\text{H}_8\text{O}$

[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^{20}_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-----

Opdyke, D.L.J., Food Cosmet. Toxicol., 1977, 15, 627, (レビュー, 毒性)

Kirk-Othmer Encycl. Chem. Technol., 3rd edn., Wiley, 1978, 13, 903, (レビュー)

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>> 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.

参考文献

American Industrial Hygiene Association Journal. (AIHA, 475 Wolf Ledges Pkwy., Akron, OH 44311) 23,95,1962

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.

参考文献

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.

参考文献

Food and Cosmetics Toxicology. (London, UK) 5,627,1977

反応の症度 : 中等度.

参考文献

American Industrial Hygiene Association Journal. (AIHA, 475 Wolf Ledges Pkwy., Akron, OH 44311) 23,95,1962

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.

参考文献

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.

参考文献

Food and Cosmetics Toxicology. (London, UK) 5,627,1977

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.

参考文献

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*

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

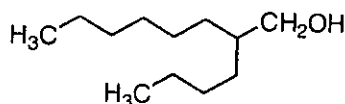
[基原] *Changium smyrnioides*, *Humulus lupulus*, *Lonicera japonica*, *Portulaca oleracea*

[沸点] B_{p12} 131-133 °C

[濃度] $d^{16.5}$ 0.84

[屈折率] n^{16} 1.4435

[販売元] Aldrich:46446-5



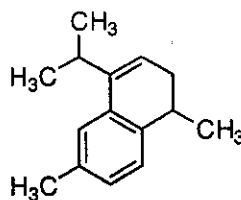
[構造式]

[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-----

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

Adachi, K. et al., Bull. Chem. Soc. Jpn., 1983, 56, 651, (合成法)

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

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

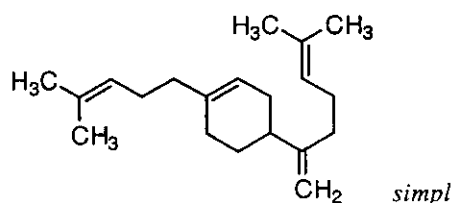
[分子式] $C_{20}H_{32}$

[分子量] 272.473

[基原] 樟脳オイル, *Humulus lupulus* のオイル. また, *Nothopanax ex*, *Dacrydium biforme*, *Cymbopogon citratus*, その他

[性状] オイル

[沸点] $Bp_{0.05}$ 110 $^{\circ}C$



-----文献-----

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

§ 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]

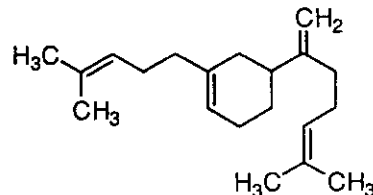
[分子式] $C_{20}H_{32}$

[分子量] 272.473

[基原] *Humulus lupulus* オイル

[性状] オイル

[沸点] $Bp_{4.5}$ 176-178 $^{\circ}C$



-----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)

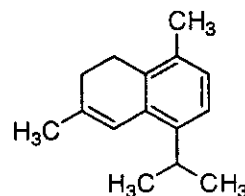
[構造式]

[分子式] $C_{15}H_{20}$

[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

-----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)

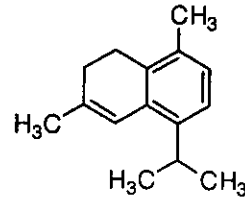
[構造式]

[分子式] $C_{15}H_{20}$

[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

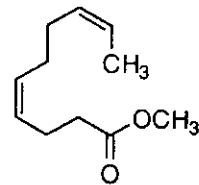
[化合物分類] 脂肪族化合物 (Unbranched alkenic methyl esters)

[構造式]

[分子式] $C_{11}H_{18}O_2$

[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]-2-methyl-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]

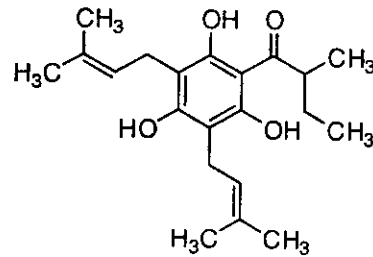
[分子式] $C_{21}H_{30}O_4$

[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

[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

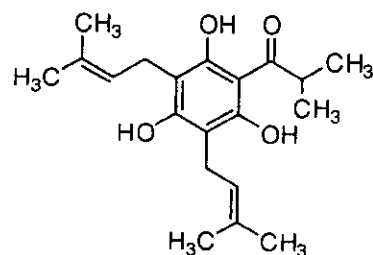
[CAS No.] 5880-42-2

[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]



[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] $C_{21}H_{30}O_4$

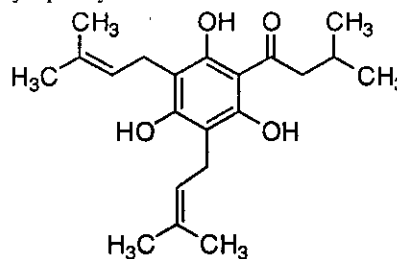
[分子量] 346.466

[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)

Cann, M.R. et al., *Chem. Ind. (London)*, 1982, 779, (H-NMR)

Zuurbier, K.W.M. et al., *Phytochemistry*, 1995, 38, 77, (生合成)

§ 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-----

Armitage, D.A. et al., *J.C.S. (C)*, 1971, 2840-2842, (合成法, H-NMR, ガスクロマト)

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

Snyder, J.P. et al., *Tet. Lett.*, 1978, 197-200, (conformn)

Dauphin, G. et al., *Org. Magn. Reson.*, 1979, 12, 557-560, (C13-NMR)

Whitfield, F.B. et al., *Chem. Ind. (London)*, 1981, 692-693, (分離)

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]

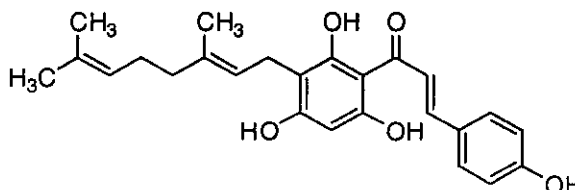
[分子式] $C_{25}H_{32}O_5$

[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]

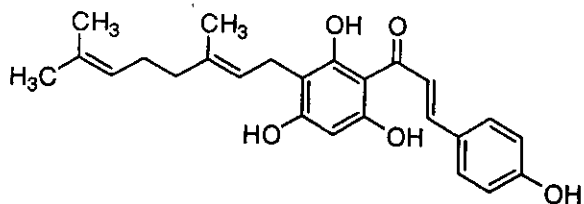
[分子式] $C_{25}H_{38}O_5$

[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] $H_3C(CH_2)_{10}COCH_3$

[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* 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_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)

§ 3,7(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)

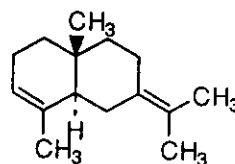
[構造式]

[分子式] $C_{15}H_{24}$

[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] $C_{15}H_{24}$

[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

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{20}$ -14.5 (c. 1 in $CHCl_3$)

----- 文献 -----

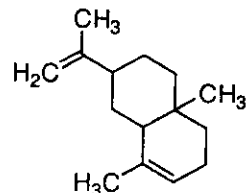
Klein, E. et al., *Tet. Lett.*, 1970, 279, (分離)

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),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] $C_{15}H_{24}$

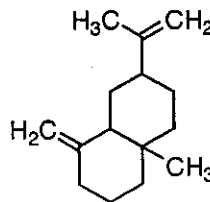
[分子量]204.355

[基原]セロリオイル。また, *Cyperus rotundus*, *Humulus lupulus*

[性状]オイル

[沸点] Bp_6 121-122 $^{\circ}C$

[比旋光度]: $[\alpha]_D +61$



-----文献-----

Itokawa, H. et al., Chem. Pharm. Bull., 1987, 35, 2860, (β -Selinene, H-NMR, 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] $H_3CCH_2CH=CHCH_2CH_2COOH$

[分子式] $C_7H_{12}O_2$

[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

[CAS No.]18787-63-8

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

[構造式] $H_3C(CH_2)_{13}COCH_3$

[分子式] $C_{16}H_{32}O$

[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 $^{\circ}C$

[沸点] Bp_{100} 130-131 $^{\circ}C$

[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 POB 57136, West End Stn., Washington, DC 20037) 19,219,1976

§ 2-Hexanone (CAS 名)