

\*\*\*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)

[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]  $H_3C(CH_2)_3COCH_3$

[分子式]  $C_6H_{12}O$

[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]  $B_p$  127 °C

[濃度]  $d_4$  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 ( $LD_{50}$ ) (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 -----

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

§ 2,6,9-Humulatriene

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

Humulene

[CAS No.] 6753-98-6

[化合物分類] テルペノイド (Humulane sesquiterpenoids), WE4500

[構造式]

[分子式]  $C_{15}H_{24}$

[分子量] 204.355

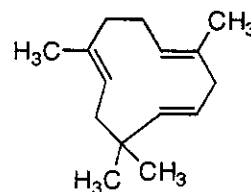
[一般的性質] Farnesane numbering shown

[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]  $B_p$  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

[構造式]

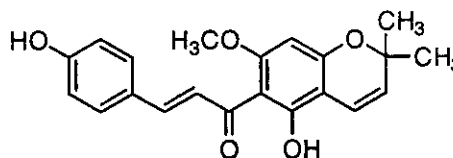
[分子式]  $C_{21}H_{20}O_5$

[分子量] 352.386

[基原] ホップ (*Humulus lupulus*)

[性状] 赤色の針状結晶

UV: [neutral]  $\lambda_{max}$  371 (MeOH)



-----文献-----

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

### § 2-Methyl dodecane

[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] Bp 229 °C. Bp<sub>10.5</sub> 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-Methyl heneicosane (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]  $H_3C(CH_2)_{18}CH(CH_3)_2$

[分子式]  $C_{22}H_{46}$

[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-Methyl heptacosane (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]  $H_3C(CH_2)_{23}CH(CH_3)CH_2CH_3$

[分子式]  $C_{28}H_{58}$

[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-Methyl heptanoic acid (CAS 名)

[化学名・別名] Isooctanoic acid. Isocaproic acid

[CAS No.] 929-10-2

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

[構造式]  $(H_3C)_2CH(CH_2)_4COOH$

[分子式]  $C_8H_{16}O_2$

[分子式]  $C_{28}H_{58}$

[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. Isocaprylic acid

[CAS No.] 929-10-2

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

[構造式]  $(H_3C)_2CH(CH_2)_4COOH$

[分子式]  $C_8H_{16}O_2$

[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)). Bp<sub>14</sub> 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]  $H_3C(CH_2)_{21}CH(CH_3)_2$

[分子式]  $C_{27}H_{56}$

[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)

§ 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

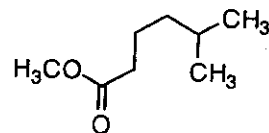
[基原] 次の植物から分離: ホップオイル (*Humulus lupulus*)

[性状] 液体

[沸点] Bp 166-167.5 °C

[濃度]  $d_4^{15}$  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

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

[分子式]  $\text{C}_{23}\text{H}_{46}$

[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]  $(\text{H}_3\text{C})_2\text{CH}(\text{CH}_2)_{11}\text{CH}_3$

[分子式]  $\text{C}_{13}\text{H}_{26}$

[分子量] 212.418

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

[融点] 凝固点: Fp -8.3 °C

[沸点] Bp<sub>15</sub> 78 °C

[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]  $\text{H}_3\text{C}(\text{CH}_2)_{20}\text{CH}(\text{CH}_3)_2$

[分子式]  $\text{C}_{24}\text{H}_{50}$

[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]  $\text{H}_3\text{C}(\text{CH}_2)_{19}\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}_3$

[分子式]  $\text{C}_{24}\text{H}_{50}$

[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<sub>10</sub> 233 °C

[屈折率]  $n^{20}_D$  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)

-----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]  $\text{H}_3\text{C}(\text{CH}_2)_{19}\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}_3$

[分子式]  $\text{C}_{24}\text{H}_{50}$

[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]  $\text{Bp}_{10}$  233 °C

[屈折率]  $n_D^{20}$  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)

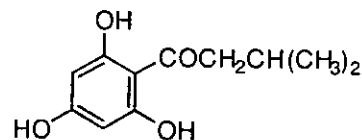
[構造式]

[分子式]  $\text{C}_{11}\text{H}_{14}\text{O}_4$

[分子量] 210.229

[基原] *Humulus lupulus* (ホップ)

[融点]  $\text{Mp}$  95 °C (一水和物).  $\text{Mp}$  145 °C (無水物)



-----文献-----

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

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

[CAS No.] 17004-75-0

[化合物分類] 単環芳香族 (Simple aryl ketones)

[構造式]

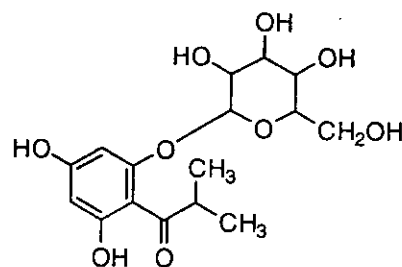
[分子式]  $\text{C}_{16}\text{H}_{22}\text{O}_9$

[分子量] 358.344

[基原] ホップ (*Humulus lupulus*), *Helichrysum* sp.

[融点]  $\text{Mp}$  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

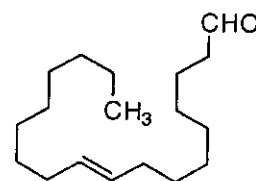
[化合物分類] 脂肪族化合物 (Unbranched alkenic aldehydes and ketones)

[構造式]

[分子式]  $\text{C}_{18}\text{H}_{34}\text{O}$

[分子量] 266.466

[基原] 次の動物の性ホルモンから得られる: 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*



[傷害・毒性]皮膚, 眼, 呼吸域を刺激する. 高濃度の蒸気は麻醉性がある. 発火しやすい, 発火温度:13℃, 自然発火温度:206/210/220℃. 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).

参考文献

Acta Pharmacologica et Toxicologica. (Copenhagen, Denmark) 37,56,1975

\*\*\*その他の多回投与試験\*\*\*

<<試験方法>> 最小毒性量(TDLo).

曝露経路 : 腹腔内投与.  
被験動物 : げっ歯類-ラット.  
投与量・期間 : 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℃

[沸点]Bp 294℃. Bp<sub>0.7</sub> 104-106℃

[販売元]Fluka:7653

-----文献-----

Krafft, F., Ber., 1879, 12, 1668

Baumgarten, P., Ber., 1943, 76, 213

Weichet, J. et al., Chem. Listy, 1957, 51, 127

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

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<sub>0.7</sub> 104-106 °C

[販売元] Fluka:7653

-----文献-----

Krafft, F., Ber., 1879, 12, 1668

Baumgarten, P., Ber., 1943, 76, 213

Weichet, J. et al., Chem. Listy, 1957, 51, 127

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<sub>3</sub>CCH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>

[分子式] C<sub>5</sub>H<sub>12</sub>

[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<sub>4</sub><sup>20</sup> 0.626

[屈折率] n<sub>D</sub><sup>20</sup> 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-----

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)

§ 5-Propyltridecane

[CAS No.] 55045-11-9

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

[構造式] H<sub>3</sub>C(CH<sub>2</sub>)<sub>7</sub>CH(CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>)(CH<sub>2</sub>)<sub>3</sub>CH<sub>3</sub>

[分子式] C<sub>16</sub>H<sub>34</sub>

[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)

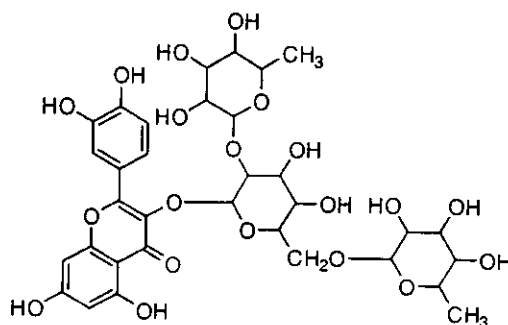
[構造式]

[分子式] C<sub>33</sub>H<sub>40</sub>O<sub>20</sub>

[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 + 1·1/2H<sub>2</sub>O (MeOH/EtOH)

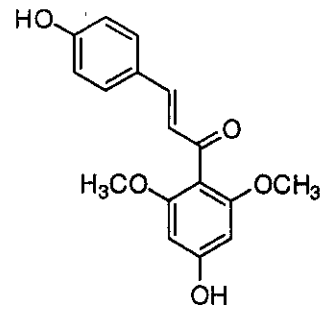


§ 2',4,4',6'-Tetrahydroxychalcone; 2',6'-Di-Me ether

[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] C<sub>17</sub>H<sub>16</sub>O<sub>5</sub>

[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

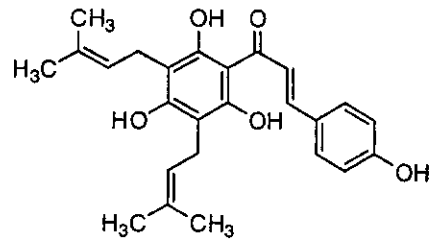
-----文献-----

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] C<sub>25</sub>H<sub>28</sub>O<sub>5</sub>

[分子量] 408.493

[基原] ホップ (*Humulus lupulus*)

UV: [neutral] λ<sub>max</sub> 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)

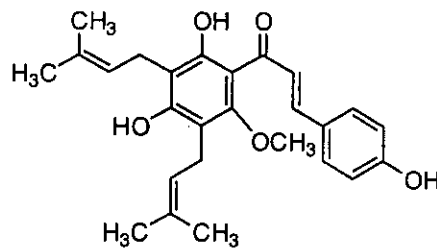
§ 2',4,4',6'-Tetrahydroxy-3',5'-diprenylchalcone; (E)-form, 6'-Me ether

[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] C<sub>26</sub>H<sub>30</sub>O<sub>5</sub>

[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] C<sub>27</sub>H<sub>30</sub>O<sub>15</sub>

[分子量] 594.525

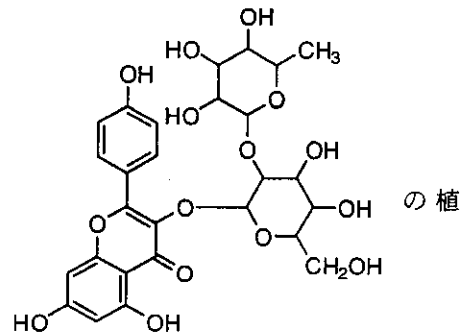
[基原] 次の植物から分離: *Humulus lupulus*, *Paris verticillata*, その他

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]<sub>D</sub><sup>25</sup> -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.



-----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-[ $\alpha$ -L-Rhamnopyranosyl-(1  $\rightarrow$  2)- $\beta$ -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  $\times$  O-置換基)

[構造式]

[分子式] C<sub>27</sub>H<sub>30</sub>O<sub>15</sub>

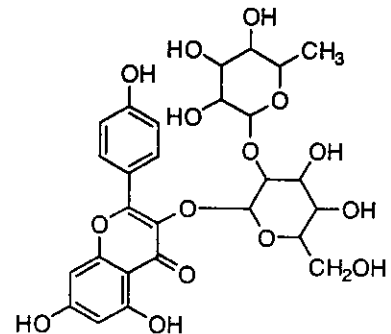
[分子量] 594.525

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

[性状] 青白い黄色の針状結晶

[融点] Mp 197-200 °C

[比旋光度]: [ $\alpha$ ]<sub>D</sub><sup>22</sup> -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  $\times$  O-置換基)

[構造式]

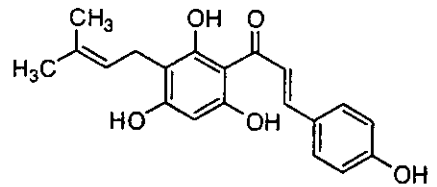
[分子式] C<sub>20</sub>H<sub>20</sub>O<sub>5</sub>

[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-----

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

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

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

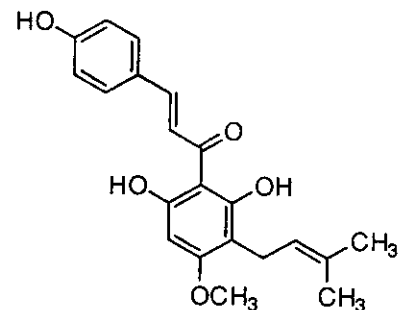
[化合物分類] フラボノイド (Chalcone flavonoids; 4  $\times$  O-置換基)

[構造式]

[分子式] C<sub>21</sub>H<sub>22</sub>O<sub>5</sub>

[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)

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

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

[構造式]

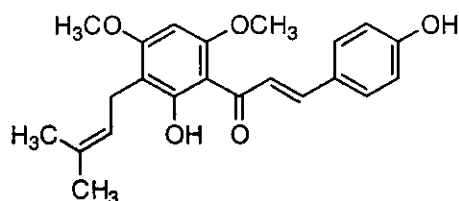
[分子式]  $C_{22}H_{24}O_5$

[分子量] 368.429

[基原] 次の植物から分離: *Humulus lupulus*

[性状] 結晶 (EtOAc/hexane)

[融点] Mp 152-153 °C



-----文献-----

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;  $\Delta^3$ -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)

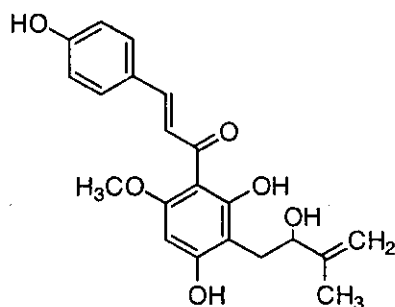
[構造式]

[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]  $\lambda_{max}$  369 (log  $\epsilon$  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;  $\alpha, \beta$ -Dihydro, 6'-Me ether

[化学名・別名] 2',4,4'-Trihydroxy-6'-methoxy-3'-prenyldihydrochalcone.  $\alpha, \beta$ -Dihydroxanthohumol

[CAS No.] 102448-00-0

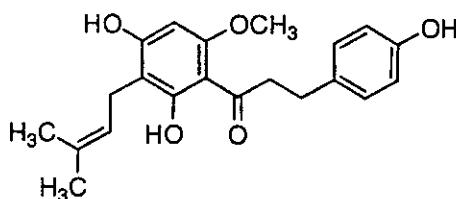
[化合物分類] フラボノイド (Dihydrochalcone flavonoids)

[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]  $C_8H_{18}$

[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

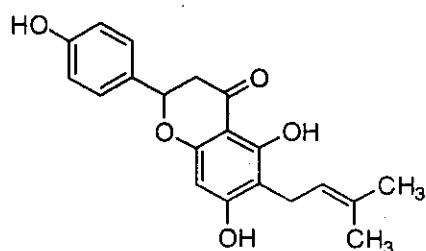
[化合物分類] フラボノイド (Flavanones; 3 × O-置換基)

[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*,



Wyet

§ 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]  $(\text{H}_3\text{C})_2\text{CHCH}(\text{CH}_3)\text{C}(\text{CH}_3)_3$

[分子式]  $\text{C}_9\text{H}_{20}$

[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]

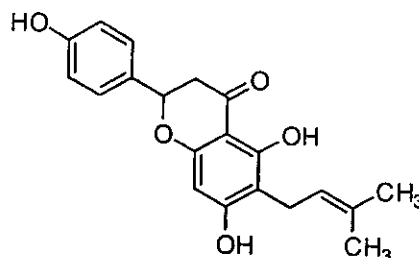
[分子式]  $\text{C}_{20}\text{H}_{20}\text{O}_5$

[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 (Et<sub>2</sub>O/hexane)

[融点] Mp 209-209.5 °C



-----文献-----

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

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]  $\text{C}_{21}\text{H}_{22}\text{O}_5$

[分子量] 354.402

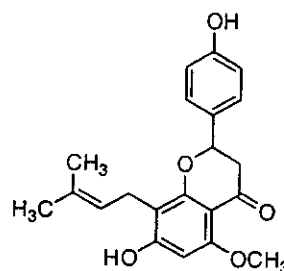
[基原] 次の植物から分離: ホップ (*Humulus lupulus*), *Sophora angustifolia* の根

[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]  $\text{C}_{10}\text{H}_{12}\text{O}$

[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-----

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

### § 1-Undecanol (CAS 名)

[化学名・別名] Alcohol C11. Undecylic alcohol

[CAS No.] 112-42-5

[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] Bp<sub>15</sub> 131 °C. Bp<sub>6</sub> 123-125 °C

[濃度]  $d_{20}^{20}$  0.833

[屈折率]  $n_D^{20}$  1.4392

[傷害・毒性] 皮膚を刺激する. 50 % 致死量 (LD<sub>50</sub>) (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)

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

\*\*\*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.

### § 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)

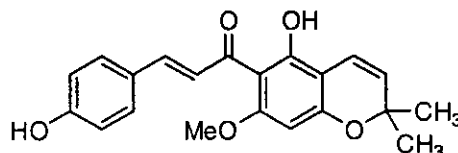
[構造式]

[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]  $\lambda_{\text{max}}$  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]

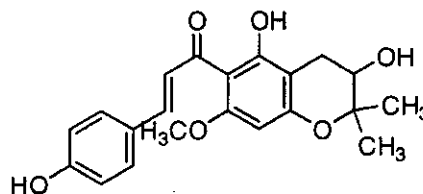
[分子式]  $\text{C}_{21}\text{H}_{22}\text{O}_6$

[分子量] 370.401

[基原] ホップ (*Humulus lupulus*)

[用途] Inhibitor of diacylglycerol acyltransferase

UV: [neutral]  $\lambda_{\text{max}}$  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)

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

### § 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

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]

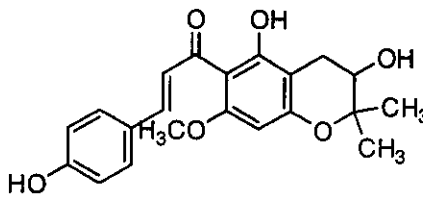
[分子式] C<sub>21</sub>H<sub>22</sub>O<sub>6</sub>

[分子量] 370.401

[基原] ホップ (*Humulus lupulus*)

[用途] Inhibitor of diacylglycerol acyltransferase

UV: [neutral] λ<sub>max</sub> 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)

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

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

[化学名・別名] Isoxanthohumol B. Isodehydrocycloxanthohumol hydrate

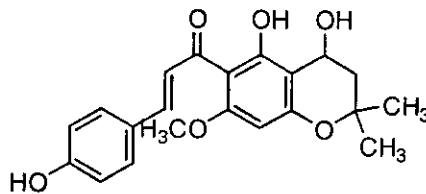
[化合物分類] フラボノイド (Chalcone flavonoids; 4 × O-置換基), フラボノイド (Cyclised C-isopentenylated flavonoids)

[構造式]

[分子式] C<sub>21</sub>H<sub>22</sub>O<sub>6</sub>

[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)

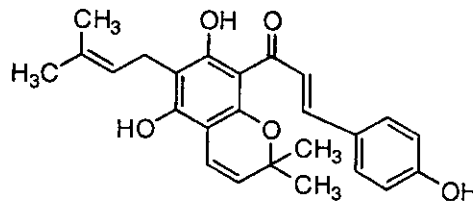
[構造式]

[分子式] C<sub>25</sub>H<sub>26</sub>O<sub>5</sub>

[分子量] 406.477

[基原] *Humulus lupulus* (ホップ)

UV: [neutral] λ<sub>max</sub> 369 (MeOH)



-----文献-----

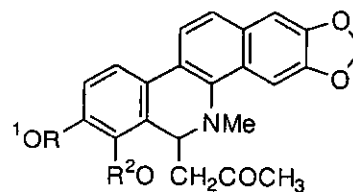
Stevens, J.F. et al., *Phytochemistry*, 2000, 53, 759- [00222038-9] V10

§ § 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



R<sup>1</sup>R<sup>2</sup> = -CH<sub>2</sub>-

§ 8-Acetyldihydrosanguinarine

[化学名・別名] 6-Acetylsanguinarine. 6-Acetyldihydrosanguinarine

[化合物分類] アルカロイド化合物 (Benzo[c]phenanthridine alkaloids)

[構造式]

[構造式]

[分子式]  $C_{18}H_{21}NO_3$

[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

[性状] プリズム結晶 (Et<sub>2</sub>O or C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>), 八面体もしくは菱形のズム結晶 + H<sub>2</sub>O (H<sub>2</sub>O)

[融点] Mp 155 °C

[比旋光度]:  $[\alpha]_D -137.8$  (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

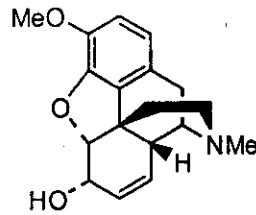
[Log P 計算値] Log P 0.82 (未確認値) (計算値)

[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 (LD<sub>50</sub>) (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%), 用プリ

-----文献-----

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

Muhtadi, F.J. et al., Anal. Profiles Drug Subst., 1981, 10, 93, (レビュー, phosphate)

\*\*\*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 : 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.

参照文献

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)

参照文献

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).

参照文献

Experientia. (Birkhaeuser Verlag, POB 133, CH-4010 Basel, Switzerland) 18,446,1962  
\*\*\*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 : 1774 mg/kg/13 週間継続投与

毒性影響 : [栄養と総代謝] 体重減少または体重増加.

参照文献

Toxicology. (Elsevier Scientific Pub. Ireland, Ltd., POB 85, Limerick, Ireland) 56,123,1989  
\*\*\*生殖に関するデータ\*\*\*

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

\*\*\*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 : 1774 mg/kg/13 週間継続投与  
毒性影響 : [栄養と総代謝] 体重減少または体重増加.

参考文献

Toxicology. (Elsevier Scientific Pub. Ireland, Ltd., POB 85, Limerick, Ireland) 56,123,1989

\*\*\*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-ラット.  
投与 : 350 mg/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

Arzneimittel-Forschung. Drug Research. (Editio Cantor Verlag, Postfach 1255, W-7960 Aulendorf, Fed. Rep. Ger.) 26,551,1976

§ 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]  $C_{18}H_{21}NO_4$

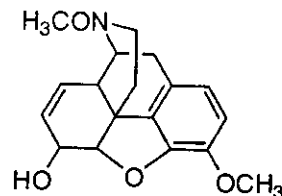
[分子量] 315.368

[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(H<sub>2</sub>O)

[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) \*\*\*

生体影響物質 : 医薬品.

§ Coreximine; (S)-form

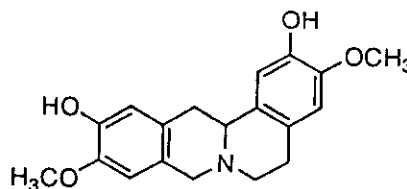
[CAS No.] 483-45-4

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

[構造式]

[分子式]  $C_{18}H_{21}NO_4$

[分子量] 327.379



§ 1-Cyclohexyl-4-tricosanol; (-)-form

[CAS No.] 151454-21-6

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

[構造式]

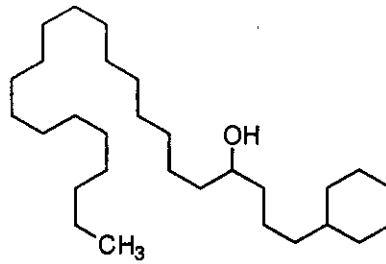
[分子式]  $C_{29}H_{58}O$

[分子量] 422.777

[基原] *Papaver somniferum*

[融点] Mp 110 °C

[比旋光度]:  $[\alpha]_D -3$  (c, 1 in Py)



-----文献-----

Bhakuni, R.S. et al., J. Indian Chem. Soc., 1992, 69, 889, (分離)

§ 3,4-Dihydroxy-1,2-benzenedicarboxylic acid; Di-Me ether

[化学名・別名] 3,4-Dimethoxy-1,2-benzenedicarboxylic acid. 3,4-Dimethoxyphthalic acid. Hemipinic acid. Hemipic acid

[CAS No.] 518-90-1

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

[構造式]

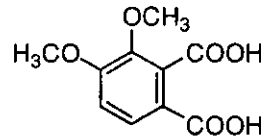
[分子式]  $C_{10}H_{10}O_6$

[分子量] 226.185

[基原] 多くのアルカロイドの酸化物. 次の植物から分離: poppy straw (*Papaver somniferum*)

[性状] 結晶・二水和物

[融点] Mp 124-126 °C. Mp 165-166 °C. Mp 181 °C



-----文献-----

Schmid, H. et al., Helv. Chim. Acta, 1945, 28, 722, (分離, 誘導体)

§ 4,5-Dihydroxy-1,2-benzenedicarboxylic acid; Di-Me ether

[化学名・別名] 4,5-Dimethoxy-1,2-benzenedicarboxylic acid. 4,5-Dimethoxyphthalic acid. Veratrole-4,5-dicarboxylic acid. Metahemipinic acid. *m*-Hemipinic acid

[CAS No.] 577-68-4

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

[構造式]

[分子式]  $C_{10}H_{10}O_6$

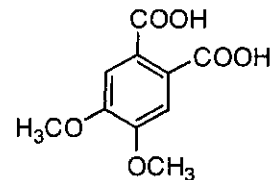
[分子量] 226.185

[基原] 多くのアルカロイドの劣化物. 次の植物から分離: poppy straw (*Papaver*

*iferum*)

[性状] 針状結晶 (H<sub>2</sub>O)

[融点] Mp 174-175 °C



*somn*

-----文献-----

Takana, K. et al., J.C.S. (C), 1969, 1920, (誘導体, 合成法, IR)

Hu, M. et al., J. Med. Chem., 1998, 41, 1789-1802, (dibenzyl ether dinitrile, 合成法, IR, H-NMR, Mass)

§ 6,7-Dihydroxy-1(3H)-isobenzofuranone; Di-Me ether

[化学名・別名] 6,7-Dimethoxy-1(3H)-isobenzofuranone. 6,7-Dimethoxyphthalide. Meconine. Opianyl

[CAS No.] 569-31-3

[化合物分類] ベンゾフラノイド (Isobenzofurans)

[構造式]

[分子式]  $C_{10}H_{10}O_4$

[分子量] 194.187

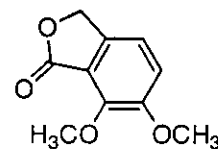
[基原] 次の植物から分離: *Hydrastis canadensis*, poppy straw (*Papaver somniferum*)

[性状] 針状結晶 (H<sub>2</sub>O)

[融点] Mp 102.5 °C

[その他のデータ] Sublimes

[販売元] Rare Chemicals Library: S42551-6



-----文献-----

Wegscheider, R., Monatsh. Chem., 1889, 3, 351, (分離, 構造決定)

Schmid, H. et al., Helv. Chim. Acta, 1945, 28, 722, (分離, 誘導体)



Veratrole-4,5-dicarboxylic acid. Metahemipic acid. *m*-Hemipinic acid

[CAS No.]577-68-4

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

[構造式]

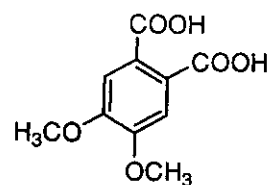
[分子式]C<sub>10</sub>H<sub>10</sub>O<sub>6</sub>

[分子量]226.185

[基原]多くのアルカロイドの劣化物。次の植物から分離: poppy straw (*Papaver somniferum*)

[性状]針状結晶 (H<sub>2</sub>O)

[融点]Mp 174-175 °C



----- 文献 -----

Takena, K. et al., J.C.S. (C), 1969, 1920, (誘導体, 合成法, IR)

Hu, M. et al., J. Med. Chem., 1998, 41, 1789-1802, (dibenzyl ether dinitrile, 合成法, IR, H-NMR, Mass)

§ 6,7-Dihydroxy-1 (3*H*)-isobenzofuranone; Di-Me ether

[化学名・別名]6,7-Dimethoxy-1 (3 H)-isobenzofuranone. 6,7-Dimethoxyphthalide. Meconine. Opianyl

[CAS No.]569-31-3

[化合物分類]ベンゾフラノイド (Isobenzofurans)

[構造式]

[分子式]C<sub>10</sub>H<sub>10</sub>O<sub>4</sub>

[分子量]194.187

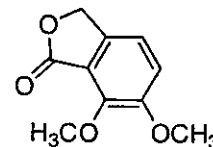
[基原]次の植物から分離: *Hydrastis canadensis*, poppy straw (*Papaver somniferum*)

[性状]針状結晶 (H<sub>2</sub>O)

[融点]Mp 102.5 °C

[その他のデータ]Sublimes

[販売元]Rare Chemicals Library:S42551-6



----- 文献 -----

Wegscheider, R., Monatsh. Chem., 1889, 3, 351, (分離, 構造決定)

Schmid, H. et al., Helv. Chim. Acta, 1945, 28, 722, (分離, 誘導体)

§ 2-(2-Furanyl)-3-methyl-2-butenal

[化学名・別名]α-(1-Methylethylidene)-2-furanacetaldehyde (CAS名). α-Isopropylidene-2-furanacetaldehyde

[CAS No.]31681-28-4

[化合物分類]含酸素複素環式化合物 (Furans), 脂肪族化合物 (Branched alkenic aldehydes and ketones)

[構造式]

[分子式]C<sub>9</sub>H<sub>10</sub>O<sub>2</sub>

[分子量]150.177

[基原]*Papaver somniferum* のオイル

[性状]黄色の液体

[沸点]Bp<sub>s</sub> 89 °C



----- 文献 -----

Dana, G. et al., Bull. Soc. Chim. Fr., 1970, 3994, (合成法)

Li, C. et al., CA, 1993, 118, 165179, (分離)

§ Glaudine

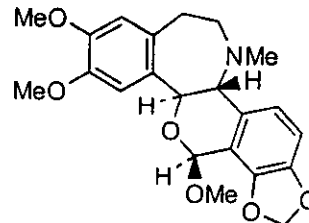
[化学名・別名](6 α,8 β)-2,3,8-Trimethoxy-16-methyl-10,11-[methylenebis(oxy)]rheadan (CAS名). *O*, *N*-Dimethylporphyroxine. *O*, *N*-Dimethylpapaverrubine D.

*N*-Methylpapaverrubine B

[CAS No.]5140-40-9

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

[構造式]



[分子式]C<sub>23</sub>H<sub>25</sub>NO<sub>6</sub>

[分子量]399.443

[基原]次の植物から得られるアルカロイド: *Papaver armeniacum*, *Papaver fugax*, *Papaver glaucum*,

\*\*\*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 : 皮下投与.  
被験動物 : げっ歯類-マウス.  
投与量・期間 : 160 mg/kg  
毒性影響 : [行動] 振戦.  
[肺,胸郭,または呼吸] 呼吸困難.

参考文献

RAT Pharmazie. (VEB Verlag Volk und Gesundheit, Neue Gruenstr. 18, Berlin DDR-1020, Ger. Dem. Rep.) 15,111,1960

<<試験方法>> 認知されている最低致死量に関する試験

曝露経路 : 静脈内投与.  
被験動物 : げっ歯類-ウサギ.  
投与量・期間 : 100 mg/kg  
毒性影響 : [行動] 振戦.  
[肺,胸郭,または呼吸] 呼吸困難.

参考文献

PHARAT Pharmazie. (VEB Verlag Volk und Gesundheit, Neue Gruenstr. 18, Berlin DDR-1020, Ger. Dem. Rep.) V.1- 1946- [Vol.,頁,年(19-)] 15,111,1960

§ 4-Hydroxybenzaldehyde

[化学名・別名] *p*-Formylphenol

[CAS No.] 123-08-0

[関連 CAS No.] 60221-52-5

[その他の CAS No.] 28777-87-9

[化合物分類] 単環芳香族 (Simple benzaldehydes)

[構造式]

[分子式] C<sub>7</sub>H<sub>6</sub>O<sub>2</sub>

[分子量] 122.123

[基原] Occurs naturally combined in many glycosides. フリーの状態で *Papaver somniferum* から分離. 微生物によって生産される. Present in sulfite liquor. Constit. of wing gland and abdominal hairpencils of the male African sugarcane borer *Eldana saccharina*

[用途] Reagent for the colorimetric detn. of shikimic acid

[性状] 針状結晶 (H<sub>2</sub>O)

[融点] Mp 115-116 °C

[PKa 値] pK<sub>a</sub> 7.62 (25 °C, H<sub>2</sub>O)

UV: [neutral] λ<sub>max</sub> 221 (ε 12000); 284 (ε 14800); 291 (MeOH) (Berdy) [neutral] λ<sub>max</sub> 220 (ε 14800); 280 (ε 18700); 330 (ε 6600) (EtOH) (Berdy)

[化学物質毒性データ総覧 (RTECS) 登録番号] CU6475000

[販売元] Aldrich:W50750-4; Fluka:54590; Rare Chemicals Library:S10273-3; Sigma:H5630

-----文献-----

Kirk-Othmer Encycl. Chem. Technol., 3rd edn., Wiley, 1978, 13, 70, (レビュー)

Sammes, P.G. et al., J.C.S. Perkin 1, 1988, 3229, (Ph ether)

Ayer, W.A. et al., J. Nat. Prod., 1993, 56, 85, (4-Prenyloxybenzaldehyde)

\*\*\*RTECS (化学物質毒性データ)\*\*\*

生体影響物質 : 変異原性物質.

\*\*\*健康障害に関するデータ\*\*\*

\*\*\*急性毒性に関するデータ\*\*\*

<<試験方法>> LD50 試験 (50%致死量試験).

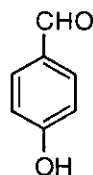
曝露経路 : 経口投与.  
被験動物 : げっ歯類-ラット.  
投与量・期間 : 2250 mg/kg  
毒性影響 : 致死量以外に毒性影響に関する報告はない.

参考文献

National Technical Information Service. (Springfield, VA 22161) OTS0534446

\*\*\*変異原性に関するデータ\*\*\*

<<試験方法>> 姉妹染色分体交換.



[分子式] C<sub>7</sub>H<sub>6</sub>O<sub>7</sub>

[分子量] 122.123

[基原] Occurs naturally combined in many glycosides. フリーの状態で *Papaver somniferum* から分離. 微生物によって生産される. Present in sulfite liquor. Constit. of wing gland and abdominal hairpencils of the male African sugarcane borer *Eldana saccharina*

[用途] Reagent for the colorimetric detn. of shikimic acid

[性状] 針状結晶 (H<sub>2</sub>O)

[融点] Mp 115-116 °C

[PKa 値] pK<sub>a</sub> 7.62 (25 °C, H<sub>2</sub>O)

UV: [neutral] λ<sub>max</sub> 221 (ε 12000); 284 (ε 14800); 291 (MeOH) (Berdy) [neutral] λ<sub>max</sub> 220 (ε 14800); 280 (ε 18700); 330 (ε 6600) (EtOH) (Berdy)

[化学物質毒性データ総覧 (RTECS) 登録番号] CU6475000

[販売元] Aldrich: W50750-4; Fluka: 54590; Rare Chemicals Library: S10273-3; Sigma: H5630

----- 文 献 -----

Kirk-Othmer Encycl. Chem. Technol., 3rd edn., Wiley, 1978, 13, 70, (レビュー)

Sammes, P.G. et al., J.C.S. Perkin 1, 1988, 3229, (Ph ether)

Ayer, W.A. et al., J. Nat. Prod., 1993, 56, 85, (4-Prenyloxybenzaldehyde)

\*\*\*RTECS (化学物質毒性データ)\*\*\*

生体影響物質 : 変異原性物質.

\*\*\*健康障害に関するデータ\*\*\*

\*\*\*急性毒性に関するデータ\*\*\*

<<試験方法>> LD50 試験 (50%致死量試験).

曝露経路 : 経口投与.

被験動物 : げっ歯類-ラット.

投与量・期間 : 2250 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

National Technical Information Service. (Springfield, VA 22161) OTS0534446

\*\*\*変異原性に関するデータ\*\*\*

<<試験方法>> 姉妹染色分体交換.

試験系 : ヒトリンパ球

投与量・期間 : 1 mmol/L

参考文献

Mutation Research. (Elsevier Science Pub. B.V., POB 211, 1000 AE Amsterdam, Netherlands) 206,17,1988

### § 3-Hydroxy-4-oxo-4H-pyran-2,6-dicarboxylic acid (CAS 名)

[化学名・別名] 3-Hydroxy-4-pyrone-2,6-dicarboxylic acid. Meconic acid. Opium acid. Poppy acid

[CAS No.] 497-59-6

[化合物分類] 含酸素複素環式化合物 (4-Pyrones)

[構造式]

[分子式] C<sub>7</sub>H<sub>4</sub>O<sub>7</sub>

[分子量] 200.104

[基原] Occurs in opium (*Papaver somniferum*), その他の *Papaver* spp.

[用途] Used as a 0.5% aq. soln. for titrimetric detn. of Fe (III)

[性状] 結晶・三水和物 (H<sub>2</sub>O), 100 °C で三水和物を失う

[融点] Mp 270 °C で分解

[沸点] 210-215 °C で昇華

[溶解性] エタノール, ベンゼンに可溶

[PKa 値] pK<sub>a1</sub> 1.83; pK<sub>a2</sub> 2.11; pK<sub>a3</sub> 11.3 (30% EtOH μ<sub>0</sub> = 0.1)

----- 文 献 -----

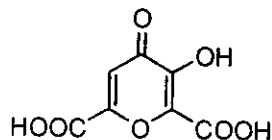
Garkusha, G.A. et al., Zh. Obshch. Khim., 1963, 33, 3579; CA, 60, 11969, (合成法)

Lovell, S. et al., J.A.C.S., 1999, 121, 7020-7025, (合成法, 結晶構造)

### § Laudanidine; (R)-form

[CAS No.] 301-21-3

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



§ **Laudanosine; (S)-form**

[CAS No.] 2688-77-9

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

[構造式]

[分子式]  $C_{21}H_{27}NO_4$

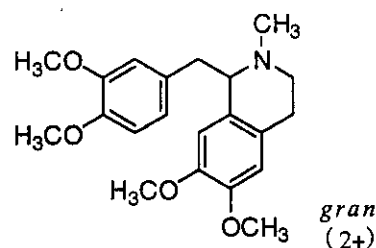
[分子量] 357.449

[基原] 次の植物から得られるアルカロイド: *Papaver somniferum*, *Argemone diflora* (ケシ科). Major metabolite of the neuromuscular blocker Atracurium

[用途] Convulsive agent acting on the extrapyramidal system and mesencephalon

[融点] Mp 89 °C

[比旋光度]:  $[\alpha]_D^{25} +103$  (EtOH).  $[\alpha]_D +52$  (CHCl<sub>3</sub>)



-----文献-----

Martindale, The Extra Pharmacopoeia, 30th edn., Pharmaceutical Press, 1993, 1200

Kitamura, M. et al., J.O.C., 1994, 59, 297-310, (合成法)

Comins, D.L. et al., Tetrahedron, 1997, 48, 16327-16340, (合成法)

§ **N-Methyl-14-O-demethylepiporphyroxine**

[化学名・別名] Alkaloid A4

[CAS No.] 18361-67-6

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

[構造式]

[分子式]  $C_{20}H_{21}NO_6$

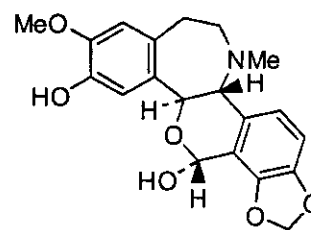
[分子量] 371.389

[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] プリズム結晶 (MeOH)

[融点] Mp 217-218 °C

[比旋光度]:  $[\alpha]_D^{20} +340$  (c, 0.2 in MeOH)



-----文献-----

Brochmann-Hanssen, E. et al., J. Pharm. Sci., 1968, 57, 30, (分離, UV, IR, H-NMR, Mass, 構造決定)

§ **4-Methylnonacosane**

[CAS No.] 125208-64-2

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

[構造式]  $H_3C(CH_2)_9CH(CH_3)CH_2CH_2CH_3$

[分子式]  $C_{30}H_{62}$

[分子量] 422.82

[基原] *Papaver somniferum*

[融点] Mp 56 °C

-----文献-----

Bhakuni, R.S. et al., J. Indian Chem. Soc., 1992, 69, 889, (分離)

§ **Morphine; (-)-form**

[化合物分類] アルカロイド化合物 (Morphine alkaloids), 薬物: 向精神薬 (Psychotropic agents), 薬物: 鎮痛薬-オピオイド (Analgesics-opioid), 薬物: 局所麻酔 (Anaesthetics, local), 薬物: オピオイド受容体作用薬 (Opioid receptor agonists)

[構造式]

[分子式]  $C_{17}H_{19}NO_5$

[分子量] 285.342

[基原] opium (*Papaver somniferum*) (ケシ科) の主なアルカロイド。また次のもの微量得られる: その他の植物 (例えばレタス), ほ乳類の組織, apparently as a result of genuine biosynth.

[用途] 強力なオピオイド鎮痛作用。Psychotomimetic agent, 鎮咳薬, 鎮吐作用。A drug of abuse. Acts as a stimulant to horses, has been used in horse doping

[性状] プリズム結晶・一水和物 (EtOH 溶液), 無水のプリズム結晶 (anisole)

[融点] Mp 254-256.4 °C で分解 (無水物)

[比旋光度]:  $[\alpha]_D^{25} -130.9$  (MeOH)

