

[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] $\text{H}_3\text{C}(\text{CH}_2)_{21}\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$
[分子式] $\text{C}_{30}\text{H}_{62}$
[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] $\text{C}_{17}\text{H}_{19}\text{NO}_5$

[分子量] 285.342

[基原] opium (*Papaver somniferum*) (ケシ科) の主なアルカロイド。また次のものから微量得られる: 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)

[溶解性] EtOAc, アセトンに易溶; エタノールに可溶; 水, エーテル, クロロホルムに難溶

[PKa 値] pKa 8.2; pKa 9.9 (25 °C)

[傷害・毒性] 治療に用いるとき胃腸に影響がある。ヒトに関する研究報告がある。Abuse leads to habituation or addiction. 大量投与で昏睡状態を誘導する呼吸抑制を引き起こす。死を引き起こす。50 % 致死量 (LD₅₀) (ラット, 経口) 335 mg/kg

[化学物質毒性データ総覧 (RTECS) 登録番号] QC7875000

-----文献-----

Bentley, K.W., Chemistry of the Morphine Alkaloids, Oxford Univ. Press, 1954, (分離, 成書, UV)

Fennessy, M.R. et al., Eur. J. Pharmacol., 1969, 8, 261, (薬理)

Bentley, K.W., The Alkaloids, (Manske, R.H.F., Ed.), 1971, 13, 1-163, (レビュー, 成書)

Thenot, J.P.G. et al., Methods Biochem. Anal., 1977, 24, 1-38, (レビュー, ガスクロマト)

Factors Affecting Action Narc. [Proc. Meet.], Raven Press, N.Y., 1978, 103; 233; 565; 595, (レビュー, 薬理)

Goldstein, A. et al., Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A., 1985, 82, 5203-5207, (分離)

Muhtadi, F.J., Anal. Profiles Drug Subst., 1988, 17, 259, (レビュー)

RTECS (化学物質毒性データ)

生体影響物質 : 医薬品, 変異原性物質, 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

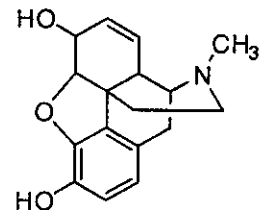
<<試験方法>> 最小毒性量 (TDLo).

曝露経路 : 経口投与,

被験動物 : ヒト-男性

投与量・期間: 3857 ug/kg/1 週間間欠投与

毒性影響 : [行動] 幻覚, 知覚の歪み.



毒性影響 : [生殖] [新生児への影響] 薬物依存.

参考文献

Pediatrics. (American Academy of Pediatrics, P.O. Box 1034, Evanston, IL 60204) 24,288,1959

変異原性に関するデータ

<<試験方法>> DNA 損傷

試験系 : ヒトリンパ球

投与量・期間 : 5 nmol/L

参考文献

Environmental and Molecular Mutagenesis. (Alan R. Liss, Inc., 41 E. 11th St., New York, NY 10003) 23,37,1994

§ Morphine; (-)-form, N-Oxide

[化学名・別名] Morphine N-oxide. Genomorphine

[CAS No.] 639-46-3

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

[構造式]

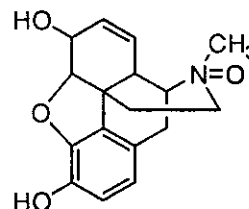
[分子式] $C_{17}H_{19}NO_4$

[分子量] 301.341

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

[代謝] Morphine の代謝物

[融点] Mp 272-273 °C



-----文献-----

Bentley, K.W., Chemistry of the Morphine Alkaloids, Oxford Univ. Press, 1954, (分離, 成書, UV)

Fennessy, M.R. et al., Eur. J. Pharmacol., 1969, 8, 261, (薬理)

Bentley, K.W., The Alkaloids, (Manske, R.H.F., Ed.), 1971, 13, 1-163, (レビュー, 成書)

Thenot, J.P.G. et al., Methods Biochem. Anal., 1977, 24, 1-38, (レビュー, ガスクロマト)

Factors Affecting Action Narc. [Proc. Meet.], Raven Press, N.Y., 1978, 103; 233; 565; 595, (レビュー, 薬理)

Muhtadi, F.J., Anal. Profiles Drug Subst., 1988, 17, 259, (レビュー)

§ Narceine

[化学名・別名] 6-[[6-[2-(Dimethylamino) ethyl]-4-methoxy-1,3-benzodioxol-5-yl] acetyl]-2,3-dimethoxybenzoic acid (CAS 名)

[CAS No.] 131-28-2

[化合物分類] PA1800, アルカロイド化合物 (Narceine alkaloids), 薬物: 抗高血圧薬 (Antihypertensive agents), 薬物: 呼吸興奮薬 (Respiratory stimulants), 薬物: 鎮咳薬 (Antitussives)

[構造式]

[分子式] $C_{23}H_{27}NO_8$

[分子量] 445.468

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

[用途] 呼吸興奮薬, 鎮咳薬, 鎮痛活性を示さない. 抗高血圧薬, 腸内平滑筋刺激剤. Reagent for I₂

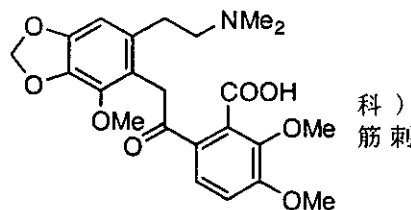
[性状] 結晶 (MeOH/Et₂O or H₂O)

[融点] Mp 176-178 °C (trihydrate). Mp 145 °C (無水物)

[PKa 値] pK_{a1} 3.5; pK_{a2} 9.3 (15 °C)

[Log P 計算値] Log P -1.79 (未確認値) (計算値)

[化学物質毒性データ総覧 (RTECS) 登録番号] YX5210000



-----文献-----

Rabe, P. et al., Annalen, 1910, 377, 223, (構造決定, 成書)

Addinall, C.R. et al., J.A.C.S., 1933, 55, 1202; 2153, (分離, 合成法)

Baggio, R. et al., Acta Cryst. C, 1996, 52, 703, (結晶構造)

***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>> 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 : 2 gm/kg

毒性影響 : [行動] 痙攣または発作閾値への影響.

Fennessy, M.R. et al., Eur. J. Pharmacol., 1969, 8, 261, (薬理)
 Bentley, K.W., The Alkaloids, (Manske, R.H.F., Ed.), 1971, 13, 1-163, (レビュー, 成書)
 Thenot, J.P.G. et al., Methods Biochem. Anal., 1977, 24, 1-38, (レビュー, ガスクロマト)
 Factors Affecting Action Narc. [Proc. Meet.], Raven Press, N.Y., 1978, 103; 233; 565; 595, (レビュー, 薬理)
 Muhtadi, F.J., Anal. Profiles Drug Subst., 1988, 17, 259, (レビュー)

§ Narceine

[化学名・別名] 6-[[6-[2-(Dimethylamino) ethyl] -4-methoxy-1,3-benzodioxol-5-yl] acetyl] -2,3-dimethoxybenzoic acid (CAS名)

[CAS No.] 131-28-2

[化合物分類] PA1800, アルカロイド化合物 (Narceine alkaloids), 薬物: 抗高血圧薬 (Antihypertensive agents), 薬物: 呼吸興奮薬 (Respiratory stimulants), 薬物: 鎮咳薬 (Antitussives)

[構造式]

[分子式] $C_{23}H_{27}NO_8$

[分子量] 445.468

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

[用途] 呼吸興奮薬, 鎮咳薬. 鎮痛活性を示さない. 抗高血圧薬. 腸内平滑筋刺激剤. Reagent for I_2

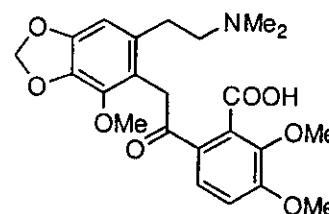
[性状] 結晶 (MeOH/Et₂O or H₂O)

[融点] Mp 176-178 °C (trihydrate). Mp 145 °C (無水物)

[PKa 値] pK_a 3.5; pK_a 9.3 (15 °C)

[Log P 計算値] Log P -1.79 (未確認値) (計算値)

[化学物質毒性データ総覧 (RTECS) 登録番号] YX5210000



文献

Rabe, P. et al., Annalen, 1910, 377, 223, (構造決定, 成書)

Addinall, C.R. et al., J.A.C.S., 1933, 55, 1202; 2153, (分離, 合成法)

Baggio, R. et al., Acta Cryst. C, 1996, 52, 703, (結晶構造)

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>> 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 : 2 gm/kg

毒性影響 : [行動] 痙攣または発作閾値への影響.

[行動] 筋脱力.

[行動] 筋収縮または痙直.

参照文献

Naunyn-Schmiedeberg's Archiv fuer Experimentelle Pathologie und Pharmakologie. (Berlin, Ger.) 233,550,1958

§ Narceine; N-De-Me

[化学名・別名] Nornarceine

[CAS No.] 483-89-6

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

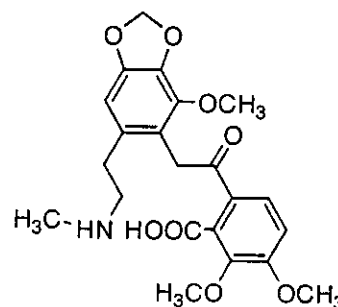
[構造式]

[分子式] $C_{22}H_{25}NO_8$

[分子量] 431.441

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

[融点] Mp 229 °C (223-225 °C)



文献

Rabe, P. et al., Annalen, 1910, 377, 223, (構造決定, 成書)

Addinall, C.R. et al., J.A.C.S., 1933, 55, 1202; 2153, (分離, 合成法)

Baggio, R. et al., Acta Cryst. C, 1996, 52, 703, (結晶構造)

§ Narcotine; (1R,9S)-form

[化学名・別名] (-)- α -Narcotine. Longatin

[CAS No.] 128-62-1

[化合物分類] アルカロイド化合物 (Phthalideisoquinoline alkaloids), 薬物: 筋肉弛緩剤 (Muscle relaxants-skeletal), 薬物: 鎮咳薬 (Antitussives), PS8120

[構造式]

[分子式] $C_{22}H_{23}NO_7$

[分子量] 413.426

[基原] 次の植物から得られるアルカロイド: *Corydalis cava* (*Corydalis osa*), *Papaver fugax*, *Papaver paeoniflorum*, *Papaver persicum*, *Papaver iferum*. Byprod. in extraction of morphine from opium. One of the first alkaloids isol. (ケマンソウ科, ケシ科)

[用途] 鎮咳薬, of similar potency to and poss. with some advantages over codeine. Mod. effective smooth muscle relaxant. Reference material used in elemental microanalysis

[性状] 頑丈な針状結晶 (EtOH)

[融点] Mp 176 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{20} -200$ (CHCl₃)

[Log P 計算値] Log P 2.74 (未確認値) (計算値)

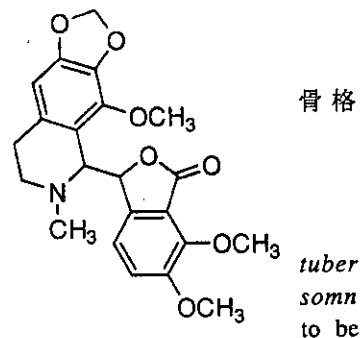
UV: [neutral] λ_{max} 209 (ϵ 72500); 291 (ϵ 4000); 309 (ϵ 4900) (EtOH) (Berdy)

[その他のデータ] Polymorphic. This is prob. the only nat. occurring stereoisomer but it readily epimerises to (-) β -Narcotine which may be isol. as an artifact. Opt. rotn. highly solv. and concn. dependent

[傷害・毒性] 50%致死量 (LD₅₀) (ラット, 経口) 1520 mg/kg. 変異原性作用を有する; BERDY HAZD : 50%致死量 (LD₅₀) (マウス, 静脈内) 83 mg/kg

[化学物質毒性データ総覧 (RTECS) 登録番号] RD2625000

[販売元] Aldrich:36396-0



-----文献-----

Robiquet, M., Ann. Chim. (Paris), 1817, 5, 275, (分離)

Ohta, M. et al., Chem. Pharm. Bull., 1964, 12, 1080, (分離)

Al-Yahya, M.A. et al., Anal. Profiles Drug Subst., 1982, 11, 407, (レビュー, 合成法, 性質, 分析)

RTECS (化学物質毒性データ)

生体影響物質 : 医薬品, 変異原性物質, 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>> 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 : ほ乳類-イヌ.

投与量・期間 : 73200 ug/kg

毒性影響 : [知覚組織と特異感覚] (視覚) 散瞳 (瞳孔の拡大).

[行動] 痙攣または発作閾値への影響.

参照文献

Oyo Yakuri. Pharmacometrics. (Oyo Yakuri Kenkyukai, CPO Box 180, Sendai 980-91, Japan) 2,323,1968

変異原性に関するデータ

<<試験方法>> 細胞遺伝学的分析.

試験系 : げっ歯類-ハムスター肺.

投与量・期間 : 100 mg/L

参照文献

Archives of Toxicology, Supplement. (Springer-Verlag New York, Inc., Service Center, 44 Hartz Way, Secaucus, NJ 07094) 4,41,1980

Robiquet, M., Ann. Chim. (Paris), 1817, 5, 275, (分離)
Ohta, M. et al., Chem. Pharm. Bull., 1964, 12, 1080, (分離)
Al-Yahya, M.A. et al., Anal. Profiles Drug Subst., 1982, 11, 407, (レビュー, 合成法, 性質, 分析)

RTECS (化学物質毒性データ)

生体影響物質 : 医薬品, 変異原性物質, 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>> 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 : ほ乳類-イヌ.

投与量・期間 : 73200 ug/kg

毒性影響 : [知覚組織と特異感覚] (視覚) 散瞳 (瞳孔の拡大).
[行動] 痙攣または発作閾値への影響.

参考文献

Oyo Yakuri. Pharmacometrics. (Oyo Yakuri Kenkyukai, CPO Box 180, Sendai 980-91, Japan) 2,323,1968

変異原性に関するデータ

<<試験方法>> 細胞遺伝学的分析.

試験系 : げっ歯類-ハムスター肺.

投与量・期間 : 100 mg/L

参考文献

Archives of Toxicology, Supplement. (Springer-Verlag New York, Inc., Service Center, 44 Hartz Way, Secaucus, NJ 07094) 4,41,1980

§ Narcotine; (1R,9S)-form, O¹-De-Me

[化学名・別名] Narcotoline

[CAS No.] 521-40-4

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

[構造式]

[分子式] C₂₁H₂₁NO₇

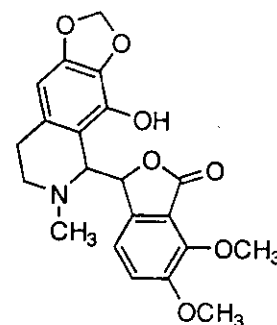
[分子量] 399.399

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

[性状] 棒状結晶 (MeOH 溶液)

[融点] Mp 202 °C (189 °C)

[比旋光度]: [α]_D²⁰ -189 (CHCl₃)



文献

Al-Yahya, M.A. et al., Anal. Profiles Drug Subst., 1982, 11, 407, (レビュー, 合成法, 性質, 分析)

§ Neopine

[化学名・別名] 8,14-Didehydro-4,5-epoxy-3-methoxy-17-methylmorphinan-6-ol (CAS 名). β-Codeine

[CAS No.] 467-14-1

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

[構造式]

[分子式] C₁₈H₂₁NO₅

[分子量] 299.369

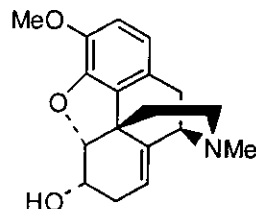
[基原] opium (*Papaver somniferum*) の微量アルカロイド, また *Papaver bracteatum* (ケシ科)

[用途] morphine よりも弱い鎮痛活性

[性状] 長針状結晶 (cyclohexane)

[融点] Mp 127.5-127.8 °C

[比旋光度]: [α]_D²⁰ -28.1 (c, 7.7 in CHCl₃)



Absolute configuration

文献

Homeyer, A.H. et al., J.O.C., 1947, 12, 356, (分離)

Small, L., J.O.C., 1947, 12, 359, (構造決定)

Brochmann-Hanssen, E. et al., J. Pharm. Sci., 1964, 53, 1549, (ガスクロマト, tlc)

Kuppers, F.J.E.M. et al., Phytochemistry, 1976, 15, 443, (分離)

§ Norlaudanoline

[化学名・別名] 1-[(3,4-Dihydroxyphenyl) methyl] -1,2,3,4-tetrahydro-6,7-isoquinolinediol (CAS 名) .
Tetrahydropapaveroline. 1-(3,4-Dihydroxybenzyl)-1,2,3,4-tetrahydro-6,7-isoquinolinediol (旧 CAS 名)

[CAS No.] 4747-99-3

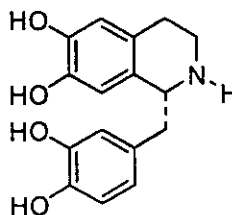
[構造式]

[分子式] C₁₆H₁₇NO₄

[分子量] 287.315

[基原] Formed in brain striatum of ethanol consuming rats. Formerly
ved to be a biosynthetic precursor of morphine in *Papaver somniferum*,
disproved

[用途] Dopaminergic and opioid receptor ligand implicated in alcohol addiction. Urinary metabolite of DOPA
treated Parkinsonian patients



(R)-form belie
now

-----文献-----

Merck Index, 12th edn., 1996, 1575, (性質, 成書)

Haber, H. et al., Life Sci., 1997, 60, 77-89, (formn, 同定; ms, ガスクロマト)

§ Norsanguinarine

[化学名・別名] [1,3] Benzodioxolo[5,6-c]-1,3-dioxolo[4,5-i] phenanthridine (CAS 名) . 2,3;7,8-Bis
(methylenedioxy) benzo[c]phenanthridine

[CAS No.] 522-30-5

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

[構造式]

[分子式] C₁₉H₁₁NO₄

[分子量] 317.3

[基原] 次の植物から得られるアルカロイド: *Corydalis incisa*, *Corydalis*

a, *Dicentra peregrina*, *Argemone mexicana*, *Argemone albiflora*, *Chelidonium japonicum*, *Eschscholtzia californica*,
Glaucium flavum var. *vestitum*, *Macleaya cordata*, *Papaver somniferum*, *Papaver setigerum*, *Papaver bracteatum*,
Papaver orientale, *Papaver rhoeas*, *Pteridophyllum racemosum*, *Fumaria vaillantii* (ケマンソウ科, ケシ科, ムクロ
ジ科)

[性状] 青白い黄色の針状結晶 (Me₂CO, CHCl₃/MeOH or CHCl₃/EtOH)

[融点] Mp 285-287 °C (278-280 °C (分解))



pallid

-----文献-----

Furuya, T. et al., Phytochemistry, 1972, 11, 3041, (分離, UV, IR, H-NMR, Mass, 構造決定)

Haisová, K. et al., Coll. Czech. Chem. Comm., 1973, 38, 3312, (分離, UV, Mass)

Haisová, K. et al., Coll. Czech. Chem. Comm., 1975, 40, 1576, (分離)

Ikuta, A. et al., Phytochemistry, 1976, 15, 577, (分離, UV, IR, H-NMR, Mass)

Döpke, W. et al., Z. Chem., 1976, 16, 54, (生育)

Itokawa, H. et al., Phytochemistry, 1978, 17, 839, (分離, UV, H-NMR)

Castedo, L. et al., Tet. Lett., 1978, 2923, (生育)

Sener, B. et al., Phytochemistry, 1983, 22, 2073, (分離)

§ 1,9-Octacosanediol

[CAS No.] 180005-28-1

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

[構造式] H₃C(CH₂)₁₈CH(OH)(CH₂)₇CH₂OH

[分子式] C₂₈H₅₈O₂

[分子量] 426.765

[基原] *Papaver alpinum* の葉のワックス, *Papaver nudicaule*, *Papaver somniferum*

-----文献-----

Jetter, R. et al., Phytochemistry, 1996, 42, 1617-1620, (分離, 合成法, H-NMR, C13-NMR, Mass)

§ D-glycero-D-manno-Octulose (旧 CAS 名)

[CAS No.] 13111-79-0

Haisová, K. et al., Coll. Czech. Chem. Comm., 1973, 38, 3312, (分離, UV, Mass)
 Haisová, K. et al., Coll. Czech. Chem. Comm., 1975, 40, 1576, (分離)
 Ikuta, A. et al., Phytochemistry, 1976, 15, 577, (分離, UV, IR, H-NMR, Mass)
 Döpke, W. et al., Z. Chem., 1976, 16, 54, (生育)
 Itokawa, H. et al., Phytochemistry, 1978, 17, 839, (分離, UV, H-NMR)
 Castedo, L. et al., Tet. Lett., 1978, 2923, (生育)
 Sener, B. et al., Phytochemistry, 1983, 22, 2073, (分離)

§ 1,9-Octacosanediol

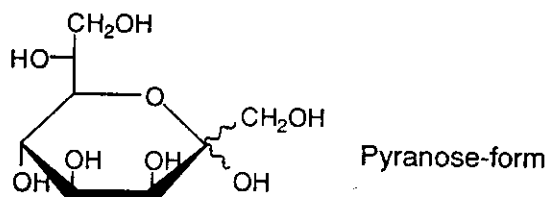
[CAS No.] 180005-28-1
 [化合物分類] 脂肪族化合物 (Saturated unbranched alcohols)
 [構造式] $\text{H}_3\text{C}(\text{CH}_2)_{18}\text{CH}(\text{OH})(\text{CH}_2)_7\text{CH}_2\text{OH}$
 [分子式] $\text{C}_{26}\text{H}_{54}\text{O}_2$
 [分子量] 426.765
 [基原] *Papaver alpinum* の葉のワックス, *Papaver nudicaule*, *Papaver somniferum*

-----文献-----

Jetter, R. et al., Phytochemistry, 1996, 42, 1617-1620, (分離, 合成法, H-NMR, C13-NMR, Mass)

§ D-glycero-D-manno-Octulose (旧 CAS 名)

[CAS No.] 13111-79-0
 [化合物分類] 炭水化物 (Higher ketoses)
 [構造式]
 [分子式] $\text{C}_8\text{H}_{16}\text{O}_8$
 [分子量] 240.21
 [基原] アボガド (*Persea gratissima*), *Sedum* spp.,
Medicago sativa, *Primula officinalis* の根, poppy
 (*Papaver somniferum*) 等
 [比旋光度]: $[\alpha]_D^{20} +20$ (c, 1.1 in MeOH)

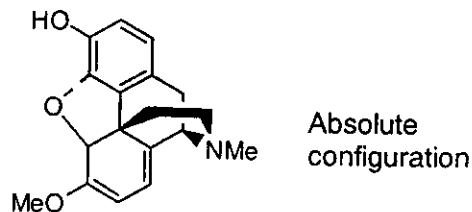


-----文献-----

Charlson, A.J. et al., J.A.C.S., 1960, 82, 3428, (生育)
 Haustveit, G. et al., Acta Chem. Scand., 1970, 24, 3059, (生育)

§ Oripavine

[化学名・別名] 6,7,8,14-Tetrahydro-4,5-epoxy-6-methoxy-17-methylmorphinan-3-ol (CAS 名)
 [CAS No.] 467-04-9
 [化合物分類] 薬物: 鎮痛薬-オピオイド (Analgesics-opioid), アルカロイド化合物 (Morphine alkaloids)
 [構造式]
 [分子式] $\text{C}_{18}\text{H}_{19}\text{NO}_3$
 [分子量] 297.353
 [基原] 次の植物から得られるアルカロイド: *Papaver somniferum*, *Papaver orientale*, *Papaver bracteatum*. Thebaine (ケシ科) の代謝物
 [用途] 鎮痛剤
 [性状] 針状結晶 (EtOH)
 [融点] Mp 201-202 °C
 [比旋光度]: $[\alpha]_D^{20} -216.9$ (c, 3.44 in CHCl_3)
 [Log P 計算値] Log P 0.91 (未確認値) (計算値)
 [化学物質毒性データ総覧 (RTECS) 登録番号] QD2097500



-----文献-----

Kiselev, V.V. et al., J. Gen. Chem. USSR (Engl. Transl.), 1948, 18, 142; 855, (分離, 構造決定)
 Shaffie, A. et al., J. Pharm. Sci., 1977, 66, 1050, (分離, UV, H-NMR)
 Israilov, I.A. et al., Khim. Pri. Soedin., 1977, 714; Chem. Nat. Compd. (Engl. Transl.), 1977, 600, (Oripavidine)
 Nielsen, B. et al., Planta Med., 1983, 48, 205, (分離, H-NMR, Mass)

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

被験動物 : げっ歯類-マウス.
 投与量・期間 : 11 mg/kg
 毒性影響 : [行動] 痙攣または発作閾値への影響.
 [行動] 硬直(カタプレシーを含む).
 [行動] 鎮痛.

参考文献

Archives Internationales de Pharmacodynamie et de Therapie. (Heymans Institute of Pharmacology, De Pintelaan 185, B-9000 Ghent, Belgium) 254,223,1981

§ Papaveraldine

[化学名・別名] 6,7-Dimethoxy-1-(3,4-dimethoxybenzoyl)isoquinoline. Xanthaline †

[CAS No.] 522-57-6

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

[構造式]

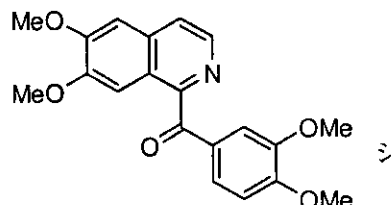
[分子式] C₂₀H₁₉NO₅

[分子量] 353.374

[基原] 次の植物から分離: *Papaver somniferum* preparations (opium) (ケシ科)

[融点] Mp 210 °C

[その他のデータ] Probably an artifact



-----文献-----

Kunitomo, J. et al., Yakugaku Zasshi, 1966, 86, 456; CA, 65, 10633g, (N-Methylpapaveraldinium)

Wu, W.-N. et al., J. Nat. Prod., 1980, 43, 143, (IR, H-NMR, Mass)

Al-Howiriny, T.A. et al., J. Nat. Prod., 2001, 64, 823-826, (Thalprzewalskiinone)

§ Papaverine, BAN

[化学名・別名] 6,7-Dimethoxy-1-(3,4-dimethoxybenzyl)isoquinoline. Papaveroline tetramethyl ether. NSC 35443

[CAS No.] 58-74-2

[化合物分類] 薬物: 抗狭心症薬 (Antianginal agents), アルカロイド化合物 (Benzyloisoquinoline alkaloids), 薬物: 抗喘息薬 (Antiasthmatic agents), 薬抗ウイルス物質 (Antiviral agents), PA4550, 薬物: 筋肉骨格弛緩剤 (Muscle relaxants-skeletal)

[構造式]

[分子式] C₂₀H₂₁NO₄

[分子量] 339.39

[基原] 次の植物から得られるアルカロイド: *Papaver somniferum*, *Rauwolfia serpentina* (ケシ科, キョウチクトウ科)

[用途] Used as 0.05 M soln. in CHCl₃ for extraction-photometric detn. of Zr (λ_{max} 580 nm, ε 51000); flotation-photometric detn. of Te (with bromide). Antianginal, anticholinergic agent. Smooth muscle relaxant, vasodilator, antiasthmatic agent. Oral antispasmodic agent which has been used for treating gastrointestinal spasm. 抗 HIV 活性を示す.

[性状] プリズム結晶 (EtOH/Et₂O)

[融点] Mp 147-148 °C

[PKa 値] pK_a 6.4 (25 °C)

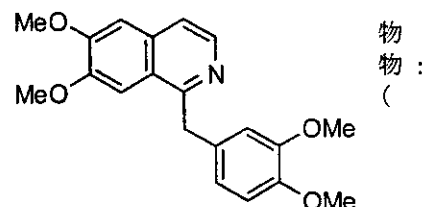
[Log P 計算値] Log P 3.37 (計算値)

UV: [neutral] λ_{max} 239 (ε 67500); 279 (ε 7380); 314 (ε 4000); 327 (ε 4660) (EtOH) (Berdy)

[傷害・毒性] 治療に用いるとき胃腸とその他に逆作用効果があるという報告がある, 摂食により眠気とめまいを引き起こす. 50%致死量 (LD₅₀) (ラット, 経口) 325mg/kg

[化学物質毒性データ総覧 (RTECS) 登録番号] NW8450000

[販売元] Rare Chemicals Library: S71060-1



-----文献-----

Neuman, M., Drugs of Today (Barcelona), 1976, 12, 278, (レビュー)

Whipple, G.H., Angiology, 1977, 28, 737, (レビュー)

Hifnawy, M.S. et al., Anal. Profiles Drug Subst., 1988, 17, 367, (レビュー)

RTECS (化学物質毒性データ)

生体影響物質 : 医薬品. 変異原性物質. ヒト.

健康障害に関するデータ

[基原] 次の植物から得られるアルカロイド: *Papaver somniferum*, *Rauwolfia serpentina* (ケシ科, キョウチクトウ科)

[用途] Used as 0.05 M soln. in CHCl₃ for extraction-photometric detn. of Zr (λ_{max} 580 nm, ϵ 51000); flotation-photometric detn. of Te (with bromide). Antianginal, anticholinergic agent. Smooth muscle relaxant, vasodilator, antiasthmatic agent. Oral antispasmodic agent which has been used for treating gastrointestinal spasm. 抗 HIV 活性を示す.

[性状] プリズム結晶 (EtOH/Et₂O)

[融点] Mp 147-148 °C

[PKa 値] pK_a 6.4 (25 °C)

[Log P 計算値] Log P 3.37 (計算値)

UV: [neutral] λ_{max} 239 (ϵ 67500); 279 (ϵ 7380); 314 (ϵ 4000); 327 (ϵ 4660) (EtOH) (Berdy)

[傷害・毒性] 治療に用いるとき胃腸とその他に逆作用効果があるという報告がある, 摂食により眠気とめまいを引き起こす. 50%致死量 (LD₅₀) (ラット, 経口) 325mg/kg

[化学物質毒性データ総覧 (RTECS) 登録番号] NW8450000

[販売元] Rare Chemicals Library: S71060-1

-----文献-----

Neuman, M., *Drugs of Today* (Barcelona), 1976, 12, 278, (レビュー)

Whipple, G.H., *Angiology*, 1977, 28, 737, (レビュー)

Hifnawy, M.S. et al., *Anal. Profiles Drug Subst.*, 1988, 17, 367, (レビュー)

RTECS (化学物質毒性データ)

生体影響物質 : 医薬品, 変異原性物質, 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>> 最小毒性量 (TDLo).

曝露経路 : 筋肉内投与.

被験動物 : ヒト-男性

投与量・期間 : 1143 ug/kg

毒性影響 : [行動] 傾眠 (全身活動度の低下).
[行動] 昏睡.

参考文献

European Journal of Clinical Pharmacology. (Springer-Verlag New York, Inc., Service Center, 44 Hartz Way, Secaucus, NJ 07094) 33,651,1988

変異原性に関するデータ

<<試験方法>> 変異原試験—通常の試験法.

試験系 : げっ歯類-マウス細胞 (種は未特定).

投与量・期間 : 100 umol/L

参考文献

Journal of Investigative Dermatology. (Williams & Wilkins Co., 428 E. Preston St., Baltimore, MD 21202) 66,313,1976

[化学名・別名] 1-(3-Hydroxy-4-methoxybenzyl)-6,7-dimethoxyisoquinoline. Palaudine

[CAS No.] 18694-10-5

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

[構造式]

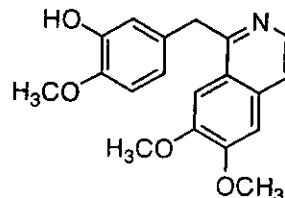
[分子式] C₁₇H₁₉NO₄

[分子量] 325.363

[基原] opium (*Papaver somniferum*) (ケシ科) の微量アルカロイド

[性状] プリズム結晶 (EtOH)

[融点] Mp 175-176 °C



-----文献-----

Brochmann-Hanssen, E. et al., *J. Pharm. Sci.*, 1968, 57, 940, (Palaudine)

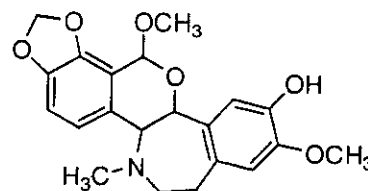
§ Papaverrubine D; N-Me

[化学名・別名] N-Methylporphyroxine. N-Methylpapaverrubine D

[CAS No.] 18211-29-5

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

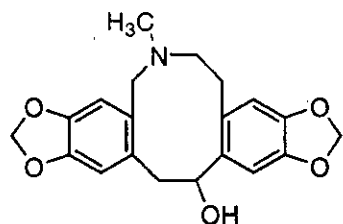
[構造式]



[化学名・別名] Dihydroprotopine
[化合物分類] アルカロイド化合物 (Protopine alkaloids)
[構造式]

[分子式] $C_{20}H_{21}NO_5$
[分子量] 355.39

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



科)

-----文献-----

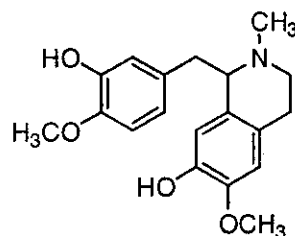
Syantav acute y, F., Alkaloids (N.Y.), 1981, 19, 461, (Dihydroprotopine)

§ Reticuline; (S)-form

[CAS No.] 485-19-8
[化合物分類] アルカロイド化合物 (Benzyloquinoline alkaloids)
[構造式]

[分子式] $C_{19}H_{23}NO_4$
[分子量] 329.395

[基原] 次の植物から得られるアルカロイド: *Annona reticulata*, *Phyllia i*, *Papaver somniferum*, 多くの異なった植物科目を超えた多くの属 (バンレクロウメモドキ科, ケシ科)



rogersi
イシ科,

[性状] 非結晶性

[比旋光度]: $[\alpha]_D +132$ (MeOH)

[傷害・毒性] 50%致死量 (LD₅₀) (マウス, 腹膜内) 56 mg/kg

[化学物質毒性データ総覧 (RTECS) 登録番号] NX5993000

-----文献-----

Arndt, R.R. et al., J.C.S., 1964, 2244-2248, (分離, UV)

Albonico, S.M. et al., Annalen, 1965, 685, 200-206, (分離, UV, H-NMR, Tembatarine)

Albonico, S.M. et al., J.C.S. (C), 1966, 1340-1342, (UV, ORD, 絶対構造, Tembatarine)

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 : 56 mg/kg

毒性影響 : [知覚組織と特異感覚] (視覚) 眼瞼下垂.

[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.

参考文献

Journal of Natural Products. (Spahr & Glenn Co., 225 E. Spring St., Columbus, OH 43215) 42,399,1979

§ Somniferine

[CAS No.] 117611-63-9
[化合物分類] 薬物: 催眠薬 (Hypnotics),
アルカロイド化合物 (Morphine alkaloids)
[構造式]

[分子式] $C_{26}H_{36}N_2O_7$
[分子量] 608.69

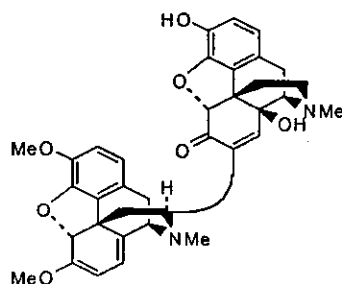
[基原] 次の植物から得られるアルカロイド: *Papaver somniferum* (ケシ科)

[用途] 催眠薬

[性状] 無定型

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{20} -297$ (c, 1 in $CHCl_3$)

[Log P 計算値] Log P 0.28 (未確認値) (計算値)



科)

-----文献-----

Dragar, C. et al., Tet. Lett., 1988, 29, 3115, (構造決定)

[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.

参照文献

Journal of Natural Products. (Spahr & Glenn Co., 225 E. Spring St., Columbus, OH 43215) 42,399,1979

§ Somniferine

[CAS No.] 117611-63-9

[化合物分類] 薬物: 催眠薬 (Hypnotics),
 アルカロイド化合物 (Morphine alkaloids)

[構造式]

[分子式] $C_{36}H_{36}N_2O_7$

[分子量] 608.69

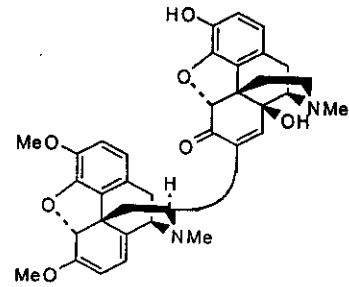
[基原] 次の植物から得られるアルカロイド: *Papaver somniferum* (ケシ科)

[用途] 催眠薬

[性状] 無定型

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{20} -297$ (c, 1 in $CHCl_3$)

[Log P 計算値] Log P 0.28 (未確認値) (計算値)



-----文献-----

Dragar, C. et al., Tet. Lett., 1988, 29, 3115, (構造決定)

§ Somniferine; 3-Me ether

[化学名・別名] *O*-Methylsomniferine

[CAS No.] 117611-62-8

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

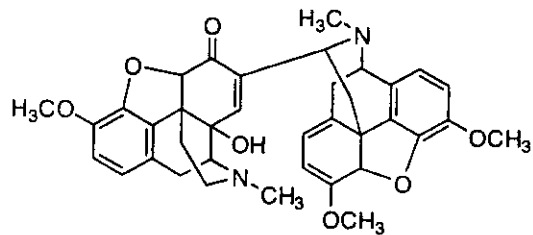
[構造式]

[分子式] $C_{37}H_{38}N_2O_7$

[分子量] 622.716

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

[その他のデータ] 物理化学的性質に関する報告はない



-----文献-----

Dragar, C. et al., Tet. Lett., 1988, 29, 3115, (構造決定)

§ 1,11-Triacontanediol

[CAS No.] 180005-30-5

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

[構造式] $H_3C(CH_2)_{18}CH(OH)(CH_2)_9CH_2OH$

[分子式] $C_{30}H_{62}O_2$

[分子量] 454.819

[基原] *Papaver alpinum* の葉のワックス, *Papaver nudicaule* and *Papaver somniferum*

-----文献-----

Jetter, R. et al., Phytochemistry, 1996, 42, 1617-1620, (分離, Mass)

§ § ケシ科ヒナゲシ (*Papaver rhoeas* L.) の花, 葉。

§ Adlumidiceine

[化学名・別名] 5-[[6-[2-(Dimethylamino) ethyl] -1,3-benzodioxol-5-yl] acetyl] -1,3-benzodioxole-4-carboxylic acid (CAS 名)

[CAS No.] 51059-65-5

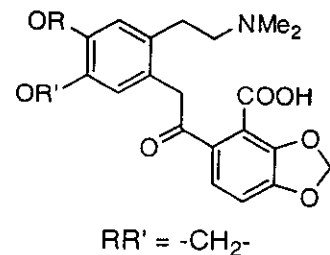
[化合物分類] アルカロイド化合物 (Narceine alkaloids)

[構造式]

[分子式] $C_{21}H_{21}NO_7$

[分子量] 399.399

[基原] 次の植物から得られるアルカロイド: *Corydalis sempervirens*, (*Corydalis glauca*), *Corydalis cava* (*Corydalis tuberosa*), *Corydalis lutea*, *Fumaria schrammii*, *Papaver rhoeas* (ケマンソウ科, ケシ科)



フジ科, ケシ科, モクレン科, クロウメモドキ科)

[融点] Mp 88-89 °C

-----文献-----

- Preininger, V. et al., *Planta Med.*, 1973, 23, 233, (Didehydroeremine)
Guinaudeau, H. et al., *Planta Med.*, 1975, 27, 304; 1976, 30, 201, (分離)
Ziyaev, R. et al., *Khim. Prir. Soedin.*, 1977, 13, 715; *Chem. Nat. Compd. (Engl. Transl.)*, 1977, 13, 602, (分離, UV, Mass)
Min, Z. et al., *Yaoxue Xuebao*, 1980, 15, 532; *CA*, 94, 117773m, (分離)
Sariyar, G. et al., *Plant. Med. Phytother.*, 1981, 15, 160; *CA*, 96, 119030g, (分離)
Kunitomo, J. et al., *Yakugaku Zasshi*, 1981, 101, 431; *CA*, 95, 204236c, (分離)
Min, Z. et al., *Yaoxue Xuebao*, 1981, 16, 557; *CA*, 97, 3595m, (分離)

§ **Glaucamine**

[化学名・別名] (6 α ,8 α)-2,3-Dimethoxy-16-methyl-10,11-[methylenebis(oxy)]rheadan-8-ol (CAS名). Alkaloid R-L

[CAS No.] 2255-44-9

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

[構造式]

[分子式] C₂₁H₂₃NO₆

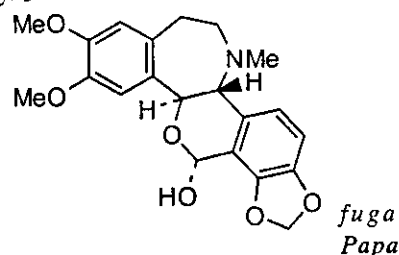
[分子量] 385.416

[基原] 次の植物から得られるアルカロイド: *Papaver anomalum*, *Papaver x*, *Papaver glaucum*, *Papaver hybridum*, *Papaver nudicaule*, *Papaver rhoeas*, *ver tauricola* (ケシ科)

[性状] 板状結晶 (CHCl₃/EtOH)

[融点] Mp 222-223 °C

[比旋光度]: [α]_D²² +298 (c, 0.25 in CHCl₃)



-----文献-----

- Slavik, J. et al., *Coll. Czech. Chem. Comm.*, 1965, 30, 3687, (分離, UV, epimer, 合成法)
Sariyar, G. et al., *Phytochemistry*, 1980, 19, 2189, (分離, H-NMR, Mass)
Phillipson, J.D. et al., *Planta Med.*, 1981, 41, 105, (分離, 誘導體)
Preininger, V. et al., *Planta Med.*, 1981, 41, 119, (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] C₂₂H₂₅NO₆

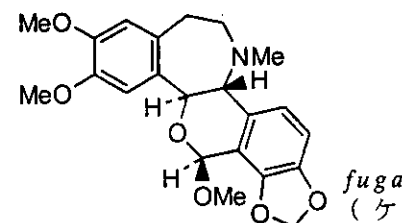
[分子量] 399.443

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

[性状] 結晶 (heptane)

[融点] Mp 103-105 °C

[比旋光度]: [α]_D²⁴ +455 (c, 0.5 in CHCl₃)



-----文献-----

- Sariyar, G. et al., *Phytochemistry*, 1980, 19, 2189, (分離, H-NMR, Mass)
Phillipson, J.D. et al., *Planta Med.*, 1981, 41, 105, (分離)
Preininger, V. et al., *Planta Med.*, 1981, 41, 119, (分離)

§ **Isorhoeagenine**

[化学名・別名] 16-Methyl-2,3:10,11-bis[methylenebis(oxy)]rheadan-8-ol (CAS名). Isorhoeagenine

[CAS No.] 17948-35-5

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

[CAS No.]5140-40-9

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

[構造式]

[分子式]C₂₂H₂₅NO₅

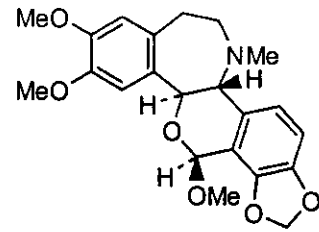
[分子量]399.443

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

[性状]結晶 (heptane)

[融点]Mp 103-105 °C

[比旋光度]:[α]_D²⁴ +455 (c, 0.5 in CHCl₃)



-----文献-----

Sariyar, G. et al., *Phytochemistry*, 1980, 19, 2189, (分離, H-NMR, Mass)

Phillipson, J.D. et al., *Planta Med.*, 1981, 41, 105, (分離)

Preininger, V. et al., *Planta Med.*, 1981, 41, 119, (分離)

§ Isorhoeagenine

[化学名・別名]16-Methyl-2,3:10,11-bis[methylenebis(oxy)]rheadan-8-ol (CAS 名). Isorheagenine

[CAS No.]17948-35-5

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

[構造式]

[分子式]C₂₀H₁₉NO₅

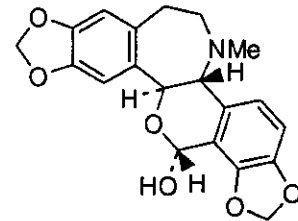
[分子量]369.373

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

[性状]針状結晶 (MeOH/Me₂CO)

[融点]Mp 210-215 °C

[比旋光度]:[α]_D²² +153 (c, 0.65 in 1:1 CHCl₃/MeOH)



-----文献-----

Syantav'y, F. et al., *Acta Chim. Acad. Sci. Hung.*, 1959, 18, 457, (分離, 誘導体)

Syantav'y, F. et al., *Coll. Czech. Chem. Comm.*, 1965, 30, 3479, (構造決定, 構造, 合成法)

Neýmecyková, A. et al., *Naturwissenschaften*, 1967, 54, 45, (構造決定, 誘導体)

§ Isorhoeagenine; O-α-D-Glucopyranoside

[化学名・別名]Alkaloid RC

[CAS No.]17948-36-6

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

[構造式]

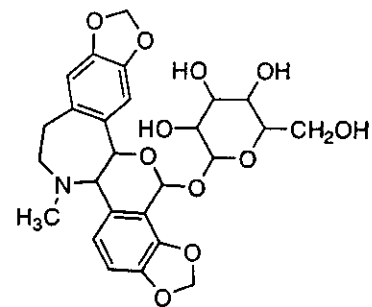
[分子式]C₂₆H₂₉NO₁₁

[分子量]531.515

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

[融点]Mp 240-242 °C

[比旋光度]:[α]_D²² +250 (c, 0.40 in CHCl₃/MeOH 1:1)



-----文献-----

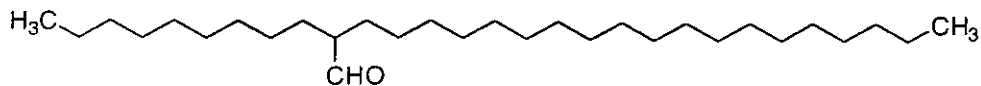
Syantav'y, F. et al., *Acta Chim. Acad. Sci. Hung.*, 1959, 18, 457, (分離, 誘導体)

Syantav'y, F. et al., *Coll. Czech. Chem. Comm.*, 1965, 30, 3479, (構造決定, 構造, 合成法)

Neýmecyková, A. et al., *Naturwissenschaften*, 1967, 54, 45, (構造決定, 誘導体)

§ 2-Nonylheneicosanal; (±)-form

[構造式]



[分子式]C₃₀H₆₀O

[分子量]436.803

[基原]Reported from above-ground parts of *Papaver rhoeas*

-----文献-----

- Furuya, T. et al., *Phytochemistry*, 1972, 11, 3041, (分離, UV, IR, H-NMR, Mass, 構造決定)
 Haisová, K. et al., *Coll. Czech. Chem. Comm.*, 1973, 38, 3312, (分離, UV, Mass)
 Haisová, K. et al., *Coll. Czech. Chem. Comm.*, 1975, 40, 1576, (分離)
 Ikuta, A. et al., *Phytochemistry*, 1976, 15, 577, (分離, UV, IR, H-NMR, Mass)
 Itokawa, H. et al., *Phytochemistry*, 1978, 17, 839, (分離, UV, H-NMR)
 Sener, B. et al., *Phytochemistry*, 1983, 22, 2073, (分離)

§ **Papaverrubine B**

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

[CAS No.]5140-39-6

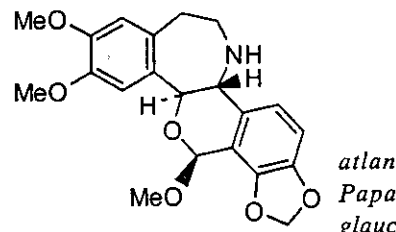
[化合物分類]アルカロイド化合物(Rhoeadine alkaloids)

[構造式]

[分子式]C₂₁H₂₃NO₆

[分子量]385.416

[基原]次の植物から得られるアルカロイド: *Papaver alpinum*, *Papaver ticum*, *Papaver bracteatum*, *Papaver californicum*, *Papaver caucasicum*, *ver commutatum*, *Papaver dubium*, *Papaver feddei*, *Papaver fugax*, *Papaver um*, *Papaver heldreichii*, *Papaver latericum*, *Papaver macrostomum*, *Papaver nudicaule*, *Papaver oreophilum*, *Papaver orientale*, *Papaver persicum*, *Papaver pilosum*, *Papaver polychaetum*, *Papaver rhoeas*, *Papaver rupifragum*, *Papaver setigerum*, *Papaver strigosum*, *Papaver triniaefolium*, *Papaver urbanianum* (ケシ科)



[性状]結晶 (MeOH)

[融点]Mp 201-203 °C

[比旋光度]:[α]_D +398 (CHCl₃)

-----文献-----

- Shamma, M. et al., *Chem. Comm.*, 1968, 212, (stereochem)
 Pfeifer, S. et al., *Pharmazie*, 1972, 27, 48, (分離, UV, Mass)
 Rönsch, H. et al., *Helv. Chim. Acta*, 1977, 60, 2402, (性質)
 Slavikovaacute, L. et al., *Coll. Czech. Chem. Comm.*, 1980, 45, 761, (分離)

§ **Rhoeagenine**

[化学名・別名] (8 β)-16-Methyl-2,3:10,11-bis[methylenebis(oxy)]rheadan-8-ol(CAS名). Rheagenine

[CAS No.]5574-77-6

[化合物分類]アルカロイド化合物(Rhoeadine alkaloids)

[構造式]

[分子式]C₂₀H₁₉NO₆

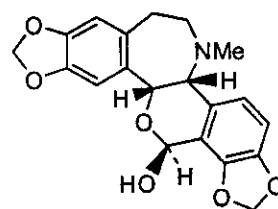
[分子量]369.373

[一般的性質]In some solvents the alkaloid exists as a mixt. C14 epimers (hemiacetal equilibrium)

[基原]次の植物から得られるアルカロイド: *Papaver arium*, *Papaver argemone*, *Papaver armeniacum*, *Papaver ticum*, *Papaver californicum*, *Papaver commutatum*, *Papaver um*, *Papaver hispidum*, *Papaver latericum*, *Papaver nudicaule*, *Papaver oreophilum*, *Papaver pilosum*, *Papaver rhoeas*, *Papaver rupifragum*, *Papaver strigosum*, *Papaver syriacum*, *Papaver tauricola*

[融点]Mp 236-238 °C

[比旋光度]:[α]_D²² +134 (c, 0.96 in Py)



of
 Absolute aren
 configuration atlan
 dubi

-----文献-----

- Shamma, M. et al., *Chem. Comm.*, 1968, 212, (stereochem)
 Huber, C.S., *Acta Cryst. B*, 1970, 26, 373; 1972, 28, 982, (結晶構造, 絶対構造)
 Slavikovaacute, L. et al., *Coll. Czech. Chem. Comm.*, 1980, 45, 761, (分離)
 Sariyar, G. et al., *Phytochemistry*, 1980, 19, 2189, (分離, H-NMR, Mass, Dubirheine)
 Vežýzník, F. et al., *Coll. Czech. Chem. Comm.*, 1981, 46, 926, (分離)

§ **3,4',5,7-Tetrahydroxyflavylium (1+); 3-O-[β -D-Glucopyranosyl-(1 \rightarrow 2)- β -D-glucopyranoside]**

[分子式] $C_{20}H_{19}NO_6$

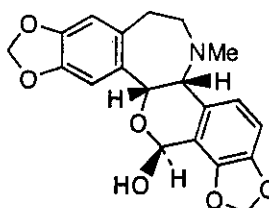
[分子量] 369.373

[一般的性質] In some solvents the alkaloid exists as a mixt. of C14 epimers (hemiacetal equilibrium)

[基原] 次の植物から得られるアルカロイド: *Papaver arenarium*, *Papaver argemone*, *Papaver armeniacum*, *Papaver atlanticum*, *Papaver californicum*, *Papaver commutatum*, *Papaver dubium*, *Papaver hispidum*, *Papaver latericum*, *Papaver nudicaule*, *Papaver oreophilum*, *Papaver pilosum*, *Papaver rhoeas*, *Papaver rupifragum*, *Papaver strigosum*, *Papaver syriacum*, *Papaver tauricola*

[融点] Mp 236-238 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{22} +134$ (c, 0.96 in Py)



Absolute configuration

-----文献-----

Shamma, M. et al., Chem. Comm., 1968, 212, (stereochem)

Huber, C.S., Acta Cryst. B, 1970, 26, 373; 1972, 28, 982, (結晶構造, 絶対構造)

Slavikovaacute, L. et al., Coll. Czech. Chem. Comm., 1980, 45, 761, (分離)

Sariyar, G. et al., Phytochemistry, 1980, 19, 2189, (分離, H-NMR, Mass, Dubirheine)

Vejřzýnik, F. et al., Coll. Czech. Chem. Comm., 1981, 46, 926, (分離)

§ 3,4',5,7-Tetrahydroxyflavylium (1+); 3-O- β -D-Glucopyranosyl-(1 \rightarrow 2)- β -D-glucopyranoside

[化学名・別名] Pelargonidin 3-sophoroside

[CAS No.] 54542-60-8

[化合物分類] フラボノイド (Anthocyanidins and anthocyanins; 4 \times O-置換基)

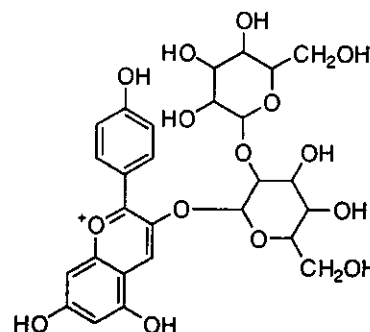
[構造式]

[分子式] $C_{27}H_{33}O_{15}^{(+)}$

[分子量] 595.533

[基原] 次の植物の花弁から分離: *Papaver rhoeas*, *Papaver orientale*

UV: [acid] λ_{max} 268 ; 505 (MeOH/HCl)



-----文献-----

Robertson, A. et al., J.C.S., 1928, 1460; 1533, (分離)

Timberlake, C.F. et al., The Flavonoids, (Eds. Harborne, J.B. et al), Chapman and Hall, London, 1975, 215, (レビュー)

Iacobucci, G.A. et al., Tetrahedron, 1983, 39, 3005, (レビュー)

*****ポプラ (Poplar) *****

§ ヤナギ科アメリカクロヤマナラシ (*Populus deltoides* Marshall) の葉や蕾または樹皮。

§ 5,7-Dihydroxyflavone; 7-O- β -D-Glucopyranoside

[化学名・別名] Aequinoctin. Equinoctin. Aequinetin

[CAS No.] 31025-53-3

[化合物分類] フラボノイド (Flavones; 2 \times O-置換基)

[構造式]

[分子式] $C_{21}H_{20}O_6$

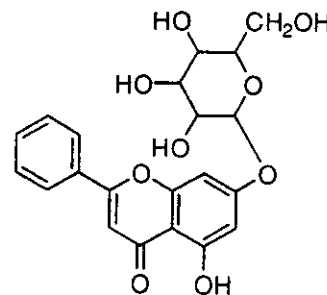
[分子量] 416.384

[基原] 次の植物から分離: *Populus deltoides* の葉, *Scutellaria orientalis* の根, *Sarothamnus patens*, *Enkianthus* spp., *Prunus aequinoctialis*

[性状] 青白い黄色の針状結晶 (EtOH 溶液)

[融点] Mp 245 °C (201-203 °C)

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{25} -71.3$ (c, 1 in Py)



-----文献-----

Liu, Q. et al., Phytochemistry, 1993, 34, 167, (Aequinoctin)

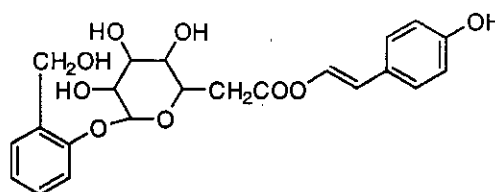
§ Salicin; 6'-O-(4-Hydroxycinnamoyl)

[化学名・別名] Trichocarposide

[CAS No.] 17063-94-4

[化合物分類] 単環芳香族 (Simple benzyl alcohols)

[構造式]



[分子式] $C_{22}H_{24}O_9$

[分子量] 432.426

[基原] *Populus balsamifera*, *Populus deltoides*, *Populus trichocarpa*, *Salix capitata*

[性状] 結晶 (H_2O)

[融点] Mp 180-182 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{20} -11.4$ (c, 2.3 in Me₂CO 溶液)

-----文献-----

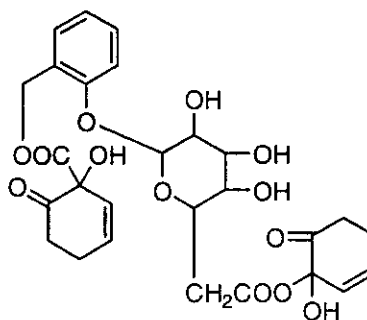
Estes, T.K. et al., CA, 1967, 67, 114359n, (Trichocarposide)

§ Salicortin; 6'-O-(1-Hydroxy-6-oxo-2-cyclohexene-1-carbonyl)

[CAS No.] 157072-22-5

[化合物分類] 単環芳香族 (Simple benzyl alcohols)

[構造式]



[分子式] $C_{27}H_{30}O_{13}$

[分子量] 562.526

[基原] *Populus deltoides* の葉

[性状] 結晶

[融点] Mp 75 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{25} -205.5$ (c, 1 in CH₂Cl₂)

-----文献-----

Thieme, H., Pharmazie, 1964, 19, 725, (分離)

Thieme, H., Planta Med., 1967, 15, 35, (分離)

Pearl, I.A., Tet. Lett., 1970, 3827, (構造決定)

Pearl, I.A., Phytochemistry, 1971, 10, 3161, (構造決定)

Clausen, T.P. et al., J. Nat. Prod., 1989, 52, 207, (分離)

§ 3,5,7-Trihydroxyflavanone; (2R,3R)-form, 3-Benzoyl

[化学名・別名] 3-Benzoyloxy-5,7-dihydroxyflavanone

[CAS No.] 129693-91-0

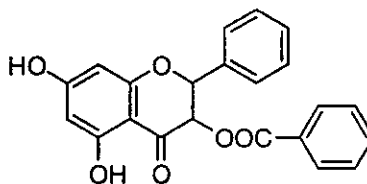
[化合物分類] フラボノイド (Dihydroflavonols; 3 × O-置換基)

[構造式]

[分子式] $C_{22}H_{16}O_6$

[分子量] 376.365

[基原] the bud exudate of *Populus deltoides*



-----文献-----

Greenaway, W. et al., Z. Naturforsch., C, 1990, 45, 587, (3-benzoyl)

Shawl, A.S. et al., Phytochemistry, 1992, 31, 1399, (Alpinone)

§ 3,5,7-Trihydroxyflavanone; (2R,3R)-form, 3-Me ether

[化学名・別名] 5,7-Dihydroxy-3-methoxyflavanone

[CAS No.] 129843-35-2

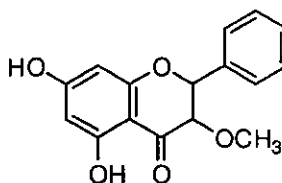
[化合物分類] フラボノイド (Flavanones; 3 × O-置換基)

[構造式]

[分子式] $C_{16}H_{14}O_5$

[分子量] 286.284

[基原] *Populus deltoides*, *Populus jackii*



-----文献-----

Jeffries, P.R. et al., Aust. J. Chem., 1962, 15, 532, (分離)

Bohlmann, F. et al., Phytochemistry, 1979, 18, 839; 1981, 20, 1907; 1982, 21, 371, (分離)

Bankova, V. et al., J. Nat. Prod., 1983, 46, 471, (5-Me ether)

Greenaway, W. et al., Z. Naturforsch., C, 1990, 45, 587, (3-benzoyl)
Shawl, A.S. et al., Phytochemistry, 1992, 31, 1399, (Alpinone)

§ 3,5,7-Trihydroxyflavanone; (2R,3R)-form, 3-Me ether

[化学名・別名] 5,7-Dihydroxy-3-methoxyflavanone

[CAS No.] 129843-35-2

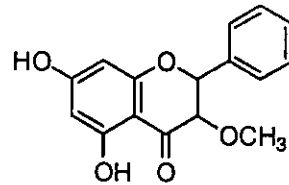
[化合物分類] フラボノイド (Flavanones; 3 × O-置換基)

[構造式]

[分子式] C₁₆H₁₄O₅

[分子量] 286.284

[基原] *Populus deltoides*, *Populus jackii*



----- 文献 -----

Jeffries, P.R. et al., Aust. J. Chem., 1962, 15, 532, (分離)

Bohlmann, F. et al., Phytochemistry, 1979, 18, 839; 1981, 20, 1907; 1982, 21, 371, (分離)

Bankova, V. et al., J. Nat. Prod., 1983, 46, 471, (5-Me ether)

*****ポポー (Papaw) *****

§ § バンレイシ科ポウポウ (*Asimina triloba* Dunal) の果実。

§ Annoglaucin; 20,24-Diepimer

[化学名・別名] 10-Hydroxytrilobacin

[CAS No.] 184240-39-9

[化合物分類] ポリケチド (Annonaceae acetogenins)

[構造式]

[分子式] C₃₇H₆₀O₈

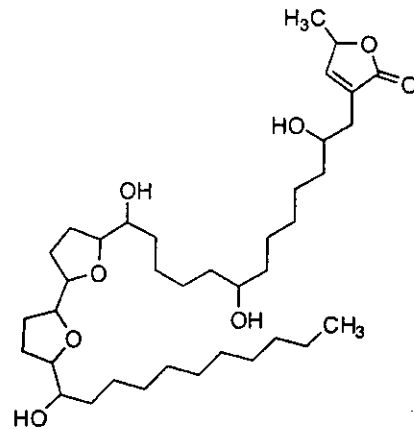
[分子量] 638.924

[基原] *Asimina triloba*

[用途] 細胞毒

[性状] オイル

[比旋光度]: [α]_D²² +8.3 (c, 0.36 in CHCl₃)



----- 文献 -----

He, K. et al., J. Nat. Prod., 1996, 59, 1029-1034, (10-Hydroxyasimicin, 10-Hydroxytrilobacin)

§ Annoglaucin; Stereoisomer

[化学名・別名] 10-Hydroxyasimicin

[CAS No.] 184240-38-8

[化合物分類] ポリケチド (Annonaceae acetogenins)

[構造式]

[分子式] C₃₇H₆₀O₈

[分子量] 638.924

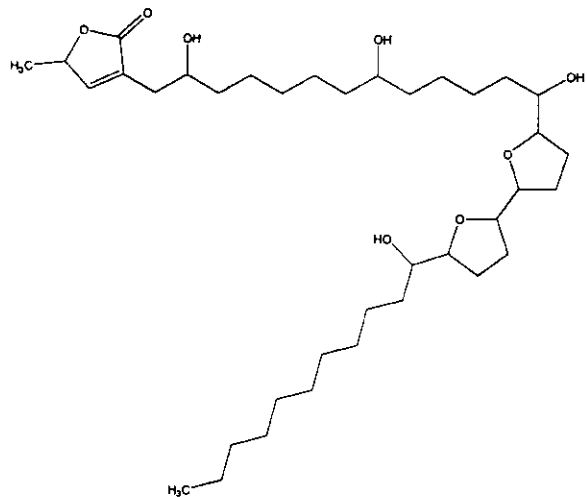
[基原] *Asimina triloba*

[用途] 細胞毒

[性状] ワックス

[比旋光度]: [α]_D +17.3 (c, 0.22 in CHCl₃)

[その他のデータ] Epimeric with Annoglaucin at C-24; C-4, C-10 configs. not known



----- 文献 -----

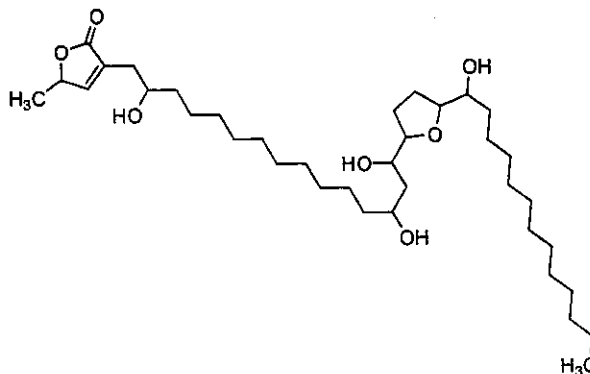
He, K. et al., J. Nat. Prod., 1996, 59, 1029-1034, (10-Hydroxyasimicin, 10-Hydroxytrilobacin)

§ Annomontacin; Stereoisomer

Jossang, A. et al., J. Nat. Prod., 1991, 54, 967-971, (分離, H-NMR, C13-NMR)
 Fang, X.-P. et al., J. Nat. Prod., 1992, 55, 1655-1663, (分離)
 Colman-Saizarbitoria, T.J. et al., J. Nat. Prod., 1994, 57, 486-493, (分離)
 Wu, F.E. et al., J. Nat. Prod., 1995, 58, 1430-1437, (Annomutacin)

§ **Annomontacin; 10-Deoxy, 15S-hydroxy**

[化学名・別名] Asitribolin C
 [化合物分類] ポリケチド (Annonaceae acetogenins)
 [構造式]



[分子式] $C_{37}H_{66}O_7$
 [分子量] 624.94
 [基原] *Asimina triloba*
 [用途] 細胞毒
 [性状] 粉末
 [融点] Mp 85.3-86.4 °C
 [比旋光度]: $[\alpha]_D -8$ (c, 0.005 in CH_2Cl_2)
 UV: [neutral] λ_{max} 226 (log ϵ 3.7) (MeOH)

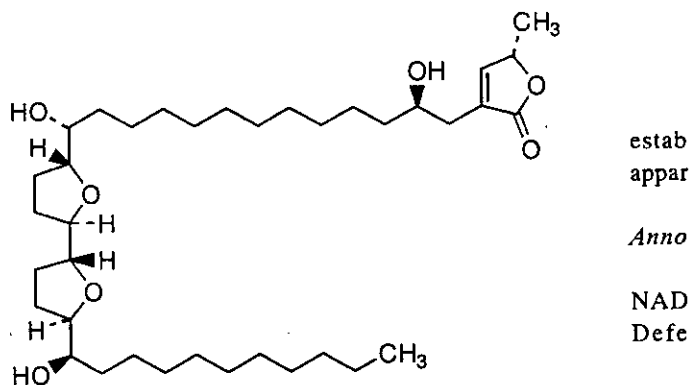
-----文献-----

Woo, M.-H. et al., Bioorg. Med. Chem., 2000, 8, 285-290, (Asitribolin C)

§ **Asimicin**

[化学名・別名] 3-[2,13-Dihydroxy-13-[octahydro-5'-(1-hydroxyundecyl) [2,2'-bifuran]-5-yl] tridecyl]-5-methyl-2(5H)-furanone (CAS名). Annonastatin. Squamocin H. Annonarecticulin
 [関連 CAS No.] 123805-39-0, 129138-51-8, 130851-93-3
 [化合物分類] 薬物: 抗腫瘍薬 (Antineoplastic agents), ポリケチド (Annonaceae acetogenins), 薬物: 抗腫瘍薬 (Antineoplastic agents)

[構造式]
 [分子式] $C_{37}H_{66}O_7$
 [分子量] 622.924
 [一般的性質] Absolute configs. are not yet fully lished and the identities of various isolates ently having the same struct. are not all certain
 [基原] 次の植物から分離: *Annona squamosa*, *na purpurea*, *Asimina triloba*, *Rollinia mucosa*
 [用途] 殺虫剤. Potent inhibitor of mitochondrial H: ubiquinone oxidoreductase. 抗腫瘍薬. nsive agent against bird predation



(4R,15R,16R,19R,20R,23R,24R,36S)-form

[性状] 結晶
 [融点] Mp 70-72 °C
 [比旋光度]: $[\alpha]_D +21.8$ (c, 0.6 in MeOH)
 UV: [neutral] λ_{max} 208 (ϵ 14300) (MeOH)

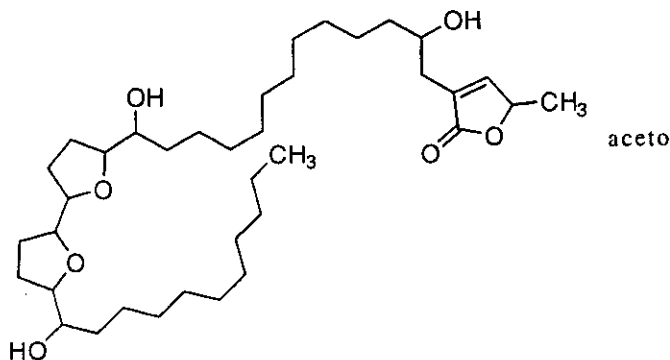
-----文献-----

Lieb, F. et al., Planta Med., 1990, 56, 317-319, (Annonastatin)

§ **Asimicin; 20-Epimer**

[化学名・別名] Trilobacin
 [CAS No.] 140224-67-5
 [化合物分類] ポリケチド (Annonaceae acetogenins)

[構造式]
 [分子式] $C_{37}H_{66}O_7$
 [分子量] 622.924
 [基原] *Asimina triloba* の樹皮
 [用途] Defensive agent against bird predation
 [性状] ワックス
 [比旋光度]: $[\alpha]_D^{25} +10$ (c, 0.0005 in $CHCl_3$)



UV: [neutral] λ_{\max} 208 (ϵ 14300) (MeOH)

-----文献-----

Lieb, F. et al., *Planta Med.*, 1990, 56, 317-319, (Annonastatin)

§ **Asimicin; 20-Epimer**

[化学名・別名] Trilobacin

[CAS No.] 140224-67-5

[化合物分類] ポリケチド (Annonaceae acetogenins)

[構造式]

[分子式] $C_{37}H_{66}O_7$

[分子量] 622.924

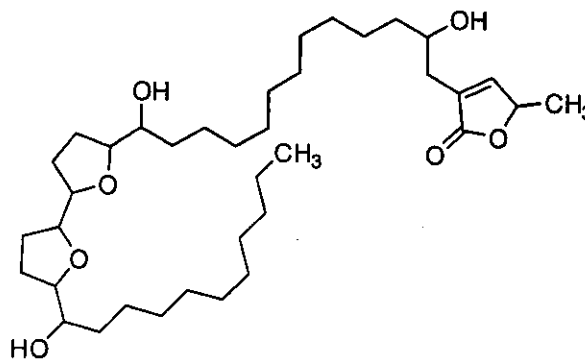
[基原] *Asimina triloba* の樹皮

[用途] Defensive agent against bird predation

[性状] ワックス

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{22} +10$ (c, 0.0005 in $CHCl_3$)

UV: [neutral] λ_{\max} 223 (ϵ 2653) (EtOH) (Berdy)



-----文献-----

Zhao, G. et al., *J. Nat. Prod.*, 1992, 55, 347-356, (Trilobacin)

Sinha, S.C. et al., *J.O.C.*, 1996, 61, 7640-7641, (合成法, Trilobacin)

Ruan, Z. et al., *Tet. Lett.*, 1999, 40, 49-52, (合成法, Asimicin, Trilobacin)

§ **Asimilobin**

[CAS No.] 168075-15-8

[化合物分類] ポリケチド (Annonaceae acetogenins)

[構造式]

[分子式] $C_{33}H_{62}O_6$

[分子量] 578.871

[一般的性質] 絶対構造は 1999 年に改正された

[基原] *Asimina triloba* の種子,
Goniothalamus giganteus の樹皮

[用途] 細胞毒

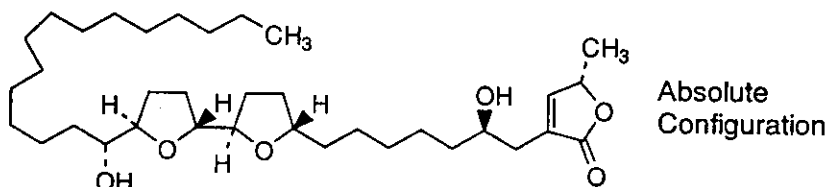
[性状] 針状結晶

[融点] Mp 56-57 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D +11.3$ (c, 1 in CH_2Cl_2). $[\alpha]_D +6$ (c, 0.05 in $CHCl_3$)

[溶解性] BERDY SOL: メタノール, ヘキサンに可溶; 水に難溶

UV: [neutral] λ_{\max} 228 (log ϵ 2.98) (EtOH) [neutral] λ_{\max} 228 (ϵ 955) (MeOH) (Berdy) [neutral] λ_{\max} 209 (ϵ 1000) (EtOH) (Berdy)



-----文献-----

Zhang, Y. et al., *Heterocycles*, 1995, 41, 1743-1755, (分離)

Woo, M.H. et al., *J. Nat. Prod.*, 1995, 58, 1533, (分離)

Wang, Z.-M. et al., *Eur. J. Org. Chem.*, 2000, 349-356, (合成法, 絶対構造)

§ **Asimin**

[CAS No.] 156162-01-5

[化合物分類] ポリケチド (Annonaceae acetogenins)

[構造式]

[分子式] $C_{37}H_{66}O_7$

[分子量] 622.924

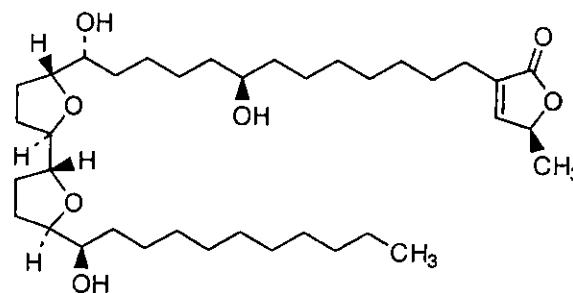
[基原] *Asimina triloba* (バンレイシ科) の茎皮

[用途] 細胞毒

[性状] ワックス

[比旋光度]: $[\alpha]_D +26$ ($CHCl_3$)

UV: [neutral] λ_{\max} 215 (MeOH)



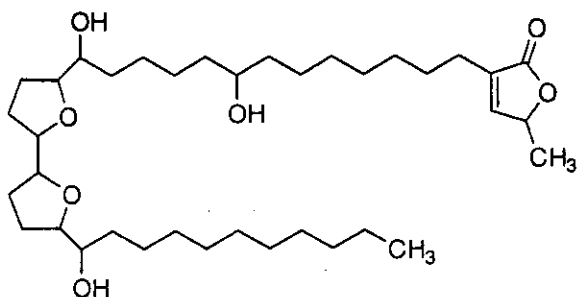
-----文献-----

Zhao, G.-X. et al., *J. Med. Chem.*, 1994, 37, 1971-1976, (分離, UV, IR, H-NMR, C13-NMR, Mass, 性質)

Zhao, G.-X. et al., *Heterocycles*, 1994, 38, 1897-1908, (Bullatin)
 Zhao, G.-X. et al., *J. Med. Chem.*, 1994, 37, 1971-1976, (分離, UV, IR, H-NMR, C13-NMR, Mass, 性質)
 Zhao, G. et al., *Tetrahedron*, 1995, 51, 7149-7160, (Trilobin)
 Zeng, L. et al., *Nat. Prod. Rep.*, 1996, 13, 275-306, (レビュー)
 Marshall, J.A. et al., *J. Nat. Prod.*, 1999, 62, 1123-1127, (合成法, 絶対構造)

§ **Asimin; 10,24-Diepimer**

[化学名・別名] Bullatin
 [CAS No.] 158515-36-7
 [化合物分類] ポリケチド (Annonaceae acetogenins)
 [構造式]



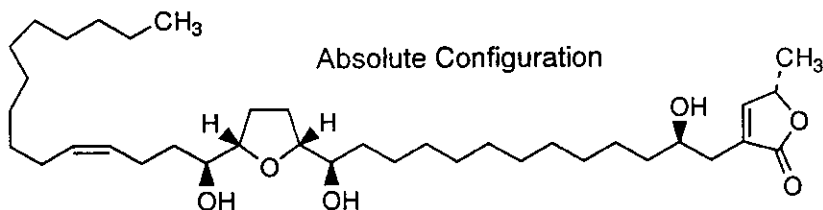
[分子式] C₃₇H₆₆O₇
 [分子量] 622.924
 [基原] *Asimina triloba*
 [比旋光度]: [α]_D +7.5 (c, 0.04 in EtOH)

-----文献-----

Zhao, G.-X. et al., *Heterocycles*, 1994, 38, 1897-1908, (Bullatin)

§ **Asiminenin A**

[CAS No.] 168075-11-4
 [化合物分類] ポリケチド (Annonaceae acetogenins)
 [構造式]



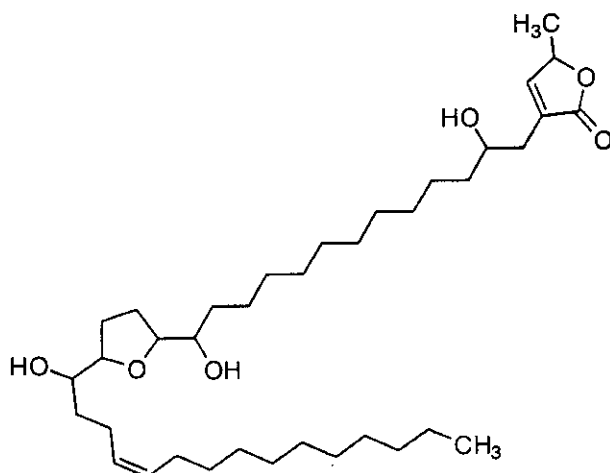
[分子式] C₃₇H₆₆O₆
 [分子量] 606.925
 [基原] *Asimina triloba* の種子
 [用途] 細胞毒
 [性状] 粉末
 [融点] Mp 58-59 °C
 [比旋光度]: [α]_D +10 (c, 0.1 in CH₂Cl₂)
 [溶解性] BERDY SOL: メタノール, ヘキサンに可溶; 水に難溶
 UV: [neutral] λ_{max} 228 (log ε 3.55) (MeOH) [neutral] λ_{max} 228 (ε 3550) (MeOH) (Berdy)

-----文献-----

Woo, M.H. et al., *Heterocycles*, 1995, 41, 1731-1742, (分離, UV, IR, H-NMR, C13-NMR, Mass)

§ **Asiminenin A; 19,20-Diepimer**

[化学名・別名] Asiminenin B
 [CAS No.] 168113-65-3
 [化合物分類] ポリケチド
 (Annonaceae acetogenins)
 [構造式]



[分子式] C₃₇H₆₆O₆
 [分子量] 606.925
 [基原] *Asimina triloba* の種子
 [用途] 細胞毒
 [性状] 粉末
 [融点] Mp 54-55 °C
 [比旋光度]: [α]_D +17 (c, CH₂Cl₂)
 [溶解性] BERDY SOL: メタノール, ヘキサンに
 ; 水に難溶
 UV: [neutral] λ_{max} 230 (log ε 2.93) (MeOH)
 neutral] λ_{max} 230 (ε 851) (MeOH) (Berdy)

可溶

[