

分担研究課題:法規制薬物及び植物の分析と識別に関する研究

研究分担者: 田中理恵 国立医薬品食品衛生研究所生薬部 主任研究官

THC アナログ, THC_V, THC_B および THC_H 含有を標榜するオイル製品中の成分の同定

研究要旨:令和3年頃より,大麻草由来のカンナビノイドである Hexahydrocannabinol (HHC)を初めとする THC アナログの含有を標榜する製品がインターネット販売サイト上等で販売されているのが確認されている. HHC は天然の大麻草から検出したとの報告もあるが, CBD などを原料として Δ^8 -tetrahydrocannabinol (Δ^8 -THC)または Δ^9 -THC を合成し,これを還元することでも得られる. HHC は令和4年3月に指定薬物に指定され規制されている. 最近では HHC より3位のアルキル側鎖が二つ長いヘプチル基である hexahydrocannabiphorol (HHCP)含有を標榜する製品や, Δ^8 -THC または Δ^9 -THC, HHC の1位水酸基をアセチル化した化合物である THCO, HHCO の含有を標榜する製品もでてきている. さらに Δ^8 -THC または Δ^9 -THC の3位のアルキル側鎖の長さが異なる化合物である THC_V, THC_B 及び THC_H の含有を標榜する製品もでてきている. これらは主に電子タバコ用のリキッドカートリッジ製品としてインターネット上などで売られている.

本研究では,令和3~4年度に入手した THC アナログの含有を標榜する製品のうち Δ^8 -THC または Δ^9 -THC の3位のアルキル側鎖の長さが異なる化合物の含有を標榜する4製品について,成分を単離し NMR を用いて各異性体の構造を同定した. その結果,3位のアルキル側鎖が THC_V の含有を標榜する製品から Δ^8 -THC_V と Δ^9 -THC_V, THC_B の含有を標榜する製品から Δ^8 -THC_B と Δ^9 -THC_B と, THC_H の含有を標榜する製品から Δ^8 -THC_H と Δ^9 -THC_H を同定した.

今後も新たな大麻成分由来化合物含有を標榜する危険ドラッグの流通が懸念されるため,継続的な実態調査を行うことが必要と考えられる.

A. 研究目的

大麻は世界で最も乱用されている薬物であり,日本においても覚せい剤に次いで二番目に検挙される人数が多い.平成27年度には2167人,平成28年度には2722人,平成29年度には3218人,平成30年度には3762人と大麻事犯の検挙数は増加の一途をたどっており,令和元年は4570人,令和2年は5260人,令和3年は5783人と2年間で1000人以上増加している.この要因として若年層の増加があげられ,令和3年は20代が2823人,20歳未満が994人と前年よりそれぞれ11.1%,12.1%増と報告されている¹⁾ また中学生が8人,高校生が186人検挙されている.こ

のような若年層の増加により,大麻の乱用による健康被害はもちろん,いわゆる“ゲートウェイドラッグ”としてコカインや覚せい剤などのハードドラッグの乱用につながるものが危惧される.

大麻は大麻草(*Cannabis sativa* L.)及びその製品のことをいう.大麻草はアサ科(*Cannabaceae*)の雌雄異株の一年生草本であり,西アジア~エジプト原産と言われている.紀元前より人類に利用されており,大麻草の茎よりとれる繊維は麻縄や衣服などに,種子は麻の実,ヘンプシードオイルとして食用に,また生薬の麻子仁としても利用される.また大麻草は繁殖力が非常に強いという特徴もある²⁻⁷⁾.大麻草にはカンナビノイドと総称され

る炭素, 水素, 酸素のみからなる化合物群が含まれている (Fig.1). カンナビノイドの中には幻覚作用などの中枢作用を持つ化合物があり, そのため大麻草は古くから乱用されてきた. カンナビノイドのうち Δ^9 -tetrahydrocannabinol (Δ^9 -THC)が最も中枢作用が強く大麻草の活性本体である. Δ^9 -THCは生の植物体中ではフェノールカルボン酸体である tetrahydrocannabinolic acid (THCA)の状態が存在する. THCA 自体は活性を持たないが, 収穫後に乾燥したり, 保存中に光や熱によって脱炭酸がおこり Δ^9 -THC へと変化する. 現在 120 種類以上のカンナビノイドが存在することが報告されており, このうち cannabidiol (CBD)はフェノールカルボン酸体 CBDA として fiber type の生の大麻草に最も多く含まれるカンナビノイドである. THCA と同じ前駆体 cannabigerolic acid (CBGA)から植物体内で CBDA は生合成される. CBD は Δ^9 -THCのような中枢作用は持たないが抗けいれん作用などの生理活性が見いだされているため医療用として応用されている国もある.

大麻草の成熟した茎や種子のみから抽出・製造された CBD を含有する製品については, 大麻取締法上の「大麻」に該当しないとされているため, 成熟した茎と種子から製造され違法でないとして標榜する CBD 製品も国内で市販されている. CBD オイル以外にアイソレートパウダーと称された高純度な粉末製品, チョコレートやグミなどの菓子類, コーヒー等の飲料, 錠剤やカプセル等のサプリメント製品または石鹸やバスソルトなどの食品以外の製品も出てきている. 最近では電子タバコ用のリキッドカートリッジ製品が増えている.

ところで令和 3 年頃より, 大麻草由来のカンナビノイドである Hexahydrocannabinol (HHC)を初めとする THC アナログの含有を標榜する製品がインターネット販売サイト上で販売されているのが確認されている. HHC は天然の大麻草から検出したとの報告もあるが, CBD などを原料として Δ^8 -tetrahydrocannabinol (Δ^8 -THC)または Δ^9 -THC を合成し, これを還元することでも得られる. HHC は

令和 4 年 3 月に指定薬物に指定され規制されている.

さらに最近では HHC より 3 位のアルキル側鎖が二つ長いヘプチル基である hexahydrocannabiphorol (HHCP)含有を標榜する製品が出現している. さらに Δ^8 -THC または Δ^9 -THC, HHC の 1 位水酸基をアセチル化した化合物である THCO, HHCO の含有を標榜する製品もでてきている. さらに Δ^8 -THC または Δ^9 -THC の 3 位のアルキル側鎖の長さが異なる化合物である THCV, THCB 及び THCH の含有を標榜する製品もでてきている. これらは主に電子タバコ用のリキッドカートリッジ製品としてインターネット上で売られている.

本研究では, 令和 3~4 年度に入手した THC アナログの含有を標榜する製品について, 成分を単離し NMR を用いて各異性体の構造を同定することにした. 今回新規流通危険ドラッグ成分として THC アナログの含有を標榜する 4 製品から同定した 6 化合物について報告する.

B. 研究方法

令和 4 年度に入手した THC アナログの含有を標榜する 4 製品について GC-MS, LC-MS 分析を行った. 未知成分については, NMR の解析により同定した.

1. 試料及び試薬

令和 3~4 年度に入手した THC アナログの含有を標榜するのうち 4 製品(オイル 4 製品)を分析に供した. LC-MS の移動相に用いたアセトニトリルは HPLC グレードを使用した. その他の試薬は市販特級品を使用した. 分析用標品としては, Cayman Chemicals (Ann Arbor, MI, USA), Chiron (Trondheim, Norway) より購入した試薬を用いた. また, その他の化合物は, 国立衛研において NMR 及び HR-MS 測定により同定したものを用いた. 抽出溶液の膜ろ過には, Ultrafree-MC (0.45 μm filter unit, Merck MILLIPORE 社製)を用いた.

2. MS 測定用試料の調製法

オイル製品は 1 mg を使用した。メタノール 1 mL を加えて超音波下 10 分間抽出を行った後、さらに膜ろ過を行い、不溶物を取り除いて測定試料とした。また、試料は適宜希釈して用いた。

3. 製品からの成分の単離

製品について、40mg をシリカゲルカラムクロマトグラフィーに付し Hex-Hex:EtoAc 50:1-40:1-30:1-1:1 で溶出して成分を単離した。

4. GC-MS 分析条件

装置:Agilent 社製 6890N GC 及び 5975 MSD
カラム:HP-1MS (30 m x 0.25 mm i.d., 膜厚 0.25 μ m, Agilent 社製), キャリアーガス:He, 1.1 mL/min, 注入法:スプリット 10:1, 注入量:1 μ L, 注入口温度:250 $^{\circ}$ C, カラム温度:200 $^{\circ}$ C (1 min hold)-5 $^{\circ}$ C/min-310 $^{\circ}$ C (7 min hold), トランスファーライン温度:280 $^{\circ}$ C, イオン化法:EI 法, scan range: m/z 40-550

5. LC-MS 分析条件

装置:[UPLC] Waters ACQUITY UPLC/[MS] Waters Single Quadrupole Detector (SQD), カラム:XBridge C18 (2.1 x 150 mm, 3.5 μ m, Waters 社製), 移動相 A:0.1% ギ酸, 移動相 B:0.1% ギ酸 アセトニトリル/メタノール(60:40), A:B 50:50 (0 min)-10:90 (30 min, 5 min hold), 流速:0.3 mL/min, カラム温度:40 $^{\circ}$ C, 注入量:1 μ L, 検出:ダイオードアレイ検出器(210 - 450 nm)及び質量検出器, 質量分析条件 イオン化法:ESI 法, ポジティブモード, コーン電圧:30V, キャピラリー電圧:2500V

質量分析条件

イオン化:エレクトロスプレーイオン化(ESI)法, Positive and negative mode, Desolvation gas flow: N₂ 650 L/h, Desolvation gas temp.:350 $^{\circ}$ C, Cone voltage:30 V, Capillary voltage:2500 V, scan range: m/z 120-650

6. 高分解能 MS 分析

LC-Q-TOF-MS

装置:Acquity UPLC and Xevo G2-X2 QTOFMS (Waters, Milford, MA, USA), カラム:ACQUITY

HSS T3 (2.1 mm i.d. x 100 mm, 1.8 μ m, Waters 社製), ガードカラム:Van Guard HSS T3 (2.1 mm i.d. x 5 mm, 1.7 μ m, Waters 社製), 移動相 A:0.1% ギ酸水溶液, 移動相 B:0.1% ギ酸アセトニトリル溶液, グラジエント条件:50:50 (0 min)-10:90 (30 min, 5 min hold), 測定波長:210-450 nm, 流速:0.3 mL/min, カラム温度:40 $^{\circ}$ C, 注入量:1 μ L, 検出:フォトダイオードアレイ検出器および質量検出器

質量分析条件

イオン化:エレクトロスプレーイオン化(ESI)法, Positive mode; Source temperature, 120 $^{\circ}$ C; desolvation gas, nitrogen (flow rate of 800 L/h at 400 $^{\circ}$ C); capillary voltage, 2000 V; cone voltage, 20 V; collision energy, 2 V; mass spectral range, m/z 100-1000. Leucine enkephalin [m/z 278.1141 and 508.20783 ([M+H]⁺)] was used as a substance for lock mass ions during the measurements.

7. NMR 測定

NMR 装置:JEOL 製 ECZ-600, ECZ-800 または ECA-800

測定核種:¹H, ¹³C, 測定溶媒:chloroform-*d* (99.96%), methanol-*d*₄ (99.96%) and dimethyl sulfoxide (DMSO)-*d*₆ (99.96%) (ISOTEC 社製)。

各種 NMR (¹H-NMR, ¹³C-NMR, heteronuclear multiple quantum coherence (HMQC), heteronuclear multiple-bond correlation (HMBC), HH correlation spectroscopy (HH-COSY), nuclear Overhauser effect (NOE)) 測定を行った。

C. 研究結果・考察

分析を行った危険ドラッグ 4 製品から 6 種類の新規流通化合物を同定した。今回同定した化合物(1-6)の構造は Fig. 2 に示し, 4 製品(A-D)のアセトニトリル抽出試料の GC-MS, LC-MS データを Fig. 3-10 に示した。化合物の NMR データを Table 1-3 に示した。

製品 A は GC-MS では保持時間 8.33 分に主成分とみられる化合物 1 のピークが検出され(Fig.

3a), そのマスペクトルは Fig. 3b に示す通りであった. LC-MS ではそれぞれ保持時間 18.2 分に m/z 287 $[M+H]^+$ のピークが観測された. NMR 分析の結果, 化合物 **1** は Δ^8 -THC の 3 位のアルキル側鎖がペンチルでなくプロピルである構造 (6aR,10aR)-6a,7,10,10a-tetrahydro-6,6,9-trimethyl-3-propyl-6H-dibenzo[b,d]pyran-1-ol (Δ^8 -tetrahydrocannabivarin, Δ^8 -THCV) (Fig. 2) であると同定した. さらに GC-MS では保持時間 8.59 分に, LC-MS では保持時間 27.8 分にマイナー成分とみられる化合物 **2** のピークが検出された (Fig. 3a, Fig. 4a). LC-MS では m/z 287 に $[M+H]^+$ のピークが観測され, GC-MS で m/z 286 に分子イオンも観測されたが, そのマスペクトルは化合物 **1** と異なっていた (Fig. 3c). Δ^9 -THCV の標準品と一致したため化合物 **2** は, 6aR,7,8,10aR-tetrahydro-6,6,9-trimethyl-3-propyl-6H-dibenzo[b,d]pyran-1-ol (11 α -hexahydrocannabinol, Δ^9 -THCV) (Fig. 2) であると同定した.

製品 B は GC-MS では保持時間 9.76, 10.13 分にマイナー成分とみられる化合物 **3** と主成分とみられる化合物 **4** のピークが検出され (Fig. 5a), そのマスペクトルは Fig. 5b, 5c に示す通りであった. LC-MS ではそれぞれ保持時間 20.8, 20.3 分に m/z 301 に $[M+H]^+$ のピークが観測された. 化合物 **3** と **4** の NMR 分析の結果, それぞれ Δ^8 -THC と Δ^9 -THC のアルキル側鎖がペンチルでなくブチルである構造であることがわかった. 以上の結果より, 製品 B に含有される化合物 **3** を *trans*-3-butyl-6aR,7,10,10a-tetrahydro-6,6,9-trimethyl-6H-dibenzo[b,d]pyran-1-ol (Δ^8 -tetrahydrocannabutol, Δ^8 -THCB, Fig. 2), 化合物 **4** を *trans*-3-butyl-6aR,7,8,10a-tetrahydro-6,6,9-trimethyl-6H-dibenzo[b,d]pyran-1-ol (Δ^9 -tetrahydrocannabutol, Δ^9 -THCB, Fig. 2) と同定した.

製品 C は主成分の CBN の他に, GC-MS では保持時間 12.6 分, LC-MS では保持時間 28.2 分にマイナー成分とみられる化合物 **5** のピークが検出された (Fig. 7a, Fig. 8a). LC-MS では m/z 329

に $[M+H]^+$ のピークが観測され, GC-MS で m/z 328 に分子イオンも観測された. 化合物 **5** の NMR 分析の結果, Δ^8 -THC のアルキル側鎖がペンチルでなくヘキシルである構造であることがわかった. 以上の結果より, 製品 C に含有される化合物 **5** の (6aR,10aR)-3-hexyl-6a,7,10,10a-tetrahydro-6,6,9-trimethyl-6H-dibenzo[b,d]pyran-1-ol (Δ^8 -tetrahydrocannabihexol, Δ^8 -THCH, Fig. 2) であると同定した.

製品 D は GC-MS では保持時間 13.0 分に主成分とみられる化合物 **6** のピークが検出され (Fig. 9a), そのマスペクトルは Fig. 9b に示す通りであった. LC-MS では保持時間 25.2 分に m/z 329 $[M+H]^+$ のピークが観測された. NMR 分析の結果, 化合物 **6** は Δ^9 -THC の 3 位のアルキル側鎖がペンチルでなくヘキシルである構造 (6aR,10aR)-3-hexyl-6a,7,8,10a-tetrahydro-6,6,9-trimethyl-6H-dibenzo[b,d]pyran-1-ol (Δ^9 -tetrahydrocannabihexol, Δ^9 -THCH) (Fig. 2) であると同定した. なお製品 D は主成分の Δ^9 -THCH の他に, GC-MS では保持時間 13.0 分, LC-MS では保持時間 25.8 分にマイナー成分の Δ^8 -THCH(**5**) のピークも検出された (Fig. 9a, Fig. 10a).

以上, 4 種類のオイル状危険ドラッグ製品について, それぞれの成分を同定した. しかしながら製品中の成分について構造不明の化合物があるため引き続き分析を行う.

D. 結論

本研究では, 令和 3~4 年度に入手した 4 種類のオイル状危険ドラッグ製品について, GC-MS, LC-MS 分析, NMR 分析を行った. その結果, THCV の含有を標榜する製品からは, Δ^8 -THCV と Δ^9 -THCV, THCB の含有を標榜する製品からは Δ^8 -THCB と Δ^9 -THCB を同定した. THCH の含有を標榜する製品からは Δ^8 -THCH と Δ^9 -THCH を同定した. 今後も新規のカンナビノイド類似化合物の流通が懸念される. 引き続き危険ドラッグの新規出現を監視していく予定である.

E. 参考文献

- 1) 法務省, 令和4年版 犯罪白書
- 2) 厚生労働省, 「大麻取扱者免許申請に関するパンフレット」, 東京(2016)
- 3) Handbook of Cannabis, Pertwee, R. ed., Oxford(2014)
- 4) 山本郁男, 大麻の文化と科学 –この乱用薬物を考える–, 廣川書店, 東京(2001)
- 5) 厚生労働省, 大麻・けしの見分け方, 東京(2016)
- 6) 船山信次, ファルマシア, 52(9), 827-831(2016)
- 7) 森元聡, ファルマシア, 52(9), 832-836(2016)
- 8) 田中理恵, 花尻(木倉)瑠理:危険ドラッグ製品中の Hexahydrocannabinol (HHC)の同定, 日本法中毒学会第41年会講演要旨集, 2022 pp58.
- 9) 田中理恵, 河村麻衣子, 水谷佐久美, 花尻

(木倉)瑠理:令和3年-令和4年の新規流通危険ドラッグ成分の同定, 第59回全国衛生化学技術協議会年会講演集, 2022 pp270-271.

F. 健康危険情報

特になし.

G. 研究発表

学会発表

- 1) 田中理恵, 花尻(木倉)瑠理:インターネット上で流通するオイル製品中の THC アナログの同定, 日本薬学会第143年会(2023.3.26, 札幌)

論文発表

なし.

H. 知的財産権の出願・登録状況

特になし.

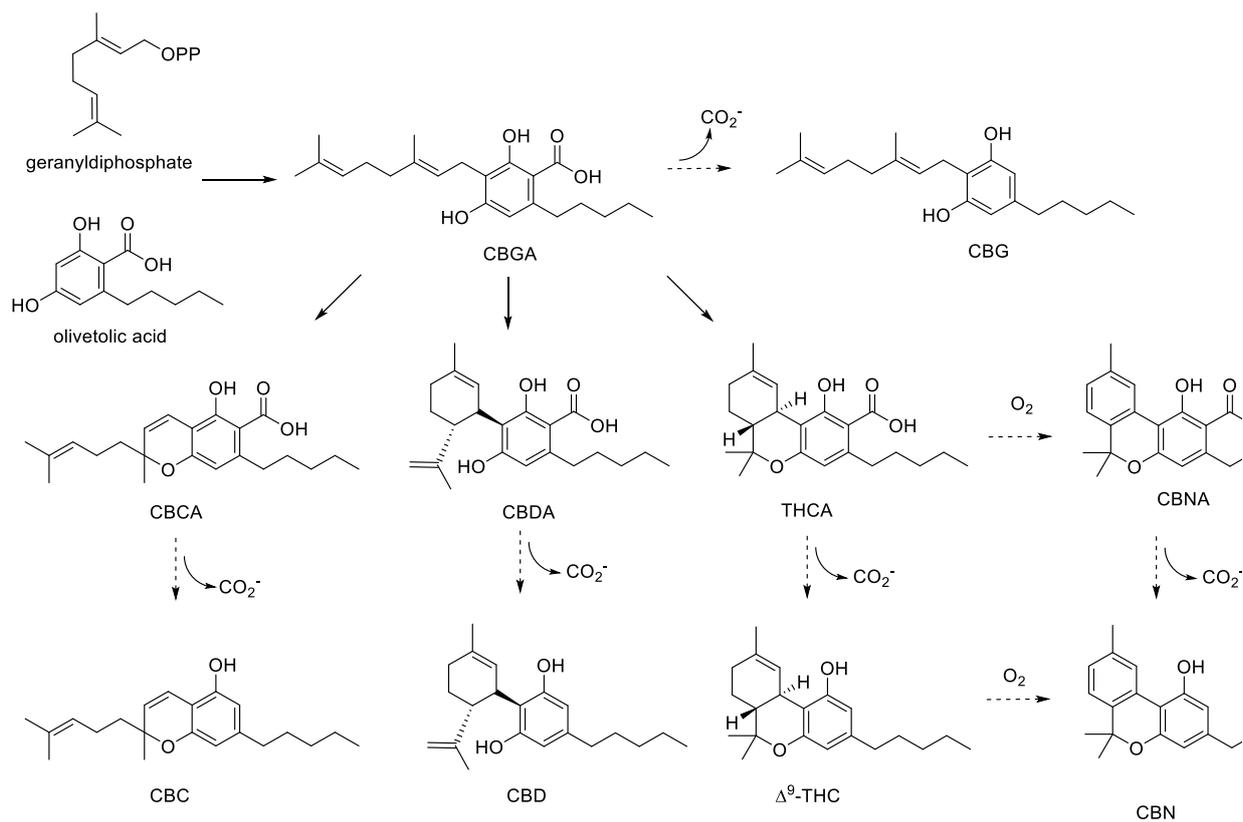


Fig. 1 Biosynthesis of cannabinoids

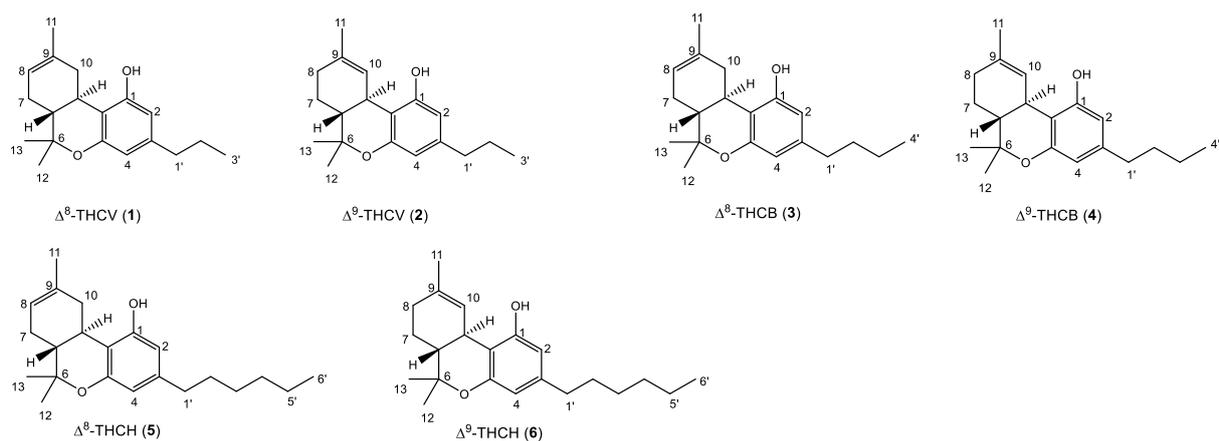


Fig. 2 Chemical structures of Δ⁸-THCV, Δ⁹-THCV, Δ⁸-THCB, Δ⁹-THCB, Δ⁸-THCH and Δ⁹-THCH.

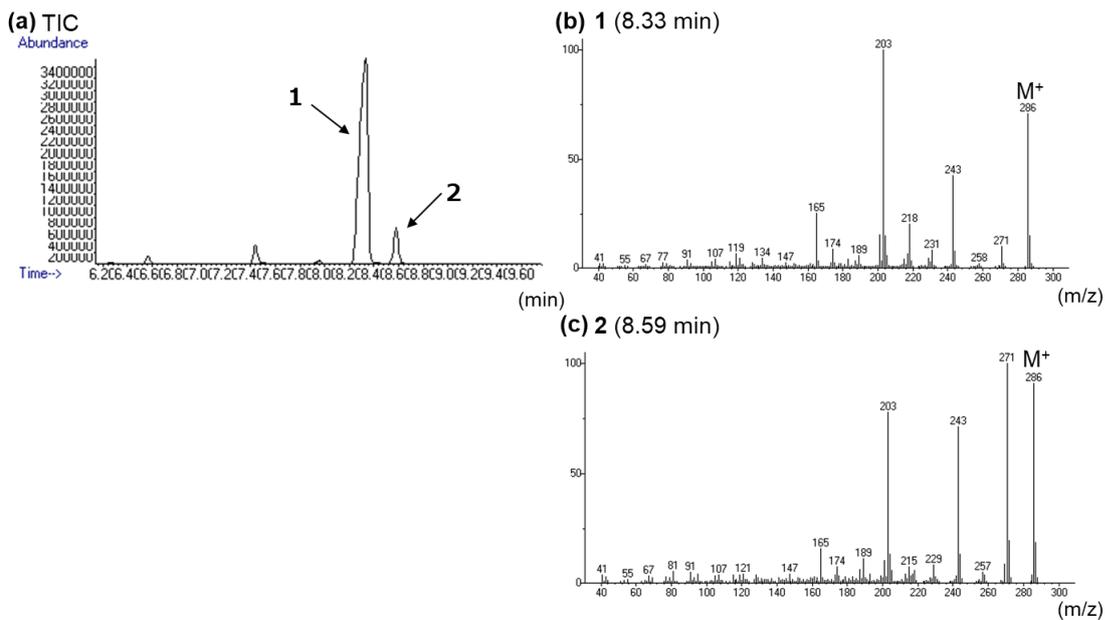


Fig. 3 GC-MS analysis of Product A. TIC (a), and EI mass spectra of peak 1 (b) and peak 2 (c)

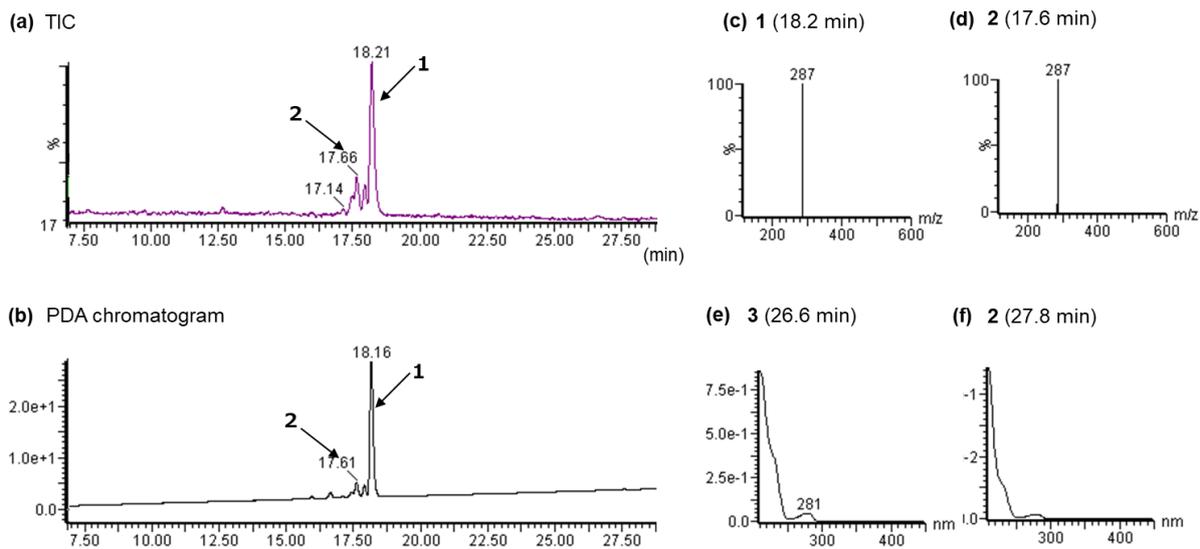


Fig. 4 LC-MS analysis of Product A. TIC (a), LC-UV-PDA chromatogram (b), ESI mass spectra (c, d) and UV spectra (e, f)

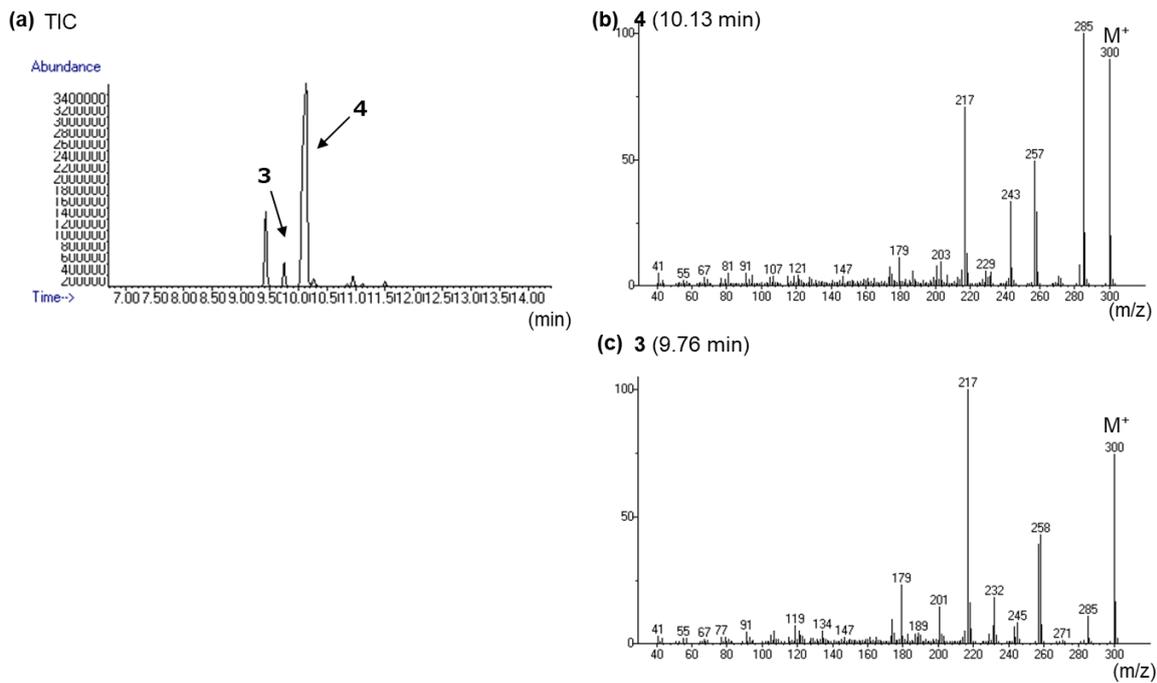


Fig. 5 GC-MS analysis of Product B. TIC (a), and EI mass spectra of peak 4 (b) and peak 3 (c).

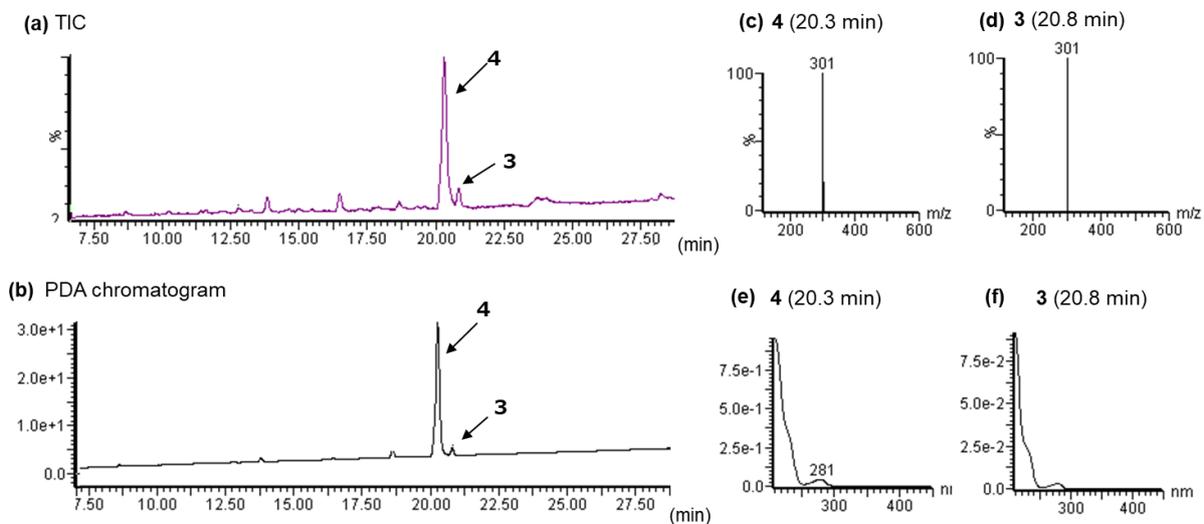


Fig. 6 LC-MS analysis of Product B. TIC (a), LC-UV-PDA chromatogram (b), ESI mass spectra (c, d) and UV spectra (e, f)

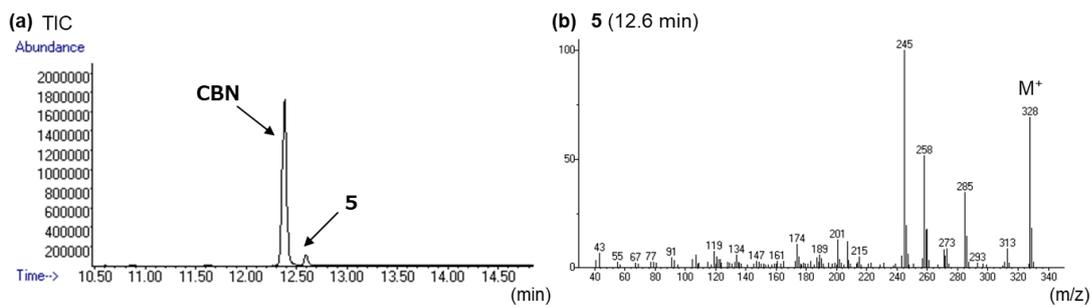


Fig. 7 GC-MS analysis of Product C. TIC (a), and EI mass spectra of peak 5 (b)

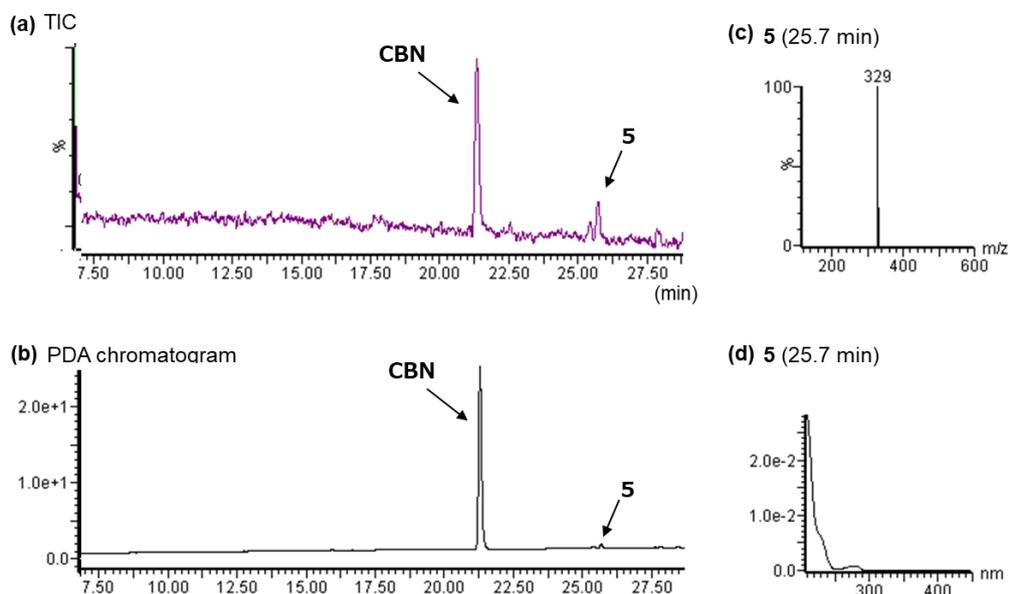


Fig. 8 LC-MS analysis of Product C. TIC (a), LC-UV-PDA chromatogram (b), ESI mass spectra (c) and UV spectra (d)

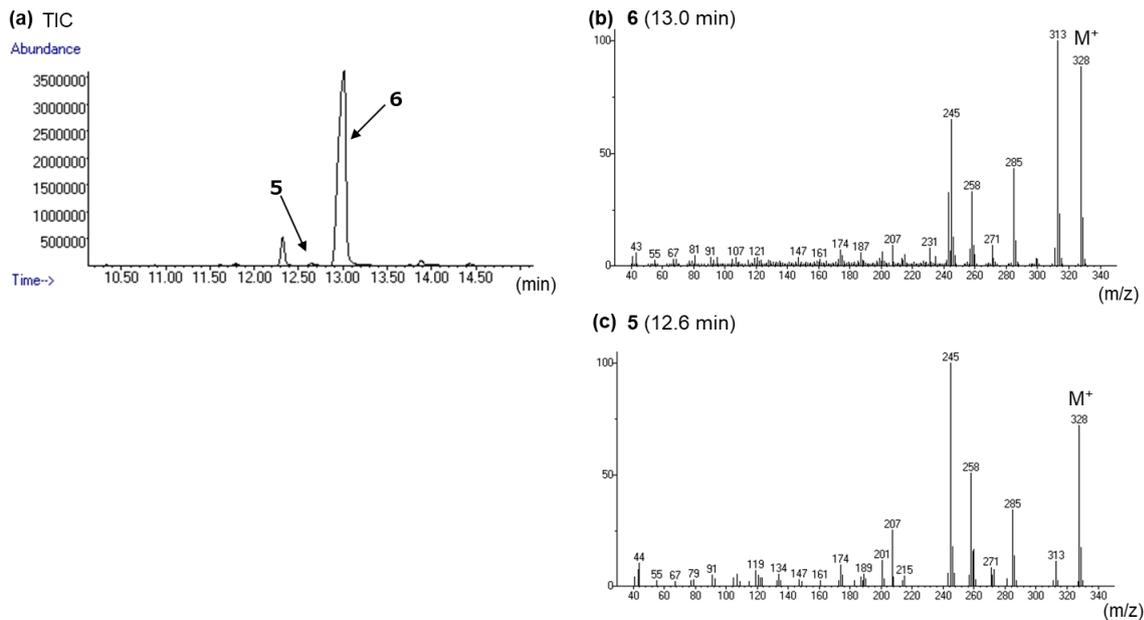


Fig. 9 GC-MS analysis of Product D. TIC (a), and EI mass spectra of peak 6 (b) and peak 5 (c)

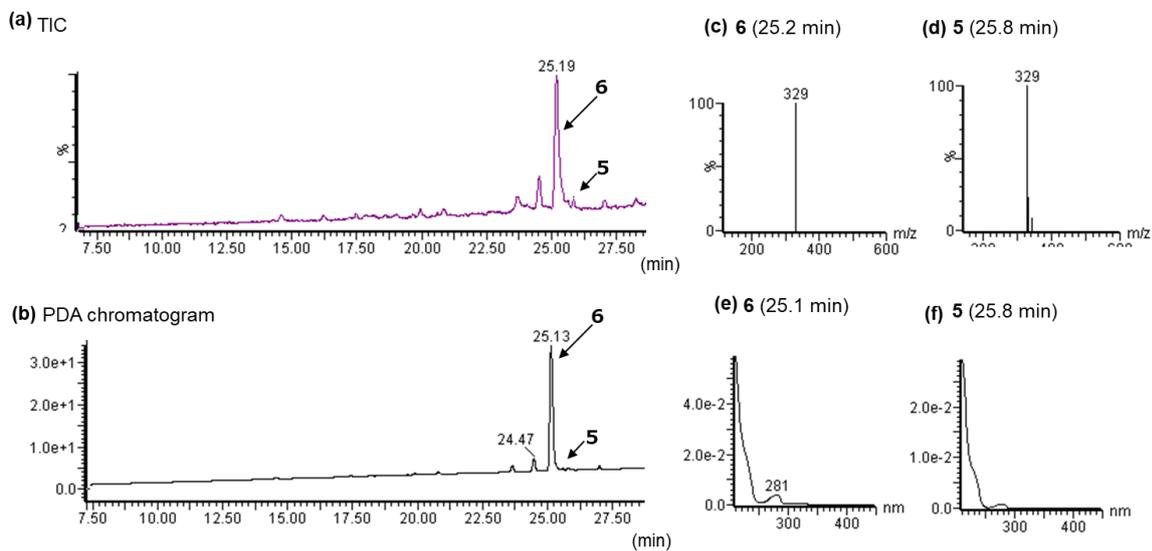


Fig. 10 LC-MS analysis of Product D. TIC (a), LC-UV-PDA chromatogram (b), ESI mass spectra (c, d) and UV spectra (e, f)

Table 1 NMR data of Δ^8 -THCV (**1**)^a

Δ^8 -THCV (1) in Methanol- <i>d</i> ₄		
No.	¹³ C	¹ H
1	157.8	–
2	108.5	6.38, 1H, d, <i>J</i> =1.4 Hz
3	143.2	–
4	109.8	6.48, 1H, d, <i>J</i> =1.4 Hz
5	155.7	–
6	77.3	–
6a	46.8	1.70, 1H, m, overlapped
7	29.0	1.80, 1H, m, overlapped 2.14, 1H, m
8	120.4	5.44, 1H, d, <i>J</i> =3.8 Hz –
9	135.8	–
10	37.2	1.82, 1H, m, overlapped 2.76, 1H, dd, <i>J</i> =4.9, 14.7 Hz
10a	33.2	2.54, 1H, ddd, <i>J</i> =4.9, 11.1, 11.1 Hz
10b	111.8	–
11	23.2	1.68, 3H, s
12	18.6	1.06, 3H, s
13	28.0	1.32, 3H, s
1'	38.8	2.38, 2H, t, <i>J</i> =7.8 Hz
2'	25.4	1.57, 2H, m, overlapped
3'	14.2	0.90, 3H, t, <i>J</i> =7.3 Hz

^a Recorded at 800 MHz (¹H) and 200 MHz (¹³C), respectively; data in δ ppm (*J* in Hz).

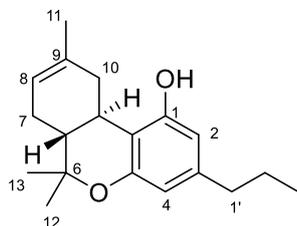


Table 2 NMR data of Δ^8 -THCB (**3**) and Δ^9 -THCB (**4**)

No.	Δ^8 -THCB (3) in Methanol- d_4		Δ^9 -THCB (4) in Methanol- d_4	
	^{13}C	^1H	^{13}C	^1H
1	157.8	–	155.2	–
2	108.4	6.14, 1H, d, $J=1.6$ Hz	108.4	6.13, 1H, d, $J=1.3$ Hz
3	143.4	–	143.0	–
4	109.7	6.07, 1H, d, $J=1.6$ Hz	109.7	6.06, 1H, d, $J=1.3$ Hz
5	155.9	–	155.8	–
6	77.3	–	77.9	–
6a	46.8	1.68, 1H, m, overlapped	47.5	1.59, 1H, m, overlapped
7	29.0	1.81, 1H, m	26.3	1.39, 1H, m
8	120.4	2.14, 1H, m, overlapped 5.41, 1H, d-like, $J = \text{Hz}$	32.3	1.93, 1H, m 1.51, 1H, m, overlapped 2.16, 1H, m
9	135.8	–	133.5	–
10	37.2	1.67, 2H, m, overlapped	126.2	5.96, 1H, s
10a	33.2	2.61, 1H, ddd, $J=4.9, 11.5, 11.5$ Hz	35.2	3.02, 1H, d-like, $J=12.8$ Hz
10b	111.7	–	110.4	–
11	23.8	1.67, 3H, s	23.6	1.65, 3H, s
12	18.6	1.05, 3H, s	19.4	1.04, 3H, s
13	28.0	1.32, 3H, s	28.0	1.36, 3H, s
1'	36.3	2.39, 2H, m, overlapped	36.3	2.40, 2H, t, $J=7.7$ Hz
2'	34.6	1.52, 2H, m, overlapped	34.6	1.53, 2H, m, overlapped
3'	23.4	1.33, 2H, m, overlapped	23.4	1.33, 2H, m, overlapped
4'	14.3	0.92, 3H, t, $J=7.5$ Hz	14.3	0.92, 3H, t, $J=7.5$ Hz

^a Recorded at 800 MHz (^1H) and 200 MHz (^{13}C), respectively; data in δ ppm (J in Hz).

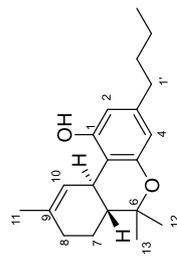
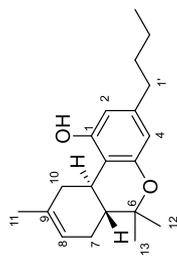


Table 3 NMR data of Δ^8 -THCH (**5**) and Δ^9 -THCH (**6**)

No.	Δ^8 -THCH (5) in Methanol- <i>d</i> ₄		Δ^9 -THCH (6) in Methanol- <i>d</i> ₄	
	¹³ C	¹ H	¹³ C	¹ H
1	157.8	—	157.2	—
2	108.4	6.14, 1H, d, <i>J</i> =1.6 Hz	108.4	6.15, 1H, d, <i>J</i> =1.6 Hz
3	143.4	—	143.3	—
4	109.7	6.07, 1H, d, <i>J</i> =1.6 Hz	109.7	6.06, 1H, d, <i>J</i> =1.6 Hz
5	155.8	—	155.8	—
6	77.4	—	77.9	—
6a	46.8	1.70, 1H, m, overlapped	47.4	1.59, 1H, ddd, <i>J</i> =2.0, 12.7, 12.7 Hz
7	29.0	1.81, 1H, m, overlapped	26.3	1.36, 1H, m, overlapped
		2.13, 1H, m		1.93, 1H, m
8	120.4	5.41, 1H, d, <i>J</i> =3.3 Hz	32.3	2.16, 2H, m
9	135.8	—	133.5	—
10	37.2	1.68, 2H, m, overlapped	126.2	6.92, 1H, s
10a	33.2	2.61, 1H, ddd, <i>J</i> =4.8, 11.3, 11.3 Hz	35.2	3.14, 1H, m
10b	111.8	—	116.5	—
11	23.7	1.67, 3H, s	23.6	1.65, 3H, s
12	18.6	1.05, 3H, s	19.4	1.04, 3H, s
13	28.0	1.32, 3H, s	28.0	1.36, 3H, s
1'	36.7	2.40, 2H, t, <i>J</i> =7.8 Hz	36.7	2.39, 2H, t, <i>J</i> =7.8 Hz
2'	32.4	1.53, 2H, m, overlapped	32.4	1.54, 1H, m, overlapped
3'	30.1	1.31, 2H, m, overlapped	30.1	1.30, 2H, m, overlapped
4'	32.9	1.30, 2H, m, overlapped	32.9	1.30, 2H, m, overlapped
5'	23.7	1.30, 2H, m, overlapped	23.7	1.30, 2H, m, overlapped
6'	14.4	0.90, 3H, t, <i>J</i> =7.1 Hz	14.4	0.99, 3H, t, <i>J</i> =7.8 Hz

^a Recorded at 800 MHz (¹H) and 200 MHz (¹³C), respectively; data in δ ppm (*J* in Hz).