投与量・期間：100 uL/24 時間
参照文献
NTIS** National Technical Information Service. (Springfield, VA 22161) Formerly U.S. Clearinghouse for Scientific & Technical Information. [Vol.,頁,年(19-)]OTS0572030

急性毒性に関するデータ

<<試験方法>> LC50 試験(50%致死濃度試験).
曝露経路　：吸入.
被験動物　：げっ歯類-ラット.
投与量・期間：15850 ug/m3/2 時間
毒性影響　：致死量以外に毒性影響に関する報告はない.
参照文献
GTPZAB Gigiena Truda i Professional'nye Zabolevaniya. Labor Hygiene and Occupational Diseases. (V/O Mezhdunarodnaya Kniga, 113095 Moscow, USSR) V.1-36, 1957-1992. For publisher information, see MTPEEI [Vol.,頁,年(19-)]16(6),46,1972

<<試験方法>> LC50 試験(50%致死濃度試験).
曝露経路　：吸入.
被験動物　：げっ歯類-マウス
投与量・期間：12300 ug/m3/2 時間
毒性影響　：致死量以外に毒性影響に関する報告はない.
参照文献
GTPZAB Gigiena Truda i Professional'nye Zabolevaniya. Labor Hygiene and Occupational Diseases. (V/O Mezhdunarodnaya Kniga, 113095 Moscow, USSR) V.1-36, 1957-1992. For publisher information, see MTPEEI [Vol.,頁,年(19-)]16(6),46,1972

<<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　：哺乳動物-種未特定.
投与量・期間：138 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.
参照文献
GTPZAB Gigiena Truda i Professional'nye Zabolevaniya. Labor Hygiene and Occupational Diseases. (V/O Mezhdunarodnaya Kniga, 113095 Moscow, USSR) V.1-36, 1957-1992. For publisher information, see MTPEEI [Vol.,頁,年(19-)]16(6),46,1972

その他の多回投与試験

<<試験方法>> 認知されている最小毒性濃度(TCLo)試験.
曝露経路　：吸入.
被験動物　：げっ歯類-ラット.
投与量・期間：250 ppm/6 時間/13 日間間欠投与
毒性影響　：〔行動〕傾眠(全身活動度の低下).
〔肺，胸郭，または呼吸〕呼吸困難.
〔栄養と総代謝〕体重減少または体重増加.
参照文献
BJIMAG British Journal of Industrial Medicine. (British Medical Journal, Box 560B, Kennebunkport, ME 04046) V.1- 1944- [Vol.,頁,年(19-)]27,1,1970

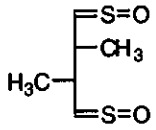
<<試験方法>> 最小毒性量(TDLo)試験.
曝露経路　：皮膚への塗布
被験動物　：げっ歯類-ウサギ.
投与量・期間：2126 mg/kg/4 週間間欠投与
毒性影響　：〔皮膚と付属器官〕その他の皮膚炎.(全身ばく露後)
参照文献
NTIS** National Technical Information Service. (Springfield, VA 22161) Formerly U.S. Clearinghouse for Scientific & Technical Information. [Vol.,頁,年(19-)]OTS0000696-1

<<試験方法>> 最小毒性量(TDLo)試験.
曝露経路　：皮膚への塗布
被験動物　：げっ歯類-ウサギ.
投与量・期間：13819 mg/kg/16 日間間欠投与

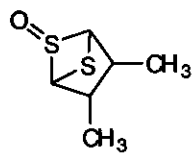
毒性影響　　：〔心臓〕その他の変化.
〔皮膚と付属器官〕その他の皮膚炎.（全身ばく露後）
慢性毒性に関するデータ：死亡.
参照文献
NTIS** National Technical Information Service. (Springfield, VA 22161) Formerly U.S. Clearinghouse for Scientific & Technical Information. [Vol.,頁,年(19-)]OTS0000696-1

§ Dimethyl trisulfide(CAS 名)
[化学名・別名]Methyl trisulfide(旧 CAS 名). 2,3,4-Trithiapentane
[CAS No.]3658-80-8
[化合物分類]脂肪族化合物(Disulfides, trisulfide)
[構造式]Me-S-S-S-Me
[分子式]$C_2H_6S_3$
[分子量]126.267
[基原]ホップ(*Humulus lupulu*)の精油, ニンニク(*Allium sativum*), *Allium cepa* and *Allium ursinum* から見つかる. Found in overcooked Brassica vegetables
[用途]An alarm pheromone in some ants
[沸点]Bp_{30} 70-71 ℃

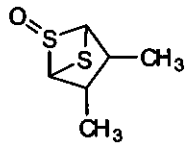
----------文献----------
Armitage, D.A. et al., J.C.S.(C), 1971, 2840,（合成法, H-NMR, ガスクロマト）
Peppard, T.L. et al., Phytochemistry, 1977, 16, 2020,（分離, Mass, ガスクロマト）
Whitfield, F.B. et al., Chem. Ind.（London）, 1981, 692,（分離）

§ 2,3-Dimethyl-1,4-butanedithial; (2*RS*,3*R*)-form, *S*,*S*'-Dioxide (*Z*,*Z*-)
[CAS No.]127793-93-5
[構造式]

[分子式]$C_6H_{10}O_2S_2$
[分子量]178.276
[正確な分子量]178.01222
[基原]タマネギ(*Allium cepa*)
[性状]塊
[融点]Mp 48 ℃(分解)

----------文献----------
Block, E. et al., J.A.C.S., 1990, 112, 4584; 1996, 118, 2799,（分離, 合成法, H-NMR, C13-NMR, Mas）

§ 2,3-Dimethyl-5,6-dithiabicyclo[2.1.1]hexane; (2*R,3*R**)-form, 5 α-Oxide**
[化学名・別名]Zwiebelane B
[CAS No.]120709-22-0
[化合物分類]脂肪族化合物(Bicycloheteroalicyclics (2 ×))
[構造式]

[分子式]$C_6H_{10}OS_2$
[分子量]162.276
[正確な分子量]162.017305
[基原]タマネギ(*Allium cepa*)

----------文献----------
Bayer, T. et al., J.A.C.S., 1989, 111, 3085; 1990, 112, 4584,（分離, 構造決定, 合成法）
Block, E. et al., J. Agric. Food Chem., 1992, 40, 2431,（ガスクロマト, Mas）
Block, E. et al., J.A.C.S., 1996, 118, 2791; 2799,（合成法, H-NMR, C13-NMR, Mas）

§ 2,3-Dimethyl-5,6-dithiabicyclo[2.1.1]hexane; (2*RS*,3*SR*)-form, 5 α-Oxide
[化学名・別名]Zwiebelane A
[CAS No.]120637-81-2
[化合物分類]脂肪族化合物(Bicycloheteroalicyclics (2 ×))
[構造式]

[分子式]$C_6H_{10}OS_2$

[分子量]162.276
[正確な分子量]162.017305
[基原]タマネギ(*Allium cepa*)
[性状]オイル
----------文献----------
Bayer, T. et al., J.A.C.S., 1989, 111, 3085; 1990, 112, 4584, (分離, 構造決定, 合成法)
Block, E. et al., J. Agric. Food Chem., 1992, 40, 2431, (ガスクロマト, Mas)
Block, E. et al., J.A.C.S., 1996, 118, 2791; 2799, (合成法, H-NMR, C13-NMR, Mas)

§ Di-2-propenyl disulfide(CAS 名)
[化学名・別名]Diallyl disulfide. Allyl disulfide. Garlicin
[CAS No.]2179-57-9
[関連 CAS No.]72869-75-1
[化合物分類]脂肪族化合物(Unbranched alkenic hydrocarbon)
[構造式] $H_2C=CHCH_2-S-S-CH_2CH=CH_2$
[分子式]$C_6H_{10}S_2$
[分子量]146.277
[正確な分子量]146.02239
[基原]ニンニクオイルの主成分. ニンニクオイル(*Allium sativum*), また *Allium cepa*, *Allium ursinum*, *Descurainia sophia* の種子から分離
[用途]殺虫剤
[沸点]Bp_{16} 78-80 ℃
[化学物質毒性データ総覧(RTEC)登録番号]BB1000000
----------文献----------
Aldrich Library of FT-IR Spectra: Vapor Phase, 1989, 3, 354A, (IR)
Milligan, B. et al., J.C.S., 1963, 3608, (ガスクロマト)
Schultz, O.E. et al., Pharmazie, 1965, 20, 441, (分離)
Amonkar, S.V. et al., Science (Washington, D.C.), 1971, 174, 1343
Ford, R.A. et al., Food Chem. Toxicol., 1988, 26, 297
Bartkowska, B. et al., Acta Cryst. C, 1997, 53, 1064, (結晶構造)

*****RTECS (化学物質毒性データ) *****
生体影響物質　　: 変異原物質

*****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 : 260 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.
参照文献
FCTOD7 Food and Chemical Toxicology. (Pergamon Press Inc., Maxwell House, Fairview Park, Elmsford, NY 10523) V.20- 1982- [Vol.,頁,年(19-)]26,297,1988
〈〈試験方法〉〉 LD50 試験(50%致死量試験).
曝露経路　　: 皮膚への塗布
被験動物　　: げっ歯類-ウサギ.
投与量・期間 : 3600 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.
参照文献
FCTOD7 Food and Chemical Toxicology. (Pergamon Press Inc., Maxwell House, Fairview Park, Elmsford, NY 10523) V.20- 1982- [Vol.,頁,年(19-)]26,297,1988

*****その他の多回投与試験*****

〈〈試験方法〉〉 最小毒性量(TDLo)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 : 878 mg/kg/6 日間間欠投与

毒性影響　　：〔内分泌〕その他の変化.
〔内分泌〕脾臓重量の変化.
〔血液〕有色赤血球または有核赤血球.

参照文献

JAFCAU Journal of Agricultural and Food Chemistry. (American Chemical Soc., Distribution Office Dept. 223, POB 57136, West End Stn., Washington, DC 20037) V.1- 1953- [Vol.,頁,年(19-)] 42,959,1994

*****変異原性に関するデータ*****

〈〈試験方法〉〉細胞遺伝学分析試験
試験系　　：げっ歯類-マウス白血球.
投与量・期間：8 mg/L

参照文献

FCTOD7 Food and Chemical Toxicology. (Pergamon Press Inc., Maxwell House, Fairview Park, Elmsford, NY 10523) V.20- 1982- [Vol.,頁,年(19-)]35,379,1997

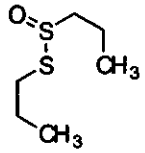
〈〈試験方法〉〉姉妹染色分体交換試験
試験系　　：げっ歯類-マウス白血球.
投与量・期間：10 mg/L

参照文献

FCTOD7 Food and Chemical Toxicology. (Pergamon Press Inc., Maxwell House, Fairview Park, Elmsford, NY 10523) V.20- 1982- [Vol.,頁,年(19-)]35,379,1997

§ Dipropyl disulfide; *S*-Oxide

[化学名・別名]*S*-Propyl 1-propanesulfinothioate(CAS 名)
[CAS No.]1948-52-3
[化合物分類]脂肪族化合物(Disulfides, trisulfide)
[構造式]



[分子式]$C_6H_{14}OS_2$
[分子量]166.308
[正確な分子量]166.048605
[基原]*Allium cepa*, *Allium sativa*, その他の *Allium* spp.
[性状]液体
[UV]:[neutral] λ_{max} 240 () (溶媒の報告はない)

----------文献----------

Allum, K.G. et al., Spectrochim. Acta A, 1968, 24, 927
Tada, M. et al., Agric. Biol. Chem., 1988, 52, 2383, (分離, 酸化物)
Bayer, T. et al., Phytochemistry, 1989, 28, 2373, (分離, 酸化物)
Barton, D.H.R. et al., Tetrahedron, 1991, 47, 6127, (合成法, IR, H-NMR, C13-NMR)

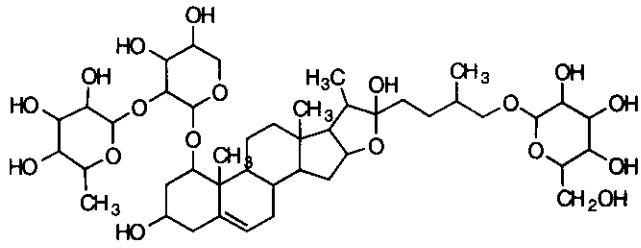
§ Ethyl isopropyl disulfide

[化学名・別名]Ethyl 1-methylethyl disulfide(CAS 名)
[CAS No.]53966-36-2
[化合物分類]脂肪族化合物(Disulfides, trisulfide)
[構造式]$EtS\text{-}S\text{-}CH(CH_3)_2$
[分子式]$C_5H_{12}S_2$
[分子量]136.282
[正確な分子量]136.03804
[基原]*Allium cepa*
[沸点]Bp_9 49 ℃

----------文献----------

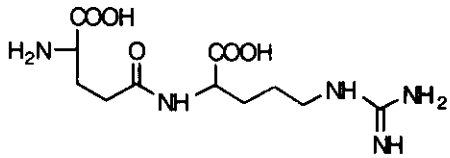
Alonso, M.E. et al., J.O.C., 1978, 43, 4491, (合成法, Mas)
Org. Synth., 1978, 58, 147
Gupta, D. et al., Can. J. Chem., 1981, 59, 543, (Mas)
Talyzin, V.V. et al., Zh. Anal. Khim., 1988, 43, 911, (分離)

§ Furost-5-ene-1,3,22,26-tetrol; (1 β,3 β,22 α,25)-form, 1-*O*-[α-L-Rhamnopyranosyl-(1 → 2)-α

-L-arabinopyranoside], 26-*O*-β-D-glucopyranoside
[化学名・別名]Alliofuroside A
[CAS No.]105798-62-7
[化合物分類]ステロイド(Furostane steroid).
(C27)
[構造式]

[分子式]$C_{44}H_{72}O_{18}$
[分子量]889.042
[正確な分子量]888.47187
[基原]*Allium cepa*
[性状]結晶
[融点]Mp 164-166 ℃
[比旋光度]:[α]$_D^{20}$ -63.7 (c, 1.11 in Py)

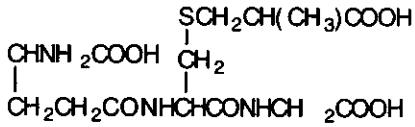
----------文献----------

Kravets, S.D. et al., Khim. Prir. Soedin., 1986, 22, 188; Chem. Nat. Compd. (Engl. Transl.), 1986, 22, 174, (分離, IR)
Yong, L.D. et al., Arch. Pharmacal Res., 1989, 295, (Spicatoside B)
Qulad-Ali, A. et al., Phytochemistry, 1996, 42, 895, (分離, H-NMR, C13-NMR)
Mimaki, Y. et al., Phytochemistry, 1998, 48, 485, (Ruscus aculeatus saponin)

§ N^2-γ-Glutamylarginine; L,L-form
[CAS No.]31106-03-3
[化合物分類]アミノ酸とペプチド(Dipeptide)
[構造式]

[基原]*Allium cepa* (タマネギ), *Panax ginseng*, *Sphagnum palustre*
[比旋光度]:[α]$_D^{23}$ +9.9 (c, 1 in 1*M* HCl)

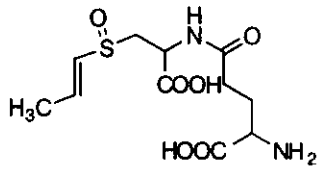
----------文献----------

Matsutani, H. et al., Phytochemistry, 1988, 27, 931, (分離, 合成法)
Chen, Z.-K. et al., J. Pept. Res., 1998, 52, 137, (分離)

§ γ-L-Glutamyl-*S*-(2-carboxy-1-propyl) cysteinylglycine
[CAS No.]6710-22-1
[化合物分類]アミノ酸とペプチド(Tripeptide)
[構造式]

[分子式]$C_{14}H_{23}N_3O_8S$
[分子量]393.417
[正確な分子量]393.120587
[基原]タマネギ(*Allium cepa*), ニンニク(*Allium sativum*)
[性状]針状結晶
[比旋光度]:[α]$_D^{22}$ -38.1 (H_2O)

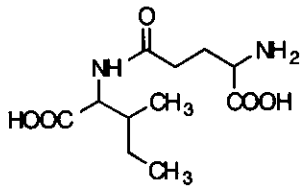
----------文献----------

Virtanen, A.J. et al., Z. Physiol. Chem., 1960, 322, 8, (分離)
Suzuki, T. et al., Chem. Pharm. Bull., 1961, 9, 77, (分離)
Tsuboi, S. et al., J. Agric. Food Chem., 1989, 37, 611, (HPLC)

§ *N*-γ-Glutamylcysteine; L-L-form, *S*-(1-Propenyl), *S*-oxide
[化学名・別名]γ-Glutamyl-*S*-(1-propenyl) cysteine sulfoxide
[化合物分類]アミノ酸とペプチド(Dipeptide)
[構造式]

[分子式]$C_{11}H_{18}N_2O_6S$
[分子量]306.339
[正確な分子量]306.088558
[基原]*Allium cepa*
[その他のデータ]非天然物

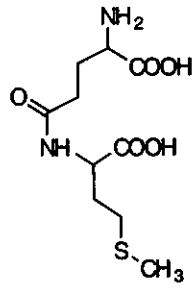
----------文献----------
Zacharius, R.M. et al., Arch. Biochem. Biophys., 1958, 73, 281; 1959, 80, 199, (分離, 合成法, 誘導体)
Suzuki, T. et al., Chem. Pharm. Bull., 1961, 9, 77, (S-methyl sulfoxide, 生育)
Virtaten, A.I. et al., Suom. Kemistil. B, 1961, 34, 44; 144; 1962, 35, 52; 245; CA, 56, 10586; 57, 6323a; 58, 7135, (分離, 誘導体)
Ettala, T. et al., Acta Chem. Scand., 1962, 16, 2061, (生合成)
Matikkala, E.J. et al., Acta Chem. Scand., 1962, 16, 2461; 1963, 17, 1799, (S-propenyl, S-propyl, 分離)
Muetsch-Eckner, M. et al., Phytochemistry, 1992, 31, 2389, (分離, 誘導体)
Enneking, D. et al., Phytochemistry, 1998, 48, 643, (S-vinyl, 分離)

§ *N*-γ-Glutamylisoleucine; L-L-form



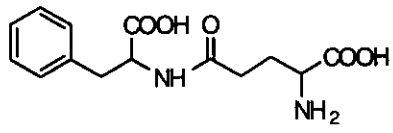
[CAS No.]23632-83-9
[化合物分類]アミノ酸とペプチド(Dipeptide)
[構造式]
[基原]タマネギ *Allium cepa*, green gram (*Vigna radiata*)の種子
[性状]針状結晶
----------文献----------
Virtanen, A.I. et al., Suom. Kemistil. B, 1961, 34, 53; CA, 56, 716, (分離)
Kasai, T. et al., Phytochemistry, 1986, 25, 679, (生育)
Anderson, M.E. et al., Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A., 1986, 83, 5029, (生化学)

§ *N*-γ-Glutamylmethionine; L-L-form



[CAS No.]17663-87-5
[化合物分類]アミノ酸とペプチド(Dipeptide)
[構造式]
[基原]次の植物から分離: タマネギ(*Allium cepa*)の種子, インゲンマメ(*Phaseolus vulgari*), mung bean (*Vigna radiata*), ニンニク(*Allium sativum*) and black gram (*Vigna mungo*)
[用途]金属又は腎毒性医薬品に対する抗腎臓毒性に使用する
[融点]Mp 203-205 ℃. Mp 228-231 ℃
[比旋光度]:$[\alpha]_D^{20}$ -9 (c, 1.4 in H_2O)
----------文献----------
Amiard, G. et al., CA, 1961, 55, 4380, (合成法)
Virtanen, A.I. et al., Suom. Kemistil. B, 1961, 34, 53; CA, 56, 716, (分離)
Morris, C.J. et al., J. Biol. Chem., 1963, 238, 650, (分離, 合成法)
Kasai, T. et al., Agric. Biol. Chem., 1971, 35, 1603; 1972, 36, 967, (分離)
Kristensen, I. et al., Phytochemistry, 1974, 13, 2803, (分離)
Otoul, E. et al., Phytochemistry, 1975, 14, 173, (分離)
Wu, S.H., J. Chromatogr., 1982, 245, 268, (分離, HPLC)
Anderson, M.E. et al., Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A., 1986, 83, 5029, (生化学)

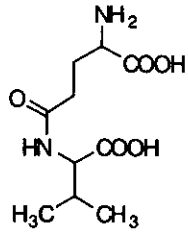
§ *N*-γ-Glutamylphenylalanine; L-L-form



[CAS No.]6810-81-7
[化合物分類]アミノ酸とペプチド(Dipeptide)
[構造式]
[基原]タマネギ(*Allium cepa*), ダイズに存在する. また *Allium sativum*, *Lupinus* spp.からも得られる
[融点]Mp 164-174 ℃で分解
[比旋光度]:$[\alpha]_D$ +17.3 (H_2O)
----------文献----------
Virtanen, A.I. et al., Hoppe Seyler's Z. Physiol. Chem., 1960, 322, 8, (分離)
Virtanen, A.I. et al., Suom. Kemistil. B, 1960, 33, 83; 34, 44; 53, (分離)
Morris, C.J. et al., Biochemistry, 1962, 1, 706, (分離)

§ *N*-γ-Glutamylvaline; L-L-form

[CAS No.]2746-34-1
[化合物分類]アミノ酸とペプチド(Dipeptide)
[構造式]

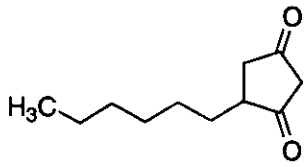


[基原]タマネギ(*Allium cepa*)
[性状]結晶(Me_2CO 溶液)
[融点]Mp 207 ℃
[比旋光度]:[α]$_D$ 0 (c, 2.4 in H_2O)

----------文献----------

Virtanen, A.I. et al., Suom. Kemistil. B, 1961, 34, 53; CA, 56, 716f, (分離)
Morris, C.J. et al., J. Biol. Chem., 1964, 239, 1833, (分離)
Sano, I. et al., J. Neurochem., 1966, 13, 711, (分離)
Anderson, M.E. et al., Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A., 1986, 83, 5029, (生化学)

§ 4-Hexyl-1,3-cyclopentanedione(CAS 名)
[化学名・別名]Tsibulin 2
[CAS No.]126624-27-9
[化合物分類]脂肪族化合物(Monocarbocyclic aldehyde and ketone)
[構造式]

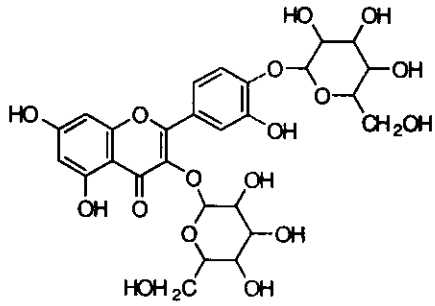


[分子式]$C_{11}H_{18}O_2$
[分子量]182.262
[正確な分子量]182.13068
[基原]*Allium cepa* の球根から得られるファイトアレキシン
[性状]青白い黄色のオイル
[UV]:[neutral] λ $_{max}$ 207 (); 220 (); 246 () (EtOH)

----------文献----------

Tverskoy, L. et al., Phytochemistry, 1991, 30, 799, (分離)

§ Isoquercitrin; 4'-*O*-β-D-Glucopyranoside
[化学名・別名]Quercetin 3,4'-diglucoside
[CAS No.]29125-80-2
[化合物分類]フラボノイド(Flavonol; 5 × O-置換基)
[構造式]

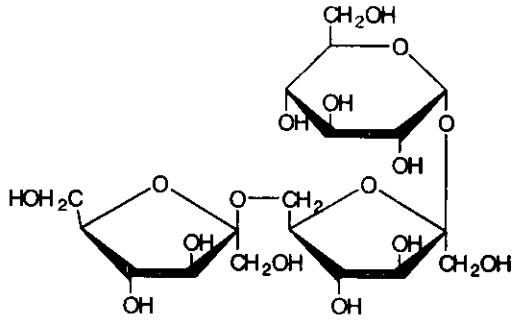


[分子式]$C_{27}H_{30}O_{17}$
[分子量]626.524
[正確な分子量]626.148305
[基原]次の植物から分離: *Allium cepa*, その他の植物属.
[性状]黄色の針状結晶・三水和物 (MeOH/Me_2CO)
[融点]Mp 249-251 ℃ (223-226 ℃)
[比旋光度]:[α]$_D^{25}$ -54.6 (c, 0.52 in Py)

----------文献----------

Farkas, L. et al., Chem. Ber., 1974, 107, 1518, (合成法, diglucoside)
Nielsen, J.K. et al., Phytochemistry, 1994, 34, 539, (3-acylsophoroside 7-glucoside)

§ 6-Kestose
[化学名・別名]*O*-β-D-Fructofuranosyl-(2 → 6)-β-D-fructofuranosyl α-D-glucopyranoside(CAS 名)(旧 CAS 名). Kestose. 6-Kestotriose
[CAS No.]562-68-5
[化合物分類]炭水化物(Oligosaccharide)
[構造式]



[分子式]$C_{18}H_{32}O_{16}$
[分子量]504.441

[正確な分子量]504.16904
[基原] *Lolium multiflorum* and *Arrhenatherum elatius*. onion (*Allium cepa*)
[融点]Mp 145 ℃
[比旋光度]:[α]$_D^{20}$ +27.3 (c, 2.19 in H_2O)
----------文献----------
Albon, N. et al., J.C.S., 1953, 24, (合成法, 分離)
Gross, D., Methods Carbohydr. Chem., 1962, 1, 360, (酵素合成)
Hammer, H., Acta Chem. Scand., 1968, 22, 197, (生育)

§ Methyl 1-(methylthio)propyl disulfide
[CAS No.]53897-66-8
[化合物分類]脂肪族化合物(Disulfides, trisulfide)
[構造式] $H_3CCH_2CH(^5SMe)$-S-S-Me
[分子式]$C_5H_{12}S_3$
[分子量]168.348
[正確な分子量]168.01011
[基原]*Allium cepa*, *Allium fistulosum*, *Allium tuberosum*
[沸点]Bp_{13} 99-100 ℃
----------文献----------
Morimitsu, Y. et al., Phytochemistry, 1990, 29, 3435, (分離)
Calvey, E.M. et al., Phytochemistry, 1998, 49, 359, (誘導体, 分離)

§ Methyl 1-(methylthio)propyl disulfide; 5-Oxide
[化学名・別名]Methyl 1-(methylsulfinyl) propyl disulfide
[CAS No.]134018-95-4
[化合物分類]脂肪族化合物(Disulfides, trisulfide)
[構造式]
[分子式]$C_5H_{12}OS_3$
[分子量]184.347
[正確な分子量]184.005025
[基原]*Allium cepa*, *Allium tricoccum*
----------文献----------
Dubs, P. et al., Helv. Chim. Acta, 1978, 51, 2351, (合成法, IR, H-NMR, Mas)
Morimitsu, Y. et al., Phytochemistry, 1990, 29, 3435, (分離)
Calvey, E.M. et al., Phytochemistry, 1998, 49, 359, (誘導体, 分離)

§ Methyl 1-propenyl disulfide; (*E*)-form, 5-Oxide
[化学名・別名]S -1-Propenyl methanesulfinothioate
[CAS No.]119052-99-2
[化合物分類]脂肪族化合物(Disulfides, trisulfide)
[構造式]
[分子式]$C_4H_8OS_2$
[分子量]136.239
[正確な分子量]136.001655
[基原]*Allium cepa*, *Allium sativum*, その他の *Allium* spp.
----------文献----------
Bayer, T. et al., Phytochemistry, 1989, 28, 2373, (誘導体, 分離, H-NMR)
Block, E. et al., Pure Appl. Chem., 1993, 65, 625, (誘導体, 生育)

§ Methyl 1-propenyl disulfide; (*Z*)-form, 5-Oxide
[CAS No.]119053-00-8
[化合物分類]脂肪族化合物(Disulfides, trisulfide)
[構造式]
[分子量]136.239
[正確な分子量]136.001655

[基原]*Allium cepa*, *Allium sativum*, その他 *Allium* spp.

----------文献----------

Bayer, T. et al., Phytochemistry, 1989, 28, 2373, (誘導体, 分離, H-NMR)
Block, E. et al., Pure Appl. Chem., 1993, 65, 625, (誘導体, 生育)

§ Methyl 1-(1-propenylthio)propyl disulfide

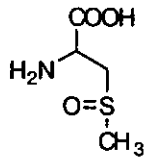
[化学名・別名]4-Ethyl-2,3,5-trithia-6-octene
[CAS No.]126876-23-1
[化合物分類]脂肪族化合物(Disulfides, trisulfide)
[構造式] $H_3CCH{=}CH^5SCH(CH_2CH_3)$-S-SMe
[分子式]$C_7H_{14}S_3$
[分子量]194.389
[正確な分子量]194.02576
[基原]*Allium cepa*, *Allium fistulosum*

----------文献----------

Kuo, M.C. et al., J. Agric. Food Chem., 1990, 38, 1378; 1992, 40, 111, (分離)
Morimitsu, Y. et al., J. Agric. Food Chem., 1992, 40, 368, (誘導体, 合成法)
Calvey, E.M. et al., Phytochemistry, 1998, 49, 359, (誘導体, 分離, Mas)

§ *S*-Methylcysteine sulfoxide; ()c()s-form

[CAS No.]32726-14-0
[その他の CAS No.]6853-87-8
[化合物分類]アミノ酸とペプチド(Non-protein α-aminoacid)
[構造式]



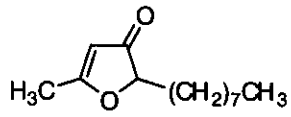
[基原]タマネギ(*Allium cepa*), その他の *Allium* spp., *Brassica* spp.
[融点]Mp 163 ℃で分解
[比旋光度]:$[\alpha]_D$ +204 (c, 0.4 in H_2O)

----------文献----------

Meese, C.O. et al., Arch. Pharm. (Weinheim, Ger.), 1990, 323, 957
Kubec, R. et al., J. Agric. Food Chem., 2000, 48, 428, (生育)

§ 5-Methyl-2-octyl-3(2*H*)-furanone(CAS 名)

[化学名・別名]Cepanone
[CAS No.]57877-72-2
[化合物分類]含酸素複素環式化合物(Furan)
[構造式]



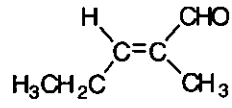
[分子式]$C_{13}H_{22}O_2$
[分子量]210.316
[正確な分子量]210.16198
[基原]*Allium cepa*, その他の *Allium* spp.

----------文献----------

Schreyen, L. et al., J. Agric. Food Chem., 1976, 24, 336; 1147, (分離)
Galetto, W.G. et al., J. Agric. Food Chem., 1976, 24, 854, (合成法)

§ 2-Methyl-2-pentenal(CAS 名)

[化学名・別名]3-Ethyl-2-methylacraldehyde. 2-Propylidenepropionaldehyde
[CAS No.]623-36-9
[化合物分類]脂肪族化合物(Branched alkenic aldehyde and ketone)
[構造式]



(*E*)-form

[分子式]$C_6H_{10}O$
[分子量]98.144
[正確な分子量]98.073165
[基原]タマネギ(*Allium cepa*), エゾネギの葉(*Allium schoenoprasum*)
[性状]刺激臭をもつ液体
[傷害・毒性]眼と皮膚を刺激する. 50 %致死量(LD_{50})(ラット, 経口) 4290 mg/kg

[化学物質毒性データ総覧(RTEC)登録番号]SB2100000
----------文献----------
Virtanen, A.I. et al., Acta Chem. Scand., 1961, 15, 1280; 1965, 19, 1327, (分離)
Lewis, R.J., Sax's Dangerous Properties of Industrial Materials, 8th edn., Van Nostrand Reinhold, 1992, MNJ750

*****RTECS (化学物質毒性データ) *****

生体影響物質　　: 一時刺激物質

*****健康障害に関するデータ*****

*****皮膚/眼の刺激に関するデータ*****

《試験方法》 標準ドライズ試験.
曝露経路　　: 皮膚への塗布
被験動物　　: げっ歯類-ウサギ.
投与量・期間 : 500 mg/24 時間
反応の症度　: 中等度.

参照文献
85JCAE "Prehled Prumyslove Toxikologie; Organicke Latky," Marhold, J., Prague, Czechoslovakia, Avicenum, 1986 [Vol.,頁,年(19-)]-,273,1986

《試験方法》 標準ドライズ試験.
曝露経路　　: 眼中への塗布
被験動物　　: げっ歯類-ウサギ.
投与量・期間 : 20 mg/24 時間
反応の症度　: 軽度

参照文献
85JCAE "Prehled Prumyslove Toxikologie; Organicke Latky," Marhold, J., Prague, Czechoslovakia, Avicenum, 1986 [Vol.,頁,年(19-)]-,273,1986

*****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 : 4290 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.

参照文献
AMIHBC AMA Archives of Industrial Hygiene and Occupational Medicine. (Chicago, IL) V.2-10, 1950-54. For publisher information, [Vol.,頁,年(19-)]10,61,1954

《試験方法》 LC50 試験(50%致死濃度試験).
曝露経路　　: 吸入.
被験動物　　: げっ歯類-ラット.
投与量・期間 : 2000 ppm/4 時間
毒性影響　　: 致死量以外に毒性影響に関する報告はない.

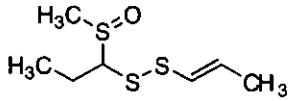
参照文献
AMIHBC AMA Archives of Industrial Hygiene and Occupational Medicine. (Chicago, IL) V.2-10, 1950-54. For publisher information, [Vol.,頁,年(19-)]10,61,1954

《試験方法》 LD50 試験(50%致死量試験).
曝露経路　　: 皮膚への塗布
被験動物　　: げっ歯類-ウサギ.
投与量・期間 : 4500 uL/kg
毒性影響　　: 致死量以外に毒性影響に関する報告はない.

参照文献
AMIHBC AMA Archives of Industrial Hygiene and Occupational Medicine. (Chicago, IL) V.2-10, 1950-54. For publisher information, [Vol.,頁,年(19-)]10,61,1954

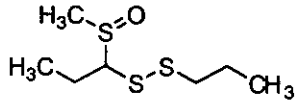
§ 1-(Methylthio)propyl 1-propenyl disulfide; 2-Oxide

[化学名・別名]1-(Methylsulfinyl)propyl 1-propenyl disulfide
[その他の CAS No.]132216-22-9, 132216-25-2, 132216-26-3, 132240-37-0, 134053-76-2, 134053-77-3, 134053-78-4, 134053-79-5, 134107-57-6, 134107-58-7

[化合物分類]脂肪族化合物(Disulfides, trisulfide)
[構造式]
[分子式]$C_7H_{14}OS_3$
[分子量]210.385
[正確な分子量]210.020675

[基原]*Allium cepa*, *Allium tricoccum*
[性状]オイル
[その他のデータ]多数の立体異性体が確認されている

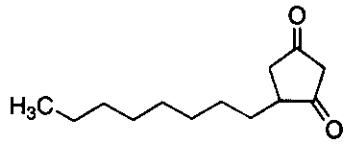
----------文献----------

Naimie, H. et al., Coll. Czech. Chem. Comm., 1972, 37, 1166,(分離)
Calvey, E.M. et al., Phytochemistry, 1998, 49, 359,(誘導体, 分離, Mas)

§ 1-(Methylthio) propyl propyl disulfide; 2-Oxide
[化学名・別名]1-(Methylsulfinyl) propyl propyl disulfide
[CAS No.]132216-21-8
[化合物分類]脂肪族化合物(Disulfides, trisulfide)
[構造式]
[分子式]$C_7H_{16}OS_3$
[分子量]212.401
[正確な分子量]212.036325

[基原]*Allium cepa*, *Allium tricoccum*

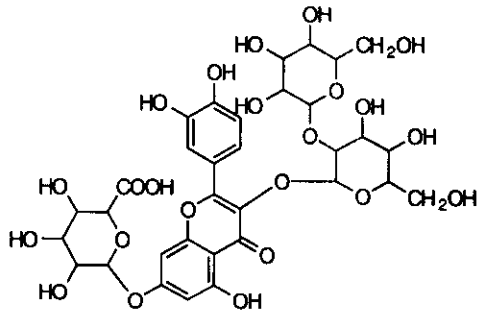
----------文献----------

Kuo, M.C. et al., J. Agric. Food Chem., 1992, 40, 111,(分離)
Calvey, E.M. et al., Phytochemistry, 1998, 49, 359,(誘導体, 分離, Mas)

§ 4-Octyl-1,3-cyclopentanedione(CAS 名)
[化学名・別名]Tsibulin 1
[CAS No.]126624-26-8
[化合物分類]脂肪族化合物(Monocarbocyclic aldehyde and ketone)
[構造式]
[分子式]$C_{13}H_{22}O_2$
[分子量]210.316
[正確な分子量]210.16198

[基原]*Allium cepa* の球根から得られるファイトアレキシン
[性状]青白い黄色のオイル
[UV]:[neutral] λ_{max} 207 (); 220 (); 246 () (EtOH)

----------文献----------

Tverskoy, L. et al., Phytochemistry, 1991, 30, 799,(分離)

§ 3,3',4',5,7-Pentahydroxyflavone; 3-*O*-[β-D-Glucopyranosyl-(1 → 2)-β-D-glucopyranoside], 7-*O*-β-D-glucuronopyranoside
[化学名・別名]Quercetin 7-glucuronoside 3-sophoroside
[CAS No.]140163-57-1
[化合物分類]フラボノイド(Flavonol; 5 × O-置換基)
[構造式]
[分子式]$C_{33}H_{38}O_{23}$
[分子量]802.649
[正確な分子量]802.180395

[基原]次の植物の葉から分離: *Allium cepa*
[性状]黄-緑色の粉末

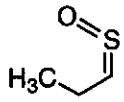
----------文献----------

Wagner, H. et al., Chem. Ber., 1968, 101, 1186; 3419,(3-gentiobioside, 3-sophoroside)
Karrer, W. et al., Konstitution und Vorkommen der Organischen Pflanzenstoffe, 2nd edn., Birkhaumluser Verlag, Basel, 1972, no. 1522,(生育)
IARC Monog., 1983, 31, 213; Suppl. 7, 71,(レビュー, 毒性)

Barron, D. et al., Phytochemistry, 1986, 25, (3-sulfate)
Cody, V. et al., Plant Flavonoids in Biology and Medicine, A.R., Liss, N.Y., 1986, (生化学的性質)
Cody, V. et al., Plant Flavonoids in Biology and Medicine II, A.R., Liss, N.Y., 1988, (生化学的性質)
The Flavonoids: Advances in Research since 1980, (Ed. Harborne, J.B.), Chapman and Hall, London, 1988
Urushibara, S. et al., Tet. Lett., 1992, 33, 1213, (3-sophoroside 7-glucuronide)
Jiyun, L. et al., Drugs of the Future, 1997, 22, 720, (レビュー, 分離, 薬理)

§ 1-Propene-1-thiol; Thial-form, *S*-Oxide

[CAS No.]32157-29-2
[構造式]



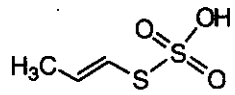
[分子式]C_3H_6OS
[分子量]90.146
[正確な分子量]90.013935
[基原]タマネギ *Allium cepa* の催涙因子
[沸点]$Bp_{0.5}$ -20 ℃
[傷害・毒性]催涙薬

----------文献----------

Block, E. et al., J.A.C.S., 1979, 101, 2200; 1980, 102, 2490, (oxide)
Block, E. et al., Tet. Lett., 1980, 21, 1277; 1985, 26, 1425, (異性, 合成法, 酸化物, dioxide)
Valleacutee, Y. et al., Synth. Commun., 1993, 23, 1267
Block, E. et al., J.A.C.S., 1996, 118, 7492, (酸化物, 合成法, H-NMR, C13-NMR, *O*-17 nmr, microwave)

§ *S*-1-Propenyl thiosulfate; (*E*)-form

[化合物分類]脂肪族化合物(Unbranched alkenic hydrocarbon), 脂肪族化合物(Other saturated unbranched ester)
[構造式]
[基原]*Allium cepa* (タマネギ)
[その他のデータ]ナトリウム塩として得られる

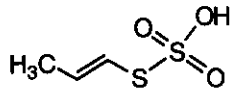


----------文献----------

Yamato, O. et al., Biosci., Biotechnol., Biochem., 1994, 58, 221, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ *S*-1-Propenyl thiosulfate; (*Z*)-form

[化合物分類]脂肪族化合物(Unbranched alkenic hydrocarbon), 脂肪族化合物(Other saturated unbranched ester)
[構造式]
[基原]*Allium cepa*
[その他のデータ]ナトリウム塩として得られる

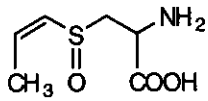


----------文献----------

Yamato, O. et al., Biosci., Biotechnol., Biochem., 1994, 58, 221, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ *S*-(1-Propenyl) cysteine; (*R*)-(*E*)-form, *S*-Oxide

[化学名・別名]3-(1-Propenylsulfinyl) alanine (CAS 名). *S*-(1-Propenyl) cysteine sulfoxide. Isoalliin
[CAS No.]23315-20-0
[化合物分類]アミノ酸とペプチド(Non-protein α-aminoacid)
[構造式]
[分子式]$C_6H_{11}NO_3S$
[分子量]177.224
[正確な分子量]177.045964



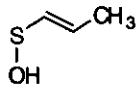
[基原]タマネギ(*Allium cepa*), *Allium* spp.
[用途]催涙因子の前駆物質
[性状]結晶(Me_2CO 溶液)
[融点]Mp 153 ℃で分解
[比旋光度]:$[\alpha]_D^{26}$ +74.9 (c, 6.2 in H_2O)

----------文献----------

Sugii, M. et al., Chem. Pharm. Bull., 1963, 11, 548, (分離)

Kubec, R. et al., J. Agric. Food Chem., 2000, 48, 428, (生育, Isoalliin)

§ Propenylsulfenic acid; (*E*)-form



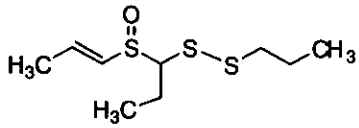
[構造式]
[基原]タマネギ(*Allium cepa*)
[傷害・毒性]催涙薬

----------文献----------

Virtanen, A.I. et al., Acta Chem. Scand., 1963, 17, 461, (分離, 構造決定, 合成法)
Carson, J.F. et al., J.O.C., 1966, 31, 1634, (構造)

§ 1-(1-Propenylthio) propyl propyl disulfide; (*E*)-form, 7-Oxide

[化学名・別名]1-(1-Propenylsulfinyl) propyl propyl disulfide
[その他の CAS No.]125017-84-7, 125017-85-8
[化合物分類]脂肪族化合物(Disulfides, trisulfide)
[構造式]



[分子式]$C_9H_{18}OS_3$
[分子量]238.439
[正確な分子量]238.051975
[基原]*Allium cepa*, *Allium tricoccum*

----------文献----------

Bayer, T. et al., Phytochemistry, 1989, 28, 2373, (誘導体, 分離)
Kuo, M.C. et al., J. Agric. Food Chem., 1992, 40, 1906, (分離)
Calvey, E.M. et al., Phytochemistry, 1998, 49, 359, (誘導体, 分離, Mas)

§ Propyl 1-(propylthio) propyl disulfide (CAS 名)

[化学名・別名]6-Ethyl-4,5,7-trithiadecane
[CAS No.]126876-27-5
[化合物分類]脂肪族化合物(Disulfides, trisulfide)
[構造式] $H_3CCH_2CH_2CH(CH_2CH_3)$-S-S-$CH_2CH_2CH_3$
[分子式]$C_9H_{20}S_3$
[分子量]224.455
[正確な分子量]224.07271
[基原]*Allium cepa*, *Allium fistulosum*

----------文献----------

Kuo, M.C. et al., J. Agric. Food Chem., 1990, 38, 1378; 1992, 40, 111, (分離)
Calvey, E.M. et al., Phytochemistry, 1998, 49, 359, (誘導体, 分離, Mas)

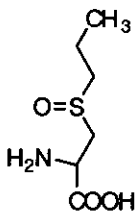
§ *S*-Propyl thiosulfate

[関連 CAS No.]6363-00-4
[化合物分類]脂肪族化合物(Disulfides, trisulfide), 脂肪族化合物(Saturated unbranched alcohol)
[構造式] $H_3CCH_2CH_2SSO_3H$
[分子式]$C_3H_8O_3S_2$
[分子量]156.226
[正確な分子量]155.991485
[基原]*Allium cepa* (タマネギ)

----------文献----------

Asano, Y. et al., Biosci., Biotechnol., Biochem., 1994, 58, 221, (分離, 合成法, H-NMR, C13-NMR)

§ *S*-Propylcysteine sulfoxide; (*R*)c ()s -form



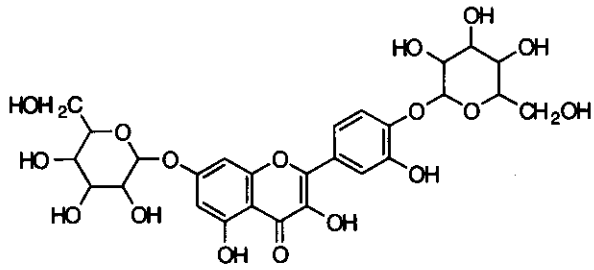
[CAS No.]17935-26-1
[化合物分類]アミノ酸とペプチド(Non-protein α-aminoacid)
[構造式]
[基原]タマネギ(*Allium cepa*), その他の *Allium* spp.
[融点]Mp 164-168 ℃で分解
[比旋光度]:[α]D +25 (c, 1.25 in H_2O) (+31.7, +33)

----------文献----------

Barnsley, E.A., Tetrahedron, 1968, 24, 3747,（合成法, 絶対構造）
Kubec, R. et al., J. Agric. Food Chem., 2000, 48, 428,（生育）

§ Quercimeritrin; 4'-*O*-β-D-Glucopyranoside

[化学名・別名]Quercetin 4',7-diglucoside
[CAS No.]42900-82-3
[化合物分類]フラボノイド(Flavonol; 5 × O-置換基)
[構造式]
[分子式]$C_{27}H_{30}O_{17}$
[分子量]626.524
[正確な分子量]626.148305
[基原]次の植物から分離: *Allium cepa*
[性状]黄色の板状結晶 + 1·1/2H_2O (EtOH/EtOAc)
[融点]Mp 195-197 ℃
[比旋光度]:[α]$_D^{25}$ -78 (c, 0.27 in Py)

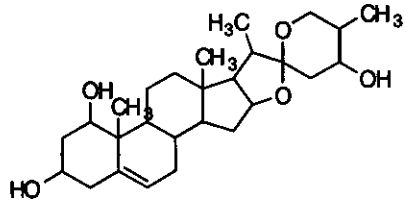


----------文献----------

Perkin, A.G. et al., J.C.S., 1909, 95, 2181; 1927, 234,（分離, 構造決定）
Farkas, L. et al., Chem. Ber., 1974, 107, 1518,（4'-glucoside）

§ Spirost-5-ene-1,3,24-triol; (1 β,3 β,24*S*,25*R*)-form

[化学名・別名]Cepagenin
[CAS No.]114317-59-8
[化合物分類]ステロイド(Spirostane steroid). (C27)
[構造式]
[基原]Genin isol from *Allium cepa*
[融点]Mp 267-269 ℃

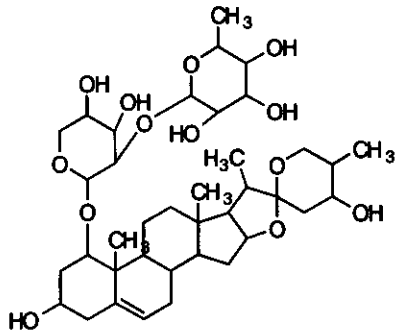


----------文献----------

Kravets, S.D. et al., Khim. Prir. Soedin., 1987, 23, 843; Chem. Nat. Compd.（Engl. Transl.), 1987, 23, 700

§ Spirost-5-ene-1,3,24-triol; (1 β,3 β,24*S*,25*R*)-form, 1-*O*-[α-L-Rhamnopyranosyl-(1 → 2)-α-L-arabinopyranoside]

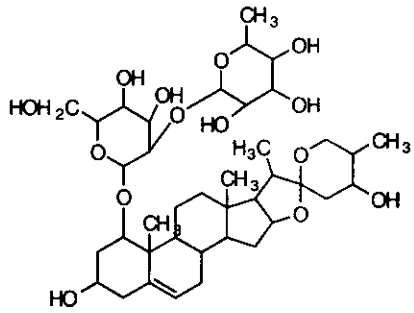
[化学名・別名]Alliospiroside C
[CAS No.]114317-57-6
[化合物分類]ステロイド(Spirostane steroid). (C27)
[構造式]
[分子式]$C_{38}H_{60}O_{13}$
[分子量]724.884
[正確な分子量]724.403395
[基原]*Allium cepa*
[性状]結晶(MeOH 溶液)
[融点]Mp 223-225 ℃
[比旋光度]:[α]$_D^{22}$ -105.7 (c, 0.94 in Py)



----------文献----------

Kravets, S.D. et al., Khim. Prir. Soedin., 1987, 23, 843; Chem. Nat. Compd.（Engl. Transl.), 1987, 23, 700

§ Spirost-5-ene-1,3,24-triol; (1 β,3 β,24*S*,25*R*)-form, 1-*O*-α-L-Rhamnopyranosyl-(1 → 2)-β-D-galactopyranoside]



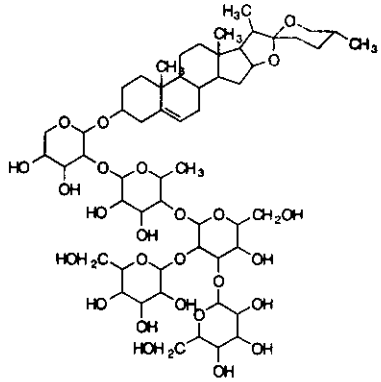
[化学名・別名]Alliospiroside D
[CAS No.]114317-58-7
[化合物分類]ステロイド(Spirostane steroid). (C27)
[構造式]
[分子式]$C_{39}H_{62}O_{14}$
[分子量]754.91
[正確な分子量]754.41396
[基原]*Allium cepa*
[性状]結晶(MeOH)
[融点]Mp 242-243 ℃
[比旋光度]:$[\alpha]_D^{22}$ -89.9 (c, 0.75 in Py)

----------文献----------

Kravets, S.D. et al., Khim. Prir. Soedin., 1987, 23, 843; Chem. Nat. Compd. (Engl. Transl.), 1987, 23, 700

§ Spirost-5-en-3-ol; (3 β,25*R*)-form, *O*-[β-D-Glucopyranosyl-(1 → 2)-[β-D-glucopyranosyl-(1 → 3)]-β-D-galactopyranosyl-(1 → 4)-α-L-rhamnopyranosyl-(1 → 2)-α-L-arabinopyranoside]

[化学名・別名]Ceposide D
[CAS No.]122018-50-2
[化合物分類]ステロイド(Spirostane steroid). (C27)
[構造式]

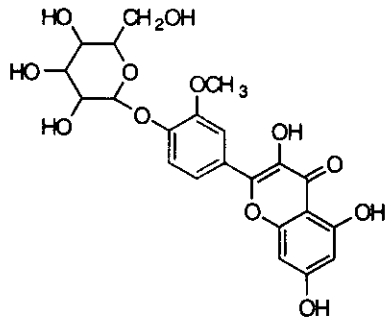


[分子式]$C_{56}H_{90}O_{26}$
[分子量]1179.311
[正確な分子量]1178.57204
[基原]*Allium cepa*

----------文献----------

Kintya, P.K. et al., Khim. Prir. Soedin., 1989, 139, (Ceposide D)

§ 3,4',5,7-Tetrahydroxy-3'-methoxyflavone; 4'-*O*-β-D-Glucopyranoside



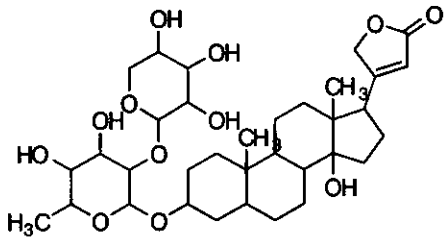
[化学名・別名]Alliumoside A. Isorhamnetin 4'-glucoside
[CAS No.]58902-89-9
[化合物分類]フラボノイド(Flavonol; 5 × O-置換基)
[構造式]
[分子式]$C_{22}H_{22}O_{12}$
[分子量]478.409
[正確な分子量]478.11113
[基原]次の植物から分離: *Dianthus deltoides*, *Allium cepa* var. *agrogatum*
[性状]黄色の結晶(MeOH)
[融点]Mp 262-266 ℃ (252-254 ℃)
[比旋光度]:$[\alpha]_D^{20}$ +28 (c, 0.2 in EtOH). $[\alpha]_D^{27}$ -40 (c, 0.1 in Py)
[UV]:[neutral] λ_{max} 254 (); 365 () (MeOH)

----------文献----------

Heap, T., J.C.S., 1926, 2336-2344, (Isorhamnetin, 合成法)
Yang, X.-H. et al., Yaoxue Xuebao, 2000, 35, 752-755, (Alliumoside A)

§§マメ科タマリンド(*Tamarindus indica* L.)の果実。

§ 3,14-Dihydroxycard-20(22)-enolide; (3 β,5 α,14 β,17 β)-form, 3-*O*-[β-D-Xylopyranosyl-(1 → 2)-α-L-rhamnopyranoside]

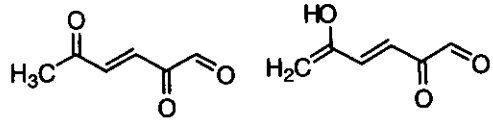


[CAS No.]255861-29-1
[化合物分類]ステロイド(Cardanolide steroid). (C23).
[構造式]
[分子式]$C_{34}H_{52}O_{12}$
[分子量]652.778
[正確な分子量]652.34588
[基原]*Tamarindus indica*

----------文献----------

Siddiqui, S. et al., Phytochemistry, 1992, 31, 3541-3546,（分離, H-NMR, C13-NMR）

§ 2,5-Dioxo-3-hexenal; (Z)-form

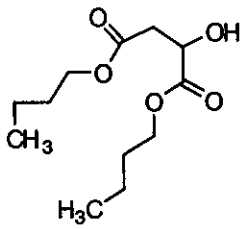


[CAS No.]149575-43-9
[化合物分類]脂肪族化合物(Unbranched alkenic aldehyde and ketone)
[構造式]
[基原]*Tamarindus indica*
[性状]Brown bitter liq.
[溶解性]水, エタノール, ベンゼン, クロロホルムに可溶; 石油エーテル, 四塩化炭素, エーテルに不溶
[UV]:[neutral] λ max 295 () (EtOH)

----------文献----------

Imbabi, E.S. et al., Fitoterapia, 1992, 63, 537,（分離, 構造決定）

§ Malic acid; ()-form, Dibutyl ester

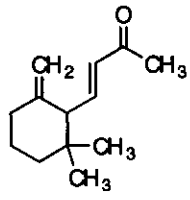


[化学名・別名]Dibutyl malate
[CAS No.]2385-79-7
[化合物分類]炭水化物(Aldaric acid)
[構造式]
[分子式]$C_{12}H_{22}O_5$
[分子量]246.303
[正確な分子量]246.146725
[基原]次の植物から分離: tamarind fruits (*Tamarindus indica*)
[用途]細胞毒性
[性状]オイル
[比旋光度]:[α]$_D$ -9.8 (c, 1 in Me_2CO)

----------文献----------

Lutz, O., Ber., 1902, 35, 2460; 1908, 41, 841,（malamic acid）
Pratt, D.S., Philipp. J. Sci., 1912, 7, 201; Chem. Zentralbl., 1913, 645,（分離, R-form）
Rodd's Chem. Carbon Compd.（2nd edn.), 1976, 1E, 224,（レビュー）
Braud, C. et al., Polym. Prepr.（Am. Chem. Soc., Div. Polym. Chem.), 1983, 24, 71,（レビュー, polymer）
Lewis, R.J., Food Additives Handbook, Van Nostrand Reinhold International, New York, 1989, MAN000
Santaniello, E. et al., J.C.S. Perkin 1, 1991, 601,（エステル）

§ 5(13),7-Megastigmadien-9-one; ()-form



[CAS No.]64129-96-0
[化合物分類]テルペノイド(Megastigmane norterpenoid)
[構造式]
[基原]*Tamarindus indica*
[性状]オイル

平成１４年度厚生科学研究

香料基原植物の含有成分及びそれらの毒性評価に関する調査

その２

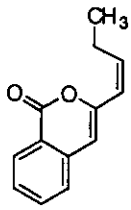
東亜大学

義平　邦利

§§シメジ科タモギダケ(*Pleurotus cornucopiae* (Pers.) Rolland (*P. citrinopileatus* Sing.))の子実体。
該当物質なし

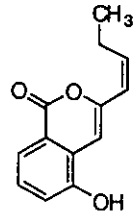
**********タラゴン (Tarragon) **********

§§キク科タラゴン(*Artemisia dracunculus* L.)の茎葉または全草。

§ 3-(1-Butenyl)-1*H*-2-benzopyran-1-one; (*E*)-form
[CAS No.]29428-84-0
[化合物分類]ベンゾピラノイド(Isocoumarin)
[構造式]

[基原]*Anthemis fuscata*, *Artemisia dracunculus*
[性状]結晶(petrol)
[融点]Mp 48 ℃

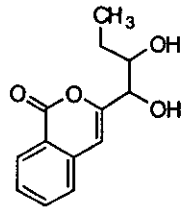
----------文献----------

Bohlmann, F. et al., Chem. Ber., 1970, 103, 2856, (分離, 構造決定)
Mallabaev, A. et al., Khim. Prir. Soedin., 1974, 10, 720; 1976, 12, 811; Chem. Nat. Compd. (Engl. Transl.), 1974, 10, 743; 1976, 12, 729, (誘導体)
Bohlmann, F. et al., Phytochemistry, 1977, 16, 795, (分離, 構造決定)
Bellina, F. et al., Tetrahedron, 2000, 56, 2533, (合成法)

§ 3-(1-Butenyl)-1*H*-2-benzopyran-1-one; (*E*)-form, 5-Hydroxy
[化学名・別名]3-(1-Butenyl)-5-hydroxy-1*H*-2-benzopyran-1-one(CAS 名). Artemidinol
[CAS No.]62268-43-3
[化合物分類]ベンゾピラノイド(Isocoumarin)
[構造式]

[分子式]$C_{13}H_{12}O_3$
[分子量]216.236
[正確な分子量]216.078645
[基原]次の植物から分離: *Artemisia dracunculus*

----------文献----------

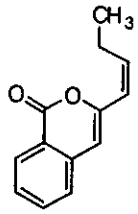
Bohlmann, F. et al., Chem. Ber., 1970, 103, 2856, (分離, 構造決定)
Mallabaev, A. et al., Khim. Prir. Soedin., 1974, 10, 720; 1976, 12, 811; Chem. Nat. Compd. (Engl. Transl.), 1974, 10, 743; 1976, 12, 729, (誘導体)
Bohlmann, F. et al., Phytochemistry, 1977, 16, 795, (分離, 構造決定)
Bellina, F. et al., Tetrahedron, 2000, 56, 2533, (合成法)

§ 3-(1-Butenyl)-1*H*-2-benzopyran-1-one; (*E*)-form, 1',2'-Dihydro, 1',2'-dihydroxy
[化学名・別名]3-(1,2-Dihydroxybutyl)-1*H*-2-benzopyran-1-one. Artemidiol
[CAS No.]54963-30-3
[化合物分類]ベンゾピラノイド(Isocoumarin)
[構造式]

[分子式]$C_{13}H_{14}O_4$
[分子量]234.251
[正確な分子量]234.08921
[基原]次の植物から分離: *Artemisia dracunculus*
[融点]Mp 131.5-133 ℃

----------文献----------

Bohlmann, F. et al., Chem. Ber., 1970, 103, 2856, (分離, 構造決定)
Mallabaev, A. et al., Khim. Prir. Soedin., 1974, 10, 720; 1976, 12, 811; Chem. Nat. Compd. (Engl. Transl.), 1974, 10, 743; 1976, 12, 729, (誘導体)
Bohlmann, F. et al., Phytochemistry, 1977, 16, 795, (分離, 構造決定)
Bellina, F. et al., Tetrahedron, 2000, 56, 2533, (合成法)

§ 3-(1-Butenyl)-1*H*-2-benzopyran-1-one; (*Z*)-form
[CAS No.]63898-24-8
[構造式]

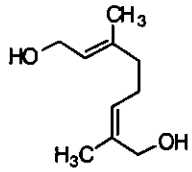


[基原]*Artemisia dracunculus*

----------文献----------

Bohlmann, F. et al., Chem. Ber., 1970, 103, 2856, (分離, 構造決定)
Mallabaev, A. et al., Khim. Prir. Soedin., 1974, 10, 720; 1976, 12, 811; Chem. Nat. Compd. (Engl. Transl.), 1974, 10, 743; 1976, 12, 729, (誘導体)
Bohlmann, F. et al., Phytochemistry, 1977, 16, 795, (分離, 構造決定)
Chatterjea, J.N. et al., Indian J. Chem., Sect. B, 1981, 20, 359; 992, (合成法)

§ 2,6-Dimethyl-2,6-octadiene-1,8-diol; (2*Z*,6*E*)-form
[化学名・別名]9-Hydroxygeraniol
[CAS No.]32663-40-4
[化合物分類]テルペノイド(Acyclic monoterpenoid)
[構造式]
[



基原]*Artemisia dracunculus*

----------文献----------

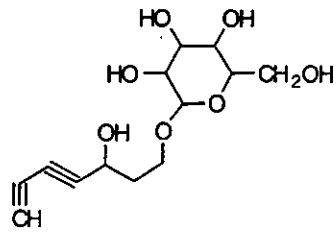
Bohlmann, F. et al., Phytochemistry, 1978, 17, 453, (bis-3-methylbutanoyl, di-Ac)
Jakupovic, J. et al., Planta Med., 1991, 57, 450, (分離, H-NMR)
Abdel-Kader, M.S. et al., Phytochemistry, 1993, 34, 1367, (分離, H-NMR, C13-NMR)
Jaensch, M. et al., Phytochemistry, 1993, 34, 1367, (分離, H-NMR)
Otsuka, H., Phytochemistry, 1994, 37, 461, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ 4,6-Heptadiyne-1,3-diol
[化合物分類]脂肪族化合物(Acetylenic alcohol)
[構造式]HC ≡ CC ≡ CCH(OH)CH_2CH_2OH
[分子式]$C_7H_8O_2$
[分子量]124.139
[正確な分子量]124.05243
[基原]次の植物の地上部から分離: *Artemisia dracunculus*

----------文献----------

Jakupovic, J. et al., Planta Med., 1991, 57, 450, (分離, struct. IR, Mass, H-NMR, C13-NMR)

§ 4,6-Heptadiyne-1,3-diol; 1-*O*-β-D-Glucopyranoside
[化合物分類]脂肪族化合物(Acetylenic alcohol)
[構造式]
[分子式]$C_{13}H_{18}O_7$
[分子量]286.281
[正確な分子量]286.105255
[基原]次の植物の地上部から分離: *Artemisia dracunculus*
[性状]オイル
[その他のデータ]3-epimers の混合物として分離

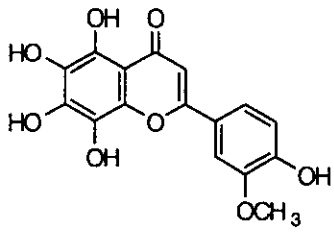


----------文献----------

Jakupovic, J. et al., Planta Med., 1991, 57, 450, (分離, struct. IR, Mass, H-NMR, C13-NMR)

§ 3',4',5,6,7,8-Hexahydroxyflavone; 3'-Me ether
[化学名・別名]4',5,6,7,8-Pentahydroxy-3'-methoxyflavone. Annagenin
[CAS No.]181020-34-8
[構造式]

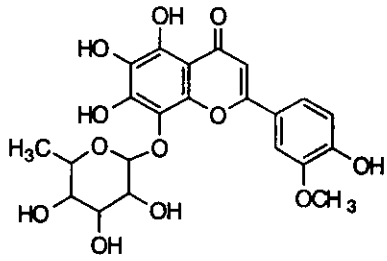
[分子式] $C_{16}H_{12}O_8$
[分子量] 332.266
[正確な分子量] 332.05322
[基原] *Artemisia dracunculus* の配糖体
[性状] 淡黄色の結晶 (EtOH 溶液)
[融点] Mp 256-258 ℃
[UV]: [neutral] λ_{max} 258 (); 271 (sh) (); 376 () (EtOH)



----------文献----------

Mizuno, M. et al., Chem. Pharm. Bull., 1987, 35, 3125, (3'-Hydroxy-4',5,6,7,8-pentamethoxyflavone)
Mizuno, M. et al., J. Nat. Prod., 1987, 50, 751, (分離, 合成法)
Kurkin, V.A. et al., Khim. Prir. Soedin., 1997, 33, 61; Chem. Nat. Compd. (Engl. Transl.), 1997, 33, 46, (Estragonoside)

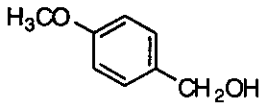
§ 3',4',5,6,7,8-Hexahydroxyflavone; 3'-Me ether, 8-*O*-α-L-rhamnopyranoside
[化学名・別名] Estragonoside
[CAS No.] 181020-33-7
[化合物分類] フラボノイド (Flavone; 6 × O-置換基)
[構造式]
[分子式] $C_{22}H_{22}O_{12}$
[分子量] 478.409
[正確な分子量] 478.11113
[基原] *Artemisia dracunculus*
[性状] 黄色の結晶 (EtOH)
[融点] Mp 192-195 ℃
[UV]: [neutral] λ_{max} 258 (); 267 (sh) (); 348 () (EtOH)



----------文献----------

Kurkin, V.A. et al., Khim. Prir. Soedin., 1997, 33, 61; Chem. Nat. Compd. (Engl. Transl.), 1997, 33, 46, (Estragonoside)

§ 4-Hydroxybenzyl alcohol; 4-Me ether
[化学名・別名] 4-Methoxybenzyl alcohol. Anisyl alcohol
[CAS No.] 105-13-5
[化合物分類] 単環芳香族 (Simple benzyl alcohol)
[構造式]
[分子式] $C_8H_{10}O_2$
[分子量] 138.166
[正確な分子量] 138.06808



[基原] 次の植物から分離: vanilla, aniseed oil, *Osmanthus fragrans* の花, *Artemisia dracunculus*, *Torilis japonica*
[用途] 単純なエステルは香料に用いられる.
[性状] 花のような甘い香りを持つ液体
[融点] Mp 24-25 ℃ (45 ℃)
[沸点] Bp_{12} 135-136 ℃
[濃度] d^{20}_4 1.115
[屈折率] n^{25}_D 1.542
[傷害・毒性] 皮膚を刺激する. 50 %致死量 (LD_{50}) (ラット, 経口) 1200 mg/kg. 発火温度:>107 ℃
[化学物質毒性データ総覧 (RTEC) 登録番号] DO8925000

----------文献----------

Opdyke, D.L.J., Food Cosmet. Toxicol., 1974, 12, 825, (レビュー, 毒性, Anisyl alcohol)
Hilborn, J.W. et al., J.A.C.S., 1994, 116, 3337, (合成法, UV, H-NMR, C13-NMR, IR, Mass, 4-Methoxybenzyl acetate, Anisyl acetate)
Lewis, R.J., Sax's Dangerous Properties of Industrial Materials, 8th edn., Van Nostrand Reinhold, 1992, MED500

*****RTECS (化学物質毒性データ) *****
生体影響物質　　: 農芸化学. 一時刺激物質.