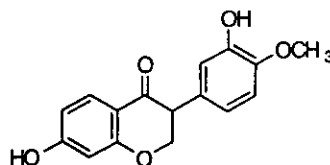


[CAS No.] 67492-31-3
[化合物分類] フラボノイド (Isoflavanone)
[構造式]
[分子式] $C_{16}H_{14}O_5$
[分子量] 286.284
[正確な分子量] 286.084125
[基原] *Myroxylon balsamum*
[性状] 結晶 (MeOH)
[融点] Mp 185-188 °C

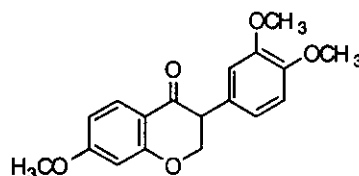


-----文献-----

Alaide, B. et al., *Phytochemistry*, 1978, 17, 593, (分離, 構造決定)
de Oliveira, A.B. et al., *Phytochemistry*, 1978, 17, 593
Ingham, J.L., *Prog. Chem. Org. Nat. Prod.*, 1983, 43, 1

§ 3',4',7-Trihydroxyisoflavone; Tri-Me ether

[化学名・別名] 3',4',7-Trimethoxyisoflavone. Cabreuvin
[CAS No.] 1621-61-0
[化合物分類] フラボノイド (Isoflavone; 3 × O-置換基)
[構造式]
[分子式] $C_{18}H_{16}O_5$
[分子量] 312.321
[正確な分子量] 312.099775
[基原] 次の植物から分離: *Calopogonium mucunoides*, *Myrocarpus fastigiatus*, *Myroxylon balsamum*
[性状] 結晶 (EtOH)
[融点] Mp 165 °C (156-158 °C)



-----文献-----

Gottlieb, O.R. et al., *An. Assoc. Quim. Bras.*, 1959, 18, 85, (Cabreuvin)
Ohsaki, A. et al., *Bioorg. Med. Chem. Lett.*, 1999, 9, 1109, (Cabreuvin)

*****トンカ (Tonka bean) *****

§ § マメ科トンカマメ (*Dipteryx odorata* (Aublet) Willdenow) の種子。

§ Diethyl disulfide (CAS 名)

[化学名・別名] Ethyl disulfide. 3,4-Dithiahexane
[CAS No.] 110-81-6
[化合物分類] 脂肪族化合物 (Disulfides, trisulfide)
[構造式] Et-S-S-Et
[分子式] $C_4H_{10}S_2$
[分子量] 122.255
[正確な分子量] 122.02239
[基原] *Dipteryx odorata* の豆, *Durio zibethinus* の果実
[性状] ニンニク臭を持つオイル
[沸点] Bp 154 °C. Bp₁₁ 46 °C
[溶解性] 水にほとんど溶けない
[濃度] d_4^{20} 0.993
[屈折率] n_D^{20} 1.5063
[傷害・毒性] 発火点: 42 °C. 皮膚と眼を刺激する。50 % 致死量 (LD50) (ラット, 経口) 2030 mg/kg
[化学物質毒性データ総覧 (RTEC) 登録番号] JO1925000

-----文献-----

Baldry, J. et al., *Phytochemistry*, 1972, 11, 2081, (分離)
Meshram, H.M., *Org. Prep. Proced. Int.*, 1993, 25, 232, (合成法)
Lewis, R.J., *Sax's Dangerous Properties of Industrial Materials*, 8th edn., Van Nostrand Reinhold, 1992, DJC600

***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>> 標準ドライブ試験.

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.

参考文献

85JCAE "Prehled Prumyslove Toxikologie; Organicke Latky," Marhold, J., Prague, Czechoslovakia, Avicenum, 1986 [Vol.,頁,年(19-)],991,1986

<<試験方法>> 標準ドライブ試験.

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 : 100 mg/24 時間

反応の症度 : 軽度

参考文献

85JCAE "Prehled Prumyslove Toxikologie; Organicke Latky," Marhold, J., Prague, Czechoslovakia, Avicenum, 1986 [Vol.,頁,年(19-)],991,1986

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 : 2030 mg/kg

毒性影響 : 致死量以外に毒性影響に関する報告はない.

参考文献

NTIS** National Technical Information Service. (Springfield, VA 22161) Formerly U.S. Clearinghouse for Scientific & Technical Information. [Vol.,頁,年(19-)]OTS0540990

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 : 150 ppm/6 時間/10 日間間欠投与

毒性影響 : [脳と外被] 脳重量の変化

[血液] 白血球数の変化.

[栄養と総代謝] 体重減少または体重増加.

参考文献

NTIS** National Technical Information Service. (Springfield, VA 22161) Formerly U.S. Clearinghouse for Scientific & Technical Information. [Vol.,頁,年(19-)]OTS0540990

米国に於ける状況

EPA TSCA Section 8(b) CHEMICAL INVENTORY

EPA TSCA Section 8(d) unpublished health/safety studies

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

§ 3-(2-Hydroxyphenyl) propanoic acid

[化学名・別名] 2-Hydroxybenzenepropanoic acid (CAS 名). 3-(*O*-Hydroxyphenyl) propionic acid (旧 CAS 名). Melilotic acid. *O*-Hydroxyhydrocinnamic acid. Hydrocoumaric acid

[CAS No.] 495-78-3

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

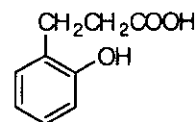
[構造式]

[分子式] C₉H₁₀O₃

[分子量] 166.176

[正確な分子量] 166.062995

[基原] *Angraecum fragrans*, *Melilotus alba*, *Dipteryx odorata*, その他の植物



[性状] 結晶(H₂O)
[融点] Mp 82-83 °C
[溶解性] エタノール, エーテルに可溶; 水に易溶; ヘキサンに難溶
[PKa 値] pK_a 4.75 (25 °C)

-----文献-----

Holberg, G.A., Acta Chem. Scand., 1955, 9, 555
Begum, N.S. et al., Acta Cryst. C, 1992, 48, 1076, (結晶構造)
Malakov, P.Y. et al., Fitoterapia, 1998, 69, 552, (C13-NMR)

§ 3-(2-Hydroxyphenyl)-2-propenoic acid; (Z)-form, O-β-D-Glucopyranoside

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

[構造式]

[分子式] C₁₅H₁₈O₈

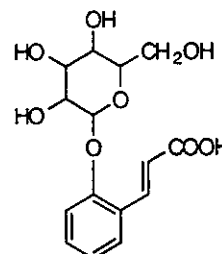
[分子量] 326.302

[正確な分子量] 326.10017

[基原] 次の植物から分離: *Melilotus alba*, *Hierochloe odorata*, *Dipteryx odorata*,
Trigonella spp.

[用途] 植物の Coumarin 生合成の中間体

[性状] シロップ



-----文献-----

C.Djerassi et al., Dictionary of Natural Products, Chapman, Hall, 2002
Lewis, R.J., Sax's Dangerous Properties of Industrial Materials, 8th edn., Van Nostrand Reinhold, 1992,
MEJ775

§ 3',4',5,6,7-Pentahydroxyisoflavone; 5,6-Di-Me, 3',4'-methylene ether

[化学名・別名] 7-Hydroxy-5,6-dimethoxy-3',4'-methylenedioxyisoflavone. Isoplatycarpanetin. Dipteryxin

[CAS No.] 68862-19-1

[化合物分類] フラボノイド (Isoflavone; 5 × O-置換基)

[構造式]

[分子式] C₁₈H₁₁O₇

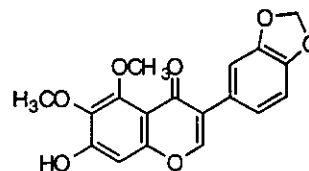
[分子量] 342.304

[正確な分子量] 342.073955

[基原] 次の植物から分離: *Cladrastis platycarpa*, *Cladrastis shikokiana*, *Dipteryx odorata*

[性状] 結晶 (CHCl₃/Et₂O)

[融点] Mp 235-237 °C



-----文献-----

Nakano, T. et al., J.C.S. Perkin 1, 1979, 2107, (Odoratine, Dipteryxine)
Ingham, J.L., Prog. Chem. Org. Nat. Prod., 1983, 43, 1, (レビュー, 生育)
Kumar, S. et al., J. Chem. Crystallogr., 1999, 29, 99, (Dalspinin, 結晶構造)

§ 3',4',5,6,7-Pentahydroxyisoflavone; 5,6,7-Tri-Me, 3',4'-methylene ether

[化学名・別名] 5,6,7-Trimethoxy-3',4'-methylenedioxyisoflavone. Odoratine

[CAS No.] 51986-39-1

[化合物分類] フラボノイド (Isoflavone; 5 × O-置換基)

[構造式]

[分子式] C₁₉H₁₁O₇

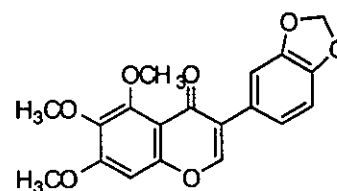
[分子量] 356.331

[正確な分子量] 356.089605

[基原] 次の植物から分離: *Cordyla africana*, *Dipteryx odorata*

[性状] 結晶 (CHCl₃/Et₂O)

[融点] Mp 172-174 °C



-----文献-----

Nakano, T. et al., J.C.S. Perkin 1, 1979, 2107, (Odoratine, Dipteryxine)

§ 3',4',6,7-Tetrahydroxyisoflavone; 4',6-Di-Me ether

[化学名・別名] 3',7-Dihydroxy-4',6-dimethoxyisoflavone. Odoratin

[CAS No.] 53948-00-8

[化合物分類] フラボノイド (Isoflavone; 4 × O-置換基)

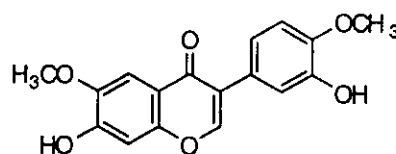
[構造式]

[分子式] C₁₇H₁₄O₆

[分子量] 314.294

[正確な分子量] 314.07904

[基原] 次の植物から分離: *Dipteryx odorata* の心材, *Pterodon apparicioi* の幹木部



-----文献-----

Hayashi, T. et al., *Phytochemistry*, 1974, 13, 1943, (Odoratin)

Velozo, L.S.M. et al., *Phytochemistry*, 1999, 52, 1473, (Odoratin 7-glucoside)

§ 3',4',7,8-Tetrahydroxyisoflavone; 4',8-Di-Me ether

[化学名・別名] 3',7-Dihydroxy-4',8-dimethoxyisoflavone

[CAS No.] 53947-99-2

[化合物分類] フラボノイド (Isoflavone; 4 × O-置換基)

[構造式]

[分子式] C₁₇H₁₄O₆

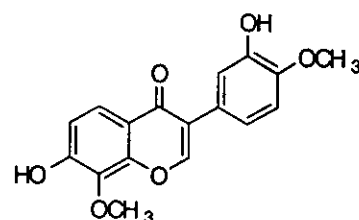
[分子量] 314.294

[正確な分子量] 314.07904

[基原] 次の植物から分離: *Dipteryx odorata*, *Monopteryx uauacu*, *Myroxylon balsamum*, *Xanthocercis zambesiaca*

[性状] 結晶 (EtOH)

[融点] Mp 212-213 °C



-----文献-----

Harper, S.H. et al., *Phytochemistry*, 1976, 15, 1019, (4',8-di-Me ether)

Albuquerque, F.B. et al., *Phytochemistry*, 1981, 20, 235, (4',8-di-Me ether)

§ 4',6,7,8-Tetrahydroxyisoflavone; 4',6-Di-Me ether

[化学名・別名] 7,8-Dihydroxy-4',6-dimethoxyisoflavone. Dipteryxin

[CAS No.] 53948-01-9

[化合物分類] フラボノイド (Isoflavone; 4 × O-置換基)

[構造式]

[分子式] C₁₇H₁₄O₆

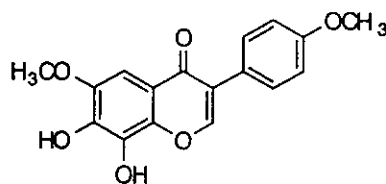
[分子量] 314.294

[正確な分子量] 314.07904

[基原] 次の植物の心材から分離: *Dipteryx odorata*

[性状] 結晶 (MeOH)

[融点] Mp 250-254 °C



-----文献-----

Hayashi, T. et al., *Phytochemistry*, 1974, 13, 1943, (Dipteryxin)

Kaneko, M. et al., *Phytochemistry*, 1988, 27, 267

§ 4',7,8-Trihydroxyisoflavone; 4'-Me ether

[化学名・別名] 7,8-Dihydroxy-4'-methoxyisoflavone. Retusin

[CAS No.] 37816-19-6

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

[構造式]

[分子式] C₁₆H₁₂O₅

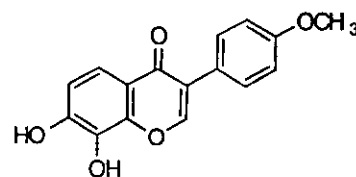
[分子量] 284.268

[正確な分子量] 284.068475

[基原] 次の植物から分離: *Dalbergia retusa* の心材, *Dipteryx odorata*, *Maackia* sp.

[性状] 結晶 (Me₂CO/MeOH or Me₂CO)

[融点] Mp 249 °C



-----文献-----

Jurd, L. et al., Tet. Lett., 1972, 2149, (Retusin)
 Hayashi, T. et al., Phytochemistry, 1974, 13, 1943, (Retusin)
 Mitra, J. et al., Phytochemistry, 1983, 22, 2326, (Retusin 7-glucoside)
 Ingham, J.L., Prog. Chem. Org. Nat. Prod., 1983, 43, 1, (レビュー, 生育)
 Krivoshchekova, O.E. et al., Khim. Prir. Soedin., 1986, 22, 39; Chem. Nat. Compd. (Engl. Transl.), 35,
 (H-NMR, Mass, Retusin)

§ 4',7,8-Trihydroxyisoflavone; 4',8-Di-Me ether

[化学名・別名] 7-Hydroxy-4',8-dimethoxyisoflavone. Isoafromosin. 8-O-Methylretusin

[CAS No.] 37816-20-9

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

[構造式]

[分子式] C₁₇H₁₄O₅

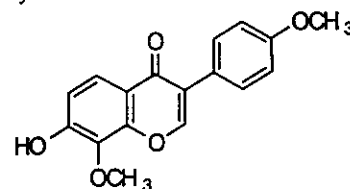
[分子量] 298.295

[正確な分子量] 298.084125

[基原] 次の植物から分離: *Cladrastis* spp., *Dalbergia retusa*, *Dalbergia variabilis*, *Dipteryx odorata*,
Monopteryx uauacu, *Pericopsis schliebenii*, *Xanthocercis zambesiaca* (すべてマメ科)

[性状] プリズム結晶 (Me:CO/MeOH)

[融点] Mp 221 °C



-----文献-----

Jurd, L. et al., Phytochemistry, 1972, 11, 2535, (8-O-Methylretusin)
 Ingham, J.L., Prog. Chem. Org. Nat. Prod., 1983, 43, 1, (レビュー, 生育)

§ Vouacapane; (5 α,8 α)-form

[CAS No.] 468-94-0

[化合物分類] テルペノイド (Cassane and vouacapane diterpenoid)

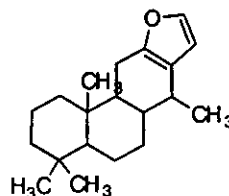
[構造式]

[基原] *Dipteryx odorata* の種子

[性状] 棒状の結晶 (EtOH)

[融点] Mp 122-123 °C

[比旋光度]: [α]_D²⁵ -45 (c, 1 in CHCl₃)



-----文献-----

Mahajan, J.R. et al., J.C.S. Perkin 1, 1973, 520, (合成法)
 Godoy, R. et al., Phytochemistry, 1989, 28, 642, (分離)

§ Vouacapane; (5 α,8 β)-form

[CAS No.] 40776-63-4

[化合物分類] テルペノイド (Cassane and vouacapane diterpenoid)

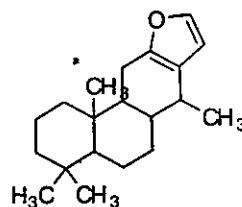
[構造式]

[基原] 次の植物の種子から分離: *Dipteryx odorata*

[性状] 針状結晶 (EtOH)

[融点] Mp 78-79 °C

[比旋光度]: [α]_D²⁵ +83 (c, 1.1 in CHCl₃)



-----文献-----

Mahajan, J.R. et al., J.C.S. Perkin 1, 1973, 520, (合成法)
 Godoy, R. et al., Phytochemistry, 1989, 28, 642, (分離)

§ 3,19-Vouacapanediol; 3 β-form, 3-Ac

[化学名・別名] 3 β-Acetoxyvouacapanol

[化合物分類] テルペノイド (Cassane and vouacapane diterpenoid)

[構造式]

[分子式] $C_{22}H_{32}O_4$

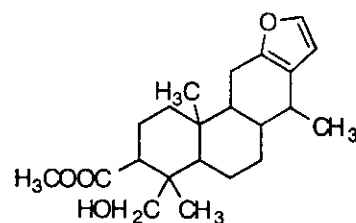
[分子量] 360.492

[正確な分子量] 360.23006

[基原] 次の植物から分離: *Dipteryx odorata*

[性状] 結晶 (EtOAc/hexane)

[融点] Mp 154-155 °C



-----文献-----

Godoy, R.L. de O. et al., *Phytochemistry*, 1989, 28, 642

§ 19-Vouacapanol

[化学名・別名] Vouacapanol

[CAS No.] 472-32-2

[化合物分類] テルペノイド (Cassane and vouacapane diterpenoid)

[構造式]

[分子式] $C_{20}H_{30}O_2$

[分子量] 302.456

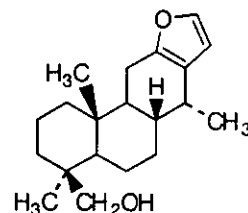
[正確な分子量] 302.22458

[基原] *Dipteryx odorata*

[性状] 結晶 (MeOH)

[融点] Mp 130-131 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{25} +71$ (c, 1.8 in CCl₄)



-----文献-----

King, F.E. et al., *J.C.S.*, 1955, 1117, (分離, 構造決定)

Bernasconi, S. et al., *J.O.C.*, 1981, 46, 3719, (合成法)

Luiz de O Godoy, R. et al., *Phytochemistry*, 1989, 28, 642, (分離)

§ 19-Vouacapanol; Ac

[化学名・別名] Vouacapanyl acetate

[化合物分類] テルペノイド (Cassane and vouacapane diterpenoid)

[構造式]

[分子式] $C_{22}H_{32}O_3$

[分子量] 344.493

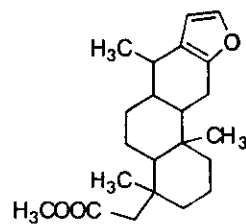
[正確な分子量] 344.235145

[基原] *Vouacapoua macropetala*, *Dipteryx odorata*

[性状] 結晶 (MeOH)

[融点] Mp 115 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{25} +63$ (CCl₄)



-----文献-----

King, F.E. et al., *J.C.S.*, 1955, 1117, (分離, 構造決定)

Narayanan, C.R. et al., *Tet. Lett.*, 1965, 3639, (H-NMR)

Bernasconi, S. et al., *J.O.C.*, 1981, 46, 3719, (合成法)

Luiz de O Godoy, R. et al., *Phytochemistry*, 1989, 28, 642, (分離)

*****ナギナタコウジュ (Naginatakoju) *****

§ § シソ科ナギナタコウジュ (*Elsholtzia ciliata* Hyland) の全草。

§ 2-Acetyl-3-methylfuran

[化学名・別名] 1-(3-Methyl-2-furyl) ethanone (CAS 名). Methyl (3-methyl-2-furyl) ketone (旧 CAS 名)

[CAS No.] 13101-45-6

[関連 CAS No.] 119363-99-4

[化合物分類] 含酸素複素環式化合物 (Furan)

[構造式]

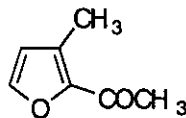
[分子式] $C_7H_8O_2$

[分子量] 124.139

[正確な分子量] 124.05243

[基原] *Perilla frutescens* と *Elsholtzia ciliata* のオイル, ゴマ油

[沸点] Bp_{20} 116-119 °C. Bp_{10} 60 °C



-----文献-----

Ueda, T., Nippon Kagaku Zasshi, 1960, 81, 1756, (分離)

Fujita, Y. et al., Nippon Kagaku Zasshi, 1966, 87, 1361, (分離)

Kutney, J.P. et al., Tetrahedron, 1971, 27, 3323, (合成法, IR, UV, H-NMR)

§ 5,7-Dihydroxy-6-methylflavanone; (R)-form, 7-O- α -D-Galactopyranoside

[CAS No.] 129601-82-7

[化合物分類] フラボノイド (Flavanone; 2 × O-置換基)

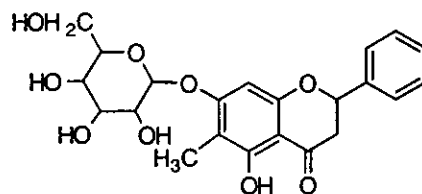
[構造式]

[分子式] $C_{27}H_{34}O_9$

[分子量] 432.426

[正確な分子量] 432.142035

[基原] *Elsholtzia ciliata*



-----文献-----

Erdtman, H., Sven. Kem. Tidskr., 1944, 56, 2; CA, 40, 1309, (分離)

Linstedt, G. et al., Acta Chem. Scand., 1951, 5, 1; 121; 129, (分離, 構造決定)

Asakawa, Y., Bull. Chem. Soc. Jpn., 1971, 44, 2761, (分離)

Star, A.E. et al., Phytochemistry, 1978, 17, 586, (分離, 誘導體)

Wollenweber, E. et al., Z. Pflanzenphysiol., 1979, 94, 241; 1981, 104, 161, (分離, 誘導體)

Markham, K.R. et al., J. Plant Physiol., 1987, 131, 45, (誘導體, 構造決定)

§ 5,7-Dihydroxy-6-methylflavanone, 7-O- α -D-Galactopyranoside

[CAS No.] 125507-63-3

[化合物分類] フラボノイド (Flavanone; 2 × O-置換基)

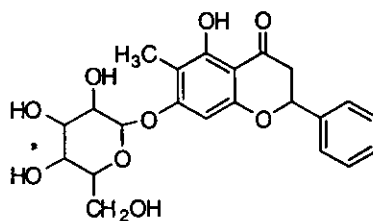
[構造式]

[分子式] $C_{27}H_{34}O_9$

[分子量] 432.426

[正確な分子量] 432.142035

[基原] *Elsholtzia ciliata*



-----文献-----

Erdtman, H., Sven. Kem. Tidskr., 1944, 56, 2; CA, 40, 1309, (分離)

Linstedt, G. et al., Acta Chem. Scand., 1951, 5, 1; 121; 129, (分離, 構造決定)

Asakawa, Y., Bull. Chem. Soc. Jpn., 1971, 44, 2761, (分離)

Star, A.E. et al., Phytochemistry, 1978, 17, 586, (分離, 誘導體)

Wollenweber, E. et al., Z. Pflanzenphysiol., 1979, 94, 241; 1981, 104, 161, (分離, 誘導體)

Markham, K.R. et al., J. Plant Physiol., 1987, 131, 45, (誘導體, 構造決定)

§ Elsholtzione; 2',3'-Didehydro

[化学名・別名] 3-Methyl-1-(3-methyl-1-furanyl)-2-buten-1-one (CAS 名). Dehydroelsholtzione. Naginata ketone

[CAS No.] 6138-88-1

[化合物分類] テルペノイド (Acyclic monoterpeneoid)

[構造式]

[分子式] C₁₀H₁₂O₂

[分子量] 164.204

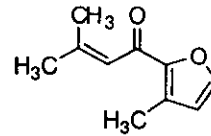
[正確な分子量] 164.08373

[基原] *Elsholtzia oldhami*, *Elsholtzia ciliata*, *Perilla* spp.

[性状] オイル

[沸点] Bp_{2.2} 81 °C

[濃度] d₂₀ 1.016



-----文献-----

Naves, Y.-R. et al., *Helv. Chim. Acta*, 1960, 43, 406, (分離)

Cahiez, G. et al., *Tet. Lett.*, 1992, 33, 5245, (合成法)

Dembitskii, A.D. et al., *Khim. Prir. Soedin.*, 1993, 29, 823; *Chem. Nat. Compd. (Engl. Transl.)*, 1993, 29, 733, (分離, H-NMR)

§ Fluoranthene (CAS 名) (旧 CAS 名)

[化学名・別名] 1,2-Benzacenaphthene. Benzo [*jk*] fluorene. Idryl. 1,2-(1,8-Naphthylene) benzene

[CAS No.] 206-44-0

[化合物分類] 多環芳香族 (Fluorene), 多環芳香族 (Miscellaneous polycyclic aromatic)

[構造式]

[分子式] C₁₆H₁₀

[分子量] 202.255

[正確な分子量] 202.07825

[基原] *Elsholtzia ciliata*

[用途] 抗ウイルス活性を示す

[性状] 針状結晶もしくは板状結晶 (EtOH)

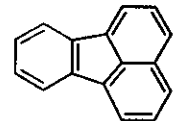
[融点] Mp 110 °C

[沸点] Bp 384 °C. Bp₆₀ 250-251 °C

[その他のデータ] 加温した濃硫酸 → 青色を示す

[傷害・毒性] 50%致死量 (LD₅₀) (ラット, 経口) 2000 mg/kg. 変異原性, 発ガン性作用

[化学物質毒性データ総覧 (RTEC) 登録番号] LL4025000



-----文献-----

Horwood Tucker, S. et al., *Chem. Rev.*, 1952, 50, 483, (レビュー)

Yip, L. et al., *Planta Med.*, 1995, 61, 187, (分離, 活性)

Lewis, R.J., *Sax's Dangerous Properties of Industrial Materials*, 8th edn., Van Nostrand Reinhold, 1992, FDF000

RTECS (化学物質毒性データ)

生体影響物質 : 催腫瘍物質. 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 : 2 gm/kg

毒性影響 : 致死量以外に毒性影響に関する報告はない.

参考文献

AIHAAP American Industrial Hygiene Association Journal. (AIHA, 475 Wolf Ledges Pkwy., Akron, OH 44311) V.19- 1958- [Vol.,頁,年(19-)] 23,95,1962

<<試験方法>> LD50 試験 (50%致死量試験).

曝露経路 : 静脈注射

被験動物 : げっ歯類-マウス

投与量・期間 : 100 mg/kg

毒性影響 : 致死量以外に毒性影響に関する報告はない.

参考文献

CSLNX* U.S. Army Armament Research & Development Command, Chemical Systems Laboratory,
NIOSH Exchange Chemicals. (Aberdeen Proving Ground, MD 21010) [Vol.,頁,年(19-)]NX00205

<<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 : 3180 mg/kg

毒性影響 : 致死量以外に毒性影響に関する報告はない.

参考文献

AIHAAP American Industrial Hygiene Association Journal. (AIHA, 475 Wolf Ledges Pkwy., Akron,
OH 44311) V.19- 1958- [Vol.,頁,年(19-)]23,95,1962

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 : 67500 mg/kg/90D-I

毒性影響 : [腎臓・尿路・膀胱] 尿細管の変化(急性腎不全, 急性尿細管壊死
を含む).

[血液] 正常血球性貧血.

[血液] 白血球数の変化.

参考文献

TOXID9 Toxicologist. (Soc. of Toxicology, Inc., 475 Wolf Ledge Parkway, Akron, OH 44311) V.1-
1981- [Vol.,頁,年(19-)]36(1,pt2),219,1997

催腫瘍性に関するデータ

<<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-マウス

投与量・期間 : 280 mg/kg/58 週間間欠投与

毒性影響 : [催腫瘍性] RTECS 基準による, 不確実な催腫瘍性物質

[皮膚と付属器官] 腫瘍

[催腫瘍性] 適用部位の腫瘍

参考文献

JNCIAM Journal of the National Cancer Institute. (Washington, DC) V.1-60, 1940-78. For publisher
information, see JJIND8. [Vol.,頁,年(19-)]56,1237,1976

変異原性に関するデータ

<<試験方法>> 微生物を用いた突然変異試験.

試験系 : 大腸菌 *Salmonella typhimurium*.

投与量・期間 : 5 ug/plate

参考文献

MUREAV Mutation Research. (Elsevier Science Pub. B.V., POB 211, 1000 AE Amsterdam,
Netherland) V.1- 1964- [Vol.,頁,年(19-)]156,61,1985

<<試験方法>> ほ乳類体細胞の突然変異試験.

試験系 : ヒトリンパ球

投与量・期間 : 2 umol/L

参考文献

DTESD7 Developments in Toxicology and Environmental Science. (Elsevier Science, New York, NY)
V.1-15, 1977-87. Discontinued [Vol.,頁,年(19-)]10,277,1982

<<試験方法>> 形態的形質変換.

試験系 : げっ歯類-ラット胚

投与量・期間 : 50 mg/L

参考文献

JNCIAM Journal of the National Cancer Institute. (Washington, DC) V.1-60, 1940-78. For publisher
information, see JJIND8. [Vol.,頁,年(19-)]51,799,1973

<<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 : 9 mg/L

参照文献

MUREAV Mutation Research. (Elsevier Science Pub. B.V., POB 211, 1000 AE Amsterdam, Netherland) V.1- 1964- [Vol.,頁,年(19-)]174,125,1986

<<試験方法>> ほ乳類体細胞の突然変異試験.

試験系 : げっ歯類-マウス白血球.

投与量・期間 : 20 mg/L

参照文献

ENMUDM Environmental Mutagenesis (New York, NY) V.1-9, 1979-87. For publisher information, see EMMUEG. [Vol.,頁,年(19-)]6,539,1984

*** REVIEWS ***

IARC Cancer Review:Animal Inadequate Evidence

IMEMDT IARC Monographs on the Evaluation of Carcinogenic Risk of Chemicals to Man. (WHO Publications Centre USA, 49 Sheridan Ave., Albany, NY 12210) V.1- 1972- [Vol.,頁,年(19-)] 32,355,1983

IARC Cancer Review:Human No Adequate Data

IMEMDT IARC Monographs on the Evaluation of Carcinogenic Risk of Chemicals to Man. (WHO Publications Centre USA, 49 Sheridan Ave., Albany, NY 12210) V.1- 1972- [Vol.,頁,年(19-)] 32,355,1983

IARC Cancer Review:Group 3

IMSUDL IARC Monographs, Supplement. (WHO Publications Centre USA, 49 Sheridan Ave., Albany, NY 12210) No.1- 1979- [Vol.,頁,年(19-)]7,56,1987

§ 4',6,7-Trihydroxyflavone; 4'-Me ether

[化学名・別名]6,7-Dihydroxy-4'-methoxyflavone

[CAS No.]129601-99-6

[化合物分類]フラボノイド(Flavone; 3 × O-置換基)

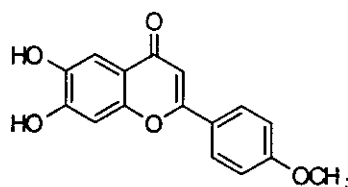
[構造式]

[分子式]C₁₆H₁₂O₅

[分子量]284.268

[正確な分子量]284.068475

[基原]*Elsholtzia ciliata*



-----文献-----

Sharma, P.N. et al., Indian J. Chem., Sect. B, 1982, 21, 263, (分離)

*****ナシ (Pear) *****

§ §バラ科ナシ(*Pyrus serotina* Rehder)の果実。

§ 4',7-Dihydroxy-3',5-dimethoxyflavone; 7-O-β-D-Glucopyranoside

[化合物分類]フラボノイド(Flavone; 4 × O-置換基)

[構造式]

[分子式]C₂₃H₂₄O₁₁

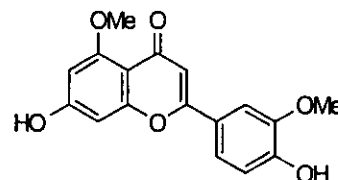
[分子量]476.436

[正確な分子量]476.131865

[基原]*Pyrus serotina*の葉

[性状]灰白色の針状結晶 (MeOH)

[融点]Mp 181-182 °C



-----文献-----

Ozawa, T. et al., Biosci., Biotechnol., Biochem., 1995, 59, 2244, (7-glucoside, 分離, UV, IR, H-NMR, C13-NMR, Mas)

§ 4',7-Dihydroxy-3',5-dimethoxyflavone; 4'-O-β-D-Glucopyranoside

[化合物分類]フラボノイド(Flavone; 4 × O-置換基)

[構造式]

[分子式] $C_{23}H_{34}O_{11}$

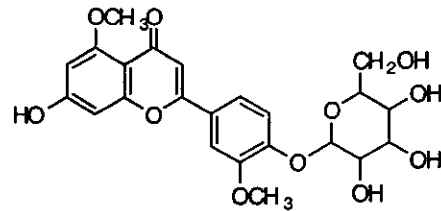
[分子量] 476.436

[正確な分子量] 476.131865

[基原] *Pyrus serotina* の葉

[性状] 灰白色の針状結晶 (MeOH)

[融点] Mp 245-246 °C



-----文献-----

Österdahl, B.G., Acta Chem. Scand., Ser. B, 1976, 30, 867, (合成法, UV, Mas)

Gehring, E. et al., Z. Naturforsch., C, 1980, 35, 380, (分離, Mas)

Ozawa, T. et al., Biosci., Biotechnol., Biochem., 1995, 59, 2244, (7-glucoside, 分離, UV, IR, H-NMR, C13-NMR, Mas)

§ § パラ科セイヨウナシ (*Pyrus communis* L.) の果実。

§ Arbutin

[化学名・別名] 4-Hydroxyphenyl β-D-glucopyranoside (CAS 名) (旧 CAS 名). Hydroquinone-glucose.

Arbutoside. Ericolin

[CAS No.] 497-76-7

[化合物分類] 炭水化物 (gluco-Hexose), 薬物: 利尿薬 (Diuretic), 薬物: 抗菌性剤 (Antibacterial agent)

[構造式]

[分子式] $C_{12}H_{16}O_7$

[分子量] 272.254

[正確な分子量] 272.089605

[基原] Glucoside in pear leaves (*Pyrus communi*). ツツジ科に広く分布し、また多くの他の植物からも見つかる

[用途] 抗菌, 利尿剤.

[融点] Mp 142-143 °C

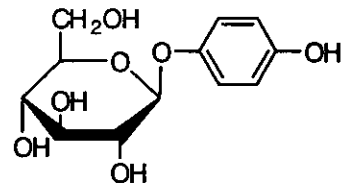
[比旋光度]: $[\alpha]_{D18} -60.34$ (H₂O)

[Log P 計算値] Log p -1.83 (計算値)

[UV]: [neutral] λ_{max} 291 () (MeOH) [neutral] λ_{max} 294 () (EtOH)

[傷害・毒性] 催奇形性を示した研究がある (かなりの多量投与時)

[化学物質毒性データ総覧 (RTEC) 登録番号] CE8863000



-----文献-----

Karrer, W. et al., Konstitution und Vorkommen der Organischen Pflanzenstoffe, 2nd edn., Birkhäuser Verlag, Basel, 1972, nos. 204; 205; 2610, (生育)

RTECS (化学物質毒性データ)

生体影響物質 : 生殖影響物質

健康障害に関するデータ

生殖に関するデータ

<<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 : 13600 mg/kg

雌雄投与期間: 雌 14 日間 (交配前)

雌 20 日間 (交配後)

毒性影響 : [生殖] [母系影響] 卵巣, 卵管.

[生殖] [胚または胎仔に対する影響] 胎仔毒性 (死亡をのぞく. たとえば胎仔の発育阻害).

参照文献

IYKEDH Iyaku hin Kenkyu. Study of Medical Supplies. (Nippon Koteisho Kyokai, 12-15, 2-chome, Shibuya, Shibuya-ku, Tokyo 150, Japan) V.1- 1970- [Vol., 頁, 年 (19-)] 19, 282, 1988

§ Arbutin; 6-Ac

[化学名・別名] 6-O-Acetylbutin. Pyroside

[CAS No.] 10338-88-2

[化合物分類] 炭水化物 (gluco-Hexose)

[構造式]

[分子式] $C_{15}H_{18}O_8$

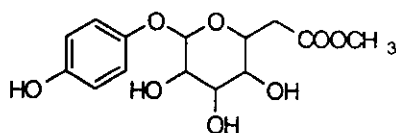
[分子量] 314.291

[正確な分子量] 314.10017

[基原] 未熟なセイヨウナシ (*Pyrus communis*), mountain cranberry (*Vaccinium vitis-idaea*)

[融点] Mp 214-216 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_{D25} -58.8$ (c, 2.0 in H₂O)



-----文献-----

Karrer, W. et al., Konstitution und Vorkommen der Organischen Pflanzenstoffe, 2nd edn., Birkhäuser Verlag, Basel, 1972, nos. 204; 205; 2610, (生育)

Askari, A. et al., Phytochemistry, 1972, 11, 1509, (Isopyroside)

HIH100

§ 1,2,3,4,7-Dibenzofuranpentol; 1,3,4-Tri-Me ether

[化学名・別名] 2,7-Dihydroxy-1,3,4-trimethoxydibenzofuran. γ -Pyrufuran

[CAS No.] 93973-18-3

[化合物分類] 単環芳香族 (Dibenzofuran)

[構造式]

[分子式] $C_{15}H_{14}O_6$

[分子量] 290.272

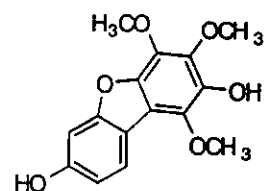
[正確な分子量] 290.07904

[基原] *Chondrostereum purpureum* に感染した *Pyrus communis*

[性状] オイル

[溶解性] メタノール, クロロホルムに可溶; 水に難溶

[UV]: [neutral] λ_{max} 210 (ϵ 25800); 227 (ϵ 27900); 262 (ϵ 15500); 297 (ϵ 15800) (EtOH)



-----文献-----

Kemp, M.S. et al., J.C.S. Perkin 1, 1984, 1441

§ 1,2,3,4-Dibenzofurantetrol; 1,2,4-Tri-Me ether

[化学名・別名] 1,2,4-Trimethoxy-3-dibenzofuranol (CAS 名). β -Pyrufuran

[CAS No.] 88256-04-6

[化合物分類] 単環芳香族 (Dibenzofuran)

[構造式]

[分子式] $C_{15}H_{14}O_5$

[分子量] 274.273

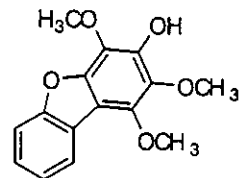
[正確な分子量] 274.084125

[基原] *Pyrus communis* から得られるファイトアレキシン

[性状] オイル

[溶解性] メタノール, EtOAc に可溶; 水に難溶

[UV]: [neutral] λ_{max} 217 (ϵ 32500); 227 (ϵ 31000); 261 (ϵ 10500); 289 (ϵ 15200) (EtOH)



-----文献-----

Kemp, M.S. et al., J.C.S. Perkin 1, 1983, 2267, (分離, 構造決定, 合成法)

Carvalho, C.F. et al., Aust. J. Chem., 1985, 38, 777, (合成法)

§ 1,2,3,4-Dibenzofurantetrol; 1,3,4-Tri-Me ether

[化学名・別名] 1,3,4-Trimethoxy-2-dibenzofuranol (CAS 名). α -Pyrufuran

[CAS No.] 88256-05-7

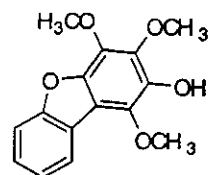
[化合物分類] 単環芳香族 (Dibenzofuran)

[構造式]

[分子式] $C_{15}H_{14}O_5$

[分子量] 274.273

[正確な分子量] 274.084125



[基原] *Pyrus communis* から得られるファイトアレキシン

[性状] オイル

[溶解性] メタノール, EtOAc に可溶; 水に難溶

[UV]: [neutral] λ_{\max} 224 (ϵ 27700); 259 (ϵ 11700); 287 (ϵ 17000) (EtOH)

-----文献-----

Kemp, M.S. et al., J.C.S. Perkin 1, 1983, 2267, (分離, 構造決定, 合成法)

Carvalho, C.F. et al., Aust. J. Chem., 1985, 38, 777, (合成法)

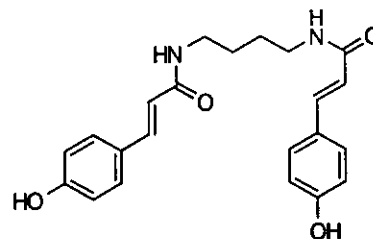
§ Di-4-coumaroylputrescine

[化学名・別名] *N,N'*-1,4-Butanediylobis[3-(4-hydroxyphenyl)-2-propenamido] (CAS 名). *N,N'*-Bis(4-hydroxycinnamoyl)-1,4-butanediamine

[CAS No.] 37946-59-1

[化合物分類] アルカロイド化合物 (Putrescine alkaloid)

[構造式]



[分子式] $C_{22}H_{24}N_2O_4$

[分子量] 380.443

[正確な分子量] 380.173608

[基原] 次の植物から得られるアルカロイド: *Dianthus caryophyllus*, *Helianthus annuus*, *Nicotiana tabacum*, *Pyrus communis*, *Rubus idaeus*, *Vicia faba* (ナデシコ科, キク科, ナス科, バラ科, マメ科)

-----文献-----

Martin-Tanguy, J. et al., C. R. Hebd. Seances Acad. Sci. Ser. D, 1973, 276, 1433, (UV, 構造決定, 合成法, Diferuloylputrescine)

Cabanne, F. et al., C. R. Hebd. Seances Acad. Sci. Ser. D, 1976, 282, 1959, (UV, 構造決定, Dicafeoylputrescine)

Martin-Tanguy, J. et al., Phytochemistry, 1978, 17, 1927, (生育, 誘導体)

§ Di-4-coumaroylputrescine; 3',3''-Dihydroxy

[化学名・別名] Dicafeoylputrescine. *N,N'*-Bis(3,4-dihydroxycinnamoyl)-1,4-butanediamine

[CAS No.] 60422-23-3

[化合物分類] アルカロイド化合物 (Putrescine alkaloid)

[構造式]

[分子式] $C_{22}H_{24}N_2O_6$

[分子量] 412.441

[正確な分子量] 412.163438

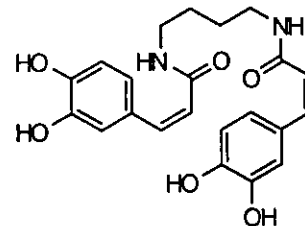
[基原] 次の植物から得られるアルカロイド: *Helianthus annuus*, *Pyrus communis*, *Nicotiana tabacum*, *Salix* spp. (キク科, バラ科, ナス科, ヤナギ科)

-----文献-----

Martin-Tanguy, J. et al., C. R. Hebd. Seances Acad. Sci. Ser. D, 1973, 276, 1433, (UV, 構造決定, 合成法, Diferuloylputrescine)

Cabanne, F. et al., C. R. Hebd. Seances Acad. Sci. Ser. D, 1976, 282, 1959, (UV, 構造決定, Dicafeoylputrescine)

Martin-Tanguy, J. et al., Phytochemistry, 1978, 17, 1927, (生育, 誘導体)



§ *N',N''*-Dicoumaroylspermidine

[化学名・別名] *N',N''*-Bis(4-hydroxycinnamoyl) spermidine

[CAS No.] 65715-79-9

[関連 CAS No.] 101330-61-4

[化合物分類] アルカロイド化合物 (Acyclic spermidine alkaloid)

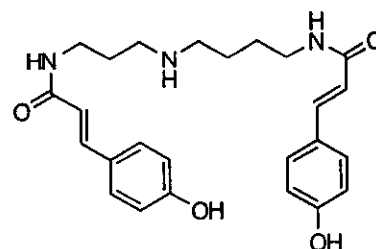
[構造式]

[分子式] $C_{23}H_{31}N_3O_4$

[分子量] 437.538

[正確な分子量] 437.231457

[基原] 次の植物から得られるアルカロイド: *Dianthus caryophyllus*, *Helianthus annuus*, *Aesculus hippocastanum*, *Vicia faba*, *Pyrus communis* (ナデシコ科, トチノキ科, マメ科, バラ科, ナス科)



-----文献-----

- Deleacutetang, J., Ann. Tab., Sect. 2, 1974, 11, 123; CA, 84, 147656m, (UV, H-NMR, 構造決定, Dicafeoylspermidine)
 Cabanne, F. et al., Physiol. Veg., 1977, 15, 429; CA, 88, 86095m, (UV, 構造決定)
 Martin-Tanguy, J. et al., Phytochemistry, 1978, 17, 1927, (生育)
 Meurer, B. et al., Phytochemistry, 1986, 25, 433, (Caffeoylferuloylspermidine, Diferuloylspermidine)

§ 2,3-Dihydroxy-12,18-ursadien-28-oic acid; (2 ξ, 3 ξ)-form, Di-Ac

[CAS No.] 273379-39-8

[化合物分類] テルペノイド (Ursane triterpenoid)

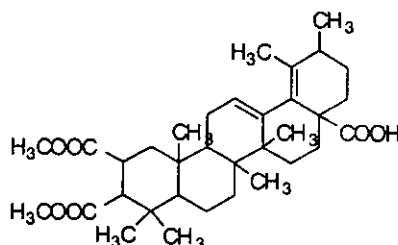
[構造式]

[分子式] C₃₄H₅₀O₆

[分子量] 554.765

[正確な分子量] 554.36074

[基原] *Pyrus communis*



-----文献-----

- Numata, A. et al., Chem. Pharm. Bull., 1990, 38, 942, (分離, H-NMR, C13-NMR)
 Ruecker, G. et al., Planta Med., 1991, 57, 468-470, (分離, H-NMR, C13-NMR, Mas)
 Yang, S.-C. et al., J. Chin. Chem. Soc. (Taipei), 1995, 42, 573, (分離, H-NMR, C13-NMR)
 Younes, M.E. et al., Egypt. J. Chem., 1999, 42, 573-586; CA, 133, 28459v, (di-Ac)

§ Gibberellin A₅; 15 β-Hydroxy

[化学名・別名] Gibberellin A₅

[CAS No.] 55812-47-0

[化合物分類] テルペノイド (Gibberellin)

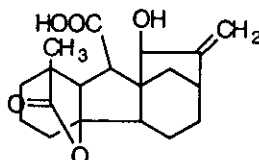
[構造式]

[分子式] C₁₉H₂₄O₅

[分子量] 332.396

[正確な分子量] 332.162375

[基原] *Pyrus communis*



-----文献-----

- Dolan, S.C. et al., J.C.S. Perkin 1, 1985, 651, (GA₄₅, GA₆₃)

§ Gibberellin A₅; 3 β, 15 β-Dihydroxy

[化学名・別名] Gibberellin A₅₃

[CAS No.] 63351-80-4

[化合物分類] テルペノイド (Gibberellin)

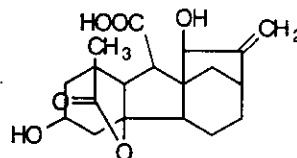
[構造式]

[分子式] C₁₉H₂₄O₆

[分子量] 348.395

[正確な分子量] 348.15729

[基原] *Pyrus communis*



-----文献-----

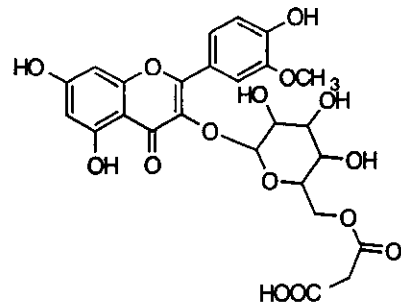
- Dolan, S.C. et al., J.C.S. Perkin 1, 1985, 651, (GA₄₅, GA₆₃)

§ 3-Glucopyranosyloxy-4',5,7-trihydroxy-3'-methoxyflavone; 6'-O-Malonyl

[CAS No.] 86555-37-5

[化合物分類] フラボノイド (Flavonol; 5 × O-置換基)

[構造式]



[分子式] $C_{25}H_{20}O_{15}$

[分子量] 564.456

[正確な分子量] 564.111525

[基原] 次の植物から分離: *Pyrus communis*

-----文献-----

C.Djerassi et al., Dictionary of Natural Products, Chapman, Hall, 2002

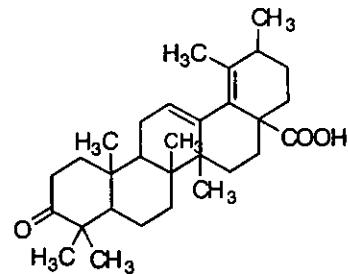
§ 3-Hydroxy-12,18-ursadien-28-oic acid; 3 β -form, 3-Ketone

[化学名・別名] 3-Oxo-12,18-ursadien-28-oic acid

[CAS No.] 273223-69-1

[化合物分類] テルペノイド (Ursane triterpenoid)

[構造式]



[分子式] $C_{30}H_{44}O_3$

[分子量] 452.676

[正確な分子量] 452.329045

[基原] *Symplocos racemosa*, *Pyrus communis*

[性状] 結晶 (CHCl₃)

[融点] Mp 90-91 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_{D55} +165$ (c, 0.15 in CHCl₃)

-----文献-----

Ali, M. et al., Phytochemistry, 1990, 29, 3601, (ketone)

Younes, M.E. et al., Egypt. J. Chem., 1999, 42, 573-586; CA, 133, 28459v, (ketone)

§ 3',4',5,7-Tetrahydroxyflavanone, 7-O- β -D-Glucopyranoside

[化学名・別名] Pyracanthoside. Miscanthoside

[CAS No.] 38965-51-4

[化合物分類] フラボノイド (Flavanone; 4 × O-置換基)

[構造式]

[分子式] $C_{21}H_{22}O_{11}$

[分子量] 450.398

[正確な分子量] 450.116215

[基原] *Malus domestica* の樹皮。また, *Crataegus pyracantha*, *Pyrus communis*, *Mentha aquatica*, *Lasianthus* spp., その他からも得られる

[融点] Mp 175-177 °C. Mp 215-216 °C

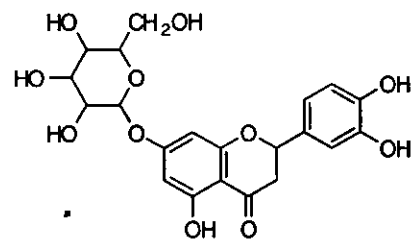
[比旋光度]: $[\alpha]_D -40$ (60% EtOH 溶液)

-----文献-----

C.Djerassi et al., Dictionary of Natural Products, Chapman, Hall, 2002

Cui, C.-B. et al., Chem. Pharm. Bull., 1990, 38, 3218, (7-glucuronoside)

§ 3,4',5,7-Tetrahydroxy-3'-methoxyflavone; 3-O-[α -L-Rhamnopyranosyl-(1 → 6)- β -D-glucopyranoside]



[化学名・別名] Keioside. Isorhamnetin 3-robinobioside

[CAS No.] 107740-46-5

[化合物分類] フラボノイド (Flavonol; 5 × O-置換基)

[構造式]

[分子式] $C_{28}H_{32}O_{16}$

[分子量] 624.551

[正確な分子量] 624.16904

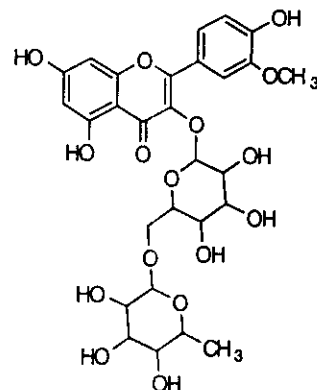
[基原] 次の植物から分離: *Campanula glomerata*, *Gomphrena martiana*,
Primula officinalis, *Convallaria keiskei*, *Pyrus communis*, *Opuntia lindheimeri*

[性状] 黄色の針状結晶 (EtOH 溶液)

[融点] Mp 183-186 °C (178-181 °C)

[比旋光度]: $[\alpha]_{D20} -21.4$ (c, 0.84 in MeOH)

[UV]: [neutral] λ_{max} 255 (); 267 (); 356 () (MeOH) [base] λ_{max} 273 (); 412 () (MeOH-NAOH)



-----文献-----

Biryuk, V.A. et al., *Farm. Zh.* (Kiev), 1972, 27, 44, (3-rhamnosylglucoside)

Karrer, W. et al., *Konstitution und Vorkommen der Organischen Pflanzenstoffe*, 2nd edn., Birkhäuser Verlag, Basel, 1972, no. 1539, (生育)

The Flavonoids: Advances in Research since 1980, (Ed. Harborne, J.B.), Chapman and Hall, London, 1988

§ 12-Ursene-3,19-diol; (3 β , 19 α)-form, 3-Ac

[CAS No.] 273223-68-0

[化合物分類] テルペノイド (Ursane triterpenoid)

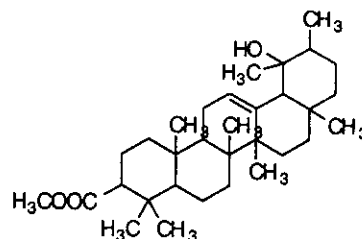
[構造式]

[分子式] $C_{32}H_{52}O_3$

[分子量] 484.761

[正確な分子量] 484.391645

[基原] *Pyrus communis*



-----文献-----

Younes, M.E. et al., *Egypt. J. Chem.*, 1999, 42, 573-586; *CA*, 133, 28459v, (分離, H-NMR, C13-NMR)

*****ナスターシャム (Common nasturtium,) *****

§ § ノウゼンハレン科ナスターシャム (*Tropaeolum majus* L.) の全草。

§ Benzyl glucosinolate

[化学名・別名] 1-Thio- β -D-glucopyranose 1-[N-(sulfooxy)benzenethanimidate] (CAS 名).

Glucotropaeolin. Phenylmethyl glucosinolate

[CAS No.] 499-26-3

[関連 CAS No.] 92761-40-5, 117489-68-6

[化合物分類] 炭水化物 (Glycosinolate), 薬物: 抗生物質 (Antibiotic)

[構造式] $PhCH_2C(SGlc)=NOSO_2H$

[分子式] $C_{14}H_{19}NO_5S_2$

[分子量] 409.437

[正確な分子量] 409.050124

[基原] 次の植物から分離: *Tropaeolum majus* の種子, *Lepidium sativum*, その他の十字科植物

[用途] 強い抗菌性

-----文献-----

Schultz, O.E. et al., *Z. Naturforsch., B*, 1952, 7, 500; 1953, 8, 151, (分離)

Schultz, O.E. et al., *Arch. Pharm.* (Weinheim, Ger.), 1955, 288, 525, (分離)

Hanley, A.B. et al., *J. Sci. Food Agric.*, 1983, 34, 869, (分離)

§ Benzyl isothiocyanate

[化学名・別名] (Isothiocyanatomethyl) benzene (CAS 名). Phenylmethyl isothiocyanate. Benzyl mustard oil.

Tromocaps. Tromalyt active substance. Urogran

[CAS No.] 622-78-6

[化合物分類] 薬物: 抗カビ薬 (Antifungal agent), 薬物: 抗菌性剤 (Antibacterial agent), 脂肪族化合物 (Simple thiocyanate and isothiocyanate), 薬物: 抗腫瘍薬 (Antineoplastic agent)

[構造式] PhCH₂NCS

[分子式] C₆H₅NS

[分子量] 149.216

[正確な分子量] 149.029919

[基原] 次の植物から分離: *Tropaeolum majus*, *Lepidium sativum*, その他の植物, 特にアブラナ科. 次の物質から製造する: 3-Hydroxybenzyl glucosinolate

[用途] 抗腫瘍薬. 殺菌剤, 抗ウイルス, 殺菌性を示す.

[性状] 淡黄色のオイルもしくは橙-赤色の結晶

[融点] Mp 41 °C

[沸点] Bp 243 °C. Bp₁₂: 125-126 °C

[Log P 計算値] Log P 3.2 (計算値)

[傷害・毒性] 厳しい刺激. 50 % 致死量 (LD₅₀) (マウス, 皮下) 150 mg/kg; BERDY HAZD : 50 % 致死量 (LD₅₀) (マウス, 皮下) 150 mg/kg

[化学物質毒性データ総覧 (RTEC) 登録番号] NX8250000

-----文献-----

Daxenbichler, M.E. et al., J. Agric. Food Chem., 1964, 12, 127, (生育)

Lien, E.J. et al., J. Med. Chem., 1968, 11, 430, (性質)

Goerler, K. et al., Xenobiotica, 1982, 12, 535, (代謝)

Pintao, A.M. et al., Planta Med., 1995, 61, 233, (薬理)

Hecht, S.S., Adv. Exp. Med. Biol., 1996, 401, 1; 13, (薬理, レビュー)

Martindale, The Extra Pharmacopoeia, 31st edn., Pharmaceutical Press, 1996, 1678

Lewis, R.J., Sax's Dangerous Properties of Industrial Materials, 8th edn., Van Nostrand Reinhold, 1992, BEU250

RTECS (化学物質毒性データ)

生体影響物質 : 医薬品, 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>> 認知されている最小致死量 (LDLo) 試験.

曝露経路 : 腹腔内投与

被験動物 : げっ歯類-ラット.

投与量・期間 : 100 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

ARNAD Arzneimittel-Forschung. 医薬品. Research. (Editio Cantor Verlag, Postfach 1255, W-7960 Aulendorf, Fed. Rep. Ger.) V.1- 1951- [Vol.,頁,年(19-)] 16,870,1966 .

<<試験方法>> 認知されている最小致死量 (LDLo) 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 : 100 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

ARNAD Arzneimittel-Forschung. 医薬品. Research. (Editio Cantor Verlag, Postfach 1255, W-7960 Aulendorf, Fed. Rep. Ger.) V.1- 1951- [Vol.,頁,年(19-)] 21,121,1971

<<試験方法>> LD50 試験 (50%致死量試験).

曝露経路 : 皮下投与.

被験動物 : げっ歯類-マウス

投与量・期間 : 150 mg/kg

毒性影響 : (行動) 痙攣または発作閾値への影響.

参照文献

ARNAD Arzneimittel-Forschung. 医薬品. Research. (Editio Cantor Verlag, Postfach 1255, W-7960 Aulendorf, Fed. Rep. Ger.) V.1- 1951- [Vol.,頁,年(19-)] 5,505,1955

変異原性に関するデータ

〈〈試験方法〉〉 微生物を用いた突然変異試験.
試験系 : 大腸菌 *Salmonella typhimurium*.
投与量・期間 : 150 ug/plate
参照文献

ABCHA6 Agricultural and Biological Chemistry. (Maruzen Co. Ltd., POB 5050, Tokyo International, Tokyo 100-31, Japan) V.25- 1961- [Vol.,頁,年(19-)]44,3017,1980

〈〈試験方法〉〉 DNA 損傷.
試験系 : げっ歯類-マウス白血球.
投与量・期間 : 1 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-)]33,31,1995

〈〈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 : 300 ug/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-)]33,31,1995

〈〈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 : 300 ug/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-)]33,31,1995

〈〈試験方法〉〉 変異原試験-通常の試験法.
曝露経路 : 皮膚への塗布
試験系 : 哺乳動物-種未特定.
投与量・期間 : 800 ug/L
参照文献

MUREAV Mutation Research. (Elsevier Science Pub. B.V., POB 211, 1000 AE Amsterdam, Netherland) V.1- 1964- [Vol.,頁,年(19-)]300,111,1993

〈〈試験方法〉〉 細胞遺伝学分析試験
曝露経路 : 皮膚への塗布
試験系 : 哺乳動物-種未特定.
投与量・期間 : 800 ug/L
参照文献

MUREAV Mutation Research. (Elsevier Science Pub. B.V., POB 211, 1000 AE Amsterdam, Netherland) V.1- 1964- [Vol.,頁,年(19-)]300,111,1993

*****ナッツ (Nut) *****

§ § ヤマモガシ科マカダミア (*Macadamia ternifolia* F. V. Mueller) の種子, またはその他の食用になる堅果、核果、種子。

§ 2-(Glucopyranosyloxy)-2-(4-hydroxyphenyl) acetonitrile; (2R)-form

[化学名・別名] Taxiphyllin. Phyllanthin. Phyllanthoside

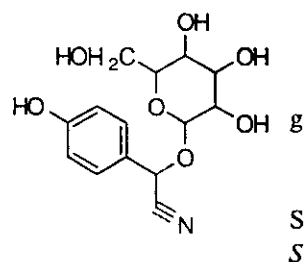
[CAS No.] 21401-21-8

[化合物分類] 単環芳香族 (Phenylacetic acid derivative), 炭水化物 (Cyanogenic lycoside)

[構造式]

[基原] Cyanogenic compd. of *Taxus* spp. and of bamboo (*Bambusa vulgaris*, easide arrow grass (*Triglochin maritima*) and *Bambusa guadua*). また *tenocarpus sinuatus*, *Macadamia ternifolia* から得られる

[性状] 結晶 (EtOH/C₆H₆)



[融点] Mp 168-169 °C. Mp 176 °C
[比旋光度]: $[\alpha]_{D20} -667$ (c, 0.37 in EtOH)
[UV]: [neutral] λ_{max} 216 (ϵ 17780); 222 (ϵ 15490); 277 (ϵ 21880) (MeOH) (Derep)
[その他のデータ] 薬理的活性な異性体.

-----文献-----

Plouvier, V. et al., C. R. Hebd. Seances Acad. Sci., 1964, 259, 665, (分離)
Towers, G.H.N. et al., Tetrahedron, 1964, 20, 71, (分離, UV, IR, H-NMR)
Reay, P.F. et al., Phytochemistry, 1969, 8, 2259, (分離)
Schwarzmaier, U. et al., Chem. Ber., 1976, 109, 3250; 3379, (絶対構造)
Nahrstedt, A. et al., Phytochemistry, 1979, 18, 1137, (分離)
Selmar, D. et al., Phytochemistry, 1996, 43, 569, (Dhurrin 6'-glucoside)
Nielsen, J.S. et al., Arch. Biochem. Biophys., 1999, 368, 121, (合成)

§ 9-Hexadecenoic acid; (Z)-form

[化学名・別名] Palmitoleic acid. Zoomaric acid. Physetoleic acid
[CAS No.] 373-49-9
[その他の CAS No.] 28039-99-8
[化合物分類] 脂肪族化合物 (Unbranched alkenic carboxylic acid and lactone)
[基原] 海の植物と動物の脂質の主成分, また植物オイルからも見つかる, 例えば, *Macadamia ternifolia* (small-fruited Macadamia nut) の種子オイル (20%)
[融点] Mp 0.5 °C
[沸点] Bp₁ 180-183 °C. Bp_{0.5} 162 °C
[屈折率] n_D^{20} 1.4582

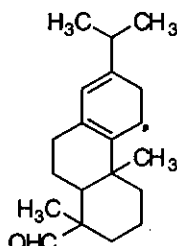
-----文献-----

Bridge, R.E. et al., J.C.S., 1950, 2396, (分離)
Boughton, B.W. et al., J.C.S., 1952, 671, (合成法)
Hofmann, K. et al., J. Biol. Chem., 1955, 213, 415
Karrer, W. et al., Konstitution und Vorkommen der Organischen Pflanzenstoffe, 2nd edn., Birkhäuser Verlag,

§ § マツ科チョウセンマツ (*Pinus koraiensis* Siebold et Zuccarini) の種子, またはその他の食用になる堅果、核果、種子。

§ 8,13-Abietadien-18-oic acid; 18-Aldehyde

[化学名・別名] 8,13-Abietadien-18-al. Palustral
[CAS No.] 13508-03-7
[化合物分類] テルペノイド (Abietane diterpenoid)
[構造式]
[分子式] C₂₀H₃₀O
[分子量] 286.456
[正確な分子量] 286.229665
[基原] 次の植物から分離: *Pinus koraiensis*, その他の針葉樹
[性状] 結晶 (EtOH)
[比旋光度]: $[\alpha]_{D20} +59$ (c, 4.24 in CHCl₃)



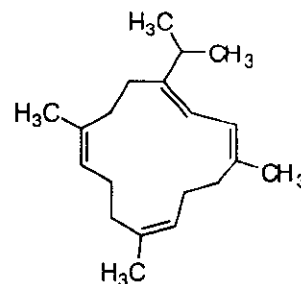
-----文献-----

Wenkert, E. et al., J.A.C.S., 1964, 86, 2038
Radulgin, V.A. et al., Khim. Prir. Soedin., 1974, 10, 674; Chem. Nat. Compd. (Engl. Transl.), 1974, 10, 696, (Palustral)
Delgado, G. et al., Phytochemistry, 1994, 37, 1119, (diepoxide)

§ 1,3,7,11-Cembratetraene; (1Z,3E,7E,11E)-form

[化学名・別名] γ -Pinacene

[CAS No.] 37905-11-6
[化合物分類] テルペノイド (Cembrane diterpenoid)
[構造式]



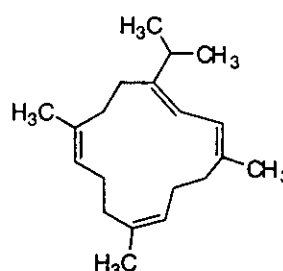
[基原] *Pinus koraiensis*, *Pinus sibirica*
[性状] オイル

-----文献-----

Raldugin, V.A. et al., Khim. Prir. Soedin., 1971, 7, 604; Chem. Nat. Compd. (Engl. Transl.), 582, (分離, IR, H-NMR)
Bowden, B.F. et al., Aust. J. Chem., 1978, 31, 2707, (分離)
Vanderah, D.J. et al., J.O.C., 1978, 43, 1614, (分離)
Raldugin, V.A. et al., CA, 1985, 102, 149548s, (H-NMR, C13-NMR, 構造決定)

§ 1,3,7,11-Cembratetraene; (1Z,3Z,7E,11E)-form

[化学名・別名] β -Pinacene
[CAS No.] 37905-10-5
[化合物分類] テルペノイド (Cembrane diterpenoid)
[構造式]



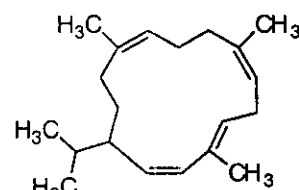
[基原] *Pinus koraiensis*, *Pinus sibirica*
[性状] オイル

-----文献-----

Raldugin, V.A. et al., Khim. Prir. Soedin., 1971, 7, 604; Chem. Nat. Compd. (Engl. Transl.), 582, (分離, IR, H-NMR)
Bowden, B.F. et al., Aust. J. Chem., 1978, 31, 2707, (分離)
Vanderah, D.J. et al., J.O.C., 1978, 43, 1614, (分離)
Raldugin, V.A. et al., CA, 1985, 102, 149548s, (H-NMR, C13-NMR, 構造決定)

§ 2,4,7,11-Cembratetraene; (1S,2E,4Z,7E,11E)-form

[化学名・別名] Cembrene. Thunbergene. Thumbelene
[CAS No.] 1898-13-1
[化合物分類] テルペノイド (Cembrane diterpenoid)
[構造式]



[基原] *Pinus formosana* のオイル, *Pinus albicaulis*, *Pinus koraiensis*, *Pinus armandii*, *Pinus peuce*, *Pinus sibirica*, *Pinus thunbergii*, *Larix sibirica*, その他の裸子植物

[性状] 結晶 (petrol)

[融点] Mp 58-59 °C

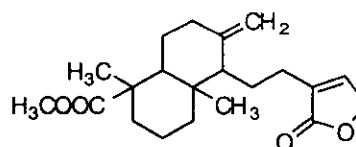
[比旋光度]: $[\alpha]_{D^{25}}$ +238 (c, 1.1 in CHCl₃)

-----文献-----

Ibers, J.A., Acta Cryst., 1961, 14, 1001, (結晶構造)
Dauben, W.G. et al., J.O.C., 1965, 30, 1693, (UV, IR, H-NMR, Mass, 構造決定)
Pattenden, G. et al., J.C.S. Perkin 1, 1996, 57, (合成法)

§ 8(17),13-Labdadien-16,15-olid-19-oic acid; Me ester

[化学名・別名] Pinusolide
[CAS No.] 31685-80-0
[化合物分類] テルペノイド (Labdane diterpenoid)
[構造式]



[分子式] C₂₁H₃₀O₄

[分子量] 346.466

[正確な分子量] 346.21441