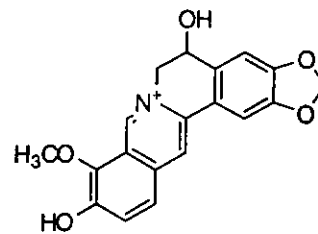


[構造式]



[基原] 次の植物から得られる4要素からなるアルカロイド: *Thalictrum fendleri*, *Nandina domestica* (キンポウゲ科, メギ科)

-----文献-----

Shamma, M. et al., Tet. Lett., 1965, 3825, (UV, 構造決定, Thalidastine, Deoxythalidastine)

Shamma, M. et al., J. Pharm. Sci., 1968, 57, 262, (分離, Thalidastine)

*****ニアウリ (Ti-tree) *****

§ § フトモモ科 (*Melaleuca viridiflora* Gaertner) の枝葉。

§ 10-Aromadendranol; (1 β , 4 α , 5 β , 6 α , 7 α , 10 β)-form

[化学名・別名] Viridiflorol. Himbaccol

[CAS No.] 552-02-3

[化合物分類] テルペノイド (Aromadendrane sesquiterpenoid)

[構造式]

[基原] *Melaleuca viridiflora* のオイル, *Himantandra baccata*, *Juniperus oxycedrus*

[性状] 結晶

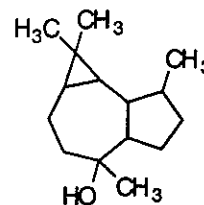
[融点] Mp 73-75 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{20} +4$ (CHCl₃). $[\alpha]_D^{20} -10$ (EtOH)

-----文献-----

Birch, A.J. et al., Aust. J. Chem., 1955, 8, 550, (分離)

Karrer, W. et al., Konstitution und Vorkommen der Organischen Pflanzenstoffe, 2nd edn., Birkhäuser Verlag, Basel, 1972, no. 1908, (生育)



*****ニューサンキンバイヨウエキ (Cultured lactic acid bacteria (lactbacilli) solution) *****

§ § 乳酸菌類の培養液。

*****ニレ (Elm) *****

§ § ニレ科 (*Ulmus fulva* Michaux) の樹皮。

§ β -D-Galactopyranosyl-(1 \rightarrow 4)- β -D-galactopyranosyl-(1 \rightarrow 4)-L-rhamnose; 2',2''-Di-O-Me

[化学名・別名] 3-O-Methyl- β -D-galactopyranosyl-(1 \rightarrow 4)-3-O-methyl- β -D-galactopyranosyl-(1 \rightarrow 4)-L-rhamnose

[CAS No.] 35949-94-1

[化合物分類] 炭水化物 (Oligosaccharide)

[構造式]

[分子式] C₂₀H₃₆O₁₅

[分子量] 516.495

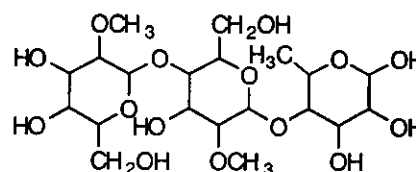
[正確な分子量] 516.205425

[基原] 次の植物から得られる粘性の多糖類: *Ulmus fulva* (slippery elm) の樹皮

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{23} +13$ (c, 1.0 in H₂O)

-----文献-----

Beveridge, R.J. et al., Carbohydr. Res., 1971, 9, 107, (分離, 合成法)



§ 4-O-β-D-Galactopyranosyl-L-rhamnose; α-Pyranose-form, 3'-Me

[化学名・別名] 4-O-(3-O-Methyl-β-D-galactopyranosyl)-L-rhamnose

[CAS No.] 35949-92-9

[化合物分類] 炭水化物 (Disaccharide)

[構造式]

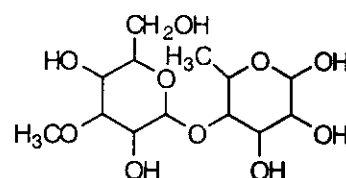
[分子式] C₁₃H₂₂O₁₀

[分子量] 340.327

[正確な分子量] 340.13695

[基原] 次の植物から得られる粘性の多糖類: *Ulmus fulva* (slippery elm) の樹皮

[比旋光度]: [α]_D²³ +8 (c, 0.7 in H₂O)



-----文献-----

Beveridge, R.J. et al., Carbohydr. Res., 1971, 19, 107, (3-Me)

Lindberg, B. et al., Carbohydr. Res., 1973, 27, 373; 1976, 48, 81, (生育)

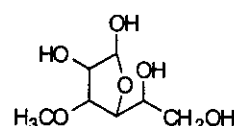
King, R.R. et al., Carbohydr. Res., 1974, 32, 239, (benzyl gly)

§ 3-O-Methylgalactose; D-form

[CAS No.] 4682-46-6

[化合物分類] 炭水化物 (galacto-Hexose)

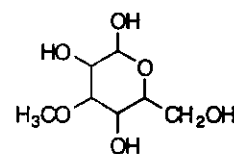
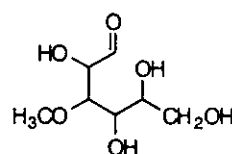
[構造式]



[基原] *Ulmus fulva* と *Ulmus glabra* の多糖類の成分

[融点] Mp 144-146 °C

[比旋光度]: [α]_D²⁴ +168 → +113.2 (c, 1.2 in H₂O)



-----文献-----

Reber, F. et al., Helv. Chim. Acta, 1945, 28, 1164, (D-form, 合成法, β-D-Me pyr, β-D-Me pyr benzylidene, α-D-Me pyr benzylidene)

Hirst, L.E. et al., J.C.S., 1951, 323, (分離)

Siddiqui, I.R. et al., Carbohydr. Res., 1967, 5, 210, (D-form, 合成法, β-D-Me fur, β-D-Me fur trityl)

Brimacombe, J.S. et al., J.C.S. (C), 1971, 1363; 3762, (D-form, 合成法)

Flowers, H.M., Carbohydr. Res., 1975, 39, 245, (α-D-Me pyr, α-D-Me pyr tri-Ac)

Miljkovic, M. et al., J.O.C., 1975, 40, 1054, (β-D-Me pyr dibenzoyl mesyl)

Liao, W. et al., Carbohydr. Res., 1994, 260, 151, (合成法, α-D-Me pyr)

§ § ニレ科アキノレ (*Ulmus parvifolia jacquin*) の樹皮。

§ 3-Hydroxy-15-cadalenic acid

[化学名・別名] 3-Hydroxy-5-methyl-8-(1-methylethyl)-2-naphthalenecarboxylic acid (CAS 名)。

3-Hydroxy-8-isopropyl-5-methyl-2-naphthoic acid. 7-Hydroxy-15-cadalenic acid

[CAS No.] 51769-00-7

[化合物分類] テルペノイド (Cadinane sesquiterpenoid)

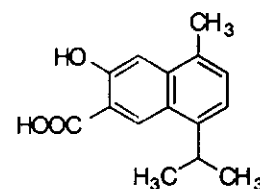
[構造式]

[分子式] C₁₅H₁₆O₃

[分子量] 244.29

[正確な分子量] 244.109945

[基原] *Ulmus parvifolia*



-----文献-----

Vasuda, S. et al., CA, 1974, 80, 83284, (分離, IR, H-NMR)

*****ニンジン (Carrot) *****

§ § セリ科ニンジン (*Daucus carota* L.) の種子または根。

§ 4-Acoren-3-one

[化学名・別名] Acorenone

[CAS No.] 5956-05-8

[化合物分類] テルペノイド (Acorane sesquiterpenoid)

[構造式]

[分子式] $C_{15}H_{24}O$

[分子量] 220.354

[正確な分子量] 220.182715

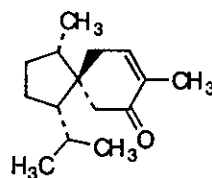
[基原] *Acorus calamus*, *Libanotis transcaucasica*, *Daucus carota*

[性状] オイル

[沸点] $Bp_{0.1}$ 61 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{20}$ -22.3

[屈折率] n_D^{20} 1.5039



-----文献-----

Kido, F. et al., J.C.S. Perkin 1, 1992, 229, (合成法, 成書)

Wu, C.-L. et al., J. Chin. Chem. Soc. (Taipei), 1995, 42, 597, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ α -Bergamotene

[化学名・別名] Bergamotene

[CAS No.] 13474-59-4

[化合物分類] WI2000, WI3000, テルペノイド (Miscellaneous bicyclic sesquiterpenoid)

[構造式]

[分子式] $C_{15}H_{24}$

[分子量] 204.355

[正確な分子量] 204.1878

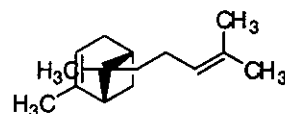
[基原] ニンジン (*Daucus carota*) オイル, ベルガモット (*Citrus bergamia*), ライム (*Citrus aurantifolia*), シトロロン (*Citrus medica*), 綿の種子オイル (*Gossypium hirsutum*)

[性状] オイル

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{20}$ -44.1 (CHCl₃)

[濃度] d_4^{20} 0.855

[屈折率] n_D^{20} 1.4904



-----文献-----

Kováts, E., Helv. Chim. Acta, 1963, 46, 2705, (H-NMR, Mass, 構造決定)

Snider, B.B. et al., J.O.C., 1988, 53, 4508, (合成法)

§ Bergamottin

[化学名・別名] 4-[(3,7-Dimethyl-2,6-octadienyl)oxy]-7H-furo[3,2-g][1]benzopyran-7-one (CAS 名).

Bergaptol geranyl ether. 5-Geranyloxypsoralen. Bergaptin

[CAS No.] 7380-40-7

[化合物分類] ベンゾピラノイド (5,7-Dioxygenated coumarin), ベンゾピラノイド (Furanocoumarin)

[構造式]

[分子式] $C_{21}H_{28}O_4$

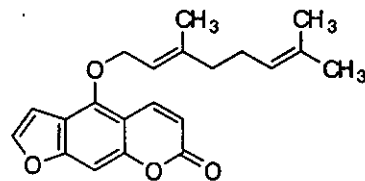
[分子量] 338.402

[正確な分子量] 338.15181

[基原] ベルガモットオイル. また, レモンオイル, その他の *Citrus* spp. と *Daucus carota* のオイル

[性状] 結晶 (Et:O/petrol)

[融点] Mp 59-61 °C (54 °C)



-----文献-----

Kainrath, P. et al., Ber., 1937, 70, 2272, (分離)

Bates, R.B. et al., Tet. Lett., 1963, 1683, (構造)

Dreyer, D.L. et al., Phytochemistry, 1973, 12, 3011, (誘導体)

Bohlmann, F. et al., Chem. Ber., 1975, 108, 2955, (分離, UV)

Kozawa, M. et al., Chem. Pharm. Bull., 1983, 31, 2712, (Notoptol, Notoptol, Anhydronotoptol)

Abyshev, A.Z. et al., Khim. Prir. Soedin., 1983, 19, 704; Chem. Nat. Compd. (Engl. Transl.), 1983, 19, 668,

(Tortuosin)

Okuyama, E. et al., Chem. Pharm. Bull., 1993, 41, 926, (Notopterol)

Xiao, Y.Q. et al., Chin. Chem. Lett., 1994, 5, 593, (Ethynotopterol, Notoptolide)

Bellevue, F.H. et al., Bioorg. Med. Chem. Lett., 1997, 7, 2593, (合成法, 6',7'-dihydroxy)

§ 4,8-Daucadiene

[化学名・別名] Daucene

[CAS No.] 16661-00-0

[化合物分類] テルペノイド (Daucane sesquiterpenoid)

[構造式]

[分子式] $C_{15}H_{24}$

[分子量] 204.355

[正確な分子量] 204.1878

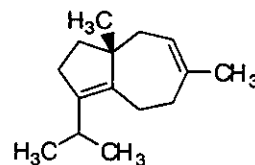
[基原] *Daucus carota*

[性状] オイル

[沸点] Bp, 96 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{20} +39$ (c, 0.3 in $CHCl_3$)

[屈折率] n_D^{20} 1.4918



-----文献-----

de Broissia, H. et al., Bull. Soc. Chim. Fr., 1972, 4314, (分離, 構造決定)

Audenaert, F. et al., Tetrahedron, 1987, 43, 5593, (合成法)

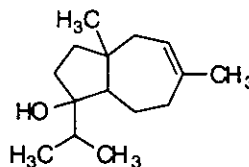
§ 8-Daucen-4-ol; 4 β-form

[CAS No.] 255062-40-9

[化合物分類] テルペノイド (Daucane sesquiterpenoid)

[構造式]

[基原] *Daucus carota*



-----文献-----

Mazzoni, V. et al., Flavour Fragrance J., 1999, 14, 268, (分離, H-NMR, C13-NMR)

§ 8-Daucen-5-ol; 5 β-form

[化学名・別名] Carotol

[CAS No.] 465-28-1

[化合物分類] テルペノイド (Daucane sesquiterpenoid)

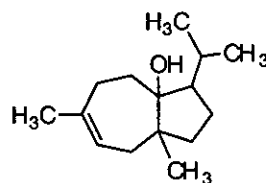
[構造式]

[基原] *Daucus carota*

[性状] オイル

[沸点] Bp, 126 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{20} +29.6$



-----文献-----

Levisalles, J. et al., Bull. Soc. Chim. Fr., 1967, 2059, (stereochem)

de Broissia, H. et al., Bull. Soc. Chim. Fr., 1972, 4314, (合成法)

§ Daucine

[化合物分類] アルカロイド化合物 (Alkaloids 構造は一部又は全てが未知)

[分子式] $C_{11}H_{18}N_2$

[分子量] 178.277

[正確な分子量] 178.146998

[一般的性質] 構造式は未知

[基原] 次の植物から得られるアルカロイド: *Daucus carota* の葉 (セリ科)

[性状] オイル

[沸点] Bp 240-250 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{20} +7.74$ (c, 0.645 in Et₂O)

-----文献-----

Pictet, A. et al., Ber., 1907, 40, 3771, (分離)

§ 5,8-Epoxy-9-daucanol; (5 β ,8 β ,9 β)-form

[化学名・別名] Daucol

[CAS No.] 887-08-1

[化合物分類] WA2800, WI3000, テルペノイド (Daucane sesquiterpenoid)

[構造式]

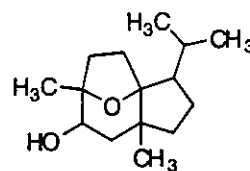
[基原] ニンジン (*Daucus carota*) の種子オイル

[性状] 結晶 (petrol at -30 °C)

[融点] Mp 113-115 °C

[沸点] Bp: 124-132 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{20}$ -16.9 (c, 2.8 in EtOH)



-----文献-----

Sykora, V. et al., Coll. Czech. Chem. Comm., 1961, 26, 788, (構造決定)

Zalkov, L.H. et al., J.O.C., 1961, 26, 981, (構造決定)

Dhillon, R.S. et al., Phytochemistry, 1989, 28, 639, (誘導體)

§ 5,8-Epoxy-9-daucanol; (5 β ,8 β ,9 β)-form, Deoxy

[化学名・別名] 5,8-Epoxydaucane. Carota-1,4-oxide

[CAS No.] 56484-24-3

[化合物分類] テルペノイド (Daucane sesquiterpenoid)

[構造式]

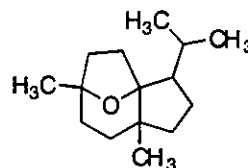
[分子式] C₁₅H₂₆O

[分子量] 222.37

[正確な分子量] 222.198365

[基原] ニンジン *Daucus carota*

[性状] オイル



-----文献-----

Sykora, V. et al., Coll. Czech. Chem. Comm., 1961, 26, 788, (構造決定)

Zalkov, L.H. et al., J.O.C., 1961, 26, 981, (構造決定)

Dhillon, R.S. et al., Phytochemistry, 1989, 28, 639, (誘導體)

§ 1,9-Heptadecadiene-4,6-diyne-3,8-diol; (3R,8S,9Z)-form

[化学名・別名] Falcarindiol

[CAS No.] 55297-87-5

[化合物分類] 薬物: 抗菌性剤 (Antibacterial agent), 薬物: 鎮痛薬 (Analgesic), 脂肪族化合物 (Acetylenic alcohol), 薬物: 抗カビ薬 (Antifungal agent)

[構造式]

[基原] 一般的なニンジン *Daucus carota* や *Angelica acutiloba* を含むいくつかの植物の根. 生薬成分: Toki

[用途] 抗カビ, 抗菌, 鎮痛活性を持つ. 抗痛覚剤

[性状] 淡黄色のオイル

[比旋光度]: $[\alpha]_D +204.8$ (c, 1 in CHCl₃)

[溶解性] メタノール, エーテルに可溶

[Log P 計算値] Log P 2.49 (計算値)

[UV]: [neutral] λ_{max} 231 (); 244 (); 256 () (MeOH) [neutral] λ_{max} 233 (ϵ 1000); 245 (ϵ 1000); 259 (ϵ 800) (EtOH) [neutral] λ_{max} 232 (ϵ 400); 244 (ϵ 400); 258 (ϵ 200) (Et₂O)

[その他のデータ] 薬理的活性な異性体

-----文献-----

Bohlmann, F. et al., Chem. Ber., 1961, 94, 958; 3189; 1967, 100, 3450; 3454; 1971, 104, 2033; 1975, 108, 511, (分離, 誘導體)

Bentley, R.K. et al., J.C.S. (C), 1969, 685, (分離, IR, UV, H-NMR)

Tanaka, S. et al., Arzneimittel-Forsch., 1977, 27, 2039, (薬理)

Kemp, M.S., Phytochemistry, 1978, 17, 1002, (分離, 性質)

Lemmich, E., *Phytochemistry*, 1981, 20, 1419, (絶対構造)
 Satoh, A. et al., *Biosci., Biotechnol., Biochem.*, 1996, 60, 152, (分離, H-NMR, Mas)
 Bernart, M.W. et al., *J. Nat. Prod.*, 1996, 59, 748, (分離, 性質)
 Kobaisy, M. et al., *J. Nat. Prod.*, 1997, 60, 1210, (分離, H-NMR, C13-NMR, 絶対構造, Oplopandiol)

§ 1,9-Heptadecadiene-4,6-diyne-3,8-diol; (3R,8S,9Z)-form, 3-Ketone

[化学名・別名] 8-Hydroxy-1,9-heptadecadien-4,6-diyne-3-one. Falcarinolone

[CAS No.] 18089-23-1

[化合物分類] 脂肪族化合物 (Acetylenic alcohol)

[構造式]

[分子式] $C_{17}H_{22}O_2$

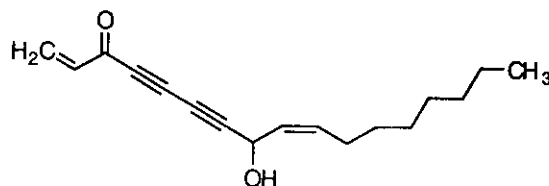
[分子量] 258.36

[正確な分子量] 258.16198

[基原] 次の植物から分離: *Carum carvi*, *Ligusticum mucronatum*, *Aegopodium*, *Angelica* spp., *Daucus carota*

[性状] 不安定な淡黄色のオイル

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{20} +255$ (c, 5.1 in Et₂O)



-----文献-----

Bohlmann, F. et al., *Chem. Ber.*, 1961, 94, 958; 3189; 1967, 100, 3450; 3454; 1971, 104, 2033; 1975, 108, 511, (分離, 誘導體)
 Bentley, R.K. et al., *J.C.S. (C)*, 1969, 685, (分離, IR, UV, H-NMR)
 Tanaka, S. et al., *Arzneim.-Forsch.*, 1977, 27, 2039, (薬理)
 Kemp, M.S., *Phytochemistry*, 1978, 17, 1002, (分離, 性質)
 Lemmich, E., *Phytochemistry*, 1981, 20, 1419, (絶対構造)
 Satoh, A. et al., *Biosci., Biotechnol., Biochem.*, 1996, 60, 152, (分離, H-NMR, Mas)
 Bernart, M.W. et al., *J. Nat. Prod.*, 1996, 59, 748, (分離, 性質)
 Kobaisy, M. et al., *J. Nat. Prod.*, 1997, 60, 1210, (分離, H-NMR, C13-NMR, 絶対構造, Oplopandiol)
 Zheng, G. et al., *J. Nat. Prod.*, 1999, 62, 626, (合成法, IR, H-NMR, C13-NMR)

§ 2,9-Heptadecadiene-4,6-diyne-1,8-diol; (2Z,8S,9Z)-form, 1-Ac

[CAS No.] 144790-29-4

[化合物分類] 脂肪族化合物 (Acetylenic acid aneester)

[構造式]

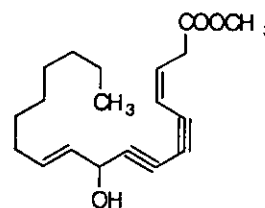
[分子式] $C_{19}H_{26}O_3$

[分子量] 302.413

[正確な分子量] 302.188195

[基原] *Azorella trifurcata*, *Daucus carota*

[性状] オイル



-----文献-----

Bohlmann, F. et al., *Chem. Ber.*, 1971, 104, 1322
 Lund, E.D. et al., *Phytochemistry*, 1992, 31, 3621, (構造決定, 成書)
 Estevez-Braun, A. et al., *J. Nat. Prod.*, 1994, 57, 1178, (分離, H-NMR, C13-NMR, 絶対構造)

§ 5-Isopropylbicyclo[3.1.0]hexan-2-one (旧 CAS 名)

[化学名・別名] 5-(1-Methylethyl)bicyclo[3.1.0]hexan-2-one (CAS 名) Sabina ketone

[CAS No.] 513-20-2

[関連 CAS No.] 110716-99-9

[化合物分類] テルペノイド (Miscellaneous bicyclic monoterpeneid)

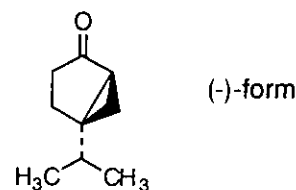
[構造式]

[分子式] $C_9H_{14}O$

[分子量] 138.209

[正確な分子量] 138.104465

[基原] 次の植物を含む様々な植物属: *Artemisia* sp., *Daucus carota*, *Renealmia* sp.



(-)-form

-----文献-----

Short, A.G. et al., *J.C.S.*, 1939, 1415, (合成法)

Daly, J.W. et al., J.A.C.S., 1958, 60, 6330, (絶対構造)
Gaoni, Y., Tetrahedron, 1972, 28, 5525, (合成法, Mass, H-NMR)
Hamon, D.P.G. et al., Aust. J. Chem., 1987, 40, 1321, (合成法)
Mash, E.A. et al., Tetrahedron, 1987, 43, 679, (合成法)

§ 5-Methyl-5-hepten-2-one (CAS 名)

[CAS No.] 10339-67-0

[化合物分類] 脂肪族化合物 (Branched alkenic aldehyde and ketone)

[構造式]

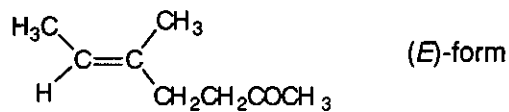
[分子式] C₈H₁₄O

[分子量] 126.198

[正確な分子量] 126.104465

[基原] *Daucus carota* の果実

[沸点] Bp₄₅ 84 °C



-----文献-----

Wender, P.A. et al., Tetrahedron, 1981, 37, 4445, (合成法, H-NMR)
Pinilla, M.G. et al., J. Essent. Oil Res., 1995, 7, 433, (分離)
Trehan, J.R. et al., J. Indian Chem. Soc., 1997, 74, 500, (合成法)

§ N-Phenyl-2-naphthylamine

[化学名・別名] 2-Anilino-naphthalene. Antioxidant 116. Antioxidant D. Antioxidant PBN

[CAS No.] 135-88-6

[化合物分類] 多環芳香族 (Naphthalene)

[構造式] 構造式は次の化合物と類似: N-Phenyl-1-naphthylamine

[分子式] C₁₆H₁₃N

[分子量] 219.285

[正確な分子量] 219.104799

[基原] *Aconitum karakolicum*, *Acroptilon repens*, *Daucus carota* and *Eichhornia crassipes*

[用途] ゴムの加硫促進作用. 共役ジエンの重合を阻害する

[性状] 針状結晶 (MeOH)

[融点] Mp 108 °C (103-104 °C)

[沸点] Bp 395-399.5 °C. Bp₁₃ 237 °C

[溶解性] エタノール, エーテル, 酢酸, ベンゼンに適度に溶ける

[その他のデータ] 溶液中では青蛍光を呈する.

[傷害・毒性] 発ガン性データがある. 50 %致死量 (LD₅₀) (ラット, 経口) 8730 mg/kg

[化学物質毒性データ総覧 (RTEC) 登録番号] QM4550000

-----文献-----

Streiff, J., Annalen, 1881, 209, 151, (合成法, N-Ac, N-benzoyl)
IARC Monog., 1978, 16, 325; Suppl. 7, 318; Suppl. 6, 461, (レビュー, 毒性)
Mallabaev, A. et al., Khim. Prir. Soedin., 1982, 18, 123, (分離)
Sultankhodzhaev, M.N. et al., Khim. Prir. Soedin., 1982, 18, 660, (分離)
Papanov, G.Y. et al., Phytochemistry, 1985, 24, 3045, (分離, 合成法, H-NMR, C13-NMR, Mas)
Li, Y. et al., Indian J. Chem., Sect. B, 1994, 33, 302, (分離, H-NMR, C13-NMR, 結晶構造)
Likhitwitayawuid, K. et al., Planta Med., 2000, 66, 275, (分離, H-NMR, C13-NMR, Mas)
Lewis, R.J., Sax's Dangerous Properties of Industrial Materials, 8th edn., Van Nostrand Reinhold, 1992, PFT500

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 : 8730 mg/kg

毒性影響 : [行動] 傾眠 (全身活動度の低下).

参照文献

HYSAAV Hygiene and Sanitation (USSR). English translation of GISAAA. (Springfield, VA) 1964-71. Discontinued. [Vol.,頁,年(19-)]31(1-3),183,1966

<<試験方法>> LD50 試験(50%致死量試験).

曝露経路 : 報告なし.
被験動物 : げっ歯類-ラット.
投与量・期間 : 8700 mg/kg
毒性影響 : [脳と外被] その他の変性性変化.
[肺,胸郭,または呼吸] 急性肺水腫.
[肝臓] その他の変化.

参照文献

TJSGA8 Tijdschrift Voor Sociale Geneeskunde. (B.V. Uitgeversmaatschappij. Reflex, Mathenesserlaan 310, Rotterdam 3003, Netherland) V.1- 1923- [Vol.,頁,年(19-)]53,415,1975

<<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-マウス
投与量・期間 : 1450 mg/kg
毒性影響 : [行動] 傾眠(全身活動度の低下).

参照文献

HYSAAV Hygiene and Sanitation (USSR). English translation of GISAAA. (Springfield, VA) 1964-71. Discontinued. [Vol.,頁,年(19-)]31(1-3),183,1966

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 : 19 gm/kg/19 日間間欠投与
毒性影響 : [腎臓・尿路・膀胱] 蛋白尿.
[血液] 赤血球数の変化.
[栄養と総代謝] 体重減少または体重増加.

参照文献

TPKVAL Toksikologiya Novykh Promyshlennykh Khimicheskikh Veshchestv. Toxicology of New Industrial Chemical Substances. For English translation, see TNICS*. (Izdatel'stvo Meditsina, Moscow, USSR) No.1- 1961- [Vol.,頁,年(19-)]12,86,1971

<<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 : 52 gm/kg/30 日間間欠投与
毒性影響 : [肝臓] 肝機能試験の異常.
慢性毒性に関するデータ : 死亡.

参照文献

GISAAA Gigiena i Sanitariya. For English translation, see HYSAAV. (V/O Mezhdunarodnaya Kniga, 113095 Moscow, USSR) V.1- 1936- [Vol.,頁,年(19-)]31(2),25,1966

<<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 : 182 gm/kg/13 週間間欠投与
毒性影響 : [肝臓] 肝臓重量の変化.
[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).

慢性毒性に関するデータ : 死亡.

参照文献

NTPTR* National Toxicology Program Technical Report Series. (Research Triangle Park, NC 27709) No.206- [Vol.,頁,年(19-)]NTP-TR-333,1988

<<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 : 36400 mg/kg/1 年間欠投与
毒性影響 : [肝臓] 肝機能試験の異常.
[腎臓・尿路・膀胱] 尿量増加.
[腎臓・尿路・膀胱] 蛋白尿.

参考文献

TPKVAL Toksikologiya Novykh Promyshlennykh Khimicheskikh Veshchestv. Toxicology of New Industrial Chemical Substances. For English translation, see TNICS*. (Izdatel'stvo Meditsina, Moscow, USSR) No.1- 1961- [Vol.,頁,年(19-)]12,86,1971

<<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-マウス

投与量・期間 : 437 gm/kg/13 週間間欠投与

毒性影響 : [肝臓] 肝臓重量の変化.

[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).

慢性毒性に関するデータ : 死亡.

参考文献

NTPTR* National Toxicology Program Technical Report Series. (Research Triangle Park, NC 27709)
No.206- [Vol.,頁,年(19-)]NTP-TR-333,1988

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 : 経口投与.

被験動物 : げっ歯類-マウス

投与量・期間 : 433 gm/kg/2 年間継続投与

毒性影響 : [催腫瘍性] RTECS 基準による, 不確実な催腫瘍性物質

[腎臓・尿路・膀胱] 腎臓腫瘍.

参考文献

NTPTR* National Toxicology Program Technical Report Series. (Research Triangle Park, NC 27709)
No.206- [Vol.,頁,年(19-)]NTP-TR-333,1988

<<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-マウス

投与量・期間 : 208 gm/kg/97 週間継続投与

毒性影響 : [催腫瘍性] RTECS 基準による発がん性.

[肺,胸郭,または呼吸] 腫瘍

[肝臓] 腫瘍.

参考文献

SYSWAE Shiyen Shengwu Xuebao. Journal of Experimental Biology. (China International Book Trading Corp., POB 2820, Beijing, Peop. Rep. China) V.1- 1953- Suspended 1966-77. [Vol.,頁,年(19-)]14,129,1981

<<試験方法>> 最小毒性量(TDLo)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 : 464 mg/kg

毒性影響 : [催腫瘍性] RTECS 基準による催腫瘍性.

[肝臓] 腫瘍.

参考文献

NTIS** National Technical Information Service. (Springfield, VA 22161) Formerly U.S. Clearinghouse for Scientific & Technical Information. [Vol.,頁,年(19-)]PB223-159

<<試験方法>> 毒性量(TD)(最低以外の)

曝露経路 : 経口投与.

被験動物 : げっ歯類-マウス

投与量・期間 : 264 gm/kg/99 週間継続投与

毒性影響 : [催腫瘍性] RTECS 基準による, 不確実な催腫瘍性物質

〔肺,胸郭,または呼吸〕腫瘍
〔肝臓〕腫瘍.

参照文献

SYSWAE Shiyao Shengwu Xuebao. Journal of Experimental Biology. (China International Book Trading Corp., POB 2820, Beijing, Peop. Rep. China) V.1- 1953- Suspended 1966-77. [Vol.,頁,年(19-)]14,129,1981

〈〈試験方法〉〉 毒性量(TD)(最低以外の)

曝露経路 : 経口投与.
被験動物 : げっ歯類-マウス
投与量・期間 : 135 gm/kg/78 週間間欠投与
毒性影響 : 〔催腫瘍性〕 RTECS 基準による催腫瘍性.
〔肝臓〕腫瘍.

参照文献

NTIS** National Technical Information Service. (Springfield, VA 22161) Formerly U.S. Clearinghouse for Scientific & Technical Information. [Vol.,頁,年(19-)]PB223-159

〈〈試験方法〉〉 毒性量(TD)(最低以外の)

曝露経路 : 経口投与.
被験動物 : げっ歯類-マウス
投与量・期間 : 17280 mg/kg/9 週間間欠投与
毒性影響 : 〔催腫瘍性〕 RTECS 基準による発がん性.
〔肺,胸郭,または呼吸〕腫瘍
〔腎臓・尿路・膀胱〕腎臓腫瘍.

参照文献

CNREA8 Cancer Research. (Public Ledger Building, Suit 816, 6th & Chestnut Sts., Philadelphia, PA 19106) V.1- 1941- [Vol.,頁,年(19-)]44,3098,1984

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 : 50 pph

参照文献

CYGEDX Cytology and Genetics (English Translation). Translation of TGANAK. (Allerton Press Inc., 150 Fifth Ave., New York, NY 10011) V.8- 1974- [Vol.,頁,年(19-)]21(6),29,1987

〈〈試験方法〉〉 形態的形質変換.

試験系 : ヒトの細胞(種は未特定).
投与量・期間 : 23100 ug/L

参照文献

ITCSAF In Vitro. (Rockville, MD) V.1-20, 1965-85. For publisher information, see ICDBEO. [Vol.,頁,年(19-)]17,719,1981

〈〈試験方法〉〉 細胞遺伝学分析試験

曝露経路 : 経口投与.
試験系 : げっ歯類-マウス
投与量・期間 : 360 mg/kg/18 日間投与

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-)]23(9),57,1979

*** REVIEWS ***

ACGIH TLV-Not classifiable as a human carcinogen

DTLVS* The Threshold Limit Values (TLV) and Biological Exposure Indices (BEI) booklet issues by American Conference of Governmental Industrial Hygienists (ACGIH), Cincinnati, OH, 1996 [Vol.,頁,年(19-)]TLV/BEI,1999

IARC Cancer Review:Animal Limited 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-)]16,325,1978

IARC Cancer Review: Human 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-)] 16,325,1978

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-)] 7,318,1987

§ Pyrrolidine (CAS名) (旧CAS名)

[化学名・別名] Tetrahydropyrrole. Tetramethyleneimine. Azacyclopentane

[CAS No.] 123-75-1

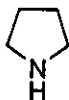
[化合物分類] アルカロイド化合物 (Simple pyrrolidine alkaloid), 脂肪族化合物 (Simple heteroalicyclics (1 × N))

[構造式]

[分子式] C₄H₉N

[分子量] 71.122

[正確な分子量] 71.073499



[基原] タバコとニンジンの葉 (*Daucus carota*) に存在する (セリ科).

[性状] ピペリジンに類似した臭気を持つ液体

[融点] 凝固点: -63 °C

[沸点] Bp 88.5-89 °C

[溶解性] 水に混和する

[濃度] d₂₀²⁰: 0.8618

[PKa 値] pK_a: 11.31 (25 °C)

[その他のデータ] 空気中で発煙する. 強いアルカリ性を示す

[傷害・毒性] 発火しやすい, 発火温度: 3 °C. 皮膚, 眼, 呼吸域を刺激する. 50%致死量 (LD₅₀) (ラット, 経口) 300 mg/kg

[化学物質毒性データ総覧 (RTEC) 登録番号] UX9650000

-----文献-----

Wilshire, J.F.K., Aust. J. Chem., 1966, 19, 1935, (誘導体)

Fieser and Fieser's Reagents for Organic Synthesis, Wiley, 1980, 8, Ullmann's Encycl. Ind. Chem., 5th Ed., VCH, Weinheim, 1985, A2, 13, (レビュー)

Achenbach, H. et al., Planta Med., 1986, 52, 12, (分離, pyrrolidide)

Luxon, S.G., Hazards in the Chemical Laboratory, 5th edn., Royal Society of Chemistry, 1992, 1090

Lewis, R.J., Sax's Dangerous Properties of Industrial Materials, 8th edn., Van Nostrand Reinhold, 1992, BSK250; NLP500; PPS500

***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 : 300 mg/kg

毒性影響 : [行動] 痙攣または発作閾値への影響.
[行動] 興奮.

Vascular その他の変化.

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-)] 18(2), 29, 1974

<<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-マウス

投与量・期間 : 450 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

BCFAAI Bollettino Chimico Farmaceutico. (Societa Editoriale Farmaceutica, Via Ausonio 12, 20123 Milan, Italy) V.33- 1894- [Vol.,頁,年(19-)]103,414,1964

<<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 : 1300 mg/m³/2 時間

毒性影響 : [行動] 痙攣または発作閾値への影響。

[行動] 興奮。

[血管] その他の変化。

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-)]18(2),29,1974

<<試験方法>> LD50 試験(50%致死量試験)。

曝露経路 : 腹腔内投与

被験動物 : げっ歯類-マウス

投与量・期間 : 420 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

JPETAB Journal of Pharmacology and Experimental Therapeutics. (Williams & Wilkins Co., 428 E. Preston St., Baltimore, MD 21202) V.1- 1909/10- [Vol.,頁,年(19-)]88,82,1946

<<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 : 56 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

CSLNX* U.S. Army Armament Research & Development Command, Chemical Systems Laboratory, NIOSH Exchange Chemicals. (Aberdeen Proving Ground, MD 21010) [Vol.,頁,年(19-)]NX06769

<<試験方法>> 認知されている最小致死量(LDL₀)試験。

曝露経路 : 経口投与。

被験動物 : げっ歯類-ウサギ。

投与量・期間 : 250 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

85GMAT "Toxicometric Parameters of Industrial Toxic Chemicals Under Single Exposure," Izmerov, N.F., et al., Moscow, Centre of International Projects, GKNT, 1982 [Vol.,頁,年(19-)]-,104,1982

<<試験方法>> 認知されている最小致死量(LDL₀)試験。

曝露経路 : 経口投与。

被験動物 : げっ歯類-モルモット。

投与量・期間 : 250 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

85GMAT "Toxicometric Parameters of Industrial Toxic Chemicals Under Single Exposure," Izmerov, N.F., et al., Moscow, Centre of International Projects, GKNT, 1982 [Vol.,頁,年(19-)]-,104,1982

<<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 : 哺乳動物-種未特定。

投与量・期間 : 250 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

GISAAA Gigiena i Sanitariya. For English translation, see HYSAAV. (V/O Mezhdunarodnaya Kniga, 113095 Moscow, USSR) V.1- 1936- [Vol.,頁,年(19-)]39(4),86,1974

§ 3',4',5,7-Tetrahydroxyflavone; 4'-O-Sulfate

[化学名・別名] Luteolin 4'-sulfate

[CAS No.] 60889-07-8

[化合物分類] フラボノイド (Flavone; 4 × O-置換基)

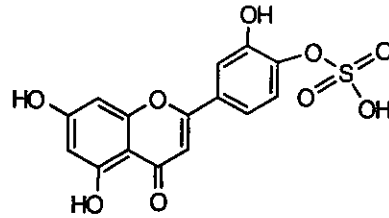
[構造式]

[分子式] C₁₅H₁₀O₆S

[分子量] 366.305

[正確な分子量] 366.004555

[基原] 次の植物から分離: *Daucus carota*



-----文献-----

Perkin, A.G., J.C.S., 1900, 77, 1315, (分離)

Diller, E., Ber., 1901, 34, 1452, (分離)

Karrer, W. et al., Konstitution und Vorkommen der Organischen Pflanzenstoffe, 2nd edn., Birkhäuser Verlag, Basel, 1972, nos. 1470; 1473, (生育)

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

§ 2,4,5-Trihydroxybenzaldehyde; 2,4,5-Tri-Me ether

[化学名・別名] 2,4,5-Trimethoxybenzaldehyde (CAS名) (旧CAS名). Asaronaldehyde. Asarylaldehyde.

Gazarin. Asaraldehyde

[CAS No.] 4460-86-0

[化合物分類] 単環芳香族 (Simple benzaldehyde)

[構造式]

[分子式] C₁₀H₁₂O₄

[分子量] 196.202

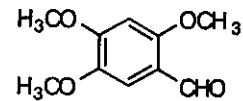
[正確な分子量] 196.07356

[基原] *Daucus carota* (ニンジン), *Acorus calamus*, *Asarum europaeum*

[性状] 針状結晶 (CHCl₃ or H₂O)

[融点] Mp 114 °C

[化学物質毒性データ総覧 (RTEC) 登録番号] CU8460000



-----文献-----

Starkovsky, N.A., J.O.C., 1962, 27, 3733, (分離, IR, 誘導体)

Jackson, A.H. et al., J.C.S. (C), 1966, 2222, (2-benzyl 4,5-di-Me ether)

Allbutt, A.D. et al., Can. J. Microbiol., 1971, 17, 1401, (分離)

Birch, A.J. et al., J.C.S. Perkin 1, 1975, 2492, (合成法, 誘導体)

Jacobson, M., J. Nat. Prod., 1976, 39, 412, (分離, IR, H-NMR, 誘導体)

Nawamaki, K., Phytochemistry, 1996, 43, 1175, (分離, H-NMR)

Lin, Y.-L. et al., J. Nat. Prod., 1999, 62, 1500, (2-ethoxy-4,5-dihydroxybenzaldehyde)

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 : 鳥類-野性種鳥類.

投与量・期間 : 422 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

AECTCV Archives of Environmental Contamination and Toxicology. (Springer-Verlag New York, Inc., Service Center, 44 Hartz Way, Secaucus, NJ 070944) V.1- 1973- [Vol.,頁,年(19-)] 12,355,1983

変異原性に関するデータ

<<試験方法>> ほ乳類体細胞の突然変異試験.

試験系 : げっ歯類-マウスリンパ球.

投与量・期間 : 900 mg/L

参照文献

EMMUEG Environmental and Molecular Mutagenesis (Alan R. Liss, Inc., 41 E. 11th St., New York,

NY 10003) V.10- 1987- [Vol.,頁,年(19-)]12,85,1988

米国に於ける状況

EPA TSCA Section 8(b) CHEMICAL INVENTORY

§ 4',5,7-Trihydroxyflavone; 7-O-[β-D-Galactopyranosyl-(1→4)-β-D-mannopyranoside]

[化学名・別名] Apigenin 7-O-galactosylmannoside

[CAS No.] 84638-36-8

[化合物分類] フラボノイド (Flavone; 3 × O-置換基)

[構造式]

[分子式] C₂₇H₃₀O₁₅

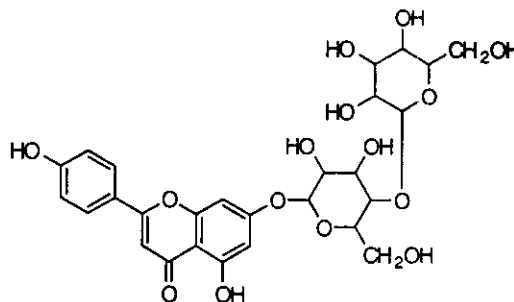
[分子量] 594.525

[正確な分子量] 594.158475

[基原] 次の植物の種子から分離: *Daucus carota*

[性状] 結晶 (MeOH)

[融点] Mp 268-270 °C



-----文献-----

Karrer, W. et al., Konstitution und Vorkommen der Organischen Pflanzenstoffe, 2nd edn., Birkhäuser Verlag, Basel, 1972, 1449, (生育)

Gupta, K.R. et al., *Planta Med.*, 1982, 46, 240, (7-O-galactosylmannose)

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

Lewis, R.J., *Sax's Dangerous Properties of Industrial Materials*, 8th edn., Van Nostrand Reinhold, 1992, CDH250

*****ニンニク (Garlic) *****

§ § ユリ科ニンニク (*Allium sativum* L.) の鱗茎。

§ Ajocysteine

[化学名・別名] 2-Amino-9-oxo-4,5,9-trithia-6,11-dodecadienoic acid

[化合物分類] アミノ酸とペプチド (Non-protein α-aminoacid)

[構造式]

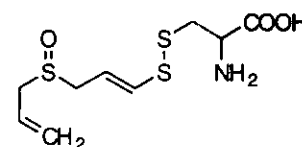
[分子式] C₉H₁₅NO₃S₃

[分子量] 281.42

[正確な分子量] 281.021404

[基原] ニンニク (*Allium sativum*)

[性状] 物理化学的性質については報告がない



-----文献-----

Lawson, L.D. et al., *Planta Med.* (Suppl.), 1993, 59, A688, (分離)

§ Alliin; (R)_c(O)_s-form

[CAS No.] 556-27-4

[化合物分類] アミノ酸とペプチド (Non-protein α-aminoacid)

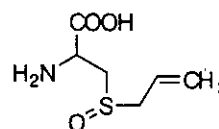
[構造式]

[基原] ニンニクオイル (*Allium sativum*), *Allium ursinum*

[性状] 針状結晶 (Me₂CO 溶液)

[融点] Mp 163 °C で分解

[比旋光度]: [α]_D²¹ +67.7 (c, 2.0 in H₂O)



-----文献-----

Virtanen, A.I., *Angew. Chem., Int. Ed.*, 1962, 1, 299, (レビュー)

Nishimura, H. et al., *Tetrahedron*, 1972, 28, 4503, (Mass, IR)

Freeman, G.G. et al., *Phytochemistry*, 1976, 15, 521, (合成法)

Muetsch-Eckner, M. et al., *J. Nat. Prod.*, 1993, 56, 864, (N-glycoside)

Edwards, S.J. et al., *Phytochem. Anal.*, 1994, 5, 4, (分析)

Keusgen, M., *Planta Med.*, 1998, 64, 736, (分析)

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

§ **Alliin; (R)_c(O)_s-form, N-(1-Deoxy-β-D-fructopyranosyl)**

[CAS No.] 149340-22-7

[化合物分類] アミノ酸とペプチド (Non-protein α-aminoacid)

[構造式]

[分子式] C₁₂H₂₁NO₆S

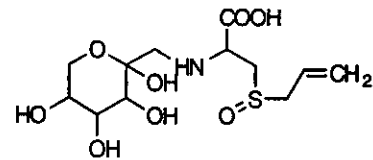
[分子量] 339.366

[正確な分子量] 339.098789

[基原] 次の植物から分離: *Allium sativum*

[性状] 粉末

[比旋光度]: [α]_D²⁰ -25.4 (c, 0.41 in H₂O)



-----文献-----

Virtanen, A.I., Angew. Chem., Int. Ed., 1962, 1, 299, (レビュー)

Freeman, G.G. et al., Phytochemistry, 1976, 15, 521, (合成法)

Edwards, S.J. et al., Phytochem. Anal., 1994, 5, 4, (分析)

Keusgen, M., Planta Med., 1998, 64, 736, (分析)

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

§ **Allithiamine**

[CAS No.] 554-44-9

[化合物分類] アルカロイド化合物 (Pyrimidine)

[構造式]

[分子式] C₁₅H₂₂N₄O₂S₂

[分子量] 354.496

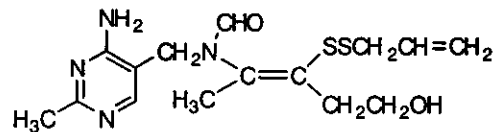
[正確な分子量] 354.118416

[基原] ニンニク (*Allium sativum*)

[用途] ビタミン B₁ 活性を有する. 肉の香り付け

[性状] 結晶 (C₆H₆)

[融点] Mp 132-133 °C で分解



-----文献-----

Matsukawa, T. et al., Science (Washington, D.C.), 1953, 118, 325, (分離, 構造決定)

Matsukawa, T. et al., CA, 1955, 49, 7572g, (合成法)

§ **Allixin**

[化学名・別名] 3-Hydroxy-5-methoxy-6-methyl-2-pentyl-4H-pyran-4-one (CAS 名)

[CAS No.] 125263-70-9

[化合物分類] 含酸素複素環式化合物 (4-Pyrone)

[構造式]

[分子式] C₁₂H₁₆O₄

[分子量] 226.272

[正確な分子量] 226.12051

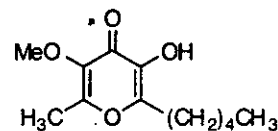
[基原] ニンニク, *Allium sativum*

[用途] Stress compd. 抗腫瘍剤

[性状] 針状結晶 (MeOH 溶液)

[融点] Mp 80-81 °C

[UV]: [neutral] λ_{max} 279 () (溶媒の報告はない)



-----文献-----

Kodera, Y. et al., Chem. Pharm. Bull., 1989, 37, 1656, (分離, 構造決定)

Arimoto, H. et al., Tet. Lett., 1997, 38, 7761, (合成法)

Matsumura, Y. et al., Tet. Lett., 1998, 39, 2339, (合成法)

§ **S-(Allylthio) cysteine; (R)-form**

[化学名・別名] L-form

[CAS No.] 2281-22-3

[化合物分類] アミノ酸とペプチド (Non-protein α -aminoacid)

[構造式]

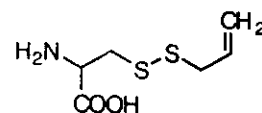
[基原] 次の植物から分離: ニンニク (*Allium sativum*)

[用途] 肝臓細胞防御作用を示す

[性状] 板状結晶 (Me₂CO 溶液)

[融点] Mp 187-188 °C で分解

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{25}$ -107.9 (c, 0.4 in 6 M HCl)



-----文献-----

Cavallito, C.J. et al., J.A.C.S., 1944, 66, 1952, (合成法)

Sugii, M. et al., Chem. Pharm. Bull., 1964, 12, 1114, (分離, IR, 構造決定)

§ 2-Amino-4,8-octadecadiene-1,3-diol; (2*S*,3*R*,4*E*,8*E*)-form, *N*-(2*R*-Hydroxytetradecanoyl), 1-*O*- β -**D**-glucopyranoside

[化学名・別名] AS 1-1

[化合物分類] 脂肪族化合物 (Sphingolipid)

[構造式]

[分子式] C₃₈H₇₁NO₉

[分子量] 685.98

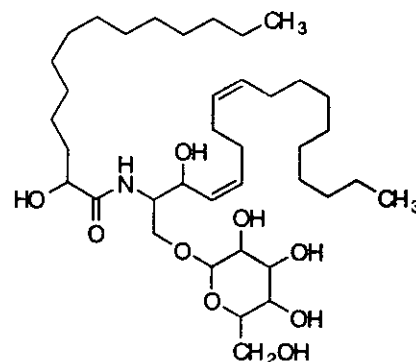
[正確な分子量] 685.512884

[基原] *Allium sativum*

[性状] 無定型の粉末

[融点] Mp 197-200 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{25}$ +5.2 (c, 0.25 in propanol)



-----文献-----

Inagaki, M. et al., Chem. Pharm. Bull., 1998, 46, 1153, (AS compound)

§ 2-Amino-4,8-octadecadiene-1,3-diol; (2*S*,3*R*,4*E*,8*E*)-form, *N*-(2*R*-Hydroxypentadecanoyl), 1-*O*- β -**D**-glucopyranoside

[化学名・別名] AS 1-2

[化合物分類] 脂肪族化合物 (Sphingolipid)

[構造式]

[分子式] C₃₉H₇₃NO₉

[分子量] 700.007

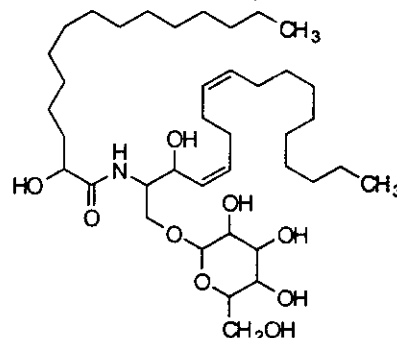
[正確な分子量] 699.528534

[基原] *Allium sativum*

[性状] 無定型の粉末

[融点] Mp 195-200 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{25}$ +8.8 (c, 0.13 in 1-propanol)



-----文献-----

Inagaki, M. et al., Chem. Pharm. Bull., 1998, 46, 1153, (AS compound)

§ 2-Amino-4,8-octadecadiene-1,3-diol; (2*S*,3*R*,4*E*,8*E*)-form, *N*-(2*R*-Hydroxyhexadecanoyl), 1-*O*- β -**D**-glucopyranoside

[化学名・別名] Soyacerebroside I. AS 1-4

[CAS No.] 114297-20-0

[化合物分類] 脂肪族化合物 (Sphingolipid)

[構造式]

[分子式] C₄₀H₇₅NO₉

[分子量] 714.034

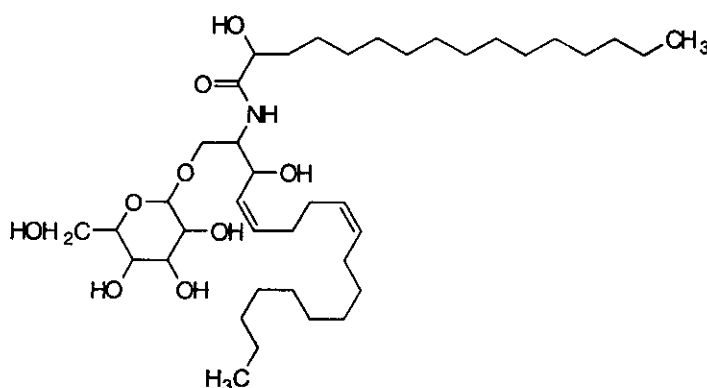
[正確な分子量] 713.544184

[基原] Cerebroside isol. from *Tetragonia tetragonoides*, *Allium sativum*, *Glycine max*

[用途] 抗腫瘍生成成分

[性状] 吸湿性粒子もしくは無定型の塊

[融点] Mp 184-186 °C. Mp 193-197 °C



[比旋光度]: $[\alpha]_D^{25} +10.5$ (c, 0.30 in MeOH/CHCl₃, 3:2)

-----文献-----

Inagaki, M. et al., Chem. Pharm. Bull., 1998, 46, 1153, (AS compound)

§ 2-Amino-4,8-octadecadiene-1,3-diol; (2*S*,3*R*,4*E*,8*Z*)-form, *N*-(2*R*-Hydroxyhexadecanoyl), 1-*O*-β-D-glucopyranoside

[化学名・別名] Soyacerebroside II. AS 1-3

[CAS No.] 115074-93-6

[化合物分類] 脂肪族化合物 (Sphingolipid)

[構造式]

[分子式] C₄₀H₇₅NO₉

[分子量] 714.034

[正確な分子量] 713.544184

[基原] 次の植物から分離: *Tetragonia tetragonoides*, *Allium sativum*,

Glycine max

[用途] 抗腫瘍生成成分.

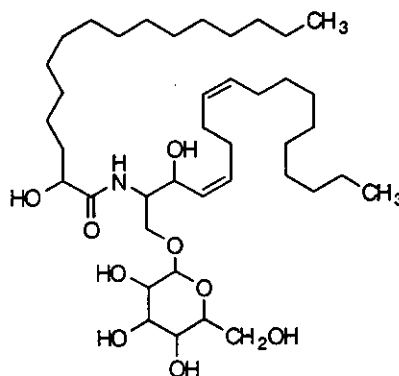
[性状] 吸湿性粒子もしくは無定型の塊

[融点] Mp 192-194 °C (183 °C)

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{25} +13.4$ (c, 0.43 in MeOH/CHCl₃ 3:2) (+4.6)

-----文献-----

Inagaki, M. et al., Chem. Pharm. Bull., 1998, 46, 1153, (AS compound)



§ 2-Amino-4-octadecene-1,3-diol; (2*S*,3*R*,4*E*)-form, *N*-(2*R*-Hydroxyhexadecanoyl), 1-*O*-β

-D-glucopyranoside

[化学名・別名] AS 1-5

[化合物分類] 脂肪族化合物 (Sphingolipid)

[構造式]

[分子式] C₄₀H₇₇NO₉

[分子量] 716.05

[正確な分子量] 715.559834

[基原] *Allium sativum*

[性状] 無定型の粉末

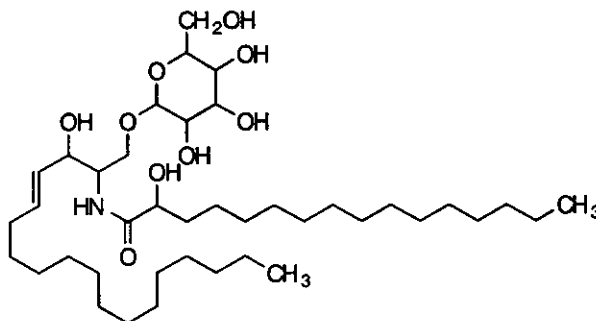
[融点] Mp 205-210 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{25} +8.3$ (c, 0.15 in propanol)

-----文献-----

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

Corey, E.J. et al., Tet. Lett., 2000, 41, 2765, (合成法)



§ Dimethyl disulfide (CAS 名)

[化学名・別名] Methyl disulfide

[CAS No.] 624-92-0

[化合物分類] 脂肪族化合物 (Disulfides, trisulfide)

[構造式] Me-S-S-Me

[分子式] C₂H₆S₂

[分子量] 94.201

[正確な分子量] 93.99109

[基原] 次の植物から分離: ニンニクオイル (*Allium sativum*), *Allium cepa*, *Allium ursinum*. ハムスター雌性フェロモン

[性状] 液体

[融点] Mp-98 °C

[沸点] Bp 110 °C (116-118 °C). Bp₁₂ 40 °C

[濃度] d₄¹⁶ 1.057

[屈折率] n_D¹⁶ 1.5219

[傷害・毒性] 50 %致死濃度 (LC₅₀) (ラット, 吸入) 約 16 mg m³ (2時間暴露). 発火しやすい, 発火温度: <21 °C

Schultz, O.E. et al., Pharmazie, 1965, 20, 441, (分離)

Casida, J.E. et al., J. Agric. Food Chem., 1992, 40, 1425, (H-NMR, C13-NMR)

Lewis, R.J., Sax's Dangerous Properties of Industrial Materials, 8th edn., Van Nostrand Reinhold, 1992, DRQ400

***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 : 眼中への塗布

被験動物 : げっ歯類-ウサギ.

投与量・期間: 100 μ L/24 時間

参考文献

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 μ g/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.

参考文献

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 μ g/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.

参考文献

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>> LDS0 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.

参考文献

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.

参考文献

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)

参考文献

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.

参考文献

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] C₂H₆S₃

[分子量] 126.267

[正確な分子量] 125.96316

[基原] *Humulus lupulus* の精油, ニンニク (*Allium sativum*), *Allium cepa*, *Allium ursinum*

[沸点] Bp₂₀ 70-71 °C

-----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)

§ 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] H₂C=CHCH₂-S-S-CH₂CH=CH₂

[分子式] C₆H₁₀S₂

[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. 次の植物から分離される: ニンニクオイル (*Allium sativum*), *Allium cepa*, *Allium ursinum*, *Descurainia sophia* の種子

[用途] 殺虫剤

[沸点] Bp₁₆ 78-80 °C

[化学物質毒性データ総覧 (RTEC) 登録番号] BB1000000

-----文献-----

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)

Ford, R.A. et al., Food Chem. Toxicol., 1988, 26, 297

***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

§ Furostane-3,6,22,26-tetrol; (3 β ,5 α ,6 β ,22 ξ ,25R)-form, 3-O- $[\beta$ -D-Glucopyranosyl-(1 \rightarrow 3)]- $[\beta$ -D-Glucopyranosyl-(1 \rightarrow 3)]- β -D-Glucopyranosyl-(1 \rightarrow 2)]- β -D-Glucopyranosyl-(1 \rightarrow 4)]- β -D-Galactopyranoside], 26-O- β -D-Glucopyranoside

[化学名・別名] Sativoside B1

[CAS No.] 126594-42-1

[正確な分子量] 1422.651475

[化合物分類] ステロイド (Furostane steroid). (C27).

[