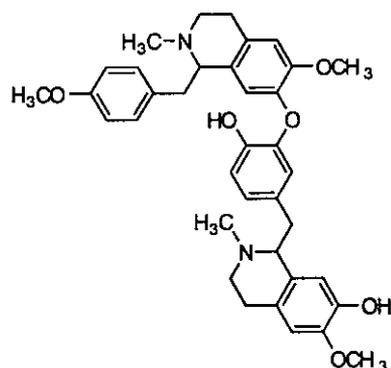


[構造式]



[分子式] $C_{37}H_{42}N_2O_6$

[分子量] 610.749

[正確な分子量] 610.304288

[基原] 次の植物の種子胚から得られるアルカロイド: *Nelumbo nucifera* (ハス科)

[性状] オイル

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{22} +49.3$ (Me₂CO). $[\alpha]_D^{29} -43.3$ (CHCl₃)

-----文献-----

Tomita, M. et al., Tet. Lett., 1964, 2637, (Isoliensinine)

§ Neferine; O¹²-De-Me

[化学名・別名] Liensinine

[CAS No.] 2586-96-1

[化合物分類] アルカロイド化合物 (Bisbenzylisoquinoline alkaloids; one ether link)

[構造式]

[分子式] $C_{37}H_{42}N_2O_6$

[分子量] 610.749

[正確な分子量] 610.304288

[基原] 次の植物の種子胚から得られるアルカロイド: *Nelumbo nucifera* (ハス科)

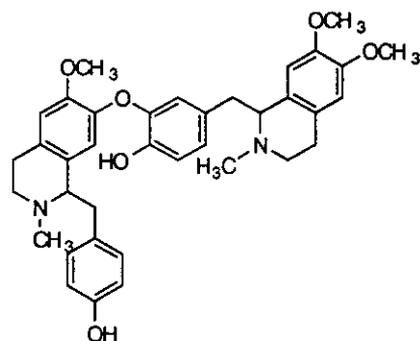
[融点] Mp 95-99 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{31} +15.85$ (c, 0.883 in Me₂CO)

-----文献-----

Chao, Y.C. et al., Sci. Sin. (Engl. edn.), 1962, 11, 215; CA, 57, 7383i, (分離, Liensinine)

Hsieh, Y.Y. et al., Sci. Sin. (Engl. edn.), 1964, 12, 2018; CA, 62, 9183h, (絶対構造, Liensinine)



§ Nuciferine; (R)-form, O²-De-Me

[化学名・別名] 2-Hydroxy-1-methoxyaporphine. Floribundine. N-Methylasimilobine. O-Nornuciferine

[CAS No.] 3153-55-7

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

[構造式]

[分子式] $C_{18}H_{19}NO_2$

[分子量] 281.354

[正確な分子量] 281.141579

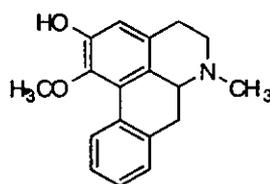
[基原] 次の植物から得られるアルカロイド: *Nelumbo nucifera* (ハス科), 次の科の中のいくつかの属; バンレイシ科 (*Asimina*, *Xylopia*), ツツラフジ科 (*Stephania*), ケシ科 (*Papaver*), クロウメモドキ科 (*Colubrina*)

[融点] Mp 195-196 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{20} -220$ (c, 0.40 in CHCl₃)

-----文献-----

Kashiwaba, N. et al., J. Nat. Prod., 2000, 63, 477, (N-methylasimilobine glucoside)



§ 3,3',4',5,7-Pentahydroxyflavone; 3-O- [β-D-Glucopyranosyl-(1→?)]-β-D-glucuronopyranoside]

[化学名・別名] Nelumboside

[CAS No.] 93252-57-4

[化合物分類] フラボノイド (Flavonols; 5 × O-置換基)

[構造式] 有効な構造式はない

[分子式] $C_{27}H_{28}O_{18}$

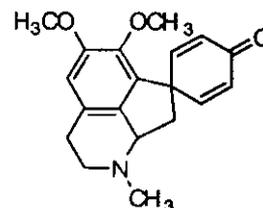
[分子量]640.507
[正確な分子量]640.12757
[基原]次の植物から分離: *Nelumbo nucifera* の葉, *Cosmos bipinnatus*, *Foeniculum vulgare*
[性状]黄色の針状結晶 (H₂O)
[融点]Mp 174-175 °C
[比旋光度]: $[\alpha]_D^{26} -21.1$ (H₂O)

-----文献-----

Nakaoki, T. et al., *Yakugaku Zasshi*, 1956, 76, 323; 1961, 81, 1158, (Reynoutrin, Nelumboside)

§ Pronuciferine; (R)-form

[CAS No.]2128-60-1
[化合物分類]アルカロイド化合物(Proaporphine alkaloids)
[構造式]
[基原]次の植物から得られるアルカロイド: *Nelumbo nucifera*, *Stephania glabra*,
Papaver caucasicum, *Meconopsis cambrica*, *Isolona pilosa* (ハス科, ツツラフジ
科, ケシ科, パンレイシ科)
[用途]強い局所麻酔作用を示す
[融点]Mp 127-129 °C
[比旋光度]: $[\alpha]_D +99$ (c, 0.2 in CHCl₃). $[\alpha]_D +106$ (c, 0.41 in EtOH)
[化学物質毒性データ総覧(RTECS)登録番号]WH0167500



-----文献-----

Bernauer, K., *Helv. Chim. Acta*, 1963, 46, 1783, (分離, UV, IR, H-NMR, 構造決定)

Casagrande, C. et al., *Farmaco, Ed. Sci.*, 1975, 30, 479, (分離)

Horii, Z. et al., *Chem. Pharm. Bull.*, 1978, 28, 481, (合成法, UV, IR, H-NMR)

RTECS (化学物質毒性データ)

生体影響物質 :天然物.

健康障害に関するデータ

急性毒性に関するデータ

<<試験方法>> 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-マウス

投与量・期間: 120 mg/kg

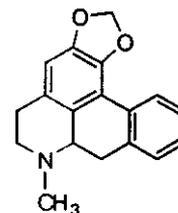
毒性影響 : 致死量以外に毒性影響に関する報告はない.

参照文献

AUPMAF Acta Universitatis Palackianae Olomucensis, Facultatis Medicae. (Statni Pedagogicke Nakladatelstvi, Ostrovni 30, 1 Nove Mesto, 113 01 Prague 1, Czechoslovakia) V.24- 1961- [Vol.,頁, 年(19-)]61,213,1972

§ Roemerine; (R)-form

[CAS No.]548-08-3
[化合物分類]アルカロイド化合物(Aporphine alkaloids)
[構造式]
[基原]次の植物から得られるアルカロイド: *Roemeria refracta* (ケシ科), *Nelumbo nucifera* (ハス科), パンレイシ科, モクレン科, ツツラフジ科, クロウメモドキ科から
も得られる
[融点]Mp 102-103 °C (85-86 °C)
[比旋光度]: $[\alpha]_D^{25} -97$ (c, 0.20 in EtOH)
[化学物質毒性データ総覧(RTECS)登録番号]CE0908000



-----文献-----

Yunousoff, S. et al., *Bull. Soc. Chim. Fr.*, 1939, 6, 811, (分離)

Johns, S.R. et al., *Aust. J. Chem.*, 1968, 21, 1383, (H-NMR, 分離)

Kunitomo, J. et al., *Yakugaku Zasshi*, 1969, 89, 1691, (UV, IR, 分離)

Ziyayev, R., *Khim. Prir. Soedin.*, 1974, 10, 685; *Chem. Nat. Compd. (Engl. Transl.)*, 1974, 10, 714, (分離, IR, UV, Mass, H-NMR)

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

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: 1 ug/plate

参照文献

MUREAV Mutation Research. (Elsevier Science Pub. B.V., POB 211, 1000 AE Amsterdam, Netherlands) V.1- 1964- [Vol.,頁,年(19-)]240,267,1990

§ 1,2,3,4-Tetrahydro-6,7-dimethoxy-2-methylisoquinoline (CAS 名)

[化学名・別名] *O*-Methylcorypalline. *N*-Methylheliamine

[CAS No.] 16620-96-5

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

[構造式]

[分子式] $C_{12}H_{17}NO_2$

[分子量] 207.272

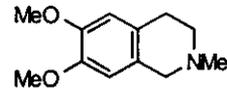
[正確な分子量] 207.125929

[基原] 次の植物から得られるアルカロイド: *Pachycereus weberi*, *Thalictrum dioicum*, *Thalictrum polygamum*, *Backebergia militaris*, *Nelumbo nucifera*, *Pilosocereus guerreronis*, *Papaver bracteatum* (サボテン科, キンボウゲ科, ハス科, ケシ科)

[性状] 結晶 (MeOH or petrol/cyclohexane), 結晶 + 1/2H₂O (Et₂O)

[融点] Mp 69-70 °C. Mp 82 °C (hemihydrate)

[化学物質毒性データ総覧 (RTECS) 登録番号] NX5018510



-----文献-----

Yang, T.-H. et al., J. Chin. Chem. Soc. (Taipei), 1970, 17, 54; 235; CA, 73, 99072s; 74, 100254g, (分離, 構造決定)

Shamma, M. et al., J. Nat. Prod., 1978, 41, 169, (分離, UV, H-NMR, Mass)

Mata, R. et al., Phytochemistry, 1980, 19, 673; 1983, 22, 1263, (分離, UV, H-NMR, Mass, C13-NMR)

Theuns, H.G. et al., Phytochemistry, 1983, 22, 247, (生育, 合成法, H-NMR, Mass)

Shakirov, R. et al., Khim. Prir. Soedin., 1996, 32, 410; Chem. Nat. Compd. (Engl. Transl.), 1996, 32, 386, (*N*-Dimethylheliamine)

***RTECS (化学物質毒性データ) ***

生体影響物質 : 医薬品.

健康障害に関するデータ

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 : 皮下投与.

被験動物 : げっ歯類-マウス

投与量・期間: 50 mg/kg

毒性影響 : [自律神経系] 中枢交感神経

参照文献

85IXA4 "Structure et Activite Pharmacodynamique des Medicaments du Systeme Nerveux Vegetatif," Bovet, D., and F. Bovet-Nitti, New York, S. Karger, 1948 [Vol.,頁,年(19-)]-,244,1948

*****ハスカップ (Hasukappu) *****

§ § スイカズラ科クロミノウグイスカグラ (*Lonicera caerulea* L. ver. *emphylocalyx* Nakai) の果実。
該当物質なし

§ § スイカズラ科ケヨノミ (*Lonicera caerulea* L. ver. *edulis* Regel) の果実。
該当物質なし

*****パースニップ (Parsnip) *****

§ § セリ科アメリカボウフウ (*Pastinaca sativa* L.) の根。

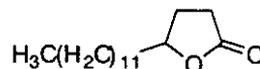
§ 5-Dodecyldihydro-2(3H)-furanone (CAS 名)

[化学名・別名] 4-Hexadecanolide. γ -Palmitolactone. 4-Dodecyl- γ -butyrolactone

[CAS No.] 730-46-1

[化合物分類] 脂肪族化合物 (Saturated unbranched carboxylic acids and lactones), 含酸素複素環式化合物 (Butanolides)

[構造式]



[分子式] $C_{16}H_{30}O_2$

[分子量] 254.412

[正確な分子量] 254.22458

[基原] パイナップルエッセンス, *Pastinaca sativa* の精油に見られる

[融点] Mp 54 °C

-----文献-----

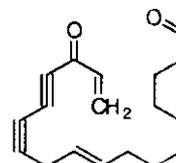
Näf-Müller, R. et al., Helv. Chim. Acta, 1971, 54, 1880, (分離)

Kubeczka, K.H. et al., Planta Med., 1977, 31, 173; CA, 86, 177157, (分離)

§ 16-Oxo-9,17-octadecadiene-12,14-diyne-1-al; (Z)-form

[化合物分類] 脂肪族化合物 (Miscellaneous acetylenes)

[構造式]



[基原] *Pastinaca sativa* (wild parsnip) の種子

[性状] とても不安定なオイル

-----文献-----

Jones, E.R.H. et al., J.C.S. (C), 1966, 1220

§ 3,4',5,7-Tetrahydroxy-3'-methoxyflavone; 3-O- β -D-Glucofuranoside, 4'-O- α -L-rhamnopyranoside

[化学名・別名] Pastenoside

[CAS No.] 10576-85-9

[化合物分類] フラボノイド (Flavonols; 5 × O-置換基)

[構造式]

[分子式] $C_{28}H_{32}O_{16}$

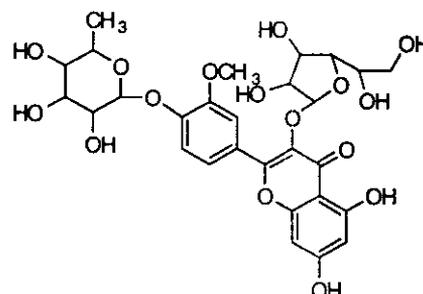
[分子量] 624.551

[正確な分子量] 624.16904

[基原] 次の植物から分離: *Pastinaca sativa*

[融点] Mp 235-237 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{20}$ -120 (c, 1.3 in Py)



-----文献-----

Maksyutina, N.P. et al., Khim. Prir. Soedin., 1966, 2, 20; Chem. Nat. Compd. (Engl. Transl.), 1966, 2, 16, (Pastenoside)

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

*****パセリ (Parsley) *****

§ § セリ科パセリ (*Petroselinum sativum* Hoffman) の種子, 茎葉または根。

§ 5,10-Dihydroxy-8-daucen-2-one; (5 β ,10 α)-form, 10-Angeloyl

[化学名・別名] Vaginatol. Crispanol

[CAS No.] 11053-21-7

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

[構造式]

[分子式] $C_{30}H_{50}O_4$

[分子量] 334.455

[正確な分子量] 334.21441

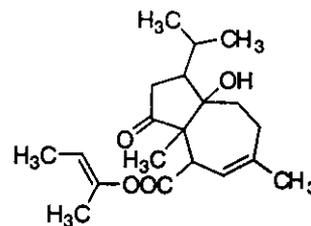
[基原] *Selinum vaginatum*, *Inula crithmoides*, *Petroselinum sativum*,
Petroselinum crispum

[性状] 結晶 (petrol)

[融点] Mp 77-78 °C (68-69 °C)

[比旋光度]: $[\alpha]_D -266.7$ (c, 4.32 in $CHCl_3$)

[その他のデータ] Crispane の構造式は 1998 年に改正された



-----文献-----

Casinovi, C.G. et al., Coll. Czech. Chem. Comm., 1983, 48, 2411, (結晶構造, Siol acetate)

Appendino, G. et al., J.C.S. Perkin 1, 1986, 1363, (Vaginatin)

Miski, M. et al., Phytochemistry, 1986, 25, 1673, (Vaginatin, Fercomin)

§ *p*-Mentha-1,3,8-triene

[化学名・別名] 1-Methyl-4-(1-methylethenyl)-1,3-cyclohexadiene (CAS 名).

1-Isopropenyl-4-methyl-1,3-cyclohexadiene

[CAS No.] 18368-95-1

[化合物分類] テルペノイド (*p*-Menthane monoterpenoids)

[構造式]

[分子式] $C_{10}H_{14}$

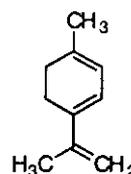
[分子量] 134.221

[正確な分子量] 134.10955

[基原] 次の植物から分離: *Petroselinum sativum* (ユーゴスラビアパセリ)

[沸点] Bp: 65 °C

[屈折率] n_D^{20} 1.5395



-----文献-----

Garnero, J. et al., Bull. Soc. Chim. Fr., 1967, 4679, (分離)

Birch, A.J. et al., Aust. J. Chem., 1969, 22, 2037, (合成法)

Thomas, A.F. et al., Helv. Chim. Acta, 1970, 53, 770, (合成法)

§ 6,9-Octadecadienoic acid; (6Z,9Z)-form

[化学名・別名] Petroselinoleic acid

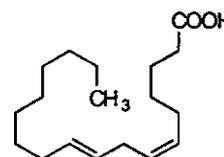
[CAS No.] 28290-77-9

[化合物分類] 脂肪族化合物 (Unbranched alkenic carboxylic acids and lactones)

[構造式]

[基原] 次の植物のオイルから分離: *Petroselinum sativum*, *Picramnia sellowii*

[融点] Mp-11.5 °C



-----文献-----

Christie, W.W. et al., Chem. Phys. Lipids, 1967, 1, 407, (合成法)

Gunstone, F.D. et al., Chem. Phys. Lipids, 1969, 3, 297; 1970, 4, 1; 131, (合成法, H-NMR, ガスクロマト, tlc)

Spencer, G.F. et al., Lipids, 1970, 5, 285, (分離)

Stepanenko, G.A. et al., Khim. Prir. Soedin., 1974, 10, 37; Chem. Nat. Compd. (Engl. Transl.), 1974, 10, 31

Sprecher, H., Prog. Chem. Fats Other Lipids, 1978, 15, 219

*****バター (Butter) *****

§ § 家畜の乳汁 (「ミルク」の項参照) を加工して得られたバター。

*****バターオイル (Butter oil) *****

§ § 家畜の乳汁（「ミルク」の項参照）を加工して得られたバターのお相部。

*****バターミルク (Butter milk) *****

§ § 家畜の乳汁（「ミルク」の項参照）を加工して得られたバターを得る際に生じるバターミルク。

*****バーチ (Birch) *****

§ § カバノキ科スイートバーチ（ブラック・バーチ）(*Betula lenta* L.)の枝葉または樹皮。

§ 3,7(14)-Caryophylladien-6-ol

[化学名・別名] 2,10,10-Trimethyl-6-methylenebicyclo[7.2.0]undec-2-en-5-ol (CAS名). α -Betulenol. α -Betulol

[CAS No.] 487-86-5

[化合物分類] テルペノイド (Caryophyllane sesquiterpenoids)

[構造式]

[分子式] $C_{15}H_{24}O$

[分子量] 220.354

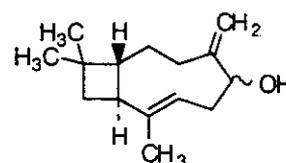
[正確な分子量] 220.182715

[基原] *Betula lenta* と *Betula alba* の精油

[性状] オイル

[沸点] $B_{p_{20}}$ 154-156 °C

[比旋光度]: $[\alpha]_D^{20}$ -19.5



-----文献-----

Holub, M. et al., Coll. Czech. Chem. Comm., 1959, 24, 3730, (構造決定)

Treibs, W. et al., Annalen, 1960, 634, 124, (合成法)

§ 3,30-Dihydroxy-20(29)-lupen-28-oic acid; 3 β -form, 28-Alcohol, 29-aldehyde

[化学名・別名] 3,28-Dihydroxy-20(30)-lupen-29-al. 3,28-Dihydroxy-20(29)-lupen-30-al (incorr.)

[化合物分類] テルペノイド (Lupane triterpenoids)

[構造式]

[分子式] $C_{30}H_{48}O_3$

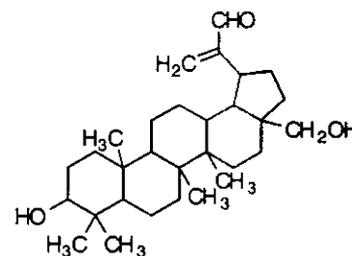
[分子量] 456.707

[正確な分子量] 456.360345

[基原] 次の植物の樹皮から分離: *Betula lenta*, *Cyclolepis genistioides*

[性状] 結晶 (EtOH)

[融点] Mp 223-224 °C. Mp 248-249 °C



-----文献-----

Bohlmann, F. et al., Planta Med., 1984, 50, 276, (3-ketone)

Tsichritzis, F. et al., Phytochemistry, 1990, 29, 3173, (分離)

Cole, B.J.W. et al., Holzforschung, 1991, 45, 265, (誘導体)

Macias, F.A. et al., J. Chem. Ecol., 1997, 23, 1781, (Messagenic acid D)

De Heluani, C.S. et al., Phytochemistry, 1997, 45, 801, (3,28-Dihydroxy-20(30)-lupen-29-al)

Mac acute i as, F.A. et al., Phytochemistry, 1998, 49, 709, (Messagenic acids F and G)

§ 20(29)-Lupene-3,28-diol; 3 β -form, 3-Ketone

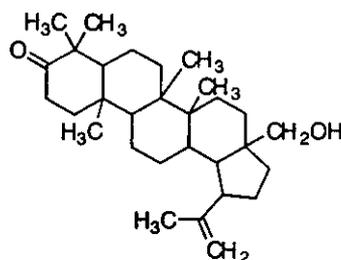
[化学名・別名] 28-Hydroxy-20(29)-lupen-3-one. Betulone

[CAS No.] 7020-34-0

[化合物分類] テルペノイド (Lupane triterpenoids)

[構造式]

[分子式] $C_{30}H_{48}O$
 [分子量] 440.708
 [正確な分子量] 440.36543
 [基原] *Betula alleghaniensis* と *Betula lenta* の樹皮
 [性状] 結晶
 [融点] Mp 207 °C
 [比旋光度]: $[\alpha]_D^{19} +19.97$



-----文献-----

Karrer, W. et al., Konstitution und Vorkommen der Organischen Pflanzenstoffe, 2nd edn., Birkhäuser Verlag,
 Hase, T.A. et al., Synth. Commun., 1981, 11, 489, (合成法, Betulone)
 Cole, B.J.W. et al., Holzforschung, 1991, 45, 265, (Betulone)

§ Methyl 2-hydroxybenzoate (CAS 名)

[化学名・別名] Methyl salicylate (旧 CAS 名). Oil of wintergreen

[CAS No.] 119-36-8

[化合物分類] 薬物: (Counter irritants), 単環芳香族 (Simple benzoic acids and esters), 薬物: 鎮痛薬
 -NSAID (Analgesics-NSAID), 薬物: 抗炎症薬 (Antiinflammatory agents), 薬物: 解熱薬 (Antipyretics)

[構造式]

[分子式] $C_8H_8O_2$

[分子量] 152.149

[正確な分子量] 152.047345

[基原] *Gaultheria procumbens* (ツツジ科) の葉, *Betula lenta* (カバノキ科) の樹皮

[用途] 抗炎症薬, 鎮痛薬, 解熱薬, 抗リウマチ薬. 香水及び香料の原料に使われる

[性状] 特異的な臭気を有するオイル

[融点] Mp -8.6 °C

[沸点] Bp 223.3 °C. Bp₁₂ 101 °C

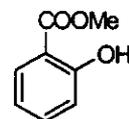
[濃度] d^{15}_4 1.851

[PKa 値] pK_a 9.87 (20 °C, 0.1 M NaClO₄)

[Log P 計算値] Log P 2.44 (計算値)

[傷害・毒性] 経口で毒性. 発火点: 96 °C, 自然発火点: 454 °C. 皮膚と眼を刺激する. 摂取による致死性が報告されている. 50 % 致死量 (LD₅₀) (ラット, 経口) 887 mg/kg. 催奇形成作用に関する研究がある

[化学物質毒性データ総覧 (RTECS) 登録番号] VO4725000



-----文献-----

Aldrich Library of 13C and 1H FT NMR Spectra, 1992, 2, 1251A, (NMR)

Aldrich Library of FT-IR Spectra, 1st edn., 1985, 2, 295C, (IR)

Aldrich Library of FT-IR Spectra: Vapor Phase, 1989, 3, 1363B, (IR)

Tijmstra, S., Ber., 1905, 38, 1375, (合成法)

Robertson, A. et al., J.C.S., 1931, 1881, (Monotropitoid)

Emery, E.M., Anal. Chem., 1960, 32, 1495, (Mass)

Hallas, G., J.C.S., 1965, 5770, (Me ester)

Towers, G.H.N. et al., Phytochemistry, 1966, 5, 677, (Monotropitoid)

Scott, K.N., J. Magn. Reson., 1970, 2, 361, (H-NMR)

S) antav acute y, F. et al., Coll. Czech. Chem. Comm., 1972, 37, 1825, (UV)

Scott, K.N., J.A.C.S., 1972, 94, 8564, (C13-NMR)

Bowie, J.H. et al., Org. Mass Spectrom., 1974, 9, 1006, (Mass)

Wu, S.K. et al., J. Macromol. Sci., Chem., Part A, 1985, 22, 1121, (UV)

Lewis, R.J., Food Additives Handbook, Van Nostrand Reinhold International, New York, 1989, MPI000

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

RTECS (化学物質毒性データ)

生体影響物質 : 変異原物質. 生殖影響物質. ヒト. 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 : 軽度
参照文献

FCTXAV Food and Cosmetics Toxicology. (London, UK) V.1-19, 1963-81. For publisher information, see FCTOD7. [Vol.,頁,年(19-)]16,821,1978

<<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 : 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-)],668,1986

<<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-モルモット.
投与量・期間 : 100%
反応の症度 : 重度
参照文献

FCTXAV Food and Cosmetics Toxicology. (London, UK) V.1-19, 1963-81. For publisher information, see FCTOD7. [Vol.,頁,年(19-)]16,821,1978

<<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-モルモット.
投与量・期間 : 100%
反応の症度 : 重度
参照文献

FCTXAV Food and Cosmetics Toxicology. (London, UK) V.1-19, 1963-81. For publisher information, see FCTOD7. [Vol.,頁,年(19-)]16,821,1978

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 : 経口投与.
被験動物 : ヒト-男性
投与量・期間 : 101 mg/kg
毒性影響 : [行動] 痙攣または発作閾値への影響.
[胃腸] 嘔気または嘔吐

参照文献

AJMSA9 American Journal of the Medical Sciences. (Slack Inc., 6900 Grove Rd., Thorofare, NJ 08086) New series: V.1- 1841- [Vol.,頁,年(19-)]193,772,1937

<<試験方法>> 認知されている最小致死量(LDLo)試験.

曝露経路 : 経口投与.
被験動物 : ヒト-男性
投与量・期間 : 1329 mg/kg
毒性影響 : [行動] 痙攣または発作閾値への影響.
[行動] 昏睡.
[血液] 出血.

参照文献

CTOXAO Clinical Toxicology. (New York, NY) V.1-18, 1968-81. For publisher information, see JTCTDW. [Vol.,頁,年(19-)]6,189,1973

<<試験方法>> 認知されている最小致死量(LDLo)試験.

曝露経路 : 経口投与.
被験動物 : ヒト-子供
投与量・期間 : 228 mg/kg

毒性影響 :〔肺, 胸郭, または呼吸〕呼吸困難.
〔胃腸〕嘔気または嘔吐

参照文献

AJDCAI American Journal of Diseases of Children. (AMA, 535 N. Dearborn St., Chicago, IL 60610)
V.1-80(3), 1911-50; V.100- 1960- [Vol.,頁,年(19-)]69,37,1945

<<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 :ヒト-子供

投与量・期間:700 mg/kg

毒性影響 :〔末梢神経と感覚〕知覚麻痺を伴わない弛緩麻痺(通常神経筋ブ
ック).

〔行動〕全身麻痺.

〔肺,胸郭,または呼吸〕呼吸困難.

参照文献

ADCHAK Archives of Disease in Childhood. (British Medical Journal, POB 560B, Kennebunkport, ME
04046) V.1- 1926- [Vol.,頁,年(19-)]28,475,1953

<<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 :ヒト-女性

投与量・期間:355 mg/kg

毒性影響 :〔行動〕昏睡.

〔肺,胸郭,または呼吸〕呼吸刺激.

〔胃腸〕嘔気または嘔吐

参照文献

AJMSA9 American Journal of the Medical Sciences. (Slack Inc., 6900 Grove Rd., Thorofare, NJ
08086) New series: V.1- 1841- [Vol.,頁,年(19-)]193,772,1937

<<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 :ヒト-幼児, 乳児.

投与量・期間:1480 mg/kg

毒性影響 :〔肺,胸郭,または呼吸〕呼吸刺激.

〔胃腸〕嘔気または嘔吐

参照文献

AJMSA9 American Journal of the Medical Sciences. (Slack Inc., 6900 Grove Rd., Thorofare, NJ
08086) New series: V.1- 1841- [Vol.,頁,年(19-)]193,772,1937

<<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 :ヒト

投与量・期間:506 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

85KYAH "Merck Index; an Encyclopedia of Chemicals, 医薬品,s, and Biologicals", 11th ed., Rahway,
NJ 07065, Merck & Co., Inc. 1989 [Vol.,頁,年(19-)]11,961,1989

<<試験方法>> 認知されている最小致死量(LDL₀)試験.

曝露経路 :報告なし.

被験動物 :ヒト-男性

投与量・期間:522 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

85DCAI "Poisoning; Toxicology, Symptoms, Treatments," 2nd ed., Arena, J.M., Springfield, IL, C.C.
Thomas, 1970 [Vol.,頁,年(19-)]2,73,1970

<<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:887 mg/kg

毒性影響 :〔行動〕傾眠(全身活動度の低下).

参照文献

FCTXAV Food and Cosmetics Toxicology. (London, UK) V.1-19, 1963-81. For publisher information, see FCTOD7. [Vol.,頁,年(19-)]2,327,1964

<<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:1110 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-)]132,207,1961

<<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 :ほ乳類-イヌ.

投与量・期間:2100 mg/kg

毒性影響 :〔肺,胸郭,または呼吸〕その他の変化.

〔胃腸〕運動亢進,下痢.

〔胃腸〕嘔気または嘔吐

参照文献

FCTXAV Food and Cosmetics Toxicology. (London, UK) V.1-19, 1963-81. For publisher information, see FCTOD7. [Vol.,頁,年(19-)]16,821,1978

<<試験方法>> 認知されている最小致死量(LDLo)試験.

曝露経路 :皮下投与.

被験動物 :ほ乳類-イヌ.

投与量・期間:2250 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

FCTXAV Food and Cosmetics Toxicology. (London, UK) V.1-19, 1963-81. For publisher information, see FCTOD7. [Vol.,頁,年(19-)]16,821,1978

<<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-ウサギ.

投与量・期間:1300 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

FCTXAV Food and Cosmetics Toxicology. (London, UK) V.1-19, 1963-81. For publisher information, see FCTOD7. [Vol.,頁,年(19-)]16,821,1978

<<試験方法>> 認知されている最小致死量(LDLo)試験.

曝露経路 :皮下投与.

被験動物 :げっ歯類-ウサギ.

投与量・期間:4250 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

FCTXAV Food and Cosmetics Toxicology. (London, UK) V.1-19, 1963-81. For publisher information, see FCTOD7. [Vol.,頁,年(19-)]16,821,1978

<<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-モルモット.

投与量・期間:700 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

14CYAT "Industrial Hygiene and Toxicology," 2nd ed., Patty, F.A., ed., New York, John Wiley & Sons, Inc., 1958-63 [Vol.,頁,年(19-)]2,1897,1963

<<試験方法>> 認知されている最小致死量(LDLo)試験.

曝露経路 : 皮下投与.
被験動物 : げっ歯類-モルモット.
投与量・期間 : 1500 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

FAONAU FAO Nutrition Meetings Report Series. (Rome, Italy) No.?-57, 1948-77. Discontinued.
[Vol.,頁,年(19-)]44A,63,1967

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 : 71400 mg/kg/17 週間継続投与
毒性影響 : [栄養と総代謝] 体重減少または体重増加.
参照文献

TXAPA9 Toxicology and Applied Pharmacology. (Academic Press, Inc., 1 E. First St., Duluth, MN 55802) V.1- 1959- [Vol.,頁,年(19-)]5,576,1963

<<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 : 546 gm/kg/2 年間継続投与
毒性影響 : [心臓] 重量の変化.
[腎臓・尿路・膀胱] 腎臓重量の変化.
[栄養と総代謝] 体重減少または体重増加.

参照文献

TXAPA9 Toxicology and Applied Pharmacology. (Academic Press, Inc., 1 E. First St., Duluth, MN 55802) V.1- 1959- [Vol.,頁,年(19-)]5,576,1963

<<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 : 40 mg/m³/4 時間/17 週間間欠投与
毒性影響 : [血液] 赤血球数の変化.
[血液] 白血球数の変化.
[生化学] [酵素の阻害・誘導・血液・組織中濃度の変化] デヒドロ

ゲナーゼ.

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-)]57(7-8),28,1992

<<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 : 85200 mg/kg/10W-C
毒性影響 : [筋肉骨格] その他の変化.
慢性毒性に関するデータ : 死亡.
参照文献

TXAPA9 Toxicology and Applied Pharmacology. (Academic Press, Inc., 1 E. First St., Duluth, MN 55802) V.1- 1959- [Vol.,頁,年(19-)]5,576,1963

<<試験方法>> 最小毒性量(TDLo)試験.

曝露経路 : 経口投与.
被験動物 : ほ乳類-イヌ.
投与量・期間 : 40800 mg/kg/59 日間間欠投与
毒性影響 : [肝臓] 脂肪変性.
慢性毒性に関するデータ : 死亡.
参照文献

TXAPA9 Toxicology and Applied Pharmacology. (Academic Press, Inc., 1 E. First St., Duluth, MN 55802) V.1- 1959- [Vol.,頁,年(19-)]5,576,1963

<<試験方法>> 最小毒性量(TDLo)試験.

曝露経路 : 経口投与.

被験動物 : ほ乳類-イヌ.

投与量・期間 : 93600 mg/kg/2 年間欠投与

毒性影響 : [肝臓] その他の変化.

[肝臓] 肝臓重量の変化.

[栄養と総代謝] 体重減少または体重増加.

参考文献

TXAPA9 Toxicology and Applied Pharmacology. (Academic Press, Inc., 1 E. First St., Duluth, MN 55802) V.1- 1959- [Vol.,頁,年(19-)]5,576,1963

<<試験方法>> 最小毒性量(TDLo)試験.

曝露経路 : 経口投与.

被験動物 : ほ乳類-イヌ.

投与量・期間 : 35 gm/kg/10 週間間欠投与

毒性影響 : [肝臓] 脂肪変性.

参考文献

FAONAU FAO Nutrition Meetings Report Series. (Rome, Italy) No.?-57, 1948-77. Discontinued. [Vol.,頁,年(19-)]44A,1,1967

<<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 : 330 gm/kg/90 日間間欠投与

毒性影響 : [胃腸] changes in structure or function of endocrine pancreas

慢性毒性に関するデータ : 死亡.

参考文献

TXAPA9 Toxicology and Applied Pharmacology. (Academic Press, Inc., 1 E. First St., Duluth, MN 55802) V.1- 1959- [Vol.,頁,年(19-)]5,576,1963

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 : 36450 mg/kg

雌雄投与期間 : multigenerations

毒性影響 : [生殖] [新生児への影響] 生児出生指数(生後に測定).

[生殖] [新生児への影響] 生育力指数(たとえば生産仔のうち4日目に生存した仔の数).

[生殖] [新生児への影響] 離乳または乳汁分泌指数(たとえば4日目に生存した仔のうち離乳時にも生存した仔の数).

参考文献

TXAPA9 Toxicology and Applied Pharmacology. (Academic Press, Inc., 1 E. First St., Duluth, MN 55802) V.1- 1959- [Vol.,頁,年(19-)]18,755,1971

<<試験方法>> 最小毒性量(TDLo)試験.

曝露経路 : 腹腔内投与

被験動物 : げっ歯類-ラット.

投与 : 400 mg/kg

雌雄投与期間 : 雌 12 日間(交配後)

毒性影響 : [生殖] [受精能への影響] 着床後死亡率.(たとえば着床総数当たりの着床の死亡および/または 吸収)

参考文献

FAATDF Fundamental and Applied Toxicology. (Academic Press, Inc., 1 E. First St., Duluth, MN 55802) V.1-40, 1981-97. For publisher information, see TOSCF2 [Vol.,頁,年(19-)]11,381,1988

<<試験方法>> 最小毒性量(TDLo)試験.

曝露経路 : 腹腔内投与

被験動物 : げっ歯類-ラット.

投与 : 500 mg/kg

雌雄投与期間：雌 11-12 日間(交配後)

毒性影響：〔生殖〕〔胚または胎仔に対する影響〕胎児毒性(死亡を除く。例えば胎児の発育阻害)
〔生殖〕〔特定の発育異常〕泌尿生殖系。

参考文献

FAATDF Fundamental and Applied Toxicology. (Academic Press, Inc., 1 E. First St., Duluth, MN 55802) V.1-40, 1981-97. For publisher information, see TOSCF2 [Vol.,頁,年(19-)]11,381,1988

<<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-ラット.

投与：500 mg/kg

雌雄投与期間：雌 10 日間(交配後)

毒性影響：〔生殖〕〔特定の発育異常〕筋肉骨格系.
〔生殖〕〔特定の発育異常〕体壁.
〔生殖〕〔特定の発育異常〕中枢神経系.

参考文献

AJPAA4 American Journal of Pathology. (Lippincott/Harper, Journal Fulfillment Dept., 2350 Virginia Ave., Hagerstown, MD 21740) V.1- 1925- [Vol.,頁,年(19-)]35,315,1959

<<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-ラット.

投与：500 mg/kg

雌雄投与期間：雌 10 日間(交配後)

毒性影響：〔生殖〕〔特定の発育異常〕肝胆系.
〔生殖〕〔特定の発育異常〕眼/耳
〔生殖〕〔特定の発育異常〕頭骸と顔(鼻と舌を含む).

参考文献

AJPAA4 American Journal of Pathology. (Lippincott/Harper, Journal Fulfillment Dept., 2350 Virginia Ave., Hagerstown, MD 21740) V.1- 1925- [Vol.,頁,年(19-)]35,315,1959

<<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-ハムスター

投与：1750 mg/kg

雌雄投与期間：雌 7 日間(交配後)

毒性影響：〔生殖〕〔特定の発育異常〕中枢神経系.

参考文献

TJADAB Teratology, The International Journal of Abnormal Development. (Alan R. Liss, Inc., 41 E. 11th St., New York, NY 10003) V.1- 1968- [Vol.,頁,年(19-)]28,421,1983

<<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-ハムスター

投与：5250 mg/kg

雌雄投与期間：雌 7 日間(交配後)

毒性影響：〔生殖〕〔特定の発育異常〕中枢神経系.

参考文献

TJADAB Teratology, The International Journal of Abnormal Development. (Alan R. Liss, Inc., 41 E. 11th St., New York, NY 10003) V.1- 1968- [Vol.,頁,年(19-)]28,421,1983

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：100 ug/disc

参考文献

JNUDAT Journal of Nihon University School of Dentistry. (Nihon University School of Dentistry, 1-8-13 Surugadai, Kanda, Chiyoda-ku, Tokyo, 101, Japan) V.1- 1958- [Vol.,頁,年(19-)]34,183,1992

*** REVIEWS ***

毒性に関するレビュー

DICPBB 医薬品. Intelligence and Clinical Pharmacy. (POB 42435, Cincinnati, OH 45242) V.3-1969- [Vol.,頁,年(19-)]9,350,1975

毒性に関するレビュー

CLCHAU Clinical Chemistry (Winston-Salem, NC). (American Assoc. for Clinical Chemistry, 1725 K St., NW, Washington, DC 20006) V.1- 1955- [Vol.,頁,年(19-)]19,361,1973

毒性に関するレビュー

ARVPAX Annual Review of Pharmacology. (Palo Alto, CA) V.1-15, 1961-75. For publisher information, see ARPTDI. [Vol.,頁,年(19-)]5,447,1965

毒性に関するレビュー

AJMEAZ American Journal of Medicine. (Technical Pub., 875 Third Ave., New York, NY 10022) V.1- 1946- [Vol.,頁,年(19-)]38,409,1965

毒性に関するレビュー

EVHPAZ EHP, Environmental Health Perspectives. (U.S. Government Printing Office, Supt of Documents, Washington, DC 20402) No.1- 1972- [Vol.,頁,年(19-)]15,121,1976

毒性に関するレビュー

FAATDF Fundamental and Applied Toxicology. (Academic Press, Inc., 1 E. First St., Duluth, MN 55802) V.1-40, 1981-97. For publisher information, see TOSCF2 [Vol.,頁,年(19-)]13,747,1989

米国規格基準

EPA FIFRA 1988 PESTICIDE SUBJECT TO REGISTRATION OR RE-REGISTRATION

FEREAC Federal Register. (U.S. Government Printing Office, Supt. of Documents, Washington, DC 20402) V.1- 1936- [Vol.,頁,年(19-)]54,7740,1989

米国NIOSH基準の発展とサーベイランス

米国NIOSH職業暴露調査データ

全米労働有害性調査(NOHS)米国全国職業ハザード調査.(1974)

NOHS Hazard Code - 48320

No. of Facilities: 15668 (評価)

No. of Industries: 138

No. of Occupations: 80

No. of Employees: 105490 (評価)

全米職業曝露調査(NOES)-米国全国職業ばく露調査(1983)

全米職業曝露調査(NOES) Hazard Code - 48320

No. of Facilities: 30724 (評価)

No. of Industries: 193

No. of Occupations: 134

No. of Employees: 454822 (評価)

No. of Female Employees: 134722 (評価)

米国に於ける状況

EPA TSCA Section 8(b) CHEMICAL INVENTORY

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

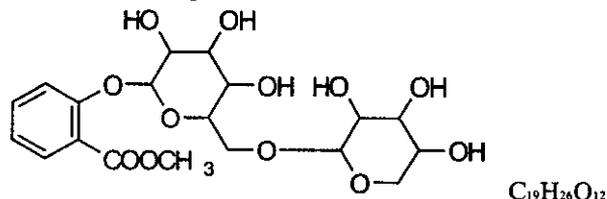
§ Methyl 2-hydroxybenzoate; O-Primeveroside

[化学名・別名] Monotropitoxide. Monotropitin. Gaultherin

[CAS No.] 490-67-5

[化合物分類] 単環芳香族 (Simple benzoic acids and esters)

[構造式]



[分子式]

[分子量] 446.407

[正確な分子量] 446.14243

[基原] 次の植物から分離: *Monotropa hypopithys*, *Betula lenta*, *Gaultheria* spp., *Ostryopsis davidiana*, その他

[性状]プリズム結晶 (Me:CO)
[融点]Mp 180℃
[比旋光度]:[α]_D -58.2 (H₂O)

-----文献-----

Aldrich Library of ¹³C and ¹H FT NMR Spectra, 1992, 2, 1251A, (NMR)
Aldrich Library of FT-IR Spectra, 1st edn., 1985, 2, 295C, (IR)
Aldrich Library of FT-IR Spectra: Vapor Phase, 1989, 3, 1363B, (IR)
Tijmstra, S., Ber., 1905, 38, 1375, (合成法)
Robertson, A. et al., J.C.S., 1931, 1881, (Monotropitoid)
Emery, E.M., Anal. Chem., 1960, 32, 1495, (Mass)
Hallas, G., J.C.S., 1965, 5770, (Me ester)
Towers, G.H.N. et al., Phytochemistry, 1966, 5, 677, (Monotropitoid)
Scott, K.N., J. Magn. Reson., 1970, 2, 361, (H-NMR)
Santavy, F. et al., Coll. Czech. Chem. Comm., 1972, 37, 1825, (UV)
Scott, K.N., J.A.C.S., 1972, 94, 8564, (C¹³-NMR)
Bowie, J.H. et al., Org. Mass Spectrom., 1974, 9, 1006, (Mass)
Wu, S.K. et al., J. Macromol. Sci., Chem., Part A, 1985, 22, 1121, (UV)
Lewis, R.J., Food Additives Handbook, Van Nostrand Reinhold International, New York, 1989, MPI000
Lewis, R.J., Sax's Dangerous Properties of Industrial Materials, 8th edn., Van Nostrand Reinhold, 1992

*****ハチミツ (Honey) *****

§ § ミツバチ科ヨーロッパミツバチ (*Apis mellifera* L.) がその巣に集めたハチミツ。

§ Abaecin

[CAS No.] 123997-18-2
[化合物分類] AH0450, アミノ酸とペプチド (Linear polypeptides)
[構造式] 不明
[基原] 次の植物から分離: 蜂蜜 (*Apis mellifera*)
[用途] 抗菌反応ペプチド

-----文献-----

Casteels, P. et al., Eur. J. Biochem., 1990, 187, 381, (分離, 構造決定)

§ Apidaecin Ia (CAS 名)

[CAS No.] 123081-48-1
[化合物分類] アミノ酸とペプチド (Linear polypeptides)
[構造式] H-Gly-Asn-Asn-Arg-Pro-⁶Val-Tyr-Ile-Pro-Gln-Pro-Arg-Pro-Pro-His-Pro-Arg-¹⁸Ile-OH
[基原] 次の植物から分離: 蜂蜜 (*Apis mellifera*)
[用途] 抗菌作用

-----文献-----

Casteels, P. et al., EMBO J., 1989, 8, 2387, (分離, 構造決定)
Maeno, M. et al., Biosci., Biotechnol., Biochem., 1993, 57, 1206, (合成法)

§ Apidaecin Ia; 18-L-Leucyl analogue

[化学名・別名] Apidaecin Ib
[CAS No.] 123276-94-8
[化合物分類] アミノ酸とペプチド (Linear polypeptides)
[構造式] アミノ酸もしくはペプチド. 有効な構造式はない
[基原] 次の植物から分離: *Apis mellifera*
[用途] 抗菌作用

-----文献-----

Casteels, P. et al., EMBO J., 1989, 8, 2387, (分離, 構造決定)
Maeno, M. et al., Biosci., Biotechnol., Biochem., 1993, 57, 1206, (合成法)

§ Apidaecin Ia; 6-L-Isoleucyl, 18-L-leucyl analogue

[化学名・別名] Apidaecin II

[CAS No.] 123276-95-9

[化合物分類] アミノ酸とペプチド (Linear polypeptides)

[構造式] アミノ酸もしくはペプチド. 有効な構造式はない

[基原] 次の植物から分離: *Apis mellifera*

[用途] 抗菌作用

-----文献-----

Casteels, P. et al., EMBO J., 1989, 8, 2387, (分離, 構造決定)

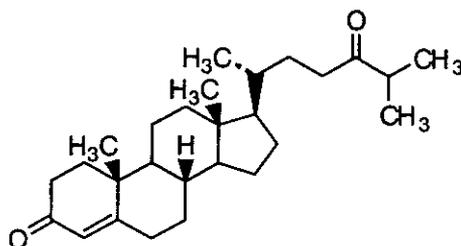
Maeno, M. et al., Biosci., Biotechnol., Biochem., 1993, 57, 1206, (合成法)

§ Cholest-4-ene-3,24-dione (CAS 名)

[CAS No.] 57701-41-4

[化合物分類] AJ1050, ステロイド (Neutral cholestane steroids). (C27).

[構造式]



[分子式]

$C_{27}H_{42}O_2$

[分子量]

398.628

[正確な分子量] 398.31848

[基原] 女王蜂の卵巣, *Apis mellifera*

-----文献-----

Ochi, K. et al., Chem. Pharm. Bull., 1978, 26, 2386, (合成法, H-NMR)

Barton, D.H.R. et al., J.C.S. Perkin 1, 1986, 1797, (合成法, UV, IR, H-NMR, Mass)

Barbier, M., J. Chem. Ecol., 1987, 13, 1681, (分離)

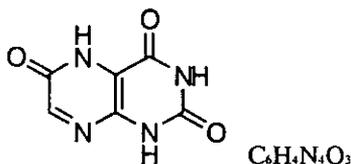
§ 1,5-Dihydro-2,4,6(3H)-pteridinetrione (CAS 名)

[化学名・別名] 2,4,6(1H,3H,5H)-Pteridinetrione. 6-Oxolumazine

[CAS No.] 2577-35-7

[化合物分類] アルカロイド化合物 (Pteridines and analogues)

[構造式]



[分子式]

$C_6H_4N_4O_3$

[分子量] 180.123

[正確な分子量] 180.028341

[基原] 次の植物から分離: 蜂蜜 (*Apis mellifera*)

-----文献-----

Pfleiderer, W., Chem. Ber., 1957, 90, 2604; 2617, (合成法)

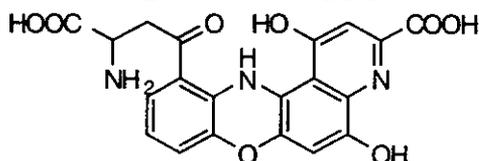
McNutt, W.S. et al., Biochemistry, 1962, 1, 1161, (代謝)

Dustmann, J.H. et al., Hoppe Seyler's Z. Physiol. Chem., 1971, 352, 1599, (分離)

§ Dihydroxanthommatin; (S)-form

[化合物分類] アルカロイド化合物 (Phenoxazines)

[構造式]



[基原] *Loligo*

の軟体動物, またハエ *Musca domestica* や蜜蜂 *Apis mellifera*, and in lepidopteran wings and excreta

vulgaris の眼と皮膚, *Sepia officinalis*, その他

[性状] 赤色の結晶

[その他のデータ] 融点: Mp >350 °C

-----文献-----

Butenandt, A. et al., Annalen, 1957, 607, 207-214, (Ommatin D)

Butenandt, A. et al., Hoppe Seyler's Z. Physiol. Chem., 1960, 321, 258-275, (Ommatin D, Rhodommatin)

Bolognese, A. et al., J. Het. Chem., 1988, 25, 1247-1250

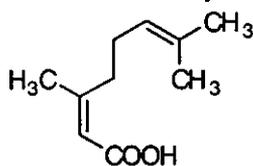
§ 3,7-Dimethyl-2,6-octadienoic acid; (E)-form

[化学名・別名] Geranic acid a

[CAS No.] 4698-08-2

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

[構造式]



[基原]

Daphne の花, *Rodgersia podophylla*. 蜂蜜 *Apis mellifera* Nasonov

pheromone lure

[性状] オイル

[沸点] Bp_{0.02} 85-87 °C

-----文献-----

Aldrich Library of FT-IR Spectra, 1st edn., 1985, 1, 844C, (IR)

Aldrich Library of 13C and 1H FT NMR Spectra, 1992, 1, 1360A, (NMR)

Burrell, J.W.K. et al., J.C.S. (C), 1966, 2144, (合成法, H-NMR)

Albright, J.A. et al., Org. Prep. Proced. Int., 1972, 4, 215, (合成法, 誘導体)

Kabayashi, S. et al., Chem. Lett., 1974, 705, (合成法)

Campbell, R.V.M. et al., J.C.S. Perkin 1, 1975, 897, (合成法)

Fujita, Y., Chem. Lett., 1978, 533, (nitrile)

Opdyke, D.L.J., Food Cosmet. Toxicol., 1979, 17, 785, (レビュー, 毒性)

Free, J.B. et al., Bee World, 1984, 65, 175

Kadas, I. et al., Org. Prep. Proced. Int., 1998, 30, 79, (合成法)

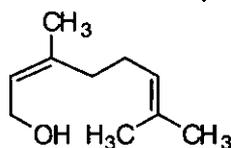
§ 3,7-Dimethyl-2,6-octadien-1-ol; (E)-form

[化学名・別名] Geraniol. Geranyl alcohol. Lemonol. β -Geraniol

[CAS No.] 106-24-1

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

[構造式]



[基原] フリ

一の状態, またゲラニウムオイルを含む多くの精油のエステルとして存在. 蜂蜜 *Apis mellifera* Nasonov pheromone lure. Most prolific natural source is palmarosa oil (70-85%). Most coml. geraniol is prod. synthetically from 3,7-Dimethyl-1,6-octadien-3-ol or β -Pinene

[用途] 広範囲にわたって香水に使われる. 香料

[性状] スイートローズ様の臭気を有するオイル

[沸点] Bp 230 °C

[屈折率] n_D^{20} 1.4777

[UV]: [neutral] λ_{max} 195 (ϵ 19000) (MeOH)

[傷害・毒性] 皮膚を刺激する. 50%致死量(LD₅₀) (ラット, 経口) 3600 mg/kg

[化学物質毒性データ総覧(RTECS)登録番号] RG5830000

-----文献-----

Aldrich Library of FT-IR Spectra, 1st edn., 1985, 1, 148D, (IR)

Aldrich Library of 13C and 1H FT NMR Spectra, 1992, 1, 224C; 225A; 968A; 968B, (NMR)

Aldrich Library of FT-IR Spectra: Vapor Phase, 1989, 3, 219A; 219B; 668D, (IR)

Bates, R.B. et al., J.O.C., 1963, 28, 1086, (構造決定)

Burrell, J.W.K. et al., J.C.S. (C), 1966, 2144, (合成法)

Francis, M.J.O. et al., *Phytochemistry*, 1969, 8, 1339, (分離, 配糖体)
 Kogami, K. et al., *Kogyo Kagaku Zasshi*, 1971, 74, 2304, (合成法, H-NMR, Mass, 誘導體)
 Karrer, W. et al., *Konstitution und Vorkommen der Organischen Pflanzenstoffe*, 2nd edn., Birkhäuser Verlag, Basel, 1972, nos. 118; 119, (生育)
 Bohlmann, F. et al., *Chem. Ber.*, 1973, 106, 2904, (分離)
 Morris, W.W., *J. Assoc. Off. Anal. Chem.*, 1973, 56, 1037, (IR)
 Casey, C.P. et al., *Synth. Commun.*, 1973, 3, 321, (合成法)
 Opdyke, D.L.J., *Food Cosmet. Toxicol.*, 1974, 12, 881, (レビュー, 毒性, Geraniol)
 Tengo, J. et al., *J. Chem. Ecol.*, 1975, 1, 253
 Pitzele, B.S. et al., *J.O.C.*, 1975, 40, 269, (合成法)
 Opdyke, D.L.J., *Food Cosmet. Toxicol., Suppl.*, 1976, 14, 783; 785, (レビュー, esters)
 Banthorpe, D.V. et al., *Phytochemistry*, 1976, 15, 91; 1983, 22, 2459, (生合成)
 Derguini-Boumechal, F. et al., *Tet. Lett.*, 1977, 1181, (合成法)
 Pickett, J.A. et al., *J. Chem. Ecol.*, 1980, 6, 425
 Bohlmann, F. et al., *Phytochemistry*, 1980, 19, 149, (分離)
 Mathew, K.K. et al., *Indian J. Chem., Sect. B*, 1981, 20, 340, (合成法)
 Williams, P.J. et al., *Phytochemistry*, 1982, 21, 2013, (6-arabinosylglucosides, rutosides)
 Free, J.B. et al., *Bee World*, 1984, 65, 175
 Bredekamp, M.W. et al., *Phytochemistry*, 1988, 28, 263, (Acuminoside)
 Ackermann, I.E. et al., *Annalen*, 1989, 79, (合成法, 配糖体)
 Lewis, R.J., *Food Additives Handbook*, Van Nostrand Reinhold International, New York, 1989, DTD000; DTD200; DTD800
 Voirin, S.G. et al., *Carbohydr. Res.*, 1990, 207, 39, (synth glycosides, H-NMR, C13-NMR)
 Voirin, S.G. et al., *J. Agric. Food Chem.*, 1990, 38, 1373, (Acuminoside)
 Howell, A.R. et al., *J.C.S. Perkin 1*, 1990, 2715, (合成法)
 Ahmad, A.A., *Pharmazie*, 1991, 46, 362, (6,7-Epoxygeranyl acetate)
 Martindale, *The Extra Pharmacopoeia*, 30th edn., Pharmaceutical Press, 1993, 1355; 1372
 Guo, W. et al., *Phytochemistry*, 1993, 33, 1373, (xylopyranosylglucopyranoside)
 Yoshikawa, K. et al., *Phytochemistry*, 1993, 34, 1431, (Kenposide A)
 Fukuda, T. et al., *Chem. Pharm. Bull.*, 1996, 44, 2173, (Kudingoside A)
 Tian, J. et al., *Chin. Chem. Lett.*, 1996, 7, 341; 1997, 8, 125, (Ligurobustosides)
 Yoshikawa, M. et al., *Chem. Pharm. Bull.*, 1997, 45, 1498, (Sacranoside B)
 Oka, N. et al., *Nat. Prod. Lett.*, 1997, 10, 187, (Rosa damascena glycosides)
 Eisenreich, W. et al., *Tet. Lett.*, 1997, 38, 3889, (生合成)
 Sy, L.-K. et al., *J. Nat. Prod.*, 1998, 61, 907, (Geranyl benzoate)
 Tian, J. et al., *Phytochemistry*, 1998, 48, 1013, (Ligurobustosides)
 Lewis, R.J., *Sax's Dangerous Properties of Industrial Materials*, 8th edn., Van Nostrand Reinhold, 1992, DTD000; GCY000; DTD200; DTD800

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.

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 : ヒト-男性

投与量・期間 : 16 mg/24 時間

反応の症度 : 重度

参照文献

CTOIDG Cosmetics and Toiletries. (Allured Pub. Corp., POB 318, Wheaton, IL 60189) V.91-1976- [Vol.,頁,年(19-)]94(8),41,1979

<<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 : 100 mg/24 時間

反応の症度 : 重度

参照文献

CTOIDG Cosmetics and Toiletries. (Allured Pub. Corp., POB 318, Wheaton, IL 60189) V.91-1976- [Vol.,頁,年(19-)]94(8),41,1979

<<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-モルモット.

投与量・期間 : 100 mg/24 時間

反応の症度 : 重度

参照文献

CTOIDG Cosmetics and Toiletries. (Allured Pub. Corp., POB 318, Wheaton, IL 60189) V.91-1976- [Vol.,頁,年(19-)]94(8),41,1979

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 : 3600 mg/kg

毒性影響 : [行動] 傾眠(全身活動度の低下).

[行動] 昏睡.

[皮膚と付属器官] 毛髪.

参照文献

FCTXAV Food and Cosmetics Toxicology. (London, UK) V.1-19, 1963-81. For publisher information, see FCTOD7. [Vol.,頁,年(19-)]2,327,1964

<<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 : 1090 mg/kg

毒性影響 : [末梢神経と感覚] 感覚変化を伴うまたは伴わない痙性麻痺.

参照文献

SIZSAR Sapporo Igaku Zasshi. Sapporo Medical Journal. (Sapporo Igaku Daigaku, Nishi-17-chome, Minami-1-jo, Chuo-ku, Sapporo 060, Japan) V.3- 1952- [Vol.,頁,年(19-)]3,73,1952

<<試験方法>> LD50 試験(50%致死量試験).

曝露経路 : 筋肉内投与.

被験動物 : げっ歯類-マウス

投与量・期間 : 4 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.

参照文献

JSICAZ Journal of Scientific and Industrial Research, Section C: Biological Sciences. (New Delhi, India) V.14-21, 1955-62. For publisher information, see IJEB6. [Vol.,頁,年(19-)]21,342,1962

<<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 : >5 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.

参照文献

FCTXAV Food and Cosmetics Toxicology. (London, UK) V.1-19, 1963-81. For publisher information, see FCTOD7. [Vol.,頁,年(19-)]12,881,1974

<<試験方法>> 認知されている最小致死量(LDLo)試験.

曝露経路 : 静脈注射

被験動物 : げっ歯類-ウサギ.

投与量・期間 : 50 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

NYKZAU Nippon Yakurigaku Zasshi. Japanese Journal of Pharmacology. (Nippon Yakuri Gakkai, c/o Kyoto Daigaku Igakubu Yakurigaku Kyoshitsu, Konoe-cho, Yoshida, Sakyo-ku, Kyoto 606, Japan) V.40-1944- [Vol.,頁,年(19-)]58,394,1962

米国NIOSH基準の発展とサーベランス

米国NIOSH職業暴露調査データ

全米労働有害性調査(NOHS)米国全国職業ハザード調査.(1974)

NOHS Hazard Code - 83197

No. of Facilities: 169 (評価)

No. of Industries: 6

No. of Occupations: 40

No. of Employees: 10861 (評価)

全米職業暴露調査(NOES)-米国全国職業ばく露調査(1983)

全米職業暴露調査(NOES) Hazard Code - 83197

No. of Facilities: 11902 (評価)

No. of Industries: 82

No. of Occupations: 88

No. of Employees: 192214 (評価)

No. of Female Employees: 104351 (評価)

米国に於ける状況

EPA TSCA Section 8(b) CHEMICAL INVENTORY

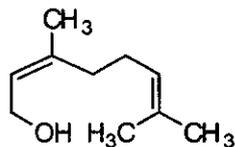
§ 3,7-Dimethyl-2,6-octadien-1-ol; (Z)-form

[化学名・別名] Nerol. Neryl alcohol. β -Nerol

[CAS No.] 106-25-2

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

[構造式]



[基原] neroli

とベルガモットオイルを含む多くの精油. Nasonov pheromone of the 蜂蜜 *Apis mellifera*. In essential oils it is a minor component always accompanied by geraniol

[用途] Adds a fresh 'blossom' note to perfumes

[性状] オイル

[沸点] Bp 225-226 °C

[屈折率] n_D^{20} 1.4744

[傷害・毒性] 皮膚を刺激する. 50%致死量(LD₅₀) (ラット, 経口) 4500 mg/kg

[化学物質毒性データ総覧(RTECS)登録番号] RG5840000

-----文献-----

Aldrich Library of FT-IR Spectra, 1st edn., 1985, 1, 148D, (IR)

Aldrich Library of 13C and 1H FT NMR Spectra, 1992, 1, 224C; 225A; 968A; 968B, (NMR)

Aldrich Library of FT-IR Spectra: Vapor Phase, 1989, 3, 219A; 219B; 668D, (IR)

Bates, R.B. et al., J.O.C., 1963, 28, 1086, (構造決定)

Burrell, J.W.K. et al., J.C.S. (C), 1966, 2144, (合成法)

Francis, M.J.O. et al., Phytochemistry, 1969, 8, 1339, (分離, 配糖体)

Kogami, K. et al., Kogyo Kagaku Zasshi, 1971, 74, 2304, (合成法, H-NMR, Mass, 誘導体)

Karrer, W. et al., Konstitution und Vorkommen der Organischen Pflanzenstoffe, 2nd edn., Birkhäuser Verlag, Basel, 1972, nos. 118; 119, (生育)

Bohlmann, F. et al., Chem. Ber., 1973, 106, 2904, (分離)

Morris, W.W., J. Assoc. Off. Anal. Chem., 1973, 56, 1037, (IR)

Casey, C.P. et al., Synth. Commun., 1973, 3, 321, (合成法)

Opdyke, D.L.J., Food Cosmet. Toxicol., 1974, 12, 881, (レビュー, 毒性, Geraniol)

Tengo, J. et al., J. Chem. Ecol., 1975, 1, 253

Pitzele, B.S. et al., J.O.C., 1975, 40, 269, (合成法)

Opdyke, D.L.J., Food Cosmet. Toxicol., Suppl., 1976, 14, 783; 785, (レビュー, esters)

Banthorpe, D.V. et al., Phytochemistry, 1976, 15, 91; 1983, 22, 2459, (生合成)

Derguini-Boumechal, F. et al., Tet. Lett., 1977, 1181, (合成法)

Pickett, J.A. et al., J. Chem. Ecol., 1980, 6, 425

Bohlmann, F. et al., Phytochemistry, 1980, 19, 149, (分離)