

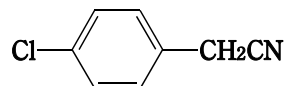
p-Chlorobenzylcyanide

[p-クロロベンジルシアニド]

Chemical Name; p-Chlorobenzylcyanide  
 Synonym ; (p-Chlorophenyl) acetonitrile  
4-Chlorobenzylcyanide  
4-Chlorobenzeneacetonitrile  
(p-クロロフェニル)アセトニトリル  
4-クロロベンジルシアニド  
4-クロロベンゼンアセトニトリル

Molecular Weight ; 151.60  
 Melting Point ; 31 - 32 °C [CHCD]  
 30.5 °C [Aldrich]  
 Boiling Point ; 264 - 267 °C [CHCD]  
 265 - 267 °C [Aldrich]  
 Flashing Point ; > 110 °C [Aldrich]  
 Molecular Formula; C<sub>8</sub>H<sub>6</sub>ClN

**Chemical Structure**



CAS No. ; 140-53-4  
 MITI No. ; (3)-1784  
 ML No. ; -  
 Specified Chemical Substances; -

Source of Substance; Tokyo Kasei Kogyo Co., Ltd.  
 Lot No. ; FCQ01  
 Purity ; 98 %

Vehicle ; DMSO

Mutagenicity in Bacterial Test ; **Negative**

IARC Evaluation ; not yet cited

Conc. µg/plate	Number of Revertants/plate									
	Base-substitution						Frame-shift			
	TA100		TA1535		WP2uvrA		TA98		TA1537	
	S9-	S9+	S9-	S9+	S9-	S9+	S9-	S9+	S9-	S9+
DMSO	(139)	(144)	( 11)	( 14)	( 25)	( 30)	( 20)	( 27)	( 8)	( 11)
	149	144	11	16	22	24	25	23	8	8
0.0763	(154)	(150)	( 11)	( 15)	( 25)	( 28)	( 21)	( 26)	( 7)	( 10)
	128	144	16	9	26	30	20	20	9	8
	127	153	9	14	28	34	8	29	3	7
0.305	(128)	(149)	( 13)	( 12)	( 27)	( 32)	( 14)	( 25)	( 6)	( 8)
	143	150	9	11	25	26	17	25	5	7
	137	135	14	10	25	23	14	23	3	11
1.22	(140)	(143)	( 12)	( 11)	( 25)	( 25)	( 16)	( 24)	( 4)	( 9)
	141	128	6	13	24	23	17	24	3	9
	159	142	9	21	22	22	20	26	8	11
4.88	(150)	(135)	( 8)	( 17)	( 23)	( 23)	( 19)	( 25)	( 6)	( 10)
	155	134	11	14	31	28	14	24	6	10
	173	146	9	16	21	23	15	26	7	10
19.5	(164)	(140)	( 10)	( 15)	( 26)	( 26)	( 15)	( 25)	( 7)	( 10)
	151	149	14	18	18	33	18	21	5	6
	151	158	8	7	29	40	9	28	7	9
78.1	(151)	(154)	( 11)	( 13)	( 24)	( 37)	( 14)	( 25)	( 6)	( 8)
	142	153	9	8	28	23*	16	26	5	8
	141	145	7	8	24	0*	18	24	6	11
313	(142)	(149)	( 8)	( 8)	( 26)	( 12*)	( 17)	( 25)	( 6)	( 10)
	0*	0*	0*	0*	0*	0*	0*	0*	0*	0*
	0*	0*	0*	0*	0*	0*	0*	0*	0*	0*
1250	( 0*)	( 0*)	( 0*)	( 0*)	( 0*)	( 0*)	( 0*)	( 0*)	( 0*)	( 0*)
	0*	0*	0*	0*	0*	0*	0*	0*	0*	0*
	0*	0*	0*	0*	0*	0*	0*	0*	0*	0*
5000	( 0*)	( 0*)	( 0*)	( 0*)	( 0*)	( 0*)	( 0*)	( 0*)	( 0*)	( 0*)

**Judgement** - - - - -

**Specific Mutagenicity**

Positive Control	AF-2 (713)	2-AA (936)	NaN <sub>3</sub> (371)	2-AA (262)	AF-2 (145)	2-AA (1162)	AF-2 (586)	2-AA (291)	9-AA (467)	2-AA (128)
------------------	------------	------------	------------------------	------------	------------	-------------	------------	------------	------------	------------

Conc. µg/plate	Number of Revertants/plate									
	Base-substitution						Frame-shift			
	TA100		TA1535		WP2uvrA		TA98		TA1537	
	S9-	S9+	S9-	S9+	S9-	S9+	S9-	S9+	S9-	S9+
	(128)	(117)	( 10)	( 12)	( 34)	( 37)	( 20)	( 28)	( 8)	( 8)
DMSO										
						39				
						36				
9.77						( 38)				
	143	124	7	9	33	34	20	21	8	13
	123	137	14	13	36	43	17	31	5	16
19.5	(133)	(131)	( 11)	( 11)	( 35)	( 39)	( 19)	( 26)	( 7)	( 15)
	130	138	8	9	29	39	22	33	5	9
	148	155	9	8	31	38	17	24	8	6
39.1	(139)	(147)	( 9)	( 9)	( 30)	( 39)	( 20)	( 29)	( 7)	( 8)
	153	158	11	21	29	30	15	30	10	9
	146	141	10	15	18	30	22	18	3	14
78.1	(150)	(150)	( 11)	( 18)	( 24)	( 30)	( 19)	( 24)	( 7)	( 12)
	124	148	8	23	30	46	24	23	5	18
	124	128	7	14	29	41	18	28	8	11
156	(124)	(138)	( 8)	( 19)	( 30)	( 44)	( 21)	( 26)	( 7)	( 15)
	128	148	7	15	23	34*	17	24	3	10
	133	138	11	15	23	37*	28	29	7	13
313	(131)	(143)	( 9)	( 15)	( 23)	( 36*)	( 23)	( 27)	( 5)	( 12)
	0*	0*	0*	0*	0*	45*	0*	17*	0*	0*
	0*	0*	0*	0*	0*	36*	0*	24*	0*	0*
625	( 0*)	( 0*)	( 0*)	( 0*)	( 0*)	( 41*)	( 0*)	( 21*)	( 0*)	( 0*)
	0*	0*	0*	0*	0*		0*	0*	0*	0*
	0*	0*	0*	0*	0*		0*	0*	0*	0*
1250	( 0*)	( 0*)	( 0*)	( 0*)	( 0*)		( 0*)	( 0*)	( 0*)	( 0*)
<b>Judgement</b>	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
<b>Specific Mutagenicity</b>										
Positive Control	AF-2 (755)	2-AA (1057)	NaN <sub>3</sub> (392)	2-AA (293)	AF-2 (171)	2-AA (1346)	AF-2 (509)	2-AA (324)	9-AA (506)	2-AA (176)

Experimental Data - 3

Conc. µg/plate	Number of Revertants/plate					
	Base-substitution					
	TA102		TA104		WP2uvrA/pKM101	
	S9-	S9+	S9-	S9+	S9-	S9+
DMSO	(291)	(339)	(278)	(355)	( 50)	( 80)
	266	390	233	317	51	75
	287	380	256	312	46	85
0.0763	(277)	(385)	(245)	(315)	( 49)	( 80)
	288	385	266	371	55	91
	259	373	269	349	48	70
0.305	(274)	(379)	(268)	(360)	( 52)	( 81)
	329	401	293	378	45	96
	298	380	274	284	56	76
1.22	(314)	(391)	(284)	(331)	( 51)	( 86)
	319	356	284	342	49	83
	298	328	260	347	61	78
4.88	(309)	(342)	(272)	(345)	( 55)	( 81)
	331	411	319	359	59	75
	266	319	259	340	54	79
19.5	(299)	(365)	(289)	(350)	( 57)	( 77)
	310	372	268	329	44	78
	334	304	297	328	39	71
78.1	(322)	(338)	(283)	(329)	( 42)	( 75)
	311	350	265	318	54	83
	279	336	276	295	63	86
313	(295)	(343)	(271)	(307)	( 59)	( 85)
	0*	0*	0*	0*	0*	0*
	0*	0*	0*	0*	0*	0*
1250	( 0*)	( 0*)	( 0*)	( 0*)	( 0*)	( 0*)
	0*	0*	0*	0*	0*	0*
	0*	0*	0*	0*	0*	0*
5000	( 0*)	( 0*)	( 0*)	( 0*)	( 0*)	( 0*)
<b>Judgement</b>	—	—	—	—	—	—
<b>Specific Mutagenicity</b>						
Positive Control	BLM (884)	2-AA (1258)	PA (1792)	2-AA (1180)	AF-2 (773)	2-AA (1071)

Experimental Data - 4

(B9309-3/3)

Conc. µg/plate	Number of Revertants/plate					
	Base-substitution					
	TA102		TA104		WP2uvrA/pKM101	
	S9-	S9+	S9-	S9+	S9-	S9+
DMSO	(276)	(326)	(301)	(374)	( 60)	( 85)
	278	324	276	371	52	81
	267	352	300	335	46	74
19.5	(273)	(338)	(288)	(353)	( 49)	( 78)
	306	352	312	365	68	84
	281	326	314	332	53	68
39.1	(294)	(339)	(313)	(349)	( 61)	( 76)
	280	342	298	320	67	87
	259	318	314	362	64	82
78.1	(270)	(330)	(306)	(341)	( 66)	( 85)
	284	355	280	338	68	106
	290	344	317	337	53	84
156	(287)	(350)	(299)	(338)	( 61)	( 95)
	287	350	310	347	59	79
	284	350	312	280	56	81
313	(286)	(350)	(311)	(314)	( 58)	( 80)
	151*	255	0*	235*	0*	83*
	102*	248	0*	240*	0*	75*
625	(127*)	(252)	( 0*)	(238*)	( 0*)	( 79*)
	0*	0*	0*	0*	0*	0*
	0*	0*	0*	0*	0*	0*
1250	( 0*)	( 0*)	( 0*)	( 0*)	( 0*)	( 0*)
<b>Judgement</b>	—	—	—	—	—	—
<b>Specific Mutagenicity</b>						
Positive Control	BLM (897)	2-AA (1301)	PA (2078)	2-AA (1121)	AF-2 (1405)	2-AA (880)