

[1,11-ウンデカンジカルボン酸エステル]

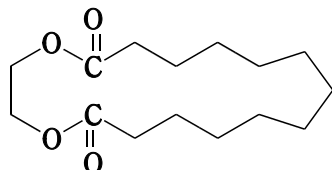
Chemical Name; Ethylene 1,11-undecane-  
dicarboxylate  
Synonym ; Ethylene brassylate  
1,4-Dioxacycloheptadecane-5,17-  
dione  
1,4-ジオキサシクロヘプタデカン-5,17-ジオン

Molecular Weight ; 270.37

Melting Point ; - 5 ℃

Boiling Point ; 160 - 170 ℃(2-3mmHg) [CHCD]

Flashing Point ; - ℃

Molecular Formula; C<sub>15</sub>H<sub>26</sub>O<sub>4</sub>**Chemical Structure**

CAS No. ; 105-95-3

MITI No. ; (5)-3880

ML No. ; -

Specified Chemical Substances; -

Source of Substance; Wako Junyaku Kogyo Co., Ltd.

Lot No. ; EPK5330

Purity ; 94.0 %

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	(156)	(149)	( 20)	( 11)	( 34)	( 38)	( 18)	( 22)	( 6)	( 9)
	160	158	19	15	31	39	17	33	7	17
	126	155	23	16	45	40	-	15	2	7
0.0763	(143)	(157)	( 21)	( 16)	( 38)	( 40)	( 17)	( 24)	( 5)	( 12)
	114	159	27	13	45	43	24	26	7	10
	155	155	18	16	29	44	21	36	9	7
0.305	(135)	(157)	( 23)	( 15)	( 37)	( 44)	( 23)	( 31)	( 8)	( 9)
	181	150	26	13	44	53	21	22	8	8
	144	138	28	13	41	44	21	38	7	9
1.22	(163)	(144)	( 27)	( 13)	( 43)	( 49)	( 21)	( 30)	( 8)	( 9)
	145	134	20	17	37	48	22	30	5	15
	157	145	25	17	32	44	20	24	6	7
4.88	(151)	(140)	( 23)	( 17)	( 35)	( 46)	( 21)	( 27)	( 6)	( 11)
	130	134	18	14	26	23	25	34	9	10
	113	133	24	14	37	43	15	21	10	5
19.5	(122)	(134)	( 21)	( 14)	( 32)	( 33)	( 20)	( 28)	( 10)	( 8)
	113*	145	17*	15	21	38	10	26	0*	8
	104*	124	13*	16	23	40	17	24	0*	7
78.1	(109*)	(135)	( 15*)	( 16)	( 22)	( 39)	( 14)	( 25)	( 0*)	( 8)
	81*	138	18*	14	31	34	14	17	0*	13
	84*	141	10*	7	28	46	9	23	0*	11
313	( 83*)	(140)	( 14*)	( 11)	( 30)	( 40)	( 12)	( 20)	( 0*)	( 12)
	63*	122*	0*	9*	24*	34	5*	24	0*	6
	51*	98*	2*	15*	25*	41	6*	30	0*	13
1250	( 57*)	(110*)	( 1*)	( 12*)	( 25*)	( 38)	( 6*)	( 27)	( 0*)	( 10)
	0*	133*	0*	7*	25*	38	2*	25	0*	15
	0*	97*	0*	7*	14*	52	5*	23	0*	11
5000	( 0*)	(115*)	( 0*)	( 7*)	( 20*)	( 45)	( 4*)	( 24)	( 0*)	( 13)
<b>Judgement</b>	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
<b>Specific Mutagenicity</b>										
Positive Control	AF-2 (896)	2-AA (1534)	NaN <sub>3</sub> (437)	2-AA (337)	AF-2 (338)	2-AA (1218)	AF-2 (414)	2-AA (350)	9-AA (711)	2-AA (220)

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+
DMS0	(118)	(147)	( 16)	( 10)	( 19)	( 26)	( 14)	( 20)	( 13)	( 14)
	123		16						10	
0.610	(123)		( 20)						( 11)	
	149		32						11	
1.22	(135)		( 25)						( 8)	
	126		23						7	
2.44	(123)		( 24)						( 8)	
	120		18						5	
4.88	(145)		( 17)						( 16)	
	134		14						16	
	156		20						15	
9.77	(122)		( 15)	( 7)					( 9)	
	116	122	16	6					9	
	127	129	13	8					8	
19.5	(109)	(147)	( 21)	( 15)					( 8)	( 12)
	104	143	20	20					5	14
	113	151	21	9					10	9
39.1	( 99*)	(147)	( 14*)	( 11)	( 24)	( 32)	( 17)	( 22)	( 0*)	( 12)
	97*	146	14*	8	18	34	18	23	0*	7
	100*	148	13*	14	30	30	15	21	0*	17
78.1	( 62*)	(137)	( 10*)	( 13)	( 22)	( 32)	( 9)	( 20)	( 0*)	( 9)
	57*	131	7*	17	25	40	9	18	0*	9
	67*	142	13*	9	18	24	9	21	0*	9
156	( 79*)	(131)	( 13*)	( 13)	( 25)	( 29)	( 12)	( 20)	( 0*)	( 13)
	81*	123	15*	10	23	32	13	26	0*	8
	76*	138	10*	15	26	26	10	13	0*	18
313		(157)		( 13)	( 23)	( 31)	( 7)	( 24)		( 22)
		157		15	24	34	3	18		22
		156		11	22	28	10	29		21
625		(139)		( 7)	( 22)	( 25)	( 5*)	( 20)		( 20)
		134		8	26	24	5*	18		21
		144		6	18	26	5*	21		18
1250		(105*)		( 13*)	( 17)	( 29)	( 3*)	( 18)		( 10)
		104*		16*	17	28	2*	21		10
		105*		10*	16	29	3*	14		10
2500		( 85*)		( 9*)	( 17)	( 18)	( 1*)	( 21)		( 11)
		83*		8*	15	22	1*	21		14
		87*		9*	18	13	1*	20		7
5000					8	21	3*	15*		9
					14	30	0*	30*		7
					( 11)	( 26)	( 2*)	( 23*)		( 8)
Judgement	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Specific Mutagenicity										
Positive Control	AF-2 (971)	2-AA (1605)	NaN <sub>3</sub> (328)	2-AA (345)	AF-2 (296)	2-AA (1147)	AF-2 (405)	2-AA (330)	9-AA (789)	2-AA (247)

Experimental Data - 3

Conc. µg/plate	Number of Revertants/plate					
	Base-substitution					
	TA102		TA104		WP2uvrA/pKM101	
	S9-	S9+	S9-	S9+	S9-	S9+
DMSO	(326)	(409)	(331)	(450)	( 44)	( 80)
	316	413	320	462	53	84
	288	408	298	427	47	99
0.0763	(302)	(411)	(309)	(445)	( 50)	( 92)
	328	413	316	456	51	91
	324	434	349	444	55	83
0.305	(326)	(424)	(333)	(450)	( 53)	( 87)
	311	400	330	380	34	70
	330	368	306	365	54	83
1.22	(321)	(384)	(318)	(373)	( 44)	( 77)
	238	414	326	428	52	87
	221	365	330	418	62	79
4.88	(230)	(390)	(328)	(423)	( 57)	( 83)
	266	417	391	390	51	84
	271	421	416	434	59	92
19.5	(269)	(419)	(404)	(412)	( 55)	( 88)
	190	421	273	421	39	98
	169	341	348	355	44	69
78.1	(180)	(381)	(311)	(388)	( 42)	( 84)
	101*	408	316	445	41	87
	51*	452	293	503	44	96
313	( 76*)	(430)	(305)	(474)	( 43)	( 92)
	0*	429	268*	440	25*	67
	0*	441	281*	410	9*	68
1250	( 0*)	(435)	(275*)	(425)	( 17*)	( 68)
	0*	373	225*	390	8*	77
	0*	306	246*	378	9*	82
5000	( 0*)	(340)	(236*)	(384)	( 9*)	( 80)
Judgement	—	—	—	—	—	—
Specific Mutagenicity						
Positive Control	BLM (1003)	2-AA (1840)	PA (2396)	2-AA (1464)	AF-2 (1224)	2-AA (1080)

Experimental Data - 4

(B9407-3/3)

Conc. µg/plate	Number of Revertants/plate					
	Base-substitution					
	TA102		TA104		WP2uvrA/pKM101	
	S9-	S9+	S9-	S9+	S9-	S9+
DMSO	(319)	(408)	(357)	(464)	( 73)	(120)
	323					
	309					
9.77	(316)					
	279					
	344					
19.5	(312)					
	263		340		62	
	225		324		70	
39.1	(244)		(332)		( 66)	
	197	421	362	432	70	114
	215	411	404	460	71	111
78.1	(206)	(416)	(383)	(446)	( 71)	(113)
	149	405	344	410	49	108
	122	426	311	432	69	100
156	(136)	(417)	(328)	(421)	( 59)	(104)
	10*	397	319	419	56	94
	13*	368	319	419	60	108
313	( 12*)	(383)	(319)	(419)	( 58)	(101)
	0*	400	295	408	49	102
	0*	374	295	416	44	96
625	( 0*)	(387)	(295)	(412)	( 47)	( 99)
		438	294*	422	29*	86
		400	294*	470	23*	104
1250		(419)	(294*)	(446)	( 26*)	( 95)
		332	276*	433	18*	109
		377	236*	425	10*	84
2500		(355)	(256*)	(429)	( 14*)	( 97)
		376	299*	394		106
		341	297*	389		94
5000		(359)	(298*)	(392)		(100)
Judgement	—	—	—	—	—	—
Specific Mutagenicity						
Positive Control	BLM (1000)	2-AA (2692)	PA (2568)	2-AA (2063)	AF-2 (1789)	2-AA (1265)