

Supporting Information

Rec. Nat. Prod. 7:2 (2013) 157-160

The first occurrence of a *Mallotus* 3,4-*seco*-taraxerane triterpenoid from *Mallotus barbatus*

Phan Minh Giang*¹, Vu Minh Trang¹, Phan Tong Son¹, Katsuyoshi
Matsunami², and Hideaki Otsuka²

¹*Faculty of Chemistry, VNU University of Science, Vietnam National
University, Hanoi, 19 Le Thanh Tong Street, Hanoi, Vietnam*

²*Graduate School of Biomedical Sciences, Hiroshima University, 1-2-3
Kasumi, Minami-ku, Hiroshima 734-8553, Japan*

Table of Contents

Page

S1: ¹H- (500 MHz) and ¹³C-NMR (125 MHz) Data of 3,4-*seco*
taraxer-14-en-3-oic acid (**1**)

1

Table 1. ^1H - (500 MHz) and ^{13}C -NMR (125 MHz) Data of **1** in CDCl_3 , δ in ppm, J in Hz.

Position	^1H	^{13}C
1	1.67 (<i>m</i>)	32.2 (<i>t</i>)
2	2.09 (<i>td</i> , $J = 9.5$ Hz, 7.5 Hz) 2.21 (<i>ddd</i> , $J = 9.5$ Hz, 9.0 Hz, 8.0 Hz)	28.0 (<i>t</i>)
3	-	179.1 (<i>s</i>)
4	1.89 (<i>m</i>)	25.1 (<i>d</i>)
5	1.03 (<i>m</i>)	47.8 (<i>d</i>)
6	1.47 (<i>m</i>)	18.5 (<i>t</i>)
7	1.26 (<i>m</i>) 2.01 (<i>ddd</i> , $J = 12.5$ Hz, 3.5 Hz, 3.0 Hz)	40.1 (<i>t</i>)
8	-	40.8 (<i>s</i>)
9	1.54 (<i>m</i>)	40.5 (<i>d</i>)
10	-	38.8 (<i>s</i>)
11	1.54 (<i>m</i>)	17.5 (<i>t</i>)
12	1.56 (<i>m</i>) 1.62 (<i>m</i>)	33.6 (<i>t</i>)
13	-	37.5 (<i>s</i>)
14	-	157.9 (<i>s</i>)
15	5.55 (<i>dd</i> , $J = 8.0$ Hz, 3.0 Hz)	117.0 (<i>d</i>)
16	1.65 (<i>m</i>) 1.92 (<i>dd</i> , $J = 14.5$ Hz, 3.0 Hz)	37.7 (<i>t</i>)
17	-	35.8 (<i>s</i>)
18	0.97 (<i>m</i>)	48.8 (<i>d</i>)
19	0.96 (<i>m</i>) 1.31 (<i>m</i>)	36.7 (<i>t</i>)
20	-	28.8 (<i>s</i>)
21	1.24 (<i>m</i>) 1.34 (<i>m</i>)	33.1 (<i>t</i>)
22	1.01 (<i>m</i>) 1.36 (<i>m</i>)	35.1 (<i>t</i>)
23	0.92 (<i>d</i> , $J = 7.0$ Hz)	24.9 (<i>q</i>)
24	0.83 (<i>d</i> , $J = 7.0$ Hz)	18.8 (<i>q</i>)
25	0.92 (<i>s</i>)	19.0 (<i>q</i>)
26	1.09 (<i>s</i>)	25.2 (<i>q</i>)
27	0.89 (<i>s</i>)	21.4 (<i>q</i>)
28	0.82 (<i>s</i>)	29.8 (<i>q</i>)
29	0.96 (<i>s</i>)	33.4 (<i>q</i>)
30	0.91 (<i>s</i>)	29.9 (<i>q</i>)