

成分分析画像（チャート）を比較参照することができる。

- ⑥ 植物データの検索：生薬名、基原植物、使用部位、写真などの情報を参照することができる。
- ⑦ 植物データの参照：植物名、ラテン名、科名、品種等、生薬名、写真、生育特性データ等を参照することができる。
- ⑧ 化合物データの検索：成分としての化合物データについて、化合物名による検索や構造式描画(部分構造可)による検索ができる。
- ⑨ 化合物データの参照：化合物名、分子量、構造式、公共データベースのエントリ ID などの情報を参照することができる。
- ⑩ MassBank データの参照：ローカルに構築した MassBank で、スペクトル検索や類似スペクトルの検出などを行うことができる。

文字入力による検索機能はあるが、基本的にマウス操作のみで植物－生薬－成分分析等の実験データ間の画面遷移が可能な構成とした。また、将来予定している一般公開後の外国人ユーザのアクセスを考慮し英語版の閲覧・検索にも対応した。

システム詳細

以下、システムの画面表示の詳細について述べる。なお、これらの表示は研究拠点内での機能評価に使用する版のものである。

- 1) ログイン画面（図 4）
ユーザ ID とパスワードによる認証を行う。
- 2) トップページ（メニュー）画面（図 5）
生薬検索、植物検索、化合物検索メニューから操作を選ぶ。日本語、英語表記の切り替

えを行う。パスワード変更画面を起動する。

- 3) 植物検索画面（図 6）
キーワードで植物を検索する。植物名の五十音順に表示する。
- 4) 植物検索結果一覧画面（図 7）
検索結果を一覧表示する。植物名、ラテン名、科名、和科名、一般名、一般英名、この植物を基原とする生薬名を表示する。
- 5) 植物詳細画面（図 8）
植物に関する情報（ラテン名、科名、一般英名）及び、生育特性、写真ライブラリー、文献情報、形態的特徴、生態的特徴等へのリンクを表示する。
- 6) 形態的特徴（図 9）
植物の形態的特徴。
- 7) 生態的特徴（図 10）
植物の生態的特徴。
- 8) 生育特性（図 11）
植物の生育特性。
- 9) 写真ライブラリー（図 12）
植物の種子、成長、収穫、生薬調製にいたる写真のライブラリー。
- 10) 文献情報（図 13）
植物、生薬に関連する主な文献。
- 11) 生薬検索画面（図 14）
キーワードで生薬を検索する。生薬名の五十音順に表示する。

12) 生薬検索結果一覧画面 (図 15)

検索結果を一覧表示する。生薬名、英名、ラテン名、局法収載、基原植物を表示する。

13) 生薬詳細画面 (図 16)

生薬に関する情報 (生薬名、和名、ラテン名、基原植物、使用部位、生薬局方収載、性状、用途、文献情報等) を表示する。モデル試料や日本薬局方情報へのリンクを表示する。

14) 定量法情報画面 (図 17)

日本薬局方一定量法に関する情報(分析条件、画像データ)を表示する。

15) 確認試験法情報画面 (図 18)

日本薬局方一確認試験法に関する情報(分析条件、画像データ) を表示する。

16) モデル試料一覧画面 (図 19)

選択された生薬のモデル試料を一覧表示する。モデル試料ごとの産地や基原情報を参照することができる。

17) モデル試料詳細画面 (図 20)

モデル試料に関する情報 (基原植物、鑑別情報、形態、産地等) を表示する。また、化合物情報、NMR, LC-MS, HPLC, TLC データがある場合は、それらの情報へのリンクを表示する。

18) 成分パターン一覧画面 (図 21)

同一生薬について、産地・基原が異なるモデル試料の HPLC, TLC プロファイル画像を一覧表示する。サムネイル画像をクリックすると、オリジナルサイズの画像を表示する。

19) HPLC 情報画面 (図 22)

HPLC データ (画像、分析条件、定量情報等) を表示する。ピークの化合物情報を表示。

20) TLC 情報画面 (図 23)

TLC データ(画像、分析条件等)を表示する。

21) LC-MS 情報画面 (図 24)

LC-MS 測定条件やマススペクトル情報へのリンクを表示する。

22) マススペクトル情報詳細画面 (図 25)

LC 保持時間、化合物情報等を表示する。また JCAMP 形式ファイルのダウンロードリンクを表示する。

23) NMR 情報詳細画面 (図 26)

NMR の測定条件や帰属情報等を表示する。

24) 化合物検索画面 (図 27)

化合物名や植物名、生薬名で検索を行う。部分構造を描画して検索を行う。

25) 化合物検索結果一覧画面 (図 28)

検索結果を一覧表示する。

26) 化合物情報詳細画面 (図 29)

化合物に関する情報 (構造、IUPAC 名、分子式、分子量、文献情報等) を表示する。さらに NMR や LC-MS で測定されている場合は、測定情報へのリンクを表示。

今年度収集したデータについて

今年度は、オウゴン、カンゾウ、ショウキョウ、ソウジュツ、ニンジンの 5 品目についてデータ収集を行った。特にオウゴンについて

ではモデル試料の LC-MS, HPLC, TLC データの収集を行い、産地が異なるモデル試料間のデータ比較が可能となった。

資源管理システムの構築

資源管理システムについては、Accessベースのシステム構築がほぼ完了し、現行の資源導入管理（種子交換業務）システム及びモデル試料管理システムからのデータの移行を開始した（図30、31）。バーコードによる資源管理に向けた設備の整備についてもあわせて進めている。

データの完全移行後に、総合データベースシステムとの関連データの共有を行い、相互参照可能なシステムとして運用を計画している。

D. 考察

構築中の総合データベースは、テキスト、画像データだけではなく、LC-MS データ、NMR データ等多様なデータ形式に対応する必要があったが、最も多様な形式を有するデータの収載が想定された成分分析情報についてデータベースの構築を今年度に完了しており、主要な問題点は克服されたと考えている。

遺伝子鑑別情報、組織培養情報、栽培法に関する情報、生物活性情報などに対するデータベース構築及びデータの登録は次年度以降であるが、必要なデータ項目の抽出は各分野においてほぼ完了しており、今後とくに技術的な問題は生じないものと考えられる。

また、本データベースは開発言語として汎用性の高い MySQL を採用しているため、他のデータベースからの接続（検索及び検索結果の利用）に柔軟な対応が可能であり、独立

行政法人 医薬基盤研究所で進めている統合データベース開発においても、横断検索からダイレクトな検索結果の表示が可能になると考えられる。

E. 結論

現行の薬用植物データベースの構造及びデータを基本骨格とし、新たに大項目として、1) 成分分析データ情報、2) 官能データ情報、3) 内部形態及びさく葉標本情報、4) 資源管理情報、5) 遺伝子の鑑別部位及び基原鑑別に関する情報、6) 植物組織培養物及び効率的増殖法に関する情報、7) 植物体栽培及び植物の効率的生産法に関する情報、8) 生物活性及び副作用情報、9) 漢方処方関連情報を付加した、薬用植物総合データベースのシステム構築を開始した。本年度はとくに、成分分析データ情報及び日本薬局方情報について重点的なシステム構築及び重点品目を対象としたデータ入力を行い、総合データベースシステムの基本構造が完成した。また、資源管理情報に特化した資源管理システムについても構築を行い、資源管理及び、モデル試料管理の体制が整った。

F. 研究発表

1. 論文発表

なし

2. 学会発表

なし

G. 知的財産権の出願・登録状況

なし

(図表)

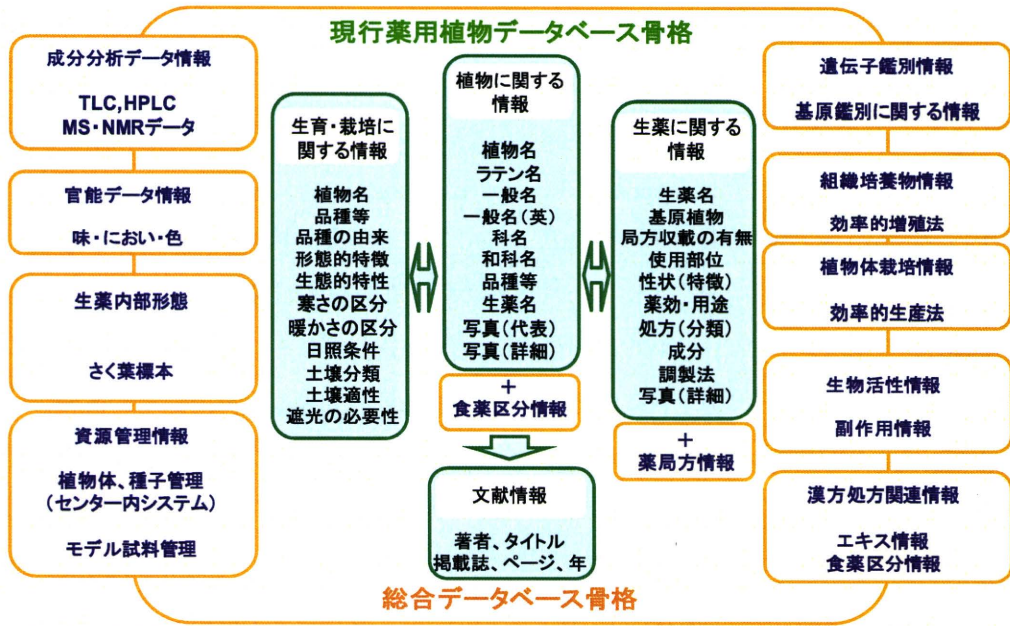


図 1. 薬用植物総合データベース概念図

年度	H22年度	H23年度	H24年度	H25年度以降
医薬基盤研究所	データ項目の設定 データ収集 現行データベース情報移行 資源管理情報移行	研究拠点内公開・評価 データ収集 データ登録 拠点内評価情報集約	データ収集 データ登録	データベース維持・管理 データ更新
研究拠点	データ項目の設定 データ収集	研究拠点内公開・評価 データ収集 データ登録	データ収集 データ登録	データ更新
開発委託 富士通九州システムズ	システム設計 システム構築 データ登録 資源管理システム構築	システム構築・拡張 データ登録	システム拡張・公開準備 データ登録	
総合情報データベース	システム基本骨格完成 成分分析情報登録 薬局方情報登録 研究拠点内評価版完成 資源管理システム完成	拠点内評価の反映 システム拡張 データ登録	システム拡張完了 データ登録完了 一般公開	データベース維持・管理 データ更新

図 2. 薬用植物総合データベース構築の年次計画

表 1. 漢方製剤生産量（平成 16 年）の 90%以上を占める漢方処方 44 処方に配合される重要生薬 75 品目

最優先5品目	オウゴン	カンゾウ	ショウキョウ	ソウジュツ	ニンジン
優先15品目	オウレン	ケイヒ	ゴシツ	サイコ	サンシシ
	ジオウ	シャクヤク	シャゼンシ	センキュウ	ソヨウ
	ダイオウ	トウキ	ビャクジュツ	ブクリョウ	マオウ
重要生薬 55品目	ポタンピ	トウニン	オウギ	サイシン	ポウフウ
	ハンゲ	ハッカ	ケイガイ	タイソウ	ゴミシ
	カンキョウ	タクシャ	バクモンドウ	ショウマ	チョウトウコウ
	サンシュユ	レンギョウ	チヨレイ	キクカ	オンジ
	ゴシュユ	キョウニン	子モ	マシニン	カッコン
	キキョウ	サンヤク	ポウイ	サンショウ	コウベイ
	ブシ	オウバク	チンピ	コウジン	キジツ
	コウボク	アキョウ	カッセキ	ポウショウ	セツコウ
	リュウコツ	ポレイ	モクソウ	ドクカツ	シンイ
	ビャクシ	リュウタン	キョウカツ	イレイセン	テンマ
	サンソウニン	モッコウ	リュウガンニク	バクガ	ボクソク

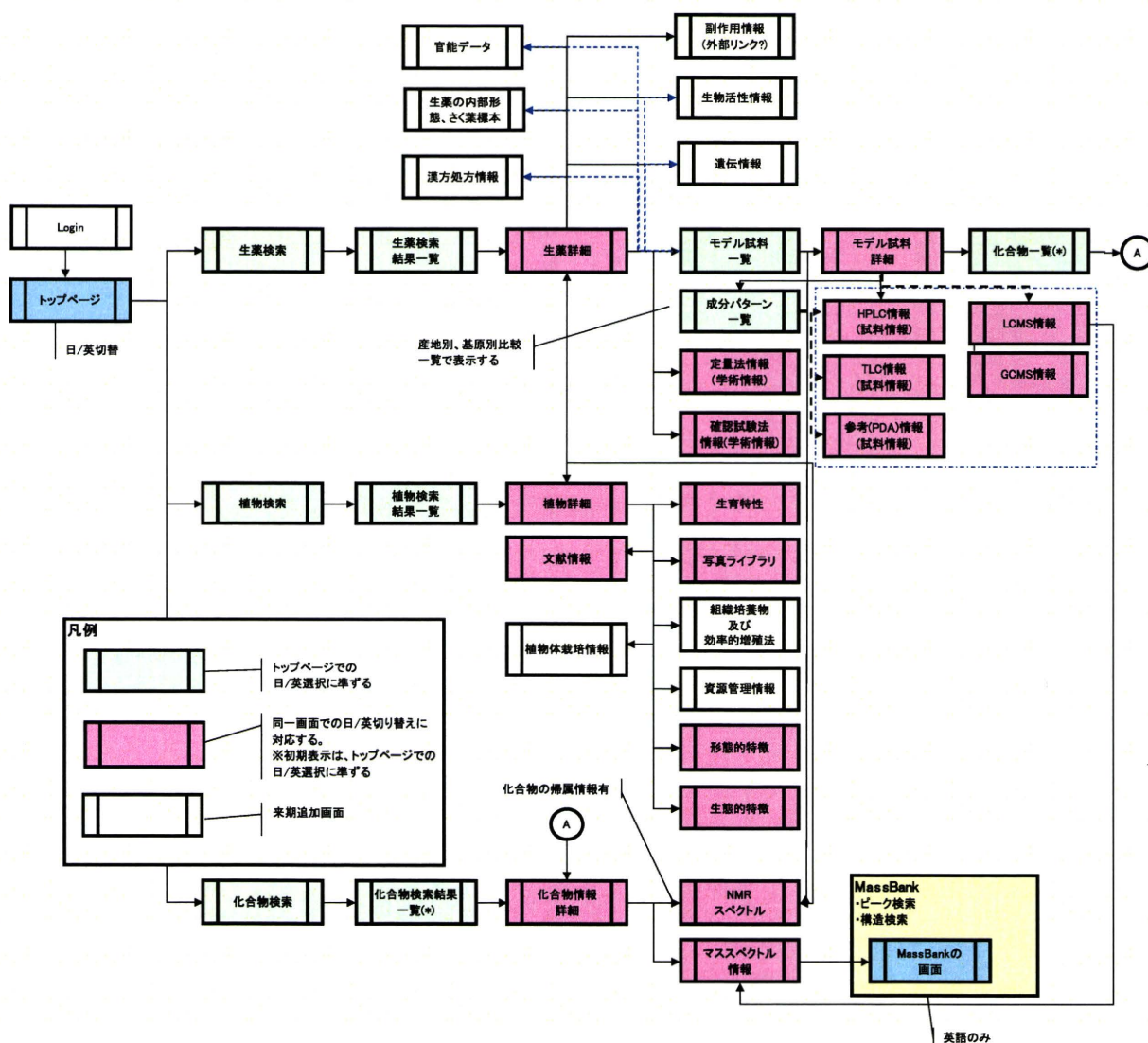


図 3. データベース遷移図

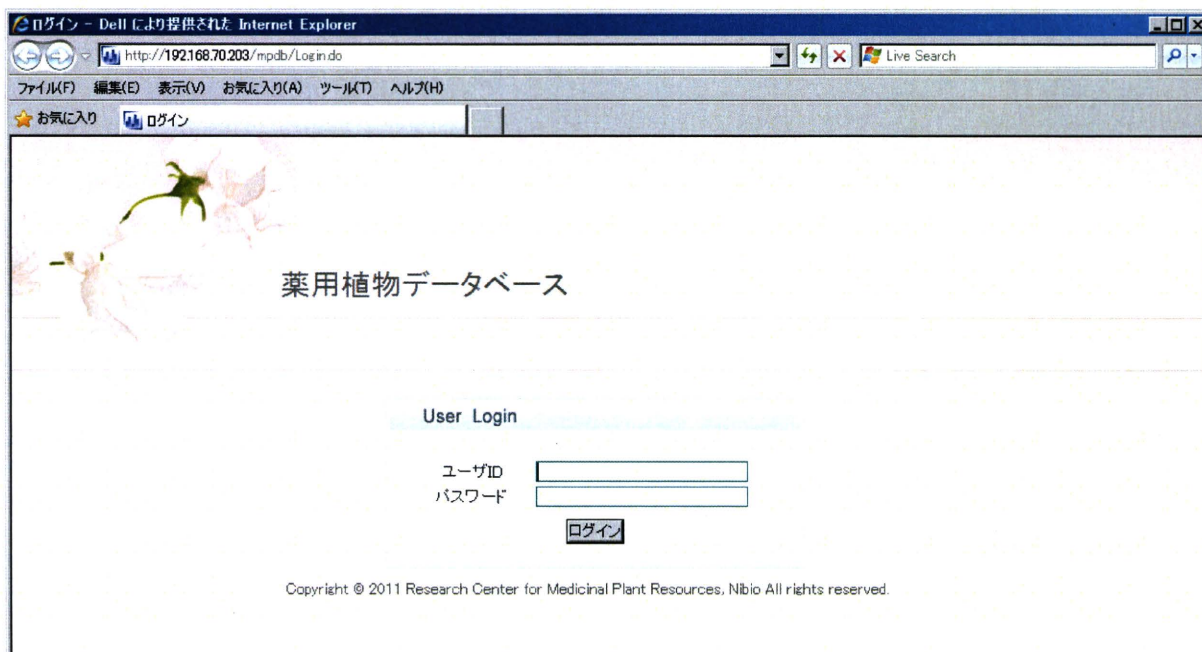


図 4. ログイン画面
ユーザ ID とパスワードによる認証を行う。

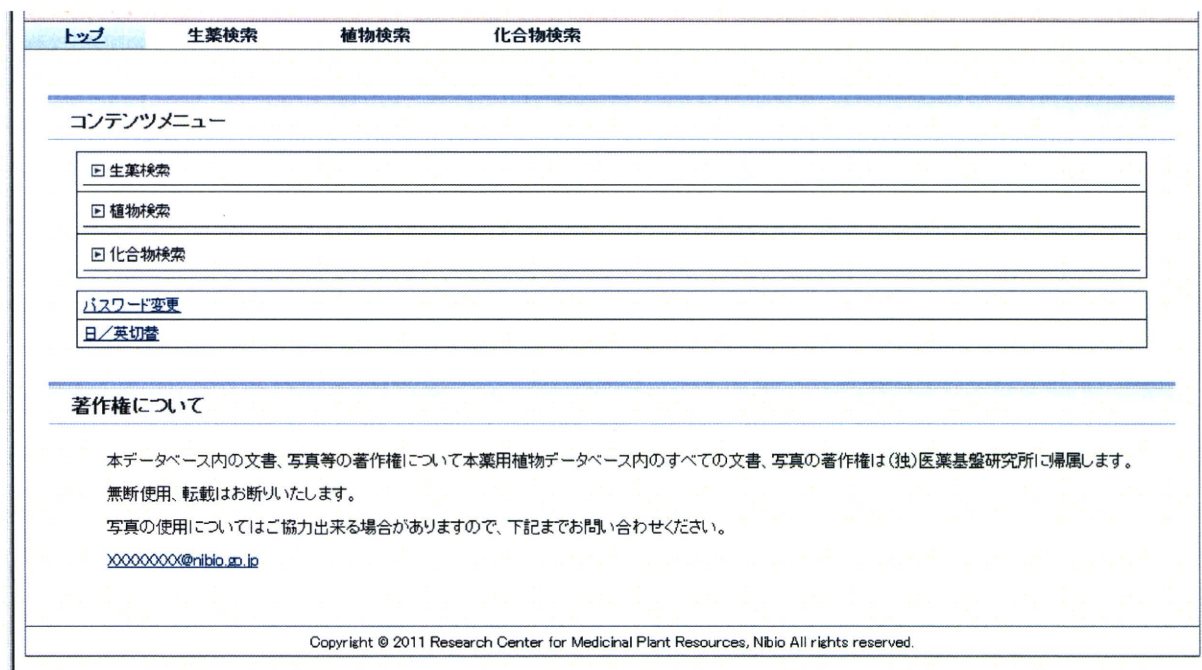


図 5. トップページ(メニュー)画面
生薬検索、植物検索、化合物検索メニューから操作を選ぶ。
日本語、英語表記の切り替えを行う。パスワード変更画面を起動する。

植物検索

植物名、生薬名、化合物名

検索 クリア

植物名五十音順表示 [ア行](#) [カ行](#) [サ行](#) [タ行](#) [ナ行](#) [ハ行](#) [マ行](#) [ヤ行](#) [ラ行](#) [ワ行](#)

Copyright © 2011 Research Center for Medicinal Plant Resources, Nibio All rights reserved.

図 6. 植物検索画面

キーワードで植物を検索する。植物名の五十音順に表示する。

植物検索結果一覧


1-20件表示/27件中 12 次へ>>								
植物コード	植物名	ラテン名	科名	和科名	一般名	一般英名	生薬名	
1	PL0000089	アイスランドポピー	Papaver nudicaule L.	Papaveraceae	ケシ科	アイスランドポピー	Iceland poppy	
2	PL0000001	アカメガシワ	Mallotus japonicus (Thunb.) MDII. Arg.	Euphorbiaceae	トウダイグサ科	アカメガシワ	Japanese mallotus	アカメガシワ
3	PL0000037	アカヤシオウ	Rehmannia glutiosa Libosch. var. purpurea Makino	Scrophulariaceae	ゴマノハクサ科	ジオウ	Glutinous rehmannia	ジオウ
4	PL0000082	アケビ	Akebia quinata Decne.	Lardizabalaceae	アケビ科	アケビ	Chocolate vine, Five leaf akebia	モクウ
5	PL0000069	アサ	Cannabis sativa L.	Cannabaceae	アサ科	アサ	Hemp, Cannabis	マシニ
6	PL0000093	アサガオ	Pharbitis nil Choisy	Convolvulaceae	ヒルガオ科	アサガオ	Morning glory	ケンゴシ
7	PL0000085	アツミゲシ	Papaver setigerum DC.	Papaveraceae	ケシ科	アツミゲシ	Opium poppy	
8	PL0000002	アマチャ	Hydrangea macrophylla (Thunb.) Ser. var. thunbergii (Siebold) Makino	Saxifragaceae	ユキノシタ科	アマチャ	Hortensia, French hydrangea	アマチャ
9	PL0000068	アミガサユリ	Fritillaria verticillata Willd. var. thunbergii Baker	Liliaceae	ユリ科	アミガサユリ	Fritillary	バイモ
10	PL0000072	イガリソウ	Epimedium grandiflorum Morr. var. thunbergianum (Miq.) Nakai	Berberidaceae	メギ科	イガリソウ		イノウカウ
11	PL0000079	インドジャポク	Rauwolfia serpentina Benth. ex Kurz	Apocynaceae	キョウチクトウ科	ラウオルフィア	Snake-root devil-pepper	ラウオルフィア
12	PL0000004	ウイキョウ	Foeniculum vulgare Miller	Umbelliferae	ゼリ科	ウイキョウ	Fennel	ウイキョウ

図 7. 植物検索結果一覧画面

検索結果を一覧表示する。植物名、ラテン名、科名、和科名、一般名、一般英名、この植物を基原とする生薬名を表示する。

植物詳細

日/英切替

植物コード	PL0000007
植物名	コガネバナ
ラテン名	Scutellaria baicalensis Georgi
科名	Labiatae
和科名	シソ科
一般名	コガネバナ
一般英名	Skullcap (Chinese skullcap)
画像	
形態的特徴	形態的特徴
生態的特徴	生態的特徴
生育特性	生育特性
写真ライブラリー	写真ライブラリー
文献情報	文献情報
生薬詳細	オウゴン
組織培養物及び効率的増殖法	
資源管理情報	
植物体栽培及び植物の効率的生産法	

[戻る](#)

図 8. 植物詳細画面

植物に関する情報（ラテン名、科名、一般英名）及び、生育特性、写真ライブラリー、文献情報、形態的特徴、生態的特徴等へのリンクを表示する。

形態的特徴

コガネバナ

日/英切替

高さ25～60cm。主根はほぼ円すい形で外皮は褐色。茎はそう生し、方形で、基部は横に倒れ、上部は直立して分枝する。全体に短毛がまばらに生える。葉は深緑色で対生、針形で長さ1.5～4.5cm。全縁。穂状花序を枝端につけ、一方に向けた紫色の唇形花を対生する。花冠は長さ約2.5cm。小葉果は黒色である。栽培種の根は直根性で細根は少ない。移植栽培では分枝根が多い。3年以上経年栽培した根部の肥大部分に、しばしば空洞が発生する。

[戻る](#)

Copyright © 2011 Research Center for Medicinal Plant Resources, Nibio All rights reserved.

図 9. 形態的特徴

生態的特徴

■ コガネバナ

日/英切替

中国北部～東シベリア、朝鮮半島原産の多年生草本。花期は7～8月、果期は8～9月。耐寒性、耐暑性は比較的強く、耐湿性は弱い。開花は1年生株では7月中旬から、2年生以上の株では6月中旬から始まり、2箇月以上続く。開花・結実は穂状花序の下位から順次始まり、秋には花と果実が混在する。主な産地は、中国・山西省、山東省、河北省、黒竜江省、内蒙古である。

戻る

Copyright © 2011 Research Center for Medicinal Plant Resources, Nibio All rights reserved.

図 10. 生態的特徴

生育特性

■ コガネバナ

日/英切替

寒さの区分	II～V	日照条件	II～IV
暖かさの区分	75～140	土壌分類	I～III
土壌適正	排水が良い場所に適する。砂壤土～埴壌土に適する。肥沃地に適する。		
遮光	不要		

画像

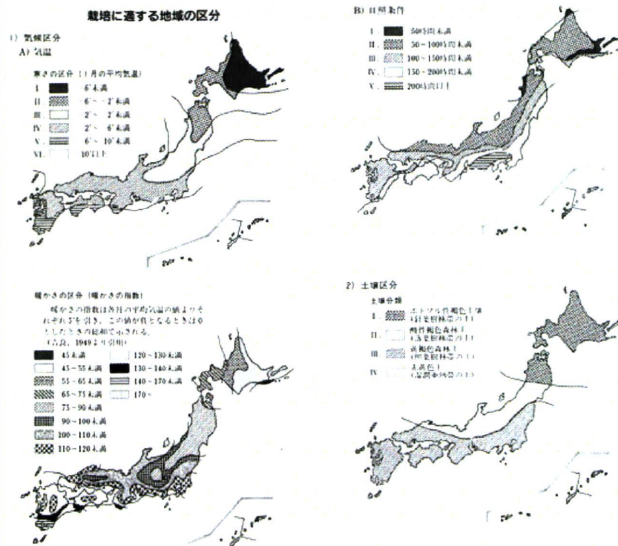


図 11. 生育特性

写真ライブラリー

コガネバナ

日/英切替




	写真コード	007-1-1V.jpg
	種子	
	SEM画像(キーエンスデジタルマイクروسコープVHX-900)	
	写真コード	007-2-1F.jpg
	発芽期	
	写真コード	007-3-1V.jpg

図 12. 写真ライブラリー

文献情報

コガネバナ

日/英切替

Miyaichi, Y. et al., Studies on constituents of Scutellaria species. XIX. Lignan glycosides of roots of Scutellaria baicalensis GEORGI. Natural Medicines (1998), 52(1), 82-86. Miyaichi, Y. et al., Studies on the constituents of Scutellaria species XVII. Phenol glycosides of the root of Scutellaria baicalensis Georgi (2). Natural Medicines (1995), 49(3), 350-3. Miyaichi, Y. et al., Constituents of Scutellaria species XVI. On the phenol glycosides of the root of Scutellaria baicalensis Georgi. Natural Medicines (1994), 48(3), 215-18. Zhang, Y. et al., Constituents of Scutellaria baicalensis Georgi. Shenyang Yaoxueyuan Xuebao (1991), 8(2), 137. Fukuhara, K. et al., Essential oil of Scutellaria baicalensis G. Agricultural and Biological Chemistry (1987), 51(5), 1449-51. Tomimori, T. et al., Studies on the constituents of Scutellaria species. VI. On the flavonoid constituents of the root of Scutellaria baicalensis Georgi (5). Quantitative analysis of flavonoids in Scutellaria roots by high-performance liquid chromatography. Yakugaku Zasshi (1985), 105(2), 148-55. Tomimori, T. et al., Studies on the constituents of Scutellaria species. IV. On the flavonoid constituents of the root of Scutellaria baicalensis Georgi (4). Yakugaku Zasshi (1984), 104(5), 529-34. Tomimori, T. et al., Studies on the constituents of Scutellaria species. III. On the flavonoid constituents of the root of Scutellaria baicalensis Georgi (3). Yakugaku Zasshi (1984), 104(5), 524-8. Tomimori, T. et al., Studies on the constituents of Scutellaria species. II. On the flavonoid constituents of the root of Scutellaria baicalensis Georgi. 2. Yakugaku Zasshi (1983), 103(6), 607-11. Tomimori, T. et al., On the flavonoid constituents from the roots of Scutellaria baicalensis georgi. 1. Yakugaku Zasshi (1982), 102(4), 388-91. Takagi, S. et al., On the minor constituents of the roots of Scutellaria baicalensis Georgi (Wogon). Yakugaku Zasshi (1981), 101(10), 899-903. Takagi, S. et al., Studies on the water-soluble constituents of the roots of Scutellaria baicalensis Georgi (Wogon). Yakugaku Zasshi (1980), 100(12), 1220-4. Takido, M. et al., Constituents in the water extracts of crude drugs. I. Roots of Scutellaria baicalensis. Yakugaku Zasshi (1975), 95(1), 108-13.

戻る

図 13. 文献情報

生薬検索

生薬名、植物名、化合物名

検索 クリア

生薬名五十音順表示 [ア行](#) [カ行](#) [サ行](#) [タ行](#) [ナ行](#) [ハ行](#) [マ行](#) [ヤ行](#) [ラ行](#) [ワ行](#)

Copyright © 2011 Research Center for Medicinal Plant Resources, Nibio All rights reserved.

図 14. 生薬検索画面
キーワードで生薬を検索する。生薬名の五十音順に表示する。

生薬検索結果一覧

生薬コード	生薬名(カタカナ)	生薬英名	生薬ラテン名	局方収載	基原植物
1	CD00000001	アカメガシワ	MALLOTUS BARK	局	アカメガシワ
2	CD00000067	アヘン	OPIMUM	局	ケシ
3	CD00000002	アマチャ	HYDRANGEAE DULCIS FOLIUM	局	アマチャ
4	CD00000003	インヂンコウ	ARTEMISIAE CAPILLARIS FLOWER	局	カワラヨモギ
5	CD00000058	インヨウカク	EPIMEDIUM HERB	局	ホザキイガリソウ, キバナイガリソウ, イガリソウ, トキワイガリソウ
6	CD00000004	ウイキョウ	FOENICULI FRUCTUS	局	ウイキョウ
7	CD00000059	ウコン	CURCUMAE RHIZOMA	局	ウコン
8	CD00000060	ウヤク	LINDERAE RADIX	局	テンダイウヤク
9	CD00000005	ウワウルシ	UVAE URSI FOLIUM	局	クマコクモモ
10	CD00000068	エンゴサク	CORYDALIS TUBER	局	エンゴサク
11	CD00000065	エンメイソウ	PLECTORANTHUS HERB	局外	ヒキオコシ
12	CD00000006	オウギ	ASTRAGALI RADIX	局	キバナオウギ
13	CD00000007	オウゴン	SCUTELLARIAE RADIX	局	コガネバナ
14	CD00000008	オウバク	PHELLODENDRON BARK	局	キハダ
15	CD00000009	オウレン	COPTIDIS RHIZOMA	局	キクバオウレン, セリバオウレン, コセリバオウレン

1-15件表示/15件中 1

ダウンロード 戻る

図 15. 生薬検索結果一覧画面
検索結果を一覧表示する。生薬名、英名、ラテン名、局方収載、基原植物を表示する。

日/英切替					
生薬コード	CD0000007				
生薬名(カタカナ)	オウゴン				
生薬英名	Scutellaria Root				
生薬ラテン名	SCUTELLARIAE RADIX				
生薬和名	黄芩				
基原植物	コガネバナ				
部位	周皮を剥いた根				
局方収載	局				
食薬区分					
性状	円すい状、半管状または平板状で、長さ5~20 cm、径0.5~2 cmである。外面は黄褐色を呈し、粗雑で著明な縦じわを認め、ところどころに側根の跡及び褐色の周皮の破片を残す。上端には茎の跡または茎の残基をつける。老根では中心部の木部は腐敗し、またはしばしばうつろとなり、質は堅いが折れやすい。折面は繊維性で鮮黄色である。最近では野生品と同時に栽培品も流通し始めたため、細長く、表面が比較的なめらかな黄色を呈するものもみられる。本品はほとんどにおいがなく、味はわずかに苦い。				
用途	消炎、解熱、鎮痛、止瀉				
調製法	2年目の秋の地上部が黄変した頃に地上部を刈り取り、根を傷つけないように掘り取る。根根部についている茎と細い根を取り除き、水洗後速やかに竹べらや金属製のたわし(鉄製は厳禁)で剥皮し、直ちに陽乾または強制乾燥(50~60℃)する。乾燥した根は黄色~鮮橙黄色を呈する。剥皮後室内などに放置しておくとき黄緑色を帯びて商品価値が劣る。したがって陽乾を行う場合は天気の良い日に調整するのがポイントである。				
エキス収率					
文献情報					
処方	黄連解毒湯、小柴胡湯、大柴胡湯、柴胡桂枝湯、三黄泻心湯、乙字湯				
モデル試料(15)					
遺伝子情報					
日本薬局方情報	<table border="1"> <tr> <td>定量法</td> <td>AS0000001</td> </tr> <tr> <td>確認試験法</td> <td>D0000001, D0000002, D0000003, D0000004</td> </tr> </table>	定量法	AS0000001	確認試験法	D0000001, D0000002, D0000003, D0000004
定量法	AS0000001				
確認試験法	D0000001, D0000002, D0000003, D0000004				

戻る

Copyright © 2011 Research Center for Medicinal Plant Resources, Nibio All rights reserved.

図 16. 生薬詳細画面

生薬に関する情報(生薬名、和名、ラテン名、基原植物、使用部位、生薬局方収載、性状、用途、文献情報等)を表示する。モデル試料や日本薬局方情報へのリンクを表示する。

定量法詳細	
日/英切替	
薬局方コード	JP0000001
薬局方試験コード	AS0000001
分析条件	
画像	<p>本品の粉末約0.5 gを精密に量り、移動相30 mLを加え、遊液冷却器を付けて水浴上で30分間加熱する。冷却後、共栓遠心沈降管に移し、遠心分離し、上遊液を分取する。遊液抽出の母液は、移動相30 mLで洗い、洗液は元の共栓遠心沈降管に入れ、5分間静置し、遠心分離し、上遊液を分取する。残留物は更に移動相30 mLを加え、5分間静置し、遠心分離し、上遊液を分取する。全抽出液を合わせ、移動相を加えて正確に100 mLとする。この100 mLを正確に量り、移動相を加えて正確に20 mLとし、試料溶液とする。別コバイカリン標準品(乾燥水分を測定しており約10 mgを精密に量り、25 mLに溶かし、正確に20 mLとする。この20 mLを正確に量り、移動相を加えて正確に20 mLとし、標準溶液とする。試料溶液及び標準溶液0.1 μLずつを正確に10 μLの条件下で液体クロマトグラフィー(20)により試験を行い、それぞれの液のバイカリンのピーク面積AT及びASを測定する。バイカリン(C21H28O11)の量(mg) = WS × (AT/AS) × 5 WS: 脱水性に乾燥したバイカリン標準品の採取量(mg) 操作条件: 抽出液: 紫外分光検出(測定波長277 nm) カラム: 粒径4~6 μm、長さ15~25 cmのスタンレス鋼10~10 μmの液体クロマトグラフィー用オクタデシルシリル化シリカゲルを充填する。カラム温度50℃付近の一定温度 移動相: 薄のメタノール(1→14) / アセトニトリル遊液(18:7) 流量: バイカリンの保持時間が約6分になるように調整する。カラムの測定: バイカリン標準品1 mg及びバイカリン標準品1 mgが1 μLを20 μLに溶かし、7.00 mLとする。この20 μLにつき、上記の条件で操作する。バイカリン、パラオキサン定息標準メチルの順に測定し、その分離度が3.0以上のものを用いる。試験の再現性: 上記の条件で標準溶液につき、試験を6回繰り返すと、バイカリンのピーク面積の相対標準偏差は1.5%以下である。</p>
備考	

戻る

図 17. 定量法情報画面

日本薬局方一定量法に関する情報(分析条件、画像データ)を表示する。

確認試験法詳細

日/英切替

薬局方コード	JP0000001
薬局方試験コード	ID0000001
分析条件	本品の粉末0.5 gにジエチルエーテル20 mLを加え、還流冷却器を付けて水浴上で5分間穏やかに煮沸し、冷後、ろ過する。ろ液を蒸発して得た残留物をエタノール(95)10 mLに溶かし、その3 mLに希塩化鉄(Ⅲ)試液1~2滴を加えるとき、液は灰緑色を呈し、後に紫褐色に変わる。
画像	
備考	

戻る

図 18. 確認試験法情報画面

日本薬局方ー確認試験法に関する情報(分析条件、画像データ)を表示する。

モデル試料一覧

1-15件表示/15件中 1				
	管理番号	生薬名	産地	基原植物
1	NE-0001	オウゴン	中国河北省	
2	NE-0002	オウゴン	中国河北省	
3	NE-0035	オウゴン	中国河北省	
4	NE-0036	オウゴン	中国河北省	
5	NE-0057	オウゴン	中国山東省	
6	NE-0059	オウゴン	中国河北省	
7	NE-0073	オウゴン	中国河北省	
8	NE-0089	オウゴン	中国吉林省	
9	NE-0105	オウゴン	中国河北省	
10	NE-0106	オウゴン	中国内蒙古自治区	
11	NE-0142	オウゴン	中国河北省	
12	NE-0145	オウゴン	中国河北省	
13	NE-0167	オウゴン	中国陝西省	
14	NE-0174	オウゴン	中国河北省	
15	NE-0175	オウゴン	中国陝西省	

1-15件表示/15件中 1

ダウンロード 戻る

図 19. モデル試料一覧画面

選択された生薬のモデル試料を一覧表示する。モデル試料ごとの産地や基原情報を参照することができる。

画面上部：モデル試料に関する項目

モデル試料詳細	
日/英切替	
管理番号	NIB-0001
生薬名称	オウゴン
このサンプルの 基原植物	
使用部位	
ロット(*)番号	10000
鑑別情報	
形態	原形
検品者(*)	深野
産地	中国河北省
初期導入量	1
情報	
提供者(*)	
等級等	栽培
導入時メモ(*)	
導入年月日	2010/06/30
入手年	2010年

画面下部：成分分析データへのリンク

化合物一覧(2)	baicalin(バイカリン) , wogonin(オウゴン)		
NMR情報			
LC(GC)MS情報	LC(GC)コード	機種名	化合物名
	0M0000002	Agilent 1100	baicalin(バイカリン) , wogonin(オウゴン)
HPPLC情報	HP0000001		
TLC情報	TL0000002 , TL0000003 , TL0000004 , TL0000005		
参考情報			
成分パターン比較(産地・基原によるバラエティ比較)(6)			
遺伝子情報			

[戻る](#)

図 20. モデル試料詳細画面

モデル試料に関する情報(基原植物、鑑別情報、形態、産地等)を表示する。また、化合物情報、NMR,LCMS,HPLC,TLC データがある場合は、それらの情報へのリンクを表示する。

成分パターン一覧(産地・基原によるバラエティ比較)

オウゴン

管理番号	産地	基原植物	HPLC,TLC,PDA プロファイル					
1	NIB-0001	中国河北省						
2	NIB-0002	中国河北省						
3	NIB-0005	中国河北省						
4	NIB-0057	中国山东省						
5	NIB-0106	中国内蒙古自治区						
6	NIB-0175	中国陕西省						

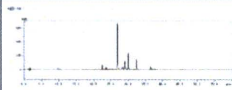
[ダウンロード](#) [戻る](#)

図 21. 成分パターン一覧画面

同一生薬について、産地・基原が異なるモデル試料の HPLC,TLC プロファイル画像を一覧表示する。サムネイル画像をクリックすると、オリジナルサイズの画像を表示する。

HPLC情報

日/英切替

生薬名	オウゴン
モデル試料管理番号	NIB-0001
産地	中国河北省
基原植物	
成分分析コード	AN0000005
HPLC	
分析条件	カラム:L-column ODS(2.1 ID. × 150 mm)(化学物質評価研究機構), カラム温度:40° C, 流速:0.3 mL/min, 測定波長:280 nm, 移動相:(A)5%酢酸水溶液および(B)メタノール(濃度勾配条件(B in A):0→30 min(0→50%), 30→35 min(50→85%), 35→40 min(85%), 40→50 min(85→90%), 50→55 min(90→100%), 55→60 min(100%))
化合物名	baicalin(ハイカリン)
備考	中国河北省産 栽培品

[戻る](#)

図 22. HPLC 情報画面

HPLC データ(画像、分析条件、定量情報等)を表示する。ピークの化合物情報を表示。

TLC情報

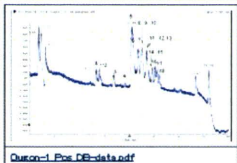
日/英切替

生薬名	オウゴン
モデル試料管理番号	NIB-0001
産地	中国河北省
基原植物	
成分分析コード	11
TLC画像	
分析条件	担体:Silica gel 60 F254 (TLC) 展開溶媒:n-BuOH-H2O-AcOH(4:2:1) 注入量, 検出:記載とあり (Linomat 5, Visualizer 使用)
定量情報	
備考	Merck社製TLCプレート使用

[戻る](#)

図 23. TLC 情報画面

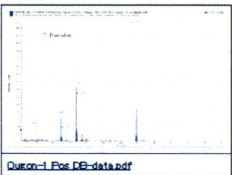
TLC データ(画像、分析条件、定量情報等)を表示する。

LCMS情報											
日/英切替											
モデル試料管理番号	NIE-0001										
成分分析コード	AN0000004										
LCコード	CM0000002										
名称	ESI-Q-TOF										
クロマトタイプ	LC										
機種名(LC)	Agilent 1100										
機種名(MS)											
カラム	充填剤	ODS									
	長さ	100mm									
	太さ	2.1mm									
	粒子径	1.9um									
	メーカー	ThermoScientific									
LCの測定条件	品名	Hypersil GOLD									
	移動相	A: 0.1%Acetic acid/water ,B: 0.1%Acetic acid/acetonitrile									
	グラジエントPG	0(min) A95.0%,B0.5%, 30(min) A30%,B70%, 35(min) A0%,B100%, 40(min) A0%,B100%, 40.1(min)A95%, B5%, 50(min) A95%,B5%									
	カラム温度	40℃									
MSの測定条件	移動相流量	200ul/min									
	イオン化モード	ESI+									
	脱溶媒温度	450℃									
	ニードル電圧	5000 V									
	スペクトル記録速度	1sec									
	m/z 範囲	0-2000									
	コリジョンガス	30 V									
JCAMP(TICデータ)											
JCAMP(UVデータ)											
備考											
MS情報	<table border="1"> <thead> <tr> <th>保持時間</th> <th>MS情報</th> <th>化合物</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>20.22</td> <td>MS0000002</td> <td>baicalin(バイカリン)</td> </tr> <tr> <td>25.12</td> <td>MS0000002</td> <td>wakonin(オウゴン)</td> </tr> </tbody> </table>		保持時間	MS情報	化合物	20.22	MS0000002	baicalin(バイカリン)	25.12	MS0000002	wakonin(オウゴン)
保持時間	MS情報	化合物									
20.22	MS0000002	baicalin(バイカリン)									
25.12	MS0000002	wakonin(オウゴン)									

[戻る](#)

図 24. LCMS 情報画面

LCMS 測定条件やマスペクトル情報へのリンクを表示する。

マスペクトル情報						
日/英切替						
MSコード	MS0000002					
Chromato TYPE	LC					
LCコード	CM0000002					
保持時間	20.22					
化合物	baicalin(バイカリン)					
MassBank ID						
JCAMP						
イオン化モード	ESI+					
コーン電圧						
備考	バイカリン					
プロダクトイオンスペクトル						
コード	保持時間	化合物	コリジョン電圧	プリカーサーイオン価額	MassBank ID	JCAMP
P0000002	20.22	baicalin(バイカリン)		[M+H] ⁺		Quonon-1_Pos_DE-data.pdf

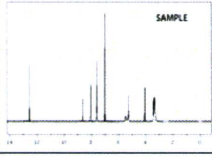
[戻る](#)

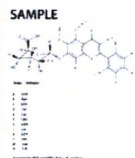
図 25. マスペクトル情報詳細画面

LC 保持時間、化合物情報等を表示する。また JCAMP 形式ファイルのダウンロードリンクを表示する。

NMR情報詳細

日/英切替

成分分析コード	AN0000001
NMRコード	NM0000001
NMR TYPE	1H-NMR
マシン名	JEOL Alpha
磁場	400MHz
溶媒	DMSO-d6
測定温度	20 deg
積算回数	32 times
試料量	0.016g/0.5ml
スペクトル	
JCAMP	
FID	

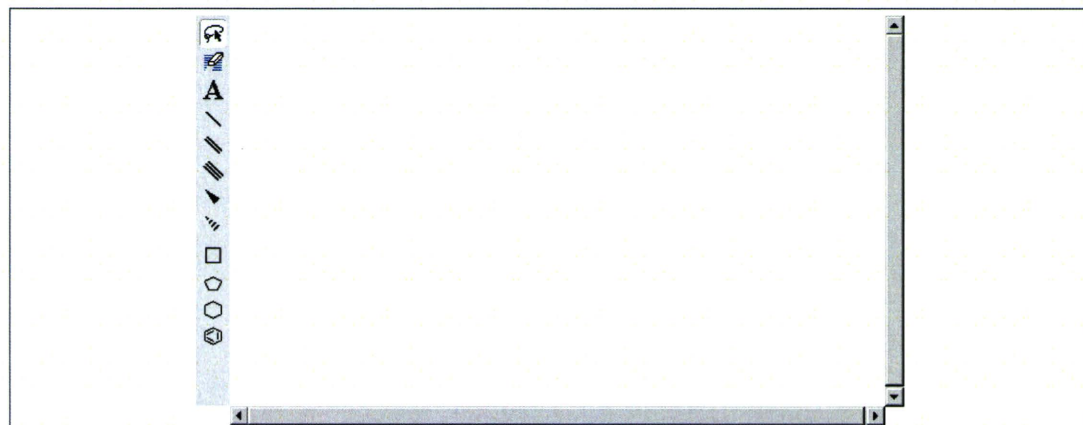
帰属情報	
	Assign ppm
	A 12.58
	B 8.66
	C 8.075
	D 7.61
	E 7.61
	F 7.063
	G 6.999
	J 5.26
	K 4.079
	L 3.45
M 3.44	
N 3.38	
化合物名	baicalin(バйкаリン)
備考	

戻る

図 26. NMR 情報詳細画面
NMR の測定条件や帰属情報等を表示する。

化合物検索

構造式描画による検索(部分構造でも検索可能です)



キーワード入力

化合物名称、別名、IUPAC名

検索 クリア

A-C D-F G-I J-L M-P Q-S T-V W-Z

図 27. 化合物検索画面

化合物名や植物名、生薬名で検索を行う。部分構造を描画して検索を行う。

化合物検索結果一覧

1-3件表示/3件中 1

化合物コード	構造式	名称	別名
1 CP0000008		Atractylodin(アトラクチロジン)	2-(1,7-Nonadiene-3,5-diyne)luran, 9CI. 1-(2-Furanyl)-1,7-nonadiene-3,5-diyne.
2 CP0000009		baicalein(バイカレイン)	Baicaleine, 5,6,7-Trihydroxy-2-phenyl-4H-1-benzopyran-4-one,
3 CP0000001		baicalin(バイカリン)	Baicalein 7- β -glucuronide, 5,6-Dihydroxy-4-oxo-2-phenyl-4H-1-benzopyran-7-yl β -D-Glucopyranosiduronic Acid

1-3件表示/3件中 1

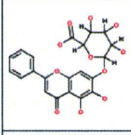
ダウンロード 戻る

図 28.化合物検索結果一覧画面

検索結果を一覧表示する。

化合物情報詳細

日/英切替

化合物コード	CP000001
名称	baicalin(ハイガリン)
別名	Baicalin 7- β -glucuronide, 5,6-Dihydroxy-4-oxo-2-phenyl-4H-1-benzopyran-7-yl β -D-Glucopyranosiduronic Acid
構造式	 baicalin.mol
IUPAC名	(2S,2S,4S,5R,6S)-6-(5,6-dihydroxy-4-oxo-2-phenyl-chromen-7-yl)oxy-3,4,5-trihydroxy-tetrahydropyran-2-carboxylic acid
CAS	21967-41-9
CHEBI	2981_0
CHEMPDB	
KEGG	C10025
NIKKAJI	J84.473D
PUBCHEM	12211
分子式	C21H18O11
分子量	446.364
文献情報	

NMR情報	1H	<table border="1"> <tr> <td>NMRコード</td> <td>マシソン</td> </tr> <tr> <td>NM0000001</td> <td>.EOL Alpha</td> </tr> </table>	NMRコード	マシソン	NM0000001	.EOL Alpha	
	NMRコード	マシソン					
NM0000001	.EOL Alpha						
13C	<table border="1"> <tr> <td>NMRコード</td> <td>マシソン</td> </tr> <tr> <td>NM0000002</td> <td>.EOL Alpha</td> </tr> </table>	NMRコード	マシソン	NM0000002	.EOL Alpha		
NMRコード	マシソン						
NM0000002	.EOL Alpha						
MS情報	<table border="1"> <tr> <td>保持時間</td> <td>LC情報</td> <td>MS情報</td> </tr> <tr> <td>20.22</td> <td>CM0000002</td> <td>MS0000002</td> </tr> </table>	保持時間	LC情報	MS情報	20.22	CM0000002	MS0000002
保持時間	LC情報	MS情報					
20.22	CM0000002	MS0000002					
化合物を含有する生薬名	オウゴン						

[戻る](#)

図 29.化合物情報詳細画面

化合物に関する情報(構造、IUPAC名、分子式、分子量、文献情報等)を表示する。さらにNMRやLCMSで測定されている場合は、測定情報へのリンクを表示する。