

实用天然产物手册

苯丙素

● 赵毅民 主编



化学工业出版社

实用天然产物手册

苯 丙 素

赵毅民 主编



化学工业出版社

· 北 京 ·

(京)新登字 039 号

图书在版编目(CIP)数据

苯丙素/赵毅民主编. —北京:化学工业出版社,
2005.1

(实用天然产物手册)

ISBN 7-5025-6417-9

I. 苯… II. 赵… III. 苯-有机卤素化合物-手
册 IV. O625.22-62

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2004) 第 130232 号

实用天然产物手册

苯 丙 素

赵毅民 主编

责任编辑:徐 蔓 李彦玲

文字编辑:林 媛

责任校对:王素芹

封面设计:于剑凝

*

化学工业出版社出版发行

(北京市朝阳区惠新里 3 号 邮政编码 100029)

发行电话:(010)64982530

<http://www.cip.com.cn>

*

新华书店北京发行所经销

大厂聚鑫印刷有限责任公司印刷

三河市延风装订厂装订

开本 787mm×1092mm 1/16 印张 23 字数 941 千字

2005 年 4 月第 1 版 2005 年 4 月北京第 1 次印刷

ISBN 7-5025-6417-9/TQ·2131

定 价:58.00 元

版权所有 违者必究

该书如有缺页、倒页、脱页者,本社发行部负责退换

序 言

天然产物是指天然存在的物质,包括人、动物、植物、矿物、昆虫、海洋生物以及微生物等。也有学者将动物、植物、昆虫、海洋生物和微生物体内的组成成分或其代谢产物以及人和动物体内许许多多内源性的化学成分统称作天然产物,其中主要包括蛋白质、多肽、氨基酸、核酸、各种酶类、单糖、寡糖、多糖、糖蛋白、树脂、胶体物、木质素、维生素、脂肪、油脂、蜡、生物碱、挥发油、黄酮、糖苷类、萜类、苯丙素类、有机酸、酚类、醌类、内酯、甾体化合物、鞣酸类、抗生素类等天然存在的化学成分。

人类在其进化过程中,首先接触的和赖以生存的都是这些天然物质,给我们提供了食物、衣物、防病治病的药物和日常使用的东西。早期人类就是利用大自然为我们提供的这些天然物质生存、繁衍。随着人类社会的发展,逐渐对大自然加深认识,懂得了如何利用这些天然物质,改造加工这些天然物质,使它们更好地为人类服务。特别是近代科学技术的迅猛发展,人们逐渐地对组成这些天然物质的化学成分或其代谢产物进行深入的研究,从分子水平上认识这些天然物质,并进一步研究它们的利用价值,从而发现人类生存需要的蛋白质、维生素、脂肪、碳水化合物以及用以防病治病的药物、防治病虫害的农药、人们日常生活中的香料、甜味料、色素、保健饮料以及化学工业用的各种化学原料等。人类进入 21 世纪以来,世界上掀起了回归大自然的热潮,天然产物与人们生活的关系也到了一个新的阶段,天然产物似乎成了人们最为依赖和信任的朋友。

我们国家地大物博,自然资源非常丰富。在我国数千年发展的历史长河中,人们为了生存,很早就对大自然有了较为深入的认识,并掌握了如何利用大自然的资源,为我们生产更好更多的产品,为人类的生活生产服务。我国古代在同各种疾病的斗争中积累了丰富的经验,创造了人类独一无二的中医中药,是我们国家民族文化的瑰宝,对我国的繁荣昌盛发挥了巨大作用,也是我国人民对人类做出的巨大贡献。但是由于历史上的各种原因,我国在天然物质的开发利用方面相对滞后。为了充分地利用我国的自然资源,发展我国天然物质的现代研究,提高我们的研究水平,同时也为更好地利用这些天然产物,发展我们的化学工业、制药工业、香料工业、保健食品工业、化妆品工业等。我们将国内外报道的具有生物学活性和实用价值天然产物汇编成册,以供同行在开发利用我国的自然资源的实践中参考。

本套手册第一批共十二个分册:生物碱;黄酮类;皂苷类;萜类;苯丙素;其他天然产物;海洋天然产物;抗生素与微生物产生的生物活性物质;动物药物;生化药物;岩石与矿物;天然色素。

本套手册内容丰富详实,特色突出,不仅是正在学习的研究生的必备参考书,也是研究人员案头的得力工具,既是从事天然产物开发的重要数据库,也是各大企业技术人员对产品质量控制、工艺研究、开发新产品的重要参考资料。成书后,会更进一步推动天然物质的研究,提高研究水平。同时也会起到更加合理地利用我国自然资源、发扬光大我国传统医学的作用,使之达到永续利用。使我国的天然产物产品走上国际市场。

前 言

本书是《实用天然产物手册》的一个分册，收录了苯丙素类天然产物。苯丙素泛指植物体内一类经桂皮酸生物合成途径生成的以苯环和 C_3 直链为基本构建单元的次生代谢产物。包括苯丙酸的衍生物、香豆素和木脂素等，在植物体内发挥着对抗昆虫、微生物或其他外界作用的侵袭，促进生长或自身修复等多种生理功能。苯丙素类化合物虽然是由简单的 C_6-C_3 单元构建而成，但是当其与其他天然有机分子缀合或以不同方式相互交联形成二聚体或多聚体后，生成的产物具有丰富的化学结构多样性，因而也具有多样的生物活性或其他有实用价值的理化特性。现代研究表明，苯丙素类化合物具有抗肿瘤、保肝、调节中枢神经、松弛平滑肌、抗凝血、抗菌、抗病毒等生物活性，具有明显的药用价值，并可用于开发天然色素、食品添加剂或农用化工产品。

本分册共收录了 1061 种化合物，主要为植物成分，少部分来源于微生物，其中据报道有生物活性的化合物 429 种。按简单苯丙素、木脂素和香豆素三个大类编排，每大类中又根据骨架结构分几个小类，小类中的化合物按英文名称字母顺序排列进行介绍。每个化合物下列中文名、英文名、结构式、分子式及相对分子质量、理化常数及光谱数据、来源、分析方法、生物活性与毒性、临床与应用价值和参考文献等条目。在编写中广泛查阅、收集了国内外相关的文献资料，加以整理分类，汇编而成。目前国内已有多部关于植物活性成分的工具书，但其中都未详细列举活性成分的核磁共振光谱数据和分析方法，本分册除对收录的化合物的光谱数据进行了详细介绍外，对一些具有结构代表性但未见生物活性报道的化合物也进行了收录，并给出了各项数据的确切文献出处，可供进行相关结构鉴定和植物化学分类研究的读者参考。

本分册较详尽地收录了见于文献报道的苯丙素类天然产物，信息趋时，内容丰富、实用，为新药开发、植物化学和结构鉴定研究提供了详实的数据，并为中药和天然药物资源的综合利用提供有益的启示。希望本分册有助于读者的研究创新。

杨峻山教授和化学工业出版社对本分册的编写工作给予了大力支持和帮助，提供了很多宝贵意见。在此特表感谢。

由于编者的水平和能力有限，手册中收录内容较多，难免有不妥和错误之处，敬请广大读者批评指正。

编 者

2004 年 11 月

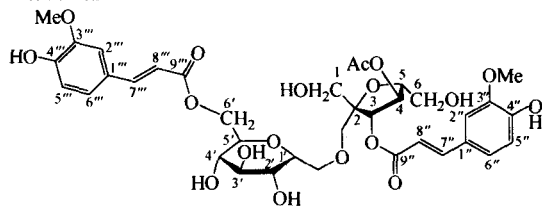
目 录

A 简单苯丙素	1
B 木脂素	128
Ba 二苯丁酸内酯木脂素	128
Bb 二苯丁烷木脂素	138
Bc 二苯基环辛二烯木脂素	145
Bd 芳基四氢萘木脂素	163
Be 呋喃及呋喃并呋喃木脂素	180
Bf 环氧四氢呋喃木脂素	192
Bg 萘类木脂素	200
Bh 新木脂素	209
Bi 阿朴木脂素	230
C 香豆素	232
Ca 二氢角形吡喃香豆素	232
Cb 二氢角形呋喃香豆素	244
Cc 二氢线形吡喃香豆素	254
Cd 二氢线形呋喃香豆素	261
Ce 简单香豆素	267
Cf 角形吡喃香豆素	302
Cg 角形呋喃香豆素	308
Ch 线形吡喃香豆素	309
Ci 线形呋喃香豆素	312
Cj 双香豆素	327
Ck 其他香豆素	336
中文索引	342
英文索引	349

A 简单苯丙素

A0001 4-乙酰-3,6'-二阿魏酰蔗糖 4-acetyl-3,6'-diferuloylsucrose

【结构式】



【分子式】 $C_{34}H_{40}O_{18}$

【相对分子质量】 736

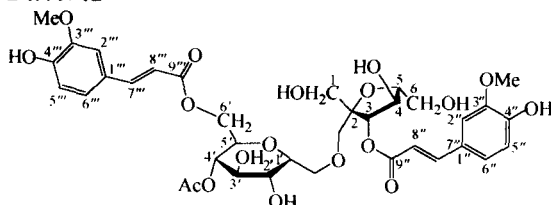
【理化常数及光谱数据】 无定形白色粉末, $[\alpha]_D^{25} -75.7^\circ$ (EtOH; c 0.30)。IR $\nu_{\max}^{KBr} \text{ cm}^{-1}$: 3400, 1710, 1635, 1600, 1520。UV $\lambda_{\max}^{MeOH} \text{ nm}(\lg \epsilon)$: 328 (4.62), 300sh (4.45), 237 (4.45)。EI-MS m/z : 380, 338, 194, 177, 150, 135。 $^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3 , 400MHz) δ : 4.22 (1H, d, $J=12.4\text{Hz}$, H-1a), 4.14 (1H, d, $J=12.4\text{Hz}$, H-1b), 6.38 (1H, d, $J=6.4\text{Hz}$, H-3), 6.17 (1H, dd, $J=6.4, 6.4\text{Hz}$, H-4), 4.62 (1H, ddd, $J=6.4, 6.4, 5.2\text{Hz}$, H-5), 4.48 (1H, dd, $J=12.5, 6.4\text{Hz}$, H-6a), 4.38 (1H, dd, $J=12.5, 5.2\text{Hz}$, H-6b), 6.01 (1H, d, $J=3.6\text{Hz}$, H-1'), 4.06 (1H, dd, $J=9.4, 3.6\text{Hz}$, H-2'), 4.52 (1H, dd, $J=9.4, 9.4\text{Hz}$, H-3'), 3.99 (1H, dd, $J=9.4, 9.4\text{Hz}$, H-4'), 4.96 (1H, ddd, $J=9.4, 6.7, 0.8\text{Hz}$, H-5'), 5.19 (1H, dd, $J=11.4, 0.8\text{Hz}$, H-6'a), 4.87 (1H, dd, $J=11.4, 6.7\text{Hz}$, H-6'b), 7.40-7.00 (6H, 芳环质子), 6.63 (1H, d, $J=15.8\text{Hz}$, 反式链烯质子), 6.86 (1H, d, $J=15.8\text{Hz}$, 反式链烯质子), 7.91 (1H, d, $J=15.8\text{Hz}$, 反式链烯质子), 8.03 (1H, d, $J=15.8\text{Hz}$, 反式链烯质子), 3.84 (3H, s, OMe), 3.85 (3H, s, OMe), 2.05 (3H, s, Ac) [1]。

【来源】 百合科百合属洋红美丽百合 *Lilium speciosum* var. *rubrum*。[1]。

【参考文献】 [1] Shimomura H, et al. Phytochemistry, 1986, 25(12): 2897。

A0002 4'-乙酰-3,6'-二阿魏酰蔗糖 4'-acetyl-3,6'-diferuloylsucrose

【结构式】



【分子式】 $C_{34}H_{40}O_{18}$

【相对分子质量】 736

【理化常数及光谱数据】 无定形白色粉末, $[\alpha]_D^{25}$

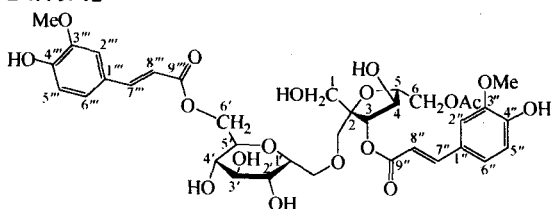
-83.3° (EtOH; c 0.90)。IR $\nu_{\max}^{KBr} \text{ cm}^{-1}$: 3400, 1710, 1640, 1600, 1520。UV $\lambda_{\max}^{MeOH} \text{ nm}(\lg \epsilon)$: 328 (4.59), 300sh (4.40), 237 (4.37)。EI-MS m/z : 380, 338, 194, 177, 150, 135。 $^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3 , 400MHz) δ : 4.11 (2H, br s, H-1), 6.17 (1H, d, $J=7.3\text{Hz}$, H-3), 5.06 (1H, dd, $J=7.3, 7.3\text{Hz}$, H-4), 4.54 (1H, ddd, $J=7.3, 6.4, 4.1\text{Hz}$, H-5), 4.37 (1H, dd, $J=12.9, 6.4\text{Hz}$, H-6a), 4.31 (1H, dd, $J=12.9, 4.1\text{Hz}$, H-6b), 5.94 (1H, d, $J=3.8\text{Hz}$, H-1'), 3.95 (1H, dd, $J=9.6, 3.8\text{Hz}$, H-2'), 4.40 (1H, dd, $J=9.6, 9.6\text{Hz}$, H-3'), 5.31 (1H, dd, $J=9.6, 9.6\text{Hz}$, H-4'), 4.81 (1H, ddd, $J=9.6, 6.5, 2.1\text{Hz}$, H-5'), 4.67 (1H, dd, $J=12.1, 2.1\text{Hz}$, H-6'a), 4.47 (1H, dd, $J=12.1, 6.5\text{Hz}$, H-6'b), 7.35-6.95 (6H, 芳环质子), 6.58 (1H, d, $J=15.8\text{Hz}$, 反式链烯质子), 6.74 (1H, d, $J=15.8\text{Hz}$, 反式链烯质子), 7.87 (1H, d, $J=15.8\text{Hz}$, 反式链烯质子), 7.88 (1H, d, $J=15.8\text{Hz}$, 反式链烯质子), 3.74 (3H, s, OMe), 3.81 (3H, s, OMe), 1.96 (3H, s, Ac) [1]。

【来源】 百合科百合属洋红美丽百合 *Lilium speciosum* var. *rubrum*。[1]。

【参考文献】 [1] Shimomura H, et al. Phytochemistry, 1986, 25(12): 2897。

A0003 6-乙酰-3,6'-二阿魏酰蔗糖 6-acetyl-3,6'-diferuloylsucrose

【结构式】



【分子式】 $C_{34}H_{40}O_{18}$

【相对分子质量】 736

【理化常数及光谱数据】 无定形白色粉末, $[\alpha]_D^{25} -71.6^\circ$ (EtOH; c 0.35)。IR $\nu_{\max}^{KBr} \text{ cm}^{-1}$: 3400, 1710, 1640, 1600, 1520。UV $\lambda_{\max}^{MeOH} \text{ nm}(\lg \epsilon)$: 327 (4.50), 300sh (4.33), 235 (4.27)。EI-MS m/z : 380, 338, 194, 177, 150, 135。 $^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3 , 400MHz) δ : 4.16 (2H, br s, H-1), 6.30 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$, H-3), 5.21 (1H, dd, $J=8.2, 8.2\text{Hz}$, H-4), 4.71 (1H, ddd, $J=8.2, 7.8, 3.0\text{Hz}$, H-5), 4.99 (1H, dd, $J=11.6, 3.0\text{Hz}$, H-6a), 4.97 (1H, dd, $J=11.6, 7.8\text{Hz}$, H-6b), 6.06 (1H, d, $J=3.7\text{Hz}$, H-1'), 4.06 (1H, dd, $J=9.3, 3.7\text{Hz}$, H-2'), 4.49 (1H, dd, $J=9.3, 9.3\text{Hz}$, H-3'), 3.92 (1H, dd, $J=9.3, 9.3\text{Hz}$, H-4'), 5.01 (1H, ddd, $J=9.3, 7.6, 1.5\text{Hz}$, H-5'), 5.27 (1H, dd, $J=11.7, 1.5\text{Hz}$, H-6'a), 4.72 (1H, dd, $J=11.7, 7.6\text{Hz}$, H-6'b), 7.45-7.05 (6H, 芳环质子), 8.01 (1H, d, $J=15.8\text{Hz}$, 反式链烯质子), 7.94 (1H, d, $J=15.8\text{Hz}$, 反式链烯质子), 6.63 (1H, d, $J=15.8\text{Hz}$, 反式链烯质子), 6.85 (1H, d, $J=15.8\text{Hz}$, 反式链烯质子), 3.88 (3H, s, OMe), 3.89 (3H, s,

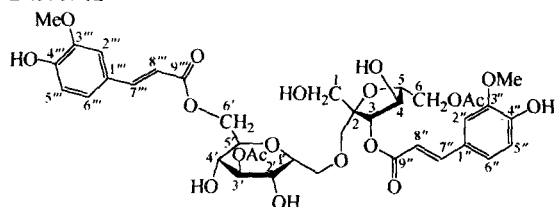
(OMe), 1.98(3H, s, Ac)^[1]。

【来源】 百合科百合属洋红美丽百合 *Lilium speciosum* var. *rubrum*.^[1]。

【参考文献】 [1] Shimomura H, et al. *Phytochemistry*, 1986, 25(12):2897。

A0004 6,3'-二乙酰-3,6'-二阿魏酰蔗糖 6,3'-acetyl-3,6'-diferuloylsucrose

【结构式】



【分子式】 C₃₆H₄₆O₁₉

【相对分子质量】 772

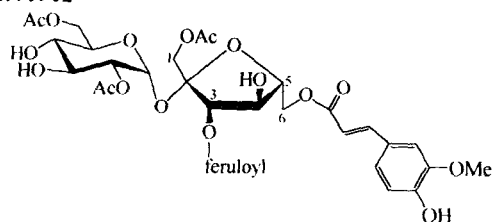
【理化常数及光谱数据】 无定形白色粉末, $[\alpha]_D^{25} -40.8^\circ$ (EtOH; c 0.78)。IR $\nu_{\max}^{\text{KBr}}$ cm⁻¹: 3400, 1710, 1630, 1600, 1515。UV $\lambda_{\max}^{\text{MeOH}}$ nm (lgε): 327(4.81), 300sh(4.65), 234(4.57)。EI-MS m/z : 380, 338, 247, 194, 177, 150。¹H-NMR(CDCl₃, 400MHz) δ: 4.09(2H, br s, H-1), 6.32(1H, d, J=8.4Hz, H-3), 5.13(1H, dd, J=8.4, 8.4Hz, H-4), 4.62(1H, ddd, J=8.4, 7.4, 3.3Hz, H-5), 4.92(1H, dd, J=11.9, 7.4Hz, H-6a), 4.87(1H, dd, J=11.9, 3.3Hz, H-6b), 6.04(1H, d, J=3.7Hz, H-1'), 4.11(1H, dd, J=9.7, 3.7Hz, H-2'), 6.00(1H, dd, J=9.7, 9.7Hz, H-4'), 4.96(1H, ddd, J=9.7, 6.9, 1.6Hz, H-5'), 5.20(1H, dd, J=11.6, 1.6Hz, H-6'a), 4.70(1H, dd, J=11.6, 6.9Hz, H-6'b), 7.40-7.05(6H, 芳环质子), 6.64(1H, d, J=15.8Hz, 反式链烯质子), 6.79(1H, d, J=15.8Hz, 反式链烯质子), 7.91(1H, d, J=15.8Hz, 反式链烯质子), 7.99(1H, d, J=15.8Hz, 反式链烯质子), 3.87(3H, s, OMe), 3.79(3H, s, OMe), 1.86(3H, s, Ac), 1.92(3H, s, Ac)^[1]。

【来源】 百合科百合属洋红美丽百合 *Lilium speciosum* var. *rubrum*.^[1]。

【参考文献】 [1] Shimomura H, et al. *Phytochemistry*, 1986, 25(12):2897。

A0005 β-D-(1-乙酰基-3,6-二阿魏酰基)呋喃果糖基-α-D-2',6'-O-二乙酰基吡喃葡萄糖苷 β-D-(1-O-acetyl-3,6-O-diferuloyl)fructofuranosyl-α-D-2',6'-O-diacetyl glucopyranoside

【结构式】



【分子式】 C₃₈H₄₄O₂₀

【相对分子质量】 820.2423

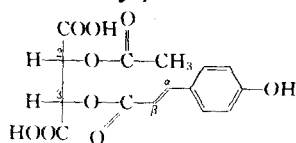
【理化常数及光谱数据】 无定形固体, mp 94~101℃。 $[\alpha]_D^{25} +73.4^\circ$ (CHCl₃; c 0.06)。UV $\lambda_{\max}^{\text{MeOH}}$ nm (lgε): 218(4.39), 237(4.34), 302(4.38), 329(4.55)。IR $\nu_{\max}^{\text{KBr}}$ cm⁻¹: 3407, 1746, 1632, 1603, 1516, 1431, 1375, 1240, 1159, 1032。FAB-MS (m/z , %): 843[M+Na]⁺ (10), 820(3), 557(20), 177(77)。FAB-MS (added KI m/z , %): 859[M+K]⁺ (23), 557(7), 177(86)。HRFAB-MS m/z : 843.2305 [M+Na]⁺, 820.2437 [M]⁺。¹H-NMR(C₅D₅N, 400MHz) δ Fructose: 4.57(1H, d, J=11.6Hz, H-1a), 4.78(1H, d, J=11.6Hz, H-1b), 6.28(1H, d, J=8.4Hz, H-3), 5.21(1H, br m, J=7.7Hz, H-4), 4.88(1H, m, H-5), 5.08(1H, dd, J=7.6, 12.0Hz, H-6a), 5.15(1H, dd, J=2.7, 12.0Hz, H-6b), 2.02(3H, s, H1OAc); Glucose: 6.26(1H, d, J=3.7Hz, H-1'), 5.40(1H, dd, J=3.7, 10.0Hz, H-2'), 4.70(1H, br t, J=10.0Hz, H-3'), 4.04(1H, br t, J=9.5Hz, H-4'), 4.90(1H, br d, J=8.1Hz, H-5'), 4.66(1H, dd, J=6.6, 11.6Hz, H-6a), 5.10(1H, br d, J=11.6Hz, H-6b), 2.08(3H, s, H-2'OAc), 2.12(3H, s, H-6'OAc); 3-Feruloyl: 7.39(1H, br s, H-2''), 7.15(1H, d, J=8.3Hz, H-5''), 7.30(1H, dd, J=1.9, 8.3Hz, H-6''), 8.05(1H, d, J=16.0Hz, H-7''), 6.70(1H, d, J=16.0Hz, H-8''), 3.80(3H, s, H-3'' OMe), 7.85(1H, br s, H-4'' OH); 6-Feruloyl: 7.29(1H, br s, H-2''), 7.17(1H, d, J=8.0Hz, H-5''), 7.24(1H, br d, J=8.0Hz, H-6''), 7.98(1H, d, J=16.0Hz, H-7''), 6.79(1H, d, J=16.0Hz, H-8''), 3.83(3H, s, H-3''' OMe), 8.21(1H, brs, H-4''' OH)。¹³C-NMR(C₅D₅N, 100MHz) δ Fructose: 65.4(t, C-1), 103.2(s, C-2), 78.5(d, C-3), 73.7(d, C-4), 81.2(d, C-5), 65.5(t, C-6), 20.6(q, C-1OAc), 170.3(s, C-1OAc); Glucose: 90.5(d, C-1'), 74.0(d, C-2'), 71.9(d, C-3'), 71.8(d, C-4'), 72.1(d, C-5'), 65.0(t, C-6'), 21.0(q, C-2'OAc), 170.9(s, C-2'OAc), 20.8(q, C-6'OAc), 171.0(s, C-6'OAc); 3-Feruloyl: 126.2(s, C-1''), 111.9(d, C-2''), 149.0(s, C-3''), 151.4(s, C-4''), 116.8(d, C-5''), 123.0(d, C-6''), 147.1(d, C-7''), 114.0(d, C-8''), 167.0(s, C-9''), 55.9(q, C-3'' OMe); 6-Feruloyl: 126.4(s, C-1'''), 111.4(d, C-2'''), 149.0(s, C-3'''), 151.2(s, C-4'''), 116.8(d, C-5'''), 123.5(d, C-6'''), 146.1(d, C-7'''), 114.8(d, C-8'''), 167.4(s, C-9''), 55.9(q, C-3''' OMe)^[1]。

【来源】 黑三棱科黑三棱属黑三棱 *Sparganium stoloniferum* (Graebn.) Buch.-Ham. ex Juz. 根茎^[1]。

【参考文献】 [1] Osamu S, et al. *Phytochemistry*, 1997, 44(4):695。

A0006 2-O-乙酰基-3-O-异对羟基桂皮酸中间酒石酸 2-O-acetyl-3-O-((E)-p-coumaroyl)-meso-tartaric acid

【结构式】



【分子式】 C₁₅H₁₄O₆

【相对分子质量】 338.06

【理化常数及光谱数据】 FAB-MS m/z : 337 $[M-H]^-$, 277 $[M-H-CH_3CO_2H]^-$, 191 $[M-COCH=CHC_6H_4OH]^-$, 163 $[OCOCH=CHC_6H_4OH]^-$. 1H -NMR(CD_3Cl_3) δ E(57%): 7.72(1H, d, $J=15.8$ Hz, H α), 7.51(2H, d, $J=8.7$ Hz, H-2', 6'), 6.85(2H, d, $J=8.7$ Hz, H-3', 5'), 6.43(1H, d, $J=15.8$ Hz, H β), 5.69, 5.65(2H, d, $J=2.4$ Hz, H-2, 3), 2.19(3H, s, COCH $_3$); Z(43%): 7.72(2H, d, $J=8.8$ Hz, H-2', 6'), 6.96(1H, d, $J=12.8$ Hz, H α), 6.78(2H, d, $J=8.8$ Hz, H-3', 5'), 5.89(1H, d, $J=12.8$ Hz, H β), 5.67, 5.59(2H, d, $J=2.4$ Hz, H-2, 3), 2.16(3H, s, COCH $_3$)^[1].

【来源】 黎科菠菜属菠菜 *Spinacia oleracea* L. 叶子^[1].

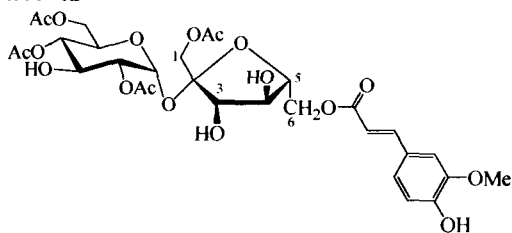
【分析方法】 色谱柱: Shandon ODS (4.6mm $\times$ 250mm, 5 μ m Bischoff analysentechnikund-Geräte, Leonberg West Germany); 流动相: A 1.5% H_3PO_4 水溶液, B 1.5% H_3PO_4 、20% HOAc 和 25% MeCN 的水溶液; 从 A+B 溶液系统中含有 30% 的 B 溶剂到溶剂 B 梯度洗脱, 35min 洗脱完。

【生物活性与毒性】 具有 CoA-依赖性, 酰基转移酶活性^[1].

【参考文献】 [1] Strack D, et al. Phytochemistry, 1987, 26 (1): 107.

A0007 β -D-(1-O-乙酰基-6-氧-阿魏酰基)呋喃果糖基- α -D-2', 4', 6'-O-三乙酰基葡萄糖苷 β -D-(1-O-acetyl-6-O-feruloyl) fructofuranosyl- α -D-2', 4', 6'-O-triacetyl glucopyranoside

【结构式】



【分子式】 $C_{30}H_{38}O_{18}$

【相对分子质量】 686.2058

【理化常数及光谱数据】 无定形固体, mp 96~102°C. $[\alpha]_D + 45.1^\circ$ ($CHCl_3$; c 0.10). UV λ_{max}^{MeOH} nm(lge): 216 (4.21), 233 (4.12), 296 (4.08), 326 (4.22). IR ν_{max}^{KBr} cm^{-1} : 3455, 1746, 1632, 1601, 1516, 1431, 1373, 1240, 1157, 1034. FAB-MS(m/z , %): 709 $[M+Na]^+$ (15), 686(2.5), 667(12), 381(25), 177(45). HRFAB-MS(m/z , %): 709.1949 $[M+Na]^+$, 686.2061 $[M]^+$. 1H -NMR(C_5D_5N , 400MHz) δ Fructose: 4.15(2H, br s, H-1), 4.16(1H, br s, H-3), 4.06(1H, t, $J=7.9$ Hz, H-4), 3.99(1H, br m, H-5), 4.45(1H, br d, $J=12.0$ Hz, H-6a), 4.46(1H, br d, $J=12.0$ Hz, H-6b), 2.08(3H, s, H-1OAc); Glucose: 5.60(1H, d, $J=3.6$ Hz, H-1'), 4.81(1H, dd, $J=3.6, 10.0$ Hz, H-2'), 4.08(1H, t, $J=9.6$ Hz, H-3'), 4.87(1H, t, $J=9.6$ Hz, H-4'), 4.21(1H, br m, H-5'), 4.15(2H, br s, H-6), 2.09(3H, s, H-2'OAc), 2.11(3H, s, H-4'OAc), 2.14(3H, s, H-6'OAc); 6-Feruloyl:

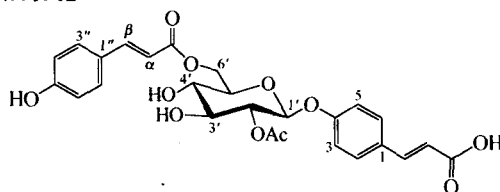
7.08(1H, d, $J=1.9$ Hz, H-2''), 6.93(1H, d, $J=8.3$ Hz, H-5''), 7.09(1H, dd, $J=1.9, 8.3$ Hz, H-6''), 7.68(1H, d, $J=16.0$ Hz, H-7''), 6.35(1H, d, $J=16.0$ Hz, H-8''). ^{13}C -NMR(C_5D_5N , 100MHz) δ Fructose: 63.9(t, C-1), 103.4(s, C-2), 77.6(d, C-3), 75.3(d, C-4), 79.4(d, C-5), 63.9(t, C-6), 20.5(q, C-1OAc), 170.8(s, C-1OAc); Glucose: 89.5(d, C-1'), 72.6(d, C-2'), 69.6(d, C-3'), 70.9(d, C-4'), 68.7(d, C-5'), 62.5(t, C-6'), 20.6(q, C-2'OAc), 171.0(s, C-2'OAc), 20.6(q, C-4'OAc), 171.1(s, C-4'OAc), 20.6(q, C-6'OAc), 171.3(s, C-6'OAc); 6-Feruloyl: 126.9(s, C-1''), 109.6(d, C-2''), 147.2(s, C-3''), 148.6(s, C-4''), 115.0(d, C-5''), 123.6(d, C-6''), 146.6(d, C-7''), 114.4(d, C-8''), 167.9(s, C-9''), 55.9(q, C-3''OAc)^[1].

【来源】 黑三棱科黑三棱属黑三棱 *Sparganium stoloniferum* (Graebn.) Buch.-Ham. ex Juz. 根茎^[1].

【参考文献】 [1] Osamu S, et al. Phytochemistry, 1997, 44 (4): 695.

A0008 4-O-(2-O-乙酰基-6-对羟基桂皮酰基- β -D-吡喃葡萄糖基)对羟基桂皮酸 4-O-(2-O-acetyl-6-O-*p*-coumaroyl- β -D-glucopyranosyl)-*p*-coumaric acid

【结构式】



【分子式】 $C_{31}H_{34}O_{11}$

【相对分子质量】 582

【理化常数及光谱数据】 无色针状晶体, mp 238~242°C. $[\alpha]_D - 60^\circ$ (MeOH; c 0.1). IR ν_{max}^{KBr} cm^{-1} : 3420, 2920, 1735, 1708, 1636, 1605, 1510, 1378, 1259, 1176, 1093, 1056, 830. EI-MS(m/z , %): 351(6), 164(20), 147(100). 1H -NMR(C_5D_5N , 400MHz) δ Coumaric acid: 7.97, 7.91(each 1H, d, $J=15.9$ Hz, H-7', 7''), 7.61, 7.57(each 2H, AA' BB', $J=8.7$ Hz, H-2', 2'', 6', 6''), 7.33, 7.21(each 2H, AA' BB', $J=8.7$ Hz, H-3', 3'', 5', 5''), 6.77, 6.63(each 1H, d, $J=15.9$ Hz, H-8', 8''); Glucose: 5.86(1H, dd, $J=8.1, 9.0$ Hz, H-2), 5.69(1H, d, $J=8.1$ Hz, H-1), 5.14(1H, dd, $J=11.8, 1.7$ Hz, H-6a), 4.89(1H, dd, $J=11.8, 6.4$ Hz, H-6b), 4.40(1H, dd, $J=9.0, 9.0$ Hz, H-3), 4.37(1H, ddd, $J=9.0, 6.4, 1.7$ Hz, H-5), 4.23(1H, dd, $J=9.0, 9.0$ Hz, H-4), 2.09(3H, s, H-Ac). ^{13}C -NMR(CD_3OD - C_5D_5N (5:1), 100MHz) δ Glucose: 99.4(C-1), 75.9(C-2), 74.7(C-3), 71.5(C-4), 75.8(C-5), 64.0(C-6); Coumaroyl: 129.9(C-1), 126.0(C-1'), 130.8(C-2, 6), 130.1(C-2', 6'), 117.5(C-3, 5), 117.0(C-3', 5'), 161.7(C-4), 159.2(C-4'), 145.5(C-7), 143.5(C-7'), 119.3(C-8), 114.9(C-8'), 169.3(C-9), 167.3(C-9'); Acetyl: 170.1(C-C=O), 21.0(C-CH $_3$)^[1].

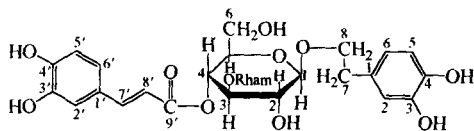
【来源】 菊科鬼针草属鬼针草 *bidens pilosa* L. 叶子^[1].

【参考文献】 [1] Sa shida Y, et al. Chem Pharm Bull, 1991, 39(3):709.

A0009 阿克苷 acteoside

【异名】 毛蕊花糖苷; 麦角甾苷; verbascoside; kusagin

【结构式】



【分子式】 $C_{29}H_{36}O_{15}$

【相对分子质量】 624

【理化常数及光谱数据】 无定形粉末, mp 145~150°C (uncorr), $[\alpha]_D^{20} -66.5^\circ$ (MeOH; c 1.0). IR ν_{max}^{KBr} cm^{-1} : 3350 (OH), 1700 (C=O), 162 (C=C), 1600, 1518 (arom, C=C). UV λ_{max}^{MeOH} nm (lg ϵ): 216 (4.28) sh, 248 (3.98) sh, 290 (4.00), 332 (4.10). FAB-MS m/z : 647 $[M+Na]^+$ [11]. D/CI-MS (NH_3) m/z : 642 $[M+NH]^+$, 626, 625 $[M+H]^+$, 496 $[M+NH_4-146]^+$, 480 $[M+NH_4-162]^+$, 463 $[M+H-162]^+$, 334 $[M+NH_4-308]^+$, 326 $[M+NH_4-316]^+$ [36]. 1H -NMR (CD_3OD , 500MHz) δ phenylethyl moiety: 6.69 (1H, d, $J=2.0$ Hz, H-1), 6.67 (1H, d, H-5), 6.57 (1H, dd, $J=8.0, 2.0$ Hz, H-6), 3.74-3.98 (1H, $CH_2-\alpha$), 2.79 (1H, t, $J=7.0$ Hz, $CH_2-\beta$); caffeoyl moiety: 7.06 (1H, $J=2.0$ Hz, H-1'), 6.73 (1H, d, $J=8.0$ Hz, H-5'), 6.94 (1H, dd, $J=2.0, 8.0$ Hz, H-6'), 6.28 (1H, $J=15.9$ Hz, H- α'), 7.57 (1H, $J=15.9$ Hz, H- β'); Glucose: 4.37 (1H, d, $J=7.9$ Hz, H-1''), 3.29-3.90 (1H, m, H-2''), 3.74 (1H, H-3''), 4.90 (1H, H-4''), 3.29-3.90 (1H, H-5''), 3.29-3.90 (1H, H-6''); rhamnose moiety: 5.17 (1H, d, $J=1.3$ Hz, H-1'''), 3.29-3.90 (1H, H-2'''), 3.29-3.90 (1H, H-3'''), 3.29-3.90 (1H, H-4'''), 3.29-3.90 (1H, H-5'''), 1.09 (1H, d, $J=6.0$ Hz, H-6'') [37]. ^{13}C -NMR (CD_3OD) δ phenethyl moiety: 131.4 (C-1), 116.2 (C-2), 145.9 (C-3), 144.4 (C-4), 117.0 (C-5), 121.1 (C-6), 36.3 (C-7), 72.0 (C-8); caffeoyl moiety: 127.5 (C-1'), 115.2 (C-2'), 146.6 (C-3'), 149.5 (C-4'), 116.4 (C-5'), 123.0 (C-6'), 147.8 (C-7'), 114.6 (C-8'), 168.2 (C-9'); glucose moiety: 104.0 (C-1), 75.8 (C-2), 81.5 (C-3), 70.2 (C-4), 75.8 (C-5), 62.2 (C-6); glc (rham): 102.8 (C-1), 72.0 (C-2), 72.0 (C-3), 73.7 (C-4), 70.2 (C-5), 18.2 (C-6) [1].

【来源】 车前科车前属车前 *Plantago asiatica* 地表部分 [1]; 玄参科玄参属 *Scrophularia scorodonia* L. [2]; 列当科列当属列当 *Orobanchae caerulea* 全草 [3]; 马钱科醉鱼草属密蒙花 *Buddleja officinalis* 花苞 [4]; 玄参科毛蕊花属 *Verbascum macrurum* 地上部分 [6]; 胡麻科 *Harpagophytum procumbens* 根 [9]; 木犀科女贞属粗壮女贞 *Ligustrum robustum* 叶子 [11]; *Abelophyllum distichum* 叶子 [13]; 唇形科糙苏属 *Phlomis physocalyx* Hub.-Mor. 地上部分 [14]; 马鞭草科大青属海州常山 *Clerodendron trichotomum* 茎干 [15]; 木犀科梣属 *Fraxinus sieboldiana* var. *angustata* [17]; 唇形科荆芥属荆芥 *Nepeta ucrainica* L. 地上部分 [18]; 马鞭草科 *Lippia dulcis* Trev. 地上部分 [20]; 马鞭草科 *Lippia canescens* Kunth 地上部分 [20]; 玄参科婆婆纳属阿拉伯婆婆纳 *Veronica persica* 地上部分 [21]; 唇形

科欧夏至草属欧夏至草 *Marrubium vulgare* [23]; 苦楝科 *Eremophila alternifolia* 叶子 [24]; 列当科肉苁蓉属肉苁蓉 *Cistanche deserticola* 茎干 [25]; 马鞭草科 *Stachytarpheta cayennensis* (L. C. Rich) Vahl 干燥叶子 [26]; 马鞭草科石梓属云南石梓 *Gmelina arborea* 叶子 [27]; 玄参科来江藤属来江藤 *Brandisia hancei* 叶子 [29]; 玄参科玄参属玄参 *Scrophularia ningpoensis* 根 [30]; 玄参科小米草属小米草 *Euphrasia pectinata* 地上部分 [31]; 马钱科醉鱼草属 *Buddleja globosa* 叶子 [32]; 唇形科野芝麻属短柄野芝麻 *Lamium album* 花 [33]; 菊科紫松果菊属 *Echinacea pallida* [34]; 胡麻科胡麻属 *Sesamum angolense* 根皮 [35]; 苦苣苔科吊石苣苔属吊石苣苔 *Lysionotus pauciflorus* [36]; 车前科车前属车前 *Plantago major* Subsp. *major* 叶子 [37].

【分析方法】 色谱柱: RP C₁₈ (Lichrospher 250mm × 10mm); 流动相: H₂O-MeOH-AcOH 梯度洗脱 [34].

HPLC 条件: 美国 PE Series 200 液相色谱泵, Zorbax Rx-C₁₈ (4.6mm × 250mm, 5 μ m). 流动相: 乙腈-甲醇-1% 醋酸 (10:15:75); 流速: 1mL/min; 检测波长: 334nm.

MS 条件: 美国 PE Sciex API 3000 型串联四级杆质谱仪, 使用 ESI 离子源。负离子扫描方式。在 LC-MS 条件下, 第一级四级杆扫描处于全扫描模式, 扫描范围 m/z 400.0~1000.0, 而第三级四级杆处于 RF-ONLY 模式 [38].

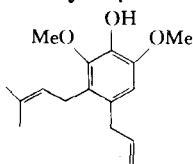
【生物活性与毒性】 具有抑制醛糖还原酶活性 [1]. 具有抗炎活性 [2]. 抗氧化活性. IC_{50} 值为 (0.31 ± 0.01) μ mol/L [3]. 显示很强的自由基清除活性 [25]. 对四氯化碳引起的肝中毒有保护作用 [5]. 具有抗氧化活性, 可以诱导 promyelocytic 白血病 HL-60 细胞死亡, IC_{50} 值为 26.7 μ mol/L [7]. 蛋白激酶 C 的抑制剂 [8]. 对聚 G 羟基自由基加合物有快速修复作用, 修复速率为 1.4×10^9 mol⁻¹ · L · s⁻¹ [10]. 具有弱的抗真菌活性 [12]. 对血管紧张素 I 转化酶有抑制作用, IC_{50} 值为 228mg/mL [13]. 预防 MPP⁺ 诱导的细胞程序死亡, 并能抑制细胞死亡程序的相关途径 [16]. 体外具有免疫调节作用 [18]. 通过抑制内皮 NO 的产生和释放, 或者是抑制 NO-媒介 TEA(+) 感光的对 K⁺ 通道的活化作用来增强血管收缩 [19]. 具有抗肿瘤活性, 对 B16F10 细胞的 GI_{50} 值为 10~16 μ mol/L [20]. 对肺黑瘤细胞 B16 的转移有抑制活性 [22]. 对 PKC α 肿瘤细胞有抑制作用, IC_{50} 值为 9.3 μ mol/L [28].

【参考文献】 [1] RAVN H, et al. Phytochemistry, 1990, 29 (11):3627; [2] Diaz AM, et al. Life Sci, 2004, 74(20):2515; [3] Lin LC, et al. Planta Med, 2004, 70(1):50; [4] Guo H, et al. J Nat Prod, 2004, 67(1):10; [5] Lee KJ, et al. Life Sci, 2004, 74(8):1051; [6] Aligiannis N, et al. J Agric Food Chem, 2003, 51 (25):7308; [7] Inoue M, et al. Biol Pharm Bull, 1998, 21(1):81; [8] Herbert JM, et al. J Nat Prod, 1991, 54(6):1595; [9] Oje K, et al. Planta Med, 2003, 69(9):820; [10] Huang CY, et al. Pharmazie, 2003, 58(9):664; [11] He ZD, et al. J Nat Prod, 2003, 66(6):851; [12] Piao MS, Arch Pharm Res, 2003, 26 (6):453; [13] Oh H, et al. Phytother Res, 2003, 17(7):811; [14] Ersoz T, et al. Z Naturforsch [C], 2003, 58(7-8):471; [15] Kang DG, et al. J Ethnopharmacol, 2003, 89(1):151; [16] Pu X, et al. Planta Med, 2003, 69(1):65; [17] Kim HJ, et al. Planta Med, 2002, 68(11):1034; [18] Akbay P, et al. Phytother Res, 2002, 16(6):593; [19] Tam WY, et al. J Nat Prod, 2002, 65(7):990; [20] Abe F, et al. Biol Pharm Bull, 2002,

25(7):920; [21] Harput US, et al. Chem Pharm Bull(Tokyo), 2002,50(6):869; [22] Ohno T, et al. Biol Pharm Bull, 2002,25(5):666; [23] Sahpaz S, et al. J Ethnopharmacol, 2002,79(3):389; [24] Pennacchio M, et al. J Ethnopharmacol, 1996,53(1):21; [25] Xiong Q, et al. Biol Pharm Bull, 1996,19(12):1580; [26] Schapoval EE, et al. J Ethnopharmacol, 1998,60(1):53; [27] Hosny M, et al. J Nat Prod, 1998,61(6):734; [28] Zhou BN, et al. J Nat Prod, 1998,61(11):1410; [29] Kong LD, et al. Planta Med, 1999,65(8):744; [30] Li YM, et al. Phytochemistry, 2000,54(8):923; [31] Ersoz T, et al. J Nat Prod, 2000,63(10):1449; [32] Pardo F, et al. J Ethnopharmacol, 1993,39(3):221; [33] Budzianowski J, et al. Phytochemistry, 1995,38(4):997; [34] Cheminat A, et al. Phytochemistry, 1988,27(9):2787; [35] Potterat O, et al. Phytochemistry, 1988,27(8):2677; [36] Yong L, et al. Phytochemistry, 1998,48(2):339; [37] Ravn H, et al. Phytochemistry, 1988,27(11):3433; [38] 王义明等. 药学报, 2000,35(11):839.

A0010 4-烯丙基-2,6-二甲氧基-3-(3-甲基-2-丁烯基)苯酚 4-allyl-2,6-dimethoxy-3-(3-methyl-2-butenyl)phenol

【结构式】



【分子式】 $C_{16}H_{22}O_3$

【相对分子质量】 262

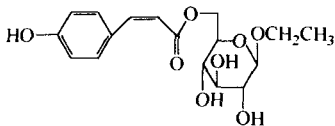
【理化常数及光谱数据】 无色油状物。IR $\nu_{max}^{CHCl_3}$ cm^{-1} : 3540 (OH), 1638 ($-CH=CH_2$)。EI-MS m/z : 262 $[M]^+$, 247, 206, 191, 173, 159, 145, 131, 115, 91。 1H -NMR($CDCl_3$, 100MHz) δ : 1.69(3H, s), 1.78(3H, s), 3.31(4H, br d, $J=6.0$ Hz), 3.84(3H, s), 3.86(3H, s), 5.05(3H, m), 5.52(1H, br t, $J=6.0$ Hz), 5.95(1H, m), 6.52(1H, s)。 ^{13}C -NMR($CDCl_3$, 100MHz) δ : 128.8(C-1), 145.3(C-2), 126.0(C-3), 130.7(C-4), 107.8(C-5), 145.3(C-6), 36.9(C-8), 137.2(C-9), 115.1(C-10), 25.0(C-11), 123.5(C-12), 136.7(C-13), 17.9(C-14), 25.6(C-15), 56.0(OMe), 60.5(OMe)^[1]。

【来源】 木兰科八角属日本莽草 *Illicium anisatum* L. 木质部分^[1]。

【参考文献】 [1] Kenichi Y, et al. Chem Pharm Bull, 1983, 31(8):2879.

A0011 6-O-(Z)-对羟基桂皮酰基乙基葡萄糖苷 6-O-(Z)-p-hydroxy-cinnamoyl-ethyl-glucose

【结构式】



【分子式】 $C_{17}H_{22}O_8$

【相对分子质量】 354

【理化常数及光谱数据】 白色无定形粉末。 $[\alpha]_D^{20} +8.3^\circ$ (c0.1, CH_3OH)。mp 168 ~ 173 $^\circ C$ 。IR ν_{max}^{KBr} cm^{-1} : 3370, 1712, 1603, 1512, 1414, 1382, 1261, 1170,

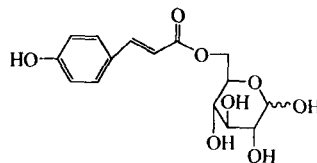
1048, 835, 617。UV λ_{max}^{MeOH} nm(lge): 206(3.79), 286(3.19)。FAB MS(-) m/z %: 353 $[M-H]^-$ 。 1H -NMR($DMSO-d_6$) δ : 酰基片段 6.75(1H, dd, $J=9.0$, 1.5Hz, H-2'), 7.64(1H, dd, $J=9.0$, 1.5Hz, H-3'), 7.64(1H, dd, $J=9.0$, 1.5Hz, H-5'), 6.75(1H, dd, $J=9.0$, 1.5Hz, H-6'), 6.85(1H, d, $J=13.0$ Hz, H-7'), 5.77(1H, d, $J=13.0$ Hz, H-8'), 9.80(OH); 糖片段 4.17(1H, d, $J=7.5$ Hz, H-1 β), 4.36(1H, dd, $J=12.0$, 1.5Hz, H-6A), 4.15(1H, dd, $J=12.0$, 1.5Hz, H-6B), 2.9-3.8(H-2-5), 1.09(t, $J=7.0$ Hz, CH_3), 3.72(m, OCH_2)。 ^{13}C -NMR($DMSO-d_6$) δ : 糖片段 102.7(C-1 β), 73.7(C-2 β), 76.5(C-3 β), 70.1(C-4 β), 73.6(C-5 β), 63.5(C-6 β); 酰基片段 125.4(C-1'), 132.7(C-2'), 115.0(C-3'), 158.9(C-4'), 115.0(C-5'), 132.7(C-6'), 115.3(C-7'), 143.3(C-8'), 166.0(C-9')^[1]。

【来源】 东北马兜铃(*Aristolochia manshuriensis* Kom.) 关木通 *Aristolochia manshuriensis* 干燥木质藤茎^[1]。

【参考文献】 [1] 王瑛等. 兰州大学学报, 2000,36(1):71.

A0012 6-O-(E)-对羟基桂皮酰基葡萄糖 6-O-(E)-p-hydroxy-cinnamoyl-glucose

【结构式】



【分子式】 $C_{15}H_{18}O_8$

【相对分子质量】 326

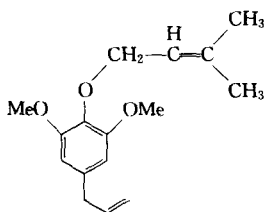
【理化常数及光谱数据】 白色颗粒固体。 $[\alpha]_D^{20} +26.1^\circ$ (c0.1, CH_3OH)。mp 190 ~ 195 $^\circ C$ 。IR ν_{max}^{KBr} cm^{-1} : 3330, 1693, 1607, 1516, 1442, 1334, 1307, 1276, 1255 ~ 1026, 819。UV λ_{max}^{MeOH} nm(lge): 212(4.06), 228(4.05), 312(4.31)。FAB MS(-) m/z %: 325 $[M-H]^-$ 。 1H -NMR($DMSO-d_6$) δ : 酰基片段 6.82(1H, dd, $J=9.0$, 1.5Hz, H-2'), 7.58(1H, dd, $J=9.0$, 1.5Hz, H-3'), 7.58(1H, dd, $J=9.0$, 1.5Hz, H-5'), 6.82(1H, dd, $J=9.0$, 1.5Hz, H-6'), 7.58(1H, d, $J=16.0$ Hz, H-7'), 6.42(1H, d, $J=16.0$ Hz, H-8'), 10.06(OH); 糖片段 5.03(1H, d, $J=4.0$ Hz, H-1 α), 4.17(1H, d, $J=8.5$ Hz, H-1 β), 4.44(1H, dd, $J=12.0$, 1.5Hz, H-6A), 4.37(1H, dd, $J=12.0$, 1.5Hz, H-6B), 2.9-5.2(H-2-5)。 ^{13}C -NMR($DMSO-d_6$) δ : 糖片段 92.3(C-1 α), 96.9(C-1 β), 72.2(C-2 α), 74.8(C-2 β), 73.0(C-3 α), 76.5(C-3 β), 70.7(C-4 α), 70.3(C-4 β), 69.3(C-5 α), 73.6(C-5 β), 63.9(C-6 α), 63.9(C-6 β); 酰基片段 125.1(C-1'), 130.2(C-2'), 115.8(C-3'), 159.8(C-4'), 115.8(C-5'), 130.2(C-6'), 114.0/114.2(C-7'), 144.9(C-8'), 166.6(C-9')^[1]。

【来源】 东北马兜铃(*Aristolochia manshuriensis* Kom.) 关木通 *Aristolochia manshuriensis* 干燥木质藤茎^[1]。

【参考文献】 [1] 王瑛等. 兰州大学学报, 2000,36(1):71.

A0013 1-烯丙基-3,5-二甲氧基-4-(3-甲丁基-2-烯氧基)苯 1-allyl-3,5-dimethoxy-4-(3-methylbut-2-enyloxy)benzene

【结构式】

【分子式】 $C_{16}H_{22}O_3$

【相对分子质量】 262

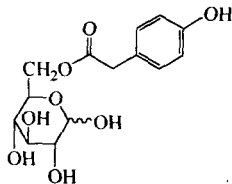
【理化常数及光谱数据】 无色油状物。IR $\nu_{\max}^{CHCl_3}$ cm^{-1} : 2850 (—OMe), 1675 (R—CH=CR'R'), 1640 (—CH=CH₂)。EI-MS m/z : 262 [M]⁺, 246, 221, 194, 179, 153, 151, 147, 133, 131, 119 etc. ¹H-NMR (CDCl₃, 100MHz) δ : 1.66 (3H, s), 1.74 (3H, s), 3.25 (2H, d, J = 6.0 Hz), 3.76 (6H, s), 4.36 (2H, d, J = 6.0 Hz), 5.00 (2H, m), 5.48 (1H, t, J = 6.0 Hz), 5.70–6.10 (1H, m), 6.30 (2H, s)^[1]。

【来源】 木兰科八角属日本莽草 *Illicium anisatum* L. 叶子^[1]。

【参考文献】 [1] Masayuki S, et al. Chem Pharm Bull, 1978, 26(9): 2671。

A0014 6-对羟基苯乙酰基-D-葡萄糖 6-O-p-hydroxyphenylacetyl-D-glucose

【结构式】

【分子式】 $C_{14}H_{18}O_8$

【相对分子质量】 314

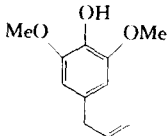
【理化常数及光谱数据】 无定形粉末, 易吸潮。[α]_D²⁷ +20.4° (c 0.1, CH₃OH)。IR $\nu_{\max}$ cm^{-1} : 3407, 2924, 1724, 1615, 1516, 1445, 1224, 1167。EI-MS (m/z , %): 337 [M+Na]⁺, HRFAB MS (—) m/z %: 313.0936 [M—H][−], C₂₂H₂₃O₁₀。 ¹H-NMR (D₂O) δ : 2.91 (m), 3.19 (m), 3.43 (m), 3.70 (m), 4.32 (m), 4.38 (m), 4.61 (d, J = 7.9 Hz, β -glc-H-1), 5.15 (d, J = 3.0 Hz, α -glc-H-1), 6.90 (m), 7.22 (m)。 ¹³C-NMR (C₅D₅N) δ : 125.2, 125.2 (C-1), 131.1, 132.3 (C-2, 6), 116.2 (C-3, 5), 157.9 (C-4), 40.2, 40.2 (C-7), 172.4 (C-8), 94.2 (C-1' α), 98.9 (C-1' β), 74.3 (C-2' α), 76.7 (C-2' β), 75.2 (C-3' α), 78.5 (C-3' β), 72.2 (C-4' α), 71.7 (C-4' β), 70.8 (C-5' α), 75.3 (C-5' β), 65.8 (C-6' α), 65.7 (C-6' β)^[1]。

【来源】 紫菊属 (*Notoseris* Shih) 光苞紫菊 *Notoseris psilolepid* Shih 全草^[1]。

【参考文献】 [1] 叶晓霞等. 有机化学, 2001, 21(9): 693

A0015 4-烯丙基-2,6-二甲氧基苯酚 4-allyl-2,6-dimethoxyphenol

【结构式】

【分子式】 $C_{11}H_{14}O_3$

【相对分子质量】 194

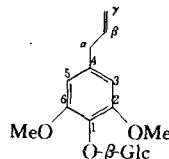
【理化常数及光谱数据】 无色油状物。IR $\nu_{\max}^{CHCl_3}$ cm^{-1} : 3500 (OH), 2850 (—OMe), 1640 (—CH=CH₂)。EI-MS m/z : 194 [M]⁺, 179, 177, 163, 161, 151, 147, 133, 119 etc. ¹H-NMR (CDCl₃, 100MHz) δ : 3.25 (2H, d, J = 6.0 Hz), 3.76 (6H, s), 5.00 (2H, m), 5.30 (1H, s, D-exchangeable), 5.70–6.10 (1H, m), 6.36 (2H, s)^[1]。

【来源】 木兰科八角属日本莽草 *Illicium anisatum* L. 叶子^[1]。

【参考文献】 [1] Masayuki S, et al. Chem Pharm Bull, 1978, 26(9): 2671。

A0016 4-烯丙基-2,6-二甲氧基苯酚葡萄糖苷 4-allyl-2,6-dimethoxyphenol glucoside

【结构式】

【分子式】 $C_{17}H_{24}O_8$

【相对分子质量】 356

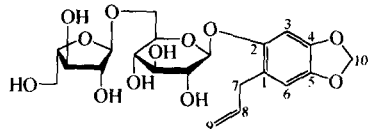
【理化常数及光谱数据】 无色针状晶体 (MeOH), mp 159~161°C。[α]_D −21.7° (MeOH; c 1.61)。IR $\nu_{\max}^{KBr}$ cm^{-1} : 3400, 1590, 1508, 1465, 1425, 1240, 1130, 1070。 ¹H-NMR (pyridine-d₅, 89.55 MHz) δ : 3.34 (2H, d, J = 7.0 Hz, H₂- α), 3.75 (6H, s, H-2 $\times$ OMe), 5.10 (2H, m, H- γ), 5.67 (1H, d, J = 7.0 Hz, H-1'), 6.00 (1H, m, H- β), 6.60 (2H, s, H-3, 5)。 ¹³C-NMR (pyridine-d₅, 22.5 MHz) δ : 40.4 (C- α), 56.7 (C-2 $\times$ OMe), 62.8 (C-6'), 71.7 (C-4'), 76.0 (C-2'), 78.2 (C-5'), 78.3 (C-3'), 105.3 (C-1'), 107.5 (C-3, 5), 115.9 (C- γ), 134.9 (C-4), 136.5 (C-1), 137.8 (C- β), 153.8 (C-2, 6)^[1]。

【来源】 兰科拟线柱兰属 *Macroclinidium trilobum* MAKINO 全草^[1]。

【参考文献】 [1] Toshio M, et al. Chem Pharm Bull, 1985, 33(10): 4445。

A0017 1-烯丙基-4,5-亚甲基二氧苯基-2-O- α -L-呋喃阿拉伯糖 (1 $\rightarrow$ 6)-O- β -D-葡萄糖苷 1-allyl-4,5-methylenedioxyphenol-2-O- α -L-arabinofuranosyl-(1 $\rightarrow$ 6)-O- β -D-glucopyranoside

【结构式】

【分子式】 $C_{21}H_{28}O_{12}$

【相对分子质量】 472

【理化常数及光谱数据】 白色无定形粉末, [α]_D¹⁵ −76.1° (MeOH; c 1.7)。FAB-MS m/z : 495 (M+Na)⁺。 ¹H-NMR (CD₃OD, 300 MHz) δ : 4.92 (1H, d, J = 2.0 Hz, ara-1), 4.69 (1H, d, J = 8.0 Hz, glc-1), 4.05 (1H, dd, J = 2.0, 12.0 Hz, glc-6a), 4.02 (1H, dd, J = 2.0, 3.0 Hz, ara-2), 3.84 (1H, dd, J = 3.0, 6.0 Hz, ara-

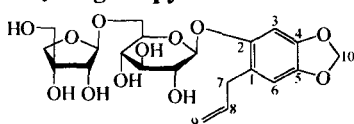
3), 3.72 (1H, dd, $J = 3.0, 11.0$ Hz, ara-5a), 3.62 (1H, dd, $J = 6.0, 11.0$ Hz, ara-5b), 3.61 (1H, dd, $J = 6.0, 12.0$ Hz, glc-6b), 3.54 (1H, ddd, $J = 2.0, 6.0, 9.0$ Hz, glc-5), 3.34-3.46 (4H, m, glc-2, 3, 4, ara-4), 6.82 (1H, s, aglycone-H-3), 6.59 (1H, s, aglycone-H-6), 3.40 (1H, m, aglycone-H-7), 5.95 (1H, ddt, $J = 7.0, 10.0, 17.0$ Hz, aglycone-H-8), 5.03 (1H, dd, $J = 2.0, 17.0$ Hz, aglycone-H-9a), 4.98 (1H, dd, $J = 2.0, 10.0$ Hz, aglycone-H-9b), 5.87 (1H, d, $J = 1.0$ Hz, aglycone-H-10). $^{13}\text{C-NMR}$ (CDCl_3 , 125 MHz) δ : 124.1 (C-1), 151.0 (C-2), 100.9 (C-3), 147.6 (C-4), 144.3 (C-5), 109.8 (C-6), 34.9 (C-7), 138.9 (C-8), 115.5 (C-9), 102.4 (C-10), 111.0 (Arabinose-C-1), 85.8 (Arabinose-C-2), 78.8 (Arabinose-C-3), 83.2 (Arabinose-C-4), 62.9 (Arabinose-C-5), 104.3 (glc-C-1), 75.0 (glc-C-2), 78.2 (glc-C-3), 71.8 (glc-C-4), 76.7 (glc-C-5), 68.3 (glc-C-6)^[1].

【来源】八角属日本莽草 *Illicium anisatum* 新鲜果实^[1]。

【参考文献】[1] Jiang ZH, et al. Chem Pharm Bull, 1999, 47(3):421.

A0018 1-烯丙基-4,5-亚甲基二氧苯基-2-O- α -D-呋喃阿拉伯糖(1 $\rightarrow$ 6)-O- β -D-葡萄糖苷 1-allyl-4,5-methylenedioxyphenol-2-O- α -D-apiofuranosyl-(1 $\rightarrow$ 6)-O- β -D-glucopyranoside

【结构式】



【分子式】 $\text{C}_{21}\text{H}_{28}\text{O}_{12}$

【相对分子质量】 472

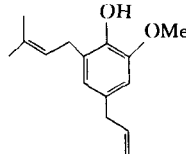
【理化常数及光谱数据】白色无定形粉末, $[\alpha]_D^{25} -64.8^\circ$ (MeOH; c 0.6)。FAB-MS m/z : 495 $[\text{M}+\text{Na}]^+$, 472 $[\text{M}]^+$ 。 $^1\text{H-NMR}$ (CD_3OD , 300 MHz) δ : 4.98 (1H, d, $J = 2.0$ Hz, api-1), 4.67 (1H, d, $J = 8.0$ Hz, glc-1), 3.99 (1H, dd, $J = 2.0, 12.0$ Hz, glc-6a), 3.98 (1H, d, $J = 11.0$ Hz, api-4a), 3.90 (1H, d, $J = 2.0$ Hz, api-2), 3.76 (1H, d, $J = 11.0$ Hz, api-4b), 3.63 (1H, dd, $J = 6.0, 12.0$ Hz, glc-6b), 3.58 (2H, s, api-5), 3.52 (1H, ddd, $J = 2.0, 6.0, 9.0$ Hz, glc-5), 3.33-3.46 (3H, m, glc-2, 3, 4), 6.83 (1H, s, aglycone-H-3), 6.60 (1H, s, aglycone-H-6), 3.40 (1H, m, aglycone-H-7), 5.96 (1H, ddt, $J = 6.9, 17.0$ Hz, aglycone-H-8), 5.02 (1H, dd, $J = 3.0, 17.0$ Hz, aglycone-H-9a), 4.99 (1H, dd, $J = 3.0, 9.0$ Hz, aglycone-H-9b), 5.88 (1H, d, $J = 1.0$ Hz, aglycone-H-10). $^{13}\text{C-NMR}$ (CDCl_3 , 125 MHz) δ : 124.2 (C-1), 151.0 (C-2), 101.0 (C-3), 147.6 (C-4), 144.3 (C-5), 109.9 (C-6), 34.9 (C-7), 138.9 (C-8), 115.6 (C-9), 102.4 (C-10), 111.0 (Apiose-C-1), 78.2 (Apiose-C-2), 80.5 (Apiose-C-3), 75.0 (Apiose-C-4), 65.8 (Apiose-C-5), 104.3 (glc-C-1), 75.0 (glc-C-2), 78.2 (glc-C-3), 71.6 (glc-C-4), 76.8 (glc-C-5), 69.0 (glc-C-6)^[1]。

【来源】八角属日本莽草 *Illicium anisatum* 新鲜果实^[1]。

【参考文献】[1] Jiang ZH, et al. Chem Pharm Bull, 1999, 47(3):421.

A0019 4-烯丙基-2-甲氧基-6-(3-甲基-2-丁烯基)苯酚 4-allyl-2-methoxy-6-(3-methyl-2-butenyl)phenol

【结构式】



【分子式】 $\text{C}_{15}\text{H}_{20}\text{O}_2$

【相对分子质量】 232

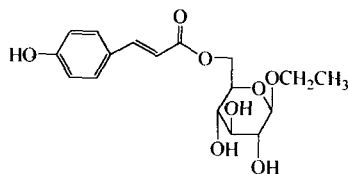
【理化常数及光谱数据】无色油状物。IR $\nu_{\text{max}}^{\text{CHCl}_3}$ cm^{-1} : 3525 (OH), 1630 ($-\text{CH}=\text{CH}_2$)。EI-MS m/z : 232 $[\text{M}]^+$, 191, 177, 151, 147, 131, 115, 91. $^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3 , 100 MHz) δ : 1.76 (6H, s), 3.34 (4H, m), 3.88 (3H, s), 5.08 (2H, m), 5.34 (1H, br t, $J = 6.0$ Hz), 5.56 (1H, s, OH), 5.96 (1H, m), 6.57 (2H, s). $^1\text{H-NMR}$ [$(\text{CD}_3)_2\text{CO}$, 100 MHz] δ : 1.73 (6H, s), 3.31 (4H, m), 3.82 (3H, s), 5.06 (2H, m), 5.33 (1H, br t), 5.95 (1H, m), 6.58 (1H, br d, $J = 2.0$ Hz), 6.69 (1H, br d, $J = 2.0$ Hz), 7.17 (1H, s, OH). $^{13}\text{C-NMR}$ (CDCl_3 , 100 MHz) δ : 141.3 (C-1), 145.9 (C-2), 108.5 (C-3), 130.7 (C-4), 122.2 (C-5), 126.8 (C-6), 39.9 (C-8), 137.7 (C-9), 115.1 (C-10), 28.2 (C-11), 121.5 (C-12), 132.1 (C-13), 17.8 (C-14), 25.7 (C-15), 55.9 (OMe)^[1]。

【来源】木兰科八角属日本莽草 *Illicium anisatum* L. 叶子^[1]。

【参考文献】[1] Kenichi Y, et al. Chem Pharm Bull, 1983, 31(8):2879.

A0020 6-O-(E)-对羟基桂皮酰基乙基葡萄糖苷 6-O-(E)-p-hydroxy-cinnamoyl-ethyl-glucose

【结构式】



【分子式】 $\text{C}_{17}\text{H}_{22}\text{O}_8$

【相对分子质量】 354

【理化常数及光谱数据】白色无定形粉末。 $[\alpha]_D^{20} +8.3^\circ$ (c 0.1, CH_3OH)。mp $168 \sim 173^\circ\text{C}$ 。IR $\nu_{\text{max}}^{\text{KBr}}$ cm^{-1} : 3370, 1712, 1603, 1512, 1414, 1382, 1261, 1170, 1048, 835, 617。UV $\lambda_{\text{max}}^{\text{MeOH}}$ nm (lg ϵ): 206 (3.79), 286 (3.19)。FAB MS ($-$) m/z %: 353 $[\text{M}-\text{H}]^-$. $^1\text{H-NMR}$ ($\text{DMSO}-d_6$) δ : 酰基片段 6.78 (1H, dd, $J = 9.0, 1.5$ Hz, H-2'), 7.55 (1H, dd, $J = 9.0, 1.5$ Hz, H-3'), 5.5 (1H, dd, $J = 9.0, 1.5$ Hz, H-5'), 6.78 (1H, dd, $J = 9.0, 1.5$ Hz, H-6'), 7.55 (1H, d, $J = 16.0$ Hz, H-7'), 6.41 (1H, d, $J = 16.0$ Hz, H-8'), 9.80 (OH); 糖片段 4.17 (1H, d, $J = 7.5$ Hz, H-1 β), 4.36 (1H, dd, $J = 12.0, 1.5$ Hz, H-6A), 4.15 (1H, dd, $J = 12.0, 1.5$ Hz, H-6B), 2.9-3.8 (H-2-5), 1.09 (t, $J = 7.0$ Hz, CH_3), 3.72 (m, OCH_2). $^{13}\text{C-NMR}$ ($\text{DMSO}-d_6$) δ : 糖片段 102.7

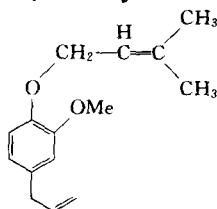
(C-1 β), 73.7(C-2 β), 76.5(C-3 β), 70.1(C-4 β), 73.4(C-5 β), 64.1(C-6 β) 酰基片段 125.1(C-1'), 130.5(C-2'), 115.8(C-3'), 160.0(C-4'), 115.8(C-5'), 130.5(C-6'), 114.0(C-7'), 145.0(C-8'), 166.7(C-9')^[1]。

【来源】东北马兜铃(*Aristolochia manshuriensis* Kom.) 关木通 *Aristolochia manshuriensis* 干燥木质藤茎^[1]。

【参考文献】[1] 王瑛等. 兰州大学学报, 2000, 36(1): 71。

A0021 1-烯丙基-3-甲氧基-4-(3-甲丁基-2-烯氧基) 苯 1-allyl-3-methoxy-4-(3-methylbut-2-enyloxy) benzene

【结构式】



【分子式】C₁₅H₂₀O₂

【相对分子质量】232

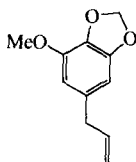
【理化常数及光谱数据】无色油状物。IR $\nu_{\max}^{\text{CHCl}_3}$ cm⁻¹: 1675(R-CH=CR'R''), 1640(-CH=CH₂)。EI-MS m/z : 232[M]⁺, 164, 149, 133, 121, 104 etc. ¹H-NMR(CDCl₃, 100MHz) δ : 1.70(3H, s), 1.76(3H, s), 3.25(2H, d, J=6.0Hz), 3.76(3H, s), 4.44(2H, d, J=6.0Hz), 5.00(2H, m), 5.48(1H, t, J=6.0Hz), 5.70-6.10(1H, m), 6.64(1H, s), 6.58-6.82(2H, AB type, J=4.0Hz)^[1]。

【来源】木兰科八角属日本莽草 *Illicium anisatum* L. 叶子^[1]。

【参考文献】[1] Masayuki S, et al. Chem Pharm Bull, 1978, 26(9): 2671。

A0022 5-烯丙基-1-甲氧基-2,3-亚甲基二氧苯 5-allyl-1-methoxy-2,3-methylene dioxybenzene

【结构式】



【分子式】C₁₁H₁₂O₃

【相对分子质量】192

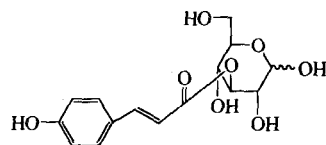
【理化常数及光谱数据】无色油状物。IR $\nu_{\max}^{\text{CHCl}_3}$ cm⁻¹: 1630(-CH=CH₂), 935(-OCH₂O)。EI-MS m/z : 192[M]⁺, 161, 147, 131, 119, 91. ¹H-NMR(CDCl₃, 100MHz) δ : 3.31(2H, br d, J=6.0Hz), 3.90(3H, s), 5.08(2H, m), 5.95(2H, s), 5.96(1H, m), 6.38(1H, br s), 6.41(1H, br s). ¹³C-NMR(CDCl₃, 100MHz) δ : 134.3(C-1), 148.6(C-2), 102.5(C-3), 134.3(C-4), 107.6(C-5), 143.2(C-6), 101.0(C-7), 40.1(C-8), 137.0(C-9), 115.6(C-10), 56.4(OMe)^[1]。

【来源】木兰科八角属日本莽草 *Illicium anisatum* L. 叶子^[1]。

【参考文献】[1] Kenichi Y, et al. Chem Pharm Bull, 1983, 31(8): 2879。

A0023 3-O-(E)-对羟基桂皮酰基葡萄糖 3-O-(E)-p-hydroxy-cinnamoyl-glucose

【结构式】



【分子式】C₁₅H₁₈O₈

【相对分子质量】326

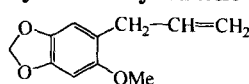
【理化常数及光谱数据】淡褐色无定形粉末。[α]_D²⁰ +38.9°(c0.1, CH₃OH)。IR $\nu_{\max}^{\text{KBr}}$ cm⁻¹: 3356, 1698, 1627, 1602, 1512, 1442, 1327, 1262, 1202, 1169, 1023, 996, 833. UV $\lambda_{\max}^{\text{MeOH}}$ nm(lge): 213(3.94), 310(4.11). FAB MS(-) m/z %: 325[M-H]⁻. ¹H-NMR(DMSO-d₆) δ : 酰基片段 6.79(1H, dd, J=8.5, 1.5Hz, H-2'), 7.56(1H, dd, J=8.5, 1.5Hz, H-3'), 7.56(1H, dd, J=8.5, 1.5Hz, H-5'), 6.79(1H, dd, J=8.5, 1.5Hz, H-6'), 7.54(1H, d, J=15.5Hz, H-7'), 6.41(1H, d, J=15.5Hz, H-8'), 10.0(OH); 糖片段 4.97(1H, d, J=3.5Hz, H-1 α), 4.41(1H, d, J=7.5Hz, H-1 β), 3.0-5.2(H-6A), 3.0-5.2(H-6B), 3.0-5.2(H-2-5). ¹³C-NMR(DMSO-d₆) δ : 糖片段 92.2(C-1 α), 96.8(C-1 β), 70.4(C-2 α), 72.8(C-2 β), 75.5(C-3 α), 77.8(C-3 β), 68.2(C-4 α), 68.1(C-4 β), 72.0(C-5 α), 76.5(C-5 β), 60.8(C-6 α), 60.8(C-6 β); 酰基片段 125.1(C-1'), 130.2(C-2'), 115.8(C-3'), 159.8(C-4'), 115.8(C-5'), 130.2(C-6'), 115.1/115.2(C-7'), 144.0/144.2(C-8'), 166.2/166.4(C-9')^[1]。

【来源】东北马兜铃(*Aristolochia manshuriensis* Kom.) 关木通 *Aristolochia manshuriensis* 干燥木质藤茎^[1]。

【参考文献】[1] 王瑛等. 兰州大学学报, 2000, 36(1): 71。

A0024 1-烯丙基-2-甲氧基-4,5-亚甲基二氧苯 1-allyl-2-methoxy-4,5-methylene dioxybenzene

【结构式】



【分子式】C₁₁H₁₂O₃

【相对分子质量】192

【理化常数及光谱数据】无色油状物。IR $\nu_{\max}^{\text{CHCl}_3}$ cm⁻¹: 2850(-OMe), 2780(-OCH₂O-), 1640(-CH=CH₂)。EI-MS m/z : 192[M]⁺, 177, 165, 161, 147, 135, 131, 119 etc. ¹H-NMR(CDCl₃, 100MHz) δ : 3.25(2H, d, J=6.0Hz), 3.76(3H, s), 5.00(2H, m), 5.70-6.10(1H, m), 5.80(2H, s), 6.50(1H, s), 6.62(1H, s)^[1]。

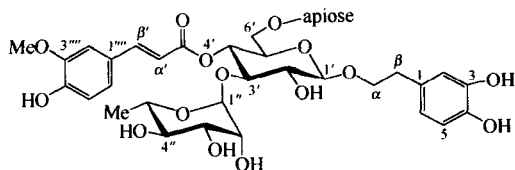
【来源】木兰科八角属日本莽草 *Illicium anisatum* L. 叶子^[1]。

【参考文献】[1] Masayuki S, et al. Chem Pharm Bull, 1978, 26(9): 2671。

A0025 欧夏至草苷 alyssonoside

【异名】 β -(3,4-dihydroxyphenyl) ethyl-O- α -L-rhamnopyranosyl-(1 $\rightarrow$ 3)-O- β -D-apiopyranosyl-(1 $\rightarrow$ 6)-4-O-feruloyl- β -D-glucopyranoside

【结构式】

【分子式】 $C_{35}H_{46}O_{19}$

【相对分子质量】 770.7

【理化常数及光谱数据】 无定形粉末。UV λ_{max}^{MeOH} nm: 206, 235(sh), 288(sh), 264. IR ν_{max}^{KBr} cm^{-1} : 3500, 1685, 1620, 1590, 1505. FAB-MS (m/z , %): 793.1 [$M+Na$]⁺, 177[feruloyl]⁺. ¹H-NMR(CD_3OD , 400MHz) δ : 1.08(3H, d, $J=6.2$ Hz, H_3-6''), 2.79(1H, t, $J=7.4$ Hz, $H-\beta$), 3.28(1H, $J=9.6$ Hz, $H-4''$), 3.38(1H, dd, $J=7.9, 9.2$ Hz, $H-2''$), 3.5(1H, m, $H-5''$), 3.5-3.6(1H, $H-6'a$), 3.53(1H, br s, $H-4''$), 3.56(1H, dd, $J=3.4, 9.6$ Hz, $H-3''$), 3.65-3.75(1H, $H-5'$), 3.70(1H, m, $H-\alpha$), 3.72(1H, d, $J=9.6$ Hz, $H-5''$), 3.80(1H, t, $J=9.2$ Hz, $H-3'$), 3.86(1H, d, $J=2.2$ Hz, $H-2''$), 3.87-3.92(1H, $H-6b$), 3.88(3H, s, H_3-OMe), 3.90(1H, $H-2''$), 3.91(1H, d, $J=9.6$ Hz, $H-5''$), 4.04(1H, m, $H-\alpha$), 4.36(1H, d, $J=7.9$ Hz, $H-1'$), 4.90(1H, d, $J=2.2$ Hz, $H-1''$), 4.94(1H, t, $J=9.7$ Hz, $H-4'$), 5.18(1H, d, $J=1.4$ Hz, $H-1''$), 6.37(1H, d, $J=15.9$ Hz, $H-\alpha'$), 6.56(1H, dd, $J=2.8, 8$ Hz, $H-6$), 6.67(1H, d, $J=8$ Hz, $H-5$), 6.69(1H, $J=2$ Hz, $H-2$), 6.80(1H, d, $J=8.2$ Hz, $H-5''$), 7.08(1H, dd, $J=2, 8.2$ Hz, $H-6''$), 7.20(1H, d, $J=2$ Hz, $H-2''$), 7.65(1H, d, $J=15.9$ Hz, $H-\beta$). ¹³C-NMR(CD_3OD , 50MHz) δ Aglycone: 131.5(s, C-1), 116.4(d, C-2), 146.1(s, C-3), 144.7(s, C-4), 117.1(d, C-5), 121.3(d, C-6), 72.3(t, C- α), 36.6(t, C- β); Glucose: 104.3(d, C-1'), 76.2(d, C-2'), 81.5(d, C-3'), 71.0(d, C-4'), 74.6(d, C-5'), 68.5(t, C-6'); Rhamnose: 103.0(d, C-1''), 72.3(d, C-2''), 72.1(d, C-3''), 73.8(d, C-4''), 70.4(d, C-5''), 18.4(q, C-6''); Apiose: 111.1(d, C-1'''), 78.1(d, C-2'''), 80.6(s, C-3'''), 75.1(t, C-4'''), 65.7(t, C-5'''); Feruloyl: 127.7(s, C-1''), 111.9(d, C-2''), 149.3(s, C-3''), 149.7(s, C-4''), 116.5(d, C-5''), 124.3(d, C-6''), 115.2(d, C- α'), 147.9(d, C- β'), 168.0(s, C=C=O), 56.5(q, C-OMe)^[1].

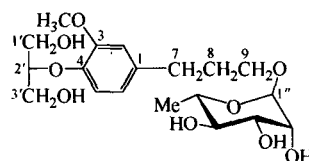
【来源】 唇形科欧夏至草属 *marrubium alysson* 地上部分^[1]; 唇形科糙苏属 *Phlomis integrifolia* 地上部分^[2]; 唇形科糙苏属 *Phlomis pungens* var. *pungens*^[3]; 大戟科斑籽属 *Ballota nigra* 地上部分^[4]; 唇形科独一味属独一味 *Lamiophlomis rotata* (Benth.) Kudm 根^[5].

【生物活性与毒性】 对自由基诱导的内皮依赖性舒张有抑制作用^[3]。

【参考文献】 [1] Calis I, et al. Phytochemistry, 1992, 31(10): 3624; [2] Saracoglu I, et al. Z Naturforsch[C], 2003, 58(11~12): 820; [3] Ismailoglu UB, et al. J Ethnopharmacol, 2002, 79(2): 193; [4] Didry N, et al. J Ethnopharmacol, 1999, 67(2): 197; [5] 易进海等. 药学报, 1995, 30(3): 206.

A0026 蛇葡萄鼠李糖苷 ampelopsisirhamnoside

【结构式】

【分子式】 $C_{19}H_{30}O_9$

【相对分子质量】 402

【理化常数及光谱数据】 无色油状物, $[\alpha]_D -18.1^\circ$ (c 0.04). IR ν_{max}^{KBr} cm^{-1} : 3380, 2910, 1600, 1380, 1260, 1090, 1045. EI and HR-MS (m/z , %): 402.190 [M^+] (100), 328.153 [$M-C_3H_6O_2$]⁺ (7), 298 (11), 284 (29), 267 (9), 255.123 [$M-H-146$]⁺ (56), 210 (90), 181 (72), 137 (93). FAB-MS (m/z , %): 401 [$M-H$]⁻ (100), 255 (19). ¹H-NMR (MeOH- d_4 , 400MHz) δ : 6.84(1H, d, $J=2.1$ Hz, $H-2$), 7.00(1H, d, $J=8.2$ Hz, $H-5$), 6.73(1H, dd, $J=8.2, 2.1$ Hz, $H-6$), 2.66(2H, m, H_2-7), 1.89(2H, m, H_2-8), 3.36, 3.65 (each 1H, m, H_2-9), 3.84(3H, s, H_3-OCH_3), 3.74, 3.76 (each 2H, each d, $J=5.0$ Hz, H_2-1' , H_2-3'), 4.16(1H, q, $J=5.0$ Hz, $H-2'$), 4.64(1H, d, $J=1.5$ Hz, $H-1''$), 3.79(1H, dd, $J=3.4, 1.5$ Hz, $H-2''$), 3.65(1H, m, $H-3''$), 3.36(1H, t, $J=9.5$ Hz, $H-4''$), 3.57(1H, dd, $J=9.5, 6.4$ Hz, $H-5''$), 1.23(3H, d, $J=6.4$ Hz, H_3-6''). ¹³C-NMR (MeOH- d_4 , 100MHz) δ : 138.1(s, C-1), 114.2(d, C-2), 152.1(s, C-3), 152.1(s, C-4), 119.6(d, C-5), 122.0(d, C-6), 32.5(t, C-7), 33.1(t, C-8), 67.8(t, C-9), 56.6(q, C- OCH_3), 62.2(t, C-1'), 83.4(d, C-2'), 62.2(t, C-3'), 101.8(d, C-1''), 72.6(d, C-2''), 72.4(d, C-3''), 74.1(d, C-4''), 69.9(d, C-5''), 18.0(q, C-6'')^[1].

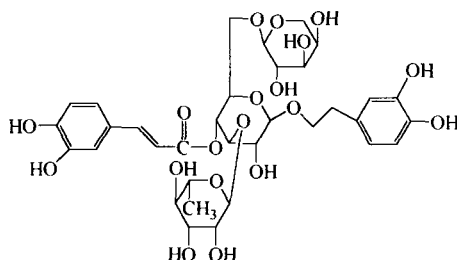
【来源】 葡萄科蛇葡萄属东北蛇葡萄 *Ampelopsis brevipedunculata* (Maxim.) Trautv. 茎^[1].

【参考文献】 [1] Inada A, et al. Chem Pharm Bull, 1991, 39(9): 2437.

A0027 安哥劳苷 A angoroside A

【异名】 3, 4-dihydroxy- β -phenylethoxy- O - α -L-arabinopyranosyl-(1 $\rightarrow$ 6)- α -L-rhamnopyranosyl-(1 $\rightarrow$ 3)-4- O -caffeoyl- β -D-glucopyranoside

【结构式】

【分子式】 $C_{34}H_{44}O_{19}$

【相对分子质量】 756.71

【理化常数及光谱数据】 无定形物质, $[\alpha]_D^{20} -68.75^\circ$ (MeOH; c 0.32). IR ν_{max}^{KBr} cm^{-1} : 3400, 1690, 1625, 1600, 1515. UV λ_{max}^{MeOH} nm: 332, 288, 248, 218, 206. FAB-MS m/z : 757 [$M+H$]⁺, 779 [$M+Na$]⁺. ¹H-NMR (CD_3OD , 300MHz) δ Aglycone moiety: 6.72

(1H, d, $J=2.0$ Hz, H-2), 6.68 (1H, d, $J=8.0$ Hz, H-5), 6.57 (1H, dd, $J=8.0, 2.0$ Hz, H-6), 4.03 (m, H- α), 3.79-3.7 (m, H- β); Glucose: 4.38 (1H, d, $J=7.9$ Hz, H-1'), 3.39 (1H, dd, $J=7.9, 9.0$ Hz, H-2'), 3.81 (t, $J=9.0$ Hz, H-3'), 4.98 (t, $J=9.5$ Hz, H-4'), 3.79-3.70 (1H, H-5'), 3.60-3.44 (1H, H-6A'), 3.86 (1H, dd, $J=1.4, 11.5$ Hz, H-6B'); Arabinose moiety: 4.23 (1H, d, $J=6.7$ Hz, H-1''), 3.60-3.44 (1H, H-2''), 3.60-3.44 (1H, H-3''), 3.29 (1H, H-4''), 3.79-3.70 (1H, H-5'' eq), 3.60-3.44 (1H, H-5'' ax); Rhamnose moiety: 5.18 (1H, d, $J=1.3$ Hz, H-1'''), 3.92 (1H, dd, $J=1.7, 3.0$ Hz, H-2'''), 3.60-3.44 (1H, H-3'''), 3.29 (1H, H-4'''), 3.60-3.44 (1H, H-5'''), 1.09 (1H, d, $J=6.2$ Hz, H-6'''); Caffeic moiety: 7.06 (1H, $J=1.9$ Hz, H-2''), 6.78 (1H, d, $J=8.2$ Hz, H-5''), 7.0 (1H, dd, $J=1.9, 8.2$ Hz, H-6''), 6.27 (1H, $J=15.9$ Hz, H- α'), 7.60 (1H, $J=15.9$ Hz, H- β'). $^{13}\text{C-NMR}$ (CD_3OD) δ Aglycone moiety: 131.6 (C-1), 116.6 (C-2), 146.3 (C-3), 144.7 (C-4), 117.2 (C-5), 121.4 (C-6), 72.4 (C- α), 36.7 (C- β); glucose moiety: 105.1 (C-1'), 72.2 (C-2'), 81.7 (C-3'), 70.5 (C-4'), 75.0 (C-5'), 69.1 (C-6'); Arabinose: 104.2 (C-1''), 72.1 (C-2''), 73.9 (C-3''), 70.0 (C-4''), 66.8 (C-5''); Rhamnose: 103.1 (C-1'''), 72.4 (C-2'''), 72.4 (C-3'''), 74.1 (C-4'''), 70.5 (C-5'''), 18.6 (C-6'''); caffeoyl moiety: 127.7 (C-1''), 114.7 (C-2''), 146.9 (C-3''), 149.9 (C-4''), 116.4 (C-5''), 123.3 (C-6''), 115.3 (C- α'), 148.3 (C- β'), 168.4 (C=O)[1].

【来源】 玄参科玄参属斯克波玄参 *Scrophularia scopoli* var. *scopoli* 根[1]; 玄参科玄参属 *Scrophularia scorodonia* L.[2]; 大戟科斑籽属 *Ballota nigra* 地上部分[3]; 玄参科毛蕊花属 *Verbascum spinosum* 地上部分[4].

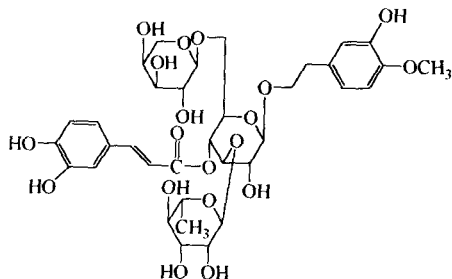
【生物活性与毒性】 对革兰阳性菌有抑制活性[2]. 具有抗炎活性[2].

【参考文献】 [1] Calis I, et al. *Phytochemistry*, 1987, 26 (7): 2057; [2] Diaz AM, et al. *Life Sci*, 2004, 74 (20): 2515; [3] Didry N, et al. *J Ethnopharmacol*, 1999, 67 (2): 197; [4] Kalpoutzakis E, et al. *J Nat Prod*, 1999, 62 (2): 342.

A0028 安哥罗苷 B angoroside B

【异名】 3-hydroxy-4-methoxy- β -phenylethoxy- O - α -L-arabinopyranosyl-(1 $\rightarrow$ 6)- α -L-rhamnopyranosyl-(1 $\rightarrow$ 3)-4- O -caffeoyl- β -D-glucopyranoside

【结构式】



【分子式】 $\text{C}_{35}\text{H}_{46}\text{O}_{19}$

【相对分子质量】 770.73

【理化常数及光谱数据】 无定形物质, $[\alpha]_D^{20} -65.7^\circ$ (MeOH; c 0.38). IR $\nu_{\text{max}}^{\text{KBr}}$ cm^{-1} : 3400, 1680, 1620,

1590, 1505. UV $\lambda_{\text{max}}^{\text{MeOH}}$ nm: 329, 288 (sh), 229 (sh), 218, 205. FAB-MS m/z : 771 $[\text{M} + \text{H}]^+$, 793 $[\text{M} + \text{Na}]^+$, 493, 485, 441. $^1\text{H-NMR}$ (CD_3OD , 300 MHz) δ Aglycone moiety: 6.71 (1H, d, $J=2.0$ Hz, H-2), 6.69 (1H, d, $J=8.0$ Hz, H-5), 6.57 (1H, dd, $J=8.0, 2.0$ Hz, H-6), 4.03 (m, H- α), 3.78-3.70 (H- α), 2.79 (t, $J=7.3$ Hz, H- β), 3.89 (s, OMe); Glucose: 4.38 (1H, d, $J=7.9$ Hz, H-1'), 3.39 (1H, dd, $J=9.1, 8.0$ Hz, H-2'), 3.90-3.70 (H-3'), 4.97 (t, $J=9.5$ Hz, H-4'), 3.90-3.70 (H-5'), 3.62-3.53 (1H, H-6'), 3.90-3.70 (H-6'); Arabinose moiety: 4.24 (1H, d, $J=6.6$ Hz, H-1''), 3.62-3.53 (1H, H-2''), 3.48 (1H, dd, $J=8.7, 3.4$ Hz, H-3''), 3.90-3.70 (1H, H-4''), 3.90-3.70 (1H, H-5'' eq), 3.46 (1H, dd, $J=12.3, 1.6$ Hz, H-5'' ax); Rhamnose moiety: 5.19 (1H, d, $J=1.7$ Hz, H-1'''), 3.91 (1H, dd, $J=3.2, 1.7$ Hz, H-2'''), 3.62-3.53 (1H, H-3'''), 3.29 (1H, t, $J=9.5$ Hz, H-4'''), 3.62-3.53 (1H, H-5'''), 1.10 (1H, d, $J=6.2$ Hz, H-6'''); Acyl moiety: 7.19 (1H, $J=1.9$ Hz, H-2''), 6.81 (1H, d, $J=8.1$ Hz, H-5''), 7.08 (1H, dd, $J=8.1, 1.9$ Hz, H-6''), 6.36 (1H, $J=15.9$ Hz, H- α'), 7.66 (1H, $J=15.9$ Hz, H- β'). $^{13}\text{C-NMR}$ (CD_3OD) δ Aglycone moiety: 131.5 (C-1), 111.8 (C-2), 146.1 (C-3), 144.7 (C-4), 117.1 (C-5), 121.3 (C-6), 72.4 (C- α), 36.5 (C- β), 56.4 (OMe); glucose moiety: 105.0 (C-1'), 76.1 (C-2'), 81.5 (C-3'), 70.5 (C-4'), 74.9 (C-5'), 68.9 (C-6'); Arabinose: 104.1 (C-1''), 72.4 (C-2''), 73.8 (C-3''), 69.5 (C-4''), 66.8 (C-5''); Rhamnose: 103.0 (C-1'''), 72.4 (C-2'''), 72.0 (C-3'''), 74.0 (C-4'''), 70.5 (C-5'''), 18.4 (C-6'''); caffeoyl moiety: 127.7 (C-1''), 115.1 (C-2''), 146.4 (C-3''), 150.9 (C-4''), 116.6 (C-5''), 124.4 (C-6''), 116.3 (C- α'), 148.1 (C- β'), 168.1 (C=O)[1].

【来源】 玄参科玄参属斯科波利玄参变种 *Scrophularia scopoli* (Hoppe ex) Pers. Var. *scopoli* 根[1].

【生物活性与毒性】 体外对革兰阳性菌有抑制活性[2].

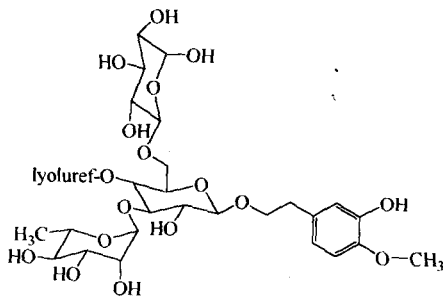
【分析方法】 色谱柱: C_{18} (1.8 cm $\times$ 80 cm); 流动相: H_2O -MeOH (10%~40%) 梯度洗脱[1].

【参考文献】 [1] Calis I, et al. *Phytochemistry*, 1988, 27 (5): 1465; [2] CA 1989, 111: 93776f.

A0029 安哥罗苷 C angoroside C

【异名】 3-hydroxy-4-methoxy- β -phenylethoxy- O - α -L-arabinopyranosyl-(1 $\rightarrow$ 6)- α -L-rhamnopyranosyl-(1 $\rightarrow$ 3)-4- O -feruloyl- β -D-glucopyranoside

【结构式】



【分子式】 $\text{C}_{36}\text{H}_{48}\text{O}_{19}$

【相对分子质量】 784

【理化常数及光谱数据】 $[\alpha]_D^{20} - 80.4^\circ$ (MeOH; c 0.38)。IR $\nu_{\text{max}}^{\text{KBr}}$ cm^{-1} : 3400, 1685, 1620, 1590 and 1505。UV $\lambda_{\text{max}}^{\text{MeOH}}$ nm: 329, 288sh, 229sh, 218, 204。FAB-MS (glycerine) m/z : 785 ($[M+H]^+$, calc. for $C_{36}H_{48}O_{19}$; 784.76), 807 ($[M+Na]^+$), 823 ($[M+K]^+$), 877 ($[M+\text{glycerine}]^+$), 653 ($[M-\text{arabinose}]^+$), 639 ($[M-\text{rhamnose}]^+$), 617 ($[M-\text{aglycone}]^+$), 507 ($[M-\text{rhamnose-arabinose}]^+$), 485 ($[M-\text{aglycone-arabinose}]^+$), 471 ($[M-\text{aglycone-rhamnose}]^+$), 339 ($[4'-O\text{-feruloyl-}\beta\text{-D-glucose}]^+$ and $177[\text{feruloyl}]^+$)。 $^1\text{H-NMR}$ (CD_3OD) δ Aglycone: 6.75 (1H, d, $J=2\text{Hz}$, H-2), 6.83 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$, H-5), 6.70 (1H, dd, $J=8.2, 2.0\text{Hz}$, H-6), 4.05 (1H, m, H- α), 3.80-3.72* (H- α), 2.83 (1H, t, $J=7.2\text{Hz}$, H- β), 3.89 (3H, s, OMe); Glucose: 4.38 (1H, d, $J=7.9\text{Hz}$, H-1'), 3.40 (1H, dd, $J=9.0, 7.9\text{Hz}$, H-2'), 3.90-3.72* (H-3'), 4.97 (1H, t, $J=9.5\text{Hz}$, H-4'), 3.9-3.72* (H-5'), 3.62-3.53* (H-6'), 3.9-3.72* (H-6'); Arabinose: 4.24 (1H, d, $J=6.6\text{Hz}$, H-1''), 3.62-3.53* (H-2''), 3.48 (1H, dd, $J=8.7, 3.4\text{Hz}$, H-3''), 3.9-3.7* (H-4''), 3.9-3.7* (Heq-5''), 3.47 (1H, dd, $J=12.3, 1.6\text{Hz}$, H'ax-5''); Rhamnose: 5.20 (1H, d, $J=1.7\text{Hz}$, H-1'''), 3.91 (1H, dd, $J=3.3, 1.7\text{Hz}$, H-2'''), 3.62-3.53* (H-3'''), 3.29 (1H, t, $J=9.4\text{Hz}$, H-4'''), 3.62-3.53* (H-5'''), 1.1 (1H, d, $J=6.2\text{Hz}$, H-6'''); Acyl moiety: 7.2 (1H, d, $J=1.8\text{Hz}$, H-2'''), 6.81 (1H, d, $J=8.2\text{Hz}$, H-5'''), 7.08 (1H, dd, $J=8.2, 1.9\text{Hz}$, H-6'''), 6.37 (1H, d, $J=15.9\text{Hz}$, H- α'), 7.66 (1H, d, $J=15.9\text{Hz}$, H- β'), 3.82 (3H, s, OMe)。* Signal pattern unclear due to overlapping。 $^{13}\text{C-NMR}$ (CD_3OD) δ Aglycone: 133.0 (C-1), 112.9 (C-2), 147.6 (C-3), 147.4 (C-4), 117.2 (C-5), 121.3 (C-6), 72.3 (C- α), 36.7 (C- β), 56.5 (OMe); Glucose: 105.16 (C-1'), 76.22 (C-2'), 81.60 (C-3'), 70.56 (C-4'), 74.98 (C-5'), 69.13 (C-6'); Arabinose: 104.19 (C-1''), 72.47 (C-2''), 73.86 (C-3''), 69.56 (C-4''), 66.87 (C-5''); Rhamnose: 103.08 (C-1'''), 72.37 (C-2'''), 72.11 (C-3'''), 74.12 (C-4'''), 70.56 (C-5'''), 18.54 (C-6'''); Acyl moiety: 127.72 (C-1'''), 111.86 (C-2'''), 149.48 (C-3'''), 150.97 (C-4'''), 116.59 (C-5'''), 124.49 (C-6'''), 115.10 (C- α'), 148.18 (C- β'), 168.38 (C=O), 56.54 (OMe')^[1]。

【来源】 玄参科玄参属 *Scrophularia scopolii* var. *scopolii* 根^[1]; 玄参科玄参属 *Scrophularia scorodonia* L.^[2]; 玄参科玄参属玄参 *Scrophularia ningpoensis* 根^[3]; 玄参科毛蕊花属 *Verbascum spinosum* 地上部分^[4]; 玄参科玄参属 *Scrophularia ilwensis* 地上部分^[5]。

【分析方法】 色谱柱: C_{18} (1.8cm $\times$ 80cm); 流动相: H_2O -iso-PrOH (5%~25%) 梯度洗脱^[1]。

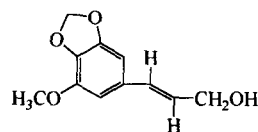
【生物活性与毒性】 具有抗炎活性^[2]。具有抗氧化活性^[3]。

【参考文献】 [1] Calis I, et al. Phytochemistry, 1988, 27 (5): 1465; [2] Diaz AM, et al. Life Sci, 2004, 74 (20): 2515; [3] Li YM, et al. Acta Pharmacol Sin, 2000, 21 (12): 1125; [4] Kalpoutakis E, et al. J Nat Prod, 1999, 62 (2): 342; [5] Calis I, et al. J Nat Prod, 1993, 56 (4): 606。

A0030 峨参醇 anthriscinol

【异名】 (E)-3-methoxy-4,5-methylenedioxy cinnamic alcohol

【结构式】



【分子式】 $\text{C}_{11}\text{H}_{12}\text{O}_4$

【相对分子质量】 208.2

【理化常数及光谱数据】 无色针晶, mp 78~79 $^\circ\text{C}$, $[\alpha]_D^{20} - 68.75^\circ$ (MeOH; c 0.32)。IR $\nu_{\text{max}}^{\text{KBr}}$ cm^{-1} : 3300, 2900, 2840, 1630, 1510, 1450, 1430, 1370, 1315, 1255, 1240, 1200, 1135, 1085, 1050, 950。UV $\lambda_{\text{max}}^{\text{MeOH}}$ nm (lg ϵ): 220 (4.39), 275 (4.7)。EI-MS m/z : 208 (M^+ , 100), 180 (28), 165 (90), 152 (35), 149 (25), 133 (10), 121 (25), 105 (10), 91 (17), 77 (32)。 $^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3 , 500MHz) δ : 6.52 (1H, d, $J=1.4\text{Hz}$, H-2), 6.60 (1H, d, $J=1.4\text{Hz}$, H-6), 6.48 (1H, d, $J=13.1\text{Hz}$, H-7), 6.22 (1H, ddd, $J=7.1, 4.2, 1.5\text{Hz}$, H-8), 4.27 ($J=4.2, 1.5\text{Hz}$, H-9), 3.9 (s, OCH_3), 5.95 (s, CH_2)。 $^{13}\text{C-NMR}$ (CDCl_3) δ : 127.2 (C-1), 106.6 (C-2), 149.1 (C-3), 135.0 (C-4), 143.5 (C-5), 101.4 (C-6), 131.6 (C-7), 130.9 (C-8), 65.3 (C-9), 56.5 (OCH_3), 100.0 (CH_2)^[1]。

【来源】 伞形科川芎属川芎 *Conioselinum vaginatum* Thell. 根茎^[1]。

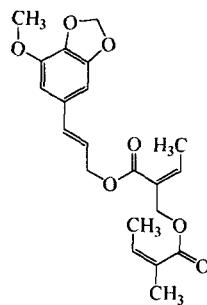
【生物活性与毒性】 对 CCl_4 引起的小鼠转氨酶升高有降低作用, 对丙酸杆菌引起的小鼠免疫性肝损伤有保护作用^[1]。

【参考文献】 [1] 陈若云等. 药学学报, 1995, 30 (7): 526。

A0031 峨参素 anthriscusin

【异名】 O-[(Z)-2-angelloyloxymethyl-2-butenyl]-3-methoxy-4,5-methylenedioxy cinnamyl alcohol

【结构式】



【分子式】 $\text{C}_{21}\text{H}_{24}\text{O}_7$

【相对分子质量】 388

【理化常数及光谱数据】 黏稠状液体, bp_{0.25} 205~210 $^\circ\text{C}$ 。IR $\nu_{\text{max}}^{\text{CHCl}_3}$ cm^{-1} : 1720, 1700, 1643, 1625, 1605, 1500^[1]。HR-FAB-MS m/z : 388.1520 ($[M+H]^+$)。 $^1\text{H-NMR}$ δ : 1.85 (3H, br s, H-5''), 1.94 (3H, br d, $J=7.3\text{Hz}$, H-4''), 2.12 (3H, br d, $J=7.5, 1.0\text{Hz}$), 3.90 (3H, s, $\text{C}_3\text{-OCH}_3$), 4.83 (2H, br d, $J=6.5$, H-3), 4.84 (2H, br s, H-5''), 5.96 (2H, s, $-\text{OCH}_2\text{O}-$), 6.03 (H, br q, $J=7.3\text{Hz}$, H-3''), 6.14 (H, ddd, $J=16.0, 6.5, 6.5\text{Hz}$, H-2), 6.45 (H, q, $J=$