

点地梅中双黄酮类化学成分的分离和鉴定

王文静^{1,2}, 雷军¹, 肖云川¹, 席贞¹, 余敏¹, 黄静^{1*}

(1. 四川大学华西药学院, 四川 成都 610041; 2. 云南中医学院中药学院, 云南 昆明 650500)

摘要: 目的 研究点地梅的化学成分。方法 运用硅胶、聚酰胺和葡聚糖凝胶等色谱方法进行分离纯化, 根据理化性质和波谱数据鉴定化合物的结构。结果 从点地梅 95% 乙醇提取物的正丁醇萃取部分中分离得到 9 个化合物, 分别鉴定为异鼠李素(I)、山奈酚(II)、槲皮素(III)、长叶世界爷双黄酮(IV)、扁柏双黄酮(V)、穗花杉双黄酮(VI)、罗波斯塔双黄酮(VII)、 β -谷甾醇 3-O- β -D-葡萄糖苷(VIIIa)、 3β -O-5,25-豆甾二烯 β -D-葡萄糖苷(VIIIb)。结论 化合物 I、IV、V、VI、VII、VIIIb 为首次从点地梅中分离得到。

关键词: 报春花科; 点地梅; 双黄酮; 化学成分

中图分类号: R28

文献标志码: A

文章编号: 1006-0103(2011)05-0420-04

The separation and identification of biflavonoids from *Androsace umbellata*

WANG Wen-jing^{1,2}, LEI Jun¹, XIAO Yun-chuan¹, XI Zhen¹, YU Min¹, HUANG Jing^{1*}

(1. School of Pharmacy, Sichuan University, Chengdu, Sichuan, 610041 P. R. China; 2. Yunnan University of Traditional Chinese Medicine, Kunming, Yunnan 650500 P. R. China)

Abstract: **OBJECTIVE** To study the chemical constituents of *Androsace umbellata*. **METHODS** The silica gel, polyamide, and Sephadex LH-20 column chromatographies were used for separation and purification, and the physico-chemical property and spectroscopic analyses were used for structural identification. **RESULTS** Nine compounds were isolated and elucidated as isorhamnetin (I), kaempferol (II), quercetin (III), sequoiaflavone (IV), hinokiflavone (V), amenioflavone (VI), robustaflavone (VII), β -sitosterol 3-O- β -D-glucopyranoside (VIIIa) and 3β -O-5,25-stigmastadien β -D-glucopyranoside (VIIIb), respectively. **CONCLUSION** Compounds I, IV, V, VI, VII and VIIIb were obtained from *Androsace umbellata* for the first time.

Key words: Primulaceae; *Androsace umbellata*; Biflavonoid; Chemical constituents

CLC number: R28

Document code: A

Article ID: 1006-0103(2011)05-0420-04

点地梅 *Androsace umbellata* Lour. Merr. 属于报春花科点地梅属植物, 又叫喉咙草、佛顶珠、地胡椒、五月朝天、小虎耳草、铜钱草、白花草等, 主产于秦岭以南各省区, 东北、华北也有分布; 民间主要用于治疗扁桃腺炎、咽喉炎、口腔炎和跌打损伤等^[1-2]。点地梅主要含有三萜皂苷和简单黄酮类化合物^[3-4]。在前期研究的基础上^[5], 继续分离该植物全草的正丁醇萃取部分的化学成分, 共分离得到 9 个化合物 (I~VIII) (2 个黄酮类、4 个双黄酮类、2 个甾醇苷类化合物), 其化学结构主要经波谱法得到确定。化合物 I、IV、V、VI、VII 和 VIIIb 为首次从该植物中分离得到。

1 实验部分

1.1 仪器和试剂

核磁共振用 Bruker AV-400 和 Varian Unity INOVA 400/54 核磁共振仪测定; 红外光谱用 Nicolet FT-IR 200XV 仪 (KBr 液膜法、KBr 压片法) 测定;

质谱用 VG Autospec 3000 型质谱仪和 VG 70 型质谱仪测定; ZF-7 三用紫外分析仪 (巩义市英峪予华仪器厂)。点地梅药材全草于 2006 年 9 月采自湖南省怀化市, 由四川大学华西药学院王曙教授鉴定为点地梅 *Androsace umbellata* Lour. Merr.; C_5D_5N 、DMSO- d_6 、TMS 内标 (百灵威化学技术有限公司); Sephadex LH-20 (Amersham Biosciences); MCI-gel CHP20P (75~150 μ m, Mitsubishi Chemical Co.); 其余试剂为分析纯。

1.2 提取与分离

取 7.5 kg 干燥并剪碎的点地梅全草, 用 95% 乙醇加热回流提取 3 次, 合并提取液, 减压浓缩得到 825 g 总浸膏。总浸膏用适量水溶解后, 依次用石油醚、二氯甲烷、乙酸乙酯和正丁醇萃取, 分别得到 45 g 石油醚萃取浸膏、45 g 二氯甲烷萃取浸膏、85 g 乙酸乙酯萃取浸膏和 105 g 正丁醇萃取浸膏。取 95% 正丁醇萃取浸膏, 用硅胶柱层析分离, 以二氯甲烷-甲醇-水 (9:1:0.1、8:2:0.2、7:3:0.3、5:

作者简介: 王文静, 女, 讲师, 从事中药化学成分的研究工作。

* 通信作者 (Correspondent author), Email: huangj_pharm@scu.edu.cn

5:0.5) 梯度洗脱, 得到6部分(Frs. 1-6)。Fr. 1以硅胶(200~300目)柱层析分离, 用二氯甲烷-甲醇-水(20:1:0→9:1:0.1)梯度洗脱, 再经葡聚糖凝胶LH-20柱层析, 甲醇-二氯甲烷(10:0→1:1)分离纯化, 得到3 mg 化合物I、5 mg II、10 mg III、4 mg IV和8 mg V。Fr. 2以硅胶(200~300目)柱层析分离, 二氯甲烷-甲醇-水(9:1:0.1→8:2:0.2)梯度洗脱, 再经葡聚糖凝胶LH-20柱层析, 用甲醇-二氯甲烷(10:0→1:1)和聚酰胺(100目)柱层析, 甲醇-水(10%→100%)分离纯化, 得到9 mg 化合物VI、7 mg VII和150 mg VIII(VIIIa+VIIIb)。

1.3 结构的鉴定

1.3.1 化合物I的鉴定 I为淡黄色菱形结晶(二氯甲烷-甲醇), mp 305 °C(分解), 三氯化铁-铁氰化钾和盐酸-镁粉反应呈阳性, 分子式 $C_{16}H_{12}O_7$, ESI-MS(negative) m/z : 315 [M-H]⁻。¹HNMR(DMSO-d₆, 400 MHz): δ12.52(1H, s, 5-OH), 10.82(1H, brs, 7-OH), 9.73(1H, brs, 4'-OH), 9.42(1H, brs, 3-OH), 7.76(1H, d, $J=2.0$ Hz, H-2'), 7.69(1H, dd, $J=8.8, 2.0$ Hz, H-6'), 6.94(1H, d, $J=2.0$ Hz, H-5'), 6.48(1H, d, $J=2.0$ Hz, H-8), 6.19(1H, d, $J=2.0$ Hz, H-6), 3.84(3H, s, CH₃O-3')。与文献^[6]数据一致, 故鉴定化合物I为异鼠李素。

1.3.2 化合物II的鉴定 II为黄色针状结晶(甲醇), mp 274~278 °C, 三氯化铁-铁氰化钾和盐酸-镁粉反应呈阳性, 分子式 $C_{15}H_{10}O_6$, ESI-MS(negative) m/z : 285 [M-H]⁻。¹HNMR(DMSO-d₆, 400 MHz): δ12.47(1H, s, 5-OH), 10.96(1H, brs, 7-OH), 10.21(1H, brs, 4'-OH), 9.42(1H, brs, 3-OH), 8.03(2H, d, $J=8.8$ Hz, H-2', 6'), 6.91(2H, d, $J=8.8$ Hz, H-3', 5'), 6.44(1H, d, $J=2.0$ Hz, H-8), 6.18(1H, d, $J=2.0$ Hz, H-6)。与文献^[7]数据基本一致, 故鉴定化合物II为山奈酚。

1.3.3 化合物III的鉴定 III为黄色针状结晶(甲醇), mp 313~314 °C, 三氯化铁-铁氰化钾和盐酸-镁粉反应呈阳性, 分子式 $C_{15}H_{10}O_7$, ESI-MS(negative) m/z : 301 [M-H]⁻。¹HNMR(DMSO-d₆, 400 MHz): δ12.47(1H, s, 5-OH), 10.86(1H, brs, 7-OH), 9.37(1H, brs, 4'-OH), 9.37(1H, brs, 3'-OH), 9.37(1H, brs, 3-OH), 7.66(1H, d, $J=2.0$ Hz, H-2'), 7.54(1H, dd, $J=8.4, 2.0$ Hz, H-6'), 6.88(1H, d, $J=8.4$ Hz, H-5'), 6.41(1H, d, $J=2.0$ Hz, H-8), 6.19(1H, d, $J=2.0$ Hz, H-6)。¹³CNMR(DMSO-d₆, 100 MHz): δ176.1(C-4),

164.2(C-7), 161.0(C-9), 156.4(C-5), 148.0(C-4), 147.0(C-2), 145.4(C-3'), 136.0(C-3), 122.3(C-1'), 120.3(C-6'), 115.7(C-5'), δ_C 115.3(C-2'), 103.3(C-10), 98.5(C-6), 93.6(C-8)。与文献^[6-7]的数据基本一致, 故鉴定化合物III为槲皮素。

1.3.4 化合物IV的鉴定 IV为黄色粉末(甲醇-二氯甲烷), mp >350 °C, 三氯化铁-铁氰化钾和盐酸-镁粉反应呈阳性, 分子式 $C_{31}H_{20}O_{10}$, ESI-MS(negative) m/z : 551 [M-H]⁻。¹HNMR(DMSO-d₆, 400 MHz): δ13.11(1H, s, 5"-OH), 12.97(1H, s, 5-OH), 10.85(1H, brs, 7"-OH), 10.30(2H, brs, 4' 4'''-OH), 8.06(1H, d, $J=2.0$ Hz, H-2'), 8.03(1H, dd, $J=8.8, 2.0$ Hz, H-6'), 7.57(2H, d, $J=8.8$ Hz, H-2'' 6'''), 7.13(1H, d, $J=8.8$ Hz, H-5'), 6.91(1H, s, H-3), 6.79(1H, s, H-3''), 6.76(1H, d, $J=2.0$ Hz, H-8), 6.70(2H, d, $J=8.8$ Hz, H-3''' 5'''), 6.37(1H, s, H-6''), 6.35(1H, d, $J=2.0$ Hz, H-6), 3.84(3H, s, CH₃O-7)。与文献^[8-9]的数据基本一致, 故鉴定化合物IV为长叶世界爷双黄酮。

1.3.5 化合物V的鉴定 V为黄色粒状结晶, mp 307~308 °C, 三氯化铁-铁氰化钾和盐酸-镁粉反应呈阳性, 分子式 $C_{30}H_{18}O_{10}$, ESI-MS(negative) m/z : 537 [M-H]⁻。¹HNMR(DMSO-d₆, 400 MHz): δ13.19(1H, s, 5-OH), 12.88(1H, s, 5"-OH), 10.50(3H, brs, 7, 7'' 4'''-OH), 8.01(2H, d, $J=8.8$ Hz, H-2' 6'), 7.96(2H, d, $J=8.4$ Hz, H-2''' 6'''), 7.03(2H, d, $J=8.8$ Hz, H-3' 5'), 6.94(2H, d, $J=8.4$ Hz, H-3''' 5'''), 6.84(1H, s, H-3), 6.83(1H, s, H-3''), 6.70(1H, s, H-8''), 6.49(1H, d, $J=2.0$ Hz, H-8), 6.20(1H, d, $J=2.0$ Hz, H-6)。与文献^[11-12]中报道的数据基本一致, 故鉴定化合物V为扁柏双黄酮。

1.3.6 化合物VI的鉴定 VI为黄色粉末, mp 283~285 °C, 三氯化铁-铁氰化钾和盐酸-镁粉反应呈阳性, 难溶于氯仿, 溶于甲醇; 分子式 $C_{30}H_{18}O_{10}$, ESI-MS(negative) m/z : 537 [M-H]⁻。¹HNMR(DMSO-d₆, 400 MHz): δ13.11(1H, s, 5"-OH), 12.98(1H, s, 5-OH), 10.83(1H, brs, 7-OH), 10.63(2H, brs, 4' 7"-OH), 10.29(1H, brs, 4'''-OH), 8.01(1H, d, $J=2.8$ Hz, H-2'), 8.01(1H, dd, $J=9.2, 2.8$ Hz, H-6'), 7.57(2H, d, $J=8.8$ Hz, H-2''' 6'''), 7.14(1H, d, $J=9.2$ Hz, H-5'), 6.84(1H, s, H-3), 6.79(1H, s, H-3''), 6.71(2H, d, $J=8.8$ Hz, H-3''' 5'''), 6.46(1H, d, $J=2.4$ Hz,

H-8) δ 6.39(1H, s, H-6'') δ 6.19(1H, d, J = 2.0 Hz, H-6)。 ^{13}C NMR(DMSO- d_6 , 100 MHz): δ 182.3(C-4'') δ 181.9(C-4) δ 164.3(C-2) δ 164.0(C-2'') δ 163.9(C-7) δ 162.3(C-7'') δ 161.6(C-4''') δ 161.2(C-5) δ 160.7(C-5'') δ 159.8(C-4') δ 157.6(C-9) δ 154.9(C-9'') δ 131.8(C-6') δ 128.4(C-2''' δ 128.0(C-2') δ 121.8(C-3') δ 121.1(C-1') δ 120.2(C-1''') δ 116.4(C-5') δ 116.0(C-3''' δ 104.2(C-10) δ 103.9(C-10'') δ 103.8(C-8'') δ 103.1(C-3) δ 102.8(C-3'') δ 99.0(C-6'') δ 98.9(C-6) δ 94.2(C-8)。与文献^[10-12]的数据基本一致,故鉴定化合物 VI 为穗花杉双黄酮。

1.3.7 化合物 VII 的鉴定 VII 为黄色粉末, mp > 300 °C, 三氯化铁-铁氰化钾和盐酸-镁粉反应呈阳性, 难溶于氯仿、甲醇, 易溶于二甲基亚砜; 分子式 $\text{C}_{30}\text{H}_{18}\text{O}_{10}$, ESI-MS(negative) m/z : 537 $[\text{M}-\text{H}]^-$ 。 ^1H NMR(DMSO- d_6 , 400 MHz): δ 13.24(1H, s, 5''-OH) δ 13.00(1H, s, 5-OH) δ 10.84(1H, brs, 7-OH) δ 10.60(2H, brs, 4', 7''-OH) δ 10.40(1H, brs, 4'''-OH) δ 7.97(2H, d, J = 8.8 Hz, H-2'' δ 7.91(1H, dd, J = 8.8, 2.0 Hz, H-6') δ 7.79(1H, d, J = 2.0 Hz, H-2') δ 7.04(1H, d, J = 8.8 Hz, H-5') δ 6.95(2H, d, J = 8.8 Hz, H-3''' δ 6.83(1H, s, H-3) δ 6.79(1H, s, H-3'') δ 6.63(1H, s, H-8'') δ 6.47(1H, d, J = 2.0 Hz, H-8) δ 6.19(1H, d, J = 2.0 Hz, H-6)。 ^{13}C NMR(DMSO- d_6 , 100 MHz): δ 182.0(C-4'') δ 181.9(C-4) δ 164.3(C-2) δ 164.1(C-2'') δ 163.8(C-7) δ 162.8(C-7'') δ 161.8(C-5) δ 161.4(C-4''') δ 160.0(C-5'') δ 159.3(C-4') δ 157.6(C-9) δ 156.6(C-9'') δ 131.1(C-6') δ 128.7(C-2''' δ 127.9(C-2') δ 121.4(C-1'') δ 121.2(C-1') δ 121.0(C-3') δ 116.4(C-5') δ 116.2(C-3''' δ 109.2(C-10'') δ 103.9(C-10) δ 103.9(C-6'') δ 103.0(C-3, 3'') δ 99.0(C-6) δ 94.2(C-8) δ 93.7(C-8'')。与文献^[10, 12-13]的数据基本一致,故鉴定化合物 VII 为罗波斯塔双黄酮。

1.3.8 化合物 VIIa 的鉴定 VIIa 为白色粉末, 10% 硫酸-乙醇显色呈紫红色, Libermann-Burchard 和 Molish 反应呈阳性, 分子式 $\text{C}_{35}\text{H}_{60}\text{O}_6$, ESI-MS(negative) m/z : 575 $[\text{M}-\text{H}]^-$ 。 ^1H NMR($\text{C}_5\text{D}_5\text{N}$, 400 MHz): δ 5.35(1H, d, J = 3.6 Hz, H-6) δ 5.08(1H, d, J = 8.0 Hz, H-1 of Glc) δ 0.99(3H, d, J = 6.4 Hz, H-21) δ 0.94(3H, s, H-19) δ 0.90(3H, t, J = 8.0 Hz, H-29) δ 0.88(3H, d, J = 8.4 Hz, H-27) δ 0.85

(3H, d, J = 8.4 Hz, H-26) δ 0.66(3H, s, H-18)。 ^{13}C NMR($\text{C}_5\text{D}_5\text{N}$, 100 MHz): δ 140.8(C-5) δ 121.9(C-6) δ 102.5(C-1 of Glc) δ 78.6(C-5 of Glc) δ 78.4(C-3 of Glc) δ 78.0(C-3) δ 75.3(C-2 of Glc) δ 71.6(C-4 of Glc) δ 62.8(C-6 of Glc) δ 56.8(C-14) δ 56.2(C-17) δ 50.3(C-9) δ 46.0(C-24) δ 42.4(C-13) δ 39.9(C-12) δ 39.3(C-4) δ 37.4(C-1) δ 36.9(C-10) δ 36.3(C-20) δ 34.2(C-22) δ 32.0(C-7, 8) δ 30.2(C-2) δ 29.4(C-25) δ 28.5(C-16) δ 26.3(C-23) δ 24.5(C-15) δ 23.3(C-28) δ 21.2(C-11) δ 19.9(C-27) δ 19.4(C-19) δ 19.2(C-26) δ 19.0(C-21) δ 12.1(C-29) δ 11.9(C-18)。与文献^[14-15]的数据基本一致,故鉴定化合物 VIIa 为 β -谷甾醇 3-O- β -D-葡萄糖苷。

1.3.9 化合物 VIIIb 的鉴定 VIIIb 为白色粉末, 10% 硫酸-乙醇显色呈紫红色, Libermann-Burchard 反应和 Molish 反应呈阳性, 分子式 $\text{C}_{35}\text{H}_{58}\text{O}_6$, ESI-MS(negative) m/z : 573 $[\text{M}-\text{H}]^-$ 。 ^{13}C NMR($\text{C}_5\text{D}_5\text{N}$, 100 MHz): δ 147.6(C-25) δ 140.8(C-5) δ 121.9(C-6) δ 111.9(C-26) δ 102.5(C-1 of Glc) δ 78.6(C-5 of Glc) δ 78.4(C-3 of Glc) δ 78.0(C-3) δ 75.3(C-2 of Glc) δ 71.6(C-4 of Glc) δ 62.8(C-6 of Glc) δ 56.8(C-14) δ 56.2(C-17) δ 50.3(C-9) δ 50.0(C-24) δ 42.4(C-13) δ 39.9(C-12) δ 39.3(C-4) δ 37.4(C-1) δ 36.9(C-10) δ 35.8(C-20) δ 34.0(C-22) δ 32.0(C-7, 8) δ 29.9(C-2) δ 29.7(C-23) δ 28.5(C-16) δ 26.7(C-28) δ 24.5(C-15) δ 21.2(C-11) δ 19.4(C-19) δ 19.0(C-21) δ 17.8(C-27) δ 12.2(C-29) δ 11.9(C-18)。与文献^[16]的核磁数据基本一致,故鉴定化合物 VIIIb 为 3β -O-5, 25-豆甾二烯 β -D-葡萄糖苷。

2 讨论

双黄酮类成分在植物中分布较少, 作者从报春花科点地梅属点地梅植物中首次分离得到了长叶世界爷双黄酮(IV)、扁柏双黄酮(V)、穗花杉双黄酮(VI)和罗波斯塔双黄酮(VII) 4 个双黄酮类成分, 这对该属植物的化学分类具有较为重要的意义。

参考文献:

- [1] 中国科学院中国植物志编辑委员会. 中国植物志[M]. 第五十九卷. 北京: 科学出版社, 1989: 1, 157.
- [2] 江苏新医学院. 中药大辞典[M]. 上海: 上海科技出版社, 1986: 2374.
- [3] 李承花, 殷志琦, 黄晓君, 等. 点地梅的化学成分[J]. 中国天然药物 2008, 6(2): 123-125.

- [4] Wang Y ,Zhang DM ,Ye WC ,*et al.* Triterpenoid saponins from *Androsace umbellata* and their anti - proliferative activities in human hepatoma cells [J]. *Planta Med* ,2008 ,74(10) : 1280 - 1284.
- [5] Lei J ,Xiao YC ,Huang J ,*et al.* Two new kaempferol glycosides from *Androsace umbellata* [J]. *Helv Chim Acta* ,2009 ,92(7) : 1439 - 1444.
- [6] 郑瑞霞 ,杨峻山. 中国沙棘果实化学成分的研究 [J]. *中草药* ,2006 ,37(8) : 1154 - 1155.
- [7] 王玉杰 ,孙启时. 金田草的化学成分研究 [J]. *中国药物化学杂志* ,2005 ,15(6) : 357 - 359.
- [8] 邱林刚 ,连敏 ,马忠武 ,等. 西藏红豆杉的双黄酮 [J]. *植物学报* ,1989 ,31(1) : 54 - 56.
- [9] Li SH ,Zhang HJ ,Niu XM ,*et al.* Chemical constituents from *Amentotaxus yunnanensis* and *Torreya yunnanensis* [J]. *J Nat Prod* ,2003 ,66: 1002 - 1005.
- [10] 范晓磊 ,徐嘉诚 ,林幸华 ,等. 翠云草中双黄酮类成分研究 [J]. *中国药学期刊* ,2009 ,44(1) : 15 - 19.
- [11] 王武宝 ,巴杭 ,阿吉艾克拜尔 • 艾萨 ,等. 新疆圆柏化学成分研究 [J]. *天然产物研究与开发* ,2005 ,17(5) : 588 - 591.
- [12] 江雪平 ,陈科力. 江南卷柏中双黄酮类化合物的研究 [J]. *中国药学期刊* ,2009 ,44(2) : 96 - 98.
- [13] 徐丽珍 ,陈真 ,孙南君. 脉叶罗汉松化学成分的研究 [J]. *植物学报* ,1993 ,35(2) : 138 - 143.
- [14] Adolfo M ,Jribarren B ,Pomilio A. Components of *Bauhinia candicans* [J]. *J Nat Prod* ,1983 ,46(5) : 752 - 753.
- [15] 李宝强 ,宋启示. 云南蕊木枝叶化学成分研究 [J]. *中草药* ,2008 ,39(9) : 1299 - 1301.
- [16] Leitao SG ,Kaplan MAC ,Monache FD ,*et al.* Sterols and sterol glucosides from two *Aegiphila species* [J]. *Phytochemistry* ,1992 ,31(8) : 2813 - 2817.

收稿日期:2011 - 01 - 03

薯蓣皂苷元抗肿瘤衍生物的设计和合成(II)

曾春玲 耿倩 吴亚克 范举正*

(四川大学华西药学院 ,四川 成都 610041)

摘要: 目的 合成薯蓣皂苷元衍生物并进行其体外抗肿瘤活性的研究。方法 运用 Autodock 进行目标分子辅助设计。薯蓣皂苷元通过 Mitsunobu 反应合成 1 - (3 α - 薯蓣皂苷元) - 1 2 β - 三氮唑和 1 - (3 α - 薯蓣皂苷元) - 1 2 β - 三氮唑两个中间体 ,再分别与不同的溴代物反应得到一系列的盐。采用 MTT 法对人恶性黑色素瘤细胞 A375、人肺腺癌细胞 A549、人肝癌细胞 HepG - 2 进行体外抗肿瘤活性试验。结果 共合成了 14 个化合物 ,其中有 10 个为新化合物 ,结构均经¹HNMR、¹³CNMR 鉴定。所测化合物均具有一定的抗肿瘤活性。结论 化合物 I、XIII 的抗肿瘤活性与阳性对照品相当。

关键词: 薯蓣皂苷元衍生物; 分子对接; 合成; 抗肿瘤活性

中图分类号: R914

文献标志码: A

文章编号: 1006 - 0103(2011) 05 - 0423 - 06

The design and synthesis of diosgenin anti - tumor derivatives(II)

ZENG Chun - ling ,GENG Qian ,WU Ya - ke ,FAN Ju - zheng*

(West China School of Pharmacy ,Sichuan University ,Chengdu ,Sichuan ,610041 ,China)

Abstract: OBJECTIVE To design and synthesize the diosgenin derivatives and investigate their antitumor activity *in vitro*. **METHODS** The target molecules were designed by Autodock based on the mechanism. 1 - (3 α - diosgenin) - 1 2 β - triazole and 1 - (3 α - diosgenin) - 1 2 β - triazole ,which then obtained from diosgenin via Mitsunobu reaction reacted with different bromide complex compounds to give a series of salts. The antitumor activity of all the compounds against human malignant melanoma A375 cells ,human lung adenocarcinoma A549 cells ,human hepatoma HepG - 2 cells *in vitro* by MTT assay. **RESULTS** 10 compounds were new among these 14 compounds. The structures of the ten new compounds were characterized by ¹HNMR ,¹³CNMR. All the tested compounds showed antitumor effects to a certain degree. **CONCLUSION** The anti - tumor activity of compounds I and XIII was comparable with the positive reference substance.

Key words: Diosgenin derivatives; Molecular docking; Synthesis; Antitumor activity

CLC number: R914

Document code: A

Article ID: 1006 - 0103(2011) 05 - 0423 - 06

薯蓣皂苷元(diosgenin) 是从薯蓣科植物穿山龙的根中分离出来的一种植物甾体化合物 ,具有广谱

作者简介: 曾春玲(1985—) ,男 ,正攻读药物化学专业的硕士学位。Email: zengchunling01@ 163. com

* 通信作者(Correspondent author) ,Email: david - 811@ 163. com