

## • 化学成分 •

## 黄果茄中 1 个新的黄酮类化合物

刁克鹏<sup>1,2</sup>, 李伟<sup>1</sup>, 向康林<sup>1</sup>, 赵琳<sup>1</sup>, 戴胜军<sup>1\*</sup>

1. 烟台大学药学院, 山东 烟台 264005

2. 山东省龙口市市场监督管理局, 山东 龙口 265701

**摘要:** 目的 研究黄果茄 *Solanum virginianum* 的化学成分。方法 通过硅胶柱色谱、Sephadex LH-20 柱色谱及高效制备薄层对黄果茄中的化学成分进行分离纯化, 根据理化性质和波谱数据对其化学结构进行阐明。结果 从黄果茄中发现并鉴定 12 个化合物, 分别为 5-羟基-8-甲氧基-6,7-亚甲二氧基黄酮 (1)、7-羟基-6-甲氧基香豆素 (2)、秦皮素 (3)、5-羟基-6,7,3',4'-四甲氧基黄酮 (4)、5-羟基-4',6,7-三甲氧基黄酮 (5)、二氢阿魏酰酪胺 (6)、反式-*N*-对羟基香豆酰酪胺 (7)、5,3'-二羟基-6,7,4'-三甲氧基黄酮 (8)、*N*-[2-(3,4-二羟基苯基)-2-羟乙基]-3-(4-甲氧基苯基) 丙-2-烯酰胺 (9)、*N*-反式香豆酰基章鱼胺 (10)、5,7,4'-三羟基-6-甲氧基黄酮 (11)、5,7,4'-三羟基-8-甲氧基黄酮 (12)。结论 化合物 1 为新化合物, 命名为黄果茄酮; 化合物 2~12 为首次从黄果茄中分离得到。

**关键词:** 黄果茄; 7-羟基-6-甲氧基香豆素; 秦皮素; 5-羟基-6,7,3',4'-四甲氧基黄酮; 二氢阿魏酰酪胺; 黄果茄酮

**中图分类号:** R284.1 **文献标志码:** A **文章编号:** 0253-2670(2020)15-3845-05

**DOI:** 10.7501/j.issn.0253-2670.2020.15.001

A new flavonoid isolated from fruits of *Solanum virginianum*DIAO Ke-peng<sup>1,2</sup>, LI Wei<sup>1</sup>, XIANG Kang-lin<sup>1</sup>, ZHAO Lin<sup>1</sup>, DAI Sheng-jun<sup>1</sup>

1. School of Pharmaceutical Science, Yantai University, Yantai 264005, China

2. Administration for Market Regulation of Longkou City, Longkou 265701, China

**Abstract: Objective** To study the chemical constituents from the fruits of *Solanum virginianum*. **Methods** By means of preparative HPTLC and column chromatography over silica gel and Sephadex LH-20, compounds were isolated and purified. Their structures were elucidated by physico-chemical properties and spectral analyses. **Results** Twelve compounds were obtained and identified as: 5-hydroxy-8-methoxy-6,7-methylenedioxyflavone (1), 7-hydroxy-6-methoxy coumarin (2), fraxetin (3), 5-hydroxy-6,7,3',4'-tetramethoxyflavone (4), 5-hydroxy-4',6,7-trimethoxyflavone (5), dihydro-*N*-feruloyltyramine (6), *N*-*trans*-coumaroyltyramine (7), 5,3'-dihydroxy-6,7,4'-tritermethoxyflavone (8), *N*-[2-(3,4-dihydroxyphenyl)-2-hydroxyethyl]-3-(4-methoxyphenyl)-prop-2-enamide (9), *N*-*trans*-coumaroyloctopamine (10), 5,7,4'-trihydroxy-6-methoxyflavone (11), and 5,7,4'-trihydroxy-8-methoxyflavone (12). **Conclusion** Compound 1 is a new flavonoid, named as solacarpumon, and compounds 2—12 are isolated from *Solanum virginianum* for the first time.

**Key words:** *Solanum virginianum* Linnaeus; 7-hydroxy-6-methoxy coumarin; fraxetin; 5-hydroxy-6,7,3',4'-tetramethoxyflavone; dihydro-*N*-feruloyltyramine; solacarpumon

黄果茄为茄科茄属植物黄果茄 *Solanum virginianum* Linnaeus 的干燥根、果实及种子, 又名黄水茄、刺茄、野茄果、大苦果、籛茄、水茄头等, 主产于福建、台湾、湖北、海南、四川、云南等地。黄果茄性温, 味苦、辛, 具有祛风湿、消痰止痛之

功效; 临床主要用于治疗风湿痹痛、牙痛、睾丸肿痛及疔疖等<sup>[1-3]</sup>。

文献调研发现, 有关黄果茄药效物质基础的系统研究尚未见报道。薄层色谱预试验证实, 黄果茄含有黄酮、香豆素等类型化合物。为此, 借助多种色

收稿日期: 2020-01-15

基金项目: 国家自然科学基金资助项目 (21372189); 山东省自然科学基金资助项目 (ZR2019HM091)

作者简介: 刁克鹏 (1964—), 男, 烟台大学药学院进修生。E-mail: lkshipin@163.com

\*通信作者 戴胜军, 男, 教授, 从事天然药物的药效物质基础及活性研究。E-mail: sjdai8616@sina.com

谱分离技术及光谱结构测定技术,本课题组对黄果茄果实中的化学成分进行研究,共分离得到 12 个化合物,分别鉴定为 5-羟基-8-甲氧基-6,7-亚甲二氧基黄酮(5-hydroxy-8-methoxy-6,7-methylenedioxyflavone, **1**)、7-羟基-6-甲氧基香豆素(7-hydroxy-6-methoxy coumarin, **2**)、秦皮素(fraxetin, **3**)、5-羟基-6,7,3',4'-四甲氧基黄酮(5-hydroxy-6,7,3',4'-tetramethoxyflavone, **4**)、5-羟基-4',6,7-三甲氧基黄酮(5-hydroxy-4',6,7-trimethoxyflavone, **5**)、二氢阿魏酰酪胺(dihydro-*N*-feruloyltyramine, **6**)、反式-*N*-对羟基香豆酰酪胺(*N-trans*-coumaroyltyramine, **7**)、5,3'-二羟基-6,7,4'-三甲氧基黄酮(5,3'-dihydroxy-6,7,4'-tritermethoxyflavone, **8**)、*N*-[2-(3,4-二羟基苯基)-2-羟乙基]-3-(4-甲氧基苯基)丙-2-烯酰胺(*N*-[2-(3,4-dihydroxyphenyl)-2-hydroxyethyl]-3-(4-methoxyphenyl)-prop-2-enamide, **9**)、*N*-反式香豆酰基章鱼胺(*N-trans*-coumaroyloctopamine, **10**)、5,7,4'-三羟基-6-甲氧基黄酮(5,7,4'-trihydroxy-6-methoxyflavone, **11**)、5,7,4'-三羟基-8-甲氧基黄酮(5,7,4'-trihydroxy-8-methoxyflavone, **12**)。其中,化合物 **1** 为未见报道的新黄酮类成分,命名为黄果茄酮;化合物 **2**~**12** 为首次从黄果茄中分离得到。

### 1 仪器与材料

XT-4 微型熔点测定仪(上海荆和分析仪器有限公司); Autospec-Ultima ETOF 型质谱仪(英国 Micromass 公司); AVANCE IIIITM 400 型核磁共振仪(TMS 内标,瑞士 Bruker 公司); Sephadex LH-20(美国 GE 公司)为北京金欧亚进口分装产品;薄层色谱硅胶(GF<sub>254</sub>)、柱色谱硅胶(200~300 目)及高效制备薄层硅胶板(HPTLC, 20 cm×20 cm)均为青岛海洋化工厂产品。

黄果茄果实为课题组于 2017 年采自海南省海口市,经烟台大学药学院生药学教研室赵燕燕副教授鉴定为茄科茄属植物黄果茄 *Solanum virginianum* Linnaeus 的干燥果实,标本(YP17076)保存于烟台大学药学院标本室。

### 2 提取与分离

取干燥的黄果茄果实 40.0 kg,粉碎,95%乙醇回流提取 3 次,每次 1 h。提取液合并,减压浓缩得到总浸膏 2.7 kg。将总浸膏悬浮于水中,依次用石油醚、醋酸乙酯、正丁醇反复萃取,萃取液分别合并、减压浓缩,得醋酸乙酯部位浸膏(201.3 g)。浸膏通过硅胶柱色谱(10 cm×120 cm),环己烷-丙酮

梯度洗脱(100:0→50:50),经薄层色谱检测、合并,得到 16 个组分。组分 4(3.4 g)通过硅胶柱色谱(环己烷-丙酮 95:5→85:15),然后通过 Sephadex LH-20 柱色谱(95%乙醇-醋酸乙酯 1:1)及高效制备硅胶薄层(20 cm×20 cm,氯仿-丙酮 95:5)反复分离与纯化,得化合物 **2**(91 mg)和 **3**(102 mg)。组分 6(4.6 g)通过硅胶柱色谱(环己烷-丙酮 90:10→70:30),再通过 Sephadex LH-20 柱色谱(95%乙醇-醋酸乙酯 1:1)及高效制备硅胶薄层(20 cm×20 cm,氯仿-丙酮 85:15)分离与纯化,得化合物 **4**(132 mg)和 **5**(198 mg)。组分 8(4.0 g)、9(3.2 g)分别通过硅胶柱色谱(环己烷-丙酮 90:10→70:30),再通过 Sephadex LH-20 柱色谱(95%乙醇-醋酸乙酯 1:1)及高效制备硅胶薄层(20 cm×20 cm,氯仿-甲醇 90:10)反复分离与纯化,得化合物 **6**(62 mg)、**7**(78 mg)、**8**(211 mg)、**9**(94 mg)及 **10**(113 mg)。组分 10(6.1 g)通过硅胶柱色谱(环己烷-丙酮 85:15→65:35)、Sephadex LH-20 柱色谱(95%乙醇-醋酸乙酯 1:1)及高效制备硅胶薄层(20 cm×20 cm,氯仿-甲醇 87:13)的分离与纯化,得化合物 **11**(85 mg)和 **12**(136 mg)。

### 3 结构鉴定

化合物 **1**: 黄色针晶(氯仿), mp 193~194 °C。甲醇溶液中,与盐酸-镁粉反应呈红色,初步判断该化合物为黄酮。在 HR-ESI-MS 谱图上,可以观察到正离子峰  $m/z$  313.070 3 [M+H]<sup>+</sup>(计算值 313.070 7)及负离子峰  $m/z$  311.056 2 [M-H]<sup>-</sup>(计算值 311.056 1),由此确定该化合物分子式为 C<sub>17</sub>H<sub>12</sub>O<sub>6</sub>, 不饱和度为 12。基于黄酮类化合物 A 环、B 环及 C 环的不饱和度分别为 4、4 及 3,推测化合物 **1** 结构中尚有一环或双键。

在化合物 **1** 的 <sup>1</sup>H-NMR(400 MHz, DMSO-*d*<sub>6</sub>, 表 1) 图谱上,可以观察到 1 个羟基 δ<sub>H</sub> 12.45 (1H, brs, 5-OH), 1 个亚甲二氧基官能团 δ<sub>H</sub> 6.21 (2H, brs), 1 个甲氧基 δ<sub>H</sub> 3.99 (3H, s, 8-OCH<sub>3</sub>), 1 个三取代双键 δ<sub>H</sub> 7.08 (1H, s, H-3), 1 个单取代的苯环 δ<sub>H</sub> 7.61 (1H, m, H-4'), 7.64 (2H, m, H-3', 5'), 8.08 (2H, m, H-2', 6')。 <sup>13</sup>C-NMR(100 MHz, DMSO-*d*<sub>6</sub>) 图谱(表 1) 给出 17 个碳信号,通过 HMQC 实验,确定为 1 个甲氧基(δ<sub>C</sub> 61.8)、1 个亚甲二氧基(δ<sub>C</sub> 103.8)、6 个次甲基及 9 个季碳信号,表明 6 个次甲基及 9 个季碳构成黄酮类化合物的基本骨架(C<sub>6</sub>-C<sub>3</sub>-C<sub>6</sub>)。在

表 1 化合物 1 的 <sup>1</sup>H-NMR 和 <sup>13</sup>C-NMR 数据 (400/100 MHz, DMSO-*d*<sub>6</sub>)

Table 1 <sup>1</sup>H-NMR and <sup>13</sup>C-NMR data (400/100 MHz, DMSO-*d*<sub>6</sub>) of compound 1

碳位	$\delta_{\text{H}}$	$\delta_{\text{C}}$
2		163.8 C
3	7.08 (1H, s)	105.5 CH
4		183.2 C
5		137.0 C
6		130.6 C
7		145.8 C
8		125.2 C
9		145.5 C
10		107.2 C
1'		131.1 C
2'	8.08 (1H, m)	126.8 CH
3'	7.64 (1H, m)	129.8 CH
4'	7.61 (1H, m)	132.7 CH
5'	7.64 (1H, m)	129.8 CH
6'	8.08 (1H, m)	126.8 CH
5-OH	12.45 (1H, s)	
8-OCH <sub>3</sub>	3.99 (3H, s)	61.8 CH <sub>3</sub>
6,7-OCH <sub>2</sub> O-	6.21 (2H, s)	103.8 CH <sub>2</sub>

HMBC 图谱上(图 1),可观察到亚甲二氧基质子  $\delta_{\text{H}}$  6.21 与  $\delta_{\text{C}}$  130.6 (C-6), 145.8 (C-7) 相关, 羟基质子  $\delta_{\text{H}}$  12.45 与  $\delta_{\text{C}}$  130.6 (C-6), 107.2 (C-10) 相关, 而甲氧基质子  $\delta_{\text{H}}$  3.99 与  $\delta_{\text{C}}$  125.2 (C-8) 相关, 由此确定亚甲二氧基连接在 A 环的 C-6 及 C-7 位, 羟基连接在 A 环的 C-5 位, 而甲氧基连接在 A 环的 C-8 位。综合上述所有信息, 确定化合物 1 的化学结构鉴定为 5-羟基-8-甲氧基-6,7-亚甲二氧基黄酮, 见图 1。经检索, 化合物 1 为 1 个新化合物, 命名为黄果茄酮。

化合物 2: 无色针晶(氯仿), mp 204~205 °C。ESI-MS  $m/z$ : 193 [M+H]<sup>+</sup>。 <sup>1</sup>H-NMR (400 MHz, DMSO-*d*<sub>6</sub>)  $\delta$ : 10.31 (1H, s, 7-OH), 7.91 (1H, d,  $J$  = 9.6 Hz, H-4), 7.22 (1H, brs, H-5), 6.78 (1H, s, H-8), 6.22 (1H, d,  $J$  = 9.6 Hz, H-3), 3.82 (3H, s, 6-OCH<sub>3</sub>)。基于上述理化常数及波谱数据, 与文献报道<sup>[4]</sup>对照, 鉴定化合物 2 为 7-羟基-6-甲氧基香豆素。

化合物 3: 无色针晶(氯仿), mp 214~216 °C。ESI-MS  $m/z$ : 209 [M+H]<sup>+</sup>。 <sup>1</sup>H-NMR (400 MHz, DMSO-*d*<sub>6</sub>)  $\delta$ : 9.38 (2H, s, -OH), 7.91 (1H, d,  $J$  = 9.6 Hz, H-4), 7.02 (1H, brs, H-5), 6.25 (1H, d,  $J$  = 9.6

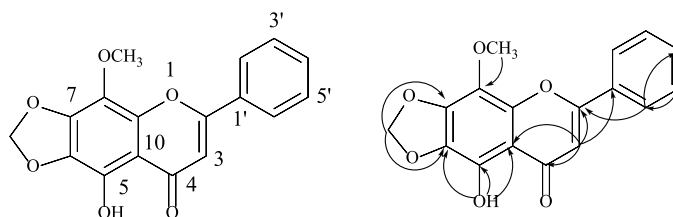


图 1 化合物 1 的化学结构及主要 HMBC (→)  
Fig. 1 Structure of compound 1 and key HMBC (→)

Hz, H-3), 3.87 (3H, s, 6-OCH<sub>3</sub>)。综合以上波谱数据及理化常数, 与文献报道<sup>[5]</sup>对照, 鉴定化合物 3 为秦皮素。

化合物 4: 黄色针晶(丙酮), mp 146~147 °C。ESI-MS  $m/z$ : 359 [M+H]<sup>+</sup>。 <sup>1</sup>H-NMR (400 MHz, DMSO-*d*<sub>6</sub>)  $\delta$ : 12.75 (1H, s, 5-OH), 7.53 (1H, dd,  $J$  = 2.0, 8.4 Hz, H-6'), 7.44 (1H, d,  $J$  = 2.0 Hz, H-2'), 7.00 (1H, d,  $J$  = 8.4 Hz, H-5'), 6.61 (1H, s, H-8), 6.56 (1H, s, H-3), 3.99 (3H, s, -OCH<sub>3</sub>), 3.98 (3H, s, -OCH<sub>3</sub>), 3.97 (3H, s, -OCH<sub>3</sub>), 3.93 (3H, s, -OCH<sub>3</sub>); <sup>13</sup>C-NMR (100 MHz, DMSO-*d*<sub>6</sub>)  $\delta$ : 164.0 (C-2), 104.5 (C-3), 182.6 (C-4), 152.3 (C-5), 129.2 (C-6), 158.7 (C-7), 90.6 (C-8), 153.2 (C-9), 106.1 (C-10), 123.8 (C-1'),

108.8 (C-2'), 149.4 (C-3'), 153.0 (C-4'), 111.2 (C-5'), 120.1 (C-6'), 60.8 (-OCH<sub>3</sub>), 56.3 (-OCH<sub>3</sub>), 56.1 (-OCH<sub>3</sub>), 56.0 (-OCH<sub>3</sub>)。根据上述理化常数及波谱数据, 与文献报道<sup>[6]</sup>对照, 鉴定化合物 4 为 5-羟基-6,7,3',4'-四甲氧基黄酮。

化合物 5: 黄色针晶(甲醇), mp 194~196 °C。ESI-MS  $m/z$  329 [M+H]<sup>+</sup>。 <sup>1</sup>H-NMR (400 MHz, DMSO-*d*<sub>6</sub>)  $\delta$ : 12.78 (1H, s, 5-OH), 7.82 (2H, d,  $J$  = 8.2 Hz, H-2', 6'), 7.00 (2H, d,  $J$  = 8.2 Hz, H-3', 5'), 6.55 (1H, s, H-3), 6.52 (1H, s, H-8), 3.95 (3H, s, -OCH<sub>3</sub>), 3.91 (3H, s, -OCH<sub>3</sub>), 3.88 (3H, s, -OCH<sub>3</sub>); <sup>13</sup>C-NMR (100 MHz, DMSO-*d*<sub>6</sub>)  $\delta$ : 163.9 (C-2), 104.0 (C-3), 182.6 (C-4), 153.1 (C-5), 132.6 (C-6), 158.7 (C-7),

90.5 (C-8), 153.0 (C-9), 106.1 (C-10), 123.5 (C-1'), 127.9 (C-2'), 114.5 (C-3'), 162.3 (C-4'), 114.5 (C-5'), 127.9 (C-6'), 60.8 (6-OCH<sub>3</sub>), 56.2 (-OCH<sub>3</sub>), 55.5 (-OCH<sub>3</sub>)。基于以上理化常数及波谱数据, 鉴定化合物 **5** 为 5-羟基-4',6,7-三甲氧基黄酮<sup>[7]</sup>。

化合物 **6**: 淡黄色粉末(甲醇)。ESI-MS  $m/z$ : 316 [M+H]<sup>+</sup>。<sup>1</sup>H-NMR (400 MHz, DMSO-*d*<sub>6</sub>)  $\delta$ : 9.41 (1H, s, -OH), 9.17 (1H, s, -OH), 7.98 (1H, t,  $J = 5.6$  Hz, N-H), 7.32 (1H, d,  $J = 15.6$  Hz, H-7), 7.12 (1H, d,  $J = 1.6$  Hz, H-2), 7.03 (2H, d,  $J = 8.4$  Hz, H-2', 6'), 6.98 (1H, dd,  $J = 8.0, 1.6$  Hz, H-6), 6.80 (1H, d,  $J = 8.0$  Hz, H-5), 6.68 (2H, d,  $J = 8.4$  Hz, H-3', 5'), 6.45 (1H, d,  $J = 15.6$  Hz, H-8), 3.80 (3H, s, 3-OCH<sub>3</sub>), 3.32 (2H, m, H-8'), 2.65 (2H, t,  $J = 7.6$  Hz, H-7')。综合以上波谱数据及理化常数, 与文献报道<sup>[8]</sup>对照, 鉴定化合物 **6** 为二氢阿魏酰酪胺。

化合物 **7**: 黄色粉末(甲醇)。ESI-MS  $m/z$ : 284 [M+H]<sup>+</sup>。<sup>1</sup>H-NMR (400 MHz, DMSO-*d*<sub>6</sub>)  $\delta$ : 9.81 (1H, s, -OH), 9.16 (1H, s, -OH), 8.00 (1H, t,  $J = 5.6$  Hz, N-H), 7.39 (2H, d,  $J = 8.6$  Hz, H-2, 6), 7.35 (1H, d,  $J = 15.6$  Hz, H-7), 7.02 (2H, d,  $J = 8.4$  Hz, H-2', 6'), 6.79 (2H, d,  $J = 8.6$  Hz, H-3, 5), 6.68 (2H, d,  $J = 8.4$  Hz, H-3', 5'), 6.40 (1H, d,  $J = 15.6$  Hz, H-8), 3.32 (2H, m, H-8'), 2.65 (2H, t,  $J = 7.2$  Hz, H-7')。基于上述理化常数及波谱数据, 与文献报道<sup>[9]</sup>对照, 鉴定化合物 **7** 为反式-*N*-对羟基香豆酰酪胺。

化合物 **8**: 黄色针晶(丙酮), mp 196~198 °C。ESI-MS  $m/z$ : 345 [M+H]<sup>+</sup>。<sup>1</sup>H-NMR (400 MHz, DMSO-*d*<sub>6</sub>)  $\delta$ : 12.95 (1H, s, 5-OH), 10.02 (1H, s, 3'-OH), 7.62 (1H, dd,  $J = 2.1, 8.7$  Hz, H-6'), 7.60 (1H, d,  $J = 2.1$  Hz, H-2'), 6.97 (1H, s, H-3), 6.96 (1H, d,  $J = 8.7$  Hz, H-5'), 6.94 (1H, s, H-8), 3.94 (3H, s, -OCH<sub>3</sub>), 3.91 (3H, s, -OCH<sub>3</sub>), 3.74 (3H, s, -OCH<sub>3</sub>); <sup>13</sup>C-NMR (100 MHz, DMSO-*d*<sub>6</sub>)  $\delta$ : 163.9 (C-2), 103.0 (C-3), 182.2 (C-4), 152.6 (C-5), 131.8 (C-6), 158.6 (C-7), 91.6 (C-8), 152.0 (C-9), 105.0 (C-10), 121.4 (C-1'), 110.2 (C-2'), 150.8 (C-3'), 148.0 (C-4'), 115.9 (C-5'), 120.4 (C-6'), 60.0 (6-OCH<sub>3</sub>), 56.4 (-OCH<sub>3</sub>), 56.0 (-OCH<sub>3</sub>)。综合以上理化常数及波谱数据, 鉴定化合物 **8** 为 5,3'-二羟基-6,7,4'-三甲氧基黄酮<sup>[10]</sup>。

化合物 **9**: 淡黄色粉末(甲醇)。ESI-MS  $m/z$  330 [M+H]<sup>+</sup>。<sup>1</sup>H-NMR (400 MHz, DMSO-*d*<sub>6</sub>)  $\delta$ : 9.31

(1H, s, -OH), 9.14 (1H, s, -OH), 8.04 (1H, t,  $J = 5.2$  Hz, N-H), 7.35 (1H, d,  $J = 15.6$  Hz, H-7), 7.17 (2H, d,  $J = 8.0$  Hz, H-2, 6), 7.12 (1H, d,  $J = 1.4$  Hz, H-2'), 7.00 (1H, dd,  $J = 1.4, 8.3$  Hz, H-6'), 6.84 (1H, d,  $J = 8.3$  Hz, H-5'), 6.75 (2H, d,  $J = 8.0$  Hz, H-3, 5), 6.59 (1H, d,  $J = 15.6$  Hz, H-8), 4.57 (1H, m, H-7'), 3.80 (3H, s, 4-OCH<sub>3</sub>), 3.40 (1H, m, H-8'a), 3.23 (1H, m, H-8'b)。根据以上波谱数据及理化常数, 与文献报道<sup>[11]</sup>对照, 鉴定化合物 **9** 为 *N*-[2-(3,4-二羟基苯基)-2-羟乙基]-3-(4-甲氧基苯基) 丙-2-烯酰胺。

化合物 **10**: 淡黄色粉末(甲醇)。ESI-MS  $m/z$ : 300 [M+H]<sup>+</sup>。<sup>1</sup>H-NMR (400 MHz, DMSO-*d*<sub>6</sub>)  $\delta$ : 9.79 (1H, s, -OH), 9.20 (1H, s, -OH), 8.06 (1H, t,  $J = 5.2$  Hz, N-H), 7.36 (2H, d,  $J = 8.8$  Hz, H-2', 6'), 7.30 (1H, d,  $J = 15.6$  Hz, H-7), 7.13 (2H, d,  $J = 8.7$  Hz, H-2, 6), 6.80 (2H, d,  $J = 8.8$  Hz, H-3', 5'), 6.73 (2H, d,  $J = 8.7$  Hz, H-3, 5), 6.50 (1H, d,  $J = 15.6$  Hz, H-8), 4.55 (1H, m, H-7'), 3.47 (1H, m, H-8'a), 3.37 (1H, m, H-8'b)。综合上述理化常数及波谱数据, 与文献报道<sup>[11]</sup>对照, 鉴定化合物 **10** 为 *N*-反式香豆酰基章鱼胺。

化合物 **11**: 淡黄色粉末(丙酮)。ESI-MS  $m/z$ : 301 [M+H]<sup>+</sup>。<sup>1</sup>H-NMR (400 MHz, DMSO-*d*<sub>6</sub>)  $\delta$ : 13.06 (1H, s, 5-OH), 10.67 (1H, s, 7-OH), 10.33 (1H, s, 4'-OH), 7.91 (2H, d,  $J = 8.4$  Hz, H-2', 6'), 6.91 (2H, d,  $J = 8.4$  Hz, H-3', 5'), 6.75 (1H, s, H-8), 6.57 (1H, s, H-3), 3.73 (3H, s, 6-OCH<sub>3</sub>); <sup>13</sup>C-NMR (100 MHz, DMSO-*d*<sub>6</sub>)  $\delta$ : 163.7 (C-2), 102.3 (C-3), 182.1 (C-4), 152.7 (C-5), 131.3 (C-6), 157.1 (C-7), 94.2 (C-8), 152.3 (C-9), 104.0 (C-10), 121.2 (C-1'), 128.4 (C-2'), 115.9 (C-3'), 161.1 (C-4'), 115.9 (C-5'), 128.4 (C-6'), 59.9 (6-OCH<sub>3</sub>)。综合以上波谱数据及理化常数, 与文献报道<sup>[12]</sup>对照, 鉴定化合物 **11** 为 5,7,4'-三羟基-6-甲氧基黄酮。

化合物 **12**: 淡黄色粉末(丙酮)。ESI-MS  $m/z$ : 301 [M+H]<sup>+</sup>。<sup>1</sup>H-NMR (400 MHz, DMSO-*d*<sub>6</sub>)  $\delta$ : 12.61 (1H, s, 5-OH), 10.69 (1H, s, 7-OH), 10.36 (1H, s, 4'-OH), 7.91 (2H, d,  $J = 8.8$  Hz, H-2', 6'), 6.95 (2H, d,  $J = 8.8$  Hz, H-3', 5'), 6.77 (1H, s, H-3), 6.26 (1H, s, H-6), 3.82 (3H, s, 8-OCH<sub>3</sub>); <sup>13</sup>C-NMR (100 MHz, DMSO-*d*<sub>6</sub>)  $\delta$ : 163.5 (C-2), 98.9 (C-3), 181.9 (C-4), 161.2 (C-5), 102.7 (C-6), 157.0 (C-7), 128.3 (C-8), 156.2 (C-9), 103.5 (C-10), 121.3 (C-1'), 127.7 (C-2'), 116.1 (C-3'), 163.5 (C-4'), 116.1 (C-5'), 127.7 (C-6'),

61.0 (8-OCH<sub>3</sub>)。基于上述理化常数及波谱数据, 鉴定化合物 **12** 为 5,7,4'-三羟基-8-甲氧基黄酮<sup>[13]</sup>。

#### 4 讨论

基于多种色谱分离方法, 从黄果茄中分离得到 12 个单体, 并通过理化常数和波谱数据对其化学结构进行阐明。12 个化合物包括 6 个黄酮、4 个酰胺及 2 个香豆素, 其中化合物 **1** 为新化合物, 其他 11 个化合物均为首次从该植物中发现。本研究首次对黄果茄的药效物质基础进行了研究, 为其进一步研究与开发奠定了基础。

#### 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]. 北京: 科学出版社, 1983.
- [2] 国家中医药管理局《中华本草》编辑委员会. 中华本草 [M]. 上海: 上海科学技术出版社, 1999.
- [3] 冉先德. 中华药海 [M]. 哈尔滨: 哈尔滨出版社, 1993.
- [4] 李全, 许琼明, 郝丽莉, 等. 紫丁香叶化学成分研究 [J]. 中草药, 2009, 40(2): 369-371.
- [5] 赵明, 王建飞, 张扩, 等. 细叶杜香中酚类成分及其抗氧化活性研究 [J]. 中草药, 2017, 48(21): 4393-4397.
- [6] 冯卫生, 陈文静, 郑晓珂, 等. 怀菊花中黄酮类化学成分研究 [J]. 中国药学杂志, 2017, 52(17): 1497-1502.
- [7] 王晓梅, 热娜·卡斯木, 马燕, 等. 新疆鼠尾草叶化学成分的基础研究 [J]. 新疆医科大学学报, 2005, 28(1): 21-23.
- [8] 任燕, 沈莉, 戴胜军. 白英中的黄酮及酰胺类化合物 [J]. 中国中药杂志, 2009, 36(6): 721-723.
- [9] Rahman A, Bhatti M K, Akhtar F, et al. Alkaloids of *Fumaria indica* [J]. *Phytochemistry*, 1992, 31(8): 2869-2872.
- [10] Ramaraj D, Rathinasamy G, Vairathevar V. Isolation of eupatorin from *Albizia odoratissima* and its application for *L-tryptophansensing* [J]. *Res Chem Intermed*, 2018, 44(11): 6917-6931.
- [11] 郑新恒, 陈芳, 梁秋萍, 等. 云南枸杞根中的酰胺类化学成分及其抗炎活性研究 [J]. 天然产物研究与开发, 2018, 30(4): 603-609.
- [12] 邓世明, 杨先会, 王宁, 等. 外来入侵植物假臭草的黄酮类成分研究 [J]. 西北植物学报, 2009, 29(12): 2548-2550.
- [13] 陈欣, 陈光英, 陈文蒙, 等. 蓝花黄芩的黄酮成分及生物活性研究 [J]. 中药材, 2016, 39(10): 2240-2243.