

## 芜菁的化学成分研究

陈斌<sup>1,2</sup>, 李作鹏<sup>3</sup>, 刘昌华<sup>2</sup>, 管嘉威<sup>2</sup>, 袁越<sup>3</sup>, 赵江瑜<sup>3</sup>, 阿吉艾克拜尔·艾萨<sup>1,2,3\*</sup>

1. 贵州医科大学药学院, 中药功效成分发掘与利用全国重点实验室, 贵州 贵阳 561113

2. 中科中山药物创新研究院, 广东 中山 528400

3. 中国科学院新疆理化技术研究所, 新疆 乌鲁木齐 830011

**摘要:** 目的 研究十字花科芸薹属植物芜菁 *Brassica rapa* 块根中的化学成分, 并评估其抗炎作用。方法 利用硅胶、薄层色谱、十八烷基键合硅胶、羟丙基葡聚糖凝胶、高效液相等方法系统分离纯化, 采用核磁共振、质谱、紫外等光谱、波谱技术鉴定结构, 使用 CCK-8 法评价化合物对小鼠巨噬细胞 RAW264.7 的细胞毒性, 同时采用 Griess 法测定化合物体外抗炎活性。结果 从芜菁块根 70%乙醇提取物中分离到 25 个化合物, 分别鉴定为 2-*C*- $\beta$ -*D*-葡萄糖-吡啶-3-乙腈 (1)、芥子酸 (2)、*p*-香豆酸 (3)、阿魏酸 (4)、芥子酸甲酯 (5)、4-羟基肉桂酸甲酯 (6)、反-4-甲氧基肉桂酸 (7)、苹果酸二甲基阿魏酰酯 (8)、苹果酸二甲基芥子酰酯 (9)、对羟基苯甲醛 (10)、苯乙酸 (11)、苯基-1,2-乙二醇 (12)、3-苯基丙酰胺 (13)、苯乙基- $\beta$ -*D*-葡萄糖苷 (14)、4-(3-hydroxypropyl) phenyl  $\beta$ -*D*-glucopyranoside (15)、idaeusinol B (16)、丁香树脂酚-4-*O*- $\beta$ -*D*-葡萄糖苷 (17)、equiselignan A (18)、红花菜豆酸 (19)、脱落酸 (20)、玫瑰花苷 (21)、佛手柑内酯 (22)、methylthioadenosine (23)、5-羟甲基糠醛 (24)、rabdosi acids B (25)。CCK-8 毒性测试表明, 化合物 16、22 和 25 有细胞毒性, Griess 法体外实验表明, 化合物 1~25 显示出不同程度的抗炎活性, 化合物 8、9 具有明显的抗炎活性。结论 化合物 1 为吡啶硫代葡萄糖苷类化合物, 化合物 2~9、16~18 为苯丙素类化合物, 化合物 10~12、14、15 为苯环衍生物, 化合物 13、23 为含氮类化合物, 其中化合物 1、6~9、13、15、16、18、19、23 为首次从芜菁中分离得到。体外抗炎活性表明, 化合物 8、9 具有明显的抗炎活性, 其半数抑制浓度 (median inhibition concentration, IC<sub>50</sub>) 值分别为 6.95、6.46  $\mu$ mol/L。

**关键词:** 芜菁; 抗炎活性; 苯丙素类; 含氮类化合物; 2-*C*- $\beta$ -*D*-葡萄糖-吡啶-3-乙腈; 芥子酸

中图分类号: R284.1 文献标志码: A 文章编号: 0253-2670(2026)05-1622-09

DOI: 10.7501/j.issn.0253-2670.2026.05.004

## Chemical constituents of *Brassica rapa*

CHEN Bin<sup>1,2</sup>, LI Zuopeng<sup>3</sup>, LIU Changhua<sup>2</sup>, GUAN Jiawei<sup>2</sup>, YUAN Yue<sup>3</sup>, ZHAO Jiangyu<sup>3</sup>, Haji Akber Aisa<sup>1,2,3</sup>

1. State Key Laboratory of Discovery and Utilization of Functional Components in Traditional Chinese Medicine & School of Pharmaceutical Sciences, Guizhou Medical University, Guiyang 561113, China

2. Zhongshan Institute for Drug Discovery, Shanghai Institute of Materia Medica, Chinese Academy of Sciences, Zhongshan 528400, China

3. Xinjiang Technical Institute of Physics and Chemistry, Chinese Academy of Sciences, Urumqi 830011, China

**Abstract: Objective** To investigate the chemical constituents of the taproots of *Brassica rapa* (Qiamagu) and evaluate their anti-inflammatory activity. **Methods** The chemical constituents were systematically isolated and purified using silica gel, ODS, Sephadex LH-20 column chromatography, and preparative HPLC. Their structures were elucidated by comprehensive spectroscopic analyses, including NMR, MS, and UV. The cytotoxicity of the isolates against RAW264.7 murine macrophages was assessed using the CCK-8 assay. The *in vitro* anti-inflammatory activity was evaluated via the Griess method. **Results** Twenty-five compounds were isolated from the 70% ethanol extract of *B. rapa* taproots and identified as 2-*C*- $\beta$ -*D*-glucosyl-indole-3-acetonitrile (1), sinapic acid (2), *p*-coumaric acid (3), ferulic acid (4), methyl sinapate (5), methyl 4-hydroxycinnamate (6), trans-4-methoxycinnamic acid (7), dimethyl

收稿日期: 2025-12-14

基金项目: 国家重点研发计划项目 (2020YFE0205600); 天山人才计划项目 (2022TSYCLJ0064); 新疆维吾尔自治区重点研发计划项目 (2024B2023); 中山市科学技术局科研项目 (2020YFE0205600)

作者简介: 陈斌 (2000—), 硕士研究生, 主要研究方向植物化学。E-mail: 2946429656@qq.com

\*通信作者: 阿吉艾克拜尔·艾萨 (1965—), 维吾尔族, 中国工程院院士, 研究员, 博士生导师, 从事于植物资源开发利用。

E-mail: haji@ms.xjb.ac.cn

feruloyl malate (8), sinapoyl dimethyl malate (9), *p*-hydroxybenzaldehyde (10), phenylacetic acid (11), phenylethane-1, 2-diol (12), 3-phenylpropanamide (13), phenylethyl- $\beta$ -*D*-glucoside (14), 4-(3-hydroxypropyl) phenyl  $\beta$ -*D*-glucopyranoside (15), idaeusinol B (16), syringaresinol-4-*O*- $\beta$ -*D*-glucoside (17), equiselinan A (18), phaseic acid (19), abscisic acid (20), roseoside (21), bergapten (22), methylthioadenosine (23), 5-hydroxymethylfurfural (24), and rabdosia acid B (25). The CCK-8 assay demonstrated the cytotoxicity of compounds 16, 22, and 25. To evaluate the anti-inflammatory activity *in vitro*, the Griess method was employed. The results demonstrated that all tested compounds exhibited varying degrees of inhibitory activity. **Conclusion** Compound 1 is an indole glucosinolate; compounds 2—9 and 16—18 are phenylpropanoids, compounds 10—12, 14 and 15 are benzene ring derivatives, and compounds 13 and 23 are nitrogen-containing compounds. Among them, compounds 1, 6—9, 13, 15, 16, 18, 19, and 23 are isolated from *B. rapa* for the first time. In the anti-inflammatory assay, with compounds 8 and 9 demonstrating significant effects, yielding IC<sub>50</sub> values of 6.95 and 6.46  $\mu$ mol/L.

**Key words:** *Brassica rapa* L.; anti-inflammatory activity; phenylpropanoids; nitrogen-containing compounds; 2-*C*- $\beta$ -*D*-glucosyl-indole-3-acetonitrile; sinapic acid

芜菁 *Brassica rapa* L., 俗名恰玛古, 是十字花科 (Brassicaceae) 芸薹属 *Brassica* L. 二年生草本, 高达 100 cm; 块根肉质, 球形、扁圆形或长圆形, 外皮白色、黄色或红色, 根肉质白色或黄色, 无辣味; 茎直立, 有分枝, 下部稍有毛, 上部无毛<sup>[1]</sup>。芜菁原产于地中海沿岸及阿富汗、巴基斯坦等地。目前, 全球各地均有种植, 我国主要分布于新疆、西藏、四川、浙江、河北等地区。芜菁在新疆地区拥有 2 000 多年的药用和食用历史。如《中华本草维吾尔分册》中记载: 生湿生热, 营养全身, 润肺止咳, 增强食欲, 明目增视。主治干寒性或黑胆质性疾, 如营养不良, 身体瘦弱, 肺燥咳嗽, 食欲不振, 视力降低<sup>[2]</sup>。

近几年, 对原产于新疆芜菁的研究主要为粗提物, 对化学成分研究较少。因此, 本研究对新疆芜菁展开化学成分研究。其化学成分主要含有多糖、酚酸类、硫代葡萄糖苷、挥发油等多种化学成分<sup>[3]</sup>。现代药理研究证明, 芜菁具有保肝、抗炎、抗肿瘤等药理作用<sup>[3-5]</sup>。

本研究对新疆芜菁展开系统性化学成分研究, 从其 70%乙醇提取物的醋酸乙酯萃取物中分离得到 25 个化合物, 分别鉴定为 2-*C*- $\beta$ -*D*-葡萄糖-吲哚-3-乙腈 (2-*C*- $\beta$ -*D*-glucosyl-indole-3-acetonitrile, 1)、芥子酸 (sinapic acid, 2)、*p*-香豆酸 (*p*-coumaric acid, 3)、阿魏酸 (ferulic acid, 4)、芥子酸甲酯 (methyl sinapate, 5)、4-羟基肉桂酸甲酯 (methyl 4-hydroxycinnamate, 6)、反-4-甲氧基肉桂酸 (*trans*-4-methoxycinnamic acid, 7)、苹果酸二甲基阿魏酰酯 (dimethyl feruloyl malate, 8)、苹果酸二甲基芥子酰酯 (sinapoyl dimethyl malate, 9)、对羟基苯甲醛 (*p*-hydroxybenzaldehyde, 10)、苯乙酸

(phenylacetic acid, 11)、苯基-1,2-乙二醇 (phenylethane-1,2-diol, 12)、3-苯基丙酰胺 (3-phenylpropanamide, 13)、苯乙基- $\beta$ -*D*-葡萄糖苷 (phenylethyl- $\beta$ -*D*-glucoside, 14)、4-(3-hydroxypropyl) phenyl  $\beta$ -*D*-glucopyranoside (15)、idaeusinol B (16)、丁香树脂酚-4-*O*- $\beta$ -*D*-葡萄糖苷 (syringaresinol-4-*O*- $\beta$ -*D*-glucoside, 17)、equiselinan A (18)、红花菜豆酸 (phaseic acid, 19)、脱落酸 (abscisic acid, 20)、玫瑰花苷 (roseoside, 21)、佛手柑内酯 (bergapten, 22)、methylthioadenosine (23)、5-羟甲基糠醛 (5-hydroxymethylfurfural, 24)、rabdosia acids B (25)。化合物 1 为吲哚硫代葡萄糖苷类化合物, 2~9、16~18 为苯丙素类化合物, 10~12、14、15 为苯环衍生物, 化合物 13、23 为含氮类化合物; 其中化合物 1、6~9、13、15、16、18、19、23 首次从芜菁中分离得到。体外抗炎活性表明, 多数化合物对 LPS 诱导 RAW264.7 细胞生成 NO 具有不同程度的抑制作用, 其中化合物 8、9 的 IC<sub>50</sub> 值为 6.95、6.46  $\mu$ mol/L。本研究系统分析了芜菁块根中的化学成分, 为阐明其物质基础提供了实验依据, 为芜菁的开发与利用提供理论依据。

## 1 仪器与材料

Bruker Avance Neo Ascend 500 和 Bruker Avance Neo Ascend 600 (美国 Bruker 公司)、1290 Infinity II-Zeno TOF 7600 (新加坡 Sciex 公司)、Exactive Plus (德国 Thermo Scientific 公司)、岛津高效液相色谱系统 (LC-20ADXR, 日本岛津公司)、XSelect<sup>®</sup> CSH C<sub>18</sub> 色谱柱 (250 mm $\times$ 4.6 mm, 5  $\mu$ m, 美国沃特世公司)、SQP 分析电子天平 [赛多利斯科学仪器 (北京) 有限公司]、LC-20AT 半制备液相色谱仪 (日本岛津公司)、常温低速离心机 (湘仪仪器有限公司)。

200~300 目硅胶(烟台江友硅胶开发有限公司), 大孔树脂填料(AB-8, 北京英莱克科技发展有限公司)、羟丙基葡聚糖凝胶(Sephadex LH-20, Cytiva 瑞典有限公司)、MCI 填料(日本三菱化学股份有限公司)、HPLC 级试剂(德国默克公司)。分析级试剂采购于中国国药集团。DMEM 培养基(美国赛默飞世尔公司), 胎牛血清(以色列生物工业公司), 穿心莲内酯(美国 MedChemexpress 生物科技公司)、CCK-8 试剂盒(美国 MedChemexpress 生物科技公司)、脂多糖(美国 MedChemexpress 生物科技公司)、NO 试剂盒(中国碧云天生物技术有限公司)、小鼠巨噬细胞 RAW264.7 采购于武汉锌衫生物技术有限公司。

茺菁块根于 2022 年 11 月采集于柯坪县恰玛古种植基地, 由中国科学院新疆理化技术研究所鲁春芳副研究员鉴别和调查, 为十字花科芸苔属植物茺菁 *B. rapa* L. 的新鲜块根, 凭证标本(WY02706)保存在中国科学院新疆理化技术研究所标本室。

## 2 方法

### 2.1 提取与分离

70.0 kg 茺菁块根经切条、干燥后获得干燥块根 10.0 kg。以物料比 1 : 5 加入 70%乙醇进行提取, 共提取 3 次, 每次 3 d, 合并提取液, 减压浓缩得粗提物浸膏。将浸膏用水分散后, 依次以醋酸乙酯和正丁醇(与水相体积比均为 3 : 1) 分别萃取 3~5 次, 合并相应萃取液并浓缩, 得到醋酸乙酯部位 48.0 g 和正丁醇部位 364.0 g。醋酸乙酯部位(48.0 g)经硅胶柱色谱分离, 以石油醚-丙酮(100 : 0→0 : 100)梯度洗脱, 收集得到 9 个馏份(Fr. A~I)。

Fr. B (4.98 g) 通过快速制备色谱(乙腈-水 10%→100%)进一步分离, 得到 Fr. B1~B10。Fr. B5 (72.5 mg) 经半制备液相色谱(乙腈-0.1%甲酸水 26 : 74), 等度洗脱分离, 获得化合物 5 (4.2 mg,  $t_R = 28.98$  min)、6 (2.8 mg,  $t_R = 29.28$  min) 与 7 (8.6 mg,  $t_R = 29.36$  min)。Fr. B7 (228.1 mg) 经 Sephadex LH-20 柱(80%甲醇-水)分离为 Fr. B7A~B7D; Fr. B7B (73.1 mg) 通过半制备液相色谱(乙腈-0.1%甲酸水 30 : 70)等度纯化, 得化合物 9 (8.4 mg,  $t_R = 32.31$  min); Fr. B7C (137.9 mg) 经半制备液相色谱(乙腈-水 35 : 65)等度分离, 得化合物 8 (9.2 mg,  $t_R = 33.01$  min)。

Fr. C (1.41 g) 经快速制备色谱(乙腈-水 10%→100%)纯化得 Fr. C1~C12。Fr. C1 (61.0 mg) 通过制备薄层色谱(石油醚-醋酸乙酯 5 : 1)分离

为 Fr. C1A~C1F。Fr. C1A (18.5 mg) 经半制备液相色谱(乙腈-水 10 : 90)纯化, 得化合物 23 (7.8 mg,  $t_R = 10.05$  min); Fr. C1B (15.8 mg) 经半制备液相色谱(乙腈-水 40 : 60)分离, 得化合物 22 (2.0 mg,  $t_R = 33.78$  min); Fr. C1E (23.5 mg) 经半制备液相色谱(乙腈-水 4 : 96)纯化, 得化合物 24 (7.6 mg,  $t_R = 7.79$  min)。Fr. C2 (90.6 mg) 经硅胶制备薄层(二氯甲烷-甲醇 50 : 1)分离为 Fr. C2A~C2E; Fr. C2B (38.5 mg) 通过半制备液相色谱(乙腈-水 35 : 65), 等度纯化, 得化合物 17 (5.4 mg,  $t_R = 21.70$  min); Fr. C2D (22.8 mg) 经半制备液相色谱(乙腈-水 22 : 78)分离, 得化合物 1 (6.3 mg,  $t_R = 23.26$  min)。

Fr. D (1.09 g) 经快速制备色谱(乙腈-水 10%→100%)分离为 Fr. D1~D7。Fr. D1 (95.7 mg) 经 Sephadex LH-20 (90%甲醇-水)分离为 Fr. D1A~D1G; Fr. D1C (44.9 mg) 通过半制备液相色谱(乙腈-水 27 : 73)纯化, 得化合物 11 (2.2 mg,  $t_R = 24.22$  min); Fr. D1D (15.9 mg) 经半制备液相色谱(乙腈-水 19 : 81)分离, 得化合物 10 (2.0 mg,  $t_R = 18.19$  min)。Fr. D3 (251.3 mg) 经 Sephadex LH-20 (90%甲醇-水)分离为 Fr. D3A~D3E; Fr. D3B (69.9 mg) 通过半制备液相色谱(乙腈-水 13 : 87)纯化, 得化合物 21 (4.5 mg,  $t_R = 16.66$  min); Fr. D3C (73.5 mg) 经半制备液相色谱(乙腈-水 9 : 91)分离, 得化合物 15 (3.1 mg,  $t_R = 13.09$  min)。Fr. D6 (203.4 mg) 经硅胶柱(石油醚-醋酸乙酯 0 : 100→100 : 0)梯度洗脱分为 Fr. D6A~D6F; Fr. D6C (38.7 mg) 通过半制备液相色谱(乙腈-0.1%甲酸水 68 : 32)纯化, 得化合物 25 (3.6 mg,  $t_R = 47.73$  min)。

Fr. E (1.73 g) 经快速制备色谱(乙腈-水 10%→100%)分为 Fr. E1~E11。Fr. E2 (16.4 mg) 通过半制备液相色谱(乙腈-0.1%甲酸水 9 : 91)纯化, 得化合物 12 (4.7 mg,  $t_R = 14.58$  min)。

Fr. G (2.30 g) 经快速制备色谱(乙腈-水, 10%→100%)分为 Fr. G1~G12。Fr. G5 (74.3 mg) 经 Sephadex LH-20 (90%甲醇-水)分离为 Fr. G5A~G5D; Fr. G5C (16.7 mg) 通过半制备液相色谱(乙腈-水 28 : 72)纯化, 得化合物 3 (6.8 mg,  $t_R = 21.43$  min)。Fr. G6 (139.3 mg) 经 Sephadex LH-20 (90%甲醇-水)分离为 Fr. G6A~G6D; Fr. G6A (10.4 mg) 通过半制备液相色谱(乙腈-水 17 : 83)纯化, 得化合物 19 (3.4 mg,  $t_R = 22.05$  min); Fr. G6B (60.1 mg) 经半制备液相色谱(乙腈-水 18 : 82)分离,

得化合物 **13** (20.7 mg,  $t_R = 20.63$  min); Fr. G6C (31.9 mg) 经半制备液相色谱 (乙腈-水 20:80) 分离, 得化合物 **2** (4.0 mg,  $t_R = 21.92$  min) 与 **4** (2.5 mg,  $t_R = 22.26$  min)。Fr. G9 (71.4 mg) 经 Sephadex LH-20 (甲醇) 分离为 Fr. G9A~G9D; Fr. G9A (54.8 mg) 通过半制备液相色谱分离, 以乙腈-水 (24:76) 洗脱得到化合物 **20** (3.5 mg,  $t_R = 26.90$  min); Fr. G9B (9.6 mg) 通过半制备液相色谱 (乙腈-水 29:71) 纯化, 得化合物 **16** (3.8 mg,  $t_R = 27.52$  min)。

Fr. I (21.09 g) 经 MCI 柱 (10%→100% 甲醇-水) 分离为 Fr. I1~I5。Fr. I1 (6.79 g) 经快速制备色谱 (乙腈-水 10%→100%) 分为 Fr. I1A~I1F; Fr. I1D (296.5 mg) 经 Sephadex LH-20 (90% 甲醇-水) 分离为 Fr. I1D1~I1D9; Fr. I1D4 (50.9 mg) 通过半制备液相色谱 (乙腈-水 14:86) 纯化, 得化合物 **14** (5.6 mg,  $t_R = 18.80$  min)。Fr. I2 (412.3 mg) 经快速制备色谱 (乙腈-水 10%→100%) 分为 Fr. I2A~I2E; Fr. I2C (63.9 mg) 通过半制备液相色谱 (乙腈-0.1% 甲酸水 16:84) 纯化, 得化合物 **18** (4.7 mg,  $t_R = 20.90$  min)。

## 2.2 抗炎活性筛选

将 RAW264.7 细胞从 -80 °C 冻存状态中取出, 于 37 °C 水浴中快速复苏, 转移至培养皿中, 加入含 10% 胎牛血清的 DMEM 完全培养基, 置于 37 °C、5% CO<sub>2</sub> 培养箱中常规培养。待细胞融合度达 80% 以上时, 弃去原培养基, 用 1×PBS 洗涤 2~3 次。加入 1 mL PBS 轻柔吹打使细胞脱壁, 收集细胞悬液至离心管中, 于 23 °C、1 000 r/min 离心 3 min, 弃上清。加入 1 mL 完全培养基轻柔重悬细胞, 调整细胞密度为 1×10<sup>5</sup> 个/mL, 接种至 96 孔板中, 每孔 100 μL, 继续于 37 °C、5% CO<sub>2</sub> 条件下培养 24 h。随后给予含目标化合物的培养基进行处理, 化合物测试浓度为 50 μmol/L, 并以完全培养基作为空白对照。继续培养适宜时间后, 参照 CCK-8 试剂说明书检测细胞活性, 测定吸光度 (*A*) 值。按公式计算细胞存活率。

$$\text{细胞存活率} = (A_{\text{样品}} - A_{\text{空白}}) / (A_{\text{对照}} - A_{\text{空白}})$$

细胞接种与培养方法同上。设置以下各组: 给药组 (50 μmol/L 化合物)、阳性对照组 (5 μmol/L 穿心莲内酯)、模型组 (1 μg/mL LPS) 及空白组 (不含药物和 LPS 的培养基)。加药处理后继续孵育 24 小时。收集各组细胞上清液 50 μL, 加入新 96 孔板中, 依次加入等体积 Griess I 与 Griess II 试剂, 混

匀后室温避光反应。于 540 nm 波长下测定 *A* 值, 并按下列公式计算 NO 抑制率。

$$\text{NO 抑制率} = (A_{\text{样品}} - A_{\text{空白}}) / (A_{\text{模型}} - A_{\text{空白}})$$

## 3 结果与分析

### 3.1 结构鉴定

化合物 **1**: 淡黄色油状物, 溶于甲醇。HR-ESI-MS  $m/z$  373.083 4 [M+Na]<sup>+</sup>, 分子式为 C<sub>18</sub>H<sub>18</sub>N<sub>2</sub>O<sub>5</sub>S。<sup>1</sup>H-NMR (600 MHz, CD<sub>3</sub>OD) δ: 7.65 (1H, d,  $J = 8.0$  Hz, H-4), 7.38 (1H, d,  $J = 8.2$  Hz, H-7), 7.23 (1H, t,  $J = 7.3$  Hz, H-6), 7.13 (1H, t,  $J = 7.6$  Hz, H-5), 4.40 (1H, d,  $J = 9.5$  Hz, H-1'), 4.18 (1H, d,  $J = 17.9$  Hz, H-8a), 4.11 (1H, d,  $J = 17.9$  Hz, H-8b), 3.89 (1H, dd,  $J = 11.9, 2.3$  Hz, H-6'), 3.71 (1H, dd,  $J = 11.9, 6.0$  Hz, H-6'), 3.35 (1H, d,  $J = 9.0$  Hz, H-3'), 3.31 (1H, m, H-5'), 3.18 (1H, t,  $J = 9.4$  Hz, H-4'), 2.98 (1H, t,  $J = 9.2$  Hz, H-2'); <sup>13</sup>C-NMR (150 MHz, CD<sub>3</sub>OD) δ: 137.0 (C-7a), 126.2 (C-3a), 123.0 (C-6), 122.7 (C-7), 119.5 (C-5), 118.6 (C-9), 118.0 (C-4), 111.2 (C-3), 111.0 (C-7), 87.7 (C-1'), 80.9 (C-5'), 78.2 (C-3'), 72.3 (C-2'), 69.8 (C-4'), 61.4 (C-6'), 12.9 (C-8)。与文献数据对比<sup>[6]</sup>, 该化合物鉴定为 2-C-β-D-葡萄糖-吡啶-3-乙腈。

化合物 **2**: 淡黄色固体, 溶于甲醇。HR-ESI-MS  $m/z$  225.075 8 [M+H]<sup>+</sup>, 分子式为 C<sub>11</sub>H<sub>12</sub>O<sub>5</sub>。<sup>1</sup>H-NMR (600 MHz, CD<sub>3</sub>OD) δ: 7.57 (1H, d,  $J = 15.8$  Hz, H-7), 6.90 (2H, s, H-2, 6), 6.35 (1H, d,  $J = 15.8$  Hz, H-8), 3.88 (6H, s, 3, 5-OCH<sub>3</sub>); <sup>13</sup>C-NMR (150 MHz, CD<sub>3</sub>OD) δ: 171.4 (C-9), 149.4 (C-3, 5), 146.5 (C-7), 139.3 (C-4), 126.8 (C-1), 117.0 (C-6), 106.7 (C-2), 56.7 (3, 5-OCH<sub>3</sub>)。与文献 NMR 数据对比<sup>[7]</sup>, 该化合物鉴定为芥子酸。

化合物 **3**: 淡黄色固体, 溶于甲醇。HR-ESI-MS  $m/z$ : 165.054 7 [M+H]<sup>+</sup>, 分子式为 C<sub>9</sub>H<sub>8</sub>O<sub>3</sub>。<sup>1</sup>H-NMR (500 MHz, CD<sub>3</sub>OD) δ: 7.57 (1H, d,  $J = 15.9$  Hz, H-7), 7.42 (2H, d,  $J = 9.8$  Hz, H-2, 6), 6.79 (2H, d,  $J = 8.1$  Hz, H-3, 5), 6.27 (1H, d,  $J = 15.9$  Hz, H-8); <sup>13</sup>C-NMR (125 MHz, CD<sub>3</sub>OD) δ: 172.0 (C-9), 161.6 (C-7), 146.8 (C-4), 131.5 (C-1), 127.8 (C-2, 6), 117.3 (C-3, 5), 116.6 (C-8)。与文献 NMR 数据对比<sup>[8]</sup>, 该化合物鉴定为 *p*-香豆酸。

化合物 **4**: 淡黄色固体, 溶于甲醇。HR-ESI-MS  $m/z$ : 195.065 4 [M+H]<sup>+</sup>, 分子式为 C<sub>10</sub>H<sub>10</sub>O。<sup>1</sup>H-NMR (600 MHz, CD<sub>3</sub>OD) δ: 7.57 (1H, d,  $J = 15.9$  Hz, H-7), 7.18 (1H, d,  $J = 1.9$  Hz, H-6), 7.06 (1H, dd,  $J = 8.2, 2.0$  Hz, H-2), 6.81 (1H, d,  $J = 8.2$  Hz, H-3), 6.32 (1H, d,  $J = 15.8$  Hz, H-8), 3.90 (3H, s, 5-OCH<sub>3</sub>); <sup>13</sup>C-NMR

(150 MHz, CD<sub>3</sub>OD)  $\delta$ : 171.7 (C-9), 150.3 (C-5), 149.4 (C-4), 146.3 (C-7), 128.0 (C-1), 123.8 (C-2), 116.8 (C-3), 116.4 (C-6), 111.6 (C-8), 56.4 (5-OCH<sub>3</sub>)。与文献数据对比<sup>[9]</sup>, 该化合物鉴定为阿魏酸。

化合物 **5**: 棕色油状物, 溶于甲醇。HR-ESI-MS  $m/z$ : 239.091 3 [M+H]<sup>+</sup>, 分子式为 C<sub>12</sub>H<sub>14</sub>O<sub>5</sub>。<sup>1</sup>H-NMR (600 MHz, CD<sub>3</sub>OD)  $\delta$ : 7.63 (1H, d,  $J$  = 15.8 Hz, H-7), 6.93 (2H, s, H-2, 6), 6.41 (1H, d,  $J$  = 15.9 Hz, H-8), 3.90 (6H, s, 3, 5-OCH<sub>3</sub>), 3.79 (3H, s, 9-OCH<sub>3</sub>); <sup>13</sup>C-NMR (150 MHz, CD<sub>3</sub>OD)  $\delta$ : 168.3 (C-9), 148.1 (C-3,5), 145.7 (C-7), 138.2 (C-4), 125.2 (C-1), 114.3 (C-8), 105.5 (C-2, 6), 55.5 (3, 5-OCH<sub>3</sub>), 50.6 (9-OCH<sub>3</sub>)。与文献数据对比<sup>[10]</sup>, 该化合物鉴定为芥子酸甲酯。

化合物 **6**: 黄色油状物, 溶于甲醇。HR-ESI-MS  $m/z$ : 179.070 4 [M+H]<sup>+</sup>, 分子式为 C<sub>10</sub>H<sub>10</sub>O<sub>3</sub>。<sup>1</sup>H-NMR (600 MHz, CD<sub>3</sub>OD)  $\delta$ : 7.63 (2H, d,  $J$  = 3.4 Hz, H-2, 6), 6.87 (1H, d,  $J$  = 12.8 Hz, H-7), 6.77 (2H, d,  $J$  = 1.7 Hz, H-3, 5), 5.78 (1H, d,  $J$  = 12.8 Hz, H-8), 3.71 (3H, s, 9-OCH<sub>3</sub>); <sup>13</sup>C-NMR (150 MHz, CD<sub>3</sub>OD)  $\delta$ : 169.0 (C-9), 160.3 (C-4), 145.2 (C-7), 133.8 (C-2, 6), 127.8 (C-1), 116.5 (C-8), 116.0 (C-3, 5), 51.8 (9-OCH<sub>3</sub>)。与文献数据对比<sup>[11]</sup>, 该化合物鉴定为芥子酸甲酯。

化合物 **7**: 黄色油状物, 溶于甲醇。HR-ESI-MS  $m/z$ : 179.070 5 [M+H]<sup>+</sup>, 分子式为 C<sub>10</sub>H<sub>10</sub>O<sub>3</sub>。<sup>1</sup>H-NMR (600 MHz, CD<sub>3</sub>OD)  $\delta$ : 7.62 (1H, d,  $J$  = 15.9 Hz, H-7), 7.46 (2H, d,  $J$  = 8.7 Hz, H-2, 6), 6.82 (2H, d,  $J$  = 8.7 Hz, H-3, 5), 6.33 (1H, d,  $J$  = 15.9 Hz, H-8), 3.76 (3H, s, 4-OCH<sub>3</sub>); <sup>13</sup>C-NMR (150 MHz, CD<sub>3</sub>OD)  $\delta$ : 169.8 (C-9), 161.3 (C-4), 146.6 (C-7), 131.1 (C-2, 6), 127.1 (C-1), 116.8 (C-8), 114.9 (C-3, 5), 52.0 (4-OCH<sub>3</sub>)。与文献数据对比<sup>[12]</sup>, 该化合物鉴定为反-4-甲氧基肉桂酸。

化合物 **8**: 黄色油状物, 溶于甲醇。HR-ESI-MS  $m/z$ : 361.089 5 [M+Na]<sup>+</sup>, 分子式为 C<sub>16</sub>H<sub>18</sub>O<sub>8</sub>。<sup>1</sup>H-NMR (500 MHz, CD<sub>3</sub>OD)  $\delta$ : 7.67 (1H, d,  $J$  = 15.9 Hz, H-7'), 7.23 (1H, d,  $J$  = 2.0 Hz, H-5'), 7.10 (1H, dd,  $J$  = 8.2, 2.0 Hz, H-2'), 6.83 (1H, d,  $J$  = 8.2 Hz, H-6'), 6.42 (1H, d,  $J$  = 15.9 Hz, H-8'), 5.54 (1H, dd,  $J$  = 6.9, 5.2 Hz, H-2), 3.91 (3H, s, 1-OCH<sub>3</sub>), 3.78 (3H, s, 4-OCH<sub>3</sub>), 3.73 (3H, s, 4'-OCH<sub>3</sub>), 3.00 (1H, s, H-3), 2.99 (1H, d,  $J$  = 2.7 Hz, H-3); <sup>13</sup>C-NMR (125 MHz, CD<sub>3</sub>OD)  $\delta$ : 171.5 (C-4), 171.2 (C-2), 167.8 (C-9'), 150.9 (C-4'), 149.4 (C-3'), 148.1 (C-7'), 127.5 (C-1'), 124.5 (C-6'),

116.5 (C-5'), 114.2 (C-8'), 111.7 (C-2'), 69.7 (C-2), 56.5 (3'-OCH<sub>3</sub>), 53.1 (4-OCH<sub>3</sub>), 52.6 (1-OCH<sub>3</sub>), 36.9 (C-3)。与文献数据对比<sup>[13]</sup>, 该化合物鉴定为苹果酸二甲基阿魏酰酯。

化合物 **9**: 黄色油状物, 溶于甲醇。HR-ESI-MS  $m/z$ : 391.100 2 [M+Na]<sup>+</sup>, 分子式为 C<sub>17</sub>H<sub>20</sub>O<sub>9</sub>。<sup>1</sup>H-NMR (500 MHz, CD<sub>3</sub>OD)  $\delta$ : 7.66 (1H, d,  $J$  = 16.7 Hz, H-7), 6.94 (2H, s, H-2, 6), 6.45 (1H, d,  $J$  = 15.8 Hz, H-8), 5.55 (1H, dd,  $J$  = 7.0, 5.2 Hz, H-2), 3.89 (6H, s, 3', 5'-OCH<sub>3</sub>), 3.79 (3H, s, 1-OCH<sub>3</sub>), 3.73 (3H, s, 4-OCH<sub>3</sub>), 2.99 (2H, m, H-3); <sup>13</sup>C-NMR (125 MHz, CD<sub>3</sub>OD)  $\delta$ : 171.5 (C-4), 171.2 (C-1), 167.7 (C-8), 149.5 (C-3',5'), 148.3 (C-7'), 139.9 (C-4), 126.4 (C-1'), 114.7 (C-8'), 107.1 (C-2', 6'), 69.7 (C-2), 56.8 (3', 5'-OCH<sub>3</sub>), 53.1 (4-OCH<sub>3</sub>), 52.6 (1-OCH<sub>3</sub>), 36.9 (C-3)。与文献数据对比<sup>[14]</sup>, 该化合物鉴定为苹果酸二甲基芥子酰酯。

化合物 **10**: 黄色粉末固体, 溶于二甲基亚砷。HR-ESI-MS  $m/z$ : 123.044 1 [M+H]<sup>+</sup>, 分子式为 C<sub>7</sub>H<sub>6</sub>O<sub>2</sub>。<sup>1</sup>H-NMR (600 MHz, DMSO-*d*<sub>6</sub>)  $\delta$ : 9.76 (1H, s, H-7), 7.74 (2H, d,  $J$  = 8.4 Hz, H-2, 6), 6.90 (2H, d,  $J$  = 8.3 Hz, H-3, 5); <sup>13</sup>C-NMR (150 MHz, DMSO-*d*<sub>6</sub>)  $\delta$ : 191.4 (C-7), 164.3 (C-4), 132.6 (C-2, 6), 128.5 (C-1), 116.4 (C-3, 5)。与文献 NMR 数据对比<sup>[15]</sup>, 该化合物鉴定为对羟基苯甲醛。

化合物 **11**: 黄色油状物, 溶于甲醇。HR-ESI-MS  $m/z$ : 169.085 5 [M+CH<sub>3</sub>OH+H]<sup>+</sup>, 分子式为 C<sub>8</sub>H<sub>8</sub>O<sub>2</sub>。<sup>1</sup>H-NMR (600 MHz, CD<sub>3</sub>OD)  $\delta$ : 7.28 (4H, d,  $J$  = 6.1 Hz, H-2, 3, 5, 6), 7.21 (1H, m, H-4), 3.56 (2H, s, H-7); <sup>13</sup>C-NMR (150 MHz, CD<sub>3</sub>OD)  $\delta$ : 175.4 (C-8), 135.3 (C-1), 128.9 (C-3, 5), 128.0 (C-2, 6), 126.3 (C-4), 41.5 (C-7)。与文献 NMR 数据对比<sup>[16]</sup>, 该化合物鉴定为苯乙酸。

化合物 **12**: 黄色油状物, 溶于甲醇。HR-ESI-MS  $m/z$ : 121.064 2 [M-H<sub>2</sub>O+H]<sup>+</sup>, 分子式为 C<sub>8</sub>H<sub>10</sub>O<sub>2</sub>。<sup>1</sup>H-NMR (600 MHz, CD<sub>3</sub>OD)  $\delta$ : 7.36 (2H, d,  $J$  = 7.2 Hz, H-2, 6), 7.32 (2H, t,  $J$  = 7.6 Hz, H-3, 5), 7.25 (1H, d,  $J$  = 7.4 Hz, H-4), 4.68 (1H, dd,  $J$  = 7.3, 4.8 Hz, H-7), 3.61 (2H, m, H-8); <sup>13</sup>C-NMR (150 MHz, CD<sub>3</sub>OD)  $\delta$ : 143.5 (C-1), 129.5 (C-3, 5), 128.8 (C-2, 6), 127.7 (C-4), 76.2 (C-7), 69.0 (C-8)。与文献 NMR 数据对比<sup>[17]</sup>, 该化合物鉴定为苯基-1,2-乙二醇。

化合物 **13**: 白色固体, 溶于甲醇。HR-ESI-MS  $m/z$ : 150.091 4 [M+H]<sup>+</sup>, 分子式为 C<sub>9</sub>H<sub>11</sub>NO。<sup>1</sup>H-

NMR (600 MHz, CD<sub>3</sub>OD)  $\delta$ : 7.25 (2H, t,  $J = 7.6$  Hz, H-3, 5), 7.21 (2H, d,  $J = 7.6$  Hz, H-2, 6), 7.16 (1H, t,  $J = 7.3$  Hz, H-4), 2.90 (2H, t,  $J = 7.0$  Hz, H-8), 2.49 (2H, t,  $J = 7.1$  Hz, H-7); <sup>13</sup>C-NMR (150 MHz, CD<sub>3</sub>OD)  $\delta$ : 178.5 (C-9), 142.5 (C-1), 129.7 (C-3, 5), 129.6 (C-2, 6), 127.5 (C-4), 38.6 (C-8), 33.0 (C-7)。与文献 NMR 数据对比<sup>[18]</sup>, 该化合物鉴定为 3-苯基丙酰胺。

化合物 14: 无色油状物, 溶于甲醇。HR-ESI-MS  $m/z$ : 285.133 2 [M+H]<sup>+</sup>, 分子式为 C<sub>16</sub>H<sub>19</sub>NO<sub>8</sub>。<sup>1</sup>H-NMR (500 MHz, CD<sub>3</sub>OD)  $\delta$ : 7.26 (4H, d,  $J = 4.5$  Hz, H-2, 3, 5, 6), 7.17 (1H, m, H-4), 4.31 (1H, d,  $J = 8.0$  Hz, H-1'), 4.10 (1H, q,  $J = 6.7$  Hz, H-8), 3.86 (1H, d,  $J = 12.4$  Hz, H-6'), 3.76 (1H, m, H-8), 3.66 (1H, dd,  $J = 11.9, 5.0$  Hz, H-6'), 3.35 (1H, m, H-5'), 3.28 (2H, m, H-7), 3.19 (1H, t,  $J = 8.2$  Hz, H-4'), 2.94 (2H, m, H-2', 3'); <sup>13</sup>C-NMR (125 MHz, CD<sub>3</sub>OD)  $\delta$ : 140.1 (C-1), 130.0 (C-3, 5), 129.3 (C-2, 6), 127.2 (C-4), 104.4 (C-1'), 78.1 (C-5'), 78.0 (C-3'), 75.1 (C-2'), 71.7 (C-4'), 71.6 (C-8), 62.7 (C-6'), 37.2 (C-7)。与文献 NMR 数据对比<sup>[19]</sup>, 该化合物鉴定为苯乙基- $\beta$ -D-葡萄糖苷。

化合物 15: 无色针状物, 溶于甲醇。HR-ESI-MS  $m/z$ : 337.125 9 [M+Na]<sup>+</sup>, 分子式为 C<sub>15</sub>H<sub>22</sub>O<sub>7</sub>。<sup>1</sup>H-NMR (600 MHz, CD<sub>3</sub>OD)  $\delta$ : 7.12 (2H, d,  $J = 8.8$  Hz, H-2, 6), 7.02 (2H, d,  $J = 8.6$  Hz, H-3, 5), 3.89 (1H, dd,  $J = 12.1, 2.1$  Hz, H-6'a), 3.70 (1H, dd,  $J = 12.1, 5.3$  Hz, H-6'b), 3.55 (2H, t,  $J = 6.5$  Hz, H-6), 3.45 (2H, t,  $J = 5.2$  Hz, H-4', 5'), 3.42 (1H, m, H-3'), 3.39 (1H, m, H-2'), 2.63 (2H, t,  $J = 8.0$  Hz, H-7), 1.80 (2H, m, H-8); <sup>13</sup>C-NMR (150 MHz, CD<sub>3</sub>OD)  $\delta$ : 157.3 (C-4), 137.3 (C-1), 130.3 (C-2, 6), 117.8 (C-3, 5), 102.5 (C-1'), 78.1 (C-3'), 78.0 (C-5'), 75.0 (C-4'), 71.4 (C-2'), 62.5 (C-6'), 62.2 (C-9), 35.7 (C-7), 32.2 (C-8)。与文献数据对比<sup>[20]</sup>, 该化合物鉴定为 4-(3-hydroxypropyl) phenyl  $\beta$ -D-glucopyranoside。

化合物 16: 白色固体, 溶于甲醇。HR-ESI-MS  $m/z$ : 299.127 5 [M+H]<sup>+</sup>, 分子式为 C<sub>18</sub>H<sub>18</sub>O<sub>4</sub>。<sup>1</sup>H-NMR (600 MHz, CD<sub>3</sub>OD)  $\delta$ : 7.21 (4H, d,  $J = 7.9$  Hz, H-2, 2', 6, 6'), 6.78 (4H, d,  $J = 8.2$  Hz, H-3, 3', 5, 5'), 4.71 (2H, d,  $J = 3.9$  Hz, H-7, 7'), 4.21 (2H, t,  $J = 6.4$  Hz, H-9a, 9'a), 3.82 (2H, dd,  $J = 9.2, 3.2$  Hz, H-9b, 9'b), 3.13 (2H, q,  $J = 4.0$  Hz, H-8, 8'); <sup>13</sup>C-NMR (150 MHz, CD<sub>3</sub>OD)  $\delta$ : 158.5 (C-4, 4'), 133.3 (C-1, 1'), 129.0 (C-2, 2', 6, 6'), 116.5 (C-3, 3', 5, 5'), 87.7 (C-7, 7'), 72.8 (C-9, 9'), 55.6

(C-8, 8')。与文献 NMR 数据对比<sup>[21]</sup>, 该化合物鉴定为 idaeusinol B。

化合物 17: 黄色油状物, 溶于甲醇。HR-ESI-MS  $m/z$ : 603.205 1 [M+H]<sup>+</sup>, 分子式为 C<sub>28</sub>H<sub>36</sub>O<sub>13</sub>。<sup>1</sup>H-NMR (600 MHz, CD<sub>3</sub>OD)  $\delta$ : 6.73 (2H, s, H-2, 6), 6.67 (2H, s, H-2', 6'), 4.78 (1H, d,  $J = 3.9$  Hz, H-7), 4.73 (1H, d,  $J = 4.1$  Hz, H-7'), 4.29 (2H, m, H-9a, 9'a), 3.93 (2H, m, H-9b, 9'b), 3.87 (12H, d,  $J = 7.9$  Hz, 3, 5, 3', 5'-OCH<sub>3</sub>), 3.79 (1H, dd,  $J = 12.0, 2.4$  Hz, H-6''a), 3.68 (1H, dd,  $J = 12.0, 5.2$  Hz, H-6''b), 3.49 (1H, m, H-4'), 3.43 (2H, m, H-2', 3'), 3.21 (1H, m, H-5''), 3.15 (2H, s, H-8, 8'); <sup>13</sup>C-NMR (150 MHz, CD<sub>3</sub>OD)  $\delta$ : 154.4 (C-3', 5'), 149.4 (C-3, 5), 139.6 (C-4'), 136.2 (C-4), 135.6 (C-1'), 133.1 (C-1), 105.3 (C-1''), 104.8 (C-2', 6'), 104.5 (C-2, 6), 87.6 (C-7), 87.2 (C-7'), 78.3 (C-5''), 77.8 (C-3''), 75.7 (C-2''), 72.9 (C-9), 72.9 (C-9'), 71.3 (C-4''), 62.6 (C-6''), 57.1 (3', 5'-OCH<sub>3</sub>), 56.8 (3, 5-OCH<sub>3</sub>), 55.7 (C-8'), 55.5 (C-8)。与文献数据对比<sup>[22]</sup>, 该化合物鉴定为丁香树脂酚-4-O- $\beta$ -D-葡萄糖苷。

化合物 18: 黄色油状物, 溶于甲醇。HR-ESI-MS  $m/z$ : 433.149 4 [M+H]<sup>+</sup>, 分子式为 C<sub>22</sub>H<sub>24</sub>O<sub>9</sub>。<sup>1</sup>H-NMR (500 MHz, CD<sub>3</sub>OD)  $\delta$ : 7.59 (1H, d,  $J = 1.8$  Hz, H-7), 6.95 (2H, s, H-2, 6), 6.60 (2H, s, H-2', 6'), 5.60 (1H, d,  $J = 1.5$  Hz, H-7'), 3.99 (1H, dd,  $J = 10.2, 3.3$  Hz, H-9'), 3.88 (6H, s, 3, 5-OCH<sub>3</sub>), 3.82 (6H, s, 3', 5'-OCH<sub>3</sub>), 3.71 (2H, m, H-8', 9'); <sup>13</sup>C-NMR (125 MHz, CD<sub>3</sub>OD)  $\delta$ : 171.9 (C-9), 148.2 (C-3, 3', 5, 5'), 138.6 (C-47), 135 (C-4'), 131.0 (C-8), 108.4 (C-2, 6), 103.1 (C-2', 6'), 80.9 (C-7'), 61.1 (C-9'), 56.2 (3, 5-OCH<sub>3</sub>), 56.1 (3', 5'-OCH<sub>3</sub>), 49.6 (C-8')。与文献 NMR 数据对比<sup>[23]</sup>, 该化合物鉴定为 equiselignan A。

化合物 19: 白色固体, 溶于甲醇。HR-ESI-MS  $m/z$ : 303.120 8 [M+Na]<sup>+</sup>, 分子式为 C<sub>15</sub>H<sub>20</sub>O<sub>5</sub>。<sup>1</sup>H-NMR (600 MHz, CD<sub>3</sub>OD)  $\delta$ : 8.05 (1H, d,  $J = 15.8$  Hz, H-9), 6.40 (1H, d,  $J = 15.9$  Hz, H-8), 5.80 (1H, s, H-10), 3.94 (1H, dd,  $J = 7.6, 2.9$  Hz, H-7a), 3.66 (1H, d,  $J = 7.6$  Hz, H-7b), 2.80 (1H, d,  $J = 17.9$  Hz, H-5a), 2.70 (1H, dd,  $J = 18.1, 2.9$  Hz, H-3), 2.47 (1H, dd,  $J = 17.9, 2.6$  Hz, H-5b), 2.38 (1H, dd,  $J = 18.1, 2.7$  Hz, H-3), 2.04 (3H, s, H-15), 1.21 (3H, s, H-13), 1.00 (3H, s, H-14); <sup>13</sup>C-NMR (150 MHz, CD<sub>3</sub>OD)  $\delta$ : 211.1 (C-4), 170.9 (C-12), 149.3 (C-10), 133.1 (C-8), 132.7 (C-9), 121.5 (C-11), 87.8 (C-2), 82.9 (C-1), 78.5 (C-7), 54.0 (C-

5), 53.2 (C-3), 21.1 (C-15), 19.4 (C-13), 15.8 (C-14)。与文献 NMR 数据对比<sup>[24]</sup>, 该化合物鉴定为红花菜豆酸。

化合物 **20**: 淡黄色油状物, 溶于二甲基亚砜。HR-ESI-MS  $m/z$  247.133 3  $[M+H-H_2O]^+$ , 分子式为  $C_{15}H_{20}O_4$ 。 $^1H$ -NMR (600 MHz,  $CD_3OD$ )  $\delta$ : 7.72 (1H, d,  $J = 16.2$  Hz, H-7), 6.14 (1H, d,  $J = 16.1$  Hz, H-8), 5.93 (1H, t,  $J = 1.4$  Hz, H-3), 5.80 (1H, s, H-10), 2.57 (1H, d,  $J = 18.2$  Hz, H-5a), 2.19 (1H, d,  $J = 16.9$  Hz, H-5b), 2.01 (3H, s, H-13), 1.95 (3H, d,  $J = 1.3$  Hz, H-14), 1.08 (3H, s, H-12), 1.05 (3H, s, H-15);  $^{13}C$ -NMR (150 MHz,  $CD_3OD$ )  $\delta$ : 201.3 (C-4), 167.0 (C-2), 146.7 (C-9), 136.1 (C-7), 130.1 (C-8), 127.6 (C-3), 123.6 (C-10), 80.8 (C-1), 50.9 (C-5), 43.0 (C-6), 24.8 (C-13), 23.7 (C-14), 21.1 (C-14), 19.8 (C-15)。与文献 NMR 数据对比<sup>[25]</sup>, 该化合物鉴定为脱落酸。

化合物 **21**: 无色油状物, 溶于甲醇。HR-ESI-MS  $m/z$ : 409.183 4  $[M+Na]^+$ , 分子式为  $C_{19}H_{30}O_8$ 。 $^1H$ -NMR (600 MHz,  $CD_3OD$ )  $\delta$ : 5.99 (1H, d,  $J = 15.6$  Hz, H-7), 5.88 (1H, s, H-3), 5.74 (1H, dd,  $J = 15.6, 7.2$  Hz, H-8), 4.55 (1H, m, H-9), 4.29 (1H, d,  $J = 7.8$  Hz, H-1'), 3.86 (1H, dd,  $J = 11.9, 2.3$  Hz, H-6'a), 3.65 (1H, m, H-6'b), 3.27 (1H, d,  $J = 3.4$  Hz, H-4'), 3.25 (1H, d,  $J = 8.8$  Hz, H-5'), 3.20 (1H, t,  $J = 8.3$  Hz, H-3'), 3.16 (1H, m, H-2'), 2.64 (1H, m, H-5a), 2.19 (1H, d,  $J = 16.5$  Hz, H-5b), 1.95 (3H, s, H-10), 1.30 (3H, d,  $J = 6.4$  Hz, H-13), 1.04 (6H, d,  $J = 12.6$  Hz, H-11,12);  $^{13}C$ -NMR (150 MHz,  $CD_3OD$ )  $\delta$ : 201.4 (C-4), 167.3 (C-2), 133.9 (C-7), 133.8 (C-8), 127.3 (C-3), 101.4 (C-1'), 80.2 (C-1), 78.5 (C-5'), 78.4 (C-3'), 75.1 (C-2'), 74.8 (C-9), 71.8 (C-4'), 63.0 (C-6'), 50.9 (C-5), 42.6 (C-6), 24.8 (C-12), 23.6 (C-11), 22.4 (C-13), 19.7 (C-10)。与文献数据对比<sup>[26]</sup>, 该化合物鉴定为玫瑰花昔。

化合物 **22**: 白色固体, 溶于甲醇、二氯甲烷。HR-ESI-MS  $m/z$ : 217.049 6  $[M+H]^+$ , 分子式为  $C_{12}H_8O_4$ 。 $^1H$ -NMR (600 MHz,  $CDCl_3$ )  $\delta$ : 8.16 (1H, d,  $J = 9.7$  Hz, H-4), 7.59 (1H, d,  $J = 2.4$  Hz, H-2'), 7.14 (1H, s, H-8), 7.02 (1H, dd,  $J = 2.3, 1.2$  Hz, H-1'), 6.28 (1H, d,  $J = 9.7$  Hz, H-3), 4.27 (3H, s, 5-OCH<sub>3</sub>);  $^{13}C$ -NMR (150 MHz,  $CDCl_3$ )  $\delta$ : 161.4 (C-2), 158.5 (C-7), 152.9 (C-9), 149.7 (C-5), 144.9 (C-2'), 139.4 (C-4), 112.8 (C-3), 112.7 (C-6), 106.58 (C-10), 105.2 (C-3'), 94.0 (C-8), 60.3 (5-OCH<sub>3</sub>)。与文献 NMR 数据对比<sup>[27]</sup>, 该化合物鉴定为佛手柑内酯。

化合物 **23**: 白色固体, 溶于 DMSO。HR-ESI-MS  $m/z$ : 298.096 8  $[M+H]^+$ , 分子式为  $C_{11}H_{15}N_3O_3S$ 。 $^1H$ -NMR (600 MHz,  $DMSO-d_6$ )  $\delta$ : 8.36 (1H, s, H-8), 8.16 (1H, s, H-2), 7.29 (2H, s, -NH<sub>2</sub>), 5.90 (1H, d,  $J = 5.7$  Hz, H-1'), 4.75 (1H, t,  $J = 5.4$  Hz, H-2'), 4.15 (1H, t,  $J = 4.4$  Hz, H-3'), 4.03 (1H, td,  $J = 6.3, 3.7$  Hz, H-4'), 2.88 (1H, dd,  $J = 13.9, 5.9$  Hz, H-5'), 2.79 (1H, dd,  $J = 13.9, 7.0$  Hz, H-5'), 2.06 (3H, d,  $J = 1.0$  Hz, -SCH<sub>3</sub>);  $^{13}C$ -NMR (150 MHz,  $DMSO-d_6$ )  $\delta$ : 156.1 (C-6), 152.7 (C-3), 149.5 (C-4), 139.8 (C-8), 119.1 (C-5), 87.3 (C-1'), 83.7 (C-4'), 72.6 (C-2', 3'), 36.1 (C-5'), 15.6 (C-7')。与文献数据对比<sup>[28]</sup>, 该化合物鉴定为 methylthioadenosine。

化合物 **24**: 黄色油状物, 溶于甲醇。HR-ESI-MS  $m/z$  127.039 1  $[M+H]^+$ , 分子式为  $C_6H_6O_3$ 。 $^1H$ -NMR (500 MHz,  $CD_3OD$ )  $\delta$ : 9.55 (1H, s, 2-CHO), 7.40 (1H, d,  $J = 3.5$  Hz, H-3), 6.60 (1H, d,  $J = 3.5$  Hz, H-4), 4.63 (2H, s, H-6);  $^{13}C$ -NMR (125 MHz,  $CD_3OD$ )  $\delta$ : 179.4 (2-CHO), 163.2 (C-5), 153.9 (C-2), 124.8 (C-3), 110.9 (C-4), 57.6 (C-6)。与文献数据对比<sup>[29]</sup>, 该化合物鉴定为 5-羟甲基糠醛。

化合物 **25**: 黄色油状物, 溶于二氯甲烷。HR-ESI-MS  $m/z$  295.226 8  $[M+H]^+$ , 分子式为  $C_{18}H_{30}O_3$ 。 $^1H$ -NMR (500 MHz,  $CDCl_3$ )  $\delta$ : 7.13 (1H, m, H-10), 6.18 (2H, m, H-8, 9), 6.07 (1H, d,  $J = 15.5$  Hz, H-11), 2.53 (2H, t,  $J = 7.4$  Hz, H-13), 2.34 (2H, t,  $J = 7.5$  Hz, H-2), 2.17 (2H, q,  $J = 7.1$  Hz, H-7), 1.62 (4H, m, H-3, 14), 1.44 (2H, m, H-15), 1.31 (10H, m, H-4~6, 16, 17), 0.89 (3H, s, H-18);  $^{13}C$ -NMR (125 MHz,  $CDCl_3$ )  $\delta$ : 201.3 (C-12), 178.5 (C-1), 145.9 (C-8), 143.2 (C-10), 129.0 (C-9), 128.0 (C-11), 40.6 (C-13), 33.9 (C-2), 33.3 (C-7), 31.5 (C-16), 29.2 (C-5), 29.2 (C-6), 29.0 (C-4), 28.5 (C-15), 24.8 (C-14), 24.5 (C-3), 22.6 (C-17), 14.1 (C-18)。与文献 NMR 数据对比<sup>[30]</sup>, 该化合物鉴定为 radosia acids B。

### 3.2 抗炎活性筛选结果

通过 CCK-8 实验测评化合物 **1**~**25** 对 RAW264.7 细胞的毒性, 结果表明化合物 **16**、**22** 和 **25** 有明显细胞毒性 (表 1)。化合物 **1**~**25** 采用 Griess 法测定 NO 抑制率来评估化合物的抗炎活性, 结果表明, 除化合物 **21**、**23** 外, 其余化合物显示出不同程度的抗炎活性 (表 2), 化合物 **8**、**9** 的 IC<sub>50</sub> 值分别为 6.95、6.46  $\mu\text{mol/L}$ 。

表1 化合物1~25的细胞毒性  
Table 1 Cytotoxicity of compounds 1—25

化合物	细胞存活率/%	化合物	细胞存活率/%
1	103.52±2.40***	14	93.13±3.90*
2	91.20±1.13**	15	107.10±3.23
3	90.25±2.75**	16	69.00±1.15***
4	83.66±4.28***	17	110.68±2.06***
5	103.98±4.83	18	88.28±4.06***
6	105.96±3.68	19	92.46±1.92*
7	92.89±2.23	20	88.53±2.42***
8	100.30±1.90	21	99.91±2.98
9	96.50±2.68	22	75.51±1.49***
10	85.92±5.34***	23	107.42±0.60*
11	86.35±0.93***	24	97.79±1.96
12	86.87±3.62***	25	73.98±3.05***
13	86.86±1.62***	对照	100.00±0.15

与对照组比较: \* $P < 0.05$  \*\* $P < 0.01$  \*\*\* $P < 0.001$ 。

\* $P < 0.05$  \*\* $P < 0.01$  \*\*\* $P < 0.001$  vs control group.

表2 化合物的抗炎活性结果  
Table 2 Anti-inflammatory activity results of compounds

化合物	NO 抑制率/%	化合物	NO 抑制率/%
穿心莲内酯	95.08±0.08	12	18.10±6.17***
1	9.84±4.09***	13	14.16±9.86***
2	35.96±4.21***	14	18.55±5.70***
3	14.39±5.53***	15	3.06±2.06***
4	14.84±3.97***	17	21.55±1.81***
5	36.46±3.99***	18	19.28±11.98***
6	41.86±4.19***	19	31.22±5.35***
7	72.47±8.05***	20	1.51±11.97***
8	89.52±0.59	21	-0.21±6.61***
9	86.64±6.96	23	-16.18±5.33***
10	19.66±1.31***	24	18.11±6.39***
11	35.54±7.85***		

与穿心莲内酯组比较: \*\*\* $P < 0.001$ 。

\*\*\* $P < 0.001$  vs control group.

#### 4 讨论

本研究对新疆产芫菁的 70%乙醇提取物进行了系统的化学成分研究。综合运用多种色谱分离技术并结合核磁共振、质谱等谱学方法,共分离并鉴定了 25 个化合物,包括苯丙素类、苯环衍生物、含氮化合物等。其中,化合物 1、6~9、13、15、16、18、19、23 为首次从芫菁中分离得到,这一发现进一步丰富了该药用植物的化学成分数据库。在活性研究方面,本研究通过 Griess 法检测化合物对 LPS 诱导的 RAW264.7 巨噬细胞 NO 生成的抑制作用,以评价其体外抗炎活性。结果表明,在 50  $\mu\text{mol/L}$  浓

度下,化合物 8、9 表现出显著的 NO 抑制活性,其  $\text{IC}_{50}$  值分别为 6.95、6.46  $\mu\text{mol/L}$ ,显示出较强的抗炎潜力。本研究明确报道了化合物 8、9 作为新疆芫菁中重要的抗炎活性成分,并量化了其活性强度。该工作不仅深化了对芫菁药效物质基础的认识,也为后续基于这些活性成分的作用机制研究、结构优化以及将该特色资源开发成抗炎相关产品提供了重要的科学依据和物质基础。

**利益冲突** 所有作者均声明不存在利益冲突

#### 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, 1993: 21.
- [2] 国家中医药管理局《中华本草》编委会. 《中华本草维吾尔分册》[M]. 上海: 上海科学技术出版社: 1998: 161-162.
- [3] 王证德, 平措绕吉, 刘莹, 等. 芜菁的化学成分和生物活性研究进展 [J]. 中南药学, 2023, 21(9): 2391-2399.
- [4] Zhang Y, Xu Q R, Liu Y, et al. *Brassica rapa* L. (Tibetan Turnip) polysaccharide improves the immune function and regulates intestinal microbiota in immunosuppressive mice [J]. *J Food Sci*, 2024, 89(12): 9816-9834.
- [5] Hua H Y, Zhang W Y, Li J Y, et al. Neuroprotection against cerebral ischemia/reperfusion by dietary phytochemical extracts from Tibetan turnip (*Brassica rapa* L.) [J]. *J Ethnopharmacol*, 2021, 265: 113410.
- [6] Yang L G, Wang G, Wang M, et al. Indole alkaloids from the roots of *Isatis indigotica* and their inhibitory effects on nitric oxide production [J]. *Fitoterapia*, 2014, 95: 175-181.
- [7] 孔江波, 朱莹, 张文静, 等. 枸杞子醋酸乙酯部位非生物碱类化学成分研究 [J]. 中草药, 2021, 52(7): 1877-1883.
- [8] Goetz G, Fkyerat A, Métais N, et al. Resistance factors to grey mould in grape berries: Identification of some phenolics inhibitors of *Botrytis cinerea* stilbene oxidase [J]. *Phytochemistry*, 1999, 52(5): 759-767.
- [9] 郑晓珂, 李钦, 冯卫生. 冬凌草水溶性化学成分研究 [J]. 天然产物研究与开发, 2004, 16(4): 300-302.
- [10] Dall'Acqua S, Innocenti G, Viola G, et al. Cytotoxic compounds from *Polygala vulgaris* [J]. *Chem Pharm Bull*, 2002, 50(11): 1499-1501.
- [11] Speranza G, Martignoni A, Manitto P. Iso-aloesin A, a minor constituent of cape *Aloe* [J]. *J Nat Prod*, 1988, 51(3): 588-590.
- [12] 姚发壮. 山柰根茎的化学成分研究 [D]. 广州: 广东药科大学, 2018.
- [13] Pedras M S C, Zheng Q G, Gadagi R S, et al. Phytoalexins and polar metabolites from the oilseeds canola and rapeseed: Differential metabolic responses to the biotroph *Albugo candida* and to abiotic stress [J]. *Phytochemistry*, 2008, 69(4): 894-910.
- [14] Dean J C, Kusaka R, Walsh P S, et al. Plant sunscreens in the UV-B: Ultraviolet spectroscopy of jet-cooled sinapoyl malate, sinapic acid, and sinapate ester derivatives [J]. *J Am Chem Soc*, 2014, 136(42): 14780-14795.
- [15] Wang Y S, Huang R, Yang J H. Chemical constituents of *Litsea szemaonis* [J]. *Chem Nat Compd*, 2011, 47(1): 122-123.
- [16] Gachet M S, Kunert O, Kaiser M, et al. Jacaranone-derived glucosidic esters from *Jacaranda glabra* and their activity against *Plasmodium falciparum* [J]. *J Nat Prod*, 2010, 73(4): 553-556.
- [17] 戴昱, 林秀萍, 庞小艳, 等. 一株秋茄内生真菌 *Colletotrichum* sp. SCSIO KcB3-2 的次级代谢产物研究 [J]. 天然产物研究与开发, 2019, 31(3): 450-454.
- [18] Pedras M S C, Alavi M, To Q H. Expanding the nasturlexin family: Nasturlexins C and D and their sulfoxides are phytoalexins of the crucifers *Barbarea vulgaris* and *B. verna* [J]. *Phytochemistry*, 2015, 118: 131-138.
- [19] Higuchi R, Aritomi M, Donnelly D M X. Monolignol and dilignol glycosides from *Pinus contorta* leaves [J]. *Phytochemistry*, 1977, 16(7): 1007-1011.
- [20] Wang W, Chen W, Yang Y S, et al. New phenolic compounds from *Coreopsis tinctoria* nutt. and their antioxidant and angiotensin I-converting enzyme inhibitory activities [J]. *J Agric Food Chem*, 2015, 63(1): 200-207.
- [21] Zhou L, Han F Y, Lu L W, et al. Isolation of enantiomeric furoolactones and furofurans from *Rubus idaeus* L. with neuroprotective activities [J]. *Phytochemistry*, 2019, 164: 122-129.
- [22] Miyazawa M, Kasahara H, Kameoka H. Biotransformation of lignans: Metabolism of (+)-yangabin in *Spodoptera litura* [J]. *Nat Prod Lett*, 1996, 8(2): 87-88.
- [23] Zhu D H, Zhang J K, Jia J F, et al. Lignans and terpenoids from the stem of *Ephedra equisetina* Bunge [J]. *Phytochemistry*, 2022, 200: 113230.
- [24] Wang J, Tan D D, Wei G Z, et al. Studies on the chemical constituents of *Cuscuta chinensis* [J]. *Chem Nat Compd*, 2016, 52(6): 1133-1136.
- [25] 郭珩, 刘洪新, 陈玉婵, 等. 深海真菌 *Diaporthe phaseolorum* FS431 次级代谢产物的分离鉴定 [J]. 广东药科大学学报, 2019, 35(2): 180-185.
- [26] Yoshikawa M, Shimada H, Saka M, et al. Medicinal foodstuffs. V. Moroheiya. (1): Absolute Stereostructures Of Corchoionosides A, B, And C, Histamine Release Inhibitors From The Leaves Of Vietnamese *Corchorus olitorius* L. (Tiliaceae) [J]. *Chem Pharm Bull*, 1997, 45(3): 464-469.
- [27] Saeed M A, Sabir A W. Irritant and cytotoxic coumarins from *Angelica glauca* Edgew roots [J]. *J Asian Nat Prod Res*, 2008, 10(1/2): 49-58.
- [28] Kawamura A, Mizuno A, Kurakake M, et al. Inaoside A: New antioxidant phenolic compound from the edible mushroom *Laetiporus cremeiporus* [J]. *Heliyon*, 2024, 10(3): e24651.
- [29] Kang H S, Choi J H, Cho W K, et al. A sphingolipid and tyrosinase inhibitors from the fruiting body of *Phellinus linteus* [J]. *Arch Pharm Res*, 2004, 27(7): 742-750.
- [30] Zhao C, Xing G S, Xu R, et al. *Rabdosia acids* a and B: Two new lipids from *Rabdosia lophanthoides* [J]. *Chem Nat Compd*, 2016, 52(2): 205-207.

[责任编辑 王文倩]