

·简 报·

土荆芥挥发油的化学成分分析

黄雪峰, 孔令义*

(中国药科大学天然药物化学教研室, 南京 210038)

关键词 土荆芥; 挥发油; 气相色谱-质谱联用; 化学成分

中图分类号: R284.1 文献标识码: A 文章编号: 1000-5048(2002)03-0256-02

土荆芥 *Chenopodium ambrosioides* L. 为藜科藜属植物, 一年生或多年生草本, 原产于热带美洲, 现广泛分布于世界热带及温带地区, 我国广西、广东、福建、台湾、江苏、浙江、江西、湖南、四川等省有野生, 长生于村旁、路边、河岸等处。土荆芥辛, 温, 有毒。去风, 杀虫, 通经, 止痛, 可治疗皮肤风湿痹痛、钩虫、蛔虫、痛经、闭经、皮肤湿疹、蛇虫咬伤。土荆芥油为一种杀肠虫药, 除蛔虫外, 对钩虫、阿米巴原虫也有效^[1]。药理学研究表明, 土荆芥挥发油对真菌如发癣菌有良好的抑制作用^[2]; 并有显著的抗溃疡及抑制幽门螺旋杆菌的作用^[3]。为寻找其活性成分, 我们对福建产土荆芥挥发油进行研究。

1 仪器与材料

气相色谱-质谱联用分析用 HP5899A 型气相色谱质谱联用仪测定; 红外光谱用 Nicolet Impact 410 型红外光谱仪测定 (KBr 压片); 核磁共振谱用 Bruker ACF-300 型核磁共振仪测定, TMS 内标, CD-Cl₃ 为溶剂; 所用薄层层析、柱层析硅胶及高效 GF₂₅₄ 薄层层析板均为青岛海洋化工厂生产; 其余试剂均为分析纯。药材为新采集的福建产土荆芥, 经福建中特制药有限公司张涌川药剂师鉴定为藜科藜属植物土荆芥 (*Chenopodium ambrosioides* L.)。

2 实验方法

2.1 挥发油提取分离

取新采集的福建产土荆芥鲜草 20 kg, 按中国药典 2000 年版一部附录挥发油测定甲法提取挥发

油, 提得精油 70 ml, 得率 0.35%。减压分馏按沸点依次得 4 部分, 在 0.08×10^6 Pa 真空度下, 56℃ 以下收集的馏出液为第一馏分, 56~60℃ 收集的馏出液为第二馏分, 60~67℃ 收集的馏出液为第三馏分, 67℃ 以上收集的馏出液为第四馏分。把第二、第三部分馏分合并通过反复硅胶柱层析, 石油醚-乙酸乙酯梯度洗脱分离得到了两个化合物 1 和 2。

2.2 结构鉴定

化合物 1, 无色液体, bp 171~174℃; IR (KBr) ν 3037, 2961, 2924, 1657, 1448, 1381, 824 cm⁻¹; ¹H-NMR δ 1.02 (6H, d, 9, 10-CH₃), 1.76 (3H, s, 7-CH₃), 2.04 (4H, t, 5, 6-H), 2.27 (1H, m, 8-H), 5.58 (2H, m, 2, 3-H); ¹³C-NMR (75MHz) δ 21.0 (C-10), 21.1 (C-9), 22.8 (C-7), 25.2 (C-5), 29.0 (C-6), 34.4 (C-8), 116.4 (C-3), 119.5 (C-2), 132.9 (C-1), 142.2 (C-4)。以上数据与文献^[4]报道 α -Terpinene 相符, 故鉴定其结构为 α -萜品烯 (α -Terpinene)。

化合物 2, 无色液体, bp 173~177℃; IR (KBr) ν 3020, 2960, 1515, 1463, 1381, 814 cm⁻¹; ¹H-NMR δ 1.23 (6H, d, 9, 10-CH₃), 2.29 (3H, s, 7-CH₃), 2.84 (1H, m, 8-H), 7.11 (4H, s, 2, 3, 5, 6-H); ¹³C-NMR (75MHz) δ 20.9 (C-7), 24.1 (C-9, 10), 33.7 (C-8), 126.3 (C-3, 5), 129.0 (C-2, 6), 135.1 (C-1), 145.8 (C-4)。以上数据与文献^[4]报道 *p*-Cymene 相符, 故鉴定其结构为对-异丙基甲苯 (*p*-Cymene)。

2.3 土荆芥挥发油 GC-MS 分析鉴定

GC-MS 分析条件: GC: HP-5 柱 (25 m $\times$ 0.2 mm); 进样口温度 260℃; 线性程序升温, 80℃ (恒温

2 min)→260℃(恒温 10 min), 升温速度 10℃/min; 分流比 50:1。GC/MS 接口温度 280℃。MS: EI 源(70eV), 离子源温度 200℃, 扫描范围 35-350 amu。

GC-MS 分析结果 由挥发油 GC-MS 分析总离子流图可知分离了 21 种组分, 通过计算机自动检索与标准图谱对照, 鉴定了其中 14 个主要化合物, 占总量的 94.47%, 其结果见表 1。

Tab 1. Chemical composition of volatile oil of *Chenopodium ambrosioides* L. by GC-MS

Number	Compound	Formula	Percentage (%)
1	benzaldehyde	C ₇ H ₆ O	0.03
2	α-terpinene	C ₁₀ H ₁₆	9.02
3	p-Cymene	C ₁₀ H ₁₄	29.73
4	γ-Terpinene	C ₁₀ H ₁₆	0.24
5	benzene, 1-methyl-2-(2-propenyl)-	C ₁₀ H ₁₂	0.16
6	α-terpinolene or δ-4-carene	C ₁₀ H ₁₆	31.17
7	4-nonene, 2, 3, 3-trimethyl-, (E)-	C ₁₂ H ₂₄	0.26
8	ascaridole	C ₁₀ H ₁₆ O ₂	23.51
9	5-cyclooctadiene, 3, 4-dimethyl-	C ₁₀ H ₁₆	0.06
10	cyclopentene, 1, 4-dimethyl-5-(1-methylethyl)-	C ₁₀ H ₁₈	0.04
11	cyclohexene, 1-methyl-3-(1-methylethyl)-	C ₁₀ H ₁₈	0.07
12	2, 2, 5, 7-tetramethyl-2, 3, 7, 8-tetrahydro-5H-fur[2, 3-g][2]benzopyran-9-ol	C ₁₅ H ₂₀ O ₃	0.02
13	geranyl pentanoate	C ₁₅ H ₂₆ O	0.05
14	2-pentadecanone, 6, 10, 14-trimethyl	C ₁₈ H ₃₆ O	0.04

3 讨 论

关于土荆芥挥发油的成分研究很多, 熊秀芳等报道^[3] 湖北产土荆芥中主要含 menthol (31.33%)、

α-terpinene (13.21%)、carvomenthenol (8.53%)、p-Cymene (8.34%)、1, 8-cineole (7.42%)。Lorenzo SN 等报道^[4] 墨西哥产土荆芥主要含 limonene (32.50%)、trans-pinocarveol (26.70%)、geranial (5.00%)、geraniol (4.30%), 和本文研究的福建产土荆芥成分相差很大, 由此可见因土荆芥的产地不同可造成其化学成分的较大差异。因此在研究土荆芥挥发油的工作中, 应充分考虑到由于产地、化学成分的差异而造成药理活性的不同。

本实验也得到了土荆芥挥发油中的部分单体成分, 为进一步研究土荆芥的药理活性、寻找抗幽门螺旋杆菌的有效成分奠定了基础。

参 考 文 献

- [1] 中国药科大学等编. 中药辞海[M]. 第一卷. 北京: 中国医药科技出版社, 1993. 232.
- [2] Okazaki K, Kawaguchi T. Antibacterial active of higher plants. XXI. Antimicrobial effect of essential oil and ascaridol[J]. 药学杂志(J Pharm Soc Japan), 1952, 72(4), 561-564.
- [3] 王瑞明(Wang RM), 谢振家(Xie ZJ), 张涌川(Zhang YC). 中华胃康对实验性胃溃疡及抑制 HP 作用的研究[J]. 海峡药学(J Strait Pharm), 1999, 2: 16-19.
- [4] Bohmann F, Zeisberg R, Klein E. E-NMR-Spektren von monoterpene[n] [J]. Org Mag Res, 1975, 7, 426-432.
- [5] 熊秀芳(Xiong XF), 张银华(Zhang YH), 龚复俊(Gong FJ)等. 湖北土荆芥挥发油化学成分研究[J]. 武汉植物学研究(J Wuhan Bot Res), 1999, 17(3), 244-248.
- [6] Lorenzo SN, John PB. Volatile constituents from the leaves of *Chenopodium ambrosioides* L. [J]. J Essent Oil Res, 1995, 7, 221-223.

Study on Chemical Constituents of Volatile Oil from *Chenopodium ambrosioides* L.

HUANG Xue-Feng KONG Ling-Yi

Department of Natural Medicinal Chemistry, China Pharmaceutical University, Nanjing 210038

ABSTRACT **AIM** The purpose is to analyse the chemical constituents of volatile oil of *Chenopodium ambrosioides* L. grown in Fujian. **METHODS** The volatile oil was extracted from *Chenopodium ambrosioides* L. by steam distillation and was analysed by chromatography, spectral evidences and GC-MS. **RESULTS** Two components were column-isolated from the volatile oil, and their structures were elucidated by spectral analysis. 14 compounds were separated and identified which accounted for over 94% of total volatile oil. **CONCLUSION** The main components of volatile oil from *Chenopodium ambrosioides* L. are p-cymene (29.73%), α-terpinene (9.02%), ascaridole (23.51%), and α-terpinolene or δ-4-carene (31.17%).

KEY WORD *Chenopodium ambrosioides* L.; Volatile oil; GC-MS; Chemical components