

爪哇木棉的化学成分及其抗肿瘤活性研究

朱 虹¹, 王升志¹, 彭佳琪¹, 陈旭阳², 张小坡^{1*}, 陈德力^{1,3*}

¹海南医科大学 & 海南省医学科学院药学院(热带药物创新与转化教育部工程研究中心 & 海南省热带药用植物研究开发重点实验室); ²海南医科大学 & 海南省医学科学院 基础医学与生命科学学院(热带转化医学教育部重点实验室), 海口 571199; ³道地药材品质保障与资源持续利用全国重点实验室, 北京 100700

摘要:为阐明爪哇木棉的化学成分和抗肿瘤活性,本研究采用硅胶柱色谱、半制备高效液相色谱技术等对爪哇木棉茎秆乙酸酯提取物进行分离纯化,结合 NMR、MS 等现代波谱学方法鉴定所得化合物的结构,从中分离鉴定了 19 个化合物,并采用 CCK-8 法,评估了各化合物对 BT549 和 4T1 肿瘤细胞的体外细胞毒性。鉴定的 19 个成分分别为:hibiscusterpene II(**1**)、hibiscone C(**2**)、7-hydroxycadalene(**3**)、7-hydroxycalamenene(**4**)、(1S)-1-methoxylacinilene C(**5**)、lacinilene C(**6**)、(7R,9R,10R)-3,9-di-hydroxycalameneno(**7**)、mansonone(**8**)、3ξ-(1ξ-羟基)-7-羟基-1-苯并呋喃酮(**9**)、vavain(**10**)、cleomiscosin B(**11**)、(+)-medioresinol(**12**)、邻甲基苯甲醚(**13**)、对甲酚(**14**)、丁香醛(**15**)、(R)-(-)-mellein methyl ether(**16**)、丹蒾酮(**17**)、丁香酸乙酯(**18**)、β-谷甾醇(**19**)。其中,化合物 **1,2,4~9,11~18** 为首次从该属中分离得到。化合物 **1,2,3,4,6,8,10** 对 BT549、4T1 细胞增殖有一定的抑制活性,且化合物 **4** 和 **8** 细胞毒活性显著。本研究首次系统阐明了爪哇木棉中的杜松烷型倍半萜类成分为关键的其抗肿瘤活性成分,为该植物在抗肿瘤药物开发中的进一步应用提供了科学依据。

关键词:爪哇木棉;化学成分;细胞毒活性;杜松烷型倍半萜

中图分类号:R284.1

文献标志码:A

文章编号:1001-6880(2026)9-1947-07

DOI:10.16333/j.1001-6880.2026.9.008

CSTR:32307.14.1001-6880.2026.9.008

Chemical components and anti-tumor activities of *Ceiba pentandra* L.

ZHU Hong¹, WANG Sheng-zhi¹,

PENG Jia-qi¹, CHEN Xu-yang², ZHANG Xiao-po¹, CHEN De-li^{1,3*}

¹Engineering Research Center of Tropical Medicine Innovation and

Transformation of Ministry of Education & Hainan Provincial Key Laboratory of Research

and Development on Tropical Herbs, School of Pharmacy, Hainan Medical University/Hainan

Academy of Medical Sciences; ²Key Laboratory of Tropical Translational Medicine of Ministry of Education,

School of Basic Medicine and Life Sciences, Hainan Medical University/Hainan Academy of Medical Sciences, Haikou

571199, China; ³State Key Laboratory for Quality Ensurance and Sustainable Use of Dao-di Herbs, Beijing 100700, China

Abstract: To investigate the chemical constituents and anti-tumor activities of the pharmacological effects of *Ceiba pentandra* L., the study was carried out to isolate and purify the chemical components from the ethyl acetate extract of the stem using silica gel and semi-preparative high-performance liquid chromatography and identify the structures of the compounds by modern spectroscopic methods such as NMR, MS, and so on. Meanwhile, the cytotoxic activities of all compounds against BT549 and 4T1 tumor cells were evaluated using the CCK-8 assay. Nineteen compounds were isolated and identified as: hibiscusterpene II (**1**), hibiscone C (**2**), 7-hydroxycadalene (**3**), 7-hydroxycalamenene (**4**), (1S)-1-methoxylacinilene C (**5**), lacinilene C (**6**), (7R,9R,10R)-3,9-di-hydroxycalameneno (**7**), mansonone (**8**), 3ξ-(1ξ-hydroxyethyl)-7-hydroxy-1-isobenzofuranone (**9**), vavain (**10**), cleomiscosin B (**11**), (+)-medioresinol (**12**), 1-methoxy-2-methylbenzene (**13**), p-cresol (**14**), syringaldehyde (**15**), (R)-(-)-mellein methyl ether (**16**), chrysazin (**17**), ethyl syringate (**18**) and β-sitosterol (**19**). Com-

收稿日期:2025-10-14 接受日期:2026-02-10

基金项目:国家自然科学基金面上项目(82473803);中央本级重大增减支项目“名贵中药资源可持续利用能力建设项目”(2060302)

* 通信作者 E-mail:z_xp1412@163.com, chendeli9999@163.com

pounds **1,2,4-9,11-18** were isolated for the first time from this genus. The results showed that compounds **1,2,3,4,6,8**, and **10** exhibited inhibitory activity against the proliferation of both BT549 and 4T1 cells, among which compounds **4** and **8** demonstrated significant cytotoxicity. This study systematically elucidates for the first time that cadinane-type sesquiterpenoids are the key antitumor constituents in *C. pentandra*, thereby providing a scientific basis for its further application in anticancer drug development.

Key words: *Ceiba pentandra* L.; chemical constituents; cytotoxic activities; cadinane-type sesquiterpene

爪哇木棉 (*Ceiba pentandra* L.) 隶属于木棉科 (Bombacaceae) 吉贝属 (*Ceiba*) 落叶大乔木^[1], 原产于热带美洲和东印度群岛, 现广泛引种于东南亚及非洲热带及我国海南、广东、广西、云南等地区^[2]。其树皮、叶、根及种子在印度、尼日利亚、东南亚等地的传统医学中应用历史悠久, 用于治疗恶性肿瘤、支气管炎、发热、糖尿病等疾病。现代研究表明, 爪哇木棉中含有丰富的萜类、黄酮类和多酚类等化学成分。药理研究证实其提取物具有抗肿瘤、抗炎、抗氧化、抗菌和降血糖等活性, 如 Kiran 等^[3] 发现其种子油通过抑制炎症因子释放发挥抗炎作用, Fofie 等^[4] 证实茎皮提取物可显著清除 DPPH 自由基并降低糖尿病模型血糖水平, Raveeshankar 等^[5] 的研究表明, 爪哇木棉树皮的提取物在体内外实验中均展现出显著的抗肿瘤活性。因此, 在文献报道的基础上, 课题组前期发现萜类化合物如杜松烷型倍半萜在其损伤茎秆中富集。为了进一步阐明爪哇木棉的萜类物质类群和组成, 本研究对爪哇木棉乙酸乙酯冷浸提取物中的化学成分进行化学成分研究, 并以 BT549、4T1 细胞为模型, 通过测定化合物对乳腺癌肿瘤细胞的毒性, 筛选爪哇木棉具有抗肿瘤生物活性的化合物, 为开发利用热带特色药用资源爪哇木棉提供实验理论依据。

1 材料与方法

1.1 材料

2022 年 12 月, 爪哇木棉采集于海口市秀英区永庄村, 经中国医学科学院药用植物研究所海南分所李榕涛副研究员鉴定为爪哇木棉 (*Ceiba pentandra* L.) 的茎秆。原药材样本保存于海南医科大学实验楼天然药物化学开放实验室 B714b 室。

BT-549 人乳腺管癌细胞 (批号: CL-0041, 武汉普诺赛生命科技有限公司); 4T1 小鼠乳腺癌细胞 (批号: CL-0007, 武汉普诺赛生命科技有限公司)。

1.2 试剂与仪器

薄层色谱用硅胶 G、H、GF₂₅₄ (青岛海洋化工有限公司); 柱色谱用硅胶 (200 ~ 300 目, 青岛海洋化

工有限公司); 石油醚 (分析纯, 批号: 20220705, 西陇科学股份有限公司)、乙酸乙酯 (分析纯, 批号: 20221102, 西陇科学股份有限公司)、二氯甲烷 (分析纯, 批号: 20220527, 西陇科学股份有限公司)、甲醇 (色谱纯, 批号: 250530, 西陇科学股份有限公司); 纯净水 (批号: 320037HN, 杭州娃哈哈集团有限公司); CCK-8 检测试剂盒 (批号: BS350C, 安徽白鲨生物科技有限公司); DMSO (批号: 35924984V, 安徽白鲨生物科技有限公司); 紫杉醇 (批号: G2508578, 美国 MedChemexpress 生物科技公司)。

Bruker AvanceIII600 型核磁共振波谱仪 (德国 Bruker 公司); ZF-7D 暗箱紫外分析仪 (广州瑞彬科技有限公司); HPT224 型电子分析天平 (梅特勒科技有限公司); LC-52 高压半制备高效液相色谱仪 (赛谱锐思科技有限公司); 色谱柱 SB-Phenyl (250 mm × 9.4 mm, 5 μm; 安捷伦科技有限公司); RE-5250 型旋转蒸发器 (上海亚荣生化仪器厂); JM-20D-28 超声波清洗仪 (杭州法兰特超声科技)。

1.3 提取与分离

取干燥的爪哇木棉茎秆 2.5 kg 烘干后用粉碎机打磨获得爪哇木棉粉末, 在室温下用乙酸乙酯浸提 3 次, 每次浸提 5 d, 提取液减压浓缩, 得总提取物为 274.5 g。将提取物分散于水中, 依次使用石油醚、二氯甲烷、乙酸乙酯萃取, 得石油醚部位 (50.1 g)、二氯甲烷部位 (25.6 g) 和乙酸乙酯部位 (17.9 g)。

取石油醚萃取部位的浸膏进行硅胶柱色谱分离, 以石油醚-二氯甲烷 (100:1→80:1→60:1→40:1→20:1→10:1→5:1→3:1→1:1→0:1) 和二氯甲烷-甲醇 (100:1→80:1→60:1→20:1→10:1→5:1→1:1→0:1) 梯度洗脱, 得爪哇木棉 PE. A ~ PE. L 部位。PE. H 经半制备高效液相 (70% 甲醇-水) 分离纯化得到化合物 **1** ($t_R = 16.04$ min, 5.1 mg), **2** ($t_R = 17.09$ min, 7.0 mg) 和 **13** ($t_R = 17.64$ min, 8.4 mg)。PE. D 经半制备高效液相 (70% 甲醇-水) 分离纯化得到化合物 **3** ($t_R = 22.22$ min, 6.7 mg) 和 **4** ($t_R = 29.92$ min, 8.8 mg)。PE. J 经半制备高效液相 (53% 甲醇-

水)分离纯化得到化合物 **6** ($t_R = 32.02$ min, 7.7 mg) 和 **7** ($t_R = 37.55$ min, 19.2 mg)。PE. C 经半制备高效液相(88% 甲醇-水)分离纯化得到化合物 **8** ($t_R = 9.06$ min, 4.5 mg)。PE. I 经半制备高效液相(70% 甲醇-水)分离纯化得到化合物 **10** ($t_R = 21.51$ min, 6.3 mg) 和 **16** ($t_R = 16.83$ min, 5.0 mg)。

取二氯甲烷萃取部位的浸膏进行硅胶柱色谱分离,以二氯甲烷-甲醇(100:1→80:1→40:1→20:1→10:1→5:1→2:1→1:1→0:1)梯度洗脱,得爪哇木棉 Fr. 1~Fr. 15 部位。Fr. 6 经半制备高效液相(60% 甲醇-水)分离纯化得到化合物 **5** ($t_R = 19.50$ min, 6.2 mg)。Fr. 3 经半制备高效液相(60% 甲醇-水)分离纯化得到化合物 **9** ($t_R = 10.39$ min, 8.5 mg) 和 **11** ($t_R = 13.84$ min, 72.2 mg)。Fr. 5 经半制备高效液相(60% 甲醇-水)分离纯化得到化合物 **12** ($t_R = 13.87$ min, 8.9 mg) 和 **14** ($t_R = 17.22$ min, 7.1 mg)。Fr. 2 经半制备高效液相(60% 甲醇-水)分离纯化得到化合物 **15** ($t_R = 9.54$ min, 8.4 mg), **17** ($t_R = 13.69$ min, 1.0 mg) 和 **18** ($t_R = 23.55$ min, 2.6 mg)。Fr. 7 经半制备高效液相(55% 甲醇-水)分离纯化得到化合物 **19** ($t_R = 27.60$ min, 4.8 mg)。

1.4 抗肿瘤活性测定

采用 CCK-8 法评估化合物对 BT549 与 4T1 细胞增殖活性的影响。取处于对数生长期的肿瘤细胞悬液 100 μ L,以每孔 8 000 个细胞的密度接种于 96 孔细胞板中,孵育 24 h 至细胞贴壁,设置空白对照组、空白培养基组,药物组分别加入化合物 **1**~**19** 的含药培养基,以紫杉醇为阳性对照组,每组设置 6 个复孔,放置与细胞培养箱中培养 24 h 后,加入含 10% CCK-8 溶液的新鲜培养基 110 μ L,再置于细胞培养箱孵育反应 1 h 后于酶标仪 450 nm 处测吸光度值,计算细胞半数抑制浓度(IC_{50})。

2 结果

2.1 结构鉴定

化合物 1 无定型粉末;分子式为 $C_{15}H_{16}O_3$; 1H NMR (600 MHz, $CDCl_3$) δ : 8.0 (1H, s, H-14), 6.97 (1H, s, H-5), 3.29 (1H, dd, $J = 10.2, 4.2$ Hz, H-4), 2.84 (1H, dd, $J = 16.8, 6.6$ Hz, H-3a), 2.78 (1H, dd, $J = 16.2, 3.6$ Hz, H-3b), 2.41 (3H, s, H-15) 2.07 (1H, m, H-11), 0.88 (3H, d, $J = 7.2$ Hz, H-12), 0.82 (3H, d, $J = 7.2$ Hz, H-13); ^{13}C NMR (150 MHz, $CDCl_3$) δ : 118.9 (C-1), 194.8 (C-2), 44.1 (C-3), 45.6 (C-4), 124.9 (C-5), 121.8 (C-6), 137.2 (C-7),

141.7 (C-8), 127.8 (C-9), 124.0 (C-10), 33.9 (C-11), 20.2 (C-12), 18.7 (C-13), 142.6 (C-14), 15.9 (C-15)。与文献^[6]数据对比,该化合物鉴定为 hibiscusterpene II。

化合物 2 白色粉末;分子式为 $C_{15}H_{18}O_3$; 1H NMR (600 MHz, $CDCl_3$) δ : 8.10 (1H, s, H-14), 3.05 (1H, td, $J = 11.4, 4.8$ Hz, H-10), 2.82 (1H, m, H-6), 2.61 (1H, dd, $J = 16.8, 3.0$ Hz, H-3a), 2.35 (1H, dd, $J = 16.8, 13.2$ Hz, H-3b), 2.20 (1H, ddd, $J = 13.2, 4.8, 2.4$ Hz, H-4) 2.06 (1H, m, H-11), 1.90 (m, H-5), 1.36 (3H, d, $J = 7.8$ Hz, H-15), 1.01 (3H, d, $J = 7.2$ Hz, H-12), 0.95 (3H, d, $J = 6.6$ Hz, H-13); ^{13}C NMR (150 MHz, $CDCl_3$) δ : 123.2 (C-1), 193.5 (C-2), 40.0 (C-3), 47.9 (C-4), 36.0 (C-5), 42.8 (C-6), 188.7 (C-7), 144.9 (C-8), 144.5 (C-9), 30.0 (C-10), 26.6 (C-11), 20.9 (C-12), 16.4 (C-13), 147.8 (C-14), 15.5 (C-15)。与文献^[7]数据对比,该化合物鉴定为 hibiscone C。

化合物 3 白色针状结晶(甲醇);分子式为 $C_{15}H_{18}O$; 1H NMR (600 MHz, $CDCl_3$) δ : 7.89 (1H, s, H-5), 7.26 (1H, s, H-8), 7.19 (1H, d, $J = 7.2$ Hz, H-2), 7.14 (1H, d, $J = 7.2$ Hz, H-3), 3.67 (1H, m, H-11), 2.56 (3H, s, H-14), 2.47 (3H, s, H-15), 1.37 (3H, d, $J = 7.2$ Hz, H-12), 1.37 (3H, d, $J = 7.2$ Hz, H-13); ^{13}C NMR (150 MHz, $CDCl_3$) δ : 133.2 (C-1), 125.8 (C-2), 119.3 (C-3), 142.3 (C-4), 126.4 (C-5), 125.3 (C-6), 152.2 (C-7), 107.0 (C-8), 130.3 (C-9), 127.0 (C-10), 28.6 (C-11), 23.9 (C-12), 23.9 (C-13), 19.7 (C-14), 17.0 (C-15)。与文献^[8]数据对比,该化合物鉴定为 7-hydroxycadalene。

化合物 4 黄色油状;分子式为 $C_{15}H_{22}O$; 1H NMR (600 MHz, $CDCl_3$) δ : 6.95 (1H, s, H-5), 6.65 (1H, s, H-8), 4.51 (1H, br s, -OH), 2.71 (1H, m, H-1), 2.63 (1H, m, H-4), 2.23 (1H, m, H-11), 2.21 (3H, s, H-15), 1.93 (1H, m, H-2a), 1.81 (1H, m, H-3a), 1.54 (1H, m, H-3b), 1.31 (1H, m, H-2b), 1.24 (3H, d, $J = 7.2$ Hz, H-14), 0.99 (3H, d, $J = 6.6$ Hz, H-13), 0.70 (3H, d, $J = 7.2$ Hz, H-12); ^{13}C NMR (150 MHz, $CDCl_3$) δ : 32.8 (C-1), 31.0 (C-2), 21.7 (C-3), 43.2 (C-4), 130.7 (C-5), 120.7 (C-6), 151.5 (C-7), 113.1 (C-8), 142.3 (C-9), 132.4 (C-10), 32.0 (C-11), 17.4 (C-12), 21.4 (C-13), 22.4 (C-14), 15.7 (C-15)。与文献^[9]数据对比,该化合物鉴

定为 7-hydroxycalamenene。

化合物 5 黄色粉末; 分子式为 $C_{16}H_{20}O_3$; 1H NMR (600 MHz, $CDCl_3$) δ : 7.40 (1H, s, H-5), 7.10 (1H, s, H-8), 6.06 (1H, s, H-3), 3.20 (1H, m, H-11), 3.06 (3H, s, -OCH₃), 2.31 (3H, s, H-14), 1.49 (3H, s, H-15), 1.28 (3H, d, $J = 6.6$ Hz, H-12), 1.26 (3H, d, $J = 6.6$ Hz, H-13); ^{13}C NMR (150 MHz, $CDCl_3$) δ : 82.2 (C-1), 202.3 (C-2), 118.5 (C-3), 163.0 (C-4), 128.6 (C-5), 123.8 (C-6), 156.2 (C-7), 113.1 (C-8), 144.1 (C-9), 123.8 (C-10), 29.3 (C-11), 22.5 (C-12), 22.2 (C-13), 16.0 (C-14), 31.9 (C-15), 54.0 (-OCH₃)。与文献^[10]数据对比, 该化合物鉴定为 (1*S*)-1-methoxylacinilene C。

化合物 6 黄色粉末; 分子式为 $C_{15}H_{18}O_3$; 1H NMR (600 MHz, $CDCl_3$) δ : 7.35 (1H, s, H-5), 7.14 (1H, s, H-8), 6.02 (1H, s, H-3), 3.20 (1H, m, H-11), 2.28 (3H, s, H-15), 1.51 (3H, s, H-14), 1.27 (3H, dd, $J = 9.6, 6.6$ Hz, H-12), 1.27 (3H, dd, $J = 9.6, 6.6$ Hz, H-13); ^{13}C NMR (150 MHz, $CDCl_3$) δ : 76.7 (C-1), 205.5 (C-2), 115.1 (C-3), 164.3 (C-4), 128.6 (C-5), 123.1 (C-6), 155.9 (C-7), 112.6 (C-8), 145.6 (C-9), 121.6 (C-10), 29.4 (C-11), 22.5 (C-12), 22.2 (C-13), 34.0 (C-14), 16.0 (C-15)。与文献^[10]数据对比, 该化合物鉴定为 lacinilene C。

化合物 7 无定状白色粉末; 分子式为 $C_{15}H_{22}O_2$; 1H NMR (600 MHz, $CDCl_3$) δ : 6.98 (1H, s, H-5), 6.71 (1H, s, H-8), 5.44 (1H, br s, 7-OH), 3.51 (1H, m, H-2), 2.88 (1H, m, H-4), 2.61 (1H, s, H-1), 2.40 (1H, s, H-11), 2.21 (3H, s, H-15), 2.06 (1H, m, H-3a), 1.47 (1H, q, H-3b), 1.37 (3H, d, $J = 6.6$ Hz, H-14), 1.02 (3H, d, $J = 6.6$ Hz, H-12), 0.63 (3H, d, $J = 6.6$ Hz, H-13); ^{13}C NMR (150 MHz, $CDCl_3$) δ : 41.6 (C-1), 74.1 (C-2), 31.8 (C-3), 42.4 (C-4), 129.2 (C-5), 121.8 (C-6), 152.2 (C-7), 113.1 (C-8), 139.5 (C-9), 130.9 (C-10), 31.0 (C-11), 15.8 (C-12), 21.0 (C-13), 17.0 (C-14), 15.8 (C-15)。与文献^[11]数据对比, 该化合物鉴定为 (7*R*, 9*R*, 10*R*)-3, 9-di-hydroxycalamenene。

化合物 8 黄色粉末; 分子式为 $C_{15}H_{16}O_2$; 1H NMR (600 MHz, $CDCl_3$) δ : 7.65 (1H, d, $J = 0.6$ Hz, H-6), 7.43 (1H, d, $J = 7.8$ Hz, H-4), 7.19 (1H, d, $J = 8.4$ Hz, H-7), 3.38 (1H, m, H-12), 2.63 (1H, s, H-11), 2.08 (3H, d, $J = 1.2$ Hz, H-15), 1.29 (3H, d, $J = 7.2$ Hz, H-13), 1.29 (3H, d, $J = 7.2$ Hz, H-14);

^{13}C NMR (150 MHz, $CDCl_3$) δ : 182.5 (C-1), 182.5 (C-2), 135.2 (C-3), 138.2 (C-4), 145.5 (C-5), 132.2 (C-6), 134.3 (C-7), 143.2 (C-8), 132.6 (C-10), 28.5 (C-12), 23.9 (C-13), 23.1 (C-14), 16.2 (C-15)。与文献^[12,13]数据对比, 该化合物鉴定为 mansonone C。

化合物 9 褐色结晶 (甲醇); 分子式为 $C_{10}H_{10}O_4$; 1H NMR (600 MHz, $CDCl_3$) δ : 11.01 (1H, s, -OH), 7.55 (1H, dd, $J = 8.4, 7.2$ Hz, H-5), 7.03 (1H, d, $J = 7.8$ Hz, H-4), 7.01 (1H, d, $J = 9.0$ Hz, H-6), 4.65 (1H, m, H-3), 4.61 (1H, m, H-1'), 1.53 (3H, d, $J = 6.0$ Hz, H-2'); ^{13}C NMR (150 MHz, $CDCl_3$) δ : 168.6 (C-1), 69.4 (C-3), 116.4 (C-4), 137.1 (C-5), 118.1 (C-6), 162.2 (C-7), 106.8 (C-8), 141.3 (C-9), 80.1 (C-1'), 18.1 (C-2')。与文献^[14]数据对比, 该化合物鉴定为 3 ξ -(1 ξ -羟基)-7-羟基-1-苯并异呋喃酮。

化合物 10 黄白色结晶 (甲醇); 分子式为 $C_{18}H_{16}O_7$; 1H NMR (600 MHz, $CDCl_3$) δ : 12.83 (1H, s, 5'-OH), 7.88 (1H, s, H-2), 6.73 (1H, d, $J = 1.8$ Hz, H-6'), 6.69 (1H, d, $J = 1.8$ Hz, H-2'), 6.41 (1H, d, $J = 2.4$ Hz, H-8), 6.39 (1H, d, $J = 2.4$ Hz, H-6), 5.88 (1H, s, 3'-OH), 3.93 (3H, s, 4'-OCH₃), 3.91 (3H, s, 5'-OCH₃), 3.88 (3H, s, 7-OCH₃); ^{13}C NMR (150 MHz, $CDCl_3$) δ : 153.4 (C-2), 123.9 (C-3), 180.8 (C-4), 162.9 (C-5), 98.5 (C-6), 165.8 (C-7), 92.7 (C-8), 158.0 (C-9), 106.4 (C-10), 126.8 (C-1'), 108.7 (C-2'), 149.5 (C-3'), 135.9 (C-4'), 152.5 (C-5'), 105.6 (C-6'), 61.2 (4'-OCH₃), 56.2 (5'-OCH₃), 56.0 (7-OCH₃)。与文献^[15]数据对比, 该化合物鉴定为 vavain。

化合物 11 淡黄色粉末; 分子式为 $C_{20}H_{18}O_8$; 1H NMR (600 MHz, DMSO- d_6) δ : 9.24 (1H, s, 4'-OH), 7.90 (1H, d, $J = 9.6$ Hz, H-4), 7.03 (d, $J = 1.8$ Hz, H-2'), 6.87 (1H, dd, $J = 7.8, 1.8$ Hz, H-6'), 6.85 (1H, s, H-5), 6.82 (1H, d, $J = 7.8$ Hz, H-5'), 6.30 (1H, d, $J = 9.6$ Hz, H-3), 5.12 (1H, t, $J = 5.4$ Hz, 9'-OH), 4.96 (1H, d, $J = 8.4$ Hz, H-7'), 4.29 (1H, m, H-8'), 3.76 (3H, s, 6-OCH₃), 3.76 (3H, s, 3'-OCH₃), 3.67 (1H, ddd, $J = 12.6, 5.4, 2.4$ Hz, H-9'a), 3.37 (1H, ddd, $J = 18.6, 10.2, 4.2$ Hz, H-9')

b); ^{13}C NMR (150 MHz, CDCl_3) δ : 160.3 (C-2), 113.4 (C-3), 145.0 (C-4), 100.9 (C-5), 145.5 (C-6), 137.3 (C-7), 138.2 (C-8), 131.9 (C-9), 111.5 (C-10), 126.9 (C-1'), 112.2 (C-2'), 147.9 (C-3'), 147.5 (C-4'), 115.6 (C-5'), 121.1 (C-6'), 76.6 (C-7'), 78.1 (C-8'), 60.1 (C-9'), 56.0 (6-OCH₃), 55.9 (3'-OCH₃)。与文献^[16]数据对比,该化合物鉴定为 cleomiscosin B。

化合物 12 白色粉末;分子式为 $\text{C}_{21}\text{H}_{24}\text{O}_7$; ^1H NMR (600 MHz, CDCl_3) δ : 6.89 (1H, d, $J = 3.0$ Hz, H-2), 6.88 (1H, d, $J = 2.4$ Hz, H-5), 6.82 (1H, s, H-6), 6.58 (2H, s, H-2', H-6'), 5.59 (1H, s, 4-OH), 5.49 (1H, s, 4'-OH), 4.73 (2H, d, $J = 4.2$ Hz, H-7, H-7'), 4.28 (2H, m, H-9a, H-9'a), 3.90 (9H, s, 3-OCH₃, 3'-OCH₃, 5'-OCH₃), 3.86 (2H, m, H-9b, H-9'b), 3.10 (2H, m, H-8, H-8'); ^{13}C NMR (150 MHz, CDCl_3) δ : 133.1 (C-1), 108.7 (C-2), 146.9 (C-3), 145.4 (C-4), 114.4 (C-5), 119.1 (C-6), 86.0 (C-7), 54.3 (C-8), 72.0 (C-9), 132.2 (C-1'), 102.8 (C-2'), 147.3 (C-3'), 134.4 (C-4'), 147.3 (C-5'), 102.8 (C-6'), 86.3 (C-7'), 54.5 (C-8'), 71.8 (C-9'), 56.1 (3-OCH₃), 56.5 (3', 5'-OCH₃)。与文献^[17]数据对比,该化合物鉴定为 (+)-medioresinol。

化合物 13 浅绿色油状;分子式为 $\text{C}_8\text{H}_{10}\text{O}$; ^1H NMR (600 MHz, CDCl_3) δ : 7.24 (1H, d, $J = 9.0$ Hz, H-3), 7.10 (1H, d, $J = 9.0$ Hz, H-5), 7.10 (1H, d, $J = 9.0$ Hz, H-6), 6.76 (1H, d, $J = 9.0$ Hz, H-4), 3.92 (3H, s, -OCH₃), 1.67 (3H, s, -CH₃); ^{13}C NMR (150 MHz, CDCl_3) δ : 154.6 (C-1), 128.1 (C-2), 128.2 (C-3), 120.5 (C-4), 128.0 (C-5), 114.9 (C-6), 31.2 (C-7), 55.4 (C-8)。与文献^[18]数据对比,该化合物鉴定为邻甲基苯甲醚。

化合物 14 黄色粉末;分子式为 $\text{C}_7\text{H}_8\text{O}$; ^1H NMR (600 MHz, CDCl_3) δ : 7.09 (2H, d, $J = 8.4$ Hz, H-2, H-6), 6.73 (2H, d, $J = 9.0$ Hz, H-3, H-5), 1.62 (3H, s, -CH₃); ^{13}C NMR (150 MHz, CDCl_3) δ : 143.5 (C-1), 114.9 (C-2), 128.1 (C-3), 153.4 (C-4), 31.2 (C-6)。与文献^[19]数据对比,该化合物鉴定为对甲酚。

化合物 15 褐色针状结晶(甲醇);分子式为 $\text{C}_9\text{H}_{10}\text{O}_4$; ^1H NMR (600 MHz, CDCl_3) δ : 9.82 (1H, s, H-7), 7.16 (2H, s, H-2, H-6), 3.98 (6H, s, H₃-8, H₃-9); ^{13}C NMR (150 MHz, CDCl_3) δ : 128.6 (C-1),

106.8 (C-2), 147.5 (C-3), 140.9 (C-4), 147.5 (C-5), 106.8 (C-6), 191.0 (C-7), 56.7 (C-8), 56.7 (C-9)。与文献^[20]数据对比,该化合物鉴定为丁香醛。

化合物 16 淡绿色油状;分子式为 $\text{C}_{11}\text{H}_{12}\text{O}_3$; ^1H NMR (600 MHz, CDCl_3) δ : 7.45 (1H, dd, $J = 9.0, 7.8$ Hz, H-6), 6.92 (1H, d, $J = 8.4$ Hz, H-7), 6.80 (1H, d, $J = 6.6$ Hz, H-5), 4.55 (1H, m, H-3), 3.95 (3H, s, -OCH₃), 2.88 (2H, m, H-4), 1.48 (3H, d, $J = 6.6$ Hz, -CH₃); ^{13}C NMR (150 MHz, CDCl_3) δ : 162.8 (C-1), 74.1 (C-3), 36.1 (C-4), 119.2 (C-5), 134.4 (C-6), 110.8 (C-7), 161.2 (C-8), 113.6 (C-9), 142.0 (C-10), 20.7 (3-CH₃), 56.2 (8-OCH₃)。与文献^[21]数据对比,该化合物鉴定为 (*R*)-(-)-mellein methyl ether。

化合物 17 橙色无定状粉末;分子式为 $\text{C}_{14}\text{H}_8\text{O}_4$; ^1H NMR (600 MHz, CDCl_3) δ : 7.85 (2H, dd, $J = 7.2, 1.2$ Hz, H-3, H-6), 7.70 (2H, t, $J = 7.2$ Hz, H-2, H-7), 7.32 (2H, dd, $J = 8.4, 1.2$ Hz, H-4, H-5), 12.1 (2H, s, 1-OH, 8-OH); ^{13}C NMR (150 MHz, CDCl_3) δ : 162.7 (C-1, 8), 124.9 (C-2, 7), 137.5 (C-3, 6), 120.3 (C-4, 5), 193.3 (C-9), 182.0 (C-10), 116.0 (C-1a, 8a), 133.8 (C-4a, 5a)。与文献^[22]数据对比,该化合物鉴定为丹蒾醌。

化合物 18 白色针晶(甲醇);分子式为 $\text{C}_{11}\text{H}_{14}\text{O}_5$; ^1H NMR (600 MHz, CDCl_3) δ : 7.32 (2H, s, H-2, H-6), 5.89 (1H, s, 4-OH), 4.36 (2H, q, $J = 6.6$ Hz, H-1'), 3.95 (6H, s, 3-OCH₃, 5-OCH₃), 1.40 (3H, t, $J = 7.2$ Hz, H-2'); ^{13}C NMR (150 MHz, CDCl_3) δ : 121.6 (C-1), 106.7 (C-2), 146.6 (C-3), 139.2 (C-4), 146.7 (C-5), 106.7 (C-6), 166.6 (C-7), 61.2 (C-1'), 14.6 (C-2'), 56.6 (3, 5-OCH₃)。与文献^[23]数据对比,该化合物鉴定为丁香酸乙酯。

化合物 19 白色粉末;分子式为 $\text{C}_{29}\text{H}_{50}\text{O}$; ^1H NMR (600 MHz, CDCl_3) δ : 5.34 (1H, br d, $J = 5.4$ Hz, H-6), 3.52 (1H, m, H-3), 1.00 (1H, s, H-19), 0.91 (3H, d, $J = 6.6$ Hz, H-21), 0.83 (3H, m, H-29), 0.82 (3H, m, H-26), 0.80 (3H, m, H-25), 0.67 (3H, s, H-18); ^{13}C NMR (150 MHz, CDCl_3) δ : 37.2 (C-1), 31.9 (C-2), 71.8 (C-3), 42.2 (C-4), 140.7 (C-5), 121.7 (C-6), 31.8 (C-7), 31.6 (C-8), 50.1 (C-9), 36.6 (C-10), 21.0 (C-11), 39.7 (C-12), 42.3 (C-13), 56.7 (C-14), 24.3 (C-15), 28.2 (C-16), 56.0

(C-17), 11.8 (C-18), 19.0 (C-19), 36.1 (C-20), 18.7 (C-21), 33.9 (C-22), 25.9 (C-23), 45.7 (C-24), 29.1 (C-25), 19.8 (C-26), 19.4 (C-27), 23.0 (C-28), 12.0 (C-29)。与文献^[24]数据对比,该化合物鉴定为 β -谷甾醇。

化合物 1~19 的化学结构见图 1。

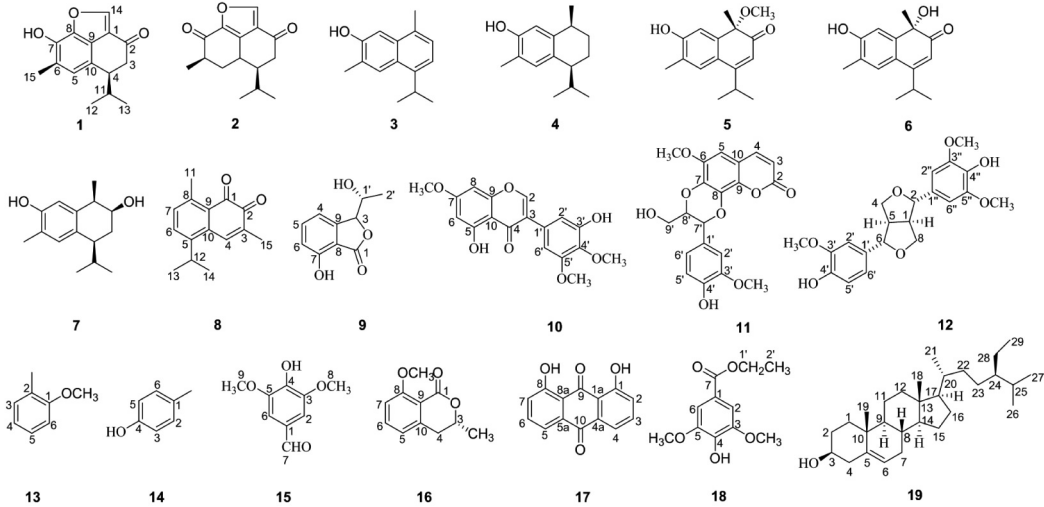


图 1 化合物 1~19 的结构
Fig. 1 Structures of compound 1-19

2.2 抗肿瘤活性研究

对化合物 1~19 进行 BT549、4T1 细胞增殖抑制实验,测试各化合物的体外抗肿瘤活性,结果见表 1。阳性药紫杉醇对 BT549、4T1 细胞的 IC₅₀ 分别为 0.51±0.02、1.21±0.09 μmol/L,化合物 1、2、3、4、6、8、10 对 BT549、4T1 细胞增殖有一定的抑制活性,其中化合物 4、8 活性相对较好,IC₅₀ 值分别为 15.9±0.6、17.9±0.4、13.8±0.5、15.2±1.3 μmol/L,化合物 5、7、9、11~19 的细胞毒活性较差 (IC₅₀>50μmol/L)。

表 1 化合物 1~19 对 BT549、4T1 细胞的 IC₅₀ 值
Table 1 IC₅₀ values of compounds 1-19
against BT549 and 4T1 cells

化合物 Compound	IC ₅₀ (μmol/L)	
	BT549	4T1
1	26.3 ± 2.1	35.3 ± 3.5
2	>50	40.9 ± 3.9
3	30.0 ± 1.2	31.3 ± 1.1
4	15.9 ± 0.6	17.9 ± 0.4
6	31.2 ± 1.5	26.4 ± 0.8
8	13.8 ± 0.5	15.2 ± 1.3
10	30.9 ± 2.3	>50
紫杉醇 Paclitaxel	0.51 ± 0.02	1.21 ± 0.09

3 讨论与结论

本研究系统地对爪哇木棉的乙酸乙酯提取物进行了分离纯化,成功从石油醚萃取部位和二氯甲烷萃取部位鉴定出 19 个化合物,其中包括 8 个杜松烷型倍半萜类(化合物 1~8),1 个异黄酮类(化合物 10),1 个木脂素类(化合物 11、12),1 个萘醌类(化合物 17),3 个苯丙素类(化合物 15、16 和 18),1 个甾醇类(化合物 19)、其他类(化合物 9、13 和 14)。体外抗肿瘤活性测试结果表明,化合物 1、2、3、4、6、8 和 10 对 BT549 和 4T1 细胞的增殖具有抑制作用,其中化合物 4、8 效果相对较好,其 IC₅₀ 值分别为 15.9±0.6、17.9±0.4 μmol/L (BT549 细胞) 和 13.8±0.5、15.2±1.3 μmol/L (4T1 细胞)。这些结果揭示了爪哇木棉作为潜在抗肿瘤天然产物来源的可能性,为其在传统医学中的应用提供了科学依据。爪哇木棉在印度传统中被用于治疗恶性肿瘤,本研究为其作为药用价值提供了科学依据。特别是杜松烷型倍半萜类化合物,这类化合物在本研究中显示出抗肿瘤活性,与文献报道的青蒿素、棉酚等类似物在抗疟疾、抗菌及抗肿瘤的活性相一致。化合物的生物活性与化学结构密切相关,化合物 4 和 8 具有相对较好的细胞毒性可能与其 α、β 不饱和酮和内酯环结构特征有关。该研究不仅丰富了爪哇木棉的化学成分,而且为其抗肿瘤活性提供了物质基础,为中药民族药的进一步开发利用提供了科学依据。

数据可用性声明: 本篇论文的关联数据可在 ScienceDB 数据库 (<https://doi.org/10.57760/sciencedb.nprdl.000cz>) 中访问获取。

参考文献

- 1 Gao Z, Wang XL, Wu JR, et al. A study on the cutting propagation of *Ceiba pentandra* [J]. Acta Agric Univ Jiangxiensis (江西农业大学学报), 2014, 36: 816-822.
- 2 Quan JW, Luo JH, Yi GL, et al. Seedling propagation techniques of *Ceiba pentandra* [J]. For Sci Technol (林业实用技术), 2005, 5: 18.
- 3 Kiran RC, Rao RT. Lipid profiling by GC-MS and anti-inflammatory activities of *Ceiba pentandra* seed oil [J]. J Biol Act Prod Nat, 2014, 4: 62-70.
- 4 Kuete CF, Léa SW, Pami EN, et al. In vitro anti-hyperglycemic and antioxidant properties of extracts from the stem bark of *Ceiba pentandra* [J]. J Complement Integr Med, 2014, 11: 185-193.
- 5 Kumar R, Kumar N, Ramalingayya GV, et al. Evaluation of *Ceiba pentandra* (L.) Gaertner bark extracts for *in vitro* cytotoxicity on cancer cells and *in vivo* antitumor activity in solid and liquid tumor models [J]. Cytotechnology, 2016, 68: 1909-1923.
- 6 Matsumoto T, Imahori D, Achiwa K, et al. Chemical structures and cytotoxic activities of the constituents isolated from *Hibiscus tiliaceus* [J]. Fitoterapia, 2020, 142: 104524.
- 7 Chen D, Li J, Xu X, et al. Plant-microbial interactions inspired the discovery of novel sesquiterpenoid dimeric skeletons of hidden natural products from *Hibiscus tiliaceus* [J]. Chin Chem Lett, 2024, 35: 312-316.
- 8 Huang M, Mei WL, Cai CH, et al. Studies on chemical compositions and cytotoxicities from roots of *Aphanamixis grandifolia* Bl [J]. J Trop Subtrop Bot (热带亚热带植物学报), 2015, 23: 329-333.
- 9 Saroj A, Pragadheesh V, Palanivelu, et al. Anti-phytopathogenic activity of *Syzygium cumini* essential oil, hydrocarbon fractions and its novel constituents [J]. Ind Crops Prod, 2015, 74: 327-335.
- 10 Xiao T, Cheng X, Huang J, et al. Bioactive substances inhibiting COX-2 and cancer cells isolated from the fibrous roots of *Alangium chinense* (Lour.) Harms [J]. RSC Adv, 2023, 13: 3346-3363.
- 11 Wang X, Shi GR, Liu YF, et al. Chemical constituents from roots of *Aristolochia championii* [J]. Nat Prod Res Dev (天然产物研究与开发), 2017, 29: S18-S22.
- 12 Bettòlo G, Casinovi C, Galeffi C. A new class of quinones: sesquiterpenoid quinones of *Mansonia altissima* chev [J]. Tetrahedron Lett, 1965, 6: 4857-4864.
- 13 Stipanovic RD, Kim HL, Altman DW. Raimondalone, a sesquiterpene from a cotton interspecific hybrid [J]. Phytochemistry, 1994, 36: 953-956.
- 14 Rahman MM, Gray AI. A benzoisofuranone derivative and carbazole alkaloids from *Murraya koenigii* and their antimicrobial activity [J]. Phytochemistry, 2005, 66: 1601-1606.
- 15 Ueda H, Kaneda N, Kawanishi K, et al. A new isoflavone glycoside from *Ceiba pentandra* (L.) Gaertner [J]. Chem Pharm Bull, 2002, 50: 403-404.
- 16 Sukhrov P, Li J, Numonov S, et al. Chemical composition of *Artemisia vachanica* growing in Tajikistan [J]. Chem Nat Compd, 2025, 61: 169-171.
- 17 Lu QR, Wang Y, Tang ZY, et al. Chemical constituents of *Wikstroemia alternifolia* and their neuroprotective activities [J]. Nat Prod Res, 2024, 38: 986-993.
- 18 Masaharu N, Ryosuke A, Takahiro I, et al. Iron fluoride/*N*-heterocyclic carbene catalyzed cross coupling between deactivated aryl chlorides and alkyl grignard reagents with or without beta-hydrogens [J]. Synthesis, 2015, 47: 1733-1740.
- 19 Zhou JH, Chen X, Yang D, et al. A facile and general oxidative hydroxylation of organoboron compounds: citric acid as an efficient catalyst in water to access phenolic and alcoholic motifs [J]. Molecules, 2023, 28: 7915.
- 20 Xu JL, Turak A, Sagdullaev S, et al. New chemical constituents from *Artemisia austriaca* [J]. Chem Nat Compd, 2024, 60: 65-67.
- 21 Klaiklay S, Rukachaisirikul V, Sukpondma Y, et al. Metabolites from the mangrove-derived fungus *Xylaria cubensis* PSU-MA34 [J]. Arch Pharm Res, 2012, 35: 1127-1131.
- 22 Yamazaki H, Rotinsulu H, Kaneko T, et al. A new dibenz[*b*, *e*]oxepine derivative, 1-hydroxy-10-methoxy-dibenz[*b*, *e*]oxepin-6, 11-dione, from a marine-derived fungus, *Beauveria bassiana* TPU942 [J]. Mar Drugs, 2012, 10: 2691-2697.
- 23 Yang CS, Yang C, Jiang HL, et al. Chemical constituents of dichloromethane fraction of ethanol extract from branches and leaves of *Trigonostemon howii* [J]. J Plant Resour Environ (植物资源与环境学报), 2022, 31: 89-91.
- 24 Shen L, Jiang SP, Zhu HJ. Chemical constituents in herb of *Incarvillea younghusbandii* Sprague [J]. Nat Prod Res Dev (天然产物研究与开发), 2012, 24: 1210-1213.