



Софийн борбут (*Descurainia sophia* (L.) Webb ex Prant.) ургамлын
антиоксидант идэвхт нэгдлийн бүтцийн судалгаа

Эрдэнэцогт Пүрэвдорж^{1*}, Мөнхбат Номин¹, Цэвэгсүрэн Номуун¹, Ганбаатар Чүнсриймтав²,
Ойдовсамбуу Сарангэрэл¹

¹Байгалийн нэгдлийн химийн лаборатори, Хими, химийн технологийн хүрээлэн, Шинжлэх ухааны академи,
Улаанбаатар 13330, Монгол

²Дрездений техникийн их сургууль, Дрезден 01069, ХБНГУ

*E-mail: purevdorje@mas.ac.mn
ORCID: [0000-0002-4043-0289](https://orcid.org/0000-0002-4043-0289)

Хүлээн авсан: 08.10.2024

Хяналтад: 13.11.2024

Хэвлэлтэд авсан: 02.12.2024

Хураангуй: Монгол оронд ургадаг Софийн борбут (*Descurainia sophia* (L.) Webb ex Prant.) ургамлын газрын дээд хэсгийн химийн бүрэлдэхүүнийг судалж, түүнд зонхилон агуулагддаг дибензилбутиролактон лигнаны уламжлалын арктигенин (1) болон арктиин (2), монотерпений лактон, бензофураны уламжлалын лолиолит (3), фурукумарины уламжлалын ксантотоксин (4) гэсэн нэгдлүүдийг ялган, молекулын бүтэц байгууламжийг физик, химийн шинж чанар болон спектроскопын аргуудаар тогтоон баталгаажуулав. Эдгээрээс лолиолитыг тухайн зүйл ургамлаас анх удаа ялгав.

Цэврээр ялгасан дээрх нэгдлүүдийн антиоксидант идэвхийг 2,2-дифенил-2-пикрилгидразил (DPPH) чөлөөт радикал, 2,2'-азино-бис(3-этилбензотиазолин-6-сульфоны хүчил) (ABTS⁺) катион радикал зайлуулах болон Fe³⁺ ионыг ангижруулах (FRAP) аргуудаар эерэг стандарттай харьцуулан тодорхойлов. Судалгааны дүнд арктигенин хамгийн сайн идэвхтэй (DPPH радикал IC₅₀, 45.12±0.39 мкг/мл; ABTS⁺ радикал 36.19±0.67 мкг/мл, FRAP утга 783.17±5.02 мкг/мл) байсан бол лолиолит ба ксантотоксин дундаж идэвхтэй, арктиин идэвхгүй байв.

Энэхүү судалгаагаар Софийн борбут ургамлын газрын дээд хэсэгт хүчтэй антиоксидант идэвхтэй арктигенин их хэмжээтэй агуулагдаж байгааг тогтоосон ба цаашид түүнээс исэлдэлтийн стрессээс үүдэлтэй өвчнөөс сэргийлэх антиоксидант идэвхтэй бүтээгдэхүүн хөгжүүлэх боломжтой байна.

Түлхүүр үг: Софийн борбут, лигнан, монотерпен, кумарин, DPPH, ABTS, FRAP

ОРШИЛ

Монгол оронд Тонолжин цэцэгтэний овог (Brassicaceae), Борбутын төрөл (*Descurainia* Webb et Berth.)-д хамаарах Софийн борбут (*Descurainia sophia* (L.) Webb ex Prant.) хэмээх цор ганц зүйл Хөвсгөл, Хэнтий, Хангай, Монгол дагуур, Ховд, Дундад халх, Их нуурын хотгор, Говь-Алтайн нутгаар тархсан ба тариалангийн талбай, айлын өвөлжөө, хаваржаа, зам дагуу, голын эргээр ургадаг [1, 2]. Софийн борбут ургамлын үр болон газрын дээд хэсгийг эртнээс хүнс болон эмийн түүхий эд байдлаар өргөн хэрэглэж ирсэн уламжлалтай. Хятадын уламжлалт эмнэлэгт уг ургамлын газрын дээд хэсгийг халуун усанд хандлан хоолойн элдэв өвчин, салхин цэцэг, улаан бурхан зэрэг халдварт өвчний эмчилгээнд, үрийг ханиалга намдаах, шээс гадагшлуулах, хаван буулгахад [3-5], Ираны уламжлалт эмнэлэгт үрийг хүйтэн усанд дэвтээн өтгөн хатах үед туулгах, гүйлгэх, мөн хоолны дуршил сайжруулах, ходоод гэдэсний хүч нэмэгдүүлэх, халуун буулгахад хэрэглэдэг байна [6]. Харин Монголын уламжлалт анагаах ухааны сударт Софийн борбут ургамлыг шанцэ, ханбил, шарилжин хамбий нэрээр тэмдэглэсэн байдаг ба ардын эмнэлэгт үрийг цусны өвчин, уушгины сүрьеэ, бөөрний

үрэвслээс үүдэлтэй усан хаван хөөх, амьсгал давхцахад, газрын дээд хэсгийг гахайн хавдар, боом өвчний эмчилгээнд хэрэглэдэг байжээ [7, 8].

Химийн бүрэлдэхүүн найрлагын судалгаагаар Софийн борбут ургамлын үрээс 14-н флавоноид гликозид болон стероид, тосны хүчил, газрын дээд хэсгээс зөвхөн тухайн зүйл ургамалд агуулагддаг дескураинин, дескураинин А, дескураинозид гэх хүхэр агуулсан өвөрмөц нэгдлүүд, кумарин, лигнан, глюкозинолат, энгийн фенолын уламжлалуудыг ялгаж бүтцийг тогтоожээ [4, 5, 9, 10]. Эдгээр анги бүлгийн нэгдлүүд нь тухайн ургамлын биологи, фармакологийн үйлдлийг нөхцөлдүүлдэг байна. Судлаачид Софийн борбут ургамлын үрийн хандны үрэвслийн эсрэг, дархлаа дэмжих, харшил дарах, нян бичил биетнийг устгах, хавдрын эсрэг зэрэг үйлдлийг судалж тогтоосон байна [6, 9-12]. Бидний энэхүү судалгааны ажил нь Монгол оронд ургадаг, химийн бүрэлдэхүүн нь төдийлөн сайн судлагдаагүй Софийн борбут ургамлын газрын дээд хэсгийн бага молекулт нэгдлийг анх удаа судалж, түүнд зонхилдог антиоксидант нэгдлүүдийг ялган, молекулын бүтэц байгууламжийг тогтоосноороо онцлог юм.

СУДАЛГААНЫ МАТЕРИАЛ, АРГА ЗҮЙ

Ургамлын дээж бэлтгэх: 2007 оны 08-р сард Архангай аймгийн Их тамир сумын нутаг Их мухартын ам, голын эрэг дагуугаас түүж, хатааж бэлтгэсэн Софийн борбут ургамлын газрын дээд хэсгийг судалгаанд хэрэглэв. Тухайн зүйл ургамлын ангилал зүйн тодорхойлолтыг ШУА, Ботаникийн цэцэрлэгт хүрээлэнгийн доктор, профессор Ч.Санчир агсан хийсэн бөгөөд ургамлын хатаамал (DS20070801) ШУА, ХХТХ-н Байгалийн нэгдлийн химийн лабораторид хадгалагдаж байна.

Хандлах, бага молекулт нэгдлийг ялгах, цэвэршүүлэх, молекулын бүтэц байгууламжийг тогтоох: Хатааж, нунтагласан Софийн борбут ургамлын газрын дээд хэсгийн 1.0 кг түүхий эдийг 96%-н этанолаор тасалгааны температурт, мацерацийн аргаар хандалж, 48 г өтгөн ханд, түүнээс гексан, хлороформ, *n*-бутанолын бүлэг хандуудыг тус тус гарган авав (*Хүснэгт 1*).

Хүснэгт 1. Ханд ба бүлэг хандны хэмжээ

№	Ханд, бүлэг ханд	Хандны хэмжээ, г
1	Этанол	48.0
2	Гексан	9.6
3	Хлороформ	10.2
4	<i>n</i> -бутанол	5.6
5	Усан үлдэгдэл	19.0

Софийн борбутын газрын дээд хэсгийн 10.2 г хлороформын бүлэг хандыг 0.063-0.200 мм хэмжээтэй силикагель 60 (Merck KgaA, Darmstadt, Germany) шингээгчтэй баганан хроматографиар, хлороформ:метанол - 9:1; 6:1; 3:1; 1:1 уусгагчийн системээр угаан, фракц тус бүрийг нимгэн үеийн хроматографийн (НҮХ) аргаар шинжилж 12 (I-XII) фракц болгон нэгтгэв. Үүнээс I фракц (394.4 мг), IV фракц (37.3 мг), V фракц (688.6 мг)-г дахин силикагель шингээгчтэй баганан хроматографийн аргаар хлороформ:метанол - 19:1; 9:1; 3:1, дихлорметан:метанол - 99:1; 95:5; 9:1; 3:1 уусгагчийн системээр угаан салгаж 1 (74.9 мг), 3 (111.4 мг), 4 (108.3 мг) гэсэн нэгдлүүдийг ялгаж цэвэршүүлэв.

Мөн 5.6 г *n*-бутанолын бүлэг хандыг силикагель шингээгчтэй баганан хроматографиар, этилацетат:метанол - 9:1; 6:1; 3:1; 1:1 уусгагчийн системээр угаан тус бүрийг НҮХ аргаар шинжилж 8 (I-VIII) фракц болгон нэгтгэв. Үүнээс III фракц (448.2 мг), VII фракц (409.3 мг)-г силикагель шингээгчтэй баганан хроматографиар салгаж 1 (244.1 мг), 2 (79.4 мг) нэгдлүүдийг цэвэрээр ялгав.

Ялгасан цэвэр нэгдлүүдийн молекулын бүтэц байгууламжийг ХБНГУ, Дрездений технологийн их сургуулийн Органик химийн факультетад масс спектр (ESI-MS Bruker Esquire LC), нэг ба хоёр хэмжээст цөмийн соронзон резонансын (ЦСР) спектроскопын аргуудаар тогтоосон бөгөөд бодисыг

дейтерийн диметилсульфоксид (DMSO-*d*₆) болон метанолд (MeOH-*d*₄) уусгаж 600 ба 150 МГц-д Bruker AVANCE III спектрометрийн багажаар тетраметилсилан дотоод стандарттай харьцуулан ¹H ба ¹³C ЦСР спектрийг бүртгэв.

Антиоксидант идэвх тодорхойлох: Софийн борбут ургамлаас ялгасан цэвэр нэгдлүүдийн антиоксидант идэвхийг 2,2-дифенил-2-пикрилгидразил (DPPH) чөлөөт радикал, 2,2'-азино-бис(3-этилбензотиазолин-6-сульфоны хүчил) (ABTS⁺) катион радикал зайлуулах болон Fe³⁺ ионыг ангижруулах (FRAP) аргуудаар эерэг стандарттай харьцуулан UV 1600 PC спектрофотометрээр хэмжин тодорхойлов [13-15]. Хэмжилт тус бүрийг 3-5 давталттайгаар гүйцэтгэж, үр дүнг утга ± стандарт хазайлтыг тооцоолон бодов.

ҮР ДҮН, ХЭЛЭЛЦҮҮЛЭГ

Химийн судалгааны үр дүн: Софийн борбут ургамлын газрын дээд хэсгийн хлороформ болон *n*-бутанолын бүлэг хандны химийн судалгааны дүнд дибензилбутиролактоны лигнан **1**, **2**, монотерпений лактоны ангиллын **3**, фурукумарины уламжлалын **4** нэгдлүүдийг ялгаж молекулын бүтэц байгууламжийг физик, химийн шинж чанар болон ЦСР-н спектроскопын аргуудаар судалж тогтоов.

Нэгдэл **1** нь цагаан өнгийн нунтаг, хлороформ, метанолд сайн уусдаг. НҮХ-д 5% H₂SO₄-р үйлчилж халаахад нил ягаан, драгендорфын урвалжаар үйлчлэхэд тод шар өнгөтэй. HR ESI-MS m/z 395.1465 [M+Na]⁺ спектрийн шинжилгээний дүнд молекулын томьёог C₂₁H₂₄O₆ гэж тодорхойлов. ¹H ЦСР спектрт (600 МГц, MeOH-*d*₄) ароматик протоны мужид δ, 6.84 (1H, д, J=7.8 Гц), 6.76 (1H, д, J=8.4 Гц), 6.62 (1H, д, J=1.8 Гц), 6.59 (1H, дд, J=7.8 ба 1.8 Гц), 6.52 (1H, дд, J=8.4 ба 1.8 Гц), 6.45 (1H, д, J=1.8 Гц) тус бүр нэг протоны идэвхтэй зургаан протоны дохио илэрсэн учир энэ нэгдлийн бүтцэд 1,3,4-байрлалдаа гурав халагдсан 2 бензолын цагариг байна гэж үзэв. Мөн δ, 4.15 (1H, дд, J=9 ба 4.0 Гц) ба 3.88 (1H, дд, J=9 ба 4.0 Гц)-г хүчилтөрөгчтэй холбогдсон метилен бүлгийн, 2.95 (1H, дд, J=14.1 ба 5.1 Гц), 2.9 (1H, дд, J=14.1 ба 6.9 Гц) ба 2.64 (2H, м, H-7) метилен бүлгийн, 2.56 (2H, м, H-8 ба H-8') метин бүлгийн протонуудын дохио тус тус илрэв. Түүнчлэн δ, 3.83, 3.80, 3.81-г тус бүр гурван протоны идэвхтэй гурван синглет илэрсэн нь 3-н метоксил бүлэг агуулсныг илэрхийлэв. ¹³C ЦСР спектрт (150 МГц, MeOH-*d*₄) ароматик 12 нүүрстөрөгч, метиний гурван нүүрстөрөгч, метилений гурван нүүрстөрөгч, хүчилтөрөгчтэй холбогдсон метиний зэрэг нийт 21 нүүрстөрөгчийн цөмийн дохио илрэв (*Хүснэгт 2*). Спектрийн шинжилгээний дээрх үр дүнг хэвлэлийн эх сурвалжтай харьцуулан бататгаж, энэ нэгдлийг арктигенин гэж тогтоов (*Зураг 1*) [16, 17].

Хүснэгт 2. Нэгдэл 1 ба 2-н ¹H болон ¹³C ЦСР-н спектрийн харьцуулсан үзүүлэлт

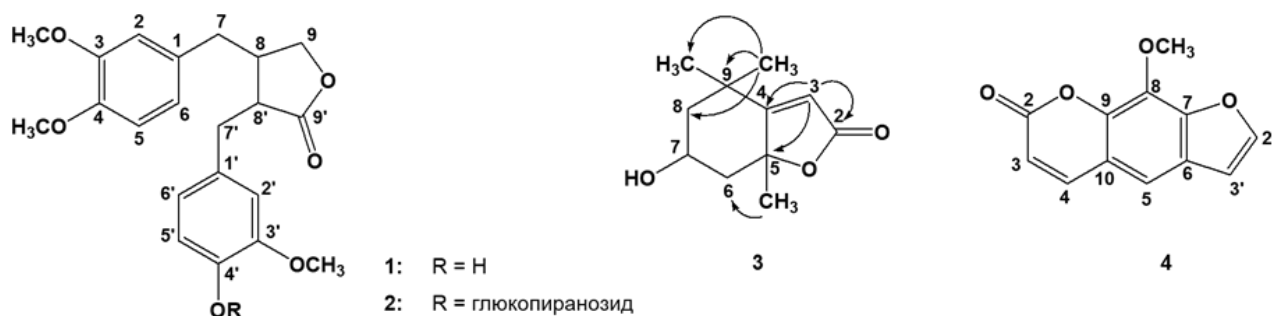
C	Нэгдэл 1		Нэгдэл 2		Эшлэл [16, 17]	
	δ_H (J)	δ_C	δ_H (J)	δ_C	δ_H (J)	δ_C
C-1	-	130.57	-	130.28	-	131.68
C-2	6.45 (1H, д, J=1.8 Гц)	111.14	6.76 (1H, c)	111.84	6.76 (1H, c)	112.43
C-3	-	146.84	-	148.96	-	148.64
C-4	-	144.67	-	144.99	-	145.31
C-5	6.76(1H, д, J=8.4 Гц)	111.14	6.65 (1H, дд, J=8.35; 1.8 Гц)	111.34	6.65 (1H, дд, J=8.5; 2.0 Гц)	115.37
C-6	6.52 (1H, дд, J=8.4; 1.8 Гц)	120.72	6.97 (1H, д, J=8.0 Гц)	120.61	6.97 (1H, д, J=8.3 Гц)	121.28
C-7	2.64 (2H, м)	38.33	2.74 (2H, м)	37.99	2.73 (2H, м)	36.83
C-8	2.56 (2H, м)	41.05	2.47 (2H, м, H-8)	41.03	2.45 (2H, м, H-8)	40.62
C-9	4.15 (1H, дд, J=9; 4.0 Гц)	71.46	4.09 (1H, т, J=8.28 Гц)	71.78	4.09 (1H, т, J=8.2 Гц)	70.68
C-1'	3.88 (1H, дд, J=9; 4.0 Гц)	129.63	3.86 (1H, т, J=8.5 Гц)	133.06	3.86 (1H, т, J=8.8 Гц)	131.19
C-2'	-	111.87	6.68 (1H, c)	113.15	6.71 (1H, c)	111.91
C-3'	-	149.15	-	149.32	-	148.69
C-4'	-	147.96	-	147.80	-	147.34
C-5'	6.84 (1H, д, J=7.8 Гц)	114.24	6.63 (1H, дд, J=8.4; 1.8 Гц)	117.07	6.6 (1H, дд, J=8.4; 2.0 Гц)	113.94
C-6'	6.59 (1H, дд, J=7.8; 1.8 Гц)	122.23	6.83 (1H, д, J=7.5 Гц)	121.81	6.85 (1H, д, J=7.5 Гц)	120.40
C-7'	2.95 (1H, дд, J=14.1; 5.1 Гц)	34.68	2.80 (2H, м)	34.33	2.80 (2H, м)	36.83
C-8'	2.90 (1H, дд, J=14.1; 6.9 Гц)	46.73	2.59 (2H, м)	46.40	2.59 (2H, м)	45.60
C-9'	2.56 (2H, м)	178.9	-	178.66	-	178.40
C-1''	-	-	4.88 (1H, д, J=7.6 Гц)	101.90	4.90 (1H, д, J=7.6 Гц)	99.87
C-2''	-	-	3.20-3.28 (3H, м)	73.15	3.2-3.3 (3H, м)	73.08
C-3''	-	-	-	76.09	-	76.68
C-4''	-	-	-	69.30	-	71.99
C-5''	-	-	3.52 (1H, м)	75.85	3.52 (1H, м)	74.29
C-6''	-	-	-	61.46	-	73.10
OCH ₃	3.83 (3H, c)	56.03	3.72 (3H, c)	55.91	3.75 (3H, c)	55.68
OCH ₃	3.80 (3H, c)	55.98	3.70 (3H, c)	55.88	3.70 (3H, c)	55.51
OCH ₃	3.81 (3H, c)	55.93	3.71 (3H, c)	55.85	3.73 (3H, c)	55.45

Тайлбар: c – синглет, д – дублет, т – триплет, м – мультиплет, дд – дублет дублет

Нэгдэл 2 цагаан өнгийн талст, метанол, хлороформд сайн уусдаг. НҮХ-д 5% H₂SO₄-р үйлчилж халаахад нил ягаан, драгендорфын урвалжаар үйлчлэхэд тод шар өнгөтэй. HR ESI-MS m/z 395.1465 [M+Na]⁺ спектрийн шинжилгээний дүнд молекулын томьёог C₂₇H₃₄O₁₁ гэж тодорхойлов. Энэ нэгдлийн ЦСР спектрийн үр дүнгүүд нэгдэл 1-тэй төсөөтэй байсан (Хүснэгт 2) ба гол ялгаа нь ¹H ЦСР спектрт (600 МГц, MeOH-d₄) сахарын мужид δ , 4.88 J=7.6 Гц харилцан үйлчлэлийн тогтмолтой нэг протоны идэвхтэй дублет сигнал илэрсэн ба үүнийг сахарын аномер протонд, 3.20-3.52-т мультиплетээр илэрсэн дохиог сахарын бусад байрлалын протонд оноосон бөгөөд энэ нь пираноз хэлбэртэй β -гексозын спектрийн өгөгдөлтэй тохирч байв [18]. Спектрийн шинжилгээний дээрх үр дүнг хэвлэлийн эх сурвалжтай харьцуулан энэ нэгдлийг арктигениний O-гликозид буюу арктиин гэж тодорхойлов (Зураг 1) [16, 17]. Арктигенин болон арктиин нь нийлмэл

цэцэгтэний овгийн ургамлуудад түгээмэл тохиолддог лигнаны уламжлалын нэгдэл бөгөөд анх *Arctium lappa* ургамлаас ялгаж бүтцийг тогтоожээ [16]. Арктигенин нь үе мөчний үрэвсэл намдаах, азотын исэл үүсэлтийг дарангуйлах, антиоксидант энзимийн идэвхийг нэмэгдүүлэх зэрэг биологийн өргөн хүрээний үйлдэлтэй [16, 19]. Харин лигнан гликозид арктиин нь вирусын эсрэг, дархлаа дэмжих үйлдэл үзүүлдэг байна [19, 20].

Нэгдэл 3 цагаан өнгийн нунтаг, метанол, хлороформд сайн уусдаг, НҮХ-д 5% H₂SO₄-р үйлчилж халаахад ягаан, драгендорфын урвалжаар үйлчлэхэд тод шар өнгөтэй. HR ESI-MS m/z 197.1177 [M+H]⁺ спектрийн шинжилгээгээр молекулын томьёог C₁₁H₁₆O₃ гэж тодорхойлов. Энэ нэгдлийн ¹H ЦСР спектрт (600 МГц, CDCl₃) δ , 1.71, 1.47 болон 1.27-т тус бүр гурван протоны идэвхтэй 3-н метил бүлгийн протонууд, 5.69-т олефиний протон, 1.97 (дт, J=14.6 ба 2.6 Гц), 1.78, 1.53 (дд,



Зураг 1. Ялгасан нэгдлүүдийн молекулын бүтэц (1)-арктигенин, (2)-арктиин, (3)-лолиолид, (4)-ксантоксин

Хүснэгт 3. Нэгдэл 3-н ¹H болон ¹³C ЦСР-н спектрийн харьцуулсан үзүүлэлт

C	Нэгдэл 3		Эшлэл [22] 600 МГц, CDCl ₃	
	δ _H (J)	δ _C	δ _H (J)	δ _C
C-2	-	171.86	-	172.44
C-3	5.69 (1H, c)	112.93	5.66 (1H, c)	113.47
C-4	-	182.50	-	183.04
C-9	-	35.90	-	36.47
C-8	1.53 (1H, дд, J=14.6; 3.6 Гц) 1.97 (1H, дд, J=14.6; 2.6 Гц)	47.29	1.51 (1H, дд, J=14.5; 3.4 Гц) 1.96 (1H, ддд, J=14.5; 3.4 ба 1.8 Гц)	47.92
C-7	4.33 (1H, м)	66.84	4.30 (1H, м)	67.35
C-6	1.78 (2H, м)	45.60	1.76 (2H, дд J=14.1, 3.4 Гц)	46.24
C-5	-	86.63	-	87.27
-OCH ₃	1.71 (3H, c)	26.99	1.76 (3H, c)	25.58
-OCH ₃	1.47 (3H, c)	26.47	1.45 (3H, c)	27.08
-OCH ₃	1.27 (3H, c)	30.64	1.25 (3H, c)	31.20

Тайлбар: c – синглет, м – мультиплет, дд – дублет дублет

J=14.6 ба 3.6 Гц)-т метилен бүлгийн дөрвөн протоны дохио тус тус илрэв. Мөн ¹³C ЦСР спектрт (150 МГц, CDCl₃) метил бүлгийн гурван нүүрстөрөгч, метилен бүлгийн хоёр нүүрстөрөгч, α, β-ханаагүй карбонил бүлгийн гурван нүүрстөрөгч, хүчилтөрөгчтэй холбогдсон метиний зэрэг нийт 11 цөмийн дохио илрэв (Хүснэгт 3). НМВС спектрийн судалгаагаар δ_H 5.69-т илэрсэн олефиний протон нь δ_C 171.86, 182.50 болон 86.63-т илэрсэн нүүрстөрөгчийн цөмүүдтэй харилцан үйлчлэлцсэн ба эндээс тухайн нэгдэл лактоны цагариг агуулсан гэж дүгнэв. Мөн δ_H 1.27-т илэрсэн метил бүлгийн протонууд δ_C 35.90, 47.29, 26.47-т илэрсэн нүүрстөрөгчийн цөмүүдтэй, 1.47-т илэрсэн метил бүлгийн протонууд δ_C 35.90, 47.29, 30.64-т илэрсэн нүүрстөрөгчийн цөмүүдтэй харилцан үйлчлэлцэж байгаа нь хоёр метил бүлэг нэг нүүрстөрөгчийн атомд холбогдсон ба 9-диметил-6-метилциклогексан нь лактоны цагаригтай шууд холбогдсон болохыг тогтоов. Дээрх спектрийн шинжилгээний үр дүнг хэвлэлийн материалтай харьцуулан бататгаж энэ нэгдлийг монотерпений лактон болох лолиолоид гэж тогтоов (Зураг 1) [21, 22]. Энэ нэгдэл нь Софийн борбут ургамлаас урьд нь ялгагдаж байгаагүй юм. Лолиолоид нь C-5 болон C-7 байрлалд хоёр хираль төвтэй ба хэд хэдэн диастереоизомертэй. Бид энэхүү судалгаагаар нэгдэл 3-н абсолют конфигурацийг тодорхойлоогүй болно.

Монотерпений лактон болох лолиолоидыг *Lolium perenne* ургамлаас анх ялгаж бүтцийг тогтоосон [21] ба бактерийн эсрэг хүчтэй идэвхтэй, бусад ургамлын өсөлт, үр боловсроход шаардлагатай гормоны нийлэгжилтийг бууруулах фитотоксик нөлөөтэй нь тогтоогджээ [22, 23].

Нэгдэл 4 цагаан өнгийн талст, хлороформ, метанолд сайн уусдаг, НҮХ-д ХЯТ-ны 365 нм-т тод шар, 5% H₂SO₄-р үйлчилж халаахад ягаан, драгендорфын урвалжаар үйлчлэхэд хөх ягаан өнгөтэй ба ХЯТ-ны шингээлтийн спектрийн λ 223, 249, 302 нм-ийн утгад максимум шингээлт илрэв. HRESI-MS (m/z 217.1974 [M+H]⁺) масс спектрийн шинжилгээгээр молекулын томьёог C₁₂H₈O₄ гэж тогтоов. Эдгээр үр дүнд үндэслэн энэ нэгдлийг фурано кумарины уламжлал гэж урьдчилан дүгнэв. ¹H ЦСР спектрт (600 МГц, CDCl₃) 8-н протоны цөм бүртгэгдсэнээс соронзон орны сул мужид буюу δ, 8.13 ба 6.27-т тус бүр нэг протоны идэвхтэй, J=9.7 Гц харилцан үйлчлэлийн тогтмолтой хоёр дублет, 7.13-т нэг протоны идэвхтэй синглет дохио илэрсэн нь кумарины пироны цагаригийн Н-3, Н-4 болон ароматик цагаригийн Н-5 протонуудад оноосон бөгөөд энэ нь уг нэгдэл C-3, C-4, C-5 байрлалдаа халагдаагүй болохыг харуулж байна. Мөн δ, 7.5 болон 7.01-т илэрсэн тус бүр нэг протоны идэвхтэй, J=2.5 Гц харилцан үйлчлэлтэй хоёр дублет дохиог фураны цагаригийн Н-2', Н-3'-д оноов. δ, 4.3-т гурван протоны идэвхтэй синглет дохио илэрсэн ба

Хүснэгт 4. Нэгдэл 4-н ¹H болон ¹³C ЦСР-н спектрийн харьцуулсан үзүүлэлт

C	Нэгдэл 4		Эшлэл [24, 25] 600 МГц, CDCl ₃	
	δ _H (J)	δ _C	δ _H (J)	δ _C
C-2	-	161.76	-	161.42
C-3	6.27 (1H, д, J = 9.5 Гц)	106.69	6.36 (1H, д, J = 9.5 Гц)	106.02
C-4	7.13 (1H, д, J = 9.7 Гц)	126.18	7.73 (1H, д, J = 9.5 Гц)	-
C-5	7.13 (1H, c)	114.71	7.34 (1H, c)	112.51
C-6	-	139.68	-	139.21
C-7	-	152.73	-	152.71
C-8	-	149.74	-	149.57
C-9	-	158.53	-	158.32
C-10	-	145.10	-	144.53
C-2'	7.50 (1H, д, J = 2.5 Гц)	116.41	7.66 (1H, д, J = 2.5 Гц)	-
C-3'	7.01 (1H, д, J = 2.5 Hz)	112.93	6.79 (1H, д, J = 2.5 Hz)	112.55
-OCH ₃	4.3 (3H, c)	60.01	4.27 (3H, c)	60.08

Тайлбар: c – синглет, д – дублет

үүнийг ароматик цагаригт холбогдсон метоксил бүлэг гэж үзэв. Харин энэ нэгдлийн ¹³C ЦСР спектрт (150 МГц, CDCl₃) дөрөв халагдсан зургаан нүүрстөрөгч, метиний таван нүүрстөрөгч, метилийн нэг нүүрстөрөгч нийт 12 цөмийн дохио илрэв. Үүнээс δ, 116.41 карбониль бүлгийн, 112.93-г C-3' гэсэн фураны цагаригийг тодорхойлох үндсэн дохио илрэв (Хүснэгт 4) [24, 25]. Энэ нэгдлийн физик, химийн шинж чанар болон спектроскопын шинжилгээний үр дүнд фурукумарины уламжлалын ксантотоксин гэж тогтоов (Зураг 1) [10, 24, 25].

Ксантотоксин нь шүхэртэний овгийн ургамлуудад элбэг тохиолддог кумарин бөгөөд топоизомераза Пв энзимийн идэвхийг дарангуйлж хавдрын эсрэг хүчтэй үйлдэлтэй ба ургамлын хэд хэдэн зүйл хортон шавжны авгалдайд хортой нөлөө үзүүлдэг болох нь тогтоогджээ [26, 27].

Цэвэр нэгдлүүдийн антиоксидант идэвхийн үр дүн: Софийн борбут ургамлын газрын дээд хэсгийн антиоксидант идэвхтэй хлороформ (DPPH радикал IC₅₀, 75.16±0.26 мкг/мл; ABTS⁺ радикал 63.17±0.89 мкг/мл) болон *n*-бутанол (DPPH радикал IC₅₀, 98.93±0.19 мкг/мл; ABTS⁺ радикал 109.63±1.13 мкг/мл)-н бүлэг ханднаас ялгаж, бүтцийг тогтоосон арктигенин (1), арктиин (2), лолиолид (3) ксантотокин (4)-ний антиоксидант идэвхийг *in vitro* нөхцөлд ялгаатай аргуудаар харьцуулан судалж үр дүнг Хүснэгт 5-д нэгтгэн үзүүлэв.

Хүснэгт 5. Цэвэр нэгдлүүдийн антиоксидант идэвх

Цэвэр нэгдэл	Антиоксидант идэвх		
	DPPH IC ₅₀ , мкг/мл	ABTS ⁺ мкг/мл	FRAP утга, мкМ/л
1	45.12±0.39	36.19±0.67	783.17±5.02
2	идэвхгүй	идэвхгүй	идэвхгүй
3	98.75±0.72	78.24±0.69	555.45±2.15
4	56.15±0.55	61.29±0.31	641.78±1.79
<i>Эерэг хяналт</i>			
Рутин	20.13±0.98	-	-
Тролокс	-	24.36±0.32	-
Витамин С	-	-	2146.91±4.7

Судалгааны дүнд лигнаны уламжлалын арктигенин нь бусад нэгдлүүдээс илүү хүчтэй идэвх үзүүлсэн бөгөөд 50 мкг/мл тундаа DPPH чөлөөт радикалыг 67.8%, ABTS⁺ катион радикалыг 72.3% зайлуулж байв. Харин арктигениний 4'-*O*-гликозид болох арктиин идэвхгүй байлаа. Иймд лигнаны цөмийн C-4' байрлал дахь гидроксил бүлэг нь антиоксидант идэвхэд чухал нөлөөтэй гэж үзэж болох юм. Ургамлын фенолт нэгдлийн антиоксидант идэвхэд гидроксил бүлгийн тоо, байрлал туйлын чухал болохыг олон судлаачид тогтоон баталсан байдаг [28, 29]. Мөн арктигенин нь туршилтын амьтны мэдрэлийн эсэд илүүдлээр хуримтлагдсан хүчилтөрөгчт чөлөөт радикалыг бууруулж үрэвсэл намдаах, мэдрэлийн эсийг хамгаалах үйлдэлтэй нь тогтоогджээ [19].

Кумарины уламжлалын ксантотоксин болон монотерпений лактон лолиолид эерэг стандартуудтай харьцуулахад дундаж идэвх үзүүлээ. Xiudong Y. нар лолиолидын антиоксидант идэвхийг *in vitro* нөхцөлд DPPH радикал зайлуулах аргаар судалж дундаж идэвхтэй гэж дүгнэсэн [30] ба үүнтэй бидний судалгааны дүн тохирч байна. Харин зарим судлаачид эдгээр нэгдлүүд нь *in vivo* туршилтаар хүчтэй антиоксидант идэвхтэй болохыг тогтоосон байдаг. Park S.H нар лолиолид нь устөрөгчийн хэт ислээр үйлчилсэн B16F10 эпители эсэд хүчтэй антиоксидант идэвхтэй, хоруу чанаргүй болохыг тогтоож энэ нэгдэл нь исэлдэлтийн стрессээс шалтгаалсан арьсны өвчин, үрэвсэл намдаахад хэрэглэх боломжтой гэж дүгнэсэн байдаг. Учир нь лолиолид эсэд АКТ/PI3K замыг идэвхжүүлж HO-1 энзимийн идэвхийг нэмэгдүүлэн антиоксидант болон үрэвслийн эсрэг үйлдэл үзүүлдэг байна [31]. Түүнчлэн ксантотоксин нь 15 мг/кг тундаа туршилтын амьтны малондиальдегидийн хэмжээг илэрхий бууруулж антиоксидант энзим болох глутатионы хэмжээг нэмэгдүүлсэн ба исэлдэлтийн стрессээс шалтгаалсан Паркинсоны өвчний шинж тэмдгийг бууруулахад хэрэглэх боломжтой гэж үзжээ [32].

ДҮГНЭЛТ

Бид Софийн борбут ургамлын химийн судалгааны дүнд түүний газрын дээд хэсэгт хүчтэй антиоксидант идэвхтэй лигнаны уламжлал арктигенин их хэмжээтэй агуулагдаж байгааг тогтоов. Мөн монотерпений уламжлалын лолиолидыг тухайн зүйл ургамлаас анх удаа ялгаж бүтцийг тогтоолоо. Эдгээр үр дүнд тулгуурлан цаашид Софийн борбут ургамлын биологи, фармакологийн бусад идэвхийг нарийвчлан судлах нь зүйтэй юм.

ТАЛАРХАЛ

Цэвэр нэгдлүүдийн масс, нэг ба хоёр хэмжээст цөмийн соронзон резонансын спектрийг бичсэн ХБНГУ, Дрездений технологийн их сургуулийн Органик химийн факультетын судлаач нарт талархал илэрхийлье.

Энэхүү судалгааны ажлыг ШуСс-2020/54 “Биологийн идэвхт бодисын бүтэц байгууламж ба субстанцийн технологи” суурь судалгааны төслийн санхүүжилтээр хийж гүйцэтгэв.

АШИГЛАСАН МАТЕРИАЛ

1. В.И. Грубов. (2008) Монголын гуурст ургамал таних бичиг, Улаанбаатар, х.159.
2. M. Urgamal, B. Oyuntsetseg, D. Nyambayar, Ch. Dulamsuren. (2014) *Conspectus of the vascular plants of Mongolia*, Admon Printing, Ulaanbaatar, p.161.

3. A. Xia, G. Yinghua, L. Xin, Y. Qiling, M. Ling, W. Li. (2024) Gold nanoparticles green-mediated by *Descurainia sophia* extract for the treatment of ovalbumin-induced asthma in rats. *Inorg. Chem. Commun.* 161, p.112011. <https://doi.org/10.1016/j.inoche.2023.112011>
4. L. Jing, X. Liu, F. Dong, J. Xu, Y. Zheng, W. Shan. (2010) Determination of the volatile composition in essential oil of *Descurainia sophia* (L.) Webb ex Prantl (Flixweed) by gas chromatography/mass spectrometry (GC/MS). *Molecules.* 15(1), p.233-240. <https://doi.org/10.3390/molecules15010233>
5. K. Sun, X. Li, J.M Liu, J.H Wang, W. Li, Y. Sha. (2005) A novel sulphur glycoside from the seeds of *Descurainia sophia* L. *J. Asian Nat. Prod. Res.* 7, p.853-856. <https://doi.org/10.1080/1028602042000204072>
6. M. Nimrouzi, M.M Zarshenas. (2016) Phytochemical and pharmacological aspects of *Descurainia sophia* Webb ex Prantl: modern and traditional applications. *Avicenna. J. Phytomed.* 6 (3), p.266-272.
7. У. Лигaa, Б. Даваасүрэн, Н. Нинжил. (2005) Монгол орны эмийн ургамлыг өрнө дорнын анагаах ухаанд хэрэглэхүй, ЖК printing, Улаанбаатар, х.97.
8. У. Лигaa. (1996) Монголын уламжлалт эмнэлэгт эмийн ургамлыг хэрэглэх арга жор, Улаанбаатар, х. 380-381.
9. J.H. Gong, Y.L. Zhang, J.L He, X.K. Zheng, W. Feng, X.L. Wang. (2015) Extractions of oil from *Descurainia sophia* seed using supercritical CO₂, chemical compositions by GC-MS and evaluation of the anti-tussive, expectorant and anti-asthmatic activities. *Molecules.* 20, p.13296-312. <https://doi.org/10.3390/molecules200713296>
10. N.H. Mohamed, A.E. Mahrous. (2009) Chemical constituents of *Descurainia sophia* L. and its biological activity. *Rec. Nat. Prod.* 3(1), p.58-67.
11. H. Askaria, N. Enayatib, M.M. Ahmadian-Attaric, M. Bakhtiyarid. (2021) Protective effects of *Descurainia sophia* against gentamicin induced nephrotoxicity in rats. *I. J. Pharm. Res.* 20(1). p.40-52. <https://doi.org/10.22037/ijpr.2020.112105.13535>
12. J.S. Park, C.J. Lim, K.C. Bang, N.S. Kim. (2016) Ethanolic extract of *Descurainia sophia* seeds sensitizes A549 human lung cancer cells to TRAIL cytotoxicity by upregulating death receptors. *BMC. Complement. Altern. Med.* 16, p.115. <https://doi.org/10.1186/s12906-016-1094-0>
13. G.C. Yen, H.Y. Chen. (1995) Antioxidant activity of various tea extracts in relation to their antimutagenicity. *J. Agric. Food. Chem.* 43(1), p.27-32. <https://doi.org/10.1021/jf00049a007>
14. R. Re, N. Pellegrini, A. Proteggente, A. Pannala, M. Yang, C. Rice-Evans. (1999) Antioxidant activity applying an improved ABTS radical cation decolorization assay. *Free Radic. Biol. Med.* 26(9-10), p.1231-1237. [https://doi.org/10.1016/s0891-5849\(98\)00315-3](https://doi.org/10.1016/s0891-5849(98)00315-3)
15. I.F. Benzie, J.J. Strain. (1996) The ferric reducing ability of plasma (FRAP) as a measure of antioxidant power: the FRAP assay. *Anal. Biochem.* 239(1), p.70-76. <https://doi.org/10.1006/abio.1996.0292>
16. X. Xu, X. Huang, Y. Zheng, X. Wang, j. Xie, S. Liu, K. Guo. (2023) Synthesis, structural elucidation, and anti-inflammatory activity of a water-soluble derivative of arctiin. *Molecules.* 28, p.1789. <https://doi.org/10.3390/molecules28041789>
17. V.C. Heleno, R. da Silva, S. Pedersoli, S. de Albuquerque, J.K. Bastos, M.L. Silva, P.M. Donateda, G.V. Silva, J.L. Lopes (2006). Detailed ¹H and ¹³C NMR structural assignment of three biologically active lignan lactones. *Spectrochim. Acta. A. Mol. Biomol. Spectrosc.* 63(1), p.234-239. <https://doi.org/10.1016/j.saa.2005.04.047>
18. G.D. Brown, J. Bauer, H.M.I Osborn, R.A. Kuemmerle. (2018) Solution NMR approach to determine the chemical structures of carbohydrates using the hydroxyl groups as starting points. *ACS Omega.* 21, 3(12), p.17957-17975. <https://doi.org/10.1021/acsomega.8b02136>
19. N. Zhang, D. Dou, X. Ran, T. Kang. (2018) Neuroprotective effect of arctigenin against neuroinflammation and oxidative stress induced by rotenone. *RSC Adv.* 8(5), p.2280-2292. <https://doi.org/10.1039/c7ra10906g>
20. K. Hayashi, K. Narutaki, Y. Nagaoka, T. Hayashi, S. Uesato. (2010) Therapeutic effect of arctiin and arctigenin in immunocompetent and immunocompromised mice infected with influenza A virus. *Biol. Pharm. Bull.* 33(7), p.1199-205. <https://doi.org/10.1248/bpb.33.1199>
21. R. Hodges, A.L. Porte. (1964) The structure of loliolide: A terpene from *Lolium perenne*. *Tetrahedron,* 20, p.1463-1467. [https://doi.org/10.1016/S0040-4020\(01\)99140-9](https://doi.org/10.1016/S0040-4020(01)99140-9)
22. N. Okada, K. Shirata, M. Niwano, H. Koshino, M. Uramoto. (1994) Immunosuppressive activity of a monoterpene from *Eucommia ulmoides*. *Phytochem.* 37(1), p.281-282. [https://doi.org/10.1016/0031-9422\(94\)85042-9](https://doi.org/10.1016/0031-9422(94)85042-9)
23. M. Murata, Y. Nakai, K. Kawazu, M. Ishizaka, H. Kajiwara, H. Abe, K. Takeuchi, Y. Ichinose, I. Mitsuahara, A. Mochizuki, S. Seo. (2019) Loliolide, a carotenoid metabolite, is a potential endogenous inducer of herbivore resistance. *Plant. Physiol.* 179 (4), p.1822-1833. <https://doi.org/10.1104/pp.18.00837>
24. N. Finkelstein, C.F. Albrecht, P.P. Jaarsveld. (1993) Isolation and structure elucidation of xanthotoxin, a

- phototoxic furanocoumarin, from *Peucedanum galbanum*. *S. Afr. J. Bot.* 59(1), p.81-84. [https://doi.org/10.1016/S0254-6299\(16\)30778-5](https://doi.org/10.1016/S0254-6299(16)30778-5)
25. R. Heinke, K. Franke, A. Porzel, L.A. Wessjohann, N.A. Ali, J. Schmidt. (2011) Furanocoumarins from *Dorstenia foetida*. *Phytochem.* 72(9), p.929-34. <https://doi.org/10.1016/j.phytochem.2011.03.008>
26. I.Y. Marwa, M.F. Elshal, N. Fathallah, M.A. Abdelkawy, M. Bishr, O. Salama, Y.S. Abulfadl. (2022) Potential anticancer activity of the furanocoumarin derivative xanthotoxin isolated from *Ammi majus* L. fruits: *in vitro* and *in silico* studies. *Molecules.* 27(3), p.943. <https://doi.org/10.3390/molecules27030943>
27. C. Sotelo-Leyva, D. Aviles-Montes, J.M. Rivas-Gonzalez, R. Figueroa-Brito, R. Abarca-Vargas, E. Toledo-Hernandez, D.O. Salinas-Sanchez. (2023) Xanthotoxin: an aphicidal coumarin from ficus petiolaris against melanaphis sacchari zehntner (Hemiptera: Aphididae). *J. Food. Potect.* 86(6), p.100084. <https://doi.org/10.1016/j.jfp.2023.100084>
28. N.C. Charlton, M. Mastuyugin, B. Török. (2023) Structural features of small molecule antioxidants and strategic modifications to improve potential bioactivity. *Molecules.* 28(3), p.1057. <https://doi.org/10.3390/molecules28031057>
29. L. Polat-Kose, I. Gulcin. (2021) Evaluation of the antioxidant and antiradical properties of some phyto and mammalian lignans. *Molecules.* 26(23), p.7099. <https://doi.org/10.3390/molecules26237099>
30. X. Yang, M.C. Kang, K.W. Lee, S.M. Kang, W.W. Lee, Y.J. Jeon. (2011) Antioxidant activity and cell protective effect of loliolide isolated from *Sargassum ringgoldianum* subsp. coreanum. *Algae.* 26(2), p.201-208. <https://doi.org/10.4490/algae.2011.26.2.201>
31. S.H. Park, E. Choi, S. Kim, D.S Kim, J.H. Kim, S. Chang, J.S. Choi, K.J. Park. (2018) Oxidative stress-protective and anti-melanogenic effects of loliolide and ethanol extract from fresh water green algae, *Prasiola japonica*. *Int. J. Mol. Sci.* 19, p.2825. <https://doi.org/10.3390/ijms19092825>
32. A.S. Sayed, N. El Sayed, B. Budzyńska, K. Skalicka-Woźniak, M.K. Ahmed, E.A. Kandil. (2022) Xanthotoxin modulates oxidative stress, inflammation, and MAPK signaling in a rotenone-induced Parkinson's disease model. *Life Sci.* 310, p.121129. <https://doi.org/10.1016/j.lfs.2022.121129>

Isolation and structure elucidation of antioxidative compounds from *Descurainia sophia* (L.) Webb ex Prant.

Erdenetsogt Purevdorj^{1*}, Munkhbat Nomin¹, Tsevegsuren Nomuun¹, Ganbaatar Chunsriimiyatav², Oidovsambuu Sarangerel¹

¹Laboratory of Natural Product Chemistry, Institute of Chemistry and Chemical Technology, Mongolian Academy of Sciences, Ulaanbaatar 13330, Mongolia

²Faculty of Chemistry, Dresden University of Technology, Dresden 01069, Germany

*E-mail: purevdorje@mas.ac.mn
ORCID: [0000-0002-4043-0289](https://orcid.org/0000-0002-4043-0289)

Submitted: 08.10.2024

Reviewed: 13.11.2024

Accepted: 02.12.2024

Abstract: Chemical composition of the ethanolic extract from the aerial parts of *Descurainia sophia* (L.) Webb ex Prant. growing in Mongolia has been evaluated in this study. Dibenzylbutyrolactone derivative arctigenin (**1**), its glucoside derivative arctiin (**2**), benzofurane derivative monoterpene lactone loliolide (**3**) and furocoumarine derivative xantotoxine (**4**) were identified by mass spectrometry, ¹H, ¹³C and 2D NMR techniques. Notably, loliolide was identified in this species for the first time. The antioxidant activity of the isolated compounds was evaluated through DPPH, ABTS⁺ radicals scavenging, and Fe³⁺ ion reduction assays. Among the compounds, arctigenin showed the most potent antioxidative effect (DPPH radical IC₅₀: 45.12±0.39 µg/mL; ABTS⁺ radical IC₅₀: 36.19±0.67 µg/mL; FRAP value: 783.17±5.02 µM/L), while loliolide and xantotoxine showed moderate antioxidative effects. These findings suggest that arctigenin, a potent antioxidant and the major component of the extract, highlights the potential of *Descurainia sophia* (L.) Webb ex Prant. as a valuable source for antioxidant products.

Keywords: lignan, monoterpene lactone, furocoumarine, DPPH, ABTS, FRAP

© The Author(s). 2024 **Open Access** This article is distributed under the terms of the Creative Commons Attribution 4.0 International License (<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>), which permits unrestricted use, distribution, and reproduction in any medium, provided you give appropriate credit to the original author(s) and the source, provide a link to the Creative Commons license, and indicate if changes were made.

DOI: