



Chemical Constituents from Seeds, Roots and Heartwood of *Caesalpinia sappan*

Orapun Yodsaoue

| | |
|---------|-----------------------|
| เลขที่ | OK495.152 072 2008 33 |
| Bib Key | 301837 |
| | 19 H.A. 2552 |

**A Thesis Submitted in Partial Fulfillment of the Requirements for the
Degree of Master of Science in Organic Chemistry**

Prince of Songkla University

2008

Copyright of Prince of Songkla University

Thesis Title Chemical Constituents from Seeds, Roots and Heartwood of
Caesalpinia sappan
Author Miss Orapun Yodsaoue
Major Program Organic Chemistry

Major Advisor

C. Karalai
.....
(Assoc. Prof. Dr. Chatchanok Karalai)

Co-advisor

C. Ponglimanont
.....
(Assoc. Prof. Chanita Ponglimanont)

Examining Committee:

K. Chantrapromma.....Chairperson
(Assoc. Prof. Dr. Kan Chantrapromma)

C. Karalai.....Committee
(Assoc. Prof. Dr. Chatchanok Karalai)

C. Ponglimanont.....Committee
(Assoc. Prof. Chanita Ponglimanont)

Supinya Tewtrakul.....Committee
(Assoc. Prof. Dr. Supinya Tewtrakul)

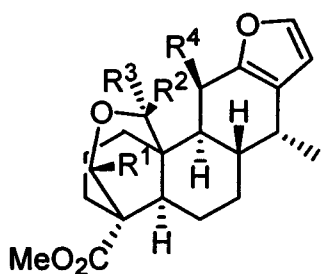
The Graduate School, Prince of Songkla University, has approved this thesis as partial fulfillment of the requirements for the Master of Science Degree in Organic Chemistry

Krekchai Thongnoo
.....
(Assoc. Prof. Dr. Krekchai Thongnoo)
Dean of Graduate School

| | |
|-----------------|--|
| ชื่อวิทยานิพนธ์ | องค์ประกอบทางเคมีจากเมล็ด รากและแก่นของฝาง |
| ผู้เขียน | นางสาวอรพรรณ ยอดสะอี |
| สาขาวิชา | เคมีอินทรีย์ |
| ปีการศึกษา | 2550 |

บทคัดย่อ

การศึกษาองค์ประกอบทางเคมีจากเมล็ด รากและแก่นของฝาง สามารถแยกสารใหม่เป็นสารประกอบไดเทอร์พีนชนิดคาสเซนได้ 11 สาร คือ phanginin A-K (DS1- DS11) ซึ่งแยกได้จากส่วนของเมล็ด นอกจากนี้ยังสามารถแยกสารประกอบที่มีการรายงานแล้ว 9 สาร ซึ่งแบ่งเป็นสารประกอบไฮโมไอโซฟลาโวน 7 สาร [3-(3',4'-dihydroxybenzyl)-7-hydroxychroman-4-one (DH1), 4-*O*-methylepisappanol (DH2), 4-*O*-methylsappanol (DH3), 3,4-isopropylidene sappanol (DH4), brazilin (DH5), protosappannin A (DH6) และ episappanol (MR1)] และสารประกอบชาลโคน 2 สาร [3-deoxysappanchalcone (MR2) และ sappanchalcone (MR3)] ซึ่งแยกได้จากส่วนของรากและแก่นของฝาง จากการศึกษาฤทธิ์ทางชีวภาพพบว่า สารประกอบ MR3 แสดงฤทธิ์ต้านโรคมะเร็งใน RBL-2H3 เซลล์โมเซลล์ีที่สูงสุด ด้วยค่า $IC_{50} = 7.6 \mu M$ รองลงมาคือสารประกอบ MR2 ($IC_{50} = 15.3 \mu M$) สารประกอบ MR3 เพียงสารเดียวที่มีฤทธิ์ยับยั้งความเป็นพิษต่อเซลล์มะเร็งเต้านม (MCF-7) มะเร็งปากมดลูก (HeLa) มะเร็งลำไส้ (HT-29) และ มะเร็งในช่องปาก (KB) ที่ค่า IC_{50} 0.64, 0.72, 0.80 และ 0.75 $\mu g/ml$ ตามลำดับ โครงสร้างของสารประกอบเหล่านี้วิเคราะห์โดยใช้ข้อมูลทางสเปกโทรสโกปี สำหรับสารประกอบ DS1 มีข้อมูลทางเอกซเรย์ในการพิสูจน์โครงสร้างด้วย



DS1: $R_1 = R_3 = R_4 = H, R_2 = OH$; Phanginin A

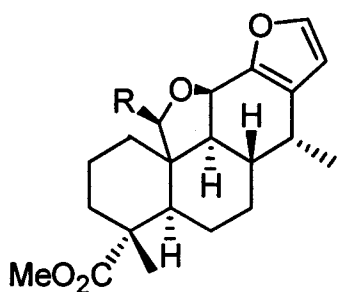
DS2: $R_1 = OH, R_2 = R_3 = R_4 = H$; Phanginin B

DS3: $R_1 = R_2 = R_4 = H, R_3 = OMe$; Phanginin C

DS4: $R_1 = OMe, R_2 = R_3 = R_4 = H$; Phanginin D

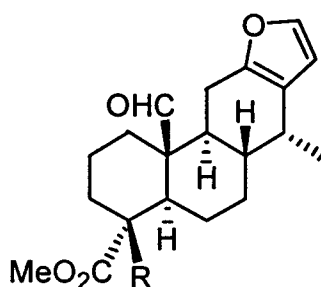
DS5: $R_1 = =O, R_2 = R_3 = R_4 = H$; Phanginin E

DS6: $R_1 = R_2 = H, R_3 = R_4 = OH$; Phanginin F



DS7: $R = OH$; Phanginin G

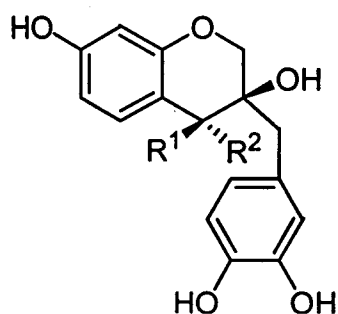
DS8: $R = H$; Phanginin H



DS9: $R = Me$; Phanginin I

DS10: $R = CHO$; Phanginin J

DS11: $R = CO_2Me$; Phanginin K

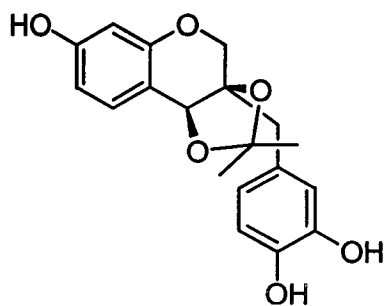


DH1: $R_1 = R_2 = =O$; 3-(3',4'-Dihydroxybenzyl)-7-hydroxychroman-4-one

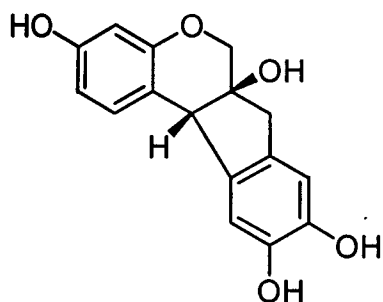
MR1: $R_1 = H, R_2 = OH$; Episappanol

DH2: $R_1 = H, R_2 = OMe$; 4-*O*-Methylepisappanol

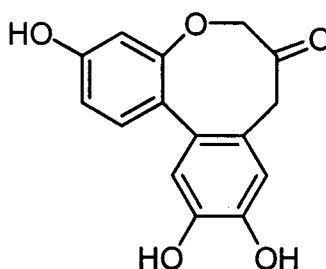
DH3: $R_1 = OMe, R_2 = H$; 4-*O*-Methylsappanol



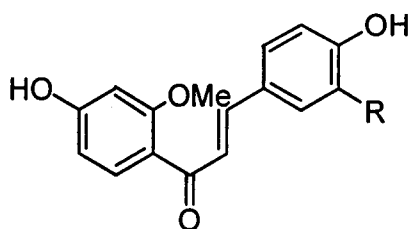
DH4: 3,4-Isopropylidene sapanol



DH5: Brazilin



DH6: Protosappannin A



MR2: R = H; 3-Deoxysappanchalcone

MR3: R = OH; Sappanchalcone

| | |
|----------------------|--|
| Thesis Title | Chemical Constituents from Seeds, Roots and Heartwood of <i>Caesalpinia sappan</i> |
| Author | Miss Orapun Yodsaoue |
| Major Program | Organic Chemistry |
| Academic Year | 2007 |

ABSTRACT

Investigation of the chemical constituents from seeds, roots and heartwood of *Caesalpinia sappan* has led to the isolation of eleven new cassane-type diterpenes phanginin A-K (**DS1- DS11**) which were obtained from the seeds, together with nine previously reported compounds: seven homoisoflavones [3-(3',4'-dihydroxybenzyl)-7-hydroxychroman-4-one (**DH1**), 4-*O*-methylepisappanol (**DH2**), 4-*O*-methylsappanol (**DH3**), 3,4-isopropylidene sappanol (**DH4**), brazilin (**DH5**), protosappannin A (**DH6**) and episappanol (**MR1**)] and two chalcones [3-deoxysappanchalcone (**MR2**) and sappanchalcone (**MR3**)] were isolated from the roots and heartwood. It was found that **MR3** possessed the most potent effect against allergic reaction in RBL-2H3 cells with an IC_{50} value of 7.6 μM , followed by **MR2** ($IC_{50} = 15.3 \mu M$). Only one compound (**MR3**) demonstrated significant inhibitory activity against MCF-7 (breast adenocarcinoma), KB (human oral cancer), HeLa (Human cervical cancer) and HT-29 (colon cancer) cell lines with IC_{50} values of 0.64, 0.72, 0.80 and 0.75 $\mu g/ml$, respectively. Their structures were elucidated by spectroscopic methods. The structure of **DS1** was additionally confirmed by X-ray diffraction technique.