

## NOTIZEN

**Kämpferol-3-(O-sinapoylsophorosid)-7-glucosid,  
ein neues Flavonoid aus *Brassica napus* L.  
(Cruciferae)**

Kaempferole-3-(O-sinapoylsophoroside)-7-glucoside,  
a New Flavonoid from *Brassica napus* L.  
(Cruciferae)

Brigitte Stengel \* und Hans Geiger

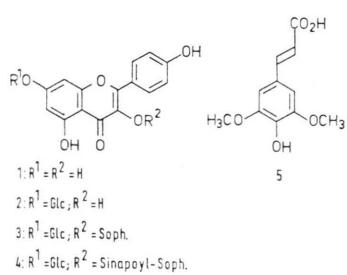
Institut für Chemie der Universität Hohenheim, Stuttgart

(Z. Naturforsch. 31c, 622–623 [1976]; eingegangen  
am 13. Juli 1976)

*Brassica napus* L., Cruciferae, Kaempferole-3-(O-sinapoylsophoroside)-7-glucoside, Flavonoids, Acylated Glycosides

Along with kaempferole-3-sophoroside and some minor flavonoids the hitherto unknown kaempferole-3-(O-sinapoylsophoroside)-7-glucoside has been isolated from the seed of *Brassica napus* L. c. v. Petranova; its structure is prooved.

Bei der Identifizierung von Samen der ökonomisch wichtigen *Brassica*-Arten stellt die Dünnenschichtchromatographie eine wertvolle Ergänzung der anatomisch-mikroskopischen Untersuchung dar<sup>1</sup>. In einer Arbeit über die Flavonoidausstattung verschiedener *Brassica*- und *Sinapis*-Arten wird für verschiedene *B. napus* L. Cultivars Kämpferol-3-sophorosid-7-glucosid (3) als Hauptflavonoid angegeben<sup>2</sup>. Untersucht man aber *B. napus* L. nach der l. c.<sup>1</sup> angegebenen Methode, so beobachtet man stets ein weiteres Flavonoid, das einen höheren *R<sub>F</sub>*-Wert besitzt als 3<sup>3</sup>. Im Folgenden soll über die Isolierung und Identifizierung dieser bislang unbekannten Flavonoids – Kämpferol-3-(O-sinapoylsophorosid)-7-glucosid (4) – berichtet werden.



\* Aus der Zulassungsarbeit von cand. rer. nat. B. Stengel, Hohenheim, 1975.

Sonderdruckanforderungen an Prof. Dr. H. Geiger, Chemisches Institut der Universität Hohenheim, Postfach 50, D-7000 Stuttgart-Hohenheim.

Die Isolierung von 3 und 4 erfolgte in Anlehnung an früher beschriebene Methoden<sup>4–6</sup>, 1 kg gemahlene Samen von *Brassica napus* L. c. v. Petranova wurden mit Petroläther entfettet und bei Raumtemperatur mit 90-prozentigem Methanol erschöpfend extrahiert. Nach dem Entfernen des Lösungsmittels wurde wie l. c.<sup>4</sup> beschrieben auf eine Säule von Polyamid 6 gegeben und mit Wasser, dem steigende Mengen Methanol zugefügt wurden, erst 3 und dann 4 eluiert. Die 3 bzw. 4 enthaltenden Fraktionen wurden auf ein kleines Volumen eingeengt und zum Ausfällen der Sinapiniumionen mit festem NH<sub>4</sub>SCN versetzt. Hernach wurde überschüssiges NH<sub>4</sub>SCN durch nochmalige Chromatographie über Polyamid 6 abgetrennt. Die weitere Reinigung erfolgte über Säulen von Sephadex LH 20 (Eluens Wasser/Athanol 1:5 bzw. 1:1) und Polyvinylpyrrolidon (Eluens Wasser/Methanol 1:9 bzw. 1:1). Schließlich wurden erhalten:

81 mg Kämpferol-3-sophorosid-7-glucosid (3).

Aus Methanol/Wasser (1:6) gelbe kugelige Kristallaggregate, die nach Schmelzpunkt und Mischschmelzpunkt (206–210 °C), IR-Spektrum und chromatographischem Verhalten identisch sind mit einem Präparat aus *Equisetum hyemale* L.<sup>7</sup>;

188 mg Kämpferol-3-(O-Sinapoyl-sophorosid)-7-glucosid (4).

Aus Methanol/Wasser (1:1) gelbe, glänzende Nadelchen vom Schmelzpunkt 220–225 °C, die 3 mol chlatratartig gebundenen Sauerstoff<sup>6</sup> enthalten.

C<sub>44</sub>H<sub>50</sub>O<sub>25</sub>·3 O<sub>2</sub> (1074,9)

Ber.: C 49,17 H 4,69;  
Gef.: C 48,93 H 4,90.

Im Felddesorptions-Massenspektrum von 4 findet man folgende Ionen: 978 m/e (Molekülionen), 530 m/e (Sinapoylsophorose – H<sub>2</sub>O) und 448 m/e (Kämpferol-7-glucosid). Entsprechende Spaltungen glykosidischer Bindungen sind auch schon bei der Massenspektrometrie permethylierter Flavonolglykoxide beobachtet worden<sup>8</sup>.

Die vorsichtige alkalische Hydrolyse (0,4-prozentige NaOH einige min bei 70 °C) von 4 liefert 3 und Sinapinsäure (5). Bei der sauren Partialhydrolyse (1-prozentige HCl 2 h bei 70 °C) von 4 entstehen hauptsächlich Kämpferol-7-glucosid (2) und



ein Zuckerester von **5**; Kämpferol (**1**), **5** und Glucose entstehen daneben nur spurenweise. Mit diesen Befunden ist nur die angegebene Konstitution von **4** verträglich, jedoch gestatten sie keine Aussage über den Ort der Bindung zwischen Sophorose und Sina-

pinsäure. Die Klärung dieser Frage ist Gegenstand weiterer Untersuchungen.

Herrn G. Swinger danken wir für die Aufnahme der F.D.-Massenspektren. Dem Fonds der Chemischen Industrie danken wir für die Gewährung von Sachmitteln.

<sup>1</sup> K. W. Perino, Z. für landwirtschaftl. Forschung **25**, 272 [1972].

<sup>2</sup> A. B. Durkee u. J. B. Harborne, Phytochemistry **12**, 1085 [1973].

<sup>3</sup> K. W. Perino, Privat-Mitteilung.

<sup>4</sup> S. Beckmann u. H. Geiger, Phytochemistry **7**, 1667 [1968].

<sup>5</sup> H. Geiger u. B. Krumbein, Z. Naturforsch. **28c**, 773 [1973].

<sup>6</sup> H. F. Aly, H. Geiger, U. Schücker, H. Waldrum, G. Van der Velde u. T. J. Mabry, Phytochemistry **14**, 1613 [1975].

<sup>7</sup> S. Reichert u. H. Geiger, unveröffentlicht.

<sup>8</sup> T. J. Mabry u. K. R. Markham, Mass Spectrometry of Flavonoids, in: The Flavonoids (Hrsg. J. B. Harborne, T. J. Mabry u. H. Mabry), London 1975.