

A Novel C21 Steroidal Glycoside from *Cynanchum atratum*

Yujie WU¹, Liman QIAO¹, Hongwei LIU^{2*}, & Shu LIN^{1*}

¹ The Second Affiliated Hospital and Yuying Children's Hospital of Wenzhou Medical University,
Wenzhou, 325027, China

² Cancer Hospital of China Medical University,
Shenyang, 110042, China

SUMMARY. *Cynanchum atratum*, commonly called 'BaiWei', is an important ancient herbal medicine widely used in China to control hyperthermia and treat hemostasis. Steroidal glycoside with deoxysugars has been characterized in the plants of the genus *Cynanchum*. In this study, 10 kg of dried *C. atratum* were extracted with 70% alcohol-water solution under reflux and the extract was suspended in H₂O and partitioned into petroleum ether, ethyl acetate and N-butyl alcohol, successively. Ethyl acetate extract was then subjected to silica gel column, sephadex LH-20, ODS and HPLC chromatography to isolate one new C21 steroid glycoside. The new compound was identified as cynaascyriogenin 3-O-β-D-glucopyranosyl-(1→6)-β-D-glucopyranosyl-(1→4)-α-L-cymaropyranosyl-(1→4)-β-D-digitoxopyranosyl-(1→4)-β-D-cymaropyranoside by intensive analysis of various spectral data, including those from 1D, 2D NMR and MS spectrums. The cytotoxic activities of the new compound on A549, HeLa and HepG2 cell lines was found to have IC₅₀ values of 50.7, 62.4 and 47.3 μM, respectively. This is the first report of the novel compound with cytotoxicity from *C. atratum*, which could be used as a lead compound and quality control compound for the pharmaceutical research.

RESUMEN. *Cynanchum atratum*, comúnmente llamado 'BaiWei', es una importante medicina herbal antigua ampliamente utilizada en China para controlar la hipertermia y tratar la hemostasia. Un glucósido esteroideo con desoxiazúcares se ha caracterizado en las plantas del género *Cynanchum*. En este estudio, se extrajeron 10 kg de *C. atratum* seco con solución de alcohol al 70% en agua a reflujo y el extracto se suspendió en H₂O y se repartió sucesivamente en éter de petróleo, acetato de etilo y alcohol N-butílico. El extracto de acetato de etilo se sometió después a columna de gel de sílice, Sephadex LH-20, ODS y cromatografía HPLC para aislar un nuevo glucósido esteroideo C21. El nuevo compuesto fue identificado como cynaascyriogenina 3-O-β-D-glucopiranosil-(1→6)-β-D-glucopiranosil-(1→4)-α-L-cymaropyranosil-(1→4)-β-D-digitoxopyranosil-(1→4)-β-D-cymaropiranosido mediante análisis intensivo de diversos datos espectrales, incluidos los de 1D, 2D NMR y espectros de MS. Se encontró que las actividades citotóxicas del nuevo compuesto en las líneas celulares A549, HeLa y HepG2 tenían valores de IC₅₀ de 50.7, 62.4 y 47.3 μM, respectivamente. Este es el primer informe del nuevo compuesto con citotoxicidad de *C. atratum*, que podría usarse como compuesto líder y compuesto de control de calidad para la investigación farmacéutica.

KEY WORDS: C21 steroids, cytotoxicity, *Cynanchum atratum*, deoxysugars, nuclear magnetic resonance.

* Authors to whom correspondence should be addressed. E-mails: shulin0577@163.com (Shu Lin), liuhw024@163.com (Hongwei Liu)