

**TIGA SENYAWA BARU CASSANE FURANO DI TERPENE
HASIL ISOLASI DARI DAGING BIJI BAGORE (*Caesalpinia crista*, L),
ASAL SULAWESI SELATAN SEBAGAI BAHAN DASAR OBAT
ANTIMALARIA.**

Faisal Attamimi¹

ABSTRACT

Three novel cassane type furano diterpenes were isolated from a dichloromethane extract of the seed kernels of Bagore (*Caesalpinia crista*) from South Sulawesi together with several known cassane furano diterpenes. All the new compounds represent unprecedented carbon framework. Norhastoypin A (1) and B (2) had 17-norcassane skeleton, while norhastoypin C (3) has 16-norcassane skeleton. Their structure were elucidated on the basis of special analyses. Antimalarial activity observed by suppression effect on the growth of parasitemia. Ten mg and 100 mg extract had suppression effect more than 80%.

Key words: novel cassane furano diterpene, norhastoypin A, B and C, *Caesalpinia crista*, antimalarial, suppression effect, parasitemia.

PENDAHULUAN

Tumbuhan obat di Indonesia jumlahnya cukup melimpah, baru sebagian kecil yang telah diteliti orang, namun sudah banyak yang digunakan dalam pengobatan tradisional. Oleh karena data ilmiah tumbuhan obat tersebut belum diketahui dengan jelas serta efikasinya sebagai obat belum terbukti secara merata, maka hingga sekarang belum dapat diterima dalam pengobatan modern (Zubaidi, 1990). Untuk dapat diterima dengan baik dalam pengobatan modern, maka beberapa persyaratan harus dapat dipenuhi terutama adalah pengetahuan tentang kandungan zat aktifnya sehingga selain khasiat juga tingkat keamanannya dapat diprediksi dengan mudah. Salah satu tumbuhan obat yang banyak digunakan di Sulawesi Selatan dan di beberapa daerah lainnya sebagai obat antimalaria dan antidiabetik adalah Bagore (*Caesalpinia crista*, L).

¹Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Hasanuddin

Bagore merupakan tumbuhan yang berasal dari India, Indonesia dan Amerika, banyak ditemukan di daerah pantai. Bagian tumbuhan yang digunakan adalah daging bijinya sebagai obat cacing, tonikum, kejang perut, obat batuk, antipiretika dan pengganti kina (Heyne, 1950). Rasanya pahit. Telah dilaporkan bahwa kandungan zat aktifnya adalah glikosida gilandin, bonduselin, asam palmitat, asam linoleat, asam oksalat, asam oleat dan asam-asam amino (Heyne, 1950 dan Anonim, 1955).

Dalam upaya menemukan obat antimalaria yang berasal dari tumbuhan, telah diamati bahwa ekstrak diklorometan dari daging biji Bagore mempunyai daya hambat yang bermakna terhadap parasitemia pada mencit yang telah diinfeksi dengan *Plasmodium berghei*. Selanjutnya penelitian ini bertujuan untuk mengisolasi dan mengidentifikasi senyawa murni yang terkandung dalam biji Bagore yang kemungkinannya mempunyai aktifitas antimalaria.

METODE

Bahan

Bahan (simplisia) berupa daging biji (seed kernels) diperoleh dari buah tumbuhan Bagore (*Caesalpinia crista*, L). Tumbuhan ini terdapat di sepanjang pantai Kabupaten Polewali-Mamasa (Sulawesi selatan) dan di beberapa daerah Indonesia lainnya. Cairan pengekstraksi dan pengisolasi digunakan metanol, petroleum eter, heksan, benzen, diklorometan, etilasetat dan kloroform, sedangkan sebagai pelarut untuk elusidasi struktur adalah deutriumkloroform (CDCl_3). Kromatografi lapis tipis silika gel dan kolom digunakan untuk pemurnian senyawa.

Alat

Seperangkat alat ekstraksi, rotavapor, penegring vakum dan blender yang tersedia pada laboratorium Fitokimia Jur. Farmasi Fak. MIPA Universitas Hasanuddin dan pada Laboratorium Kimia dari Institute of Natural Product, Toyama Medical and Pharmaceutical University (TMPU), Toyama, Jepang. Isolasi menggunakan kolom dengan garis tengah 9 cm dan panjang 45 cm, dan beberapa kolom kecil lainnya serta lempeng kromatografi lapis tipis (KLT) dan lempeng kromatografi lapis tipis preparatif (KLTP). Elusidasi struktur menggunakan Nuclear Magnetic Resonansi (NMR) JEOL JNM LA-400-

spectrometer dengan tetrametilsilan (TMS) sebagai baku internal (McMurry, 1992) dan High Resolution Fast Atom Bombardment Mass Spectrometry (HRFABMS) dari TPU.

Cara kerja

Penyiapan bahan

Bahan berupa daging biji Bagore, diserbukkan menggunakan lumpang besi sehingga diperoleh kurang lebih 1 kg simplisia, berupa serbuk kasar. Isi bijinya yang sudah diserbukkan ini dimasukkan ke dalam perkolator.

Ekstraksi

Ada dua cara ekstraksi yang dilakukan yaitu pertama dengan menghilangkan kandungan lemak yang terdapat dalam bahan, dengan menggunakan petroleum eter. Cara kedua bahan langsung direndam dengan diklorometan.

Ekstraksi dengan Petroleum eter dan Metanol.

Bahan direndam dengan pelarut petroleum eter selama 1 (satu) malam di dalam perkolator, kemudian pelarutnya dikeluarkan semuanya dan diperiksa kandungan lemaknya. Perendaman masih dilanjutkan sampai pelarut yang keluar bebas lemak. Ekstraksi dilanjutkan dengan menambahkan metanol ke dalam bahan kemudian direfluks selama 3 x 3jam (Harborne, JB, 1996). Ekstrak metanol yang dihasilkan diperiksa pada lempeng KLT dengan menggunakan beberapa campuran eluen sehingga didapatkan pemisahan senyawa berupa noda-noda tunggal yang bersih, baik yang dapat dilihat dengan menggunakan lampu ultraviolet maupun dengan penyemprotan larutan penampak noda (1% CeSO_4 dalam 10% H_2SO_4). Isolasi dan pemurnian senyawa dilakukan dengan menggunakan KLTP fase normal.

Cara ekstraksi langsung.

Serbuk Bagore yang diperoleh, direndam dengan diklorometan selama 3 malam dan setiap hari cairannya ditampung dan dikeringkan secara dingin dengan menggunakan vakum destillator pada suhu berkisar antara -11°C sampai -15°C , agar penguapan dan reaksi dengan pelarut dapat dihindari. Destilat yang diperoleh dikumpulkan kemudian dikeringkan dengan pengering hampa, kemudian ditimbang dan dilakukan langkah – langkah identifikasi sebagaimana pada cara yang pertama di atas.

Isolasi

Ekstrak yang diperoleh dimasukkan ke dalam kolom yang telah berisi silika gel, kemudian ditambahkan cairan pengelusi. Fraksi-fraksi yang dihasilkan masing-masing diperiksa jenis nodanya, yang Rf nodanya sama disatukan. Fraksi yang menghasilkan noda tunggal diperiksa kembali dengan menggunakan KLTP, hasil KLTP ini diambil dan dilakukan reisolasi. Senyawa murni hasil reisolasi dilarutkan dalam pelarut yang sesuai kemudian dikeringkan pada pengering vakum, sehingga benar-benar sudah tidak mengandung cairan lagi.

Elusidasi struktur

Senyawa murni yang telah dikeringkan, dilarutkan ke dalam pelarut NMR yang sesuai, masukkan ke dalam tabung NMR, dan tabung dimasukkan ke dalam instrumen NMR, dilakukan pemeriksaan terhadap jumlah dan letak proton dan karbon yang terdapat pada struktur, juga melihat korelasi antara proton – proton dan proton – karbon (HMQC dan HMBC) dengan menggunakan NMR spektrometer.

Untuk mempertegas hasil elusidasi struktur yang telah diperoleh maka dilakukan pemeriksaan bobot molekul senyawa menggunakan HRFABMS. Data tambahan diperoleh melalui pemeriksaan infra merah, untuk mengetahui gugus fungsionalnya.

Uji aktifitas antimalaria ekstrak secara in vivo.

Digunakan mencit jantan strain BALBC umur antara 8 – 12 minggu, bobot rata-rata antara 25 – 28 g. Mencit diinfeksi secara intraperitoneal dengan *Plasmodium berghei* yang diperoleh dari lembaga Eijkman Jakarta. Parasitemia diukur setiap hari dan pada saat parasitemia mencapai 1 – 2% (H-0), pemberian ekstrak dimulai, selama 5 hari (H-4). Mencit dibagi atas 5 kelompok masing-masing 5 ekor/kelompok. Kelompok I diberi larutan CMC 1%, kelompok II, III, IV diberi larutan ekstrak dalam CMC 1% peroral masing-masing 0,2 ml dengan konsentrasi 1 mg, 10 mg, dan 100 mg/kg bobot mencit. Kelompok V diberi artemisinin 10 mg/kg sebanyak 0,2 ml/CMC 1%. Pemeriksaan parasitemia dilakukan setiap hari sampai H-4.

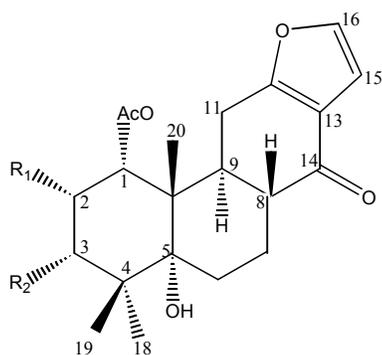
HASIL DAN PEMBAHASAN

Ekstrak metanol yang penyariannya menggunakan refluks, ternyata pada pengerjaan lebih lanjut dari fraksi-fraksi yang dihasilkan, sulit memperoleh senyawa murni (banyak pengotoran), hanya satu fraksi yang dapat menghasilkan senyawa murni (Hastopyin A), hal ini disebabkan oleh adanya pemanasan sehingga terjadi reaksi antara

pelarut dengan sebagian senyawa, selain itu kemungkinan pula ada senyawa yang terikut pada fasa lemak. Senyawa-senyawa yang diperoleh sebagai hasil elusidasi struktur adalah sbb:

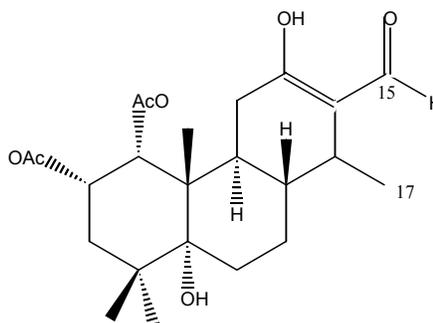
Norhastoypin A (1),

Rumus molekulnya berdasarkan HRFABMS adalah $C_{23}H_{30}O_7$, merupakan isolat yang berbentuk padat amorf tidak berwarna. Pada infra merah spektrofotometer memberikan absorban pada 3625 cm^{-1} dan 1735 cm^{-1} , menunjukkan adanya gugus karbonil dan hidroksil. Spektra ^1H NMR menunjukkan adanya metil tertier, dua meten tersubstitusi oksigen, dua meten alifatik bersama dua proton cincin furan 1,2-disubstitusi (δ 7.29, 6.63) dan dua metilasetil. Selanjutnya spektra ^{13}C NMR



1 $R_1 = \text{OAc}$, $R_2 = \text{H}$
2 $R_1 = \text{H}$, $R_2 = \text{OAc}$

Gambar 1.a



3

Gambar 1.b

Menunjukkan adanya karbonil karbon keton (δ 169.3, 21.1; 170.3, 20.29), empat karbon olefenik (δ 165.4, 142.2, 119.9, 106.5) dan tiga karbon oksigen substitusi (δ 74.5, 67.3, 76.4) bersama dua ester karbon karbonil. Kecuali untuk dua gugus asetil (δ 169.3, 21.1; 170.3, 20.9), kerangka karbon senyawa ini memiliki sinyal karbon 19 menunjukkan dia adalah norditerpen.

Sebagian dari struktur disimpulkan melalui spektra COSY dan HMQC yang didasari oleh hubungan jarak jauh (long range correlations) pada pengamatan spektra HMBC (gbr 1a) Proton metil pada δ 1.30 (H_3 -20) terlihat korelasi HMBC dengan dua karbon meten pada δ 74.5 (C-1) dan 40.0 (-9) dan dua karbon kuarterner pada δ 45.0 (C-10) dan 76.4 (C-5),

menunjukkan bahwa karbon, C-1, C-5 dan C-9, dan gugus metil (C-20) dapat dihubungkan dengan karbon kuarterner C-10. Selanjutnya, proton metil pada δ 1.10 (H₃-18) menunjukkan korelasi jarak jauh dengan karbon pada δ 28.0 (C-19), 76.4 (C-5), 40.1 (C-4) dan 35.7 (C-3), dan proton pada δ 1.19 (H₃-19) dengan karbon pada δ 25.4 (C-18), C-3, C-4 dan C-5. Jadi karbon C-3, C-5, C-18 dan C-19 berhubungan dengan karbon kuarterner C-4. Selanjutnya, hubungan C-13 (δ 119.9) dan C-11 (δ 22.9) dengan karbon olefenik tersubstitusi oleh oksigen C-12 (δ 165.4) diperoleh atas dasar korelasi HMBC antara proton metilen (H₂-11) dan karbon C-13. Demikian juga, hubungan antara C-15 (δ 106.5) dan C-13 diperoleh atas dasar korelasi HMBC antara H-15 dan C-13. Ikatan eter antara C-16 (δ 142.9) dan C-12 (δ 165.4) terdapat cincin furan, terkonfirmasi oleh pengamatan pada korelasi jarak jauh antara H-16 dan C-12.. Korelasi HMBC antara dua proton meten pada δ 2.37 (H-8) dan δ 2.97 (H-9) dengan karbon karbonil keton pada δ 195.2 menunjukkan bahwa karbonil keton adalah C-14. Maka sesuai dengan hal tersebut, semua 19 karbon dalam inti skeleton telah tergambar, yang mana satu karbon (C-17 terikat pada C-14) kurang dari cassane diterpene. Jadi Senyawa **1** adalah 17-norcassane-type diterpene. Lokasi dua gugus asetil ditetapkan pada C-1 dan C-2, karena korelasi jarak jauh karbon ester karbonil pada δ 169.3 (1-OCO-) dengan proton pada 5.29 (H-1) dan ester karbon karbonil pada δ 2.15(1 -OCOCH₃) dan 5.29 (H-1) dan ester karbon karbonil pada δ 170.3 (2-OCO-) dengan proton pada δ 1.99 (2-OCOCH₃) dan 5.35 (H-2).

Stereokimia relatif dari senyawa **1** ditetapkan pada basis kopling konstan dan menghasilkan perbedaan NOE eksperimen (gbr 1 b). Besarnya nilai J untuk H-2 ($J_{2,3ax} = 13$ Hz) menunjukkan bahwa H-2 berupa aksial, sedangkan nilai kecil J untuk H-1 (2.2 Hz) adalah ekuatorial. Di dalam perbedaan eksperimen NOE sorotan proton metil pada Stereokimia relatif dari senyawa **1** ditetapkan pada basis kopling konstan dan menghasilkan perbedaan NOE eksperimen (gbr 1 b). Besarnya nilai J untuk H-2 ($J_{2,3ax} = 13$ Hz) menunjukkan bahwa H-2 berupa aksial, sedangkan nilai kecil J untuk H-1 (2.2 Hz) adalah ekuatorial. Di dalam selisih eksperimen NOE sorotan proton metil pada δ 1.30 (H₃-20) menyebabkan NOE meningkat pada H-1, H-2, H-6_{ax}, H-8 dan

H₃ -19 Korelasi ini menunjukkan bahwa semua proton H-1, H-2, H-6_{ax}, H-8, H₃-19, H₃-20 ada pada posisi β dalam cincin A dan B dalam konformasi kursi. Selanjutnya korelasi NOE antara H-1 dan H-11_{eq} dan antara H₃-20 dan H-11_{ax}, bersama dengan pemerisaan model

Dreiding, menyarankan bahwa cincin C adalah konformasi kapal. Jadi stereostruktur norhastoypin A adalah senyawa **1**.

Norhastoypin B (2),

Rumus molekulnya sama dengan Senyawa **1**, $C_{23}H_{30}O_7$, isolat yang tidak berwarna, padat amorf. Spektra 1H dan ^{13}C NMR (Tabel 1) senyawa **2** identik dengan **1** kecuali perbedaan pada posisi gugus asetil. Kedua proton meten substitusi oksigen senyawa **2** pada δ 4.95 dan 4.92 sebagai pengganti δ 5.35 dan 5.29 pada senyawa **1**. Korelasi COSY dua proton meten ini dengan gugus metilen yang sama (H_2-2) menyarankan bahwa gugus asetil di senyawa **2** adalah pada C-1 dan C-3 sebagai pengganti C-1 dan C-2 di senyawa **1**. Nilai J kecil kedua proton meten ($H-1:t, J = 3.2$ Hz; $H-3: t, J = 2.8$ Hz) menunjukkan mereka adalah equatorial dan sisanya adalah sama dengan senyawa **1**. Berdasarkan fakta tersebut, struktur norhastoypin B ditetapkan adalah **2**.

Norhastoypin C (3),

Juga didapatkan sebagai zat padat amorf tidak berwarna. Spektrum Infra merah menunjukkan adanya gugus hidroksil (3575 cm^{-1}) dan karbonil (1785 cm^{-1}) secara fungsional (Linn, 2003) Rumus molekulnya ditetapkan sama dengan senyawa **1** dan **2**, yaitu $C_{23}H_{30}O_7$ oleh HRFABMS. Spektrum 1H NMR dapat dilihat pada tabel 1 menggambarkan adanya metil tertier, dua metil asetil, sebuah aldehid (δ 10.38), sebuah olefin (δ 6.55). dua hidroksil (δ 11.75, 3.07) dan tiga metil. Spektrum ^{13}C NMR menunjukkan hubungan 23 karbon termasuk karbon aldehid (δ 195.1), dua ester karbon karbonil (δ 170.5, 169.0), enam karbon olefenik (δ 161.3, 153.4, 140.2, 125.7, 117.2, 110.9) dan tiga karbon oksigen substitusi (δ 74.2, 67.5, 75.2). Kerangka karbon inti juga hanya memiliki 19 karbon menunjukkan dia juga adalah norditerpene. Data 1H NMR dan ^{13}C NMR adalah mirip dengan 2-acetoxy-3-deacetoxycaesaldeka -rin e (Balmain, A., 1967), kecuali oleh adanya gugus aldehid (δ_H 10.38, δ_C 195.1) sebagai pengganti dua proton furan 1,2-disubstitusi. Proton aldehid (δ 10.38) ditunjukkan oleh korelasi HMBC dengan dua karbon olefenik pada δ 161.3 (C-12) dan 117.2 (C-13) (gbr 2a), menunjukkan karbon aldehid dihubungkan dengan karbon olefenik (C-13). Selanjutnya, proton metil

pada δ 2.46 (H₃-17) menunjukkan korelasi HMBC dengan tiga karbon olefenik pada δ 125.7 (C-8), 140.2 (C-14) dan 117.2 (C-13), dan mendapatkan bahwa karbon C-8 dan C-13 dan gugus metil (C-17) berhubungan dengan karbon kuartener C-14. Korelasi HMBC proton hidroksil pada δ 11.75 (12-OH) dengan karbon pada δ 110.9 (C-11) dan C-12 dan C-13 diperoleh bahwa gugus hidroksil ditempatkan pada C-12. Jadi, senyawa **3** ditetapkan sebagai 16-norcassane-diterpen.

Aktifitas antimalaria

Aktifitas antimalaria diamati dari kemampuan ekstrak menekan pertumbuhan *plasmodium berghei* di dalam sel darah merah mencit (parasitemia) atau efek supresi. Efek supresi ini yang dinyatakan dalam dosis supresi dapat dihitung dari rata-rata pertumbuhan parasitemia pada perlakuan kontrol dikurangi dengan rata-rata pertumbuhan parasitemia dari masing-masing konsentrasi ekstrak yang diberikan dibagi dengan rata-rata pertumbuhan kontrol dikali dengan 100%, sehingga diperoleh angka-angka sbb:

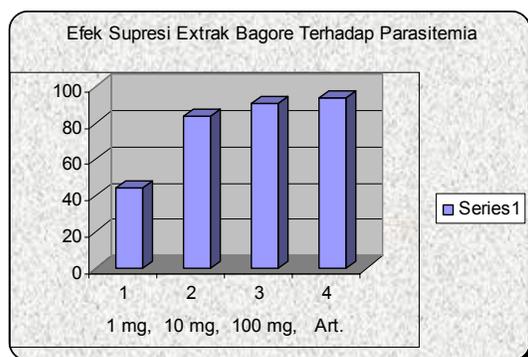
Tabel 1. Rata-rata pertumbuhan parasitemia (%) pada H-3.

Kontrol (%)	Ekstrak 1 mg/kg bb	Ekstrak 10 mg/kg bb	Ekstrak 100 mg/kg bb	Artemisinin 10 mg/kg bb
25,146	14,116	3,986	2,368	1,634

Tabel 2. Efek supresi dari masing-masing konsentrasi

Ekstrak 1mg/kg	Ekstrak 10mg/kg	Ekstrak 100mg/kg	Artemisinin 10mg/kg
43,8%	84,1%	90,8%	93,8%

Dari Tabel 1 dan Tabel 2 di atas terlihat bahwa pemberian ekstrak Bagore 10 mg/kg bb dan 100 mg/kg berpengaruh cukup efektif terhadap pertumbuhan *plasmodium*, bahkan pengaruhnya hampir menyamai Artemisinin 10 mg/kg, sedangkan ekstrak dengan konsentrasi 1 mg/kg efek supresinya tidak cukup 50%, artinya dengan pemberian ekstrak dengan konsentrasi yang rendah masih memungkinkan terjadinya pertumbuhan *plasmodium*. Untuk jelasnya dapat dilihat pada grafik berikut:



Gambar 2. Efek Supresi Ekstrak Bagore Terhadap Parasitemia

KESIMPULAN

1. Norhastoypin A, B dan C merupakan senyawa-senyawa baru yang berhasil diisolasi dari Ekstrak Biji Bagore (*Caesalpinia crista*, l). Ketiga senyawa ini merupakan isomer satu dengan lainnya.
2. Norhastoypin A dan B merupakan skeleton dengan 17 norcassane, sedangkan norhastoypin C merupakan skeleton dengan 16-norcassane.
3. Ekstrak Bagore ini mempunyai aktifitas antimalaria yang cukup berarti (efek supresi di atas 80%) pada konsentrasi 10 mg dan 100 mg/kg bobot mencit dalam waktu singkat 3 hari.

Ucapan terima kasih.

Penelitian ini dapat berhasil dengan baik oleh adanya dukungan dari berbagai pihak, utamanya dari Yayasan Heiwa terutama Dr Hayashi dan Prof. DR Chaeruddin Rasyad dan Toyama Medical and Pharmaceutical University, Toyama, Jepang, yang telah menyiapkan sarana dan prasarana yang diperlukan dalam penelitian ini. Juga terima kasih kepada Lembaga Eijkman Jakarta yang telah menyiapkan *plasmodium berghei*.

Penelitian ini merupakan bagian dari Disertasi Doktor penulis dari program Ilmu Kimia Program Pascasarjana UNHAS.

REFERENSI

- Anonim, 1995: "Medicinal Herb Index in Indonesia", 2nd Edition, PT Eisai Indonesia, Jakarta.
- Balmain, A.;Bjamer,K.;Conolly,J. D.; Fergusson, G. (1967) *Tetrahedron Lett.*, 5027-5031.
- Chamberlain, Nugent F (1974): *The Practice of NMR Spectroscopy with Spectra-Structure Correlations for Hydrogen-1*"; Plenum Press, New York and London.
- Darise, M dan S.Wiryowidagdo (1999):"Perkembangan Penemuan Obat Dari Bahan Alam Sampai Farmakobioteknologi", Makalah disampaikan pada seminar sehari Pengembangan Pendidikan Farmasi di Ujungpandang (29 Mei 1999).
- Harborne, J.B. (1996): "Metode Fitokimia", Penuntun cara modern menganalisis tumbuhan, Terbitan kedua, ITB Bandung.
- Heyne, K (1987):"Tumbuhan Berguna Indonesia III", jilid III, Badan Litbang Kehutanan, Jakarta.
- Kitagawa, Isao, Partomuan Simanjuntak, Taifo Mahmud, Motomasa Kobayashi, Satoshi Fujii, Tahan Uji, and Hirotaka Shibuya, (1996): "Indonesian Medicinal Plants. XIII, Chemical Structures of Caesaldehydins c, d, and e, Three Additional Cassane-Type Furanoditerpenes from Roots of *Caesalpinia major* (Fabaceae). Several Interesting Reaction Products of Caesaldehydin a Provided by N-Bromosuccinimide Treatment,"; *Chem.Pharm.Bull.* 44 (6) p,1157-1161.
- McMurry, John. (1992),:"Organic chemistry", third ed, Cornell University, Brooks/Cole Publishing Company, California.
- Murakami, Nobutoshi,;Masanori Sugimoto;Motoyuki Kawanishi, Satoru Tamura, Hye-Sook Kim, Khurshida Begum, Yusuke Wataya and Motomasa Kobayashi (2003),:"New Semisynthetic Quassinoids with in Vivo Antimalarial Activity", *J.Med.Chem.* 46, 638-641.
- Linn, T Z.; Faisal Attamimi.; Tepy Usia.; A. H Banskota,.; Tezuka, Y.; Shigetoshi Kadota, (2003).:"Novel cassane and norcassane-type diterpenes from the seed kernels of *Caesalpinia crista*."; Abstrak book, 26th annual meeting of the Pharmaceutical Society of Japan; March 27-29, 2003, Nagasaki,Japan; Abstract 27 [P1] I-219.
- Pascoe, Keith O; Basil A.Burke; Wilfred R Chan (1986):"Caesalpin F: A new Furanoditerpene From *Caesalpinia Bonducella*"; *Journal of Natural Products* 49 (5) ,p.913-915.
- Peter, Sonia R, Winston F Tinto, Stewart McLean, William F Reynolds, and Margareth Yu (1997): "Bonducellins A-D, New Cassane Furanoditerpenes of *Caesalpinia bonducella*"; *Journal of Natural Products*, 60 (12), p.1219-1221.

LAMPIRANTabel 3. Data ^1H NMR dalam CDCl_3 .

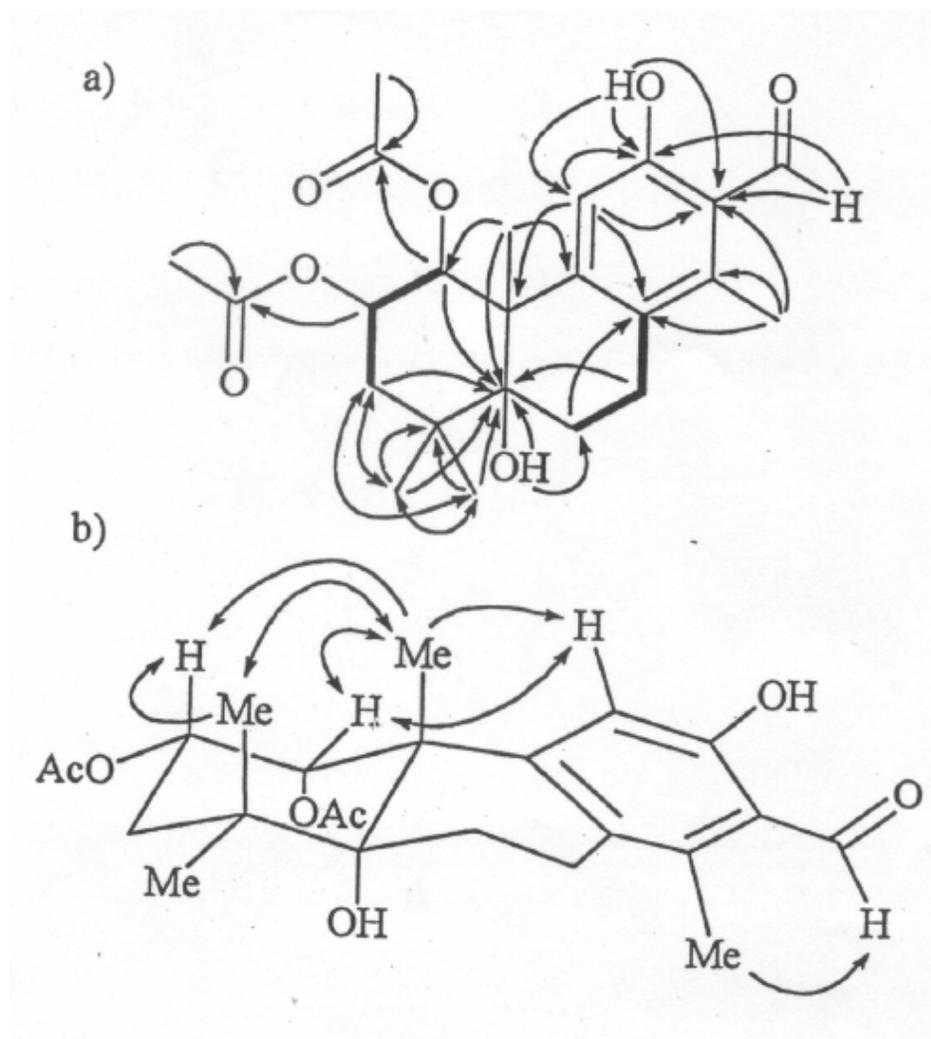
Nomor	1	2	3
1	5.29 d (2.2)	4.92 t (3.2)	5.91 d (2.4)
2 α	-	2.14 m	-
2 β	5.35 ddd (13,4.8,2.2)	2.33 m	5.45 ddd (13,4.6,2.4)
3 α	2.03 m	-	2.14 br (13.3)
3 β	1.41 dd (13,4.8)	4.95 t (2.8)	1.47 dd (12.5,4.6)
4	-	-	-
5	-	-	-
6 α	1.75 m	1.79 m	2.07 m
6 β	1.64 ddd (14.3,4.4,2.6)	1.71 m	2.79 dd (10.2,7.5)
7 α	2.15 m	2.15 m	2.66 dd (17.5,7.5)
7 β	1.84 dd (13.4,4.4)	1.82 m	1.98 m
8	2.37 td (12,4.8)	2.36 m	-
9	2.97 td (12,5.3)	3.29 td (12,5.3)	-
10	-	-	-
11 α	-	-	-
11 β	2.58 dd (17,5.3)	2.44 dd (17,5.3)	6.55 s
12	2.70 dd (17,12)	2.75 dd (17,12)	-
13	-	-	-
14	-	-	-
15	-	-	-
16	6.63 d (2)	6.65 d (1.7)	10.38 s
17	7.29 d (2)	7.31 d (1.7)	-
18	-	-	2.46 s
19	1.10 s	1.11 s	1.17 s
20	1.19 s	1.14 s	1.21 s
1-OAc	1.30 s	1.20 s	1.43 s
	2.15 s	2.06 s	2.00 s
2-OAc	1.99 s	-	2.03 s
3-OAc	-	2.05 s	-
5-OH ^{b)}	2.90 d (2.4)	2.28 d (2.9)	3.07 d (1.9)
12-OH ^{b)}	-	-	11.75 s

Spektra ^1H NMR diukur pada 400 MHz

Tabel 4. Data ^{13}C NMR di dalam CDCl_3

Nomor	1	2	3
1.	74.5	73.5	74.2
2	67.3	26.7	67.5
3	35.7	76.9	35.7
4	40.1	41.5	39.9
5	76.4	76.5	75.2
6	25.7	26.3	23.6
7	20.5	20.4	23.2
8	43.7	43.9	125.7
9	40.0	39.6	153.4
10	45.0	43.9	48.7
11	22.9	22.7	110.9
12	165.4	165.5	161.3
13	119.9	119.9	117.2
14	195.2	195.4	140.2
15	106.5	106.5	195.1
16	142.9	142.9	
17			13.4
18	25.4	23.1	27.7
19	28.0	25.1	25.6
20	17.7	18.4	29.1
1-OAc	21.1	21.4	21.0
	169.3	169.5	169.0
2-OAc	20.9		21.0
	170.3		170.5
3-OAc		21.1	
		169.2	

Spektra ^{13}C NMR dan diukur pada 100 MHz.



Gambar 2.

Hubungan yang terjadi (garis tebal) disimpulkan dari spektra COSY dan HMQC sedangkan hubungan jarak jauh (panah) diamati dari spektrum HMBC senyawa 3 (a) dan hubungan NOE diamati dari perbedaan eksperimen NOE (b)