

## PHÂN LẬP VÀ XÁC ĐỊNH CẤU TRÚC MỘT SỐ HỢP CHẤT TỪ CÂY HOÀNG LAN HOA TRẮNG (*C. ODORATA*) Ở THANH HÓA VIỆT NAM

Lê Thị Như Quỳnh<sup>1</sup>, Ngô Xuân Lương<sup>1</sup>, Nguyễn Thị Ngọc Vinh<sup>1</sup>, Phạm Minh Quân<sup>2</sup>

### TÓM TẮT

*Từ dịch chiết metanol của lá cây hoàng lan hoa trắng được thu hái tại Thanh hóa bằng các phương pháp sắc ký và kết hợp các phương pháp phổ, đã xác định được cấu trúc 04 hợp chất: Stigmasterol; 6 $\beta$ -hydroxy-24-etylcholesta-4-en-3-on; kaempferol 3-O- $\beta$ -D-apiofuranosyl-(1 $\rightarrow$ 2)- $\alpha$ -L-rhamnopyranosyl-(1 $\rightarrow$ 6)- $\beta$ -D-glucopyranosit và 2, 3, 8-trimethoxy axit ellagic, trong đó hợp chất kaempferol 3-O- $\beta$ -D-apiofuranosyl-(1 $\rightarrow$ 2)- $\alpha$ -L-rhamnopyranosyl-(1 $\rightarrow$ 6)- $\beta$ -D-glucopyranosit lần đầu tiên được tách ra từ cây này.*

**Từ khóa:** Hoàng lan hoa trắng, kaempferol.

### 1. ĐẶT VẤN ĐỀ

Cây Hoàng lan hoa trắng hay Ngọc lan tây, (*Cananga odorata*, *C. odorata*), là một loài cây thân gỗ trong Chi Công chúa (*Cananga*). Loài cây này có thể có độ cao trung bình khoảng 12 m, phát triển tối đa khi được trồng tại nơi có nhiều nắng, và nó ưa thích các loại đất chua tại khu vực nguồn gốc của nó là các rừng mưa. Vỏ cây màu xám trắng; nhánh ngang hay thòng, mang lá song đỉnh, không lông. Lá của nó dài, trơn và bóng loáng. Hoa có màu trắng, quần như sao biển, và có tinh dầu có mùi thơm rất mạnh, nở từ tháng 11 đến tháng 12. Mỗi hoa cho ra một chùm quả, mỗi chùm quả chứa 10 - 12 hạt, giống như hạt na [1]. Tinh dầu thơm của cây được sử dụng trong sản xuất nước hoa và đồ gia vị. Vỏ cây, lá và rễ của một số loài được sử dụng trong y học dân gian chữa bệnh nhiễm trùng, bệnh ho, bệnh gan, bệnh vàng da do gan, bệnh tiêu chảy... Các nghiên cứu dược lý đã tìm thấy khả năng kháng nấm, kháng khuẩn và đặc biệt là khả năng sử dụng trong hóa học trị liệu của một số thành phần hóa học của lá và vỏ cây [2]. Mặc dù các cây họ Na (*Annonaceae*) có giá trị kinh tế cao cũng như có các hoạt tính sinh học quý được sử dụng rộng rãi trong dân gian, song việc nghiên cứu về thành phần hoá học của nó chưa được tiến hành nhiều ở Việt Nam. Buckingham J. (2005) đã xác định dãy các hợp chất acetogenin đã được tách từ 2 chi của họ Na (*Annonaceae*) là *Annona* và *Rollinia*, trong đó có 24 chất mới. Phần lớn các acetogenin gồm một hoặc hai vòng tetrahydrofuran, một  $\alpha$ ,  $\beta$ -unsaturated- $\gamma$ -lacton hoặc epoxit trong mạch chính với các nhóm chức như -OH, =O, C=C và diol kề nhau trong mạch dài [3]. Wu và cộng sự đã tìm thấy 4 chất flavonoid và tất cả chúng đều là dẫn xuất của glycosit: quercetin-3-O-rhamnosit, kaempferol-3-O-rhamnosit, isorhamnetin-3-O-rhamnosit, tanarixetin-3-O-rhamnosit thu được từ lá của *A. purpurea* [4].

<sup>1</sup> Khoa Khoa học Tự nhiên, Trường Đại học Hồng Đức; Email: quynhthile12345@gmail.com

<sup>2</sup> Viện hợp chất tự nhiên - Viện Hàn Lâm Khoa học và Công nghệ Việt Nam, Hà Nội

## 2. THỰC NGHIỆM

### 2.1. Thiết bị

Điểm chảy được xác định trên kính hiển vi Boëtius. Phổ tử ngoại UV được ghi trên máy Agilent UV-VIS. Phổ hồng ngoại IR được ghi trên máy Bruker 270-30, dạng viên nén KBr. Phổ khối lượng EI-MS được ghi trên máy Agilent HP 5973. Phổ khối lượng ESI-MS được ghi trên máy Agilent 1200 Series LC-MSD Trap. Phổ  $^1\text{H-NMR}$  (500MHz), phổ  $^{13}\text{C-NMR}$  (125MHz), DEPT và phổ 2 chiều HMBC, HSQC ghi trên máy Bruker Viện Hoá học-Viện Hàn lâm Khoa học và Công nghệ Việt Nam). Sắc ký lớp mỏng được tiến hành trên bản mỏng tráng sẵn silicagel 60F<sub>245</sub> (Merck), hiện hình bằng đèn UV và hơi iot, sắc ký cột trên silica gel cỡ hạt 230-400mesh (Merck). Các dung môi dùng để ngâm chiết mẫu thực vật đều dùng loại tinh khiết (pure), khi dùng cho các loại sắc ký lớp mỏng và sắc ký cột sử dụng loại tinh khiết phân tích (PA). Dung môi được sử dụng là: metanol ( $\text{CH}_3\text{OH}$ ), butanol ( $\text{C}_4\text{H}_9\text{OH}$ ), etylaxetat ( $\text{CH}_3\text{COOC}_2\text{H}_5$ ), hexan, nước cất.

### 2.2. Nguyên liệu thực vật

Lá của cây Hoàng lan hoa trắng được thu hái ở Trường Đại học Hồng Đức, Thanh Hóa vào tháng 5 năm 2020. Tiêu bản của loài này đã được TS Đậu Bá Thìn định danh và lưu giữ mẫu tại khoa Khoa học Tự nhiên, Trường Đại Học Hồng Đức.

### 2.3. Phân lập các hợp chất

Lá của cây hoàng lan hoa trắng (4,6 kg) được phơi khô, nghiền nhỏ, ngâm bằng dung môi metanol (10L) ở nhiệt độ phòng trong vòng 20 ngày, thu hồi dịch chiết cất và dung môi thu được cao metanol (176g). Cao metanol được hòa tan trong nước và chiết phân bố với dung môi n hexan, etylaxetat cất thu hồi dung môi các phân đoạn thu được: cao n hexan (78g), cao Etylaxetat (56g) và dịch chiết nước.

Cao n hexan<sup>78</sup> được tiến hành sắc ký cột silica gel với hệ dung môi n hexan-clorofom (100:0, 25:1, 15:1, 10:1, 7:1, 5:1) và hệ dung môi n hexan : Etylaxetat (100:0, 6:1, 3:1, 2:1, 1:1) thu được 8 phân đoạn chính (kí hiệu từ N1 đến N8) mỗi hệ dung môi sử dụng 100 ml,

Phân đoạn N1 (5,6 g) được tiến hành sắc ký cột silica gel (200 gam, 60 x 5 cm) rửa giải bằng hệ dung môi nhexan: clorofom (100:0, 50:1, 50:2, 10:1, 4:1), thu hợp chất sạch (1) (3mg).

Phân đoạn N3 (1,7 g) được sắc ký cột silica gel (200 gam, 60x3,2 cm) được rửa giải bằng hệ dung môi nhexan: Etylaxetat (9:1, 6:1, 4:1, 1:1, mỗi hệ dung sử dụng 100ml) thu được hợp chất (2) (21 mg).

Cao etylaxetat được phân tách bằng sắc ký cột silicagel, dung môi giải hấp là cloroform : metanol (19 : 1-4 : 1) thu được 6 phân đoạn chính. Phân đoạn E3 tinh chế lại bằng sắc ký cột hệ dung môi cloroform : etylaxetat (98 : 2) thu được chất (3) có khối lượng 132 mg. Phân đoạn E6 tinh chế lại bằng sắc ký cột hệ dung môi cloroform : metanol (19 : 1-4 : 1) thu được chất (4) có khối lượng 12 mg.

**Hợp chất 1.** Tinh thể hình kim, đ.n.c: 155°-157°C. IR (KBr)  $\nu_{\max}$  (cm<sup>-1</sup>): 3400, 3025, 1410, 1250, 820, 690. Phổ EI-MS  $m/z$ : 412 [M<sup>+</sup>] (7), 300 (7), 255 (11), 231 (4), 213 (8), 173 (7), 145 (20), 133 (20), 83 (49,3), 55 (100), 43 (90). <sup>1</sup>H-NMR (500MHz, CDCl<sub>3</sub>) ( $\delta$  ppm) ; <sup>13</sup>C-NMR (125MHz, CDCl<sub>3</sub>) ( $\delta$  ppm)(bảng 3.1).

**Hợp chất 2.** Tinh thể hình kim, đ.n.c: 166-167°C. EI-MS  $m/z$  428 [M]<sup>+</sup>. Phổ <sup>1</sup>H-NMR (500Hz CDCl<sub>3</sub>) ( $\delta$  ppm): 5,80 (1H, *br s*, H-4); 4,34 (1H, *br s*, H-6b); 1,38 (3H, *s*, 21-CH<sub>3</sub>); 0,92 (3H, *d*,  $J=6,5$  Hz, 26-CH<sub>3</sub>); 0,85 (3H, *d*,  $J=2,0$  Hz, 19-CH<sub>3</sub>); 0,82 (3H, *d*,  $J=3,5$  Hz, 29-CH<sub>3</sub>); 0,81 (3H, *s*, 61-CH<sub>3</sub>); 0,74 (3H, *s*, 18-CH<sub>3</sub>); Phổ <sup>13</sup>C-NMR (125MHz, CDCl<sub>3</sub>) ( $\delta$  ppm): 200,4 (C-3); 168,5 (C-5); 126,3 (C-4); 73,3 (C-6b); 56,1 (C-17); 55,9 (C-14); 53,7 (C-9); 45,9 (C-24); 42,6 (C-13); 39,7 (C-12); 38,6 (C-7); 38,0 (C-10); 37,1 (C-1); 36,1 (C-20); 34,3 (C-2); 34,0 (C-22); 29,8 (C-8); 29,2 (C-25); 28,2 (C-16); 26,2 (C-23); 24,2 (C-15); 23,1 (C-28); 21,0 (C-11); 19,8 (C-26); 19,5 (C-19); 19,1 (C-27); 18,8 (C-21); 12,0 (C-18, C-29).

**Hợp chất 3.** chất bột màu vàng, đ.n.c 174-175°C; ESI-MS:  $m/z$  725 [M-H]<sup>+</sup>; <sup>1</sup>H-NMR (500 MHz, CD<sub>3</sub>OD)  $\delta$  (ppm): 6,15 (1H, *d*,  $J=2$  Hz, H-6), 6,31 (1H, *d*,  $J=2$  Hz, H-8), 6,90 (2H, *d*,  $J=12$  Hz, H-3', H-5'), 8,10 (2H, *d*,  $J=9$  Hz, H-2', H-6'), 1,16 (3H, *d*,  $J=6,5$  Hz, rham-CH<sub>3</sub>), 4,53 (1H, *s*, rham H-1), 5,37 (1H, *d*,  $J=7,5$  Hz, glu H-1), 5,47 (1H, *d*,  $J=1,5$  Hz, apio H-1).

<sup>13</sup>C-NMR (125 MHz, CD<sub>3</sub>OD)  $\delta$  (ppm): xem bảng 3.2

**Hợp chất 4.** Là chất bột màu vàng, đ.n.c 295-296°C; IR  $\nu_{\max}^{\text{KBr}}$  cm<sup>-1</sup>: 3410 (OH), 3055, 2361, 1756; EI-MS:  $m/z$  334 [M]<sup>+</sup>; <sup>1</sup>H-NMR (500 MHz, CDCl<sub>3</sub>)  $\delta$  (ppm): 7,60 (1H, *s*, H-5), 7,53 (1H, *s*, H-5'), 4,08 (3H, *s*, OCH<sub>3</sub>); 4,07 (3H, *s*, OCH<sub>3</sub>), 4,00 (3H, *s*, OCH<sub>3</sub>).

<sup>13</sup>C-NMR (125 MHz, CDCl<sub>3</sub>)  $\delta$  (ppm): xem bảng 3.3.

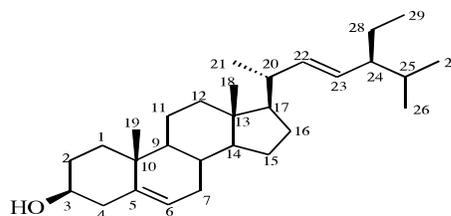
### 3. KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

Dịch chiết metanol từ lá của cây Hoàng lan sau khi cất thu hồi dung môi, phân bố lần lượt trong các dung môi n hexan, etyl axetat và butanol. Cất loại dung môi thu được các cặn dịch chiết tương ứng. Từ dịch chiết n hexan và etyl axetat bằng các phương pháp sắc ký cột trên silicagel đã phân lập được 04 hợp chất là: 1, 2, 3, 4.

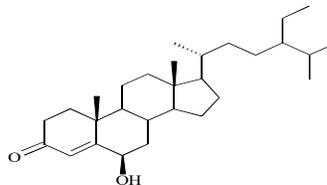
**Hợp chất 1.** Hợp chất (1) là tinh thể hình kim không màu, đ.n.c 155-157°C. Trên phổ EI-MS hợp chất (1) cho thấy pic ion phân tử  $m/z$  412 [M]<sup>+</sup> tương ứng với công thức phân tử C<sub>29</sub>H<sub>48</sub>O. Trên Phổ IR, <sup>1</sup>H-NMR và <sup>13</sup>C-NMR của hợp chất (1) cho thấy sự có mặt của nhóm hydroxyl gắn với C-3 tương ứng với các tín hiệu  $\delta_{\text{H-3}}$  3,28 ppm,  $\delta_{\text{C-3}}$  71,77 ppm và  $\nu_{\max}=3400$  cm<sup>-1</sup>, ngoài ra còn có tín hiệu của 3 proton thuộc nhóm metin của 2 nối đôi không liên hợp với các tín hiệu đặc trưng  $\delta_{\text{H-6}}$  5,35 ppm;  $\delta_{\text{H-22}}$  5,14 ppm và  $\delta_{\text{H-23}}$  5,03 ppm. So sánh các số liệu phổ của hợp chất (1) chúng ta thấy hoàn toàn phù hợp với hợp chất stigmasterol [5].

**Bảng 1. Số liệu phổ  $^{13}\text{C}$ -NMR của hợp chất (1)**

Cacbon	DEPT	Độ chuyển dịch hóa học $\delta$ (ppm)	[5]
1	CH <sub>2</sub>	37,28	37,3
2	CH <sub>2</sub>	31,66	31,7
3	CH	71,67	71,8
4	CH <sub>2</sub>	42,32	42,3
5	C	140,56	140,8
6	CH	121,54	121,7
7	CH <sub>2</sub>	31,7	31,9
8	CH	31,85	31,9
9	CH	50,1	51,3
10	C	36,34	36,5
11	CH <sub>2</sub>	20,8	21,1
12	CH <sub>2</sub>	39,6	39,7
13	C	42,12	42,3
14	CH	56,55	56,9
15	CH <sub>2</sub>	24,04	24,4
16	CH <sub>2</sub>	28,2	28,9
17	CH	55,8	56,0
18	CH <sub>3</sub>	12,55	11,9
19	CH <sub>3</sub>	19,3	19,4
20	CH	40,33	40,5
21	CH <sub>3</sub>	20,79	20,2
22	CH	135,72	138,3
23	CH	131,59	129,3
24	CH	42,68	50,2

**(1) Stigmasterol**

**Hợp chất 2.** Hợp chất (2) kết tinh hình kim, đ.n.c 165-166°C. Trên phổ khối lượng cho pic ion phân tử  $m/z$  428  $[\text{M}]^+$  có thể khẳng định công thức phân tử hợp chất (2) là  $\text{C}_{29}\text{H}_{48}\text{O}_2$ . Trên phổ IR của hợp chất chỉ ra các tín hiệu ở tần số cực đại là 3570, 1675, 1640  $\text{cm}^{-1}$  đây là đặc trưng của nhóm chức hydroxyl và liên kết đôi  $\text{C}=\text{C}$  trong phân tử. Trên phổ  $^1\text{H}$ -NMR cho thấy các tín hiệu của các proton gắn với nối đôi  $\text{C}=\text{C}$  tại  $\delta_{\text{H-4}}$  5,80 ppm và tín hiệu của proton gắn với C-6 ( $\delta_{\text{C-6}}$  73,3 ppm) đây là cacbon có chứa nhóm hydroxyl. Ngoài ra trên phổ này còn xuất hiện 6 tín hiệu của nhóm methyl đặc trưng ở vùng từ 0,74 - 1,38 ppm. Trên phổ  $^{13}\text{C}$ -NMR thấy xuất hiện tín hiệu đặc trưng của nhóm xeton tại  $\delta_{\text{C-3}}$  200,4 ppm và nhóm metin của cacbon chứa liên kết đôi tại  $\delta_{\text{C-4}}$  126,3 ppm. Trên các số liệu phổ của chất (2) và so sánh với các số liệu phổ của hợp chất các số liệu phổ của hợp chất 6 $\beta$ -hydroxy-24-etylcholesta-4-en-3-on trong tài liệu [6] kết luận hợp chất (2) là 6 $\beta$ -hydroxy-24-etylcholesta-4-en-3-on.

**(2) 6 $\beta$ -hydroxy-24-etylcholesta-4-en-3-on**

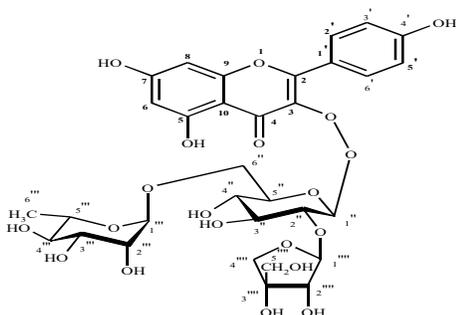
**Hợp chất 3.** Kết tinh chất bột màu vàng, có đ.n.c 173-174°C. Trên phổ khối lượng ESI-MS của chất (3) cho pic ion  $m/s$  725  $[\text{M}-\text{H}]^+$ , từ đó có thể chỉ ra hợp chất (3) có khối lượng phân tử 726 tương ứng với công thức  $\text{C}_{32}\text{H}_{38}\text{O}_{19}$ . Trên phổ cộng hưởng từ hạt nhân  $^1\text{H}$ -NMR thấy các tín hiệu cộng hưởng từ chỉ ra cấu trúc khung kaempferol. Ở vùng trường trung bình thì có các tín hiệu của các proton vòng thơm (aglycol) ở  $\delta$  6,15 (1H,  $d$ ,  $J = 2$  Hz, H-6), 6,31 (1H,  $d$ ,  $J = 2$  Hz, H-8), 6,90 (2H,  $d$ ,  $J = 12$  Hz, H-3', H-5'), 8,10 (2H,  $d$ ,  $J = 9$  Hz,

H-2', H-6'). Sự tồn tại của 3 proton anomeric được khẳng định bởi các tín hiệu cộng hưởng từ tại  $\delta_H$  5,37 (1H, *d*,  $J = 7,5$  Hz, H-1''), 5,47 (1H, *d*,  $J = 7,5$  Hz, H-1''') và 4,53 (1H, *s*, H-1'''). Hằng số tương tác ( $J$ ) của các proton anomeric khẳng định sự có mặt của hai đơn vị đường dạng  $\beta$  và một đơn vị đường dạng  $\alpha$ . Sự xuất hiện tín hiệu cộng hưởng từ của một nhóm methyl tại  $\delta_H$  1,16 (3H, *d*,  $J = 6,5$  Hz, H-6''') cho biết sự có mặt của một đơn vị đường  $\alpha$ -L-rhamnozơ. Trên phổ  $^{13}\text{C}$ -NMR của chất 3 có các tín hiệu cộng hưởng từ của 32 cacbon. Từ các phổ DEPT chỉ ra sự có mặt của 18 cacbon nhóm metin, 3 nhóm cacbon metylen, 1 nhóm cacbon methyl và 10 cacbon bậc 4. Sự xuất hiện cấu trúc aglycol dạng kaempferol được khẳng định bởi các tín hiệu cộng hưởng tại  $\delta$  158,7 (C-2), 134,6 (C-3), 180,2 (C-4), 162,9 (C-5), 101,1 (C-6), 179,2 (C-7), 95,6 (C-8), 158,1 (C-9), 104,7 (C-10), 123,1 (C-1'), 132,2 (C-2' và C-6'), 116,3 và 116,2 (C-3' và C-5') và 161,4 (C-4') [7, 8]. Trên phổ tương tác xa HMBC và HSQC của chất (3) đã khẳng định thêm một lần nữa các tín hiệu còn lại thuộc về một chuỗi oligosaccharit gồm ba đơn vị đường. Các tín hiệu cộng hưởng tại  $\delta_C$  101,4, 80,8, 76,9, 70,6, 75,3, (5 x CH) và 66,1 (CH<sub>2</sub>), hoàn toàn tương ứng với các giá trị  $\delta$  từ C- 1 đến C-6 của một phân tử đường glucopyranozơ, và các tín hiệu  $\delta_C$  110,8, 75,5, (2 x CH), 75,2, 67,1 (2 x CH<sub>2</sub>) và 78,1 (C) hoàn toàn tương ứng với một phân tử đường apiofuranozơ; trong đó tạo thành liên kết glucosit tại C-2'' và C-1''' ; đồng thời cùng các tín hiệu trường thấp của các tín hiệu tại 101,9, 72,3, 72,1, 73,9, 69,7 (5 x CH) và 17,9 (CH<sub>3</sub>) khẳng định sự có mặt của một đơn vị đường rhamnopyranozơ. Phân đường L-rhamnopyranozơ nối với phân đường glucopyranozơ qua C1''' - C6''.

**Bảng 2. Số liệu phổ NMR của hợp chất (3)**

C	DEPT	Độ dịch chuyển hoá học	
		$\delta_C$ (ppm)	$\delta_C^*$ (ppm) [7]
2	C	158,7	156,4
3	C	134,6	132,3
4	C	180,2	177,4
5	C	162,9	161,1
6	CH	101,1	98,4
7	C	179,2	163,9
8	CH	95,6	93,6
9	C	158,1	156,4
10	C	104,7	104,0
1'	C	123,1	120,9
2'	CH	132,2	130,8
3'	CH	116,3	115,2
4'	C	161,4	159,2
5'	CH	116,2	115,2
6'	CH	132,2	130,8
<b>Glu</b>			
1''	CH	101,4	98,7
2''	CH	80,8	82,1
3''	CH	76,9	76,5
4''	CH	70,6	69,7
5''	CH	75,3	74,6
6''	CH <sub>2</sub>	66,1	66,2
<b>Rha</b>			
1'''	CH	101,9	100,4
2'''	CH	72,3	70,3
3'''	CH	72,1	69,9
4'''	CH	73,9	71,9
5'''	CH	69,7	68,1
6'''	CH <sub>3</sub>	17,9	17,5
<b>Api</b>			
1''''	CH	110,8	108,5
2''''	CH	75,5	76,3
3''''	C	78,1	77,4
4''''	CH <sub>2</sub>	75,2	73,9
5''''	CH <sub>2</sub>	67,1	67,8

$\delta_C$  (Đo ở 125 MHz trong CD<sub>3</sub>OD),  $\delta_C^*$  (Đo ở 125 MHz trong CD<sub>3</sub>OD)



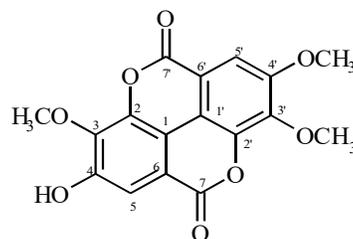
**(3) Kaempferol 3-O-β-D-apiofuranosyl-(1→2)-[α-L-rhamnopyranosyl-(1→6)]-β-D-glucopyranosit** tìm thấy từ cây này.

**Hợp chất 4.** Là chất bột màu vàng, có đ.n.c 295-296<sup>0</sup>C. Trên phổ khối lượng (EI-MS) của hợp chất (4) có pic ion  $m/z$  334  $[M]^+$ , có thể khẳng định công thức phân tử của (4) là  $C_{17}H_{12}O_8$ .

Trên phổ cộng hưởng từ hạt nhân <sup>1</sup>H-NMR thấy xuất hiện các tín hiệu singlet ở δ 7,60 (1H, s, H-5) và 7,53 (1H, s, H-5'). Các tín hiệu của 3 nhóm metoxy ở δ 4,08 (3H, s, OCH<sub>3</sub>), 4,07 (3H, s, OCH<sub>3</sub>), 4,00 (3H, s, OCH<sub>3</sub>). Trên phổ cộng hưởng từ hạt nhân <sup>13</sup>C-NMR và DEPT cho ta thấy tín hiệu của 17 carbon trong đó: 3 carbon metyl, 2 carbon metin và 12 carbon bậc 4.

**Bảng 3. Số liệu phổ <sup>13</sup>C-NMR của hợp chất (4)**

Vị trí C	DEPT	Độ chuyển dịch hoá học	
		δC	δC* [12]
1	C	110,9	111,2
2	C	141,1	141,0
4	C	152,3	152,6
3	C	140,1	140,2
5	CH	111,5	111,7
6	C	112,1	112,5
7	C	157,9	158,3
1'	C	111,6	112,0
2'	C	141,1	141,5
3'	C	140,5	140,8
4'	C	153,5	153,8
5'	CH	107,6	107,5
6'	C	113,1	113,4
7'	C	158,0	158,5
3-OCH <sub>3</sub>	CH <sub>3</sub>	60,6	61,0
3'-OCH <sub>3</sub>	CH <sub>3</sub>	60,9	61,3
4'-OCH <sub>3</sub>	CH <sub>3</sub>	56,5	56,7



(4) 2, 3, 8-tri-metoxy axit ellagic

Qua phân tích các số liệu phổ của hợp chất (4) và so sánh với tài liệu [9], [10], có thể kết luận hợp chất (4) được xác định là axit 2, 3, 8-tri-metoxy ellagic. Đây là hợp chất được phân lập từ một số loài cây khác nhau thuộc họ Na. [9], [10]. Và đặc biệt hợp chất này đã được thử nghiệm *invitro* on đối với các chủng khuẩn *Streptococcus pneumoniae*, *Vibro cholera*, *Staphylococcus aureus*, *Klebsiella pneumoniae*, *Pseudomonas aeruginosa*, *Bacillus cereus*, *Escherichia coli* và *Salmonella typhimurium* và đã cho kết quả khả quan [9]

## 4. KẾT LUẬN

Từ dịch chiết metanol của lá cây Hoàng lan hoa trắng ở Thanh Hóa, bằng các phương pháp sắc ký kết hợp với các phương pháp phổ hiện đại đã phân lập và xác định được 04 hợp chất đó là: stigmasterol; 6 $\beta$ -hydroxy-24-etylcholesta-4-en-3-on, kaempferol 3-O- $\{\beta$ -D-apiofuranosyl-(1 $\rightarrow$ 2)- $[\alpha$ -L-rhamnopyranosyl-(1 $\rightarrow$ 6)- $\beta$ -D-glucopyranosit, hợp chất này lần đầu tiên được phân lập từ loài này và 2, 3, 8-tri-metoxi axit ellagic.

## TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] Võ Văn Chi (1997), *Từ điển cây thuốc Việt Nam*, Nxb. Y học, Hà Nội.
- [2] Đỗ Tất Lợi (2001), *Những cây thuốc và vị thuốc Việt Nam*, Nxb. Y học, Hà Nội.
- [3] Ahammadsahib K. I., Hollingworth R. M., McGovren J. P., Hui Y. H., McLaughlin J. L. (1993), Mode of action of bullatacin a potent antitumor and pesticidal Annonaceous acetogenin, *Life Sci.*, 53, pp. 1113-1120.
- [4] Kuo R. Y., Chang F. C. and Wu Y. C. (2002), Chemical constituents and their pharmacological activities from formosan Annonaceous plants, *The Chinese Pharmaceutical Journal*, 54, pp. 155-173.
- [5] Kuo H. Y., Yeh M. H. (1997), Chemical constituents of heartwood of *Bauhinia purpurea*, *J. Chin. Chem. Soc.*, 44, pp. 379-383.
- [6] Marina D. G., Pietro M., Lucio P. (1990), Stigmasterols from *Typha latifolia*, *J. Nat. Prod.*, 53 (6), 1430-1435.
- [7] Anna L. P., Attilio V., Siro P., Francesco D. S., Luca R. (2007), Flavonol glycosides from whole cottonseed by-product, *Food chemistry*, 100, pp. 344-349.
- [8] Dictionary of Natural product on CD-Rom (2005), *Chapman and Hall-CRC*.
- [9] George I., Ndukwe C. and Yimin Z., Pharmacological activity of 2,3,8-tri-O-methyl ellagic acid isolated from the stem bark of *Irvingia gabonensis*, *African Journal of Biotechnology*, 6 (16), pp. 1910-1912.
- [10] George I., Ndukwe C., Amupitan J. O. and Yimin Z. (2008), Isolation and characterization of 2, 3, 8-tri-me ether ellagic acid from the stem bark of *Irvingia gabonensis* (Baill), *Journal of Medicinal Plants Research*, 2(9), pp. 234-236.

### ISOLATING AND DETERMINING THE STRUCTURE OF SOME COMPOUNDS FROM *C. ODORATA* IN THANH HOA

Le Thi Nhu Quynh, Ngo Xuan Luong, Nguyen Thi Ngoc Vinh, Pham Minh Quan

#### ABSTRACT

*From the methanol extract of white orchid leaves collected in Thanh Hoa by chromatographic and spectral methods, the structure of 04 compounds has been determined:*

*Stigmasterol; 6 $\beta$ -hydroxy-24-ethylcholesta-4-en-3-on; kaempferol 3-O-{bD-apiofuranosyl-(1 $\rightarrow$ 2)-[aL-rhamnopyranosyl-(1 $\rightarrow$ 6)-bD-glucopyranosite and 2, 3, 8-tri-methoxy ellagic acid, of which the compound kaempferol 3- O-{bD-apiofuranosyl-(1 $\rightarrow$ 2)-[aL-rhamnopyranosyl-(1 $\rightarrow$ 6)-bD-glucopyranosite was isolated from this plant for the first time.*

**Keywords:** *Cananga odorata (C. Odorata), kaempferol.*

\* Ngày nộp bài: 4/11/2020; Ngày gửi phản biện: 21/12/2021; Ngày duyệt đăng: 11/10/2021