

# Thành phần hóa học của cây ngâu (*Aglaia odorata*) và ngâu Biên Hòa (*Aglaia hoaensis*)

Lê Chí Hào, Nguyễn Ngọc Diễm Thy, Nguyễn Thị Thảo Ly, Nguyễn Thị Lệ Thu, Bùi Quốc Thái, Trần Thu Phương, Nguyễn Diệ Liên Hoa\*



Use your smartphone to scan this QR code and download this article

## TÓM TẮT

*Aglaia* là chi lớn nhất của họ Xoan (Meliaceae) với khoảng 120 loài, phân bố chủ yếu ở các vùng nhiệt đới và cận nhiệt đới. Ở Việt Nam, chi này có khoảng 30 loài. Nhiều loài được sử dụng trong y học dân gian để chữa bệnh. Các nhóm hợp chất chính trong chi này là rocaglamide, bisamide, lignan, triterpenoid và steroid. Nhiều hợp chất thể hiện hoạt tính sinh học đa dạng. Nghiên cứu này báo cáo kết quả phân lập bốn hợp chất từ cây ngâu (*Aglaia odorata*) và ngâu Biên Hòa (*Aglaia hoaensis*). Quá trình ly trích được thực hiện bằng cách sử dụng bộ chiết Soxhlet với dung môi hữu cơ, sau đó cô quay thu hồi dung môi để điều chế cao thô. Quá trình phân lập chất được thực hiện bằng sắc ký cột trên silica gel và sắc ký lọc gel trên Sephadex LH-20. Cấu trúc hóa học được xác định dựa vào phổ 1D NMR ( $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$  NMR, DEPT), 2D NMR (HSQC, HMBC, COSY, NOESY), IR, HRESIMS và kết hợp so sánh với tài liệu tham khảo. Hai triterpenoid là aglaiadoratol và 3-friedelinol đã được phân lập từ toàn thân cây ngâu. Hai hợp chất khác là lignan (+)-syringaresinol và một dẫn xuất của acid béo là acid *threo*-9,10-*O*-isopropylidene-13-hydroxy-(11*E*)-octadecenoic đã được tìm thấy trong vỏ cây ngâu Biên Hòa. Trong bốn hợp chất phân lập được, aglaiadoratol là một hợp chất mới lần đầu tiên được tìm thấy trên thế giới. Đây cũng là lần đầu tiên lignan (+)-syringaresinol và acid *threo*-9,10-*O*-isopropylidene-13-hydroxy-(11*E*)-octadecenoic được báo cáo hiện diện trong cây ngâu Biên Hòa.

**Từ khoá:** Ngâu (*Aglaia odorata*), ngâu Biên Hòa (*Aglaia hoaensis*), phân lập, xác định cấu trúc, triterpenoid, lignan, chất dẫn xuất của acid béo

## GIỚI THIỆU

*Aglaia* là chi lớn nhất của họ Xoan (Meliaceae) với khoảng 120 loài, phân bố chủ yếu ở các vùng nhiệt đới và cận nhiệt đới như Nam Á, Trung Quốc, Đông Nam Á và Tây Thái Bình Dương<sup>1,2</sup>. Ở Việt Nam, chi *Aglaia* có khoảng 30 loài, mọc rải rác ở miền trung và miền nam, nhất là ở khu vực Lâm Đồng, Đồng Nai, Châu Đốc, Phú Quốc<sup>3</sup>. Một số loài được sử dụng trong y học dân gian để chữa bệnh. Vỏ trái ngâu dụ (*A. edulis*) dùng trị tiêu chảy. Cây ngâu *A. duperreana* có lá dùng trị ghê ngứa, hạt chữa suyễn, lá và hoa trị vàng da, sốt. Lá cây ngâu mũm (*A. spectabilis*) dùng đắp chỗ sưng<sup>4,5</sup>. Các nhóm hợp chất chính trong chi này là rocaglamide<sup>6</sup>, bisamide, lignan<sup>7</sup>, triterpenoid và steroid<sup>8</sup>. Nhiều hợp chất thể hiện hoạt tính sinh học đa dạng như diệt côn trùng, gây độc tế bào ung thư, kháng nấm, kháng viêm, kháng oxy hóa, kháng sốt rét<sup>9</sup>.

Cây ngâu có tên khoa học là *Aglaia odorata* Lour., tên gọi khác là ngâu Tàu (*Cinnamon de Chine*), thuộc loại tiểu mộc, gỗ vàng vàng, hoa nhiều, nhỏ, màu vàng, thơm. Hoa được sử dụng để ướp hương cho trà hay

quần áo. Trong y học dân gian, loài này được dùng trị ho, bầm dập, ung thư bạch huyết<sup>4</sup>. Các nghiên cứu trước đây về thành phần hóa học cho thấy loài cây này sinh tổng hợp nên rocaglamide<sup>10</sup>, alkaloid<sup>11</sup>, coumarin<sup>12</sup>, terpenoid<sup>13</sup> và steroid<sup>11</sup>. Cây ngâu Biên Hòa có tên khoa học là *Aglaia hoaensis* Pierre, thuộc loại đại mộc; hoa tròn, nhỏ, dài khoảng 1 mm; trái tròn, màu nâu đỏ; phân bố chủ yếu ở Biên Hòa, Thủ Đức và mọc rải rác ở Mã Đà - Vĩnh Cửu - Đồng Nai<sup>3</sup>. Thành phần hóa học và hoạt tính sinh học của loài này chưa được khảo sát.

## VẬT LIỆU VÀ PHƯƠNG PHÁP

### Đối tượng nghiên cứu

Toàn thân cây ngâu (*Aglaia odorata* Lour.) được thu hái tại tỉnh Bình Định và vỏ cây ngâu Biên Hòa (*Aglaia hoaensis* Pierre) được thu hái tại Khu Bảo tồn Thiên nhiên và Văn hóa Đồng Nai, tỉnh Đồng Nai. Tên khoa học của hai loài cây này được TS. Đặng Văn Sơn, Viện Sinh học Nhiệt đới Thành phố Hồ Chí Minh định danh.

**Trích dẫn bài báo này:** Hào L C, Thy N N D, Ly N T T, Thu N T L, Thái B Q, Phương T T, Hoa N D L. **Thành phần hóa học của cây ngâu (*Aglaia odorata*) và ngâu Biên Hòa (*Aglaia hoaensis*).** *Sci. Tech. Dev. J. - Nat. Sci.*; 5(3):1245-1255.

Khoa Hóa học, Trường Đại học Khoa học Tự nhiên, Đại học Quốc gia Thành phố Hồ Chí Minh, Việt Nam

### Liên hệ

**Nguyễn Diệ Liên Hoa**, Khoa Hóa học, Trường Đại học Khoa học Tự nhiên, Đại học Quốc gia Thành phố Hồ Chí Minh, Việt Nam

Email: ndlhoa@hcmus.edu.vn

### Lịch sử

- Ngày nhận: 08-3-2021
- Ngày chấp nhận: 05-5-2021
- Ngày đăng: 09-5-2021

DOI: 10.32508/stdjns.v5i3.1035



### Bản quyền

© ĐHQG Tp.HCM. Đây là bài báo công bố mở được phát hành theo các điều khoản của the Creative Commons Attribution 4.0 International license.



### Hóa chất và thiết bị

Độ quay cực đo bằng triển quang kế A. Krüss Op-tronic. Phổ IR đo trên quang phổ kế hồng ngoại Nicolet 760 FTIR. Khối phổ phân giải cao ion hóa bằng kỹ thuật phun điện (HRESIMS) ghi trên máy Bruker micrOTOF-QII (80 eV). Phổ NMR đo bằng máy Bruker Avance III 500 [500 MHz ( $^1\text{H}$ ) và 125 MHz ( $^{13}\text{C}$ )] hay Bruker Biospin Avance Neo 400 [400 MHz ( $^1\text{H}$ ) và 100 MHz ( $^{13}\text{C}$ )] với  $\text{CDCl}_3$  là dung môi. Độ dịch chuyển hóa học được hiệu chỉnh dựa trên dung môi sử dụng<sup>14</sup>.

Sắc ký cột (SKC) được thực hiện trên silica gel 60 (40-63  $\mu\text{m}$ , Merck). Sắc ký (SK) lọc gel được thực hiện trên Sephadex LH-20 (GE Healthcare) với hệ dung môi giải ly  $\text{CHCl}_3$ -MeOH 1:1. Sắc ký lớp mỏng được thực hiện trên bản silica gel (250  $\mu\text{m}$ , Merck). Các cấu tử trên bản mỏng được phát hiện bằng đèn tử ngoại, cho vào bình đựng iod hay phun xịt với dung dịch vanilin- $\text{H}_2\text{SO}_4$  trong EtOH rồi nung nóng bản ở khoảng 120  $^\circ\text{C}$  trong 3-5 phút.

### Ly trích và phân lập

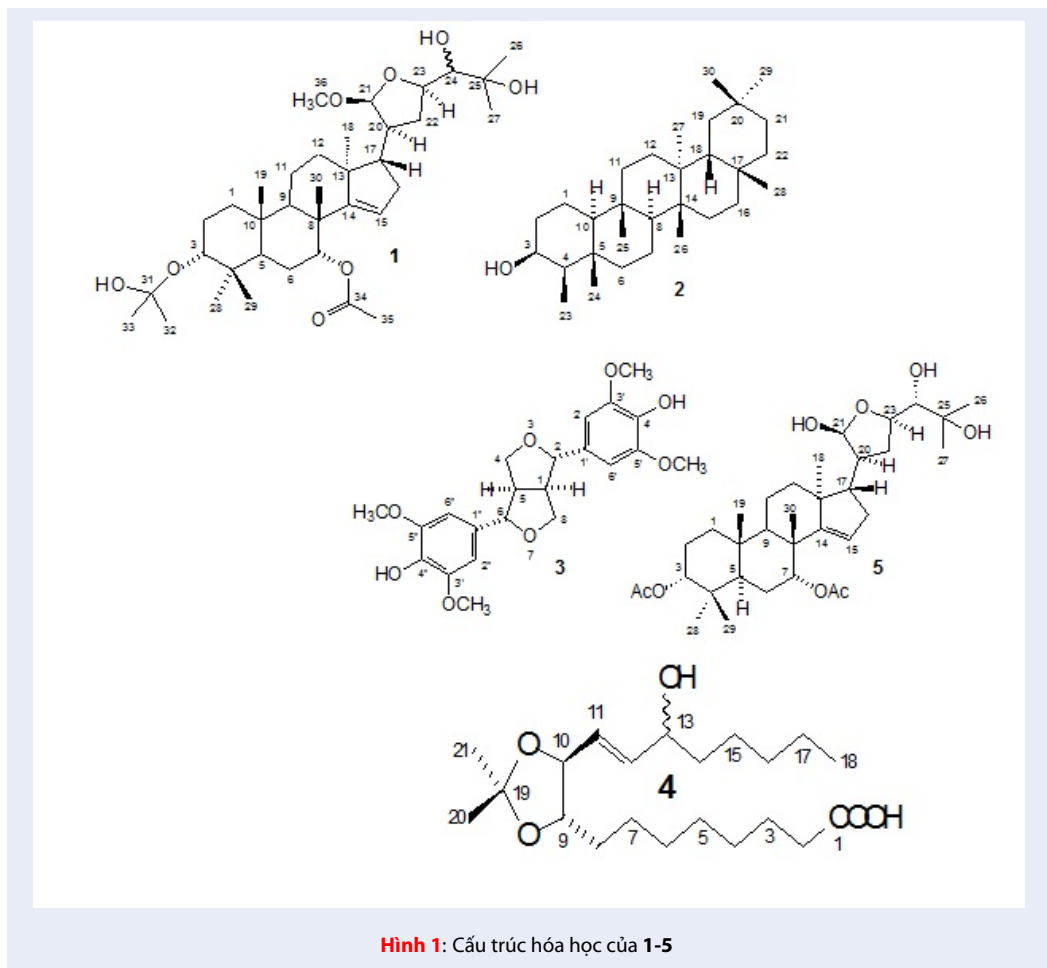
Toàn thân cây ngâu được phơi khô, xay nhỏ rồi trích kiệt (12 kg) với MeOH bằng bộ chiết Soxhlet. Cô quay thu hồi dung môi thu được cao MeOH (110 g). SKC cao này trên silica gel (hexane-EtOAc 0-100%) thu được 9 phân đoạn (OM1-9). SKC phân đoạn OM5 (10,1 g) trên silica gel (hexane-EtOAc) thu được 7 phân đoạn (OM5.1-7). Tinh chế phân đoạn OM5.2 (3,0 g) bằng SKC trên silica gel (hexane-EtOAc rồi hexane- $\text{CHCl}_3$ ) và SK lọc gel trên Sephadex LH-20 ( $\text{CHCl}_3$ -MeOH 50%) thu được aglaiadoratol (**1**; 3,5 mg). SKC phân đoạn OM2 (4,2 g) trên silica gel (hexane-EtOAc) thu được 8 phân đoạn (OM2.1-8). SKC phân đoạn OM2.1.3 (2,4 g) trên silica gel (EtOAc-hexane rồi hexane- $\text{CHCl}_3$ ) thu được 3 -friedelinol (**2**; 5,4 mg).

Vỏ cây ngâu Biên Hòa được phơi khô, xay nhỏ rồi trích kiệt (8,5 kg) bằng bộ chiết Soxhlet với hexane rồi EtOAc. Cô quay thu hồi dung môi thu được cao hexane và cao EtOAc. SKC cao hexane (44,0 g) trên silica gel (hexane-EtOAc 0-100%) thu được 7 phân đoạn (HH1-7). SKC phân đoạn HH5 (3,2 g) trên silica gel (hexane-EtOAc, hexane-acetone rồi  $\text{CHCl}_3$ -MeOH) thu được (+)-syringaresinol (**3**; 8,0 mg). SKC cao EtOAc (122 g) trên silica gel (hexane-EtOAc 0-100%) thu được 14 phân đoạn (HE1-14). SKC phân đoạn HE7 (2,2 g) trên silica gel (hexane-EtOAc rồi  $\text{CHCl}_3$ -EtOAc), sau đó tinh chế bằng SK lọc gel trên Sephadex LH-20 ( $\text{CHCl}_3$ -MeOH 50%) thu được acid *threo*-9,10-*O*-isopropylidene-13-hydroxy-(11*E*)-octadecenoic (**4** 3,5 mg).

### KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

Từ toàn thân cây ngâu, hai hợp chất **1** và **2** đã được phân lập. Từ vỏ cây ngâu Biên Hòa, hai hợp chất khác là **3** và **4** cũng đã được tìm thấy (Hình 1).

**Hợp chất 1:** chất rắn vô định hình màu trắng, điểm nóng chảy 90-91  $^\circ\text{C}$ ,  $[\alpha]_D^{25}$  -218,2 (c 3 mg/ 1 mL MeOH). Phổ IR cho các mũi hấp thu đặc trưng ứng với dao động ở 3340 (O-H), 1717 (C=O), 1251, 1028  $\text{cm}^{-1}$  (C-O). Khối phổ phân giải cao HRESIMS cho mũi ion  $[\text{M}-\text{H}_2\text{O}+\text{Na}]^+$  ở  $m/z$  625,4089 ứng với công thức phân tử  $\text{C}_{36}\text{H}_{60}\text{O}_8$  (giá trị tính toán cho  $\text{C}_{36}\text{H}_{58}\text{O}_7\text{Na}$  là 625,4075). Vậy hợp chất có độ bất bão hòa bằng 7. Phổ  $^1\text{H}$  NMR (Bảng 1) cho các tín hiệu cộng hưởng ứng với một proton olefin [ $\delta_H$  5,20 (1H, m, H-15)], một proton acetal [ $\delta_H$  4,89 (1H, d,  $J = 2,9$  Hz, H-21)], bốn nhóm oxymethine [ $\delta_H$  5,17 (1H, t,  $J = 2,5$  Hz, H-7); 4,00 (1H, ddd,  $J = 10,2$ ; 8,1; 5,0 Hz, H-23); 3,62 (1H, d,  $J = 8,0$  Hz, H-24); 3,42 (t,  $J = 2,8$  Hz, H-3), một nhóm methoxy [ $\delta_H$  3,41 (3H, s, 21-OCH<sub>3</sub>)], một nhóm acetoxy [ $\delta_H$  1,95 (3H, s, H<sub>3</sub>-35)], chín nhóm methyl gắn vào carbon bậc bốn [ $\delta_H$  1,46 (3H, s, H<sub>3</sub>-33); 1,37 (3H, s, H<sub>3</sub>-32); 1,29 (3H, s, H<sub>3</sub>-27); 1,16 (3H, s, H<sub>3</sub>-26); 1,09 (3H, s, H<sub>3</sub>-30); 1,05 (3H, s, H<sub>3</sub>-18); 0,91 (3H, s, H<sub>3</sub>-19); 0,85 (3H, s, H<sub>3</sub>-28) và 0,83 (3H, s, H<sub>3</sub>-29)] và nhiều tín hiệu trong vùng từ trường cao.



**Bảng 1: Số liệu phổ <sup>1</sup>H và <sup>13</sup>C NMR của 1 và 2 trong CDCl<sub>3</sub> (J tính bằng Hz)**

Vị trí	Chất 1 [500 MHz ( <sup>1</sup> H) và 125 MHz ( <sup>13</sup> C)]			Chất 2 [400 MHz ( <sup>1</sup> H) và 100 MHz ( <sup>13</sup> C)]	
	δH (ppm)	Tương quan HMBC	δC (ppm)	δH (ppm)	δC (ppm)
1	1,39 m	C-3, C-5, C-10	32,8	1,45 m	15,9
	1,50 m	C-9			
2	1,59 m	C-1	25,3	1,54 m	36,2
	1,99 m	C-1		1,90 m	
3	3,42 t (2,8)	C-1, C-5, C-31	76,2	3,74 br s	72,9
4			37,1	1,26 m	49,3
5	1,83 m	C-10, C-19, C-28	42,1		38,0
6	1,65 m	C-5	23,4	1,01 m	41,9
	1,75 m	C-5		1,74 br d (12,8)	
7	5,17 t (2,5)	C-8, C-30, C-34	75,7	1,39 m	17,7
				1,42 m	
8			42,5	1,28 m	53,4
9	2,06 m	C-8, C-10, C-11, C-18, C-30	43,3		37,3
10			37,7	0,93 m	61,5
11	1,57 m	C-10, C-12	16,6	1,54 m	35,5
	1,75 m	C-12			
12	1,47 m	C-13	33,9	1,32 m	30,8
				1,34 m	
13			47,1		38,5
14			160,5		39,8
15	5,20 m	C-13, C-16, C-17	117,9	1,28 m	32,5
16	1,96 m	C-13, C-14, C-15, C-17, C-20	35,0	1,54 m	35,7
	2,07 m			1,26 m	
17	1,66 m	C-12, C-13, C-18, C-21	57,8		30,2
18	1,05 s	C-12, C-13, C-14, C-17	19,8	1,58 m	43,0
19	0,91 s	C-1, C-5, C-9, C-10	15,5	1,21 m	35,3
20	2,37 m	C-17, C-21	47,2	1,38 m	28,3
21	4,89 d (2,9)	C-20, C-22, C-23, C-36	108,9	1,28 m	33,0
				1,48 m	
22	1,27 m	C-20, C-21, C-23	33,8	1,48 m	39,4
	1,97 m	C-17		0,93 m	
23	4,00 ddd (10,2; 8,1; 5,0)	C-24	75,8	1,00 s	11,8
24	3,62 d (8,0)	C-23, C-25, C-26, C-27	86,0	0,95 s	16,6
25			79,7	0,87 s	18,4
26	1,16	C-24, C-25, C-27	23,7	0,97 s	20,3
27	1,29	C-24, C-25, C-26	27,3	1,01 s	18,8
28	0,85 s	C-3, C-4, C-5, C-29	28,1	1,18 s	32,2
29	0,83	C-3, C-4, C-5, C-28	22,1	0,95	35,2
30	1,09	C-7, C-8, C-14	27,6	1,00 s	31,9

Continued on next page

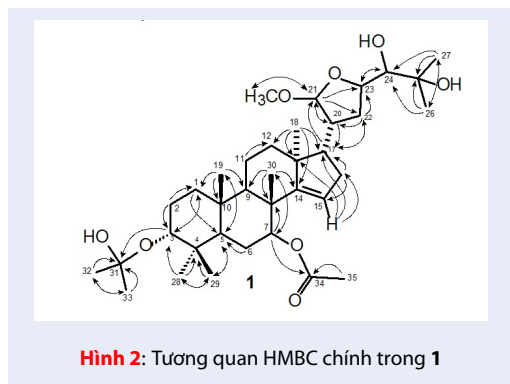
Table 1 continued

31			107,8
32	1,37 s	C-31, C-33	27,2
33	1,46 s	C-31, C-32	28,7
34			170,6
35	1,95 s	C-34	21,5
21-OCH <sub>3</sub>	3,41 s	C-21	55,7

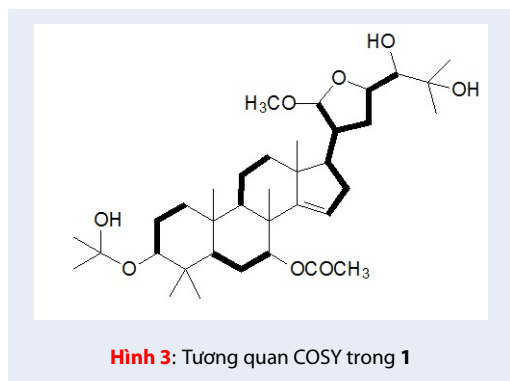
Phổ  $^{13}\text{C}$  NMR (Bảng 1) kết hợp với phổ HSQC cho các tín hiệu cộng hưởng ứng với 36 carbon gồm 10 nhóm CH, 7 nhóm  $\text{CH}_2$ , 11 nhóm  $\text{CH}_3$ , 2 carbon  $sp^2$  hoàn toàn thể và 6 carbon bậc bốn. Phân tích chi tiết cho thấy 36 carbon này gồm một nhóm acetoxy [ $\delta_{\text{C}}$  170,6 (s, C-34) và 21,5 (q, C-35)], hai carbon olefin của một nối đôi C=C tam hoán [ $\delta_{\text{C}}$  160,5 (s, C-14) và 117,9 (d, C-15)], một nhóm acetal [ $\delta_{\text{C}}$  108,9 (d, C-21)], bốn nhóm oxymethine [ $\delta_{\text{C}}$  86,0 (d, C-24); 76,2 (d, C-3); 75,8 (d, C-23) và 75,7 (d, C-7)], một nhóm acetonide [ $\delta_{\text{C}}$  107,8 (s, C-31); 28,7 (q, C-33) và 27,2 (q, C-32)], một carbon bậc bốn mang oxygen [ $\delta_{\text{C}}$  79,7 (s, C-25)], một nhóm methoxy [ $\delta_{\text{C}}$  55,7 (q, 21-OCH<sub>3</sub>)], 7 nhóm methyl [ $\delta_{\text{C}}$  28,1 (q, C-28); 27,6 (q, C-30); 27,3 (q, C-27); 23,7 (q, C-26); 22,1 (q, C-29); 19,8 (q, C-18) và 15,5 (q, C-19)], 7 nhóm methylene [ $\delta_{\text{C}}$  35,0 (t, C-16); 33,9 (t, C-12); 33,8 (t, C-22); 32,8 (t, C-1); 25,3 (t, C-2); 23,4 (t, C-6) và 16,6 (t, C-11)], 4 nhóm methine [ $\delta_{\text{C}}$  57,8 (d, C-17); 47,2 (d, C-20); 43,3 (d, C-9); 42,1 (d, C-5)] và bốn carbon bậc bốn [ $\delta_{\text{C}}$  47,1 (s, C-13); 42,5 (s, C-8); 37,7 (s, C-10); 37,1 (s, C-4)]. Các số liệu phổ trên có nhiều điểm tương đồng với phổ của agladoral A (5) (Hình 1), là một triterpenoid khung apotirucalane mang một vòng tetrahydrofuran tại C-17, đã được Liu và cộng sự cô lập vào năm 2012 từ cây ngâu (*A. odorata*)<sup>15</sup>. Điểm khác biệt chủ yếu là trong phổ 1D NMR của hợp chất 1 có sự xuất hiện các tín hiệu cộng hưởng ứng với một nhóm methoxy [ $\delta_{\text{H}}$  3,41 (s, 21-OCH<sub>3</sub>);  $\delta_{\text{C}}$  55,7 (q, 21-OCH<sub>3</sub>)] và một nhóm acetonide thay vì nhóm acetoxy [ $\delta_{\text{H}}$  1,46 (s, H<sub>3</sub>-33) và 1,37 (s, H<sub>3</sub>-32);  $\delta_{\text{C}}$  107,8 (s, C-31), 28,7 (q, C-33) và 27,2 (q, C-32)].

Trong phổ HMBC, hai proton của nhóm methyl bậc ba ở  $\delta_{\text{H}}$  0,85 (H<sub>3</sub>-28) và 0,83 (H<sub>3</sub>-29) tương quan với nhau [ $\delta_{\text{C}}$  28,1 (C-28) và 22,1 (C-29)], cùng tương quan với một carbon bậc bốn ( $\delta_{\text{C}}$  37,1; C-4), một nhóm oxymethine ( $\delta_{\text{C}}$  76,2; C-3) và một carbon bậc ba ( $\delta_{\text{C}}$  42,1; C-5). Trong khi đó, hai nhóm methyl bậc ba ở  $\delta_{\text{H}}$  1,46 (H<sub>3</sub>-33) và 1,37 (H<sub>3</sub>-32) cho tương quan với nhau [ $\delta_{\text{C}}$  28,7 (C-33) và 27,2 (C-32)] và cùng tương quan với carbon hemiacetal ( $\delta_{\text{C}}$  107,8) mà proton H-3 cũng cho tương quan với carbon này. Điều đó chứng tỏ carbon hemiacetal là C-31 mang một nhóm OH và gắn với C-3 thông qua một nguyên tử oxygen. Proton của nhóm methoxy ở  $\delta_{\text{H}}$  3,41 cho tương quan với C-21 ( $\delta_{\text{C}}$  108,9), do đó C-21 mang nhóm thế OCH<sub>3</sub> này. Vậy hợp chất này có cấu trúc 1. Các tương quan HMBC khác (Hình 2 và Bảng 1) và tương quan COSY (Hình 3) phù hợp với cấu trúc này.

Hóa học lập thể của hợp chất này được xác nhận bằng phổ NOESY. Tương quan NOE (Hình 4) giữa H<sub>3</sub>-19 ↔ H-3 và H<sub>3</sub>-30, H-3 ↔ H<sub>3</sub>-29 và H<sub>3</sub>-30 ↔ H-7 cho thấy các proton và nhóm methyl này nằm cùng phía



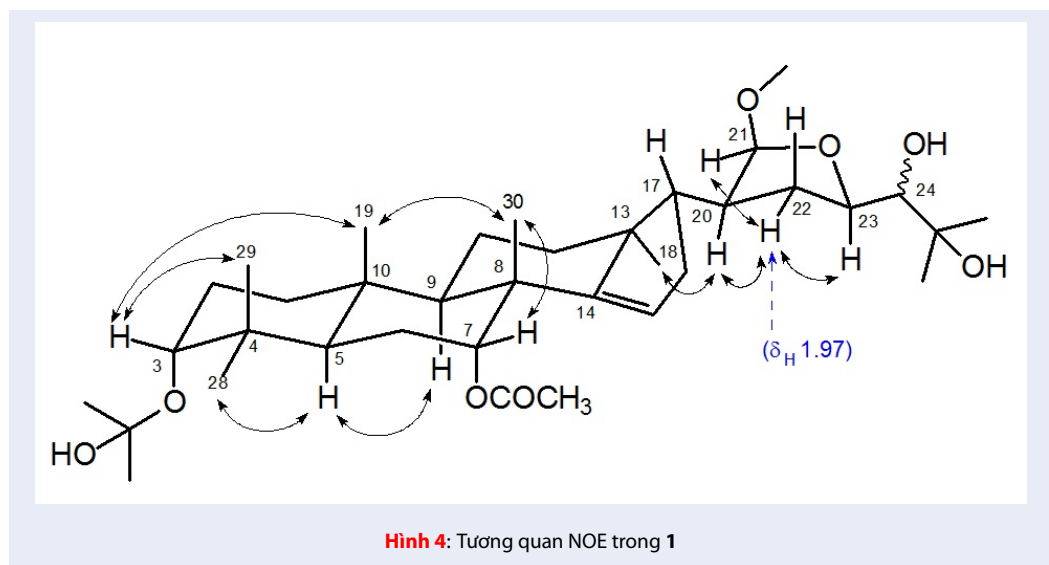
Hình 2: Tương quan HMBC chính trong 1



Hình 3: Tương quan COSY trong 1

(β). Không thấy tương quan NOE giữa H<sub>3</sub>-18 ↔ H<sub>3</sub>-30 nhưng quan sát được tương quan giữa H<sub>3</sub>-18 ↔ H-20, chứng tỏ nhóm methyl tại C-18 và dây nhánh gắn vào C-17 nằm cùng phía (α). Các tương quan NOE trên phù hợp với hóa học lập thể của khung apotirucalane. Trong vòng tetrahydrofuran, tương quan NOE giữa H-21 ↔ H-20, H-20 ↔ H<sub>a</sub>-22 ( $\delta_{\text{H}}$  1,97) và H<sub>a</sub>-22 ↔ H-23 cho thấy các proton này nằm cùng phía. Đây là một hợp chất mới chưa được tìm thấy trên thế giới và được đặt tên là aglaiadoratol (1).

**Hợp chất 2:** tinh thể màu trắng, không hấp thu tia UV. Phổ  $^1\text{H}$  NMR (Bảng 1) cho các tín hiệu cộng hưởng ứng với proton của một alcol bậc hai [ $\delta_{\text{H}}$  3,74 (1H, br s, H-3)], 8 nhóm methyl bậc ba [ $\delta_{\text{H}}$  1,18 (3H, s, H<sub>3</sub>-28); 1,01 (3H, s, H<sub>3</sub>-27); 1,00 (6H, s, H<sub>3</sub>-30 và H<sub>3</sub>-23); 0,95 (6H, s, H<sub>3</sub>-29 và H<sub>3</sub>-24); 0,97 (3H, s, H<sub>3</sub>-26) và 0,87 (3H, s, H<sub>3</sub>-25)] và nhiều tín hiệu cộng hưởng trong vùng từ trường cao ( $\delta_{\text{H}}$  0,93-1,90). Phổ  $^{13}\text{C}$  NMR (Bảng 1) kết hợp với phổ DEPT 135 cho các tín hiệu cộng hưởng ứng với 30 carbon gồm một nhóm oxymethine [ $\delta_{\text{C}}$  72,9 (d, C-3)], bốn nhóm methine [ $\delta_{\text{C}}$  61,5 (d, C-10); 53,4 (d, C-8); 49,3 (d, C-4) và 43,0 (d, C-18)], tám nhóm methyl [ $\delta_{\text{C}}$  35,2 (q, C-29); 32,2 (q, C-28); 31,9 (q, C-30); 20,3 (q, C-26); 18,8 (q, C-27); 18,4 (q, C-25); 16,6 (q, C-24) và 11,8 (q, C-23)], 11 nhóm methylene ở vùng trường cao ( $\delta_{\text{C}}$  15,9-



39,4) và sáu carbon bậc bốn [ $\delta_C$  39,8 (s, C-14); 38,5 (s, C-13); 38,0 (s, C-5); 37,3 (s, C-9); 30,2 (s, C-17) và 28,3 (s, C-20)]. Từ các số liệu phổ cho thấy hợp chất này có công thức phân tử  $C_{30}H_{52}O$  với độ bất bão hòa là 5. Đây là một triterpenoid có năm vòng. So sánh các số liệu phổ với tài liệu tham khảo<sup>16</sup> cho thấy hợp chất này là 3a- hoặc 3 $\beta$ -friedelinol, thường gọi là 3a- hoặc 3 $\beta$ -friedelinol, đã được phân lập từ loài *Maytenus truncate* thuộc họ Dây gối (Celastraceae). Trong phổ  $^1H$  NMR, H-3 ( $\delta_H$  3,74) hiện diện ở dạng mũi đơn rộng (br s) chứng tỏ proton này nằm ở vị trí xích đạo (a), do đó nhóm OH nằm ở vị trí trục ( $\beta$ ) (Hình 5). Nếu nằm ở vị trí trục ( $\beta$ ,  $\delta_H \sim 3,4$ ), proton H-3 sẽ có dạng mũi dt ( $J = 10; 4$  Hz)<sup>16</sup>. Vậy hợp chất này là 3 $\beta$ -friedelinol (2), cũng được tìm thấy khá phổ biến trong thực vật.

**Hợp chất 3:** tinh thể màu trắng,  $[\alpha]_D^{25} +48.0$  (c 5 mg/mL MeOH),  $C_{22}H_{26}O_8$  ( $m/z$  441,1536 [M+Na]<sup>+</sup>, trị số tính toán cho  $C_{22}H_{26}O_8Na$  là 441,1520) với độ bất bão hòa là 10. Phổ  $^1H$  và  $^{13}C$  NMR (Bảng 2) cho các tín hiệu cộng hưởng đặc trưng của một dẫn xuất lignan đối xứng bao gồm hai đơn vị 6C-3C và mang bốn nhóm methoxy. Hai đơn vị 6C là hai vòng benzene mang bốn proton [ $\delta_H$  6,58 (4H, s, H-2; H-6; H-2'' và H-6'');  $\delta_C$  102,9 (d'4, C-2; C-6; C-2'' và C-6'')] và 8 carbon mang nhóm thế trong đó có 6 carbon mang oxygen [ $\delta_C$  147,3 (s'4, C-3; C-5; C-3'' và C-5''); 134,5 (s'2, C-4' và C-4'')]. Hai đơn vị 3C tạo thành hai vòng furan dung hợp gồm hai nhóm oxymethylene [ $\delta_H$  4,28 (2H, dd,  $J = 9,2; 6,8$  Hz, H<sub>b</sub>-4 và H<sub>b</sub>-8); 3,91 (2H, m, H<sub>a</sub>-4 và H<sub>a</sub>-8);  $\delta_C$  72,0 (t'2, C-4 và C-8)], hai nhóm oxymethine [ $\delta_H$  4,73 (2H, d,  $J = 4,7$  Hz, H-2 và H-6);  $\delta_C$  86,2 (d'2, C-2 và C-6)], hai

nhóm methine [ $\delta_H$  3,09 (2H, m, H-1 và H-5)];  $\delta_C$  54,5 (d'2, C-1 và C-5)]. Ngoài ra, còn có bốn nhóm methoxy gắn vào hai vòng benzene [ $\delta_H$  3,90 (12H, s, 3'-OCH<sub>3</sub>, 5'-OCH<sub>3</sub>, 3''-OCH<sub>3</sub>, 5''-OCH<sub>3</sub>),  $\delta_C$  56,6 (q'4, 3'-OCH<sub>3</sub>, 5'-OCH<sub>3</sub>, 3''-OCH<sub>3</sub>, 5''-OCH<sub>3</sub>)]. Từ các số liệu phổ trên và so sánh với tài liệu tham khảo<sup>17</sup> cho thấy hợp chất này là (+)-syringaresinol (3), đã được tìm thấy trong loài cây *Magnolia thailandica* thuộc họ Ngọc lan (Magnoliaceae).

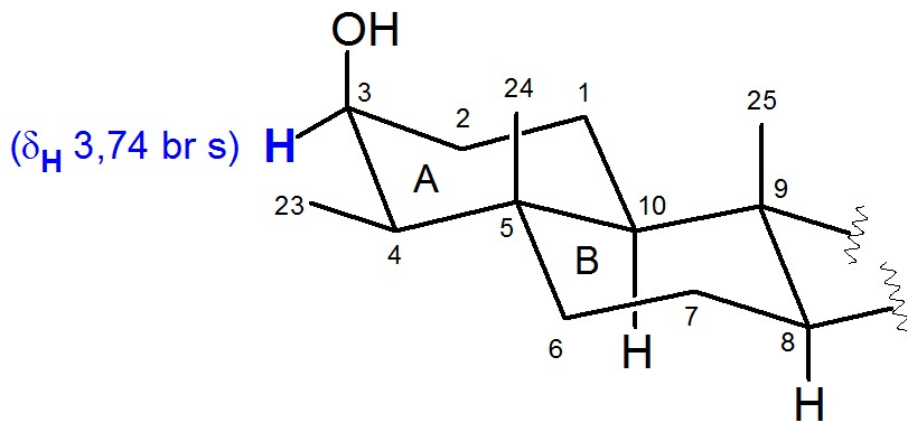
**Hợp chất 4:** dầu không màu,  $[\alpha]_D^{25} +54,8$  (c 3,3 mg/mL MeOH),  $C_{21}H_{38}O_5$  ( $m/z$  393,2605 [M+Na]<sup>+</sup>, trị số tính toán cho  $C_{21}H_{38}O_5Na$  là 393,2611) với độ bất bão hòa là 3. Phổ  $^1H$  và  $^{13}C$  NMR (Bảng 2) kết hợp với phổ DEPT cho các tín hiệu cộng hưởng ứng với 21 carbon trong đó có 5 nhóm methine, 11 nhóm methylene và 3 nhóm methyl. Các tín hiệu cộng hưởng cho thấy hợp chất có một carbon carbonyl của acid carboxylic [ $\delta_C$  178,3 (s, C-1)], hai carbon olefin ghép cặp *trans* [ $\delta_H$  5,83 (1H, ddd,  $J = 15,5; 6,1$  và  $0,6$  Hz, H-12); 5,65 (1H, ddd,  $J = 15,5; 7,6$  và  $1,2$  Hz, H-11)];  $\delta_C$  138,1 (d, C-12) và 127,6 (d, C-11)], một carbon bậc bốn mang hai nguyên tử oxygen [ $\delta_C$  108,7 (s, C-19)], ba nhóm oxymethine [ $\delta_H$  4,15 (1H, dd,  $J = 11,7$  và  $6,1$  Hz, H-13); 4,00 (1H, t,  $J = 7,9$  Hz, H-10); 3,67 (1H, m, H-9)];  $\delta_C$  82,0 (d, C-10); 81,0 (d, C-9) và 72,1 (d, C-13)], một nhóm methyl gắn vào carbon bậc hai [ $\delta_H$  0,89 (3H, t,  $J = 7,0$  Hz, H<sub>3</sub>-18)];  $\delta_C$  14,2 (q, C-18)], hai nhóm methyl gắn vào carbon bậc bốn [ $\delta_H$  1,42 (3H, s, H<sub>3</sub>-21) và 1,41 (3H, s, H<sub>3</sub>-20)];  $\delta_C$  27,4 (q, C-20) và 27,1 (q, C-21)] và 11 nhóm methylene trong đó có một nhóm gắn với carbon carbonyl [ $\delta_H$  2,34 (2H, t,  $J = 7,4$  Hz, H<sub>2</sub>-2)];  $\delta_C$  33,9 (t, C-2)]. Từ các số liệu phổ trên và so sánh với tài liệu tham khảo<sup>18</sup> cho thấy hợp chất

**Bảng 2:** Số liệu phổ  $^1\text{H}$  (500 MHz) và  $^{13}\text{C}$  (125 MHz) NMR của 3 và 4 trong  $\text{CDCl}_3$  (J tính bằng Hz)

Chất 3			Chất 4					
Vị trí	$\delta\text{H}$	$\delta\text{C}$	Vị trí	$\delta\text{H}$	$\delta\text{C}$	Vị trí	$\delta\text{H}$	$\delta\text{C}$
1	3,09 m	54,5	1'		132,3	1		178,3
2	4,73 d (4,7)	86,2	2'	6,58 s	102,9	2	2,34 t (7,4)	33,9
3			3'		147,3	3	1,62 m	24,7
4	3,91 m 4,28 dd (9,2; 6,8)	72,0	4'		134,5	4	1,35 ma	28,9 <sup>b</sup>
5	3,09 m	54,5	5'		147,3	5	1,32 m <sup>a</sup>	29,1 <sup>b</sup>
6	4,73 d (4,7)	86,2	6'	6,58 s	102,9	6	1,31 m <sup>a</sup>	29,2 <sup>b</sup>
7			1''		132,3	7	1,48 m	25,9
8	3,91 m 4,28 dd (9,2; 6,8)	72,0	2''	6,58 s	102,9	8	1,30 m <sup>a</sup>	32,0
			3''		147,3	9	3,67 m	81,0
			4''		134,5	10	4,00 t (7,9)	82,0
			5''		147,3	11	5,65 ddd (15,5; 7,6; 1,2)	127,6
			6''	6,58 s	102,9	12	5,83 ddd (15,5; 6,1; 0,6)	138,1
			3'-OCH <sub>3</sub>	3,90 s	56,6	13	4,15 dd (11,7; 6,1)	72,1
			4'-OH	5,50 s		14	1,52 m	37,2
			5'-OCH <sub>3</sub>	3,90 s	56,6	15	1,32 ma	25,2
			3''-OCH <sub>3</sub>	3,90 s	56,6	16	1,52 m	32,1
			4''-OH	5,50 s		17	1,28 ma	22,7
			5''-OCH <sub>3</sub>	3,90 s	56,6	18	0,89 t (7,0)	14,2
						19		108,7
						20	1,42 s <sup>c</sup>	27,1 <sup>d</sup>
						21	1,41 s <sup>c</sup>	27,4 <sup>d</sup>

<sup>a,b,c,d</sup>: Các trị số có cùng ký hiệu có thể hoán đổi lẫn nhau.





Hình 5: Hóa học lập thể trong vòng A và B của 2

này là acid *threo*-9,10-*O*-isopropylidene-13-hydroxy-(11*E*)-octadecenoic (4), đã được tìm thấy trong rễ cây *Cudrania tricuspidata* thuộc họ Dâu tằm (Moraceae). Hợp chất này được xem như chuyển hóa từ acid rumenic, là một đồng phân hình học của acid linoleic liên hợp<sup>18</sup>

## KẾT LUẬN

Từ toàn thân cây ngâu (*Aglaiia odorata*), hai triterpenoid là aglaiadoratol (1) và 3β -friedelinol (2) đã được phân lập. Từ vỏ cây ngâu Biên Hòa (*Aglaiia hoensis*), hai hợp chất khác là (+)-syringaresinol (3) và acid *threo*-9,10-*O*-isopropylidene-13-hydroxy-(11*E*)-octadecenoic (4) đã được tìm thấy. Cấu trúc của các hợp chất này được xác định dựa vào phổ <sup>1</sup>H, <sup>13</sup>C NMR, HSQC, HMBC, COSY, NOESY, IR, HRESIMS và so sánh các số liệu phổ có được với tài liệu tham khảo. Đây là lần đầu tiên aglaiadoratol (1) được tìm thấy trên thế giới. Đây cũng là lần đầu tiên hợp chất 3 và 4 được tìm thấy trong cây ngâu Biên Hòa.

## LỜI CẢM ƠN

Nghiên cứu này được tài trợ bởi Quỹ Phát triển Khoa học và Công nghệ Việt Nam (NAFOSTED) thông qua đề tài mã số 104.01-2016.62.

## DANH MỤC TỪ VIẾT TẮT

br: broad

COSY: Correlation spectroscopy

d: doublet

DEPT: Distortionless enhancement by polarization transfer

HMBC: Heteronuclear multiple Bond correlation

HRESIMS: High resolution electrospray ionisation mass spectrometry

HSQC: Heteronuclear single quantum correlation

IR: Infra red

m: multiplet

NMR: Nuclear magnetic resonance

NOESY: Nuclear Overhauser effect spectroscopy

q: quartet

s: singlet

t: triplet

## XUNG ĐỘT LỢI ÍCH

Nhóm tác giả tuyên bố không có xung đột lợi ích.

## ĐÓNG GÓP CỦA TÁC GIẢ

Tác giả Lê Chí Hào, Nguyễn Ngọc Diễm Thy: tra cứu và tổng hợp tài liệu, ly trích, phân lập chất, xử lý phổ, phân tích phổ.

Tác giả Nguyễn Thị Thảo Ly, Bùi Quốc Thái, Trần Thu Phương: lên quy trình, hướng dẫn thực nghiệm, đo mẫu, xác định cấu trúc.

Tác giả Nguyễn Thị Thảo Ly, Lê Chí Hào: viết bản thảo.

Tác giả Nguyễn Thị Lệ Thu, Nguyễn Diệu Liên Hoa: kiểm tra cấu trúc, sửa và hoàn chỉnh bản thảo.

## TÀI LIỆU THAM KHẢO

- Mabberley DJ. Flowering Plants. Eudicots: Sapindales, Cucurbitales, Myrtaceae, Kubitzki K Ed., Vol. X, Springer, Heidenberg. 2011;
- Harneti D, Supriadin A, Ulfah M, Safiri A, Supratman U, Awang K, Hayashi H. Cytotoxic constituents from the bark of *Aglaiia eximia* (Meliaceae). *Phytochemistry Letters*. 2014;8:28-31; Available from: <https://doi.org/10.1016/j.phytol.2014.01.005>.
- Hộ PH. Cây cỏ Việt Nam, Quyển 2, NXB Trẻ, Tp. HCM. 1999;
- Hộ PH. Cây cỏ vị thuốc ở Việt Nam, NXB Trẻ, Tp. HCM. 2006;
- Chi VV. Từ điển cây thuốc Việt Nam, NXB Y học, Tp. HCM. 1997;

6. Salim AA, Chai HB, Rachman I, Riswan S, Kardono LB, Farnsworth NR, Carcache-Blanco EJ, Kinghorn AD. Constituents of the leaves and stem bark of *Aglaia foveolata*, Tetrahedron. 2007;63:7926-7934;PMID: 18698338. Available from: <https://doi.org/10.1016/j.tet.2007.05.074>.
7. Brader G, Vajrodaya S, Greger H, Bacher M, Kalchhauser H, Hofer O. Bisamides, lignans, triterpenes, and insecticidal cyclopenta[b]benzofurans from *Aglaia* species, Journal of Natural Products. 1998;61:1482-1490;PMID: 9868148. Available from: <https://doi.org/10.1021/np9801965>.
8. Leong KH, Looi CY, Loong XM, Cheah FK, Supratman, Litaudon M, Mustafa MR, Awang K. Triterpenes and steroids from the leaves of *Aglaia exima* (Meliaceae), Fitoterapia. 2012;83:1391-1395;PMID: 23098876. Available from: <https://doi.org/10.1016/j.fitote.2012.10.004>.
9. Ebada SS, Lajkiewicz N, Porco Jr JA, Li-Weber M, Proksch P. Chemistry and biology of rocaglamides (= flavaglines) and related derivatives from *Aglaia* species (Meliaceae). Progress in the Chemistry of Organic Natural Products. 2011;94:1-58;PMID: 21833837. Available from: [https://doi.org/10.1007/978-3-7091-0748-5\\_1](https://doi.org/10.1007/978-3-7091-0748-5_1).
10. An FL, Wang JS, Wang H, Wang XB, Yang MH, Guo QL, Dai Y, Luo J, Kong LY. Cytotoxic flavonol-diamide [3+2] adducts from the leaves of *Aglaia odorata*. Tetrahedron. 2015;71:2450-2457; Available from: <https://doi.org/10.1016/j.tet.2015.02.028>.
11. Liu B, Xu YK. Cytotoxicity and synergistic effect of the constituents from roots of *Aglaia odorata* (Meliaceae), Natural Product Research. 2016;30:433-437;PMID: 25742723. Available from: <https://doi.org/10.1080/14786419.2015.1016940>.
12. Zhang H, Song ZJ, Chen WQ, Wu XZ, Xu HH. Chemical constituents from *Aglaia odorata* Lour.. Biochemical Systematics and Ecology. 2012;41:35-40; Available from: <https://doi.org/10.1016/j.bse.2011.12.022>.
13. Cai X, Luo X, Zhou J, Hao X. Compound representatives of a new type of triterpenoid from *Aglaia odorata*. Organic Letters. 2005;7:2877-2879. Liu B, Xu YK. (2016), Cytotoxicity and synergistic effect of the constituents from roots of *Aglaia odorata* (Meliaceae), Natural Product Research. 2016;30:433-437;PMID: 25742723. Available from: <https://doi.org/10.1080/14786419.2015.1016940>.
14. Gottlieb HE, Kotlyar V, Nudelman A. NMR chemical shifts of common laboratory solvents as trace impurities, Journal of Organic Chemistry. 1997;62:7512-7515;PMID: 11671879. Available from: <https://doi.org/10.1021/jo971176v>.
15. Liu J, Yang SP, Ni G, Gu YC, Yue JM. Triterpenoids from *Aglaia odorata* var. *microphyllina*. Journal of Asian Natural Products Research, 2012;14:929-939;PMID: 23046464. Available from: <https://doi.org/10.1080/10286020.2012.730698>.
16. Salazar GCM, Silva GDF, Duarte LP, Vieira-Filho SA, Lula IS. Two epimeric friedelane triterpenes isolated from *Maytenus truncate* Reiss: <sup>1</sup>H and <sup>13</sup>C chemical shift assignments, Magnetic Resonance in Chemistry. 2000;38:977-980; Available from: [https://doi.org/10.1002/1097-458X\(200011\)38:11<977::AID-MRC757>3.0.CO;2-9](https://doi.org/10.1002/1097-458X(200011)38:11<977::AID-MRC757>3.0.CO;2-9).
17. Monthong W, Pichuanchom S, Nuntasae N, Pompi-mon W. (+)-Syringaresinol lignan from new species *Magnolia thailandica*, The American Journal of Applied Sciences. 2011;8:1268-1271; Available from: <https://doi.org/10.3844/ajassp.2011.1268.1271>.
18. Li CP, Chang XJ, Fang L, Yao JB, Wang RW, Zhan ZJ, Ying YM, Shan WG. A new ruminic acid derivative from the roots of *Cudrania tricuspidata*. Chemistry of Natural Compounds. 2016;52:202-204; Available from: <https://doi.org/10.1007/s10600-016-1594-7>.

# Chemical constituents of *Aglaia odorata* and *Aglaia hoensis*

Le Chi Hao, Nguyen Ngoc Diem Thy, Nguyen Thi Thao Ly, Nguyen Thi Le Thu, Bui Quoc Thai, Tran Thu Phuong, Nguyen Dieu Lien Hoa\*



Use your smartphone to scan this QR code and download this article

## ABSTRACT

*Aglaia* is the largest genus of the Meliaceae family with about 120 species, which grow mainly in the tropical and subtropical regions. In Vietnam, the genus contains about 30 species. Many are used in folk medicine for the treatment of different diseases. Rocaglamides, bisamides, lignans, triterpenoids and steroids are the main classes of compounds found in the genus. Some of them exhibit diverse biological activities. This research work reports the isolation of four compounds from *A. odorata* and *A. hoensis*. Extraction was carried out using Soxhlet extractors with organic solvents followed by concentration of the solvents to yield crude extracts. Isolation was performed using column chromatography on silica gel and gel permeation on Sephadex LH-20. Chemical structures were determined using 1D NMR ( $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$  NMR, DEPT), 2D NMR (HSQC, HMBC, COSY, NOESY), IR and HRESIMS spectroscopic methods, and comparison of the spectral data with those in literature. Two triterpenoids, aglaiadoratol and  $3\beta$ -friedelinol, were isolated from the whole tree of *A. odorata*. Two other compounds, (+)-syringaresinol lignan and *threo*-9,10-*O*-isopropylidene-13-hydroxy-(11*E*)-octadecenoic acid, a derivative of fatty acid, were obtained from the bark of *A. hoensis*. Among the four isolated compounds, this is the first time that aglaiadoratol has been reported in the world. In addition, (+)-syringaresinol lignan and *threo*-9,10-*O*-isopropylidene-13-hydroxy-(11*E*)-octadecenoic acid are reported here for the first time in *A. hoensis*.

**Key words:** *Aglaia odorata*, *Aglaia hoensis*, isolation, structure determination, triterpenoids, lignan, derivative of fatty acid

Faculty of Chemistry, University of Science, Vietnam National University Ho Chi Minh City, Vietnam

## Correspondence

**Nguyen Dieu Lien Hoa**, Faculty of Chemistry, University of Science, Vietnam National University Ho Chi Minh City, Vietnam

Email: ndlhoa@hcmus.edu.vn

## History

- Received: 08-3-2021
- Accepted: 05-5-2021
- Published: 09-5-2021

DOI : 10.32508/stdjns.v5i3.1035



## Copyright

© VNU-HCM Press. This is an open-access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution 4.0 International license.



**Cite this article :** Hao L C, Thy N N D, Ly N T T, Thu N T L, Thai B Q, Phuong T T, Hoa N D L. **Chemical constituents of *Aglaia odorata* and *Aglaia hoensis*** . *Sci. Tech. Dev. J. - Nat. Sci.*; 5(3):1245-1255.