Tạp chí Phát triển Khoa học và Công nghệ – Natural Sciences 2024, 8(4):3198-3206

Open Access Full Text Article

Bài nghiên cứu

Thành phần hóa học của cao ethyl Acetate từ lá cây chân chim bầu dục (*Schefflera elliptica*)

Ngô Trọng Nghĩa[1], Lê Hoàng Vân[2], Đặng Thị Hồng Ngọc[1], Lý Hoàng Diễm[1], Nguyễn Thị Kim Phụng[1], Huỳnh Kim Yến[1], Đặng Văn Sơn[3], Nguyễn Tấn Phát[4,*]

TÓM TẮT

Cây Chân chim bầu dục (*Schefflera elliptica*) thuộc họ Nhân sâm (Araliaceae) là cây tiểu mộc phân bố nhiều nơi ở Việt Nam. Cây được sử dụng trong dân gian để điều trị các bệnh như đau nhức gân cốt, trị phong thấp, ung thư và kích thích tiêu hoá. Hiện chưa có bất kỳ nghiên cứu nào về thành phần hoá học của cây Chân chim bầu dục ở Việt Nam cũng như trên thế giới. Vì vậy đây là lần đầu tiên tiến hành nghiên cứu về thành phần hóa học của loài này giúp cung cấp thông tin sơ bộ về thành phần hoá thực vật cũng như định hướng cho các nghiên cứu về hoạt tính sinh học. Lá cây Chân chim bầu dục được phơi khô, nghiền bột và trích kiệt với ethanol 96° ở nhiệt độ phòng. hần dịch chiết được lọc và cô loại dung môi thu lấy cao thô ethanol. Cao thô ethanol này được chiết lỏng-lỏng lần lượt với -hexane, EtOAc thu được các cao - hexane, cao ethyl acetate. Từ cao ethyl acetate của lá cây Chân chim bầu dục thu hái ở Tịnh Biên, An Giang đã phân lập được năm hợp chất, gồm hai phytosphingolipid là 1-*O*-β-D-glucopyranosyl-(2*S*,3*S*,4*R*,9*Z*)-2-[(2'*R*)-2'-hydroxytetracosanoylamino] -octadec-9-en-1,3,4-triol (**1**), 1-*O*-β-D-glucopyranosyl-(2*S*,3*S*,4*R*,9*E*)-2-[(2'*R*)-2'-hydroxyhexa decanoylamino]-octadec-9-en-1,3,4-triol (**2**), và ba flavonoid là kaempferol (**3**), quercetin (**4**), astragalin (**5**) bằng phương pháp sắc ký cột pha thường, pha đảo, kết hợp với sắc ký lớp mỏng. Cấu trúc hóa học của các hợp chất này được xác định dựa vào dữ liệu khối phổ phân giải cao một lần HR-ESI-MS, hai lần HR-ESI-MS/MS, phổ cộng hưởng từ hạt nhân 1D & 2D NMR, và kết hợp so sánh tài liệu tham khảo. Đây là lần đầu tiên các hợp chất này (**1**-**5**) được phân lập từ loài . *elliptica*, cũng như đây là lần đầu tiên hai hợp chất **1**, **2** được xác định từ chi Chân chim (*Schefflera*).

Từ khoá: Chân chim bầu dục, Schefflera elliptica, họ Nhân sâm, phytosphingolipid, flavonoid

[1]*Trường Đại học Kiên Giang, Kiên Giang*

[2]*Trường THPT Kiến Tường, Long An*

[3]*Viện Sinh học Nhiệt đới – Viện Hàn lâm Khoa học và Công nghệ Việt Nam (ITB-VAST)*

[4]*Viện Công nghệ Hoá học – Viện Hàn lâm Khoa học và Công nghệ Việt Nam (ICT-VAST)*

Liên hệ

Nguyễn Tấn Phát, Viện Công nghệ Hoá học – Viện Hàn lâm Khoa học và Công nghệ Việt Nam (ICT-VAST)

Email: ntphat@ict.vast.vn

Lịch sử

- Ngày nhận: 23-2-2024
- Ngày sửa đổi: 30-5-2024
- Ngày chấp nhận: 04-12-2024
- Ngày đăng: 31-12-2024

DOI :

https://doi.org/10.32508/stdjns.v8i4.1371

Check for updates

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.

VNUHCM PRESS

MỞ ĐẦU

Chân chim bầu dục có tên khoa học là *Schefflera elliptica* (Bl.) Harms., thuộc họ Nhân sâm (Araliaceae). Trong dân gian cây Chân chim bầu dục được dùng điều trị các bệnh như đau nhức gân cốt, trị phong thấp, ung thư và kích thích tiêu hoá [1–3]. Về hoạt tính sinh học, cũng chỉ có công trình của nhóm tác giả Nguyễn Thị Thuý Hạnh đánh giá khả năng hiệp lực của *S. elliptica* với *S. corymbiformis*, *S. sp3*, và Hồng sâm thuộc họ Nhân sâm (Araliaceae) trên tác dụng tăng lực và chịu đựng stress nóng [4]. Ở Việt Nam, nghiên cứu về loài *S. elliptica* cũng chỉ là khảo sát định tính sơ bộ về thành phần hóa học, định lượng saponin tổng và cô lập được một sapogenin là acid oleanolic từ việc thuỷ phân saponin tổng [5]. Bài báo này trình bày kết quả phân lập và xác định cấu trúc hai phytosphingolipid và ba flavonoid từ cao ethyl acetate lá Chân chim bầu dục.

VẬT LIỆU VÀ PHƯƠNG PHÁP

Hóa chất và thiết bị

Phổ cộng hưởng từ hạt nhân đo trên máy Bruker AM600 [600 MHz (^{1}H-NMR) và 150 MHz (^{13}C-NMR)] (sử dụng tetramethyl silane (TMS) làm chất nội chuẩn). Phổ HR-ESI-MS và HR-ESI-MS/MS được ghi trên máy LC-X500R QTOF. Sắc ký cột với chất hấp phụ là silica gel pha thường (240-430 mesh), pha đảo RpC_{18} và các dung môi *n*-hexane (H), $CHCl_3$, EtOAc, và MeOH.

Đối tượng nghiên cứu

Mẫu lá cây Chân chim bầu dục (*Schefflera elliptica*) thu hái tại huyện Tịnh Biên, tỉnh An Giang, Việt Nam vào tháng 5 năm 2023 được định danh bởi PGS. TS. Đặng Văn Sơn, Viện Sinh học Nhiệt đới – Viện Hàn Lâm Khoa học Công nghệ Việt Nam.

Chiết xuất và phân lập các hợp chất

Bột lá cây Chân chim bầu dục khô (10 kg) được trích kiệt với EtOH 96°, lọc bỏ bã, phần dịch chiết được cô loại dung môi dưới áp suất thấp thu được cao thô EtOH (960 g). Sau đó, cao thô EtOH được thêm

Trích dẫn bài báo này: Nghĩa N T, Vân L H, Ngọc D T H, Diễm L H, Phụng N T K, Yến H K, Sơn D V, Phát N T. **Thành phần hóa học của cao ethyl Acetate từ lá cây chân chim bầu dục (*Sche lera elliptica*).** *Sci. Tech. Dev. J. - Nat. Sci.* 2024; 8(4):3198-3206.

(200 mL) nước, chiết lỏng-lỏng lần lượt với -hexane, EtOAc thu được các cao - hexane SEH (220 g), cao ethyl acetate SEE (150 g) và dịch nước SEW (700 g). Cao SEE (150 g) tiến hành sắc ký cột silica gel pha thường với hệ dung môi có độ phân cực tăng dần -hexane:EtOAc:MeOH (-hexane:EtOAc 75:25, *n*-hexane:EtOAc 50:50, *n*-hexane:EtOAc 25:75, EtOAc 100%, EtOAc:MeOH 90:10, EtOAc:MeOH 80:20, *v/v*) thu được sáu phân đoạn chính SEE.I-VI. Phân đoạn SEE.II (27 g) được sắc ký cột silica gel pha thường rửa giải với hệ dung môi (H:EtOAc, 30:70 ® 0:100, *v/v*) thu tám phân đoạn nhỏ (SEE.II.1-8). Tại phân đoạn SEE.II.4 (4,5 g), tiếp tục sắc ký cột silica gel pha thường rửa giải với hệ $CHCl_3$:MeOH (98:2 ® 85:15, *v/v*) thu được hợp chất **3** (10 mg) và hợp chất **4** (15 mg). Phân đoạn SEE.IV (35 g) được sắc ký cột silica gel pha thường với hệ dung môi rửa giải là H:EtOAc (25:75 ® 0:100, *v/v*), và EtOAc:MeOH (90:10 và 80:20, *v/v*) thu được sáu phân đoạn nhỏ (SEE.IV.1-6). Tại phân đoạn SEE.IV.2 (3,5 g) tiếp tục sắc ký cột silica gel pha thường rửa giải với hệ $CHCl_3$:MeOH (95:5 ® 85:15, *v/v*) thu được hỗn hợp **1** và **2** (100 mg). Hỗn hợp **1** và **2** (100 mg) tiếp tục được tinh chế bằng sắc ký cột silica gel pha đảo RpC_{18} rửa giải bằng W:MeOH (70:30, *v/v*) thu được hợp chất **1** (15 mg) và hợp chất **2** (20 mg). Tại phân đoạn SEE.IV.3 (6.5 g) tiếp tục sắc ký cột silica gel pha thường rửa giải với hệ $CHCl_3$:MeOH (95:5® 85:15, *v/v*) thu được hợp chất **5** (25 mg).

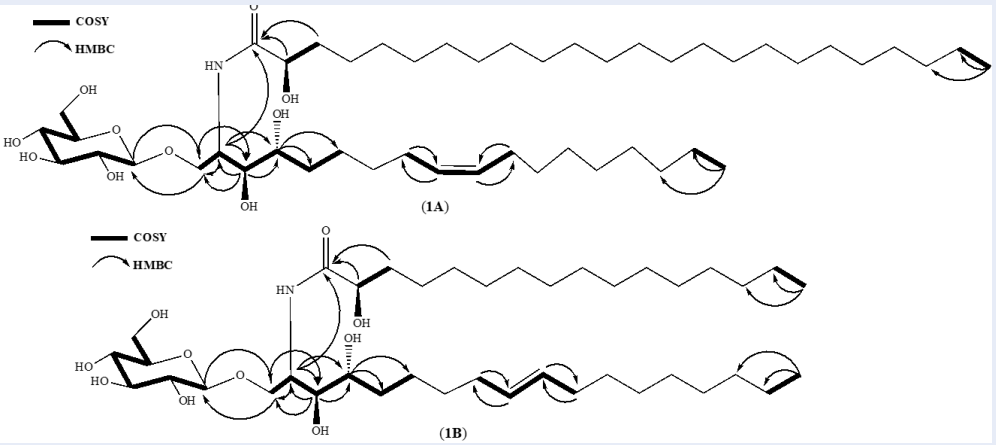
KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

Hợp chất **1** dạng bột, màu trắng, tan trong methanol. Phổ HR-ESI-MS (ion âm) cho mũi ion phân tử giả với *m/z* $[M-H]^-$ 842,6668 ứng với $C_{48}H_{92}NO_{10}$ (tính toán 842,6721) hổ HR-ESI-MS (ion dương) cho mũi ion phân tử giả *m/z* $[M+H]^+$ 844,6831 ứng với $C_{48}H_{94}NO_{10}$ (tính toán 844,6878), giúp xác định CTPT của **1** là $C_{48}H_{93}NO_{10}$.

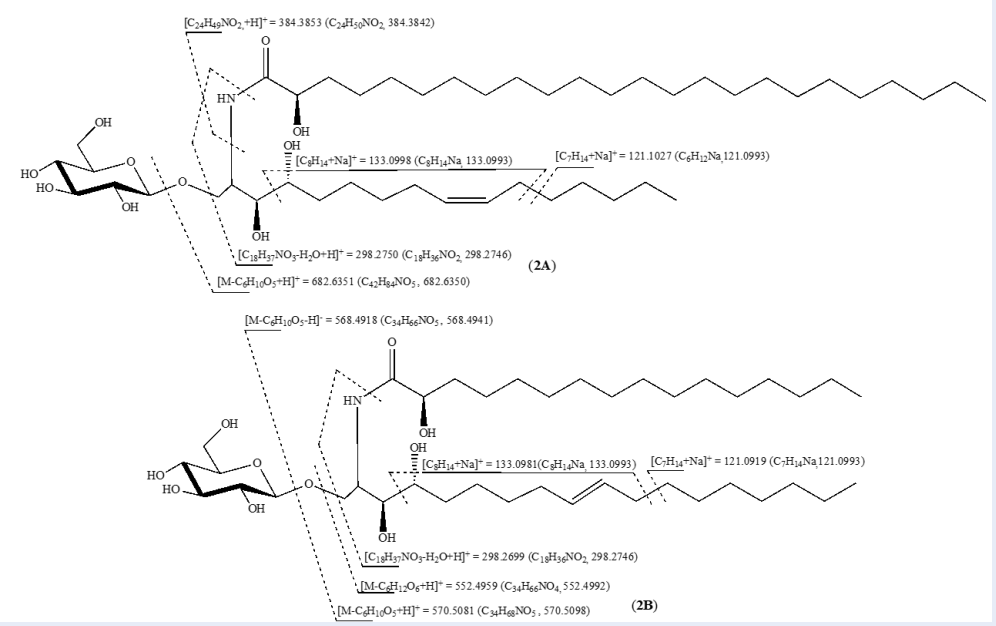
Phổ ^{1}H-NMR (600 MHz, CD_3OD, d ppm, *J* Hz) và ^{13}C-NMR (150 MHz, CD_3OD, d ppm) (Bảng 1) của hợp chất **1** cho các tín hiệu của một proton methine ở δ_H 4,28 (1H, *dd d*, *J* = 6,0, 6,0, 3,6 Hz, H-2) tương ứng với carbon amidomethine ở δ_C 51,7 (C-2), cùng với carbon carbonyl ở δ_C 177,1 (C-1') đặc trưng cho liên kết amide bậc hai (>CH-NH-CO) của phytosphingolipid[6–9]. Ngoài ra, phổ HSQC cho thấy proton anomer ở δ_H 4,31 (1H, *d*, *J* = 7,8 Hz, H-1") tương quan với carbon ở δ_C 104,7 (C-1") và hai proton oxymethylene ở δ_H 3,89 (1H, *brd*, *J* = 10,8 Hz, H-6"a), 3,69 (1H, *dd*, *J* = 12,0, 4,8 Hz, H-6") tương quan với carbon ở δ_C 62,7 (C-6"), xác nhận hợp chất **1** có đơn vị đường *O*-β-D-glucopyranose (Glc). Phổ ^{13}C-NMR của hợp chất **1** kết hợp với DEPT cho thấy còn có hai carbon olefine ở δ_C 131,0 (C-9), 130,8 (C-10), hai carbon methylene ở δ_C 28,4 (C-8), 28,3 (C-11), cho thấy hợp chất **1** có dây acid béo mang nối đôi có cấu hình *Z*[6,9]. Phổ HMBC (Hình 1A) của hợp chất **1** cho thấy các tương tác giữa proton oxymethine ở δ_H 4,04 (1H, *dd*, *J* = 7,8, 4,2 Hz, H-2') với carbon carbonyl ở δ_C 177,1 (C-1'), proton oxymethylene ở δ_H 4,07 (1H, *dd*, *J* = 10,8, 6,6 Hz, H-1a), 3,84 (1H, *dd*, *J* = 10,8, 4,2 Hz, H-1b) với ba carbon ở δ_C 69,9 (C-1), 51,6 (C-2), 75,5 (C-3); proton oxymethine ở δ_H 3,62 (1H, *dd*, *J* = 6,0, 6,0 Hz H-3) với ba carbon ở δ_C 69,9 (C-1), 51,7 (C-2), 73,0 (C-4). Bên cạnh đó, phổ COSY (Hình 1A) của **1** cho thấy sự tương quan giữa H-1a (δ_H 4,07), H-1b (δ_H 3,84), H-3 (δ_H 3,62) với H-2 (δ_H 4,28), giữa H-3 (δ_H 3,62) với H-4 (δ_H 3,54), giúp xác định dây acid béo có nhóm hydroxy ở vị trí C-2' và phần phytosphingosin có nhóm hydroxy ở C-1, C-3, C-4. Ngoài ra, proton anomer ở δ_H 4,31 (H-1") tương tác với carbon ở δ_C 69,9 (C-1), chứng tỏ đường Glc gắn vào phần phytosphingosin vị trí C-1.

Phổ HR-ESI-MS/MS (ion dương) cho các mảnh ion *m/z* $[M-C_6H_{10}O_5+H]^+$ 682,6351 ứng với $C_{42}H_{84}NO_5$ (tính toán 682,6350), giúp xác định **1** có một đơn vị đường 6 carbon $C_6H_{12}O_6$. hổ HR-ESI-MS/MS (ion dương) (Hình 2A) cho thấy các phân mảnh ion *m/z* $[M-C_6H_{11}O_5+H-C_{18}H_{34}O_3+H]^+$ 384,3853 ứng với $C_{24}H_{50}$ O_2(tính toán 384,3842), *m/z* $[M-C_6H_{10}O_5+H-C_{24}H_{47}O_2-H_2O+H]^+$ 298,2741 ứng với $C_{18}H_{36}$ O_2(tính toán 298,2746), giúp xác định phần acid béo no 24 carbon và suy ra phần phytosphingosin 18 carbon, mang một nối đôi. Ngoài ra, hổ HR-ESI-MS/MS (ion dương) (Hình 2A) còn có các phân mảnh ion *m/z* $[C_8H_{14}+Na]^+$ 133,0998 ứng với $C_8H_{14}Na$(tính toán 133,0993), *m/z* $[C_7H_{14}+Na]^+$ 121,1027 ứng với C_7H_{14} Na(tính toán 121,0993), đặc trưng cho việc cắt nối ở vị trí β của nối đôi trong chuyển vị McLafferty[7,10], đã giúp xác định vị trí của nối đôi ở C-9 và C-10. Mặt khác, dựa vào độ dich chuyển hoá học của proton H-2 (δ_H 4,28), và của các carbon C-1 (69,9), C-2 (51,7), C-3 (75,6), C-4 (73,0), C-1' (177,1), và C-2' (73,0) đã xác định cấu hình của hợp chất **1** là 2*S*,3*S*,4*R*,2'*R*[9,11,12]. Từ các dữ liệu phổ HR-ESI-MS, HR-ESI-MS/MS, NMR và so sánh với tài liệu[6–13], cấu trúc của hợp chất **1** được xác định là 1-*O*-β-D-glucopyranosyl-(2*S*,3*S*,4*R*,9*Z*)-2-[(2'*R*)-2'-hydroxytetracosanoylamino]-octadec-9-en-1,3,4-triol.

Hợp chất **2** có dạng bột màu trắng, tan tốt trong methanol. Phổ HR-ESI-MS (ion âm) cho mũi ion phân tử giả với *m/z* $[M-H]^-$ 730,5438 ứng với $C_{40}H_{76}NO_{10}$ (tính toán 730,5469) phổ HR-ESI-MS (ion dương) cho mũi ion phân tử giả *m/z* $[M+H]^+$ 732.5626 ứng với $C_{40}H_{78}NO_{10}$ (tính toán 732,5626), *m/z* $[M+Na]^+$ 754,5449 ứng với $C_{40}H_{77}NO_{10}Na$



Hình 1: Các tương tác HMBC, COSY chính của **1** (1A) và **2** (1B)



Hình 2: Các phân mảnh ion chính của **1** (2A) và **2** (2B)

(tính toán 754,5445), giúp xác định CTPT của hợp chất **2** là $C_{40}H_{77}NO_{10}$.

Phổ ^{1}H-NMR (600 MHz, CD_3OD, d ppm, *J* Hz) và ^{13}C-NMR (150 MHz, CD_3OD, d ppm) (Bảng 1) của **2** cho các tín hiệu của một phytosphingolipid tương tự như hợp chất **1**, tuy nhiên hai carbon olefine ở δ_C 131,4 (C-9), 131,5 (C-10), hai carbon methylene ở δ_C 33,8 (C-8), 33,7 (C-11) bị dịch chuyển về phía trường thấp hơn so với hai carbon olefine ở δ_C 131,0 (C-9), 130,8 (C-10), hai carbon methylene ở δ_C 28,4 (C-8), 28,3 (C-11) ở hợp chất **1**, giúp xác định phần dây acid béo của **2** mang nối đôi có cấu hình *E*[6,9]. Phổ HMBC của hợp chất **2** (Hình 1B) cho thấy các tương tác giữa proton oxymethine ở δ_H 4,04 (1H, *dd*, *J* = 7,8, 4,2 Hz, H-2') với carbon carbonyl ở δ_C 177,1 (C-1'), proton oxymethylene ở δ_H 4,08 (1H, *dd*, *J* = 10,2, 6,6 Hz, H-1a), 3,83 (1H, *dd*, *J* = 10,2, 4,2 Hz, H-1b) với ba carbon ở δ_C 70,0 (C-1), 51,6 (C-2), 75,5 (C-3); proton oxymethine ở δ_H 3,64 (1H, *dd*, *J* = 6,0, 6,0 Hz, H-3) với ba carbon ở δ_C 70,0 (C-1), 51,6 (C-2), 73,0 (C-4), giúp xác định dây acid béo có nhóm hydroxy ở vị trí C-2' và phần phytosphingosin có nhóm hydroxy ở C-1, C-3, C-4, tương tự hợp chất **1**. Ngoài ra, proton anomer ở δ_H 4,31 (H-1") tương tác với carbon ở

δ_C 70,0 (C-1), chứng tỏ đường Glc gắn vào phần phytosphingosin vị trí C-1, tương tự hợp chất **1**.

Phổ HR-ESI-MS/MS (ion dương) của **2** (Hình 2B) cho các mảnh ion *m/z* $[M-C_6H_{10}O_5+H]^+$ 570,5081 ứng với $C_{34}H_{68}NO_5$ (tính toán 570,5098), *m/z* $[M-C_6H_{12}O_6+H]^+$ 552,4959 ứng với $C_{34}H_{66}NO_4$ (tính toán 552,4992), giúp xác định **2** có một đơn vị đường sáu carbon $C_6H_{12}O_6$. Ngoài ra, phổ HR-ESI-MS/MS (ion dương) cho thấy phân mảnh giả ion quan trọng *m/z* $[C_{18}H_{37}O_3-H_2O+H]^+$ 298,2699 ứng với $C_{18}H_{36}O_2$ (tính toán 298,2746), giúp xác định phần acid béo no 16 carbon và suy ra phần phytosphingosin 18 carbon, mang một nối đôi. Thêm nữa, hổ HR-ESI-MS/MS (ion dương) của hợp chất **2** còn có các phân mảnh ion *m/z* $[C_8H_{14}+Na]^+$ 133,0981 ứng với $C_8H_{14}Na$ (tính toán 133,0993), *m/z* $[C_7H_{14}+Na]^+$ 121,0919 ứng với $C_7H_{14}Na$ (tính toán 121,0993), đặc trưng cho việc cắt ở vị trí β của nối đôi trong chuyển vị McLafferty [7-10], đã giúp xác định vị trí của nối đôi ở C-9 và C-10, tương tự **1**. Mặc khác, dựa vào δ_H của H-2 (4,27), δ_C của C-1 (70,0), C-2 (51,6), C-3 (75,5), C-4 (73,0), C-1' (177,1), C-2' (73,0) đã xác định cấu hình của hợp chất **2** là 2*S*,3*S*,4*R*,2'*R*, tương tự hợp chất **1**[9,11,12]. Từ các dữ liệu phổ HR-ESI-MS, HR-ESI-MS/MS, NMR và so sánh với tài liệu[6–13], cấu trúc của hợp chất **2** được xác định là **1-*O*-β-D-glucopyranosyl-(2*S*,3*S*,4*R*,9*E*)-2-[(2' *R*)-2'-hydroxyhexadecanoylamino]-octadec -9-en -1,3,4-triol.**

Hợp chất **3** dạng bột, màu vàng tan tốt trong methanol. Phổ HR-ESI-MS (ion âm) cho mũi ion phân tử giả với *m/z* $[M-H]^-$ 285,0398 ($C_{15}H_9O_6$, tính toán 285,0399), giúp xác định CTPT của hợp chất **3** là $C_{15}H_{10}O_6$. Phổ ^{1}H-NMR (600 MHz, DMSO-d_6, d ppm) của hợp chất **3** (Bảng 2) cho các tín hiệu proton của nhóm hydroxyl kiểm nối ở δ_H 12,46 (1H, *s*, OH-5), hai proton methine vòng thơm ghép cặp *meta* với nhau ở δ_H 6,19 (1H, *d*, *J* = 2,4 Hz, H-6), 6,44 (1H, *d*, *J* = 1,8 Hz, H-8), bốn proton methine vòng thơm ghép cặp *ortho* với nhau ở δ_H 8,03 (2H, *d*, *J* = 9,0 Hz, H-2', H-6'), 6,92 (2H, *d*, *J* = 8,4 Hz, H-3', H-5'). Phổ ^{13}C-NMR (150 MHz, DMSO-d_6, d ppm) kết hợp với HSQC cho thấy hợp chất **3** (Bảng 2) có 15 carbon gồm một carbon carbonyl ở δ_C 175,9 (C-4), sáu carbon vòng thơm kề oxy, hai carbon bậc bốn vòng thơm, sáu carbon methine vòng thơm, chứng tỏ hợp chất **3** là 5-hydroxyflavone mang thêm ba nhóm hydroxyl. Phổ HMBC của hợp chất **3** cho thấy các tương tác giữa proton hydroxyl kiểm nối ở δ_H 12,46 (OH-5) với một carbon vòng thơm kề oxy ở δ_C 160,7 (C-5), giữa hai roton methine vòng thơm ở δ_H 6,19 (H-6), 6,44 (H-8) với carbon vòng thơm kề oxy ở δ_C 163,9 (C-7), giữa các proton methine vòng thơm ở δ_H 8,03 (H-2', H-6'), 6,92 (H-3', H-5') với carbon vòng thơm kề oxy ở δ_C 159,2 (C-4'), giúp xác định ba nhóm hydroxyl lần lượt gắn vào khung sườn flavone ở vị trí C-5, C-7, C-4'. Từ đó xác định carbon vòng thơm kề oxy còn lại ở δ_C 135,7 (C-3). Từ các dữ liệu phổ HR-ESI-MS, NMR và so sánh với tài liệu[14], cấu trúc của hợp chất **3** được xác định là **3,5,7,4'-tetrahydroxyflavone** (**kaempferol**).

Hợp chất **4** dạng bột, màu vàng, tan tốt trong methanol. Phổ HR-ESI-MS (ion âm) cho mũi ion phân tử giả với *m/z* $[M-H]^-$ 301,0341 ($C_{15}H_9O_7$, tính toán 301,0348), giúp xác định CTPT của hợp chất **4** là $C_{15}H_{10}O_7$. Phổ ^{1}H-NMR (600 MHz, CD_3OD, d ppm) của hợp chất **4** (Bảng 2) cho các tín hiệu của proton methine vòng thơm ở δ_H 7,65 (1H, *d d*, *J* = 9,0, 2,4 Hz, H-6') lần lượt ghép cặp *ortho* và *meta* với hai proton methine vòng thơm ở δ_H 6,90 (1H, *d*, *J* = 9,0 Hz, H-5'), 7,75 (1H, *d*, *J* = 1,8 Hz, H-2'), hai proton methine vòng thơm ghép cặp *meta* với nhau ở δ_H 6,41 (1H, *d*, *J* = 1,8 Hz, H-8), 6,20 (1H, *d*, *J* = 2,4 Hz, H-6). Phổ ^{13}C-NMR (150 MHz, CD_3OD, d ppm) kết hợp với phổ HSQC của hợp chất **4** (Bảng 2) cho thấy tín hiệu của 15 carbon gồm một carbon carbonyl ở δ_C 177,4 (C-4), bảy carbon vòng thơm mang oxy, hai carbon bậc bốn vòng thơm, năm carbon methine vòng thơm, giúp nhận định hợp chất **4** là 5-hydroxyflavone tương tự như hợp chất **3** nhưng mang thêm một nhóm hydroxyl so với hợp chất **3**. Phổ HMBC của hợp chất **4** cho thấy các tương tác giữa hai proton ở δ_H 6,41 (H-8), 6,20 (H-6) với carbon vòng thơm kề oxy ở δ_C 165,6 (C-7), giữa proton ở δ_H 6,20 (H-6) với carbon vòng thơm kề oxy ở δ_C 162,5 (C-5), giữa hai proton ở δ_H 6,90 (H-5'), 7,75 (H-2') với hai carbon vòng thơm kề oxy ở δ_C 146,2 (C-3'), 148,8 (C-4'), giúp xác định bốn nhóm hydroxyl lần lượt gắn vào khung sườn flavone ở vị trí C-5, C-7, C-3', C-4'. Từ đó xác định carbon vòng thơm kề oxy còn lại ở δ_C 137,2 (C-3). Từ các dữ liệu phổ HR-ESI-MS, NMR và so sánh với tài liệu[15], cấu trúc của hợp chất **4** được xác định là **3,5,7,3' ,4' -pentahydroxyflavone** (**quercetin**).

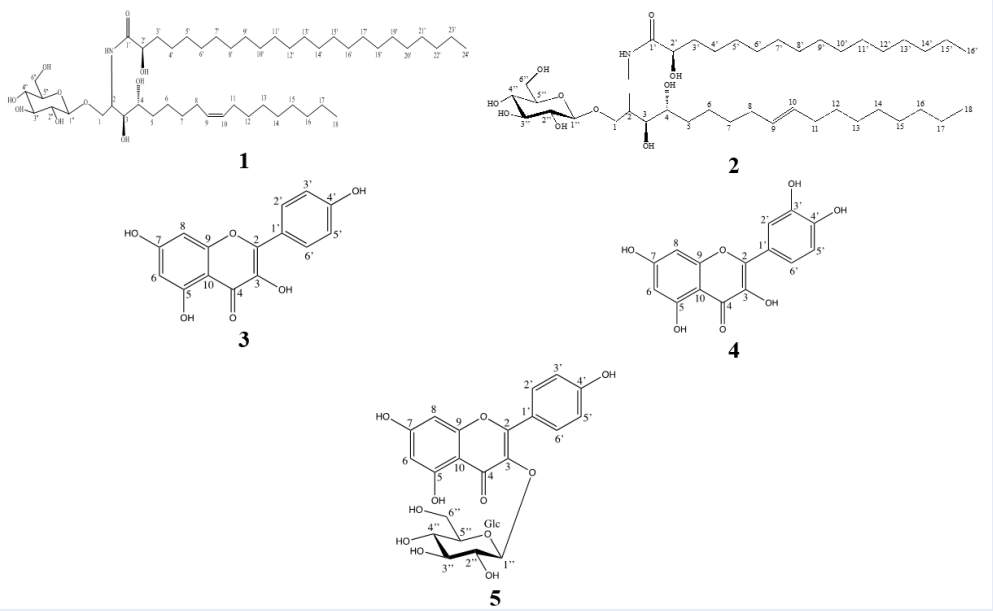
Hợp chất **5** dạng bột, màu vàng, tan trong methanol. Phổ HR-ESI-MS (ion âm) cho mũi ion phân tử giả với *m/z* $[M-H]^-$ 447,0925 ($C_{21}H_{19}O_{11}$, tính toán 447,0927), giúp xác định CTPT của hợp chất **5** là $C_{21}H_{20}O_{11}$. Phổ ^{1}H-NMR (600 MHz, CD_3OD, d ppm) của hợp chất **5** (Bảng 2) cho các tín hiệu của khung sườn kaempferol tương tự như hợp chất **3** với hai proton methine vòng thơm ghép cặp *meta* với nhau ở δ_H 6,23 (1H, *d*, *J* = 2,4 Hz, H-6), 6,43 (1H, *d*, *J* = 2,4 Hz, H-8), bốn proton methine vòng thơm ghép cặp *ortho* với nhau ở δ_H 8,07 (2H, *d*, *J* = 9,0 Hz, H-2', H-6'), 6,91 (2H, *d*, *J* = 9,0 Hz, H-3', H-5'). Ngoài

Bảng 1: Dữ liệu phổ ^{13}C, ^{1}H-NMR của 1, 2 đo trong CD_3OD

No.	1		No.	2	
	d ppm	δ ppm (số H, dạng mũi, J = Hz)		d ppm	δ ppm (số H, dạng mũi, J = Hz)
1	69,9	4,07 (1H, *dd*, 10,8, 6,6)	1	70,0	4,08 (1H, *dd*, 10,2, 6,6)
		3,84 (1H, *dd*, 10,8, 4,2)			3,83 (1H, *dd*, 10,2, 4,2)
2	51,7	4,28 (1H, *ddd*, 6,0, 6,0, 3,6)	2	51,6	4,27 (1H, *ddd*, 6,6, 6,0, 4,2)
3	75,6	3,62 (1H, *dd*, 6,0, 6,0)	3	75,5	3,64 (1H, *dd*, 6,0, 6,0)
4	73,0	3,54 (1H, t*d*, 6,6, 2,4)	4	73,0	3,54 (1H, t*d*, 6,6, 2,4)
5	33,0	1,68-1,72 (1H, m)	5	32,7	1,65-1,71 (1H, m)
		1,41-1,46 (1H, m)			1,41-1,44 (1H, m)
6	30,3	1,31 (brs)	6	30,3	1,31 (brs)
7	27,3	1,57-1,64 (1H, m)	7	27,3	1,60-1,65 (1H, m)
		1,40-1,44 (1H, m)			1,41-1,44 (1H, m)
8	28,4	2,06 (2H, m)	8	33,8	1,99 (2H, m)
9	130,8	5,39 (1H, m)	9	131,4	5,39 (1H, m)
10	131,0	5,39 (1H, m)	10	131,5	5,39 (1H, m)
11	28,3	2,06 (2H, m)	11	33,7	1,99 (2H, m)
12	27,3	1,61-1,64 (1H, m)	12	27,3	1,60-1,65 (1H, m)
		1,41-1,46 (1H, m)			1,41-1,44 (1H, m)
13→15	30,5-30,9	1,31 (brs)	13→15	30,3-30,9	1,31 (brs)
16	33,1		16	33,0	
17	23,7		17	23,7	
18	14,5	0,92 (3H, t, 7,2)	18	14,4	0,92 (3H, t, 7,2)
1’	177,1		1’	177,1	
2’	73,0	4,04 (1H, *dd*, 7,8, 4,2)	2’	73,0	4,04 (1H, *dd*, 7,8, 4,2)
3’	35,7	1,76-1,80 (1H, m)	3’	35,7	1,75-1,78 (1H, m)
		1,61-1,64 (1H, m)			1,60-1,65 (1H, m)
4’	26,1	1,41-1,46 (1H, m)	4’	26,1	1,41-1,44 (1H, m)
5’→21	30,5-30,9	1,31 (brs)	5’→13’	30,3-30,9	1,31 (brs)
22’	33,1		14’	33,1	
23’	23,7		15’	23,7	
24’	14,4	0,92 (3H, t, 7,2)	16’	14,4	0,92 (3H, t, 7,2)
1”	104,7	4,31 (1H, *d*, 7,8)	1”	104,6	4,31 (1H, *d*, 7,8)
2”	75,0	3,20 (1H, *dd*, 9,0, 7,8)	2”	75,0	3,20 (1H, *dd*, 9,0, 7,8)
3”	77,9	3,38 (1H, *dd*, 9,0, 9,0)	3”	77,8	3,39 (1H, *dd*, 9,0, 9,0)
4”	71,6	3,28-3,31 (1H, m)	4”	71,6	3,30-3,31 (1H, m)
5”	78,0	3,28-3,31 (1H, m)	5”	78,0	3,30-3,31 (1H, m)
6”	62,7	3,89 (1H, brd, 10,8)	6”	62,6	3,89 (1H, *dd*, 12,0, 1,2)
		3,69 (1H, *dd*, 12,0, 4,8)			3,70 (1H, *dd*, 12,0, 4,8)

Bảng 2: Dữ liệu phổ ^{13}C, ^{1}H-NMR của 3 đo trong DMSO-d_6 và 4, 5 đo trong CD_3OD=d_4

No.	3		4		5	
	dH	dC	dH	dC	dH	dC
2		146,9		148,0		158,6
3		135,7		137,2		135,4
4		175,9		177,4		179,4
5		160,7		162,5		163,0
6	6,19 (1H, *d*, 2,4)	98,2	6,20 (1H, *d*, 2,4)	99,3	6,23 (1H, d, J = 2,4)	100,2
7		163,9		165,6		166,9
8	6,44 (1H, *d*, 1,8)	93,5	6,41 (1H, *d*, 1,8)	94,4	6,43 (1H, d, J = 2,4)	95,1
9		156,2		158,3		158,9
10		103,1		104,5		105,5
1’		121,7		124,2		122,8
2’	8,03 (2H, *d*, 9,0)	129,5	7,75 (1H, *d*, 1,8)	116,0	8,07 (2H, d, J = 9,0)	132,3
3’	6,92 (2H, *d*, 8,4)	115,5		146,2	6,91 (2H, d, J = 9,0)	116,0
4’		159,2		148,8		161,5
5’	6,92 (2H, *d*, 8,4)	115,5	6,90 (1H, *d*, 9,0)	116,2	6,91 (2H, d, J = 9,0)	116,0
6’	8,03 (2H, *d*, 9,0)	129,5	7,65 (1H, *dd*, 9,0, 2,4)	121,7	8,07 (2H, d, J = 9,0)	132,3
OH-5	12,46 (1H, s)	57,9				
1”		50,6			5,27 (1H, d, J = 7,2)	104,2
2”		48,4			3,46 (1H, dd, J = 9,6, 7,2)	75,7
3”		151,8			3,43 (1H, dd, J = 9,0, 8,4)	78,0
4”		31,4			3,33 (1H, overlap)	71,3
5”		37,5			3,21-3,23 (1H, m)	78.4
6”		29,3			3,71 (1H, dd, J = 12,0, 2,4) 3,54 (1H, dd, J = 12,0, 5,4)	62,6



Hình 3: Cấu trúc các hợp chất được phân lập từ lá cây Chân chim bầu dục

ra, còn có một proton anomer ở δ_H 5,27 (1H, *d*, *J* = 7,2 Hz, H-1”), bốn proton oxymethine ở δ_H 3,46 (1H, *dd*, *J* = 9,6, 7,2 Hz, H-2”), 3,43 (1H, *dd*, *J* = 9,0, 8,4 Hz, H-3”), 3,33 (1H, *overlap*, H-4’), 3,21-3,23 (1H, *m*, H-5”), hai proton oxymethylene ở δ_H 3,71 (1H, *dd*, *J* = 12,0, 2,4 Hz, H-6”a), 3,54 (1H, *dd*, *J* = 12,0, 5,4 Hz, H-6”). Phổ ^{13}C-NMR (150 MHz, CD_3OD, d ppm) kết hợp với HSQC cho thấy hợp chất **5** (Bảng 2) có 21 carbon trong đó 15 carbon gồm một carbon carbonyl ở δ_C 179,6 (C-4), sáu carbon vòng thơm kề oxy, hai carbon bậc bốn vòng thơm, sáu carbon methine vòng thơm, chứng tỏ hợp chất **5** có phần aglycon là kaempferol, còn lại sáu carbon gồm một carbon anomer ở δ_C 104,1 (C-1”) tương quan với proton anomer ở δ_H 5,27 (1H, *d*, *J* = 7,2 Hz, H-1”), bốn carbon oxymethine ở δ_C 71,4-78,4 (C-2”àC-5”), một carbon oxymethylene ở δ_C 62,7 (C-6”), giúp xác định hợp chất **5** có phần đường là đơn vị đường *O*- -D-glucopyranose (Glc). Phổ HMBC của hợp chất **5** cho thấy các tương tác giữa hai roton methine vòng thơm ở δ_H 6,23 (H-6), 6,43 (H-8) với carbon vòng thơm kề oxy ở δ_C 166,1 (C-7), giữa các proton methine vòng thơm ở δ_H 8,07 (H-2’, H-6’), 6,91 (H-3’, H-5’) với carbon vòng thơm kề oxy ở δ_C 161,6 (C-4’), giúp xác định lại các vị trí quan trọng của khung sườn. Ngoài ra, còn thấy proton anomer ở δ_H 5,27 (H-1’) tương tác với carbon ở δ_C 135,5 (C-3). Từ các dữ liệu phổ HR-ESI-MS, NMR và so sánh với tài liệu [16], cấu trúc của hợp chất **5** được xác định là **3-*O*- -D-glucopyranosylkaempferol** (**astragalin**).

KẾT LUẬN

Bằng phương pháp sắc ký cột kết hợp với sắc ký lớp mỏng nhiều lần đã phân lập được hai phytosphingolipid là 1-*O*-β-D-glucopyranosyl-(2*S*,3*S*,4*R*,9*Z*)-2-[(2’*R*)-2’-hydroxytetracosanoylamino] -octadec-9-en-1,3,4-triol (**1**), 1-*O*-β-D-glucopyranosyl-(2*S*,3*S*,4*R*,9*E*)-2-[(2’*R*)-2’-hydroxyhexadeca noylamino]-octadec-9-en-1,3,4-triol (**2**) và ba flavonoid là kaempferol (**3**), quercetin (**4**), astragalin (**5**) (Hình 3) từ cao ethyl acetate chiết từ lá cây Chân chim bầu dục. Cấu trúc hóa học của các hợp chất này được xác định dựa vào phổ HR-ESI-MS, HR-ESI-MS/MS, NMR kết hợp so sánh tài liệu tham khảo. Đây là lần đầu tiên tất cả các hợp chất được công bố từ cây Chân chim bầu dục. Đây là lần đầu tiên các hợp chất (**1**, **2**) được phân lập từ chi Chân chim (*Schefflera)* .

LỜI CẢM ƠN

Nghiên cứu được tài trợ bởi đề tài cấp Bộ Giáo dục và Đào tạo trong khuôn khổ Đề tài mã số B2023-TKG-03.

DANH MỤC VIẾT TIT

^{1}H-NMR: Phổ cộng hưởng từ hạt nhân của 1.
^{13}C-NMR: Phổ cộng hưởng từ hạt nhân của ^{13}C.
H: *n*-hexane
EtOAc: Ethyl acetate
MeOH: Methanol

W: nước ct
s: Mũi đơn (singlet)
d: Mũi đôi (doublet)
m: Mũi đa (multilet)
brs: Mũi đơn bầu rộng (broad singlet)
dd: mũi đôi đôi (doublet of doublet)
dds: mũi đôi đôi đôi (doublet of doublet of doublets)
t: mũi ba (triplet)
TD: mũi BA-đôi (triplet of doublets)

XUNG ĐỘT LỢI ÍCH

Các tác giả cam đoan không có bất kỳ xung đột lợi ích nào trong bài nghiên cứu này.

ĐÓNG GÓP CỦA CÁC TÁC GIẢ

Ngô Trọng Nghĩa thu mẫu nguyên liệu, phân lập, tinh chế các hợp chất, xử lý dữ liệu phổ, viết bản thảo.
Lê Hoàng Vân, Đặng Thị Hồng Ngọc, Lý Hoàng Diễm, Nguyễn Thị Kim Phụng, Huỳnh Kim Yến phân lập, tinh chế các hợp chất.
Đặng Văn Sơn thu thập và định danh khoa học mẫu nguyên liệu.
Nguyễn Tấn Phát xác định cấu trúc các hợp chất, chỉnh sửa và hoàn thiện bản thảo.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. Võ Văn Chi. Từ điển cây thuốc Việt Nam. Nhà xuất bản Y học; 1997;.
2. Batugal, Pons A, Jayashree K, Lee SY and Jeffrey TO, Edistors. Medicinal plants research in Asia, Volume 1: The framework and project workplans, International plant genetic resources institute-Regional office for Asia. the Pacific and Oceania (IPGRI-APO), Serdang, Selangor DE, Malaysia; 2004;.
3. Sukhdev SH, Dev DR, Karan V. Compendium of medicinal and aromatic plants ASIA, Volume 2. United nations industrial development organization and the international centre for science and high technology; 2006;.
4. Nguyễn Thị Thúy Hạnh, Nguyễn Trần Châu, Đỗ Mai Anh, Trần Công Luận, Nguyễn Phương Dung. Nghiên cứu khả năng hiệp lực của 3 loài Schefflera với Hồng sâm thuộc họ Nhân sâm (Araliaceae) trên tác dụng tăng lực và chịu đựng stress nóng. Y học Tp. HCM. chuyên đề Y học cổ truyền. 2004; 8(2): 151-155;Available from: https://doi.org/10.52852/tcncyh.v138i2.72.
5. Trần Công Luận, Phan Văn Đệ, Đỗ Thanh Phú, Nguyễn Phương Dung, Nghiên cứu tạo nguồn nguyên liệu làm thuốc từ 3 loài (Schefflera elliptica, Schefflera corymbiformis, Schefflera sp3) thuộc họ nhân sâm (Araliaceae) có tác dụng chống stress và tăng lực. Đề tài cấp Bộ, Trung tâm Sâm và Dược liệu Tp. HCM; 2004;Available from: https://doi.org/10.54772/jomc.03.2024.574.
6. Mansoor TA, Shinde PB, Luo X, Hong JK, Lee CO, Sim CJ, Son BW, and Jung JH. Renierosides, Cerebrosides from a Marine Sponge Haliclona (Reniera) sp., Journal Natural Products. 2007; 70: 1481-1486. Available from: DOI: 10.1021/np070078u;Available from: https://doi.org/10.1021/np070078u.
7. Mbosso EJT, Nguedia JCA, Meyer F, Lenta BN, Ngouela S, Lallemand B, Mathieu VP, Antwerpen V, Njunda AL, Adiogo D, Tsamo E, Looze Y, Kiss R, Wintjens R. Ceramide, cerebroside and triterpenoid saponin from the bark of aerial roots of Ficus elastica (Moraceae). Phytochemistry. 2012; 83:95-103;Available from: doi.org/10.1016/j.phytochem.2012.07.010.
8. Park T, Mansoor TA, Shinde PB, Bao B, Hong J, and Jung JH. New Cerebrosides from a Marine Sponge Haliclona (Reniera) sp. Chemical and Pharmaceutical Bulletin. 2009; 57(1): 106-111;Available from: https://doi.org/10.1248/cpb.57.106.
9. Zhao B, Ren J, Yuan Z. Isolation of a new cerebroside from Codonopsis lanceolata, Biochemical Systematics and Ecology. 2013; 46: 26-28;Available from: https://doi.org/10.1016/j.bse.2012.09.004.
10. Nguyễn Kim Phi Phụng, Khối phổ - Lý thuyết – Bài tập – Bài giải, Nhà xuất bản Đại học Quốc gia Tp. HCM; 2004; 95;Available from: https://doi.org/10.54607/hcmue.js.18.8.3020(2021).
11. Liu A, Zou ZM. Xu LZ, Yang SL. A new cerebroside from Uvaria tonkinensis var. Journal of Asian Natural Product Research. 2005; 6: 861-865;.
12. Sugiyama S., Honda M., Higuchi R., and Komori T., Biologically active glycosides from asteroidea, XXVI, Stereochemistry of the four diastereomers of ceramide and ceramide lactoside, Liebigs Annlen der Chemie. 1991; 349-356;Available from: https://doi.org/10.1002/jlac.199119910161.
13. Ngo TN, Nguyen NDP, Nguyen NTL, Pham NKT, Phan NM, Bui TD, Dang VS, Tran CL, Mai DT, Nguyen TP. Markhasphingolipid A, new phytosphingolipid from the leaves of Markhamia stipulata var. canaense V.S. Dang. Natural Product Research. 2020, 34(13): 1820-1826;Available from: https://doi.org/10.1080/14786419.2018.1561686.
14. Chen Z, Lai J, Kao Y. The constituents of Cynanchum taiwanianum. Journal of the Chinese Chemical Society. 1991; 38: 393-396;Available from: https://doi.org/10.1002/jccs.199100067.
15. Hong SS, Choi Y, Suh H, Kang M, Shin J, Kwon O, Joa S. Flavonoid constituents of Acacia catechu. Journal of Applied Biological Chemistry. 2015; 58(2): 189−194;Available from: https://doi.org/10.3839/jabc.2015.030.
16. Kim HJ, Woo ER, Park HK. A novel lignan and flavonoids from Polygonum aviculare. Journal Natural Products. 1994; 57(5): 581-586;Available from: https://doi.org/10.1021/np50107a003.

Science & Technology Development Journal – Natural Sciences 2024; 8(4):3198-3206

Open Access Full Text Article

Research article

The phytochemical constituents of the ethyl acetate extract of the *Schefflera elliptica* leaves

Trong Nghia Ngo[1], Hoang Van Le[2], Thi Hong Ngoc Dang[2], Hoang Diem Ly[1], Thi Kim Phung Nguyen[1], Kim Yen Huynh[1], Van Son Dang[3], Tan Phat Nguyen[4,*]

ABSTRACT

Schefflera elliptica belonging totheAraliaceae family, is a shrub or small tree widely grown in many places in Vietnam. This plant is used in traditional Vietnamese medicine for the treatment of pain in tendons and bones, rheumatism, cancer, and to stimulate digestion. To the best of our knowledge, the phytochemical compositions and biological activities of this specieshave not been investigated. This is the first time a chemical investigation of . *elliptica has been* conducted. This study contributes to the acknowledgment of the phytochemical profile and provides a foundation for further biological investigations. The leaves of *S. elliptica* were dried, powdered, and extracted in ethanol 96° at room temperature to provide the crude extract. The crude extract was then subjected to liquid-liquid separation with -hexane and EtOAc, to obtain the -hexane, ethyl acetate extracts. From the ethyl acetate extract of the leaves of . *elliptica*, two phytosphingolipids, 1-*O*-β-D-glucopyranosyl-(2*S*,3*S*,4*R*,9*Z*)-2-[(2¢*R*)-2¢-hydroxytetracosanoylamino]-octadec-9-en-1,3,4-triol (**1**), and 1-*O*-β-D-glucopyranosyl-(2*S*,3*S*,4*R*,9*E*)-2-[(2'*R*)-2'-hydroxyhexadecanoylamino]-octadec-9-en-1,3,4-triol (**2**), along with three flavonoids, kaempferol (**3**), quercetin (**4**), and astragalin (**5**) were isolated by various chromatographic column techniques over normal-phase and/or reverse-phase silica gel, and confirmed by thin layer chromatography. The chemical structures of all separated substances were clearly elucidated using High Resolution Mass **spectrometry** with the ElectroSpray Ionization source, such as HR-ESI-MS, and HR-ESI-MS/MS techniques, Nuclear Magnetic Resonance spectroscopy 1D & 2D NMR data, and further comparison to those database of the published literatures. For the first time, all purified compounds were identified from this species, and compounds (**1**, **2**) were determined to be from the *Schefflera* genus.

Key words: Schefflera elliptica, Araliaceae, phytosphingolipid, flavonoid

[1]*Kien Giang University, Kien Giang*

[2]*Kien Tuong High School, Long An*

[3]*Institute of Tropical Biology, Vietnam Academy of Science and Technology*

[4]*Institute of Chemical Technology, Vietnam Academy of Science and Technology*

Correspondence

Tan Phat Nguyen, Institute of Chemical Technology, Vietnam Academy of Science and Technology

Email: ntphat@ict.vast.vn

History

- Received: 23-2-2024
- Revised: 30-5-2024
- Accepted: 04-12-2024
- Published Online: 31-12-2024

DOI : https://doi.org/10.32508/stdjns.v8i4.1371

Check for updates

Copyright

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

VNUHCM PRESS

Cite this article : Ngo T N, Le H V, Dang T H N, Ly H D, Nguyen T K P, Huynh K Y, Dang V S, Nguyen T P. **The phytochemical constituents of the ethyl acetate extract of the *Sche lera elliptica* leaves**. *Sci. Tech. Dev. J. - Nat. Sci.* 2024; 8(4):3198-3206.