

Thành phần hóa học của củ nghệ tím (*Curcuma zedoaria*)

Đỗ Văn Nhật Trường*, Nguyễn Xuân Hải, Lê Hữu Thọ, Nguyễn Thị Thanh Mai



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

TÓM TẮT

Loài cây *Curcuma zedoaria*, thuộc họ Gừng (Zingiberaceae), là một trong những loài dược liệu được tìm thấy chủ yếu ở các nước Đông Nam Á. Ở Việt Nam, loài cây này có tên là Nghệ tím và phần củ của loài này được sử dụng nhiều trong các bài thuốc dân gian để chữa các bệnh đờ ỉa, viêm gan, một số nghiên cứu trước đây về củ Nghệ tím báo cáo thành phần hoá học tiêu biểu là các hợp chất serquiterpene và curcuminoid cùng với sự đa dạng hoạt tính sinh học như hoạt tính chống tăng sinh các tế bào ung thư, chống loét dạ dày, kháng oxy hóa và kháng viêm. Bằng phương pháp sắc kí cột kết hợp với phương pháp sắc kí bản mỏng điều chế pha thường từ cao chiết EtOAc của củ Nghệ tím, chúng tôi đã phân lập được năm hợp chất tinh khiết. Cấu trúc hóa học của các hợp chất này được xác định bằng phương pháp phổ cộng hưởng từ hạt nhân NMR kết hợp với so sánh tài liệu tham khảo cho thấy các hợp chất này là gajustulactone A (**1**), isozedoarondiol (**2**), neoliticumone (**3**), β -sitosterol (**4**) và β -stigmasterol (**5**). Kết quả nghiên cứu này đã góp phần đóng góp vào hệ thống dữ liệu khoa học về thành phần hoá học các cây thuốc Việt Nam, đặc biệt là củ Nghệ tím được trồng ở vùng Tịnh Biên, An Giang. Từ đó, có thêm bằng chứng để tiếp tục nghiên cứu sàng lọc phát hiện các hoạt tính sinh học nổi bật từ loài này.

Từ khoá: Nghệ tím, *Curcuma zedoaria*, serquiterpene, Zingiberaceae

MỞ ĐẦU

Nghệ tím có tên khoa học là *Curcuma zedoaria*, thuộc họ Gừng (Zingiberaceae), có mặt trong một số phương thuốc chữa bệnh bằng y học cổ truyền với tên gọi là Nga truật. Ngoài ra, trong dân gian còn có một số tên gọi khác như Ngải tím, Bông truật, Ngải xanh, Bông nga, Bông được, Nghệ đầm ... Nghệ tím là cây thân thảo, cao 1-1.5 m. Thân rễ hình nón, có vân ngang và khía dọc, mang những củ hình trụ tỏa ra theo hình chân vịt, dày, nạc. Củ không có hình dạng nhất định, phân nhánh trên một mặt phẳng, làm thành nhiều đốt, kích thước không đều, dài 3-8 cm, dày 1-3 cm, mặt ngoài màu trắng tro hay vàng nhạt, lõi tròn rỗng, có màu vàng và được bao bởi 1 lớp màu tím. Theo đông y, củ Nghệ tím có vị đắng, cay, mùi thơm hăng, tính ấm, có tác dụng hành khí, thông huyết, tiêu thực, tiêu viêm, tiêu xơ, mạnh tì vị, kích thích tiêu hóa, chữa các chứng đầy bụng, khó tiêu, rối loạn tiêu hóa, viêm loét dạ dày, kinh nguyệt không đều...^{1,2}.

Đã có nhiều nghiên cứu phát hiện ra nhiều hợp chất có trong củ Nghệ tím mà tiêu biểu là các hợp chất serquiterpene, curcuminoid và các dẫn xuất của chúng, ngoài ra còn có các hợp chất tinh dầu. Một số hợp chất đại diện như curcumin, demethoxycurcumin, bisdemethoxycurcumin, 3,7-dimethylindan-5-carboxylic acid, curcolonol³⁻⁹. Các nghiên cứu về hoạt tính sinh học cũng cho thấy rằng củ Nghệ tím

có nhiều hoạt tính sinh học quý giá như kháng ung thư, kháng viêm, kháng oxy hóa...³⁻⁹. Hiện nay, trên thị trường một số nước Đông Nam Á như Thái Lan, Myanmar, Indonesia đã có một số sản phẩm từ củ Nghệ tím, tuy nhiên chủ yếu từ tinh dầu và bột củ thô hỗ trợ điều trị kháng khuẩn, tăng cường sinh lý nam. Nhận thấy củ Nghệ tím được các nhà khoa học đánh giá rất cao về hoạt tính sinh học, tuy nhiên ở nước ta hiện nay chưa quan tâm nghiên cứu đến loại cây này mà chủ yếu chỉ sử dụng như một vị thuốc dân gian ở một số địa phương.

VẬT LIỆU VÀ PHƯƠNG PHÁP

Đối tượng nghiên cứu

Củ Nghệ tím được thu hái tại huyện Tịnh Biên, tỉnh An Giang vào tháng 09 năm 2017. Mẫu tươi (40 kg) được phơi khô, xay nhỏ (6,7 kg) vào tháng 01/2019. Mẫu cây được định danh bởi PGS. TS. Trần Công Luận, Trường Đại Học Tây Đô.

Hóa chất và thiết bị

Máy ghi phổ cộng hưởng từ hạt nhân Bruker-500 MHz với dung môi CDCl₃, CD₃SOCD₃, máy HR-ESI-MS – Phòng Phân tích trung tâm, Trường Đại học Khoa học Tự nhiên, ĐHQG-HCM; silica gel pha thường (Merck), bản mỏng silica gel pha thường (Merck) và các dung môi *n*-hexane, chloroform, ethyl

Khoa Hóa học, Trường Đại học Khoa học Tự nhiên, ĐHQG-HCM, Việt Nam

Liên hệ

Đỗ Văn Nhật Trường, Khoa Hóa học, Trường Đại học Khoa học Tự nhiên, ĐHQG-HCM, Việt Nam
Email: dvtruong@hcmus.edu.vn

Lịch sử

- Ngày nhận: 08-09-2020
- Ngày chấp nhận: 25-3-2021
- Ngày đăng: 30-4-2021

DOI: 10.32508/stdjns.v5i2.950



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.



Trích dẫn bài báo này: Trường D V N, Hải N X, Thọ L H, Mai N T T. Thành phần hóa học của củ nghệ tím (*Curcuma zedoaria*). *Sci. Tech. Dev. J. - Nat. Sci.*; 5(2):1078-1085.

acetate, ethanol và methanol (Schalau, độ tinh khiết >99%).

Chiết xuất và phân lập

Mẫu củ Nghệ tím khô được tiến hành trích Soxhlet lần lượt với các dung môi có độ phân cực tăng dần. Sau đó, thu hồi dung môi bằng hệ thống cô quay chân không thu được lần lượt các cao thô *n*-hexane (270,0 g), EtOAc (256,3 g) và MeOH phân đoạn (110,1 g). Tiến hành sắc ký bản mỏng với các cao thô, kết hợp với khả năng hấp thu tia tử ngoại và khả năng hiện hình bằng thuốc thử H₂SO₄ 20% cho thấy cao EtOAc tách tốt nhất nên được chọn để tiếp tục tiến hành điều chế cao phân đoạn. Cao EtOAc (238,6 g) được tiến hành sắc ký cột pha thường và hệ dung môi giải ly *n*-hexane–acetone có độ phân cực tăng dần từ 0–50% acetone, sau đó tiếp tục với hệ dung môi chloroform–MeOH có độ phân cực tăng dần từ 20–100 % MeOH thu được 26 cao phân đoạn (A–Z). Tiến hành sắc ký cột pha thường phân đoạn G (2,9 g) và T (17,5 g), kết hợp sắc ký lớp mỏng điều chế pha thường nhiều lần với các hệ dung môi có độ phân cực khác nhau thu được 5 hợp chất là gajustulactone A (1), isozedoarondiol (2), neoliticumone (3), β-sitosterol (4) và β-stigmasterol (5) (Hình 1).

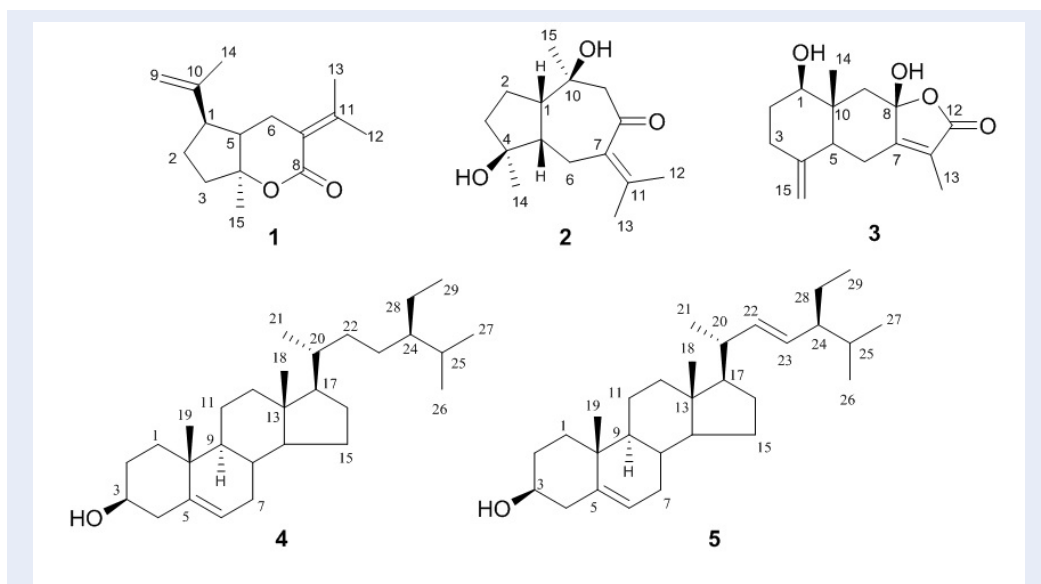
KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

Hợp chất 1 có dạng tinh thể hình kim, màu trắng, tan tốt trong dung môi chloroform và DMSO. Phổ HR-ESI-MS cho thấy tín hiệu của mũi ion phân tử giả [M+Na]⁺ có *m/z* là 257,1518; so với *m/z* lý thuyết 257,1517; lệch 0,1 mmass. Phổ ¹H-NMR của hợp chất 1 cho thấy có 2 tín hiệu proton olefin ghép *geminal* [δ_H 4,75 (1H; d; *J*=1,6 Hz; H-9a)], [δ_H 4,74 (1H; d; *J*=1,6 Hz; H-9b)]; 2 nhóm methine [δ_H 2,24 (1H; m; H-1)], [δ_H 2,04 (1H; m; H-5)]; 3 nhóm methylene [δ_H 2,06 (1H; m; H-2a), δ_H 1,90 (1H; m; H-2b)]; [δ_H 2,45 (1H; m; H-3a), [δ_H 1,67 (1H; m; H-3b)]; [δ_H 1,92 (1H; m; H-6a), δ_H 1,82 (1H; m; H-6b)]; 4 nhóm methyl [δ_H 2,19 (3H; s; H-13)], [δ_H 1,84 (3H; s; H-14)], [δ_H 1,71 (3H; s; H-12)], [δ_H 1,22 (3H; s; H-15)]. Phổ ¹³C-NMR kết hợp với phổ DEPT của hợp chất 1 cho thấy có 15 carbon, trong đó có 1 carbon carbonyl của nhóm ester [δ_C 167,4; C-8]; 4 carbon olefin [δ_C 119,8; C-7], [δ_C 145,9; C-10], [δ_C 152,2; C-11] và [δ_C 110,6; C-9]; 1 carbon *sp*³ tứ cấp nối oxygen [δ_C 85,3; C-4]; 2 carbon *sp*³ methine [δ_C 47,6; C-1], [δ_C 45,7; C-5]; 3 carbon *sp*³ methylene [δ_C 27,0; C-6], [δ_C 26,8; C-2], [δ_C 36,8; C-3] cùng với 4 carbon methyl [δ_C 23,5; C-12], [δ_C 23,7; C-13], [δ_C 19,6; C-14], [δ_C 19,6; C-15] (Bảng 1). Từ dữ liệu phổ trên cho thấy hợp chất 1 có cấu trúc của một sesquiterpene thuộc khung *seco*-guaiane có 1 vòng *d*-valerolactone. Phân

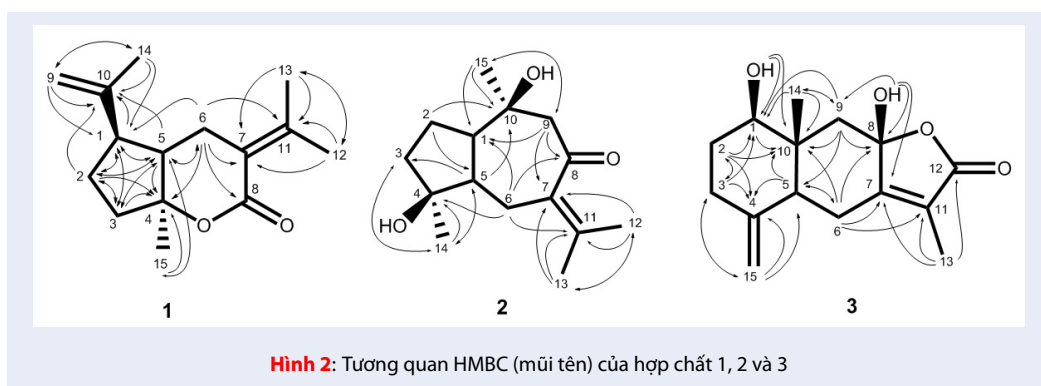
tích phổ HSQC và HMBC hợp chất 1 cho phép xác định nối đôi tại vị trí C-9–C-10 thông qua tương quan HMBC của H-1 và H-14 đến C-9 và H-2, H-5, H-9 và H-14 đến C-10, nối đôi tại vị trí C-7–C-11 thông qua tương quan HMBC của H-6, H-12 và H-13 đến C-11 và C-7 (Hình 2). Tra cứu tài liệu tham khảo cho thấy dữ liệu phổ của hợp chất 1 tương đồng với hợp chất gajustulactone A¹⁰. Vì vậy, đề nghị cấu trúc của hợp chất 1 là gajustulactone A.

Hợp chất 2 có dạng bột màu trắng, tan tốt trong dung môi chloroform và DMSO. Phổ HR-ESI-MS cho thấy tín hiệu của mũi ion phân tử giả [M+Na]⁺ có *m/z* là 175.1630, so với *m/z* lý thuyết 175,1623, lệch 0,7 mmass. Phổ ¹H-NMR của hợp chất 2 cho thấy tại vùng từ trường cao có sự hiện diện tín hiệu proton của 2 nhóm methine [δ_H 2,83 (1H; m; H-1)], [δ_H 1,95 (1H; m; H-5)]; 4 nhóm methylene lần lượt là [δ_H 1,54 (1H; m; H-2a)], [δ_H 1,94 (1H; m; H-2b)], [δ_H 1,78 (2H; m; H-3)], [δ_H 1,80 (1H; m; H-6a)], [δ_H 2,52 (1H; d; *J* = 14,1 Hz; H-6b)], [δ_H 2,42 (1H; d; *J* = 16,2 Hz; H-9a)], [δ_H 3,21 (1H; d; *J* = 16,2 Hz; H-9b)]; 4 nhóm methyl [δ_H 2,00 (3H; s; H-12)], [δ_H 1,87 (3H; s; H-13)], [δ_H 1,42 (3H; s; H-14)], [δ_H 1,22 (3H; s; H-15)] (Bảng 1). Phổ ¹³C-NMR của hợp chất 2 cho thấy tín hiệu của 15 carbon. Trong đó, có 1 carbon carbonyl nhóm ketone [δ_C (203,1; C-8)]; 2 carbon olefin tứ hoá [δ_C (134,2; C-7)], [δ_C (143,9; C-11)]; 2 carbon *sp*³ nối oxygen [δ_C (82,6; C-4)], [δ_C (73,3; C-10)]; 2 carbon methine [δ_C (51,9; C-1)], [δ_C (53,5; C-5)]; 4 carbon methylene [δ_C (25,3; C-2)], [δ_C (37,2; C-3)], [δ_C (27,6; C-6)] và [δ_C (50,4; C-9)]; 4 carbon methyl [δ_C (23,0; C-12)], [δ_C (22,2; C-13)], [δ_C (25,1; C-14)] và [δ_C (32,3; C-15)] (Bảng 1). Từ dữ liệu phổ ¹H-NMR và ¹³C-NMR cho thấy hợp chất 2 cũng có cấu trúc của một sesquiterpene thuộc khung guaiane. Phân tích dữ liệu phổ HSQC và HMBC của hợp chất 2 cho thấy có một nhóm ketone tại vị trí C-8 thông qua tương quan HMBC của H-9 và H-6 đến carbon carbonyl (δ_C 203,1 ppm, C-8), một nối đôi tại vị trí C-7–C-11 thông qua tương quan HMBC của H-5, H-9, H-12 và H-13 đến C-7; H-6, H-12 và H-13 đến C-11. Ngoài ra, hai nhóm hydroxyl được xác định tại vị trí C-4 và C-10 thông qua độ dịch chuyển hoá học lần lượt là (δ_C 82,6 ppm; C-4) và (δ_C 73,3 ppm; C-10) (Hình 2). Tiến hành so sánh dữ liệu phổ của hợp chất 2 với isozedoarondiol cho thấy có sự tương đồng¹¹. Do đó, cấu trúc của hợp chất 2 được đề nghị là isozedoarondiol.

Hợp chất 3 có dạng bột màu trắng, tan tốt trong dung môi methanol và DMSO. Phổ HR-ESI-MS cho thấy tín hiệu của mũi ion phân tử giả [M+Na]⁺ có *m/z* là 287,1264; so với *m/z* lý thuyết 287,1259; lệch 0,5 mmass. Phổ ¹H-NMR của hợp chất 3 cho thấy có



Hình 1: Cấu trúc các hợp chất được phân lập từ củ Nghệ tím (*Curcuma zedoaria*)



Hình 2: Tương quan HMBC (mũi tên) của hợp chất 1, 2 và 3

sự xuất hiện của 2 proton olefin ghép *geminal* cô lập [δ_H 4,79 (1H; s; H-15a)], [δ_H 4,59 (1H; s; H-15b)]; 2 nhóm methine [δ_H 3,16 (1H; dd; $J = 6,5; 5,0$ Hz; H-1)], [δ_H 1,75 (1H; dd; $J = 12,6; 3,1$, Hz; H-5)]; 4 nhóm methylene [δ_H 1,56 (1H; ddd; $J = 12,8; 5,0; 1,0$ Hz; H-2a), δ_H 1,38 (1H; m; H-2b)], [δ_H 2,19 (1H; ddd; $J = 13,4; 5,0; 2,5$ Hz; H-3a), δ_H 1,96 (1H; td; $J = 13,4; 5,3$ Hz; H-3b)], [δ_H 2,55 (1H; dd; $J = 13,0; 3,2$ Hz; H-6a), δ_H 2,26 (1H; t; $J = 12,9$ Hz; H-6b)], [δ_H 1,24 (1H; d; $J = 13,6$ Hz; H-9a), δ_H 2,47 (1H; d; $J = 14,8$ Hz; H-9b)]; 2 nhóm methyl [δ_H 1,69 (3H; s; H-13)], [δ_H 0,80 (3H; s; H-14)]. Phổ $^{13}\text{C-NMR}$ của hợp chất 3 cho thấy tín hiệu của 15 carbon. Trong đó, có 1 carbon carbonyl nhóm ester [δ_C 171,7; C-12]; 4 carbon olefin [δ_C 147,7; C-4], [δ_C 160,9; C-7], [δ_C 120,5; C-11]; [δ_C 107,3; C-15]; 1 carbon sp^3 tứ cấp [δ_C 40,9; C-10], 1 carbon ketal [δ_C 103,9; C-8]; 1 carbon oxymethine [δ_C 76,8; C-1]; 1 carbon methine [δ_C 48,9; C-

5]; 4 carbon methylene [δ_C 30,6; C-2], [δ_C 33,3; C-3], [δ_C 23,7; C-6], [δ_C 47,8; C-9] và 2 carbon nhóm methyl [δ_C 7,9; C-13], [δ_C 10,6; C-14]. Từ dữ liệu phổ trên cho thấy hợp chất 3 cũng có cấu trúc của một sesquiterpene thuộc khung eudesmanolide. Phân tích phổ HSQC và HMBC của hợp chất 3 cho phép xác định nối đôi tại vị trí C-4–C-15 thông qua tương quan của H-15, H-3- H-5 đến C-4; H-3 và H-5 đến C-15; nối đôi tại vị trí C-7–C-11 thông qua tương quan của H-6 và H-13 cùng đến C-7 và C-11; 2 nhóm hydroxyl được xác định lần lượt tại vị trí C-1 và C-8 thông qua tương quan HMBC của proton nhóm hydroxyl vào C-7, C-8 và C-9 và C-1, C-2 và C-10. Nhóm carbonyl ester được xác định tại vị trí C-12 thông qua độ dịch chuyển hoá học (δ_C 171,7 ppm) cùng với tương quan HMBC của H-13 đến C-12 (Hình 2). Tra cứu tài liệu tham khảo cho thấy dữ liệu phổ của hợp chất 3 tương đồng với neoliticumone A¹², vì vậy, đề nghị cấu trúc

Bảng 1: Dữ liệu phổ NMR của hợp chất 1, 2 trong dung môi CDCl₃ và hợp chất 3 trong dung môi CD₃SOCD₃

Vị trí	Hợp chất 1		Hợp chất 2		Hợp chất 3	
	δ_H	δ_C	δ_H	δ_C	δ_H	δ_C
1	2,24 (m)	47,6	2,83 (m)	51,9	3,16 (dd; 6,5; 5,0)	76,8
2	2,06 (m) 1,90 (m)	26,8	1,54 (m) 1,94 (m)	25,3	1,56 (ddd; 12,8; 5,0; 1,0) 1,38 (m)	30,6
3	2,45 (m) 1,67 (m)	36,8	1,78 (m)	37,2	2,19 (ddd; 13,4; 5,0; 2,5) 1,96 (td; 13,4; 5,3)	33,3
4		85,3		82,6		147,7
5	2,04 (m)	45,7	1,95 (m)	53,5	1,75 (dd; 3,1; 12,6)	48,9
6	1,92 (m) 1,82 (m)	27,0	1,80 (m) 2,52 (d, 14,1)	27,6	2,55 (dd; 13,0; 3,2) 2,26 (t; 12,9)	23,7
7		119,8		134,2		160,9
8		167,4		203,1		103,9
9	4,74 (d; 1,6) 4,75 (d; 1,6)	110,6	2,42 (d, 16,2) 3,21 (d, 16,2)	50,4	1,24 (d; 13,6) 2,47 (d; 14,8)	47,8
10		145,9		73,3		40,9
11		152,2		143,9		120,5
12	1,71 (s)	23,5	2,00 (s)	23,0		171,7
13	2,19 (s)	23,7	1,87 (s)	22,2	1,69 (s)	7,9
14	1,84 (s)	19,6	1,42 (s)	25,1	0,80 (s)	10,6
15	1,22 (s)	19,6	1,22 (s)	32,3	4,79 (brs) 4,59 (brs)	107,3

của hợp chất 3 là neoliticumone.

Hợp chất 4 có dạng bột, màu trắng, tan tốt trong dung môi chloroform. Phổ ¹H-NMR của hợp chất 4 cho thấy ở vùng từ trường thấp có sự xuất hiện tín hiệu của 1 proton olefin [δ_H 5,35 (1H; d; $J = 5,3$ Hz; H-6)]. Ở vùng trường cao cho thấy có sự xuất hiện tín hiệu của 1 nhóm oxymethine [δ_H 3,53 (1H; m; H-3)]; 6 nhóm methyl [δ_H 1,01 (3H; s; H-18)], [δ_H 0,69 (3H; s; H-19)], [δ_H 0,92 (3H; d; $J = 6,5$ Hz; H-21)], [δ_H 0,83 (3H; d; $J = 6,6$ Hz; H-26)], [δ_H 0,81 (3H; d; $J = 6,9$ Hz; H-27)], [δ_H 0,85 (3H; t; $J = 7,3$ Hz; H-29)]. Ngoài ra, ở vùng từ trường cao còn có sự xuất hiện của nhiều nhóm methine và methylene nằm trong vùng có độ dịch chuyển hóa học từ 1,00 ppm đến 2,40 ppm. Phổ ¹³C-NMR cho thấy hợp chất 4 có sự xuất hiện tín hiệu của 29 carbon. Trong đó, ở vùng trường thấp có sự xuất hiện của 1 carbon olefin trí hoá [δ_C 140,9; C-5]; 1 carbon olefin methine [δ_C 121,9; C-6]; 1 carbon oxymethine [δ_C 72,0; C-3]. Ở vùng trường cao có sự xuất hiện tín hiệu của 2 carbon sp^3 tứ cấp [δ_C 36,7; C-10], [δ_C 42,5; C-13]; 7 carbon methine [δ_C 32,1; C-8], [δ_C 50,3; C-9], [δ_C 56,9; C-14], [δ_C 56,2;

C-17], [δ_C 36,3; C-20], [δ_C 46,0; C-24], [δ_C 29,4; C-25]; 11 carbon nhóm methylene [δ_C 37,4; C-1], [δ_C 31,9; C-2], [δ_C 42,5; C-4], [δ_C 32,1; C-7], [δ_C 21,3; C-11], [δ_C 39,9; C-12], [δ_C 26,3; C-15], [δ_C 28,4; C-16], [δ_C 34,1; C-22], [δ_C 26,3; C-23], [δ_C 23,3; C-28]; 6 carbon nhóm methyl [δ_C 12,0; C-18], [δ_C 18,9; C-19], [δ_C 19,2; C-21], [δ_C 20,0; C-26], [δ_C 19,6; C-27], [δ_C 12,1; C-29] (Bảng 2). Từ dữ liệu phổ trên cho thấy hợp chất 4 có cấu trúc của một steroid khung stigmas-tane. Tiến hành so sánh dữ liệu phổ của hợp chất 4 với hợp chất β -sitosterol^{13,14} cho thấy có sự tương hợp. Vậy cấu trúc của hợp chất 4 là β -sitosterol.

Hợp chất 5 có dạng bột, màu trắng, tan tốt trong dung môi chloroform. Phổ ¹H-NMR của hợp chất 5 cho thấy sự xuất hiện tín hiệu của 1 proton olefin [δ_H 5,35 (1H; m; H-6)]; 2 proton olefin ghép *trans* [δ_H 5,15 (1H; dd; $J = 15,1$ 8,6 Hz; H-22)] và [δ_H 5,02 (1H; dd; $J = 15,1$ 8,7 Hz; H-23)]; 1 proton oxymethine [δ_H 3,52 (1H; m; H-3)]; 5 nhóm methyl [δ_H 0,69 (3H; s; H-18)], [δ_H 1,01 (3H; ; H-19)], [δ_H 1,02 (3H; d; $J = 8,5$ Hz; H-21)], [δ_H 0,85 (3H; t; $J = 6,5$; H-29)], [δ_H 0,84 (3H; d; $J = 6,4$ Hz; H-26)] và [δ_H 0,80 (3H; d; $J = 7,6$

Bảng 2: Dữ liệu phổ NMR của hợp chất 4 và 5 trong dung môi $CDCl_3$

Vị trí	Hợp chất 4		Hợp chất 5		Vị trí	Hợp chất 4		Hợp chất 5	
	δH	δC	δH	δC		δH	δC	δH	δC
1	1,09 (m)	37,4	1,85 (m)	37,6	16	1,25 (m)	28,4	1,74 (m)	29,3
	1,85 (m)		1,09 (m)			1,83 (m)		1,25 (m)	
2	1,49 (m)	31,9	1,83 (m)	32,1	17	1,11 (m)	56,2	1,15 (m)	56,2
	1,86 (m)		1,53 (m)						
3	3,53 (m)	72,0	3,52 (m)	72,1	18	1,01 (s)	12,0	0,69 (s)	12,2
4	2,27 (m)	42,5	2,30 (m)	42,4	19	0,69 (s)	18,9	1,01 (s)	19,5
			2,24 (m)						
5		140,9		141,1	20	1,43 (m)	36,3	2,06 (m)	40,6
6	5,35 (d; 5,3)	121,9	5,35 (m)	121,8	21	0,92 (d; 6,5)	19,2	1,02 (d; 6,5)	21,4
7	1,49 (m)	32,1	1,98 (m)	31,8	22	1,10 (m)	34,1	5,15 (dd; 15,1; 8,6)	138,3
			1,51 (m)			1,36 (m)			
8	1,97 (m)	32,1	1,49 (m)	31,8	23	1,17 (m)	26,3	5,02 (dd; 15,1; 8,7)	129,7
9	1,02 (m)	50,3	0,94 (m)	50,2	24	0,95 (m)	46,0	1,52 (m)	51,5
10		36,7		36,6	25	1,67 (m)	29,4	1,53 (m)	32,2
11	1,47 (m)	21,3	1,51 (m)	21,5	26	0,83 (d; 6,6)	20,0	0,84 (d; 6,4)	21,2
12	1,16 (m)	39,9	2,00 (m)	39,9	27	0,81 (d; 6,9)	19,6	0,80 (d; 7,6)	19,2
	2,02 (m)		1,18 (m)						
13		42,5		42,4	28	1,26 (m)	23,3	1,18 (m)	25,4
14	1,05 (m)	56,9	1,02 (m)	56,8	29	0,85 (t; 7,3)	12,1	0,85 (t; 6,5)	12,2
15	1,07 (m)	26,3	1,07 (m)	24,4					
	1,51 (m)		1,54 (m)						

Hz; H-27)]; cùng với nhiều tín hiệu của nhóm methylene và nhóm methine có độ dịch chuyển hoá học từ 1,00 ppm đến 2,50 ppm. Phổ ^{13}C -NMR kết hợp với phổ DEPT của hợp chất 5 cho thấy hợp chất này có 29 carbon trong đó có 4 carbon olefin [δ_{C} 141,1; C-5], [δ_{C} 121,8; C-6], [δ_{C} 138,3; C-22] và [δ_{C} 129,7; C-23], 1 carbon oxymethine [δ_{C} 72,1; C-3]; 2 carbon tứ cấp [δ_{C} 42,4; C-13] và [δ_{C} 36,6; C-10]; 7 carbon methine [δ_{C} 31,8; C-8], [δ_{C} 50,2; C-9], [δ_{C} 40,6; C-20], [δ_{C} 56,8; C-14], [δ_{C} 56,2; C-17], [δ_{C} 51,5; C-24] và [δ_{C} 32,2; C-25]; 9 carbon methylene [δ_{C} 37,6; C-1], [δ_{C} 32,1; C-2], [δ_{C} 31,8; C-7], [δ_{C} 42,4; C-4], [δ_{C} 21,5; C-11], [δ_{C} 39,9; C-12], [δ_{C} 24,4; C-15], [δ_{C} 29,3; C-16] và [δ_{C} 25,4; C-28]; 6 carbon methyl [δ_{C} 12,2; C-18], [δ_{C} 19,5; C-19], [δ_{C} 21,4; C-21], [δ_{C} 19,2; C-27], [δ_{C} 21,2; C-26] và [δ_{C} 12,2; C-29] (ảng 2). Các dữ liệu phổ ^1H -NMR và ^{13}C -NMR cho thấy hợp chất 5 có cấu trúc của một sterol của khung stigmasterane giống với hợp chất 4 nhưng xuất hiện thêm một nối đôi. Tiến hành tra cứu tài liệu tham khảo cho thấy cấu trúc có sự tương đồng với hợp chất β -stigmasterol¹⁵. Vì vậy cấu trúc của hợp chất 5 được đề nghị là β -stigmasterol.

KẾT LUẬN

Từ cao EtOAc của củ Nghệ tím đã phân lập được 5 hợp chất hữu cơ là gajustulactone A (1), isozedoarondiol (2), neolitacumone (3), β -sitosterol (4) và β -stigmasterol (5). Cấu trúc hóa học của các hợp chất này được xác định dựa vào phổ NMR kết hợp so sánh tài liệu tham khảo. Kết quả tra khảo tài liệu cho thấy hợp chất gajustulactone A (1) và neolitacumone (3) lần đầu tiên được tìm thấy trong loài này.

LỜI CẢM ƠN

Để tài được thực hiện bằng nguồn kinh phí hỗ trợ từ Chương trình Vườn ươm Sáng tạo Khoa học và Công nghệ Trẻ, được quản lý bởi Trung tâm Phát triển Khoa học và Công nghệ Trẻ - Thành Đoàn thành phố Hồ Chí Minh và Sở Khoa học và Công nghệ thành phố Hồ Chí Minh, theo hợp đồng số “30/2019/HĐ-KHCN-VU”

DANH MỤC VIẾT TẮT

TMS: Chất nội chuẩn Tetramethylsilane.

^1H -NMR: Phổ cộng hưởng từ hạt nhân của ^1H .

^{13}C -NMR: Phổ cộng hưởng từ hạt nhân của ^{13}C .

HSQC: Phổ tương quan hạt nhân giữa ^{13}C và ^1H thông qua 1 liên kết.

HMBC: Phổ tương quan hạt nhân giữa ^{13}C và ^1H thông qua 2, 3 liên kết.

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

Đỗ Văn Nhật Trường chiết xuất cao chiết và phân lập, xác định cấu trúc các hợp chất, Nguyễn Xuân Hải viết bản thảo bài báo, Lê Hữu Thọ cung cấp mẫu vật và xác định cấu trúc các hợp chất, Nguyễn Thị Thanh Mai phân bố cục và chỉnh sửa bản thảo chi tiết. Tất cả các tác giả đã đọc và chấp nhận bản thảo cuối cùng.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- Đỗ TL. Những cây thuốc và vị thuốc Việt Nam, Nhà xuất bản Y học. 2005;p. 299-300.
- Võ VC. Từ điển thực vật thông dụng, Nhà xuất bản Khoa học Kỹ thuật. 2003;p. 377.
- Matsuda H, Ninomiya K, Morikawa T, Yo M. Inhibitory effect and action mechanism of sesquiterpenes from zedoariae rhizoma on D-galactosamine/lipopolysaccharide-induced liver injury. *Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters*. 1998;8:339-344. Available from: [https://doi.org/10.1016/S0960-894X\(98\)00021-3](https://doi.org/10.1016/S0960-894X(98)00021-3).
- Hong CH, Noh MS, Lee WY, Lee SK. Inhibitory effects of natural sesquiterpenoids isolated from the rhizomes of *Curcuma zedoaria* on prostaglandin E2 and nitric oxide production. *Planta Medica*. 2002;68:545-547. PMID: 12094302. Available from: <https://doi.org/10.1055/s-2002-32560>.
- Chen W, Lu Y, Gao M, Wu J, Wang A, Shi R. Anti-angiogenesis effect of essential oil from *Curcuma zedoaria* in vitro and in vivo. *Journal of Ethnopharmacology*. 2011;133:220-226. PMID: 20920565. Available from: <https://doi.org/10.1016/j.jep.2010.09.031>.
- Hamdi OAA, Rahman SNSA, Awang K, Wahab NA, Looi CY, Thomas NF, Malek SNA. Cytotoxic constituents from the rhizomes of *Curcuma zedoaria*. *The Scientific World Journal*. 2014;2014:1-11. PMID: 25126594. Available from: <https://doi.org/10.1155/2014/321943>.
- Jang MK, Lee HJ, Kim JS, Ryu J. A curcuminoid and two sesquiterpenoids from *Curcuma zedoaria* as inhibitors of nitric oxide synthesis in activated macrophages. *Archives of Pharmacological Research*. 2004;27:1220-1225. PMID: 15646795. Available from: <https://doi.org/10.1007/BF02975885>.
- Rahman A, Afrozi M, Islam R, Islam KD, Hossain MA, Na M. In vitro antioxidant potential of the essential oil and leaf extracts of *Curcuma zedoaria* Rosc. *Journal of Applied Pharmaceutical Science*. 2014;4:107-111.
- Lai EYC, Chyau CC, Mau JL, Chen CC, Lai YJ, Shih CF, Lin LL. Antimicrobial activity and cytotoxicity of the essential oil of *Curcuma zedoaria*. *The American Journal of Chinese Medicine*. 2004;32:281-290. PMID: 15315265. Available from: <https://doi.org/10.1142/S0192415X0400193X>.
- Matsuda H, Morikawa T, Toguchida I, Ninomiya K, Yoshikawa M. Inhibitors of nitric oxide production and new sesquiterpenes, zedoarofuran, 4-epicurcumenol, neocurcumenol, gajustulactones A and B, and zedoarolides A and B, from *Zedoariae* rhizome. *Chemical and Pharmaceutical Bulletin*. 2001;49:1558-1566. PMID: 11767075. Available from: <https://doi.org/10.1248/cpb.49.1558>.
- Masanori K, Akira U, Kaoru U, Sadao S. Structure of sesquiterpenes from *Curcuma aromatica* SALISB. *Chemical and Pharmaceutical Bulletin*. 1987;35:53-59. Available from: <https://doi.org/10.1248/cpb.35.53>.
- Chang FR, Hsieh TJ, Huang TL, Chen CY, Kuo RE, Chang YC, Chiu HF, Wu YC. Cytotoxic constituents of the stem bark of *Neolitsea acuminatissima*. *Journal Natural Products*. 2002;65:255-258. PMID: 11908960. Available from: <https://doi.org/10.1021/np010236w>.

13. Chaturvedula VSP, Prakash I. Isolation of stigmasterol and β -sitosterol from the dichloromethane extract of *Rubus suavissimus*. International Current Pharmaceutical Journal. 2012;1:239–242. Available from: <https://doi.org/10.3329/icpj.v1i9.11613>.
14. Mouffok S, Haba H, Lavaud C, Long C, Benkhaled M. Chemical constituents of *Centaurea omphalotricha* Coss. & Durieu ex Batt. & Trab. Records of Natural Products. 2012;6:292–295.
15. Forgo P, Kövér KE. Gradient enhanced selective experiments in the $^1\text{H-NMR}$ chemical shift assignment of the skeleton and side-chain resonances of stigmasterol, a phytosterol derivative. Steroids. 2004;69:43–50. PMID: 14715376. Available from: <https://doi.org/10.1016/j.steroids.2003.09.012>.

Chemical constituents of the Rhizomes of *Curcuma zedoaria*

Truong Nhat Van Do*, Hai Xuan Nguyen, Tho Huu Le, Mai Thanh Thi Nguyen



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

ABSTRACT

Curcuma zedoaria (Berg.), belongs to the Zingiberaceae family, is one of the medicinal plants found in Southeast Asia. This plant is known as "Nghe tim" in Vietnam; and a decoction of its rhizomes has been traditionally used for the cure flatulence, fatigue, and hepatitis. Previously, some studies on the chemical constituent of the rhizomes of *C. zedoaria* have reported plenty of curcuminoids and sesquiterpenoids together with their derivatives, which have shown various bioactivities such as antiproliferative characteristic, anti-ulcer, antioxidant and antibacterial potential. By chromatography column method along with preparative thin layer chromatography on a normal phase silica gel on the EtOAc extract of the rhizomes of *Curcuma zedoaria*, we have isolated five pure compounds. Their chemical structures were determined to be gajustulactone A (**1**), isozedoarondiol (**2**), neolitacumone (**3**), β -sitosterol (**4**), and β -stigmasterol (**5**) by using NMR techniques and comparison with publishing data. Among isolated compounds, **1** and **3**, although already known in other species, but this is the first time they were reported from rhizomes of *Curcuma zedoaria*. The results of this study have contributed to the scientific data system on the chemical composition of Vietnamese medicinal plants, especially the rhizomes of *Curcuma zedoaria* grown in Tinh Bien, An Giang.

Key words: rhizomes, *Curcuma zedoaria*, sesquiterpene, Zingiberaceae

Faculty of Chemistry, University of Science, VNU-HCM, Vietnam

Correspondence

Truong Nhat Van Do, Faculty of Chemistry, University of Science, VNU-HCM, Vietnam

Email: dvntruong@hcmus.edu.vn

History

- Received: 08-9-2020
- Accepted: 25-3-2021
- Published: 30-4-2021

DOI : 10.32508/stdjns.v5i2.950



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 : Do T N V, Nguyen H X, Le T H, Nguyen M T T. Chemical constituents of the Rhizomes of *Curcuma zedoaria*. *Sci. Tech. Dev. J. - Nat. Sci.*; 5(2):1078-1085.