

Các hợp chất triterpenoid và triterpenoid saponin từ lá cây Bông giầy (*Bougainvillea spectabilis*)

Võ Thị Ngà¹, Đỗ Thị Mỹ Liên², Phạm Bảo Quý³, Nguyễn Thị Ánh Tuyết^{3,*}



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

TÓM TẮT

Chi *Bougainvillea* thuộc họ Bông phấn (Nyctaginaceae) có khoảng 18 loài, phân bố rộng rãi trên thế giới. Trong y học cổ truyền Ấn độ và Mexico, cây Bông giầy (*Bougainvillea spectabilis*) được sử dụng để chữa trị ho, viêm gan, tiêu chảy. Cao chiết ethanol, methanol từ lá, thân có tác dụng kháng viêm. Nhiều nghiên cứu dược tính tập trung trên hoạt tính chống bệnh đái tháo đường từ loài này. Kết quả nghiên cứu cho thấy cao chiết từ vỏ thân, lá có tác dụng hạ đường huyết, ức chế các enzyme α -glucosidase và amylase. Các nghiên cứu thành phần hóa học của loài này cho thấy cây chứa các hợp chất flavonoid, một vài triterpenoid saponin và steroid. Sử dụng phương pháp ngâm mẫu nguyên liệu với ethanol ở nhiệt độ phòng thu được cao ethanol thô. Bằng phương pháp chiết lỏng-lỏng, từ cao thô này điều chế được cao *n*-hexane và cao ethyl acetate. Sắc kí cột silica gel pha thường, pha đảo RP-18 và sắc kí cột Sephadex LH-20 trên cao ethyl acetate thu được sáu hợp chất. Cấu trúc hóa học của sáu hợp chất này được xác định bằng phương pháp phổ nghiệm NMR, HRESIMS và so sánh với tài liệu tham khảo, bao gồm: lupeol (**1**), (20S)-3 β -acetoxylupan-29-oic acid (**2**), maslinic acid (**3**), 3-O- β -D-(6'-O-methyl)glucuronopyranosyloleanolic acid (**4**), 3-O- β -D-(6'-O-ethyl)glucuronopyranosyloleanolic acid (**5**) và 3-O- β -D-glucopyranosyl-(1 \rightarrow 4)- β -D-(6'-O-methyl)glucuronopyranosyloleanolic acid (**6**). Các hợp chất này lần đầu được phân lập từ chi *Bougainvillea*.

Từ khoá: Bông giầy (*Bougainvillea spectabilis*), phân lập, NMR, triterpenoid, triterpenoid saponin

¹Khoa Công nghệ Hoá học và Thực phẩm, Trường Đại học Sư phạm Kỹ thuật Tp.HCM, Việt Nam

²Viện Công nghệ Môi trường-Năng lượng, Trường Đại học Sài Gòn, Việt Nam

³Khoa Hóa học, Trường Đại học Sư phạm Tp.HCM, Việt Nam

Liên hệ

Nguyễn Thị Ánh Tuyết, Khoa Hóa học, Trường Đại học Sư phạm Tp.HCM, Việt Nam

Email: tuyetnta@hcmue.edu.vn

Lịch sử

- Ngày nhận: 30-5-2022
- Ngày chấp nhận: 20-7-2022
- Ngày đăng: 30-9-2022

DOI: 10.32508/stdjns.v6i3.1197



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.



GIỚI THIỆU

Cây Bông giầy (*Bougainvillea spectabilis*), một trong 18 loài thuộc chi *Bougainvillea*, được phân bố rộng rãi trên thế giới¹. Trong y học cổ truyền, loài này được sử dụng để chữa trị viêm gan, tiêu chảy, ho^{2,3}. Các nghiên cứu trước đây về hoạt tính sinh học trên loài này tập trung chủ yếu vào hoạt tính đái tháo đường. Cao chiết ethanol từ vỏ thân hoặc cao chiết methanol từ lá có tác dụng hạ đường huyết, ức chế các enzyme α -glucosidase và amylase⁴⁻⁷. Ngoài ra, cao chiết từ cây này còn có tác dụng kháng viêm^{8,9}, kháng khuẩn và kháng nấm¹⁰. Các nghiên cứu hóa học trước đây tập trung vào rễ và vỏ thân cho thấy cây có chứa một số hợp chất thuộc nhóm flavonoid, steroid, triterpenoid saponin¹¹⁻¹⁶. Bài báo này trình bày việc phân lập và xác định cấu trúc một số triterpenoid và triterpenoid saponin từ lá cây Bông giầy.

VẬT LIỆU VÀ PHƯƠNG PHÁP

Đối tượng nghiên cứu

Lá cây Bông giầy được thu hái ở khu vực ngoại ô thành phố Hồ Chí Minh và được TS. Võ Văn Chi nhận danh vào năm 2014. Sau khi thu hái, mẫu được rửa sạch, phơi khô, nghiền thành bột, ngâm chiết với ethanol ở

nhiệt độ phòng.

Hóa chất và thiết bị

Phổ cộng hưởng từ hạt nhân đo trên máy Bruker Avance (500 MHz cho phổ ¹H-NMR và 125 MHz cho phổ ¹³C-NMR). Phổ HRESIMS được đo trên máy Bruker microOTOF Q-II. Sắc kí cột (SKC) sử dụng silica gel 60 (0,040–0,063 mm, Merck), silica gel RP-18 (Merck) và Sephadex LH-20 (GE Healthcare). Sắc kí lớp mỏng sử dụng bản mỏng silica gel F₂₅₄, silica gel 60 RP-18 F₂₄₅ (Merck), thuốc thử hiện vết là dung dịch sulfuric acid 10%, sấy nóng. Các hóa chất dùng cho quá trình chiết và sắc kí là ethanol (EtOH), methanol (MeOH), *n*-hexane, chloroform (CHCl₃), ethyl acetate (EtOAc) và acetone (Chemsol).

Chiết xuất và phân lập hợp chất

Mẫu lá cây khô (38,0 kg) được ngâm chiết với EtOH (4 x 50 lít). Dịch chiết được thu hồi dung môi dưới áp suất kém thu được cao ethanol thô (1,27 kg). Thực hiện chiết lỏng-lỏng với các dung môi *n*-hexane, EtOAc thu các cao *n*-hexane (340,1 g), cao EtOAc (683,5 g) và dịch ethanol-nước còn lại. Cao EtOAc (683,5 g) được SKC silica gel pha thường

Trích dẫn bài báo này: Ngà V T, Liên D T M, Quý P B, Tuyết N T A. **Các hợp chất triterpenoid và triterpenoid saponin từ lá cây Bông giầy (*Bougainvillea spectabilis*).** *Sci. Tech. Dev. J. - Nat. Sci.*; 6(3):2306-2313.

với hệ dung môi *n*-hexane–EtOAc (9:1–0:10), sau đó EtOAc–MeOH (10:0–0:10), thu được chín phân đoạn (EA1–EA9). Phân đoạn EA1 (167,2 g) được SKC silica gel (dung môi giải li *n*-hexane–EtOAc, 0–100% EtOAc), thu được năm phân đoạn phụ (EA1.1–EA1.5). SKC silica gel phân đoạn phụ EA1.2 (25,2 g) với hệ dung môi giải li *n*-hexane–EtOAc (0–100% EtOAc), thu được hợp chất 1 (45,2 mg). Phân đoạn EA2 (51,0 g) được SKC Sephadex LH–20 (CHCl₃–MeOH 1:1), tiếp sau là SKC silica gel, hệ dung môi giải li *n*-hexane–EtOAc (0–100% EtOAc), thu được tám phân đoạn phụ (EA2.1–EA2.8). Phân đoạn phụ EA2.5 (7,2 g) được SKC silica gel lần nữa (*n*-hexane–EtOAc, 1:1) thu được hợp chất 2 (28,0 mg) và 3 (15,8 mg). Phân đoạn EA4 (32,6 g) được SKC silica gel, dung môi giải li *n*-hexane–acetone với độ phân cực tăng dần (10:0–0:10), thu được 12 phân đoạn phụ (EA4.1–EA4.12). Phân đoạn phụ EA4.8 (1,3 g) được SKC silica gel pha đảo RP–18 với hệ dung môi giải li MeOH–nước (3:2) thu được hợp chất 6 (6,4 mg). Phân đoạn EA7 (34,0 g) được SKC silica gel, giải li với hệ dung môi *n*-hexane–EtOAc có độ phân cực tăng dần (7:3–0:10) tiếp theo là hệ dung môi EtOAc–MeOH (10:0–7:3) thu được bảy phân đoạn (EA7.1–EA7.7). Phân đoạn EA7.3 (3,2 g) được SKC silica gel với dung môi giải li CHCl₃–MeOH (95:5) thu được hợp chất 4 (19,6 mg) và 5 (8,3 mg).

Lupeol (1): Dạng bột, màu trắng. ¹H-NMR (CDCl₃), δ_H ppm, J (Hz): 3,18 (1H, dd, 11,5/5,0, H-3); 4,66 (1H, d; 2,0; H-29a); 4,54 (1H, dd; 2,5/1,5; H-29b); 0,95 (3H, s, H-23); 0,76 (3H, s, H-24); 0,81 (3H, s, H-25); 1,01 (3H, s, H-26); 0,92 (3H, s, H-27); 0,79 (3H, s, H-28); 1,66 (3H, s, H-30). ¹³C-NMR (CDCl₃): xem Bảng 1.

(20S)-3β-A cetoxyilupan-29-oic acid (2): Dạng bột, màu trắng. ¹H-NMR (CDCl₃), δ_H ppm, J (Hz): 4,48 (1H, dd; 10,5/6,0 H-3) 2,31 (1H, m, H-19); 2,79 (1H, dd; 7,0/3,0; H-20); 0,84 (3H, s, H-23); 0,85 (3H, s, H-24); 0,87 (3H, s, H-25); 1,04 (3H, s, H-26); 0,92 (3H, s, H-27); 0,77 (3H, s, H-28); 1,05 (3H, d, 7,0, H-30); 2,04 (3H, s, H-2'). ¹³C-NMR (CDCl₃): xem Bảng 1.

Maslinic acid (3): Dạng bột, màu trắng. ¹H-NMR (CDCl₃+CD₃OD), δ_H ppm, J (Hz): 3,61 (1H, ddd; 10,5/10,5/4,5; H-2); 2,91 (1H, d; 10,0; H-3); 5,24 (1H, t; 3,0; H-12); 2,81 (1H, dd; 14,0/4,0; H-18); 0,99 (3H, s, H-23); 0,78 (3H, s, H-24); 0,77 (3H, s, H-25); 0,96 (3H, s, H-26); 1,13 (3H, s, H-27); 0,87 (3H, s, H-29); 0,91 (3H, s, H-30). ¹³C-NMR (CDCl₃+CD₃OD): xem Bảng 1.

3-O-β-D-(6'-O-Methyl)glucuronopyranosyloleanolic acid (4): Dạng bột màu trắng. ¹H-NMR (CD₃OD), δ_H ppm, J (Hz): 3,14 (1H, dd; 12,0/4,5; H-3); 5,23 (1H, t; 3,5; H-12); 2,84 (1H, dd; 13,5/3,5; H-18); 1,05

(3H, s, H-23); 0,85 (3H, s, H-24); 0,82 (3H, s, H-25); 0,81 (3H, s, H-26); 1,16 (3H, s, H-27); 0,91 (3H, s, H-29); 0,95 (3H, s, H-30); 4,38 (1H, d; 8,0, H-1'); 3,24 (1H, dd; 8,5/8,0; H-2'); 3,36 (1H, dd; 9,0/9,0; H-3'); 3,51 (1H, dd; 9,5/9,0; H-4'); 3,81 (1H, d; 10,0; H-5'); 3,77 (3H, s, H-7'). ¹³C-NMR (CD₃OD): xem Bảng 1.

3-O-β-D-(6'-O-Ethyl)glucuronopyranosyloleanolic acid (5): Dạng bột màu trắng. ¹H-NMR (CD₃OD), δ_H ppm, J (Hz): 3,17 (1H, dd; 12,0/4,0; H-3); 5,24 (1H, brs, H-12); 2,85 (1H, brd; 10,5; H-18); 1,05 (3H, s, H-23); 0,95 (3H, s, H-24); 0,82 (3H, s, H-25); 0,85 (3H, s, H-26); 1,16 (3H, s, H-27); 0,91 (3H, s, H-29); 0,94 (3H, s, H-30); 4,38 (1H, d; 8,0; H-1'); 3,25 (1H, dd; 9,0/8,0; H-2'); 3,36 (1H, dd; 9,5/9,0; H-3'); 3,52 (1H, dd; 9,5/9,0; H-4'); 3,81(1H, d; 9,5; H-5'); 4,24 (2H, q; 7,0; H-7'); 1,29 (3H, t; 7,0; H-8'). ¹³C-NMR (CD₃OD): xem Bảng 1.

3-O-β-D-Glucopyranosyl-(1→4)-β-D-(6'-O-methyl)glucuronopyranosyloleanolic acid (6): Dạng bột, màu trắng. ¹H-NMR (DMSO- *d*₆), δ_H ppm, J (Hz): 3,08 (1H, dd; 11,5/5,0 H-3); 5,15 (1H, brs, H-12); 2,74 (1H, brd; 10,5; H-18); 0,98 (3H, s, H-23); 0,75 (3H, s, H-24); 0,86 (3H, s, H-25); 0,71 (3H, s, H-26); 1,09 (3H, s, H-27); 0,87 (6H, s, H-29/H-30); 4,38 (1H, d; 8,0 H-1') 3,08 (1H, m, H-2'); 3,37(1H, m, H-3'); 3,50 (1H, t; 9,0; H-4'); 3,94 (1H, d; 9,5; H-5'); 4,14 (1H, d; 8,0 H-1'"); 2,93 (1H, t; 8,5; H-2'"); 3,13 (1H, t; 9,0; H-3'"); 3,02 (1H, dd; 9,5/9,0; H-4'"); 3,18 (1H, m, H-5'"); 3,70 (1H, m, H-6'a); 3,32 (1H, m, H-6'b); 3,66 (3H, s, 6'-OCH₃). ¹³C-NMR (DMSO- *d*₆): xem Bảng 1.

KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

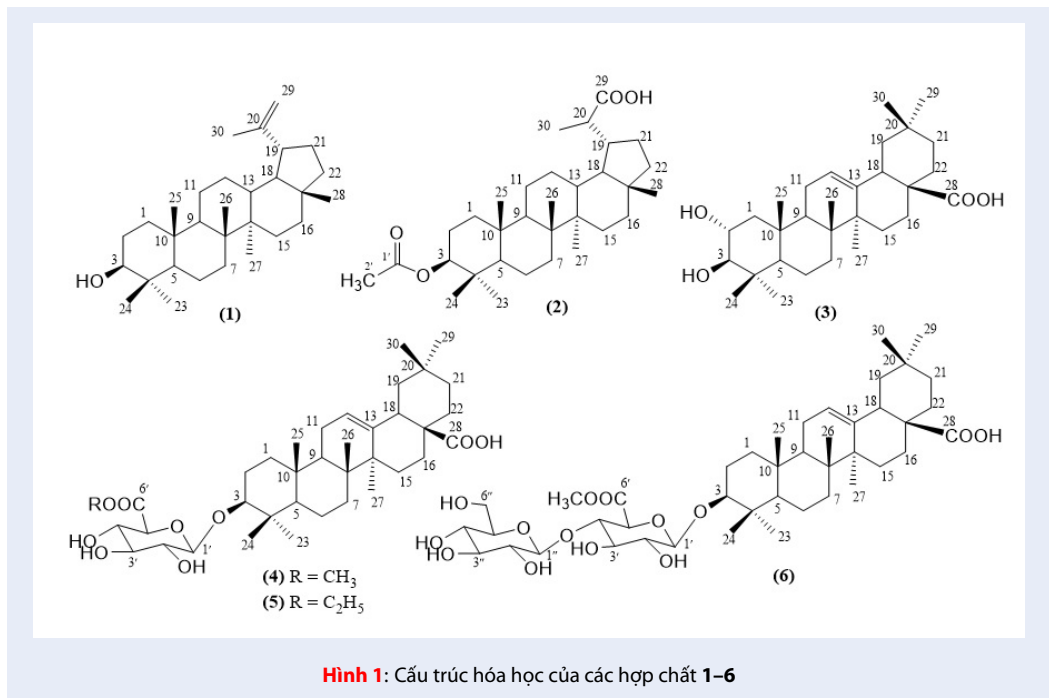
Từ cao EtOAc của lá cây Bông giấy, bằng các kỹ thuật sắc kí đã phân lập được sáu hợp chất (Hình 1).

Phổ ¹H-NMR (CDCl₃) của hợp chất 1 cho thấy các tín hiệu cộng hưởng của hai proton olefin tại δ_H 4,66 (1H, d, *J* = 2,0 Hz, H-29a) và 4,54 (1H, dd, *J* = 2,5/1,5 Hz, H-29b), một proton oxymethine δ_H 3,18 (1H, dd, *J* = 11,5/5,0 Hz, H-3), bảy nhóm methyl mũi đơn ở vùng từ trường cao [δ_H 1,66 (3H, s, H-30); 1,01 (3H, s, H-26); 0,95 (3H, s, H-23); 0,92 (3H, s, H-27); 0,81 (3H, s, H-25); 0,79 (3H, s, H-28) và 0,76 (3H, s, H-24)]. Phổ ¹³C NMR kết hợp với phổ HSQC cho thấy hợp chất 1 có 30 carbon. Trong đó có hai carbon olefin ở δ_C 151,1 (>C=, C-20) và 109,5 (=CH₂, C-29), một carbon oxymethine ở δ_C 79,2 (C-3), năm carbon tứ cấp, năm nhóm methine, 10 nhóm methylene và bảy nhóm methyl. Các dữ liệu NMR này phù hợp dữ liệu NMR của lupeol¹⁷. Hợp chất 1 được đề nghị là lupeol. Phổ ¹H-NMR của hợp chất 2 cho thấy tín hiệu cộng hưởng của proton gắn trên carbon mang oxygen ở δ_H

Bảng 1: Dữ liệu phổ ^{13}C -NMR của các hợp chất 1–6

Vị trí	1 ^{a)}	2 ^{a)}	3 ^{b)}	4 ^{c)}	5 ^{c)}	6 ^{d)}	Vị trí	4 ^{c)}	5 ^{c)}	6 ^{d)}
1	38,9	38,5	47,2	39,8	39,7	38,7	3-O-Glc			
2	25,3	23,8	69,1	27,0	27,0	25,5	1'	107,0	107,1	105,2
3	79,2	81,1	84,1	91,1	91,1	88,3	2'	75,3	75,3	73,3
4	39,0	38,0	39,9	40,2	40,2	38,8	3'	77,5	77,6	74,2
5	55,5	55,5	55,1	57,0	57,0	54,9	4'	73,2	73,2	81,2
6	18,2	18,3	19,1	19,3	19,3	17,7	5'	76,6	76,7	73,1
7	34,5	34,4	33,4	33,6	33,6	32,4	6'	171,4	171,0	168,9
8	41,0	41,2	40,5	40,6	40,6	38,0	7'	51,7	62,4	52,0
9	50,6	50,1	48,4	49,0	49,0	47,0	8'		14,4	
10	37,3	37,2	38,8	37,9	37,9	36,4	4'-O-Glc			
11	21,1	21,0	24,1	24,5	24,5	22,8	1''			103,1
12	27,6	26,5	122,9	123,7	123,7	121,8	2''			72,8
13	38,2	37,9	144,7	145,2	145,2	143,3	3''			76,4
14	43,0	43,2	42,5	42,9	42,9	41,3	4''			70,0
15	27,6	27,4	28,3	28,9	28,5	27,2	5''			76,8
16	35,7	35,6	23,7	24,1	24,1	22,6	6''			61,0
17	43,2	43,2	47,1	47,7	47,7	45,4				
18	48,5	47,4	42,1	42,8	42,8	40,8				
19	48,1	40,3	46,7	47,3	47,3	45,6				
20	151,1	41,0	31,2	31,6	31,6	30,4				
21	30,0	23,8	34,5	34,0	34,0	32,8				
22	40,2	40,5	33,4	34,9	34,9	32,1				
23	28,1	28,1	28,0	28,5	28,9	27,5				
24	15,5	16,7	16,9	17,0	16,9	16,3				
25	16,3	16,3	17,2	15,9	15,9	15,0				
26	16,1	16,1	17,4	17,7	17,8	16,8				
27	14,7	14,5	26,3	26,4	26,4	25,5				
28	18,5	18,1	181,4	181,9	182,0	181,0				
29	109,5	182,2	33,3	33,8	33,9	32,9				
30	19,5	9,7	24,1	24,0	24,0	23,3				
3-OAc		171,2 21,4								

Dung môi đo phổ: ^{a)}CDCl₃, ^{b)}CDCl₃+CD₃OD, ^{c)}CD₃OD, ^{d)}DMSO-*d*₆



4,48 (dd, $J = 10,5/6,0$ Hz, H-3), hai proton methine ở δ_H 2,79 (dd, $J = 7,0/3,0$ Hz, H-20); 2,31 (m, H-19), một nhóm acetoxy (δ_H 2,04, s, H-2'), sáu nhóm methyl mũi đơn ở δ_H 1,04 (s, H-26); 0,92 (s, H-27); 0,87 (s, H-25); 0,85 (s, H-24); 0,84 (s, H-23); 0,77 (s, H-28) và một nhóm methyl mũi đôi ở δ_H 1,05 (d, $J = 7,0$ Hz, H-30). Phổ ^{13}C -NMR kết hợp với phổ HSQC cho thấy sự hiện diện của ba mươi hai nguyên tử carbon. Trong đó xuất hiện tín hiệu cộng hưởng của một carbon carboxyl tại δ_C 182,2 (C-29), một nhóm acetoxy (δ_C 171,2 và 21,4), một nhóm oxymethine tại δ_C 81,1, bảy nhóm methyl tại δ_C 28,1; 16,7; 16,3; 16,1; 14,5; 18,1 và 9,7 năm nhóm methine tại δ_C 55,5; 50,1; 37,9; 47,4 và 40,3. Tương quan HMBC giữa proton H-3 (δ_H 4,48) với carbon C-1' giúp xác định nhóm acetoxy gắn qua C-3. Theo báo cáo của tác giả Corbett¹⁸, carbon C-20 có cấu hình S thì δ_C của C-30 là 9,6 ppm, ngược lại C-20 có cấu hình R thì δ_C của C-30 là 17,2 ppm. Từ các dữ liệu phổ nghiệm NMR và so sánh tài liệu¹⁹, hợp chất 2 được xác định là (20S)-3-acetoxyilupan-29-oic acid.

Phổ ^1H -NMR của hợp chất 3 cho tín hiệu cộng hưởng của proton olefin δ_H 5,24 (t, $J = 3,0$ Hz, H-12), hai nhóm oxymethine δ_H 3,61 (ddd, $J = 10,5/10,5/4,5$ Hz, H-2) và 2,91 (d, $J = 10,0$ Hz, H-3), bảy nhóm methyl mũi đơn nhọn ở vùng từ trường cao δ_H 1,13–0,78. Phổ ^{13}C -NMR kết hợp với phổ HSQC cho thấy hợp chất 3 có 30 carbon, bao gồm một carbon carboxyl δ_C 181,4 (C-28), hai carbon olefin δ_C 122,9 (C-12), 144,7 (C-13), hai nhóm oxymethine ở δ_C 84,1 và

69,1; sáu carbon tứ cấp, ba nhóm methine, chín nhóm methylene và bảy nhóm methyl. Proton của hai nhóm methyl H_3 -23 (δ_H 0,99) và H_3 -24 (δ_H 0,78) cho tương quan HMBC với carbon oxymethine ở δ_C 84,1 (C-3) và carbon methine δ_C 55,1 (C-5) giúp dự đoán C-3 mang nhóm -OH. Tương quan HMBC giữa proton oxymethine còn lại (δ_H 3,61) với C-3 cũng như proton H-3 cho tương quan với carbon oxymethine ở δ_C 69,1 giúp dự đoán C-2 mang nhóm -OH (Hình 2). Từ những dữ liệu NMR trên, hợp chất 3 được xác định là maslinic acid²⁰.

Phổ ^1H -NMR của hợp chất 4 cho tín hiệu cộng hưởng của proton olefin ở δ_H 5,23 (t, $J = 3,5$ Hz, H-12), một nhóm oxymethine ở δ_H 3,14 (dd, $J = 12,0/4,5$ Hz, H-3), tín hiệu của một phân tử đường [proton anomer ở δ_H 4,38 (1H, d, $J = 8,0$ Hz, H-1'), các proton gắn trên carbon mang oxygen của đường trong vùng 3,20–3,80 ppm], một nhóm methoxy ở δ_H 3,77 (s) và tín hiệu cộng hưởng của 7 nhóm methyl mũi đơn ở vùng từ trường cao δ_H 1,16–0,81. Phổ ^{13}C -NMR kết hợp với phổ HSQC cho thấy hợp chất 4 có 37 carbon. Trong đó xuất hiện tín hiệu cộng hưởng của hai carbon carboxyl tại δ_C 181,9 (C-28) và δ_C 171,4 (C-6'), hai carbon olefin ở δ_C 123,7 (C-12) và 145,2 (C-13), một nhóm methoxy tại δ_C 51,7 (C-7'). Tín hiệu của một phân tử đường glucuronic acid [một carbon anomer tại δ_C 107,0 (C-1'), bốn carbon oxymethine trong vùng δ_C 73,2–77,5; một carbon carboxyl δ_C 171,4 (C-6')]. Những dữ

kiện phổ NMR trên giúp dự đoán hợp chất **4** là một saponin triterpenoid với phần aglycone là oleanolic acid và một phân tử đường glucuronic acid. Proton anomer H-1' ở δ_H 4,38 cho tương quan HMBC đến carbon ở δ_C 91,1 (C-3) và ngược lại giúp xác định phân tử đường gắn vào aglycone qua C-3. Tương quan HMBC từ proton của nhóm methoxy δ_H 3,77 đến carbon ở δ_C 171,4 (C-6') giúp xác định nhóm -OCH₃ gắn ở C-6' (Hình 2). Kết hợp với tài liệu tham khảo²¹, hợp chất **4** được đề nghị là 3-O- β -D-(6'-O-methyl)glucuronopyranosyloleanolic acid.

Phổ NMR của hợp chất **5** cho thấy có nhiều tương đồng với hợp chất **4**. Điểm khác biệt là trong phổ NMR của hợp chất **5** có tín hiệu cộng hưởng của một nhóm ethoxy [δ_H 4,24; δ_C 62,4 (-CH₂-, C-7') và δ_H 1,29; δ_C 14,4 (-CH₃, C-8')] thay vì nhóm methoxy như trong hợp chất **4**. Tương quan HMBC từ hai proton oxymethylene với C-6' (δ_C 171,0) giúp xác nhận nhóm ethoxy gắn ở C-6' (Hình 2). Từ những dữ liệu NMR trên, hợp chất **5** được đề nghị là 3-O- β -D-(6'-O-ethyl)glucuronopyranosyloleanolic acid.

Hợp chất **6** phân lập được ở dạng bột vô định hình màu trắng. Khối phổ phân giải cao cho mũi ion phân tử giả tại m/z 793,4371 (phù hợp với công thức phân tử C₄₃H₆₈O₁₄, với [M-CH₃]⁻ = 793,4374). Phổ ¹H-NMR của hợp chất **6** có nhiều điểm tương đồng với phổ NMR của hợp chất **4** và **5**, ngoại trừ trong hợp chất **6** có thêm tín hiệu cộng hưởng của một phân tử đường hexose [proton anomer thứ hai ở δ_H 4,14 (1H, d, J = 8,0 Hz, H-1''), carbon anomer thứ hai ở δ_C 103,1] giúp dự đoán hợp chất **6** cũng là triterpenoid saponin với phần aglycone là oleanolic acid, phần đường gồm có hai phân tử đường. Các phổ COSY, HSQC và HMBC giúp xác định một phân tử đường là 6-O-methyl glucuronate và phân tử đường còn lại là đường hexose. Phân tử đường thứ hai được xác định là β -D-glucopyranose dựa vào giá trị hằng số ghép của H-1'' (δ_H 4,14; d, J = 8,0 Hz) và H-4'' (δ_H 3,02; dd, J = 9,5/9,0 Hz). Phổ HMBC của hợp chất **6** cho thấy tương quan của proton anomer H-1' (δ_H 4,38) đến carbon C-3, proton anomer thứ hai H-1'' (δ_H 4,14) đến carbon C-4' (δ_C 81,2) giúp xác định phân tử đường thứ nhất gắn vào aglycone ở C-3 và phân tử đường thứ hai gắn vào phân tử đường thứ nhất ở C-4' (Hình 2). Kết hợp với tài liệu tham khảo²², hợp chất **6** được xác định là 3-O- β -D-glucopyranosyl-(1 \rightarrow 4)- β -D-(6'-O-methyl)glucuronopyranosyloleanolic acid.

KẾT LUẬN

Từ cao chiết ethyl acetate của lá cây Bông giấy (*Bougainvillea spectabilis*), bằng các kỹ thuật sắc

ki, đã phân lập được sáu hợp chất (**1-6**). Cấu trúc hóa học của sáu hợp chất này được xác định là lupeol (**1**), (20S)-3-acetoxylupan-29-oiic acid (**2**), maslinic acid (**3**), 3-O- β -D-(6'-O-methyl)glucuronopyranosyloleanolic acid (**4**), 3-O- β -D-(6'-O-ethyl)glucuronopyranosyloleanolic acid (**5**), và 3-O- β -D-glucopyranosyl-(1 \rightarrow 4)- β -D-(6'-O-methyl)glucuronopyranosyloleanolic acid (**6**). Sáu hợp chất này đều lần đầu tiên được phát hiện có trong chi *Bougainvillea*.

DANH MỤC CÁC TỪ VIẾT TẮT

brs: mũi đơn rộng (broad singlet)
brd: mũi đôi rộng (broad doublet)
COSY: Homonuclear COrrrelation Spectroscopy (Homonuclear COrrrelation Spectroscopy)
d: mũi đôi (doublet)
dd: mũi đôi-đôi (doublet of doublets)
ddd: mũi đôi-đôi-đôi (doublet of doublet of doublets)
DEPT: Distortionless enhancement by polarization transfer
HMBC: Heteronuclear multiple Bond correlation
HRESIMS: High resolution electrospray ionization mass spectrometry
HSQC: Heteronuclear single quantum correlation
m: mũi đa (multiplet)
NMR: Nuclear magnetic resonance
q: mũi bốn (quartet)
s: mũi đơn (singlet)
t: mũi ba (triple)

XUNG ĐỘT LỢI ÍCH

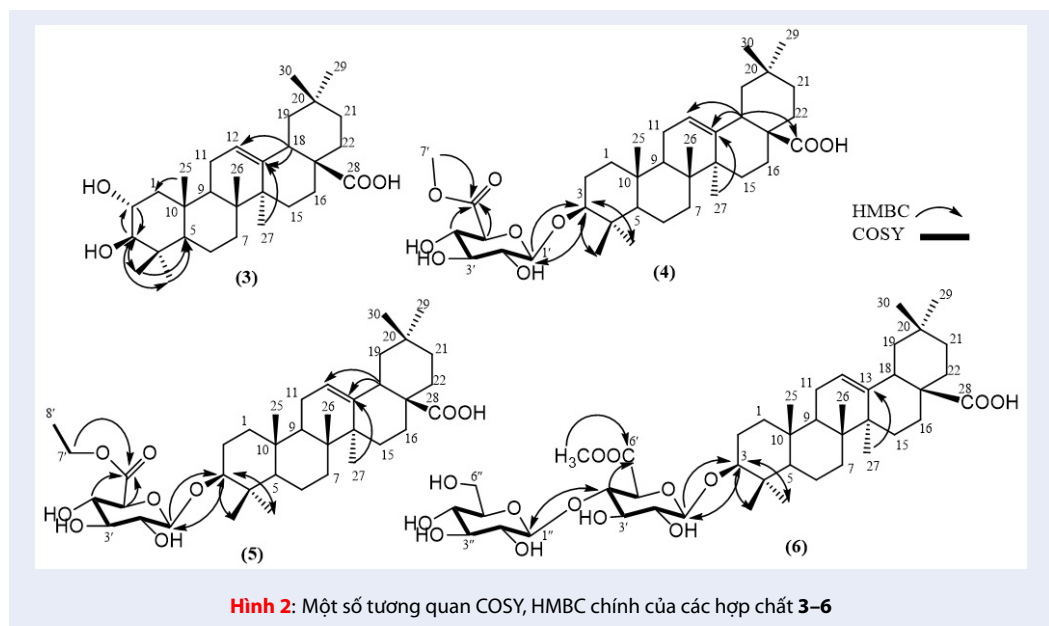
Nhóm tác giả tuyên bố không có xung đột lợi ích.

ĐÓNG GÓP CỦA TÁC GIẢ

Tác giả Đỗ Thị Mỹ Liên, Phạm Bảo Quý, tổng hợp tài liệu, chiết tách và phân lập các hợp chất. Tác giả Võ Thị Ngà, Nguyễn Thị Ánh Tuyết xác định cấu trúc, viết bản thảo và hoàn thiện bản thảo. Tất cả các giả đã đọc và chấp nhận bản thảo cuối cùng.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. Abarca-Vargas R, Petricevic VL. *Bougainvillea* Genus: A Review on phytochemistry, pharmacology, and toxicology. Evidence-Based Complementary and Alternative Medicine, 2018, 9070927, 1-17; Available from: <https://doi.org/10.1155/2018/9070927>.
2. Ahmad Z, Khan SS, Wani AA, Khan F. Ethnomedicinal plants used for different ailments by the tribals of district Raisen (M.P.). India. Journal of Medicinal Plants Research, 2013, 7, 298-303; Available from: [10.5897/JMPR011.1669](https://doi.org/10.5897/JMPR011.1669).
3. Canales M, Hernández T, Caballero J, Romo de Vivar A, Avila G, Duran A, Lira R. Informant consensus factor and antibacterial activity of the medicinal plants used by the people of San Rafael Coxcatlán, Puebla, México. Journal of Ethnopharmacology, 2005, 97, 429-439; Available from: <https://doi.org/10.1016/j.jep.2004.11.013>.



4. Purohit A, Sharma A. Antidiabetic efficacy of Bougainvillea spectabilis bark extract in streptozotocin induced diabetic rats. *Journal of Cell and Tissue Research*, 2006, 6 (1) 537-540; Available from: [https://doi.org/10.1016/S2221-1691\(12\)60337-2](https://doi.org/10.1016/S2221-1691(12)60337-2).
5. Bhat M, Kothiwale SK, Tirmale AR, Bhargava SY, Joshi BN. Antidiabetic properties of Azadiracta indica and Bougainvillea spectabilis: In vivo studies in murine diabetes model. *Evid Based Complement Alternat Med.*, 2011, 561625; PMID: 19389871. Available from: <https://doi.org/10.1093/ecam/nep033>.
6. Jawla S, Kumar Y, Khan MSY. Hypoglycemic activity of Bougainvillea spectabilis stem bark in normal and alloxan-induced diabetic rats, *Asian Pacific Journal of Tropical Biomedicine*, 2012, S919-S923; Available from: [https://doi.org/10.1016/S2221-1691\(12\)60337-2](https://doi.org/10.1016/S2221-1691(12)60337-2).
7. Bhat M, Zinjarde SS, Bhargava SY, Kumar AR, Joshi BN. Antidiabetic Indian plants: A good source of potent amylase inhibitors. *Evid Based Complementary Alternat Med.*, 2011, 810207; Available from: <https://doi.org/10.1093/ecam/nen040>.
8. Manivannan E, Kothai R, Arul B, Rajaram S. Anti-inflammatory activity of Bougainvillea spectabilis Linn, *Research Journal of Pharmaceutical, Biological and Chemical Sciences*, 2012, 3 (1), 642-646; Available from: [https://www.rjpbcs.com/pdf/2012-3\(1\)/78.pdf](https://www.rjpbcs.com/pdf/2012-3(1)/78.pdf).
9. Mandal G, Chatterjee C, Chatterjee M. Evaluation of anti-inflammatory activity of methanolic extract of leaves of Bougainvillea spectabilis in experimental animal models. *Pharmacognosy Research*, 2015, 7 (1), 18-22; PMID: 25598630. Available from: <https://doi.org/10.4103/0974-8490.147194>.
10. Kumara SM, Sudipta KM, Lokesh P, Neeki AM, Rashmi W, Bhaumik HS, Darshil HS, Vijay R, Kashyap SSN. Phytochemical screening and in vitro antimicrobial activity of Bougainvillea spectabilis flower extracts. *International Journal of Phytomedicine*, 2012, 4, 375-379; Available from: <https://core.ac.uk/download/pdf/233974639.pdf>.
11. Ahmed AH. Biologically active saponins from Bougainvillea spectabilis growing in Egypt. *Asian Journal of Chemistry*, 2009, 21 (7), 5510-5516; Available from: https://asianjournalofchemistry.co.in/User/ViewFreeArticle.aspx?ArticleID=21_7_78.
12. Jawla S, Kumar Y, Khan MSY. Isolation of antidiabetic principle from Bougainvillea spectabilis Willd (Nyctaginaceae) stem bark, *Tropical Journal of Pharmaceutical Research*, 2013, 12 (5), 761-765; Available from: <https://doi.org/10.4314/tjpr.v12i5.15>.
13. Lien DTM., Aree T, Siripong P, Tuyet PNK, Phung NKP, Tip-pyang S. Bougainvinones A-H, peltogynoids from the stem bark of purple Bougainvillea spectabilis and their cytotoxic activity. *J. Nat. Pro.*, 2016, 79, 939-945; PMID: 26963142. Available from: <https://doi.org/10.1021/acs.jnatprod.5b00996>.
14. Lien DTM., Aree T, Siripong P, Nga VT, Tuyet NTA, Phung NKP, Tip-pyang. Cytotoxic flavones from the stem bark of Bougainvillea spectabilis Will. *Planta Medica*, 2018, 84(02), 129-134; PMID: 28800661. Available from: <https://doi.org/10.1055/s-0043-118102>.
15. Tuyet T.A. Nguyen, Hai L. Nguyen, Tuyet N.K. Pham, Phung K.P. Nguyen, Tuyet T. N. Huynh, Jirapast Sichaem, Lien T.M. Do. Bougainvinones N-P, three new flavonoids from Bougainvillea spectabilis, *Fitoterapia* 149 (2021) 104832; PMID: 33460723. Available from: <https://doi.org/10.1016/j.fitote.2021.104832>.
16. Y B.N. Tran, Van-Kieu N, Phuong T.K.N. Cytotoxic flavonoids from the roots of Bougainvillea spectabilis. *Phytochemistry Letters*, 2021, 42, 117-120; Available from: <https://doi.org/10.1016/j.phyto.2021.01.007>.
17. Jamal AK, Yaacob WA, Din LB. A chemical study on Phyllanthus reticulatus. *Journal of Physical Science*, 2008, 19, 45-50; Available from: <https://jps.usm.my/wp-content/uploads/2014/11/Article-19-2-5.pdf>.
18. Corbett RE; Cong ANT; Wilkins AL, Thomson RA. Lichens and fungi. Part 17. The synthesis and absolute configuration at C-20 of the (R)- and (S)- epimers of some 29-substituted lupane derivatives and of some 30-norlupan-20-ol derivatives and the crystal structure of (20R)-3 β -acetoxylupan-29-ol. *J. Chem. Soc. Perkin Trans. I* 1985, 2051-2056; Available from: <https://doi.org/10.1039/P19850002051>.
19. Chiang YM, Kuo YH (2001). New peroxy triterpenes from the aerial roots of Ficus microcarpa. *Journal of Natural Products*, 64(4), 436-439; Available from: <https://doi.org/10.1021/np0004808>.
20. Van QTT, Vien LT, Hanh TTH, Huong PTT, Thanh NV, Cuong NX, Nam NH, Minh CV. Triterpenoid derivatives from Barringtonia racemosa, *Vietnam J. Chem.*, 2019, 57(1), 96-100; Available from: <https://doi.org/10.1002/vjch.201900006>.
21. Melek FR, Miyase T, El-Gindi, OD, Abdel-Khalik SM, Hag-

gag MY. Saponins from *Fagonia mollis*. *Phytochemistry*, 1996, 42(5), 1405-1407; Available from: [https://doi.org/10.1016/0031-9422\(95\)00087-9](https://doi.org/10.1016/0031-9422(95)00087-9).

22. Tuyet NTA, Suong NN, Phung NKP. Two novel oleanolic glycosides from *Polyscias balfouriana* Bail (Araliaceae). *Vietnam J. Chem*, 2008, 46(3), 379-384, 2008;

Triterpenoids and triterpenoid saponins from leaves of *Bougainvillea spectabilis*

Vo Thi Nga¹, Do Thi My Lien², Pham Bao Quy³, Nguyen Thi Anh Tuyet^{3,*}



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

¹Faculty of Chemical and Food Technology, Ho Chi Minh City University of Technology and Education, Vietnam.

²Institute of Environment–Energy Technology, Sai Gon University, Ho Chi Minh City, Vietnam.

³Department of Chemistry, Ho Chi Minh City University of Education, Ho Chi Minh City, Vietnam.

Correspondence

Nguyen Thi Anh Tuyet, Department of Chemistry, Ho Chi Minh City University of Education, Ho Chi Minh City, Vietnam.

Email: tuyetnta@hcmue.edu.vn

History

- Received: 30-5-2022
- Accepted: 20-7-2022
- Published: 30-9-2022

DOI : 10.32508/stdjns.v6i3.1197



Copyright

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



ABSTRACT

The genus *Bougainvillea* with about 18 species belonging to the family Nyctaginaceae is a widespread group throughout the world. *Bougainvillea spectabilis* was traditionally used in Indian and Mexico for treatment hepatitis, cough, and diarrhea. Ethanolic and methanolic extracts from leaves and stems of this plant showed anti-inflammatory activity. Some pharmacological studies have focused on antidiabetic activity of this species. Some extracts from leaves, bark exhibited hypoglycemic, α -glucosidase, and amylase inhibitor activities. Phytochemical investigations have reported the isolation of flavonoids, triterpenoid saponins, and steroids. Leaves of *B. spectabilis* were collected and extracted with ethanol at room temperature by maceration method to obtain the ethanolic extract. By partitioning with n -hexane, ethyl acetate successively yields n -hexane and ethyl acetate extracts. Column chromatographies on normal phase silica gel, reversed-phase RP-18, and Sephadex LH-20 were used to isolate compounds 1–6. Their chemical structures were elucidated by HRESIMS, 1D, and 2D-NMR and compared with those reported in the literature, including lupeol (**1**), (20S)-3-acetyloxylupan-29-oic acid (**2**), maslinic acid (**3**), 3-O- β -D-(6'-O-methyl)glucuronopyranosyloleanolic acid (**4**), 3-O- β -D-(6'-O-ethyl)glucuronopyranosyloleanolic acid (**5**), and 3-O- β -D-glucopyranosyl-(1 \rightarrow 4)- β -D-(6'-O-methyl)glucuronopyranosyloleanolic acid (**6**). All these compounds were isolated for the first time from the genus *Bougainvillea*.

Key words: *Bougainvillea spectabilis*, isolation, NMR, triterpenoid, triterpenoid saponin

Cite this article : Nga V T, Lien D T M, Quy P B, Tuyet N T A. Triterpenoids and triterpenoid saponins from leaves of *Bougainvillea spectabilis*. *Sci. Tech. Dev. J. - Nat. Sci.*; 2022, 6(3):2306-2312.