

Phân lập hợp chất phenol từ vỏ cây xà cừ lá nhỏ (*Swietenia microphylla*)

Trịnh Hoàng Dương¹, Nguyễn Thị Lệ Thu^{2,3}, Bùi Ngọc Dũng^{2,3}, Nguyễn Diệu Liên Hoa^{2,3}, Trần Thu Phương^{2,3,*}

TÓM TẮT

Họ Xoan (Meliaceae) là một họ thực vật lớn trên thế giới với khoảng 50 chi và 650 loài phân bố nhiều ở vùng nhiệt đới, cận nhiệt đới và một ít ở vùng ôn đới. *Swietenia* là một chi thuộc họ Xoan, gồm 7-8 loài được sử dụng rộng rãi trong công nghiệp, thực phẩm và y học cổ truyền. Những nghiên cứu trước đây cho thấy chi *Swietenia* chứa các nhóm hợp chất chủ yếu là limonoid, terpenoid, steroid và các hợp chất phenol đã được khảo sát hoạt tính kháng khuẩn, kháng nấm, chống sốt rét, kháng ung thư, kháng virus. Xà cừ lá nhỏ (*Swietenia microphylla*) thuộc chi *Swietenia*, là loài thực vật mới hiện chưa được công bố ở Việt Nam cũng như trên thế giới về thành phần hóa học và hoạt tính sinh học. Vì vậy việc thực hiện nghiên cứu thành phần hóa học trên loài cây này là cần thiết nhằm nâng cao sự hiểu biết về hóa học hợp chất tự nhiên, đồng thời cung cấp mẫu chất cho các thử nghiệm hoạt tính sinh học. Bài báo trình bày kết quả phân lập và xác định cấu trúc của năm hợp chất phenol từ cao ethyl acetate của vỏ cây xà cừ lá nhỏ thu hái tại vườn ươm thực vật Trảng Bom, tỉnh Đồng Nai. Vỏ cây được phơi khô, xay nhỏ và trích Soxhlet với ethyl acetate, sau đó cô quay thu hồi dung môi thu được cao ethyl acetate. Sắc ký cột nhiều lần cao ethyl acetate trên silica gel kết hợp sắc ký lọc gel trên Sephadex LH-20 với các hệ dung môi khác nhau, ba hợp chất tinh khiết là scopoletin (**1**), 3,4-dihydroxybenzoic acid (**2**), (+)-epiafzelechin (**3**) và một hỗn hợp ở tỉ lệ 6:4 của (+)-catechin (**4**) và (+)-epicatechin (**5**) đã được phân lập. Cấu trúc hóa học của các hợp chất được xác định dựa vào phổ 1D, 2D-NMR, HRESIMS kết hợp so sánh với tài liệu tham khảo. Đây là lần đầu tiên các hợp chất này được báo cáo hiện diện trong cây xà cừ lá nhỏ.

Từ khóa: Xà cừ lá nhỏ (*Swietenia microphylla*), họ Xoan (Meliaceae), phân lập, hợp chất phenol

¹Viện Kiểm nghiệm Thuốc Thành phố Hồ Chí Minh, Việt Nam

²Khoa Hóa học, Trường Đại học Khoa học Tự nhiên, ĐHQG-HCM, Việt Nam

³Đại học Quốc gia Thành phố Hồ Chí Minh, Việt Nam

Liên hệ

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

Đại học Quốc gia Thành phố Hồ Chí Minh, Việt Nam

Email: ttpuong@hcmus.edu.vn

Lịch sử

- Ngày nhận: 12-8-2023
- Ngày chấp nhận: 23-02-2024
- Ngày đăng: 31-3-2024

DOI:

<https://doi.org/10.32508/stdjns.v8i1.1302>



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

Họ Xoan (Meliaceae), tên gọi khác là họ Dái ngựa, là một họ lớn trong nhóm thực vật có hoa với khoảng 50 chi và 650 loài phân bố khắp vùng nhiệt đới, cận nhiệt đới và số ít ở vùng ôn đới. Chi *Swietenia* thuộc họ Xoan, không những được biết đến là nguồn cung cấp gỗ có giá trị kinh tế cao mà còn được sử dụng trong y học cổ truyền để điều trị nhiều bệnh khác nhau như đái tháo đường, làm se vết thương, bệnh leishmania, sốt rét¹⁻⁴. Ở Việt Nam, họ Xoan có khoảng 20 chi, bao gồm cả *Swietenia*, với khoảng 65 loài được sử dụng rộng rãi trong lĩnh vực lâm nghiệp, công nghiệp, thực phẩm và y học cổ truyền⁵. Kết quả nghiên cứu trước đây về thành phần hóa học cho thấy các loài thuộc chi *Swietenia* chứa chủ yếu là limonoid, ngoài ra còn có terpenoid, steroid và hợp chất phenol⁶. Các hợp chất phân lập đã được thử nghiệm và thể hiện hoạt tính sinh học khá đa dạng như khả năng trừ sâu, kháng khuẩn, kháng nấm, chống sốt rét, kháng ung thư, kháng virus và kháng oxy hóa⁷⁻¹⁰. Vì thế, các loài thực vật thuộc chi này được xem là một trong những nguồn nguyên liệu dồi dào cung cấp hợp chất tự nhiên có hoạt tính sinh học giá trị. Xà cừ lá nhỏ

(*Swietenia microphylla*) được biết đến là loài cây lấy gỗ, được trồng với mục đích phủ xanh đất trống và cung cấp gỗ cho vùng Đông Nam Bộ. Cho đến nay vẫn chưa có nghiên cứu nào về thành phần hóa học và hoạt tính sinh học của loài này. Tiếp nối ý nghĩa của các nghiên cứu về chi *Swietenia*, bài báo này trình bày quy trình phân lập và xác định cấu trúc hóa học một số hợp chất hóa học từ vỏ cây xà cừ lá nhỏ (*Swietenia microphylla*).

VẬT LIỆU VÀ PHƯƠNG PHÁP

Đối tượng nghiên cứu

Vỏ cây xà cừ lá nhỏ (*S. microphylla*) thu hái tại vườn ươm thực vật Trảng Bom, phân hiệu Trường Đại học Lâm nghiệp, tỉnh Đồng Nai vào tháng 01/2019, do TS. Đặng Việt Hùng, trường Đại học Lâm Nghiệp, phân hiệu Đồng Nai định danh.

Hóa chất và thiết bị

Phổ cộng hưởng từ hạt nhân (NMR) đo trên máy Bruker Avance III 500 [500 MHz (¹H) và 125 MHz (¹³C)] với CDCl₃ hoặc acetone-*d*₆ là dung môi, độ dịch chuyển hóa học (tính bằng ppm) được hiệu

Trích dẫn bài báo này: Dương TH, Thu NTL, Dũng BN, Hoa NDL, Phương TT. **Phân lập hợp chất phenol từ vỏ cây xà cừ lá nhỏ (*Swietenia microphylla*).** *Sci. Tech. Dev. J. - Nat. Sci.* 2024; 8(1):2879-2885.

chính dựa trên độ dịch chuyển hóa học của dung môi sử dụng. Khối phổ phân giải cao (HRESIMS) ghi trên máy X500R QTOF và Shimadzu IT-TOF. Năng lực triển quang đo trên triển quang kế A. Krüss Optronic. Sắc ký cột (SKC) được thực hiện trên silica gel 60 (40-63 μm , Merck). Sắc ký lớp mỏng (SKLM) được thực hiện trên bản silica gel 60 F₂₅₄ (250 μm , Merck) và RP-18 (250 μm , Merck). Cấu tử trên bản mỏng được phát hiện bằng đèn tử ngoại hoặc phun với dung dịch vanillin–acid sulfuric trong EtOH rồi nung nóng. Dung môi để thực hiện chiết xuất và phân lập chất đều được chưng cất lại trước khi sử dụng.

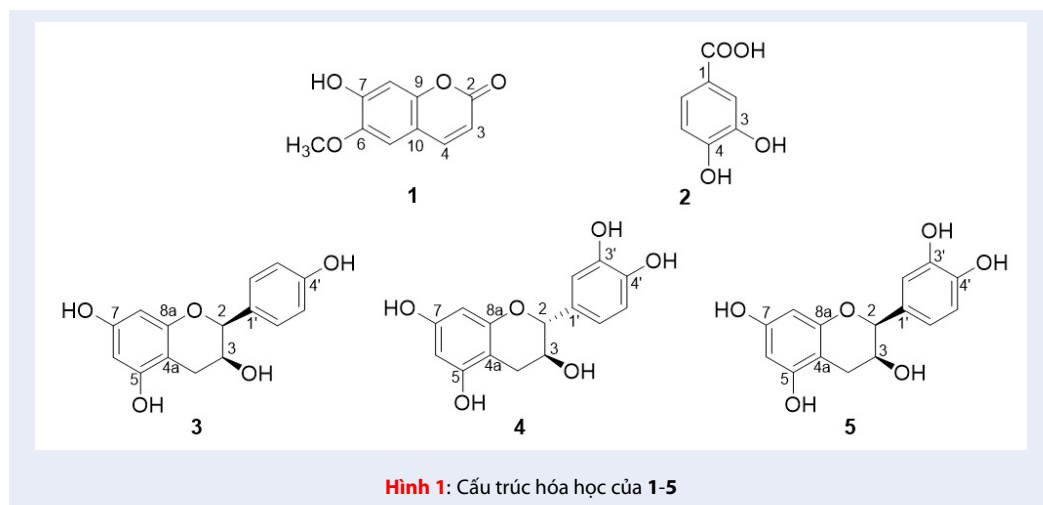
Chiết xuất và phân lập

Vỏ cây sau khi thu hái được phơi khô tự nhiên, xay nhỏ. Trích kiệt mẫu (14 kg) bằng bộ chiết Soxhlet với EtOAc, cô quay thu hồi dung môi thu được cao EtOAc, ký hiệu là SME. SKC cao SME (890 g) trên silica gel (*n*-hexane-acetone, 0-100%) thu được tám phân đoạn (SME1–8). SKC phân đoạn SME5 (103,2 g) trên silica gel (*n*-hexane-acetone, 0-100%) thu được năm phân đoạn (SME5.1–5). Thực hiện SKC phân đoạn SME5.3 (32,3 g) nhiều lần trên silica gel với hệ dung môi *n*-hexane-acetone (0-100%) thu được phân đoạn SME5.3.2.1–6. Tiếp tục SKC phân đoạn SME5.3.2.1 trên silica gel bằng hệ dung môi *n*-hexane-chloroform-acetone (70:27:3), sau đó tinh chế phân đoạn SME5.3.2.1.3 (20 mg) bằng SKC trên silica gel (*n*-hexane-EtOAc, 0-100%) thu được scopoletin (**1**; 7,0 mg). Phân đoạn SME5.3.2.4 (601,9 mg) được SKC trên silica gel bằng hệ dung môi *n*-hexane-chloroform (50-100%) thu được tám phân đoạn (SME5.3.2.4.1–8). SKC phân đoạn SME5.3.2.4.6 trên silica gel (*n*-hexane-EtOAc 0-100%) và tinh chế lại bằng hệ dung môi *n*-hexane-acetone (0-100%) thu được (+)-epiafzelechin (**3**; 3,0 mg). Tiến hành SKC phân đoạn SME5.3.2.5 (1,11 g) trên silica gel bằng hệ dung môi *n*-hexane-acetone (0-100%) thu được năm phân đoạn. Phân đoạn SME5.3.2.5.4 (823,2 mg) được SKC trên silica gel (chloroform-MeOH, 0-50%), sau đó tiếp tục thực hiện SK lọc gel trên Sephadex LH-20 (chloroform-MeOH, 50%) và tinh chế lại bằng SKC trên silica gel (*n*-hexane-acetone, 0-70%) thu được hỗn hợp (+)-catechin và (+)-epicatechin (**4** và **5**; 10,6 mg). SKC phân đoạn SME5.3.5 (19,7 g) trên silica gel (*n*-hexane-EtOAc, 0-100%) thu được 9 phân đoạn (SME5.3.5.1-9). Thực hiện SKC phân đoạn SME5.3.5.3 (6,25 g) trên silica gel (*n*-hexane-EtOAc 0-100%) thu được 8 phân đoạn (SME5.3.5.3.1–8). Chọn phân đoạn SME5.3.5.3.4 (27 mg) tiếp tục SKC trên silica gel (dichloromethane-EtOAc, 0-100%), và tinh chế lại bằng SKC trên silica gel (*n*-hexane-acetone, 0-100%) thu được 3,4-dihydroxybenzoic acid (**2**; 3,5 mg).

KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

Xác định cấu trúc

Từ cao EtOAc của vỏ cây xà cừ lá nhỏ, ba hợp chất là scopoletin (**1**), 3,4-dihydroxybenzoic acid (**2**), (+)-epiafzelechin (**3**) và một hỗn hợp gồm (+)-catechin (**4**) và (+)-epicatechin (**5**) đã được phân lập (Hình 1). **Hợp chất 1** thu được dưới dạng bột màu vàng. Phổ HRESIMS cho tín hiệu của mũi ion phân tử giả $[M+H]^+$ ở m/z 193,0458, tương ứng với công thức phân tử C₁₀H₈O₄. Phổ ¹H và ¹³C NMR (CDCl₃) cho các tín hiệu cộng hưởng của một carbon carbonyl [δ_C 161,6 (s, C-2)], một nối đôi C=C mang hai proton ghép cặp *cis* [δ_H 7,59 (1H, d, J = 9,5 Hz, H-4) và 6,26 (1H, d, J = 9,5 Hz, H-3); δ_C 143,4 (C-4) và 107,7 (C-3)], một vòng benzene 1,2,4,5-tứ hoán [δ_H 6,84 (1H, s, H-8) và 6,91 (1H, s, H-5); δ_C 150,4 (s; C-7); 149,9 (C-9); 144,2 (C-6); 113,6 (C-5); 111,6 (C-10) và 103,4 (C-8)] và một nhóm methoxy [δ_H 3,95 (3H; s; 6-OCH₃); δ_C 56,6 (6-OCH₃)]. So sánh các số liệu phổ của **1** với tài liệu tham khảo¹¹ xác nhận hợp chất là scopoletin. **Hợp chất 2** thu được dưới dạng bột màu trắng. Phổ HRESIMS cho tín hiệu của mũi ion $[M-H]^-$ ở m/z 153,0186, tương ứng với công thức phân tử C₇H₆O₄. Phổ ¹H và ¹³C NMR (acetone-*d*₆) cho các tín hiệu cộng hưởng của một carbon carbonyl [δ_C 167,6 (C-7)] và một vòng benzene 1,2,4-tam hoán [δ_H 7,52 (1H, d, J = 2,0 Hz; H-2); 7,47 (1H, dd, J = 8,3 và 2,0 Hz; H-6) và 6,89 (1H, d, J = 8,3; H-5); δ_C 150,8 (C-4); 145,6 (C-3); 123,6 (C-6); 123,2 (C-1); 117,5 (C-2) và 115,7 (C-5)]. So sánh các số liệu phổ của **2** với tài liệu tham khảo¹² xác nhận hợp chất là 3,4-dihydroxybenzoic acid. **Hợp chất 3** thu được dưới dạng bột màu trắng, [α]_D²⁵ +252.8 (*c* 0.4 trong MeOH). Phổ HRESIMS cho tín hiệu của mũi ion $[M-H]^-$ ở m/z 273,0784, tương ứng với công thức phân tử C₁₅H₁₄O₅. Phổ ¹H NMR (acetone-*d*₆, Bảng 1) cho các tín hiệu cộng hưởng ứng với proton của một vòng benzene 1,4-nhi hoán [δ_H 7,36 (2H, brd, J = 8,5 Hz, H-2', 6') và 6,81 (2H, brd, J = 8,5 Hz, H-3', 5')] và một vòng benzene 1,2,3,5-tứ hoán [(δ_H 6,03 (1H, d, J = 2,2 Hz; H-6) và 5,92 (1H, d, J = 2,2 Hz; H-8)]. Ngoài ra còn có tín hiệu cộng hưởng của hai nhóm oxymethine [(δ_H 4,93 (1H, s, H-2) và 3,58 (1H, d, J = 5,8 Hz; H-3), một nhóm methylene [δ_H 2,88 (1H, dd, J = 16,6 và 4,6 Hz; H_a-4) và 2,75 (1H; dd; J = 16,6 và 3,1 Hz; H_b-4)] và proton của ba nhóm hydroxy [(δ_H 8,25 (1H, s, 4'-OH); 8,12 (1H, s, 5-OH) và 7,94 (1H, s, 7-OH)]. Phổ ¹³C NMR (acetone-*d*₆, Bảng 1) cho các tín hiệu cộng hưởng ứng với 15 carbon, trong đó có 12 carbon hương phương với bốn carbon mang oxygen [(δ_C 157,7 (C-5, 7, 4') và 157,2 (C-8a)], hai carbon mang nhóm thế [(δ_C 131,5 (C-1') và 99,8 (C-4a)] và sáu carbon mang proton. Ngoài ra



còn có tín hiệu cộng hưởng của hai nhóm oxymethine [δ_C 79,5 (C-2) và 66,9 (C-3)] và một nhóm methylene [δ_C 29,2 (C-4)]. Các số liệu phổ trên giúp dự đoán **3** là một flavanol.

Cấu trúc hóa học của **3** được xác định bằng phổ HMBC (Hình 2A). Trong phổ HMBC, hai proton hương phương ghép cặp *ortho* của vòng benzene 1,4-nhi hoán ở δ_H 7,36 (H-2', 6') cho tương quan với một carbon thơm mang oxygen (δ_C 157,7) và một carbon sp^3 của nhóm oxymethine (δ_C 79,5) nên hai carbon này lần lượt là C-4' và C-2. Như vậy có thể xác định được đây là vòng B gắn vào C-2. Ở vòng C, proton oxymethine ở δ_H 4,93 cho tương quan HMBC với C-1' và C-6' chứng tỏ đây là H-2. Ngoài ra, H-2 cùng với proton oxymethine ở δ_H 3,58 cùng cho tương quan với một carbon methylene ở δ_C 29,2. Vậy proton oxymethine này là H-3 và carbon methylene là C-4. Vị trí của các carbon trong vòng C cũng được xác nhận nhờ vào tương quan của H-3 với C-2 và H-4 với C-2/C-3. Proton H₂₋₄ cho tương quan HMBC với hai carbon thơm (δ_C 157,7 và 99,8). Đồng thời, hai proton thơm ghép cặp *meta* trên vòng benzene 1,2,3,5-tứ hoán [δ_H 6,03 (H-6) và 5,92 (H-8)] cùng cho tương quan HMBC với carbon thơm ở δ_C 99,8 chứng tỏ carbon này là C-4a và suy ra carbon ở δ_C 157,7 là C-5. Proton nhóm -OH (δ_H 7,94) cho tương quan với hai carbon thơm trong đó có một carbon mang oxygen [δ_C 157,7 và 95,8] nên hai carbon này lần lượt là C-7 và C-8. Vị trí của C-8a được xác nhận nhờ vào tương quan HMBC với proton H-8 (δ_H 5,92).

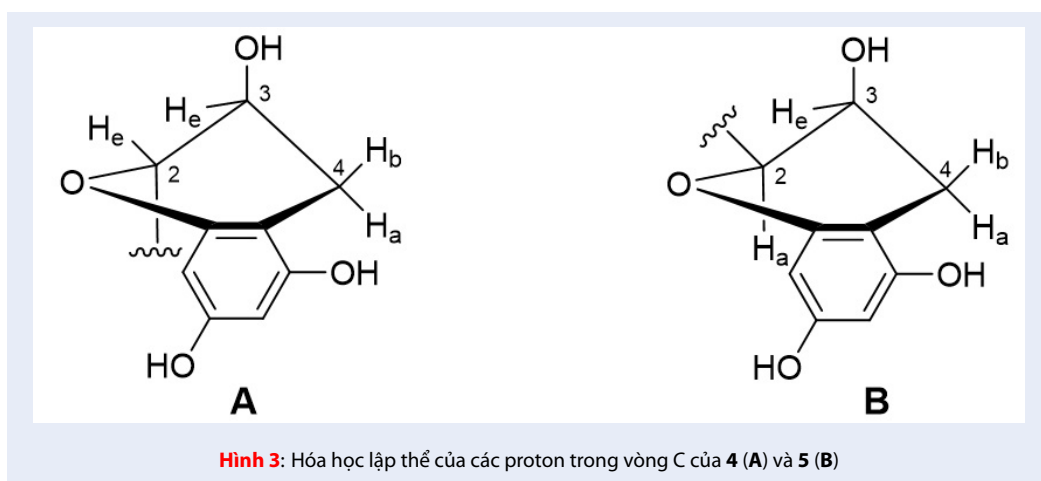
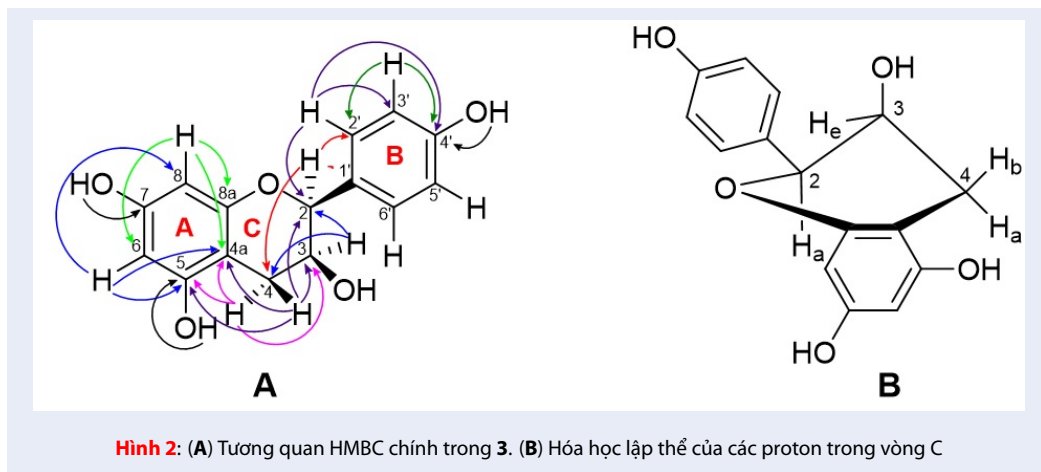
Trong vòng C, hai proton của nhóm methylene [δ_H 2,88 ($J = 16,6$ và $4,6$ Hz; H_{a-4}) và 2,75 ($J = 16,6$ và $3,1$ Hz; H_{b-4})] ghép cặp với nhau với hằng số ghép lớn và ghép cặp với H-3 với hằng số ghép nhỏ nên H-3 phải ở vị trí xích đạo. Kết hợp so sánh tài liệu tham khảo¹³

cho thấy khi H-2 là một mũi đơn, H-2 và H-3 ở cùng phía với nhau, phù hợp cấu hình *cis* trong cấu trạng nửa ghế (Hình 2B). Phân tích số liệu phổ kết hợp giá trị $[\alpha] > 0$ và so sánh tài liệu tham khảo¹⁴ để nghị hợp chất **3** là (+)-epiafzelechin.

Hỗn hợp hai hợp chất 4 và 5 thu được dưới dạng bột màu vàng, $[\alpha]_{25}^D +79.5$ (c 0,6, MeOH). Phổ ^{13}C NMR (acetone-*d*₆) cho các tín hiệu cộng hưởng ứng với 30 carbon. Phân tích phổ 1H và ^{13}C NMR (Bảng 1) cho thấy hợp chất mang hai khung flavan-3-ol tương tự như hợp chất **3**. Điểm khác biệt duy nhất ở vòng B là một vòng benzene 1,2,4-tam hoán thay vì 1,4-nhi hoán như ở **3**. Phổ HRESIMS cho mũi ion $[M-H]^-$ ở m/z 289,0708 (trị số tính toán cho C₁₅H₁₃O₆ là 289,0712) ứng với công thức phân tử C₁₅H₁₄O₆, độ bất bão hòa là 9. Kết quả phân tích phổ NMR và HRESIMS cho thấy đây là hỗn hợp của hai flavan-3-ol thay vì là một dimer của hai flavan-3-ol. Lập luận tương tự như với hợp chất **3**, ở hợp chất thứ nhất, H-2 là mũi đôi, ghép cặp với H-3 bằng hằng số ghép cặp lớn ($J = 7.8$ Hz), hai proton này có nằm ngược hướng nhau, tương ứng với cấu hình *trans* trong cấu trạng nửa ghế (Hình 3A). Ở hợp chất thứ hai, H-2 là mũi đơn và H-3 là mũi đơn rộng, hai proton này ở cùng hướng, tương ứng với cấu hình *cis* trong cấu trạng nửa ghế (Hình 3B). Từ các số liệu phổ kết hợp so sánh với tài liệu tham khảo¹³ xác nhận cấu trúc hóa học của hỗn hợp là (+)-catechin (**4**) và (+)-epicatechin (**5**) hiện diện ở tỉ lệ 6:4, tính theo tích phân của proton.

KẾT LUẬN

Từ cao ethyl acetate của vỏ cây xà cừ lá nhỏ, thu hái tại vườn ươm thực vật Trảng Bom, tỉnh Đồng Nai, ba hợp chất là scopoletin (**1**), 3,4-dihydroxy benzoic acid (**2**), (+)-epiafzelechin (**3**), và một hỗn hợp gồm (+)-catechin (**4**) và (+)-epicatechin (**5**) đã được phân lập.



Cấu trúc hóa học của các hợp chất được xác định dựa vào phổ NMR, HRESIMS và so sánh với tài liệu tham khảo. Đây là lần đầu tiên các hợp chất này được phân lập từ cây xà cừ lá nhỏ, trong đó hợp chất **3** và **5** lần đầu tiên được báo cáo hiện diện trong chi *Swietenia*.

LỜI CẢM ƠN

Nghiên cứu được tài trợ bởi Đại học Quốc gia Thành phố Hồ Chí Minh trong khuôn khổ Đề tài mã số B2023-18-08.

DANH MỤC TỪ VIẾT TẮT

br: broad
 d: doublet
 dd: doublet of doublet
 HMBC: Heteronuclear multiple bond correlation
 HRESIMS: High resolution electrospray ionization mass spectroscopy
 m: multiplet
 NMR: Nuclear magnetic resonance
 s: singlet

XUNG ĐỘT LỢI ÍCH

Nhóm tác giả cam đoan không có xung đột lợi ích.

ĐÓNG GÓP CỦA CÁC TÁC GIẢ

Trịnh Hoàng Dương phân lập hợp chất, phân tích dữ liệu phổ, tổng hợp tài liệu và viết bản thảo. Bùi Ngọc Dũng thu thập mẫu cây, ly trích và điều chế cao thô. Nguyễn Thị Lệ Thu xử lý, phân tích dữ liệu phổ và xác định cấu trúc hóa học. Nguyễn Diệu Liên Hoa kiểm tra cấu trúc hóa học và tư vấn quy trình thí nghiệm. Trần Thu Phương lên kế hoạch nghiên cứu, kiểm tra cấu trúc hóa học và hoàn chỉnh bản thảo.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. Australian Biological Resources Study, Flora of Australia, CSIRO Publishing. 2013; 26:1-2;.
2. Dewanjee S, Paul P, Dua TK, Bhowmick S, Saha A. Big leaf mahogany seeds: *Swietenia macrophylla* seeds offer possible phytotherapeutic intervention against diabetic pathophysiology. In: Preedy VR, Watson RR, Patel VB, Nuts and

Bảng 1: Số liệu phổ ¹H (500 MHz), ¹³C NMR (125 MHz) của 3–5 trong acetone-d₆ (J tính bằng Hz)

Vị trí	3			4		5	
	δ_H	Tương quan HMBC	δ_C	δ_H	δ_C	δ_H	δ_C
1							
2	4,93 s	C-4, C-1', C-2'	79,5	4,56 d (7,8)	82,8	4,88 s	79,5
3	3,58 d (5,8)	C-2, C-4	66,9	3,99 m	68,4	4,20 brs	67,0
4	Ha: 2,88 dd (16,6; 4,6) Hb: 2,75 dd (16,6; 3,1)	C-3, C-4a, C-5 C-2, C-3, C-4a, C-5	29,2	Ha: 2,53 dd (16,1; 8,5) Hb: 2,85 m	28,9	Ha: 2,74 dd (16,6; 3,2) Hb: 2,85 dd (16,6; 4,6)	29,0
4a			99,8		100,7		99,9
5			157,7		157,3		157,2
6	6,03 d (2,2)	C-4a, C-5, C-8	96,3	6,02 d (2,1)	96,2	6,02 d (2,1)	96,3
7			157,7		157,8		157,8
8	5,92 d (2,2)	C-4a, C-6, C-8a	95,8	5,88 d (2,2)	95,5	5,92 d (2,2)	95,8
8a			157,2		157,0		157,6
1'			131,5		132,27		132,31
2'	7,36 brd (8,5)	C-2, C-3', C-4'	129,2	6,90 d (1,8)	115,3	7,05 d (1,7)	115,3
3'	6,81 brd (8,5)	C-1', C-2', C-4'	115,5		145,7		145,3
4'			157,7		145,8		145,5
5'	6,81 brd (8,5)	C-1', C-4', C-6'	115,5	6,79 d (8,1)	115,8	6,79 d (8,1)	115,6
6'	7,36 brd (8,5)	C-2, C-4', C-5'	129,2	6,76 dd (8,1; 1,7)	120,1	6,84 dd (8,2; 1,7)	119,4
3-OH	4,21 brs			3,87 s		3,52 d (4,8)	
5-OH	8,12 s	C-4a, C-5, C-6					
7-OH	7,94 s	C-7, C-8					
4'-OH	8,25 s	C-3', C-4'					

Seeds in Health and Disease Prevention, Academic Press, Elsevier 2020; 38:543-565; Available from: <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-818553-7.00038-3>.

- Bourdy G, DeWalt S, Chávez de Michel LR, Roca A, Deharo E, Muñoz V, Balderrama L, Quenevo C, Gimenez A. Medicinal plants uses of the Tacana, an Amazonian Bolivian ethnic group. *J Ethnopharmacol.* 2000; 70:87-109; PMID: 10771199. Available from: [https://doi.org/10.1016/S0378-8741\(99\)00158-0](https://doi.org/10.1016/S0378-8741(99)00158-0).
- Falah S, Safithri M, Katayama T, Suzuki T. Hypoglycemic effect of Mahogany (*Swietenia macrophylla* King) bark extracts in alloxan-induced diabetic rats. *Wood Research Journal.* 2010; 1:89-94;.
- Trương Thị Đẹp (2007), *Thực vật dược*, NXB Giáo Dục, Hà Nội. 2007; 252-253;.
- Sun YP, Jin WF, Wang YY, Wan G, Morris-Natschke SL, Liu JS, Wang GK, Lee KH. Chemical structures and biological activities of limonoids from the genus *Swietenia* (Meliaceae). *Molecules.* 2018; 23:1-17; PMID: 29966275. Available from: <https://doi.org/10.3390/molecules23071588>.
- Roy A, Saraf S. Limonoids: Overview of significant bioactive triterpenes distributed in plants kingdom. *Biol Pharm Bull.* 2006; 29:191-201; PMID: 16462017. Available from: <https://doi.org/10.1248/bpb.29.191>.
- Cheng YB, Chien YT, Lee JC, Tseng CK, Wang HC, Lo IW, Wu YH, Wang SY, Wu YC, Chang FR. Limonoids from the seeds of *Swietenia macrophylla* with inhibitory activity against dengue virus 2. *J Nat Prod.* 2014; 77(11):2367-2374; PMID: 25330401. Available from: <https://doi.org/10.1021/np5002829>.
- Wu WB, Zhang H, Liu HC, Dong SH, Wu Y, Ding J, Yue

- JM.Ivorenoids A-F: Limonoids from *Khaya ivorensis*. *Tetrahedron*. 2014; 70:3570-3575; Available from: <https://doi.org/10.1016/j.tet.2014.04.007>.
10. Pereira TB, Rocha E Silva LF, Amorim RC, Melo MR, Zacardi de Souza RC, Eberlin MN, Lima ES, Vasconcellos MC, Pohlit AM. In vitro and in vivo anti-malarial activity of limonoids isolated from the residual seed biomass from *Carapa guianensis* (andiroba) oil production. *Malar J*. 2014; 13:317-325; PMID: 25124944. Available from: <https://doi.org/10.1186/1475-2875-13-317>.
 11. Khan NMM, Hossain MS. Scopoletin and β -sitosterol glucoside from roots of *Ipomoea digitata*. *J Pharmacogn Phytochem*. 2015; 4(2):05-07; Available from: <https://www.phytojournal.com/vol4Issue2/4-2-10.1.html>.
 12. Nguyen DMC, Seo DJ, Kim KY, Park RD, Kim DH, Han Y, Kim TH, Jung WJ. Nematicidal activity of 3,4-Dihydroxybenzoic acid purified from *Terminalia nigrovirens* bark against *Meloidogyne incognita*. *Microb Pathog*. 2013; 59-60:52-59; PMID: 23603737. Available from: <https://doi.org/10.1016/j.micpath.2013.04.005>.
 13. El-Razek MHA. NMR assignments of four catechin epimers. *Asian J Chem*. 2007;19:4867-4872;.
 14. Ngô QL, Huỳnh MT, Vũ DK, Lê TD, Nguyễn NH. Ba hợp chất flavonoid từ lá Ô môi (*Cassia Grandis*), Tạp chí Khoa học Trường Đại học Cần Thơ. 2013; 29:111-116;.

Phenolic compounds from the bark of *Swietenia microphylla*

Trinh Hoang Duong¹, Nguyen Thi Le Thu^{2,3}, Bui Ngoc Dung^{2,3}, Nguyen Dieu Lien Hoa^{2,3}, Tran Thu Phuong^{2,3,*}

ABSTRACT

Meliaceae is a large plant family with approximately 50 genera and 650 known species which are mostly distributed in the pantropical regions of the World. *Swietenia*, a genus of the family Meliaceae, comprises 7–8 species which were widely used in the manufacture of furniture, food and traditional medicine. Previous studies revealed that *Swietenia* mainly contained limonoids, terpenoids, steroids and phenolic compounds. Antibacterial, antifungal, antimalarial, anticancer, antiviral activities of the isolated compounds and extracts of the genus were also reported. *Swietenia microphylla* is a species of genus *Swietenia* whose phytochemical composition and biological activities have not been studied. This paper showed the results of isolation and structural elucidation of five phenolic compounds from an ethyl acetate extract of *Swietenia microphylla* bark, collected at Trang Bom Botanical garden, Dong Nai Province. Dried and ground barks of the species were extracted with ethyl acetate by Soxhlet extraction. The ethyl acetate extract, obtained after removal of the solvent via rotary evaporation, was separated using column chromatography on silica gel and Sephadex LH-20. Chemical structures of isolated compounds were elucidated by analysis of 1D, 2D-NMR, HRESIMS spectra and comparison of the spectral data with relevant literature. They were identified as scopoletin (**1**), 3,4-dihydroxybenzoic acid (**2**), (+)-epiafzelechin (**3**) and a mixture at a 6:4 ratio of (+)-catechin (**4**) and (+)-epicatechin (**5**). All the compounds have been reported for the first time from this species.

Key words: *Swietenia microphylla*, Meliaceae, isolation, phenolic compound

¹Institute of Drug Quality Control Ho Chi Minh City, Vietnam

²Faculty of Chemistry, University of Science, VNU-HCM, Vietnam

³Vietnam National University Ho Chi Minh City, Vietnam

Correspondence

Tran Thu Phuong, Faculty of Chemistry, University of Science, VNU-HCM, Vietnam

Vietnam National University Ho Chi Minh City, Vietnam

Email: ttpuong@hcmus.edu.vn

History

- Received: 12-8-2023
- Accepted: 23-02-2024
- Published Online: 31-3-2024

DOI :

<https://doi.org/10.32508/stdjns.v8i1.1302>



Copyright

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



Cite this article : Duong T H, Thu N T L, Dung B N, Hoa N D L, Phuong T T. **Phenolic compounds from the bark of *Swietenia microphylla***. *Sci. Tech. Dev. J. - Nat. Sci.* 2024; 8(1):2879-2885.