

# Một số hợp chất flavanone từ củ ngải bún (*Boesenbergia pandurata*)

Nguyễn Xuân Hải, Lê Quang Phong, Nguyễn Thị Thanh Mai, Nguyễn Trung Nhân

**Tóm tắt**—*Boesenbergia pandurata* (Roxb.) Schltr. là một loại thảo dược thuộc họ gừng. Loài cây này được trồng chủ yếu ở các nước nhiệt đới nằm trong vùng Đông Nam Á như Việt Nam, Thái Lan, Myanmar, Indonesia và Malaysia. Ở Việt Nam, loài cây này được gọi là “Ngải bún”, và củ tươi của nó được sử dụng chủ yếu như một loại gia vị. Các nghiên cứu cho thấy, củ Ngải bún có thành phần chính là các hợp chất prenyl chalcone và flavonoid cũng như có nhiều hoạt tính sinh học đa dạng. Từ cao chloroform (CHCl<sub>3</sub>) của củ Ngải bún đã được phân lập được sáu hợp chất flavanone là pinocembrin (1), pinostrobin (2), alpinetin (3), di-*O*-methylpinocembrin (4), naringenin (5) và 5-*O*-methylnaringenin (6). Cấu trúc các hợp chất này được xác định bằng các phương pháp phổ nghiệm kết hợp với so sánh tài liệu tham khảo.

**Từ khóa**—flavanone, Ngải bún, họ gừng, củ

## 1 MỞ ĐẦU

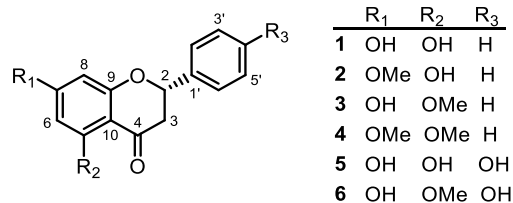
Cây ngải bún có tên khoa học là *Boesenbergia pandurata*, họ gừng (Zingiberaceae). Cây ngải bún là cây thân thảo lâu năm, được sử dụng làm gia vị trong đời sống và được phân bố ở các nước nhiệt đới như: Việt Nam, Indonesia, Myanmar, Malaysia và Thái Lan [1]. Ở Việt Nam, cây Ngải bún được trồng nhiều ở các tỉnh phía Nam, chủ yếu ở An Giang, Trà Vinh và Sóc Trăng [2]. Trong dân gian, củ ngải bún còn được sử dụng để trị bệnh hen suyễn, khó tiêu, tiêu chảy, ngứa, sốt, loét, khô miệng, dạ dày, kiết lỵ ... [1–3]. Bằng các phương pháp sắc ký và các phương pháp phổ nghiệm, nhiều nhà khoa học trên thế giới đã phân lập, xác định cấu trúc và định danh các hợp chất có

Ngày nhận bản thảo: 12-11-2017; Ngày chấp nhận đăng: 05-03-2018; Ngày đăng: 15-10-2018.

Tác giả Nguyễn Xuân Hải, Nguyễn Thị Thanh Mai, Nguyễn Trung Nhân – Trường Đại học Khoa học Tự nhiên, ĐHQG-HCM; Lê Quang Phong – Trường Đại học Quốc tế, ĐHQG-HCM

(email: ntnhan@hcmus.edu.vn)

trong củ Ngải bún như flavonoid, chalcone, dihydrochalcone, tinh dầu...[4–5]. Bài báo này công bố về việc phân lập và xác định cấu trúc của sáu hợp chất từ củ ngải bún là pinocembrin (1), pinostrobin (2), alpinetin (3), di-*O*-methylpinocembrin (4), naringenin (5) và 5-*O*-methylnaringenin (6) (hình 1).



Hình 1. Cấu trúc của các hợp chất được phân lập từ củ Ngải bún

## 2 THỰC NGHIỆM

Củ ngải bún được lấy tại tỉnh An Giang vào tháng 01 năm 2017 và được định danh bởi TS. Đặng Lê Anh Tuấn, Khoa Sinh học, Trường Đại học Khoa học Tự nhiên, ĐHQG-HCM. Từ 5,5 kg lượng mẫu thô củ ngải bún, tiến hành xay nhuyễn, đun hoàn lưu với dung môi methanol (MeOH). Toàn bộ dịch chiết được cô quay áp suất kém thu được cao MeOH thô. Lấy cao MeOH thô hòa tan vào H<sub>2</sub>O. Sau đó, chiết lỏng – lỏng lần lượt với các dung môi chloroform (CHCl<sub>3</sub>), ethyl acetate (EtOAc) thu được các cao phân đoạn tương ứng: cao CHCl<sub>3</sub> (510 g), cao EtOAc (10 g) và cao H<sub>2</sub>O (142 g).

Bằng kỹ thuật sắc ký cột trên silica gel pha thường kết hợp với sắc ký bản mỏng điều chế pha thường và pha đảo với các hệ dung môi giải ly khác nhau, sáu hợp chất tinh khiết đã được phân lập từ phân đoạn cao CHCl<sub>3</sub> của củ ngải bún. Phổ cộng hưởng từ hạt nhân (NMR) của các hợp chất này được ghi trên máy Bruker 500 MHz với chất nội chuẩn tetramethylsilane (TMS).

### 3 KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

Hợp chất **1** thu được có dạng bột màu trắng, tan tốt trong dung môi acetone. Phổ <sup>1</sup>H-NMR của hợp chất **1** cho thấy ở vùng trường thấp xuất hiện tín hiệu cộng hưởng của 2 proton thơm ghép cặp *meta* với nhau [ $\delta_H$  5,98 (1H; d;  $J = 2,2$  Hz; H-6)] và [ $\delta_H$  6,01 (1H; d;  $J = 2,2$  Hz; H-8)]; 5 proton thơm khác [ $\delta_H$  7,45 (2H; m; H-3' & H-5')], [ $\delta_H$  7,56 (2H; m; H-2' & H-6')], [ $\delta_H$  7,38 (1H; m; H-4')]. Điều này cho thấy cấu trúc của hợp chất **1** có 1 vòng thơm 1 nhóm thế và 1 vòng thơm 4 nhóm thế. Ngoài ra, tại vùng từ trường thấp còn có tín hiệu đặc trưng của 1 nhóm hydroxyl kiềm nổi [ $\delta_H$  12,15 (1H; s; 5-OH)]. Mặt khác, ở vùng từ trường cao có sự xuất hiện tín hiệu cộng hưởng của 2 proton của nhóm methylene [ $\delta_H$  2,80 (1H; dd;  $J = 17,1$  & 3,1 Hz; H-3a)] và [ $\delta_H$  3,13 (1H; dd;  $J = 17,1$  & 12,8 Hz; H-

3b)], cùng với 1 proton của nhóm oxymethine [ $\delta_H$  5,54 (1H; dd;  $J = 12,8$  & 3,1 Hz; H-2)] (bảng 1).

Phổ <sup>13</sup>C-NMR của hợp chất **1** cho thấy có tín hiệu của 15 carbon. Trong đó có 1 carbon carbonyl của nhóm ketone [ $\delta_C$  196,7; C-4]; 3 carbon thơm mang nhóm thế nối với oxygen [ $\delta_C$  164,1; C-9], [ $\delta_C$  165,2; C-5], [ $\delta_C$  167,4; C-7]; 2 carbon thơm mang nhóm thế [ $\delta_C$  103,2; C-10] [ $\delta_C$  140,0; C-1']; 7 carbon methine thơm [ $\delta_C$  95,9; C-6], [ $\delta_C$  97,0; C-8], [ $\delta_C$  127,2; C-2' & C-6'], [ $\delta_C$  129,3; C-4'], [ $\delta_C$  129,4; C-3' & C-5']; 1 carbon methylene [ $\delta_C$  43,4; C-3]; 1 carbon oxymethine [ $\delta_C$  79,9; C-2] (bảng 1).

Phân tích dữ liệu phổ trên cho thấy hợp chất **1** có cấu trúc của một flavanone có hai nhóm hydroxyl. So sánh dữ liệu phổ NMR của hợp chất **1** với hợp chất pinocembrin cho thấy có sự tương hợp [6]. Vậy hợp chất **1** là pinocembrin.

**Bảng 1.** Dữ liệu phổ NMR của hợp chất **1** và **2** trong dung môi acetone-*d*<sub>6</sub>

Vị trí	1		2	
	$\delta_H$ (J/Hz)	$\delta_C$	$\delta_H$ (J/Hz)	$\delta_C$
2	5,54 dd (12,8; 3,1)	79,9	5,60 dd (12,8; 3,1)	80,1
3a	2,80 dd (17,1; 3,1)	43,4	2,86 dd (17,2; 3,1)	43,6
3b	3,13 dd (17,1; 12,8)		3,15 dd (17,2; 12,8)	
4		196,7		197,3
5		165,2		165,1
6	5,98 d (2,2)	95,9	6,05 d (2,3)	95,6
7		167,4		168,9
8	6,01 d (2,2)	97,0	6,09 d (2,3)	94,7
9		164,1		163,8
10		103,2		103,0
1'		140,0		140,0
2', 6'	7,56 m	127,2	7,57 m	127,3
3', 5'	7,45 m	129,4	7,45 m	129,5
4'	7,38 m	129,3	7,40 m	129,5
5-OH	12,15 s		12,12 s	
7-OH	9,61 s			
7-OCH <sub>3</sub>			3,86 s	56,3

Hợp chất **2** thu được có dạng bột màu trắng, tan tốt trong dung môi acetone. Phổ <sup>1</sup>H-NMR của hợp chất **2** cho thấy ở vùng từ trường thấp xuất hiện tín hiệu cộng hưởng của 2 proton thơm ghép cặp *meta* với nhau [ $\delta_H$  6,05 (1H; d;  $J = 2,3$  Hz; H-6)] và [ $\delta_H$  6,09 (1H; d;  $J = 2,3$  Hz; H-8)]; 5 proton thơm khác [ $\delta_H$  7,40 (1H; m; H-4')], [ $\delta_H$  7,45 (2H; m; H-3' & H-5')], [ $\delta_H$  7,57 (2H; m; H-2' & H-6')]. Điều này cho thấy cấu trúc của hợp chất **2** có 1 vòng thơm 1 nhóm thế và 1 vòng thơm 4 nhóm thế. Ngoài ra, ở vùng từ trường thấp còn có tín hiệu đặc trưng của

1 nhóm hydroxyl kiềm nổi [ $\delta_H$  12,12 (1H; s; 5-OH)]. Mặt khác, ở vùng trường cao có sự xuất hiện tín hiệu cộng hưởng của 2 proton của nhóm methylene [ $\delta_H$  2,86 (1H; dd;  $J = 17,2$  & 3,1 Hz; H-3a)] và [ $\delta_H$  3,15 (1H; dd;  $J = 17,2$  & 12,8 Hz; H-3b)], 1 proton của nhóm oxymethine [ $\delta_H$  5,60 (1H; dd;  $J = 12,8$  & 3,1 Hz; H-2)], cùng với 1 tín hiệu của nhóm methoxyl [ $\delta_H$  3,86 (3H; s; 7-OCH<sub>3</sub>)] (bảng 1). Phổ <sup>13</sup>C-NMR của hợp chất **2** cho thấy có tín hiệu của 16 carbon. Trong đó có 1 carbon carbonyl của nhóm ketone [ $\delta_C$  197,3; C-4]; 3

carbon thơm mang nhóm thế nối với oxygen [ $\delta_C$  163,8; C-9], [ $\delta_C$  165,1; C-5], [ $\delta_C$  168,9; C-7]; 2 carbon thơm mang nhóm thế [ $\delta_C$  103,0; C-10], [ $\delta_C$  140,0; C-1']; 7 carbon methine thơm [ $\delta_C$  94,7; C-8], [ $\delta_C$  95,6; C-6], [ $\delta_C$  127,3; C-2' & C-6'], [ $\delta_C$  129,5; C-3' & C-5'], [ $\delta_C$  129,5; C-4']; 1 carbon methylene [ $\delta_C$  43,6; C-3]; 1 carbon oxymethine [ $\delta_C$  80,1; C-2]; 1 carbon methoxyl [ $\delta_C$  56,3; 7-OCH<sub>3</sub>] (bảng 1). Phân tích dữ liệu phổ trên cho thấy hợp chất **2** cũng có cấu trúc tương tự như hợp chất **1**, ngoại trừ có sự xuất hiện thêm một nhóm methoxyl. So sánh dữ liệu phổ NMR của hợp chất **2** với hợp chất pinostrobin cho thấy có sự tương hợp [7]. Vậy hợp chất **2** là pinostrobin.

Hợp chất **3** thu được có dạng bột màu trắng, tan tốt trong dung môi acetone. Phổ <sup>1</sup>H-NMR của hợp chất **3** cho thấy ở vùng từ trường thấp có tín hiệu cộng hưởng của 2 proton thơm ghép cặp *meta* với nhau [ $\delta_H$  6,09 (1H; d;  $J = 2,2$  Hz; H-6)] và [ $\delta_H$  6,15 (1H; d;  $J = 2,2$  Hz; H-8)]; 5 proton thơm khác [ $\delta_H$  7,37 (1H; t;  $J = 7,2$  Hz; H-4')], [ $\delta_H$  7,43 (2H; d;  $J = 7,2$  Hz; H-3' & H-5')], [ $\delta_H$  7,54 (2H; d;  $J = 7,2$  Hz; H-2' & H-6')]. Điều này cho thấy cấu trúc của hợp chất **3** có 1 vòng thơm 1 nhóm thế và 1 vòng thơm 4 nhóm thế. Ngoài ra, ở vùng từ trường thấp còn có tín hiệu của 1 nhóm hydroxyl [ $\delta_H$  9,51 (1H; s; 7-OH)]. Mặt khác, ở vùng từ trường cao có sự xuất hiện tín hiệu của 2 proton của nhóm methylene [ $\delta_H$  2,65 (1H; dd;  $J = 16,3$  & 3,0 Hz; H-3a)] và [ $\delta_H$  2,96 (1H; dd;  $J = 16,3$  & 12,7 Hz; H-3b)], 1 proton của nhóm oxymethine [ $\delta_H$  5,47 (1H; dd;  $J = 12,7$  và 3,0 Hz; H-2)], cùng với 1 tín hiệu của nhóm methoxyl [ $\delta_H$  3,80 (3H; s; 5-OCH<sub>3</sub>)] (bảng 2). Phổ <sup>13</sup>C-NMR của hợp chất **3** cho thấy có tín hiệu của 16 carbon. Trong đó có 1 carbon carbonyl của nhóm ketone [ $\delta_C$  187,7; C-4]; 3 carbon thơm mang nhóm thế nối với oxygen [ $\delta_C$  163,7; C-5], [ $\delta_C$  165,0; C-9], [ $\delta_C$  165,6; C-7]; 2 carbon thơm mang nhóm thế [ $\delta_C$  106,2; C-10], [ $\delta_C$  140,6; C-1']; 7 carbon methine thơm [ $\delta_C$  94,2; C-8], [ $\delta_C$  96,7; C-6], [ $\delta_C$  127,2; C-2' & C-6'], [ $\delta_C$  129,2; C-4'], [ $\delta_C$  129,4; C-3' & C-5']; 1 carbon methylene [ $\delta_C$  46,4; C-3]; 1 carbon oxymethine [ $\delta_C$  79,8; C-2]; 1

carbon methoxyl [ $\delta_C$  56,1; 5-OCH<sub>3</sub>] (bảng 2). Phân tích dữ liệu phổ trên cho thấy hợp chất **3** cũng có cấu trúc của một flavanone tương tự như hợp chất **2**, ngoại trừ có sự biến mất một nhóm hydroxyl kiềm nối. Tra cứu tài liệu tham khảo cho thấy dữ liệu phổ của hợp chất **3** và hợp chất alpinetin có sự tương hợp [8]. Do đó, cấu trúc của hợp chất **3** được xác định là alpinetin.

Hợp chất **4** thu được dạng bột màu trắng, tan tốt trong dung môi acetone, chloroform. Phổ <sup>1</sup>H-NMR của hợp chất **4** cho thấy ở vùng từ trường thấp xuất hiện tín hiệu cộng hưởng của 2 proton thơm ghép *meta* với nhau [ $\delta_H$  6,09 (1H; d;  $J = 2,3$  Hz; H-6)] và [ $\delta_H$  6,15 (1H; d;  $J = 2,3$  Hz; H-8)]; 5 proton thơm [ $\delta_H$  7,40–7,46 (5H; m; H-2', H-3', H-4', H-5', H-6')]. Điều này cho thấy hợp chất **4** có một vòng thơm mang 1 nhóm thế và một vòng thơm mang 4 nhóm thế. Ở vùng từ trường cao có sự xuất hiện tín hiệu cộng hưởng của 1 proton oxymethine [ $\delta_H$  5,41 (1H; dd;  $J = 13,2$ ; 3,0 Hz; H-2)] và 2 proton methylene [ $\delta_H$  2,67(1H; dd;  $J = 16,5$ ; 3,0 Hz; H-3a)] và [ $\delta_H$  2,96 (1H; dd;  $J = 16,5$ ; 13,2 Hz; H-3b)]. Ngoài ra, ở vùng từ trường cao của hợp chất **4** còn có tín hiệu của 2 nhóm methoxyl [ $\delta_H$  3,89 (3H; s; 5-OMe)] và [ $\delta_H$  3,82 (3H; s; 7-OMe)] (bảng 2). Phổ <sup>13</sup>C-NMR của hợp chất **4** cho thấy có tín hiệu của 17 carbon. Trong đó có 1 carbon carbonyl của nhóm ketone [ $\delta_C$  188,0; C-4]; 3 carbon thơm mang nhóm thế gắn với oxygen [ $\delta_C$  163,3; C-9], [ $\delta_C$  165,7; C-5], [ $\delta_C$  166,7; C-7]; 2 carbon thơm mang nhóm thế [ $\delta_C$  106,8; C-10], [ $\delta_C$  140,6; C-1']; 7 carbon methine thơm [ $\delta_C$  93,7; C-8], [ $\delta_C$  94,5; C-6], [ $\delta_C$  127,2; C-2' & C-6'], [ $\delta_C$  129,5; C-3' & C-5'], [ $\delta_C$  129,3; C-4']; 1 carbon oxymethine [ $\delta_C$  79,9; C-2]; 1 carbon methylene [ $\delta_C$  46,4; C-3] và 2 nhóm methoxyl [ $\delta_C$  56,3; 5-OMe] và [ $\delta_C$  56,2; 7-OMe] (bảng 2). Phân tích dữ liệu phổ trên cho thấy hợp chất **4** cũng có cấu trúc của một flavanone tương tự như hợp chất **1**, ngoại trừ có sự xuất hiện thêm hai nhóm methoxyl. So sánh dữ liệu phổ của hợp chất **4** với hợp chất di-*O*-methylpinocembrin cho thấy có sự tương hợp [9,10]. Vậy cấu trúc hợp chất **4** là di-*O*-methylpinocembrin.

Bảng 2. Dữ liệu phổ NMR của hợp chất 3 và 4

Vị trí	3 <sup>a</sup>		4	
	$\delta_H$ (J/Hz)	$\delta_C$	$\delta_H$ (J/Hz) <sup>a</sup>	$\delta_C$ <sup>b</sup>
2	5,47 dd (12,7; 3,0)	79,8	5,41 dd (13,2; 3,0)	79,9
3a	2,65 dd (16,3; 3,0)		2,67 dd (16,5; 3,0)	
3b	2,96 dd (16,3; 12,7)	46,4	2,96 dd (16,5; 13,2)	46,4
4		187,7		188,0
5		163,7		165,7
6	6,09 d (2,2)	96,7	6,09 d (2,3)	94,5
7		165,6		166,7
8	6,15 d (2,2)	94,2	6,15 d (2,3)	93,7
9		165,0		163,3
10		106,2		106,8
1'		140,6		140,6
2', 6'	7,54 d (7,2)	127,2	7,40 -7,46 m	127,2
3', 5'	7,43 d (7,2)	129,4	7,40 -7,46 m	129,5
4'	7,37 t (7,2)	129,2	7,40 -7,46 m	129,3
7-OH	9,51 s			
5-OCH <sub>3</sub>	3,80 s	56,1	3,89s	56,3
7-OCH <sub>3</sub>			3,82 s	56,2

Ghi chú<sup>a</sup>: acetone-*d*<sub>6</sub>; <sup>b</sup>: chloroform-*d*<sub>1</sub>

Hợp chất 5 có dạng bột màu vàng nhạt, tan tốt trong dung môi DMSO và acetone. Phổ <sup>1</sup>H-NMR của hợp chất 5 cho thấy ở vùng từ trường thấp xuất hiện tín hiệu của 2 proton thơm ghép cặp *meta* với nhau [ $\delta_H$  5,86 (2H; s; H-6 & H-8)]; 4 proton thơm ghép 2 cặp *ortho* với nhau [ $\delta_H$  6,78 (2H; d;  $J = 8,5$  Hz; H-3' & H-5')] và [ $\delta_H$  7,31 (2H; d;  $J = 8,5$  Hz; H-2' & H-6')]. Điều này cho thấy cấu trúc của hợp chất 5 có 1 vòng thơm 2 nhóm thế và 1 vòng thơm 4 nhóm thế. Ngoài ra, ở vùng từ trường thấp còn có tín hiệu đặc trưng của 1 nhóm hydroxyl kiềm nổi [ $\delta_H$  12,14 (1H; s; 5-OH)]. Mặt khác, ở vùng từ trường cao có sự xuất hiện tín hiệu của 2 proton của nhóm methylene [ $\delta_H$  2,86 (1H; dd;  $J = 17,0$  Hz & 3,0 Hz; H-3a)] và [ $\delta_H$  3,24 (1H; dd;  $J = 17,0$  Hz & 13,0 Hz; H-3b)], cùng với 1 proton của nhóm oxymethine [ $\delta_H$  5,42 (1H; dd;  $J = 13,0$  Hz & 3,0 Hz; H-2)] (bảng 3). Phổ <sup>13</sup>C-NMR của hợp chất 5 cho thấy có tín hiệu của 15 carbon. Trong đó có 1 carbon carbonyl của nhóm ketone [ $\delta_C$  196,1; C-4]; 4 carbon thơm mang nhóm thế nối với oxygen [ $\delta_C$  157,7; C-4'], [ $\delta_C$  162,9; C-5], [ $\delta_C$  163,5; C-9], [ $\delta_C$  167,1; C-7]; 2 carbon thơm mang nhóm thế [ $\delta_C$  101,6; C-10], [ $\delta_C$  128,9; C-1']; 6 carbon methine thơm [ $\delta_C$  95,1; C-8], [ $\delta_C$  95,9; C-6], [ $\delta_C$  115,2; C-3' & C-5'], [ $\delta_C$  128,2; C-2' & C-6']; 1 carbon methylene [ $\delta_C$  41,9; C-3]; 1 carbon oxymethine [ $\delta_C$  78,3; C-2] (bảng 3). Các dữ liệu trên cho thấy hợp

chất 5 cũng có cấu trúc của một flavanone tương tự như hợp chất 1, ngoại trừ có sự xuất hiện thêm một nhóm hydroxyl. So sánh dữ liệu phổ NMR của hợp chất 5 với hợp chất naringenin cho thấy có sự tương hợp [11]. Vậy hợp chất 5 là naringenin.

Hợp chất 6 thu được dạng bột màu trắng, tan tốt trong dung môi DMSO. Phổ <sup>1</sup>H-NMR của hợp chất 6 cho thấy ở vùng từ trường thấp xuất hiện tín hiệu cộng hưởng của 2 proton thơm ghép *meta* với nhau [ $\delta_H$  5,93 (1H;d;  $J = 2,0$  Hz;H-8)] và [ $\delta_H$  6,03 (1H;d;  $J = 2,0$  Hz; H-6)]; 4 proton thơm ghép *ortho* theo từng đôi một [ $\delta_H$  6,75 (2H; d;  $J = 8,5$  Hz; H-3' & H-5')] và [ $\delta_H$  7,26 (2H; d;  $J = 8,5$  Hz; H-2' & H-6')]. Điều này cho thấy hợp chất 6 có một vòng thơm mang 2 nhóm thế và một vòng thơm mang 4 nhóm thế. Ở vùng từ trường cao có sự xuất hiện tín hiệu cộng hưởng của 1 proton oxymethine [ $\delta_H$  5,30 (1H; dd;  $J = 12,5$ ; 2,8 Hz; H-2)] và 2 proton methylene [ $\delta_H$  2,50 (1H; dd;  $J = 16,4$ ; 2,8 Hz; H-3a)] và [ $\delta_H$  2,95 (1H; dd;  $J = 16,4$ ; 12,5 Hz; H-3b)]. Ngoài ra, ở vùng từ trường cao của hợp chất 6 còn có tín hiệu của 1 nhóm methoxyl [ $\delta_H$  3,71 (3H;s; 5-OMe)] (bảng 3). Phổ <sup>13</sup>C-NMR của hợp chất 6 cho thấy có tín hiệu của 16 carbon. Trong đó có 1 carbon carbonyl của nhóm ketone [ $\delta_C$  188,0; C-4]; 4 carbon thơm mang nhóm thế gắn với oxygen [ $\delta_C$  157,6; C-4'], [ $\delta_C$  162,3; C-9], [ $\delta_C$  164,3; C-5], [ $\delta_C$  164,4; C-7]; 2

carbon thơm mang nhóm thế [ $\delta_C$  104,5; C-10], [ $\delta_C$  129,4; C-1']; 6 carbon methine thơm [ $\delta_C$  93,3; C-8], [ $\delta_C$  95,7; C-6], [ $\delta_C$  115,2; C-2' & C-6'], [ $\delta_C$  128,2; C-3' & C-5']; 1 carbon oxymethine [ $\delta_C$  78,1; C-2]; 1 carbon methylene [ $\delta_C$  44,8; C-3] và 1 nhóm methoxyl [ $\delta_C$  55,7; 5-OMe] (bảng 3). Các dữ liệu phổ trên cho thấy hợp chất **6** cũng có cấu trúc

của một flavanone tương tự như hợp chất **5**, ngoại trừ có sự xuất hiện thêm một nhóm methoxyl và sự biến mất một nhóm hydroxyl kiềm nổi. So sánh dữ liệu phổ của hợp chất **6** với hợp chất 5-*O*-methylnaringenin cho thấy có sự tương hợp [12]. Vậy cấu trúc hợp chất **6** là 5-*O*-methylnaringenin.

Bảng 3. Dữ liệu phổ NMR của hợp chất **5** và **6** trong dung môi DMSO- $d_6$

Vị trí	5		6	
	$\delta_H$ (J/Hz)	$\delta_C$	$\delta_H$ (J/Hz)	$\delta_C$
2	5,42 dd (13,0; 3,0)	78,3	5,30dd (12,5; 2,8)	78,1
3a	2,86 dd (17,0; 3,0)		2,50 dd (16,4; 2,8)	
3b	3,24 dd (17,0; 13,0)	41,9	2,95 dd (16,4; 12,5)	44,8
4		196,1		188,0
5		162,9		164,3
6	5,86 s	95,9	6,03 d (2,0)	93,3
7		167,1		164,4
8	5,86 s	95,1	5,93 d (2,0)	95,7
9		163,5		162,3
10		101,6		104,5
1'		128,9		129,4
2', 6'	7,31 d (8,5)	128,1	7,26 d (8,5)	128,2
3', 5'	6,78 d (8,5)	115,2	6,75 d (8,5)	115,2
4'		157,7		157,6
5-OH	12,14 s			
5-OCH <sub>3</sub>			3,71 s	55,7

#### 4 KẾT LUẬN

Bằng kỹ thuật sắc ký cột trên silica gel pha thường kết hợp với sắc ký bản mỏng điều chế pha thường và pha đảo với các hệ dung môi giải ly khác nhau, sáu hợp chất tinh khiết đã được phân lập từ phân đoạn cao CHCl<sub>3</sub> của củ ngải bún. Trên cơ sở của phổ cộng hưởng từ hạt nhân kết hợp với so sánh tài liệu tham khảo, cấu trúc của các hợp chất này được xác định là pinocembrin (**1**), pinostrobin (**2**), alpinetin (**3**), di-*O*-methylpinocembrin (**4**), naringenin (**5**) và 5-*O*-methylnaringenin (**6**).

**Lời cảm ơn:** Nhóm tác giả chân thành cảm ơn Sở Khoa học Công nghệ An Giang đã tài trợ cho nghiên cứu này thông qua mã số đề tài 373.2017.08.

#### TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1]. S.E. Chong, L.Y. Kee, C.C. Fei, H.C. Han, W. S. Ming, C.T.L. Ping, F.G. Teck, N. Khalid, N.A. Rahman, S.A. Karsani, S. Othman, R. Othman, R. Yusof, *Boesenbergia rotunda*: from ethnomedicine to drug discovery, *SelectedWorks*, 1–3, 2012.
- [2]. P.H. Hộ, *Cây cỏ Việt Nam*, Nhà xuất bản Trẻ, 455–456, 2003.
- [3]. T. Patoomratana, R. Vichai, C. Per, P. Ubonwan, S. Tuanta, S. Thawatchai, T. Waltere, Anti-inflammatory cyclohexenylchalcone derivatives in *Boesenbergia pandurata*, *Phytochemistry*, 59, 169–173, 2002.
- [4]. A.Y.L. Ching, T.S. Wah, M.A. Sukari, G.E.C. Lian, M. Rahmani, K. Khalid, Characterization of flavonoid derivatives from *Boesenbergia rotunda* (L.), *The Malaysian Journal of Analytical Sciences*, 11, 154–159, 2007.
- [5]. T. Morikawa, K. Funakoshi, K. Ninomiya, Structures of new prenylchalcones and prenylflavanones with TNF- $\alpha$  and aminopeptidase N inhibitory activities from *Boesenbergia rotunda*, *Chemical and Pharmaceutical Bulletin*, 56, 956–962, 2008.
- [6]. J.H. Jung, S. Pummangura, C. Chaichantipyuth, C. Patarapanich, L. McLaughlin, Bioactive constituents of *Melodorum fruticosum*, *Phytochemistry*, 29, 1667–1670, 1990.

- [7]. M. Tanjung, T.S. Tjahjandarie, M. HadiSentosa, Antioxidant and cytotoxic agent from the rhizomes of *Kaempferia pandurata*, *Asian Pacific Journal of Tropical Disease*, 3, 401–404, 2013.
- [8]. S. Atun, R. Arianingrum, E. Sulistyowati, N. Aznam, Isolation and antimutagenic activity of some flavanone compounds from *Kaempferia rotunda*, *International Journal of Chemical and Analytical Science*, 4, 3–8, 2013.
- [9]. Y. Chavi, W. Suchana, P. Siripit, S. Bungon, Structural modification of 5,7-dimethoxyflavone from *Kaempferia parviflora* and biological activities, *Archives of Pharmacal Research*, 32, 1179–1184, 2009.
- [10]. M. Ralf, Flavonoids from *Leptospermum scoparium*, *Phytochemistry*, 29, 1340–1342, 1990.
- [11]. A.R.S. Ibrahim, A.M. Galal, M.S. Ahmed, G.S. Mossa, O-Demethylation and sulfation of 7-methoxylated flavanones by *Cunninghamella elegans*, *Chemical and Pharmaceutical Bulletin*, 51, 203–206, 2003.
- [12]. M. Duangdeun, C. Geoffrey, U. Suchart, K. Maleeya, B. Viroon, S. Nouwaratn, K. Chitapa, V. Opa, P. Somchai, T. Pittaya, Traditional medicinal plants of Thailand XIII. Flavonoid derivatives from *Dracaena loureiri* (Agavaceae), *Journal of The Science Society of Thailand*, 14, 3–24, 1988.

# Flavanones from the rhizomes of *Boesenbergia pandurata*

Nguyen Xuan Hai<sup>1</sup>, Le Quang Phong<sup>2</sup>, Nguyen Thi Thanh Mai<sup>1</sup>, Nguyen Trung Nhan<sup>1,\*</sup>

<sup>1</sup>University of Science, VNUHCM

<sup>2</sup>International University, VNUHCM

\*Corresponding author: ntnhan@hcmus.edu.vn

Received: 12-11-2017, Accepted: 05-03-2018, Published: 15-10-2018

**Abstract**—*Boesenbergia pandurata* (Roxb.) Schltr. is a perennial medicinal herb belonging to the Zingiberaceae family. It is cultivated in some tropical countries in Southeast Asia including Vietnam, Thailand, Myanmar, Indonesia and Malaysia. In Vietnam, it is known as "Ngai bun", and the fresh rhizomes are mainly used as a spice. This plant contains prenylated chalcones and other

flavonoids as the major bioactive constituents. From the CHCl<sub>3</sub> extract of *Boesenbergia pandurata*, we had isolated six flavanones. Their structures, pinocembrin (1), pinostrobin (2), alpinetin (3), di-*O*-methylpinocembrin (4), naringenin (5) and 5-*O*-methylnaringenin (6), were determined based on extensive spectroscopic analysis and in comparison with previous works.

**Index Terms**—flavanone, *Boesenbergia pandurata*, Zingiberaceae, rhizomes.