

NGHIÊN CỨU THÀNH PHẦN HÓA HỌC CỦA CÂY NAN LUẬT

STUDY OF THE CHEMICAL COMPONENTS IN *PLUCHEA INDICA* LESS.

Ngô Thị Hằng^{1,*}, Nguyễn Hoàng Oanh²,
Phạm Tuấn Anh², Đỗ Văn Quý², Nguyễn Thị Thanh Mai³

TÓM TẮT

Hợp chất quercetin PIE1 được phân lập từ cặn chiết ethyl acetat của cây Nan luật (*Pluchea indica* Less) được thu hái tại huyện Đan Phượng, thành phố Hà Nội, Việt Nam. Cấu trúc của hợp chất này được xác định bằng phương pháp phổ cộng hưởng từ hạt nhân (NMR) và so sánh với dữ liệu phổ trong tài liệu. Bên cạnh đó, đã xác định được một số thành phần hóa học khác có trong cao chiết Ethyl Acetate của cây nan luật thông qua GC/MS.

Từ khóa: Quercetin, Nan luật, Đan Phượng.

ABSTRACT

The quercetin compound PIE1 was isolated from the ethyl acetate residue of *Pluchea indica* Less. collected at Dan Phuong district, Hanoi city, Vietnam. The structure of this compound was determined by nuclear magnetic resonance (NMR) spectroscopy and compared with the spectral data in the literature. In addition, a number of other chemical components have been identified in the Ethyl Acetate extract of *Pluchea indica* Less. through GC/MS.

Keywords: Quercetin, *Pluchea indica* Less, Dan Phuong.

¹Lớp Kỹ thuật Hóa học 02 - K14, Khoa Công nghệ Hóa, Trường Đại học Công nghiệp Hà Nội

²Lớp kỹ thuật Hóa học 01- K14, Khoa Công nghệ Hóa, Trường Đại học Công nghiệp Hà Nội

³Khoa Công nghệ Hóa, Trường Đại học Công nghiệp Hà Nội

*Email: ngohangbtdhmu@gmail.com

1. ĐẶT VẤN ĐỀ

Cây Nan luật có tên khoa học là *Pluchea indica* Less thuộc họ cúc (*Asteraceae*) [1]. Trong Cây Nan luật có chứa các nhóm hợp chất: sesquiterpenes, monoterpen, flavonoid, lignans, thiophenes, dẫn xuất caffeoylquinic acid và các phenol khác [2]. Dịch chiết Nan luật có khả năng kháng khuẩn [3], chống oxy hóa [4] và kháng viêm [5]. Tại Việt Nam nó được trồng rộng rãi khắp nơi để làm hàng rào. Nó là một trong những dược liệu quý sẵn có nhất ở Việt Nam. Lá Nan luật được dùng làm thuốc chữa cảm sốt, đau mỗi toàn thân, giúp tiêu hoá tốt [6]. Người ta còn thường dùng cây Nan luật để làm thuốc lợi tiểu, chữa loét tá tràng [7]. Vì vậy, chúng tôi đã tiến hành nghiên cứu thành phần hóa học của cây Nan luật (*Pluchea indica* Less.) nhằm góp phần làm sáng tỏ thành phần hóa học và một phần giải thích công dụng chữa bệnh của loài cây này.

2. PHƯƠNG PHÁP NGHIÊN CỨU

2.1. Nguyên liệu, hóa chất

Nan luật (*Pluchea indica* Less.) được thu hái tại huyện Đan Phượng, thành phố Hà Nội vào tháng 11 năm 2021. Mẫu Nan luật sau khi thu hái sẽ được rửa sạch, phơi khô tự nhiên trong bóng râm. Dược liệu sau khi phơi vẫn giữ nguyên được màu sắc, mùi thơm tự nhiên.

Hóa chất: n-hexan (Trung Quốc, 99%), dichloromethane (Trung Quốc, 99%), ethyl acetate (Trung Quốc, 99%), methanol (Trung Quốc, 99%), H₂SO₄ (Trung Quốc, 98%), ethanol (Trung Quốc, 99,9%). Silicagel 60: 0,04 - 0,06mm (Merck), bản mỏng TLC Silicagel 60 F₂₅₄ (Merk).

2.2. Phương pháp và thực nghiệm

2.2.1. Chiết xuất

Mẫu Nan luật khô được ngâm ngâm chiết với dung môi ethanol 80° ở nhiệt độ phòng trong 72 giờ (3 lần x 3500ml), gộp tất cả dịch chiết cất loại dung môi thu được cao ethanol. Cao ethanol được thêm 150mL nước cất và tiến hành chiết phân bố với các dung môi n-hexan, ethyl acetate, cất loại dung môi dưới áp suất thấp thu được cao chiết n-hexan (PIH, 6,3g), ethyl acetate (PI, 6,27g) và cao nước (PIN, 8,03g).

2.2.2. Phương pháp phân lập

Cao chiết ethyl acetate (PI) 6,27g tiến hành phân tích trên cột sắc ký silicagel bằng phương pháp gradient hệ dung môi tăng dần độ phân cực từ n-hexan đến MeOH, thu được 9 phân đoạn lớn ký hiệu là PI1 đến PI9. Phân đoạn PI6 (1,25g) được phân tích trên cột sắc ký silicagel rửa giải với hệ dung môi tăng dần độ phân cực từ n-hexan đến MeOH, thu được 6 phân đoạn nhỏ là PI6.1 đến PI6.7. Phân đoạn PI6.6 (0,17g) tiếp tục được phân tích trên sắc ký cột silicagel rửa giải với hệ dung môi tăng dần độ phân cực, chia làm phân đoạn nhỏ từ PI6.6.1 đến PI6.6.3. Phân đoạn PI 6.6.2 (70mg) được kết tinh lại trong acetone thu được hợp chất PIE1 (37mg).

2.2.3. Phương pháp xác định cấu trúc

Phổ cộng hưởng từ ¹H-NMR và phổ ¹³C-NMR được đo tại viện Hóa học - Viện Hàn lâm Khoa học và Công nghệ Việt Nam.

2.2.4. Phương pháp sắc ký khí khối phổ GC-MS

Phân tích GC/MS của cao chiết Ethyl Acetat được thực hiện tại Khoa Công nghệ Hóa, trường Đại học Công nghiệp Hà Nội.

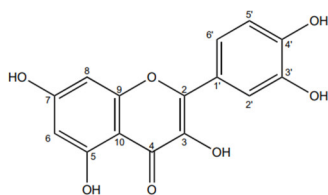
3. KẾT QUẢ THẢO VÀ THẢO LUẬN

3.1. Xác định và khẳng định cấu trúc của hợp chất PIE1

Hợp chất PIE1: Phổ $^1\text{H-NMR}$ (500 MHz, DMSO): δ_{H} 12,537 (1H, s, 5-OH); 10,862 (1H, s, 7-OH); 9,445 (1H, s, 3-OH); 9,372 (1H, s, 3'-OH); 7,713 (1H, d, H-2', $J = 2\text{Hz}$); 7,53 (1H, dd, H-15, $J = 2\text{Hz}$, 6Hz); 6,922 (1H, d, H-5', $J = 8.5\text{Hz}$); 6,443 (1H, d, H-8, $J = 2\text{Hz}$); 6,227 (1H, d, H-6, $J = 2\text{Hz}$).

$^{13}\text{C-NMR}$ (150 MHz, DMSO): δ_{C} 176,88 (C-4); 161,92 (C-5); 157,41 (C-9); 150,03 (C-7); 148,68 (C-4'); 147,78 (C-2); 146,18 (C-3'); 136,76 (C-3); 123,12 (C-1'); 120,61 (C-6'); 116,22 (C-5'); 115,76 (C-2'); 103,91 (C-10); 98,83 (C-6); 94,05 (C-8).

Các số liệu phổ $^1\text{H-NMR}$ và $^{13}\text{C-NMR}$ của hợp chất PIE1 hoàn toàn phù hợp với phổ của chất 2-(3,4-dihydroxyphenyl)-3,5,7-trihydroxy-4H-chromen-4-one (quercetin) [8]. Vì vậy, chất PIE1 chính là 2-(3,4-dihydroxyphenyl)-3,5,7-trihydroxy-4H-chromen-4-one (quercetin). Hợp chất này có trong nhiều loài thực vật, và nó thể hiện nhiều hoạt tính quý báu như: chống viêm kéo dài, kháng khuẩn phổ rộng, có tác dụng ức chế vi khuẩn tốt, có tác dụng hữu ích với các bệnh tim mạch, khả năng ức chế tế bào ung thư [9, 10].



Hình 1. Quercetin

3.2. Kết quả phân tích GC/MS dịch chiết Nan luật

Bằng phương pháp phân tích GC/MS chúng tôi đã xác định được một số hợp chất có trong cao chiết Ethyl Acetat của cây Nan luật.

Bảng 1. Kết quả phân tích GC/MS một số hợp chất trong dịch chiết Nan luật

STT	Thời gian lưu	Tên hợp chất	CTPT	CTPT	Hàm Lượng %
1	8.574	2-phenylethanol	$\text{C}_8\text{H}_{10}\text{O}$		0,6
2	14.319	2,1,3-Benzothiazazole	$\text{C}_6\text{H}_4\text{N}_2\text{S}$		1,55
3	14.903	1-Methyl-3-pyrrolin-2-one	$\text{C}_5\text{H}_7\text{NO}$		0,2
4	15.109	beta-Selinene	$\text{C}_{15}\text{H}_{24}$		0.37

5	15.790	2(4h)-benzofuranone	$\text{C}_8\text{H}_6\text{O}_2$		0,63
6	21.443	palmitic acid	$\text{C}_{16}\text{H}_{32}\text{O}_2$		0.47
7	23.555	Linolenic acid	$\text{C}_{18}\text{H}_{30}\text{O}_2$		1.86

Trong đó, 2-Phenylethanol là hợp chất có hoạt tính kháng khuẩn mạnh, với giá $\text{IC}_{50} = 3,04\text{mM}$ [11]. Palmitic acid gây độc tính tế bào có chọn lọc đối với các tế bào bạch cầu của người, nhưng không gây độc tế bào đối với các tế bào HDF bình thường. Và cho thấy hoạt động chống khối u in vivo ở chuột [12]. Bên cạnh đó Linolenic acid cũng là hợp chất có khả năng kháng khuẩn tốt [13].

4. KẾT LUẬN

Trong nghiên cứu này, chúng tôi đã thành công phân lập được hợp chất Quercetin (PIE1) từ cao chiết Ethyl acetate của cây Nan luật. Bên cạnh đó, đã nghiên cứu một số thành phần có hoạt tính sinh học tốt như 2-Phenylethanol, Palmitic acid, Linolenic acid thông qua phân tích GC/MS.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1]. Hộ P, H. 2000. *Cây cỏ Việt Nam*. NXB Trẻ, Thành phố Hồ chí Minh, tập 3, 264.
- [2]. Ruan, et al, 2019. *Comprehensive chemical profiling in the ethanol extract of Pluchea indica aerial parts by liquid chromatography/mass spectrometry analysis of its silica gel column chromatography fractions*. Molecules, 2019, 24(15): p, 2784.
- [3]. Noridayu A, et al, 2011. *Antioxidant and antiacetylcholinesterase activities of Pluchea indica Less*. International Food Research Journal. 18(3).
- [4]. Sen T, A.N, Chaudhuri, 1991. *Antiinflammatory evaluation of a Pluchea indica root extract*. Journal of ethnopharmacology, 33(1-2): p, 135-141.
- [5]. Sen T., et al, 1996. *Action of Pluchea indica methanol extract as a dual inhibitor on PAF-induced paw oedema and gastric damage*. Phytotherapy Research, 10(1): p, 74-76.
- [6]. Võ Văn Chi, 1999. *Từ điển thuốc Việt Nam*. NXB Y học, Hà Nội
- [7]. Suriyaphan O., 2014. *Nutrition, health benefits and applications of Pluchea indica (L.) Less leaves*. Mahidol University Journal of Pharmaceutical Sciences, 41(4): p, 1-10.
- [8]. Kyriakou, Eleni, et al., 2012. *Unexpected enzyme-catalyzed regioselective acylation of flavonoid aglycones and rapid product screening*. Organic & biomolecular chemistry 10.9: 1739-1742.
- [9]. Qin X., et al., 2009. *Study on the antibacterial activity of quercetin*. Chemistry & Bioengineering 26(4): p, 55-57.
- [10]. Lee T J., et al, 2006. *Quercetin arrests G2/M phase and induces caspase-dependent cell death in U937 cells*. Cancer letters, 240(2): p, 234-242
- [11]. Zhu Yu-Jing, et al., 2011. *Antityrosinase and antimicrobial activities of 2-phenylethanol, 2-phenylacetaldehyde and 2-phenylacetic acid*. Food Chemistry 124.1: 298-302.
- [12]. Harada Hideki, et al.. 2002. *Antitumor activity of palmitic acid found as a selective cytotoxic substance in a marine red alga*. Anticancer research 22.5: 2587-2590.
- [13]. Jung Sung Woo, et al.. 2015. *Mechanism of antibacterial activity of liposomal linolenic acid against Helicobacter pylori*. PloS one 10.3: e0116519.