

Tạp chí Khoa học Trường Đại học Cần Thơ
 Phần A: Khoa học Tự nhiên, Công nghệ và Môi trường

website: sj.ctu.edu.vn

DOI:10.22144/jvn.2017.014

THÀNH PHẦN HOÁ HỌC VÀ HOẠT TÍNH KHÁNG OXY HOÁ CỦA CÂY BẠCH ĐÀU ÔNG *Vernonia cinerea* (L.) LESS, HỌ CÚC (ASTEACEAE)

Nguyễn Trọng Tuân, Nguyễn Quốc Châu Thanh, Mai Văn Hiếu, Nguyễn Anh Vinh, Lê Thị Bạch, Đoàn Thị Ngọc Châu và Nguyễn Thành Lập

Khoa Khoa học Tự nhiên, Trường Đại học Cần Thơ

Thông tin chung:

Ngày nhận: 05/12/2016

Ngày chấp nhận: 28/04/2017

Title:

Chemical constituents and antioxidant activity of *Vernonia cinerea* (L.) Less, Asteraceae

Từ khóa:

Bạch Đầu Ông, lupeol acetate, 1-palmitoylglycerol, polyphenol tổng, tricin

Keywords:

Lupeol acetate, 1-palmitoylglycerol, total polyphenolic content, tricin, *Vernonia cinerea*

ABSTRACT

Three compounds including (1) lupeol acetate, (2) 1-palmitoylglycerol and (3) tricin were isolated from the hexane and ethyl acetate extracts of *Vernonia cinerea* (L.) Less. Their structures were interpreted by spectroscopic methods such as ¹H-NMR, ¹³C-NMR, HSQC, HMBC, MS and based on published data. Total polyphenolic content showed the ethyl acetate extract (215.55 mg GAE /g extract) was higher than ethanol and aqueous extracts. These results correlated with the highest DPPH scavenging capacity of ethyl acetate extract, IC₅₀ = 24.10 µg/mL.

TÓM TẮT

Ba hợp chất: (1) lupeol acetate, (2) 1-palmitoylglycerol và (3) tricin đã được phân lập từ cao chiết phân đoạn hexane và ethyl acetate từ cây Bạch Đầu Ông *Vernonia cinerea* (L.) Less. Cấu trúc của các hợp chất được nhận danh bằng các phương pháp phổ hiện đại như ¹H-NMR, ¹³C-NMR, HSQC, HMBC, MS và so sánh với tài liệu đã công bố. Hàm lượng polyphenol tổng của cao chiết phân đoạn ethyl acetate (215,55 mg GAE/g) từ cây Bạch đầu ông cao nhất so với các cao chiết ethanol tổng và cao nước. Kết quả trên tương đồng với khả năng kháng oxy hoá tốt nhất của cao ethyl acetate IC₅₀ = 24,10 µg/mL.

Trích dẫn: Nguyễn Trọng Tuân, Nguyễn Quốc Châu Thanh, Mai Văn Hiếu, Nguyễn Anh Vinh, Lê Thị Bạch, Đoàn Thị Ngọc Châu và Nguyễn Thành Lập, 2017. Thành phần hoá học và hoạt tính kháng oxy hoá của cây Bạch Đầu Ông *Vernonia cinerea* (L.) less, họ Cúc (Asteraceae). Tạp chí Khoa học Trường Đại học Cần Thơ. 49a: 104-109.

1 GIỚI THIỆU

Cây Bạch Đầu Ông (*Vernonia cinerea* (L.) Less, thuộc họ Cúc - Asteraceae là loài cây nhiệt đới, nhập cư rất phổ biến ở nước ta, mọc hoang ven đường từ miền núi đến đồng bằng trung du, ven biển và cũng phân bố ở nhiều nơi khác vùng như miền Đông, ở châu Phi, châu Đại Dương. Theo y học cổ truyền, cây Bạch Đầu Ông kết hợp với một số cây thuốc khác dùng để điều trị suy nhược thần kinh, huyết áp cao. Ở khu vực Đồng bằng sông Cửu Long, theo kinh nghiệm dân gian cây thường được dùng như một vị thuốc nam hỗ trợ điều trị rắn

cắn, bệnh ngoài da hay viêm gan vàng da (Võ Văn Chi, 2011).

Các công trình nghiên cứu trên thế giới về thành phần hóa học từ dịch chiết methanol của cây Bạch Đầu Ông cho thấy thành phần chính là *n*-hexadecanoic acid (42-88%), 1,2-benzenedicarboxylic acid, diisooctyl ester (23,00%), squalene (11,31%) và các hợp chất khác được xác định là caryophyllene oxide (2,31%),... Các thành phần sesquiterpene được phân lập đã khảo sát với nhiều hoạt tính đáng chú ý như kháng ung thư, kháng viêm, kháng sốt rét và cũng có tác dụng chữa khối u, trị tiêu đường và ung thư. Các

nghiên cứu trong nước đến nay chỉ mới bước đầu xác định thành phần hóa học với việc phân lập và xác định cấu trúc của các hợp chất thuộc loại triterpene-steroid như lupeol, β -amyirin acetate, β -sitosterol, stigmasterol,... Từ đó cho thấy cây Bạch Đầu Ông là một nguồn dược liệu quý, có tiềm năng cần tiến hành nghiên cứu (Nguyễn Thị Hồng Thủy, 2001; Chea *et al.*, 2006; Abirami *et al.*, 2012; Youn *et al.*, 2012, 2014; Lakshmi *et al.*, 2015).

2 THỰC NGHIỆM

2.1 Nguyên liệu

Cây Bạch Đầu Ông được thu hái trên địa bàn thành phố Cần Thơ trong thời kỳ cây đang ra hoa và được định danh bởi TS. Đặng Minh Quân – Bộ môn Sinh học, mẫu được lưu giữ tại phòng thí nghiệm Hợp chất thiên nhiên – Khoa Khoa học Tự nhiên – Trường Đại học Cần Thơ. Kết quả định danh mẫu cây có tên khoa học là *Vernonia cinerea* (L.) Less. Mẫu được thu hái toàn thân rồi rửa sạch, loại bỏ tạp bẩn, cắt nhỏ và sấy ở nhiệt độ 60°C đến khối lượng không đổi, rồi nghiền mịn thu được bột khô.

2.2 Hóa chất và thiết bị

Silica gel sắc ký cột cỡ hạt 0,040 – 0,063 mm và bản mỏng silicagel 60-F₂₅₄ của hãng Merck, Đức. Các dung môi gồm: hexane (Hex), dichloromethane (DC), ethyl acetate (EA), methanol (Me) từ hãng Chemsol (Việt Nam). Phổ ¹H-NMR và ¹³C-NMR được ghi trên máy Bruker Advance 600 MHz. Khối phổ MS được ghi trên máy Bruker microOTOF-Q. Các phân tích này được thực hiện tại Viện Kỹ thuật - Công nghệ Kyoto, Nhật Bản.

2.3 Xác định hàm lượng polyphenol và thử nghiệm hoạt tính kháng oxy hoá

2.3.1 Điều chế cao

Bột cây Bạch Đầu Ông khô được cho vào túi vải rồi cột kín, ngâm chiết trong EtOH 95° 5 lần, mỗi lần ngâm 24 giờ. Sau đó dịch chiết được lọc qua giấy lọc rồi tiến hành cô quay thu hồi dung môi dưới áp suất thấp thu được cao chiết ethanol tổng dạng lỏng. Cao tổng được phân bố vào nước dưới sự hỗ trợ của sóng siêu âm rồi tiến hành chiết phân bố lỏng - lỏng với hexane, rồi ethyl acetate, cô đuổi dung môi sẽ thu được các cao phân đoạn tương ứng: Cao Hex (105 g), cao EA (46 g), cao nước (115 g).

2.3.2 Xác định polyphenol tổng

Hàm lượng polyphenol tổng được xác định bằng phương pháp Folin – Ciocalteu. Cao chiết tổng và phân đoạn được hoà tan với methanol với

nồng độ từ 25 – 100 µg/mL. 250 µL mẫu cao chiết được thêm vào 250 µL nước và 250 µL thuốc thử Folin. Lắc mạnh rồi để yên 5 phút, thêm tiếp 250 µL Na₂CO₃ 10%, ủ trong 30 phút ở 40°C. Đo bước sóng ở 765 nm. Hàm lượng polyphenol tổng của mẫu cao chiết được thể hiện qua miligram đương lượng acid galic trên mỗi gram chất khô (mg GAE/g) (Daffodil *et al.*, 2014).

2.3.3 Thử nghiệm hoạt tính kháng oxy hoá

Khả năng kháng oxy hoá của các cao chiết được thực hiện dựa trên khả năng khử gốc tự do DPPH (2,2-Diphenyl-1-picrylhydrazyl). Cao chiết tổng và phân đoạn được hoà tan với methanol với nồng độ từ 0 – 1000 µg/mL trong DPPH (40 µg/mL). Hỗn hợp được ủ trong tối ở nhiệt độ phòng trong 30 phút và đo tại bước sóng 517 nm. Đối chứng dương được sử dụng trong thử nghiệm là Vitamin C. Kết quả hoạt tính kháng oxy hóa của các loại cao chiết được biểu diễn bằng giá trị IC₅₀ (Rajamurugan *et al.*, 2011; Daffodil *et al.*, 2014).

2.4 Phân lập các chất

Phân đoạn cao Hex, tiến hành sắc ký cột với hệ dung môi Hex:EA (100:0→0:100) thu được 20 phân đoạn được ký hiệu (Hex.1-Hex.20). Phân đoạn **Hex.5** (9,02 g) tiến hành sắc ký cột nhiều lần, kết tinh lại trong dung môi hexane thu được chất **1** (15 mg). Phân đoạn **Hex.14** (4,38 g), tiến hành sắc ký cột nhiều lần với hệ dung môi Hex:EA (8:2→0:1) thu được tinh thể, tiến hành lọc rửa với dung môi hexane và kết tinh lại trong acetone được chất **2** (7,5 mg).

Phân đoạn cao EA, tiến hành sắc ký cột với hệ dung môi Hex:EA (95:5→0:1) thu được 13 phân đoạn được ký hiệu (EA.1→EA.13). Phân đoạn **EA.5** (0,833 mg) được tiến hành sắc ký cột bằng hệ dung môi Hex:EA (4:6→0:1) thu được 8 phân đoạn nhỏ ký hiệu (EA.5.1→EA.5.8), sắc ký cột phân đoạn **EA.5.2** (23 mg) thu được hợp chất **3** (5 mg) với hệ dung môi Hex:EA (5:5).

Hợp chất **1**, dạng tinh thể hình kim màu trắng, TLC R_f = 0,93 (DC:Me = 95:5). ESI-MS *m/z* [M+Na]⁺ 491. ¹H-NMR (CDCl₃, 600 MHz) δ 4,69 (1H, *d*, *J* = 2,4 Hz, H-29b), 4,57 (1H, *dd*, *J* = 1,2; 2,4 Hz, H-29a), 4,47 (1H, *dd*, *J* = 5,4; 10,8 Hz, H-3), 2,04 (3H, *s*, H-2'), 1,68 (3H, *s*, H-30), 1,03 (3H, *s*, H-25), 0,94 (3H, *s*, H-28), 0,85 (3H, *s*, H-23), 0,84 (3H, *s*, H-24), 0,83 (3H, *s*, H-26), 0,79 (3H, *s*, H-27). ¹³C-NMR (CDCl₃, 150 MHz) δ 171,0 (C-1'), 151,0 (C-20), 109,4 (C-29), 81,0 (C-3), 55,4 (C-5), 50,4 (C-9), 48,4 (C-18), 48,0 (C-19), 43,0 (C-17), 42,9 (C-14), 40,9 (C-8), 40,0 (C-22), 38,4 (C-1), 38,1 (C-4), 37,8 (C-10), 37,1 (C-13), 35,6 (C-16), 34,3 (C-7), 29,9 (C-21), 28,0 (C-2'), 27,5

(C-23), 25,2 (C-15), 23,8 (C-12), 21,3 (C-2), 21,0 (C-11), 19,3 (C-30), 18,2 (C-6), 18,0 (C-28), 16,5 (C-24), 16,2 (C-25), 16,0 (C-26), 14,5 (C-27).

Hợp chất 2, dạng rắn màu trắng, TLC $R_f = 0,51$ (DC:Me = 95:5). ESI-MS m/z $[2M-H]^-$ 659, $[2M+Na]^+$ 683, $[2M-75]^-$ 585, $[M-75]^-$ 255. 1H -NMR ($CDCl_3$, 600 MHz) δ 4,21 (1H, *m*, H-1a), 4,15 (1H, *m*, H-1b), 3,93 (1H, *s*, H-2), 3,69 (1H, *m*, H-3a), 3,60 (1H, *m*, H-3b), 2,57 (1H, *s*, 2-OH), 2,35 (2H, *t*, $J = 7,8$ Hz, H-2'), 2,13 (1H, *s*, 3-OH), 1,63 (2H, *m*, H-3'), 1,26 (24H, *m*, H-4', 5', 6', 7', 8', 9', 10', 11', 12', 13', 14', 15'), 0,88 (3H, *t*, $J = 6,6$ Hz, H-16'). ^{13}C -NMR ($CDCl_3$, 150 MHz) δ 174,4 (C-1'), 70,3 (C-2), 65,2 (C-1), 63,4 (C-3), 34,2 (C-2'), 31,9 (C-14'), 29,5 (C-4', 5', 6', 7', 8', 9', 10', 11', 12', 13'), 24,9 (C-3'), 22,7 (C-15'), 14,1 (C-16').

Hợp chất 3, dạng rắn màu vàng, TLC $R_f = 0,49$ (DC:Me = 9:1). ESI-MS m/z $[M-H]^-$ 329, $[M+Na]^+$ 353. 1H -NMR (Acetone- d_6 , 600 MHz) δ 9,55 (1H, *s*, HO-7), 8,08 (1H, *s*, HO-4'), 7,39 (2H, *s*, H-2', 6'), 6,74 (1H, *s*, H-3), 6,56 (1H, *d*, $J = 2,4$ Hz, H-8), 6,26 (1H, *d*, $J = 2,4$ Hz, H-6), 3,97 (6H, *s*, $H_3CO-3', 5'$). ^{13}C -NMR (Acetone- d_6 , 150 MHz) δ 182,2 (C-4), 164,2 (C-2), 163,9 (C-7), 162,5 (C-9), 157,9 (C-5), 148,3 (C-3', 5'), 140,1 (C-4'), 121,5 (C-1'), 104,5 (C-10), 104,4 (C-2', 6'), 103,8 (C-3), 98,8 (C-6), 94,0 (C-8), 56,1 ($H_3CO-3', 5'$).

3 KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

3.1 Kết quả xác định hàm lượng polyphenol tổng

Hàm lượng polyphenol trong cao chiết được xác định tương đương hàm lượng acid gallic với phương trình đường chuẩn $y = 0,0937x + 0,0504$ ($R^2 = 0,99928$). Kết quả hàm lượng polyphenol tổng của các cao chiết phân đoạn được trình bày trong Bảng 1:

Bảng 1: Kết quả hàm lượng polyphenol tổng của các cao chiết

Cao chiết	Hàm lượng polyphenol tổng (mg GAE /g cao)
Cao Ethanol tổng	49,86 ± 0,86
Cao EA	215,55 ± 1,50
Cao nước	43,83 ± 0,66

Hàm lượng polyphenol trong cao chiết lần lượt là: cao chiết phân đoạn EA (215,55 mg GAE /g), cao ethanol tổng (49,86 mg GAE /g), cao nước (43,83 mg GAE /g. Trong đó, cao chiết phân đoạn

EA (215,55 mg GAE /g) có hàm lượng polyphenol cao nhất và cao hơn so với cao ethanol tổng (49,86 mg GAE /g). Kết quả này khá phù hợp với nghiên cứu của Aliyu *et al.*, 2011 về cây *Vernonia blumeoides* (cùng chi) cho thấy hàm lượng polyphenol tổng từ cao chiết EA (340 mg GAE /100g cao) cao hơn so với cao methanol tổng (110 mg GAE /100g cao) (Aliyu *et al.*, 2011). Như vậy, có thể thấy thành phần các hợp chất polyphenolic tập trung nhiều ở cao chiết phân đoạn EA. Điều này tương đồng với các nghiên cứu đã công bố trong việc lựa chọn dung môi có độ phân cực thích hợp để chiết các thành phần hợp chất polyphenolic. Kết quả trên làm nền tảng đánh giá hoạt tính kháng oxy hoá dựa vào sự hiện diện của các hợp chất polyphenolic trong cao chiết (Nand Lal, 2014).

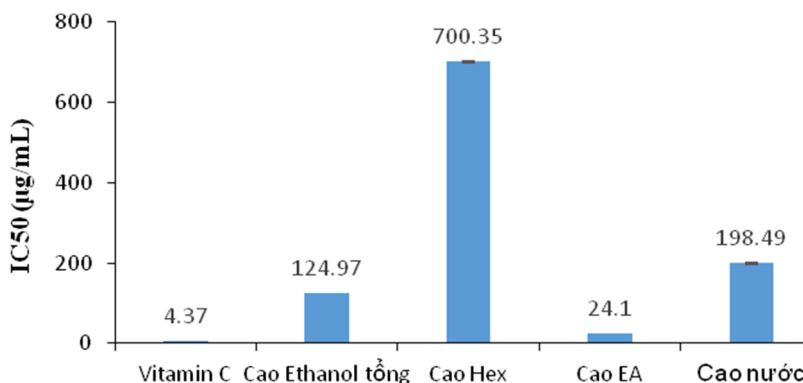
3.2 Kết quả thử nghiệm hoạt tính kháng oxy hoá

Hiệu quả loại bỏ gốc tự do của các loại cao chiết phân đoạn cây Bạch đầu ông được so sánh dựa vào khả năng loại bỏ 50% lượng gốc tự do DPPH. Giá trị IC_{50} được trình bày trong Bảng 2:

Bảng 2: Kết quả hoạt tính kháng oxy hoá các cao chiết

Cao chiết	Giá trị IC_{50} ($\mu g/ml$)
Cao Ethanol tổng	124,97 ± 0,13
Cao Hex	700,35 ± 1,83
Cao EA	24,10 ± 0,23
Cao nước	198,49 ± 0,29
Vitamin C	4,37 ± 0,005

Dựa trên giá trị IC_{50} , khả năng kháng oxy hoá của các cao chiết theo thứ tự giảm dần như sau: cao EA > cao ethanol tổng > cao nước > cao Hex. Cao EA ($IC_{50} = 24,10 \mu g/mL$) cho khả năng kháng oxy hoá mạnh hơn các cao chiết khác nhưng yếu hơn so với chất đối chứng dương Vitamin C ($IC_{50} = 4,37 \mu g/mL$). Kết quả trên tương đồng với nghiên cứu của A.B. Aliyu về cây *Vernonia blumeoides* cho thấy cao chiết phân đoạn EA (57 mg AAE /g cao, AAE: Ascorbic Acid Equivalent) có khả năng kháng oxy hoá mạnh hơn so với cao ethanol tổng (40 mg AAE /g cao) (Aliyu *et al.*, 2011). Tuy nhiên, so sánh với nghiên cứu của Afra Khiralla về cây *Vernonia amygdalina* cho thấy khả năng kháng oxy hóa của cao chiết phân đoạn EA ($IC_{50} = 24,10 \mu g/mL$) từ cây Bạch đầu ông cao hơn so với cao chiết phân đoạn EA từ cây *Vernonia amygdalina* ($IC_{50} = 50 \mu g/mL$) (Khiralla *et al.*, 2015).



Hình 1: Biểu đồ thể hiện khả năng kháng oxy hoá của cao chiết Bạch đầu ông

Như vậy, khả năng ức chế gốc tự do DPPH (IC₅₀) của cao EA mạnh là do thành phần cao chiết có chứa các hợp chất polyphenolic, kết quả này phù hợp với hàm lượng polyphenol tổng.

3.3 Kết quả định danh các hợp chất cô lập được

Từ cao chiết Hex và EA, bằng các kỹ thuật sắc ký cột và sắc ký bản mỏng điều chế đã phân lập được 3 hợp chất. Cấu trúc hóa học của các hợp chất được xác định bằng các phương pháp phổ 1D và 2D NMR, khối phổ độ phân giải cao HR-ESI-MS.

Hợp chất 1 là dạng tinh thể hình kim màu trắng. Phổ ESI-MS Positive cho tín hiệu m/z $[M+Na]^+$ = 491 phù hợp với công thức phân tử $C_{32}H_{52}O_2$ (M = 468 đvC), tín hiệu m/z = 409 $[M+H-CH_3-CO_2]^+$.

– Phổ ¹H-NMR (CDCl₃, 600 MHz, δ_H ppm, J Hz) cho tín hiệu ở 4,57 ppm và 4,69 ppm tương ứng với 2 proton olefin (–C=CH₂), hằng số ghép gem J = 2,4 Hz, trong đó tín hiệu proton ở 4,57 ppm cho mũi đôi đôi J = 1,2; 2,4 Hz do có tương tác xa với J = 1,2 Hz giữa 2 proton (H–CH₂–C=CH–H). Tín hiệu 4,47 ppm của proton (>CH–O–), tín hiệu 2,04 ppm dạng mũi đơn mạnh thuộc về nhóm (–CH₃) khi gắn kề nhóm (–COO–) của nhóm (CH₃COO–). Ngoài ra, còn nhiều mũi đơn của các nhóm (–CH₃) trong vùng 0,60 - 1,80 ppm.

– Phổ ¹³C-NMR (CDCl₃, 150 MHz, δ_C ppm) cho 32 tín hiệu carbon, kết hợp với phổ DEPT cho thấy 1 phù hợp với cấu trúc khung Lupan của nhóm hợp chất triterpenoid gồm 30 carbon. Ngoài ra, còn có tín hiệu tại 171,0 ppm của carbon nhóm carbonyl (–COO–) và 1 tín hiệu tại 28,0 ppm của carbon methyl khi gắn liền với nhóm carbonyl (CH₃COO–). Với đặc điểm trên, tra cứu tài liệu thấy trùng khớp với lupeol acetate (Jamal *et al.*, 2008).

Hợp chất 2, dạng rắn màu trắng. Phổ ESI-MS Negative cho tín hiệu m/z $[2M-H]^-$ = 659 và phổ

Positive cho tín hiệu m/z $[2M+Na]^+$ = 683 phù hợp với công thức phân tử $C_{19}H_{38}O_4$ (M = 330 đvC). Ngoài ra, còn thu được mảnh ion m/z $[2M-75]^-$ = 585 và mảnh m/z $[M-75]^-$ = 255 phù hợp với sự phân mảnh tạo ra sự mất mảnh trung hòa (HO–CH₂–CH(OH)–CH₂–).

– Phổ ¹³C-NMR (CDCl₃, 150 MHz, δ_C ppm) cho một tín hiệu đặc trưng tại 174,4 ppm của carbon (–COO–), 3 mũi carbon tại vùng 60,0 – 70,0 ppm được quy kết cho các carbon liên kết với các nguyên tử có độ âm điện lớn như oxi, kết hợp với kỹ thuật DEPT, các mũi carbon vùng này cho một tín hiệu mũi dương và 2 mũi âm, phù hợp với cấu trúc của phân tử glycerol HO–CH₂–CH(OH)–CH₂–OH. Mũi 14,1 ppm cho tín hiệu dương trên phổ DEPT, kết hợp với phổ ¹H-NMR cho biết đây là một carbon (–CH₃). Ngoài ra, còn nhiều mũi carbon (cho tín hiệu âm trên kỹ thuật DEPT) nằm trong vùng 20,0 - 30,0 ppm của các carbon methylene (–CH₂–).

– Kỹ thuật DEPT cho một mũi tứ cấp của nhóm carbonyl, 2 mũi dương của (>CH–) (của glycerol) và (–CH₃), các mũi còn lại là mũi âm, không phát hiện mũi dương (thứ 3) của nhóm (>CH–), độ bất bão hòa của 2 $C_{19}H_{38}O_4$ bằng 1, cho thấy 2 có cấu trúc gồm một phân tử glycerol được gắn thêm một nhóm thế ester với dây hydrocarbon dài, no, không phân nhánh. Loại trừ 3 carbon của glycerol, một carbon carbonyl và một carbon đầu mạch, cho thấy dây hydrocarbon có tới 14 nhóm methylene (dây palmitate).

– Phổ ¹H-NMR (CDCl₃, 600 MHz, δ_H ppm, J Hz) cho 2 tín hiệu của proton (–OH) tại 2,57 và 2,13 ppm. Tín hiệu tại δ 0,88 ppm dạng mũi triplet có cường độ mũi bằng 3 được quy kết cho proton của nhóm (–CH₃), các tín hiệu mũi đa tại 3,50 – 4,50 ppm với cường độ mũi theo tỷ lệ 2:1:2 được quy kết cho các proton của glycerol, mũi triplet tại 2,35 ppm, được quy kết cho 2 proton H_a của nhóm

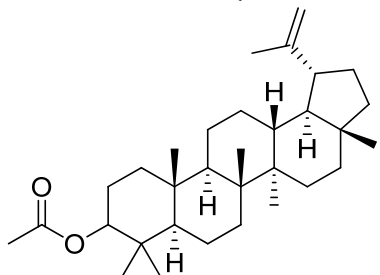
carbonyl, mũi đa tại 1,63 ppm của 2 proton H_β của nhóm carbonyl, mũi đa với tích phân 24 đơn vị proton 1,26 ppm là của các proton nhóm methylene dây dài nằm trùng lấp nhau. Từ các dữ kiện trên, hợp chất **2** được nhận định là 1-palmitoylglycerol.

Hợp chất **3** là dạng bột màu vàng. Phổ ESI-MS Negative cho tín hiệu m/z $[M-H]^- = 329$ phù hợp với công thức phân tử $C_{17}H_{14}O_7$ ($M = 330$ đvC), phổ Positive cũng cho tín hiệu m/z $[M+Na]^+ = 353$.

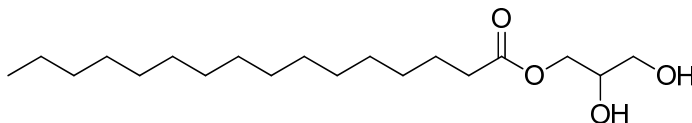
– Phổ 1H -NMR (Acetone- d_6 , 600 MHz, δ_H ppm, J Hz) cho tín hiệu đặc trưng của 5 proton vùng benzen (δ_H từ 6,20 – 8,00 ppm), trong đó có một cặp proton tương đương nhau cùng cho một mũi tín hiệu tại 7,39 ppm, 2 proton ghép cặp ở vị trí *meta* với nhau lần lượt cho 2 tín hiệu tại 2 vị trí

lần lượt là 6,56 và 6,26 ppm với hằng số ghép *meta* $J = 2,4$ Hz và một proton vòng benzen ở 6,74 ppm. Ngoài ra, còn có một mũi tín hiệu của 6 proton methoxy ($-OCH_3$), trong cấu trúc **3** có 2 nhóm methoxy ở vị trí tương đương nhau trên vòng benzen. Phổ 1H -NMR cũng ghi nhận được các tín hiệu của nhóm ($-OH$) tại các vị trí 8,08 và 9,05 ppm.

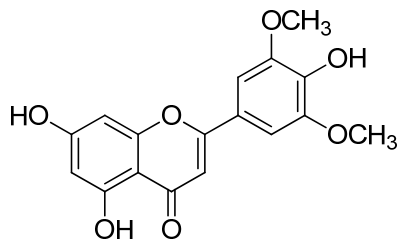
– Phổ ^{13}C -NMR (Acetone- d_6 , 150 MHz, δ_C ppm) cho 14 tín hiệu carbon, ngoài tín hiệu của 2 carbon ($-OCH_3$), 13 tín hiệu còn lại của phổ ^{13}C kết hợp với kỹ thuật DEPT cho thấy phù hợp với cấu trúc của khung flavon gồm 15 carbon, trong đó có 2 cặp carbon tương đương nhau. Tra cứu tài liệu cho thấy **3** trùng khớp với tricrin (Jiao *et al.*, 2007).



(1) Lupeol acetate



(2) 1-Palmitoylglycerol



(3) Tricrin

Lupeol acetate được biết đến là một chất có tiềm năng ứng dụng trong y học, cho khả năng kháng viêm hiệu quả, có thể ngăn chặn sự di chuyển và sự phát triển của của tế bào ung thư, trung hòa nọc độc của nhiều loài rắn cực độc như *Daboia russellii*, *Naja kaouthia* (Arrieta *et al.*, 2003; Chatterjee *et al.*, 2006).

Tricrin như là một chất kháng ung thư tiềm năng nhất được thử nghiệm lâm sàng. Các thử nghiệm cho thấy tricrin có khả năng ức chế tăng sinh tế bào lympho trên chuột. Ngoài ra, tricrin được chiết xuất từ cám gạo đã được chứng minh là có khả năng ức chế tế bào ung thư vú ở người và ung thư ruột kết,... (Zhou *et al.*, 2010).

4 KẾT LUẬN

Nghiên cứu về thành phần hoá học của cây Bạch Đầu Ông đã phân lập được 3 hợp chất được nhận danh là (1) lupeol acetate, (2) 1-

palmitoylglycerol và (3) tricrin. Cao chiết phân đoạn EA thể hiện khả năng kháng oxy hoá tốt. Kết quả này làm sáng tỏ thêm được tính của cây Bạch Đầu Ông, làm nền tảng cơ bản để sử dụng cây Bạch Đầu Ông như một nguồn dược liệu tiềm năng. Các nghiên cứu về thành phần hoá học và hoạt tính sinh học khác vẫn đang được tiến hành.

LỜI CẢM ƠN

Các tác giả chân thành cảm ơn GS. Kaeko Kamei và GS. Kenji Kanaori, Viện kỹ thuật - công nghệ Kyoto, Nhật Bản đã hỗ trợ và giúp đỡ hoàn thành nghiên cứu này.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- Abirami, P., Rajendran, A., 2012. GC-MS analysis of methanol extracts of *Vernonia cinerea*. European Journal of Experimental Biology, 2 :9-12.
- Aliyu, A. B., Ibrahim, M. A. Musa, A. M., Bulus, T., and Oyewale, A. O., 2011. Phenolics Content

- and Antioxidant Capacity of Extracts and Fractions of *Vernonia blumeoides* (Asteraceae). International Journal of Biology and Chemistry. 5: 352-359.
- Arrieta J., Benitez J., Flores E. *et al.*, 2003. Purification of gastroprotective triterpenoid from the stem bark of *Amphipterygium adstringens*; role of prostaglandins, sulfhydryls, nitric oxide and capsaicin-sensitive neurons. *Planta Medica*. 69:905–909.
- Chatterjee, I., Chakravarty A.K., Gomes A., Russellii, D., and Kaouthia N., 2006. Venom neutralization by lupeol acetate isolated from the root extract of Indian sarsaparilla *Hemidesmus indicus* R. Br., *Journal of Ethnopharmacology*. 106: 38-43.
- Chea, A., Hout, S., Long, C., Marcourt, L., Faure, R., Azas, N., Elias, R., 2006. Antimalarial Activity of Sesquiterpene Lactones from *Vernonia cinerea*. *Chemical and Pharmaceutical Bulletin*. 54: 1437-1439.
- Daffodil, E. D., Lincy, P., and Mohan, V. R., 2014. Study of whole plant of *Vernonia cinerea* Less. for in vitro antioxidant activity. *International Journal of Pharmacy*. 4:172-178.
- Jamal, A. K., Yaacob, W. A. and Din, L. B., 2008. A Chemical Study on *Phyllanthus reticulatus*. *Journal of Physical Science*. 19: 45–50.
- Jiao, J., Zhang, Y., Liu, C., Liu, J., Wu, X., and Zhang, Y., 2007. Separation and Purification of Tricin from an Antioxidant Product Derived from Bamboo Leaves. *Journal of Agriculture and food Chemistry*. 55: 10086–10092.
- Khiralla, A., Mohamed, I., Thomas, J., Mignard, B., Spina, R., Yagi, S., and Laurain-Mattar, D., 2015. A pilot study of antioxidant potential of endophytic fungi from some Sudanese medicinal plants. *Asian Pacific Journal of Tropical Medicine*. 8: 701–704.
- Lakshmi Prabha, J., 2015. Therapeutic Uses of *Vernonia cinerea* - A Short Review, *International Journal of Pharmaceutical and Clinical Research*. 7: 323-325.
- Nand Lal, 2014. In vitro Antioxidant activity and Phytochemical screening of aqueous and nonaqueous extract of *Vernonia cinerea* flowers. *Plant Archives*. 14: 691-693.
- Nguyễn Thị Hồng Thủy, 2001. Góp phần tìm hiểu thành phần hóa học của cây Bạch đầu ông *Vernonia cinerea* Less. họ Cúc (Asteraceae). Luận văn Thạc sĩ Hóa học, Đại học Khoa học Tự nhiên HCM.
- Rajamurugan, R., Selvaganabathy, N., Kumaravel, S., Ramamurthy, C. H., Sujatha, V., Kumar, M. S., and Thirunavukkarasu, C., 2011. Identification, quantification of bioactive constituents, evaluation of antioxidant and in vivo acute toxicity property from the methanol extract of *Vernonia cinerea* leaf extract. *Pharmaceutical Biology*. 49: 1311–1320.
- Võ Văn Chi, 2011. Từ điển cây thuốc Việt Nam. NXB Y học, trang 99-100.
- Youn, U. J., Miklossy, G., Chai, X., Wongwiwatthanakut, S., Toyama, O., Songsak, T., Turkson, J., and Chang, L. C., 2014. Bioactive sesquiterpene lactones and other compounds isolated from *I. Fitoterapia*, 93: 194-200.
- Youn, U. J., Park, E-J., Tamara, P., Kondratyuk, Simmons, C. J., Borris, R. P., Tanamatayarat, P., Wongwiwatthanakut, S., Toyama, O., Songsak, T., Pezzuto, J. M., Chang, L. C., 2010. Anti-inflammatory sesquiterpene lactones from the flower of *Vernonia cinerea*. *Bioorganic and Medicinal Chemistry Letters*, 22: 5559-5562.
- Zhou, J-M., Ibrahim, R. K., 2010. Tricin - a potential multifunctional nutraceutical, *Phytochemistry Review*. 9:413–424.