



# Chiết xuất, phân lập một số hợp chất từ cây Thài lài trắng (*Commelina diffusa* Burm.f.)

## EXTRACTION AND ISOLATION OF SEVERAL COMPOUNDS FROM *COMMELINA DIFFUSA* BURM.F.

Nguyễn Xuân Tùng<sup>1,3</sup>, Vũ Đức Lợi<sup>1,2</sup>, Lê Hồng Dương<sup>1</sup>, Nguyễn Thị Vân Anh<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Trường Đại học Y Dược, Đại học Quốc gia Hà Nội

<sup>2</sup> Học viện Y-Dược học cổ truyền Việt Nam

<sup>3</sup> Trường Đại học Khoa học và Công nghệ Hà Nội

### TÓM TẮT

**Mục tiêu:** Chiết xuất, phân lập một số hợp chất từ cây Thài lài trắng (*Commelina diffusa* Burm.f.).

**Đối tượng và phương pháp:** Cây Thài lài trắng được ngâm chiết bằng MeOH, sau đó cồn MeOH được lắc phân đoạn với n-hexan và ethyl acetat. Sử dụng các phương pháp sắc ký thích hợp để phân lập ba hợp chất sạch, ký hiệu 1-3. Sau đó, đo nhiệt độ nóng chảy, phổ khối (MS), phổ cộng hưởng từ hạt nhân (1H-NMR, 13C-NMR, DEPT) để xác định cấu trúc hóa học của chúng.

**Kết quả:** Ba hợp chất được xác định là stigmasterol (1), daucosterol (2) và quercitrin (3). Trong đó, hợp chất 3 lần đầu tiên được phân lập từ loài thực vật này.

**Kết luận:** Nghiên cứu đã chiết xuất, phân lập được 3 hợp chất từ cồn chiết ethyl acetate của cây Thài lài trắng (*Commelina diffusa* Burm.f.), gồm stigmasterol (1), daucosterol (2) và quercitrin (3).

**Từ khóa:** *Commelina diffusa* Burm.f., stigmasterol, daucosterol, quercitrin, thành phần hóa học.

### SUMMARY

**Objective:** Extraction and isolation of several compounds from *Commelina diffusa* Burm.f.

**Subjects and methods:** *Commelina diffusa* was extracted by MeOH, then fractionated with n-hexane and ethyl acetate. The appropriate chromatographic methods were utilized to isolate three clean compounds 1-3. Then, measured the melting temperature, mass spectrometry (MS), nuclear magnetic resonance spectroscopy (1H-NMR, 13C-NMR, DEPT) to determine their chemical structure.

**Results:** Three compounds were identified as stigmasterol (1), daucosterol (2) and quercitrin (3). Among them, compound number 3 was isolated for the first time from this plant.

**Conclusion:** The study was extracted and isolated 3 compounds from the ethyl acetate extract of *Commelina diffusa* Burm.f., including stigmasterol (1), daucosterol (2) and quercitrin (3).

**Keywords:** *Commelina diffusa* Burm.f., stigmasterol, daucosterol, quercitrin, chemical constituents.

Tên tác giả liên hệ: Vũ Đức Lợi

Số điện thoại: 0917879959

Email: ducloi82@gmail.com

Ngày nhận bài: 11/1/2023

Ngày phản biện: 30/1/2023

Ngày chấp nhận đăng: 3/2/2023



## ĐẶT VẤN ĐỀ

Thài lài trắng, tên khoa học là *Commelina diffusa* Burm.f., là một loài thực vật thuộc chi *Commelina* L., được tìm thấy ở khắp các vùng nhiệt đới của châu Mỹ, châu Phi, châu Á và Thái Bình Dương, cũng như ở các vùng cận nhiệt đới phía nam của Hoa Kỳ, Nam Mỹ, Úc và các đảo Nam Á [1]. Tại Việt Nam, loài này thường xuất hiện chủ yếu ở những nơi thoáng và ẩm ướt như các cánh đồng lúa, ven đò, ven đường. Trong y học cổ truyền, cây được sử dụng để chữa cảm cúm, viêm nhiễm phần trên đường hô hấp, viêm hạnh nhân cấp, viêm hầu, phù thũng, nhiễm khuẩn đường niệu - sinh dục, viêm ruột thừa cấp, ỉa, cao huyết áp và bệnh lậu. Ngoài ra, cây còn được giã tươi để đắp vết thương và điều trị viêm mủ da. Ở dân tộc Mường, người dân sử dụng nước sắc toàn cây để trị bệnh sỏi thận [2,3]. Tuy nhiên, cho đến nay, trên thế giới cũng như ở Việt Nam, các nghiên cứu về thành phần hóa học và hoạt tính sinh học của loài này vẫn còn khá hạn chế. Bằng phương pháp sắc ký lớp mỏng và định lượng sơ bộ, các nhà khoa học đã chứng minh thành phần hóa học của Thài lài trắng bao gồm những nhóm chất như alkaloid, flavonoid, saponin, tanin, coumarin, glycosid tim, phenolic acid, anthraquinon, steroid và terpenoid. Ngoài ra, Thài lài trắng còn chứa các chất có hàm lượng dinh dưỡng cao, bao gồm protein, vitamin C, vitamin B<sub>2</sub>, vitamin B<sub>3</sub>, caroten, chất béo và acid hữu cơ [4-6]. Mặc dù cơ chế tác dụng chưa được tìm hiểu rõ ràng, các nghiên cứu dược lý hiện đại đã cho thấy tác dụng kháng khuẩn, kháng nấm, chống oxy hóa, kháng viêm, ức chế thần kinh trung ương, bảo vệ gan, thận và ổn định đường huyết của Thài lài trắng [7,8]. Như vậy, để góp phần cung cấp những cơ sở tiền đề cho việc ứng dụng nguyên liệu cây Thài lài trắng trong chăm sóc sức khỏe, nhóm nghiên cứu đã tiến

hành chiết xuất, phân lập và xác định cấu trúc một số hợp chất có trong cây Thài lài trắng.

## ĐỐI TƯỢNG VÀ PHƯƠNG PHÁP NGHIÊN CỨU

### Đối tượng nghiên cứu

Cây Thài lài trắng được thu hái vào tháng 10 năm 2021 tại thị trấn Cổ Lễ, huyện Trực Ninh, tỉnh Nam Định và được giám định tên khoa học bởi Thạc sĩ Nghiên Đức Trọng, trường Đại học Dược Hà Nội. Mẫu cây được lưu giữ tại Bộ môn Dược liệu - Dược học cổ truyền, Trường Đại học Y Dược, Đại học Quốc gia Hà Nội (Số hiệu tiêu bản: HNIP/18651/22).

### Hóa chất, thuốc thử

Các dung môi hóa chất dùng để chiết xuất và phân lập chất gồm methanol (MeOH), *n*-hexan, ethyl acetat (EtOAc) và nước cất (H<sub>2</sub>O) đều đạt tiêu chuẩn tinh khiết phân tích.

Pha tĩnh dùng trong sắc ký cột: silica gel (Merck) cỡ hạt 0,040 - 0,063 mm và Sephadex LH-20 (Sigma-Aldrich). Bản mỏng tráng sẵn trên đế nhôm, pha thường silica gel 60 F<sub>254</sub> (Merck), độ dày 0,2 mm; pha đảo silica gel 60 RP-18 F<sub>254s</sub> (Merck), độ dày 0,25 mm; hoạt hóa ở 110°C trong 1 giờ.

### Phương pháp nghiên cứu

#### Phương pháp xử lý mẫu và chiết xuất

Mẫu cây Thài lài trắng sau khi sấy khô, nghiền nhỏ (5,0 kg) được ngâm chiết ở nhiệt độ phòng bằng 10 L MeOH trong vòng 24 giờ. Quá trình ngâm chiết này được lặp lại 3 lần. Gộp dịch chiết, lọc và cô quay chân không dưới áp suất giảm thu được khoảng 520,0 g cao lỏng toàn phần. Hòa tan cao này trong 2 L nước cất và chiết phân lớp lần lượt với *n*-hexan và EtOAc (mỗi loại chiết 2 L x 3 lần). Các dịch chiết được cất loại dung môi dưới áp suất giảm thu được cặn *n*-hexan (142,1 g), cặn EtOAc (23,4 g) và dịch nước (285,5 g).



### Phương pháp phân lập các hợp chất

Từ cặn chiết EtOAc (23,4 g) được tiến hành trên sắc ký cột silicagel, rửa giải bằng phương pháp gradient với hệ dung môi là CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>-MeOH (100:0→0:100, v/v) thu được 5 phân đoạn, ký hiệu E1→E5. Phân đoạn E1 (322,6 mg) được phân tách trên cột silicagel với hệ dung môi *n*-hexan-EtOAc (4:1, v/v), sau đó được đưa lên cột Sephadex LH-20 và rửa giải bằng dung môi MeOH thu được chất sạch **1** (7,8 mg). Từ phân đoạn E4 (1,23 g), triển khai phương pháp sắc ký cột silicagel pha thường với hệ dung môi rửa giải CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>-MeOH (9:1, v/v). Tiếp tục phân tách phân đoạn này bằng cột Sephadex LH-20 với hệ dung môi MeOH-CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> (9:1, v/v) thu được hợp chất **2** (11,0 mg). Từ phân đoạn E5 (1,02 g), triển khai phương pháp sắc ký cột silicagel pha thường với hệ dung môi CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>-MeOH-H<sub>2</sub>O (5:1:0,1, v/v) thu được 4 phân đoạn nhỏ (E5.1 - E5.4). Phân đoạn nhỏ E5.2 (120 mg) được phân tách bằng phương pháp sắc ký cột silicagel pha thường với hệ dung môi là CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>-MeOH-H<sub>2</sub>O (5:1:0,1, v/v) thu được chất tinh khiết là hợp chất **3** (5 mg).

### Phương pháp xác định cấu trúc các hợp chất phân lập được

Xác định cấu trúc các hợp chất phân lập được bằng phương pháp đo nhiệt độ nóng chảy, phổ khối (MS), phổ cộng hưởng từ hạt nhân (<sup>1</sup>H-NMR, <sup>13</sup>C-NMR, DEPT) và so sánh các số liệu thu được từ thực nghiệm với các số liệu đã công bố [9-11].

## KẾT QUẢ VÀ BÀN LUẬN

### Hợp chất 1: Stigmasterol

Hợp chất **1** là chất rắn kết tinh, màu trắng, hình kim, nhiệt độ nóng chảy 169 - 170°C. Dựa vào tín hiệu của pic ion phân tử trên phổ khối ESI-MS tại *m/z* 413 [M+H]<sup>+</sup>, khối lượng phân tử của hợp chất **1** được xác định là 412, tương ứng với công thức

phân tử là C<sub>29</sub>H<sub>48</sub>O. Phổ <sup>1</sup>H-NMR của hợp chất **1** cho thấy sự xuất hiện của hai nhóm methyl singlet tại δ<sub>H</sub> 0,85 (3H, s, H-18); 1,02 (3H, s, H-19), ba nhóm methyl doublet tại δ<sub>H</sub> 0,92 (3H, d, J = 6,0 Hz, H-21); 0,83 (3H, d, J = 7,2 Hz, H-26); 0,80 (3H, d, J = 6,8 Hz, H-27) và một nhóm methyl triplet tại δ<sub>H</sub> 0,70 (3H, t, J = 9,5 Hz, H-29). Ngoài ra, phổ <sup>1</sup>H-NMR cũng cho thấy tín hiệu của các olefinic proton tại δ<sub>H</sub> 5,35 (1H, brs, H-6); 5,15 (1H, m, H-22); 5,03 (1H, m, H-23) chứng tỏ sự có mặt của hai liên kết đôi tại C-5/C-6 và C-22/C-23. Bên cạnh đó, trên phổ còn xuất hiện tín hiệu proton đặc trưng của nhóm -OH trên khung sterol tại δ<sub>H</sub> 3,51 (1H, m, H-3). Phổ <sup>13</sup>C-NMR và DEPT cho biết hợp chất **1** có 29 carbon trong phân tử, bao gồm sáu nhóm methyl (CH<sub>3</sub>), chín nhóm methylen (CH<sub>2</sub>), mười một nhóm methin (CH) và ba carbon bậc bốn (C<sub>q</sub>). Trong đó, xuất hiện tín hiệu carbon của một nhóm oxymethin tại δ<sub>C</sub> 71,8 (C-3), tín hiệu carbon của liên kết đôi tại δ<sub>C</sub> 140,7 (C-5); 121,7 (C-6); 138,3 (C-22); 129,3 (C-23), cùng với tín hiệu carbon của sáu nhóm methyl lần lượt tại δ<sub>C</sub> 12,0 (C-18); 19,1 (C-19); 19,8 (C-21); 21,2 (C-26); 18,9 (C-27); 12,2 (C-29). Các dữ liệu phổ của hợp chất **1** được so sánh với các giá trị tương ứng của hợp chất stigmasterol đã được công bố trong tài liệu tham khảo [9] (Bảng 1). Sự phù hợp giữa các số liệu cho phép khẳng định hợp chất **1** là stigmasterol.

Bảng 1. Dữ liệu phổ <sup>1</sup>H-NMR (600 MHz) và <sup>13</sup>C-NMR (150 MHz) của hợp chất **1** và hợp chất tham khảo [9] (dung môi đo CDCl<sub>3</sub>)

Vị trí	Hợp chất 1		Stigmasterol [9]	
	δ <sub>C</sub> (ppm)	δ <sub>H</sub> (ppm) (J, Hz)	δ <sub>C</sub> (ppm)	δ <sub>H</sub> (ppm) (J, Hz)
1	37,3	-	37,3	-
2	31,7	-	31,6	-



3	71,8	3,51 (1H, m)	71,8	3,52 (1H, m)
4	42,2	-	42,3	-
5	140,7	-	140,7	-
6	121,7	5,35 (1H, brs)	121,7	5,36 (1H, brd, J = 3,5 Hz)
7	31,9	-	31,8	-
8	31,8	-	31,8	-
9	50,2	-	50,1	-
10	36,5	-	36,6	-
11	21,0	-	21,1	-
12	39,8	-	39,7	-
13	42,3	-	42,2	-
14	56,8	-	56,8	-
15	24,4	-	24,5	-
16	28,2	-	28,9	-
17	56,1	-	56,1	-
18	12,0	0,85 (3H, s)	12,1	0,85 (3H, s)
19	19,1	1,02 (3H, s)	19,4	1,02 (3H, s)
20	40,5	-	40,6	-
21	19,8	0,92 (3H, d, J = 6,0 Hz)	21,1	0,92 (3H, d, J = 6,5 Hz)
22	138,3	5,15 (1H, m)	138,2	5,16 (1H, dd, J = 15,0; 8,5 Hz)
23	129,3	5,03 (1H, m)	129,3	5,03 (1H, dd, J = 15,0; 8,5 Hz)
24	51,2	-	51,2	-
25	33,9	-	31,9	-
26	21,2	0,83 (3H, d, J = 7,2 Hz)	21,2	0,83 (3H, t, J = 8,5 Hz)
27	18,9	0,80 (3H, d, J = 6,8 Hz)	19,1	0,83 (3H, d, J = 6,8 Hz)
28	25,4	-	25,3	-
29	12,2	0,70 (3H, t, J = 9,5 Hz)	12,2	0,79 (3H, d, J = 9,5 Hz)

Stigmasterol là một phytosterol được tìm thấy nhiều trong thực vật và có cấu trúc hóa học tương tự như cholesterol. Các nghiên cứu đã xác định hợp chất này có thể ức chế sự phát triển của các tế bào ung thư khác nhau như ung thư vú, ung thư buồng trứng, ung thư ruột kết và ung thư tuyến tiền liệt bằng cách thúc đẩy và gia tăng quá trình apoptosis [12].

**Hợp chất 2: Daucosterol**

Hợp chất **2** là chất rắn màu trắng, dạng bột vô định hình, chuyển sang màu hồng với cerin sulfat, nóng chảy ở 135 - 136°C. Phổ <sup>1</sup>H-NMR của hợp chất **2** cho thấy sáu tín hiệu cộng hưởng của nhóm methyl tại δ<sub>H</sub> 0,62 (3H, s, H-18); 0,84 (3H, m, H-27); 0,88 (3H, m, H-29); 0,89 (3H, s, H-26); 0,92 (3H, m, H-19); 0,95 (3H, m, H-21). Một proton ở C-3 xuất hiện dưới dạng multiplet tại δ<sub>H</sub> 4,25 (1H, m). Ngoài ra, tín hiệu proton anomer tại δ<sub>H</sub> 4,99 (1H, d, J = 7,8 Hz, H-1') chứng tỏ phân tử hợp chất **2** có mặt một gốc đường β-glucopyranose với hằng số tương tác lớn. Từ phổ <sup>13</sup>C-NMR và DEPT chỉ ra rằng hợp chất **2** bao gồm 35 carbon trong cấu trúc, trong đó tín hiệu cộng hưởng của 29 nguyên tử carbon của khung β-sitosterol gồm sáu nhóm methyl (CH<sub>3</sub>) tại δ<sub>C</sub> 12,0 (C-18); 19,3 (C-19); 18,9 (C-21); 19,8 (C-26); 19,1 (C-27); 11,8 (C-29); mười một nhóm methylen (CH<sub>2</sub>) tại δ<sub>C</sub> 37,3 (C-1); 30,0 (C-2); 39,8 (C-4); 32,0 (C-7); 21,1 (C-11); 39,1 (C-12); 24,3 (C-15); 28,4 (C-16); 34,1 (C-22); 26,3 (C-23); 23,2 (C-28); chín nhóm methin (CH) tại δ<sub>C</sub> 78,1 (C-3); 121,8 (C-6); 31,9 (C-8); 50,2 (C-9); 56,7 (C-14); 56,1 (C-17); 36,2 (C-20); 45,9 (C-24); 29,3 (C-25) và ba carbon bậc bốn (C<sub>q</sub>) tại δ<sub>C</sub> 140,8 (C-5); 36,8 (C-10); 42,3 (C-13). Bên cạnh đó, xuất hiện sáu tín hiệu cộng hưởng chứng tỏ sự có mặt của một gốc đường β-glucopyranose tại δ<sub>C</sub> 102,3 (C-1'); 75,0 (C-2'); 78,2 (C-3'); 71,4 (C-4'); 78,1 (C-5'); 62,5



(C-6'). Từ dữ liệu phổ thu được, kết hợp so sánh với dữ liệu phổ của hợp chất daucosterol đã được công bố [10] (Bảng 2), có thể kết luận hợp chất **2** là daucosterol (sitosterol- $\beta$ -D-glucosid).

Bảng 2. Dữ liệu phổ  $^1\text{H-NMR}$  (600 MHz) và  $^{13}\text{C-NMR}$  (150 MHz) của hợp chất **2** và hợp chất tham khảo [10] (dung môi đo  $\text{C}_5\text{D}_5\text{N}$ )

Vị trí	Hợp chất <b>2</b>		Daucosterol [10]	
	$\delta_c$ (ppm)	$\delta_H$ (ppm) (J, Hz)	$\delta_c$ (ppm)	$\delta_H$ (ppm) (J, Hz)
1	37,3	-	37,4	-
2	30,0	-	30,2	-
3	78,1	4,25 (1H, m)	78,6	4,31 (1H, m)
4	39,8	-	39,3	-
5	140,8	-	140,8	-
6	121,8	5,30 (1H, overlap)	121,9	5,33 (1H)
7	32,0	-	32,0	-
8	31,9	-	32,1	-
9	50,2	-	50,3	-
10	36,8	-	36,9	-
11	21,1	-	21,2	-
12	39,1	-	39,9	-
13	42,3	-	42,5	-
14	56,7	-	56,8	-
15	24,3	-	24,5	-
16	28,4	-	28,5	-
17	56,1	-	56,2	-
18	12,0	0,62 (3H, s)	11,9	0,64 (3H, s)
19	19,3	0,92 (3H, s)	19,1	0,92 (3H, s)
20	36,2	-	36,4	-
21	18,9	0,95 (3H, m)	19,0	0,97 (3H, d, $J=6,5$ Hz)
22	34,1	-	34,2	-
23	26,3	-	26,3	-

24	45,9	-	46,0	-
25	29,3	-	29,4	-
26	19,8	0,89 (3H, s)	19,9	0,89 (3H, d, $J=5,6$ Hz)
27	19,1	0,84 (3H, m)	19,2	0,84 (3H, d, $J=6,5$ Hz)
28	23,2	-	23,3	-
29	11,8	0,88 (3H, m)	12,1	0,88 (3H, d, $J=3,1$ Hz)
1'	102,3	4,99 (1H, d, $J=7,8$ Hz)	102,5	-
2'	75,0	3,91 (1H, m)	75,3	3,93 (1H)
3'	78,2	4,02 (1H, t, $J=9,0$ Hz)	78,5	4,05 (1H, t, $J=8,1$ Hz)
4'	71,4	4,20 (1H, m)	71,6	4,26 (1H, m)
5'	78,1	3,94 (1H, m)	78,0	3,97 (1H, m)
6'	62,5	4,33 (1H, m, H-6'b) 4,50 (1H, d, $J=12,0$ Hz, H-6'a)	62,8	4,41 (1H, dd, $J=5,1; 11,7$ Hz, H-6'b) 4,56 (1H, dd, H-6'a)

Daucosterol, còn gọi là sitoglucoside, là một sterol khá phổ biến ở các loài thực vật bậc cao. Các nghiên cứu dược lý cho thấy hợp chất này thể hiện nhiều tác dụng sinh học rõ rệt trên *in vitro* và *in vivo* như chống oxy hóa, chống ung thư, bảo vệ thần kinh, kháng viêm, điều hòa miễn dịch, hạ đường huyết và giảm mỡ máu [13].

### Hợp chất **3**: Quercitrin

Hợp chất **3** thu được dưới dạng bột vô định hình, màu vàng. Dữ liệu phổ ESI-MS có các phân mảnh ion với  $m/z = 449$   $[\text{M}+\text{H}]^+$ . Do đó, khối lượng phân tử của hợp chất **3** là 448 tương ứng với công thức phân tử là  $\text{C}_{21}\text{H}_{20}\text{O}_{11}$ . Phổ  $^1\text{H-NMR}$  của chất **3** xuất hiện tín hiệu của ba proton aromatic tại  $\delta_H$  7,36 (1H, d,  $J=2,4$  Hz, H-2'); 7,33

(1H, dd,  $J = 8,4; 2,4$  Hz, H-6'); 6,94 (1H, d,  $J = 8,4$  Hz, H-5') gợi ý sự có mặt của một hệ vòng thơm ABX. Tín hiệu của hai proton aromatic tại  $\delta_H$  6,40 (1H, d,  $J = 2,4$  Hz, H-8); 6,23 (1H, d,  $J = 2,4$  Hz, H-6) cũng gợi ý sự có mặt của hệ vòng thơm AX trong cấu trúc. Các dữ liệu này đặc trưng cho một hợp chất flavonoid. Ngoài ra, trên phổ  $^1\text{H-NMR}$  cũng xuất hiện tín hiệu proton anomeric tại  $\delta_H$  5,37 (1H, d,  $J = 1,2$  Hz, H-1'') cùng với các tín hiệu proton của nhóm oxymethin tại  $\delta_H$  4,23 (1H, dd;  $J = 3,6; 1,8$  Hz, H-2''); 3,77 (1H, dd;  $J = 9,6; 3,6$  Hz, H-3''); 3,43 (1H, m, H-4''); 3,36 (1H, m, H-5'') và doublet của nhóm methyl tại  $\delta_H$  0,97 (3H, d;  $J = 6,0$  Hz, H-6'') gợi ý cấu trúc của một gốc đường  $\alpha$ -L-rhamnopyranosid. Phổ  $^{13}\text{C-NMR}$  và DEPT của hợp chất **3** xuất hiện tín hiệu của 21 carbon, bao gồm một nhóm methyl ( $\text{CH}_3$ ), mười nhóm methin (CH), và mười carbon bậc bốn ( $\text{C}_q$ ). Hai hệ vòng thơm ABX và AX được khẳng định bởi tín hiệu của năm nhóm methin tại  $\delta_C$  116,96 (C-2'); 116,39 (C-5'); 123,00 (C-6'); 99,84 (C-6); 94,73 (C-8). Trong khi đó, sự xuất hiện của một tín hiệu nhóm carbonyl tại  $\delta_C$  179,68 (C-4) cùng các tín hiệu carbon của vòng thơm liên kết với oxy tại  $\delta_C$  136,25 (C-3); 163,24 (C-5); 165,94 (C-7); 146,45 (C-3'); 149,82 (C-4') cho phép xác định cấu trúc của một hợp chất khung flavonol. Năm tín hiệu methin liên kết với oxy tại  $\delta_C$  103,57 (C-1''); 71,92 (C-2''); 72,15 (C-3''); 72,04 (C-4''); 73,28 (C-5'') và một tín hiệu methyl tại  $\delta_C$  17,65 (C-6'') cho phép khẳng định sự xuất hiện của một gốc rhamnopyranosid. Như vậy, có thể xác định hợp chất **3** là một flavonol monoglycosid. Dữ liệu phổ NMR của hợp chất **3** tương đồng với các dữ liệu công bố trong tài liệu tham khảo của hợp chất quercitrin [11] (Bảng 3). Từ đó, có thể khẳng định hợp chất **3** chính là Quercitrin (quercetin-3-O- $\alpha$ -L-rhamnopyranosid).

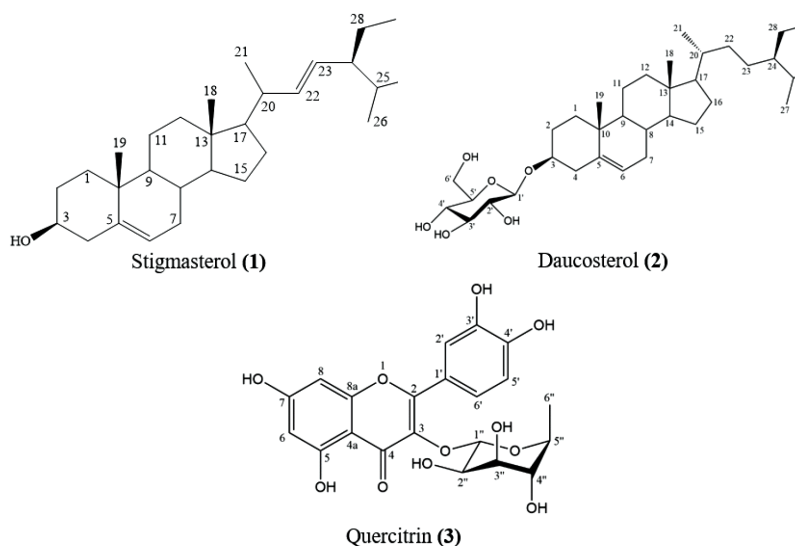
Bảng 3. Dữ liệu phổ  $^1\text{H-NMR}$  (500 MHz) và  $^{13}\text{C-NMR}$  (125 MHz) của hợp chất **3** và hợp chất tham khảo [11] (dung môi đo  $\text{CD}_3\text{OD}$ )

Vị trí	Hợp chất 3		Quercitrin [11]	
	$\delta_C$ (ppm)	$\delta_H$ (ppm) (J, Hz)	$\delta_C$ (ppm)	$\delta_H$ (ppm) (J, Hz)
2	159,34	-	159,31	-
3	136,25	-	136,23	-
4	179,68	-	179,65	-
4a	105,91	-	105,90	-
5	163,24	-	163,21	-
6	99,84	6,23 (1H, d, $J = 2,4$ Hz)	99,82	6,20 (1H, d, $J = 2,1$ Hz)
7	165,94	-	165,89	-
8	94,73	6,40 (1H, d, $J = 2,4$ Hz)	94,71	6,37 (1H, d, $J = 2,1$ Hz)
8a	158,57	-	158,53	-
1'	122,86	-	122,85	-
2'	116,96	7,36 (1H, d, $J = 2,4$ Hz)	116,93	7,34 (1H, d, $J = 2,1$ Hz)
3'	146,45	-	146,41	-
4'	149,82	-	149,80	-
5'	116,39	6,94 (1H, d, $J = 8,4$ Hz)	116,36	6,91 (1H, d, $J = 8,3$ Hz)
6'	123,00	7,33 (1H, dd, $J = 8,4; 2,4$ Hz)	122,96	7,31 (1H, dd; $J = 8,3; 2,1$ Hz)
1''	103,57	5,37 (1H, d, $J = 1,2$ Hz)	103,54	5,35 (1H, d; $J = 1,4$ Hz)
2''	71,92	4,23 (1H, dd; $J = 3,6; 1,8$ Hz)	71,89	4,22 (1H, dd; $J = 3,3; 1,4$ Hz)
3''	72,15	3,77 (1H, dd; $J = 9,6; 3,6$ Hz)	72,11	3,75 (1H, dd; $J = 9,5; 3,3$ Hz)
4''	72,04	3,43 (1H, m)	72,02	3,41 (1H, m)
5''	73,28	3,36 (1H, m)	73,25	3,15 (1H, m)
6''	17,65	0,97 (3H, d; $J = 6,0$ Hz)	17,65	0,94 (3H, d; $J = 6,2$ Hz)



Quercitrin là một flavonoid glycosid với phần aglycon là quercetin, được tìm thấy trong nhiều loài thực vật. Hợp chất này đã được chứng minh có khả năng chống oxy hóa, kháng viêm, khôi phục hoạt tính của flavin

monoxygenase ở những bệnh nhân bị viêm gan, xơ gan, ung thư gan do tăng sản xuất nitric oxide và ngăn chặn sự tổn thương của tế bào  $\beta$  thông qua con đường ty thể và truyền tín hiệu NF- $\kappa$ B [11,14,15].



Hình 1. Cấu trúc hóa học của các hợp chất 1 - 3

## KẾT LUẬN

Nghiên cứu đã chiết xuất, phân lập được 3 hợp chất từ căn chiết ethyl acetate của cây Thái lái trắng (*Commelina diffusa* Burm.f.), gồm stigmasterol (1), daucosterol (2) và quercitrin (3). Cấu trúc hóa học của các hợp chất đã được xác định thông qua các kết quả đo nhiệt độ nóng chảy, phổ khối, phổ cộng hưởng từ hạt nhân và so sánh với các dữ liệu công bố của các hợp chất liên quan. Đây là lần đầu tiên hợp chất 3 được phân lập từ cây Thái lái

trắng. Kết quả của nghiên cứu đã góp phần cung cấp thông tin, làm phong phú thêm tri thức về thành phần hóa học của loài *C. diffusa*. Từ đó, mở ra những hướng nghiên cứu tiếp theo nhằm tìm ra những hoạt chất chính có khả năng ứng dụng trong nghiên cứu và phát triển thuốc.

## LỜI CẢM ƠN

Nghiên cứu này được tài trợ bởi đề tài cấp Đại học Quốc gia Hà Nội, mã số: QG.20.81.

## TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. N. L. Burman, *Flora Indica*: cui accedit series zoophytorum indicorum, nec non Prodromus Florae Capensis, *Biodiversity Heritage Library*, 1768, Vol. 18, pp. 303.
2. Phạm Hoàng Hộ, *Cây cỏ Việt Nam (Tập III)*, NXB Trẻ, TP. Hồ Chí Minh, 2003, tr. 373.

3. **Võ Văn Chi**, *Cây thuốc An Giang*, Ủy ban Khoa học - Kỹ thuật An Giang, An Giang, 1991, tr. 455.
4. **S. A. Kamble**, Nutraceutical Investigations of *Commelina diffusa* Burm. f. Leaves - A Popular Wild Vegetable, *Plantae Scientia*, 2019, 2(3), pp. 34-39.
5. **M. A. A. Khan, M. T. Islam, S. K. Sadhu**, Evaluation of Phytochemical and Antimicrobial Properties of *Commelina diffusa* Burm. f., *Oriental Pharmacy and Experimental Medicine*, 2011, 11(4), pp. 235-241.
6. **T. Sultana, M. A. Mannan**, Evaluation of Central Nervous System (CNS) Depressant Activity of Methanolic Extract of *Commelina diffusa* Burm. in Mice, *Clinical Phytoscience*, 2018, 4(5), pp. 1-7.
7. **A. A. Prima, R. Ahmed, A. Faruk, Z. Zafron, P. R. Dash**, Pharmacological Importance of *Commelina diffusa* (Commelinaceae): A Review, *International Journal of Life Sciences and Review*, 2019, 5(1), pp. 1-5.
8. **R. A. Mou**, Phytochemical and Biological Investigation of *Commelina diffusa*, *BRAC University, Dhaka*, 2017, pp. 17-32.
9. **B. T. Xuan, V. D. Loi, P. T. Ha, T. M. Ngoc, B. T. K. Dung**, Compounds Isolated from the Leaf of *Sanchezia nobilis* Hook.f., *VNU Journal of Science: Medical and Pharmaceutical Sciences*, 2019, 35(1), pp. 61-66.
10. **M. A. Esmaili, M. M. Farimani**, Inactivation of PI3K/Akt Pathway and Upregulation of *PTEN* Gene are Involved in Daucosterol, Isolated from *Salvia sahendica*, Induced Apoptosis in Human Breast Adenocarcinoma Cells, *South African Journal of Botany*, 2014, 93, pp. 37-47.
11. **Y. Xu, Z. Tao, Y. Jin, et al**, Flavonoid, a Potential New Insight of *Leucaena leucocephala* Foliage in Ruminant Health, *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 2018, 66, pp. 7616-7626.
12. **Y. S. Kim, X. F. Li, K. H. Kang, et al**, Stigmasterol Isolated from Marine Microalgae *Navicula incerta* Induces Apoptosis in Human Hepatoma HepG2 Cells, *BMB Reports*, 2014, 47(8), pp. 433-438.
13. **N. E. Omari, I. Jaouadi, M. Lahyaoui, et al**, Natural Sources, Pharmacological Properties, and Health Benefits of Daucosterol: Versatility of Actions, *Applied Sciences*, 12(5779), 2022, pp. 1-27,.
14. **X. Dai, Y. Ding, Z. Zhang, et al**, Quercetin and Quercitrin Protect Against Cytokine-induced Injuries in RINm5F  $\beta$ -cells via the Mitochondrial Pathway and NF- $\kappa$ B Signaling, *International Journal of Molecular Medicine*, 2013, 31, pp. 265-271.
15. **R. R. Cutler**, Secondary Metabolites/Medicinal and Pharmaceutical Uses, *Encyclopedia of Rose Science*, 2003, pp. 716-726.