

# GÓP PHẦN KHẢO SÁT THÀNH PHẦN HÓA HỌC CỦA VỎ RỄ BÀN (*SONNERATIA CASEOLARIS* L.)

Lê Thanh Phước và Từ Minh Tô<sup>1</sup>

## ABSTRACT

*From the petroleum ether extracts of the roots of *Sonneratia caseolaris* L., collected in Tra On district, Vinh Long province, two compounds have been isolated: lupeol (C<sub>30</sub>H<sub>50</sub>O) and betulinaldehyde (C<sub>30</sub>H<sub>50</sub>O<sub>2</sub>). The structures of these compounds have been elucidated by modern spectroscopic methods: <sup>1</sup>H-NMR, <sup>13</sup>C-NMR, DEPT NMR.*

**Keywords:** *Sonneratia caseolaris* L. root, chemical components, lupeol, betulinaldehyde

**Title:** *Contribution to the study on the chemical components of *Sonneratia caseolaris* L. root*

## TÓM TẮT

*Từ dịch chiết petroleum ether của rễ cây Bàn trồng tại huyện Trà Ôn, tỉnh Vĩnh Long, cô lập được hai hợp chất là: lupeol (C<sub>30</sub>H<sub>50</sub>O) và betulinaldehyde (C<sub>30</sub>H<sub>50</sub>O<sub>2</sub>). Cấu trúc hóa học của các hợp chất này đã được xác định bằng các phương pháp phổ hiện đại <sup>1</sup>H-NMR, <sup>13</sup>C-NMR, DEPT NMR.*

**Từ khóa:** *Rễ Bàn *Sonneratia caseolaris* L., thành phần hóa học, lupeol, betulinaldehyde*

## 1 ĐẶT VẤN ĐỀ

Cây Bàn có tên khoa học là *Sonneratia caseolaris* L. thuộc họ Bàn (Sonneratiaceae) (Đỗ Huy Bích *et al.*, 2004) nay đổi sang họ Lythraceae. Bàn là loại cây được trồng nhiều ven các con sông, cửa biển, trên các bãi đất bồi và là một quần thể không thể thiếu của rừng ngập mặn ven biển nước ta. Với hệ thống rễ phát triển cây Bàn có khả năng chắn sóng, chống xói mòn và gió; theo dân gian Bàn chẳng những được dùng để tạo thêm hương vị cho các món ăn mà còn có thể tạo ra những bài thuốc có giá trị như: cầm máu, viêm tấy, giải nhiệt (Đỗ Huy Bích *et al.*, 2004). Trên thế giới Bàn được sử dụng như chất kháng oxi hóa và các tế bào độc hại. Hơn nữa dân gian sử dụng như chất làm se vết thương, chữa bong gân, chữa bệnh trĩ, ngăn cản xuất huyết (Jiny Varghese K *et al.*, 2010). Ở Việt Nam, thành phần hóa học cây Bàn chưa được nghiên cứu. Tuy nhiên, trên thế giới đã có một số bài báo nghiên cứu về loài cây này nhưng chưa chú ý nghiên cứu đến bộ phận rễ. Do đó để làm sáng tỏ thêm cơ sở khoa học cho những bài thuốc dân gian và góp phần vào những nghiên cứu mới, chúng tôi phân lập và xác định cấu trúc hóa học các hợp chất của rễ Bàn (*Sonneratia caseolaris* L.) trồng tại huyện Trà Ôn, tỉnh Vĩnh Long.

<sup>1</sup> Khoa Khoa học Tự Nhiên, Trường Đại học Cần Thơ

## 2 PHƯƠNG TIỆN VÀ PHƯƠNG PHÁP

Nguyên liệu: Rễ cây Bần được thu hái (phần phía trên mặt đất) tại xã Lục Sĩ Thành huyện Trà Ôn, tỉnh Vĩnh Long, sau đó rửa sạch, tách lấy phần vỏ, cắt nhỏ, phơi khô.

Phương pháp: Chiết hoạt chất: Vỏ rễ Bần được ngâm trong cồn 96°, phần dịch chiết cô quay loại dung môi thu được cao cồn. Sau đó lấy cao cồn chiết với dung môi petroleum ether (PE) cô quay loại dung môi thu được cao PE.

Phân lập chất từ cao PE: thực hiện quá trình sắc ký cột, chất hấp phụ là silica gel, theo dõi quá trình sắc ký cột bằng sắc ký lớp mỏng thin layer chromatography (TLC), giải ly cột bắt đầu từ PE sau đó tăng độ phân cực bằng dung dịch PE với ethyl acetate (EtOAc) theo tỷ lệ thích hợp. Thuốc thử hiện vết là dung dịch vanillin/ sulfuric acid 10% trong methanol. Các phân đoạn thể hiện  $R_f$  giống nhau trên TLC được gộp lại. Tiến hành sắc ký cột tiếp tục với các phân đoạn giống nhau để phân lập được chất sạch.

Xác định cấu trúc của chất đã phân lập được: sử dụng các phương pháp phổ nghiệm:  $^1\text{H-NMR}$ ,  $^{13}\text{C-NMR}$ , DEPT NMR và các tài liệu liên quan để xác định cấu trúc các chất phân lập được. Phổ NMR được đo trên máy Bruker Advance 500 MHz (Viện Công Nghệ, số 18 Hoàng Quốc Việt, Cầu Giấy, Hà Nội).

Silica gel dùng cho sắc ký cột pha thường cỡ hạt 0.040-0.063 mm. Sắc ký lớp mỏng được thực hiện trên bản mỏng tráng sẵn silica gel KG 60 F<sub>254</sub>. Các hóa chất tinh khiết khác có xuất xứ từ Trung Quốc.

## 3 KẾT QUẢ THẢO LUẬN

### 3.1 Kết quả sắc ký cột

Từ 2.012 g cao petroleum ether tiến hành sắc ký cột thường với hệ dung môi giải ly PE:EtOAc và EtOAc:MeOH có độ phân cực tăng dần. Kết quả ở phân đoạn PE:EtOAc = 90:10 thu được 25 mg một hợp chất tinh khiết có dạng tinh thể màu trắng, hiện vết trên TLC cho một vết tròn màu hồng tím với  $R_f = 0.29$  (PE:EtOAc = 90:10). Nhiệt độ nóng chảy 188-190°C. Ký hiệu hợp chất này là PHUOC-TO-01. Ở phân đoạn PE:EtOAc = 95:5 kết quả thu được 34 mg một hợp chất tinh khiết, có dạng tinh thể hình kim màu trắng đục trên TLC xuất hiện vết màu tím có  $R_f = 0.36$  (PE:EtOAc = 80:20). Ký hiệu hợp chất này là PHUOC-TO-02.

### 3.2 Kết quả dữ liệu phổ

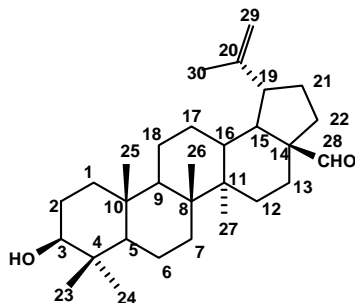
#### Hợp chất PHUOC-TO-01:

Phổ  $^1\text{H NMR}$  (500 MHz,  $\text{CDCl}_3$ )  $\delta$  (ppm), J (Hz): 0.74 (3H, s,  $\text{CH}_3$ -24), 0.81 (3H, s,  $\text{CH}_3$ -25), 0.91 (3H, s,  $\text{CH}_3$ -27), 0.95 (3H, s,  $\text{CH}_3$ -23), 0.97 (3H, s,  $\text{CH}_3$ -26), 1.69 (3H, s,  $\text{CH}_3$ -30), 2.85 (1H, m, H-19), 3.18 (1H, dd, J= 11.5, 5.0 Hz, H-3), 4.62 (1H, br. s, H-29), 4.74 (1H, br. s, H-29), 9.67 (1H, s, CHO).

Phổ  $^{13}\text{C NMR}$  (125.8 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ),  $\delta$  (ppm): 15.1 (C-27), 15.3 (C-24), 15.8 (C-25), 16.1 (C-26), 18.3 (C-6), 19.0 (C-30), 20.8 (C-11), 25.6 (C-12), 27.4 (C-2), 28.0 (C-23), 28.8 (C-16), 29.3 (C-15), 29.9 (C-21), 33.3 (C-22), 34.4 (C-7), 37.2

(C-10), 38.8 (C-1), 38.8 (C-13), 38.9 (C-4), 40.9 (C-8), 42.6 (C-14), 47.6 (C-19), 48.1 (C-18), 50.5 (C-9), 55.4 (C-5), 59.3 (C-17), 79.0 (C-3), 110.2 (C-29), 149.7 (C-20), 206.7 (C-28).

Từ các dữ kiện trên nhận danh được **PHUOC-TO-01** là betulinaldehyde (Hình 1). Kết quả này cũng phù hợp với kết quả của Most. Nazma Parvin *et al.*, 2009.



Hình 1: Công thức cấu tạo của betulinaldehyde

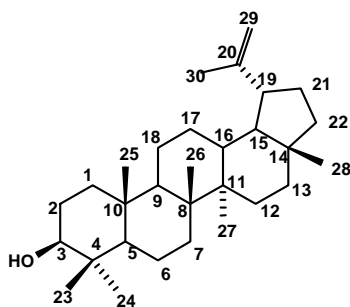
Betulinaldehyde là một triterpen được tìm thấy trong các loài thực vật, có khả năng kháng một số loại vi trùng như: *Bacillus subtilis*, *Escherichia coli*, *Pseudomonas* (M. Shoeb *et al.*, 2005), gây độc đối với tế bào trên màng bụng của chuột (Manuel Jesús Chan-Bacab *et al.*, 2001). Ngoài ra nó là hợp chất quan trọng để tổng hợp betulinic acid và các dẫn xuất của betulin một trong những hợp chất có thể dùng để điều trị các bệnh khó chữa trị như: ung thư, HIV (Perumal Yogeeswari *et al.*, 2005).

#### Hợp chất PHUOC-TO-02

Phổ  $^1\text{H-NMR}$  (500 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ),  $\delta$  (ppm), J (Hz):  $\delta$  0.68 (d, 1H, J = 9.5 Hz, H-5), 0.76 (s, 3H,  $\text{CH}_3$ -24), 0.79 (s, 3H,  $\text{CH}_3$ -28), 0.83 (s, 3H,  $\text{CH}_3$ -25), 0.95 (s, 3H,  $\text{CH}_3$ -27), 0.97 (s, 3H,  $\text{CH}_3$ -23), 1.03 (s, 3H,  $\text{CH}_3$ -26), 1.66 (s, 3H,  $\text{CH}_3$ -30), 1.87–1.96 (m, H-21), 2.35 (dt, 1H, J = 11, 5.5 Hz, H-19), 3.18 (dd, 1H, J = 11, 5 Hz, H-3), 4.57 (br s, 1H, H-29), 4.69 (br s, 1H, H-29).

Phổ  $^{13}\text{C-NMR}$  (125.8 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ),  $\delta$  (ppm):  $\delta$  14.6 (C-27), 15.4 (C-24), 16.0 (C-25), 16.1 (C-26), 18.0 (C-28), 18.3 (C-6), 19.3 (C-30), 21.0 (C-11), 25.2 (C-12), 27.5 (C-2, C-15), 28.0 (C-23), 29.7 (C-21), 34.3 (C-7), 35.6 (C-16), 37.2 (C-10), 38.1 (C-13), 38.7 (C-1), 38.9 (C-4), 40.0 (C-22), 40.9 (C-8), 42.9 (C-14), 43.0 (C-17), 48.0 (C-18), 48.3 (C-19), 50.4 (C-9), 55.3 (C-5), 79.0 (C-3), 109.3 (C-29), 150.9 (C-20).

Từ những dữ kiện trên **PHUOC-TO-02** được nhận danh là lupeol (Hình 2). Kết quả này cũng phù hợp với kết quả của Tian Mingqing *et al.*, 2009.



**Hình 2: Công thức cấu tạo hóa học lupeol**

Lupeol là một triterpen được tìm thấy rất nhiều trong các thực phẩm rau, quả, cây trái. Những nghiên cứu trong khoảng ba thập kỷ trở lại đây cho thấy lupeol có hoạt tính dược lý quan trọng. Nghiên cứu in vitro và cận lâm sàng đối với động vật cho thấy lupeol có khả năng kháng viêm, kháng vi trùng, ức chế sinh trưởng của tế bào ung thư đầu và cổ, làm hạ cholesterol. Lupeol cũng được thử nghiệm trên cơ thể sống, như một phương thuốc điều trị cho thấy có thể chữa lành vết thương, tiểu đường, tim mạch, thận, viêm khớp. Đáng chú ý là lupeol có khả năng trị bệnh chon lọc ít gây ảnh hưởng đối với tế bào lành bệnh (Hifzur Rahman Siddique et al., 2010).

#### 4 KẾT LUẬN

Đã phân lập và xác định cấu trúc của hai hợp chất: betulinaldehyde và lupeol từ dịch chiết petroleum ether của rễ cây Bần. Trong đó hợp chất betulinaldehyde lần đầu được phân lập trên cây *Sonneratia caseolaris* L., hợp chất lupeol đã được phát hiện trên cây này nhưng được trồng tại các vùng khác không phải ở Việt Nam. Đây là những hợp chất đã được nghiên cứu đều có hoạt tính sinh học cao do đó phần nào giải thích cơ sở khoa học của các bài thuốc trị liệu dân gian như đã nêu trên.

#### TÀI LIỆU THAM KHẢO

- Đỗ Huy Bích, 2004. Cây thuốc và động vật làm thuốc ở Việt Nam, NXB Khoa học và Kỹ thuật, Hà Nội. (I), tr. 187-188.
- Jiny Varghese K , Belzik N, Nisha A R ,Resiya S, Resmi S,Silvipriya KS 2010. Pharmacognostical and phytochemical studies of a Mangrove ( *Sonneratia caseolaris* ) from Kochi of Kerala state in India, *Journal of Pharmacy Research* 3 (11), 2625-2627.
- Hifzur Rahman Siddique, Mohammad Saleem, 2010. Beneficial health effects of lupeol triterpene: A review of preclinical studies, Volume 88, Issues 7-8, 14 February 2011, Pages 285-293 *Life Sciences*.
- Manuel Jesús Chan-Bacab and Luis Manuel Peña-Rodríguez, 2001. Plant natural products with leishmanicidal activity, *The Royal Society of Chemistry Journal* 18, 674–688.
- Margareth B. C. Gallo. Miranda J. Sarachine 2009. Biological Activities of Lupeol, *International Journal of Biomedical and Pharmaceutical Sciences*.
- Most. Nazma Parvin, Mohammad S. Rahman, Mohammad S. Islam and Mohammad A. Rashid 2009. Chemical and biological investigations of *Dillenia indica* Linn, *Bangladesh Journal Pharmacol* 4: 122-125.

- M. Shoeb, M. I. R. Mamun, N. Nahar and M. Mosihuzzaman, 2005. Biological Screening of *Zizyphus rugosa* and *Zizyphus oenoplia* extractives, *Dhaka Univ. J. Pharm. Sci.* 4(2): 131-134.
- Perumal Yogeewari and Dharmarajan Sriram 2005. Betulinic Acid and Its Derivatives: A Review on their Biological Properties, *Current Medicinal Chemistry* 12, 657-666.
- Tian Minqing, Dai Haofu, Li Xiaoming, Wang Bingui, 2009. Chemical constituents of marine medicinal mangrove plant *Sonneratia caseolaris*, *Chinese Journal of Oceanology and Limnology* Vol. 27 No. 2, P. 288-296.