

BƯỚC ĐẦU KHẢO SÁT THÀNH PHẦN HÓA HỌC CỦA QUẢ SU ỎI (*Xylocarpus granatum*) THU HÁI Ở VŨNG TÀU – VIỆT NAM

Đến toàn soạn 18-08-2022

Trần Trung Hiếu, Phan Thị Thùy, Đậu Xuân Đức,
Khoa Hóa học, Trường Sư phạm, Trường Đại học Vinh

Nguyễn Tân Thành

Viện Công nghệ Hóa, Sinh và Môi trường, Trường Đại học Vinh

Nguyễn Ngọc Tuấn, Trần Đình Thắng

Viện Công nghệ Sinh học & Thực phẩm, Trường Đại học Công nghiệp Tp Hồ Chí Minh

Email: thangtd@iuh.edu.vn

SUMMARY

THE LIMONOID AND OTHER COMPOUNDS FROM FRUIT OF *Xylocarpus granatum*

A limonoid compound, xylocarpine F (1) and two other known compounds (pseudopalmatine (2) and catechin (3)) were isolated from the fruit of *Xylocarpus granatum* collected in Vung Tau, Vietnam. The structures of the compounds were determined on the basis of 1D- and 2D- nuclear magnetic resonance (NMR) methods, mass spectrometry (ESI-MS) combined with spectral data in the previous literature. This is the first study on the chemical components of *Xylocarpus granatum* growing in Vietnam.

Keywords: *Xylocarpus granatum*, limonoid, alkaloid, flavan-3-ol.

1. MỞ ĐẦU

Su ổi (tên gọi khác là xu ổi, đấng dinh, xương cá) có tên khoa học là *Xylocarpus granatum* thuộc chi su (*Xylocarpus*), họ Xoan (*Meliaceae*). Su ổi là cây thân gỗ cao khoảng 5-12 m, vỏ thân màu đỏ xám, tán lá sum suê, cuống lá dài 15 cm, nang 2-4 lá nhỏ mọc đối, dày tron nhẵn, hình trái xoan, dài 8 - 11cm, rộng 4-5cm. Hoa su ổi màu trắng. Quả hình cầu, đường kính 10-20 cm nứt thành 4 mảnh, có 8-12 hạt. Hạt không có áo và phôi nhũ. Su ổi ra hoa khoảng tháng 10-11, ra quả vào khoảng tháng 6-7 [1]. Su ổi phân bố ở các khu vực Đông Nam Á, châu Úc, Đông Phi và Ấn Độ Dương [2]. Ở Việt Nam, cây su ổi mọc ở rừng ngập mặn ven biển Bắc bộ và Nam bộ trên đất bồi phù sa hay phù sa cát sau khi đã được các loài cây tiên phong cố định, ít ngập,

thủy triều; chúng cũng sống được ở vùng nước lợ, khả năng đâm chồi mạnh. Gỗ su ổi màu hồng hay nâu xám, nặng, không có vân, bền ít bị mối mọt nên thường được dùng làm cột nhà, trụ mỏ. Vỏ chứa hàm lượng tanin cao được dùng để nhuộm và thuộc da, hạt chứa nhiều dầu [1]. Hơn nữa, vỏ cây còn được sử dụng để chữa bệnh kiết lỵ, tiêu chảy; bột tro hạt su ổi trộn với lưu huỳnh và dầu dừa như thuốc mỡ trị ngứa; quả được dùng làm thuốc chữa bệnh sung vú và phù chân voi [3]. Thành phần hóa học của su ổi gồm có triterpenoid, limonoid, alkaloid, phenolic, steroid, monoterpene và một số hợp chất khác với các hoạt tính sinh học như hoạt tính gây độc tế bào, hoạt tính kháng khuẩn, hoạt tính chống sốt rét, chống nhiễm sắc tố [4,5, 6]. Cho đến nay đã có một số nghiên cứu trên thế giới, tuy nhiên ở Việt

Nam chưa có công bố nào về loài cây su ối. Trong nghiên cứu này, chúng tôi trình bày kết quả phân lập và xác định cấu trúc hóa học của 1 limonoid, 1 alkaloid và 1 flavanol có trong cao chiết ethyl acetate của quả su ối (*Xylocarpus granatum*) được thu hái ở Vũng Tàu.

2. THỰC NGHIỆM

2.1. Nguyên liệu

Quả su ối (*Xylocarpus granatum*) được thu hái ở Vũng Tàu vào tháng 08 năm 2019, mẫu được định danh bởi TS. Nguyễn Quốc Bình, Bảo tàng Thiên nhiên Việt Nam - Viện Hàn lâm Khoa học và Công nghệ Việt Nam. Tiêu bản (kí hiệu XG-082019) hiện đang được bảo quản và lưu giữ tại Viện Công nghệ Hóa, Sinh và Môi trường - Trường Đại học Vinh.

2.2. Thiết bị

Sắc ký cột sử dụng silicagel pha thường (cỡ hạt 63-200 μm , Merck), pha đảo RP-18 (30-50 μm , FujiSilisa Chemical Ltd.). Sắc ký lớp mỏng được tiến hành trên bản mỏng silica gel Merck 60 F₂₅₄ trắng sẵn; hiện màu bằng hơi iot và đèn UV bước sóng 254 nm. Sắc ký lỏng điều chế được thực hiện trên máy Agilent PrepStar-218 sử dụng cột Zorbax SB-C18 (5 μm , 9.4 $\times$ 250 mm) và detector DAD. Phổ khối lượng ion hóa tia điện ESI-MS đo trên máy Agilent LC/MS-6420. Phổ cộng hưởng từ hạt nhân NMR được đo trên máy cộng hưởng từ hạt nhân 500 MHz (Bruker AM500 FT-NMR).

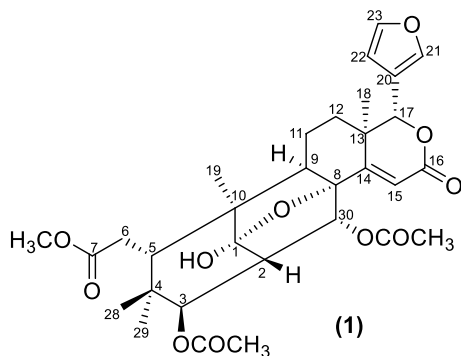
2.3. Phân lập các hợp chất

Quả su ối (*Xylocarpus granatum*) được sấy khô, nghiền nhỏ thu được dạng bột có khối lượng 15 kg. Bột nguyên liệu được ngâm chiết siêu âm với methanol ở nhiệt độ 45°C (15L $\times$ 3 lần). Dịch chiết được lọc và sau đó loại bỏ dung môi bằng máy cô quay chân không dưới áp suất giảm thu được 742 g cao tổng methanol. Phân bố cao methanol vào nước cất và chiết lần lượt với các dung môi: *n*-hexane, ethyl acetate và butanol. Tiến hành lọc và cô đặc các dịch chiết thu được các cao chiết tương ứng là cao *n*-hexane (95,7 g), cao ethyl acetate (355,8 g) và cao butanol (148,8 g). Cao ethyl acetate được phân tách bằng sắc ký cột với pha tĩnh là silicagel pha thường (63-200 μm ,

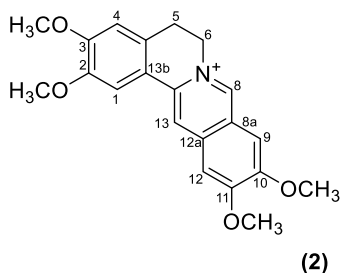
Merck), pha động là hỗn hợp dung môi có độ phân cực tăng dần $\text{CH}_2\text{Cl}_2\text{:MeOH}$ (tỉ lệ về thể tích từ 100:1 đến 1:1) thu được 7 phân đoạn chính (E1-E7). Phân đoạn E2 (14,9 g) được phân tách bằng sắc ký cột (silicagel pha thường, cỡ hạt 63-200 μm , Merck), hệ dung môi rửa giải là *n*-hexane:acetone (tỉ lệ 18:1 đến 3:1, 1:1) thu được 5 phân đoạn nhỏ (E2.1-E2.5). Tinh chế phân đoạn E2.3 (2,4 g) bằng sắc ký cột được nhờ gel pha đảo RP-18, rửa giải bằng MeOH: H_2O (3:2, 2:1) thu được hợp chất 2 (12,4 mg). Phân đoạn E3 (20,2 g) được phân tách bằng sắc ký cột, pha tĩnh là silica gel pha thường, pha động sử dụng hỗn hợp *n*-hexane:ethyl acetate (tỉ lệ 20:1 đến 5:1, 3:1, 1:1), sau đó tiếp tục rửa giải bằng $\text{CHCl}_3\text{:MeOH}$ (20:1 đến 3:1, 1:1) thu được hợp chất 3 (14,7 mg). Phân đoạn E5 (45,1 g) được tiến hành sắc ký cột với hệ dung môi rửa giải hỗn hợp *n*-hexane:acetone (tỉ lệ 12:1 đến 1:1) thu được 7 phân đoạn nhỏ (E5.1-E5.7). Phân đoạn nhỏ E5.5 (7,8 g) tiếp tục được tiến hành sắc ký cột với pha tĩnh là silicagel thường, hệ dung môi rửa giải là hỗn hợp $\text{CHCl}_3\text{:MeOH}$ (tỉ lệ 10:1; 8:1; 4:1) thu được 5 phân đoạn (E5.5.1-E5.5.5). Phân đoạn E5.5.4 kiểm tra bằng sắc ký lớp mỏng TLC thấy có một cặp chất chính. Tiến hành phân tách bằng máy sắc ký lỏng điều chế (pha động là hỗn hợp acetonitrile: H_2O , tỉ lệ 44:56) thu được hợp chất 1 (6,3 mg).

Xylocarpin F (1): Chất bột màu trắng; ESI-MS m/z : 609.2 $[\text{M}+\text{Na}]^+$; ^1H -NMR (500 MHz, CDCl_3) δ_{H} (ppm): 7.48 (1H, s, H-21), 7.41 (1H, s, H-23), 6.41 (1H, s, H-22), 6.05 (1H, s, H-15), 5.59 (1H, d, $J = 4.5$ Hz, H-30), 5.01 (1H, d, $J = 9.5$ Hz, H-3), 4.97 (1H, s, H-17), 3.69 (3H, s, 7-OCH₃), 2.92 (1H, dd, $J = 9.5$, 4.5 Hz, H-2), 2.63 (1H, dd, $J = 10.0$, 1.5 Hz, H-5), 2.38 (1H, m, H-11), 2.36 (2H, dd, $J = 16.0$, 10.0 Hz, H-6), 2.15 (1H, m, H-9), 2.13 (1H, m, H-12), 2.00 (3H, s, 30-OCOCH₃), 1.99 (3H, s, 3-OCOCH₃), 1.80 (1H, m, H-11), 1.40 (1H, dd, $J = 13.0$, 8.0 Hz, H-12), 1.24 (3H, s, H-29), 1.22 (3H, s, H-18), 1.06 (3H, s, H-19), 0.80 (3H, s, H-28); ^{13}C -NMR (125 MHz, CDCl_3) δ_{C} (ppm): 173.9 (C-7), 170.3 (30-

OCOCH₃), 170.0 (3-OCOCH₃), 163.7 (C-16), 160.0 (C-14), 142.9 (C-23), 141.3 (C-21), 120.0 (C-20), 117.5 (C-15), 109.9 (C-22), 107.5 (C-1), 81.6 (C-17), 81.3 (C-8), 76.5 (C-30), 74.2 (C-3), 53.2 (C-2), 52.0 (7-OCH₃), 51.5 (C-9), 42.9 (C-10), 40.6 (C-5), 39.0 (C-13), 37.3 (C-4), 32.1 (C-6), 25.1 (C-12), 24.5 (C-28), 21.8 (C-29), 21.1 (30-OCOCH₃), 20.7 (3-OCOCH₃), 20.6 (C-19), 19.4 (C-18), 15.0 (C-11).

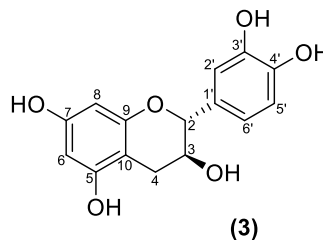


Pseudopalmitine (2): Chất bột màu vàng; ESI-MS m/z : 352.1 [M]⁺; ¹H-NMR (500 MHz, DMSO-*d*₆) δ_H (ppm): 9.52 (1H, s, H-8), 8.83 (1H, s, H-13), 7.71 (1H, s, H-9), 7.67 (1H, s, H-1), 7.60 (1H, s, H-12), 7.10 (1H, s, H-4), 4.79 (2H, *t*, J = 6.0 Hz, H-6), 4.08 (3H, s, 11-OCH₃), 4.01 (3H, s, 10-OCH₃), 3.94 (3H, s, 2-OCH₃), 3.88 (3H, s, 3-OCH₃), 3.22 (2H, *t*, J = 6.0 Hz, H-5); ¹³C-NMR (125 MHz, DMSO-*d*₆) δ_C (ppm): 157.4 (C-11), 152.2 (C-10), 151.5 (C-3), 148.7 (C-2), 145.5 (C-8), 138.4 (C-13a), 136.6 (C-12a), 128.6 (C-4a), 122.0 (C-8a), 118.9 (C-13b), 117.9 (C-13), 111.4 (C-4), 108.6 (C-1), 106.5 (C-9), 105.3 (C-12), 56.6 (11-OCH₃), 56.3 (2-OCH₃), 56.0 (3-OCH₃), 55.8 (10-OCH₃), 54.7 (C-6), 26.0 (C-5).



Catechin (3): Chất bột màu vàng nhạt; ESI-MS m/z : 289.2 [M-H]⁻; ¹H-NMR (500 MHz, DMSO-*d*₆) δ_H (ppm): 9.16 (1H, s, 5-OH), 8.92

(1H, s, 7-OH), 8.83 (1H, s, 3'-OH), 8.79 (1H, s, 4'-OH), 6.71 (1H, *d*, J = 2.0, H-2'), 6.68 (1H, *d*, J = 8.5 Hz, H-5'), 6.59 (1H, *dd*, J = 8.0, 2.0 Hz, H-6'), 5.88 (1H, *d*, J = 2.5 Hz, H-6), 5.69 (1H, *d*, J = 2.0 Hz, H-8), 4.85 (1H, *d*, J = 5.0 Hz, 3-OH), 4.47 (1H, *d*, J = 7.5 Hz, H-2), 3.81 (1H, *m*, H-3), 2.65 (1H, *dd*, J = 16.0, 5.5 Hz, H-4a), 2.35 (1H, *dd*, J = 16.0, 8.0 Hz, H-4b); ¹³C-NMR (125 MHz, DMSO-*d*₆) δ_C (ppm): 156.4 (C-7), 156.2 (C-5), 155.3 (C-9), 144.8 (C-3'/4'), 130.6 (C-1'), 118.4 (C-6'), 115.1 (C-5'), 114.5 (C-2'), 99.1 (C-10), 95.1 (C-6), 93.8 (C-8), 81.0 (C-2), 66.3 (C-3), 27.8 (C-4).

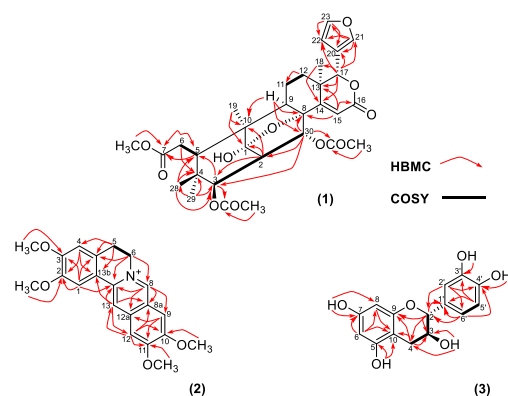


3. KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

Hợp chất **1** thu được ở dạng chất bột màu trắng. Phổ khối lượng ESI-MS (positive) của **1** cho pic ion m/z 609.2 [M+Na]⁺ phù hợp với công thức phân tử là C₃₁H₃₈O₁₁ (suy ra độ bất bão hòa bằng 13). Phân tích dữ liệu phổ ¹H-NMR của hợp chất **1** cho thấy sự xuất hiện của 4 nhóm methyl bậc ba ở vùng trường cao tại δ_H 1.24 (3H, s, CH₃-29), 1.22 (3H, s, CH₃-18), 1.06 (3H, s, CH₃-19), 0.80 (3H, s, CH₃-28); 2 nhóm methyl acetyl tại δ_H 2.00 (3H, s, 30-OCOCH₃) và 1.99 (3H, s, 3-OCOCH₃); 1 nhóm methoxy tại δ_H 3.69 (3H, s, 7-OCH₃) và 3 proton oxymethine tại δ_H 5.59 (1H, *d*, J = 4.5 Hz, H-30), 5.01 (1H, *d*, J = 9.5 Hz, H-3), 4.97 (1H, s, H-17). Ở vùng trường thấp, các proton đặc trưng của vòng furan thể một vị trí xuất hiện tại δ_H 7.48 (1H, s, H-21), 7.41 (1H, s, H-23), 6.41 (1H, s, H-22). Phân tích đồng thời dữ liệu phổ ¹³C-NMR và phổ DEPT cho thấy sự có mặt của 31 nguyên tử cacbon, bao gồm 4 cacbon thuộc nhóm -COO [δ_C 173.9 (C-7), δ_C 170.3 (30-OCOCH₃), δ_C 170.0 (3-OCOCH₃) và δ_C 163.7 (C-16)], 4 cacbon đặc trưng của vòng

furan [δ_C 120.0 (C-20), δ_C 141.3 (C-21), δ_C 109.9 (C-22) và δ_C 142.9 (C-23)], 2 cacbon C=C [δ_C 160.0 (C-14), δ_C 117.5 (C-15)], 3 cacbon nhóm $-\text{OCH}_3$ [δ_C 52.0 (7- OCH_3), δ_C 21.1 (30- OCOCH_3) và δ_C 20.7 (3- OCOCH_3)], ngoài ra còn có sự hiện diện của 5 cacbon lai hoá sp^3 liên kết trực tiếp với Oxi [δ_C 107.5 (C-1), δ_C 81.6 (C-17), δ_C 81.3 (C-8), δ_C 76.5 (C-30) và δ_C 74.2 (C-3)], trong đó C-1 dịch chuyển mạnh về vùng trường thấp do liên kết trực tiếp với 2 nguyên tử Oxi]; cùng với các tín hiệu cacbon no khác. Dựa vào các số liệu đã phân tích ở trên, nhận thấy hợp chất **1** là một limonoid loại khung mexicanolide. Phân tích phổ hai chiều HSQC nhận thấy các tương tác giữa các nguyên tử hydro và cacbon liên kết trực tiếp với nhau, điển hình như tương tác giữa H-21 (δ_H 7.48) với C-21 (δ_C 141.3), giữa H-22 (δ_H 6.41) với C-22 (δ_C 109.9), giữa H-23 (δ_H 7.41) với C-23 (δ_C 142.9), giữa H-15 (δ_H 6.05) với C-15 (δ_C 117.5). Phân tích phổ HMBC của hợp chất **1**, tín hiệu tại δ_H 4.97 (1H, s) được gán cho proton oximetin H-17 thông qua tương tác giữa H-17 (δ_H 4.79) với các nguyên tử cacbon trong vòng furan δ_C 142.9/C-23, 141.3/C-21, 109.9/C-22 cũng như tương tác giữa H-17 (δ_H 4.79) với cacbon thuộc nhóm carbonyl lactone liên hợp C-16 (δ_C 163.7). Ngoài ra, vòng lactone không bão hòa cũng được làm sáng tỏ thông qua tương tác giữa proton olefin H-15 (δ_H 6.05) với C-16 (δ_C 163.7) và C-8 (δ_C 81.2). Vị trí của hai nhóm $-\text{OCOCH}_3$ gắn ở C-3 và C-30 cũng được chứng minh thông qua các tương tác giữa H-3 (δ_H 5.01) với 3- OCOCH_3 (δ_C 170.0), giữa H-30 (δ_H 5.59) với 30- OCOCH_3 (δ_C 170.3). Nguyên tử cacbon không liên kết với hydro tại δ_C 107.5 được gán cho C-1 là một nhóm hemiketal. Từ các kết quả phân tích phổ MS, ^1H -, ^{13}C -NMR, DEPT, HSQC, HMBC, HSQC, COSY và so sánh với tài liệu tham khảo [7], hợp chất **1** được xác định là **xylocarpin F**. Hợp chất này

được Wenhan Lin và cộng sự phân lập lần đầu tiên từ quả của loài *X. granatum* thu hái ở đảo Hải Nam, Trung Quốc [7].



Hình 1. Các tương tác HMBC và COSY trong các hợp chất 1 – 3

Hợp chất **2** thu được ở dạng chất bột màu vàng. Phổ khối lượng ESI-MS (positive) của hợp chất **3** cho peak ion m/z 352.1 $[\text{M}]^+$ phù hợp với công thức phân tử của hợp chất **2** là $\text{C}_{21}\text{H}_{22}\text{NO}_4$. Phân tích phổ ^1H -NMR của hợp chất **2** nhận thấy ở vùng trường thấp có sự hiện diện của 6 tín hiệu singlet tương ứng với 6 proton thơm tại δ_H (ppm): 9.52 (H-8), 8.83 (H-13), 7.71 (H-9), 7.67 (H-1), 7.60 (H-12) và 7.10 (H-4), 2 tín hiệu triplet của 2 nhóm methylene dịch chuyển về vùng trường thấp [δ_H 4.79 (2H, t, J = 6.0 Hz, H-6) và δ_H 3.22 (2H, t, J = 6.0 Hz, H-5)] và có cùng giá trị hằng số ghép (J) gợi ý sự có mặt của nhóm $-\text{CH}_2-\text{CH}_2-$ trong cấu trúc phân tử. Ở vùng δ_H 3.80-4.10 ppm quan sát được sự xuất hiện của 4 nhóm methoxy lần lượt tại δ_H 4.08 (11- OCH_3), 4.01 (10- OCH_3), 3.94 (2- OCH_3) và 3.88 (3- OCH_3). Phân tích phổ ^{13}C -NMR, DEPT, HSQC của hợp chất **2** chỉ ra tín hiệu cộng hưởng của 21 nguyên tử cacbon, trong đó có 4 cacbon thơm liên kết trực tiếp với oxy gồm C-11 (δ_C 157.4), C-10 (δ_C 152.2), C-3 (δ_C 151.5) và C-2 (δ_C 148.7), 6 cacbon metin thơm gồm C-8 (δ_C 145.5), C-13 (δ_C 117.9), C-4 (δ_C 111.4), C-1 (δ_C 108.6), C-9 (δ_C 106.5) và C-12

(δ_C 105.3), 5 cacbon thơm không liên kết với hidro gồm C-13a (δ_C 138.4), C-12a (δ_C 136.6), C-4a (δ_C 128.6), C-8a (δ_C 122.0) và C-13b (δ_C 118.9), 4 nhóm methoxy gồm 11-OCH₃ (δ_C 56.6), 2-OCH₃ (δ_C 56.3), 3-OCH₃ (δ_C 56.0) và 10-OCH₃ (δ_C 55.8) và 2 cacbon metylen gồm C-6 (δ_C 54.7), C-5 (δ_C 26.0). Vị trí của 4 nhóm methoxy cũng được làm sáng tỏ thông qua phân tích tương tác trong phổ HMBC. Các tương tác HMBC giữa H-1 (δ_H 7.67)/H-4 (δ_H 7.10)/ 2-OCH₃ (δ_H 3.94) và C-2 (δ_C 148.7) chứng minh sự có mặt của 1 nhóm methoxy gắn vị trí C-2. Tương tác giữa H-1 (δ_H 7.67)/H-4 (δ_H 7.10)/ 3-OCH₃ (δ_H 3.88) và C-3 (δ_C 151.5) chứng tỏ có 1 nhóm methoxyl gắn vị trí C-3. Phân tích tương tự, nhận thấy các tương tác giữa H-9 (δ_H 7.71)/H-12 (δ_H 7.60)/10-OCH₃ (δ_H 4.01) và C-10 (δ_C 152.2), tương tác giữa H-9 (δ_H 7.71)/H-12 (δ_H 7.60)/ 11-OCH₃ (δ_H 4.08) và C-11 (δ_C 157.4) giúp khẳng định vị trí 2 nhóm methoxyl còn lại lần lượt gắn vào C-10 và C-11. Từ các phân tích ở trên, cho phép dự đoán hợp chất **2** là 1 alkaloid kiểu khung protoberberin. Từ các dữ kiện phân tích phổ kết hợp với đối chiếu với tài liệu tham khảo [9], hợp chất **2** được xác định là pseudopalmitine. Hợp chất này cho thấy khả năng kháng ký sinh trùng sốt rét [9].

Hợp chất **3** được phân lập dưới dạng chất bột màu vàng nhạt. Phổ khối lượng ESI-MS (negative) nhận thấy peak ion $[M-H]^-$ ở m/z 289.2 phù hợp với công thức phân tử hợp chất **3** là C₁₅H₁₄O₆. Phổ ¹H-NMR của **3** cho thấy tín hiệu của 1 vòng benzen bị thế 3 vị trí [δ_H 6.71 (1H, *d*, *J* = 2.0 Hz, H-2'), δ_H 6.68 (1H, *d*, *J* = 8.5 Hz, H-5'), δ_H 6.59 (1H, *dd*, *J* = 8.0, 2.0 Hz, H-6')], tín hiệu của 1 vòng benzen bị thế 4 vị trí [δ_H 5.88 (1H, *d*, *J* = 2.5 Hz, H-6), δ_H 5.69 (1H, *d*, *J* = 2.0 Hz, H-8)], tín hiệu của 2 nhóm oximetin [δ_H 4.47 (1H, *d*, *J* = 7.5 Hz, H-2), δ_H

3.81 (1H, *m*, H-3)] và tín hiệu của 1 nhóm metylen ở vùng trường cao [δ_H 2.65 (1H, *dd*, *J* = 16.0, 5.5 Hz, H-4), δ_H 2.35 (1H, *dd*, *J* = 16.0, 8.0 Hz, H-4)]. Ở vùng trường thấp, 4 tín hiệu singlet được quy kết cho 4 nhóm hydroxyl [δ_H 9.16 (1H, *s*, 5-OH), δ_H 8.92 (1H, *s*, 7-OH), δ_H 8.83 (1H, *s*, 3'-OH), δ_H 8.79 (1H, *s*, 4'-OH)] do không tìm thấy tương tác trong phổ HSQC. Phổ ¹³C-NMR, DEPT cho thấy sự xuất hiện của 15 nguyên tử cacbon, bao gồm 1 nhóm metylen, 7 nhóm metin và 7 nguyên tử cacbon không liên kết trực tiếp với hydro. Phân tích phổ HMBC, tương tác giữa 5-OH (δ_H 9.16) và C-5 (δ_C 156.2), tương tác giữa 7-OH (δ_H 8.92) và C-7 (δ_C 156.4), tương tác giữa 3'-OH (δ_H 8.83)/4'-OH (δ_H 8.79) và C-3' (δ_C 144.8)/C-4' (δ_C 144.8) đã chỉ ra vị trí của 4 nhóm hydroxy gắn vào vị trí 5, 7, 3' và 4'. Tất cả các dữ liệu phổ đều chỉ ra rằng hợp chất **3** có khung flavan-3-ol. Đối chiếu với tài liệu tham khảo [10] kết luận hợp chất **3** là catechin. Hợp chất này có hoạt tính chống ung thư, chống béo phì, kháng viêm, chống oxy hóa [11].

4. KẾT LUẬN

Từ cao chiết ethyl acetate của quả su ôi (*Xylocarpus granatum*) thu hái ở Vũng Tàu, bằng các phương pháp sắc ký kết hợp với các phương pháp phổ, 3 hợp chất gồm xylocarpin **1**, pseudopalmitine (**2**) và catechin (**3**) đã được phân lập và xác định cấu trúc. Đây là nghiên cứu đầu tiên xác định thành phần hóa học của loài *Xylocarpus granatum* thu hái ở Việt Nam.

Lời cảm ơn: Các tác giả xin chân thành cảm ơn Bộ Giáo dục và Đào tạo đã tài trợ kinh phí cho đề tài này, mã số đề tài B2021-TDV-07.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. T. Hợp, N. B. Quỳnh. Cây gỗ kinh tế ở Việt Nam, Nhà xuất bản Nông nghiệp, 1993, 523.

2. Z. F. Zhou, T. Kurtán, A. Mándi, Y. C. Gu, L. G. Yao, G. R. Xin, X. W. Li, Y. W. Guo., 2016, Novel and neuroprotective tetranortriterpenoids from Chinese mangrove *Xylocarpus granatum* Koenig, *Sci. Rep.*, 6, 33908.
3. A. Ghani, 1998, Medicinal plant of Bangladesh with chemical constituents and uses, *Asiat. Soc. Bangladesh*, 2, 431-432.
4. L. R. Shen, D. Guo, Y. M. Yu, B. W. Yin, L. Zhao, Q. W. Shi, Y. L. Wang, C. H. Huo., 2009, Chemical constituents of plants from the Genus *Xylocarpus*, *Chem. Biodivers.*, 6, 1293-1308.
5. V. Lakshmi, N. Singh, S. Shrivastva, S. K. Mishra, P. Dharmani, V. Mishra, G. Palit, 2010, Gedunin and photogedunin of *Xylocarpus granatum* show significant anti-secretory effects and protect the gastric mucosa of peptic ulcer in rats, *Phytomedicine*, 17, 569-574.
6. S. Yin, X. N. Wang, C. Q. Fan, L. P. Lin, J. Ding, J. M. Yue, 2007, Limonoids from the seeds of the marine mangrove *Xylocarpus granatum*, *J. Nat. Prod.*, 70, 682-685.
7. J. Cui, J. Wu, Z. Deng, P. Proksch, W. Lin, 2007, Xylocarpins A-I limonoids from the Chinese mangrove plant *Xylocarpus granatum*, *J. Nat. Prod.*, 70, 772-778.
8. J. Wu, Z. Xiao, Y. Song, S. Zhang, Q. Xiao, C. Ma, H. Ding, Q. Li, 2006, Complete assignments of (1)H and (13)C NMR data for two 3 β ,8 β -epoxymexicanolides from the fruit of a Chinese mangrove *Xylocarpus granatum*, *Magn. Reson. Chem.*, 44, 87-89.
9. B. Baghdikian, V. M. Leddet, S. Bory, S. S. Bun, Au. Dumetre, F. Mabrouki, S. Hutter, N. Azas, E. Ollivier, 2013, New antiplasmodial alkaloids from *Stephania rotunda*, *J. Ethnopharmacol.*, 145, 381-385.
10. Y. Tang, R. Xiong, A. G. Wu, C. L. Yu, Y. Zhao, W. Q. Qiu, X. L. Wang, J. F. Teng, J. Liu, H. X. Chen, J. M. Wu, D. L. Qin, 2018, Polyphenols derived from Lychee Seed Suppress A β (1-42)-Induced Neuroinflammation, *Int. J. Mol. Sci.*, 19, 2109.
11. E. Nakano, D. Kamei, R. Murase, I. Taki, K. Karasawa, K. Fukuhara, S. Iwai, 2019, Anti-inflammatory effects of new catechin derivatives in a hapten-induced mouse contact dermatitis model, *Eur. J. Pharmacol.*, 845, 40-47.

Liên hệ: **Trần Đình Thắng**

Viện Công nghệ sinh học và thực phẩm, Đại học Công nghiệp TP Hồ Chí Minh

Email: thangtd@iu.edu.vn

Điện thoại: 0913049689