

# THÀNH PHẦN HÓA HỌC LÁ CÂY VÚ SỮA HỌ HỒNG XIÊM

**Hồ Đắc Hùng\***, **Đỗ Trung Sỹ\***, **Nguyễn Thị Diệp\***, **Phạm Quỳnh Trang\***,  
**Hoàng Thị Phương\***, **Trần Hữu Huy\***, **Hà Thị Hải Yến\***, **Bùi Kim Anh\*\***  
**Email: anhvhh@gmail.com**

Ngày tòa soạn nhận được bài báo: 28/2/2024

Ngày phản biện đánh giá: 15/10/2024

Ngày bài báo được duyệt đăng: 28/10/2024

DOI: 10.59266/houjs.2024.467

**Tóm tắt:** Cây vú sữa có tên khoa học là *Chrysophyllum cainito* L., thuộc họ Hồng xiêm (Sapotaceae). Là loài cây gỗ lớn phát triển chủ yếu ở vùng nhiệt đới. Mặc dù loài *C. cainito* được trồng trên toàn thế giới chủ yếu để lấy quả chứa nhiều chất dinh dưỡng như protein, carbohydrate, vitamin, phenolic và axit amin, chiết xuất từ lá, vỏ thân, quả, cùi hoặc hạt của *C. cainito* đã được sử dụng như một loại thuốc truyền thống trong một thời gian dài, và gần đây một số chức năng sinh học của chiết xuất này đã được khám phá và chứng minh. Nhiều hoạt tính dược lý của loài *C. cainito* được tìm thấy như chống oxy hóa, kháng viêm, trị đau thần kinh, chống ung thư, hạ huyết áp, thúc đẩy quá trình lành vết thương và phân chia tế bào xương đốt sống. Do có thành phần dược liệu phong phú nên lá, quả và vỏ cây được sử dụng làm nhiều loại thuốc thảo dược với nhiều mục đích khác nhau. Nghiên cứu này nhằm mục đích mô tả các thành phần hóa học thực vật có trong dịch chiết lá của *Chrysophyllum cainito* bằng phương pháp sắc ký và quang phổ. Bảy hợp chất: *N-p-trans - coumaroyltyramin* (1); *lupeol* (2); *5-hydroxy-4',7-dimethoxy flavon* (3); *quercetin* (4); *catechin* (5);  $\beta$ -*sitosterol* (6) và *daucosterol* (7) được phân lập từ phần dịch chiết lá của *Chrysophyllum cainito*. Cấu trúc của chúng được làm sáng tỏ trên cơ sở phân tích quang phổ và so sánh với các hợp chất liên quan đã biết. Hợp chất *N-p-trans - coumaroyltyramin* (1) lần đầu tiên được tách ra từ lá cây vú sữa.

**Từ khóa:** cây Vú sữa, họ Hồng xiêm, *N-p-trans - coumaroyltyramin*, *lupeol*, *5-hydroxy-3,7-dimethoxy flavon*, *quercetin*, *catechin*.

## I. Đặt vấn đề:

Loài *Chrysophyllum cainito* L. (Sapotaceae) (cây Vú sữa) là loại cây gỗ lớn, thân dẻo, tán lá rộng, chiều cao lên tới 10 - 15 mét. Các loài *Chrysophyllum* phân

bổ rộng khắp các vùng nhiệt đới như Mexico, Argentina, Peru, Ấn Độ, Trung Quốc, Malaysia, Việt Nam, và các quốc gia khác có độ cao từ thấp đến trung bình [1]. Theo y học cổ truyền, chiết xuất từ

\* Viện Hóa Học, Viện Hàn lâm Khoa học và Công nghệ Việt Nam

† Tác giả liên hệ

lá, vỏ thân, quả, vỏ, cùi hoặc hạt của *C.cainito* đã được sử dụng như một loại thuốc dân gian. Quả Vú sữa được dùng làm thức ăn bổ, tráng miệng, rễ và lá có tác dụng làm tan máu ú, hoạt huyết, tiêu sưng và giảm đau. Người ta cũng dùng lá sắc lấy nước uống chữa bệnh đau dạ dày, đái tháo đường. Một số nghiên cứu trên thế giới đã minh chứng về các hoạt tính dược lý từ các phần dịch chiết từ quả, lá và vỏ thân loài cây này như kháng khuẩn [2], chống oxy hóa và chữa lành vết thương [3], hạ huyết áp, chống viêm [4], trị đái tháo đường [5,6] và chống ung thư [7]. Các nghiên cứu trên thế giới trước đây đã phân lập và phát hiện một số hợp chất phenol, alkaloid, flavonoid, steroid, saponin, tannin và glycosid tìm trên các bộ phận quả, lá, vỏ cây Vú sữa [2, 3, 4, 8], song nghiên cứu hóa thực vật ở Việt Nam về loài Vú sữa chưa có nhiều. Bài báo này trình bày việc phân lập và xác định cấu trúc hóa học của 7 hợp chất từ lá cây Vú sữa thu hái tại Long Khánh, Đồng Nai, Việt Nam.

## II. Nguyên liệu và phương pháp nghiên cứu

### 2.1. Nguyên liệu

Lá cây Vú sữa *Chrysophyllum cainito* L. được thu hái vào tháng 2/2023 tại Long Khánh, Đồng Nai - Việt Nam. Tên cây được nhà thực vật học Nguyễn Kim Đào (Viện Sinh thái và tài nguyên sinh vật) định tên, tiêu bản được lưu giữ tại phòng Công nghệ Y sinh và Môi trường, Viện Hóa học, Viện Hàn lâm KH & CN VN

### 2.2. Hoá chất và thiết bị

Sử dụng dung môi hữu cơ tinh khiết phân tích hoặc kỹ thuật được cất lại. Sắc ký lớp mỏng phân tích (TLC) được thực hiện

trên bản mỏng silica gel Merck 60 F<sub>254</sub>, các vết chất được phát hiện bằng đèn tử ngoại ở hai bước sóng 254 và 365 nm hoặc dùng thuốc thử là dung dịch 5% vanilin/H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> phun đều lên bản mỏng rồi sấy ở nhiệt độ cao cho đến khi hiện màu. Sắc ký cột (CC) dùng chất hấp phụ silica gel Merck, cỡ hạt 40-63 µm và 63-200µm, Sephadex LH-20 (GE Healthcare) và silica gel pha đảo C18 (RP-18, Merck, 15-25 µm).

Phổ khối (ESI-MS) được ghi bằng thiết bị AGILENT 1100 LC-MSD. Điểm nóng chảy được đo trên Mikroskopheiztisch CHLB Đức. Phổ cộng hưởng từ hạt nhân NMR được ghi trên máy quang phổ Bruker Avance 500 MHz (Đức). Độ chuyển dịch hóa học δ (ppm) hằng số (*J*) được tính bằng Hertz (Hz) với tetramethylsilane (TMS) làm chất nội chuẩn.

### 2.3. Phương pháp nghiên cứu

Sử dụng các phương pháp sắc ký cột thường, sắc ký cột nhanh, cột pha đảo và sắc ký lọc gel Sephadex LH-20 để phân lập các hợp chất. Độ sạch các hợp chất được kiểm tra bằng sắc ký lớp mỏng TLC.

Cấu trúc của các hợp chất được xác định bằng sự kết hợp của các dữ kiện thu được từ các phương pháp phổ khối (ESI-MS, HR-ESI-MS), phổ cộng hưởng từ hạt nhân NMR một chiều (<sup>1</sup>H-NMR, <sup>13</sup>C-NMR và DEPT) và 2 chiều (COSY, HSQC, HMBC và NOESY).

### 2.4. Chiết xuất, phân lập và tinh chế các hợp chất

Lá cây Vú sữa *Chrysophyllum cainito* L. được làm sạch, phơi, sấy khô và xay nghiền (1.95 kg). Bột lá được ngâm chiết bằng dung môi metanol ở nhiệt độ

40-45°C trong 6h và lặp lại 5 lần. Gom các dịch chiết methanol, lọc và cất cô đặc dưới áp suất thấp ở nhiệt độ 50 - 55°C đến khi hết dung môi metanol thu được cặn dịch chiết tổng. Cặn dịch chiết tổng được bổ sung thêm nước sau đó chiết lỏng lỏng lần lượt với các loại dung môi khác nhau có độ phân cực tăng dần như *n*-hexan, ethyl axetat và *n*-butanol. Mỗi dung môi được chiết lặp lại 4 lần, thu các dịch chiết của mỗi dung môi và cất cô đặc ở 50°C dưới áp suất thấp để thu được các cặn chiết tương ứng như cặn chiết *n*-hexan (46 g), EtOAc (72g) và BuOH (58 g).

Cặn dịch chiết *n*-hexan (30g) được tách phân đoạn bằng sắc ký cột silica gel, dung môi giải hấp *n*-hexan/acetone (98:2-5:5), thu được 5 phân đoạn (kí hiệu từ F1.1 - F 1.5); phân đoạn F1.2 được tiếp tục sử dụng sắc ký cột nhanh, chất hấp phụ silica gel cỡ hạt 0,015-0,043  $\mu\text{m}$ , với hệ dung môi rửa giải *n*-hexan/acetone (20/2, v/v) và kết tinh phân đoạn thu được hợp chất **2** (11mg) và chất **3** (7mg). Phân đoạn F1.3 xuất hiện tinh thể hình kim, gạn dịch, rửa lại trong hỗn hợp acetone/*n*-hexan thu được chất **6** (16mg). Phân đoạn F1.4 thu được chất rắn, tinh chế lại bằng hỗn hợp dung môi  $\text{CH}_2\text{Cl}_2/\text{MeOH}$  thu được 18mg hợp chất **7**.

Cặn dịch chiết ethyl axetat (45g) được tách phân đoạn bằng sắc ký cột VLC (Vacuum Liquid Chromatography), chất hấp phụ silica gel cỡ hạt 0,04-0,063  $\mu\text{m}$ , dung môi giải hấp *n*-hexan/ethylacetat (9:1-1:9) và  $\text{CHCl}_3/\text{MeOH}$  (từ 10:0 - 0:50, v/v) thu 10 phân đoạn (kí hiệu từ F2.1- F2.10). Phân đoạn F2.3 được phân tách tiếp bằng cột sephadex LH-20 dung môi rửa giải là MeOH thu được hợp chất **4** (15mg). Phân đoạn F2.4 được tiếp tục sử dụng sắc ký

cột nhanh, chất hấp phụ silica gel cỡ hạt 0,015-0,043  $\mu\text{m}$ , với hệ dung môi rửa giải  $\text{CHCl}_3/\text{MeOH}$  (8:2, v/v) thu được chất rắn màu trắng, kết tinh lại bằng hệ dung môi  $\text{CH}_2\text{Cl}_2/\text{MeOH}$  thu được hợp chất **1**. Phân đoạn F2.5 được phân tách tiếp bằng cột sephadex LH-20 dung môi rửa giải là MeOH thu được hợp chất **5** (10mg).

*N-p-trans-coumaroyltyramin* (1): Chất rắn màu trắng, ESI-MS  $m/z$ : 284  $[\text{M}+\text{H}]^+$  (công thức phân tử  $\text{C}_{17}\text{H}_{17}\text{O}_3\text{N}$ ).  $^1\text{H-NMR}$  ( $\text{CD}_3\text{OD}$ , 500 MHz),  $\delta_{\text{H}}$  (ppm): 7,46 (1H, d, H-3'); 7,41 (2H, d, H-5'/H-9'); 7,07 (2H, d, H-4/H-8); 6,80 (2H, d, H-6'/H-8'); 6,74 (2H, d, H-5/H-7); 6,40 (1H, d, H-2'); 3,48 (1H, t, H-1); 2,77 (1H, t, H -2).  $^{13}\text{C NMR}$  ( $\text{CD}_3\text{OD}$ , 125 MHz)  $\delta$  (ppm) : 162,2 (C-1'); 160,5 (C-7'); 156,9 (C- 6); 141,7 (C-3'); 131,3 (C-4/C-8); 130,5 (C-5'/C-9'), 127,7 (C-4'); 116,7 (C-6'/ C-8'); 118;4 (C-2'); 116;2 (C-5/C-7); 42,5 (C-1); 35,8 (C-2).

Lupeol (2): Chất bột màu trắng, công thức phân tử:  $\text{C}_{30}\text{H}_{50}\text{O}$ , ESI-MS  $m/z$  427  $[\text{M}+\text{H}]^+$ .  $^1\text{H-NMR}$  ( $\text{CDCl}_3$ , 400 MHz):  $\delta$  0,76; 0,79; 0,83; 0,91; 0,94; 1,06; 1,69 (each 3H, s, Me  $\times$  7); 3,20 (1H, dd,  $J = 5.4$ , 10.6 Hz, H-3); 4,56 (1H, s, H-29a); 4,70 (1H, s, H-29b);  $^{13}\text{C NMR}$  ( $\text{CDCl}_3$ ):  $\delta$  151,6 (C-20); 108,6 (C-29); 78,4 (C-3); 55,1 (C-5); 49,7 (C-9); 48,2 (C-18); 47,8 (C-19); 43,2 (C-17); 42,6 (C-14); 41,2 (C-8); 40,2 (C-22); 39,2 (C-13); 38,6 (C-4); 38,0 (C-1); 37,3 (C-10); 35,6 (C-16); 34,1 (C-7); 30,0 (C-21); 28,2 (C-23); 27,6 (C-15); 27,5 (C-12); 25,3 (C-2); 21,1 (C-11); 19,5 (C-30); 18,1 (C-6); 18,0 (C-28); 16,8 (C-25); 16,4 (C-26); 16,0 (C-24); 15,1 (C-27).

5-hydroxy-3,7-dimethoxy flavon (3): Là chất rắn màu trắng, ESI-MS  $m/z$  297

[M+H]<sup>+</sup> (công thức phân tử C<sub>17</sub>H<sub>14</sub>O<sub>5</sub>). <sup>1</sup>H-NMR (CDCl<sub>3</sub>); δ (ppm): 3,87 (3H, s, 4'-OCH<sub>3</sub>); 3,89 (3H, s, 7-OCH<sub>3</sub>); 6,36 (1H, d, J=2,0Hz, H-8); 6,47 (1H, d, J=2,0Hz, H-6); 6,56 (1H, s, H-3); 7,01 (2H, d, J=8,5 Hz; H-3' và H-5'); 7,84 (2H, d, J=8,5 Hz, H-2' và H-6'); 12,80 (1H, s, 5-OH). <sup>13</sup>C-NMR (CDCl<sub>3</sub>) δ (ppm): 55,5 (4'-OCH<sub>3</sub>); 55,7 (7-OCH<sub>3</sub>); 92,6 (C-8); 98,0 (C-6); 104,3 (C-3); 105,5 (C-10); 114,3 (C-3' và C-5'); 123,6 (C-1'); 128,0 (C-2' và C-6'); 157,7 (C-5); 162,2 (C-9); 162,6 (C-2); 164,0 (C-4'); 165,4 (C-7), 182,45 (C-4).

Quercetin (4): Chất bột màu vàng, ESI-MS *m/z* 301 [M-H]<sup>-</sup> (C<sub>15</sub>H<sub>10</sub>O<sub>7</sub>). <sup>1</sup>H-NMR (CD<sub>3</sub>OD, 500MHz), δ (ppm): 7,65 (dd, J = 8,5Hz, H-6'); 7,75 (d, J = 2,0 Hz, H-2'); 6,90 (d, J = 8,5Hz, H-5'); 6,40 (d, J = 2Hz, H-8); 6,20 (d, J = 2Hz, H-6). <sup>13</sup>C-NMR (CD<sub>3</sub>OD, 125 MHz), δ (ppm): 148,0 (C-2); 137,2 (C-3); 177,3 (C-4); 162,4 (C-5); 99,2 (C-6); 165,5 (C-7); 94,4 (C-8); 158,2 (C-9); 104,5 (C-10); 124,1 (C-1'); 116,0 (C-2'); 146,2 (C-3'); 148,7 (C-4'); 116,2 (C-5'); 121,7 (C-6').

(+)-Catechin (5): Chất rắn màu nâu, ESI-MS *m/z* 289 [M-H]<sup>-</sup>, C<sub>15</sub>H<sub>14</sub>O<sub>6</sub>. <sup>1</sup>H-NMR (CDCl<sub>3</sub>&CD<sub>3</sub>OD, 500MHz); δ (ppm): 6,64 (dd, J = 8Hz, 2Hz, H-6'); 6,74 (d, J = 2Hz, H-2'); 6,67 (d, J = 8Hz, H-5'); 5,84 (d, J = 1,5Hz, H-8); 5,81 (d, J = 1,5Hz, H-6); 2,8 (dd, J = 16Hz, 5,5Hz, H-4<sup>b</sup>); 2,4 (dd, J = 16Hz, 8,5Hz, H-4<sup>a</sup>); 3,9 (ddd, J = 8,8 & 5,5Hz, H-3); 4,5 (d, J = 7,5Hz, H-2). <sup>13</sup>C-NMR (CDCl<sub>3</sub>+CD<sub>3</sub>OD, 125 MHz), δ (ppm): 81,2 (C-2); 67,4 (C-3); 27,1 (C-4); 155,6 (C-5); 95,4 (C-6); 155,2 (C-7); 94,5 (C-8); 155,8 (C-9); 99,7 (C-10); 130,2 (C-1'); 114,0 (C-2'); 144,4 (C-3'); 144,6 (C-4'); 115,0 (C-5'); 119,0 (C-6').

Các hợp chất 6 và 7 được xác định là β-sitosterol (6), stigmasterol (7) bằng việc phân tích định tính và so sánh với chất chuẩn.

### III. Kết quả và thảo luận

Chất 1 thu được là chất rắn màu trắng. Phổ <sup>1</sup>H-NMR của chất 1 cho tín hiệu của 14 proton, trong đó tín hiệu đặc trưng cho tương tác *trans* của nối đôi tại δ 7,46 (d, J=16,5 Hz) và δ 6,40 (d, J=16,5 Hz) tương ứng với proton H-3' và H-2', tín hiệu của 4 cặp proton có hằng số tương tác bằng nhau (dd, J=2,5; J-8,5 Hz) tại δ 7,41; 7,07; 6,80 và 6,74 ppm đặc trưng cho hai hệ spin AA'BB' của 2 vòng thơm, tín hiệu proton của 2 nhóm metylen vị trí 1 và 2 tại δ 3,48 (t, J=7,5 Hz) và δ 2,77 (t, J=7,5 Hz). <sup>13</sup>C-NMR của hợp chất cho thấy tín hiệu của 17 nguyên tử cacbon bao gồm 2xCH<sub>2</sub>, 10xCH và 5xC. Tín hiệu đặc trưng của nhóm carbonyl (CO) ở δ 169,2 ppm. Tín hiệu hai cacbon C-7' và C-6 chuyển dịch về phía trường thấp ở δ 160,5 và 159,9 ppm do gắn trực tiếp với nhóm hydroxy, tín hiệu 2 phổ nhóm metylen ở δ 42,5 và δ 35,8 ppm (xem số liệu phổ chi tiết ở trên). Kết hợp thông tin từ <sup>1</sup>H, <sup>13</sup>C -NMR với các tương tác quan sát được trên phổ HMBC, HSQC và COSY có so sánh với tài liệu tham khảo [9, 10] cho phép nhận dạng cấu trúc hợp chất 1 là N-*p-trans*- coumaroyltyramin.

Chất 2 thu được là chất rắn màu trắng. Phổ <sup>1</sup>H NMR cho thấy có tín hiệu của 7 nhóm methyl bậc ba ở vùng từ δ 0,76 - 1,69 ppm và một nhóm hydroxyl ở dạng doublet của doublet ở δ 3,20 ppm. Nó cũng cho thấy hai proton olefinic ở δ 4,56 và 4,68 ppm thể hiện liên kết đôi ngoại vòng như trong hình cấu trúc. <sup>13</sup>C-NMR cho thấy 30 tín hiệu cho terpenoid của khung lupane trong đó

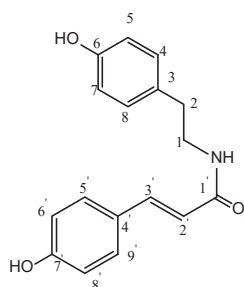
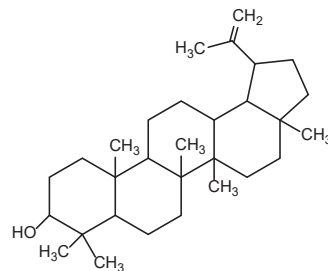
có carbon liên kết với nhóm hydroxyl ở vị trí C-3 xuất hiện ở  $\delta$  79,0, trong khi nhóm carbon olefinic của liên kết đôi ngoại vòng xuất hiện ở  $\delta$  150,9 và 109,3. Dữ liệu phổ chi tiết (NMR và khối lượng) (*xem chi tiết ở trên*) cho biết cấu trúc của chất 2 được gán là lupeol phù hợp các giá trị tài liệu [11,12] được báo cáo.

Chất 3 thu được là chất rắn màu trắng, điểm nóng chảy 166°C. EI-MS  $m/z$  297  $[M+H]^+$  (công thức phân tử  $C_{17}H_{14}O_5$ ). Trên phổ  $^1H$ -NMR có 2 tín hiệu proton của hai nhóm methoxy tại  $\delta$  3,87 và  $\delta$  3,89. Hai tín hiệu doublet vị trí *meta* (1H, d,  $J=2,0$ Hz) của proton H-8 và H-6 tại  $\delta$  6,37 và  $\delta$  6,47 tương ứng. Tín hiệu singlet tại  $\delta$  6,56 (1H, s) là của H-3. Cặp tín hiệu doublet tại  $\delta$  7,01 (H-3' và H-5') và  $\delta$  7,84 (H-2' và H-6') ở vị trí *ortho* (2H, d,  $J=8,5$  Hz) gợi ý vòng B bị thế ở vị trí 4'. Tín hiệu proton của nhóm hydroxi ở vùng trường thấp tại  $\delta$  12,80. Dữ liệu từ phổ  $^1H$ -NMR gợi ý cấu trúc của hợp chất 3 là 5-hydroxy-4',7'-dimethoxy flavon (*apigenin-7,4'-dimethyl ether*). Phổ  $^{13}C$ -NMR của chất 3 cũng cho kết quả phù hợp với cấu trúc đề nghị, trong đó có 17 nguyên tử carbon, 1 nhóm  $>C=O$ , 2 nhóm  $-OCH_3$ , 7 nhóm  $-CH=$  kề nối đôi, 7 nhóm  $>C=C$  tứ cấp. Việc gán phổ của chất 3 được thực hiện trên cơ sở phân tích các phổ  $^1H$ -,  $^{13}C$ -HSQC và HMBC. Số liệu phổ của hợp chất 5-hydroxy-4',7'-dimethoxy flavon) được so sánh với tài liệu [13] hoàn toàn phù hợp.

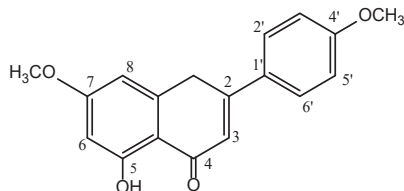
Chất 4 thu được là tinh thể hình kim màu vàng nhạt. Phổ  $^1H$ -NMR xuất hiện các tín hiệu tại  $\delta$  6,40 ppm (d,  $J = 2$ Hz, H-8); và  $\delta$  6,20 ppm (d,  $J = 2$ Hz, H-6) chứng tỏ hợp chất thơm có 2 proton ở vị trí *meta* với nhau. Kiểu tín hiệu xuất hiện tại vùng  $\delta$  6,90 - 7,75 ppm với hằng số tương tác  $J = 8$ Hz và  $J = 2$ Hz chứng tỏ vòng B có

hai nhóm thế như ở vị trí C-3' và C-4'. Phổ  $^{13}C$ -NMR thấy xuất hiện 15 pic tương ứng với 15 carbon của khung flavonoid, trong đó nhóm  $C=O$  tại  $\delta_c$  177,3 ppm, các vị trí tại C-5, C-7, C-3' và C-4' có sự dịch chuyển về phía trường yếu chứng tỏ ở đây có nhóm OH. (*xem số liệu phổ chi tiết ở trên*). Kết hợp phân tích các dữ kiện phổ và so sánh với tài liệu [14, 15] cùng với thông tin từ phổ khối lượng (ESI-MS) với pic ion  $m/z$  301  $[M-H]^-$  (công thức phân tử  $C_{15}H_{10}O_7$ ) cho phép kết luận chất 4 là 2-(3,4-dihydroxyphenyl)-3,5,7-trihydroxy-4H-chromen-4-on hay còn gọi là quercetin.

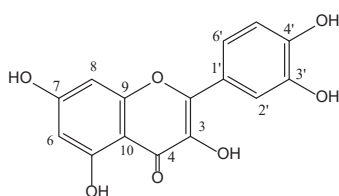
Chất 5 thu được dạng chất rắn màu nâu nhạt. Phổ khối lượng ESI-MS cho pic ion tại  $m/z$  289  $[M-H]^-$  tương ứng công thức phân tử  $C_{15}H_{14}O_6$ . Phổ  $^{13}C$ -NMR xuất hiện 15 pic tương ứng với 15 carbon của khung flavonoid. Trên phổ  $^1H$ -NMR xuất hiện tín hiệu của 2 proton thơm tại  $\delta$  5,84 ppm (d,  $J = 1,5$ Hz, H-8) và  $\delta$  5,81 ppm (d,  $J = 1,5$ Hz, H-6) chỉ ra sự có mặt của 2 nhóm hydroxy ở vị trí C-5 và C-7. Các tín hiệu proton quan sát được tại 2,8 ppm (dd,  $J = 16, 6$ Hz, H-4) và 2,4 ppm (dd,  $J = 16, 6$ Hz, H-4), 3,9 ppm (ddd,  $J = 8, 8$  và 5,5Hz, H-3), 4,4 ppm (d,  $J = 8$ Hz, H-2) chứng tỏ vòng C có nhóm OH ở vị trí C-3. Thêm vào đó có các tín hiệu tại  $\delta$  6,64 ppm (dd,  $J = 8, 2$ Hz, H-6'); 6,74 ppm (d,  $J = 8,0$ Hz, H-2') và 6,67 ppm (d,  $J = 8,0$ Hz, H-5') đặc trưng của hệ thống spin ABX ở vòng B chỉ ra rằng vòng B có hai nhóm OH ở vị trí C-3' và C-4' (*xem số liệu phổ chi tiết ở trên*). Từ phân tích dữ liệu thu được, so sánh với tài liệu [16, 17] xác định hợp chất 5 là flavanol có tên gọi là 2R, 3S - 2-(3,4-dihydroxyphenyl)-3,4-dihydro-2H-chromene-3,5,7-triol hoặc catechin.

1. *N-p-trans-cumaroyltyramin*

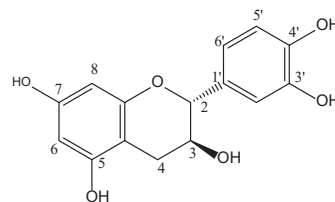
2. lupeol



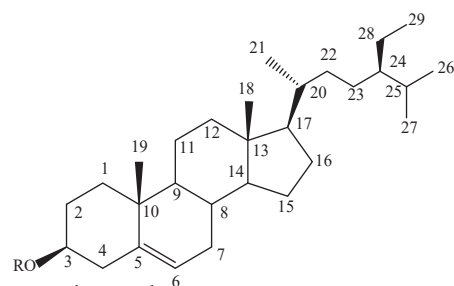
3. 5-hydroxy-4',7-dimethoxyflavon



4. quercetin



5 (+)-catechin

6.  $\beta$ -sitosterol7.  $\beta$ -sitosterol-3-O- $\beta$ -D-glucopyranoside

R=H

R=  $\beta$ -D-glucopyranosyl

Các hợp chất phân lập được từ lá cây Vú sữa *Chrysophyllum cainito* L. (Sapotaceae)

#### IV. Kết luận

Nghiên cứu hóa thực vật về lá cây Vú sữa (*Chrysophyllum cainito* L.) thu hái tại Long Khánh, Đồng Nai - Việt Nam đã phân lập được 7 hợp chất bao gồm: *N-p-trans-cumaroyltyramin* (1), lupeol (2), 5-hydroxy-4',7-dimethoxy flavon (3), quercetin (4), catechin (5)  $\beta$ -sitosterol (6)

và daucosterol (7). Cấu trúc của các chất đã được xác định bằng phân tích dữ liệu phổ và so sánh với tài liệu. Trong đó hợp chất *N-p-trans-cumaroyltyramin* (1) lần đầu tiên được tách ra từ lá cây Vú sữa.

**Lời cảm ơn:** Nghiên cứu này được thực hiện với sự hỗ trợ kinh phí đề tài cơ sở Viện Hóa học, VAST.

**Tài liệu tham khảo:**

- [1]. C. V. Vo. Medicinal Plant Dictionary in Vietnam (Written in Vietnamese). Medical Publishing House, Ha Noi, Vietnam, 2012.
- [2]. S. U. Oranusi, W. Braide, and R. U. Umeze. Antimicrobial activities and chemical compositions of *Chrysophyllum cainito* (star apple) fruit. *Microbiology Research International*, 2015, 3 (3), 41–50.
- [3]. X.-D. Luo, M. J. Basile, and E. J. Kennelly. Polyphenolic antioxidants from the fruits of *Chrysophyllum cainito* L. (star apple). *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 2002, 50 (6), 1379-1382.
- [4]. Nicole Anzanelo Meira, Luiz Carlos Klein Jr, Lilian W. Rocha, Zhelmy Martin Quintal, Franco Delle Monache, Valdir Cechinel Filho, Nara Lins Meira Quintão N.A. Anti-inflammatory and anti-hypersensitive effects of the crude extract, fractions, and triterpenes obtained from *Chrysophyllum cainito* leaves in mice. *Journal of Ethnopharmacology* 2014, 151, 975 - 983.
- [5]. Koffi N, Ernest AK, Marie-Solange T, Beugre K, Noel ZG, Effect of aqueous extract of *Chrysophyllum cainito* leaves on the glycemia of diabetic rabbits, *African Journal of Pharmacy and Pharmacology*, 2009, 3 (10), 501-506.
- [6]. Doan, H. V., Rijayan, S., Iyara, R., Chudapongse, N. Antidiabetic activity, glucose uptake stimulation and  $\alpha$ -glucosidase inhibitory effect of *Chrysophyllum cainito* L. stem bark extract. *BMC Complementary and Alternative Medicine* 2018, 18 (267), 1-10.
- [7]. A. Das, D. I. B. B. Nordin, and A. Bhaumik. A brief review of *Chrysophyllum cainito*. *IJPI's Journal of Pharmacognosy and Herbal Formulations*, 2010, 1 (1), 7.
- [8]. Sunita Shailajan and Deepti Gurjar. Pharmacognostic and phytochemical evaluation of *Chrysophyllum cainito* linn. Leaves. *International Journal of Pharmaceutical Sciences Review and Research*, 2014, 26 (1), 106-111.
- [9]. Raissa Viviane Tala Sipowo et al. Triterpenes and coumaroyltyramide from *Ochthocosmus Africanus*, *Journal of Diseases and Medicinal Plants*, 2017, 3 (1), 12.
- [10]. Kim DK, Lee K, - Inhibitory effect of trans-N-p-coumaroyl tyramine from the twigs of *Celtis chinensis* on the acetylcholinesterase. *Arch. Pharm. Res*, 2003, 26 (9), 735-8.
- [11]. Shehla Imam, Iqbal Azhar, M. Mohtasheemul Hassn Pak, *J. Pharm. Sci.*, 2007, 20 (2), 125-127.
- [12]. Wenkert E, - <sup>13</sup>C-NMR of lupan triterpenes, *Org. Magn. Reson.*, 11 (1978) 337-342.
- [13]. Chen Dong, el. Al. *Chinese Journal of Natural Medicines*, 2012, 10 (4), 287-291.
- [14]. M. M. Adeyemi, D. A. Adebote, J. O. Amupitan, A. O. Oyewale and A. S. Agbaji Aust, *J. Basic and App'Sci.*, 2010, 3342-3346.
- [15]. P.K. Agrawal. Carbon-13 NMR of Flavonoids", Elsevier Science, New York, 1989.
- [16]. M.A. Hye, M. A. Taher, M. Y. Ali, M. U. Ali and Shahed Zaman. Isolation of (+)-catechin from *Acacia catechu* (Cutch tree) by convenient method. *J. Sci. Res*, 2009, I (2), 300-305.
- [17]. Savi L. A., Berardi C. R., Simoes C. M. Evaluation of antiherpetic activity and genotoxic effects of catechin derivatives. *J. Agric. Food. Chem.*, 2006, 54 (7), 2552-2527.

## CHEMICAL CONSTITUENTS FROM THE LEAVES OF *CHRYSOPHYLLUM CAINITO* L. (SAPOTACEAE)

*Ho Đac Hung*<sup>‡</sup>, *Đo Trung Sy*<sup>‡</sup>, *Nguyen Thi Diep*<sup>‡</sup>, *Pham Quynh Trang*<sup>‡</sup>,  
*Hoang Thi Phuong*<sup>‡</sup>, *Tran Huu Huy*<sup>‡</sup>, *Ha Thi Hai Yen*<sup>‡</sup>, *Bui Kim Anh*<sup>‡§</sup>

**Abstract:** *Chrysophyllum cainito* L. belongs to the family Sapotaceae. It is a large tree species living mainly in the tropics. Although the *C. cainito* species is grown worldwide mainly to obtain fruits that contain many nutrients such as proteins, carbohydrates, vitamins, phenolic and amino acids, extracts from the leaves, stem bark, fruit, and pulp or seeds of *C. cainito* has been used as a traditional medicine for a long time, and recently some biological functions of this extract have been discovered and demonstrated. Many pharmacological activities of *C. cainito* species have been found to be antioxidant, anti-inflammatory, anti-cancer, anti-hypertensive, and promote wound healing and vertebral bone cell division. Due to its rich medicinal ingredients, the leaves, fruits, and bark are used in various herbal medicines for different purposes. This study aims to characterize the phytochemical constituents present in the leaf extracts of *Chrysophyllum cainito* using chromatographic and spectroscopic methods. Seven compounds, *N-p-trans-coumaroyltyramin* (1); *lupeol* (2); *5-hydroxy-4',7-dimethoxy flavon* (3); *quercetin* (4); *catechin* (5);  $\beta$ -*sitosterol* (6) and *daucosterol* (7) were isolated from the extract of the leaves of *Chrysophyllum cainito* L. Their structures were elucidated based on spectroscopic analysis and comparisons with known related compounds. Compound 1 was reported for the first time from the leaves of *Chrysophyllum cainito*.

**Keywords:** *Chrysophyllum cainito*, Sapotaceae, *N-p-trans - coumaroyltyramin*, *lupeol*, *5-hydroxy-3,7 dimethoxy flavon*, *quercetin*, and *catechin*.

---

<sup>‡</sup> Institute of Chemistry, Vietnam Academy of Science and Technology

<sup>§</sup> Corresponding author