

NGHIÊN CỨU THÀNH PHẦN HOÁ HỌC RỄ CÂY XUÂN HOA (*PSEUDERANTHEMUM PALATIFERUM*)

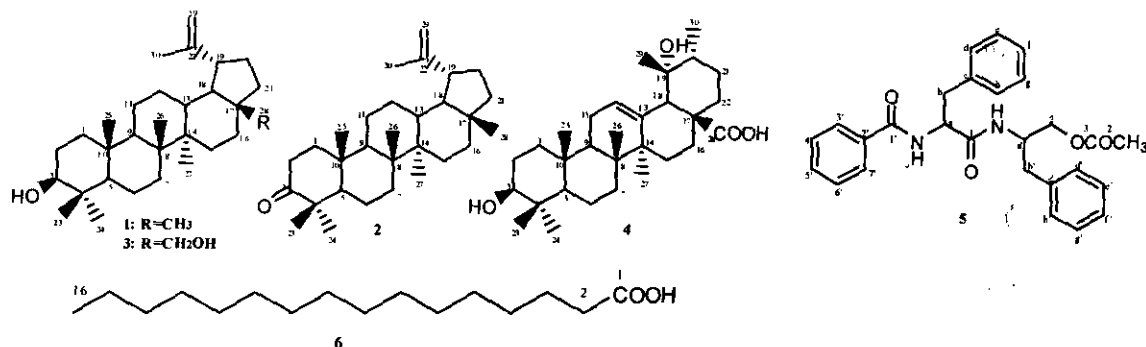
TRẦN CÔNG KHÁNH, NGUYỄN THỊ MINH HẰNG, ĐOÀN THỊ MAI HƯƠNG,
NGUYỄN VĂN HÙNG

I. MỞ ĐẦU

Cây xuân hoa (*Pseuderanthemum palatiferum* (Nees) Radlk.) thuộc họ Ô rô (Acanthaceae) [1] được biết rộng rãi trong dân gian dưới tên cây hoàn ngọc, cây con khi dùng để chữa các bệnh như tiêu chảy, kiết lỵ, đái rắt, tiểu ra máu, viêm đại tràng [2 - 3]. Cao đặc lá cây xuân hoa có tác dụng ức chế quá trình peroxy hoá màng tế bào và có xu hướng bảo vệ tế bào gan [4], rễ cây được sử dụng làm trà uống (trà Hoàn Ngọc) có tác dụng giải nhiệt, kháng khuẩn, giải độc, tăng cường thể lực và hỗ trợ tiêu hóa. Trước đây, chúng tôi và một số nhà khoa học của Việt Nam đã nghiên cứu về thành phần hóa học của lá cây xuân hoa [5 - 7]. Tiếp tục nghiên cứu về thành phần hóa học của cây xuân hoa, chúng tôi đã thử hoạt tính kháng vi sinh vật kiểm định các dịch chiết của rễ cây và thấy rằng dịch chiết n-hexan của rễ có hoạt tính kháng vi sinh vật kiểm định đối với chủng tụ cầu vàng *Staphylococcus aureus*. Trong bài báo này chúng tôi thông báo về việc phân lập được 4 triterpenoit là lupeol (1), lupenone (2), betulin (3), axit pomolic (4), 1 dipeptide là asperglaucide (5) và 1 axit béo là axit palmitic (6).

II. KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

Từ dịch chiết n-hexan chúng tôi phân lập được lupeol (1), lupenone (2), betulin (3), asperglaucide (5) và axit palmitic (6). Từ dịch chiết EtOAc chúng tôi đã phân lập được lupeol (1), β -sitosterol, betulin (3), axit pomolic (4) và β -sitosterol glycoside.



Chất 1 được phân lập dưới dạng tinh thể màu trắng, điểm nóng chảy 210 – 211°C. Phổ ¹³C-NMR và DEPT cho tín hiệu cộng hưởng của 30 cacbon trong đó có 2 cacbon sp² và 28 cacbon sp³ tương ứng với 7 nhóm metyl, 11 nhóm metylen, 6 nhóm metin và 6 cacbon bậc bốn. Trên phổ khối lượng EIMS pic ion phân tử xuất hiện ở m/z 426. Các dữ kiện phổ ¹³C-NMR và EI-MS cho phép xác định công thức phân tử của chất này là C₃₀H₅₀O và cho biết đây là một triterpen có năm vòng cùng với một liên kết đôi và một nhóm hydroxy trong phân tử. Trên phổ ¹H-NMR ở

vùng trường thấp có tín hiệu cộng hưởng của hai proton olefinic (δ_H 4,56 và 4,68, H-29a và H-29b). Các tương tác trên phổ HSQC cho biết hai proton này thuộc về một nhóm metylen olefinic, nhóm metylen này rất đặc trưng cho các tritecpen khung lupan. Ở trường cao hơn có tín hiệu cộng hưởng của một proton của nhóm hydroxymetin (δ_H 3,18, H-3). Proton này bị tách dưới dạng quintet với hằng số tương tác trung bình ($J=5,5$ Hz) cho biết cấu hình α của nó. Một proton của nhóm metin nữa xuất hiện dưới dạng double triplet (δ_H 2,37, $J=5,5$; 11,0 Hz, H-19). Proton của 7 nhóm methyl đều xuất hiện dưới dạng singlet ở vùng trường cao (δ_H 0,76 - 1,68). Các tín hiệu cộng hưởng của các proton thuộc các nhóm metylen còn lại đều xuất hiện ở vùng trường cao dưới dạng multiplet. Trên phổ ^{13}C -NMR dễ dàng nhận thấy tín hiệu cộng hưởng của một liên kết đôi (δ_C 109,33 và 150,98, C-19 và C-20), một nhóm hydroxymetin (δ_C 79,04, C-3). Kết hợp các dữ kiện phổ và tham khảo tài liệu [8] cho phép xác định cấu trúc của chất này là lupeol, một tritecpen khung lupan. Hợp chất này có hoạt tính gây độc tế bào đối với dòng tế bào Hep-G2, A-431, H-4IIE [9], ngoài ra lupeol còn là chất chống oxy hoá và kháng viêm [10].

Chất 2 được phân lập dưới dạng tinh thể màu trắng, điểm nóng chảy 164 – 165°C. Phổ ^{13}C -NMR và DEPT cho tín hiệu cộng hưởng của 30 cacbon trong đó có 3 cacbon sp^2 và 27 cacbon sp^3 tương ứng với 7 nhóm methyl, 11 nhóm metylen, 5 nhóm metin và 7 cacbon bậc bốn trong đó có một nhóm cacbonyl ($>\text{C}=\text{O}$). Trên phổ khối lượng EIMS pic ion phân tử xuất hiện ở m/z 424. Các dữ kiện phổ ^{13}C -NMR và EI-MS cho phép xác định công thức phân tử của chất này là $\text{C}_{30}\text{H}_{48}\text{O}$ và cho biết đây là một tritecpen có năm vòng cùng với một liên kết đôi và một nhóm cacbonyl trong phân tử. Các dữ kiện phổ của chất này rất gần với dữ kiện phổ của chất 1. Giống như chất 1, trên phổ ^1H -NMR của 2 có tín hiệu cộng hưởng của hai proton olefinic (δ_H 4,57 và 4,68, H-29a và H-29b). Một proton của nhóm metin (δ_H 2,46, H-19). Proton của các 7 nhóm methyl đều xuất hiện dưới dạng singlet ở vùng trường cao (δ_H 0,78-1,68). Khác với 1, ở 2 đã mất đi tín hiệu cộng hưởng của proton thuộc nhóm hydroxymetin. Trên phổ ^{13}C -NMR dễ dàng nhận thấy tín hiệu cộng hưởng của một liên kết đôi (δ_C 109,80 và 150,89, C-19 và C-20) và một nhóm cacbonyl (δ_H 218,12, C-3), không có tín hiệu của nhóm hydroxymetin. Như vậy có thể kết luận chất này cũng là một tritecpen thuộc khung lupan như chất 1 trong đó nhóm hydroxymetin được thay thế bằng nhóm cacbonyl. Qua các dữ kiện phổ và tham khảo tài liệu [8] cho phép xác định cấu trúc của chất này là lupenone.

Chất 3 được phân lập dưới dạng tinh thể màu trắng, điểm nóng chảy 248°C – 249°C. Phổ ^{13}C -NMR và DEPT cho tín hiệu cộng hưởng của 30 cacbon trong đó có 2 cacbon sp^2 và 28 cacbon sp^3 tương ứng với 6 nhóm methyl, 12 nhóm metylen trong đó có một nhóm hydroxymetylen, 6 nhóm metin trong đó có một nhóm hydroxymetin và 6 cacbon bậc bốn. Trên phổ khối lượng EI-MS pic ion phân tử xuất hiện ở m/z 442. Các dữ kiện phổ ^{13}C -NMR và EI-MS cho phép xác định công thức phân tử của chất này là $\text{C}_{30}\text{H}_{50}\text{O}_2$ và cho biết đây là một tritecpen có năm vòng cùng với một liên kết đôi và hai nhóm hydroxy trong phân tử. Các dữ kiện phổ của 3 rất gần với các dữ kiện của 1. Giống như hợp chất 1, trên phổ ^1H -NMR thấy có tín hiệu cộng hưởng của hai proton olefinic thuộc một nhóm metylen olefinic (δ_H 4,56 và 4,68, H-29a và H-29b), một proton của nhóm hydroxymetin (δ_H 3,18, H-3). Một proton của nhóm metin nữa xuất hiện dưới dạng double triplet (δ_H 2,38, $J=6,0$, 11,0 Hz, H-19). Khác với 1, ở 3 tín hiệu của một nhóm methyl đã được thay thế bởi một nhóm hydroxymetylen (δ_H 3,33 (1H, dd, $J=10,5$, 3,0 Hz, H-28b) và 3,80 (1H, d, $J=8,5$ Hz, H-28a). Trên phổ ^{13}C -NMR cũng dễ dàng nhận thấy tín hiệu cộng hưởng của một liên kết đôi (δ_C 109,68 và 150,48, C-19 và C-20), một nhóm hydroxymetin (δ_C 79,00, C-3) và một nhóm hydroxymetylen (δ_H 60,58). Các dữ kiện phổ và tài liệu tham khảo [8] đã cho phép xác định cấu trúc của chất này là betulin. Hợp chất betulin

được El Deeb K. S. tách ra từ loài *Maytenus forsskaoliana* thể hiện hoạt tính gây độc tế bào trên 2 dòng HeLa và Hep-2 [11], nó cũng thể hiện hoạt tính chống HIV với giá trị IC_{50} là 6,1 $\mu\text{g/ml}$ [12].

Chất 4 được phân lập dưới dạng tinh thể màu trắng, điểm nóng chảy 290 – 291°C. Phổ ^{13}C -NMR và DEPT cho tín hiệu cộng hưởng của 30 cacbon trong đó có 3 cacbon sp^2 và 27 cacbon sp^3 tương ứng với 7 nhóm methyl, 9 nhóm methylen, 6 nhóm metin trong đó có một nhóm hydroxymetin và 6 cacbon bậc bốn, một cacbon bậc ba gắn với nhóm hydroxyl (δ_{C} 78,84) và một nhóm cacbonyl (δ_{C} 180,74). Trên phổ khối lượng EI-MS thấy pic $[\text{M}-46]^+$ xuất hiện ở m/z 426. Các dữ kiện phổ ^{13}C -NMR và EI-MS cho phép xác định công thức phân tử của chất này là $\text{C}_{30}\text{H}_{48}\text{O}_4$ và cho biết đây là một tritecpen có năm vòng cùng với một liên kết đôi và hai nhóm hydroxy trong phân tử. Trên phổ ^1H -NMR thấy có tín hiệu của một proton olefinic (δ_{H} 5,29, H-12), một proton thuộc nhóm hydroxymetin dưới dạng double doublet (δ_{H} 3,15, H-3) với hằng số tương tác lớn ($J=5,5$ và 11.0 Hz) cho biết cấu hình α của proton này. Proton của một nhóm metin xuất hiện dưới dạng singlet (δ_{H} 2,50, H-18), một proton khác có dạng double triplet (δ_{H} 2,43, H-16). Có một nhóm methyl xuất hiện dưới dạng doublet (δ_{H} 0,86, H-30) còn các nhóm methyl khác đều xuất hiện dưới dạng singlet ở vùng trường cao (δ_{H} 0,70 - 1,15). Trên phổ ^{13}C -NMR dễ dàng nhận thấy tín hiệu của nhóm cacbonyl (δ_{C} 180,74), nối đôi (δ_{C} 138,01 và 129,05), một nhóm hydroxymetin (δ_{C} 78,84) và một cacbon bậc ba gắn với nhóm hydroxyl (δ_{C} 72,98). Trên phổ HMBC, các tương tác của proton olefinic (δ_{H} 5,29) với các cacbon C-11, C-18, C-9, C-14 cho biết vị trí của nối đôi là 12, 13. Các tương tác khác trên phổ HMBC cho phép xác định vị trí của các nhóm trong phân tử. Các dữ kiện phổ cùng với tài liệu tham khảo [15] cho phép xác định chất này là axit pomolic. Hợp chất này có hoạt tính gây độc tế bào đối với dòng tế bào biểu mô đốt sống cổ ME-180 và ung thư tế bào có hạch tổ phát triển M-14 [14], đồng thời nó cũng thể hiện hoạt tính chống HIV [15].

Chất 5 được phân lập dưới dạng tinh thể màu trắng. Điểm nóng chảy 180 – 181°C. Phổ ^{13}C NMR và DEPT cho tín hiệu cộng hưởng của 27 cacbon trong đó có 21 cacbon sp^2 và 6 cacbon sp^3 tương ứng với 1 nhóm methyl, 3 nhóm methylen, 2 nhóm metin bão hoà và 15 nhóm metin thơm, 3 nhóm cacbonyl và 3 cacbon bậc bốn thơm. Trên phổ khối lượng EIMS pic ion phân tử xuất hiện ở m/z 444. Các dữ kiện phổ ^{13}C -NMR và EI-MS cho phép xác định công thức phân tử của chất này là $\text{C}_{27}\text{H}_{28}\text{N}_2\text{O}_4$. Trên phổ ^1H -NMR ở vùng trường thấp dễ dàng nhận thấy tín hiệu cộng hưởng của 15 proton thơm (δ_{H} 7,06 - 7,72) cho biết trong phân tử có thể có 3 vòng benzen bị thế 1 lần. Tín hiệu cộng hưởng của 2 proton thuộc 2 nhóm amin bậc hai ($>\text{NH}$) xuất hiện ở trường khá thấp (δ_{H} 6,74 và 5,96) cho biết các nhóm amin này thuộc về hai liên kết amit ($-\text{NH}-\text{CO}-$). Các tín hiệu của hai proton của hai nhóm metin xuất hiện dưới dạng multiplet ở vùng trường khá thấp (δ_{H} 4,75 và 4,34) chứng tỏ các nhóm metin này có liên kết với nguyên tố có độ âm điện lớn. Tiếp theo là tín hiệu của một nhóm methylen có liên kết với oxy xuất hiện dưới dạng 2 double doublet (δ_{H} 3,94 và 3,82). Một nhóm methylen khác cũng xuất hiện dưới dạng 2 double doublet (δ_{H} 3,21 và 3,03). Các proton của nhóm methylen thứ ba xuất hiện dưới dạng multiplet (δ_{H} 2,73). Nhóm methyl xuất hiện dưới dạng singlet (δ_{H} 2,16) chứng tỏ nó thuộc về một nhóm acetyl ($\text{CH}_3-\text{CO}-$). Trên phổ ^{13}C -NMR dễ dàng nhận thấy tín hiệu của 3 nhóm cacbonyl ở vùng trường thấp trong đó có hai nhóm cacbonyl amit (δ_{C} 170,63, C-1 và 167,50, C-1') và một nhóm cacbonyl este (δ_{C} 171,16, C-3). Ở vùng trường cao hơn có tín hiệu cộng hưởng của 18 cacbon thơm thuộc 3 vòng benzen (δ_{C} 127 - 137). Tín hiệu của các cacbon còn lại cũng dễ dàng nhận thấy trên phổ. Các tín hiệu trên phổ 2D NMR cho phép xác định vị trí các nhóm trong phân tử. Từ các dữ kiện phổ trên cùng với việc tham khảo tài liệu [16] cho phép xác định chất này là một dipeptide có tên là asperglaucide.

Chất 6 nhận được dưới dạng chất rắn màu trắng. Phổ $^1\text{H-NMR}$ của 6 thể hiện các đặc trưng của 1 axit béo no mạch thẳng. So sánh phổ $^1\text{H-NMR}$ và chấm bản mỏng TLC với chất đã tách ra ở phòng thí nghiệm chúng tôi khẳng định chất 6 chính là axit palmitic.

III. THỰC NGHIỆM

Điểm nóng chảy được đo trên máy Boetius. Phổ khối EI-MS ghi trên máy HP 5989 B Serie II. Phổ NMR được ghi trên máy Bruker Avance 500 MHz với TMS làm chất chuẩn nội. Sắc kí cột được tiến hành với silica gel cỡ hạt 40 μm - 63 μm và sephadex LH-20.

Mẫu thực vật: Rễ cây xuân hoa được thu hái tại Tây Ninh vào tháng 08 năm 2007. Mẫu tiêu bản được lưu giữ tại Trung Tâm nghiên cứu và phát triển cây thuốc dân tộc cổ truyền (CREDEP).

Xử lý mẫu thực vật và chiết tách: Rễ của cây xuân hoa (*Pseuderanthemum palatiferum* (Nees) Radlk.) được sấy khô, nghiền nhỏ rồi ngâm chiết với EtOH (3 lần trong 72 giờ). Dịch chiết sau đó được cất loại dung môi ở áp suất giảm thu được cặn dịch EtOH. Cặn dịch EtOH được cho thêm H_2O , chiết tiếp bằng n-hexan, EtOAc, BuOH, cất loại dung môi thu được 8,5 g cặn dịch n-hexan; 9 g cặn dịch EtOAc, 12 g cặn dịch BuOH và 25 g cặn dịch H_2O . Dịch chiết tổng và các dịch chiết khác được đem đi thử hoạt tính kháng vi sinh vật kiểm định kết quả cho thấy dịch chiết n-hexan có hoạt tính kháng vi sinh vật kiểm định đối với chủng tụ cầu vàng *Staphylococcus aureus* với giá trị IC_{50} là 174,9 $\mu\text{g/ml}$.

Từ dịch chiết n-hexan chúng tôi phân lập được lupeol (1, 1 g), lupenone (2, 10 mg), betulin (3, 2 g), asperglaucide (5, 3,5 mg) và axit palmitic (6, 5,9 mg).

Từ dịch chiết EtOAc chúng tôi đã phân lập được lupeol (1, 0,75 g), β -sitosterol (10 mg), betulin (3, 0,72 g), axit pomolic (4, 6 mg), β -sitosterol glycoside (20 mg).

Lupeol ($\text{C}_{30}\text{H}_{50}\text{O}$, 1): Tinh thể hình kim màu trắng (CH_2Cl_2). Điểm nóng chảy 210 – 211 $^\circ\text{C}$. $^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3 , 500 MHz) δ ppm: 0,76 (3H, s, H-24), 0,79 (3H, s, H-28), 0,83 (3H, s, H-25), 0,94 (3H, s, H-27), 0,96 (3H, s, H-23), 1,68 (3H, s, H-30), 2,37 (1H, dt, $J=5,5$, 11,0 Hz, H-19), 3,18 (1H, quin, $J=5,5$ Hz, H-3), 4,56 (1H, m, H-29a), 4,68 (1H, t, $J=2,0$ Hz, H-29b). $^{13}\text{C-NMR}$ (CDCl_3 , 125 MHz) δ ppm: 14,58 (q, C-27), 15,38 (q, C-24), 16,02 (q, C-26), 16,14 (q, C-25), 18,03 (q, C-28), 18,36 (t, C-6), 19,34 (q, C-30), 20,98 (t, C-11), 25,21 (t, C-12), 27,47 (t, C-2), 27,50 (t, C-15), 28,02 (q, C-23), 29,90 (t, C-21), 34,34 (t, C-7), 35,63 (t, C-16), 37,22 (s, C-10), 38,12 (d, C-13), 38,76 (t, C-1), 38,89 (s, C-4), 40,04 (t, C-22), 40,89 (s, C-8), 42,88 (s, C-14), 43,03 (s, C-17), 48,02 (d, C-19), 48,37 (d, C-18), 50,50 (d, C-9), 55,36 (d, C-5), 79,04 (d, C-3), 109,33 (t, C-29), 150,98 (s, C-20). EI-MS (70 eV) m/z (%): 426 ($[\text{M}]^+$, 5,1), 411 (2,0), 315 (1,8), 257 (1,4), 207 (85,5), 189 (99,9), 135 (81,1), 121 (85,6), 109 (95,7), 95 (100), 69 (73,6), 55 (71,7).

Lupenone ($\text{C}_{30}\text{H}_{48}\text{O}$, 2): Tinh thể hình kim màu trắng (CH_2Cl_2). Điểm nóng chảy 164 $^\circ\text{C}$ – 165 $^\circ\text{C}$. $^1\text{H-NMR}$ (CDCl_3 , 500 MHz) δ ppm: 0,78 (3H, s, H-28), 0,93 (3H, s, H-25), 0,95 (3H, s, H-27), 1,02 (3H, s, H-24), 1,07 (6H, s, H-23 và H-26), 1,68 (3H, s, H-30), 1,87-1,97 (2H, m, H-1a và H-21a), 2,40 (2H, m, H-2), 2,46 (1H, m, H-19), 4,57 (1H, q, $J=1,0$ Hz, H-29a), 4,68 (1H, d, $J=2,0$ Hz, H-29b). $^{13}\text{C-NMR}$ (CDCl_3 , 125 MHz) δ ppm: 14,50 (q, C-27), 15,81 (q, C-26), 15,98 (q, C-25), 18,03 (q, C-28), 19,33 (q, C-30), 19,71 (t, C-6), 21,05 (q, C-24), 21,50 (t, C-11), 25,20 (t, C-12), 26,68 (q, C-23), 27,46 (t, C-15), 29,87 (t, C-21), 33,60 (t, C-7), 34,17 (t, C-2), 35,55 (t, C-16), 36,91 (s, C-10), 38,21 (d, C-13), 39,65 (t, C-1), 40,00 (t, C-22), 40,82 (s, C-8), 42,93 (s, C-14), 43,02 (s, C-17), 47,35 (s, C-4), 47,98 (d, C-19), 48,28 (d, C-18), 49,83 (d, C-9), 54,97 (d, C-5), 109,40 (t, C-29), 150,89 (s, C-20), 218,12 (d, C-3). ESI-MS m/z : 425 ($[\text{M}+\text{H}]^+$).

Betulin ($C_{30}H_{50}O_2$, 3): Tinh thể hình kim màu trắng (CH_2Cl_2). Điểm nóng chảy $248^\circ C - 249^\circ C$. 1H -NMR ($CDCl_3$, 500 MHz) δ ppm: 0,76 (3H, s, H-24), 0,83 (3H, s, H-25), 0,97 (3H, s, H-23), 0,98 (3H, s, H-27), 1,02 (3H, s, H-26), 1,68 (3H, s, H-30), 2,38 (1H, dt, $J=6,0, 11,0$ Hz, H-19), 3,18 (1H, m, H-3), 3,33 (1H, dd, $J=10,5, 3,0$ Hz, H-28b), 3,80 (1H, d, $J=8,5$ Hz, H-28a), 4,57 (1H, t, $J=1,0$ Hz, H-29a), 4,68 (1H, d, $J=2,0$ Hz, H-29b). ^{13}C -NMR ($CDCl_3$, 125 MHz) δ ppm: 14,78 (q, C-27), 15,36 (q, C-24), 16,01 (q, C-26), 16,11 (q, C-25), 18,33 (t, C-6), 19,10 (q, C-30), 20,86 (t, C-11), 25,26 (t, C-12), 27,09 (t, C-15), 27,42 (t, C-2), 28,00 (q, C-23), 29,21 (t, C-16), 29,80 (t, C-21), 33,99 (t, C-22), 34,28 (t, C-7), 37,19 (s, C-10), 37,35 (d, C-13), 38,74 (t, C-1), 38,89 (s, C-4), 40,96 (s, C-8), 42,75 (s, C-14), 47,81 (s, C-17, C-19), 48,81 (d, C-18), 50,44 (d, C-9), 55,33 (d, C-5), 60,58 (t, C-28), 79,00 (d, C-3), 109,68 (t, C-29), 150,48 (s, C-20). EI-MS (70 eV) m/z (%): 442 ($[M]^+$, 2,3), 411 (4,9), 234 (4,3), 203 (74,1), 189 (93,2), 175 (39,8), 147 (43,8), 135 (64,8), 107 (6,7), 95 (100), 69 (65,7), 55 (69,2).

Axit pomolic ($C_{30}H_{48}O_4$, 4): Tinh thể hình kim màu trắng (CH_2Cl_2). Điểm nóng chảy $290^\circ C - 291^\circ C$. 1H -NMR ($CDCl_3+MeOD$, 500 MHz) δ ppm: 0,70 (3H, s, H-26), 0,72 (3H, s, H-24), 0,85 (3H, s, H-25), 0,89 (3H, d, $J=6,5$ Hz, H-30), 0,92 (3H, s, H-23), 1,15 (3H, s, H-29), 1,20 (3H, s, H-27), 1,91 (2H, m, H-11), 2,43 (1H, dt, $J=4,5, 12,8$ Hz, H-16), 2,5 (1H, brs, H-18), 3,14 (1H, dd, $J=5,5, 11,0$ Hz, H-3), 5,29 (1H, t, $J=8,5$ Hz, H-12). ^{13}C -NMR ($CDCl_3+MeOD$, 125 MHz) δ ppm: 15,10 (q, C-25), 15,43 (q, C-24), 15,98 (q, C-30), 16,46 (q, C-26), 18,34 (t, C-6), 23,57 (t, C-11), 24,32 (q, C-27), 25,42 (t, C-16), 25,93 (t, C-21), 26,79 (t, C-2), 27,10 (q, C-29), 27,92 (q, C-23), 28,12 (t, C-15), 32,72 (t, C-7), 36,87 (s, C-10), 37,46 (t, C-1), 38,39 (s, C-4), 38,61 (t, C-22), 39,82 (s, C-8), 41,05 (s, C-14), 41,10 (t, C-20), 47,11 (s, C-17), 47,47 (d, C-9), 53,09 (d, C-18), 55,07 (d, C-5), 72,98 (s, C-19), 78,84 (d, C-3), 129,05 (d, C-12), 138,01 (s, C-13), 180,74 (s, C-28). EI-MS (70 eV) m/z (%): 426 ($[M-46]^+$, 4,9 %), 354 (3,2), 246 (10,5), 190 (32,5), 146 (100), 119 (34,8), 105 (37,9), 69 (50,6), 55 (81,5).

Asperglaucide ($C_{27}H_{28}N_2O_4$, 5): Điểm nóng chảy $180^\circ C - 181^\circ C$. 1H -NMR ($CDCl_3$, 500 MHz) δ ppm: 2,04 (3H, s, $OCOCH_3$), 2,75 (2H, m, CH_2-b'), 3,05 (1H, dd, $J=13,5; 8,5$ Hz, H-b), 3,21 (1H, dd, $J=13,5; 6,0$ Hz, H-b), 3,82 (1H, dd, $J=11,5; 4,5$ Hz, H-2), 3,92 (1H, dd, $J=11,5; 5$ Hz, H-2), 4,34 (1H, m, H-a'), 4,75 (1H, m, H-a'), 5,96 (1H, d, $J=8,5$ Hz, NH-a'), 6,73 (1H, d, $J=7,5$ Hz, NH-a), 7,06 (2H, dd, $J=6,6$ Hz, H-d + H-h), 7,11-7,18 (3H, m, H-e + H-f + H-g), 7,21-7,30 (5H, m, H-d' + H-e' + H-f' + H-g' + H-h'), 7,43 (2H, t, $J=7,3$ Hz, H-4' + H-6'), 7,52 (1H, td, $J=7,3; 1,2$ Hz, H-5'); 7,70 (2H, dd, $J=7,3; 1,2$ Hz, H-3' + H-7'); ^{13}C -NMR ($CDCl_3$, 125 MHz) δ ppm: 2,18 (s, C-4), 37,84 (t, C-b'), 38,81 (t, C-b), 49,85 (d, C-a'); 55,39 (d, C-a); 64,97 (t, C-2), 128,98 (d, C-f), 127,44 (d, C-3' + C-7'), 128,98 (d, C-e' + C-g'), 129,03 (d, C-e + C-g), 129,16 (d, C-4' + C-6'), 129,52 (d, C-d' + C-h'), 129,68 (d, C-d + C-h), 132,31 (d, C-5'), 134,06 (s, C-2'), 137,01 (s, C-c'), 137,08 (s, C-c), 167,50 (s, C-1'), 170,63 (s, C-1), 171,16 (s, C-3).

ESI-MS m/z : 445 $[M+H]^+$.

Axit palmitic ($C_{16}H_{32}O_2$, 6): Chất rắn màu trắng. 1H -NMR ($CDCl_3$, 500MHz) δ 2,34 (2H, t, $J=7,5$ Hz, H-2); 1,63 (2H, m, H-3); 0,86 (3H, t, $J=7$ Hz, H-16).

Lời cảm ơn. Các tác giả xin bày tỏ lời cảm ơn đến DNTN TRÀ HOÀN NGỌC 7 NGA TÂY NINH đã cấp mẫu rễ cây Hoàn Ngọc và kinh phí để thực hiện công trình nghiên cứu này.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. Phạm Hoàng Hộ - Cây cỏ Việt Nam, Nhà xuất bản Trẻ, 2000, p. 69.
2. Trần Công Khánh - Tạp chí Thuốc và Sức khỏe, 1997, 101, pp. 10-11.

3. Trần Công Khánh và cộng sự - Tạp chí Dược liệu, **3** (2) (1998) 37-41.
4. Nguyễn Thị Minh Thu và cộng sự - Tạp chí Dược học, **9** (1999) 13-18.
5. Lê Thị Lan Oanh và cộng sự - Tạp chí Dược liệu, **4** (1) (1999) 13-17.
6. Lê Thị Lan Oanh và cộng sự - Tuyển tập báo cáo hội nghị hoá học toàn quốc lần thứ 3, tập 1 (1998) 96-99.
7. Nguyễn Thị Minh Thu và cộng sự - Tạp chí Dược liệu **5** (6) (2000) 163-167.
8. Phan Minh Giang và cộng sự - Tạp chí Hoá học, **41** (2) (2003) 115-118.
9. Nguyễn Văn Hùng, Lê Anh Tuấn, Nguyễn Quyết Chiến - Tạp chí Khoa học và Công nghệ, (2004)
10. Shashi B. Mahato and Asish P. Kundu - Phytochemistry, **37** (6) (1994) 1517-1575.
11. Moriarity D.M., Huang J., Yancey C.A., Zhang P., Setzer W.N., Lawton R.O., Bates R.B., Caldera S. - Planta Med. **64** (1998) 370-372.
12. Fernandez M.A., De las Heras B., Garcia M.D., Saenz M.T., Villar A. - J. Pharm. Pharmacol. **53** (11) (2001) 1533-1539.
13. El Deed K.S., Al-Haidari R.A., Mossa J.S., Abdel Monem A.A. - Saudi Pharmaceutical Journal **11** (4) (2003) 184-191
14. Vlietinck A.J., De Bruyne T., Apers S., Pieters L.A. - Planta Med. **64** (1998) 97-109.
15. Atsushi Numata, Peiming Yang et al. - Chem. Pharm. Bull. **37** (3) (1989) 648-651.
16. Catherine C. N., Abrahm J. V., Bing-Nam Z., David G. I. K. and Gerald B. H. - Planta Med. **66** (2000) 483-484
17. Yoshiki K., Hui-Kang W., Tsuneatsu N., Susumu K., Ichiro Y., Toshihiro F. - J. Nat. Prod. **61** (1998) 1090-1095.
18. K. Ishiguro, S. Nagata, H. Fukumoto, M. Yamaki, S. Takagi and K. Isoi - Phytochemistry **30** (11) (1991) 3639-3641.

SUMMARY

STUDY ON THE CHEMICAL CONSTITUENTS OF THE ROOTS OF *PSEUDERANTHEMUM PALATIFERUM* (NEES) RADLK. (ACANTHACEAE)

The roots of *Pseuderanthemum palatiferum* (Nees) Radlk. (Acanthaceae) has been used as a traditional medicine for treating of inflammation and digestive troubles in Vietnam. First studies have shown that extracts from the roots of this plant had antibacterial and antifungal activities. We report here the isolation and determination of four triterpenes: lupeol, lupenone, betulin, pomolic acid and dipeptide asperglaucide from the roots of *Pseuderanthemum palatiferum* (Nees) Radlk. Structures of these compounds have been elucidated by means of spectroscopic methods such as MS, 1D and 2D NMR.

Địa chỉ:

Nhận bài ngày 10 tháng 5 năm 2007

Trần Công Khánh,

Trung Tâm nghiên cứu và phát triển cây thuốc dân tộc cổ truyền (CREDEP).

Nguyễn Thị Minh Hằng, Đoàn Thị Mai Hương, Nguyễn Văn Hùng,

Viện Hoá học, Viện Khoa học và Công nghệ Việt Nam.