

KHẢO SÁT THÀNH PHẦN HÓA HỌC CÂY NỔ BÒ *Dipteracanthus repens* (L.) Hassk Ở VÙNG BẦY NÚI AN GIANG

Ngô Quốc Luân¹ và Nguyễn Thị Bích Thuyền²

¹Trường Sư phạm, Đại học Cần Thơ

²Trường Bách khoa, Đại học Cần Thơ

Email: ngoquocluan@ctu.edu.vn

Thông tin chung

Ngày nhận bài:

19/7/2025

Ngày nhận bài sửa:

01/8/2025

Ngày duyệt đăng:

05/8/2025

TÓM TẮT

Nghiên cứu này được thực hiện nhằm khảo sát thành phần hóa học của cây Nổ bò (*Dipteracanthus repens* (L.) Hassk.), họ Ô rô (*Acanthaceae*) để làm cơ sở khoa học cho việc ứng dụng trong y dược và bổ sung dữ liệu hóa thực vật cho loài. Nguyên liệu nghiên cứu là phần trên mặt đất của cây thu hái tại An Giang, được chiết xuất tuần tự bằng các dung môi có độ phân cực khác nhau, sau đó tiến hành phân tách bằng sắc ký cột và sắc ký lớp mỏng, tinh chế bằng kỹ thuật kết tinh lại. Thông qua các phương pháp phổ hiện đại như NMR, MS, cấu trúc hóa học của các hợp chất phân lập được xác định. Kết quả đã tách và nhận diện ba hợp chất tự nhiên, gồm một triterpenoid (lupeol) và hai steroid glycoside (daucosterol và stigmasterol glucoside). Đây là lần đầu tiên các hợp chất này được báo cáo có trong loài Nổ bò tại Việt Nam. Với các hoạt tính sinh học như chống viêm, chống oxy hóa và khả năng hạ đường huyết, các hợp chất phân lập được cho thấy tiềm năng ứng dụng trong nghiên cứu phát triển dược liệu và thuốc hỗ trợ điều trị bệnh.

Từ khóa: *Daucosterol*, *lupeol*, *Nổ bò*, *stigmasterol glucoside*

1. GIỚI THIỆU

Cây Nổ bò (Hình 1) có tên khoa học là *Dipteracanthus repens* (L.) Hassk., thuộc họ Ô rô (*Acanthaceae*) [1] và một số tên đồng nghĩa khác như *Dipteracanthus prostratus* [2], *Ruellia repens* [1] hay tên địa phương còn gọi là ngải bìm bịp. Tại Việt Nam, cây Nổ bò hiện phân bố ở các vùng núi thấp thuộc tỉnh An Giang.

Hiện nay, cây Nổ bò được các thầy thuốc Nam ở Đồng bằng sông Cửu Long sử dụng để hỗ trợ điều trị đái tháo đường, mang lại nhiều cải thiện sức khỏe cho bệnh nhân. Một số nghiên cứu quốc tế đã khảo sát hoạt tính sinh học của dịch chiết từ cây, nhưng chưa đi sâu vào phân tích thành phần hóa học, đặc biệt là chưa có nghiên cứu nào sử dụng phương pháp phổ NMR để phân lập và xác định cấu trúc hợp chất.



Hình 1. Cây Nổ bò

Việc sử dụng loài cây này chủ yếu dựa vào kinh nghiệm dân gian do thiếu cơ sở khoa học. Cho đến nay, chưa có công bố nào nghiên cứu bài bản về dược liệu này. Vì vậy, nghiên cứu hiện tại có ý nghĩa quan trọng trong việc cung cấp dữ liệu hóa học và dược lý, làm nền tảng cho việc bào chế thuốc, ứng dụng y học và bảo tồn nguồn dược liệu quý.

2. THỰC NGHIỆM

2.1. Mẫu thực vật

Toàn bộ phần trên mặt đất của cây Nô bò được thu tại Nhà Bàng, An Giang vào tháng 7/2024 và định danh tại Khoa Sinh học, Trường Sư phạm, Đại học Cần Thơ. Sau khi làm sạch và loại bỏ phần hư hỏng, mẫu vật được sấy ở 50°C đến khi độ ẩm dưới 2%, sau đó nghiền thành bột làm nguyên liệu cho quá trình chiết xuất và phân lập chất.

2.2. Phương pháp thực nghiệm

2.2.1 Chiết xuất và tinh chế

Chiết xuất rắn-lỏng được tiến hành lần lượt với các dung môi methanol, *n*-hexane và ethyl acetate. Dung môi được loại bỏ bằng máy cô quay chân không RE-52A (Trung Quốc).

Sắc ký lớp mỏng (TLC) được thực hiện trên tấm nhôm phủ silica gel 60 F254 (0,25 mm, Merck). Các vết được quan sát dưới UV (bước sóng 254 nm và 365 nm) hoặc sau khi phun dung dịch H₂SO₄ 10% trong ethanol và gia nhiệt ở 105°C trong khoảng 1–2 phút.

Trong sắc ký cột pha thường (CP-CC), sử dụng silica gel 60 (kích thước hạt 0,040–0,063 mm, Merck) làm chất hấp phụ. Các dung môi phân cực tăng dần gồm *n*-hexane (H), chloroform (C), ethyl acetate (E) và methanol (M) được dùng để tách thành phần từ cao chiết. Sản phẩm cuối cùng được tinh chế bằng phương pháp kết tinh lại trong dung môi tinh khiết thích hợp.

2.2.2 Xác định cấu trúc và nhận danh

Điểm nóng chảy được đo bằng thiết bị mao quản RY-1 (Trung Quốc) tại Đại học Cần Thơ. Phổ ¹H-NMR, ¹³C-NMR, DEPT, HSQC và HMBC được ghi bằng máy Bruker AM 500 MHz. Khối phổ (MS) được đo bằng thiết bị HP 1100 LC/MSD Trap (Agilent, USA) tại Viện Hàn lâm Khoa học và Công nghệ Việt Nam.

2.2.3 Quy trình chiết xuất và phân lập

Bột nguyên liệu khô (5,2 kg) được chiết ngâm kiệt bằng *n*-hexane (10 L). Dịch chiết được cô đặc dưới áp suất kém để loại bỏ dung môi, sau đó sấy khô ở khoảng 50°C thu được cao chiết DRH (73,4 g).

Bã sau khi chiết với *n*-hexane được sấy khô ở 50°C (4,9 kg) và tiếp tục chiết kiệt với ethyl acetate, cô loại bỏ dung môi thu được cao DRE (77,2 g).

Từ cao DRH (73,4 g), thực hiện CP-CC với hệ dung môi *n*-hexane: ethyl acetate tỷ lệ tăng dần độ phân cực (H:E, 0–100%E) thu được 9 phân đoạn (DRH1-9).

Phân đoạn DRH2 (H:E 95:5; 2,59 g) được tiếp tục CP-CC với hệ H:E (10:0–9:1), thu được 5 phân đoạn con (DRH2.1–2.5). Phân đoạn con DRH2.2 (H:E 98:2; 0,69 g) được kết tinh lại trong *n*-hexane cô lập được hợp chất NB01 (0,61 g).

Cao DRE (77,2 g) được thực hiện CP-CC hệ dung môi *n*-hexane: ethyl acetate tỷ lệ tăng dần độ phân cực (H:E, 100:0–25:75%) thu được 7 phân đoạn (DRE1–7).

Phân đoạn DRE5 (H:E 5:5; 6,8 g) được thực hiện CP-CC với dung môi H:E (100:0 đến 40:60) thu được 7 phân đoạn con (DRE5.1-5.7). Phân đoạn DRE5.4 (H:E 52:48; 5,1 g) được kết tinh lại nhiều lần trong methanol thu được hợp chất NB03 (5,08 g).

Phân đoạn DRE3 (H:E 85:15; 5,88 g) được đưa vào CP-CC với H:E (100:0 đến 80:20) làm hệ dung môi rửa giải thu được 4 phân đoạn con (DRE3.1-3.4). Phân đoạn DRE3.3 (H:E 85:15; 4,1 g) được kết tinh lại nhiều lần trong methanol thu được hợp chất NB04 (1,96 g).

3. KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

3.1. Tính chất vật lý và dữ liệu phổ nghiệm

Lupeol (NB01): Tinh thể hình kim màu trắng, nhiệt độ nóng chảy 215-216°C, TLC cho vết màu tím sen, không phát quang dưới đèn UV. HR-MS cho ion m/z 427,39397 $[M+H]^+$; 1H -NMR (DMSO, 500 MHz, δ_H ppm, J Hz) và ^{13}C -NMR (DMSO, 125 MHz, δ_C ppm): (Bảng 1).

Daucosterol (NB03): Bột vô định hình màu trắng, nhiệt độ nóng chảy 275-277°C, TLC cho vết màu hồng tím, không phát quang dưới đèn UV. ESI-MS cho ion m/z 577,4 $[M+H]^+$; 1H -NMR ($CDCl_3$ & CD_3OD , 500 MHz, δ_H ppm, J Hz) và ^{13}C -NMR ($CDCl_3$ & CD_3OD , 125 MHz, δ_C ppm): (Bảng 1).

Stigmasterol glucoside (NB04): Bột vô định hình màu trắng nhạt, nhiệt độ nóng chảy 278-280°C, vết TLC màu tím, không phát quang dưới đèn UV. ESI-MS cho ion m/z 575,4 $[M+H]^+$; 1H -NMR (DMSO, 500 MHz, δ_H ppm, J Hz) và ^{13}C -NMR (DMSO, 125 MHz, δ_C ppm): (Bảng 1).

3.2. Cấu trúc hóa học các hợp chất phân lập

3.2.1. Hợp chất NB01

Phổ HR-MS cho tín hiệu ion phân tử giả (IGPT) ở m/z 427,39397 $[M+H]^+$ (tính toán lý thuyết: $C_{30}H_{51}O$, 427,39399), tương ứng với công thức phân tử (CTPT) $C_{30}H_{50}O$ (426,39 đvC, 6 độ bất bão hòa).

Phổ 1H -NMR (Bảng 1) cho 7 tín hiệu proton methyl ở δ_H 0,76; 0,79; 0,83; 0,95; 0,97, 1,03 và 1,65 (3H; *s*). Ở δ_H 4,57 (1H; *s*) và 4,69 (1H; *d*; 2,0 Hz) là các tín hiệu của hai proton loại olefinic methylene và ở δ_H 3,17–3,20 (1H, *m*) là tín hiệu của proton oxymethine. Còn lại là các tín hiệu proton methine và methylene khác ở dạng tín hiệu multiplet (*m*).

Phổ ^{13}C -NMR (Bảng 1) kết hợp với phổ DEPT cho các tín hiệu của tổng số 30 carbon. Trong đó có 7 carbon methyl, 11 carbon

methylene, 6 carbon methine và 6 carbon bậc bốn. Carbon ở δ_C 79,0 là carbon methine mang oxygen. Ngoài ra, tín hiệu ở δ_C 109,3 kết hợp với 2 tín hiệu olefinic proton trên phổ 1H -NMR cho phép xác định đây là tín hiệu đặc trưng của nhóm methylene mang nối đôi.

Từ CTPT $C_{30}H_{50}O$ (6 độ bất bão hòa), với sự hiện diện của 1 nhóm olefinic methylene suy ra hợp chất NB01 đóng 5 vòng. Từ các đặc điểm trên cho phép dự đoán hợp chất NB01 thuộc nhóm triterpene với cấu tạo khung sườn lupane.

So sánh dữ liệu phổ 1D-NMR của NB01 với tài liệu đã công bố [3], hợp chất NB01 được xác định là lupeol (Hình 2). Lần đầu tiên lupeol được phân lập từ cây Nô bò.

3.2.2. Hợp chất NB03

Phổ ESI-MS cho tín hiệu IGPT ở m/z 577,4 $[M+H]^+$ tương ứng với CTPT $C_{35}H_{60}O_6$ (576 đvC, 6 độ bất bão hòa).

Phổ 1H -NMR (Bảng 1) cho 6 tín hiệu proton methyl ở δ_H 0,61; 0,73; 0,77; 0,78 và 0,93 (6H; *s*), 1 tín hiệu của proton loại olefinic methine ở δ_H 5,29 (1H; *d*; 5,0) và 1 tín hiệu của proton methine mang oxygen δ_H 3,47–3,54 (1H, *m*), còn lại là các tín hiệu proton methine và methylene khác. Ngoài ra còn có tín hiệu proton của 1 đơn vị đường hexose dạng β , trong đó ở δ_H 4,33 (1H; *d*; 8,0) là tín hiệu của proton anomer.

Phổ ^{13}C -NMR (Bảng 1) kết hợp với phổ DEPT cho các tín hiệu của tổng số 35 carbon. Trong đó có 29 carbon khung sterol và 6 carbon tương ứng với 1 đơn vị đường D-glucose, ở δ_C 140,1 và 122,0 là tín hiệu của 2 carbon mang nối đôi; ở δ_C 100,9 là tín hiệu của carbon anomer.

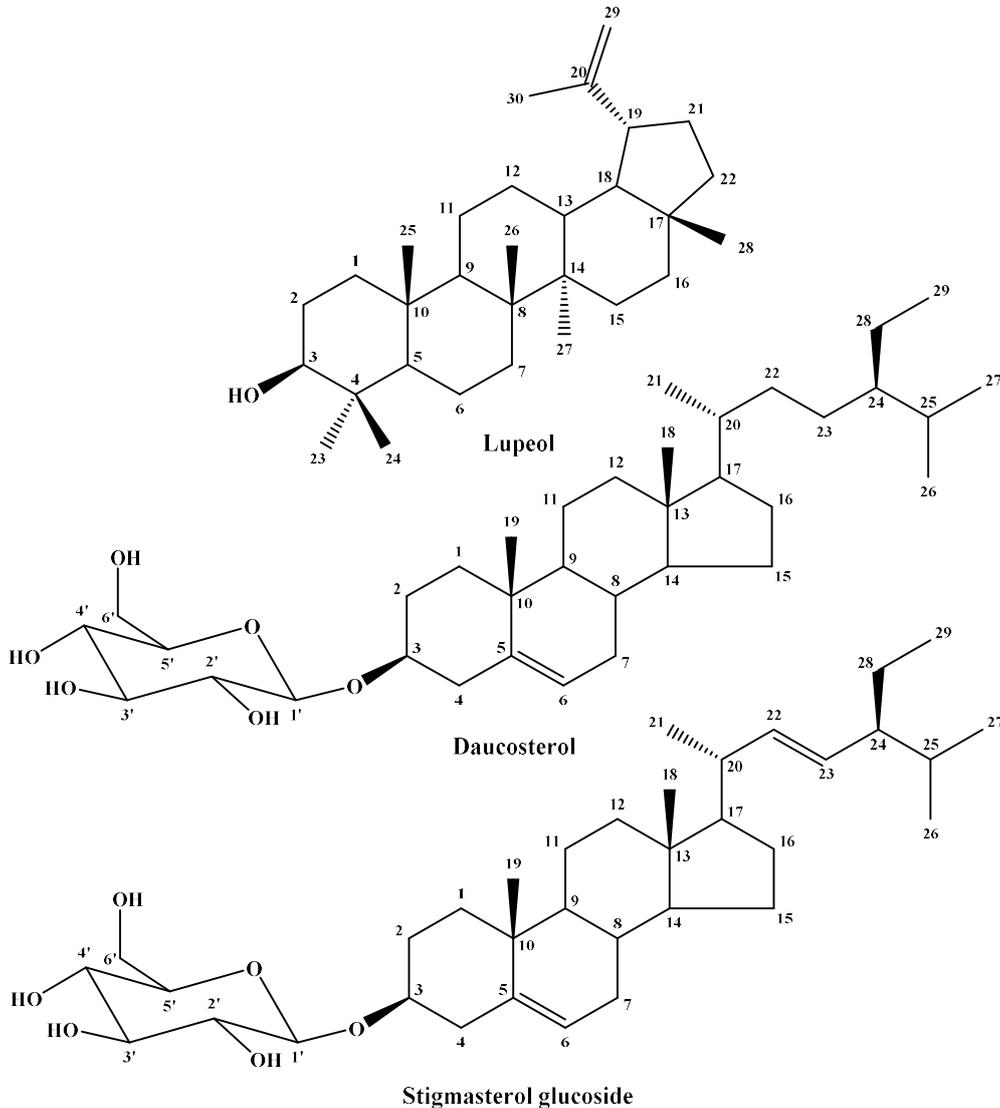
Phổ HSQC và HMBC cho phép xác định đơn vị đường glucose gắn vào khung sterol tại C-3. So sánh các số liệu phổ NMR với tài liệu công bố trước đây [4], hợp chất NB03 được xác định là daucosterol (Hình 2). Daucosterol lần đầu tiên được biết có trong cây Nô bò.

3.2.3. Hợp chất NB04

Phổ ESI-MS cho tín hiệu ion phân tử giả ở m/z 575,4 $[M+H]^+$ tương ứng với CTPT $C_{35}H_{58}O_6$ (574 đvC), phù hợp với CTPT của hợp chất NB03 thêm 1 nối đôi.

Phổ 1H -NMR (Bảng 1) cho 6 tín hiệu proton methyl, 3 tín hiệu của proton loại olefinic methine và 1 tín hiệu của proton methine mang oxygen, còn lại là các tín hiệu proton methine và methylene khác và 1 đơn vị đường hexose dạng β tương tự hợp chất NB03, chỉ khác là có hơn NB03 2 proton methine mang nối đôi (δ_H 5,04 và 5,18).

Phổ ^{13}C -NMR (Bảng 1) kết hợp với phổ DEPT cho thấy tín hiệu của tổng số 35 carbon. Trong đó có 33 carbon hoàn toàn tương tự hợp chất NB03, chỉ khác là tăng 2 olefinic carbon (δ_C 138,0 và 128,8) và giả 2 methylene carbon. Như vậy, NB04 có cùng khung cấu trúc là sterol. So sánh các số liệu phổ NMR với tài liệu đã xuất bản [5], hợp chất NB04 được xác định là stigmasterol-3- O - β -D-glucopyranoside hay còn gọi tắt là stigmasterol glucoside (Hình 2). Stigmasterol glucoside cũng là hợp chất tự nhiên phổ biến trong thực vật nhưng đây là lần đầu tiên được biết có trong cây Nô bò.



Hình 2. Công thức hóa học các hợp chất phân lập

3.3. Một số thông tin chọn lọc về hoạt tính của các hợp chất phân lập

Lupeol khá phổ biến trong các loài thực vật, có các hoạt tính sinh học như chống viêm, kháng oxi hóa, kháng vi sinh vật và kháng ung thư, có thể sử dụng như chất phòng ngừa các bệnh liên quan [6].

Daucosterol thể hiện các hoạt tính sinh học bao gồm tác dụng chống oxy hóa, chống tiểu đường, chống viêm, điều hòa miễn dịch, bảo vệ thần kinh và chống ung thư [7, 8].

Stigmasterol glucoside được biết rộng rãi với tác dụng kháng viêm hiệu quả [9].

Đặc biệt hỗn hợp của daucosterol và stigmasterol glucoside được gọi là charantin có nhiều trong quả mướp đắng (khổ qua rừng). Charantin được cho là có tác dụng hạ đường huyết tương tự như insulin và đã được nghiên cứu về tiềm năng trong việc hỗ trợ điều trị bệnh tiểu đường [10]. Do đó, sự hiện diện của cả 2 hợp chất daucosterol và stigmasterol glucoside trong cây Nổ bò là cơ sở hợp lý cho việc Hội Đông y tỉnh An Giang có thể sử dụng làm thuốc chữa bệnh đái tháo đường.

Bảng 1. Dữ liệu phổ 1D-NMR của các hợp chất phân lập từ Nổ bò

NB01 (Lupeol)		NB03 (Daucosterol)		NB04 (Stigmasterol glucoside)	
¹ H	¹³ C	¹ H	¹³ C	¹ H	¹³ C
1	38,2		37,1		38,3
2	26,9		29,4		29,2
3	3,00 (1H, <i>m</i>)	3,47-3,54 (1H, <i>m</i>)	79,0		77,0
4		1,92-1,95 (1H, <i>m</i>)	38,5	1,81 (1H; <i>brd</i>); 1,16 (1H; <i>brd</i>)	36,8
5	0,69 (3H, <i>s</i>)		140,1		140,5
6		5,29 (1H; <i>d</i> ; 5,0)	122,0	5,32 (1H; <i>t</i> ; 2,0)	121,1
7			31,70		31,3
8		1,89-1,91 (1H, <i>m</i>)	31,74		31,4
9			50,0		49,6
10			36,5		36,2
11			20,9		21,1
12			39,6		40,1
13			42,1		31,3
14			56,6		56,3
15		1,52-1,53 (1H, <i>m</i>)	24,1		24,8
16			28,0		28,4
17		1,48-1,51 (1H, <i>m</i>)	55,9		55,4
18		0,78 (3H, <i>s</i>)	11,6	0,68 (1H, <i>s</i>)	12,1
19	2,37 (1H; <i>dd</i> ; 5,5; 11,0)	0,73 (3H, <i>s</i>)	18,7	0,99 (1H, <i>s</i>)	18,8
20			36,0		41,7
21	1,90 (1H, <i>m</i>)	0,93 (3H, <i>s</i>)	18,5	0,97 (1H, <i>s</i>)	20,6
22			33,8	5,18 (1H; <i>dd</i> ; 8,5; 15,0)	138,0
23	0,94 (3H, <i>s</i>)		25,9	5,04 (1H; <i>dd</i> ; 8,5; 15,0)	128,8
24	1,02 (3H, <i>s</i>)		45,7		50,6
25	0,80 (3H, <i>s</i>)	1,55-1,61 (1H, <i>m</i>)	29,0		31,2
26	1,27 (3H, <i>s</i>)	0,77 (3H, <i>s</i>)	19,5	0,84 (1H, <i>s</i>)	20,9
27	0,90 (3H, <i>s</i>)	0,93 (3H, <i>s</i>)	19,1	0,82 (1H, <i>s</i>)	19,1

NB01 (Lupeol)		NB03 (Daucosterol)		NB04 (Stigmasterol glucoside)	
¹ H	¹³ C	¹ H	¹³ C	¹ H	¹³ C
28	0,79 (3H, s)	17,5	22,9	1,01 (1H, s)	23,9
29	4,69 (d) và 4,56 (dq)	109,0	11,7	0,79 (1H, s)	11,8
30	1,66 (3H, s)	18,7			
1'		4,33 (1H; d; 8,0)	100,9	4,23 (1H; d; 7,5)	100,8
2'			73,4		73,5
3'			75,6		76,7
4'			70,0		70,1
5'			76,2		76,8
6'		3,75-3,78 (1H, m)	61,7	3,64-3,67 (1H, m)	61,1
		3,66-3,70 (1H, m)		3,45-3,49 (1H, m)	

Ghi chú: NB01, NB04 ghi phổ trong DMSO (500/125 MHz), NB03 ghi phổ trong CDCl₃&CD₃OD (500/125 MHz).

4. KẾT LUẬN

Khảo sát bước đầu về thành phần hóa học của cây Nỏ bò (*D. repens*) thu hái tại vùng Bảy Núi, An Giang đã tách được ba hợp chất tự nhiên thuộc nhóm triterpene và sterol gồm: lupeol, daucosterol và stigmasterol glucoside. Nghiên cứu này bổ sung thông tin mới về sự hiện diện của các hợp chất này trong loài *D. repens* tại Việt Nam. Các hợp chất phân lập được đều cho thấy tiềm năng ứng dụng trong lĩnh vực y dược.

Lời cảm ơn

Nhóm tác giả chân thành cảm ơn Đại học Cần Thơ đã hỗ trợ một phần kinh phí cho nghiên cứu (mã số T2024-51), và trân trọng cảm ơn PGS.TS Đặng Minh Quân đã hỗ trợ định danh mẫu thực vật.

Tài liệu tham khảo

[1] Phạm Hoàng Hộ. Cây cỏ Việt Nam, Quyển III. Nhà xuất bản Trẻ ; 2003.

[2] Siti M.Z., Che N.A., Che A. et al. Leaf anatomy and micromorphology of potential medicinal weed *Ruellia repens* (Acanthaceae) from Tasik Chini, Pahang. *Malaysian Journal of Biochemistry & Molecular Biology*. 2021; 1: 131-142.

[3] Imam S., Azhar M.I. Two triterpenes lupanone and lupeol, isolated and identified from *Tamarindus indica*. *Linn. Pak. J. Pharm. Sci*. 2007; 20(2): 125-127.

[4] Sarkar B., Abu R.S.M., Sultana N., Islam M.E. Isolation of two steroids and two flavonoids having antioxidant, antibacterial and cytotoxic properties from aerial stems of *Equisetum debile* Roxb. *National University Journal of Science*. 2014; 1(2): 31-42.

[5] Ahmad R., Alfian N., Nunuk H.S., Tjodi H., and Ian V.A. A stigmasterol glycoside from the root wood of *Melochia umbellata* (Houtt) Stapf var. *degrabrata* K. *Indonesian Journal of Chemistry*. 2012; 12(1): 100-103.

[6] Gallo M.B.C, Sarachine M.J. Biological activities of lupeol. *International Journal of Biomedical and Pharmaceutical Sciences*. 2009; 3(1): 46-66.

[7] Chuanke Z., Tiantian S., Lixin W., et al. Daucosterol inhibits cancer cell proliferation by inducing autophagy through reactive oxygen species-dependent manner. *Life Sciences*. 2015; 137: 37-43.

[8] El Omari N., Jaouadi I., Lahyaoui M., Benali T., et al. Natural sources, pharmacological properties, and health benefits of daucosterol: Versatility of Actions. *Appl. Sci*. 2022; 12: 5779.

[9] Toukam P.D., Tagatsing M.F., Yamthe L.R.T., Baishya G., et al. Novel saponin and benzofuran isoflavonoid with in vitro anti-inflammatory and free radical scavenging activities from the stem bark of *Pterocarpus*

erinaceus (Poir). *Phytochemistry Letters*. 2018; 28: 69-75.

[10] Singh J., Cumming E., Manoharan G., Kalasz H. and Adeghate E. *Medicinal chemistry of the anti-diabetic effects of*

Momordica charantia: active constituents and modes of actions. *The Open Medicinal Chemistry Journal*. 2011; 5(Supple 2-M2): 70-77.

SURVEY ON THE CHEMICAL COMPOSITION OF *Dipteracanthus repens* (L.) HASSK IN THE SEVEN MOUNTAINS REGION OF AN GIANG PROVINCE

ABSTRACT

*This study was conducted to investigate the chemical composition of *Dipteracanthus repens* (L.) Hassk., Acanthaceae family, to provide a scientific basis for its application in medicine and to supplement phytochemical data for the species. The research material is the above-ground part of the plant collected in An Giang, extracted sequentially with solvents of different polarities, then separated by column chromatography and thin layer chromatography, and purified by recrystallization technique. Through modern spectroscopic methods such as NMR, MS, the chemical structures of the isolated compounds were determined. The results isolated and identified three natural compounds, including a triterpenoid (lupeol) and two steroid glycosides (daucosterol and stigmaterol glucoside). This is the first time these compounds have been reported in *Dipteracanthus repens* in Vietnam. With biological activities such as anti-inflammatory, antioxidant and hypoglycemic ability, the isolated compounds show potential application value in research and development of medicinal herbs and supportive drugs for disease treatment.*

Keywords: *Daucosterol, dipteracanthus repens, lupeol, stigmaterol glucoside*