

## MEGASTIGMANES FROM THE AERIAL PART OF *PANDANUS ODORATISSIMUS* LINN.

Do Hoang Giang<sup>1,2</sup>, Nguyen Hai Dang<sup>1</sup>, Nguyen Tien Dat<sup>2\*</sup>, Hoang Le Tuan Anh<sup>2</sup>, Nguyen Ngoc Tung<sup>2</sup>, Dang Thanh Binh<sup>2</sup>, Bui Thi Nhat Le<sup>2</sup>, Tran Thanh Tung<sup>3</sup>, Cao Thanh Hai<sup>4</sup>, Ngo Thi Thuy Ngan<sup>5</sup>

<sup>1</sup>University of Science and Technology of Hanoi – VAST, <sup>2</sup>Center for High Technology Research and Development - VAST

<sup>3</sup>Center for Science and Technology of Inorganic Chemicals and Fertilizers - Vietnam Institute of Industrial Chemistry

<sup>4</sup>TNU - University of Sciences, <sup>5</sup>TNU - University of Medicine and Pharmacy

ARTICLE INFO	ABSTRACT
<b>Received:</b> 15/01/2025	This study presents the isolation and structural elucidation of megastigmanes from the aerial parts of <i>Pandanus odoratissimus</i> , a plant species commonly found in coastal provinces and often used as food and in traditional medicine. The samples were collected in Cam Ranh, Khanh Hoa in May 2021 and subsequently extracted and separated using chromatographic methods, including column and preparative chromatography. The structures of the compounds were elucidated through analysis of Nuclear Magnetic Resonance spectra, Electrospray Ionization Mass Spectrometry, and specific optical rotation. As a result, three compounds were identified: (6 <i>R</i> ,9 <i>R</i> )-3-oxo- $\alpha$ -ionol- $\beta$ -D-glucopyranoside, (6 <i>S</i> ,9 <i>S</i> )-roseoside, and (6 <i>S</i> ,9 <i>S</i> )-vomifoliol. This is the first time these megastigmane compounds have been discovered in <i>P. odoratissimus</i> , meanwhile, (6 <i>R</i> ,9 <i>R</i> )-3-oxo- $\alpha$ -ionol- $\beta$ -D-glucopyranoside has been found for the first time from a <i>Pandanus</i> species. These findings expand the chemical profile of <i>P. odoratissimus</i> and the genus <i>Pandanus</i> . They also provide a foundation for further research on the chemical composition and biological effects of this plant species.
<b>Revised:</b> 17/02/2025	
<b>Published:</b> 19/02/2025	
<b>KEYWORDS</b>	
<i>Pandanus odoratissimus</i>	
Megastigmane	
3-oxo- $\alpha$ -ionol- $\beta$ -D-glucopyranoside	
Roseoside	
Vomifoliol	

## MỘT SỐ HỢP CHẤT MEGASTIGMANE TỪ PHẦN TRÊN MẶT ĐẤT CỦA LOÀI DỨA GỖ (*PANDANUS ODORATISSIMUS* LINN.)

Đỗ Hoàng Giang<sup>1,2</sup>, Nguyễn Hải Đăng<sup>1</sup>, Nguyễn Tiến Đạt<sup>2\*</sup>, Hoàng Lê Tuấn Anh<sup>2</sup>, Nguyễn Ngọc Tùng<sup>2</sup>, Đặng Thanh Bình<sup>2</sup>, Bùi Thị Nhật Lệ<sup>2</sup>, Trần Thanh Tùng<sup>3</sup>, Cao Thanh Hải<sup>4</sup>, Ngô Thị Thuý Ngan<sup>5</sup>

<sup>1</sup>Trường Đại học Khoa học và Công nghệ Hà Nội - Viện Hàn lâm Khoa học và Công nghệ Việt Nam

<sup>2</sup>Trung tâm Nghiên cứu và Phát triển Công nghệ cao - Viện Hàn lâm Khoa học và Công nghệ Việt Nam

<sup>3</sup>Trung tâm Khoa học công nghệ hóa chất vô cơ và phân bón - Viện Hóa học Công nghiệp Việt Nam

<sup>4</sup>Trường Đại học Khoa học - ĐH Thái Nguyên, <sup>5</sup>Trường Đại học Y Dược - ĐH Thái Nguyên

THÔNG TIN BÀI BÁO	TÓM TẮT
<b>Ngày nhận bài:</b> 15/01/2025	Nghiên cứu này trình bày kết quả phân lập và xác định cấu trúc các hợp chất megastigmane từ phần trên mặt đất của cây dứa gỗ ( <i>Pandanus odoratissimus</i> ), một loài thực vật phổ biến tại các tỉnh ven biển, thường được sử dụng làm thực phẩm và dược liệu trong y học cổ truyền. Mẫu nghiên cứu được thu hái tại Cam Ranh, Khánh Hòa, vào tháng 05 năm 2021, sau đó được chiết xuất và phân tách bằng các phương pháp sắc ký hiện đại, bao gồm sắc ký cột và sắc ký điều chế. Cấu trúc các hợp chất được xác định qua phân tích dữ liệu phổ cộng hưởng từ hạt nhân, khối phổ và góc quay cực riêng. Kết quả, ba hợp chất đã được xác định, bao gồm (6 <i>R</i> ,9 <i>R</i> )-3-oxo- $\alpha$ -ionol- $\beta$ -D-glucopyranoside, (6 <i>S</i> ,9 <i>S</i> )-roseoside, và (6 <i>S</i> ,9 <i>S</i> )-vomifoliol. Đây là lần đầu tiên các hợp chất megastigmane này được phát hiện trong cây dứa gỗ, đồng thời, đây cũng là lần đầu tiên hợp chất (6 <i>R</i> ,9 <i>R</i> )-3-oxo- $\alpha$ -ionol- $\beta$ -D-glucopyranoside được phát hiện từ một loài thuộc chi <i>Pandanus</i> . Những kết quả này góp phần làm phong phú thêm dữ liệu về thành phần hóa học của loài <i>P. odoratissimus</i> cũng như chi <i>Pandanus</i> , làm cơ sở cho các nghiên cứu tiếp theo về thành phần hoá học và tác dụng sinh học của loài thực vật này.
<b>Ngày hoàn thiện:</b> 17/02/2025	
<b>Ngày đăng:</b> 19/02/2025	
<b>TỪ KHÓA</b>	
Dứa gỗ	
Megastigmane	
3-oxo- $\alpha$ -ionol- $\beta$ -D-glucopyranoside	
Roseoside	
Vomifoliol	

DOI: <https://doi.org/10.34238/tnu-jst.11900>

\* Corresponding author. Email: [ntdat@chtd.vast.vn](mailto:ntdat@chtd.vast.vn)

## 1. Giới thiệu

Dứa gỗ (*Pandanus odoratissimus* Linn.) là loài thực vật thuộc chi dứa dại (*Pandanus*), họ Pandanaceae, phân bố phổ biến ở các khu vực nhiệt đới và cận nhiệt đới như Việt Nam, Ấn Độ, Thái Lan và một số quốc gia Đông Nam Á khác [1]. Các bộ phận của cây dứa gỗ (*P. odoratissimus*) từ lâu đã được sử dụng trong đời sống hàng ngày cũng như trong y học cổ truyền. Tinh dầu từ lá dứa gỗ (*P. odoratissimus*) được sử dụng để điều trị đau đầu, đau tai và làm thuốc xoa bóp giảm đau nhức cơ xương khớp. Ngoài ra, lá của loài cây này có thể dùng làm kẹo giúp thơm hơi thở hoặc dùng làm chất bảo quản gạo [1]. Chiết xuất từ cây dứa gỗ đã được chứng minh có các hoạt tính kháng virus [2], kháng khuẩn [3], giảm đau [4], chống viêm [5], chống oxy hóa [6], và bảo vệ gan [7]. Các nghiên cứu hóa thực vật chỉ ra rằng lá và thân của loài *P. odoratissimus* chứa các hợp chất như phenolic, tannin, terpenoid, saponin và glycoside [8], [9]. Một số hợp chất từng được phân lập từ loài *P. odoratissimus* có thể kể đến như eudesmin, pinosresinol, epipinosresinol, de-4'-*O*-methyleudesmin và 3,4-bis(4-hydroxy-3-methoxy-benzyl)-tetrahydrofuran [9].

Trong nghiên cứu này, chúng tôi phân lập và xác định cấu trúc của ba hợp chất megastigmane là (6*R*,9*R*)-3-oxo- $\alpha$ -ionol- $\beta$ -D-glucopyranoside, (6*S*,9*S*)-roseoside và (6*S*,9*S*)-vomifoliol. Đây là lần đầu tiên, các hợp chất megastigmane được tìm thấy trong thành phần hoá học của loài dứa gỗ (*P. odoratissimus*).

## 2. Phương pháp nghiên cứu

### 2.1. Mẫu nghiên cứu

Phần trên mặt đất của cây dứa gỗ (*P. odoratissimus*) được thu hái tại Cam Ranh, Khánh Hoà vào tháng 5 năm 2021 và được giám định bởi TS. Bùi Văn Thanh, Viện Sinh thái và Tài nguyên Sinh vật. Mẫu tiêu bản được lưu trữ tại Trung tâm Nghiên cứu Nông dược, Trung tâm Nghiên cứu và Phát triển Công nghệ cao, Viện Hàn lâm Khoa học và Công nghệ Việt Nam.

### 2.2. Vật liệu và phương pháp nghiên cứu

Sắc ký lớp mỏng được thực hiện trên bản mỏng tráng sẵn TLC Silica gel 60 F<sub>254</sub> (Merck). Sắc ký cột được thực hiện với các vật liệu hấp phụ Silica gel 60 có kích thước hạt 0,040-0,063 mm (240-430 mesh ASTM) (Merck, CHLB Đức). Sắc ký điều chế được thực hiện trên hệ thống Agilent 1100 sử dụng cột YMC ODS-A 250×12 mm (L×D), tốc độ dòng dung môi 4 mL/phút. Phổ cộng hưởng từ hạt nhân được đo trên máy Bruker Avance 600 MHz (chất chuẩn nội là Tetramethylsilane - TMS) tại Viện Hóa học, Viện Hàn lâm Khoa học và Công nghệ Việt Nam. Phổ ESI-MS được đo trên thiết bị Thermo LCQ Fleet LC/MS tại Trung tâm Nghiên cứu và Phát triển Công nghệ cao, Viện Hàn lâm Khoa học và Công nghệ Việt Nam.

### 2.3. Thực nghiệm

Phần trên mặt đất của cây dứa gỗ (28 kg) được rửa sạch bằng nước, sau đó cắt nhỏ và sấy khô ở 50 °C rồi nghiền nhỏ thành bột (3,9 kg). Mẫu bột được chiết với 30 L methanol trong bể siêu âm ở 40 °C trong vòng 60 phút (lặp lại 4 lần). Toàn bộ dịch chiết được gom lại, cất loại hoàn toàn dung môi thu được cạn chiết tổng (125 g). Cạn chiết này được phân tán trong 4 L nước và chiết phân bố lần lượt với n-hexane (4 L × 3 lần) và ethyl acetate (4 L × 3 lần), thu lại từng pha hữu cơ rồi cất loại dung môi để thu được phân đoạn hexane (23,7 g) và phân đoạn ethyl acetate (31,3 g).

Phân đoạn ethyl acetate được phân tách trên cột sắc ký silica gel với hệ dung môi rửa giải CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> – MeOH (100/0 – 0/100, v/v) thu được mười phân đoạn E1-E10. Phân đoạn E8 (2,34 g) được phân tách trên cột sắc ký silica gel với hệ dung môi rửa giải CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> – MeOH (9/1, v/v) thu được sáu phân đoạn E8.1 – E8.6. Phân đoạn E8.6 (201 mg) được tinh chế trên hệ thống sắc ký điều chế với gradient dung môi 20-60% MeOH trong 120 phút thu được hợp chất **1** (11,2 mg). Phân đoạn E8.7 (345 mg) được phân tách trên cột sắc ký silicagel với hệ dung môi rửa giải CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> – MeOH – nước (5/1/0,05, v/v/v) thu được hợp chất **2** (3,0 mg). Phân đoạn E6 (658 mg)

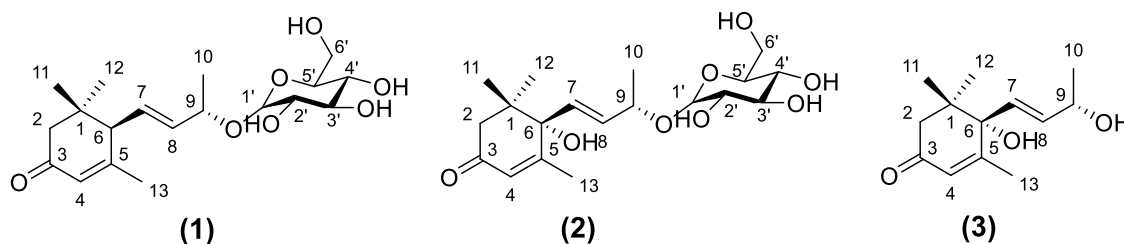
được phân tách trên hệ thống sắc ký điều chế với gradient dung môi 30-75% MeOH trong 140 phút thu được hợp chất 3 (3,6 mg).

Cấu trúc của các chất được thể hiện trong Hình 1. Dữ liệu phổ của các hợp chất 1-3 được trình bày dưới đây.

**(6*R*,9*R*)-3-oxo- $\alpha$ -ionol- $\beta$ -D-glucopyranoside(1):** bột màu trắng,  $[\alpha]_D^{25} -89,5$  ( $c = 0,56$ ; MeOH). ESI-MS:  $m/z$  371  $[M+H]^+$ ;  $^1H$  NMR ( $CD_3OD$ , 600 MHz): Xem Bảng 1;  $^{13}C$  NMR ( $CDCl_3$ , 150 MHz): Xem Bảng 1.

**(6*S*,9*S*)-Roseoside (2):** bột màu trắng,  $[\alpha]_D^{25} +68,9$  ( $c = 0,62$ ; MeOH). ESI-MS:  $m/z$  387  $[M+H]^+$ ;  $^1H$  NMR ( $CD_3OD$ , 600 MHz): Xem Bảng 2.  $^{13}C$  NMR ( $CDCl_3$ , 150 MHz): Xem Bảng 2.

**(6*S*,9*S*)-Vomifoliol (3):** chất rắn không màu,  $[\alpha]_D^{25} +121,8$  ( $c = 0,58$ ; MeOH). ESI-MS:  $m/z$  225  $[M+H]^+$ ;  $^1H$  NMR ( $CD_3OD$ , 600 MHz): Xem Bảng 2.  $^{13}C$  NMR ( $CDCl_3$ , 150 MHz): Xem Bảng 2.



Hình 1. Cấu trúc của các hợp chất được phân lập

### 3. Kết quả và bàn luận

Hợp chất 1 thu được dưới dạng chất bột vô định hình màu trắng. Trên phổ khối lượng ESI-MS của 1 xuất hiện pic ion phân tử tại  $m/z$  371  $[M+H]^+$  cho phép xác định khối lượng phân tử 370 Da. Trên phổ  $^1H$  NMR của hợp chất 1 xuất hiện tín hiệu của hai proton methylene tại 2,46 (1H; d;  $J = 16,8$  Hz; H-2a) và 2,08 (1H; d;  $J = 16,8$ ; H-2b), một tín hiệu proton nhóm methine  $sp^3$  tại 2,71 (1H; d;  $J = 9,0$  Hz; H-6), một tín hiệu proton oxymethine tại 4,43 (1H; m; H-9), bốn nhóm methyl tại 1,32 (3H; t;  $J = 6,6$  Hz; H-10), 1,05 (3H; s; H-11), 1,03 (3H; s; H-12), 1,96 (3H; brs; H-13), một cặp tín hiệu proton olefin tại 5,68 (1H; dd;  $J = 15,0$ ; 9,0 Hz; H-7) và 5,81 (1H; dd;  $J = 15,0$ ; 6,6 Hz; H-8) cùng một tín hiệu proton olefin khác tại 5,91 (1H; brs; H-4). Bên cạnh đó, phổ  $^1H$  NMR của hợp chất 1 còn xuất hiện tín hiệu của một proton anomer tại 4,38 (1H; d;  $J = 7,8$  Hz; H-1'), cùng các tín hiệu oxymethine và oxymethylene của một phân tử đường glucose tại 3,20 (1H; dd;  $J = 8,1$ ; 7,8 Hz; H-2'), 3,35 (1H; m; H-3'), 3,33 (1H; m; H-4'), 3,34 (1H; m; H-5'), 3,87 (1H;  $J = 12,0$ ; 5,4 Hz; H-6'a) và 3,69 (1H; dd;  $J = 12,0$ ; 5,4 Hz; H-6'b). Cấu hình  $\beta$  của phân tử glucose được xác định thông qua hằng số tương tác  $J = 7,8$  Hz của proton H-1'. Trên phổ  $^{13}C$  NMR và DEPT của hợp chất 1 xuất hiện 18 tín hiệu carbon, trong đó có một tín hiệu nhóm carbonyl tại 202,1 (C-3), hai cặp tín hiệu carbon olefin tại 126,2 (C-4), 165,9 (C-5) và 128,8 (C-7), 138,2 (C-8). Độ chuyển dịch hoá học của C-5 tại 165,9 ppm cho phép xác định hệ liên kết đôi liên hợp giữa C-4, C-5 với nhóm carbonyl tại vị trí C-3. Bên cạnh đó, phổ  $^{13}C$  NMR và DEPT của hợp chất 1 còn có sự xuất hiện của 4 nhóm methyl tại 21,0 (C-10), 28,1 (C-11), 27,6 (C-12), 23,8 (C-13), một nhóm methine  $sp^3$  tại 56,8 (C-6) và một nhóm methine liên kết với phân tử đường tại 77,0 (C-9). Dữ liệu phổ của hợp chất 1 (Bảng 1) trùng khớp với dữ liệu của hợp chất megastigmane glycoside là 3-oxo- $\alpha$ -ionol- $\beta$ -D-glucopyranoside [10]. Cấu hình 6*R*,9*R* của hợp chất 1 được xác định qua sự tương đồng của giá trị  $[\alpha]_D^{25} -89,5$  cũng như sự trùng khớp về độ chuyển dịch hoá học của C-6 và C-9 (H-9) với các hợp chất tham khảo có cấu hình tương tự [10], [11]. Từ các dữ kiện này, có thể kết luận hợp chất 1 là (6*R*,9*R*)-3-oxo- $\alpha$ -ionol- $\beta$ -D-glucopyranoside.

Hợp chất 2 thu được dưới dạng chất bột vô định hình màu trắng. Trên phổ khối lượng ESI-MS của 2 xuất hiện pic ion phân tử tại  $m/z$  387  $[M+H]^+$  cho phép xác định khối lượng phân tử 386 Da. Trên phổ  $^1H$  NMR của hợp chất 2 xuất hiện tín hiệu của hai proton methylene tại 2,70 (1H; d;  $J = 16,8$  Hz; H-2a), 2,55 (1H; d;  $J = 16,8$  Hz; H-2b), một tín hiệu proton oxymethine tại 4,57

(1H; m; H-9), bốn nhóm methyl tại 1,32 (3H; t;  $J = 7,2$  Hz; H-10), 1,06 (3H; s; H-11), 1,04 (3H; s; H-12), 1,96 (3H; brs; H-13), một cặp tín hiệu proton olefin tại 5,77 (1H; dd;  $J = 15,0; 9,0$  Hz; H-7), 6,01 (1H; dd;  $J = 15,0; 6,6$  Hz; H-8), cùng một tín hiệu proton olefin khác tại 5,89 (1H; brs; H-4). Trên phổ  $^1\text{H}$  NMR của hợp chất **2** cũng xuất hiện tín hiệu của một proton anomer tại 44,30 (1H; d;  $J = 8,4$  Hz; H-1') và các tín hiệu oxymethine và oxymethylene tại 33,37 (1H; dd;  $J = 8,1; 7,8$  Hz; H-2'), 3,33 (1H; m; H-3'), 3,27 (1H; m; H-4'), 3,19 (1H; m; H-5'), 3,88 (1H;  $J = 12,0; 5,4$ ; H-6'a), 3,67 (1H; dd;  $J = 12,0; 5,4$  Hz; H-6'b), cho phép dự đoán sự xuất hiện của một phân tử  $\beta$ -D-glucose tương tự như hợp chất **1**. Trên phổ  $^{13}\text{C}$  NMR và DEPT của hợp chất **2** xuất hiện 18 tín hiệu carbon, trong đó có một tín hiệu nhóm carbonyl tại 202,2 (C-3), hai cặp tín hiệu carbon olefin tại 127,2 (C-4), 167,1 (C-5) và 131,5 (C-7), 133,7 (C-8). Độ chuyển dịch hoá học của C-5 tại 167,1 ppm cho phép xác định hệ liên kết đôi liên hợp giữa C-4, C-5 với nhóm carbonyl tại vị trí C-3. Bên cạnh đó, phổ  $^{13}\text{C}$  NMR và DEPT của hợp chất **1** còn có sự xuất hiện của 4 nhóm methyl tại 22,2 (C-10), 23,5 (C-11), 24,7 (C-12), 19,6 (C-13), một nhóm oxymethine tại 75,2 (C-9). Có thể thấy, phổ  $^1\text{H}$  và  $^{13}\text{C}$  NMR của hợp chất **2** khá tương đồng với dữ liệu phổ của hợp chất **1**. Tuy nhiên, trên phổ  $^{13}\text{C}$  NMR của hợp chất **2** có sự xuất hiện của một carbon không liên kết hydro và có liên kết trực tiếp với oxy tại 80,0 (C-6) thay thế cho tín hiệu nhóm methine  $\text{sp}^3$  tại 56,8 (C-6) ở hợp chất **1**. Sự chênh lệch 16 Da về khối lượng phân tử giữa hai hợp chất cũng khẳng định sự xuất hiện thêm của một nhóm hydroxy trong cấu trúc của hợp chất **2**. Dựa vào các dữ liệu trên, kết hợp so sánh với tài liệu tham khảo (Bảng 2), có thể xác định hợp chất **2** là roseoside [11]. Cấu hình 6*S*,9*S* được xác định qua sự tương đồng về giá trị  $[\alpha]_{\text{D}}^{25} + 68,9$  cũng như độ chuyển dịch hoá học của C-6 và C-9 (H-9) với dữ liệu của (6*S*,9*S*)-roseoside trong các công bố trước đây [11], [12]. Vì vậy, hợp chất **2** được xác định là (6*S*,9*S*)-roseoside.

**Bảng 1.** So sánh dữ liệu phổ NMR của hợp chất **1** với (6*R*,9*R*)-3-oxo- $\alpha$ -ionol- $\beta$ -D-glucopyranoside

Vị trí	Hợp chất <b>1</b> (CD <sub>3</sub> OD)		(6 <i>R</i> ,9 <i>R</i> )-3-oxo- $\alpha$ -ionol- $\beta$ -D-glucopyranoside (CD <sub>3</sub> OD) [10]	
	$^{13}\text{C}$ ( $\delta_{\text{C}}$ , ppm), 150 MHz	$^1\text{H}$ ( $\delta_{\text{H}}$ , ppm), 600 MHz	$^{13}\text{C}$ ( $\delta_{\text{C}}$ , ppm), 100 MHz	$^1\text{H}$ ( $\delta_{\text{H}}$ , ppm), 400 MHz
1	37,1		36,5	
2	48,0	2,46 (1H; d; $J = 16,8$ Hz) 2,08 (1H; d; $J = 16,8$ Hz)	47,7	2,46 (1H; d; $J = 16,8$ Hz) 2,07 (1H; d; $J = 16,8$ Hz)
3	202,1		201,6	
4	126,2	5,90 (1H; brs)	125,7	5,91 (1H; brs)
5	165,9		165,8	
6	56,8	2,71 (1H; d; $J = 9,0$ Hz)	56,6	2,71 (1H; d; $J = 9,1$ Hz)
7	128,8	5,68 (1H; dd; $J = 15,0; 9,0$ Hz)	128,4	5,68 (1H; dd; $J = 15,5; 9,1$ Hz)
8	138,2	5,81 (1H; dd; $J = 15,0; 6,6$ Hz)	137,6	5,81 (1H; dd; $J = 15,5; 6,4$ Hz)
9	77,0	4,43 (1H; m)	76,4	4,43 (1H; m)
10	21,0	1,32 (3H; t; $J = 6,6$ Hz)	20,3	1,32 (3H; t; $J = 6,0$ Hz)
11	28,1	1,05 (3H; s)	27,6	1,06 (3H; s)
12	27,6	1,03 (3H; s)	27,1	1,04 (3H; s)
13	23,8	1,96 (3H; brs);	23,2	1,97 (3H; d; $J = 1,2$ Hz)
1'	102,5	4,38 (1H; d; $J = 7,8$ Hz)	102,0	4,38 (1H; d; $J = 7,2$ Hz)
2'	75,3	3,20 (1H; dd; $J = 8,4; 7,8$ Hz);	74,8	3,21 (1H; dd; $J = 8,0; 7,6$ Hz)
3'	78,1	3,35 (1H; m);	77,6	3,35 (1H; m)
4'	71,5	3,33 (1H; m);	71,1	3,33 (1H; m)
5'	78,0	3,34 (1H; m);	77,5	3,34 (1H; m)
6'	62,7	3,87 (1H; $J = 12,0; 5,4$ Hz) 3,69 (1H; dd; $J = 12,0; 5,4$ Hz)	62,20	3,87 (1H; m) 3,69 (1H; dd; $J = 11,8; 5,3$ Hz)

Hợp chất **3** thu được dưới dạng chất rắn không màu. Trên phổ khối lượng ESI-MS của **3** xuất hiện pic ion phân tử tại  $m/z$  225  $[\text{M}+\text{H}]^+$  cho phép xác định khối lượng phân tử 224 Da. Trên phổ  $^1\text{H}$  NMR của hợp chất **3** xuất hiện các tín hiệu tương đồng với phần aglycol của hợp chất **2**, bao gồm tín hiệu của hai proton methylene tại 2,72 (1H; d;  $J = 16,8$  Hz; H-2a), 2,56 (1H; d;  $J = 16,8$ ; H-2b), một tín hiệu proton oxymethine tại 4,60 (1H; m; H-9), bốn nhóm methyl tại 1,30 (3H; t;  $J$

= 7,2 Hz; H-10), 1,02 (3H; s; H-11), 1,01 (3H; s; H-12), 1,90 (3H; brs; H-13), một cặp tín hiệu proton olefin tại 5,76 (1H; dd;  $J = 15,0; 9,0$  Hz; H-7), 6,03 (1H; dd;  $J = 15,0; 6,6$  Hz; H-8), cùng một tín hiệu proton olefin khác tại 5,91 (1H; brs; H-4). Trên phổ  $^{13}\text{C}$  NMR và DEPT của hợp chất **3** xuất hiện 13 tín hiệu carbon bao gồm bốn tín hiệu nhóm methyl tại 23,0 (C-10), 23,9 (C-11), 24,0 (C-12), 19,0 (C-13); một tín hiệu nhóm carbonyl tại 197,4 (C-3), hai cặp tín hiệu carbon olefin tại 125,5 (C-4), 164,4 (C-5), và 127,9 (C-7), 135,9 (C-8), một nhóm oxymethine tại 75,2 (C-9) và một carbon không liên kết hydro và có liên kết trực tiếp với oxy tại 77,8 (C-6). Qua các dữ liệu trên, kết hợp với tài liệu tham khảo (Bảng 2) có thể khẳng định hợp chất **3** là vomfoliol [11], [12]. Giá trị  $[\alpha]_D^{25} +121,8$  và sự trùng khớp về dữ liệu phổ của **3** với phần aglycol của hợp chất **2** cho phép xác định hợp chất này là (6*S*,9*S*)-vomifoliol.

**Bảng 2.** So sánh dữ liệu phổ NMR của hợp chất 2 và 3 với (6*S*,9*S*)-roseoside

No.	Hợp chất 2 (CD <sub>3</sub> OD)		Hợp chất 3 (CD <sub>3</sub> OD)		(6 <i>S</i> ,9 <i>S</i> )-Roseoside (CD <sub>3</sub> OD) [11]	
	$^{13}\text{C}$ ( $\delta_{\text{C}}$ ; ppm), 150 MHz	$^1\text{H}$ ( $\delta_{\text{H}}$ ; ppm), 600 MHz	$^{13}\text{C}$ ( $\delta_{\text{C}}$ ; ppm), 150 MHz	$^1\text{H}$ ( $\delta_{\text{H}}$ ; ppm), 600 MHz	$^{13}\text{C}$ ( $\delta_{\text{C}}$ ; ppm), 75 MHz	$^1\text{H}$ ( $\delta_{\text{H}}$ ; ppm), 300 MHz
1	42,4		42,4		42,5	
2	50,6	2,70 (1H; d; $J = 16,8$ Hz) 2,55 (1H; d; $J = 16,8$ Hz)	50,7	2,55 (1H; d; $J = 16,8$ Hz) 2,20 (1H; d; $J = 16,8$ Hz)	50,8	2,17 (1H; d; $J = 17,0$ Hz) 2,61 (1H; d; $J = 17,0$ Hz)
3	201,2		201,1		201,3	
4	127,2	5,89 (1H; brs)	127,1	5,89 (1H; brs)	127,2	5,87 (1H; quint.; $J = 1,0$ Hz)
5	167,1		167,4		167,2	
6	80,0		79,9		80,1	
7	131,5	5,77 (1H; dd; $J = 15,0; 9,0$ Hz)	130,1	5,77 (1H; dd; $J = 15,0; 9,0$ Hz)	133,8	5,97 (1H; dd; $J = 15,5; 10,0$ Hz)
8	133,7	6,01 (1H; dd; $J = 15,0; 6,6$ Hz)	136,9	5,82 (1H; dd; $J = 15,0; 6,6$ Hz)	134,7	5,73 (1H; dd; $J = 15,5; 7,5$ Hz)
9	75,2	4,57 (1H; m)	68,7	4,36 (1H; m)	74,7	4,53 (1H; quint.-like; $J = 6,5$ Hz)
10	22,2	1,32 (3H; t; $J = 7,2$ Hz)	23,0	1,27 (3H; d; $J = 7,2$ Hz)	22,3	1,29 (3H; d; $J = 6,5$ Hz)
11	23,5	1,06 (3H; s)	23,9	1,06 (3H; s)	23,5	1,01 (3H; s)
12	24,7	1,04 (3H; s)	24,0	1,04 (3H; s)	24,7	1,04 (3H; s)
13	19,9	1,96 (3H; brs)	19,0	1,94 (3H; brs)	19,6	1,94 (3H; d; $J = 9,0$ Hz);
1'	101,3	4,30 (1H; d; $J = 8,4$ Hz)			100,3	4,27 (1H; d; $J = 7,5$ Hz)
2'	74,7	3,37 (1H; dd; $J = 8,1; 7,8$ Hz)			75,0	3,19 (1H; dd; $J = 8,5; 7,5$ Hz)
3'	78,2	3,33 (1H; m)			78,4	3,28 (1H; t; $J = 8,5$ Hz)
4'	71,6	3,27 (1H; m)			71,7	3,24 (1H; t; $J = 8,5$ Hz)
5'	78,1	3,19 (1H; m)			78,3	3,14 (1H; ddd; $J = 8,5; 6,5$ Hz)
		3,88 (1H; $J = 12,0; 5,4$ Hz)				3,63 (1H; dd; $J = 12,0; 6,0$ Hz)
6'	62,8	3,67 (1H; dd; $J = 12,0; 5,4$ Hz)			62,9	3,85 (1H; dd; $J = 12,0; 6,5$ Hz)

Như vậy, từ phần trên mặt đất của loài dứa gỗ (*P. odoratissimus*), ba hợp chất megastigmane đã được phân lập bao gồm (6*R*,9*R*)-3-oxo- $\alpha$ -ionol- $\beta$ -D-glucopyranoside, (6*S*,9*S*)-roseoside và (6*S*,9*S*)-vomifoliol. Các nghiên cứu trước đây đã tìm thấy khá nhiều lớp hoạt chất chuyên hoá thứ cấp phenolic, tannin, terpenoid, saponin và glycoside trong cây dứa gỗ (*P. odoratissimus*) [8], [9]. Nghiên cứu này lần đầu tiên phát hiện các hợp chất megastigmane trong thành phần hóa học của loài thực vật này, trong đó, hợp chất (6*R*,9*R*)-3-oxo- $\alpha$ -ionol- $\beta$ -D-glucopyranoside lần đầu tiên được phát hiện từ một loài thuộc chi *Pandanus*.

#### 4. Kết luận

Ba hợp chất megastigmane đã được phân lập và xác định từ cây dứa gổ (*P. odoratissimus*), bao gồm (6*R*,9*R*)-3-oxo- $\alpha$ -ionol- $\beta$ -D-glucopyranoside, (6*S*,9*S*)-roseoside, và (6*S*,9*S*)-vomifoliol. Đây là lần đầu tiên các hợp chất megastigmane được phát hiện trong hóa học thực vật của loài này. Kết quả của nghiên cứu đã cung cấp những thông tin mới, làm cơ sở khoa học cho những nghiên cứu sâu hơn trên đối tượng cây dứa gổ cũng như các loài khác của chi dứa dại trong tương lai. Các hợp chất megastigmane được biết đến với nhiều tiềm năng sinh học trong lĩnh vực dược liệu, y học và thực phẩm. Bởi vậy, nghiên cứu này có thể mở ra triển vọng ứng dụng các hợp chất kể trên trong phát triển sản phẩm có giá trị sinh học từ cây dứa gổ. Tuy nhiên, nghiên cứu mới chỉ dừng lại ở việc phân lập và xác định cấu trúc các hợp chất, chưa có đánh giá cụ thể về hoạt tính sinh học. Do đó, những nghiên cứu chuyên sâu về tác dụng sinh học của các hợp chất và cao chiết từ cây dứa gổ (*P. odoratissimus*) cần được triển khai trong tương lai nhằm làm rõ hơn tiềm năng ứng dụng của loài thực vật này trong các lĩnh vực y dược học và thực phẩm.

#### Lời cảm ơn

Nghiên cứu này được thực hiện với sự hỗ trợ của Viện Hàn lâm Khoa học và Công nghệ Việt Nam trong khuôn khổ nhiệm vụ "Phát triển nhóm nghiên cứu xuất sắc hạng I về ứng dụng các phương pháp phân tích hiện đại trong nghiên cứu chất lượng và an toàn thực phẩm", mã số: NCXS01.02/23-25, phối hợp cùng nhóm nghiên cứu mạnh Toptier Research Group Phytomedicine thuộc trường Đại học Khoa học và Công nghệ Hà Nội, Viện Hàn lâm Khoa học và Công nghệ Việt Nam.

#### TÀI LIỆU THAM KHẢO/ REFERENCES

- [1] P. P. Adkar and V. H. Bhaskar, "Pandanus odoratissimus (Kewda): A Review on Ethnopharmacology, Phytochemistry, and Nutritional Aspects," *Advances in Pharmacological and Pharmaceutical Sciences*, vol. 2014, no. 1, 2014, Art. no. 120895.
- [2] L. S. M. Ooi, S. S. M. Sun, and V. E. C. Ooi, "Purification and characterization of a new antiviral protein from the leaves of *Pandanus amaryllifolius* (Pandanaeae)," *The International Journal of Biochemistry & Cell Biology*, vol. 36, no. 8, pp. 1440-1446, 2004.
- [3] D. Kumar, S. Kumar, S. Kumar, J. Singh, C. Sharma, and K. Aneja, "Antimicrobial and preliminary phytochemical screening of crude leaf extract of *Pandanus odoratissimus* L.," *Pharmacologyonline*, vol. 2, pp. 600-610, 2010.
- [4] U. Al, N. Ojeh, S. Gupta, R. Up, S. Vijayalakshmi, R. Rajput, A. Rajput, D. Benegal, A. Benegal, S. Rao, S. Rao, and S. Nisarga, "Analgesic Activity of *Pandanus fascicularis* Lam.," *Pharmacologyonline*, vol. 2, pp. 837-840, 2011.
- [5] R. Londonkar, A. Kamble, and C. Reddy, "Anti-Inflammatory Activity of *Pandanus odoratissimus* Extract," *International Journal of Pharmacology*, vol. 6, no. 3, pp. 311-314, 2010.
- [6] R. Londonkar and A. Kamble, "Evaluation of Free Radical Scavenging Activity of *Pandanus odoratissimus*," *International Journal of Pharmacology*, vol. 5, no. 6, pp. 377-380, 2010.
- [7] I. Rangasamy and J. Roshy, "Hepatoprotective and hepatocurative activity of the traditional medicine ketaki (*Pandanus odoratissimus* Roxb.)," *Asian Journal of Traditional Medicines*, vol. 5, no. 6, pp. 212-218, 2006.
- [8] S. Sanjeeva, R. Kumar, N. Ojeh, S. Gupta, U. Al, V. Patil, P. Kodancha, D. Benegal, A. Benegal, S. Rao, S. Rao, and S. Nisarga, "Antioxidant activity of methanol extract of *Pandanus fascicularis* Lam.," *Pharmacologyonline*, vol. 1, pp. 833-841, 2011.
- [9] T.-T. Jong and S.-W. Chau, "Antioxidative Activities of constituents Isolated from *Pandanus odoratissimus*," *Phytochemistry*, vol. 49, no. 7, pp. 2145-2148, 1998.
- [10] N. Sfaksi, A. Bottone, M. Masullo, S. Bicha, S. Piacente, S. Benayache, A. Bentamène, K. Rebbas, and F. Benayache, "Phytochemical investigation of *Volutaria lippii* and evaluation of the antioxidant activity," *Natural Product Research*, vol. 38, no. 7, pp. 1280-1286, 2024.
- [11] Y. Yamano and M. Ito, "Synthesis of Optically Active Vomifoliol and Roseoside Stereoisomers," *Chemical and Pharmaceutical Bulletin*, vol. 53, no. 5, pp. 541-546, 2005.
- [12] H. G. Do, T. N. L. Bui, H. D. Nguyen, T. T. T. Nguyen, T. T. N. Ngo, L. T. A. Hoang, N. T. Nguyen, and T. D. Nguyen, "Shikimate esters, megastigmane and glycoside from leaves of *Pandanus amaryllifolius*," *Journal of Tropical Science and Technology*, vol. 35, pp. 82-88, 2024.