

IDENTIFICATION OF CHEMICAL CONSTITUENTS IN THE EXTRACT OF *CRATOXYLUM PRUNIFLORUM* (KURZ) KURZ USING ULTRA PERFORMANCE LIQUID CHROMATOGRAPHY COUPLED WITH QUADRUPOLE TIME-OF-FLIGHT MASS SPECTROMETRY (UPLC-QToF-MS)

Nguyen Phu Binh, Luu Tran Duc Luong, Luong Van Luyen, Ngo Tuan Vinh*

Viet Bac Highlands High School

| ARTICLE INFO | ABSTRACT |
|--|--|
| <p>Received: 21/01/2025</p> <p>Revised: 27/02/2025</p> <p>Published: 27/02/2025</p> | <p>This study analyzes the chemical composition of <i>Cratoxylum pruniflorum</i> using UPLC-QToF-MS. The analysis reveals 80 compounds belonging to various chemical groups in <i>Cratoxylum pruniflorum</i>, including flavonoids, phenolics, alkaloids, and terpenoids. Flavonoids such as cyanidin, quercetin, and epicatechin gallate are identified as compounds with notable biological activities, including anticancer, cardioprotective, and antioxidant effects. The <i>Cratoxylum pruniflorum</i> extract also contains alkaloids such as oxazepam, liriodenine, and reserpine, which exhibit antimicrobial, and anticancer properties. Additionally, ganoderic acid G, HT-2 toxin, and maytenin of the terpenoid group have been widely studied, with ganoderic acid G showing potential for cancer treatment and organ protection, while maytenin demonstrates the ability to induce apoptosis in head and neck cancer cells. Some compounds with coloring ability include Cyanidin, Quercetin, and Epicatechin Gallate, Delphinidin, Protocatechuic acid, and 1,4-Dihydroxyanthraquinone. This study highlights the potential of <i>Cratoxylum pruniflorum</i> for drug development and biological coloring.</p> |
| <p>KEYWORDS</p> <p><i>Cratoxylum pruniflorum</i> UPLC-QToF-MS Antioxidant activity Anticancer activity Antimicrobial activity</p> | |

XÁC ĐỊNH THÀNH PHẦN HÓA HỌC TRONG DỊCH CHIẾT CÂY THÀNH NGÀNH *CRATOXYLUM PRUNIFLORUM* (KURZ) KURZ BẰNG PHÂN TÍCH SẮC KÝ LỒNG GHÉP NỐI KHỐI PHỔ TỬ CỰC THỜI GIAN BAY (UPLC-QToF-MS)

Nguyễn Phú Bình, Lưu Trần Đức Lương, Lương Văn Luyện, Ngô Tuấn Vinh*

Trường Phổ thông Vùng cao Việt Bắc

| THÔNG TIN BÀI BÁO | TÓM TẮT |
|---|--|
| <p>Ngày nhận bài: 21/01/2025</p> <p>Ngày hoàn thiện: 27/02/2025</p> <p>Ngày đăng: 27/02/2025</p> | <p>Nghiên cứu này phân tích thành phần hóa học của cây Thành ngành bằng phương pháp khối phổ phân giải cao UPLC-QToF-MS. Kết quả phân tích đã chỉ ra 80 hợp chất trong cây Thành ngành thuộc nhiều nhóm chất khác nhau như flavonoid, phenolic, alkaloid và terpenoid. Các hợp chất trong nhóm flavonoid như cyanidin, quercetin và epicatechin gallate là những hợp chất có hoạt tính sinh học điển hình như tác dụng chống ung thư, bảo vệ tim mạch và chống oxy hóa. Dịch chiết cây Thành ngành còn chứa các alkaloid như oxazepam, liriodenine và reserpine, với tác dụng an thần, kháng khuẩn và chống ung thư. Bên cạnh đó, ganoderic acid G, HT-2 toxin và maytenin trong nhóm terpenoid đã được nghiên cứu nhiều, với ganoderic acid G có tác dụng điều trị ung thư và bảo vệ các cơ quan, trong khi maytenin cho thấy khả năng kích thích apoptosis ở tế bào ung thư đầu và cổ. Một số hợp chất có khả năng nhuộm màu như Cyanidin, Quercetin và Epicatechin Gallate, Delphinidin, Protocatechuic acid và 1,4-Dihydroxyanthraquinone. Nghiên cứu này chỉ ra tiềm năng sử dụng cây Thành ngành trong phát triển thuốc và nhuộm màu sinh học.</p> |
| <p>TỪ KHÓA</p> <p>Thành ngành UPLC-QToF-MS Kháng oxi hoá Hoạt tính kháng ung thư Hoạt tính kháng khuẩn</p> | |

DOI: <https://doi.org/10.34238/tnu-jst.11934>

* Corresponding author. Email: ngotuanvinhvc@gmail.com

1. Giới thiệu

Cratoxylum là một chi thực vật có hoa từ khu vực nhiệt đới châu Á, được sử dụng trong y học truyền thống của nhiều cộng đồng. Lá, vỏ và rễ của một số loài chế biến thành dầu trị sốt, ho, tiêu chảy, ngứa, loét và bệnh dạ dày [1]. Một số loài trong chi này được dùng làm rau trong ẩm thực Thái Lan, với rễ và lá điều trị các bệnh tiêu hóa và ngoài da. *Cratoxylum pruniflorum* (*C. pruniflorum*) có trong thành phần trà Kudung của Trung Quốc dùng chữa sốt, ho và tiêu chảy. Loài này hiện có mặt ở các quốc gia Đông Nam Á, trong đó lá được dùng làm rau hoặc nấu canh ở Việt Nam, lá cùng hoa được dùng điều trị vết thương ngoài da và ho [2], [3]. Hiện nay, các hợp chất phân lập từ các cây trong chi *Cratoxylum* chủ yếu được tổng hợp thông qua các phương pháp sắc ký như sắc ký lỏng hiệu năng cao (HPLC - high-performance liquid chromatography), sắc ký lỏng áp suất trung bình (MPLC - medium-pressure liquid chromatography) và cột sắc ký. Hơn 270 hợp chất đã được phân lập từ các loài trong chi *Cratoxylum*, trong đó bao gồm các nhóm hóa học như xanthone, anthraquinone, flavonoid, benzophenone, triterpenoid, phytosterol, tocopherol, mono-phenol và coumarin [4]. Hợp chất formosumone A có cấu trúc flavanone kết hợp với phloroglucinol, lần đầu tiên được phát hiện trong họ Clusiaceae. Toxyloxanthone B và vismione D cho thấy tác dụng chống viêm thần kinh và bảo vệ thần kinh, đặc biệt là chống lại sự giảm khả năng sống sót của tế bào do β -amyloid gây ra [5]. Các thành phần như vismione B, feruloylcholine và caffeic acid có tác dụng chống ung thư dạ dày qua con đường sản sinh ROS và tín hiệu chu kỳ tế bào. Thí nghiệm *in vitro* cho thấy *C. pruniflorum* ức chế sự phát triển và di chuyển tế bào ung thư, tăng ROS nội bào, ngừng chu kỳ tế bào, kích thích apoptosis và pyroptosis. Kết quả này chứng tỏ *C. pruniflorum* có tiềm năng trong điều trị ung thư dạ dày và cung cấp cơ sở cho việc ứng dụng trong lâm sàng [6]. Caged-xanthone và Formoxanthone C phân lập từ rễ của cây *C. pruniflorum* đã làm giảm sự biểu hiện của NF- κ B, protein P-glycoprotein, sự di chuyển và xâm lấn tế bào, cũng như khả năng hình thành khối u của tế bào ung thư phổi A549 [7], [8]. Nghiên cứu này có mục tiêu là sử dụng phương pháp phân tích khối phổ phân giải cao thời gian bay UPLC-QtoF-MS nhằm xác định các hợp chất hóa học có trong dịch chiết từ cây Thành ngạnh (*C. pruniflorum*) phân bố tại Việt Nam.

2. Vật liệu và phương pháp nghiên cứu

2.1. Thu thập và định loại mẫu

Mẫu cây thuốc được thu thập theo các bước đã được mô tả bởi Nguyễn Nghĩa Thìn [9]. Việc xác định tên khoa học của các loài cây được thực hiện thông qua sự hỗ trợ của các chuyên gia, kết hợp với việc đối chiếu với "Từ điển cây thuốc Việt Nam" (phiên bản mới) [10] để đảm bảo tính chính xác và đồng nhất trong quá trình nhận diện mẫu nghiên cứu.

2.2. Chiết xuất dịch chiết tổng số từ cây Thành ngạnh

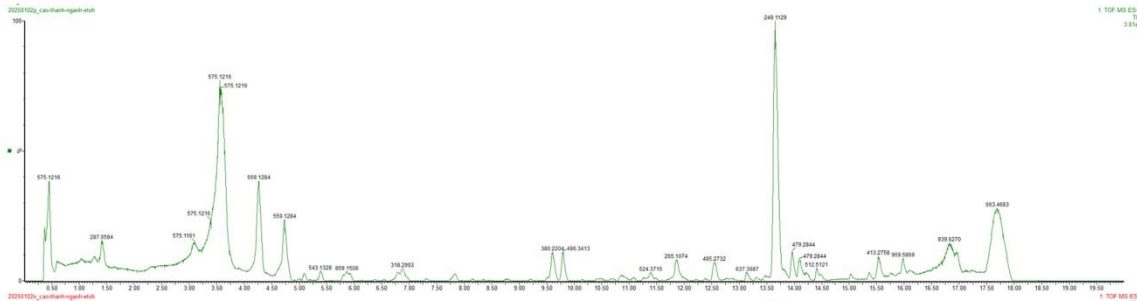
Các bước tiến hành thu dịch chiết cây Thành ngạnh bao gồm: thân cây Thành ngạnh được chặt nhỏ thành lát và sấy khô ở nhiệt độ 50 °C trong 72 h. Tiếp theo, mẫu sau chiết trong dung môi ethanol 95%, lắc đều 200 vòng/phút trong 24 h. Dịch được lọc qua giấy lọc Whatmann đường Φ 220 mm. Cao được cô đặc sau đó được làm khô ở nhiệt độ 50 °C trong 48 h và được bảo quản ở nhiệt độ -20 °C.

2.3. Phân tích phổ UPLC-QtoF-MS

Thành phần hóa học các hợp chất có trong cây Thành ngạnh được phân tích bằng phương pháp ghép nối sắc ký UPLC và khối phổ Xevo G3 ESI/QTOF. Mẫu được chuẩn bị bằng cách hòa tan 10 mg chiết xuất khô trong MeOH và lọc qua màng 0,22 μ m. Phổ khối được thu thập qua ion hóa phun điện ở chế độ dương và âm, với các thông số điện áp và nhiệt độ cụ thể. Phân tích được thực hiện ở chế độ quét toàn dải từ m/z 50 đến 1100. Việc chú thích các đỉnh dựa trên mô hình phân mảnh và thư viện Waters Traditional Medicine.

3. Kết quả và thảo luận

3.1. Thành phần hóa học của cây Thành ngạnh



Hình 1. Phổ phân tích UPLC-QToF-MS dịch chiết cây Thành ngạnh

Kết quả phân tích phổ UPLC-QToF-MS (Hình 1 và Bảng 1) cho thấy, 80 hợp chất khác nhau được xác định, chủ yếu là flavonoid, phenolic, alkaloid và các dẫn xuất phức tạp, bao gồm cyanidin, quercetin, epicatechin gallate và các hợp chất khác như beta-N-Methylaminoalanine và phlorobenzophenone. Nhiều hợp chất có mặt trong Bảng 1 có thể được phân loại vào các nhóm phân tử quan trọng trong nghiên cứu dược lý như cyanidin, quercetin và epicatechin gallate. Một số hợp chất có trọng lượng phân tử cao, như ganoderic acid G và schweinfurthin E, có thể là các ứng viên tiềm năng trong nghiên cứu về y học. Việc phân tích chi tiết các hợp chất này mở ra tiềm năng phát triển các phương pháp điều trị mới trong y học và dược lý.

Bảng 1. Thành phần hóa học của dịch chiết thân cây Thành ngạnh

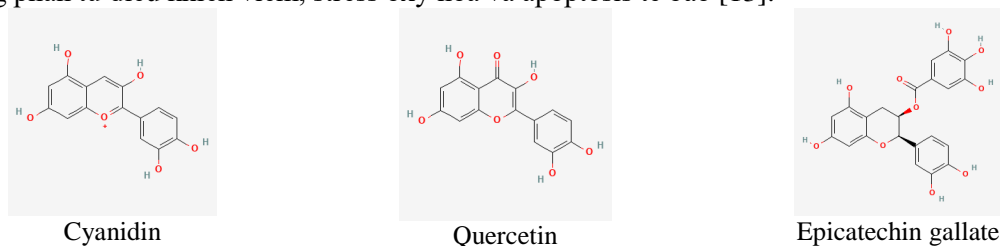
| TT | Tên hợp chất | RT (min) | m/z | Công thức hóa học |
|----|--|----------|---------|---|
| 1 | Choline [M] ⁺ | 0,371 | 104,106 | C ₅ H ₁₄ NO ⁺ |
| 2 | Betaine | 0,401 | 118,086 | C ₅ H ₁₁ NO ₂ |
| 3 | beta-N-Methylaminoalanine | 0,432 | 119,086 | C ₄ H ₁₀ N ₂ O ₂ |
| 4 | 2-Aminobenzoic acid | 0,436 | 138,054 | C ₇ H ₇ NO ₂ |
| 5 | 4H-chromen-4-one | 0,436 | 147,043 | C ₉ H ₆ O ₂ |
| 6 | alpha-Keto-gamma-(methylthio)butyric acid | 0,447 | 149,027 | C ₅ H ₈ O ₃ S |
| 7 | Phthalamic acid | 0,451 | 166,050 | C ₈ H ₇ NO ₃ |
| 8 | Vanillin | 0,453 | 175,040 | C ₈ H ₈ O ₃ |
| 9 | Protocatechuic acid | 0,453 | 177,019 | C ₇ H ₆ O ₄ |
| 10 | Phosphocholine | 0,455 | 184,075 | C ₅ H ₁₅ NO ₄ P ⁺ |
| 11 | A alpha C | 0,615 | 184,081 | C ₁₁ H ₉ N ₃ |
| 12 | Scopoletin | 1,020 | 193,050 | C ₁₀ H ₈ O ₄ |
| 13 | N-alpha-acetyl-l-asparagine | 1,042 | 197,047 | C ₆ H ₁₀ N ₂ O ₄ |
| 14 | Phlorobenzophenone | 1,417 | 231,065 | C ₁₃ H ₁₀ O ₄ |
| 15 | 4-methoxy-7-methyl-5H-furo[3,2-g]chromen-5-one | 2,296 | 231,069 | C ₁₃ H ₁₀ O ₄ |
| 16 | 2-(4-hydroxyphenyl)-4H-chromen-4-one | 4,255 | 239,071 | C ₁₅ H ₁₀ O ₃ |
| 17 | 1,4-dihydroxyanthraquinone | 4,262 | 241,051 | C ₁₄ H ₈ O ₄ |
| 18 | Diallyl phthalate | 4,262 | 247,096 | C ₁₄ H ₁₄ O ₄ |
| 19 | (R)-9-hydroxy-8,8-dimethyl-9,10-dihydropyrano[2,3-f]chromen-2(8H)-one | 4,262 | 247,100 | C ₁₄ H ₁₄ O ₄ |
| 20 | 8-hydroxy-3-(4-oxopentyl)-3,4-dihydroisochromen-1-one [IIN-based: Match] | 4,262 | 249,116 | C ₁₄ H ₁₆ O ₄ |
| 21 | 4,7,8-trimethoxy-3,5-dimethylchromen-2-one | 4,264 | 265,107 | C ₁₄ H ₁₆ O ₅ |
| 22 | 3,9-dihydroxy-6H-[1]benzofuro[3,2-c]chromen-6-one | 4,266 | 269,049 | C ₁₅ H ₈ O ₅ |
| 23 | 6-hydroxy-2-(4-methoxyphenyl)-4H-chromen-4-one | 4,333 | 269,083 | C ₁₆ H ₁₂ O ₄ |
| 24 | Nordazepam | 4,709 | 271,063 | C ₁₅ H ₁₁ C ₁ N ₂ O |
| 25 | 3,3',4',7-tetrahydroxyflavylium chloride | 4,713 | 272,067 | C ₁₅ H ₁₁ O ₅ ⁺ |

| TT | Tên hợp chất | RT (min) | m/z | Công thức hóa học |
|----|--|----------|---------|---|
| 26 | Isopalmitic acid | 4,801 | 274,276 | C ₁₆ H ₃₂ O ₂ |
| 27 | oleate | 5,386 | 283,269 | C ₁₈ H ₃₄ O ₂ |
| 28 | Stearamide | 5,386 | 284,299 | C ₁₈ H ₃₇ NO |
| 29 | Cyanidin | 5,388 | 287,054 | C ₁₅ H ₁₁ O ₆ ⁺ |
| 30 | Oxazepam | 6,371 | 287,058 | C ₁₅ H ₁₁ ClN ₂ O ₂ |
| 31 | liriodenine | 6,539 | 298,047 | C ₁₇ H ₉ NO ₃ |
| 32 | Phellopterin | 6,792 | 301,108 | C ₁₇ H ₁₆ O ₅ |
| 33 | Delphinidin | 6,874 | 303,048 | C ₁₅ H ₁₁ O ₇ |
| 34 | Quercetin | 7,312 | 303,052 | C ₁₅ H ₁₀ O ₇ |
| 35 | 2,4-dihydroxyheptadecyl acetate | 7,826 | 313,277 | C ₁₉ H ₃₈ O ₄ |
| 36 | Sodium Tetradecyl Sulfate | 7,828 | 317,176 | C ₁₄ H ₃₀ O ₄ S |
| 37 | D-ribo-Phytosphingosine | 7,828 | 318,303 | C ₁₈ H ₃₉ NO ₃ |
| 38 | 2-Hydroxy-3-[(10-methyl-2,7-dioxo-5-oxecanyl)sulfanyl]propanoic acid | 8,3488 | 327,088 | C ₁₃ H ₂₀ O ₆ S |
| 39 | Methyl 4,6'-dihydroxy-6-methyl-3-oxo-3'-(2-oxopropyl)-3H-spiro[1-benzofuran-2,1'-cyclohex[4]ene]-2'-carboxylate | 9,324 | 343,118 | C ₁₉ H ₂₀ O ₇ |
| 40 | Piperonyl butoxide | 9,498 | 361,197 | C ₁₉ H ₃₀ O ₅ |
| 41 | diacetylsongorine | 9,504 | 380,220 | C ₂₂ H ₃₁ NO ₃ |
| 42 | 3-[5-hydroxy-7-methoxy-2,3-dimethyl-6-(3-methylbut-2-enyl)-4-oxo-2,3-dihydrochromen-8-yl]hexanoic acid | 9,511 | 387,221 | C ₂₃ H ₃₂ O ₆ |
| 43 | Deoxycholic acid | 9,602 | 393,307 | C ₂₄ H ₄₀ O ₄ |
| 44 | Kushenol A | 9,602 | 409,200 | C ₂₅ H ₂₈ O ₅ |
| 45 | Lup-20(29)-en-3-ol | 9,740 | 409,388 | C ₃₀ H ₅₀ O |
| 46 | 3-(acetyloxymethyl)-5-(2-formyl-4-hydroxy-5,5,8a-trimethyl-1,4,4a,6,7,8-hexahydronaphthalen-1-yl)pent-2-enoic acid [IIN-based on: CCMSLIB00000845030] | 9,793 | 415,210 | C ₂₂ H ₃₂ O ₆ |
| 47 | Maytenin | 10,142 | 421,277 | C ₂₈ H ₃₆ O ₃ |
| 48 | 3-(4-chlorophenyl)-5-hydroxy-10-(1-methyl-1H-pyrazol-4-yl)-9,10-dihydropyrano[2,3-f]chromene-4,8-dione methyl (R)-4-((3R,5S,7R,8R,9S,10S,13R,14S,15S,17R)-3,7,15-trihydroxy-10,13-dimethylhexadecahydro-1H-cyclopenta[a]phenanthren-17-yl)pentanoate | 10,236 | 423,071 | C ₂₂ H ₁₅ ClN ₂ O ₅ |
| 49 | HT-2 Toxin | 11,075 | 423,309 | C ₂₅ H ₄₂ O ₅ |
| 50 | Methyl 3-[(1E,3E)-3,5-dimethyl-1,3-heptadien-1-yl]-8-hydroxy-6a,8-dimethyl-6-oxo-6a,8,9,9a-tetrahydro-6H-furo[2,3-h]isochromene-9-carboxylate | 11,587 | 425,215 | C ₂₂ H ₃₂ O ₈ |
| 51 | Ochrolifuanine A | 11,854 | 437,192 | C ₂₄ H ₃₀ O ₆ |
| 52 | [(2R,3R,4R,5R)-2-(2,4-dioxypyrimidin-1-yl)-4-hydroxy-5-(hydroxymethyl)oxolan-3-yl] 4-hydroxy-2-methoxy-6-methylbenzoate | 11,854 | 439,291 | C ₂₉ H ₃₄ N ₄ |
| 53 | Mappain | 11,854 | 447,078 | C ₁₈ H ₂₀ N ₂ O ₉ |
| 54 | 1-tridecanoyl-2-hydroxy-sn-glycero-3-phosphocholine | 11,856 | 449,273 | C ₂₉ H ₃₆ O ₄ |
| 55 | 2,4,6-trihydroxy-5-[1-(4-hydroxy-1,1,4,7-tetramethyl-1a,2,3,4a,5,6,7a,7b-octahydrocyclopropa[h]azulen-7-yl)-3-methylbutyl]benzene-1,3-dicarbaldehyde | 11,859 | 454,289 | C ₂₁ H ₄₄ NO ₇ P |
| 56 | Epicatechin gallate | 12,219 | 455,278 | C ₂₈ H ₄₀ O ₆ |
| 57 | 4-(3,7-diacetoxy-5-hydroxy-4-oxo-4H-chromen-2-yl)-1,2-phenylene diacetate | 12,379 | 465,081 | C ₂₂ H ₁₈ O ₁₀ |
| 58 | 6-oxopristimerol derivative | 12,379 | 471,092 | C ₂₃ H ₁₈ O ₁₁ |
| 59 | 10-Acetoxy-4a-hydroxy-1,1,3,6,9-pentamethyl-4-oxo- | 12,536 | 479,279 | C ₃₀ H ₃₈ O ₅ |
| 60 | 1a,4,4a,5,6,7,7a,10,11,11a-decahydro-1H-cyclopenta[a]cyclopropa[f][11]annulen-7-yl benzoate | 12,550 | 481,257 | C ₂₉ H ₃₆ O ₆ |
| 61 | Schweinfurthin E | 13,134 | 495,273 | C ₃₀ H ₃₈ O ₆ |

| TT | Tên hợp chất | RT (min) | m/z | Công thức hóa học |
|----|--|----------|----------|---|
| 62 | 2-((4R)-4-((5R,7R,8R,9S,10S,12S,13R,17R)-7,12-dihydroxy-10,13-dimethyl-3-oxohexadecahydro-1H-cyclopenta[a]phenanthren-17-yl)pentanamido)ethane-1-sulfonic acid" | 13,134 | 496,275 | C ₂₆ H ₄₃ NO ₇ S |
| 63 | (2-([3-(hexadecanoyloxy)-2-hydroxypropyl phosphonato]oxy)ethyl)trimethylazanium 11-(3-acetamido-2-methylpropyl)-6a,8a,9-trimethyl-10-oxo- | 13,173 | 496,336 | C ₂₄ H ₅₀ NO ₇ P |
| 64 | 1,3,4,5,6,6a,6b,7,8,8a,8b,9,10,12,12a,12b-hexadecahydropentaleno[2,1-a]phenanthren-4-yl acetate | 13,189 | 496,341 | C ₃₁ H ₄₅ NO ₄ |
| 65 | 13,20-Dihydroxy-8,14-dimethoxy-4,10,12,16-tetramethyl-3-oxo-2-azabicyclo[16.3.1]docosa-1(22),4,10,18,20-pentaen-9-yl carbamate | 13,304 | 519,307 | C ₂₈ H ₄₂ N ₂ O ₇ |
| 66 | Ergovaline | 13,323 | 534,267 | C ₂₉ H ₃₅ N ₅ O ₅ |
| 67 | 5,7-dihydroxy-6-[3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]-8-[3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxochromen-2-one | 13,641 | 541,116 | C ₂₁ H ₂₆ O ₁₅ |
| 68 | Melezitose | 13,665 | 543,132 | C ₁₈ H ₃₂ O ₁₆ |
| 69 | Ganoderic Acid G | 13,667 | 555,291 | C ₃₀ H ₄₄ O ₈ |
| 70 | 2-(3,4-dihydroxyphenyl)-5,7-dihydroxy-4-oxo-2,3-dihydrochromen-3-yl]-5,7-dihydroxy-2-(4-hydroxyphenyl)chromen-4-one | 13,737 | 557,103 | C ₃₀ H ₂₀ O ₁₁ |
| 71 | 2-(acetoxymethyl)-6-((3-methoxy-1,4-dioxo-1,4-dihydronaphthalen-2-yl)thio)tetrahydro-2H-pyran-3,4,5-triyl triacetate | 13,848 | 573,106 | C ₂₅ H ₂₆ O ₁₂ S |
| 72 | 3-(3,4-Dihydroxyphenyl)-2-propenoyl]oxy)ethyl)-2-(beta-D-glucopyranosyloxy)-3-vinyl-3,4-dihydro-2H-pyran-5-carboxylic acid | 13,957 | 577,1353 | C ₂₅ H ₃₀ O ₁₃ |
| 73 | 5-(3-methoxyphenyl)-1,3-dioxo-11,11a-dihydro-1H-imidazo[1',5':1,6]pyrido[3,4-b]indol-2(3H,5H,6H)-yl)benzamido)-4-methylpentanoic acid | 13,959 | 581,244 | C ₃₃ H ₃₂ N ₄ O ₆ |
| 74 | Pheophorbide A | 13,978 | 593,27 | C ₃₅ H ₃₆ N ₄ O ₅ |
| 75 | 2-[4,6-dihydroxy-2-nonyl-3-[(2S,3R,4S,5S,6R)-3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxyphenoxy]-6-(hydroxymethyl)oxane-3,4,5-triol | 14,087 | 593,282 | C ₂₇ H ₄₄ O ₁₄ |
| 76 | Dereplicator Identification - (3R)-9'-cis-1'-Methoxy-3',4'-didehydro-1 | 14,114 | 599,445 | C ₄₁ H ₅₈ O ₃ |
| 77 | lappaconitine | 14,406 | 607,302 | C ₃₂ H ₄₄ N ₂ O ₈ |
| 78 | 3-[(Z)-5-[6-hydroxy-5,5,8a-trimethyl-2-methylidene-3-[3,4,5-trihydroxy-6-(hydroxymethyl)oxan-2-yl]oxy-3,4,4a,6,7,8-hexahydro-1H-naphthalen-1-yl]-3-methylpent-2-enoyl]-3-oxopropanoic acid | 14,408 | 609,270 | C ₂₉ H ₄₆ O ₁₁ |
| 79 | Reserpine | 15,363 | 609,276 | C ₃₃ H ₄₀ N ₂ O ₉ |
| 80 | Euphorbia factor L14 - Lathyrane diterpenoid | 15,367 | 659,287 | C ₃₈ H ₄₂ O ₁₀ |

Nhóm hợp chất flavonoid có trong cây Thành ngạnh có sự đa dạng với 20 hợp chất khác nhau đã được chỉ ra gồm **16; 22; 23; 25; 29; 33; 34; 44; 48; 57; 58; 70**. Trong nhóm này thì cyanidin, quercetin và epicatechin gallate (Hình 2) đã được chỉ ra là có nhiều hoạt tính sinh học quan trọng. Cyanidin (**29**) đã được chỉ ra trong các nghiên cứu trước đây có tác dụng chống đột biến trong mô hình vi khuẩn và ức chế ung thư, đặc biệt là u đại tràng và ung thư đại tràng [11]. Bên cạnh đó, cyanidin còn thể hiện tính chất chống viêm và bảo vệ DNA khỏi tổn thương, ngăn ngừa đột biến do tia UV gây ra [11]. Quercetin (**34**) có tác dụng bảo vệ sức khỏe, bao gồm giảm nguy cơ mắc các bệnh tim mạch, ung thư và loãng xương. Ngoài ra, quercetin cũng giúp giảm huyết áp và nồng độ lipoprotein mật độ thấp ở người thừa cân và bệnh nhân huyết áp cao [12]. Epicatechin gallate (**57**) là polyphenol tìm thấy phổ biến nhất trong trà xanh. Nhờ vào khả năng tương tác với

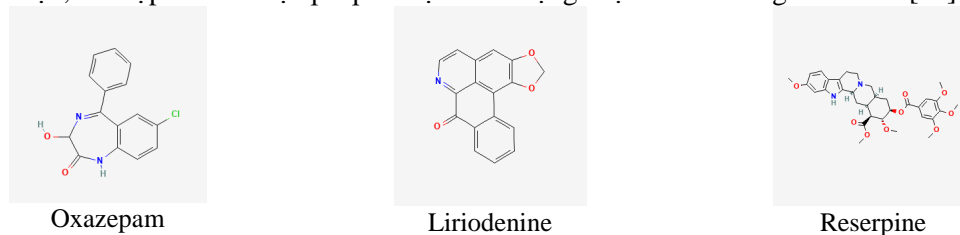
các con đường tín hiệu và các yếu tố phiên mã nhân, Epicatechin gallate tác động lên các con đường phân tử điều khiển viêm, stress oxy hóa và apoptosis tế bào [13].



Hình 2. Cấu trúc hóa học của các hợp chất Cyanidin, Quercetin và Epicatechin gallate

3.3. Nhóm hợp chất alkanoid

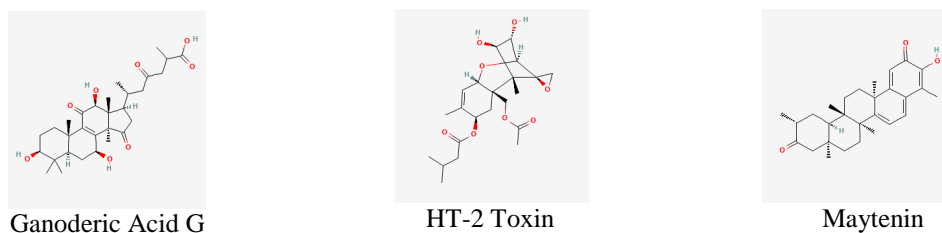
Nhóm alkanoid được xác định gồm 11 hợp chất bao gồm các hợp chất số **7; 11; 24; 30; 31; 52; 66; 73; 74; 77; 79**. Ba hợp chất có hoạt tính sinh học điển hình đã được nghiên cứu gồm Oxazepam (**30**), Liriodenine (**31**) và Reserpine (**79**) (Hình 3). Oxazepam là một thành phần quan trọng tạo ra thuốc benzodiazepine có tác dụng an thần, giảm lo âu và căng thẳng. Oxazepam được biết đến vì tính an toàn và hiệu quả trong điều trị các vấn đề tâm lý [14]. Liriodenine là một alkanoid thuộc loại oxoaporphine. Hợp chất này đã chứng minh có sự đa dạng về tác dụng sinh học, bao gồm các hoạt tính chống ung thư, kháng khuẩn, chống ký sinh trùng và diệt côn trùng. Bên cạnh đó, liriodenine còn thể hiện khả năng ức chế các enzyme như topoisomerase và cholinesterase [15]. Có nghiên cứu cho thấy reserpine gây trầm cảm, được sử dụng với liều thấp trong thời gian dài và chủ yếu nghiên cứu ở những bệnh nhân không mắc bệnh tâm thần [16]. Vì vậy, nghiên cứu hiện nay đang tiến hành đánh giá tác động của reserpine với liều vừa phải trong một khoảng thời gian có hạn, kết hợp với các liệu pháp ổn định tâm trạng hoặc thuốc chống trầm cảm [16].



Hình 3. Cấu trúc hóa học của các hợp chất Oxazepam, Liriodenine và Reserpine

3.4. Nhóm hợp chất terpenoid

Các hợp chất terpenoid được xác định gồm hợp chất số **39, 41, 45-47, 50, 56, 59, 60, 69, 72, 78, 80**. Trong số đó, Ganoderic Acid G (**69**), HT-2 Toxin (**50**) và Maytenin (**47**) được nghiên cứu nhiều và được chỉ ra là có hoạt tính sinh học rõ rệt nhất (Hình 4). Ganoderic acid là các hợp chất triterpenoid phức tạp được chỉ ra là có tiềm năng điều trị nhiều loại ung thư bao gồm ung thư gan, tuyến tiền liệt, vú và dạ dày, cùng với tác dụng bảo vệ gan, tim và xương. Ganoderic acid hoạt động thông qua các cơ chế chính như thúc đẩy apoptosis trong tế bào ung thư, can thiệp vào chu kỳ tế bào, và điều chỉnh phản ứng stress oxy hóa, can thiệp vào con đường tín hiệu quan trọng như PI3K/AKT/mTOR, NF- κ B, và JAK3/STAT3 [17]. Toxin HT-2 được chỉ ra là có độc tính, gây hại cho sức khỏe động vật và con người, ức chế tổng hợp protein và gây suy giảm miễn dịch, dẫn đến các triệu chứng như giảm cân, tiêu chảy và tử vong [18]. Nghiên cứu đánh giá độc tính của maytenin trên chuột SCID cấy ghép khối u từ tế bào ung thư biểu mô vảy cho thấy maytenin có hoạt tính kích thích apoptosis đối với các dòng tế bào ung thư đầu và cổ. Hợp chất này đã gây sự sản sinh quá mức của ROS và giảm sự biểu hiện đối với microRNA-27a và microRNA-20a/miR-17-5p [19].



Ganoderic Acid G

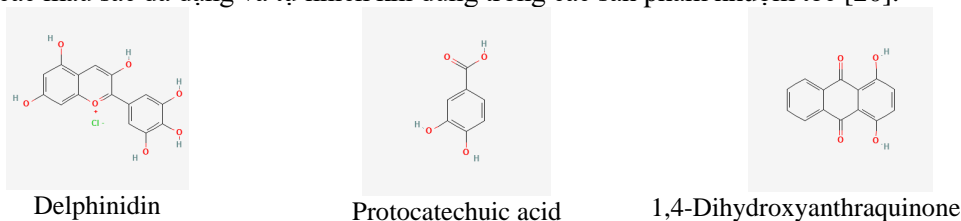
HT-2 Toxin

Maytenin

Hình 4. Cấu trúc hóa học của các hợp chất Ganoderic Acid G, HT-2 Toxin và Maytenin

3.5. Nhóm hợp chất có khả năng nhuộm màu đen

Thành ngạnh không chỉ là một cây thuốc mà nó còn được sử dụng bởi một số dân tộc thiểu số trong tục nhuộm răng đen. Dựa trên những dữ liệu đã được công bố, bên cạnh 3 hợp chất đã được chỉ ra trong nhóm flavonoid là Cyanidin (**29**), Quercetin (**34**) và Epicatechin Gallate (**57**) còn có các hợp chất Delphinidin (**34**), Protocatechuic acid (**9**), 1,4-Dihydroxyanthraquinone (**17**) (Hình 5) đã được ghi nhận trong các nghiên cứu trước đây về khả năng nhuộm tóc của chúng [20]. Những hợp chất này có thể tác động đến sắc tố tóc thông qua cơ chế tạo màu tự nhiên nhờ vào cấu trúc hóa học của chúng. Quercetin và Epicatechin Gallate, là những flavonoid, có thể tạo ra màu nâu, trong đó Protocatechuic acid có thể giúp ổn định màu sắc và tăng độ bền màu. Hợp chất như 1,4-Dihydroxyanthraquinone cũng đã được xác định có khả năng tạo màu bền vững, đóng góp vào việc tạo nên các màu sắc đa dạng và tự nhiên khi dùng trong các sản phẩm nhuộm tóc [20].



Delphinidin

Protocatechuic acid

1,4-Dihydroxyanthraquinone

Hình 5. Cấu trúc hóa học của các hợp chất có khả năng nhuộm màu

4. Kết luận

Nghiên cứu thành phần hóa học của Thành ngạnh đã xác định được nhiều hợp chất tiềm năng như cyanidin, quercetin, epicatechin gallate, ganoderic acid G và maytenin, với các hoạt tính sinh học đáng chú ý như chống viêm, ung thư, bảo vệ tim mạch và an thần. Các hợp chất này có giá trị ứng dụng trong y học, đặc biệt trong điều trị ung thư và các bệnh lý về thần kinh, gan. Tuy nhiên, việc đánh giá hoạt tính của các hợp chất riêng rẽ về hoạt tính sinh học *in vitro* và *in vivo* chưa được triển khai trong nghiên cứu này. Các thử nghiệm cận lâm sàng và lâm sàng tiếp theo là cần thiết để khẳng định giá trị và áp dụng thực tiễn trong điều trị đối với loại thảo dược này.

TÀI LIỆU THAM KHẢO/REFERENCES

- [1] H. Latifah, O. T. Akbar, A. Irawan, C. R. Kholibrina, and A. Aswandi, "Local wisdom on processing and utilization of geronggang's oil for daily remedy and healthcare," *IOP Conf. Ser. Earth Environ. Sci.*, vol. 977, no. 1, p. 012026, Jun. 2022, doi: 10.1088/1755-1315/977/1/012026.
- [2] S.-J. Choi, B. H. Tai, N. M. Cuong, Y.-H. Kim, and H.-D. Jang, "Antioxidative and anti-inflammatory effect of quercetin and its glycosides isolated from mampat (*Cratoxylum formosum*)," *Food Sci. Biotechnol.*, vol. 21, no. 2, pp. 587-595, Apr. 2012, doi: 10.1007/s10068-012-0075-4.
- [3] R. Keowkase and N. Weerapreeyakul, "Cratoxylum formosum Extract Protects against Amyloid-Beta Toxicity in a *Caenorhabditis elegans* Model of Alzheimer's Disease," *Planta Med.*, vol. 82, no. 06, pp. 516-523, Feb. 2016, doi: 10.1055/s-0041-111621.
- [4] T. H. Nguyen, Q. H. Nguyen, and T. S. Ninh, "The genus *Cratoxylum*: traditional use, phytochemistry and pharmacology," *J. Pharm. Pharmacol.*, vol. 75, no. 10, pp. 1259-1293, Oct. 2023, doi: 10.1093/jpp/rgad074.

- [5] J. Xiong, X. H. Liu, V. B. Bui, Z. L. Hong, L. J. Wang, Y. Zhao, H. Fan, G. X. Yang, and J. F. Hu, "Phenolic constituents from the leaves of *Cratoxylum formosum* ssp. *pruniflorum*," *Fitoterapia*, vol. 94, pp. 114-119, Apr. 2014, doi: 10.1016/j.fitote.2014.02.002.
- [6] Y. Song, C. Long, W. Chen, H. Li, H. Zhao, and L. Liu, "Cratoxylum formosum ssp. *pruniflorum* induces gastric cancer cell apoptosis and pyroptosis through the elevation of ROS and cell cycle arrest," *Cell Biochem. Biophys.*, vol. 82, no. 3, pp. 2937-2955, Sep. 2024, doi: 10.1007/s12013-024-01408-4.
- [7] C. Kaewpiboon, N. Boonnak, N. Yawut, S. Kaowinn, and Y.-H. Chung, "Caged-xanthone from *Cratoxylum formosum* ssp. *pruniflorum* inhibits malignant cancer phenotypes in multidrug-resistant human A549 lung cancer cells through down-regulation of NF- κ B," *Bioorg. Med. Chem.*, vol. 27, no. 12, pp. 2368-2375, Jun. 2019, doi: 10.1016/j.bmc.2018.12.042.
- [8] C. Kaewpiboon, N. Boonnak, S. Kaowinn, and Y.-H. Chung, "Formoxanthone C, isolated from *Cratoxylum formosum* ssp. *pruniflorum*, reverses anticancer drug resistance by inducing both apoptosis and autophagy in human A549 lung cancer cells," *Bioorg. Med. Chem. Lett.*, vol. 28, no. 4, pp. 820-825, Feb. 2018, doi: 10.1016/j.bmcl.2017.07.066.
- [9] N. T. Nguyen, *Methods of Plant Research*. Hanoi National University, 2007.
- [10] V. C. Vo, *Dictionary of Vietnamese medical plants*. Medical Publishing House, 2012.
- [11] F. Galvano, L. L. Fauci, G. Lazzarino, V. Fogliano, A. Ritieni, S. Ciappellano, N. C. Battistini, B. Tavazzi, and G. Galvano, "Cyanidins: metabolism and biological properties," *J. Nutr. Biochem.*, vol. 15, no. 1, pp. 2-11, Jan. 2004, doi: 10.1016/j.jnutbio.2003.07.004.
- [12] A. Anand David, R. Arulmoli, and S. Parasuraman, "Overviews of biological importance of quercetin: A bioactive flavonoid," *Pharmacogn. Rev.*, vol. 10, no. 20, pp. 84-89, 2016, doi: 10.4103/0973-7847.194044.
- [13] D. Mokra, M. Joskova, and J. Mokry, "Therapeutic Effects of Green Tea Polyphenol (–)-Epigallocatechin-3-Gallate (EGCG) in Relation to Molecular Pathways Controlling Inflammation, Oxidative Stress, and Apoptosis," *Int. J. Mol. Sci.*, vol. 24, no. 1, p. 340, Dec. 2022, doi: 10.3390/ijms24010340.
- [14] S. Garattini, "Biochemical and pharmacological properties of oxazepam," *Acta Psychiatr. Scand.*, vol. 58, no. S274, pp. 9-18, Oct. 1978, doi: 10.1111/j.1600-0447.1978.tb02382.x.
- [15] X. Huang, N. Hao, Q. Wang, R. Li, G. Zhang, G. Chen, S. Li, and Z. Che, "Non-food bioactive forest product liriodenine: Sources, chemistry, and bioactivities," *Ind. Crops Prod.*, vol. 187, Nov. 2022, Art. no. 115447, doi: 10.1016/j.indcrop.2022.115447.
- [16] R. Strawbridge, R. R. Javed, J. Cave, S. Jauhar, and A. H. Young, "The effects of reserpine on depression: A systematic review," *J. Psychopharmacol. (Oxf.)*, vol. 37, no. 3, pp. 248-260, Mar. 2023, doi: 10.1177/02698811221115762.
- [17] S. Wang, L. Wang, J. Shangguan, A. Jiang, and A. Ren, "Research Progress on the Biological Activity of Ganoderic Acids in *Ganoderma lucidum* over the Last Five Years," *Life*, vol. 14, no. 10, Oct. 2024, Art. no. 1339, doi: 10.3390/life14101339.
- [18] J. Meneely, B. Greer, O. Kolawole, and C. Elliott, "T-2 and HT-2 Toxins: Toxicity, Occurrence and Analysis: A Review," *Toxins*, vol. 15, no. 8, Jul. 2023, Art. no. 481, doi: 10.3390/toxins15080481.
- [19] C. Hernandez, L. Miguita, R. O. Sales, E.P. Silva, P. O. R. Mendonça, B. L. Silva, M. F. G. Klingbeil, M. B. Mathor, E. B. Rangel, L. C. Marti, J. D. S. Coppede, F. D. Nunes, A. M. S. Pereira, and P. Severino, "Anticancer Activities of the Quinone-Methide Triterpenes Maytenin and 22- β -hydroxymaytenin Obtained from Cultivated *Maytenus ilicifolia* Roots Associated with Down-Regulation of miRNA-27a and miR-20a/miR-17-5p," *Molecules*, vol. 25, no. 3, Feb. 2020, Art. no. 760, doi: 10.3390/molecules25030760.
- [20] Y. Tang, Z. Zhang, S. Yang, G. J. Smith, and L. Liu, "Diatomite encapsulated AgNPs as novel hair dye cosmetics: Preparation, performance, and toxicity," *Colloids Surf. B Biointerfaces*, vol. 200, Apr. 2021, Art. no. 111599, doi: 10.1016/j.colsurfb.2021.111599.