

## Extraction and isolation of some chemical components from *n*-hexane extract of *Paederia scandens*

Tran Thanh Ha<sup>1\*</sup>, Tran Thi Tuyet<sup>2</sup>, Nguyen Thi Ha<sup>1</sup>

<sup>1</sup> National Institute of Medicinal Materials, 3B Quang Trung, Trang Tien, Hanoi, Vietnam

<sup>2</sup> Dai Nam University, 56 Vu Trong Phung, Thanh Xuan, Hanoi, Vietnam

\*Corresponding author: Phone: 0387931639, E-mail: thanhha.tran889@gmail.com

### ABSTRACT

**Background:** Traditionally, *Paederia scandens* (Lour.), Rubiaceae has been used in folk medicines, however, there have not been many reports on the bioactivity as well as the phytochemistry of this plant.

**Aim:** Isolation and structural determination of compounds from *n*-hexane fractions of *P. scandens* to elucidate the effect of this plant in folk experience

**Method:** All the substances were isolated based on chromatographic methods. Chemical structures were determined based on physicochemical properties and experimental spectral data such as MS, NMR.

**Results:** From the *n*-hexane extract of *Paederia scandens*, four compounds including lupeol (**1**), betulinic acid (**2**), asperglaucid (**3**) and oleanolic acid (**4**) were isolated and structurally identified.

**Conclusions:** This is the first time that compounds **1**, **2** and **3** have been identified in the composition of *Paederia scandens*.

**Keywords:** betulinic acid, oleanolic acid, asperglaucide, lupeol, *Paederia scandens*



# Nghiên cứu chiết xuất và phân lập một số thành phần hóa học từ phân đoạn chiết *n*-hexan cây Mơ leo (*Paederia scandens*)

Trần Thanh Hà<sup>1,\*</sup>, Trần Thị Tuyết<sup>2</sup>, Nguyễn Thị Hà<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Viện Dược liệu

<sup>2</sup> Đại học Đại Nam

\*Tác giả liên hệ: T.T. Hà [SĐT: 0387931639,

E-mail: thanhha.tran889@gmail.com]

(Ngày gửi đăng: 11/01/2023 – Ngày duyệt đăng: 25/02/2023)

## TÓM TẮT

**Dẫn nhập:** Cây mơ leo *Paederia scandens* (Lour.), Họ cà phê (Rubiaceae) từ lâu đã được sử dụng làm thuốc trong dân gian, tuy nhiên chưa có nhiều công bố về tác dụng sinh học cũng như thành phần hóa học của loài cây này.

**Mục tiêu nghiên cứu:** Phân lập và xác định cấu trúc các hợp chất từ phân đoạn *n*-hexan của cây Mơ leo để làm sáng tỏ tác dụng của loài cây này theo kinh nghiệm dân gian.

**Phương pháp:** Phân lập các chất dựa trên các phương pháp sắc ký, xác định cấu trúc các chất dựa vào tính chất hóa lý và dữ kiện phổ thực nghiệm MS, NMR.

**Kết quả:** Từ phân đoạn chiết *n*-hexan của cây Mơ leo đã phân lập và nhận dạng cấu trúc bốn hợp chất bao gồm lupeol (**1**), acid betulinic (**2**), asperglaucid (**3**), acid oleanolic (**4**).

**Kết luận:** Đây là lần đầu tiên các chất **1**, **2** và **3** được xác định có trong thành phần cây Mơ leo.

**Từ khóa:** acid betulinic, acid oleanolic, asperglaucide, lupeol, *Paederia scandens*

## Đặt vấn đề

Dây mơ leo còn gọi là Kê thi đặng, mẫu cẩu đặng có tên khoa học là *Paederia scandens* (Lour.), họ cà phê (Rubiaceae). Tất cả các bộ phận (rễ, cành, lá, hoa, quả) đều được sử dụng làm thuốc, dùng tươi hoặc khô. Theo Đông y, mơ leo có vị chua ngọt, tính bình, có tác dụng tiêu thực, đạo trê, trừ phong hoạt huyết chỉ thống, trừ thấp, tiêu thũng, giải độc. Chủ trị phong thấp, đau nhức, tả chảy, ly, phù thũng, vàng đầu, chán ăn, mụn nhọt, lở ngứa, đòn ngã, chấn thương... [1]

Các nghiên cứu về thành phần hóa học trên thế giới chỉ ra nhóm chất hóa học chủ

yếu có trong mơ leo là các iridoid và dẫn xuất, anthraquinon, flavonoid. Nghiên cứu của Chen và cộng sự [2], Quang và cộng sự [3] chỉ rõ iridoid và dẫn xuất glucosid là nhóm hoạt chất chính trong cây mơ leo. Mặt khác, ở Việt Nam loài mơ leo là loài mọc hoang dại, được nhân dân sử dụng làm thuốc, chưa có nhiều nghiên cứu về tác dụng sinh học cũng như thành phần hóa học của loài này. Các nghiên cứu ban đầu của chúng tôi đã xác định được các chất anthraquinon, 3,3'-dimethoxyellagic acid 4'-O- $\alpha$ -L-rhamnopyranosid, 3',4',7'-trihydroxyflavanon, acid betulinic, kaempferol, linarin, paederosid, quercetin 3-



O- $\alpha$ -L-rhamnosyl-(1 $\rightarrow$ 6)- $\beta$ -D-glucopyranosyl-(1 $\rightarrow$ 3)- $\beta$ -D-glucopyranosid và kaempferol 3-O- $\beta$ -D-glucopyranosid trong cây mơ leo thu hái ở Đồng Nai [4]. Để nghiên cứu toàn diện về thành phần hóa học của loài cây này, chúng tôi tiếp tục xác định thành phần hóa học của các phân đoạn khác trong cây, nghiên cứu này thông báo về sự có mặt của một số hợp chất có trong phân đoạn chiết *n*-hexan cây Mơ leo.

#### **Nguyên liệu và phương pháp nghiên cứu** **Nguyên liệu**

Mẫu nghiên cứu: Phần trên mặt đất cây Mơ leo (*Paederia scandens* Lour.), họ Cà phê (Rubiaceae) được thu hái tại Đồng Nai vào tháng 3/2021, sau đó được sấy khô ở nhiệt độ 50 °C rồi xay thành bột. Mẫu do các nhà khoa học khoa Tài nguyên dược liệu - Viện Dược liệu giám định tên khoa học. Tiêu bản mẫu số ML-260321 được lưu tại khoa Công nghệ chiết xuất - Viện Dược liệu.

Methanol (MeOH), ethanol (EtOH), *n*-hexan (Hx), ethyl acetat (EtOAc), acetone, dichlormethan (CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>) đạt tiêu chuẩn công nghiệp và được chưng cất lại trước khi dùng. Dung môi phân tích gồm MeOH, EtOH, Hx, EtOAc, H<sub>2</sub>O, acetone, CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> dùng để phân tích sắc ký đạt tiêu chuẩn phân tích. Silica gel pha thường (cỡ hạt 63–200  $\mu$ m) và pha đảo RP-18 (30–50  $\mu$ m) (Merck, Darmstadt, Đức). Sắc ký lớp mỏng được thực hiện trên bản mỏng trắng sẵn DC-Alufolien 60 F254 (Merck, Darmstadt, Đức) (silica gel, 0,25 mm) và bản mỏng pha đảo RP-18 F254 (Merck, Darmstadt, Đức) (silica gel, 0,25 mm). Acid H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> 10 % trong ethanol, thuốc thử dragendorff

#### **Trang thiết bị**

Máy cất quay Rotavapor R-200 (BÜCHI Labortechnik AG, Flawil, Switzerland). Tủ sấy Binder (Im Mittleren Ösch 5, 78532 Tuttlingen, Đức). Phát hiện chất bằng đèn tử ngoại UV 365/254nm (Vilber Lourmat, Pháp). Điểm chảy được đo trên máy Kofler micro hot stage (Meerhout, Bỉ). Phổ khối lượng đo trên máy AGILENT 1100 LC-MSD Trap (Agilent Technologies, Santa Clara, CA, Hoa Kỳ) và AutoSpec Premier (Waters, Milford, Hoa Kỳ).

Phổ cộng hưởng từ hạt nhân được đo trên máy Bruker AM500 FT-NMR (Bruker, Billerica, MA, Hoa Kỳ). Chất nội chuẩn là tetramethyl silan.

#### **Phương pháp chiết xuất và phân lập**

7,0 kg bột dược liệu được ngâm với EtOH 90% ở nhiệt độ phòng (3 lần  $\times$  15 lít, mỗi lần 4 ngày). Các dịch chiết được gộp lại và cất loại dung môi dưới áp suất giảm thu được phân đoạn chiết tổng (330,53 g). Phân đoạn chiết này được phân bố lại lần lượt trong các dung môi có độ phân cực tăng dần: *n*-hexan, ethyl acetat, *n*-butanol. Cất loại hết dung môi dưới áp suất giảm thu được các phân đoạn chiết tương ứng (MLH, 91,86 g), ethyl acetat (MLE, 93,57 g) và *n*-butanol (MLB, 71,43 g) và nước (59,46 g).

Phân tách phân đoạn *n*-hexan (50 g) bằng sắc ký cột silica gel cỡ hạt 63–200  $\mu$ m với hệ dung môi rửa giải gradient *n*-hexan/ ethyl acetat 99:1, 9:1, 8:1, 5:1, 1:1 (v/v) thu được 10 nhóm phân đoạn kí hiệu từ MLH 1–10.

Phân đoạn MLH5 cô cho bay hơi hết dung môi, xử lý loại màu rồi kết tinh lại trong hệ dung môi *n*-hexan/ ethyl acetat (8:2, v/v) thu được hợp chất 1 (15 mg).

Phân đoạn MLH7 cô cho bay hơi hết dung môi, rồi tiếp tục được phân tách bằng sắc ký cột silica gel với dung môi giải hấp dichlormethan/methanol (10:1) thu được bốn phân đoạn con MLH7.1–MLH 7.4. Phân đoạn MLH7.2 cô cho bay hơi hết dung môi, xử lý loại màu rồi kết tinh lại trong hệ dung môi dichlormethan/methanol (9:1, v/v) thu được hợp chất 2 (17 mg). Tiếp tục thực hiện sắc ký cột silica gel với dung môi giải hấp dichlormethan/methanol (7:1) với phân đoạn MLH7.4 thu được hợp chất 3 (13 mg).

Phân đoạn MLH9 cô cho bay hơi hết dung môi, rồi tiếp tục được phân tách bằng sắc ký cột silica gel với dung môi giải hấp dichlormethan/methanol (5:1) thu được hợp chất 4 (20 mg).

#### **Kết quả nghiên cứu**

Từ phân đoạn *n*-hexan của dịch chiết EtOH 90% cây mơ leo đã phân lập và xác định cấu trúc 4 hợp chất lupeol (**1**), betulinic acid (**2**), asperglaucide (**3**), acid oleanolic (**4**) (Hình 1).





6,0 Hz, H-21 $\beta$ ), 3,82 (1H, dd,  $J = 11,5$ ; 4,0 Hz, H-12 $\alpha$ ), 3,93 (1H, dd,  $J = 11,0$ ; 3,5 Hz, H-12 $\beta$ ), 4,34 (1H, m, H-8), 4,77 (1H, m, H-16), 6,05 (1H, d,  $J = 8,5$  Hz, NH-9), 6,79 (1H, d,  $J = 7,5$  Hz, NH-17), 7,07 (2H, H-4 & H-25), 7,11–7,18 (4H, H-23 & H-27; H-2 & H-6), 7,20–7,29 (4H, H-24 & H-27; H-3 & H-5); 7,42–7,45 (2H, H-30 & H-32), 7,52 (1H, brt, H-31), 7,71 (2H, H-29 & H-33).

$^{13}\text{C}$ -NMR (125 MHz,  $\text{CDCl}_3$ ):  $\delta$  (ppm) 70,7 (C-14), 170,3 (C-10), 167,1 (C-18), 136,7 (C-22), 136,6 (C-1), 133,7 (C-28), 131,9 (C-31), 129,3 (C-24 & C-26), 129,1 (C-23 & C-27), 128,7 (C-30 & C-32), 128,6 (C-2 & C-6), 128,5 (C-3 & C-5), 127,1 (C-25), 127,0 (C-29 & C-33), 126,7 (C-4), 64,6 (C-12), 54,9 (C-16), 49,5 (C-8), 38,4 (C-21), 37,4 (C-7), 20,7 (C-20).

**Chất 4: Acid oleanolic**

Chất rắn màu trắng, đnc. 307-308°C. EI-MS:  $m/z$  456,3903  $[\text{M}]^+$ .

$^1\text{H}$ -NMR (500MHz,  $\text{CDCl}_3$ & $\text{CD}_3\text{OD}$ ),  $\delta$  (ppm): 5,26 (1H, t,  $J = 3,5$  Hz, H-12), 3,17 (1H, dd,  $J = 11,5$ ; 5,0 Hz, H-3), 2,85 (1H, dd,  $J = 14,0$ ; 4,0 Hz, H-18), 1,17 (3H, s, H-27), 0,98 (3H, s, H-23), 0,81 (3H, s, H-24), 0,96 (3H, s, H-30), 0,94 (3H, s, H-29), 0,91 (3H, s, H-25), 0,78 (3H, s, H-26).

$^{13}\text{C}$ -NMR (125MHz,  $\text{CDCl}_3$ & $\text{CD}_3\text{OD}$ ),  $\delta$  (ppm): 39,6 (C-1), 27,6 (C-2), 79,5 (C-3), 37,9 (C-4), 56,5 (C-5), 19,3 (C-6), 33,5 (C-7), 40,3 (C-8), 48,7 (C-9), 37,9 (C-10), 23,8 (C-11), 123,4 (C-12), 144,9 (C-13), 42,7 (C-14), 28,6 (C-15), 24,3 (C-16), 47,4 (C-17), 42,4 (C-18), 46,9 (C-19), 31,4 (C-20), 34,7 (C-21), 33,8 (C-22), 28,6 (C-23), 15,8 (C-24), 16,2 (C-25), 17,6 (C-26), 26,4 (C-27), 181,6 (C-28), 33,5 (C-30), 23,9 (C-29).

**Bàn luận**

Dựa trên việc phân tích các dữ kiện phổ thực nghiệm cũng như so sánh với tài liệu tham khảo, cấu trúc của các hợp chất đã được khẳng định. Trong các hợp chất phân lập được, hợp chất **1**, **2** và **3** lần đầu tiên được xác nhận có mặt trong phân đoạn *n*-hexan của cây Mỡ leo.

**Chất 1:** Phổ MS cho pic ion  $m/z$ : 427  $[\text{M}+\text{H}]^+$  cùng với 30 tín hiệu C trên phổ  $^{13}\text{C}$ -NMR phù hợp với công thức phân tử của **1** là  $\text{C}_{30}\text{H}_{50}\text{O}$ . Phổ  $^1\text{H}$ -NMR cho tín hiệu cộng hưởng

của một proton của nhóm hydroxymetin ở  $\delta_{\text{H}}$  3,21 (1H, m, H-3), tín hiệu proton vinylic của nhóm methylen đầu mạch  $\delta_{\text{H}}$  4,68 (1H, d,  $J = 2,0$  Hz, H-29 $\alpha$ ), 4,56 (1H, d,  $J = 2,0$  Hz, H-29 $\beta$ ); bảy tín hiệu proton methyl ở  $\delta_{\text{H}}$  1,68 (3H, s, H-30); 1,65 (1H, t, H-13); 1,61 (3H, s, H-2), 1,03 (3H, s, H-23); 0,96 (3H, s, H-27); 0,94 (3H, s, H-25), 0,83 (3H, s, H-28). Các tín hiệu proton gợi ý **1** có cấu trúc của hợp chất lupin-triterpenoid.

Trên phổ  $^{13}\text{C}$ -NMR và DEPT các tín hiệu của cacbon olefin methin lai hóa  $\text{sp}^2$  đầu mạch ở  $\delta_{\text{C}}$  151,0 (C-20) và 109,3 (C-29) đặc trưng cho sự có mặt của một triterpen khung lupan, một cacbon methin  $\delta_{\text{C}}$  78,64 (C-3) cùng với 7 tín hiệu của cacbon methyl  $\delta_{\text{C}}$  29,1 (C-23), 15,4 (C-24), 16,1 (C-25), 16,0 (C-26), 14,6 (C-27), 18,0 (C-28), 19,3 (C-30). Ngoài ra trên phổ còn chỉ rõ sự có mặt của 10 nhóm methylen, 5 nhóm methin, 5 cacbon bậc 4. Hai cacbon lai hóa  $\text{sp}^2$  ở  $\delta_{\text{C}}$  150,58 (C-20), 109,27 (C-29). Từ những phân tích ở trên cùng với việc so sánh các dữ kiện phổ thực nghiệm với các tài liệu đã được công bố [5] cho phép khẳng định **1** là  $\beta$ -hydroxy-lup-20(29)-en hay tên gọi khác là lupeol.

**Chất 2:** Phổ MS cho pic ion  $m/z$ : 457  $[\text{M}+\text{H}]^+$  cùng với 30 tín hiệu C trên phổ  $^{13}\text{C}$ -NMR phù hợp với công thức phân tử của **2** là  $\text{C}_{30}\text{H}_{48}\text{O}_3$ .

Khi so sánh phổ  $^1\text{H}$ -NMR của chất **2** với chất **1** cho nhiều điểm tương đồng với tín hiệu cộng hưởng của một proton của nhóm hydroxymetin ở  $\delta_{\text{H}}$  3,16 (1H, t,  $J = 16,5$  Hz, H-3), tín hiệu proton vinylic của nhóm methylen đầu mạch  $\delta_{\text{H}}$  4,72 (1H, d,  $J = 2,0$  Hz, H-29 $\alpha$ ), 4,59 (1H, d,  $J = 2,0$  Hz, H-29 $\beta$ ); sáu tín hiệu proton methyl ở  $\delta_{\text{H}}$  1,93 (1H, m, H-22 $\beta$ ), 0,95 (3H, s, H-23), 0,75 (3H, s, H-24), 0,82 (3H, s, H-25), 0,94 (3H, s, H-26), 0,97 (3H, s, H-27), 1,69 (3H, s, H-30). Tuy nhiên khi so sánh phổ  $^{13}\text{C}$ -NMR và DEPT của hai chất cho thấy ở chất **2** có tín hiệu đặc trưng của cacbon cacbonyl ở  $\delta_{\text{C}}$  179,02 (C-28), và các cacbon olefin methin với  $\delta_{\text{C}}$  109,27 (C-29), một cacbon methin  $\delta_{\text{C}}$  78,64 (C-3) cùng với 6 tín hiệu của cacbon methyl  $\delta_{\text{C}}$  27,67 (C-23), 15,67 (C-24), 15,87 (C-





25), 15,13 (C-26), 14,44 (C-27), 19,07 (C-30). Ngoài ra trên phổ còn chỉ rõ sự có mặt của 10 nhóm methylen, 5 nhóm methin, 5 cacbon bậc 4. Từ những phân tích ở trên cùng với việc so sánh các dữ kiện phổ thực nghiệm với các tài liệu đã được công bố [5] cho phép khẳng định chất **2** là acid 3 $\beta$ -hydroxy-lup-20(29)-en-28-oiic hay tên gọi khác là acid betulinic.

**Chất 3:** Hợp chất **3** được phân lập dưới dạng tinh thể hình kim màu trắng, nhiệt độ nóng chảy: 126-127°C. Phổ khối lượng phun mù điện tử chỉ ra pic ion giả phân tử  $m/z$ : 445  $[M+H]^+$  tương ứng công thức phân tử là  $C_{27}H_{28}O_4N_2$  và phân tử khối  $M=444$  đvC.

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, 15 nhóm methin thơm, 3 nhóm cacbonyl và 3 cacbon bậc 4 thơm. Trên phổ khối lượng ESI-MS pic ion phân tử xuất hiện ở  $m/z$  445  $[M+H]^+$  tương ứng với công thức phân tử của chất **3** là  $C_{27}H_{28}O_4N_2$ . Trên phổ  $^1H$ -NMR cho 15 tín hiệu cộng hưởng proton chuyển dịch về trường thấp ( $\delta_H$  7,06-7,72) cho phép dự đoán sự có mặt của 3 vòng benzen thế 1 lần trong công thức cấu tạo của chất **3**. Tín hiệu cộng hưởng của 2 proton thuộc 2 nhóm amin bậc 2 ( $>NH$ ) xuất hiện ở trường khá thấp [ $\delta_H$  6,05 (1H, d,  $J = 8,5$  Hz, NH-9), 6,79 (1H, d,  $J = 7,5$  Hz, NH-17)] cho biết các nhóm amin này thuộc về hai liên kết amid ( $-NH-CO-$ ) tương ứng với 2 nhóm cacbonyl ở vùng trường thấp ở  $\delta_C$  170,3 (C-10), 167,1 (C-18) trên  $^{13}C$ -NMR. Ở vùng trường thấp xuất hiện 2 tín hiệu proton multiplet của 2 nhóm methin nằm cạnh dị tố có độ âm điện lớn như nitơ [ $\delta_H$  4,34 (1H, m, H-8), 4,77 (1H, m, H-16)]. Tiếp đến là tín hiệu của 3 nhóm methylen trong đó có một nhóm chuyển dịch về trường thấp hơn cho thấy nó phải liên kết với dị tố oxy [ $\delta_H$  3,82 (1H, dd,  $J = 11,5$ ; 4,0 Hz, H-12 $\alpha$ ), 3,93 (1H, dd,  $J = 11,0$ ; 3,5 Hz, H-12 $\beta$ )], một nhóm khác cũng xuất hiện dưới dạng double double [ $\delta_H$  3,06 (1H, dd,  $J = 13,5$ ; 8,5 Hz, H-21 $\alpha$ ), 3,22 (1H, dd,  $J = 11,0$ ; 6,0 Hz, H-21 $\beta$ )] và nhóm còn lại xuất hiện dưới dạng multiplet ở  $\delta_H$  2,75 (2H, m, H-7). Tín hiệu

singlet ở  $\delta_H$  2,02 (3H, s,  $CH_3$ -20) đặc trưng cho một nhóm methyl của một este ( $CH_3-COO-$ ) với tín hiệu của cacbon cacbonyl  $\delta_C$  ở 170,7 (C-14). Ở vùng trường cao hơn trên  $^{13}C$ -NMR có các tín hiệu cộng hưởng của 18 cacbon thơm thuộc 3 vòng benzen ( $\delta_C$  126,7-136,7), 3 nhóm methylen  $\delta_C$  64,6 (C-12), 38,4 (C-21), 37,4 (C-7), 2 nhóm methin  $\delta_C$  54,9 (C-16), 49,5 (C-8) và một nhóm methyl 20,7 (C-20). Từ việc phân tích các dữ kiện phổ trên cùng với việc tham khảo tài liệu [6] cho phép xác định chất **3** là một dipeptid có khả năng chống dị ứng có tên gọi (2-[(N-benzoylphenylalanyl) amino]-3-phenylpropylacetat) hay tên khác là Asperglaucid.

**Chất 4:** Phổ khối lượng (EI-MS) của hợp chất **4** chỉ ra pic ion phân tử  $m/z$  456  $[M]^+$  ( $C_{30}H_{48}O_3$ ) và các phân mảnh ở 248, 203, 189 tương ứng với phân mảnh retro Diels-Alder từ tritecpen urs-12-en với nhóm OH ở vòng A. Phân tích các phổ  $^1H$ -NMR và  $^{13}C$ -NMR cho thấy tín hiệu của proton của nhóm hydroxymetin  $\delta_H$  3,17 (1H, dd,  $J = 11,5$ ; 5,0 Hz, H-3a) tương ứng với tín hiệu cacbon ở  $\delta_C$  79,5 (C-3), nhóm cacbonyl chuyển dịch về trường thấp đặc trưng ở  $\delta_C$  181,6 (C-28). Sự có mặt của nhóm methin olefinic thể hiện qua tín hiệu ở  $\delta_H$  5,26 (1H, t,  $J = 3,5$  Hz, H-12) và  $\delta_C$  125,4 (C-12), 144,9 (C-13). Kết hợp phân tích các phổ  $^{13}C$ -NMR và DEPT cho thấy hợp chất **4** có 30 nguyên tử cacbon với 5  $CH$ , 7  $CH_3$ , 10  $CH_2$  và 7 C. Với các phân tích trên, kết hợp so sánh với các số liệu phổ đã công bố [7] cho phép khẳng định cấu trúc của hợp chất **4** là acid oleanolic.

Từ kết quả phân tích cấu trúc cho thấy các hợp chất phân lập được đều là các hợp chất có hoạt tính sinh học khá thú vị. Hai hợp chất lupeol (chất 1) và acid betulinic (chất 2) là hai triterpen khung lupan đã được công bố nhiều về tác dụng chống viêm, kháng khuẩn, kháng virus, trị đái tháo đường, chống sốt rét, chống HIV và chống ung thư [8, 9]. Asperglaucid là một amid được phân lập lần đầu tiên từ *Piper aurantiacum* có các đặc tính chống viêm, kháng khuẩn, chống oxy hóa và chống ung thư [10, 11]. Acid oleanolic là một triterpen



khung olean được chứng minh có tác dụng chống oxy hóa, chống khối u, chống viêm, chống tiểu đường, chống vi khuẩn trong các mô hình bệnh lý khác nhau [12]. Từ kết quả trên cho thấy sự tương đồng về hoạt tính sinh học giữa các hợp chất phân lập được và cây Mơ leo với tác dụng kháng viêm, chống ung thư, chống oxi hóa và kháng khuẩn đã được công bố [13].

### Kết luận

Bằng các phương pháp sắc ký kết hợp với các phương pháp phổ, đã phân lập và nhận dạng cấu trúc bốn hợp chất từ phân đoạn chiết *n*-hexan của cây Mơ leo (*Paederia scandens*) bao gồm lupeol (**1**), acid betulinic (**2**), asperglauacid (**3**), acid oleanolic (**4**). Đây là lần đầu tiên các chất **1**, **2** và **3** được xác định có trong thành phần hóa học cây Mơ leo.

### TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. Đỗ Tất Lợi, 2004. Những cây thuốc và vị thuốc Việt Nam. Nhà xuất bản Y Học Hà Nội
2. Quang DN. Anthraquinones from the roots of *Paederia scandens*. *Vietnam Journal of Chemistry*. 2009; 47(1): 95–8
3. Quang DN, Hashimoto T, Tanaka M, Dung NX, and Asakawa Y. Iridoid glucosides from roots of Vietnamese *Paederia scandens*. *Phytochemistry*. 2002; 60(5): 505–14
4. Tran Thanh Ha, Nguyen Thi Ha, Nguyen Tuan Hiep, Le Thi Huyen. Chemical constituents from ethyl acetate extract of *Paederia scandens* (Lour.) Merr. collected in Vietnam. *Journal of Medicinal Materials* 2022; 27(1): 9–14.
5. Nguyễn Thị Hoài, Nguyễn Trang Thúy, Nguyễn Minh Khởi, Phương Thiện Thương. Triterpenoid nhóm lupan phân lập từ cây chặc chiu. *Tạp chí dược liệu* 2011; 16 (6): 379–383.
6. Giang PM, Son HV, Son PT. Study on the chemistry and antimicrobial activity of *Psychotria reevesii* Wall. (Rubiaceae). *Journal of Chemistry* 2011; 45(5): 628–633.
7. Seebacher W, Simic N, Weis R, Saf R, Kunert O. Complete assignments of <sup>1</sup>H and <sup>13</sup>C - NMR resonances of oleanolic acid, 18 $\alpha$ -oleanolic acid, ursolic acid and their 11-oxo derivatives. *Magnetic Resonance in Chemistry* 2003; 41(8): 636–638.
8. Hanghang L, Hao L, Shengliang Zh, Hongyun L, Qihe Ch, Xingxian Zh. A Review on preparation of betulinic acid and its biological activities. *Molecules* 2021; 26(18): 5583.
9. Kai L, Xumin Zh, Long X, Mao D, Huijuan Ch, Jiawen S, et al. Lupeol and its derivatives as anticancer and anti-inflammatory agents: Molecular mechanisms and therapeutic efficacy. *Pharmacological Research* 2021; 164:105373.
10. Banerji, A, and Ray, R. Aurantiamides: A new class of modified dipeptides from *Piper aurantiacum*. *Phytochemistry* 1981; 20(9): 2217–2220.
11. Yang Y, Zhang LH, Yang BX. Aurantiamide acetate suppresses the growth of malignant gliomas in vitro and in vivo by inhibiting autophagic flux. *Journal of Cellular and Molecular Medicine*. 2015; 19(5):1055–1064.
12. Taiwo BA, Mashudu GM, and Emmanuel M. Oleanolic Acid and Its Derivatives: Biological activities and therapeutic potential in chronic diseases. *Molecules*. 2017; 22(11): 1915.
13. Liang W, Yiping J, Ting H, Chengjian Zh and Luping Q. A Phytochemical, pharmacological and clinical profile of *Paederia foetida* and *P. scandens*. *Natural Product Communications*. 2014; 9(6): 897–886.