

Nghiên cứu đặc điểm thực vật và thành phần hóa học của thân cây Đinh lăng rừng (*Polyscias guilfoylei* cv. *quinquefolia*)

Nguyễn Mạnh Tuyển*, Lê Hương Giang, Đinh Thị Vân
Trường Đại học Dược Hà Nội

*Tác giả liên hệ: tuyen.dhct.hup@gmail.com

(Ngày gửi đăng: 15/5/2019 - Ngày duyệt đăng: 30/10/2019)

SUMMARY

The plant in the Vietnamese vernacular name of “Đinh lăng rừng”, collected at Tien Hai district, Thai Binh province, were studied on taxonomic morphology, anatomy microscopy and thereby identified as *Polyscias guilfoylei* (W.Bull) L.H.Bailey var. *quinquefolia*. Three compounds were isolated from the plant stems and structurally verified as chlorogenic acid (**1**), rosmarinic acid (**2**) and isorhamnetin-3-o-beta-glucopyranoside (**3**). These findings would offer helpful ground for quality standardization and control of the medicinal plant material.

Từ khóa: *Polyscias guilfoylei*, đặc điểm thực vật, thành phần hoá học, thân, đinh lăng rừng.

Đặt vấn đề

Chi Đinh lăng là chi lớn thứ hai trong họ Nhân sâm (Araliaceae) [1], và nhận được nhiều sự quan tâm nghiên cứu của các nhà khoa học trên thế giới cũng như ở Việt Nam. Các nghiên cứu về thành phần hóa học đều cho thấy chi Đinh lăng chứa nhiều các hợp chất sterol, triterpen, saponin, flavonoid, và các dẫn xuất của acid quinic [5], [8]. Ngoài ra, những nghiên cứu thực nghiệm sinh học cho thấy một số loài cây thuộc chi Đinh lăng có tác dụng rất tốt như: cao Đinh lăng lá xẻ (liều 45-180 mg/kg thể trọng) có tác dụng chống trầm cảm, kích thích hoạt động của não bộ và nội tiết, tăng sức đề kháng của cơ thể, chống viêm và xơ vữa động mạch [2]. Gần đây, Ashmawy và cộng sự vừa công bố dịch chiết lá của Đinh lăng rừng (*Polyscias guilfoylei*) có tác dụng kháng khuẩn

Escherichia coli với $IC_{50} = 9,76 \mu\text{g/mL}$ [4]. Trong dân gian, người dân vẫn thường thu hái một số loài của chi Đinh lăng để đun nước uống. Hiện nay ở huyện Tiền Hải, Thái Bình người dân thu hái Đinh lăng rừng để đun nước uống giúp tăng cường sức dẻo dai và nâng cao sức đề kháng của cơ thể, giảm mệt mỏi, giúp ăn ngon, ngủ yên, tăng khả năng lao động. Tuy nhiên, hiện có rất ít nghiên cứu về đặc điểm thực vật và thành phần hóa học của loài Đinh lăng này. Xuất phát từ những nghiên cứu về chi Đinh lăng và kinh nghiệm của người dân sử dụng Đinh lăng, chúng tôi đã tiến hành nghiên cứu về cây Đinh lăng rừng thu hái tại huyện Tiền Hải, Thái Bình nhằm góp phần tìm hiểu, làm sáng tỏ giá trị của cây Đinh lăng rừng, đặc biệt trong khai thác sử dụng làm thuốc. Trong nghiên cứu trước đây, chúng tôi đã công bố một số hợp chất chính từ



lá [3], trong nghiên cứu này tiếp tục công bố nghiên cứu về đặc điểm thực vật và quy trình chiết xuất và phân lập một số hợp chất từ thân của cây Đinh lăng.

Đối tượng và phương pháp nghiên cứu

Đối tượng nghiên cứu

Cây Đinh lăng rừng được thu hái vào tháng 8 năm 2018 tại huyện Tiên Hải, Thái Bình, Việt Nam. Tên khoa học được ThS. Nghiêm Đức Trọng (Bộ môn Thực vật - Trường Đại học Dược Hà Nội) giám định là *Polyscias guilfoylei* (W.Bull) L.H.Bailey cv. quinquefolia.

Phương pháp nghiên cứu

Nghiên cứu đặc điểm thực vật và đặc điểm giải phẫu

Nghiên cứu về hình thái bằng quan sát tại thực địa và mô tả đặc điểm hình thái thực vật về: dạng sống; thân; lá (hình dạng phiến, chóp, gân, gốc, cuống, kích thước...).

Nghiên cứu về đặc điểm vi học bằng cách làm vi phẫu các bộ phận của cây theo phương pháp cắt ngang, nhuộm kép. Soi bột dược liệu, quan sát và chụp ảnh dưới kính hiển vi.

Nghiên cứu thành phần hoá học

Phương pháp chiết xuất

Sử dụng phương pháp chiết các phân đoạn theo độ phân cực tăng dần của dung môi. Thân cây được cắt nhỏ, sấy khô và được xay thô, sau đó được ngâm chiết với ethanol 96 % ở nhiệt độ 65 °C; cất thu hồi dung môi được cất, hòa lẫn vào nước, lần lượt lắc phân đoạn với dung môi có độ phân cực tăng dần (*n*-hexan; *n*-butanol; ethyl acetat; nước). Cất thu hồi dung môi các phân đoạn thu được cất *n*-hexan (cần Hexan); cần ethyl acetat (cần EtOAc); cần *n*-butanol (cần BuOH); cần nước (cần H₂O).

Phương pháp phân lập

Các phân đoạn được phân lập bằng sắc ký cột silica gel pha thường (Merck), sắc ký cột silica gel pha đảo RP-18, cột Sephadex LH-20. Sắc ký lớp mỏng được thực hiện trên bản mỏng trắng sẵn 60 GF₂₅₄ (Merck), RP-18 (Merck). Sắc ký lớp mỏng dùng để theo dõi vết các chất từ các phân đoạn. Sắc ký đồ được quan sát dưới đèn tử ngoại ở bước sóng 254 nm và 366 nm hoặc

dùng thuốc thử là dung dịch H₂SO₄ 10 % trong ethanol.

Phương pháp xác định cấu trúc các hợp chất:

Sử dụng phương pháp phổ khối, phổ cộng hưởng từ hạt nhân (1H, 13C NMR) và các thông số vật lý khác cho xác định cấu trúc hóa học của các hợp chất, và kết hợp so sánh số liệu với những công trình khoa học công bố trước đây.

Kết quả và bàn luận

Đặc điểm hình thái của Đinh lăng rừng

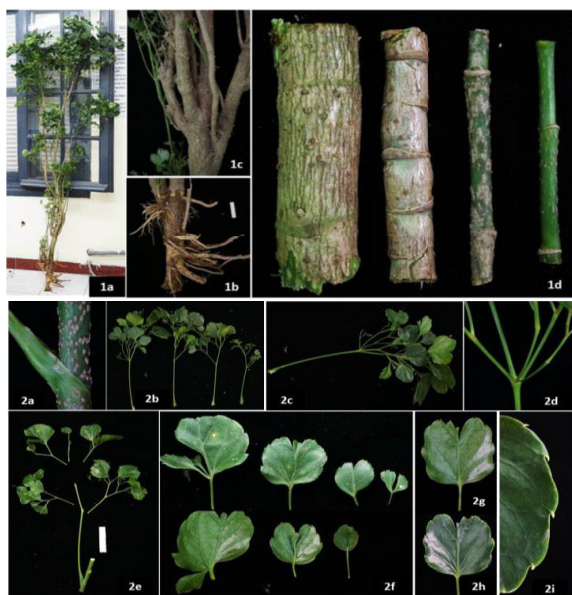
Cây gỗ nhỏ, cao khoảng 2-3 m. Rễ cọc ăn sâu xuống đất, có nhiều rễ phụ. Thân gỗ phân nhánh từ gốc; thân già có màu nâu đường kính 4-6 cm, thân non màu xanh đậm, đường kính từ 0,8 - 1,2 cm, có đốm trắng nhỏ; bề mặt thân có nhiều nốt sần; có sẹo dạng nhẫn là vết tích của bẹ lá sau khi rụng.

Lá kép lông chim 2 lần dài 18-36 cm; cuống lá dài 12 - 20 cm có bẹ lá dài 1,5-2 cm ôm lấy thân, mặt ngoài màu xanh đậm có nốt sần, mặt trong màu xanh nhạt; ở mấu đầu tiên của lá kép, có 2-5 nhánh. Lá chét 22 đến 32; cuống dài 1-3 cm, đường kính 0,1 - 0,2 cm, cuống có cánh rộng khoảng 0,1-0,2 cm mỗi bên; phiến lá màu xanh đậm, hai mặt đều nhẵn, hình dạng đa dạng: hình gần tròn, hình gốc lệch, ngọn lá chia 2 thùy hoặc xẻ sâu thành 2- 3 thùy đều hoặc không đều nhau, kích thước 2-6 cm × 2-6 cm; gốc lá thường tròn hoặc hơi tù; gân lá hình mạng có 2-5 gân chính xuất phát từ gốc, nổi rõ 2 mặt; mép lá có răng thưa cách nhau 0,5 đến 1 cm (**Hình 1.1**).

Đặc điểm vi phẫu của Đinh lăng rừng

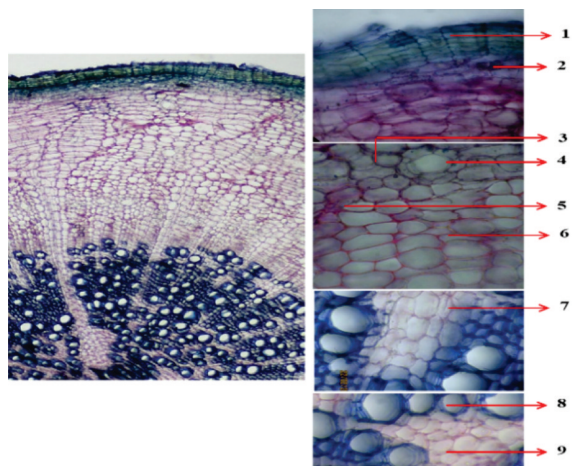
Đặc điểm vi phẫu rễ

Vi phẫu có tiết diện tròn. Từ ngoài vào trong có: Bần (1) gồm nhiều lớp tế bào hình chữ nhật xếp thành hàng đồng tâm và dày xuyên tâm. Mô mềm vỏ (3) gồm nhiều tế bào thành mỏng, hình đa giác, kích thước khác nhau, vách mỏng, xếp lộn xộn. Libe thứ cấp (6) không xếp thành dải liên tục mà tạo thành nhiều bó libe, gồm các tế bào mỏng có xu hướng bị ép dẹp, xếp thành dãy xuyên tâm, rải rác bên trong có chứa các ống tiết (4) tinh dầu. Gỗ thứ cấp (8) xếp thành các dải xuyên tâm không liên tục, gồm các



Hình 1.1. Đặc điểm thực vật của mẫu Đinh lăng răng 1a. Toàn cây; 1b. Rễ cây; 1c. Gốc cây; 1d. Hình thái thân từ già đến non; 2a. Bẹ lá; 2b, 2c, 2d, 2e. Lá kép lông chim; 2f. Hình thái lá chét; 2g. Mặt dưới lá. 2h. Mặt trên lá; 2i. Mép lá.

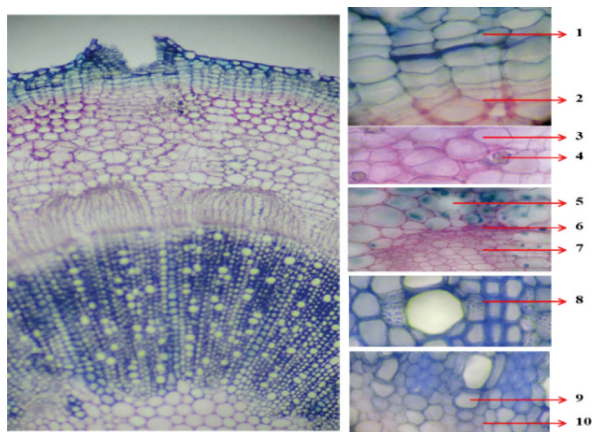
mạch gỗ xếp xen kẽ với các tế bào mô mềm gỗ. Tia ruột (7) khoảng 1-4 dãy tế bào hình chữ nhật, chạy theo hướng xuyên tâm, xen giữa các bó gỗ và loe rộng khi ra phần vỏ (Hình 1.2).



Hình 1.2. Hình ảnh vi phẫu rễ của Đinh lăng răng
1. Bần; 2. Tinh thể calci oxalat; 3. Mô mềm vỏ;
4. Ống tiết; 5. Libe sơ cấp; 6. Libe thứ cấp;
7. Tia ruột; 8. Gỗ thứ cấp; 9. Mô mềm ruột

Đặc điểm vi phẫu thân

Vi phẫu tiết diện tròn. Từ ngoài vào trong có: Bần (1) gồm nhiều lớp tế bào hình chữ nhật, xếp thành các dãy đồng tâm và xuyên tâm. Lục bì xếp dưới bần, gồm 1-2 lớp bất màu hồng. Mô dày góc (2) từ 2-5 lớp tế bào hình đa giác tròn, kích thước không đều, xếp thành từng đám. Mô mềm vỏ (3) gồm nhiều tế bào thành mỏng, đa giác, kích thước khác nhau, vách mỏng, xếp lộn xộn. Libe sơ cấp (6) xếp thành cụm đẹt, là các tế bào nhỏ, xếp xít nhau, bị ép dẹp biến dạng. Libe thứ cấp (7) là các tế bào mỏng, xếp thành dãy xuyên tâm, đều đặn, xếp thành vòng không liên tục mà tạo thành các chùy đỉnh bằng gần nhau. Tầng phát sinh libe gỗ là một hàng tế bào liên tục, bị ép dẹp giữa libe thứ cấp và gỗ thứ cấp. Gỗ thứ cấp (8) xếp thành vòng, dày gấp 3-4 lần libe thứ cấp và khoảng 1/3 - 1/2 bề dày vi phẫu. Các tế bào mạch gỗ thứ cấp hình đa giác, kích thước không đều, phân bố đều trong vùng mô mềm gỗ. Mô mềm gỗ là các tế bào đa giác, kích thước nhỏ. Gỗ sơ cấp (9) xếp thành cụm, mỗi cụm 1-2 bó, mỗi bó 2-4 hàng nằm trong vùng mô mềm gỗ vách cellulose. Tia ruột hẹp 1-2 dãy tế bào hình chữ nhật xen giữa bó gỗ. Mô mềm ruột (10) tế bào đa giác kích thước không đều. Rải rác trong phần mô dày, mô mềm vỏ và libe thứ cấp là các tinh thể calci oxalat (4) hình cầu gai và các ống tiết (5) tinh dầu (Hình 1.3).



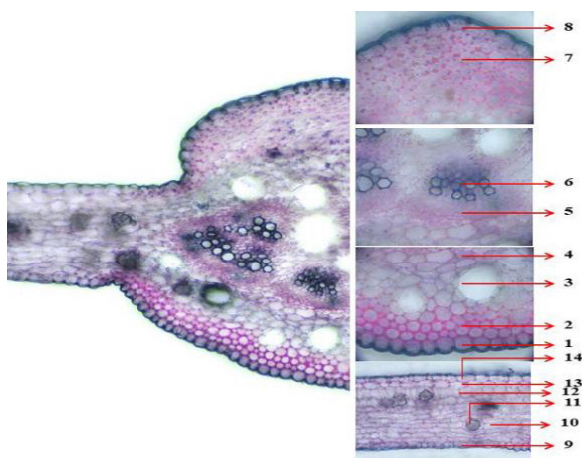
Hình 1.3. Hình ảnh vi phẫu thân của Đinh lăng răng
1. Bần; 2. Mô dày; 3. Mô mềm; 4. Tinh thể calci oxalat;
5. Ống tiết; 6. Libe sơ cấp; 7. Libe thứ cấp; 8. Gỗ thứ cấp;
9. Gỗ sơ cấp; 10. Mô mềm ruột.



Đặc điểm vi phẫu lá

Phần gân lá: Vi phẫu lá Đinh lăng có gân chính nổi rõ ở 2 mặt, mặt dưới nổi rõ hơn mặt trên. Từ dưới lên trên có cấu tạo bao gồm: Biểu bì dưới (1) gồm một lớp tế bào xếp sát nhau, mặt ngoài hóa cutin. Mô dày dưới (2) gồm 3-4 lớp tế bào, hình đa giác, vách dày bắt màu hồng đậm. Mô mềm (4) gồm nhiều lớp tế bào hình đa giác kích thước lớn, vách mỏng, xếp lộn xộn có chứa các tinh thể calci oxalat hình cầu gai. Ống tiết tinh dầu (3) có kích thước lớn nằm xen kẽ trong các đám mô mềm. Libe và gỗ tập trung thành từng bó nhỏ, mỗi bó gồm libe (5) ở ngoài gồm các tế bào vách mỏng, kích thước bé hơn mô mềm bắt màu hồng, gỗ (6) ở trong gồm các tế bào vách dày bắt màu xanh. Các bó này xếp quay phần gỗ hướng chụm vào nhau. Bề dày lớp gỗ gấp 2-3 lần lớp libe. Mô dày trên (7) từ 6-10 lớp tế bào hình đa giác, vách dày bắt màu hồng đậm. Biểu bì trên (8) gồm một lớp tế bào xếp sát nhau, vách hóa cutin bắt màu xanh.

Phần phiến lá: Bề dày của phiến lá khoảng 1/3-1/2 bề dày phần gân lá. Biểu bì dưới (9) là một lớp tế bào xếp sát nhau, mặt ngoài hóa cutin. Mô khuyết (10) gồm các tế bào thành mỏng bên trong có các tinh thể calci oxalat hình



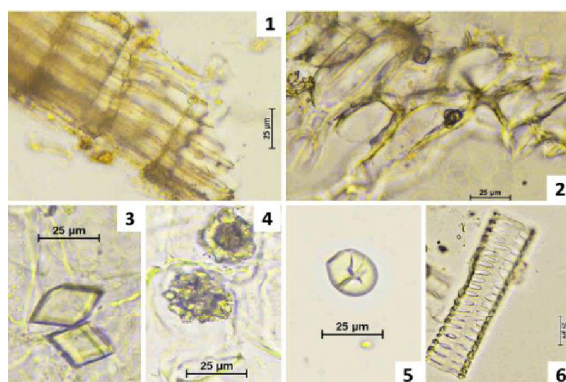
Hình 1.4. Cấu tạo giải phẫu lá của Đinh lăng rừng
 A. Gân lá: 1. Biểu bì dưới; 2. Mô dày dưới; 3. Ống tiết;
 4. Mô mềm; 5. Libe; 6. Gỗ; 7. Mô dày trên;
 8. Biểu bì trên. B. Phiến lá: 9. Biểu bì dưới;
 10. Mô khuyết; 11. Tinh thể calci oxalat;
 12. Mô gai; 13. Hạ bì; 14. Biểu bì trên

cầu gai (11). Mô gai (12) gồm một lớp tế bào hình chữ nhật, xếp sát nhau theo chiều dọc. Hạ bì trên (13) là một lớp tế bào hình đa giác hơi dẹt, xếp sát nhau theo chiều ngang. Biểu bì trên (14) là một hàng tế bào kích thước lớn hơn biểu bì dưới, có vách ngoài hóa cutin dày (**Hình 1.4**).

Đặc điểm soi bột

Đặc điểm bột rễ

Bột rễ màu vàng nâu, vị đắng ngọt hơi cay, mùi thơm. Soi kính hiển vi thấy: Mảnh bản (1) sẫm màu với các tế bào hình chữ nhật dẹt, xếp thẳng hàng. Mảnh mô mềm (2) với các tế bào gần tròn, thành mỏng, xếp lộn xộn. Tinh thể calci oxalat hình khối (3) hoặc hình cầu gai (4) với kích thước đa dạng, từ 15-30 µm. Hạt tinh bột đơn (5) hình chuông hoặc gần tròn, có rốn hạt rõ ở chính giữa, kích thước khoảng 10-20 µm. Mảnh mạch điểm (6) (**Hình 1.5**).



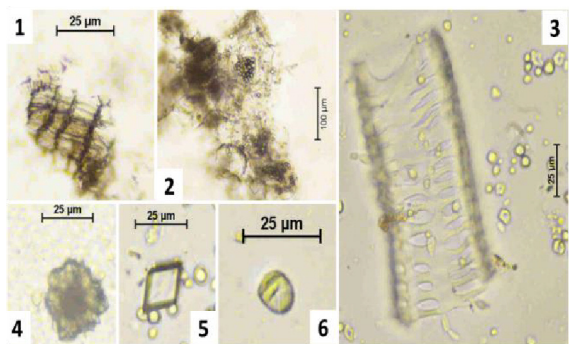
Hình 1.5. Bột rễ của Đinh lăng rừng
 1. Mảnh bản; 2. Mảnh mô mềm; 3. Tinh thể calci oxalat hình khối; 4. Tinh thể calci oxalat hình cầu gai; 5. Hạt tinh bột; 6. Mảnh mạch điểm

Đặc điểm bột thân

Bột thân có màu nâu xám, vị đắng hơi cay, mùi thơm. Soi kính hiển vi thấy: Mảnh bản (1) sẫm màu với các tế bào hình chữ nhật xếp thẳng hàng. Mảnh mô mềm (2) với các tế bào hình thù đa dạng, thành mỏng, xếp lộn xộn, bên trong có thể chứa tinh bột. Tinh thể calci oxalat hình khối (5) hoặc hình cầu gai (4) với kích thước đa dạng, từ 15-30 µm. Hạt tinh bột đơn (6) hình chuông hoặc gần tròn, có rốn hạt rõ ở chính



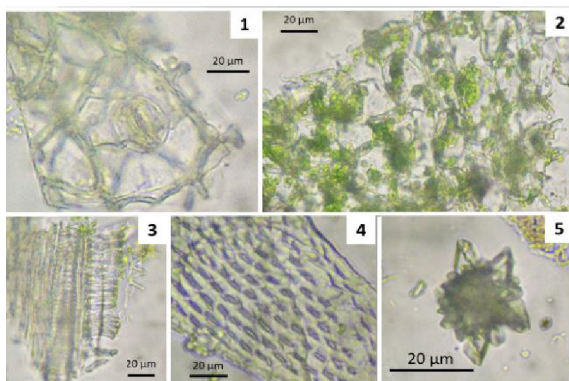
giữa, kích thước khoảng 10-20 μm . Mảnh mạch điểm (3) (**Hình 1.6**).



Hình 1.6. Bột thân của Đinh lăng răng
 1. Mảnh bản; 2. Mảnh mô mềm chứa tinh bột;
 3. Mảnh mạch điểm; 4. Tinh thể calci oxalat hình cầu gai; 5. Tinh thể calci oxalat hình khối;
 6. Hạt tinh bột

Đặc điểm bột lá

Bột lá màu xanh thẫm, mùi thơm. Soi trên kính hiển vi thấy: Mảnh biểu bì (1) mang tế bào lỗ khí kiểu trực bào, kích thước lỗ khí khoảng 20 μm x 25 μm , có 4 - 5 tế bào kèm. Mảnh mô mềm (2) với các tế bào elip hoặc tròn, thành mỏng, xếp lộn xộn. Tinh thể calci oxalat (5) hình cầu gai kích thước từ 10-30 μm . Mảnh mạch xoắn (3), mảnh mạch điểm (4). (**Hình 1.7**).



Hình 1.7. Bột lá của Đinh lăng răng
 1. Biểu bì mang lỗ khí; 2. Mô mềm;
 3. Mảnh mạch xoắn; 4. Mảnh mạch điểm;
 5. Tinh thể calci oxalat

Trên thực tế, cây Đinh lăng răng được khai thác sử dụng toàn cây, do vậy việc nghiên cứu

đặc điểm hình thái thực vật và đặc điểm vi phẫu, đặc điểm bột rễ, thân, lá của cây Đinh lăng răng *Polyscias guilfoylei* cv. *quinquefolia* góp phần xây dựng cơ sở dữ liệu về đặc điểm thực vật của cây, tạo tiền đề cho việc nhận thức, phân biệt và xây dựng tiêu chuẩn kiểm nghiệm dược liệu này.

Các hợp chất phân lập được

Thân cây Đinh lăng răng (4.0 kg) được cắt nhỏ, ngâm chiết với ethanol 96 % ở nhiệt độ 65 °C (8 lít x 3 lần). Lọc, gộp dịch lọc, và loại bỏ dung môi dưới áp suất giảm thu được cao chiết cồn (280,8 g). Cao chiết cồn được hòa tan vào nước cất (1 lít), sau đó chiết lần lượt với dung môi *n*-hexan (1 lít x 3 lần), ethyl acetat (1 lít x 3 lần), và *n*-butanol (1 lít x 3 lần). Thu được các phân đoạn phân đoạn *n*-hexan (49,1 g), ethyl acetat (13,2 g) và *n*-butanol (40,5 g).

Phân đoạn ethyl acetat (13,2 g) được chạy qua cột sắc ký (3 x 60 cm) pha tĩnh là silica gel, rửa giải bằng hệ dung môi CH_2Cl_2 -MeOH = 10:1 \rightarrow 0:1 (v/v), thu được 6 phân đoạn (EA1 - EA6). Phân đoạn EA4 (3,45 g) được làm tiếp tục cho qua cột pha đảo RP-C18 (2 x 60 cm), pha động là MeOH-H₂O = 1 : 1 thu được 5 phân đoạn (EA4-1 - EA4-5). Phân đoạn EA4-4 (0,84 g) được làm sạch bằng cột pha thường (2 x 45 cm) với hạt silica gel, rửa giải bằng hệ CH_2Cl_2 -MeOH = 7:1 (v/v) thu được **hợp chất 1** (3,2 mg). Sử dụng hệ dung môi CH_2Cl_2 -MeOH = 2:1 (v/v) cho làm sạch phân đoạn EA4-3 (1,03 g) bằng cột pha thường (2 x 60 cm) với hạt silica gel, kết quả thu được **hợp chất 2** (8,5 mg). Phân đoạn EA2 (2,19 g) được cho qua cột silica gel (2 x 60 cm), pha động là diclometan-methanol = 7 : 1 cho 5 phân đoạn (EA2-1 - EA2-5). Phân đoạn EA2-4 (0,67 g) tiếp tục phân lập trên cột pha đảo RP-18 (2 x 45 cm) thu được 3 phân đoạn (EA2-4-1 - EA2-4-3). Phân đoạn EA2-4-2 (0,23 g) được làm sạch trên cột sephadex LH-20 (2 x 65 cm), dung môi rửa giải 100 % MeOH, thu được **hợp chất 3** (7,5 mg).

Hợp chất 1: bột vô định hình, màu trắng. Phổ ESI-MS của hợp chất 1 thu được tín hiệu mảnh ion $m/z = 355,35$ $[\text{M}+\text{H}]^+$, kết hợp với phổ



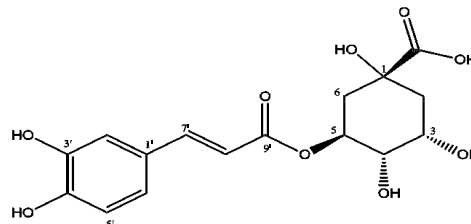
^{13}C NMR gợi ý công thức phân tử của hợp chất 1 là $\text{C}_{16}\text{H}_{18}\text{O}_9$ ($M = 354,31$). Dữ liệu thu được của phổ ^1H NMR cho thấy trong cấu trúc của hợp chất 1 có những tín hiệu proton của vòng benzen tại vị trí *meta* và *ortho*, cụ thể như sau: δ_{H} 7,07 (1H, d, $J = 2,0$ Hz, H-2'), 6,80 (1H, d, $J = 8,0$, Hz, H-5'), 6,98 (1H, dd, $J = 8,0, 2,0$ Hz, H-6'), bên cạnh đó có sự xuất hiện của một cặp trans-olefin cộng hưởng tại δ_{H} 7,58 (1H, d, $J = 16,0$ Hz, H-7'), 6,28 (1H, d, $J = 16,0$ Hz, H-8'). Những tín hiệu này gợi ý hợp chất 1 là dẫn xuất của phân tử acid caffeic. Ngoài ra, ở vùng trường cao trong phổ ^1H NMR xuất hiện sự có mặt của một vòng acid quinic đặc trưng tại δ_{H} 2,22 (2H, m, H-2); 5,36 (1H, m, H-3); 3,74 (1H, m, H-4); 4,18 (1H, m, H-5); 2,08 (2H, m, H-6). Trong phổ ^{13}C NMR thu được 16 tín hiệu carbon đặc trưng của dẫn xuất caffeoyl của acid quinic. So sánh dữ liệu ^1H và ^{13}C NMR của **1** (Bảng 1) với những giá

trị công bố trong tài liệu tham khảo [7] dẫn đến kết luận hợp chất 1 được xác định là **acid chlorogenic (Hình 2.1)**.

Hợp chất 2: bột vô định hình, màu trắng. Công thức phân tử của hợp chất 2 được xác định là $\text{C}_{18}\text{H}_{16}\text{O}_8$ ($M = 360,31$) dựa trên những dữ liệu thu được của phổ ESI-MS với tín hiệu mảnh ion $m/z = 359,25$ $[\text{M}-\text{H}]^-$ và ^{13}C NMR. Dữ liệu thu được của phổ ^1H NMR cho thấy có 6 proton vòng thơm cho tín hiệu cộng hưởng tại vùng trường thấp, cụ thể là: δ_{H} 7,06 (1H, d, $J = 2,0$ Hz, H-2), δ_{H} 6,77 (1H, d, $J = 2,0$ Hz, H-2'), 6,80 (1H, d, $J = 8,5$ Hz, H-5), 6,72 (1H, d, $J = 8,0$ Hz, H-5'), 6,97 (1H, d, $J = 8,0$ Hz, H-6), 6,63 (1H, d, $J = 8,5$ Hz, H-6'); từ hằng số ghép cặp (J) gợi ý rằng proton trong 2 cặp vòng thơm nằm ở vị trí *meta* và *ortho* với nhau. Tương tự như hợp chất **1**, hợp chất **2** cũng có tín hiệu của một cặp trans-olefin tại δ_{H} 7,57 (1H, d, $J = 16,0$ Hz, H-7), 6,28 (1H, d,

Bảng 1. Bảng dữ liệu phổ ^1H và ^{13}C NMR của hợp chất 1

	Vị trí C	Hợp chất 1 (MeOD)	
		δ_{H} (ppm) (J , Hz)	δ_{C} (ppm)
1	C	-	*
2	CH_2	2.22, 2H, m	38.9
3	CH	5.36, 1H, m	73.6
4	CH	3.74, 1H, m	72.0
5	CH	4.18, 1H, m	71.4
6	CH_2	2.08, 2H, m	38.3
1'	C	-	127.9
2'	CH	7.07, 1H, d (2.0)	116.5
3'	C	-	147.1
4'	C	-	146.8
5'	CH	6.80, 1H, d (8.0)	115.3
6'	CH	6.98, 1H, dd (8.0, 2.0)	123.0
7'	CH	7.58, 1H, d (16.0)	149.6
8'	CH	6.28, 1H, d (16.0)	115.2
9'	CO	-	168.7



Hình 2.1. Cấu trúc phân tử của **1**



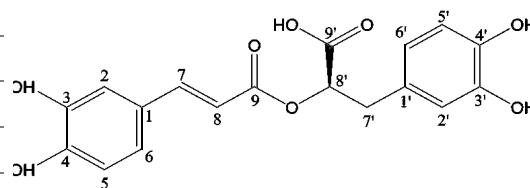
$J = 16,0$ Hz, H-8). Điều này cho thấy đây là những tín hiệu của acid caffeic. Ngoài ra, phổ ^1H NMR xuất hiện sự có mặt của nhóm CH tại δH 5,21 (1H, dd, $J = 4,0, 8,0$ Hz, H-8') và nhóm CH₂ tại δH 3,11 (1H, br d, $J = 14,5$ Hz, H-7'a) và δH 3,03 (1H, m, H-7'b). Trong phổ ^{13}C NMR thu được 17 tín hiệu carbon bao gồm: 7 tín hiệu carbon bậc 4, 9 nhóm CH, 1 nhóm CH₂. Những dữ liệu ^1H và ^{13}C NMR của hợp chất **2** (Bảng 2) được so sánh với tài liệu tham khảo [5], từ đó hợp chất **2** được xác định là **acid rosmarinic**. Để khẳng định cho cấu hình tại vị trí C-8' chúng tôi tiến hành đo thêm góc quay cực $[\alpha]^{25}\text{D} = +47,3$ (methanol, c 0,2), và so sánh với tài liệu tham khảo [5], cấu trúc của hợp chất **2** được trình bày ở Hình 2.2.

Hợp chất 3: bột màu vàng. Công thức phân tử của hợp chất 3 được xác định là $\text{C}_{22}\text{H}_{22}\text{O}_{12}$ (M

$= 478,11$) dựa trên dữ liệu thu được từ phổ khối MS có pic ion $m/z = 477,15$ $[\text{M}-\text{H}]^-$ và kết hợp với dữ liệu phổ ^{13}C NMR. Dữ liệu phổ ^1H NMR hiển thị những tín hiệu proton của vòng benzen tại δH 7,86 (1H, d, $J = 2,2$ Hz, H-2'); 7,61 (1H, dd, $J = 8,5, 2,2$ Hz, H-6'); 6,22 (1H, d, $J = 2,0$ Hz, H-6); 6,42 (1H, d, $J = 2,0$ Hz, H-8); hằng số tương tác (J) cho thấy các proton nằm ở các vị trí ortho và meta với nhau. Ngoài ra, trên phổ ^1H NMR cũng xuất hiện một phân tử đường. Phân tử đường được xác định là glucose thông qua tín hiệu proton anomer δH 5,18 (1H, d, $J = 7,5$ Hz, H-1') và carbon anomer δC 103,7 (C-1'), cùng với những tín hiệu carbon δC 75,9; 78,1; 71,5; 78,5 và 62,6. Ngoài ra, trong phổ ^1H NMR của hợp chất **3** xuất hiện thêm một tín hiệu methoxy ($-\text{OCH}_3$) tại δH 3,96 (3H, s). Phổ ^{13}C NMR cho 21 tín hiệu carbon,

Bảng 2. Bảng dữ liệu phổ ^1H và ^{13}C NMR của hợp chất 2

Vị trí C		Hợp chất 2 (MeOD)	
		δH (ppm) (J , Hz)	δC (ppm)
1	C	-	127.7
2	CH	7.06, 1H, d (2.0)	115.3
3	C	-	146.8
4	C	-	149.7
5	CH	6.80, 1H, d (8.5)	116.5
6	CH	6.97, 1H, d (8.0)	123.1
7	CH	7.57, 1H, d (16.0)	147.7
8	CH	6.28, 1H, d (16.0)	114.5
9	CO	-	168.5
1'	C	-	129.3
2'	CH	6.77, 1H, d (2.0)	117.6
3'	C	-	146.2
4'	C	-	145.3
5'	CH	6.72, 1H, d (8.0)	116.3
6'	CH	6.63, 1H, d (8.5)	121.8
7'a	CH ₂	3.11, 1H, br d (14.5)	37.9
7'b	CH ₂	3.03, 1H, m	
8'	CH	5.21, 1H, dd (4.0/8.0)	74.6



Hình 2.2. Cấu trúc phân tử của 2



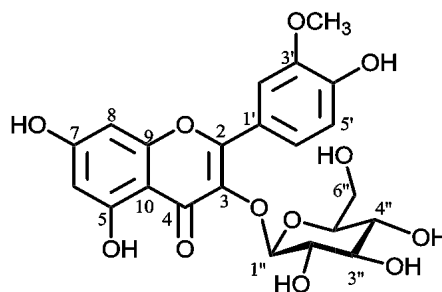
kết hợp với dữ liệu phổ ^1H NMR nhận thấy rằng hợp chất **3** là một flavonoid glycosid có aglycon là flavonol và một phân tử đường glucose. Giá trị NMR của hợp chất **3** (Bảng 3) so sánh với những giá trị NMR đã công bố trước đây [6], dẫn đến kết luận hợp chất **3** là **isorhamnetin-3-O- β -D-glucopyranoside** (Hình 2.3).

Trong nghiên cứu này, chúng tôi đã lựa chọn phân đoạn ethyl acetat của dịch chiết ethanol từ thân để tiến hành phân lập chất tinh khiết trên cơ sở khảo sát bằng sắc ký lớp mỏng với nhiều hệ dung môi khác nhau (diclometan: methanol và methanol : nước) đều cho kết quả phân đoạn ethyl acetat cho các vết hiện lên rõ nét và tách nhau khá rõ ràng.

Nghiên cứu đã sử dụng kỹ thuật sắc ký cột cho sự phân lập các hoạt chất từ phân đoạn ethyl acetat của dịch chiết ethanol từ thân của loài *Polyscias guilfoylei* cv. *quinquefolia*. Kết quả phân lập được xác định cấu trúc hóa học bằng phương pháp phổ cộng hưởng từ hạt nhân (NMR), cùng với phương pháp vật lý khác, và kết hợp so sánh với tài liệu tham khảo đã công bố trước đây, cho hai hợp chất thu được dẫn xuất của caffeoylquinic acid và một hợp chất flavonoid. Kết quả này được so sánh với các nghiên cứu trước đây về thành phần hoá học của loài *Polyscias guilfoylei* tại Việt Nam, dẫn đến kết luận hợp chất 1 đã được tìm thấy ở phần lá của cây này và được công bố ở nghiên cứu trước của

Bảng 3. Bảng dữ liệu phổ ^1H và ^{13}C NMR của hợp chất 3

Vị trí C	Hợp chất 2a (CD ₃ OD)		
	δ_{H} (ppm) (J, Hz)	δ_{C} (ppm)	
2	C	-	158,5
3	C	-	135,4
4	C=O	-	179,4
5	C	-	163,1
6	=CH-	6,22, 1H, d (2,0)	99,9
7	C	-	166,0
8	=CH-	6,42, 1H, d (2,0)	94,7
9	C	-	158,7
10	C	-	105,7
1'	C	-	123,1
2'	=CH-	7,86, 1H, d (2,2)	114,4
3'	C	-	148,4
4'	C	-	150,9
5'	=CH-	6,88, 1H, dd (8,5)	116,0
6'	=CH-	7,61, 1H, d (8,5; 2,2)	123,9
1''	>CH-O-	5,18, 1H, d (7,5)	103,7
2''	>CH-OH	3,58, m	75,9
3''	>CH-OH	3,58, m	78,1
4''	>CH-OH	3,84, m	71,5
5''	>CH-OH	3,67, m	78,5



Hình 2.3. Cấu trúc phân tử của **3**



chúng tôi. Hai hợp chất tinh khiết (**2**, **3**) được công bố lần đầu tiên phân lập được từ thân cây Đinh lăng răng (*Polyscias guilfoylei*).

Kết luận

Đã mô tả đặc điểm hình thái, xác định tên khoa học của cây Đinh lăng răng. Xác định được các đặc điểm vi phẫu lá, thân, rễ; đặc điểm bột lá, thân, rễ của cây *Polyscias guilfoylei* (W.Bull) L.H.Bailey cv. *quinquefolia*. Loài nghiên cứu có các đặc điểm đặc trưng gồm: ống tiết tinh dầu trong cả vi phẫu rễ, thân, lá; tinh thể calci oxalat trong cả rễ, thân, lá; hạt tinh bột trong rễ và thân của mẫu nghiên cứu.

Từ dịch chiết ethanol của thân cây Đinh lăng răng phân lập được ba hợp chất, trong đó hai hợp chất là dẫn xuất caffeoyl của acid quinic (**1**, **2**) và một flavonoid (**3**). Những hợp chất này được xác định cấu trúc hóa học bằng phương pháp phổ cộng hưởng từ hạt nhân (NMR), cùng với phương pháp vật lý khác, và kết hợp so sánh với tài liệu tham khảo đã công bố trước đây. Trong đó, hợp chất **1** cũng được tìm thấy ở phần lá của cây này và được công bố ở nghiên cứu trước của chúng tôi. Hai hợp chất tinh khiết (**2**, **3**) được công bố lần đầu tiên phân lập được từ thân cây Đinh lăng răng (*Polyscias guilfoylei*).

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. Phạm Hoàng Hộ (2000), *Cây cỏ Việt Nam*, Nhà xuất bản Trẻ, TP. Hồ Chí Minh.
2. Nguyễn Thị Thu Hương (2001), "Nghiên cứu tác dụng chống trầm cảm và stress của Đinh lăng", *Tạp chí Dược liệu*, 6, tr. 84-86.
3. Đinh Thị Vân, Lê Hương Giang, Nguyễn Quốc Tuấn, Phạm Quốc Tuấn, Phương Thiện Thương, Nguyễn Mạnh Tuyển (2019), "Nghiên cứu thành phần hoá học của lá cây Đinh lăng răng (*Polyscias guilfoylei* cv. *quinquefolia*)", *Tạp chí Y học Việt Nam*, 477, tr. 100-104.
4. Ashmawy N. S. Gad, H. A. Al-Musayeib, N. El-Ahmady, S. H. Ashour, M. L. Singab, A. N. B. (2019), "Phytoconstituents from *Polyscias guilfoylei* leaves with histamine-release inhibition activity", *Zeitschrift fur Naturforschung. C, Journal of biosciences*, pp.145-150.
5. Aung H. T. Nikai, T. Niwa, M. Takaya, Y. (2010), "Rosmarinic acid in *Argusia argentea* inhibits snake venom-induced hemorrhage", *J Nat Med*, 64(4), pp. 482-6.
6. Liu H. Mou, Y. Zhao, J. Wang, J. Zhou, L. Wang, M. Wang, D. Han, J. Yu, Z. Yang, F. (2010), "Flavonoids from *Halostachys caspica* and their antimicrobial and antioxidant activities", *Molecules*, 15(11), pp. 7933-45.
7. Lopez-Martinez L. M. Santacruz-Ortega, H. Navarro, R. E. Sotelo-Mundo, R. R. Gonzalez Aguilar, G. A. (2015), "A (1)H NMR Investigation of the Interaction between Phenolic Acids Found in Mango (*Manguifera indica* cv *Ataulfo*) and Papaya (*Carica papaya* cv *Maradol*) and 1,1-diphenyl-2-picrylhydrazyl (DPPH) Free Radicals", *PLoS One*, 10(11), pp. 140-151.
8. Sugimoto S. Yamano, Y. Khalil, H. E. Otsuka, H. Kamel, M. S. Matsunami, K. (2017), "Chemical structures of constituents from the leaves of *Polyscias balfouriana*", *J Nat Med*, 71(3), pp. 558-563.