

## NGHIÊN CỨU PHỔ NMR CỦA MỘT SỐ CHALCONES CÓ CHỨA MẠCH *O*-PROPARGYL

Đến tòa soạn 12-07-2022

Hoàng Hữu Anh<sup>1</sup>, Nguyễn Đình Thành<sup>\*1</sup>, Lê Ngọc Hoan<sup>1</sup>, Ngô Thị Chính<sup>1</sup>,  
Nguyễn Thị Minh Huyền<sup>1</sup>, Nguyễn Thị Thảo<sup>1</sup>, Nguyễn Thị Thuý Đình<sup>1</sup>, Phạm Văn Tường<sup>1</sup>,  
Lê Ngọc Bích Loan<sup>1</sup>, Nguyễn Minh Trí<sup>2</sup>, Vũ Ngọc Toán<sup>2</sup>

1. Khoa Hoá học, Trường Đại học khoa học Tự nhiên (Đại học Quốc gia Hà Nội)

2. Viện Công nghệ mới (Viện KH-CN quân sự, Bộ Quốc phòng)

Email: nguyendinhthanh@hus.edu.vn

### SUMMARY

#### STUDY ON NMR SPECTROSCOPY OF SOME CHALCONES HAVING *O*-PROPARGYL MOIETY

Several substituted chalcones containing propargyl ether group in position 4 of benzene ring were synthesized by aldol-condensation reaction of substituted 4-propargyloxy derivatives of corresponding benzaldehydes and acetophenones. Potassium hydroxide solution in methanol was used as base. The <sup>1</sup>H and <sup>13</sup>C NMR spectra of these compounds have been studied.

**Keywords:** Acetophenones, benzaldehydes, chalcones, propargyl ether, NMR

### 1. MỞ ĐẦU

Chalcone là ketone  $\alpha,\beta$ -không no gồm 2 vòng thơm liên kết với nhau bởi liên kết carbonyl và liên kết đôi carbon-carbon liên hợp. Trong thời gian gần đây mối quan tâm ứng dụng của chúng trong một số lĩnh vực đã tăng lên đáng kể do các hoạt tính sinh học đáng chú ý của chúng, như hoạt tính kháng khuẩn [1], kháng virus [2], chống lại virusw herpes simplex (virus gây bệnh viêm da) [3], điều trị bệnh đái tháo đường [4], chống co thắt [5], chống oxy hoá [6], chống HIV [8], chống ung thư [9], chống viêm [10], v.v... Mặt khác, việc đưa mạch propargyl vào khung phân tử của chalcone làm cho phân tử đích có thể được sử dụng làm một trong các chất phản ứng cần thiết trong hoá học click nhằm tạo ra vòng 1*H*-1,2,3-triazole [7]. Để góp phần vào việc tổng hợp các chalcone thể có hoạt tính sinh học và được quan tâm khác, chúng tôi đã tiến hành tổng hợp dãy các chalcone có chứa mảnh cấu

trúc propargyl và nghiên cứu phổ NMR của chúng.

### 2. THỰC NGHIỆM

Điểm nóng chảy được đo trên thiết bị đo điểm nóng chảy STUART SMP3 (BIBBY STERILIN-UK) Phổ <sup>1</sup>H NMR và <sup>13</sup>C NMR được đo trên phổ kế NMR AvanceNEO 600MHz Spectrometer (Bruker, Đức) ở tần số 600 MHz và 150 MHz tương ứng trong dung môi DMSO-*d*<sub>6</sub> và chất chuẩn nội TMS.

**Qui trình phản ứng tổng hợp các chalcone (4a-h).** Hòa tan *p*-propargyloxybenzaldehyde **1** hoặc *p*-propargyloxyacetophenone **2** (5 mmol) và acetophenone thể (**3a-e**) hoặc benzaldehyde thể (**3f-h**) tương ứng (5 mmol) vào trong 12 ml methanol. Dung dịch KOH (0,34 g; 6 mmol; 1,2 đương lượng) trong 2 ml methanol được nhỏ giọt từ từ vào hỗn hợp trên trong khi khuấy đều. Hỗn hợp phản ứng được khuấy tiếp ở nhiệt độ phòng trong 30 giờ, kiểm tra phản ứng bằng sắc kí lớp mỏng với hệ dung môi

hexane:ethyl acetate (7:3 về thể tích). Xử lý sản phẩm bằng cách cho H<sub>2</sub>O vào gấp đôi thể tích, trung hòa bằng dung dịch HCl (1:1) đến pH 5. Lọc lấy kết tủa bằng phễu lọc Büchner, rửa bằng nước đến trung tính. Phơi khô ngoài không khí. Thu được các sản phẩm **4a-h** có màu vàng nhạt hoặc vàng đậm. Kết tinh lại bằng hỗn hợp ethanol 96%/toluene (3:1 về thể tích). Sản phẩm được tinh chế tiếp bằng sắc kí cột trên silica gel (vói hệ dung môi rửa giải hexane: ethyl acetate, 7:3 về thể tích). Thu được các chất rắn tinh khiết có màu vàng nhạt. Số liệu phổ <sup>1</sup>H và <sup>13</sup>C NMR của các hợp chất này như sau.

(*E*)-1-(4-Nitrophenyl)-3-(4-propargyloxyphenyl)-prop-2-en-1-one (**4a**). Từ **1** (0,8 g) và **3a** (0,825 g), thu được **4a** (1,02 g, 66,7%). Đ<sub>nc</sub>: 160–162°C.

(*E*)-1-(4-Bromophenyl)-3-(4-propargyloxyphenyl)-prop-2-en-1-one (**4b**). Từ

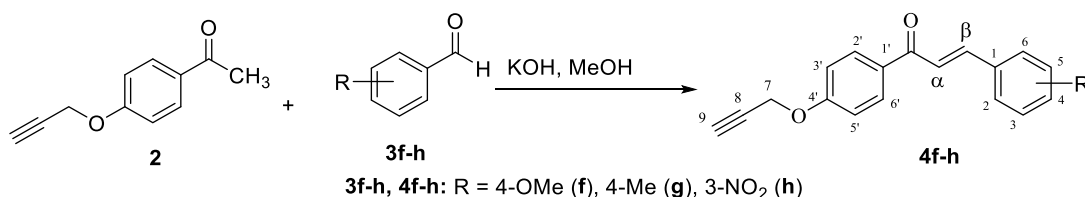
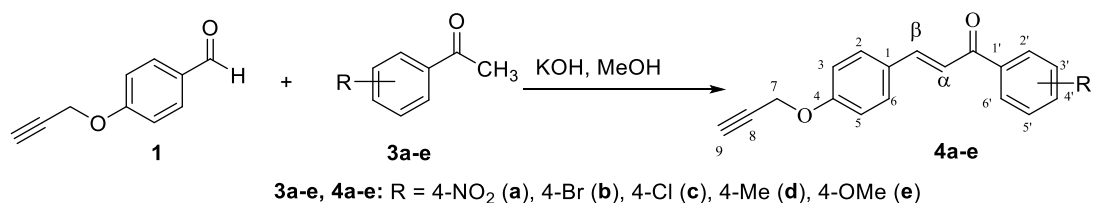
**1** (0,8 g) và **3b** (0,995 g), thu được **4b** (1,43 g, 84%). Đ<sub>nc</sub>: 140–142°C.

(*E*)-1-(4-Chlorophenyl)-3-(4-propargyloxyphenyl)-prop-2-en-1-one (**4c**). Từ **1** (0,8 g) và **3c** (0,64 ml; 0,77 g), thu được **4c** (1,11 g, 75%). Đ<sub>nc</sub>: 147–149°C.

(*E*)-1-(4-Methylphenyl)-3-(4-propargyloxyphenyl)-prop-2-en-1-one (**4d**). Từ **1** (0,8 g) và **3d** (0,68 ml, 0,67 g), thu được **4d** (0,7 g, 51%). Đ<sub>nc</sub>: 140–142°C.

(*E*)-1-(4-Methoxyphenyl)-3-(4-propargyloxyphenyl)-prop-2-en-1-one (**4e**). Từ **1** (0,8 g) và **3e** (0,75 g), thu được **4e** (0,996 g, 68%). Đ<sub>nc</sub>: 158–160°C.

(*E*)-1-(4-Propargyloxyphenyl)-3-(4-methoxyphenyl)-prop-2-en-1-one (**4f**). Từ **2** (0,87 g) và **3f**



#### Sơ đồ 1. Con đường tổng hợp một số hợp chất chalcone 4a-h

(0,68 g; 0,61 ml), thu được **4f** (0,87 g, 60%). Đ<sub>nc</sub>: 143–145°C.

(*E*)-1-(4-Propargyloxyphenyl)-3-(4-methylphenyl)-prop-2-en-1-one (**4g**). Từ **2** (0,87 g) và **3g** (0,6 g, 0,56 ml), thu được **4g** (0,86 g, 62,5%). Đ<sub>nc</sub>: 110–112°C.

(*E*)-1-(4-Propargyloxyphenyl)-3-(3-nitrophenyl)-prop-2-en-1-one (**4h**). Từ **2** (0,87 g) và **3h** (0,76 g), thu được **4h** (1,38 g, 85%). Đ<sub>nc</sub>: 162–164°C.

### 3. KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

Các chalcone được tổng hợp bằng phản ứng ngưng tụ aldol từ các acetophenone và benzaldehyde thế khác nhau tương ứng theo Sơ đồ 1. Phản ứng được xúc tác bởi base mạnh, như KOH hoặc NaOH. Dung môi cho phản ứng có thể là methanol. Cấu trúc của sản phẩm

tạo thành được xác nhận bằng phương pháp phổ <sup>1</sup>H NMR và <sup>13</sup>C NMR.

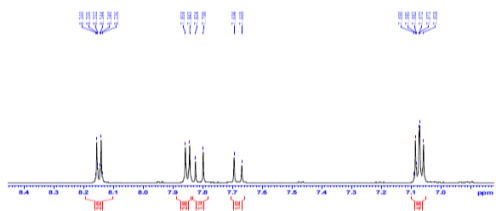
Trên phổ <sup>1</sup>H NMR xuất hiện các tín hiệu cộng hưởng đặc trưng cho từng kiểu proton có mặt trong phân tử (Hình 1). Ở các hợp chất **4a-4e**, các tín hiệu cộng hưởng ở trường yếu nhất thuộc về các proton ở vòng thơm gắn trực tiếp

với nhóm C=O xuất hiện trong vùng trường yếu nhất ở  $\delta=8,32-8,05$  ppm, với độ cao đường cong tích phân bằng 2H, thường có độ bội doublet với hằng số ghép cặp  $J=7,8-9,0$  Hz, được gán cho các proton H-2' và H-6', vì các proton này nằm ở vị trí *ortho* của nhóm ketone thơm nên chịu hiệu ứng anisotropy và hiệu ứng -C gây phân chấn mạnh của nhóm này. Các proton này có tương tác từ theo kiểu thể *para* với các proton H-3' và H-6' tương ứng, với độ chuyển dịch hoá học ở vùng  $\delta=8,35-7,08$  ppm. Trong khi đó, các proton ở vòng thơm benzene có nhóm vinyl gắn vào thì lại cộng hưởng ở vùng trường mạnh hơn của vùng proton thơm, ở vùng  $\delta=7,88-7,76$  và  $\delta=7,26-7,00$  ppm, được gán cho các proton H-2 và H-6, hoặc H-3 và H-5 tương ứng. Các tín hiệu này cũng có độ cao đường cong tích phân 2H và độ bội doublet với hằng số ghép cặp  $J=8,4-9,0$  Hz. Ở các hợp chất **4f-4h**, việc di chuyển nhóm propargyloxy, có hiệu ứng đẩy electron mạnh (hiệu ứng +C), sang phía vòng thơm gắn với nhóm carbonyl làm cho sự cộng hưởng của các proton H-2' và H-6' cũng như của các proton H-3' và H-5' xảy ra ở vùng trường mạnh hơn (khi so sánh tương tự với các hợp chất **4a-4e**), ở vùng  $\delta=8,24-8,15$  và  $\delta=7,17-7,13$  ppm tương ứng. Các proton này

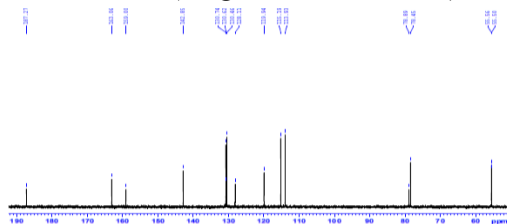
cũng có tương tác từ với nhau theo kiểu thể *para* nên tín hiệu cộng hưởng xuất hiện ở dạng doublet với độ cao đường cong tích phân 2H và hằng số ghép cặp  $J=8,4-9,0$  Hz. Các proton H-3' và H-5' có độ chuyển dịch hoá học nhỏ hơn do ảnh hưởng đẩy electron trực tiếp của nhóm thể propargyloxy ở vị trí *ortho* với chúng. Ở hợp chất **4h**, do có kiểu thể *meta* của nhóm thể NO<sub>2</sub> hút electron mạnh (hiệu ứng -C), nên sự cộng hưởng của các proton H-2, H-4, và H-6 chuyển dịch mạnh về phía trường yếu, ở  $\delta=8,76; 8,32$  và  $8,26$  ppm tương ứng (do chịu ảnh hưởng hút electron của nhóm nitro). Proton H-5 có tín hiệu cộng hưởng ở trường mạnh hơn,  $\delta=7,74(t)$  ppm, do không chịu ảnh hưởng này. Các proton H-3' và H-5' của các hợp chất **4a-4e** cũng như H-3 và H-5 của các hợp chất **4f-4h** vì nằm ở vị trí *ortho* của nhóm thể *para*-R (trừ hợp chất **4h** có kiểu thể *m*-NO<sub>2</sub>) nên tín hiệu cộng hưởng của chúng thay đổi phụ thuộc vào bản chất electron của nhóm thể R. Các tín hiệu này xuất hiện ở vùng trường yếu  $\delta=8,35$  ppm với độ bội doublet và độ cao đường cong tích phân 2H, với hằng số ghép cặp  $J=9,0$  Hz (trường hợp chalcone **4a** với R=4-NO<sub>2</sub>), do chịu ảnh hưởng hút electron -C của nhóm nitro.

Bảng 1. Phổ <sup>1</sup>H NMR của các hợp chất 4a-h [ $\delta$  (ppm); J (Hz)]

Proton	4a	4b	4c	4d	4e	4f	4g	4h
H-2	7,88(d); 9,0	7,87(d); 8,4	7,88(d); 8,4	7,86(d); 8,4	7,85(d); 9,0	7,82(d); 8,4	7,76(d); 9,0	8,76(s)
H-3	7,08(d); 9,0	7,07(d); 8,4	7,09(d); 8,4	7,07(d); 8,4	7,07(d); 9,0	7,00(d); 8,4	7,26(d); 9,0	-
H-4	-	-	-	-	-	-	-	8,32(d); 7,8
H-5	như H-3	như H-3	như H-3	như H-3	như H-3	như H-3	như H-3	7,74(t); 7,8
H-6	như H-2	như H-2	như H-2	như H-2	như H-2	như H-2	như H-2	8,26(dd); 7,8, 1,8
H-7	4,89(d); 2,4	4,89(d); 2,4	4,90(d); 2,4	4,88(d); 2,4	4,88(d); 2,4	4,93(d); 2,4	4,94(d); 2,4	4,97(d); 2,4
H-9	3,60(t); 2,4	3,60(t); 2,4	3,62(t); 2,4	3,59(t); 2,4	3,60(t); 2,4	3,61(t); 2,4	3,63(t); 2,4	3,66(t); 2,4
H- $\alpha$	7,76(d); 15,6	7,73(d); 15,6	7,75(d); 15,6	7,70(d); 15,6	7,68(d); 15,6	7,69(d); 15,6	7,69(d); 15,6	7,82(d); 15,6
H- $\beta$	7,81(d); 15,6	7,79(d); 15,6	7,82(d); 15,6	7,80(d); 15,6	7,81(d); 15,6	7,78(d); 15,6	7,87(d); 15,6	8,16(d); 15,6
H-2'	8,32(d); 9,0	8,07(d); 8,4	8,17(d); 8,4	8,05(d); 7,8	8,15(d); 9,0	8,15(d); 8,4	8,17(d); 9,0	8,24(d); 9,0
H-3'	8,35(d); 9,0	7,76(d); 8,4	7,63(d); 8,4	7,37(d); 7,8	7,08(d); 9,0	7,13(d); 8,4	7,14(d); 9,0	7,17(d); 9,0
H-5'	như H-3'	như H-3'	như H-3'	như H-3'	như H-3'	như H-3'	như H-3'	như H-3'
H-6'	như H-2'	như H-2'	như H-2'	như H-2'	như H-2'	như H-2'	như H-2'	như H-2'
CH <sub>3</sub>	-	-	-	2,40(s)	3,86(s)	3,81(s)	2,34(s)	-



Hình 1. Phổ  $^1\text{H-NMR}$  của hợp chất **4e** với  $R=4\text{-OMe}$  (vùng thơm và liên kết đôi)



Hình 2. Phổ  $^{13}\text{C-NMR}$  của hợp chất **4e** (với  $R=4\text{-OMe}$ )

Ở trường hợp các chalcone **4b** ( $R=4\text{-Br}$ ) và **4c** ( $R=4\text{-Cl}$ ), các tín hiệu cộng hưởng ở  $\delta=7,76$  ppm và  $\delta=7,63$  ppm cũng có độ bội doublet với độ cao đường cong tích phân 2H và hằng số ghép cặp đều là  $J=8,4$  Hz là do ảnh hưởng độ âm điện của nhóm halogen; hoặc xuất hiện ở vùng trường mạnh hơn, ở  $\delta=7,37$  ppm và  $\delta=7,26$  ppm cũng với độ bội doublet và độ cao đường cong tích phân 2H, hằng số ghép cặp tương ứng  $J=7,8$  và  $9,0$  Hz (trường hợp hợp chất **4d** và **4g** với  $R=4\text{-Me}$ ) do ảnh hưởng +I của nhóm methyl,  $\delta=7,08$  ppm và  $\delta=7,00$  ppm cũng với độ bội doublet và độ cao đường cong tích phân 2H, hằng số ghép cặp tương ứng  $J=9,0$  và  $8,4$  Hz (trường hợp hợp chất **4e** ( $R=4\text{-Me}$ ) và **4f** ( $R=4\text{-OMe}$ ) cũng do ảnh hưởng đẩy electron +C của nhóm methoxy. Sự xuất hiện của 4 nhóm tín hiệu doublet trên với độ cao đường cong tích phân là 2H và hằng số ghép cặp  $J=7,8\text{--}9,0$  Hz trên phổ các hợp chất **4a-4g** cho thấy chúng đều có tương tác từ trực tiếp của các proton *ortho*, điều này giúp cho việc khẳng định lại kiểu thế *para* của hai vòng thơm, trừ hợp chất **4h** có kiểu thế *m-NO<sub>2</sub>*, nên bốn tín hiệu đặc trưng nằm ở các vị trí khác nhau theo kiểu thế *meta*, chẳng hạn, tín hiệu  $\delta=8,76$  ppm có độ bội singlet và độ cao đường cong tích phân 1H được gán cho proton H-2 do proton

này nằm cạnh liên kết  $\text{C}=\text{C}$  và nhóm nitro; tín hiệu  $\delta=8,32$  ppm có độ bội doublet và độ cao đường cong tích phân 1H và hằng số ghép cặp  $J=7,8$  Hz được gán cho proton H-4, vì do proton này nằm cạnh nhóm nitro và proton H-5; độ chuyển dịch hoá học  $\delta=8,27$  ppm cũng có độ bội doublet và độ cao đường cong tích phân 1H với hằng số ghép cặp  $J=1,8$  Hz được gán cho proton H-6 do proton này nằm cạnh proton H-5 và nhóm thế  $\text{C}=\text{C}$ ,  $\delta=7,74$  ppm với độ bội triplet và độ cao đường cong tích phân là 1H với hằng số ghép cặp  $J=7,8$  Hz được gán cho H-5 do proton này nằm giữa 2 proton H-4 và H-6. Các tín hiệu cộng hưởng đặc trưng của proton alkene trong phân tử chalcone xuất hiện ở vùng  $\delta=8,16\text{--}7,78$  ppm, với độ cao đường cong tích phân bằng 1H và độ bội doublet, hằng số ghép cặp  $J=15,6$  Hz, được gán cho proton H- $\beta$ , trong khi đó, các tín hiệu cộng hưởng ở vùng  $\delta=7,82\text{--}7,69$  ppm, cũng có độ cao tích phân 1H và độ bội doublet với hằng số ghép cặp  $J=15,6$  Hz được gán cho proton H- $\alpha$ . Giá trị hằng số ghép cặp  $J = 15,6$  Hz cho thấy alkene thế này có cấu hình *trans*. Proton- $\beta$  có tín hiệu cộng hưởng nằm ở vùng trường yếu hơn so với proton H- $\alpha$  vì vị trí  $\beta$  chính là vị trí có mật độ electron thấp hơn cả trên hệ liên hợp carbonyl  $\alpha,\beta$ -không no. Các tín hiệu cộng hưởng trong vùng trường mạnh còn lại đặc trưng như sau. Tín hiệu cộng hưởng ở vùng  $\delta=4,88\text{--}4,97$  ppm với độ bội doublet, độ cao tích phân 2H và hằng số ghép cặp  $J=2,4$  Hz được gán cho proton H-7 của nhóm methylene nằm giữa nguyên tử oxy và liên kết ba (nhóm propargyloxy). Tín hiệu cộng hưởng đặc trưng cho proton alkyne cuối mạch  $\text{C}\equiv\text{CH}$  xuất hiện ở vùng  $\delta=3,59\text{--}3,66$  ppm, có độ bội triplet và hằng số ghép cặp  $J=2,4$  Hz. Các proton ở nhóm thế *para*-methoxy ở các hợp chất **4e** và **4f** có độ chuyển dịch hoá học ở  $\delta=3,86$  và  $3,81$  ppm tương ứng. Các proton ở nhóm thế *para*-methyl ở các hợp chất **4d** và **4g** có tín hiệu cộng hưởng ở  $\delta=2,40$  và  $2,34$  ppm tương ứng.

Bảng 2. Phổ  $^{13}\text{C}$  NMR của các hợp chất 4a-h

Carbon-13	4a	4b	4c	4d	4e	4f	4g	4h
C=O	188,1	188,1	187,9	188,6	187,3	187,4	187,4	187,2
C- $\alpha$	130,9	130,7	130,7	128,6	130,7	130,6	128,8	131,0
C- $\beta$	145,3	144,3	144,2	143,4	142,9	143,3	143,3	140,6
C-1	127,7	127,8	127,9	128,1	130,5	127,4	132,0	136,7
C-2	123,7	119,6	119,6	120,0	119,9	119,5	120,9	122,9
C-3	115,3	115,2	115,2	115,3	115,2	114,8	129,5	148,4
C-4	159,5	159,5	159,3	159,1	159,0	160,9	140,4	124,4
C-5	như C-3	như C-3	như C-3	như C-3	như C-3	như C-3	như C-3	124,7
C-6	như C-2	như C-2	như C-2	như C-2	như C-2	như C-2	như C-2	134,9
C-7	55,6	55,6	55,6	55,6	55,6	55,7	55,7	55,7
C-8	78,8	78,8	78,8	78,9	78,9	78,7	78,7	78,7
C-9	78,5	78,5	78,5	78,5	78,5	78,6	78,6	78,6
C-1'	142,6	136,7	136,4	135,3	128,1	131,3	131,1	130,7
C-2'	129,7	130,4	130,3	130,6	130,6	130,6	130,7	130,2
C-3'	119,7	131,7	128,8	129,3	113,9	114,4	114,8	114,8
C-4'	149,7	127,0	137,9	143,4	163,1	161,3	160,1	161,2
C-5'	như C-3'	như C-3'	như C-3'	như C-3'	như C-3'	như C-3'	như C-3'	như C-3'
C-6'	như C-2'	như C-2'	như C-2'	như C-2'	như C-2'	như C-2'	như C-2'	như C-2'
CH <sub>3</sub>				21,2	55,5	55,3	21,0	

Trên phổ  $^{13}\text{C}$ -NMR cũng xuất hiện các tín hiệu cộng hưởng đặc trưng cho tất cả các nguyên tử carbon có mặt trong phân tử (Hình 2). Tín hiệu cộng hưởng ở vùng trường yếu nhất, với giá trị  $\delta=187,2-188,6$  ppm (do ảnh hưởng của hiệu ứng anisotropic), có cường độ pic yếu, được gán cho nguyên tử carbon C=O (không mang proton). Các tín hiệu có độ chuyển dịch hóa học ở vùng  $\delta=159,0-159,5$  ppm và  $\delta=160,1-161,3$  ppm, có cường độ pic mạnh hơn thuộc về các nguyên tử carbon C-4 (ở các chalcone **4a-4e**) và C-4' (ở các chalcone **4f-4h**), vì các nguyên tử carbon này gắn trực tiếp với nguyên tử oxy có độ âm điện cao của nhóm propargyl. Trong khi đó, các tín hiệu carbon-13 ở trường mạnh hơn của vùng carbon thơm, với giá trị  $\delta=115,2-115,3$  ppm và  $\delta=114,4-114,8$  ppm, lần lượt thuộc về các nguyên tử carbon C-3 và C-5 (ở các chalcone **4a-4e**), C-3' và C-5' (ở các chalcone **4f-4h**) do các vòng thơm này có sự thế *para* nên các nguyên tử carbon này chiếm các vị trí *ortho* so với nhóm propargyloxy, vì thế chúng bị ảnh hưởng bởi hiệu ứng liên hợp dương +C, làm tăng mật độ electron ở các vị trí này và vì thế làm tăng sự

che chắn nghịch từ địa phương ở đây.

Các tín hiệu còn lại ở các vùng carbon thơm và alkene có thể được gán cụ thể cho các nguyên tử carbon như sau:  $\delta$  (ppm) 140,6–145,3 (C- $\beta$ ), 128,6–131,0 (C- $\alpha$ ), 130,2–130,9 (C-2' và C-6'), 127,4–136,7 (C-1), 130,5–142,6 (C-1'), 119,6–120,0 (C-2 và C-6), trừ hợp chất **4h** với nhóm thế nitro nằm ở vị trí *meta* (vòng thơm có kiểu thế *meta*). Các tín hiệu cộng hưởng xuất hiện ở vùng  $\delta=78,7-78,9$  ppm (có cường độ pic yếu) và  $\delta=78,5-78,6$  (có cường độ pic mạnh hơn) được gán cho các nguyên tử carbon của mạch alkyne cuối mạch, lần lượt là carbon C-8 (C bậc 4) và carbon C-9 (C $\equiv$ CH alkyne cuối mạch). Các tín hiệu cộng hưởng ở vùng  $\delta=55,6-55,7$  ppm thuộc về các nguyên tử C-7 (nhóm methylene nằm giữa nguyên tử carbon của liên kết ba và nguyên tử oxy). Carbon ở nhóm thế *para*-methoxy ở các hợp chất **4e** và **4f** có độ chuyển dịch hoá học ở  $\delta=55,5$  và 55,3 ppm tương ứng. Carbon ở nhóm thế *para*-methyl ở các hợp chất **4d** và **4g** tín hiệu cộng hưởng ở  $\delta=21,2$  và 21,0 ppm tương ứng.

Tóm lại, các số liệu phổ  $^1\text{H}$  NMR và  $^{13}\text{C}$  NMR đã được bàn luận ở trên đã xác nhận cấu trúc

của các hợp chất chalcone tổng hợp được.

### LỜI CẢM ƠN

Nghiên cứu này được hoàn thành với sự tài trợ của Quỹ Phát triển Khoa học và Công nghệ Quốc gia Việt Nam (NAFOSTED) theo mã số tài trợ 104.01-2020.01.

### TÀI LIỆU THAM KHẢO

[1] S.N. Bukhari, I. Jantan, M. Jasamai, Anti-inflammatory trends of 1,3-diphenyl-2-propen-1-one derivatives, *Mini-Reviews in Medicinal Chemistry*, 13(1), 87-94 (2013).

[2] T.N. Kaul, E. Middleton Jr, P.L. Ogra, Antiviral effect of flavonoids on human viruses, *Journal of Medical Virology*, 15(1), 71-79 (1985).

[3] H.G. Kjaergaard, N.B. Perry, R.T. Weavers, Hydrogen-bonded rotamers of 2',4',6'-trihydroxy-3'-formyldihydrochalcone, an intermediate in the synthesis of a dihydrochalcone from *Leptospermum recurvum*, *Tetrahedron*, 59(32), 6113-6120 (2003).

[4] D.K. Mahapatra, V. Asati, S.K. Bharti, Chalcones and their therapeutic targets for the management of diabetes: structural and pharmacological perspectives, *European Journal of Medicinal Chemistry*, 92(839-865 (2015).

[5] H. Nagai, J.X. He, T. Tani, T. Akao, Antispasmodic activity of licochalcone A, a species-specific ingredient of *Glycyrrhiza inflata* roots, *Journal of Pharmacy and Pharmacology*, 59(10), 1421-1426 (2007).

[6] A. Rammohan, J.S. Reddy, G. Sravya, C.N. Rao, G.V. Zyryanov, Chalcone synthesis, properties and medicinal applications: a review, *Environmental Chemistry Letters*, 18(2), 433-458 (2020).

[7] V.K. Tiwari, B.B. Mishra, K.B. Mishra, N. Mishra, A.S. Singh, X. Chen, Cu-Catalyzed Click Reaction in Carbohydrate Chemistry, *Chemical Reviews*, 116(5), 3086-3240 (2016).

[8] Q. Wang, Z.-H. Ding, J.-K. Liu, Y.-T. Zheng, Xanthohumol, a novel anti-HIV-1 agent purified from Hops *Humulus lupulus*, *Antiviral Research*, 64(3), 189-194 (2004).

[9] W. Wu, H. Ye, L. Wan, X. Han, G. Wang, J. Hu, M. Tang, X. Duan, Y. Fan, S. He, L. Huang, H. Pei, X. Wang, X. Li, C. Xie, R. Zhang, Z. Yuan, Y. Mao, Y. Wei, L. Chen, Millepachine, a novel chalcone, induces G2/M arrest by inhibiting CDK1 activity and causing apoptosis via ROS-mitochondrial apoptotic pathway in human hepatocarcinoma cells in vitro and in vivo, *Carcinogenesis*, 34(7), 1636-1643 (2013).

[10] F. Zhao, H. Nozawa, A. Daikonnya, K. Kondo, S. Kitanaka, Inhibitors of nitric oxide production from hops (*Humulus lupulus L.*), *Biological and Pharmaceutical Bulletin*, 26(1), 61-65 (2003).