

MỘT SỐ KẾT QUẢ NGHIÊN CỨU BAN ĐẦU VỀ THÀNH PHẦN HÓA HỌC CỦA CÂY BẰNG LĂNG NƯỚC (*LAGERSTROEMIA SPECIOSA*)

Nguyễn Quyết Tiến¹, Phạm Thị Hồng Minh¹, Nguyễn Quảng An¹,
Trương Thị Thanh Nga¹, Nguyễn Ngọc Tuấn¹, Đoàn Văn Tuấn², Phạm Hữu Điền³

¹Viện Hóa học - Viện Khoa học và Công nghệ Việt Nam,

²Trường ĐH Sư phạm - ĐH Thái Nguyên, ³Trường ĐH Sư phạm Hà Nội

TÓM TẮT

Bằng lăng nước – *Lagerstroemia speciosa* là cây thuốc quý của một số nước Đông Nam Á và Ấn Độ. Người ta sử dụng nó để điều trị các bệnh như đái tháo đường, giảm mỡ máu và kháng viêm [1-9]. Những kết quả nghiên cứu ban đầu thu được về thành phần hóa học của cây Bằng lăng nước – *Lagerstroemia speciosa*, cho biết, ngoài 2 chất thuộc nhóm chất phytosterol là β -sitosterol (1). β -sitosterol-3-yl-glucopyranosid (2) còn axit 3,7,8-tri-O-methylellagic (3) lần đầu tiên phân lập được từ cây này. Cấu trúc hóa học của chúng được xác định bằng các phương pháp phổ hiện đại IR, HR/MS và 1D-, 2D-NMR.

Từ khóa: *Lagerstroemia speciosa*, sterol, axit 3,7,8-tri-O-methylellagic

GIỚI THIỆU

Cây Bằng lăng nước – *Lagerstroemia speciosa*, thuộc họ Bằng lăng (LYTHRACEAE), Bằng lăng nước (tiếng Philipin: Banaba, tiếng Campuchia: Banglang, tên Ấn Độ: Pride of India, Queen's flower) hay còn gọi là Bằng lăng tiên, tên khoa học là *Lagerstroemia speciosa* (L.) Pers. họ Bằng lăng (Lythraceae) [1, 2]. Ở Việt Nam, Bằng lăng nước có nhiều ở Hà Nội, Lâm Đồng, Đồng Nai, thành phố Hồ Chí Minh ... Chi Bằng lăng (*Lagerstroemia*) ở Việt Nam có khoảng 20 loài. Bằng lăng nước là loài bằng lăng hoa tím ở vùng nhiệt đới đã được dùng làm thuốc chữa bệnh ở Châu Mỹ, Ấn Độ, Philippin,... để trị tiểu đường và khá nhiều bệnh khác như trị ỉa chảy, chống ô xi hóa, giảm mỡ máu, kháng khuẩn, ... Thành phần hóa học của Bằng lăng nước đã có nhiều công trình nghiên cứu được công bố ở trong và ngoài nước. Các lớp chất chủ yếu trong Bằng lăng nước gồm: phytosterol, axit béo, các triterpen, glycosid, tannin, amino axit, ... Đặc biệt, hợp chất axit urosolic (axit 2 α -hydroxyursolic) với hàm lượng khá cao trong nó được cho là hoạt chất có tác dụng giảm glucozo huyết rất tốt [3=4]. Trong khuôn khổ bài báo này chúng tôi trình bày về một số kết quả ban đầu phân lập được từ cây này.

THỰC NGHIỆM

1. Nguyên liệu

Mẫu lá, cành cây Bằng lăng nước – *Lagerstroemia speciosa*, (1,0 kg khô từ 8 kg tươi) được thu hái ở Từ Liêm, Hà Nội tháng 12 năm 2010 và được TS. Đỗ Hữu Thư, Viện Sinh thái và Tài nguyên Sinh vật, Viện Khoa học và Công nghệ Việt Nam xác định tên khoa học là *Lagerstroemia speciosa*.

2. Thiết bị nghiên cứu

Điểm chảy được đo trên máy Electrothermal IA-9200 (Anh). Phổ IR được ghi trên máy IMPACT 410 sử dụng đĩa nén tinh thể KBr. Phổ ESI-MS đo trên máy HP-1100 LS/MS Trap. Phổ ¹H-NMR (500 MHz) và ¹³C-NMR (125 MHz) được ghi trên máy Bruker AM500 FT-NMR và TMS được sử dụng là chất nội chuẩn. Sắc kí cột (CC) sử dụng chất nhồi Silica gel (Kieselgel 60, 70 - 230 mesh và 230 - 400 mesh, Merck).

3. Phương pháp nghiên cứu

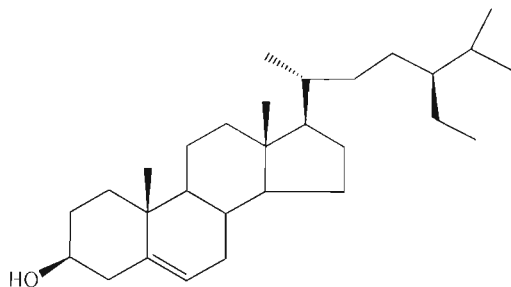
Mẫu thực vật tươi được khử men trong tủ sấy 10 phút ở nhiệt độ 110°C, sau đó được sấy khô đến khối lượng không đổi (độ ẩm < 10%) ở nhiệt độ 60°C. Mẫu khô được nghiền nhỏ và được tiến hành ngâm chiết phân đoạn và phân lập các chất sạch bằng phương pháp sắc kí cột silica gel. Phương pháp ngâm chiết và phân lập chất xem sơ đồ 1.

* Tel: 01676473616. Email: nqtienvh@ gmail.com

4. Dữ liệu phổ các chất đã phân lập

β -Sitosterol (1)

Tinh thể hình kim không màu (47 mg), điểm chảy 138-140 °C. IR (ν_{\max} , cm^{-1}): 3431,5 (dao động hóa trị OH), 2931,3 (dao động hóa trị CH); 1647,2 (C=C); EI-MS (m/z): 414[M]⁺. ¹H-NMR (500MHz, CDCl₃, TMS, δ ppm): 3,51 (1H, m, H-3); 5,31 (1H, dd, J=5 và 2 Hz, H-6); 1,01 (3H, s, H-18); 0,92 (3H, d, J = 6,6Hz, H-21); 0,85 (3H, d, J = 7,1Hz, H-26); 0,84 (3H, d, J = 6,6Hz, H-29); 0,81 (3H, d, J = 6,6Hz, H-28); 0,68 (3H, s, H-19). ¹³C-NMR (125MHz, CDCl₃, TMS, δ ppm): 37,3 (C-1); 31,7 (C-2); 71,8 (C-3); 42,3 (C-4); 140,8 (C-5); 121,7 (C-6); 31,9 (C-7); 31,9 (C-8); 50,2 (C-9); 36,5 (C-10); 21,1 (C-11); 39,8 (C-12); 42,3 (C-13); 56,8 (C-14); 24,3 (C-15); 28,3 (C-16); 56,1 (C-17); 11,9 (C-18); 19,4 (C-19); 36,2 (C-20); 18,8 (C-21); 33,9 (C-22); 26,1 (C-23); 45,9 (C-24); 29,2 (C-25); 19,1 (C-26); 19,4 (C-27); 23,1 (C-28); 11,9 (C-29).



β -Sitosterol (1)

• β -sitosterol-3-yl-glucopyranosid (2)

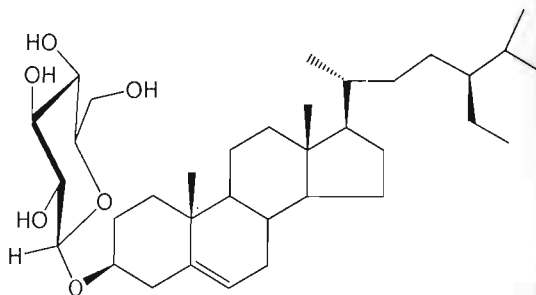
Chất bột rắn trắng (52 mg), Phổ FT-IR ν_{\max} (cm^{-1}): 3390 (rộng); 2934; 1644; 1461; 1373; 1073; 1026.

Phổ EI-MS: m/z (%): 396 [M - C₆H₁₂O₆]⁺ (9); 273 (2); 255 (9); 185 (5); 161 (15); 145 (25); 133 (21); 105 (42); 91 (46); 81 (51); 69 (100).

Phổ ¹H-NMR (500 MHz, DMSO-d₆): δ (ppm): 0,65 (3H, s, Me-18); 0,93 (3H, s, Me-19).

Phổ ¹³C-NMR (125MHz, DMSO-d₆): δ (ppm): Phần genin: 36,3 (t, C-1); 27,9 (t, C-2); 76,8 (d, C-3); 38,4 (t, C-4); 140,6 (s, C-5); 121,3 (d, C-6); 31,7 (d, C-7); 31,5 (d, C-8);

50,7 (d, C-9); 35,6 (s, C-10); 21,0 (t, C-11); 36,9 (t, C-12); 45,2 (s, C-13); 56,3 (d, C-14); 23,9 (t, C-15); 29,4 (t, C-16); 55,5 (d, C-17); 11, 9 (q, C-18); 19,8 (q, C-19); 33,4 (d, C-20); 19,6 (d, C-21); 31,5 (t, C-22); 28,8 (t, C-23); 49,7 (d, C-24); 25,5 (t, C-25); 19,0 (q, C-26); 20,7 (d, C-27); 22,7 (t, C-28); 12,2 (q, C-29); Phần đường: 100,9 (d, C-1'); 77,1 (d, C-3'); 76,8 (d, C-5'); 73,6 (d, C-2'); 70,2 (d, C-4'); 61,2 (t, C-6').



β -sitosterol-3-yl-glucopyranosid (2)

• Axit 3,7,8-tri-O-methylellagic (3)

Chất bột rắn trắng (217 mg), nhiệt độ nóng chảy: 289 – 290 °C, HR-MS positive (m/z): 345,06273 [M+H]⁺, ¹H-NMR (500MHz, D₂O, TMS, δ ppm): 6,969 (1H, s, H-6); 7,683 (1H, s, H-1); 3,759 (3H, s, H-12); 3,952 (3H, s, H-13); 4,112 (3H, s, H-11). ¹³C-NMR (125MHz, D₂O, TMS, δ ppm): 119,18 (C-1); 114,79 (C-1a); 144,82 (C-2); 144,41 (C-3); 139,32 (C-4); 109,63 (C-4a); 158,48 (C-5); 110,61 (C-5a); 107,54 (C-6); 153,93 (C-7); 140,72 (C-8); 139,01 (C-9); 111,10 (C-9a); 158,44 (C-10); 62,24 (C-11); 56,65 (C-12); 61,68 (C-13).

KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

Từ 3 phân đoạn dịch chiết n-hexan, etylaxetat và metanol của bột khô thân, lá cây Bằng lăng nước – *Lagerstroemia speciosa* (1,0 kg), bằng các phương pháp ngâm chiết, phân lập các chất trên sắc ký cột với chất nhồi Silica gel và các hệ dung môi thích hợp chúng tôi đã thu được 3 chất sạch và cấu trúc hóa học của chúng đã được xác định dựa trên các dữ liệu phổ IR, MS, 1D, 2D-NMR và các tài liệu tham khảo [4-9] gồm: β -sitosterol (1); β -sitosterol-3-ylglucopyranosid (2) chất còn lại là phenolic axit 3,7,8-tri-O-methylellagic (3).

• Axit 3,7,8-tri-O-methylellagic (3)

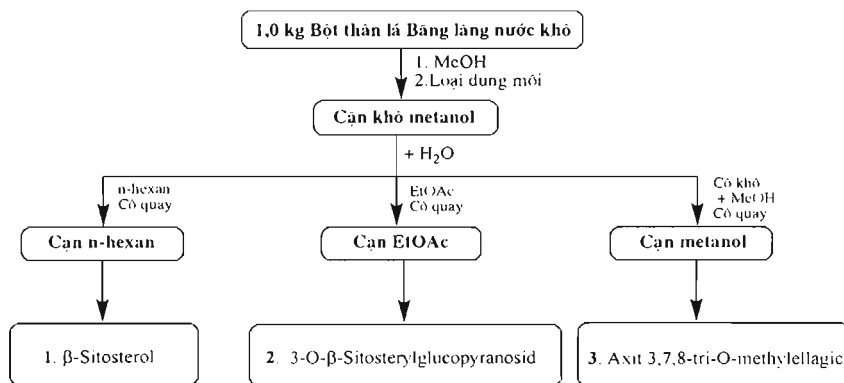
Hợp chất **3** thu được từ dịch chiết metanol của cây Bằng lăng nước – *Lagerstroemia speciosa*, sau khi chạy qua cột Silica gel và kết tinh lại trong metanol thu được hợp chất bột rắn màu trắng (217 mg ~0,022%). Phân tích sơ bộ các loại phổ của **3** có thể khẳng định bộ nó là một hợp chất phenolic với chỉ 2 proton olefin ở các độ dịch chuyển hóa học δH: 6,969 (s) và 7,683 (s); 3 nhóm methoxy ở các độ dịch chuyển hóa học δC/H:

56,65/3,759(s); 61,68/3,952(s) và 62,24/4,112(s). Phổ IR của **3** cho biết các liên kết đặc trưng ở các tần số dao động 3514 cm⁻¹ (OH); 1738⁻¹ (C=O); 1606⁻¹ (C=C); 1046⁻¹ và 1281⁻¹ (C-O-C). Phổ EIS-MS cho [M+H]⁺ =

345 tương ứng với công thức C₁₇H₁₃O₈ → M = 344 ứng với C₁₇H₁₂O₈.

Phổ ¹H, ¹³C, DEPT NMR và HSQC của **3** cho biết có tổng số 17 cac bon gồm có 14 C thuộc các C liên kết đôi với 2 C thuộc các liên kết carbonyl (C=O) ở δ_C về trường cao hơn thông thường 158,48 và 158,44ppm cho biết các liên kết này thuộc loại liên kết liên hợp và chứa vòng lacton. Ba C còn lại cho biết các độ dịch chuyển hóa học của nó phù hợp với các tín hiệu của 3 C thuộc các nhóm methoxy (CH₃O) tại δ_{C-H} 56,65/3,759; 61,68/3,952(s) và 62,24/4,112(s). Trên cơ sở số liệu phổ NMR (1D và 2D) các dữ liệu phổ NMR và các tương tác xa của **3** được tổng kết trong bảng 1.

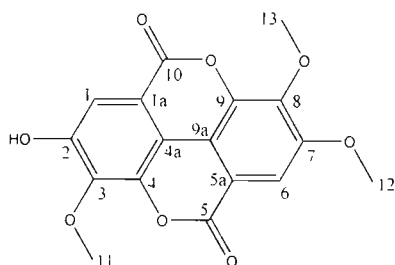
Sơ đồ 1. Phương pháp ngâm chiết và phân lập các chất từ cây Bằng lăng nước



Bảng 1. Số liệu phổ NMR và các tương tác xa của **3** 500MHz (¹H-NMR), 125MHz (¹³C-NMR); Nội chuẩn TMS, dung môi D₂O

TT	H (δ ppm)/D ₂ O	C (δ ppm)/ D ₂ O	H → C (HMBC)	CH _n (DEPT)
1	7.683 (s)	119.18	C-1a; 2; 3; 4; 4a; 10	≧C-H
1a	-	114.79		>C=
2	-	144.82		≧C-OH
3	-	144.41		≧C-OMe
4	-	139.32		≧C-O-C
4a	-	109.63		>C=
5	-	158.48		>C=O
5a	-	110.61		>C=
6	6.969 (s)	107.54	C-5a; 5; 7; 8; 9; 9a	≧C-H
7	-	153.93		≧C-OMe
8	-	140.72		≧C-OMe
9	-	139.01		≧C-O-C
9a	-	111.10		>C=
10	-	158.44		>C=O
11	4.112 (s)	62.24	C-3 (144.41)	CH ₃ O-
12	3.759 (s)	56.65	C-7 (153.93)	CH ₃ O-
13	3.952 (s)	61.68	C-8 (140.72)	CH ₃ O-

Qua việc phân tích các số liệu phổ NMR của chất **3** như trên, kết hợp với việc so sánh với các kết quả nghiên cứu về axit 3,7,8-tri-O-methylellagic trong tài liệu [10] cho phép khẳng định hợp chất **3** là axit 3,7,8-tri-O-methylellagic với cấu trúc hóa học của nó như sau.



Axit 3,7,8-tri-O-methylellagic

KẾT LUẬN

Từ các kết quả nghiên cứu ở trên chúng tôi đi đến kết luận sau:

Từ thực vật Bằng lăng nước – *Lagerstroemia speciosa*, thu hái ở Từ Liêm, Hà Nội đã phân lập được 3 hợp chất thuộc các lớp chất đã biết như: các phytosterol: β -sitosterol (**1**), β -sitosterol-3-yl-glucopyranoside (**2**) và hợp chất phenolic axit 3,7,8-tri-O-methylellagic (**3**). Trong đó, hợp chất axit 3,7,8-tri-O-methylellagic (**3**) với hàm lượng khá cao và có nhiều hoạt tính quý đã được khẳng định như chống ung thư, chống ô xi hóa, kháng khuẩn [10], lần đầu tiên phân lập được từ cây này.

Lời cảm ơn: Các kết quả nghiên cứu này được hoàn thành với sự hỗ trợ kinh phí từ Đề tài Nghiên cứu Khoa học trọng điểm cấp Bộ, mã số B2010-17-275TĐ.

SUMMARY

PRIMARY STUDY ON THE CHEMICAL COMPOSITION OF *LAGERSTROEMIA SPECIOSA*

Nguyen Quyet Tien^{1*}, Pham Thi Hong Minh¹, Nguyen Quang An¹,
Truong Thi Thanh Nga¹, Nguyen Ngoc Tuan¹, Doan Van Tuan², Pham Huu Dien³

¹Institute of Chemistry, ¹AST, ²Thainguyen University of Education

³Hanoi University of Education

Phenolic compound 3,7,8-tri-O-methylellagic acid (**3**), together with β -sitosterol (**1**) and β -sitosterol-3-yl-glucopyranosid (**2**) were isolated from the methanol extract of the branches and leaves of *Lagerstroemia speciosa*. Their structures were determined by IR, Mass, HR-ESI/Mass, 1D and 2D NMR spectra. Compound **3** was isolated from this plant for the first time.

Key words: *Lagerstroemia speciosa*, phytosterols and 3,7,8-tri-O-ellagic acid

* Tel: 01676473616; Email: nqtienwhh@gmail.com

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1]. Võ Văn Chi (1997). *Từ điển cây thuốc Việt Nam*, Nxb Y học, tr. 76-77.
- [2]. *Danh mục các loài thực vật Việt Nam* tập II (2003). Nxb Nông nghiệp, tr.870
- [3]. Phùng Thanh Hương; Nguyễn Thị Thu Hiền. *Tác dụng của dịch chiết lá bằng lăng nước (Lagerstroemia speciosa (L.) Pers.) trên chuột cống đái tháo đường tuýp 2*, TC Dược học, 2009, số 9, tr.19-22
- [4]. Chapman & Hall/CRC. DNP on CD – ROM, 1982-2009, Version 18.1
- [5]. Klein Guy; Kim Jaekyung; Himmeldirk Klaus; Cao Yanyan; Chen Xiaozhuo, *Antidiabetes and Anti-obesity Activity of Lagerstroemia speciosa*, Evidence-based Complementary and Alternative Medicine, 2007, Vol.4 (4): p.401.
- [6]. Naisheng Bai, Kan He, Marc Roller, Bolin Zheng, Xiaozhuo Chen, Zhongguang Shao, Tangsheng Peng and Qunyi Zheng, *Active Compounds from Lagerstroemia speciosa. Insulin-like Glucose Uptake-Stimulatory/Inhibitory and Adipocyte Differentiation-Inhibitory Activities in 3T3-L1 Cells*. J. Agric. Food Chem., 2008, Vol. 56(24), p.11668–11674
- [7]. Anil P, Manish S, Garvendra RS, Vijay B, Tarachand K, *In Vitro antioxidant studies of Lagerstroemia speciosa leaves*, Pharmacognosy Journal, 2010, Vol. 2(10), p.357-360
- [8]. H. R. Ambujakshi, *Antibacterial activity of leaves of Lagerstroemia speciosa (L) Pers.*, Journal of Pharmacy Research, 2009, Vol 2 (6)
- [9]. Goad, L. J., and Akihisa, T., "Analysis of sterols", Chapman & Hall, (1997) 324-333.
- [10]. George, I. Ndukwe and Yimin Zhao, *Pharmacological activity of 2,3,8-tri-O-methyl ellagic acid isolated from the stem bark of Irvingia gabonensis*, African Journal of Biotechnology Vol. 6 (16), 2007, p.1910-1912.