



TUYỂN TẬP BÁO CÁO HỘI NGHỊ TOÀN QUỐC

KHOA HỌC TRÁI ĐẤT VÀ TÀI NGUYÊN VỚI PHÁT TRIỂN BỀN VỮNG

Hà Nội, 11 - 11 - 2022

ERSD 2022



NHÀ XUẤT BẢN GIAO THÔNG VẬN TẢI

ĐƠN VỊ TỔ CHỨC

Trường Đại học Mở - Địa chất (HUMG)

CÁC ĐƠN VỊ PHỐI HỢP TỔ CHỨC

Tập đoàn Công nghiệp Than - Khoáng sản Việt Nam
Tổng cục Địa chất và Khoáng sản Việt Nam
Tổng hội Địa chất Việt Nam
Cục Đo đạc, Bản đồ và Thông tin địa lý Việt Nam
Cục Bản đồ - Bộ Tổng tham mưu
Hội Cơ học Đá Việt Nam
Hội Công trình ngầm Việt Nam
Hội Địa chất Thủy văn Việt Nam
Hội Địa chất Công trình và Môi trường Việt Nam
Hội Địa chất Kinh tế Việt Nam
Hội Khoa học và Công nghệ Mỏ Việt Nam
Hội Khoa học Kỹ thuật Địa vật lý Việt Nam
Hội Kỹ thuật Nổ mìn Việt Nam
Hội Trắc địa - Bản đồ - Viễn thám Việt Nam
Viện Địa chất và Địa vật lý biển
Viện Khoa học và Công nghệ Mỏ
Trường Đại học Công nghệ Đồng Nai
Trường Đại học Thủ Dầu Một

BAN TỔ CHỨC

Trưởng ban

GS.TS Trần Thanh Hải, *Trường Đại học Mở Địa - chất*

Phó Trưởng ban

GS.TS. NGŨT Bùi Xuân Nam, *Trường Đại học Mở - Địa chất*

PGS.TS Triệu Hùng Trường, *Trường Đại học Mở - Địa chất*

Ủy viên

GS.TS. NGŨT Võ Chí Mỹ, *Hội Trắc địa - Bản đồ - Viễn thám Việt Nam*

GS.TS Đỗ Như Tráng, *Hội Cơ học Đá Việt Nam*

PGS.TS Đỗ Ngọc Anh, *Trường Đại học Mở - Địa chất*

PGS.TS Lê Hồng Anh, *Trường Đại học Mở - Địa chất*

PGS. TS Đỗ Văn Bình, *Trường Đại học Mở - Địa chất*

PGS.TS Nguyễn Công Giang, *Hội Công trình ngầm Việt Nam*

PGS.TS Phạm Văn Hòa, *Trường Đại học Mở - Địa chất*

PGS.TS Phùng Mạnh Đắc, *Hội Khoa học và Công nghệ Mỏ Việt Nam*

PGS.TS. NGŨT Nguyễn Văn Lâm, *Hội Địa chất Thủy văn Việt Nam*

PGS.TS Khổng Cao Phong, *Trường Đại học Mở - Địa chất*

PGS.TS. NGŨT Nguyễn Phương, *Hội Địa chất Kinh tế Việt Nam*

PGS.TS Đặng Trung Thành, *Trường Đại học Mở - Địa chất*

PGS.TS. NGND Tạ Đức Thịnh, *Hội Địa chất Công trình và Môi trường Việt Nam*

PGS.TS Lê Đức Tình, *Trường Đại học Mở - Địa chất*

PGS.TS Nguyễn Như Trung, *Hội Khoa học kỹ thuật Địa vật lý Việt Nam*

PGS.TS Nguyễn Thế Vinh, *Trường Đại học Mở - Địa chất*

TS Trần Thị Phúc An, *Trường Đại học Mở - Địa chất*

TS Đỗ Huy Cường, *Viện Địa chất và Địa vật lý biển*

TS Công Tiến Dũng, *Trường Đại học Mở - Địa chất*

TS Nguyễn Tiến Dũng, *Trường Đại học Mở - Địa chất*

TS Ngô Hồng Điệp, *Trường Đại học Thủ Dầu Một*

TS Nguyễn Đại Đồng, *Cục Đo đạc, Bản đồ và Thông tin địa lý Việt Nam*
TS Nguyễn Đắc Đồng, *Tổng hội Địa chất Việt Nam*
TS Lê Quốc Hùng, *Tổng cục Địa chất và Khoáng sản Việt Nam*
TS Lê Đại Ngọc, *Cục Bản đồ - Bộ Tổng tham mưu*
TS Đào Hồng Quảng, *Viện Khoa học Công nghệ Mỏ*
TS Lê Văn Quyền, *Hội Kỹ thuật Nổ mìn Việt Nam*
TS Bùi Thị Thu Thủy, *Trường Đại học Mỏ - Địa chất*
TS Đặng Kim Triết, *Trường Đại học Công nghệ Đồng Nai*

BAN KHOA HỌC

Trưởng ban

GS.TS. NGUYỄN Bùi Xuân Nam, *Trường Đại học Mỏ - Địa chất*

Phó trưởng ban

PGS.TS. ĐỖ Ngọc Anh, *Trường Đại học Mỏ - Địa chất*

Ủy viên

GS.TSKH. NGUYỄN Hoàng Ngọc Hà, *Trường Đại học Mỏ - Địa chất*
GS.TS. NGUYỄN Võ Trọng Hùng, *Trường Đại học Mỏ - Địa chất*
GS.TS. NGUYỄN Trương Xuân Luận, *Trường Đại học Mỏ - Địa chất*
GS.TS. ĐỖ Như Tráng, *Hội Cơ học Đá Việt Nam*
PGS.TS. ĐỖ Văn Bình, *Trường Đại học Mỏ - Địa chất*
PGS.TS. Phùng Mạnh Đắc, *Hội Khoa học và Công nghệ Mỏ Việt Nam*
PGS.TS. Phạm Văn Hòa, *Trường Đại học Mỏ - Địa chất*
PGS.TS. Lê Văn Hưng, *Trường Đại học Mỏ - Địa chất*
PGS.TS. Hoàng Văn Long, *Viện Dầu khí Việt Nam*
PGS.TS. Phạm Văn Luận, *Trường Đại học Mỏ - Địa chất*
PGS.TS. Nguyễn Quang Minh, *Trường Đại học Mỏ - Địa chất*
PGS.TS. Phạm Xuân Núi, *Trường Đại học Mỏ - Địa chất*
PGS.TS. Khổng Cao Phong, *Trường Đại học Mỏ - Địa chất*

PGS.TS. Bùi Ngọc Quý, *Trường Đại học Mỏ - Địa chất*
PGS.TS. Ngô Xuân Thành, *Trường Đại học Mỏ - Địa chất*
PGS.TS. NGUYỄN Tạ Đức Thịnh, *Hội Địa chất Công trình và Môi trường Việt Nam*
PGS.TS. Nguyễn Thế Vinh, *Trường Đại học Mỏ - Địa chất*
PGS.TS. Nguyễn Văn Xô, *Trường Đại học Mỏ - Địa chất*
PGS.TS. Lê Hồng Anh, *Trường Đại học Mỏ - Địa chất*
TS. ĐỖ Huy Cường, *Viện Địa chất và Địa vật lý biển, Viện Hàn lâm Khoa học và công nghệ Việt Nam*
TS. Nguyễn Đại Đồng, *Cục Đo đạc, Bản đồ và Thông tin địa lý Việt Nam*
TS. Công Tiến Dũng, *Trường Đại học Mỏ - Địa chất*
TS. Nguyễn Mạnh Hùng, *Trường Đại học Mỏ - Địa chất*
TS. Nguyễn Quốc Phi, *Trường Đại học Mỏ - Địa chất*
TS. Phạm Đức Thọ, *Trường Đại học Mỏ - Địa chất*
TS. Bùi Thị Thu Thủy, *Trường Đại học Mỏ - Địa chất*

BAN BIÊN TẬP

Trưởng ban

TS. Nguyễn Thạc Khánh, *Trường Đại học Mỏ - Địa chất*

Phó Trưởng ban

TS. Nguyễn Viết Nghĩa, *Trường Đại học Mỏ - Địa chất*

Ủy viên

PGS.TS. Tống Thị Thanh Hương, *Trường Đại học Mỏ - Địa chất*
PGS.TS. Phạm Văn Luận, *Trường Đại học Mỏ - Địa chất*

PGS.TS. Bùi Ngọc Quý, *Trường Đại học Mỏ - Địa chất*
PGS.TS. ĐỖ Như Ý, *Trường Đại học Mỏ - Địa chất*
TS. Tô Xuân Bản, *Trường Đại học Mỏ - Địa chất*
TS. Nguyễn Thị Mai Dung, *Trường Đại học Mỏ - Địa chất*
TS. Nguyễn Mạnh Hùng, *Trường Đại học Mỏ - Địa chất*
TS. Nguyễn Quốc Phi, *Trường Đại học Mỏ - Địa chất*
TS. Phạm Đức Thọ, *Trường Đại học Mỏ - Địa chất*

BAN THƯ KÝ

Trưởng ban

PGS.TS. ĐỖ Ngọc Anh, *Trường Đại học Mỏ - Địa chất*

Phó Trưởng ban

TS. Nguyễn Thạc Khánh, *Trường Đại học Mỏ - Địa chất*

Ủy viên

PGS.TS. Phạm Văn Luận, *Trường Đại học Mỏ - Địa chất*
TS. Tô Xuân Bản, *Trường Đại học Mỏ - Địa chất*
TS. Lê Quang Duyên, *Trường Đại học Mỏ - Địa chất*
TS. Nguyễn Mạnh Hùng, *Trường Đại học Mỏ - Địa chất*
TS. Nguyễn Duy Huy, *Trường Đại học Mỏ - Địa chất*
TS. Nguyễn Quốc Phi, *Trường Đại học Mỏ - Địa chất*

TS. Ngô Thanh Tuấn, *Trường Đại học Mỏ - Địa chất*
TS. Phạm Đức Thọ, *Trường Đại học Mỏ - Địa chất*
TS. Trần Thị Hải Vân, *Trường Đại học Mỏ - Địa chất*
ThS. Hoàng Thu Hằng, *Trường Đại học Mỏ - Địa chất*
ThS. Nguyễn Thanh Hải, *Trường Đại học Mỏ - Địa chất*
ThS. Phạm Đức Nghiệp, *Trường Đại học Mỏ - Địa chất*

Lê Thị Phương Thảo, Nguyễn Thị Kim Thoa	1275
Ảnh hưởng của ion đất hiếm (Y^{3+} , Nd^{3+} , Sm^{3+}) lên cấu trúc tinh thể, tính chất quang học và tính chất từ của vật liệu $BiFeO_3$	
Đào Việt Thắng, Nguyễn Mạnh Hùng, Hồ Quỳnh Anh, Nguyễn Thị Diệu Thu	1280
Nghiên cứu cấu trúc tinh thể, tính chất sắt điện và sắt từ của vật liệu $Bi_{0,95}RE_{0,05}Fe_{0,975}Ni_{0,025}O_3$ (RE = La, Ho)	
Đào Việt Thắng, Nguyễn Mạnh Hùng, Hồ Quỳnh Anh, Nguyễn Thị Diệu Thu	1285
Nghiên cứu vai trò của cation kim loại chuyển tiếp và nhiệt động học của quá trình tạo phức	
Vũ Duy Thịnh, Nguyễn Thu Hà	1291
Nghiên cứu ảnh hưởng của lovastatin đến khả năng giải phóng lovastatin từ vật liệu tổ hợp chitosan/carrageenan	
Nguyễn Thị Kim Thoa, Vũ Quốc Mạnh, Hà Mạnh Hùng, Võ Thị Hạnh, Vũ Quốc Trung	1296
Kết quả nghiên cứu thành phần hóa học và đánh giá hoạt tính hạ đường huyết của loài Địa hoàng <i>Rehmannia glutinosa</i>	
Vũ Kim Thư, Công Tiến Dũng, Nguyễn Thị Thu Hiền, Nguyễn Thị Kim Thoa, Đỗ Thị Hải, Trương Thị Thanh Thủy	1303
Các hợp chất phenolic phân lập từ loài Sóc xéo <i>Glochidion obliquum</i> Decne	
Vũ Kim Thư, Nguyễn Thị Thu Hiền, Nguyễn Thị Kim Thoa	1309
Trải nghiệm ứng dụng Classkick trong dạy và học tiếng Anh trực tuyến tại trường Đại học Mở - Địa chất	
Trương Thị Thanh Thủy	1313
Tính tự chủ của sinh viên trong học tiếng Anh trực tuyến tại trường Đại học Mở - Địa chất	
Trương Thị Thanh Thủy	1318
Dao động tham số của hệ phi tuyến cấp ba có chứa ma sát Coulomb, ma sát động và cản nhớt cấp phân số	
Bùi Thị Thúy	1323
Bài toán dòng chảy một chiều đối xứng trục tới giếng khai thác	
Trần Thị Trâm	1329
Classifying the idioms concerning money according to their meanings	
Nguyen Hong Van	1334
Introducing new social media terminologies	
Nguyen Hong Van	1338
Tăng cường khả năng phát quang của vật liệu $YVO_4:Eu^{3+}$ ứng dụng trong y sinh	
Lê Thị Vinh, Hà Thị Phương, Hoàng Thị Khuyên, Nguyễn Thanh Hương, Phạm Thị Liên, Trần Thu Hương	1342
Kỹ thuật cộng gộp sóng mang trong truyền dẫn dữ liệu qua mạng di động 4G-LTE	
Tống Ngọc Anh, Hà Thị Chúc	1346
Thuật toán lọc sai số thô trong hệ thống đo ứng dụng công nghệ IOT Gateway	
Đặng Văn Chí, Nguyễn Thế Lực	1353

Các hợp chất phenolic phân lập từ loài Sóc xéo *Glochidion obliquum* Decne

Vũ Kim Thu*, Nguyễn Thị Thu Hiền, Nguyễn Thị Kim Thoa
Bộ môn Hóa học, Khoa Khoa học cơ bản, Trường Đại học Mở - Địa chất

TÓM TẮT

Sử dụng phối hợp các phương pháp sắc ký đã phân lập được 04 hợp chất phenolic từ cành lá loài Sóc xéo *Glochidion obliquum* Decne., đó là Vanillin (1), Leonuriside A (2), Methyl gallate (3) và (1'R, 2'R)-Guaiacyl glycerol (4). Cấu trúc hóa học của chúng được xác định bằng dữ liệu phổ cộng hưởng từ hạt nhân NMR, ESI-MS và so sánh với số liệu của các chất tham khảo.

Từ khóa: phenolic, *Glochidion obliquum*, Sóc xéo

1. Đặt vấn đề

Glochidion là một chi lớn của họ thầu dầu Euphorbiaceae, bao gồm hơn 250 loài trên thế giới. Loài Sóc xéo có tên khoa học là *Glochidion Obliquum* Decne là cây bụi nhỏ được phân bố ở Ấn Độ, Malaysia, Indonesia và Campuchia. Ở Việt Nam, loài Sóc xéo phân bố ở các tỉnh Lạng Sơn, Phú Thọ, Vĩnh Phúc, Tây Ninh, Đồng Nai, Kiên Giang. Lá của cây Sóc xéo đã được sử dụng trong y học dân gian để điều trị bệnh sốt rét (Võ Văn Chi, 2012). Những công bố trước đây của chúng tôi về thành phần hóa học của loài *Glochidion Obliquum* bao gồm triterpene, flavonoid và lignan (Vu Kim Thu, 2016; Vu Kim Thu, 2016; Vu Kim Thu, 2015). Phenolic là những hợp chất gồm vòng thơm liên kết trực tiếp với một, hoặc nhiều nhóm hydroxyl. Các hợp chất phenolic có đặc tính quan trọng là khả năng chống oxy hóa (Ana-Maria Chiorcea-Paquim, 2020). Trong bài báo này chúng tôi tiếp tục thông báo kết quả phân lập và xác định cấu trúc hóa học của 04 hợp chất phenolic từ cành lá loài Sóc xéo *Glochidion obliquum* Decne., đó là Vanillin (1), Leonuriside A (2), Methyl gallate (3) và (1'R, 2'R)-Guaiacyl glycerol (4).

2. Cơ sở lý thuyết và phương pháp nghiên cứu

2.1. Mẫu nghiên cứu

Mẫu cành lá của loài Sóc xéo *Glochidion obliquum* Decne. được thu hái tại Phúc Yên, Vĩnh Phúc vào tháng 12 năm 2012. Mẫu được giám định bởi Tiến sĩ Nguyễn Thế Cường, Viện Sinh thái và Tài nguyên Sinh vật, Viện hàn lâm Khoa học và Công nghệ Việt Nam. Mẫu tiêu bản có kí hiệu GO1212 được lưu giữ tại Viện Hóa sinh biển, Viện hàn lâm Khoa học và Công nghệ Việt Nam.



Hình 1. Mẫu cành lá của loài Sóc xéo *Glochidion obliquum* Decne

2.2. Phương pháp tách chiết

Sắc ký lớp mỏng (TLC) được thực hiện trên bản mỏng tráng sẵn DC-Alufolien 60 F254 và RP18 F254s (Merck-Đức). Các vết chất được phát hiện bằng đèn tử ngoại ở hai bước sóng 254 và 365 nm hoặc dùng thuốc thử là dung dịch H₂SO₄ 10% phun đều lên bản mỏng rồi sấy ở nhiệt độ cao cho đến khi hiện màu.

* Tác giả liên hệ

Email: vukimthu@humg.edu.vn

Sắc ký cột (CC) được tiến hành với chất hấp phụ pha thường (Silica gel 240-430 mesh, Merck) hoặc pha đảo (ODS-60-14/63, Fujisilisa-Nhật Bản). Nhựa trao đổi ion Diaion HP-20 (Misubishi Chem. Ind. Co., Ltd.).

2.3. Các phương pháp phổ

Phổ NMR được đo bằng máy quang phổ Bruker AM500 FT-NMR (500 MHz cho $^1\text{H-NMR}$ và 125 MHz cho $^{13}\text{C-NMR}$). Phổ ESI-MS được ghi trên máy LC-MS-QTOF của Viện Hóa học.

2.4. Phân lập các hợp chất

Mẫu cành lá khô của loài Sóc xéo được tán thành bột (4,2 kg) và chiết ba lần bằng methanol nóng (50°C) cô quay thu được dịch chiết methanol tổng GOM (210,3 g). GOM được hòa tan trong nước rồi chiết lần lượt bằng n-hexan, dichloromethane và ethylacetate thu được 4 cặn chiết tương ứng: n-hexan (87,2 g, GOH), dichloromethane (55,0 g, GOD), ethylacetate (12,0 g, GOE) và cặn nước (35,5 g, GOW).

Cặn nước được chạy qua cột Diaion và được rửa giải bằng gradient hệ dung môi MeOH/nước : 25/75 \rightarrow 100/0 (v/v) thu được 4 phân đoạn là GOW1 (3,34 g), GOW2 (13,5 g), GOW3 (10,7 g) và GOW4 (3,7 g). Phân đoạn GOW1 (3,34 g) được phân tách trên cột silica gel pha đảo với hệ dung môi acetone/nước : 1/2 (v/v) thu được 3 phân đoạn GOW1A (1,25 g), GOW1B (1,35 g) và GOW1C (1,05 g).

Phân tách phân đoạn GOW1A (1,25 g) trên cột silica gel pha thường với hệ dung môi rửa giải $\text{CH}_2\text{Cl}_2/\text{MeOH}$: 5/1 (v/v) thu được hai phân đoạn nhỏ hơn GOW1A1 và GOW1A2. Phân đoạn GOW1A2 (700 mg) tiếp tục được phân tách trên cột silica gel pha thường với hệ dung môi rửa giải EtOAc/MeOH : 8/1 (v/v) thu được hợp chất **1** (18,0 mg) và **4** (10,0 mg).

Chạy sắc ký phân đoạn GOW1B (1,35 g) trên cột silica gel pha thường với hệ dung môi EtOAc/MeOH: 10/1 (v/v) thu được hai phân đoạn GOW1B1 và GOW1B2. Hợp chất **2** (9,0 mg) và hợp chất **3** (15,0 mg) thu được khi sử dụng sắc ký cột silica gel pha thường đối với phân đoạn GOW1B1 hệ dung môi rửa giải $\text{CH}_2\text{Cl}_2/\text{EtOAc}$: 2/3 (v/v).

Vanilin hay **3-methoxy-4-hydroxybenzaldehyde (1)**: tinh thể, màu trắng, nhiệt độ nóng chảy 82°C . ESI-MS $[\text{M} + \text{H}]^+$ tại m/z 153,1, CTPT $\text{C}_8\text{H}_8\text{O}_3$ ($M = 152$). ^1H - và ^{13}C -NMR (CDCl_3) xem Bảng 1.

Leonuriside A hay **2,6-dimethoxy-4-hydroxyphenol 1-O- β -D-glucopyranoside (2)**: bột, màu trắng, nhiệt độ nóng chảy $230 - 233^\circ\text{C}$, ESI-MS $[\text{M} + \text{Na}]^+$ tại m/z 355,2, CTPT $\text{C}_{14}\text{H}_{20}\text{O}_9$ ($M = 332$), ^1H - và ^{13}C -NMR (CD_3OD) xem Bảng 1.

Methyl gallate (3): tinh thể, màu trắng, nhiệt độ nóng chảy 200°C , ESI-MS $[\text{M} + \text{Na}]^+$ tại $m/z = 207,2$, CTPT $\text{C}_8\text{H}_8\text{O}_5$ ($M = 184$), ^1H - và ^{13}C -NMR (CD_3OD) xem Bảng 1.

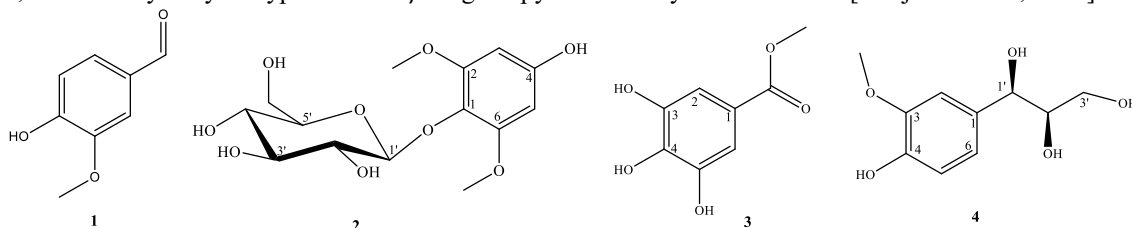
(1'R, 2'R)-Guaiacyl glycerol (4): bột, màu trắng, ESI-MS $[\text{M} + \text{Na}]^+$ tại m/z 237,1, CTPT $\text{C}_{10}\text{H}_{14}\text{O}_5$ ($M = 214$), ^1H - và ^{13}C -NMR (CD_3OD) xem Bảng 1.

3. Kết quả và thảo luận

Hợp chất **1** được phân lập dưới dạng tinh thể màu trắng, công thức phân tử là $\text{C}_8\text{H}_8\text{O}_3$ được xác định bằng tín hiệu ion dương trên phổ ESI-MS $[\text{M} + \text{H}]^+$ tại m/z 153,1 và kết hợp với phân tích phổ ^{13}C -NMR. Trên phổ ^1H -NMR của **1** cho thấy sự xuất hiện của 3 proton thơm dạng ABX [tại δ_{H} 7,26 (1H, s, H-2), 7,04 (1H, d, $J = 8,5$ Hz, H-5) và 7,43 (1H, dd, $J = 2,0, 8,5$ Hz, H-6), 3 proton của nhóm methoxy tại δ_{H} 3,97 (3H, s) và 1 proton formyl tại δ_{H} 9,83 (1H, s). Phổ ^{13}C -NMR và DEPT của **1** gồm tín hiệu của 8 carbon, bao gồm 1 carbon nhóm methoxy tại δ_{C} 56,17 ppm, sáu carbon thơm tại δ_{H} 108,85, 114,41, 127,50, 129,99, 147,18 và 151,70 ppm, một carbon formyl tại δ_{H} 190,82 ppm. Phân tích các số liệu phổ này gợi ý cấu tạo của hợp chất **1** gồm 1 vòng benzen thế ABX, 1 nhóm aldehyt và 1 nhóm methoxy, dựa vào tín hiệu cộng hưởng cao nhất của carbon trong vòng benzen, kết hợp với công thức phân tử gợi ý cấu tạo có 1 nhóm hydroxyl gắn vào vòng benzen. Phân tích tương tác trên phổ HMBC giúp khẳng định cấu trúc hóa học của hợp chất **1** là 3-methoxy-4-hydroxybenzaldehyde hay có tên là Vanillin – một chất phổ biến được dùng làm chất tạo hương trong các loại đồ uống (Jih-Jung Chen, 2008).

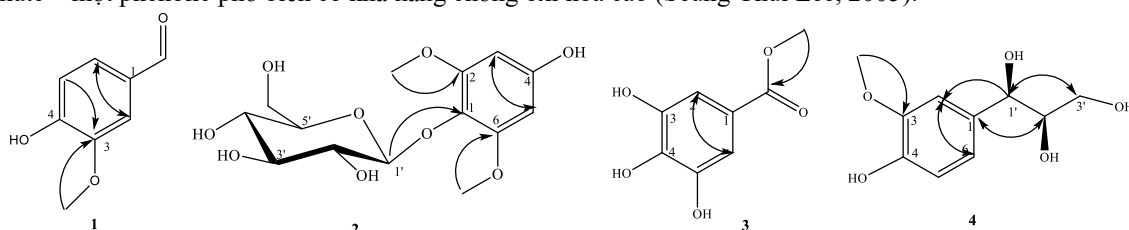
Hợp chất **2** thu được dạng bột, màu trắng. Phổ khối lượng ESI-MS xuất hiện pic ion dương $[\text{M} + \text{Na}]^+$ tại m/z 355,2 phù hợp với CTPT $\text{C}_{14}\text{H}_{20}\text{O}_9$ ($M = 332$). Phổ ^1H - và ^{13}C -NMR của **2** cho tín hiệu của 1 vòng benzen đã thế 4 vị trí với 2 proton đối xứng [tại δ_{H} 6,15 (2H, s, H-3,5) và δ_{C} 94,65 x 2, 130,0, 154,76 x 2, 156,00 ppm], 1 đơn vị đường glucose [proton anome tại δ_{H} 4,69 (1H, d, $J = 7,0$ Hz), 6 tín hiệu carbon tại δ_{C} 62,65, 71,36, 75,73, 77,82, 78,26 và 106,23 ppm] và 2 nhóm methoxy gắn đối xứng vào vòng benzen [tại δ_{H} 3,81 (6H, s) và δ_{C} 56,83 x 2 ppm]. Vị trí các nhóm thế vào vòng benzen được xác định bằng tương tác quan sát được trên phổ HMBC: 2 nhóm methoxy thế vào C-2 và C-6 do tương tác HMBC từ proton methyl δ_{H} 3,81 đến carbon δ_{C} 154,76 ppm; phân tử đường glucose được gắn vào C-1 bởi tương tác HMBC từ proton anome δ_{H} 4,69 tới δ_{C} 130,00 ppm. Dựa vào CTPT và tín hiệu C-4 tại trường yếu δ_{C} 156,00 ppm khẳng định nhóm -OH được gắn vào carbon này. Kết hợp so sánh với số liệu phổ NMR của

hợp chất đã công bố thấy hoàn toàn phù hợp do vậy hợp chất **2** được xác định là một phenolic glycoside 2,6-dimethoxy-4-hydroxyphenol 1-O- β -D-glucopyranoside hay Leonuriside A [Kanji Ishimaru, 1990].



Hình 2. Cấu trúc hóa học của 04 hợp chất phenolic phân lập được từ loài *Glochidion obliquum* Decne

Hợp chất **3** có dạng tinh thể, màu trắng. Trên phổ ESI-MS của **3** xuất hiện peak ion giả phân tử $[M+Na]^+$ tại $m/z = 207,2$ cho phép xác định CTPT của **3** là $C_9H_8O_5$ ứng với $M = 184$. Các tín hiệu trên phổ NMR của **3** gợi ý đây một phenolic với vòng benzen thế đối xứng chỉ có 1 tín hiệu của 2 proton tại δ_H 7,06 (2H, s), 1 nhóm methoxy tại δ_H 3,83 (3H, s), thêm nữa hợp chất **3** có tín hiệu của carbon carbonyl tại δ_C 169,03 ppm. Vị trí nhóm methoxy được xác định gắn với nhóm carbonyl CO dựa vào tương tác HMBC giữa các proton CH_3 tại δ_H 3,83 với carbon carbonyl δ_C 169,03 ppm. Kết hợp phân tích dữ liệu phổ NMR với CTPT và tài liệu tham khảo xác định được cấu trúc hóa học của hợp chất **3** là methyl gallate – một phenolic phổ biến có khả năng chống oxy hóa cao (Seung Chui Lee, 2005).



Hình 3. Một số tương tác HMBC chính của 04 hợp chất phenolic

Hợp chất **4** thu được là chất bột vô định hình màu trắng. Trên phổ ESI-MS của **4** xuất hiện pic ion giả phân tử $[M+Na]^+$ tại m/z 237,1, tính toán lý thuyết phù hợp cho công thức $C_{10}H_{14}O_5$. Trên phổ 1H -NMR của hợp chất **4** cũng xuất hiện tín hiệu của vòng benzene thế kiểu ABX tại δ_H 6,81 (1H, d, $J = 1,5$ Hz), 6,78 (1H, d, $J = 8,5$ Hz) và 7,02 (dd, $J = 1,5, 8,5$ Hz), 1 nhóm methoxy tại δ_H 3,87 (3H, s) và 4 proton hydroxyl tại δ_H 5,23 (1H, d, $J = 6,0$ Hz), 4,33 (1H, ddd, $J = 4,5, 6,0, 6,0$ Hz), 4,01 (1H, dd, $J = 6,0, 11,0$ Hz), 4,15 (1H, dd, $J = 4,5, 11,0$ Hz). Trên phổ ^{13}C -NMR và DEPT của **4** xuất hiện tín hiệu của 10 nguyên tử carbon trong đó 6 nguyên tử carbon của vòng benzen tại δ_C 111,60, 115,89, 120,67, 134,81, 147,10 và 148,88 ppm, một carbon methoxy tại δ_C 56,38 ppm và 3 carbon hydroxyl tại δ_C 64,25, 75,46 và 77,59. Các dữ liệu NMR này cho phép dự đoán cấu trúc hóa học của **4** là một phenyl propanoid. Dựa trên tương tác HMBC xác định được vị trí nhóm methoxy ở C-3 của vòng benzen. So sánh số liệu NMR của **4** với hợp chất tham khảo thấy hoàn toàn phù hợp, do vậy **4** được xác định là (1'R, 2'R)-guaiacyl glycerol (Toru Ishikawa, 2002).

Bảng 1. Số liệu phổ 1H - và ^{13}C -NMR của 04 hợp chất phenolic phân lập được từ loài *Sóc xéo*

C	1		2		3		4	
	$\delta_C^{a,c}$	$\delta_H^{a,d}$ ($J = \text{Hz}$)	$\delta_C^{b,c}$	$\delta_H^{b,d}$ ($J = \text{Hz}$)	$\delta_C^{b,c}$	$\delta_H^{b,d}$ ($J = \text{Hz}$)	$\delta_C^{b,c}$	$\delta_H^{b,d}$ ($J = \text{Hz}$)
1	129,99	-	130,00	-	121,43	-	134,81	-
2	108,85	7,26 (s)	154,76	-	110,05	7,06 (s)	111,60	6,81 (d, 1,5)
3	147,18	-	94,65	6,15 (s)	139,75	-	148,88	-
4	151,70	-	156,00	-	146,46	-	147,10	-
5	114,41	7,04 (d, 8,5)	94,65	6,15 (s)	139,75	-	115,89	6,78 (d, 8,5)
6	127,50	7,43 (dd, 2,0, 8,5)	154,76	-	110,05	7,06 (s)	120,67	7,02 (dd, 1,5, 8,5)
3-OMe	56,17	3,97 (s)					56,38	3,87 (s)
1-CHO	190,82	9,83 (s)						
C=O					169,03	-		
1'			106,23	4,69 (d, 7,0)			75,46	5,23 (d, 6,0)
2'			75,73	3,22 (m)			77,59	4,33 (ddd, 4,5, 6,0, 6,0)
3'			77,82	3,41 (m)			64,25	4,01 (dd, 6,0, 11,0), 4,15 (dd,

C	1		2		3		4	
	$\delta_{C^{a,c}}$	$\delta_H^{a,d}$ ($J = \text{Hz}$)	$\delta_{C^{b,c}}$	$\delta_H^{b,d}$ ($J = \text{Hz}$)	$\delta_{C^{b,c}}$	$\delta_H^{b,d}$ ($J = \text{Hz}$)	$\delta_{C^{b,c}}$	$\delta_H^{b,d}$ ($J = \text{Hz}$)
								4,5, 11,0)
4'			71,36	3,43 (m)				
5'			78,26	3,45 (m)				
6'			62,65	3,80 (brd, 12,0), 3,69 (dd, 5,0, 12,0)				
2,6- OMe			56,83	3,81 (s)				
-OMe					52,26	3,83 (s)		

^a đo trong $CDCl_3$, ^b đo trong CD_3OD , ^c đo tại 125 MHz, ^d đo tại 500 MHz

4. Kết luận

Bài báo này thông báo kết quả phân lập và xác định cấu trúc hóa học của 04 hợp chất phenolic từ cành lá loài Sóc xéo *Glochidion obliquum* Decne., đó là Vanilin (1), Leonuriside A (2), Methyl gallate (3) và (1'R, 2'R)-Guaiacyl glycerol (4). Các hợp chất phenolic có khả năng chống oxy hóa tốt do đó kết quả nghiên cứu góp phần giải thích việc sử dụng Sóc xéo trong một số bài thuốc dân gian.

Tài liệu tham khảo

Ana-Maria Chiorcea-Paquim, Teodor Adrian Enache, Eric De Souza Gil, Ana Maria Oliveira-Brett, July 2020, *Natural phenolic antioxidants electrochemistry: Towards a new food science methodology*, Comprehensive Reviews in Food Science and Food Safety, 19(4): 1680-1726.

Jih-Jung Chen, Chang-Syun Yang, Chien-Fang Peng, Ih-Sheng Chen, and Chang-Ling Miaw, 2008. *Dihydroagarofuranoid Sesquiterpenes, a Lignan Derivative, a Benzenoid, and Antitubercular Constituents from the Stem of Microtropis japonica*. J. Nat. Prod., 71: 1016–1021.

Kanji Ishimaru, Hiroshi Sudo, Motoyoshi Satake and Koichiro Shimomura, 1990. *Phenyl Glucosides from a hairy root culture of Swertia japonica*. Phytochemistry, 29(12): 3823-3825.

Seung Chui Lee, Yong Soo Kwon, Kyung Hun Son, Hyun Pyo Kim, and Moon Young Heo, 2005. *Antioxidative Constituents from Paeonia lactiflora*. Arch Pharm Res, 28(7): 775-783.

Toru Ishikawa, Eiko Fujimatu and Junichi Kitasima, 2002. *Water-Soluble Constituents of Anise: New Glucosides of Anethole Glycol and Its Related Compounds*. Chem. Pharm. Bull., 50(11): 1460-1466.

Võ Văn Chi, 2012. *Từ điển Cây thuốc Việt Nam*, Tập 2 (697), NXB Y Học, Hà Nội.

Vu Kim Thu, Nguyen Van Thang, Nguyen Xuan Nhiem, Hoang Le Tuan Anh, Pham Hai Yen, Dan Thi Thuy Hang, Chau Van Minh and Phan Van Kiem, 2016, *Two New Compounds from the Leaves of Glochidion obliquum*, Natural Product Communications, 11(4): 443 – 444.

Vu Kim Thu, Nguyen Van Thang, Hoang Le Tuan Anh, Nguyen Xuan Nhiem, Dan Thi Thuy Hang, Phan Van Kiem, 2016, *Flavones and Lignans from Glochidion obliquum Decne*, Vietnam Journal of Chemistry, 54(2): 185-188.

Vu Kim Thu, Le Thi Kieu Anh, Dang Ngoc Quang, Nguyen Van Thang, Hoang Le Tuan Anh, Nguyen Xuan Nhiem, Dan Thi Thuy Hang, Chau Van Minh, Phan Van Kiem, 2015, *Triterpens from the leaves of Glochidion obliquum*, Vietnam Journal of Chemistry, 53(2e): 103-106.

ABSTRACT

Phenolic compounds isolated from *Glochidion obliquum* Decne

Vu Kim Thu*, Nguyen Thi Thu Hien, Nguyen Thi Kim Thoa
Chemistry Department, Faculty of Basic Sciences, Hanoi University of Mining and Geology

By using various chromatography methods, four phenolic compounds were isolated from the leaves of *Glochidion obliquum* Decne., Vanillin (1), Leonuriside A (2), Methyl gallate (3), and (1'R, 2'R)-Guaiacyl glycerol (4). Their chemical structures were elucidated by NMR, ESI-MS spectroscopy data as well as by comparison with the NMR data reported in the literature.

Keywords: phenolic, *Glochidion obliquum*, Sóc xéo