

ĐẠI HỌC THÁI NGUYÊN
TRƯỜNG ĐẠI HỌC KHOA HỌC



NGUYỄN KHOA OÁNH

**“PHÂN TÍCH CẤU TRÚC MỘT SỐ HỢP CHẤT FLAVONOIT
TRONG CÂY XÉN MỦ (*Garcinia mackeaniana*) THUỘC CHI BỨA
(*Garcinia*) BẰNG CÁC PHƯƠNG PHÁP HÓA LÝ HIỆN ĐẠI”.**

LUẬN VĂN THẠC SĨ HÓA HỌC

THÁI NGUYÊN - 2019

ĐẠI HỌC THÁI NGUYÊN
TRƯỜNG ĐẠI HỌC KHOA HỌC



NGUYỄN KHOA OÁNH

**“PHÂN TÍCH CẤU TRÚC MỘT SỐ HỢP CHẤT FLAVONOIT
TRONG CÂY XÉN MỦ (*Garcinia mackeaniana*) THUỘC CHI BÚA
(*Garcinia*) BẰNG CÁC PHƯƠNG PHÁP HÓA LÝ HIỆN ĐẠI”.**

Chuyên ngành: Hóa phân tích

Mã số: 8 44 01 18

LUẬN VĂN THẠC SĨ HÓA HỌC

NGƯỜI HƯỚNG DẪN KHOA HỌC: TS. Nguyễn Thị Thu Hà

THÁI NGUYÊN - 2019

LỜI CẢM ƠN

Lời đầu tiên với lòng kính trọng và biết ơn sâu sắc nhất, tôi xin gửi lời cảm ơn tới TS. Nguyễn Thị Thu Hà người đã tận tình hướng dẫn, giúp đỡ và tạo điều kiện tốt nhất để tôi hoàn thành bản luận văn này.

Tôi xin chân thành cảm ơn thầy cô, các anh chị ở Viện Hóa học Việt Nam đã tận tình giúp đỡ, chỉ bảo và tạo điều kiện thuận lợi về cơ sở vật chất và thời gian để tôi hoàn thành luận văn.

Tôi xin cảm ơn Quỹ phát triển khoa học và công nghệ quốc gia Việt Nam NAFOSTED đã hỗ trợ tài chính để chúng tôi thực hiện đề tài mã số: 104.01-2017.28.

Tôi xin chân thành cảm ơn Thầy Cô khoa Hóa học – Trường Đại học Khoa Học – Đại học Thái Nguyên đã tận tình giảng dạy, trang bị kiến thức để tôi có thể tiếp cận những kiến thức khoa học để có thể vận dụng hoàn thành luận văn.

Tôi xin bày tỏ lòng biết ơn tới toàn thể người thân, bạn bè, đồng nghiệp đã động viên, giúp đỡ tôi trong suốt quá trình học tập và hoàn thành luận văn.

Trong quá trình thực hiện luận văn do còn hạn chế về mặt thời gian nên không tránh khỏi những sai sót. Rất mong nhận được những ý kiến đóng góp của các Thầy Cô, bạn bè và đồng nghiệp.

Ngày tháng 06 năm 2019

Tác giả luận văn

Nguyễn Khoa Oánh

MỤC LỤC

DANH MỤC CHỮ VIẾT TẮT	a
DANH MỤC SƠ ĐỒ	b
DANH MỤC HÌNH	c
DANH MỤC CÁC BẢNG BIỂU	e
DANH MỤC PHỤ LỤC	f
MỞ ĐẦU	1
CHƯƠNG 1. TỔNG QUAN TÀI LIỆU	3
1.1. Một số phương pháp hóa lí dùng để phân tích cấu trúc hóa học các hợp chất tự nhiên	3
1.1.1. <i>Phổ cộng hưởng từ hạt nhân NMR (Nuclear Magnetic Resonancespectroscopy)</i>	3
1.1.2. <i>Phổ khối lượng MS (Mass spectrometry)</i>	5
1.1.3. <i>Phổ hồng ngoại IR (Infrared Spectroscopy)</i>	5
1.2. Tình hình nghiên cứu trong và ngoài nước về thành phần hóa học và hoạt tính sinh học của chi Bứa	6
1.2.1. <i>Sơ lược về họ Bứa (Clusiaceae), chi Bứa (Garcinia) và cây Xén mủ(Garcinia mackeaniana)</i>	6
1.2.2. <i>Tình hình nghiên cứu ngoài nước về chi Bứa (Garcinia)</i>	7
1.2.3. <i>Tình hình nghiên cứu trong nước về chi Bứa (Garcinia)</i>	14
CHƯƠNG 2: VẬT LIỆU VÀ PHƯƠNG PHÁP NGHIÊN CỨU	17
2.1. Vật liệu nghiên cứu	17
2.1.1. <i>Đối tượng nghiên cứu</i>	17
2.1.2. <i>Hóa chất</i>	17
2.1.3. <i>Thiết bị nghiên cứu</i>	18
2.2. Phương pháp nghiên cứu.....	18
2.2.1. <i>Thực nghiệm</i>	18
2.2.2. <i>Các bước tiến hành thực nghiệm</i>	19

2.2.3. Các phương pháp phân tích cấu trúc hoá học các hợp chất tự nhiên	21
2.3. Hằng số vật lý và các dữ kiện phổ của các chất phân lập được	22
2.3.1. Hợp chất GM 15: Quercetin	22
2.3.2. Hợp chất GM 16: Apigenine	22
2.3.3. Hợp chất GM 18: Kaempferol	23
2.3.4. Hợp chất GM 23: Amentoflavone	23
2.3.5. Hợp chất GM 26: Vitexin	23
2.3.6. Hợp chất GM 28: 2''-O-acetylvitexin	24
CHƯƠNG 3: KẾT QUẢ NGHIÊN CỨU.....	25
3.1. Hợp chất GM26: Vitexin.....	25
3.2. Hợp chất GM28: 2''-O-acetyl vitexin.....	30
3.3. Hợp chất GM23: Amentoflavone.....	34
3.4. Hợp chất GM16: Apigenine.....	38
3.5. Hợp chất GM15: Quercetin.....	39
3.6. Hợp chất GM18: Kaempferol	41
3.7. Tổng kết các chất phân lập được từ cặn EtOAc của lá cây Xén mủ.....	44
KẾT LUẬN VÀ KIẾN NGHỊ	45
1. KẾT LUẬN	45
2. KIẾN NGHỊ	45
PHỤ LỤC	

DANH MỤC CHỮ VIẾT TẮT

Kí hiệu/ Từ viết tắt	Tên tiếng anh	Tên tiếng việt
NMR	Nuclear Magnetic Resonance	Phổ cộng hưởng từ hạt nhân
¹ H-NMR	Nuclear Magnetic Resonance- ¹ H	Phổ cộng hưởng từ proton
¹³ C-NMR	Nuclear Magnetic Resonance- ¹³ C	Phổ cộng hưởng từ hạt nhân ¹³ C
DEPT	Distortionless Enhancement by Polarization Transfer	Phổ DEPT
COSY	Homonuclear Correlated Spectroscopy	Phổ COSY
HMBC	Heteronuclear Multiple Bond Correlation	Phổ tương tác di hạt nhân qua nhiều liên kết
HSQC	Heteronuclear Single Quantum Coherence	Phổ tương tác trực tiếp H-C
ESI-MS	Electron Ionization-Mass Spectroscopy	Phổ khối phun sương mù điện tử
IR	Infrared spectroscopy	Phổ hồng ngoại
MS	Mass Spectroscopy	Phổ khối lượng
đnc		Điểm nóng chảy
TLC	Thin Layer Chromatography	Sắc ký bản lớp mỏng
DMSO	Dimethyl sulfoxide	
EtOAc	Ethyl acetate	Ethyl acetat
EtOH	Ethanol	Ethanol
MeOH	Methanol	Methanol
δ_H, δ_C		Độ chuyển dịch hóa học của proton và cacbon
ppm	Part per million	Phần triệu
s: singlet d: doublet t: triplet q: quartet		dd: doublet of doublets dt: doublet of triplets dq: doublet of quartets

DANH MỤC SƠ ĐỒ

Sơ đồ 2.1. Sơ đồ ngâm chiết lá cây Xén Mủ (<i>Garcinia mackeaniana</i>)	18
Sơ đồ 2.2. Sơ đồ phân lập các hợp chất từ cặn EtOAc của lá cây Xén Mủ từ phân đoạn F1-F11	19
Sơ đồ 2.3. Sơ đồ phân lập các hợp chất từ cặn EtOAc của lá cây Xén Mủ từ phân đoạn F12-F17	20

DANH MỤC HÌNH

Hình 1.1. Một số hợp chất phân lập từ chi <i>Garcinia</i> có hoạt tính gây độc tế bào	9
Hình 1.2. Một số hợp chất có hoạt tính kháng vi sinh vật phân lập từ chi <i>Garcinia</i>	11
Hình 1.3. Một số hợp chất có hoạt tính chống oxy hóa phân lập từ chi <i>Garcinia</i>	12
Hình 1.4. Một số hợp chất phân lập từ chi <i>Garcinia</i> có các hoạt tính khác	13
Hình 1.5. Một số hợp chất phân lập được các loài chi Bứa thu hái tại Việt Nam có hoạt tính gây độc tế bào.....	15
Hình 1.6. Các hợp chất xanthone phân lập được từ dịch chiết EtOAc của lá cây Xén mủ (<i>Garcinia mackeaniana</i>).....	16
Hình 2.1. Cây Xén Mủ (<i>Garcinia mackeaniana</i>).....	17
Hình 3.1. Phổ ESI-MS của hợp chất GM26.....	25
Hình 3.2. Phổ ¹ H-NMR của hợp chất GM26	26
Hình 3.3. Phổ ¹³ C của hợp chất GM26	27
Hình 3.4. Phổ HSQC của hợp chất GM26	27
Hình 3.5. Phổ HMBC của hợp chất GM26.....	28
Hình 3.6. Cấu trúc hóa học và một số tương tác chính trên phổ HMBC của GM26.....	30
Hình 3.7. Phổ ¹ H của GM28.....	31
Hình 3.8. Phổ ¹³ C của hợp chất GM28	31
Hình 3.9. Phổ HMBC của hợp chất GM28.....	32
Hình 3.10. Phổ HSQC của hợp chất GM28.....	32
Hình 3.11. Cấu trúc hợp chất GM28.....	34
Hình 3.12. Phổ ¹ H - NMR của hợp chất GM23	35
Hình 3.13. Phổ ¹³ C - NMR của hợp chất GM23.....	35
Hình 3.14. Phổ HMBC của hợp chất GM23.....	36
Hình 3.15. Cấu trúc và một số tương tác HMBC chính của GM23.....	38

Hình 3.16. Phổ $^1\text{H-NMR}$ của hợp chất GM16.....	38
Hình 3.17. Cấu trúc hợp chất GM16.....	39
Hình 3.18. Phổ ESI-MS của hợp chất GM15.....	40
Hình 3.19. Phổ $^1\text{H-NMR}$ giãn rộng của hợp chất GM15.....	40
Hình 3.20. Cấu trúc hợp chất GM15.....	41
Hình 3.21. Phổ ESI-MS của hợp chất GM18.....	41
Hình 3.22. Phổ $^1\text{H-NMR}$ giãn rộng của hợp chất GM18.....	42
Hình 3.23. Phổ $^{13}\text{C-NMR}$ của hợp chất GM18.....	42
Hình 3.24. Cấu trúc hợp chất GM18.....	43
Hình 3.25. Các hợp chất flavonoid phân lập được từ cặn EtOAc của lá cây Xén mủ.....	44