

**ĐẠI HỌC THÁI NGUYÊN  
TRƯỜNG ĐẠI HỌC KHOA HỌC**

---

**PHẠM THỊ HUYỀN**

**PHÂN TÍCH CẤU TRÚC MỘT SỐ HỢP CHẤT  
FLAVONOID TÁCH CHIẾT TỪ LÁ CÂY SEN HỒNG  
(*NELUMBO NUCIFERA* GAERTN.) BẰNG CÁC  
PHƯƠNG PHÁP HÓA LÝ HIỆN ĐẠI**

**LUẬN VĂN THẠC SĨ HÓA HỌC**

**THÁI NGUYÊN - 2017**

**ĐẠI HỌC THÁI NGUYÊN  
TRƯỜNG ĐẠI HỌC KHOA HỌC**

**PHẠM THỊ HUYỀN**

**PHÂN TÍCH CẤU TRÚC MỘT SỐ HỢP CHẤT  
FLAVONOID TÁCH CHIẾT TỪ LÁ CÂY SEN HỒNG  
(*NELUMBO NUCIFERA* GAERTN.) BẰNG CÁC  
PHƯƠNG PHÁP HÓA LÝ HIỆN ĐẠI**

**Chuyên ngành: Hóa phân tích**

**Mã số: 60.44.01.18**

**LUẬN VĂN THẠC SĨ HÓA HỌC**

**Người hướng dẫn khoa học: TS. NGUYỄN THỊ THU HÀ**

**THÁI NGUYÊN - 2017**

## LỜI CẢM ƠN

Với lòng kính trọng và biết ơn sâu sắc, em xin chân thành cảm ơn GS.TS. Nguyễn Văn Tuyên và TS. Nguyễn Thị Thu Hà đã giao đề tài và tận tình hướng dẫn em trong suốt thời gian thực hiện đề tài.

Em xin chân thành cảm ơn các cán bộ phòng Hóa sinh ứng dụng - Viện Hóa học đã giúp đỡ em rất nhiều trong quá trình thực nghiệm và hoàn thành luận văn.

Tôi xin cảm ơn các thầy cô khoa Hóa Học - Trường Đại Học Khoa Học Thái Nguyên đã trang bị cho em kiến thức để tiếp cận với các vấn đề nghiên cứu khoa học, và các anh chị, các bạn học viên lớp K9B- lớp Cao học Hóa đã trao đổi và giúp đỡ tôi trong suốt thời gian thực hiện đề tài.

Cuối cùng, tôi xin bày tỏ lòng biết ơn sâu sắc tới gia đình tôi, bạn bè và đồng nghiệp của tôi - những người đã luôn bên cạnh động viên và giúp đỡ tôi trong suốt thời gian học tập và thực hiện luận văn này.

*Ngày 28 tháng 5 năm 2017*

**Học viên**

**Phạm Thị Huyền**

# MỤC LỤC

LỜI CẢM ƠN .....	a
MỤC LỤC.....	b
DANH MỤC CÁC CHỮ VIẾT TẮT .....	d
DANH MỤC CÁC HÌNH.....	e
DANH MỤC CÁC BẢNG.....	f
DANH MỤC CÁC SƠ ĐỒ .....	g
<b>MỞ ĐẦU .....</b>	<b>1</b>
<b>Chương 1: TỔNG QUAN.....</b>	<b>3</b>
1.1. Giới thiệu về họ Sen (Nelumbonaceae), chi sen (Nelumbo), và loài Sen hồng (Nelumbo nucifera gaertn.) .....	3
1.2. Tình hình nghiên cứu trong và ngoài nước về thành phần hóa học và hoạt tính sinh học của cây Sen hồng (Nelumbo Nucifera gaertn.) .....	4
1.2.1. Tổng quan tình hình nghiên cứu ngoài nước .....	4
1.2.2. Tổng quan tính hình nghiên cứu trong nước.....	7
1.3. Hợp chất Flavonoid.....	8
1.3.1. Phân loại.....	8
1.3.2. Các phương pháp định tính và định lượng flavonoid .....	11
1.3.3. Các phương pháp chiết xuất flavonoid .....	13
1.3.4. Hoạt tính sinh học của lớp chất flavonoid .....	14
1.4. Một số phương pháp hóa lí dùng để phân tích cấu trúc hóa học các hợp chất tự nhiên.....	19
1.4.1. Phương pháp phổ cộng hưởng từ hạt nhân $^1\text{H-NMR}$ và $^{13}\text{C-NMR}$ . ....	19
1.4.2. Phương pháp phổ khối lượng (MS) .....	20
1.4.3. Phương pháp phổ hồng ngoại (IR).....	21
<b>Chương 2: VẬT LIỆU VÀ PHƯƠNG PHÁP NGHIÊN CỨU .....</b>	<b>23</b>
2.1. Vật liệu nghiên cứu .....	23
2.1.1. Đối tượng .....	23
2.1.2. Hóa chất .....	23

2.1.3. Thiết bị nghiên cứu .....	23
2.2. Phương pháp nghiên cứu.....	23
2.2.1. Phương pháp xử lý và ngâm chiết mẫu thực vật.....	23
2.2.2. Phương pháp phân lập các hợp chất tự nhiên .....	24
2.3. Hằng số vật lý và các dữ kiện phổ của các chất phân lập được .....	26
2.3.1. Hợp chất catechin (NN1) .....	26
2.3.2. Hợp chất hyperoside (NN2) .....	27
2.3.3. Hợp chất quercetin (NN3).....	27
2.3.4. Hợp chất kaempferol (NN4) .....	28
2.3.5. Hợp chất isorhamnetin-3-O- $\beta$ -D-glucuronide (NN5).....	28
2.3.6. Hợp chất quercetin-3-O- $\beta$ -D-glucuronide (NN6).....	29
<b>Chương 3: KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN .....</b>	<b>30</b>
3.1. Phân tích cấu trúc hóa học hợp chất catechin (NN1).....	30
3.2. Hợp chất hyperoside (NN2) .....	34
3.3. Hợp chất quercetin (NN3).....	38
3.4. Hợp chất kaempferol (NN4) .....	40
3.5. Hợp chất isorhamnetin-3-O- $\beta$ -D-glucuronide (NN5) .....	43
3.6. Hợp chất quercetin-3-O- $\beta$ -D-glucuronide (NN6) .....	47
<b>KẾT LUẬN VÀ KIẾN NGHỊ .....</b>	<b>50</b>
<b>TÀI LIỆU THAM KHẢO .....</b>	<b>52</b>
<b>PHỤ LỤC .....</b>	<b>56</b>

## DANH MỤC CÁC CHỮ VIẾT TẮT

Kí hiệu/ Từ viết tắt	Tên tiếng anh	Tên tiếng việt
NMR	Nuclear Magnetic Resonance	Phổ cộng hưởng từ hạt nhân
<sup>1</sup> H-NMR	Nuclear Magnetic Resonance- 1H	Phổ cộng hưởng từ proton
<sup>13</sup> C-NMR	Nuclear Magnetic Resonance- 1H	Phổ cộng hưởng từ hạt nhân <sup>13</sup> 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 <sub>H</sub> , δ <sub>C</sub>		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 CÁC HÌNH

Hình 1.1: Cây Sen hồng ( <i>Nelumbo nucifera</i> Gaertn.).....	3
Hình 1.2: Một số hợp chất flavonoid phân lập từ cây Sen hồng.....	5
Hình 3.1. Phổ ESI-MS của hợp chất NN1 .....	30
Hình 3.2. Phổ <sup>1</sup> H-NMR giãn rộng của hợp chất NN1 .....	31
Hình 3.3. Phổ DEPT của hợp chất NN1 .....	32
Hình 3.4. Phổ HMBC của hợp chất NN1.....	33
Hình 3.5. Phổ HSQC của hợp chất NN1.....	34
Hình 3.6. Công thức cấu tạo và một số tương tác chính trên phổ HMBC của hợp chất catechin .....	34
Hình 3.7. Phổ ESI-MS của hợp chất NN2 .....	35
Hình 3.8. Phổ <sup>1</sup> H-NMR của hợp chất NN2.....	36
Hình 3.9. Phổ <sup>13</sup> C-NMR của hợp chất NN2.....	36
Hình 3.10. Phổ DEPT của hợp chất NN2 .....	37
Hình 3.11. Cấu trúc hóa học của hợp chất hyperoside.....	38
Hình 3.12. Phổ ESI-MS của hợp chất NN3 .....	39
Hình 3.13. Phổ <sup>1</sup> H-NMR giãn rộng của hợp chất NN3 .....	39
Hình 3.14. Cấu trúc hóa học của hợp chất quercetin .....	40
Hình 3.15. Phổ ESI-MS của hợp chất NN4 .....	40
Hình 3.16. Phổ <sup>1</sup> H-NMR giãn rộng của hợp chất NN4 .....	41
Hình 3.17. Phổ <sup>13</sup> C-NMR của hợp chất NN4.....	42
Hình 3.18. Cấu trúc hóa học của hợp chất kaemferol.....	43
Hình 3.19. Phổ ESI-MS của hợp chất NN5 .....	44
Hình 3.20. Phổ <sup>1</sup> H-NMR giãn rộng của hợp chất NN5 .....	45
Hình 3.21. Phổ <sup>13</sup> C-NMR của hợp chất NN5.....	45
Hình 3.22. Phổ DEPT của hợp chất NN5 .....	46
Hình 3.23. Cấu trúc hóa học của hợp chất isorhamnetin-3-O-β-D-glucuronide .....	46
Hình 3.24. Phổ ESI-MS của hợp chất NN6 .....	47
Hình 3.25. Phổ <sup>1</sup> H-NMR giãn rộng của hợp chất NN6 .....	48
Hình 3.26. Phổ <sup>13</sup> C-NMR của hợp chất NN6.....	48
Hình 3.27. Cấu trúc hóa học của hợp chất quercetin-3-O-β-D-glucuronide ...	50

Hình 3.28. Các hợp chất phân lập được từ dịch chiết EtOAc lá sen hồng *Nelumbo nucifera* ..... 50

### **DANH MỤC CÁC BẢNG**

Bảng 3.1. Dữ liệu phổ  $^1\text{H-NMR}$  và  $^{13}\text{C-NMR}$  của hợp chất NN1 ..... 32

Bảng 3.2. Dữ liệu phổ  $^1\text{H-NMR}$  và  $^{13}\text{C-NMR}$  của hợp chất NN2 ..... 37

Bảng 3.3. Dữ liệu phổ  $^1\text{H-NMR}$  và  $^{13}\text{C-NMR}$  của hợp chất NN4 ..... 42

Bảng 3.4. Dữ liệu phổ  $^1\text{H-NMR}$  và  $^{13}\text{C-NMR}$  của hợp chất NN6 ..... 49



## DANH MỤC CÁC SƠ ĐỒ

Sơ đồ 2.1. Sơ đồ ngâm chiết lá cây Sen hồng <i>Nelumbo nucifera</i> .....	24
Sơ đồ 2.2. Sơ đồ phân lập các hợp chất từ cặn EtOAc của lá Sen hồng.....	26

## DANH MỤC PHỤ LỤC

PL1. Phổ ESI-MS của hợp chất catechin (NN1): $C_{15}H_{14}O_6$ .....	1
PL2. Phổ IR của hợp chất catechin (NN1) : $C_{15}H_{14}O_6$ .....	2
PL3. Phổ $^1H$ -NMR của hợp chất catechin (NN1) : $C_{15}H_{14}O_6$ .....	3
PL4. Phổ $^{13}C$ -NMR của hợp chất catechin (NN1) : $C_{15}H_{14}O_6$ .....	4
PL5. Phổ DEPT của hợp chất catechin (NN1): $C_{15}H_{14}O_6$ .....	5
PL6. Phổ HSQC của hợp chất catechin (NN1) : $C_{15}H_{14}O_6$ .....	6
PL7. Phổ HMBC của hợp chất catechin (NN1) : $C_{15}H_{14}O_6$ .....	7
PL8. Phổ ESI-MS của hợp chất hyperoside (NN2) : $C_{21}H_{20}O_2$ .....	8
PL9. Phổ IR của hợp chất hyperoside (NN2) : $C_{21}H_{20}O_2$ .....	9
PL10. Phổ $^1H$ -NMR của hợp chất hyperoside (NN2) : $C_{21}H_{20}O_2$ .....	10
PL11. Phổ $^{13}C$ -NMR của hợp chất hyperoside (NN2) : $C_{21}H_{20}O_2$ .....	11
PL12. Phổ DEPT của hợp chất hyperoside (NN2) : $C_{21}H_{20}O_2$ .....	12
PL13. Phổ ESI-MS của hợp chất quercetin (NN3) : $C_{15}H_{10}O_7$ .....	13
PL14. Phổ IR của hợp chất quercetin (NN3) : $C_{15}H_{10}O_7$ .....	14
PL15. Phổ $^1H$ -NMR của hợp chất quercetin (NN3) : $C_{15}H_{10}O_7$ .....	15
PL16. Phổ ESI-MS của hợp chất (NN4) : $C_{15}H_{10}O_6$ .....	16
PL17. Phổ IR của hợp chất (NN4) : $C_{15}H_{10}O_6$ .....	17
PL18. Phổ $^1H$ -NMR của hợp chất (NN4) : $C_{15}H_{10}O_6$ .....	18
PL19. Phổ $^{13}C$ -NMR của hợp chất (NN4) : $C_{15}H_{10}O_6$ .....	19
PL20. Phổ ESI-MS của hợp chất (NN5) : $C_{22}H_{20}O_{13}$ .....	20
PL21. Phổ IR của hợp chất (NN5) : $C_{22}H_{20}O_{13}$ .....	21
PL22. Phổ $^1H$ -NMR của hợp chất (NN5) : $C_{22}H_{20}O_{13}$ .....	22
PL23. Phổ $^{13}C$ -NMR của hợp chất (NN5) : $C_{22}H_{20}O_{13}$ .....	23
PL24. Phổ DEPT của hợp chất (NN5) : $C_{22}H_{20}O_{13}$ .....	24
PL25. Phổ ESI-MS của hợp chất NN6.....	25
PL26. Phổ IR của hợp chất NN6.....	26
PL27. Phổ $^1H$ -NMR của hợp chất (NN6) : $C_{21}H_{18}O_{13}$ .....	27
PL28. Phổ $^{13}C$ -NMR của hợp chất (NN6) : $C_{21}H_{18}O_{13}$ .....	28