

THÔNG TIN VỀ LUẬN VĂN THẠC SĨ

1. Họ và tên học viên: Trần Thị Hiền
2. Giới tính: nữ
3. Ngày sinh: 20 – 08 – 1987
4. Nơi sinh: Nam Định
5. QĐ công nhận HVCH số: 2933/QĐ – KHTN- CTSV ngày 07/09/2011
6. Các thay đổi trong quá trình đào tạo: không
7. Tên đề tài luận văn: **“Nghiên cứu các xanthanolid và các thành phần hóa học khác của cây Ké đầu ngựa (*Xanthium strumarium* L., Asteraceae) mọc ở Hà Nội”**
8. Chuyên ngành: Hóa hữu cơ
9. Mã số: 60440114
10. Cán bộ hướng dẫn khoa học: **PGS.TS. Phan Minh Giang**, Trường Đại Học Khoa Học Tự Nhiên – ĐHQG Hà Nội.
11. Tóm tắt các kết quả của luận văn:

Trong thế giới thực vật muôn màu, đa dạng về công dụng chữa bệnh thì cây Ké đầu ngựa (*Xanthium strumarium* L.) thuộc chi *Xanthium*, họ Cúc (Asteraceae) được biết đến là cây thuốc của nhiều nước như Bắc Mỹ, Trung Quốc, Nhật Bản, Hàn Quốc, Ấn Độ và Việt Nam với nhiều công dụng chữa bệnh cho con người. Ké đầu ngựa là loài cây mọc rất phổ biến ở Việt Nam, thường mọc ở vùng đất hoang, bờ ruộng, bờ đường, xen kẽ với các loài cỏ khác. Theo một số nghiên cứu trước đây, thành phần hóa học của cây *Xanthium strumarium* L. được biết đến với các xanthanolid, các dẫn xuất của axit quinic và thiazindion giàu hoạt tính sinh học. Các xanthanolid là các secquiterpen dẫn xuất từ khung cacbon guaian và thu hút được sự quan tâm vì chúng xuất hiện hạn chế trong chi *Xanthium* và có các hiệu quả chống viêm và ung thư đã được chứng tỏ. Các axit quinic là các chất chống oxi hóa được quan tâm nhiều trong công nghiệp thực phẩm và các thiazindion là các dẫn xuất thiên nhiên duy nhất của các chất dị vòng thiazin chống ung thư. Có rất ít thông tin về thành phần hóa học loài *Xanthium strumarium* L. của Việt Nam, mặc dù các bộ phận của loài cây này vẫn được dùng làm thuốc trong y học truyền thống của Việt Nam.

Theo Đỗ Tất Lợi quả Ké đầu ngựa là thành phần thuốc nam, có trong một số bài thuốc Y học cổ truyền Việt Nam. Tại Việt Nam có 2 loài *Xanthium*, *Xanthium strumarium* L. và *Xanthium inaequilaterum* DC.; chúng là các loài phổ biến và mọc hoang ở mọi nơi. Riêng loài *Xanthium inaequilaterum* DC. chủ yếu phân bố ở miền Trung như Huế, Nha Trang, Tây Ninh....

Mẫu thực vật sau khi được thu hái được rửa sạch, thái nhỏ và phơi khô trong bóng râm, sau đó sấy ở 50 °C.

Nguyên liệu thực vật được ngâm chiết với dung môi metanol ở nhiệt độ phòng rồi được phân bố chọn lọc bằng chiết hai pha lỏng lần lượt vào các dung môi có độ phân cực tăng dần, *n*-hexan, điclorometan và etyl axetat.

Luận văn thạc sĩ “**Nghiên cứu các xanthanolid và các thành phần hóa học khác của cây Ké đầu ngựa (*Xanthium strumarium* L., Asteraceae) mọc ở Hà Nội**” đã thực hiện các nghiên cứu phân lập sắc ký và xác định các thành phần có trong lá và cành cây Ké đầu ngựa mọc ở Hà Nội và đã thu được các kết quả nghiên cứu chính sau:

1. Đã xây dựng được quy trình chiết để phân bố các hợp chất hữu cơ từ lá và cành cây Ké đầu ngựa (*Xanthium strumarium* L., Asteraceae) mọc ở Hà Nội theo độ phân cực tăng dần vào các phần chiết lá *n*-hexan (**XSLH**, hiệu suất chiết 1,15 % so với lượng nguyên liệu khô), điclorometan (**XSLD**, 1,01 %) và phần chiết cành *n*-hexan (**XSCH**, 0,43 %), điclorometan (**XSCD**, 0,34 %).

2. Đã phân tích sắc ký lớp mỏng (TLC) các phần chiết nhận được để xác định các điều kiện sắc ký định tính các phần chiết này và các hệ dung môi thích hợp cho phân tách sắc ký cột các phần chiết.

3. Bằng các kỹ thuật sắc ký điều chế đã phân lập được 9 hợp chất từ các phần chiết *n*-hexan và điclorometan từ lá và cành cây Ké đầu ngựa Hà Nội.

4. Đã xác định được cấu trúc của các hợp chất được phân lập bằng các phương pháp phổ (ESI-MS, ¹H-NMR, ¹³C-NMR và DEPT). Các hợp chất được phân lập là: 4-hexacosanoyl-2-oxacyclopentanon (**I**), β -sitosterol (**II**), betulinalin (**III**), 5 α ,8 α -epidioxy-(22*E*,24*R*)-ergosta-6,22-dien-3 β -ol (**IV**), axit docosanoic (**V**), *N*-(1,3,4-trihydroxyheptadecyl)-2-hydroxypentadecanamid (**VIa**) và *N*-(1,3,4-trihydroxy-15*Z*-heptacosen)-2-hydroxypentadecanamid (**VIb**), β -sitosterol 3-*O*- β -D-glucopyranosid (**VIIa**) và stigmasterol 3-*O*- β -D-glucopyranosid (**VIIb**) từ lá cây Ké đầu ngựa, 1-docosanol (**VIII**) và artemisidiol A (**IX**) từ cành cây Ké đầu ngựa.

5. Các hợp chất **I**, **III**, **IV**, **V**, **VIa**, **VIb** và **VIII** đã lần đầu tiên được phân lập từ cây *Xanthium strumarium*. Theo các tra cứu tài liệu, các chất **VIa** và **VIb** chưa được mô tả trong các công bố. Các hợp chất xanthanol có thể xuất hiện ở hàm lượng thấp trong cây Ké đầu ngựa được thu thập vào tháng 10 năm 2012, do đó, chưa được phân lập trong nghiên cứu này.

12. Khả năng ứng dụng trong thực tiễn

Các kết quả nghiên cứu của luận văn sẽ bước đầu đóng góp vào việc xây dựng cơ sở cho việc hiện đại hóa Y học cổ truyền, giải thích các tác dụng chữa bệnh của cây Ké đầu ngựa, góp phần ổn định chất lượng và hiệu quả điều trị của các vị thuốc chứa các thành phần từ cây Ké đầu ngựa.

13. Những hướng nghiên cứu tiếp theo:

Tiếp tục xác định cấu trúc hóa học của các hợp chất phân lập được

Các nghiên cứu điều chế lượng lớn có thể được thực hiện để phân lập các hợp chất từ cây Ké đầu ngựa. Cho các thử nghiệm hoạt tính sinh học *in vitro* và *in vivo* cũng như các thử nghiệm lâm sàng khác.

14. Các công trình công bố có liên quan đến luận văn: không

Hà Nội, ngày 17 tháng 04 năm 2014

Học viên cao học

Trần Thị Hiền

INFORMATION ON MASTER'S THESIS

1. Full name: Tran Thi Hien
2. Sex: female
3. Date of birth: 20/08/1987
4. Place of birth: Nam Dinh
5. Admission decision number: 2933/QĐ – KHTN- CTSV Date: 07-09-2011
6. Changes in academic process: No
7. Official thesis title: **Study on the xanthanoids and chemical composition of Cocklebur (*Xanthium strumarium* L., Asteraceae) grows in Ha Noi**
8. Major: organic chemistry
9. Code: 60440114
10. Supervisors: Assoc. Prof, PhD. **Phan Minh Giang**, University of Science-Vietnam National University, Hanoi.
11. Summary of the findings of the thesis:

In the colourful plant world, diversified medicinal plant competition where Cocklebur (*Xanthium strumarium* L.) genus *Xanthium*, Asteraceae (Asteraceae) is known as the tree of many countries, such as North America, China, Japan, South Korea, India and Vietnam with many healing properties for humans. Cocklebur is the plant that grows very popular in Vietnam, often grows in wastelands, agriculturalist butter or interspersed with grasses . According to some previous studies, the chemical composition of plant *Xanthium strumarium* L. is known for xanthanolid, quinic acid derivatives and thiazindion rich biological activity. These are xanthanoid secquiterpen guaian derived carbon frame and attracted attention because they appear limited in the genus *Xanthium* and have effective against inflammation and cancer has been shown. The quinic acid are antioxidants and applied in food industrial, derivatives thiazindion's only natural substances contained thiazin detour for against cancer. There is little information about the chemical composition of all kinds of *Xanthium strumarium* L. of Vietnam, although parts of this plant were used as medicine in traditional medicine in Vietnam.

According Do Tat Loi Cocklebur fruit are male drug ingredients, remedies available in some Vietnamese traditional medicine. At Vietnam there are 2 types *Xanthium*, *Xanthium strumarium* L., and *Xanthium inaequilaterum* DC.; they are a popular species and wild everywhere. Particularly *Xanthium inaequilaterum* DC. mainly distributed in central Hue, Nha Trang, Tay Ninh

Plant samples collected after washed, sliced and dried in the shade, then dried at 50 °C.

The plant material is leaching with solvent methanol at room temperature and then is distributed selectively extracted into two liquid phase solvents and increasing polarity, *n*-hexane, dichloromethane and ethyl acetate.

Master Thesis “**Study on the xanthanoids and chemical composition of Cocklebur (*Xanthium strumarium* L., Asteraceae) grows in Ha Noi**” has made the study chromatographic isolation and identification of components available in leaves and branches of Cocklebur tree sprout in Hanoi and obtained the following main research results:

1. Has established rules to allocate the extraction of organic compounds from plant leaves and branches of Cocklebur tree (*Xanthium strumarium* L., Asteraceae) that grows in Hanoi, extracts polarization the population growth is *n*-hexane (**XSLH**, extracted the performance of 1.15 % compared to dry ingredients), dichloromethane (**XSLD**, 1.01%) and *n*-hexane extract broth (**XSCH**, 0.43%), dichloromethane (**XSCD**, 0, 34%).

2. Analyzed thin-layer chromatography (TLC) received the extract to determine the qualitative chromatographic this extract and the solvent systems suitable for parting the extract column chromatography.

3. Chromatographic techniques table of modulation 9 isolated compounds from *n*-hexane and dichloromethane extract from leaves and branches of Cocklebur tree (*Xanthium strumarium* L., Asteraceae) that grows in Hanoi .

4. Has identified the structure of the compounds were isolated by methods spectrum (ESI-MS, ¹H-NMR, ¹³C-NMR and DEPT). Isolated compounds are: 4-hexacosanoyl-2-oxacyclopentanone (**I**), β-sitosterol (**II**), betulin (**III**), 5α, 8α-epidioxy-(22*E*,24*R*)-6-*O*-22-dienergosta-3β-ol (**IV**), docosanoic acid (**V**), *N*-(1,3,4-trihydroxyheptadecyl)-2-hydroxypentadecanamide (**VIa**) and *N*-(1,3,4-trihydroxy-15*z*-heptacosen)-2-hydroxypentadecanamide (**VIb**), β-sitosterol 3-*O*-β-D-glucopyranoside (**VIIa**) and stigmasterol 3-*O*-β-D-glucopyranoside (**VIIb**) from where horse thistle leaves, 1-docosanol (**VIII**) and artemisidiol A (**IX**) where private horse farm thistle.

5. Compounds **I, III, IV, V, VIa, VIb** and **VIII** is the first to be isolated from *Xanthium strumarium* plants. According to the literature survey, **VIa** and **VIb** substances not described in publications. Xanthanol compounds may appear in low concentrations in plants of Cocklebur tree (*Xanthium strumarium* L., Asteraceae) on ladder 10 - 2012, therefore, not be isolated in this study.

12. Practical applicability:

The results of the thesis research will initially contribute to the construction of facilities for the modernization of traditional medicine, explain the therapeutic effects of tree top shelf horse, help stabilize the quality and performance treatment outcomes of an effective remedy ingredients from plants Cocklebur.

13. Further research directions:

Continue to identify the chemical structure of the compounds isolated

The large study modulation may be made to isolate the compound where horse thistle. For testing the biological activity *in vivo* as well as other clinical trials.

14. Thesis-related publications: No

Ha Noi, date: 17/04/2014

Signature:

Full name: Tran Thi Hien