

ĐẠI HỌC ĐÀ NẴNG
TRƯỜNG ĐẠI HỌC SƯ PHẠM

NGUYỄN QUANG TRUNG

NGHIÊN CỨU XÁC ĐỊNH THÀNH PHẦN HOÁ HỌC
VÀ ĐÁNH GIÁ HOẠT TÍNH CHỐNG OXY HOÁ
MỘT SỐ HỢP CHẤT CÓ TRONG MỘT SỐ LOÀI
CỦA CHI MƠ DÂY (*PAEDERIA L.*)
BẰNG PHƯƠNG PHÁP HOÁ TÍNH TOÁN

TÓM TẮT LUẬN ÁN TIẾN SĨ
HOÁ HỮU CƠ

Đà Nẵng – Năm 2025

Công trình được hoàn thành tại:

TRƯỜNG ĐẠI HỌC SƯ PHẠM

NGƯỜI HƯỚNG DẪN KHOA HỌC:

1. GS.TS. Đào Hùng Cường

2. TS. Võ Văn Quân

PHẢN BIỆN 1:.....

PHẢN BIỆN 2:.....

PHẢN BIỆN 3:.....

Luận án sẽ được bảo vệ trước Hội đồng đánh giá Luận án cấp Trường (Ngành Hóa hữu cơ) họp tại Trường Đại học Sư phạm vào ngày ...tháng ... năm 20...

Có thể tìm hiểu Luận án tại:

- Thư viện Quốc gia;
- Thư viện Trường Đại học Sư phạm – ĐHQĐHN.

MỞ ĐẦU

1. Đặt vấn đề

Chi Mơ dây (*Paederia* L.) là một chi thực vật có hoa trong họ cà phê (Rubiaceae), có khoảng 31 loài, đều là dây leo, phân bố chủ yếu ở vùng cận nhiệt đới, nhiệt đới châu Á, và Nam Mỹ. Ở Việt Nam, có 5 loài, trong đó cây Mơ tròn (*Paederia foetida*), Mơ lông (*Paederia lanuginosa*) và Mơ tam thể (*Paederia scandens*) là các loài phổ biến nhất. Từ xa xưa, trong dân gian đã sử dụng một số loài thuộc chi này để chữa một số loại bệnh theo phương pháp truyền thống.

Nhiều nghiên cứu đã công bố về thành phần hoá học, hoạt tính sinh học, dược lý của dịch chiết từ cây Mơ và giá trị của chúng trong y học, trong đó tập trung vào hai loài chủ yếu là Mơ tròn (*Paederia foetida*) và Mơ tam thể (*Paederia scandens*). Bên cạnh đó, một vài nghiên cứu cũng đã đánh giá hoạt tính sinh học của một số hợp chất được phân lập từ chi Mơ dây, đồng thời chỉ ra rằng, hoạt tính chúng có được thông qua cơ chế chống oxy hoá như khả năng chống ung thư kháng viêm, kháng khuẩn, bảo vệ tim mạch, bảo vệ thần kinh, bệnh đái tháo đường, viêm khớp... Tuy nhiên, chưa có các nghiên cứu đánh giá hoạt tính chống oxy hoá của các hợp chất có nguồn gốc từ chi Mơ dây, cơ chế phản ứng chống oxy hoá, cũng như mối liên hệ giữa cấu trúc và hoạt tính của các hợp chất này.

2. Mục tiêu nghiên cứu

– Chiết tách và định danh thành phần hoá học, thăm dò, thử nghiệm hoạt tính chống oxy hoá của một số cao chiết phân đoạn từ một số loài được chọn lọc của chi Mơ dây (*Paederia* L.);

– Phân lập, xác định cấu trúc của một số hợp chất hoá học từ bộ phận của một số loài được chọn lọc của chi Mơ dây (*Paederia* L.);

– Lựa chọn phương pháp tính toán hoạt tính chống oxy hoá phù

hợp đối với một số hợp chất có tiềm năng của chi Mơ dây (*Paederia* L.);

– Đánh giá hoạt tính chống oxy hóa của hợp chất chiết xuất từ một số loài được chọn lọc của chi Mơ dây (*Paederia* L.) bằng phương pháp hóa tính toán đã lựa chọn.

3. Nội dung chính của luận án

– Chiết tách, định danh một số thành phần hoá học của dịch chiết từ lá cây Mơ lông và Mơ tròn, thử nghiệm hoạt tính chống oxy hoá của một số phân đoạn dịch chiết;

– Phân lập và xác định cấu trúc hoá học một số hợp chất từ phân đoạn dịch chiết của lá cây Mơ lông và Mơ tròn;

– Khảo sát, lựa chọn phương pháp tính toán hoạt tính chống oxy hoá phù hợp cho một số hợp chất tiềm năng có trong cây Mơ lông, Mơ tròn và Mơ tam thể;

– Tính toán hoạt tính chống oxy hoá của một số hợp chất tiềm năng có trong cây Mơ lông, Mơ tròn, Mơ tam thể, hợp chất được phân lập bằng phương pháp hoá tính toán đã lựa chọn.

4. Những đóng góp mới của luận án

– Từ lá của cây Mơ lông (*Paederia lanuginosa*) đã phân lập được 10 hợp chất, trong đó, theo tra cứu tại thời điểm nghiên cứu:

+ **Ba hợp chất lần đầu tiên được phân lập từ chi Mơ dây (*Paederia* L.),** bao gồm 1-hexacosanol, phytol và quercitrin;

+ **Năm hợp chất lần đầu tiên được phân lập từ lá của cây Mơ lông** gồm β -sitosterol, stigmasterol, arachidic acid, rutin và linarin;

– Đã đánh giá độ chính xác của 17 phương pháp phiếm hàm mật độ (DFT), trong đó **đã lựa chọn được phương pháp M06-2X là phương pháp để tính toán hoạt tính chống oxy hoá của hợp chất có nhân thơm chứa liên kết X-H (X = C, N, O, S) với độ chính xác**

phù hợp và tiêu tốn tài nguyên tính toán hợp lý;

– Đã khảo sát hoạt tính chống oxy hoá của một số hợp chất từ chi Mơ dây (*Paederia* L.) bằng phương pháp hoá tính toán, bao gồm **một hợp chất cleomiscosin** (cleomiscosin B), **sáu hợp chất anthraquinone** (1,3-dihydroxy-2,4-dimethoxy-9,10-anthraquinone, 2-hydroxy-1,4-dimethoxy-9,10-anthraquinone, 1-methoxy-2-methoxymethyl-3-hydroxy-9,10-anthraquinone, 1-hydroxy-2-hydroxymethyl-9,10-anthraquinone, 1-methyl-2,4-dimethoxy-3-hydroxyanthraquinone, 1-methoxy-3-hydroxy-2-ethoxymethylanthraquinone), **hai hợp chất feruloylmonotropein** (6'-O-E-feruloylmonotropein, 10'-O-E-feruloylmonotropein) và **hai hợp chất flavonoid** (kaempferol, quercitrin)..

5. Cấu trúc của luận án

Luận án gồm 142 trang, trong đó có 42 bảng và 53 hình. Phần mở đầu 05 trang, kết luận và kiến nghị 02 trang, danh mục các công trình khoa học đã công bố 01 trang (06 công trình), tài liệu tham khảo 15 trang (240 tài liệu). Nội dung của luận án chia làm 04 chương:

Chương 1. Tổng quan tài liệu, 42 trang.

Chương 2. Đối tượng và phương pháp nghiên cứu, 08 trang.

Chương 3. Thực nghiệm, 06 trang.

Chương 4. Kết quả và thảo luận, 78 trang.

CHƯƠNG 1. TỔNG QUAN TÀI LIỆU

Phân tổng quan tài liệu trình bày các nghiên cứu trong nước và trên thế giới về các vấn đề:

1.1. Tổng quan về một số loài thực vật thuộc chi Mơ dây (*Paederia*) và công dụng làm thuốc trong dân gian

1.2. Tình hình nghiên cứu về thành phần hóa học và hoạt tính sinh học của một số loài thuộc chi Mơ dây (*Paederia*)

1.3. Nghiên cứu hoạt tính chống oxy hóa bằng phương pháp hóa tính toán

CHƯƠNG 2. ĐỐI TƯỢNG VÀ PHƯƠNG PHÁP NGHIÊN CỨU

2.1. Đối tượng nghiên cứu

– Đối tượng nghiên cứu về thành phần hoá học: cây Mơ lông (*Paederia lanuginosa*) và Mơ tròn (*Paederia foetida*) được thu hái tại các hộ gia đình ở khối phố Cầu Nhi Đông, phường Điện An, thị xã Điện Bàn, tỉnh Quảng Nam.

– Đối tượng nghiên cứu hoạt tính chống oxy hoá bằng phương pháp hoá tính toán: hợp chất phân lập được trong phạm vi luận án này và một số hợp chất khác có trong một số loài phổ biến thuộc chi Mơ dây (bao gồm cây Mơ lông (*Paederia lanuginosa*), Mơ tròn (*Paederia foetida*), Mơ tam thể (*Paederia scandens*)), với tiềm năng chống oxy hoá tốt.

2.2. Hóa chất, dụng cụ, thiết bị thí nghiệm và phần mềm tính toán

– Các hoá chất sử dụng trong phương pháp quang phổ hấp thụ nguyên tử xác định thành phần kim loại (dung dịch chuẩn kim loại Pb, Cd, As, Hg, Mg, Fe và Zn, 1000 mg/L, Merck), thử nghiệm hoạt tính bắt gốc tự do DPPH (L-ascorbic acid 99,7%, Fisher; 2,2-diphenyl-1-picrylhydrazyl 95%, Alfa Aesar), dung môi (methanol, hexane, EtOAc, Xilong Scientific Co., Ltd), bản mỏng (silica gel 60 F₂₅₄,

Merck; RP-18 F_{254S}, Merck), hạt nhỏ (Sephadex LH-20, Sigma-Aldrich; silicagel 60N, neutral, 40-50 μm , Kanto Chemical, Inc.; silicagel YMC RP-18 (30-50 μm , Fujisilisa, Chemical Ltd.), cột sắc ký dùng để chiết tách và tinh chế;

– Thiết bị quang phổ hấp thụ nguyên tử, thiết bị quang phổ UV-VIS-NIR, thiết bị đo phổ khối lượng phân giải cao, thiết bị đo phổ NMR;

– Phần mềm tính toán Gaussian 16 (Gaussian16 suite of programs) và một số phần mềm hỗ trợ khác.

2.3. Phương pháp nghiên cứu

2.3.1. Phương pháp chiết tách

Mẫu nguyên liệu vật được chiết theo phương pháp chiết rắn-lỏng và phương pháp chiết lỏng-lỏng.

2.3.2. Phương pháp định danh thành phần hoá học của dịch chiết phân đoạn

Các dịch chiết được định danh thành phần hoá học bằng phương pháp đo sắc ký khí ghép khối phổ (GC-MS).

2.3.3. Phương pháp thử nghiệm hoạt tính chống oxy hoá của cao chiết phân đoạn

Thử nghiệm hoạt tính bắt gốc tự do DPPH được tiến hành theo phương pháp của Kamkar và cộng sự với một số điều chỉnh.

2.3.4. Phương pháp phân lập hợp chất sạch

Kết hợp sắc ký lớp mỏng và sắc ký cột.

2.3.5. Phương pháp xác định cấu trúc hợp chất sạch

Kết hợp các phương pháp phổ gồm: Phổ khối lượng phân giải cao, phổ cộng hưởng từ hạt nhân một chiều (¹H-NMR, ¹³C-NMR, DEPT), phổ cộng hưởng từ hạt nhân hai chiều (HSQC, HMBC, COSY, NOESY), so sánh với các tài liệu tham khảo.

2.3.6. Phương pháp tính toán hoạt tính chống oxy hoá

- 17 phương pháp DFT và một số bộ hàm cơ sở phổ biến được khảo sát, lựa chọn phương pháp tính toán hoạt tính chống oxy hoá của các hợp chất tiềm năng từ chi Mơ dây với độ chính xác phù hợp và tiêu tốn tài nguyên hợp lý, dựa trên việc so sánh với dữ liệu thực nghiệm đã được công bố. Trên cơ sở phương pháp đã lựa chọn:

+ Đánh giá thông số nhiệt động học (BDE, IE, PA) để xác định cơ chế phản ứng bắt gốc tự do phù hợp của hợp chất được khảo nghiệm;

+ Tính toán động học phản ứng bắt gốc tự do, trong đó, hằng số tốc độ phản ứng (k) được tính toán sử dụng lý thuyết trạng thái chuyển tiếp (TST) và trạng thái tiêu chuẩn 1M, 298,15 K. Đối với phản ứng theo cơ chế SET, lý thuyết Marcus được sử dụng để tính toán hàng rào năng lượng hoạt hoá thông qua năng lượng tự do của phản ứng và năng lượng tái tổ hợp hạt nhân. Ngoài ra, một hệ số hiệu chỉnh áp dụng đối với hằng số tốc độ phản ứng lân cận với giới hạn khuếch tán, theo lý thuyết Collins–Kimball, được tính toán trong dung môi ở 298,15 K.

CHƯƠNG 3. THỰC NGHIỆM

3.1. Thu mẫu, xử lý nguyên liệu và định danh thực vật

Cây Mơ lông và Mơ tròn thu hái đầy đủ các bộ phận, được định danh bởi Ths. GVC. Nguyễn Việt Thắng (Khoa Sinh học, Trường Đại học Khoa học – Đại học Huế).

Lá Mơ lông sau khi thu hái được xử lý, loại bỏ tạp chất, rửa sạch, để ráo. Một phần nhỏ được sử dụng để thử nghiệm xác định thành phần một số kim loại, phần còn lại được sấy khô và tạo mẫu nguyên liệu, thu được nguyên liệu lá Mơ lông cho các nghiên cứu tiếp theo.

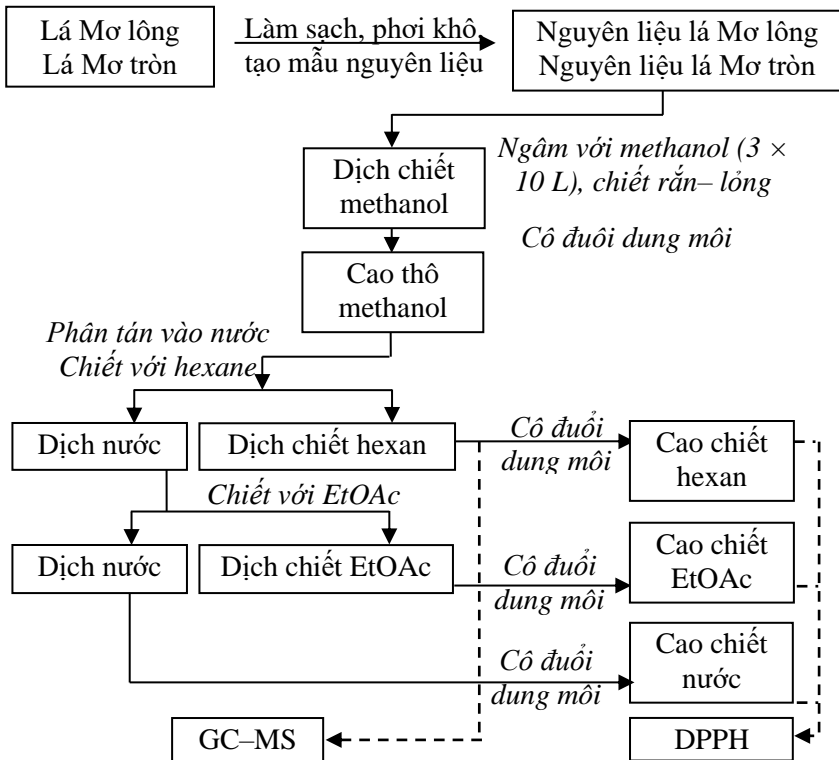
Lá Mơ tròn sau khi thu hái cũng được xử lý tương tự, thu được nguyên liệu lá Mơ tròn cho các nghiên cứu tiếp theo.

3.2. Xác định hàm lượng kim loại trong lá Mơ lông và lá Mơ tròn

Lá Mơ lông và lá Mơ tròn sau khi thu hái, loại bỏ tạp chất, rửa sạch và để ráo, tiến hành tro hoá và hoà tan bằng dung dịch HNO_3 , định mức đến thể tích phù hợp và xác định thành phần kim loại bằng phương pháp quang phổ hấp thụ nguyên tử.

3.3. Chiết mẫu thực vật và thử nghiệm hoạt tính chống oxy hoá của các cao chiết phân đoạn

Sơ đồ quá trình thu dịch chiết và cao chiết được trình bày trong **Hình 3.1**.

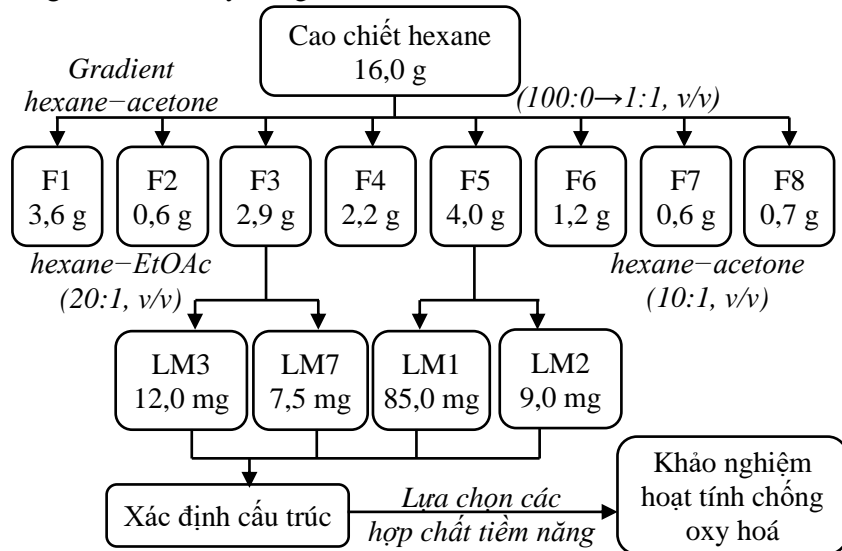


Hình 3.1. Sơ đồ thu dịch chiết và cao chiết

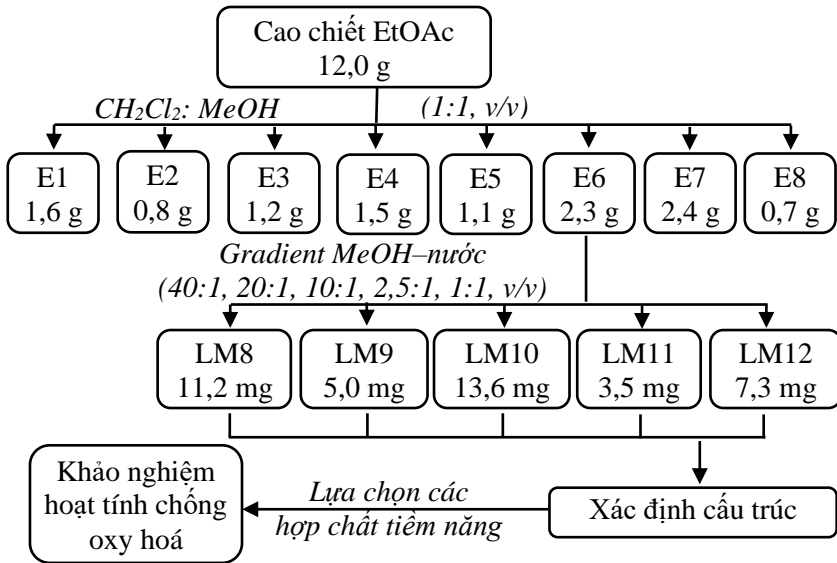
Quá trình chiết nguyên liệu lá Mơ lông bằng dung môi methanol thu được 45 g cao chiết thô. Sau đó cao chiết thô được chiết phân đoạn và loại bỏ dung môi, thu được cao chiết hexane (16,0 g), cao chiết EtOAc (12,0 g) và cao chiết nước (17,0 g) tương ứng. Tương tự, quá trình chiết mẫu nguyên liệu lá Mơ tròn bằng dung môi methanol thu được 51 g cao chiết thô. Sau đó cao chiết thô được chiết phân đoạn và loại bỏ dung môi, thu được cao chiết hexane (14,0 g), cao chiết EtOAc (18,0 g) và cao chiết nước (19,0 g) tương ứng. Các dịch chiết phân đoạn được trích một phần để định danh thành phần hoá học, một phần cao chiết phân đoạn được thử nghiệm hoạt tính bắt gốc tự do DPPH.

3.4. Phân lập hợp chất sạch từ cao chiết phân đoạn nguyên liệu lá Mơ lông

Sơ đồ phân lập hợp chất sạch từ cao chiết hexane và EtOAc lá Mơ lông được trình bày trong **Hình 3.2** và **Hình 3.3**.



Hình 3.2. Sơ đồ phân lập cao chiết hexane nguyên liệu lá Mơ Lông

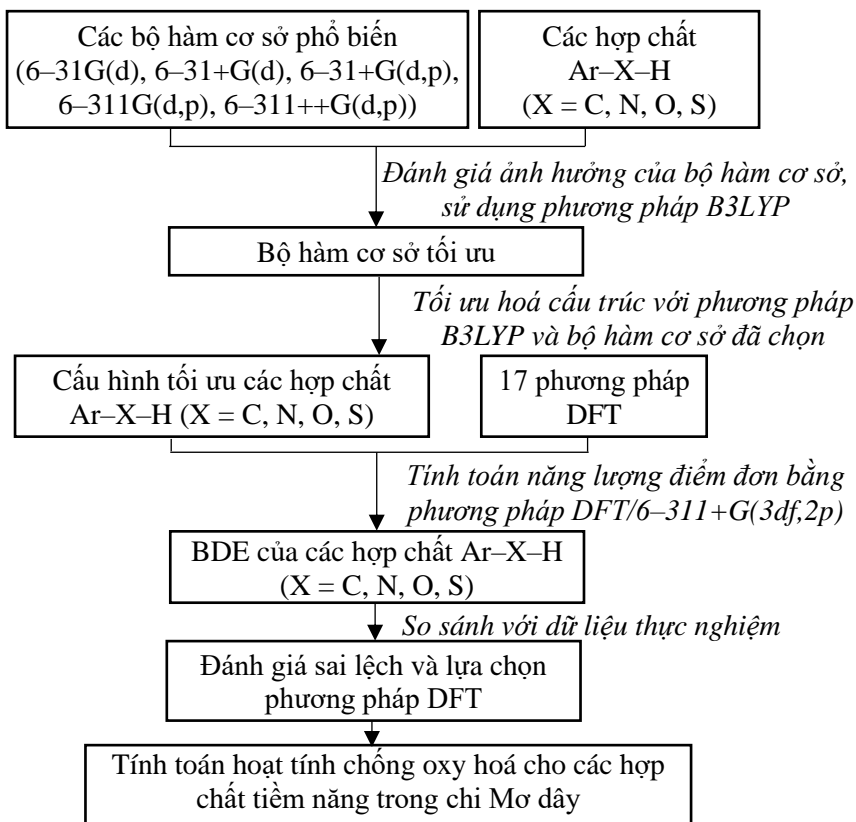


Hình 3.3. Sơ đồ phân lập cao chiết EtOAc nguyên liệu lá Mơ lông
3.5. Khảo nghiệm hoạt tính chống oxy hoá của một số hợp chất có trong chi Mơ dây bằng phương pháp hoá tính toán

Mô hình khảo sát lựa chọn phương pháp tính toán BDE liên kết X-H (X = C, N, O, S) của hợp chất có chứa vòng thơm (Ar-X-H) được trình bày trong **Hình 3.4**.

– 17 phương pháp DFT (M06–2X, M05–2X , M06 , M05, BMK , MPW1B95, B1B95, B98, B97–2, LC–wPBE, B3LYP, cam–B3LYP, B2PLYP, MPWB1K, BB1K, BB95, M08–HX) và một số bộ hàm cơ sở phổ biến ((6–31G(d), 6–31+G(d), 6–31+G(d,p), 6–311G(d,p), 6–311++G(d,p)) được khảo sát để đánh giá khả năng tính toán.

– Các hợp chất tiềm năng có nguồn gốc từ chi Mơ dây được lựa chọn để khảo nghiệm hoạt tính chống oxy hoá bao gồm ba hợp chất flavonoid (kaempferol, quercetin, quercitrin) có trong cây Mơ lông



Hình 3.4. . Sơ đồ khảo sát lựa chọn phương pháp tính toán BDE của các hợp chất Ar-X-H (X = C, N, O, S)

được phân lập trong luận án này, ba dẫn xuất phenolic acid (6'-*O-E*-feruloylmonotropein, 10'-*O-E*-feruloylmonotropein, cleomiscosin B) và sáu hợp chất anthraquinone (1,3-dihydroxy-2,4-dimethoxy-9,10-anthraquinone, 2-hydroxy-1,4-dimethoxy-9,10-anthraquinone, 1-methoxy-2-methoxymethyl-3-hydroxy-9,10-anthraquinone, 1-hydroxy-2-hydroxymethyl-9,10-anthraquinone, 1-methyl-2,4-dimethoxy-3-hydroxyanthraquinone, 1-methoxy-3-

hydroxy-2-ethoxymethylanthraquinone) phân lập từ cây Mơ tam thể. Ngoài ra một số hợp chất có cấu trúc tương tự như cleomiscosin A, cleomiscosin C cũng được lựa chọn để khảo nghiệm hoạt tính chống oxy hoá nhằm đánh giá mối quan hệ hoạt tính-cấu trúc của các hợp chất này.

CHƯƠNG 4. KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

4.1. Kết quả định danh thực vật

Mẫu cây Mơ lông (*Paederia lanuginosa* Wall.) và cây Mơ tròn (*Paederia foetida* L.) được định danh bởi Ths. GVC. Nguyễn Việt Thắng (Khoa Sinh học, Trường Đại học Khoa học-Đại học Huế)

4.2. Thành phần kim loại của lá Mơ lông và lá Mơ tròn

Hàm lượng kim loại trong lá Mơ lông và Mơ tròn nằm trong khoảng cho phép đối với thực phẩm theo QCVN 8-2:2011/BYT. Kết quả phân tích được trình bày trong **Bảng 4.1**.

Bảng 4.1. Kết quả xác định hàm lượng kim loại trong lá Mơ lông và lá Mơ tròn

Kim loại	Lá Mơ lông (mg/kg)	Lá Mơ tròn (mg/kg)	Hàm lượng cho phép (mg/kg) (*)
Pb	<0,02	<0,02	0,3
Cd	<0,02	<0,02	0,2
As	<0,02	<0,02	1,0
Hg	<0,02	<0,02	/
Fe	8,67	13,5	/
Zn	8,06	5,04	/
Mg	370	530	/

(*) QCVN 8-2:2011/BYT

4.3. Định danh một số thành phần hoá học của dịch chiết phân đoạn

4.3.1. Kết quả định danh một số thành phần hoá học trong dịch chiết phân đoạn nguyên liệu lá Mơ lông

Bằng phương pháp GC–MS đã định danh được 55 cấu tử trong các dịch chiết hexane, EtOAc và nước của nguyên liệu lá Mơ lông. Trong đó một số cấu tử có mặt trong cả hai hoặc ba dịch chiết như palmitic acid, stearic acid, phytol, methyl palmitate, methyl stearate, methyl linoleate, 2–methoxy–4–vinylphenol. Một số cấu tử có hàm lượng cao bao gồm methyl oleate (41,1%^b), phytol (22,1%^a), methyl linoleate (14,3%^b, 5,1%^a), vitamin E (13,9%^a), γ -sitosterol (11,9%^a), linolenic acid (7,3%^a), oleic acid (7,0%^b), methyl palmitate (6,7%^b), 5-hydroxymethylfurfural (6,4%^c), stigmaterol (5,7%^a), squalene (5,5%^a) và campesterol (4,6%^a).

Trong số các cấu tử đã được định danh, các hợp chất như palmitic acid, stearic acid, phytol, sitosterol, linolenic acid, oleic acid, stigmaterol, squalene, linalool, linoleic acid, terpineol và 9, 12, 15–octadecatrienoic acid, 2, 3–dihydroxypropyl ester, (Z, Z, Z) đã được công bố trước đó trong một số nghiên cứu về thành phần tinh dầu của cây Mơ tròn (*Paederia foetida*) và cây Mơ tam thể (*Paederia scandens*) bằng kỹ thuật GC–MS. Theo tra cứu tài liệu thì cho đến nay chưa có công bố về thành phần hoá học của lá Mơ lông (*Paederia lanuginosa*) được định danh bằng kỹ thuật này.

4.3.2. Kết quả định danh một số thành phần hoá học trong dịch chiết phân đoạn nguyên liệu lá Mơ tròn

Bằng phương pháp GC–MS đã định danh được 37 cấu tử trong các dịch chiết hexane, ethyl acetate và nước của nguyên liệu lá Mơ tròn. Trong đó một số cấu tử có mặt trong cả hai hoặc ba dịch chiết và có

hàm lượng cao như 9,12,15–Octadecatrienoic acid, (Z,Z,Z)–(17,718%^a), vitamin E (6,547%^b), 4H–Pyran–4–one, 2,3–dihydro–3,5–dihydroxy–6–methyl–(8,938%^c), campesterol (2,992%^a), neophytadiene (8,355%^b), palmitic acid (8,325%^a), oleic acid (0,345%^b), phytol (6,496%^a), squalene (3,942%^b), stigmasterol (4,364%^a), γ –sitosterol (7,612%^a).

Trong số các cấu tử đã được định danh, các hợp chất như n–hexadecanoic acid, oleic acid, phytol, squalene, stigmasterol, γ –sitosterol, 2–furanocarboxaldehyde, 5–methyl– là các hợp chất đã được công bố trước đó trong một số nghiên cứu về thành phần tinh dầu của cây Mơ tròn (*Paederia foetida*).

4.4. Hoạt tính chống oxy hoá của các cao chiết phân đoạn

Kết quả thử nghiệm hoạt tính bắt gốc tự do DPPH của các cao chiết phân đoạn và chất chuẩn đối chứng được trình bày trong **Bảng 4.4**.

Bảng 4.4. Hoạt tính bắt gốc tự do DPPH của các cao chiết phân đoạn

Cao chiết	IC_{50} ($\mu\text{g/mL}$)			
	Hexane	EtOAc	Nước	Ascorbic acid
Mơ lông	$7,36 \pm 0,15$	$14,09 \pm 0,17$	$37,93 \pm 0,46$	$2,67 \pm 0,026$
Mơ tròn	$19,83 \pm 0,27$	$2,95 \pm 0,07$	$104,1 \pm 6,7$	

Tất cả các cao chiết đều có giá trị IC_{50} cao hơn ascorbic acid. Trong đó, cao chiết EtOAc của lá Mơ tròn có hoạt tính chống oxy hoá tốt nhất với giá trị IC_{50} là 2,95 $\mu\text{g/mL}$, gần tương đương ascorbic acid (2,67 $\mu\text{g/mL}$). Đối với lá Mơ lông, cao chiết hexane có giá trị IC_{50} thấp hơn so với cao chiết EtOAc và cao chiết nước. Trong khi đó, cao chiết EtOAc của lá Mơ tròn có giá trị IC_{50} thấp hơn cao chiết hexane và cao chiết nước. Điều này phù hợp với kết quả định danh thành phần hoá học bằng kỹ thuật GC–MS các dịch chiết phân đoạn từ lá của hai loài cây này, với sự có mặt nhiều hơn cả về số lượng và hàm lượng của các

hợp chất có tiềm năng chống oxy hoá tốt.

4.5. Cấu trúc hoá học của các hợp chất sạch đã phân lập

4.5.1. Các hợp chất phân lập từ cao chiết hexane lá Mơ lông

a. Hỗn hợp β -sitosterol: stigmasterol (3:2) (LM1) (Hình 4.10)

Dữ liệu phổ NMR:

– δ_{H} (ppm) ($^1\text{H-NMR}$ CDCl_3 , 500 MHz): 5,35 (m, H-6); 3,52 (m, H-3); 5,16 (dd, $J = 15,0; 8,4$ Hz, H-22); 5,02 (dd, $J = 15,0; 9,0$ Hz, H-23); 1,03 (s, H-21) và δ_{H} 1,02 (s, H-26) (stigmasterol); 0,92 (s, H-21) và 0,83 (s, H-26) (β -sitosterol); 1,01 (s, H-19); 0,85 (s, H-18); 0,84 (s, H-27);

– δ_{C} (ppm) ($^{13}\text{C-NMR}$ CDCl_3 , 125 MHz): 140,8 (C-5); 121,7 (C-6); 71,8 (C-3); 138,3 (C-22); 129,3 (C-23); 56,9–11,9 (C-1; C-2; C-4; C-7 ÷ C-21; C-24 ÷ C-29).

b. Hợp chất Arachidic acid (LM2) (Hình 4.11)

Dữ liệu phổ NMR:

– δ_{H} (ppm) ($^1\text{H-NMR}$ CDCl_3 , 500 MHz): 2,35 (2H, t, $J = 7,2$ Hz, H-2); 1,62 (2H, m, H-3–4); 0,88 (3H, t, $J = 7,2$ Hz, H-20); 1,25 (H-5 ÷ H-19);

– δ_{C} (ppm) ($^{13}\text{C-NMR}$ CDCl_3 , 125 MHz): 178,0 (C-1); 14,1–33,7 (C2–C20)

c. Hợp chất 1-hexacosanol (LM3) (Hình 4.12)

Dữ liệu phổ NMR:

– δ_{H} (ppm) ($^1\text{H-NMR}$ CDCl_3 , 500 MHz): 3,64 (2H, t, $J = 6,6$, H-1); 0,88 (3H, t, $J = 7,2$ Hz, H-26); 1,25 và 1,56 (H-2 ÷ H-25);

– δ_{C} (ppm) ($^{13}\text{C-NMR}$ CDCl_3 , 125 MHz): 63,1 (C-1); 32,9 (C-2); 14,1 (C-26); 22,7–31,9 (C-3 ÷ C-25).

d. Hợp chất (E)-Phytol (LM7) (Hình 4.13)

Dữ liệu phổ NMR:

– δ_{H} (ppm) ($^1\text{H-NMR}$ CDCl_3 , 500 MHz): 5,41 (qt, $J = 7,2$; 1,2 Hz, H-2); 4,15 (d, $J = 7,2$ Hz, H-1); 2,00 (H-4); 1,67 (s, H-20); 1,52 (H-15); 0,86–0,88 (H₃-16 ÷ H₃-19);

– δ_{C} (ppm) ($^{13}\text{C-NMR}$ CDCl_3 , 125 MHz): 123,1 (C-2); 140,3 (C-3); 59,4 (C-1); 16,2–39,9 (C-4 ÷ C-20).

4.5.2. Các hợp chất phân lập từ cao chiết EtOAC lá Mơ lông

a. Kaempferol (LM8) (Hình 4.14)

Dữ liệu phổ NMR:

– δ_{H} (ppm) ($^1\text{H-NMR}$ CDCl_3 , 500 MHz): 6,93 (dd, $^3J_{\text{H-H}} = 9,0$, $^4J_{\text{H-H}} = 1,8$, H-2'/H-6'); 8,04 (dd, $^3J_{\text{H-H}} = 9,0$, $^4J_{\text{H-H}} = 1,8$ Hz, H-3'/H-5'); 6,19 (d, $^4J_{\text{H-H}} = 2,4$ Hz, H-6) và 6,44 (d, $^4J_{\text{H-H}} = 1,8$ Hz, H-8);

– δ_{C} (ppm) ($^{13}\text{C-NMR}$ CDCl_3 , 125 MHz): 175,9 (C-4); 146,8 (C-2); 160,7 (C-9); 135,6 (C-3); 156,1 (C-5); 163,9 (C-7); 159,2 (C-4').

b. Quercitrin (LM9) (Hình 4.15)

Dữ liệu phổ NMR:

– δ_{H} (ppm) ($^1\text{H-NMR}$ CDCl_3 , 500 MHz): 6,87 (1H, d, $^3J_{\text{H-H}} = 8,4$ Hz, H-5'); 7,25 (1H, dd, $^3J_{\text{H-H}} = 8,4$, $^4J_{\text{H-H}} = 2,4$ Hz, H-6'); 7,30 (1H, d, $^3J_{\text{H-H}} = 2,4$ Hz, H-2'); 6,20 (1H, d, $^4J_{\text{H-H}} = 2,4$ Hz, H-6); 6,39 (1H, d, $^4J_{\text{H-H}} = 2,4$ Hz, H-8); 12,65 (1H, s, H-5O); 0,82 (3H, d, $^3J_{\text{H-H}} = 6,0$ Hz, H-6'');

– δ_{C} (ppm) ($^{13}\text{C-NMR}$ CDCl_3 , 125 MHz): 177,7 (C-4); 104,0 (C-10); 120,7 (C-1'), 145,2 (C-3'); 148,4 (C-4'), 93,6 (C-8); 98,6 (C-6); 115,4 (C-2'); 115,6 (C-5'); 121,1 (C-6'); 17,4 (C-6''); 70,0 (C-5''); 70,3 (C-3''); 70,5 (C-2''); 71,1 (C-4''); 101,8 (C-1'').

c. Quercetin (LM10) (Hình 4.16)

Dữ liệu phổ NMR:

– δ_{H} (ppm) ($^1\text{H-NMR}$ CDCl_3 , 500 MHz): 6,19 (d, $^4J_{\text{H-H}} = 1,8$ Hz); δ_{H} 6,41 (d, $^4J_{\text{H-H}} = 1,8$ Hz); 6,89 (d, $^3J_{\text{H-H}} = 9,0$ Hz); 7,54 (dd, $^3J_{\text{H-H}} = 8,4$, $^4J_{\text{H-H}} = 1,8$ Hz); 7,68 (d, $^4J_{\text{H-H}} = 2,4$ Hz); 10,75 (s_{br}, 7-OH); 12,45 (s, 5-OH); 9,27 (s, 3'-OH); 9,32 (s, 4'-OH);

– δ_{C} (ppm) ($^{13}\text{C-NMR}$ CDCl_3 , 125 MHz): 175,8 (C-4); 135,7 (C-3); 156,1 (C-5); 163,8 (C-7); 146,8 (C-3'); 147,7 (C-4').

d. Rutin (LM11) (Hình 4.18)

Dữ liệu phổ NMR:

– δ_{H} (ppm) ($^1\text{H-NMR}$ CDCl_3 , 500 MHz): 6,84 (1H, d, $J = 7,8$ Hz, H-5'); 7,54 (1H, dd, $J = 7,8$; 1,8 Hz, H-6'); 6,19 (1H, d, $J = 1,8$ Hz, H-6); 6,38 (1H, d, $J = 2,4$ Hz, H-8); 7,53 (1H, d, $J = 2,4$ Hz, H-2'); 12,59 (1H, s, 5-OH); 4,39 (1H, d, $J = 1,2$ Hz, H-1'''); 5,34 (1H, d, $J = 7,2$ Hz, H-1''); 1,0 (3H, d, $J = 6,0$ Hz, H-6''');

– δ_{C} (ppm) ($^{13}\text{C-NMR}$ CDCl_3 , 125 MHz): 177,3 (C-4); 156,6 (C-2); 133,3 (C-3); 161,2 (C-5); 164,0 (C-7); 156,4 (C-9); 144,7 (C-3'); 148,4 (C-4'); 103,9 (C-10); 121,6 (C-1'); 93,5 (C-8); 98,6 (C-6); 115,2 (C-2'); 116,2 (C-5'); 121,1 (C-6').

e. Linarin (LM12) (Hình 4.20)

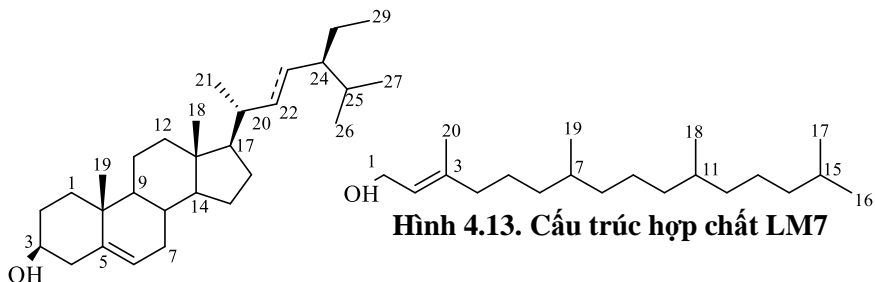
Dữ liệu phổ NMR:

– δ_{H} (ppm) ($^1\text{H-NMR}$ CDCl_3 , 500 MHz): 6,46 (1H, d, $J = 2,4$ Hz, H-6); 6,79 (1H, d, $J = 1,8$ Hz, H-8); 6,94 (1H, s, H-3); 8,05 (2H, d, $J = 9,0$ Hz, H-2'/H-6'); 7,15 (2H, d, $J = 9,0$ Hz, H-3'/H-5'); 3,87 (3H, s, 4'-OCH₃); 5,06 (1H, d, $J = 7,2$ Hz, H-1''); 4,57 (1H, s, H-1'''); 1,09 (3H, d, $J = 6,6$ Hz, H-6''');

– δ_{C} (ppm) ($^{13}\text{C-NMR}$ CDCl_3 , 125 MHz): 182,0 (C-4); 163,9 (C-2); 161,1 (C-5), 162,4 (C-7); 157,0 (C-9); 162,9 (C-4'); 105,4 (C-10); 122,7 (C-1'); 94,8 (C-8); 99,9 (C-6); 103,8 (C-3); 128,4 (C-2'/C-6'); 114,7 (C-3'/5'); 99,6 (C-1''); 73,1 (C-2''); 76,2 (C-3''), 69,6 (C-4''),

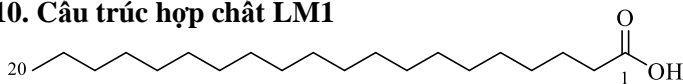
75,7 (C-5''), 66,1 (C-6''); 100,5 (C-1'''); 70,3 (C-2'''); 70,7 (C-3'''); 72,0 (C-4'''); 68,3 (C-5'''); 17,8 (C-6''').

Như vậy, từ cao chiết n-hexane và EtOAc của lá Mỡ lông đã phân lập được 10 hợp chất sạch, trong đó có ba hợp chất lần đầu tiên được phân lập từ chi Mỡ dây (*Paederia*), bao gồm 1-hexacosanol, phytol và quercitrin, bốn hợp chất lần đầu tiên được phân lập từ lá của cây Mỡ lông gồm β -sitosterol, stigmasterol, rutin và linarin, hai hợp chất khác là kaempferol và quercetin đã được phân lập từ lá cây Mỡ lông trong các công trình nghiên cứu trước đây.

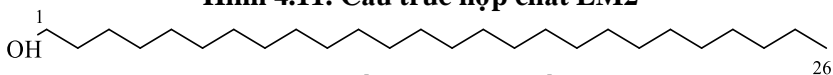


Hình 4.13. Cấu trúc hợp chất LM7

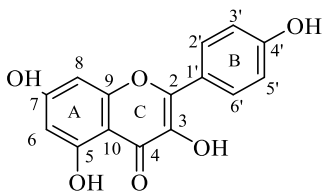
Hình 4.10. Cấu trúc hợp chất LM1



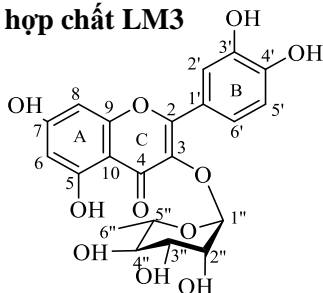
Hình 4.11. Cấu trúc hợp chất LM2



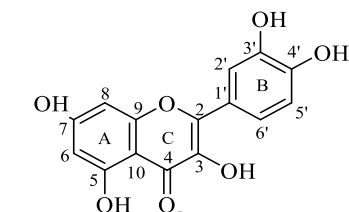
Hình 4.12. Cấu trúc hợp chất LM3



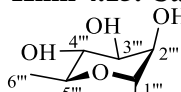
Hình 4.13. Cấu trúc hợp chất LM8



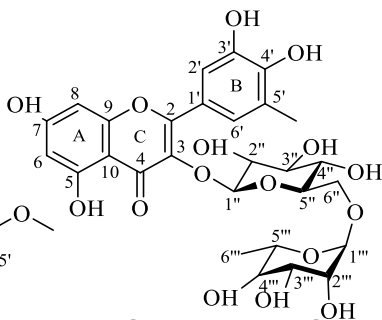
Hình 4.14. Cấu trúc hợp chất LM9



Hình 4.15. Cấu trúc hợp chất LM10



Hình 4.19. Cấu trúc hợp chất LM12



Hình 4.17. Cấu trúc hợp chất LM11

4.6. Đánh giá hoạt tính chống oxy hoá của một số hợp chất tiềm năng có trong chi Mỡ dây bằng phương pháp hoá tính toán

4.6.1. Khảo sát lựa chọn phương pháp DFT để tính toán nhiệt động học của các hợp chất có nhân thơm chứa liên kết X-H (X = C, N, O, S)

a. Khảo sát ảnh hưởng của bộ hàm cơ sở (basis set)

Kết quả khảo sát cho thấy, việc tối ưu hoá cấu trúc sử dụng các bộ hàm cơ sở lớn không mang lại kết quả khác biệt nhiều so với bộ hàm cơ sở nhỏ, và mặc dù không so sánh với dữ liệu thực nghiệm, có thể nhận thấy rằng việc này cũng không cải thiện nhiều về độ chính xác của kết quả tính toán (độ chệch lệch từ 0,1–0,3 %). Như vậy, trong trường hợp tính toán với các phân tử lớn thì việc giảm độ lớn của bộ hàm cơ sở sẽ mang lại kết quả tính toán BDE tốt với thời gian tính toán hợp lý. Vì vậy, các tính toán tiếp theo sử dụng mô hình tính toán với bộ hàm cơ sở nhỏ nhất (DFT/6–311+G(3df,2p)// B3LYP/6–

31G(d)) để đánh giá độ chính xác của các phương pháp khi sử dụng tính toán giá trị BDE các liên kết C–H, N–H, O–H, S–H của hợp chất có chứa vòng thơm, trên cơ sở so sánh với giá trị thực nghiệm.

b. Tính toán giá trị BDE của các liên kết C–H

c. Tính toán giá trị BDE của các liên kết N–H

d. Tính toán giá trị BDE của các liên kết O–H

e. Tính toán giá trị BDE của các liên kết S–H

f. Sai số trung bình

Để đánh giá tổng quát độ chính xác và hiệu quả tính toán của các phương pháp được khảo sát, giá trị trung bình của MUE và MaxAE của mỗi phương pháp khi tính toán giá trị BDE các liên kết C–H, N–H, O–H và S–H của hợp chất Ar–X–H được trình bày trong **Bảng 4.18**.

Bảng 4.18. Sai số tuyệt đối trung bình (kcal/mol) và sai số tương đối trung bình (%) của giá trị BDE các liên kết so với giá trị thực nghiệm

Phương pháp	Giá trị tuyệt đối		Giá trị tương đối	
	MUE ^a	MaxAE ^b	MUE ^a	MaxAE ^b
M06–2X	1,2	3,7	1,4	4,5
M05–2X	1,4	3,7	1,6	4,6
M06	3,2	5,5	3,7	6,2
M05	4,6	7,0	5,4	8,1
BMK	2,3	4,4	2,7	5,0
MPW1B95	2,7	5,8	3,2	6,6
B1B95	3,2	6,2	3,9	7,0
B98	4,3	6,8	5,1	7,6
B97–2	4,7	7,2	5,6	8,1
LC– ω PBE	3,3	5,9	3,9	6,7
B3LYP	4,3	6,8	5,0	7,6
cam–B3LYP	2,5	4,9	2,9	5,6
B2PLYP	8,2	10,6	9,8	12,2
MPWB1K	2,2	5,3	2,6	6,0

BB1K	2,5	5,6	3,0	6,3
BB95	5,5	8,2	6,5	9,1
M08-HX	1,5	4,1	1,7	5,3

^a MUE (mean unsigned error) = sai số tuyệt đối trung bình;

^b MaxAE = sai số tuyệt đối lớn nhất.

Kết quả tổng hợp cho thấy, phương pháp M06-2X, M05-2X, và M08-HX có độ chính xác cao hơn các phương pháp được khảo sát khác. Trong đó, M06-2X là cho độ chính xác tốt nhất với sai số tuyệt đối và tương đối thấp nhất. Phương pháp M05-2X và M08-HX cũng có độ chính xác tốt, tuy nhiên giá trị MUE và MaxAE cao hơn một chút so với phương pháp M06-2X. Tất cả các phương pháp được khảo sát còn lại đều có sai số khi tính toán giá trị BDE lớn hơn so với phương pháp Minnesota. Vì vậy, trên cơ sở các dữ liệu thu được, có thể kết luận rằng các phương pháp M06-2X, M05-2X và M08-HX là các phương pháp chính xác và hiệu quả để tính toán giá trị BDE cho liên kết X-H của hợp chất Ar-X-H (X = C, N, O, S).

Từ kết quả khảo sát này, chúng tôi lựa chọn phương pháp M06-2X để tính toán hoạt tính chống oxy hoá các hợp chất tiềm năng từ chi Mơ dây, bao gồm ba hợp chất flavonoid, năm dẫn xuất phenolic acid và sáu hợp chất anthraquinone.

4.6.2. Khả năng chống oxy hoá của các hợp chất cleomiscosin

4.6.3. Khả năng chống oxy hoá của các hợp chất anthraquinone

4.6.4. Khả năng chống oxy hoá của các hợp chất feruloylmonotropein

4.6.5. Khả năng chống oxy hoá của một số flavonoid (FLV) phân lập từ dịch chiết lá Mơ lông trong môi trường nước ở pH 7,4

Các hợp chất tiềm năng được khảo nghiệm hoạt tính chống oxy hoá bằng mô hình tính toán đã lựa chọn, kết quả tính toán được tổng hợp trong **Bảng 4.38**.

Bảng 4.38. Tổng hợp hoạt tính bắt gốc tự do HOO[•] của một số hợp chất có trong chi Mơ dây

Nhóm	Hợp chất	Môi trường	k _{overall} (M ⁻¹ s ⁻¹)	Cơ chế chính	Vai trò
Glycoside	Feruloyl mono tropein	Khí	$2,59 \times 10^2 - 5,30 \times 10^3$	FHT	H ₂ A
		Pentyl ethanoate	24,0–25,5	FHT	H ₂ A
		Nước	$9,45 \times 10^6 - 3,66 \times 10^7$	SET	A ²⁻
Dẫn xuất phenolic	Cleomis cosin	Khí	$7,52 \times 10^2 - 6,28 \times 10^4$	FHT	H ₂ A
		Pentyl ethanoate	$3,47 \times 10^2 - 6,44 \times 10^4$	FHT	H ₂ A
		Nước	$4,03 \times 10^7 - 8,66 \times 10^7$	SET	HA ⁻
	Flavonoid	Nước	$1,4 \times 10^6 - 8,0 \times 10^6$	SET	A ²⁻
Anthra quinone	Anthra quinone	Khí	3,1–66,3	FHT	H ₂ A
		Nước	$5,56 \times 10^{-3} - 8,95 \times 10^1$ ($3,42 \times 10^6 - 3,70 \times 10^8$) [*]	SET	HA ⁻ (H ₂ A) [*]

H₂A: Phân tử trung hoà, HA⁻: anion, A²⁻: dianion

(*) Hằng số tốc độ phản ứng bắt gốc tự do O₂⁻

Từ kết quả khảo nghiệm có thể nhận thấy, các hợp chất có trong chi Mơ dây là hợp chất chống oxy hoá yếu trong môi trường không phân cực (pha khí, pentyl ethanoate), trong đó, cơ chế bắt gốc tự do chủ đạo trong môi trường này là cơ chế FHT. Ngược lại, các hợp chất này có hoạt tính chống oxy hoá tiềm năng trong môi trường phân cực (môi trường nước, pH 7,4). Kết quả cho thấy, hoạt tính bắt gốc tự do HOO[•] của các hợp chất feruloyl monotropein, cleomiscosin và

flavonoid nằm trong khoảng từ $1,4 \times 10^6 \text{ M}^{-1} \text{ s}^{-1}$ đến $8,66 \times 10^7 \text{ M}^{-1} \text{ s}^{-1}$, cao hơn khoảng 10^1 – 10^3 lần so với hợp chất chống oxy hoá phổ biến như Trolox ($k = 1,30 \times 10^5 \text{ M}^{-1} \text{ s}^{-1}$) [192], gần tương đương với ascorbic acid ($k = 9,97 \times 10^7 \text{ M}^{-1} \text{ s}^{-1}$) [76] và resveratrol ($k = 5,62 \times 10^7 \text{ M}^{-1} \text{ s}^{-1}$) [48, 97]. Trong khi đó, hoạt tính bắt gốc tự do $\text{O}_2^{\cdot-}$ của các hợp chất anthraquinone nằm trong khoảng từ $3,42 \times 10^6 \text{ M}^{-1} \text{ s}^{-1}$ đến $3,70 \times 10^8 \text{ M}^{-1} \text{ s}^{-1}$, cao hơn nhiều lần so với các hợp chất chống oxy hoá phổ biến như ascorbic acid và quercetin (k nằm trong khoảng từ $0,1 \times 10^3 \text{ M}^{-1} \text{ s}^{-1}$ đến $3,0 \times 10^3 \text{ M}^{-1} \text{ s}^{-1}$) [129]. Đồng thời, cơ chế bắt gốc tự do HOO^{\cdot} trong môi trường phân cực xảy ra chủ yếu theo cơ chế SET, trong đó các dạng phân ly (anion, dianion) của các hợp chất có vai trò đóng góp chính đối với hoạt tính chống oxy hoá của các hợp chất này.

KẾT LUẬN

Thực hiện nghiên cứu đề tài luận án, chúng tôi đã hoàn thành được các mục tiêu và nội dung nghiên cứu theo đề cương của đề tài, bao gồm nghiên cứu thành phần hoá học của một số loài thuộc chi Mơ dây và đánh giá hoạt tính chống oxy hoá bằng phương pháp hoá tính toán một số hợp chất có trong chi này.

1. Về thành phần hoá học và hoạt tính chống oxy hoá của các cao chiết từ lá một số loài thuộc chi Mơ dây:

1.1. Các cao chiết từ lá Mơ lông và Mơ tròn thể hiện hoạt tính bắt gốc tự do DPPH khá tốt, trong đó cao chiết EtOAC của lá Mơ tròn có giá trị IC_{50} là $2,95 \mu\text{g/mL}$, thấp nhất trong số các cao chiết, gần tương đương với ascorbic acid ($2,67 \mu\text{g/mL}$).

1.2. Bằng kỹ thuật GC-MS đã định danh được nhiều hợp chất có hoạt tính sinh học, được lý có giá trị, trong đó bao gồm 55 hợp chất đã được xác định từ các dịch chiết lá Mơ lông và 37 hợp chất đã được xác

định từ dịch chiết lá Mơ tròn.

1.3. Từ cao chiết hexane và EtOAc của lá Mơ lông đã phân lập được 10 hợp chất sạch, trong đó có ba hợp chất lần đầu tiên được phân lập từ chi Mơ dây (*Paederia* L.), bao gồm 1-hexacosanol, phytol và quercitrin, bốn hợp chất lần đầu tiên được phân lập từ lá của cây Mơ lông gồm β -sitosterol, stigmasterol, rutin và linarin, hai hợp chất khác là kaempferol và quercetin đã được phân lập từ lá cây Mơ lông trong các công trình nghiên cứu trước đây.

2. Về hoạt tính chống oxy hoá của một số hợp chất tiềm năng có trong chi Mơ dây đánh giá bằng phương pháp hoá tính toán:

2.1. Phương pháp M06-2X là phương pháp DFT được lựa chọn trong số 17 phương pháp được khảo sát để tính toán chống oxy hoá của các hợp chất có trong chi Mơ dây. Hợp chất được đánh giá bao gồm các hợp chất cleomiscosin (cleomiscosin A, cleomiscosin B, cleomiscosin C), anthraquinone (1,3-dihydroxy-2,4-dimethoxy-9,10-anthraquinone, 2-hydroxy-1,4-dimethoxy-9,10-anthraquinone, 1-methoxy-2-methoxymethyl-3-hydroxy-9,10-anthraquinone, 1-hydroxy-2-hydroxymethyl-9,10-anthraquinone, 1-methyl-2,4-dimethoxy-3-hydroxyanthraquinone, 1-methoxy-3-hydroxy-2-ethoxymethylanthraquinone), feruloyl monotropein (6'-*O-E*-feruloylmonotropein, 10'-*O-E*-feruloylmonotropein) và flavonoid (kaempferol, quercetin, quercitrin).

2.2. Kết quả cho thấy các hợp chất được đánh giá thể hiện hoạt tính chống oxy hoá rất tốt trong môi trường phân cực khi so sánh với một số hợp chất chống oxy hoá điển hình như Trolox, ascorbic acid và resveratrol. Cụ thể, hằng số tốc độ phản ứng bắt gốc tự do HOO^\bullet của các hợp chất feruloyl monotropein, cleomiscosin và flavonoid nằm trong khoảng từ $1,4 \times 10^6 \text{ M}^{-1} \text{ s}^{-1}$ đến $8,66 \times 10^7 \text{ M}^{-1} \text{ s}^{-1}$, trong khi đó,

hằng số tốc độ phản ứng bắt gốc tự do $O_2^{\bullet-}$ của các hợp chất anthraquinone nằm trong khoảng $3,42 \times 10^6 M^{-1} s^{-1}$ đến $3,70 \times 10^8 M^{-1} s^{-1}$.

2.3. Hoạt tính chống oxy hoá của các hợp chất đánh giá được đóng góp chủ yếu bởi các dạng phân ly anion, dianion của chúng với cơ chế phản ứng bắt gốc tự do chủ đạo là cơ chế SET, trong đó vai trò chính thuộc về các nhóm chức $-OH$ liên kết trực tiếp với vòng thơm của các hợp chất này.

Bên cạnh các kết quả đã đạt được, luận án vẫn còn có một số hạn chế như chưa phân lập được hết các phân đoạn dịch chiết và đánh giá hoạt tính chống oxy hoá của các phân đoạn này.

KIẾN NGHỊ

Từ kết quả phân lập và khảo nghiệm hoạt tính chống oxy hoá của một số hợp chất của một số loài thuộc chi Mơ dây tại Quảng Nam, Việt Nam, chúng tôi kiến nghị:

- Tiếp tục khảo sát, phân lập nhằm tìm kiếm các hợp chất mới, các hợp chất có tiềm năng chống oxy hoá tốt từ các phân đoạn dịch chiết khác của lá Mơ lông và Mơ tròn;

- Tiếp tục khảo nghiệm hoạt tính chống oxy hoá của các hợp chất khác thuộc các nhóm hợp chất có tiềm năng chống oxy hoá tốt có nguồn gốc từ chi Mơ dây, đặc biệt là các hợp chất có chứa vòng thơm như các hợp chất flavonoid glycoside, dẫn xuất phenolic, terpenoid.

DANH MỤC CÁC CÔNG TRÌNH KHOA HỌC ĐÃ CÔNG BỐ

[1] **Nguyen Quang Trung**, Nguyen Minh Thong, Dao Hung Cuong, Tran Duc Manh, Loc Phuoc Hoang, Nguyen Khoa Hien, Pham Cam Nam, Duong Tuan Quang (2021), "Radical scavenging activity of natural anthraquinones: A theoretical insight." *ACS omega*, 6.20, 13391-13397. (<https://pubs.acs.org/doi/full/10.1021/acsomega.1c01448>)

[2] **Nguyen Quang Trung**, Adam Mechler, Nguyen Thi Hoa, Quan V. Vo (2022), "Calculating bond dissociation energies of X–H (X= C, N, O, S) bonds of aromatic systems via density functional theory: a detailed comparison of methods." *Royal Society Open Science* 9.6, 220177. (<https://royalsocietypublishing.org/doi/full/10.1098/rsos.220177>)

[3] **Nguyen Quang Trung**, Nguyen Thi Thu Thanh, Nguyen Thi Hoa, Adam Mechler, Quan V. Vo (2023), "Feruloylmonotropeins: promising natural antioxidants in *Paederia scandens*." *RSC advances* 13.9, 6153-6159. (<https://pubs.rsc.org/en/content/articlehtml/2023/ra/d3ra00458a>)

[4] **Nguyen Quang Trung**, Adam Mechler, Quan V. Vo (2024), "Computational assessment of the radical scavenging activity of cleomiscosins." *RSC advances*, 2024,14, 23629-23637 (<https://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2024/ra/d4ra03260h>)

[5] **Nguyễn Quang Trung**, Đào Hùng Cường, Võ Văn Quân (2022), "Nghiên cứu thành phần hoá học của lá cây Mơ lông (*Paederia lanuginosa*) thu hái tại Quảng Nam, Việt Nam." *Tạp chí Hoá học và ứng dụng*, 268-276

[6] **Nguyen Quang Trung**, Dao Hung Cuong, Vo Van Quan (2023) "Structure and antioxidant ability of flavonoids from leaves of

Paederia lanuginosa from Quangnam, Vietnam." *The University of Danang - Journal of science and technology*, 124-135. (<https://jst-ud.vn/jst-ud/article/view/8495>)