

## TRANG THÔNG TIN LUẬN ÁN TIẾN SĨ

**Tên luận án:** 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.

**Ngành:** Hóa hữu cơ

**Mã số:** 9440114

**Nghiên cứu sinh:** Nguyễn Quang Trung

**Người hướng dẫn khoa học:**

1. GS.TS. Đào Hùng Cường

2. TS. Võ Văn Quân

**Cơ sở đào tạo:** Trường Đại học Sư phạm – Đại học Đà Nẵng

**Tóm tắt:** Hai loài cây thuộc chi **Mơ dây** (*Paederia*) trên địa bàn tỉnh Quảng Nam, Việt Nam được thu thập, định danh thực vật học và xác định là cây **Mơ lông** (*Paederia lanuginosa*) và **Mơ tròn** (*Paederia foetida*). Các cao chiết từ lá của hai loài này thể hiện hoạt tính bắt gốc tự do DPPH khá tốt, với giá trị  $IC_{50}$  từ 2,95  $\mu\text{g/mL}$  – 104  $\mu\text{g/mL}$ . Trong đó cao chiết EtOAC của lá Mơ tròn có giá trị  $IC_{50}$  thấp nhất, gần tương đương với ascorbic acid (2,67  $\mu\text{g/mL}$ ). Một số thành phần hoá học đã được định danh bằng kỹ thuật GC-MS, với 55 hợp chất đã được xác định từ các dịch chiết lá Mơ lông, 37 hợp chất đã được xác định từ dịch chiết lá Mơ tròn, trong đó có mặt nhiều hợp chất với hoạt tính sinh học, được lý quan trọng như palmitic acid, phytol, vitamin E, oleic acid, linolenic acid, squalene, neophytadiene, campesterol, stigmasterol,  $\beta$ -sitosterol,  $\gamma$ -sitosterol. Đồng thời, từ cao chiết lá Mơ lông đã phân lập được 10 hợp chất, trong đó, theo tra cứu tại thời điểm nghiên cứu, 03 hợp chất lần đầu tiên được phân lập từ chi Mơ dây (*Paederia* L.), bao gồm 1-hexacosanol, phytol và quercitrin, 05 hợp chất lần đầu tiên được phân lập từ lá của cây Mơ lông gồm  $\beta$ -sitosterol, stigmasterol, arachidic acid, rutin và linarin, 02 hợp chất khác là kaempferol và quercetin đã được phân lập từ lá của loài cây này trong một công trình nghiên cứu trước đây.

Cũng trong luận án này, độ chính xác của 17 phương pháp DFT khi sử dụng để đánh giá giá trị BDE(X-H) (X = C, N, O, S) được nghiên cứu. Kết quả tính toán cho thấy phương pháp M06-2X có độ chính xác phù hợp và tiêu tốn tài nguyên tính toán hợp lý. Phương pháp này được sử dụng để tính toán hoạt tính chống oxy hoá của các hợp chất phenolic đã phân lập trong phạm vi luận án này cũng như một số nhóm hợp chất chính khác đã được phân lập từ **chi Mơ dây** (*Paederia*) trong các nghiên cứu trước đây, cùng với một số hợp chất có cấu trúc tương tự với tiềm năng chống oxy hoá tốt, 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-

ethoxymethylantraquinone), feruloyl monotropein (6'-*O-E*-feruloyl monotropein, 10'-*O-E*-feruloyl monotropein) và flavonoid (kaempferol, quercetin, quercitrin). Kết quả cho thấy, các hợp chất được đánh giá có tiềm năng chống oxy hoá tốt trong môi trường phân cực. Trong đó, các hợp chất cleomiscosin, feruloyl monotropein và flavonoid có hằng số tốc độ tổng quát của phản ứng bắt gốc tự do HOO• trong môi trường phân cực nằm trong khoảng  $10^6 - 10^8 \text{ M}^{-1} \text{ s}^{-1}$ . So sánh với một số hợp chất chống oxy hoá tiêu biểu, hằng số tốc độ phản ứng này cao hơn nhiều lần so với Trolox, gần tương đương với ascorbic acid và resveratrol. Trong khi đó, các hợp chất anthraquinon thể hiện hoạt tính bắt gốc tự do  $\text{O}_2^{\bullet-}$  tuyệt vời trong môi trường phân cực, với hằng số tốc độ tổng quát nằm trong khoảng  $10^6 - 10^8 \text{ M}^{-1} \text{ s}^{-1}$ , cao hơn  $10^3 - 10^5$  lần so với ascorbic acid. Nhìn chung, hoạt tính chống oxy hoá của các hợp chất này được đóng góp chủ yếu bởi các dạng phân ly trong môi trường phân cực như anion, dianion của chúng, trong đó vai trò chính thuộc về các nhóm chức -OH liên kết trực tiếp với vòng thơm của các hợp chất này. Theo tra cứu tài liệu, kết quả tính toán hoạt tính chống oxy hoá của các hợp chất kể trên là các kết quả được công bố lần đầu tiên trong luận án này.