

ĐÁNH GIÁ THÀNH PHẦN HÓA HỌC DỊCH CHIẾT DUNG MÔI EUTECTIC SÂU (DES) TỪ VỎ MĂNG CỤT (*Garcinia mangostana* L.) BẰNG PHƯƠNG PHÁP LC-MS Q-TOF

● NGUYỄN HOÀNG ANH¹ - LÊ HOÀNG HUYỀN¹ - NGUYỄN THỊ PHƯƠNG THẢO¹ -
HUỠNH ANH KHÔI¹ - NGUYỄN VĂN ANH^{1*}

¹Khoa Công nghệ Thực phẩm, Trường Đại học Công Thương Thành phố Hồ Chí Minh

*Tác giả liên hệ: anhnv@huit.edu.vn

TÓM TẮT:

Nghiên cứu này đánh giá thành phần hóa học của dịch chiết được từ phương pháp trích xuất xanh từ vỏ măng cụt (*Garcinia mangostana* L.) bằng phương pháp sắc ký phương pháp LC-MS Q-ToF và so sánh với dịch chiết thu được bằng phương pháp chiết suất dung môi thông thường, đồng thời tính xanh của các phương pháp được đánh giá bằng các công cụ Green Extraction Tree (GET), AGREEprep và Sample Preparation Metric of Sustainability (SPMS). Kết quả LC-MS Q-ToF cho thấy, dịch chiết DES và ethanol đều chứa nhiều nhóm hợp chất có hoạt tính sinh học như phenolic, polyphenol, flavonoid, coumarin, triterpenoid và một số nhóm chất khác. Kết quả đánh giá tính xanh cho thấy, phương pháp DES đạt điểm cao hơn theo cả 3 công cụ, với GET 24/28, AGREEprep 0,69 và SPMS 7,58. Điều này cho thấy, DES là hệ dung môi có tiềm năng thay thế dung môi hữu cơ truyền thống trong trích ly các hợp chất hoạt tính từ phụ phẩm vỏ măng cụt, góp phần nâng cao giá trị phụ phẩm nông nghiệp và định hướng phát triển công nghệ trích ly xanh, bền vững.

Từ khóa: vỏ măng cụt, dung môi eutectic sâu (DES), phụ phẩm nông nghiệp, thành phần hóa học.

1. Đặt vấn đề

Măng cụt (*Garcinia mangostana* L.) là loại quả nhiệt đới có giá trị kinh tế cao, trong đó phần vỏ chiếm 50% khối lượng quả. Vỏ măng cụt là nguồn nguyên liệu giàu hợp chất chuyển hóa thứ cấp, đặc biệt là anthocyanin, polyphenol, flavonoid,

xanthone, tannin, benzophenone và một số nhóm hợp chất phenolic khác (Milan et al., 2022). Vì vậy, việc tận dụng vỏ măng cụt không chỉ góp phần nâng cao giá trị phụ phẩm nông nghiệp mà còn phù hợp với định hướng phát triển kinh tế tuần hoàn.

Các phương pháp trích ly truyền thống bằng

dung môi hữu cơ còn tồn tại một số hạn chế như tiêu tốn dung môi, hiệu suất thu hồi chưa cao (Chemat et al., 2012). Trong bối cảnh đó, phương pháp trích ly xanh bằng dung môi eutectic sâu có tiềm năng để cải thiện các hạn chế trên. Bên cạnh hiệu quả trích ly, mức độ thân thiện môi trường của quy trình cũng cần được đánh giá định lượng thông qua các công cụ như Green Extraction Tree (GET) (Fan et al., 2025), AGREEprep (Pena-Pereira et al., 2022) và Sample Preparation Metric of Sustainability (SPMS) (González-Martín et al., 2023). Các công cụ này cho phép đánh giá mức độ xanh của quy trình dựa trên 10 tiêu chí, bao gồm loại dung môi và thuốc thử, vật liệu sử dụng, lượng mẫu và hóa chất tiêu thụ, lượng chất thải phát sinh, mức tiêu thụ năng lượng, khả năng tự động hóa, thông lượng mẫu, cấu hình phân tích sau chuẩn bị mẫu và mức độ an toàn cho người thao tác.

Nghiên cứu này được thực hiện nhằm khảo sát thành phần các hợp chất có trong dịch chiết vỏ măng cụt thu được bằng phương pháp trích ly sử dụng dung môi eutectic sâu và phương pháp trích ly ethanol truyền thống thông qua kỹ thuật LC-MS Q-ToF. Đồng thời, nghiên cứu tiến hành đánh giá tính xanh của các phương pháp trích ly bằng các công cụ Green Extraction Tree, AGREEprep và Sample Preparation Metric of Sustainability, từ đó làm rõ tiềm năng ứng dụng của phương pháp trích xuất xanh từ vỏ măng cụt.

2. Đối tượng và phương pháp nghiên cứu

2.1. Nguyên liệu

Vỏ quả măng cụt được thu ở chợ địa phương, TP. Hồ Chí Minh, được làm sạch, loại bỏ tạp chất, cắt nhỏ, sấy ở nhiệt độ 40°C, nghiền mịn, đóng gói trong túi hút chân không và bảo quản lạnh.

2.2. Bố trí thí nghiệm

Đối với phương pháp trích ly bằng dung môi eutectic sâu, hệ dung môi DES được chuẩn bị từ choline chloride, acid lactic và nước theo tỷ lệ mol 1:2:1. Hỗn hợp được khuấy và gia nhiệt (55-60°C đến khi đồng nhất). Bột vỏ măng cụt được phối trộn với dung môi DES theo tỷ lệ nguyên liệu/dung môi là 1:50. Quá trình trích ly được thực

hiện bằng sóng siêu âm trong 15 phút với biên độ siêu âm 35%. Sau khi trích ly, hỗn hợp lọc để loại bỏ bã rắn, thu được dịch chiết DES.

Đối với phương pháp trích ly bằng ethanol, dung môi ethanol 35% được chuẩn bị và điều chỉnh pH. Bột vỏ măng cụt được phối trộn với dung môi theo tỷ lệ nguyên liệu/dung môi là 1:25. Quá trình trích ly được tiến hành bằng sóng siêu âm trong 10 phút với biên độ siêu âm 30%. Sau khi trích ly, hỗn hợp được lọc để loại bỏ phần bã rắn, thu được dịch chiết ethanol (Cheok et al., 2013).

Dịch chiết thu được từ 2 phương pháp được sử dụng để phân tích bằng LC-MS Q-ToF. Tính xanh của 2 phương pháp trích ly được đánh giá bằng các công cụ Green Extraction Tree (Fan et al., 2025), AGREEprep (Pena-Pereira et al., 2022) và Sample Preparation Metric of Sustainability (González-Martín et al., 2023) nhằm so sánh mức độ thân thiện môi trường của từng quy trình.

2.3. Phương pháp phân tích

Thành phần các hợp chất trong dịch chiết vỏ măng cụt được xác định bằng hệ thống sắc ký lỏng siêu hiệu năng ghép khối phổ phân giải cao Acquity UPLC I-class Plus/Xevo G2-XS Q-ToF (Waters Corp., Milford, Hoa Kỳ). Nhiệt độ cột được duy trì ở 40°C, thể tích tiêm mẫu là 5 µL và tốc độ dòng là 0,4 mL/phút. Pha động gồm nước chứa 0,1% acid formic (A) và acetonitrile chứa 0,1% acid formic (B). Chương trình gradient được thiết lập như sau: 5% B trong 0-2 phút, tăng từ 5-40% B trong 2-10 phút, tăng từ 40-95% B trong 10-20 phút, giữ 95% B trong 20-25 phút, giảm từ 95-10% B trong 25-26 phút và giữ 10% B đến 30 phút.

Phân tích khối phổ được thực hiện bằng nguồn ion hóa phun điện tử ở chế độ ion dương (ESI+). Thiết bị được vận hành trong dải khối lượng m/z 100-1200 Da. Điện áp mao quản được đặt ở 3,0 kV, điện áp hình nón 40V, nhiệt độ nguồn 125°C và nhiệt độ tách solvat 350°C. Lưu lượng khí hình nón và khí tách solvat lần lượt là 50 L/h và 650 L/h. Quá trình phân mảnh MS/MS được thực hiện với dải năng lượng va chạm 10-40 eV.

Dữ liệu sắc ký và phổ khối được thu thập, xử

lý bằng phần mềm MassLynx 4.1 (Waters Corp., Milford, Hoa Kỳ). Việc định danh hợp chất được thực hiện bằng phần mềm UNIFI NPAS kết hợp với các thư viện phổ sản phẩm thiên nhiên và các cơ sở dữ liệu hóa học như ChemSpider, PubMed và MassBank. Các hợp chất được nhận diện dựa trên công thức phân tử dự đoán, ion phân tử $[M+H]^+$, thời gian lưu, phổ phân mảnh MS/MS và dữ liệu tài liệu tham khảo. Để tăng độ tin cậy của kết quả định danh, các tiêu chí gồm sai số khối lượng $\leq \pm 5$ ppm, cường độ đáp ứng ≥ 1000 counts, RMR ≤ 20 ppm và RMS ≤ 15 ppm được áp dụng.

3. Kết quả và thảo luận

3.1. Đánh giá thành phần các hợp chất trong dịch chiết DES

Phân tích LC-MS/QTOF được thực hiện nhằm xác định thành phần các hợp chất có trong dịch chiết thu được bằng phương pháp trích ly sử dụng dung môi eutectic sâu DES (Hình 1).

Kết quả sắc ký đồ TIC ở Hình 1a cho thấy dịch chiết DES có thành phần hóa học với tín hiệu peak xuất hiện trong khoảng thời gian lưu từ khoảng 7 đến 26 phút. Các peak có cường độ cao tập trung nhiều ở vùng thời gian lưu 9-20 phút. Tổng cộng 150 chất đã được phát hiện trong dịch chiết vỏ măng cụt bằng dung môi DES. Đối với dịch chiết bằng phương pháp chiết dung môi ethanol 127 chất đã được phát hiện.

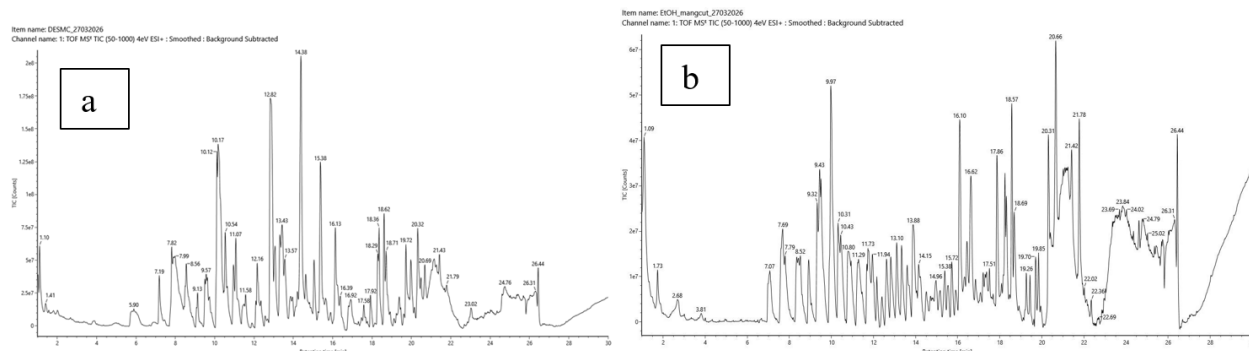
Trong sắc ký lỏng hiệu năng cao sử dụng cột pha đảo, các hợp chất có thời gian lưu ngắn hơn thường có xu hướng phân cực hơn, các hợp chất ở thời gian lưu dài hơn có tính bán phân cực hoặc kỵ

nước cao hơn. Từ kết quả phân tích LC-MS/QTOF cho thấy dịch chiết DES từ vỏ măng cụt chứa nhiều hợp chất có hoạt tính sinh học. Trong đó, 15 hợp chất chính thuộc các nhóm như phenolic, polyphenol, flavonoid, coumarin, triterpenoid, lipid và anthranoid.

Kết quả ở Bảng 1 cho thấy, dịch chiết DES và ethanol đều thu nhận được nhiều nhóm hợp chất có hoạt tính sinh học, bao gồm phenolic, polyphenol, flavonoid, coumarin và triterpenoid. Một số hợp chất xuất hiện ở cả 2 phương pháp như *6-Aldehydo-isoophiopogonone B*, *Decursitin C*, *Sanggenon H*, *(+)-Praeruptorin E*, *Gedunin*, *Procyanidin B1* và *Cniforin/Cinforin B*. Tuy nhiên, thứ tự xuất hiện và tỷ lệ diện tích peak của các hợp chất này có sự khác biệt rõ rệt giữa 2 hệ dung môi. Trong dịch chiết DES, *6-Aldehydo-isoophiopogonone B* chiếm tỷ lệ cao nhất với 8,53%, tiếp theo là *Decursitin C* 7,21% và *D-Catechin* 5,66%. Trong khi đó, ở dịch chiết ethanol, *Procyanidin B1* là hợp chất có tỷ lệ cao nhất với 7,97%, tiếp theo là *Sanggenon H* 6,36%, *Interiorin C* 5,30%, *Cniforin B* 5,02% và *Decursitin C* 5,00%. Điều này cho thấy loại dung môi và điều kiện trích ly ảnh hưởng đáng kể đến khả năng hòa tan, khuếch tán và thu nhận các nhóm hợp chất trong nền mẫu vỏ măng cụt.

Trong 15 chất chính thu được từ dịch chiết DES, *6-Aldehydo-isoophiopogonone B* được xác định có hàm lượng cao nhất. Đây là hợp chất thuộc nhóm phenolic, có cấu trúc giàu vòng thơm và nhóm chức oxy hóa. Wang và cộng sự đã nghiên

Hình 1: Sắc ký đồ TIC của dịch chiết vỏ măng cụt bằng dung môi DES (a) và dung môi truyền thống (ethanol) (b)



Bảng 1. Thành phần 15 hợp chất chính trong dịch chiết DES và ethanol vỏ măng cụt được xác định bằng LC-MS/QTOF

TT	Dịch chiết DES				Dịch chiết ethanol			
	Tên	Công thức	Phân loại	Tỉ lệ (%)	Tên	Công thức	Phân loại	Tỉ lệ (%)
1	6-Aldehydo-isoophiopogonone B	C19H16O6	Phenolic	8,53	Procyanidin B1	C30H26O12	Polyphenol	7.97
2	Decursitin C	C24H26O7	Coumarin	7,21	Sanggenon H	C20H18O6	Flavonoid	6.36
3	D-Catechin	C15H14O6	Polyphenol	5,66	Interiorin C	C24H26O8	Coumarin	5.30
4	Sanggenon H	C20H18O6	Flavonoid	4,29	Cniforin B	C23H26O7	Coumarin	5.02
5	(+)-Praeruptorin E	C24H28O7	Coumarin	4,03	Decursitin C	C24H26O7	Coumarin	5.00
6	Gedunin	C28H34O7	Triterpenoid	3,85	(+)-Praeruptorin E	C24H28O7	Coumarin	4.63
7	9,12-Dihydroxy-15-nonadecenoic acid	C19H36O4	Lipid	3,69	8-C-Prenylkaempferol	C20H18O6	Flavonoid	4.03
8	Cinforin B	C23H26O7	Coumarin	3,51	Gedunin	C28H34O7	Triterpenoid	4.00
9	Linolein	C57H98O6	Lipid	2,85	Benzothiazole	C7H5NS	Others	2.89
10	Procyanidin B1	C30H26O12	Polyphenol	2,85	6-Aldehydo-isoophiopogonone B	C19H16O6	Phenolic	2.48
11	Munjistin	C15H8O6	Anthranoid	2,78	Kushenol G	C25H28O8	Flavonoid	2.20
12	Procyanidin C-1	C45H38O18	Polyphenol	2,50	2-Amino-benzoic acid	C7H7NO2	Others	1.50
13	Carthamidin	C15H12O6	Flavonoid	2,22	Sesaminone	C20H18O7	Lignan	1.32
14	4',7-Dimethyltectorigenin	C18H16O6	Flavonoid	1,92	(3R,4S)-3,4-Dihydroxy-3-(3',4'-dimethoxybenzyl)-7-methoxy-chroman	C19H22O6	Lignan	1.23
15	8-(Δ ² -Isopentenyl)-5,7,3',4'-tetrahydroxy-flavone	C20H18O6	Flavonoid	1,71	Procyanidin A2	C30H24O12	Polyphenol	1.11

cứu rễ *Ophiopogon japonicus* và định danh nhóm phenolic bằng HPLC-DAD/LC-MS/MS và cho thấy nhóm hợp chất này có hoạt tính chống oxy hóa với dịch chiết thực vật (Wang et al., 2017). Do đó, 6-Aldehydo-isoophiopogonone B trong dịch chiết DES từ vỏ măng cụt có khả năng thu nhận

một số hợp chất phức tạp và tiềm năng sinh học của dịch chiết thực vật.

Nhóm polyphenol gồm *D-Catechin*, *Procyanidin B1* và *Procyanidin C-1*, có nhiều nhóm hydroxyl trên vòng thơm, có khả năng cho electron hoặc nguyên tử hydro để trung hòa các gốc

tự do. Đối với *D-Catechin*, Munteanu và cộng sự (2022) là một hợp chất chống oxy hóa (Munteanu & Apetrei, 2022). Với hợp chất *catechin* và *procyanidin* là các thành phần phenolic quan trọng trong vỏ măng cụt, trong đó *procyanidin B1* có trong mẫu vỏ măng cụt và *catechin* chiếm tỷ lệ lớn trong nhóm flavanol (Lai et al., 2024). Từ nghiên cứu cho thấy, dịch chiết DES đã thu nhận được những hợp chất polyphenol đặc trưng của vỏ măng cụt, đặc biệt là *catechin* và *procyanidin*.

Nhóm flavonoid gồm *Sanggenon H*, *Carthamidin*, *4',7-Dimethyltectorigenin*, *8-(Δ2-Isopentenyl)-5,7,3',4'-tetrahydroxy-flavone*, *Kushenol G*. flavonoid là nhóm hợp chất có phổ hoạt tính sinh học bao gồm chống oxy hóa, kháng viêm, kháng khuẩn, bảo vệ tim mạch và điều hòa miễn dịch (Hao et al., 2024). Đối với *carthamidin*, hoạt tính của *carthamidin* bằng hệ DPPH và hệ oxy hóa *methyl linoleate*, cho thấy *carthamidin* có khả năng bắt gốc tự do và ức chế quá trình oxy hóa lipid (Miyake et al., 2003).

Nhóm coumarin gồm *Decursitin C*, *(+)-Praeruptorin E*, *Cinforin B* *Interiorin C*, *E* là nhóm hợp chất phổ biến trong thực vật. đây là nhóm hợp chất phổ biến trong thực vật. Các coumarin tự nhiên có nhiều hoạt tính chống oxy hóa, kháng viêm, kháng khuẩn và tiềm năng bảo vệ hệ tim mạch. Theo Stefanachi và cộng sự (2016), nhóm coumarin và các dẫn xuất thường được nghiên cứu nhiều về đặc tính chống oxy hóa và kháng viêm, một số coumarin có thể ức chế các chất trung gian viêm hoặc ảnh hưởng đến các đường tín hiệu miễn dịch. (Stefanachi et al., 2018)

Nhóm triterpenoid có *gedunin*, là một limonoid thuộc nhóm triterpenoid, thường được tìm thấy trong một số loài thực vật họ Meliaceae. Theo Braga và cộng sự (2020), *gedunin* là hợp chất có phổ hoạt tính sinh học khá rộng, bao gồm kháng khuẩn, kháng nấm, chống sốt rét, kháng viêm, chống dị ứng, chống ung thư và bảo vệ thần kinh (Braga et al., 2020). Vì vậy, trong nghiên cứu này, *gedunin* cho thấy dịch chiết DES có khả năng thu nhận thêm một số hợp chất triterpenoid/limonoid bên cạnh nhóm polyphenol và flavonoid.

Nhóm lipid trong dịch chiết DES gồm *9,12-Dihydroxy-15-nonadecenoic acid* và *Linolein*. Nghiên cứu cho thấy, hệ DES không chỉ thu nhận các hợp chất phân cực như polyphenol và flavonoid, mà còn có thể kéo theo một phần các hợp chất kỵ nước hoặc bán phân cực trong nền mẫu vỏ măng cụt. Trong đó, *Linolein* là một triacylglycerol có liên quan đến acid linoleic. (Chen et al., 2022)

Nhóm anthranoid trong dịch chiết DES gồm *Munjistin* là một dẫn xuất anthraquinone tự nhiên. Các anthraquinone là nhóm hợp chất có khung quinone, thường được tìm thấy trong dược liệu và chống oxy hóa, kháng viêm, kháng khuẩn và bảo vệ tế bào. (Nam et al., 2017)

Nhìn chung, kết quả định danh 15 hợp chất chính cho thấy dịch chiết DES từ vỏ măng cụt có thành phần hóa học đa dạng, trong đó nổi bật là các nhóm polyphenol, flavonoid và coumarin.

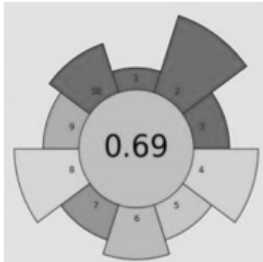
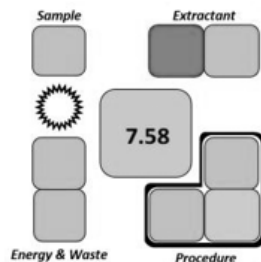
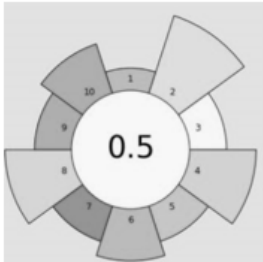
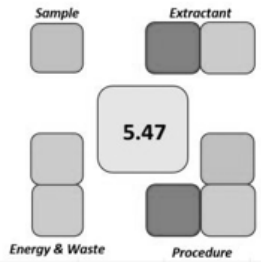
Nhóm lignan trong dịch chiết ethanol gồm *Sesaminone* và *(3R,4S)-3,4-Dihydroxy-3-(3',4'-dimethoxybenzyl)-7-methoxy-chroman*. Theo Rodríguez-García và cộng sự (2020), các lignan tự nhiên là nhóm hợp chất có nguồn gốc thực vật đóng vai trò quan trọng trong cơ chế chống oxy hóa mạnh mẽ và bảo vệ tế bào (Hano et al., 2021). Nghiên cứu cho thấy, hệ dung môi ethanol không chỉ thu nhận các hợp chất phân cực mà còn có thể kéo theo một phần các hợp chất bán phân cực trong nền mẫu vỏ măng cụt.

Nhóm các hợp chất khác trong dịch chiết ethanol có *Benzothiazole* và *2-Amino-benzoic acid*. *Benzothiazole* là hợp chất dị vòng chứa lưu huỳnh và nitơ, trong khi *2-Amino-benzoic acid* là một dẫn xuất vòng thơm. Kết quả này cho thấy, hệ dung môi phân cực như ethanol có thể kéo theo các hợp chất có trọng lượng phân tử nhỏ chứa dị vòng trong nền mẫu vỏ măng cụt.

3.3. Đánh giá tính xanh của phương pháp

Trong nghiên cứu này, tính xanh của các phương pháp trích ly được đánh giá bằng 3 công cụ gồm Green Extraction Tree (GET), AGREEprep và Sample preparation metric of sustainability (SPMS).

Bảng 2. Các công cụ đánh giá tính xanh của phương pháp trích ly: a- Green Extraction Tree (GET), b- AGREEprep và c- Sample preparation metric of sustainability (SPMS)

Phương pháp trích ly	Công cụ đánh giá tính xanh		
	GET	AGREEprep	SPMS
DES	24/28		
Truyền thống	17/28		

Kết quả tại Bảng 2 cho thấy, phương pháp trích ly sử dụng dung môi âm sâu (DES) đạt điểm số cao hơn ethanol truyền thống. Theo AGREEprep, điểm số tổng thể lần lượt là DES (0,69) > Ethanol truyền thống (0,46). DES cho thấy tính xanh vượt trội nhờ sử dụng NADES như choline chloride và acid lactic có khả năng phân hủy sinh học cao, độc tính thấp, áp suất hơi thấp và tính không cháy nổ. Kết hợp hỗ trợ siêu âm (UAE) giúp rút ngắn thời gian xử lý xuống còn 15 phút và giảm tiêu thụ năng lượng. Trong khi đó, phương pháp ethanol truyền thống có tính xanh thấp nhất do sử dụng lượng lớn dung môi hữu cơ, thời gian chiết dài và hiệu suất thu hồi anthocyanin thấp.

4. Kết luận

Nghiên cứu cho thấy, vỏ măng cụt là nguồn phụ phẩm giàu hợp chất hoạt tính sinh học, được khai thác hiệu quả bằng các phương pháp trích ly xanh. Kết quả LC-MS/QTOF xác định được

150 hợp chất trong dịch chiết DES, gồm các nhóm phenolic, polyphenol, flavonoid, coumarin, triterpenoid, lipid và anthranoid; trong đó các hợp chất chính *6-Aldehydo-isoophiopogonone B* là 8,53%, *Decursitin C* là 7,21% và *D-Catechin* là 5,66%.

Đối với dịch chiết ethanol, ghi nhận 15 hợp chất chính, nổi bật là *Procyanidin B1* là 7,97%, *Sanggenon H* là 6,36%, *Interiorin C* là 5,30%, *Cniforin B* là 5,02% và *Decursitin C* là 5,00%. Về đánh giá tính xanh, phương pháp DES cho kết quả cao nhất với GET 24/28, AGREEprep 0,69 và SPMS 7,58, cao hơn ATPE (22/28; 0,66; 6,74) và phương pháp ethanol truyền thống (17/28; 0,50; 5,47).

Như vậy, DES là phương pháp trích ly có tính xanh vượt trội, có khả năng thu nhận đa dạng hợp chất sinh học từ vỏ măng cụt, đồng thời nâng cao giá trị phụ phẩm nông nghiệp.

Lời cảm ơn:

Bài viết được thực hiện trong khuôn khổ của đề tài nghiên cứu khoa học của sinh viên mã số 229/HĐ-DCT ngày 01/07/2025 của Trường Đại học Công Thương Thành phố Hồ Chí Minh.

TÀI LIỆU THAM KHẢO:

- Braga T. M., Rocha L., Chung T. Y., Oliveira R. F. et al. (2020). Biological Activities of Gedunin-A Limonoid from the Meliaceae Family. *Molecules* (Basel, Switzerland), 25(3). <https://doi.org/10.3390/MOLECULES25030493>
- Chemat F., Vian M. A., & Cravotto G. (2012). Green extraction of natural products: concept and principles. *International Journal of Molecular Sciences*, 13(7), 8615-8627. <https://doi.org/10.3390/IJMS13078615>.
- Chen Y. F., Wu K. J., Siao L. R., & Tsai H. Y. (2022). Trilinolein, a Natural Triacylglycerol, Protects Cerebral Ischemia through Inhibition of Neuronal Apoptosis and Ameliorates Intimal Hyperplasia via Attenuation of Migration and Modulation of Matrix Metalloproteinase-2 and RAS/MEK/ERK Signaling Pathway. *International Journal of Molecular Sciences*, 23(21). <https://doi.org/10.3390/IJMS232112820>.
- Cheok C. Y., Chin N. L., Yusof Y. A., Talib R. A., & Law C. L. (2013). Optimization of total monomeric anthocyanin (TMA) and total phenolic content (TPC) extractions from mangosteen (*Garcinia mangostana* Linn.) hull using ultrasonic treatments. *Industrial Crops and Products*, 50, 1-7. <https://doi.org/10.1016/J.INDCROP.2013.07.024>.
- Fan L., Fan W., Hui Z., Zhang Q., Tang J., Wang Z., & Yang L. (2025). Green Extraction Tree: A Novel Tool to Greenness Metric for Green Extraction of Natural Products. *ACS Omega*, 10(43), 51531-51544. <https://doi.org/10.1021/ACSOMEGA.5C07167>.
- González-Martín R., Gutiérrez-Serpa A., Pino V., & Sajid M. (2023). A tool to assess analytical sample preparation procedures: Sample preparation metric of sustainability. *Journal of Chromatography A*, 1707, 464291. <https://doi.org/10.1016/J.CHROMA.2023.464291>.
- Hano C. F., Dinkova-Kostova A. T., Davin L. B., Cort J. R., & Lewi N. G. (2021). Editorial: Lignans: Insights Into Their Biosynthesis, Metabolic Engineering, Analytical Methods and Health Benefits. *Frontiers in Plant Science*, 11, 630327. <https://doi.org/10.3389/FPLS.2020.630327>.
- Hao B., Yang Z., Liu H., Liu Y., & Wang S. (2024). Advances in Flavonoid Research: Sources, Biological Activities, and Developmental Prospectives. *Current Issues in Molecular Biology*, 46(4), 2884-2925. <https://doi.org/10.3390/CIMB46040181>.
- Lai M., Chen H., Liu X. et al. (2024). Exploration of phenolic profile from mangosteen (*Garcinia mangostana* L.) pericarp and their contribution to inhibitory effects on α -amylase and α -glucosidase. *LWT*, 203, 116350. <https://doi.org/10.1016/J.LWT.2024.116350>.
- Milan E. P., Bertolo M. R. V., Martins V. C. A. et al. (2022). Effects of Mangosteen Peel Phenolic Compounds on Tilapia Skin Collagen-Based Mineralized Scaffold Properties. *ACS Omega*, 7(38), 34022. <https://doi.org/10.1021/ACSOMEGA.2C03266>.
- Miyake Y., Minato K., Fukumoto S., Yamamoto K., Oyaito T., Kawakishi S., & Osawa T. (2003). New Potent Antioxidative Hydroxyavanones Produced with *Aspergillus saitoi* from Flavanone Glycoside in Citrus Fruit. *Bioscience, Biotechnology, and Biochemistry*, 67(7).
- Munteanu I. G., & Apetrei C. (2022). Assessment of the Antioxidant Activity of Catechin in Nutraceuticals: Comparison between a Newly Developed Electrochemical Method and Spectrophotometric Methods. *International Journal of Molecular Sciences*, 23(15), 8110. <https://doi.org/10.3390/IJMS23158110/S1>.
- Nam W., Kim S. P., Nam S. H., Friedman M., & Sabatier J. M. (2017). Structure-Antioxidative and Anti-Inflammatory Activity Relationships of Purpurin and Related Anthraquinones in Chemical and Cell Assays. *Molecules : A Journal of Synthetic Chemistry and Natural Product Chemistry*, 22(2), 265. <https://doi.org/10.3390/MOLECULES22020265>
- Pena-Pereira, F., Tobiszewski, M., Wojnowski, W., & Psillakis, E. (2022). A Tutorial on AGREEprep an Analytical Greenness Metric for Sample Preparation. *Advances in Sample Preparation*, 3, 100025. <https://doi.org/10.1016/J.SAMPRE.2022.100025>.

Stefanachi A., Leonetti F., Pisani L., Catto M., & Carotti A. (2018). Coumarin: A Natural, Privileged and Versatile Scaffold for Bioactive Compounds. *Molecules* (Basel, Switzerland), 23(2). <https://doi.org/10.3390/MOLECULES23020250>.

Wang Y., Liu F., Liang Z., Peng L., Wang B., Yu J., Su Y., & Ma C. (2017). Homoisoflavonoids and the Antioxidant Activity of *Ophiopogon japonicus* Root. *Iranian Journal of Pharmaceutical Research : IJPR*, 16(1), 357. <https://pmc.ncbi.nlm.nih.gov/articles/PMC5423261/>.

Ngày nhận bài: 15/4/2026

Ngày phản biện đánh giá và sửa chữa: 28/4/2026

Ngày chấp nhận đăng bài: 18/5/2026

EVALUATION OF CHEMICAL COMPOSITION OF DEEP EUTECTIC SOLVENT EXTRACT FROM MANGOSTEEN PEEL (*Garcinia mangostana* L.) USING LC-MS Q-TOF

● NGUYEN HOANG ANH¹
● LE HOANG HUYEN¹
● NGUYEN THI PHUONG THAO¹
● HUYNH ANH KHOI¹
● NGUYEN VAN ANH^{1*}

¹Ho Chi Minh City University of Industry and Trade

*Corresponding author: anhnv@huit.edu.vn

ABSTRACT:

Mangosteen peel (*Garcinia mangostana* L.), an agricultural by-product, is rich in bioactive compounds. This study evaluates the chemical composition of extracts obtained from mangosteen peel using a green extraction method with deep eutectic solvents (DES), analyzed by LC-MS Q-ToF, and compares them with conventional ethanol extracts. The environmental performance of the methods was assessed using Green Extraction Tree (GET), AGREEprep, and Sample Preparation Metric of Sustainability (SPMS). Results show that both DES and ethanol extracts contain various bioactive compound groups such as phenolics, polyphenols, flavonoids, coumarins, and triterpenoids. The DES method achieved higher green scores (GET 24/28, AGREEprep 0.69, SPMS 7.58), indicating its strong potential as a sustainable alternative to conventional organic solvents for extracting bioactive compounds from mangosteen peel.

Keywords: mangosteen peel, deep eutectic solvent, agricultural by-product, chemical composition