

**NGHIÊN CỨU TÁC DỤNG KHÁNG α -GLUCOSIDASE CỦA MỘT SỐ HỢP
CHẤT TỪ CÂY GỪNG ĐEN (*DISTICHOCHLAMYS CITREA* M.F.NEWMAN.)
BẰNG TÍNH TOÁN HÓA LƯỢNG TỬ VÀ MÔ PHÒNG DOCKING PHÂN TỬ**

**Bùi Quang Thành¹, Hồ Thị Tố Vân¹, Nguyễn Vĩnh Phú², Phan Tứ Quý³,
Nguyễn Thị Thanh Hải¹, Nguyễn Thị Ái Nhung^{1*}**

¹Khoa Hóa học, Trường Đại học Khoa học, Đại học Huế

²Khoa Khoa học cơ bản, Trường Đại học Y Dược, Đại học Huế

³Khoa Khoa học Tự nhiên, Trường Đại học Tây Nguyên

*Email: ntanhung@hueuni.edu.vn

Ngày nhận bài: 11/7/2022; ngày hoàn thành phản biện: 22/7/2022; ngày duyệt đăng: 4/8/2022

INHIBITABILITY OF COMPOUNDS FROM DISTICHOCHLAMYS CITREA M.F. NEWMAN RHIZOME TOWARDS ENZYME α -GLUCOSIDASE BASED ON QUANTUM CHEMICAL CALCULATION AND DOCKING SIMULATION

Bui Quang Thanh¹, Ho Thi To Van¹, Nguyen Vinh Phu², Phan Tu Quy³,
Nguyen Thi Thanh Hai¹, Nguyen Thi Ai Nhung^{1*}

¹Faculty of Chemistry, University of Sciences, Hue University

²Faculty of Basic Sciences, University of Medicine and Pharmacy, Hue University

³Faculty of Natural Science and Technology, Tay Nguyen University

*Email: ntanhung@hueuni.edu.vn

ABSTRACT

The selected compounds in the essential oil of *Distichochlamys citrea* M.F. Newman (commonly known as "Black Ginger") including Linalool (B1), β -Citral (B2), Geraniol (B3), Borneol acetate (B4), Geranyl acetate (B5) were chosen to study the inhibitability towards enzyme α -glucosidase. Quantum properties were examined using density functional theory (DFT). The inhibitability of the compounds towards protein 3W37 of enzyme α -glucosidase evaluated by molecular docking simulation and their bio-compatibility was justified by physicochemical properties obtained from QSARIS-based analysis in reference to Lipinski's rule of five. Molecular docking results indicated that 3W37 protein inhibited by the studied compounds and the inhibitory efficiency was in the order B5>B1>B4>B3>B2 and the physicochemical parameters from the QSARIS system were consistent with the rule Lipinski 5. The theoretical results would contribute to the basis for further studies on the chemical compositions of *Distichochlamys citrea* and their biological activities.

Keywords: Density functional theory (DFT), molecular docking, α -glucosidase, protein 3W37, *Distichochlamys Citrea*.



Bùi Quang Thành tốt nghiệp cử nhân chuyên ngành Hóa học tại Trường Đại học Sư phạm, Đại học Đà Nẵng; nhận bằng Thạc sĩ chuyên ngành Hóa lý thuyết và hóa lý tại Trường Đại học Khoa học, Đại học Huế. Hiện nay, ông giảng dạy và nghiên cứu tại Trường Đại học Khoa học, Đại học Huế.

Lĩnh vực nghiên cứu: Hóa học vật liệu và vật liệu nano.



Hồ Thị Tố Vân sinh ngày 20 tháng 12 năm 1987 tại Gia Lai. Năm 2009, bà tốt nghiệp Đại học sư phạm chuyên ngành Hóa học. Hiện bà đang theo học chương trình thạc sĩ chuyên ngành Hóa Vô cơ tại trường Đại học Khoa học, Đại học Huế. Hiện nay, bà công tác tại trường Trung học phổ thông Phan Bội Châu, thành phố Pleiku, tỉnh Gia Lai.

Lĩnh vực nghiên cứu: Hóa lý thuyết.



Nguyễn Vĩnh Phú sinh năm 1996. Ông tốt nghiệp cử nhân Hóa học tại trường Đại học Khoa học, Đại học Huế; Hiện đang theo học chương trình thạc sĩ chuyên ngành Hóa lý thuyết và Hóa lý tại trường Đại học Khoa học, Đại học Huế. Hiện nay, ông giảng dạy và nghiên cứu tại trường Đại học Y Dược, Đại học Huế.

Lĩnh vực nghiên cứu: Hóa hữu cơ và Hóa vật liệu.



Phan Tú Quý sinh năm 1982. Ông tốt nghiệp cử nhân Hóa học tại trường Đại học Sư phạm, Đại học Huế; nhận bằng thạc sĩ chuyên ngành Hóa lý tại trường Đại học Sư phạm, Đại học Huế; nhận bằng tiến sĩ ngành Hóa lý thuyết và Hóa lý tại trường Đại học Khoa học, Đại học Huế. Hiện nay, ông giảng dạy và nghiên cứu tại trường Đại học Tây Nguyên.

Lĩnh vực nghiên cứu: Hóa lý và hóa lý thuyết.



Nguyễn Thị Thanh Hải sinh ngày 17/04/1982 tại Thừa Thiên Huế. Bà tốt nghiệp kỹ sư chuyên ngành Công nghệ thực phẩm và sinh học tại trường Đại học Bách khoa, Đại học Đà Nẵng năm 2005; thạc sĩ chuyên ngành hóa lý thuyết và hóa lý tại trường Đại học Khoa học, Đại học Huế năm 2011; bảo vệ luận án tiến sĩ năm 2021 ngành hóa lý thuyết và hóa lý tại Trường Đại học Khoa học, Đại học Huế. Hiện nay bà công tác tại Trường Đại học Khoa học Huế.

Lĩnh vực nghiên cứu: vật liệu nano, hóa dược.



Nguyễn Thị Ái Nhung sinh năm 1980. Bà tốt nghiệp cử nhân Hóa học tại trường Đại học Khoa học, Đại học Huế; nhận bằng thạc sĩ chuyên ngành Hóa lý thuyết và Hóa lý tại trường Đại học Sư phạm, Đại học Huế; nhận bằng tiến sĩ ngành Hóa lý thuyết tại trường Đại học tổng hợp Philipps, Marburg, Cộng Hòa Liên Bang Đức. Bà được phong học hàm phó giáo sư năm 2018. Hiện nay, bà giảng dạy và nghiên cứu tại trường Đại học Khoa học, Đại học Huế.

Lĩnh vực nghiên cứu: Hóa lượng tử và hóa lý thuyết.