

NGHIÊN CỨU HOẠT TÍNH KHÁNG UNG THƯ CỦA KAEMPFEROL-1,
DAIDZIN TỪ ZINGIBER ZERUMBET SM VÀ GLUCINE MAX L
SỬ DỤNG CÁC THAM SỐ MÔ TẢ PHÂN TỬ 2D VÀ 3D

Bùi Thị Phương Thúy¹, Phùng Văn Trung³, Hoàng Thị Kim Dung³,
Trần Dương², Phạm Văn Tất^{4*}

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

² Khoa Hóa học, Trường Đại học Sư phạm, Đại học Huế

³Viện Công nghệ Hóa học, TP. Hồ Chí Minh

⁴Khoa Khoa học và Công nghệ, Trường Đại học Hoa Sen, TP. Hồ Chí Minh

*E-mail: vantat@gmail.com

Ngày nhận bài: 24/5/2017; ngày hoàn thành phản biện: 14/6/2017; ngày duyệt đăng: 27/10/2017

TÓM TẮT

Trong nghiên cứu này, chúng tôi đã phân lập được hai dẫn xuất flavonoid từ *Zingiber zerumbet Sm* và *Glucine Max L* ở Việt Nam, với hoạt tính gây độc tế bào ung thư Hela tương đối mạnh. Các mô hình QSAR xây dựng được bao gồm: Mô hình QSAR_{MLR} (1), R^2_{train} là 0,955; R^2_{pred} là 0,745; mô hình QSAR_{MLR} (2), R^2_{train} là 0,854 và R^2_{pred} là 0,812; mô hình mạng thần kinh QSAR_{ANN} với kiến trúc mạng I(9)-HL(5)-O(1), R^2_{train} là 0,8963 và R^2_{pred} là 0,8883; Mô hình mạng thần kinh QSAR_{PCA-ANN} với kiến trúc mạng I(6)-HL(9)-O(1), R^2 là 0,8973 và R^2_{pred} là 0,8872. Hoạt tính kháng ung thư của các hợp chất flavonoid trong nhóm kiểm tra và các hợp chất phân lập được dự đoán từ những mô hình QSAR phù hợp với dữ liệu thực nghiệm từ các tài liệu tham khảo.

Từ khoá: QSAR_{MLR}, QSAR_{ANN}, QSAR_{PCA-ANN}, hoạt tính kháng ung thư Hela.

**ANTICANCER AGENTS OF KAEMPFEROL-3-O-METHYLEETHER AND DAIDZIN
IN LEAF OF PLANTS *ZINGIBER ZERUMBET SM* AND *GLUCINE MAX LUSING*
2D, 3D DESCRIPTORS**

**Bui Thi Phuong Thuy¹, Phung Van Trung³, Hoang Thi Kim Dung³,
Tran Duong², Pham Van Tat^{4*}**

¹Faculty of Chemistry, University of Sciences, Hue University

²Faculty of Chemistry, University of Education, Hue University

³Institute of Chemical Technology, Ho Chi Minh City

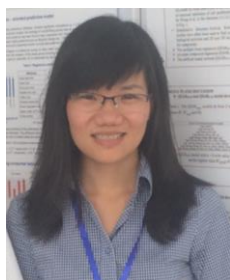
⁴Faculty of Science and Technology, Hoa Sen University, Ho Chi Minh City

*E-mail: vantat@gmail.com

ABSTRACT

In this study, we have isolated the two flavone and isoflavone in flavonoid group from *Zingiber zerumbet Sm* and *Glucine Max L* in Vietnam, with relatively strong cytotoxic activity in Hela cancer cells. In the QSAR study on cancer Hela cell line, the techniques of multiple linear regression, the artificial neural network and principal component analysis were integrated with artificial neural network to construct the different QSAR models such as: The best linear model QSAR_{MLR} (1), R^2_{train} of 0.955, R^2_{pred} of 0.745; QSAR_{MLR} (2), R^2_{train} of 0,854 and R^2_{pred} of 0.812; The artificial neural network QSAR_{ANN} with structural style I(9)-HL(5)-O(1) exhibited a better quality in statistical values R^2_{train} of 0.8963 and R^2_{pred} of 0.8883. The artificial neural network QSAR_{PCA-ANN} with structural style R^2 of 0.8973 and R^2_{pred} of 0.8872. The anti-cancer activities of the flavonoids in the test group and extraction of flavonoids resulting from those models turned out to give a good agreement with experimental data and those from literature.

Keywords: QSAR_{MLR}, QSAR_{ANN}, QSAR_{PCA-ANN}, anticancer activities Hela.



Bùi Thị Phương Thúy sinh ngày 10/08/1988 tại Đắk Lắk. Năm 2010, bà tốt nghiệp cử nhân chuyên ngành Sư phạm Hóa học tại Trường Đại học Tây Nguyên. Năm 2012, bà nhận bằng thạc sĩ chuyên ngành Hóa lý thuyết và hóa lý tại Trường Đại học Khoa học, Đại học Huế. Hiện nay bà đang công tác tại Trường Đại học Công nghệ Đồng Nai.

Lĩnh vực nghiên cứu: Hóa lý thuyết và hóa lý, hóa hữu cơ.



Hoàng Thị Kim Dung sinh ngày 27/3/1976 tại Thanh Hóa. Năm 1998, bà tốt nghiệp Đại học Bách khoa TP. HCM chuyên ngành Hóa hữu cơ. Năm 2003, bà nhận bằng thạc sĩ chuyên ngành Công nghệ Hóa học tại trường Đại học Bách khoa TP. HCM. Năm 2010, bà nhận bằng Tiến sĩ chuyên ngành Hóa hữu cơ tại Viện Công nghệ Hóa học – Viện Hàn lâm Khoa học và Công nghệ Việt Nam. Hiện nay bà đang công tác tại Viện Công nghệ Hóa học, Viện Hàn lâm Khoa học và Công nghệ Việt Nam.

Lĩnh vực nghiên cứu: hóa hữu cơ, hóa dược, hóa học các hợp chất thiên nhiên.



Phùng Văn Trung sinh ngày 01/05/1977 tại Thừa Thiên Huế. Năm 1998, ông tốt nghiệp cử nhân chuyên ngành Hoá học tại Trường ĐH Khoa học Tự nhiên Tp. Hồ chí Minh. Năm 2004, ông nhận bằng thạc sĩ chuyên ngành Hoá hữu cơ tại ĐH Khoa học Tự nhiên Tp. Hồ Chí Minh. Năm 2015, ông nhận bằng tiến sĩ Hoá học tại Viện Công nghệ Hoá học. Hiện nay, ông đang công tác tại Viện Công nghệ Hoá học.

Lĩnh vực nghiên cứu: Hoá học các hợp chất thiên nhiên.



Trần Dương sinh ngày 01/01/1960 tại Quảng Ngãi. Năm 1981, ông tốt nghiệp cử nhân ngành Hóa học tại Trường Đại học Sư phạm, Đại học Huế. Năm 1989, ông nhận bằng thạc sĩ chuyên ngành Hóa vô cơ tại Trường Đại học Sư phạm Hà Nội. Năm 2005, ông nhận bằng tiến sĩ chuyên ngành Hóa vô cơ tại Trường Đại học Khoa học Tự nhiên, Đại học Quốc gia Hà Nội. Năm 2016, ông được công nhận chức danh phó giáo sư ngành Hóa học. Hiện nay, ông đang công tác tại Trường Đại học Sư phạm, Đại học Huế.

Lĩnh vực nghiên cứu: Vật liệu vô cơ, Hóa tin học



Phạm Văn Tất sinh ngày 30/11/1966 Tại Nam Định. Năm 1989 ông tốt nghiệp cử nhân Kỹ thuật Hóa học, Đại học Quốc gia Hà Nội. Năm 2002, ông nhận bằng thạc sĩ chuyên ngành Hoá học phân tích tại Trường Đại học Đà Lạt. Năm 2006 ông nhận bằng tiến sĩ chuyên ngành Hóa học tính toán - Lý thuyết tại Trường Đại học zu Köln, Deutschland. Năm 2011 ông được công nhận chức danh phó giáo sư ngành Hóa học. Hiện nay, ông đang công tác tại Trường Đại học Hoa Sen TP. HCM.

Lĩnh vực nghiên cứu: Hóa tính toán, Hóa môi trường, Hóa hữu cơ, hóa dược.