

**NGHIÊN CỨU KHẢ NĂNG BẢO VỆ THỤ THỂ CHỦ ACE2
VÀ ỨC CHẾ SPIKE PROTEIN 6VSB CỦA SARS-CoV-2
TỪ MỘT SỐ DẪN XUẤT PHENYLPROPENE
BẰNG PHƯƠNG PHÁP MÔ PHÒNG LẮP GHÉP PHÂN TỬ**

**Bùi Quang Thành¹, Nguyễn Vĩnh Phú², Nguyễn Hoài Bảo¹, Phan Tú Quý³,
Trần Thị Ái Mỹ¹, 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: 5/3/2021; ngày hoàn thành phản biện: 15/3/2020; ngày duyệt đăng: 15/4/2021

TÓM TẮT

Các dẫn xuất phenylpropene gồm chavicol acetate (**A1**), eugenol (**A2**), *trans*-isoeugenol (**A3**) và eugenol acetate (**A4**) được nghiên cứu bằng mô phỏng lắp ghép phân tử với việc ức chế thụ thể ACE2 và protein gai sừng (spike protein) (6VSB) của SARS-CoV-2. Kết quả mô phỏng chỉ ra rằng protein ACE2 được ức chế bảo vệ khả năng ức chế theo thứ tự **A1 > A3 > A4 > A2**. So sánh với khả năng ức chế protein 6SVB nhận thấy thứ tự về khả năng ức chế thay đổi theo dãy **A1 > A4 > A3 > A2**. Giá trị độ lệch bình phương trung bình gốc (RMSD) trong các phức hợp nghiên cứu < 2Å khẳng định tiềm năng ức chế. Khả năng ức chế được giải thích dựa vào sự khớp hình học giữa các thành phần tham gia. Các dẫn xuất của phenylpropene được đề xuất là các hợp chất tự nhiên tiềm năng trong việc hỗ trợ quá trình tìm kiếm các dược chất trong nghiên cứu ức chế SARS-CoV-2.

Từ khóa: Mô phỏng lắp ghép phân tử, thụ thể chủ ACE2, spike glycoprotein (6VSB), phenylpropenes.

INHIBITABILITY OF PHENYLPROPENE DERIVATIVES TOWARDS HUMAN PROTEIN ACE2 AND SARS-CoV-2 PROTEIN 6VSB BASED ON MOLECULAR DOCKING SIMULATION

Bui Quang Thanh¹, Nguyen Vinh Phu², Nguyen Hoai Bao¹, Phan Tu Quy³, Tran Thi Ai My¹,
Nguyen Thi Thanh Hai¹, Nguyen Thị 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

Inhibitory capability of phenylpropenes derivatives, including chavicol acetate (**A1**), eugenol (**A2**), *trans*-isoeugenol (**A3**), eugenol acetat (**A4**) with high potentiality for the treatment of SARS-CoV-2 disease, was examined on the host receptor Angiotensin-converting enzyme 2 (ACE2) in human body and spike glycoprotein (6VSB) using molecular docking simulation. Results indicate that ACE2 protein is strongly inhibited by compounds investigated and the inhibitory effectiveness is in the order **A1** > **A3** > **A4** > **A2** while the overall inhibitability of the potential compounds with 6VSB protein follows the order **A1** > **A4** > **A3** > **A2**. Their biologically rigid conformation is given by the corresponding values of RMSD registering under 2 Å in any systems. The expected inhibition is explainable by topographical complementarity between the inhibitory aducts. The studied compounds are suggested as natural medication-assisted agents for selecting potential pharmaceuticals supporting treatment against infection caused by SARS-CoV-2.

Keywords: Molecular docking simulation, SARS-CoV-2, angiotensin-converting enzyme 2 (ACE2), spike glycoprotein (6VSB), phenylpropenes.



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 công tác tại Trường Đại học Khoa học, Đại học Huế.

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



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 công tác tại trường Đại học Y Dược, Đại học Huế.

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



Nguyễn Hoài Bảo sinh năm 1980. Ông tốt nghiệp cử nhân sư phạm Hóa học tại trường Đại học Quy Nhơn; hiện đang theo học chương trình thạc sĩ chuyên ngành Hóa Vô cơ tại trường Đại học Khoa học, Đại học Huế. Hiện nay, ông công tác tại trường THPT Huỳnh Thúc Kháng, tỉnh Quảng Ngãi.

Lĩnh vực nghiên cứu: Hóa vô cơ.



Phan Tứ 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 công tác tại trường Đại học Tây Nguyên.

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



Trần Thị Ái Mỹ sinh ngày 16/02/1982 tại Thừa Thiên Huế. Năm 2004, bà tốt nghiệp Cử nhân Hóa học tại Trường Đại học Sư phạm, Đại học Huế. Năm 2007, bà tốt nghiệp Thạc sĩ Hóa học tại Trường Đại học Khoa học, Đại học Huế. Năm 2018, bà nhận học vị Tiến sĩ Hoá học tại Trường Đại học Vrije Universiteit Brussel, Bỉ. Hiện nay, bà công tác tại Trường Đại học Khoa học, Đại học Huế.

Lĩnh vực nghiên cứu: Phân tích các chất độc trong môi trường, đánh giá nguy cơ rủi ro đối với hệ sinh thái và con người.



Nguyễn Thị Thanh Hải sinh ngày 17 tháng 04 năm 1982 tại Thừa Thiên Huế. Năm 2005, 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 2011, bà nhận bằng thạc sĩ chuyên ngành Hóa lý thuyết và hóa lý tại trường Đại học Khoa học, Đại học Huế. Hiện bà đang là nghiên cứu sinh tại trường Đại học Khoa học, Đại học Huế. Hiện nay, bà công tác tại trường Đại học Khoa học, Đại 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 công tác tại trường Đại học Khoa học, Đại học Huế.

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