

THÔNG TIN KẾT QUẢ NGHIÊN CỨU

1. Thông tin chung

- Tên đề tài: Nghiên cứu phân lập và docking phân tử in silico theo định hướng kháng tế bào ung thư của hợp chất saponin từ loài Huyết giác núi (*Dracaena draco* L.)
- Mã số: TNUE-2025-09
- Chủ nhiệm đề tài: PGS.TS Nguyễn Đức Hùng
- Tổ chức chủ trì: Trường Đại học Sư phạm – Đại học Thái Nguyên
- Thời gian thực hiện: Từ tháng 6-2025 đến tháng 6-2026.

2. Mục tiêu

- Nghiên cứu định tính thành phần hóa học, phân lập được hợp chất saponin từ cây Huyết giác núi.
- Đánh giá được hoạt tính kháng tế bào ung thư bằng phương pháp docking phân tử in silico giữa hợp chất saponin phân lập được và protein liên quan đến chết theo chương trình của tế bào.

3. Tính mới và tính sáng tạo

Đề tài nghiên cứu thành phần hóa học, phân lập hợp chất saponin từ cây Huyết giác núi và đánh giá tiềm năng kháng tế bào ung thư bằng phương pháp docking phân tử *in silico*. Điểm mới của đề tài là kết hợp nghiên cứu hóa học hợp chất thiên nhiên với mô phỏng tính toán nhằm định hướng khả năng tương tác của hợp chất saponin với protein liên quan đến quá trình chết theo chương trình của tế bào.

Cụ thể là:

- i) Cây Huyết giác núi được thu thập, định danh và tạo cao chiết bằng dung môi nước, alcohol ethylic.
- ii) Hợp chất saponin được phân lập bằng các phương pháp sắc ký và xác định cấu trúc bằng các phương pháp phổ hiện đại như 1D, 2D-NMR và MS.
- iii) Hợp chất saponin phân lập được được đánh giá khả năng dính gắn với protein liên quan đến chết theo chương trình của tế bào bằng docking phân tử và kiểm soát bằng giả lập động học phân tử.

4. Kết quả nghiên cứu

Qua quá trình thực hiện đề tài, nhóm nghiên cứu đã đạt được những kết quả tốt theo mục tiêu đề ra, cụ thể:

- Đã tạo được cao chiết và đánh giá được hoạt tính sinh học từ lá của loài *Huyết giác núi*.
- Đã phân lập và xác định được cấu trúc của 01 hợp chất saponin từ cao chiết lá của loài *Huyết giác núi*.
- Đã đánh giá được khả năng dính gắn của hợp chất saponin và steroids với protein liên quan đến chết theo chương trình của tế bào bằng các phương pháp mô phỏng *in silico*.

5. Sản phẩm

5.1. Sản phẩm khoa học

1. Hung Duc Nguyen (2026), “Unveiling the mechanism of selected steroids targeting G6PD in gastric cancer through computational approaches”, *Indian Journal of Chemistry* 65(05): 458-474, DOI: <https://doi.org/10.56042/ijc.v65i5.25391>.
2. Souvanna Xayyasith, Nguyễn Thị Thu Nga, Ngô Mạnh Dũng, Nguyễn Đức Hùng (2026), “Nghiên cứu phân lập steroidal saponin từ lá loài *Huyết giác núi* (*Dracaena draco* L.)”, *TNU Journal of Science and Technology* 231(09): 199 - 204.

5.2. Sản phẩm đào tạo

- Hướng dẫn 01 đề tài nghiên cứu khoa học sinh viên: Trần Minh Thảo (2026), “Nghiên cứu xác định thành phần hóa học và tạo cao chiết bằng phương pháp sóng âm từ cây *Huyết giác núi* (*Dracaena draco* L.)”, Đề tài nghiên cứu khoa học sinh viên, Trường Đại học Sư phạm – Đại học Thái Nguyên, 2026.

5.3. Sản phẩm ứng dụng

- 01 Biên bản chuyển giao quy trình phân lập hợp chất saponin từ mẫu nghiên cứu của đề tài cho cơ sở giáo dục phục vụ đào tạo và nghiên cứu khoa học.

6. Phương thức chuyển giao, địa chỉ ứng dụng, tác động và lợi ích mang lại của kết quả nghiên cứu

6.1. Phương thức chuyển giao

- Kết quả của đề tài được công bố là các bài báo khoa học trên các tạp chí trong nước và quốc tế.
- Được nộp thư viện làm tài liệu tham khảo phục vụ cho cán bộ tham khảo tài liệu để nghiên cứu, giảng dạy về Sinh dược học, Hóa học các hợp chất thiên nhiên tại Đại học Thái Nguyên.

6.2. Địa chỉ ứng dụng

- Kết quả của đề tài là tài liệu tham khảo cho cán bộ làm công tác nghiên cứu, giảng viên giảng dạy về hóa dược, công nghệ dược phẩm tại Trường Đại học Sư phạm – Đại học Thái Nguyên, và các cơ sở giáo dục trên địa bàn Tỉnh Thái Nguyên nói riêng và cả nước nói chung.

- Kết quả của đề tài là tài liệu tham khảo cho Nghiên cứu sinh, Học viên cao học, Sinh viên, và học sinh quan tâm tới lĩnh vực Hóa học các hợp chất thiên nhiên.

6.3. Tác động và lợi ích mang lại của kết quả nghiên cứu

6.3.1. Đối với lĩnh vực giáo dục và đào tạo

- Kết quả của đề tài được cụ thể hóa bằng hướng dẫn 01 đề tài nghiên cứu khoa học sinh viên, có ý nghĩa thực tiễn trong phục vụ đào tạo đại học và sau đại học tại Đại học Thái Nguyên, là tài liệu tham khảo cho học sinh, sinh viên, học viên cao học, nghiên cứu sinh và cán bộ giảng dạy ngành Sinh học và Hóa học các hợp chất thiên nhiên.

6.3.2. Đối với lĩnh vực khoa học và công nghệ có liên quan

- Kết quả của đề tài được cụ thể hóa bằng 01 bài báo khoa học thuộc danh mục các tạp chí quốc tế SCIE-Q3 và 01 bài báo đăng trên tạp chí trong nước có uy tín, giúp các nhà nghiên cứu trong nước và trên thế giới có nguồn thông tin tham khảo để nghiên cứu tăng cường hoạt tính sinh học của các hợp chất thiên nhiên, tạo ra loại thuốc mới.

6.3.3. Đối với phát triển kinh tế-xã hội

- Kết quả của đề tài có ý nghĩa thực tiễn trong việc góp phần vào quá trình tìm ra các hợp chất mới trong việc điều trị bệnh.

6.3.4. Đối với tổ chức chủ trì và các cơ sở ứng dụng kết quả nghiên cứu

- Nâng cao năng lực nghiên cứu cho nhóm nghiên cứu đề tài, đồng thời tăng cường sự hợp tác trong nghiên cứu khoa học của cán bộ Đại học Thái Nguyên với các cơ sở khác trong và ngoài nước. Kết quả nghiên cứu giúp các công ty dược phẩm có thêm những lựa chọn nghiên cứu để tìm ra các loại thuốc mới.