โครงสร้างของกรดเบทูลินิก (**1**) ถูกพิสูจน์ทราบด้วยเทคนิคเอ็กซ์เรย์สเปกโตรสโคปีแบบผลึกเดี่ยว พบว่าโครงสร้างที่ได้สอดคล้องกับผลที่ได้โดยการคำนวณจากวิธีทางทฤษฎีเดนซิตีฟังก์ชันนัลที่ทฤษฎีระดับ B3LYP/6-31G(d) ซึ่งแสดงว่าโครงสร้างที่ได้ดังกล่าวเป็นโครงสร้างที่เสถียรที่สุด

กรดเบทูลินิก **1**, acetylbeutulinic acid, **2**, 3-*O* -(*E*)-cinnamoylbetulinic acid, **3**, 3-*O*-(*E*)-coumaroybetulinic acid, **4** และ 3-*O*-(*E*)-*p*-chlorocinnamoylbetulinic acid, **5** ถูกคำนวณหาโครงสร้างที่เหมาะสมและศึกษาการจับกับแอล-ลิวซีน แอล-แอสพาราจีน และแอล-ฟีนิลอะลานีนโดยใช้ทฤษฎีระดับ B3LYP/6-31G(d) และ ZPVE correction ในสถานะก๊าซ พบว่า **1** จับกับ L-Leu และ **4** จับกับ L-Asn และ L-Phe ได้ดีที่สุด เมื่อเปรียบเทียบกับการศึกษาทางเทคนิคนิวเคลียร์แมกเนติกเรโซแนนซ์ไตเตรชันในตัวทำละลาย dimethylsulfoxide-d_6 ซึ่งไตเตรต **1** และ **2** กับเกลือเตตระบิวทิลแอมโมเนียมของ L-Leu, L-Asn และ L-Phe สังเกตค่า chemical shift ของโปรตอนที่เปลี่ยนแปลงไปเมื่อเพิ่มความเข้มข้นของกรดอะมิโนขณะทำการไตเตรต และนำผลที่ได้มาหาค่าคงที่การเกิดสารประกอบเชิงซ้อน (K) โดยใช้โปรแกรม EQNMR พบว่า **1** จับกับ TBA·L-Asn และ **2** จับกับ TBA·L-Leu ได้ดีที่สุด

The molecular structure of betulinic acid, **1**, was investigated with the X-ray single crystal spectroscopy technique. The result shows good agreement with calculated result obtained using the density functional theory at the B3LYP/6-31G(d) level of theory confirms that this conformer is the most stable structure.

Betulinic acid **1**, acetylbeutulinic acid, **2**, 3-*O*-(*E*)-cinnamoylbetulinic acid, **3**, 3- *O*-(*E*)-coumaroybetulinic acid, **4** and 3- *O*-(*E*)-*p*-chlorocinnamoylbetulinic acid, **5** were also computed their geometry optimizations and studied their L-Leucine, L-Asparagine and L-Phenylalanine binding properties at the B3LYP/6-31G(d) level with ZPVE correction in gas phase. It has been found that **1** is the best to bind L-Leu and **4** is the best to bind L-Asn and L-Phe. **1** and **2** were studied their binding properties with tetrabutylammonium salt of L-Leu, L-Asn and L-Phe using the nuclear magnetic resonance spectroscopy titration technique in dimethylsulfoxide-d_6. Changes of chemical shifts of the protons during addition of amino acid concentration were observed and investigated their complexation formation constants (K) using EQNMR program. The results show that **1** prefers to bind TBA·L-Asn and **2** prefers to bind TBA·L-Leu.