

УДК 541.1

## **IN SILICO МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ПОЛИФЕНОЛОВ ПРОДУКТОВ ПИТАНИЯ С БЕЛКОМ РЕЦЕПТОРОМ ГОРЬКОГО ВКУСА TAS2R38**

**Ивушкова К.О. (ИТМО), Кисляк А.Б. (ИТМО)**

**Научный руководитель – Волкова О. О. (ИТМО)**

**Введение.** Восприятие горького вкуса является одним из ключевых защитных механизмов, позволяющим животным избегать потенциально опасных и токсичных веществ в пище. Тем не менее, не все горькие молекулы представляют угрозу; различные полифенолы растительного происхождения проявляют сильные антиоксидантные и противовоспалительные свойства.[1] Пищевые продукты являются сложными системы, где общий вкус формируется на основе характеристик всех компонентов и их соотношения. Возможность моделирования конечного вкуса продуктов на основе свойств отдельных ингредиентов представляет значительный интерес для пищевых и биологических технологий.

Механизм восприятия горечи в основном реализуется через вкусовую систему человека, особенно благодаря горьким рецепторам типа TAS2R, которые связаны с G-белками и преимущественно расположены на поверхности языка и в ротовой полости. При связывании горькой молекулы с рецептором TAS2R активируется сигнальный путь, что приводит к ощущению горечи. Таким образом, моделирование взаимодействия малых молекул с рецепторами горького вкуса TAS2R открывает возможности для предсказания вкусовых свойств компонентов пищи.

В качестве объекта исследования выбран белок рецептор горького вкуса TAS2R38, который является одним из белков класса TAS2R. В рамках данного проекта было исследовано взаимодействие полифенольных кислот (кофейной, хлорогеновой, эллаговой, феруловой и галловой)[2] с белком рецептором горького вкуса TAS2R38.

**Основная часть.** С помощью инструментов хемоинформатики были решены следующие задачи:

- 1) С использованием библиотеки RDKit был проведен анализ базы данных горьких соединений и выбрана референсная молекула для дальнейшего анализа. Референс выбирался на основе подобия его структуры со структурами лигандов полифенольных кислот. В качестве параметра подобия использовался индекс подобия Танимото.
- 2) Были определены сайты связывания белка рецептора горького вкуса TAS2R38.
- 3) Для определения наилучшего положения выбранных лигандов в комплексе с белком TAS2R38 были использованы алгоритмы AutoDock Vina[3] и Smina[4].
- 4) Были определены энергии связывания ( $\Delta G$ ) выбранных полифенольных кислот с белком рецептором горького вкуса TAS2R38.

**Выводы.** Согласно полученным результатам среди выбранных полифенольных кислот наилучшую аффинность ( $\Delta G = -7,7$  ккал/моль) к белку рецептору горького вкуса TAS2R38 показала хлорогеновая кислота.

### **Список использованных источников:**

1. Zhang Z. et al. Polyphenols as Plant-Based Nutraceuticals: Health Effects, Encapsulation, Nano-Delivery, and Application // Foods. 2022. Vol. 11, № 15. P. 2189.
2. Yang F. et al. Effects of Fermentation on Bioactivity and the Composition of Polyphenols Contained in Polyphenol-Rich Foods: A Review // Foods. 2023. Vol. 12, № 17. P. 3315.
3. Trott O., Olson A.J. AutoDock Vina: Improving the speed and accuracy of docking with a new scoring function, efficient optimization, and multithreading // J. Comput. Chem. 2010. Vol. 31, № 2. P. 455–461.
4. Koes D.R., Baumgartner M.P., Camacho C.J. Lessons Learned in Empirical Scoring with smina from the CSAR 2011 Benchmarking Exercise // J. Chem. Inf. Model. 2013. Vol. 53, № 8. P. 1893–1904.