

ФЕРМЕНТАТИВНАЯ АКТИВНОСТЬ ЭКСТРАКТА ЧЕРНИКИ В ОТНОШЕНИИ ГЛЮКАН-1,4- α -ГЛЮКОЗИДАЗЫ (ЕС 3.2.1.3), α -ГЛЮКОЗИДАЗЫ (ЕС 3.2.1.20) И β -ГЛЮКОЗИДАЗЫ (ЕС 3.2.1.21)

Бабинцев К.А.¹, Курбонова М.К.¹

Научный руководитель – кандидат технических наук, доцент Бараненко Д.А.¹

¹Университет ИТМО

kirik.bv@bk.ru

Работа выполнена в рамках государственного задания (проект FSER-2025-0008).

Введение

Разработка функциональных продуктов питания активно растущая сфера пищевой биотехнологии. Исследование свойств продуктов, влияния их компонентов на здоровье и самочувствие человека сегодня может быть обеспечено внедрением медицинских и биологических методов анализа в сферу пищевых систем.

Актуально представляется использовать накопившийся опыт в сфере разработки лекарственных средств в области продуктов питания, так как профилактика патологических изменений может быть более предпочтительна чем лечение уже существующей проблемы. Так проблема ожирения и быстрых углеводов сегодня особенно актуальна, переедание влечет за собой набор массы и как следствие проблемы с регуляцией уровня сахара в крови, так как жировые клетки влияют на выработку инсулина [1].

Разработка функциональных продуктов с антигликимической активностью могут быть решением проблемы и предотвратить расстройства. Исследование ферментативной активности продуктов и соединений в составе продукта актуальная задача для сегодняшнего фудтех сообщества [2,3].

Цель исследования произвести биоинформатический анализ компонентов экстракта черники на активность по отношению к ферментам углеводного обмена, с последующим получением экспериментальных значений характеристик ингибирования и определение антигликимической активности экстракта

Основная часть

Молекулярный докинг лигандов с ферментами углеводного обмена осуществляется для определения возможности конформационного соединения мишени в активном центре рецептора. В работе использовали базы данных UniProt и PDB. Расчет энергий связывания происходил в программе в UCSF Chimera.

По окончании скрининга выявлены молекулы обладающие наименьшим докинг скором, определены типы связей, выбраны перспективные кандидаты для дальнейших исследований. Для анализа стабильности связей использовали методы молекулярной динамики использованием пакета GROMACS. Рассчитывали стандартные характеристики RMSD, RMSF [4].

Экспериментально исследовали доза-эффект зависимости, а также характеристики IC50 для глюкоамилазы, альфаглюкозидазы и бетаглюкозидазы [5].

Методы биоинформатики позволили сократить процедуру предварительного поиска и могут быть использованы как начальный этап разработки функциональных продуктов питания [6].

Выводы

Методы молекулярного докинга, молекулярной динамики и *in vitro* исследование позволили оценить способность продукта ингибировать ферменты углеводного обмена. Расчет доза-эффект зависимостей подтвердил возможность рассматривать экстракт как потенциальный ингибитор гликимической активности. Дальнейшие исследования необходимы для определения способов доставки и биодоступности. Методы вычислительной биологии подтвердили эффективность междисциплинарного подхода для разработки функциональных продуктов питания.

Литература

1. Wang L., Li C., Huang Q., Fu X. Polysaccharides and polyphenols as inhibitors of α -glucosidase and α -amylase: recent advances // Food Chemistry. 2022. Vol. 372. 131270. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2021.131270>.
2. Khoo H.E., Azlan A., Tang S.T., Lim S.M. Anthocyanidins and anthocyanins: colored pigments as food, pharmaceutical ingredients and potential health benefits — recent updates // Food & Nutrition Research. 2021. Vol. 65. <https://doi.org/10.29219/fnr.v65.5523>.
3. Pinzi L., Rastelli G. Molecular docking: shifting paradigms in drug discovery and food bioactive research // International Journal of Molecular Sciences. 2021. Vol. 22. 6608. <https://doi.org/10.3390/ijms22126608>.
4. Hollingsworth S.A., Dror R.O. Molecular dynamics simulation for biomolecular modeling: recent methodological advances and applications // Neuron. 2018. Vol. 99, no. 6. P. 1129–1142. <https://doi.org/10.1016/j.neuron.2018.08.011>.
5. Xu J., Zhang Y., Wang W. et al. Berry polyphenols as natural inhibitors of carbohydrate-hydrolyzing enzymes: mechanisms and structure–activity relationships // Nutrients. 2023. Vol. 15. 2481. <https://doi.org/10.3390/nu15112481>.
6. Chen J., Li X., Li Y. Functional foods targeting postprandial glycemia: current evidence and future perspectives // Trends in Food Science & Technology. 2024. Vol. 143. P. 104–116. <https://doi.org/10.1016/j.tifs.2024.01.002>.