

Скрининг молекулярных свойств и аффинности связывания компонентов лавра благородного (*Laurus nobilis*) с ферментами пищеварения человека

Иванов Н.*, Пенцак Е.
Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН, Москва, Россия
* nikstar.ivanov@yandex.ru

Ключевые слова: лавр благородный; липаза; биологически активные вещества

Мотивация и цель: Биологически активные вещества лавра благородного (*Laurus nobilis*) отличаются высокими антидиабетическими свойствами, имеют высокий потенциал применения в эндокринологической практике [1–5], однако информация о молекулярном взаимодействии некоторых компонентов лавра благородного с молекулами ферментами человека представляется недостаточной. В связи с этим целью данной работы является изучение молекулярных свойств и аффинности связывания компонентов лавра благородного с трехмерными структурами пищеварительных ферментов человека.

Методы и алгоритмы: Трехмерная структура лизосомальной кислой липазы человека была получена методом гомологичного моделирования в предыдущей работе [6]. Процедура молекулярного докинга данного фермента с трехмерными структурами биологически активных компонентов лавра благородного [7] была проведена с использованием программного обеспечения AutoDock Vina, Proteins.Plus.

Результаты: в результате проведенных исследований получены данные аффинности связывания и типа молекулярного взаимодействия основных компонентов лавра благородного с лизосомальной кислой липазой человека, представленные в табл. 1.

Таблица 1. Данные аффинности связывания и типа молекулярного взаимодействия

Компоненты	Аффинность связывания, Ккал/моль	Тип взаимодействия
1,8-цинеол	–8.8	Водородное
терпинилацетат	–7.9	Гидрофобное
α-пинен	–6.8	Гидрофобное

Выводы: Экспериментальные данные *in silico* исследования показывают наличие белок-лигандного взаимодействия между лизосомальной кислой липазой человека и компонентами экстракта лавра благородного. Одним из направлений дальнейших исследований может быть скрининг *in vitro* кинетики связывания компонентов растения и ферментов пищеварения человека.

Screening of molecular properties and binding affinities of laurel (*Laurus nobilis*) components with human digestive enzymes

Ivanov N.*, Pentsak E.
N.D. Zelinsky Institute of Organic Chemistry of the Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia
* nikstar.ivanov@yandex.ru

Key words: bay laurel; lipase; biologically active substances

Motivation and Aim: The biologically active substances of laurel nobilis (*Laurus nobilis*) are distinguished by high antidiabetic properties and have a high potential for use in endocrinological practice [1–5], however, information on the molecular interaction of some components of laurel nobilis with human enzyme molecules seems insufficient. In this regard, the purpose of this work is to study the molecular properties and binding affinities of *Laurus nobilis* components with the three-dimensional structures of human digestive enzymes.

Methods and Algorithms: The three-dimensional structure of human lysosomal acid lipase was obtained by homology modeling in a previous work [6]. The procedure for molecular docking of this enzyme with three-dimensional structures of biologically active components of *Laurus nobilis* [7] was carried out using AutoDock Vina, Proteins.Plus software.

Results: As a result of the studies, data on the binding affinity and type of molecular interaction of the main components of *Laurus nobilis* with human lysosomal acid lipase were obtained, presented in the Table 1.

Table 1. Affinity and type of molecular interaction

Components	Binding affinity, Kcal/mol	Interaction
1,8-cineol	–8.8	Hydrogen
terpinyl acetate	–7.9	Hydrophobic
α-pinene	–6.8	Hydrophobic

Conclusion: Experimental data from *in silico* studies indicate the presence of protein-ligand interactions between human lysosomal acid lipase and components of bay laurel extract. However, further *in vitro* studies are needed to determine how these components can be used.

Список литературы/References

1. Mohammed R.R. et al. Biomedical effects of *Laurus nobilis* L. leaf extract on vital organs in streptozotocin-induced diabetic rats: Experimental research. *Ann Med Surg.* 2021;61:188-197
2. Daher C. et al. *Laurus nobilis* leaves extract protects against high fat diet-induced type 2 Diabetes in rats. *J Pharmacogn Phytotherapy.* 2021;13(3):82-90
3. Bourebaba N. et al. *Laurus nobilis* ethanolic extract attenuates hyperglycemia and hyperinsulinemia-induced insulin resistance in HepG2 cell line through the reduction of oxidative stress and improvement of mitochondrial biogenesis – possible implication in pharmacotherapy. *Mitochondrion.* 2021;59:190-213

4. Senou M., Lokonon J.E., Ayitchehou G. et al. Antidiabetic activity of aqueous extracts of laurus nobilis, a spice used by beninese traditional therapists. *Am J Med Sci.* 2021;9:115-119
5. Chbili C., Maoua M., Selmi M. et al. Evaluation of daily Laurus nobilis tea consumption on lipid profile biomarkers in healthy volunteers. *J Am College of Nutrition.* 2020;39(8):733-738
6. Иванов Н.В. Молекулярный *in silico* скрининг и докинг потенциальных ингибиторов активности ферментов растительного сырья. *Хранение и переработка сельхозсырья.* 2023;(1):117-135. doi 10.36107/spfp.2023.399
[Ivanov N.V. Molecular *in silico* screening and docking of potential inhibitors of enzyme activity of plant raw materials. *Storage and Processing of Farm Products.* 2023;(1):117-135. doi 10.36107/spfp.2023.399 (in Russian)]
7. Fidan H. et al. Chemical composition and antimicrobial activity of Laurus nobilis L. essential oils from Bulgaria. *Molecules.* 2019;24(4):804