

Научная статья  
УДК 004.89.615.224

## СОЗДАНИЕ ПЕПТИДА НА ОСНОВЕ ПРОТЕОМНОЙ БАЗЫ

Степан Витальевич Самойлов<sup>1</sup>, Сергей Леонидович Тихонов<sup>2</sup>

<sup>1, 2</sup> Уральский государственный лесотехнический университет,

Екатеринбург, Россия

<sup>1</sup> stepan5amoilov@yandex.ru

<sup>2</sup> tihonov75@bk.ru

**Аннотация.** Статья описывает дизайн антигипергликемических пептидов с использованием UniProt. Определены ключевые параметры, что подтверждает эффективность вычислительных методов. Новые последовательности – перспективные кандидаты для исследований активности, токсичности и стабильности.

**Ключевые слова:** компьютерный дизайн пептидов, антигипергликемические пептиды, биоинформационный анализ, использование протеомных баз данных, молекулярное моделирование

**Для цитирования:** Самойлов С. В., Тихонов С. Л. Создание пептида на основе протеомной базы // Научное творчество молодежи – лесному комплексу России = Scientific creativity of youth to the forest complex of Russia : материалы XXII Всероссийской (национальной) научно-технической конференции студентов и аспирантов. Екатеринбург : УГЛТУ, 2026. С. 1230–1234.

Original article

## CREATION OF A PEPTIDE BASED ON A PROTEOMIC BASE

Stepan V. Samoilov<sup>1</sup>, Sergey L. Tikhonov<sup>2</sup>

<sup>1, 2</sup> Ural State Forest Engineering University, Ekaterinburg, Russia

<sup>1</sup> stepan5amoilov@yandex.ru

<sup>2</sup> tihonov75@bk.ru

**Abstract.** The article describes the design of antihyperglycemic peptides using UniProt. The key parameters have been determined, which confirms the effectiveness of computational methods. The new sequences are promising candidates for research of activity, toxicity, and stability.

**Keywords:** computer design of peptides, antihyperglycemic peptides, bioinformatic analysis, use of proteomic databases, molecular modeling

**For citation:** Samoilov S. V., Tikhonov S. L. (2026) Sozdanie peptida na osnove proteomnoj bazy` [Creation of a peptide based on a proteomic base]. Nauchnoe tvorchestvo molodezhi – lesnomu kompleksu Rossii [Scientific creativity of youth to the forest complex of Russia] : materials of the XXII All-Russian (national) Scientific and Technical Conference of undergraduate and postgraduate students. Ekaterinburg : USFEU, 2026. P. 1230–1234. (In Russ).

Пептиды, как основополагающая часть всего живого, находят широкое применение в медицине благодаря своим функциям. Одной из важнейших функций пептидов является гормональная функция: пептиды способны действовать как гормоны, регулируя различные физиологические процессы. Пептиды выполняют значимую регуляторную функцию в нервной системе, выступая в роли ключевых медиаторов. Подобного рода пептиды используются для регулирования настроения, уровня боли и стресса. Благодаря структуре пептиды избирательно взаимодействуют с рецепторами или ферментами, обеспечивая мощное терапевтическое действие с минимальными побочными эффектами и низкой токсичностью.

Несмотря на существование множества методов для изучения белок-белковых взаимодействий, таких как коиммунопреципитация, аффинная очистка с масс-спектрометрией, кристаллография и флуоресцентный резонансный перенос энергии (FRET), их применение тесно связано с общими фундаментальными ограничениями: высокой стоимостью и трудозатратностью, ограниченным охватом исследований и нацеленность на существующие пептиды. В современной пептидологии при разработке препаратов используется компьютерное проектирование пептидов [1].

Метод компьютерного проектирования становится более эффективным благодаря развитию машинного обучения и нейронных сетей. Современные ресурсы, например UniProt, являются ключевой основой для компьютерного проектирования пептидов. Они предоставляют стандартизированные данные о белковых последовательностях и их функциях, которые, в свою очередь, используются для обучения моделей искусственного интеллекта.

Целью данной работы является создание пептида на основе протеомной базы UniProt.

Основными задачами исследования являются: идентификация нужных характеристик пептидов, определяющих их биологическую активность; создание пептидных последовательностей с заданными физико-химическими параметрами на основе базы UniProt; прогнозирование характеристик пептидов: активности (антигликемической), токсичности, устойчивости.

Для достижения цели был выбран антигликемический пептид. Для его создания были проанализированы несколько подобных пептидов (ГПП, эксенатид, С-пептид, лираглутид и INGAР-пептид) и выделены их ключевые

характеристики. Оптимальная длина пептида составила 30–50 аминокислот. Короткие пептиды (менее 30 аминокислот) теряют активность, а длинные (более 50) увеличивают иммуногенность. Средний заряд пептида составляет +2. Этот небольшой положительный заряд улучшает взаимодействие с клеточными мембранами. Изоэлектрическая точка (pI) пептида находится в оптимальном диапазоне 4,5–6,5, обеспечивает хорошую растворимость при pH крови и эффективное связывание с рецепторами. Значение GRAVY – в диапазоне от –0,5 до 0. Все пептиды гидрофильны, что гарантирует их растворимость в крови. Все пептиды имеют  $\alpha$ -спирали, которые обеспечивают стабильность и связывание. Некоторые содержат трансмембранные домены для интеграции в мембрану и  $\beta$ -листы для жесткой структуры. Гидрофильные петли улучшают растворимость пептидов [2].

Для создания новых пептидов был проведен поиск в базе данных UniProt по ключевым словам antihyperglycemic peptide, GLP-1 и incretin mimetic [3–5]. Затем результаты были отфильтрованы по заданным характеристикам. На основе выявленных шаблонов и их консервативных участков были разработаны последовательности, которые сохранили ключевые функциональные элементы природных пептидов, и оптимизированы под целевые характеристики.

Последовательность № 1: Glu-Ala-Val-Glu-Leu-Ala-Ser-Lys-Pro-Leu-Arg-Glu-Leu-Leu-Ala-Gln-Ala-Leu-Glu-Lys-Ala-Phe-Val-Gln-Trp-Leu-Ile-Arg-Ser-Arg-Asp

Последовательность № 1 представляет собой входящую в оптимальный диапазон (30–50) последовательность аминокислот. Ее длина составляет 31 звено. Расчетный заряд приближается к +2. Изоэлектрическая точка (pI) составляет около 5,6, молекула обладает слабокислыми свойствами. Гидрофобность (GRAVY) равна примерно –0,3. Молекула имеет низкую гидрофобность и будет растворяться в воде. Предсказанная структура включает амфипатическую  $\alpha$ -спираль (аминокислоты 10–25), где на одной стороне спирали находятся гидрофобные остатки (Leu, Val, Phe, Trp, Ile), обеспечивающие взаимодействие с рецептором. На другой же стороне спирали расположены гидрофильные остатки (Glu, Lys, Arg), которые способствуют растворимости молекулы в воде, ее контакту с водной средой. Участки, расположенные по краям спирали, обеспечивают ей гибкость. Молекулярное моделирование и предсказание свойств с помощью инструментов, таких как AlphaFold, подтвердили, что полученная последовательность соответствует заданным требованиям по длине, заряду, изоэлектрической точке, гидрофобности и вторичной структуре.

Последовательность №2: His-Ala-Glu-Gly-Thr-Phe-Thr-Ser-Asp-Val-Ser-Ser-Tyr-Leu-Glu-Gly-Gln-Ala-Ala-Lys-Glu-Phe-Ile-Ala-Trp-Leu-Val-Arg-Gly-Arg-Gly.

Последовательность № 2 состоит из 31 аминокислоты. Ее расчетный заряд составляет примерно +2. Изоэлектрическая точка (pI) находится в допустимом диапазоне (4,5–6,5) и равна 5,8. Гидрофобность (GRAVY) составляет –0,4, что попадает в оптимальный диапазон от –0,5 до 0, что указывает на умеренную гидрофильность. Это означает, что молекула обладает низкой гидрофобностью и, скорее всего, хорошо растворяется в воде.

В средней части цепи находится протяженная  $\alpha$ -спираль, которая критически важна для связывания с рецептором ГПП-1. Гидрофильные остатки обеспечивают растворимость молекулы. Моделирование на молекулярном уровне и прогнозирование свойств подтвердили, что полученная последовательность соответствует заданным параметрам по длине, расчетному заряду, изоэлектрической точке, гидрофобности и вторичной структуре.

Полученные последовательности соответствуют ключевым критериям и являются гипотетическими кандидатами для дальнейшего исследования и экспериментального тестирования на антигипергликемическую активность, токсичность и стабильность.

В рамках исследования был успешно разработан компьютерный дизайн двух новых пептидных последовательностей, гипотетически обладающих антигипергликемической активностью. Анализ природных пептидов на основе протеомной базы данных UniProt позволил определить ключевые параметры: оптимальную длину (30–50 аминокислотных остатков), заряд (+2), изоэлектрическую точку (4,5–6,5) и гидрофобность (значение GRAVY от –0,5 до 0). Разработанные пептиды полностью соответствуют заданным характеристикам и включают структурные элементы, важные для их биологической активности. Полученные результаты подтверждают, что комбинация биоинформатического анализа с современными методами молекулярного моделирования является эффективным подходом к дизайну терапевтических пептидов. Описанные последовательности представляют собой перспективных кандидатов для дальнейших экспериментальных исследований.

#### *Список источников*

1. Main methods and tools for peptide development based on protein-protein interactions (PPIs) // Sciencedirect : [сайт]. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0006291X25003377> DOI: 10.1016. (дата обращения: 11.10.2025).

2. Препараты для лечения сахарного диабета // Справочник MSO: [сайт]. URL : <https://www.msdmanuals.com/ru/professional/эндокринные-и-метаболические-нарушения/сахарный-диабет-и-нарушения-углеводного-обмена/препараты-для-лечения-сахарного-диабета> (дата обращения: 15.10.2025).

3. UniProt Consortium. GLUC\_HUMAN (P01275) // Uniprot : [сайт].  
URL : <https://www.uniprot.org/uniprotkb/P01275/entry> (дата обращения: 15.10.2025).

4. UniProt Consortium. ANPRC\_HUMAN (P17342) // Uniprot : [сайт].  
URL : <https://www.uniprot.org/uniprotkb/P17342/entry> (дата обращения: 20.10.2025).

5. UniProt Consortium. U3KRF3\_YEASX (U3KRF3) // Uniprot : [сайт].  
URL : <https://www.uniprot.org/uniprotkb/U3KRF3/entry> (дата обращения: 20.10.2025).