

нике, типов растворителя образца и ионизирующих добавок на интенсивность аналитических сигналов определяемых веществ.

В рамках экспериментальной работы испытаны различные способы масс-спектрометрической ионизации аналитов – электрораспылительная ионизация (ESI) и химическая ионизация при атмосферном давлении (APCI). Проведено сравнение предлагаемых способов ионизации с электронным ударом в методе газовой хромато-масс-спектрометрии. В качестве дериватизирующих агентов апробированы различные производные гидроксилamina и дансил-хлорид.

Незначительная разница в структуре родственных стероидных гормонов и их метаболитов предопределяет сложность их хроматографического разделения, низкое разрешение пиков, сложность их интегрирования и, как следствие, снижение точности количественной оценки. Оценено влияние состава элюентов, вида градиентного элюирования и других хроматографических параметров на эффективность разделения комплекса компонентов в сложных биологических образцах.

Апробированы различные подходы пробоподготовки биоматериала с использованием

жидкостно-жидкостной экстракции, твердофазной экстракции, осадительных приемов с оценкой эффективности извлечения целевых соединений из биологических сред. Учитывая разнообразие химических компонентов, присутствующих в сыворотке крови и слюне человека и способных оказывать влияние на результат аналитического отклика, процесс пробоподготовки направлен на создание оптимальных условий для эффективного извлечения целевых соединений и максимальной очистки конечной вытяжки.

В ходе разработки условий пробоподготовки для полноценного извлечения андрогенов из биоматериала оптимизированы следующие параметры: тип и объем растворителя, объемы вспомогательных реагентов, скорость и время перемешивания, температура, рН среды.

Выбраны оптимальные условия количественного определения андрогенов в сыворотке крови и слюне человека, разработана селективная и высокочувствительная методика анализа для достоверной и своевременной оценки андрогенов в рамках гормональной клинической диагностики.

Список литературы

1. Alemany M. // *Int. J. Mol. Sci.* – 2022. – V. 23. – P. 1–69.
2. Olisov D., Lee K., Jun S.H., Song S.H., Kim J.H., Lee Y.A., Song J. // *J. Chromatogr. B.* – 2019. – V. 1117. – P. 1–9.
3. Ankarberg-Lindgren C., Dahlgren J., Andersson M.X. // *J. Steroid. Biochem. Mol. Biol.* – 2018. – V. 183. – P. 116–124.

ГЕНЕРАЦИЯ ХИМИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ С ПОМОЩЬЮ НЕЙРОСЕТЕВЫХ МЕТОДОВ

Б. И. Пякилля

Научный руководитель – д.т.н., профессор ОАР ИШИТР ТПУ В. И. Гончаров
Национальный исследовательский Томский политехнический университет
Россия, г. Томск, пр. Ленина, д. 30
morphism@tpu.ru

Генерация химических соединений с использованием нейросетевых методов открывает новые возможности в химии и фармацевтике, что позволяет ускорить и удешевить процесс поиска и разработки новых лекарственных средств и материалов. Основной задачей в хемоинформатике является создание молекулярных структур с заданными свойствами и активностями,

что ранее требовало значительных временных и ресурсных затрат [1].

Нейросетевые методы, такие как генеративно-сопоставительные сети (GANs) и вариационные автокодировщики (VAEs), демонстрируют высокую эффективность в генерации новых молекул, которые могут обладать полезными для медицины и промышленности свойствами. Эти методы

позволяют моделировать сложные молекулярные структуры, учитывая их химическую совместимость и потенциальную биологическую активность. Использование нейронных сетей для генерации химических соединений также включает в себя оценку фармакокинетических свойств, токсичности и других параметров, важных для разработки лекарственных препаратов. Таким образом, ИИ не только помогает в создании новых молекул, но и способствует их анализу и отбору на ранних этапах разработки.

Генеративно-сопоставительные сети (GANs) работают на принципе обучения двух сетей: генератора, создающего молекулы, и дискриминатора, оценивающего, насколько сгенерированные молекулы похожи на настоящие. Вариационные автокодировщики (VAEs) используются для создания многомерного латентного пространства

молекул, позволяя таким образом генерировать новые соединения путем выборки из этого пространства.

Кроме того, применение машинного обучения позволяет обнаруживать неочевидные закономерности в структуре и свойствах веществ, что открывает путь к созданию инновационных соединений. Важным преимуществом нейросетевых методов является их способность обучаться на основе существующих данных, что делает их особенно ценными в условиях ограниченной информации о новых молекулах.

Развитие нейросетевых технологий в химии и фармации приведет к сокращению времени и затрат на исследования и разработку новых веществ, способствуя быстрому внедрению инновационных продуктов на рынок.

Список литературы

1. Daniel C.E., Zois B., Mark D.F. *Deep learning for molecular design – a review of the state of the art*. // *Mol. Syst. Des. Eng.* – 2019. – 4. – P. 828–849.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ СПЕКТРАЛЬНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК АЦЕТОНОВЫХ ЭКСТРАКТОВ КАУЧУКОВ МЕДИЦИНСКОГО НАЗНАЧЕНИЯ

Е. Н. Ригер, А. Ю. Грозеску, Т. Е. Суханова

ФГБУ «Научно-исследовательский институт синтетического каучука им. академика С. В. Лебедева»
198035, С.-Петербург, ул. Гапсальская, 1
catherine.riger@yandex.ru

Медицинские и пищевые резины на основе натуральных и синтетических каучуков, разрешенных органами здравоохранения для изготовления изделий медицинского назначения или контактирующих с продуктами питания, широко используются в настоящее время: в медицинской промышленности (при производстве изделий для эндопротезирования, клапанов, катетеров, контактирующих с кровью, в урологии и анестезиологии и др.), в фармацевтической промышленности (для укупорки лекарственных препаратов), а также в отраслях, производящих и реализующих пищевые продукты [1].

Такие резины должны обладать комплексом специфических свойств, обусловленным их назначением, в том числе, широким спектром биологической активности. Ранее нами была исследована антибактериальная и фунгицидная

активность экстрактов каучуков медицинского назначения. Показано, что наибольшим ингибирующим действием в отношении тест-микроорганизмов обладают экстракты изопренового каучука СКИ-5 ПМ (ПМ – пищевой медицинский) [2].

Целью работы является сравнительное исследование и идентификация различных каучуков медицинского назначения, а также выделенных из них продуктов экстракции, с помощью метода ИК-спектроскопии.

Объектами исследования были изопреновые каучуки – натуральный каучук марки SVR-10 (Вьетнам) и синтетические каучуки СКИ-5 ПМ и СКИ-3С (Стерлитамак, Россия). Процесс получения ацетоновых экстрактов осуществляли согласно ГОСТ ISO 1407-2013 [3]. Регистрацию ИК-спектров проводили на инфракрасном