

УДК 542.87

**ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ПРЕДЕЛА ОБНАРУЖЕНИЯ И ОПРЕДЕЛЕНИЯ
АМИНОКИСЛОТ ДЛЯ НОВЫХ ГЕТЕРОГЕННЫХ СОСТАВОВ С
ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ АЛГОРИТМОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ В
ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОЙ АНАЛИТИКЕ**

Дмитриева А.П. (ИТМО), Фомкина А.С. (ИТМО), Порохина Д.Л. (ИТМО)

**Научный руководитель – доктор химических наук, доцент Кривошапкина Е.Ф.
(ИТМО)**

Введение. Анализ и оценка уровня аминокислот имеют большое значение в различных областях, включая пищевую, биотехнологическую и фармакологическую, так как аминокислоты являются строительными блоками для синтеза важных низкомолекулярных веществ. В плазме организма уровень аминокислот обычно находится в микромолярном диапазоне, но некоторые генетические нарушения обмена веществ могут изменять его. Повышенные или пониженные уровни аминокислот могут быть связаны со заболеваниями и состояниями, такими как непереносимость фруктозы, почечная недостаточность и кетоацидоз. Для анализа аминокислот существует широкий спектр аналитических стратегий, таких как инфракрасная и рамановская спектроскопия, ультрафиолетовая, масс- и видимая спектроскопия. Однако некоторые из этих методов требуют преобразования аминокислот в производные, содержащие хромофоры, что может быть длительным и сложным процессом пробоподготовки. В связи с этим, электрохимические методы предпочтительны, так как они позволяют проводить анализ без необходимости дериватизации аминокислот. Дополнительное преимущество таких сенсоров в возможности проведения анализа в стационарных условиях или в устройствах для пользования пациентами, что позволяет получать экспрессные и высокочувствительные результаты анализа. В данной работе рассматривается возможность обнаружения наиболее важных электроактивных аминокислот, таких как триптофан, тирозин, метионин, гистидин и цистеин, в реальных образцах биологических жидкостей. Применение методов машинного обучения может значительно улучшить и ускорить процесс определения и обнаружения аминокислот для выбора оптимального материала сенсора, модифицированного благородными и переходными металлами для более точной и эффективной диагностики и мониторинга различных состояний организма.

Основная часть. Благородные (Au, Ag, Pt) и переходные (Cu, Fe, Co, Ni, Ti и другие) при различных модификациях электродов, находят применение в разработке эффективных сенсоров для обнаружения электроактивных аминокислот. Добавление наночастиц металлов существенно повышает пиковые токи и чувствительность модифицированных электродов по сравнению с неизолрованными. Для построения моделей машинного обучения была собрана репрезентативная база данных, содержащая тип реального образца биологической жидкости, используемый метод электрохимической детекции, химический состав сенсорного материала, предел обнаружения и определения, температуру, время проведения реакции, стабильность катализатора во времени (от нескольких минут до месяцев). Выбранные молекулы обладают особой характеристикой - гидрофобной природой, для чего дополнительно собраны параметры Ван-дер-Ваальсова объема, наличие заряженных остатков, липофильность, площадь удельной поверхности, дипольный момент и дефектная структура поверхности модифицированного электрода. Электрохимические датчики часто используют линейную регрессию для определения концентрации аналита. Однако влияние таких факторов, как загрязнение электродов и изменение поверхности, может привести к снижению чувствительности и отклонению от линейности. Для преодоления этой проблемы в исследованиях применяется метод SVM, который позволяет извлекать другие электрохимические сигналы, такие как ширина пика и фоновый ток, для более точного построения калибровочной кривой. Анализ полученных данных после предобработки показал,

что существует корреляция между объемом аминокислот, их ионным током, кинетикой реакции и временем проведения эксперимента. Аналиты с объемными акцепторными функциональными группами имеют более длительное время пребывания и меньший ионный ток. Кроме того, обнаружено, что скорость электрохимического отклика и молекулярная масса связаны степенным соотношением.

Выводы. Проведен анализ возможных протоколов обнаружения электроактивных аминокислот в зависимости от среды реального образца и химической формулы используемого модификатора. Эти результаты имеют практическое значение при определении и обнаружении аминокислот на основе электрохимических методов. Более длительное время пребывания позволяет достичь более низкого предела обнаружения, что важно для высокочувствительного анализа аминокислот.

Список использованных источников:

1. A. González-Calabuig , D. Guerrero , N. Serrano and M. del Valle , *Electroanalysis*, 2016, 28 , 663 —670
2. M. Kang , E. Kim , S. Chen , W. E. Bentley , D. L. Kelly and G. F. Payne , *Biosens. Bioelectron.*, 2018, 112 , 127 —135
3. N. Artrith , K. T. Butler , F.-X. Coudert , S. Han , O. Isayev , A. Jain and A. Walsh , *Nat. Chem.*, 2021, 13 , 505 —508

Автор _____ Дмитриева А.П.

Научный руководитель _____ Кривошапкина Е.Ф.