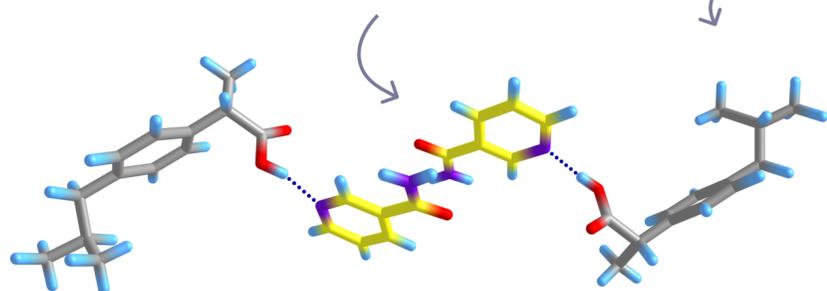


Губина Нина Вячеславовна
Руководители: В. В. Виноградов, Н. С. Серов

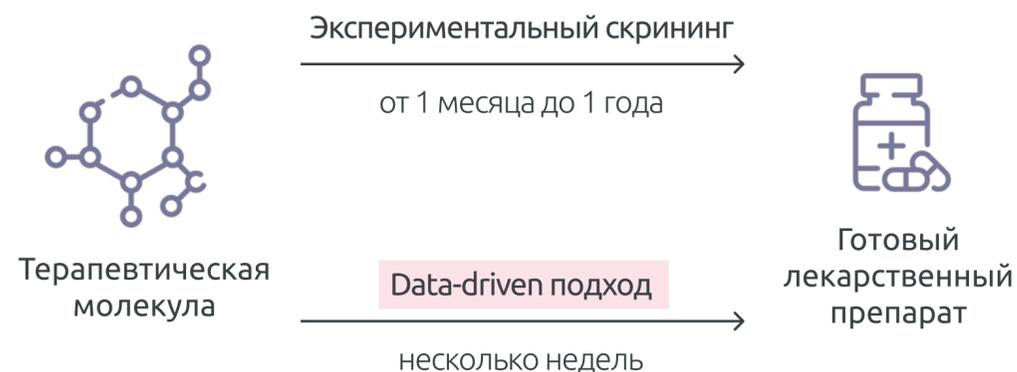
Сокристаллы - однофазные кристаллические материалы, состоящие из двух или более нейтральных молекул. Сокристаллизация является доступным способом улучшить свойства лекарственных препаратов

Основными компонентами являются:

- Терапевтическая молекула (Ибупрофен)
- «Инертный» коформер (Никотинамид)



Цель: Разработка системы, основанной на больших данных и методах машинного обучения, которая позволит генерировать молекулы коформеров для создания сокристаллов с заранее заданными свойствами

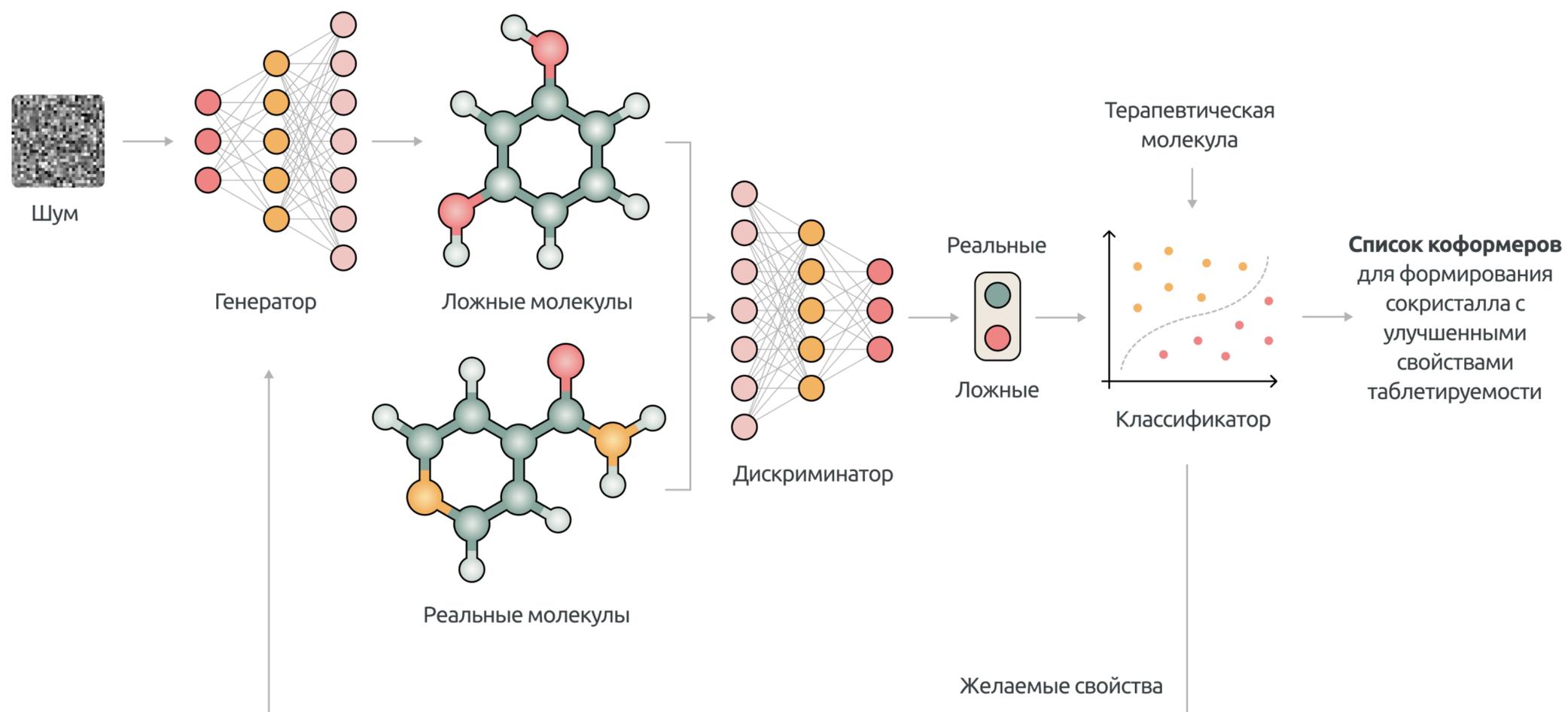


Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет информационных технологий, механики и оптики

В данной работе была разработана **система генерации коформеров** для создания фармацевтических сокристаллов с заданными свойствами, которая состоит из генеративно-состязательной нейронной сети, предлагающей молекулярные структуры, и набора моделей машинного обучения, которые проверяют эти структуры на соответствие желаемым свойствам

Входные данные для модели - структура лекарственной молекулы

Результат работы модели - набор коформеров с наилучшими параметрами таблеттируемости



Вывод: Созданная модель предлагает как уже известные молекулы в качестве коформеров, что подтверждает ее валидность, так и ранее неизвестные кандидаты для создания сокристалла с лучшими свойствами таблеттируемости