人工智能辅助实现复杂糖苷分子检测

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/29276.html

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

人工智能辅助实现复杂糖苷分子检测。甜菊糖苷是一类来源于植物的二萜类次级代谢产物，被广泛地用作天然甜味剂，糖基化修饰对其生物功能以及作为甜味剂的风味等起着决定性作用。近日，中国科学院大连化学物理研究所研究员卿光焱、副研究员李闵闵团队在纳米孔糖链检测分析方面取得新进展，利用气单胞菌溶素纳米孔和高浓度氯化锂溶液，在人工智能的辅助下，实现了多种甜菊糖苷分子的精准单分子识别及其在复杂样品中的快速定性、定量分析。相关成果发表在《美国化学学会-纳米》上。

糖基化修饰位置、糖链组成、单糖连接方式等差异，导致甜菊糖苷化合物的结构多样性和复杂性。目前，已发现的甜菊糖苷化合物有近百种，且同分异构体众多，为精细结构表征和精准检测提出了挑战。

卿光焱团队一直致力于基于纳米孔道的分析方法的研究，前期，团队基于气单胞菌溶素纳米孔，利用标记法实现了酸性和中性寡糖链的识别和分析。本工作中，团队引入高浓度的氯化锂溶液作为纳米孔单分子传感的电解液，提升了甜菊糖苷分子在气单胞菌溶素纳米孔内的驻留时间，以及纳米孔对糖苷分子的分辨力，针对15种糖苷实现了单分子水平的精准识别。随后，团队进一步利用端到端的深度学习方法，针对15种糖苷的纳米孔信号所训练的人工智能模型，实现了复杂样品中甜菊糖苷类型的快速识别和定量分析。

该工作展示了纳米孔对于复杂糖苷化合物的结构解析能力，以及纳米孔和人工智能相结合对工业产品的高灵敏性、快速且自动化的质量控制应用潜力。（来源：中国科学报 孙丹宁）

相关论文信息：https://doi.org/10.1021/acsnano.4c07038

作者：卿光焱等 来源：《美国化学学会—纳米》

更多 科学进展 请访问 https://www.iikx.com/news/progress/

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，爱科学iikx.com转发