

На рисунках 1 и 2 представлены полученные спектры 1-ой и 2-ой компоненты, выделенных данным методом.

При анализе спектральных характеристик компонентов, полученных методом MCR-ALS наглядно выявляются различия в интенсивности пиков 1 компоненты в полосе 1150 см^{-1} (β -каротины) и 1515 см^{-1} (цитозин) и в пиках 2 компоненты 1400 см^{-1} (фосфолипиды) и 1600 см^{-1} (белки α -спирали) [2]. Стоит отметить, что полосы, в которых они находятся, остаются неизменными. Также стоит отметить, что для одного из полученных компонентов обнаружен пик в полосе 1750 см^{-1} (амид I) для людей без хронической сердечной недостаточности, которого нет в спектре этого же компонента, полученного для людей с заболеванием.

Список использованных источников

1. I. A. Matveeva, Y. A. Khristoforova, L. A. Bratchenko, V. P. Zakharov, Analysis of Raman spectra using the multivariate curve resolution-alternating least squares (MCR-ALS) algorithm. // Biomedical Spectroscopy, Microscopy, and Imaging II., 2022, v. 12144. <https://doi.org/10.1117/12.2620966>.
2. X. Feng, A. J Moy, H. T. M. Nguyen, Raman active components of skin cancer. // Biomedical Optics Express., 2017, v. 8. No. 6.

Сорокина Елена Владимировна, студент гр. 6464-120304D, hellitio15@gmail.com

Христофорова Юлия Александровна, к.ф.-м.н., ст. преподаватель каф. лазерных и биотехнических систем, khristoforova.yua@ssau.ru

УДК 004.891.3:543.424.2:616-71

АНАЛИЗ РАМАНОВСКИХ СПЕКТРОВ СЫВОРОТКИ КРОВИ МЕТОДОМ РАЗРЕШЕНИЯ МНОГОМЕРНЫХ КРИВЫХ

И.А. Пименова, И.А. Матвеева

«Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королёва», г. Самара

Ключевые слова: чередующиеся наименьшие квадраты, метод разрешения многомерных кривых, рамановская спектроскопия, сыворотка крови.

Рамановская спектроскопия является перспективным методом достижения повышения прогностической значимости при исследовании комплекса изменений компонентного состава крови [1]. Это неинвазивный оптический метод, который использует взаимодействие света с молекулами для получения информации о их структуре и состоянии. Основой этого метода является эффект Рамана, который заключается в изменении частоты и интенсивности рассеянного света при взаимодействии со спектрально активными молекулами. При проведении рамановской спектроскопии

образец подвергается облучению лазерным светом определенной длины волны. Часть этого света неупруго рассеивается молекулами образца, и рассеянный свет анализируется с помощью спектрометра. В результате анализа можно получить информацию о колебательных и вращательных состояниях молекул, а также о химической структуре и конформации образца.

Целью данного исследования является изучение возможности применения метода разрешения многомерных кривых с использованием метода чередующихся наименьших квадратов (MCR-ALS) для анализа *in vitro* рамановских спектров образцов сыворотки крови.

В этой работе анализируются рамановские спектры сыворотки крови 50 здоровых людей. Образцы сыворотки крови отбирали утром натощак и помещали в стерильные пробирки с последующим замораживанием при температуре -16°C . Непосредственно перед спектральным анализом образцы размораживали при комнатной температуре.

Запись рамановских спектров проводилась по технологии поверхностно-усиленной рамановской спектроскопии (SERS), подробно описанной в [2]. Каждый образец сыворотки объемом 1,5 мкл наносили на алюминиевую фольгу со слоем серебряных структур и сушили в течение 30 минут.

В результате MCR-анализа рамановских спектров сыворотки крови выделено восемь компонентов. Их основные рамановские пики описаны в таблице 1.

Таблица 1 – Описание рамановских пиков для SERS-спектров сыворотки крови (первый столбец – номер компонента)

№	Положение пика, cm^{-1}	Соответствие
1	1002	Растяжение ароматического кольца C=C (фенилаланин) или растяжению N-C-N (мочевина)
	1236	Липиды и амид III
	1393	Креатинин
2	644	Тирозин
	1653	Растяжение C=O амида I
	1330	Полносимметричное валентное колебание кольца гуанина или аденина
3	725	Мочевина и креатинин
	1097	Фенилаланин и тирозин
	1442	Деформационная вибрация CH_2 гипоксантина
4	725	Мочевина и креатинин
	960	Растяжение C-C
	1372	Гуанин, порфирин и липиды
5	755	Полносимметричное валентное колебание кольца триптофана

	1300	Липидная деформация CH_2
	1539	$\text{C}=\text{C}$ вибрация каротиноида или вклада триптофана
6	642	Тирозин
	683	Валентное колебание кольца гуанина
	1002	Растяжение ароматического кольца $\text{C}=\text{C}$, что соответствует фенилаланину, или растяжению $\text{N}-\text{C}-\text{N}$ в мочеvine
	1263	$=\text{CH}$ амида III и липидов
	1602	колебание $\text{C}=\text{C}$ фенилаланина и тирозина
7	490	Гликоген
	637	Мочевая кислота
8	1128	$\text{C}-\text{N}$ растяжение мочевой кислоты, фенилаланин и тирозин
	1209	Объединенный вклад амида III, аденина, тимина, фенилаланина и тирозина
	1341	Белки
	1659	Растяжение $\text{C}=\text{O}$ амида I

Дальнейшие исследования будут посвящены использованию данных о компонентном составе образцов сыворотки крови в качестве признаков для идентификации заболеваний.

Список использованных источников

1. Atkins C. G. et al. Raman spectroscopy of blood and blood components //Applied spectroscopy. – 2017. – Т. 71. – №. 5. – С. 767-793.
2. Al-Sammaraie S. Z. et al. Silver nanoparticles-based substrate for blood serum analysis under 785 nm laser excitation //Journal of Biomedical Photonics & Engineering. – 2022. – Т. 8. – №. 1. – С. 010301.

Пименова Ирина Александровна, студентка группы 6131-120404D, pimenova.0312@list.ru.

Матвеева Ирина Александровна, ассистент кафедры лазерных и биотехнических систем, matveeva.ia@ssau.ru.

УДК 004.891.3:543.424.2:616-71

МНОГОСЛОЙНЫЙ ПЕРЦЕПТРОН ДЛЯ КЛАССИФИКАЦИИ РАМАНОВСКИХ СПЕКТРОВ КОЖИ

К.Е. Томникова, И.А. Матвеева

«Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королёва», г. Самара

Ключевые слова: новообразования кожи, рамановская спектроскопия, нейронные сети, многослойный перцептрон, бинарная модель классификации.

В настоящее время всё большую популярность в диагностике новообразований кожи набирают оптические методы диагностики, например, рамановская спектроскопия [1, 2, 3].