

ПИЛОТНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВОЗМОЖНОСТИ ПРИМЕНЕНИЯ БИК-СПЕКТРОСКОПИИ И АКВАФОТОМИКИ ДЛЯ АНАЛИЗА МОЧИ С ЦЕЛЬЮ ОНКОЛОГИЧЕСКОГО СКРИНИНГА

Латышева А.А. (ИТМО), Суркова А.А. (ИТМО)

Научный руководитель – доктор физико-математических наук, профессор Орлова А.О. (ИТМО)

Введение. Присутствие раковых клеток вызывает системные метаболические изменения, которые отражаются на химическом составе внеклеточных биологических жидкостей (например, мочи, крови, плазмы или спинномозговой жидкости пациента) [1]. Согласно статистике, высокий процент смертности при онкологических заболеваниях зачастую связан с диагностикой на поздних стадиях, когда лечение менее эффективно [2]. Современные «золотые стандарты» диагностики, такие как биопсия и томография, обладая высокой точностью являются инвазивными, дорогостоящими и непригодны для частого скрининга [3]. В связи с этим анализ биологических жидкостей является одним из наиболее перспективных неинвазивных подходов для быстрого скрининга рака. Для анализа жидкостей используется множество методов, в том числе различные хроматографические и спектроскопические техники. Однако эти методы часто являются дорогостоящими и требуют длительных и утомительных процедур. Существует острая необходимость в разработке эффективных, быстрых и простых альтернативных методов скрининга рака.

Основная часть. Ближняя инфракрасная спектроскопия (БИК) спектроскопия обладает высоким потенциалом для быстрого скрининга и динамического мониторинга пациентов посредством анализа биологических жидкостей. БИК спектроскопия позволяет оценивать ключевые биомолекулы, такие как гемоглобин и вода, в биологических жидкостях [4]. Однако из-за широких и сильно перекрывающихся полос поглощения, характерных для БИК области, информационное содержание необработанных спектров часто ограничено. Для извлечения релевантной информации применяются специализированные методы предварительной обработки данных и хемометрика. БИК спектры особенно ценны для изучения структуры воды, особенно в области первого обертона валентных колебаний (1300–1600 нм), который содержит многочисленные характерные полосы поглощения воды. Эта область лежит в основе новой научной дисциплины – аквафотомики [5], которая исследует молекулярную организацию воды посредством анализа БИК спектров.

В данном исследовании изучается потенциал аквафотомического подхода в различении образцов мочи пациентов с диагностированным раком простаты, раком почки и контрольной группы. 124 образца были изучены с помощью спектрофотометра Shimadzu UV-3600 в области 900–1600 нм. Были изучены различные методы предобработки спектров (нормализация, SNV, EMSC), а полученные данные были использованы в качестве входных данных для алгоритмов классификации машинного обучения.

Заключение. Результаты указывают на определенный потенциал данного подхода, однако для выяснения его реальной применимости необходимы дальнейшие исследования. Практические рекомендации для дальнейших исследований: строгий контроль температуры (как окружающей среды, так и самого образца), использование одной и той же кюветы для измерений, единые условия хранения образцов, поэтапная предварительная обработка для удаления мешающих эффектов. Соблюдение этих рекомендаций повысит надежность будущих исследований.

Список использованных источников.

- [1] Mayhew M., Megram O., Roshan S., et al. // *Metabolomics*. – 2025. – № 1(22). – P. 13.
- [3] McPhail S., Johnson S., Greenberg D., et al. // *Br. J. Cancer*. – 2015. – V. 112. – № S1. – P. S108–S115.
- [3] Marrugo-Ramírez J., Mir M., Samitier J. // *Int. J. Mol. Sci.* – 2018. – V. 19. – № 10. – P. 2877.
- [4] Huck C.W., in *Near-Infrared Spectroscopy* (Eds.: Y. Ozaki, C. Huck, S. Tsuchikawa, S.B. Engelsen), Springer, Singapore (2021) 413–435.
- [5] Tsenkova R., et al. // *Front. Chem.* – 2018. – V. 6. – P. 636.