**Классификация клинически значимых микроорганизмов с помощью оптических методов анализа**

***Горт С.А., Рубекина А.А., Якимов Б.П.***

*студент, м.н.с, с.н.с.*

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,   
 физический факультет, Москва, Россия  
 E–mail: stanislaw.gort@gmail.com*

Классические клинические методы классификации бактериальных культур и определение их антибиотикорезистентности требуют длительного культивирования биомассы (вплоть до 48 часов), необходимое количество которой определяется конкретным исследованием микроорганизмов. Самый распространенный способ выявления патогенных микроорганизмов – визуальный анализ, проводимый, исходя из косвенных признаков бактериальных колоний: формы, цвета, блеска, наличия гемолиза на чашке Петри – полагается на практический опыт врача. Для определения вида бактерий и грибов используются также биохимические тесты и золотой стандарт клинической диагностики – масс-спектрометрия. Оба этих метода требуют дополнительного пробоотбора и в некоторых случаях дополнительного культивирования биоматериала. Поиск компромиссных решений, достаточно точных, но не требующих дополнительного пробоотбора, является актуальным вопросом для индустрии. Среди них – флуоресцентная спектроскопия и спектроскопия комбинационного рассеяния, интересующая нас в рамках этой работы. Ее применение не требует дополнительного пробоотбора и позволяет измерять оптический отклик от одиночных колоний диаметром вплоть до 0.7 мм.

При решении задачи классификации необходима правильная разметка базы данных: достоверно должен быть известен вид каждого из исследованных микроорганизмов. В данной работе для этого была использована масс-спектрометрия MALDI-TOF – золотой стандарт в клинических методах. Сформированная база данных насчитывает данные о более, чем 500 микроорганизмах из числа 27 клинически значимых видов. Измерения происходили на рамановском микроскопе производства «ООО Фотон-Био» (Россия) на длине волны возбуждения 532 нм. При обработке спектров с помощью методов понижения размерности, таких как PCA (Principal components analysis), t-SNE (t-distributed Stochastic Neighbor Embedding), будет рассмотрена возможность разделения системы микроорганизмов на значимые группы: виды, роды и наиболее важные – ввиду непосредственной связи с антибиотикорезистентностью микроорганизмов – биохимические группы.

Таким образом, в данной работе исследуются возможности спектроскопии комбинационного рассеяния как инструмента классификации микроорганизмов по их оптическому отклику в сочетании с методами статистического анализа.

**Литература**

1. Bo Zhou, Liying Sun, Teng Fang, Haixia Li, Ru Zhang, Anpei Ye – Rapid and accurate identification of pathogenic bacteria at single‐cell level using laser tweezers Raman spectroscopy and deep learning // Journal of Biophotonics 15(24)
2. Chi-Sing Ho, Neal Jean, Catherine A. Hogan, Lena Blackmon, Stefanie S. Jeffrey, Mark Holodniy, Niaz Banaei, Amr A.E. Saleh, Stefano Ermon & Jennifer Dionne – Rapid identification of pathogenic bacteria using Raman spectroscopy and deep learning // Nature Communications, Article number: 4927 (2019)
3. Lin Deng, Yuzhong Zhong, Maoning Wang, Xiujuan Zheng, Jianwei Zhang – Scale-Adaptive Deep Model for Bacterial Raman Spectra Identification // IEEE Journal of Biomedical and Health Informatics (Volume: 26, Issue: 1, January 2022)
4. Xuejun Qiu, Hanchuan Huang, Zhitong Huang, Zhengfei Zhuang, Z.Y. Guo, Songhao Liu – Effect of Red Light-Emitting Diodes Irradiation on Hemoglobin for Potential Hypertension Treatment Based on Confocal Micro-Raman Spectroscopy // Scanning 2017(20):1-8