

Patogeninių mikroorganizmų identifikavimas ATR IR spektriniu metodu

Identification of pathogenic microorganisms by means of ATR IR spectroscopy

Gerda Anužienė¹, Rimantė Bandzevičiūtė¹, Eglė Lastauskienė², Justinas Čeponkus¹

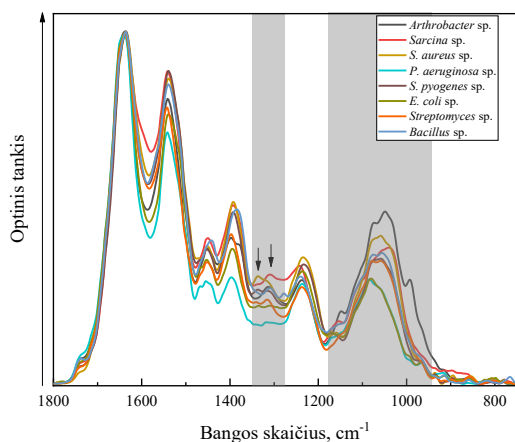
¹Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Cheminės fizikos institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257, Vilnius

²Vilniaus universitetas, Gamtos mokslų centras, Biomokslų institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257, Vilnius
mickunaitegerda@gmail.com

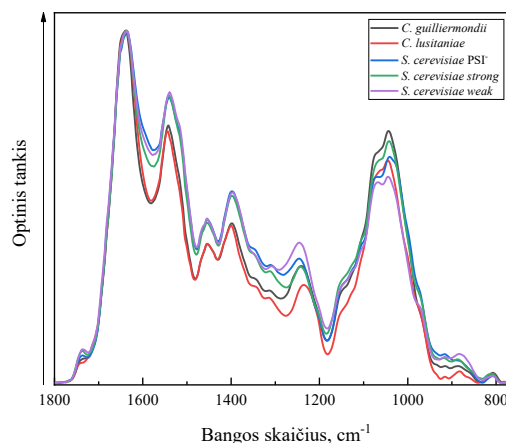
Patogeniniai mikroorganizmai, tokie kaip mieliagybiai ir bakterijos, gali sukelti infekcines ligas, kurių komplikacijos sukelia pavojų paciento gyvybei. Šiuo metu mielių sukeliams ligoms gydyti yra skiriami priešgrybeliniai vaistai, o bakterijų sukeliams ligoms gydyti – antibiotikai. Esant mišriai grybelinei ir bakterinei infekcijai, gydymas medikamentais gali paveikti tik vieną mikroorganizmų tipą (eukariotus arba prokariotus), o išgyvenusi mikroorganizmų rūšis plinta dar greičiau. Todėl yra svarbu ankstyvoje susirgimo stadijoje tiksliai identifikuoti patogeninio mikroorganizmo rūšį. Siekiant identifikuoti skirtingas patogeninių mikroorganizmų rūšis yra taikomi įvairūs molekulinės biologijos, cheminiai ir fizikiniai tyrimo metodai, tačiau taikant šiuos metodus tyrimas užtrunka iki kelių dienų ar net savaičių. Taikant ATR IR spektrinį metodą nereikalingas specialus bandinių paruošimas, o spektro registravimas užtrunka kelias minutes, todėl identifikavimas gali būti atliekamas greičiau [1-3].

Mokslinio darbo metu tyrimas atliktas su 8 skirtingomis bakterijų ir 3 skirtingomis mielių rūšimis, iš viso ištirta 150 bandinių.

Svarbiausi spektriniai skirtumai, tarp bakterijų ir mielių ATR IR sugerties spektrų, yra stebimi spektrinėje srityje, esančioje nuo 1183 cm⁻¹ iki 930 cm⁻¹, kuri susijusi su bakterijų ir mielių ląstelėse esančiais angliavandeniais. Taip pat mielių ir bakterijų ATR IR sugerties spektruose yra stebimas spektro kontūro pokytis, spektriniame intervale, esančiame nuo 1360 cm⁻¹ iki 1280 cm⁻¹. 1 pav. pateikiami skirtingų bakterijų rūšių, o 2 pav. skirtingų mielių rūšių bandinių ATR IR sugerties spektrai.



1 pav. Skirtingų bakterijų rūšių ATR IR sugerties spektrai



2 pav. Skirtingų mielių rūšių ATR IR sugerties spektrai

Tyrimo metu siekta nustatyti patikimiausią bakterijų ir mielių ATR IR sugerties spektrų identifikavimo metodą, tam tikslui pasiekti taikyti du skirtingi statistinės analizės metodai – hierarchinė klasterių analizė (angl. *hierarchical cluster analysis* – HCA) ir principinių komponentų analizė (angl. *principal component analysis* – PCA).

Atlikus 150 bandinių HCA nustatyta, kad mielių ATR IR sugerties spektrai gali būti identifikuojami 100 % tikslumu, o bakterijų ATR IR sugerties spektrai – 89,9 % tikslumu. Neteisingai grupei priskirti 6 *Arthrobacter* sp. bakterijų ATR IR sugerties spektrai. Taikant PCA statistinės analizės metodą nustatyta, kad mielių ATR IR sugerties spektrai gali būti identifikuojami 100 % tikslumu, o bakterijų ATR IR sugerties spektrai 91,2 % tikslumu. Taikant PCA, kaip ir HCA, bakterijų ATR IR sugerties spektrų identifikavimo tikslumui įtaką daro neteisingai priskirti 5 *Arthrobacter* sp. bakterijų ATR IR sugerties spektrai.

Reikšminiai žodžiai: virpesinė spektroskopija, infraraudonosios sugerties spektroskopija, patogeniniai mikroorganizmai, bakterijos, mielės

Literatūra

- [1] M. Pigłowski, Int. J. Environ. Res. Public Health **16**, 477 (2019)
- [2] M. Harz, P. Rösch, J. Popp, Cytometry **75A**, 104-113 (2009)
- [3] B. Buszewski, A. Rogowska, P. Pomastowski, M. Zloch, V. Railean-Plugaru, J. AOAC Int **100**, 1607-1623 (2017)