

ИЗУЧЕНИЕ ИЗМЕНЕНИЙ СПЕКТРАЛЬНЫХ СВОЙСТВ ЭМАЛИ ДЛЯ ДИАГНОСТИКИ ПАРОДОНТИТА

И.В. Бажутова¹, О.О. Фролов², Е.В. Тимченко², П.Е. Тимченко²

¹ Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Самарский государственный медицинский университет» Министерства здравоохранения Российской Федерации, Самара, Россия;

² Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева» (Самарский университет), Самара, Россия

Как цитировать: Бажутова И.В., Фролов О.О., Тимченко Е.В., Тимченко П.Е. Изучение изменений спектральных свойств эмали для диагностики пародонтита // Аспирантский вестник Поволжья. 2021. № 1–2. С. 26–30. DOI: <https://doi.org/10.55531/2072-2354.2021.21.1.26-30>

Поступила: 20.01.2021

Одобрена: 03.02.2021

Принята: 10.03.2021

В работе рассмотрена возможность проведения ранней неинвазивной диагностики заболеваний пародонта с помощью метода спектроскопии комбинационного рассеяния. Показаны результаты спектральных исследований эмали зубов при пародонтите с помощью данного метода. Предложено использовать полученные данные для ранней неинвазивной диагностики пародонтита.

Ключевые слова: рамановская спектроскопия; спектральный анализ; пародонтит; эмаль; зубы; экспресс-оценка.

CHANGES IN THE SPECTRAL PROPERTIES OF ENAMEL IN THE DIAGNOSTICS OF PERIODONTITIS

I.V. Bazhutova¹, O.O. Frolov², E.V. Timchenko², P.E. Timchenko²

¹ Samara State Medical University, Samara, Russia;

² Samara National Research University named after S.P. Korolev, Samara, Russia

To cite this article: Bazhutova IV, Frolov OO, Timchenko EV, Timchenko PE. Changes in the spectral properties of enamel in the diagnostics of periodontitis. *Aspirantskiy Vestnik Povolzhiya*. 2021;(1-2):26–30. DOI: <https://doi.org/10.55531/2072-2354.2021.21.1.26-30>

Received: 20.01.2021

Revised: 03.02.2021

Accepted: 10.03.2021

The paper considers the possibility of early noninvasive diagnosis of periodontal diseases by using the method of Raman spectroscopy. The results of spectral studies of tooth enamel with periodontitis by means of this method are shown. It is proposed to use the obtained data for early non-invasive diagnostics of periodontitis.

Keywords: Raman spectroscopy; spectral analysis; periodontitis; enamel; teeth; rapid assessment.

Обоснование

Высокая распространенность заболеваний пародонта, достигающая, по данным некоторых авторов, 98 % среди взрослого населения, подразумевает актуальность всех исследований, направленных на разработку методов диагностики и лечения пародонтита.

На сегодняшний момент в большинстве случаев заболевание выявляют лишь на стадии активных клинических проявлений. Часто диагностика осложняется тем, что к пародонтиту приводит множество факторов. Нередко он является следствием других заболеваний [2, 3]. Как и при проблемах любой нозологии, ранняя диагностика пародонтита, вероятно, позволила бы купировать активный процесс и значительно улучшить прогноз заболевания.

С развитием современной медицины в стоматологической практике все чаще используются оптические методы [1, 5]. Спектроскопия считается сегодня наиболее перспективным методом в современной неинвазивной оптической диагностике. Метод применяется в качестве инструмента для мониторинга динамики процессов, происходящих в тканях, дает уникальные возможности изучения возбужденных состояний молекул, фотохимических реакций, структуры и свойств химических и биологических объектов.

С развитием современной медицины в стоматологической практике все чаще используются оптические методы [1, 5]. Спектроскопия считается сегодня наиболее перспективным методом в современной неинвазивной оптической диагностике. Метод применяется в качестве инструмента для мониторинга динамики процессов, происходящих в тканях, дает уникальные возможности изучения возбужденных состояний молекул, фотохимических реакций, структуры и свойств химических и биологических объектов.

Цель исследования — изучение спектральных свойств эмали зубов для разработки неинвазивного метода ранней диагностики пародонтита.

Материалы и методы

В качестве объектов исследований были использованы 34 зуба (моляры и премоляры) пациентов с диагнозом «пародонтит». Возрастная группа пациентов обоего пола составляла 35–70 лет. Все исследуемые категории зубов были поделены на две основные группы: 1-я группа — контрольная (зубы, удаленные по ортодонтическим показаниям — без патологии), 2-я группа — зубы, удаленные по поводу заболеваний пародонта. Пациентам обеих групп предварительно перед удалением зубов за 7–10 сут проводили профессиональную гигиену полости рта. Из исследования исключались пациенты с эндокринной патологией и курильщики.

Диагноз «пародонтит» ставили клинически и при анализе компьютерной конусно-лучевой томографии (КТ). Для основной группы исследования отбирали зубы, удаленные по поводу хронического пародонтита тяжелой степени, с глубиной пародонтальных карманов от 6 мм и более и патологической подвижностью III–IV степени. Все исследования

проводили в соответствии с протоколом этического комитета (выписка из протокола № 4 заседания комитета по биоэтике Самарского государственного медицинского университета от 20.05.2020).

В качестве основного метода исследований был использован метод спектроскопии комбинационного рассеяния. Он отличается от других аналитических методов следующими преимуществами: высокое пространственное разрешение (до 1 мкм), простота пробоподготовки, сниженные требования к образцу и высокая информативность. Спектроскопия комбинационного рассеяния (КР) является неразрушающим и неинвазивным методом анализа.

Данный метод был реализован с помощью экспериментального стенда, подробно описанного в работе [4]. Обработка спектров комбинационного рассеяния производилась в программной среде WolframMathematica 12.2 и заключалась в удалении высокочастотных шумов и вычитании фоновой флуоресценции методом многоитерационной аппроксимации полинома 6-й степени.

Результаты и обсуждение

На рис. 1 приведены характерные усредненные нормированные спектры комбинационного рассеяния эмали зубов с диагнозом

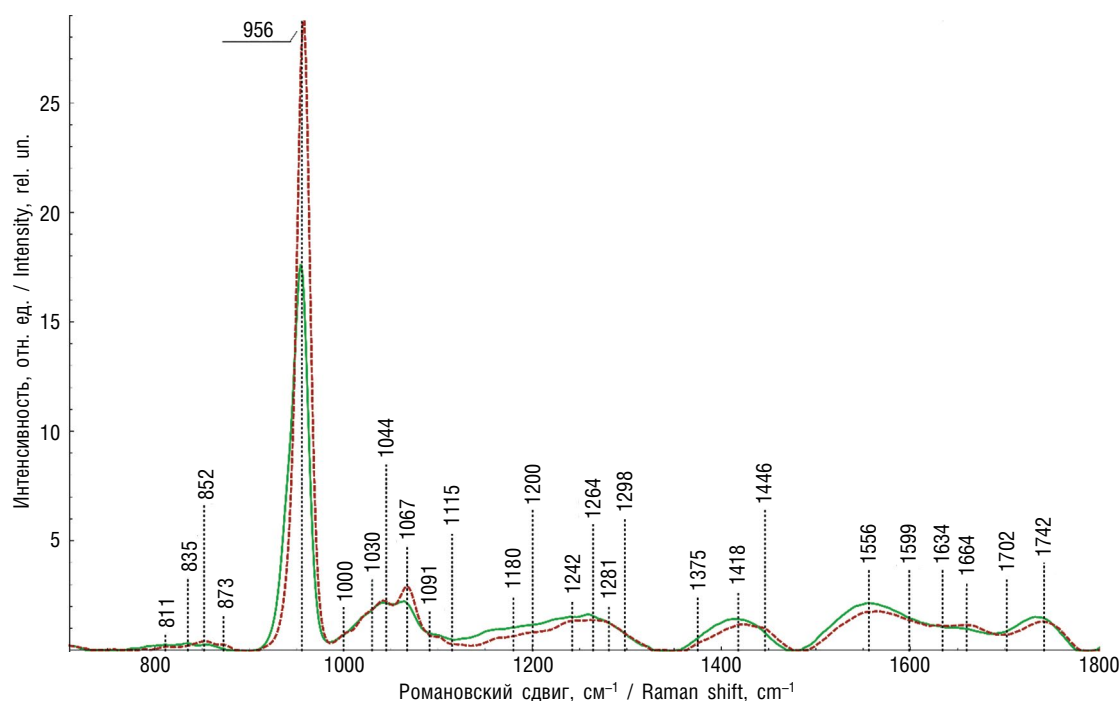


Рис. 1. Усредненные спектры комбинационного рассеяния, нормированные на среднее значение интенсивности, исследуемых образцов: красный — эмаль зубов с диагнозом пародонтита, зеленый — здоровая эмаль

Fig. 1. Average Raman spectra, normalized to the average value of the intensity of the studied samples: red — enamel of teeth with periodontitis, green — healthy enamel

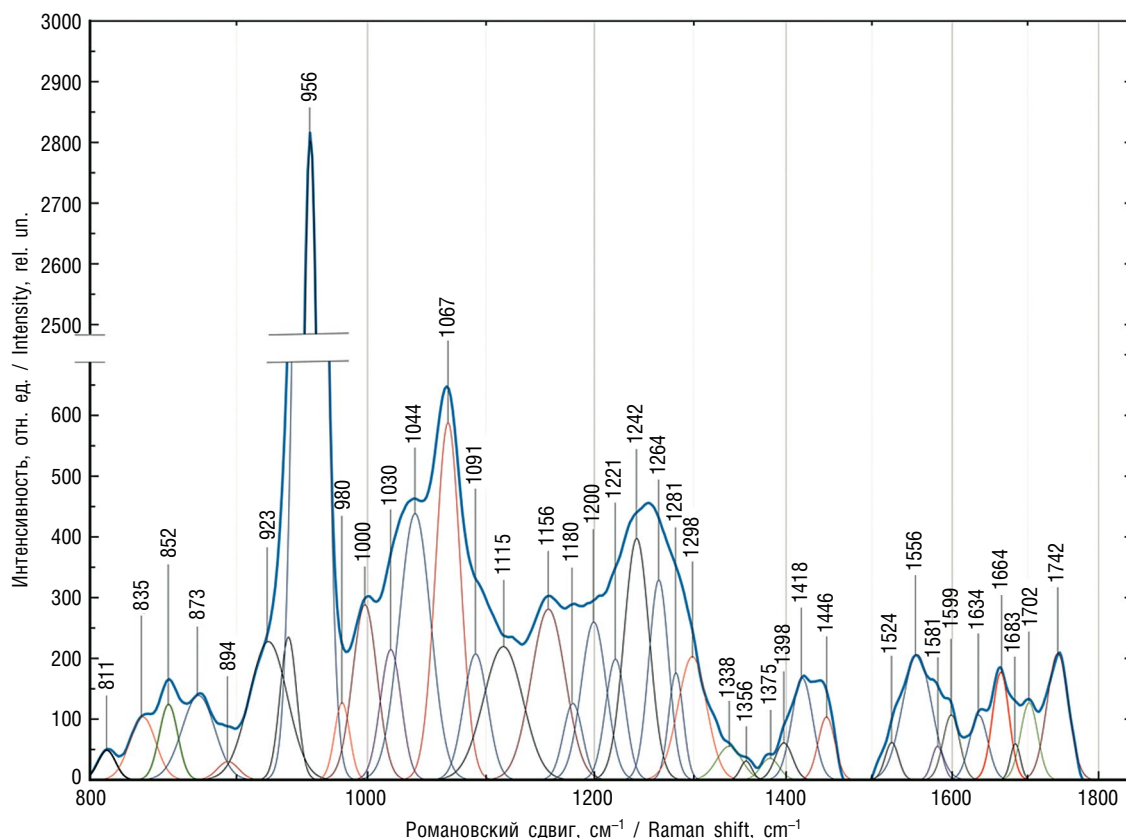


Рис. 2. Разложение спектрального контура для образцов эмали

Fig. 2. Decomposition of the spectral contour for enamel samples

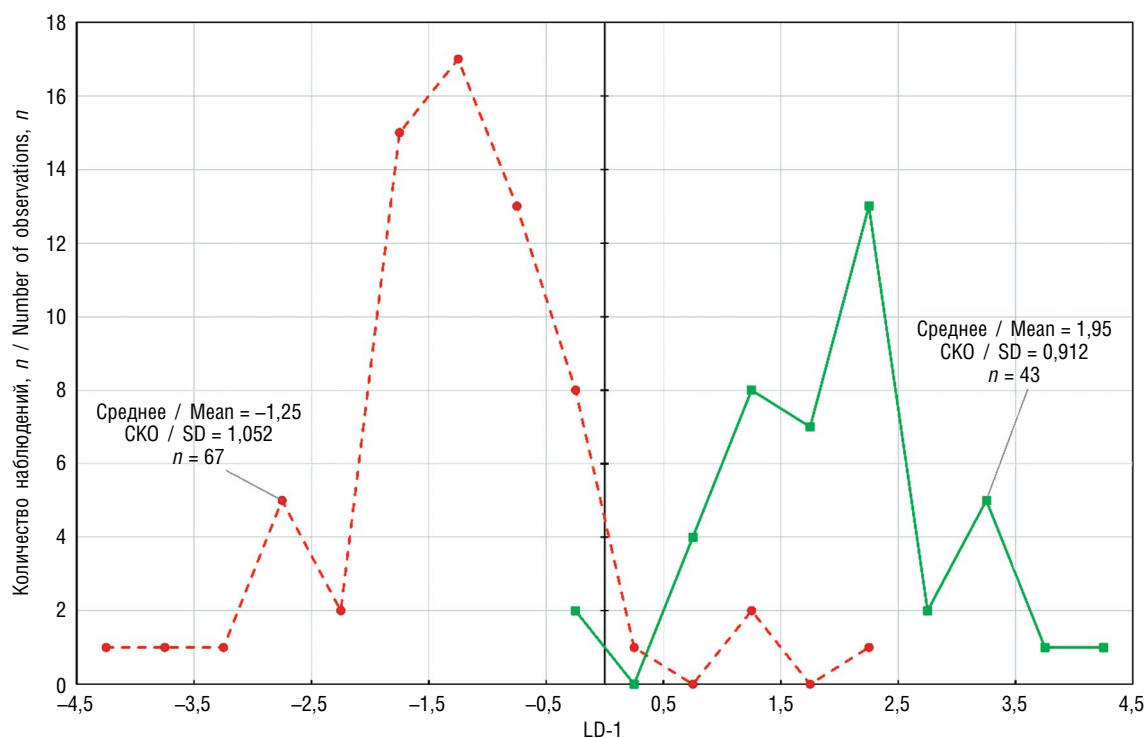


Рис. 3. График значений линейной дискриминантной функции для образцов эмали: красная линия — эмаль зубов при пародонтите; зеленая линия — эмаль здоровых зубов

Fig. 3. Graph of the linear discriminant function values for the enamel samples: red line — tooth enamel with periodontitis; green line — healthy teeth enamel

пародонтита (красная линия) и эмали здоровых зубов (зеленая линия).

Анализ спектров здоровых тканей зубов и тканей зубов при пародонтите показывает, что основные спектральные различия тканей зубов при пародонтите проявляются в изменении амплитуды интенсивности линий органической составляющей 852, 873 см^{-1} [C-C stretching, proline and hydroxyproline (collagen assignment)], 1664 (Amide I), 1242 (Amide III) и 1446 см^{-1} (Lipids and proteins), а также в изменении амплитуды интенсивности линии минеральной составляющей зуба 956 см^{-1} [P-O симметричное валентное PO_4^{3-} (ν_1)], 1067 [C-O плоскостное валентное CO_3^{2-} (ν_1) замещение В-типа] и 1091 см^{-1} [C-O плоскостное валентное CO_3^{2-} (ν_1) замещение А-типа].

Для повышения информативности полученных спектров КР был произведен нелинейный регрессионный анализ спектров, состоящий в их разложении на спектральные линии. На рис. 2 представлен результат разложения спектрального контура на сумму распределений линий Гаусса.

Среднее значение коэффициента детерминации результирующего спектра от исходного в области 780–1780 см^{-1} составило $R^2 = 0,998$, относительная погрешность определения интенсивности спектральных линий a не превышает 1 %, усредненное стандартное отклонение координаты линии x_0 составляет 1,4 см^{-1} , усредненное стандартное отклонение ширины линии (HWHM) Гаусса dx составило 2,3 см^{-1} .

Для относительной количественной оценки компонентного состава эмали использовались отношения интенсивности линий КР к интенсивности линии амида I.

На рис. 3 представлены результаты LDA сравнения здоровой эмали и эмали зубов с пародонтитом. Проанализированы 67 спектров эмали зубов с пародонтитом и 43 спектра КР здоровой эмали зубов. Дискриминантная функция LD-1 описывает дисперсию на 100 %. Положительные значения LD-1 характерны для спектров КР, полученных для образцов здоровой эмали (среднее значение LD-1 группы равно 1,95, стандартное отклонение равно 0,912), и наоборот, отрицательные — группы образцов эмали с патологией (среднее значение LD-1 группы равно -1,25, СКО равно 1,052). Области групп имеют незначительное пересечение в интервале LD-1 = {-0,25; 2,25}.

Увеличение относительной интенсивности линий гидроксиапатита 956 [P-O симметричное валентное PO_4^{3-} (ν_1)], ~1044 [PO_4^{3-} (ν_3) (P-O асимметричное валентное)], 1067 [C-O плоскостное валентное CO_3^{2-} (ν_1) замещение

В-типа] и 1091 см^{-1} [C-O плоскостное валентное CO_3^{2-} (ν_1) замещение А-типа] может быть связано с нарушением водно-минерального обмена в тканях зубов при пародонтите, что приводит к более интенсивному замещению гидроксид-иона OH^- в структуре апатита ионами CO_3^{2-} .

Также наблюдается снижение в эмали зубов при пародонтите, по сравнению со здоровыми, относительной интенсивности линий: ~1742 (фосфолипиды), ~1556 (амид II Parallel/Antiparallel β -sheet structure), 1200–1300 (амид III), ~1418 и ~1446 см^{-1} (CH_2 scissoring & CH_3 bending колебания липидов и белков). Данный эффект может быть вызван дегидратацией пептидных групп амидов, которые чувствительны к структурным изменениям в молекулах коллагена.

Выводы

Проведенный детальный анализ линий с помощью деконволюции функции Гаусса и хемометрический анализ позволили идентифицировать основные спектральные изменения в эмали зубов, которые проявляются при пародонтите. Выявлены структурные изменения эмали зубов при пародонтите, которые проявляются в нарушении водно-минерального обмена в тканях зубов (интенсивное замещение гидроксид-иона OH^- в структуре апатита ионами CO_3^{2-}) и нарушении синтеза коллагена.

Диагностирование спектральных изменений в эмали зубов позволит идентифицировать пациентов с группой риска по заболеваниям пародонта. Чувствительность и специфичность разработанного алгоритма составили 95,5 и 95,3 % соответственно.

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Список литературы

1. Gonchukov S., Sukhinina A., Bakmutov D., Minaeva S. Raman spectroscopy of saliva as a perspective method for periodontitis diagnostics // *Laser Phys Lett*. 2012. Vol. 9, No. 1. P. 73–77. DOI: 10.1002/lapl.201110095
2. Lindskog S., Blomlof L. Cementum hypoplasia in teeth affected by juvenile periodontitis // *J Clin Periodontol*. 1983. No. 10. P. 443–451.
3. Paknejad M., Khorsand A., Yaghobee S., et al. Cementogenesis in patients with localized aggressive periodontitis // *J Dent (Tehran)*. 2015. Vol. 12, No. 5. P. 347–351.
4. Timchenko P.E., Timchenko E.V., Volova L.T., et al. Chemometric analysis during the fabrication of biological implants from cerebral dura mater //

- J Opt Technol. 2019. Vol. 86, No. 1. P. 9–15. DOI: 10.1364/JOT.86.000009
5. Zahraa M.N., Elhadi M.A., Nada T.H. Microscopic differences in cementum structure and mineral composition of teeth extracted from patients with gingivitis, chronic periodontitis and aggressive periodontitis. A preliminary comparative study // Int J Dental Sci Res. 2016. Vol. 4, No. 5. P. 90–94. DOI: 10.12691/ijdsr-4-5-3
 2. Lindskog S, Blomlof L. Cementum hypoplasia in teeth affected by juvenile periodontitis. *J Clin Periodontol.* 1983;(10):443–451.
 3. Paknejad M, Khorsand A, Yaghobee S, et al. Cementogenesis in patients with localized aggressive periodontitis. *J Dent (Tehran).* 2015;12(5):347–351.
 4. Timchenko PE, Timchenko EV, Volova LT, et al. Chemometric analysis during the fabrication of biological implants from cerebral dura mater. *J Opt Technol.* 2019;86(1):9–15. DOI: 10.1364/JOT.86.000009
 5. Zahraa MN, Elhadi MA, Nada TH. Microscopic differences in cementum structure and mineral composition of teeth extracted from patients with gingivitis, chronic periodontitis and aggressive periodontitis. A preliminary comparative study. *Int J Dental Sci Res.* 2016;4(5):90–94. DOI: 10.12691/ijdsr-4-5-3

References

1. Gonchukov S, Sukhinina A, Bakhmutov D, Minaeva S. Raman spectroscopy of saliva as a perspective method for periodontitis diagnostics. *Laser Phys Lett.* 2012;9(1):73–77. DOI: 10.1002/lapl.201110095

Информация об авторах

Ирина Владимировна Бажутова — кандидат медицинских наук, доцент кафедры стоматологии ИПО. ФГБОУ ВО «Самарский государственный медицинский университет» Минздрава России, Самара, Россия. E-mail: docba@mail.ru

Олег Олегович Фролов — аспирант кафедры физики. ФГАОУ ВО «Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева» (Самарский университет), Самара, Россия. E-mail: frolovaleh@gmail.com

Елена Владимировна Тимченко — кандидат физико-математических наук, доцент кафедры лазерных и биотехнических систем. ФГАОУ ВО «Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева» (Самарский университет), Самара, Россия. E-mail: laser-optics.timchenko@mail.ru

Павел Евгеньевич Тимченко — кандидат физико-математических наук, доцент кафедры лазерных и биотехнических систем. ФГАОУ ВО «Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева» (Самарский университет), Самара, Россия. E-mail: Timpavel@mail.ru

Information about the authors

Irina V. Bazhutova — Candidate of Medical Sciences, Associate Professor. Samara State Medical University, Samara, Russia. E-mail: docba@mail.ru

Oleg O. Frolov — Postgraduate student, Department of Physics. Samara National Research University named after S.P. Korolev, Samara, Russia. E-mail: frolovaleh@gmail.com

Elena V. Timchenko — Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor, Department of Laser and Biotechnical Systems. Samara National Research University named after S.P. Korolev, Samara, Russia. E-mail: laser-optics.timchenko@mail.ru

Pavel E. Timchenko — Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor, Department of Laser and Biotechnical Systems. Samara National Research University named after S.P. Korolev, Samara, Russia. E-mail: Timpavel@mail.ru