

FTIR-ПРИЗНАКИ ПЕРЕСТРОЙКИ БЕЛКОВ ДЕСНЕВОЙ ЖИДКОСТИ У ДЕТЕЙ ПРИ КАРИЕСЕ И ГИНГИВИТЕ

П. В. Середин¹✉, Ю. А. Ипполитов^{1,2}, И. Ю. Ипполитов^{1,2}, Д. Л. Голощапов¹, Т. А. Литвинова¹¹ Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия² Воронежский государственный медицинский университет имени Н. Н. Бурденко, Воронеж, Россия³ Белгородский государственный национальный исследовательский университет, Белгород, Россия

Актуальность исследования связана с поиском малоинвазивных молекулярных признаков состояния тканей зубодесневого комплекса у детей. Цель пилотного исследования — выявить в пилотной выборке спектральные признаки перестройки белков десневой жидкости у детей 8–14 лет при кариесе и воспалительных изменениях десны (гингивите) на основе анализа ИК-спектральной полосы Амид III. Проанализированы образцы десневой жидкости, полученные у 20 детей 8–14 лет с различным стоматологическим статусом. ИК-спектры регистрировали методом синхротронной ИК-Фурье-спектроскопии на спектрометре Bruker Vertex 80/v в диапазоне 3800–700 см⁻¹ с акцентом на область Амид III. Вклад элементов вторичной структуры белков оценивали с помощью деконволюции спектрального профиля и методов многомерного анализа. В пилотной выборке кариес ассоциировался с направленным увеличением суммарного вклада компонент, соответствующих β-складчатым структурам. По данным суммарной оценки основных элементов вторичной структуры, вклад β-складчатых компонент во всех четырех аналитических группах превышал 50%, вклад неупорядоченных конформаций составлял примерно 21–31%, а вклад β-поворотов и α-спиральных компонент оставался менее 10–11%. При воспалительных изменениях десны отмечена тенденция к уменьшению вклада β-поворотов и относительному увеличению неупорядоченных конформаций. Таким образом, профиль полосы Амид III может отражать интегральные физико-химические изменения белков десневой жидкости при кариесе и гингивите. Выявленные особенности следует рассматривать как кандидатные спектральные признаки, имеющие гипотезо-генерирующий характер и требующие дальнейшей клинической проверки.

Ключевые слова: десневая жидкость, ИК-Фурье-спектроскопия, полоса Амид III, вторичная структура белков, деконволюция спектров, многомерный анализ, кариес, гингивит

Финансирование: исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда, проект № 26-15-00389, <https://rscf.ru/project/26-15-00389>.

Благодарности: авторы благодарят сотрудников инфракрасной линии синхротронного излучения Pohang Accelerator Laboratory (Pohang, Republic of Korea), где часть экспериментов была выполнена в рамках proposal 2023-1st-12D-001 IRS.

Вклад авторов: П. В. Середин — концепция, методология, интерпретация спектральных данных, написание текста; Ю. А. Ипполитов — клинический дизайн, формирование выборки, стоматологическое обследование; И. Ю. Ипполитов — формирование выборки, стоматологическое обследование; Д. Л. Голощапов — регистрация и обработка спектров, деконволюция и многомерный анализ; Т. А. Литвинова — анализ литературы, статистическая обработка, подготовка и редактирование рукописи.

Соблюдение этических стандартов: исследование одобрено этическим комитетом ФГБОУ ВО ВГМУ имени Н. Н. Бурденко Минздрава России (протокол № 3 от 24 марта 2026 г.), выполнено в соответствии с этическими стандартами и Хельсинкской декларацией ВМА (2013 г.). От законных представителей участников получено добровольное информированное согласие на участие в исследовании.

✉ **Для корреспонденции:** Павел Владимирович Середин
Университетская площадь, д. 1, г. Воронеж, 394018, Россия; paul@phys.vsu.ru

Статья получена: 15.06.2026 **Статья принята к печати:** 21.07.2026 **Опубликована онлайн:** 31.07.2026

DOI: 10.24075/vrgmu.2026.042

Авторские права: © 2026 принадлежат авторам. **Лицензиат:** РНИМУ им. Н. И. Пирогова. Статья размещена в открытом доступе и распространяется на условиях лицензии Creative Commons Attribution (CC BY) (<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>).

FTIR SIGNATURES OF PROTEIN CONFORMATIONAL CHANGES IN GINGIVAL CREVICULAR FLUID IN CHILDREN WITH CARIES AND GINGIVITIS

Seredin PV¹✉, Ippolitov YuA^{1,2}, Ippolitov IYu^{1,2}, Goloshchapov DL¹, Litvinova TA¹¹ Voronezh State University, Voronezh, Russia² Burdenko Voronezh State Medical University, Voronezh, Russia³ Belgorod State National Research University, Belgorod, Russia

The relevance of the study is associated with the search for minimally invasive molecular signatures of the dentogingival complex tissue condition in children. A pilot study aimed to identify spectral signatures of protein conformational changes in gingival crevicular fluid from children aged 8–14 years with dental caries and gingival inflammation (gingivitis) based on analysis of the IR spectral Amide III band in a pilot cohort. Gingival crevicular fluid samples collected from 20 children aged 8–14 years with different dental status were analyzed. FTIR spectra were acquired using synchrotron-based Fourier transform infrared spectroscopy in a Bruker Vertex 80/v spectrometer in the range of 3800–700 cm⁻¹ with a focus on the Amide III region. Spectral deconvolution combined with multivariate analysis was used to estimate the contribution of protein secondary-structure elements. In the pilot cohort, dental caries was associated with a directed increase in the total contribution of components related to β-sheet structures. Based on the summed contributions of the main secondary structure elements, the β-sheet contribution exceeded 50% across the four analytical groups, the disordered component ranged approximately from 21 to 31%, and the contributions of β-turns and α-helical components remained below 10–11%. Inflammatory gingival changes showed a tendency toward a decreased contribution of β-turns and a relative increase in disordered conformations. Thus, the Amide III profile may reflect integral physicochemical changes in proteins of gingival crevicular fluid in individuals with caries and gingivitis. The reported features should be regarded as candidate spectral signatures of a hypothesis-generating nature that require further clinical validation.

Keywords: gingival crevicular fluid, Fourier transform infrared spectroscopy, Amide III band, protein secondary structure, spectral deconvolution, multivariate analysis, dental caries, gingivitis

Funding: the study was supported by the Russian Science Foundation, project No. 26-15-00389, <https://rscf.ru/project/26-15-00389>.

Acknowledgments: the authors express their gratitude to the staff of the Pohang Accelerator Laboratory synchrotron radiation-based infrared beamline (Pohang, Republic of Korea), where some experiments were conducted within the framework of the proposal 2023-1st-12D-001 IRS.

Author contribution: Seredin PV — study concept, methods, spectral data interpretation, manuscript writing; Ippolitov YuA — clinical design of the study, participant recruitment, dental patient examination; Ippolitov IYu — participant recruitment, dental patient examination; Goloshchapov DL — spectrum acquisition and processing, deconvolution and multivariate analysis; Litvinova TA — literature review, statistical processing, manuscript writing and editing.

Compliance with ethical standards: the study approved by the Ethics Committee of the Burdenko Voronezh State Medical University (protocol No. 3 dated March 24, 2026) was conducted in accordance with ethical standards and the World Medical Association Declaration of Helsinki (2013 update). The informed consent for participation in the study was obtained from legal representatives of all subjects.

✉ **Correspondence should be addressed:** Pavel V. Seredin
Universitetskaya pl. 1, Voronezh, 394018, Russia; paul@phys.vsu.ru

Received: 15.06.2026 **Accepted:** 21.07.2026 **Published online:** 31.07.2026

DOI: 10.24075/brsmu.2026.042

Copyright: © 2026 by the authors. **Licensee:** Pirogov University. This article is an open access article distributed under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution (CC BY) license (<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>).

Десневая жидкость — это локальная биосреда зубодесневой борозды, отражающая физико-химическое состояние тканей зубодесневого комплекса. Ее состав определяется белками, пептидами, компонентами воспалительного экссудата и продуктами тканевого ремоделирования, поэтому она удобна для спектроскопического анализа. В отличие от таргетных биохимических методов, ИК-Фурье (FTIR)-спектроскопия позволяет получать интегральную молекулярную характеристику малого объема образца и оценивать перераспределение вкладов различных конформационных состояний белковой составляющей образца [1–4].

Для детской стоматологии эта тема особенно актуальна, однако данные о локальных молекулярных маркерах десневой жидкости у детей пока ограничены. Современные обзоры показывают, что воспалительные изменения десны у детей и подростков встречаются часто, а на состояние тканей дополнительно влияют возраст, стадия прикуса, пубертатные изменения, уровень зубного налета и ортодонтическая нагрузка [5–7]. В связи с этим десневая жидкость представляет интерес как малоинвазивный аналитический субстрат, который можно отбирать повторно и соотносить с конкретным участком зубодесневого комплекса [1, 5–6]. Теоретически на такие спектральные сдвиги могут влиять микробные факторы, локальный протеолиз, окислительный стресс и воспалительно-ремоделирующие процессы, меняющие состав и конформационное состояние белков в десневой жидкости.

Особый интерес для анализа белковой составляющей представляет область полосы Амид III, чувствительная к вкладу α -спиральных, β -складчатых, β -поворотных и неупорядоченных структур. По сравнению с областями Амид I и Амид II, ее интерпретация в меньшей степени осложняется влиянием воды и водородно-связанного фона, что особенно важно при исследовании малых объемов водосодержащих биосред, к которым относится десневая жидкость [4, 8–10]. Вместе с тем для корректной трактовки спектров белковых систем в этой области необходим учет перекрывания ИК-полос, выбор схемы предварительной обработки и параметров деконволюции [4, 8–10]. Поэтому в сложных биосредах целесообразно рассматривать не отдельные пики как прямые маркеры, а интегральный спектральный профиль как отражение направленных изменений белковой составляющей [4, 8].

Дополнительным ограничением подобных исследований является небольшой объем выборки, что требует применения методов многомерного анализа, адаптированных к спектральным данным и ограниченному числу наблюдений. Ранее было показано, что многомерный анализ ИК-спектров десневой жидкости позволяет выявлять скрытые закономерности, связанные с клиническим статусом и индивидуальными особенностями пациента [11]. Это делает сочетание деконволюции полосы Амид III и многомерного статистического анализа перспективным подходом к изучению направленных изменений вторичной структуры белков в десневой жидкости [11].

Мы исходили из рабочей гипотезы, что при кариесе и воспалительных изменениях десны профиль полосы Амид III десневой жидкости у детей будет изменяться направленно за счет перераспределения спектрально-ассоциированных компонент, соответствующих различным элементам вторичной структуры белков. Целью настоящей работы было выявить такие направленные изменения спектрального профиля полосы Амид III и оценить

возможность их рассмотрения в качестве кандидатных спектральных признаков изменений белковой составляющей десневой жидкости.

ПАЦИЕНТЫ И МЕТОДЫ

Дизайн исследования и характеристика выборки

В исследование включили 20 детей в возрасте 8–14 лет, у которых после стоматологического обследования выполняли забор десневой жидкости. Критерии включения: возраст 8–14 лет; наличие информированного добровольного согласия законных представителей; возможность проведения стандартного стоматологического обследования и забора десневой жидкости; отсутствие на момент обследования антибактериальной и иной терапии, способной существенно повлиять на состав исследуемой биосреды. Критерии исключения: иной возраст и несоответствие критериям включения. Исследование имело пилотный одноцентровый характер. Поскольку у части пациентов клинические факторы сочетались, исследование было ориентировано прежде всего на выявление направленности спектральных сдвигов, а не на строгую оценку независимого вклада каждого фактора.

Кариозный статус оценивали клинически с выделением групп без клинических признаков кариеса, с начальным кариесом и с множественным кариесом. Состояние десны характеризовали по наличию и степени выраженности воспалительных изменений как отсутствие клинически значимых изменений, воспалительные изменения легкой степени или воспалительные изменения средней степени. Сопутствующую соматическую патологию учитывали по данным анамнеза и медицинской документации. Для детального сопоставления спектральных профилей и их деконволюции были выделены четыре аналитические группы (табл.).

Отбор образцов десневой жидкости

Объектом исследования служила белковая составляющая десневой жидкости — сложной многокомпонентной биосреды, локально связанной с тканями зубодесневого интерфейса. Забор образцов проводили на кафедре детской стоматологии с ортодонтией Воронежского государственного медицинского университета имени Н. Н. Бурденко (Воронеж, Россия). Десневую жидкость отбирали в утренние часы без предварительной стимуляции с использованием микрокапилляров. Такой режим отбора минимизировал влияние циркадных колебаний и обеспечивал сопоставимость условий регистрации спектров [12]. После отбора образцы помещали в стерильные контейнеры и хранили при температуре 1–2 °C до спектроскопического анализа в рамках единого преаналитического режима.

ИК-Фурье-спектроскопия

ИК-спектры регистрировали методом синхротронной ИК-Фурье-спектроскопии с использованием вакуумированного спектрометра Bruker Vertex 80/v (Bruker Optik GmbH, Ettlingen, Germany) в диапазоне 3800–700 см⁻¹. В качестве основной аналитической области рассматривали полосу Амид III, поскольку она позволяет анализировать конформационные особенности белковой составляющей при меньшей методической зависимости от водного

Таблица. Описание групп образцов десневой жидкости, включенных в деконволюцию спектральных профилей Амид III

Внутренний код аналитической группы	Пол	Возрастная подгруппа	Стадия кариеса	Воспалительные изменения десны	Сопутствующая патология
ЖМЗЗЗ	Ж	Младшая (М)	Здоровый (З)	Клинически значимые изменения не выявлены (З)	Отсутствует (З)
ЖПКЗЗ	Ж	Подростковая (П)	Начальный кариес (К)	Клинически значимые изменения не выявлены (З)	Отсутствует (З)
ЖПКСО	Ж	Подростковая (П)	Начальный кариес (К)	Воспалительные изменения средней степени (С)	Онкологическое заболевание (О)
МПМЛЖ	М	Подростковая (П)	Множественный кариес (М)	Воспалительные изменения легкой степени (Л)	Заболевание ЖКТ (Ж)

Примечание: Внутренний код аналитической группы включает пять символов: 1-й — пол, 2-й — возрастную подгруппу, 3-й — кариозный статус, 4-й — состояние десны, 5-й — сопутствующую патологию.

фона по сравнению с областями Амид I и Амид II [4, 8–10]. В исходном экспериментальном цикле применяли стандартные параметры регистрации: спектральное разрешение 4 см^{-1} , аподизацию Blackman–Harris 3-Term, фазовую коррекцию Mertz и коэффициент zero filling, равный 2. Содержимое каждого образца разделяли на десять порций, для каждой из которых регистрировали отдельный ИК-спектр; последующую характеристику спектрального профиля проводили по усредненным данным.

Предварительная обработка спектров и деконволюция

Первичная обработка ИК-спектров включала сглаживание кривых полиномом Савицкого–Голея второго порядка при размере окна 25 точек. Коррекцию базовой линии выполняли методом асимметричных наименьших квадратов в диапазоне $4000\text{--}500\text{ см}^{-1}$ при пороговом значении 0,01 и факторе асимметрии около 0,001. Параметры предобработки подбирали так, чтобы уменьшить артефакты сглаживания и коррекции базовой линии при сохранении чувствительности к изменениям формы полосы Амид III.

Для количественного описания профиля полосы Амид III выполняли деконволюцию с выделением компонент, соотносимых с α -спиральными, β -складчатыми, β -поворотными и неупорядоченными конформациями. Для аппроксимации использовали гауссовы функции. Предварительный поиск центров тяжести и ширины полос на полувысоте проводили по вторым и четвертым производным сглаженных спектров. Дальнейшее моделирование выполняли в программе Fityk v.1.3.1 (разработчик М. Wojdyr, Польша) с использованием алгоритма Левенберга–Марквардта. Для сопоставимости результатов во всех образцах сохраняли одинаковое число компонент. При моделировании использовали box-ограничения: для положений максимумов $\pm 2\text{ см}^{-1}$, для значений FWHM — $7\text{--}10\text{ см}^{-1}$. Критерием завершения аппроксимации служило наилучшее соответствие между теоретической и экспериментальной кривыми по критерию χ^2 . Полученные компоненты рассматривали как спектрально-ассоциированные вклады, а не как прямое абсолютное измерение содержания соответствующих вторичных структур [4, 8–10]. Соотнесение компонент I–XII с элементами вторичной структуры белков проводили на основании ранее опубликованных данных по интерпретации полосы Амид III и диапазонов максимумов соответствующих ИК-полос [4, 8–10]. Выбранные box-ограничения задавали в пределах, обеспечивавших устойчивость аппроксимации и соответствие литературным диапазонам положений максимумов и ширины полос для

области Амид III [4, 8–10]. Одинаковое число компонент, единые box-ограничения и применение одинаковой схемы аппроксимации во всех образцах использовали для повышения воспроизводимости и сопоставимости результатов деконволюции.

Многомерный и статистический анализ

После предварительной обработки массив спектральных данных анализировали методом главных компонент для оценки взаимного расположения образцов в многомерном пространстве и интерпретации связей между спектральной вариабельностью и клиническими факторами. В качестве количественных переменных использовали интенсивности спектров в области полосы Амид III, а характеристики пациентов рассматривали как категориальные признаки, применяемые на этапе интерпретации. Для анализа использовали пакет FactoMineR в среде R, а для визуализации — пакет factoextra. На этом этапе определяли, какие клинические факторы в наибольшей степени связаны с основными направлениями спектральной вариабельности, и оценивали близость образцов в пространстве главных компонент. На этапе интерпретации дополнительно оценивали, как уровни категориальных клинических признаков соотносятся с положением образцов и основными направлениями спектральной вариабельности, выявленными методом главных компонент. Категориальные клинические признаки не включали в модель как независимые ковариаты; их использовали для клинической интерпретации распределения образцов в пространстве главных компонент, что соответствовало пилотному дизайну исследования.

На следующем этапе после выделения ключевых факторов вариабельности отбирали образцы для дальнейшей деконволюции спектральных профилей и проводили исследовательские попарные сравнения. Для этого использовали пакет BSDA и функцию tsum.test с поправкой Бонферрони на множественные сравнения. Анализ выполняли при уровне значимости 0,05.

РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

Спектральный профиль полосы Амид III

В области полосы Амид III образцы десневой жидкости характеризовались сложным многокомпонентным контуром, формируемым перекрывающимися полосами различной конформационной принадлежности (рис.1). Поэтому интегральная интенсивность была информативна лишь частично, тогда как более содержательным параметром оказалось перераспределение вкладов

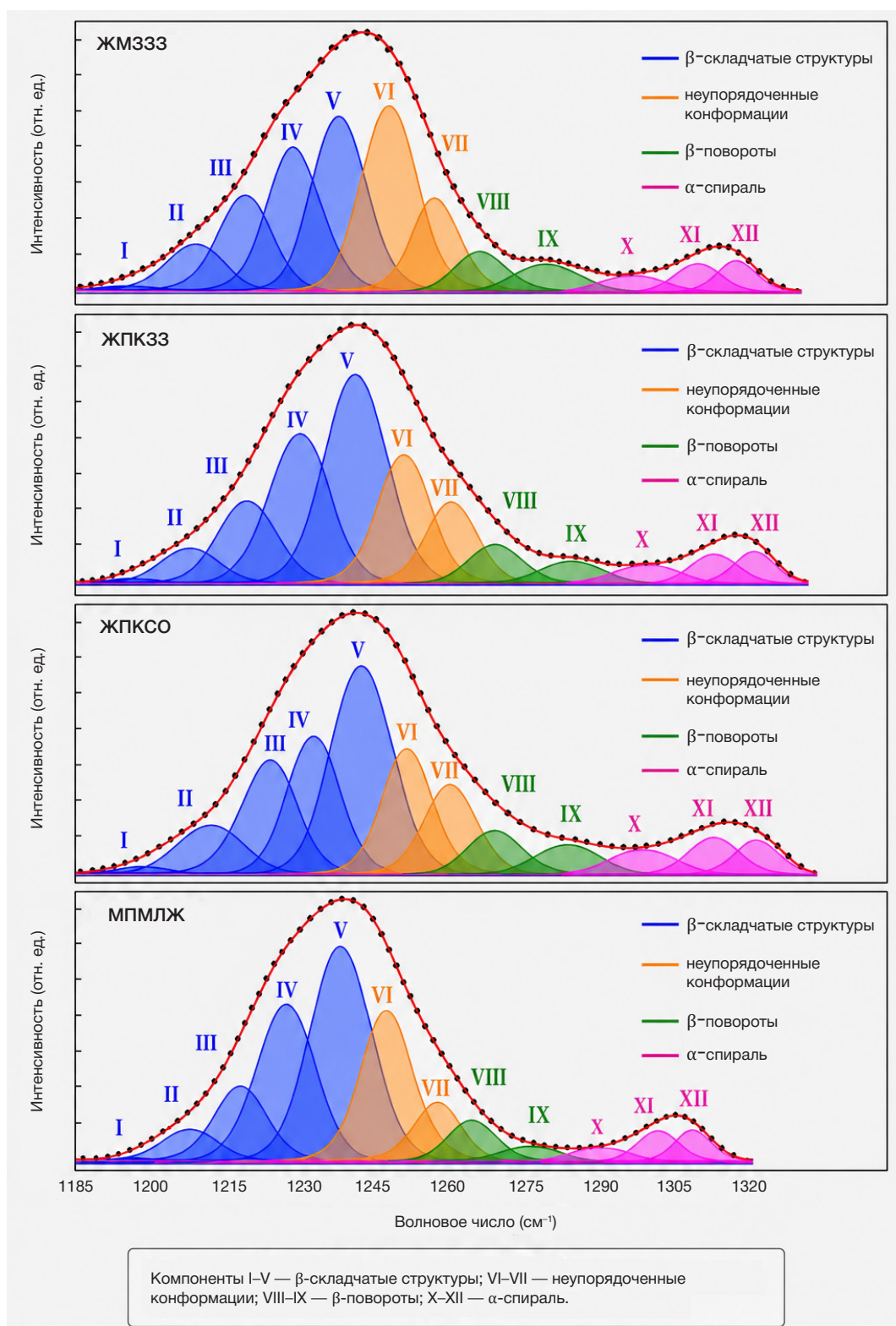


Рис. 1. Деконволюция спектрального профиля полосы Амид III образцов десневой жидкости у детей 8–14 лет с различным клиническим статусом. Внутренние коды образцов представлены в таблице. Компоненты I–V в спектральном профиле соотносены с β-складчатыми структурами, VI–VII — с неупорядоченными конформациями, VIII–IX — с β-поворотами, X–XII — с α-спиральными компонентами

отдельных спектральных компонент внутри общего профиля. Основной вклад в интегральную интенсивность вносили компоненты, соотносимые с β-складчатыми структурами и неупорядоченными конформациями; вклад α-спиральных компонент был менее выражен [8–10]. По данным суммарной оценки основных элементов вторичной структуры (рис. 2), во всех четырех аналитических группах

вклад β-складчатых компонент превышал 50%, вклад неупорядоченных конформаций составлял примерно 21–31%, тогда как вклад β-поворотов и α-спиральных компонент оставался менее 10–11%. Ключевые клинические характеристики аналитических групп приведены в таблице, а типичный профиль деконволюции — на рис. 1. На рис. 2 столбцы отражают средние значения суммарных вкладов,

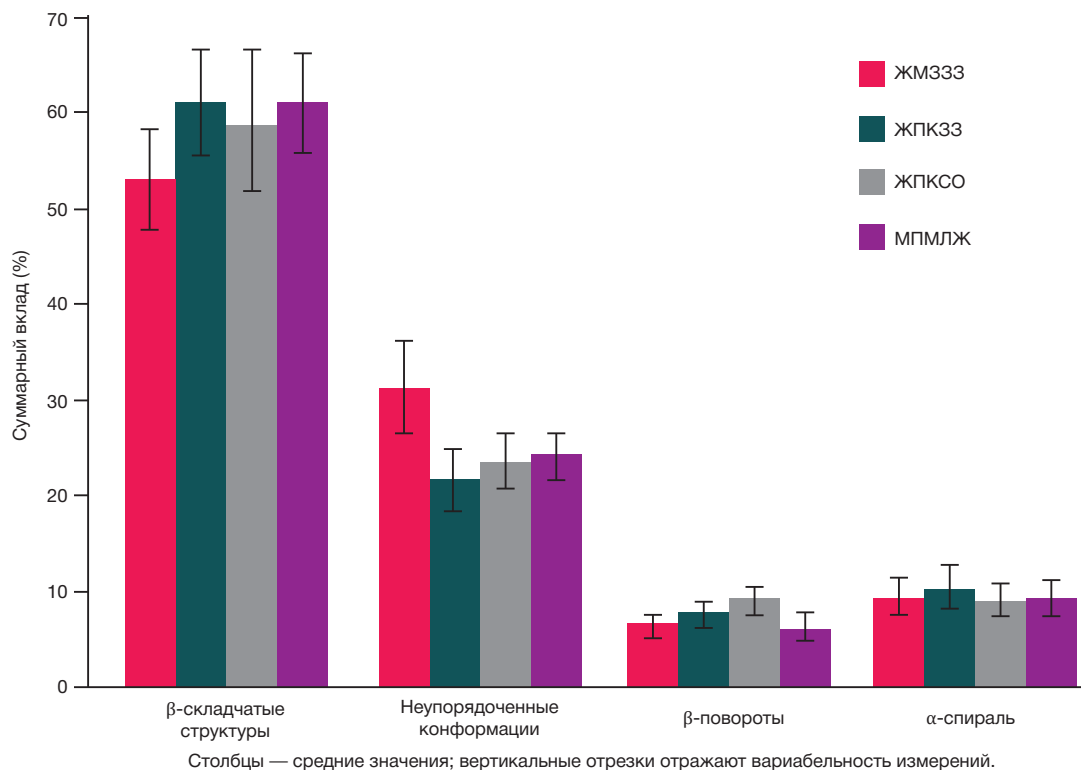


Рис. 2. Относительный вклад основных элементов вторичной структуры белков десневой жидкости в интегральный профиль полосы Амид III

а вертикальные отрезки — вариабельность измерений. Данные многомерного анализа использовали для отбора четырех аналитических групп; выявленная спектральная неоднородность образцов в целом согласовывалась с направленностью сдвигов, установленной при последующей деконволюции полосы Амид III. В пространстве первых главных компонент наблюдалось частичное разграничение аналитических групп, что в целом не противоречило последующим различиям в суммарных вкладах β-складчатых компонент и β-поворотов.

Внутренние коды образцов представлены в таблице. Компоненты I–V в спектральном профиле соотнесены с β-складчатыми структурами, VI–VII — с неупорядоченными конформациями, VIII–IX — с β-поворотами, X–XII — с α-спиральными компонентами. Такое распределение также вынесено в поясняющий блок рис. 1 для облегчения интерпретации графического материала.

Спектральные сдвиги при кариесе

Наиболее устойчивой особенностью в пилотной выборке было направленное увеличение относительного вклада компонент, ассоциированных с β-складчатыми структурами, в образцах детей с кариесом. Суммарный вклад β-складчатых компонент в группах с кариесом достигал примерно 59–61% против около 53% в группе без клинически значимых стоматологических изменений (рис. 2). Этот сдвиг сохранял одно и то же направление при разных сочетаниях сопутствующих клинических признаков, хотя его величина менялась от сравнения к сравнению. В рамках настоящей работы такой результат корректно рассматривать не как диагностический критерий, а как кандидатный спектральный признак изменений белковой составляющей десневой жидкости [11, 13–14].

По своему направлению это наблюдение согласуется с данными литературы по ИК-Фурье-спектроскопии в

области полосы Амид III у взрослых, где β-складчатые компоненты также описаны как наиболее устойчивый сдвиг, ассоциированный с кариесом [11, 13–14]. Однако совпадение направления не означает эквивалентности выводов: взрослая когорта и детская выборка различаются по возрасту, клиническому контексту и набору смешивающих факторов. Следовательно, речь идет о предварительной межисследовательской согласованности, а не о полноценной внешней репликации.

Спектральные сдвиги при воспалительных изменениях тканей пародонта

При воспалительных изменениях десны наблюдалась тенденция к уменьшению вклада β-поворотов и относительному увеличению неупорядоченных конформаций. В исследовательском наборе доля β-поворотов оставалась низкой и не превышала примерно 10%, тогда как вклад неупорядоченных конформаций находился в диапазоне около 21–24% для групп с воспалительными изменениями десны. С физико-химической точки зрения такой сдвиг может отражать изменение состава белковой составляющей, усиление протеолитической активности и повышение доли структурно менее упорядоченных белковых состояний в локальной воспалительно-ремоделирующей среде [2–3, 15].

Международные данные по анализу состава десневой жидкости с использованием методов молекулярной идентификации поддерживают эту общую логику: при развитии заболеваний пародонта образцы могут различаться по молекулярному профилю, а значимыми оказываются изменения цитокинов, металлопротеиназ и матричных белков [2–3, 15–16]. В настоящем исследовании выявленные спектральные сдвиги следует трактовать как интегральный сигнал воспалительно-ремоделирующей среды, а не как характеристику отдельных таргетных белков или белковых панелей.

Сопутствующая соматическая патология

У части детей с сопутствующей соматической патологией регистрировалось уменьшение вклада α -спиральных компонент. Биологически такой сдвиг возможен, поскольку для различных заболеваний и состояний стресса в белковых образцах описывали соотношение типа « α -спираль / β -складчатая структура» [4, 17–18]. Однако с учетом малого объема выборки и сочетания клинических факторов этот результат следует трактовать как наблюдательную тенденцию, а не как доказанный самостоятельный эффект сопутствующей патологии. В контексте детской слюнной жидкости ИК-Фурье-анализ следует рассматривать как интегральный метод молекулярного профилирования, а не как замену таргетным белковым панелям [4, 17–18]. Распределение вкладов основных элементов вторичной структуры белков представлено на рис. 2.

ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Полученные данные свидетельствуют о том, что профиль полосы Амид III в слюнной жидкости следует рассматривать прежде всего как интегральную спектральную характеристику сложной белковой смеси, а не как прямое количественное измерение содержания отдельных вторичных структур. Поэтому интерпретация результатов должна учитывать ограничения, связанные с перекрыванием полос, схемой предварительной обработки и используемой моделью деконволюции [4, 8–10].

Направленное увеличение вклада β -складчатых компонент при кариесе согласуется с ранее описанными в работах по ИК-спектроскопии оральных биосред и расширяет эти результаты на педиатрическую выборку [11, 13–14]. Такая тенденция может отражать изменение соотношения более упорядоченных и менее упорядоченных белковых состояний в условиях локального кариозного процесса. В свою очередь, тенденция к снижению вклада β -поворотов и относительному росту неупорядоченных конформаций при воспалительных изменениях десны биологически правдоподобна и соответствует современным представлениям о перестройке молекулярного профиля слюнной жидкости в воспалительно-ремоделирующей среде [1–3, 15–16].

Таким образом, многомерный анализ и деконволюция спектральной полосы Амид III в настоящей работе выполняли взаимодополняющие функции: PCA использовали для выявления общей спектральной

неоднородности и отбора аналитических групп, тогда как деконволюция позволяла интерпретировать эту вариабельность через перераспределение вкладов компонент полосы Амид III. Такое согласование двух подходов повышает доказательность выявленных направленных сдвигов, хотя в силу пилотного дизайна не заменяет их дальнейшей клинической проверки.

Ограничения исследования

Интерпретация выявленных сдвигов ограничена пилотным объемом выборки, клинической неоднородностью наблюдений и зависимостью результатов деконволюции от алгоритмов предварительной обработки спектров [4, 8]. Кроме того, в детской выборке на состав слюнной жидкости потенциально влияют возраст, стадия прикуса, гигиенический статус, ортодонтическая нагрузка и пубертатные изменения [5–7]. Дополнительными источниками вариабельности могли быть особенности преаналитического этапа, в том числе объем материала и временной интервал между забором и регистрацией спектров. Наконец, в настоящем пилотном исследовании сопутствующую соматическую патологию не анализировали как самостоятельный независимый фактор. Поэтому обнаруженные особенности следует рассматривать как гипотезо-генерирующие и требующие дальнейшей валидации на расширенном клинически стратифицированном материале. Дополнительным ограничением является то, что кариозный статус и выраженность воспалительных изменений десны в настоящей пилотной работе описывали исследовательской клинической стратификацией, а не развернутой индексной оценкой, что должно учитываться при интерпретации результатов.

ВЫВОДЫ

Анализ полосы Амид III слюнной жидкости у детей 8–14 лет позволил выявить различия ИК-спектрального профиля белковой составляющей в зависимости от стоматологического статуса. В пилотной выборке кариес ассоциировался с увеличением вклада β -складчатых структур, а воспалительные изменения десны — с тенденцией к росту неупорядоченных конформаций и снижению вклада β -поворотов. Таким образом, анализ ИК-спектральной полосы Амид III может быть полезен как исследовательский подход для оценки молекулярных изменений в слюнной жидкости, однако его клиническая значимость требует дальнейшего подтверждения.

Литература

1. Cuevas-González MV, Cuevas-González JC, Espinosa-Cristóbal LF, Tovar-Carrillo KL, Saucedo-Acuña RA, García-Calderón AG, et al. The potential of gingival crevicular fluid as a tool for molecular diagnosis: a systematic review. *Biomed Res Int.* 2024; 2024: 5560866. DOI: 10.1155/2024/5560866.
2. Buduneli N, Bıyıkoglu B, Kinane DF. Utility of gingival crevicular fluid components for periodontal diagnosis. *Periodontol* 2000. 2024; 95 (1): 156–75. DOI: 10.1111/prd.12595.
3. Torres A, Michea MA, Végvári Á, Arce M, Pérez V, Alcota M, et al. A multi-platform analysis of human gingival crevicular fluid reveals ferroptosis as a relevant regulated cell death mechanism during the clinical progression of periodontitis. *Int J Oral Sci.* 2024; 16 (1): 43. DOI: 10.1038/s41368-024-00306-y.
4. Tintor Đ, Ninković K, Milošević J, Polović NB. Gaining insight into protein structure via ATR-FTIR spectroscopy. *Vib Spectrosc.* 2024; 134: 103726. DOI: 10.1016/j.vibspec.2024.103726.
5. American Academy of Pediatric Dentistry. Periodontal conditions in pediatric dental patients. In: *The Reference Manual of Pediatric Dentistry*. Chicago (IL): American Academy of Pediatric Dentistry, 2025; p. 527–44.
6. Deng Q, Wong HM, Peng S. Salivary and gingival crevicular fluid biomarkers of periodontal health and/or obesity among children and adolescents: a systematic review and meta-analysis. *Heliyon.* 2024; 10 (1): e23782. DOI: 10.1016/j.heliyon.2023.e23782.
7. Iwamoto Y, Mitsuhashi C, Ikeda S, Ito Y, Hamaguchi S, Tabata E, et al. Development of a novel method to evaluate gingivitis in

- children by combining rapid saliva test systems. *Sci Rep.* 2025; 15: 41033. DOI: 10.1038/s41598-025-24982-w.
8. De Meutter J, Goormaghtigh E. Searching for a better match between protein secondary structure definitions and protein FTIR spectra. *Anal Chem.* 2021; 93 (3): 1561–8. DOI: 10.1021/acs.analchem.0c03943.
 9. Cai S, Singh BR. Identification of beta-turn and random coil amide III infrared bands for secondary structure estimation of proteins. *Biophys Chem.* 1999; 80 (1): 7–20. DOI: 10.1016/S0301-4622(99)00060-5.
 10. Stani C, Vaccari L, Mitri E, Birarda G. FTIR investigation of the secondary structure of type I collagen: new insight into the amide III band. *Spectrochim Acta A Mol Biomol Spectrosc.* 2020; 229: 118006. DOI: 10.1016/j.saa.2019.118006.
 11. Seredin P, Litvinova T, Ippolitov Y, Goloshchapov D, Peshkov Y, Kashkarov V, et al. A study of the association between primary oral pathologies (dental caries and periodontal diseases) using synchrotron molecular FTIR spectroscopy in view of the patient's personalized clinical picture (demographics and anamnesis). *Int J Mol Sci.* 2024; 25 (12): 6395. DOI: 10.3390/ijms25126395.
 12. Papagerakis P, Zheng L, Kim D, Said R, Ehler AA, Chung KKM, et al. Saliva and gingival crevicular fluid collection for biomarker screening. In: Papagerakis P, editor. *Odontogenesis: Methods and Protocols.* New York: Springer, 2019; p. 549–62. DOI: 10.1007/978-1-4939-9012-2_41.
 13. Seredin P, Goloshchapov D, Ippolitov Y, Vongsvivut J. Comparative analysis of dentine and gingival fluid molecular composition and protein conformations during development of dentine caries: a pilot study. *Vib Spectrosc.* 2020; 108: 103058. DOI: 10.1016/j.vibspec.2020.103058.
 14. Seredin P, Goloshchapov D, Ippolitov Y, Vongsvivut J. Spectroscopic signature of the pathological processes of carious dentine based on FTIR investigations of the oral biological fluids. *Biomed Opt Express.* 2019; 10 (8): 4050–8. DOI: 10.1364/BOE.10.004050.
 15. Teles F, Martin L, Patel M, Hu W, Bittinger K, Kallan MJ, et al. Gingival crevicular fluid biomarkers during periodontitis progression and after periodontal treatment. *J Clin Periodontol.* 2025; 52 (1): 40–55. DOI: 10.1111/jcpe.14061.
 16. Esberg A, Kindstedt E, Isehede C, Lindquist S, Holmlund A, Lundberg P. LIGHT protein: a novel gingival crevicular fluid biomarker associated with increased probing depth after periodontal surgery. *J Clin Periodontol.* 2024; 51 (7): 852–62. DOI: 10.1111/jcpe.13964.
 17. Portaccio M, d'Apuzzo F, Perillo L, Grassia V, Errico S, Lepore M. Infrared microspectroscopy characterization of gingival crevicular fluid during orthodontic treatment. *J Mol Struct.* 2019; 1176: 847–54. DOI: 10.1016/j.molstruc.2018.09.013.
 18. Lepore M, Portaccio M, d'Apuzzo F, Nucci L, Grassia V, Annunziata M, et al. Rapid acquisition of gingival crevicular fluid FT-IR spectra for monitoring orthodontic treatments. In: 2024 IEEE Sensors Applications Symposium (SAS), 2024; p. 1–5. DOI: 10.1109/SAS60918.2024.10636387.

References

1. Cuevas-González MV, Cuevas-González JC, Espinosa-Cristóbal LF, Tovar-Carrillo KL, Saucedo-Acuña RA, García-Calderón AG, et al. The potential of gingival crevicular fluid as a tool for molecular diagnosis: a systematic review. *Biomed Res Int.* 2024; 2024: 5560866. DOI: 10.1155/2024/5560866.
2. Buduneli N, Birykoğlu B, Kinane DF. Utility of gingival crevicular fluid components for periodontal diagnosis. *Periodontol 2000.* 2024; 95 (1): 156–75. DOI: 10.1111/prd.12595.
3. Torres A, Michea MA, Végvári Á, Arce M, Pérez V, Alcota M, et al. A multi-platform analysis of human gingival crevicular fluid reveals ferroptosis as a relevant regulated cell death mechanism during the clinical progression of periodontitis. *Int J Oral Sci.* 2024; 16 (1): 43. DOI: 10.1038/s41368-024-00306-y.
4. Tintor Đ, Ninković K, Milošević J, Polović NB. Gaining insight into protein structure via ATR-FTIR spectroscopy. *Vib Spectrosc.* 2024; 134: 103726. DOI: 10.1016/j.vibspec.2024.103726.
5. American Academy of Pediatric Dentistry. Periodontal conditions in pediatric dental patients. In: *The Reference Manual of Pediatric Dentistry.* Chicago (IL): American Academy of Pediatric Dentistry, 2025; p. 527–44.
6. Deng Q, Wong HM, Peng S. Salivary and gingival crevicular fluid biomarkers of periodontal health and/or obesity among children and adolescents: a systematic review and meta-analysis. *Heliyon.* 2024; 10 (1): e23782. DOI: 10.1016/j.heliyon.2023.e23782.
7. Iwamoto Y, Mitsuhashi C, Ikeda S, Ito Y, Hamaguchi S, Tabata E, et al. Development of a novel method to evaluate gingivitis in children by combining rapid saliva test systems. *Sci Rep.* 2025; 15: 41033. DOI: 10.1038/s41598-025-24982-w.
8. De Meutter J, Goormaghtigh E. Searching for a better match between protein secondary structure definitions and protein FTIR spectra. *Anal Chem.* 2021; 93 (3): 1561–8. DOI: 10.1021/acs.analchem.0c03943.
9. Cai S, Singh BR. Identification of beta-turn and random coil amide III infrared bands for secondary structure estimation of proteins. *Biophys Chem.* 1999; 80 (1): 7–20. DOI: 10.1016/S0301-4622(99)00060-5.
10. Stani C, Vaccari L, Mitri E, Birarda G. FTIR investigation of the secondary structure of type I collagen: new insight into the amide III band. *Spectrochim Acta A Mol Biomol Spectrosc.* 2020; 229: 118006. DOI: 10.1016/j.saa.2019.118006.
11. Seredin P, Litvinova T, Ippolitov Y, Goloshchapov D, Peshkov Y, Kashkarov V, et al. A study of the association between primary oral pathologies (dental caries and periodontal diseases) using synchrotron molecular FTIR spectroscopy in view of the patient's personalized clinical picture (demographics and anamnesis). *Int J Mol Sci.* 2024; 25 (12): 6395. DOI: 10.3390/ijms25126395.
12. Papagerakis P, Zheng L, Kim D, Said R, Ehler AA, Chung KKM, et al. Saliva and gingival crevicular fluid collection for biomarker screening. In: Papagerakis P, editor. *Odontogenesis: Methods and Protocols.* New York: Springer, 2019; p. 549–62. DOI: 10.1007/978-1-4939-9012-2_41.
13. Seredin P, Goloshchapov D, Ippolitov Y, Vongsvivut J. Comparative analysis of dentine and gingival fluid molecular composition and protein conformations during development of dentine caries: a pilot study. *Vib Spectrosc.* 2020; 108: 103058. DOI: 10.1016/j.vibspec.2020.103058.
14. Seredin P, Goloshchapov D, Ippolitov Y, Vongsvivut J. Spectroscopic signature of the pathological processes of carious dentine based on FTIR investigations of the oral biological fluids. *Biomed Opt Express.* 2019; 10 (8): 4050–8. DOI: 10.1364/BOE.10.004050.
15. Teles F, Martin L, Patel M, Hu W, Bittinger K, Kallan MJ, et al. Gingival crevicular fluid biomarkers during periodontitis progression and after periodontal treatment. *J Clin Periodontol.* 2025; 52 (1): 40–55. DOI: 10.1111/jcpe.14061.
16. Esberg A, Kindstedt E, Isehede C, Lindquist S, Holmlund A, Lundberg P. LIGHT protein: a novel gingival crevicular fluid biomarker associated with increased probing depth after periodontal surgery. *J Clin Periodontol.* 2024; 51 (7): 852–62. DOI: 10.1111/jcpe.13964.
17. Portaccio M, d'Apuzzo F, Perillo L, Grassia V, Errico S, Lepore M. Infrared microspectroscopy characterization of gingival crevicular fluid during orthodontic treatment. *J Mol Struct.* 2019; 1176: 847–54. DOI: 10.1016/j.molstruc.2018.09.013.
18. Lepore M, Portaccio M, d'Apuzzo F, Nucci L, Grassia V, Annunziata M, et al. Rapid acquisition of gingival crevicular fluid FT-IR spectra for monitoring orthodontic treatments. In: 2024 IEEE Sensors Applications Symposium (SAS), 2024; p. 1–5. DOI: 10.1109/SAS60918.2024.10636387.