

近红外光谱技术在药物分析中的应用

王娟 宗学刚

(齐鲁制药有限公司 山东 济南 250000)

摘要:近些年来,社会持续地发展和进步,近红外光谱技术逐渐被应用在越来越广阔的领域当中。近红外光谱技术指的是可见光与中红外光之间的一种电磁波技术类型,根据美国实验和材料协议报告定义波长为 780~2526nm 的电磁波可以称之为近红外光,根据波长反应的差异性一般分为近红外短波与近红外长波两种。近红外光谱是一种分子振动类型的光谱,具有较高的穿透力。现阶段近红外光谱分析技术主要应用于化工领域、食品加工领域以及制药领域当中,但是当下近红外光谱技术的应用还存在着许多不理想的状况,基于此,本文针对近红外光谱技术在药物分析中的应用展开研究和分析。

关键词:近红外光谱技术;药物分析;应用

近年来,近红外光谱区域以及含有 H 有机物质被广泛应用起来。根据实践研究指出,红外光谱自身具有较高的专属性特点,并且操作方式比较简单便捷,能够在实际应用过程中发挥出绿色环保的价值,因此当前这项技术主要被应用在药物定性定量分析工作以及市场监管工作当中。本文阐述近些年来近红外光谱技术在药物分析工作中存在的问题,并探究近红外光谱技术如何在药物分析中发挥价值的价值。

一、近红外光谱技术在药物分析工作中的应用问题

现阶段,近红外光谱技术在药物分析工作当中的应用存在着一定的不足和问题。首先,近红外光谱分析技术属于一种间接性的分析技术,主要途径是通过收集大量典型的、标准化的样品,并利用化学分析的方式测量计算机建立起的数据和数字模型,从而推测出未知样品的结果,构建专业化模型,从而得出预计要消耗的人力成本、物力成本以及财力成本^[1]。其次,因为近红外光谱区域在分子倍频和组合频率振动的情况下光谱信号呈现出弱化的特点,光谱峰出现明显的重叠现象,现阶段只能应用在常数分析工作中,测量成分的数量一般情况下需要大于样品质量的 1%。最后,在开展近红外光谱分析工作的过程中需要重点考虑样品的基本特征,针对实验的设计方案和数据的处理方式进行深入分析,从而获取精确性的分析结果。

二、近红外光谱技术在药物分析工作中的应用

(一) 定性分析法

近红外光谱的吸收峰位置和强度能够直接反映出物质的组成和分子结构特点,除了光学异构体与分子量高的聚合物以外,一般情况下不会出现两个化合物完全相同的红外光谱图,如同人的指纹。分子结构中不管多么细小的差异都会在红外光谱中呈现出来,如同分异构体、多晶型等等,这些高专属性特点和特异性特点就是定性分析工作的依据和参考^[2]。红外光谱是一种常量分析技术,一般情况下需要将被测样品的纯度限制在大于或等于 90% 的范围内,结合国内外的药典来看,近红外光谱技术是检测和分析原料药真伪的重点方法。近红外光谱技术具有高专属性、快速性和可靠性,随着社会的进步这项技术的应用越来越广泛,逐渐被应用于制剂的鉴别工作当中。针对不含辅料的制剂,比如注射应用的无菌粉针剂能够被直接测定和分析,无需进行样品前处理工作,含有辅料的制剂通常需要提前进行提取、分离和浓缩等处理,然后才能进行测定和分析。使用光纤探头能够直接收集八种头孢菌素类抗菌药物原料药的近红外光谱成像,应用偏最小二乘法及你选哪个光谱的预处理,并构建起无损快速鉴定头孢菌素类抗菌药物原料药的近红外识别模型,最后进行模拟试验,确保模型的专属性 and 耐用性。应用近红外光谱技术,能够构建起西咪替丁有效 A 晶型分析模型,从而快速精准地鉴定出西咪替丁中生物活性存在差异的晶型,进而更好地维持西咪替丁片的质量。

(二) 定量分析法

定量分析法分别为主成分回归法、人工神经网络法以及逐步回归分析法等等,主成分回归法的应用原理为利用主成分权重图,明确出主成分与其他组分之间的关系,但是当前技术的限制还无法清晰地分析出每个主成分分别代表的是什么。人工神经网络法是近些年来广泛应用起来的药物分析方法,这项方法的应用优势在于起到良好的抗干扰和防噪音作用,在面对一些特殊情况时能够有效地减小误差,取得优异的检测结果。逐步回归分析法的应用途径为进行反复多次地搜索,明确出含有待测成分信息量最大的波长点,并利用波长点的吸光度来分析未知样品。

(三) 药物分析的过程控制和在线分析

在生产药物制剂的过程中,传统的过程控制方法主要是将采集到的样本送到实验室进行检测,这样的方法不仅耗费时间和精力,工作效率也不高,且容易给样品造成严重的损坏现象^[3]。而利用近红外漫反射技术活光纤探头,可以在保证样品良好无损的状况下获取样品内部的信息数据,高速采集中间参数,并得到及时有效的反馈,不仅能够保证多个小组同步测验,还可以收集精准的样品物理参数,比如湿度、混合均一性、硬度和色差等的数值等等,在药品的加工和制剂包装过程中实现各个流程和各个阶段的质量监督,有效地控制资源浪费,提高工作效率。与热传感技术和拉曼光谱技术进行对比,近红外光谱技术具有高度的可行性和适用性,并且在药物粉末混合过程中应用最为广泛。搭配偏最小二乘法构建阿司匹林和乳糖二元混合体系的定量模型,在线上监测阿司匹林的成分和浓度,最后分析出混合终点,根据实际调查发现,也有相关方面的人员应用观察药物混合过程中粉末的粒度与流动性变化情况来判断混合终点的方式。

结束语:

综上所述,现代化近红外光谱技术在药物分析工作中的应用具有显著的实际意义,未来医药科学持续发展和进步,能够应用在药物分析工作中的技术更加丰富多元,且应用价值更加广阔。在应用近红外光谱技术的过程中需要注意由于这项技术是一种间接性的技术,在开展药物分析工作之前需要进行一定的准备工作,进而保障工作质量,提升药物分析的效果。

参考文献:

- [1]罗珏,祝媛媛.近红外光谱技术在化学分析方面的应用分析[J].当代化工研究,2021(2):94-95.
- [2]叶陈奎,袁冲,王晓岗.近红外光谱技术在药物分析中的应用[J].化工设计通讯,2020,46(8):204-211.
- [3]陈俊波,符秀娟.近红外光谱技术在药物分析中的应用[J].医学食疗与健康,2020,18(13):160-161+163.