

药品检测中近红外光谱分析的应用价值研究

向超

第一师食品药品检验所 新疆 阿拉尔 843300

[摘要]随着我国医药行业的逐步发展,近红外光谱分析技术逐渐应用在药品检测中,不仅避免了对药品造成的伤害,还促使药品检测效率得到提高。近红外光谱分析技术与传统的药品检测技术相比,提高了药品检测的效率与质量,从而促进了我国医药行业的发展。基于此,分析了光谱原理以及近红外光谱分析技术的特点,并且探究了近红外光谱分析在药品检测中的应用。

[关键词]近红外光谱;药品检测;应用

[DOI] 10.12252/j.issn.2096-627X.2021.10.822

红外光谱是目前人们所发现的吸收光谱中首个非可见光区,在红外光谱和可见光之间存在的一种介质即被视为近红外光谱。目前,近红外光谱在很多领域得到应用,主要应用原理是通过近红外光对所检测的药品进行扫描分析,之后收集药品内部所存在的信息,然后对所需要的信息进一步分析与总结。红外光谱检测在药品的生产和加工过程中工作发挥着重要的作用。由于药品中活性可影响药物成分与效果,为了使药品质量可以达到我国相关质量检测标准,所以加强对药品质量的分析非常关键。而近红外光谱技术具有高效、准确、成本低、绿色环保等特点,其可以确保相关作业的生产进行,目前已在各种物品质量检测中得到应用与推广,尤其是在药品质量检测中具有较好的应用价值。

1. 近红外光谱分析技术的简介及原理

1.1 近红外光谱分析技术的简介

近红外光谱分析技术是90年代以来发展最快、最引人注目的光谱分析技术,是光谱测量技术与化学计量学学科的有机结合,他在农业、矿业、医疗、药品以及化工分析领域都有广泛应用。近红外线是一种波长在780~2526nm的电磁波。随着化学计量学和光纤的发现、计算机技术和相关检测设备的普及,近红外光谱逐渐成为独立的分析技术,在近现代的工农业中逐渐发展成为一项有效的分析手段。

1.2 近红外光谱分析技术的原理

近红外光谱是介于可见光(VIS)和中红外光(MIR)之间的电磁波谱,波数约为:10000~4000 cm^{-1} 。分子在振动作用下产生非谐振性,其振动从基态转为高能级的跃迁。我们知道,红外光谱区与有机分子中含有的氢基团(X-H, X为:C, O, N, S等)化学键(X-H)的倍频和合频吸收区相同,由此通过扫描就可以得到样品的含氢基团信息。然后利用一定的化学计量校正方法,将使用近红外光谱扫描得到的样品的含氢基团在近红外区的吸收光谱与其成分浓度或性质数据建立联系,建立校正模型。这样一来,通过测量未知样品的光谱,并应用校正模型则可以得到预测未知样品的组成及性质。此外,利用一定的化学计量学模式识别方法,建立分离提取样本的近红外吸收光谱特征信息相应的类模型,并应

用类模型和未知样品的吸收光谱,就可以判定未知样品的类别。

总而言之,近红外光谱的分析技术一种间接分析技术,是一种通过建立校正模型而实现对未知样本进行定性或定量分析的方法。具有方便、高效、环保等优点,尤其适用于对高分子物质及有机物质的分析。具体来说有以下几个要素:(1)保证测样设备设施如近红光谱仪的精度,及测量技术的稳定性,确保得到可靠的扫描数据;(2)应用多元校正方式的软件技术来对数据做处理;(3)选择合适、完整、准确的分析模型,来对数据进行对比并建立联系。具体步骤如下:(1)选取具有代表性的校正集样本并用近红光谱仪测量其近红外光谱;(2)采用标准或认可的参考方法测定所关心的组成或性质数据;(3)运用一定方法对光谱进行预处理,利用合适的化学计量学方法将光谱与各数据进行联系,建立校正模型;(4)测定未知样本的组成及性质,并判断校正模型是否适用于对未知样本的测定若适用,那么测定的结果符合模型允许的误差要求,若不适用则只能作为参考性数据。

2. 近红外光谱技术的特点

2.1 优点

红外光谱技术应用优势近红外光谱具有非常好的传输性能,因此在进行药品质量测试时,其速度非常快,可以通过多重通道检测的方式有效分析近红外光谱结果。对于近红外光谱技术在药品质量中应用,可有效提升检测设备的分析速度。

在对药品质量进行检测时使用近红外线光谱进行检测,对于被检物品外部结构以及内部结构不会造成任何损伤,因此,使用近红外光谱对药品质量进行检测可以确保被检药品的完整性,而且具有非常高的检测准确度。

除了在物品检测中得到良好应用外,近红外光谱在活体检测中也得到良好应用,且大量研究证实,对活体进行近红外光谱检测不会造成被检物出现任何损伤,近红外光谱检测技术也被称为无损检测技术。

在采用近红外光谱对药品质量进行分析时,在完成校正模型建立后,可以对需要检测的样品不进行任何预处理,而

且采用近红外光谱检测时可实现一次性进行多组样品检测,对于不同样品无需进行逐一分析,这但可以有效缩短检测时间,而且可以有效提高检测效率。近红外光谱检测与传统检测方式不同,其具有非常快的传输能力,可有效缩短样本检测时间。一般而言,在进行药品质量检测时,采用近红外光谱进行检测,所花费的检测时间往往不会超过1分钟。若在检测过程中使用声光调制型分光器结合二极管阵列型检测器的分析仪,可以在几秒钟内将药品质量检测结果及时测出。

近红外光谱可以对多种形态的样品进行测量,且在进行测量时对于环境无特殊要求,在对样品进行检测时具有非常强的适用性,采用近红外光谱可以对液态、固态以及半固态等形态的样品进行快速测量,短时间内便可得出被测量样品的质量数据,通过其超快的样品检测速度,从而为药品生产带来很大的便利。

近红外光谱检测分析技术具有非常低的检测成本,在进行检测时,仅会消耗较低电量,因其在进行检测时不会对被检样品造成任何损伤。因此,在进行近红外光谱药品质量检测时,不会出现样品被消耗的情况,从而有效缩短检测所造成的成本浪费,为药品生产企业提供更高的积极收益。

采用近红外光谱进行检测与传统检测方式不同,不需要任何化学试剂进行干预,从而不会造成化学污染事件的发生,因此近红外光谱技术进行药品质量检测属于一种绿色环保的检测方式。

2.2 缺点

虽然近红外光谱分析技术在药品检测中应用十分广泛,但是仍然还存在着许多的问题,其表现为具有变动性,而这种变动性势必会给样品的检测带来一定的影响。另外,在对样品进行检测的过程中由于事先并没有对所测试样品的测定方式以及形态等因素进行处理,所以在检测时这些因素的出现也势必会影响到检测的结果。一种基团在近红外光谱区的多个波长处有吸收,这会使多组份样品在一个波长处出现多个谱峰重叠的情况。

3. 在药品检测中近红外光谱分析技术的应用

3.1 通过近红外光谱对药品进行定性分析

近几年,在医药学领域中近红外光谱技术的定性分析得到迅速发展,可以通过近红外光谱定性技术对绝大部分药品进行鉴别。通过对近红外光谱快速识别系统的建立,使对抗假药的识别能力以及识别速度得到进一步提高。目前比较常用的药品检测方法有相关系数法、判别分析以及主成分分析法等。在选择合适的检测方法时,必须要根据药品检测的要求与具体情况选择,这样才能保证检测结果的有效性。

3.2 通过近红外光谱对药品进行定量分析

在药品质量检测时利用近红外光谱分析技术进行定量分析,首先应当进行数字模型建立,然后检验所建立模型的

稳定性,并对数据模型进行进一步优化处理,然后使用所建立的数字模型结合位置样品的近红外光谱完成药品的定量鉴定。因为近红外光谱具有结构复杂、谱图重叠多等特点,在使用近红外光谱技术进行药品定量检查时常会采用多波长下获得数据,然后对所获得数据进行统一处理,经过一定的筛选与处理后,这样才能获得更加准确可靠的数据来分析结果。其中,主成分回归法、多元线性回归法以及偏最小二乘法等为目前常用的几种近红外光谱定量分析方法。

3.3 通过近红外光谱实现药品质量控制及在线监测

在以往,传统的药物质量控制,主要是将样品取出带到实验室进行分析,之后将所获得的信息反馈给生产车间来控制加工过程。由于该检测方式比较慢,且不能保证样品在检测之前是否有所污染而影响检测结果的准确性,由此,所带来的经济损失较大。而近几年,随着我国医药领域飞速发展,特别是现代化信息技术的应用,使近红外光谱分析技术在药品质量控制以及在线检测方面的应用也得到进一步提升。在该技术应用过程中近红外光谱内水分子像比其他各分子的合频以及倍频吸收都比较强烈,这也方便于在使用近红外光谱对药品质量进行检测时可以准确的对药品中水分子含量进行测定。而且,在中药提取、浓缩以及纯化等工艺过程中还可以使用近红外光谱技术进行在线检测,有效识别出各个工序当中可能出现的问题,避免药品质量受到影响。与此同时,该技术可以在很难时间内完成大量药剂的检测,保证了整批产品的质量。

结语

综上所述,近红外光谱分析技术具有良好的传输性能、分析速度以及方便性等,所以一直以来都是药品领域所重点青睐的对象。随着我国科学技术能力的快速发展,近红外光谱技术也正在不断的完善与创新,而这种检测技术也弥补了我国传统检测技术中的不足之处,为我国药品检测朝着高效率、高质量以及高精度方向逐步发展奠定了坚实的基础。

参考文献

- [1] 宋志铭,于海龙,吴昊,等.浅析近红外光谱分析在食品药品检测中的应用[J].科学技术创新,2016,(31): 1.
- [2] 李真,周立红,叶正良,等.近红外光谱分析技术在药物质量分析中的应用进展[J].药物评价研究,2016,39(4): 686-692.
- [3] 黄洁,单敏,王苑桃,等.近红外光谱技术在药品质量控制中的应用与研究进展[J].中国药房,2017,28(33): 4744-4748.
- [4] 刘宏群,孙长波,曲正义.近红外光谱技术在人参定性、定量和在线检测分析中的应用[J].中国药房,2018,29(13): 132-135.