

a szakértői
val tehát – a
vő aláírások
mtatás nem
isított írásos
aláírás után
ok.
ninalisztikai
3 vonalak
en frappáns
kérdéssel és
éven át. És
ezekben

Gyógyszerkészítmények jellemzése Raman-térképezés és többváltozós kalibrációs módszerek alkalmazásával

Kutatás, fejlesztés/ R & D

Nagy Brigitta, Vajna Balázs, Farkas Attila, Nagy Zsombor, Marosi György
Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Szerves Kémia és Technológia Tanszék

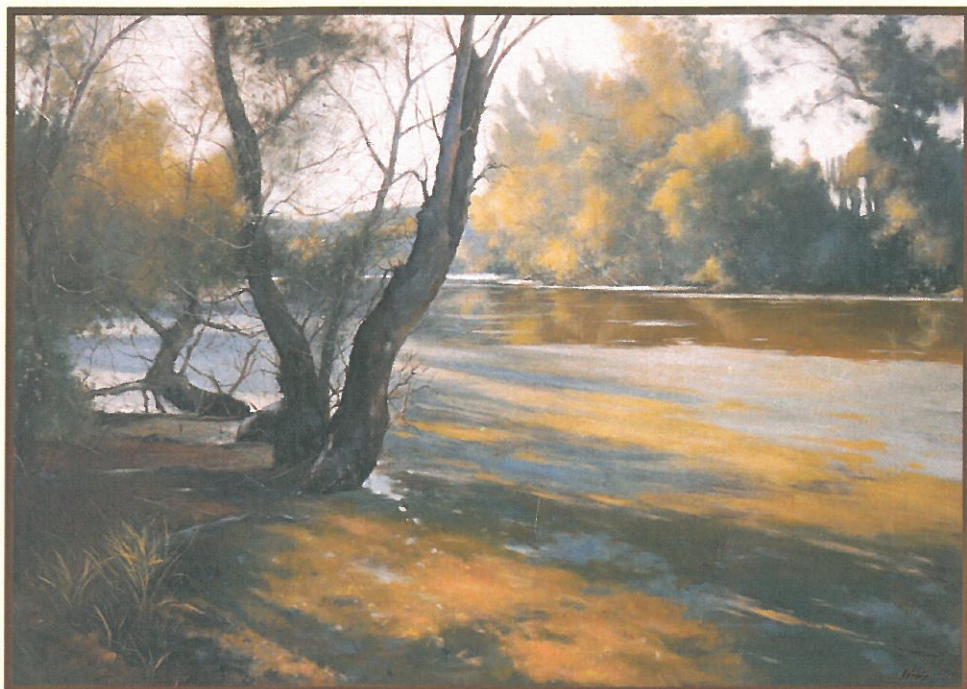
Bevezetés

A Raman spektroszkópia egyik fontos területe a kémiai térképezéssel történő anyagvizsgálat. Kémiai térképezéshez a Raman-spektroszkópot mikroszkóppal kapcsoljuk össze, ami számos előnnyel jár, ezért a kémiai térképezés (chemical imaging, CI) az analitikai és főként a spektrometriai technikák közül az egyik leggyorsabban fejlődő terület. Jelentőségét jelzi, hogy nemcsak a tudományban hanem az iparban is számos területen alkalmazzák, mint például a félvezetőiparban [1], az orvostudományban [2], papíriparban [3], az élelmiszeriparban [4-6], a műanyagiparban [7,8] és a bűnügyben [9]. Fontos megjegyezni, hogy különbséget kell tenni spektrális képalkotás (spectral imaging, SI) és kémiai térképezés között. A spektrális képalkotás mindazon technikák gyűjtőfogalma, amelyet valamilyen optikai spektroszkópiai módszer (lehet infravörös, Raman, fluoreszcencia, UV stb.) és a hagyományos képalkotó eljárások (mikroszkópok) összeolvasztásával érünk el. A kémiai térképezés fogalma ennél szűkebb. Ez alatt csak a rezgési spektroszkópiai módszereket értjük (infravörös, közeli infravörös, Raman). E módszerek fejlődése főként az utóbbi két évtizedben robbanásszerű, s már 2000-2008 között megduplázódott a kémiai térképezéssel foglalkozó cikkek száma [12]. A gyógyszerek vizsgálatában a növekedés még szignifikánsabb volt, s egyre több vonatkozásban bizonyosodott be, hogy adott kérdések hatékony eldöntése csupán e módszertől várható [13-15]. A sok pontból történő fókuszált spektrumfelvétel a minőségi és mennyiségi információk mellett térbeli információk kinyerésére is alkalmas. Egyes komponensek eloszlása mellett még határfelületi kölcsönhatásokra és egyéb technológiai jellemzőkre is következtetni tudunk.

A kémiai térképezés megvalósításának eredménye, hogy a mérések során óriási mennyiségű adat keletkezik, amelyeket csak számítógépes szoftverekkel és matematikai statisztikai módszerekkel lehet feldolgozni és kiértékelni. A spektrumokat több száz akár ezer hullámszámon mérik, amelyek ugyanennyi változót jelentenek. Ezeket többváltozós adatelemzési módszerekkel lehet kezelni oly módon, hogy a megfelelő információkat kinyerhessük.

A legegyszerűbben akkor járhatunk el, ha a vizsgált szilárd minták komponenseinek száma és a tiszta komponensek referenciaspektrumai ismertek. A referenciaspektrumokat együttthatókkal szorozva megkaphatjuk a mért spektrumokat, ha a mért és a számított spektrumaink közötti eltérések négyzetösszegét minimalizáljuk. A kapott együttthatókból adott komponensek eloszlástérképe hozható létre. Ezt a legkisebb négyzetek módszerén (classical least

Bilingual lecturebook on Spectroscopy



Ezt a kötetet Dr. Billes Ferenc professzor úrnak ajánljuk 80.
születésnapja alkalmából / *This book is dedicated to professor
Dr. Ferenc Billes on the occasion of his 80th birthday*

Esztergom, 2014.