ПРИМЕНЕНИЕ ОТРАЖАТЕЛЬНОЙ СПЕКТРОСКОПИИ В БЛИЖНЕЙ ИК ОБЛАСТИ ДЛЯ ИДЕНТИФИКАЦИИ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ПРЕПАРАТОВ

Желтвай О.И.
Физико-химический институт им. А.В.Богатского НАН Украины
zheltvay@ukr.net

Перспективным направлением аналитической химии органических веществ является спектроскопия в ближней ИК области, которая охватывает интервал длин волн от 0,75 до 2,5 мкм (13 300 – 4000 $см^{-1}$). В этой области расположены полосы обертонов и составных частот основных колебаний связей С-Н, N-H, O-H. Создание спектрофотометров, регистрирующих спектры диффузного отражения в широком диапазоне частот (например, Perkin Elmer Lambda-9), позволило получать колебательные спектры поверхности твердых образцов. Простота их получения и легкость интерпретации может быть использована для разработки методик идентификации и неразрушающего контроля качества лекарственных субстанций и таблетированных форм лекарственных препаратов, в некоторых случаях, даже без нарушения целостности упаковки. Актуальность и необходимость решения такой задачи связана с участившимися случаями фальсификации лекарств.

На основе анализа спектров более 50 модельных соединений (гидразиды кислот) и около 100 реальных лекарственных препаратов (аминокислоты, сульфаниламиды, барбитураты, производные пара-аминофенола, фенотиазина, изоникотиновой кислоты) сделан вывод, что наиболее пригодными для целей идентификации являются следующие параметры.

1. При наличии ароматических фрагментов, в спектрах четко фиксируются 1-й и 2-й обертоны валентного колебания С-Н групп. В области составных частот характерно наличие 4 полос при 2,13-2,17; 2,24-2,28; 2,42-2,46 и 2,74-2,78 мкм. Соотношение их интенсивностей постоянно и может служить индивидуальной характеристикой данного соединения.

2. Колебания связи С-Н алифатических групп проявляются в виде 1-го обертона в области 1,7-1,76 мкм и интенсивного пика составной частоты при 2,3 мкм. Соотношение интенсивности первых обертонов валентных колебаний С-Н ароматических и алифатических групп удовлетворительно коррелирует с их относительным содержанием в структуре конкретного соединения.

3. Наличие аминогруппы однозначно определяется по полосам первого обертона и очень интенсивной составной частоте в области 2,02-2,06 мкм. О присутствии в молекуле первичных, вторичных аминогрупп, а также гидразидного фрагмента можно судить по характеру расщепления и мультиплетности первого обертона.

Показано, что метод анализа спектров диффузного отражения в ближней ИК области обладает достаточно большой избирательностью, позволяет проводить идентификацию вещества без всякой предварительной подготовки образца.