электронный журнал
МОЛОДЕЖНЫЙ НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ВЕСТНИК
Издатель ФГБОУ ВПО "МГТУ им. Н.Э. Баумана". Эл No. ФС77-51038.

УДК 535.361

Фотолюминесценция водных растворов фармацевтических препаратов при импульсном ультрафиолетовом возбуждении

 # 08, август 2012

А. Ю. Пятышев

Студент,
кафедра «Физика»

Научный руководитель: В. С. Горелик,
доктор физико-математических наук, профессор кафедры «Физика»

МГТУ им. Н.Э. Баумана
bauman@bmstu.ru

Биоактивные препараты включают в себя большой класс веществ, оказывающих сильное воздействие на молекулярном уровне на биологические структуры и живые организмы. К ним относятся, в частности, различные фармацевтические объекты, стимуляторы процессов жизнедеятельности, аминокислоты, токсические вещества и др. Для эффективного использования биоактивных препаратов необходимо обеспечение соответствия их молекулярной структуры и состава номинальным препаратам, воздействие которых на биологические структуры и живые организмы надёжно установлено.

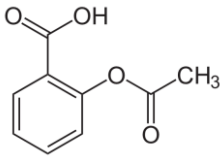
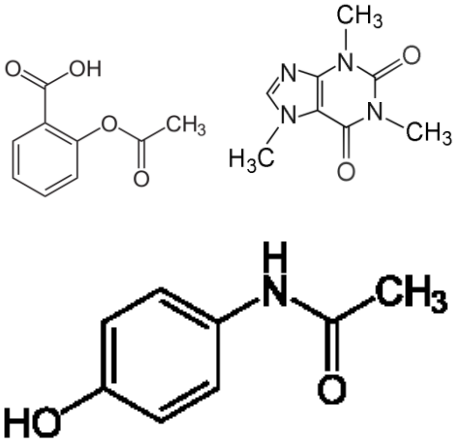
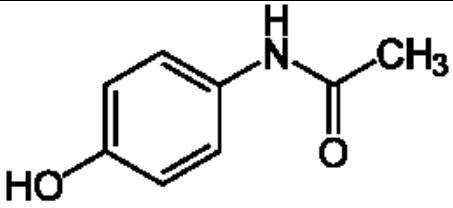
Для выяснения соответствия реальных образцов, используемых в различных областях жизнедеятельности человека, с номинальными биоактивными препаратами могут быть использованы спектроскопические методы, включая флуоресцентную спектроскопию [1], метод комбинационного рассеяния света, нелинейно-оптическую спектроскопию, оптические методы анализа [2] и т.д.

В данной работе ставилась задача сравнения спектров фотолюминесценции анализируемых и номинальных биоактивных объектов на примере коммерческих фармацевтических препаратов. Задача решалась на основе использования метода разностной фотолюминесцентной спектроскопии.

В качестве объектов исследования были выбраны типичные фармацевтические препараты: аспирин, парацетамол и цитрамон. В таблице 1 приведены химические и структурные формулы исследованных фармацевтических препаратов. Как видно из таблицы 1, в структуре всех

исследованных веществ присутствуют ароматические кольца. Электронные облака шести π - электронов бензольного кольца перекрываются друг с другом. Поглощение в видимой и близкой ультрафиолетовой областях спектра молекул ароматических соединений связаны с присутствием в них именно этих электронов. Люминесцентная способность молекулы обусловлена присутствием тех же π – электронов, осуществляющих двойную связь между атомами углерода, которая принадлежит всей молекуле [3].

Таблица 1. Химические формулы исследованных фармацевтических препаратов.

Фармацевтический препарат	Химическая формула	Структурная формула
Аспирин	$C_9H_8O_4$	
Цитрамон (аспирин, кофеин, парацетамол)	$C_9H_8O_4$ $+C_8H_{10}N_4O_2$ $+C_8H_9NO_2$	
Парацетамол	$C_8H_9NO_2$	

Для возбуждения и регистрации спектров фотолюминесценции использовалась волоконно-оптическая методика. Схема используемой экспериментальной установки приведена на Рис.1. Ультрафиолетовое излучение от лазерного источника направляется (Рис.1) в кювету с водным раствором исследуемого вещества. Вторичное излучение (фотолюминесценция) собирается на выходе кюветы с помощью волоконно - оптического световода и направляется на входную щель миниспектрометра, связанного с компьютером. При этом в качестве источника возбуждающего ультрафиолетового излучения использовалась четвёртая гармоника (266 нм) лазера на алюмоиттриевом гранате, генерирующего импульсно-периодическое излучение с длиной волны 1064 нм. Средняя мощность

возбуждающего ультрафиолетового излучения на поверхности анализируемого препарата составляла 10 мВт, что позволяло осуществлять анализ объекта без какой-либо его деструкции. Небольшое количество (10 мг) анализируемого вещества в виде порошка помещалось в кювету, после чего в кювету наливалась вода и исследуемое вещество растворялось в ней (см. Рис. 1).

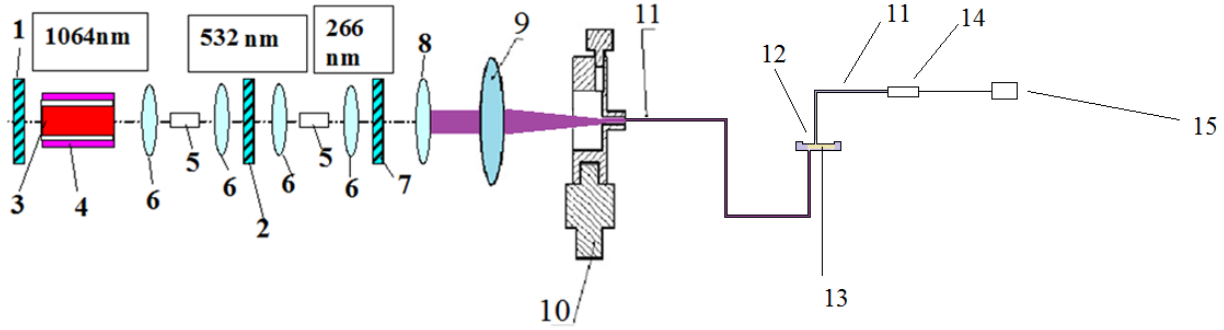
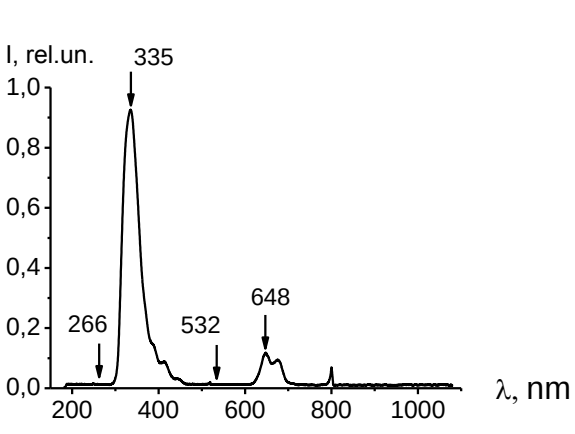
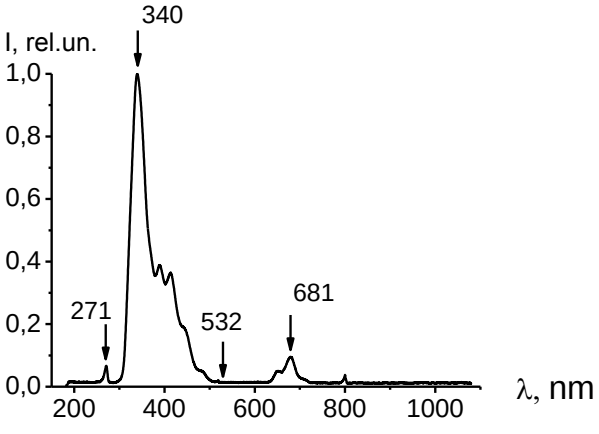


Рис. 16. Схема экспериментальной установки для регистрации спектров фотолюминесценции водных растворов фармацевтических препаратов: 1, 2, 7 - зеркала;3 - активный элемент; 4—«накачка»; 5 - нелинейный кристалл; 6 - линза; 8 - конденсор; 9 - фокусирующая линза; 10,12 - кювета; 11 - световод; 13 - вещество; 14 – миниспектрометр FSD-8; 15 - компьютер.

После компьютерной обработки были построены нормированные спектры фотолюминесценции фармацевтических препаратов. На Рис.2 (a-g) приводятся спектры фотолюминесценции аспирина, цитрамона и парацетамола. Как видно из Рис. 2(a-g), для всех анализируемых фармацевтических препаратов наблюдаются структурированные полосы фотолюминесценции в фиолетово-красной области. Из Рис.2 (a-b) видно, что спектры фотолюминесценции анализируемых образцов аспирина немного отличаются в области 400-500 нм и 600-800 нм. Спектр фотолюминесценции парацетамола (см. Рис. 2 c) существенно отличается от спектров фотолюминесценции цитрамона и аспирина. Спектры фотолюминесценции цитрамона (см. Рис.2 d-g) имеют некоторые различия в области 400-800 нм.



a



b

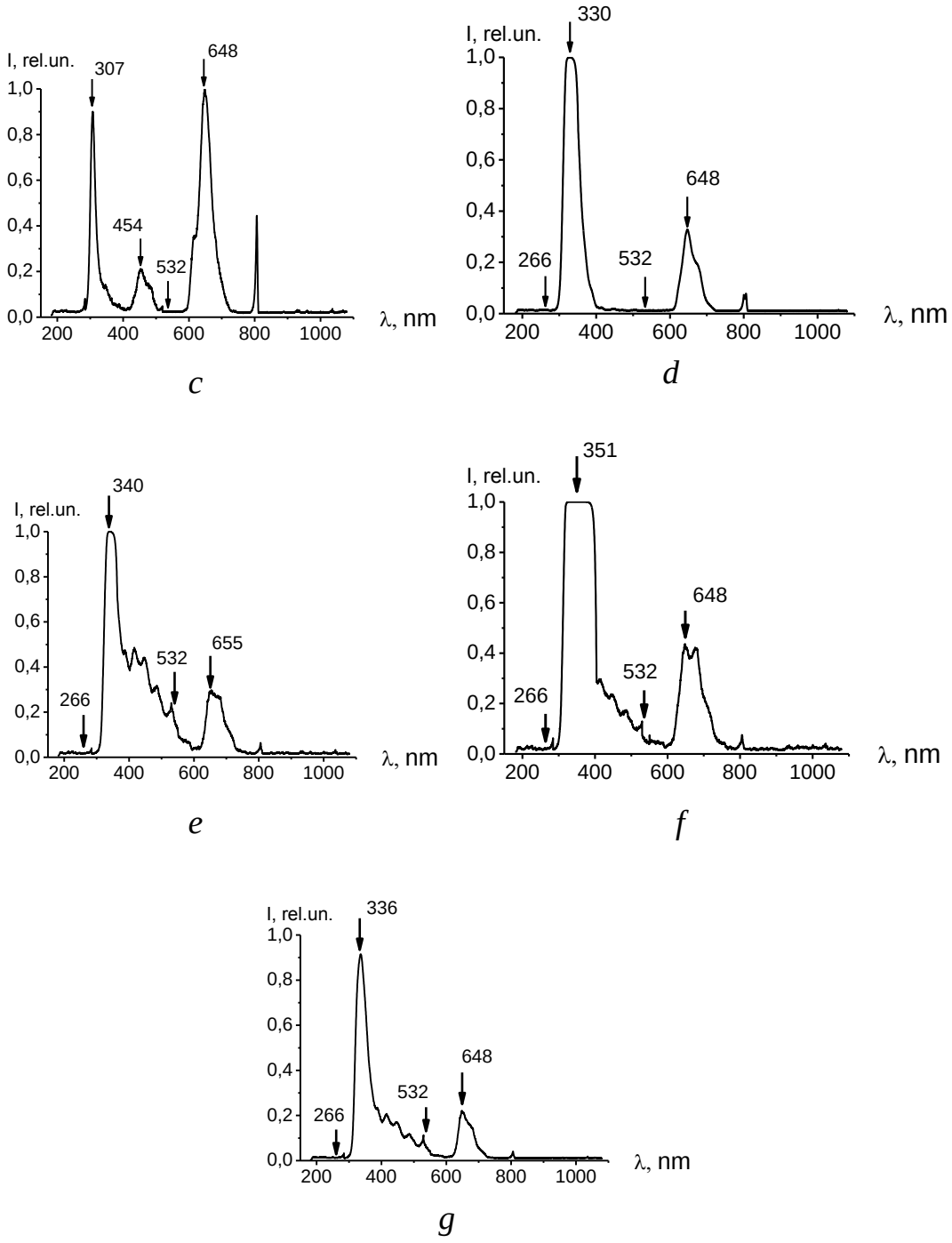


Рис. 2. Нормированные спектры фотолюминесценции: a - аспирин №1, b - аспирин №3, c - парацетамол №1, d - цитрамон №1, e - цитрамон №2, f - цитрамон №3, g - цитрамон №4.

Для установления количественного отличия спектров фотолюминесценции, полученных от различных фармацевтических препаратов, нами были построены разностные спектры (см. Рис.3) с использованием следующего соотношения:

$$K_X^Б(\lambda) = 1 - |\, I_X(\lambda) - I_Б(\lambda) \,| \qquad (1)$$

Здесь $I_X(\lambda)$, $I_Б(\lambda)$ - нормированные спектры фотолюминесценции анализируемого препарата (Х) и эталона этого препарата (Б). В формуле (1)

за эталон аспирина взят образец №1,за эталон цитрамона также взят образец №1. Также были вычислены соответствующие интегральные коэффициенты соответствия (приведены на Рис. 3) по формуле:

$$K = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} K_X^{E}(\lambda_i) \qquad (2)$$

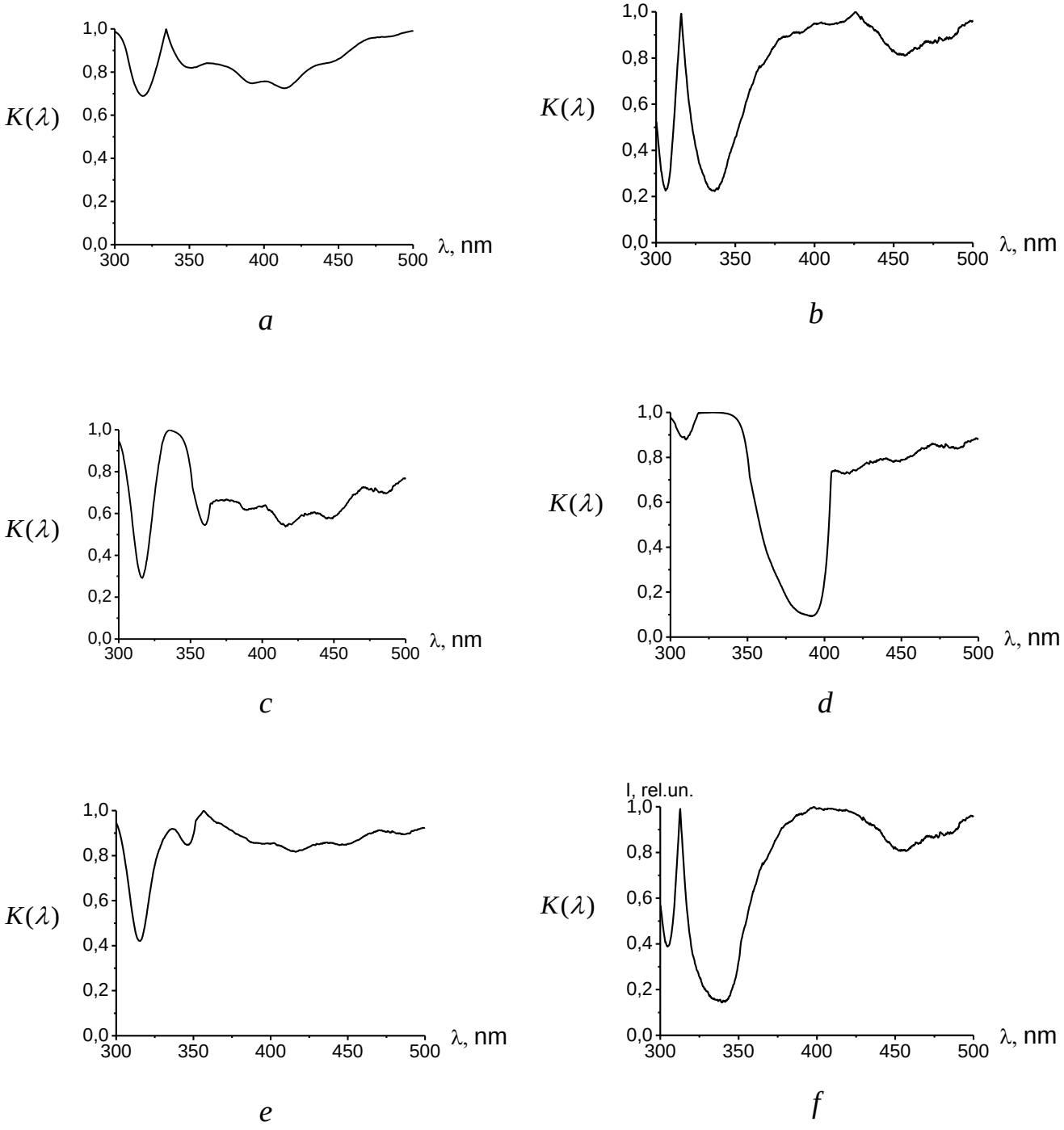


Рис. 3. Разностный спектры образцов:a- аспирин №3 по отношению к образцу аспирин №1, интегральный коэффициент соответствия $K = 0{,}85$*; b- парацетамол №1 по отношению к образцу аспирин №1. интегральный*

коэффициент соответствия $K = 0,76$*; c - образец цитрамон №2 по отношению к образцу цитрамон №1, интегральный коэффициент соответствия* $K = 0,66$*; d - образец цитрамон №3 по отношению к образцу цитрамон №1, интегральный коэффициент соответствия* $K = 0,70$*; e - образец цитрамон №4 по отношению к образцу цитрамон №1, интегральный коэффициент соответствия* $K = 0,85$*; f - образец парацетамол №1 по отношению к образцу цитрамон №1, интегральный коэффициент соответствия* $K = 0,74$.

Вычисленные по формуле (2) интегральные коэффициенты соответствия показывают, что все исследуемые тождественные препараты различаются. Наблюдается значительное отличие между эталонными образцами цитрамона, аспирина и парацетамола.

Таким образом, в данной работе на примере близких по структуре фармацевтических препаратов показано, что для количественного неразрушающего контроля молекулярного состава фармацевтических препаратов, содержащих ароматические кольца, может быть эффективно использован метод фотолюминесцентного анализа, дополненный построением соответствующих разностных функций. Возбуждение спектров фотолюминесценции осуществлялось четвёртой гармоникой лазера на алюмоиттриевом гранате с использованием волоконно-оптической методики и малогабаритного спектрометра. Разработанная методика обеспечивает получение информации от небольшого количества анализируемой пробы.

Литература.

[1] Разностная флуоресцентная спектроскопия структуры и состава биоактивных препаратов / Ю. П. Войнов [и др.] КСФ №11,2011.
[2] А. И. Сливкин, В. Ф. Селеменев, Е. А. Суховерхова. Физико-химические и биологические методы оценки качества лекарственных средств. Издательство Воронежского государственного университета 1999.
[3] В. Л. Лёвшин. Фотолюминесценция жидких и твердых веществ. Государственное издательство технико-теоретической литературы. Москва, Ленинград 1951.