

关键词

- Qcheck
- 真伪鉴别
- 药物晶型识别
- 精确识别
- 高灵敏度算法

## Qcheck高精度识别工具系列二：药检

沈怡 博士，赛默飞世尔科技，上海Demo实验室

### 介绍

在“质检质控新法宝：Qcheck高精度识别工具”一文中，已经详述了赛默飞世尔科技公司分子光谱部最新专利技术Omnic Qcheck在质检质控领域的突出贡献。而在药检系统、药物研究所和新药研发中心等领域，Qcheck同样可为研究工作者在药物质量控制和真伪鉴别上提供更快速和完善的解决方案。

### 药物晶型检测和研究

众多研究发现药物的不同晶型对药物的理化性质、生物利用度、药物制剂质量等方面会有不同的作用和影响，那如何来快速而又精确识别各种晶型？

### 药物精确性鉴别

药物的精确鉴定既是“打假”的迫切需求，也是质量监控的首要条件。红外导数谱在某些药物的真伪鉴别上曾取得较好的效果，但如果两个药物的成分基本相同，只是含量上略有不同时，导数谱往往也很难分辨。而二维红外光谱又很难满足分析工作者对鉴定速度的要求。那究竟如何来迅速区分只有细微差别的药物？

### 解决方案

Nicolet iS10型傅立叶红外光谱仪；

Smart iTR金刚石晶体采样附件；

采用专利优化高灵敏度算法的Qcheck高精度识别技术；

精确辨认相近物质间的细微差别，充分满足药物分析领域工作者对鉴定速度和鉴定质量的苛刻要求。

### 实例

#### 药物晶型鉴别

- 西米替丁的四种晶型

图1为西米替丁A/B/C/D四种晶型的红外光谱。

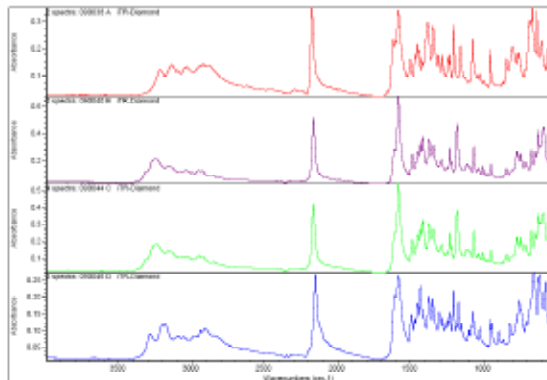


图1

比较四种晶型的谱图，发现A和D晶型很容易辨认，但B和C晶型的谱图相似度却非常高。利用Qcheck高灵敏度算法，设B为标准（见图2），计算得到C与B的相似度只有83%，Qcheck迅速判定两者为不同晶型，实现了精确识别的要求。

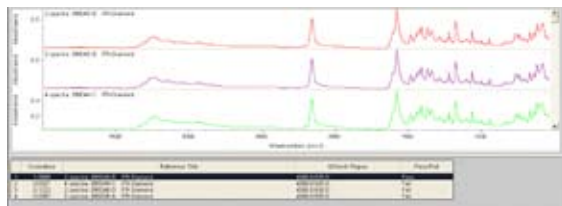


图2

把中美史克生产的西米替丁成品药片作为未知样品，用Qcheck判断其晶型，得到该药片的晶型为A型（匹配度达到98%，见下图3），与实际完全相符，进一步验证了Qcheck的高度准确性。

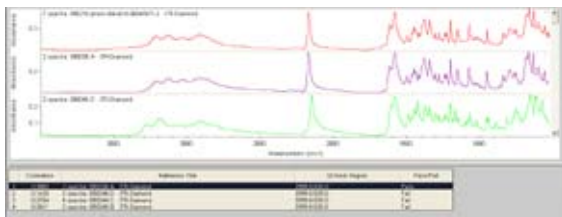


图3

#### 精确性鉴别

- 不同厂家生产的同种药片

共计有六个厂家生产的各批西米替丁药片（中美史克，上海衡山、上海世康特、上海宏新、上海黄海、上海信谊万象），其中中美史克有两种，0.8g和0.4g，其余厂家的均为0.2g。所有谱图如下（图4）。

中美史克的西米替丁为A晶型，谱图与其他厂家的差

异较为明显，但其余所有厂家的药片均为不同程度的混晶（以C或者B为主），所以谱图的相似度很高。为此用Qcheck高精度算法加以区分，以上海宏新为例（见下图5），宏新与黄海的匹配度为82%左右，与世康特的为75%，与信谊的为66%，与衡山的为44%，因此很轻松的就得到唯一答案。

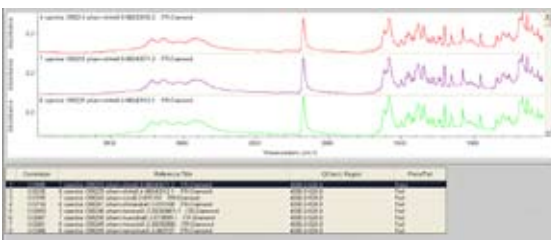


图7

### 总结

1. Qcheck高精度识别工具界面友好，使用简单，双重分析算法可轻松满足药检系统工作者对工作效率和结论精确性的苛刻要求。
2. 高精度算法在对物质精确定性的同时，还可快速得到成分含量的半定量结果，并可根据实际应用灵活拓展到其他一些理化指标的半定量分析。

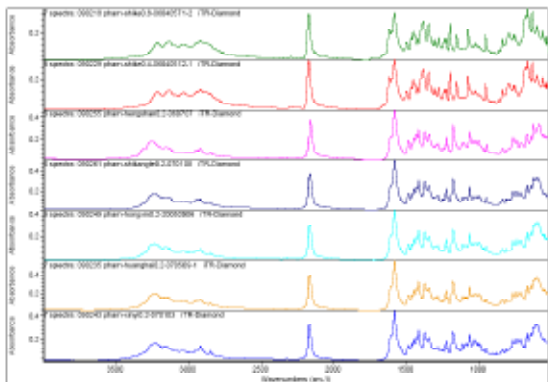


图4

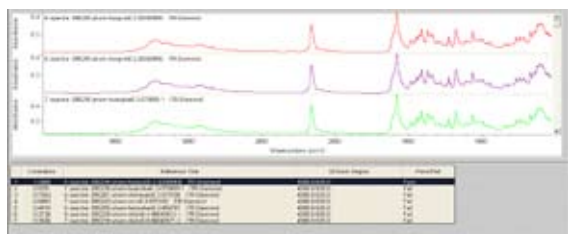


图5

进一步用Qcheck高精度算法区分同为中美史克生产的西米替丁含量不同的药片，以含0.8g西米替丁的成品药为例（图6），发现0.4g的与0.8g的相似度仅为68%，所以也轻易区分开来。

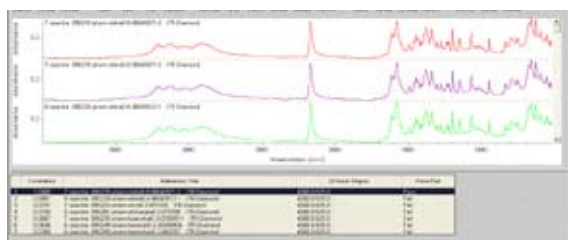


图6

把另一个批次的史克0.8g药片作为未知样品，检验Qcheck的准确性，结果如下（图7），Qcheck判断该样品与标准史克0.8g的匹配度达到95%，而与0.4g的匹配度仅为66%，检测结果完全正确。

### 赛默飞世尔科技

上海  
上海浦东  
新金桥路27号6号楼  
邮编：201206  
电话：021-68654588  
传真：021-64457830

北京  
北京东城区安定门东大街28号  
雍和大厦西楼F座7层702-715室  
邮编：100007  
电话：010-84193588  
传真：010-66210845

广州  
广州市东风中路410-412号  
健力宝大厦3003-3004室  
邮编：510030  
电话：020-83487138  
传真：020-83486621

服务热线  
800 810 5118  
400 650 5118

analyze.cn@thermofisher.com  
www.thermo.com.cn