

## ПРИМЕНЕНИЕ СПЕКТРОСКОПИИ И ХЕМОМЕТРИКИ ПРИ КЛАССИФИКАЦИИ ОБРАЗЦОВ ГЕПАРИНА

Бурмистрова Н.А., Кривец О.О., Соболева П.М., Монахова Ю.Б.

*Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н. Г. Чернышевского,  
410012, Саратов, ул. Астраханская 83, e-mail: naburmistrova@mail.ru*

Проблема контроля качества лекарственных препаратов и исходных препаратов для их получения играет большое значение. Для решения этой задачи, в настоящее время, успешно используются хроматографические методы и ЯМР-спектроскопия. В тоже время скрининговый контроль образцов требует поиска альтернативных подходов. В этом направлении определенный интерес представляют хемометрические подходы обработки экспериментальных данных, полученных широкодоступными и низко затратными спектроскопическими методами.

Объект данного исследования – гепарин, получивший широкое распространение в медицине благодаря антикоагулянтным свойствам<sup>1</sup>. Гепарин является полимером природного происхождения, который получают из слизистых оболочек внутренних органов крупного и мелкого рогатого скота. Пути происхождения, процедура и степень очистки гепарина существенно влияют на его биологическую активность, что ставит задачу контроля за качеством исходного сырья при получении препаратов.

В работе изучена возможность классификации образцов гепарина спектроскопическими методами (абсорбционная, люминесцентная, ИК-спектроскопия) на основе хемометрической обработки данных. Показано, что использование абсорбционной молекулярной спектроскопии и ИК-спектроскопии позволяют классифицировать образцы по производителю, степени очистки при обработке спектральных данных одноклассовым алгоритмом SIMCA<sup>2</sup> и методом проекции на латентные структуры (PLS1).

### Литература

1. Alquwaizani M., Buckley L., Adams C., Fanikos, J. 2013, 1 (2), 83.
2. Pomerantsev, A.L. Chemometrics in Excel, Wiley & Sons, 2014.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 18-73-10009.*