

OP-4

DOI: <https://doi.org/10.14232/fff.2020.op4>

Valós idejű spektroszkópiai mérések és kemometriai módszerek alkalmazása gyógyszerkioldódás predikciójára

Horváth Livia

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Szerves Kémia és Technológia Tanszék

A világon évente több százmilliárd gyógyszertablettát gyártanak, melyek minőségbiztosítására a gyógyszergyártó cégek többsége statisztikai eszközöket alkalmaz. Ennek értelmében egy legyártott sarzsóból kis számú mintát vesznek, amelyeket különböző roncsolásos analitikai módszerekkel vizsgálnak, majd ez alapján vonnak le következtetéseket az egész sarzsról. A gyártott tabletták minőségbiztosításának szempontjából nagy szükség lenne egy olyan megbízható, gyors és minden tablettát roncsolásmentesen átvizsgáló módszerre, amellyel lehetőség nyílna arra, hogy a minőségellenőrző rendszerek beépíthetők legyenek a folyamatos gyártásba, ezzel felgyorsítva a gyártási folyamatot. Visszacsatolások szabályozókörök segítségével pedig arra is lehetőség nyílik, hogy beavatkozhassunk a folyamatba, ezzel csökkentve a hibás termékek kockázatát.

Erre ad lehetőséget a Raman és NIR-spektroszkópia, különböző kemometriai módszerekkel kapcsolva [1]. Segítségükkel lehetőség nyílik egy adott tablettá hatóanyagleadásának becslésére a felvett spektrumok alapján. Kutatásomban ezt a módszert használtam fel háromkomponensű, nyújtott hatóanyagleadású tabletták kioldódásgörbéinek becslésére. Munkám során a céloom már előzőleg felállított, az adott kísérletben bizonyítottan jól működő modellek [2] robusztusságának ellenőrzése, kibővítése és összehasonlítása volt, hogy a változó paraméterek szélesebb tartományában biztosítsanak megbízható eredményt. Az általam használt többféle kemometriai módszer közül (PLS-regresszió, illesztett válaszfelület, mesterséges neurális háló és kombinációik) sikerült megállapítani, melyik alkalmas a legjobban a feladatra, és melyiket lenne érdemes beépíteni egy gyártósorba. Ilyen alapos összehasonlító tanulmányt még nem végeztek a kioldódáspredikció témakörében. Eredményeim és tapasztalataim segíthetik majd valódi gyógyszeripari problémáknál a mérési és modellezési módszerek közötti választást.

Irodalom:

1. E. M. Agency, "Guideline on Real Time Release Testing," 2012.
2. B. Nagy *et al.*, "Application of artificial neural networks for Process Analytical Technology-based dissolution testing," *Int. J. Pharm.*, vol. 567, Aug. 2019

Témavezető: Nagy Zsombor Kristóf