

Elavult módszernek tekinthető-e az ultraibolya spektroszkópia szerves vegyületek szerkezet-felderítésében?

GÖRÖG Sándor

Richter Gedeon Nyrt

Bár történetileg az ultraibolya (UV)-spektroszkópia volt az első spektroszkópiás módszer szerves vegyületek szerkezet-felderítésében,¹ jelentősége a 20. század közepére az infravörös spektroszkópia fejlődésével és elterjedésével párhuzamosan jelentősen csökkent, majd a tömeg- és NMR-spektroszkópia megjelenése és gyors térhódítása következtében teljesen eltűnni látszott.

Sok tekintetben új helyzetet teremtett azonban a nagyhatékonyságú folyadék-kromatográfiában (HPLC) és a különböző elektroforetikus módszerekben detektorként használt ultraibolya spektrofotométerek újabb generációjának, a milliszekundum nagyságrendű időtartam alatt spektrum felvételét lehetővé tevő diódasoros ultraibolya detektornak megjelenése és gyors elterjedése.^{1,2} Az a lehetőség, hogy a kromatográfiás, stb. elválasztással egy időben juthatunk jó minőségű ultraibolya spektrumhoz, ismét felértékelte ennek a módszernek lehetőségeit minden olyan esetben, amikor sok-komponensű elegyek, esetenként igen kis mennyiségben jelenlevő összetevőiről kívánunk gyors szerkezeti információt kapni. Ilyen esetek gyakran fordulnak elő, pl. gyógyszerek szennyezési és/vagy bomlástermék profiljának vizsgálata,^{3,4} gyógynövények szkrínelése,⁵ kromatográfiás csúcs-homogenitási vizsgálatok során. Ha az elválasztást vékonyréteg-kromatográfián végezzük el, akkor reflexiós spektrofotométer alkalmazásával juthatunk jól értékelhető spektrumokhoz.^{2,6}

A leírtakat a szerző gyógyszerek szennyezésprofil vizsgálatának három területéről vett példákkal illusztrálja. Ezek során egyszerű aromás vegyületek,^{2,7-9} fenol-típusú¹⁰⁻¹⁴ vegyületek, valamint telítetlen keton származékok^{2,6,10,11,15-17} szennyezéseinek UV spektrumaiból levonható következtetéseket tárgyalja.

Néhány megállapítás:

·Amennyiben jelentős különbség van a gyógyszervegyület és szennyezése UV spektrumai között, a spektrum alapján szerencsés esetben akár közvetlenül is lehet javaslatot tenni a szennyezés szerkezetére.

·Bizonyos esetekben csekély különbségeknek is lehet diagnosztikus értéke.

·Az UV spektrumokból levonható következtetések segítségével az esetek egy részében időt és nagyműszeres kapacitást takaríthatunk meg.

·Ha az UV spektrum (pl. a főkomponenssel való teljes azonosság vagy más ok miatt) nem is alkalmas közvetlen szerkezeti következtetések levonására, annak alapján bizonyos szerkezetek kizárhatók, vagy a spektrumból levonható következtetések hasznos kiegészítő adatokat szolgáltathatnak, pl. tömegspektrumok értékelése során.

Hivatkozások

- Görög, S. *Spektrofotometriás gyógyszeranalízis*, Akadémiai Kiadó, Budapest, **1994.**; Görög, S. *Ultraviolet-Visible Spectrophotometry in Pharmaceutical Analysis*, CRC Press, Boca Raton, **1995.**
- Görög, S.; Babják, M.; Gazdag, M.; Horváth, P.; Osztheimer, É.; Rényi, M.; Varga, K. *Acta Pharm. Hung.* **1999**, *69*, 60-68.
- Görög, S. (Ed.): *Identification and Determination of Impurities in Drugs*, Elsevier, Amsterdam, **2000.**
- Görög, S. *Trends Anal. Chem.* **2006**, *25*, 755-757.
- Nyiredy, Sz. *Acta Pharm. Hung.* **1998**, *68*, 189-196.
- Görög, S.; Babják, M.; Balogh, G.; Brlik, J.; Dravec, F.; Gazdag, M.; Horváth, P.; Laukó, A.; Varga, K. *J. Pharm. Biomed. Anal.* **1998**, *18*, 511-525.
- Görög, S.; Laukó, A.; Herényi, B.; Georgakis, A.; Csizér, É.; Balogh, G.; Gálik, Gy.; Mahó, S.; Tuba, Z. *Chromatographia*, **1988**, *26*, 316-320.
- Görög, S.; Herényi, B.; Rényi, M. *J. Pharm. Biomed. Anal.* **1992**, *10*, 831-835.
- Görög, S. *Trends Anal. Chem.* **2003**, *22*, 407-415.
- Görög, S.; Herényi, B. *J. Chromatogr.* **1987**, *400*, 177-186.
- Görög, S.; Laukó, A.; Herényi, B. *J. Pharm. Biomed. Anal.*, **1988**, *6*, 697-705.
- Görög, S.; Brlik, J.; Csehi, A.; Halmos, Zs.; Herényi, B.; Horváth, P.; Dravec, F.; Bor, D. *Anal. Methods Instrum.* **1995**, *3*, 154-157.
- Görög, S.; Bihari, M.; Csizér, É.; Dravec, F.; Gazdag, M.; Herényi, B. *J. Pharm. Biomed. Anal.* **1996**, *14*, 85-92.
- Görög, S.; Herényi, B.; Rényi, M.; Georgakis, A.; Balogh, G.; Csehi, A.; Gizur, T. *Magy. Kém. Folyóirat* **1989**, *95*, 504-507.
- Balogh, G.; Csizér, É.; Ferenczy, G. Gy.; Herényi, B.; Horváth, P.; Halmos, Zs.; Laukó, A.; Görög, S. *Pharm. Research* **1995**, *12*, 295-298.
- Horváth, P.; Balogh, G.; Brlik, J.; Csehi, A.; Dravec, F.; Halmos, Zs.; Laukó, A.; Rényi, M.; Varga, K.; Görög, S. *J. Pharm. Biomed. Anal.* **1997**, *15*, 1343-1349.
- Görög, S.; Babják, M.; Balogh, G.; Csehi, A.; Dravec, F.; Gazdag, M.; Horváth, P.; Laukó, A.; Varga, K. *Talanta*, **1997**, *44*, 1517-1526.