

WYBRANE PRZYKŁADY ZASTOSOWAŃ TECHNIK CHEMOMETRYCZNYCH W ANALIZIE FITOTERAPEUTYKÓW

WESOŁOWSKI M.

Akademia Medyczna w Gdańsku, Katedra i Zakład Chemii Analitycznej, Gdańsk

Stosowane w farmacji surowce pozyskiwane z roślin leczniczych są produktami o złożonym składzie chemicznym, uwarunkowanym zarówno czynnikami genetycznymi, jak i warunkami środowiskowymi, w których roślina wzrasta. Zmienność składu chemicznego roślinnych surowców leczniczych powoduje, że jednoznaczna ocena ich właściwości jest trudna do wykonania. To samo dotyczy otrzymywanych z nich preparatów farmaceutycznych. W związku z tym podjęto próby zastosowania zaawansowanych metod analizy matematycznej i statystycznej jako narzędzi stwarzających możliwość nowego podejścia do interpretacji wyników analiz chemicznych roślinnych surowców leczniczych.

W ostatnim dziesięcioleciu do powszechnego użytku wprowadzono tzw. chemometrię. Określa się ją często jako dział chemii analitycznej zajmujący się projektowaniem eksperymentów chemicznych, optymalizacją metod pomiarowych, opracowaniem wyników pomiarowych i uzyskaniem z nich maksimum użytecznej informacji przy zastosowaniu, m.in. matematyki, rachunku prawdopodobieństwa, statystyki matematycznej oraz teorii podejmowania decyzji i techniki komputerowej. Łącząc elementy informatyki i analizy chemicznej, współczesne techniki obliczeniowe okazały się nadzwyczaj użyteczne w pracy zawodowej farmaceutów, związanej z poszukiwaniem nowych związków chemicznych jako potencjalnych leków, badaniem klinicznym tych związków, optymalizacją postaci leku, oceną jego jakości, a także zmierzającej w kierunku poznania złożonych procesów, jakim podlegają substancje lecznicze w organizmie człowieka.

Dane literaturowe wskazują, iż najczęściej stosowane techniki chemometryczne to analiza głównych składowych (ang. principal component analysis, PCA), analiza skupień (ang. cluster analysis, CA) i sztuczne sieci neuronowe (ang. artificial neural networks, ANN's). Są one pomocne przy ocenie jednorodności danych analitycznych, klasyfikacji analizowanych próbek surowców roślinnych oraz w identyfikacji wewnętrznych zależności pomiędzy wynikami analiz chemicznych surowców leczniczych, a szeroko rozumianymi właściwościami tych produktów.