人参皂苷Ro胶束化影响因素的介观模拟研究

戴幸星　王宇光　（首都医科大学 北京 1000069）
史新元**　乔延江**　（北京中医药大学 北京 100102）

[摘要] 目的：研究中药制剂过程中不同因素对人参皂苷Ro（简称Ro）胶束化的影响，从而为增强中药难溶性药物的溶解度提供指导。**方法：**采用介观动力学方法（MesoDyn），考察了Ro的临界胶束浓度（CMC）及聚集形态随温度、难溶性药物柴胡皂苷a（简称Sa）浓度及体系盐强度的变化。通过对有序参数及珠子密度分布的分析，探讨介观尺度下不同因素对聚集体相行为的影响机制。**结果：**Ro与水的二元混合体系中，当Ro浓度低于1.29 vol%时，体系呈均相态，溶液中尚无胶束形成，有序参数值很小；而当浓度达到1.29 vol%时，体系开始发生相分离而出现球状聚集体，有序参数发生明显变化，故Ro在水溶液中的CMC约为1.29 vol%。在298K~373K温度范围内，Ro的CMC随温度升高呈近似线性增大；固定Ro浓度为2.0 vol%，随温度升高，体系发生相分离所用的时间延长，表明温度的升高不利于胶束的形成。通过对2.0 vol% Ro体系中不同珠子密度分布的分析发现，随着温度升高，中心亲水珠子的密度增大，亲水区域增大，表明温度升高有利于亲水分子向囊泡中心扩散，中心含水量也略有增加。在Ro、Sa、水三元混合体系中，随着Sa浓度的增加，Ro的CMC减小，且Sa浓度越大，CMC降低的程度越大；随着Sa浓度增加，Ro发生相分离所需的时间越短，且呈幂函数降低，说明Sa有利于促进Ro胶束的形成。考察不同盐强度下Ro的CMC，结果显示当随着盐强度的增加，Ro的CMC略有下降，但并不显著，当离子强度大于0.2mol·L^{-1}时，CMC基本不变，考虑可能与Ro疏水链较短有关[1,2]。**结论：**介观动力学方法（Mesodyn）可用于表面活性剂相分离过程及其与化合物间的相互作用的研究。

[关键词] 介观模拟　人参皂苷Ro　增溶　临界胶束浓度

基于在线近红外光谱技术的金银花水提过程研究

隋丞琳[1,2]，史新元[1,2]，乔延江[1,2*]
[1]北京中医药大学 中药学院
[2]国家中医药管理局 中药信息工程重点研究室

[摘要]　目的：采用在线近红外分析技术，研究中试规模金银花药材提取过程，实现中药提取过程的在线分析。**方法：**以清开灵注射液中间体银花提取环节为研究对象，采用在线近红外光谱仪（XDS Process Analyzer, Foss）采集金银花提取过程的近红外光谱数据（800~2200nm），以HPLC法测定值为参考值，采用偏最小二乘算法建立绿原酸的定量校正模型。建模过程对近红外光谱数据进行了消除噪音、归一化等预处理，并以模型评价参数R^2、SEP、SECV、SEC评价所建模型的预测能力。**结果：**对波长范围为800~2200nm的原始光谱，建立同一生产批次下的偏最小二乘模型，以该批次中70%样本作为校正集，30%作为验证集，模型预测参数可达（R^2_{cal}=0.9970，SECV=0.0417，SEP=0.0409，R^2_{val}=0.9898），结果良好。为剔除组合频区饱和吸收对模型稳定性的影响，以800~1900nm建立不同生产批次间定量预测模型达到理想预测结果（R^2_{cal}=0.9950，SECV=0.0360，SEP=0.0358，R^2_{val}=0.9942），结果良好。由批次内及批次间的模型参数可知，所建模型较为稳健，在线动态采集近红外光谱过程中受环境影响较小，该在线检测技术及所构建偏最小二乘模型可靠性较高。**结论：**本研究运用在线近红外分析技术，建立中药提取过程在线质量评价方法，所建近红外预测模型结果良好，满足金银花药材水提过程在线质量检测的要求。

[关键字]　近红外光谱 在线检测 金银花 偏最小二乘法

?1994-2015 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved.　http://www.cnki.net