

多変量解析を用いた速度論解析による抗酸化能を持つ薬物の系統分類

(東理大薬¹) 奥村 勇太¹・鈴木 有美香¹・小林 拳志朗¹・大塚 裕太¹・後藤 了¹
 Systematic classification of drugs with antioxidative activities by kinetic analysis using multivariate analysis (¹*Faculty of Pharmaceutical Sciences, Tokyo University of Science*) Yuta Okumura,¹ Yumika Suzuki,¹ Kenshiro Kobayashi,¹ Yuta Otsuka,¹ Satoru Goto¹

Hydroxocobalamin (OHCb) and cyanocobalamin is known to change color when degraded in the presence of ascorbic acid (ASC), which may indicate the reactivity of various antioxidants. The purpose of this study was systematic classification of drugs with antioxidative activities by observed changes over time in the reaction of OHCb. For Various antioxidants, their time courses of spectra in the reaction of OHCb was measured with the UV-Vis spectroscopy, and the consequent analysis was multivariably carried out. As a result, it was found that singular value decomposition (SVD) and principal component analysis (PCA) are efficient for systematic classification of antioxidants.

Attenuation of the peak over time was observed in the spectrum. Sequential combination of SVD and PCA on the spectral data for each time was performed, and it was found that from the trajectory of the principal component, the UV-Vis spectra of ascorbic acid had red shift and attenuation.

Keywords : Antioxidant; Singular Value Decomposition; Principal Component analysis; Hydroxocobalamin; Multivariate Analysis

ヒドロキソコバラミン (OHCb) とシアノコバラミンは、アスコルビン酸 (ASC) 存在下で分解する際色調が変化することが報告されており、色調変化が種々の抗酸化物質の反応性を表す可能性がある。本研究では、OHCb の反応における時間変化を観察することで、抗酸化能を持つ薬物を系統分類することを目的とした。種々の抗酸化物質を用い、OHCb の反応における時間変化を紫外可視吸光スペクトルを用いて経時的に測定し、多変量解析を用いて解析を行った。その結果、特異値分解 (SVD) と主成分分析 (PCA) が抗酸化物質の系統分類に有用であることが分かった。

測定スペクトルはピークの経時的な減衰が観察された。時間ごとのスペクトルデータに対し SVD を行った結果について、PCA を行ったところ主成分の軌跡からアスコルビン酸の紫外可視吸光スペクトルが高波長シフトと減衰をしていることが分かった。

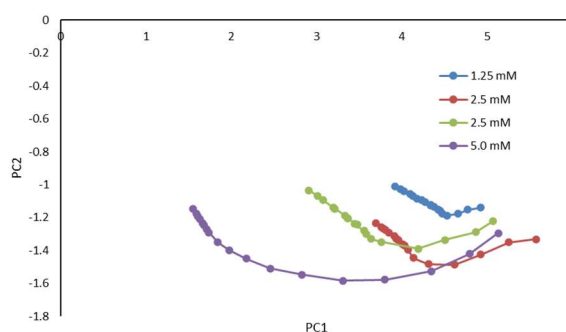


Fig. アスコルビン酸の主成分の軌跡