

附件 2

化学成像指导原则增订说明

一、制修订的目的意义

充分获取药品的化学成分及物理形态信息,对于准确评价药品质量至关重要。化学成像可同时提供样品的成分信息与空间信息,能可视化分析样品表面的分布特征,可实现不同样品之间的快速和无损比较,是传统光谱分析方法的重要补充,已收载于欧洲药典和英国药典。

本指导原则围绕药学实践应用需求,参考欧洲药典、英国药典和其他相关技术要求,旨在通过建立统一的技术指南,为化学成像在药品成分鉴别、含量分布评估、物理形态表征等应用中提供指导,实现该技术在我国制药行业的规范和广泛应用,促进我国药品质量控制与国际接轨。

二、起草过程

按照国家药典委员会药品标准提高课题任务要求,课题组协作开展调研,掌握国内外化学成像技术发展现状,对比国外药典,并结合化学成像在我国的发展和应用现状,起草了“化学成像指导原则(草案)”,经药典委理化分析专委会审议,现在国家药典委员会网站公示,面向社会各界公开征求意见。

三、制修订的主要内容

为使指导原则具有可读性、学习性、实用性和指导性,对

草案内容分章节循序渐进阐述,并在各章节中分层次介绍相关内容。

表 1 各章节内容简介

章节	内容
前言	阐述化学成像概念及其基本原理
一、适用范围	基于样品类型和检测目的对化学成像的适用范围进行阐述,并解释该技术能够可视化分析样品在不同空间位点的组成成分或形态特征这一概念
二、成像特点	依次介绍化学成像模式、采集所得数据立方体以及多维化学成像的概念,阐述该成像技术区别于传统光谱分析方法的主要特点
三、成像系统	阐述基于振动光谱的化学成像系统类型,明确近红外光谱、中红外光谱、远红外/太赫兹光谱及拉曼光谱成像各自特点及适用性,指导实践应用
四、采集模式	依次介绍摆扫式、推扫式和凝视式这三类扫描型数据采集模式以及快照式采集模式,阐述化学成像的空间分辨率和光谱分辨率概念及其与成像质量的关系

五、成像过程	分别阐述成像过程中样品制备、仪器装置、图像处理及图像分析过程中的要点和注意事项
--------	---

四、需重点说明的问题

1. 化学成像定义及指导原则适用范围

化学成像概念起源于20世纪末，在早期主要指基于分子光谱学的成像技术，因此也被称为光谱成像，且以基于振动光谱的成像技术为主。随着技术的发展，其他类型的分析检测手段，包括质谱、核磁共振、电化学等，也可与数字图像处理技术结合以提供样品的化学成分和物理形态信息，拓展了化学成像的定义。结合当前技术发展现状并对比欧洲药典，本指导原则将化学成像定义如下：“化学成像（**chemical imaging**）结合具有空间分辨能力的传感技术与数据分析技术，利用主要获自样品表面的信息来表征样品的化学、物理性质，包括光谱成像、质谱成像、磁共振成像等，其中光谱成像是利用不同波长的光照射样品表面各个空间位点，收集所产生的反馈信号，构建反映样品表面化学和物理特性的图像，用于成分鉴别及浓度、晶型、空间排列、区域尺寸和颗粒大小分析等”。

目前基于振动光谱的化学成像技术发展较为成熟，综合考虑其在药学实践中的应用现状，参考欧洲药典，对指导原则适用范围进行如下说明：“本指导原则主要适用于基于振动光谱

(例如, 近红外、中红外、远红外和拉曼光谱) 的化学成像系统, 但也适用于其他成像技术”。

2. 中英文对照表

表 2 中英文对照表

序号	英文名称	中文名称
1	chemical imaging	化学成像
2	multispectral imaging	多光谱成像
3	hyperspectral imaging	高光谱成像
4	ultraspectral imaging	超光谱成像
5	datacube	数据立方体
6	hypercube	超立方阵
7	pixel	像素
8	imaging plane	像平面
9	snapshot	快照式
10	whiskbroom	摆扫式
11	pushbroom	推扫式
12	staring	凝视式
13	point scanning	点扫描
14	point mapping	点映射
15	linear scanning	线扫描
16	line mapping	线映射

17	focal plane scanning	焦平面扫描
18	global imaging	全局成像
19	spectral axis	光谱轴
20	spatial axes	空间轴

3. 名词mapping和imaging的翻译

本指导原则将mapping和imaging分别译为映射和成像，根据是否平移样品来区分上述采集图像模式；如需平移，常用术语映射(mapping)，如不需平移，更常用术语成像(imaging)。由于mapping和imaging均译为成像（只是成像采集模式的不同），所以在很多情况下并不严格区分这两个术语。