

[rigaku.com](https://www.rigaku.com)で見る

B-XRD1079 - X線回折装置によるキャピラリー温調アタッチメントを用いた 高温結晶相の未知構造解析

はじめに

医薬品は、有効性、安全性、安定性の観点から、すべての結晶多形について評価を行う必要があります。しかし、医薬品は分子量が大きく結晶構造も複雑で、湿度や温度などの条件により多くの結晶多形が生成します。そこで、X線回折測定とDSC測定を同時に行うことができるX-ray DSCアタッチメントを用いて、高温下で生成する結晶相の存在を明らかにしました。またその結晶相について、キャピラリー高温アタッチメントを用いて結晶構造解析を行いました。

測定・解析例

医薬品の一種であるアシクロビルは、非環状側鎖を有するプリン骨格の抗ウイルス剤であり、ヘルペス群ウイルスに特異的な活性を示します。以前から複数の結晶多形の存在が知られていましたが、その一部は結晶構造がわかっていませんでした。この試料をX-ray DSCを用いて室温から180℃まで昇温し、その後再び室温に戻したところ、高温条件下で新たな結晶相が生成することがわかりました（図1）。新たな結晶相である無水物 Form 4 についてキャピラリー高温アタッチメントを用いて結晶構造解析を行ったところ、粉末試料から結晶構造を解析することができました（図2）。

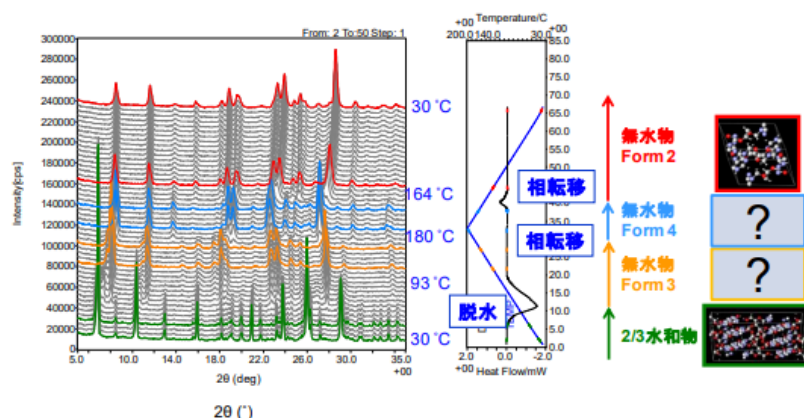


図1 アシクロビルのX-ray DSC測定結果

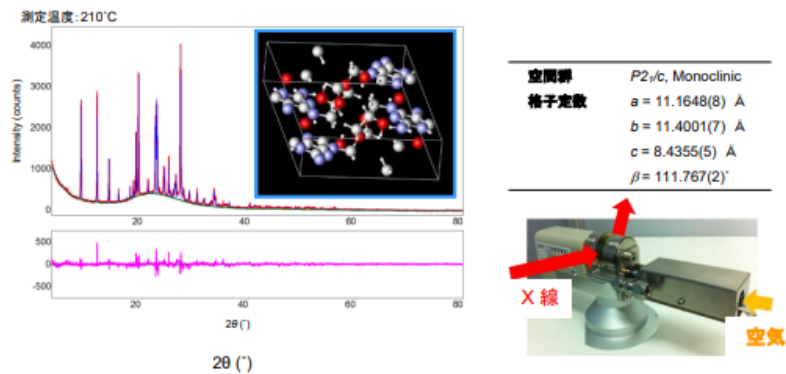


図2 アシクロビルForm 4の未知結晶構造解析結果とキャピラリー高温アタッチメント

試料ご提供：東邦大学 寺田勝英 先生

参考文献：Takayuki Konya, Katsuhide Terada et al, IWPCPS-15, June 24-27, 2013.

推奨装置・ソフトウェア

- 全自動多目的X線回折装置 SmartLab
- キャピラリー高温アタッチメント
- X-ray DSC
- 統合X線回折ソフトウェア SmartLab
(Powder XRD、XRD-DSCプラグイン)

おすすめの製品



SmartLab

全自動多目的X線回折装置 *SmartLab*

装置が最適条件を教えてくれるガイダンス機能を実現。



SmartLab SE

全自動多目的X線回折装置 *SmartLab SE*

リガクの分析ノウハウを凝縮した「ガイダンス」機能を搭載。



SmartLab Studio II

X線分析統合ソフトウェア *SmartLab Studio II*

測定から解析まで、X線分析のすべてをこなす統合ソフトウェア