

一般化二次元相関分光法によるガチフロキサシン水和物の脱水転移過程におけるラマンスペクトルの解析

○吉川 亜依子¹, 内田 浩¹, 内野 智裕¹, 江口 欣也², 大塚 誠¹(¹武蔵野大薬,
²ニューワーテック)

【目的】医薬品開発の初期段階において、微量な原薬で物理化学的特性に関する多くの情報を効率的に得ることが医薬品開発経費の効率化とその期間を短縮する上での鍵となる。顕微昇温ラマン分光法は、微量試料の温度を制御し、非接触で測定したスペクトルの温度変化から、結晶化や結晶転移過程における分子の動的反応機構を解析できる方法として着目されている。その際、得られるスペクトルは複雑な変化を示すこともある。結晶転移に関する分子状態の変化を捉えるためには、動的スペクトルから有用な情報を効率よく引き出すことが重要である。本研究では、医薬品水和物の脱水過程における昇温ラマンスペクトルに、動的スペクトルの新しい解析方法である一般化二次元相関分光法を適用し、疑似結晶多形の脱水挙動の解析を試みた。

【方法】試料としてガチフロキサシン水和物（杏林製薬）を用いた。ラマンスペクトルの測定に、温度制御装置を搭載した Non-Confocal 型レーザーラマン顕微鏡（EX7001, ニューワーテック）を用いた。微量試料の昇温ラマンスペクトルを経時的に測定し、得られたスペクトル群を一般化二次元相関分光法により解析した。

【結果】ガチフロキサシン水和物の脱水過程における昇温ラマンスペクトルから、芳香族アミンの C-N 伸縮に基づく、1400~1250 cm^{-1} 領域における特徴的なバンド変化が抽出された。さらに、昇温ラマンスペクトルの一般化二次元相関分光法による解析から、バンド強度変化の相関及び順序が明確になり、疑似結晶多形転移における分子状態の変化を詳細に捉えることができた。

【謝辞】武蔵野大学薬学研究所ハイテクリサーチセンター（2004-2008）