

28T-pm09S

医薬品配合剤原末の赤外スペクトルと粉末 X 線回折による定量的相関解析

○大塚 裕太¹, 伊藤 丹¹, 竹内 政樹¹, 田中 秀治¹ (徳島大薬)

【緒言】非破壊での粉末の定量分析は、混合や造粒などの医薬品製造工程において、高品質で安定した製品を提供するために必須である。近年では、2種類以上の主薬を含んだ配合剤の開発が盛んに行われている。そこで本研究では、全反射減衰赤外(ATR-IR)分光法と粉末 X 線回折(PXRD)を用い、医薬品配合剤モデル原末の定量的相関解析を行った。

【方法】カフェイン無水物、アセトアミノフェンおよび α -ラクトース一水和物を、さまざまな組成比(6種類)のもと乳鉢中で粉碎混合し、3成分系医薬品配合剤原末を調製した。これら原末について、ATR-IR と PXRD の測定を行った。後者における各 2θ と回折強度の行列を目的変数として、前者における波長と吸光度の行列を説明変数として、部分的最小二乗法(PLS)モデルを構築した。構築されたモデルから予測された PXRD スペクトルを評価した。さらに、PLS モデルにおける回帰ベクトルにより、異次元データ間の相関解析を評価した。

【考察】構築した PLS モデルによる定量性は R^2 値 0.986 となり、IR スペクトルから PXRD 回折パターンを予測することができた。回帰ベクトルによる相関性マッピングは、 $\text{cm}^{-1} : 2\theta = 1070 : 20.8$ において極大値を示した。この結果は、 α -ラクトース一水和物由来の 1070 cm^{-1} における赤外固有振動と、回折角 20.8° における結晶面に定量的相関性があることを示している。