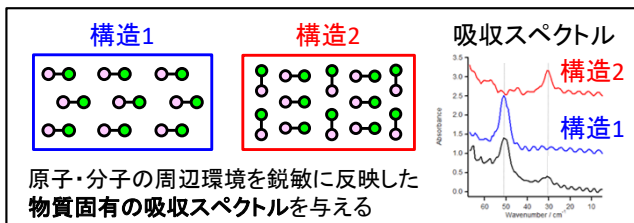


第一原理計算を用いた結晶性医薬品のテラヘルツ分光スペクトルの振動モード解析

結晶多形を有する医薬品のテラヘルツ分光スペクトルに対して、第一原理計算を用いて、吸収ピークの振動モードを解析した。本シミュレーション手法により、分析だけでは解釈が困難な、テラヘルツ分光スペクトルの帰属が可能となる。

1. テラヘルツ分光

高い透過性を持つテラヘルツ波を利用した分光法。高エネルギー電磁波を使用するX線回折とは異なり、被曝の恐れが無く、非破壊での測定が可能。



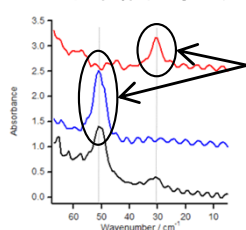
医薬品の結晶多形判別などに利用されている。

2. テラヘルツ周波数領域の振動モード

テラヘルツ周波数領域の振動モード

- 分子の秤動、捻じれ等の低振動モード
- 水素結合等の分子間振動、格子振動

分析だけでは帰属が困難!



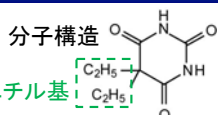
原子・分子の挙動を予測出来るシミュレーション手法である第一原理計算を用いて、実験スペクトルを精度良く再現し、振動モードを可視化。

熟練した周期系の計算経験と分散力補正を考慮した高度な条件設定が必要

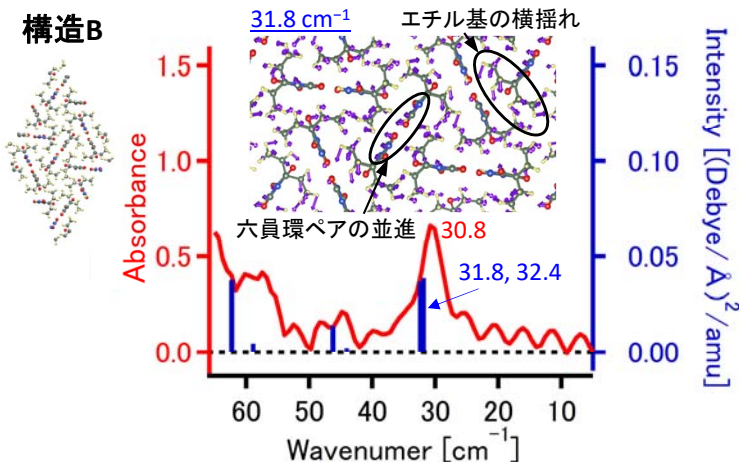
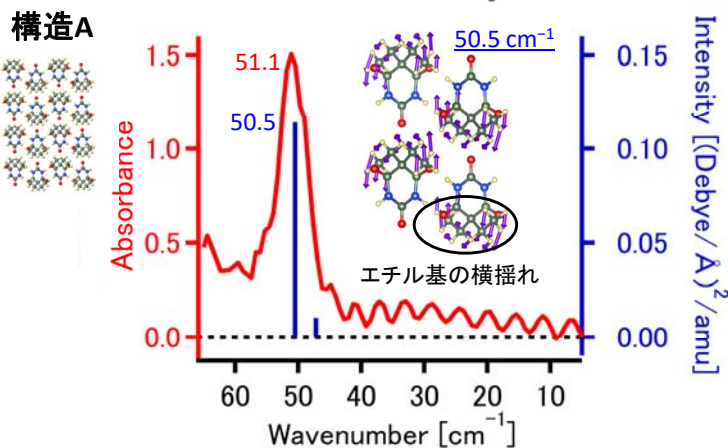
3. 結晶多形を有する医薬品のテラヘルツ分光スペクトルの振動モード解析

■ バルビタール結晶

催眠・鎮静医薬品



赤: 実験
青: 計算



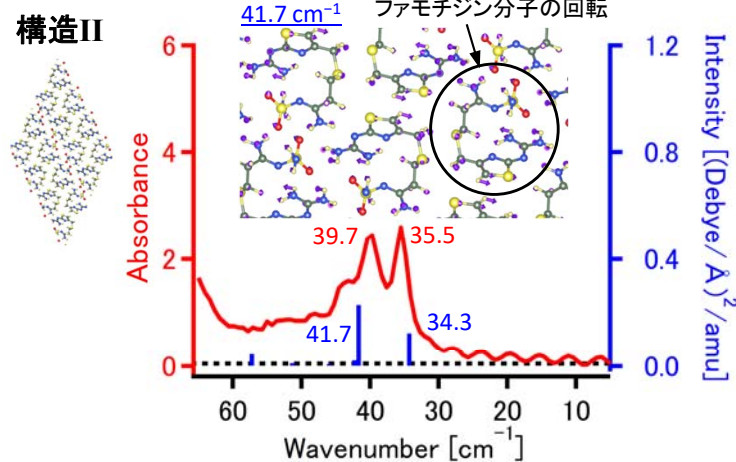
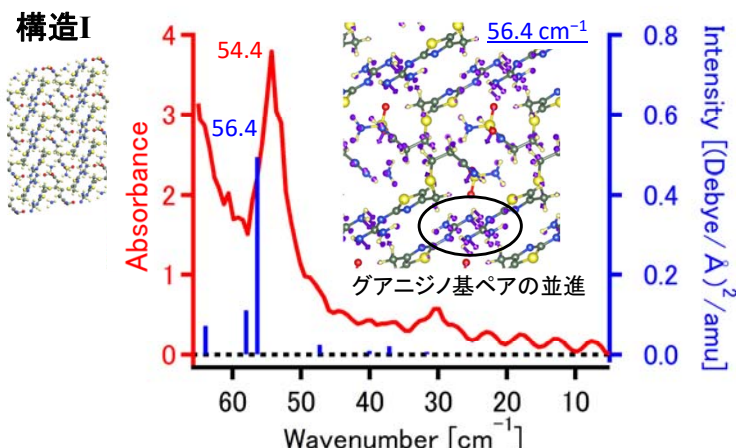
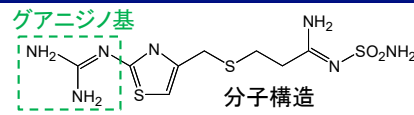
メインピーク波数 (cm⁻¹)

	実験値	計算値
構造A	51.1	50.5
構造B	30.8	31.8, 32.4

実験スペクトルと計算スペクトルの良好な一致

■ ファモチジン結晶

胃酸分泌抑制医薬品



メインピーク波数 (cm⁻¹)

	実験値	計算値
構造I	54.4	56.4
構造II	35.5, 39.7	34.3, 41.7

巧みな条件設定と計算科学の高い専門性により、解釈困難な分光スペクトルの帰属が可能です!