

## 論文内容要旨

報告 番号	甲 創 第 25 号	氏 名	大塚 裕太
学位論文題目	Chemometrics evaluation of phase transformations based on ATR-IR spectra and powder X-ray diffractogram. (ATR-IR スペクトルと粉末 X 線回折に基づくケモメトリックスによる相転移評価の研究)		
<p>内容要旨</p> <p>1. 赤外スペクトルと多変量解析によるリン酸カルシウムの相転移機構の研究</p> <p>近年の生命科学の発展により、損傷した生体組織や臓器の再生機構が明らかになりつつある。このため、生体組織に類似した、バイオマテリアルの合成研究が益々盛んに行われるようになった。代表的な生体吸収性セラミックスとして、第二リン酸カルシウムとリン酸四カルシウムの練合を用いた自己硬化アパタイトセメントが挙げられる。そこで本申請者は、全反射減衰赤外分光(ATR-IR)法と多変量解析を用いて反応の詳細を明らかにした。独自の数学的手法を導入した多変量解析を用いて、ペースト試料の高精度 ATR-IR 測定を可能にした。アパタイトセメントの硬化相転移においては、試料中の二酸化炭素濃度とアパタイトのリン酸基の吸光度との間に相関性があり、前者が相転移に重要な役割を果たしていることが明らかになった。</p> <p>2. 赤外スペクトルと多変量解析を用いた医薬品結晶多形転移の研究</p> <p>多くの医薬品には結晶多形が存在することが知られている。抗てんかん薬のカルバマゼピン(CBZ)には4種類の結晶多形が報告されている。医薬品添加物であるセルロース誘導体は固形薬物の溶媒介多形転移に対する抑制効果をもつことが報告されている。そこで本申請者は、ATR-IR 測定法と多変量解析を用いて、CBZ の溶媒介多形転移速度に対する上記医薬品添加物の影響について比較検討を行った。CBZ の転移速度は、セルロース誘導体の添加により低下した。この低下は、これら高分子医薬品添加物が、溶液の粘度上昇による CBZ の拡散移動度の低下と、CBZ 表面への吸着による界面自由エネルギーの低下を引き起すことに起因すると結論した。</p> <p>3. 医薬品共結晶のメカノケミカル合成における機械的エネルギーと温度制御の影響</p> <p>医薬品候補化合物の溶解度改善のために、親水性を持つ化合物との水素結合による共結晶化が注目を浴びている。本研究では、カフェイン-シュウ酸 1:2 共結晶の合成における機械的エネルギーと反応温度がどのような影響を与えるのかを粉末 X 線回折パターンと多変量解析による定量法を用いて検討した。共結晶の合成は自動ピストン乳鉢スターラーの RPM に依存したが、温度による有意差は認められなかった。</p>			