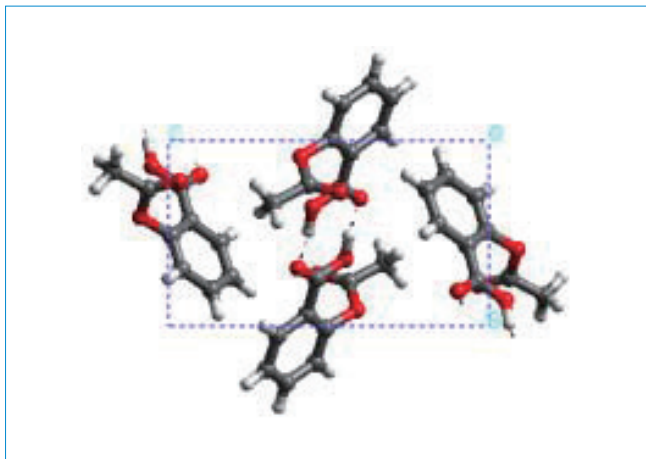


アスピリンの潜在的多形

アスピリンの更なる多形の可能性を検討するためMS.Polymorph Predictorが使用されました。



アスピリンの結晶構造。

アスピリンはアセチルサリチル酸としても知られており、医薬品として数多くの応用があります。1897年に初めて合成され、実験的には1種類の結晶構造しか見つかっていません。1960年代終わりから1970年代初めまでに他の結晶形が唱えられました。しかしこれらの研究では、他の結晶形の存在を証明する裏付けとなる物理的データが不足していました。このような経緯とアスピリン分子の重要性に基づき、ゼネカ社の研究者[1]がBIOVIAのC2.Polymorph、一般的にはPolymorph Predictorとして知られているソフトウェアを用いてアスピリン多形の可能性を研究しました。

C2.Polymorphではアスピリンの既知の結晶構造、すなわち非平面配座異性体を含む構造を予測することができました。さらに低エネルギー構造も予測され、これには平面配座異性体が含まれました。半経験的および第一原理の計算では平面配座異性体は非平面配座より不安定と示されましたが、力場の計算から平面配座異性体のほうが安定と示唆されました。

ゼネカ社の研究者により、平面配座を安定化する実験的結晶化条件が開発されれば、アスピリンの更なる多形が発見される可能性が指摘されました。このような考え方は研究者がアスピリンの更なる実験的結晶形を発見しようとする際に役立ちます。

Reference

1. R.S. Payne, R.C. Rowe, R.J. Roberts, M.H. Charlton, R. Docherty, J. Comp. Chem., 1999, 20, 262-273

Potential Polymorphs of Aspirin

Industry Sector

医薬

Organization

Zeneca (英)

Products

BIOVIA Materials Studio Polymorph Predictor
(C2 Polymorph)