

I_b – интенсивность рассеяния смесью кристаллических фаз, имеющей аналогичный полностью аморфному образцу химический состав.

Более точной мерой интенсивности рассеяния аморфной фазой служит интегральная интенсивность одного или нескольких максимумов.

Безэталонный метод основан на выделении средней интенсивности рассеяния рентгеновского излучения аморфной фазой I_a из средней интенсивности рассеяния образца I_n . Содержание аморфной фазы определяют по формуле:

$$C_a = \frac{I_a}{I_n} .$$

Оба метода используют только для сравнительной оценки доли аморфной фазы (C_a). Основным недостатком является влияние изменений состава образца на результат определения.

ПРИМЕНЕНИЕ РЕНТГЕНОВСКОЙ ПОРОШКОВОЙ ДИФРАКТОМЕТРИИ В ФАРМАЦЕВТИЧЕСКОМ АНАЛИЗЕ

Метод дифракции рентгеновских лучей на порошковом образце является инструментом для исследования поликристаллических субстанций лекарственных веществ.

Несмотря на то что рентгеноструктурный анализ монокристалла обеспечивает реальное понимание кристаллической структуры, использование такого метода для рутинных исследований кристалличности фармацевтических субстанций затруднено вследствие длительности (необходимость вырастить монокристалл) процедуры и трудоёмкости. Для общей оценки качества и структуры вещества обычно достаточно установить его полиморфную форму и идентичность.

Типичным применением метода рентгеновской порошковой дифрактометрии является оценка полиморфизма, сольватоморфизма, изучение переходов состояний «кристаллическое – аморфное» и оценка степени кристалличности, которую определяют с помощью калибровки. В