

## TA no.15

## 咖啡因的热分析

1983.4

### 1. 前言

热分析可以广泛应用于医药品的研究和试验中。

本节将介绍用TG/DTA 以及DSC 对咖啡因和无水咖啡因进行测量的示例。

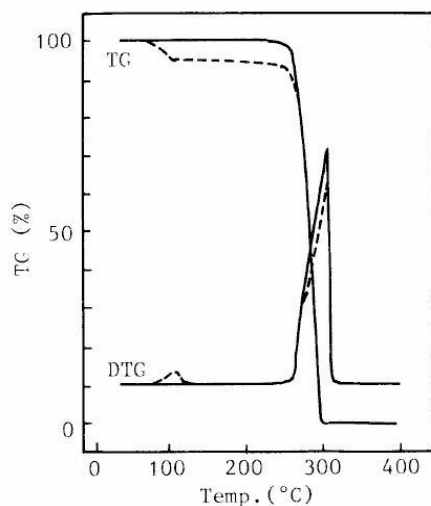


图1 咖啡因和无水咖啡因的TG、DTG 曲线

..... 咖啡因  
\_\_\_\_\_ 无水咖啡因

### 2、测量实例

#### 2-1 结晶水

图1 所示为咖啡因和无水咖啡因的TG、DTG曲线。测量条件：试样量约10mg，气氛为氮气100 ml/min，升温速率10°C/min。由图可以看出，咖啡因的结晶水在约80°C时脱水蒸发，其量约为5%。而无水咖啡因直至200°C附近都未见质量减少，由此可知它完全不含水分。

图2 所示为使用开放式试样容器对咖啡因和无水咖啡因进行DSC 测量的结果，图3为密封式试样容器的测量结果，测量条件均为：试样量约3mg，升温速率10℃/min。图2的开放式容器测量结果中，与咖啡因结晶水的脱水蒸发相对应的峰在78℃和86℃出现了2 个峰。而图3 中，尽管用密封式容器抑制了水的蒸发，在78℃还是出现了吸热峰。因此可以认为，图2 中咖啡因在78℃的峰是结晶水的脱离引起的，86℃的峰值是由这些水的蒸发引起的。

2-1 熔融

图2 中，咖啡因和无水咖啡因都在236℃出现了熔融引起的吸热峰，而图1 的TG曲线中，从熔点附近开始出现质量减少。这表明在咖啡因熔融的同时水的蒸发也在迅速进行。无水咖啡因不管容器是开放式还是密封式，都在236℃出现了熔融峰，而咖啡因在使用密封式容器时熔融峰变小，并向低温一侧偏移，这是因为从咖啡因脱离出来的结晶水残留在密封的容器内，对咖啡因的结晶构造造成了影响。

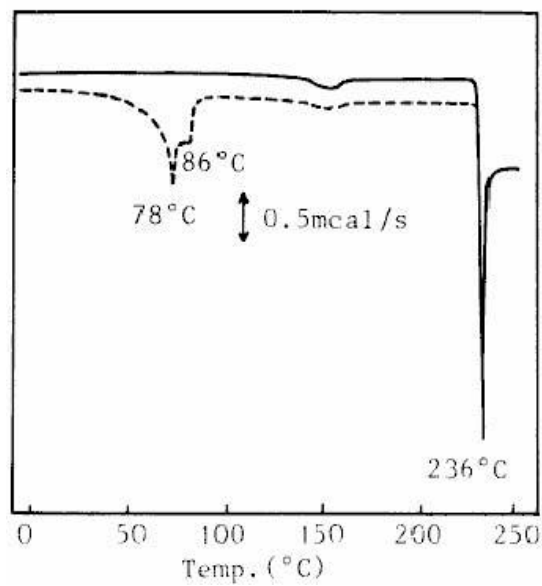


图2 开放式试样容器的DSC 测量结果

..... 咖啡因  
\_\_\_\_\_ 无水咖啡因

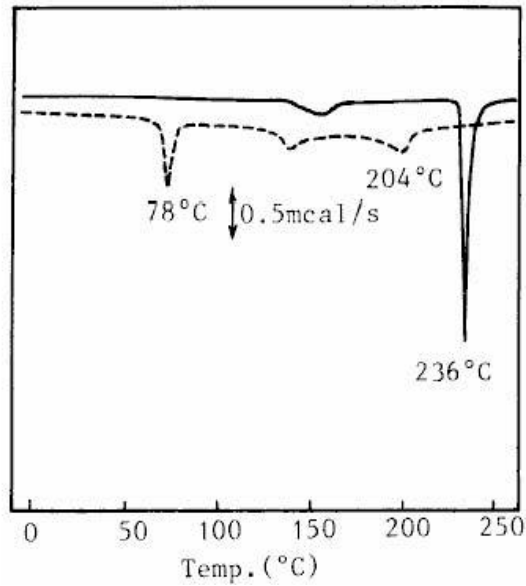


图3 密封式试样容器的DSC 测量结果

..... 咖啡因  
\_\_\_\_\_ 无水咖啡因