分子動力学計算による溶解度パラメータの評価

概要

ある物質が別の物質の中に溶けやすいか否かを評価することは様々な場面で重要となります。この相溶性を評価する方法には様々なものが提案されており、例えば一番原理的なものとして溶媒和自由エネルギー、簡便かつ実用的な予測精度を持つものとして各種の溶解度パラメータ(ヒルデブラント、ハンセンなど)が提案されています。

ヒルデブラント(Hildebrand)の溶解度パラメータは、蒸発熱を比体積で規格化した値です。値が近い化合物ほど互いに相溶しやすいことが知られています。疎水性・親水性などの化学的な個性が直接的に表現されていないため比較的精度が低いものの、蒸発熱や比体積といった比較的測定しやすい物性値から算出できるのが特徴です。また、力場さえ割り当てられれば分子動力学計算から算出することができます。

本書では、Winmostar上で各種低分子化合物のヒルデブラント溶解度パラメータを計算した例を示します。

計算条件

電荷はAM1-BCC、力場はGAFFとしました。液相の初期構造は密度0.6 g/cm^{3}で生成し、分子数は1024としました。本書の計算にはGromacs 5.0.7を使用し、系の作成から溶解度パラメータの取得までの全ての操作はWinmostar上で実行されました。温度、圧力は300 K、1 barとしました。

本書の液相の計算は以下の手順で実行されました。

①平衡化: Preset=Minimizeで計算を実行

②平衡化: Preset=NVTからnsteps=100000、dt=1 fsに変更して計算を実行

③平衡化: Preset=NPTからnsteps=5000000、dt=1 fsに変更して計算を実行

④平衡化: Preset=NPTからnsteps=1000000、dt=1 fsに変更して計算を実行

⑤本計算: Prset=NVTからref-t=293.15、nsteps=10000000に変更して計算を実行

本書の気相の計算は以下の手順で実行されました。

①平衡化: Preset=Minimize(vapor)で計算を実行

②平衡化: Preset=NVT(vapor) で計算を実行

⑤本計算: Prset=NVT(vapor)からnsteps=1000000、dt = 1fs、gen-vel=noに変更して計算を実行

今回計算した物質を図1に示します。

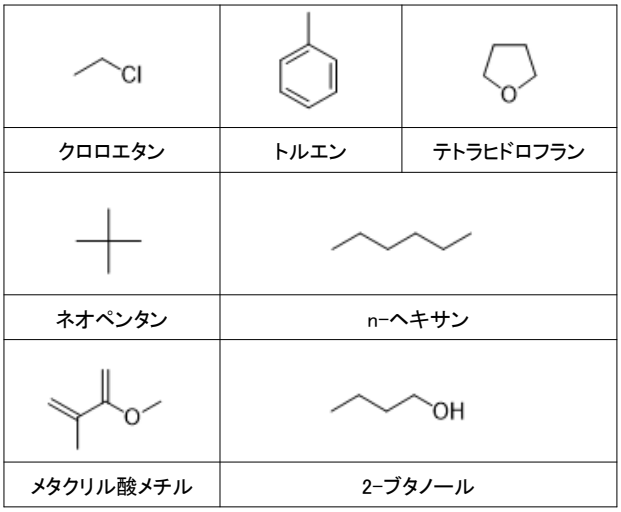

図1 計算した物質

計算結果

図2に各物質のヒルデブラント溶解度パラメータの実験値[1,2]と計算値(本書および文献[1])を示します。本書と文献[1]で使用している力場の設定(Dreiding+HF/6-31G** ESP電荷)が異なり、本書が文献[1]の厳密な再現ではない点にはご注意ください。

まず、本書の結果は力場の設定が異なるにも関わらず、文献値[1]の結果をある程度再現していることが分かります。それにより、本書(Winmostar)の計算手順の妥当性が示されたと考えられます。また、一部の化合物については本書と文献[1]のどちらについても実験値から大きくずれるものがあり(例えばクロロエタン、実験値:9.20)、化合物によっては実験値の予測時に注意が必要です。これは力場の改良により改善することが見込まれます。Winmostarでは今後対応する力場の種類を拡充することを予定しています。

通常、様々な物質に対する物性値の算出作業は煩雑で大きな作業コストを伴いますが、Winmostarを用いるとマウス操作のみで手軽に実行でき、作業を大幅に効率化できます。

Winmostarバージョン: 10.8.0

対応ソルバ: Gromacs

引用: [1] J. Comp. Chem., 25, 1814 (2004).

[2] J. Appl. Polym. Sci., 116, 1 (2010).

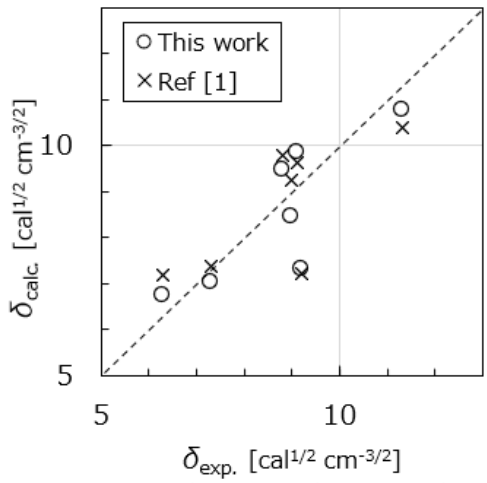

図2 実験値と計算値の比較

Copyright 2008-2024 X-Ability Co., Ltd.