

○門田 和紀<sup>1</sup>

<sup>1</sup>大阪薬大

溶液中での粒子生成過程で起こる核生成および結晶成長機構に関する分子レベルでの理解は、限られた範囲に留まっており、無機物質においても未だ解明されていない。したがって、溶液中において分子レベルで有機結晶を制御して、結晶化させる医薬品の晶析については経験的試行錯誤に大きく依存している。これまで、溶液中からの結晶化においては、古典核生成理論から説明されていたが、近年特に高濃度系で起こる結晶化機構については、溶質のクラスター形成とその結晶表面への付着が結晶成長に大きく影響するという新しい展開が示されている。結晶化において、さらなる詳細な原子・分子レベルでの粒子生成機構の理解とそれに基づく制御技術の進展が望まれており、実験と分子シミュレーションを融合させることが期待されている。分子レベルで起こる核生成・結晶成長機構に関して、微視的な情報が得られる分子シミュレーションによる研究例を紹介する。炭酸カルシウムは、多様な形態を示すことが知られており、適用分野に応じた形態制御が求められる代表的な粒子の一つである。炭酸カルシウムの溶液中での結晶成長機構について分子動力学法による検討例を示す。また、炭酸カルシウムのカルサイトが凝集して形成する、特異的な紡錘状炭酸カルシウムの粒子生成機構についてモンテカルロシミュレーションにより明らかにした例を示す。さらに、有機結晶のモデル物質としてアミノ酸のグリシンを用いた溶液中での粒子生成機構について分子動力学法により行った検討例についても紹介する。