

アスピリン結晶界面における吸着安定性の全原子 MD による解析

(阪大基礎工¹・阪大院基礎工²) ○松村 徹平¹・田中 泉利²・松林 伸幸²

All-atom MD analysis of adsorption stability on the aspirin crystal surface (¹*Engineering Science, Osaka University*, ²*Graduate School of Engineering Science, Osaka University*) ○
Teppey Matsumura,¹ Senri Tanaka,² Nobuyuki Matubayasi²

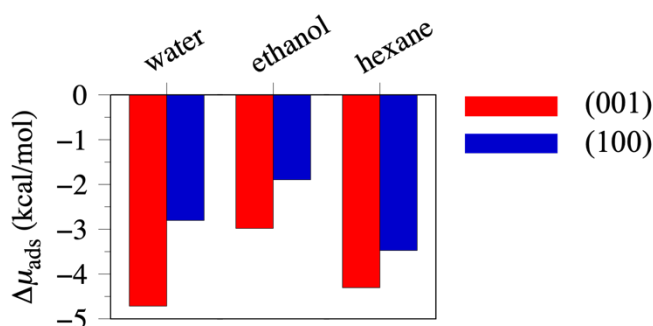
Differences in crystal habit can affect physical properties such as dissolution properties, and it is important to control crystal habit in the pharmaceutical field. The crystal of aspirin, a typical pharmaceutical, has two major crystal faces, the (001) face and the (100) face, and the crystal habit can be characterized by these faces. In the present study, the adsorption free energies of aspirin molecules on each crystal face of aspirin in various solvents were evaluated at the atomic level by applying the all-atom MD and energy representation methods.

For each solvent examined, the adsorption of an aspirin molecule is more favorable on the (001) face than on (100). The solvent affects the difference in the adsorption free energy between the (001) and (100) faces, which corresponds to experimental observations. In addition, the free energy is divided into contributions from the crystal and solvent components, and the contributions of stability factors such as hydrogen bonding and interaction energies are discussed.

Keywords : *crystal surface; physical adsorption; All-atom Molecular Dynamics; Energy Representation Method*

結晶の晶癖の差異は、溶出特性などの物理的な性質に影響を与えることがあり、医薬品分野においては晶癖を制御することが重要である。代表的な医薬品であるアスピリンの結晶には(001)面と(100)面という 2 つの主要な結晶面が存在し、これらの面で晶癖を特徴付けることができる。本研究では、種々の溶媒中におけるアスピリンの各結晶面へのアスピリン分子の吸着自由エネルギーを、全原子 MD とエネルギー表示法を適用し、全原子レベルで評価した。

各溶媒において、アスピリン分子の吸着は(100)面よりも(001)面により優勢である。溶媒は(001)面と(100)面の吸着自由エネルギーの差に影響を与え、これは実験結果と一致する。さらに、自由エネルギーを結晶成分、溶媒成分からの寄与に分割し、水素結合や相互作用エネルギーなどの安定性因子の寄与を議論する。



Adsorption free energies of aspirin onto the (001) and (100) faces