分子モデリング

山内 仁喬

2021 年 10 月 31 日

1 濃度換算

分子モデリングをする際には, 実験で使用されたイオン濃度をシミュレーションでも再現することが多い. その際に, 何個のイオン原子を含めるかを計算する必要がある. この章では, 濃度換算についてまとめる.

1.1 モル濃度

モル濃度の定義は以下の通りである.

- 単位体積の溶液中の溶質の物質量
- SI 単位系で $\mathrm{mol/m^3}$

モル濃度をモーラー ($\mathrm{M} = \mathrm{mol/L}$) へ単位変換は以下の通りである.

$$
\begin{aligned}
\mathrm{mol/m^3} =& 10^{-3}\ \mathrm{mol/dm^3} && (1)\\
=& 10^{-3}\ \mathrm{mol/L} && (2)\\
=& 10^{-3}\ \mathrm{M} && (3)\\
=& 1\ \mathrm{mM} && (4)
\end{aligned}
$$

1.1.1 例 1: 2.00 mol/L の NaCl 水溶液を 100 mL 調整する

NaCl のモル濃度は 58.4 g/mol である. 必要な NaCl は

$$
\begin{aligned}
&2.00\ (\mathrm{mol/L}) \times 58.4\ (\mathrm{g/mol}) = 116.8\ (\mathrm{g/L}) && (5)\\
&116.8\ (\mathrm{g/L}) = 0.1168\ (\mathrm{g/10^{-3}L}) = 0.1168\ (\mathrm{g/mL}) && (6)\\
&0.1168\ (\mathrm{g/mL}) \times 100\ (\mathrm{mL}) = 11.7(\mathrm{g}) && (7)
\end{aligned}
$$

故に 11.7 g の NaCl を 100mL になるまで水を足せば, 2.00 mol/L の NaCl 水溶液が完成する.

1.1.2 例 2: NaCl 水溶液における NaCl の質量分率, 体積, モル濃度の計算

100 mL の水に 11.6 g の NaCl が溶解している. 溶液の密度は 1.07 g/mL, 水の密度を 1.00 g/mL とする. この時, NaCl の質量分率は

$$\frac{11.6\ (\mathrm{g})}{11.6\ (\mathrm{g}) + 100\ (\mathrm{g})} \times 100\% = 10.5\% \tag{8}$$

一方で水 (H_2O) の質量分率は

$$\frac{100\ (\mathrm{g})}{11.6\ (\mathrm{g}) + 100\ (\mathrm{g})} \times 100\% = 89.6\% \tag{9}$$

である．溶液の密度から溶液の体積は，

$$\frac{11.6\ (\mathrm{g}) + 100\ (\mathrm{g})}{1.07\ (\mathrm{g/mL})} = 104\ (\mathrm{mL}) \tag{10}$$

NaCl のモル濃度は

$$11.6\ (\mathrm{g}) \times \frac{1}{58.4\ (\mathrm{g/mol})} \times \frac{1}{104\ (\mathrm{mL})} \times 1000 = 1.91\ \mathrm{M} \tag{11}$$

1.1.3　例 3: 水溶液に含まれているイオンの数を換算する

一辺 100 Å の箱に NaCl が 150 mM = 150 mol/m^3 入っているとする．この時に，NaCl がいくつ含まれているかを数える．まず体積を SI 単位系で表す．

$$100\ \text{Å} = 100 \times 10^{-10}\ \mathrm{m} = 10^{-8}\ \mathrm{m} \tag{12}$$

だから，

$$(100\ \text{Å})^3 = (10^{-8}\ \mathrm{m})^3 = 10^{-24}\ \mathrm{m}^3 \tag{13}$$

150 mol/m^3 の濃度の時，1 立方メートルあたりに含まれる NaCl のイオンの数は，

$$150\ (\mathrm{mol/m^3}) = 150 \times 6.0 \times 10^{23}\ (\mathrm{m}^{-3}) \tag{14}$$
$$= 900 \times 10^{23}\ (\mathrm{m}^{-3}) \tag{15}$$
$$= 9 \times 10^{25}\ (\mathrm{m}^{-3}) \tag{16}$$

したがって，一辺が 100 Å の箱に含まれる NaCl の数は，

$$9 \times 10^{25}\ (\mathrm{m}^{-3}) \times 10^{-24}\ (\mathrm{m}^3) = 90 \tag{17}$$

と計算される．つまり，90 個の NaCl が含まれている．

1.1.4　例 4: 体積が V (Å^3) の箱にモル濃度 x mM の NaCl を入れる

単位を mM から mol/m^3 に変換すると，

$$x\ (\mathrm{mM}) = x\ (\mathrm{mol/m^3}) \tag{18}$$

体積の単位を SI 単位系に直すと，

$$V\ (\text{Å}^3) = V \times 10^{-30}\ (\mathrm{m}^3) \tag{19}$$

したがって，

$$x\ (\mathrm{mM}) = x\ (\mathrm{mol/m^3}) \tag{20}$$
$$= x \times 6.022 \times 10^{23}\ (\mathrm{mol}^{-1})(\mathrm{mol/m^3}) \tag{21}$$
$$= x \times 6.022 \times 10^{23}\ (\mathrm{m}^{-3}) \tag{22}$$
$$= 6.022x \times 10^{23}\ (\mathrm{m}^{-3}) \tag{23}$$

よって，体積が V (Å^3) の箱に含まれるイオンの数は，

$$6.022x \times 10^{23} \times V \times 10^{-30} = 6.022xV \times 10^{-7}(\text{個}) \tag{24}$$

と計算される．

2　水の初期配置について

常温常圧における水の密度に合わせて水を配置するには, どのような間隔で並べればいいかを考える. 水の質量, 常温常圧での密度は

- 水の質量 $= 18$ (g/mol)
- 水の密度 $= 998.233$ (kg/m^3) $\simeq 1.0$ (g/cm^3)
- アボガドロ定数 $= 6.02214086 \times 10^{23}$ (mol^{-1})

である. 1 cm $= 1.0 \times 10^8$ Å であるので,

$$1.0\ (\mathrm{g/cm^3}) = \frac{6.02214086 \times 10^{23}}{18}\ (\mathrm{cm}^{-3}) \tag{25}$$

$$= \frac{6.02214086 \times 10^{23}}{18} \times \frac{1}{10^{24}}\ (\text{Å}^{-3}) \tag{26}$$

$$= 0.334 \times \frac{1}{10}\ (\text{Å}^{-3}) \tag{27}$$

$$= 0.0334\ (\text{Å}^{-3}) \tag{28}$$

すなわち, 1 Å^3 に 0.0334 個の水分子が存在するような密度であるので, 1 Å に 0.3220 個の間隔で水分子を置けばよいという計算となる. よって, 3.104 Å に 1 個の水を置けば良い.

3　一般化螺旋集合 (GSS: Generalized Spiral Set)

ミセルの初期構造を配置するなど, 任意の点数を球面上にできるだけ等間隔にプロットするためのアルゴリズムを考える. これを実現する一つの方法として, 螺旋を球面状に射影することが挙げられる. このような点の集合を一般化螺旋集合という.

3.1　アルゴリズム

区間 $[-1,\ 1]$ を $(N-1)$ 等分した離散パラメータ h は自然数 $0 \leq k \leq N-1$ を用いれば,

$$h_k = -1 + 2\frac{k}{N-1} \tag{29}$$

と書くことができる. 一般化螺旋集合は以下のような漸化式で表される偏角を持つような点の集合である.

$$\theta_k = \arccos(h_k) \tag{30}$$

$$\phi_0 = 0 \tag{31}$$

$$\phi_{k+1} = \phi_k + \frac{3.6}{\sqrt{N}} \frac{1}{\sqrt{1-h_{k^2}}} \tag{32}$$

$h_k = \pm 1$, つまり $k = 0,\ N-1$ のとき ϕ_{k+1} が発散してしまうのに注意.

4　水のモデル