

1. BIOVIA COSMOtherm 2026 の改良点と修正点

<改良点>

- サードパーティーライブラリを新しいバージョンやバグフィックス版に更新しました。
詳細は以下のウェブサイトをご参照ください。
<https://media.3ds.com/support/progdir/>

<修正点>

- VLE/LLE オプションを使用時、計算結果にイレギュラーな値（無限大など）が含まれる場合、テーブル形式の結果が非表示となりますが、そのような場合にユーザーにメッセージを通知するように修正しました。
- COSMOtherm のジョブでイレギュラーな値（無限大など）が生じたとき、計算を停止して、適切なエラーメッセージを出力するようになりました。
- COSMOthermn 非対応の cavity を使用した COSMO ファイルを検出したときのエラーメッセージが分かりづらい問題を修正しました。
- COSMOthermX の COSMOmic 機能で使用する Modify Micelle ダイアログのポテンシャル定義の入力単位を修正しました。
- COSMOtherm の界面張力計算において、自動相平衡計算 (Automatic phase equilibrium) と温度範囲が指定されたとき、各温度で適切な自動相平衡計算が行われない不具合を修正しました。
- Env. Properties タブの Atmospheric lifetime 予測において、エラー発生時に適切なエラーメッセージが表示されるように修正しました。

2. BIOVIA COSMOplex&perm 2026 の改良点と修正点

<改良点>

- サードパーティーライブラリを新しいバージョンやバグフィックス版に更新しました。
詳細は以下のウェブサイトをご参照ください。
<https://media.3ds.com/support/progdir/>

<修正点>

- COSMOplex 計算の実行時に、スタックサイズが小さい計算環境で稀にセグメンテーション違反が生じる不具合を修正しました。
- COSMOplex や COSMOperm のジョブを並列計算で実行したとき、時々、異常終了する不具合を修正しました。

3. BIOVIA COSMOconf 2026 の改良点と修正点

<改良点>

- サードパーティーライブラリを新しいバージョンやバグフィックス版に更新しました。
詳細は以下のウェブサイトをご参照ください。
<https://media.3ds.com/support/progdir/>

<修正点>

- COSMOconfX の Remote Systems で Expert Settings を設定すると、その後、削除や修正が行えない不具合を修正しました。
- COSMOconfX の Remote Systems において、Save Job ボタンを押したとき、ジョブがローカルに保存される場合でも COSMOconf のリモートマシンの利用可否を確認していました。そのため、ジョブをローカルで実行する意図がある場合には関係のない不要なエラーメッセージが表示されていました。現在この問題は修正されており、ジョブがローカル実行用に保存された場合にはエラーメッセージは表示されません。

4. BIOVIA COSMOquick 2026 の改良点と修正点

<改良点>

- サードパーティーライブラリを新しいバージョンやバグフィックス版に更新しました。
詳細は以下のウェブサイトをご参照ください。
<https://media.3ds.com/support/progdir/>

<修正点>

- インストール時に QuickDB のパス設定を自動設定する機能が無効になっていました。そのため、インストール後にプリファレンスにて、手動で設定する必要がありましたが、この不具合を修正し、QuickDB のパスがインストール時に自動設定されるようになりました。
- CFDB から QuickDB へのフォーマット変更に伴い、高分子のリピートユニットを表す SMILES コードが利用不可となりました。

5. BIOVIA COSMObase 2026 の修正点

<修正点>

- 化合物 glycol の配座セットを更新しました。

6. BIOVIA TURBOMOLE 2026 の新機能、改良点、および修正点

<新しいデフォルト設定>

BIOVIA TURBOMOLE 2026 に含まれる TURBOMOLE 8.0 には以下の新しいデフォルト設定が採用されました。

1. 入力ファイルを生成するための define モジュール

- a. \$atoms セクションで以下のような短縮書式を使用するようになりました。以下の書式では原子の番号や元素ラベルの指定は不要です。

```
$atoms
```

```
basis = def2-TZVP
```

- b. デフォルトの基底関数が def-SV(P) から def2-SV(P) に変わりました。
- c. デフォルトの DFT 汎関数が B-P86 から PBE に変わりました。
- d. デフォルトの DFT 数値積分グリッドが m3 から 3 に変わりました。
- e. 汎関数のリストを libxc のリストに更新し、汎関数リストを出力するオプションを追加しました。

2. COSMO 溶媒和モデル

- a. デフォルトを cavity 表面上の点電荷から Gaussian 電荷モデル (GCM) に変更しました。
- b. GCM では、Lebedev グリッドを使用した新しい cavity 構築方法を採用しました。これにより、構造最適化における解析的エネルギー勾配や振動数計算における 2 次微分を精度良く取り扱えるようになりました。
- c. これまでのデフォルトの cavity 設定の名称を klamt と命名しました。これまでのデフォルト設定を使用する場合は、control ファイルの \$cosmo セクションにキーワード klamt を追加する必要があります。
- d. テンプレートやスクリプトは更新しましたが、典型的なワークフローに影響を及ぼさないようにしました。特に、COSMOtherm 用の COSMO ファイル生成のためのテンプレートは、修正なしで引き続き使用できます。

3. DFT

- a. DFT 汎関数を指定せずに DFT を有効化することができなくなりました。

4. RI-J/MARI-J

- a. dscf や ridft モジュールの実行が、\$rij キーワードの有無で停止することがなくなりました。
- b. dscf モジュールが RI-J 有効として実行された場合、control ファイルから \$rij キーワードを削除します。
- c. ridft モジュールが RI-J 無効として実行された場合、control ファイルに \$rij キーワードを追加します。

5. 安定性と精度

- a. Hartree-Fock の場合、density convergence がデフォルトになりました。
- b. TURBOMOLE の全モジュールにおいて、density convergence の閾値が \$denconv 1d-6 になりました。
- c. 振動数計算モジュール aoforce と基準の統一を図るため、grad、rdgrad、evib モジュールにおいて DFT weight derivatives をデフォルトにしました。
- d. mpshift モジュールや RT-TDDFT の応答プロパティ計算において、meta-GGA や局所ハイブリッド (LHF) 法では電流依存項 (current-dependent term) を使用するようになりました。

6. 利便性

- a. 相対論計算のための新しいセクション \$relham を導入しました。相対論ハミルトニアンに関連した全てのオプションを本セクションで取り扱います。
- b. 新しく導入された簡略化した入力ファイル形式が推奨となりました。define モジュールを使って入力ファイルを作成することは引き続き可能ですが、オプションとして位置付けられます。簡略化入力ファイルの詳細は、TURBOMOLE documentation のチャプター 3 の第 1 セクションを参照してください。

control ファイル用のシンプルで汎用的な入力テンプレートを用いて入力が行えるようになったことで、define モジュールを実行する必要がなくなり、TURBOMOLE がより使いやすくなりました。ridft、dscf、および riper モジュールは TURBOMOLE に付属の基底関数ライブラリから、不足した補助基底関数を自動的にインポートし、さらに初期軌道を原子の電子密度の重ね合わせ (\$atomdens) や拡張ヒュッケル法を用いて生成するようになりました。

<新機能>

- 溶媒和モデルを使用した ricc2: 自己無撞着 PTED カップリング法を用いた COSMO 法、および PE 法を使用することで、MP2 や CC2 レベルにおける基底状態の解析的エネルギー勾配、ならびに ADC(2) や CC2 レベルにおける励起状態の解析的エネルギー勾配が計算できるようになりました。
- CCSDR(T)、および CCSDR(3) 摂動的三重項補正を考慮した CCSD 励起エネルギー

- 強相関補正レンジ分離型 (range-separated) 局所ハイブリッド汎関数 ω LH25tdE ([DOI: 10.1021/acs.jctc.5c00699](https://doi.org/10.1021/acs.jctc.5c00699))、x-LMF を用いた局所ハイブリッド LH24x ([DOI: 10.1063/5.0233312](https://doi.org/10.1063/5.0233312))、ニューラルネットワークに基づく LMF を用いた新しい局所ハイブリッド汎関数 LH24n-B95、LH24n ([DOI: 10.1021/acs.jctc.4c01503](https://doi.org/10.1021/acs.jctc.4c01503))、LH25nP ([DOI: 10.26434/chemrxiv-2025-q3mzp-v2](https://doi.org/10.26434/chemrxiv-2025-q3mzp-v2)) が ridft や rdgrad モジュールで使用できるようになりました。rdgrad モジュールでは解析的エネルギー勾配が計算できます。
- rirpa モジュールで、閉殻、および開殻系の凍結コア解析的エネルギー勾配が計算できるようになりました。
- RT-TDDFT 計算において電流依存 meta-GGA が使用できるようになりました。
- riper モジュールにおいて、周期境界条件を適用した HF 法、ハイブリッド汎関数、およびレンジ分離型ハイブリッド汎関数のためのスピン軌道 2 成分 Fock 交換項が考慮できるようになりました ([DOI: 10.1103/PhysRevB.109.165144](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.109.165144))。
- ridft、rdgrad、および riper モジュールに電流依存 meta-GGA、および局所ハイブリッド汎関数のためのスピン軌道 2 成分 Scalmani-Frisch 法を追加しました ([DOI: 10.1063/5.0246433](https://doi.org/10.1063/5.0246433))。
- ridft、rdgrad、および riper モジュールに分子系、および周期系に適用可能な全ての汎関数クラスに対応した正則化 (Regularized) スピン軌道 2 成分 Scalmani-Frisch 法を追加しました。
- ridft、および mpshift モジュールに 2 成分相対論 EPR 超微細結合テンソルを各寄与 (FC、SD、PSO、Rel) に分割する機能を追加しました。
- riper モジュールに実時間時間依存 DFT 計算に使用できる Fock 交換項、および電流依存 meta-GGA を追加しました ([DOI: 10.1021/acs.jpca.5c02937](https://doi.org/10.1021/acs.jpca.5c02937))。
- rdgrad モジュールに 2 成分計算におけるエネルギー勾配のための DFT weight derivatives を追加しました。
- GW-BSE 法 (1 成分) による過渡吸収スペクトル
- GW-BSE 法 (2 成分) による相対論非線形過渡吸収スペクトル
- T 行列の線形、および非線形量子力学的部分の計算： UV/Vis および NIR 領域における電子間相互作用(ee)部分および電磁相互作用(em)部分を含む
- 磁場依存非線形励起状態プロパティ

<改良点>

- 複素 DIIS と再設定された閾値に基づく改良された 2 成分 SCF
- 新しい相対論全電子計算のための入力方法や多くのユーザーオプションを追加しました。また、すべてのモジュールにおける相対論全電子計算の性能を向上しました ([DOI: 10.1039/9781837678020-00098](https://doi.org/10.1039/9781837678020-00098))。
- 2 成分計算において、Grimme の電荷平衡モデルから取得した部分電荷と自動スピン割

り当てを使用することで、原子の電子密度の重ね合わせによる初期電子密度の生成機能を改良しました。

- dscf モジュールの原子の電子密度の重ね合わせによる初期電子密度の生成機能を改良しました。
- escf モジュールの励起状態や分極率計算において、多くの強相関補正局所ハイブリッドやレンジ分離型局所ハイブリッド汎関数 (scLH22t、scLH22ta、scLH23t-mBR、scLH23t-mBR-P、 ω LH23tdX[X = B, E, P])、ならびに LH24x が利用できるようになりました。
- 基底状態、および励起状態計算において、X2C と embedding を併用できるようになりました。
- mpshift モジュールにおいて、運動量演算子 p や角運動量演算子 l の摂動電子密度行列をディスク上に保存できるようになりました。
- GIMIC を使用したときの軌道寄与に対する軌道回転や重なり行列を全て保存できるようになりました。
- スピン軌道相互作用の 3 つの成分のうち、1 つだけを考慮する新しいオプションを追加しました。
- mkspec モジュールで励起状態スペクトルを生成できるようになりました。
- dscf や ridft モジュールの並列化効率を改善し、実行時間の 99% 以上で並列処理が行えるようになりました。また、いくつかのボトルネックとなる部分を解消しました。
- 局所ハイブリッド汎関数のコードを改良し、基底状態のエネルギーと励起状態計算において標準的なグローバルハイブリッド汎関数と同等の性能を示すようになりました。
- senex アルゴリズムのスクリーニング処理が改良され、計算効率が向上しました。
- senex アルゴリズムの基幹処理が改良され、計算効率が向上しました。
- マニュアルの NMR や EPR のセクションを改訂しました。
- X2C/DKH/BSS の計算における、規約表現 e の点群の対称性を修正しました。
- 2 成分計算の ESP フィット機能を修正しました。
- TmoleX : TURBOMOLE/parameter/cosmosolvents ファイル内で定義された溶媒リストを使用できるようになりました。本ファイルには、溶媒の誘電率や屈折率が予め登録されています。
- TmoleX : RPA 計算のための σ 汎関数補正のオプションを追加しました。
- サードパーティーライブラリを新しいバージョンやバグフィックス版に更新しました。詳細は以下のウェブサイトをご参照ください。
<https://media.3ds.com/support/progdir/>
- TmoleX : TURBOMOLE 8.0 の新しいデフォルトに合わせて、TmoleX に新しいデフォルトを設定しました。デフォルトの基底関数を def2-SV(P) に、DFT グリッドサイズを m3 から 3 に、汎関数を BP-86 から PBE に変更しました。

- TmoleX : COSMO 法の設定において Gaussian 電荷モデル (GCM) をデフォルトにしました。この変更により、大幅に計算精度が向上し、特に構造最適化やスペクトル計算において良い結果が得られます。
- TmoleX において、バッチジョブにジョブテンプレートを適用した場合、初期分子軌道をローカルマシン上で生成することがなくなりました。これにより、バッチジョブで多くの分子を取り扱う場合に、入力作成の速度が大幅に向上しました。
- TmoleX : 分子リストに対して自動ワークフローを実行するためのジョブテンプレートで、MP2 や結合クラスター法 [CCSD、CCSD(T) など] のようなポスト Hartree-Fock 法で使用する PNO (Paired Natural Orbital) 近似が使用できるようになりました。

<修正点>

- TmoleX : 非常に大きな分子構造を取り扱うとき、Start new job with current data ボタンを押すと、まれに重原子の ECP が削除される不具合を修正しました。
- TmoleX : COSMO 法の設定において、以前のデフォルト cavity 生成を指定するためのオプションキーワード 'klamt' を追加しました。
- 古いバージョンの TmoleX から COSMO 法計算のリモートジョブが実行されたとき、以前のデフォルト設定を使用するようになりました。
- TmoleX : COSMO 法を適用した DFT 計算において、フラーレンやゼオライトのような内側 cavity をもつ分子の構造最適化を行えるようになりました。
- TmoleX : 周期境界条件下の構造最適化時のエネルギーの収束チェックを改善しました。
- TmoleX : CC2 レベルで励起状態の電子密度を計算したとき、Density Plot ダイアログに生じる矛盾点を修正しました。
- 部分占有数をもつ場合にも DFT-D4 分散力補正使用時の電荷が正しく計算されるようになりました。