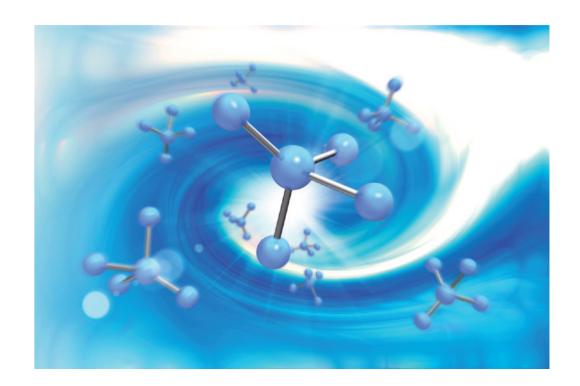




BIOVIA COSMOtherm

熱力学物性推算ソフトウェア

Thermodynamic Property Prediction with COSMO-RS



https://www.molsis.co.jp/



ダッソー・システムズ株式会社 販売代理店

株式会社モルシス

※本カタログの仕様は予告なく変更される場合があります。

〒104-0032 東京都中央区八丁堀3-19-9 ジオ八丁堀 Tel: 03-3553-8030 Fax: 03-3553-8031 E-mail: sales@molsis.co.jp https://www.molsis.co.jp/

開発元 ダッソー・システムズ社ホームページ (https://www.3ds.com/、および http://www.cosmologic.de/)もあわせてご覧ください。 ※記載の商品名は各社の商標または登録商標です。



ひろがる領域、ひろがる可能性。

BIOVIA COSMOtherm

Thermodynamic Property Prediction with COSMO-RS

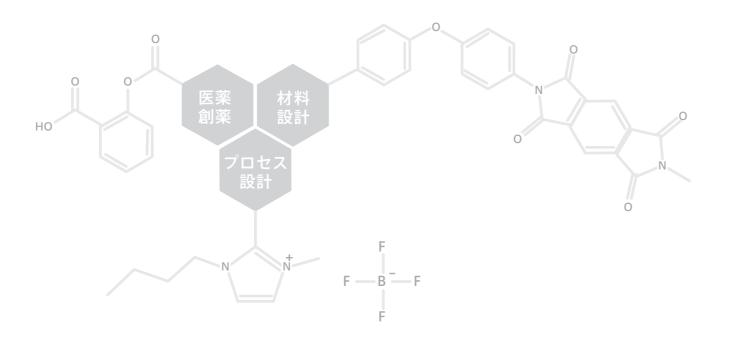
熱力学物性推算ソフトウェア

BIOVIA COSMOthermは、COSMO-RS法を用いた熱力学物性推算ソフトウェアです。 任意の化合物や混合溶液の蒸気圧・分配係数など様々な平衡物性を推算することができます。

BIOVIA COSMOthermは、様々な化合物の物性予測を可能にし、研究者・技術者の幅広いニーズに応えます。 例えば、プラント設計や材料設計から医薬品設計・製剤プロセス設計において利用できます。

COSMO-RS法 (Conductor-like Screening Model for Realistic Solvation) は量子化学計算で得られる分子の表面電荷情報と分子統計力学に基づき、溶液中の化学種(分子やイオンなど)の化学ポテンシャルを算出します。そして、得られた化学ポテンシャルから様々な平衡熱力学物性が求められます。

BIOVIA COSMOconfやBIOVIA COSMOplex & COSMOpermなど関連製品を使用することで、 計算効率の向上やBIOVIA COSMOthermでは予測できないプロパティの算出が行え、研究対象が大きく広がります。



幅広い物性推算機能

BIOVIA COSMOthermは、気液・液液・固液平衡を始め、酸解離定数、反応平衡定数、

イオン液体の各種プロパティなど様々な熱力学物性を予測できます。

物性推算機能

蒸気圧の計算

純物質・混合物の蒸気圧(分圧)の予測

指定温度範囲の蒸気圧の自動計算

気化熱の予測

蒸気圧の実測値を用いた補正

沸点の計算

任意の圧力での純物質・混合物の沸点の予測

蒸気圧の実測値を用いた補正

溶解度の計算

任意の温度での液体、固体の溶解度の予測

塩、共結晶に対応

混合溶媒に対応

実測値を用いた融解熱推算

QSPR式を用いた融解熱推算

溶質のpKaと溶媒のpHを考慮した補正

ガス溶解度の計算

任意の圧力での気体の溶解度の予測

任意の溶媒組成に対応

活量係数の計算

任意の溶媒中における活量係数の予測

任意の溶媒組成に対応

任意の参照状態を設定可能

温度・組成に対する活量係数の1次微分の計算

Henry定数の計算

任意の溶媒中におけるHenry定数の予測

任意の溶媒組成に対応

蒸気圧の実測値を用いた補正

溶媒和自由エネルギーの予測 分配係数(log P)の計算

任意の溶媒の組み合わせにおける分配係数の予測

任意の溶媒組成に対応

溶質のpKaと水相のpHを考慮した補正

酸解離定数(pK_a)の計算

水、DMSO、アセトニトリル、ヘプタン、THF中の任意の化合物の pK_a 予測 ユーザの実験データに基づく補正により任意の溶媒への適用も可能

多成分2相平衡の計算

任意の化合物の組み合わせにおける相平衡の計算

任意の温度・圧力の設定

イオン液体・塩に対応

液液平衡の探索(2成分系の臨界溶液温度探索)

固液平衡の探索(2成分系の共晶点探索)

共沸点の探索(2成分系のみ)

蒸気圧の実測値を用いた補正

NRTL、WILSON、UNIQUAC活量係数パラメータへの フィッティング機能

状態方程式との連携

Soave-Redlich-Kwong (SRK)、Peng-Robinson (PR) に対応 VDW、WS、MHV1混合則に対応

臨界定数の計算

純物質の臨界温度、臨界体積、臨界圧の予測

臨界圧縮係数、偏心係数、温度依存パラメータの予測

引火点の計算

純物質・混合物の引火点の予測

引火点の実測値を用いた補正

多成分多相平衡の計算

任意の化合物の組み合わせにおける相平衡の計算

最大10相系に対応

気相・固相を各1相考慮可能(残りは液相)

イオン液体・塩に対応

密度・粘度の計算

任意の温度での純物質の密度・粘度の計算

イオン液体に対応(密度のみ)

類似度の計算

σ-プロファイルの類似度の計算

σ-ポテンシャルの類似度の計算

Sigma-match similarity (SMS) の計算

界面張力の計算

任意の温度における液液界面の張力の計算

任意の溶媒組成に対応(イオン種を除く)

界面自由エネルギーの計算

任意の温度での気液、液液界面における自由エネルギーの計算

任意の溶媒組成に対応

反応平衡定数・反応自由エネルギーの計算

任意の温度における平衡定数・自由エネルギーの予測

任意の溶媒組成に対応

零点振動エネルギー等による補正に対応

イオン液体の各種プロパティの計算

モル体積、密度、熱容量、エントロピー、融点、臨界ミセル濃度、粘度、電気伝導度の予測

高分子溶融状態への対応

自由体積理論に基づく補正機能 メソスケールパラメータの計算

任意の分子・部分構造のFlory-Hugginsのχパラメータの推算

散逸粒子動力学(DPD)の△aパラメータの推算

パラメータの温度・組成依存性の考慮

スクリーニング機能

溶解度スクリーニング (純溶媒・混合溶媒に対応)

共結晶スクリーニング

イオン液体スクリーニング

その他

自由エネルギー、過剰混合エンタルピー、過剰混合エントロピーの算出

分子の表面電荷密度の3次元表示用VRMLファイルへの出力

 σ - プロファイル、 σ -ポテンシャル、 σ -モーメントの出力



量子化学と分子統計力学の融合

COSMO-RS法について

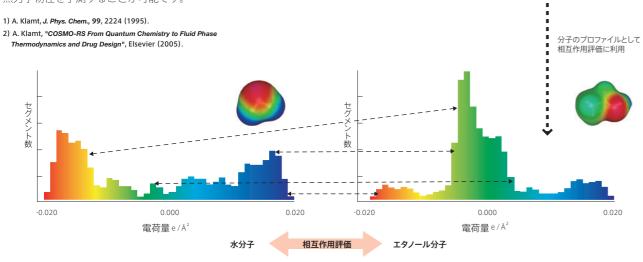
BIOVIA COSMOthermで使用するCOSMO-RS(Conductor-like Screening Model for Realistic Solvation) 法は、 1995年にA. Klamtによって提案された溶液中の化学種の化学 ポテンシャルを表す理論モデルです。1,2)

COSMO-RS法では、始めに導電体中の分子モデルを用いて溶 液中の分子状態を近似し(COSMO近似)、溶液内の分子の構造 や表面電荷密度を量子化学計算により求めます。表面電荷密度 をスクリーニング電荷密度と呼びます。

次に、得られた分子のスクリーニング電荷密度を用いて、溶液中 の分子間相互作用を評価します。溶液中の分子間相互作用は、 分子表面間の接触による相互作用として表します。具体的には、 分子表面を小さなセグメントに分割し、それぞれのセグメントが 独立に相互作用すると仮定し、相互作用エネルギーを計算しま す。相互作用エネルギーは、スクリーニング電荷密度に基づく静 電相互作用や水素結合相互作用、ならびにファン・デル・ワール ス相互作用に基づき算出されます。

相互作用エネルギーの計算は、溶液に含まれるすべての化 合物同士の全セグメント間で行い、そのアンサンブル平均 を計算します。そして、アンサンブル平均から各化合物の 化学ポテンシャルを算出し、活量係数・溶解度などの熱力 学物性を推算します。この方法では、分子の複雑な形状や 溶液内の分子配置の取り扱いを簡略化し、計算を高速化す ることを可能にしています。

このように、COSMO-RS法では、分子の構造情報から直接、 熱力学物性を推算することができます。また、特殊な仮定を 用いることなく、有限・無限希釈どちらの場合でも精度良く 熱力学物性を予測することが可能です。



相互作用の単位:セグメント

【図1. エタノール分子の表面電荷分布】

-0.020

【図2. エタノール分子のセグメント数とその表面電荷量】

0.000 電荷量 e / Ų (赤:負電荷 青:正電荷)

表面電荷のセグメントへの 分割と電荷量による分類

【図3. 水とエタノールの分子間相互作用の統計的評価のイメージ・セグメント数と電荷量を同時に考慮して、分子間相互作用を評価】

使いやすいユーザインターフェース

BIOVIA COSMOtherm には、使いやすいグラフィカルユーザインターフェース **COSMO thermX が付属しています。**

マウス操作や数値入力のみで、推算するプロパティの選択や条件設定を行うことができます。 また、グラフや分子構造・分子の表面電荷の表示ができますので、計算結果や分子の特徴などを容易に確認できます。 COSMOthermXは、関連製品BIOVIA COSMObase、BIOVIA COSMOconf、BIOVIA TURBOMOLEなどにも対応し、 BIOVIA COSMObaseのコンテンツ検索・管理やBIOVIA TURBOMOLEのジョブ実行・管理などを簡単に行えます。

計算設定·実行機能

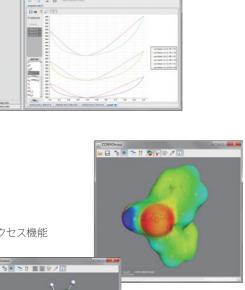
- BIOVIA COSMOtherm、BIOVIA COSMOplex & COSMOpermの物性計算設定
- BIOVIA COSMOtherm、BIOVIA COSMOplex & COSMOpermの実行・制御
- BIOVIA COSMOthermを用いた物性スクリーニング
- BIOVIA COSMOquickを用いた表面電荷作成機能
- BIOVIA COSMOconf、BIOVIA TURBOMOLEへのジョブ投入・管理機能
- 分子表面電荷の修正機能 (Atomic Weight・メタファイル作成)
- 配座異性体の定義

表示機能

- 計算結果のスプレッドシート表示
- 蒸気圧曲線・相平衡のグラフ表示
- σ-プロファイル・σ-ポテンシャルのグラフ表示
- 分子構造・分子表面電荷の3次元表示

その他の機能

- 分子の表面電荷分布データ(COSMOファイル)の検索機能
- 分子構造構築(3次元描画、SMILESの3次元構造への変換機能)
- COSMOファイル内の構造情報の各種構造ファイルフォーマットへの変換
- BIOVIA COSMObaseのコンテンツに対応したCOSMOファイル管理
- 計算結果のMicrosoft Excel形式への変換
- ウェブサイトChemSpider (http://www.chemspider.com/)へのアクセス機能



【図1. COSMOthermXの表示例】

BIOVIA COSMOtherm p4 BIOVIA COSMOtherm p5



BIOVIA COSMOtherm 関連製品

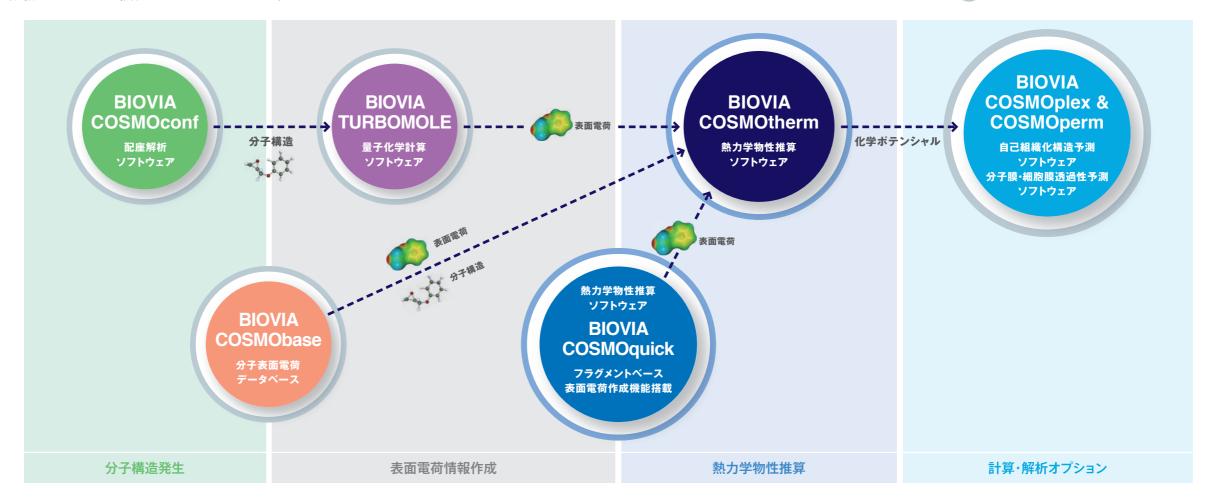
BIOVIA COSMOtherm は、量子化学計算ソフトウェア BIOVIA TURBOMOLE や分子表面電荷データベース BIOVIA COSMObase と組み合わせて使用します。

BIOVIA COSMOthermとBIOVIA TURBOMOLEを組み合わせて使用することで、任意の化合物の物性推算が可能です。一方、BIOVIA COSMObaseと組み合わせれば、データベースに収録されている化合物については、量子化学計算を行わずに物性推算が行えます。BIOVIA COSMOthermの姉妹製品として、医薬品の研究開発で重要な物性値の推算機能とフラグメントベースの分子の表面電荷作成機能を組み合わせた熱力学物性推算ソフトウェアBIOVIA COSMOquickもあります。BIOVIA COSMOquickの分子表面電荷作成機能は非常に高速(1分子あたり約5秒)で、大量の化合物を対象とした物性推算やスクリーニングに適しています。

オプション製品には、BIOVIA TURBOMOLEやBIOVIA COSMObaseのほか、BIOVIA TURBOMOLEと組み合わせて使用する配座解析ソフトウェア、ならびにBIOVIA COSMOthermでは取り扱えないプロパティを推算するソフトウェアなどがあります。

物性推算ソフトウェア

オプション製品





BIOVIA COSMOquick

熱力学物性推算ソフトウェア

溶解度などの物性値を高速スクリーニング

BIOVIA COSMOquickは、医薬品の研究開発で重要とされる物性の推算機能と分子の表面電荷作成機能を組み合わせた熱力学物性推算ソフトウェアです。通常、BIOVIA COSMOthermで物性推算を行う場合、量子化学計算を用いて分子の表面電荷情報を求めますが、その作業量と計算時間が問題になることがあります。これを解決するために考案されたBIOVIA COSMOquickは、量子化学計算を行わずに、内蔵の分子表面電荷データベースの部分構造の表面電荷の重ね合わせで、目的分子の表面電荷情報を作成することができます(図1参照)。また、その作成時間も非常に短く(1分子あたり約5秒)、大量の化合物のスクリーニングにも適しています。

BIOVIA COSMOquickには、ワークフロー形式のユーザインターフェースが用意されています。①計算したい物性の選択、②化合物名、分子スケッチ、あるいは分子構造ファイルによる化合物指定、③分子表面電荷の作成、④計算の実行、⑤結果の表示の5つのステップを順に進めることで、操作に迷うことなく物性推算が行えます。

機能

●ユーザインターフェース

化合物名、分子スケッチ、分子構造ファイルによる化合物指定 ワークフロー形式の計算設定

計算結果のグラフ表示

Excelファイル形式での計算結果の保存

●物性推算機能

溶解度の推算

分配係数の推算

Henry定数・気体の溶解度の推算

Hansenの溶解度パラメータの推算

溶質のバックフィッティング

共結晶化のための溶媒探索

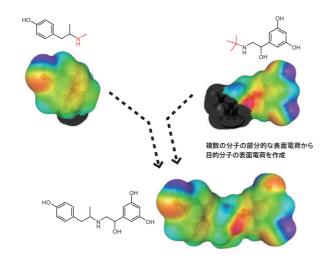
混合熱に基づく共結晶・溶媒和物スクリーニング

ADME物性の推算

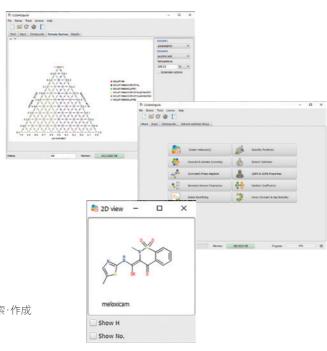
分子記述子計算

σ-プロファイルの出力

- ●分子表面電荷作成機能(中性化合物、1 価のアニオン·カチオンに対応)
- ●分子表面電荷作成用化合物データベース(収録分子数:約19万件)の検索・作成



【図1. BIOVIA COSMOquickによる分子表面電荷作成のイメージ】



【図2. BIOVIA COSMOquickのユーザインターフェース】

BIOVIA COSMOconf

配座解析ソフトウェア

効率的な配座探索と物性推算に適した配座選択

BIOVIA COSMOconfは、BIOVIA TURBOMOLEと組み合わせて使用する配座解析ソフトウェアです。与えられた分子構造から、その配座異性体の候補を作成し、分子力学計算や半経験的および非経験的量子化学計算を用いて最安定配座や準安定配座を自動的に求めます(図1参照)。配座解析の手順は、自由に変更が可能で、ユーザ独自の抽出・解析スキームを作成・使用することができます。

配座の選択では、分子構造や表面電荷の類似性による絞り込みのほか、代表的な30種の溶媒中の化学ポテンシャルを計算し、各溶媒中で重要な配座を残すように絞り込みが行えます。後者の基準を用いることで、BIOVIA COSMOthermの物性推算で使用すべき配座異性体の選択が容易に行えます。

配座解析機能

- ●配座発生方法
- 多目的遺伝的アルゴリズムによる配座発生 (Balloon) ¹⁾ Geometry distanceアプローチによる配座発生 (RDkit) ²⁾
- ●分子の類似性による配座選択(分子構造、分子表面電荷)
- ●エネルギーによる配座選択(全エネルギー、化学ポテンシャル)
- ●配座解析手順作成

計算制御機能

- ●BIOVIA TURBOMOLEのジョブ実行・制御
- ●MOPAC7のジョブ実行・制御
- ●配座解析のための化学ポテンシャル計算の実行・制御

ジョブ管理機能

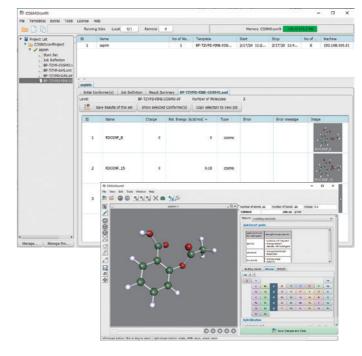
- ●配座解析ジョブの実行・管理
- ●配座解析のリモートジョブ実行・管理

ユーザインターフェース

- ●分子構造構築(3次元構造構築)
- ●分子構造表示
- ●マウス操作による配座解析設定

1) M. J. Vainio, M. S. Johnson, *J. Chem. Inf. Model.*, 47, 2462-2474 (2007) 2) https://www.rdkit.org/ 分子構造の入力
 各アルゴリズムによる配座発生
 分子力学計算による構造最適化
 構造・エネルギーに基づく配座のクラスタリング
 BP/TZVPレベルの構造最適化
 構造・エネルギーに基づく配座のクラスタリング
 BP/TZVPDレベルのエネルギー・分子表面電荷計算
 30種の溶媒中の化学ポテンシャルの計算
 化学ポテンシャルに基づく配座の絞り込み

【図1. BIOVIA COSMOconfの処理のながれ】



【図2. BIOVIA COSMOconfのユーザインターフェース】



BIOVIA TURBOMOLE

量子化学計算ソフトウェア

高速な密度汎関数法・post-HF計算

BIOVIA TURBOMOLEは、BIOVIA COSMOthermの物性推算に必要な分子の表面電荷情報を高速、かつ精度良く算出することができる量子化学計算ソフトウェアです。

BIOVIA TURBOMOLEは、カールスルーエ大学R. Ahlrichs 教授の研究室で開発され、Resolution of the identity (RI) 近似の導入により、クーロン積分を高速化し、密度汎関数法やMP2、クラスター展開法の計算を高速に実行できることが特長です。また、並列計算にも対応し(OpenMP、およびIntel MPIを使用)、さらに計算速度を高速化することが可能です。

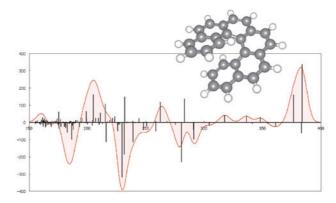
BIOVIA TURBOMOLEは、時間依存密度汎関数法(TD-DFT)を搭載し、励起状態の分子の構造最適化や振動計算、ならびに非断熱遷移を考慮した量子分子動力学計算も可能です。

計算機能

- ●基底状態、励起状態の分子の構造最適化
- ●基底状態、励起状態の分子の振動計算
- ●基底状態、励起状態の系の量子分子動力学計算
- ●COSMO法による溶媒効果の設定
- ●外場の設定: 点電荷、静電場、PEEC、FDE
- ●その他: minimum-energy crossing pointの最適化、chain-of-states法による反応経路探索、遺伝的アルゴリズムによる最安定構造探索

プロパティ計算機能

- ●赤外吸収スペクトル、ラマンスペクトル
- ●NMR遮蔽定数、スピン結合定数
- ●励起エネルギー、振動子強度
- ●(周波数依存)分極率、超分極率
- ●可視·紫外吸収スペクトル (スピン軌道相互作用、Franck-Condon因子の考慮可)
- ●2光子吸収スペクトル
- ●吸収円二色性 (VCD、ECD) スペクトル
- ●1次電子振動カップリング
- ●1次非断熱結合行列要素
- ●原子電荷: Mulliken、ESP



【図1. ヘキサヘリセンの構造とCDスペクトル】

計算手法

- ●Hartree-Fock法: RHF、UHF、ROHF
- ●Møller-Plesset摂動法:MP2、MP2 (F12)、MP3 (F12)、MP4 (F12)、SCS-MP2、SOS-MP2、PNO-MP2、PNO-MP2-F12
- ●配置間相互作用法: CIS、CISD、ADC(2)
- ●クラスター展開法:

CC2 (approx.CCSD)、SCS-CC2、SOS-CC2、CCSD、CCSD (F12)、CCSD (F12) (T)、PNO-CCSD、PNO-CCSD (T)

●密度汎関数法:

LDA: SVWN、SPW GGA: BLYP、BVWN、BP、PBE

MGGA: TPSS, SCAN, M06 Hybrid: B3LYP, BHLYP, TPSSH, PBE0, M06-2X

Other: Empirical dispersion, Double Hybrid (B2PLYP),
Range-separated Hybrid (CAM-B3LYP, wB97 (X))
Local Hybrid (Lh07t-SVWN, Lh07s-SVWN,

Lh12ct-SsirPW92、Lh12ct-SsifPW92、Lh14t-calPBE)
●相対論効果: Spin-Orbit (X2C、DKH、BSS)、

- Scalar (X2C、DKH、BSS)

 ●周期境界条件: 1~3次元
- ●post-Kohn-Sham法: RPA、GW、BSE

TmoleX

TmoleXは、BIOVIA TURBOMOLEのグラフィカルユーザインターフェースです。TmoleXを用いることで、計算設定・実行・結果の可視化を簡単に行うことができます。

構造構築機能

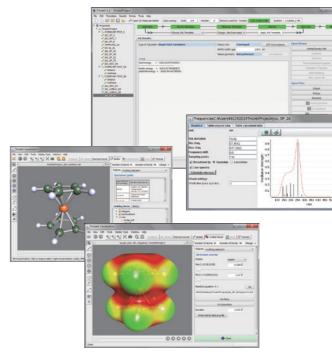
- ●官能基·環構造などのフラグメントを用いた構造構築
- ●分子力場·MOPACなどを使用した簡易構造最適化
- ●ブラベー格子の指定による周期構造の構築
- ●フラグメントライブラリのカスタマイズ
- ●部分構造固定や修正

計算設定・ジョブ管理機能

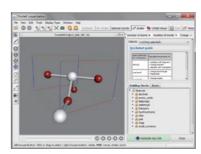
- ●計算方法、基底関数、プロパティなどの計算設定
- ●計算設定のテンプレートの作成・管理
- ●計算ジョブ (ローカル・リモート) の投入・管理機能
- ●キューイングシステム対応 (PBS、Grid Engineなど)

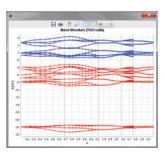
表示機能

- ●アニメーション表示:構造最適化計算、基準振動解析
- ●3次元データの等値面表示:分子軌道、電荷密度、静電ポテンシャルなど
- ●各種スペクトルのグラフ表示:IR、ラマン、UV/vis、CD
- ●バンド構造図、状態密度図の表示
- ●複数の計算結果のサマリ表示



【図1. TmoleXの表示例】





【図2. 周期境界モデルとバンド構造図の表示例】



BIOVIA COSMOplex

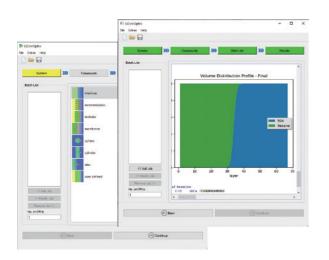
自己組織化構造予測ソフトウェア

COSMO-RS法に基づきミセル・分子膜構造を予測

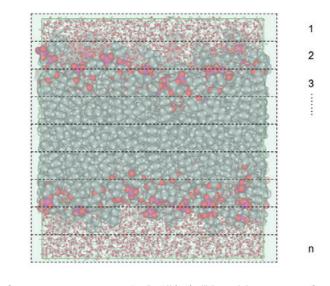
BIOVIA COSMOplexはミセルや分子膜のような自己組織化構造を予測するためのソフトウェアです。BIOVIA COSMOplexでは、自己組織化構造が層状の構造(球状ミセル:同心球状、円筒状ミセル:同心円状、分子膜:層状[図1参照])をもつと仮定し、各層に存在する分子の部分構造を決定すると共に自己組織化構造を予測します。このとき、各層における分子の化学ポテンシャルを計算する必要がありますが、COSMO-RS法を用いるため、分子動力学シミュレーションなどに比べて計算負荷が小さく、自己組織化構造を高速に予測することが可能です。

機能

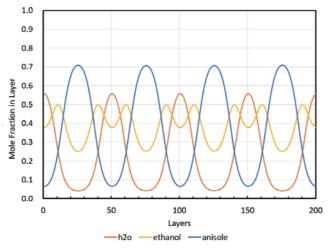
- ●自己組織化構造の予測 ミセル(球状、円筒状、層状)、分子膜、 マイクロエマルション、液液界面に対応
- ●自己組織化構造における各層のプロパティ原子・分子の濃度分布 分子の化学ポテンシャル・自由エネルギー 圧力・極性分布
- ●自己組織化構造に関連したプロパティ 界面張力 臨界ミセル濃度



【図2. BIOVIA COSMOplexのグラフィカルユーザインタフェース】



【図1. BIOVIA COSMOplexにおいて分子膜を層状(n層)の構造として考慮するときのイメージ】



【図3. マイクロエマルション形成時の各層の化合物のモル分率】

BIOVIA COSMOperm

分子膜・細胞膜透過性予測ソフトウェア

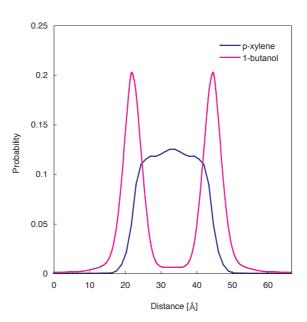
低分子の分子膜・細胞膜透過性を予測

BIOVIA COSMOpermは、低分子の分子膜や細胞膜の透過性を 予測するためのソフトウェアです。また、分子膜やミセル内の低 分子の平衡分布を予測することも可能です。

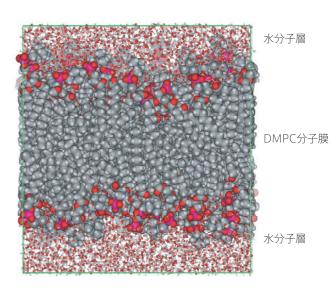
BIOVIA COSMOpermでは、図1のような分子膜の構造情報と量子化学計算で得られる分子の表面電荷情報(あるいは、BIOVIA COSMOplexで得られる自己組織化構造情報)に基づき、図2のような低分子の平衡分布を推算することが可能です。さらに、低分子の平衡分布データから、分子膜一溶媒間の分配係数(図3)や膜透過性の予測も行えます。

機能

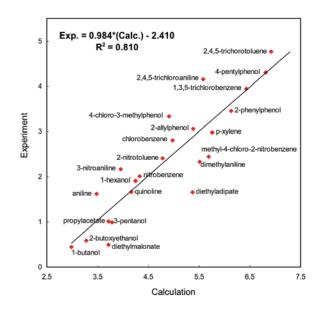
- ●分子膜·細胞膜透過性の予測
- ●分子膜・ミセル内の分子の位置分布の予測
- ●分子膜・ミセル内の分子の体積分布の予測
- ●分子膜・ミセル内の自由エネルギー・エントロピーの算出
- ●分子膜・ミセルー溶媒間の分配係数の算出



【図2. DMPC分子膜内の低分子の平衡分布(Distanceは図1の縦方向)】



【図1. ジミリストイルフォスファチジルコリン (DMPC) の分子膜構造】



【図3. DMPC-水の分配係数の推算値と実測値の比較】



BIOVIA COSMObase

分子表面電荷データベース

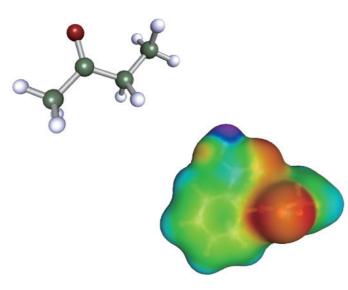
12,000種以上の分子情報を収録

BIOVIA COSMObaseは、化合物の分子構造とBIOVIA COSMOthermの物性推算に必要な分子の表面電荷分布データ (COSMOファイル)を収録したデータベースです。一般的な有機溶媒を含む12,000種以上の分子情報が収録されています。BIOVIA COSMObaseの利用により、量子化学計算を行わずに一般的な化合物や混合物の物性推算を行うことができます。例えば、多くの溶媒を対象とした溶解度スクリーニングを行うなど、一般的・汎用的な化合物を研究対象とされる方に有用です。また、一部の化合物については蒸気圧データ、融解熱・融点、臨界定数などの情報も収録しています。

収録内容

- ●分子の表面電荷情報
- ●分子の最適化構造
- ●気相中の分子のエネルギー

●蒸気圧、融解熱·融点、臨界定数



【収録例: メチルエチルケトンの構造(左上)、アスピリンの表面電荷分布(右下)】

サポートプラットフォーム

BIOVIA COSMOthermならびに関連製品は、次の環境で使用できます。 詳細はお問い合わせください。

- ●Windows 8、10 (64ビット)
- ●Intel-based Linux (x86_64)
- ●Intel-based Mac OS X

対応量子化学計算ソフトウェア

BIOVIA COSMOtherm の物性推算で必要となる分子の表面電荷情報は、量子化学計算ソフトウェア BIOVIA TURBOMOLE のほか、次のソフトウェアでも作成することができます。 詳細はお問い合わせください。

- ●BIOVIA Materials Studio DMoL³(ダッソー・システムズ株式会社)
- ●PQS *ab initio* プログラム (Parallel Quantum Solutions社)
- ●Molpro (ver. 2006以降、TTI GmbH社)
- ●Gaussian 16 (Gaussian社)
- ●Gaussian 09 (Rev. C.01以降、Gaussian社)
- ●Gaussian 03 (Rev. B.03-C.02、Gaussian社)

お問い合わせ窓口

BIOVIA COSMOtherm ならびに関連製品に関するお問い合わせは下記までお寄せください。

ダッソー・システムズ株式会社 販売代理店 株式会社モルシス

Tel: 03-3553-8030 Fax: 03-3553-8031

E-mail: sales@molsis.co.jp