熱力学物性推算ソフトウェア

BIOVIA COSMOtherm

量子化学計算ソフトウェア

BIOVIA TURBOMOLE

ダッソー・システムズ株式会社 パートナー（販売代理店）
株式会社モルシス
www.molsis.co.jp　03-3553-8030
104-0032 東京都中央区八丁堀3-19-9 ジオ八丁堀

2026.09

株式会社モルシス
MOLSIS Inc.

化合物の物性を見極め
材料設計・プロセス設計を加速

Understand Compound Properties.
Accelerate Material, Process and Formulation Design.

BIOVIA COSMOlogic製品の主な適用分野

材料設計

BIOVIA COSMOthermで得られる熱力学物性と、BIOVIA TURBOMOLEで得られる電子状態情報や各種プロパティを活用することで、用途に適した分子や材料の設計を効率的に行えます。

プロセス設計

BIOVIA COSMOthermで得られる気液平衡・液液平衡・固液平衡データを活用することで、蒸留、抽出、晶析プロセスの条件検討を効率化できます。また、実測データが不足する条件領域の予測・補完にも活用できます。

製剤設計

BIOVIA COSMOthermやBIOVIA COSMOquickで得られる溶解度予測や溶媒和物・共結晶スクリーニングのデータを活用することで、医薬品の溶解性評価や共結晶形成の可能性を効率的に検討できます。

BIOVIA COSMOlogic製品について

Overview of BIOVIA COSMOlogic Products

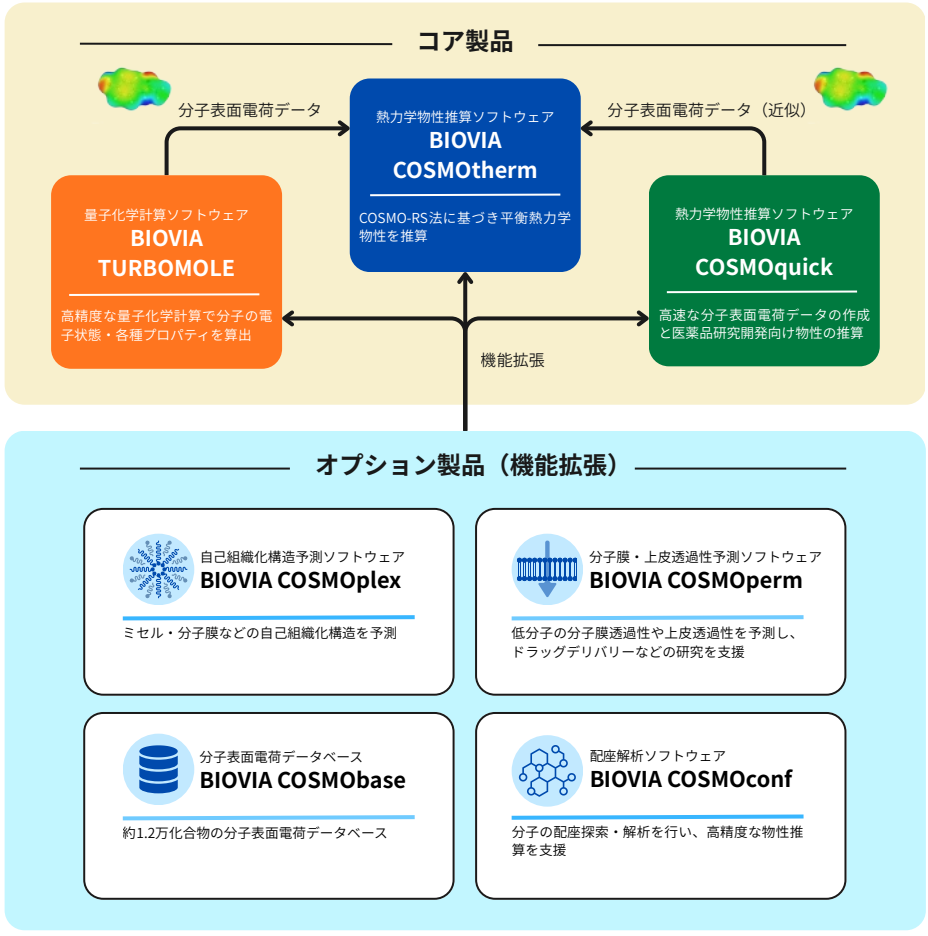
BIOVIA COSMOlogic製品は、化合物の様々な物性推算に対応し、幅広い研究分野で利用できます。例えば、プラント設計、材料設計、ならびに製剤設計において活用されています。BIOVIA COSMOlogic製品は、COSMO-RS法（詳細はp. 4参照）や量子化学計算に基づく計算方法を使用しているため、化合物を問わず使用できることが特長です。

BIOVIA COSMOlogic製品は、3つのコア製品BIOVIA COSMOtherm、BIOVIA COSMOquick、ならびにBIOVIA TURBOMOLEと、コア製品と組み合わせて使用する4つのオプション製品で構成されます（下図参照）。

BIOVIA COSMOthermは、COSMO-RS法に基づき化学種の化学ポテンシャルを推算し、気液・液液・固液平衡、蒸気圧、溶解度など様々な平衡熱力学物性を予測する熱力学物性推算ソフトウェアです。一方、BIOVIA COSMOquickは、医薬品開発で重要な物性に限定した推算機能とCOSMO-RS法で必要な分子の表面電荷情報を生成する機能を組み合わせた高速物性推算ソフトウェアです。

BIOVIA TURBOMOLEは、COSMO-RS法で必要な分子の表面電荷情報を算出する機能をはじめ、量子化学計算ソフトウェアとして幅広い機能を搭載しています。

BIOVIA COSMOlogic製品群



BIOVIA COSMOtherm

Prediction of Thermodynamic Properties and Phase Behavior

概要

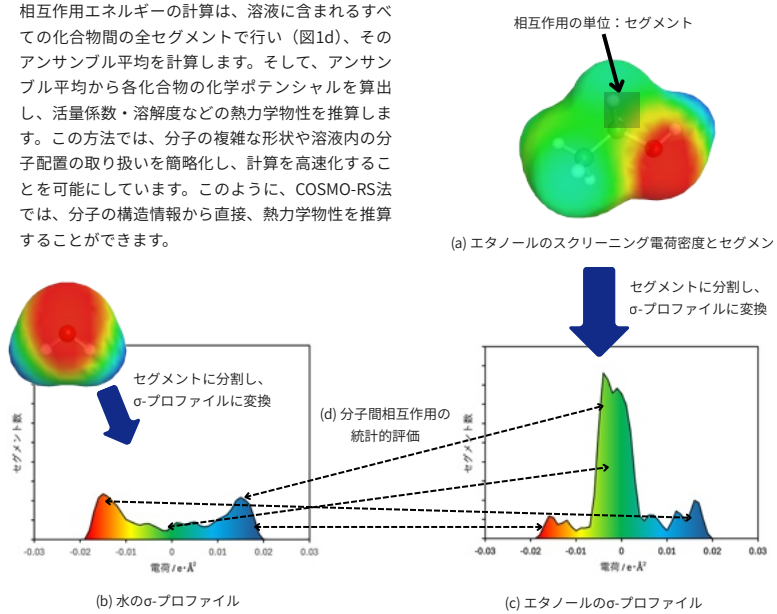
Overview

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。量子化学計算で得られる分子表面電荷情報から溶液中の化学種の化学ポテンシャルを推算し、蒸気圧や分配係数など様々な平衡熱力学物性を予測します。
BIOVIA COSMOthermは、多様な化合物の物性推算が可能で、研究者・技術者のニーズに応えます。

COSMO-RS法

COSMO-RS Theory

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導出する理論モデルです。[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）、溶液中の分子構造や表面電荷密度を量子化学計算により求めます。
この表面電荷密度をスクリーニング電荷密度と呼びます（図1a）。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、評価対象の化合物（図１では水とエタノール）の分子表面を小さなセグメントに分割し(図1b、図1c)、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。セグメントの電荷密度に基づき、静電相互作用エネルギーや水素結合相互作用エネルギーを、セグメントを与える元素種に基づきファン・デル・ワールス相互作用エネルギーを算出します。
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間の全セグメントで行い（図1d)、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。



(a) エタノールのスクリーニング電荷密度とセグメント

(b) 水のσ-プロファイル

(c) エタノールのσ-プロファイル

図1. エタノールのスクリーニング電荷密度とセグメント（a)、水・エタノールのスクリーニング電荷密度をセグメントの電荷量とセグメント数で表したσ-プロファイル（b, c)、ならびに水・エタノールの分子間相互作用の統計的評価のイメージ（d）

1） A. Klamt, J. Phys. Chem., 99,2224 (1995).
2） A. Klamt, "COSMO-RS From Quantum Chemistry to Fluid Phase Thermodynamics and Drug Design", Elsevier (2005).

物性推算機能

Property Prediction

BIOVIA COSMOthermは、以下の物性推算に対応しています。

- 蒸気圧
  - 指定温度における純物質・混合物の蒸気圧予測
  - 指定温度範囲の自動計算
  - 気化熱
  - 蒸気圧の実測値を用いた補正
- 沸点
  - 指定圧力における純物質・混合物の沸点予測
  - 蒸気圧の実測値を用いた補正
- 溶解度
  - 指定温度における純物質（液体・固体）の溶解度予測
  - 溶質として塩・共結晶に対応
  - 混合溶媒に対応
  - 溶解度の実測値を用いた融解自由エネルギー推算
  - QSPR式を用いた融解自由エネルギー推算
  - 溶質のpK_aと溶媒のpHを考慮した補正
- ガス溶解度
  - 指定圧力における純物質（気体）の溶解度予測
  - 混合溶媒に対応
- 活量係数
  - 指定温度における溶質の活量係数予測
  - 混合溶媒に対応
  - 無限希釈に対応
  - 任意の参照状態に対応
  - 温度・組成に対する活量係数の1次微分
- ヘンリー定数
  - 指定温度における溶質のヘンリー定数予測
  - 混合溶媒に対応
  - 蒸気圧の実測値を用いた補正
  - 溶媒和自由エネルギー予測
- 分配係数（logP）
  - 指定温度における溶質のlogP予測
  - 混合溶媒・任意の溶媒の組み合わせに対応
  - 溶質のpK_aと水相のpHを考慮した補正
- 酸解離定数（pK_a）
  - 水、DMSO、アセトニトリル、ヘプタン、THF中の溶質のpK_a予測
  - 実験データに基づき相関式を構築することで任意の溶媒への適用も可能
- 多成分２相平衡
  - 任意の化合物の組み合わせにおける相平衡予測
  - 定温・定圧に対応
  - 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の探索）
  - 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）
  - NRTL、WILSON、UNIQUAC活量係数パラメーター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
  - 純物質の臨界定数予測（臨界温度、臨界体積、臨界圧）
  - 臨界圧縮係数、偏心係数、温度依存パラメーターの予測
- 引火点
  - 純物質・混合物の引火点予測
  - 引火点の実測値を用いた補正
- 多成分多相平衡
  - 任意の化合物の組み合わせにおける相平衡予測
  - 定温に対応
  - 最大10相系に対応
  - 気相・固相を各1相考慮可能（他は液相）
  - イオン液体・塩に対応
- 液密度・液粘度
  - 指定温度における純物質の液密度・液粘度予測
  - イオン液体に対応（液密度のみ）
- 界面張力
  - 指定温度における液液界面張力予測
  - 混合溶液・任意の溶媒の組み合わせに対応（イオン種不可）
- 気液・液液界面の分子の自由エネルギー
  - 指定温度における気液・液液界面の分子の自由エネルギー予測
  - 混合溶媒に対応
- 反応平衡定数・反応自由エネルギー
  - 指定温度における反応平衡定数・反応自由エネルギー予測
  - 混合溶媒に対応
  - 零点振動エネルギー等を用いた補正
- イオン液体の各種プロパティ
  - モル体積、液密度、熱容量、エントロピー、融点、臨界ミセル濃度、液粘度、電気伝導度の予測に対応
- 高分子への対応
  - 自由体積理論に基づく補正
- メソスケールパラメーター
  - 分子や部分構造のFlory-Hugginsのχパラメーター予測
  - 散逸粒子動力学（DPD）のΔaパラメーター予測
  - パラメーターの温度・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（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
- 分子類似度
  - σ-プロファイル・σ-ポテンシャルの類似度計算
  - Sigma-match similarity(SMS)の計算
- 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
  - 分子の表面電荷情報の3次元表示用VRMLファイル出力
  - σ-プロファイル、σ-ポテンシャル、σ-モーメント出力

BIOVIA COSMOplex

Prediction of Self-Assembled Structures such as Micelles and Membranes

概要
Overview

BIOVIA COSMOplexは、BIOVIA COSMOthermと組み合わせて、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はCOSMO-RS法に基づき計算されるため、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。

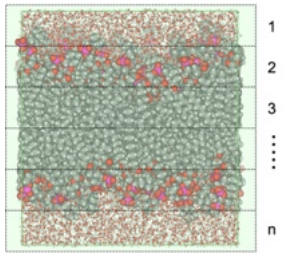


図1. 分子膜を層状（n層）の構造として考慮するイメージ

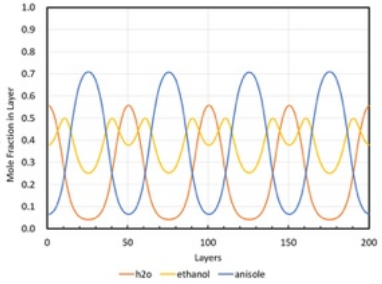


図2. 水 - エタノール - アニソール混合系のマイクロエマルション形成時の各層の化合物のモル分率

機能
Capabilities

BIOVIA COSMOplexは、以下の機能を搭載しています。

- 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、界面（気液・液液）に対応
- 自己組織化構造の各層のプロパティの算出
  - 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の予測
  - 表面張力・界面張力
  - 臨界ミセル濃度

BIOVIA COSMOperm

Prediction of Permeability Through Membranes and Skin

概要
Overview

BIOVIA COSMOpermは、BIOVIA COSMOthermと組み合わせて、低分子の分子膜や上皮の透過性を予測するためのソフトウェアです。また、低分子の分子膜やミセル内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のような低分子の膜内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、分子膜ー溶媒間の分配係数や膜透過性の予測も行えます。
また、図3のような上皮モデルを内蔵し、上皮透過性を予測することが可能です。

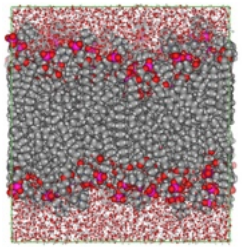


図1. ジミリストイルフォスファチジルコリン（DMPC）の分子膜構造

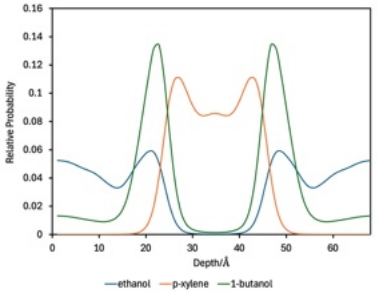


図2. DMPC分子膜内の低分子の平衡分布（横軸のDepthは図1の縦方向）

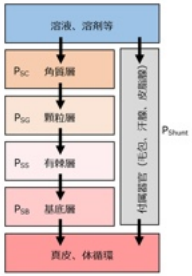


図3. 上皮モデル

機能
Capabilities

BIOVIA COSMOpermは、以下の機能を搭載しています。

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

COSMOthermX

User Interface for BIOVIA COSMOtherm and Related Tools

概要
Overview

BIOVIA COSMOthermには、使いやすいグラフィカルユーザーインターフェースCOSMOthermXが付属します。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、全てのBIOVIA COSMOlogic製品と連携することが可能で、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。

機能
Capabilities

COSMOthermXは、以下の機能を搭載しています。

- 計算設定・実行機能
  - BIOVIA COSMOthermの物性推算設定・実行制御
  - BIOVIA COSMOthermのリモートジョブ実行制御
  - 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
  - BIOVIA COSMOquickを用いた分子表面電荷作成
  - 以下のコア製品・オプション製品の計算設定・実行制御
    - BIOVIA COSMOplex
    - BIOVIA COSMOperm
    - BIOVIA COSMOconf
    - BIOVIA TURBOMOLE
- 表示機能
  - 計算結果のスプレッドシート表示
  - 蒸気圧・相平衡等の計算結果のグラフ表示
  - 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
  - 分子の表面電荷情報（COSMOファイル）の検索
  - 分子構造構築（2次元分子スケッチ、3次元モデルによる構造構築、SMILESの3次元構造への変換）
  - 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形式への保存

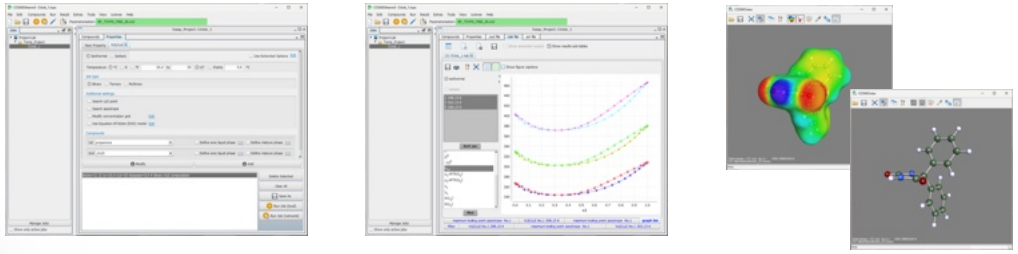


図1. COSMOthermXの表示例

BIOVIA COSMOquick

High-Speed Prediction of Thermodynamic Properties

概要
Overview

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、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分子表面電荷作成機能は、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します（図1）。作成時間は非常に短く（1分子あたり約5秒）、大量の化合物のスクリーニングに適しています。
BIOVIA COSMOquickには、ワークフロー形式のユーザー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、２次元分子スケッチ、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つのステップを進めることで、操作に迷うことなく物性推算が行えます。

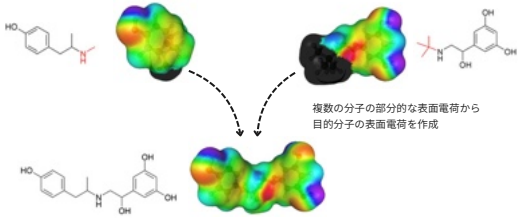


図1. BIOVIA COSMOquickによる分子表面電荷作成のイメージ

機能
Capabilities

BIOVIA COSMOquickは、以下の機能を搭載しています。

- ユーザーインターフェース
  - 化合物名、２次元分子スケッチ、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
  - 計算結果のMicrosoft Excel形式への保存
- 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

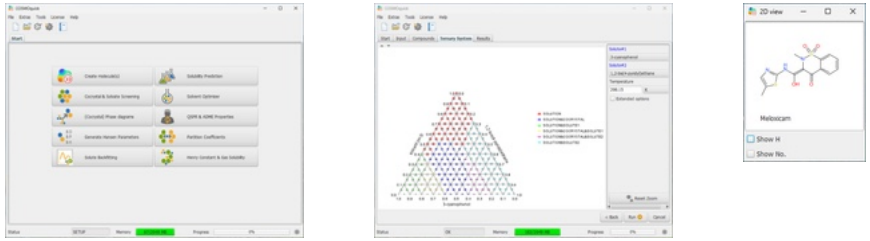


図2. BIOVIA COSMOquickのユーザーインターフェース

量子化学計算ソフトウェア
BIOVIA
TURBOMOLE
各精度な量子化学計算で分子の電子状態・各種プロパティを算出

BIOVIA TURBOMOLE

Quantum Chemical Calculations for Molecules and Periodic Systems

概要
Overview

BIOVIA TURBOMOLEは、Karlsruhe大学（現在のKarlsruhe工科大学）R. Ahlrichs教授の研究室で開発された、高速・高精度な量子化学計算ソフトウェアです。Resolution of the identity（RI）近似をはじめとする効率的な計算手法により、電子積分計算を高速化し、密度汎関数法（DFT）、MP2、結合クラスター法など、様々な電子状態計算を効率的に実行できます。
OpenMPおよびMPIによる並列計算にも対応しており、共有メモリ型マルチコア計算環境から分散メモリ型計算環境まで、計算環境に応じた高速計算が可能です。
また、時間依存密度汎関数法（TD-DFT）をはじめ、CC2、ADC(2)などの励起状態計算法にも対応しています。励起状態の構造最適化や振動計算、UV-Vis・CDスペクトルなど、分子の電子励起に関する様々な解析が可能です。
さらに、溶媒和モデルのCOSMO法にも対応しており、溶媒効果を考慮した計算や、BIOVIA COSMOthermを用いた物性推算に必要な分子表面電荷を効率的に得ることもできます。

機能
Capabilities

BIOVIA TURBOMOLEは、以下の機能を搭載しています。

- 基底状態・励起状態の構造最適化
- 基底状態・励起状態の振動計算
- 基底状態・励起状態の量子分子動力学計算
- 溶媒効果の考慮: COSMO法、Direct COSMO-RS法
- 環境・外場の設定: 点電荷、静電場、PEEC、FDE、PE、GOSTSHYP
- その他: Minimum-Energy Crossing Point（MECP）の最適化、Chain-of-States法による反応経路探索、光学スペクトルに基づくRGBカラー予測

計算手法
Methods

BIOVIA TURBOMOLEは、以下の計算手法に対応しています。

- 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、CIS(D)、CIS(D_∞)
- 結合クラスター法: CC2、SCS-CC2、SOS-CC2、CCSD、CCSD(F12)、CCSD(F12)(T)、CCSD(F12*)(T)、 PNO-CCSD、 PNO-CCSD(T)
- 密度汎関数法（DFT）
  - LDA: S-VWN、PWLDA
  - GGA: B-VWN、B-LYP、B-P、PBE、revPBE、SOGGA11、KT3
  - meta-GGA: TPSS、SCAN、r2SCAN、r4SCAN、r++SCAN、TASK、LAK、revTPSS、PKZB、Tao-Mo、M06-L、M11-L、 MN12-L、MN15-L
  - Hybrid: BH-LYP、B3-LYP、PBE0、TPSSh、revTPSSh、r2SCANh、r2SCAN0、r2SCAN50、BMK、 B97M(-V)、SOGGA11-X、M05、M06、M06-2X、MN12、MN15、PW6B95
  - Range-separated hybrid: CAM-B3LYP、HSE06, M11、revM11、MN12-SX、ωB97(X)(-V)、ωB97M-V、LRC-ωPBE、LC-ωPBE class、CAM-QTP-00、CAM-QTP-01、CAM-QTP-02
  - Double–hybrid: B2-PLYP、B2GP-PLYP、XYG3
  - Local hybrid: Lh07t-SVWN、Lh07s-SVWN、Lh12ct-SsirPW92、Lh12ct-SsifPW92、Lh14t-calPBE、LH20t、PSTS、mPSTS、LHJ14、LHJ-HF、LHJ-HFcal、TMHF、TMHF-3P、CHYF (CHYF-PBE)、CHYF-B95、scLH21ct-SVWN-m、scLH22t、scLH22ta、scLH23t-mBR、scLH23t-mBR-P
  - Range-separated local hybrid: ωLH22t、ωLH23td、ωLH23tX (X=B、E、P)、ωLH23tdX (X=B、E、P)、ωLH23ct-sir
  - Locally range-separated hybrid: ωBT21、ωBT23
  - 分散補正: DFT-D3、DFT-D4、VV10
- 励起状態計算法： TD-HF(RPA)、TD-DFT、ADC(2)、CC2、GW-BSE
- 相対論効果: スピン軌道相互作用(ECP、X2C、DKH、BSS)、スカラー相対論(ECP、X2C、DKH、BSS)
- 周期境界条件: 1〜3次元
- Post-Kohn-Sham法: RPA、GW
- その他: 減衰応答、実時間時間依存DFT、安定性解析、エネルギー分割解析

プロパティ
Properties

BIOVIA TURBOMOLEは、以下のプロパティ計算に対応しています。

- 赤外吸収スペクトル、ラマンスペクトル
- 励起エネルギー、振動子強度
- （周波数依存）分極率、超分極率、旋光度
- 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
- 核磁気共鳴（NMR）: 遮蔽定数、スピン結合定数
- 電子常磁性共鳴（EPR）: gテンソル、超微細結合定数、ZFSテンソル
- 吸収円二色性スペクトル: VCD、ECD、MCD
- 1次振電結合強度
- 非断熱結合強度（NACME）
- スピン軌道結合強度（SOCME）
- 原子電荷: Mulliken、ESP
- Mössbauerパラメーター: 核上電子密度、EFG
- Berry曲率

TmoleX
Graphical User Interface

TmoleXは、BIOVIA TURBOMOLEに付属のグラフィカルユーザー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ー表示

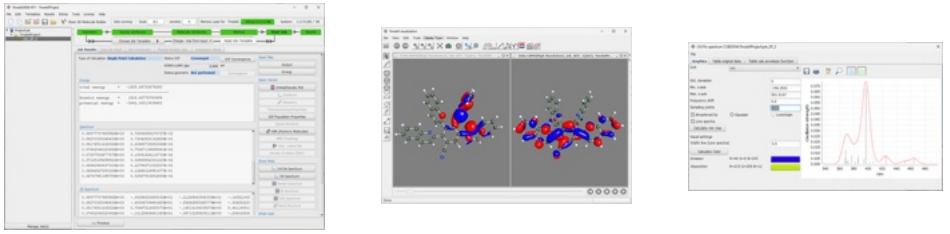


図1. TmoleXの表示例

BIOVIA COSMOconf

Automated Conformational Search for Molecules

概要
Overview

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）。配座解析の手順は、自由に変更が可能で、ユーザー独自の抽出・解析スキームを作成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の選択が容易に行えます。

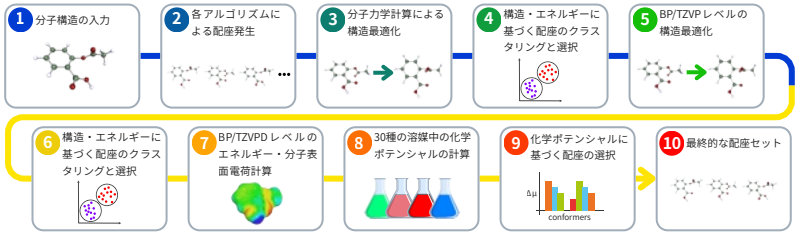


図1. BIOVIA COSMOconfの処理の流れ

機能
Capabilities

BIOVIA COSMOconfは、以下の機能を搭載しています。

- 配座解析
  - 配座発生
    - 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)]
  - 配座選択
    - 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）
- 計算管理機能
  - 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
- ユーザーインターフェース
  - 分子構造構築（3次元モデルによる構造構築）
  - 分子構造表示
  - マウス操作による配座解析設定

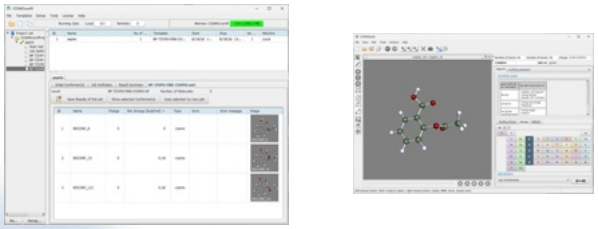


図2. BIOVIA COSMOconfのユーザーインターフェース

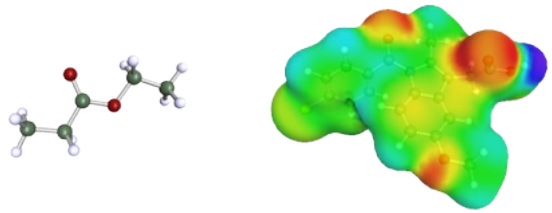
1) M. J. Vainio, M. S. Johnson, J. Chem. Inf. Model., 47, 2462-2474 (2007).
2) https://www.rdkit.org/

BIOVIA COSMObase

Database of COSMO Surface Charge Data for Chemical Compounds

概要
Overview

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情報（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、沸点、融解熱、融点、臨界定数などの情報も収録しています。



収録例. プロピオン酸エチルの分子構造（左）とインドメタシンの分子表面電荷情報（右）

収録内容
Contents

BIOVIA COSMObaseは、以下の情報を収録しています。

- 分子の表面電荷情報
- 分子の最適化構造（真空中・COSMO法条件下）
- 分子のエネルギー（真空中・COSMO法条件下）
- 実験データ（蒸気圧、沸点、融解熱、融点、臨界定数など）

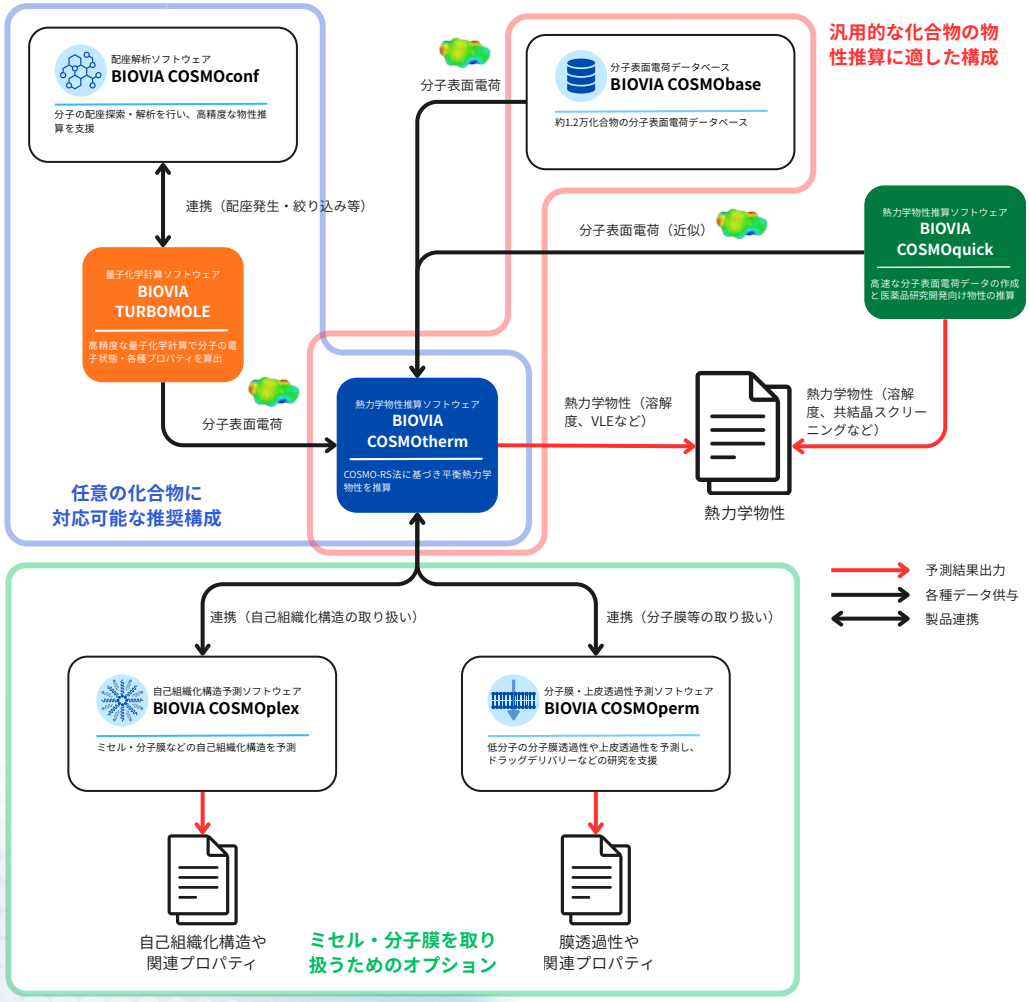
製品の機能と連携

Features and Integration of BIOVIA COSMOlogic products

BIOVIA COSMOlogic製品は、複数の製品を組み合わせることで、化合物の熱力学物性の予測や、ミセル・分子膜などの自己組織化構造の予測・評価を行うことができます。例えば、任意の化合物の物性予測を行う場合は、BIOVIA COSMOtherm、BIOVIA COSMOconf、およびBIOVIA TURBOMOLEの3製品を組み合わせた構成（下図青枠）が推奨されます。この構成により、化合物の配座の影響を考慮した高精度な物性予測が可能となります。また、実験データが存在しない未知化合物についても検討することが可能です。

一方、BIOVIA COSMOthermとBIOVIA COSMObaseを組み合わせることで、データベースに収録されている化合物については、量子化学計算を実行することなく物性予測を行うことができます（下図赤枠）。汎用的な化合物を対象としたスクリーニングや候補化合物の絞り込みを効率的に実施したい場合に適した構成です。

BIOVIA COSMOthermでは直接取り扱うことができないミセルや分子膜などの自己組織化構造を解析する場合には、オプション製品のBIOVIA COSMOplexおよびBIOVIA COSMOpermが必要となります（下図緑枠）。



サポートプラットフォーム/対応量子化学計算ソフトウェア

Supported Platforms / Quantum Chemical Calculations Compatible with BIOVIA COSMOlogic Products

サポートプラットフォーム

Supported Platforms

BIOVIA COSMOlogic製品は、以下の計算環境で使用できます。

- OS
  - Windows 11 (Pro, Enterprise, Pro for Workstations)
  - Red Hat Enterprise Linux 8.10以降
  - Red Hat Enterprise Linux 9.4以降
  - Rocky Linux 8.10以降
  - Rocky Linux 9.4以降
  - macOS 11.7以降
- CPU
  - 64bit Intel、またはAMD社製CPU

対応量子化学計算ソフトウェア

Quantum Chemical Calculations Compatible with BIOVIA COSMOlogic Products

BIOVIA COSMOlogic製品で必要な分子の表面電荷情報は、BIOVIA TURBOMOLEのほか、以下の量子化学計算ソフトウェアでも取得できます。詳細はお問い合わせください。

- BIOVIA Materials Studio DMol^3（ダッソー・システムズ株式会社）
- Molpro（ver. 2006以降、 TTI社）
- Gaussian 16（Gaussian社）
- Gaussian 09（Rev. C.01以降、Gaussian社）