

1. BIOVIA COSMOtherm 2023 の新機能、改良点、および修正点

<新機能>

- Pipeline Pilot 上で BIOVIA COSMOtherm の機能を使用するための Solvation Chemistry collection に結晶形態に関連した溶媒スクリーニングを行うワークフローを追加しました。
- 電解液系の特別なパラメータセット COSMO-RS-ELYTE を搭載しました。この新しいパラメータセットを使用することで、硬い小さなイオン（アルカリ金属の単原子イオンなど）を含むプロトン性溶媒中の電解質の物性を精度良く予測することが可能です。
- 融点 (Tmelt) や融解熱 (Hfus) を予測するための Random-Forest/ Gradient Boosting Machine Learning モジュールがコマンドライン版の BIOVIA COSMOtherm で使用できます。また、固相の情報が利用できる場合、本機能を融解自由エネルギー Gfus の温度依存性の推算に使用することが可能です。
- コマンドライン版、およびユーザーインターフェース版の BIOVIA COSMOtherm において温度依存性を考慮した輸送物性（拡散係数、熱伝導率）の推算が可能になりました。

<改良点>

- COSMOthermX に輸送物性推算のための新しいプロパティ計算パネル Thermal Conductivity、Diffusion Coefficient を追加しました。また、粘度計算用の Viscosity パネルを改良し、COSMOtherm 2019 で導入された粘度推算の QSPR モデルの温度依存性パラメーターに対応しました。加えて、COSMOthermX の Compound Properties や COSMObaseEditor から、純物質の粘度の実測値を入力・保存できるようになりました。入力された実測値は熱伝導率の計算に使用します。
- 密度推算のために DIPPR 105 式などの温度依存密度 QSPR パラメーターを COSMOthermX で使用できるようになりました。
- COSMOthermX の Density パネルを改良し、混合溶液の密度予測に対応しました。
- COSMOtherm のコマンドライン版が、すべての物性推算において体積分率の組成の入出力に対応しました。.tab ファイルの体積分率の出力は、キーワード pr_phi によって行います。体積分率は指定された温度における化合物のモル体積から算出されます。密度の実測値を利用できる場合は、これを利用します。利用できない場合は、COSMOtherm の密度予測機能を用いてモル体積を計算します。
- COSMOthermX に 3 成分 LLE 相図描画機能を再度搭載しました。
- COSMOmic と COSMOperm の 3D Viewer において、ミセルや膜中心からの距離に応じたすべての配座の配向を表示できるようになりました。以前のバージョンでは、1 つ

目の配座の表示に限られていました。

- 臨界点までの液相の圧縮性や実在気体の影響を考慮するための状態方程式 (EOS) 機能を COSMOthermX において、次の物性推算に使用できるようになりました：液密度 (Density)、蒸気圧 (Pvap)、ヘンリー定数と溶媒和自由エネルギー (Henry/Gsolv)、2 成分気液・液液・固液相平衡 (BINARY/LLE/SLE)
- グラフィカルユーザーインターフェース COSMOthermX、COSMOquick、COSMOconfX、および TmoleX で使用する Java Look & Feel を Synthetica バージョン V3 にアップデートしました。
- .mom や .moma ファイルに出力される σ -moment や atomic σ -moment の値を LONGTAB オプションによって long number フォーマットに変更できるようになりました。
- CTAB WCONF キーワード使用時の出力テーブルに気相・液相の Grimme D3 の分散エネルギーのカラムが追加されるようになりました。ただし、COSMO ファイルや Energy ファイルに当該エネルギーが含まれる場合、あるいは、BP-TZVPD-FINE パラメーターが使用された場合に限られます。
- COSMOtherm コマンドライン版の共結晶スクリーニング機能を改良しました。COCRYSTAL と IGNORE_CHARGE キーワードを組み合わせることで、イオン種の共結晶スクリーニングが行えるようになりました。なお、COCRYSTAL キーワードはイオン種を対象にして計算が行われた場合、WARNING メッセージを出力する仕様になっています。
- COSMOthermX の Mixture パネルに“Add All Pure”ボタンを追加しました。このボタンにより、1 回のボタン操作で Compounds タブのすべての化合物を純物質とした計算設定が行えます。
- COSMOthermX の 2 成分固液平衡計算 (BINARY SLE) において、単純共晶点の自動補間最適化が行えるようになりました。また、以前は結果の表示が COSMOthermX のグラフウインドウ上に限られていましたが、Excel ファイルへの出力も可能になりました。
- COSMOthermX の New Molecule ワークフローにおいて、計算途中のジョブから COSMO ファイル等のデータの抽出を行おうとした場合、その操作が行えないことを示すメッセージ“Please note that only completed jobs can be added to the database or compound list”を出力するようになりました。
- MCOS ファイルの conformer weight オプションを external quantum chemical energy オプションの conformer weight と統合しました。
- Pipeline Pilot の Solvation Chemistry collection の COSMOtherm mixture core コンポーネントの利便性が向上しました。Property Options の相を定義するテキスト形式の \$ PHASE 入力に代えてパラメーター設定が使用できるようになりました。また、

COSMOtherm のスクリーニングジョブの入力を簡略化し、相の入力キーワードを自動設定するようになりました。

- Pipeline Pilot の Morphology Solvent Screening ワークフローの一部として、与えられた結晶表面と溶媒間の crystal surface activity coefficient を COSMOtherm で計算するプロトコルを Pipeline Pilot Solvation Chemistry collection に追加しました。
- Pipeline Pilot の Morphology Solvent Screening ワークフローの一部として、与えられた結晶構造の結晶形態や結晶表面の COSMO ファイルを計算する 2 つのプロトコルを Pipeline Pilot Solvation Chemistry collection に追加しました。また、Pipeline Pilot Materials Studio collection から DMol3 のプロトコルを追加しました。
- Pipeline Pilot の Morphology Solvent Screening ワークフローの一部として、階層的クラスタリング法を用いて与えられた溶媒の crystal surface activity coefficient を解析するプロトコルを Pipeline Pilot Solvation Chemistry collection に追加しました。

<修正点>

- COSMOthermX の Liquid Extraction パネルの Load List ボタンが本パネル用に設計されておらず、動作しないため削除しました。
- 純物質の蒸気圧データとして 3 点の蒸気圧-温度データが kPa 単位で与えられたとき (VPEXP_KPA キーワード)、正常に動作しない不具合を修正しました。
- BP_TZVPD_FINE_19.ctd 以降のパラメーターファイルを用いて計算したとき、WCONF キーワードによる配座の分圧 $\log_{10}(p)$ の出力に稀に誤りがある不具合を修正しました。
- REACTION オプションの計算結果の出力の不整合を修正しました。化合物の解析的、または数値的部分エンタルピーが内部で使われていましたが、.tab ファイルの出力ではエンタルピーの期待値 (部分エンタルピーの近似値に相当) を出力していました。これを修正し、現在は正確な部分エンタルピーが内部、および出力に使用されます。さらに .tab ファイルのヘッダーも調整しました。
- 球状ミセルの PDB ファイルの可視化を修正し、化合物がシミュレーションボックスから出た状態で表示されることがなくなりました。
- COSMOtherm の物性推算において mixture ファイルを用いて無限希釈プロパティ (特にヘンリー定数や溶媒和自由エネルギー) を計算すると、無限希釈の定義が不正確になり、理解しづらい結果となる場合があります。このような計算結果を誤って解釈することを避けるため、mixture ファイルを使用した無限希釈プロパティの計算ができないようになりました。
- COSMOtherm コマンドライン版で化合物のバッチリストが指定され、それが見つからないとき、COSMOtherm がエラーメッセージなく終了する不具合を修正しました。現在は正しくエラー処理を行い、適切な警告メッセージを出力します。

- COSMOtherm コマンドライン版で WMOL オプションを用いて得られる sdf/mol フォーマットの分子構造ファイルが、稀に COSMOview で読み込めない形式になる不具合を修正しました。
- COSMOview で分子表示を拡大したとき、操作できないグレーの領域が現れる不具合を修正しました。
- COSMOmic 計算において複数の rmic ファイルが使用されると、mic ファイルの処理を正常に行えない不具合を修正しました。
- COSMOtherm の一つの入力ファイルに複数の COSMOmic のジョブが設定され、それが実行されたとき、出力の xml ファイルに最後の COSMOmic ジョブの結果のみを出力する不具合を修正しました。現在はすべてのジョブの結果を xml ファイルに出力します。
- mixture ファイルが使用された場合、COSMOtherm 内で推算した気相のエネルギーを使用していたため、通常の混合物として計算した場合と結果に違いが生まれました。これを修正し、同じ基準で気相のエネルギーを使用するようになり、mixture ファイルを用いた場合も同じ結果が得られるようになりました。
- COSMOtherm の結合認識の影響で、稀に計算速度が著しく遅くなる不具合を修正しました。この現象は、K や Cs のような原子イオンを含む分子クラスターなど、一部結合がない構造を使用した場合に起こります。
- COSMOtherm の Compounds パネルにおいて Compound Properties を開いて蒸気圧ペアの単位を変更し、Apply ボタンを押し、再度 Compound Properties を開くと変更が保持されない不具合を修正しました。現在は、Apply ボタンを押すことで単位や数値の変更が認識され、再度 Compound Properties を開いてもその状態が保持されます。
- Windows のディスプレイ設定でテキストサイズの拡大（テキスト等の拡大が 150%以上）が設定されているとき、COSMOthermX の MCOS ファイルエディター COSMOweight の表示に不具合がありました。不具合としては、原子を選択すると、COSMOweight 内の原子が消えます。本不具合を修正し、任意の拡大率・画像解像度で正常に原子選択が行えます。
- COSMOthermX の Compounds パネルにおいて、Compound Properties を開いて臨界定数の実測値の変更を行っても、COSMOtherm の物性推算に反映されない不具合を修正しました。
- COSMOthermX の Job Manager でジョブのコピーを行うと、コピー先のジョブ名が一定のルールで命名されるため、同じ保存先（プロジェクト）に複数のコピーを行うとジョブの区別ができない問題が生じていました。このため、コピー先のジョブ名に数字を付与する仕様に変更しました。
- Pure COSMOtherm Property コンポーネントで水などの不活性化化合物を認識できないことにより、不活性化化合物の引火点が有限の温度になる不具合を修正しました。現在、

水や他の不活性化合物を正しく認識し、それらの引火点は NA と出力されます。

- COSMOthermX の Interfacial Tension (IFT) パネルで出力するエラーメッセージを修正しました。現在は IFT 計算でイオン種が取り扱えないことをエラーメッセージとして出力します。
- 複数の温度、あるいは圧力条件で行った 2 成分、3 成分、および多成分の相平衡計算の結果から活量係数式 (NRTL、UNIQUAC、WILSON 式) パラメーターを出力する機能を改善しました。温度依存活量係数式パラメーターと温度非依存のパラメーターの出力を混同しないように、大文字で指定された場合、前者を出力し、小文字の場合、後者のパラメーターを出力するようになりました。
- COSMOthermX において、UQMG キーワードを使用すべきところ、稀に廃止されたキーワード UQME と入力ファイルに書き出す不具合を修正しました。
- Windows のシステムフォルダに COSMObase データベースが保存されているとき、システムフォルダへの読み書き権限がない場合は、そのようなデータベースを COSMOtherm に登録することは出来ません。このようなとき、COSMOthermX の Extras メニュー→Preferences→Compounds ダイアログでデータベースの追加は行えません。この制限について、COSMOthermX User Guide や COSMObase の Product Release Document の Installation Instructions セクションに記載しました。
- 気相エネルギーが energy/geometry ファイルなしで atomic weight (または MCOS ファイル)、および MCSE オプションを組み合わせで使用された場合、エネルギー入力を警告などのメッセージなしで無視する仕様となっていました。今回からエネルギー入力を COSMOtherm が使用しない場合 (BP-TZVPD-FINE レベルのパラメーター使用時)、警告を出力します。警告がない場合は、入力されたエネルギーを読み込み、利用します。

2. BIOVIA COSMOplex&perm 2023 の新機能、改良点、および修正点

<新機能>

- SMILES 表記で COSMObase 内の化合物検索が行えるようになりました。
- ミセルや膜中心からの距離に応じたすべての配座の配向を表示できるようになりました。
- COSMOplex で得られた系の可視化が行えるようになりました。

<改良点>

- COSMOmic と COSMOperm の 3D Viewer において、ミセルや膜中心からの距離に応

じたすべての配座の配向を表示できるようになりました。以前のバージョンでは、1 つ目の配座の表示に限られていました。

- COSMOmic Viewer をスタンドアロンツールとして使用できるようになりました。終了した COSMOplex ジョブの Results パネルから起動できます。
- 適切な情報が含まれる既存の MIC ファイルから COSMOplex ジョブを開始する場合、物性に関連したシミュレーションボックスの指定が不要になりました。
- COSMOplex や COSMOperm の計算結果のサマリ表示機能がグラフィカルユーザーインターフェースに搭載され、簡単に重要な計算結果を確認することができるようになりました。以前のような計算結果の詳細は Details ボタンを選択することで確認できます。
- OS に依存しない、統一的なユーザーインターフェース表示となるように改良しました。
- より正確な Gibbs 分割面が得られるように化合物の界面の活量を出力するようになりました。
- COSMOplex や COSMOperm のコマンドライン操作のオプションで SMILES 表記による COSMObase 内の化合物検索が行えるようになりました。本機能は Linux を含むすべてのサポートプラットフォームで利用できます（なお、本機能は COSMOthermX と同様に non-isomeric SMILES を使用します）。
- 新しいジョブ作成時や過去の計算結果からのリスタート時にシミュレーションボックスサイズに不整合がある場合、計算結果のファイルやユーザーインターフェースに警告を表示するようになりました。
- COSMOplex の計算結果のダイアログ表示を、相対的なレイヤー（層）番号ではなく、オングストローム単位で出力するようになりました。
- ユーザーインターフェースやコマンドライン版において、ボックスプロパティに周期境界条件の設定が含まれるようになりました。
- xml ファイルに出力される各レイヤーの体積分率・質量分率が減衰されていないため、COSMOplex の他の出力と一致していませんでした。これを修正し、モル分率から体積分率・質量分率を算出するようになり、一貫した結果が得られるようになりました。
- 新機能：COSMOplex で得られた計算結果を可視化できるようになりました。
- 表面エネルギーとバルクエネルギーの差に関連した効果を COSMO-RS 法に取り入れることにより、気液界面の取り扱いを改善しました。
- COSMOplex のオプション“scientific”を指定することにより、distribution profile の出力値（モル分率、静電ポテンシャルなど）の桁数を増やすことができるようになりました。
- イオン化状態や化合物リストの使い方を説明する COSMOperm のサンプルプロトコルを追加しました。

<修正点>

- COSMOplex の TZVPD-FINE レベルの計算に安定性の高い積分法を導入し、NaN (not a number) やエラーの発生を大幅に減らしました。
- イオン種が複数の配座をもつとき、mic ファイルの書き出し時の丸め誤差により、真空相の静電ポテンシャルに不整合が生じることがありました。この不具合を修正しました。
- 相分離が生じない場合や相の境界がシミュレーションボックスの境界に非常に近いときの圧力ベースライン補正を改善しました。また、圧力極小点の圧力の局所積分の方法を改善し、界面張力計算において全体の積分値により近い値が得られるようになりました。
- 自己無撞着静電ポテンシャル計算において、単位変換に関連した 4π の内部ファクターが欠けていましたが、このファクターを追加し、多くの計算タイプにおいて計算精度が向上しました。なお、イオン系の場合、これにより収束に問題が生じる可能性があります。そのため、新しいオプション“epot-reduced”を追加しました。このオプションでは、従来の式を使用し、近似した静電ポテンシャルを出力します。
- COSMOtherm の New Molecule Wizard 機能で得られる新しい形式の energy ファイルを COSMOperm で読み込めない不具合を修正しました。
- single-cycle の COSMOplex 計算をリスタートする場合、過去の計算の最終 distribution profile を使用しない不具合を修正しました。
- 原子位置指定に間違いがある場合、COSMOtherm の alkyl extension 機能がエラーメッセージを出力し、すぐに停止するようになりました。

3. BIOVIA COSMOconf 2023 の改良点、および修正点

<改良点>

- グラフィカルユーザーインターフェース COSMOthermX、COSMOquick、COSMOconfX、および TmoleX の Java Look & Feel を Synthetica バージョン V3 にアップデートしました。

<修正点>

- COSMOview で分子表示を拡大したとき、操作できないグレーの領域が現れる不具合を修正しました。
- Linux 上で少ない数の分子の COSMOconf ジョブを行ったとき、balloon による配座発生が正常に終了しない不具合を修正しました。

- COSMOconfX の Job Manager でジョブのコピーを行うと、コピー先のジョブ名が一定のルールで命名されるため、同じ保存先（プロジェクト）に複数のコピーを行うとジョブの区別ができない問題が生じていました。このため、コピー先のジョブ名に数字を付与する仕様に変更しました。

4. BIOVIA COSMOquick 2023 の改良点

<改良点>

- 一時フォルダ内のファイルを計算前に削除する仕様に変更しました。
- グラフィカルユーザーインターフェース COSMOthermX、COSMOquick、COSMOconfX、および TmoleX で使用する Java Look & Feel を Synthetica バージョン V3 にアップデートしました。
- 共結晶スクリーニングを含む、いくつかの項目のマニュアル中の記載を更新しました。
- BIOVIA COSMOquick 2022 リリース時に導入した SQL ベースの分子データベースに関連する不具合を修正し、利便性が向上しました。

5. BIOVIA COSMObase 2023 の新機能、改良点、および修正点

<新機能>

- 13,000 種以上の化合物の分子表面電荷情報を収めたデータベースを以下の4つのレベルで提供します。

➤ BP-TZVPD-FINE	最高精度
➤ BP-TZVP-COSMO	classic COSMO-RS レベル
➤ DMOL3_PBE	classic COSMO-RS レベル
➤ BP-SVP-AM1	スクリーニングレベル

<改良点>

- COSMOthermX に輸送物性のための新しいプロパティ計算パネル Thermal Conductivity、Diffusion Coefficient を追加しました。また、粘度計算用の Viscosity パネルが改良され、COSMOtherm 2019 で導入された粘度推算の QSPR モデルの温度依存性パラメーターに対応しました。加えて、純物質の粘度の実測値を COSMOthermX の Compound Properties や COSMObaseEditor から入力・保存できるようになりました。

た。入力された実測値は熱伝導率の計算に使用します。

- 化合物 glycerol の配座を検証し、更新しました。
- COSMObase の BP-TZVP、および BP-TZVPD-FINE レベルに収録の化学種 tert-butylamine_cation において、2つ同じ配座が登録されていましたが、重複を削除しました。

<修正点>

- COSMObase に収録された morphine や codeine の化学構造の誤りを修正しました。

6. BIOVIA TURBOMOLE 2023 の新機能、改良点、および修正点

<新機能>

- EPR g-テンソル： spin-orbit 摂動論や自己無撞着 spin-orbit X2C 法を用いて g-テンソルを計算できるようになりました。scalar、(modified) screened nuclear spin-orbit 近似、および local 近似 (DLU) において有限原子核モデルを使用できます。これらの計算では、local ハイブリッド汎関数までのすべての汎関数を利用できます。加えて、Hartree-Fock 法、LSDA、GGA、meta-GGA、(range-separated) ハイブリッド汎関数、および COSMO 法を使用する場合は gauge-including atomic orbital (GIAO)が利用できます。
- スピン軌道 2 成分 X2C NMR スピンスピン結合定数を計算できるようになりました。scalar、vector potential、(modified) screened nuclear spin-orbit 近似、および local 近似 (DLU) において有限原子核モデルを使用できます。local ハイブリッド汎関数までのすべての汎関数に対応し、COSMO 法も使用できます。
- Bethe-Salpeter 式 (BSE) やグリーン関数 (GW) 法を用いて NMR スピンスピン結合定数を計算できるようになりました。
- 超微細結合定数を非相対論、半相対論 (scalar)、スピン軌道摂動法、および自己無撞着スピン軌道 X2C 法で計算できるようになりました。scalar、vector potential、(modified) screened nuclear spin-orbit 近似、および local 近似 (DLU) において有限原子核モデルを使用できます。local ハイブリッド汎関数までのすべての汎関数に対応し、COSMO 法も使用できます。
- 開殻系の常磁性 NMR 遮蔽定数を非相対論、半相対論 (scalar)、スピン軌道摂動法 (X2C、または DLU-X2C) で計算できるようになりました。
- 磁場内での LDA と GGA の計算に対応しました。また TD-DFT による励起状態計算にも対応しました。
- ricc2 モジュールに内殻励起を計算するための core valence separation (CVS) 近似を搭

載しました。CC2、および ADC(2)レベルで計算が行えます。

- ricc2 モジュールに complex polarization propagator (CPP) アプローチが搭載され、対角化を行わず、振動数指定で CC2 レベルの 1 光子吸収や ECD スペクトルの計算が行えるようになりました。
- GKS-spRPA 汎関数を用いて 1 粒子エネルギー（イオン化ポテンシャルや電子親和力）を計算できるようになりました。analytic continuation オプションを利用することで、1 粒子エネルギーの計算を $O(N^4)$ の計算コストで行うことができます。
- TDDFT+TB のような Tight-Binding TDDFT 計算に類似した高速な TDDFT-as 法を使用するための新しいキーワードを追加しました。
- 第一原理計算から導出された新しい local ハイブリッド汎関数 TMHF や TMHF-3P を追加しました。
- NMR 遮蔽定数、常磁性 NMR の軌道寄与、および EPR g-テンソルの計算において、電流密度応答を考慮できるようになりました。この計算では、meta-GGA や local ハイブリッド汎関数を使用します。
- スピン軌道相互作用を考慮した電流密度汎関数法を用いて、エネルギー、エネルギー 1 次微分、励起エネルギー、NMR 物性、および EPR 物性を計算できるようになりました。
- エネルギーに基づくプラズモン性指数を計算できるようになりました。
- VCD/IR 領域の（減衰）分極率の計算が可能になりました。
- range-separated local ハイブリッド汎関数を用いて、エネルギー、基底状態のエネルギー 1 次微分、および TDDFT 励起エネルギーを計算できるようになりました。また、ユーザー指定の汎関数にも対応します。
- contour deformation (CD) GW 近似に frequency sampling strategy を導入し、低く縮退した準粒子エネルギーを容易に計算できるようになりました。

<改良点>

- escf や egrad モジュールで Multipole-accelerated resolution of the identity (MARI-J) を使用できるようになりました。
- ricc2 モジュールに roothome オプションを追加し、エネルギーの高い励起状態を収束させるための初期ベクトルを入力できるようになりました。
- 2 成分 local ハイブリッド汎関数計算を改良しました：キャリブレーション関数への対応、libXC インターフェースの導入、local mixing 関数への対応、メモリ制御の修正、および計算効率の向上
- proper や moloch モジュールにおいて、ビリアル定理を含むすべての期待値計算で相対論描像変化補正 (relativistic picture-change correction) を使用できるようになりました。

- 核電場勾配や核四極子相互作用テンソルを相対論ハミルトニアン (DKH、BSS、X2C、DLU) で計算できるようになりました。
- 磁場印加と電流依存 meta-GGA 汎関数の組み合わせが使用できるようになりました (基底状態、励起状態ともに利用可能)。
- 以下の基底関数を追加しました
 - プロパティ最適化基底 (def2-SVPD、def2-TZVP(P)D、def2-QZVP(P)D) にランタノイド原子を追加
 - Jensen の pcH、pcX、ccJ
 - IGLO-II、IGLO-III
 - NMR スピンスピンカップリングを計算するための非縮約の x2c-タイプ基底
 - even-tempered 参照基底
- libXC V5.2.3 への更新に伴い以下の機能が利用できるようになりました。
 - r2SCAN ハイブリッド汎関数 (r2SCANh、r2SCAN0、r2SCAN50) とその分散力補正
 - ユーザー定義の汎関数を利用するための様々な機能
 - 任意の汎関数の組み合わせ
 - 汎関数の番号や名称による指定
- インターフェースに関する改良：
 - GIMIC を用いた環電流計算のインターフェースの改良
 - escf モジュールの分極率計算インターフェースの改良
- 計算速度に関する改善：
 - seminumerical アルゴリズムにおいて実行時コード生成を導入し、計算速度を大幅に向上
 - Linux 版の 2 次微分 DFT 物性計算において NVIDIA GPU をサポート
- グラフィカルユーザーインターフェース COSMOthermX、COSMOquick、COSMOconfX、および TmoleX で使用する Java Look & Feel を Synthetica バージョン V3 にアップデートしました。
- TmoleX: Hartree-Fock 法や DFT の基本的な自己無撞着場法のソルバーとして Augmented Roothaan-Hall (ARH) アルゴリズムを使用できるようになりました。複雑な電子状態でデフォルト設定で収束しない場合に有効です。
- TmoleX: バッチジョブの出力結果のテーブル表示に組成式を出力するようになりました。
- TmoleX: 遷移状態構造の最適化において、ヘッセ行列データを外部ファイルや他のジョブから入力ファイルに手動で追加できるようになりました。これにより計算時間の掛かる振動計算の再実行を回避することができます。
- TmoleX: 3D molecular builder に xTB を用いた構造最適化の並列計算機能を追加しま

した。

- TmoleX: Gradients 表示で原子を選択できるようになり、原子ラベルや原子間距離などを表示できるようになりました。
- TmoleX: TmoleX の新機能について TmoleX のドキュメントに記載しました。

<修正点>

- T や Th 対称性の場合、TmoleX の Molecular Attributes パネルの電子数の表示の不具合を修正しました。なお、これは表示上の問題で、TURBOMOLE の計算には影響ありません。
- COSMOview で分子表示を拡大したとき、操作できないグレーの領域が現れる不具合を修正しました。
- TmoleX: リチウム原子を含む計算において def2-QZVP や dhf-QZVP 基底の読み込みに失敗する不具合を修正しました。
- 特定の環境変数が使用されたとき、BIOVIA TURBOMOLE による 3 次元電子密度分布ファイル (.plt、.plv ファイル) 作成に失敗する不具合を修正しました。
- TmoleX の Job Manager でジョブのコピーを行うと、コピー先のジョブ名が一定のルールで命名されるため、同じ保存先 (プロジェクト) に複数のコピーを行うとジョブの区別ができない問題が生じていました。このため、コピー先のジョブ名に数字を付与する仕様に変更しました。