

## 1. BIOVIA COSMOtherm 2024 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 に搭載されている、結晶多形に関連した溶媒スクリーニングを行うワークフローを改良しました。
- 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、およびユーザーインターフェース版の BIOVIA COSMOtherm で利用できるようになりました。本機能は BIOVIA COSMOtherm のすべて計算レベルで使用でき、融解自由エネルギー Gfus の温度依存性を考慮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、粘度）の推算が可能になりました。

### <改良点>

- マルチコア計算が BIOVIA COSMOplex、および BIOVIA COSMOperm 計算で可能になり、計算速度が大幅に向上しました。
- 異なる表示スケールの複数のディスプレイを使用したときに生じる BIOVIA COSMOlogic 製品のグラフィカルユーザーインターフェースの表示の不具合（例：ダイアログサイズの問題、スクロールバーが表示されないなど）を解消しました。
- グラフィカルユーザーインターフェースのデフォルトフォントやフォントサイズを変更し、ディスプレイの表示スケールが使用された際の見やすさを改善しました。
- BIOVIA COSMOtherm では、特殊文字「#」や「@」を含むファイル名が使用できませんでしたが、ダブルクォーテーション内に記述することで使用できるようになりました。例：f="nam#\_c0.cosmo"や f="n@me\_c0.cosmo"など
- 外部モニタを使用したとき、ダイアログが別のスクリーンに表示される不具合を解消しました。
- BIOVIA COSMOtherm の 2 成分定圧 LLE 計算において、LLE 計算結果の表のヘッダーに定圧時の圧力の代わりに LLE のときの温度が出力するように変更しました。これにより、3 成分や多成分定圧 LLE 計算の表形式の出力と形式を統一しました。
- 以下の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：

1. jogl library (2.4.0 から 2.5.0-rc に更新)
2. CDK library (2.7.1 から 2.8.4 に更新)
3. Synthetica (3.4.1 から 3.5.0 に更新)
4. gson (2.9.0 から 2.10.1.6 に更新)
5. MariadbClient (2.7.2 から 3.1.4 に更新)
6. SQLite library (3.36.0.3 から 3.42.0.0.8 に更新)
7. POI library (5.2.2 から 5.2.3 に更新)

<修正点>

- COSMOthermX において、Build compound list のメッセージダイアログを閉じると、COSMOthermX のメインウィンドウが異常終了する不具合や、COSMObaseEditor でデータベースの内容を CDB ファイルにエクスポートする際に表示される進捗を示すダイアログを閉じると、COSMObaseEditor が異常終了する不具合を修正しました。
- COSMOthermX の New Compound 機能において、Add Compounds to Database ボタンを連続で使用すると、正常にデータベースに化合物を追加できない不具合を解消しました。これまでは不具合が生じた場合、COSMOthermX の再起動が必要でしたが、その必要がなくなりました。
- 特定の条件下（古いバージョンの COSMOthermX がインストールされていないなど）で COSMOthermX の New Compound 機能が正常に機能しない不具合を解消しました。最新版では、すべてのインストール状況において、New Compound 機能が正常動作します。
- いくつかの条件において、COSMOtherm 2023 の Mac OS X 用インストーラーが動作しない不具合を解消しました。
- 稀に 3 成分 LLE 計算の表形式出力をソートすると、x' や x'' の値を混同する不具合を解消しました。この現象は、最後に出力された LLE 組成において、第 1 成分の組成が 0 となる場合のみ起こる現象です。
- COSMOtherm の溶解度スクリーニング機能において、参照溶解度が質量分率で与えられ (ref\_sol\_c や ref\_sol\_gg キーワードで指定)、その値が 0 以下や 1 以上の不適切な値のとき、不明瞭なエラーメッセージを出力する不具合を解消しました。

## 2. BIOVIA COSMOplex&perm 2024 の新機能、改良点、および修正点

<新機能>

- BIOVIA COSMOplex において、複数 CPU コアを使用した計算が実行できるようになりました。並列計算はバッチジョブにおいても行えます。バッチジョブの場合、計算効率上、各ジョブに少ない CPU コア数を割り当て、より多くのジョブを同時実行することが推奨されます。

<改良点>

- マルチコア計算が BIOVIA COSMOplex、および BIOVIA COSMOperm 計算で可能になり、計算速度が大幅に向上しました。
- 系の初期状態にシミュレーションの物理的性質が含まれておらず、最終結果における初期状態の寄与を過小評価していました。新しく収束条件を追加し、これを改善しました。
- デフォルトの COSMOplex の出力では、最終の減衰状態のみを出力しましたが、新しいオプションを追加し、収束直後の最終の減衰していない状態も出力できるようになりました。
- バッチジョブのための並列ジョブオプションを改良しました。2つの引数の指定が可能になり、1つ目の引数で同時実行ジョブ数を指定し、2つ目の引数で各ジョブのコア数を指定できます。
- ドキュメントを更新し、機能変更の内容を反映しました。

### 3. BIOVIA COSMOconf 2024 の改良点、および修正点

<改良点>

- 異なる表示スケールの複数のディスプレイを使用したときに生じる BIOVIA COSMOlogic 製品のグラフィカルユーザーインターフェースの表示の不具合（例：ダイアログサイズの問題、スクロールバーが表示されないなど）を解消しました。
- グラフィカルユーザーインターフェースのデフォルトフォントやフォントサイズを変更し、ディスプレイの表示スケールが使用された際の見やすさを改善しました。
- 外部モニターを使用したとき、ダイアログが別のスクリーンに表示される不具合を解消しました。
- 以下のサードパーティ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：
  1. jogl library (2.4.0 から 2.5.0-rc に更新)
  2. CDK library (2.7.1 から 2.8.4 に更新)
  3. Synthetica (3.4.1 から 3.5.0 に更新)

4. gson (2.9.0 から 2.10.1.6 に更新)
5. MariadbClient (2.7.2 から 3.1.4 に更新)
6. SQLite library (3.36.0.3 から 3.42.0.0.8 に更新)
7. POI library (5.2.2 から 5.2.3 に更新)

<修正点>

- ライセンスファイルに BIOVIA COSMObase のライセンス情報が含まれない場合、BIOVIA COSMOconf と BIOVIA DMol3 との組み合わせた使用において、CONFSELECT ステップが正常動作しない不具合を解消しました。最新版では BIOVIA COSMObase のライセンス情報の有無にかかわらず、BIOVIA COSMOconf と BIOVIA DMol3 を組み合わせて使用できます。

#### 4. BIOVIA COSMOquick 2024 の改良点

<改良点>

- 異なる表示スケールの複数のディスプレイを使用したときに生じる BIOVIA COSMOlogic 製品のグラフィカルユーザーインターフェースの表示の不具合（例：ダイアログサイズの問題、スクロールバーが表示されないなど）を解消しました。
- グラフィカルユーザーインターフェースのデフォルトフォントやフォントサイズを変更し、ディスプレイの表示スケールが使用された際の見やすさを改善しました。
- BIOVIA COSMOquick ユーザーガイドに Java コマンドラインの例を追加しました。また、COSMOfrag リファレンスマニュアルにエラーコード 61 に関する記述を追加しました。
- 外部モニターを使用したとき、ダイアログが別のスクリーンに表示される不具合を解消しました。
- 以下のサードパーティ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：
  1. jogl library (2.4.0 から 2.5.0-rc に更新)
  2. CDK library (2.7.1 から 2.8.4 に更新)
  3. Synthetica (3.4.1 から 3.5.0 に更新)
  4. gson (2.9.0 から 2.10.1.6 に更新)
  5. MariadbClient (2.7.2 から 3.1.4 に更新)
  6. SQLite library (3.36.0.3 から 3.42.0.0.8 に更新)
  7. POI library (5.2.2 から 5.2.3 に更新)

- BIOVIA COSMOtherm と同様に BIOVIA COSMOquick で使用できなかった、特殊文字「#」や「@」を含むファイル名が使用できるようになりました。

<修正点>

- コマンドラインで BIOVIA COSMOquick を実行したとき、コマンドが実行されたディレクトリの親ディレクトリに必要なライブラリがあると想定しているため、任意のディレクトリでコマンドを実行すると実行エラーが生じました。最新版ではコマンドラインオプション-Djava.library.path で指定されたパス内のライブラリを検索するように修正しました。加えて、コマンドライン実行に必要な設定に関する説明を BIOVIA COSMOquick ユーザーガイドに記載しました。
- グラフィカルユーザーインターフェースの計算ログの領域を拡大したとき、ボタン類が正しく表示されない不具合を解消しました。
- QuickDB2022.db ファイルが Mac OS X 上で使用できないこと、またそれについてドキュメントに記載がありませんでした。最新版では、ドキュメントに解決方法を記載しました。

5. BIOVIA COSMObase 2024 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

6. BIOVIA TURBOMOLE 2024 の新機能、改良点、および修正点

<新機能>

- 周期境界条件における相対論効果を考慮した2成分DFT (モジュール riper) : エネルギー、エネルギー勾配、ストレステンソルの計算が行えます。
- 原子の電子密度の (non-collinear) 重ね合わせによる2成分 SCF 計算のための初期軌

## 道生成

- TDDFT-ris: ハイブリッド TDDFT 計算の最小補助基底を使用した数百倍の高速化
- Frozen-density embedding(FDE)の機能拡張：
  - dscf や ridft モジュール (OpenMP や MPI 並列版を含む) における supermolecular ステップを使用しない高速な FDE 計算
  - パウリ反発を考慮するための FDE(ECP)計算
  - ricc2 や pnoocsd モジュールにおける FDE 計算
  - 任意の数のサブシステムに対応
- 高い状態密度領域のスペクトル計算のための CC2 減衰応答理論 (Complex Polarization Propagator)
  - UV-vis や ECD スペクトルのための減衰線形応答理論
  - magnetic circular dichroism (MCD)や他の誘導スペクトルのための減衰二次応答理論
  - 縮退した励起状態をもつ分子の MCD スペクトルのための CC2 Faraday A 項の計算
- EPR における電場勾配 (EFG) の核四重極相互作用 (NQI) への自動変換
- EPR g-テンソル、HFC、EFG、および NQI のオイラー変換
- GIAO の結果を補完する共通のゲージ原点を基準とした 1 成分 EPR g-テンソル
- 有限サイズ原子核荷電モデルや modified screened nuclear spin-orbit 近似を含む X2C/DLU-X2C ハミルトニアンを用いた 2 成分 NMR シフト
- 有限サイズ原子核荷電モデルを含む半相対論 X2C/DLU-X2C ハミルトニアンを用いた NMR カップリング定数
- ゼロ磁場分裂テンソルの計算。有効パウリ演算子、screened nuclear spin-orbit 近似、spin-orbit mean-field 近似、ならびに X2C/DLU-X2C ハミルトニアンを利用可能。また、有限サイズ原子核荷電モデルも利用可能
- hfacm スクリプト：double hybrid 汎関数や adiabatic connection model 汎関数使用時の利便性向上のためのスクリプト
- range-separated local hybrid 汎関数 wLH22t (基底状態 DFT、TDDDT、エネルギー勾配計算に対応) を wlh22t キーワードで使用できるようになりました。なお、バージョン 7.7 では異なるパラメーターを使用しています。
- rirpa：様々な sigma 汎関数を用いたエネルギー・解析的エネルギー一次微分の計算に対応
- 内殻軌道関連プロパティに適した新しい local hybrid 汎関数 LH23pt を追加しました。エネルギー、エネルギー一次微分、TDDFT 計算で利用可能
- 強相関補正 local hybrid 汎関数 (scLH22ta, scLH22t, scLH23t-mBR, scLH23t-mBR-P) や強相関補正 range-separated local hybrid 汎関数 ( $\omega$ LH23tE,  $\omega$ LH23tdE,  $\omega$ LH23tP,

$\omega$ LH23tdP,  $\omega$ LH23tB,  $\omega$ LH23tdB) を追加しました。

- time-reversal symmetry breaking GW や Bethe-Salpeter equation 法を追加しました。
- GW や BSE における Natural virtual orbital 生成
- TD-DFT と GW-BSE 計算で得られる内殻イオン化状態や励起状態の CVS 近似を用いた評価が行えるようになりました。
- 高速な adaptive grid contour deformation GW 法 (1 成分・2 成分波動関数に対応)
- フォトデバイス、およびマルチスケールシミュレーションのための treams パッケージの量子化学計算部分のツールとして使用できるようになりました。
- Bethe-Salpeter 方程式における二次応答
- egrad モジュールにおいて、ゲージ不変 cMGGA を用いた励起状態のエネルギー一次微分と双極子モーメントをサポートしました。また、escf モジュールにおいて、MGGA とゲージ不変 cMGGA を用いた (動的) 超分極率と 2 光子吸収断面積のサポートしました。

#### <改良点>

- BIOVIA TURBOMOLE コマンドライン版において以下の改良を行いました：
  - 周期 DFT (riper モジュール) の OpenMP による並列計算パフォーマンスの改善
  - 簡略化した COSMO 計算の入力形式 (溶媒名指定による誘電率・屈折率の自動設定)
  - ridft、rdgrad、escf、mpshift、および riper において、\$soscal オプションを用いてスピン軌道結合のスケールリングが可能になりました。
  - 2 成分 SCF 計算に自動軌道シフトを追加しました (これまでは automatic の指定は無効となっていました)。
  - 原子の電子密度の重ね合わせによる初期軌道生成
  - 実験標準に準ずる NMR および EPR 計算における同位体の自動選択
  - すべての EPR 特性 (HFC、g テンソル、EFG/NQI、ZFS) を同時に計算するための新しいキーワード \$epr を追加しました。また、EPR 計算のリスタートも可能になりました。
  - フォトデバイス、およびマルチスケールシミュレーションのための treams (<https://github.com/tfp-photonics/treams/tree/main>) パッケージとの互換性
  - 改良された半数値計算アルゴリズムと改良された精密グリッド
  - すべての GW、および BSE 計算が GPU 計算に対応しました。
  - 基底関数に関連した改良：
    - ◇ riper モジュールによる周期 DFT 計算用の pob-DZVP-rev2 と pob-TZVP-rev2 基底、およびこれに対応した ECP を追加しました。
    - ◇ 軽元素用の Dyll 基底を追加しました。

- ◇ Dolg の基底と ECP を追加しました。
- ◇ basen ライブラリ内の ECP を再構成しました。
- ▶ 修正点：
  - ◇ 長距離の NICS 関連出力を修正し、加えて文書表現を修正しました。
  - ◇ aoforce モジュールの D3 分散力補正使用時の libxc 関連出力を修正しました。
  - ◇ mpshift モジュールにおける擬スペクトル法の使用を廃止し、senex を用いるようになりました。
  - ◇ GIMIC インターフェースを改良しました (例: GIMIC バージョン 2 で不要になったファイル削除など)。
  - ◇ LHF エネルギー一次微分におけるメモリリークを修正しました。
  - ◇ mpshift モジュールにおける fullshell キーワード指定時の DFT グリッドを修正しました。
  - ◇ mpshift モジュールにおける \$esenex キーワードと LHF 同時使用時の不具合を修正しました。
  - ◇ \$intsdebug キーワードに関連した不具合を修正しました。
  - ◇ evib モジュールのメモリリークを修正しました。
- TmoleX:新しい計算方法GWやGW/BSEによる励起エネルギー計算に対応しました。
- TmoleX:外部実行したジョブを TmoleX 内にコピーするとき、ファイルを選択できるようになりました。
- TmoleX:異なる表示スケールの複数のディスプレイを使用したときに生じる BIOVIA COSMOlogic 製品のグラフィカルユーザーインターフェースの表示の不具合 (例: ダイアログサイズの問題、スクロールバーが表示されないなど) を解消しました。
- TmoleX:グラフィカルユーザーインターフェースのデフォルトフォントやフォントサイズを変更し、ディスプレイの表示スケールが使用された際の見やすさを改善しました。
- TmoleX:以下の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：
  1. jogl library (2.4.0 から 2.5.0-rc に更新)
  2. CDK library (2.7.1 から 2.8.4 に更新)
  3. Synthetica (3.4.1 から 3.5.0 に更新)
  4. gson (2.9.0 から 2.10.1.6 に更新)
  5. MariadbClient (2.7.2 から 3.1.4 に更新)
  6. SQLite library (3.36.0.3 から 3.42.0.0.8 に更新)
  7. POI library (5.2.2 から 5.2.3 に更新)

<修正点>



- TmoleX：TDDFT 計算で得られる励起状態の自然遷移軌道生成において、開殻系ではエラーが発生し、描画できない不具合を解消しました。
- TmoleX：BIOVIA TURBOMOLE 2023 では、TmoleX から DFT エネルギー計算を停止・再実行するとエラーとなる不具合を解消しました。
- TmoleX：初期分子軌道の生成を行わずに、Frozen orbitals 設定ができる不具合を解消しました。現在は、警告を表示し、初期分子軌道を生成することを提案します。
- TmoleX：リモート実行した redox ジョブを停止したとき、出力ファイルの転送に失敗する不具合を解消しました。
- TmoleX：TmoleX のデモ版でバッチジョブを実行したとき、デモ版の制限に該当する分子が含まれると正常に動作しない不具合を解消しました。
- BIOVIA COSMOtherm 2022 で変更された pot ファイルフォーマットに BIOVIA TURBOMOLE の DCOSMO-RS オプションが対応しました。
- XCFun ライブラリの汎関数使用時に DFT-D3 分散力補正を用いた振動計算（aoforce モジュール使用）においてエラーが発生する不具合を解消しました。
- 単原子の COSMO 計算で FINE キャビティを使用したとき、原点に原子が設定されない不具合を解消しました。
- TmoleX：リモートジョブのファイル名にダブルクォーテーションが含まれるとき、正常にダウンロードできない不具合を解消しました。
- 自然遷移軌道(NTO)生成のための右マウスメニューの項目を分かりやすくなるように修正しました。
- TmoleX：リモートジョブでキューイングシステム用にユーザによって入力されたスクリプトが、ジョブ投入スクリプト全体の最後に実行するようになりました。
- 「@」や「#」などの特殊文字がインストールディレクトリのパスに含まれるとインストールに失敗することをインストールのインストラクションに追記しました。

#### <既知の不具合>

- proper コマンドで生成された局在分子軌道の.plt ファイルが、TmoleX 上で表示されない不具合
- 環構造内の結合角を対象とした結合角スキャンを行ったとき、計算が正常終了した場合も TmoleX 起動時に毎回エラーメッセージが表示される不具合