

熱力学物性推算ソフトウェア

COSMOtherm セミナー報告

COSMOthermは、量子化学計算で得られる分子表面の電荷分布情報から熱力学物性を推算する新しい物性推算法COSMO-RS法に基づく物性推算ソフトウェアです。

第79回RSIセミナー「熱力学物性推算ソフトウェア COSMOthermセミナー」では、COSMOlogic社 CEO Andreas Klamt氏を招聘し、COSMO-RSの理論背景のレクチャーならびに最新の応用事例について紹介しました。また、弊社からもCOSMOthermのユーザインターフェースの開発状況やアプリケーション事例について紹介しました。

セミナーの概要は下記のとおりです。

1. COSMO-RS: The bridge from quantum chemistry to fluid phase thermodynamics.

Part I. Fundamentals

Klamt氏より、COSMO-RS法の理論ならびにCOSMO-RS法の発展した次期計算モデルCOSMO-SPACEについて紹介しました。COSMO-SPACEでは分子の表面電荷情報に加えて、表面電荷の外部応答を考慮するためのlocal polarizabilityや分子表面の形状評価を含めた分子間相互作用の計算を行い、より精度の高い物性予測が可能になります。

2. COSMO-RS: The bridge from quantum chemistry to fluid phase thermodynamics.

Part II. Applications and Extensions

Klamt氏より、化学工学に関連する基礎物性の予測事例からライフサイエンス分野に関する事例まで、幅広い応用例を紹介しました。また、分子の表面電荷情報に基づく分子の類似検索法（図1）やタンパク質ーリガンド間のドッキングのスコア

リング法のアイデアなどが紹介されました。今後、COSMOlogic社では、創薬研究に対して有用なモジュール開発にも注力する予定です。

3. COSMOtherm応用事例紹介とCOSMO UIの開発状況

弊社より、COSMOthermによる医薬品の溶解度予測の事例紹介を行いました。また、弊社とCOSMOlogic社共同開発のCOSMOthermユーザインターフェース COSMO UIの次期リリース情報を紹介しました。次期バージョンより計算結果のグラフ化などが可能になります。



Klamt氏による講演の様子

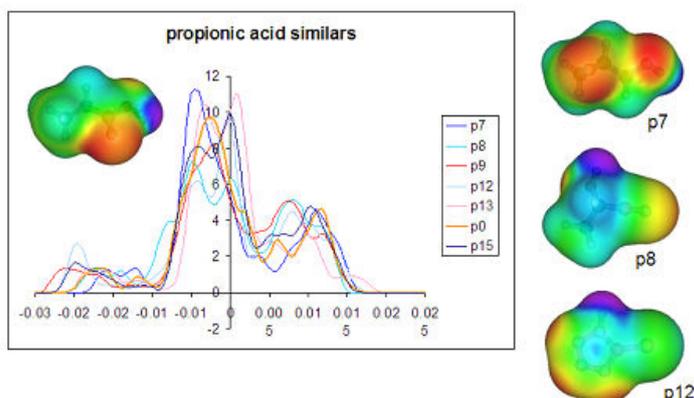


図1 分子の表面電荷情報に基づく類似検索法のイメージ