

# COSMOtherm 改訂版リリース

昨年12月にCOSMOlogic社製COSMOtherm改訂版 (Version C2.1 Revision 01.05) がリリースされました。COSMOthermは量子化学計算で得られる溶質・溶媒分子の表面電荷情報をもとに蒸気圧や溶解度など熱力学物性を推算するソフトウェアです。

改訂版では新たに4種類の物性計算が可能になり、COSMOthermの適用範囲が大幅に広がりました。また、ヒ素やセレン用のパラメータが更新され、これらの元素を含む有機化合物の予測精度が向上しました。今回は、新たに追加された物性推算機能について紹介します。

## 気体の溶解度計算

本機能では、任意の気体の各種溶媒（混合溶媒を含む）への溶解度を推算することができます。気体の溶解度では、圧力および温度依存性が重要になりますが、本機能は両者の予測に対応しています。下図に、25°Cにおける気体の水への溶解度計算の結果を示します。R<sup>2</sup>およびRMSEより比較的精度良く予測できることが確認できました。例では水への溶解度を検討していますが、各種有機溶媒や混合溶媒への溶解度も同様の精度で予測することができます。

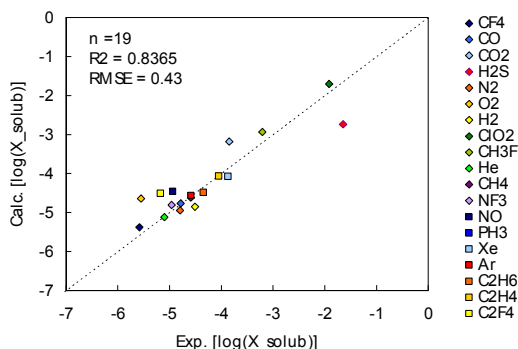


図 1 各種気体の水への溶解度予測 (25 °C)

## 液体の密度・粘度

本機能では、任意の液体（純物質に限定）の密度および粘度を推算することができます。本推算は、COSMOthermに内蔵された構造物性相関 (QSPR) 式を用いて行い、適用可能な温度は室温 (25°C 付近) です。下図に、弊社で行った密度・粘度の計算結果を示します。密度予測では、計算値と実測値が良く一致していることが確認できます。一方、粘度予測では、一部の化合物の推算精度にばらつきが見られました。この理由として、粘性が特殊な分子の形状や反応性・解離性の官能基の効果に由来する場合に誤差が大きくなる傾向があるようです。

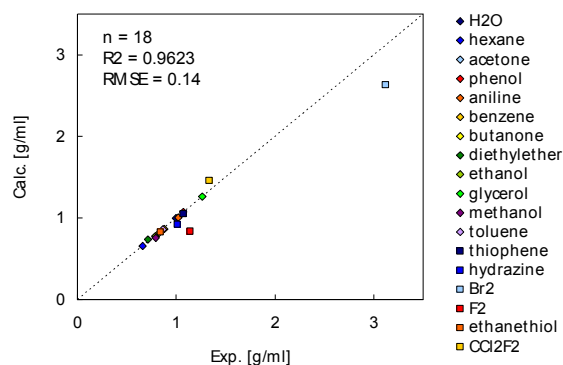


図 2 各種液体の密度予測 (20 or 25 °C)

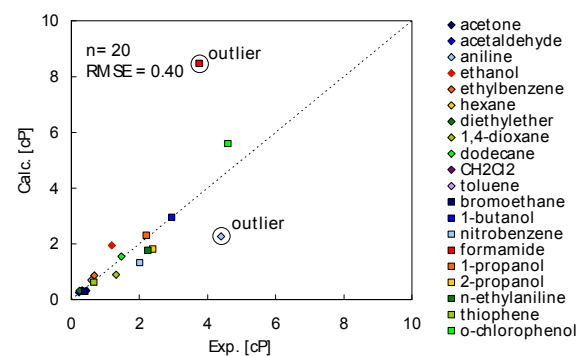


図 3 各種液体の粘度予測 (20°C)

## 界面活性

本機能では、仮想的な2液界面を仮定し (図4)、界面活性剤に見立てた分子の自由エネルギーおよび最安定エネルギーとなる時の分子中心の界面からの距離を算出します。実際の界面現象を再現することはできませんが、界面活性剤などの定性的な性質・性能の評価に有用と考えられます。2液および界面活性剤分子は任意の化合物で使用できます。

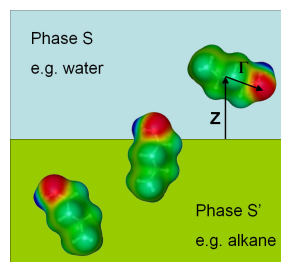


図 4 2液界面と界面活性剤分子のイメージ