

COSMOtherm 改訂版リリース

昨年11月にCOSMOtherm改訂版 (Version C2.1 Revision 01.06) をリリースしました。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。

改訂版ではケイ素・ゲルマニウムのCOSMO半径とvan der Waalsパラメータが最適化され、これらの元素を含む有機化合物の物性予測の精度が向上しました。特に、ケイ素化合物の蒸気圧予測の精度が改善されました。また、新機能として、COSMO-RS法の分子間相互作用の評価に基づき、溶液中の分子クラスタ構造を構築する機能が追加されました。本稿では、ケイ素化合物の蒸気圧予測と分子クラスタ構築機能について紹介します。

ケイ素化合物の蒸気圧予測

ケイ素化合物は、電子材料や高機能材料の原料として、幅広く用いられる素材のひとつです。特に、電子材料の原料としてケイ素化合物が用いられるとき、その蒸気圧が重要になります。これまで、COSMOthermで得られるケイ素化合物の蒸気圧は、実測値に比べて過小評価される傾向があり、改善が求められていました。

今回の改訂では、175種のケイ素化合物に関する280点の実測値（蒸気圧、沸点、分配係数、溶解度）に基づき、ケイ素原子のCOSMO半径とvan der Waalsパラメータが最適化されました。図1に改訂前後の蒸気圧予測の比較を示します。グラフおよび平均2乗誤差 (RMSE) から、ケイ素化合物の蒸気圧予測の精度が大幅に改善されたことが確認できます。

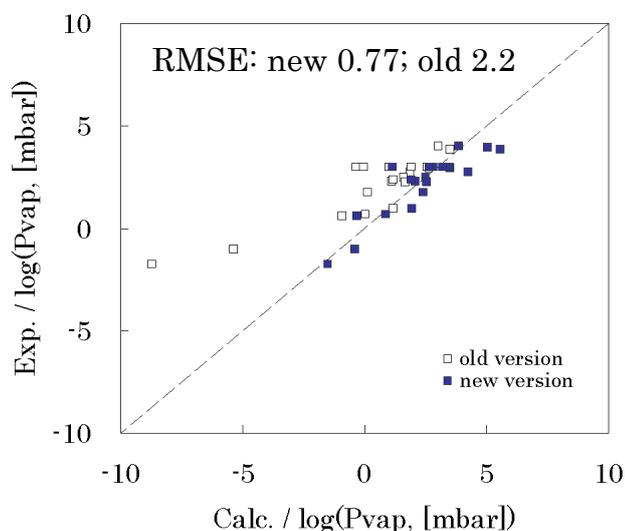


図1 新旧リビジョンの予測精度の比較

新機能: 分子クラスタ構造構築

COSMOthermでは、分子間の静電相互作用・水素結合相互作用・van der Waals相互作用を評価し、物性値を推算します。分子間相互作用の評価では、分子表面を単位面積に分割し（分割された分子表面の1つずつをセグメントと呼びます）、得られたセグメントごとに、相互作用の強さと確率を評価します。本機能では、セグメント間の相互作用の強さと確率から、妥当な分子クラスタ構造を構築します。

例えば、溶質をエタノール、溶媒を水としたとき、図2の3種類の2分子から形成されるクラスタが出力されます。このクラスタ構造は、いずれも水素結合に由来する構造を持ち、溶液中の分子間相互作用が主に水素結合相互作用であることを示しています。得られた構造を量子化学計算で構造最適化すれば、正確なクラスタ構造を得ることも可能です。また、本機能は複数分子から形成される分子クラスタにも対応します。本機能を用いて、溶液中での具体的な分子状態の検討・評価が行えます。

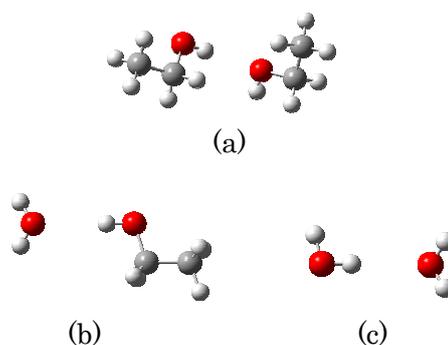


図2 水-エタノール混合溶液中で形成されるクラスタ構造: (a) エタノール2分子; (b) エタノール-水; (c) 水-水