

COSMOlogic社製品開発動向 -新機能と新製品のご紹介-

COSMOlogic社では、熱力学物性推算ソフトウェアCOSMOthermや量子化学計算ソフトウェアTURBOMOLEを中心とした分子設計やプロセス設計に有用な製品を開発・提供しています。本稿では、COSMOlogic社の既存製品および新製品の開発動向についてご紹介します。以下で紹介する新機能や新製品は、今後の製品バージョンアップの際に搭載、またはリリースされる予定です。

新しい原子半径の定義

COSMOthermの物性計算に必要な分子表面の電荷情報は、これまではファン・デル・ワールス半径に基づく原子半径で定義される球とそのつなぎ合わせによって分子表面（またはキャビティ）を構築し、COSMO法計算によって算出されてきました（図1）¹⁾。しかし、原子半径が未定義の元素があることや原子の状態（酸化・イオン化）に応じた適切な原子半径を用いることができないなどの問題がありました。

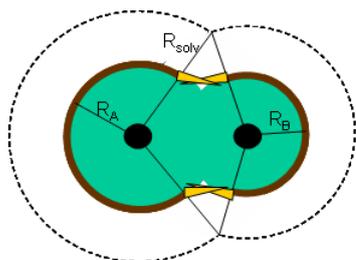


図1 分子表面の作成イメージ。原子半径 R_A と R_B の球のつなぎ合わせ。黄色の三角形はつなぎ合わせ処理を指す。

COSMOlogic社では、従来の原子半径に代わる新しい定義として、“iso-scaled densities”を考案しました。この方法では、元素ごとに基準となる電子密度を定義し、与えられた電子密度を与える原子半径を原子ごとに決定します。これにより、分子内の原子の環境によって適切な原子半径が分子表面の構築に用いられることとなります。

COSMOlogic社の検証では、活量係数や液液平衡などの物性推算において、“iso-scaled densities”を用いることでCOSMOthermの予測精度が大幅に向上することを確認しています。

配座発生ソフトウェアCOSMOconf

COSMOthermによる物性推算では、配座異性体を考慮することで、より正確な推算が行えます。しかし、配座異性体の考慮には、量子化学計算で重要な配座異性体をすべて計算する必要があり、構造構築や配座の選択の作業に労力が必要と

なります。

COSMOlogic社では、簡単に物性推算に必要な配座異性体を得るための配座発生ソフトウェアCOSMOconfを開発しました。COSMOconfは、与えられた分子構造から、その配座異性体を発生させ、次にTURBOMOLEを用いて分子表面電荷を算出し、最後に分子の全エネルギーと表面電荷の類似性に基づき重要な配座を自動的に判定します（図2）。COSMOconfは、内包した半経験的分子軌道計算ソフトウェアMOPAC7の使用と表面電荷の類似性評価による配座の絞り込みにより、量子化学計算の計算量を最小限に抑えるように設計されています。

1. 分子構造の入力
2. 配座の発生
3. MOPAC7による構造最適化
4. 配座の解析（重複した配座の削除）
5. TURBOMOLEによるエネルギー一点計算
6. 表面電荷の評価（酷似した配座の削除）
7. TURBOMOLEによる構造最適化
8. 表面電荷の評価（酷似した配座の削除）
9. 各配座の構造と分子表面電荷情報の出力

図2 COSMOconfの機能概要と処理の流れ

Direct COSMO-RS法

近年、COSMOlogic社CEO A. Klamtらによって、COSMO-RS法で得られるポテンシャル関数を用いてCOSMO法を改良したDirect COSMO-RS (D-COSMO-RS)法が提案されました²⁾。D-COSMO-RS法は、量子化学計算において精度良く溶媒効果を考慮するための方法です。

COSMO法では、溶質分子の電荷分布に対応して誘電率 ϵ で表される導電体が溶媒として作用し、溶質分子と溶媒間の静電相互作用を再現することで溶媒効果を含んだ量子化学計算を行います。この方法は、純溶媒の溶媒効果の再現などで、成功を収めてきました。

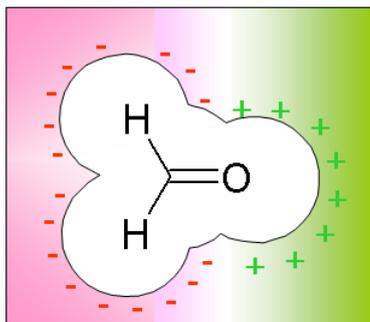


図 3 COSMO法計算における溶質とその周囲の溶媒を表す導電体(グラデーション部分)のイメージ

しかし、より現実的な溶媒効果の考慮において、次のような課題があります。

- 混合溶媒の取り扱いができない
- 溶媒分子の局所的な効果(水素結合の効果など)を考慮できない
- 温度依存性を考慮できない

一方、COSMO-RS法は、COSMO法の前述の問題点を解決し、より正確な溶媒効果を考慮できる分子統計力学モデルとして考案・実証されています。Klamtらは、COSMO法の改良として、COSMO-RS法で得られる溶媒のポテンシャル関数を用いてCOSMO法を補正する方法D-COSMO-RS法を考案しました。そして、D-COSMO-RS法を有機分子のgテンソル予測に適用し、COSMO法では再現できなかったgテンソルの溶媒依存性を精度良く再現し、この方法の有効性を実証しています²⁾。

今後、D-COSMO-RS法はTURBOMOLEに搭載される予定です。

Flory-Hugginsパラメータ作成ソフトウェアCOSMOmeso

高分子同士や高分子-低分子の相溶性やそれらの混合系のマクロ構造を検討するため、散逸粒子動力学(DPD)シミュレーションが用いられます。DPDシミュレーションでは、いくつかの原子で構成されるユニット(ビーズ)のつながり合わせで高分子や低分子を表し、相互作用評価においてもビーズ間の相互作用パラメータ(Flory-

Hugginsパラメータ)が用いられます。パラメータは、ビーズの種類やその組み合わせに応じて必要ですが、既知のパラメータは少なく、また、パラメータ作成にもいくつかの実測値が必要で、以前よりパラメータ不足が問題となっています。

COSMOlogic社では、Flory-Hugginsパラメータを導出するソフトウェアCOSMOmesoを現在、開発しています。COSMOmesoでは、必要な物性をCOSMOthermにより算出し、パラメータを導出します。現在、COSMOmesoで導出されたパラメータを用いたメソスケールシミュレーションを実施し、パラメータの有効性を検証しています。

イオン液体に対応した物性推算機能

近年、化学工学分野においてイオン液体が注目されています(図4)。イオン液体は、蒸気圧が非常に小さく、難燃性である特徴から、安全で取り扱いやすい溶媒として期待されています。また、特異的な分子構造や極性をもつことから、化学反応に対する有用な効果も期待されています。

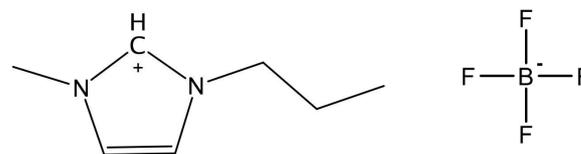


図 4 イオン液体の例(1-ブチル-3-メチルイミダゾリウムとテトラフルオロボレート)

イオン液体はアニオンとカチオンの2種の分子からなる特殊な液体であるため、一般的な物性推算法は利用できません。一方、COSMO-RS法では取り扱いが可能ですが、COSMOthermには、これらに対応した機能はありませんでした。

COSMOlogic社では、イオン液体に対応した次の機能を開発しました。

- イオン液体1成分を含む2成分系気液・液液平衡の推算
- イオン液体や塩の溶解度の推算
- イオン液体や双性イオンの密度の推算

上記の機能を利用することで、中性化合物と同様にイオン液体に関する物性を予測できるようになります。

- 1)A. Klamt, G. Schüürmann, *Parkin Trans.* 2, 1993, 799.
- 2)S. Sinnecker, A. Rajendran, A. Klamt, M. Diedenhofen, F. Neese, *J. Phys. Chem. A*, 2006, 110, 2235.