

本年2月にCOSMOthermの改訂版C14.01がリリースされました。COSMOthermは、COSMO-RS法に基づき蒸気圧・溶解度・相平衡などの平衡物性を推算するための熱力学物性推算ソフトウェアです。本稿では、改訂版で新たに導入されたvan der Waals (VDW) 相互作用の評価方法や刷新されたグラフィカルユーザーインターフェースCOMSOthermXについて紹介します。

■改訂版のトピックス

今回の改訂版の主なトピックスは次の2つです。

- ・新しいvan der Waals (VDW) 相互作用の評価方法の導入
- ・グラフィカルユーザーインターフェースCOSMOthermXの刷新

このほか、混合物の蒸気圧曲線に対する実験データによる補正機能や固液平衡計算における液液平衡の同時探索などの機能が追加されました。

以降では、前述の2つのトピックスについて紹介します。

■新しいVDW相互作用の評価方法の導入

従来のCOSMO-RS法では、分子間のVDW相互作用エネルギーを分子表面間で生じる相互作用として評価してきました。具体的には、各元素(i)に1つのVDWパラメーター(τ_i)を割り当て、2つの分子が分子表面を介して相互作用すると仮定し、接し合う分子表面に寄与する原子(A, B)のVDWパラメーター(τ_A, τ_B)に基づきVDWエネルギー $E_{VDW}(A, B)$ を評価します(式1)。

$$E_{VDW}(A, B) = a_{eff}(\tau_A + \tau_B) \quad (1)$$

ここで、 a_{eff} は接する分子表面の面積です。

今回、予測精度の向上を図るため、新しいVDW相互作用の評価方法を導入しました。新しい評価方法は、量子化学計算で用いられる分散補正として代表的なGrimmeのD3分散項¹⁾をもとに考案されました。D3分散項は対応元素種(H-Puに対応)が幅広く、精度が良いことで知られています。新しい方法では、VDW距離に相当する分子表面にプローブとなる原子(実際にはネオン原子)を置き、分子内の各原子とプローブ間のVDW相互作用をD3分散項に基づき評価し、VDW相互作用エネルギーを推算します。また、水素結合が生じる場合には、原子間距離がVDW距離よりも大幅に短くなることから、その場合のVDW相互作用エネルギーを正しく見積もるための補正項も導入されました。

新評価方法には、以下のような特長があります。

- ・分子内のすべての原子のVDW相互作用への寄与が考慮される
- ・分子内の各原子の化学的環境がVDW相互作用に与える効果が考慮される

また、物性推算において、新評価方法を用いることで以下の改善が確認されています。

- ・従来のCOSMO-RS法に比べて、化学ポテンシャルの誤差が0.07 kcal/mol減少しました。
- ・芳香族化合物系においては、化学ポテンシャルの誤差が約0.1 kcal/mol減少しました。

なお、新評価方法を使用するためには、事前にTZVPD基底と精密な表面グリッド(FINE)を用いたCOSMO法計算を行う必要があります。この計算方法は、現時点でTURBOMOLE 6.4以降でのみ使用可能です。

■刷新されたCOSMOthermX

COSMOthermXの操作性向上を図るため、アイコン、メインウィンドウ、設定ウィンドウなどすべての表示スタイルを見直しました。これにより、任意のモニタサイズで見やすく、使いやすくなりました。また、メインウィンドウ内に複数の入力設定パネルを表示できるように変更したことで、2つ以上の計算設定を同時に行うことができるようになりました(図1)。

さらに、COSMOthermXの新機能として、以下の機能が追加されました。

- ・データベース作成・編集機能: COSMOファイル用のデータベースを簡単に作成・編集できるインターフェースです。データベース内のCOSMOファイルを削除する際の面倒な作業が簡単なマウス操作で行えます。
- ・アップデート機能: COSMOlogic社のサーバー上の更新データの有無を確認し、更新があれば、ソフトウェアをアップデートすることができます。

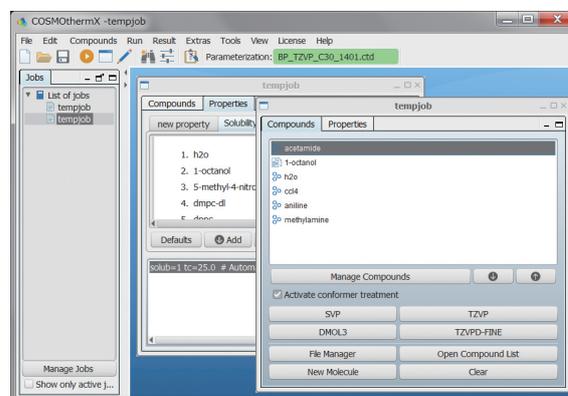


図1 新しいCOSMOthermXの画面イメージ。複数の入力設定パネルが表示可能。

1) S. Grimme, J. Antony, S. Ehrlich, H. Krieg, *J. Chem. Phys.* 132, 154104 (2010).