

熱力学物性推算ソフトウェア

COSMOtherm改訂版リリース


 COSMOlogic
Predicting Solutions

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、3月に日本国内向けにリリースしました改訂版C30-1501について紹介します。

■改訂版のトピックス

今回の改訂版のトピックスは次の2つです。

- ・ Residual Dielectric Correction(RDC)の導入
- ・ 新しい物性推算機能の追加

このほかにも、改訂版では既存機能の改善や改良が図られ、推算精度と計算速度が向上しています。

以降では、前述の2つのトピックスについて紹介します。

■Residual Dielectric Correction(RDC)の導入

従来のCOSMO-RS法では、分子間の静電相互作用を接し合う分子表面の断片(セグメント)ごとに評価しています。この評価では、接し合うセグメントの電荷が完全に打ち消し合うときを理想的な静電相互作用とし、そうでない場合の不安定化量を評価し、溶液中の化学種の化学ポテンシャルを導出しています。この評価において、直接接することのない長距離の静電相互作用は無視されてきました。

通常、打ち消し切れない電荷(残余電荷)が小さい場合、この効果は無視できますが、相当量の残余電荷が生じる場合、長距離の静電相互作用が重要になります。特に、残余電荷により分子表面に双極子が形成される場合(例: DMSOのような極性溶媒中のヘキサンのような無極性溶質)には、この効果は無視することはできません。そして、これが長年、COSMO-RS法の主要な問題となっていました。改訂版では、この問題の解決方法として、Residual Dielectric Correction(RDC)を導入しました。

RDCの基本概念は、長距離

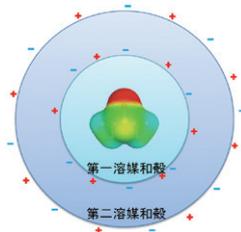


図1 RDC項における静電相互作用の評価のイメージ

の静電相互作用(n 次の溶媒和殻)を従来のCOSMO-RS法の概念内で記述することにあります。具体的には、残余電荷は第一溶媒和殻の電荷と相互作用し、さらに第一溶媒和殻の電荷は第二溶媒和殻と相互作用します(図1)。これをRDCでは、溶媒の誘電率 ϵ や屈折率 n に基づき、長距離の静電相互作用エネルギーを算出します。そして、RDCを導入したことにより、化学ポテンシャルの予測精度が前バージョンより0.03 kcal/mol改善されました。RDCの詳細については、今後論文発表にて公開予定です。

■新しい物性推算機能の追加

■界面張力の推算機能

4種類の界面張力の推算機能が追加されました。そのうち3種は、定量的構造物性相関(QSPR)に基づく推算法で、液液平衡の相分離組成や溶媒間の相互溶解度と界面張力の相関性に基づいています。これらの経験的なモデルは、室温や純溶媒相への適用に限られます。また、相の1つを水とする制限があります。残り1つの推算法は、2015年第1号のニュースレターで紹介した界面モデルを用いた第一原理的な予測法です。この方法は、経験的なモデルに比べて計算時間が必要ですが、温度や混合組成の制限はありません。詳細は前号をご参照ください。

■高分子溶液に対応したコンビナトリアル項の導入

高分子溶液を取り扱うため、Elbroらの高分子に対応した自由体積コンビナトリアル項が導入されました。Elbroのコンビナトリアル項は、高分子の分子量と密度を用い、高分子溶液の過剰混合エントロピーの評価を可能にします。これにより、高分子溶液中の低分子の化学ポテンシャルを始め、活量係数・ヘンリー定数などの定量的な予測が可能になりました。詳細は、2015年第1号のニュースレターをご参照ください。

- ・ 弊社 Web サイトには、取り扱い製品、最新のニュース、お客様向けサポート情報、他のサイトへのリンクなどを掲載しております。
- ・ 電子媒体でのニュースレターおよびバックナンバーは下記 URL をご利用下さい。
- ・ <http://www.rsi.co.jp/kagaku/cs/news/newsletter.html>
- ・ 本ニュースレターは、弊社取り扱い製品をご購入いただきましたサイトのご担当者様にお送りしています。その他に発送をご希望がございましたら弊社までご連絡ください。
- ・ 記載されている会社名及び商品名は、各社の商標または登録商標です。

RSI ニュースレター

Vol. 22, No. 2, 2015

2015年4月1日発行

発行人 後藤 純一

発行所 株式会社菱化システム

Copyright © 2015 Ryoka Systems Inc.


 Ryoka
Systems
Inc.

 株式会社 菱化システム
科学技術システム事業部
URL: <http://www.rsi.co.jp/>TEL: 03-6830-9724 FAX: 03-5610-1161 E-mail: support@rsi.co.jp