

量子化学計算ソフトウェア・配座解析ソフトウェア・イオン液体データベース

COSMOlogic社製品新バージョンリリース

本年7月にCOSMOlogic社製品の量子化学計算ソフトウェアTURBOMOLE、配座解析ソフトウェアCOSMOconf、ならびにイオン液体データベースCOSMObaseLLの新バージョンがそれぞれリリースされました。本稿では、各製品の特長、ならびに新バージョンで搭載された新機能について紹介します。

■COSMOlogic社製品の概要

COSMOlogic社では、COSMO-RS法に基づき蒸気圧や溶解度など平衡熱力学物性を推算するソフトウェアCOSMOthermと高速量子化学計算ソフトウェアTURBOMOLEを中心とした製品を提供しています(図1)。

TURBOMOLEは分子の電子状態やそれに由来するプロパティを求めるために使用されるほか、COSMOthermを用いた物性推算に必要な化合物分子の表面電荷情報を得るためにも用いられます。このとき、分子の最安定・準安定配座を探索する必要があり、そのためのツールとして配座解析ソフトウェアCOSMOconfが提供されています。

COSMObaseLLは、イオン液体を構成するカチオン・アニオンの表面電荷情報を収録したCOSMOtherm用のデータベースで、量子化学計算を行うことなく、イオン液体の物性値を予測することを可能にします。

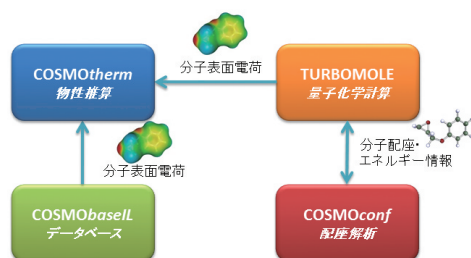


図1 COSMOlogic社の主な製品とその関連性

■量子化学計算ソフトウェア TURBOMOLE

TURBOMOLEは、カールスルーエ大学のAhlich教授らによって開発された製品です。Resolution of the Identity(RI)法によるクーロン・交換積分の高速化により、密度汎関数法(DFT)、ならびにHartree Fock(HF)法・post-HF法(MP2やCCSDなど)の計算を高速・効率的に行うことができます。以下では、TURBOMOLEの特長と新バージョン7.0の新機能を紹介합니다。

■特長

- RI法によるクーロン・交換積分の高速演算
- 先進的な高精度計算方法
 - ・ ジェミナル基底を使用した計算：MP2-F12、CCSD-F12など
 - ・ Random Phase Approximation (RPA) による電子相関の考慮
 - ・ GW法による高精度エネルギー計算

● 特徴的なプロパティ計算

- ・ 非断熱結合を考慮した計算：無輻射遷移確率など
- ・ スピン軌道相互作用を考慮した計算：構造最適化、励起エネルギーなど
- ・ 励起状態間の遷移モーメント

■新機能

追加された主な新機能は以下のとおりです。

- 1~3次元周期境界条件 (PBC) を適用したエネルギー計算、およびPBCに適した高効率計算方法¹⁾
- 計算コストを抑えたMP2・MP2-F12²⁾
- スピン軌道相互作用を考慮した励起状態間の遷移モーメント

■事例: PBCを考慮したエネルギー計算

従来、分子・クラスターモデルのみの取扱いでしたが、PBCの搭載で、結晶などの繰り返し構造の電子状態を計算できるようになりました。ここでは、カーボンナノチューブ(CNT)ならびに、酸化チタン(アナターゼ)に適用した事例を紹介します。

(a) カーボンナノチューブ (CNT) のバンド構造の計算

キラル指数(6,0)のCNTのバンド構造を以下の計算設定で求めた場合の計算時間と結果を以下に示します。

●計算設定

ユニットセルの原子数：24原子(C₂₄)

汎関数：Becke-Perdew 基底関数：def-SVP

PBC： 1次元 k点： 20

●計算時間と結果

計算時間：12分20秒

使用CPU：Intel Xeon X3470 2.93 GHz 4コア並列

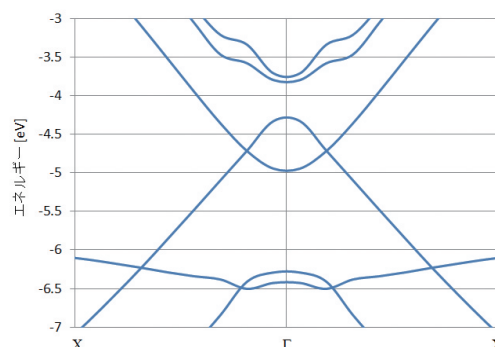


図2 カーボンナノチューブ(6,0)のバンド構造

(b) ルチル型酸化チタンの電子状態密度

計算設定、計算時間、ならびに結果を以下に示します。

● 計算設定

ユニットセルの原子数：6原子(Ti₂O₄)

汎関数：Becke-Perdew 基底関数：def-SVP

PBC：3次元 k点：9×9×7

● 計算時間と結果

計算時間:40分31秒(CPUは前述と同じ、12コア並列)

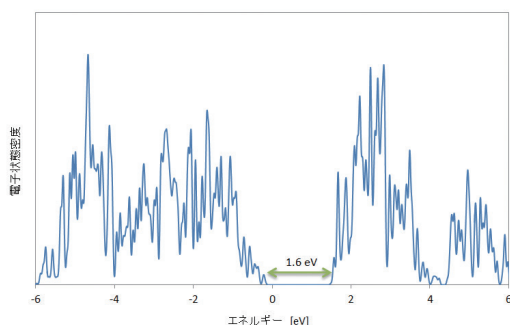


図3 ルチル型酸化チタンの電子状態密度

■ 配座解析ソフトウェア COSMOconf

COSMOconfは、TURBOMOLEと組み合わせて使用する配座解析ソフトウェアです。与えられた分子構造から、その配座異性体の候補を作成し、分子力学計算・量子化学計算を用いて、最安定配座や準安定配座を自動的に求めます。

COSMOthermを用いた物性推算では、配座異性体を考慮することが可能で、溶媒環境による配座分布の変化を考慮した物性値が得られます。このためには、極性溶媒から無極性溶媒までに対応した配座セットが必要で、COSMOconfに搭載された「10種の溶媒中の化学ポテンシャルに基づく配座クラスタリング」の方法を用いることでこの配座セットが自動的に得られます。

■ 配座解析フロー

COSMOconfの配座解析のフローを図4に示します。始めに、遺伝的アルゴリズムにより配座の候補を発生させ、その後、分子力学計算、量子化学計算を用いて、配座のエネルギーや構造を求めます。配座のクラスタリングには、構造情報や10種の溶媒中の化学ポテンシャルを用います。

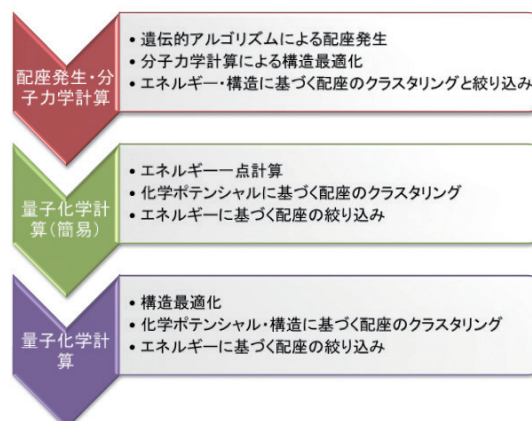


図4 COSMOconfの配座解析フロー

■ 特長

- ・多目的遺伝アルゴリズムによる効率的な配座発生
- ・化学ポテンシャルに基づく配座クラスタリング

■ 新機能

バージョンアップで追加された新機能は以下のとおりです。

- ・COSMObase-1501に収録の気相中の配座セットを再現する配座解析スキーム
- ・配座解析の分散処理機能
- ・配座解析のバッチジョブ機能

■ イオン液体データベース COSMObaseIL

COSMOthermで用いるCOSMO-RS法は、イオン種を取り扱うことができる数少ない物性推算法です。その特長を生かして、イオン液体の物性値を求めるために利用されることも多く、その際に必要となるカチオン・アニオン種の表面電荷情報をイオン液体データベースCOSMObaseILとして提供しています。COSMObaseILのコンテンツは表1のとおりです。COSMObaseILを利用することで、約3万6千種のイオン液体の物性値を評価することが可能です。

表1 COSMObaseIL収録のイオン種の内訳

カチオン種	372	アニオン種	98
イミダゾリウム系	134	カルボン酸系	53
ピリジニウム系	68	硫酸系	9
アンモニウム系	49	スルホン酸系	7
その他	121	その他	29

■ 参考文献

- 1) A. M. Burow et. al., *J. Chem. Theory Comput.*, **7**, 3097 (2011).
- 2) G. Schmitz et. al. *Mol. Phys.* **111**, 2463 (2013); G. Schmitz et. al. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **16**, 22167 (2014)