

熱力学物性推算ソフトウェア

COSMOtherm 新バージョンリリース

本年1月にCOSMOlogic社製品の熱力学物性推算ソフトウェアCOSMOthermと分子表面電荷情報データベースCOSMObaseの新バージョンがリリースされました。本稿では、各製品のバージョンアップの内容を紹介します。

■バージョンアップのトピックス

各製品のバージョンアップのトピックスは次のとおりです。

■ COSMOtherm Ver. C30 Release 16.01

- ・2成分、3成分、多成分の液液平衡予測における組成のゆらぎに対する経験的補正
- ・溶解度計算の設定パネルの統合
- ・COSMOconfとの連携機能の追加

このほかにも、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、上述の3つのトピックスについて紹介します。

■ COSMObase Release 16.01

- ・11000化合物の分子構造・表面電荷情報を収録
- ・気相と液相の配座が対応（一致）するよう配座セットを改訂

■2成分、3成分、多成分の液液平衡予測における組成のゆらぎに対する経験的補正

一般にギブス自由エネルギーに基づく液液平衡(LLE)の予測において、臨界点近傍で誤差が生じやすいことが知られています。これは、各相をそれぞれ均一相と仮定して、相平衡を予測することが原因で、実際には組成にゆらぎがあり、特に臨界点近傍ではより大きくなるためです。このため、観測される上部および下部臨界溶液温度(UCST, LCST)よりも、推算値がそれぞれ低温と高温側にシフトします(図1)。

この誤差を補正するために、新バージョンには経験的な補正式が導入されました。補正式では、推算された相分離組成の差に基づき、経験的にその差が小さくなるように補正します(図1の推算値の“補正あり”と“補正なし”の差を参照)。これにより、実測の相分離組成やUCST・LCSTの再現性が向上しました。図1の例では、補正によって、UCST、およびLCSTの実測値を精度良く再現していることが確認できます。

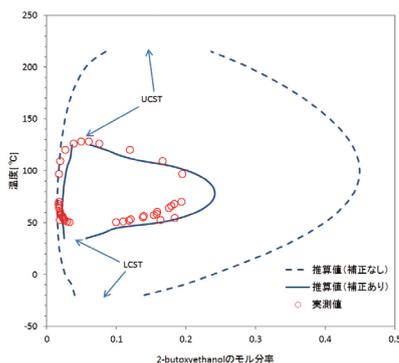


図1 2-butoxyethanol-水のLLEの実測値と推算値の比較

■COSMOtherm-COSMOconf連携機能の追加

COSMOconfは量子化学計算ソフトウェアTURBOMOLEと組み合わせて使用する配座解析ソフトウェアです。COSMOconfの使用により、配座異性体の分子の表面電荷情報を簡単に得ることが可能で、その結果を利用してCOSMOthermの物性推算で配座異性体の物性値への影響を考慮することができます。

従来、COSMOthermとTURBOMOLE、COSMOconfとTURBOMOLEの連携機能はありましたが、COSMOthermとCOSMOconf間のデータ移動などは、手作業で行う必要がありました(図2)。

新バージョンでは、COSMOthermとCOSMOconfの連携機能が追加されました(図2)。3製品を連携することで、構造構築→配座解析→量子化学計算→物性推算までをシームレスに行うことが可能になりました。

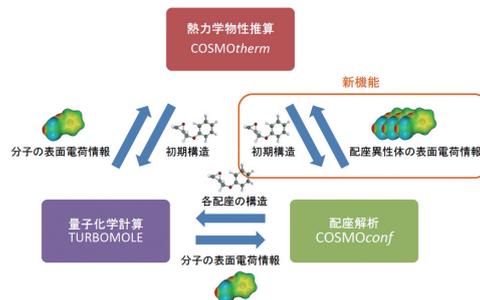


図2 COSMOlogic社3製品間の連携

■溶解度計算の設定パネルの統合

従来の溶解度推算機能は、図3のように4つの推算機能に分割されていました。そのため、溶質の種類や溶媒の数に応じて、設定パネルの切り替えが必要で、操作が分かりづらかったことが指摘されていました。

新バージョンでは、機能を整理・統合し、既存機能を2つの設定パネルに統合しました。これにより、溶質や溶媒の数に応じた機能の使い分けのみで、簡単に操作を行うことができるようになりました。

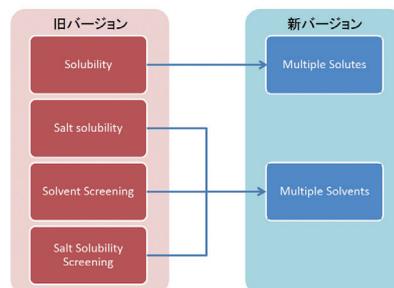


図3 新旧バージョン間の溶解度計算パネルの比較