

熱力学物性推算ソフトウェア・高速量子化学計算ソフトウェア

# BIOVIA COSMOlogic 製品 2022 年版リリース

昨年 12 月に BIOVIA COSMOlogic 製品の 2022 年版がリリースされました。製品としては、BIOVIA COSMOtherm、BIOVIA COSMOconf、BIOVIA COSMObase、BIOVIA COSMOplex&perm、ならびに BIOVIA TURBOMOLE の 5 製品です。本稿では、2022 年版の新機能や改善された機能について紹介します。

## ■ 2022 年版のトピックス

2022 年版のトピックスは次のとおりです。

- BIOVIA COSMOtherm
  - ・融点・融解熱予測の Random Forest モデルを搭載
  - ・複数 CPU コアを使用した並列計算に対応
- BIOVIA COSMOplex&perm
  - ・界面や表面モデルにおける界面・表面付近の界面活性剤分子の組成を最適化する機能の改良
- BIOVIA TURBOMOLE
  - ・分子系の実時間発展時間依存 DFT 計算機能を追加
  - ・グラフィカルユーザーインターフェース (GUI) TmoleX への機能追加

このほかにも、新機能の追加や既存機能の改良が図られ、新しいプロパティの計算が可能になると共に計算速度が向上しています。以降では、上述の 6 つのトピックスについて紹介します。

## ■ 融点・融解熱予測の Random Forest モデル

BIOVIA COSMOtherm には、これまで室温の融解自由エネルギーを予測する簡易的な構造物性相関 (QSPR) モデルは搭載されていましたが、今回、融点や融解熱を予測する Random Forest モデルが搭載されました。既存の QSPR モデルと比べて、融点と融解熱を予測することで室温以外の融解自由エネルギーの推定が行えます。また、多くの実測データを用いた機械学習により構築された予測モデルであるため、予測精度が向上しています。約 500 種の有機化合物の融解熱・融点の予測値と実測値の比較を図 1 に示します。図 1 のように、融解熱・融点の予測値は実測値と高い相関性があり、比較的精度の高い予測モデルであることが分かります。ただ、「二乗平均平方根誤差」(RMSE) からそれぞれ約 1 kcal/mol・約 22 K の誤差があり、この誤差が物性推算の予測精度に大きく影響することに留意が必要です。

本機能は固相に関連した物性推算 (例：溶解度、固液平衡) で使用できます。ただし、BIOVIA COSMOtherm の GUI である COSMOthermX では未対応のため、使用に際しては入力ファイルへキーワードの追加が必要です。

## ■ 複数 CPU コアを使用した BIOVIA COSMOtherm の並列計算

BIOVIA COSMOtherm による物性推算は計算負荷が小さく、通常 OA 用 PC などで使用されています。しかし、系が複雑な場合 (化合物数が多い・分子サイズが大き

い・配座数が多いなど) には、長時間の計算になることがあります。今回、BIOVIA COSMOtherm に複数 CPU コアを使用した並列計算機能が追加されました。本機能により、計算時間の短縮が可能になります。3 成分系の液液平衡予測を行った場合の使用 CPU コアに対する計算時間と速度比を図 2 に示します。図 2 のように 1 コアに比べて 2・4・8 コアを使用したとき、計算速度が 35%、116%、168% 向上します。並列化効率が少し低い傾向にありますが、例えば 4 コアを使用して計算することで複雑な系の計算時間を半減することが可能です。本機能は、COSMOthermX とコマンドライン実行のどちらからでも使用できます。

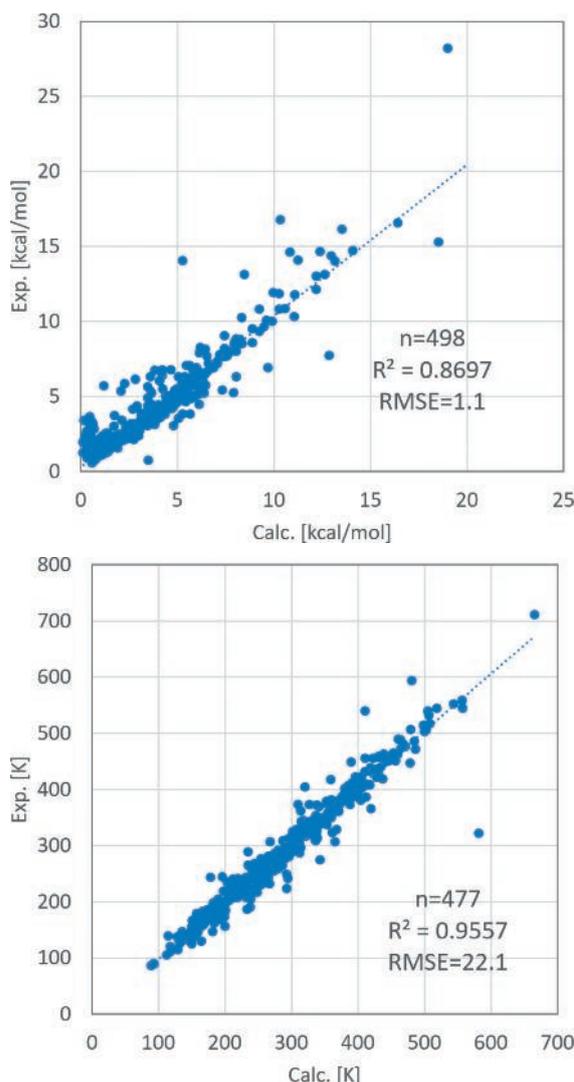


図 1. 有機化合物の融解熱と融点の予測値と実測値の比較 (上：融解熱、下：融点)

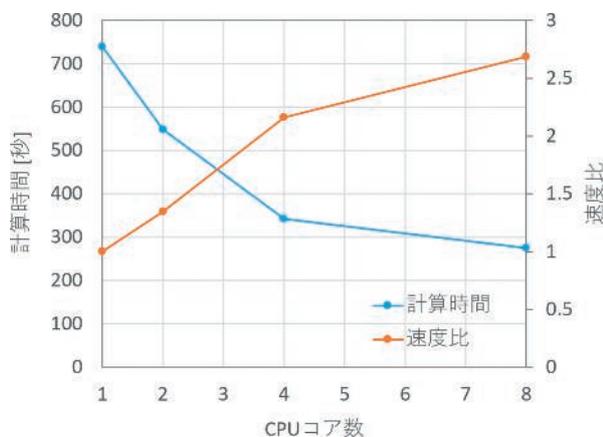


図 2. BIOVIA COSMOtherm の物性推算の計算時間と速度比

## ■ 界面・表面付近の界面活性剤分子の組成最適化機能の改良

BIOVIA COSMOplex&perm は、COSMO-RS 法に基づき分子膜・ミセルなどの自己組織化構造の予測、ならびに分子膜・細胞膜透過性を予測するためのオプションツールです。今回、界面・表面モデルにおいて、界面・表面付近の界面活性剤分子の組成を最適化する機能を改良しました。これまでは、入力された各相や系全体の組成を保持して、界面（表面）近傍の組成を最適化していましたが、界面（表面）近傍の界面活性剤の高い濃度を再現できるように、各相や系全体の組成に制限されることなく、界面活性剤分子の組成を最適化するようになりました。これにより、従来よりも妥当な界面（表面）モデルが得られるようになり、界面張力等の物性推算精度の向上が期待されます。

## ■ 分子系の実時間発展時間依存 DFT 計算

BIOVIA TURBOMOLE に実時間発展時間依存 DFT (RT-TDDFT) 計算機能が追加されました。一般的には線形応答 TDDFT (LR-TDDFT) がよく用いられ、励起状態計算などの研究例をよく目にしますが、フェムト・アト秒単位の非線形的な励起状態ダイナミクスを検討するためには、RT-TDDFT による取り扱いが必要となります。また、光分解、電子輸送、電荷移動ダイナミクス、分子の導電性などの物理プロセスの解明にも役立つものと期待されています。加えて、RT-TDDFT は LR-TDDFT に比べて、系のサイズの増加に対して計算量の増加が抑えられるため、大きな系の励起状態計算で LR-TDDFT の代替としての利用も期待されています。

BIOVIA TURBOMOLE の RT-TDDFT 計算機能では、電場内の分子の電子密度の経時変化や可視・UV スペクトルを求めることができます。一例として、図 3 にベンゼンの電子密度の経時変化を、図 4 に RT-TDDFT と LR-TDDFT で得られたベンゼンの UV スペクトルを示します。図 3 のように RT-TDDFT を用いることで、電場による電子密度変化を調べることができます。図 4 から RT-

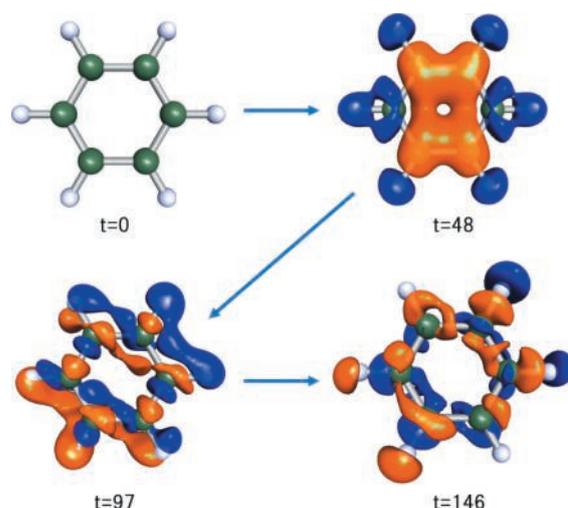


図 3. 電場内のベンゼン分子の電子密度変化：矢印の順に時間が経過（時間単位：アト秒）。オレンジが電子密度の初期状態からの増加、青が減少を示す。

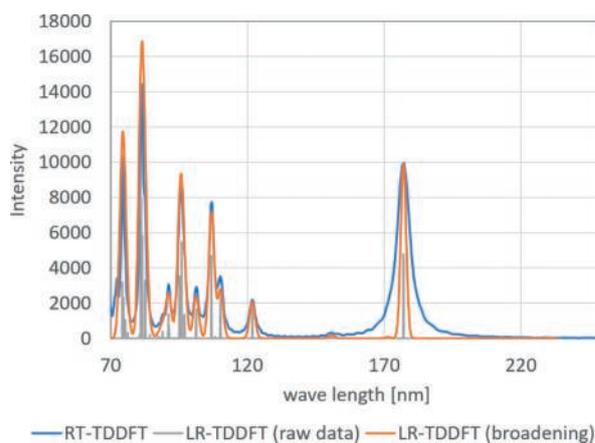


図 4. ベンゼンの UV スペクトル

TDDFT で得られるスペクトルのピーク位置は LR-TDDFT (raw data) と良く一致し、LR-TDDFT と同等の結果が得られます。また、RT-TDDFT のスペクトルは実測のようにブロードニングしており、実測値との比較においても便利です。

## ■ TmoleX への機能追加

BIOVIA TURBOMOLE の GUI である TmoleX に以下の機能が追加されました。

- ・酸化・還元電位計算
- ・動的反応座標 (DRC) ・極限的反応座標 (IRC) 計算
- ・発光色・吸光色予測ツール
- ・Direct-COSMO-RS 法
- ・電子親和力・イオン化エネルギー計算

いずれも BIOVIA TURBOMOLE の過去のリリースにおいてコマンドラインで使用可能な機能ですが、今回 TmoleX から使用できるようになり利便性が向上しました。