

1. BIOVIA COSMOtherm 2025 の改良点と修正点

<改良点>

- ガス溶解度計算 (SOLGAS) において、状態方程式 (EOS) を使用したときの警告メッセージを修正し、当該計算には USE_EOS キーワードを合わせて使用する必要があること示すようになりました。
- サードパーティーライブラリを新しいバージョンやバグフィックス版に更新しました。詳細は以下のウェブサイトをご参照ください。
<https://media.3ds.com/support/progdir/>

<修正点>

- COSMOthermX Windows 版において、COSMOmic で使用する PDB ファイルインポート機能が動作しない不具合を修正しました。この不具合は、インポートに使用する実行ファイルがインストールパッケージに含まれていないことが原因でした。
- Apache Xalan(Java)ライブラリを v2.7.0 から v2.7.3 にアップデートし、脆弱性識別子 CVE-2014-0107、および CVE-2022-34169 の問題を解消しました。
- cURL ライブラリ v7.64.1 の使用を終了し、脆弱性識別子 CVE-2022-32221 の問題を解消しました。
- 稀な条件下において、最新版 BP-TZVPD-FINE パラメーターが与える分子配座の重みづけに僅かに矛盾が生じる問題を修正しました。この問題は分子内水素結合を形成する分子で稀に生じることがありました。

2. BIOVIA COSMOplex&perm 2025 の改良点と修正点

<改良点>

- サードパーティーライブラリを新しいバージョンやバグフィックス版に更新しました。詳細は以下のウェブサイトをご参照ください。
<https://media.3ds.com/support/progdir/>
- COSMOplex ユーザーインターフェースで使用する Qt ライブラリを Qt 6 にアップデートしました。これにより、Qt 5 の脆弱性の問題を解消しました。

<修正点>

- COSMOthermX Windows 版において、COSMOmic で使用する PDB ファイルインポ

ート機能が動作しない不具合を修正しました。この不具合は、インポートに使用する実行ファイルがインストールパッケージに含まれていないことが原因でした。

- COSMOplex の以前のバージョンでは、DMOL3 レベルが選択可能でしたが、完全なサポートではないため、不適切な使用を避けるため、COSMOplex、および COSMOperm の最新版では選択不可に変更しました。

3. BIOVIA COSMOconf 2025 の改良点と修正点

<改良点>

- サードパーティーライブラリを新しいバージョンやバグフィックス版に更新しました。詳細は以下のウェブサイトをご参照ください。
<https://media.3ds.com/support/progdir/>

<修正点>

- cURL ライブラリ v7.64.1 の使用を終了し、脆弱性識別子 CVE-2022-32221 の問題を解消しました。

4. BIOVIA COSMOquick 2025 の改良点と修正点

<改良点>

- COSMOquick User Guide の例題で、CDK ライブラリへのパスが不足している問題を修正しました。該当するセクションの記載を更新し、例題に CDK ライブラリへのパスを追加しました。
- サードパーティーライブラリを新しいバージョンやバグフィックス版に更新しました。詳細は以下のウェブサイトをご参照ください。
<https://media.3ds.com/support/progdir/>

<修正点>

- Apache Xalan(Java)ライブラリを v2.7.0 から v2.7.3 にアップデートし、脆弱性識別子 CVE-2014-0107、および CVE-2022-34169 の問題を解消しました。

5. BIOVIA COSMObase 2025 の修正点

<修正点>

- 前バージョン COSMObase 2024 において、化合物 glycerinaldehyde が収録されていませんでした。当該化合物を追加しました。

6. BIOVIA TURBOMOLE 2025 の新機能、改良点、および修正点

<新機能>

- ricc2: CC2 レベルの励起エネルギー計算のための PTED-COSMO、および PTED-PE を追加しました。
- ccscdf12: CC3 レベルの一重項励起エネルギー計算(閉殻 Hatree-Fock 参照状態を使用)を追加しました。
- DFT 計算における基底関数の縮約係数に関する一次微分
- 相対論効果を考慮した HF/DFT/RPA/MP2/CC2 計算におけるメスバウアーコンタクト密度、および有効コンタクト密度の計算
- post-HF、および post-KS 計算における半相対論や非相対論 EPR 超微細結合定数
- Li らの modified SNSO パラメーター：ユニバーサルで周期依存 Dirac-Coulomb/Dirac-Coulomb-Briet アプローチ
- すべての相対論効果を考慮した計算（エネルギー、エネルギー一次微分、NMR、EPR など）のための低スケールリング DLU-X2C アプローチや modified DLU(NB)
- vdW 空隙と Lebedev グリッドを使用した COSMO 法計算のためのガウス型電荷モデルの導入。構造決定の際のエネルギー一次微分や二次微分で使用できます。
- 高圧下の分子シミュレーションのための GOSTSHYP 計算。HF/DFT 計算を用いた解析的エネルギー一次微分や励起状態計算が行えます。
- 有限磁場下 HF/DFT 計算における Berry 曲率や Berry 電荷の計算
- 相対論効果を考慮した HF 計算における Berry 曲率の計算
- 非調和振電スペクトルをシミュレートするための Single-Hessian thawed Gaussian 近似
- 二光子吸収や超分極率計算のための Bethe-Salpeter 式 (BSE) を用いた非線形応答 (モジュール: escf)
- TD-DFT や BSE における非線形応答を考慮するための複素応答 (キーワード: \$damped_response、モジュール: escf)

- マルチスケール光学材料シミュレーションのための光励起における線形（電気・磁気パート）や非線形（電子パート）T行列の計算（モジュール：escf）
- 振動励起における線形（電気・磁気パート）T行列や分極率の計算（モジュール：aoforce、NumForce）
- 一般化されたフェルミ粒子相互作用に基づく最先端の密度汎関数 CHYF の追加：TD-DFT、NMR、および他のプロパティにおいて最も良いパフォーマンスと数値安定性を示しています（モジュール：全モジュール）
- 任意のフェルミ粒子（陽子、ミュー粒子、陽電子など）の取り扱いが可能な多成分 DFT 計算。フェルミ粒子の相対論補正が可能（モジュール：ridft）
- 多成分 RPA や GW 計算。電子系に対する他のフェルミ粒子の相関や結合エネルギーの計算が行えます（モジュール：escf）
- 初期バージョンとしての多成分時間依存 DFT 計算機能。電子系内での他のフェルミ粒子の相互作用の計算に使用できます。
- TD-DFT や BSE 計算における基底-励起状態間、および励起状態間のスピン軌道結合行列要素（SOCMEs）の出力

<改良点>

- 計算効率やユーザー利便性に関する改良：
 - ricc2 や ccscf12 における技術的改善
 - ◇ ADC(2)、CC2、CC3 の非線形固有値ソルバーを改善しました。
 - X2C 計算のためのオプションとして CHYF 汎関数の追加
 - 3d 元素や S ブロック元素のための Dyall 基底の追加
 - 全電子相対論基底使用時の x2c-universal jbas 補助基底自動アサイン
 - ripper モジュールにおいて原子の電子密度の重ね合わせからの初期軌道生成をサポートしました。
 - 新しい局所ハイブリッド汎関数 LHJ-HFcal、TMHF、TMHF-3P、CHYF を TmoleX でサポートしました。
 - 他の計算プログラムと比較できるように、有限原子核モデルのパラメーターを追加しました。
 - エネルギー分割解析において、局所ハイブリッド汎関数のサブエネルギーの出力に対応しました。
 - 2成分波動関数を用いたエネルギー計算において、current density のプロットに対応しました。
 - X2C 計算において原子核近傍の電子密度から Fermi contact 項を推算する機能を追加しました。
 - 強い磁場環境下の計算のための近似スクリーニング機能を改善しました。

- define モジュールに外部磁場を設定するオプションを追加しました。
- LibXC のバージョンを 6.2.2 にアップデートしました。
- LibXC の利便性向上：汎関数を番号や名称で指定できるようになりました。
- DFT 計算における三次微分の計算効率が大幅に向上しました。
- より効率的なスクリーニングを使用し、senex の全体的なパフォーマンスを改善しました。
- GW や BSE の GPU パフォーマンスを改善しました。BSE に計算に関しては、マルチ GPU をサポートしました。
- 多成分 DFT 計算のより良いパフォーマンスのための量子陽子のための基底（軌道・補助）を追加しました(def2-TZVPP-mc、def2-QZVPP-mc)。
- 多成分 DFT 計算のための適合積分グリッドを追加しました。
- Full incore RI-K TD-DFT 計算のための新しいオプションを追加しました。これにより、すべての中間データをメモリ内で処理できる場合、計算速度が向上します。
- \$rigw キーワードの縮退した軌道の取り扱いがより安定になりました。これにより、対称性の破れが少なくなりました。
- proper に TD-DFT NTO を生成するオプションが追加されました。
- 修正点：
 - ダミー原子に対する DFT-D4 一次微分の不具合を修正しました。
 - 原子の電子密度の重ね合わせを用いた初期軌道生成が、すべてのサポート対象の点群対称性において動作するように修正しました。
 - define モジュールにおいて、General Menu の ricc2 セクションで異常終了する不具合を修正しました。
 - 自己無撞着 VV10 分散力補正を行った場合の全エネルギーの出力の不具合を修正しました。
 - wB97X-D3 の分散力パラメーターを修正しました。
 - 複数ノードを使用した大規模な ricc2 MPI 並列計算において生じる MPI tag エラーを修正しました。
 - 特定の場合に COSMO outlying charge 補正において、NaN が生じる不具合を修正しました。
 - 対称性を考慮した振動計算における COSMO 法の不具合を修正しました。
 - 局所ハイブリッド汎関数を用いたエネルギー一次微分計算で生じる OpenMP/MKL の不具合を修正しました。
 - MARI-J と OpenMP の組み合わせで生じる不具合を修正しました。
 - diffuse 基底を使用したときの GIMIC インターフェースの不具合 (MOL ファイル出力) を修正しました。
 - GIMIC インターフェースのグリッドデータの出力 (C1 対称性の場合のみ使用可)

における不具合を修正しました。

- DFT に関連したすべてのモジュールの初期化や境界違反などの不具合を修正しました。
- 2成分波動関数計算を用いたときの NumForce モジュールの不具合を修正しました。
- FINE cavity を用いた COSMO 法エネルギー一次微分計算において、\$use_contcav キーワードが使用できるようになりました。
- egrad モジュールにおいて、range-separated ハイブリッド汎関数と特定の積分近似の組み合わせで生じる不具合を修正しました。
- TmoleX で積分グリッド 3a、4a、5a をサポートしました。当該グリッドは相対論 X2C 計算での使用が推奨されます。
- サードパーティーライブラリを新しいバージョンやバグフィックス版に更新しました。詳細は以下のウェブサイトをご参照ください。
<https://media.3ds.com/support/progdir/>
- TmoleX: 周期 DFT 計算用の新しい基底 (pob-TZVP-def2、pob-DZVP-def2) をサポートしました。
- TmoleX: 周期 DFT 計算において分子用基底を使用した場合、警告を表示するように修正しました。
- TmoleX の Start Job パネルにあるメモリ使用量、ディスク容量、および CPU 数の設定を Preferences の Jobs でカスタマイズし、保存できるようになりました。

<修正点>

- スピン軌道相互作用を考慮した 2 成分波動関数計算において、2 成分計算用 ECP が必要な重原子が含まれる場合、TmoleX でエラーが生じる不具合を解消しました。
- Apache Xalan(Java) ライブラリを v2.7.0 から v2.7.3 にアップデートし、脆弱性識別子 CVE-2014-0107、および CVE-2022-34169 の問題を解消しました。
- 2 成分相対論計算の場合、TmoleX の Molecular Attributes において非相対論の初期軌道のみが表示される不具合を修正しました。
- TmoleX で NumForce を使った数値的二次微分計算を、リモートジョブとして Windows PC から Linux システムに投入したとき、Windows 上のファイル名に関係したシステム制限によりエラーとなる不具合を解消しました。
- TmoleX の 3D builder の pre-optimization において xTB を使用した場合、分子の全電荷が考慮されない不具合を解消しました。
- TmoleX: 励起状態の差電子密度の 3D 描画を Windows PC からのリモートジョブとして実行したとき、描画に失敗する不具合を修正しました。
- TmoleX で def2-基底を使用した場合、Ba 元素に間違った基底がアサインされる不具合

を修正しました。これまで使用していた基底は、論文 PCCP, 2005, 7, 3297 で発表された Ba 用の初期の基底で、前バージョンまでアップデートされていませんでした。

- wB97X-D3 汎関数の DFT-D3 分散力パラメーターを論文 (<https://pubs.acs.org/doi/10.1021/ct300715s>) で発表された値に修正しました。
- TmoleX: Bethe-Salpeter 式を用いた UV/Vis スペクトル計算をリモートジョブとして実行した場合、エラーが生じる不具合を修正しました。
- TmoleX: Windows 版の proper.exe で生じるエラーのため、Windows 上で自然遷移軌道 (NTO) を計算できない不具合を修正しました。
- 過去の計算の S² 値が control ファイル中に残り、以降の閉殻系の計算結果にも出力される不具合を修正しました。
- TmoleX: TmoleX 上に入力された DIIS ダンピングパラメーターを周期 DFT 計算においても使用するよう修正しました。
- proper コマンドラインツールで生成された局在化分子軌道の 3D グリッドデータを TmoleX 上で利用できるよう修正しました。
- 環内の結合角のスキャン計算を行ったとき、計算完了後、エラーメッセージが繰り返し表示される不具合を修正しました。