

GRRM は

量子化学の予言性を利用して

未知の化学を切り拓きます

量子化学を利用するプログラムは非常にたくさんありますが、何の予備知識もなしに、未知の化学を切り拓くことができるのは、**GRRM** プログラムだけです。

分子の平衡構造を求めたり、反応の遷移状態の構造を求めたりすることができるというプログラムは世界中に出回っていますが、必ず何らかの情報を補わないと、何もできません。初期構造を与えてやらないと何も答えてくれませんし、初期構造の与え方でうまく結果が出る場合もありますが、失敗して何も出てこないこともあります。

構造最適化による極小点探索をランダムな初期構造を発生させて何度も行うことで、すべての構造が決められると述べている方法が発表されていますが、その方法では乱数の出方で結果が変わり、いくら多数の乱数を用いても、どんなに素晴らしい計算機を用いても、全部見つけられという保証はありません。実際、BCNOS という 5 原子系について「完ぺきに調べた」として報告されている結果を検証するために、**GRRM** を適用してみたところ、多数の構造が見逃されていたことがわかりました。**GRRM** では、さらに反応経路までわかるので、**GRRM** の方が優れていることは明らかです。

反応物と生成物の構造を与えれば、その間の反応経路を調べて遷移状態の構造がわかる（と称している）方法、いろいろなプログラムに搭載されていて非常に多数の人たちに利用されていますが、必ず遷移状態が見つかるわけではなく、見つけられずに失敗することもよくあります。多くの場合、反応物と生成物をまっすぐに結んで一番エネルギーが高くなる場所のエネルギーを下げる方向に探したり、あるいは、遷移状態の構造の予想を付加情報として与えるなどして近くの鞍点を探したりしますが、結局、遷移状態の構造を見つけれずに失敗し、がっかりすることがかなり頻繁に起こります。

GRRM プログラムには、非調和下方歪み追跡(Anharmonic Downward Distortion Following: ADD)という、画期的な化学情報探索アルゴリズムが搭載されているため、何の予備知識や仮定を用いなくても、安定な平衡構造や化学反応の鍵を握る遷移状態の構造を、それらがまったく未知の情報であっても、どんどん探し出してくれます。

さあ、あなたも、**GRRM** を使って、未知の化学を切り拓いてみませんか。