

# 人工力誘起反応法の GRRM プログラムへの実装とその応用

(北大院理) 前田 理

smaeda@eis.hokudai.ac.jp

GRRM プログラムは[1]、量子化学計算に基づいて反応経路の自動探索を行うために開発された。開発当初は、非調和下方歪み追跡法[2]のみが利用可能であったが、2014年にリリースされた GRRM14 からは人工力誘起反応 (Artificial Force Induced Reaction: AFIR) 法[3]の利用が可能になった。

AFIR 法は、二つ以上の分子が衝突して反応する際の反応経路を効率よく探索する目的で開発された[4]。その際用いられる多成分アルゴリズム (MC-AFIR) は、GRRM14でも利用することができる。一方、単成分アルゴリズム (SC-AFIR) の導入により、異性化や分解の経路も含むグローバル反応経路地図の作製も可能となった[5]。SC-AFIRでは、探索領域を柔軟に制限する多数のオプションを用いて、計算者がほしい経路のみを高速に得ることができる。そのため、有機反応など複雑系への適用性が非常に高い。また、GRRM17 では指定した二つの構造間の経路のみを得るアルゴリズム (DS-AFIR) が利用でき、多段階反応の経路全体を単一のインプットで得ることが可能である[6]。

本講演では、SC-AFIR および DS-AFIR の利用について、単純な応用例と共に示す。また、二枚のポテンシャル面同士の交差領域内エネルギー極小点および円錐交差領域内エネルギー極小点の自動探索を SC-AFIR によって実行する例、および、SC-AFIR と ONIOM 法とを組み合わせた巨大系の反応経路探索についても述べる。時間があれば、現在開発中の速度論[7]の実装や固体系への応用[8]などについても議論する。

## References:

- [1] S. Maeda, Y. Harabuchi, Y. Osada, T. Taketsugu, K. Morokuma, K. Ohno, GRRM14, see [http://grrm.chem.tohoku.ac.jp/GRRM/index\\_e.html](http://grrm.chem.tohoku.ac.jp/GRRM/index_e.html) (accessed date: August 19, 2017).
- [2] For review, see: S. Maeda, T. Taketsugu, K. Morokuma, K. Ohno, *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **2014**, *87*, 1315-1334.
- [3] For review, see: S. Maeda, Y. Harabuchi, M. Takagi, T. Taketsugu, K. Morokuma, *Chem. Rec.* **2016**, *16*, 2232-2248.
- [4] S. Maeda, K. Morokuma, *J. Chem. Phys.* **2010**, *132*, 241102/1-4.
- [5] S. Maeda, T. Taketsugu, K. Morokuma, *J. Comput. Chem.* **2014**, *35*, 166-173.
- [6] S. Maeda, et al., (submitted for publication).
- [7] Y. Sumiya, T. Taketsugu, S. Maeda, *J. Comput. Chem.* **2017**, *38*, 101-109.
- [8] M. Takagi, T. Taketsugu, H. Kino, Y. Tateyama, K. Terakura, S. Maeda, *Phys. Rev. B* **2017**, *95*, 184110/1-11.