

## 化学反応経路自動探索結果の自動解析システム GDSP の開発

(1:豊田理研, 2:東北大院理) 大野 公一<sup>1</sup>, 長田 有人<sup>2</sup>, 岩本武明<sup>2</sup>

[序] 特定の化学式について、どのような化学種が可能であるか、それらはどのように相互変換するか、各化学種はどのように分解するか(逆向きに、どのように過不足なく合成されるか)は、化学の基本問題である。われわれは、この問題を理論的に解き明かす基本アルゴリズムおよび量子化学計算に基づいて Global Reaction Route Mapping(GRRM)を追求するプログラムの開発を進めてきた[1-3]。その結果、従来まったく不可能[4]とされてきた5原子以上の系の GRRM の自動探索が可能になり、対象となる原子数は 10 を超え、使用可能 cpu 数が増せば、原子数の壁はさらに大きく打ち破ることができる状況になった。これに伴い獲得される情報量も膨大になり、その処理を手作業で行うと莫大な時間を浪費するため、GRRM の出力データの整理・解析を自動化することが必要になってきた。本講演では、GRRM の出力データを整理・解析し、個々の構造の3D 表示を、WEB ページを通して簡便に閲覧できるようにするための自動解析システム GDSP の構築とその結果について報告する。

[方法] 計算サーバ上に出力された GRRM の出力データを、そのまま解析して、エネルギーの高低の順などにより、平衡構造や遷移構造を系統的に番号付けするとともに、それらの連結関係を整理した2次データを自動作成するプログラム GRRM\_FORM と、さらにその結果に基づいて、整理されたデータリストがリンクとして張られ、各構造の3D 表示や TS 周辺の IRC チャンネルの動画を簡単な操作で閲覧できる WEB ページおよび関連データを自動作成するプログラム GDSP を開発した。

[結果と考察] GRRM 出力データの整理・解析は、すべてテキスト処理であることと、整理されたデータの閲覧を WEB ページで行うための HTML ファイルの作成もテキスト編集で行うため、プログラム言語としては Perl(**Practical Extraction and Report Language**)を使用し、テキストファイル全体を1つの文字列として読み込み、序列処理は Hash を用いて行った。3D 画像表示は無料で使用できる JMOL を標準とし、CambridgeSoft の Chem3D も option で使用できるようにした。データ処理および WEB ページ用 HTML ファイルおよび関連データファイルの作成は、Linux サーバ上で行った(Linux を起動できるパソコン上でも可)。整理解析されたデータの閲覧は、WEB サーバに搭載して任意の場所から WEB ページとして利用でき、個人の PC 内に搭載すれば off-line でいつでも利用することができる。

8原子系  $\text{H}_4\text{C}_2\text{O}_2$  の GRRM について、整理解析を手作業で試みたところ、全体の約3分の1を行うのに 140 時間(約半月)を要し、途中で完成を断念した。これに対し、本研究で作製した GRRM\_FORM+GDSP (GRRM-GDSP)では、全作業の処理に要した計算時間は、わずか数秒であった。発表時には、ノートパソコンを用い、得られた整理解析結果の WEB ページによる閲覧を実演するとともに、IRC チャンネルの動画を通じて、反応過程における原子の移動状況における興味深い挙動について討論する。

[1] K. Ohno and S. Maeda, Chem. Phys. Lett. 384, 277 (2004).

[2] S. Maeda and K. Ohno, J. Phys. Chem. A 109, 5742 (2005).

[3] K. Ohno and S. Maeda, J. Phys. Chem. A 110, 8933 (2006).

[4] F. Jensen, Introduction to Computational Chemistry, Wiley, 1999.