

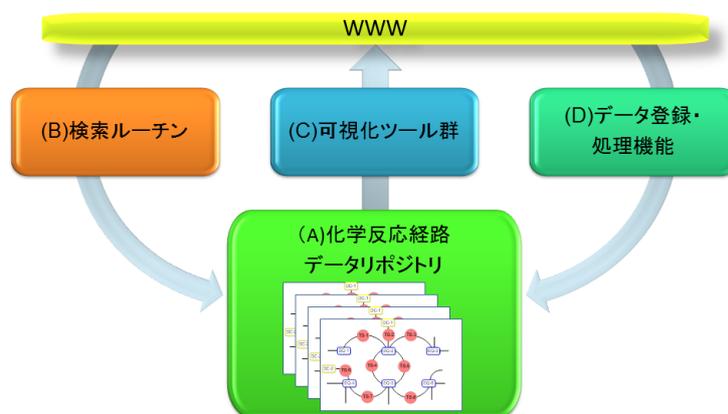
## GRRMによる化学反応経路探索とライブラリ化

佐藤寛子<sup>1</sup>, Stefano Borini<sup>1</sup>, 小田朋宏<sup>2</sup>, 中小路久美代<sup>2</sup>, 大野公一<sup>3</sup>  
(1. 国立情報学研究所, 2. 株式会社 SRA, 3. 豊田理化学研究所)

有機化学反応の設計と予測には、従来、化学合成実験データに基づいた経験的なアプローチと、量子力学や分子動力学による理論計算・シミュレーションによるアプローチがとられてきている。経験的なアプローチには、実験事実にもとづき、現実的な大きさの反応系について、高速に解を与える利点があり、有機合成に携わる研究者のデマンドに適う提案や、研究者が考えるヒントとなるような情報を与える可能性が高い。その一方で、既知情報に基づくアプローチには、新規反応の設計や予測には限界がある。理論計算によるアプローチには、有機合成で検討される反応系の規模と件数をカバーするほどの高速性はないが、検討すべき問題の焦点が絞られた系について、高精度な設計や予測のための重要な指針を与えることができる。さらに、新規反応の設計や予測にも広く利用することが可能である。

我々は、両者の利点を活かした有機化学反応の設計と予測を目指し、ポテンシャルエネルギー曲面上の反応経路の全面探索が可能な超球面探索法(GRRM)を利用した量子化学計算ベースの化学反応経路ライブラリの構築に着手し、プロトタイプを開発した[1,2]。

今回は、本ライブラリの開発状況と、GRRMによる探索と本ライブラリへの格納を進めている、低分子を対象とした反応経路探索の結果についての最新の結果を報告する。



化学反応経路ライブラリの概念図

[1] 佐藤寛子、「理論化学と化学情報学の連携による化学反応の予測と設計への取り組み」、化学反応経路探索のニューフロンティア 2011

[2] 佐藤寛子、「化学反応経路データベースの構築」、化学反応経路探索のニューフロンティア 2009