

## 三次元表示に基づくグローバル反応経路地図可視化の試み

(北大院理) ○小野ゆり子、前田理、武次徹也

【序論】異性化反応経路や解離反応経路を網羅的に自動的に探索する GRRM により、計算化学は新たな局面を迎えている。これまで経験的な技量に頼ることが多かった遷移状態探索、またこれまで見落とされていた反応経路も全て自動的に探索され、分子系全経路地図を僅かな労力で手に入れることも可能になった。今や、反応経路、分子系の辿る全経路を総合的・俯瞰的に理解することも可能になったと言っても過言ではない。しかしながら GRRM 計算から得られる情報は膨大であり、経路地図作成を始めとする結果処理も手作業では到底追いつかない。解析にはこれまで局所的に見つけた反応を解析するために使われていた分子描画ツール、グラフ作成ツールが使われているケースが多いが、GRRM から得られる全データの全体像を容易に把握するには、新たな解析手法、新たなツールの開発が必要である。本研究においては GRRM 計算から得られる結果の全体像を直感的に理解することを目標として、反応経路図の二次元及び三次元マッピングを目的としたツールの開発を行なった。羅針盤である GRRM から得られたデータを二次元に表現した全経路図は、まさにその反応系の「世界地図」である。このグラフを三次元化することにより、更に反応系のイメージを掴みやすくする。

【作図】反応経路地図の作成には Graphviz<sup>1</sup>を使用する。Graphviz はグラフ記述言語 DOT で記述された構造と結合の情報を、自動的に二次元図に描画するプログラムである。GRRM 計算より得られる EQ\_list.log, TS\_list.log, DC\_list.log より構造とエネルギー及び connection の情報を取得し、DOT 言語に書き直し Graphviz で実行すると自動的に反応経路地図が作成される。なお、対象となる全構造はエネルギー順に sort し、最小エネルギーを持つ構造を青、最大エネルギーを持つ構造を赤として中間に位置する各構造を表現するノードの表記に用いられる色を決定した。構造の数が数百個に及ぶ場合は有向グラフである dot を用い、構造の数が 30 個程度に収まる場合には「spring-model」を用いる neato を用いる方が全体像を掴みやすい。反応経路（三次元）図の作成は、まず前述の二次元図を作成して地図の全体像を確認してから各構造を示す全ノードの座標を取得し、x, y 座標を決定する。この座標に各構造の持つエネルギー値を z 座標の値として設定した。各ノード間を結ぶエッジは spline 曲線で描く他、IRC 計算から得られた曲線のカーブをエッジ上に表現することも可能である。三次元レンダリングには POV-Ray<sup>2</sup>を用いた。

---

<sup>1</sup> Graphviz (<http://www.graphviz.org/>)

<sup>2</sup> POV-Ray (<http://www.povray.org/>)