

GRRM 計算結果の直感的理解を目指した 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、原渕祐、住谷陽輔、武次徹也、前田理

異性化反応経路や解離反応経路を網羅的かつ自動的に探索する反応経路自動探索法 (Global Reaction Route Mapping 法) の登場により、これまで経験的な技量に頼り議論されてきた遷移状態構造や反応経路も全て自動的に探索され、分子系の全経路地図を僅かな労力で手に入れることが可能になった。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が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データ処理も手作業では到底追いつかない。

GRRM 計算結果の解析には、これまで個別の反応経路を解析するために使われてきた分子描画ツール、グラフ作成ツールが利用され、目的とする化学現象の解明を試みるケースが多い。そのため多くの場合、着目した現象に直接繋がるデータ以外のデータに関しては、十分に活用されているとは言い難い。切り出した一部の情報のみでも、通常の議論には充分である。しかし GRRM から得られたデータの他にはない価値の高さは、何より GRRM が対象分子に対し「網羅的に」「系統的に」経路を探索していることにある。ここには対象分子に関する非常に多くの情報が含まれており、一つのシステムを形成していると言える。しかしながら GRRM から得られる情報は、個人が直感的に把握し扱うことのできる量を遥かに超えており、得られた計算結果を解析し、全体像を容易かつ余すところなく把握し理解するためには、新たな解析手法やツールの開発が必要である。我々は GRRM 計算結果の全体像の直感的な理解を目指し、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進めている。SRPS2013 ではブタジエンの全面探索結果の可視化を行ったが、今回はクライゼン転位反応を題材に可視化を行う。

化学の世界の羅針盤である 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。 $3N - 6$ 次元の自由度を持つ分子の膨大なデータを二次元へ縮約し可視化することは、現象の直感的理解に役立ち、見る者に反応系の全貌を鳥瞰するような視点をもたらし、反応系についての深い洞察と幅広い議論へと繋がることが期待される。

反応経路地図の作成には Graphviz¹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グラフに描画するプログラムである。またネットワーク解析には networkx²を用いた。三次元レンダリングには POV-Ray³を用いた。

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

² networkx (<https://networkx.github.io/>)

³ POV-Ray (<http://www.povray.org/>)