

GRRMプログラムの新展開2019

(北大WPI-ICReDD・北大院理・NIMS) 前田 理

コンピュータの高速化・大規模化と、量子化学計算の手法およびソフトウェアの発展により、量子化学計算は反応開発において欠かせないツールになりつつある。例えば、複数の反応機構に対するエネルギープロファイルを量子化学計算によって計算し、それらと比較することで、最も有力な反応機構を明らかにした成果が数多く報告されている。しかしながら、一般に行われている構造最適化計算では、求めたい反応経路に関する事前情報が必要になる。このため、反応機構が全く分からない反応に対して計算を実行することは難しい。さらに踏み込んで、未知反応の「予測」を目指すならば、この問題は避けて通れない。

我々は、この問題の解決を目指して、反応経路自動探索法の開発を進めてきた。中でも、2010年から開発を進めている人工力誘起反応（AFIR: artificial force induced reaction）法は汎用性が高く、有機合成反応など様々な化学反応へと適用されてきた[1]。本講演では、AFIR法によって反応経路ネットワークを構築し、その速度論に基づく解析によって化学反応を予測する技術について紹介する。加えて、すでに公開している GRRM17 プログラム[2]からの発展と、次のバージョンの公開に向けた取り組みについても紹介する。

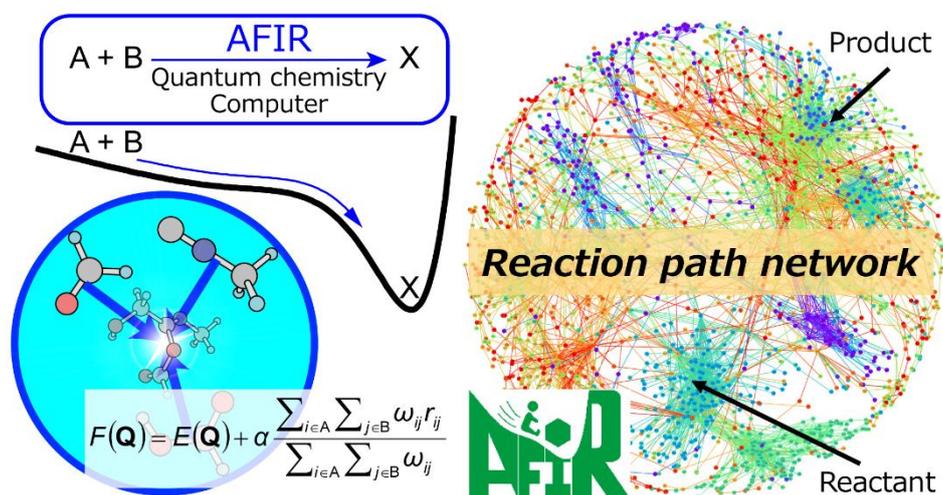


図1. AFIR法を用いた反応経路ネットワークの構築

1. Maeda, S.; Ohno, K.; Morokuma, K. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2013**, *15*, 3683-3701.; Maeda, S.; Takagi, M.; Harabuchi, Y.; Taketsugu, T.; Morokuma, K. *Chem. Rec.* **2016**, *16*, 2232-2248.
2. Maeda, S.; Harabuchi, Y.; Takagi, M.; Saita, K.; Suzuki, K.; Ichino, T.; Sumiya, Y.; Sugiyama, K.; Ono, Y. *J. Comput. Chem.* **2018**, *39*, 233-251.