

GRRMプログラムの新展開2021

(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。我々は、量子化学計算に基づく化学反応経路の自動探索を可能にする GRRM プログラムの開発を進めてきた[1]。近年では、人工力誘起反応 (AFIR) 法の開発を進め[2]、反応機構の解明のみならず、オン・ザ・フライ速度論シミュレーション[3] (図 1) や未知反応の予測[4] (図 2) にまで応用範囲を拡張してきた。さらに最近、生成物構造を入力とし、その化学組成で可能な反応物構造候補を列挙する多段階量子化学的逆合成解析 (MS-QCaRA) を実現した[5]。MS-QCaRA を除く機能は、最新版 GRRM20 において一般利用者が使用可能である[6]。本講演では、AFIR 法を用いた最新の応用について紹介する他、GRRM20 の機能についても紹介する。

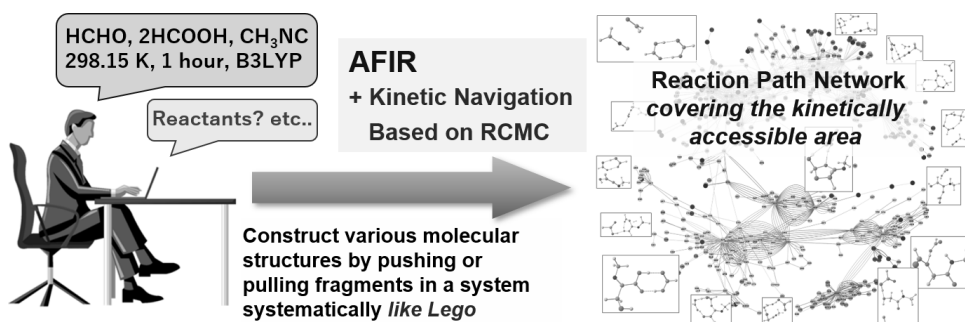


図 1. AFIR 法を用いたオン・ザ・フライ速度論シミュレーション

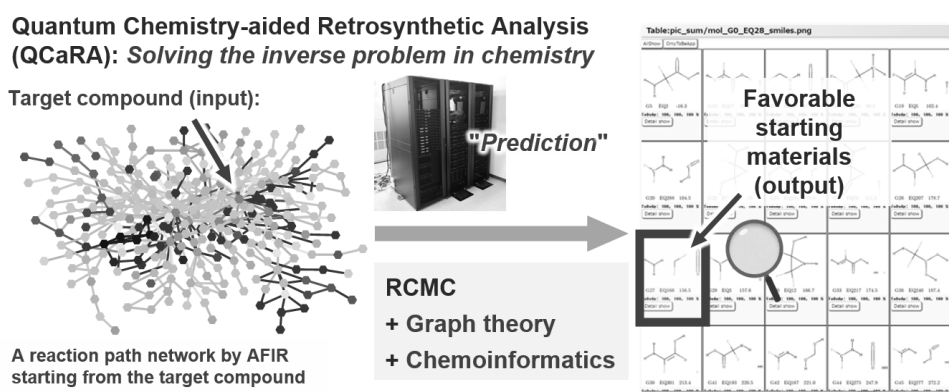


図 2. AFIR 法を用いた化学反応の予測 (量子化学的逆合成解析)

1. Maeda, S.; Ohno, K.; Morokuma, K. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2013**, *15*, 3683.
2. Maeda, S.; Harabuchi, Y. *WIREs Comput. Mol. Sci.* **2021**, *11*, e1538.
3. Sumiya, Y.; Maeda, S. *Chem. Lett.* **2020**, *49*, 553.
4. Mita, T.; Harabuchi, Y.; Maeda, S. *Chem. Sci.* **2020**, *11*, 7569.
5. Sumiya, Y.; Harabuchi, Y.; Nagata, Y.; Maeda, S. (preprint is available in *ChemRxiv*).
6. <https://afir.sci.hokudai.ac.jp/>