

## GRRM プログラムの新展開 2022

(北大院理・北大 ICReDD) 前田 理

smaeda@eis.hokudai.ac.jp

コンピュータの大規模化と、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反応経路自動探索を可能にする GRRM プログラムの開発を行ってきた[1]。近年では、人工力誘起反応 (AFIR) 法の開発を進め[2]、速度式を解きながら反応経路ネットワークを生成し、生成物、副生成物、それらの収率、および、それらの生成機構を一挙に予測するオン・ザ・フライ速度論シミュレーションを実現した[3]。さらに、速度式を逆向きに解きながら、生成物から反応物へと時間をさかのぼって反応経路ネットワークを生成する、逆オン・ザ・フライ速度論シミュレーションをも可能にした[4]。これらを用いた有機合成法の開発にも取り組んでおり、量子化学計算によって化学反応をゼロから予測できることを実証してきた[5,6]。

それらとは別に、有機金属触媒の配位子スクリーニングを革新するバーチャル配位子 (Virtual Ligand: VL) モデルを提案した[7]。VL モデルを用いることで、電子効果と立体効果の 2 パラメータに対する初期スクリーニングを、連続関数空間で行うことができる。これにより特定したヒット領域のパラメータから配位子を選択/設計するという、従来とは全く異なる高速スクリーニングが可能である。さらに、VL モデルは有機金属触媒における反応経路ネットワーク生成を劇的に加速する。

講演では、上記について解説するとともに、ゲル材料内でのメカノラジカル生成効率予測[8]や光レドックス触媒機構の全貌解明[9]などの応用例についても紹介する。

1. Maeda, S.; Ohno, K.; Morokuma, K. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2013**, *15*, 3683-3701.
2. Maeda, S.; Harabuchi, Y. *WIREs Comput. Mol. Sci.* **2021**, *11*, e1538.
3. Sumiya, Y.; Maeda, S. *Chem. Lett.* **2020**, *49*, 553-564.
4. Sumiya, Y.; Harabuchi, Y.; Nagata, Y.; Maeda, S. *JACS Au* **2022**, *2*, 1181-1188.
5. Mita, T.; Harabuchi, Y.; Maeda, S. *Chem. Sci.* **2020**, *11*, 7569-7577.
6. Hayashi, H.; Katsuyama, H.; Takano, H.; Harabuchi, Y.; Maeda, S.; Mita, T. *Nat. Synth.* **2022**, [DOI: 10.1038/s44160-022-00128-y].
7. Matsuoka, W.; Harabuchi, Y.; Maeda, S. *ACS Catal.* **2022**, *12*, 3752-3766.
8. Wang, Z. J.; Jiang, J.; Mu, Q.; Maeda, S.; Nakajima, T.; Gong, J. P. *J. Am. Chem. Soc.* **2022**, *144*, 3154-3161.
9. Harabuchi, Y.; Hayashi, H.; Takano, H.; Mita, T.; Maeda, S. (submitted to a journal), a preprint available from ChemRxiv [DOI: 10.26434/chemrxiv-2022-5bjb6].