

GRRM プログラムの新展開 2024

(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]。

講演では、上記について解説するとともに、WPI-ICReDD において実施した情報グループや数学グループとの連携によって拓かれた新たな展開についても紹介する。具体的には、機械学習ポテンシャルの導入法や活用事例[6,7]、速度論シミュレーションによって得られる理論収率のエネルギー微分[8]とエネルギーの触媒パラメータ微分[9]を組み合わせた触媒能の連続最適化の試みなどである。

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. Maeda, S.; Harabuchi, Y.; Hayashi, H.; Mita, T. *Annu. Rev. Phys. Chem.* **2023**, *74*, 287-311.
5. Hayashi, H.; Maeda, S.; Mita, T. *Chem. Sci.* **2023**, *14*, 11601-11616.
6. Staub, R.; Gantzer, P.; Harabuchi, Y.; Maeda, S.; Varnek, A. *Molecules* **2023**, *28*, 4477.
7. Ichino, T.; Nabata, H.; Matsumoto, K.; Hasegawa, T.; Maeda, S. *ChemRxiv* [DOI: 10.26434/chemrxiv-2024-9h20v].
8. Harabuchi, Y.; Yokoyama, T.; Matsuoka, W.; Oki, T.; Iwata, S.; Maeda, S. *J. Phys. Chem. A* **2024**, *128*, 2883-2890.
9. Matsuoka, W.; Oki, T.; Yamada, R.; Yokoyama, T.; Suda, S.; Harabuchi, Y.; Iwata, S.; Maeda, S. *ChemRxiv* [DOI: 10.26434/chemrxiv-2024-6www6].