

# GRRM プログラムの新展開 2025

(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、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など、最近の進展について紹介する。具体的には、速度定数行列縮約法の拡張[6]や、オンザフライ探索-NNP トレーニング技術の進展[7]、実験グループとの連携の下での自己強化ポリマー材料設計における活用事例[8,9]、松岡らによって開発されているバーチャル配位子法の発展[10]とその GRRM との連携についてなどである。

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. Maeda, S.; Ichino, T.; Harabuchi, Y.; Staub, R.; Varnek, A. (To be submitted).
7. Staub, R.; Harabuchi, Y.; Seraphim, C.; Varnek, A.; Maeda, S. *ChemRxiv* [DOI: 10.26434/chemrxiv-2025-9h8dr].
8. Jiang, J.; Wang, Z. J.; Staub, R.; Harabuchi, Y.; Varnek, A.; Gong, J. P.; Maeda, S. *Chem. Sci.* **2025**, *16*, 14278-14285.
9. Jiang, J.; Kubota, K.; Harabuchi, Y.; Jin, M.; Wang, Z. J.; Nakajima, T.; Ito, H.; Gong, J. P.; Maeda, S. *J. Am. Chem. Soc.* **2025**, *147*, 32502-32521.
10. Matsuoka, W.; Hirose, K.; Yamada, R.; Oki, T.; Iwata, S.; Maeda, S. *J. Chem. Inf. Model.* **2025**, *65*, 6913-6926.