

SMILES 記法による反応経路の分類： γ -ketohydroperoxide の反応経路探索

○原 祐^{1,2,3}、前田 理^{1,3,4}

(北大院理¹、JST さきがけ²、WPI-ICReDD³、NIMS⁴)

我々は反応経路自動探索法の開発を世界に先駆けて進め[1]、反応経路探索が実際の化学反応の機構解析に有効であることを示してきた。現在、反応速度論や周期境界条件などの技術を導入しながら、効率の改善と適用範囲の拡大を進めている。最近では、freezing string method (FSM) [2]、growing string method (GSM) [3]、single-ended growing string method (SSM) [4]、KinBot [5]など、いくつかの異なる原理に基づいた方法が提案されている。また、 γ -ketohydroperoxide (KHP)に対してこれらの反応経路探索法を適用し、得られる経路の種類やその計算コストを比較する研究も行われ[6,7]、反応経路探索法に対する注目がますます高まっている。

反応経路探索は未知の反応経路を予測することが可能であるが、その一方で、多くの反応経路が得られるため、どのように得られた結果を解析するかが課題となってきた。例えば、図に示す KHP を反応物とする反応経路を GRRM17 プログラム[8]を用いて単成分人工力誘起反応(SC-AFIR)法によって探索した場合、KHP から KHP 以外の分子構造に到達する反応の遷移状態(TS)が 401 個、KHP のコンフォメーション変化の TS が 99 個得られる[7]。得られた TS の中には、同一の化学種の異なるコンフォマーに到達する反応経路が複数存在するため、何種類の反応経路が得られたのかを研究者が解析するのは容易ではない。

本研究では、分子構造の文字列表記法の 1 つである SMILES 記法を用いることで、得られた反応経路を分類する方法を提案する。SMILES 記法は、分子構造をある文字列で表現するため、データ量が小さいことに加え、同じ結合パターンを持つ分子構造を文字列比較で分類することが可能である。本研究では、SMILES 記法を用いて得られた反応経路を 85 グループに分類することで結果を解析した[7]。

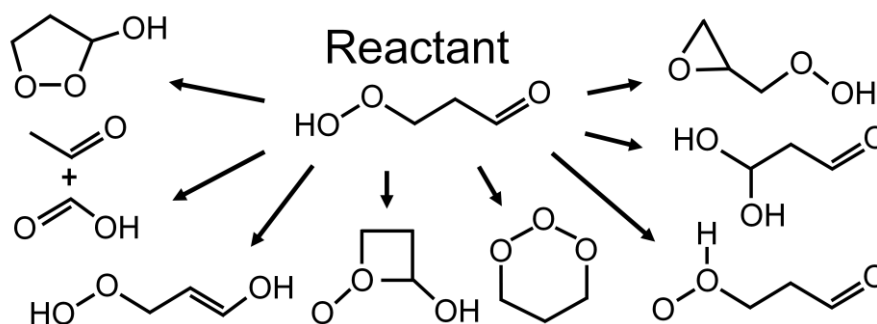


図. γ -ketohydroperoxide (KHP)からの反応経路の一部

【引用文献】

- [1] Maeda, S.; Ohno, K.; Morokuma, K. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2013**, 15, 3683-3701. Maeda, S.; Harabuchi, Y.; Takagi, M.; Taketsugu, T.; Morokuma, K. *Chem. Rec.* **2016**, 16, 2232-2248.
- [2] Behn, A.; Zimmerman, P. M.; Bell, A. T.; Head-Gordon, M. *J. Chem. Phys.* **2011**, 135, 224108; Suleimanov, Y. V.; Green, W. H. *J. Chem. Theory. Comput.* **2015**, 11, 4248-4259.
- [3] Mallikarjun Sharada, S.; Zimmerman, P. M.; Bell, A. T.; Head-Gordon, M. *J. Chem. Theory. Comput.* **2012**, 8, 5166-5174; Zimmerman, P. M. *J. Comput. Chem.* **2013**, 34, 1385-1392.
- [4] Zimmerman, P. M. *J. Comput. Chem.* **2015**, 36, 601-611.
- [5] Zador, J.; Najm, H. N., Report No. SAND2012-8095 Sandia National Laboratories, **2013**.
- [6] Grambow, C. A.; Jamal, A.; Li, Y. P.; Green, W. H.; Zador, J.; Suleimanov, Y. V. *J. Am. Chem. Soc.* **2018**, 140, 1035-1048.
- [7] Maeda, S.; Harabuchi, Y. *J. Chem. Theory Comput.* **2019**, 154, 2111-2115.
- [8] 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.