

人工力誘起反応法による反応経路の自動探索

前田 理：北大院理・NIMS

化学反応のメカニズムは、量子化学計算に基づく反応経路を計算することによって解析できる。数学的に定義される反応経路である固有反応座標は、ポテンシャルエネルギー曲面上の一次鞍点からの（質量荷重座標での）最急降下経路として計算することができる。そのため、反応に関わる一次鞍点すべてを、見落としなく自動探索できれば、化学反応を予測することも可能である。しかしながら、分子の持つ構造変化の自由度は膨大で、構造変数空間全体をしらみつぶしに調べることは不可能に近い。一方、反応経路は一次元の線であるため、反応経路自身を辿って反応経路を自動探索することができれば、構造変数空間をしらみつぶしにせずとも、すべての反応経路を得ることができる。しかしながら、固有反応座標を安定構造から辿って別の構造へと移動することは不可能であることが分かっている。

我々は、安定構造から辿れる近似的な反応経路を提案し、得られる近似経路を最適化する、という戦略によって、反応経路を辿って反応経路を見つけるという理想へとアプローチしてきた。2010年に発表した人工力誘起反応（AFIR）法は、反応サイト同士を押し付ける、という一見乱暴にも思える単純アルゴリズムで、近似的な反応経路を求めることができる[1]。AFIR法は多くの有機反応や光反応に応用されてきた。本講演では、AFIR法と、AFIR法を搭載したGRRMプログラムの利用例について紹介する[2]。

押し付けるという単純操作は、複雑な反応系であっても容易に実行できる。そのため、図1に示すような様々な反応系への汎用化が実現している。例えば、図2に示す表面反応の反応経路ネットワーク自動構築を最近報告した[3]。講演では、これら最先端技術についても紹介する。

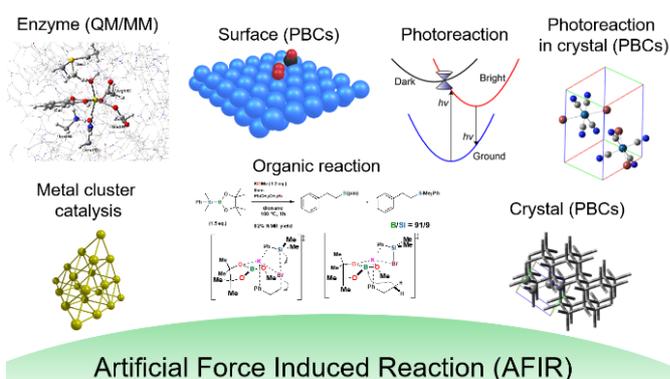


図 1. AFIR 法の様々な反応系への汎用化

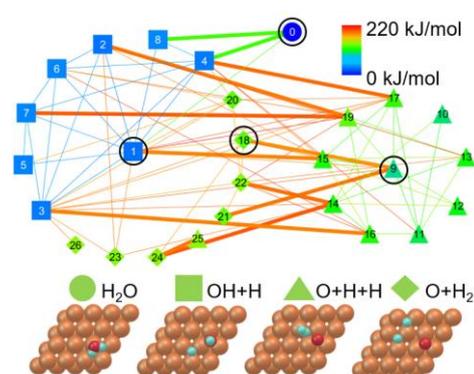


図 2. Cu(111)表面上の H₂O の反応経路ネットワーク [3]

参考文献

- [1] S. Maeda, K. Morokuma, *J. Chem. Phys.* **2010**, *132*, 241102
- [2] S. Maeda, Y. Harabuchi, M. Takagi, K. Saita, K. Suzuki, T. Ichino, Y. Sumiya, K. Sugiyama, Y. Ono, *J. Comput. Chem.* **2018**, *39*, 233.
- [3] S. Maeda, K. Sugiyama, Y. Sumiya, M. Takagi, K. Saita, *Chem. Lett.* **2018**, (in press).

関連 web

<https://afir.sci.hokudai.ac.jp/>