

1P117 理論化学—データケミストリー：  
超球面探索法より得られる化学反応経路データの蓄積と活用  
(国立情報研<sup>1</sup>, 株式会社 SRA<sup>2</sup>, 量子化学探索研究所<sup>3</sup>)  
佐藤寛子<sup>1</sup>, ボリーニ・ステファノ<sup>1</sup>, 小田朋宏<sup>2</sup>, 中小路久美代<sup>2</sup>, 大野公一<sup>3</sup>

Theoretical-Data Chemistry: Data Repository and Applications of Chemical Reaction Path  
Information Obtained from Scaled Hypersphere Search

(National Institute of Informatics (NII)<sup>1</sup>, Software Research Associates (SRA), Inc.<sup>2</sup>, Institute for Quantum  
Chemical Exploration<sup>3</sup>)

Hiroko Satoh<sup>1</sup>, Stefano Borini<sup>1</sup>, Tomohiro Oda<sup>2</sup>, Kumiyo Nakakoji<sup>2</sup>, Koichi Ohno<sup>3</sup>

**【序】** 現在までに存在が確認されている化学物質は約 7000 万種類であり、年間数十万～百万種オーダーで増え続けている。しかし、超球面探索法 (SHS: Scaled Hypersphere Search) 法の開発と GRRM (Global Reaction Rout Map) プログラムへの実装により、理論的には存在しうるが、いまだ人類が手にしていない化学物質種の数はいくらに凌駕することが明らかとされつつある。これらの未知の分子構造を含む化学反応経路データをリポジトリ化し、化学情報処理により新規分子構造の発見や分子・反応設計に応用するプロジェクトを開始した。今回は、現在までに構築した化学反応経路リポジトリと応用展開の展望について報告する。

**【分子構造の数え上げ方法】** 指定された組成式を満たす分子構造を数え上げる方法としては、原子 (点) と結合 (線) のトポロジカルな関係にもとづき数学的に列挙する方法 (ここではトポロジカル法と呼ぶ) がある。トポロジカル法としては、ドイツ Bayreuth 大学の A. Kerber, R. Lane らにより開発されている MOLGEN<sup>1</sup> が代表的である。トポロジカル法の利点は極めて高速に数え上げを可能とする点にある。得られる分子は原子価を満たすもののみであり、分子構造は平面である。一方、量子化学に基づき、ポテンシャル曲面上の極小点と鞍点を結ぶ化学反応経路を探索することで、分子構造とその合成方法を得る数え上げ方法 (ここではポテンシャル法と呼ぶ) も原理的に可能である。これを自動的に探索することは不可能であると考えられていたが、2004 年に大野公一・前田理 (当時東北大学) らにより発表された SHS(Scaled Hypersphere Search) と名付けられた画期的な手法により、従来の常識が破られた。<sup>2</sup> 本手法は、GRRM (Global Reaction Route Map) プログラムに実装され、ポテンシャル曲面を超球面探索法により網羅的に探索する。現在までに種々の化学物質に適用され、従来知られていた化学物質や反応経路を遥かに凌駕する可能性が発掘されることが明らかとなってきた。たとえば、組成式 C<sub>6</sub>H<sub>6</sub> の場合、トポロジカル法では 217 種の分子構造が得られるが、GRRM では、半経験的レベルで 2073 種の平衡構造が出力される。ポテンシャル法の利点は、分子の性質や反応性、物性を議論するのに不可欠な、分子構造が 3 次元であること、電子状態や分子軌道の情報を含むこと、遷移状態を含む反応経路の情報が提供されることである。

**【システム構想と開発状況】** そこで、私達は、GRRM を利用し、未知の化学物質を含む化学反応経路の網羅的探索とリポジトリ化を行い、新規物質の発見と創出のための化学情報資源を整備する『埋蔵分子発掘プロジェクト』を開始した。システム構想を Fig.1 に示す。GRRM による分子構造・反応経路探索は、ユーザによるものと、分散型 GRRM により広範囲に自動的に行われるものの 2 種類を想定している。いずれもリポジトリ化され、計算結果の可視化と解析、データリポジトリの検索を可能とする。大量に蓄積された分子構造・反応経路データのマイニングにより、新規物質の発見と反応経路設計へと応用する機能も構想に含まれている。

現在までに、データベースのプロトタイプを開発するとともに (Fig. 2)、GRRM の計算結果を解析するための可視化ツールの開発を進めてきている。

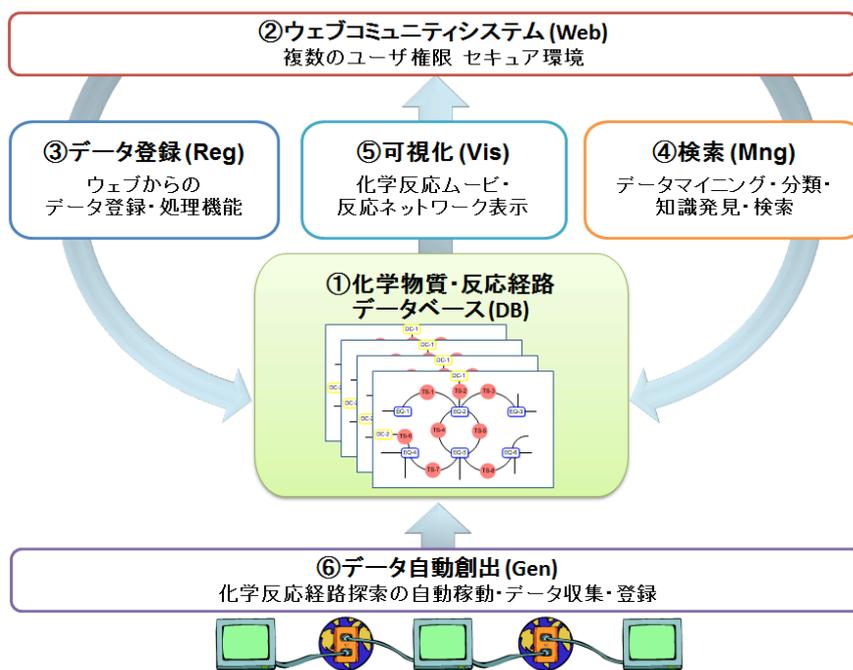


Fig. 1 システム構想

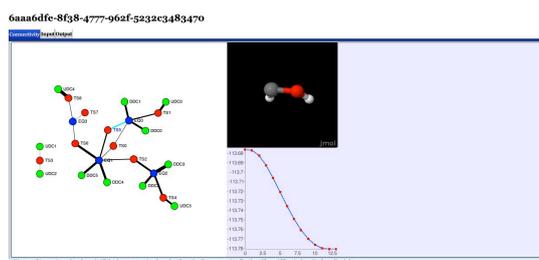


Fig. 2 プロトタイプシステムの表示例

発表では、プロトタイプと可視化ツールのデモンストレーションを合わせて、システム構想と開発状況について報告する。

1. URL: molgen.de
2. (a) Ohno, K.; Maeda, S. *A Chem. Phys. Lett.* **2004**, *384*, 277-282. (b) Maeda, S.; Ohno, K. *J. Phys. Chem. A* **2005**, *109*, 5742-4753. (c) Ohno, K.; Maeda, S. *J. Phys. Chem. A* **2006**, *110*, 8933-8941.