

課題名(タイトル):

分子構造の回帰分析に基づく触媒の最適形状探索

利用者氏名:

○山口 滋

理研における所属研究室名:

環境資源科学研究センター 触媒・融合研究グループ

### 1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

データ駆動型不斉触媒設計法の開発に取り組んでいる。本課題では、不斉触媒反応における生成物の鏡像異性体比と不斉触媒の3次元構造情報とを機械学習手法を用いて相関付けし、不斉収率にとって重要な構造情報を抽出・可視化し、その情報をもとに触媒設計を行うことを目的としている。不斉触媒を3次元構造情報に変換するために、触媒構造の構造最適化を行った。また遷移状態計算もあわせて行い、可視化した重要構造情報と照らしあわせることによる反応機構解明も行なった。

### 2. 具体的な利用内容、計算方法

触媒構造最適化、反応の遷移状態計算には Gaussian16 を用いた。密度汎関数法を用い各種汎関数および基底関数を検討した。

### 3. 結果

最適化した不斉触媒構造を用いて、機械学習のための記述子を計算した。計算した記述子から汎化能の良い不斉収率予測モデルを構築しつつ、可視化した重要構造情報をもとに分子設計にも成功している。とくに今年度は開発した手法をさまざまな系に拡張し、その適用範囲を調べた。広範囲の不斉触媒反応に本手法が有用であることがわかりつつある。

### 4. まとめ

計算化学的手法が不斉触媒反応のデータ解析に大いに役立っている。研究推進上、Hokusai スーパーコンピュータシステムは不可欠となっている。

### 5. 今後の計画・展望

引き続き、不斉触媒のデータ駆動型設計法の開発に取り組む。

2019 年度 利用研究成果リスト

【雑誌に受理された論文】

Shigeru Yamaguchi<sup>\*</sup>, Mikiko Sodeoka “Molecular Field Analysis Using Intermediates in Enantio-Determining Steps Can Extract Information for Data-Driven Molecular Design in Asymmetric Catalysis” *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **2019**, vol 92, No10, 1701-1706. Published on September 11, 2019.