

プロジェクト名(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 先進機能触媒研究グループ

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・応用に取り組んでいる。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。

また遷移状態計算を使って計算機上であつめた訓練データを用いたデータ駆動型触媒設計の検討も行なった。

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。とくに今年度は計算機上で算出した触媒活性を用いてデータ解析を行い、不斉収率が向上する触媒の設計に成功した。

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および応用に取り組む

2021 年度 利用研究成果リスト

【雑誌に受理された論文】

Data-driven catalyst optimization for stereodivergent asymmetric synthesis by iridium/boron hybrid catalysis

H. Chen, S. Yamaguchi, Y. Morita, H. Nakao, X. Zhai, Y. Shimizu, H. Mitsunuma, M. Kanai

Cell Reports Physical Science. **2021**, *2*, 100679.

Molecular Field Analysis Using Computational-Screening Data in Asymmetric N-Heterocyclic Carbene-Copper
Catalysis toward Data-driven in silico Catalyst Optimization

M. Mukai, K. Nagao, S. Yamaguchi, H. Ohmiya

Bulletin of the Chemical Society of Japan, **2022**, *95*, 271.