

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 バイオ高分子研究チーム

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および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。データ収集のために不斉触媒反応の遷移状態計算を行なった。

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を行った。とくに今年度は一種類の反応系ではなく、複数の反応系のデータを集めて解析を行った。

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。