

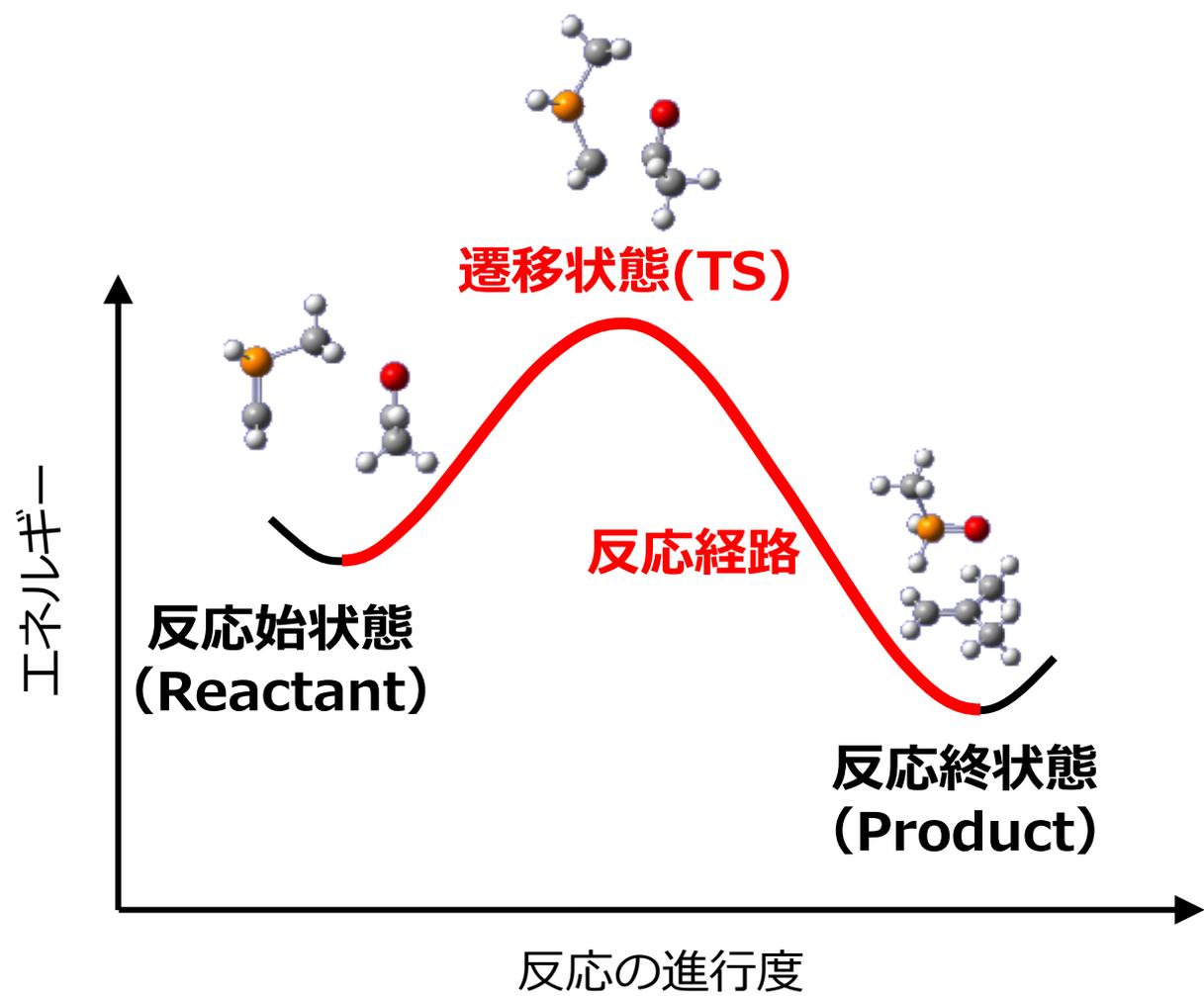
Reaction plus & GRRMのご紹介

～コンピュータによる反応経路の探索技術～

©HPC Systems Inc., 2021



反応経路と遷移状態(TS)



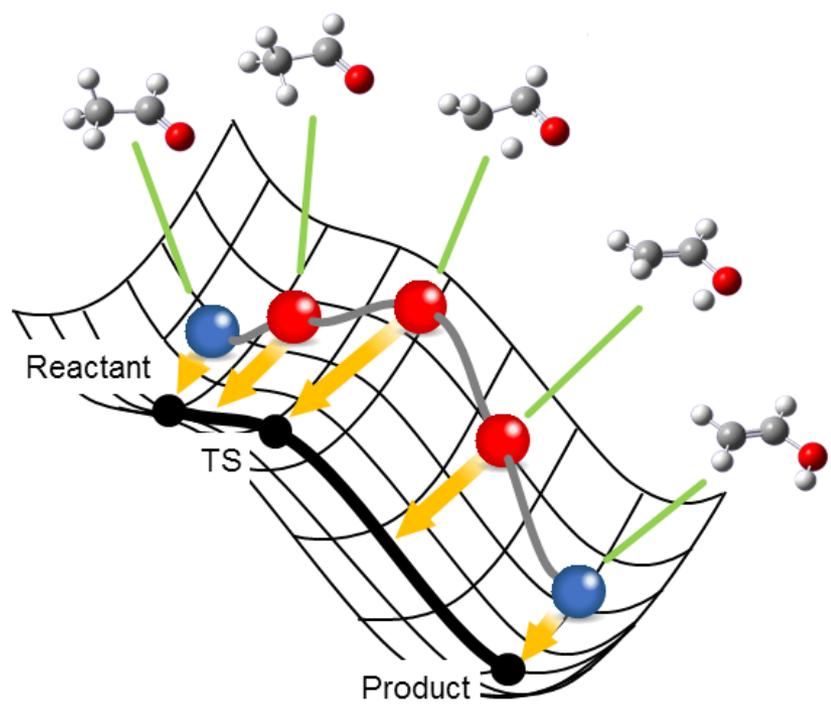
反応経路(TS構造)の計算ソフト

Gaussian

反応経路計算を含む
汎用量子化学計算ソフト

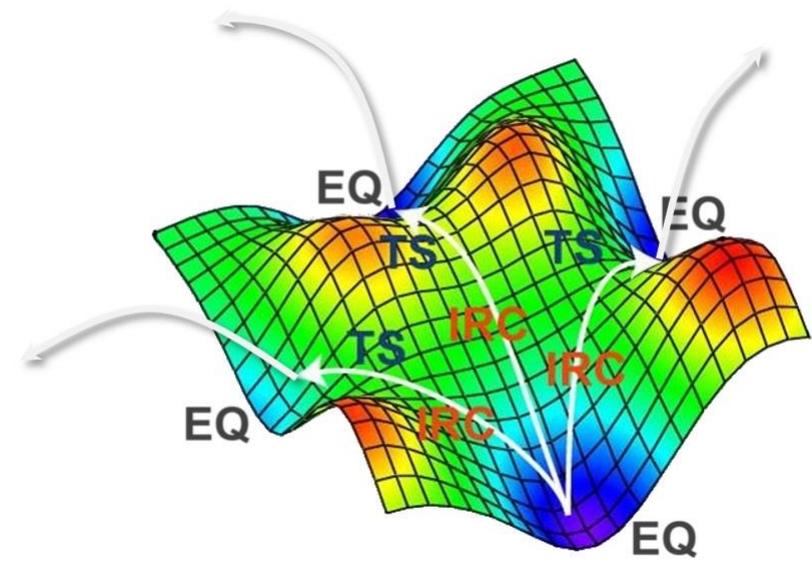
Reaction plus

誰でも簡単・手軽に反応経路計算



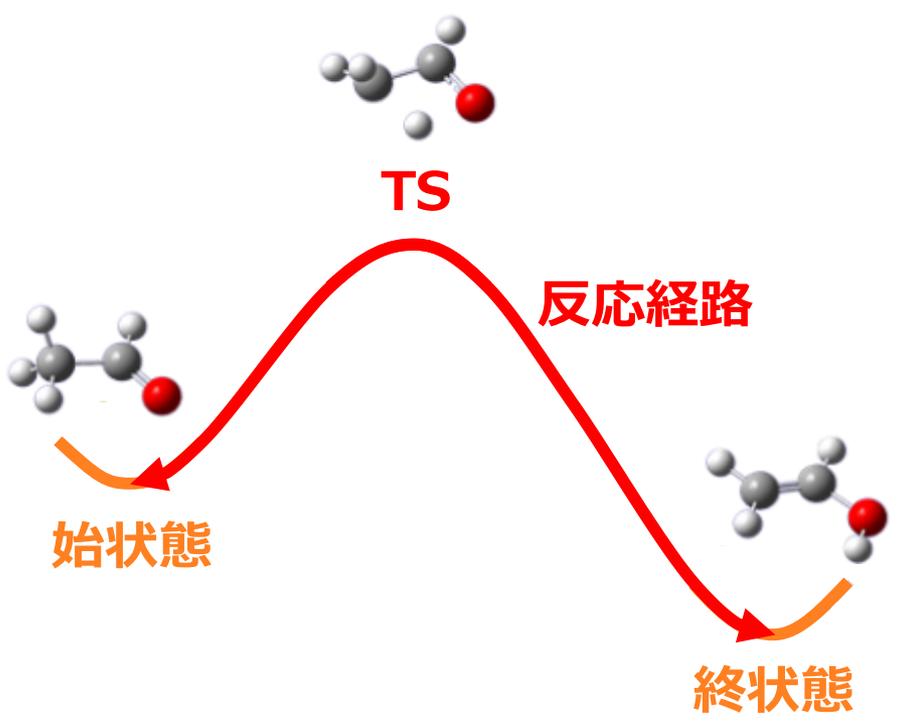
GRRM

自動的かつ網羅的に反応経路計算

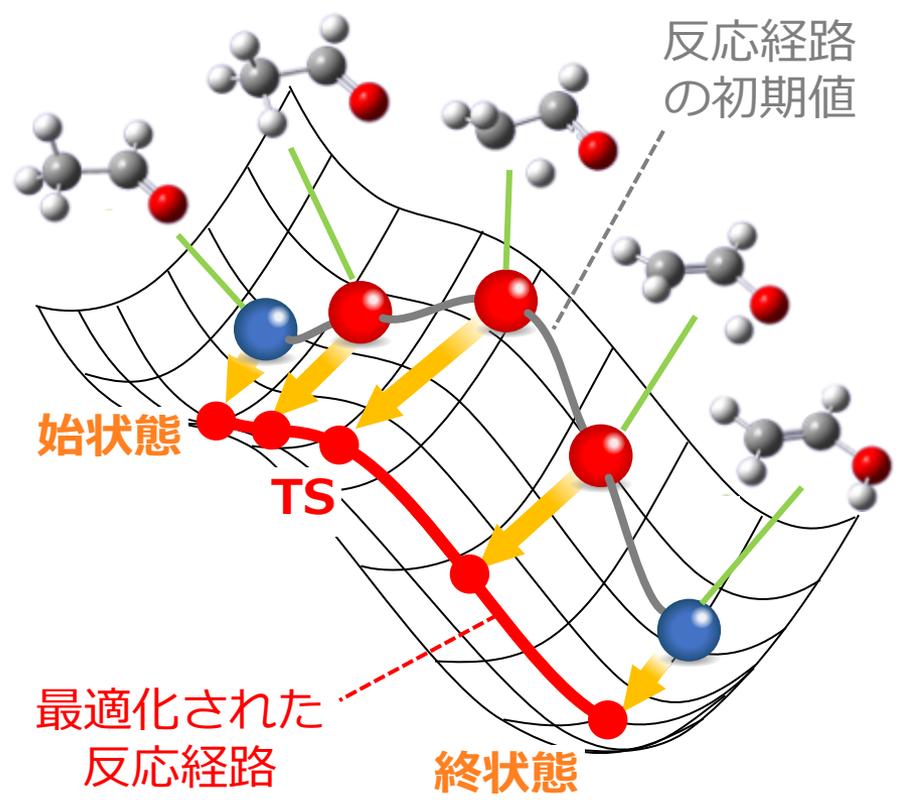


Reaction plusの基本原理

Gaussian



Reaction plus

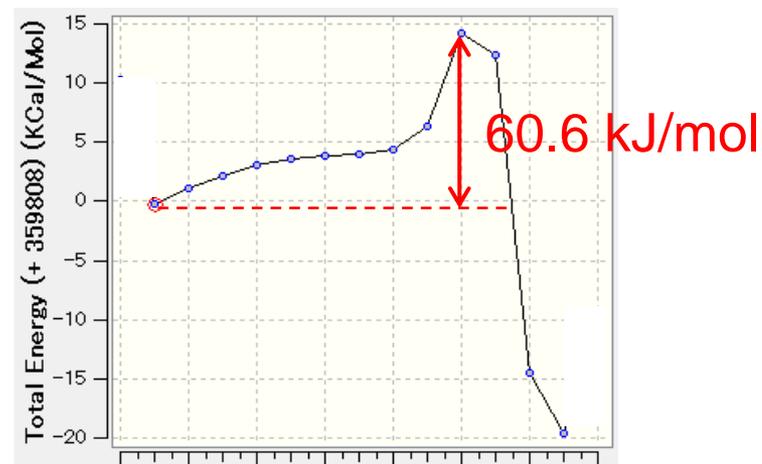
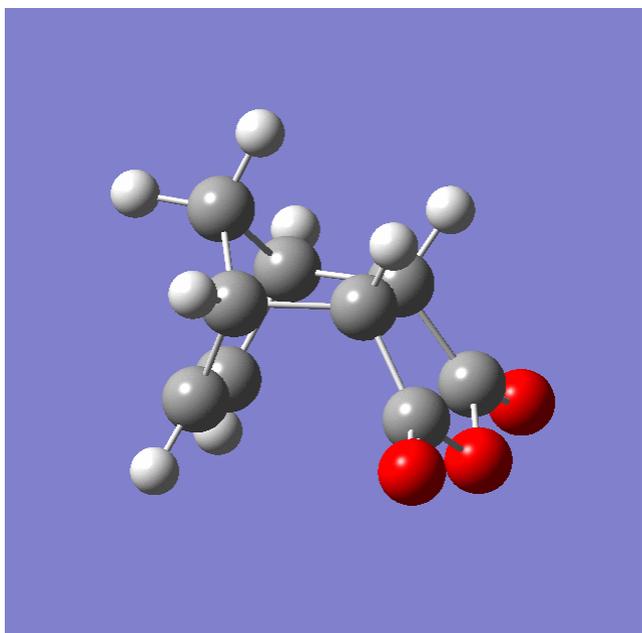
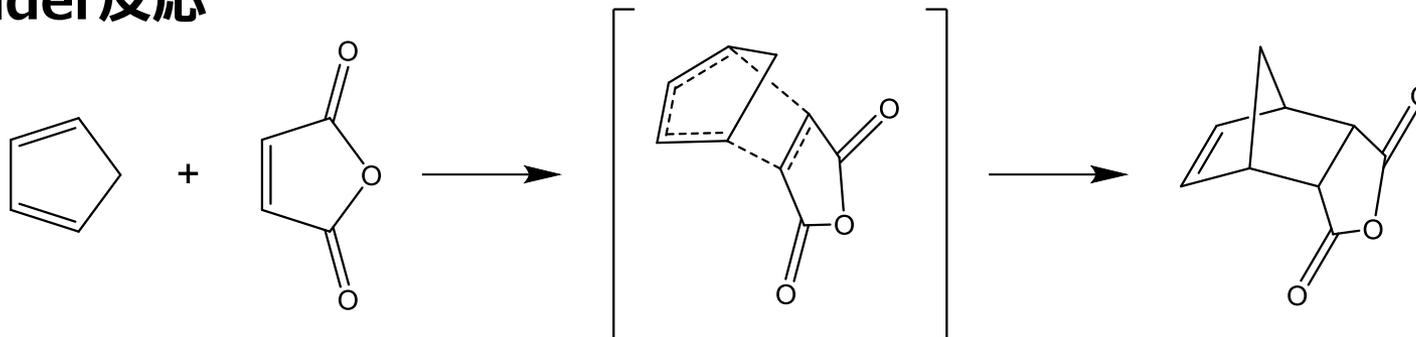


Reaction plusの特徴

- **ユーザは始状態と終状態の構造を用意するだけ**
 - 難しいTS構造の初期値は不要
 - Proは数時間～数日で、Expressなら数分で計算完了
- **Gaussian標準ビューア(GaussView)で操作可能**
 - GaussViewユーザは、使い方の学習不要
 - 途中経過も閲覧可能
- **均一系・不均一系両方に対応**
 - 一部の原子座標を固定することにより、不均一反応が計算可能
- **巨大反応系にも対応**
 - ONIOMを利用することにより、酵素反応等が計算可能
- **開殻系反応にも対応**
 - Gaussian chkファイルを利用することにより、複雑な開殻系反応が計算可能

Reaction plusの応用事例

Diels-Alder反応



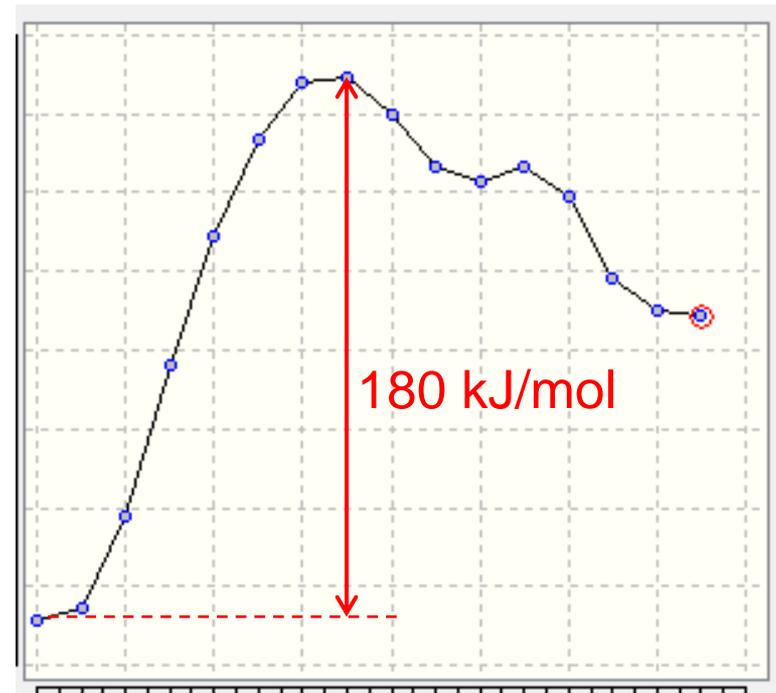
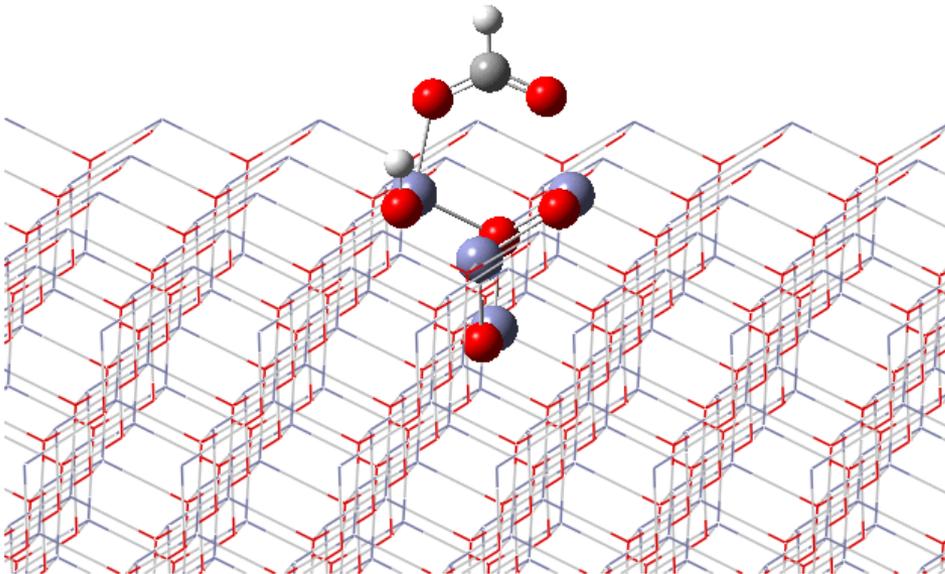
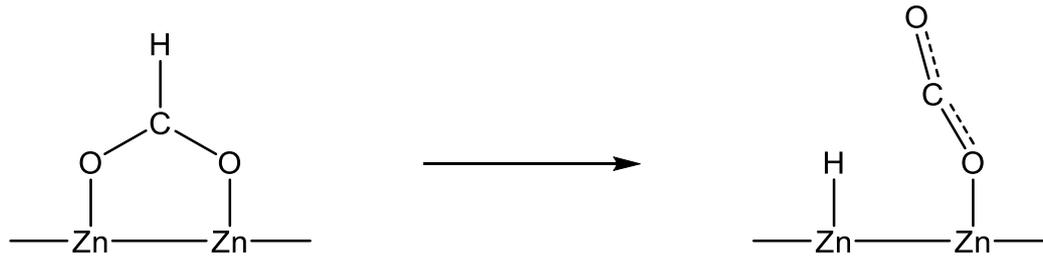
活性化エネルギーの計算値と実測値

Reaction plus	Obsd.*
60.6 kJ/mol	59.0 kJ/mol

*R. A. Grieger, C. A. Eckert, *J. Am. Chem. Soc.* 92, 7149 (1970)

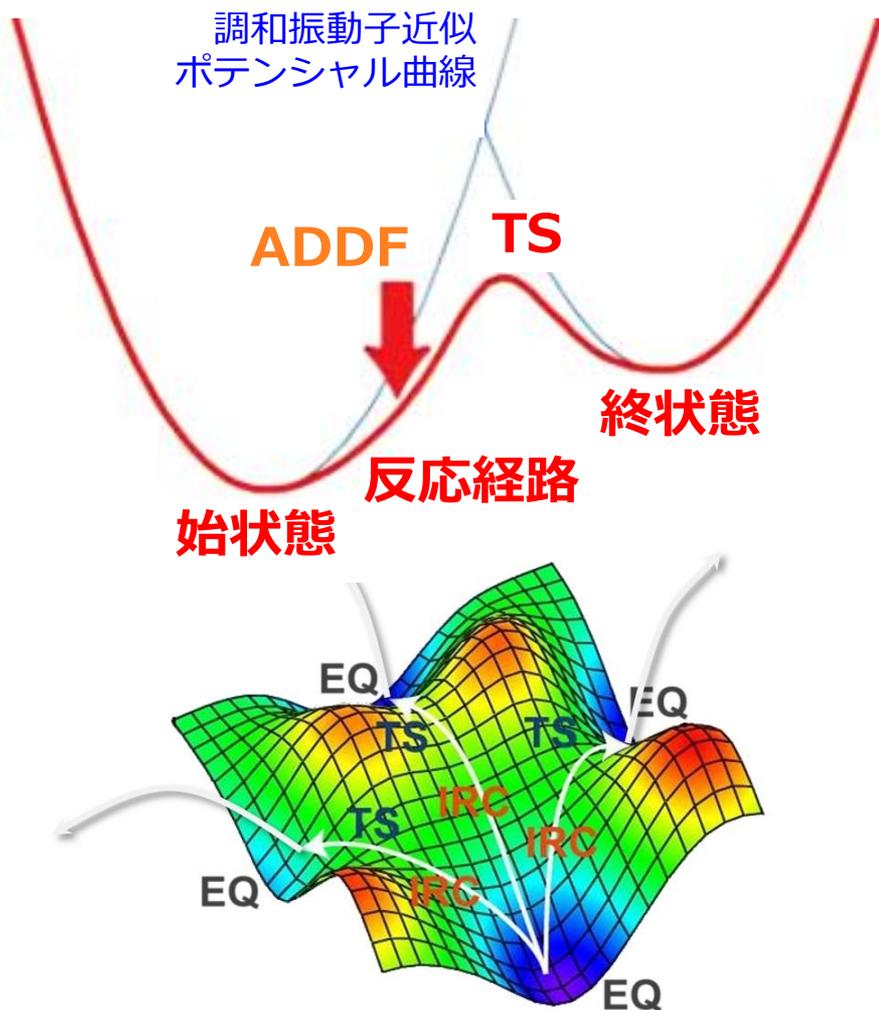
Reaction plusの応用事例

ZnO(10 $\bar{1}$ 0)表面上のギ酸分解過程

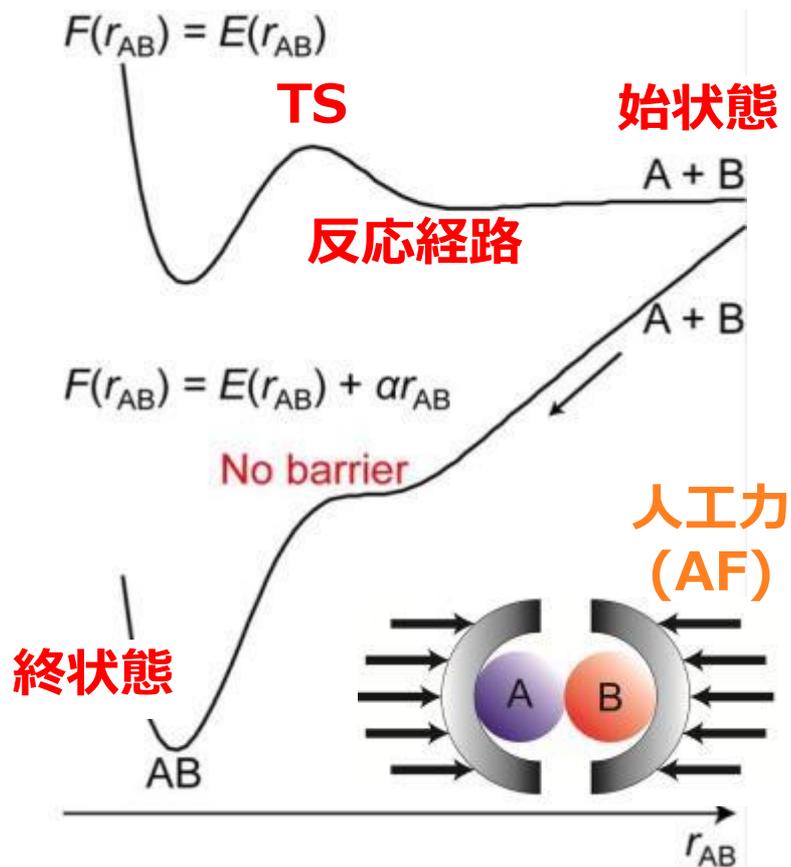


GRRMの基本原理

非調和下方歪み追跡(ADDF)法



人工力誘起反応(AFIR)法

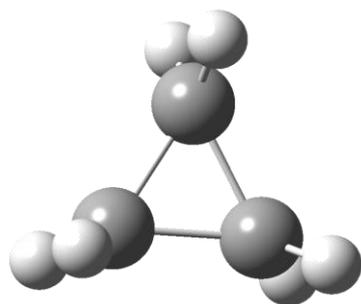


GRRMの計算事例

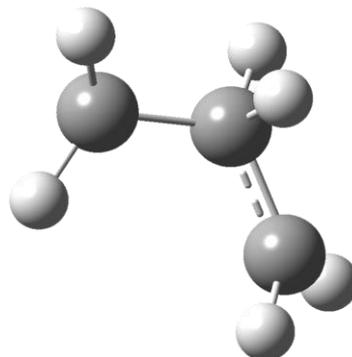
シクロプロパンからプロピレンへの異性化反応



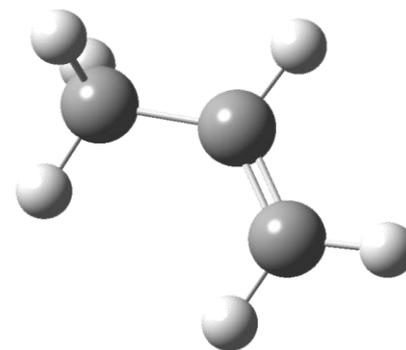
Reactant



TS



Product



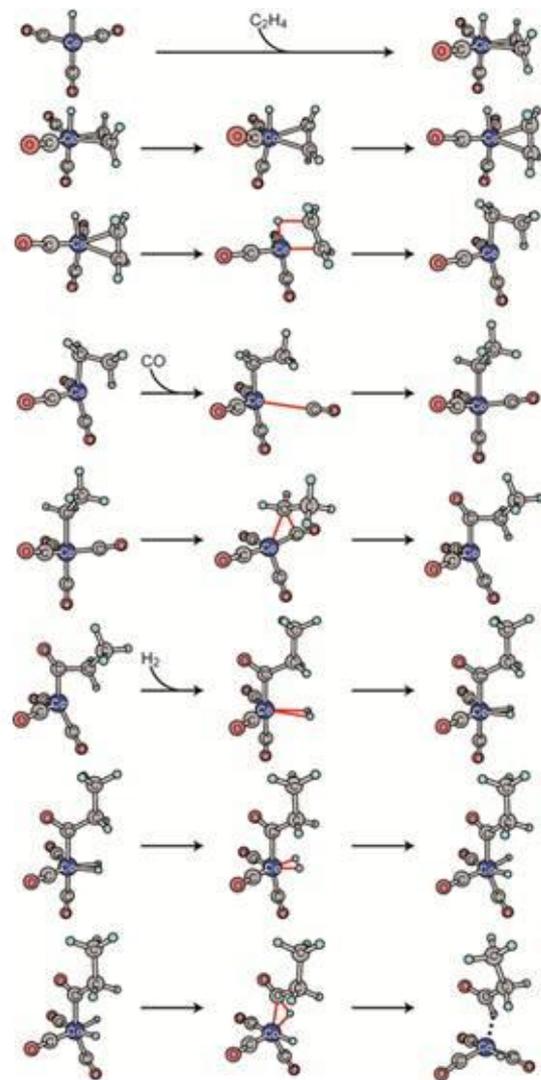
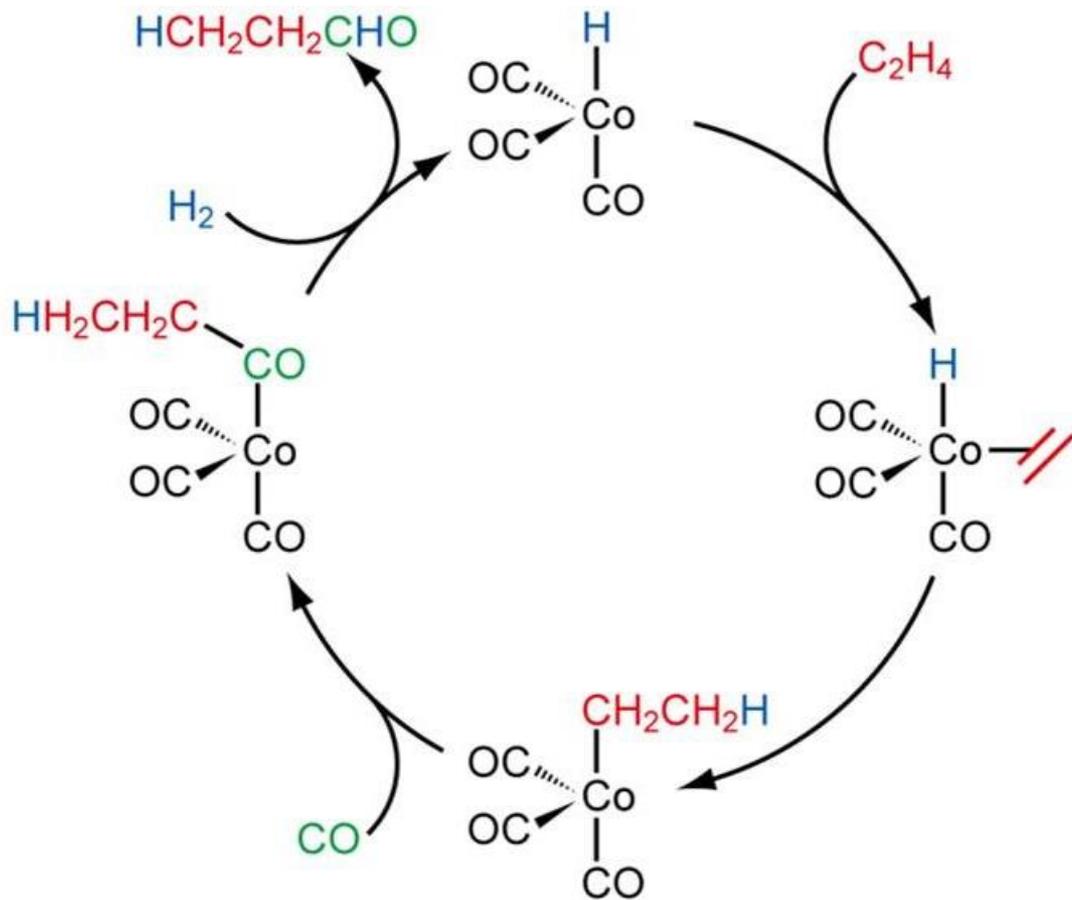
活性化エネルギーの計算値と実測値

GRRM	Obsd.*
278.8 kJ/mol	271 kJ/mol

* ラディ一般化学、東京化学同人 (1982)

GRRMの計算事例

ハイドロホルミレーション過程の解析



まとめ

ソフト名	Gaussian 16 (反応経路計算機能)	Reaction plus 2	GRRM 14
開発元	米国 Gaussian Inc.	HPCシステムズ(株)	量子化学探索研究所 (IQCE)
操作性	比較的容易	比較的容易	ある程度の慣れが必要
計算時間	数時間～数日程度 (多大な試行錯誤が必要)	Gaussianの数倍程度	Gaussianの数倍～数千倍 (探索方法に依る)
TS構造の正確さ	正確	近似的	正確
終状態構造の想定	必要	必要	不要
TS構造の想定	必要	不要	不要
想定内の 反応経路	熟練的技術が必要だが 求められる	手軽に求められる	求められる
想定外の 反応経路	求めるのは困難	求まることもある	網羅的な探査が可能

**反応経路がある程度想定できる場合はReaction plusで、簡単・手軽に調査
反応経路が想定できない場合はGRRMで、時間はかかるが網羅的に調査**