

数理化学的計算手法を用いた異性体探索プログラムの開発

○森川大, 野村泰志, 松村嘉之
信州大学 繊維学部(〒386-8567 上田市常田 3-15-1)

【緒言】

コンピュータを用いた化学の分野（計算機化学）は、分子や分子集団の構造やエネルギー、電子状態などを計算し、その物性などを解析する計算化学と、分子の構造に関するデータベースを用いて分子の構造と物性の相関の解析や構造探索などを行う化学情報学（ケモインフォマティクス）の二つが主に挙げられる。

これら二つの領域の中間に属する分野として、分子の隣接行列を用い、原子間の隣接関係（トポロジー）のみを考慮した計算によって、トポロジカルな要素が分子の熱力学的特性や電子構造に与える影響を解析する分野が存在する。このような分野はグラフの組合せや数え上げを主に使用する事から、特に数理化学と呼ばれる。例えば、最も簡単な分子軌道法計算であるヒュッケル分子軌道法も、この数理化学的計算手法の一種であるとされている[1]。

数理化学的計算では主に π 電子系を対象に、ケクレ構造の数え上げを用いた π 電子分布解析や、特性多項式を用いた分子の安定性や共鳴エネルギー、芳香族性の解析が行われる。近年、これらの解析によって得られた値と物性や毒性、薬理活性などを比較し、分子構造から物性を予測する、一種の構造活性相関に基づいた研究が行われている[2, 3]。このような研究は、特に化学情報学で行われている異性体探索と組合せる事で、取りうる異性体の中から求める物性を持つ構造を探索する事が可能であると考えられる。そこで本研究では、幾つかの数理化学的計算手法を用いた異性体探索プログラムのモデルを作製し、それを従来知見と照らし合わせてその妥当性を検証する。

【プログラムの概要】

本プログラムでは π 電子系の中でも、 n 個の六員環がカタ縮合によって線形に連なった、catahexと呼ばれる多環芳香族炭化水素を対象とし、その中から最も安定な $n/2$ （切り上げ）個のフェナントレン型の環の繋がりを持つ構造を探索した。この際、初期構造としては直線状に繋がったポリアセン型を用いた。数理化学的計算手法としては、トポロジカル共鳴エネルギー（TRE）[4]と芳香族性インデックス[5]を用い、最も異性体の中から最も安定性の高い分子を探索した。異性体探索の手法としては、最も基本的なものの一つである局所探索法を用いた。得られた結果は、主にClar's Theoryに基づいて比較を行った。

【結果】

$n=6$ の場合に得られた結果を右に示す。TRE、芳香族性インデックス共にこの構造が最も安定となるという結果が得られた。また、最も安定構造以外の局所構造と比較する事で、sextetの数が3となる中で、一つのポリアセン型の結合を持つ場合には、直線的な構造を取るものが最も安定する事が分かった。これらの結果はClar's Theoryによる結果と一致している。

その他の結果については当日報告する。

参考文献

- [1] I. Gutman, "Chemical Graph Theory – The Mathematical Connection", *Adv. Quantum. Chem.* **51**, 125-134, (2005).
- [2] 栗原照夫, 城西情報科学研究 **8**(1), 51-60, (1997).
- [3] 大前貴之, *J. Comput. Chem. Jpn.* **3**, 159-164, (2004).
- [4] J. Aihara, *J. Am. Chem. Soc.* **98**, 2750-2758, (1976).
- [5] H. Hosoya, et al., *Theoret. Chim. Acta*, **38**, 37-45, (1975).

TRE : 0.94623 β

芳香族性インデックス : 269026

