

## 超強酸 *in silico* 設計に向けた高精度量子化学計算と機械学習による気相酸性度予測

(中央大理工<sup>1</sup>・JST ACT-X<sup>2</sup>・分子研<sup>3</sup>) ○鈴木 里麻<sup>1</sup>・黒木 菜保子<sup>1,2</sup>・森 寛敏<sup>1,3</sup>  
Prediction of Gas Phase Acidity for *in Silico* Design of Super Acids with High Precision Quantum Chemical Calculations and Machine Learning (<sup>1</sup>*Department of Applied Chemistry, Faculty of Science and Engineering, Chuo University*, <sup>2</sup>*JST ACT-X*, <sup>3</sup>*Department of Theoretical and Computational Molecular Science, Institute for Molecular Science*) ○Rima Suzuki,<sup>1</sup> Nahoko Kuroki,<sup>1,2</sup> Hirotohi Mori<sup>1,3</sup>

In semiconductor processing, it is necessary to design super acids having desired physicochemical properties according to the situation where they will be applied. In the engineering fields, there is a growing momentum breaking away from the traditional experiment-driven molecular design in which whole candidates are synthesized in brute force. We have performed a set of *ab initio* molecular orbital calculations to predict the gas phase acidities of various organic substances, which is the basis of superacid design. In this presentation, we will report on the possibility of "whether the gas phase acidity can be predicted quickly by the approach of electronic state informatics".

*Keywords* : Superacid; Gas Phase Acidity; Quantum Chemical Calculation; Machine Learning; Materials Informatics

半導体分野では、場面に応じ、所望の物性をもつ超強酸を設計せねばならない。当該分野では、「電子吸引性置換基を導入すると性能が向上する」という実験的経験則に基づき、候補物質を手当たり次第に合成する実験主導型分子設計が行われてきた。設計された超強酸の骨格は限定されており<sup>1)</sup>、大規模な探索によってより強い超強酸を発見することが可能であると考えられる。だが、超強酸分子を合成する際には、危険な作業を伴う。実験に先立ち、安全・高速・精密に目的の超強酸分子を設計するための、新たな理論分子設計指針が求められている。酸の  $pK_a$  値は諸手法により、実測値と約 1  $pK_a$  程度の誤差により算出されているが、予め経験的な化合物種ごとの分類を必要とする<sup>2)</sup>。

我々は、超強酸設計の基礎となる気相酸性度制御法について、実測値が存在する約 1,000 化合物の高精度分子軌道法による系統調査を実施し、その精度評価を実施してきた。関連して、「電子状態インフォマティクスのアプローチにより気相酸性度を迅速予測できるか」を併せて検討したので、その可能性まで含めて報告する。

1) Equilibrium Acidities of Superacids. A. Kütt, et.al., *J. Org. Chem.* **2011**, 76, 391.

2) プロトンの水合自由エネルギー: 酸解離定数および標準水素電極電位の高精度計算 松井 亨, 喜屋武 茜, 庄司 光男, 重田 育照, *J. Comput. Chem. Jpn.* **2016**, 15, 184.