

反応経路地図とパーシステント・ホモロジーの融合によるポテンシャルエネルギー地形に対する記述子の創出

(北大院総化¹・北大院理²・産総研³・関大システム理工⁴・北大 WPI-ICReDD⁵・京大 ESICB⁶) ○村山 武来¹・小林 正人^{2,5,6}・青木 雅允²・石橋 卓²・齋藤 琢弥²・中村壮伸³・寺本央⁴・武次徹也^{2,5,6}

Creating New Descriptors for Potential Energy Landscape by Integrating Reaction Route Map and Persistent Homology (¹Graduate School of Chemical Sciences and Engineering, Hokkaido University, ²Faculty of Science, Hokkaido University, ³National Institute of Advanced Industrial Science and Technology, ⁴Faculty of Engineering Science, Kansai University, ⁵WPI-ICReDD, Hokkaido University, ⁶ESICB, Kyoto University) ○Burai Murayama,¹ Masato Kobayashi,^{2,5,6} Masamitsu Aoki,² Suguru Ishibashi,² Takenobu Nakamura,³ Hiroshi Teramoto,⁴ Tetsuya Taketsugu^{2,5,6}

The GRRM program, developed by Maeda et al.¹⁾, automatically obtains reaction route maps (RRMs) composed of full information on equilibrium points and transition states on the potential energy landscape (PEL). This enables us to access massive data of RRM, and create a new problem to compare the similarity of each RRM for statistical analysis. Recently, Mirth et al.²⁾ proposed a new method for extracting the feature of PEL by persistent homology (PH), but it was limited to a simplified model. Then, we have developed a method applicable to RRM for realistic molecular systems based on Petri's work³⁾ on PH for the weighted graph. We will show the application for coinage metal clusters and organic molecular systems.

Keywords : GRRM; Reaction route map, Persistent homology, Potential energy landscape

前田ら¹⁾が開発した GRRM プログラムにより、特定の化学組成に対するポテンシャルエネルギー地形 PEL 上の平衡点と遷移状態を網羅する反応経路地図(RRM)を自動的に取得することが可能となった。これにより大量の RRM が得られるに至った。それに伴い、データの統計的な解析を行うために RRM 間の類似性を評価する枠組みが必要となった。従来は解離性グラフを用いてグラフ間の比較が行われていた。近年 Mirth ら²⁾は、パーシステント・ホモロジー(PH)解析を適用し、新たな情報の抽出手法を提案した。しかしながら対象は単純化されたモデルに限定されていた。

我々は、RRM に対して PH 解析を適用する新しいスキームを構築した。その際、Petri ら³⁾が行なった、頂点と辺にエネルギーがタグ付けされたグラフに対する PH の適用可能性に関する議論を参考にした。その結果、RRM の解析に適した具体化を実現し、HomCloud⁴⁾を用いた解析プログラムを開発した。発表では本手法を貨幣金属クラスターや有機分子反応に適用した結果について報告する。

1) S. Maeda, T. Taketsugu, K. Morokuma, and K. Ohno, *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **87**, 1315 (2014).

2) J. Mirth et al., *J. Chem. Phys.* **154**, 114114 (2021).

3) G. Petri, M. Scolamiero, I. Donato, and F. Vaccarino, *PLOS ONE* **8**, e66506 (2013).

4) <https://homcloud.dev/>