

アルカンに適用した離散原子指定法の挙動

(和歌山大システム工¹・和歌山大院システム工²) ○田中 一浩¹・向井 徳²・山門 英雄^{1,2}

Behavior of the PDrCA (Picking up Discrete reaction Center Atoms)-method applied to alkanes (¹Wakayama University · ²Graduate School of Systems Engineering, Wakayama University)
○Kazuhiro Tanaka,¹ Akira Mukai,² Hideo Yamakado^{1,2}

The PDrCA (Picking up Discrete reaction Center Atoms)-method has been proposed for the purpose of applying the Scaled Hypersphere Search method by reducing the number of variables and the calculation time when searching for conformers of large molecules.

In this study, the PDrCA method using GRRM17 was applied to search for alkanes with LADD=5, and compared with LADDf-method search with LADD=5. PM3 calculation was used as the calculation method. When the number of selected atoms is three, the PDrCA-method exerted the same effect as the conventional LADDf-method searches for molecules up to C₅H₁₂, and found about 70% of EQs which were found in the conventional LADDf-method search in C₆H₁₄. In C₇H₁₆, the PDrCA-method found an EQ that was not found in the conventional LADDf-method searches.

Keywords: GRRM ; PDrCA ; alkanes ; ADDF ; Quantum chemistry calculation ;

離散原子指定(PDrCA)法¹⁾は原子数が多い系に対して配座異性体を探索する際に、変数の数を減らし超球面探索法²⁾を適用する(結果的に計算時間を削減する)ことを目的として提案された方法である。

本研究では GRRM17³⁾上でアルカンに LADD=5 条件下で PDrCA 法を適用し、LADD=5 条件の限定探索と比較した。計算手法は PM3 を使用した。選択原子がある 3 箇所の場合、PDrCA 法は C₅H₁₂ までの分子で従来の限定探索と同等の効果を発揮し、C₆H₁₄ において従来の探索で発見される EQ の 7 割(=27/36)を発見した(表 1 参照)。C₇H₁₆ においては従来の限定探索では発見されなかった EQ(図 1 参照)が発見された。

表 1 PDrCA 法と従来型探索の比較

	従来の限定探索 の発見EQ数	PDrCA探索 の発見EQ数
CH ₄	1	1
C ₂ H ₆	1	1
C ₃ H ₈	1	1
C ₄ H ₁₀	3	3
C ₅ H ₁₂	8	8
C ₆ H ₁₄	36	27
C ₇ H ₁₆	157	73

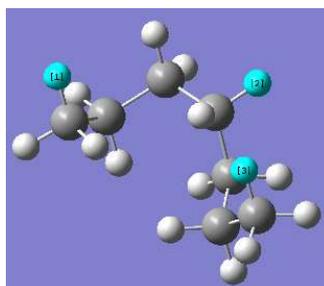


図 1 PDrCA 法でのみ発見された C₇H₁₆ の EQ(水色が選択原子)

1) Y. Midoro, Y. Kodaya, T. Oki, A. Mukai, H. Yamakado, K. Ohno, *Chem. Lett.* **2020**, 49, 826-827.

2) a) K. Ohno, S. Maeda, *Chem. Phys. Lett.* **2004**, 384, 277. b) S. Maeda, K. Ohno, *J. Phys. Chem. A* **2005**, 109, 5742. c) K. Ohno, S. Maeda *J. Phys. Chem. A* **2006**, 110, 8933.

3) S. Maeda, Y. Harabuchi, Y. Sumiya, M. Takagi, K. Suzuki, M. Hatanaka, Y. Osada, T. Taketsugu, K. Morokuma, K. Ohno, GRRM17, see http://iqce.jp/GRRM/index_e.shtml (accessed date 3 March, 2020).