

## 酸化還元電位算出における誤差の機械学習を用いた要因解析

(筑波大学<sup>1</sup>) ○金丸 雄基<sup>1</sup>・松井 亨<sup>1</sup>

Factor Analysis of Error in Redox Potential Calculation: a Machine Learning Study  
(<sup>1</sup>University of Tsukuba) ○Yuki Kanamaru,<sup>1</sup> Toru Matsui<sup>1</sup>

Polarizable continuum model, one of the solvation models, regards solvent effects as an electrostatic interaction with continuous dielectric, which is frequently used in quantum chemical calculation. Although the model is low cost, it is difficult to accurately describe the interaction between substructures such as hydrogen bond since the parameter is described by the permittivity of a solvent. It is also known that the error is particularly large in the charged system.

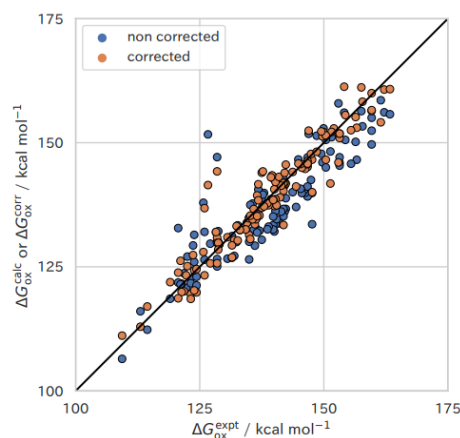
In this study, we performed statistical analysis on the error by the C-PCM method in the calculation of the oxidation potential, and considered the cause of the error in the charge system. As a result, we found a correlation between the calculation error and the substructure of the solute molecule, and the presence or absence of the substructure is relatively better in explaining the error than the number of substructures, and the variance of the obtained regression coefficient. We have previously performed a similar analysis on solvation energy and the opposite trend. Our result indicates that the factors deficient in C-PCM are different between the solvation phenomenon and the oxidation phenomenon in solution.

**Keywords:** *Quantum Chemical Calculation; Machine Learning; Solvation Model; Redox Potential*

量子化学計算において溶媒和を簡便に取り込む方法として、溶媒を連続誘電体とすることで静電相互作用を記述する polarizable continuum model (PCM)法がある。しかし、連続体近似のために水素結合等の部分構造間の相互作用を精確に記述することが困難であり、また、特に荷電系における誤差が大きいことが知られている。

本研究では酸化電位算出における C-PCM 法による誤差に関して統計解析を行い、荷電系における誤差の要因について考察を行った。その結果、酸化電位の算出誤差と溶質分子の部分構造の間の相関を見出した。ここで得られた回帰モデルによって計算値を補正した結果を Fig. 1 に示す。部分構造の数よりも部分構造の有無の方が比較的誤差の説明に優れているほか、得られる回帰係数の分散も小さい傾向にあることが分かった。我々は以前に溶媒和エネルギーについて同様の解析を行っており、それとは逆の傾向にある。これは C-PCM に不足している因子が、溶媒和現象と溶液中での酸化現象とは異なることを示唆しているものと考えられる。

[1] T. Matsui, Y. Kitagawa, Y. Shigeta, M. Okumura, *J. Chem. Theory and Comput.* **2013**, 7, 2974.



**Fig. 1** Scatter plot for non-corrected or corrected (vertical) and experimental value (horizontal) of  $\Delta G_{\text{ox}}$ . The corrected value is closer to the experimental value.