

## 配位自己集合系における反応ネットワークの自動生成

(東大院総合文化<sup>1</sup>) ○竹内啓介<sup>1</sup>・平岡秀一<sup>1</sup>

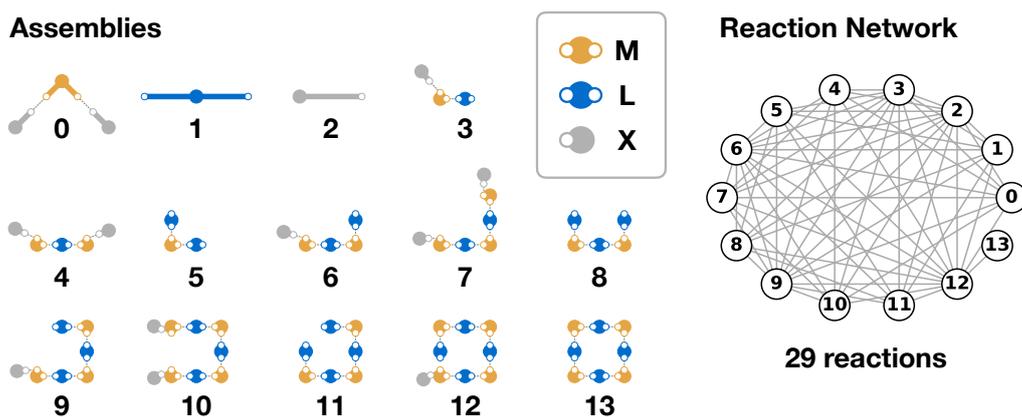
Automatic generation of reaction networks for coordination self-assembly systems (<sup>1</sup>*Graduate School of Arts and Sciences, The University of Tokyo*) ○Keisuke Takeuchi<sup>1</sup> and Shuichi Hiraoka<sup>1</sup>

We previously developed a method to estimate the main pathways and rate-determining steps in self-assembly based on quantitative data from <sup>1</sup>H NMR. This involves creating a reaction network, which previously required significant manual effort. In this study, we created a program that can automatically generate reaction networks. With this program, a network composed of around 500 intermediates and 5,000 elementary reactions was obtained in approximately 1.5 hours on a laptop. We will also present an automated program for determining rate constant datasets and identifying key assembly pathways.

**Keywords** : Reaction network; Coordination self-assembly; Graph theory

我々の研究室で開発された NASAP (Numerical Analysis of Self-Assembly Process) という手法を用いると、自己集合過程で生じ得る多数の化学種 (典型的な配位自己集合系の場合、原料錯体・原料配位子・脱離配位子、および多数の中間体) のうち、<sup>1</sup>H NMR を用いて観測可能な化学種の時間発展の定量データに対し、各素反応の速度定数を変数としたフィッティングを行うことで、自己集合の主経路や律速段階を推定できる。

本手法では、反応ネットワークの作成 (具体的には、原料、生成物、中間体とこれらを繋ぐ全素反応の列挙) が必要だが、これまで手作業で作成していたため、多くの時間と労力を要していた。本研究ではこの問題を解決すべく、反応ネットワークの作成を自動化するプログラムを作成した。このプログラムを用いることで、例えば約 500 の中間体と約 5000 の素反応を含むネットワークを、ノート PC を用いて約 1.5 時間で作成できた。発表では、作成した反応ネットワークをもとに、速度定数のデータセットの決定、主経路および律速段階を自動化するプログラムについても紹介する。



M<sub>4</sub>L<sub>4</sub> 環状錯体の反応ネットワーク。集合体と素反応の列挙結果。

1) Y. Matsumura, S. Hiraoka, and H. Sato, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2017**, *19*, 20338–20342.

2) S. Takahashi, Y. Sasaki, S. Hiraoka, and H. Sato, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **2019**, *21*, 6341–6347.