

コンピュータを用いて 電子の流れを捉え、 新たな化学反応を予測する

中西 達大

北海道大学 大学院総合化学院

量子化学研究室

4 質の高い教育を
みんなに



7 エネルギーをみんなに
そしてクリーンに



9 産業と技術革新の
基盤をつくろう



12 つくる責任
つかう責任



未来社会のあるべきかたち

- ◆ 実験して「何ができるか」を簡単に予測できる
- ◆ 新薬・新材料の開発が迅速に進む
- ◆ 新たな物質を通して生活が豊かに

化学：セントラルサイエンス

- ・ 医学、工学、エネルギー分野など、広い分野に応用
- ・ 新たな化学反応：**世の中を変える！**

例：鈴木・宮浦カップリング反応（**ノーベル化学賞**）

新薬・農薬、液晶・有機ELの開発に活用



物質を作る化学反応は、社会の根底を支える

日本学士院より引用（2026年7月27日閲覧）：https://www.japan-acad.go.jp/japanese/members/4/suzuki_akira.html

コンピュータを活用した化学

- ・ 従来の化学研究：実験による**試行錯誤の積み重ね**
何度も何度も実験して、新たな物質を合成する



何千、何万もの実験



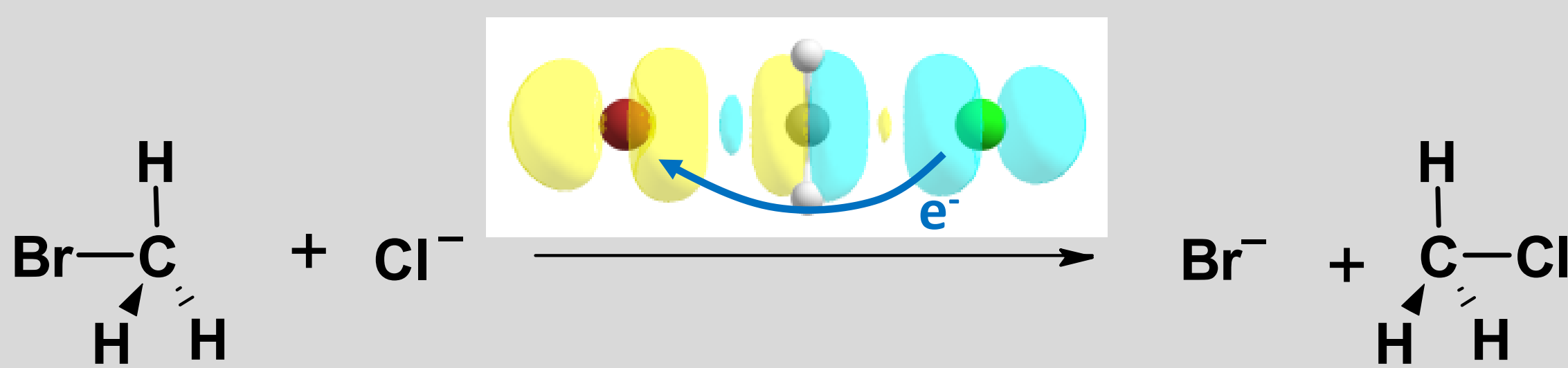
課題：時間がかかる、廃棄物の環境負荷

- ・ もし、実験する前に**結果を予め予測**できたら？
→少ない実験で、新たな物質の合成に成功する
- ・ **コンピュータを用いた化学**が注目



私の研究：電子の流れを捉える

- ・ 化学反応：**化学結合**の組み換え
「電子」という非常に小さな粒子の流れが重要
- ・ 反応中の電子の流れをコンピュータ上で**可視化**



- ・ 化学反応の詳細を解明することで、
異なる反応の設計指針となる→研究開発が加速

社会へのインパクト

電子の流れから反応を予測し、新物質の開発に貢献！