

化学なのに実験しない？ 紙と鉛筆とコンピュータで 分子の世界を見える化する

神原 龍冬

北海道大学 大学院総合化学院
量子化学研究室

ψ



未来社会のあるべきかたち

- ◆ 理論の力で、地球に優しい化学反応を提案する
- ◆ 実験と理論で力を合わせて、
分子の世界を「見える化」する！

自己紹介

神原龍冬（かんばらりゅうと）
ハカセ課程の2年生です。
趣味は友達作りと写真です。



化学科だけど**化学ギライ**でした。↑カッコつけてる
量子化学の研究をしています。 僕です😓

化学のここがイヤでした



反応物 **XX mg** を溶かして **XX 度** まで温度を上げると…

こまかいよ！



この分子は**こんな構造**だよ。こ
こが**2重結合**で、**結合長**は…

分子なんか見えないじゃん！

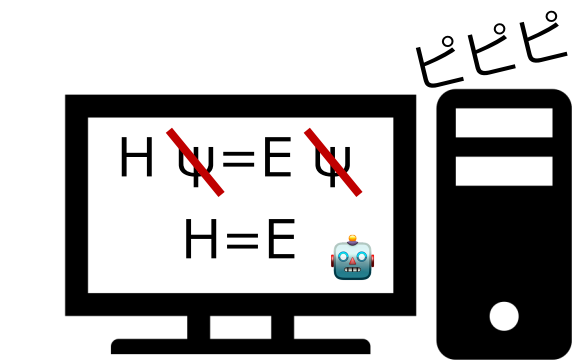
量子化学ってなに？



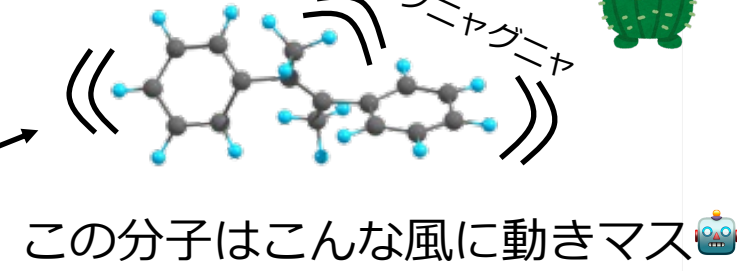
昔、鶴と亀の数を方程式で求めましたよね。

僕は、小さな粒子がしたかう**シュレディンガー方程式**を解くことで分子の性質を調べています。
ものすごく大変な計算なので、コンピュータ🖥️に
計算してもらいます。**実験はしません。**

具体的に何がわかるの？

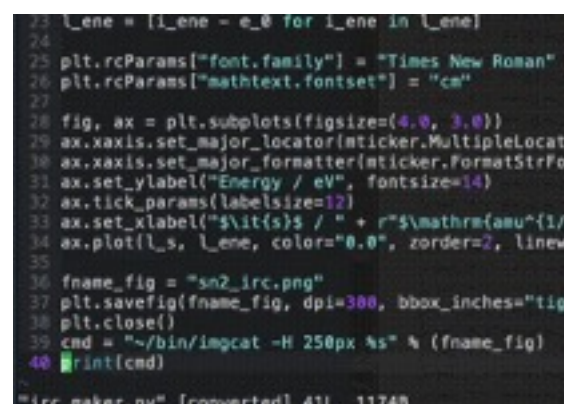
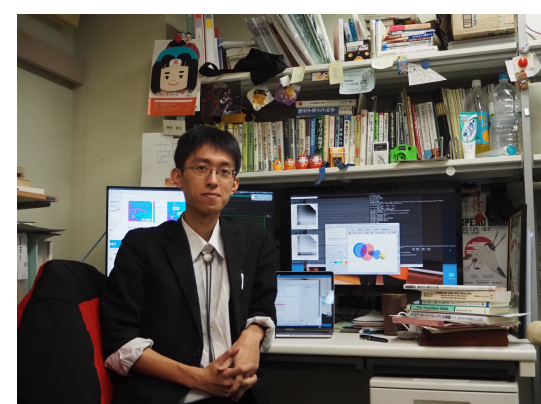


僕が寝ている間もコンピュータが
休まず計算してくれます😓



電子はこんな風になってマス🖥️

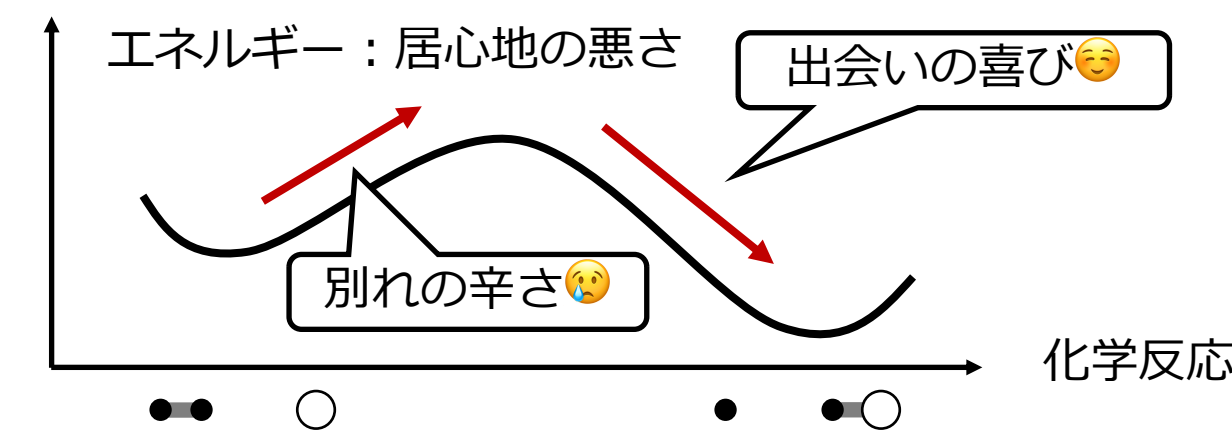
こんな毎日です



パソコンと紙とペンだけで ハッカーのような、真っ黒の
研究します。画面に分子が！ 画面を操ります！かっこいい？

化学反応を見える化したい

量子化学では、反応のエネルギー図を作れます。



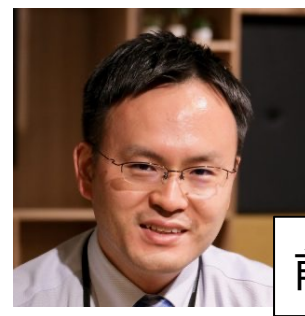
反応を進ませるためには、外からエネルギーを
与える必要があります。

反応経路はとてまたくさん

同じ反応物と生成物でも、いろいろな反応経路が
ありえます。なるべくエネルギーの低い経路で
合成する事ができれば、**エコですね**👍。



すごいぞ北大理学の化学



反応経路網羅探索
前田理 先生



反応経路動力学
武次徹也 先生

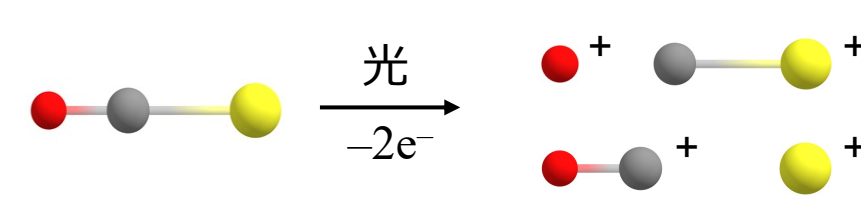


ICReDD 拠点長！

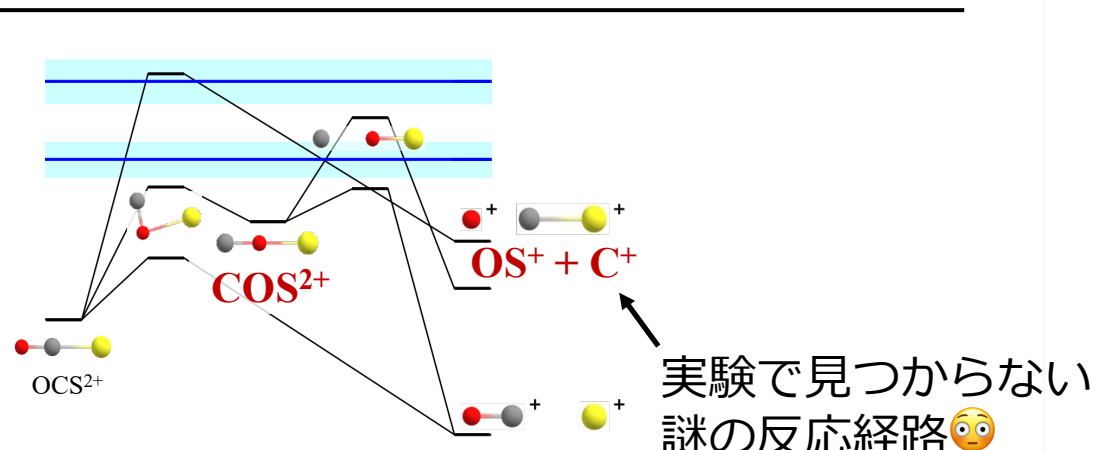
神原くん、反応経路が全部わ
かったとしても、**動力学効果**
を考えないとわからないこと
もあります。

僕の研究：実験との協働！

実験研究で
わかっていること



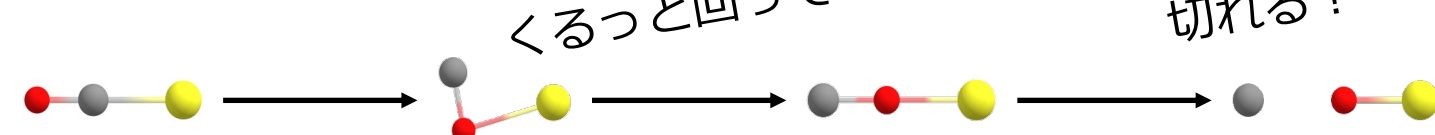
僕が計算した
反応経路



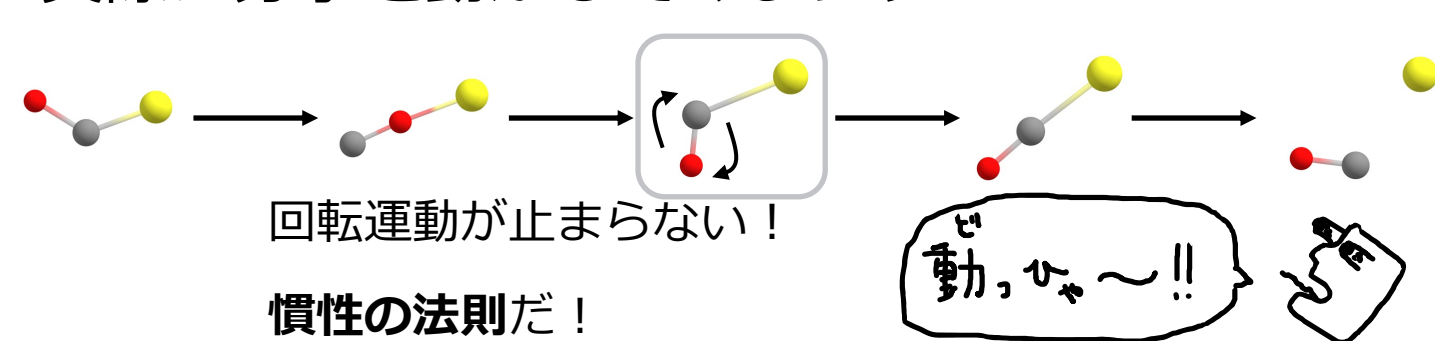
実験で見つからない
謎の反応経路🤖

動力学効果が経路を隠す

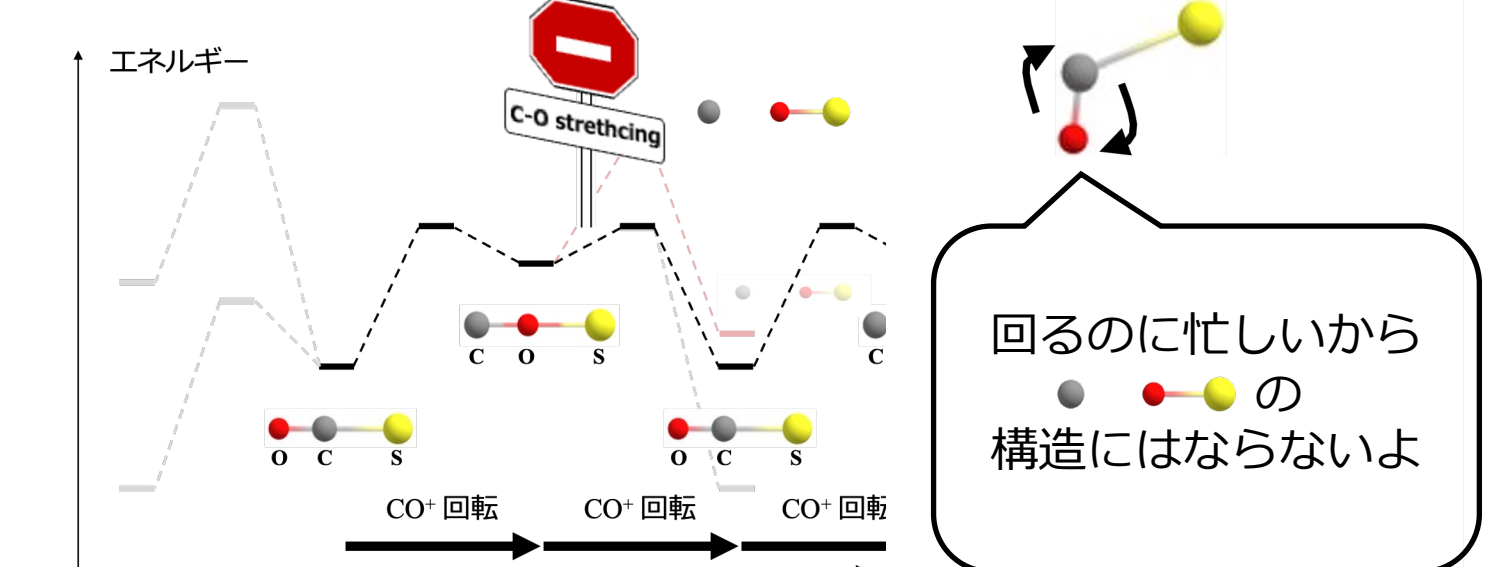
反応経路だと…



実際に分子を動かしてみまシタ🖥️



分子は急には止まらない！



回るのに忙しいから
の
構造にはならないよ

経路があっても、そこを通らないこともあるんだ！