

Chem3D を用いた 化学反応の研究

有沢早葵子
高柳加奈子
森 優希

小柳沙綾歌
田中亜有実

1. はじめに

古典力学と量子力学



古典力学

私たちの世界では

ニュートンの運動方程式

$F=ma$ が成り立つ



量子力学

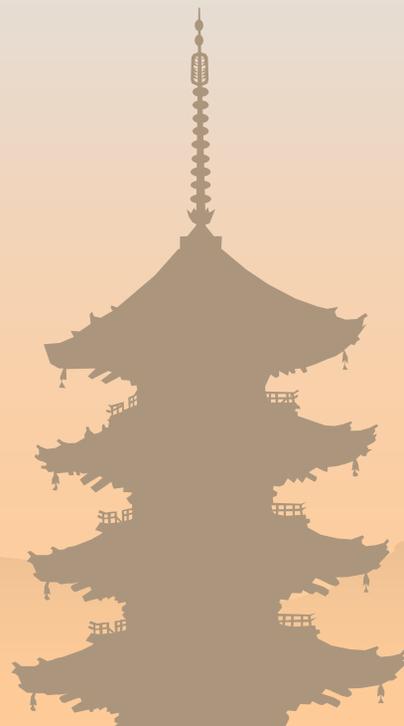
原子・分子の世界では

シュレディンガーの波動
方程式

$\hat{H}\Psi = \varepsilon \Psi$ が成り立つ



2. 基本的考察方法



化学反応は、分子同士の
衝突や熱運動による分子
構造の変化がきっかけて
起こる。



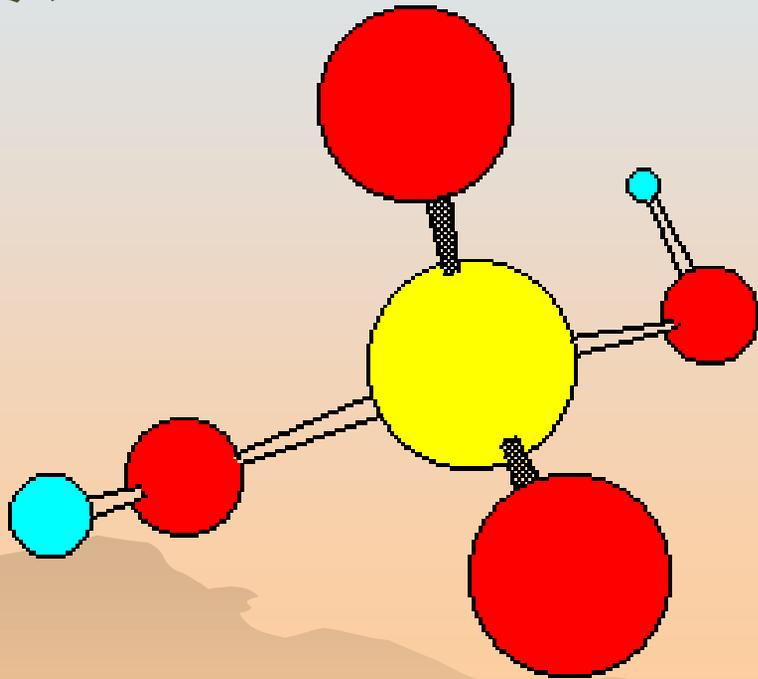
そこで!

パソコン上で分子を衝突
または変形させ、遷移状
態を想定し、反応をシミ
ュレーションしてみた。

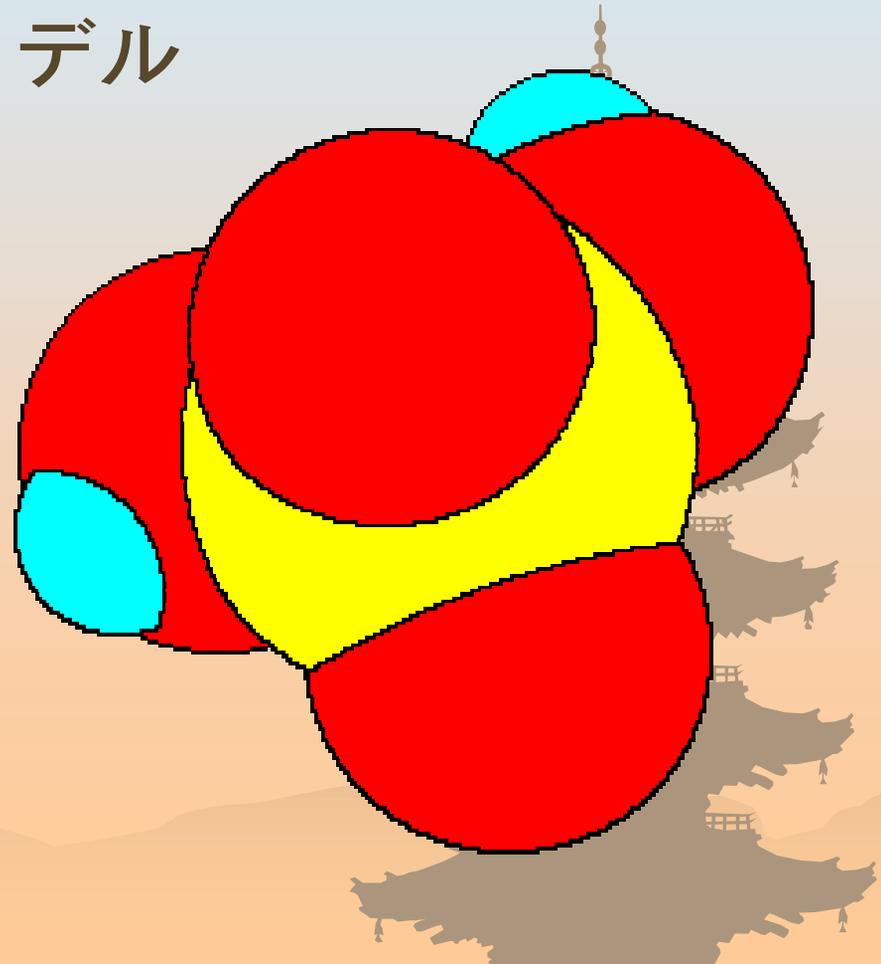


分子モデルの説明

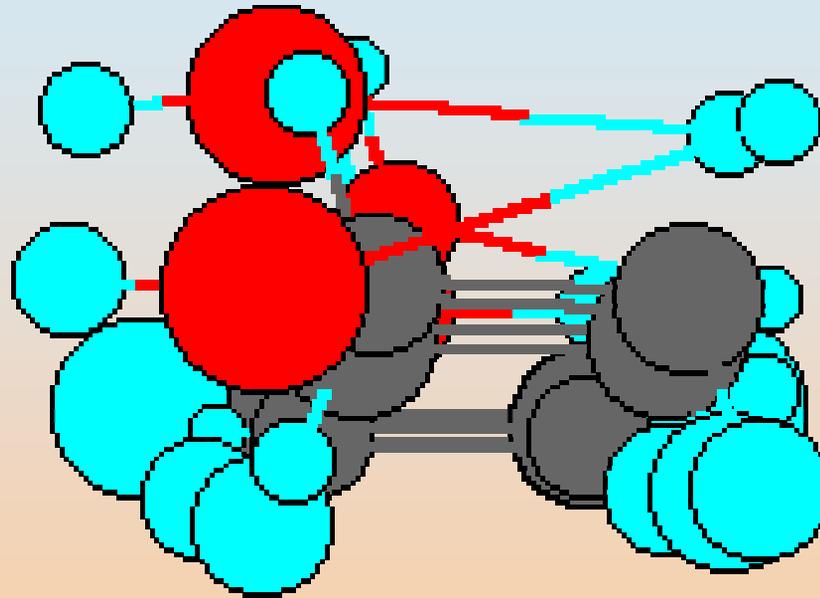
H_2SO_4 の棒球モデル



H_2SO_4 の充填モデル



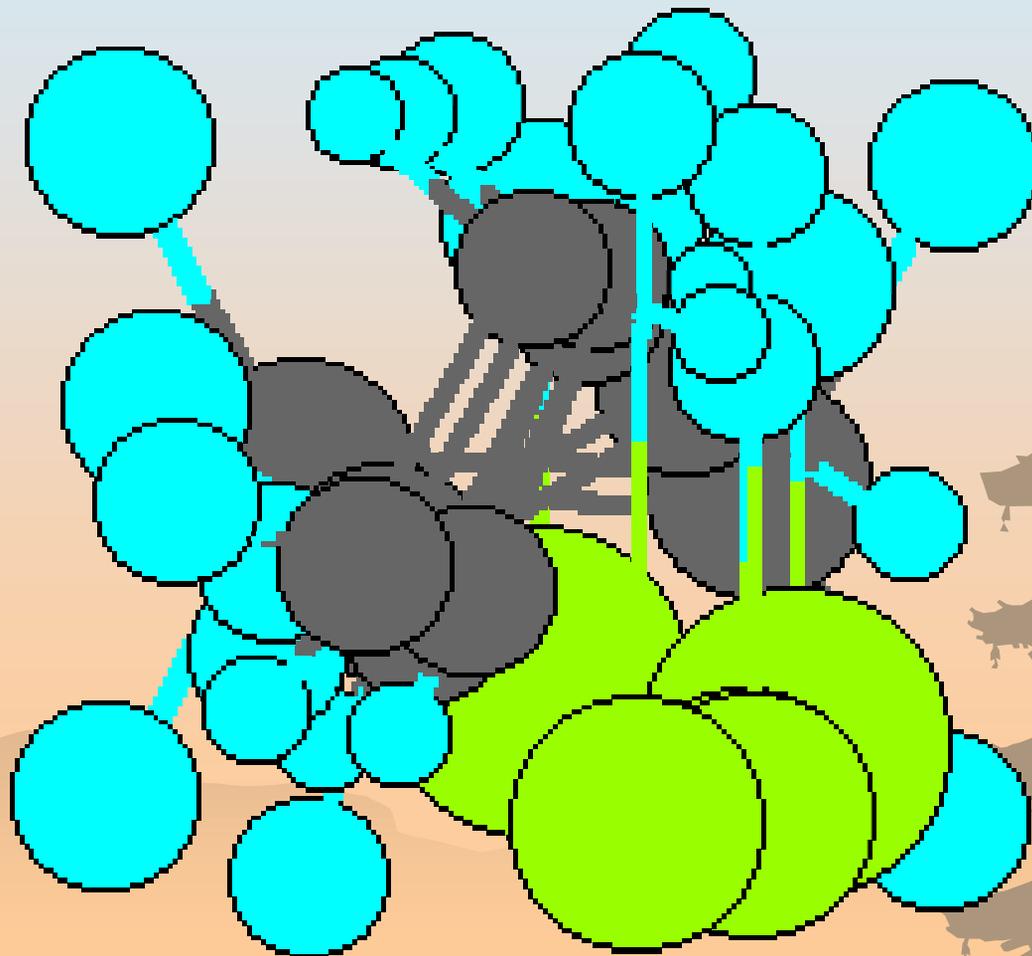
エチレンへの水分子の付加反応



[動画へリンク](#)

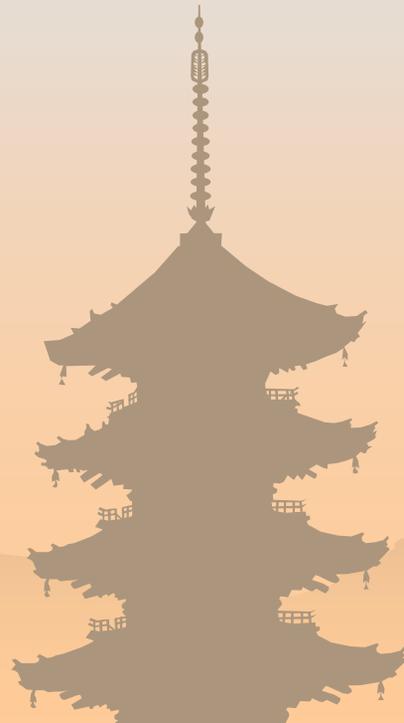


エチレンへの HCl 分子の付加反応



[動画にリンク](#)

まとめ



パソコンを使うことによ
って、実際には見ること
のできない**分子の反応過
程**を見ることができた。



同じ物質でも、置かれた
条件によって、反応のし
やすさや反応のしかたが
大きく異なっていること
がわかった。



今後、自然科学の研究
において、ますます工
コンピュータが**必要不可**
欠になるだろう。

