

21. 総合ディスカッション

はじめに福留氏より本研究会で出された化学反応に関する問題点を整理・分類された。それによると次の8つになる。

1. 電子論的アプローチ
 - 反応性に関する Fukui 理論の拡張
 - 電子間の相関をとり入れた反応過程についての基礎理論
2. 分子構造と反応性の関連性
 - 軌道の対称性と反応性
 - 反応における核運動の効果
3. Relaxation method による反応の dynamics の研究
4. model system を使った物質の存在様式の多様性と安定性
5. Simple system を代用して反応の大筋をつかむ
6. 衝突論的に反応速度を調べる。
7. 反応における非平衡，非線型の効果
8. 励起分子の反応性

これら研究分野のどれも重要で本質的である。その意味で，反応研究のfieldの全貌を明らかにした今回の研究会は大変いい勉強になったと思われる。

ところでこれら各々の研究のすすめ方について，2つの方法がはっきり区別されて見られる。第一原理的あるいは deductive とも言うべき方法と，実験的あるいは inductive ともいうべき方法である。前者は物理学者に多い発想法であり，後者は化学者のほとんどの発想法である。このような方法上のちがいが，物理屋と化学屋を結びつけることをさまたげる一つの壁になっているようである。

自由討論になって，研究上のこと，研究体制上のこと，研究会のやり方などについて意見がだされた。それを以下に箇条書にする。

○化学反応は drastic な構造変化をとともなう dynamical な問題である。そのどこを

問題にするかによって、いろんなレベルの研究ができる。ある時点で、いろんなレベルの研究を総合して、totalに反応を見ることは必要であろう。

- 日本にはいわゆる Chemical Physics が少ない。構造派が多くて、dynamical な研究をする人が少ない。
- 総合的な研究会を行うについて2つの方法がある。
 1. 各自が自分の専門について話す。
 2. 大きなテーマを決め、担当者に話題を与えておいて、それについて調べて話す。
- 毎年このような研究会をやろうとするなら、話題をしぼって行うとよい。今回のように範囲の広いものであれば、2～3年毎に行う方がよいのではないか。
- 10年前に物性研で同じような種類の研究会が開かれた。そのときのテーマは「世界の化学はどうなっているか」であった。10年間にどれくらい進歩があったのでしょうかね。

(以上は垣谷が、メモをもとにとりまとめました。まとめ方、内容についての責任は垣谷にあります。)