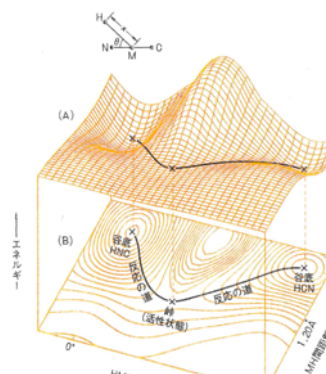


ディビジョン番号	3
ディビジョン名	理論化学、情報化学、計算化学

大項目	1. 理論化学
中項目	1-2. ダイナミクス
小項目	1-2-1. 化学動力学基礎論

概要（200字以内）

化学における動力学諸現象を解明すると共に、新しい現象を予測・設計し制御する指針を提案することが化学動力学論の役割である。そのためには、化学動力学諸過程に潜んでいる重要な基本メカニズムを抽出し、その理論を構築すると共に、それらを活用して現実の動力学過程を解析し得る手法を開発することが求められる。非断熱遷移、トンネル現象、強いレーザー場等外場との相互作用、媒体との相互作用、相転移、生体高分子の構造と機能等々の為の基礎理論や方法論の開発を行うと共に、諸過程への応用が進められている。



図の説明：HCN分子の異性化反応の概念図。(A)はポテンシャルエネルギー曲面の立体図。(B)は等高線図。  
(出典：「分子の世界」分子科学研究所発行、化学同人製作、1985)

現状と最前線

多方面に亘る動力学現象解明の為の多彩な展開が進められている、基本的な理論について言えば、状態変化の根本メカニズムである非断熱遷移の理論や多次元トンネル現象の理論の構築などがある。非断熱遷移とは、異なる電子状態間の遷移を意味し、化学現象にとっては極めて重要である。これを旨く制御できれば化学現象を制御出来ることになる。反応について言えば、3～数原子からなる基本的な素反応系の動力学が量子力学的に正しく評価され、反応機構が解明されるようになってきており、より複雑な反応系の動力学を理解する上で重要な知見が得られるようになってきている。多自由度系における現象の統計的な振る舞いと個性的な動力学の選択性との間における葛藤に関する理解も進んでいる。動力学現象においては、僅かな初期条件の違いが終状態に大きな影響を及ぼすカオス現象がしばしば現れる。この起源を知りカオスと規則性との競合を理解することも重要である。溶液や界面における化学反応に対する基本モデルの提唱と理論の構築も進んでいる。また、最近のレーザー技術の進歩は著しく、その多面に亘る優れた特性を利用して様々な分子動力学を制御しようとする努力も行われている。レーザーによる化学反応の自在な制御は、正に今世紀の夢の科学の一つである。レーザーによって粒子の運動を止めてしまうレーザークーリングによる分子凝縮や単一分子の自在な操作なども現実性のある話である。上述した様々な過程に対する実用的な半古典力学理論の構築が懸命に進められている。更には、最近のスーパーコンピューター能力の目覚ましい進歩によって、現実に近い形でのシミュレーションが様々な系に対して行われるようになっており、相転移現象の解明や生体高分子の構造と機能の解明等々が行われている。

要約：

化学動力学理論は、現象を解明するだけでなく新現象を予測・設計し制御するための指針を提案出来る様にならねばならない。重要な基本メカニズムや量子効果を正しく取り入れた実用的な理論の構築を進めると共に、電子状態論と統計力学的理論との合体により大次元系や生物系における新現象の解明が期待される。

文献：

1. 21世紀の化学の潮流を探る。No.9「理論化学・計算化学の挑戦」(日本化学会。平成13年)。

将来予測と方向性

量子効果を正しく取り入れた実用性の高い半古典力学理論が構築され、現実の化学動力学過程の理論的な解明が進むと期待される。

また、電子状態理論、動力学理論、及び、統計力学理論の合体による理論化学の包括的な発展がなされ、化学諸現象の設計・制御の理論の発展も期待される。

更には、生命現象の化学反応の立場からの解明が進められ、好ましい化学過程を効率よく進行させるには電子状態と動力学がどうあるべきかを解明し、反応を好ましい方向に協力現象的に促進する環境メカニズムの解明が進むであろう。

キーワード

化学動力学、反応動力学、反応制御、統計性と選択性、半古典力学理論

(執筆者： 中村 宏樹 )