

第12回 理論化学シンポジウム（ - 物性・反応・生物の分子物理化学：理論と実験の最前線）を、
2004年9月12日 14日、琵琶レイクオーツカ（滋賀県滋賀郡志賀町近江舞子）にて開催した。
全参加者は65名で、うち10名が招待講演者で、ポスター講演が16件あった。
招待講演者は以下のように理論研究者が5名、実験研究者が5名という割合であった。

「ロドプシン内で光はどのように機能へと変換されるのか？」		
神取 秀樹	名古屋工業大学	工学研究科 物質工学専攻
「超臨界流体からみた凝縮系のエネルギー散逸過程」		
木村 佳文	京都大学	国際融合創造センター
「疎水効果と水の相転移」		
甲賀 研一郎	岡山大学	理学部 化学科
「身近になったタンパク質の量子化学計算：その意義と将来展望」		
佐藤 文俊	東京大学	生産技術研究所
「複雑な分子システムに対する次世代密度汎関数理論」		
常田 貴夫	東京大学大学院	工学系研究科 応用化学専攻
「分子系の非線形 / 量子光学特性およびエキシトンダイナミクスに対する理論化学的アプローチ」		
中野 雅由	大阪大学大学院	基礎工学研究科
「光合成水分解（酸素発生）反応のメカニズム」		
野口 巧	筑波大学	物質工学系
「有機ラジカル結晶が示す磁性：構造変化と磁気相転移」		
藤田 渉	名古屋大学	物質科学国際研究センター
「機能典型元素化学：材料科学を指向した分子設計」		
山口 茂弘	名古屋大学大学院	工学研究科
「光受容タンパク質の反応機構の分子論」		
倭 剛久	名古屋大学大学院	工学研究科 物質理学専攻

シンポジウム運営世話人は4名で、うち二名（工学研究科の熊崎茂一助教授と工学研究科の長谷川淳也助手）が本 COE 拠点から参加した。本 COE 拠点の学生も7名が参加した。

世話人から各講師には理論と実験の接点を意識した講演をしてもらうように要望した。各講師の持ち時間は1時間で、大学院生向け程度の導入から始まり、最後には高度な最先端の成果までが紹介された。講演後の討論では、計算機シミュレーションがタンパク質の問題にどこまで肉薄できるのか？ そして、その信頼性はどの程度か？ というような問題が討論された。また、疎水相互作用の問題、エネルギー散逸の分子レベルの理解と言うような基礎的問題でも理論、計算による定量的または定性的予測と現実の実験結果がどれだけ近いものかが特に集中的に議論された。さらに有機ラジカル結晶の磁性、非線形量子光学特性、有機エレクトロニクスのような比較的新しい応用的潜在力の高い問題でも理論の持つ意味、役割について活発な議論が行われた。このように最先端の実験科学的知見と最先端の理論および計算法的手法が紹介され、実験側の実感と理論側の特質を見比べながら、議論が深まったと思われる。このような高度な討論内容は本 COE 拠点から参加した学部生、大学院生にとっても非常に有益であったと思われる。