

氏名 重光 保博 Shigemitsu Yasuhiro	役職 教授 Professor	専門分野 計算化学 Computational Chemistry
<p>1. 主な研究概要</p> <p>① 溶液化学反応機構の計算解析 (Computational chemistry focused on organic solution reactions) 化学反応の「ふるさと」ともいえる溶液内反応には、現代においても未解明な要素が数多く残されています。現代反応理論の中核である遷移状態理論で解釈できない興味深い溶液反応機構について、理論解析と分子シミュレーションを組み合わせた解明を行っています。特に、超高压下において分子運動が阻害される非化学平衡系について研究を進めています。</p> <p>② 機械学習と分子シミュレーションを融合した化学反応速度解析 (Molecular simulation analysis of chemical kinetics combined with machine learning) 現代の高速計算機と分子シミュレーション技術を駆使しても、大半の化学反応やタンパク質の構造変異等の動的挙動を十分なタイムスケールで再現することは不可能です。いっぽう、急速に発展しているデータ駆動科学は化学分野にも革命的なインパクトをもたらしつつあり、化学反応速度解析に対して、ビッグデータ解析技術の活用を図っています。分子シミュレーションから得られるトラジェクトリー（軌跡）情報を機械学習させることで計算効率を飛躍的に高め、分子材料の時間的挙動を明らかにすることを目指しています。</p> <p>③ 有機光機能材料の分子設計 (Computational molecular modeling of photofunctional organics) 薄く・軽く・フレキシブルな最先端の情報表示デバイスには、液晶や有機 EL のような有機材料が使われています。その発光特性制御や耐久性向上に向けて、様々な材料探索アプローチが行われています。我々のグループでは、分子動力学シミュレーションと第一原理計算を用いた計算探索に加えて、マテリアルズインフォマティクス (MI) を用いた光物性予測にも取り組んでいます。</p> <div style="text-align: center;"> </div>		
<p>2. キーワード 分子シミュレーション、量子化学計算、溶液反応機構解析、有機光機能性材料 Molecular Simulation, Quantum Chemistry, Solution Reaction Mechanism, Photofunctional Materials</p>		
<p>3. 特色・研究成果・今後の展望</p> <ul style="list-style-type: none"> ・平衡状態から乖離した系は、通常とは異なる化学動力学に支配されています。高压下の有機化学反応で観測される特異的な反応速度定数挙動を理論・分子シミュレーション・実験測定から総合的に研究しています。 ・電子状態計算・分子動力学シミュレーション・流体解析を組み合わせ、複雑系に対する実践的シミュレーション活用を目指しています。 <p>researchmap : https://researchmap.jp/read0203460 研究室 HP: https://www.pref.nagasaki.jp/section/kogyo-c/</p>		
<p>4. 社会実装への展望・企業へのメッセージ</p> <p>・連携教員としてのスタンスから、ものづくり現場とアカデミアをつなぐ役割を日頃から意識しています。専門分野である計算化学シミュレーション技術を活用して、ミクロな分子レベルからマクロな連続体レベルまでの広範な材料設計に貢献します。</p>		