

氏名 重光 保博 Shigemitsu Yasuhiro	役職 教授 Professor	専門分野 計算化学 Computational Chemistry
1. 主な研究概要		
① 溶液化学反応機構の計算解析 (Computational chemistry focused on organic solution reactions)		
<p>溶液状態での化学反応機構について、理論と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>The organic reactions in solution exhibit distinct chemical kinetics under extreme high pressure, which derives from the breakdown of chemical equilibrium in solution system. The dynamic solvent effect plays the critical role in the pressure-dependent behavior of the reaction rate constants in such extreme condition, which contrasts with the normal pressure-independent reaction rate constants which obey the conventional Transition State Theory. Our research team investigate the chemical kinetics anomaly observed in the non-equilibrium system from theoretical, computational and experimental standpoints.</p>		
② 有機光機能材料の分子設計 (Computational molecular modeling of photofunctional organics)		
<p>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。我々は MD シミュレーションと第一原理計算を用いた理論探索を行っています。</p>		
<p>A variety of OLED materials have become universally utilized in the modern IT society. The organic display materials installed into digital devices continue to evolve into more compact, energy-efficient, and eco-friendly ones. The OLED performance in the solid state is quite sensitive to the molecular structures as well as the condensed environment. We focus on the photophysical properties of the OLED materials particularly in the aggregated phase and computationally design novel OLED materials by means of quantum chemical calculations combined with molecular dynamics simulations to represent the aggregated systems.</p>		
2. キーワード		
和文：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		
英文：Molecular Simulation, Quantum Chemistry, Solution Reaction Mechanism, Photofunctional Materials		
3. 特色・研究成果・今後の展望		
<p>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。</p>		
<p>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/		
4. 社会実装への展望・企業へのメッセージ		
<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、マイ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>		