

氏名	重光 保博 (Shigemitsu Yasuhiro)
所属・職名	工業材料・環境科 専門研究員
専門分野	計算化学、物理化学、有機化学、CAE
主な研究テーマ	1. 分子シミュレーションとCAEを融合するマルチフィジックスシミュレーション技術の開発 2. 機能性色素の理論分子設計・有機結晶の光物性予測 3. 液相化学反応の非平衡溶媒効果
研究内容キーワード	CAE、量子化学、分子動力学、溶媒効果、機能性色素
技術相談・共同研究・受託研究など可能な技術	・ CAE (構造解析・流体解析・複合解析) ・ 分子シミュレーションシステムの構築・ソフトウェア技術 ・ 有機機能性材料の探索・開発に関する技術相談
共同研究等に利用可能な装置等	・ CAE ソフトウェア (ANSYS) ・ 分子設計ソフトウェア (Gaussian、MOLCAS、AMBER) ・ Linux CPU/GPU クラスタマシン

[研究実績]

- ・ 研究者データベース (JST Researchmap)

<https://researchmap.jp/read0203460/>

- ・ ResearchGate

<https://www.researchgate.net/profile/Yasuhiro-Shigemitsu>

機能性色素の開発: 計算化学と実験化学の連携

