

CS-51 TEN-NO RESEARCH GROUP

計算分子工学 天能研究室

MAIN RESEARCH SUBJECTS

- ・超並列物質計算アルゴリズムの開発
- ・高精度 F12 電子状態理論の開発
- ・複雑な電子状態を計算するための量子モンテカルロ法の開発
- ・溶液中の分子性液体理論の開発と電子状態理論への適用
- ・生体分子のためのマルチスケールモデルの開発
- ・GELLAN 量子化学プログラムの開発とそれを用いた応用研究
- ・光合成系の機構解明と物質設計

COMPUTING RESOURCES



K-COMPUTER



FX100



π -COMPUTER



XEON CLUSTER

GRANT-IN-AIDS

文科省フラッグシップ2020
ポスト「京」重点課題⑤

科研費
KAKENHI

スタッフ7名（教職員6名、秘書1名）

【学生の就職先】国立環境研究所、北海道大学、富士通、関西電力、大日本印刷、デンソー、東芝プラントシステム、ニッセイ情報テクノロジー、大阪信用金庫、コベルコシステム、NTT ファシリティーズ、富士通テン、菱友システムズ、等



研究室 URL <http://www.gellan.cs.kobe-u.ac.jp/group/index.html>

☎ 078-803-6110 (秘書) ☎ 078-803-6109 (大西)

STAFF PROFILE



天能 精一郎 / Seiichiro Ten-no
教授 科学技術イノベーション研究科 (兼 システム情報学研究科) 理学博士 1994 (京都大) / 分子科学研究所助手、名古屋大学助教授・准教授を経て、2009年4月より現職。2010年分子科学会賞 受賞、2012年より国際分子量子化学アカデミー (IAQMS) 会員、文部科学省 ポスト「京」重点課題⑤「エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発」副代表・サブ課題 A 実施責任者。

倉重 佑輝 / Yuki Kurashige

准教授 システム情報学研究科
工学博士 2008 (東京大) / 分子科学研究所助教を経て、2016年4月より現職。2009年英国ブリストル大訪問研究員、2014年よりJST さきがけ研究者「分子技術と新機能創出」兼任、2014年分子科学研究所奨励森野基金、2015年日本化学会進歩賞 受賞。専門は分子電子状態理論と高性能プログラム実装。



大西 裕也 / Yu-ya Ohnishi

助教 システム情報学研究科
工学博士 2009 (京都大) / フロリダ大学博士研究員、イリノイ大学博士研究員、神戸大特命助教を経て、2013年7月より現職。専門は、電子状態理論・計算化学・物理化学の理論開発と応用研究。趣味は、ジャズ・ファンク・ソウルミュージック鑑賞と蒐集、戦後の日本文学の蒐集、フットサル。

上島 基之 / Motoyuki Uejima

特命助教 科学技術イノベーション研究科
工学博士 2014 (京都大) / 2014年4月より現職。専門は、量子化学、電荷輸送現象や発光現象における振電相互作用 (分子の電子状態と振動状態のカップリング) 解析のための理論構築、高効率な電荷輸送材料および高量子収率の発光材料の指針導出と、新規発光材料の分子設計。



土持 崇嗣 / Takashi Tsuchimochi

特命助教 科学技術イノベーション研究科
Ph.D. 2012 (ライス大) / マサチューセッツ工科大学博士研究員を経て、2015年5月より現職。専門は量子化学、特に強相関系に対する電子状態理論の構築。趣味は作曲・編曲・演奏を含む音楽全般および映画鑑賞。

許 恩華 / Enhua Xu

特命助教 科学技術イノベーション研究科
Ph.D. 2011 (南京大) / 南京大学博士研究員を経て、2016年4月より現職。専門は基底状態と励起状態に対する多参照電子相関理論とコードの自動生成。趣味はテレビ・軽音楽鑑賞、卓球。

