

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
- ・量子化学プログラム GELLAN 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
ポスト「京」重点課題⑤

科研費
KAKENHI

スタッフ6名（教職員5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



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、名古屋大学を経て、2009年4月より現職。2010年分子科学会賞受賞、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副代表 (事務局)・サブ課題 A 実施責任者。



土持 崇嗣 / Takashi Tsuchimochi
 講師 システム情報学研究科
 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、神戸大特命助教を経て 2018年4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。



上島 基之 / Motoyuki Uejima
 特命講師 科学技術イノベーション研究科
 工学博士 2014 (京都大) / 神戸大特命助教を経て 2018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。

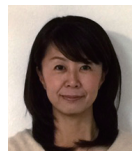


島崎智実 / Tomomi Shimazaki
 特命講師 科学技術イノベーション研究科
 工学博士 2006 (東京大) / 産総研博士研究員、東北大助教、理研研究員を経て 2018年4月より現職。専門は、量子化学、計算化学、情報化学。特に、有機薄膜太陽電池、単一分子電子デバイス等の電子移動が重要な系の解析。最近は、機械学習や人工知能といったデータ科学と化学との融合にも取り組んでいる。



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。趣味は映画鑑賞・軽音楽鑑賞、卓球。

ASSISTANT



渡邊 理恵 / Rie Watanabe
 秘書 (PostK) 科学技術イノベーション研究科
 趣味は旅行、テニス、野球観戦。

☎ 078-803-6110 (代表)

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