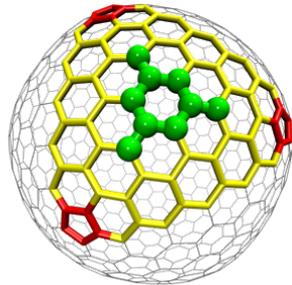


氏名 バン チェン Bun Chan	役職 助教 Assistant Professor	専門分野 計算量子化学 Computational Chemistry
<b>1. 主な研究概要</b>		
<b>① 計算化学 (Computational Chemistry)</b> 広範なプロセスのモデル化のために、計算量子化学的手法を用いています。これまでの事例として、フラーレンの安定性を正確に決定した成果や、その知見を用いてフラーレンの熱化学のための完全な理論を定式化した成果が特筆されます。		
We use computational quantum chemistry to model a wide range of processes. Some past highlights include determination of fullerene stabilities and using these knowledges to formulate a complete theory for fullerene thermochemistry.		
<b>② 量子化学理論 (Quantum Theory)</b> 大きな分子系の高度に正確な量子化学手法を格段に発展させました。例えば、高効率計算ができる複合化したプロトコルを構築し、密度汎関数理論(DFT)を鍛え上げるための信頼性の高いデータを得るために用いています。		
We develop improved quantum chemistry methods to enable highly accurate computations for large systems. For example, we have formulated computationally efficient composite protocols and have used them to obtaining reliable data for training DFT methods.		
<b>2. キーワード</b> 和文：計算化学、DFT、ナノカーボン、フラーレン 英文：Computational chemistry, DFT, nanocarbon, fullerene		
<b>3. 特色・研究成果・今後の展望</b> <b>researchmap</b> : <a href="https://researchmap.jp/el_buno">https://researchmap.jp/el_buno</a> <b>研究室 HP</b> : <a href="http://bit.ly/bunchan">http://bit.ly/bunchan</a>		
<p>フラーレンの安定性は、その実用化にとって重要ですが、実験的な決定は依然として困難であり、許容できないほど大きな不確実性があります。量子化学計算を使用して、安定性データセットを100倍に拡張し、実験の精度を1桁向上させました。これらのデータにより、すべてのフラーレンの安定性の正確なモデルの開発が可能になりました。これにより、さまざまなアプリケーションで原子精度で優れたフラーレンを特定しました。私たちの将来の研究には、より多様に調整可能な特性を持つエンドフラーレンとヘテロフラーレンも含まれます。</p> <p>The stability of fullerene is important for its practical application, yet experimental determination remains difficult with unacceptably large uncertainties. We have used quantum-chemistry computations to expand the stability data set by a hundred-fold, with accuracy bettering experiment by an order of magnitude. These data enabled our development of an accurate model of stability for all fullerenes. With it, we have identified fullerenes that would excel in different applications with atomic precision. Our future research would also involve endo-fullerenes and hetero-fullerenes with more diversely tunable properties.</p>		
<b>4. 社会実装への展望・企業へのメッセージ</b>		
<p>フラーレンは軽量でありながら機械的に強いいため、高度な軽量鋼にとって理想的な強化ドーパントになります。私たちの研究は、現代の製造業の進歩に最適なフラーレン誘導体を特定します。フラーレンドーピングはまた、一連の(半)伝導特性をもたらし、高性能/低エネルギー分子エレクトロニクスデバイスの適切な候補を特定します。</p> <p>Fullerenes are light yet mechanically strong, which makes them an ideal strengthening dopant for advanced lightweight steel. Our research will identify the optimal fullerene derivatives for the advancement of modern manufacturing. Fullerene doping also leads to a continuum of (semi)conducting properties, and we will pinpoint suitable candidates for high-performance/low-energy molecular electronics devices.</p>		