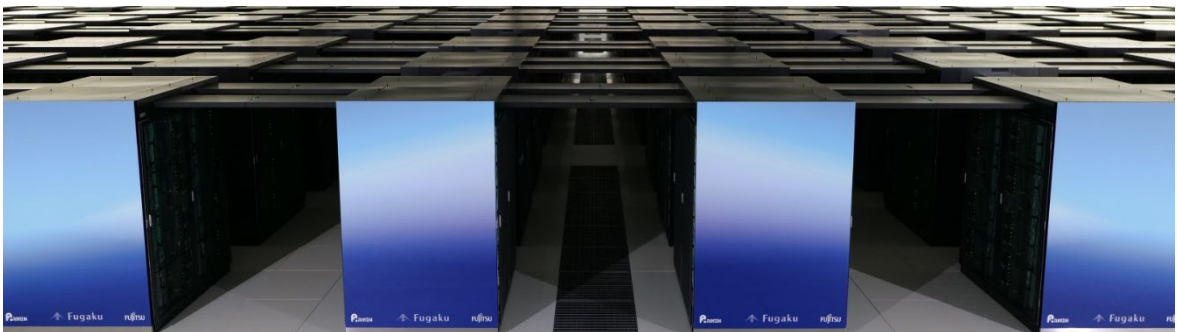
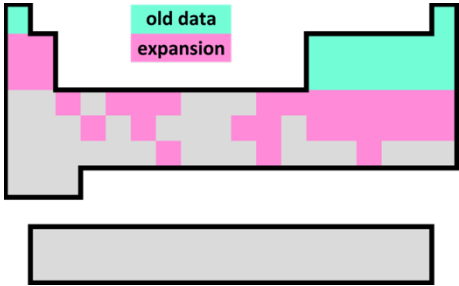


|                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        |           |                                |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------|--------------------------------|
| 氏名<br>チェン バン                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                           | 役職<br>准教授 | 専門分野<br>量子力学, 計算化学, 化学データサイエンス |
| <p>1. 主な研究テーマ</p>  <p>当研究では、量子化学分野における高性能コンピュータの活用を主要な研究テーマとしてしています。私たちは、シミュレーションの高速化を実現する新たな手法の開発に取り組んでおり、多様な化学系および材料系システムのモデル化を可能にしています。このようなモデル化は、実験研究者との連携のもとで行われ、電子レベルでの知見を提供することで、新たな技術の開発に貢献しています。以下に、当研究の主な成果例をいくつかご紹介します。</p> <p>(1) 高精度量子化学手法は伝統的に、周期表のほんの一部の化学物質にしか適用できませんでした。私たちは、高精度予測の適用範囲を拡大し、化学分野の機械学習に信頼できるデータを提供するため、一連の量子化学手法を開発しました。</p>  <ul style="list-style-type: none"> <li>Chan, B. Accurate Thermochemistry for Main-Group Elements up to Xenon with the Wn-P34 Series of Composite Methods. <i>J. Chem. Theory Comput.</i> <b>2021</b>, 17, 5704.</li> <li>Chan, B. Compilation of Ionic Clusters with the Rock Salt Structure: Accurate Benchmark Thermochemical Data, Assessment of Quantum Chemistry Methods, and the Convergence Behavior of Lattice Energies. <i>J. Phys. Chem. A</i> <b>2023</b>, 127, 5652.</li> </ul> <p>(2) 複数の国際研究チームとの共同研究において、量子化学を応用し、新たなガラス材料における発光現象を引き起こす構造的特性を解明しています。</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>Hou, J.; Chen, P.; Shukla, A.; Krajnc, A.; Wang, T.; Li, X.; Doasa, R.; Tizei, L. H. G.; Chan, B.; Johnstone, D. N. et al. Liquid-Phase Sintering of Lead Halide Perovskites and Metal-Organic Framework Glasses. <i>Science</i> <b>2021</b>, 374, 621.</li> </ul> |           |                                |
| <p>2. キーワード</p> <p>量子化学、化学物理学、分子生物学、材料科学、化学データサイエンス</p>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |           |                                |
| <p>3. 特色・研究成果・今後の展望等（社会実装への展望・企業へのメッセージもあれば）</p> <p><b>researchmap</b> : <a href="https://researchmap.jp/el_buno">https://researchmap.jp/el_buno</a><br/> <b>研究室 HP</b>: <a href="https://sites.google.com/view/bunchan">https://sites.google.com/view/bunchan</a><br/> <b>Google scholar</b>: <a href="https://scholar.google.com/citations?user=URuEgEoAAAAJ&amp;hl=en">https://scholar.google.com/citations?user=URuEgEoAAAAJ&amp;hl=en</a></p>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     |           |                                |