

전산 재료 과학 연구실

Computational Materials
Science Laboratory



이주형

교수

Jhyoung@gist.ac.kr

062-715-2322

<https://sites.google.com/view/cmatgist>

Education

- 2005** 2005 Ph.D. in Physics, Northwestern University
- 2000** 2000 M.S. in Physics, Seoul National University
- 1996** 1996 B.S. in Nuclear Engineering, Seoul National University

Experience

- 2012 ~** 2012 ~ Associate Professor, School of Materials Science & Engineering, GIST
- 2009 ~ 2012** 2009 ~ 2012 Postdoctoral Researcher, MIT
- 2006 ~ 2009** 2006 ~ 2009 Postdoctoral Researcher, UC Berkeley

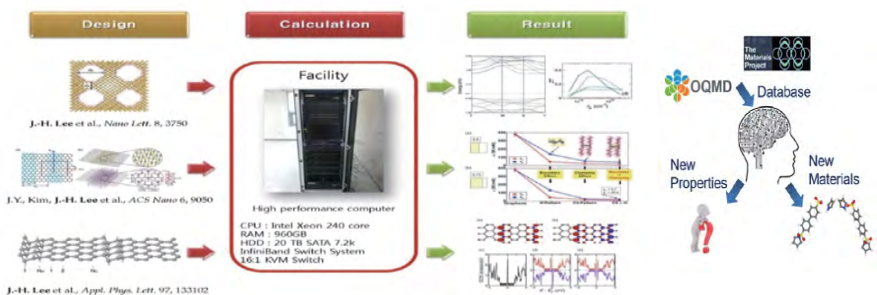
Professional Activities & Honors

- Member, Korean Physical Society
- Member, Korean Magnetics Society

연구실 소개

근래에 컴퓨터 제작 기술의 눈부신 발전으로 이전에는 불가능하다고 여겨졌던 계산이 가능해짐에 따라, 이러한 컴퓨팅 환경을 재료 과학에 접목하여 여러 재료들의 성질을 연구하고 그 응용 가능성을 살펴보는 분야가 크게 발전하였는데 이를 전산 재료 과학이라 한다. 이러한 전산 재료 과학 분야에서는 잘 정립된 이론적/계산적 방법을 통해 물질의 성질을 규명할 뿐만 아니라, 아직 존재하지 않는 물질의 성질을 예측하기도 하는데, 재료 과학 연구의 방법론이 원자간의 상호작용을 바탕으로 해서 개발된 이론이기 때문에 이러한 예측은 매우 정확하며 이는 미래의 응용 방향을 제시해 주는 중요한 역할을한다.

본 연구실에서는, 이러한 전산 재료 과학적인 방법론을 사용하여 반도체와 금속과 같은 고체 재료의 전기적, 자기적, 기계적, 광학적 물성을 연구하고 미래의 응용 가능성을 제시하고자 한다. 구체적인 연구 주제로는 태양광 및 열전을 포함하는 에너지 변환 재료, 탄소 나노 구조의 전/자기적 특성, 자성 나노 구조 등이 있고, 이들의 물성에 대한 근본적인 이해를 바탕으로 신개념 미래 소자의 개발에 기여하고자 한다. 또한, 최근 기계 학습과 인공지능 기술은 데이터를 기반으로 비교적 빠르고 정확하게 결과를 예측하고 있으며, 전산 분야 뿐만 아니라 데이터가 쌓여있는 여러 분야에서 다양한 과학, 공학 문제에 새로운 해결책으로 각광받고 있다. 수년간의 재료 연구를 통해 축적된 빅데이터를 활용하여 최근에 대두되고 있는 기계 학습을 통해 새로운 재료를 설계하고 물성을 예측하며, 기존의 과학 계산 이론에 기계 학습을 적용하여 계산 속도와 정확도가 향상된 새로운 방법론을 제안하고자 한다.



연구 성과

수행중인 주요 연구과제 (주요과제경력)

- 전기화학적 압축기를 이용한 화학흡착식 히트펌프 시스템 개발 (한국에너지기술평가원, 2021.07 – 2025.12)
- 텍스트 마이닝 기반 소재 데이터베이스 구축 자동화 파이프라인 개발 (교육부, 2020. 06 – 2023. 05)
- AI를 이용한 수소 생산용 고성능 촉매 및 전극 설계 (GIST-MIT 국제 공동연구, 2021.09 – 2025.12)

주요논문 (대표실적)

- J.-H. Yang, E. G. Ahn and J.-H. Lee, "Cumulative cationic and anionic redox reaction in $Mg_3V_2(SiO_4)_3$ and impact on the battery performance", *J. Power Sources*, 520, 230828 (2022).
- E. G. Ahn, J.-H. Yang and J.-H. Lee, " $Mg_3Si_3(MoO_6)_2$ as a high-performance cathode active material for Magnesium-ion batteries", *ACS Appl. Mater. & Interfaces*, 13, 47749 (2021).
- S. So, J.-Y. Kim, D. Kim and J.-H. Lee, "Recovery of thermal transport in atomic-layer-deposition-healed defective graphene", *Carbon*, 180, 77 (2021).
- J. Jang, D.-H. Kim, B. Kang, J.-H. Lee, C. Park and J.-S. Lee, "Impact of N-substituent and pKa of Azole rings on fuel cell performance and phosphoric acid loss", *ACS Appl. Mater. & Interfaces*, 12, 531 (2021).
- I.-S. Jeong, E. G. Ahn and J.-H. Lee, "Bond strengthening in lateral heterostructures of transition metal dichalcogenides", *Phys. Rev. B*, 102, 075441 (2020).

주요연구시설

Parallel Cluster



RIGEL 156 cores



DENEb 212 cores