

# 계산 화학 연구실

Computational  
Chemistry Laboratory



## 최준호

교수

junhochoi@gist.ac.kr

062-715-4626

[https://sites.google.com/  
view/comp-chem-gist](https://sites.google.com/view/comp-chem-gist)

## Education

1992 ~ 1996 Ph.D. in Physical Chemistry, Seoul National University

1990 ~ 1992 M.S. in Physical Chemistry, Seoul National University

1986 ~ 1990 B.S. in Chemistry, Seoul National University

## Experience

2020 ~ Associate Professor, Department of Chemistry, GIST

2018 ~ 2020 Assistant Professor, Department of Chemistry, GIST

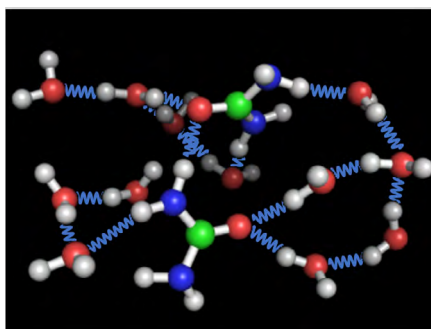
2015 ~ 2018 Research Professor, IBS center in Korea University

1999 ~ 2014 Research Professor, Korea University

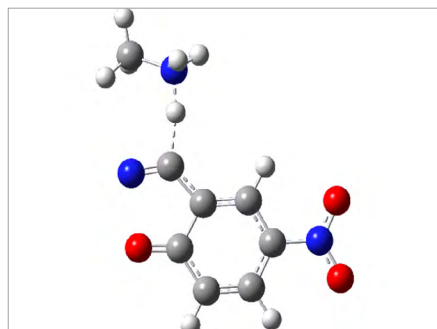
## 연구실 소개

계산 화학은 컴퓨터 모사를 통해 분자들의 물리 화학적 특성, 화학 반응 메커니즘 예측, 단백질과 리간드의 결합, 그리고 새로운 분자의 설계에 이르기까지, 물리화학 분야의 연구 뿐 아니라 유기, 무기, 생, 의학 화학 등 다양한 분야와의 융합 연구를 가능하게 한다.

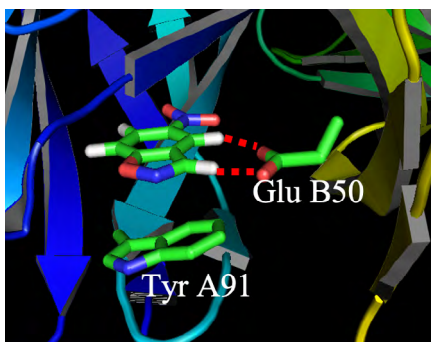
본 연구실에서는 분자 동역학 모사 (Molecular Dynamics simulation)와 양자 화학 계산 (Quantum Mechanical Calculation)을 사용하여 용액 내 물의 수소 결합 구조와 동역학의 탐구, 분광학 스펙트럼의 해석과 같은 기초 연구를 수행하고 있으며, 화학과 내의 다양한 연구실들과 유기, 무기 화학 반응 경로 예측, 의약 후보 물질의 도출과 같은 공동 연구를 활발히 수행하고 있다.



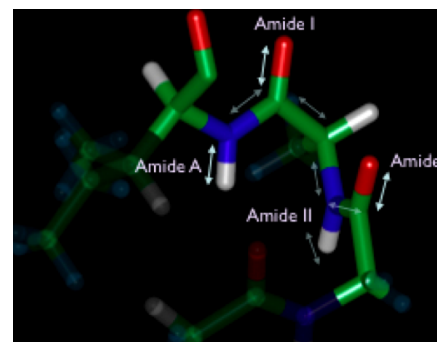
용액 내 물의 수소 결합 구조



화학 반응 분자들의 전이 구조



단백질-리간드 상호작용



다양한 진동 모드의 스펙트럼 분석

## 연구 성과

### 수행중인 주요 연구과제 (주요과제경력)

- 중견연구 (한국연구재단, 2023~2028)
- 탄소중립과제 (산업통상자원부, 2023~2026)
- 기본연구 (한국연구재단, 2018~2023)

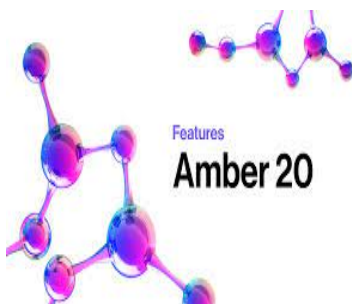
### 주요논문 (대표실적)

- "Molecular Aggregation Behavior and Microscopic Heterogeneity in Binary Osmolyte-Water Solutions" J. Chem. Inf. Model, 64, 138 (2024) (front cover)
- "Spatial Inhomogeneity and Molecular Aggregation behavior in Aqueous Binary Liquid Mixtures" J. Mol.Liq. 369, 120949 (2023)
- "Temperature Effects on Alcohol Aggregation Phenomena and Phase Behavior in n-butanol Aqueous Solution" J. Mol.Liq. 347, 118339 (2022)
- "Effects of Molecular Shape on Alcohol Aggregation and Water Hydrogen Bond Network Behavior in Butanol Isomer Solutions", Phys.Chem.Chem.Phys. 23, 12976 (2021).
- "Understanding Alcohol Aggregates and Water Hydrogen Bond Network Towards Miscibility in Alcohol Solutions: Graph Theoretical Analysis", Phys.Chem.Chem.Phys. 22, 17181 (2020).
- "Graph Theory and Ion and Molecular Aggregations in Aqueous Solutions", Annu. Rev. Phys. Chem. 69, 125 (2018).
- "Ion aggregation in high salt solutions. III. Computational vibrational spectroscopy of HDO in aqueous salt solutions" J. Chem. Phys. 142, 204102 (2015)
- "Azido Homoalanine is a Useful Infrared probe for Monitoring Local Electrostatics and Side-chain Solvation in Proteins", J. Phys. Chem. Lett. 2, 2158 (2011).

### 주요연구시설



계산용 서버



AMBER20 (분자동역학모사 소프트웨어)



Gaussian 16 (양자화학계산 소프트웨어)

## 융합연구 및 비전

물의 수소 결합 구조 및 동역학 연구

분광학

화학 반응 메커니즘 규명

유기, 무기 화학

신소재 및 의약 후보 물질 개발

생, 의약 화학