

양자화학 시뮬레이션 연구실

Quantum Chemical
Simulation Laboratory



김현우
교수

hwk@gist.ac.kr

062-715-4640

<https://sites.google.com/view/hwk-grp>

Education

2009 ~ 2014 Ph.D. in Chemistry, Pohang University of Science and Technology (POSTECH)

2006 ~ 2009 B.S. in Chemistry, POSTECH

Experience

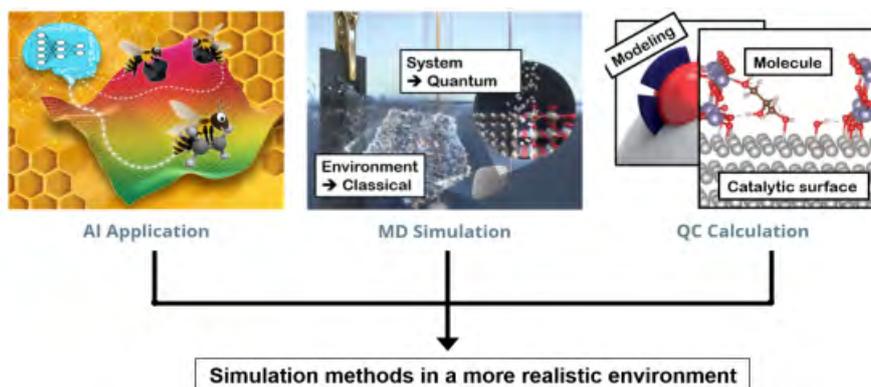
2022 ~ Assistant Professor, Department of Chemistry, GIST

2016 ~ 2022 Senior Researcher, Korea Research Institute of Chemical Technology (KRICT)

2014 ~ 2016 Research Fellow (non-tenure track), Institute for Basic Science (IBS)

연구실 소개

본 연구실에서는 화학 현상을 양자화학 시뮬레이션으로 설명하기 위한 방법을 만들고 적용합니다. 현재 진행중인 연구는 (1) 촉매 반응 등 화학 문제에서 인공지능 기술 개발 및 응용, (2) 양자 시뮬레이터에 적합한 양자화학 방법 개발, (3) 양자역학과 고전역학을 혼합한 분자 동역학 방법 개발입니다. 물리화학 개념을 바탕으로 전통적인 양자화학 계산과 분자 동역학 시뮬레이션이 연구될 것이고 동시에 기계학습 등 인공지능 연구와 양자 시뮬레이터 연구가 진행될 것입니다.



연구 성과

수행중인 주요 연구과제 (주요과제경력)

- 한국연구재단 이공분야기초연구사업 기본연구 (2022~2023)
- 한국산업기술진흥원 위탁과제 (2023~2026)
- KIST 기관고유사업 위탁연구과제 (2022~2023)
- 한국화학연구원 주요사업 (2016-2021)

주요논문 (대표실적)

- "Machine-guided Representation for Accurate Graph-based Molecular Machine Learning". Phys. Chem. Chem. Phys., 2020, 22, 18526–18535.
- "Improving Long Time Behavior of Poisson Bracket Mapping Equation: A Non-Hamiltonian Approach" J. Chem. Phys., 2014, 140, 184106.
- "On the pH Dependent Behavior of the Firefly Bioluminescence: Protein Dynamics and Water Content in the Active Pocket" J. Phys. Chem. B, 2013, 117, 7260–7269.
- "All-atom Semiclassical Dynamics Study of Quantum Coherence in Photosynthetic Fenna–Matthews–Olson Complex" J. Am. Chem. Soc., 2012, 134, 11640–11651.

융합연구 및 비전

양자화학 계산/분자 동역학 시뮬레이션

물리화학 기반 기계학습 방법

신소재 개발을 위한 양자 시뮬레이터

물리화학

인공지능

양자정보