다차원 분자모델링 및 전산모사 적용 연구 심포지엄

(Symposium on Application Studies of Multiscale Molecular Modeling and Simulation in Sustainable Chemistry and Engineering)

주 관: 열역학부문위원회

대전컨벤션센터 J발표장(105호) 2019년 10월 24일(목), 08:30~11:00

Chairman: 곽상규, 울산과학기술원 (Sang Kyu Kwak, UNIST)

08:30	[Keynote Lecture] 흡착식 열펌프를 위한 금속-유기 골격체의 전산 스크리닝 *(Computational screening of metal-organic frameworks for adsorption heat pumps)*	송 리, 화종과학기술대학교 *(Song Li, Huazhong Univ. of Sci. and Tech.)*
09:00	제일원리 계산을 활용한 촉매 설계 *(Catalyst design from First-Principles calculation)*	함형철, 인하대학교 *(Hyung Chul Ham, Inha Univ.)*
09:30	Coffee break	
09:40	기계학습을 통한 고체화학 물질공간 탐색 *(Exploring solid-state chemical space by machine learning)*	정유성, 한국과학기술원 *(Yousung Jung, KAIST)*
10:10	기계학습 포텐셜을 이용한 분자동역학 *(Molecular dynamics simulation using machine-learning potential)*	한승우, 서울대학교 *(Seungwu Han, Seoul Nat'l Univ.)*
10:40	머신러닝 기법과 분자모델링의 융합 연구를 통한 나노 다공성 물질 개발 *(Development of nanoporous materials using computational modeling combined with machine learning)*	이용진, 상해기술대학교 *(Yongjin Lee, ShanghaiTech Univ.)*

Speaker

Song Li
2014 Ph.D., Chemical and Biomolecular Eng., Vanderbilt Univ.
2014 Post-doc., Chem. & Bio. Eng., Northwestern Univ.
현 재 Associate Prof., Current Huazhong Univ. of Sci. and Tech.

함형철
2011 Univ. of Texas at Austin 화학공학 박사
2019 KIST 수소·연료전지연구단 책임연구원
현 재 인하대 화학공학과 부교수

정유성
2005 UC Berkeley 화학과 박사
2018 포플(Pople) 메달 수상
현 재 KAIST 생명화학공학과 교수

한승우
2000 서울대 물리학과 이학박사
2001 프린스턴대 연구원
현 재 서울대 재료공학부 교수

이용진
2014 Univ. of Texas Austin 화학공학 박사
2017 스위스 로잔공대 박사 후 과정
현 재 ShanghaiTech Univ. 조교수

Organizer/Chairman

곽상규
2005 Univ. at Buffalo, SUNY 화학공학 박사
2011 싱가포르 난양공대 조교수
현 재 UNIST 에너지 및 화학공학부 부교수