

---

# 물리화학분과 소식지

---

2023년 7월 10일

5호



대한화학회  
KOREAN CHEMICAL SOCIETY



## 대한화학회 물리화학분과회 회원님들께

2023년 새로운 대한화학회 물리화학분과회를 맡아서 일을 하면서 여러 회원님들께 봉사를 시작한 지가 5개월이 지났습니다. 여러 회원님들의 많은 성원과 협조, 그리고 물리분과회 간사진들의 많은 노력과 열정으로 대한화학회 봄학회를 성황리에 무사히 마쳤고 여름 심포지엄과 광주에서 열릴 예정인 가을학회를 준비하고 있습니다. 아쉽게도 여름 심포지엄과 함께 열려고 했던 물리화학 분야 한-일공동심포지엄은 일본 측의 사정으로 내년도로 연기하기로 하였습니다. 지금 국내외 여건상 국제학술 활동이 많은 제약 요건이 있어서 어려움이 많은 것 같습니다. 이를 잘 극복하셔서 많은 국제학술활동을 이어가실 수 있기를 희망합니다.

여러 가지 어려움이 있지만 이번에 물리화학 분과회 등록비를 조금 인상하기로 결정을 하게 되어서 회원님들의 양해와 이해를 구합니다. 오랫동안 여러 가지 사정으로 인상을 하지 못하게 되었고 여러 사업단과 기업의 후원은 항상 지원이 가능한 것은 아니라서 일정한 수준의 자체 재정 확보가 필요한 상황이라서 분과회 재정의 어려움을 다소 해결하기 위하여 소액의 인상을 하게 되었습니다. 인상과 함께 신입 교수님 등 연구비 확보가 아직 되지 못한 분들을 위한 여러 가지 배려하는 방안들도 동시에 마련하여 실행을 하고 있습니다. 이번 가을학회 그리고 겨울심포지엄에 많은 참석을 부탁드립니다. 물리화학분과회의 발전을 위한 여러 가지 제언도 부탁드립니다.

10월

10월 25일(수) ~ 27일(금)

제132회 대한화학회 (광주 김대중컨벤션센터)

12월

12월 8일(금)

물리화학분과 심포지엄 (나주 한국에너지공과대학교)

# 감사 인사

## 대한화학회 물리화학분과 회원님들께

정부에서는 연구재단의 기초 기반 연구 예산을 올해에 17% 줄여서 연구자들의 연구비 확보에 많은 어려움이 있었습니다. 내년도에도 소폭 감액을 할 것으로 예상됩니다. 줄여진 예산을 반도체, 에너지 분야 등의 국가의 주력 첨단 산업 기술 개발 분야로 투입하는 것으로 알려져 있습니다. 여러분들께서도 전통적인 물리화학 연구의 범주를 벗어나서 융합적이며 사회적 수요가 증가하는 물리화학이 접근 가능한 분야의 연구와 융합 연구에 관심을 가지셔서 연구에 필요한 연구비 확보 전략을 가지시길 권합니다.

마지막으로 여러 회원님들의 건강과 우수한 연구 성과를 도출하시길 기원합니다. 감사합니다.

제39대 대한화학회 물리화학분과 회장 **강영수**

그리고 2023년 물리화학분과 **간사인 일동**



## 제 139차 물리화학분과 봄 심포지엄

일시: 2023년 2월 24일

장소: 고려대학교 아산이학관 633호



2023년 2월 24일 (금)에 고려대학교에서 “제 139차 물리화학분과 봄 심포지엄”을 개최하였습니다. 코로나19의 영향력이 많이 약화되어 전면 대면 방식으로 학회를 진행하였고 총 87명의 회원분들께서 등록 및 현장에 참여해 주셨습니다. 적극 참여해주시고 많이 성원해주신 모든 회원님들께 감사드립니다.

강영수 (한국에너지공과대학) 회장의 개회사로 심포지엄을 시작하였고, 2개의 심포지엄에서 총 6건의 회원 구두발표를 진행했습니다. 흥미로운 발표를 해 주신 **이영주** (한국기초과학지원연구원), **이영욱** (경상국립대), **Stefan Ringe** (고려대), **이종우** (서울시립대), **신재윤** (고려대), **김태연** (성균관대) 회원들께 감사드립니다. 올해는 특히 산업부 한전 R&D 세션을 열어 **윤정수** (한국전력공사)와 **이영훈** (한국산업기술평가원) 두 분의 발표로 연구비 수주에 대한 폭넓은 지혜를 공유하는 뜻깊은 시간을 가졌습니다. 전년도 물리화학분과 회장을 맡아 물리화학분과 발전에 애쓰신 **김동호** (연세대) 회원에게 공로패를 증정하였고, 이후 단체사진 촬영을 진행하고 **강영수** (한국에너지공과대학) 회장의 폐회사로 심포지엄을 마무리하였습니다.

항상 적극적으로 참여해주시고 많은 성원을 보내주시는 회원님들께 감사드리며, 2023년 첫 심포지엄의 성공적 개최를 위해 수고해주신 **곽경원** (고려대), **심상희** (고려대), **정근홍** (육군사관학교), **이종우** (서울시립대), **이정호** (서울대) 조직위원분들에게 감사드립니다.



## 제 139차 물리화학분과 봄 심포지엄

### 프로그램

2월 24일 금요일

12:00 - 13:20	등록
13:20 - 13:30	개회사: 분과회장 강영수 교수 (한국에너지공과대학)
<b>심포지엄 1</b> 좌장: 이정호 교수 (서울대학교 화학과)	
13:30 - 14:00	이영주 박사 (한국기초과학지원연구원) Solid-state NMR study on confined systems in nanopores and rechargeable battery
14:00 - 14:30	이영욱 교수 (경상국립대학교 화학교육과) Shape control and composition of metal nanoparticles and application of enhanced catalysts
14:30 - 15:00	Stefan Ringe 교수 (고려대학교 화학과) Computationally facilitated screening and understanding of electrochemical CO <sub>2</sub> reduction catalysts
15:00 - 15:30	이종우 교수 (서울시립대학교 융합응용화학과) Harnessing strong band-filling in perovskites boosts the photovoltaics performance
15:30 - 15:50	Coffee Break
<b>심포지엄 2</b> 좌장: 정근홍 교수 (육군사관학교)	
15:50 - 16:20	신재운 교수 (고려대학교 신소재화학과) Dynamics of photoinduced electron transfer revealed in bimetallic photocatalysts
16:20 - 16:50	김태연 교수 (성균관대학교 화학과) Vibronic couplings drive photoinduced dynamics of perylenediimide assemblies
<b>산업부 한전 R&amp;D 세션</b> 좌장: 차현길 박사(한국화학연구원)	
16:50 - 17:20	윤정수 차장 (한국전력공사) 탄소중립과 에너지안보를 위한 KEPCO 마스터 플랜
17:20 - 17:50	이영훈 팀장 (한국산업기술평가원) 산업통상자원부 R&D 현황 소개

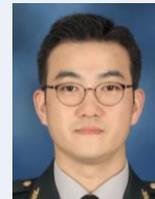
### 조직위원회



심상희 회원  
(고려대)



이정호 회원  
(서울대)



정근홍 회원  
(육군사관학교)



이종우 회원  
(서울시립대)



곽경원 회원  
(고려대)

### 현장운영진

총괄: 박민석

프런트데스크: 김영삼, 송인애, 엄예은

강연진행: 이세찬, 이수현

Zoom 송출: 봉성민, 황성주

사진촬영: 배형석

물품: 손석현, 강성수

Goody-bag: 박주미, 이유진

### 주최

대한화학회 물리화학분과회

### 공동 주최

고려대학교 분자 분광학 및 동력학 연구단 (IBS)

고려대학교 단일세포 분석화학 기초연구실 (BRL)

본 행사를 후원해 주신 모든 분들께 다시 한번 깊은 감사 말씀드립니다.



## 제 139차 물리화학분과 봄 심포지엄



분과 회장 인사말



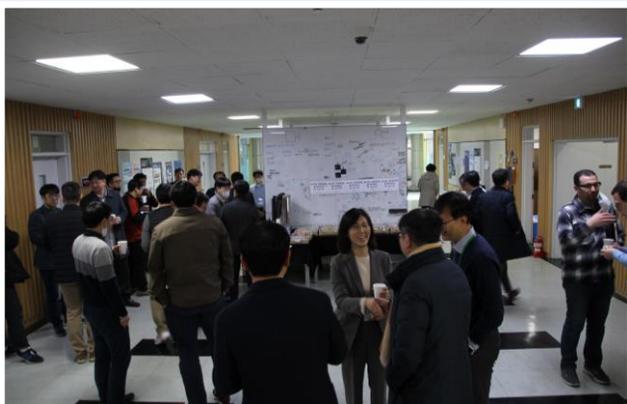
구두발표



구두 발표



현장 참석 회원들



Coffee Break



공로패 증정 (김동호 회원)



## 제 131회 대한화학회 학술발표회

일시: 2023년 4월 26 ~ 28일

장소: 수원컨벤션센터 (SCC)



2023년 4월 26일 수요일 ~ 28일 금요일의 2박 3일 일정으로 수원컨벤션센터에서 “제 131회 대한화학회 학술발표회 및 총회”가 개최되었습니다.

물리화학분과 심포지엄은 4월 27일 목요일과 28일 금요일에 걸쳐 진행되었습니다. **심은지 (연세대)** 회원의 **입재물리화학상** 수상기념강연과 **성봉준 (서강대)** 회원의 **신국조학술상** 수상기념강연이 있었고, 총 3개 주제의 심포지엄에서 총 11개의 초청강연을 진행했습니다. 이외에 총 12건의 신진연구자, 연구교수, 대학원생들의 일반구두발표를 진행했고, 4월 28일 금요일에는 총 158건의 포스터 발표가 있었습니다. 또한 **대한화학회 학술상**을 수상하신 **조민행 (고려대)** 회원의 수상기념강연도 있었습니다. 수상하신 모든 분께 다시 한번 진심 어린 축하인사를 드립니다.

훌륭한 연구업적을 열정적으로 강연해주신 회원분들과 적극적으로 참여해주시고 많은 성원 보내주신 모든 회원분들께 깊은 감사의 말씀드립니다. 저희 분과회의 지속적인 발전을 확인할 수 있는 기회였습니다. 이와 같은 성공적 개최를 위해 수고해주신 **권오훈, 김형준, 차현길, 조현우** 회원님께 감사드리며, 원활한 진행을 맡아 주신 **박준우, 김준우, 김현우, 차현길** 회원님께도 감사드립니다. 또한, 분과회 식사와 맥주를 후원해주신 **김태규, 권오훈, 조범석, 장락우** 회원님께도 깊은 감사인사 드립니다.



## 제 131회 대한화학회 학술발표회



현장 참석 회원들



대한화학회 학술상  
시상 모습 (조민행 회원)



입재물리화학상  
수상자 (심은지 회원)



신국조학술상  
수상자 강연 (성봉준 회원)



## 제140차 물리화학분과 여름 심포지엄

일시: 2023년 6월 19일 ~ 21일

장소: 부산 해운대 한화리조트



2023년 6월 19일 (월)부터 총 2박 3일간의 일정으로 부산 해운대 한화리조트에서 "제140차 물리화학분과 여름 심포지엄"을 개최하였습니다. 심포지엄은 초청강연 20건, 포스터 발표 154건으로 구성되었으며, 총 399명의 회원들이 직접 심포지엄 현장에 참석하여 큰 규모로 행사가 진행되었습니다. 총 19건의 우수포스터발표상을 시상하였고, 학생 및 연구원을 위한 이벤트로 푸짐한 경품을 준비하여 경품추첨을 진행하였습니다.

바쁘신 가운데 훌륭한 강연을 해 주신 초청연사님들께 감사드리며, 행사가 성공적으로 진행될 수 있도록 아낌없는 후원을 보내주신 모든 분들께 감사드립니다. 또한 본 행사가 성공적으로 진행될 수 있도록 헌신적으로 봉사해주신 심포지엄 조직위원회 분들께 깊은 감사의 말씀을 드리며, 마지막으로 본 행사에 많은 관심을 가져 주시고 성원해 주신 모든 물리화학분과 회원들께 감사드립니다.



## 제140차 물리화학분과 여름 심포지엄

### 조직위원회

#### 프로그램 운영:

양성익(총괄, 경희대), 김준우(총북대), 최한규(군산대), 성주영(DGIST), 강명종(강릉원주대),  
이종우(서울시립대), 손운용(충북대)

#### 행사 운영 및 현장 관리:

이상학(총괄, 부산대), 최정모(부산대), 손창윤(Postech), 이승훈(동아대)

#### 재무간사:

최명룡(국립경상대), 김형민(국민대)

#### 총무간사:

곽경원(고려대)

#### 분과회장:

강영수(한국에너지공과대학교)

본 행사 준비에 헌신적으로 봉사해 주신 조직위원들과 학생 도우미들께 다시  
한번 깊은 감사의 말씀드립니다.





## 제140차 물리화학분과 여름 심포지엄



현장 참석 회원들



현장 참석 회원들



포스터 발표



우수 포스터 발표상



경품 추첨



폐회사 (분과회장)



## 제140차 물리화학분과 여름 심포지엄

### 주최

대한화학회 물리화학분과회

### 공동 주최

IBS 첨단 반응동역학 연구단

고려대학교 분자 분광학 및 동력학 연구단 (IBS, CMSD)

KENTECH광에너지 전환 연구실 (리더연구)

경상국립대학교 광화학 나노소재 전문 핵심연구지원센터

광화학 나노소재 에너지 환경 기초연구실(BRL)

부산대학교 기초연구실 (BRL)

중앙대학교 생물리광화학 창의인재 양성사업팀 (BK21)

중앙대학교 세포화학동역학 창의연구단 (리더연구)

POSTECH 양자동역학연구센터 (SRC)

연세대학교 지속가능 화학 교육연구단 (BK21)

강원대학교 강원방사선융복합연구지원센터 (KRCRSC)

경북대학교 혁신화학소재 교육연구단 (BK21)

POSTECH 분자과학교육연구단 (BK21)

부산대학교 에너지융합기술교육연구단 (BK21)

KAIST 분자과학연구단 (BK21)

### 후원

UNIST 구조-기능 상관관계 초고속 나노이미징 기초연구실(BRL)

UNIST 저온분자반응연구단

연세대학교 기능성소재동역학연구실

(주) 케이오에스

(주) 아이에스엠

코리아스펙트랄프로덕츠(주)

(주) 사이플러스

케이비사이언스

(주) 우양포토닉스

후원해 주신 모든 연구단과 사업팀께 다시 한번 깊은 감사 말씀드립니다.



## 대학화학회 학술상



고려대학교  
조민행 회원

## 입재물리화학상



연세대학교  
심은지 회원

## 신국조학술상



서강대학교  
성봉준 회원

## FACS Distinguished Young Chemist Award



POSTECH  
손창윤 회원

수상하신 모든 분께  
다시 한번 진심 어린 축하인사를 드립니다.



## 2023년도 대학화학회 학술상

### 고려대학교 조민행 회원



Professional Career	
2014 ~ Present	IBS 분자 분광학 및 동력학 연구단 단장
1996 ~ Present	교수, 고려대학교
1994 ~ 1996	박사후 연구원, MIT
Awards	
2023	대한화학회 학술상, 대한화학회
2021	한국도레이 과학상, Korea Toray
2012	대한민국 학술원상, 학술원
2010	경암과학상, 경암재단
1999	젊은과학자상, 한국과학기술 한림원

**Q. 교수님의 연구분야와 관련된 간단한 키워드 작성 부탁드립니다.**

A. 시분해 분광학, 비선형 분광학, 극초단 분광학, 결맞음 다차원 분광학 및 분자 이미징

**Q. 수상을 축하 드립니다. 가장 기억에 남는 연구 경험을 소개해 주세요.**

A. 시카고 대학교 화학과에 박사과정 대학원생으로 있을 당시 지도 교수님이셨던 플레밍 교수 그리고 로체스터 대학교에 계셨던 무카멜 교수와 함께 작성한 논문을 투고했을 때 일입니다. 그 논문을 제출하고 몇 주 후에 익명의 리뷰어가 작성한 보고서가 왔습니다. 그 분은 단 하나의 단어로 'Beautiful!'이라는 칭찬과 함께 출판을 추천했습니다. 요즈음에는 다들 연구를 대하는 자세에 있어서 여유가 없어서인지 날카롭고 불필요하게 긴 리뷰를 하거나 받은 합니다. 그러나 당시에는 서로의 연구에 대해 흔쾌히 인정하고 축하해주는, 지금과 달리 비교적 낭만적인 분위기였는데 이제 더 이상 그런 시절이 다시 오지는 않겠지요. 안타깝게도...

**Q. 앞으로 교수님께서 더 큰 학문적 발전을 이루실 것이라고 기대합니다. 향후 학문의 방향에 대한 큰 계획을 소개해 주세요.**

A. 극초단 분광학은 분자 분광학의 한 분야입니다. 지난 수년동안 분자 이미징으로 제 연구 분야를 넓혀왔습니다. 이 연구 방법들은 앞으로도 계속해서 발전을 거듭할 것으로 생각합니다. 좀 더 넓은 파장 범위에서 사용할 수 있는 다차원 분광학 방법을 개발하기 위해서는 여전히 많은 기술적인 난제들을 극복해야 합니다. 그러나 예를 들어 frequency comb 또는 fiber를 기반으로 하는 증폭 레이저와 같이 새로운 광원이 개발되고 있는데, 이 기술들은 광대역 비선형 분광학 개발 및 연구에 매우 유용하게 활용될 것으로 생각합니다. 마찬가지로 거의 single photon 수준에서 측정이 가능한 검출기 역시 개발되고 있습니다. 이 모든 선도적 기술들을 잘 이용한다면 새로운 분광학적 도구의 개발이 가능할 것입니다. 앞으로 다차원 분광학에서 더 나아가 다차원 분자 이미징 기술을 개발한다면, 궁극적으로는 살아있는 세포 및 생체 조직 내에서 매우 빠른 속도로 진행되는 생화학 및 생물학적 현상을 직접 관찰 연구하는 것이 가능할 것입니다. 즉 새로운 분자 분광학 및 이미징 방법의 개발을 통해 생명현상을 분자수준에서 연구하는 것이 앞으로 제가 추구하는 연구의 방향 및 목표입니다.

**Q. 덧붙여 하실 말씀 있으신가요?**

A. 대한화학회에서 수여하는 학술상을 받게 되어 영광스럽게 생각합니다. 그동안 저와 함께 연구해왔던 많은 학생 연구원 그리고 동료 교수들에게 진심으로 감사하다는 말씀을 드리고 싶습니다. 물리화학을 어렵게 생각하는 많은 학생들이 있는데, 반면에 물리화학만큼 재미있는 분야는 없다는 것이 제 생각입니다. 모두 다 즐겁게 연구하시고, 작은 것에서 즐거움을 찾는 과학자들이 되기를 바랍니다.

대표 연구 업적



## 2023년도 입재물리화학상

### 연세대학교 심은지 회원



Professional Career	
2003 ~ Present	교수, 연세대학교
2002 ~ 2003	연구원, Rutgers University
1999 ~ 2002	박사후 연구원, Columbia University
1997 ~ 1999	박사후 연구원, Northwestern University
Awards	
2023	입재물리화학상, 대한화학회
2019	아이센스 여성화학자상, 대한화학회
2017	신국조학술상, 대한화학회
2007, 2008, 2013	우수강의상, 연세대학교

**Q. 교수님의 연구분야와 관련된 간단한 키워드 작성 부탁드립니다.**

A. Density-Corrected Density Functional Theory, path integral quantum dynamics, polymer self-assembly 등 계산화학 방법론과 응용에 관련된 연구를 수행하고 있다

**Q. 수상을 축하드립니다. 가장 기억에 남는 연구 경험을 소개해 주세요.**

A. 내 이름을 내건 첫 연구논문을 마주했던 순간이 아니었나 싶습니다. 그 당시에는 pdf라던가 인터넷이 없어서 논문을 인쇄해서 직접 우편으로 보내주었는데, 몇 페이지 되지 않는 그 논문이 그렇게 소중하고 묵직하게 느껴졌어요. 막연한 아이디어를 수학적 식으로 전개하고 코딩을 해서 기대하던 결과를 얻음에 신기하고 뿌듯했던 경험이 지금까지도 생생합니다.

**Q. 앞으로 교수님께서 더 큰 학문적 발전을 이루실 것이라고 기대합니다. 향후 학문의 방향에 대한 큰 계획을 소개해 주세요.**

A. 실험과 계산 연구는 상보적인 관계일 때 서로 최상의 결과를 도출한다고 생각합니다. 밀도범함수이론은 이제 자연과학을 넘어서 공학 분야에까지 활용되고 있지만 아직도 많은 경우에 실험결과를 설명하고 보조하는 역할로 인식되고 있습니다. 계산으로 예측한 결과를 실험으로 증명하는 경우가 늘어나려면 방법론이 좀 더 신뢰를 얻어야 하겠지요. 저는 밀도범함수이론의 방법론을 체계적으로 개선하여 그 일관성 있는 결과를 얻음으로써 결과적으로 계산 결과의 신뢰성을 확보할 계획입니다.

**Q. 덧붙여 하실 말씀 있으신가요?**

A. 작년에 분과회 총무간사를 하면서 저희 분과회에 대한 자부심이 더욱 커졌습니다. 물리화학분과회가 운영진을 구심점으로 조직력이 강해지고 유대감이 상승하는게 보였습니다. 지금 이 소식지도 분과회 간사님들의 수고와 봉사로 만들어지고 있고 덕분에 회원님들이 분과회의 역할과 행사에 관심을 가질 수 있게 되었습니다. 지금까지 분과회를 이끌어 주시고 앞으로도 봉사해 주실 운영진께 진심을 담아 감사의 말씀을 드립니다.

**대표 연구 업적**

Extending density functional theory with near chemical accuracy beyond pure water	<i>Nature Communications</i> 14, 799, 2023
Improving results by improving densities: density-corrected density functional theory	<i>Journal of the American Chemical Society</i> , 144, 6625, 2022



## 2023년도 신국조학술상

### 서강대학교 성봉준 회원



Professional Career	
2007 ~ Present	교수, 서강대학교
2006 ~ 2007	박사후 연구원, University of Wisconsin at Madison
Awards	
2023	신국조학술상, 대한화학회
2019	젊은물리화학자상, 물리화학분과회
2014	KCS-Young Chemist Award, 대한화학회
2011	The Distinguished Lectureship Award, The Chemical Society of Japan

**Q. 교수님의 연구분야와 관련된 간단한 키워드 작성 부탁드립니다.**

A. 저는 물리화학 분야 내의 계산 및 이론화학 전공자입니다. 분자 동역학 전산모사, 몬테 카를로 전산모사 등의 계산화학 방법과 integral equation theory, percolation theory, scaling theory 등을 활용하여 연성 소재 (고분자, 생체막, 콜로이드)에 대한 연구를 수행하고 있습니다.

**Q. 수상을 축하 드립니다. 가장 기억에 남는 연구 경험을 소개해 주세요.**

A. 모든 프로젝트가 나름의 사연이 있지만, 지금 기억에 떠오르는 프로젝트는 제가 서강대학교에 처음 부임하고 기업과 함께 수행했던 과제입니다. 학교에만 있었기 때문에 기업 과제 경험이 현저히 부족했고, 계산화학을 하는 연구자로서 실험 연구자와의 협업 경험 역시 부족해서 크게 우왕좌왕했던 것 같습니다. 다행히 기업의 담당자께서 훌륭한 분이었고, 그 분과의 소통 끝에 과제를 잘 마무리 할 수 있었습니다. 이를 통해 "소통"이 연구에 얼마나 중요한 지 배울 수 있었습니다.

**Q. 앞으로 교수님께서 더 큰 학문적 발전을 이루실 것이라고 기대합니다. 향후 학문의 방향에 대한 큰 계획을 소개해 주세요.**

A. 회원들께서 모두 아시다시피, 인공 지능과 컴퓨터 HW(특히 GPU)의 눈부신 발전으로 계산화학 분야가 한층 성장할 것으로 생각합니다. 또한, 비평형 통계역학 등의 이론화학도 지속적으로 발전하고 있습니다. 계산화학과 이론화학의 이러한 발전에 힘입어 전통적인 연성 소재를 넘어서 에너지, 환경, 반도체 등 여러 현안에 작게나마 공헌할 수 있으면 좋겠다는 바램이 있습니다.

**Q. 덧붙여 하실 말씀 있으신가요?**

A. 물리화학분과회의 모든 회원들에게 감사드리고 싶습니다. 연구과제 수주, 논문 발표, 교육 등 어느 하나 놓치지 않다는 것을 항상 느끼고 있습니다. 하지만, 회원 여러분들과 함께 동고동락하고 힘내어 그 동안 학자로 무난히 살아올 수 있었던 것 같아 진심으로 감사드립니다. 신국조 학술상도 제가 생각이 많아질 즈음 주셔서, 더욱 힘내고 물리화학분과회를 위해 더 애쓰라는 말씀으로 생각합니다. 다시 한 번 감사드립니다.

**대표 연구 업적**

AT-specific DNA visualization revisits the directionality of bacteriophage $\lambda$ DNA ejection	<i>Nucleic Acids Research</i> , 51, 5634, <b>2023</b>
Facilitated and non-Gaussian diffusion of cholesterol in liquid ordered phase bilayers depends on the flip-flop and spatial arrangement of cholesterol	<i>The Journal of Physical Chemistry Letters</i> , 9, 6529, <b>2018</b>
Fractional viscosity dependence of reaction kinetics in glass-forming liquids	<i>Physical Review Letters</i> , 119, 087801, <b>2017</b>



## 2023 Federation of Asian Chemical Societies (FACS), Distinguished Young Chemist Award

### POSTECH 손창윤 회원



Professional Career	
2020 ~ Present	조교수, POSTECH
2017 ~ 2020	박사후 연구원, California Institute of Technology
Awards	
2023	FACS Distinguished Young Chemist Award
2023	한국고분자학회 신진학술상
2022	젊은 물리화학자상, 대한화학회
2021	청암 사이언스 펠로우, 청암재단

**Q. 교수님의 연구분야와 관련된 간단한 키워드 작성 부탁드립니다.**

A. 전하와 계면의 상호작용, 분자동역학 시뮬레이션, 에너지/바이오 소재 시뮬레이션 연구

**Q. 수상을 축하 드립니다. 가장 기억에 남는 연구 경험을 소개해 주세요.**

A. 작년에 발표한 지방방울(lipid droplet)이라는 세포내 소기관을 활용해서 고부가가치 의약소재를 생산하고 저장체로 사용하는 연구를 소개하고 싶어요. 연구에서 저희의 기여는 시뮬레이션을 통해 합성된 화합물의 유연성(flexibility)이 생산성에 큰 영향을 준다는 새로운 메커니즘을 밝힌 것이었는데, 공동연구를 시작한 계기가 정말 우연히 친해진 소재과 교수님이 학회에서 '예의상' 제 발표를 들으러 오셨다가 '손박사 이런 연구를 해?'하고 제안을 주신 거란 게 재미있어요. 이론연구의 특성상 물리화학적 개념과 방법론을 다양한 시스템에 적용하며 폭넓은 현상을 깊이 있게 생각해 볼 수 있다는 게 너무 매력적인 것 같습니다.

**Q. 앞으로 교수님께서 더 큰 학문적 발전을 이루실 것이라고 기대합니다. 향후 학문의 방향에 대한 큰 계획을 소개해 주세요.**

A. 저희 연구실의 목표는 'charged interface' 에 대한 분자수준 모델링을 가장 잘 할 수 있는 그룹이 되고 싶어요. 크게 고분자 전해질, 전해질-고체/기체 계면, 생체분자막의 큰 세 분야에서 여러 재미있는 문제들을 찾고 이론적인 설명을 시도하고 있습니다. 궁극적으로는 양자역학과 고전적 분자동역학의 간극을 연결할 수 있는 큰 스케일에서의 반응성 분자동역학 시뮬레이션 기법을 만들어 다양한 응용을 목표로 달려가는 중입니다^^

**Q. 덧붙여 하실 말씀 있으신가요?**

A. 아직 이론 것에 비해 과분한 상을 받게 되어서 부담이 가득입니다. 최근 물리화학 분과회의 규모도 커지고 더욱 다양한 분야의 회원님들이 오셨기에, 함께 재미있는 연구들을 할 기대도 가득이구요. 늘 더욱 번창하는 분과회가 되기를 기대합니다!

#### 대표 연구 업적

Metastable hexagonal close-packed palladium hydride in liquid cell transmission electron microscopy	<i>Nature</i> , 603, 631, 2022
Chain flexibility of lipids determines their selective migration in lipid droplets	<i>Nature Communications</i> , 13, 3612, 2022
Image charge effects on ion adsorption near aqueous interfaces	<i>Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America</i> , 118, e2020615118, 2021



물리화학분과 회원 중 최근 퇴임하신 교수님이 계십니다. 연구와 후학 양성을 위한 그간의 헌신적인 노고에 깊은 존경과 감사를 표하며, 아래와 같이 퇴임 교수님을 소개 드립니다.



**김창민 교수님 (경북대학교 화학과)**

1993 - 2023 : 경북대학교 교수  
2006 - 2013 : BK21 단장, 경북대학교  
1992 : 박사. 캘리포니아대학교 버클리  
1988 : 석사. 캔자스 주립대학교  
1983 : 학사. 서울대학교 화학과

**“그동안 수고 많으셨습니다. 감사합니다.”**

**“지금 우리가 걷는 이 길에 첫 발자국을 내주신 교수님들께 경의와 깊은 감사를 드립니다.”**



## 가나다 순



### DGIST 화학물리학과

### 김종구 회원

김종구 회원은 KAIST 화학과에서 학사 (2010) 및 박사 (2016, 지도교수: 이효철 교수) 학위를 취득하였다. 이후 기초과학연구원에서 박사후 연구원을 거쳐, 2023년 6월에 DGIST 화학물리학과로 부임하였다. 시간분해 엑스선 산란법을 이용하여 분자의 구조 변화를 추적함으로써 반응 메커니즘을 밝히는 연구를 수행하고 있다. 작은 분자 및 단백질에 이 방법을 적용하여 화학적, 생물학적 반응에 대한 이해를 증진시키는 연구를 수행 중이다.



### 성균관대학교 화학과

### 김태연 회원

김태연 회원은 성균관대학교 화학과에 2023년 2월에 임용되었다. 김태연 회원은 초고속 시간-분해 분광 실험을 통해 기능성 유기 분자들로 구성된 시스템에서 이들 간의 상호작용에 효과로 나타나는 광유도 동역학을 추적하고, 분자 레벨의 구조적 접근을 통해 들뜬 상태 동역학의 메커니즘과 이로 인해 발생하는 특이적인 광학 성질을 탐구하고 있다. 특히, 광유도 동역학에서 중요한 구조 파라미터들과 전자-핵진동 상호작용의 역할을 밝히고자 한다.



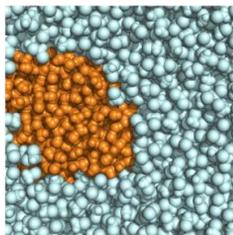
출판일: 1 December 2022

GIST 최준호 회원

## “Spatial inhomogeneity and molecular aggregation behavior in aqueous binary liquid mixtures”

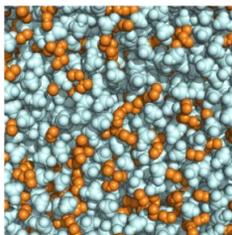
Spatial Inhomogeneity

$h = 0.5293$



Inhomogeneous mixture

$h = 0.2146$



Homogeneous mixture

Jiwon Seo, Seungeui Choi, Ravi Singh, and Jun-Ho Choi\*

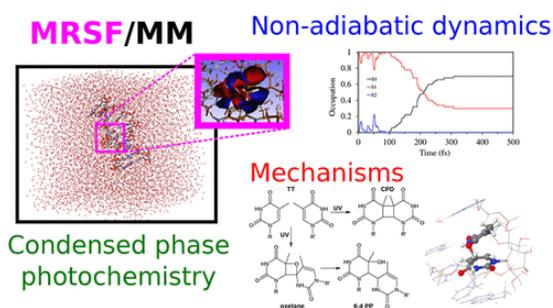
수용액 혼합물에서 분포하는 분자들의 공간 불균일성을 측정하였다.

J. Mol. Liq. 369, 120949 (2023)

출판일: 27 December 2022

경북대학교 최철호 회원

## “Photochemistry of thymine in solution and DNA revealed by an electrostatic embedding QM/MM combined with mixed-reference spin-flip TDDFT”



Karno Schwinn, Vladimir Pomogaev, Maryam Farmani, Nicolas Ferré, Seunghoon Lee, and Cheol Ho Choi\*

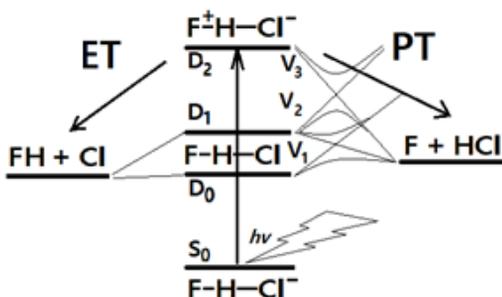
We combine mixed-reference spin-flip time-dependent density functional theory (MRSF-TDDFT) with electrostatic embedding QM/MM using electrostatic potential fitted (ESPF) atomic charges, as a strategy to accurately and efficiently describe the electronic structure of chromophores polarized by an electrostatic medium.

J. Chem. Theory Comput. 19, 147 (2023)

출판일: 3 January 2023

강릉원주대학교 백경구 회원

## “Nuclear wave-packet-propagation-based study of the electron-coupled, proton-transfer process in the charge-transfer state of FHCl exhibiting three electronic states in full-dimensional space”



Pinit Ariyageadsakul and Kyoung Koo Baek\*

전자 이동과 양성자 이동이 얽히면서 서로 반대 방향으로 짝지어 진행되는 동역학의 초기 과정에서, 양성자 이동과 전자 이동이 본격 시작되는 시점의 차이를 펨토-초 수준에서 이해하기 위하여, 세 개의 전자 상태가 동시에 관여하는 FHCl 전하-이동 전자 상태의 초기 과정을 원자핵 파속 전개 방법으로 연구하였다.

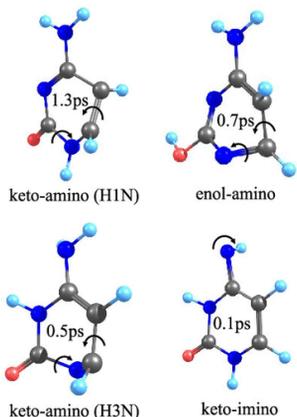
J. Chem. Phys. 158, 014302 (2023)



출판일: 18 January 2023

경북대학교 최철호 회원

## “Prototropically Controlled Dynamics of Cytosine Photodecay”



Saima Sadiq, Woojin Park, Vladimir Mironov, Seunghoon Lee, Michael Filatov, and Cheol Ho Choi\*

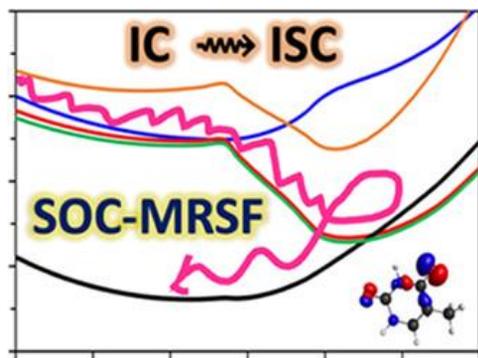
The effect of the existence of several prototropic tautomers of cytosine is studied by spectral and nonadiabatic molecular dynamics (NAMD) simulations in connection with the mixed-reference spin-flip time-dependent density functional theory (MRSF-TDDFT) method.

*J. Phys. Chem. Lett.* **14**, 791 (2023)

출판일: 18 January 2023

경북대학교 최철호 회원

## “Accurate Spin–Orbit Coupling by Relativistic Mixed-Reference Spin-Flip-TDDFT”



Konstantin Komarov, Woojin Park, Seunghoon Lee, Tao Zeng, and Cheol Ho Choi\*

Relativistic mixed-reference spin-flip (MRSF)-TDDFT is developed considering the spin–orbit coupling (SOC) within the mean-field approximation.

*J. Chem. Theory Comput.* **19**, 953 (2023)

출판일: 6 February 2023

고려대학교 신재윤 회원

## “Dynamics of Photoinduced Intramolecular and Intermolecular Electron Transfers in Ligand-Conjugated Ir(III)–Re(I) Photocatalysts”



SooHwan Kim, Daehan Lee, Taesoo Kim, Chul Hoon Kim, Ho-Jin Son, Sang Ook Kang, and Jae Yoon Shin\*

The dynamics of intramolecular electron transfer between Ir and Re moieties depend on the bridging ligand structures in ligand-conjugated Ir(III)–Re(I) photocatalysts.

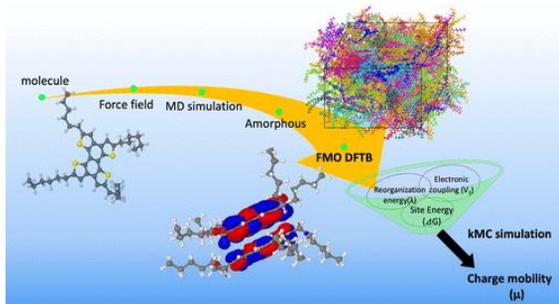
*J. Phys. Chem. Lett.* **14**, 1535 (2023)



출판일: 9 February 2023

경북대학교 최철호 회원

## “Toward Accurate Prediction of Ion Mobility in Organic Semiconductors by Atomistic Simulation”



Hiroya Nakata, Hirotaka Kito-Nishioka, Wakana Sakai, and Cheol Ho Choi\*

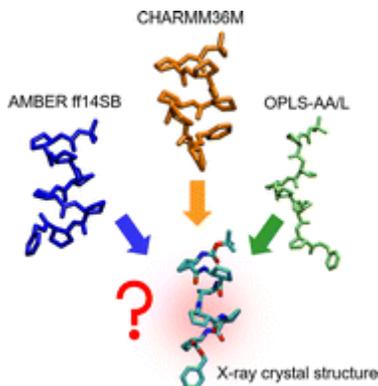
A multiscale scheme (MLMS: Multi-Level Multi-Scale) to predict the ion mobility ( $\mu$ ) of amorphous organic semiconductors is proposed.

J. Chem. Theory Comput. 19, 1517 (2023)

출판일: 21 February 2023

부산대학교 최정모 회원, KAIST 김형준 회원

## “Conformational landscapes of artificial peptides predicted by various force fields: are we ready to simulate $\beta$ -amino acids?”



Jihye Park, Hee-Seung Lee, Hyungjun Kim\*, and Jeong-Mo Choi\*

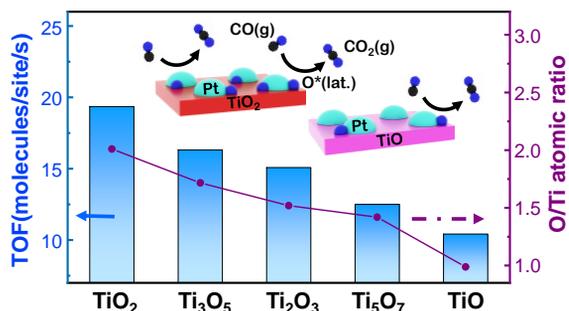
$\beta$ -아미노산 폴대머를 시뮬레이션하기 위해 다양한 역장을 테스트하였고, 그 결과 역장마다 서로 다른 결과를 예측한다는 사실을 발견하였다.

Phys. Chem. Chem. Phys. 25, 7466 (2023)

출판일: 21 February 2023

KAIST 박정영 회원

## “Role of the Support Oxidation State on the Catalytic Activity of Two-Dimensional Pt/TiO<sub>x</sub> Catalysts”



Gyuhoo Han, Hee Chan Song, Sang Hoon Kim, and Jeong Young Park\*

This article demonstrates that the catalytic performance of Pt/TiO<sub>x</sub> catalyst varies depending on the oxidation state of the titanium oxide support.

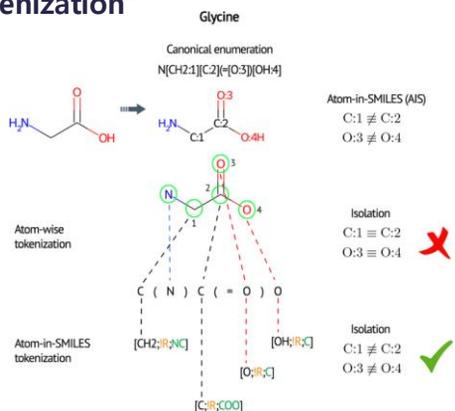
J. Phys. Chem. C 127, 4096 (2023)



출판일: 23 February 2023

서울대학교 이주용 회원

## “Improving the quality of chemical language model outcomes with atom-in-SMILES tokenization”



Umit V. Ucak, Islambek Ashyrmamatov and Juyong Lee\*

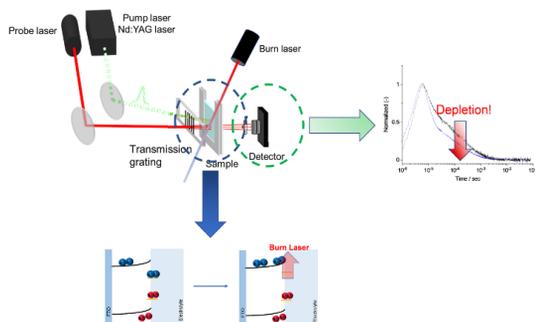
분자를 텍스트 형태로 표현할 때 사용되는 새로운 토큰화 방법인 Atom-in-SMILES (AIS)를 제시하였다.

J. Cheminform. 15, 55 (2023)

출판일: 4 April 2023

충북대학교 손운용 회원

## “Development of charge carrier-selective heterodyne transient grating spectroscopic technique and its application in the distinction of surface trap states in hematite”



Young Hyun Kim, Yu Gyeong Bae and Woon Yong Sohn\*

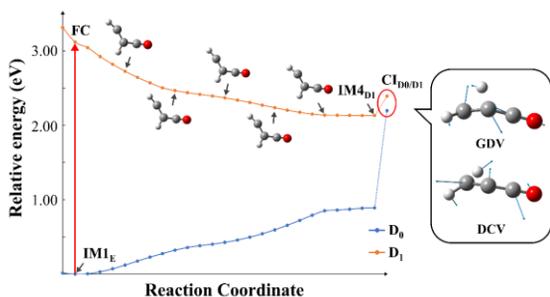
We newly developed a spectroscopic technique named charge carrier-selective heterodyne transient grating (CS-HD-TG) method, which could be utilized for the distinction of the surface trap states.

Phys. Chem. Chem. Phys. 25, 11981 (2023)

출판일: 11 April 2023

가톨릭대학교 김중환 회원, KRISS 임정식 회원

## “Photochemical Reaction Mechanism of Intramolecular H Transfer Reaction of H<sub>2</sub>C<sub>3</sub>O<sup>•+</sup> Radical Cation”



Joonghan Kim,\* Dakyeung Oh, Eunji Park, Jeongmin Park, Jungyoon Kim, and Jeong Sik Lim\*

The photochemical reaction mechanism of the intramolecular H-transfer reaction of H<sub>2</sub>C<sub>3</sub>O<sup>•+</sup> proceeding to H<sub>2</sub>CCCO<sup>•+</sup> was elucidated using time-dependent density functional theory and high-level ab initio methods.

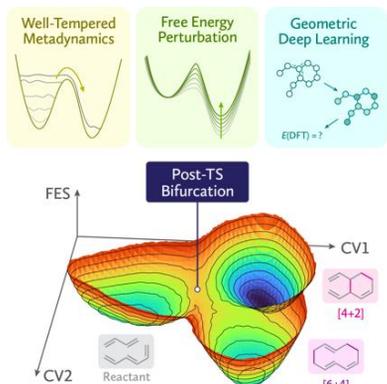
ChemPhysChem, 24, e2023000 (2023)



출판일: 17 April 2023

서울대학교 정연준 회원

## “Enhanced Sampling for Free Energy Profiles with Post-Transition-State Bifurcations”



Juno Nam and YounJoon Jung\*

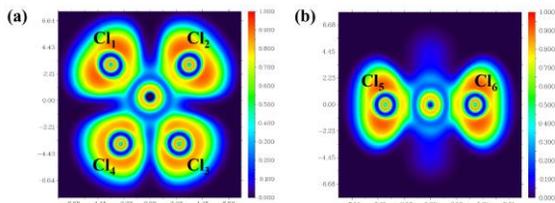
We present a strategy to explore the free energy landscapes of chemical reactions with post-transition-state bifurcations using enhanced sampling methods and geometric deep learning models.

J. Chem. Theory Comput. 19, 2735 (2023)

출판일: 20 April 2023

가톨릭대학교 김중환 회원, 연세대학교 김태규 회원

## “High Level Ab Initio and Density Functional Study of $\text{TeF}_6^+$ and $\text{TeCl}_6^+$ : Attainability of +7 Oxidation State for Tellurium”



Joonghan Kim,\* Eunji Park, Jeongmin Park, Jungyoon Kim, Kihwan Yoon, Dakyeung Oh, Junho Lee, Tae Wu Kim, and Tae Kyu Kim\*

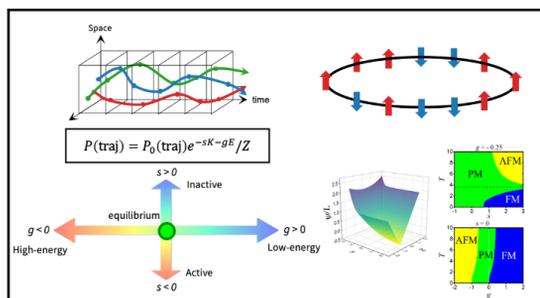
We determined that Te can attain a +7 oxidation state through the existence of a distorted octahedron (DOH) structure of  $\text{TeCl}_6^+$  based on coupled cluster singles and doubles with perturbative triples calculations.

J. Chem. Phys. 158, 154301 (2023)

출판일: 20 April 2023

서울대학교 정연준 회원

## “Anomalous Dynamical Phase Transitions of the Ising Model Studied by the Nonequilibrium Ensemble Method: Freezing-by-Heating and Permanent Liquid”



Jay-Hak Lee and YounJoon Jung\*

We investigated the nonequilibrium, dynamical phase transition behavior of the one-dimensional Ising model, using the trajectory ensemble approach in the context of the large deviation theory.

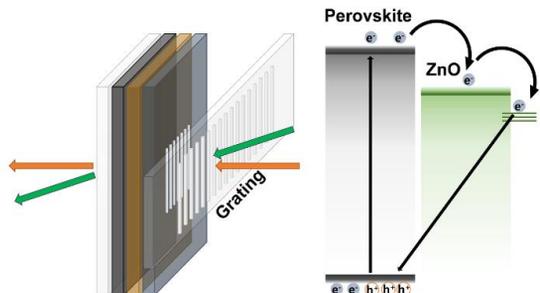
J. Phys. Chem. B 127, 3939 (2023)



출판일: 8 May 2023

충북대학교 손운용 회원

## “A New Strategy for Monitoring the Charge Transfer from Perovskite Thin Films to Electron Transport Layers Using a Heterodyne Transient Grating Technique”



Young Hyun Kim and Woon Yong Sohn\*

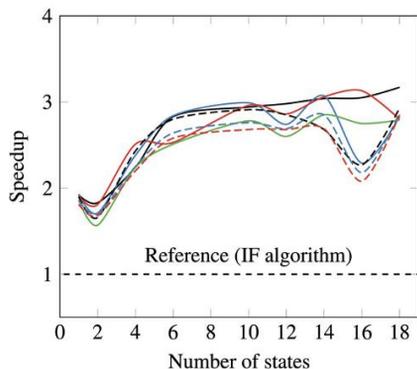
We investigated the charge injection dynamics from MAPbI<sub>3</sub> to ZnO, based on the component arising from the recombination of the surface trapped electrons in the ZnO layer, using a HD-TG method.

Phys. Chem. Chem. Phys. 25, 14742 (2023)

출판일: 15 May 2023

경북대학교 최철호 회원

## “High-performance strategies for the recent MRSF-TDDFT in GAMESS”



Komarov, Vladimir Mironov, Seunghoon Lee, Buu Q Pham, Mark S Gordon, and Cheol Ho Choi\*

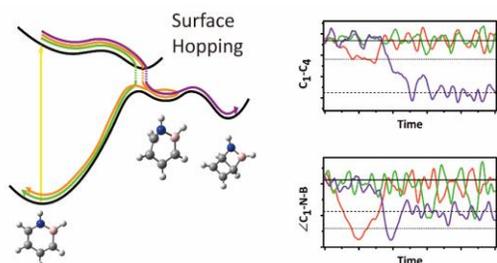
Our combined strategies remarkably improve the performance of the MRSF (mixed reference spin flip)-TDDFT (time-dependent density functional theory) by nearly 300%.

J. Chem. Phys. 158, 194105 (2023)

출판일: 29 May 2023

POSTECH 김경환 회원, 가톨릭대학교 김중환 회원

## “Ultrafast photoisomerization mechanism of azaborine revealed by nonadiabatic molecular dynamics simulations”



Sangmin Jeong, Eunji Park, Joonghan Kim\* and Kyung Hwan Kim\*

Our non-adiabatic molecular dynamics simulations exploring the photoisomerization mechanism of azaborine demonstrates its distinct photochemical properties.

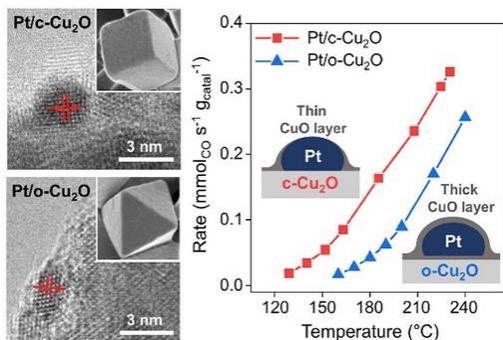
Phys. Chem. Chem. Phys., 2023, Advance Article



출판일: 1 June 2023

KAIST 박정영 회원

## “Facet-Controlled Cu<sub>2</sub>O Support Enhances Catalytic Activity of Pt Nanoparticles for CO Oxidation”



Seunghwa Hong, Daeho Kim, Ki-Jeong Kim, and Jeong Young Park\*

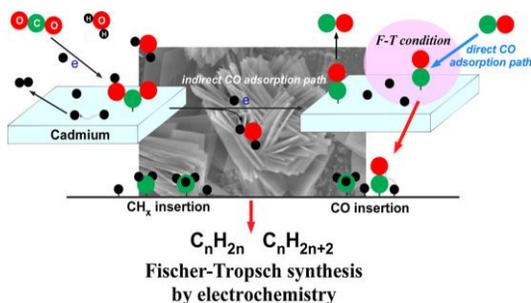
Cubic and octahedral Cu<sub>2</sub>O supported Pt nanoparticles show facet-dependent encapsulation, giving catalytic enhancement for CO oxidation.

J. Phys. Chem. Lett. 14, 5241 (2023)

출판일: 9 June 2023

충남대학교 손영구 회원

## “Electrochemical CO<sub>2</sub>/CO Reduction and C–C Coupling Path for Mimicking Fischer–Tropsch Synthesis over Cadmium Electrodes”



Ju Young Maeng, Seon Young Hwang, Young Jun Kim, Ilsun Yoon, Chang Woo Myung, Choong Kyun Rhee, and Youngku Sohn\*

Fischer–Tropsch synthesis chemistry was successfully achieved over Cd electrode by electrochemistry

J. Phys. Chem. C 127, 11448 (2023)

# 분과회비 납부 안내 및 현황

물리화학분과 연회비(2023년 기준)는 50,000원 입니다. (회원분들의 관심 부탁드립니다.)

## 납부 여부 확인 방법:

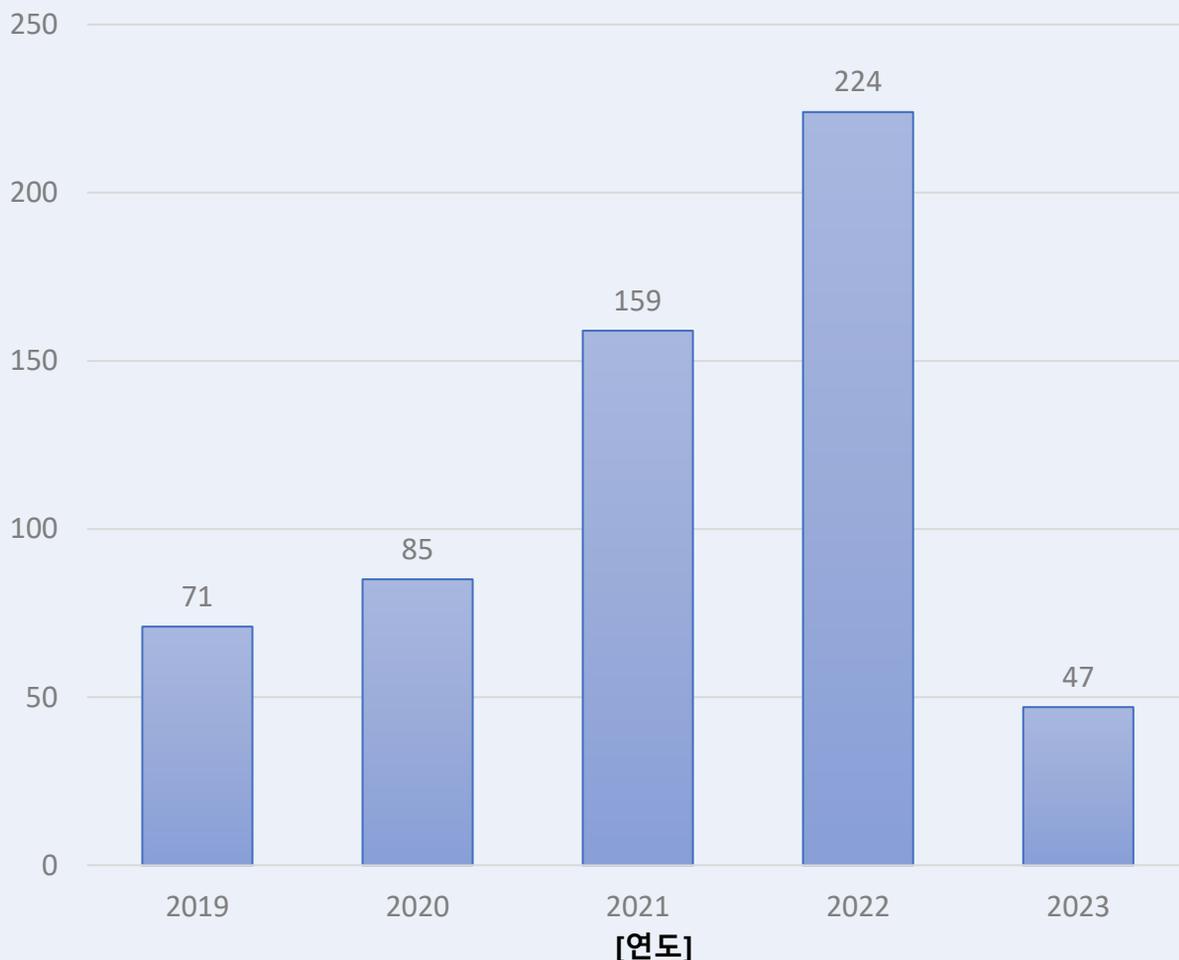
대한화학회 홈페이지(<http://new.kcsnet.or.kr/>)에 접속하여 로그인>우측상단의 "마이페이지"를 클릭 > "결제내역(영수증)" 클릭

## 분과회비 납부 방법:

대한화학회 홈페이지(<http://new.kcsnet.or.kr/>)에 접속하여 로그인>우측상단의 "마이페이지"를 클릭 > "결제하기" 클릭 > 분과회비 부분에 있는 "분과회 행사 결제" 클릭 > 물리분과 심포지엄 등록시 "비회원" 등록

## 분과회비 납부자 수 연도별 추이

2023년 6월 26일 기준



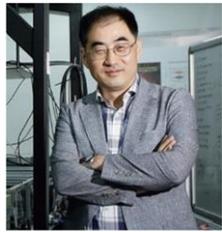
물리화학분과 운영진의 헌신적인 봉사와 회원들의 후원,  
그리고 모든 회원들의 적극적인 참여로 물리화학분과가 매년 발전하고 있습니다.  
이 자리를 빌려 올해도 많은 관심과 성원을 보내주신 회원들께 다시 한번 감사인사 올립니다.

# 2023년도 물리화학분과 운영진 소개



**회장 강영수**

한국에너지공과대학  
yskang@kentech.ac.kr



**총무곽경원**

고려대학교  
kkwak@korea.ac.kr

## 운영위원 (가나다 순)

강명중, 강릉원주대	심상희, 고려대
권오훈, UNIST	안태규, 성균관대
김경환, 포항공대	양성익, 경희대
김명화, 이화여대	양재성, 연세대
김준우, 충북대	이경구, 국립군산대
김태우, 국립목포대	이상학, 부산대
김현우, GIST	이승훈, 동아대
김형민, 국민대	이정호, 서울대
김형준, 인천대	이종우, 서울시립대
민두영, UNIST	정근홍, 육군사관학교
민승규, UNIST	조현우, 서울과학기술대
박명기, 국립부경대	차현길, 한국화학연구원
박재홍, 이화여대	최명룡, 국립경상대
성주영, DGIST	최정모, 부산대
손운용, 충북대	최한규, 국립군산대
손창윤, 포항공대	황윤정, 서울대



물리화학분과 소식지는 학술대회 및 세미나 소식과 일정 안내, 연구 혹은 교육과 관련된 물리화학분과 회원들의 새로운 소식 등을 수록하고자 합니다. 알고 계신 다양한 소식들을 분과 운영회원에게 전해 주시면, 소식지를 통해 전체 회원에게 공유하고 알려드리도록 하겠습니다. 물리화학분과 소식지는 회원들께 홈페이지(<https://www.physchem.kcsnet.or.kr/>)와 이메일을 통해 공유해드리고 있습니다. 회원 여러분들의 많은 관심과 참여 부탁드립니다.

## 소식지 편집위원(홍보간사) 일동



**홍보 총무간사**  
**박재홍**  
이화여자대학교  
화학나노과학과  
jaehong@ewha.ac.kr  
Tel: 02-3277-4706



**편집위원**  
**성주영**  
대구경북과학기술원  
화학물리학과  
jooyoung@dgist.ac.kr  
Tel: 053-785-6533



**편집위원**  
**김현우**  
광주과학기술원  
화학과  
hwk@gist.ac.kr  
Tel: 062-715-4640



**편집위원**  
**조현우**  
서울과학기술대학교  
정밀화학과  
chohw2000@seoultech.ac.kr  
Tel: 02-970-6451



**편집위원**  
**최한규**  
군산대학교  
화학과  
hchoi@kunsan.ac.kr  
Tel: 063-469-4579



**편집위원장**  
**이정호**  
서울대학교  
화학부  
jung-ho.lee@snu.ac.kr  
Tel: 02-880-4363

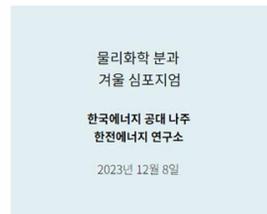
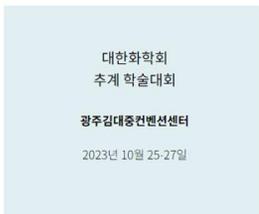
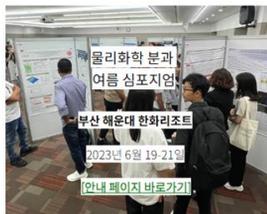


물리화학분과 내 소식, 관련 행사 안내, 과제 관련 정보 공유를 위하여, 분과홈페이지(<https://www.physchem.kcsnet.or.kr/>)를 올해 개설하였습니다. 현재 각 분기별 학회 및 분과 심포지엄 정보 등을 게시하고 있으며, 분과회원분들의 수상소식전달 및 위성학회 홍보 등을 위해서도 활용되고 있습니다. 홍보간사들도 홈페이지 제작을 공부하면서 업데이트를 하는 상황이다 보니, 아직 부족한 점이 많지만 회원님들의 넓은 아량으로 이해해주시고, 오류나 개선할 점은 홍보총괄간사(박재홍, jaehong@ewha.ac.kr)에게 알려주시면 수정하도록 하겠습니다. 향후 분과회에 기여하시는 스폰서 업체들의 배너광고 등을 기획하고 있으며, 이를 통해 좀 더 지속가능한 분과회를 만들고자 노력하고 있으니, 회원분들의 많은 참여를 부탁드립니다.

(\*홈페이지 메뉴 중 2023년 주요 과제 정보는 패스워드가 걸려있습니다. 패스워드는 "1983" 입니다. - 물리화학분과 1회 회장님 선출년도입니다.)



## 2023년 주요 일정



# 2023년도 물리화학분과 행사일정

