

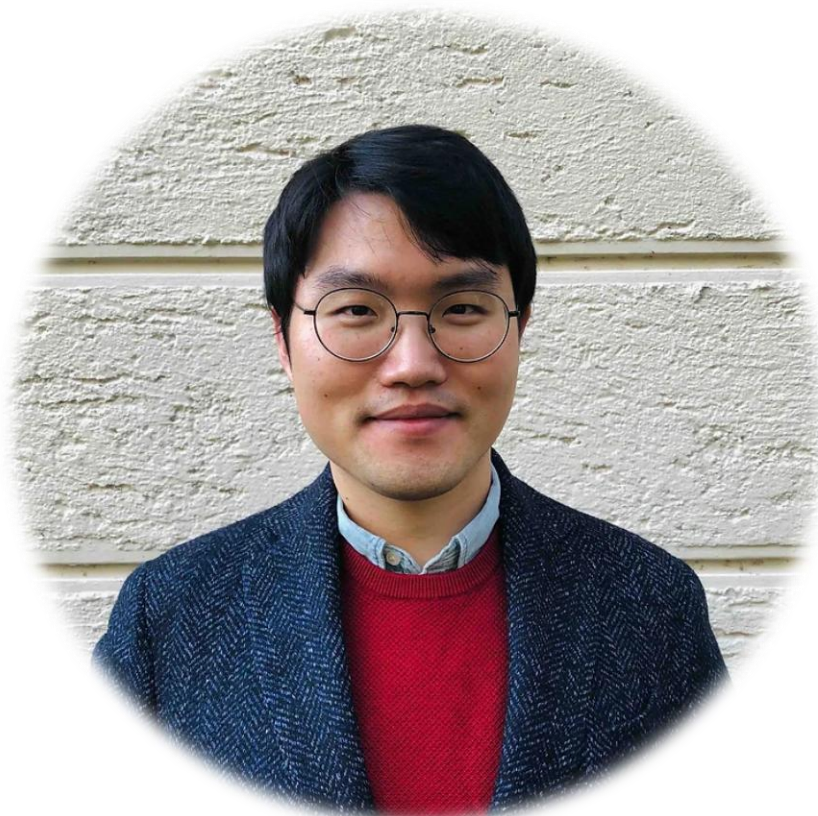
Welcome to Myung Group!

연구참여 및 대학원생 모집



SCAN ME





Prof. Myung Chang Woo

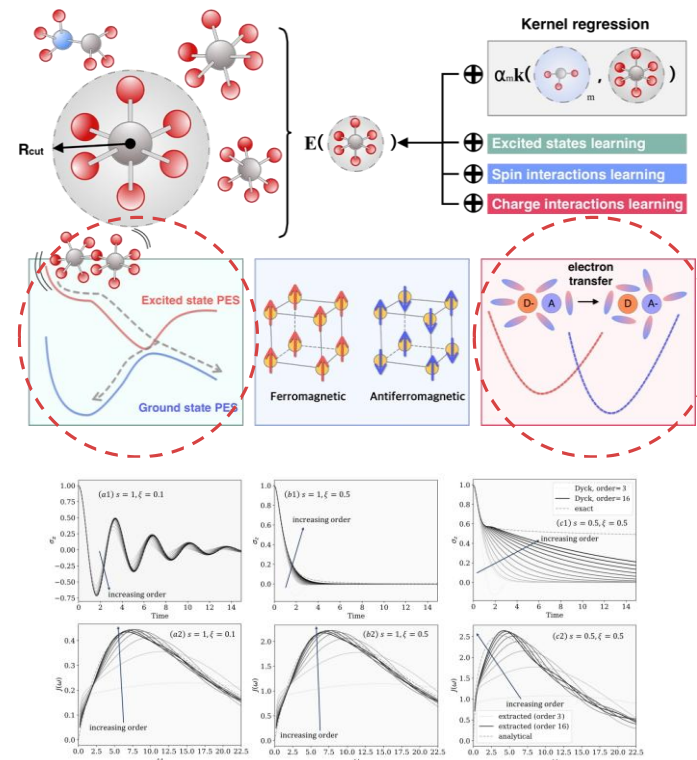
Professional experience

- **09/01/2025-present**
Associate Professor, Department of Energy/Department of Energy Science/Department of Quantum Information Engineering, Sungkyunkwan University, Korea
- **02/27/2023-08/31/2025**
Assistant Professor, Department of Energy, Sungkyunkwan University, Korea
- **01/09/2021-02/26/2023**
Assistant Professor, Department of Chemistry, Chungnam National University, Korea
- **01/12/2020-30/08/2021**
Postdoctoral Fellow of National Research Foundation of Korea,
Yusuf Hamied Department of Chemistry, University of Cambridge, United Kingdom
Research Group: Prof. Angelos Michaelides
- **16/12/2019-30/11/2020**
Postdoctoral Researcher, ETH Zürich/USI, Switzerland
Research Group: Prof. Michele Parrinello
- **13/02/2019-12/12/2019**
Postdoctoral Researcher, Ulsan National Institute of Science and Technology (UNIST), Korea
Research Group: Prof. Kwang S. Kim

Education

- **01/09/2014-12/02/2019**
Ph.D., Department of Chemistry, Ulsan National Institute of Science and Technology (UNIST)
Supervisor: Prof. Kwang S. Kim
Dissertation title: “*First-Principles calculation of energy materials*”
- **01/09/2012-08/08/2014**
M.S. Department of Electrical & Electronic Engineering, Pohang University of Science and Technology (POSTECH)
Supervisor: Prof. Jae Koo Lee
Dissertation title: “*Linear and Nonlinear Landau Damping using Particle-in-Cell Simulation*”
- **01/03/2007-10/08/2012**
B.S. Department of Electrical & Electronic Engineering, Pohang University of Science and Technology (POSTECH)

Quantum Computing



- 개발한 Universal MLP의 leader board 1위 달성
- MLP 기반 대규모 분자동역학을 통한 응용 계산 기
틀 마련

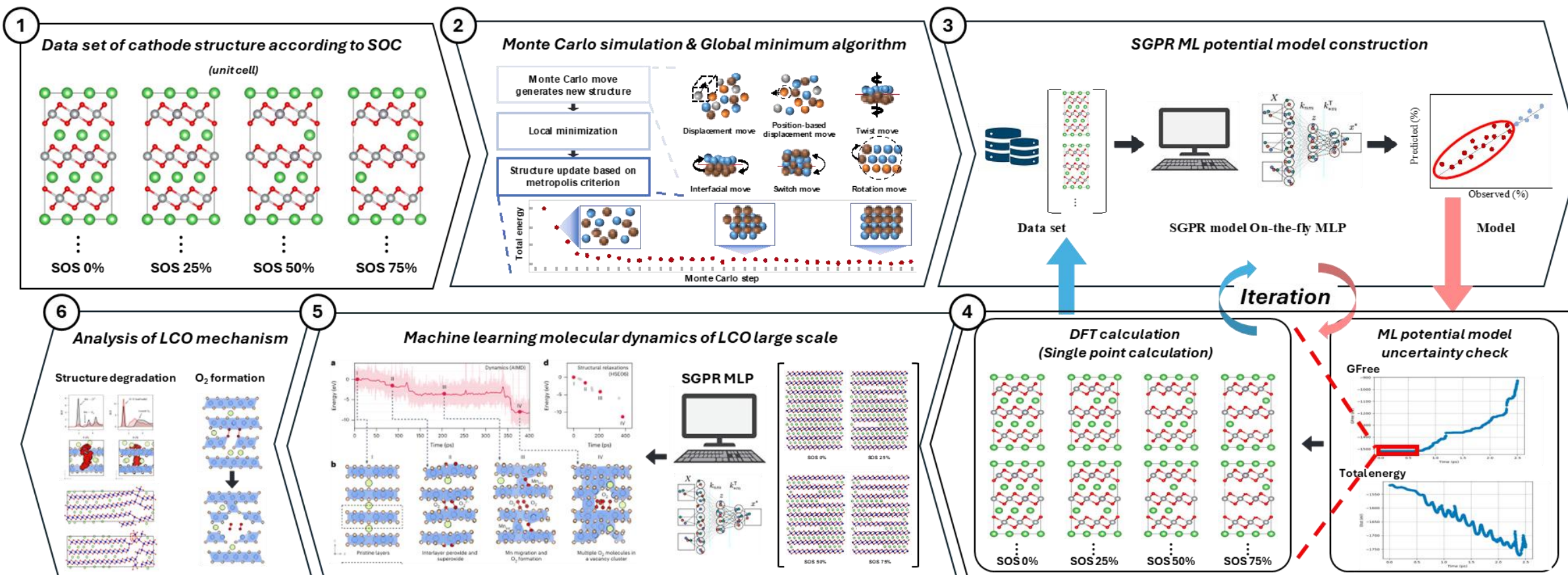
- 머신러닝 방법론을 적용한 성능 저감 메커니즘 규명
- 머신러닝 방법론을 적용한 고효율 촉매 탐색

- 양자 몬테카를로를 적용한 전자구조 계산 정밀화
- 분자 구조 계산 가속을 위한 양자 알고리즘 개발

Machine Learning Potential

Machine learning potential (MLP) 개발

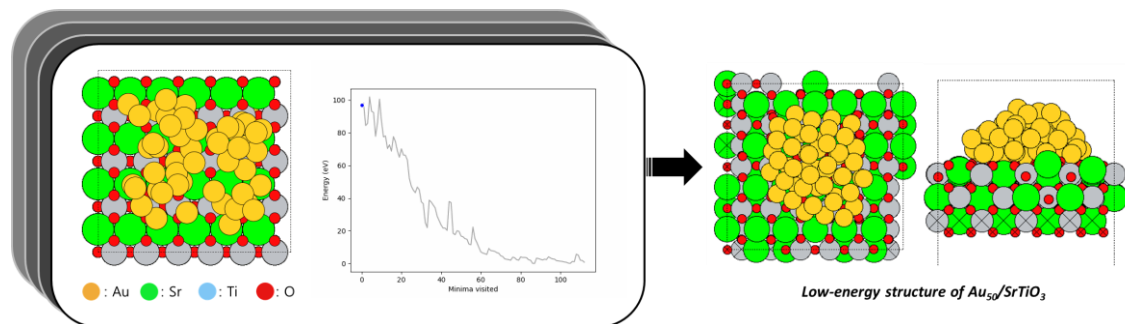
• MLP development workflow



Catalyst

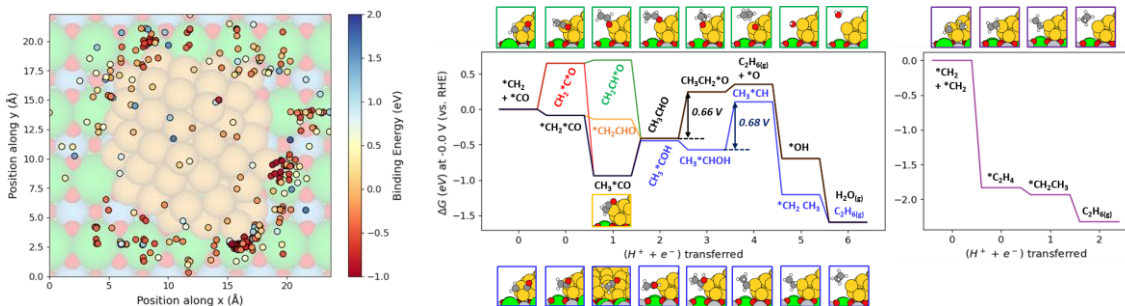
Study about catalysis of complex systems based on machine learning

• Development of machine learning global optimization method



- 복잡한 촉매 계를 모델링하기 위한 기계학습 기반의 전역최적화 방법 개발
- 기계학습을 통해 효율적이고 논리적으로 촉매 구조와 촉매 활성 영역 탐색

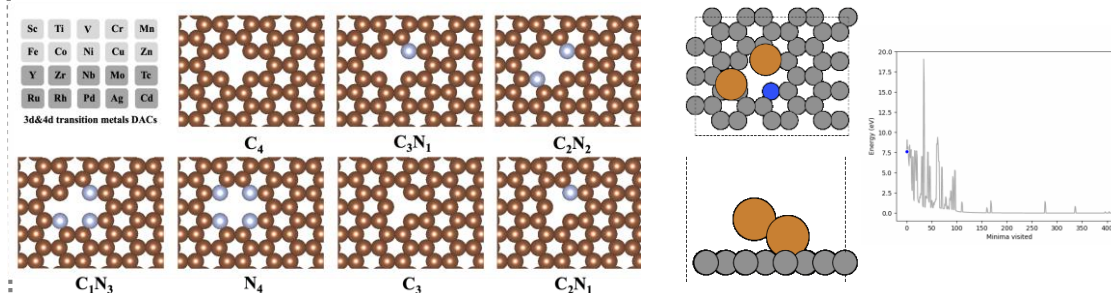
• Study of the catalytic reaction on the metal oxide-supported nanoparticle



- 기계학습을 통해 도출해낸 촉매 활성 영역에서의 촉매 반응 메커니즘 연구
- 복잡한 촉매 작용을 효과적으로 연구할 수 있는 기계학습 기반의 방법론 연구

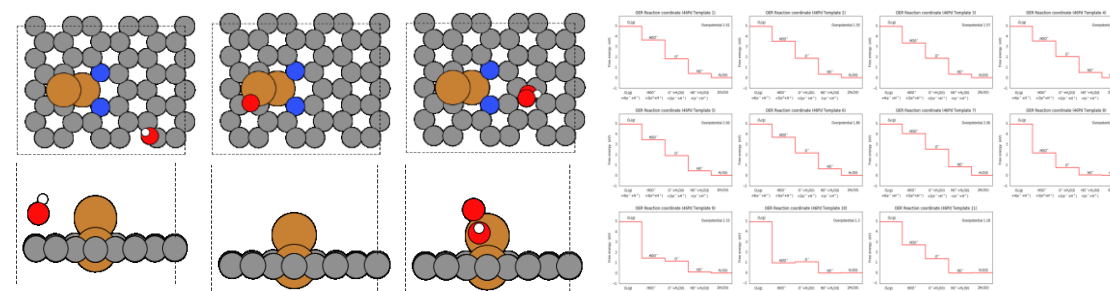
High-throughput Screening of Dual Atom Catalyst using Machine Learning

• Dual Atom Catalyst Screening



- Machine Learning을 사용해 가장 안정한 구조의 후보군을 빠르게 찾음
- 구조의 특성을 분석해 다양한 특성 탐구

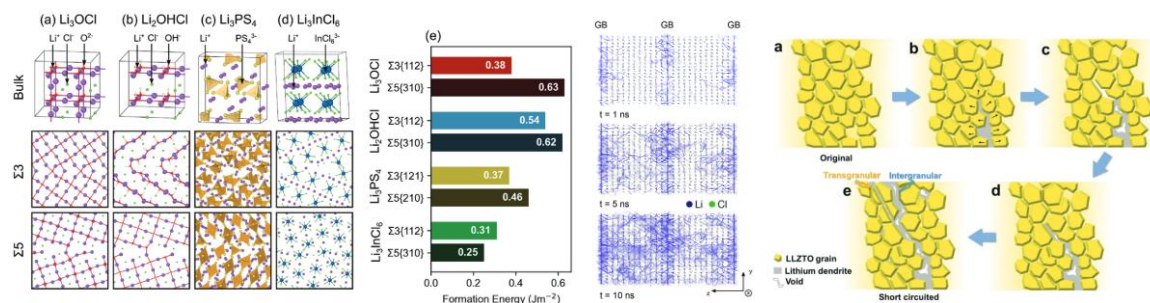
• Dual Atom Catalyst의 촉매 활동 탐색 및 분석



- Machine Learning을 사용해 촉매의 활성 사이트를 찾음
- 촉매의 반응을 분석해 어떤 금속이 좋은 성능은 가지는지 탐색

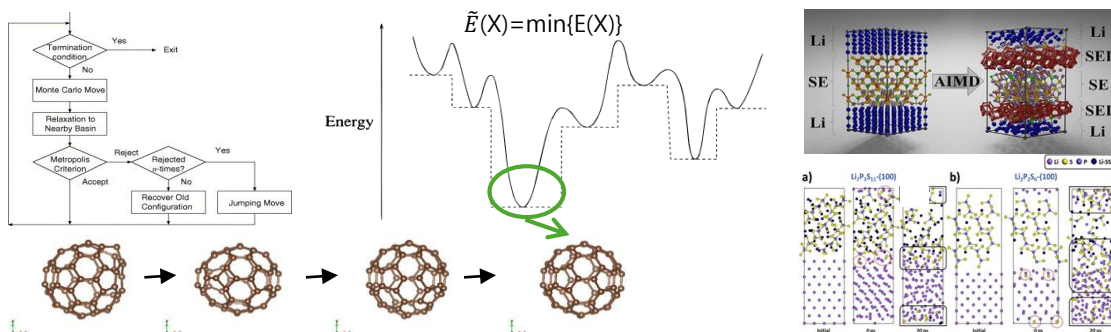
Machine learning potential (MLP)를 활용한 배터리 메커니즘 규명

• Grain boundary(GB)에 의한 Li⁺ diffusion 거동 분석



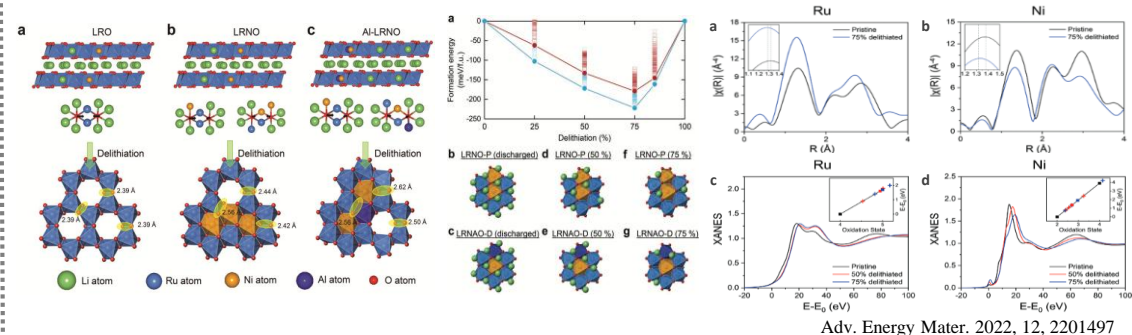
- Solid electrolyte (황화물)의 GB 모델 생성 및 분자 동역학 기반 계면 반응 메커니즘 규명
- 구축된 MLP를 활용하여 다른 구조를 가진 solid electrolyte (산화물, 폴리머 등)에 적용 가능

• 전역 최적화 알고리즘을 활용한 anode 구조 탐색



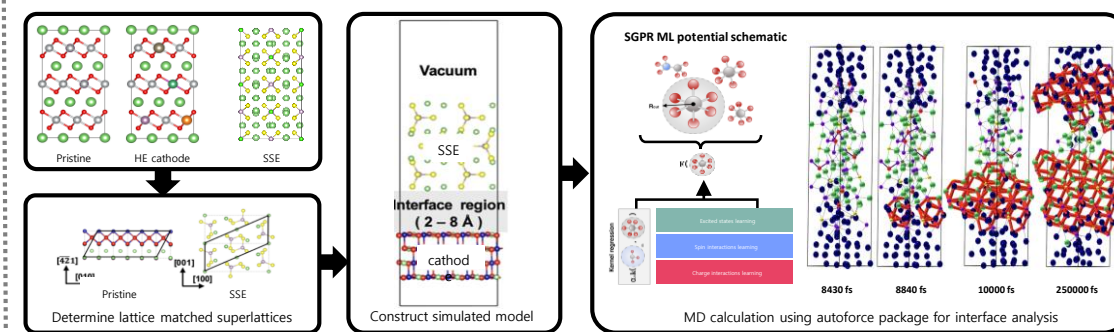
- GMIN 프로그램을 활용한 전역 최적화 구조 탐색
- 분자 동역학 기반 anode/solid electrolyte 계면 반응 메커니즘 규명

• Cathode 구조 악화 메커니즘 규명



- 본 연구실에서 개발한 MLP를 활용하여 기존 계산 비용 감소
- 고도 분석인 EXAFS 및 XANES을 시뮬레이션으로 구현하여 전이금속 effect 확인

• Solid electrolyte/cathode 계면 분석



- MLP 계산 기반, solid electrolyte/cathode 계면 반응 메커니즘 규명
- 다양한 solid electrolyte 물질 스크리닝을 통한 최적의 고체계면 시스템 제시

Questions

Q • 코딩을 전혀 할 줄 모르는데, 괜찮을까요?

A •

코딩을 전혀 접해보지 않아도 연구를 수행하며 차차 익히게 될 겁니다. 현재 대학원생들도 처음엔 코딩을 전혀 할 줄 몰랐지만, 지금은 스스로 프로그램을 만들고 있습니다. 전혀 문제 될 게 없습니다.

Q • 이론은 너무 어려운데, 제가 잘 할 수 있을까요?

A •

물리적인 내용이 많은 건 사실입니다. 하지만 세 분의 연구교수님들 및 연구실 선배들로부터 많은 도움을 받을 수 있어, 배우고자 하는 의지만 있다면 충분히 쉽게 할 수 있습니다.

Q • 취직이 잘 될까요?

A •

개인간 편차, 시기, 트렌드에 따라 연구분야의 취업시장도 많이 바뀝니다. 현재, 재료 시뮬레이션과 머신러닝 분야 및 양자 컴퓨팅은 현재 많은 대기업/국책연구소에서 수요가 높습니다.



Group vision

1. Quantum mechanics (QM) computational methods
2. Machine learning

A world-leading group in



01

Energy Materials Theory

Global network: Angelos Michaelides (Cambridge), Michele Parrinello (IIT, Italy)

02

Computational Design + Experiment

Global network: Charlie Sykes (Tufts, US)

03

Theory & Methods

Global network: David J. Wales (Cambridge), Barak Hirshberg (Israel)

Research/Supervision Philosophy

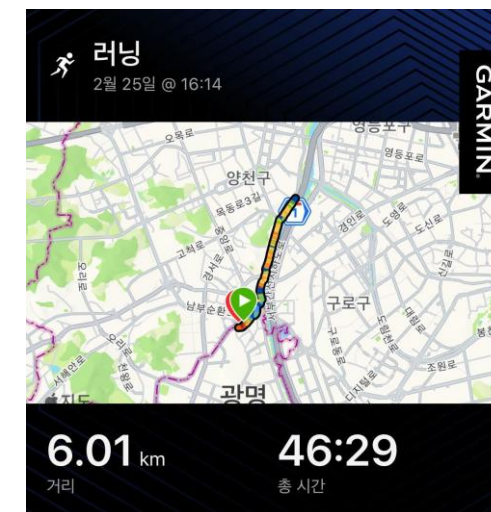
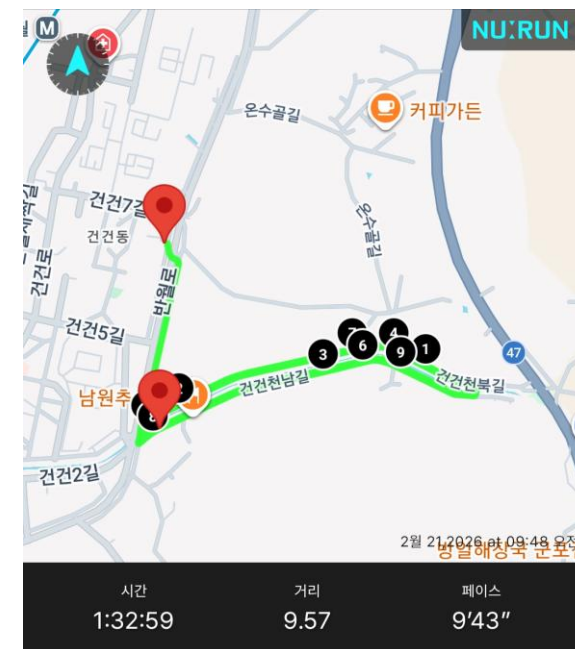
- 무위이치(無爲而治): 나서지 않아도 잘 굴러가네
- 기욕립이립인 (己欲立而立人): 나눌수록 커리어로 돌아온다

Group welfare & activity

Running +Cycling+ Swimming Challenge !!



- **500,000 KRW prize** for the person who logs the most distance over the year!
- Conversion: Cycling 4.5 km = Swimming 75 m = Running 1 km
- Proof via GPS tracking apps is preferred. Otherwise, log on the honor system.
- 2025 Winner: Soohaeng Yoo Willow (370 km, awarded 300,000 KRW)
- 2026 Winner: ? (Maybe you ?!)



Group members

Research Prof.

Soohaeng Willow Yoo

연구 분야

- 머신러닝 포텐셜
- 양자 컴퓨팅

David ChangMo Yang

연구 분야

- 양자몬테카를로
- 양자컴퓨팅

Hye Jung Kim

연구 분야

- DFT
- 2D materials
- Topological properties

Postdoc.

Yanmei Zang

연구 분야

- 머신러닝
- DFT
- CO₂ RR

Xiaorong Zou

연구 분야

- 2D materials
- DFT
- Tight-binding model

Combined

김 승 원

연구 분야

- 머신러닝
- 전기촉매

박 현 규

연구 분야

- 머신러닝
- 배터리

송 주 연

연구 분야

- 머신러닝

Doctor course

박 태 현

연구 분야

- 머신러닝
- 배터리

심 기 범

연구 분야

- 머신러닝
- 전기촉매

조 광 현

연구 분야

- 양자 몬테카를로
- 머신러닝

최 원 웅

연구 분야

- 머신러닝
- 배터리

Undergraduate student

이 원 호

연구 분야

- 머신러닝

최 시 영

연구 분야

- 양자컴퓨팅

김 재 현

연구 분야

- 양자컴퓨팅



Contact us

Members

Students

Gi Beom Sim, Tae-Hyun Park,
Seung Won Kim, Hyun Gyu Park,
Won Woong Choi, Kwanghyeon Jo,
Jooyeon Song

Undergraduate students

Wonho Lee, Siyoung Choi,
Jae Hyeon Kim

Postdoc

Yanmei Zang, Xiaorong Zou

Research Prof.

Soohaeng Willow Yoo,
David ChangMo Yang,
Hye Jung Kim

Package

AutoForce GitHub package

BAM GitHub package

<https://github.com/myung-group>



Myung Group is waiting for you!



SCAN ME



Key collaborators

Prof. Michele Parrinello (IIT, Italy)
Prof. Angelos Michaelides (Cambridge)
Prof. Juho Lee (KAIST)
Dr. Amir Hajibabaei (Cambridge)
Dr. Miran Ha (Samsung SDI)
Dr. Jeonghun Yun (Samsung SDI)
Dr. Sangjae Seo (KISTI)



Funding

