



제7회 전자구조계산 여름학교 + 물리학회 계산분과 설립

Yong-Hoon Kim

School of Electrical Engineering
Korea Advanced Institute of Science & Technology
y.h.kim@kaist.ac.kr

2026. 2. 10.

2026 APCTP 학술프로그램 조직자 간담회

행사 소개: (1) 연혁

- 제목: 제7회 전자구조계산 여름학교
 - 연혁:
 - 2021.6 제1회 여름학교: on + off (강사) @평창, 참석자 475명
 - 2022.1 제2회 겨울학교
 - 2023.1 제3회 겨울학교: 참석자 243명
 - 2024.1 제4회 겨울학교: 참석자 227명
 - 2024.8 제5회 여름학교: on + off @무주
 - 2025.7 제6회 여름학교: on + off @KAIST
- APCTP 지원
- 학생 실습




제6회 전자구조계산 여름학교

2025년 7월 14일 (월) ~ 18일 (금)
KAIST IT 융합빌딩(N1) 및 온라인
<https://escschool.edison.re.kr/>

조직위원회	프로그램
<p>김용훈 교수(KAIST, 위원장)</p> <p>손영우 교수(KIAS)</p> <p>박노정 교수(UNIST)</p> <p>서상재 박사(KISTI)</p> <p>신동빈 교수(GIST)</p> <p>유재준 교수(서울대)</p> <p>이정철 박사(KISTI)</p> <p>최형준 교수(연세대)</p> <p>한명준 교수(KAIST)</p>	<p>7/14 (월) KAIST IT 융합빌딩(N1) 112호</p> <p>09:30 ~ 13:20 등록/상하: 이봉규 박사과정, 박준호 박사(KAIST)</p> <p>13:30 ~ 15:30 유재준 교수(서울대) Density Functional Theory (DFT) 기본 원리</p> <p>16:00 ~ 18:00 김용훈 교수(KAIST) 일자의 전자구조 계산: Hartree-Fock 대 DFT</p> <hr/> <p>7/15 (화) KAIST IT 융합빌딩(N1) 112호</p> <p>09:30 ~ 11:30 최형준 교수(연세대)</p> <p>13:30 ~ 15:30 SIESTA로 배우는 원자 오비탈 기저함수 DFT 코드</p> <p>16:00 ~ 18:00 신동빈 교수(GIST) Quantum Espresso로 배우는 평면파 기저함수 DFT 코드</p> <hr/> <p>7/16 (수) KAIST IT 융합빌딩(N1) 112호</p> <p>09:30 ~ 11:30 신동빈 교수(GIST)</p> <p>13:30 ~ 15:30 손영우 교수(KIAS) DFT에서의 교환-상관 범함수와 Hubbard 범함수</p> <p>16:00 ~ 18:00 실습: 양우일 박사, 민홍국 박사(KIAS)</p> <hr/> <p>7/17 (목) Online : Zoom</p> <p>13:30 ~ 15:00 최민 박사(UC Riverside) Harnessing CPU-GPU hybrids for high-performance TDDFT simulation in QBox</p> <p>15:00 ~ 16:30 박노정 교수(UNIST) Very basic introduction to time-dependent equations: current, gauges problems, source code technicalities</p> <hr/> <p>7/18 (금) Online : Zoom</p> <p>09:30 ~ 11:30 Carsten Ullrich 교수(Univ. Missouri) Toward the journey of time-dependent current density functional theory; basic introduction and overview</p> <p>13:30 ~ 15:00 우재현 박사(KISTI) Real-space grid method & GPU acceleration</p> <p>15:00 ~ 16:30 김인구 박사(삼성전자) Very-large-scale DFT on massively parallel GPUs</p>

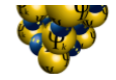




행사 소개: (2) 2026년 계획

- 주제: 제1원리(원자수준) 전자구조 계산(density functional theory, DFT)
 - cf. # of DFT papers in top 10 of “Nature top 100 papers”: [2 \(2014\)](#) → [3 \(2025\)](#)
- 형태, 날짜, 장소: 대전 KAIST 본원
 - 오프라인: 7월 13일(월)~16일(목), 강사 + 학생 ~ 40명 (지원 연구실 별 1인+)
 - 온라인: 7월 20일(월)~21일(화)
 - 오프라인 강의 + 온라인 → 외부 공개
- 예산: 2천만원 ~ 2.5천만원
 - APCTP 5백만원 + 고등과학원 5백만원 + KISTI 실습컴퓨터•홈페이지 지원
 - 슈퍼컴활용 과제 (UNIST 박노정) + EDISON 과제 (KAIST 김용훈): ~1천만원
 - 등록비: 학생들 실비(숙박비, 식비 등)

필요성: 한국 제1원리 계산 커뮤니티의 위상?



$|\Psi_k$ Scientific Highlight Of The Month
<http://psi-k.net/highlights/>

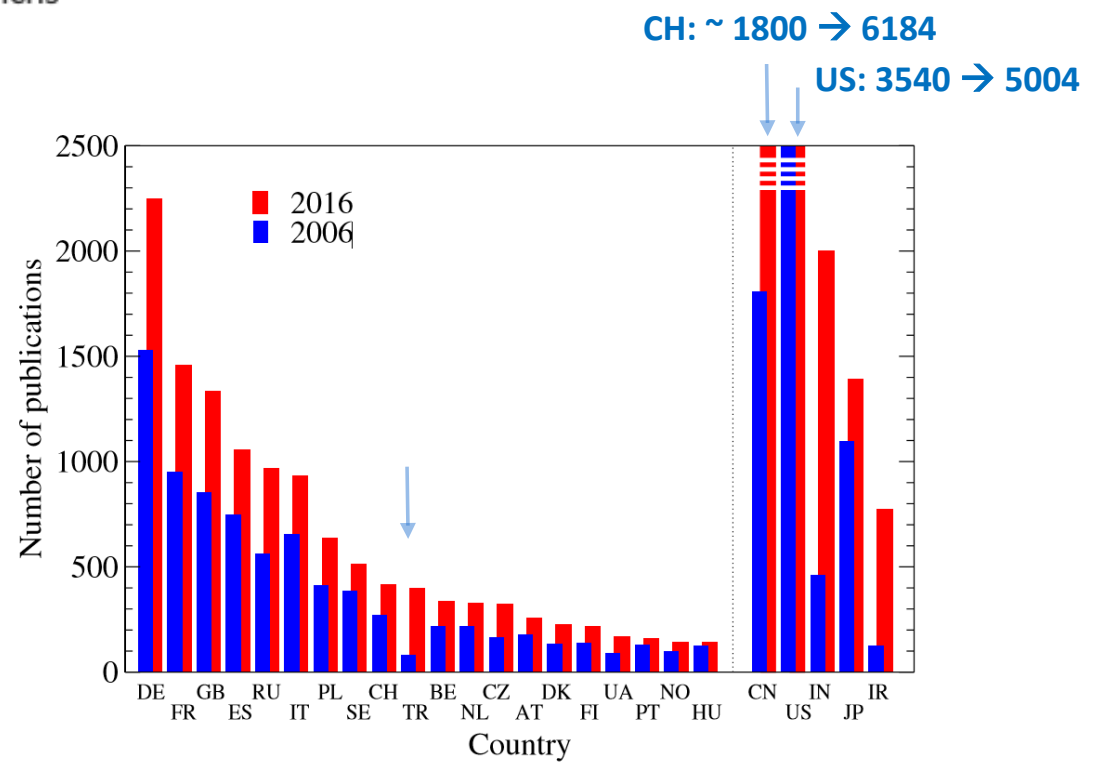
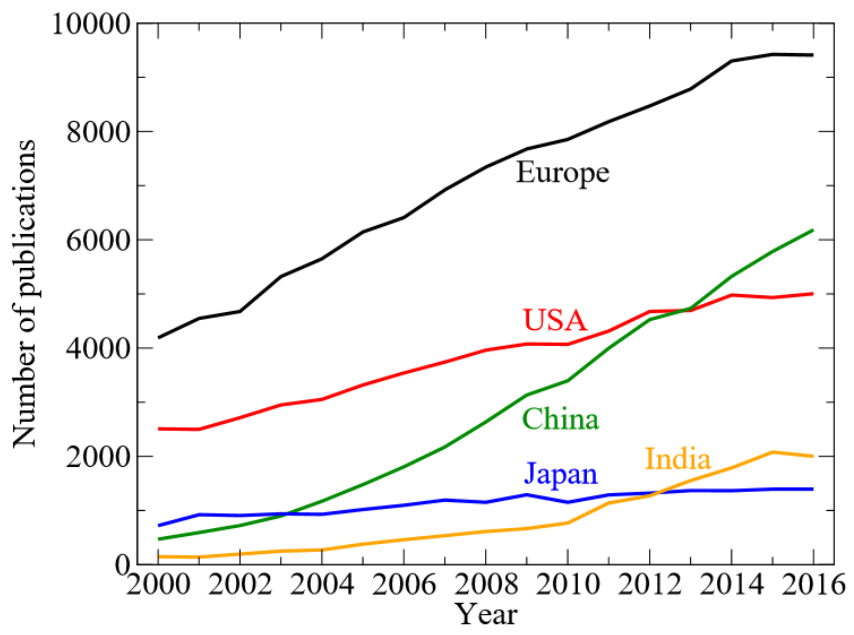
No. 135

April 2017

Statistical Data about Density Functional Calculations

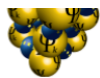
by Phivos Mavropoulos and Peter Dederichs

Number of publications per year



“Here, we consider the strong growth of the “newcomers” India, Iran and Turkey, as most surprising.” (한국 언급 없음 😞)

목표: 한국 제1원리 계산 커뮤니티의 질적 도약



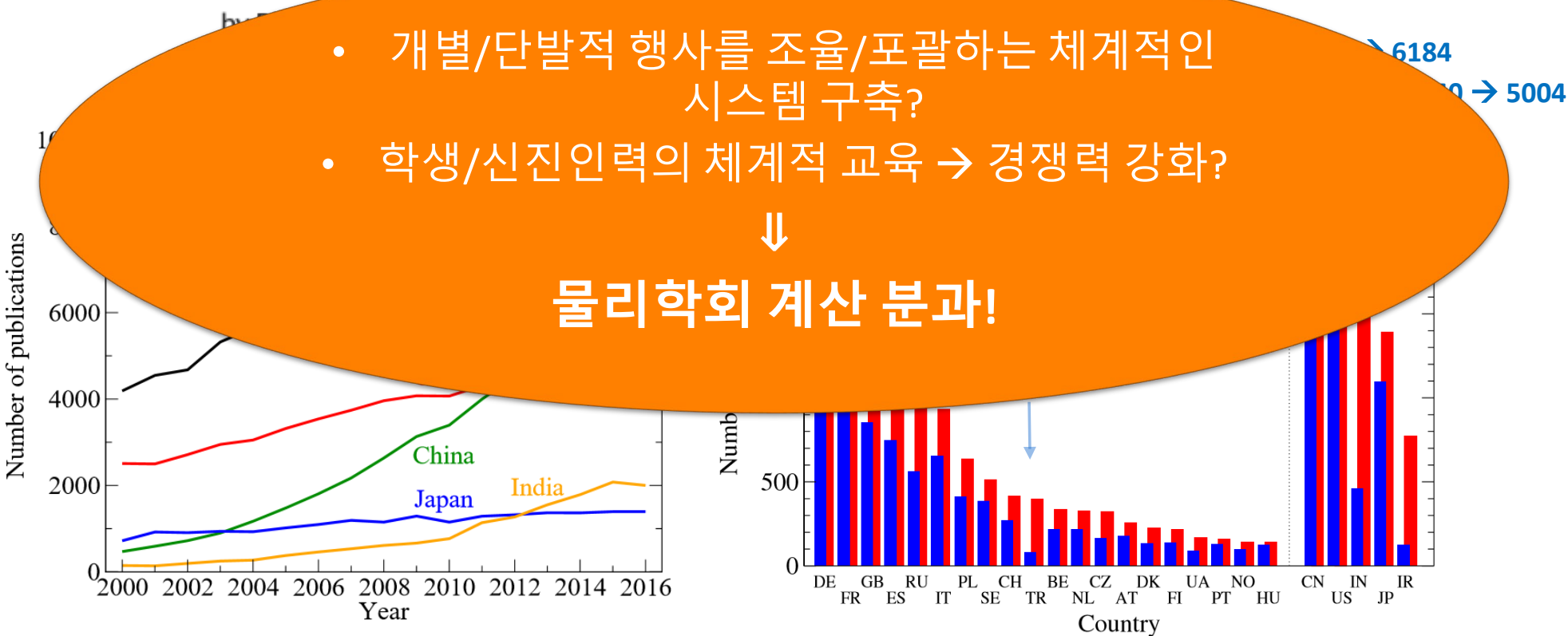
$|\Psi_k$ Scientific Highlight Of The Month

<http://psi-k.net/highlights/>

No. 135

April 2017

Statistical Data about Publications in Computational Calculations



- 개별/단발적 행사를 조율/포괄하는 체계적인 시스템 구축?
- 학생/신진인력의 체계적 교육 → 경쟁력 강화?



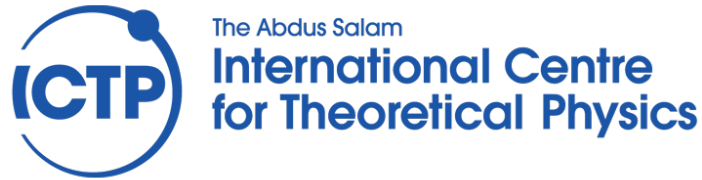
물리학회 계산 분과!

“Here, we consider the strong growth of the “newcomers” India, Iran and Turkey, as most surprising.” (한국 언급 없음 😞)

참고 모델 (1)

- ❑ ICTP - International Centre for Theoretical Physics (이탈리아 Trieste)

<https://www.ictp.it/>



- 1964년 노벨상 수상자 Abdus Salam 주도로 설립
- 이탈리아 정부, UNESCO, IAEA 지원
- 목표: “Foster the growth of advanced studies and research in physical and mathematical sciences” (특히 개발 도상 국가)
- SISSA (International School for Advanced Studies) 등과 공동으로 석박사 프로그램 운영
- 매년 60개 이상 국제학회/워크숍 및 세미나 개최

- ❑ CECAM - Centre Européen de Calcul Atomique et Moléculaire

<https://www.cecaml.org>



- 1969년 개원
- 목표: “*promotion of fundamental research on advanced computational methods and to their application to important problems in frontier areas of science and technology*”
- 본부: 스위스 EPF-Lausanne
- 노드: 유럽 18 + 이스라엘 1
- 활동: 연중 워크숍, 스쿨, 학회 개최

참고 모델 (2)

❑ Psi-k network (1994~)

<http://psi-k.net>



Psi-k WORKSHOPS 2021

For more information and to register for events please visit www.psi-k.net/workshops

9-11 February, ONLINE - Correlated synthetic quantum matter: theory meets experiment

23-25 February, ONLINE - International Workshop on Computational Physics and Materials Science: Total Energy and Force Methods

2-5 March, ONLINE - Materials Design for Energy Storage and Conversion: Theory and Experiment

12-16 April, ONLINE - All electron DFT with Fleur - a Hands-on Tutorial

16-27 May, Addis Ababa, Ethiopia - Ethiopian School on Electronic Structure Methods and Applications for Emerging Energy Technologies

31 May-4 June, Clermont-Ferrand, France - 10th ABINIT developer workshop: from developers to users

May/June, ONLINE - Principles of light-induced charge transfer for optoelectronics

1-4 June, ONLINE - GRAW2021: Users and Developers Meeting

7-11 June, Stockholm, Sweden - Conference on defects in solids for quantum technologies

7-16 June, Genova, Italy - Bridging first-principles calculations and effective Hamiltonians

9-17 June, Benasque, Spain - 9th School and Workshop on Time-Dependent Density-Functional Theory: Prospects and Applications

14-18 June, Lausanne, Switzerland - Path Integral Quantum Mechanics: From the Basics to the Latest Developments

14-23 June, Riga, Latvia - HoW exciting! Hands-on Workshop on Excitons in Solids 2021

16-21 June, Riga, Latvia - Towards exascale solutions in Green function methods and advanced DFT

21-23 June, Lausanne, Switzerland - Excitonic and competing orders in two-dimensional materials

12-23 July, Trieste, Italy - Summer School on Quantum Monte Carlo methods for ab initio electronic simulations

26 July-6 August, Berlin, Germany - Hands-on Workshop: Density Functional Theory and Beyond - Foundations to Frontiers

September, Jena, Germany - 5th Octopus Developers Workshop

September, Cagliari, Italy - The 17th ETSF Young Researchers' Meeting

9 September, ONLINE - Volker Heine Young Researcher Award Symposium

20-22 September, London, UK - CECAM / Psi-k Research Conference - New Horizons in Nucleation: a playground for classical and ab initio simulation methods

5-7 October, Linköping, Sweden - Ontologies for materials databases interoperability

11-13 October, Denton, USA - Emvion and eQE: Modelling Complex Environments in Quantum Espresso

11-14 October, Leoben, Austria - GreenALM hands-on tutorial 2021

21-22 October, Rome, Italy - Recent developments in quantum Monte Carlo

15-19 November, Lyngby, Denmark - High-throughput workflows for materials science with the Atomic Simulation Environment and Fireworks

15-19 November, ONLINE - Machine learning interatomic potentials: Young researchers' tutorial

6-9 December, Lausanne, Switzerland - Capturing Anharmonic Vibrational Motion in First-Principles Simulations

13-16 December, Lausanne, Switzerland - Exciton Dynamics in Functional Materials: New Theoretical Frontiers

7-11 February 2022, Kigali, Rwanda - Joint School / Workshop on Application of Machine Learning in Electronic Structure and Molecular Dynamics

TBC 2021, Daresbury, UK - 4th Daresbury QUESTAAL school

TBC 2021, London, UK - Hermes Summer School

21-25 March 2022, Lausanne, Switzerland - Theoretical Spectroscopy Lectures

22-25 August 2022, Lausanne - Psi-k Conference 2022 (www.psi-k.net)

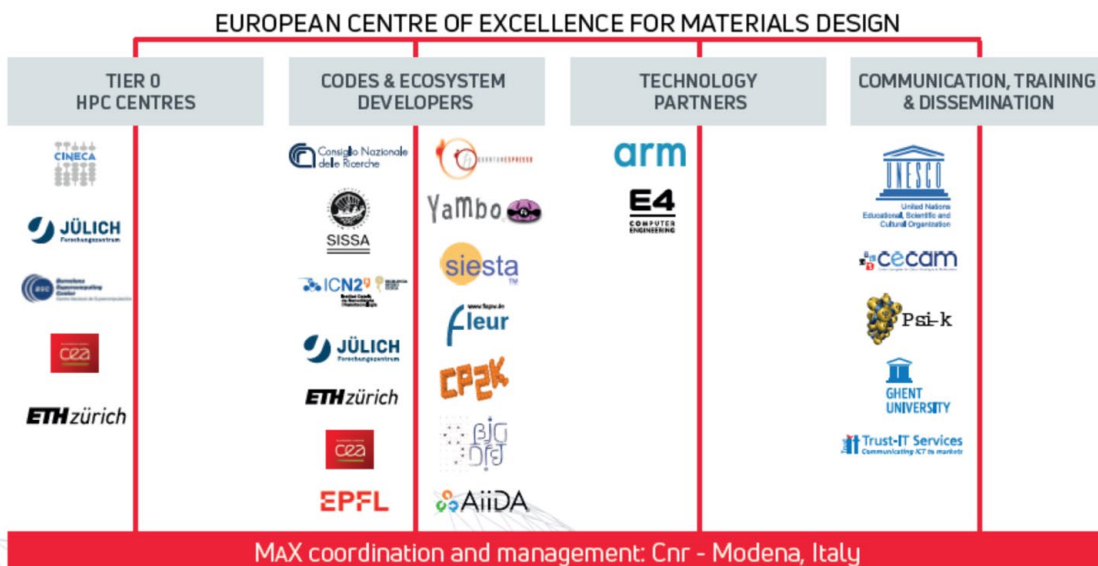
CECAM / Psi-k Research Conference 20-22 September London, UK

Psi-k Conference 22-25 August 2022 Lausanne, Switzerland www.psi-k.net

<http://psi-k.net/workshops/>

❑ MaX center (2015~)

<http://www.max-centre.eu>



Materials design at the eXascale (MAX)

<http://www.max-centre.eu/max-nutshell>

물리학회 계산분과 설립: 취지 및 필요성

- **취지:** 전자구조 계산뿐만 아니라 **AI 계산을 포함한 전체 물리 커뮤니티**의 질적 향상 + 양적 확대
- **필요성(위기 및 기회):**
 - 유럽 제1원리 전자구조 계산 커뮤니티의 활성화 참고 (CECAM, Psi-k 등)
 - AI 기술의 과학/기술 전분야로의 파급
 - 물리학 내/다른 학문 분야 간 이론-실험 연구를 연계하는 제1원리 전자구조 계산 분야의 특성 → 극대화/발전 방안 조율할 컨트롤 타워 필요
 - 국내 타 학회(재료학회, 화공학회 등) 내 DFT 연구자 수의 급격한 증가(기회) → 이미 분과 설립 및 체계적 신진인력 육성 노력 진행 중(위기)

2024 계산화학 여름학교
- Linux/DFT(VASP) 입문/초급 과정 -

Density Functional Theory

$$F = m \frac{dv}{dt}$$

$$H\Psi = E\Psi$$

Molecular Dynamics
Electronic Structure Monte Carlo
Computational Chemistry

2024. 7. 22 (월) - 7. 24 (수)

장 소: 한양대학교 제2공학관 402호
(주소) 서울특별시 성동구 왕십리로 222

주 최: 한국화학공학회 교육 인재양성위원회
에너지 환경부문위원회, 열역학분자모사부문위원회, 촉매부문위원회

주 관: BK21 한양대학교 첨단에너지소재 교육연구단
아주대학교 수소연료전지 창의융합형 인력양성사업단
강원대학교 에너지·생체 소재 및 소자 공정 융합 교육연구단

후 원: 충북대학교 기업수요 대응 차세대 이차전지 소재 선도연구센터
한양대학교 탈플라스틱 특성화 대학원
두산퓨얼셀(주)

한국화학공학회
THE KOREAN INSTITUTE OF CHEMICAL ENGINEERS

(우) 02856 서울특별시 성북구 안암로 119 한국화학회관 5층
Tel: (02)458-3078-9 E-mail: kiche@kiche.or.kr
Homepage: www.kiche.or.kr

물리학회 계산분과 설립: 활용 및 기대효과

- 학술대회들을 통한 타학회(화학, 금속, 화공, 반도체 등) 계산 연구자들의 물리학회 흡입
 - 물리학회 회원수 증대
- 물리학회 내 계산 및 관련 분야의 동반 성장
 - 물리학회 여러 분과와의 실험-이론 연구자들 간 협업의 체계화/활성화
- 전자구조계산 여름학교 및 계산 관련 행사들 운영 조율
 - 대학원생 및 신진연구자의 R&D 능력 체계적 배양
- 양자/반도체/AI 관련 온라인 교육 업그레이드 및 온라인 R&D 프로젝트 제공(cf. 과학원 Pre-URP 프로그램)
 - 물리학과 및 관련 학과 학부생 및 대학원생 수 증대

The image shows a screenshot of the nanoHUB website, which is described as 'THE online resource for Semiconductors!'. The page is organized into a grid of various resource categories:

- Immersive Learning:** Features a grid of educational modules with titles like 'What is Si', 'What is band structure', 'Silicon crystal structure', 'What is a p-n junction', 'What is a MOSFET', and 'What is a light-emitting diode (LED)'. It includes small thumbnail images of these topics.
- Chipshub:** Promotes 'Chip Design for Students' with a central icon of a chip.
- Open Courseware:** Shows a person presenting a slide with a circuit diagram and the equation $I = \int_{\text{area}} \sigma \cdot \mathbf{E} \cdot d\mathbf{A}$.
- 600+ Apps:** Displays a grid of various application icons.
- Expert Tools:** Lists 'Commercial Tools' including SILVACO, Thermo-Calc Software, and MATLAB.
- Free Textbooks:** Shows several textbook covers related to semiconductor physics and materials.
- For Faculty:** Similar to the Immersive Learning section, it features educational content for faculty members.
- Partners:** Lists partner organizations such as SCALE Workforce Development (A PROGRAM FOR COLLEGE STUDENTS), NACK NETWORK, MNTPEC (Micro Nano Technology Education Center), SCME (Semiconductor Center for Materials Education), and NEATEC.
- Curated Resources:** Displays icons for various resources, including a circuit diagram, a light bulb, a microscope, and a network diagram.

물리학회 계산분과 설립: 지지 서명서

한국물리학회 계산물리분과 설립 지지 서명서

한국물리학회 귀중

최근 물리학 전 분야에서 계산 과학과 데이터 기반 연구의 비중은 급격히 확대되고 있습니다. 양자물질·반도체·에너지 소재 연구에서의 **제1원리 계산**, 통계·연성·생물 물리 및 천체·입자물리 분야에서의 **대용량 데이터 분석 및 시뮬레이션 기반 해석**, 그리고 인공지능 기반의 **새로운 AI 물리 탐구 방법론**은 이미 현대 물리 연구의 필수 요소가 되었습니다.

이러한 변화에 부응하기 위해서는 계산물리 연구자들이 한데 모여 지식을 공유하고, 학제 간 교류를 촉진하며, 한국물리학회 내에서 계산 기반 연구의 정체성과 위상을 공고히 할 수 있는 전담 플랫폼이 필요합니다. 그러나 현재 한국물리학회에는 계산물리학을 독립적으로 다루는 분과가 부재하여, 관련 연구자들이 분산된 채 여러 분과에서 개별적으로 활동하거나, 다른 학회·커뮤니티를 통하여 활동을 이어가야 하는 실정입니다.

이에 아래 서명한 우리는 **한국물리학회 내 '계산물리분과(가칭)의 공식 설립을 지지하며**, 본 분과의 설립이 다음과 같은 중요한 기여를 할 것임을 확신합니다.

- 계산물리 연구자들의 전문적 소통·교류 공간 마련**
 - 전산물리, 전자구조, 분자동역학, 유체/플라즈마 시뮬레이션, 계산천체물리, 계산입자물리, AI 기반 물리 계산 등 다양한 분야의 연구자들이 통합적으로 교류할 수 있는 장을 마련함.
- 학제 간 연구 촉진 및 학회 내 연구 생태계 확장**
 - 이론·실험·계산이 결합된 현대 물리학 연구 패러다임을 체계적으로 반영하고, 재료·화학·AI·고성능컴퓨팅 등 외부 분야와의 연결 고리를 강화함.
- 신진연구자 및 학생 교육 플랫폼 확보**
 - 계산물리 커리큘럼 개발, 오픈소스 워크숍, 고성능컴퓨팅(HPC) 활용 교육, 데이터 기반 물리 학습, 관련 계절 학교 운영 등 교육적 기여를 체계화하고 확대함.
- 국가 전략기술 및 산업 수요 대응**
 - 반도체·배터리·신소재·양자기술 등 국가적 핵심 분야에서 계산 기반 예측·설계가 필수적이며, 이에 부응하는 학문적 기반을 학회 차원에서 강화할 필요가 있음.

이상의 이유로 서명자 일동은 **한국물리학회 계산물리분과 설립이 시의적절하며, 학문적·사회적·교육적으로 중요한 발전을 이끌 것이라 판단하여** 본 서명서를 제출합니다.

Statement of Support for the Establishment of the Division of Computational Physics within the Korean Physical Society

To the Korean Physical Society,

The role of computational science and data-driven research has expanded rapidly across all areas of modern physics. First-principles calculations in quantum materials, semiconductors, and energy materials research; large-scale data analysis and simulation-driven studies in statistical, soft, biological, astrophysical, and particle physics; and emerging AI-based methodologies for scientific discovery have become essential components of contemporary physics research.

To keep pace with these developments, it is necessary to establish a dedicated platform within the Korean Physical Society (KPS) that enables computational physicists to gather, share knowledge, promote interdisciplinary collaboration, and strengthen the identity and presence of computation-based research within the Society. At present, however, no standalone division dedicated to computational physics exists within the KPS. As a result, researchers in this field remain dispersed across multiple divisions or must rely on other societies and external communities for collaboration and academic exchange.

We, the undersigned, therefore express our full support for the official establishment of a **Division of Computational Physics** within the Korean Physical Society, as we firmly believe that such a division will make the following important contributions:

1. A dedicated platform for professional communication and collaboration

The division will provide an integrated venue for researchers across diverse fields—computational physics, electronic-structure theory, molecular dynamics, fluid and plasma simulations, computational astrophysics, computational particle physics, and AI-based physical modeling—to interact and collaborate.

2. Promotion of interdisciplinary research and expansion of the Society's