

: E-mail:siklee@kisti.re.kr
KISTI



가

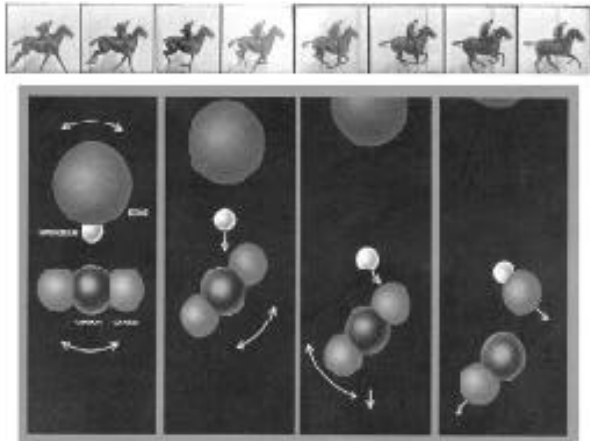


(Molecular Reaction Dynamics)

가

1.

가가



1999
 (Caltech) Ahmed Zewail
 (Femtochemistry)

가
 azobenzene

가

40

가

가

2. 가 (cluster)
 (quantum size effect)

(cluster) cluster

가 ,

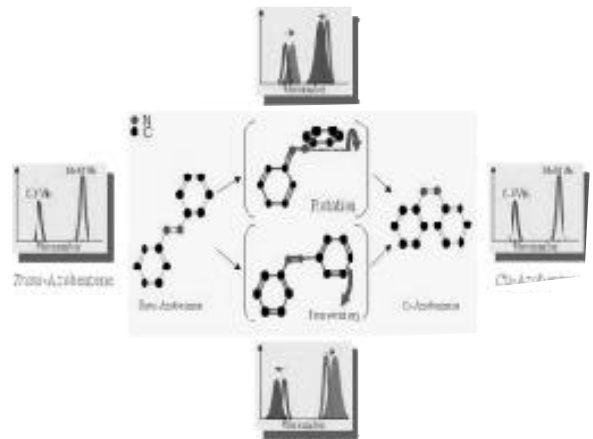
bulk

가 cluster

cluster 가

cluster

cluster ,



DNA

cluster

DNA

thymine

cluster

가

zwitterion

4 .

(composite)

cluster

가

3.



?

가

가

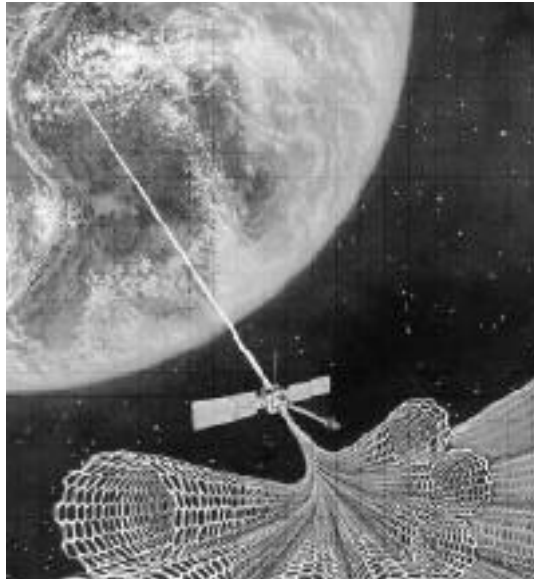


cluster

가

closed-shell 가 , Pauli repulsion

cluster graphene sheet carbon-carbon pair potential DNA base cluster



가

3

1980 NSF National



가

?

Supercomputer Center Princeton John von Neumann Center Cyber 205 system vector algorithm

가

가 가 가 , 가 가 가 ()

closed-shell

가

가

Pauli repulsion



?

가 ,

, real chemistry cyber chemistry
가

가



가 ,

Cray

T3E 128 MB
1 GB

가 ,

가

가 “ Theory without experiment is empty;
experiment without theory is blind. ”

가

blind science

가

가 software

2001
2 GB

IBM

가

SP2

가

()

3

가



. 2
1999

1980

1987
1989

“ ”