

화학연합

Bulletin of Korean Chemical Science and Technology

Summer

Vol. 12 No. 1

12권 1호
통권 58호



포커스

- 한국공업화학회 30주년
- (Photo-CRP)의 과거와 최신 연구 동향
- 단분자 접합에서의 열전성질 연구



한국화학관련학회연합회
THE KOREAN UNION OF CHEMICAL SCIENCE AND TECHNOLOGY SOCIETIES

<http://www.kucst.org>

IBS CMSD

Seek for the Postdoctoral Candidates

Desired experience and skills

Experiences in one or more of the following research areas are strong plus: ultrafast nonlinear optics and condensed matter spectroscopy; theory of nonlinear field-matter interaction; amplified Ti: Sapphire laser systems and OPAs; fs pulse shaping; fs IR generation and spectroscopy; coherent multidimensional spectroscopy; quantum optics and imaging; quantum entangled photon pair generation, application, and theory; super-resolution imaging; stimulated Raman imaging; and computational chemistry and QM/MM and ab initio MD simulation.

Strong oral and written communication skills and ability to work effectively and congenially with other group members are essential for all positions. Applicants should have a PhD and sufficient research experience. They should also have a strong interest in chemical and biological systems and desire to work in a multidisciplinary and dynamic research environment.

Conditions

The position will be for two years with the possibility of renewing the contract. Salary will commensurate with experience. The position will be open until filled, and consideration of applicants will begin immediately.

How to apply

Interested applicants should send a CV (including a publication list) and arrange for 3 references to send letters of recommendations to mcho@korea.ac.kr.

About the employer

The Institute for Basic Science (IBS) will serve as a model of Korean scientific excellence to join the ranks of the world's leading institutes in basic science research. For more information, please visit the center's website, https://cmsd.ibs.re.kr/html/cmsd_en/.

MS-PhD Joint Program or PhD Graduate Students

"We are eagerly looking forward to have applications from students who have a strong passion for Science in the interdisciplinary fields of Chemistry and Physics. (<http://graduate2.korea.ac.kr/gradeng/index.do#none>)"

자유아카데미 신간도서



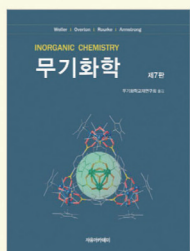
유기신소재화학

저 자: 장우동
출판년도: 2019년
쪽 수: 232쪽
ISBN 9791158082437



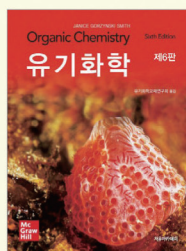
이공계 학생을 위한 파워포인트로 이미지 만들기

저 자: 장우동
출판년도: 2020년
쪽 수: 180쪽
ISBN 9791158082703



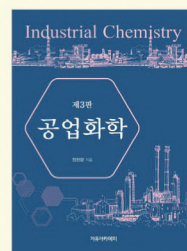
무기화학 제7판

저 자: Weller 외
역 자: 무기화학교재연구회
출판년도: 2020년
쪽 수: 880쪽
ISBN 9791158082475



유기화학 제6판

저 자: Smith
역 자: 유기화학교재연구회
출판년도: 2020년
쪽 수: 1416쪽
ISBN 9791158082420



공업화학 제3판

저 자: 정찬문
출판년도: 2020년
쪽 수: 276쪽
ISBN 9791158082567



한국공업화학상

후보자 추천 및 신청안내

한국공업화학회에서는 (주)동진씨미켈의 후원을 받아 국내·외 공업화학의 발전에 기여하고자 2002년도부터 “한국공업화학상”을 제정하여 시행해 오고 있습니다. 2020년도에도 회원 여러분의 뜨거운 관심과 참여를 부탁드립니다.

1/수상자의 자격

본 상의 수상자는 대한민국 국민으로서 국내·외 공업화학 분야에서 15년 이상 종사하고, 한국공업화학회 회원으로 10년 이상 활동한 자로 탁월한 업적을 이룩한 전문가
(최근 3년 이내에 동일한 업적으로 우리 학회에서 학술 또는 기술관련 수상자는 제외)

2/시상 및 시상 내역

- 가. 시상: 2020년 10월 29일(목)
(한국공업화학회 추계 총회 시)
- 나. 시상 내역: 상패 및 상금 1,000만원
- 다. 상금재원: (주)동진씨미켈 후원 기금

3/추진 절차

- 후보자 추천 접수: 6월 1일 ~ 7월 31일
- 심사 및 선정: 9월

4/제출 서류

- 가. 추천서 – 단체 (수상후보자가 속한 기관장 또는 부서장) 또는 개인의 추천서 (본인 추천 가능) (양식 1)
 - 나. 이력사항 및 피추천인의 우수성 (양식 2)
 - 다. 대표실적 10건 리스트 (양식 3)와 증빙자료
 - 라. 모든 실적물 리스트 (자유양식)
- ※ 양식: 홈페이지 (<http://www.ksiec.or.kr>) 참조

5/접수 방법 및 문의처

- 가. 접수 방법: 한국공업화학회 이메일 (ksiec@ksiec.or.kr)로 온라인 접수.
서류 접수 후 접수증 (이메일)을 보내드리니 반드시 확인바랍니다.
- 나. 문의처: ☎ 02-594-4511~2 (한국공업화학회 사무국)

한국화학관련학회연합회 5개 정회원 학회

2020년, 2021년 춘·추계 학술대회 일정



연도	구분	월	개최학회	개최일	개최장소
2020년	추계	10월	대한화학회	21(수)~23(금)	광주 김대중컨벤션
			한국고분자학회	6(수)~8(목)	부산 BECXO
			한국세라믹학회	14(수)~16(금)	서울COEX
			한국화학공학회	14(수)~16(금)	여수엑스포컨벤션
			한국공업화학회	28(수)~30(금)	광주김대중컨벤션
2021년	춘계	4월	대한화학회	21(수)~23(금)	수원컨벤션센터
			한국고분자학회	7(수)~9(금)	대전컨벤션센터
			한국세라믹학회	14(수)~16(금)	창원CECO
			한국화학공학회	21(수)~23(금)	부산 BECXO
		5월	한국공업화학회	12(수)~14(금)	부산 BECXO
	추계	10월	대한화학회	13(수)~15(금)	부산 BECXO
			한국고분자학회	13(수)~15(목)	경주컨벤션센터
			한국화학공학회	27(수)~29(금)	대전컨벤션센터
		11월	한국공업화학회	3(수)~5(금)	대구 EXCO
			한국세라믹학회	17(수)~19(금)	서울COEX

CONTENTS

Bulletin of Korean Chemical Science and Technology



03 권두언_최종길

포커스

05 한국공업화학회 30주년_이준혁

08 Photomediated Controlled Radical Polymerization
(Photo-CRP)의 과거와 최신 연구 동향
_권용환, 김영무, 노연진, 이윤경, 권민상

24 단분자 접합에서의 열전성질 연구_장성연

지상초대석

33 유기형광프로브의 개발 연구와 테라노스틱스로의 응용_이민희, 윤신아

42 반 데르 발스 결합기반 1차원 선형소재 연구_류학기

50 사라진 판데르발스 힘을 찾아서_김원준, 김형준

57 Bioorthogonal 나노자임 설계와 응용 연구_정영도, 김민수

화학연합카페

69 역사와 내 기억 속에 길이 남을 여성들_진정일

74 식품의 원산지 판별법 개발 현황_이광식

79 제로에너지 건축물 구현을 위한 BEMS 기술
_김태영, 강원희, 이제현, 이광호

86 과학기술의 시대에 과학을 이야기한다는 것_박윤지

화학연합회소식

정회원 소식

93 대한화학회

96 한국고분자학회

99 한국공업화학회

103 한국세라믹학회

105 한국화학공학회

특별회원사 소식

109 한국화학연구원

우수연구단체

122 전기장제어소재연구단_이상한

130 엔지니어링개발연구센터_이종민

139 울산과학기술원 화학과(UNIST Chemistry)

144 리그닌 바이오리파이너리 사업단 소개_김용환

149 멀티스케일 카이랄 구조체 연구센터_이희승



최중길

(사)한국화학관련학회연합회 회장

존경하는 한국화학관련학회연합회 회원 여러분!
여러분과 가정에 건강과 평온이 항상 함께하시기를 진심으로 기원합니다.

온 세상에 새싹이 돌아나는 희망찬 봄을 맞았으나 지난 몇 개월 동안 코로나19(Covid-19)로 인한 팬데믹 쇼크는 우리 국민뿐만 아니라 지구촌 구성원 전체의 생명이 위협받고 있음은 물론, 경제, 사회의 심각한 위기를 초래하고 있습니다. 그러나 우리나라는 국민 모두의 헌신적 노력으로 세계의 모범이 되고 있으며 조만간 이 위기를 슬기롭게 극복함으로써 다시 활기차고 풍요로운 사회를 되찾기를 간절히 기대해봅니다.

한국화학관련학회연합회는 1999년 7월에 발족한 이래 국내 화학 관련 핵심 5개 학회 회원들의 상호협력을 통한 공동 발전을 도모하고, 우리나라 화학관련 과학 및 산업 기술의 발전과 보급에 기여하는 것을 목적으로 활동해오고 있습니다. 작년에 20주년을 맞아 성년으로 성장한 저희 연합회는 그동안 많은 어려움 속에서도 선배 회원님들의 헌신적인 노력과 회원님들의 적극적인 참여로 지금과 같이 발전할 수 있었습니다.

화학산업은 우리나라 산업에서 가장 핵심적이고 중추적인 원천 산업으로서 그 동안 우리나라 경제성장의 원동력이 되어왔음은 주지의 사실입니다. 그러나 최근 국제 무역전쟁과 일부 핵심소재에 대한 수출규제에 따른 국내외 경제 및 산업 상황의 침체와 변화에 따라 화학분야에서도 변화를 요구하고 있습니다. 이에 따라 화학산업의 지속 성장을 위하여 글로벌 시대에 맞는 전략의 변화와 내부 혁신을 통한 경쟁력 강화의 필요성이 대두되고 있습니다.

이와 같이 급변하는 시대 상황 속에서는 미래·혁신 인재 양성은 물론이고 연구 혁신을 통해 변화에 선제적으로 대응하여 위기를 극복함으로써 새로운 도약의 기회로 활용하여야만 합니다. 특히 ‘인간과 기계의 대화’가 가능함으로써 인공지능(AI)으로 열매 맺는 4차 산업혁명의 현 세상은 끝없이 상상하고, 줄기차게 도전하는 사람들이 열게 될 것이며 이를 위하여 ‘연결’과 ‘협력’은 아무리 요구하여도 지나치지 않을 것입니다. 이러한 시대의 흐름을 반영하기 위해서는 저희 연합회가 소속 학회간의 진정한 징검다리 역할을 더욱 활성화하여 긴밀한 협력을 통한 우리나라 화학산업 기술발전에 기여할 수 있어야 합니다.

올해는 한국공업화학회가 30년이 되며, 내년은 한국화학관련학회연합회의 모태가 된 대한화학회가 75년이 되는 뜻 깊은 해입니다. 이를 계기로 화학의 가치 재정립을 통해 화학 및 화학산업의 중요성을 대중에게 널리 알려 국민 인식을 향상시키는 일을 해야 합니다. 이리하여 화학산업 발전의 장기적 기반을 마련하고, 국가 경쟁력인 미래 인재 육성에 노력하는 일 등에 연합회와 회원들의 적극적인 노력이 요구됩니다. 또한 과학기술 정책 분야 및 정부의 의사 결정에 적극 참여하여 영향력을 증대시킴으로써 화학산업의 글로벌 경쟁력 제고를 위한 산·학·연·관의 협력을 강화시키는 것이 무엇보다도 중요하다고 하겠습니다. 연합회는 이와 같은 일에 회원들이 화학분야에서 효율적으로 활동할 수 있도록 연합회 회원 학회의 사업과 활동을 지원하는데 최선의 노력을 할 것입니다. 이리하여 새로운 기술 및 소재의 개발, 환경규제에 대한 효율적 대응 등, 회원 여러분의 공통 관심사를 이끌어내고, 이를 함께 해결할 수 있는 토양을 만들도록 노력하겠습니다.

연합회가 효율적으로 운영되기 위해서는, 회원들의 실제적 협력을 통하여 성장하고 발전하는 것이 무엇보다도 중요합니다. 이를 위해 함께 소통하고 참여하는 연합회가 되도록 회원 여러분의 관심과 참여, 격려와 성원을 부탁드립니다. 현재 코로나19로 인해 대내외적으로 학회 학술활동이 지연, 취소됨에 따라 과학기술계의 활동도 크게 위축되고 있는 등, 전 세계 과학기술계 모두가 어려운 시기를 보내고 있습니다. 지금이야말로 과학기술계의 역할과 사명이 그 어느 때보다 엄중한 시기이기에 우리 연합회도 전문성을 한데 모아 과학기술계 공동체 문제 해결에 적극적으로 참여하고 앞장서기 위해 최선을 다해야 할 것입니다.

존경하는 회원 여러분, 이 어려운 시기를 모두의 마음과 뜻을 모아 함께 극복하고 희망찬 미래로 나아갑시다. 모든 회원님들과 회원님들의 가정에 건강과 행복이 가득하시기를 진심으로 기원합니다.

2020년 6월

(사)한국화학관련학회연합회 회장 최 중 길

한국공업화학회 창립 30주년

이 준 혁 (한국공업화학회 회장)



1990년 5월 12일 서울대학교 문화관 소강당에서 창립총회를 통하여 출범한 한국공업화학회가 올해로 창립 30주년을 맞이하였다. 지난 30년간의 한국공업화학회 역사는 우리나라 화학산업의 성장과 맥을 함께하고 있다. 초기 380여 명의 회원으로 시작한 이후 현재는 본부를 중심으로 8개의 지부, 12개의 위원회, 17개의 분과회로 구성되어 약 6,000명의 회원과 70여 특별 및 단체회원이 활동하고 있는 국내 중견학회로 양적, 질적으로 비약적인 성장을 하였다. 국문지「공업화학」연 6회, 영문지「Journal of Industrial and Engineering Chemistry」연 12회, 기술전망지「공업화학전망」가 연 6회 발간되고 있으며, 특히 2018 피인용 지수(Impact Factor) 4.978로 국내 화학분야 저널 중 부동의 1위를 유지하고 있는 영문지(JIEC)는 학회의 자랑스

로서 현재 우리 학회의 위상을 잘 보여주고 있다. 작년 2019년 추계학술대회에는 1,927편(구두 발표 299편 및 포스터 발표 1,628편)의 학술 논문 발표와 2,200명이 참가하였으며 기술교육 세미나, 기기전시 등 다양한 프로그램들이 진행되며 최고의 수준이라는 호평을 받았다.

한국공업화학회가 다루는 분야는 화학, 화학공학과 밀접한 관계가 있을 뿐 아니라, 에너지, 디스플레이, 나노, 바이오, 석유화학, 환경, 고분자, 전기화학, 촉매, 무기재료, 생체재료, 펄프제지, 윤활유, 도료 및 코팅 등 다양한 산업에 응용되는 화학분야를 망라하는 특징이 있다. 설립 초창기부터 우리 학회는 대기업 중심의 산업분야인 정유, 석유화학과는 차별되게 중견, 중소기업이 화학에 연계된 사업을 하는 다양한 분야를 아우르며 산학연의 연계 고리를 찾고자 노력해왔다. 우리학회는 화학산업에 기반이 되고 다양한 산업현장에 직접 연관이 되는 세세한 기술과 이의 활용에 관심을 두고 활동해 온 노력을 기반으로, 산업 현장과의 연관성을 더욱 강화해나갈 것이다. 또한, 국제 협력 강화 및 더욱 적극적인 산학연 협력 사업을 통해 4차 산업혁명과 AI 도입으로 산업 패러다임이 바뀌고 있는 산업 현장에 큰 일익을 담당할 수 있도록 노력할 것이다.



한국공업화학회 창립총회(1990. 5. 12, 서울대학교)

30년 전 한국공업화학회의 창립취지문에 표기된 "새로운 기술시대는 한국의 화학공업이 장치공업과 아울러 신물질의 창출, 기능성 소재, 생명공학, 에너지, 환경분야 등의 신기술개발로 새로운 활로를 개척할 것을 요구하고 있습니다. 이러한 요구는 과거 어느 때보다도 학문제 분야간의 유기적 협조아래 공업화학인들의 창의력과 노력을 필요로 하고 있습니다." 라는 문장은 지금도 유효하다. 즉, 공업화학 분야의 고부가가치화를 위한 신기술개발과 학문간 융합을 통한 신 분야 개척은 노력에 따라 무궁한 새로운 산업을 사회에 제공해줄 수 있다. 이에 대한 한국공업화학회의 역할은 무궁무진하며 같이 노력해서, 30년 전 선배들이 제창한 취지가

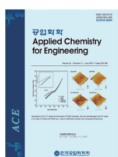
본격 실현될 수 있는 기반을 한국공업화학회가 마련해 나갈 것이다.

올해 창립 30주년을 기념하여 그동안의 학회 활동 발자취와 실적을 담은 '한국공업화학회 30년사'를 발간할 예정이며, 추계 학술대회(10월 28일(수)~30일(금), 광주 김대중컨벤션센터)에서는 아마도 국내 학회에서 흔치 않은 규모로서 JIEC 학술지와 연계한 국제심포지엄이 개최되고 2,000편에 이르는 논문과 포스터도 발표될 예정이다. 이러한 학회의 저력은 30년 나이가 주는 느낌 그대로 활동성과 진취성, 창의성으로 발전되고 있다. 그러나 사람의 일생에서도 패기와 열정으로 나아가는 10대, 20대와 달리 학문의 기초가 확립되는 나이인 30세는



Journal of Industrial and Engineering Chemistry (JIEC)

ISSN : 1226-086X
ISSN(Online) : 1876-794X
연 12회
SCIE 등재지



Applied Chemistry for Engineering (Appl. Chem. Eng.)

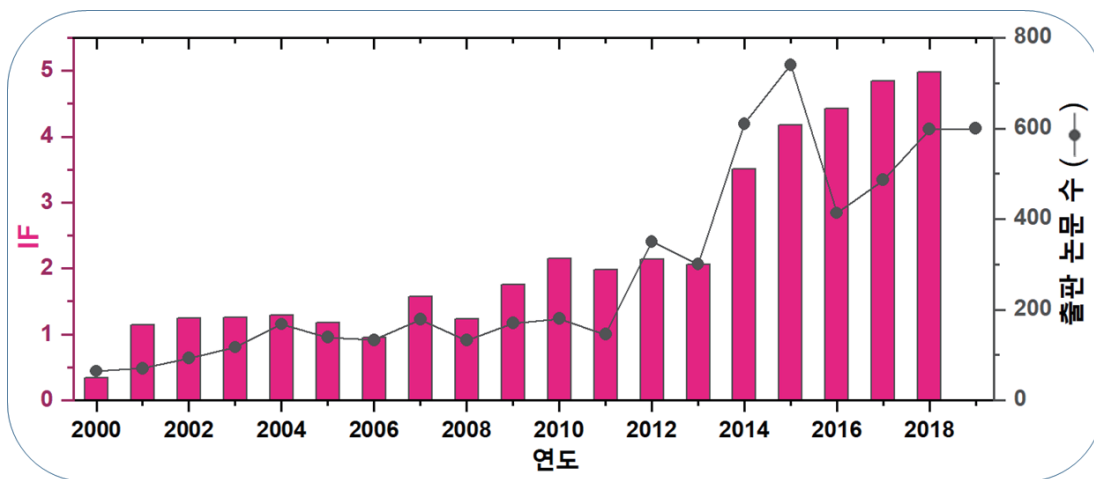
ISSN: 1225-0112
ISSN(Online) : 2288-4505
연 6회 발간
SCOPUS 등재지



공업화학전망

ISSN: 1229-120X
국내/국외 첨단 기술연구 동향
연 6회 발간

한국공업화학회 간행물



영문학문지(JIEC)의 연도별 IF 지수/출판 논문 수 변화

우리학회로 보아서도 매우 중요한 시점이다. 지난 30년간 이룩한 성취에 만족하지 않고 지금까지 다져온 기초 위에 공업화학 전반 산업에 대한 기여도를 높이기 위해 더욱더 노력해야 할

것이다. “30년의 열정, 100년 미래를 꿈꾸다.” 라는 우리학회 30주년 슬로건처럼, 명실상부한 대한민국의 주요 학회로서 향후 100년을 바라 보는 한국공업화학회 30주년이 되었으면 한다.

Photomediated Controlled Radical Polymerization (Photo-CRP)의 과거와 최신 연구 동향

권용환, 김영무, 노연진, 이윤경, 권민상*

1. 개요

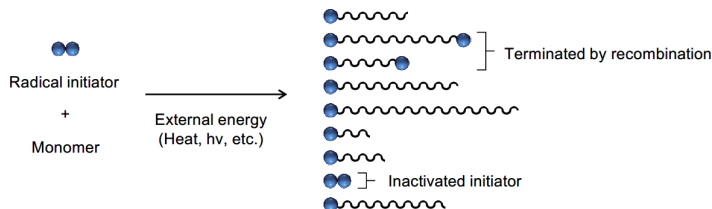
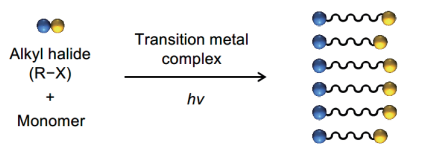
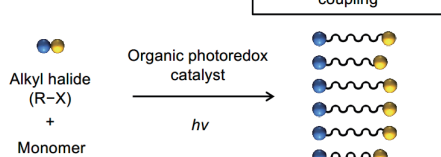
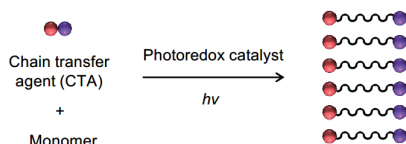
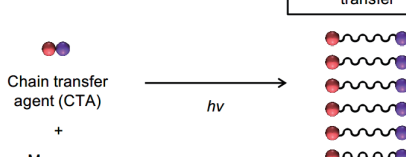
1920-1930년대 Staudinger, Carothers를 비롯한 과학자들에 의해 현대 고분자 과학이 정립되고, 1950년대 Zigler-Natta축매의 개발을 통한 고분자 혁명이 일어난 이래, 고분자 제품 생산량은 매년 꾸준히 증가해왔으며 그 수치는 연간 6.66 천억 달러(2018년 기준)에 달한다.^[1]

고분자 중합은 중합 방식에 따라 단계-성장(step-growth) 중합과 사슬-성장(chain-growth) 중합으로 나뉘고, 사슬-성장 중합은 활성종(active species)에 따라 이온 중합과 라디칼 중합으로 분류할 수 있다. 그 중, 라디칼 중합은 중합 조건이 까다롭지 않고, 값싸고 다양한 단량체 범위 때문에, 널리 사용되고 있다.^[2] 하지만, 통상의 상업적 고분자 중합에 많이 활용되는 자유 라디칼 중합(free radical polymerization, FRP) 방법은 라디칼의 높은 반응성에서 기인하는 고유의 종결(termination) 반응으로 인해 잘 정의된 구조의 고분자 생산이 힘들어, 고부가 가치 산업으로의 응용에 한계가 있다. 반면, 제어 라디칼 중합(controlled radical polymerization, CRP)은 고분자의 분자량, 분자량 분포, 조성 및 세부구조 등을 정밀하게

제어할 수 있어, FRP의 한계를 극복할 수 있는 새로운 라디칼 중합 방법으로 큰 주목을 받아왔다.^[3-4] CRP는 코팅, 접착제, 화장품, 잉크젯 프린팅, 세제, 도료 및 계면 활성제의 합성에 핵심 기술로 사용될 수 있으며, 약 600억 달러가 넘는 잠재시장^[5]을 가지고 있어, 현재까지도 활발히 연구가 진행되고 있다. 그 중에서도 1982년 오사카시립대학의 Otsu 교수팀에 의해 처음으로 제안된 광매개 제어 라디칼 중합(photomediated controlled radical polymerization, photo-CRP)은 온화한 조건에서, 지속 가능하며 시공간적 조절(spatiotemporal control)이 용이한 빛을 중합 에너지원으로 사용함으로써 미래 지향적인 중합 방법으로 평가된다.^[6] 본 기고에서는, photo-CRP의 과거 연구성과와 최근 연구동향을 살펴보고자 한다(그림 1).

2. 광매개 원자 이동 라디칼 중합 (Photomediated atom transfer radical polymerization, Photo-ATRP)

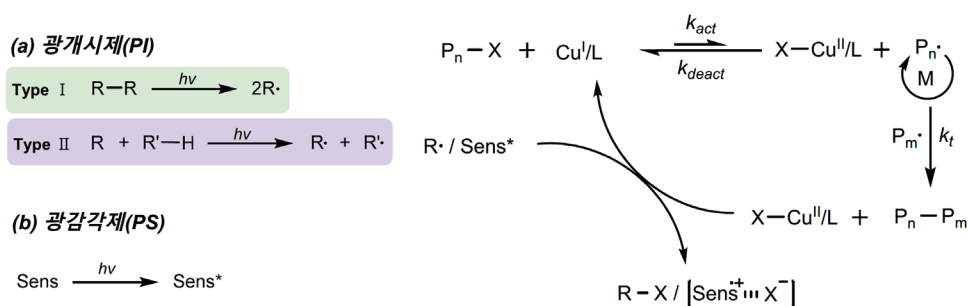
CRP에서는 크게 세 가지, deactivation by catalyzed reversible coupling, deactivation by spontaneous coupling, 그리고, deactivation by degen-

(a) Free radical polymerization (FRP)**(b) Photomediated controlled radical polymerization (Photo-CRP)****(b-1) Photo-ATRP****(b-2) O-ATRP****(b-3) PET-RAFT polymerization****(b-4) Photoiniferter polymerization**

[그림 1] Photo-CRP 개요

erative transfer 방법을 통해, 중합 도중 발생하는 종결 반응을 억제함으로써, 잘 정의된 구조의 고분자를 얻게 된다. 1995년 카네기 멜런 Matyjaszewski 교수와 교토 대학의 Sawamoto 교수에 의해 독립적으로 개발된 원자 이동 라디칼 중합(atom transfer radical polymerization, ATRP)은 가장 널리 사용되는 CRP로 deactivation by catalyzed reversible coupling 방법을 사용한다. 전이금속 촉매와 알킬 할라이드(alkyl halide)간 산화-환원 반응을 통해, 휴면종(dormant species)과 활성종(active species)간 평형을 조절하는데, 휴면종은 높은 농도로 활성종

은 낮은 농도를 유지한다. 그 결과, 활성종 간 종결 반응이 억제되고, 이를 통해 분자량이 정밀하게 제어된 좁은 분자량 분포를 가진 고분자가 얻어진다; 생성되는 고분자의 단량체 전환율(monomer conversion, α), 분산도(dispersity, D), 개시효율(initiation efficiency, I^*), 및 말단 충실도(end-group fidelity) 등을 통하여 중합의 성공을 판단할 수 있다. 최근에는, 빛을 사용한 photo-ATRP의 연구가 활발히 진행되고 있으며 2018년 Matyjaszewski 교수가 발표한 리뷰 논문^[4,7] 및 이스탄불 공과 대학의 Yagci 교수가 발표한 리뷰 논문^[8]을 통해 photo-ATRP의



[그림 2] 광개시제와 광감각제 및 광첨가제 매개 ATRP의 메커니즘

역사, 메커니즘, 응용 및 최근 동향을 자세히 살펴볼 수 있다.

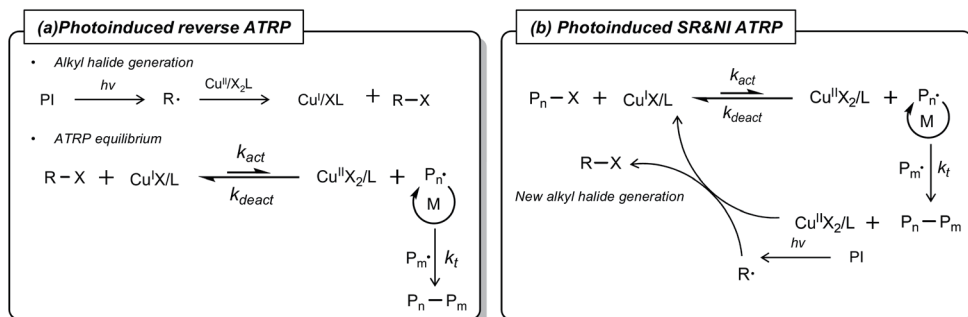
2-1. 광첨가제(photosensitive additive) 매개 ATRP

Cu(II)촉매는 흡광 이후의 광첨가제(photosensitive additive)로부터 Cu(I)촉매로 환원된다; 광첨가제는 흡광 후 라디칼을 생성하는 광개시제(photoinitiator, PI)와 들뜬 상태가 되어 환원시키는 광감각제(photosensitizer, PS)가 있다(그림 2).

PI를 광첨가제로 사용한 photo-ATRP는 알킬

할라이드 첨가 여부에 따라 두 가지 메커니즘으로 분류된다. PI로부터 생성된 라디칼이 Cu(II)촉매를 환원시켜 Cu(I)촉매와 알킬 할라이드를 생성하는 photoinduced reverse ATRP와 알킬 할라이드와 PI를 같이 첨가하여 새로운 알킬 할라이드가 추가 생성되는 photoinduced simultaneous reverse & normal initiation(SR&NI) ATRP로 분류할 수 있다(그림 3).

2001년 베이징 대학의 Qiu 교수팀은 최초로 photoinduced reverse ATRP를 보고하였다.^[9] Fe(III) 촉매와 DMPA(Type I PI)를 사용, UV 환경에서 PMMA-*b*-PSt 공중합체와 구체적



[그림 3] (a) Photoinduced reverse ATRP와 (b) photoinduced SR&NI ATRP 비교

인 메커니즘을 제시하였다. 2002년 Yagci 교수팀은 benzophenone/DMEA(Type II PI)를 사용하여 PMMA-*b*-PSt 공중합에 성공하였다.^[10] 2011년 Yagci 교수는 photoinduced SR&NI ATRP를 photoinduced reverse ATRP와 실험적으로 비교하여 photoinduced SR&NI ATRP가 고분자 제어에 더 적절하다는 결론을 내렸으며,^[11] 2012년에는 유기색소/아민(Type II PI)을 사용함으로써 가시광 영역에서의 성공적인 photoinduced SR&NI ATRP를 발표하였다.^[12] 2013년 Matyjaszewski, Yagci 공동 연구팀은 Irgacure2959를 사용하여 photoinduced SR&NI ATRP를 inverse microemulsion에 적용시킴으로써 photo-ATRP의 응용 범위를 넓혔다.^[13] 그 외에, AIBN(Type I PI)^[14], aniline(Type I PI)^[15] camphorquinone/benzhydrol(Type II PI)^[16]을 사용한 연구가 보고되었지만, PI로부터 생성된 자유 라디칼은 예상치 못한 부가반응(side reaction)을 야기하여 고분자 중합을 제어하기 어렵게 만들기 때문에 최근에는 PI를 사용한 연구는 상대적으로 활발하지 않다.

한편, PS의 대표적인 예로써 유기 색소(organic dye) 또는 광활성 나노입자(nanoparticle, NP)가 있는데, 특히 NP의 경우 반응 후 제거하기 용이하고 반응 후 재사용이 가능해,^[13] 큰 관심을 받았고 활발한 연구가 진행되었다(그림 2).

2016년 HIST 대학의 Zhong 교수팀은 chlorophyll *a*를 PS로 사용함으로써 가시광 영역 빛(λ_{\max} = 430 nm, 640 nm)에서 PMMA 중합에 성공하였고^[17] 2018년 Niederrhein 대학의 Strehmel교수는 Yagci 교수팀과의 공동연구로

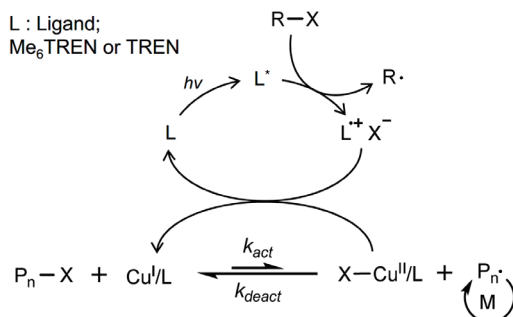
근적외선(λ_{\max} = 790 nm)에서 polymethine 계열을 PS로 사용하여 PMMA 중합에 성공함으로써 생체, 제약 분야로의 응용 가능성을 보여주었다.^[18] 한편, Yagci 교수팀은 2013년 ZnO,^[19] 2014년 mpg-C₃N₄^[20]를 사용하여 성공적인 PMMA 중합을 보고하며, 해당 분야의 선구자 역할을 하였다. Lanzhou 기관의 Zhou 교수팀은 태양광 아래에서 TiO₂를 사용하여 brushed polymer 합성을 보고하였으며,^[21] 2019년 Strehmel 교수팀은 최초로 carbon dot을 photo-ATRP에 적용하여 성공적인 PMMA 중합을 보고하였다.^[22] 최근, Nanchang-normal 대학의 Lu 교수팀은 가시광 환경에서 conjugated polymer를 PS로 사용하여 광첨가제의 범위를 넓혔다.^[23] 더 자세한 내용은 Matyjaszewski가 발표한 리뷰 논문^[7,24]을 통해 살펴볼 수 있다.

2-2. 광첨가제 없는 photo-ATRP

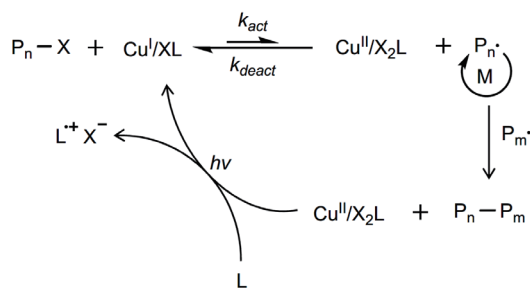
전이금속 촉매가 직접 빛을 흡수하여 활성제(activator)가 되어 중합을 시작하는 방법이며, 2000년 DuPont의 Guan 연구팀이 최초로 광촉매를 사용한 photo-ATRP의 가능성을 보고하였다.^[25] 그 이후 학계의 관심에서 멀어졌으나, 최근 광중합의 중요성이 강조되면서 다시금 주목을 받았다.

많은 연구에서 Cu(II)를 시작 촉매로 사용했지만, Cu(II) 촉매 기반 photo-ATRP의 반응 메커니즘은 아직 정확히 규명되지 않았다. Warwick 대학의 Haddleton 교수팀^[8,26]에 따르면 들뜬 리간드가 알킬 할라이드를 환원시키면서 개시반응이 시작된다(그림 4a). 반면,

(a) Haddleton and coworkers



(b) Matyjaszewski and coworkers



[그림 4] (a) Haddleton 교수팀과 (b) Matyjaszewski 교수팀이 제안한 Cu(II) 촉매 기반 photo-ATRP의 메커니즘

Matyjaszewski 교수팀^[27-28]에 따르면 들뜬 상태의 Cu(II) 촉매는 리간드로부터 환원되어 개시 반응이 시작한다(그림 4b). 정확한 메커니즘 규명을 위해서는 추가적인 연구가 뒷받침 되어야 한다.

2010년 Yagci 교수팀은 활발한 연구가 진행되지 않았던 Cu(II) 촉매 기반 photo-ATRP의 연구성과를 발표하여 학계의 관심을 모았고^[29-30] 2012년 Polymer Institute SAS 기관의 Mosnáček 연구팀^[31], Matyjaszewski 교수팀^[27-28]은 Cu(II) 촉매 당량 감소(단량체 대비 100 ppm)를 성공하였으며, 2016년에는 Haddleton 교수팀^[32-33]과 Matyjaszewski 교수팀^[28]에 의해 photo-ATRP는 수상 중합으로도 응용 범위가 확대되었다. UHA 대학의 Lalevée 교수팀은 Cu(phen)²⁺ 촉매를 사용한 연구성과를 2015년에 발표하였는데^[34], 이 논문을 통해 Cu(II) 촉매가 리간드로부터 환원되는 메커니즘이 아닌 알킬 할라이드로부터 산화되는 새로운 메커니즘을 제안하였다. 최근 ETH Zurich 대학의 Anastasaki 교수

팀은 Cu(II) 촉매 당량에 따른 분자량 분포의 정량적인 분석을 발표하였다.^[35]

한편, Monash 대학의 Junkers 교수팀은 Cu(II) 촉매 기반 photo-ATRP의 응용을 집중적으로 연구했는데, 2014년 아크릴계 단량체들의 one-pot 중합을 통해 10개의 블록을 가진 공중합체를 성공적으로 합성($D = 1.11 \sim 1.17$)하여 photo-ATRP의 효율성을 잘 보여주었다.^[36] 후속 연구로 고분자 브러쉬 중합에 응용하여 최초로 1 μm 길이의 고분자 중합에 성공하였고,^[37] 리간드별로 단량체의 반응성이 다르다는 연구 결과^[38]에 기반하여 먼저 PMMA를 CuBr₂/PMDETA로 중합한 뒤, 과량의 Me₆TREN을 첨가하여 PMA 블록을 중합하는 새로운 PMMA-b-PMA 공중합체 합성 방법을 제시하였다.^[39]

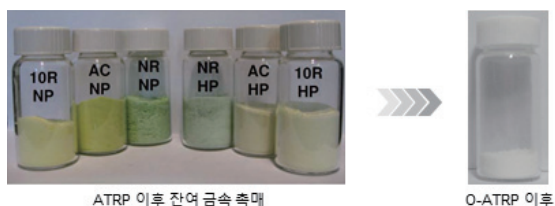
Cu(II) 촉매 외에도 다른 전이금속 촉매도 연구되었다. 특히 Fe(III) 촉매는 매장량이 많고 가격이 싸고 유해성이 낮기 때문에 주목받았는데^[3,40-41], 2015년 Matyjaszewski 교수팀

은 오직 Fe(III) 촉매와 알킬 할라이드만으로도 photo-ATRP가 가능함을 보였다.^[40] 그에 따른 후속 연구로 2017년 소량의 리간드를 첨가하여 가시광 영역에서의 중합도 성공하였다.^[41] 다른 전이금속인 Au(I) 촉매,^[42] Ir(III)^[43-44] 촉매 등도 현재 활발한 연구가 진행 중이다. 더 자세한 내용은 Matyjaszewski 교수가 발표한 리뷰 논문^[3,7]을 참고하기 바란다.

2-3. 순수 유기물 광촉매 기반 photo-ATRP (O-ATRP)

Photo-ATRP에 사용되는 전이금속 촉매는 값이 비싸며 인체에 유해할 뿐만 아니라, 중합 이후에 금속 촉매가 남아 별도의 정제가 필요하다. 이는 생산단가를 상승시킬 뿐 아니라 정제 이후에도 금속 촉매가 남아있기 때문에 생체공학, 전자공학 응용에 한계가 있다(그림 5).^[45-46] 그러므로 잔여 금속으로 인한 한계를 극복할 수 있는 방안으로써 순수 유기물 광촉매를 사용한 ATRP(O-ATRP)가 최근 큰 관심을 받고있다.

2014년 UC Santa Barbara의 Hawker 교수팀은 phenothiazine 계열 촉매를 사용하여 최초로 O-ATRP의 성공적인 사례를 보고하였다.^[47]



[그림 5] ATRP와 O-ATRP 이후의 고분자 비교

이후 O-ATRP의 연구가 활발히 진행되었는데, 2016년 Yagci 교수팀은 xanthene 계열^[48]과 polyaromatics 계열^[49] 촉매를 O-ATRP에 적용하였으며, 콜로라도 주립 대학의 Miyake 교수팀은 dihydrophenazine 계열^[50-51], phenoxazine 계열^[52], dimethyl-dihydroacridine 계열 촉매^[53]를 사용하여 성공적인 중합을 발표함으로써 O-ATRP 분야를 선도하고 있다. 앞서 언급한 O-ATRP 사례들은 여전히 유기물 광촉매 당량(단량체 대비 100~1000 ppm)이 높기 때문에 유기물 광촉매 당량을 낮출 수 있는 새로운 유기물 광촉매 및 중합법 연구가 필수적이다.

2018년 권민상 교수팀은 고효율 순수 유기물 광촉매 컴퓨터 지원 설계(computer-aided design)를 발표하였다.^[46] 이에 따르면, 뒤틀린 전자 주개-받개 구조(strongly twisted donor-acceptor)를 가지는 유기 물질은 1) 삼중항 생성이 용이하고, 2) 기저/들뜬 상태 산화/환원 전위의 독립적 조절이 가능하여, 고효율 유기물 광촉매로 사용될 수 있다. 본 설계원리를 바탕으로, 30여 종에 이르는 유기물 광촉매 라이브러리를 구축하고, 이로부터 초고효율의 유기물 광촉매를 발굴하여, 기존의 유기물 광촉매로는 중합하기 힘들었던 PSt을 성공적으로 중합하였으며, 광촉매량의 극적인 감소를 통해(단량체 대비 0.5 ppm) O-ATRP가 별도의 정제 과정이 필요 없는 중합 방법이 될 수 있음을 보고하였다.

O-ATRP는 생체공학 및 전자공학에 응용할 수 있는 장점을 갖고 있으나, 강한 환원력을 가진 광촉매의 부재로 적용 가능한 단량체

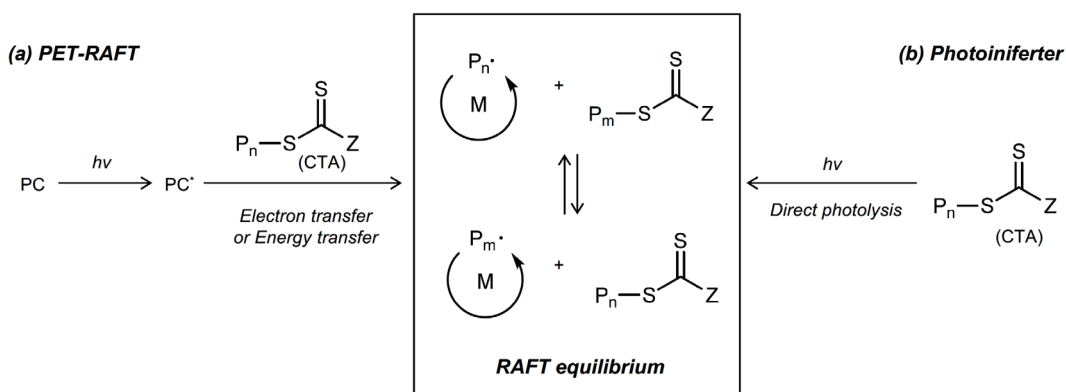
종류에 한계가 있다. 특히 vinyl acetate(VAc)와 같이 전자가 풍부한 단량체 중합의 연구에 큰 진척이 없어 지속적인 노력과 투자가 필요할 것으로 사료된다. O-ATRP에 대한 더욱 자세한 내용은 Yagci 교수가 출판한 리뷰 논문^[8] 및 Miyake 교수가 출판한 리뷰 논문^[54]을 통해 살펴볼 수 있다.

3. 광매개 가역적 첨가-분절 연쇄이동 (Photomediated reversible addition-fragmentation chain transfer, Photo-RAFT) 중합

1998년 호주 CSIRO의 Moad, Rizzardo, Thang 박사의 선구자적 연구 이후,^[58] RAFT 중합은 현재까지 알려진 고분자 중합 방법 중 균일한 분자량 분포와 잘 조절된 분자량, 그리고 잘 보존된 말단기를 갖는 고분자를 효과적으로 중합할 수 있는 방법으로 각광 받아 왔다.

ATRP나 nitroxide 매개 중합(nitroxide-mediated polymerization, NMP)과는 다르게, RAFT 중합은 사슬이동제(chain transfer agent, CTA)를 사용하여 deactivation by degenerative transfer 방법을 통해 고분자 중합 반응을 제어하며 xanthate 작용기를 포함한 CTA를 사용할 경우에는 MADIX(macromolecular design via the interchange of xanthates)라고 부르기도 한다.

앞서 서술했듯, RAFT 중합에서는 FRP에서 사용하는 라디칼 개시제에 더해 thiocarbonylthio(TCT)에 기반한 CTA가 필요하다. 먼저 개시제가 외부 요인(열, 빛 등)에 의해 분해되어 라디칼을 생성하게 되면 소량의 단량체와 반응하여 성장 사슬을 생성하게 되고 CTA와 반응하게 된다. 이때 기존의 성장 사슬($P_n \cdot$)과 CTA에서 기인한 성장 사슬($P_m \cdot$) 사이의 평형이 형성된다. 이러한 평형은 RAFT 중간체($P_n-S-C(Z)-S-P_m$)를 사이에 두고 형성되며, 한쪽 사슬이 성장할 동안 다른 사슬은



[그림 6] PET-RAFT와 photoiniferter 중합의 개요

CTA와의 반응에 의해 잠시 휴면 상태가 되어 성장을 멈춘다. 따라서 이 평형을 통해 서로 다른 사슬들이 단량체와 번갈아 반응하여 성장하게 된다. 중요한 점은, 반복되는 첨가와 분절 사이의 평형이 일어나는 속도가 성장 사슬이 단량체와 반응하여 성장하는 속도보다 빠르기 때문에, 대부분의 사슬이 균일하게 성장할 수 있다는 것이다. 하지만 RAFT 중합의 메커니즘에 관해서는 아직 학계의 논란이 있다.^[56-57] RAFT 중합에 대한 전반적 내용은 Perrier 교수가 2017년 *Macromolecules*에 발표한 논문에 잘 정리되어 있으며,^[59] 다양한 CTA 개발 동향, 합성법, 응용 및 메커니즘 논의 등은 CSIRO에서 주기적으로 발표하는 논문들을 통해 참고할 수 있다.^[60-62]

3-1. Photoinduced electron/energy transfer RAFT(PET-RAFT) 중합

RAFT 중합 방법에 광촉매를 접목시킨 PET-RAFT 중합이 2014년 호주 UNSW Boyer 교수팀에 의해 제시되었다(그림 6a).^[63] 해당 연구에서는 기존의 RAFT 중합과 다르게 라디칼 개시제 없이, CTA와 전이금속 기반 광촉매(여기서는, *fac*-[Ir(ppy)₃])를 사용하여 다양한 단량체((meth)acrylates, (meth)acrylamides, vinyl acetate 등)와 분자량($M_n = 1,000 \sim 2,000,000$ g/mol)에 대해, 그리고 산소 제거 과정 없이도 성공적인 중합 결과($D < 1.3$)를 보였다. 반응을 위한 외부 에너지원으로 가시광 영역의 빛($\lambda_{max} = 435$ nm)을 사용하고, 산소 제거 과정이 필요없으므로, 반응 조건이 온화하고 간단하여 사

용자에게 매우 편리하다. 이후로 Boyer 교수팀에서 Ir(III) 기반 광촉매뿐 아니라 Ru(II) 기반 광촉매(Ru(bpy)₃Cl₂),^[64-65] Zn(II) 기반 광촉매(ZnTPP),^[66-68] 그리고 생체 촉매인 chlorophyll a,^[69] bacteriochlorophyll a^[70] 등의 다양한 금속 기반의 광촉매들을 사용하여 성공적인 PET-RAFT 중합을 선보였고, 특히 생체 촉매인 chlorophyll a와 bacteriochlorophyll a를 사용하면 상당히 낮은 에너지의 빛(각각 $\lambda_{max} = 635$ nm, $\lambda_{max} = 850$ nm)으로도 중합이 가능함을 보였다. 이외에도 Bi(III) 기반 광촉매(Bi₂O₃)를 사용한 PET-RAFT 중합이 Müllner 교수팀에 의해 제시되었다.^[71] 최근 Boyer 교수팀에서는 ZnTPP를 광촉매로 사용한 PET-RAFT 중합 환경에 루이스 산을 첨가하여 양이온 중합(cationic polymerization)까지 동시에 진행, isobutyl vinyl ether와 methyl acrylate의 공중합을 선보였다.^[72]

다만 전이금속 기반 광촉매의 사용은 잠재적 독성과 높은 비용 등의 문제가 있어 촉매의 양을 줄이거나^[73] 순수 유기물 광촉매를 사용한 PET-RAFT 중합도 연구되었다. Boyer 교수팀,^[74-77] Miyake 교수팀,^[76-77] Johnson 교수팀,^[78] Chen 교수팀,^[79] 그리고 권민상 교수팀^[80] 등 여러 연구팀에서 순수 유기물 광촉매를 사용한 PET-RAFT 중합의 연구를 진행하였다. 기존에 널리 사용되던 유기 염료인 eosin Y나 fluorescein 뿐 아니라, phenothiazine 계열 분자, xanthene 계열 분자, carbon dot^[81] 등이 순수 유기물 광촉매로 제시되었다. 특히 권민상 교수팀에서 진행한 연구의 경우, 해당 연구실에서 발표했던 효율적인 순수 유기물 광촉매의 설

계 전략을 성공적으로 PET-RAFT 중합에도 적용하여 전이금속 기반 광촉매와 비슷한 수준의 양(단량체 대비 5 ppm)의 순수 유기물 광촉매(4DP-IPN)를 사용하면서도 성공적인 결과($\alpha = 62\%$, $D = 1.11$)를 보였다.^[80]

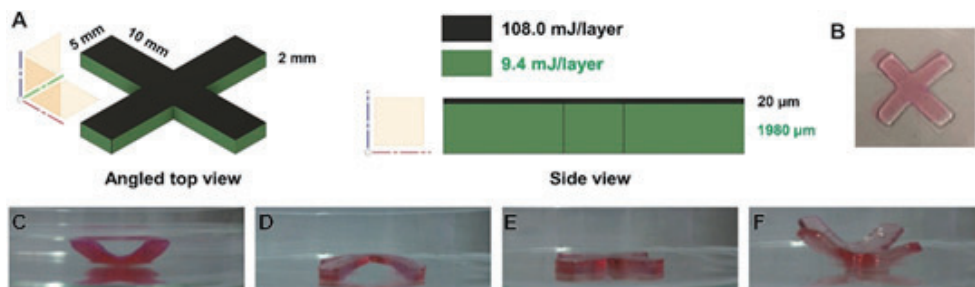
PET-RAFT 중합의 명확한 반응 메커니즘에 대해서는 아직 활발한 논의가 진행 중이지만, 주로 전자 전달(electron transfer)과 에너지 전달(energy transfer)의 두 가지 경로가 제시되고 있다(그림 6a).^[57] 전자 전달 경로를 따르는 경우, 전자 전달이 일어나게 될 광촉매와 CTA 사이의 표준 환원 전위 관계가 중요하게 작용한다. 산화 회로(oxidative quenching cycle)를 예로 들면, 바닥 상태 CTA의 환원 전위보다 높은 바닥 상태 환원 전위와 낮은 들뜬 상태 환원 전위를 갖는 광촉매를 사용해야 한다. 촉매의 바닥 상태, 들뜬 상태 산화-환원 전위에 더하여, 가시광 흡수, 수명시간(lifetime)이 긴 들뜬 상태 삼중항(triplet)의 효율적 생성 등이 광촉매 활성화에 중요한 영향을 끼치게 된다.^[80] 따라서 이러한 점들을 고려한 효율적인 순수 유기물 광촉매 설계 전략에 대한 연구도 진행되었다.^[80] 반면, 에너지 전달 경로를 따른다면 빛을 흡수하여 들뜬 광촉매의 에너지 준위와 CTA의 들뜬 상태 에너지 준위의 관계가 중요하다.

3-2. Photoiniferter 중합

1982년 Otsu 교수팀에 의해 제안된 CTA 자체의 광분해(direct photolysis)로 진행되는 photoiniferter 중합은 광촉매조차 필요하지 않기 때문에 위의 PET-RAFT 중합에 비해서도 간단

한 중합 반응이다(그림 6b).^[6] CTA가 개시제(initiator), 사슬이동제(transfer agent), 종결제(terminator), 이 모든 역할을 하기에 iniferter라 명명하며, 따라서 고분자 중합 이후 광촉매 정제 과정이 불필요하므로 산업적으로도 강점을 가질 수 있다. 이전까지는 photoiniferter 중합에 자외선 영역의 빛을 사용하였으나,^[6, 82] 2015년 Qiao 교수팀^[83]을 시작으로 Johnson 교수팀,^[84] Boyer 교수팀,^[85-86] Sumerlin 교수팀^[87-88] 등 여러 연구팀들이 낮은 에너지의 빛인 가시광 영역의 빛만을 사용한 photoiniferter 중합에 대한 연구를 활발히 진행하고 있으며, 최근 Sumerlin 교수팀에서는 photoiniferter 중합을 통해 수백 만에 달하는 분자량을 갖는 고분자까지 중합이 가능함을 보고하였다.^[88] 이렇게 단순한 중합 방법으로도 잘 제어된 고분자를 얻을 수 있으나, 기존의 음이온 중합(anionic polymerization)이나 잘 설계된 CRP에 상응하는 수준으로 잘 제어된 photoiniferter 중합은 아직까지 보고된 바 없다.

PET-RAFT 중합과 마찬가지로 photoiniferter 중합의 메커니즘에 대해서도 아직 명확히 밝혀진 바가 없다. 중합 과정에서 deactivation by spontaneous coupling 방법과 deactivation by degenerative transfer 방법이 동시에 작용한다는 것으로 알려졌지만, 이들이 고분자 중합 반응의 제어에 어떠한 영향을 미치는지는 불명확하다. CTA가 갖는 $n\pi^*$ 흡수대(absorption band)가 가시광 영역의 빛을 흡수할 수 있어,^[83] 가시광을 이용한 photoiniferter 중합이 가능하다는 것이 알려졌으나, 흡수 이후에 진행되



[그림 7] Boyer 교수팀이 보인 PET-RAFT 중합을 활용한 3D 프린팅 [91]

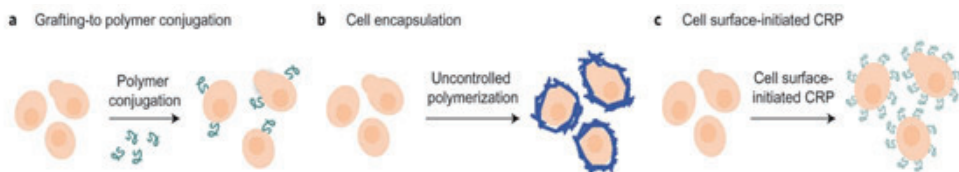
는 TCT 기반 iniferter의 광분해과정을 비롯하여, 이에 수반되는 photoiniferter 중합의 정확한 반응 경로에 대해서는 거의 밝혀진 바 없다. Photoiniferter 중합의 메커니즘을 밝히는 것은 새로운 iniferter 물질 개발을 통하여 photoiniferter 중합의 응용 범위를 폭발적으로 확장할 수 있으므로, 이 분야 발전의 큰 열쇠이다.

3-3. PET-RAFT 중합과 photoiniferter 중합의 특징

빛을 사용한다는 점에 있어서, 기존의 RAFT 중합에 비해 PET-RAFT 중합과 photoiniferter 중합은 여러 장점을 가진다. 먼저, 반응 메커니즘에서 확인할 수 있듯, 빛의 조사가 없다면 반응이 진행되지 않는다(그림 5). 이는 라디칼 개시제에 의해 반응이 진행되는 기존 RAFT 중

합에서는 나타나지 않는 특징으로, 고분자를 원하는 정도로만 중합하는 시간적 제어(temporal control)를 가능하게 한다. 빛을 조사하는 부분에서만 중합이 제어되는 공간적 제어(spatial control) 또한 장점인데, Boyer 교수팀은 이를 3D 프린팅에 적용하여 고분자를 원하는 형태로 중합하는 것이 가능하다는 것을 최근 보여주었다(그림 7). [89-91]

또한, 가시광 영역의 빛을 이용함으로써, 불필요한 부가반응의 효과적인 억제에 기대할 수 있다. 자외선 영역의 빛과 같은 강한 에너지의 빛을 광원으로 사용할 경우, 높은 빛 에너지에서 기인한 CTA, 촉매, 단량체, 중간체의 분해 등으로 인한 부가반응이 발생할 수 있는데, 가시광 영역의 빛은 에너지가 낮아 그러한 부가반응이 충분히 억제될 수 있다. [92-93] 특히 pho-



[그림 8] Hawker 교수팀이 보인 PET-RAFT 중합을 활용한 살아있는 세포 표면의 기능화 [95]

toiniferter 중합은 중합에 CTA와 단량체만을 사용해 부반응이 일어날 우려가 적고, 촉매 제거 과정 없이 중합된 고분자를 바로 이용할 수 있으므로 경제적이다.

PET-RAFT, photoiniferter 중합은 특정 조건에서 산소에 대해 저항성을 갖기도 했는데, 이는 살아있는 세포에서의 반응처럼 산소 제거가 불가능한 의생명과학 분야로의 확장 가능성을 시사한다. 비록 중합되는 고분자의 제어 정도가 떨어지고 산소의 양이 매우 적었지만, Boyer 교수팀^[63]에서 발표한 $fac-[Ir(ppy)_3]$ 을 광촉매로 사용한 PET-RAFT 중합이 처음으로 PET-RAFT 중합의 산소 저항성을 증명하였다. 이를 시작으로, Boyer 교수팀과 Miyake 교수팀,^[75-76] 그리고 권민상 교수팀^[80] 등에서 순수 유기물 광촉매를 사용한 PET-RAFT 중합에서 산소 저항성을 확인하였으며 Qiao 교수팀^[94]은 광촉매 없이 triethanolamine(TEOA)과 같은 적절한 환원제를 추가하여 photoiniferter 중합에서도 산소 저항성을 확인하였다. 심지어 Johnson 교수팀^[84]은 아무것도 추가하지 않은 photoiniferter 중합에서도 산소 저항성을 확인할 수 있다고 보고하였다. Hawker 교수팀은 앞서 설명한 PET-RAFT 중합의 특성, 시공간적 제어(spatiotemporal control)와 산소 저항성을 모두 적용하여 살아있는 세포의 표면을 기능화(functionalization)하였다(그림 8).^[95] PET-RAFT와 photoiniferter 중합이 산소 저항성을 갖게 되는 정확한 메커니즘 또한 명확히 규명된 바 없으나, 여러 가능성이 제시되고 있다.^[96] 위에서 서술한 내용들에 대해 보다 자세한

내용은 Boyer 교수팀에서 작성한 리뷰 논문들^[57, 96-97]과 Johnson 교수팀에서 2016년에 작성한 리뷰 논문에서 확인할 수 있다.^[98]

4. 요약 및 전망

Photo-CRP는 지속 가능하며 친환경적 에너지원인 빛을 사용하여 고분자의 분자량, 분자량 분포, 조성 및 세부구조 등을 정밀하게 제어할 수 있는 중합론이다. 지난 1982년 Otsu 교수팀에 의해 처음으로 제안된 이후, 현재까지 많은 발전을 이룩했다. Photo-ATRP, O-ATRP, PET-RAFT 중합, photoiniferter 중합 등이 제안되었으며 이들을 활용한 응용분야까지 연구되었다. 이에 따라 산업적으로 활용될 가치가 확인되었다고 할 수 있으나 불분명한 메커니즘, 사슬이동제 높은 가격에 따른 높은 생산비용 발생 등이 해결해야 하는 과제로 남았다. 또한, 외부 에너지원으로 널리 사용되고 있는 열에 비해 빛은 에너지의 균일한 전달이 힘들어 대량 생산에는 적합하지 않을 수 있는데, 이를 해결하기 위한 flow chemistry의 연구가 현재 활발히 진행되고 있다. 이렇듯, 수많은 연구팀이 보내는 뜨거운 관심과 투자로써 더 혁신적이며 미래지향적인 photo-CRP를 기대해본다.

참고 문헌

- [1] Industry ARC., *Polymers market – Forecast (2020-2025)*. (2019).
- [2] W. A. Braunecker and K. Matyjaszewski, *Prog. Polym. Sci.* **32**, 93–146 (2007).

- [3] S. D. Silab and K. Matyjaszewski, *molecules*, **25**, 1648 (2020).
- [4] K. Matyjaszewski, *Advanced materials*, **30**, 1706441 (2018).
- [5] J. Spanswick and B. Pike, *ACS Symp. Ser.*, **1023**, 385–396 (2009).
- [6] T. Otsu, M. Yoshida, T. Tazaki, *Makromol. Chem. Rapid Commun.* **3**, 133–140 (1982).
- [7] X. Pan, M. Fantin, F. Yuana and K. Matyjaszewski, *Chem. Soc. Rev.* **47**, 5457 (2018).
- [8] S. D. Silab, S. Doran, and Y. Yagci, *Chem. Rev.* **116**, 10212–10275 (2016).
- [9] S. H. Qin, D. Q. Qin, and K. Y. Qiu, *New J. Chem.* **25**, 893–895 (2001).
- [10] I. Erel, I. Cianga, E. Serhatli, and Y. Yagci, *Eur. Polym. J.* **38**, 1409–1415, (2002).
- [11] M. A. Tasdelen, M. Uygun, and Y. Yagci, *Macromol. Chem. Phys.* **212**, 2036–2042 (2011).
- [12] M. A. Tasdelen, M. Ciftci, and Y. Yagci, *Macromol. Chem. Phys.* **213**, 1391–1396 (2012).
- [13] M. Ciftci, M. A. Tasdelen, W. Li, K. Matyjaszewski, and Y. Yagci, *Macromolecules* **46**, 9537–9543 (2013).
- [14] Q. L. Zhao *et al.*, *J. Polym. Res.*, **21**, 444 (2014).
- [15] E. X. Liang *et al.*, *J. Macromol. Sci. Part A Pure Appl. Chem.*, **53**, 210–214 (2016).
- [16] O. S. Taskin, G. Yilmaz, M. A. Tasdelen, and Y. Yagci, *Polym. Int.* **63**, 02–907 (2014).
- [17] G. X. Wang, J. Y. He, L. C. Liu, H. Wu, and M. Zhong, *J. Polym. Res.* **23**, 101 (2016).
- [18] C. Kütahya, C. Schmitz, V. Strehmel, Y. Yagci, and B. Strehmel, *Angew. Chemie - Int. Ed.* **57**, 7898–7902 (2018).
- [19] S. Dadashi-Silab, M. Atilla Tasdelen, A. Mohamed Asiri, S. Bahadar Khan, and Y. Yagci, *Macromol. Rapid Commun.* **35**, 454–459 (2014).
- [20] S. Dadashi-Silab, M. A. Tasdelen, B. Kiskan, X. Wang, M. Antonietti, and Y. Yagci, *Macromol. Chem. Phys.* **215**, 675–681 (2014).
- [21] B. Li, B. Yu, and F. Zhou, *Macromol. Rapid Commun.* **35**, 1287–1292 (2014).
- [22] C. Kütahya *et al.*, *Angew. Chemie - Int. Ed.* **59**, 3166–3171 (2020).
- [23] M. Lu, *Iran. Polym. J.*, **28**, 167–172 (2019).
- [24] X. Pan, M. A. Tasdelen, J. Laun, T. Junkers, Y. Yagci, and K. Matyjaszewski, *Prog. Polym. Sci.* **62**, 73–125 (2016).
- [25] Z. Guan and B. Smart, *Macromolecules* **33**, 6904–6906 (2000).
- [26] A. Anastasaki *et al.*, *J. Am. Chem. Soc.* **136**, 1141–1149 (2014).
- [27] D. Konkolewicz, K. Schröder, J. Buback, S. Bernhard, and K. Matyjaszewski, *ACS Macro Lett.* **1**, 1219–1223 (2012).
- [28] X. Pan, N. Malhotra, A. Simakova, Z. Wang, D. Konkolewicz, and K. Matyjaszewski, *J. Am. Chem. Soc.* **137**, 15430–15433 (2015).
- [29] M. A. Tasdelen, M. Uygun, and Y. Yagci,

- Macromol. Chem. Phys.* **211**, 2271–2275 (2010).
- [30] M. A. Tasdelen, M. Uygun, and Y. Yagci, *Macromol. Rapid Commun.* **32**, 58–62 (2011).
- [31] J. Mosnáček and M. Ilčíková, *Macromolecules* **45**, 5859–5865 (2012).
- [32] A. Anastasaki *et al.*, *Macromolecules* **47**, 3852–3859 (2014).
- [33] G. R. Jones, R. Whitfield, A. Anastasaki, and D. M. Haddleton, *J. Am. Chem. Soc.* **138**, 7346–7352 (2016).
- [34] Q. Yang, F. Dumur, F. Morlet-Savary, J. Poly, and J. Lalevée, *Macromolecules* **48**, 1972–1980 (2015).
- [35] R. Whitfield, K. Parkatzidis, M. Rolland, N. P. Truong, and A. Anastasaki, *Angew. Chemie - Int. Ed.* **58**, 13323–13328 (2019).
- [36] Y. M. Chuang, A. Ethirajan, and T. Junkers, *ACS Macro Lett.* **3**, 732–737 (2014).
- [37] J. Laun *et al.*, *Macromol. Rapid Commun.* **36**, 1681–1686 (2015).
- [38] J. Mosnáček, A. Eckstein-Andicsová, and K. Borská, *Polym. Chem.* **6**, 2523–2530 (2015).
- [39] Y. M. Chuang, B. Wenn, S. Gielen, A. Ethirajan, and T. Junkers, *Polym. Chem.* **6**, 6488–6497 (2015).
- [40] X. Pan, N. Malhotra, J. Zhang, and K. Matyjaszewski, *Macromolecules* **48**, 6948–6954 (2015).
- [41] S. Dadashi-Silab, X. Pan, and K. Matyjaszewski, *Macromolecules* **50**, 7967–7977 (2017).
- [42] F. Nzulu *et al.*, *Polym. Chem.* **6**, 4605–4611 (2015).
- [43] B. P. Fors and C. J. Hawker, *Angew. Chemie - Int. Ed.* **51**, 8850–8853 (2012).
- [44] S. Telitel *et al.*, *Polym. Chem.* **6**, 613–624 (2015).
- [45] M. Ding, X. Jiang, L. Zhang, Z. Cheng, and X. Zhu, *Macromol. Rapid Commun.* **36**, 1702–1721 (2015).
- [46] V. K. Singh *et al.*, *Nat. Catal.* **1**, 794–804 (2018).
- [47] N. J. Treat *et al.*, *J. Am. Chem. Soc.* **136**, 16096–16101 (2014).
- [48] C. Kutahya, F. S. Aykac, G. Yilmaz, and Y. Yagci, *Polym. Chem.* **7**, 6094–6098 (2016).
- [49] A. Allushi, S. Jockusch, G. Yilmaz, and Y. Yagci, *Macromolecules* **49**, 7785–7792 (2016).
- [50] J. C. Theriot, C. H. Lim, H. Yang, M. D. Ryan, C. B. Musgrave, and G. M. Miyake, *Science* **352**, 1082–1086 (2016).
- [51] C. H. Lim *et al.*, *J. Am. Chem. Soc.* **139**, 348–355 (2017).
- [52] B. G. McCarthy, R. M. Pearson, C. H. Lim, S. M. Sartor, N. H. Damrauer, and G. M. Miyake, *J. Am. Chem. Soc.* **140**, 5088–5101 (2018).
- [53] B. L. Buss, C. H. Lim, and G. M. Miyake, *Angew. Chemie - Int. Ed.* **59**, 3209–3217 (2020).
- [54] Corbin, D. A., Lim, C. H., & Miyake, G. M.

- Aldrichimica acta* **52**, 7 (2019).
- [55] G. Moad, *Macromol. Chem. Phys.* **215**, 9-26 (2014).
- [56] C. Barner-Kowollik, S. Perrier, *J. Polym. Sci. Part A: Polym. Chem.* **46**, 5715-5723 (2008).
- [57] J. Phommalsack-Lovan, Y. Chu, C. Boyer, J. Xu, *Chem. Commun.* **54**, 6591-6606 (2018).
- [58] J. Chiefari, Y. K. Chong, F. Ercole, J. Krstina, J. Jeffery, T. P. T. Le, R. T. A. Mayadunne, G. F. Meijs, C. L. Moad, G. Moad, E. Rizzardo, S. H. Thang, *Macromolecules* **31**, 5559-5562 (1998).
- [59] S. Perrier, *Macromolecules* **50**, 7433-7447 (2017).
- [60] G. Moad, E. Rizzardo, S. H. Thang, *Aust. J. Chem.* **59**, 669-692 (2006).
- [61] G. Moad, E. Rizzardo, S. H. Thang, *Aust. J. Chem.* **62**, 1402-1472 (2009).
- [62] G. Moad, E. Rizzardo, S. H. Thang, *Aust. J. Chem.* **65**, 985-1076 (2012).
- [63] J. T. Xu, K. Jung, A. Atme, S. Shanmugam, C. Boyer, *J. Am. Chem. Soc.* **136**, 5508-5519 (2014).
- [64] J. Xu, K. Jung, C. Boyer, *Macromolecules* **47**, 4217-4229 (2014).
- [65] J. Yeow, J. Xu, C. Boyer, *ACS Macro Lett.* **4**, 984-990 (2015).
- [66] S. Shanmugam, J. Xu, C. Boyer, *J. Am. Chem. Soc.* **137**, 9174-9185 (2015).
- [67] N. Corrigan, D. Rosli, J. W. J. Jones, J. Xu, C. Boyer, *Macromolecules* **49**, 6779-6789 (2016).
- [68] A. Bagheri, J. Yeow, H. Arandian, J. Xu, C. Boyer, M. Lim, *Macromol. Rapid Commun.* **37**, 905-910 (2016).
- [69] S. Shanmugam, J. Xu, C. Boyer, *Chem. Sci.* **6**, 1341-1349 (2015).
- [70] S. Shanmugam, J. Xu, C. Boyer, *Angew. Chem., Int. Ed.* **55**, 1036-1040 (2016).
- [71] K. Hakobyan, T. Gegenhuber, C. S. P. McErlean, M. Müllner, *Angew. Chem. Int. Ed.* **58**, 1828-1832 (2019).
- [72] K. Satoh, Z. Sun, M. Uchiyama, M. Kamigaito, J. Xu, C. Boyer, *Polymer Journal* **52**, 65-73 (2020).
- [73] K. Matyjaszewski, N. V. Tsarevsky, *J. Am. Chem. Soc.* **136**, 6513-6533 (2014).
- [74] J. Xu, S. Shanmugam, H. T. Duong, C. Boyer, *Polym. Chem.* **6**, 5615-5624 (2015).
- [75] J. Xu, S. Shanmugam, C. Fu, K.-F. Aguey-Zinsou, C. Boyer, *J. Am. Chem. Soc.* **138**, 3094-3106 (2016).
- [76] J. C. Theriot, G. M. Miyake, C. A. Boyer, *ACS Macro Lett.* **7**, 662-666 (2018).
- [77] C. Wu, N. Corrigan, C.-H. Lim, K. Jung, J. Zhu, G. Miyake, J. Xu, C. Boyer, *Macromolecules* **52**, 236-248 (2019).
- [78] M. Chen, M. J. MacLeod, J. A. Johnson, *ACS Macro Lett.* **4**, 566-569 (2015).
- [79] H. Gong, Y. Zhao, X. Shen, J. Lin, M. Chen, *Angew. Chem., Int. Ed.* **57**, 333-337 (2018).
- [80] Y. Song, Y. Kim, Y. Noh, V. K. Singh, S. K. Behera, A. Abudulimu, K. Chung, R. Wannemacher, J. Gierschner, L. Lürer and M.

- S. Kwon, *Macromolecules*, **52**, 5538-5545 (2019).
- [81] J. Jiang, G. Ye, Z. Wang, Y. Lu, J. Chen, K. Matyjaszewski, *Angew. Chem., Int. Ed.* **57**, 12037-12042 (2018).
- [82] M. Y. Khan, M.S. Cho, Y.J. Kwark, *Macromolecules* **47**, 1929-1934 (2014).
- [83] T. G. McKenzie, Q. Fu, E. H. H. Wong, D. E. Dunstan, G. G. Qiao, *Macromolecules* **48**, 3864-3872 (2015).
- [84] J. R. Lamb, K. P. Qin, J. A. Johnson, *Polym. Chem.* **10**, 1585-1590 (2019).
- [85] J. Yeow, O. R. Sugita, C. Boyer, *ACS Macro Lett.* **5**, 558-564 (2016).
- [86] S. Shanmugam, J. Cuthbert, T. Kowalewski, C. Boyer, K. Matyjaszewski, *Macromolecules* **51**, 7776-7784 (2018).
- [87] R. N. Carmean, T. E. Becker, M. B. Sims, B. S. Sumerlin, *Chem* **2**, 93-101 (2017).
- [88] R. N. Carmean, M. B. Sims, C. A. Figg, P. J. Hurst, J. P. Patterson, B. S. Sumerlin, *ACS Macro Lett.* **9**, 613-618 (2020).
- [89] A. Bagheri, C. W. A. Bainbridge, K. E. Engel, G. G. Qiao, J. Xu, C. Boyer, J. Jin, *ACS Appl. Polym. Mater.* **2**, 782-790 (2020).
- [90] A. Bagheri, K. E. Engel, C. W. A. Bainbridge, J. Xu, C. Boyer, J. Jin, *Polym. Chem.* **11**, 641-647 (2020).
- [91] Z. Zhang, N. Corrigan, A. Bagheri, J. Jin, C. Boyer, *Angew. Chem. Int. Ed.* **58**, 17954-17963 (2019).
- [92] R. C. McAtee, E. J. McClain, C. R. J. Stephenson, *Trends Chem.* **1**, 111-125 (2019).
- [93] D. M. Schultz, T. P. Yoon, *Science* **343**, 1239176 (2014).
- [94] Q. Fu, K. Xie, T. G. McKenzie, G. G. Qiao, *Polym. Chem.* **8**, 1519-1526 (2017).
- [95] J. Niu, D. J. Lunn, A. Pusuluri, J. I. Yoo, M. A. O'Malley, S. Mitragotri, H. T. Soh, C. J. Hawker, *Nat. Chem.* **9**, 537-545 (2017).
- [96] N. Corrigan, J. Yeow, P. Judzewitsch, J. Xu, C. Boyer, *Angew. Chem. Int. Ed.* **58**, 5170-5189 (2019).
- [97] J. Yeow, R. Chapman, A. J. Gormley, C. Boyer, *Chem. Soc. Rev.* **47**, 4357-4387 (2018).
- [98] M. Chen, M. Zhong, J. A. Johnson, *Chem. Rev.* **116**, 10167-10211 (2016).

•• 권 용 환 ••



2018년: 울산과학기술원 화학과 학사
2018년~현재: 울산과학기술원 신소재공학부 석/박사 통합과정
관심분야: 유기/고분자 합성, 분자 광화학, 계산 화학

•• 김 영 무 ••



2017년: 울산과학기술원 신소재공학부 학사
2017년~현재: 울산과학기술원 신소재공학부 석/박사 통합과정
관심분야: 유기/고분자 합성, 분자 광화학, 고분자 분석 학

••노 연 진••



2019년: 울산과학기술원 신소재공학부 학사
2019년~현재: 울산과학기술원 신소재공학부 석사과정

관심분야: 유기/고분자 합성, 분자 광화학

••권 민 상*••



2006년: 서울대학교 재료과/화학과 학사
2011년: 서울대학교 화학과 박사
2011~2013년: 서울대학교 박사후 연구원
2013~2016년: 미시간대학교 박사후 연구원
2016~2020년: 울산과학기술원 신소재공학부 조교수
2020년~현재: 서울대학교 재료공학부 조교수

관심분야: 유기/고분자 합성, 광화학, 촉매화학

••이 윤 경••



2017년: 울산과학기술원 나노생명화학공학부 학사
2019년: 울산과학기술원 화학과 석사
2019년~현재: 울산과학기술원 신소재공학부 박사과정

관심분야: 유기/고분자 합성, 생체재료 공학

단분자 접합에서의 열전성질 연구

장 성 연 (울산과학기술원, 에너지 및 화학공학부)

단분자접합의 전하전달

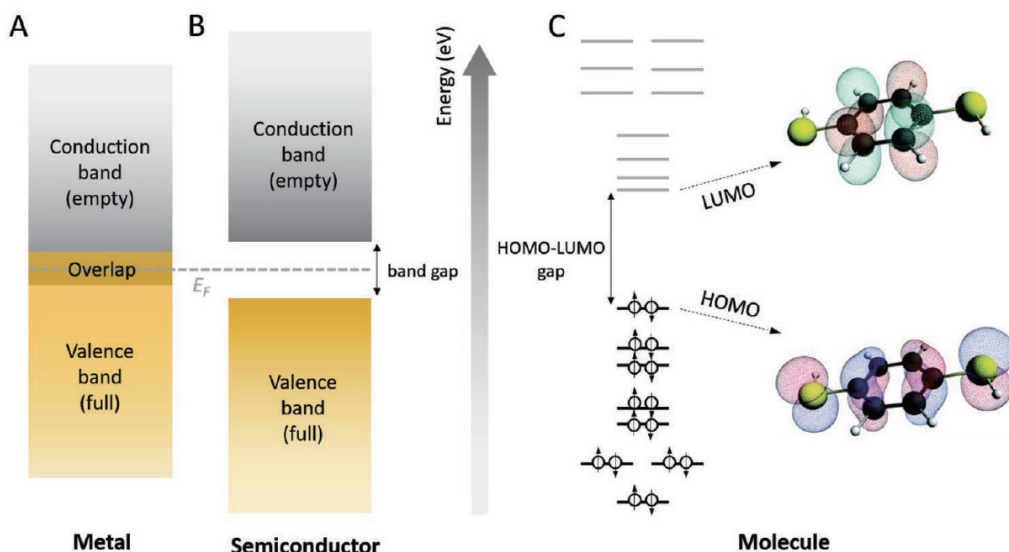
무어의 법칙(Moore's law)을 넘어서서 하나의 개별분자 또는 나노스케일의 분자조립을 전자소자의 최소단위로 사용하고자 하는 분자전자(molecular electronics, ME)의 아이디어는 지속해서 요구되는 전자회로의 집적화에 매우 중요하고 가능성 있는 개념이다. 유기분자를 사용할 경우, 1-3 nm 정도의 사이즈를 가지는 전자회로를 구성할 수 있고, 이는 현재 실리콘 기반의 전자회로가 달성할 수 없는 크기의 전자소자를 구성할 수 있을 것으로 기대된다. 나아가 유기분자의 구조적 다양성과 조립할 수 있는 특성은 기존 반도체 소재들이 달성할 수 없는 다양한 물리적 현상과 기능성을 발현할 기회를 제공한다.

지난 20여 년 동안 분자전자에 대한 많은 실험적 이론적 연구가 진행됐다. 특히 분자와 원자 레벨에서의 양자전달을 측정하기 위해 단분자를 두 개의 금속 전극 사이에 연결하여 분자 접합(molecular junction, MJ)을 형성하여 측정하는 방법이 제시되었으며, MJ에서 발생하는 현상들의 연구는 다양하고 흥미로운 전하전달 현상들의 근본적인 매커니즘을 이해하는데 많은 기여를 하였다.

최근 전자소자적 관점에서의 활용도를 넘어서서, MJ의 열전 및 열전달의 관점에서 관심도가 증가함으로써 실험적, 계산적 방법을 통해 이에 관한 연구가 가능하게 되었다. 일반적인 벌크소재들의 열전현상과 마찬가지로 MJ의 열구배에 따라 연결된 전극에서 전압이 형성되었다. 뿐만 아니라, MJ를 통해 에너지를 전달하는 전하 캐리어들에 의해 접합면의 특정 위치에서 부분적 가열과 냉각을 할 수 있다. 무엇보다도 MJ에서의 에너지 변환과 열전달을 측정하는 것은 원자와 분자레벨에서의 전달 현상에 관한 질문들을 대답하기 위해 가장 중요한 이슈이다. 이러한 연구들은 나노스케일에서의 다양한 응용분야들(local refrigeration, thermal rectifier/transistors, thermal logic gates/memory)에 활용이 가능하다.

분자접합에서의 양자전달

벌크소재들의 연속적인 에너지준위 분포와 달리, 분자의 경우 에너지준위가 개별적으로 존재하여 에너지가 양자화되어 있다 (그림 1). 전자들은 낮은 에너지준위로부터 HOMO에 이르기까지 분자 내 에너지준위들을 채우고 있으며, 유기분자에서 HOMO와 LUMO 레벨은



[그림 1] (a) 금속, (b) 반도체, (c) 분자의 에너지 레벨 모식도 (ref. 1).

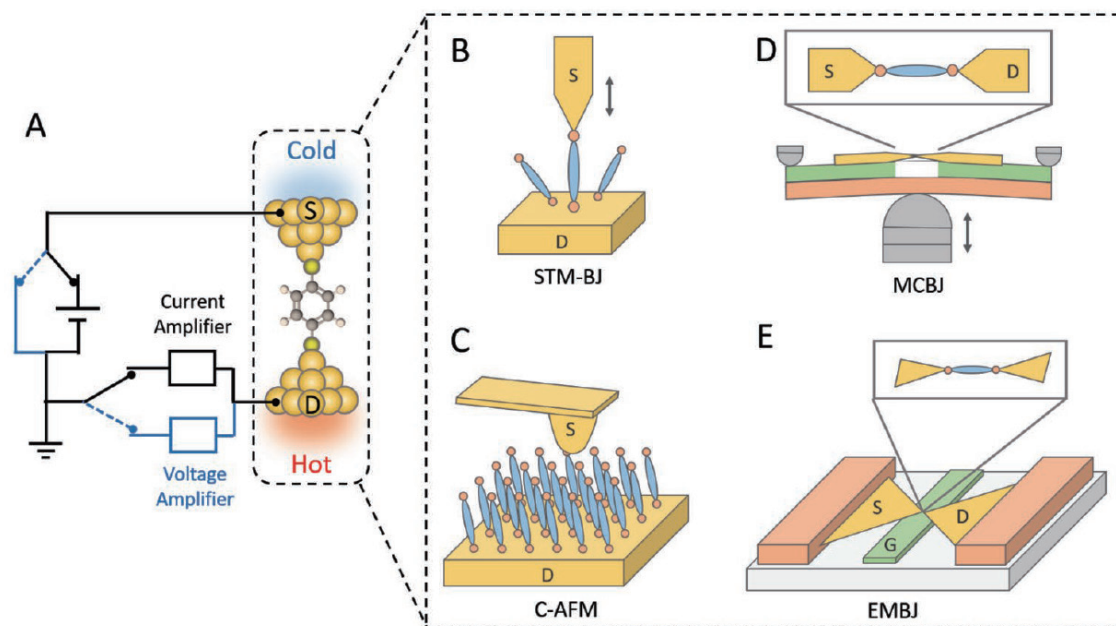
무기반도체 소재의 valence 밴드와 conduction 밴드의 끝과 같다고 할 수 있다. 이러한 frontier molecular orbitals (FMO) 즉 HOMO와 LUMO에 의해 전하전달 현상이 지배된다. 따라서 분자와 금속전극접합에서의 전자전달은 HOMO 또는 LUMO가 금속전극의 Fermi 레벨과 얼마나 가까우냐에 의해 결정된다. 분자가 금속에 연결되었을 때 이들의 양자화된 에너지준위가 금속전극의 연속적인 에너지상태와 상호작용을 하여 MJ의 전달현상을 결정하게 된다.

분자접합에서의 열전특성

열전소재는 열을 전기로 바꿀 수 있는 특성이 있어서 에너지 변환 또는 냉각소자로의 응용이 가능하다. 열전소재의 성능은 열전성능지수 (figure-of-merit, ZT)에 의해 결정되며 $ZT = \sigma$

$\cdot S^2 \cdot T/k$ (σ : 전기전도도, S : 제벡상수, T : 온도, k : 열전도도)로 정의된다. 분자에서의 열전성질은 벌크소재와 다르며 많은 재미있는 현상들이 발생한다. 2003년도에 Paulsson 연구팀이 유기분자의 MJ의 열전현상에 대한 이론적 연구결과를 발표하였으나 [1] 유기단분자의 열전현상을 실험적으로 증명하기는 매우 어려웠다. 그 후 많은 연구자가 이를 실험적으로 증명하기 위해 많은 시간과 노력을 기울였다.

분자접합의 열전특성을 실험적으로 측정하기 위해서는 접합의 양말단에 온도차에 의해 발생하는 열전압(thermoelectric voltage)을 정확히 측정하는 것이 매우 중요하다. 이를 측정하는 방법으로는 크게 3가지 방법이 있다; 1) open-circuit 상태에서 발생하는 thermoelectric voltage를 직접 측정하는 방법, 2) zero bias 조건에서 접합에서의 전류를 측정하여 thermoelectric voltage로 변환하는 방법,

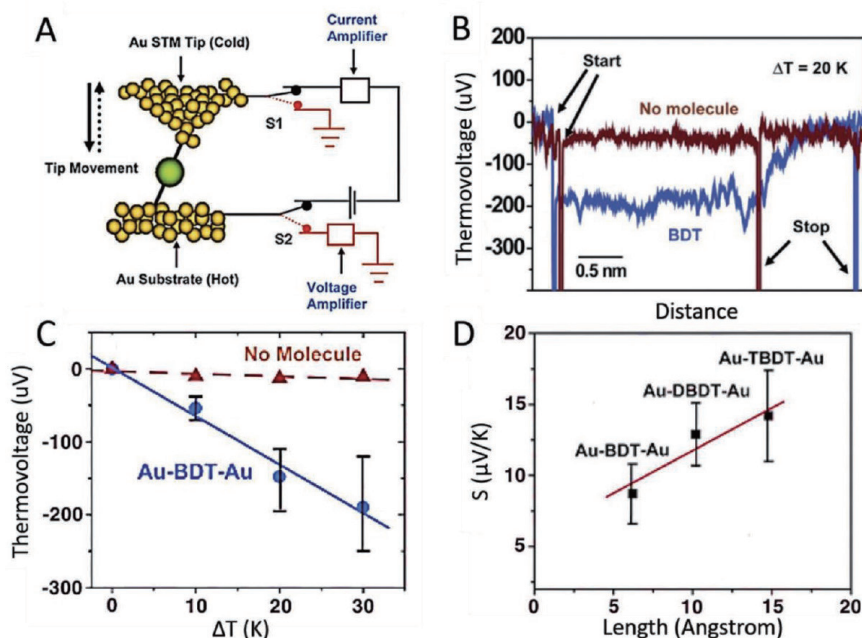


[그림 2] 분자접합의 열전특성을 측정하기 위한 실험적 방법: (a) 열전특성 측정을 위한 회로 구성, (b) STM-BJ, (c) C-AFM, (d) MCBJ, (e) EMBJ 방법.

3) I-V 거동을 측정하여 전류를 0으로 만드는 데 필요한 전압을 분석하는 방법이다. 또한, 분자들이 두 전극사이에 연결된 MJ를 형성하는 방법으로는 1) scanning tunneling microscopy based break junction (STM-BJ) 기술 [2-3], 2) mechanically controllable break junction (MCBJ) 기술 [4], 3) electromigrated break junction (EMBJ) 방법 [5] 이 있다 (그림 2). 또한, 분자 접합에서의 thermopower (또는 thermovoltage)는 접합면에서의 분자의 숫자에 관여하지 않으므로, 분자 조립층을 형성하고 conductive atomic force microscopy (C-AFM)을 이용하여 측정하는 방법 [6-7]도 가능하다 (그림 2c). 각 측정 방법별로 분자접합을 구현하는 방법이

달라지는데, STM-BJ, MCBJ, C-AFM 방법의 경우 dynamic formation 기법을 활용하고 EMBJ의 경우에는 static formation 기법을 활용한다.

최초의 분자접합에서 열전성질의 측정은 2007년 Peddy 와 Jang 연구팀이 이루어졌다. 해당 연구팀은 STM-BJ 기술을 사용하였으며 분자접합면의 금으로 된 기판에 열을 가하고 상온에 있는 STM tip 과의 온도 차이에 의해 온도구배를 형성했으며 thermovoltage는 STM의 bias를 0으로 할 때 발생하는 전압을 측정하였다 (그림 3). 전류모드에서는 STM tip이 특정 전류값에 도달할 때까지 (즉, 분자와 접합을 이룰 때 까지) 기판을 향해 다가가며, 분자와 접합을 이루어 정해진 전류값에 도달할 경우,



[그림 3] 최초의 분자접합 열전특성 측정 셋업 및 측정결과; (a) 열전특성 측정을 위한 STM-BJ 방법의 도식화, (b) 측정된 thermovoltage 의 결과, (c) thermovoltage vs. 온도차의 결과, (d) 여러 유기분자의 S값의 플롯 (ref. 2).

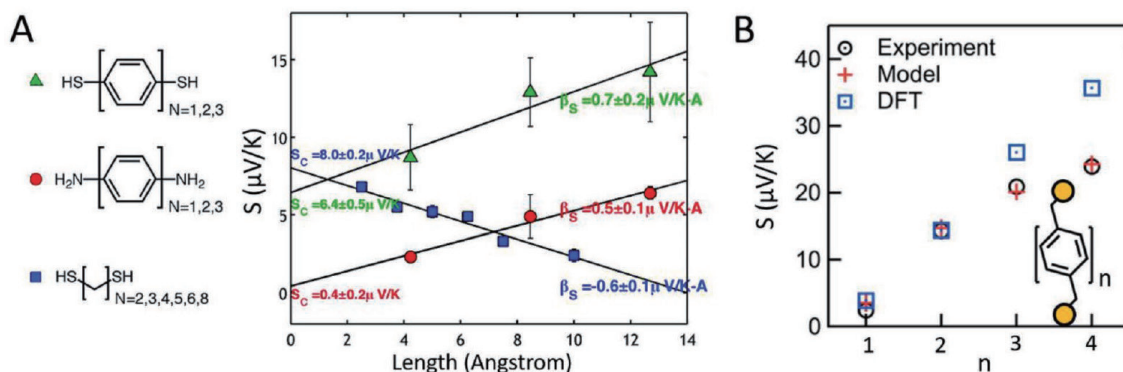
tip이 withdrawing을 시작하고 외부전압은 꺼지며 전압측정 모드로 전환하게 된다. 이때 가해진 온도 차이와 얻어진 전압값을 토대로 제벡상수 (S)를 얻을 수 있다 (그림 3). 이 연구의 결과 Au 전극과 연결된 1,4-benzenedithiol (BDT), dibenzenedithiol (DBDT), tribenzenedithiol (TBDT) 분자의 S 값이 $8.7 (\pm 2.1)$, $12.9 (\pm 2.2)$, $14.2 (\pm 3.2) \mu\text{V K}^{-1}$ 임을 밝혔다.

제벡상수를 측정하는 방법은 이후 좀 더 다양해졌는데, 2012년 Widawsky 그룹에서 [8] STM-BJ 방법을 사용하여 0 bias에서 thermocurrent를 측정하고 동일 접합에서 측정한 저항값과 곱하여 제벡상수 값을 얻었다. 이 방법은 STM-BJ에서 전류모드와 전압모드를 서로

교차로 유지할 필요가 없고 한 번의 측정으로 S 와 σ 값을 동시에 얻을 수 있는 장점이 있다.

분자구조가 열전특성에 미치는 영향

분자접합의 열전특성에 대한 측정이 가능해진 이후, 분자의 구조에 따른 열전특성에 미치는 영향에 대한 다양한 연구가 진행되었다. Malen 그룹 등은 다양한 길이의 aromatic 분자들의 길이에 따른 MJ 제벡상수 값에 대한 영향을 연구하였다 [9]. 이 연구에서 Au-phenylenediamines-Au, Au-phenylenedithiols-Au 또는 Au-alkanedithiols-Au 접합면을 형성하고 이들의 특성을 측정하였는데 분자의 길이가



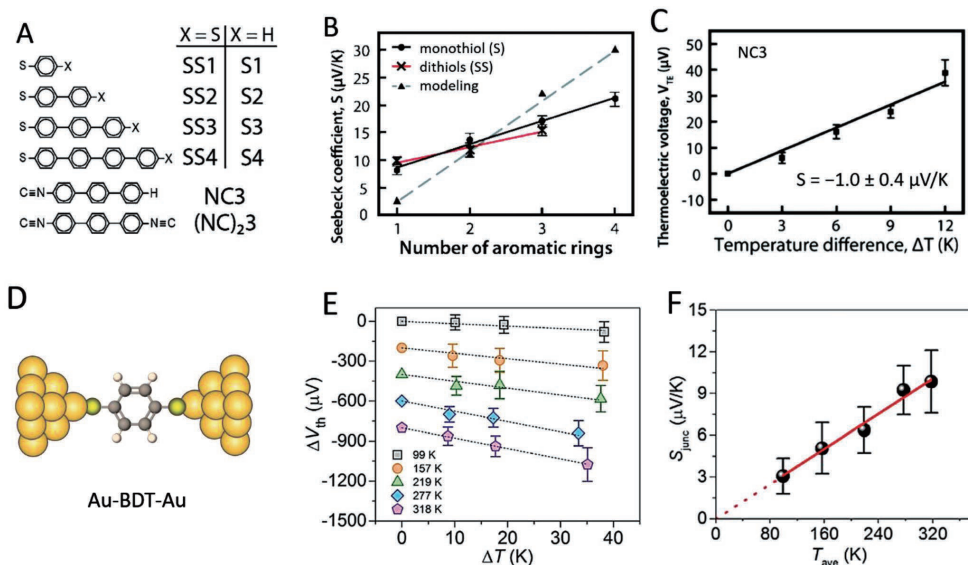
[그림 4] 분자길이에 따른 제백상수 변화에 대한 연구결과: (a) 다양한 길이를 지닌 분자의 구조 및 길이에 따른 S 값의 결과, (b) 실험적 결과와 DFT 계산 결과와의 비교 (ref. 9).

길어질수록 S 값이 증가하는 결과를 얻었다 (그림 4).

분자와 전극 접합면의 화학적 결합이 MJ의 전자전달 및 열전특성에 미치는 영향에 관한 연구도 수행되었다. 몇몇 그룹에서 oligophenylene 분자들의 MJ에서 Au 전극과 분자말단기의 화학적 결합에 따른 열전특성에 관한 연구를 수행하였다. 그 결과 Au-thiol (SH)와 Au-carbon (C) 접합에서는 양의 값의 제백상수 값을 얻었고, Au-isocyanide (NC) 접합에서는 음의 값을 얻었다. 또한, Au-C 결합이 Au-S 결합보다 더 높은 제백상수를 나타내었으며 분자의 길이가 길어질수록 더 뚜렷한 경향성을 보였다. 이와 더불어 이론적 연구에 의하면 Au가 NC, CN, NH_2 등의 말단기와 결합면을 형성하였을 때 분자에서부터 전자전달이 일어나며 이는 분자의 FMO를 낮추는 효과가 있음을 확인하였다. 이러한 연구결과는 MJ의 제백상수의 값이 HOMO-LUMO 에너지준위 및 분자의 전기음성도에 큰 영향을 받음을 알 수 있게

해준다. 최근 Reddy 그룹에서는 온도에 따른 제백상수의 변화에 관한 연구도 수행되었는데 [10], STM-BJ 방법을 이용하여 Au-benzenedithiol-Au 결합면에서의 제백상수 값을 온도의 변화에 따라 측정하였다. 그 결과 온도가 증가함에 따라 제백상수 값이 선형적으로 증가함을 알 수 있었다 (그림 5f-f). 이는 Landauer 이론의 예측 결과와 일치하였다.

유기분자들 뿐만 아니라, fullerene (C_{60})과 그 유도체에 대한 분자레벨에서의 전기적 특성 및 열전특성에 관한 연구도 수행되었다. Evangelidis 등은 STM으로 C_{60} 가 도포된 Au(111) 표면을 이미지화한 후에 하나의 C_{60} 를 STM tip에 부착시켜 표면의 C_{60} 와 dimer를 형성할 수 있었다. 제백상수의 측정결과 C_{60} dimer의 경우 $-33 \mu\text{V K}^{-1}$ 으로 한 개의 C_{60} 분자의 거의 두배의 값($-18 \mu\text{V K}^{-1}$)을 보였다 (그림 6). Dimer에서의 제백상수의 향상은 두 개의 C_{60} 분자의 상호작용에 기인한 것으로 판단된다. 또한 Tada 그룹에서는 C_{82} , Gd@C_{82} , Ce@C_{82}



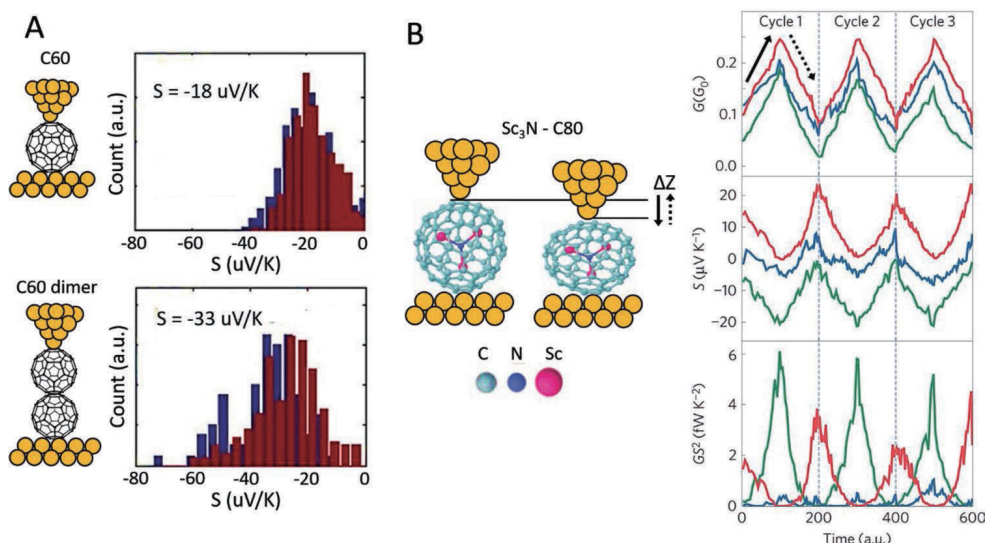
[그림 5] 분자의 길이, 분자-전극 화학적결합에 따른 열전특성의 변화 연구결과; (a) 다양한 길이와 말단기를 지닌 oligothiophene 분자, (b) thiol 말단기를 지닌 분자들의 실험적 측정결과와 계산실험에 의한 결과, (c) Au-isocyanide 그룹을 지닌 분자의 thermovoltage, (d) Au-benzenedithiol (BDT)-Au 결합의 모식도, (e) 온도변화에 따른 thermovoltage 거동의 변화, (f) BDT 분자의 온도변화에 따른 thermovoltage 거동. (a-c) ref. 7, (d-f) ref. 10.

세 종류의 fullerene 유도체들의 열전성질에 관한 연구를 수행하였는데, 세 종류 모두 제백상수가 음의 값을 보였다 (n-type transport). 그 중 Gd@C82와 Ce@C82의 경우 매우 큰 제백상수 값 ($-1.6, -30.0 \mu\text{V K}^{-1}$)을 얻었지만 C82는 이보다 작은 $-22.7 \mu\text{V K}^{-1}$ 값을 얻었다. 하지만 전기전도도는 세 종류의 fullerene 모두 거의 유사한 값을 보였다. 최근에는 Rincon-Garcia 등이 Sc3N@C80와 Au의 결합면에서 압력이 제백상수에 영향을 미친다는 실험 결과를 얻었다 [12]. STM-BJ 방법을 사용하여 한 개의 Sc3N@C80 분자에 STM tip으로 압력을 가했을 때 전기전도도가 상승하는 반면 제백상수는 양의 값에서 음의 값으로 바뀌는 현상을 관찰하였다. 이러한 양면적 열전기력 효과는

반복적으로 얻어졌다. 하지만 이러한 현상은 C60의 MJ에서는 얻어지지 않았으며 Sc3N@C80에서만 관찰되었지만 열전기력이 외력에 의해 제어될 수 있음을 보여주었다. 이러한 양면적 열전기력 효과는 결합면에서의 transmission resonance가 Fermi 준위에 매우 가까운 곳에서 일어날 때 외력에 의한 분자의 배열변화가 Fermi 준위의 위와 아래로 변화하면서 n-type과 p-type의 전하전달로 전환될 수 있음에 기인한다.

분자접합에서의 열전도

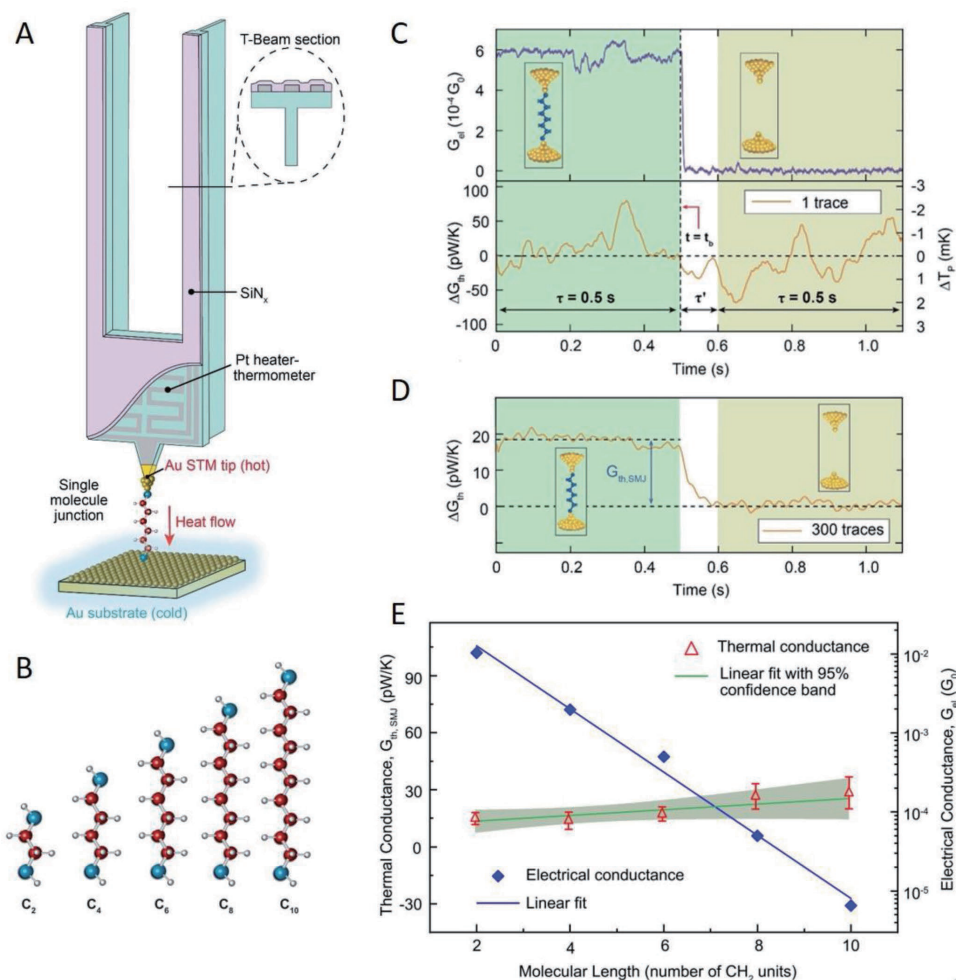
개념적으로 MJ에서의 열전도 측정은 매우 단순해 보이지만 MJ에서의 열전달은 매우 작고



[그림 6] C60 와 그 유도체의 열전특성 측정결과; (a) C60 단분자(위)와 dimer(아래)의 접합 모식도 [11], (b) Au-Sc₃N@C₈₀-Au 결합면에서 외력에 따른 전기전도도 및 제벡상수, 파워팩터 결과 (ref. 12).

주변 열에 의해 쉽게 방해받아 정확한 측정을 하기 매우 어렵다. 매우 적은 양의 열전달을 매우 정확히 정량 측정하는 기술적 한계는 분자접합에서의 열전도 현상을 규명하는 데 많은 어려움을 야기시켰고, 매우 최근에 들어서야 microcalorimetry 기술의 개발에 의해 가능해졌다. 최근 Reedy와 Jang 그룹에서 calorimetric scanning thermal (C-SThM) tip을 사용하고 time averaging 기법으로 signal-to-noise를 감소시킴으로써 유기단분자(Au-alkanedithiol-Au) 접합의 열전도 특성에 대한 정량적 측정을 세계 최초로 성공하였다 (그림 7). 이 연구결과는 단분자에서의 열전달이 금속과 같은 원자접합 보다 월등히 낮다($\approx 500 \text{ pW K}^{-1}$ vs. tens of pW K^{-1})는 것을 보여주었는데 이는 유기분자에서의 열전달이 phonon에 의존한다는 것을 실험적으로 보여준 결과다. 연구팀에 사용

한 기술은 $\approx 0.1 \text{ mK}$ 단위까지 정밀하게 온도 측정이 가능하며 이는 $\approx 2 \text{ pW K}^{-1}$ 의 해상도까지 열전도를 측정하는 것을 가능케 한다. 측정과정에서 전기적신호와 열적신호가 동시에 모니터 되므로 Au가 코팅된 C-SThM tip과 단분자 사이의 Au-alkanedithiol-Au 접합의 형성이 쉽게 식별할 수 있다. 단분자접합이 형성되었을 때 C-SThM tip은 고정되어 접합을 유지하며 전기적 신호를 관찰하게 되는데 전기전도도가 갑작스럽게 감소할 때까지 (즉 접합이 끊어질 때까지) 그 신호를 모니터링 한다. 접합이 끊어지자마자 tip 쪽의 온도가 약간 올라가게 된다. 하지만 한 번의 단분자접합 측정에서 변화를 감지할 수 있을 정도의 현저한 열전도의 변화를 C-SThM tip에서 관찰하기는 쉽지 않았다 (그림 7). 그러나 수 백번의 열전도 측정결과를 통계적으로 분석하였을 때,



[그림 7] Au-alkanedithiol-Au 단분자 접합의 열전도 측정(ref. 13); A) calorimetric scanning thermal microscopy (C-SThM) setup 모식도, (b) 해당 연구에서 사용된 alkanedithiol 분자들 (C_n , $n = 2, 4, 6, 8, 10$), (c) single-C6 분자의 열전도 측정의 실험 방법 및 결과, (d) 300개의 열전도 측정결과의 통계적 분석을 통해 향상된 signal-to-noise ratio 결과, (e) 측정된 분자의 길이에 따른 전기전도(blue square, right axis) 및 열전도 (red triangle, left axis) 특성 (ref. 13).

분자접합이 끊어졌을 때 열전도의 감소가 더욱 명확하게 관찰되었다(그림 7d). 이 실험을 통해 Au-alkanedithiol-Au 단분자접합에서 탄소의 개수가 2개에서 10개로 증가할 때 열전도도는 분자의 길이와 상관이 없음을 알 수 있었으며

(그림 7d), 측정된 열전도 값은 $10-20 \text{ pW K}^{-1}$ 였다. 이 결과는 분자의 길이와 열전도관계에 대한 이전의 이론적 연구에 배치되는 연구 결과였다. 이 연구에서 얻은 결과는 향후 분자의 열전성능지수인 ZT 값을 측정할 수 있을 것

이라는 기대를 주기에 충분한 결과였다.

결론 및 향후 연구

지난 20년 동안 MJ에 관한 연구는 많은 진보를 이루었다. 전기전도특성, 열전성능, 열전도성능 등을 실험적으로 측정하는 데 성공하였다. 하지만 실험적 관점에서는 여전히 극복해야 할 몇몇 중요한 관문들이 남아있다. 첫 번째로 단분자에서의 열전도는 더 적은 온도변화를 감지할 수 있는 능력의 향상되어야 한다. 이는 보다 많은 분자에서 일어나는 열전도현상을 보다 정확히 밝혀내는 데 꼭 필요한 기술이 될 것이다. 열전응용의 관점에서는 더 높은 파워팩터를 나타낼 수 있는 MJ의 개발이 필요하다. 이는 더욱 다양한 분자디자인을 통해 전기전도특성과 열전기력 특성이 우수하면서 열전도도가 낮은 분자의 개발을 통해서 달성될 수 있다. 더 나아가 3차원 MJ 기반 소자의 개발도 많은 관심을 기울일 때다. 향후 화학, 물리, 공학을 비롯한 다양한 학문분야에서의 단분자접합에서의 전하전달 매커니즘에 대한 추가적 연구를 통해 단분자접합체 기반의 전자소자 및 에너지소자의 발전을 가져올 수 있을 것으로 기대된다.

참고문헌

1. M. L. Perrin, E. Burzuri, H. S. J. van der Zant, Chem. Soc. Rev. 2015, 44, 902.
2. P. Reddy, S.-Y. Jang, R. A. Segalman, A. Majumdar, Science 2007, 315, 1568.
3. J. A. Malen, P. Doak, K. Baheti, T. D. Tilley, R. A. Segalman, A. Majumdar, Nano Lett. 2009, 9, 1164.
4. T. Morikawa, A. Arima, M. Tsutsui, M. Taniguchi, Nanoscale 2014, 6, 8235.
5. Y. Kim, W. Jeong, K. Kim, W. Lee, P. Reddy, Nat. Nanotechnol. 2014, 9, 881.
6. A. Tan, S. Sadat, P. Reddy, Appl. Phys. Lett. 2010, 96, 013110.
7. A. Tan, J. Balachandran, S. Sadat, V. Gavini, B. D. Dunietz, S.-Y. Jang, P. Reddy, J. Am. Chem. Soc. 2011, 133, 8838.
8. J. R. Widawsky, P. Darancet, J. B. Neaton, L. Venkataraman, Nano Lett. 2012, 12, 354.
9. J. A. Malen, P. Doak, K. Baheti, T. D. Tilley, R. A. Segalman, A. Majumdar, Nano Lett. 2009, 9, 1164.
10. Y. Kim, A. Lenert, E. Meyhofer, P. Reddy, Appl. Phys. Lett. 2016, 109, 033102.
11. C. Evangeli, K. Gillemot, E. Leary, M. T. Gonzalez, G. Rubio-Bollinger, C. J. Lambert, N. Agrait, Nano Lett. 2013, 13, 2141.
12. L. Rincon-Garcia, A. K. Ismael, C. Evangeli, I. Grace, G. Rubio-Bollinger, K. Porfyrakis, N. Agrait, C. J. Lambert, Nat. Mater. 2016, 15, 289.
13. L. Cui, S. Hur, Z. A. Akbar, J. C. Klockner, W. Jeong, F. Pauly, S.-Y. Jang, P. Reddy, E. Meyhofer, Nature 2019, 572, 628.

유기형광프로브의 개발 연구와 테라노스틱스로의 응용 (Developments of organic fluorescent probes and its application to theranostics)

이 민 희 (숙명여자대학교 화학과 부교수)

윤 신 아 (숙명여자대학교 화학과 박사과정)

서론

과거부터 현재까지 사람은 질병을 이겨내기 위해 많은 기술을 연구하고 해결법을 만들어 왔다. CT, MRI, 등 각종 진단 장비로부터 다양한 질병을 검사하고 방사선, 항암제 등으로 질병을 치료하고 있다. 그러나 지금까지 유용하게 사용하고 있는 이러한 방식들은 여전히 여러 가지 한계점을 지니고 있다. 예를 들어 검사를 진행함에 있어서 상당한 비용이 요구되고 어떠한 질병은 초기 발생 상태에서는 진단이 되지 않아 심각한 상태에서야 발견이 되는 경우도 있으며, 항암제와 같은 화학약물의 부작용은 이미 잘 알려져있는 문제점이다. 따라서 더 높은 민감도를 가지고 부작용을 줄일 수 있는 경제적인 질병 진단 방식과 치료법이 요구되어 왔다. 많은 유기화학자들은 이러한 목적을 이룰 수 있는 물질로 유기형광체의 응용을 제안해왔다. 유기형광체는 형광을 발생시킬 수 있는 유기물로 구조에 따라 형광 파장, 세기, 다양한 반응 자리(reaction site)를 조절할

수 있다. 형광프로브는 높은 민감도와 빠른 반응 시간, 기술적 간편함과 같은 장점으로 인해 기존의 질병세포 이미징 방식의 문제점을 해결할 수 있다. 또한, 반응 자리를 다양하게 만들 수 있기 때문에 질병세포에서 과발현되는 특정 물질에만 반응하는 프로브의 개발이 가능하며 원하는 부위, 시간에 맞춰 약물을 방출하는 방식을 도입할 수 있다. 따라서 본 지상초대석에서 질병세포에 과발현되는 물질을 이미징하는 유기형광프로브를 소개하고 이를 이용한 테라노스틱스 치료법에 관해 이야기하고자 한다.

본론

1. 질병세포 과발현 바이오마커(biomarker) 이미징

현재까지 많은 형광프로브들이 암과 같은 질병을 이미징하는데 있어서 다양한 기술을 접목해왔다. 그중에서도 주로 사용되는 방식이 질병 과발현 물질을 선택적으로 검출할 수 있는 인식부위(recognition site)를 형광체와 결합시켜 관찰하는 방법이다. 현재까지 질병과 관련된

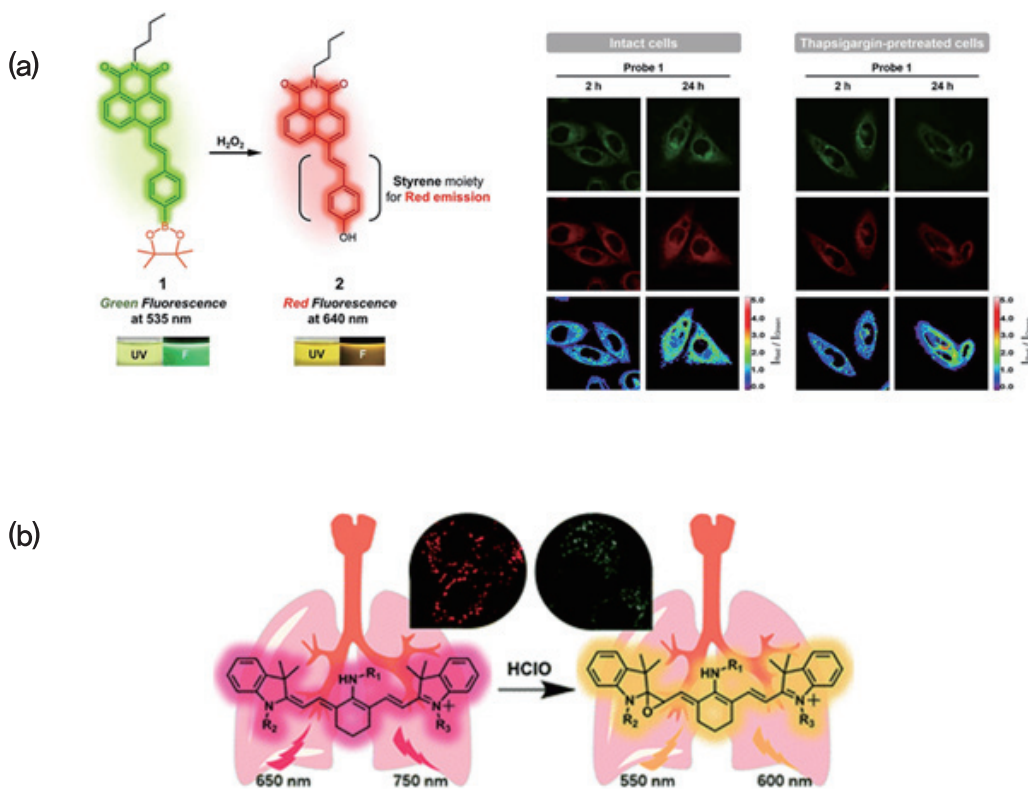
각종 과발현 물질들이 발표되었으며, 활성산소종(reactive oxygen species, ROS), 활성질소종(reactive nitrogen species, RNS), 티올(thiols), 효소(enzymes) 등으로 나눌 수 있다. 이번 챗터에서는 새롭게 개발된 바이오마커 검출 형광프로브와 이를 질병세포 모델에 적용한 논문들을 소개하도록 하겠다.

1-1. 활성산소종(Reactive oxygen species)

활성산소종(reactive oxygen species, ROS)은 화학적으로 반응성이 큰 산소 원자를 포함하는 물질을 일컫는다. 활성산소의 종류로는 과

산화수소(H_2O_2), 수산화 라디칼(hydroxy radical, OH^\cdot), 하이포염소산(hypochlorous acid, HClO), 초과산화물 라디칼(superoxide anion radical, $^\cdot\text{O}_2^-$) 등이 있다. 이러한 활성산소들은 생체 내 신호전달에 사용되지만 과발현되었을 경우 세포막의 지질이나 효소, DNA 등에 산화스트레스를 발생시켜 세포손상을 일으키며, 알츠하이머병, 당뇨병, 심혈관질환, 노화, 그리고 암을 유발하는 것으로 알려져있다.¹ 이러한 이유로 다양한 활성산소종을 이미징하는 형광프로브가 많이 개발되어왔다.

그림 1a는 스티릴나프탈이미드(styrylnaph-



[그림 1] (a) H_2O_2 검출 형광프로브. (b) HClO 검출 형광프로브.

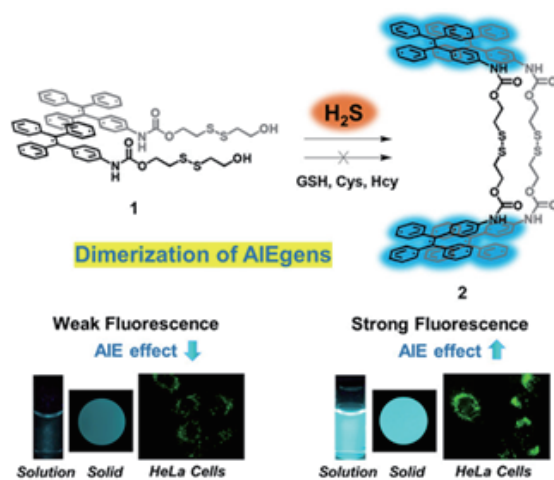
thalimide)와 보로네이트 에스터(boronate ester)가 결합된 과산화수소 검출용 적색방출 비율계량(ratiometric) 형광프로브이다.² 이 형광프로브는 보로네이트 에스터에 의해 단파장에서 형광을 보이다가 과산화수소에 의해 떨어져나가게 되면 강한 분자 내 전자전달(intramolecular charge transfer, ICT)에 의해 장파장으로 이동된 붉은 형광을 띄게 된다. 두 가지 파장의 변화를 비율계량적으로 나타낼 수 있기때문에 더 정확한 정량분석이 가능하다는 장점이 있다. 실제 HeLa 세포 내 소포체에 스트레스를 유발하였을 때 과산화수소가 과발현되고 이로 인해 장파장으로 이동된 형광이 크게 증가하는 것을 확인할 수 있었다. 그림 1b는 헵타메틴시아닌(heptamethine cyanine) 형광체를 이용한 하이포염소산(HClO) 검출용 비율계량 형광프로브이다.³ 이 형광프로브는 하이포염소산의 첨가반응으로 인해 에틸렌옥사이드(oxirane) 고리를 형성하게 되고 분자 내 전자전달 효과가 약해지게 된다. 이로 인하여 장파장의 형광 세기는 감소하고 단파장의 형광은 증가하는 비율계량적 형광변화를 보이게 되어 하이포염소산을 검출할 수 있다. 이러한 메커니즘을 이용하여 쥐의 폐암세포인 A549 세포에 염증 유발 물질인 지질다당체(lipopolysaccharide, LPS)를 처리 후 하이포염소산을 과발현시켜 변화를 관찰하였다. 그 결과 대조군에서는 장파장의 형광을 관찰할 수 있었고 LPS를 처리한 군에서는 강한 단파장의 녹색형광을 관찰할 수 있었다.

1-2. 티올(Thiols)

생체 내 티올(thiol)은 -SH 기를 갖는 산화

환원반응에 필수적인 물질이다. 대표적인 티올에는 시스테인(cysteine, Cys), 호모시스테인(homocysteine, Hcy), 글루타티온(glutathione, GSH), 황화수소(H_2S) 등이 있다. 이들은 효소 반응에서 친핵체(nucleophile)이며 세포 내 산화환원 상태를 유지하는 완충 분자로서 작용한다. 따라서 티올의 농도변화는 각종 질병과 관련되어 있다. 예를 들어 호모시스테인은 알츠하이머병, 시스테인의 부족은 저성장 및 간손상 그리고 글루타티온의 부족은 파킨슨병과 연관이 있다고 알려져있다.⁴ 또한 기체상으로 존재하는 황화수소는 세포 내 산화환원과 신경전달에 관여하지만 비정상적인 농도에서는 알츠하이머병, 간경변 등의 질병을 유발할 수 있다. 그러므로 질병과 관련하여 생체 내 티올을 검출하는 여러 가지 형광프로브들이 개발되고 있다.

그림 2a는 다이설파이드(disulfide)와 결합된 응집유도형광체(aggregation induced emission luminogens, AIEgen)인 테트라페닐에텐(tetra-



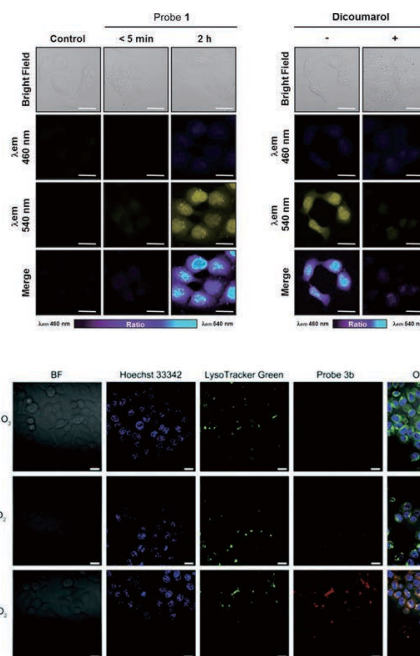
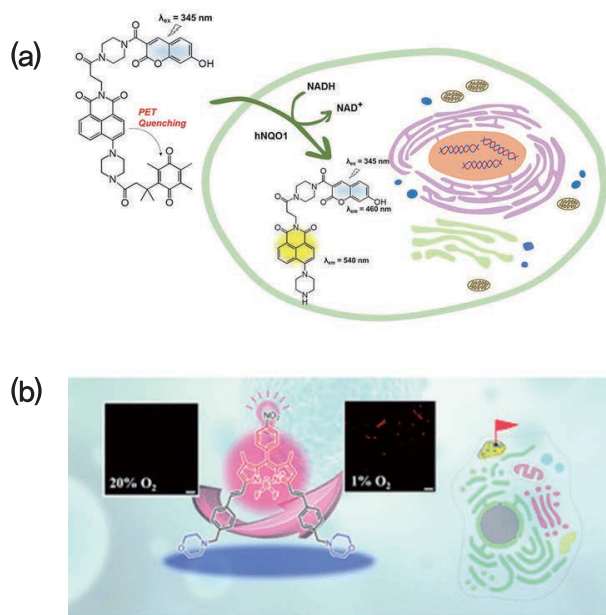
[그림 2] H_2S 검출 형광프로브.

phenylethene, TPE)을 이용하여 황화수소를 검출할 수 있는 형광프로브의 개발이다.⁵ 이 프로브는 황화수소에 의해 다이설파이드 결합이 끊어지고 동시에 다이머(dimer)를 형성하면서 더 강한 AIE 형광을 보이는 메커니즘을 가지고 있다. 이 형광프로브는 다른 티올(Cys, Hcy, GSH)과는 반응하지 않고 황화수소에만 선택적으로 반응하여 응집체를 형성하는 것이 확인되었다. 또한 세포실험에서 황화수소를 유발하는 시스테인과 *N*-acetyl cysteine(NAC)를 처리하였을 때 대조군보다 더 큰 형광 세기를 나타내었고, 황화수소 합성에 관여하는 단백질의 억제제를 처리했을 때는 형광이 감소하는 것을 확인하였다. 마지막으로 형광프로브를 코팅한 TLC plate를 이용하여 기체 상태의 황화수소도

검출할 수 있음을 확인할 수 있었다.

1-3. 효소(enzymes)

생체 내에서 일어나는 화학반응의 대부분이 효소반응(enzyme reaction)에 의한 것이다. 효소는 일반적으로 특정 기질과 결합하여 복합체를 형성하고 해리과정을 거친 후에 반응물과 본래의 활성 효소로 돌아오게 된다. 비정상적인 효소의 발현은 여러 질병과 연관된다. 예를 들어 비정상적인 tyrosinase 발현은 피부암, 파킨슨병과 연관이 있으며, human NADH:quinine oxidoreductase(hNQO1)와 nitroreductase(NTR)는 저산소 상태의 종양에서 과발현된다고 보고된바 있다.⁶ 따라서 이러한 효소의 발현정도와 질병 간의 상관관계를 이용



[그림 3] (a) hNQO1 검출 형광프로브, (b) NTR 검출 형광프로브.

하여 질병세포 특이적으로 과발현된 효소를 이미징하는 형광프로브의 개발이 활발하게 이루어지고 있다.

그림 3a는 세포 내 hNQO1을 이미징 하는 비율계량 형광프로브이다. hNQO1은 환원효소의 한 종류로 정상농도에서는 항산화시스템에 관여하고 종양의 성장을 억제하는 효소이다.⁷ 그러나 종양세포에서는 이 농도가 50배 가까이 과발현되는 것으로 알려져 있어 암세포의 바이오마커로 간주된다. 이 형광프로브는 본래 쿠마린의 형광만 보이지만, hNQO1의 존재에서 trimethyl lockquinone(TLQ)이 환원되어 고리를 형성하며 떨어져나가게 되면, 광유발전자전달(photoinduced electron transfer, PET)이 사라지면서 강한 나프탈이미드 형광을 보이게 된다. 결국, 효소반응 후에는 쿠마린과 나프탈이미드 두 종류의 형광을 띠게 된다. 한편 세포에서 쿠마린 형광과 나프탈이미드 형광을 시간에 따라 관찰하였을 때 쿠마린의 형광세기는 일정하게 유지되는 반면 나프탈이미드의 형광은 2시간 후에 크게 증가하는 것을 확인하였다. 또한 hNQO1 효소의 보조인자(cofactor)인 NADH와 경쟁적으로 반응하여 효소활성을 억제하는 디쿠마롤(dicoumarol)을 처리하였을 때 나프탈이미드의 형광이 억제되는 것을 관찰하였다. 이 프로브를 이용해 암세포 내 hNQO1을 정밀하게 검출하여 실시간 이미징이 가능함을 보여주었다. 그림 3b는 boron dipyrromethene(BODIPY) 형광체를 기반으로한 리소좀(lysosome) 타겟팅 NTR 검출 형광프로브이다.⁸ NTR은 저산소 상태의 암세포에서 과발현되는 환원효소 중의 하나로 니트로

기(nitro group)가 달린 벤젠을 아미노기(amino group)로 환원시킨다. NTR의 경우 여러 종류의 박테리아에서 구조와 기능이 많이 밝혀졌지만, 인간의 경우 NTR의 역할을 하는 단백질에 대한 연구가 아직 미흡하여 꾸준히 관련연구가 진행되고 있다. 이 연구에서는 BODIPY의 상단에 파라-니트로페닐기(*p*-nitrophenyl group)를 도입하고 아래에는 모르폴린(morpholine)을 연결하여 선택적으로 리소좀을 타겟하고 NTR을 이미징 할 수 있는 프로브를 개발하였다. 효소반응 전에는 니트로기로 인해 형광이 나타나지 않다가 NTR에 의해 아미노기로 환원되면서 650nm에서 형광을 보이는 메커니즘을 가지고 있다. 저산소 상태의 암세포에서 NTR의 발생이 증가한다는 점에 착안하여 암세포의 산소농도를 조절하면서 형광 변화를 측정하였고, 산소농도가 1%인 저산소 상태로 갈수록 형광세기가 리소좀에서 현저히 증가하는 것을 보였다.

2. 테라노스틱스(theranostics)로의 응용

테라노스틱스(theranostics)는 치료(therapy)와 진단(diagnosis)의 합성어로 한가지의 물질로 진단과 치료를 동시에 할 수 있는 의학기술을 말한다. 이 기법은 특히 암과 같은 질병의 이미징과 치료라는 측면에서 매우 각광받고 있는 기술이다. 테라노스틱스 프로브는 암을 선택적으로 표적화하고 항암제와 같은 약물의 위치와 효능을 동시에 모니터링할 수 있다는 장점을 가지고 있다. 또한 테라노스틱스 프로브는 특정 조건에서만 약물 활성을 보이기 때문에 정상적인 세포나 기관에는 영향을 적게 미치게 되어 기존의 항암치료의 부작용을 개선할 수

있음을 보여주었다. 일반적으로 테라노스틱스 프로브를 활성화시키기 위해 암세포에 과발현되는 물질(ROS, thiols, enzymes)과의 생화학반응, 암세포의 저산소 상태에 과발현되는 효소와의 반응, 암세포의 약산성 pH, 또는 빛과 같은 외부자극을 이용하는 다양한 방식이 이용된다.⁸ 이번 챕터에서는 여러 테라노스틱스 기법 중에서 약물전달시스템(drug delivery system, DDS)와 광역학치료(photodynamic therapy, PDT)를 이용한 테라노스틱스 형광프로브를 소개하도록 하겠다.

2-1. 약물전달시스템(drug delivery system, DDS)

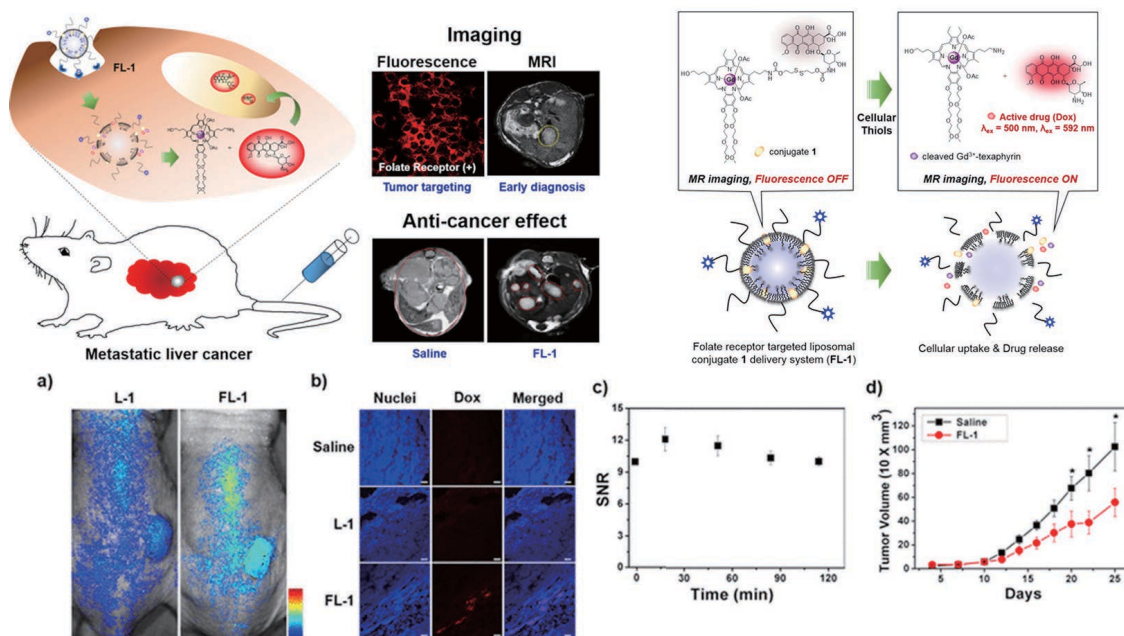
최근 약물전달시스템에 형광프로브를 접목하여 생체 내 화학반응에 의해 선택적으로 활성화 약물을 방출하고 동시에 형광변화를 보이는 테라노스틱스 응용연구가 한창이다. 이러한 시스템은 암세포 타겟팅 리간드, 생체 분자 감응형 형광프로브, 비활성 약물로 구성된다. 정상세포에서는 비활성 약물의 형태로 존재하기 때문에 항암제에 의한 부작용을 줄이고, 암세포를 선택적으로 타겟팅하여 형광반응과 동시에 활성 약물을 전달함으로써 높은 약리효과와 실시간 모니터링을 가능하게 한다.⁹

그림 4는 형광과 자기공명영상(magnetic resonance imaging, MRI)으로 암세포를 선택적으로 이미징하고 동시에 활성 약물을 제공하는 테라노스틱 복합체 개발 연구에 대한 것이다. 이 복합체는 가돌리늄-텍사피린(Gd^{3+} -texaphyrin)과 독소루비신(doxorubicin) 항암제를 다이설파이드 결합으로 연결한 암세포 타겟팅 프로드러그(prodrug) 약물전달시스템이다.¹⁰ 가돌

리늄-텍사피린은 물에 잘 녹고 암세포에 잘 축적되는 특징을 가지고 있으며 MRI 조영이 가능한 물질이다. 독소루비신은 암 치료에 사용되는 대표적인 화학요법 약물로 특유의 형광을 지닌다. 이 복합체 자체는 형광을 띠지 않지만, 생체 내 티올에 의해 다이설파이드 결합이 끊어지고 독소루비신이 전달되면서 동시에 592nm에서 특유의 형광을 보인다. 이 연구에서는 암세포를 더 효과적으로 타겟팅할 수 있도록 복합체를 엽산 수용체 타겟팅 리포솜(folate receptor targeted liposome)의 형태로 제작하였다. 이 리포솜은 엽산에 의한 엔도사이토시스(folate-mediated endocytosis)로 암세포에 흡수되기 때문에 엽산 수용체 양성 세포(KB, CT29)에서 강한 형광이미지와 함께 약리효과를 보였고, 이는 엽산 수용체 음성 세포(HepG2, NIH3T3)와 대조적이었다. 동물실험(in vivo)을 통해 테라노스틱 리포솜의 치료효율을 확인하였고, 복합체가 암 조직에 잘 모이는 것을 형광과 자기공명영상으로 확인하였고 종양의 크기를 날짜별로 측정했을 때 대조군 대비 종양의 성장이 억제되는 결과를 얻었다. 이러한 형광프로브 기반의 생체전달시스템을 이용하면 실시간으로 약물이 활성화되는 정도를 확인할 수 있고 선택적으로 암을 치료할 수 있어서 기존 항암제의 부작용에 대한 대체재가 될 수 있음을 제시할 수 있다.

2-2. 광역학 치료(photodynamic therapy, PDT)

광역학 치료(photodynamic therapy, PDT)는 빛을 이용하는 테라노스틱스의 한 종류로 특정 빛에 반응하는 감광제(photosensitizer)를 포함

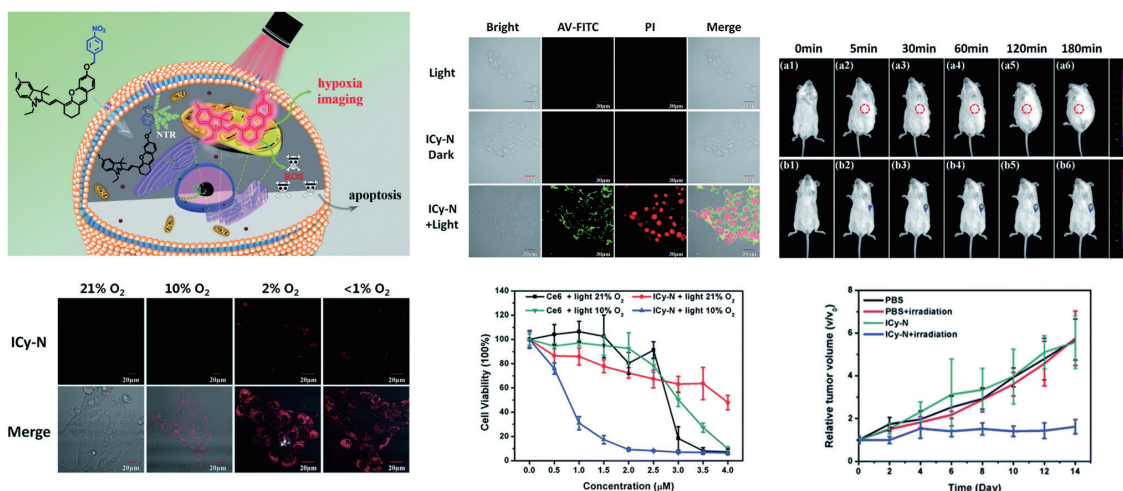


[그림 4] 테라노스틱 약물전달시스템(DDS)과 그 형광이미징, MRI 및 in vivo 데이터.

한다. 감광제가 빛을 받게 되면 바닥상태(S_0)에 있던 전자가 들뜬상태(S_1)로 전이되고, 계간교차(intersystem crossing)로 인해 들뜬 전자는 삼중항 상태(triplet state)로 이동하게 된다. 삼중항의 전자가 다시 바닥상태로 돌아오게 되는데 이 과정에서 주변에 삼중항 산소(3O_2)가 독성을 갖는 활성산소(1O_2 와 $OH\cdot$)로 변환하게 된다. 이렇게 발생한 활성산소는 주변 암세포를 죽이는 치료제의 역할을 하게 된다. 광역학 치료는 빛을 이용하여 치료효과를 활성화시키는 것이기 때문에 치료효과를 시간적, 공간적으로 조절할 수 있어 많은 테라노스틱스 연구에 응용되고 있다.¹¹

그림 5는 나이트로 환원효소(NTR) 감응형 형광프로브를 이용한 광역학 치료연구이다.¹²

이 물질은 분자 내 전자전달 억제와 니트로기의 진동운동으로 인하여 자체 형광이 소광되어 있지만, NTR 효소에 의해 니트로벤질(4-nitrobenzyl)이 환원되어 떨어지게 되면 710nm에서 형광을 보이고, 빛 조사하였을 때 단일항 산소(singlet oxygen, 1O_2)를 생성하여 암을 치료하는 효과를 보인다. 동물(in vivo) 실험 결과, 이 광역치료 물질은 암 조직에서 NTR 효소 반응에 의한 강한 형광 증가를 보이고, 빛을 조사하였을 때는 종양의 크기를 억제시키는 것이 증명되었다. 이를 통해 종양에서 과발현되는 효소반응을 이용하여 질병부위를 실시간 형광 이미징하고 빛의 조사 위치와 세기에 따라 선택적이고 효과적인 광역학치료가 가능함을 보여주었다.



[그림 5] 광역학치료 (PDT)을 이용한 형광프로브와 형광 이미징 및 in vivo 치료

결론

저분자의 유기형광프로브는 생체 내 물질을 높은 감도와 선택성, 빠른 시간으로 검출할 수 있고, 정성 및 정량적으로 실시간 모니터링을 가능하게 하는 생체적합 스마트 센서 유기물질이다. 최근 형광프로브는 생체분자 감응형 이미징을 통해 정밀한 질병진단 및 질병부위 타겟 약물전달시스템으로 응용되어 큰 주목을 받고 있다. 지금까지 질병과 연관된 다양한 생체분자를 검출하기 위해 수많은 유기형광프로브가 개발되었고, 궁극적으로 맞춤형 진단 및 치료의 목적으로 응용하기 위해 계속해서 관심이 증가하고 있다. 임상적 사용까지는 아직 수많은 과제가 남아 있지만 향후에 진단 및 치료제로 응용이 된다면 분명 현재 방식에서 조기 진단의 어려움, 심각한 부작용, 실시간 모니터링의 부재 등과 관련된 문제점을 개선하거나 해결하는 데 도움을 줄 수 있을 것이다.

앞으로도 지속적인 관심과 연구가 필요한 분야이며 기초 생리학 등의 학문 분야연구에 중요한 역할을 할 뿐만 아니라, 스마트 센서소자, 진단 및 치료 등의 의료분야 발전에 공헌할 수 있으리라 기대한다.

참고문헌

1. L. Wu, A. C. Sedgwick, X. Sun, S. D Bull, X. P. He, T. D. James. Acc. Chem. Res., 2019, 52, 2582.
2. J. Lee, S. A. Yoon, J. Chun, C. Kang, M. H. Lee. Anal. Chim. Acta, 2019, 1080, 153.
3. X. Zhang, W. Zhao, B. Li, W. Li, C. Zhang, X. Hou, J. Jiang, Y. Dong. Chem. Sci., 2018, 9, 8207.
4. K. Wang, H. Peng, B. Wang. J. Cell Biochem., 2014, 115, 1007.
5. M. J. Chang, K. Kim, C. Kang, and M. H. Lee. ACS Omega, 2019, 4, 7176.

6. H. W. Liu, L. Chen, C. Xu, Z. Li, H. Zhang, X. B. Zhang, W. Tan, Chem. Soc. Rev., 2018, 47, 7140.
7. S. Y. Park, M. Won, C. Kang, J. S. Kim, M. H. Lee, Dyes Pigm., 2019, 164, 341.
8. X. Kong, L. Di, Y. Fan, Z. Zhou, X. Feng, L. Gai, J. Tian, H. Lu, Chem. Commun., 2019, 55, 11567.
9. M. H. Lee, A. Sharma, M. J. Chang, J. Lee, S. Son, J. L. Sessler, C. Kang, J. S. Kim, Chem. Soc. Rev., 2018, 47, 28.
10. M. H. Lee, E. J. Kim, H. Lee, H. M. Kim, M. J. Chang, S. Y. Park, K. S. Hong, J. S. Kim, J. L. Sessler, J. Am. Chem. Soc., 2016, 138, 16380.
11. Z. Zhou, J. Song, L. Nie, X. Chen, Chem. Soc. Rev., 2016, 45, 6597.
12. F. Xu, H. Li, Q. Yao, H. Ge, J. Fan, W. Sun, J. Wang, X. Peng, Chem. Sci., 2019, 10, 10586.

••이 민 희••



학 력

2002–2006 단국대학교 화학과, 학사
 2006–2008 단국대학교 화학과, 석사
 2008–2012 고려대학교 화학과, 박사
 2012–2015 The University of Texas at Austin
 화학과, 박사후연구원
 2015–현재 숙명여자대학교 화학과, 부교수

••윤 신 아••



학 력

2014–2018 숙명여자대학교 화학과, 학사
 2018–2020 숙명여자대학교 화학과, 석사
 2020–현재 숙명여자대학교 화학과, 박사과정

반 데르 발스 결합기반 1차원 선형소재 연구 (Researches for 1D linear materials based on van der Waals bonding)

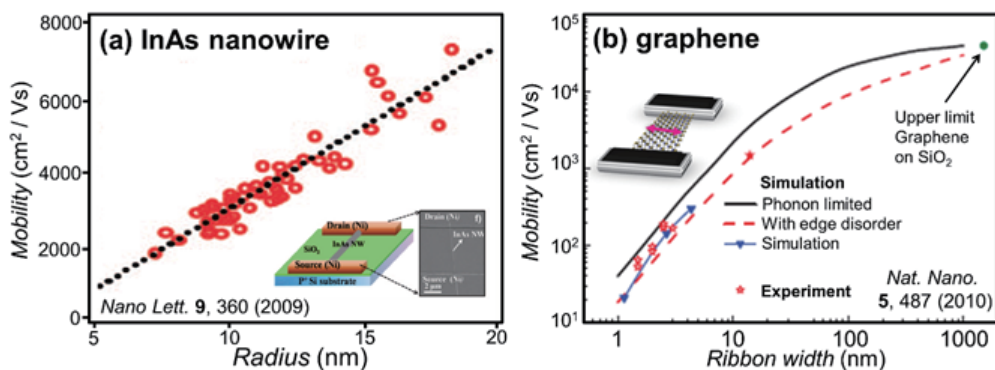
류 학 기 (아주대학교 신소재공학과 부교수)

1. 서론

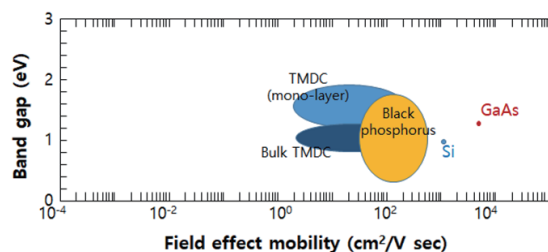
반도체 소자의 고성능 및 고집적도를 위한 크기 축소 (Scaling Down)는 현대 과학 기술의 키워드 중 하나이며, 이를 실현하기 위한 첫 단계로 인류는 소자 구성 요소의 실제 크기를 줄이려는 시도를 하였고, 이러한 경향은 나노 과학과 나노기술의 탄생을 가져왔다. 그러나 나노 크기의 물질에서 나타나는 3차원 재료의 예기치 않은 물리적 특성하락으로 인해 분자

수준 이하의 크기로 사이즈를 줄이는 것은 불가능함이 알려졌다. 또한 표면적 / 체적 비율이 급격히 증가하는 10 nm 미만의 크기에서는 전도성 및 이동성과 같은 전하의 이동 특성이 재료의 구조적 불완전성으로 인해 심각하게 감소하는 문제점이 나타나기 시작하였다.

이러한 문제를 해결하기 위해 연구자들은 저차원 재료 (1차원 선형 재료 및 2차원 면형 재료)를 이용한 새로운 나노 소자 제작으로 패러다임을 전환하기 위해 노력하고 있다. 그래핀



[그림 1] (a) 기존 반도체 재료의 크기 감소에 의한 전자 이동도 감소와 (b) 2차원 면형 재료인 그래핀의 넓이에 따른 이동도 감소. (참고 문헌 1, 2)

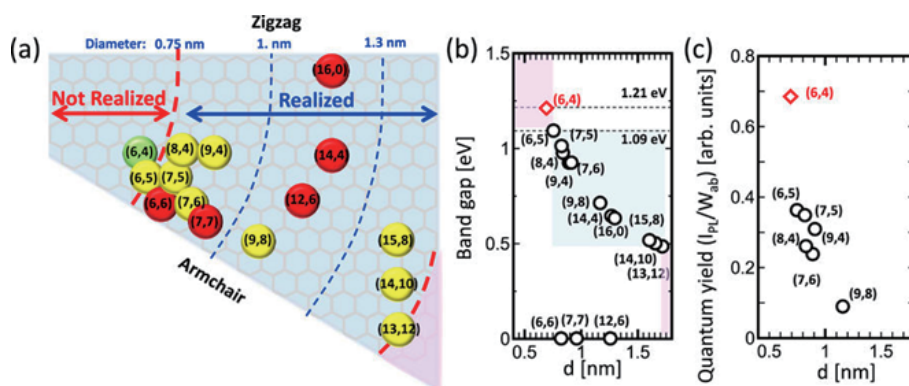


[그림 2] 현재 연구되고 있는 2차원 면형 소재들의 전하 이동도 및 밴드 갭 비교. (참고 문헌3)

연구를 시작으로 개척된 2차원 면형 재료 연구는 흑린 (Black-phosphor), 질화 붕소 (BN), 전이금속칼코겐 화합물 (TMDC, Transition Metal Dichalcogenide) 등과 같은 다양한 종류의 물리적 특성을 가지는 재료의 개발로 이어지고 있다. 그래핀은 우수한 전하 이동도를 가지지만, 반도체 소자에 필요한 밴드갭을 갖지 않는 단점이 있다. 그래핀에 밴드갭을 형성시키기 위하여 그래핀 나노 리본 (Graphene nano-ribbon: GNRs)을 제작하거나 그래핀의

층 수 조절 혹은 기체원자를 이용한 표면 개질 등의 방법 등이 거론 되었으나, 소자 활용이 용이한 크기의 밴드갭 (1 ~ 2 eV)를 균일하게 얻기 어려운 것으로 알려져 있다. TMDC 및 흑린 과 같은 다른 2D 반도체 재료는 적절한 밴드갭 (1 ~ 2eV)을 갖지만, 이들의 안정성 혹은 전하 이동도 등이 현재 반도체 소자로 사용되고 있는 Si, Ge, 및 GaAs 와 비교하여 낮은 단점이 있다. (참고 문헌 3) 궁극적으로 이러한 2차원 재료에도 가장자리 (edge) 및 grain boundary에는 필연적으로 결함 (dangling bond)이 존재하며, 원자단위 두께의 2차원 소재를 나노 간격으로 제작할 때 기존 벌크 재료에서 발생하는 전하이동도 감소와 같은 문제를 회피할 수 없다.

1차원 선형 재료 가운데 높은 전기 이동도, 화학적 안정성 및 기계적 강도를 가진 탄소나노튜브 (CNTs) 는 트랜지스터, 센서 및 나노 복합 재료의 빌딩 블록 (building block)으로 사용하기 위해 광범위하게 연구되어 왔다.



[그림 3] (a) 현재까지 합성된 CNT의 chirality에 따른 성장 지도: distributed growth (yellow) and high purity synthesis (red). CNT의 굵기에 따른 (b) 밴드 갭 및 (c) 양자 효율. (참고 문헌 4)

그러나, CNT의 다양한 키랄성 (Chirality)으로 인하여 동일한 성능을 갖는 나노 전자 소자 제작이 어려운 단점이 있기 때문에, 벌크 CNT로부터의 단일 키랄성 분리를 이루어 내거나, CNT를 성장할 때 키랄성을 제어하는 것이 필요하지만, 여전히 단일 키랄성 CNT를 얻는 것이 어려운 한계가 있다.

이와 같이, 현재까지 개발 및 연구되고 있는 저차원 물질 (1차원 선형 소재 및 2차원 면형 소재)들이 가지는 물성의 한계를 극복하고 궁극적인 저차원 소자의 개발을 위해서는 새로운 저차원 신물질의 개발 및 관련 연구가 필요한 시점이다. 새로운 저차원 신물질은 기존의 저차원 재료들이 가지는 물성의 한계를 모두 극복하는 것이 아니라 궁극적으로 개발하고자 하는 저차원 소자 개발에 있어 재료의 선택적 다양성을 증가시키는 데에도 매우 중요한 역할을 할 수 있을 것으로 기대한다. 최근 표면의 결함 (Dangling Bond)이 존재하지 않는 반 데르 발스 결합 기반의 초나노급 1차원 선형 물질을 합성하고 이를 원자단위로 분산 및 배열하여 고집적도의 새로운 반도체 소자를 생산할 수 있는 방안에 대한 연구가 진행되고 있다. 본 소개글에서는 이러한 반 데르 발스 결합 기반의 1차원 선형소재 연구에 대한 소개와 함께 향후 연구 동향에 대해 알고자 한다.

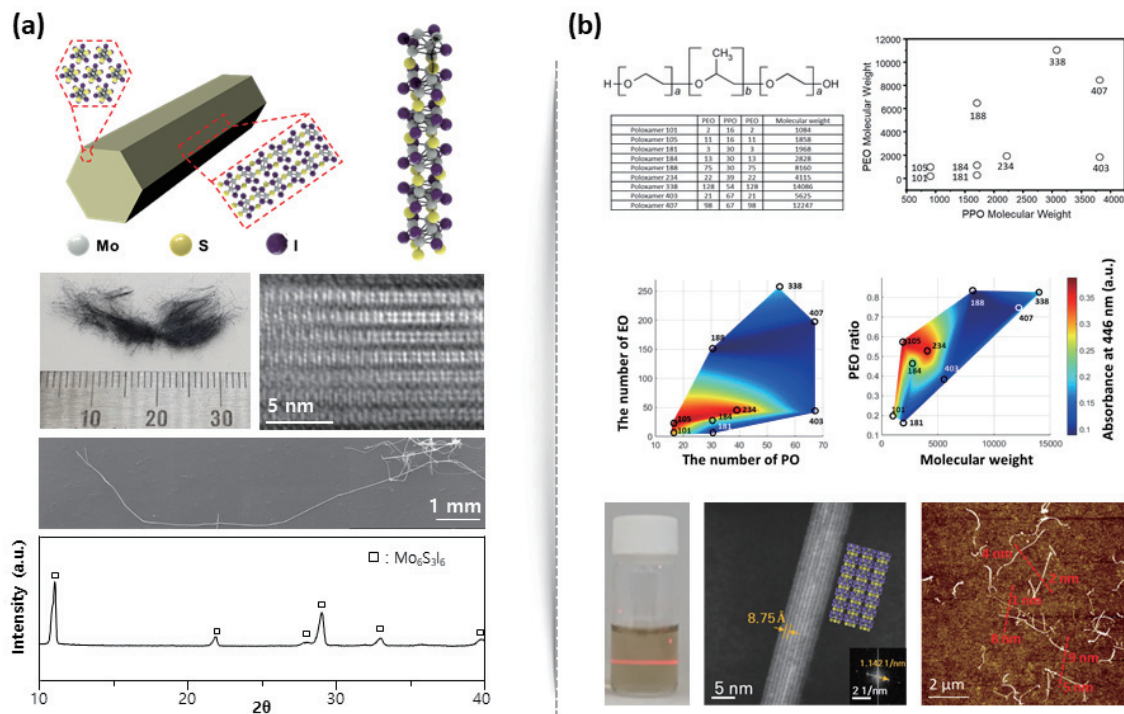
2. 본론

2-1. $\text{Mo}_6\text{S}_3\text{I}_6$

$\text{Mo}_6\text{S}_3\text{I}_6$ 은 2004년 Daniel Vrbancic에 의해 처음으로 합성된 반 데르 발스 결합 기반의

1차원 무기 선형 물질이다. 중심의 Mo원자를 S와 I가 공유결합을 통해 둘러싸고 있으며 단위 무기 분자 사슬선 사이에는 반 데르 발스 인력으로 이루어져 있기 때문에, 물리적 혹은 화학적 박리를 통해 0.8 nm 이하의 단위 분자선으로 분리가 가능하다. $\text{Mo}_6\text{S}_3\text{I}_6$ 은 우수한 기계적 특성을 가지며 4 nm 이하의 나노 크기로 박리되었을 때 전기전도도가 매우 크게 증가함이 보고되었다. 이러한 $\text{Mo}_6\text{S}_3\text{I}_6$ 를 합성하는 방법은 Mo, S, I를 화학양론에 맞게 주입한 후 진공을 형성한 앰플을 고상 반응하여 얻을 수 있다. 하지만 $\text{Mo}_6\text{S}_6\text{I}_2$ 이나 MoI_2 와 같은 중간상들이 순수한 $\text{Mo}_6\text{S}_3\text{I}_6$ 형성을 방해하기 때문에, 중간상인 MoI_2 를 합성 유도체로 사용하여 cm 스케일의 $\text{Mo}_6\text{S}_3\text{I}_6$ 대면적 합성을 진행하는 공정도 개발된 바 있다. (참고 문헌 5)

$\text{Mo}_6\text{S}_3\text{I}_6$ 는 표면에 S 및 I원자들이 배치되어 있어 일반적으로 알려진 TMDC의 표면장력과 유사한 값을 가진다 ($23 \sim 40 \text{ mJ/m}^2$). 따라서 수계 (물의 표면장력 72.8 mJ/m^2) 보다는 유사한 표면장력을 가지는 유기용매들 dimethylformamide (DMF, 36.4 mJ/m^2)이나 isopropyl alcohol (IPA, 23 mJ/m^2)에 잘 분산되는 특성을 보인다. 하지만, 친수성과 소수성을 모두 가지는 분산제를 활용 (PPO-PEO-PPO구조의 Poloxamer, 소수성 부분 PPO는 $\text{Mo}_6\text{S}_3\text{I}_6$ 는 표면에 흡착, 친수성 부분 PEO는 수계에서 용해되며 공간 분해를 유도함)하여 수계에서도 분산이 가능함이 실험적으로 증명되고 있다. 따라서 앞서 언급한 것처럼 단위 분자선을 활용한 전자소자 및 에너지, 바이오 소자 등에 다양한 활용이 기대되고 있다.



[그림 4] (a) $\text{Mo}_6\text{S}_3\text{I}_6$ 1차원 선형 무기 분자 사슬 재료의 결정 구조 및 cm scale 합성 사진 및 X-ray profile (참고 문헌 5).

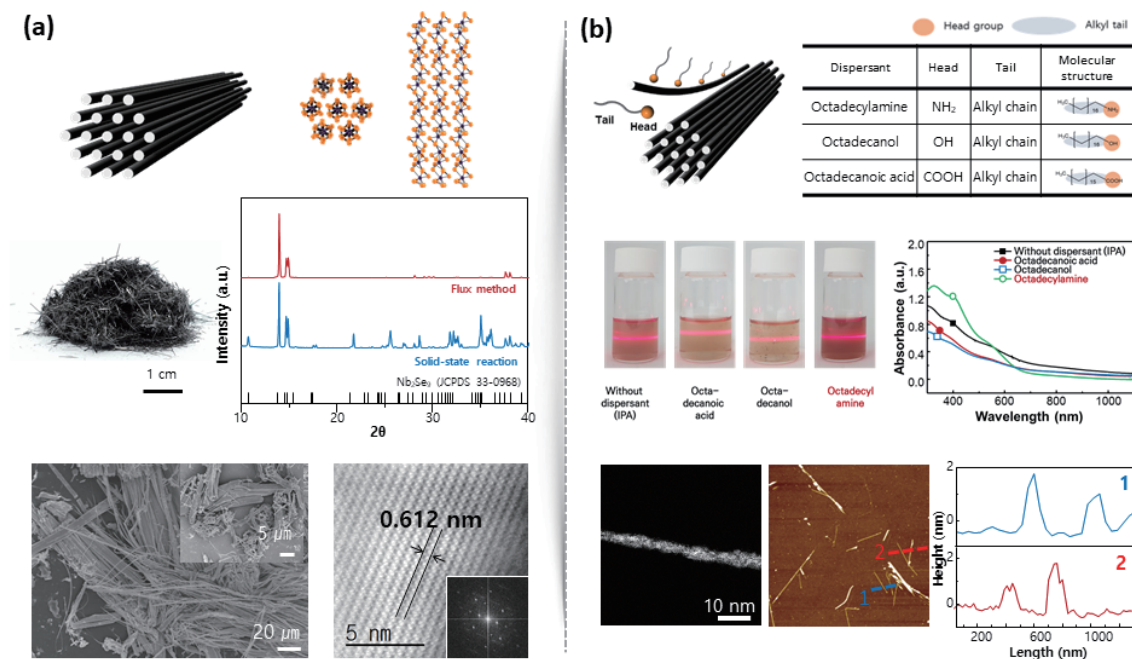
(b) Poloxamer 시리즈를 활용한 $\text{Mo}_6\text{S}_3\text{I}_6$ 의 수계 분산 결과 (투고 예정).

2-2. Nb_2Se_9

Nb_2Se_9 는 Nb 중심원자를 Se이 공유결합으로 둘러싸고 있는 구조이며, 단위 분자사슬 사이에는 약한 반 데르 발스 결합으로 이루어져 있어 적절한 박리 공정을 통해 1 nm 이하의 단위 사슬로 분산이 가능할 수 있다. Nb_2Se_9 는 1980~90년대에 벌크상으로 합성이 보고된 바 있지만, 1차원 단위사슬로의 박리시키는 연구는 진행되지 않았다. Nb-Se의 상태도는 Nb_2Se_9 뿐만 아니라 다양한 중간상 Nb_2Se_x , NbSe_2 , Nb_2Se_3 등이 존재하기 때문에 Nb_2Se_9 를 순수하게 합성하는 공정이 쉽지 않다. 최근에

는 과량의 Se 환경에서 Se를 용융시켜 그 안에서 cm 크기의 Nb_2Se_9 를 합성하는 연구 결과가 보고되었다. (참고 문헌 6)

합성에 성공한 Nb_2Se_9 1차원 무기분자사슬 소재들이 벌크 상태에서는 간접 밴드 갭을 가지지만, 7개의 선 이하로 작아지게 되면 직접 밴드 갭을 가지며 밴드 갭의 크기도 1 eV 이상으로 상승하는 계산 결과도 보고되었다. 또한, 기존 재료들에서 나타나는 전하이동도의 감소 현상이 나타나지 않고 이동도가 증가하는 현상 또한 계산과학을 통해 확인된 바, 이를 통해 Å 단위 1차원 소재의 새로운 양자우물효과를



[그림 5] (a) Nb₂Se₉ 1차원 선형 무기 분자 사슬 재료의 결정 구조 및 cm scale 합성 사진 및 X-ray profile (참고 문헌 6).

(b) Amine을 활용한 분산제의 종류에 따른 Nb₂Se₉의 유기 용매 분산 결과 (참고 문헌 8).

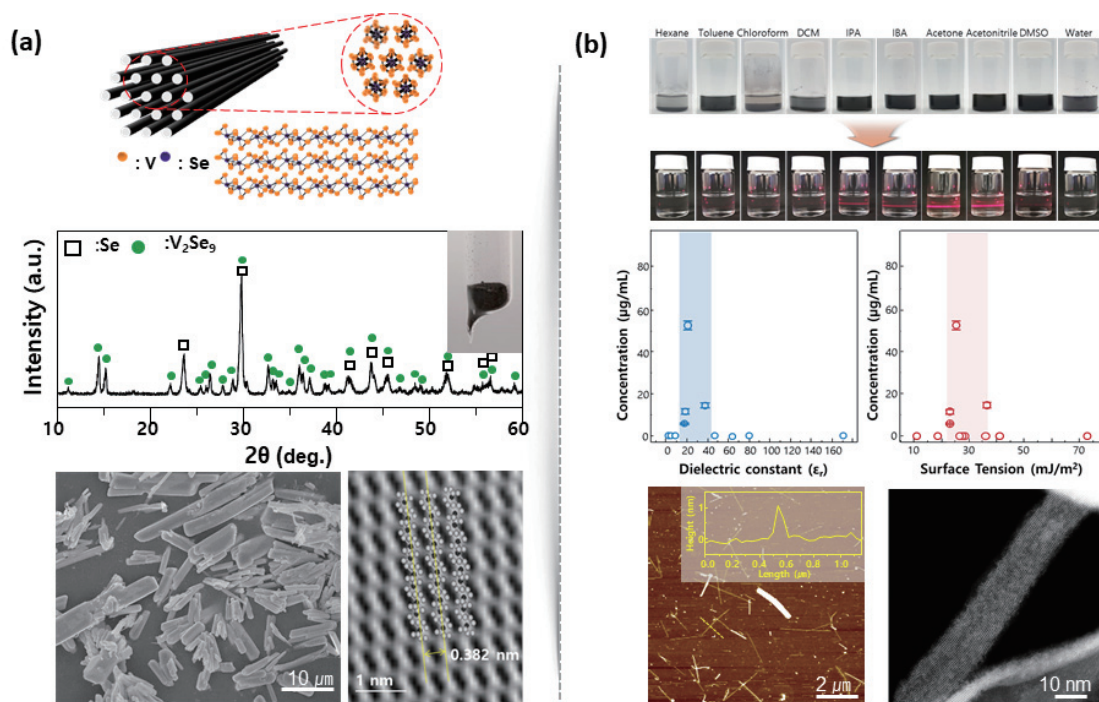
기대할 수 있었으며, 다양한 추가 실험을 통해 이를 검증하는 단계가 필요하다. (참고 문헌 7)

뿐만 아니라, amine 구조를 가지는 분산제를 활용하여 유기용매에서 nm급의 Nb₂Se₉를 얻을 수 있는 연구 결과도 보고 되었다. (참고 문헌 8) Amine은 Nb₂Se₉ 표면에는 강하게 흡착하는 특성이 있어 적절한 분산제 tail을 설계하게 되면 다양한 유기용매에서 높은 분산 농도를 얻을 수 있는 장점이 있다. 이러한 분산 결과를 통해 단위 사슬의 Nb₂Se₉를 얻게 되면, 전자 소자 및 각종 센서 그리고 바이오 소자 등에 활용할 수 있을 것으로 기대한다. 실제 분산된 Nb₂Se₉를 활용하여 수소생산 촉매에 활용하였을 때 분산된 Nb₂Se₉의 굵기가

가늘수록 높은 효율을 가지는 촉매로 활용될 수 있음을 실험적으로 검증하였다. (참고 문헌 9)

2-3. V₂Se₉

V₂Se₉는 Nb₂Se₉와 유사하게 V중심원자를 Se이 공유결합으로 둘러싸고 있는 구조이며, 단위 분자사슬 사이에는 약한 반 데르 발스 결합으로 이루어져 있어 적절한 박리 공정을 통해 1 nm이하의 단위 사슬로 분산이 가능한 재료로 알려져 있다. 하지만, Nb₂Se₉와 유사하게 V-Se의 상태도에도 V₃Se₄나 VSe₂와 같은 다양한 중간상들이 존재하기 때문에 순수한 합성을 위해서는 최적의 합성 조건이 필요하다. 최근 진공앰플에서 최적의 화학 양론



[그림 6] (a) V_2Se_9 1차원 선형 무기 분자 사슬 재료의 결정 구조 및 합성 사진 및 X-ray profile (참고 문헌 10).

(b) V_2Se_9 의 다양한 유기 용매에 대한 분산 결과 (참고 문헌 11).

및 합성온도를 설정하여 V_2Se_9 를 합성하는 연구 결과가 보고 되었다. (참고 문헌 10) 합성된 V_2Se_9 는 섭씨 400도의 온도까지 상 안정성을 유지하며 박리 시 다양한 활용성을 기대할 수 있게 되었다. 실제, 다양한 유기 용매에 분산 실험을 진행한 결과, IPA 혹은 DMF 혹은 acetone과 같은 유기용매에서 우수한 분산성을 확보한 결과도 보고되었다. (참고 문헌 11).

나아가, 셀레나이드계 1차원 선형 물질에서 (Nb_2Se_9 과 V_2Se_9) Nb과 V의 비율을 조절하여 ($V_{2-x}Nb_xSe_9$)와 같은 중간상을 합성하게 되면, 주변 원자 크기 변화에 기인한 Peierls distortion이 발생하여, 밴드갭과 같은 재료의 물성

이 변할 수 있을 것으로 기대되며, 1차원 선형 물질의 Band-gap engineering을 통한 다양한 활용 또한 예상되고 있다.

3. 맺음말

본 소개글에서 제안하는 초나노 단위 1차원 무기분자사슬 소재는 최근 많은 연구가 진행되어 온 2차원 물질에 비교하여 궁극적으로 표면 결함이 존재하지 않는 물질로서 원자 단위 박리 시 물성의 저하가 없으며 다양하고 새로운 양자 물리 현상을 기대할 수 있다. 이를 통해, 현재 반도체 산업의 공정 한계를 극복

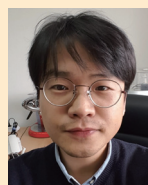
하고 고집적화를 이룰 수 있는 소재가 될 수 있을 것으로 기대되고 있다. 또한, 초나노 단위 1차원 무기분자사슬 소재는 유기고분자와 같은 사슬 구조를 가지므로 무기재료가 가지는 취성의 한계에서 벗어나 다양한 유연소자 및 웨어러블 소자에도 손쉽게 적용이 가능하기 때문에 기존의 저차원 재료 (2차원 혹은 0차원 물질)과는 차별화되는 물리적, 기계적, 화학적 특성을 가지므로 전자소자뿐만 아니라 다양한 바이오소자 및 에너지소자에도 널리 적용될 수 있을 것으로 기대한다.

참고문헌

1. A. C. Ford, J. C. Ho, Y. -L. Chueh, Y. -C. Tseng, Z. Fan, J. Guo, J. Bokor, and A. Javey, "Diameter-Dependent Electron Mobility of InAs Nanowires" *Nano let.*, 9, 360-65 (2009).
2. F. Schwierz, "Graphene transistors" *Nat. Nanotech.*, 5, 487-96 (2010).
3. D. Jariwala, V. K. Sangwan, L. J. Lauhon, T. J. Marks, and M. C. Hersam, "Emerging Device Applications for Semiconducting Two-Dimensional Transition Metal Dichalcogenides" *ACS Nano*, 8, 1102 - 1120 (2014).
4. 3. B. Xu, T. Kaneko, Y. Shibuta, and T. Kato, "Preferential synthesis of (6,4) single-walled carbon nanotubes by controlling oxidation degree of Co catalyst," *Sci. Rep.*, 7, 11149 (2017).
5. S. Oh#, S. Chae#, K. H. Choi, B. J. Kim, S. H. Lee, C. Wang, Z. Liu, J. Jeon, J. -H. Lee, H. K. Yu*, and J. -Y. Choi*, "Large-scale synthesis of van der Waals 1-dimensional material Mo6S3I6 by using a MoI2 precursor", *Journal of Alloys and Compounds*, vol.803, 499 (2019).
6. . Oh#, S. Chae#, B. J. Kim, A. J. Siddiqua, K. H. Choi, K. H. Lee, H. Y. Kim, W. -S. Jang, D. K. Lee, Y. -M. Kim, H. K. Yu*, and J. -Y. Choi*, "Inorganic Molecular Chain Nb2Se9: Synthesis of Bulk Crystal and One-Atom-Thick Level Exfoliation", *Physica Status Solidi - RRL*, vol.12, 1800451 (2018).
7. W. -G. Lee, S. Chae, Y. K. Chung, S. Oh, J. -Y. Choi, and J. Huh, "New One-Dimensional Material Nb2Se9: Theoretical Prediction of Indirect to Direct Band Gap Transition due to Dimensional Reduction", *Physica Status Solidi - RRL*, vol.13, 1800517 (2019).
8. S. Chae#, A. J. Siddiqua#, S. Oh, B. J. Kim, K. H. Choi, H. K. Yu*, and J. -Y. Choi*, "Design of dispersant for highly concentrated one-dimensional Nb2Se9 inorganic molecular chains from bulk crystal", *Scientific Reports*, vol.9, 14579 (2019).
9. F. O-T. Agyapong-Fordjour, S. Oh, J. Lee, S. Chae, K. H. Choi, S. H. Choi, S.

- Boandoh, W. Yang, J. Huh, K. K. Kim, and J. -Y. Choi, "One-Dimensional Single-Chain Nb₂Se₉ as Efficient Electrocatalyst for Hydrogen Evolution Reaction", ACS Appl. Energy Mater. Vol. 2, 5785 (2019).
10. S. Oh#, S. Chae#, B. J. Kim, K. H. Choi, W. -S. Jang, J. Jang, Y. Hussain, D. K. Lee, Y. -M. Kim, H. K. Yu*, and J. -Y. Choi*, "Synthesis of One-dimensional Atomic Crystal of V₂Se₉", RSC Advances, Vol. 8, 33980 (2018).
11. S. Chae#, A. J. Siddiqua#, B. J. Kim, S. Oh, K. H. Choi, K. H. Lee, H. Y. Kim, H. K. Yu, and J. -Y. Choi, "Isolation of inorganic molecular chain from rod-like bulk V₂Se₉ crystal by liquid exfoliation", RSC Advances, Vol. 8, 35348 (2018).

••류 학 기••



2003년 포항공과대학교 신소재공학과 학사
 2010년 포항공과대학교 신소재공학과 박사
 2011-2014년 Max Planck Institute (MPI) 박사 후 연구원
 2015-2018년 아주대학교 공과대학 신소재공학과 조교수
 2017 - 현재 삼성전자공과대학교 (SSIT) 초빙교수
 2019 - 현재 아주대학교 공과대학 신소재공학과 부교수

사라진 판데르발스 힘을 찾아서 (For restoring the missing van der Waals interaction)

김 원 준 (창원대학교 생물학화학융합학부 조교수)

김 형 준 (KAIST 조교수, 부교수)

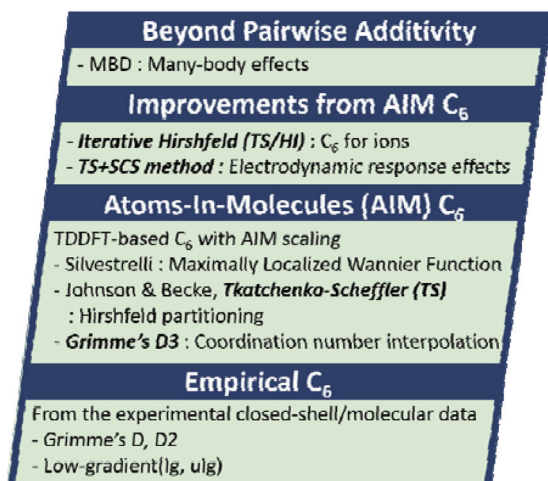
1. 서론

판데르발스 (van der Waals) 힘은 여러가지 분자 간 힘 중에서 가장 에너지 스케일이 작은 비결합성 상호작용 (noncovalent interaction) 이다. 하지만 어느 원자쌍 혹은 분자쌍 내에서 언제나 존재할 수 있기 때문에 분자량이 커지면 더 이상 그 크기를 무시할 수 없는 수준이 되고, 이러한 판데르발스 힘을 바탕으로 우리는 게코도마뱀의 발바닥의 우수한 접착성을 설명하기도 하고, 또 다양한 고분자 물성 및 초분자 화학을 논하기도 한다.

판데르발스 힘은 1800년대 네덜란드 과학자 요하네스 판데르발스 (Johanne van der Waals; 1910년 노벨물리학상 수상)의 이름을 따서 명명되었다. 이는 판데르발스가 분자 간 (비결합성) 상호작용을 고민했던 최초의 사람 중 하나이기 때문에 이것을 기념하기 위한 것이며, 따라서 판데르발스 힘은 광의적으로는 분자 간 비결합성 상호작용 대부분을 칭한다. 하지만 보통은 유도쌍극자와 유도쌍극자 간의 상호작용에 의한 분자 간 힘을 특정하여 지칭하는 경우가 많으며, 이를 특별히 런던 분산력 (London

dispersion force)이라 부르기도 한다. 1930년에 영국 과학자인 프리츠 런던 (Fritz London)은 양자역학의 2차 섭동이론 (second-order perturbation theory)을 이용하여 두 원자 사이의 전자-전자 원거리 상관에너지 (long-range correlation energy)를 계산하여 유도쌍극자와 유도쌍극자 간 상호작용 에너지가 거리의 6제곱에 반비례함을 보였고, 이에 보통 판데르발스 상호작용은 $1/R^6$ 에 비례하는 pairwise 상호작용으로 이해할 수 있다. 더 나아가 판데르발스 힘은 (비교적 최신의 양자 이론인) 양자장론 (quantum field theory) 관점에서 보면 캐시미어 힘 (Casimir force)과 그 근원을 같이하기도 한다.

이처럼 아주 간단하게는 학부 일반화학에서 가르치는 고전적인 내용이면서도, 또 매우 복잡한 양자역학적 효과인 판데르발스 힘에 대한 새로운 고민이 있다. 밀도범함수 이론 (density functional theory, 줄여서 DFT)은 최근 다양한 양자 화학 문제나 고체 이론 문제를 컴퓨터 시뮬레이션을 활용하여 해결할 때 널리 사용되는 방법이다. DFT는 슈뢰딩거 방정식을 근사적으로 접근하여 비교적 적은 계산량으로도



[그림 1] DFT에서 판데르발스 힘을 보정하기 위한 이론 개발 역사 [1].

높은 정확도를 확보할 수 있다. 하지만 이 근사 과정에서 전자-전자 간의 상관 에너지를 정확하게 기술되지 않은 문제로 인하여, DFT는 판데르발스 상호작용을 보통 실제보다 작게 기술하는 문제가 알려져 있다. 이에 DFT의 장점인 상대적으로 적은 계산 복잡도를 유지하면서 사라진 판데르발스 힘을 복원하기 위한 이론적 노력이 지난 20여년 간 계속되어 왔다 (그림 1). 이에 본 지상초대석에서는 DFT에 판데르발스 힘을 보정하기 위한 이론적 노력과 연구 동향을 소개하고자 한다.

2. 본론

2-1. Pairwise 상호작용 모델

DFT의 판데르발스 보정 방법을 위한 초기의 이론은 런던의 이론에 기반을 둔다. 분자 내에 존재하는 모든 원자쌍 사이에 $-C_6/R^6$ pairwise

상호작용이 존재한다고 가정하고, 이 때 비례상수 C_6 는 단순히 원자의 종류에만 의존한다고 가정한다. 각 원자마다 정해진 C_6 값이 있으면 이러한 보정 에너지를 빠르게 계산할 수 있고, 이를 DFT 에너지에 더해서 보정하는 것이 가장 초기의 판데르발스 보정 이론이며, 대표적으로 Grimme의 DFT-D 방법 [2]이 있다.

2-2. 주위 효과 보정 모델

Pairwise 상호작용 모델은 매우 간단하기 때문에, 추가적인 계산량이 적다는 장점이 있다. 하지만, 단순한 원자쌍 사이의 에너지를 순차적으로 더하는 것만으로는 실제 판데르발스 힘을 정확히 계산하는데 한계가 있다. 이를 Dobson은 판데르발스 상호작용의 비가법성 (non-additivity)라고 명명하였고 [3], 그 원인을 크게 세 가지로 분류하였다.

비가법성의 첫번째 원인은 원자가 주위의 원자와 화학 결합을 통해 분자를 이루거나 고체를 이룰 경우에 원자 주위의 전자 구름의 형태에 변형이 있게 된다. 유도쌍극자의 크기는 전자 구름의 분극률에 의하여 결정되기 때문에, 이러한 전자 구름 모양의 변형은 원자-원자 간의 분산력 세기를 변화시키고, 이는 C_6 값의 변화를 가져오게 된다. Dobson은 이를 Type A 비가법성이라 명명하였고, 이를 보정하기 위한 새로운 이론 모델들이 개발되었다. DFT 계산을 통하여 주변 원자와의 결합 상태와 이에 따른 전자 구름 모양의 변형 정도를 계산하고, 이를 통해 C_6 값을 보정하는 이론이 개발되었으며, 대표적으로는 화학자들 사이에서 널리 사용되는 Grimme의 DFT-D3 방법 [4]과 물리

학자들 사이에서 널리 사용되는 Tkatchenko–Scheffler의 TS 방법 [5]이 있다.

2-3. 요동치는 쌍극자 모델 (Fluctuating dipole model)

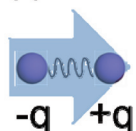
DFT-D3나 TS 보정 방법은 원자 주위 효과를 고려하여 C_6 값을 보정하기는 하지만 여전히 원자쌍 사이의 이체계 (two-body) 상호작용만을 고려하고 있다. 하지만, 실제 시스템에는 삼체계, 사체계 등의 다체계 (many-body) 상호작용이 적지 않게 존재하는 것이 알려져 있고, 액체나 고체와 같은 응집상 (condensed phase)의 경우에는 그 양이 대략 10% 정도로 무시할 수 없음이 알려져 있다. Dobson은 이러한 다체계 상호작용에 의한 비가법성을 Type B 비가법성이라 명명하였다.

다체계 상호작용을 고려하기 위해서는 단순한 원자쌍 사이의 pairwise 에너지 합이 아닌 조금 더 복잡한 이론적 모델이 요구된다. 전자 구름의 분극에 의해서 생성되는 유도쌍극자는 그림 2에서 보는 것과 같이 점전하 q 에 상대 점전하 $-q$ 가 스프링으로 연결되어 있는 모델로 이해할 수 있다. 이 때 외부에서 전기장이 가해지게 되면 크기는 같지만 부호가 반대인 두 점전하 사이의 스프링이 늘어나면서, 전기장 세기에 비례하여 쌍극자가 유도되며, 그 비율은 분극률을 결정한다. 이와 같은 점전하 두 개가 연결된 조화 진동자 (harmonic oscillator) 두 개가 서로 상호작용을 할 때의 진동 모드에 갖는 영점 에너지 (zero point energy)를 얻으면 $1/R^6$ 에 비례하는 런던 분산력을 이해할 수 있다 [6]. 이를 확장하여, 여러 개의 원자를 각각

(1) No electric field:

$$\bullet \quad d = 0, \mu = 0$$

(2) With external e-field (F):



$$d \propto F, \mu \propto F$$

$$\mu = \alpha F$$

[그림 2] 전기장에 의해서 유도되는 쌍극자는 스프링으로 연결된 두 개의 점전하로 모델링 가능함 (d : 두 점전하 사이의 거리, μ : 쌍극자 모멘트 크기, F : 전기장 세기, α : 분극률).

의 조화 진동자로 간주하고, 이들이 서로 커플된 진동 모드의 영점 에너지를 계산하면, 다체계 상호작용을 고려한 분산력을 이론적으로 기술할 수 있으며 이를 커플된 요동치는 쌍극자 모델 (CFDM: coupled fluctuation dipole model)이라 한다.

이에 Type B 비가법성을 보완하기 위한 이론으로, DFT에서 얻은 전자 구름 형태를 분석하여 각 진동자의 성격 (예. 후크 상수, 점전하의 크기 등)을 결정하고, CFDM 모델을 결합시켜 판데르발스 에너지를 계산하여 DFT 에너지에 보정하는 MBD (many-body dispersion) 방법이 Tkatchenko와 Scheffler에 의해 개발 [7]되었다. 더 나아가 근거리에 존재하는 주변 조화 진동자와의 상호작용에 의해 진동수가 변화하는 효과를 self-consistent하게 고려하고 (SCS: self-consistent screening 모델), 이를 바탕으로 원거리에 위치하는 진동자 사이의 다체계 상호작용을 CFDM 모델로 기술하는, 체계적인 판데르발스 보정 방법인 MBD@rsSCS 이론 [8]이 개발되었고, 판데르발스 에너지 기술의 정

확도가 한층 높아졌다.

2-4. 다양한 물질에서 발견되는 문제점과 해결

MBD@rsSCS 방법은 유기 분자나 유기물 결정 내의 판데르발스를 효과적이면서 정확히 기술하는 것이 알려졌다. 하지만 이온성 결합 물질의 경우에 나타나는 문제점이 보고되었고, 부분 이온 (FI: fractional ion)이라는 방법을 통해 MBD@rsSCS/FI [9]가 개발되면서, 유기물 시스템을 넘어 이온 결합 물질에서의 판데르발스 힘 보정이 가능해졌다.

2016년에는 본 저자는 판데르발스 보정 DFT 이론이 금속성 물질에서 심각한 오차를 나타내는 현상을 발견하였다[10]. 이는 금속성 전자는 원자핵에 상대적으로 작은 힘으로 구속되어 있기 때문에, 전자 구름이 훨씬 넓게 퍼져 분산

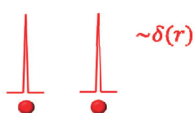
된 형태로 존재한다고 이해할 수 있다. 하지만 두 개의 점전하가 스프링으로 연결된 CFDM 모델은 이러한 퍼져있는 전자 구름 형태를 제대로 기술하지 못하고, 이에 주변 진동자들끼리의 커플링이 너무 강하게 일어나기 때문에 금속성 전자에서의 분산력을 제대로 기술하지 못한다. 따라서, 본 저자는 그림 3처럼 전자 구름의 퍼져있는 모양에서 기인하는 중거리의 가리움 효과를 기술하는 CFSDM (coupled fluctuating smeared dipole model)을 개발하였다 [10].

2-5. uMBD 이론 개발 및 벤치마크

이를 확장하여 2020년에는 CFSDM을 MBD@rsSCS/FI와 결합하여, 유기 분자, 유기물 결정, 이온성 결합 물질, 금속성 물질 내의 다양한 판데르발스 힘을 높은 정확도로 기술할 수 있는 이론을 개발하고 이를 uMBD (universal many-body dispersion) 방법이라 명명하여 발표하였다 [11]. 기존의 판데르발스 보정 DFT 이론이 대부분 유기 분자 시스템에 대해서만 주로 그 정확도를 평가하였는데, uMBD 방법은 다양한 분자와 재료, 그리고 이들간의 상호작용에 널리 사용 가능하기 위하여 다양한 시스템에 대해서 광역적인 벤치마크를 수행하였다. 벤치마크 세트는 (1) 유기 분자쌍 (22종), (2) 유기물 결정 (23종), (3) 알칼리(토)금속 (12종), (4) 이온성 결정 (28종), (5) 유기분자의 금속 표면 흡착 (11종)과 같은 다양한 원자 간 상호작용을 치우침 없이 테스트할 수 있도록 구성되었고, 판데르발스 보정이 없는 일반적인 DFT (PBE 방법)부터 다양한 가장 최신의

✓ CFDM in MBD approach

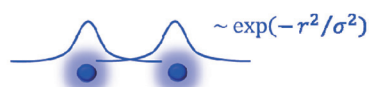
• Point-dipole model



: Can be viewed as oscillating point charges

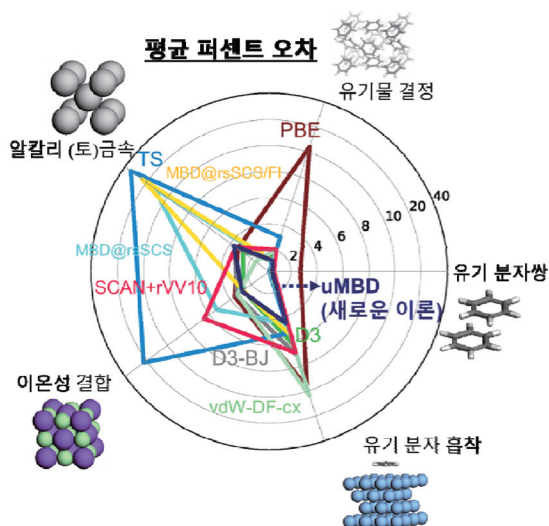
✓ CFSDM in uMBD approach

• Smeared-out dipole model



: Can be viewed as oscillating Gaussian charges

[그림 3] CFDM 모델은 스프링에 연결된 점전하로 이해 가능하며, CFSDM 모델은 전자 구름의 크기에 의한 가리움 효과를 기술할 수 있음.

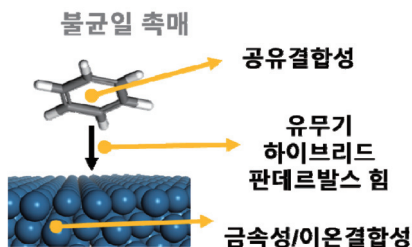


[그림 4] 다양한 결합 성질을 갖는 벤치마크 세트에서 uMBD는 균형잡힌 정확도를 보임.

판데르발스 보정 DFT를 두루 비교 검증하였다. 그림 4에서 보는 것과 같이 uMBD 방법은 다른 판데르발스 보정 이론에 비해 균형 잡힌 정확도를 보여주었으며, 이는 판데르발스 힘의 다양한 비가법성 효과를 정확히 기술하면서도 FI와 CFSDM을 통하여 이온성 결합과 금속성 결합에서의 정확도를 높였기 때문이다.

2-6. 재료 내의 복잡한 물성 예측: 배터리 양극 소재로의 응용

uMBD 방법의 이러한 균형 잡힌 정확도는 재료 내에서 다양한 화학적 결합 특성이 변화하는 물리화학적 프로세스를 이해하고, 이를 통해 재료 물성을 예측하는데 매우 중요하다. 한가지 예로는 유기 분자의 금속 혹은 산화물 표면에서의 흡착 현상은 불균일 촉매 현상 이해와 반응성 예측에 직접적으로 맞닿아 있다 (그림 5).

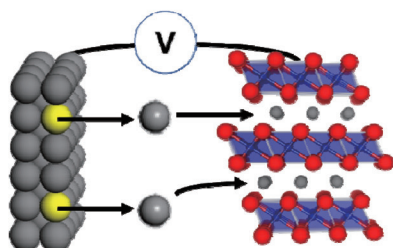


[그림 5] 금속이나 산화물 표면에 유기물이 흡착하는 현상은 불균일 촉매에서 중요한 현상으로 복합적인 판데르발스 힘이 중요하다.

재료 내에서 화학 결합 특성이 변화하는 복잡한 프로세스 중 하나의 예로 리튬 이온 전지의 충/방전 현상을 꼽을 수 있다. 전극 소재, 특히 양극재 소재는 주로 층상 구조의 산화물 물질이 널리 이용된다. 이러한 층상 구조 산화물은 산화물 층 내부에서는 전이금속과 산소 결합에 상당한 이온 결합성을 가지고 있을 뿐 아니라, 층과 층 사이에는 판데르발스 상호작용을 통해 안정화를 이루고 있다. 더욱이 배터리 방전 동안에는 이러한 층간 간격에 리튬 이온이 삽입되게 되고, 재료 내의 이온 결합 성질이 더욱 높아지게 된다. 또한 방전 포텐셜을 정량적으로 예측하는 데에는 금속 리튬 벌크의 에너지가 필요하기 때문에, 금속성 결합과 이온성 결합, 판데르발스 결합의 결합 에너지 변화에 의해서 전기화학적 방전 포텐셜이 결정된다고 할 수 있다 (그림 6).

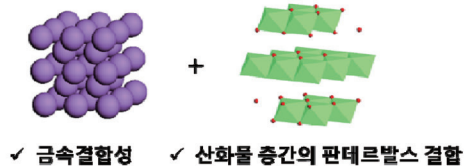
그림 4에서 볼 수 있듯이 uMBD 방법은 방전동안 형성되는 다양한 양극 물질의 소재 특성을 정확하게 기술할 수 있기 때문에, 관련된 방전 에너지를 정확히 기술하고 이를 바탕으로 그림 7에서 볼 수 있듯이 실험적 방전 포텐셜을 정확하게 예측하는 것을 알 수 있었

리튬 이온 배터리 시스템

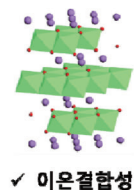


$$\begin{aligned} \mathcal{E}(V) &= -\Delta G/(nF) \\ &\approx -\Delta E_{\text{DFT}}/(nF) \end{aligned}$$

리튬 삽입 전 상태:



방전 후 리튬이 삽입된 상태



[그림 6] 리튬 이온 배터리 방전 동안 일어나는 리튬 삽입 프로세스는 양극재 소재의 결합성질을 다양하게 변화시킨.

다. 특히 uMBD 방법 외에 최근에 개발된 판데르발스 보정 DFT 방법인 vdW-DF-cx 방법과 SCAN+rVV10 방법에 비해서도 더 적은 계산량으로도 더 높은 정확도를 보이는 것을 알 수 있었다.

3. 맺음말

현재 새로운 소재를 설계하거나 신물질 가상 스크리닝 연구에 DFT는 가장 중요한 방법론으로 활용되고 있다. 소재의 물성을 정확히 예측하고, 물리화학적 메커니즘을 이해하기 위해서는 정확한 에너지 예측이 기반이 되어야하고,

이를 위해서 DFT의 판데르발스 힘을 보정하는 것은 에너지 예측의 정확도를 높이기 위해 중요하다. 체계적인 판데르발스 힘 보정 이론 개발을 통하여 신뢰성 높은 방법이 개발되고 있으며, 이를 다양한 소재 연구에 활용 가능할 것으로 기대된다. 다만, 판데르발스 보정 이론은 에너지와 구조 예측에서는 정확도를 높일 수 있지만, 이것이 곧 전자 구조 예측의 정확도를 높이는 것으로 연결되지는 않기 때문에, 앞으로 하이브리드 DFT 등의 이론과 최첨단 판데르발스 보정 이론을 결합하는 연구 등을 통하여 DFT의 복잡한 소재 물성을 예측하는 정확도를 다각도적으로 높이려는 노력이 필요할 것이다.

양극 물질	vdW-DF-Cx	SCAN+rVV10	uMBD	실험값 (V)
CoO ₂	3.60	4.53	3.96	4.10
V ₂ O ₅	3.08	3.58	3.40	3.60
SnS ₂	1.72	1.72	1.72	1.95
TiS ₂	1.98	2.09	2.09	2.10

[그림 7] 다양한 양극재 물질의 방전 포텐셜 예측 결과. uMBD는 다른 최첨단 판데르발스 보정 DFT 방법에 비해서도 높은 정확도를 보임. (0.4 V 이상의 큰 오차를 보이는 경우를 붉은색으로 하이라이트 하였음)

참고문헌

- [1] M. Kim et al., “Recent Development of Atom–Pairwise Van Der Waals Corrections for Density–Functional Theory: From Molecules to Solids”, *Int. J. Quantum Chem.* **116**, 598–607 (2016).
- [2] S. Grimme, “Accurate Description of van der Waals Complexes by Density Functional Theory Including Empirical Corrections”, *J. Comput. Chem.* **25**, 1463–1473 (2004).
- [3] J. Dobson, “Beyond Pairwise Additivity in London Dispersion Interactions”, *Int. J. Quantum Chem.* **114**, 1157–1161 (2014).
- [4] S. Grimme et al., “A consistent and accurate ab initio parameterization of density functional dispersion correction (DFT–D) for the 94 elements H–Pu”, *J. Chem. Phys.* **132**, 154104 (2010).
- [5] A. Tkatchenko and M. Scheffler, “Accurate Molecular Van Der Waals Interactions from Ground–State Electron Density and Free–Atom Reference Data”, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 073005 (2009).
- [6] A. G. Donchev, “Many–body Effects of dispersion interaction”, *J. Chem. Phys.* **125**, 074713 (2006).
- [7] A. Tkatchenko et al., “Accurate and Efficient Method for Many–Body van der Waals Interactions”, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 236402 (2012).
- [8] A. Ambrosetti et al., “Long–range correlation energy calculated from coupled atomic response functions”, *J. Chem. Phys.* **140**, 18A508 (2014).
- [9] T. Gould et al., “A Fractionally Ionic Approach to Polarizability and van der Waals Many–Body Dispersion Calculations”, *J. Chem. Theory. Comput.* **12**, 5920–5930 (2016).
- [10] W. J. Kim et al., “Failure of density functional dispersion correction in metallic systems and its possible solution using a modified many–body dispersion correction”, *J. Phys. Chem. Lett.* **7**, 3278–3283 (2016).
- [11] M. Kim et al., “uMBD: A Materials–Ready Dispersion Correction That Uniformly Treats Metallic, Ionic, and van der Waals Bonding”, *J. Am. Chem. Soc.* **142**, 2346–2354 (2020).

••김 원 준••



2010 KAIST 화학과 (학사)
 2017 KAIST 화학과 (박사)
 2017–2019 CNRS–Universite de Lorraine (Post. Doc.)
 2019–현재 창원대학교 생물화학융합학부 조교수

••김 형 준••



2004 KAIST 화학과 (학사)
 2009 Caltech 화학과 (박사)
 2009–2012 KAIST 응용과학연구소 선임연구원
 2013–현재 KAIST 조교수, 부교수

Bioorthogonal 나노자임 설계와 응용 연구 (Bioorthogonal Nanozymes: Design and Applications)

정 영 도 (한양대학교 의과대학 HY-KIST 의공학융합학과 겸임교수)

김 민 수 (한국과학기술연구원 의공학연구소 생체재료연구단 연구원)

1. 서론

Bioorthogonal 화학과 나노자임

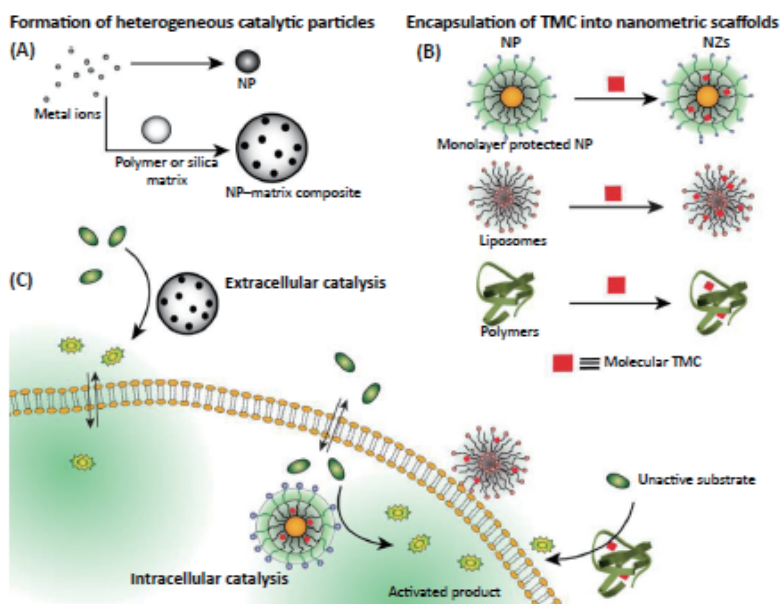
Bioorthogonal 화학은 생체 내에서 발생하는 화학반응에 어떤 간섭 없이 일어나며, 또한 그 결과 및 과정이 생체 현상에 영향을 주지 않는 화학 반응을 일컫는다^{1,2}. 이런 Bioorthogonal 화학은 생체 내 효소 촉매반응을 대체할 수 있고, 이를 통해 생체 현상을 조절하거나, 그 현상을 모니터링할 수 있기 때문에, 생명 현상 연구 및 질병 치료에 효과적인 방법이다^{3,4,5}. 특히, 전이금속을 사용한 Bioorthogonal 반응은 생체 내에서 일어나는 반응과는 상관없이 의도를 가지고 설계된 유기반응을 구현할 수 있기 때문에, 살아있는 세포에서 특정 생명 현상을 이미징하거나, 세포내 약물을 생성시키는 반응을 통해 치료의 역할을 수행할 수 있다^{6,7}. 그러나, 전이금속 자체를 생체 내에 투여하게 되면 전이금속의 생체 적합성의 한계, 물에서의 낮은 용해성과 촉매 기능의 불안정성은 전이금속 기반의 Bioorthogonal 화학 반응을 생체에 적용하는데 어려움이 있다. 또한, 항상성에 기인한 세포의 외부 물질의 배출에 의해 쉽게 배출되어 그 효과를 보기 어렵다⁸.

나노크기의 수용성 스캐폴드를 설계하고 이를 전이금속 촉매 분자와 병합하는 것은 촉매체의 친수성을 확보하고, 촉매의 안정성을 유지할 수 있는 환경을 제공할 수 있다⁹. 이러한 나노 기반 스캐폴드에 촉매를 삽입한 구조체는 나노자임의 역할을 수행하여, 세포내 목표로 하는 위치할 수 있고, 또한 스캐폴드의 물리적/화학적 변화를 조절하여 나노자임의 촉매의 활성을 조절할 수 있습니다¹⁰. 기존 방법과는 다르게, bioorthogonal 나노자임은 치료 또는 진단 역할을 수행하는 분자의 생성을 촉매 반응 조절을 통해 시간적/공간적으로 제어할 수 있는 시스템으로, 정밀한 타겟팅이 가능하기 때문에 의학적 활용의 가능성이 높다¹¹. 따라서, 본 지상초대석에서는 공학, 화학, 의학, 생명공학 및 융합 기술을 응용한 다양한 나노자임의 설계와 원리, 그리고 이를 통한 생물의학에 활용되는 사례들을 소개하고자 한다.

2. 본론

2-1. Bioorthogonal 나노자임의 제조

나노자임의 설계에 있어서, 사용하는 촉매의 크기 또는 촉매 반응 형태에 따라, 나노자임

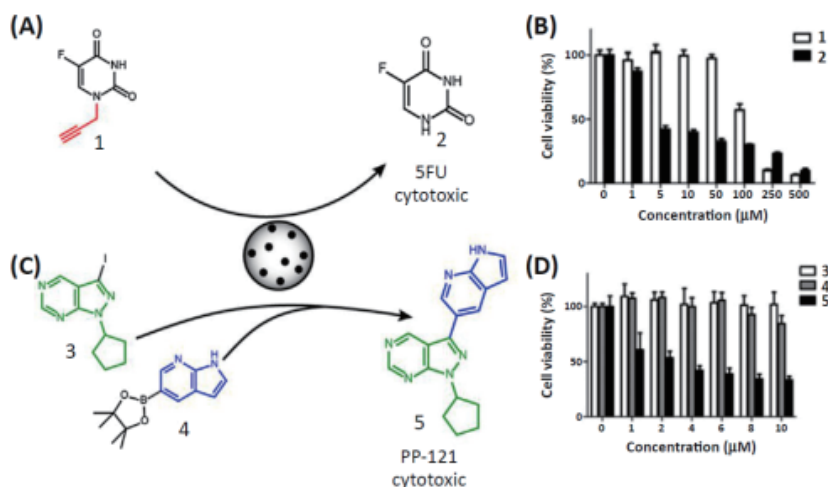


[그림 1] 나노자임의 설계 (A) 나노 촉매와 서포트를 활용한 나노자임. (B) 나노 스캐폴드에 분자 전이금속촉매를 삽입한 나노자임의 설계. (C) 세포 안을 포함하는 생체 환경에서 촉매 반응을 수행하는 bioorthogonal 나노자임.

제조 방법은 대표적으로 두 가지로 나눌 수 있다 (그림 1). Bradley와 Unciti-Broceta는 나노 입자로 이루어진 bioorthogonal 나노촉매를 지지체인 더 큰 나노입자에 부착하여 나노자임을 설계/합성하는 방법을 제시하였다 (그림 1A)¹². 현재까지는 환원된 상태의 팔라듐 또는 금을 매개체로 사용하는 촉매를 활용하였지만, 다양한 종류의 전이금속 촉매에도 적용이 가능하다. 다른 방법으로, Rotello 그룹에서는 분자 기반의 전이금속촉매를 나노크기의 스캐폴드인 금 나노입자에 삽입하여 나노자임으로 활용하는 방식을 제안하였다 (그림 1B)¹³. 이 전략은 분자 촉매를 삽입함으로써, 나노 크기의 수준에서 촉매 기능을 수행하는데 적합하다. 논의된 두가지 전략을 사용한 연구 내용과 활용 사례를 소개하고자 한다 (그림 1C).

2-2. 나노촉매를 사용한 나노자임

금속성 구조로 되어있는 팔라듐은 다양한 화학 공정에서 촉매역할을 수행 할 수 있다. Bradley, Unciti-Broceta 연구진은 이런 팔라듐 촉매를 활용하여 나노자임을 개발하였고, 복잡한 생물학적 시스템에서 촉매 반응을 구현하였다. 이를 위해 3 nm 크기의 팔라듐입자를 합성하였고, 지지체로서 폴리스티렌 입자 (~ 500 nm)를 활용하였다.¹² 연구진은 지지체 표면 위에 팔라듐 입자들을 부착하였고, 부착된 촉매는 그 활성을 유지하였다. 제조된 나노자임은 생체 환경에서 두 가지의 촉매 반응을 수행 했다. 첫 번째로 Suzuki-Miyaura 반응을 통해 C-C 결합을 형성을 관찰하였고, 두 번째로는 세포 내 형광 발생 화학 반응을 구현하였다. 또한, 팔라듐나노입자와 스타이



[그림 2] 치료약물을 생성하는 나노자임 (팔라듐 나노입자-기반) (A) 나노자임(폴리스티렌-팔라듐 복합체)이 prodrug의 빨간 부분을 절단하여 cytotoxic 물질을 생성. (B) 세포 독성평가 결과: (1)prodrug, (2)prodrug과 나노자임이 반응하여 생성된 항암제. (C) 나노자임이 Suzuki-Miyaura cross-coupling을 생성하여 PP-121 항암물질을 생성(연결되는 물질을 파란색과 초록색으로 표시함). (D) 세포 독성평가 결과 : 나노자임과 3번, 4번 물질을 하나씩, 그리고 혼합된 상태로 배양하였다. 3번 물질과 4번 물질이 coupling되어 5번물질을 생성하여 세포독성을 나타냄.

렌 복합체의 사이즈를 조절하여 bioorthogonal 화학 반응이 일어나는 위치를 세포안과 밖으로 제어하였다. 세포 외에서 bioorthogonal 화학 반응이 일어나도록 조절하기 위해, 연구진은 일반적인 세포의 크기보다 큰 150 μm의 직경을 가지는 폴리스티렌 지지체를 사용하여, 나노자임을 제조하였고, zebra fish 배아에 주입하였다. 주입된 나노자임은 allyl carbamate로 protection되어 형광을 잃은 물질을 deprotection 하여 수행하여 형광이 나타나도록 했고, 살아있는 zebra fish 내부에서 국소적으로 형광을 생성하는 것을 관찰하였다¹⁴. 한편, 세포 내에서 bioorthogonal한 화학 반응이 일어나도록 조절하기 위해서 ~500 nm 크기의 지지체를 사용하였다. 줄어든 크기의 나노

자임은 쉽게 세포내부로 들어갈 수 있었고, 선택적인 세포 흡수를 위해서 cRGDfE cyclopeptide를 나노자임의 리간드로 활용하였다. 이렇게 제조된 나노자임은 αvβ3 수용체가 과발현된 세포 더 많이 축적되는 것을 되는 것을 확인하였다¹⁵.

팔라듐 나노자임의 촉매 특성은 종양 세포배양에서 치료제의 활성화에도 사용되었다 (그림 2A, B). 불활성화된 항암제인 5-fluoro-uracil (5FU) 처리한 세포에서 팔라듐 나노자임을 통해 항암제를 활성화 하고 이를 통해 암 세포의 사멸을 확인하였다. 또한 다른 연구를 통해서, Unciti-Broceta 그룹은 팔라듐 deprotection 반응으로 활성화 되는 gemcitabine, amsacrine, doxorubicin과 floxuridine 등 다양한 약물 전

물질을 개발했다^{10,16}.

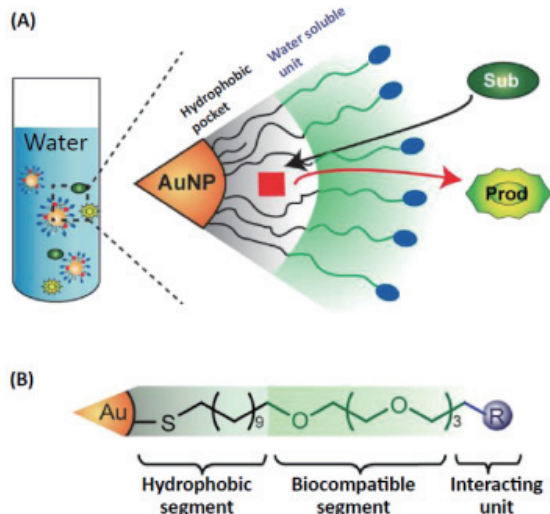
최근 논문에서, Bradley 연구진은 Suzuki-Miyaura 반응을 사용하여 키나아제 억제제 (PP-121)의 세포 내 생성을 구현하였다 (그림 2C). 이 연구에서, 종양세포는 팔라듐 나노자임과 전구체인 화합물 5와 6이 동시에 존재할 때 종양세포의 생존능력이 감소하는 것을 보여주었다(그림 2D). 이러한 전략은 표적하지 않은 조직 및 기관에 손상을 최소화하며 원하는 부위의 조직에 치료 약물을 생성하는데 효과적이다. 그러나, 반응의 복잡성은 다양한 치료 약물로 확장하여 범용적인 사용의 한계가 있다. 이러한 이유로 아직은 항암제 전구체의 나노자임을 통한 deprotection반응을 통해 종양 세포내 항암제 생성을 활용한 치료방법이 보다 일반적이다¹⁵.

최근 Unciti-Broceta는 생체 환경에서 금을 매개체로 하는 촉매 반응을 수행하기 위한 나노자임을 개발했다. 폴리스티렌 내부에 금나노입자를 생성 하고, 이를 활용한 형광전 물질, 전구체 항암제의 uncaging 반응을 구현하였다. 이 시스템에서 폴리스티렌은 스캐폴드의 역할 뿐 아니라 세포내에 있는 glutathione에 의한 금나노입자 표면의 흡착을 막아주는 역할로 나노촉매를 보호하였다¹².

2-3. 분자 전이금속촉매를 삽입한 나노자임

미국의 로텔로 교수 연구진은 나노 스캐폴드에 전이금속촉매를 삽입하여 촉매활성의 안정성을 확보하였고, 제조된 구조체를 나노자임으로 활용했다. 연구진은 2 nm 직경의 나노입자에 목적에 맞게 설계된 유기리간드를 부착

하였다. 리간드로 기능화 된 최종 나노입자의 직경은 ~10 nm로 천연 효소와 유사한 크기를 구현했다 (그림 3A)¹⁷. 유기리간드의 기능기는 3가지의 기능적 요소로 구성되어있는데, 1) 리간드층의 내부층은 소수성의 전이금속 촉매 삽입이 가능하도록 알킬체인으로 구성하였고, 2) tetraethylene glycol (TEG) 부분을 두어 친수성인 반응물이 들어올 수 있는 공간을 확보 하였으며, 3) 추가적인 기능이 가능하도록 말단기능기를 설계하였다. 추가적인 기능은 촉매 활성을 조절하거나 세포와의 상호작용에 영향을 주어 나노자임의 타겟팅이 가능하도록 하는 기능을 제시하였다 (그림 3B)¹⁸. 사용된 소수성 분자 촉매는 루세늄, 팔라듐, 로듐 기반의 다양한 유기분자 촉매를 사용하였고,



[그림 3] 전이금속촉매를 삽입한 나노자임의 구조 (금나노입자 기반) (A) 전이금속이 금나노입자 소수성공간에 삽입되어 있는 구조. (B) 금나노입자 스캐폴드에 결합되어 있는 기능기의 구조.

수용액 상에서 나노자임의 역할을 수행하는 것을 확인했다. 연구진은 향후 니켈 또는 철과 같은 분자 유기금속 촉매의 삽입을 통해 나노자임의 활용 범위를 확장하는 연구를 수행 중이다.

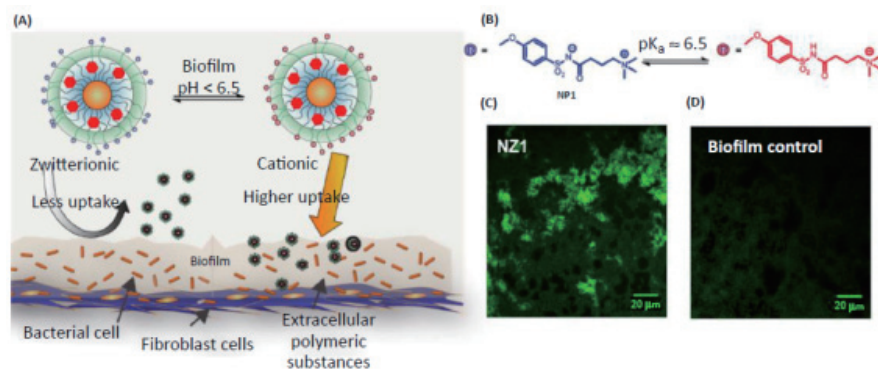
이와 같은 구조를 갖는 나노자임은 그 표면 기능기를 통해 화학적 성질과 반응 속도의 제어가 가능하다. 로텔로 교수 연구진은 양전하를 띠면서 다양한 소수성 기능기를 갖는 리간드 라이브러리를 구성했고, 이를 적용한 나노자임들을 개발했다. 일반적으로 소수성 영역을 가지는 나노자임은 Michaelis-Menten 속도 상수를 따르는 반면, 친수성의 영역이 많은 나노자임은 반응물과 친수성 영역 사이의 상호작용에 의해 반응 속도가 억제 또는 증가 되는 것을 관찰하였다.

나노자임의 표면 기능기는 반응물 뿐 아니라 생체와의 상호작용을 조절할 수도 있다. 예를 들어 양전하와 음전하를 같이 가지는 양성이온 기능기(zwitterion)를 부착한 나노입자는 세포와 약하게 상호작용을 하고, 양전하를 가지는 나노입자는 세포 안으로 침투(internalize)하는 경향이 있는데, 이를 활용하여 bioorthogonal 촉매반응의 위치를 조절하는 연구가 보고되었다. 또한, 나노자임에 pH에 따라 charge가 변화하는 기능기를 부착하여, 특정 산성조건에서만 zwitterion에서 양성 전하로 변화시켜, biofilm의 산성 환경을 타겟하여 침투하는 나노자임도 개발되었다 (그림 4A). pKa의 6.5를 가지는 alkoxyphenyl acylsulfonamide 기능기(그림 4B)가 부착된 나노자임을 박테리아 biofilm과 mammalian 세포를 공배양 배지에

처리하였는데, 산성을 띄는 biofilm에서 나노자임의 표면 전하가 양전하로 변화되었다. 양전하로 표면전하가 변화된 나노자임은 박테리아의 내부로 침투하였고, 세포와 박테리아 중 박테리아만 선택적으로 들어가서 rhodamine 형광체를 박테리아 내부에서 생성했다 (그림 4C, D)^{13,19}. 이러한 결과를 기반으로 원하는 biofilm 감염 위치의 이미징 기술 및 목표로 하는 부위의 치료법에 활용할 수 있을 것으로 기대된다.

나노자임과 단백질 사이의 상호작용에 의한 단백질 코로나의 생성을 조절하여 세포내부에서 나노자임의 촉매활성을 선택적으로 조절한 연구도 보고되었다²⁰. 나노자임의 표면 기능기에 따라 단백질 코로나의 형성 방법이 바뀌게 되며, 단백질 코로나가 촉매 활성을 저해하게 하여 그 반응 속도를 조절하였다. 리간드에 tetraethyleneglycol (TEG)이 없는 나노자임은 'hard' 코로나가 형성되어 표면에 흡착하여 반응물과 촉매가 결합되는 경로를 막는 반면, TEG가 있는 나노자임은 'soft' 코로나를 형성하게 되어 단백질 코로나가 없는 경우 보다는 촉매 활성도가 감소하지만 촉매활성을 유지할 수 있었다. Hard 또는 soft 코로나가 형성된 나노자임의 활성은 단백질을 분해하는 효소를 통해 회복할 수 있었고, 코로나 형성을 조절함으로써 세포내에서 선택적으로 나노자임의 활성을 조절할 수 있었다.

천연 단백질도 나노 스캐폴드처럼 전이금속촉매를 삽입할 수 있다. Heinisch와 Ward는 streptavidin과 강하게 상호작용을 할 수 있는 biotin이 결합된 루테튬 촉매를 합성하였고,



[그림 4] 표면기능기가 pH에 따라 변화되도록 설계된 나노자임 (A) pH에 따라 표면 전하가 바뀌는 나노자임을 biofilm의 imaging에 사용. (B) pH에 따라 전하가 바뀌는 기능기. (C) 전하가 바뀌는 나노자임을 사용하여 biofilm 내부에서 형광 물질을 발생 시키는 화학 반응을 confocal image로 관찰. (D) 나노자임 없이 형광 전 물질만 처리한 biofilm (대조군 실험).

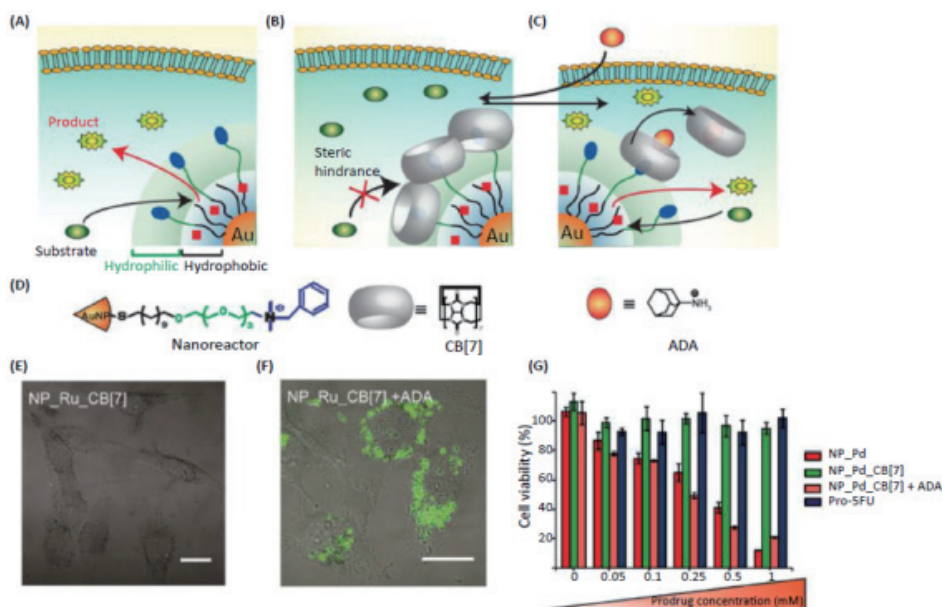
streptavidin과 결합시켰다²¹. 제조된 나노자임을 처리된 세포는 endosome에서 호르몬 전구체를 호르몬 분자로 변화시켰고, 호르몬을 통해 세포의 특정 생체과정을 upregulate 할 수 있었다. 비슷한 방식으로 Hoveyda-Grubbs 촉매를 streptavidin 스캐폴드에 삽입하여 olefin metathesis reaction을 수행한 연구도 보고되었다. 단백질 스캐폴드가 전이금속촉매를 보호하는 효과가 있어서, 살아있는 박테리아에서 특정 화학 반응이 가능했다²².

나노자임을 구성할 때 고분자를 스캐폴드로 사용하는 것도 가능하다. 최근, Palmans과 Albertazzi 연구진은 단일-체인을 가지는 폴리머 입자에 palladium bipyridine과 copper phenanthroline을 결합시켰고, 이렇게 만들어진 고분자 나노자임은 세포 이미징 연구를 하는데 활용되었다²³.

2-4. 자극에 반응하는 bioorthogonal 나노자임

나노자임은 화학적 물리적 신호를 받아

bioorthogonal 촉매활성을 조절할 수 있다. 금나노입자에 다른 종류의 전이금속촉매 [$Cp^*RuCl(cod)$ 와 ferrocene diphosphine palladium chloride]들을 삽입하고(그림 5A) 초분자 상호작용을 이용하여 촉매활성을 조절하였다(그림 5)¹¹. 이 설계에서 나노입자는 cucurbit[7]uril (CB[7])과 결합할 수 있는 benzyl ammonium 표면 기능기를 이용하여 host-guest 복합체를 형성할 수 있다(그림 5B). 나노자임에 결합된 CB[7]은 반응물이 촉매와 만날 수 있는 경로를 막아 촉매 반응을 방해한다. 그러나, CB[7]과 나노자임의 스캐폴드보다 더 강한 상호작용을 할 수 있는 guest 물질인 1-adamantylamine (ADA)이 있을 때에는 나노스캐폴드부터 빠져나와 ADA와 결합하게 된다(그림 5C). 이러한 초분자 문지기 시스템은, 세포 내에서 rhodamine 기반의 형광 전구체 물질(그림 5E, F)과 propargyl-masked prodrug을(그림 5G) 특정 상황에서만 활성화시키는 것을 가능하게 했다.

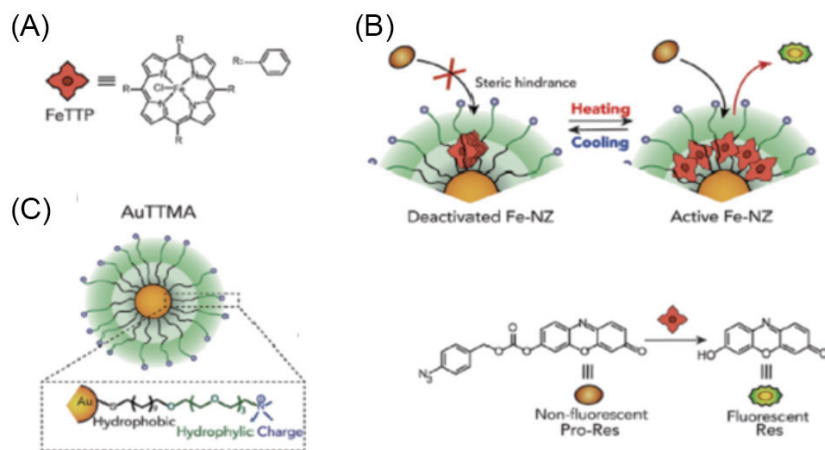


[그림 5] 자극에 반응하는 나노자임 (A) 나노자임이 세포안에서 촉매기능을 수행 (B) 나노자임의 기능기인 benzyl ammonium과 CB[7]이 복합체를 형성하여, 반응물이 촉매와 반응하지 못하게 하여 촉매반응을 방해함. (C) ADA를 넣어주게 되면 촉매 기능이 재활성화 됨. (D) 나노자임 리간드의 화학 구조, CB[7], ADA의 화학 구조. (E) CB[7]이 결합된 나노자임은 세포내에서 촉매 기능이 불활성화되어 형광물질이 생성되지 않음. (F) ADA를 넣어주면, 나노자임의 촉매 기능이 활성화되어 형광물질이 생성됨. (G) 나노자임을 이용하여 특정 상황에서 세포내 약물 전구체를 활성화 시키고, 이를 통해 종양 세포를 사멸시킴.

Cao-Milan 과 그의 동료 연구자들은 나노자임에 자기조립 되어 쌓이는 iron (III) tetraphenylporphyrin (FeTPP)를 삽입하여(그림 6A), 온도조절을 통하여 촉매활성을 조절하는 연구를 보고했다 (그림 6)²⁴. 이 설계에서 나노자임에 삽입된 FeTTP는 25 °C에서 묶여져 있어서 구조적 방해로 인해 반응물과 반응할 수 없지만, 온도가 37 °C까지 증가하게 되면 FeTPP가 나노자임내의 리간드 층에서 흩어지게 되어 반응물과 결합하여 촉매 반응을 수행할 수 있다 (그림 6B). 나노자임에 삽입하는 FeTPP

의 양을 조절하면, 나노자임의 촉매 반응이 활성화 되는 온도를 3°C의 간격으로 제어할 수 있으며, 보고된 연구에서는 25°C에서 37°C까지 제어했다. 나노자임의 스캐폴드는 주어진 온도에서 안정하며 생체에서 독성을 나타내지 않고 생체 반응에 영향을 주지 않는 금나노입자를 사용하였다. (그림 6C).

Qu와 그의 동료들은 mesoporous 실리카입자에 팔라듐 나노입자를 삽입하여 빛에 반응하는 나노자임을 보고했다²⁵. 그들의 시스템에서 실리카 입자에 삽입된 α -cyclodextrin (CD)와



[그림 6] 열 반응 나노자임 (A) FeTTP의 화학 구조, (B) 온도 반응에 따른 촉매 반응 조절 방식의 원리, (C) 나노자임의 스캐폴드가 되는 나노입자 (AuTTMA)의 구조와 그 리간드의 화학 구조.

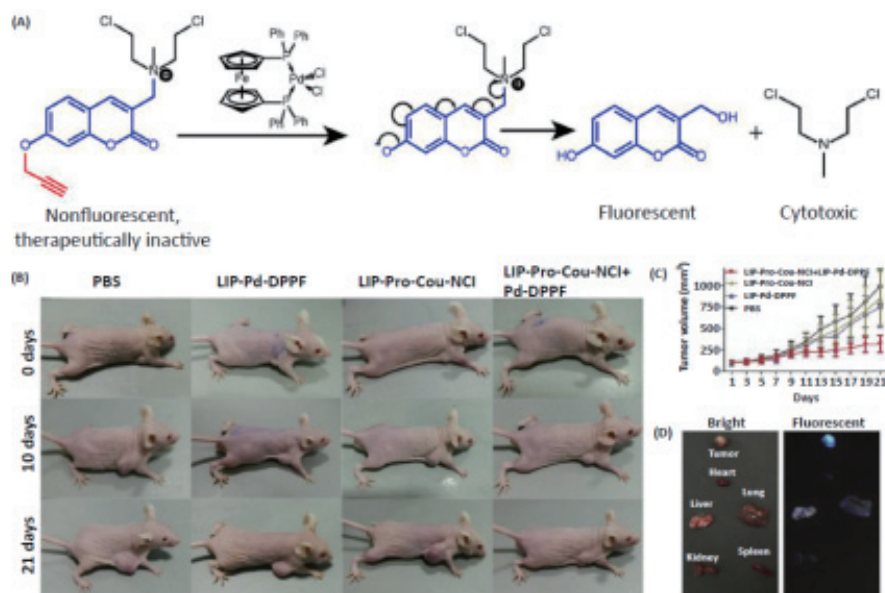
azobenzene 리간드는 팔라듐이 반응물과 만나는 것을 빛을 통해 조절하는 게이트의 역할을 한다. UV를 투사하였을 때, azobenzene은 trans 이성질체에서 cis 이성질체로 바뀌게 되어 CD가 실리카 입자로부터 나오게 되고, CD를 기반으로 하는 촉매반응이 활성화된다.

2-5. 동물모델에서의 나노자임을 사용한 bioorthogonal 촉매반응

항암제 전구체와 팔라듐 기반의 bioorthogonal 촉매를 이용하여 동물 종양 모델에 적용하여 고형종양을 치료를 진행한 연구가 보고되었다²⁶. Zeng, Wu 와 그의 동료들은 ferrocene diphosphine 팔라듐 착물을 리포솜을 통해 세포내로 전달하였다. 그들이 진행한 연구에서, propargylate 기능기로 protection 된 형광 전구체와 세포독성을 가지는 기능기를 가지는 분자를 설계하였고, 전달된 촉매(LIP-

Pd-DPPF)에 의해 설계된 분자가 활성화 되면 형광 물질인 coumarin과 세포독성을 가지는 cytotoxic nitrogen mustard (HN1)이 생성되었다(그림 7). 동물 모델 실험에서는 팔라듐 착물과 prodrug을 같이 삽입한 그룹에서만 종양이 억제되었고(그림 7C), 형광 물질을 추적한 결과 주입된 부분에만 촉매를 통해 활성화된 반응물이 남아있는 것을 확인했다(그림 7D).

Weissleder 교수 연구진은 palladium allyl carbamate deprotection 반응을 활용하여, 동물 모델 내 원하는 위치에서 doxorubicin을 생성시켜 동물의 종양을 억제한 결과를 보고했다. 이 연구에서, 나노자임은 생분해성 poly(lactic acid)-poly(ethylene glycol) (PLGA-PEG) copolymer에 bisphosphine palladium(II)dichloride 착물을 삽입하여 제조하였고, 나노자임과 약물 전구체인 (proDox)은 종양에 직접 투여했다. 흥미롭게도 proDox는 동물모델에서 여러 장



[그림 7] 생체 내에서 팔라듐-기반 bioorthogonal 활성을 이용한 약물 치료법 (A) Propargylate로 protection 된 반응물의 화학 구조. 이 화학물질은 형광 염료 전구체와 독성 moiety를 모두 가진 물질로 설계됨. (B) 실험군과 대조군에서의 동물모델 실험 결과: 나노자임과 약물 전구체가 동시에 처리된 그룹에서만 종양의 크기가 감소하였음. (C) 종양의 부피 변화 (n=3) (D) 나노자임과 약물 전구체 투여 후의 장기에서의 발현된 반응물: 종양에서만 활성화된 반응물이 발견됨.

기에서 발견 되었지만, 활성화 되어 약물효과를 낼수 있는 항암제는(Dox) 나노자임이 위치한 종양조직에서만 관찰되었다²⁷.

비슷하게 Hoop와 그의 동료는 Fe-Pd 두가지 금속으로 구성된 자성 나노와이어를 합성하여 종양이 있는 동물 모델에서 촉매의 활성화를 이용한 항암 치료 연구를 보고했다. 연구에서, 저자들은 종양 내에 촉매역할을 하는 Fe-Pd와 약물 전구체인 pro-5FU를 정맥을 통해 주사했다. 약물 전구체와 Fe-Pd bimetallic 나노입자를 조합으로 처리된 동물 그룹에서만 혈관 침습과 종양 크기의 급격한 감소를 관찰할 수 있었다²⁸.

3. 맺음말

나노자임의 개념은 2013년에 ‘효소와 비슷한 특징을 가지는 나노 크기의 물질’이라고 정의되었다. Bioorthogonal 촉매반응은 생체 내에서 치료약물 혹은 imaging 분자를 전달하는 효율적인 접근법으로 알려져 있다. Bioorthogonal 촉매반응과 나노자임의 개념을 합치면, 생체 내에서 일어나지 않는 새로운 촉매반응을 일으키는 것이 가능하다. 본 기고문에서는 bioorthogonal 나노자임을 만드는 두 가지 전략을 소개했다. 나노 촉매 기반의 나노자임은, 나노입자의 표면에 존재하는 반응성을 가지는 전이금속이 bioorthogonal 촉매반응을 일으

킨다. 사용할 때에는 나노자임에 존재하는 중금속 촉매의 반응성과 잠재적인 독성을 고려해야 한다. 분자 촉매 나노자임은, 전이금속 촉매가 나노 스캐폴드 안에 포함되어 있어, 안정성 및 용해성을 확보하지만, 아직 치료 효과에 대해서는 완벽하게 정립되어 있지는 않다. 현재 동물실험에서, 나노자임이 삽입된 조직에 선택적으로 약물의 활성을 조절시키는 연구가 진행되고 있다. 이러한 나노자임을 이용한 치료법은 화학치료법에 필요한 약물이 계속해서 만들어지는 결과를 보여, 발전된 방법으로 여겨지고 있다.

대부분의 화학치료방법은 약물이 생체에 전체적으로 퍼지는 성질을 가지고 있지만, bioorthogonal 나노자임을 이용한 치료방법은 원하는 부위에 약물을 생성할 수 있는 방법으로 주목을 받고 있다. 향후 치료법으로 활용되기 위해서는, 추가적으로 약물의 흡수, 분포, 대사, 배설과정을 동역학적 관점에서 연구가 진행될 필요가 있다. 첫 번째로 생체 내 나노자임이 분포되어 있는 위치, 두 번째로 생체 내에서 나노자임이 분해 및 제거되는 과정(특히 촉매기능을 수행하는 중금속), 세 번째로 나노자임의 전달물질이 목표로 하는 조직 및 장기에 축적의 확인이 필요하다.

Bioorthogonal 나노자임의 최종 연구 목표는 ON/OFF 제어가 가능한 'programmable 나노자임'을 만드는 것이다. 이러한 나노자임은 목표로 하는 조직에서 약물의 활성을 시간 및 공간적으로 조절할 수 있을 것이다. 더 나아가 체내의 신호를 받으면 자동으로 촉매 기능이 활성화가 되는 나노자임의 설계도 포함이 된

다면 생체의학적인 활용도는 더 확장될 것이다. 이러한 나노자임은 생화학 반응을 조절하여, 생체의 항상성을 유지하고 건강한 상태로 회복하는데 도움을 줄 수 있을 것이다.

참고문헌

1. Saxon, E. and Bertozzi, C.R. (2000) Cell surface engineering by a modified Staudinger reaction. *Science* 287, 2007–2011
2. Zhang, X. et al (2019) Bioorthogonal nanozyme: Progress towards therapeutic applications. *Trends in chemistry*. 1. 90-98
3. Sletten, E.M. and Bertozzi, C.R. (2011) From mechanism to mouse: a tale of two bioorthogonal reactions. *Acc. Chem. Res.* 44, 666–676
4. Hangauer, M.J. and Bertozzi, C.R. (2008) A FRET-based fluorogenic phosphine for live-cell imaging with the Staudinger ligation. *Angew. Chem. Int. Ed.* 47, 2394–2397
5. Van Berkel, S. et al. (2007) Metal-free triazole formation as a tool for bioconjugation. *Chem. Biochem.* 8, 1504–1508
6. Sasmal, P.K. et al. (2013) Metal complex catalysis in living bio-logical systems. *Chem. Commun.* 49, 1581–1587
7. Völker, T. and Meggers, E. (2017) Chemical activation in blood serum and human cell culture: improved ruthenium complex for catalytic uncaging of alloc-protected amines. *Chem. Bio. Chem.* 18, 1083–1086

8. Unciti-Broceta, A. et al. (2012) Synthesis of polystyrene micro-spheres and functionalization with Pd 0 nanoparticles to perform bioorthogonal organometallic chemistry in living cells. *Nat. Pro-toc.* 7, 1207–1218
9. Bai, Y. et al. (2018) Designed transition metal catalysts for intra-cellular organic synthesis. *Chem. Soc. Rev.* 47, 1811–1821
10. Weiss, J.T. et al. (2014) Extracellular palladium-catalysed deal-kylation of 5-fluoro-1-propargyl-uracil as a bioorthogonally activated prodrug approach. *Nat. Commun.* 5, 3277
11. Tonga, G.Y. et al. (2015) Supramolecular regulation of bioorthog-onal catalysis in cells using nanoparticle-embedded transition metal catalysts. *Nat. Chem.* 7, 597–603
12. Pérez-López, A.M. et al. (2017) Gold-triggered uncaging chemistry in living systems. *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* 56, 12548–12552
13. Gupta, A. et al. (2018) Charge-switchable nanozymes for bio-orthogonal imaging of biofilm-associated infections. *ACS Nano* 12, 89–94
14. Yusop, R.M. et al. (2011) Palladium-mediated intracellular chem-istry. *Nat. Chem.* 3, 239–243
15. Clavadetscher, J. et al. (2017) In-cell dual drug synthesis by cancer targeting palladium catalysts. *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* 56, 6864–6868
16. Cao-Milán, R. et al. (2017) Molecular systems design & engineering modulating the catalytic activity of enzyme-like nanoparticles through their surface. *Mol. Syst. Des. Eng.* 2, 624–628
17. Jeong, Y. et al. (2018) Solubilization of hydrophobic catalysts using nanoparticle hosts. *Small.* 14, 1–5
18. Boisselier, E. and Astruc, D. (2009) Gold nanoparticles in nano-medicine: preparations, imaging, diagnostics, therapies and tox-icity. *Chem. Soc. Rev.* 38, 1759–1782
19. Gupta, A. et al. (2018) Charge-switchable nanozymes for bioorthogonal imaging of biofilm-associated infections. *ACS Nano.* 12, 89–94
20. Zhang, X. et al. (2020) Intracellular activation of bioorthogonal nanozymes through endosomal proteolysis of the protein corona. *ACS Nano.* <https://dx.doi.org/10.1021/acsnano.0c00629>
21. Heinisch, T. and Ward, T.R. (2016) Artificial metalloenzymes based on the biotin-streptavidin technology: challenges and opportunities. *Acc. Chem. Res.* 49, 1711–1721
22. Jeschek, M. et al. (2016) Directed evolution of artificial metal-loenzymes for in vivo metathesis. *Nature.* 537, 661–665
23. Liu, Y. et al. (2018) Catalytically active single-chain polymeric nanoparticles: exploring

- their functions in complex biological media. *J. Am. Chem. Soc.* 140, 3423–3433
24. Cao-Milán et al. (2020) Thermally gated bio-orthogonal nanozymes with supramolecularly confined porphyrin catalysts for antimicrobial uses. *Chem.* <https://doi.org/10.1016/j.chempr.2020.01.015>
25. Wang, F. et al. (2018) Designed heterogeneous palladium catalysts for reversible light-controlled bioorthogonal catalysis in living cells. *Nat. Commun.* 2018, 1209
26. Li, B. et al. (2017) A bioorthogonal nanosystem for imaging and in vivo tumor inhibition. *Biomaterials.* 138, 57–68
27. Miller, M.A. et al. (2017) Nano-palladium is a cellular catalyst for in vivo chemistry. *Nat. Commun.* 8, 1–13
28. Hoop, M. et al. (2018) Mobile magnetic nanocatalysts for bioorthogonal targeted cancer therapy. *Adv. Funct. Mater.* 28, 1705920–1705928

정 영 도



1998.03 – 2005.02 한양대학교 화학과(학사)
 2005.03 – 2007.02 한양대학교 화학과(석사)
 2008.08 – 2014.09 University of Massachusetts, Amherst 화학과 (박사)
 2014.08 – 2017.12 LG화학 중앙연구소 책임연구원
 2018.03 – 2020.02 과학기술연합대학원대학교 (UST) KIST School 부교수
 2017.12 – 현재 한국과학기술연구원(KIST) 의공학연구소 생체재료연구단 선임연구원
 2020.03 – 현재 한양대학교 의과대학 HY-KIST 의공학융합학과 겸임교수

김 민 수



2011.03 – 2016.02 삼육대학교 컴퓨터학부(수료)
 2016.03 – 2018.08 세종대학교 화학과(학사)
 2018.09 – 현재 한양대학교 화학과(석사)
 2018.09 – 현재 한국과학기술연구원(KIST) 의공학연구소 생체재료연구단 연구원

역사와 내 기억 속에 길이 남을 여성들

진 정 일 (고려대 명예교수 전 IUPAC 회장)

들어가기 - 캐서린 존슨 이야기

최근에 미국 한 여성의 부고가 뉴스면을 장식했다. 지난 2월 24일에 101세로 생을 마감한 캐서린 존슨(Katherine Coleman Goble Johnson, 1918.8.26.-2020.2.24.)의 이야기가 우리들에게 새로웠다. 그녀의 일대기가 2016년(12월 1일) 셔틀리(Margot Lee Shetterly)에 의해 출간되고, 같은 해에 '히든 피겨스'(Hidden Figures) 영화가 헨슨(Taraji P. Henson)에 의해 개봉되어 그녀의 삶이 재조명되었다.

왜 세계가 이 흑인 여성에게 새삼 존경심을 표하고 있을까?

인종차별과 성차별을 자기의 능력과 업적으로 극복했을 뿐만 아니라, 자기의 수학적 재능을 인류의 우주탐사 노력에 적극적으로 투여한 업적이 눈부셨기 때문이다.



존슨은 35년간이나 미국항공우주국(NASA)에서 수학자로 근무하였다. 그녀는 NASA의 우주비행 프로그램에 필요한 수학적 계산-처음에는 손으로, 후에는 컴퓨터로-을 통해 절대적 기여를 하였다. 그녀는 비행궤적, 귀환 경로, 비상착륙 경로 등의 정확한 계산과 결과를 NASA에 제공해, 머큐리 프로젝트(Project Mercury) 우주비행이 성공할 수 있게 만든 장본인이었다. 쉐퍼드(Alan Shepard, 미국 첫 우주비행사), 존 글렌(John Glenn, 우주궤도를 비행한 첫 미국 우주비행사)의 비행궤적, 아폴로 달 착륙선과 사령선(command module)의 랑데부 궤적 등은 그녀의 계산에 의존했다.

우주왕복선 프로그램(Space Shuttle Program, SSP)의 시작과 화성탐사계획에도 그녀의 공헌이 컸다. 그 공로를 인정해 2015년에는 오바마 대통령(President Barack Obama)은 대통령 자유메달(Presidential Medal of Freedom)을, 2019년에는 미국 의회 금메달(Congression of Gold Medal)을 수여했다.

‘그녀가 괜찮다고 해야만 떠나겠다’고 한 존 글렌의 요구는 존슨의 계산이 얼마나 중요했는지 짧게나마 웅변적으로 말해준다.

존슨은 서버지니아주(West Virginia)의 화이트 설퍼 스프링스(White Sulphur Springs)에서 4남매의 맏이로 태어났다. 어머니는 학교 선생

이었으며, 딸의 교육을 위해 특별히 신경을 썼다. 어려서부터 수학에 뛰어난 그녀는 14살에 고등학교를 졸업하고 흑인 명문대학 서버지니아 주립대(West Virginia State)에 입학했다. 대학은 그녀를 위해 새로운 수학 강좌를 개설해야 했을 정도였다. 그녀는 18살의 나이로 우등생으로 대학을 졸업했으며(1937), 수학에서 뿐만 아니라 프랑스어에서도 학위를 받았다. 그 후 흑인학생들을 가르치는 학교의 선생으로 일했으며, 1939년에 결혼 후 서버지니아대학의 대학원에 진학했다. 그러나 곧 임신하게 되어 학업을 중단했다. 존슨은 수학연구자이길 꿈꾸었지만, 흑인 여성으로 그 꿈을 이루기가 그리 쉬운 일은 아니었다. 그러던 중 1952년에 존슨이 자기 꿈을 이룰 수 있는 기회가 왔다.

국가항공자문위원회(National Advisory Committee for Aeronautics, NACA; 현 NASA의 전신)가 Langley Memorial Aeronautical Laboratory(버지니아주 Hampton)에 계산 임무를 수행할 수학자들을 모집하고 있었다. 인종을 따지지 않는다는 고용조건도 마음에 들었다. 좋은 기회라 생각한 존슨은 지원을 했고 1953년부터 1958년까지 NACA에서 ‘계산인’(Computer)으로 일했다. 비행경로 수식화를 주로 연구했다. 이때까지만 해도 흑백 인종차별이 심해 흑인 계산인들 사무실은 ‘유색 계산인’(Colored Computers)이라는 사무실 문표가 부착되어 있었다.

NACA가 NASA로 재편되면서 존슨은 1958년부터 28년간(1986년에 퇴임) 항공우주 과학자로 엄청난 공헌을 남겼다. Langley 연구센터 내에는 2016년에 지은 ‘캐서린 G. 존슨 계산연구소’ 빌딩(1200여 평)이 있다.

그녀는 1939년에 결혼해(첫 남편: James F. Goble) 세 딸을 두었으나, 1956년에 남편이 뇌종양으로 사망했다. 삼 년 후 미군장교(James A. Johnson)와 결혼했고 두 번째 남편은 2019년 3월에 93세로 타계했다. 그는 한국전쟁에도 종군한 바 있다.

그녀는 모교를 비롯한 여러 대학에서 명예박사 학위도 받았다.

‘저는 NASA에서 인종차별을 느끼거나 경험하지 못했습니다. 모두 연구에만 전념하고 있었지요....’

따뜻한 성품을 지녔던 캐서린은 우리가 어떻게 살아야 하는지를 잘 가르치고 있어 그녀를 향한 존경심이 절로 우리나라온다. 극락세계에서 평화스러운 후생을 누리길 빈다.

마이너 리스(Mina Rees)박사와 이리나 보코바(Irina Bokova)총재 – 기억 속의 두 여성

살아가면서 우리는 수많은 사람들을 만난다. 의도적인 만남도 있고 우연한 만남도 있다. 그렇게 많은 사람들 중 우리의 기억에 질게 남는 사람 수는 그리 많지 않다. 자주 만난 사람들의 기억은 자연스레 깊게 남아있게 마련이다. 그러나 한 두 번 밖에 만나지 않았는데도 웬지 뇌리에서 떠나지 않는 사람들도 있다. 나에게 는 잠깐의 만남 밖에 없었는데도 내 기억 속에 깊이 남아있는 두 여성이 있다. 한 분은 내가 박사학위 과정 학생시절 부딪힌 뉴욕시립대 대학원장(마이너 리스(Mina Rees, 1902–1997)박사)와 2016년에 UNESCO 나노과학기술 메달을 나에게 수여한 이리나 보코바(Irina Bokova,

1952-) 전 UNESCO 총재다.

박사학위 수여식 준비로 식장이 어수선했다. 미국뉴욕시립대(CUNY)는 박사학위 수여식을 별도로 행했다. 뉴욕시에 흩어져 있는 몇 개 CUNY 산하 대학들은 별도로 학사·석사 학위 수여식을 갖지만 박사학위 수여식을 함께 행했다. 박사학위 과정이 통합되어 운영되고 있기 때문이었다. 박사학위 수여 대상자들은 알파벳 순으로 맨 앞줄에 자리하고 앉았다. 뒤에는 친척들이 한 쪽에, 또 한 쪽에는 지도교수들이 앉았다. 특히 지도교수들의 상당수가 자신들의 박사복을 입은 장면이 이채로웠다. 출신학교들이 다양해 그들의 박사복도 다양하여 특히나 눈에 잘 띄었다. 우리들은 캡의 술이 오른쪽으로 되어 있는지 확인했다. 후드(hood)는 단상에서 입혀주고-뉴욕시 고등교육감이-금색 모자술은 리스 대학원장이 오른쪽에서 왼쪽으로 옮겨주었다. 대학원 신문을 통해 지상으로만 만났던 리스 원장이 확대되어 내 눈에 들어왔다. 후리후리한 키에 60대 중반의 여성. ‘진박사님, 박사학위 취득을 축하합니다.’

모자 술을 옮겨 준 후 따뜻한 미소와 함께 축하의 악수를 청해왔다.

‘고맙습니다. 리스 원장님!’

참으로 짧은 만남이었으나, 그녀가 나에게 준 인상은 짙었다. 인자하면서도 근엄했다고 기억한다.

‘그녀는 어떻게 이리 높은 지위에 오를 수 있었을까?’

그녀에 관한 몇 가지 정보는 나를 놀라게 했다.

리스 원장은 내가 연구실이 있던 헌터대학(Hunter College)을 최우등으로 졸업한 후, 시카고 대학과 컬럼비아 대학에서 수학공부를 해



박사학위를 받았다. 원래 컬럼비아 대학에서 공부를 마칠생각을 갖고 있었으나, 당시(1920년대)만 해도 여자 박사학위 과정생을 받기 지 않음을 깨닫고는 석사학위 취득(1925년) 후 모교 헌터대학으로 돌아가 교육에 투신했다. 후에 시카고 대학에서 박사학위를 취득했다(1931년). 박사학위논문 내용은 추상대수학 분야였다.

‘아니, 리 원장이 수학자였어?!’

2차 세계대전 시절이 그녀에게 행정능력을 발휘할 기회를 주었다. 사실 그녀는 컬럼비아 대학 대학원 시절 법학도 공부해두었다. 대전 기간동안 리스박사는 미국 과학연구개발국(Office of Scientific Research and Development)의 응용수학 기술고문 겸 최고보좌역으로 일했다. 전후에 그녀는 해군연구국(Office of Naval Research, ONR)의 수학과장을 거쳐 과학부국장이 되었다. 그녀는 ONR 재직 중 많은 업적을 쌓았다: 전산을 위한 수학적 알고리즘 연구 사업 및 대학 전산시스템 구축(예컨대 MIT의 Whirlwind)사업의 실행에 절대적 역할을 담당했다. 특이한 사실은 진공관 대신 트랜지스터의 사용을 주장하고, 개선된 디스플레이

개발의 필요성을 주장했다는 점이다. 리스 박사는 수학적 재능을 통해 고속 컴퓨터 기술 개발에 족적을 많이 남겼다. 그녀는 1953년에 헌터대학 학장으로 돌아와 그 자리를 여러 해 차지하다가 1961년에 뉴욕시립대(CUNY) 대학원 프로그램 담당 원장이 되었다. 내가 박사학위 취득 시(1969년)에는 CUNY 대학원장이었다. 같은 해에 그녀는 미국과학진흥협회(American Association for Advancement of Science, AAAS) 회장으로 당선되었다. 그녀가 AAAS의 첫 여성 회장이 되었고, 당시에 미국에서 큰 뉴스가 되었다. 뉴욕타임스지는 이 사실을 전하며, ‘여성들이 그 수준의 과학자들 사회에서는 희귀하게 여겨지고 있으나, 리스 박사는 마리 큐리(Marie Curie), 리제 마이트너(Wise Meitner)와 마가렛 미드(Magaret Mead)처럼 과학적 창의성이 남자들만의 전유물이 아님을 증명했다.’며 그녀의 업적과 능력을 극찬했다.

1969년 8월 초, CUNY를 떠나 직장생활을 곧 시작해야 될 즈음에 나는 리스 대학원장을 찾았다.

‘리스 원장님. 안녕하십니까. 지난 6월 5일 박사학위를 받은 화학과의 진정일입니다. 기억하실지 모르겠지만...’

‘진박사님, 물론 잘 기억합니다. 한국학생이 우리 대학원에는 별로 없어, 잘 기억하고 있습니다.’

‘제가 뉴욕시를 떠나게 되어 인사 차 찾아뵙고 싶습니다.’

나는 직장을 얻어 뉴욕시를 떠나게 된 배경을 설명하고는, 조그만 한국 수공예품을 드렸다.

‘진박사님, 성공적인 직장 생활을 빕니다. 안

녕히 가십시오.’

이 인사말을 그녀와 나눈 만남이 결국 마지막 만남이 되었다. 나에게 박사학위를 얹어 준 그녀가 고맙고 그녀와의 인연이 자랑스럽기만 하다. 그녀는 미국 수학회 및 전산학회, 여성단체, 미국학술원, 영국왕실, 미국대통령 등으로부터 여러 상과 훈장을 받았다.

두 번째 여성은 이리나 보코바 제 9대 UNESCO 총재다. 보코바 총재는 불가리아의 소피아에서 1952년에 태어났다. 2016년 10월 11일, 나는 프랑스 파리 UNESCO 본부에서 개최된 2016년도 UNESCO 나노과학기술 메달 수여식에 수상자로 참여했다. 소강당에서 수여식이 개최되었다. 보코바 총재가 수상자 모두에게 일일이 메달과 상장을 수여했다. 한국 사람으로서는 처음이요, 아시아 사람으로는 두 번째로 이상을 받게 된 영광이 나를 어리둥절케 만들었다. 나보다 10년 젊은 보코바 총재는 부드러운 미소로 사람들을 대했고, 어찌보면 약간 근엄함도 느끼게 했다. 그녀가 UNESCO 총재가 된 배경이 궁금해졌다.

그녀는 소피아에서 제일 영어학교를 마친 후 러시아 모스크바로 유학을 떠났다. 국제관계에서 석사학위를 받은 후 불가리아로 귀국해 국내정치와 외교에 활발히 참여했다. 불가리아 공산당의 요직에 있던 부친의 영향도 많이 받은 듯 했다.

불가리아의 외교부에서 승승장구 해 외무부장관이 되었고, 프랑스와 모나코 대사 노릇도 했다. 또 국회의원으로도 두 임기를 보냈다. 2009년 11월에는 9대 UNESCO 총재가 되었다. 첫 여성 총재이자 동남유럽 출신이었다. 그녀는 성평등, 교육개선, 테러방지, 지적재산권

보호에 앞장섰다. 그녀는 인종차별에 대해 강한 반대 입장을 견지했고 유대인 학살을 비난했다.

그녀의 활발하고 훌륭한 활동은 세계적 반향을 일으켰다. 그녀는 우리나라 이화여대(2010년)를 비롯해 세계 각국의 대학에서 25개나 되는 명예박사학위를 수여받았을 정도다. 우리나라 정부는 2014년에 그녀에게 외교공로 훈장을 수여했다.

반기문 UN 사무총장의 가장 유력한 후계자로 떠올랐던 보코바 여사가 불가리아 정부와의 마찰로 UN 사무총장에 당선되지 못하는 불운을 맞보게 되어 안타까웠다. 불가리아 여성 두 후보가 경쟁하고 표를 나누는 불편한 쓴 경험을 하게 되었다.

UNESCO 메달 시상식 후 가진 저녁 만찬에 내 옆자리를 지켜주었던 보코바 총재에게 슬쩍 농담을 던졌다.

‘보코바 총재님, 총재님 성을 조금 변형시키면 ‘보고파’가 됩니다. 이 말은 한국말로 ‘당신을 보고싶다’는 뜻을 나타냅니다. 많은 한국인들은 총재님을 만나보고 싶어합니다.’

‘고맙습니다. 진교수님. 제가 한국을 방문했을 때 한국인들이 저에게 베풀어 준 따뜻한 환영과 배려는 제 머릿속에 크게 자리잡고 있습니다!’

그녀가 준 커다란 상장과 메달을 들고 함께 찍은 사진이 액자 속에서 내 집무실을 장식해 주고 있다. 조그만 불가리에서 세계적 여성 지도자가 된 보코바. 우리나라에도 그런 여성들이 많이 배출되길 바란다.



잠깐 만난 두 여인, 리스 CUNY 대학원장과 보코바 UNESCO 총재는 한 가지 공통점을 지녔다. 그들은 여성스러운 따뜻함과 지도자의 근엄함을 동시에 지니고 있는 뛰어난 활동가들 이었다. 이미 타계한 리스 대학원장의 평화스러운 영면을 기도하며, 보코바 총재의 장수·평안을 빈다.

진정일



서울대 화학과를 졸업하고, 미국 뉴욕시립대에서 1969년에 고분자화학박사학위를 취득했다. 귀국 후 고려대학교 화학과 교수로 재직하였으며, 대한화학회, 한국고분자학

회, 한국과학기술학회, 한국과학편집인협의회, 한국과학문화교육단체 연합회장, IUPAC 회장을 역임했다. 또한 한국과학상, 일본고분자학회 국제상, UNESCO 나노과학기술 메달, 과학기술창조장(1등급)을 수상했다.

식품의 원산지 판별법 개발 현황

이 광 식 (한국기초과학지원연구원 연구위원)

점차 가속화 되는 국제화와 국가 간 자유무역협정의 확대로 가공 또는 비가공 식품이 예전보다 훨씬 자유롭게 각국의 국경을 넘나들게 되었다. 국가마다 식품에 대한 선호도가 다르므로 같은 종류의 식품이라도 원산지에 따라 국가별로 판매 가격에 큰 차이가 있을 수 있다. 예로서, 우리나라에서는 국내산 한우 고기가 미국산이나 호주산보다 훨씬 높은 가격에 거래되고 있으며, 국내산 한약재도 중국산보다 선호도와 가격이 높다. 우리 국민의 대부분은 수입산 농축산물보다 국내산을 선호하지만 수요에 비해 공급이 부족하기 때문에 국내산이 비싸게 거래된다. 국내산과 수입산 사이의 큰 가격 차이 때문에 식품의 원산지 위조를 통해 더 많은 이익을 남기고자하는 범죄행위가 발생하고 시장질서가 교란되는 경우가 종종 발생한다.

식품의 원산지를 과학적으로 판별하는 것은 세계적으로 중요한 문제가 되었으며, 원산지 판별 분석 기술은 그 중요성을 더해 가고 있다. 특히 유럽연합(EU)에서는 시장 단일화에 따라 식품 원산지 및 품질관리 연구가 한층 강화되고 있다. 식품의 진위 감별 및 원산지 판별 기술은 품질이나 원산지를 속여 부당 이익을 취하는 행위를 감별해 낼 수 있는 강력한 도구가 되며, 식품의 안전과 품질관리에 매우 중요하다. 기대수명의 증가로 건강에 대한 관심이 높아짐에 따라 유기농법으로 생산된 농축산물에

대한 선호도가 뚜렷이 높아지고 있다. 특정 지역에서 유기농법으로 재배된 농축산물은 질적 우수성을 인정받아 고가로 거래되고 있으며, 식품의 원산지 판별 기술은 이들의 가치를 보호할 수 있는 중요한 수단이 되어 소비자들에게 품질에 대한 신뢰를 제공할 수 있다.

2008년 광우병 사태를 계기로 우리정부에서는 식품의 안전과 품질관리에 더 큰 노력을 하고 있다. 농축산물에 대한 원산지 표시를 점차 의무화하고 단속을 강화하고 있지만, 의도적으로 원산지를 위조한 농축산물을 단속하는 것은 쉬운 일이 아니다. 국내 시장에서는 중국산을 국내산으로 위조하여 고가로 판매하다 적발되는 경우가 많은데, 위조 여부를 육안으로 감별하는 것은 매우 어렵다고 한다. 중국에서 생산되어 우리나라로 수입되고 있는 농산물 중에는 국산 품종이 많아서 유전자 검사법으로 국내산과 중국산을 감별하는 것은 의미가 적다.

식품의 원산지 위조로부터 국내 생산 농가의 피해를 최소화하기 위해 위조 여부를 과학적으로 판별하는 방법의 확보가 필수적이다. 원산지 위조 문제로 법정 다툼이 있을 경우에 과학적 판별법의 보유 여부는 문제 해결에 매우 중요한 역할을 하게 된다. 식품의 원산지 판별 및 진위 감별에 대한 기술의 발전은 자국민의 먹거리에 대한 불안감을 해소해 줄 뿐만 아니라, 공급자에 대한 정보를 제공하여 유통의 투명성

을 보장해 줄 수 있다. 정확하고 객관적인 원산지 판별법을 확립하고 있지 못하면 우리 농축산물에 대한 국제적인 보호망도 확보할 수 없어 국가 경제적으로도 타격을 입게 된다. 원산지 위조 문제로부터 식품의 안전성을 확보하고 생산자와 소비자를 동시에 보호하기 위해서는 식품의 원산지를 과학적으로 판별할 수 있는 분석기술의 지속적인 발전이 필요하다.

원산지 판별법

지난 20여 년간 세계의 여러 지역에서 생산된 다양한 종류의 식품에 대한 원산지 판별법을 개발하기 위한 연구들이 수행되었다. 식품의 원산지 판별을 위해서는 질량분석법, 분광분석법 및 분리분석법이 흔히 이용 된다 (표 1). 전자코 분석법이나 유전자 분석법이 이용되기도 한다. 한 가지 분석법보다 두 가지 이상의 분석법을 결합하여 사용하면 판별의 정확도를 높일 수 있다.

유전자 분석기술은 형사사건에서 범인 검거에는 탁월하지만 식품 원산지 판별에는 제한적으로 밖에 사용되지 못한다. 유전자 분석은 품종에 대한 정보는 제공할 수 있지만 원산지에 대한 정보는 제공할 수 없기 때문이다. 농축산물의 품종을 수입하여 생산한 후에 품종을 들

[표 1] 식품 원산지 판별에 이용되는 분석법

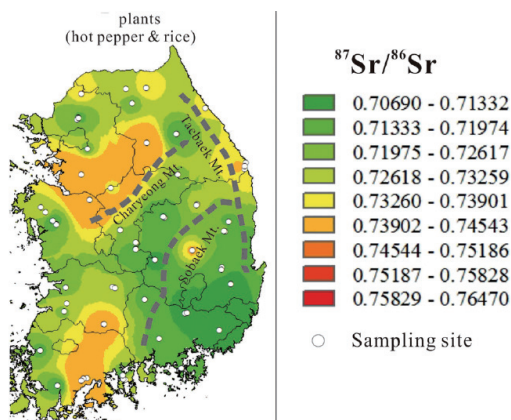
분석법	주요 분석기술
질량 분석법	Isotope ratio mass spectrometry (IRMS)
	Inductively coupled plasma mass spectrometry (ICP-MS)
	Proton transfer reaction mass spectrometry (PTR-MS)
	Gas chromatography mass spectrometry (GC-MS)
분광 분석법	Nuclear magnetic resonance spectroscopy (NMR)
	Infrared spectroscopy (IR)
	Fluorescence spectroscopy
	Atomic spectroscopy
분리 분석법	High performance liquid chromatography (HPLC)
	Gas chromatography (GC)
	Capillary electrophoresis (CE)
기타	Sensor technology
	DNA technology
	Sensory analysis

여온 국가로 역수출하는 것이 일상화된 지금은 유전자 분석기술로 식품 원산지를 판별하는 것은 거의 불가능하다.

식품의 원산지 판별을 위하여 활용되고 있는 방법으로는 1) 동위원소와 미량원소 분석 기술, 2) 대사체 분석 기술, 그리고 3) 유전자 분석 기술이 있다. 농산물은 재배된 지역의 토양이나 기후에 영향을 받고, 축산물은 생육된 지역의 기후나 먹이의 특성에 크게 영향을 받는다. 이로 인해 지리적 위치에 따라 농축산물의 동위원소, 미량원소 및 대사체 함량에 차이가 있으



[그림 1] 식품 원산지 판별 절차



[그림 2] 우리나라에서 재배되는 고추와 쌀의 Sr 동위원소 지도의 예

며 이 자료를 분석하고 통계 처리하여 원산지 판별을 하는 것이다 (그림 1).

원산지 판별의 추적자: 동위원소

동위원소 분석기술은 원산지 판별 기술의 핵심중 하나이다. 식품의 원산지 판별 연구에 이용되고 있는 동위원소에는 수소($^2\text{H}/^1\text{H}$), 탄소($^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$), 질소($^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$), 산소($^{18}\text{O}/^{16}\text{O}$), 황($^{34}\text{S}/^{32}\text{S}$) 및 스트론튬($^{87}\text{Sr}/^{86}\text{Sr}$) 등이 있다 (표 2). 농축산물 생산 지역의 토양 성분, 섭취한 물과 사료의

동위원소 조성은 농축산물의 체내에 반영되어 있다. 산소와 수소 동위원소는 생산 지역의 기후나 지리적 요인에 의해 주로 영향을 받으며, 탄소와 질소 동위원소는 가축의 먹이와 비료에 영향을 받는다. 스트론튬 동위원소는 생산 지역의 기반암과 토양에 지배를 받는다. 농축산물은 가공 과정에서 동위원소 분별작용이 일어나기도 하는데 동위원소를 이용하여 가공과정과 원재료를 추적할 수 있다. 기후 특성을 나타내는 산소와 수소 동위원소를 지질 특성을 제공하는 스트론튬 동위원소와 함께 활용하면 원산지에 대한 정보를 보다 정확하게 얻을 수 있다.

동위원소의 공간적 분포 연구결과는 지난 십여 년간 동위원소지도(isoscape)로 발간되고 있으며, 이것들은 인류학, 고고학 및 법과학에서 원산지 추적의 기본 자료로 활용되고 있다 (그림 2). 원산지 판별의 정확도를 높이기 위해서는 두 가지 이상의 동위원소나 미량원소를 적절히 조합한 다중추적자를 활용하는 것이 효과적이다.

[표 2] 식품 원산지 연구에 활용되고 있는 동위원소

동위원소	분별작용 기작	제공정보
$^1\text{H}/^2\text{H}$	증발, 응축, 강수	지리정보
$^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$	C3 및 C4 식물	식습관(지리정보)
$^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$	먹이사슬단계, 해양·육상 식물, 농업형태	식습관(지리정보)
$^{18}\text{O}/^{16}\text{O}$	증발, 응축, 강수	지리정보
$^{34}\text{S}/^{32}\text{S}$	박테리아작용	지리정보(해양)
$^{87}\text{Sr}/^{86}\text{Sr}$	암석의 연대와 Rb/Sr 비	기반암(지리정보)

연구 동향

생산자와 소비자를 철저히 보호하고 원산지 위조 행위를 감시하기 위해 원산지 분석 기술이 활용되고 있다. 식품의 원산지 추적에 대한 연구는 유럽연합과 북미에서 가장 활발하게 진행되고 있으며 이와 관련된 동위원소 분석법 개발을 위해 산·학·연의 협동 연구가 진행되고 있다. 유럽에서는 식품의 원산지 연구를 통한 안전한 식품관리를 위하여 “TRACE (Tracing Food commodities in Europe)” 라는 프로그램이 시행되었고 2005~2009년에 19백만 유로의 연구비가 투입되어 많은 성과를 얻었다.

해외에서는 최근 십여 년간 식품의 원산지 추적에 관한 연구가 급속히 증가하였으며, 많은 종류의 농축산물에 대한 원산지 판별이 가능해

지고 있다. 쇠고기, 돼지고기, 양고기, 해산물, 우유·유제품, 와인, 밀, 쌀, 양파, 감자, 과일주스, 벌꿀 등에 대한 원산지 판별 연구가 이루어지고 있다.

국내에서도 동물성식품과 식물성식품의 다양한 종류에 대한 원산지 판별 연구가 이루어져왔다 (표 3). 1990년대 후반부터 연구가 이루어졌는데 특히 최근 십여 년간 연구가 비교적 활발히 수행되었다. 이는 국내에서도 식품에 대한 대사체, 미량원소 및 동위원소 분석이 가능한 시설이 구축된 것과 밀접히 관련되어 있다. 유럽연합에서는 원산지 연구를 위해 유럽 전역의 토양에 대한 동위원소 특성에 대한 연구를 진행 중에 있으며 우리나라에서도 최근 이러한 연구가 시도되고 있다.

우리나라의 기후와 토양 특성은 다른 나라와

[표 3] 국내 주요 식품에 대한 원산지 연구 현황

식품류		분석 장비	활용 추적자	참고문헌
동물성 식품	쇠고기	NMR IRMS	대사체 C/N/H/O동위원소	[1] [2,3]
	돼지고기	IRMS/(MC)ICP-MS	C/N/H/Sr동위원소/미량원소	[4,5]
	우유	IRMS	C/N/O/S동위원소	[6,7]
식물성 식품	인삼	NIR/ICP-AES IRMS NMR/TIMS/ICP-AES	섬유소/단백질/녹말/미량원소 C/N/H/O/S동위원소 대사체/Sr동위원소/미량원소	[8] [9-11] [12]
		NMR/ICP-MS/UPLC-MS	대사체/미량원소	[13,14]
		MC-ICP-MS IRMS/ICP-MS	Sr동위원소 C/N/O/S동위원소/미량원소	[15] [16,17]
	쌀	TIMS/ICP-AES/ICP-MS NMR	Sr동위원소/미량원소 대사체	[18,19] [20]
	배추	IRMS	C/N/O/S동위원소	[21]
	감자	NMR IRMS	대사체 C/N/H/O/S동위원소	[22] [23]
	마늘/양파	NMR FT-IR	대사체 지방산/단백질 외	[24,25] [26]
	참기름/콩기름	IRMS	C/N/O/S동위원소	[27]
	표고버섯			

차이가 있기 때문에 외국의 자료들을 국내에서 생산되는 식품에 그대로 적용하기 어렵다. 식품의 원산지 추적에 대한 연구를 보다 활발히 진행시켜 토양과 식품 등에 대한 많은 자료를 축적한다면 국내 분석 기술로 우리 농축산물을 보호하는데 큰 역할을 할 수 있을 것이다. 식품 원산지 판별 기술이 향상됨에 따라 식품의 원산지 표시를 속여 부당 거래를 하는 행위를 찾아 낼 수 있는 훌륭한 도구로서 활용될 수 있을 것이다.

참고문헌

- [1] Y. Jung et al., J Agric Food Chem 58, 10458–10466 (2010)
- [2] Y.S. Bong et al., Rapid Commun Mass Spectrom 24, 155–159 (2010)
- [3] M. Horacek and J.S. Min, Food Chem 121, 517–520 (2010)
- [4] W.J. Shin et al., Rapid Commun Mass Spectrom 32, 1843–1850 (2018)
- [5] Y.M. Park et al., Meat Sci 143, 93–103 (2018)
- [6] I.M. Chung et al., Food Chem 160, 214–218 (2014)
- [7] I.M. Chung et al., Food Control 107, 106755 (2020)
- [8] Y.A. Woo et al., Microchem J 73, 299–306 (2002)
- [9] M. Horacek et al., Anal Chim Acta 682, 77–81, (2010)
- [10] K. Kim et al., Forensic Sci Int 255, 43–49 (2015)
- [11] I.M. Chung et al., J Ginseng Res 42, 485–495 (2018)
- [12] A.R. Lee et al., J Agri Food Chem 59, 8560–8567 (2011)
- [13] Y.K. Kwon et al., Food Chem 161, 168–175 (2014)
- [14] E.J. Kim et al., J Agri Food Chem 59, 8806–8815 (2011)
- [15] B.Y. Song et al., J Agri Food Chem 62, 9232–9238 (2014)
- [16] I.M. Chung et al., J Sci Food Agric 96, 2433–2439 (2016)
- [17] I.M. Chung et al., Food Chem 240, 840–849 (2018)
- [18] Y.S. Bong et al., Food Chem 135, 2666–2674 (2012)
- [19] Y.S. Bong et al., Food Control 30, 626–630 (2013)
- [20] J. Kim et al., Food Chem 137, 68–75 (2013)
- [21] I.M. Chung et al., Food Chem 212, 48–57 (2016)
- [22] S. Jo et al., Int J Food Proper 23, 241–254 (2020)
- [23] J.H. Park et al., Food Control 101, 121–125 (2019)
- [24] S.Y. Kim et al., Food Control 112, 107113 (2020)
- [25] G. Jin et al., J Oleo Sci 66, 337–344 (2017)
- [26] B.J. Lee et al., PloS One 13, e0196315 (2018)
- [27] I.M. Chung et al., Food Chem 264, 92–100 (2018)

제로에너지 건축물 구현을 위한 BEMS 기술

김 태 영¹, 강 원 희¹, 이 제 헌², 이 광 호¹

(¹고려대학교 공과대학 건축학과, ²삼성전자(주) 생활가전사업부)

들어가는 말 : 건물에너지 소비의 중요성

산업혁명 이후 무분별한 화석연료 사용으로 인해 대기 중 온실가스 농도가 증가하여 지구 온난화 현상을 비롯해 많은 문제가 발생하고 있다. 국제 에너지 기구인 IEA의 보고서에 의하면, 전 세계 에너지 수요는 경제의 발전과 지역의 냉방 및 난방 수요의 증가에 따라 빠른 속도로 증가하고 있으며, 에너지 수요 증가의 70%를 화석연료가 차지했다고 발표했다[1]. 대한민국의 경우 에너지 자원의 해외 수입 의존도가 90% 이상으로 굉장히 높은 편이며, 전력 생산을 위한 화력발전소에 대부분 화석연료를 사용한다. 이러한 과정에서 대량의 이산화탄소가 배출되고 이산화탄소로 인해 지구온난화의 주범으로 꼽히는 온실효과를 일으키게 된다. 이에 따라, 국내외적으로 화석에너지를 대체할 수 있는 지속 가능한 에너지에 관한 관심이 높아지고 있다.

2017년도 에너지 총 조사 보고서에 따르면, 국내 건물부문의 에너지 소비량은 전체 에너지 소비량의 약 25%를 차지하며, 상업·공공부문의 용도별 소비 구성 중 냉방 부분은 약 24.4%로 큰 부분을 차지한다. 또한, 상업·공공부문의 에너지 소비 추이에서 전력이 소비하는 에너지는 약

67%를 차지한다[2]. 이와 더불어 과학적 발전과 경제적 성장으로 인한 최근 건물의 대형화와 고층화에 따른 건물 내에서의 쾌적한 환경 조성을 위한 냉난방 전력사용량 증가, 설비 기기의 고급화 증대로 인해 건물 에너지 소비량은 점점 증가하고 있는 추세이다. 이러한 상황을 감안하여 볼 때, 건물에너지 절감은 국가적으로 매우 중요한 사항이다[2].

대한민국의 환경부와 정부에서는 2018년 7월 에너지 전환 정책과 국가 온실가스 감축 목표 이행력을 높이기 위해 ‘2030 국가 온실가스 감축목표 달성을 위한 기본로드맵 수정안’과 ‘제2차 계획기간 국가 배출권 할당계획 2단계 계획’을 확정했다. 이에 따라, 최근 건축물 에너지 절감 및 온실가스 감축에 획기적으로 기여할 수 있는 혁신적인 건물로서 제로에너지빌딩에 대한 관심이 높아지고 있다.

건물 온실가스 감축 : 제로 에너지 빌딩

제로 에너지빌딩의 정의는 단열재, 이중창 등을 적용하여 건물 외피를 통해 외부로 손실되는 에너지를 최소화하고, 태양광·지열과 같은 신재생에너지를 활용하여 냉·난방 등에 사용되는 에너지로 충당함으로써 에너지 소비를



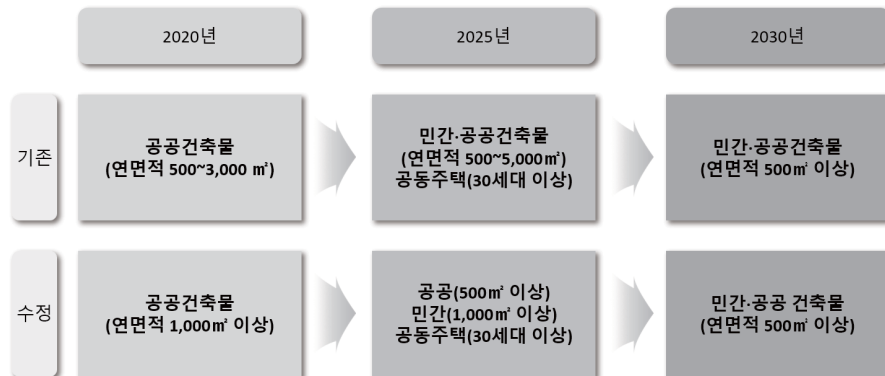
[그림 1] 삼성물산의 제로에너지 시범주택, '그린 투모로우' (출처: 삼성물산)

최소화하는 건물을 말한다. (미국의 경우 의미가 조금 상이한데, 공급망으로부터 에너지를 사용하는 만큼 공급하는 에너지와 생산되는 에너지 원이 같은 건물을 뜻한다.)

현재 대한민국 국토교통부는 제로에너지빌딩 의무화 세부로드맵을 발표해 확산·보급에 박차를 가하고 있다. 올해 2020년부터 연면적 1,000㎡ 공공건축물에 제로 에너지 건축 설계가 의무화되고, 2025년에는 500㎡ 이상의 공공건축물과 1,000㎡ 이상의 민간건축물이 의무화, 2030년에는 기준이 더 강화되어 500㎡ 이상 모

든 건물을 단열과 재생에너지 자체 생산 등으로 최소 수준의 에너지만 소비하는 '제로 에너지 건축물'로 지어야 한다. 국토부는 제로 에너지건축물이 연면적 기준으로 2020년 전체의 약 5%, 2025년 약 76%, 2030년 약 81%를 차지할 것으로 전망했다. 또한, 계획대로 진행된다면 온실가스 감축 로드맵 2030년의 신축건물 감축목표(540만톤)를 넘는 542만톤의 온실가스 감축이 가능해질 것으로 전망하였다.

그림 2는 국토교통부에서 발표한 제로에너지건축 의무화 세부로드맵으로써, 2020년에 중



[그림 2] 제로에너지건축 의무화 세부 로드맵 (출처: 국토교통부)



[그림 3] 제로에너지건축 구현을 위한 Passive, Active, 신재생 시스템 [4]

소규모 건축물(500~3,000m²)을 대상으로 최초 적용할 계획이었으나, 추가 공사비 부담을 고려해 여력이 큰 중대형건축물(1,000m² 이상)만 우선 적용 대상으로 선정했다.

제로 에너지 빌딩 구현 : Passive, Active, Renewable Energy

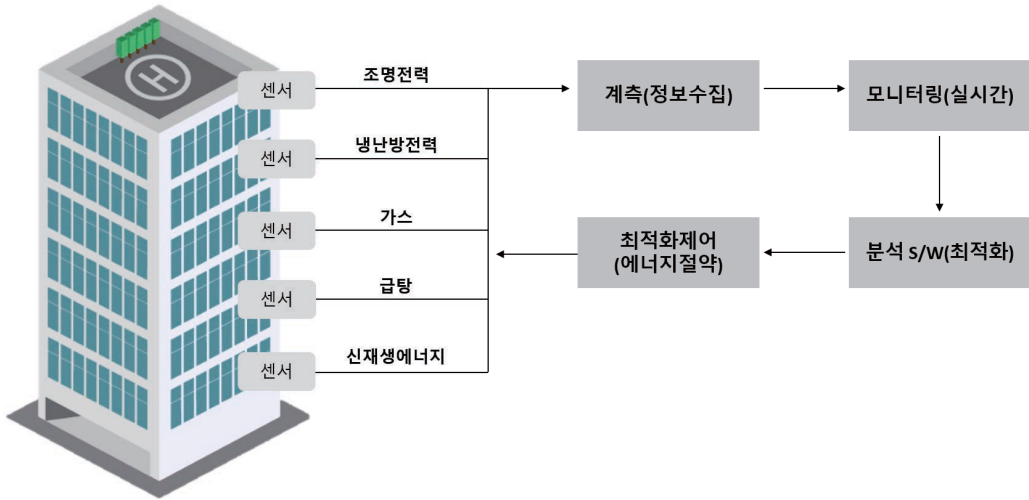
제로 에너지 빌딩 구현을 위해서 Passive와 Active, 신재생에너지 개념이 도입된다. 먼저 패시브(Passive)란 건물의 기밀성과 단열, 자연환기, 자연채광 성능 등을 강화해 냉·난방에너지요구량을 최소화하여 적절한 실내온도를 유지할 수 있게 설계하는 방식을 뜻한다. 액티브(Active)란 열회수 환기장치, 수열원 히트펌프 등 고효율 설비를 이용하거나 BEMS를 적용하여 에너지 소비량을 최소화하는 설계 방식을 뜻

한다. 신재생에너지란 연료전지 등의 신(新)에너지와 태양광 에너지, 지열 에너지, 풍력 등의 재생에너지를 통칭하는 에너지를 뜻한다.

다양한 제로 에너지 빌딩 구현 요소중, 최근 BEMS는 효율적인 에너지 관리와 에너지 절감 가능성이 큰 요소로 각광 받고 있다. 따라서, 본 고에서는 BEMS의 개념과 중요성에 대해 소개하고자 한다.

BEMS (Building Energy Management System)

건물관리시스템 중 하나인 건물자동화시스템(BAS)은 설비 기기 상태 감시 및 중앙관제를 담당하고, 시설관리시스템(FMS)은 건축물 정보, 자재, 장비, 작업, 인력, 도면 등의 관리를 담당한다.



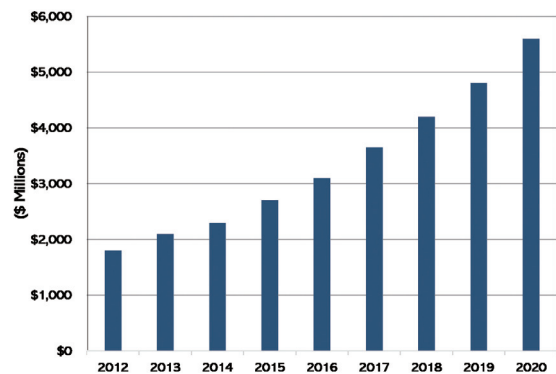
[그림 4] BEMS의 개략도 (출처:(주)아이디정보시스템)

하지만, BEMS는 실내환경 및 에너지 사용 현황을 계량·계측하고, 수집된 데이터로 설비 운영 분석과 에너지 소비분석을 통해 비효율적 운영설비를 파악하고, 최적의 설비제어를 통해 쾌적한 환경을 제공하며, 에너지 절감을 극대화하는 시스템으로 에너지 데이터를 관리하고 그 데이터나 BEMS에 탑재된 어플리케이션, 그 외 에너지 절약 제어와의 인터페이스에 의해 건물을 종합적으로 관리하는 시스템이다.

BEMS의 해외 시장, 개발 동향

세계 BEMS 시장은 2012년 18억 달러에서 2020년 56억 달러로 3배 이상 성장할 것으로 전망된다. 국외 주요국의 정책 동향을 살펴보면 이미 일본·미국·유럽은 기술 개발 및 실증 연구가 활발히 진행되고 있다. EMS 기술 개발 및 보급 확산을 위해 지역 에너지 관리

시스템인 CEMS(스마트시티) 실증사업이 활발하게 추진되고 있고, 지역 특성과 수용성을 고려한 제어 기술 개발과 지역 에너지 관리 서비스와의 연동 기술, 전력 계통 운용과 연계 제어 기술 개발이 적극적으로 진행되고 있다[3]. 일본은 세계 최초로 2002년부터 BEMS 설



[그림 5] 세계 BEMS 시장 전망
(출처: Navigant Research)

치 보조금 지원제도를 도입하여 시행 중이고, 미국 에너지부(DOE)는 5개년 스마트 그리드 연구개발 계획(2010년~2014년)을 수립하여 4개 분야(기준과 표준화, 기술·개발, 모델링, 분석)에 대해 연구·개발을 추진하고 있다. 독일은 ICT(Information and Communication Technology)를 활용해 미래 에너지시스템 구축 프로젝트를 추진하고 있다. 이처럼 일본, 미국, 유럽의 선진국은 BEMS 도입·확산을 유도를 위해 보조금 지원, VA 및 친환경 건축물 인증 등 기존 제도와 연계하여 보급·확대 정책을 시행하고 있다.

국내 BEMS 도입 현황

산업부는 지난 2017년 에너지 신산업 활성화와 에너지이용의 합리화를 위해 ‘공공기관 에너지이용 합리화 추진에 관한 규정’을 개정·고시했다. 공공기관에서 연면적 10,000㎡ 이상의 건물 신축 시 건물에너지관리시스템(BEMS)을 의무적으로 설치하여야 하며, 한국에너지공단으로부터 설치확인 과정을 거쳐야 한다. (에너지이용 합리화법 제8조 시행령 제15조) 서울특별시도 연면적 100,000㎡ 또는 21층 이상의 건축물을 새로 짓거나 리모델링할 때 BEMS 설치를 의무적으로 설치하도록 정했다. 하지만, 이러한 법규의 제정에도 불구하고 대한민국의 경우 BEMS 시장은 초기 단계라고 말할 수 있다. 이유는 소비자의 BEMS에 관한 관심이 부족하고, 설치비용이 비싸며, 수요자 관리 서비스 시장 미약, 국내 기술 경쟁력이 취약하기 때문이다.

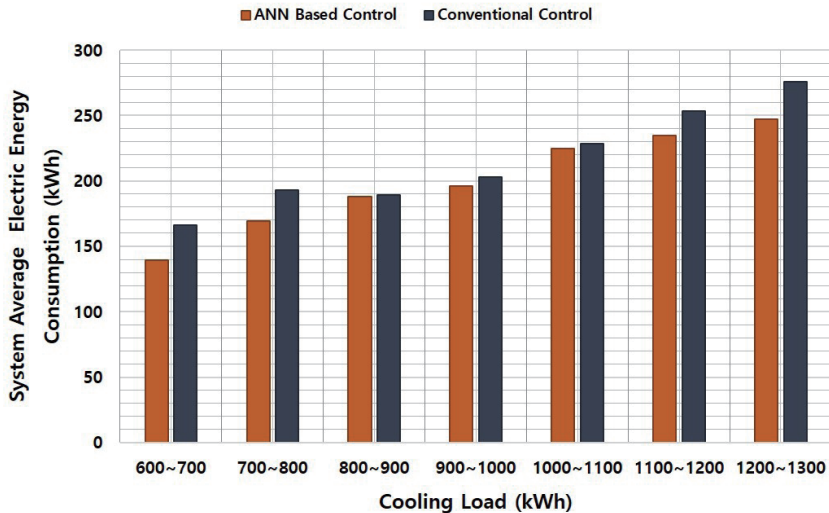


[그림 6] 서울시 관악구, "S"사 R&D Center [5]
(출처: (주)삼성전자)

BEMS를 통한 공조설비 최적제어 연구 소개

앞서 언급하였듯이, BEMS는 건축분야에서 에너지절감을 달성하기 위한 잠재력이 높은 시스템이며, 성능개선 및 제어를 통해 에너지 감축에 효과적인 기술이다. 하지만, BEMS 자체만으로 에너지 절감을 실현하기엔 다소 부족한 부분이 존재한다. BEMS에서 광범위한 건물 시스템의 세부적인 요소의 데이터 분석을 통한 제어가 이뤄지지 않는다면, 에너지 절감에 어려움이 따르기 때문이다. 따라서, 본 절에서는 건물 에너지 절감을 위해 BEMS 시스템이 실제 적용된 건물에서의 최적제어에 대한 필자가 연구한 내용을 간략히 소개해보고자 한다.

공조 시스템은 냉동기, 냉각탑, 펌프, Air Handling Unit, 보일러 등 서로 다른 특성을 가진 다수의 기기가 연동되며, 구성 요소 중 한 기기의 제어 설정값 변경은 시스템의 모든 제어 요소에 영향을 끼친다. 또한, 최적제어를 위한 분석의 경우에 많은 데이터를 필요로 하고



[그림 7] 냉방 부하에 따른 냉동기와 냉각탑 합산 전력 에너지 소비량 비교 [5]

비 선형적인 특징을 지닌다. 따라서, 저자는 데이터 분석을 통한 최적제어를 구현하고자, 실제 BEMS가 설치되어 운용 중인 업무용 건물에서 여름철 전력에너지 소비량 저감을 위한 연구를 진행하였다. 먼저, HVAC 시스템의 제어 요소를 분석하여 제어 설정값 최적화 방안을 모색하였으며, 이를 바탕으로 MPC(Model Predictive Control)기반의 공조설비 실시간 예측 제어 및 최적화 알고리즘을 개발하였다. 또한, 입력변수들의 다양한 성능정보를 활용하여 정량적인 에너지 소비량을 예측하는데 있어 보다 정확한 결과를 도출하기 위하여 개발한 알고리즘을 실제 건물에 적용하여 알고리즘 실증 평가 및 실측 운전데이터를 활용한 냉방 에너지 절감 효과를 분석하였다. 이를 위한 시스템 제어 설정 값 변수로는 냉각탑의 냉각수 온도와 냉동기의 냉수 온도를 설정하였으며, 냉수 및 냉각수 온도 고정제어 일때와 냉수 및

냉각수 온도 MPC 기반 동적 제어일 때의 시스템을 비교 분석하여 알고리즘을 검증하였다. 또한, 개발한 알고리즘의 공조설비 실측 운전 데이터를 활용하여 기존의 시스템과의 전력 소비량과 효율 비교분석을 통해 부하구간별 냉방 에너지 절감 효과를 분석하였다.

최종적으로 MPC 기반 제어 알고리즘의 에너지 절감효과 분석 결과, 600kWh ~ 1,300kWh 냉방 부하구간에서의 냉동기와 냉각탑의 전력 에너지 합산 평균 에너지 절감율은 7.37%를 나타냈다. 이처럼 BEMS를 활용하여 최적제어를 구현할시, 에너지 절감효과가 가능한 것을 확인할 수 있다.

맺음말

국가 스마트 그린 실현을 위해 에너지 절감 관련 다양한 정책을 제시하고 있다. 이를 위

해, 건축분야 에서는 차별화된 설비시스템의 최적제어와 각 기기별 에너지 소비량을 정확하게 파악하여 설비시스템의 유지관리를 통한 최적성능을 유지할 수 있는 기술이 개발되어야 한다.

건물 에너지 분야에서 선진국들은 자국의 환경에 적합한 기술을 개발하므로, 건축 환경적으로 서로 다른 국가의 기술은 상충되며 비효율적인 결과를 초래한다. 따라서, 한국은 자체적인 건물 에너지 효율 향상을 위한 기술 개발이 필수적이며, 개발한 기술의 적극적인 상용화를 통해 해외의존도를 감소시킬수 있을 것으로 전망된다.

건물은 산업, 수송과 함께 3대 주요 온실가스 배출 부문으로써, 국가 온실가스 배출량의 약 25%를 차지한다. 또한, 국내 총 에너지 사용량에서 건물 부문이 상당부분을 차지하며, 수입 에너지 의존도와 소비가 증가하는 실정이다. 즉, 건물의 온실가스 배출량과 에너지는 지속적으로 증가하는 추세이므로, 건물 에너지 관리와 CO₂절감은 잠재력이 있는 에너지 관련 분야로 전망된다.

이러한 문제점을 고려할 때, 건물에너지관리 시스템(BEMS)분야는 국가 전체적인 제로에너지건축물 의무화를 이루기 위해 필수적으로 연구/개발되어야하는 분야일 것이다. 또한, 민간 건물에서 관리에 대한 유지비용 절감 문제를 해결하기 위한 에너지 전문가가 부족한 실정인데, 체계적이고 통합적인 건물에너지 분야의 인력양성은 지속적으로 필요한 요소라고 사료된다.

참고문헌

- [1] 한국에너지공단, KEA 에너지 이슈 브리핑, 2018
- [2] 에너지경제연구원, 에너지통계월보, 2018
- [3] 국토교통부, 건물에너지관리시스템(BEMS)산업 기술동향조사 및 활성화 방안 연구, 2014
- [4] 신병철, 친환경 건축의 최근 경향과 나아갈 방향, 2012
- [5] 대한설비공학회, ML 기반 제어 설정 값 최적화 알고리즘 효과 검증에 대한 보고서 - 삼성전자(주), 2019

과학기술의 시대에 과학을 이야기한다는 것

박 윤 지

소통의 시대이자 불통의 시대다. 모든 생명은 서로 소통한다. 어떤 것들은 페로몬을 이용하고, 어떤 것들은 몸짓을, 언어를 이용해 소통한다. 우리도 그렇다. 우리는 우리가 알고 있는 것들을 말하거나 쓴다. 지식이 쌓여가고 전문화되며 내가 아는 것을 어떻게 전달할 것인지는 더욱 중요해지고 있다. 꼭대기에 있는 사람은 땅의 모습을 잘 보지 못하고 땅에 사는 사람들은 꼭대기에 있는 사람들이 무슨 일을 하는지 잘 알지 못한다.

과학이 특히 그렇다. 과학자들이 쓰는 용어는 다른 사람들이 한 번에 알아듣기 힘들고 설명을 한다고 해도 잘 이해하지 못하는 것들이 대다수이다. 대부분의 용어들이 영어이거나, 일본에서 들어온 번역체라는 것도 큰 이유다.

과학과 기술이 균림하는 시대에 우리 모두는 얼리어답터가 되지 않을 수 없다. 그런데 그 벽이 너무 높다. 당장 새로운 핸드폰 하나를 사려고 해도 성능을 따지고, 여러 사이트를 비교한다. 고릴라 글라스, 레티나 디스플레이 등의 용어는 처음 들어서는 알 수 없다. 뉴스에서는 어떤 공장에서 사고가 나서 어떤 물질이 유출되었다거나 4차 산업혁명이 어떻다는 등의 이야기가 심심치 않게 들려온다. 많은 사람들은 ‘위험한 거구나.’ 이상의 인상을 가지기 힘들다. 한창 알파고가 뜨거운 감자

이던 1~2년 전에는 인공지능이 인간을 뛰어넘을 날이 곧 머지 않았으며 약간의 선동과 날조를 하는 자극적 기사들도 많지 않았는가.

‘다리’의 존재가 필요해졌다. 랜스레 자극적인 제목과 내용으로 사람을 현혹하는 기사나 글, 유사과학이 아닌 그것이 진짜 무엇인지 말해줄 수 있는 사람들의 존재가 필요해진 것이다. 단, 그들이 아닌 우리가 이해할 수 있는 언어로.

우리나라는 과학커뮤니케이션의 개념이 늦게 들어온 편이라 아직 용어조차 낯설다. 과학커뮤니케이션을 하는 과학커뮤니케이터 1~2세대 분들은 교수이거나 작가이다. 이화여자 대학교의 최재천 교수님, KAIST 정재승 교수님, 하리하라 이은희 작가님, 국립과천과학관 이정모 관장님, 경희대학교 김상욱 교수님, 성균관대학교 김범준 교수님, 별뿔별 아줌마로 알려진 이지유 작가님 등.

7년 전부터 한국과학창의재단(이하 창의재단)에서는 ‘페임랩(FameLab)’을 통해 새로운 과학커뮤니케이터들을 발굴하고 있다. 나와 같은 신인 과학커뮤니케이터, 과학자들에게 페임랩은 일종의 데뷔무대인 셈이다. 과학커뮤니케이션 계의 ‘슈퍼스타K’라고나 할까. 페임랩은 3분 안에 과학적 내용을 설명해야 하는 프레젠테이션이다. 매년 2월 중순~말 즈음

공지가 올라오고 3월 하순부터 4월 초 예선을 거쳐 선발된 10명은 영국에서 오신 선생님께 ‘마스터클래스’라는 이름으로 1박2일간 집중교육을 받는다. 그리고 10명 모두의 3분짜리 발표는 5월 중순에 본선을 치른다. 네이버tv에 생중계까지 나가는 꽤 큰 스케일로.

페임랩을 통해 데뷔한 과커들은 과학커뮤니케이션전문가로 대우받는다. 재단에 소속된 과커들은 전문가활용비와 교통비를 지원받고 강연을 하거나 버스킹공연을 한다. 모든 자료 준비와 각 개인/팀의 공연 형식 등은 과커의 재량이다. 자신의 전공, 관심사나 트렌드에 따라 강연 주제를 정하고 PPT를 만든다. 버스킹 콘텐츠도 마찬가지로. 재료비를 지원받고 콘텐츠 기획안을 내고 준비하거나 기존에 있던 팀에 들어간다. 각 팀의 공연에 쓰일 BGM(백그라운드뮤직), 공연의 시간(대체적으로 5분~15분 사이이다.), 큐시트까지 모두 과커들의 손으로 만든다.

신규 과학커뮤니케이터들은 강연이나 공연에 나가기 전, 교육 캠프를 거친다. 우리 끼리는 ‘다들배움 캠프’, ‘버스킹 캠프’라고 부른다. 다들배움 캠프에서는 각자의 분야나 스타일에 따라 몇 개의 분과로 나뉘어 신규 커뮤니케이터들이 준비해 온 강연 콘텐츠를 발표하고 다른 사람들에게 피드백을 받아 자료를 보완한다. 버스킹 캠프에서는 기존에 있거나 신규 콘텐츠를 선보이고 새로운 공연을 만든다.

과학커뮤니케이션 계는 블루오션이다. 아직 과학문화가 태동기에 있는 우리나라는 과학커뮤니케이터들의 수가 많지 않다. 현재 대중에게 알려진 10년 이상 활동하고 계시는 시니어

커뮤니케이터분들은 많아야 30분을 넘지 않는다. 할 수 있는 활동은 다양하다. 기존의 책, 강연, 칼럼을 넘어 방송, 웹툰, 유튜브, 카드뉴스, 버스킹이나 연극 등의 공연까지. 나 또한 한국과학창의재단과 과학기술정보통신부에서 위촉된 과학커뮤니케이터로써 하고 있는 활동들이 있다. 창의재단에서 지원하는 중고등학교 방문 과학강연인 다들 배움을 위주로 과학공연인 사이언스버스킹에도 나간 적이 있고, 작년 12월 초에는 사이언스나이트라이브(SNL)라는 이름의 공연에 부스 스텝으로 참가하기도 했다.

창의재단이나 과기정통부 뿐 아니라 다른 기관에서도 과학문화소통활동을 많이 하고 있다. ‘카오스재단’에서 매 학기 카오스정기강연을, 여름에는 카오스콘서트를 열고 있다. ‘아시아-태평양이론물리센터(APCTP)’에서는 올해의 과학책을 선정하고 서대문자연사박물관과 연계해 강연을 개최하며 겨울마다 대학(원)생을 대상으로 과학커뮤니케이션스쿨을 모집한다.

KAIST의 정재승 교수님을 주축으로 한 비영리모임인 ‘10월의 하늘’은 매년 10월 마지막 주 토요일에 전국 각지의 도서관에서 동시에 강연을 진행한다. 또한, 서울 삼청동에 위치한 과학문화의 허브인 ‘과학책방 갈다’에서는 북토크, 캠프, 교육 등의 프로그램을 운영한다. 생물학연구정보센터인 BRIC, APCTP 산하의 웹진 크로스로드 등은 칼럼이나 기사를 통해 소통한다. 대중과학콘텐츠 개발 전문기업인 ‘과학과 사람들’의 경우, 팟캐스트를 만들기도 한다. 페이스북 페이지인 ‘이웃집 과학자’는 흥미로운 카드뉴스와 기사로 유명하다.

이상하게도 화학의 경우, 이름이 알려진 사람도 다른 분야에 비해 현저히 적을 뿐더러 신진 커뮤니케이터도 많지 않다. 내가 속한 폐임랩 기수에서는 10명 중 내가 유일한 화학 전공자이다. 화학 전공자로서 과학커뮤니케이션 활동을 하며 항상 의문을 가지는 요소이다. 일상과 가장 밀접하게 닿아 있는 부분이 아니던가. 종종 김상욱 교수님이나 다른 분들과 이야기할 기회가 생길 때마다 꺼내는 주제 중 하나다. 그럴 때마다 내가 하라는 답이 농담 반 진담 반으로 돌아오고는 하지만 나름 나온 답은 몇 가지가 있다.

다른 과학사와 비교해보았을 때, 거대한 담론이 적다. 우리가 아는 과학사의 대부분은 물리학이나 천문학을 중심으로 돌아간다. 뉴턴, 갈릴레오, 슈뢰딩거 등이 그렇다. 물리학이나 천문학 분야의 대중 강연에서 밥 먹듯이 나오는 이야기들은 세계관이나 사상이 바뀌는 류의 것들이다. 그러나 화학은 그런 거대담론들이 이 두 분야에 비해 많지 않다. 이 때문에 화학사를 이야기할 때에는 스토리빌딩이 더 중요해진다. 나의 경우, 화학사에 대해 이야기할 때에는 세계대전과 과학윤리의 이야기를 꼭 덧붙인다.

화학은 다른 자연과학에 비해 소위 ‘돈이 되는’ 학문이다. 화학분야의 전공자에게는 다른 자연과학 분야보다 더 많은 취업기회가 주어진다. 분석, 재료, 약학, 고분자, 석유화학 등 나아갈 수 있는 폭이 넓다. 1월 초에 떨림과 올림 리커버 기념강연 후에 김상욱 교수님을 포함해 동아시아 출판사의 한성봉 대표님과 마케팅 팀에서 나오신 분들, 우람스튜디오

디자이너 분과 이야기할 기회가 있었다. 그 자리에서 옆자리에 앉으셨던 한성봉 대표님께서 내리셨던 결론이다.

화학을 하는 사람들은 특히 바쁘다! 사람을 사귀는 것은 어디에서나 중요하다. 기본적으로 과학커뮤니케이터가 하는 일은 비과학인과 커뮤니케이션하는 활동이다. 당연히 과학커뮤니케이터 사이의 소통은 전제조건이다. 판이 좁은 만큼 서로 끌어주어야 나아갈 수 있는 곳이다. 많이 돌아다닐수록 좋다. 나의 경우에는 이런저런 행사에 많이 참여하는 편이다. 대중강연을 따라다니기도 하고, 시니어 커뮤니케이터 분들의 북토크나 다른 기관에서 주최하는 캠프에도 참여한다. 그러다 보면 자연스레 인사를 나누게 되고 무언가를 시작할 때 조언을 구할 수 있는 사람이 많아진다. 과학 유튜브 채널을 운영한다면 좋아요를 눌러줄 수 있는 사람 한 명이, 저술 활동으로 책을 내게 된다면 내 책을 홍보해 줄 사람 한 명이 더 생기는 것이다. 그리고 분명한 것은 기꺼이 그렇게 해 줄 사람들이 모두 우리의 동업자이자 선배이며 멘토라는 사실이다.

나와 같은 신인 커뮤니케이터들에게 멘토가 있다는 것은 좋은 지침과 힘이 되어준다. 꼭 과학 커뮤니케이션뿐만 아니라 다른 방면에서도 말이다. 다른 분들의 강연을 듣다 보면 어떤 식으로 비유해야 할지, 어떻게 인문학, 예술, 혹은 그 밖의 영역들을 끌어와야 하는지 대해 많이 생각하고 배우게 된다.

우리의 눈으로 보아야 한다. 중요한 것은 과학을 하는 사람이 아니다. 과학을 하지 않는 사람들이다. 정말 중요하지 않다는 것이 아니라

우선순위가 그렇다는 말이다. 과학을 하는 사람들에게는 구구절절 풀어 설명하는 것보다 전문용어 한 단어가 더 이해하기 쉬울지 모른다. ‘물질이 화학반응을 하기 위해 넘어야 하는 최소한의 에너지 장벽’이라는 말보다는 활성화에너지라는 말이 더 빠른 것처럼 말이다. 그러나 과학을 하지 않는 이들에게 이런 용어들은 과학을 더 어렵고 먼 것으로 만들기 일쑤다. 당장 화학을 전공하는 나도 전공 수업 때 새로운 용어나 개념이 나오면 받아들이기까지 꽤 시간이 걸리는데 그렇지 않은 사람들은 오죽하랴.

과학과 기술이 세상을 끄는 쌍두마차가 된 시대에 과학을 이야기한다는 것은 당연한 이야기이지만 당연하지 않은 이야기가 되었다. 여전히 많은 사람들은 과학을 어려워한다. 흔히

과학에 대해 가지고 있는 이미지가 복잡하고 긴 수식과 알아들을 수 없는 말들, 실험실에 박혀 하얀 가운을 입은 심오한 연구자의 모습이기 때문이다. 나는 과학이 이런 정적이고 딱딱한 이미지를 벗어 던지고 저녁을 먹으며 정치현안을 이야기하거나 전시회를 찾아가는 것과 같은 무계이기를 바란다.

아직 갈 길은 멀다. 사람들이 단순히 흥미를 가지게 하는 것을 넘어 계속 찾아오고 말할 수 있게 해야 하니까. 그러기 위해서는 우리가 먼저 다가가 함께 놀고 떠들 수 있어야 한다. 옆집에 사는 이웃이, 가족이 되어서 말이다. 그렇게 함께 뛰어노는 사람이 많아질수록 과학이 단순히 지식이 아니라 세상을 대하는 태도의 하나가 될 수 있지 않을까?

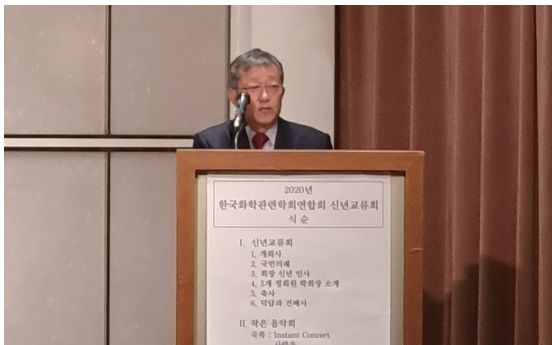
화학연합회 소식

1. 신년교류회 개최

한국화학관련학회연합회 2020년도 신년교류회가 1월 8일(수) 오후 3시 과충회관 SC컨벤션에서 열렸다.

이석중 총무이사의 사회로 한국화학관련학회연합회 최중길 회장의 인사말씀에 이어 5개 정회원 학회의 회장(대한화학회 정옥상 회장, 한국고분자

학회 김양국 회장, 한국공업화학회 이준혁 회장, 한국세라믹학회 유상임 회장, 한국화학공학회 이관영 회장)의 소개와 인사가 있었다. 또한 전임 회장님들과 내·외빈들이 소개되었으며, 신년교류회를 축하 하는 의미에서 이우일 한국과학기술단체총연합회 차기회장의 축사와 더불어 채영복 전 과학기술부장관과 이현구 한국화학회관 이사장의 덕담을 나누는 자리를 마련하였다. 이 자리에는 각 대학의 교수, 명예 교수, 연구소 연구원, 기업인 등 80 여명의 화학계 인사들이 참석하여 새해 인사를 나누며 즐거운 담소를 나누는 뜻 깊은 자리가 되었다. 특히 특별프로그램으로 호방하고 힘찬 금관5중주의 소리를 들으며 2020년 경자년 새해를 희망차게 시작하는 의미에서 작은 음악회를 개최하였다.



2. 미래 화학 인재상 포상

대한민국을 이끌 미래 화학 인재로 성장하기를 바라는 뜻을 담은 '미래 화학 인재상'을 전년도에 이어 올해도 시상 하였으며, 전국 5개교의 과학영재 고등학교 졸업생에게 포상하였다. 제3회 미래 화학 인재상을 받은 학생의 이름은 아래 표와 같으며, 대한민국의 미래 화학 인재로 성장하기를 바란다.



학교	서울과학 고등학교	경기과학 고등학교	대구과학 고등학교	대전과학 고등학교	한국과학 영재학교
성명	김태홍	박현우	박병호	배우진	장현성

3. 한국화학관련학회연합회 특별심포지엄

주제: 반도체 연구의 현재와 미래

(Semiconducting Materials, Present and Future)

일시: 2020년 7월 6일(월) 오후 3시



장소: 수원 광고컨벤션센터

14:30~14:50 접수

사회: 이석중 총무이사

14:50~15:00 개회사: 최중길 회장

15:00~15:30 Semiconductor Technologies from

Materials to Devices for Next-

Generation Display Applications

(오민석 / 전자부품연구원 수석연구원)

15:30~16:00 EUV lithography and its challenges

(임창문 / SK하이닉스)

16:00~16:20 <break time>

16:20~16:50 Fullerene and Nonfullerene Organic

Photovoltaic Materials for Renewable

Green Energy Sources

(우한영 / 고려대학교 화학과 교수)

17:00 ~ 행사 후 식사

[회의록]

2020년 제1차 편집운영이사회 회의록

일시 : 2020년 2월 17일(월) 오후 4시

장소 : 한국화학회관 3층 연합회 회의실

1. 참석자 : 장우동, 김정곤, 심우영, 유자형, 이민희,
장호원, 제정호, 최정규

2. 편집회의의 안건

1) 이사별 연간 담당 업무 배정

- 연간 담당 업무는 추후 조정 가능
- 편집위원에게 참고용으로 예전 화학연합 pdf 파일 송부 예정
- 우수연구단체는 각 학회별로 1건씩 추천하기로 함.

2) 2020년도 화학연합 12권 표지 검토:

- 2020년 2월 17일 편집운영이사회에서 논의된

내용을 그대로 활용하기로 함.

3) 12권 1호 원고 마감 시한

원고 마감시한은 다음과 같이 결정함.

저자 섭외 마감: 2월28일

원고 마감: 4월 30일

(단, 저자에게는 4월 15일 마감으로 통보)

3. 기타 토의

1) 2차 편집운영이사회 일정

1차회의에서 하반기 원고 담당을 모두 결정하였기 때문에 서면으로 회의를 진행하기로 하였으며 필요시 오프라인 회의를 개최하기로 함.

12권 2호 마감 후에 정리회의를 개최하기로 함.

[2020년 제1차 이사회 회의]

일시: 2020년 2월 19일 (수) 오후 5시 30분

장소: 티원 서울역점

참석: 금교창, 김양국, 김우식, 문두경, 우제완,
유상임, 이석중, 장우동, 정옥상, 정찬화,
조용수, 최중길, 이기성 (감사)

1. 성원 보고

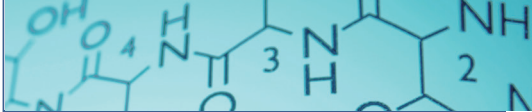
- 재적 이사 18명 중 참석 이사 12명 참석으로 정관 제24조 1항에 규정된 이사회 개최에 필요한 정족수(재적 이사 과반수)가 성원되었음을 보고함.

2. 개회 선언

- 정족수가 성원이 되었기에 한국화학관련학회 연합회 2020년 제1차 이사회 개회를 선언함.

3. 2019년 회무 보고

- 이석중 총무 이사가 2020년 사업계획과 2020. 1. 1. ~ 2020. 2. 18. 현재까지의 주요회무를 보고함. (P1~P4)



화학연합회 소식

4. 의안 심의

1) 2019년 회계 결산 승인에 관한 건 (P5~P8)

- 만장일치로 원안대로 승인함.

2) 정관개정에 관한 건 (p9)

- 정관개정안 :

(1) 정관 제12조(임원의 선임방법)의 총회 인준 사항을 이사회 인준사항으로 변경하고자 함.

(2) 정관 19조 ①항(총회의 소집)의 소집 시기를 상반기와 하반기로 변경하고자 함.

- 위 변경안에 대하여 재석이사 12명 전원의 찬성으로 정관 제7장(보칙) 제33조(본회의 정관을 개정하고자할 때에는 재석이사 3분의 2 이상의 찬성으로 의결한 후 감독청의 허가를 받아야 한다.)에 따라 정관을 개정하고 감독청의 허가를 받기로 의결함.

- 단, 감독청에서 기준으로 삼는 정관의 준칙에 의하면 임원을 최대 15명까지만 정수로 정하게 되어 있다는 의견이 있어, 감독청에 이사 정수에 대해 문의 후 답변에 따라 정관 이사의 정수를 조정하는 권한을 회장에게 위임하는 조건으로 정관 개정을 승인함.

5. 기타토의

- 연합회가 재정의 지속성을 갖추 수 있도록 특별회원사의 회원 수를 늘릴 필요성이 있어 올해 1학회가 1회사를 추천해 줄 것을 건의함. (최중길 회장)
- 기금을 마련 후, 외국의 비슷한 단체의 사례를 참조해서, 연합회가 나아가야 할 방향과 추진할 수 있는 사업을 찾아보는 것이 좋겠다는 의

견이 제시됨. (유상임, 김양국 부회장)

- 학회가 산·학·연·관 중, 관(官)과의 관계가 원활하지 못하는데 연합회가 이 부분에 대한 연결고리가 되었으면 좋겠다는 의견이 제시됨. (정찬화 이사)

- 회원 학회간 활발한 교류 활동을 위하여 이사들 사이의 교류를 좀 더 활성화하면 좋겠다는 의견이 제시됨. (김양국 부회장)

- 연합회에서 '젊은 과학자상'같은 의미의 상을 만들자는 의견이 제시 됨. (조용수 이사)

- 상을 제정하면, 상금의 규모가 어느 정도 되어야 하는데 연합회 자체의 예산이 적어 외부의 지속적인 후원을 받지 못하면 상을 유지하기 어려운 상황임. 따라서 상 제정에 앞서 후원사를 발굴하여 기금을 마련하는 것이 급선무라는 의견이 제시됨. (이석중 이사)

- 현재 이슈가 되고 있는 화학물질 등록 및 평가에 관한 법률(이하 화평법), 화학 물질 관리법 (이하 화관법)을 주제로 공청회 또는 포럼을 개최해 회원학회들의 의견을 수렴해서 관련 기관에 모아진 의견을 연합회 명의로 전달함으로써 관련 규제가 완화 또는 개정되는 데 힘을 실어주면 좋겠다는 의견이 제시됨. (문두경 이사)

- 과학용어의 의미와 사용에 있어서 우리와 북한에 많은 차이가 존재하므로 통일을 대비하여 남북한 과학용어의 비교연구가 요구되는바, 연합회가 주가 되어 우선 남북한 화학용어의 비교 연구를 위한 정부에 대한 지원요청도 필요함이 제안됨. (최중길 회장)

2020 대한화학회



정 옥 상 (대한화학회 회장)

1. 대한화학회 2020년도 임원

1) 운영위원회

회장		정옥상	부산대학교
부회장	총무	금교창	한국과학기술연구원(KIST)
	기획	옥강민	서강대학교
	학술	이동환	서울대학교
	홍보	황금숙	한국기초과학지원연구원
	산학협력	김필호	한국화학연구원
	교육	강석진	전주교육대학교
실무이사	총무	김 민	충북대학교
	기획	정낙천	DGIST
	기획	임미희	KAIST
	학술	이은성	POSTECH
	학술	곽경원	고려대학교
	홍보	강은주	경희대학교
	홍보	윤민영	경북대학교
	홍보	이준승	전남대학교
	산학협력	김정근	전북대학교
	교육	주상훈	UNIST

2) 이사, 감사

구분	성명	소속	성명	소속
이사	정옥상	부산대, 2020-2021 회장	하현준	한국외대, 2018-2019 회장
	강석진	전주교육대학교	금교창	한국과학기술연구원(KIST)
	손대원	한양대학교	유재훈	서울대학교
	이호선	경북대학교	이철범	서울대학교
	이영일	울산대학교	임만호	부산대학교
	채규운	원광대학교	정종화	경상대학교
	황금숙	기초과학지원연구원(KBSI)	허정녕	한국화학연구원
감사	이덕형	서강대학교	정택모	한국화학연구원

3) 지부

지부	지부장	
강원지부	김상철	한림대학교
경기지부	구상호	명지대학교
경남지부	정종화	경상대학교
광주·전남지부	이종백	전남대학교
대구·경북지부	강태종	대구대학교
대전·충남·세종지부	이석우	공주대학교
부산지부	장병용	부경대학교
울산지부	류광선	울산대학교
인천지부	김찬경	인하대학교
전북지부	한재량	전북대학교
충북지부	정용석	충북대학교

4) 분과회

분과회	분과회장	
고분자화학분과회	손대원	한양대학교
공업화학분과회	이익모	인하대학교
무기화학분과회	정종화	경상대학교
물리화학분과회	신석민	서울대학교
분석화학분과회	주재범	중앙대학교
생명화학분과회	양은경	KIST
유기화학분과회	이필호	강원대학교
의약화학분과회	배애남	KIST
재료화학분과회	김승주	아주대학교
전기화학분과회	정택동	서울대학교
화학교육분과회	백성혜	한국고원대학교
환경에너지분과회	이재영	GIST

5) 각급 위원회

위원회	위원장	
화학세계지 편집위원회	황금숙	KBSI
학술지간행위원회	신석민	서울대학교
기금위원회	이상기	이화여자대학교
화학술어위원회	문봉진	서강대학교
국제협력위원회	이철범	서울대학교
출판위원회	이선우	전남대학교
학술위원회	이원용	연세대학교
화학올림피아드위원회	류도현	성균관대학교
정보화사업위원회	양성익	경희대학교
화학교육·홍보위원회	강석진	전주교육대학교
여성위원회	이호선	경북대학교
연구윤리위원회	김학원	경희대학교
화학전공인증위원회	장우동	연세대학교
탄소문화원	이덕환	서강대학교
연구실안전위원회	이익모	인하대학교

2. 학술발표회, 총회 및 기기전시회 개최

1) 제125회 학술발표회, 총회 및 기기전시회 (춘계)

- 일시: 2020.7.6~7.8
- 장소: 수원컨벤션센터

2) 제126회 학술발표회, 총회 및 기기전시회 (추계)

- 일시: 2020.10.21~10.23
- 장소: 광주 김대중 컨벤션센터

3. '20년 주요 추진 사업

1) 2021년 대한화학회 창립 75주년 기념사업

- 대한화학회 75주년 기념사업 위원회 설립 (위원장: 이덕환 명예교수, 서강대)
- 화학 대중화 사업 추진
 - 화학 대중화 서적 발간
 - 주기율표 공모전

- 화학시화, 포스터 대회
- 화학 UCC 공모전
- 화학 포럼 개최

2) 「Bulletin of the Korean Chemical Society」

위상 제고 사업

- 편집장 선임: 남원우 (이화여자대학교)

3) 화학올림피아드 2020 계절학교

(겨울학교)

- 일시: 2020.1.6~1.18
- 장소: 충남대학교 강의실 및 실험실

(여름학교)

- 일시: 2020.7.26~8.7
- 장소: 전북대학교 강의실 및 실험실

4) 제52회 국제화학올림피아드 대회 참가

- 일시: 2020.7.6~7.15
- 장소: 터키 이스탄불
- 참가학생: 박준하(대구과고), 이민정 (대구과고), 전무겸(서울과고), 홍준하(서울과고)

4. '19 원소 주기율표 150주년 기념의 해, IUPAC 창립 100주년 기념의 해 사업 추진 결과

- 1) 원소 주기율표 동영상 제작 및 네이버 TV 업로드
: “주기율표와 원소, 150년의 이야기”라는 주제로 80여개의 국문으로 된 동영상 공개
- 2) 주기율표 공모전 시행

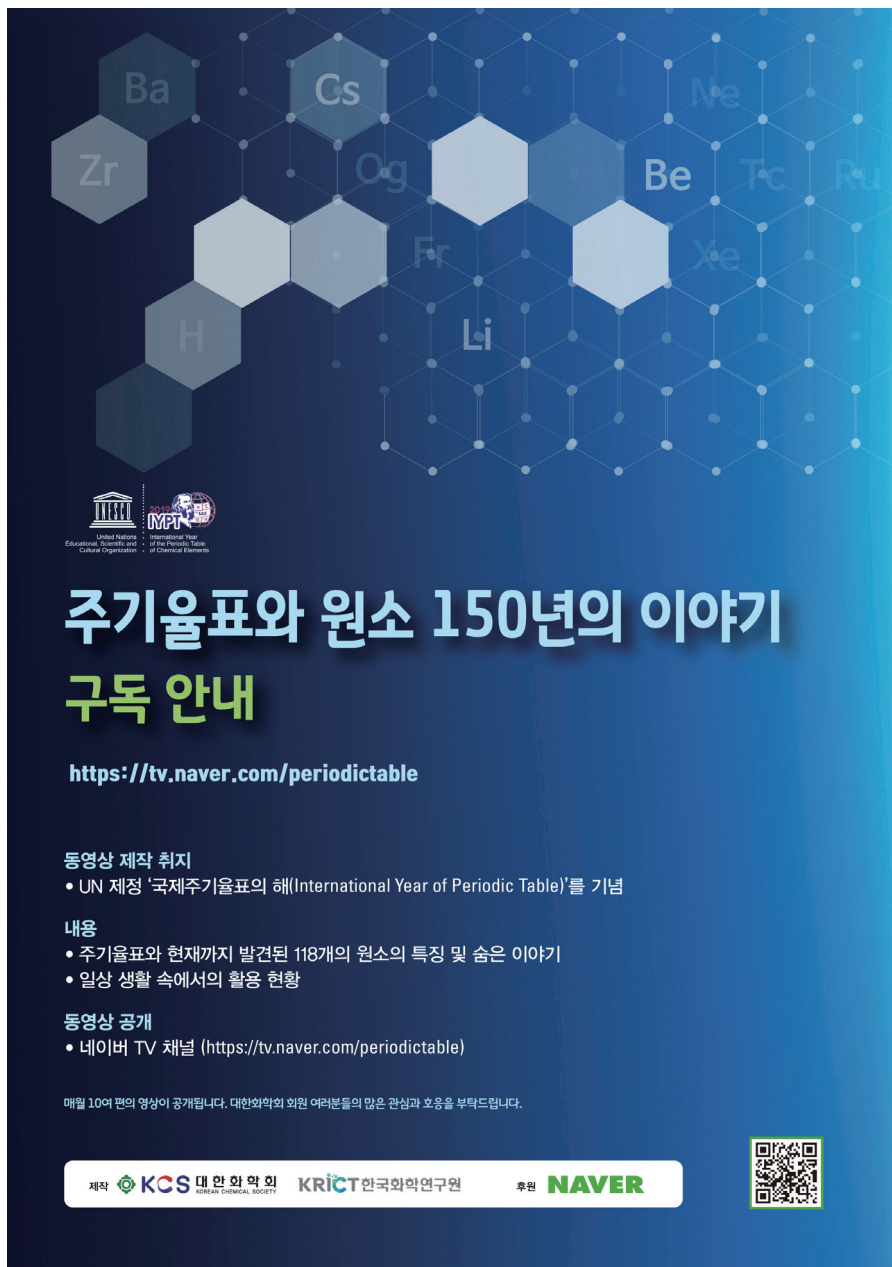
3) 화학시화, 포스터 대회 시행

4) 화학 대중화 서적 제작, 배포

: 「청소년이 묻고 화학자가 답하다. 진짜

궁금했던 원소 질문 30」

5) IUPAC 창립 100주년 기념 컨퍼런스 학술
대회 참석



The poster features a stylized periodic table with elements represented by hexagons on a blue background with a molecular network pattern. The title '주기율표와 원소 150년의 이야기' (The Story of the Periodic Table and Elements 150 Years) is prominently displayed in white and green. Below the title is the subtitle '구독 안내' (Subscription Guide). A URL <https://tv.naver.com/periodictable> is provided. The poster also includes logos for the United Nations Educational, Scientific and Cultural Organization (UNESCO) and the International Year of the Periodic Table of Chemical Elements (IYPT). At the bottom, there are logos for the Korean Chemical Society (KCS), KRICT, and Naver, along with a QR code.

주기율표와 원소 150년의 이야기
구독 안내

<https://tv.naver.com/periodictable>

동영상 제작 취지

- UN 제정 '국제주기율표의 해(International Year of Periodic Table)'를 기념


내용


- 주기율표와 현재까지 발견된 118개의 원소의 특징 및 숨은 이야기
- 일상 생활 속에서의 활용 현황

동영상 공개


- 네이버 TV 채널 (<https://tv.naver.com/periodictable>)

매월 10여 편의 영상이 공개됩니다. 대한화학회 회원 여러분의 많은 관심과 호응을 부탁드립니다.

제작  **KCS** 대한화학회
KOREAN CHEMICAL SOCIETY

 **KRICT** 한국화학연구원

후원 **NAVER**



2020 한국고분자학회



김 양 국 (한국고분자학회 회장)

1. 2020년 사업 안내

학회사업	일시	장소
동계워크숍	13(월) - 14(화)	곤지암리조트
제19회 고분자 신기술 강좌(연기)	4, 8(수) -> 10, 6(화)	대전컨벤션센터 부산컨벤션센터
춘계 정기총회 및 학술대회(취소)	4, 8(수) - 10(금)	대전컨벤션센터
2020 고분자 포럼(잠정연기)	5, 22(금) - 23(토)	부여롯데리조트
제28회 고분자 아카데미	8월 20일	미정
IUPAC-Macro2020(연기) (48th World Polymer Congress)	7, 5(일) - 9(목) -> 2021, 5, 16(일) - 20일(목)	제주컨벤션센터
제20회 고분자 신기술 강좌	10, 6(화)	부산컨벤션센터
추계 정기총회 및 학술대회	10, 6(화) - 8(목)	부산컨벤션센터
제42회 고분자 기기분석	11, 11(수) - 12(목)	한국화학연구원

* 코로나-19로 취소 또는 (잠정)연기.

2. 제 37대 (2020.1.1. - 12.31.) 임원

직위	성명	소속
회장	김양국	(주)아이컴포넌트 대표이사
수석부회장	이준영	성균관대학교 화학공학부 교수
부회장	김영철	경희대학교 화학공학과 교수
	김윤희	경상대학교 화학과 교수
	김재경	한국과학기술연구원 에너지재료연구단 광전자재료연구팀 책임연구원

직위	성명	소속
부회장	나창운	전북대학교 고분자나노공학과 교수
	성익경	코오롱인더스트리(주) 부사장
	윤호규	고려대학교 신소재공학부 교수
	임희석	도레이첨단소재 대표이사
감사	권용구	인하대학교 고분자공학과 교수
	이종휘	중앙대학교 화학신소재공학부 교수
전무이사	김승현	인하대학교 화학공학과 교수
총무이사	이승우	영남대학교 화학공학부 교수
	강경보	롯데케미칼 연구소 소장/전무이사
	강길선	전북대학교 BIN융합공학과 교수
	강영종	한양대학교 화학과 교수
	강창균	현대EP 사장
	강충석	코오롱인더스트리 상무이사
	곽영제	송실대학교 유기신소재 · 파이버공학과 교수
	권오필	아주대학교 응용화학생명공학과 교수
	김덕준	성균관대학교 화학공학부 교수
	김범성	케이씨씨 전무이사
	김상태	동우화인켐(주) 연구기술본부장/CTO
	김성룡	한국교통대학교 나노화학소재공학과 교수
	김수현	한국과학기술연구원 생체재료연구센터 책임연구원

직 위	성 명	소 속
이사	김영률	한국바스프 회장
	김인선	(주)포리스 대표이사
	김인욱	(주)두산전자 연구소 상무이사
	김종만	한양대학교 화학공학과 교수
	김중인	효성기술원 전무이사
	김태동	한남대학교 화공신소재공학과 교수
	김홍균	KIP 국제특허법률사무소 대표 변리사
	노기수	LG화학기술연구원 사장
	류두열	연세대학교 화공생명공학부 교수
	박근홍	차의과학대학교 의생명과학과 교수
	박기홍	한국고분자시험연구소(주) 연구소장(대표)
	박수영	경북대학교 고분자공학과 교수
	박원호	충남대학교 유기재료공학과 교수
	박정진	이녹스 사장
	박종수	국도화학(주) 부회장
	박지웅	광주과학기술원 신소재공학부 교수
	박철민	연세대학교 신소재공학과 교수
	박태호	포항공과대학교 화학공학과 교수
	손병혁	서울대학교 화학부 교수
	신규순	동진씨미켈 연구소장
이사	안동준	고려대학교 화공생명공학과 교수
	안철희	서울대학교 재료공학부 교수
	우종표	명지대학교 화학공학과 교수
	원종찬	한국화학연구원 화학소재연구본부 책임연구원
	윤성철	한국화학연구원 화학소재연구단 소재재료연구센터 책임연구원
	윤영서	코오롱인더스트리(주) CPI사업팀 팀장
	이기라	성균관대학교 화학공학과 교수
	이도훈	한화토탈 상무이사
	이상수	한국과학기술연구원 광전하이브리드연구센터 책임연구원
	이상천	경희대학교 치과대학 교수
	이영준	롯데케미칼 부사장
	이원기	부경대학교 고분자공학과 교수
	이원목	세종대학교 화학과 교수
	이종찬	서울대학교 화학생명공학부 교수
	이현정	국민대학교 신소재공학부 교수
	장재영	퓨어엔비텍 대표이사

직 위	성 명	소 속
이사	장호식	한화토탈 상무이사
	정병문	이화여자대학교 화학나노과학과 교수
	정일두	부산대학교 고분자공학과 교수
	조광수	경북대학교 고분자공학과 부교수
	조남주	부산대학교 고분자공학과 교수
	조성호	(주)삼양화인테크 상무이사
	조준한	단국대학교 고분자공학과 교수
	진형준	인하대학교 고분자공학과 교수
	최동훈	고려대학교 화학과 교수
	한장선	LG화학 부사장
	허양일	전남대학교 고분자융합소재공학부 교수
	홍성철	세종대학교 나노신소재공학과 교수

3. 2020년도 각 위원회/부문위원회 위원장 및 지부장

위원회	성 명	소속기관
자문위원회	김은영	
재무위원회	임희석	도레이케미칼 대표이사
국문지편집위원회	김성룡	한국교통대학교 나노화학소재공학과 교수
영문지편집위원회	권용구	인하대학교 고분자공학과 교수
기술지편집위원회	김승현	인하대학교 화학공학과 교수
학술위원회	윤호규	고려대학교 기술경영전문대학원 교수
교육위원회	김윤희	경상대학교 화학과 교수
산학협동위원회	성익경	코오롱인더스트리(주) 부사장
학회발전위원회	이준영	성균관대학교 화학공학부 교수
펠로우선정위원회	김상울	한국과학기술원 화학과 교수
정책기획위원회	김덕준	성균관대학교 화학공학부 교수
국제협력위원회	조준한	단국대학교 고분자공학과 교수

부문위원회	성 명	소속기관
분자전자	윤성철	한국화학연구원 소재재료연구센터 책임연구원
의료용고분자	박근홍	차의과학대학교 의생명과학과 교수
콜로이드 및 분자조립	안동준	고려대학교 화공생명공학과 교수

지부	성명	소속기관
대구경북지부	조광수	경북대학교 고분자공학과 교수
부산경남지부	이원기	부경대학교 고분자공학과 교수
충청지부	원종찬	한국화학연구원 화학소재연구본부 책임연구원
호남지부	박종진	전남대학교 고분자융합소재공학부 교수

4. 2020년도 춘계 학회상 수상자

명 칭	금 액	성명(소속)
LG화학고분자학술상	상패와 상금 1,000만원	백종범 회원 (울산과학기술원)
한화고분자학술상	상패와 상금 1,000만원	김덕준 회원 (성균관대학교)
중견학술상	상패와 상금 300만원	김도환 회원 (한양대학교) 임성갑 회원 (한국과학기술원) 조정호 회원 (연세대학교)
신진학술상	상패와 상금 200만원	이병훈 회원 (이화여자대학교) 정경원 회원 (조선이공대학교)
기술상	상패와 상금 300만원	정용철 회원 (한국생산기술연구원)
우수학위논문상 (박사학위 논문상)	상장과 상금 50만원	이상면 회원 (울산과학기술원) 홍기현 회원 (과학기술연합대학원)
우수학위논문상 (석사학위 논문상)	상장과 상금 50만원	진호철 회원 (부경대학교) 한나라 회원 (한밭대학교)

5. 추계학회상 후보자 응모

- 롯데산학협력상(상패/상금1천만원, 1명), 도레이고분자상(상패/상금1천만원, 1명), KOPTRI 고분자학술상(상패/상금 5백만원, 1명), 중견학술상(상패/상금3백만원, 3명), 신진학술상(상패/상금2백만원, 2명), TCI우수고분자연구상(상패/상금300만원-제1저자 100만원, 해당연구실 200만원), 벤처기술상(상패, 1명)
- 서류접수 마감일: 2020년 9월 중
- 서류접수처: 한국고분자학회 사무실 (우편 접수)

6. 한국고분자학회 2021년도 수석부회장 선거 일정

- 선거운동 기간: 5월 1일(목)~7월 31일(금)
- 투표 기간: 8월 1일(토)~8월 31일(월)
- 개표 및 당선자 확정: 9월 3일(목)

7. 일본고분자학회 - 69회 고분자토론회 참가자 선정

- 일시: 9월 16일(수) - 18일(금)
- 장소: Iwate University, Morioka City, Iwate Prefecture
- 참가자: 박정태 교수 (건국대), 배준원 교수 (동덕여대), 전석진 교수 (금오공대), 조한선 교수 (KAIST)

8. IUPAC-Macro2020 (48th World Polymer Congress) 개최 일정 연기

전 세계적으로 코로나19 확산 및 국가별 출입국 현황 등을 검토 후 IUPAC과 협으로 일정연기로 확정.

- 일시: 2021년 5월 16일(일) ~ 20일(목)
- 장소: 제주컨벤션센터
- 초록접수 일정
 - 접수 마감: 2020년 12월 31일
 - 결과 발표: 2021년 1월 31일
- 등록 일정

	Early Bird (~Feb. 28, 2021)	Pre-registration (~May 9, 2021)	On-site Registration (May 16-20, 2021)
General Participants	\$680	\$730	\$780
Student	\$180	\$200	\$220
IUPAC Member	\$620	\$670	\$720
PSK Member	\$620	\$670	\$720

* 포함사항

Welcome Reception, Banquet Ticket
(학생은 Welcome Reception만 포함)

* Banquet Ticket 추가구매: \$70

* 국내 등록비: 환율 1,000원 적용

2020 한국공업화학회



이 준 혁 (한국공업화학회 회장)

1. 2020년 임원

직 위	성 명	소 속
회장	이준혁	(주)동진씨미캠 대표이사 부회장
수석부회장	우제완	상명대학교 화공신소재학과 교수
부회장(학계)	구기갑	서강대학교 화공생명공학과 교수
	김건중	인하대학교 화학공학과 교수
	박기동	아주대학교 응용화학생명공학전공 교수
	엄명현	공주대학교 화학공학부 교수
	원장묵	한양대학교 화학공학과/산학협력중점 교수
	이호원	제주대학교 생명화학공학과 교수
	홍인권	단국대학교 화학공학과 교수
부회장(연구계)	박선민	한국세라믹기술원 세라믹섬유복합재센터 수석연구원
	윤용승	고등기술연구원 부원장
	임순호	한국과학기술연구원 전북분원 중소기업지원센터 책임연구원
	홍영택	한국화학연구원 화학소재본부 책임연구원
부회장(산업계)	강충석	코오롱인더스트리 CPI사업부장
	김영근	한국건설생활환경시험연구원(KCL) 영남미래산업본부 본부장
	박영호	(주)아모레퍼시픽 기술연구원 원장
	임일지	대주전자재료(주) 대표이사 사장
	전재희	한국중소벤처무역협회 본부장(이사)
	제해득	(주)하이탑 대표이사

직 위	성 명	소 속
부회장(산업계)	조성용	경인양행(주) 대표이사 사장
	최 현	(주)신코 사장
	최형기	한국기계산업진흥회 부회장
	황복현	영림화학(주) 대표이사
감사	박광용	중앙대학교 화학신소재공학부 교수
	이우걸	단국대학교 화학공학과 교수
전무이사	성영은	서울대학교 화학생물공학부 교수
총무이사	김영기	한경대학교 화학공학과 교수
기획이사	김재홍	영남대학교 화학공학부 교수
	김주현	부경대학교 고분자공학과 교수
	김현철	서강대학교 화공생명공학과 교수
	신승한	한국생산기술연구원 청정화학응용소재그룹 수석연구원
	장재형	연세대학교 화공생명공학부 교수
	김 석	부산대학교 화공생명공학부 교수
	김영진	충남대학교 유기재료공학과 교수
조직이사	문준혁	서강대학교 화공생명공학과 교수
	윤순도	전남대학교 화공생명공학과 교수
	조한익	건국대학교 미래에너지공학과 교수
	박정태	건국대학교 화학공학부 교수
재무이사	이상엽	연세대학교 화공생명공학부 교수
	임상혁	고려대학교 화공생명공학과 교수
	홍성철	세종대학교 나노신소재공학과 교수
학술이사	김주현	중앙대학교 화학신소재공학부 교수

직 위	성 명	소 속
학술이사	목영선	제주대학교 생명화학공학과 교수
	박재형	성균관대학교 화학공학/고분자공학부 교수
	박종혁	연세대학교 화공생명공학부 교수
	박현	부산대학교 조선해양공학과 교수
	박호범	한양대학교 에너지공학과 교수
	오준학	서울대학교 화학생명공학부 교수
	이경진	충남대학교 응용화학공학과 교수
	정영미	강원대학교 화학과 교수
	최정규	고려대학교 화공생명공학과 교수
홍보이사	강상욱	상명대학교 화학에너지공학과 교수
	방석호	성균관대학교 화학공학/고분자공학부 교수
	이장용	한국화학연구원 분리막연구센터 책임연구원
	황성원	인하대학교 화학공학과 교수
국제협력이사	박성영	한국교통대학교 화공생명공학과 교수
	박호석	성균관대학교 화학공학/고분자공학부 교수
	봉기완	고려대학교 화공생명공학과 교수
	송호준	한국생산기술연구원 지능형청정소재그룹 선임연구원
	유필진	성균관대학교 화학공학/고분자공학부 교수
	정승영	한국에너지기술평가원 성과확산본부 국제협력실장
	주지봉	건국대학교 화학공학부 교수
	최석원	경희대학교 정보전자신소재공학과 교수
산학연협력 이사	이재환	미원상사(주) 기능소재사업부 사업부장/이사
	이태영	코스코아생명과학(주) 대표이사
	조준혁	(주)이그젝스 연구소 소장
산학연협력 이사	김기현	한국전자통신연구원 실감디스플레이연구그룹 책임연구원
	김진태	한국화학융합시험연구원 인증본부 본부장
	김태호	한국화학연구원 분리막연구센터 책임연구원
산학연협력 이사 (학계)	김태현	한양대학교 재료화학공학과 교수
	박현웅	경북대학교 에너지공학부 교수
	우창화	경상대학교 기계융합과 교수
편집이사 (공업화학)	임병직	한양대학교 재료화학공학과 교수
	김상훈	한국과학기술연구원 물질구조제어연구단 책임연구원
	엄성현	고등기술연구원 플랜트엔지니어링센터 수석연구원
	이혜진	경북대학교 화학과 교수
	진병석	동덕여자대학교 응용화학부 교수
	최석순	세명대학교 바이오환경공학과 교수

직 위	성 명	소 속
편집이사 (J.Ind.Eng. Chem.)	김진웅	성균관대학교 화학공학/고분자공학부 교수
	박경원	송실대학교 화학공학과 교수
	배준원	동덕여자대학교 응용화학부 교수
	안익성	연세대학교 화공생명공학부 교수
	유효종	한양대학교 재료화학공학과 교수
	이상호	국민대학교 건설시스템공학부 교수
	이영석	충남대학교 응용화학공학과 교수
	이중휘	중앙대학교 화학신소재공학부 교수
	이준엽	성균관대학교 화학공학/고분자공학부 교수
	이혁진	이화여자대학교 약학대학 교수
	고문주	건국대학교 화학공학부 교수
	김중래	부산대학교 화공생명공학부 교수
편집이사 (공업화학전망)	박성영	한국교통대학교 화공생명공학과 교수
	이기봉	고려대학교 화공생명공학과 교수
	이윤성	전남대학교 화학공학부 교수
	김성수	경기대학교 환경에너지공학과 교수
	김일태	가천대학교 화공생명공학과 교수
	문홍철	서울시립대학교 화학공학과 교수
	서지훈	고려대학교 신소재공학과 교수
	심봉섭	인하대학교 화학공학과 교수
	제정호	부산대학교 화공생명공학부 교수
	조정호	연세대학교 화공생명공학부 교수

2. 2020년 위원장

위원회	성 명	소 속
교육	강미숙	영남대학교 화학생화학부 교수
국문지편집	이기세	명지대학교 환경에너지공학과 교수
국제협력	남상용	경상대학교 나노신소재융합공학과 교수
산학연협력	유의상	한국생산기술연구원 휴먼융합기술그룹 수석연구원
술어제정	오세천	공주대학교 환경공학과 교수
여성인재육성	여민경	경희대학교 환경학 및 환경공학과 교수
연구윤리	조영민	경희대학교 환경학 및 환경공학과 교수
영문지 편집	유복렬	KIST 물질구조제어연구센터 책임연구원
전망지 편집	김상범	경기대학교 화학공학과 교수
중장기발전	심상준	고려대학교 화공생명공학과 교수
포상	우제완	상명대학교 화학신소재학과 교수
학술	김영호	충남대학교 응용화학공학과 교수

3. 2020년 분과회장

분과회	성명	소속
고분자	이상수	KIST 광전하이브리드연구센터 책임연구원
나노	소대섭	한국과학기술정보연구원 데이터분석플랫폼센터 센터장
도료 및 코팅	오중걸	조광페인트 연구소 기술이사
디스플레이	박종욱	경희대학교 화학공학과 교수
무기재료	김동하	이화여자대학교 화학나노과학과 교수
생물공학	이현호	명지대학교 화학공학과 교수
생체재료	나 건	가톨릭대학교 생명공학전공 교수
석유화학 · 윤활유	김재곤	한국석유관리원 석유기술연구소 팀장
에너지저장 · 변환	강진규	DGIST 에너지융합연구부 책임연구원
전기화학	김점수	동아대학교 화학공학과 교수
정밀화학	유동원	서울대학교 화학생명공학부 교수
촉매	김도희	서울대학교 화학생명공학부 교수
콜로이드 · 계면화학	유효종	한양대학교 재료화학공학과 교수
펄프 · 제지	신수정	충북대학교 목재종이과학과 교수
화학공정	이철진	중앙대학교 화학신소재공학부 교수
화학물질 안전 · 위해성	정영진	강원대학교 소방방재학부 교수
환경 · 에너지	김정훈	한국화학연구원 C1가스분리 · 전환센터 책임연구원

4. 2020년 지부장

지부명	지부장	소속
강원	김주영	강원대학교 신소재공학과 교수
광주 · 전남	홍창국	전남대학교 화학공학부 교수
대구 · 경북	김재홍	영남대학교 화학공학부 교수
대전 · 세종 · 충남	김영운	한국화학연구원 환경자원센터 책임연구원
부산 · 울산 · 경남	이선구	부산대학교 화공생명공학부 교수
전북	유동진	전북대학교 에너지저장변환공학과 교수
제주	허 훈	한국생산기술연구원 고온에너지시스템그룹 수석연구원

5. 2020년 운영과 발전을 위한 워크숍 개최

2020년 경자년 새해, 한국공업화학회의의 운영과 발전을 위한 워크숍이 1월 16일(목)부터 17일(금)까지 양일간 대전 인터시티호텔에서 개최되었다. 이 워크숍은 2020년 한해 한국공업화학회 활동의 청사진을 제시하는 매우 중요한 자리로 학회의 지부장, 분과회장, 위원장 및 본부임원 등 68명의 인원이 참석하였다. 특히,



〈2020 운영과 발전을 위한 워크숍 단체사진〉



〈제1차 확대 이사회의 단체사진〉

올해에는 한국공업화학회 창립 30주년을 맞이하는 뜻깊은 해로 행사의 성공적 진행을 위한 의견 교환과 함께 올 한해 학회 운영방안을 공유하는 시간을 가졌다. 한국공업화학회 창립 30주년 행사를 차질 없이 성공적으로 추진하고, 2020년의 계획과 목표를 성공적으로 수행하기 위해 주요 임원진의 활발한 참여와 각자의 역할에 최선을 다해 달라고 당부하며 1박

2일에 걸친 2020 한국공업화학회 운영과 발전을 위한 워크숍이 마무리되었다.

6. 2020년 한국공업화학회 추계 총회 및 학술대회 개최

- 일시: 2020년 10월 28일(수) ~ 10월 30일(금)
- 장소: 광주 김대중컨벤션센터

2020 한국세라믹학회



유 상 임 (한국세라믹학회 회장)

1. 2020년 권두언

존경하는 한국세라믹학회 회원 여러분

2020년 경자년을 맞이하여 신년회에서 인사드린 바와 같이 올 한해 세라믹 학회가 큰 도약을 할 것이라고 말씀드린 지도 어느 덧 2개월이 지나고 있습니다. 코로나 바이러스로 인해 나라 안팎으로 시련을 겪고 있지만, 학회에서 계획하는 큰 행사들과 더불어 회원님께서 계획하신 모든 일이 순조로이 진행되길 바라우고 건승하시는 한 해가 되시기를 소망합니다.

학회 임원진은 지난 2월 21-22일에 걸쳐 진주에서 상반기 워크숍을 갖고 2020년 추진 주요 사업에 대한 실행 점검하고, 학회운영에 최선을 다할 것을 다짐하였습니다. 2020년은 한국세라믹학회가 명실상부한 대규모 학회로 도약하는 원년이 되도록 최선을 다하고자 합니다. 춘계 및 추계 학술대회에서 논문 발표 건수가 각각 800건과 1000건 이상이 되도록 노력을 다할 예정입니다. 주요 세라믹 부회와 연계성을

강화하여 학술대회의 규모를 성장시키고자 합니다. Emerging 신소재 분야의 학술 활동을 적극적으로 유도하여 재료 분야 최고의 학술대회로 자리매김하고자 합니다. 사무국 확대 개편을 통해 사무국의 역량을 대폭적으로 강화하고자 합니다. 신입 직원을 채용하여 사무국에 3인 직원이 상시 근무하는 사무국이 구축될 예정입니다. 또한 전임 회장단과 연합회의 협조를 구하여 학회회관이 확보될 수 있도록 구체적인 방안을 설립할 계획입니다.

향후 10년간 학회의 발전 방향이 제시될 수 있도록 2030 학회발전 계획이 수립될 것입니다. 운영이사회 담당업무별 규정 검토 및 매뉴얼 작성이 이루어질 것이며, 학술대회 매뉴얼이 함께 작성될 것입니다. 정부 주도의 소재·부품·장비(소부장) 산업 경쟁력 강화 대책에 효율적으로 대응할 수 있도록 TF가 구성될 것입니다. 국내 세라믹 주요 산업체와 학회 간 교류 협력의 증진방안도 수립될 예정입니다. 세라미스트 저널이 KCI 등재지로 승격시키는 노력을 지속하면서, 한국세라믹학회지가 SCIE로

등재될 수 있도록 다방면으로 최선을 다하고자 합니다.

저희 학회 임원진은 회원님의 학술 활동을 돕고 학회의 위상이 한층 향상될 수 있도록 최선을 다할 것을 약속드립니다. 회원님의 많은 성원 부탁드립니다.

한국세라믹학회 회장 유 상 임 드림

2. 2020년 학술대회 안내

1) 춘계학술대회 (온라인 학술대회)

일시: 2020년 7월 6일(월) ~ 9일(목)

진행본부: 서울대 글로벌공학교육센터

2) 추계학술대회

일시: 2020년 10월 21 (수) ~ 10월 23일 (금)

장소: 서울 COEX

3. 부회 행사 안내

제 26회 유리 기술 세미나

일시: 2020년 12월 4일 (금)

장소: 여의도 중소기업중앙회 회관

4. 국제학술행사 안내

1) 8th International Congress On Ceramics ICC8

일시: 2021년 4월 25일 (일) ~ 4월 30일 (금)

장소: 여의도 중소기업중앙회 회관

2) 2020 Asian SOFC Symposium & Exhibition

일시: 2020년 11월 1일 (일) ~ 11월 4일 (수)

장소: 여의도 중소기업중앙회 회관

2020 한국화학공학회



이 관 영 (한국화학공학회 회장)

1. 2020년도 한국화학공학회 임원 및 운영위원회

◀ 제51대 임원 ▶

구분	성명	소속	직위
회 장	이관영	고려대학교	교 수
수석부회장	김형순	해양에너지	대표이사
학술부회장	정찬화	성균관대학교	교 수
산업계부회장	김철진	SK Advanced	대표이사
지부부회장	전종기	공주대학교	교 수
감 사	신채호	충북대학교	교 수
	문일	연세대학교	교 수
이 사	강태욱	서강대학교	교 수
	김우경	영남대학교	교 수
	김민찬	제주대학교	교 수
	김범상	홍익대학교	교 수
	김창구	아주대학교	교 수
	이재성	인하공업전문대학	교 수
	이종민	서울대학교	교 수
	정상문	충북대학교	교 수
	주오심	KIST	책임연구원
	조혜정	삼성전자	상 무

◀ 제51대 운영위원회 ▶

구분	성명	소속	직위
회 장	이관영	고려대학교	교 수
수석부회장	김형순	해양에너지	대표이사
학술부회장	정찬화	성균관대학교	교 수
산업계부회장	김철진	SK Advanced	대표이사
지부부회장	전종기	공주대학교	교 수
총무이사	이종민	서울대학교	교 수
	정상문	충북대학교	교 수
재무이사	강태욱	서강대학교	교 수
	김종선	해양에너지	이 사
조직이사	김우경	영남대학교	교 수
	홍창국	전남대학교	교 수
학술이사	김우재	이화여자대학교	교 수
	서용원	UNIST	교 수
	윤정우	전남대학교	교 수
	황윤정	KIST	책임연구원
기획이사	배종욱	성균관대학교	교 수
	윤민혜	KIER	선임연구원
	이창준	부경대학교	교 수

구분	성명	소속	직위
사업이사	서영웅	한양대학교	교수
	안성모	한국하니웰	상무
	임연호	전북대학교	교수
	홍수린	차의과학대학교	교수
국제이사	임성갑	KAIST	교수
	최시영	KAIST	교수
	김석기	한국화학연구원	선임연구원
	황성원	인하대학교	교수
산학이사	김창환	현대자동차	상무
	이기수	LG화학	상무
	이시훈	전북대학교	교수
	이연수	SK Advanced	상무
	이형철	GS칼텍스	상무
	허승현	울산대학교	교수
홍보이사	김수현	고등기술연구원	책임연구원
	장재형	연세대학교	교수
	최정규	고려대학교	교수

2. 2020년도 한국화학공학회 업무위원장 / 지부장 / 부문위원장

업무위원회		
구분	성명	소속
교육인재양성위원회	정진석	울산대학교
국제화 국제협력위원회	채희엽	성균관대학교
기획 재정위원회	이강택	연세대학교
산학연관 협력위원회	오미혜	한국자동차연구원
수상후보추천위원회	정찬화	성균관대학교 (학술부회장 당연직)
여성위원회	엄영순	한국과학기술연구원
연구 기술개발위원회	용기중	POSTECH
전문대학위원회	이재성	인하공업전문대학
정보화 홍보위원회	한종희	KIST
출판 편집위원회	고영수	공주대학교
지부		
구분	성명	소속
강원지부	이대원	강원대학교
광주전남제주지부	김도형	전남대학교

지부		
구분	성명	소속
대구경북지부	심재진	영남대학교
대전충남지부	정순용	한국화학연구원
미국지부	이현민	Tufts University
부산경남지부	허광선	경남정보대학교
울산지부	변용위	울산대학교
일본지부	김익수	Shinshu University
전북지부	윤영상	전북대학교
충북지부	김대수	충북대학교
부문위원회		
구분	성명	소속
고분자부문위원회	류두열	연세대학교
공업화학부문위원회	박정훈	동국대학교
공정시스템부문위원회	신동일	명지대학교
미립자공학부문위원회	김현창	호서대학교
분리기술편위원회	강정원	고려대학교
생물화공부문위원회	김동명	충남대학교
에너지 환경부문위원회	김희탁	KAIST
열역학분자모사부문위원회	곽상규	UNIST
유동충부위원회	이동현	성균관대학교
이동현상부문위원회	이강택	연세대학교
재료부문위원회	용기중	POSTECH
촉매부문위원회	박용기	한국화학연구원
화학공정안전부문위원회	엄현용	SK Advanced

3. 2020년도 산업체 계속 교육 프로그램

- 일시: 2020년 6월 23일(화)~26일(금)
- 장소: 서울대학교 화학공정신기술연구소
- 주최: 한국화학공학회
- 수강료: 70만원(교재, 점심, 간친회 포함)
- 신청방법: 한국화학공학회 홈페이지에서 온라인 접수 및 결제(www.kiche.or.kr)
- 대상: 정유, 석유화학 및 화학 관련 업체 중간 관리자

- 과목: 반응공학, 촉매공정, 전달현상, 단위 조작(열교환기), 증류, 공정제어 및 모사

• 신청마감: 선착순 30명

• 일정:

– 6월 23일(화)

09:00~09:30 등 록

09:30 ~ 12:30 반응공학 / 이시훈(전북대학교)

12:30~14:00 점 심

14:00 ~ 18:00 촉매공정 / 이정규(동아대학교)

18:00~18:30 CEO 특강

19:00~ 간 친 회

– 6월 24일(수)

09:30 ~ 12:30 전달현상 / 남재욱(서울대학교)

12:30~14:00 점 심

14:00 ~ 18:00 단위조작(열교환기) / 최종찬 (히트란)

– 6월 25일(목)

09:30 ~ 12:30 증 류 I / 이문용(영남대학교)

12:30~14:00 점 심

14:00 ~ 18:00 증 류 II / 이문용(영남대학교)

– 6월 26일(금)

09:30~12:30 공정제어 및 모사 I / 이종민(서울대학교)

12:30~14:00 점 심

14:00~17:00 공정제어 및 모사 II / 이종민(서울대학교)

17:00~ 수 료 식

4. 2020년도 여름 특별 심포지엄

- 일시: 2020년 7월 15일(수)~17일(금)
- 장소: 평창 라마다호텔앤스위트

- 주제: 사회문제해결과 지속가능발전을 위한 화학공학

5. 차기 수석부회장 선거 추진 일정

5월 29일(금): NICE 6월호 및 홈페이지에 차기 수석부회장 선거 안내 게재

6월 5일(금): 선거인단(평의원)에게 선거 안내 문 우편과 E-mail 발송

6월 22일(월): 평의원 20명이 추천하는 후보자 등록 시작

7월 6일(월) 평의원 20명이 추천하는 후보자 등록 마감

7월 28일(화): 등록 후보자가 없는 경우 이사회에서 후보자 추천 예정 (총회 80일 전)

8월 21일(금): 수석부회장 전자 투표 시작 (선거인단에게 후보자 안내 및 투표 안내 E-mail 발송)

9월 3일(목): 수석부회장 전자 투표 마감

9월 4일(금): 당선자 확정(제6차 운영위원회 개최 일)

10월 14일(수), 15일(목): 가을 평의원회와 총회에 상정

6. 2020년도 가을 총회 및 학술대회 (국제 심포지엄)

- 일시: 2020년 10월 14일(수)~16일(금)
- 장소: 여수엑스포컨벤션센터
- Theme: 사회문제해결과 지속가능발전을 위한 화학공학 (Chemical Engineering for

Social Problem Solving and Sustainable Development)

7. 2021년도 총회 및 학술대회

■ 봄 총회 및 학술대회

- 일시: 2021년 4월 21일(수)~23일(금)
- 장소: 부산 BEXCO

■ 가을 총회 및 학술대회(국제 심포지엄)

- 일시: 2021년 10월 27일(수)~29일(금)
- 장소: 대전컨벤션센터(DCC)

8. 2020년도 제16차 CEO 포럼

- 일시: 2020년 5월~6월 경
- 장소: 곤지암 리조트 & CC
- 참석대상: CEO 클럽 회원

9. 2020년도 제17차 CEO 클럽 조찬간담회

- 일시: 2020년 7월 7일(화)
- 장소: 인터컨티넨탈 서울 코엑스 H/L ‘비바체’
- 참석대상: CEO 클럽 회원

10. 2020년도 제18차 CEO 포럼

- 일시: 2020년 9월 18일(금)
- 장소: 곤지암 리조트 & CC
- 참석대상: CEO 클럽 회원

11. 한국화학공학회 부문위원회 행사

■ 분리기술부문위원회(위원장: 강정원 교수)

ICSST 2020(한일 분리기술 컨퍼런스)

- 일시: 2020년 10월 28일(수)~30일(금)
- 장소: Shimane, Japan
- 프로그램

– 10월 28일(수)

- 18:00~ Registration
- 18:00~19:00 Chairman's Meeting
- 19:00~ Welcome Reception

– 10월 29일(목)

- 09:00~ Presentation
- 12:00~13:30 Technical Luncheon
(& Committee Meeting)

- 18:00~ Banquet

– 10월 30일(금)

- 09:00~ Presentation
- 12:00~ Closing Ceremony
- 13:30~ Excursion

■ 유동층부문위원회(위원장: 이동현 교수)

제7차 ASCON-IEEChE 2021

- 일시: 2021년 11월 7일(일)~10일(수)
- 장소: 강릉 스카이베이 호텔
- 내용: 유동층 및 화학공학 전문가 연구 교류

한국화학연구원

1. 화학산업 필수기술 수소화 반응 상온에서도 가능

화학산업의 필수기술인 수소화 반응(수소 첨가 화학반응)이 상온에서도 가능해졌다. 고온 조건이 아니어도 값비싼 귀금속 촉매를 사용하지 않고도 수소화 반응을 일으키는 촉매기술이 개발된 것이다.

한국화학연구원 화학공정연구본부 황영규 본부장과 울산대 정재훈 교수 공동 연구팀은 수소화 반응 촉매 연구결과를 세계적인 촉매 분야 권위지인 ‘미국 화학회 촉매(ACS Catalysis)’ 3월호에 표지논문으로 발표했다.

수소화 반응은 액상수소원과 반응물을 촉매에 함께 넣으면, 수소가 촉매를 거쳐 반응물에 전달돼 반응이 이뤄져, 새로운 생성물을 얻는

화학반응이다.

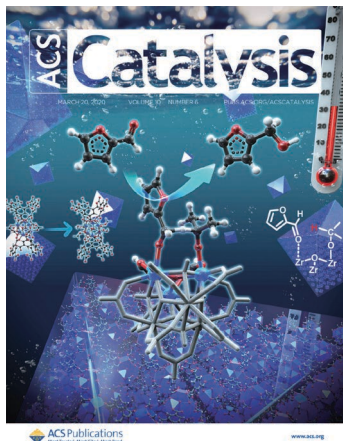
플라스틱 · 연료 · 섬유 · 고무 등을 생산하는 석유화학공정의 중간체, 의약품 · 화장품 등을 생산하는 정밀화학공정의 중간체, 바이오 화학공정의 바이오매스를 합성하는 데 널리 쓰인다. 화학산업에서 없어서는 안 될 기술인 셈이다.

일반적으로 수소화 반응은 100℃ 이상의 고온에서 이뤄지는데, 고온으로 높이기 위해 에너지가 많이 소모되고 온실가스를 배출해 상온으로 낮추기 위한 연구가 이어졌다. 하지만 상온에서의 수소화 반응은 경제성이 떨어지는 게 문제였다. 팔라듐과 플래티늄 등 값비싼 귀금속 촉매를 써야 하기 때문이다.

한국화학연구원 연구진은 금속유기골격체(MOF · Metal Organic Framework) 촉매에 알코올을 넣고 단순 가열하는 간단한 방법으로 이 문제들을 한꺼번에 해결했다.

MOF 촉매에 알코올을 넣고 끓이자 MOF의 지르코늄 산화물 부분에 활성점(반응하는 자리)이 생겼다. 이렇게 반응 자리가 늘어나자 촉매 표면이 활성화되고, 활성 에너지를 낮춰 상온 30℃에서도 쉽게 수소화 반응이 이뤄진 것이다.

연구진은 신형 MOF 촉매를 이용해 상온에서 바이오매스 ‘퍼퓨랄(Furfural)’을 화학원료 ‘퍼퓨릴 알코올(Furfuryl alcohol)’로 전환하는



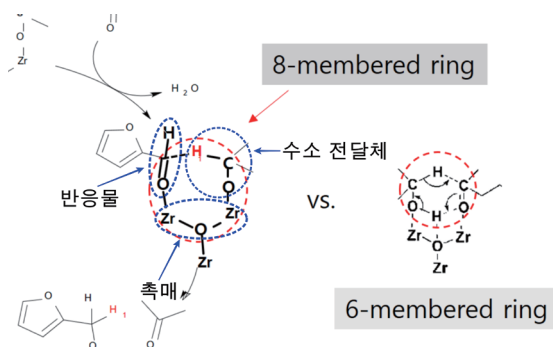
데 성공했다. 이러한 방식으로 석유화학공정과 바이오화학공정 등의 중간체 7종을 만드는 데 성공했고, 신형 MOF 촉매가 상온에서 작동하는 것을 확인했다.

이에 따라 지금까지 화학공정에서 골칫거리로 취급받던 폐열을 반응열로 활용할 수 있게 됐다. 석유화학공정 등에서 발생하는 폐열은 보통 80℃ 이상인데, 환경에 미치는 영향을 감안하여 냉각수로 식혀 40℃ 이하로 떨어뜨린 후 공기 중으로 배출하는 경우가 많다. 냉각수로 식힌 폐열을 새로운 수소화 반응의 반응열로 활용하게 되면 폐열 재활용은 물론이고, 온실가스 감소에도 기여할 것으로 기대된다.

또한 수소화 반응에서 일어나는 수소 전달 메커니즘도 새롭게 밝혀냈다. 수소는 촉매를 거쳐 반응물에 전달되는데, 이때 수소가 촉매와 반응물의 여섯 자리를 거쳐 전달된다는 게 학계의 정설이었다. 이를 6각링 전이상태라고 한다. 지난 10년간 연구자들은 미국 위스콘신대 화학생물공학과 듀메식(James A. Dumesic) 교수가 설명한 6각링 전이상태를 바탕으로 촉매를 만들어왔다. 지금까지 전이상태를 잘못 알고 있던 것이다.

하지만 한국화학연구원 연구진은 실제 실험과 계산과학을 통해 수소화 반응이 촉매와 반응물의 6각링 전이상태를 거치는 게 아니라, 8각링 전이상태를 거쳐 진행된다는 것을 밝혀냈다. 수소화 반응이 석유화학·정밀화학공정 등에 폭넓게 쓰이고 있는 만큼 촉매연구에 새로운 대안을 제시한 것으로 평가된다.

한국화학연구원 황영규 본부장은 “수소 전달 과정의 전이상태 중간체가 밝혀졌기 때문에 이를 바탕으로 한 새로운 촉매 반응경로 연구



수소 전달 메커니즘의 8각링 전이상태와 6각링 전이상태 비교

등이 활발하게 이뤄질 것”이라며 “석유화학·정밀화학, 바이오화학 공정 등에 미치는 영향이 클 것”으로 내다봤다.

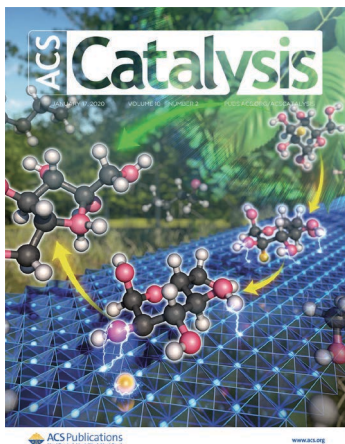
이번 연구는 과학기술정보통신부 차세대 탄소자원화 사업과 한국화학연구원 주요사업의 지원을 받아 수행됐다.

2. 페트병 대체 친환경 플라스틱 페프 핵심 원료 생산 기술 개발

촉매로 친환경 바이오플라스틱의 원료를 생산하는 기술이 개발됐다. 플라스틱의 대명사인 페트병을 대체할 바이오플라스틱으로 꼽히는 페프(PEF)의 핵심 원료를 생산하는 기술로, 페프의 출발물질인 글루코스를 프럭토스로 바꾸는 촉매 공정을 만든 것이다.

기존 효소 공정과 비교해 비용을 50%나 줄이고, 공정을 두 단계에서 단일 공정으로 간소화해 바이오플라스틱 산업 활성화에 전기가 될 전망이다.

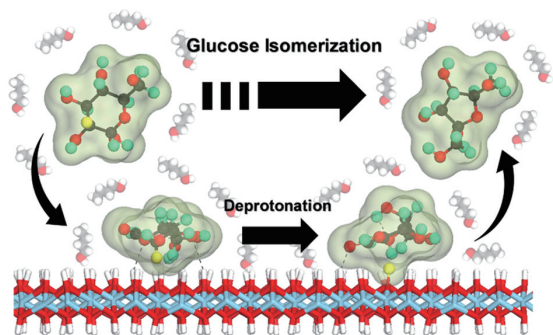
한국화학연구원 화학공정연구본부 황동원·황영규 박사팀은 이 기술을 촉매 분야 권위지 ‘ACS Catalysis(미국 화학회 촉매)’에 발표



한국화학연구원 황동원·황영규 박사팀이 개발한 바이오 플라스틱 핵심 원료 생산 촉매 시스템이 촉매 분야 권위지 'ACS Catalysis(미국 화학회 촉매)' 표지 이미지는 글루코스가 촉매 표면에 흡착된 후 프럭토스로 전환되는 반응을 표현했다.

했다. 미국 화학회는 연구의 중요성을 감안해 1월호 표지논문으로 선정했다.

페프(PEF)는 글루코스→프럭토스→HMF→FDCA→PEF의 전환단계를 거쳐 만든다. 글루코스는 식물에서 유래한 포도당 기반의 물질로, 풍부하고 값싸지만 직접 바이오플라



신규 촉매 표면에서 글루코스가 프럭토스로 전환되는 반응을 나타냈다. 글루코스가 촉매 표면에 흡착된 후 수소결합과 탈수소 반응(Deprotonation)을 거쳐 프럭토스로 생성된다.

스틱 원료로 사용할 수 없다. 글루코스에서 프럭토스로 전환하는 공정이 필요한 것이다.

기존에는 효소 공정으로 글루코스를 프럭토스로 전환했다. 하지만 비용이 만만치 않았다. 고가의 효소를 1회 사용하면 재사용할 수 없기 때문이다. 또 프럭토스로 전환되고 남은 글루코스를 분리하기 위해 고가의 크로마토그래피 장비도 필요하다.

연구진이 개발한 촉매 공정은 효소 공정과 비교해 비용이 50%나 적게 든다. 촉매가 효소보다 저렴한 데다, 재사용할 수 있기 때문이다. 또 글루코스를 분리하는 크로마토그래피 공정도 필요하지 않다.

글루코스는 촉매 표면에 흡착된 후 수소결합과 탈수소 반응을 거쳐 50% 이상 프럭토스로 전환된다. 이후 상온에서 글루코스와 프럭토스가 섞인 용액을 식히면, 용해도가 낮은 글루코스가 결정화된다. 여기서 글루코스 결정만 분리하면 프럭토스만 남는 것이다.

새로 개발된 촉매는 하이드로탈사이트·부탄올이다. 하이드로탈사이트는 이전에도 '글루코스→프럭토스' 전환 연구에 많이 쓰였으나, 불안정한 게 문제였다. 한국화학연구원 연구진은 하이드로탈사이트와 부탄올을 결합해 이 문제를 해결했다. 화학적 안정성을 높이는 동시에 안정적으로 고수율을 확보한 것이다.

이번 연구를 주도한 한국화학연구원 황동원 박사는 "페프 바이오 플라스틱의 핵심 원료를 안정적으로 확보할 수 있는 기반을 마련한 것"이라며 "신규 촉매기술을 바탕으로 다양한 바이오플라스틱 원료를 만들 수 있는 기술을 개발해 국내 바이오플라스틱 산업 활성화에 이바지하겠다"고 말했다.

또한 이번 연구는 한국화학연구원 주요사업과 한국연구재단의 해외 우수 신진 연구자 유치사업의 지원을 받아 수행됐다.

3. 종이처럼 구길 수 있는 유연 디스플레이 핵심소재 개발

한국화학연구원 화학소재연구본부 김운호 박사팀과 포항공대 정성준 교수팀이 플렉시블 디스플레이의 난제였던 ‘트랜지스터용’ 유연·절연 소재를 개발하고 제조공정을 단순화하는 데 성공했다.

트랜지스터는 디스플레이를 구동하기 위한 소자로 해상도를 정하는 픽셀의 켜짐·꺼짐을 제어하는 역할을 하며, 전극·반도체·절연체로 구성되어 있다. 현재는 무기물 기반의 소재들로 이뤄진 트랜지스터가 디스플레이 패널에 쓰이고 있다.

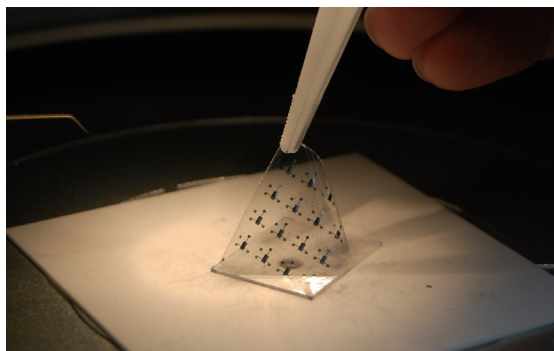
디스플레이를 자유자재로 구부리거나 접으려면, 특히 디스플레이 패널 전면에 적용되는 트랜지스터용 절연체에 유연한 소재를 써야 한다. 이를 위해 다양한 고분자 기반의 후보물

질이 제안됐지만, 절연체의 필수조건인 전류를 차단하는 절연성 확보가 관건이었다. 공동연구진은 분자설계를 최적화하여 절연성(전류 차단)과 유연성, 내열성의 삼박자를 동시에 갖춘 폴리이미드 기반의 유연·절연 소재를 개발했다.

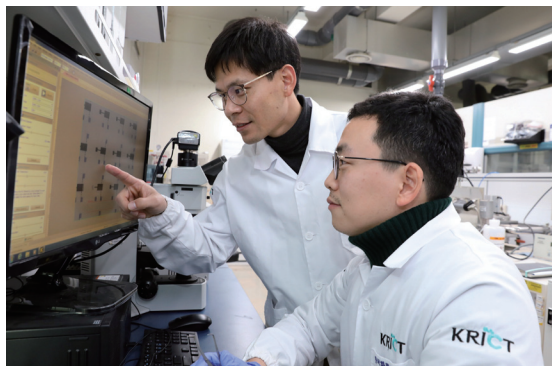
절연성을 나타내는 누설전류밀도가 10^{-9} A/cm²(암페어/제곱센티미터) 이하로, 기존의 트랜지스터용 무기 절연체와 유사한 수준이다. 특히, 350℃ 이상의 우수한 내열성을 가지고 있어 기존 디스플레이 패널 제조공정에도 충분히 적용할 수 있다.

또한 제조공정을 단순화하는 데 성공했다. 기존 폴리이미드 제조에 필수인 200℃ 이상의 고온 열처리 과정이 필요 없는 상온 용액공정을 개발한 것이다. 분자설계를 통해 용매에 녹을 수 있는 폴리이미드 소재를 개발했고, 상온에서 한 번의 용액 코팅공정으로 폴리이미드 절연 박막을 형성했다. 그 결과, 유연·절연 폴리이미드를 트랜지스터 절연체에 적용해 종이처럼 구길 수 있는 유기 트랜지스터를 제작하는 데 성공했다.

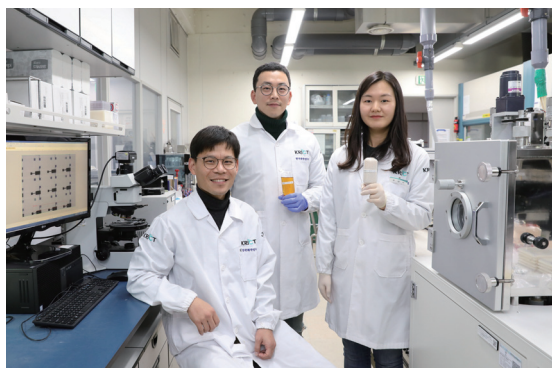
이에 대해 한국화학연구원 김운호 박사는 “이번에 개발된 폴리이미드 절연 소재는 현재 디스플레이 패널 제조공정 환경에도 충분히 적용될 수 있을 것”이라면서 “특히, 최근 인쇄 공정 기반의 유연전자소자 개발에도 매우 적절한 절연소재로 활용될 수 있다”고 설명했다. 또한 김운호 박사는 “앞으로 이번에 개발된 원천소재 및 공정기술을 바탕으로 유연 전자 소자 실용화 개발 연구에 힘을 기울이겠다”고 덧붙였다.



폴리이미드 절연 소재가 적용된 유기 트랜지스터



폴리이미드 절연 소재를 적용한 유기 트랜지스터를 현미경으로 확대 관찰 중인 김윤호 박사와 박현진 박사.



한국화학연구원 화학소재연구본부 고기능고분자연구센터 연구진(왼쪽부터 김윤호 박사, 박현진 박사, 유성미 연구원).

이번 연구성과는 재료과학 분야 권위지인 『ACS Applied Materials & Interfaces(IF: 8.456)』2019년 12월호에 ‘분자 설계를 기반으로 한 저온 용액공정 가능 용해형 폴리이미드 절연 소재 개발 및 유연 유기 트랜지스터 제작 (Low-Temperature Solution-Processed Soluble Polyimide Gate Dielectrics: From Molecular-Level Design to Electrically Stable and Flexible Organic Transistors)’으로 게재됐다.

4. 국산 농약 최초 세계 1위 미국시장 진출

국내 연구진이 개발한 잔디 제초제가 전 세계 1위 미국 시장에 진출한다. 농약 수입국인 한국이 전 세계 잔디 제초제 시장의 70%를 차지하는 미국에 신농약을 수출하는 건 처음이다.

한국화학연구원(원장 이미혜)과 목우연구소(대표이사 구석진)가 공동으로 개발한 잔디 제초제 ‘메티오졸린’이 지난해 말 미국 환경청으로부터 상용화 승인을 받았다. 미국 수출길이 열린 것이다. 미국 환경청에 농약을 등록하는 건 미국 식약청(FDA)의 신약 등록에 준하는 일이다.

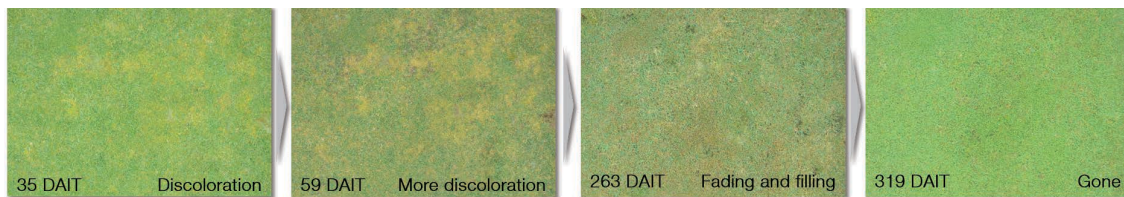
메티오졸린은 골프장과 스포츠 필드, 가정정원 등 잔디조성지에 쓰이는 제초제로, 정상 세포에 영향을 주지 않고 암세포만 선택적으로 제거하듯이 잡초(새포아풀)만 방제하여 제초 효과가 탁월하다. 새포아풀은 골프장에서 방제하기 가장 까다로운 잡초로 꼽힌다. 열대지역을 제외한 전 세계에 분포하는 잔디와 비슷



전 세계 잔디 제초제 1위 시장인 미국에 진출하는 국산 메티오졸린.



특별회원 소개 및 소식



메티오졸린이 처리된 골프장. 잔디에는 피해를 주지 않고 잡초만을 서서히 고사시키는 모습(노란색: 새포아풀). 메티오졸린 처리 후 색상은 변하지만 잔디와 섞여 있다가 새포아풀만 사라지고 그 자리를 잔디가 채우게 된다.

한 잡초인데, 잔디 병을 유발하는 병균의 숙주 역할을 할 뿐 아니라, 여름철에는 말라 죽고 겨울철에는 얼어 죽기 때문이다.

하지만 일반적으로 양잔디로 불리는 한지형 잔디(추운 날씨에도 초록색을 유지하여 온대~냉대에 걸쳐 재배됨)와 새포아풀은 거의 같은 식물 계통이어서 기존에는 한지형 잔디 내에서 새포아풀을 선택적으로 방제할 수 있는 제초제가 없는 상황이었다. 또한 보통 한국 잔디라 불리는 난지형 잔디(겨울에는 휴면에 들어가며 온대~열대에 걸쳐 재배됨)에서 새포아풀을 방제할 수 있는 제초제는 있으나, 최근 새포아풀에 이들 기존 제초제에 대한 저항성이 크게 발생해 난지형 잔디에서 새포아풀 방제도 점점 어려워지고 있다.

메티오졸린은 독창적인 화학구조와 새로운 작용기전을 가져, 기존 제초제에 저항성을 보이는 새포아풀뿐 아니라, 한지형 잔디에서도 새포아풀만 제거할 수 있다. 또한 제초효과가 매우 느리게 발현되어 골프장 등 잔디조성지의 미관에도 영향을 주지 않는다. 메티오졸린 살포 후 2주간 잔디조성지의 외관상 변화 없이 새포아풀의 생장만 저해하다가 4~6주 후에는 잔디가 차 들어오기 때문이다.

한국화학연구원 김형래·(故)유응걸 박사팀이 2002년 메티오졸린을 벼 제초제로 개발했으나 상용화되진 않았고, 2007년 (주)목우연구소로 기술이 이전된 후 잔디 제초제로서의 용도가 밝혀졌다. 이후 친환경신물질연구센터 고영관 박사팀과 (주)목우연구소가 2007년부터 2010년까지 메티오졸린의 대량생산공정을 공동으로 개발했으며, 현재 국내·외 6개국에 관련 공정특허를 등록했다. 의약바이오연구본부 이혁본부장은 “출연연과 산업체가 공동연구로 세계적 수준의 기술 경쟁력을 가진 신농약을 개발해 선진국 시장에 진출함으로써, 국내 신물질 R&D의 위상을 한층 강화했다는 데 의미가 크다”고 말했다.

메티오졸린은 이미 2010년 농촌진흥청 농약으로 등록된 후 ‘포아박사’라는 상품명으로 지금까지 국내에서만 누적 150억 원의 매출을 기록했다. 2016년 일본 농림수산성에 등록 및 출시된 데 이어, 2020년 미국 시장에 진출하게 됐다. 연내 호주와 남아프리카공화국에서도 상용화되며, 점차 캐나다와 유럽으로도 시장을 확대할 계획이다. 판매가 정상 궤도에 오르면 글로벌 시장에서만 연간 500억 원의 매출을 올릴 것으로 기대된다. 한편 이번 연구성과는



메티오졸린이 기존 제초제에 저항성을 보이는 잡초(새포아풀)를 완전 제거한 모습

산업통상자원부의 ‘고저항성 잡초 방제용 신규 발 제초제 개발’, 대덕연구개발특구의 ‘새포아풀 방제 전문 잔디제조제 메티오졸린 글로벌 사업화 개발’ 및 ‘신규 잔디 잡초관리제 사업화’ 등의 지원을 받아 이뤄졌다.

5. EGFR 변이 폐암 치료제 세계적 혁신 기술 선정

한국화학연구원은 의약바이오연구본부 이광호 박사팀의 폐암 치료제 기술을 ‘세계적 혁신 기술’로 선정하고 2월 3일 인증서 및 현판 수여식을 개최했다.

세계적 혁신 기술은 세계 일류 수준의 경쟁력을 보유해 새로운 가치를 창출할 수 있는 기술로, 한국화학연구원이 매년 내·외부 전문가의 심의를 통해 선정한다.

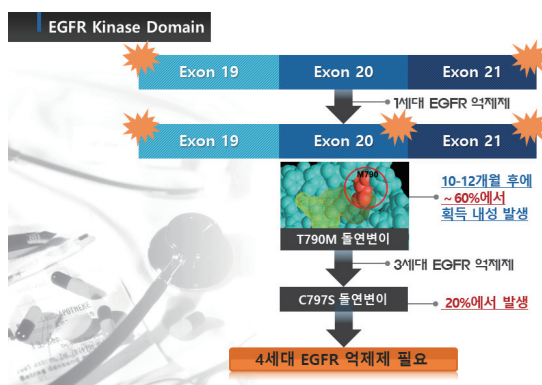
이광호 박사팀의 폐암 치료제는 3세대 EGFR 억제제가 잘 듣지 않는 EGFR C797S 돌연변이나, 기존 약물에 내성을 보이는 폐암 세포를

선택적으로 죽이는 4세대 치료제로, 세계 최초로 개발됐다.

EGFR(Epidermal Growth Factor Receptor · 상피세포 성장인자 수용체) 표적 치료제는 폐암의 85%를 차지하는 비소세포폐암에서 돌연변이가 발생한 종양 유전자인 EGFR을 억제한다. EGFR 돌연변이는 주로 세포 내 키나아제 영역의 엑손에서 일어나는데, 3세대 치료제는 엑손 20에서 발생한 T790M 돌연변이를 억제하는 방식이다.

이광호 박사팀은 연세암병원 조병철 교수팀과 공동으로 이 같은 4세대 EGFR 억제제 ‘BBT-176’을 개발해 2018년 12월 브릿지바이오테라퓨틱스에 기술을 이전했다. 기술이전료는 계약금 및 선급 실시료 10억 원을 포함하여 총 300억 원 규모에 달한다.

브릿지바이오테라퓨틱스는 BBT-176의 전 임상 연구를 마치고, 2019년 12월 환자를 대상으로 하는 임상시험계획서(IND)를 식품의약품안전처와 미국 식품의약국(FDA)에 제출



이광호 박사팀과 연세암병원 조병철 교수팀의 폐암 치료제(EGFR 억제제) 개념도.



했고, 2020년 1월 미국 임상 진입 허가를 받았다. 앞으로 한국과 미국에서 BBT-176의 안전성과 항암효과를 확인하기 위한 임상 1·2상 연구를 수행할 계획이다.

한국화학연구원 이미혜 원장은 “국내 암 사망률 1위인 폐암에 대응하는 신약 물질을 발굴하고, 기술이전을 실시한 점에서 국내 기초과학의 실용화에 기여했다”면서 “앞으로도 국민의 건강한 삶과 의료 혁신을 위한 새로운 신약 물질 개발을 목표로 의약·바이오 연구 지원에 힘쓰겠다”고 말했다.

한편 이번 연구는 과학기술정보통신부가 주관한 신약개발 기초연계후보물질발굴사업의 일환으로 수행됐다.

6. 스스로 자가치유하는 웨어러블 센서 개발

한국화학연구원 연구진이 초고속 자가치유 소재를 개발했고, 이를 이용해 강원대 연구진이 땀 성분을 측정할 수 있는 센서를 제작했다.

한국화학연구원 정밀·바이오화학연구본부 황성연·박제영 박사팀과 강원대 최봉길 교수팀은 이 웨어러블 센서를 개발해 분석화학 최고 권위지 ‘바이오센서 및 바이오일렉트로닉스’와 ‘미국화학회 응용 재료 및 계면’에 발표했다.

자가치유와 건강측정 두 마리 토끼를 잡은 웨어러블 센서가 개발됐다. 머리에 밴드 형태의 센서를 착용하고 운동하는 중 배출되는 땀으로 건강상태를 실시간으로 측정하는데, 굽히거나 잘려도 금세 원래 상태로 돌아온다.

불과 30초면 손상된 소재가 원래 상태로 회복된다. 전 세계 최고 속도를 보유한 중국 쓰촨

대의 기록을 앞질렀다. 30초에 8 MJ/m³(메가 줄/세제곱미터)를 회복해, 2분에 6 MJ/m³를 회복하는 쓰촨대보다 4배 이상 빠른 수준이다.

웨어러블 센서의 한계인 손상으로 인한 성능 저하 문제를 자가치유 소재로 해결한 것이다. 기존 센서는 걷거나 달리기, 뛰기 등의 동작으로 인해 굽히거나 파손되면 성능이 떨어졌다.

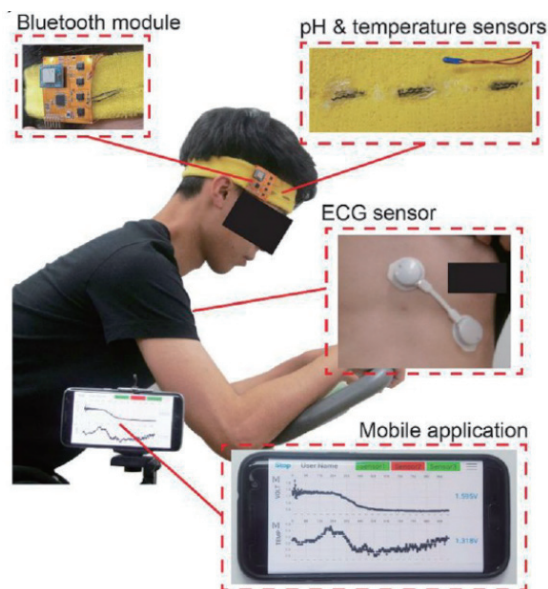
먼저 한국화학연구원 연구진은 감귤류와 목질류에서 추출하는 구연산과 숙신산 등의 친환경 화합물을 합쳐 새로운 초분자 중합체를 만들었다.

초분자 중합체는 수소결합(전기 음성도가 강한 질소와 수소, 산소와 수소, 불소와 수소를 갖는 분자가 이웃한 분자를 끌어당기는 힘) 등의 상호작용으로 자가치유 특성을 가지는 고분자이다.

수소결합이 자가치유의 핵심으로, 새로운 초분자 중합체는 말단의 카르복실산(COOH)과 알콜기(OH)가 서로 수소결합을 한다. 이로 인해 분자 간 인력이 강해져 기계적 강도가 세고, 붙었다 떨어지는 가역적 성질로 인해 잘라도 금세 다시 붙는 것이다.

한국화학연구원 김선미 연구원은 “수소결합으로 인해 기계적 강도가 셀 뿐 아니라 자가치유 속도가 놀라울 정도로 빨라졌다”면서 “3 mm 두께의 절단된 소재가 상온에서 1분 후에 아령 1 kg을 들 수 있을 정도의 강도로 돌아온다”고 설명했다.

강원대 연구진은 땀에서 얻은 데이터를 측정하는 가느다란 실 형태의 센서와 실시간으로 스마트폰에 데이터를 전송해 보여주는 장치를 제작했다. 초고속 자가치유 소재는 실 형태의



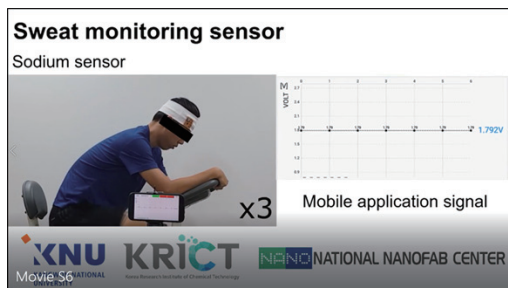
스마트폰에 무선으로 연결한 땀 측정 센서를 이용하여 운동 중 실시간 건강상태 측정이 가능한 자가치유 웨어러블 센서.

땀 측정 센서를 감싸는 피복재로 쓰였다.

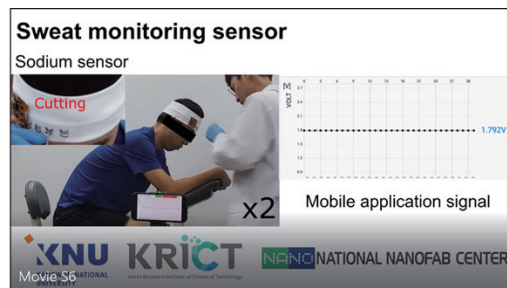
피실험자가 실 형태의 센서를 바느질한 헤어 밴드를 착용한 채 고정식 자전거를 탔는데, 50분 동안 땀의 전해질 농도를 정확하게 추적했고, 운동 중 가위로 센서를 잘랐더니 20초 만에 다시 정상 작동했다.

강원대 최봉길 교수는 “자가치유 땀 측정 센서는 실 형태로 바느질하듯이 꿰매는 방식”이라면서 “여러 종류의 의류제품에 적용할 수 있어 다양한 제품으로 응용될 수 있을 것”이라고 말했다.

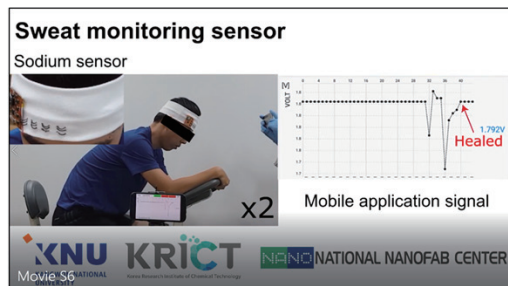
이번에 개발된 웨어러블 센서는 땀에 포함된 칼륨, 나트륨 이온, 수소 이온 등의 데이터를 통해 심근경색, 근육경련, 저나트륨혈증 등의 건강상태를 알 수 있다.



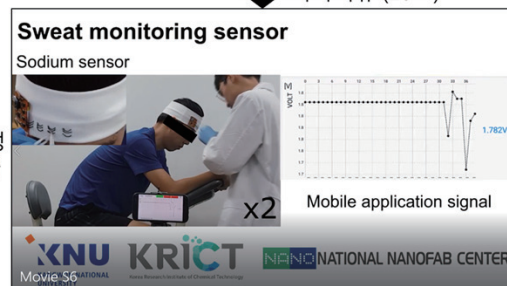
→
센서
절단



↓ 자가치유 (20초)



←
땀-측정
정상화



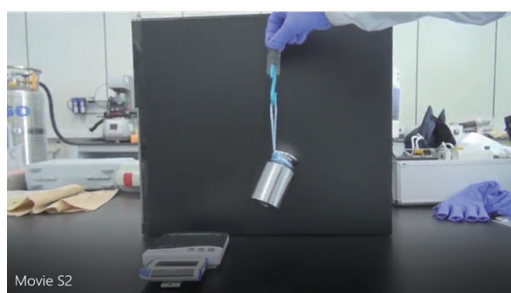
피실험자가 땀으로 건강상태를 측정하는 자가치유 센서를 바느질한 헤어밴드를 착용한 채 운동하던 중 센서를 잘랐더니 불과 20초 만에 자가치유되어 정상적으로 작동했다.



기계적
절단



자가치유 (60초)



1kg 추
버티기



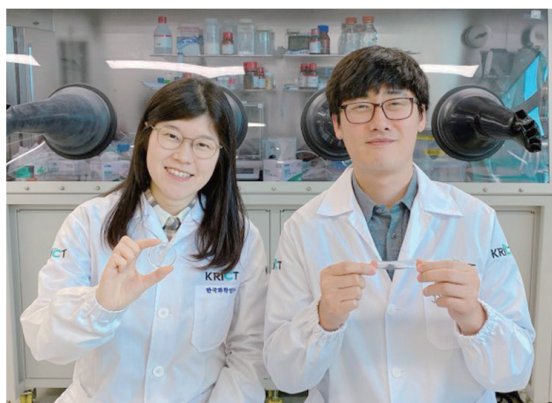
초고속 자가치유 소재를 자르고 다시 붙였더니 60초 후에 추 1kg을 들 수 있을 정도의 강도로 회복됐다.

이번 연구를 주도한 한국화학연구원 황성연 박사는 “자가치유 초분자 중합체를 기반으로 한 땀 측정 센서의 설계 및 제작은 광범위한

비침습적 진단 및 의료 모니터링 응용 분야에서 스마트 웨어러블 기술에 대한 새로운 기회를 열어줄 것으로 기대한다”고 밝혔다.

연구결과는 ‘바이오 센서 및 바이오 일렉트로닉스(Biosensors & Bioelectronics/IF:9.518)’ 2월호와 ‘미국화학회 응용 재료 및 계면(ACS Applied Materials & Interfaces/IF:8.456)’ 2019년 12월호에 게재됐다. 각각의 논문명은 ‘Highly self-healable and flexible cable-type pH sensors for real-time monitoring of human fluids’, ‘Extremely Fast Self-Healable Bio-Based Supramolecular Polymer for Wearable Real-Time Sweat-Monitoring Sensor’이다.

한편 이번 연구는 한국화학연구원의 수월성 연구그룹 육성 사업 및 연구재단의 신진연구 지원을 받아 수행됐다.



초고속 자가치유 소재를 개발한 한국화학연구원
바이오화학연구센터 연구진
(왼쪽부터 한국화학연구원 김선미 연구원, 박제영 박사).

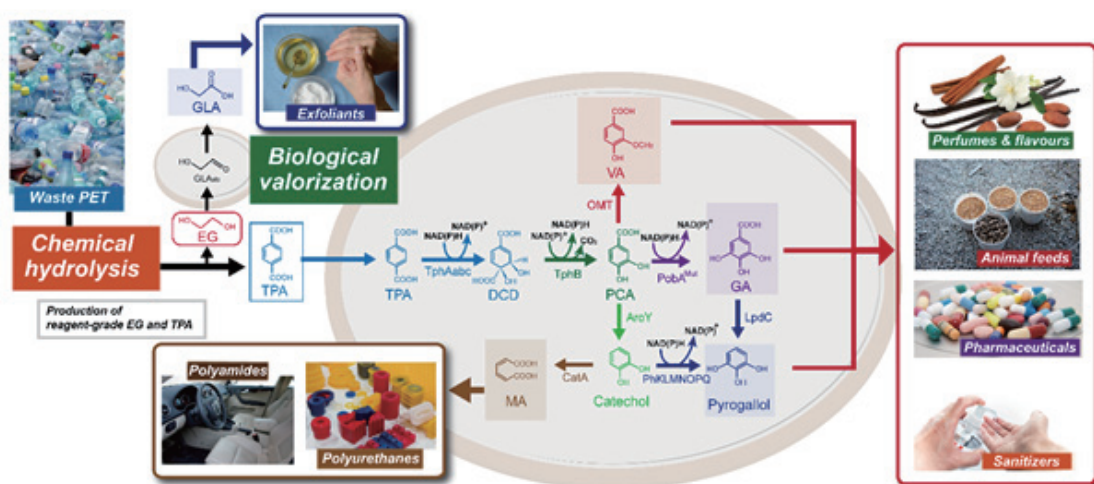
7. 버려지는 페트병 의약품 원료로 재탄생

전 세계가 플라스틱 쓰레기로 몸살을 앓고 있는 가운데 플라스틱의 대명사 페트병을 의약품 원료 등으로 재탄생시키는 기술이 개발됐다. 페트병의 주성분인 폴리에틸렌 테레프탈레이트(PET)를 화학적으로 분해하고 생물학적으로 전환해 유용한 소재로 바꾸는 기술이다.

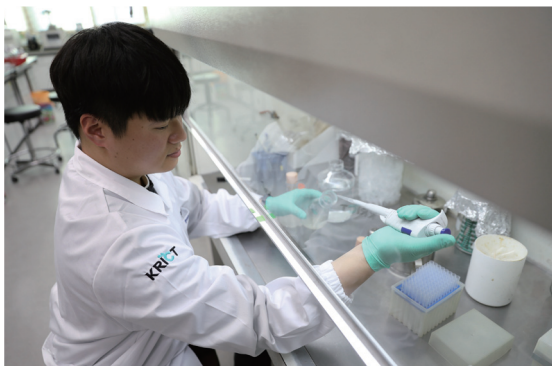
한국화학연구원 정밀·바이오화학연구본부 김희택·주정찬·차현길 박사팀, 고려대 김정현 교수팀, 이화여대 박시재 교수팀은 공동으로 PET를 의약품과 플라스틱 원료 등으로 전환하는 기술을 개발했다. 공동 연구진은 물을 이용해 PET를 단량체(단위 분자)로 친환경적으로 분해하고, 이를 미생물을 이용해 유용한 소재들로 전환하는 전략을 설계했다.

연구진은 먼저 PET를 마이크로웨이브 반응기에서 230℃ 조건으로 물과 반응시켜 테레프탈산과 에틸렌글리콜로 화학적으로 분해했다. 수율은 99.9%에 달했다. 이어서 미생물을 이용해 테레프탈산과 에틸렌글리콜을 유용한 소재로 전환하는 데 성공했다. 테레프탈산을 갈산(92.5%), 카테콜(90.1%), 피로갈롤(20.8%), 뮤콘산(85.4%), 바닐릭산(29.4%)으로, 에틸렌글리콜을 글라이콜산(98.6%)으로 전환했다. 갈산과 뮤콘산, 바닐릭산, 피로갈롤, 글라이콜산 등은 의약품과 플라스틱 원료, 방향 성분에서 사용되는 물질이다. 대표적으로 갈산은 의약품(항산화제) 중간체, 뮤콘산은 플라스틱 단량체, 바닐릭산은 의약 및 화장품용 방향 성분으로 쓰인다.

이처럼 다양한 소재로 전환할 수 있기 때문에 기존의 PET 재활용 방법의 낮은 활용도를



버려진 PET는 화학적으로 테레프탈산과 에틸렌글리콜로 분해된다. 이어서 미생물을 이용해 테레프탈산은 핵심 중간산물인 프로토키테루산을 거쳐 갈산, 피로갈롤, 카테콜, 뮤콘산, 바닐릭산으로 전환된다. 에틸렌글리콜은 해당 물질의 대사균주를 이용해 글라이콜산으로 전환된다.



미생물을 이용해 테레프탈산을 갈산, 바닐릭산 등으로
생물학적 전환하는 모습



고성능 액체크로마토그래피(HPLC)로 테레프탈산이 갈산,
바닐릭산 등 최종 물질로 변환됐는지 확인하고 있다.

개선하는 모델로, 버려지는 PET 감축에 기여할 것으로 기대된다. 기존 PET 재활용은 기계적 방법과 화학적 방법으로 이뤄진다. 기계적 방법은 파쇄·세척·건조와 같은 기계적 처리와 열처리를 통해 PET 섬유를 회수해 새로운 PET 제품을 만드는 것이다. 하지만 가공 중 섬유의 길이가 짧아지는 품질 저하가 일어나는 문제가 발생한다. 화학적 방법은 PET 섬유를 분해하고, 단량체를 회수해 재증합해 활용하

는 방식으로, 재활용 비용이 높은 탓에 경제성이 떨어지는 문제점이 있었다.

김희택 박사는 “기존에 폐기물로 취급됐던 폐플라스틱의 원료화 및 소재화 기술의 실마리를 제공한 것”으로 “향후 PET를 포함한 폐플라스틱 자원화 및 소재화 기술 개발이 이번 연구개발을 바탕으로 활발히 진행될 것으로 기대한다”고 설명했다. 이번 연구결과는 미국화학회에서 발간하는 국제학술지 『ACS Sustainable Chemistry & Engineering(지속 가능 화학 및 공학)(IF:6.97)』 12월호에 게재됐다. 또한 이번 연구성과는 한국연구재단의 중견연구지원사업, 기후변화대응기술개발사업, Korea Bio Grand Challenge 사업의 지원을 받아 수행됐다.

8. 64만종 신약 씨앗 ‘화합물 정보’ 웹으로 검색한다

한국화학연구원이 천연 다기능성 소재와 슈퍼 바이오플라스틱 제조기술을 관련 전문기업에 이전하고 상용화를 본격화하고 있다.

화학연 한국화합물은행이 신약개발의 씨앗 ‘화합물 정보’를 웹으로 검색할 수 있는 ‘웹 기반 신약소재 화합물 통합 DB’의 데모 서비스(demo.chembank.org)를 시작했다. 웹 기반 신약소재 화합물 통합 DB는 신약개발 연구자들에게 웹으로 64만 종 이상의 화합물 정보를 제공하는 서비스로, 기존에 세 개로 나뉘었던 화합물 관련 DB를 통합한 것이다.

웹 기반 신약소재 화합물 통합 DB는 크게 ▲물질 관리 정보 DB(화합물의 입고(기탁),



출고(활용), 보유량 등), ▲화합물 정보 DB(화합물의 구조와 약효 등), ▲해외 공공 화합물 DB로 구성되어 있다. 이 서비스를 통해 연구자들은 64만 종 이상의 신약소재 화합물 정보를 검색하고, 연관된 650만 건 이상의 약효시험 및 관련 질병, 생물학적 타겟을 효과적으로 찾아볼 수 있다. 또한 다양한 화합물 정보(생물학적 활성 및 단백질 결합 정보), 승인 약물 및 약물 후보물질 정보 등을 제공받을 수 있다.

이와 함께 화합물 확보 및 관리를 위한 기탁 프로세스와 국내 연구자에게 화합물 라이브러리를 제공하기 위한 약효시험 활용 프로세스도 웹 기반으로 진행할 수 있다. 단, 현재 데모 서비스에서는 보안 검증이 필요한 기탁 및 약효시험 활용 프로세스 등의 일부 서비스는 사용이 제한된다.

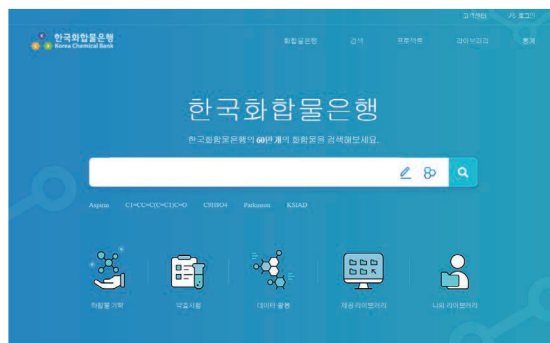
한국화합물은행은 빅데이터 및 인공지능 기반의 신약개발 벤처기업 (주)파로스아이비티와 공동으로 지난해 7월 1일부터 화합물 통합 DB의 베타(시험) 서비스를 시작했으며, 지난 12월 13일 연구자들을 대상으로 시연회를 열었다. 앞으로 사용자 권한 설정 등의 보안 검증을 완료한 후 올해 상반기에 전체 서비스를 제공할 예정이다.

한국화합물은행 이선경 센터장은 “국내 신약개발 분야 연구자들에게 다양한 서비스 제공의 토대가 되는 웹 기반 신약 소재 화합물 통합 데이터베이스를 구축했다”면서 “앞으로 신약개발에 필요한 시간과 비용을 줄여주는 것은 물론이고 성공률 제고에도 기여하게 될 것”이라고 말했다.

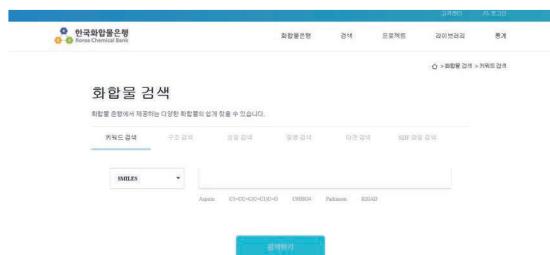
한국화합물은행(chembank.org)은 범국가적

으로 화합물을 확보·관리·제공하기 위해 2000년에 출범했다. 현재 다양성과 약물성, 특이성이 우수한 64만 종의 화합물을 보유하고 있다. 연평균 200건의 국내 산·학·연 연구과제(신규 60건 이상)에 화합물을 제공하고 있으며, 현재까지 935건 이상의 질병 치료 연구과제 약효시험을 지원했다.

(주)파로스아이비티는 2016년 설립돼 타겟(질병 관련 단백질), 화합물, 약물 관련 공공 데이터를 기반으로 단백질 구조 예측, 화합물 가상탐색, 유효물질을 발굴하고 물성을 예측, 설계할 수 있는 빅데이터 기반의 신약개발 플랫폼 케미버스(chemiverse.co.kr)를 개발한 경험을 가지고 있다.



웹 기반 신약소재 화합물 통합 DB



웹 기반 신약소재 화합물 통합 DB의 검색화면



전기장제어소재연구단 (Research Center for electric-field-controlled materials)

이 상 한 (광주과학기술원 부교수 / 연구단장)

주소 : 광주광역시 북구 첨단과기로 123 광주과학기술원 신소재공학부

전화 : 062-715-2314

이메일 : sanghan@gist.ac.kr

홈페이지 : <http://sanghan.gist.ac.kr>

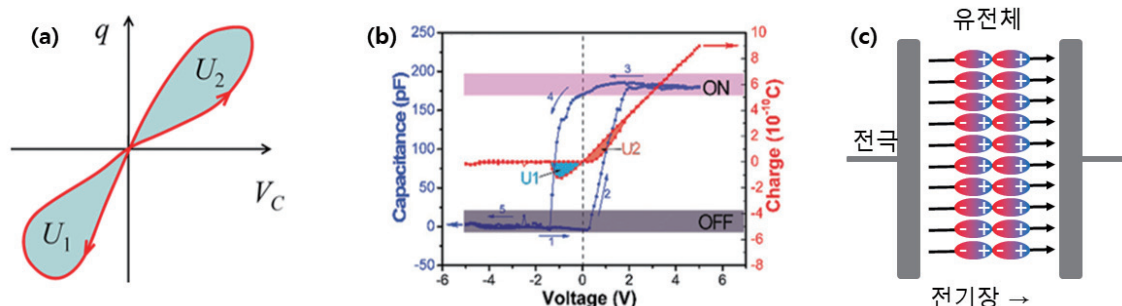
1. 연구배경

제 4차 산업혁명을 맞이하면서 태블릿PC, 스마트폰 등의 모바일 플랫폼을 이용한 무선 인터넷과 초고속 인터넷의 발달에 따른 고품질의 콘텐츠 배포 및 전송이 급증하며 정보를 빠르게 처리할 수 있고 많이 저장할 수 있는 초고집적, 초저전력 반도체 로직, 메모리 소자와 같은 고성능 전자 소자의 개발이 필수적으로 요구되고 있다.

하지만 현재 실리콘 기반의 소자의 경우, 게이트 길이는 10 nm급, 절연막 두께는 1 nm급에 이르러 더 이상의 스케일링(scaling)이 어려워지며, 고집적화로 인한 단위면적당 전력소모/발열문제가 기술적인 한계에 근접하고 있어, 향후 휴대용 및 초고집적 소자에 적합한 초저전력 소자의 개발이 필수적이며, human-machine interface를 고려한 새로운 개념의

소자를 위한 신소재 개발이 필요하다.

본 연구단은 이러한 문제를 극복하고자 정전용량이 조절되는 신소재를 개발하고, 해당 소재를 기반으로 메모리 및 미래형 반도체 소자를 개발하기 위한 연구를 진행 중이다. 정전용량 변조 소재가 적용된 메모리 소자는 메모리와 연산 동작을 같이 구현할 수 있기 때문에 소자 회로를 획기적으로 단순화할 수 있고, 패턴인식 칩, 뉴로모픽 칩 등의 다양한 응용분야에 적용할 수 있다. 또한 소재의 정전용량을 단계적으로 조절할 수 있다면, 다차로직 소자, 초고주파-THz 응용소자에도 적용가능하다. 현재 전체 반도체 시장 규모는 4485억 달러이며, 이 중 본 연구단이 개발하는 기술이 적용될 수 있는 시장은 약 20% 정도인 881억 달러 규모로 예측되므로 그 파급효과 또한 클 것으로 예상된다.



[그림 1] (a) 멤커패시터의 전하-전압 그래프. (b) 멤커패시터의 전하-전압 그래프 및 정전용량-전압 그래프. (c) 커패시터 구조

2. 연구분야 및 연구내용

(1) 멤커패시터와 정전용량 변조소재란?

멤커패시터는 메모리(memory)와 커패시터(capacitor)의 합성어로, 메모리와 프로세스가 통합된 기능을 할 수 있다. 전압과 전하를 연결하는 수동소자인 커패시터에 비해 멤커패시터는 다소 생소한 개념일 수 있는데, 멤커패시터는 멤리스터 개념을 커패시터에 확장시킨 개념이다. 멤리스터는 1971년 Chua 교수에 의해 만들어진 용어로 전하(charge)와 자속(magnetic flux)을 연결하는 제4의 수동소자(레지스터, 커패시터, 인덕터 이외의 소자)로써 재료나 물리적 메커니즘에 상관없이 전류-전압 평면의 첫번째 사분면과 세번째 사분면에서 핀치(pinched) 히스테리시스 루프를 나타내는 회로 소자이다.¹⁾ 2008년 HP 연구팀에서 멤리스터 특성이 얻어지는 소자에 관한 논문을 발표한 이후, 2009년 멤리스터의 개념을 커패시터에 확장시켜 재료나 물리적 메커니즘에

상관없이 전압-전하 평면의 첫번째 사분면과 세번째 사분면에서 핀치 히스테리시스 루프를 나타내는 회로 소자를 멤커패시터라 하였다(그림 1a).²⁾ 멤커패시터는 전압에 따른 정전용량(capacitance)을 측정하면 히스테리시스 루프를 나타내는데, 양단에 인가되는 특정 전압에 따라 정전용량 값이 변화하며 정전용량 값은 단일 레벨이 아닌 멀티 레벨을 유지할 수 있고 일정 시간 이를 저장하는 메모리 역할을 할 수 있다(그림 1b).³⁾

멤커패시터의 구조는 상-하단 전극과 그 내부 유전체로 채워진다. 유전체는 전극에 인가된 전기장 안에서 분극을 가지는 물질로, 통상적으로 물질에 따라 고유의 유전율을 가진다(그림 1c). 현재까지 멤커패시터는 유전체 재료 내부 이온의 이동을 기반으로 하는 메커니즘으로 작동된다. 이와 관련된 원천 특허는 HP에서 보유하고 있다. 본 연구단은 이 유전체

1 Chua, Leon, IEEE Transactions on circuit theory 18,5 (1971): 507-519.

2 Di Ventra, et al. Proceedings of the IEEE 97,10 (2009): 1717-1724.

3 Qian, Wen-Hu, et al. Advanced Materials 31,37 (2019): 1806424.



소재가 기존의 2중 상태가 아닌 외부 전기장에 따라 다중으로 정전용량이 변조되는 소재를 개발하고 있으며, 특히 기존의 이온 이동 기반이 아닌 새로운 메커니즘을 기반으로 하는 다중정전용량 변조 소재를 개발하고 있다. 다중정전용량 변조소재가 메모리스터에 적용이 된다면 기존의 2중 상태에서 다중 상태를 가져다치 정보를 기억하는 메모리로 적용될 수 있어 기존의 메모리 대비 전력 소모도 획기적으로 줄일 수 있다. 본 연구단은 메모리스터에 적용될 새로운 메커니즘을 기반으로 하는 다중정전용량 변조 소재를 개발하기 위해서 이론기반 소재 발굴, 실험기반 소재 구현, 대면적 증착, 소자제작 및 응용팀으로 구성되어 있으며 이들 팀 간 유기적으로 연구를 진행하고 있다.

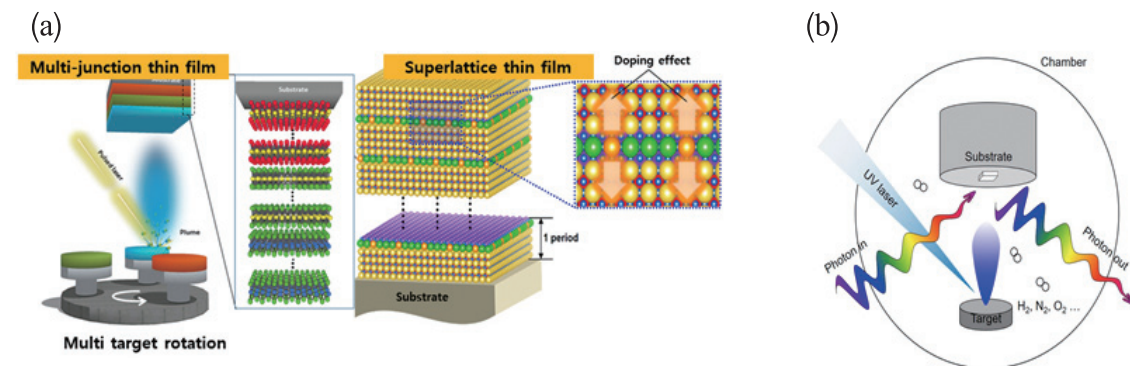
(2) 소재발굴을 위한 이론기반 양자계놈법 개발

본 연구단은 효율적으로 소재를 개발하기 위해 양자계놈법을 적용해 이론적으로 정전용량 변조가 가능한 새로운 소재를 발굴하는 연구를 진행 중이다. 양자 물질은 필연적으로 다양한 순서 매개 변수 (order parameters)를 가진다. 스핀 (spin)과 격자 (lattice), 전기분극 (electric dipole) 등 이 양자 물성을 결정하는 순서 매개 변수이다. 이러한 순서 매개 변수의 조합이 각각의 물질의 고유한 물성을 결정한다. 그런데 실험에서 측정할 수 있는 상태는 대부분 물질의 기저 상태 (ground state)이다. 따라서 실험만으로는 양자 물질의 다양한 상전이의 가능성을 간과하기 쉽고 새로운 대체 상태, 즉 메타 상태에 대한 정보를 예측하기 힘든 경우가 많다. 한편으로 이 기저 상태에서부터 유도되

는 다양한 상전이를 통한 새로운 대체 상태와 그에 따른 물성은 바로 위에서 서술한 매개 변수의 다른 조합이 결정한다. 이러한 기저 상태와는 다른 매개 변수 조합과 그에 따른 다양한 대체 상태를 예측하기 위해 매개 변수에 대한 정보를 생물학에서의 염기 (A, T, G, C)처럼 슈퍼컴퓨터에 디지털 정보로 저장하여 기본 구성 요소를 만들었고, 이러한 디지털화된 정보로부터 가능한 모든 대체 상태에 대한 상대적인 에너지와 그에 따른 물성을 제일 원리 계산으로부터 이론적으로 예측하여 신소재를 발굴 중이다. 현재까지 본 연구단이 양자계놈법을 통해 발굴한 대표적인 정전용량 변조 가능 소재로는 에피택셜하게 격자가 인장된 산화물 박막, 3중 초격자 산화물 박막, 다중 분극 기반 산화물 박막 등이 있다.

(3) 다중정전용량 변조 고품질 박막 제조

이론 계산을 통해 예측된 다중 정전용량 소재 후보군을 실험적으로 검증 및 구현하기 위해서 에피택시얼 격자 인장된 박막 및 다층/초격자 박막 등의 복잡한 구조의 박막 제조가 요구된다. 본 연구단은 다양한 조성 및 복합구조를 가지는 유전체 소재 후보군을 단기간에 효율적으로 스크리닝하기 위해 정확한 구조 제어가 가능한 순차 펄스드 레이저 증착법을 도입했으며 (그림 2a), 보다 정밀한 조성제어를 위해 메탈 가스가 주입가능한 펄스드 레이저 시스템을 개발했다. 이 기술을 바탕으로 실험적으로 최초로 격자가 인장된 스트론튬 망간 계열 산화물 박막에서 3중 상태의 계단형 유전을 변조를 확인했으며 해당 소재에 대한 원천 특허



[그림 2] (a) 순차 펄스 레이저 증착법과 제작 가능 형태의 박막. (b) 펄스 레이저 증착법 + in-situ 유전율 광학 분석장비 모식도

기술을 확보 중이다. 특히, 본 소재는 기존의 내부 이온 이동을 기반 메커니즘을 기반으로 하지 않고 특정 격자의 응력에서 외부 전압에 따라 인가된 스핀의 변조에 따라 유전율이 변하는 메커니즘을 따르는데 의의가 있다.

(4) 다중정전용량 기반 메모리 소자 분석

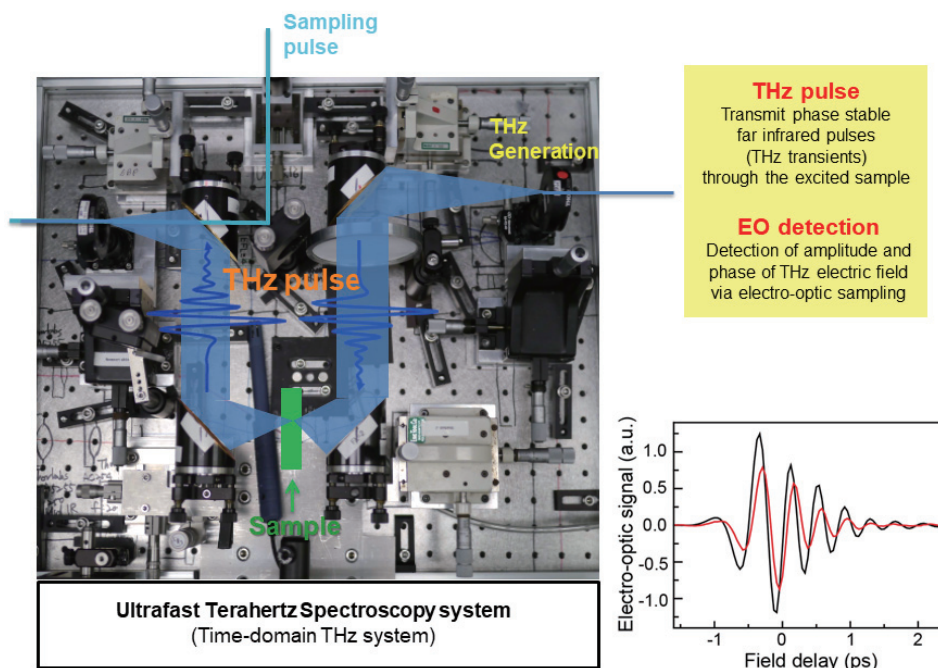
기술 개발

새로운 개념인 정전용량 변조에 대한 분석을 위해서 본 연구단은 몇 가지 분석법을 개발 및 적용중이다. 먼저, 펄스 레이저 증착법을 통해 박막을 성장하면서 동시에 비접촉 방식인 분광학을 사용하여 물질의 유전율을 in-situ 형태로 분석하는 기술을 개발하고 도입했다(그림 2b). 해당 기술은 여러 기체 분위기에서의 박막 합성과 유전 특성 분석을 동시에 진행할 수 있어 박막내부 공공에 의해 발생하는 누설전류를 감소시키면서 유전특성을 최적화 하는 조건을 확립하여 효율적으로 다중정전용량 변조 소재 군을 확보할 수 있게 한다.

또한 본 연구진은 마이크로 X선 빔을 이용하

여 박막의 이차원 이미징 및 외부전압에 따른 박막의 구조적인 변화를 관찰하는 분석 기술을 적용중이다. 실시간으로 외부에서 인가되는 전기장으로 유도되는 구조적 변화를 관찰하여 상전이 및 분극의 변화 현상과 다중정전용량 변조 현상과의 상관관계를 검증하는 연구를 진행 중이다.

비접촉식으로 물질 고유의 유전체 특성을 보다 정밀하게 분석하기 위해 THz 신호를 샘플링 펄스로 이용하여 실시간으로 측정하는 time-domain THz spectroscopy(TDS)시스템을 구축했다(그림 3). TDS 측정은 분광기처럼 단순한 파장 분해를 통해 주파수에 따른 흡수도를 측정하는 것이 아니라 실험을 통해 얻은 시간-도메인의 전기장을 고속 푸리에 변환(fast fourier transform)을 이용해 진동수-도메인의 스펙트럼을 얻는 방법으로, 데이터 분석 과정을 통한 물질의 유전상수와 전기전도도 등의 주요 실험값을 주파수에 따른 복합 함수로 얻어 실수 및 허수 값을 동시에 분석할 수 있다. 따라서, 큰 누설 전류를 가지는 박막물질에서



[그림 3] 구축된 테라헤르츠 레이저 시스템

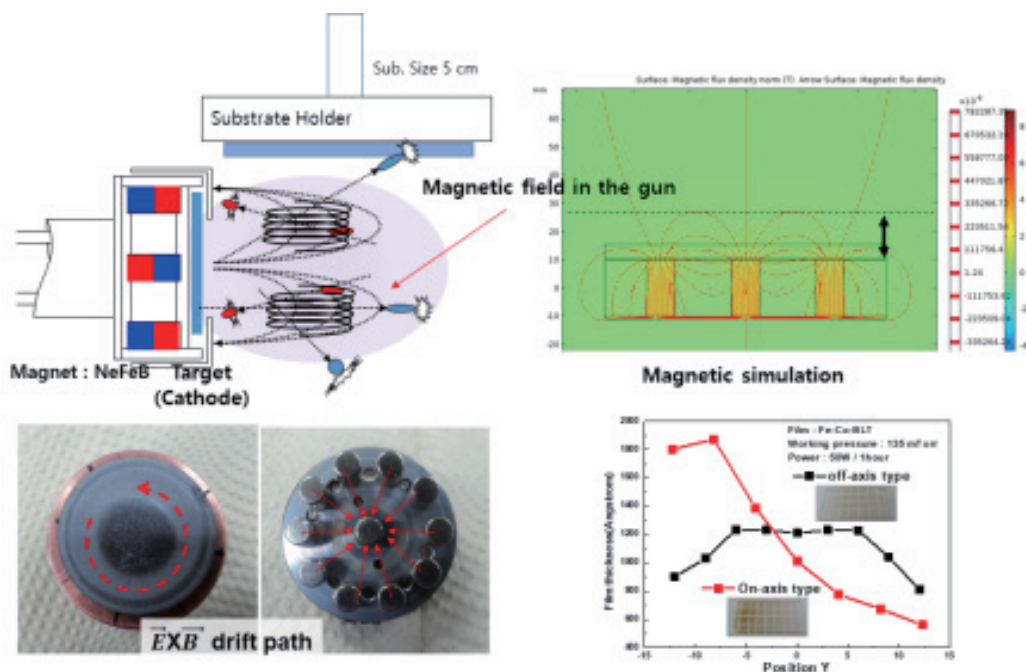
도 TDS 측정을 통해 물질의 유전율을 측정 및 분석이 가능하며, 이를 통해 메모리 소자의 정전용량 변조 특성을 연구 중이다.

(5) 대면적 공정 개발

본 연구단은 개발하는 다중정전용량 변조소재를 연구적 단계에서 응용 단계로 접근하기 위해서 대면적 성장을 위한 공정 개발을 추진 중이다. 개발된 다중정전용량 변조 소재의 에피택시 대면적 성장을 위해 off-axis 스퍼터링법을 개발했으며 해당 원천 특허기술을 확보 중이다 (그림 4). off-axis RF 스퍼터를 이용하여 표면에 대해 90도 각도에서 특정 조건으로 박막을 증착시키면, layer-by-layer 성장 모드

로 박막 증착을 유도하고, 증착방향과 그 직각 방향에 대하여 원자 단위로 균일한 거칠기를 가지는 표면지형을 만들 수 있는 점을 활용하여, 증착 온도 및 기체 분위기 조건 등의 증착 조건을 조절하여 박막의 에피택시 성장을 최적화하는 연구 중이다. 자계 시뮬레이션을 이용하여 최적 조건의 내부 구속 자계 분포를 도출하여 대면적 에피택시 박막을 성장시키는 연구를 진행 중이다.

또한 이론 기반으로 도출한 다중 분극 상태를 보이는 하프늄계 금속산화물 후보군을 펄스 레이저 증착법 뿐만 아니라 원자 기상 증착법을 적용해 대면적 성장을 진행하고 있다. 특히 하프늄계열 금속 산화물의 경우 실리콘 기



[그림 4] Off-axis 스퍼터링법 간략도 및 내부 자기 시뮬레이션 결과

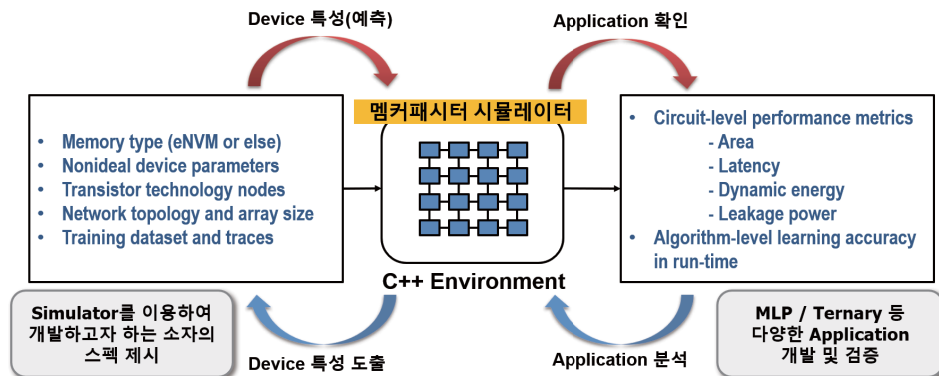
반 반도체 산업에 이미 적용되고 있으며 원자 기상 증착법은 기존 반도체 공정과의 호환성이 우수해 향후 다중정전용량 기반 소자의 상용화에 박차를 가할 것으로 판단된다.

펄스 레이저 증착법 및 스퍼터링 법에 사용되는 타겟은 고상법(solid-state reaction)을 이용해 자체 제작 중이다. 시작 물질을 화학조성비로 혼합한 후, 소결 온도 (1400 °C 이하) 및 시간 (3~48시간)에서 최적의 조건을 확립하여 불순물 혼입, 불균일 입자 분포, 2차 상 형성 등의 문제점을 해결하고 고속 불밀링 시스템을 이용하여 나노사이즈의 균일도 85% 이상 분말을 제조해 고밀도 유전체 타겟을 제작하고 있는 중이며 관련 기술을 개발하는 중이다.

(6) 응용 소자 제작 및 회로 설계

[다중정전용량 기반 소자 연구]

본 연구단의 소자 전문 연구팀은 다중정전용량 소자와 그 메모리패시터 동작 메커니즘을 분석하고, 동작 안정성을 개선하기 위한 소자의 구조를 재설계하고 이에 적합한 공정을 개발을 진행하는 중이다. 이를 위해, 다중정전용량 소자의 각 층에 해당하는 물질과 적층된 물질 간의 계면 현상에 대하여, 개별 분석 과정을 통해 전체적인 소자의 동작 메커니즘을 규명 중이다. 이와 더불어 다치로직 소자의 정전용량 값 변화 분석을 통해, 연구단에서 개발중인 다중정전 신소재를 로직 소자에 적용하기 위한



[그림 5] 제안하는 뉴로모픽 메모리 array를 활용한 멤캐피터 시뮬레이터의 활용 방안

기준값과 적용될 소자의 구조, 공정 조건 등을 확립하는 중이다.

[다중정전용량 기반 회로 연구]

본 연구진의 회로 설계팀은 다중 정전용량 소재가 적용된 멤캐피터에 대한 전기적 특성을 분석하여 단일소자 모델을 확립하여 소규모 다치로직 회로 및 비휘발성 메모리 구현에 활용하고, 회로 시뮬레이션을 통해 특성이 개선될 수 있는 소재 구조 및 소자 특성을 분석하는 연구를 진행 중이다. 또한 본 연구단이 개발한 시뮬레이터를 통해, 뉴로모픽 multi-layer perceptron (MLP) 신경망 어플리케이션을 개발하여 SRAM 등 기존 소자대비 전력소비 감소 여부를 검증하는 연구를 수행중이다 (그림 5).

[다중정전용량 기반 고주파소자 연구]

다중정전용량 변조소재의 경우 초고주파 대역의 소자로 적용이 가능하다. 이에 초고주파 대역 정전용량 변조 소재의 성능 한계 극복(상

온에서 낮은 전계 인가로 구동 시 저손실, 높은 변조비, 고속 변조속도 달성)을 위해 초고주파 재구성 소자에 적용하여 최적의 소재 설계 및 제조-공정기술을 개발 중이다. 다중 정전용량 소재가 적용된 평판형 전자기 도파로 구조의 일차원 전자기 메타물질 기반 주파수 재구성 안테나를 설계, 제작하고 주파수 가변비, 방사성능, 인가전계에 의한 선형지표 등의 성능 측정을 진행 중이며, 또한 다중 정전용량 소재가 적용된 능동형 안테나를 설계, 제작하고, 분산관계($\omega-\beta$) 제어에 의해 안테나의 빔조향 가능성을 확보하고 있다. 안테나의 이득, 최대 빔조향 각도, 선형지표 등을 고려하여 성능 평가를 수행하고 소자의 성능을 극대화할 수 있는 소재 특성 제안과 소재의 제조-공정기술을 개발하며, 더불어 대용량 다중 입출력 안테나 또는 안테나 이외 전치단 구성 요소인 재구성 소자에 다중 정전용량 소재 적용을 통해 저전력 구동의 다양한 파라미터(주파수, 임피던스, 위상) 제어, 고효율, 고품위 전력전송 특성 등

의 다기능성 초고주파 소자 응용 및 성능 개선방안에 대해 모색하고, 소재 최적화 연구를 진행 중이다.

3. 맺음말

본 연구단이 개발하는 세상에 존재하지 않는 새로운 소재인 다중정전용량 변조 유전체와 그 멤커패시터는 이론적으로만 가능했던 멤아키텍처를 실제로 구현할 수 있게 하고 기존 회로를 획기적으로 단순화함으로써 기존 정보처리 시스템의 전력소모를 수십 배 줄이는 혁신이 가능하게 하는 미래형 소재이다. 이 소재를 개발하기 위해 광주과학기술원, 울산과학기술원, 포항공과대학교, 서울대학교, 가천대학교 5개의 대학연구기관이 참여하고 있으며, 2017년 9월에 출범 후 약 3년간의 1단계 연구를 진행하여 다중정전용량 변조 가능 소재에 대한 원천기술 확보를 위한 연구를 수행했다. 2020년 2단계 연구에 진입한 본 연구단은 개발된 소재에 대한 응용기술 및 대면적 제조에 중점을 두

고 연구를 수행중이다. 본 연구단이 연구 중인 소재 및 소자 개발이 완료되면 기본 단위회로의 구성을 혁신하는 기술이므로, 메모리, 로직 등 반도체 분야의 거의 모든 분야에 적용이 가능하며, 확보된 원천 특허 및 해당 기술은 국내 반도체 관련 기업들에 이전을 추진할 계획이다. 본 연구단은 세계 반도체 산업에서 선도 국가로의 입지를 공고히 하고 새로운 반도체 시장을 선점하기 위해 연구에 매진하고 있다.

..이 상 한..



1997~2004 포항공과대학교 신소재공학과 학사
 2004~2006 포항공과대학교 신소재공학과 석사
 2007~2009 University of Wisconsin-Madison, 재료공학 석사
 2007~2012 University of Wisconsin-Madison, 재료공학 박사
 2012~2013 University of Wisconsin-Madison, 박사 후 연구원
 2013~현재 광주과학기술원 부교수
 2019~ 미래소재디스커버리 사업 전기장제어소재 연구단장



엔지니어링개발연구센터 (Engineering Development Research Center, EDRC)

이 중 민 (서울대학교 화학생물공학부 교수, 엔지니어링개발연구센터(EDRC) 소장)

주소 : 서울시 관악구 관악로 1 서울대학교 화학생물공학부
전화 : 02-880-1878
이메일 : jongmin@snu.ac.kr
홈페이지 : <http://www.edrc.or.kr>

1. 사업단 개요

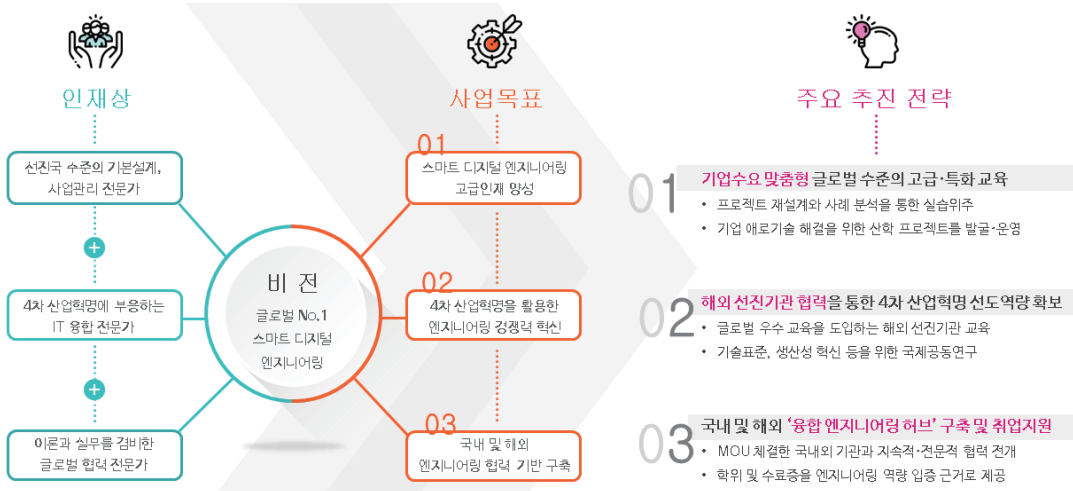
엔지니어링개발연구센터(Engineering Development Research Center, EDRC)는 엔지니어링에 필요한 고급 전문인력의 양성을 목표로 2014년 6월에 출범하였다. 산업통상자원부의 '고급 두뇌 역량 강화'를 통한 산업 고도화 정책의 일환으로 엔지니어링 산업에 필요한 글로벌 수준의 전문인력 양성과 확보를 통해 세계 플랜트 엔지니어링시장에서 대한민국의 수주 경쟁력과 기술역량을 강화하는데 설립 의의를 두고 있다.

센터는 출범 이후 5개년은 국내·외 다양한 엔지니어링 기업 및 기관 등과 연계하여 정기 교육인 글로벌 엔지니어 인재양성 프로그램, 해외 선진기관 교육, 해외 인턴파견, 엔지니어링 온라인 교육, 산학프로젝트 등을 통해 그간 약 15,000여 명에 달하는 인원을 교육하고 지원하였다. 특히 엔지니어링분야 고급 인력양성에 초점을 두고 엔지니어링 선진국과의

지속적인 네트워크 협력을 통해 국내 엔지니어링 분야에서 불모지였던 기본설계, FEED분야 등의 엔지니어 역량 함양을 도모하였다.

이후 플랜트, 건설 해외프로젝트 경쟁력 강화를 위하여 핵심 원천기술, 기본설계, FEED, 요소설계, 엔지니어링 시뮬레이션 등의 역량과 엔지니어링 노하우와 공사 경험이 집약된 시스템 기반 선행설계, 품목 다양화 등으로 사업영역 확대, 기본설계부터 기자재 제작, 시공까지 원스톱 수행이 가능한 일관 수행체계를 확보하고 IT기반의 에러 감소 및 효율향상 시스템을 활용하는 차세대 통합솔루션 제공하는 고부가가치 엔지니어링 특화역량을 기반으로 한 스마트디지털엔지니어링인력양성사업을 2019년부터 추진하고 있다.

스마트디지털엔지니어링인력양성사업은 기본설계 등 기존의 엔지니어링 고급역량에 4차 산업혁명으로 부각된 IT융합역량을 강화하여 차세대 글로벌 선도인력을 양성하는 것으로 2014년부터 진행했던 엔지니어링고급인력



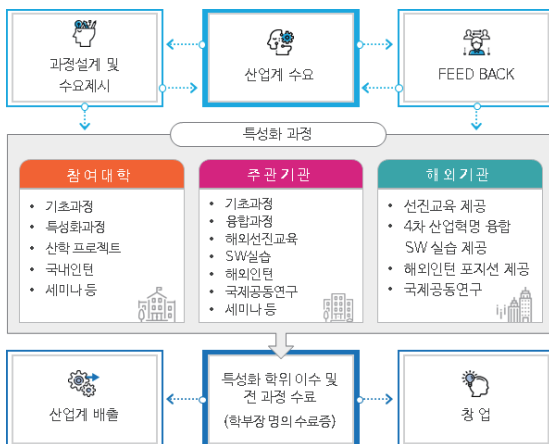
[그림 1] 인재상 및 주요 추진전략

양성에서 보였던 EDRC의 성과를 기반으로 하고 있다.

이를 위하여 EDRC의 가장 큰 특징이자 장점인 기업 수요 맞춤형 글로벌 고급·특화교육을 국내 또는 해외 우수 기업과 기관의 전문가를 초청하여 사례와 실습 위주로 진행하는 것

은 물론 WTP(World Top-tier Program)을 통한 해외 선진기관 교육, 국제 공동연구 등을 진행하여 4차 산업혁명 선도역량을 확보하고 국내외 기관을 망라하는 융합엔지니어링허브 구축 및 취업 지원 등을 추진하고 있다.

2. 사업단 구성 및 추진내용



[그림 2] 스마트디지털엔지니어링인력양성사업 추진체계)

스마트디지털엔지니어링인력양성 사업단은 플랜트 기본설계 분야 4개 대학과, 건설 기본설계 분야 3개 대학 등 총 6개 대학 7개 조직이 핵심 수행기관으로 구성되어있고 대기업, 중견·중소기업을 혼합하여 참여대학별 특성에 맞게 관련 분야 57개 기업이 참여하고 있다.

이중 플랜트 분야는 기본설계 및 요소설계, 빅데이터 기반 공급사슬 설계 및 운영, 기계 장치 상세 설계, 센서 및 제어, AI 기반 디지털 트윈, Operation Analytics, O&M 및 산업안전 등 8개 Career Path에 대한 학위과정이 운영되



[그림 3] 사업단구성

고 있으며, 건설분야는 친환경 토목설계 및 스마트 PM, 스마트 건설 자동화 및 정보학, PM 융합 개념설계 및 상세설계 등 9개 Career Path를 학위과정으로 운영되고 있다.

본 사업에 참여하는 학생들은 각 소속대학의 학위과정을 이수하면서 동시에 주관기관인

EDRC의 하절기와 동절기 맞춤형 과목을 수강하고 있는데 플랜트분야는 인공지능 및 머신러닝 전문가인 정동휘 교수가 사업총괄책임자인 이중민 교수와 함께 담당하고 있고, 건설 및 PM분야는 삼성엔지니어링 및 그룹 부사장 출신인 최현대 교수가 맡고 있는데 스마트디지털사업 첫해인 2019년 한 해 동안 국내외 전문가 특별강좌, 해외선진기관 교육, 4차 산업혁명 교육 등으로 총 22과목을 개설하여 대학원생 226명, 참여기업 재직자 1,268명이 수강하였다.

EDRC 개설과목은 학위과정에서 접하기 어려운 산업계 관심분야로 짜여져 있어 1회 초빙비용이 5천만원을 상회하는 해외 저명인사를 초청하여 참여기업에 무료로 제공하는 관계로 참여대학 뿐 아니라 참여기업으로부터 폭발적인 관심을 받고 있다.

사업 참여대학은 주관기관과 공동으로 해외 명문대학 인턴파견도 진행하고 있다. 사업



[그림 4] 플랜트분야 구성도



[그림 5] 건설분야 구성도

첫 해인 2019년 한 해 동안 영국 임페리얼컬리지, 미국 일리노이주립대, 스페인 세빌리아 대학 등에 대학원생을 선발 및 파견하여 각각 Carbon Capture Pilot Plant 실습, 최신 시뮬레이션 기법을 활용한 빅데이터기반 네트워크 분석,

신재생에너지에 대한 효율적인 에너지 생산 및 공급 등에 대한 실습과 연구에 참여하였다.

그 외에도 국내 27개 관련기업에서 전원이 현장실습에 참여하는 한편, 기업이 필요로 하는 애로기술 등을 29건의 산학연구프로젝트로

▶ 국내외 전문가 특별강좌

No	강좌명	수강생		
		대학원생	재직자	전체
1	Dynamic Simulation	16	64	80
2	화학공장 설계실무	18	87	105
3	Project Management 일반	16	99	115
4	Petrochemical Process Design	10	47	57
5	Design Consideration for Pumps and Relevant Piping	5	61	66
6	Project Feasibility Study	9	49	58
합계		74	407	481

▪ 실습이 가능한 과목 위주로 개설 및 운영하였으며, 강사의 즉석 기술 컨설팅(Fluor), 맞춤형 실습 KITS 제공(Brigham Young Univ.) 등도 병행

▶ 해외 선진기관 교육

No	강좌명	선진기관	수강생		
			대학원생	재직자	전체
1	Advanced Work Packaging	美 CIL-Teknibuilt	10	59	69
2	Modularization	美 KBR	6	53	59
3	Practical Distillation Technology	美 Fluor	4	29	33
4	Practical LNG 공정 기본설계 및 스마트 응용	美 SBM Offshore	8	27	35
5	Engineering Management	日 Technip	7	42	49
6	Cost Estimation	美 S.E.S	9	53	62
합계			44	263	307

▶ 4차 산업혁명 교육

No	강좌명	수강생		
		대학원생	재직자	전체
1	Python 기반 최적화 Tool 개발	35	60	95
2	Digital Transformation Trend	12	70	82
3	플랜트를 위한 Reality Capture	5	56	61
4	Digital Transformation & Digital Twin	4	94	98
5	IoT 활용 데이터 관리 및 플랫폼 현장 적용방안	7	86	93
6	Plant Industry 4차 산업 대응을 위한 사례 및 솔루션 동향	2	90	92
7	Machine Learning and Dynamic Optimization (Brigham Young Univ.)	20	20	40
8	IoT 융합 솔루션 및 산업용 드론의 활용방안	3	47	50
9	Robotic Process Automation & Smart Construction	1	28	29
10	BIM(bimSCORE/Stanford Univ.)	19	47	66
합계		108	598	706

[그림 6] 2019년 주관기관 개설과목



발굴하여 신기술개발(9건), 애로기술 해결(10건), 업무 매뉴얼 개발(6건) 등의 성과를 도출하였고 미국 CII와 국제공동연구 및 협력을 강화하여 EDRC 지정 국내기업에 대해서는 CII회원과 동일한 정보접근권한을 부여하고 있다.

이와 같은 성과에 힘입어 2020년에는 정부지원예산이 8억원 증액되어 전문가 발굴, 산학연구, 신규과목 개설 등이 더 확대될 예정인데

코로나19로 대면접촉교육 개설이 어려워진 것을 계기로 실시간 화상교육 강화를 추진하고 있으며 이로 인하여 한국까지 출장오기가 쉽지 않았던 외국 전문가 섭외가 오히려 용이해질 수 있어 교육의 폭과 깊이가 한층 더해질 것으로 기대되고 있다.

2020년에는 코로나19로 인한 기업분쟁 세미나를 해외의 글로벌 클레임 전문기업 및 법무법인과 5월에 공동개설하기로 하고 4차 산업혁명에 대응하는 멀티스케일 응용설계를 글로벌 IT기업 전문가를 초청하여 진행하는 등 산업 수요 대응을 강화하는 한편 기존의 인기 과목인 화학공정설계실무, Advanced Project Management 등의 과목을 계속 개설할 예정이다.

구분	과목명
석학초청 특별강좌	Practical distillation technology (Henry Kister @Fluor)
기본설계 강화	Dynamicsimulation
	화학공장 설계실무
	Petrochemical process design
	Design consideration for pumps and relevant piping
	Practical LNG 공정 기본 설계 및 스마트 응용
PM/CM역량 강화	Advanced Project Management
	Cost Estimation & Feasibility Study
	Contract/Claim Management
	Risk Management

구분	과목명
4차IR 융합교육	공정 데이터 기반 디지털 트윈 설계
	Virtual Plant-based Operation Training for Engineer(Unisim)
	공정 빅데이터 활용 및 에너지 효율 분석
	Python기반 최적화 Tool 개발
	Machine learning and dynamic optimization
	기계 및 강화 학습의 화학 공정 응용
	멀티스케일 응용 설계
	Advanced Work Packaging 실무과정
	Modularization 응용과정
	Smart Construction Platform을 통한 실시간 현장관리 시스템

[그림 7] 2020년 주관기관 개설 예정과목

3. 엔지니어링개발연구센터(EDRC) 플랜트 분야 참여 대학 연구실 소개

1. 한국과학기술원(KAIST) 스마트디지털 엔지니어링인력양성사업

한국과학기술원(KAIST)은 주관기관인 서울대학교 엔지니어링개발연구센터(EDRC)를 중심으로 하는 스마트디지털엔지니어링인력양성사업의 참여기관으로서 생명화학공학과와 이재형 교수를 책임자로 같은 생명화학공학과와 김지한 교수와 기계공학과와 이익진 교수와 함께 사업을 추진하고 있다.

세계적으로 이슈화 되고 있는 4차산업 기반 기술의 IT역량을 복합적으로 갖춘 인재양성을 목적으로 실용적 기술력 제공의 한계가 있는 대학의 단점을 극복하고 인재 양성 노하우가 미흡한 기업들의 요구에 부응하기 위한 선진국과

대응한 수준으로의 기술도약 선도가 목표이다.

4차 산업혁명에 대응하여 선진국 엔지니어링은 AI를 이용한 자동설계시스템 등 IT 기반 융합기술 역량에 박차를 가하고 있으나 국내 기업은 3D 캐드 등 전통적인 엔지니어링에 여전히 의존하고 있는 실정이다. 엔지니어링 경쟁력 강화 및 전문인력 확보 방안에 대한 설문조사('17년) 결과에 따르면 기업의 73.3%가 기본설계 인력부족, 신입직원 역량미흡 등을 극복하기 위해 엔지니어링 전문교육을 희망하고, 4차 산업혁명에 대응하는 기술인력 확보를 위하여 관련분야 교육과 전문성을 갖춘 기술 선도인력 충원을 우선으로 하고 있다고 한다. 이에 한국과학기술원에서는 실습과 기술경쟁력 제고를 결합한 산학협력 프로젝트를 발굴하여 학생의 실무역량을 강화시키고 전국 우수 교수 및 석·박사급 인력, 전·현직 현업 전문가 풀을 활용하여 기업의 애로기술 해결에 노력하고 있다. 각 연구실의 특성에 맞는 산학협력 프로젝트를 진행하여 전자 담배 기기 개선안 도출(e-cig stick 시뮬레이션 기술개발 프로젝트), 고분자 epoxy resin 생성 알고리즘 SW 개발(분자 모사를 통한 Epoxy 고분자의 물성 예측 프로젝트), 신기술 개발(AI기반 차량 파워트레인 성능 분포 예측) 및 SCI(E) 논문 1편(AI(머신러닝, 딥러닝)을 이용한 파워트레인 성능 예측 프레임워크 개발 프로젝트)을 제출하는 등의 성과를 내어 1차년도 목표치를 초과 달성하였다.

또한, 기본설계 및 사업관리 분야에 대한 효율적인 교육과 이를 통한 노하우 축적이 중요한 반면 과목 중심의 이론 강의와 SCI 논문

중심 교육이 대부분인 국내 대학 실정을 바꾸고자 엔지니어링 관련 교과목 이수 및 논문 중심에서 현업 맞춤형 실습위주 교육으로 지속 전환하고 기존의 엔지니어링 분야는 물론 4차 산업혁명 융합분야에도 적용하여 교육수준의 획기적 제고를 추진하고 있다.

한국과학기술원에서는 머신러닝, 데이터 마이닝, 강화학습 등 최신 4차 산업 기술에 관한 교육 강화 및 화학공학 동향에 대한 이해도를 높이기 위한 교과목을 개발하고 기존 교과목을 개선 등 융합형 엔지니어링 고급 전문 인력 양성을 위한 필수 교과과정과 교과목을 설계하여 실습기반 교육으로 기존 이론 중심 교과과정을 개선하고자 노력하고 있다.

앞으로 한국과학기술원에서는 산학연계를 통한 전문인력 양성 및 기업의 고급인재 수요에 부응하기 위해 축적한 전문지식과 인력양성 노하우를 활용하여 관련 학위과정 지속 운영 및 현장 맞춤형 고급인재 양성을 지속하고 취업률 제고를 위한 다양한 활동 적극 추진 추진할 계획이다.

II. 인하대학교 스마트디지털엔지니어링 전공

인하대학교 스마트디지털엔지니어링 전공에는 현재 화학공학과 교수 3명이 참여 중에 있습니다. 우선, 연구책임자인 황성원 교수는 UMIST에서 박사학위 취득 후 AspenTech, UOP에 근무하였습니다. 현재 청정에너지공정 연구실을 운영중에 있으며, 정유, 석유화학, 중공업을 비롯해서 정밀화학, 바이오, 제약산업 등에서 사용되는 화학공정을 개발하기 위한 다양한 연구를 진행하고 있습니다. 또한 환경,



에너지, 경제성 평가, 안전 등 공정과 관련된 다양한 문제를 해결하기 위해서 많은 산업체와 협력하며, 인공지능, 증강현실 3D printing 등 4차 산업의 다양한 기술을 습득하고 공정기술에 접목하기 위한 교육 및 연구를 진행중입니다. 참여교수인 신내철 교수는 Georgia Institute of Technology에서 박사학위 취득 후 Univ. of Wisconsin-Madison에서 Post doc을 수행 하였습니다. 이후 인하대학교에서 반도체 나노 소재 연구실을 운영 중에 있습니다. 주로 증기상 합성법을 이용하여 반도체 특성을 가지는 나노 소재들의 1차원 및 2차원 구조 엔지니어링을 주제로 하고 있으며, 머신러닝과 연계하여 나노소재를 디자인하고 대량으로 합성할 수 있는 새로운 방법론을 제시하는 연구를 진행하고 있습니다. 함형철 교수는 Univ. of Texas of Austin에서 박사학위 취득 후 KIST에서 근무하였습니다. 현재는 계산 촉매 및 재료 연구실에서 계산화학, 특히 양자역학 기반 원자 모델링을 사용하여 차세대 에너지 변환 및 저장용 소재(수소, 연료전지, 이산화탄소 및 메탄의 유용 물질 전환 등)의 특성을 해석하고, 이를 바탕으로 소재의 효율(성능, 내구성)을 높이는 연구 및 획기적 성능을 나타내는 에너지 소재의 초고속 탐색을 위한 머신러닝 모델 개발에 대한 연구를 진행하고 있습니다.

인하대학교 스마트디지털엔지니어링전공은 화학공학, 기계공학, 전자공학, 신소재공학 및 조선해양공학등의 학과들이 협동하여 개설한 전공으로 센서 및 제어, 인공지능 기반 디지털 트윈 두가지 career path를 운영하여 세부 분야별 특성화 고급인재를 양성하는 것을 목표로



[스마트디지털엔지니어링전공 연구성과 교류회]

하고 있습니다.

2019년 4월 전공 신설 이후 연사 초청 강연 및 교과목을 개발 및 개선해 강의를 진행하였고, 2020년 1월에는 교수와 학생, 재직자가 참여해 각 연구성과를 발표하고 협동방안을 논의하는 세미나를 개최하였습니다.

III. 명지대학교 Intelligent System Engineering Lab(iSEL)

Intelligent System Engineering Lab(iSEL)은 공정이상감지 및 진단, 센서배치최적화, 누출원추적, 공정설계자동화, 화학반응경로합성 등을 연구하며 공정데이터를 기반으로 Machine learning, 최적화 등을 데이터처리를 통하여 공정 및 공정안전에 적용 및 활용한다.

iSEL의 연구책임자인 신동일 교수(한국화학공학회 공정시스템부문위원장, 재난안전학과장)는 인공지능을 활용한 실시간 이상감지 및 진단, 누출원 추적, (안전)설계 자동화 연구를 비롯해 지난 30년간 화학산업과 안전에의 인공지능 응용 연구에 매진해왔으며, 지난 2018년 명지대학교 대학원 재난안전학과와 화학공학

과의 협동과정인 스마트엔지니어링 전공 신설의 중심에 있었다.

4차 산업혁명의 대두와 Digitalization으로 큰 변화가 예상되는 엔지니어링 산업을 이끌고 갈 고급 인재 양성이 국가적으로 시급한 가운데, 신동일 교수의 iSEL에서는 엔지니어링 산업의 경쟁력 강화에 필수적인 4차 산업혁명 기술을 접목한 화학공정 특히 차세대 Operation and Maintenance을 중심으로 한 실시간 산업안전 및 4차 산업혁명 기술(AI, 빅데이터)에 대한 전문지식과 더불어 관련 산학프로젝트 등을 통해 플랜트 엔지니어링 실무도 겸비한 스마트 디지털 엔지니어링 핵심전문인력양성, 플랜트·재난안전 고급인력 양성을 목표로 하고 있다. 또한 화학공학-재난안전학 학과간 협동과정을 통해 Operation Analytics와 Smart Safety 2개의 career path를 집중적으로 운영하여 O&M 및 공정안전 및 공정안전설계 관련 전공지식을 이해하고 이를 실무에 활용할 수 있는 전문가 양성에 힘쓰고 있다.

지난해에는 한국산업기술진흥원(KIAT)가 주관으로하는 스마트디지털엔지니어링 전문인력 양성사업 1차년도에 참여하여 한국화학공학회 안전부문위원회와 공동으로 “4차 산업혁명과 스마트안전” 심포지엄 개최를 통해 전문기업 담당자들과의 교류 기회를 제공하였고 수혜학생과 산학프로젝트 참여기업, 각 분야 연사가 참여하여 취업 정보 공유, 경쟁력 제고 및 성과발표를 통해 협력방안 강화를 논의하는 O&M 및 스마트 디지털 엔지니어링 워크숍을 개최하였다.

또한 기초과정, 특성화과정, 융합과정에 해당하는 교과트랙을 관련학과 참여교수와

공동으로 운영하고 AI, Big Data 등의 지식 습득 및 기술 활용을 목표로 하여 융합형 스마트 디지털엔지니어링 전문 고급 교과목과 인력 양성사업의 핵심분야인 O&M을 스마트안전과 연계한 교과목을 개설함과 동시에 기업 현장연수 프로그램을 통해 현업과 아울러 O&M(운영 및 유지보수)와 PSM(공정안전관리)의 이해도를 높였다.

더불어 산학 프로젝트인 해양시스템의 위험성평가 절차서 및 스마트 안전 기술 활용 연구를 통해 선진 표준 및 사례 분석을 바탕으로 기존 위험성평가 체계가 갖추어지지 않았던 해양 곤돌라 리프트 시스템을 대상으로 국제표준 및 선진 엔지니어링 문서를 분석해 국내 환경에 적합한 위험성평가 절차서를 국내 최초로 신기술 개발하였으며 위험성평가 결과가 목표로 하는 안전운전 리스크 수준에 미흡한 경우 스마트안전기술의 활용을 통한 시스템의 안전성 개선 사례를 개발하였다.

또한 산학 프로젝트로 저준위 폐열 회수 및 재활용 공정 시뮬레이션 및 개념을 설계하고 빅데이터를 활용하여 안전환경을 제시하는 안전예측 모델링 기술을 세계 최초로 개발하여 산업안전 사고예측 활용을 통한 스마트안전 플랫폼으로의 확대 적용에 대한 새로운 프로젝트를 구상하고 있다.

현재 학교 자체에서도 화학공학-재난안전학 학과간협동과정을 통해 Operation Analytics와 Smart Safety 2개의 career path를 집중적으로 운영하고 있는 만큼 분야별 고급인력과 재난안전학과 스마트엔지니어링을 겸비하는 융합적 전문인력, 현장실무 안전설계 관련 전공



지식을 이해하고 실무안전을 창의적으로 활용할 수 있는 현장 적응형 Safety Engineer의 양성 및 Plant and Safety 전문인력 양성을 기대하고 있다.

4. 기대효과

엔지니어링개발연구센터(EDRC)는 기존 EDRC 사업에서 축적한 인기 과목과 4차산업혁명 과목의 융합된 과정 개발에 주력하고 있다. 4차 산업혁명 역량을 융합한 글로벌 NO.1 스마트 디지털 엔지니어 양성을 위하여 기업수요 맞춤형 글로벌 수준의 고급·특화 교육을 운영하고 해외 선진기관 협력을 통한 4차 산업혁명 선도역량 확보를 추진하고 있다. MOU를 체결한 국내외 기관과 지속적·전문적 협력 전개와 학위 및 수료증을 엔지니어링 역량 입증 근거로 제공함으로써 국내 및 해외 융합 엔지니어링 허브 구축 및 취업지원에 매진하고 있다.

스마트디지털엔지니어링인재양성사업은 특화된 고부가가치 스마트디지털엔지니어링 역량 강화로 엔지니어링 산업의 글로벌 밸류 체인을 확장하고 프로젝트 리스크 및 사업관리 역량 혁신을 통한 경험의 자산화와 글로벌 현지화 강화를 추진할 계획이다. 산학연계를 통한 전문인력 양성 및 기업의 고급인재 수요에 부응과 축적한 전문지식과 인력양성 노하우를 활용하여 관련 학위과정을 지속적으로 운영하고 현장 맞춤형 고급인재 계속 양성하는데 기여하고자 한다.

..이 종 민..



〈전공분야〉

공정제어 및 공정시스템 공학

〈학력〉

1996.2 서울대학교 화학공학과 공학사
2004.7 Georgia Institute of Technology 화학공학과 공학박사

〈주요경력〉

2010.09-現 서울대학교 공과대학 화학생물공학부, 조교수, 부교수, 교수
2017.05-現 엔지니어링개발연구센터, 센터장
2016.09-2017.08 美 Massachusetts Institute of Technology, Chemical Engineering, Visiting Associate Professor
2015.03-2017.03 서울대학교 공과대학 삼화모터스 석좌교수
2006.07-2010.07 加 University of Alberta, Chemical & Materials Engineering, 조교수

〈자격〉

2007.08-現 加 The Association of Professional Engineers and Geoscientists of Alberta (APEGA), 기술사(Professional Engineer)
1996.12-現 화공기사

〈수상내역〉

2019.06.14 신양(信陽) 기술상, 서울대학교 공과대학
2018.10.24 범석논문상, 한국화학공학회
2015.12.09 신양(信陽) 공학학술상 (산학협력분야), 서울대학교 공과대학
2015.07.01 2015년 연암해외연구교수, LG연암문화재단
2015.03.16 삼화모터스 석좌교수, 서울대학교 공과대학
2014.12.18 한국엔지니어링협회 협회장상, 한국엔지니어링협회
2014.10.25 Outstanding paper award (산업통상자원부장관상 제13858호, 오세규), International Conference on Control, Automation and Systems 2014
2011 우수강의상, 서울대학교 공과대학
1996 Summa Cum Laude, 서울대학교

울산과학기술원 화학과 (UNIST Chemistry)

주소 : 울산광역시 울주군 언양읍 유니스트길 50
홈페이지 : <http://chemistry.unist.ac.kr>

1. 설립 배경 및 현황

울산과학기술원(Ulsan National Institute of Science and Technology, UNIST)은 첨단과학기술 혁신과 과학기술인재 양성을 목적으로 설립된 과학기술특성화 대학입니다. 2020년 현재 개교 11주년을 맞은 UNIST는 짧은 역사에도 불구하고 한국 과학기술을 주도적으로 이끄는 대학으로 성장하였으며, 산업수도 울산의 R&D 혁신을 주도할 인재를 양성하고 산학협력 연구를 선도하고 있습니다. 설립 초기 7개의

응용과학 및 공학부로 구성되어 있던 UNIST는 2030년 세계 10위권의 연구중심대학으로의 성장을 목표로 기초과학 분야를 중점 육성하기로 결정하였고, 3개의 IBS 연구단 유치와 함께 자연과학부 및 생명과학부를 2013년에 설립하였습니다. UNIST 화학과는 자연과학부 소속으로 2개의 IBS 연구단을 보유하고 있으며, 현재 27명의 교수진과 41명의 연구교수 및 연구원, 70명의 학부생, 153명의 석박사 대학원생으로 구성되어 있습니다.



UNIST 전경



UNIST 연구지원본부 (UCRF)

2. 교육 및 연구 환경

UNIST는 화학과를 포함한 모든 신입생에게 입학금과 등록금을 100% 지원합니다. 등록금의 전액 또는 반액이 지급되는 성적우수 장학금, 생활 경비 지원까지 최고 수준의 장학제도를 다양하게 마련하고 있습니다. 대학원과정 또한 등록금 및 수업료가 전액 감면이며 그 외 스타이펜드(stipend)로 국내 최고 수준의 생활 경비를 지원합니다. UNIST 화학과를 포함한 UNIST의 모든 강의와 세미나는 영어로 진행되며 세계적인 수준의 연구 인프라 및 연구 환경을 제공하고 있습니다. 특히 UNIST 캠퍼스 내의 UNIST 연구지원본부(UCRF)는 고가의 첨단 장비의 공동활용을 장려하고 시험, 분석, 공정 등 기술전문인력의 인적 네트워크를 형성하고 있으며, 현재 300여 종 이상의 공용연구장비를 보유하고 있습니다. 각 분야별로는, 기기분석실, 나노소자공정실, 기기가공실, 환경분석실, 광학바이오메드 이미징실, 생체 효능검증실, 방사광활용실로 구성되어 있습니다. UNIST 화학과는 이러한 우수 연구지원 서

비스를 제공 받으며 세계적인 연구를 수행하고 있습니다.

3. 교수진

UNIST 화학과는 현재 27 명의 교수진으로 구성되어 있으며, 화학 전 분야에서 세계를 선도하는 연구를 진행하고 있습니다. 이 중 8 명은 미국, 독일 등 해외 우수 대학교 및 연구기관의 전임교수들을 초빙하였으며, 전체 교수진의 약 30% 를 구성합니다. 이는 국가간 장벽을 허물고 전세계 우수 인재가 함께 모여 교육과 연구를 수행하고자 하는 UNIST 화학과의 목표에 부합합니다. 김광수 교수는 화학 분야 ‘국가과학자’로서 이론 및 물리화학 분야에서 세계적인 과학자로 활동하고 있으며, Rodney Ruoff 교수와 Steve Granick 교수는 각각 IBS 연구단의 단장으로서 탁월한 연구성과를 보여주고 있습니다. 현재 유자형 교수가 학과장으로서 UNIST 화학과를 이끌고 있으며, 세계 우수 학과로 발돋움하기 위해 노력하고 있습니다.



권오훈 부교수 (2013년 부임)
(052-217-5424, ohkwon@unist.ac.kr)

연구분야

- 초고속 전자현미경 (Matter 2019)
- 재료 반응동역학 (Adv. Mater. 2017)
- 화학 반응동역학 (Angew. Chem, Int. Ed, 2020)



기정민 조교수 (2014년 부임)
(052-217-5427, jimkee@unist.ac.kr)

연구분야

- 단백질 His/Arg 인산화 연구
- 단백질 번역후수식 및 chemical proteomics 연구
- Nat. Chem. Biol. 2017 / ChemComm 2019



김영삼 조교수 (2010년 부임)
(052-217-2530, kimys@unist.ac.kr)

연구분야

- 초고속 이차원 적외선 분광학
- J. Phy. Chem. A 2019 / J. Phy. Chem. Lett 2018



나명수 교수 (2010년 부임)
(052-217-2931, mslah@unist.ac.kr)

연구분야

- 결정공학 (Chem. Sci, 2019)
- 금속-유기 골격체 (J. Am. Chem. Soc, 2018)
- 초분자화학 (Commun. Chem, 2019)



민두영 조교수 (2019년 부임)
(052-217-2675, dymin@unist.ac.kr)

연구분야

- 막단백질 생물리화학 (Science 2018 / Nat. Chem. Biol. 2018)
- 단백질 분광학 (Science 2019 / Nat. Chem. Biol. 2015)
- 교접화학 (Science 2015 / Nat. Commun. 2015)



박영석 조교수 (2016년 부임)
(052-217-3191, youngspark@unist.ac.kr)

연구분야

- 헤테로원자가 도핑된 저차원 탄소 물질의 상향식 합성
- 헤테로원자가 도핑된 다환방향족 탄화수소의 합성
- Angew. Chem, Int. Ed, 2016



신현석 교수 (2008년 부임)
(052-217-2311, shin@unist.ac.kr)

연구분야

- 초저전압을 비정질 육방정계 질화붕소 (Nature 2020)
- 그래핀/h-BN 헤테로구조체 (Nat. Commun, 2019)
- 이차원소재 합성 및 응용 (Adv. Mater, 2018)



유지형 부교수 (2012년 부임)
(052-217-2548, jhyru@unist.ac.kr)

연구분야

- 세포내 자기조직을 통한 항암치료 (Nat. Commun, 2017)
- 단백질 코로나 극복 약물전달체 (Nat. Commun, 2018)
- 미토콘드리아 표적 항암 약물 (J. Am. Chem. Soc, 2017)



권태혁 부교수 (2012년 부임)
(052-217-2947, kwon90@unist.ac.kr)

연구분야

- 실내 조명 에너지 재활용 (Energy Environ Sci, 2020)
- 초음파 화학 (Adv Mater, 2017)
- 항암 광역동 치료 (J. Am. Chem. Soc, 2016)



김광수 석좌교수 (2014년 부임)
(052-217-5410, kimks@unist.ac.kr)

연구분야

- 이론 물리화학 / 나노 화학
- Nat. Sustain, 2020 / Nat. Commun, 2019



김봉수 부교수 (20118년 부임)
(052-217-3197, bongsoo@unist.ac.kr)

연구분야

- 유기전자재료 소재 (Nat. Commun, 2020)
- 신축성 전자 소재 (Adv. Funct. Mater, 2019)
- 고이동도 콘주게이트드 고분자 소재 (Adv. Mater, 2015)



문희리 교수 (2010년 부임)
(052-217-2928, hoirimoon@unist.ac.kr)

연구분야

- 금속-유기 골격체
- Nat. Commun, 2019 / Adv. Mater, 2019



민승규 부교수 (2015년 부임)
(052-217-2918, skmin@unist.ac.kr)

연구분야

- 들뜬 상태 분자 동역학 이론 (J. Phys. Chem. Lett, 2018)
- 양자화학 물질 계산 (Sci. Adv, 2019)
- 빛-분자 상호작용 분자 소자 (J. Phys. Chem. Lett, 2018)



박철민 부교수 (2013년 부임)
(052-217-2555, cmpark@unist.ac.kr)

연구분야

- 의약화학 / 카빈 및 라디칼 반응을 이용한 유기합성법 개발
- Nat. Commun, 2020 / Angew. Chem, Int. Ed, 2020 / J. Am. Chem. Soc, 2012 / Nat. Med, 2013



심교승 조교수 (2020년 부임)
(052-217-2221, kyos@unist.ac.kr)

연구분야

- 유기 연성 소자 (Sci. Adv, 2019)
- 웨어러블 전자 소자 및 시스템 (Sci. Adv, 2019)
- 차세대 소자 제작 기술 (Nat. Electron, 2019)



이근석 부교수 (2015년 부임)
(052-217-5428, gslee@unist.ac.kr)

연구분야

- 이론 및 계산 화학
- Nat. Commun, 2019 / Adv. Energy Mater, 2018



조범석 부교수 (2012년 부임)
(052-217-2540, zhao@unist.ac.kr)

연구분야

- 레이저장을 이용한 분자운동 제어 (Sci. Adv, 2020 / Phys. Rev. Lett, 2015)
- 스핀입사 물질파 광학 확립 (Phys. Rev. Lett, 2019 / Sci. Adv, 2016)



조재홍 교수 (2020년 부임)

연구분야

- 생체모사 물질 합성과 반응성 연구 (J. Am. Chem. Soc, 2018)
- 항암 및 심혈관계 신약개발 (Angew. Chem. Int. Ed, 2019)
- 친환경 촉매 개발 (J. Am. Chem. Soc, 2017)



주상훈 교수 (2010년 부임)
(052-217-2522, shjoo@unist.ac.kr)

연구분야

- 에너지 변환 및 범용 화학물질 생산을 위한 나노촉매 개발
- Nat. Commun, 2020 / Nat. Commun, 2019 / Angew. Chem. Int. Ed, 2019 / Sci. Adv, 2018 / J. Am. Chem. Soc, 2016



최원영 부교수 (2012년 부임)
(052-217-2546, choe@unist.ac.kr)

연구분야

- 금속-유기 골격체
- Sci. Adv, 2019 / Nat. Commun, 2017



홍성유 부교수 (2010년 부임)
(052-217-2528, syhong@unist.ac.kr)

연구분야

- Ni-촉매를 이용한 고리화첨가반응 (J. Am. Chem. Soc, 2017)
- Pd-촉매를 이용한 고리화반응 (Angew. Chem. Int. Ed, 2017)
- 방향족 화합물의 고리화반응 (Org. Lett, 2019)



Bielawski, Christopher W. 석좌교수 (2013년 부임)
(052-217-3001, bielawski@unist.ac.kr)

연구분야

- 탄소 재료 / 고분자 화학
- Angew. Chem. Int. Ed, 2019 / ChemComm 2019



Ganick, Steve 석좌교수 (2014년 부임)
(052-217-5508, sgranick@ibs.re.kr)

연구분야

- 연성물질 물리 및 화학
- Proc. Natl. Acad. Sci, 2020 / J. Am. Chem. Soc, 2019



Grzybowski, Bartosz A. 석좌교수 (2014년 부임)
(052-217-5522, grzybor72@unist.ac.kr)

연구분야

- 나노 과학 / 바이오 공학
- Nature 2020 / Nat. Nanotechnol, 2020



Rohde, Jan-Uwe 부교수 (2013년 부임)
(052-217-5423, rohde@unist.ac.kr)

연구분야

- 무기금속화학
- Chem. Commun, 2012 / J. Am. Chem. Soc, 2009



Ruoff, Rodney S. 석좌교수 (2014년 부임)
(052-217-2924, ruofflab@gmail.com)

연구분야

- 다차원 탄소재료
- Nat. Nanotechnol, 2020 / Matter 2020



Schultz, Tomas 부교수 (2013년 부임)
(052-217-5425, schultz@unist.ac.kr)

연구분야

- 물리분석 / 상관화전정렬 분광학
- Proc. Natl. Acad. Sci, 2018 / Phys. Chem. Chem. Phys, 2020

UNIST 화학과 교수진

4. 연구 분야 및 성과

UNIST 화학과는 화학 전 분야에서 교육과 연구를 진행하고 있습니다. 세부 분야로 유기

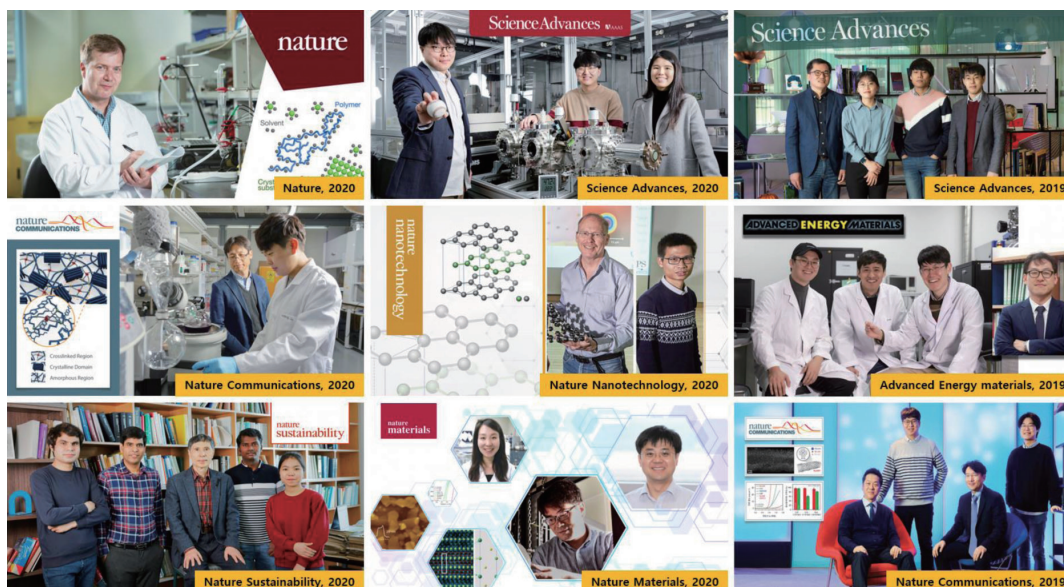
화학, 무기화학, 물리화학, 고분자화학, 재료화학, 화학생물학, 이론화학(계산화학) 등이 있으며, 다양한 융합 연구분야에도 강점을 보입니다. 예컨대, 에너지 재료, 나노화학, 의약화

학, 생물리화학(생물물리), 재료전자공학 등, 학문간 융합을 통한 새로운 지식 창출에 앞장서고 있습니다. 구체적인 연구 분야로는 유기 전자재료, 광전자소자, 유기태양전지, 에너지 하베스팅, 광역동 암치료, 신약개발, 금속-유기 골격체, 단일 분자 분광학, 2차전지 재료, 2차원 하이브리드 물질, 단백질 공학, 연료 전지, 에너지 촉매, 펩타이드 합성, 반도체 재료, 다차원 탄소재료, 초분자 나노화학, 바이오 이미징, 펩토초 분광학, 분자동역학 계산 및 시뮬레이션 등이 있습니다. UNIST 화학과는 이러한 각 연구 분야에서 탁월한 연구 성과를 꾸준히 내고 있으며, 지난 2019년에는 U.S. News & World Report 화학분야에서 세계 31위, 국내 1위의 우수한 성적을 거두었습니다. 또한 최근 수년간 Nature, Nature Nanotechnology, Nature Materials 등 세계 최고 권위지에 다수의 논문을

출판함으로써 UNIST 화학과의 학문적 우수성을 보여주고 있습니다.

5. 비전 및 맺음말

2009년 개교 이래 불과 10년여 만에 UNIST는 괄목할 만한 학문적 성장을 이루었으며, UNIST 화학과는 2개의 IBS 연구단 유치 및 훌륭한 연구 성과 등을 통해 이러한 성장에 상당한 기여를 하였습니다. UNIST 화학과는 이러한 성과에 안주하지 않을 것이고 더 큰 비전을 향해 나아가고자 합니다. UNIST 화학과는 글로벌 리더 양성에 앞장서며 인류의 삶에 공헌하는 세계적인 학과로 도약하고자 하며, 화학 분야 세계 10위권으로 성장함을 목표로 하고 있습니다. 화학 분야에 새로운 패러다임을 제시할 수 있는 UNIST 화학과를 기대해주시시오.



UNIST 화학과 최근 연구성과



리그닌 바이오피파이너리 사업단 소개

김 용 환 (UNIST 에너지 및 화학공학부 교수)

주소 : 울산광역시 울주군 유니스트길 50
전화 : 052-217-3068
이메일 : metalkim@unist.ac.kr
홈페이지 : <https://sites.google.com/site/enzproyh/>

리그닌 바이오피파이너리 사업 개요

1. 리그닌 바이오피파이너리 사업 필요성

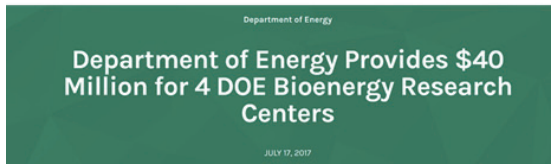
리그닌은 셀룰로오즈 다음을 자연계에서 대량 생산되는 생물자원이다. 셀룰로오즈의 경우 펄프, 제지, 섬유 산업 등에서의 핵심소재로 사용되고 있으나, 리그닌의 경우 연간 20억톤 이상이 자연계에서 생산되고 있으나 현재까지는 쓸모를 찾지 못하여 거의 전량 소각 처리되고 있는 바이오고분자라 할 수 있다. 현재 2세대 바이오매스를 이용하여 바이오연료를 생산하는 시설이 건설되고 있는바 이러한 경우 막대한 양의 리그닌이 부산물로 발생하고 있는 실정이며, 이러한 리그닌을 부가가치화 하지 못할 경우 바이오매스를 이용한 전체 바이오리파이너리 산업 전체의 경제성이 담보되기 어려운 실정이다.

리그닌은 셀룰로오즈와 달리 방향족 화합물을 단량체로 하고 있는 매우 독특한 소재이다. 그러나 셀룰로오즈 등은 효소 등에 의하여 용이하게 가수분해되어 당으로 전환되는 반면 리그

닌의 경우 아직까지 분해기술이 확립되지 못한 상태이다. 리그닌을 효율적으로 단량체화 할 수 있는 원천 생축매를 개발에 성공할 경우 다양한 방향족 분해산물에 기반한 새로운 바이오리파이너리 신산업을 구축할 수 있을 것이라 판단되었다. 이에 한국연구재단 지원으로 2017년부터 2021년까지 리그닌으로부터 유용 자원 및 바이오연료를 생산할 수 있는 원천기술 개발을 목표로 연구사업이 출범되어 진행되고 있다.

2. 리그닌 바이오피파이너리 해외 연구 동향

- 미국 DOE (Energy Independence and Security Act)
 - 미국 DOE를 중심으로 2022년까지 360억 갤런 이상의 리그노셀룰로오즈 유래 Advanced Biofuel을 공급을 목표로 함.
 - 이를 가능하게하기 위하여 현재 3개 이상의 바이오에너지 센터에 매년 1,500억원 이상의 연구비를 투여하고 있음.



Bioenergy Centers Address Key Science Themes

Sustainability	Feedstock Development	Deconstruction	Conversion
Conduct long-term studies of producing bioenergy crops on marginal land.	Design improved dedicated bioenergy crops.	Develop renewable biomass deconstruction and separation strategies.	Develop novel biomass conversion microbes.
Optimize water and nutrient use in dedicated bioenergy crops.	Create multistep tools for developing high-yield bioenergy crops.	Advance integrated and consolidated thermophilic bioprocessing.	Generate drop-in biofuels and bioproducts from biomass and lignin residues.
Study environmental resilience of engineered bioenergy crops.	Engineer plants for atom-economical conversion into biofuels and bioproducts.	Develop feedstock agnostic biomass deconstruction processes using renewable ionic liquids.	Develop high-throughput synthetic biology tools and hosts for scalable, atom-economical biofuels and bioproducts.
Integrate economic and environmental analyses for biomass supply.	Develop "plants as factories" concept for biofuels and bioproducts.	Develop product separation technologies for in planta production.	Establish automated biofoundry concept for fuels and bioproducts.

[그림 1] 미국 4개 바이오에너지 센터 리그닌 연구 지원 현황

- RFS 제도하에 의무적으로 리그노셀룰로오스 유래 바이오연료를 혼합사용하게 하고 있음.
- 이로 인하여 매년 거의 1억톤에 해당하는 막대한 양의 리그닌이 부산물로 배출될 것이며 이에 관한 사용 방안 마련이 시급한 상태임.

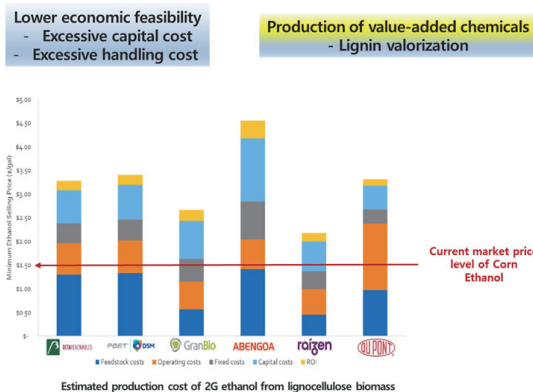
이에 따라 미국에서는 4개 바이오에너지센터

에 리그닌의 부가가치화를 위한 연구를 집중적으로 지원하고 있음.

현재 리그닌의 부가가치없이 리그노셀룰로오스 기반 바이오연료의 경제성 확보가 난망.

○ 유럽 BBI-JU (Bio-based Industries Joint Undertaking)

- 유럽 Horizon 2020 프로그램에 따라 바이오매스 기반 신산업을 위하여 산학연간 연계 프로그램을 유럽 차원에서 결성



[그림 2] 리그노셀룰로오스 기반 에탄올 생산 경제성 분석 자료



[그림 3] 유럽의 바이오매스 이용 프로그램 (BBI-JU)



- 2014년부터 2020년 7년간 총 37억유로 (4조원)의 예산으로 바이오매스 기반 신 산업 창출을 위하여 노력
- 바이오연료 및 부산물로 발생하는 리그닌을 고부가치화하는데 역량을 결집하고 있음.

<https://www.bbi-europe.eu/>

3. 리그닌 바이오리파이너리 사업단 연구 내용

자연계에서 폐기물로 버려지고 있는 리그닌을 효과적으로 분해할 수 있는 신개념의 생촉매를 개발함으로써 리그닌 유래 신규의 방향족 화합물을 획득하는 기술을 중점적으로 연구함.

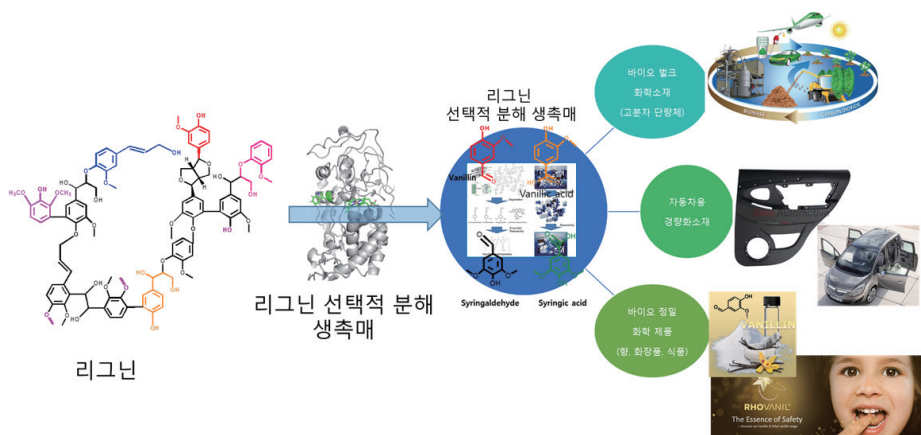
○ (특징)

- 상온 상압의 환경하에서 리그닌을 선택적으로 분해하는 고효율 생촉매 기술
- 선택적으로 분해되어 예상가능한 수의 방향족 단량체가 생성
- 생성된 방향족 단량체를 이용하여 기존

정밀화학산업, 석유화학산업의 생성물과 경쟁이 가능하고 대체가 가능

○ (핵심기술)

- 무변형 고효율 리그닌 추출기술: 자연계에서 생합성되어 있는 리그닌을 화학적 변형없이 자연상태의 결합상태를 유지하면서 고효율로 추출하는 기술
- 고효율 리그닌 분해 생촉매 기술: 분해된 단량체의 재중합을 억제할 수 있고, 단량체 라디칼의 공격으로부터 방어가 가능하고, 고농도의 산화분해 조건 및 고농도의 단량체 생산물에 내성이 있으며, 동시에 고속의 반응동력학적 특성을 가지는 리그닌 분해 생촉매 개발
- 고효율 리그닌 분해 생촉매 고생산 기술: 리그닌 분해 고효율 생촉매의 대량생산을 위하여 반응부위 cofactor 생합성증진, 생산된 생촉매의 분비 및 고농도 생산 기술



[그림 4] 연구개발 개념도

- 분해 단량체의 반응 정제 및 zero-waste 화 기술: 생축매에 의하여 분해되어 생산된 단량체를 반응 및 전환을 통하여 좀더 용이하게 분리정제, 고부가가치화 하는 기술

○ (활용분야) 코스메틱산업, 자동차산업, 의약용 정밀화학산업

- 코스메틱산업용 (방향족계 향료, 천연방부제, UV 차단제 등)
- 자동차산업용 (방향족계 엔지니어링 플라스틱, 방향족계 바이오우레탄 등)
- 의약용 정밀화학산업용 (방향족 기반 의약용 중간체 등)

○ (시장전망)

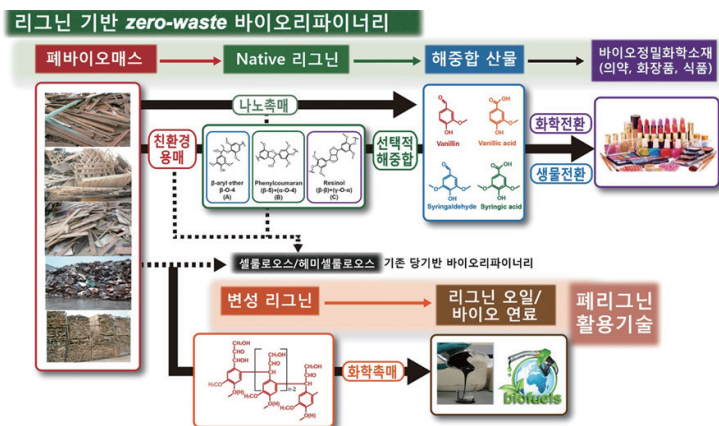
- 방향족계 화학산업 시장 세계 규모: 100 조원 이상
- 국내 코스메틱산업 연평균 성장률 20 % 이상 급성장
- 자동차 산업의 친환경, 경량 바이오플라스틱 소재에 대한 의무 사용 (5% 이상)
- 자연계에서 발견되는 리그닌 분해효소의 활성을 비약적으로 증가시키기 위해서는 신규의 고활성 효소 유전자 탐색과 함께 효소 단백질 표면으로부터 반응부위, 즉 heme 부위로의 전자 이동 경로에 대한 면밀한 관찰이 필요함. 이러한 전자 이동 경로에 관여하는 아미노산 잔기의 역할을 연구하고, 단백질 공학기법을 통하여 변형함으로써 매우 탁월한 성능

의 리그닌 분해효소의 개발이 가능할 것으로 예상됨. 이를 위해서는 분자진화적 방법 외에 양자계산 등을 통하여 바이오촉매를 모델링하고 재설계하는 기법을 개발, 적용하는 것이 가능할 것으로 판단됨.

- 일반적인 화학촉매와 달리 재설계된 바이오촉매를 이용하여 리그닌을 분해할 경우 단량체 상태의 저분자화합물이 선택적으로 획득될 것으로 예상되고 있음. 물론 최초 리그닌의 단량체 종류, 비율에 따라 산출되는 생성물의 종류, 농도는 변화될 것으로 예상됨. 다만 올리고머 상태 외에 단량체 형태의 저분자 화합물은 그 자체로 신규성이 있을 것으로 예상됨.
- 단량체 상태의 저분자 화합물은 식품, 화장품 등 personal care용 정밀화학, 기능성 화학제품의 핵심소재가 될 것으로 예상되고 있음. 또한 시린직산과 같은 화합물은 고분자 소재의 단량체로 사용이 가능하며, 이를 이용하여 고분자를 중합생산할 경우 자동차 소재 등으로 대량 적용이 가능할 것으로 예상되어 매우 큰 파급효과가 기대됨.

4. 현재 리그닌 바이오테크 사업단 과제 구성도

현재 본 사업단은 5개 주관기관 (UNIST, (주)슈가엔, KIST, 한국화학연구원, 성균관대)이 각 세부과제를 맡아서 리그닌으로부터 고부가가치 화합물 생산을 위한 연구과제를 진행하고



[그림 5] 리그닌 바이오리파이너리 과제 구성도

있음.

현재까지 2년 3개월의 단기간에도 불구하고 논문 65편의 SCI논문 (대표논문: Nature Communications, ACS Catalysis, Green Chemistry 등) 게재 및 14건의 특허를 출원하였고, 기술이전도 4건을 실시할 정도로 매우 높은 연구집중력을 발휘하였음.

5. 리그닌 바이오리파이너리 사업 전망 및 맺음말

최근 미국의 4대 바이오에너지 관련 연구기관에서 기존 당기반 바이오리파이너리 외에 리그닌 기반 바이오리파이너리로 연구방향을 선회하였다. 이는 국내에서 시작된 리그닌 바이오리파이너리 사업이 규모는 비록 1/10 규모이나 시작 시점 자체는 거의 동시적이었다고 할 수 있습니다. 앞으로 리그닌에 대한 과학적 이해 및 지식이 급속히 축적되어 이를 이용할 수 있는 생촉매 등 다양한 지식, 기술적 진보가 이루어질 것이라고 예측이 됩니다. 이러한 리그닌을 고부가가치 화합물로 전환하는 기술의

개발은 바이오매스 전체를 이용할 수 있게 됨으로써 앞으로 바이오경제 체제 구축에 큰 이정표가 될 것으로 확신합니다. 다만 리그닌의 복잡성, 리그닌 분자결합의 난해함 등은 큰 장애가 될 것으로 예측되는바 다양한 학제간 융복합연구를 통하여 이를 극복할 방안이 마련될 것이라 생각합니다.

• 김 용 환 •



〈학력 및 경력〉
1987-1991 서울대학교 화학공학과 학사
1991-1993 서울대학교 화학공학과 석사
1993-1996 서울대학교 화학공학과 박사
1996-2000 삼성종합기술원/삼성엔지니어링 선임연구원
2000-2005 한국화학연구원 책임연구원
2005-2016 광운대학교 화학공학과 교수
20016-현재 UNIST 에너지 및 화학공학부 교수

〈주요연구과제〉
생물촉매 설계
생물촉매 이용 리그닌 전환기술
생물촉매 이용 C1 가스 전환 기술

멀티스케일 카이랄 구조체 연구센터 (Center for Multiscale Chiral Architectures, CMCA)

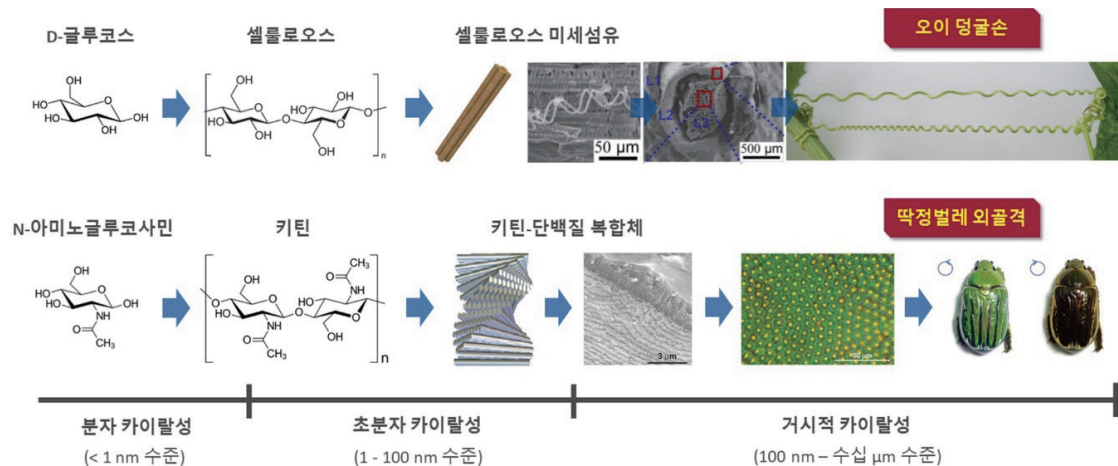
이 희 승 (KAIST 화학과 교수 / 멀티스케일 카이랄구조체 연구센터장)

주소 : 대전광역시 유성구 대학로 291 KAIST 화학과
전화 : 042-350-2846
이메일 : hee-seung_lee@kaist.ac.kr
홈페이지 : <http://cmca.kaist.ac.kr> (<http://hslee.kaist.ac.kr>)

1. 연구배경

카이랄성(chirality)은 화학의 핵심 개념이며 물질의 특성을 결정하는 근본 요소 중 하나로써 카이랄성 분자 또는 구조체 형성의 근본적인 원리에 관한 연구는 다양한 분야에서 지속

적인 관심을 받고 있다. 자연계는 한 시스템의 특정 기능성 발현의 전략으로서 계층적 자기조립 방법을 통한 분자-나노미터-거시적 수준을 포괄하는 멀티스케일 카이랄성(multiscale chirality)을 사용하고 있으며, 그 기능성의 예는 효소복합체, 마이크로 튜블과 같은 분자



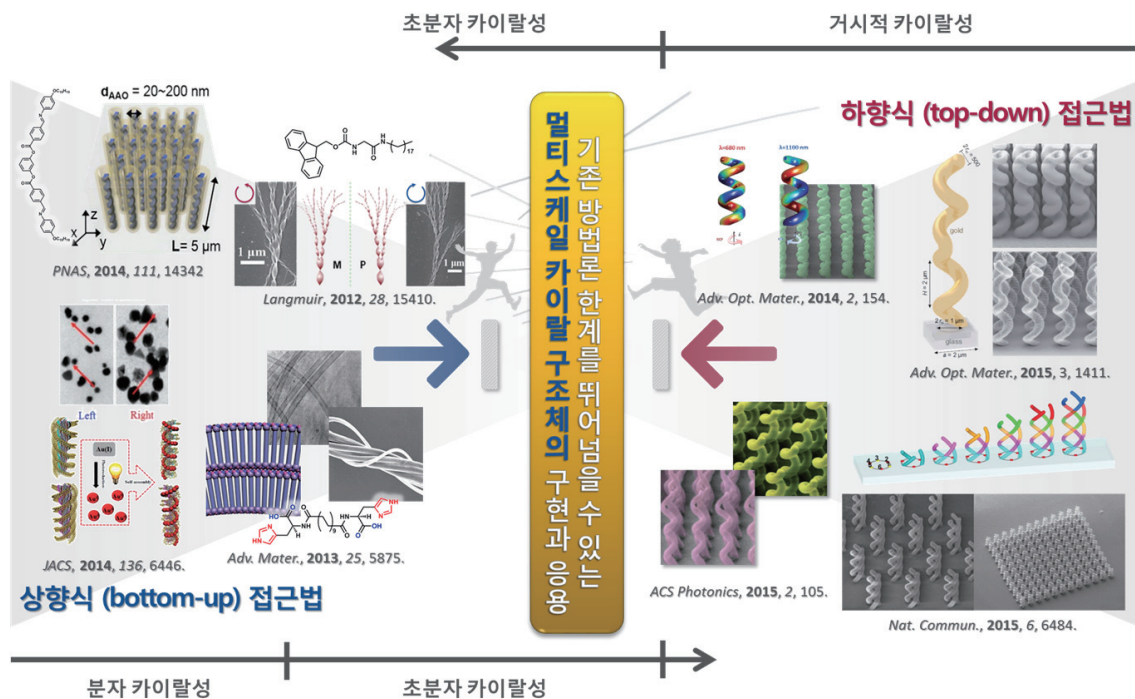
[그림 1] 자연계 멀티스케일 카이랄성의 역학적 특성(위) 및 광학적 특성(아래) 발현의 예



-초분자 상호작용 이외에도 역학적 특성, 광학특성 등 다양하다. 오이 덩굴손은 멀티스케일 카이랄성의 역학적 특성 발현의 예이다. 오이의 덩굴손은 나선 모양으로 꼬이면서 지지할 곳을 찾아 감아 오르며 성장함이 알려져 있는데, 당(카이랄 분자)으로 구성된 셀룰로오스 고분자로 형성된 소섬유(fibril) 자체가 이미 높은 탄성을 갖는 나선 형상을 이루며 이들이 다시 세포벽 및 덩굴손 외벽을 계층적으로 형성하면서 거시적 수준까지 카이랄성이 전달되어 나선을 형성함으로써 외력에 대해 유연하게 반응이 가능하며 심지어 나선 방향을 바꾸는 것으로 알려져 있다. 또한, 멀티스케일 카이랄성의 광학적 특성 발현의 대표적인 예로서 딱

정벌레 외골격의 보는 각도에 따른 색변화 특성(iridescence)의 경우를 들 수 있는데, 이는 당(카이랄 분자)고분자인 키틴(chitin)-단백질 복합체가 콜레스테릭 액정(cholesteric liquid crystal)과 본질적으로 같은 구조의 거시적 수준 카이랄성을 형성하여 특정한 회전 방향의 원편광만을 반사하기 때문에 나타나는 현상으로서, 멀티스케일 카이랄성을 갖는 소재가 빛의 카이랄성을 증폭하는 예이다 (그림 1).

자연계의 시스템을 모방하여 분자-나노미터-거시적 수준에서 공히 카이랄성을 갖는 멀티스케일 카이랄성 물질을 자유자재로 합성할 수 있다면, 카이랄성의 극한적 증폭이 가능할 것이며 미시적 분자 수준의 상호작용 유도



[그림 2] 학문적 관점에 따른 카이랄성 연구방법론

및 거시적 수준에서의 에너지 상호작용의 동시제어가 가능할 것으로 기대된다. 크기 및 구성요소를 막론하고 카이랄성 분자 또는 구조체의 형성에 관한 근본 원리의 이해를 위한 연구는 다양한 분야의 연구자들로부터 지속적인 관심의 대상이 되어 왔으나, 물질의 카이랄성에 관한 연구자의 학문적 관점에 따라 한정된 스케일(분자수준 또는 거시적)의 연구에 국한되어 있었다. 최근, 화학(기초화학) 및 공학적 측면에서 공통적으로 멀티스케일 카이랄성 물질에 관한 연구의 중요성이 급부상함에 따라 다양한 시도가 진행되고 있으나 크게 분자수준의 카이랄성에서 출발한 분자과학적 접근법과 리소그래피 기반 거시적 수준 카이랄성에서 출발한 공학적 접근법으로 분류될 수 있으며, 여전히 계층적인 멀티스케일 카이랄성에 대한 통합적 연구는 부재한 상황이다. 그 주된 이유는, 공학적 접근법은 분자수준의 비대칭적 상호작용 유도에 필수적인 다양한 관능기(유기분자, 금속 원자/이온 등)의 원하는 위치정렬이 불가능할 뿐만 아니라 100 nm 이하 크기 수준의 카이랄 구조체를 구현하기에는 한계가 있다. 반면에, 자기조립 기반 화학적 접근법의 경우에는 유기분자, 고분자, 무기/나노입자 등 카이랄성 및 기능성 구현을 위한 다양한 빌딩블록의 활용이 가능한 장점은 있으나, 각 빌딩블록의 카이랄성을 주기적으로 배열하여 원하는 모양과 기능성을 갖는 거시적 크기의 카이랄 구조체로 확장시킬 수 있는 일반적인 방법론이 없으므로 멀티스케일 카이랄 구조체의 체계적인 개발은 매우 도전적인 과제로 인식되고 있다(그림 2).

기존 연구는 대부분 분자의 카이랄성을 초분자 카이랄성으로 전달시키는 방법론 연구에 국한되어 있어 카이랄성의 전이 메커니즘의 이해 수준은 낮은 편이며, 초분자 카이랄성의 가역적 제어를 포함하여 카이랄 분자로부터 거시적 수준(macroscopic scale)까지 카이랄성이 계층적으로 전이된 구조체를 구현할 수 있는 방법이 거의 없어 뚜렷한 한계를 드러내고 있다. 따라서, 기초과학적 측면 뿐만 아니라 실제 응용가능한 차세대 소재 창출을 위해 카이랄성 연구 패러다임의 혁신적 전환이 필요하다. 본 연구센터는 멀티스케일 카이랄 구조체의 구현 및 응용에 대한 통합적 연구를 목표로 다양한 빌딩블록을 활용한 분자-나노미터-거시적 수준의 계층적 자기조립을 통해서 각 단계의 카이랄성이 제어된 멀티스케일 카이랄 구조체를 구현하는 예측 가능하고 신뢰성 높은 합성 방법론을 개발하고 있다.

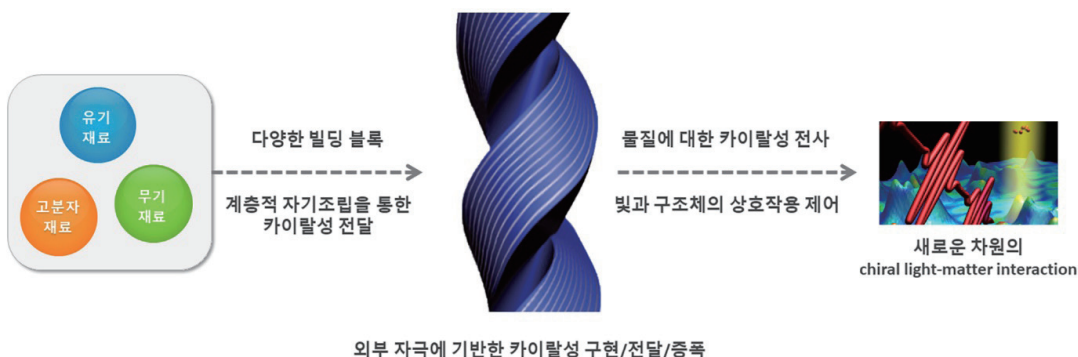
2. 연구분야 및 연구내용

본 CMCA 연구센터는 분자 수준, 나노미터 수준, 거시적 수준을 포괄하는 멀티스케일 카이랄 구조체에 대한 통합적 연구를 수행하고 있으며, 계층적 자기조립 과정에서 카이랄성이 전달되는 메커니즘을 이해하고 다양한 외부자극을 이용해 멀티스케일 카이랄 구조체를 유도할 수 있는 디자인 원리 및 방법론을 확립함으로써, 멀티스케일 카이랄 구조체가 외부 에너지 및 분자와 상호작용을 통해 카이랄성을 전이 및 증폭할 수 있는 시스템 개발을 최종 목표로 하고 있다(그림 3).

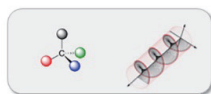


기존 방법론의 한계를 뛰어넘는
멀티스케일 카이랄 구조체의 구현과 응용

- 카이랄성 전달 메커니즘의 이해에 기반한 멀티스케일 카이랄 구조체의 디자인 원리 확립
- 카이랄 상호작용의 제어를 통한 카이랄성의 전사 및 증폭



외부 자극에 기반한 카이랄성 구현/전달/증폭



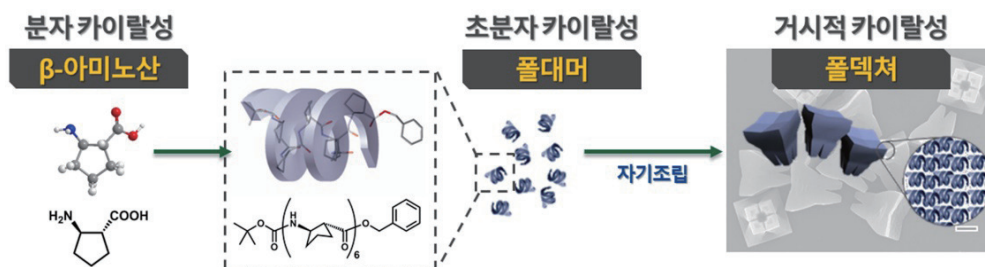
[그림 3] CMCA 연구목표 및 연구개요

본 연구센터는 총 98명(교수 11명, 연구교수 및 포스트닥 14명, 석박사과정 73명)의 연구원들이 3개의 그룹으로 나뉘어 연구를 수행하고 있으며, 각 연구그룹은 멀티스케일 카이랄성의 발현 및 상호전이원리(제1그룹), 외부자극 기반 멀티스케일 카이랄성 유도(제2그룹), 멀티스케일 카이랄성을 이용한 입체선택성 전이 및 증폭(제3그룹) 연구를 중점적으로 수행하고 있다.

멀티스케일 카이랄성의 발현 및 상호전이원리 연구 (제1그룹)

본 연구실에서는 지난 10 여년 동안 카이랄 비천연 아미노산 분자로부터 나노미터 크기의 나선형 올리고머 (폴대머, foldamer)를 거쳐

마이크로미터 크기의 독특하고 다양한 3차원 자기조직구조체 (폴덱처, foldecture)를 합성할 수 있는 독창적인 방법론을 확립한 바 있다 (그림 4). 최근에는 이들 폴덱처들이 특정한 조건에서 다시 수십 마이크로미터 크기의 계층적 구조체를 형성할 수 있음을 확인한 바 있다. 이는 순수한 유기화합물을 이용하여 멀티스케일 카이랄 구조체를 구현할 수 있는 기반 요소기술을 일부 확보하고 있음을 의미한다. 또한, 동종 나선형 폴대머의 자기조직을 통해 합성된 폴덱처는 반자성 비금속 유기물질임에도 불구하고 1 테슬라 이하의 회전 자기장에서도 실시간으로 감응하여 거시적 회전운동 조절이 가능함을 증명한 바 있는데, 이 선행연구 결과는 분자, 나노미터 및 거시적 크기수준에서



[그림 4] 유기분자기반 멀티스케일 카이랄 구조체 연구 (폴덱처 연구)

공히 카이랄성을 갖는 멀티스케일 카이랄 구조체가 새로운 물리화학적 특성을 나타내는 대표적인 예이다.

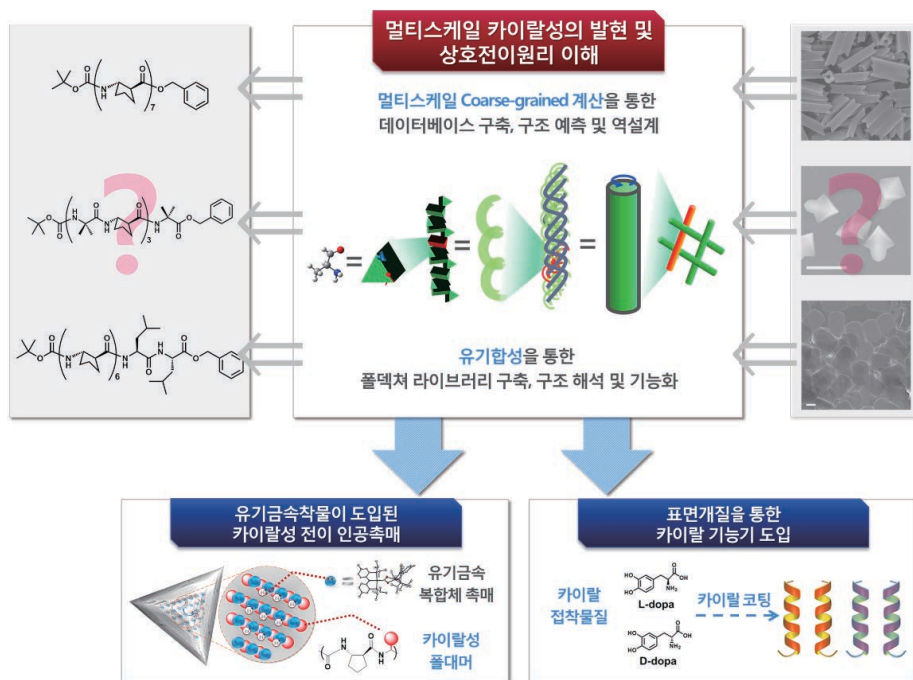
폴덱처는 합성분자가 계층적 자기조립을 통해 거시적 수준의 자기조립체를 이루는 아주 독특하면서도 폭넓게 확장할 수 있는 플랫폼으로서 분자 카이랄성이 초분자 카이랄성을 거쳐 거시적 카이랄성까지 증폭되는 멀티스케일 카이랄 구조체 연구의 이상적인 모델이지만, 구성요소인 폴대머의 카이랄성과 이들의 자기조립체인 폴덱처에서 나타나는 거시적 수준의 카이랄성과의 상관관계에 관한 이해는 아직 부족하다. 따라서, 제1그룹에서는 계산화학(김우연 교수), 유기금속 촉매화학(이윤호 교수), 표면화학(이해신 교수) 전문가와의 공동연구를 통해서 구성요소 및 구조의 복잡성이 더 큰 자연계의 시스템에 준하는 수준의 멀티스케일 카이랄 구조체의 디자인, 합성, 구조분석, 카이랄성 전사/증폭 메커니즘 및 물리화학적 특성 연구 등을 포괄적으로 수행하고 있다 (그림 5).

이론적인 설계를 기반으로 합성한 카이랄성 폴덱처와 유기금속 촉매를 결합한 인공효소를 합성을 목표로 하여 연구를 수행하고 있으며, 멀티스케일 카이랄성과 촉매의 입체선택성의

상관관계 규명, 다양한 카이랄 기능기를 예측 가능한 위치의 폴덱처 표면에 도입할 수 있는 방법론 개발 및 카이랄 특성연구를 수행하고 있다. 제1그룹의 분자 카이랄성에 기반한 멀티스케일 카이랄 구조체 합성연구는 제2그룹의 외부자극 기반 멀티스케일 카이랄 구조체 합성연구와 상호보완적으로 결합하여 다양한 멀티스케일 카이랄 구조체를 구현의 핵심 기반기술이 될 것으로 기대한다. 또한, 본 연구를 통해서 자연에서 발견되는 멀티스케일 카이랄성 물질의 합성원리 및 멀티스케일 카이랄성이 전달되고 증폭되는 메커니즘에 대한 이해도가 높아진다면, 카이랄 촉매, 카이랄 분리매질, 카이랄 센서 등을 새로운 개념의 설계원리로 합성할 수 있을 것이므로 다양한 연구분야에 큰 파급효과가 있을 것으로 예상된다.

외부자극 기반 멀티스케일 카이랄성 유도 연구 (제2그룹)

일반적으로 초분자의 카이랄성을 유도하기 위한 방법으로서 빌딩 블록으로 사용되는 분자의 카이랄 정보에 전적으로 의존한다. 즉, 반대 카이랄성을 갖는 구조체를 구현하기 위해서는 반대 카이랄성의 빌딩 블록을 이용하여

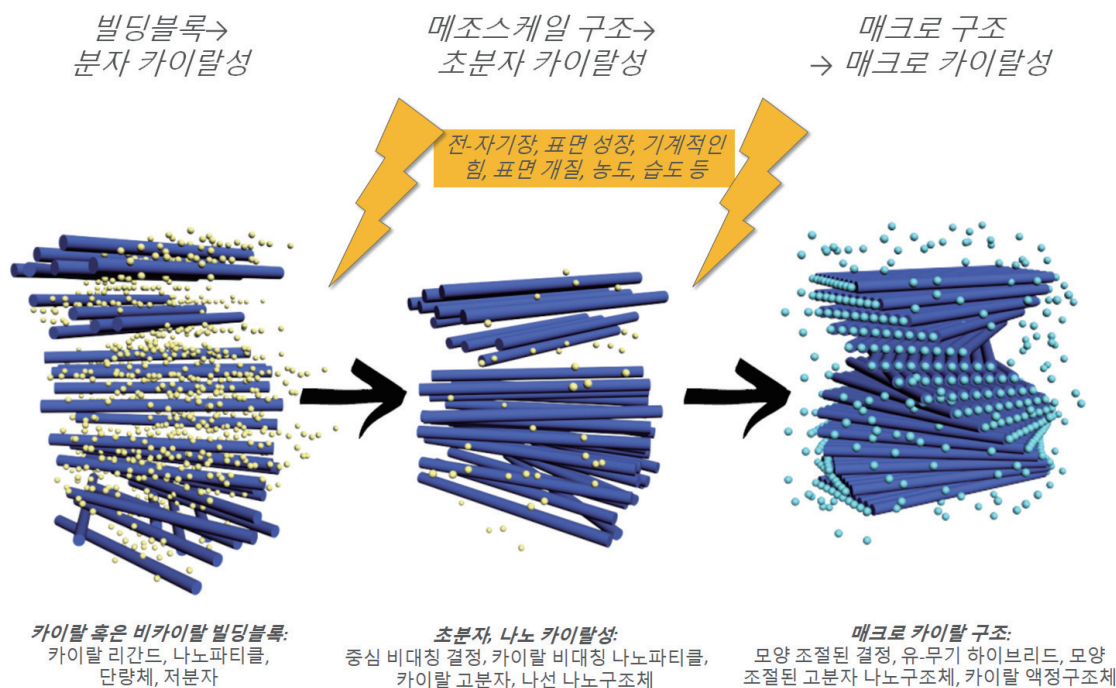


[그림 5] 멀티스케일 카이랄성의 발현 및 상호전이원리 연구

합성할 수밖에 없으며, 구성분자의 카이랄성은 동적으로 변환이 불가능함을 의미하며 카이랄 특성변화에 따라 반응할 수 있는 자극 감응성 물질의 개발이 어려웠던 근본적인 이유이기도 하다. 또한, 현재의 지식수준에서는 구성분자의 카이랄성으로부터 나노미터 및 거시적 수준에서 형성되는 카이랄성으로 전달되는 메커니즘을 명확하게 이해하고 있지 못하기 때문에, 이미 분자수준에서 결정된 카이랄성 구조에서부터 예측 가능한 수준의 나노미터 및 거시적 카이랄성을 구현하는 것은 매우 어렵다. 따라서, 본 연구센터에서는 분자 카이랄성에 의존하지 않는 새로운 카이랄성 유도 방법을 개발할 필요성을 인지하여, 제2그룹에서는 비카이랄성 분자를 이용하여 자기조립시에 전자기장,

외부주형, 공간제어 등의 적절한 외부자극을 가하여 나노미터 및 거시적 수준의 카이랄성을 유도하는 새로운 방법론에 대해 집중적으로 연구를 수행하고 있다 (그림 6).

무기 초분자, 나노입자와 같은 나노미터 크기의 물체, 빛에 감응하는 유기분자 등 다양한 빌딩 블록을 활용하여 각 크기 수준에서 카이랄성이 제어 가능한 멀티스케일 카이랄 유무기 혼성체를 구현하고 외부자극에 대한 감응성을 연구하는 것이 목표이다. 이를 위해, 무기초분자화학 (옥강민 교수), 무기나노입자 합성 (한상우 교수), 고분자합성 및 자기조립 (서명은 교수), 액정 자기조립 (윤동기 교수) 분야의 전문가들이 활발한 공동연구를 수행하고 있다. 특히, 유기분자기반 카이랄성 연구와 비교해서



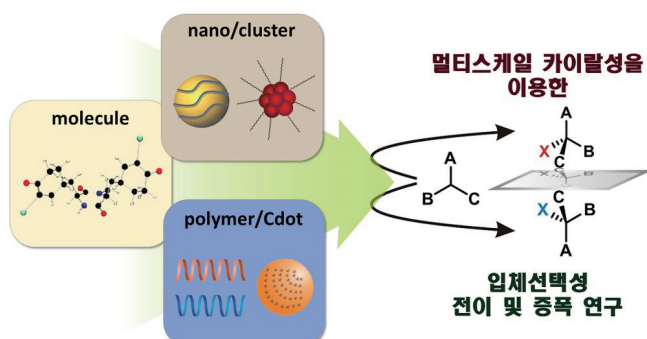
[그림 6] 외부자극 기반 멀티스케일 카이랄성 유도 연구

카이랄 무기구조체에 관한 연구는 아직 태동기 수준에 머물러 있기 때문에 본 센터의 연구를 통해서 이 분야 연구를 선도할 수 있을 것으로 기대하고 있다. 또한, 유무기재료의 혼성화를 통해 특성이 증강된 멀티스케일 카이랄 구조체의 개발이 가능하므로, 빛과 같은 외부에너지와의 상호작용을 연구를 통해서 다양한 카이랄성 광학 신소재의 창출을 기대하며 연구를 진행하고 있다.

멀티스케일 카이랄성을 이용한 입체선택성 전이 및 증폭 연구 (제3그룹)

불균일계 촉매는 분리 및 재사용성이 탁월함에도 불구하고 균일계 촉매에 비해 비대칭 반응을 유도하기 어려운 것으로 알려져 있다.

이는 균일계 유기금속 촉매의 경우에는 카이랄 리간드의 금속 배위를 조절하여 반응 중간체의 입체적 배향을 예측가능한 수준으로 조절할 수 있는 반면, 불균일계 금속촉매는 활성상태의 촉매 구조가 명확히 정의되지 않을 뿐만 아니라 리간드가 쉽게 탈착되어 일정한 배향을 유지하지 못하기 때문이다. 그러나, 분자-초분자-거시적 수준에 걸쳐 분자의 배향조절을 통해 이들의 시너지에 따른 카이랄성 증폭이 기대되는 멀티스케일 카이랄 구조체 기반 촉매는, 균일계 촉매를 능가하는 입체선택성과 재사용성을 동시에 달성할 수 있을 것으로 예상하고 있다. 이 가설을 증명하기 위하여 제3그룹에서는 나노입자/나노촉매 (송현준 교수), 기능성고분자 합성 및 구조제어 (김병수 교수),



[그림 7] 멀티스케일 카이랄성을 이용한 입체선택성 전이 및 증폭 연구

유기 구조체 전합성 (한순규 교수) 연구분야의 전문가들이 공동연구를 통해서 멀티스케일 카이랄 구조체 기반 촉매를 다양한 유기반응에 적용하는 연구를 수행하고 있다 (그림 7). 특히, 촉매 활성이 높은 고산화수 금속 클러스터-카이랄 리간드 복합체 연구, 전기화학용 촉매로 기능할 수 있는 카이랄 탄소 나노입자에 기반한 촉매개발 연구를 병행하면서 카이랄 구조체 촉매의 증폭된 카이랄성이 반응물 및 생성물에 전이되는 메커니즘 규명 연구를 수행하고 있다. 이를 통해 높은 입체선택성을 갖는 새로운 불균일계 비대칭반응 촉매를 개발하고, 나아가 천연물 전합성에 적용하여 새로운 합성 경로를 개척함으로써 유기합성 분야에 이바지하고자 노력하고 있다.

3. 맺음말

본 CMCA 연구센터는 멀티스케일 카이랄 구조체의 새로운 특성을 규명하고, 멀티스케일 카이랄 구조체가 다른 분자 또는 빛과 같은 외부 에너지와 일으키는 비대칭적 상호작용을

통해 카이랄성이 전이 및 증폭되는 과정을 이해하며, 나아가 멀티스케일 카이랄 구조체를 매개체로 하여 빛과 분자의 카이랄 상호작용을 제어할 수 있는 방법을 확립할 것이다. 본 연구센터는 멀티스케일 카이랄성에 관한 도전적 융합연구를 통해 기존의 한계를 극복하고 특정 스케일에 국한되지 않는 화학의 새로운 연구영역을 개척하고자 한다. 이는 자연의 근본원리에 대한 이해 수준을 제고하여 생명체의 경이적 구조 및 기능성에 근접한 수준까지 자연 모사기술을 끌어올리고, 새로운 광학적, 전자기적 특성을 갖는 신소재 원천 기술을 선점할 수 있는 기회가 될 것이다.

..이 희 승..



[학력 및 경력]

1986~1990 KAIST 화학과 학사
1990~1992 KAIST 화학과 석사
1992~1996 KAIST 화학과 박사
1996~1999 삼성정밀화학 연구소 선임연구원
1999~2003 Univ. of Wisconsin-Madison, Postdoc
2016 ICCEOCA-11 Organizer & Co-Chair
2016 대한화학회 유기화학분과 총무부회장
2016~2017 대한화학회 학술이사
2004~현재 KAIST 화학과 조교수, 부교수, 교수
2018~현재 CMCA 센터장

● ● 한국화학관련학회연합회 제22대 임원 ● ●

회 장	최종길(연세대학교 화학과 명예교수)	
수석 부회장	김우식(경희대학교 화학공학과)	
부 회 장	정옥상(부산대학교 화학과)	김양국(아이컴포넌트 대표이사)
	이준혁(㈜동진씨미캠 대표이사 부회장)	유상임(서울대학교 재료공학부)
	이관영(고려대학교 화공생명공학부)	
감 사	김철희(인하대학교 고분자공학과)	이기성(국민대학교 기계공학부)
총 무 이 사	이석중(고려대학교 화학과)	
편 집 이 사	장우동(연세대학교 화학과)	
이 사	하현준(한국외국어대학교 화학과)	금교창(한국과학기술연구원)
	차국헌(서울대학교 화학생명공학부)	이준영(성균관대학교 화학공학부)
	우제완(상명대학교 화공신소재학과)	문두경(건국대학교 융합신소재공학과)
	조용수(연세대학교 신소재공학과)	서원선(한국세라믹기술원)
	정찬화(성균관대학교 화학공학/고분자공학부)	

● ● 화학연합 편집운영이사회 ● ●

수석편집운영이사	장우동(연세대학교 화학과)	
편 집 운 영 이 사	김정곤(전북대학교 화학과)	유자형(UNIST 화학과)
	제정호(부산대학교 화공생명공학과)	장호원(서울대학교 재료공학부)
	최정규(고려대학교 화공생명공학부)	심우영(연세대학교 신소재공학과)
	이민희(숙명여대 화학과)	이은지(GIST 신소재공학과)
	이 연(서울대학교 화학부)	

· 전 문 위 원 ·

총무재정	정옥상(부산대학교)	금교창(한국과학기술연구원)
	김승현(인하대학교)	김영기(한경대학교)
	김동완(고려대학교)	이종민(서울대학교)
기획홍보	이준혁(㈜동진씨미캠)	성영은(서울대학교)
	이승우(영남대학교)	옥강민(서강대학교)
	이규형(연세대학교)	최정규(고려대학교)
산학협력	김양국(아이컴포넌트)	유상임(서울대학교)
	성익경(코오롱인더스트리)	서원선(한국세라믹기술원)
	김태현(한양대학교)	김필호(한국화학연구원)
	서영웅(한양대학교)	
학술출판	이관영(고려대학교)	정찬화 (성균관대학교)
	이동환(서울대학교)	최정규(고려대학교)
	윤호규(고려대학교)	장호원(서울대학교)

● ● 한국화학관련학회연합회 정회원/특별회원 ● ●

1. 정회원: 5개 화학관련 학회

학회명	회장	소속	홈페이지
대한화학회	정옥상	부산대학교 화학과	http://www.kcsnet.or.kr
한국고분자학회	김양국	아이컴포넌트 대표이사	http://www.polymer.or.kr
한국공업화학회	이준혁	(주)동진세미켐 대표이사 부회장	http://www.ksiec.or.kr
한국세라믹학회	유상임	서울대학교 재료공학부	http://www.ceramics.or.kr
한국화학공학회	이관영	고려대학교 화공생명공학과	http://www.kiche.or.kr

2. 특별회원: 10개 화학관련학회 산업체 및 연구기관

회원명	기관장	홈페이지
한화토탈	권혁웅	http://www.hanwha-total.com
(주)LG화학	신학철	http://www.lgchem.com
한국과학기술연구원	이병권	http://www.kist.re.kr
한국석유화학협회	문동준	http://www.kpia.or.kr
한국화학연구원	이미혜	http://www.kRICT.re.kr
GS칼텍스(주)	허세홍, 김형국	http://www.gscaltext.com
KCC 중앙연구소	이정대	http://www.kccworld.co.kr
한국생산기술연구원	이낙규	https://www.kitech.re.kr/main/
고등기술연구원	김진균	http://www.iae.re.kr/
한국세라믹기술원	유광수	http://www.kicet.re.kr/Front/

화학연합

제12권 제1호 (통권 58호)

2020년 5월 30일 인쇄
2020년 6월 3일 발행

발행인 최 중 길
발행처 사단법인 한국화학관련학회연합회
서울시 성북구 안암로 119 한국화학회관 3층
TEL : 02) 925-5271 FAX : 02) 925-5272
E-mail : kucst@kucst.org WEB : <http://www.kucst.org>

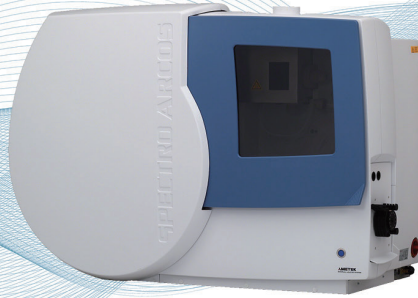
인쇄 한림원(주)
서울특별시 중구 퇴계로 51길 20, 1303(오장동, 넥서스타워)
TEL : 02) 2273-4201 FAX : 02) 2266-9083
WEB : www.hanrimwon.com

정가: 3,500원

※ 판본이나 잘못된 책은 구입에서 교환해 드립니다.

SPECTRO ARCOS

A new pinnacle of productivity and performance in ICP-OES



- 새로운 MultiView Plasma (axial or radial Plasma) 하나의 장비로 두 가지 플라즈마 전환 가능
- High Power Solid State Generator 고안으로 안정된 Plasma 와 32개의 CCD Detector
- Halogen 원소 Cl, Br, I 분석 가능

SPECTRO XEPOS

A new era in EDXRF analytical performance



- 복잡한 전처리 없이 Na(11) ~ U(92)의 원소 동시 분석
- TurboQuant(특허) 제공으로 다양한 종류의 샘플을 손쉽게 분석
- 다양한 적용 분야; 금속, 화장품, 제약, 전기전자, 석유화학, 폐기물 등등

본사

경기도 성남시 중원구 상대원동
우림라이온스 벨리 1차 814~816호
Tel: (02) 540-0651
Fax: (02) 540-4145

영남지사

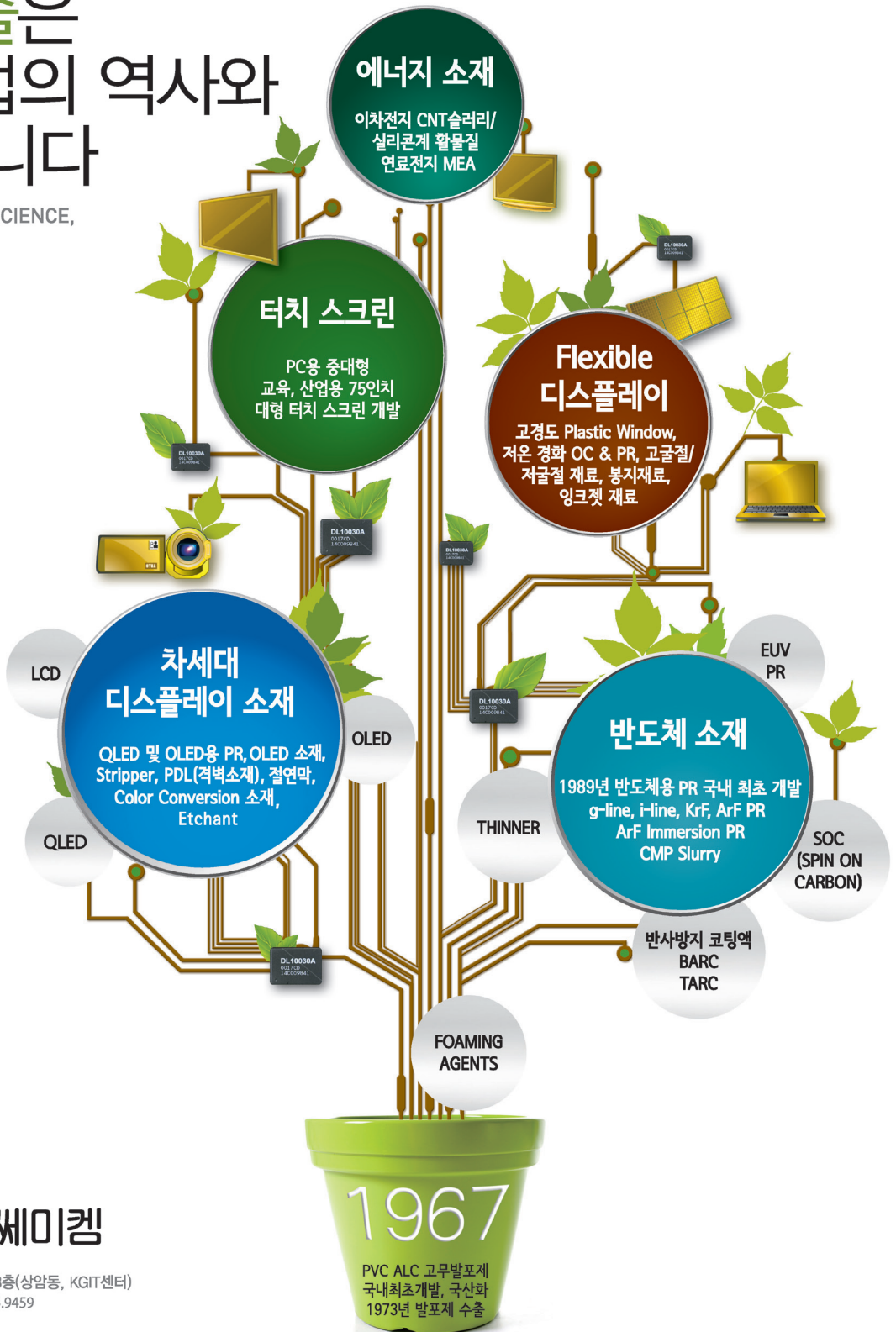
경상남도 창원시 성산구 중앙대로 81
(올림픽상가 제2층 제13호)
Tel: (055) 263-0651
Fax: (055) 262-4145

시흥공장

경기도 시흥시 경기과기대로 219, 220호
(정왕동, 길산에스에스티지식산업센터)

동진세미켐의 소재기술은 전자산업의 역사와 함께 합니다

LEADER IN MATERIAL SCIENCE,
DONGJIN SEMICHEM



동진세미켐

서울시 마포구 월드컵북로 402 23층(상암동, KGIT센터)

TEL 02.6355.6100 | FAX 02.325.9459

HOME PAGE www.dongjin.com