능할 정도로의 충분한 결합 강도가 입증되었다. 이러한 비공유결합(non-covalent bond) 덕분에 두 부분으로 자른 후에 단순히 접촉만 시켜줘도 수소결합 및 정전기적 결합이 그대로 복원되어 자가치유(self- healing) 혹은 자가접합(self-bonding) 할 수 있는 유용한 능력을 갖게 된다.

또한 연구팀의 실험 결과에 따르면, 이 하이드로젤은 형상기억(shape memory) 특성을 갖고 있어서, 완전히 건조시킨 후에 물이나 유기 혹은 이온성 액체로 다시 적시면 원래의 구조로 돌아올 수 있다. 이런 특성을 이용해, 유착방지제(anti-adhesive material)를 포함한 생의학적 치료나 수술 등에서도 광범위하게 활용될 수 있을 것으로 기대되고 있다.

본 연구결과는 2013년 9월, *Journal of the American Chemical Society* 저널에 "Linear versus Dendritic Molecular Binders for Hydrogel Network Formation with Clay Nanosheets: Studies with ABA Triblock Copolyethers Carrying Guanidinium Ion Pendants" 라는 제목으로 게재되었다(DOI:10.1021/ja408547g).

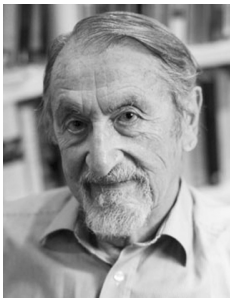
본 토픽은 KISTI 미리안의
글로벌동향브리핑(http://mirian.kisti.re.kr) 및
NanoWerk (http://www.nanowerk.com)의
기사를 참조하여 정리하였습니다.

# 2013년 노벨 화학상

**도춘호** | 자유기고가, 전 순천대 교수 (E-mail: choondo@sunchon.ac.kr)

2013년 노벨 화학상은 컴퓨터를 이용해서 화학 반응을 디자인하고 화학 반응 결과를 예측하는 계산 화학 분야의 하바드대학교의 카프러스 교수, 스텐포드대학교의 레빗 교수 그리고 남가주대학교의 와셀 교수가 공동으로 수상했다. 이번 수상자들은 QM/MM(quantum mechanics/molecular mechanics)라고 알려진 양자역학과 분자역학을 합친 계산 화학 분야를 개발해서 생체 고분자와 같은 거대한 분자들의 작용을 이해하는데 큰 역할을 했다. (주: 노벨상 위원회의 홈페이지 자료 등을 인용해서 2013년 노벨 화학상을 소개합니다)

우리는 화학 반응의 결과를 보통 실험을 통해서 얻는다. 실험대신 이론으로 풀어보려는 것이 이론 화학이다. 예를들면, 교과서에 나오는 것처럼 공-막대기(ball and stick), 공-스프링(ball and spring)과 같은 분자 모델을 만들어서 분광 진동스펙트럼을 설명할 때 고전 역학적 수식으로 푸는 것도 이론 화학이다. 화학 반응은 전자의 이동이 포함되어 있고 화학 결합이 끊어지고 새로 생기는 것이다. 분자의 모양이 바뀌고 크기도 바뀐다. 그리고 화학 반응은 반응에 참여하는 분자들이 정지 상태에 있는 것이 아니고 에너지를 받아서 여기 상태에서 반응하고 반응은 중간 상태나 전이 상태를 거친다. 우리가 일반적으로 알고 있는 분자의 구조는 에너지가 낮은 상태의 것을 알고 분자 내의 각 원자의 움직임이나 전자의 이동은 알 수가 없다. 더구나 결합이 끊어지고 생기는 상태는 더욱 알 수 없다. 이전에는 이런 문제


**카프러스 교수**
(Martin Karplus)

**레빗 교수**
(Michael Levitt)

**와셀 교수**
(Arieh Warshel)

들을 풀기 위해 고전 역학을 적용해 왔다. 그러나 고전 역학은 원자의 이동이나 화학 결합이 생성되고 끊어지는 전자와 관련된 문제는 해결하지 못했다. 주변의 용매의 역할에 대해서는 더욱 설명하기가 어렵다. 여기상태, 정전기적 성질, 반데르발스 힘, 전자이동 등 전자와 관련된 화학 결합 문제는 양자역학을 이용한 계산 화학이 풀 수 있다.

양자역학적 문제를 계산 화학을 통해서 풀기 위해서는 컴퓨터 용량과 속도가 무척 크고 빨라야 한다. 컴퓨터의 발달과 함께 계산 화학도 더욱 발전했다. 그러나, 반드시 컴퓨터 발전의 덕분만은 아니다. 이번 수상자들이 연구를 시작한 1960년대 말 컴퓨터의 메모리용량은 1M 정도 밖에 되지 않았고 오늘날 휴대전화 메모리보다 적은 것을 사용했다. 더욱 중요한 것은 이번 수상자들의 아이디어와 40여 년의 노력의 결과임을 우리는 이해해야 한다. 계산을 더욱 편리하고 빠르게 하기 위해 주변 화학구조를 단순화시켰다(그림 1). 이 구조는 고분자 구조나 반응을 이해하는데 도움이 될 것이다. 그러나 아직 분자 전체, 특히 단백질, DNA와 같은 거대한 생체 고분자에 대한 문제를 풀긴 어렵다. 그래서 중점적으로 화학 반응에 참여하는 작용기 부분은 양자역학적으로 풀고 다른 주변 부분은 고전 역학으로 해결하는 것이다(그림 2). 여기에서 어려운 부분은 이와 같은 양자역학적인 부분과 고전역학적인 문제를 각각 이해하고 이것을 같이 묶어서 계산하는 프로그램을 개발해야 하는 것이다.

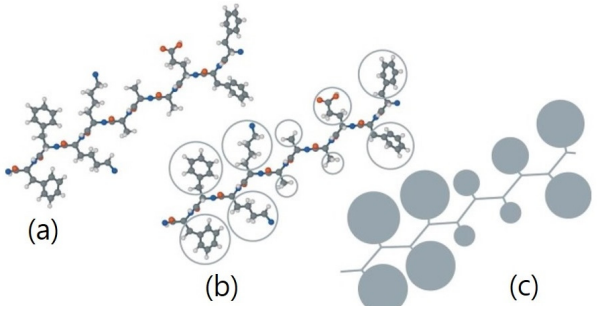



**그림 1.** 복잡한 분자들을 간단한 그룹으로 묶어서 처리하는 방법을 나타내는 그림. (a) 폴리펩타이드의 자세한 구조; (b) 각 아미노 잔기를 간단하게 한 그룹으로 묶는 모양의 그림; (c) 앞의 과정을 통해서 간단하게 만든 구조. 이 구조를 가지고 모의 실험(계산)을 한다.

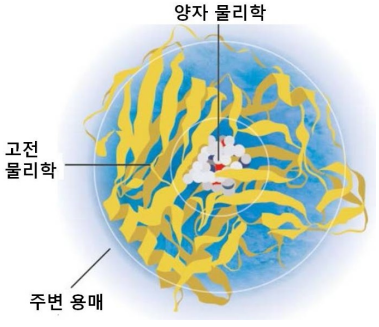



**그림 2.** 물 속의 다중 구리산화효소의 구조. 주변 용매와 작용기 부분이 아닌 주변은 고전역학적으로 모델을 만들고 핵심 작용기 부분은 양자역학적으로 모델을 만들어서 합쳐서 문제를 해결하는 것으로 설명하는 그림.

이번 노벨화학상 수상자들은 이런 문제들을 1970년대부터 연구하고 풀어왔다. 분자 모델을 모의실험을 하는 "Chemistry at Harvard Macromolecular Mechanics" (CHARMM)가 같은 계산 화학자들이 많이 사용하는 프로그램도 이들이 개발한 것이다. 우리가 NMR 스펙트럼의 위치와 크기 등을 예측할 수 있게 된 것도 이런 계산 화학의 결과 중 하나이다.

이번 2013년 노벨 화학상을 통해서 계산 화학이 컴퓨터를 이용한 가상공간에서 분자 모델을 사용해서 화학반응을 예측할 수 있다는 것을 알려주었다. 앞으로 컴퓨터의 발전과 함께 의약품 개발, 촉매 반응, 화학 물질의 성질, 생체 고분자뿐만 아니라 일반적인 고분자 성질과 반응 예측 등을 모델에서 사용한 이론적인 계산 화학이 중요한 역할을 할 것이다. 이론 화학의 모델은 더욱 세밀하고, 더욱 복잡한 화학 반응계, 예를 들면, 세포 내의 전체 화학 반응, 더 나아가 세포 자체의 생명 활동까지 넓혀서 계산화학으로 예측하는 시대가 올 것이다.

## 참고문헌:

1. "The Nobel Prize in Chemistry 2013 - Advanced Information". *Nobelprize.org*. Nobel Media AB 2013. Web. 6 Dec 2013. http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/chemistry/laureates/2013/advanced.html
2. *C&EN*, Vol. 91, No. 41, Oct 14, p 5 (2013).
3. *Chemistryworld*, Vol. 10, No. 11, pp 42-45 (2013).