

산학연 연구실 소개(1)

# 연세대학교 화학과 고분자 나노소재 연구실

# (Soft and Hybrid Nanomaterials Lab, Yonsei University)

주소: 서울특별시 서대문구 연세로 50, 연세대학교 과학관 454호 (우: 03722)

전화: 02-2123-2636

E-mail: bskim19@yonsei.ac.kr, 홈페이지: http://bskim19.yonsei.ac.kr



연구책임자 I **김병수** 교수 연세대학교 언더우드 특훈교수 이과대학 화학과

# 1. 연구실 소개

고분자 나노소재 연구실(연구책임자: 연세대학교 이과대학 화학과 김병수 교수)은 2009년부터 복잡계 거대분자 시스템의 대표적인 기능성 고분자와 나노소재의 화학적 합성 및 이를 활용한 에너지 및 생물학적 소재에 이르는 다양한 응용 연구를 활발하게 수행 중이다.

기능성 고분자 분야에 관한 연구는 주로 단량체 합성 및 이를 이용한 생체모사 고분자의 중합과 더불어 신규 단량체 합성을 통한 생분해성 및 생물학적 활성을 가지는 기능성 고분자 개발이다. 구체적으로 펩타이드를 이루는 아미노산을 모사하는 에폭시 단량체 라이브러리를 구축한 뒤, 이를 통해 폴리에테르 기반의 기능성 펩타이드를 모사하는 연구를 통해 홍합족사 단백질 및 항생 펩타이드의 모사와 같은 생물학적 응용에 이르는 연구를 꾸준히 진행하고 있다. 또한, 외부 환경 및 자극에 의해 분해될 수 있는 분해성 고분자 시스템을 구축하기 위한 촉매 및 단량체의 합성과 같은 다양한 연구가 진행되고 있다. 이외에도 기계화학적 고분자 합성 및 분해와 공유결합성 유기구조체와 자기조립 초분자 구조체의 합성에 관한 연구도 활발하게 진행하여 현재 이를 활용하는 연구로 확장하고 있다.

본 연구실은 이러한 혁신적인 고분자 소재의 개발에 대한 통찰력을 얻음으로써 에너지 및 생물학적 활용을 최대치로 끌어내도록 물질의 성질들을 개발하고자 한다. 더불어 열린 연구실 운영으로 정기적인 그룹미팅 및 논문미팅과 국내외 학회 및 해외 우수연구실 방문 연구를 통해 연구진 개개인의 전문적 성장을 도모하고 최고의 경력관리를 위한 다양한 프로그램을 제공하고 있다. 현재까지 본 연구실은 10명의 박사, 25명의 석사를 배출하였으며 학계, 정부출연연구기관 및 산업계에서 다양하게 활동하고 있다.

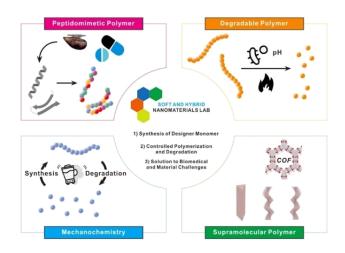


그림 1. "고분자 나노소재 연구실"의 주요 연구 분야.

# 2. 주요 연구 분야

# 2.1 폴리에테르 기반 자연모사 시스템

# 2.1.1 항생 펩타이드 모사 고분자

본 연구실은 항생 펩타이드(antimicrobial peptides)에 널리 존재하는 양전하, 소수성, 친수성을 띠는 아미노산을 모사하여 고분자 단량체를 개발하였으며, 이를 활용하여 폴리에테르 기반 항생 고분자를 합성하여 다양한 박테리아 종에 대한 항생 효과 및 혈액적합성에 관한 연구를 진행하였다.

항생 펩타이드는 면역 체계를 이루는 구성 요소로 항생 내성균을 효과적으로 파괴할 수 있어 널리 연구되어 왔으나, 펩타이드의 대량 합성이 용이하지 않으며 체내에서 단백질 분해 효소에 의해 쉽게 분해되는 등의 단점이 있다. 이를 대체할 물질로 항생 고분자가 연구됐으며, 본 연구에서는 아미노산을 모사한 다양한 기능기들을 적절하게 배치하여 이들의 살균효과 및 생체 적합성을 확인하고자 하였다. 높은 친수성과 유연성을 가지는 폴리에테르를 고분자의 주요 사슬로 사용하는 실험을 통해 고분자의 항생 효과와 혈액 적합성이 어떻게 달라지는지를 확인했으며, 그 결과 실험에 사용된 항생 고분자는 4종의 그람음성균. 2종의 그람양성균에 모두 높은 항생 효과를 보이는 것으로 나타났다. 또한, 분자동역학 시뮬레이션을 통해 고분자의 미세 구조에 따라 세포막과의 상호작용이 조절되는 특성을 파악할 수 있었다. 이를 통해서 항생 고분자의 개발에 있어 단량체의 조합과 더불어 미세구조의 정밀한 제어도 중요한 인자가 된다는 점을 확인할 수 있었다(Kim et al., ACS Nano, 2021, 그림 2).

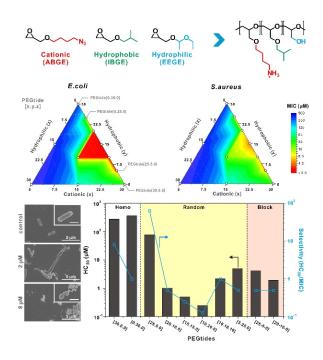


그림 2. 항생 펩타이드 모사 고분자의 합성 및 항생 효과 평가.

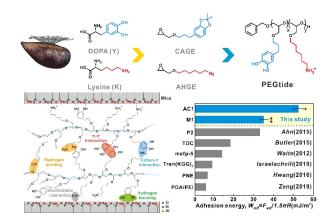


그림 3. 홍합 족사단백질 모사 고분자의 합성 및 접착능 평가.

# 2.1.2 홍합 족사단백질 모사 고분자

홍합의 수중접착력에 가장 크게 기여하는 물질은 DOPA로 많이 알려져 왔으나, 이와 동시에 수중에서 그 접착력을 유지하기 위하여 lysine등의 양전하를 띠는 아미노산이 중요한역할을 한다는 점이 보고되어 왔다. 이에 기반하여 다양한수중접착 소재에 대한 연구가 활발하게 진행되었으나, 많은경우 탄소기반의 고분자를 이용을 하였으며, 고분자의 주사슬이접착 능력에 어떠한 영향을 미치는지에 대한 연구는 보고가되지 않았다. 본 연구실에서는 홍합 족사단백질을 모사한, 높은 수중접착능을 가진 폴리에테르를 합성하고자 했다.

DOPA와 lysine 아미노산을 모사한 단량체의 합성부터 이를 기반한 고분자 중합을 통하여 수중접착 능력이 고분자의 주사슬과의 수소결합을 통해 크게 증가될 수 있다는 것을 보였으며, 이들이 그동안 연구되었던 홍합 족사단백질을 모사한 물질 중 가장 높은 접착력을 가지는 것을 표면결합력 측정 및 전산모사계산을 통하여 검증하였다(Kim et al, J. Am Chem Soc., 2022, 그림 3).

#### 2.1.3 동결방지 펩타이드 모사 고분자

결빙제어 소재 개발은 주로 극지방 생물의 체액에 존재하는 결빙방지 단백질(antifreezing proteins)의 기능을 모방함으로써 냉동—해동 과정에서 얼음의 변이에 의한 생체 시료의 피해를 최소화시키는 동결보존제로 활용되어 왔다. 이 결빙제어 단백질은 얼음결정 표면에 나노곡률을 형성시켜 얼음이 자라나는 것을 막아 생물이 영하의 환경에서 생존할 수 있도록 돕는다고 알려져 있다. 많은 경우 얼음 성장을 최소화시키는 방향으로 초점이 맞춰져 있었으며, 이와 반대로 얼음을 빨리 자라게 만드는 소재나 조건에 따라 결빙 촉진 및 억제가 모두가능한 소재에 대한 연구는 보고된 바 없다.

본 연구에서는 3차원 구조가 정교하게 제어된 생체적합성 고분자인 폴리글리세롤을 활용하여 얼음 형성의 촉진과 억제를 조절할 수 있었으며, 그 원동력은 친수성 고분자의 산학연 연구실 소개

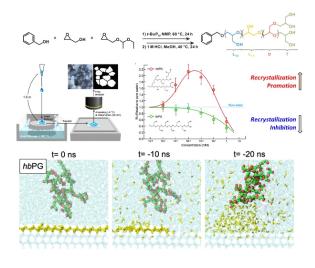


그림 4. 분지도 제어를 통한 폴리글리세롤의 결빙제어 효과 분석.

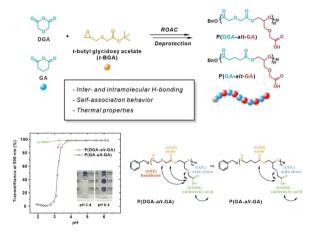
표면 작용기가 얼음 표면에서 결합과 해리를 시공간에서 반복할 경우 얼음 성장이 촉진되기 때문이라는 사실을 밝혀냈다. 또한, 해당 소재의 농도를 조절하여 그 속도를 최대 3배 빠르게 만들거나 절반 이하 수준으로 느려지게 만드는 데 성공했다 (Kim et al., Nat. Commun., 2022, 그림 4).

#### 2.2 분해성 고분자 시스템

# 2.2.1 생분해성 기능성 폴리에스테르

카르복실산 기반 기능성 에폭시 단량체는 pH 반응성, 친수성, 수소결합 등 유용한 특성을 보유하고 있다. 교대 공중합은 두 단량체의 조합을 통해 구조적으로 다양한 폴리에스테르를 합성할 수 있다는 장점이 있다. 이를 감안하여 카르복실산 기능기를 가진 에폭시 단량체를 사용하여 무수물과의 교대 공중합을 통해 분해성 폴리에스테르를 합성하고자 하였다.

Interplay between Monomers in the Properties of Degradable Polyesters



**그림 5.** 기능성 에폭시 단량체를 활용한 생분해성 고분자의 합성 및 자기조립 거동.

이때 무수물로써 헤테로 산소 원자의 유무가 차이 나는 단량체를 선정하여 단량체 구조에 따른 고분자 성질의 변화를 살펴본 결과, 단량체에 산소 원자를 가진 고분자가 수소결합을 통해 더욱 높은 유리전이온도 및 pH 변화에 따른 자기조립 특성을 나타내는 것을 관찰할 수 있었다. 또한, 염기성 조건에서 두 고분자 모두 가수분해를 통해 손쉽게 분해되는 것을 확인하였다(Lee et al., ACS Macro Lett., 2023, 그림 5).

# 2.2.2 생분해성 약물 전달 하이드로젤 시스템

본 연구에서는 소수성 아세탈 시스템을 기반으로 하여, 산성 조건에서 분해 속도를 정교하게 조절할 수 있는 온도 및 pH 감응성 하이드로젤 시스템을 개발하였다. 소수성 아세탈의 구조에 따라 분해 속도가 달라지며, 이를 이용하여 PEG 기반의 ABA 타입 삼중블락 공중합체를 합성하였으며, 이는 물에서 소수성 블락의 물리적 가교에 의하여 하이드로젤을 형성한다. 이후 아세탈 그룹이 체내에서 가수분해를 통한 소수성 블락이 친수성으로 변화하며 하이드로젤의 분해 속도를 정교히 조절할 수 있음을 ex-situ NMR 분석을 통해 확인하였다. 특징적으로 온도에 따라 용액상 졸인 고분자가 하이드로젤로 상태가 바뀌었으며 체온범위에서 젤 형상을 띄어 주사 가능형 특징을 가졌으며, 젤 내부의 소수성 물질을 서방형으로 방출할 수 있고 이 또한 방출 속도를 소수성 아세탈 단량체의 종류에 따라서 정교하게 조절할 수 있음을 검증할 수 있다(그림 6).

#### 2.2.3 기계화학적 고분자 분해

폴리염화비닐(PVC)은 다양한 분야에서 널리 쓰이고 있지만, 재활용이나 후처리가 어렵다는 단점을 가지고 있다. 특히나 소각을 할 경우 염산이나 다이옥신과 같은 환경에 치명적인 부산물이 나와 사용 후 처리에 관한 기술개발이 필수적이다. 본 연구에서는 이를 대체하고자 기계화학적 방법을 통해 기능화 및 분해가 용이하게 변형시키는 새로운 방안을 제시

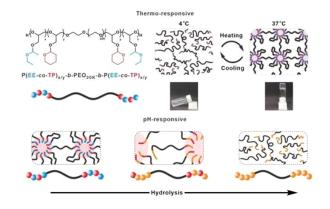


그림 6. 생분해성 아세탈 단량체 기반 하이드로젤 시스템의 모식도.

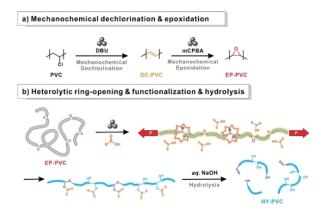


그림 7. 기계화학적 방법을 활용한 PVC의 분해.

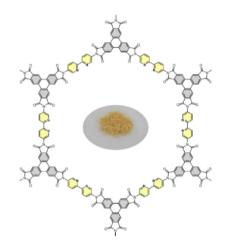


그림 8. 폴리이미드 유기 골격 구조체의 구조.

하였다(Choudhury et al., Adv. Mater., 2023, 그림 7).

유기계 염기인 DBU를 사용하여 PVC에 기계화학적 힘을 가하게 되면 탈염소화반응에 의하여 고분자 주사슬에 이중 결합을 도입할 수 있으며, 이를 mCPBA를 활용하여 추가적인 기계화학적 반응을 하게 되면, 고분자 주사슬의 에폭시화 및 이를 추가적인 비대칭적 고리열림반응이 진행되며, 이를 가수분해시켜서 저분자 수준의 수용성 물질로의 변환이가능했다. 이는 또한 낮은 세포 독성 및 생물독성을 가짐을 확인함으로써, 일반적인 방법으로는 분해가 불가능한 PVC를 무용매 기계화학적 방법을 통해 유용한 물질로 성공적으로 분해한 연구를 보고하였다.

# 2.3 감응형 초분자 중합 시스템

#### 2.3.1 광촉매 응용을 위한 공유결합성 유기 골격 구조체

공유결합성 유기 골격 구조체(covalent organic framework, COF)는 전구체 사이의 공유결합으로 형성되는 2차원 혹은 3차원 다공성 결정체로, 우수한 화학적 안정성을 가지는

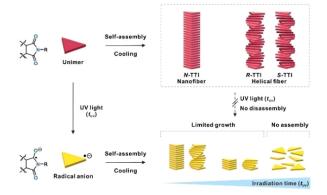


그림 9. 방향족 이미드 화합물 기반 광감응형 단량체의 자기 조립 제어.

물질이다. 특히, 일정하게 배열된 구조와 기공으로 인해 물질의 접근과 전달에 유리하며, 공액계 시스템을 형성하여 광학적 특성이 우수하여 다양한 분야의 광촉매로 활용되고 있다. 본 연구는 전자전달 복합체인 폴리이미드 기반 공유결합성 유기 골격 구조체를 합성하여, 과산화수소수를 생성하기 위한 광촉매로 활용하는 연구를 진행하고 있다(그림 8).

# 2.3.2 광 감응형 카이랄 초분자의 구조 변화

새로운 방향족 이미드 화합물로서  $C_3$  대칭성 트리페닐렌 트리이미드 단량체를 디자인하여, 자기조립을 통해 비카이랄성 및 카이랄성 초분자를 만들 수 있다(그림 9). 본 연구에서는 분자 카이랄성의 존재에 따라 자기조립 성질과 초분자의 결정 구조가 다르다는 것을 보여주었다.

흥미롭게 본 연구에서는 빛에 의해 단량체에서 생긴 라디칼 음이온은 정전기적 반발력으로 인해 자기조립이 억제되는 것을 확인하였다. 반면에 조립 상태에서는 분자간 상호작용으로 인해 빛 조사 하에서 라디칼 음이온이 생성되지 않아 분해 (disassembly)가 일어나지 않았다. 해당 연구를 통해 빛 자극을 이용하여 초분자의 구조를 조절할 수 있는 유용한 방안을 제시하였다(Kim et al., Macromolecules, 2023).

# 3. 연구실 현황 및 비전

연세대학교 화학과 고분자 나노소재 연구실은 현재 박사후 연구원 2명, 박사과정 6명, 석사과정 6명의 학생들로 이뤄져 있다. 최근 연구실의 다양한 연구 성과들이 저명한 국제 학술지에 게재되는 것과 더불어, 대기업 및 중견기업들과 산학협력을 통한 연구도 활발하게 이루어지고 있다. 이러한 과정을 통해서 고분자 합성 및 분해, 그리고 이의 응용 분야에 이르는 다양한 연구 결과를 비단 연구실에서의 발견에만 그치지 않고 산업화를 통한 미래 기술 및 국가발전에 보다 더 이바지 할 수 있도록 전력을 다할 계획이다.