

지스트 학부생, 물리화학 분야 SCI급 저널에 논문 게재

- 화학과 '학부생 연구프로그램' 참여, *Journal of Molecular Liquids*에 논문 게재



▲ (왼쪽부터) 최준호 교수, 서지원 학사과정생

지스트(광주과학기술원, 총장 김기선) 학사과정 학생이 제1저자로 주도한 물리화학* 분야의 연구 논문이 SCI* 등재 국제학술지에 게재됐다.

* 물리화학: 다양한 화학 현상을 물리 법칙을 이용하여 연구하는 학문

* SCI: 과학논문 인용색인, [Science Citation Index, SCI] 데이터베이스에 등재된 학술지

지스트 학사과정에 재학 중인 서지원 씨(화학전공, 4학년)는 지도교수인 화학과 최준호 교수와 함께 한국연구재단 기초연구사업의 지원을 받아 '혼합물에서 분자들의 분포에 관한 계산 화학적 연구'를 주제로 연구를 진행하고, 그 결과를 물리화학 분야의 SCI 등재 국제학술지인 '*Journal of Molecular Liquids*'에 게재(12월 1일자 온라인)했다.

서씨는 2022학년도 2학기 동안 연구과목인 '학사논문 연구'를 수강, 화학과의 학부생 연구 프로그램에 참여하며 관련 연구를 진행했다.

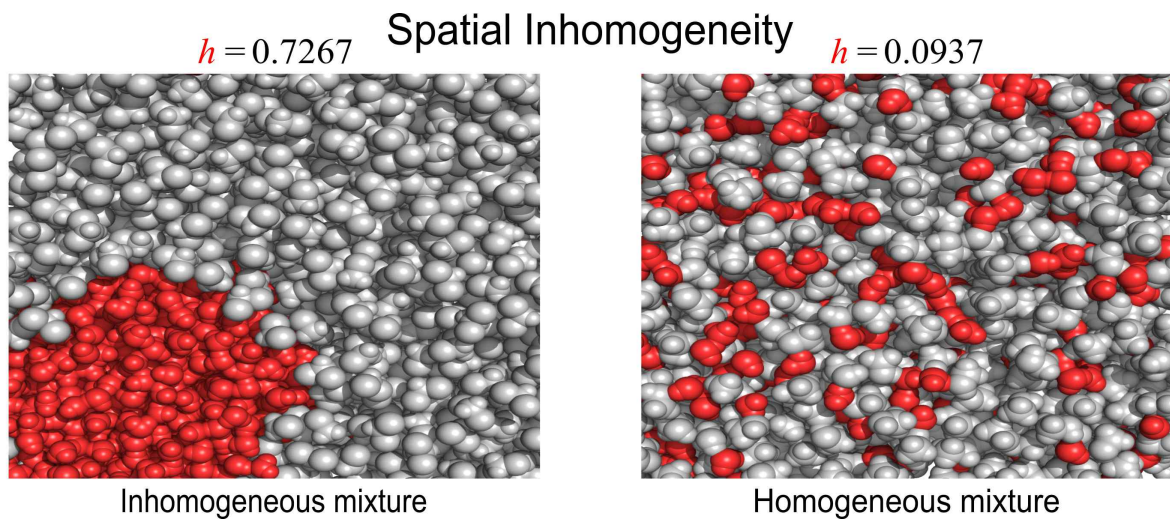
최준호 교수와 서씨는 소금, 설탕과 같은 물질이 물에 녹을 때 변화하는 용액의 특성에 관한 연구를 통해 최근 분자 동역학 모사와 그래프 이론을 도입하여 용질 분자들의 응집 현상에 대한 새로운 가설을 제시했다.

어떤 물질이 물에 녹았을 때 물과 잘 섞이는지(혼합성), 혼합물 속 분자들은 어떤 구조로 분포하는지 등을 설명하려는 다양한 시도들이 있었지만, 액체 상태의 구조 결정에 대한 실험이 어렵고 분자들 간의 복잡한 상호작용 때문에 용해도, 상 분리, 끓는점과 같은 기본적인 현상조차도 이해하기 쉽지 않다. 또한 녹아 있는 다양한 물질들의 전체적인 분포를 정량적으로 측정할 수 있는 방법은 없었다.

연구팀은 다양한 농도와 온도에서 세 가지 혼합물(메탄올/다이클로로메테인/부탄올)에 대해 분자 동역학 모사*(Molecular Dynamics simulations)를 수행하고, h value*라는 측정법을 도입해 분자들의 공간적 불균일성을 측정했다. 또한 그래프 이론 분석도 적용해 서로 다른 혼합성을 가진 혼합물을 정량적으로 검사했다.

* 분자 동역학 모사(Molecular Dynamics Simulations): 뉴턴의 운동방정식을 이용해 원자 또는 분자의 행동을 연구하는 이론적인 방법. 시간에 따른 분자의 구조, 역학, 열역학을 조사하기에 굉장히 효율적인 방법이며, 특히 실험으로는 연구하기 어려운 실시간에서의 물의 수소 결합 구조 및 운동 연구에 폭넓게 사용된다.

* h value: 무선 네트워크 연구 분야에서 사용되던 측정 방법으로 주어진 점들의 공간적 분포를 수치화해 측정하는 방법이다. 본 연구에서는 물과 물에 녹아 있는 분자들의 질량 중심을 점으로 취급해 이들의 공간적 분포를 계산했다.



▲ 혼합물에서 물과 물에 녹아 있는 분자들의 응집 형태: 그림에 적혀 있는 h 값은 각 혼합물에서 분자들의 공간적 분포를 정량적으로 계산한 값이다. 왼쪽의 상태는 다이클로로메테인 수용액에서 다이클로로메테인 (회색)이 물(빨간색)으로부터 분리되어 존재하고 있다. 오른쪽의 상태는 메탄올 수용액에서 메탄올(회색)이 물(빨간색)과 잘 섞여있다. 왼쪽의 상태에서는 h 값이 매우 높게 측정된 반면, 오른쪽에서는 매우 낮게 측정되었다.

메탄올은 온도와 농도와 관계없이 물에 잘 섞이고, 다이클로로메테인은 온도와 농도에 관계없이 물과 분리되며, 부탄올은 농도와 온도에 따라 섞이는 정도가 달라진다. 연구팀은 이러한 혼합성 차이가 분자들의 응집 형태와 관련이 있으며, h value 계산을 통해 응집 형태가 분자들의 공간적 분포에도 영향을 미친다는 것을 밝혔다.

또한 세 가지 물질에서의 분자들의 공간적 분포는 뚜렷하게 구분된다. 즉, 물과 잘 섞이는 메탄올 용액은 0에 가까운 h -value를 가지는 반면에, 물과 섞이지 않는 다이클로로메테인 혼합물은 0.7의 상대적으로 큰 값을 보인다.

이번 연구는 새로운 측정 방법을 도입해 분자들의 공간적 분포를 수치화하여 설명했다는 데 의의가 있으며, 기초과학 분야의 난제로 여겨왔던 이온과 삼투 물질이 물의 수소 결합구조와 용액의 특성에 미치는 영향을 이해하는 데 중요한 기여를 할 것으로 기대된다.

나아가 이러한 용질의 응집 구조와 혼합도에 대한 정량적 분석 연구는 용액의 물리 화학적 특성, 세포 내 단백질의 액체-액체 상 분리와 같은 현상의 메커니즘 규명을 넘어 **특정 물질의 추출, 단백질의 용해도와 안정성 증가, 의약 후보 물질의 용해도 증가와 같은 산업적 측면에서의 다양한 응용**을 가져올 수 있다.

서지원 씨는 "이번 연구를 통해 서로 다른 혼합성을 가진 물질이 물에 녹아있을 때 분자들의 공간적 분포를 정량적으로 설명할 수 있었으며, **수용액 내에서 분자들의 응집 거동과 공간적 분포 사이의 관계를 확립했다**"며 "향후 삼투 물질, 단백질 등 다양한 분자들이 물에 녹아있을 때 물의 구조와 분자의 분포에 미치는 영향에 관한 연구로 확장되길 기대하고 있다"고 말했다.

용 어 설 명

1. 그래프 이론 (Graph Theory)

- 그래프 이론은 수학적으로 그래프로 표현되는 물체들 사이의 관계에 관한 연구로 화학, 사회과학 그리고 컴퓨터 과학에 응용된다. 본 연구에서는 알코올과 물 분자는 점으로 표현하고 그들 사이의 수소 결합은 선으로 표현하여 그래프를 만들었다.

2. h value

- h value는 무선 네트워크 연구 분야에서 사용되던 측정 방법으로 주어진 점들의 공간적 분포를 수치화하여 측정하는 방법이다. 본 연구에서는 물과 물에 녹아 있는 분자들의 질량 중심을 점으로 취급하여 이들의 공간적 분포를 계산하였다.

논문의 주요 정보

1. 논문명, 저자정보

- 저널명 : Journal of Molecular Liquids, impact factor : 6.63 (2021년 기준)
- 논문명 : Spatial Inhomogeneity and Molecular Aggregation behavior in Aqueous Binary Liquid Mixtures
- 저자 정보 : Jiwon Seo (제1저자, 지스트 화학전공), Seungeui Choi (공동 저자, 지스트 화학과), Ravi Singh (공동 저자, 지스트 화학과), Jun-Ho Choi (교신 저자, 지스트 화학과)