



문의 : 담당자 연락처(02-880-6659)
 연구단장/연구책임자 김성근 교수(02-880-6659) / 교신저자
 한기림, 황도익 연구원(02-877-8039) / 공동 제1저자
 이승훈, 이종우, 임은학 연구원 / 공동 저자

자연대 김성근 교수 연구팀, 135년 동안 사용되어온 분자에 숨겨진 광안정성의 비밀 발견

□ 내용

분자가 에너지를 받아 들뜨는 상태가 되는 과정은 분자의 성질과 화학반응을 이해하는데 매우 중요한 단서를 제공하기 때문에 오랫동안 다양한 분야에서 지대한 관심을 받아온 현상이다. 특히 소자가 작동하는 에너지원으로 빛을 사용하는 OLED와 유기태양전지 등이 최근 첨단기술로 대두되면서 이들의 구성물질인 염료 분자의 들뜨 상태와 동적 변화에 대한 관심 또한 급격히 고조되고 있다.

최근 서울대학교 화학부 김성근 교수 연구팀은 1882년 발견된 이래 미국 FDA와 EU의 승인을 받아 세계적으로 널리 사용되어온 황색 염료인 퀴놀프탈론이라는 물질(상업명 퀴놀린 옐로우)이 갖는 특이한 성질인 빛에 의해 잘 깨어지지 않는 광안정성의 근원적 이유를 발견하여 국제저널인 사이언티픽 리포트(Scientific Reports)에 발표하였다.

연구팀은 생체 내 유전자를 구성하는 DNA 염기들이 빛을 받아 들뜨게 되면 화학적으로 불안정한 상태가 되었다가 1 피코초(1조분의 1초) 내에 안정한 상태로 돌아가기 때문에 생명체의 돌연변이를 억제하는 광안정성을 갖게 된다는 사실을 2000년대 초에 발견한 바 있다. 퀴놀프탈론 분자도 빛을 받으면 1 나노초(10억분의 1초) 이내에 원래 상태로 돌아가는 것으로 추측되었기 때문에 연구팀은 퀴놀프탈론 분자도 DNA 염기와 유사한 과정을 겪을 것으로 예상하여 연구에 착수하였으나, 내부에너지 이완과 수소 이동 반응에 의해 안정화되는 DNA 염기와는 달리 퀴놀프탈론 분자는 양성자 이동에 의해 안정화된다는 사실을 발견하였다.

특히 양성자 이동은 대개 동종 원소 사이에서 일어나는데 반해 이 반응은 질소에서 산소로의 양성자 이동 반응이면서 둘 다 광염기성 물질이기 때문에 지금까지 알려진 바 없는

새로운 형태의 양성자 이동에 해당되며, 이를 통해 광안정성이 유래한다는 사실을 밝힘으로써 향후 다양한 광활성 물질에 대한 근본적 이해와 기술적 활용을 가능케 할 것으로 기대된다.

[붙임] 1. 연구결과 2. 용어설명 3. 그림설명 4. 연구진 이력사항

연구 결과

Shedding new light on an old molecule: quinophthalone displays uncommon N-to-O excited state intramolecular proton transfer (ESIPT) between photobases

Gi Rim Han*, Doyk Hwang*, Seunghoon Lee, Jong Woo Lee, Eunhak Lim, Jiyoung Heo, and Seong Keun Kim

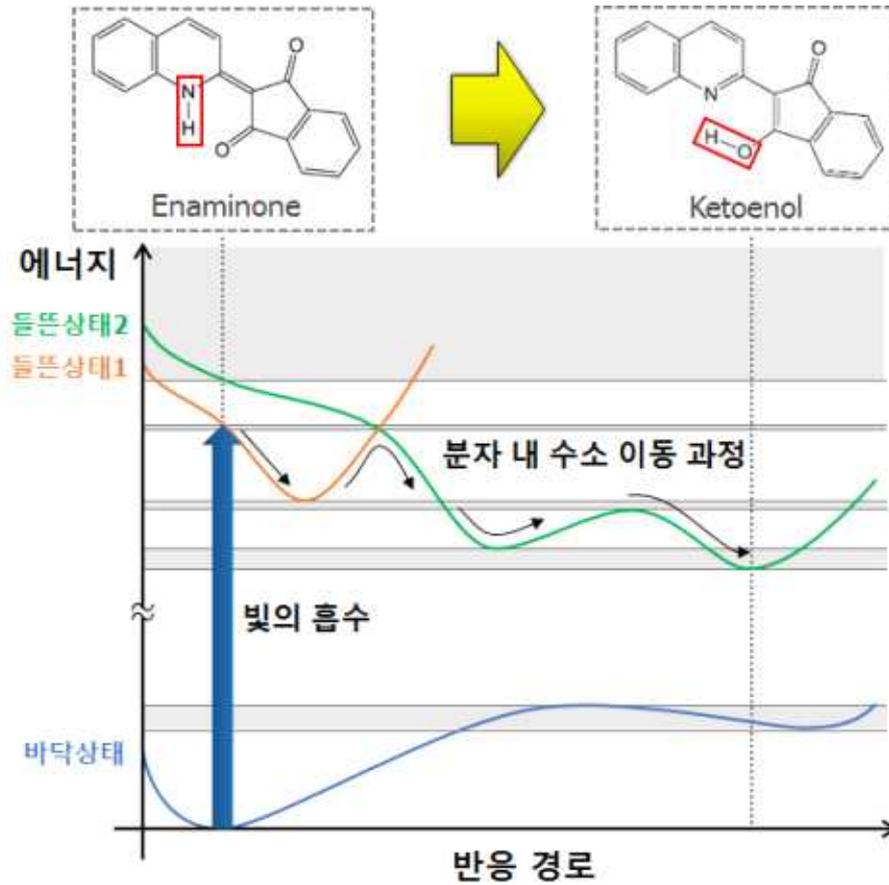
(Scientific Reports, *in press*)

펨토초 (1,000조분의 1초) 수준의 시간분해능을 갖는 극초고속 순간흡수 분광법과 DFT/TDDFT 이론화학 계산법을 이용하여 퀴놀프탈론 분자가 빛을 받아 불안정한 상태로 들떴다가 다시 안정한 상태로 돌아가는 광물리적/광화학적 전 과정을 관찰하고 동적 원리를 규명하였다. 동위원소 치환을 활용한 비교실험을 통해 퀴놀프탈론의 경우 들뜬 상태에서 분자 내 양성자 이동 반응이 일어남을 관찰하였다. 또한 에너지 준위 계산을 통해서 이러한 양성자 이동이 에너지 표면의 교차에 의해 일어난다는 것을 밝혔다. 이 연구 결과는 새로운 형태의 양성자 이동 반응을 밝혔다는 점에서 학문적 의의를 가지며 향후 다양한 광활성 물질을 활용하는데 있어서 기반지식을 제공할 것으로 기대된다.

용 어 설 명

1. 펨토초 순간흡수 분광법 (femtosecond transient absorption spectroscopy)
 - 순간흡수 분광법은 첫 번째 빛을 통해 분자를 들뜬 상태로 만든 후 일어나는 변화를 두 번째 빛의 흡수를 통해 추적하는 방식이다. 펨토초 (1,000조분의 1초) 수준의 시간분해능을 갖는 극초고속 분광법으로는 펨토초에서 피코초(1조분의 1초)에 이르는 매우 빠른 시간영역에서 일어나는 분자의 변화를 추적할 수 있다.
2. DFT/TDDFT 이론화학 계산법
 - Density functional theory/time-dependent density functional theory의 약자이며 분자의 에너지를 분자 내 전자밀도로부터 계산하는 방식이다.
3. 양성자 이동 (proton transfer)
 - 분자 내 또는 분자 간 반응에서 양성자(H^+)가 다른 위치로 이동하는 과정을 일컫는다. 분자 간 양성자 이동의 경우는 산-염기 반응을 흔히 수반하는 반면, 분자 내에서의 양성자 이동은 그 분자의 에너지 이완을 유발하는 경우가 많다. 분자 내 양성자 이동의 경우 해당 분자가 빛에 의해 들뜸으로서 촉발되는 경우가 많으며 이를 “들뜬상태 분자 내 양성자 이동 (excited-state intramolecular proton transfer, ESIPT)”이라고 부른다.

그림 설명



퀴놀프탈론의 바닥상태에서 질소(N)에 붙어있던 양성자(H⁺)가 들뜬상태에서 산소(O)로 이동하는 과정에서 에너지 상태의 변화를 나타낸 모식도이다. 바닥상태에서는 왼쪽 분자구조(enaminone)의 에너지가 더 안정하지만 들뜬 상태에서는 오른쪽 분자구조(ketoenol)가 더 안정하기 때문에 이 과정이 빛에 의해 들뜬 이후 자발적으로 일어날 수 있음을 보여주고 있다. 또한 들뜬 상태의 교차부분에서 이 과정 중간에 다른 들뜬 상태로의 전이가 일어남을 보여준다.

연구자 이력사항 - 김성근 교수

1. 인적사항

- 소 속 : 서울대학교 자연과학대학 학장
서울대학교 화학부 교수
- 전 화 : 02-880-6659
- E-mail : seongkim@snu.ac.kr



2. 학력

- 1977 - 1980 서울대학교 이학사 (화학)
- 1981 - 1982 미국 하버드대학교 이학석사 (물리학)
- 1983 - 1987 미국 하버드대학교 이학박사 (화학물리학)

3. 경력사항

- 1983 - 1984 미국 하버드대학교 Polaroid Foundation Fellow
- 1987 - 1989 미국 시카고대학교 박사 후 연구원
- 1989 - 현재 서울대학교 화학부 / 생물물리 및 화학생물학과 교수
- 1996 - 1997 서암 Fellow
- 1996 - 1997 서울대학교 최다인용논문 선정 (1996년 및 1997년 시행)
- 1996 - 1997 미국 하버드대학교 방문학자
- 1997 - 1999 롯데 Fellow
- 1998 - 현재 Pacificchem 분과조직위원장
- 1999 일본 학술진흥회 (JSPS) Fellow
- 1999 - 2002 과학기술부 창의적연구사업단장
- 2002 프랑스 파리 13대학 석좌초빙 교수
- 2002 - 2003 미국 하버드대학교 방문학자
- 2005 - 2010 과학기술부 국가지정연구실 사업단장
- 2006 교육인적자원부 선정 제 1회 국가석학
- 2006 - 2010 국제학술지 *Phys. Chem. Chem. Phys.* Advisory Board Member
- 2006 - 2013 일본 문부과학성 지정 Priority Area Group 국제자문이사
- 2006 - 현재 아시아 분광학회 국제운영위원

- 2007 과학기술부 우수연구과제 50선 및 국가연구개발 우수과제 100선 선정
- 2008 - 2013 교육과학기술부 WCU 사업단장
- 2008 - 2009 아시아 분광학회 조직위원장
- 2009 - 2010 세계화학회 (IUPAC) 광화학 심포지움 국제운영위원
- 2010 - 현재 국제학술지 *Phys.Chem.Chem.Phys.* Editorial Board Member
- 2011 - 2013 국제학술지 *Phys.Chem.Chem.Phys.* Associate Editor
- 2012 - 현재 국제학술지 *Chem.Phys.* Advisory Editorial Board Member
- 2013 대한민국 홍조근정훈장
- 2013 - 현재 영국 왕립화학회 펠로우 (Fellow of the Royal Society of Chemistry)
- 2013 - 현재 국제학술지 *Chem.Sci.* Advisory Editorial Board Member
- 2014 국제학술지 *Phys.Chem.Chem.Phys.* Deputy Chair of Editorial Board
- 2014 국제학술지 *Annu.Rev.Phys.Chem.* Guest Advisor
- 2015 - 현재 국제학술지 *Phys.Chem.Chem.Phys.* Chair of Editorial Board

4. 기타 정보

학내 봉사

- 1993 - 1996 전국기초과학교육연구공동기기원 기기부장
- 2004 - 2007 분자과학연구소장
- 2005 - 2006 자연과학대학 기획부학장
- 2008 - 2013 생물물리 및 화학생물학과장
- 2010 - 2014 산학협력단 이사
- 2011 법인화추진위원
- 2012 - 2014 외국인교수 초빙위원
- 2012 - 현재 재경위원
- 2013 - 2014 자체평가위원
- 2014 - 현재 자연과학대학 학장
- 2014 - 현재 서울대학교 기초과학연구원 원장
- 2014 - 현재 차세대융합기술연구원 이사
- 2015 - 현재 서울대학교 기술지주회사 이사

학외 봉사 (정부, 공공기관 및 산업체 관련)

- 2000 대한화학회 총무이사
- 2005 - 2007 바른정책연구소 운영위원

- 2008 - 2013 생물물리 및 화학생물학과장
- 2008 국가과학기술위원회 국가과학기술위원회 위원
- 2008 - 2013 대통령 직속 미래기획위원회 제 1기 및 2기 위원
- 2008 - 2012 국가과학기술위원회 기초과학연구진흥협의회 제 1기 및 2기 위원/부위원장
- 2009 - 2010 대통령 직속 미래기획위원회 과학기술 Task Force 위원장
- 2009 - 2010 교육과학기술부 과학기술장기비전위원회 위원
- 2010 - 2012 기초기술연구회 전문위원
- 2010 - 2012 한국연구재단 Review Board 위원
- 2010 교육과학기술부 글로벌 프론티어 사업 추진위원
- 2010 - 2013 청와대 과학기술비서관 정책자문위원
- 2010 - 2013 한국연구재단 BK21 사업 운영위원
- 2010 - 2014 국무총리 직속 정부업무평가위원회 제 3기 및 4기 위원
- 2011 - 2015 기초과학연구원 이사
- 2012 - 현재 한국과학기술나눔포럼 감사
- 2013 - 2015 삼성종합기술원 미래기술연구회 회장
- 2013 - 현재 국가과학기술심의회 다부처공동기술협력특별위원
- 2013 - 2016 삼성미래기술육성재단 이사
- 2013 - 현재 과학기술정책평가원 (KISTEP) 자문위원
- 2013 - 현재 과학기술정책평가원 (KISTEP) 정책위원장
- 2013 - 2016 삼성미래기술육성센터 운영위원
- 2014 국가연구개발 우수성과 선정위원장 (기초/인프라 분야)
- 2014 - 현재 한국연구재단 대학특성화사업관리위원회 위원
- 2014 - 현재 전국자연과학대학장협의회 회장
- 2014 - 현재 전국기초과학연구원장연합회 회장
- 2015 - 현재 한국경제신문 주관 스트롱코리아 포럼 자문위원
- 2015 - 2016 과총 창립 50주년 기념 세계과학기술인대회 학술위원장
- 2015 - 현재 과학기술정책평가원 (KISTEP) 이사
- 2016 - 현재 한국과학창의재단 이사