



지스트(광주과학기술원) 보도자료

<http://www.gist.ac.kr>

보도시점	배포 즉시 보도 부탁드립니다.	
배포일	2020.07.23.(목)	
보도자료 담당	홍보팀 김효정 팀장	062-715-2061
	홍보팀 이나영 선임행정원	062-715-2062
자료 문의	화학과 최준호 교수	062-715-4626

지스트 학부생, 학사논문연구 프로그램에 참여해 SCI급 저널 제1저자로 등재

- 지스트의 학부생 연구프로그램 활성화로 수준급 연구 결과물 배출

- 지스트(광주과학기술원, 총장 김기선) 최승의 학부생(화학전공 4학년, 지도교수: 화학과 최준호 교수)이 제1저자로 참여한 연구 논문이 영국왕립화학회가 발간하는 SCI급 저널인 ‘PCCP’ (Physical Chemistry Chemical Physics, 물리화학 화학물리)에 게재되었다.
- 최승의 학생은 2019년 2학기에 연구과목인 ‘학사논문 연구’를 신청하였으며, 이를 통해 지스트 화학과의 학부생 연구 프로그램에 참여하여 물의 구조에 관한 계산 화학적 연구를 수행하였다. 이를 발전시켜 SCI 저널에 논문을 게재하는 성과를 거두었다.
- 최승의 학생은 다양한 농도에서 세 가지의 알코올 수용액에 분자 동역학 모사(Molecular Dynamics simulations)*와 그래프 이론 분석을 적용하여 부탄올의 부분 혼합성**을 정량적으로 검사하였고, 이를 다른 혼합성의 알코올들과 비교하였다.

*분자 동역학 모사(Molecular Dynamics Simulations): 뉴턴의 운동방정식을 이용하여 원자 또는 분자의 행동을 연구하는 이론적인 방법이다. 이는 시간에 따른 분자의 구조, 역학 그리고 열역학을 조사하기에 굉장히 효율적인 방법이며, 특히 실험으로는 연구하기 어려

은 실시간에서의 물의 수소 결합 구조 및 운동 연구에 폭넓게 사용된다.

****혼합성(Miscibility):** 혼합성은 균일한 용액을 형성하며, 모든 비율로 혼합할 수 있는 두 물질의 특성이다. 분자 특성이 유사한 두 물질은 대체로 혼합성을 보이지만, 특성이 다른 두 물질들은 일반적으로 잘 섞이지 않는다. 예를 들어, 메탄올과 에탄올은 물과 혼합 가능하지만, 부탄올은 부분적으로 혼합 가능하다.

□ 물에 녹아 있는 다양한 물질들은 물의 수소 결합 구조와 운동에 영향을 준다. 이 중 알코올들은 그 종류에 따라 물과 잘 섞이기도 하고 때로는 분리되는 경향을 보여준다. 기존에 이러한 혼합성이나 액상 분리를 설명하려는 여러 시도들이 있었으나, 용해된 분자들의 응집 방식과 이것이 물의 수소 결합에 어떤 영향을 주는지에 대한 정량적인 설명과 비교는 없었다.

○ 메탄올과 에탄올은 농도와 관계없이 물에 잘 섞이지만, 부탄올은 특정 농도에서는 물과 부탄올로 서로 분리된다. 흥미롭게도 메탄올, 에탄올 그리고 부탄올은 그들의 분자 특성의 차이에도 불구하고, 물이 없는 순수한 알코올 상태에서는 알코올 응집체들의 형태학적 구조는 차이가 거의 없었다. 하지만 수용액에서는 메탄올과 에탄올은 물과 양립하는 반면에 부탄올은 물과 양립하지 않는 것으로 확인되어, 이들이 물의 수소 결합 구조에 서로 다른 영향을 주는 것을 확인하였다.

□ 최승의 학생은 “본 연구를 통해 알코올과 물의 수소 결합 네트워크의 집합적 구조가 정량적으로 설명되었으며, 수용액 내에서의 알코올 응집체들의 형태학적 구조와 알코올의 혼합성 사이의 관계를 확립하였다”면서 “이 결과를 바탕으로 알코올 뿐 아니라 이온, 삼투 물질, 단백질 등 다양한 분자들이 물의 수소 결합 구조에 미치는 영향에 관한 연구로 확장되길 기대하고 있다”고 말했다.

○ 이번 연구는 한국연구재단의 지원을 받아 수행되었으며, 연구결과는 7월 8일 물리 화학 분야의 권위 있는 학술지인 ‘PCCP’ (Physical Chemistry Chemical Physics, 물리화학 화학물리)에 게재되었다. <끝>

논문의 주요 내용

1. 논문명, 저자정보

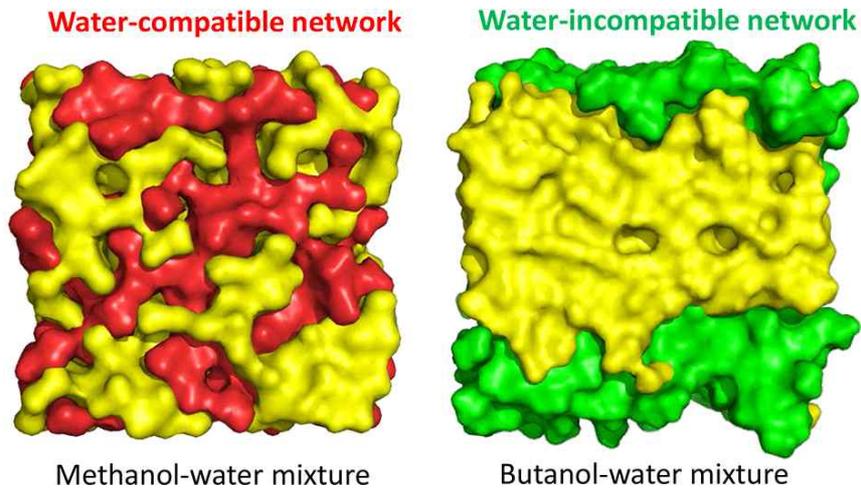
- 논문명 : Understanding Alcohol Aggregates and Water Hydrogen Bond Network Towards Miscibility in Alcohol Solutions: Graph Theoretical Analysis
- 저자 정보 : Seungeui Choi: 제1저자(지스트 화학전공)
Saravanan Parameswaran: 공동 저자(지스트 화학과)
Jun-Ho Choi: 교신 저자(지스트 화학과)

용어 설명

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.

그림 설명



< 그림 1 > 수용액에서 각 알코올들의 네트워크 형성 모습

왼쪽의 상태는 메탄올 수용액에서 메탄올(적색)이 물과 양립하는 네트워크를 형성한 모습이다. 에탄올 역시 메탄올과 비슷한 네트워크를 형성한다. 오른쪽의 상태는 부탄올 수용액에서 부탄올(초록색)이 물과 양립하지 않는 네트워크를 형성한 모습이다.