 한국과학기술정보연구원 <small>Korea Institute of Science and Technology Information</small>	<h1>보도자료</h1>	http://www.kisti.re.kr
배포 즉시 보도 가능합니다.		
대전(본원): 대외협력실 이종성 042 - 869 - 0976 / 이해준 0676 / 손영주 0997 문의: 최성환 선임연구원 042-869-0717		
배포번호 : 2019- 배포일자 : 2019.09.04	매수 : 보도자료 2매 (첨부자료 2매)	배포처 : 대외협력실

고전도성 및 고기능성 유기소재 개발·응용에 새로운 지평 열어

- 세계 최초로 반방향성 이합체에서 3차원 방향성 형성 현상을 규명 -

한국과학기술정보연구원(원장 최희윤, 이하 KISTI)의 슈퍼컴퓨터 5호기 누리온을 활용하여 3차원 방향성(aromaticity) 형성 현상을 규명하였다. 연세대학교 화학과 김동호 교수 연구팀은 일본 나고야대학교의 히로시 시노쿠보(Hiroshi Shinokubo)교수 연구팀과 공동으로 반방향성(anti-aromaticity) 이합체*에서의 3차원 방향성 형성 현상을 세계 최초로 규명하였다.

방향성이란 본 연구 이전까지 2차원 평면상에서만 관찰되었던 성질로서, 탄소화합물이 불포화결합, 홀전자쌍, 빈 오비탈 등에 의하여 완전히 콘주게이션** 되었을 때, 일반적인 콘주게이션에 의한 안정화 효과보다 큰 안정화 효과를 보이는 성질을 말한다. 이와 반대로 반방향성이란 방향성을 가지는 것과 같이 콘주게이션을 이루지만, 방향성 없이 높은 불안정성을 가지는 성질을 말한다. 본 연구에서 처음으로 확인한 3차원 방향성은 3차원 공간상에서 콘주게이션을 형성하여 방향성을 나타내는 것을 말한다.

* 이합체(dimer): 동일한 두 화합물이 강한 인력으로 하나의 화합물처럼 행동하는 단위

* 콘주게이션(conjugation): 연결된 원자들의 전자들이 비편재화되어 일반적인 불포화 결합에 비해 안정화 효과가 있다.

본 연구는 반방향성 분자들이 직접적으로 연결되지 않고 2차원 화합물들이 평면에 수직 방향의 인력으로 형성한 쌓임 이합체를 형성할 때 3차원 방향성을 보여 안정한 기능성 유기소재 구현에 중요한 역할을 할 수 있다는 것을 입증하였다.

본 연구팀은 반방향성 분자의 고유한 불안정성을 극복하고 3차원 방향성 형성 현상을 입증하기 위해 노어코롤(norcorrole) 분자를 활용하여 안정한 반방향성-반방향성 이합체를 구현하고, 분자사이에서 공간적으로 이어진 3차원 방향성을 가진다는 것을 증명하였다. 노어코롤(norcorrole) 분자는 기존에 반방향성을 가지는 것으로 알려진 분자로 이번 연구를 통해 3차원으로 이합체를 형성했을 때 방향성을 가진다는 점이 알려졌다.

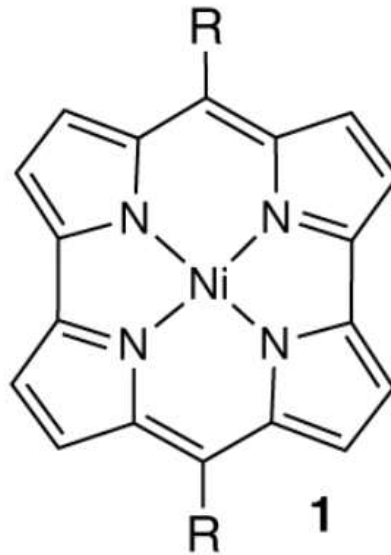
연구진은 실험적으로 얻은 반방향성-반방향성 이합체의 링전류(ring current)와 KISTI 슈퍼컴퓨터 5호기 누리온에서 시뮬레이션을 통해 얻은 결과를 비교하여 기존의 이론적으로만 알려져 있던 3차원 방향성을 성공적으로 입증하였다. 링전류(ring current)란 완전히 콘주게이션이 된 화합물에서 콘주게이션 된 링을 따라 유도된 전류를 의미한다.

본 연구를 통해 입증한 반방향성 상호작용에 의한 3차원 공간적 방향성 형성은 고전도성 및 고기능성 유기소재 개발 및 응용에 새로운 지평을 열어줄 것이라 기대된다.

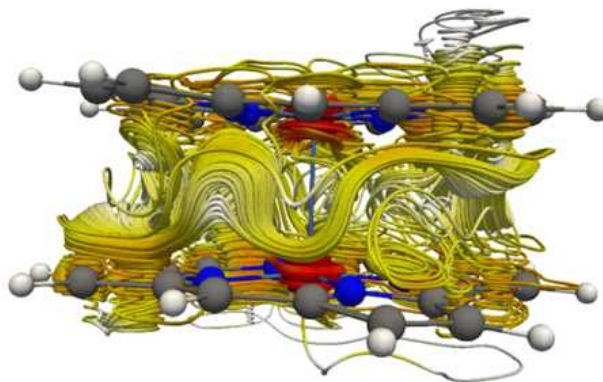
본 연구는 중요성과 우수성을 인정받아 Nature의 자매지 “네이처 커뮤니케이션(Nature Communications)”에 2019년 8월 게재 되었다.

별첨 : 관련 그림

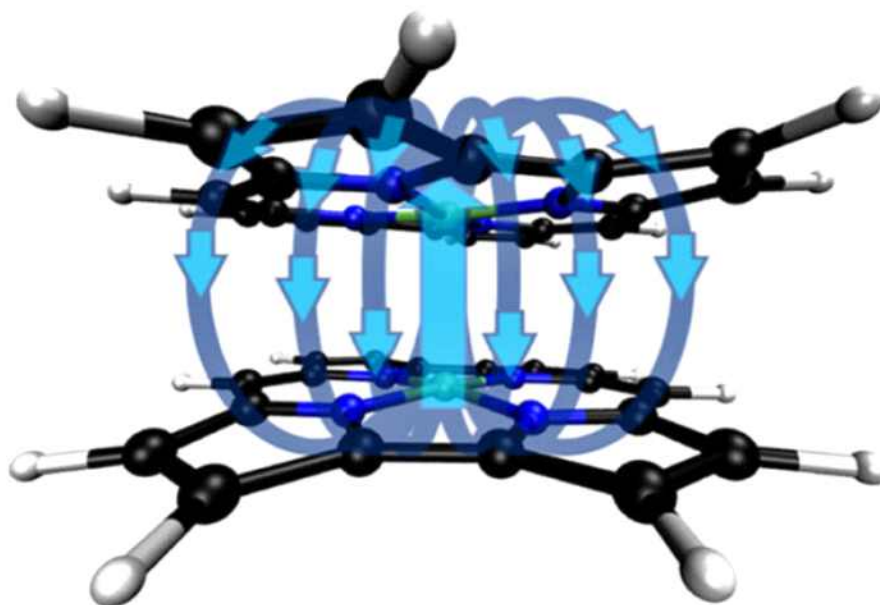
[참고자료: 관련 그림]



<연구에 사용된 노어코롤분자의 분자구조>



<반방향성-반방향성 이합체에 자성을 통해 유도된 전류의 흐름>



<노어코롤(norcorrole) 분자들 사이의 전류 흐름도>