

유기화학분과 뉴스레터

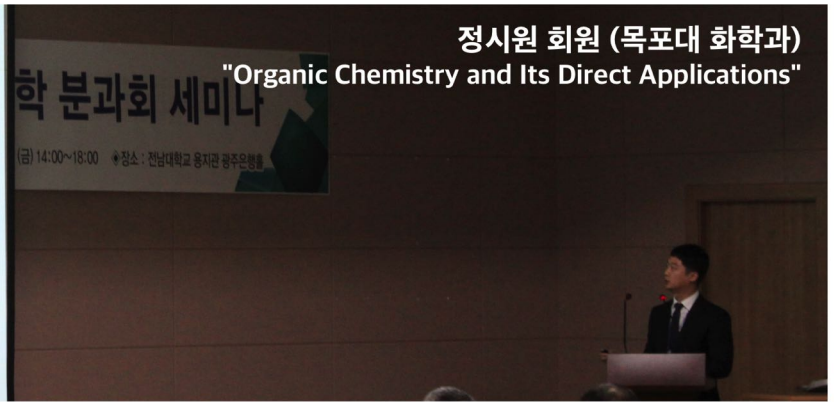
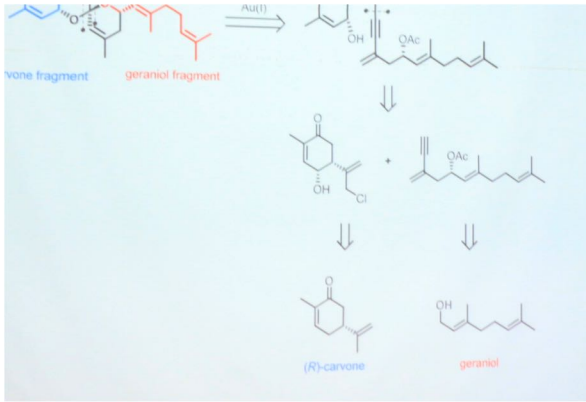
2018년도 제242회 유기화학 분과회 세미나



2018년 6월 15일(금요일), 전남대학교 용지관 광주은행홀에서 제242회 유기화학 세미나가 개최되었습니다. 이 행사에서는 특별히 최근에 교원으로 신규 임용된 **정시원 (목포대 화학과)**, **여현욱 (경북대 화학교육과)**, **이송이 (부경대 화학과)** 세 회원의 강연과 함께 총 34분의 회원들이 함께 모여 알찬 교류의 장을 가질 수 있었고 역동적으로 발전하는 유기화학분과회의 모습을 재확인하는 기회가 되었습니다.

본 행사가 성공적으로 진행될 수 있도록 적극적으로 참여해 주신 모든 **대한화학회 유기분과회 회원들**, 특히 좋은 강연으로 행사를 풍성하게 만들어 주신 **연사분들**, 또한 행사의 장소 제공 및 진행을 담당해 주신 **전남대학교 화학과 교수님 및 학생 여러분**과 **단일단계합성법 개발 연구실(BRL)**, 그리고 다과 등의 후원을 해주신 **세진시아이**에 특별한 감사의 인사를 드립니다.

제242회 유기화학 분과회 세미나 스케치



미래에서 고분자 재료가 사용되는가?
발전, 경제성, 경량성 등에서 타 소재 대비 우수

기기의 경량화, 박형화, 소형화, 다기능화
→ 고집적화로 인한 발열열 증가

미래에는 ??

1996년 최초의 폴더폰 2001년 최초의 컬러폰 2007년 보급형 스마트폰 2016년 최재의 스마트폰



Num. of papers based on conjugated polymers

2000 2004 2007 2010 2013 2016

ethylene-Based Colorimetric/Fluorometric Chemosensors

A. Race, W. Barford, R. J. Bursill, *Phys. Rev.* 2008, 178, 035208



제 18회 유기화학분과회 하계 워크샵 초청의 글



오는 8월 20일(월) - 21일(화) 이틀간, 강원도 원주에 위치한 오크밸리 리조트에서 **제18회 유기화학분과회 하계 워크샵**이 개최됩니다. 작년에 이어, 학생들의 구두발표를 중심으로 진행될 이번 행사에서는 **젊은 유기화학자상 시상 및 기념 강연**은 물론, **ACP Junior Travel Award 수상자 선정** 및 **튜토리얼 강연** 등 다양한 프로그램이 준비되어 있습니다. 유기화학 각 분야의 전문가 교류는 물론, 동시에 미래의 유기화학자들을 양성하는 뜻 깊은 자리가 될 수 있도록 많은 성원을 부탁드립니다.

일정: 2018년 8월 20-21일

장소: 강원도 원주시 오크밸리 리조트 (<http://www.oakvalley.co.kr>)

워크샵 안내: 유기화학분과회 홈페이지(<http://kcsorganic.org>) 내 “하계워크샵안내” 메뉴

제 4회 유기화학 튜토리얼 강좌 안내



이석근 박사



김원석 회원

8월 20일(월) 오전에 제공되는 제 4회 유기화학 튜토리얼 세션에서는 한국 NMR의 거장 이석근 박사가 NMR 이론 및 활용에 대한 강좌를, 그리고 이화여대 김원석 회원은 “flow chemistry”의 소개 및 활용 전망에 대한 강좌를 제공합니다. 이 튜토리얼 세션에 참석하고자 하는 회원께서는 아래 유기화학 튜토리얼 강좌 등록 안내를 참조해 주십시오.

유기화학 튜토리얼 강좌 및 워크샵 등록/결제 안내

(1) 유기화학 튜토리얼 강좌 등록 및 결제

8월 13일(월) 23시까지 대한화학회 홈페이지 내 “분과행사 결제” 페이지로 이동하신 후 행사명 메뉴에서 “제 4회 유기화학 튜토리얼 강좌” 메뉴를 선택하시고 안내에 따라 등록에 필요한 정보를 기입하신 후 결제해 주십시오 (분과행사 결제 페이지 [클릭](#))

(2) 하계워크샵 등록 및 결제

8월 13일(월) 23시까지 대한화학회 홈페이지 내 “분과행사 결제” 페이지로 이동하신 후 행사명 메뉴에서 “제 18회 유기화학 분과회 하계워크샵” 메뉴를 선택하시고 안내에 따라 등록에 필요한 정보를 기입하신 후 결제해 주십시오 (분과행사 결제 페이지 [클릭](#))

* 튜토리얼 강좌를 등록하시는 분들은 하계워크샵 등록도 동시에 하셔야 합니다.

** 현장 결제를 원하시는 분들은 8월 13일(월) 23시까지 유은정 회원 ejyoo@khu.ac.kr 에게 이메일로 구체적인 방법에 대해 문의해 주십시오.

포스터 및 구두발표 초록 접수

유기분과회 홈페이지 내에 초록 등록 페이지가 활성화되어 있습니다 (초록 등록 페이지 [클릭](#)). 안내에 따라 초록 template 파일을 다운받아 작성한 후 해당 페이지에서 온라인으로 제출해 주십시오. 초록 제출은 8월 10일(금) 23시까지입니다. 기타 질문사항은 유은정 회원 ejyoo@khu.ac.kr 에게 이메일로 문의해 주십시오.

제 18회 유기화학분과회 하계 워크샵 참석 요청 공문



문서번호: 유기화학분과 2018-005

시행일자: 2018. 08. 20

수 신: 대한화학회 유기화학분과회 회원

제 목: 제 18회 유기화학분과회 하계워크샵 참석 요청

1. 회원 여러분의 무궁한 발전을 기원합니다.
2. 대한화학회 유기화학분과회에서는 다음과 같이 원주 오크밸리 리조트에서 제 18회 유기화학분과회 하계워크샵을 개최하오니 많은 참석을 부탁드립니다.

- 다 음 -

- 일 시: 2018년 8월 20일 (월) – 21일 (화)
- 장 소: 원주 오크밸리 리조트

대한화학회 유기화학분과회

회장 조 천 규



제 20회 장세희 학술상 안내

제 20회 장세희 학술상 후보자 공모

1. **수상자격:** 대한화학회 유기화학 분과회 회원으로 유기화학에 관련된 탁월한 논문을 발표하여 유기화학분야 및 분과회 발전에 현저하게 공헌한 사람에게 수여한다. (다만, 전년도까지 3년 이상 연속으로 분과회비를 납부하였으며, 해당 연구업적은 국내에서 주도적으로 이루어진 것 이어야 한다.)
2. **추천자격:** 본인, 분과회원 3인 이상의 추천인단, 및 학술상 심사위원
3. **심사대상업적:** 수상 전년도 말까지 3년 동안 발표한 대표논문 1편 (5년간 발표한 논문 목록을 참고자료로 심사에 반영)
4. **제출서류:** 추천서 1부 (분과회 홈페이지 <http://kcsorganic.org> 참조)
5. **제출마감:** 2018년 8월 17일
6. **제출처:** 대한화학회 유기화학분과회 (2018@kcsorganic.org)
7. **수상내역:** 상장 및 부상
8. **수상시기:** 대한화학회 제122회 추계 총회 및 학술발표회

분과회비 납부 안내

유기화학분과회 연회비는 3만원입니다. 분과회비 납부방법은 아래와 같습니다. **분과회비 납부자 명단을 6월호에 업데이트**하였습니다. 여전히 누락 등의 오류를 발견하신 분들은 **고려대학교 화학과 김학중 회원(hakkim@korea.ac.kr)**에게 이메일로 연락부탁드립니다.

대한화학회 홈페이지를 통한 납부

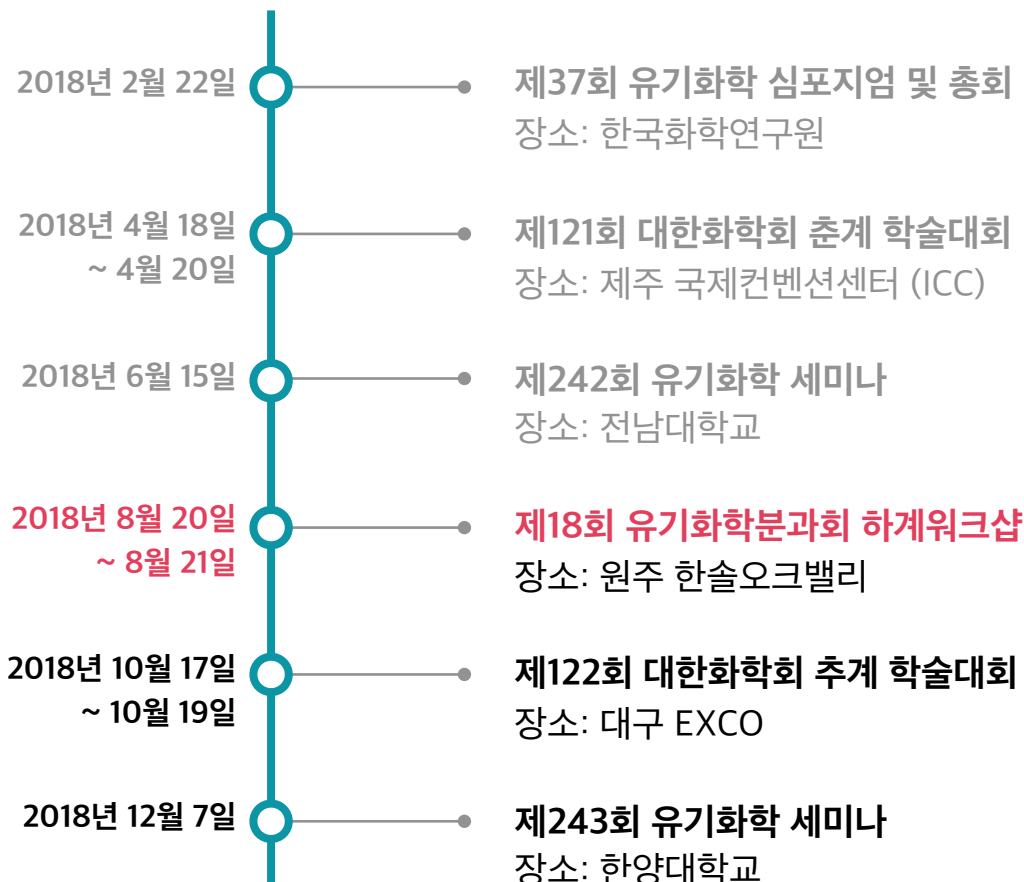
대한화학회 홈페이지에 로그인 후, 바로가기 서비스의 분과회비 납부를 선택하시면 됩니다. 납부방법으로 신용카드, 계좌이체, 또는 무통장 입금이 선택 가능합니다. 결제 후 증빙서류는 본인이 직접 출력하실 수 있습니다 (결제 페이지 http://new.kcsnet.or.kr/pay_select, 로그인 후 사용 가능).

2018년도 유기화학분과회 회비 납부자 명단

2018년 6월 5일 기준, 총 150명

강경태	강동진	강성민	강용한	강택	강한영	고영관	고혜민	공영대	구상호
권용억	권태혁	금교창	김건철	김만주	김민	김병문	김성곤	김원석	김원석
김원섭	김윤경	김인수	김재녕	김정곤	김주현	김지민	김진호	김필호	김학중
김현석	김현우	김홍석	김훈영	김희권	김희진	남계춘	문봉진	민선준	박세훈
박정민	박정우	박지훈	박진균	박철민	백무현	서상원	서성용	서지원	손정훈
송창식	신승훈	신인재	신인지	안교한	안덕근	안양수	양시경	양정운	염을균
염현석	오경수	우상국	유은정	유자형	윤소원	윤승수	윤재숙	윤주영	윤창수
윤효재	이경	이광호	이규양	이기승	이기연	이덕형	이동환	이민재	이민희
이상기	이선경	이선우	이성호	이송이	이안나	이영호	이용록	이윤미	이은성
이은지	이일영	이재인	이정규	이정태	이종대	이준석	이준희	이창희	이철범
이태호	이필호	이혁	이현규	이현우	이홍근	이희봉	이희승	이희윤	임상민
임지우	임희남	장두옥	장석복	장성연	장영태	장우동	전동주	전철호	정규성
정병혁	정시원	정영식	조동규	조승환	조우경	조은진	조천규	주정민	지기환
천철홍	최기항	최준원	최태림	추현아	하현준	한민수	한서정	한수봉	한순규
허정녕	호필수	홍대화	홍성유	홍순혁	홍승우	홍종인	황길태	황종연	Jean Bouffard

2018년도 유기화학 분과회 행사 일정



뉴스레터 발행 안내

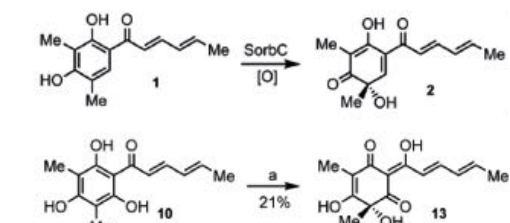
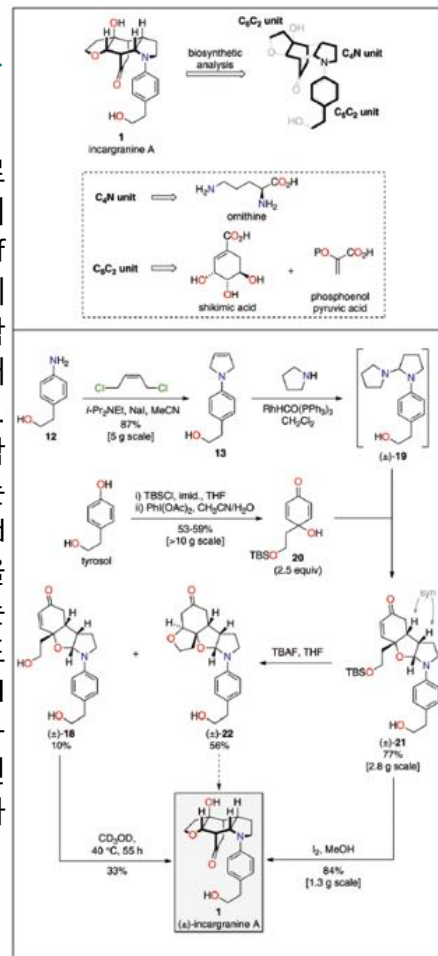
유기화학분과회 뉴스레터는 월 1회 발행되어 분과회원들에게 e-mail로 보내드리고 있습니다. 회원 여러분들의 관심과 적극적인 뉴스 제보를 부탁드립니다 (담당: 고려대학교 화학과 김학중 회원, hakkim@korea.ac.kr). 7월호 유기화학분야 연구 동향에 대한 원고를 작성해 주신 **한순규, 이상희, 김도경, 이윤미, 김정곤** 회원들께 감사드립니다.

광고 및 후원 모집

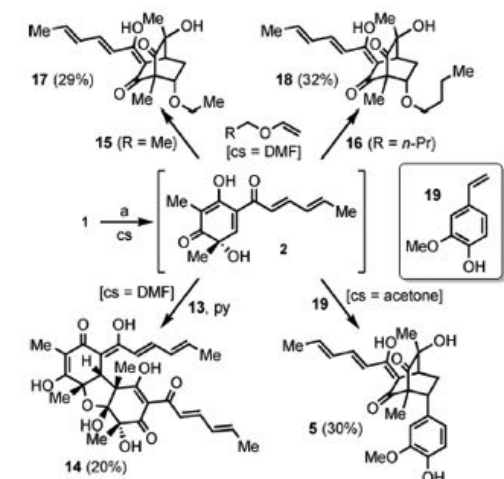
유기화학 분과회의 안정적인 운영을 위하여 광고업체 및 후원 연구실을 모집하고 있습니다. 매 월 발행 되는 소식지에 기업체 광고 및 연구실 홍보페이지를 수록 예정이며 기업광고의 경우 유기분과회 홈페이지 하단의 배너광고를 무료로 제공하고 있습니다. 소식지 7월호 후원해 주신 **세진시아이** (<https://www.sejinci.co.kr>), **대정화금** (<http://www.daejungchem.co.kr>)에 감사드립니다. 회원 여러분께 광고 및 후원에 대한 홍보에 협조를 부탁드립니다 (광고 및 후원 문의 담당: 한국화학연구원 윤창수 회원, csyun@kriect.re.kr)

Andrew Lawrence et al. “Total Synthesis of Incargranine A” *Org. Biomol. Chem.* **2018**, Advance Article. DOI: 10.1039/C8OB00702K.

연구를 하고 논문을 읽다 보면 본인과 비슷한 합성 철학을 갖고, 비슷한 방식으로 문제를 선정해서, 비슷한 방식으로 풀어나가는 연구자를 발견하게 되는 순간이 아마 여러분에게도 있었을 것입니다. 저에게는 그런 존재가 University of Edinburgh의 Andrew Lawrence라는 비교적 젊은 교수입니다. 생합성 가설에 기반해서 최대한 간단하게 복잡한 천연물 구조를 합성하는 것은 모든 합성 화학자가 갖고 있는 기본 자세겠지만, Lawrence 교수의 연구내용이나 논문의 전개 방식은 너무나도 제가 추구하는 연구방향과 일치하여 소름이 돋기도 합니다. Lawrence 그룹은 최근 OBC에 Incargranine A의 4 스텝짜리 gram-scale 전합성을 보고하였습니다. 이 그룹은 기본적으로 incargranine A 알칼로이드는 ornithine 에서 유래한 C4N 유닛과 shikimic acid와 phosphoenol pyruvic acid 에서 유래한 C6C2 유닛 2개로부터 생합성 될 것이라는 가설 아래 합성 디자인을 하였습니다. Ornithine에서 pyrrolidine 헤테로 고리가 생합성되는 기작을 아는 사람이라면 당연히 iminium-enamine 반응을 생각할 수 있을 것이고 이 그룹도 실제로 이를 통해 핵심 선구체를 21을 합성하였습니다. 약간의 우여곡절 끝에 21을 메탄올 용매하에서 요오드와 반응시킬 때 탈실릴화 반응과 더불어 Retro-oxa-Mannich/Mannich 반응이 효과적으로 진행함을 발견하여 천연물인 incargranine A를 84%의 수율로 얻었습니다. 반응을 1.3 그램 스케일로 보낸 사실은 본 합성 경로의 견고함을 증명합니다. [KAIST 한순규 회원]



a) Phosphate buffer (50 mM, pH 8.0), SorbC, NADH, room temperature; acetone was used as co-solvent (cs) for solubilization of substrates 8–10.

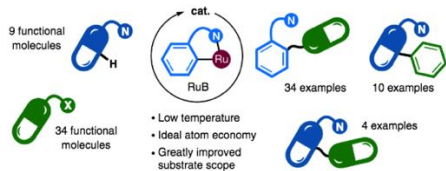


Scheme 2. Chemo-enzymatic total syntheses of bisvertinolone (14), rezishanone C (17), rezishanone B (18), and sorbicatechol A (5). a) cf. Scheme 1.

Tobias A. M. Gulder et al. “Chemo-enzymatic Total Synthesis of Oxosorbicillinol, Sorrentanone, Rezishanones B and C, Sorbicatechol A, Bisvertinolone, and (+)-Epoxy-sorbicillinol”, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2018**, ASAP. DOI: 10.1002/anie.201802176.

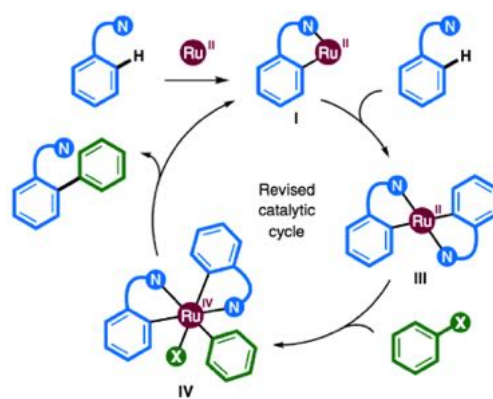
이번에 소개해드릴 논문은 생축매를 통하여 다양한 천연물을 합성하여 유기화학계에서 각광을 받기 시작한 Gulder의 SorbC를 사용한 다양한 sorbicillinoids의 합성에 관한 것입니다. Sorbicillin(1)이 산화적 비방향족화를 통해 sorbicillinol(2)을 만들고 이것이 다양한 이합체화 반응을 통해 다양한 bisorbicillinoids를 합성할 수 있다는 것은 1999과 2000년에 Nicolaou와 Corey의 연구를 통하여 잘 알려져 있었습니다. Nicolaou의 합성보다 나은 합성은 있을 수 없다는 편견(?)으로 잊혀져 가던 sorbicillinoid 합성에 새로운 전기를 마련한 것이 Gulder 그룹입니다. Gulder 그룹은 recombinant SorbC를 생축매로 사용하여 1을 2로 거울상 이성질체 선택적으로 산화시키고 이를 통하여 Nicolaou가 실현하였던 이합체화 반응들을 작년에 발표하였는데(*ACIE* **2017**, *56*, 12888), 이번에는 매우 불안정한 sorbicillinol (2)을 그나마 work-up 할 수 있는 protocol을 개발하여 이를 다양한 olefin (15, 16, 19) 및 역시 SorbC를 통하여 합성한 13과 반응시켜 다양한 천연물(17, 18, 5, 14)을 합성하였습니다. 기존의 rezishanone C (17)의 합성은 17스텝이 걸렸으나 본 논문에서는 sorbicillinol (2)에서 한스텝만에 17을 합성한 점은 본 논문이 제시한 접근법의 효율성을 단적으로 보여줍니다. [KAIST 한순규 회원]

Igor Larrosa et al. “Cyclometallated ruthenium catalyst enables late-stage directed arylation of pharmaceuticals”, *Nature Chem.* **2018**, *10*, 724. DOI: 10.1038/s41557-018-0062-3.

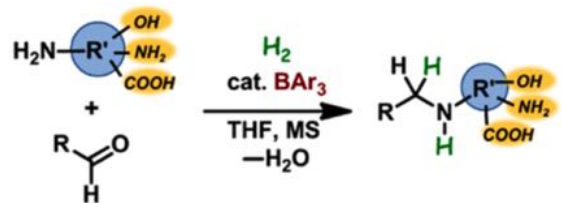


본 논문은 다소 진부하게 느껴질지도 모르는 N-지향기(directing group)를 포함한 아렌의 C-H 아릴화반응을 다루고 있다. 혹자는 지난 decades 동안 수많은 논문이 출판된 바 있는, Ru 촉매를 이용하여 sp² C-H 결합을 아릴화하는 반응이 high-profile 저널 중 하나에 역선택되는 것이 의아하다고 생각할 수도 있다. 하지만, 본 논문의 challenge에 대한 접근 방식, 다양한 기질에 대한 적용성, 그리고 새로 제안된 메커니즘은 그러한 편견을 깨기에 충분

하다. 그동안 Ru를 이용한 C-H 결합의 활성화에 유용하다고 여겨진 p-cymene 리간드는 사실 반응속도를 retard시킨다는 사실을 발견, 그에 따라 새롭게 cyclometallated Ru 촉매를 디자인했다. 이 촉매는 섭씨 35도에서의 반응 진행을 가능하게 하고, mild한 반응조건은 polar, heavily functionalized pharmaceuticals의 C-H 아릴화로 적용될 수 있도록 했다. 다만, 매우 복잡한 Ru 센터에서 진행되는 아릴 iodide와의 산화첨가반응에 대한 insight을 조금 더 제공했으면 더욱 좋지 않았을까하는 생각이 든다. 본 논문을 흥미롭게 보신 분들께 Ru 촉매를 이용하여 지향기가 없는 아렌의 아릴화반응을 다룬 논문(Larrosa et al. *JACS* 2016, 138, 3596)도 추천한다. **[연세대 이윤미 회원]**

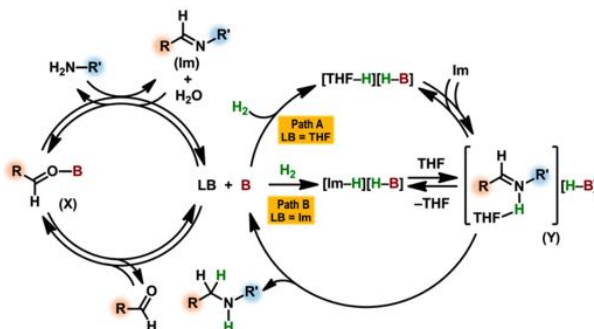


Yoichi Hoshimoto and Sensuke Ogoshi et al. “Main-Group-Catalyzed Reductive Alkylation of Multiply Substituted Amines with Aldehydes Using H₂”, *J. Am. Chem. Soc.* **2018**, *140*, 7292. DOI: 10.1021/jacs.8b03626.

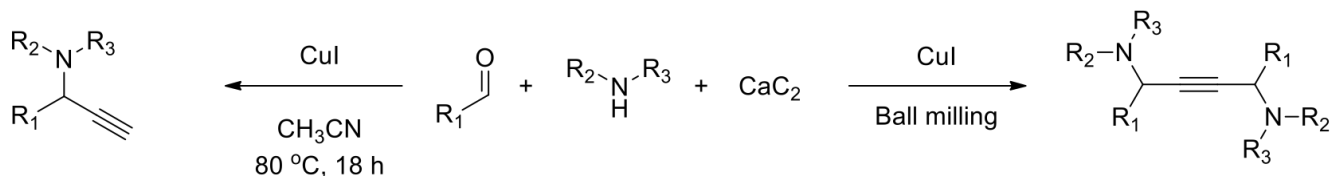


2006년 토론토대의 Stephan 그룹이 포스핀/보란 루이스쌍이 H₂를 가역 활성화시킴을 보인 이후에, 이 반응성은 다양한 불포화 기질의 수소화반응으로 응용되어왔다. 본 논문에서는 아민과 알데히드가 반응하여, in-situ로 생성된 이민을 H₂를 이용하여 reduce시키는 언뜻 보기에 매우 간단한 반응을 다루고 있다. 주족원소물질이 촉매로 작용하고, 수소가 환원제로 사용되며 물이 부산물로 생기는 나름 환경 친화적인 반응이다. 촉매로 어떤 보란을 사용했는지가 가장 중요했다고

해도 과언이 아닌데, 사용되는 보란은 염기와 함께 H₂를 활성화시킬 수 있어야 할 뿐만 아니라 물과 화학적으로 compatible해야 하기 때문이다. 반응 최적화과정에서 B(2,6-Cl₂C₆H₃)(p-HC₆F₄)₂가 앞의 조건들을 잘 만족시킴을 확인했고, 이 보란은 이민의 생성과정 역시 촉진하였다. Kinetic 스테디를 통하여, 용매로 사용된 THF가 보란과 협동하여 H₂를 활성화시킴을 보였다. 마지막으로, 본 촉매 시스템이 carboxyl, hydroxyl, amino 그룹 등을 포함한 기질에 적용될 수 있다는 점이 주목할 만하다. 작용기 tolerance가 좋지 않던 기존 주족원소 루이스쌍을 이용한 촉매반응들의 한계점을 극복해 나가고 있기 때문이다. **[연세대 이윤미 회원]**



Carsten Bolm and José G. Hernández et al. "Altering Copper-Catalyzed A3-Couplings by Mechanochemistry; One-Pot Synthesis of 1,4-Diamino-2-butyne", *Angew. Chem. Int. Ed.* **2018**, Accepted Article. DOI:10.1002/anie.201805505.



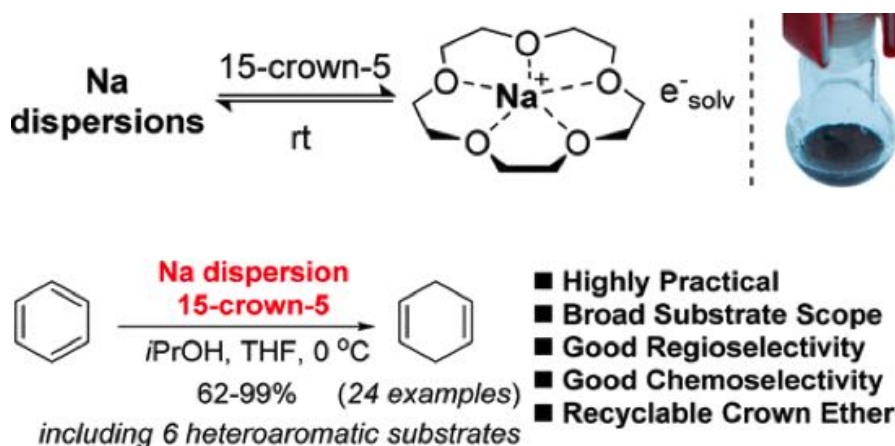
Conventional Product

Mechanochemical Product

화학 반응을 일으키는 에너지 공급 방식으로 직접적인 가열법, 빛을 사용하는 광화학법, 전기에너지를 이용하는 전기화학법을 활용한다. 이에 더하여, 연마, 연신, 마찰등의 기계적인 에너지를 활용하는 기계화학 합성 (Mechanochemical Synthesis)이 최근 관심을 받고 있다. 용매가 없는 조건에서 물리적인 혼합과 에너지를 전달하여 원자 경제성을 최대화 하며, 용액 반응에서 구현할 수 없는 새로운 선택성의 발견으로 합성화학의 영역을 넓혀 주고 있다. Bolm 연구팀은 Aldehyde-Alkyne-Amine 삼성분 반응이 용액 조건에서는 propargyl amine을 형성하지만, 볼밀 무용매 조건에서는 1,4-amino-2-butyne을 형성하는 것을 보고하였다. 용액 조건에서는 반응 부산물에 의하여 칼슘카바이드가 한번만 반응하지만, 무용매 볼밀 조건에서는 양쪽의 반응성을 다 활용할 수 있다. 새로운 에너지의 활용에 의한 새로운 합성의 방향을 보여주는 예시로서, 기계화학 합성에서만 구현 되는 반응성과 선택성이 더 개발되기를 기대한다. **[전북대 김정곤 회원]**

Jie An et al. "A Practical and Chemoselective Ammonia-Free Birch Reduction" *Org. Lett.* **2018**, *20*, 3439. DOI: 10.1021/acs.orglett.8b00891.

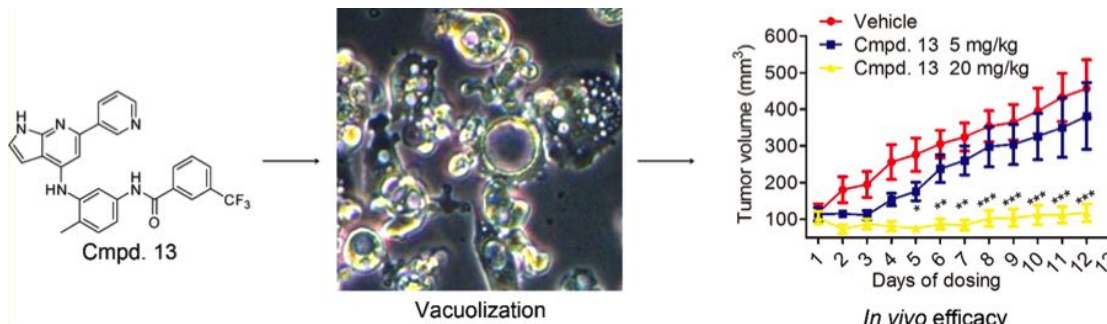
방향족 화합물을 환원/탈방향족화 하여 cyclohexadiene을 형성하는 반응은 유기 합성에서 오랜 기간 사용되었다. 그 오랜 역사에도 불구하고, 현재에도 액체 암모니아에 용해된 금속을 이용하는 전통적인 Birch 환원 반응이 가장 일반적인 방법이다. 하지만 끓는점이 매우 낮으며 사용에 위험성이 따르는 암모니아를 사용하여 극저온 조건이 필요하며 모든 사용 시약들의 세심한 정제가 요구된다. 또한, 선택성 역시 높지 못한 문제점이 있다. 북경 농과 대학의 Jie An 연구팀은 소듐/암모니아 대신



소듐 금속과 15-Crown-5를 사용하여, 암모니아를 사용하지 않는 새로운 조건을 보고하였다. 공기중에서 안정한 소듐 분산체와 15-Crown-5간의 반응은 특별한 수분 제거 조건 없이 쉽게 전자 전달체를 형성한다. 이를 방향족 화합물과 0 °C에서 반응하여 1시간 이내에 cyclohexadiene을 얻을 수 있다. 암모니아의 사용에 따른 극저온 조건을 사용하지 않으며, 일상적인 실험실 조건에서 쉽게 수행할 수 있어, 기존 Birch 환원반응에 대비 넓은 활용이 기대된다. **[전북대 김정곤 회원]**

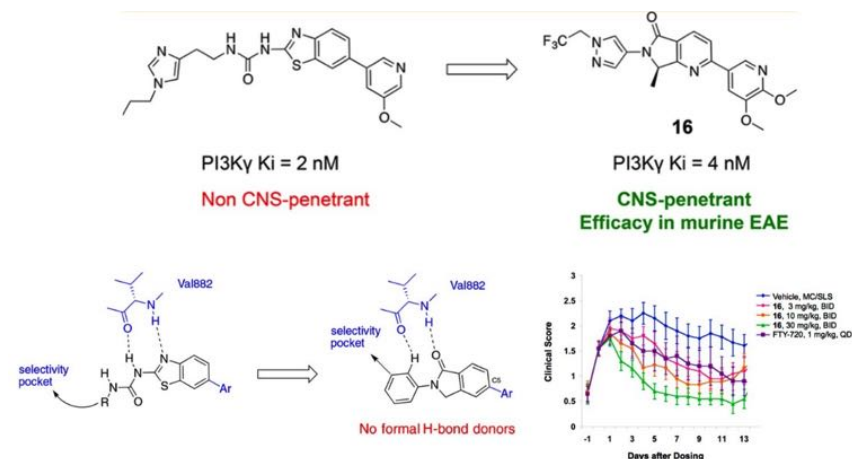
Wei Huang et al. “Discovery and Identification of Small Molecules as Methuosis Inducers with in Vivo Antitumor Activities”, *J. Med. Chem.* **2018**, ASAP. DOI:10.1021/acs.jmedchem.8b00753.

잘 알려진 세포 사멸 기작은 세포자멸사 (apoptosis) 혹은 괴사 (necroptosis)가 있다. 하지만 이외에도 다양한 분야에서 세포사멸을 유도하는 다른 작용 기작 및 화합물에 대한



연구가 꾸준히 진행되고 있다. 이번 호에서는 Methuosis라고 명명한 새로운 세포사멸기작을 유도하는 Azaindole 골격을 지니는 신규 화합물에 대한 연구를 소개하고자 한다. Methuosis는 세포사멸기작 중 하나로 특징적인 패턴을 보인다. Macropinocytosis라고 불리는 세포내 이입경로 중 하나에 의한 세포 내 소포체(vacuole)를 유도하면서 세포를 사멸에 이르게 하는 사멸기작으로 2008년 처음 보고되었다. 그 이후 MOMIPP, Vacquinol-1 등의 물질이 보고되었으나, 아직까지 in vivo에서 효능 평가가 이루어진 적이 없었다. 본 연구에서는 새로 발굴한 Azaindole 기반 compound **13**이 기존에 알려진 apoptosis, necroptosis, autophagic cell death에 의한 것이 아니라 methuosis를 통해 세포 사멸을 유도함을 증명하였을 뿐만 아니라, 쥐를 이용한 종양 이식 연구에 적용하여 암세포사멸에 대한 치료학적 가능성을 제시하였다. **[KIST 이상희 회원]**

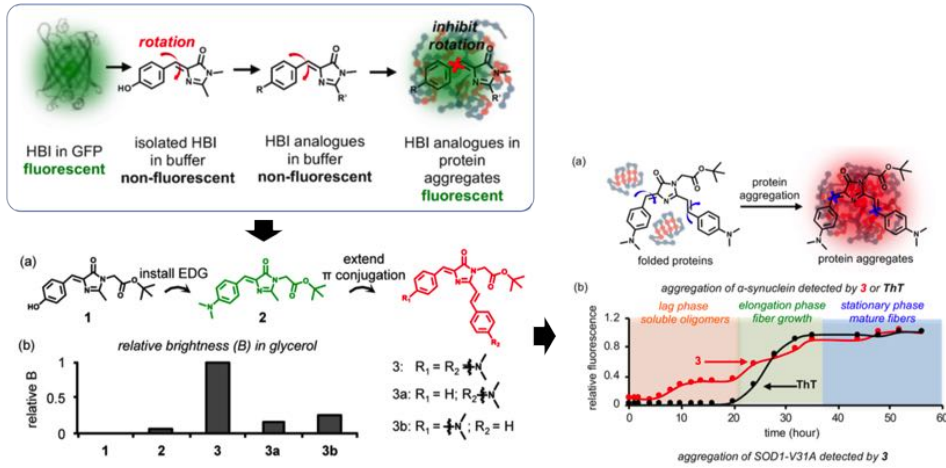
Jon H. Come et al. “Design and Synthesis of a Novel Series of Orally Bioavailable, CNS-Penetrant, Isoform Selective Phosphoinositide 3-Kinase γ (PI3K γ) Inhibitors with Potential for the Treatment of Multiple Sclerosis (MS)” *J. Med. Chem.* **2018**, ASAP. DOI:10.1021/acs.jmedchem.8b00085.



Lipid kinase phosphoinositide 3-kinase γ (PI3K γ)는 다양한 자가면역질환에 있어서 매우 중요한 타겟으로 각광받고 있다. 특히 다발성 경화증(multiple sclerosis, MS)은 뇌, 척수 등의 중추신경계의 염증성 질환 중 하나이다. 뇌의 경우 체내의 다른 혈관과 다르게 '혈액-뇌장벽(BBB, Blood-Brain-Barrier)'에 의해 물질이동을 제한하여 뇌를 보호하는 시스템을 갖추고 있다. 따라서 뇌질환의 치료제 개발에 있어서 BBB를 통과해 뇌실질까지 약물을 전달하는 것이 매우 중요하다. 특히 CNS를 통과하는

kinase 저해제의 개발은 ATP-경쟁적 저해제의 구조적 특성 상 매우 어려운 것으로 여겨져 왔다. 본 연구에서는 기존의 isoindolinone scaffold PI3K 저해제 구조에서 γ 타입에 대한 선택성을 높이고 CNS 투과율을 높이기 위해 selectivity pocket 및 Val882 잔기와 화합물 간의 상호작용에 주목하였다. 결과적으로 formal hydrogen bond donors를 제거한 화합물을 확보하고 이에 대한 추가적인 SAR 연구를 통해 높은 PI3K γ 선택성 뿐만 아니라 CNS 투과율이 향상된 화합물을 얻을 수 있었다. 또한 EAE 동물 모델에서 효능 평가를 통해 그 우수성을 증명하였다. 이는 다른 뇌질환 치료제 개발에 있어서도 주요한 연구 결과가 될 것으로 여겨진다. **[KIST 이상희 회원]**

Y. Liu et al. “Modulation of Fluorescent Protein Chromophores To Detect Protein Aggregation with Turn-On Fluorescence”, *J. Am. Chem. Soc.* **2018**, in press. DOI: 10.1021/jacs.8b02176.

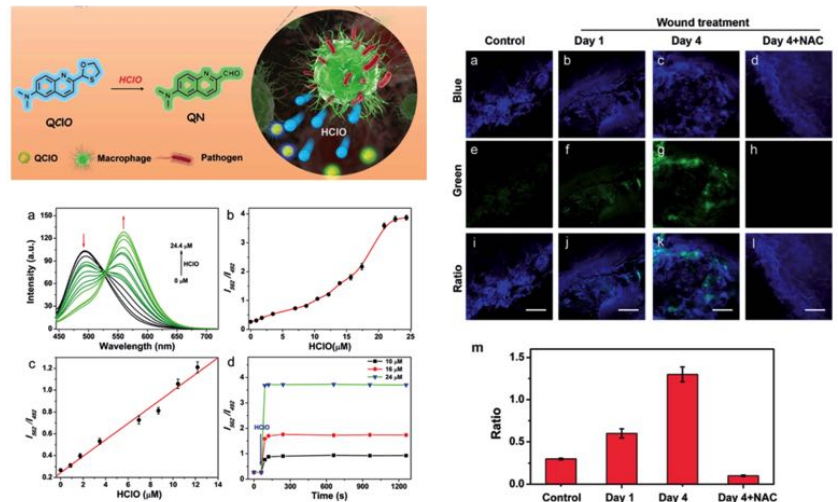


형광 단백질 (FPs)은, 1962년 녹색 형광단백질 (Green Fluorescent proteins, GFP)의 발견 이후 현재까지 다양한 종류가 개발되어 왔으며, 단백질의 표지, 세포 내 메커니즘 및 운동성 확인, 유전자 발현 등 생물학적 표지자로서 널리 사용되어지고 있다. FPs에서 형광을 내는 HBI (4-hydroxybenzylidene-imidazolinone)는 FPs의 cavity 내에서는 강한 형광 특성을 보이거나 외부에서는 rotation에 의한 non-radiative decay로 인해 형광을 보이지 않는다. Pennsylvania State

University의 X. Zhang 그룹에서는, HBI 구조에 electron-donor group (-NMe₂, dimethyl amine)을 도입하여 donor-acceptor type의 dipolar 형광체를 디자인하고, 이를 단백질 misfolding이나 aggregation을 감지할 수 있는 분자 프로브 (probe)로 개발하였다. 단백질 aggregation에 대한 분자 프로브의 intercalation은 rotation에 의한 non-radiative decay가 감소하며, 이는 형광 켜짐(fluorescence turn-on) 현상으로 관찰된다. Zhang 그룹에서는 이를 이용하여 치매와 관련된 단백질의 한 종류인 알파-시뉴클린 (alpha-synuclein) aggregation을 추적하는 연구 결과와 Halo-Tag/AggTag 으로의 응용 가능성을 검증하였다. 본 연구는 질병 바이오마커의 한 종류인 단백질 응집체 검출 및 약물개발로의 응용 등에 활용 가능 할 것이라 기대된다. [경희대 김도경 회원]

Z. Mao et al. “Design of a ratiometric two-photon probe for imaging of hypochlorous acid (HClO) in wounded tissues”, *Chem. Sci.* **2018**, in press. DOI: 10.1039/c8sc01697f.

하이포아 염소산 (hypochlorous acid, HClO)는 차아염소산이라고 불리며, 생체 내 활성산소종 (reactive oxygen species, ROS)의 한 종류로서 생리학적, 병리학적으로 매우 중요한 역할을 수행한다. 생체 내 HClO은 heme enzyme myeloperoxidase (MPO)와 chloride ion의 촉매반응에 의해 생성되며, 일반적으로 세포/조직의 손상이나 여러가지 염증 관련 질병 내에서 다량 생성되는 것으로 알려져 있다. South-Central University for Nationalities에 Z. Liu 연구팀에서는, 상처난 조직에서의 HClO 농도를 영상화 할 수 있는 비율기준 이광자 프로브 (ratiometric two-photon probe)를 개발하고, 조직 손상 초기로부터 회복 단계별 HClO의 농



도를 이광자 생체 영상화를 통해 확인하였다. 프로브는 thioketal 작용기를 반응기로 가지고 있으며 (이름: QClO), 이는 HClO를 만나 aldehyde 작용기로 변형된다 (이름: QN). 반응 전후 물질은 각각 전자 주개 작용기(Donor)로 dimethylamine(-NMe₂)를 가지고 있으며, donor-acceptor type의 dipolar 특성은 acceptor 작용기의 변화에 따라 HClO반응 전후 각기 다른 형광 특성이 유도된다. HClO 농도 측정은 RAW 264.7 세포와 손상된 조직을 가지는 쥐 동물 모델에서 이광자 형광영상화를 통해 검증되었다. 본 연구는, 최근 활발히 진행되고 있는 질병 바이오마커 in vivo monitoring 연구의 일환으로, 앞으로 다양한 종류의 응용 연구가 기대된다. [경희대 김도경 회원]

TCI · 세진시아이는 유기분과회 공식후원사 입니다.



Perovskite Solar Cell 연구를 위한

* 35% 할인 이벤트!

7월 1일 ~ 9월 30일 까지

플러스친구



MATERIALS



[L0291]
[L0292]



[C3569]



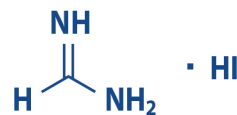
[P2415]



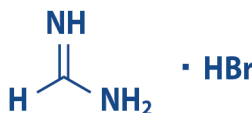
[L0288]



[L0279]



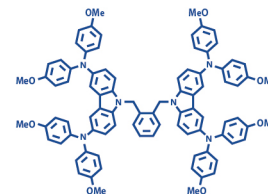
[F0974]



[F0973]



[T3449]



[V0146]

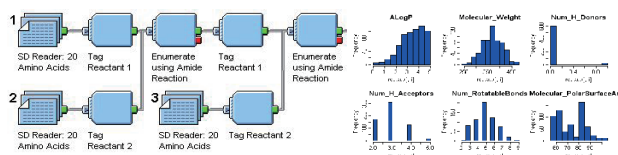
제품번호	포장단위	제품명
C3569	1g, 5g	Cesium Lead Tribromide (Low water content) New
T3449	1g, 5g	Tin(II) Iodide [for Perovskite precursor] New
L0279	1g, 5g, 25g, 100g, 1kg	Lead(II) Iodide (99.99%, trace metals basis) [for Perovskite precursor]
L0288	1g, 5g, 25g	Lead(II) Bromide [for Perovskite precursor]
L0291	1g, 5g	Lead(II) Chloride (purified by sublimation) [for Perovskite precursor]
L0292	1g, 5g, 25g	Lead(II) Chloride [for Perovskite precursor]
P2415	1g, 5g, 25g	PbI ₂ /MAI(1:1) - DMF Complex (99.99%, trace metals basis) [for Perovskite precursor]
F0974	1g, 5g, 25g	Formamidine Hydroiodide (Low water content)
F0973	1g, 5g, 25g	Formamidine Hydrobromide (Low water content)
V0146	1g, 5g	V886

LabNetwork Product

WuXi Virtual Library

- Drawn from more than 17 years of library design and synthesis expertise and a generously stocked collection of building blocks, scaffolds and templates,
- The WuXi virtual library contains over 90 million compounds and has been constructed to meet the need for an expanded global set of lead- and drug-like molecules.

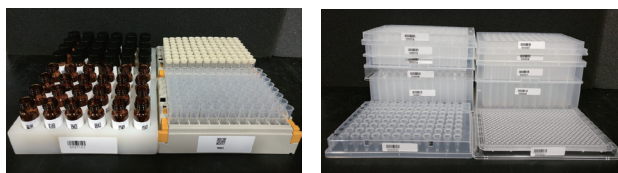
Design



Synthesis

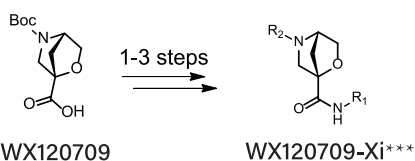


Delivery



Template Base

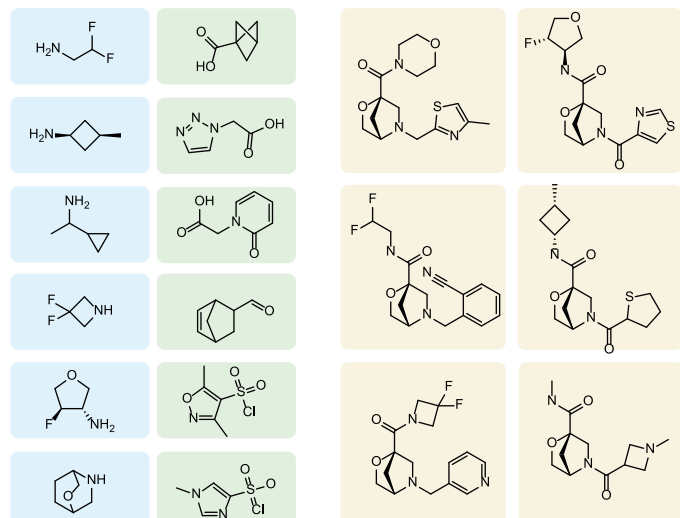
- Take WX120709 as Example for Virtual library:



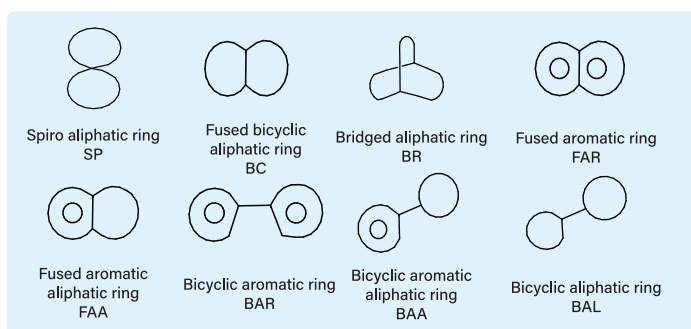
Examples :

Examples:

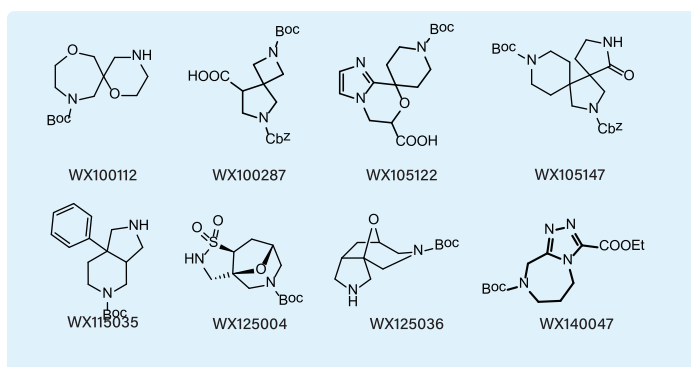
Examples:



Diverse chemo-type



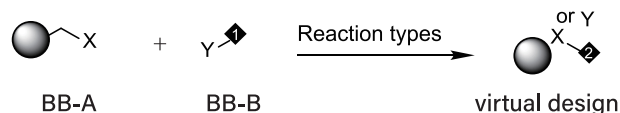
Example for template



Building Block Docking

WuXi AppTec Virtual Library Quick Facts (Phase 1, BB Docking)

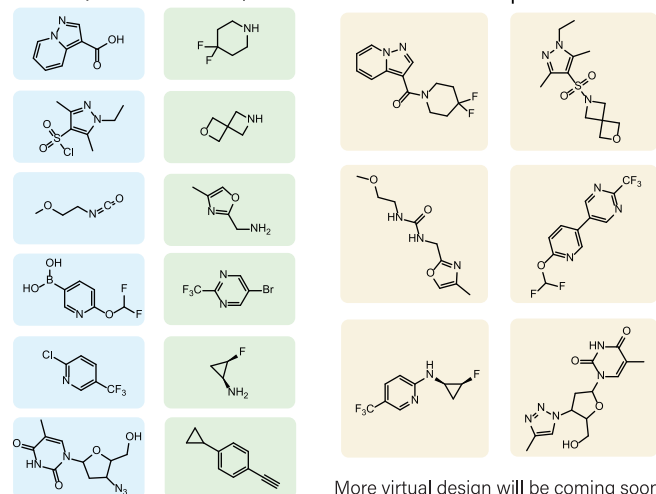
Compound Count:	90,000,000+
Shipping Time:	4~6 weeks
Synthetic Feasibility Rate:	60-80 %
Inventory Library	155K+ building blocks collected from 1,800+ suppliers



BB-A

BB-B

Examples:



More virtual design will be coming soon