

# 유기화학분과 뉴스레터

## 제 18회 유기화학 분과회 하계 워크숍 후기



오는 8월 20일(월) - 21일(화) 이틀간, 강원도 원주에 위치한 오크밸리 리조트에서 **제18회 유기화학 분과회 하계 워크숍**이 개최되었습니다. 유기분과회 회원 여러분들의 적극적인 참여와 성원으로 성황리에 행사를 마쳐진 것에 깊이 감사의 말씀을 드립니다.

이번 하계워크숍은 화학연구원 **이석근 박사님**, 그리고 이화여자대학교의 **김원석 회원님**의 **NMR 및 flow chemistry 튜토리얼 강좌**로 시작되어 오후에는 중앙대학교 **조은진 회원**의 **젊은 유기화학자상 시상 및 기념 강연 행사**로 이어졌습니다. 그 이후에는 **학생 14명의 구두발표**, 그리고 **총 159편의 포스터 발표**가 있었습니다. 이러한 많은 수의 학생 참여를 통해 더욱더 학문적 열의가 가득찬 토론의 장이 될 수 있었습니다. 특히나 **구두발표 4명, 포스터발표 12명**을 선정하여 시상하였으며 이들 중 **8명의 학생**을 선발하여 **ACP Junior 학회 참석**을 지원할 예정입니다.

성공적인 하계 워크숍 행사를 위해 세진시아이, 대정화금, Thermo Fisher, Bruker, AminoLogics, 바이텍켄스, Cengage, 수림교역, 영린기기, JAI, 자유아카데미, LG화학, IDC Asia, 이수화학, YMC, IWOO, KNF, Biotage, 레고켄바이오, 한국도레이과학진흥재단, 한국화학물은행에서 광고 및 기기 협찬으로 후원해 주셨습니다. 적극적인 후원에 다시 한번 감사드립니다.

이번 행사에는 총 571명 등록, 전체 참여 인원 632명으로 집계되었습니다. 마지막으로 이토록 큰 행사가 안전하게 진행되고 또한 내용적으로도 풍성하게 만들어 주신 모든 회원들의 적극적인 참여에 감사의 인사를 전합니다.

## 제 18회 유기화학 분과회 하계 워크샵 수상자 내역

### 구두발표상

#### TCI ACP Junior Award

**최우수상:** POSTECH 이여산 (조승환), "Generation and Application of (Diborylmethyl) zinc(II) Species: Access to Enantioenriched gem-Diborylalkanes by an Asymmetric Allylic Substitution"

**우수상:** KAIST 이재연 (이희윤), "Total Syntheses of Alotaketals A and Phorbaketals"

#### 대정화금 ACP Junior Award

**최우수상:** KAIST 장수민 (김현우), "1H NMR Chiral Analysis of Alcohols at Room Temperature by Chiral Octahedral Gallium Complex"

**우수상:** 성균관대 장원준 (윤재숙), "Asymmetric Synthesis of Organoboron Compounds via Copper Catalysis"

### 우수 포스터발표상

#### 써모피셔 사이언티픽 ACP Junior Award

**최우수포스터상:** 서울대학교 이근석 (홍순혁), "Visible Light Mediated Ni Catalysis of Triplet Enone Diradicals for Formal Giese Addition of C(sp<sup>3</sup>)-H Nucleophiles"

**우수포스터상:** 충북대학교 김성우 (김민), "Practical Postsynthetic Ligand Exchange using Defective Metal-Organic Frameworks"

#### Bruker ACP Junior Award

**최우수포스터상:** KAIST 김건 (이희윤/한순규), "(+)-Dimericbiscognienyne A: Total Synthesis and Mechanistic Investigations of the Key Heterodimerization"

**우수포스터상:** 한양대학교 오동환 (오창호), "Au-catalyzed tandem reaction of 2-bisalkynylanilines with aldehyde: an efficient access to 2,2'-disubstituted bisindolylmethanes"

#### 우수포스터상

연세대학교 이정현 (장우동), "Control of Ion Bindings in Oligo Ethylene glycol Strapped Porphyrin Receptors"

한양대학교 정아름 (민선준), "Synthesis of Fused Azacycles via Oxidative C-H Activation"

충남대학교 조수정 (조우경), "Spray Coating of Brown AlgaeDerived Fucoidan for Antibacterial Applications"

한국외국어대학교 서현석 (김해조), "Two Photon-Active Probe for Photodynamic Therapy"

부산대학교 이우형 (주정민), "Synthesis of C2-Alkenylated Pyrroles by Electronically Complementing Ligand Systems"

성균관대학교 이주열 (류도현), "One-Pot Synthesis of 4,6-Substituted  $\alpha$ -Pyrone and  $\alpha$ -Pyridone via Mercury(II)-Mediated Decarboxylative Dehydrogenation Reactions"

경희대학교 이지윤 (유은정), "Unprecedented cycloadditions to contract N-heterocycles; Beyond Corey-Chaykovsky Reactions"

GIST 강창목 (홍석원), "Bifunctional N-heterocyclic carbene complexes with Pd-arene interaction for Pd-catalyzed amination"



## 제 18회 유기화학 분과회 하계 워크샵 스케치



워크샵 회장 전경



(좌에서 우로) 조천규 분과회 회장의 인사말, 이석근 박사(화학연구원)의 NMR 튜토리얼 강좌, 김원석 회원(이화여자대학교)의 flow chemistry 튜토리얼 강좌



조은진 회원(중앙대) 젊은 유기화학자상 수상 및 강연, 학생들과의 기념촬영



# 제 18회 유기화학 분과회 하계 워크숍 스케치



학생 구두발표



감사패 증정 및 시상

## 대한화학회 제 122회 총회 및 학술발표회 안내

대한화학회 제 122회 총회 및 학술발표회가 **10월 17일(수) - 19일(금)**까지, **대구광역시 EXCO**에서 개최됩니다. 이번 학술발표회에서 유기분과회는 **3개의 심포지엄, 1개의 구두발표**, 그리고 **포스터 발표** 행사를 주관하여 진행할 예정입니다. 특별히 이번 학술발표회에서는 “Korea-Poland Joint Organic Chemistry Symposium”의 명칭으로 한국 및 폴란드 유기 화학자 간의 교류의 장을 마련하였습니다. 각 행사의 주제 및 조직책임자는 아래와 같습니다.

\*일시는 추후 변경될 수 있음

### **[구두발표] Oral Presentations for Young Scholars in Organic Division**

조직책임자: 중앙대학교 화학과 조은진 회원

10월 18일(목) 9:00 ~ 11:00

### **[심포지엄 1] Current Trends in Organic Chemistry I: Total Synthesis and Synthetic Methods Development**

조직책임자: KAIST 화학과 한순규 회원

10월 18일(목) 15:30 ~ 18:00

### **[심포지엄 2] Current Trends in Organic Chemistry II: Synthetic Methodology and Catalysis**

조직책임자: 충북대학교 화학과 김민 회원

10월 19일(금) 14:30 ~ 16:30

### **[Korea-Poland Joint Organic Chemistry Symposium] Recent Advances in Organic Chemistry in Cognate Areas of Biology and Materials**

조직책임자: KAIST 화학과 이희승 회원

10월 19일(금) 9:00 ~ 11:00

## 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

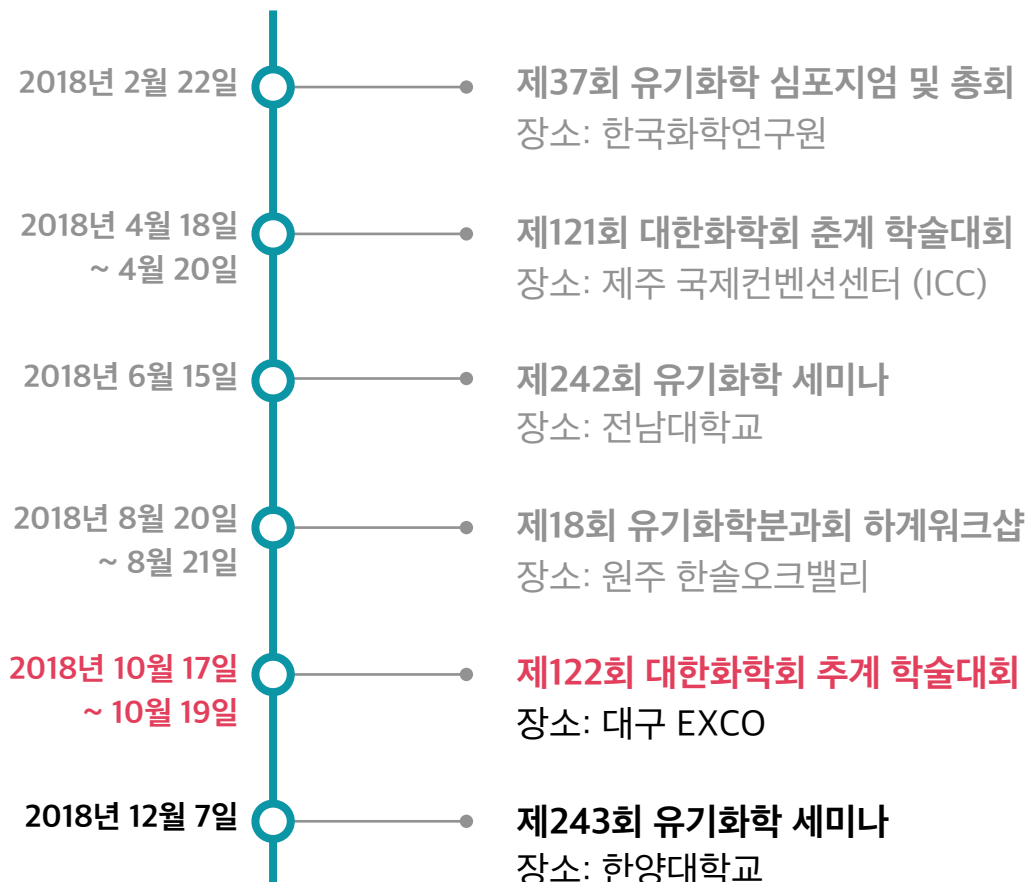
대한화학회 홈페이지에 로그인 후, 바로가기 서비스의 분과회비 납부를 선택하시면 됩니다. 납부방법으로 신용카드, 계좌이체, 또는 무통장 입금이 선택 가능합니다. 결제 후 증빙서류는 본인이 직접 출력하실 수 있습니다 (결제 페이지 [http://new.kcsnet.or.kr/pay\\_select](http://new.kcsnet.or.kr/pay_select), 로그인 후 사용 가능).

## 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

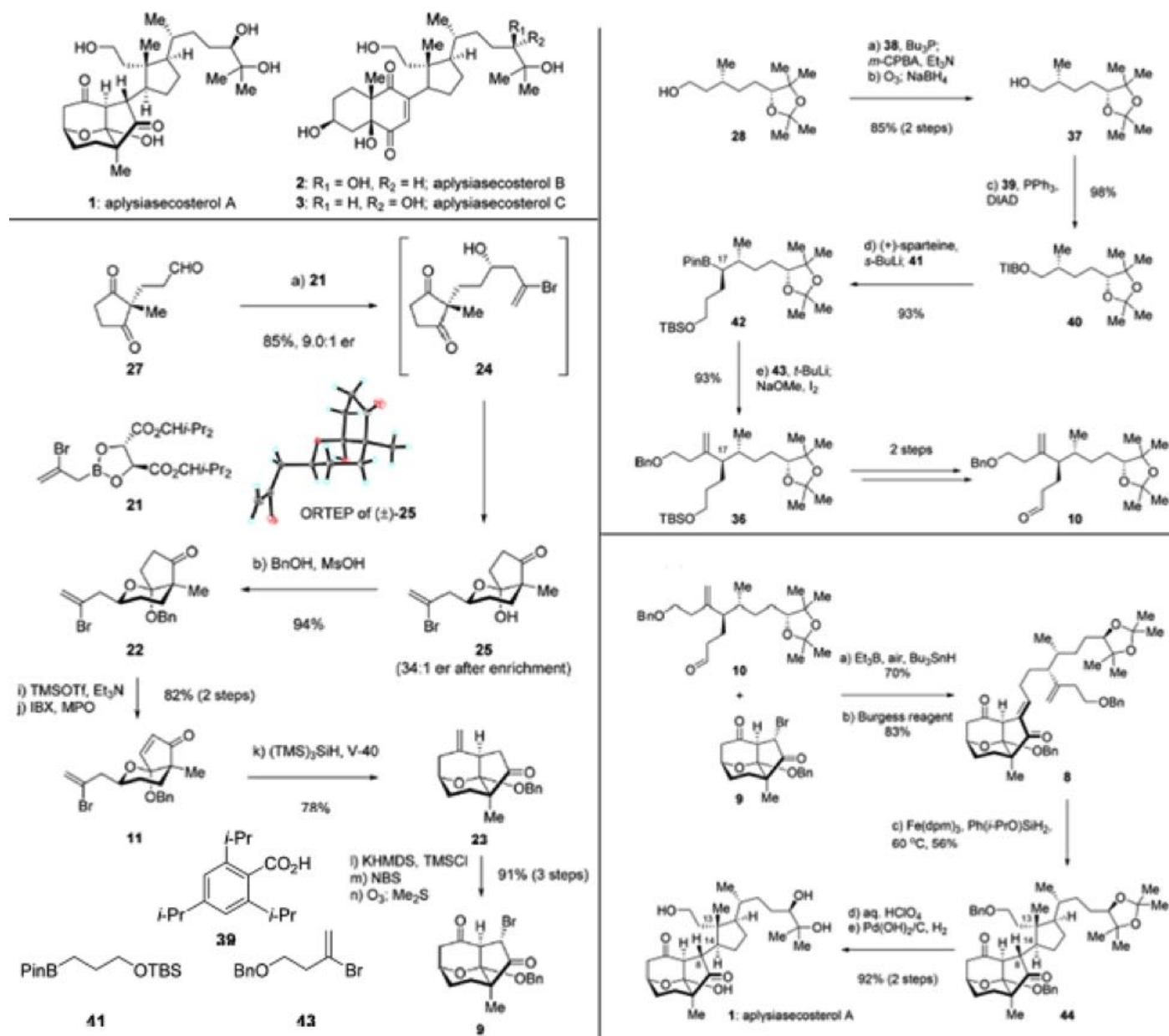
유기화학분과회 뉴스레터는 월 1회 발행되어 분과회원들에게 e-mail로 보내드리고 있습니다. 회원 여러분들의 관심과 적극적인 뉴스 제보를 부탁드립니다 (담당: 고려대학교 화학과 김학중 회원, [hakkim@korea.ac.kr](mailto:hakkim@korea.ac.kr)). 9월호 유기화학분야 연구 동향에 대한 원고를 작성해 주신 **한순규, 이윤미, 이상희, 김도경, 김정곤** 회원들께 감사드립니다.

## 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 8월호 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](mailto:csyun@kriect.re.kr))



Ang Li et al. "Total Synthesis of Aplysiasecosterol A", *J. Am. Chem. Soc.* **2018**, *140*, 9211.



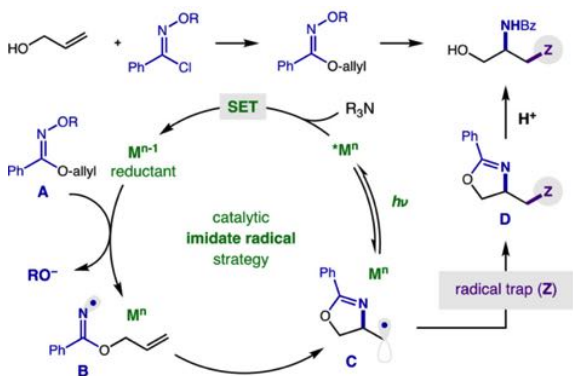
원래 유기분과소식지 최신연구동향의 한 페이지에는 두 편의 페이지를 소개하도록 되어 있습니다. 하지만 이번 달 전합성 분야 섹션에서는 최근 SIOC의 Ang Li 그룹에서 발표한 Aplysiasecosterol A의 합성 하나만 소개하고자 합니다. 이 논문이 2018년 현재까지 발표된 전합성 페이퍼중 최고의 연구내용을 담고 있다고 개인적으로 판단하였기에 조금 더 자세하게 연구내용을 소개해드리고 동시에 근래에 이루어지고 있는 전합성 연구의 트렌드에 대한 이야기를 하고자 해서입니다.

Aplysiasecosterol A의 분자구조를 봤을 때 합성적인 측면에서 가장 난이도가 높을 것으로 여겨지는 부분은 세 개의 연속된 카이랄 중심을 가지고 있고 그 중 하나는 네개의 탄소치환체를 가지는 중앙의 오각형 탄소고리일 것입니다. 결론부터 이야기하자면 Ang Li 그룹은 최근 유용성이 크게 대두되고 있는 금속촉매를 통한 hydrogen atom transfer (HAT)에 의한 비활성 알켄의 기능화 반응을 통해 화합물 8을 44로 변환하였습니다. HAT에 의해 형성된 라디칼의 에논으로의 쿨주게이션 첨가반응은 최근 전합성 연구에서 사차탄소 형성에 적극적으로 사용되고 있는 트렌디한 전략입니다.

전술한 오각고리구조의 형성전략은 9와 10이라는 두 개의 서브유닛의 합성 및 짝지움으로 문제를 환원시켰습니다. 흥미로운 것은 서브유닛 10의 합성에 Aggarwal과 Zwifel Evans의 boronate를 이용하는 합성전략을 통해 40에서 42로의 변환과 42에서 36로의 변환을 성공시킨 점입니다. 사실 이는 10의 2세대 합성경로로 본 페이지에서는 Myers의 비대칭 알킬화 전략을 사용한 1세대 합성 전략도 소개하는데 boronate를 이용한 경로가 더 효율적입니다. 전합성도 진화를 하고 새로운 트렌드가 생김을 새삼 실감하게 됩니다. [KAIST 한순규 회원]



David A. Nagib et al. “Catalytic Alkene Difunctionalization via Imidate Radicals”, *J. Am. Chem. Soc.* **2018**, Articles ASAP. DOI: 10.1021/jacs.8b07578.



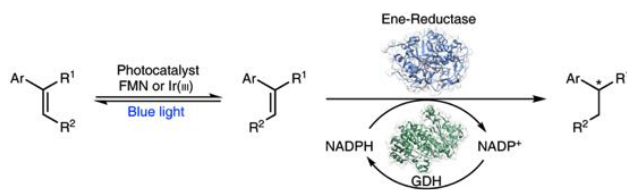
이번 연구동향에서는 알켄을 기질로 사용하면서, ‘빛’을 이용하여 새로운 반응성을 탐색하는 반응들을 소개하고자 한다. 첫번째 논문은 imidate 라디칼(B)의 반응성을 탐색하는 예로 다양한 1,2-amino alcohol을 합성하는 반응을 다루고 있다. 이 일은 같은 그룹에서 2017년에 보고한 imidate 라디칼을 통한 알코올의 베타 아미네이션(JACS **2017**, 139, 10204)의 후속작이라고도 볼 수 있는데, 이번 논문에서는 알켄 기능화라는 뜨거운 주제와 imidate라디칼을 사용한 첫 ‘축매반응’이라는 점이 추가되었다. Ir(ppy)<sub>2</sub>(dtbpy)PF<sub>6</sub>가 광축매(M<sup>n</sup>)로, iPr<sub>2</sub>NEt가 reductive quencher로, 그리고 blue LED가 광원으로 사용되었다. 알릴 알코올과 imidoyl chloride로부터 생성된

알릴 imidate(A)의 N-O 결합(일반적인 BDE: ~48 kcal/mol)은 이리듐 축매에 의해 환원되어 N-중심 imidate 라디칼(B)을 만든다; 후에, 알켄과의 5-exo-trig고리화를 통하여 탄소 라디칼 C를 생성하는데, 이 라디칼은 다양한 트랩과 각기 다른 메커니즘으로 짝지움이 가능하다 <그림 참조>. 어떻게 보면 전체적으로, 특히 메커니즘적으로 특별히 새롭거나 놀라운 점은 없어 보인다. 그런데 결과적으로는 알켄의 hydroamination, aminoalkylation, 그리고 aminoarylation을 가능하게 한다는 점이 매우 의미있다. 새로운 반응성(imidate 라디칼의 축매반응), 생성물의 유용성(1,2-amino alcohol), 그리고 중요 연구주제(알켄 기능화) 모두를 나름대로 잘 만족시키는 예가 아니었나 생각한다. [연세대학교 이윤미 회원]

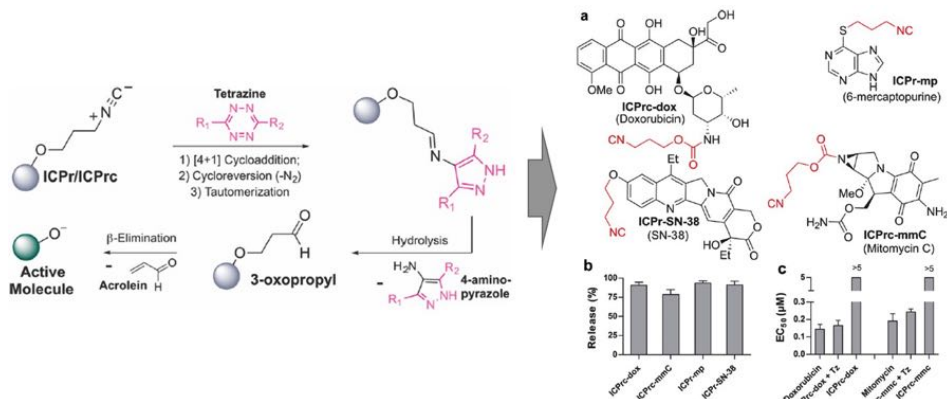


Huimin Zhao and John F. Hartwig et al. “Cooperative Asymmetric Reactions Combining Photocatalysis and Enzymatic Catalysis” *Nature* **2018**, 560, 355–359. DOI: 10.1038/s41586-018-0413-7.

본 논문은 광축매반응과 효소축매반응의 협동을 통한 알켄의 비대칭 환원반응을 다루고 있다. Hartwig 그룹(UC Berkeley)과 Zhao 그룹(UIUC)의 공동연구로 이루어진 일로, 이 반응에서 광축매와 효소의 콜라보 원리는 꽤 간단하다. 광축매는 알켄의 Z to E isomerization을 촉진하고 (이미 몇개의 예가 보고된 바 있다: e.g., JOC **2017**, 82, 9955), 효소(ene-reductase)는 E isomer만을 광학선택적으로 환원시킨다. 이미 알려진 두 반응의 조합이지만, 예상할 수 있듯이 chemical 축매와 enzyme이 서로의 활성을 저해하지 않으면서 동시에 두 축매 모두 수득률과 선택성 면에서 좋은 활성을 나타낼 수 있는 반응 조건을 찾는 것이 가장 큰 챌린지이다. 여러 조건들 중에서도 온도에 대해서 이야기해보면 이 반응은 효소의 활성에 적합한 상온(~근처)에서 일어나는데, 광축매를 사용하기 때문에 비교적 낮은 온도임에도 효과적으로 isomerization을 촉진할 수 있다. 그렇다면 이 일이 왜 Nature에 보고될 수 있었을까 생각해보면, 가장 주요한 이유는 이렇하다. 지난 30년이 넘도록 연구되어왔던 Chemoenzymatic 반응들의 카테고리는 크게 2가지 뿐이었다: 1) 알코올 혹은 아민의 DKR/ 2) cofactor(chemical)의 regeneration이 요구되는 효소축매반응. 그런데, 본 논문은 이 두가지 카테고리에 들어가는 않는 ‘새로운 클래스’의 chemoenzymatic 반응을 보고하고 있기에, 앞으로 많은 photo-chemo-enzyme반응 개발로의 inspiration이 될 수 있지 않을까 하는 ‘기대감’에서 커다란 추가 점수를 받지 않았을까 생각한다. 새로운 클래스의 반응임을 증명하는 게 관건인만큼 메커니즘을 위한 많은 양의 kinetic 실험 등 control 실험을 하였는데, 본문이 아닌 SI에 자세히 기술되어 있으니 관심있는 분들께 추천드린다. [연세대학교 이윤미 회원]



Julian Tu et al. “Bioorthogonal Removal of 3-Isocyanopropyl Groups Enables the Controlled Release of Fluorophores and Drugs in Vivo”, *J. Am. Chem. Soc.* **2018**, *140*, 8410–8414. DOI: 10.1021/jacs.8b05093.

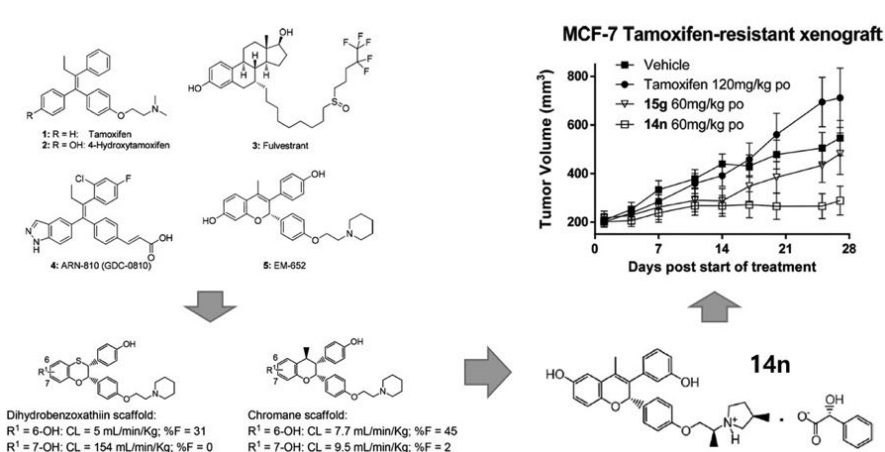


생물직교 반응은 빠른 반응성과 높은 선택성 등의 장점을 바탕으로 생명현상을 연구하기 위한 화학적 도구의 대표적인 예로 여겨지고 있다. 특히 최근 들어서는 기존의 azide-alkyne를 이용한 click chemistry에서 확장된 다양한 작용기가 개발되고 널리 사용되고 있다. 이 논문에서는 원하는 물질을 전달하기 위한 masking group으로 3-isocyanopropyl 작용기와 tetrazine를 이용한 생물 직교 반응을

사용하였다. 3-isocyanopropyl 작용기와 tetrazine의 반응을 통해 생성된 pyrazole의 hydrolysis에 따른 3-oxopropyl group의 제거로 인해 원하는 phenol group을 손쉽게 도출해 낼 수 있으며, 빠른 반응 속도와 physiological conditions으로도 반응이 가능하다는 장점을 지니고 있다. 저자는 이 기술을 다양한 형광체 및 의약품질의 전달에 적용하여 세포 및 zebrafish 모델에서도 효과적으로 작용할 수 있음을 밝혔다. 이처럼 이 논문은 새로운 생물직교 반응을 이용한 새로운 caging/masking 작용기를 도출하여 성공적으로 drug delivery에 사용할 수 있는 가능성을 제시하였다. **[KIST 이상희 회원]**

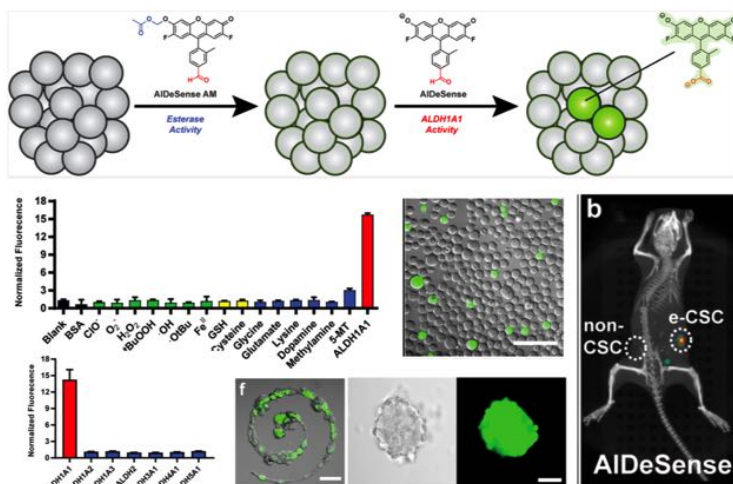
Johnny Nagasawa et al. “Identification of an Orally Bioavailable Chromene-Based Selective Estrogen Receptor Degradator (SERD) That Demonstrates Robust Activity in a Model of Tamoxifen-Resistant Breast Cancer”, *J. Med. Chem.* **2018**, ASAP. DOI: 10.1021/acs.jmedchem.8b00921.

Estrogen receptor (ER)은 전체 유방암의 75%를 차지하는 암의 치료학적 타겟으로 여겨지고 있으며, Tamoxifen과 같은 anti-hormonal 계열의 치료제가 알려져 있다. 하지만 현재 사용되는 약물에 대한 저항성이 보고되면서 antagonist와 deradater의 역할을 동시에 수행하는 selective estrogen receptor degrader (SERD)에 대한 관심이 증대되고 있다. 이 중 Fulvestrant는 스테로이드 기반의 SERD로 intramuscular injections 방식으로 투여되지만 아직까지 그 효능에 한계가 있음이 보고되고 있다. 이 논문에서는 chromene을 기본 골격으로 하는 ER 조절 물질의 최적화를 통해 매우 효능이 높은 SERD 물질인 14n 화합물에 대해 보고하였다. 뿐만 아니라 Side-chain ring size와 treochemical element가 활성에 있어서 중요한 역할을 함을 증명하였다. 특히 이 물질은 기존 SERD 및 tamoxifen 계열에 비해 매우 높은 분해 효능과 PK 활성, oralbioavailability를 나타내었다. 뿐만 아니라 Tamoxifen에 저항성을 보이는 유방암 모델에서도 매우 효과적인 항암효과를 나타냄으로 향후 유방암 치료제로서의 가능성을 증명하였다. **[KIST 이상희 회원]**

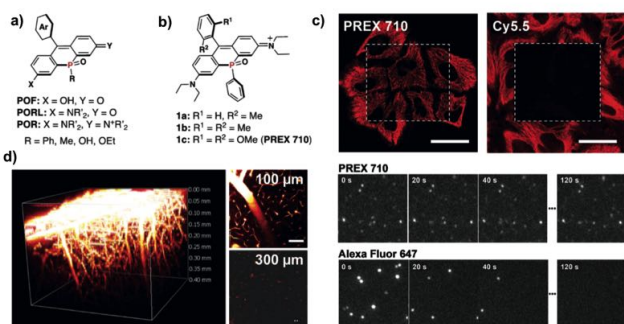


C. Anorma et al. “Surveillance of Cancer Stem Cell Plasticity Using an Isoform-Selective Fluorescent Probe for Aldehyde Dehydrogenase 1A1”, *ACS Cent. Sci.* **2018**, in press. DOI: 10.1021/acscentsci.8b00313.

암 줄기세포(cancer stem cell, CSC)는 종양형성(tumorigenic) 능력을 가지는 세포를 말한다. 암 줄기세포는 다양한 세포형에서 줄기세포의 특성인 자기재생과 분화능력을 통해 종양을 발생시킨다. 이에, 암 줄기세포를 선택적으로 영상화하는 것은 암의 진단과 치료에 있어 매우 중요한 부분으로 인식되고 있다. UIUC (USA)의 Jefferson Chan 연구팀에서는, Fluorescein 형광체의 한 종류인 Pennsylvania Green을 기반으로 하여, 암 줄기세포의 바이오마커(biomarker)로 알려진 Aldehyde Dehydrogenase 1A1 (ALDH1A1)을 선택적으로 감지할 수 있는 형광 분자 프로브(fluorescence molecular probe)를 개발하였다(그림 참조, AIDeSense). AIDeSense의 형광은 benzaldehyde 작용기의 donor-photoinduced electron transfer(d-PeT) 프로세스에 의해 소광되었다가, ALDH1A1의 activity에 의해 carboxylic acid로 전환되면서 turn-on 되는 특징을 보인다. In vitro assay에서 ALDH1A1에 대한 선택성이 검증되었으며, human chronic myeloid leukemia cell line (K562)과 enriched CSCs(e-CSCs)을 이용한 세포 형광 영상화에서도 선택적인 CSC imaging 능력이 확인되었다. 이와 더불어, e-CSCs를 이용한 xenograft mouse model study에서도 효율적인 형광 영상화 결과가 검증되었다. 본 연구는 질병 바이오마커의 한 종류인 ALDH1A1을 효과적으로 검증할 수 있는 분자프로브에 대한 연구로서, 향후 질병 관련 기초연구, 신약개발 등 다양한 분야로 활용 가능 할 것이라 기대된다. **[경희대학교 김도경 회원]**



M. Grzybowski et al. “A highly Photostable Near-Infrared Labeling Agent Based on a Phospha-rhodamine for Long-Term and Deep Imaging”, *Chem. Sci.* **2018**, in press. DOI: 10.1039/c8sc01697f.

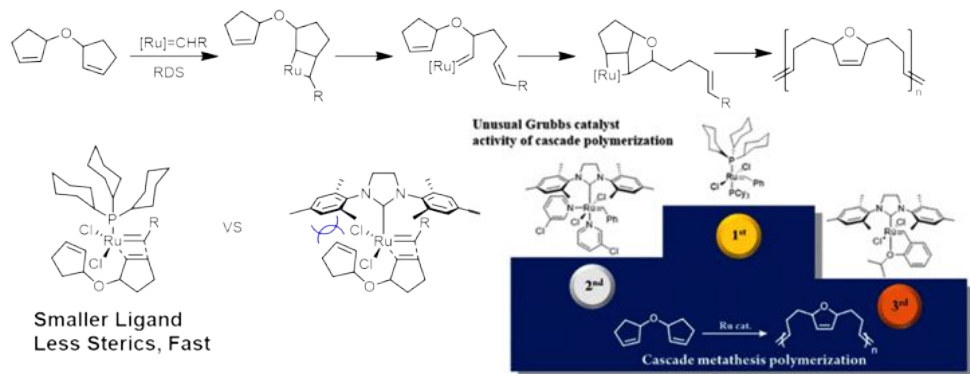


형광 생체영상화(fluorescence bio-imaging)은 생체 내 분자의 거동을 추적하거나, 이와 관련된 생물학적 메커니즘을 규명하고, biomolecules들의 구조와 역할을 이해하는데 널리 사용되는 매우 효과적인 영상화 기술 중 하나이다. 형광 생체영상화는 빛을 흡수하고 형광을 방출하는 형광체(dye) 또는 분자 프로브(molecular probe)의 개발과 더불어 발전하였다. 최근에는, 형광 생체 영상화 과정에서 영상의 질을 저해하는 자가형광(auto-fluorescence)를 최소화하고, 선명하며 깊은 조직 영상화 구현이 가능하며, 높은 광안정성(photo-stability)를

가지는 근적외선 형광 방출(near-infrared fluorescence emitting, NIR-emitting) 형광체가 큰 주목을 받고 있다. Nagoya University (Japan)의 Yamaguchi 연구팀에선, Xanthene scaffold에 phosphine oxide(P=O) moiety를 가지는 다양한 유도체를 개발하였다 (그림 참조). Fluorescein 계열의 POF, Rhodol 계열의 PORL, Rhodamine 계열의 POR 및 PREX710 등이 소개되었으며 이의 광학적 특성이 규명되었다. 그 중, PREX710은 기존 NIR-emitting 형광체에 비하여 매우 높은 광안정성 특성을 보였다 (흡수 712 nm, 방출 740 nm). 이와 더불어, Yamaguchi연구팀에서는 PREX710을 70K-dextran에 conjugation 하여 mouse brain에서의 deep tissue blood vessels 영상화로의 응용 연구를 수행하였다. 본 연구는, 새로운 NIR 형광 분자 프로브의 개발과, 이를 이용한 질병 진단 및 생체 영상화 연구로 활용 가능할 것이라 기대된다. **[경희대학교 김도경 회원]**



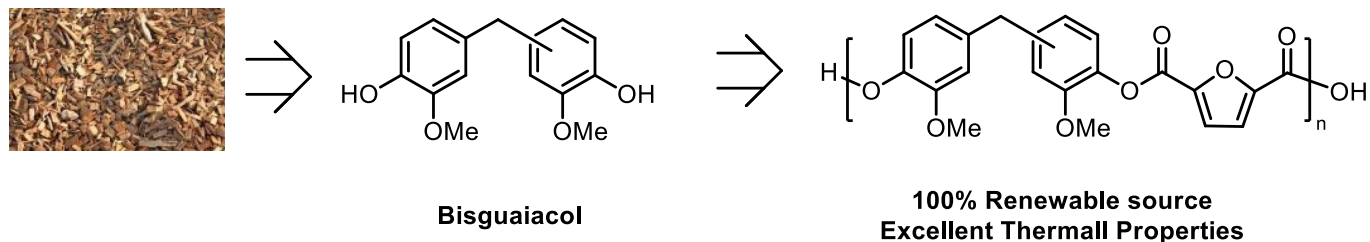
Tae-Lim Choi et al. “Unusual Superior Activity of the First-Generation Grubbs Catalyst in Cascade Olefin Metathesis Polymerization”, *ACS Macro Lett.* **2018**, *7*, 531-535.



Ru 기반 복분해 반응은 새로운 리간드의 사용에 따라 넓은 반응성과 선택성을 가지는 다양한 촉매의 선택이 가능하다. 일반적인 반응성의 측면에서는 2개의 포스핀 리간드를 가지는 1세대 촉매에 비하여 카빈 리간드를 기반으로 하는 2, 3 세대 촉매들이 대부분의 고리 닫힘, 고리 열림, 교차 복분해 반응에서 훨씬 더 높은 활성을 보인다. 이에 반대 되는 예시로,

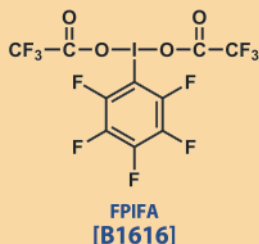
서울대학교 최태림 교수 연구실에서는 연속적인 고리 열림/닫힘 복분해 중합 반응에서 1세대 촉매가 카빈 촉매들에 대비하여 월등한 활성을 가짐을 발견하였으며, 그에 대한 원인을 연구하여 발표하였다. 다양한 모델 시스템과 반응속도 연구는 리간드와 단량체간의 상호 입체 장애 효과에 의한 첫 [2+2] 반응이 실제 반응 속도를 결정하는 요소임을 증명하였다. 즉 반응물의 구조에 따라 반응속도 결정 단계가 변화하는 것이다. 앞으로 Grubbs 2세대 또는 3세대 촉매에서 잘 진행이 되지 않는 복분해 반응에서 오래된 1세대 촉매를 사용해보는 것도 하나의 연구 전략이 될 수 있을 것이다. **[전북대학교 김정곤 회원]**

S. Curia et al. “Towards Sustainable High-Performance Thermoplastics: Synthesis, Characterization, and Enzymatic Hydrolysis of Bisguaiacol-Based Polyesters” *ChemSusChem* **2018**, *11*, 2529-2539.



석유 자원에 기반하는 화학 원료를 지속 가능한 소재로 대체하는 노력은 지속되고 있다. 그 가운데에서도 목재의 리그닌을 기반으로 하는 다양한 화학 제품의 개발과 함께 이를 이용하는 새로운 제품에 대한 관심이 매우 높다. 본 연구에서는 그 가운데 방향족 디올 화합물인 bisguaiacol (BG)를 사용한 바이오 폴리에스터 중합을 수행하였다. 그동안 바이오 유래 폴리에스터는 지방족 화합물 중심으로 개발되었지만, 낮은 열적 특성은 고부가 재료로 활용을 막았다. 하지만 Bisguaiacol은 방향족 바이오 알코올로서 이를 포함하는 폴리에스터의 경우 공중합 단량체에 따라 150도 이상의 유리 전이온도를 보여주어, 고부가 엔지니어링 플라스틱으로서 가능성을 보여주었다. 또한 생체 효소를 이용한 빠른 분해성능도 동시에 가져, 친환경 플라스틱으로서 높은 잠재력을 보인다. 향후 리그닌 소재의 실제 상용화에 따른 상업적인 활용이 기대된다. **[전북대학교 김정곤 회원]**

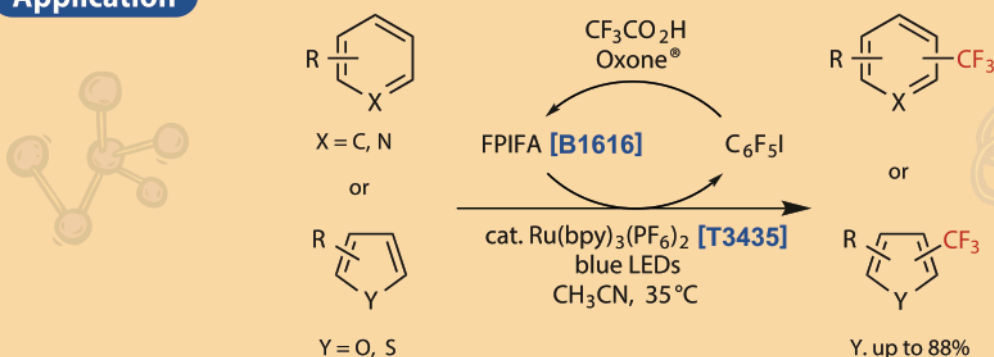
# Hypervalent Iodine Reagent for Photoredox Trifluoromethylation



## Advantages

- Usable for C-H Trifluoromethylation of (Hetero)arenes with a Photoredox Catalyst
- Applicable under the Neutral Condition
- Pentafluoroiodobenzene as a Byproduct Is Easily Recoverable and Recyclable to FPIFA.

## Application



B. Yang, D. Yu, X.-H. Xu, F.-L. Qing, *ACS Catal.* **2018**, 8, 2839.

## Experimental procedure:

A Schlenk flask is charged with Ru(bpy)<sub>3</sub>(PF<sub>6</sub>)<sub>2</sub> (9.0 mg, 0.01 mmol, 2 mol%), FPIFA (650.0 mg, 1.25 mmol, mixture). The mixture is degassed twice by the freeze-pump-thaw procedure, then irradiated under blue LED strips (4.8 W). The reaction mixture is subsequently stirred at 35 °C for 12 h. After the reaction is completed, it is diluted with water (8.0 mL). The aqueous phase is extracted with ether (8.0 mL) three times. The combined organic layers are washed with brine and dried over anhydrous sodium sulfate, and concentrates *in vacuo*. The residue is purified by silica gel column chromatography (hexane:EtOAc=15:1) to afford dimethyl (trifluoromethyl)tephthalate in 63% yield (83.9 mg).

[Bis(trifluoroacetoxy)iodo]pentafluorobenzene (= FPIFA)

1g / 5g [B1616]

## Related Product

Tris(2,2'-bipyridine)ruthenium(II) Bis(hexafluorophosphate) (= Ru(bpy)<sub>3</sub>(PF<sub>6</sub>)<sub>2</sub>)

1g [T3435]

제 18회 유기분과회 | TCI·세진시아이 부스에 방문 해주셔서 감사합니다.



<https://www.sejinci.co.kr>



<https://www.TCIchemicals.com/ko/kr>

문의. 02-2655-2480

플러스친구



# DNA-Encoded Library

## Capability

- Established end-to-end capabilities in DEL library design, construction, screening, and hit confirmation
- Built multiplex structurally diverse DEL libraries
- A rapidly expanding global team of experts and scientists based in Shanghai and Boston
- Successfully identified nanomolar hits with novel structures from multiply library screenings

## Business model

- Modest project initiation fee allows easy access to the cutting-edge technology
- Flexible success fee structures defined based on customer needs
- No down-stream royalty or milestone

### Rarity & Diversity of Building Blocks

Global e-Commerce Platform accessing > 4M compounds

### Chemistry Service Unit

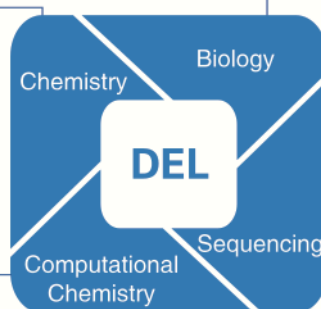
#### Synthesis & Design

- Custom compound synthesis
- >17+ years libraries design experience

### Computational Chemistry Center

#### Library Design & Data Analysis

- Design toward drug-likeness
- Maximize diversity
- Enrich by 3D, shape, sp<sup>3</sup>, properties



### Biology Service Unit

#### Selection & Bioassay

- Assay development and HTS
- Comprehensive in vitro screening platform
- Disease models
- CRISPR, PDX, CDX, KO/KI
- Immuno-oncology



### Biophysical validation

a WuXi AppTec company

- Generate high quality proteins, deconvolute & characterize, hits, hits to leads support

### WuXiNextCODE

#### Sequencing & Decoding

- The only CLIA and CAP-certified sequencing lab in China
- Massive-scale discovery for hospitals, academia & pharma

## Screening Process

Incubation of the library with a target protein immobilized on a solid support

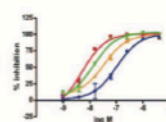
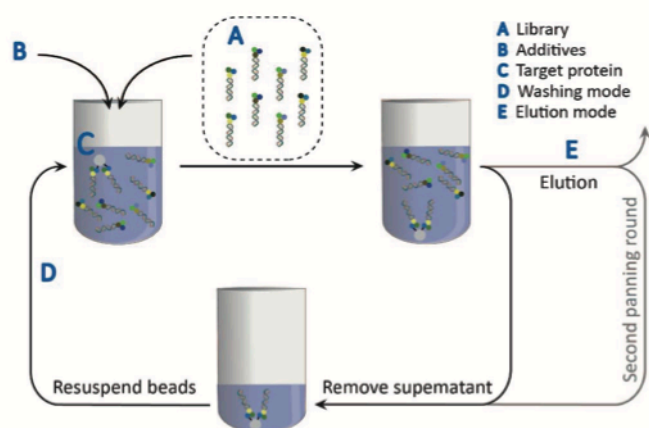
Removal of non-binders by washing cycles of the solid support

PCR amplification of the DNA codes linked to the binders

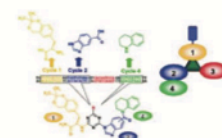
High-throughput sequencing of DNA codes

Categorization and relative quantification of DNA codes

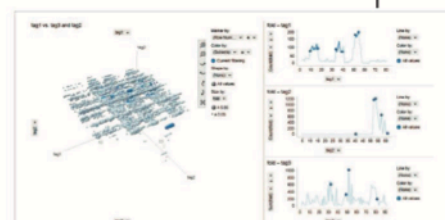
Further biological or biochemical analysis of identified compounds



Bio-assay



Off-DNA synthesis



hit finding in targets selection

