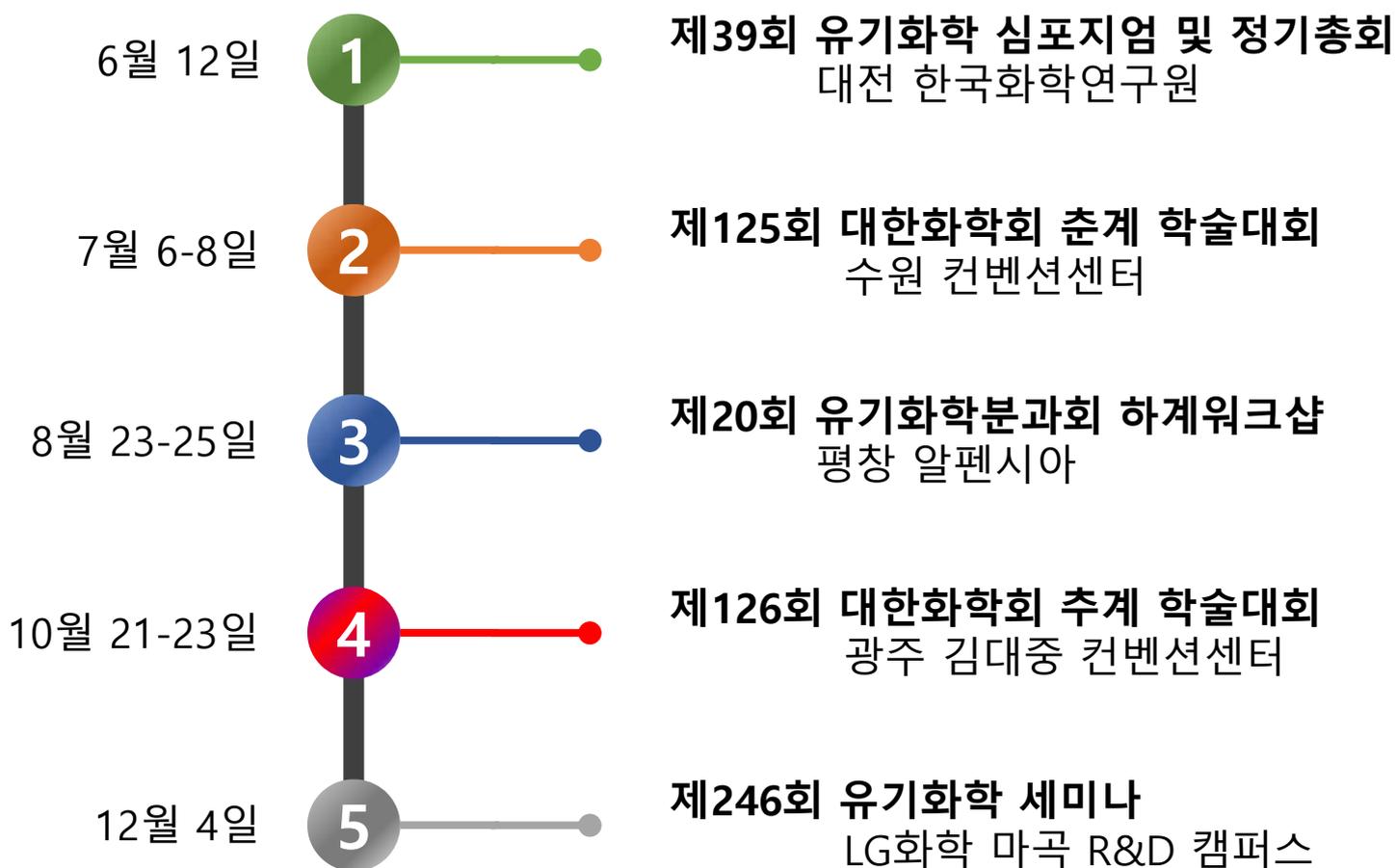


유기화학분과 뉴스레터

<http://kcsorganic.org/>

2020년도 유기화학분과회 행사 일정



유기화학분과회 회원님들께

최근 전 세계적으로 확산된 코로나19 때문에 회원 여러분의 심려가 크실 줄 압니다. 유기화학분과회에서는 회원님의 안전과 건강을 위하여 2월 한국화학연구원에서 개최 예정이었던 유기화학분과회 총회 및 심포지엄을 6월 12일로 연기하였습니다. 또한, 대한화학회에서도 춘계 학술대회를 7월 6일-8일로 연기하였습니다. 연기된 행사에 대한 자세한 내용은 추후 안내가 될 예정입니다. 이번 연기로 회원님께서 겪은 혼란과 불편에 많은 양해를 부탁드립니다. 연기된 학술대회에 꼭 참석하실 수 있기를 기대합니다.

코로나19 상황이 조만간 종료되기를 바라며 회원 여러분의 건강을 기원하며 교육과 연구에 많은 진전이 있기를 바라겠습니다. 감사합니다.

2020년 유기화학분과회 운영진 드림

코로나 바이러스 관련 기사 및 논문

코로나19 사태가 장기화되고 있습니다. 이미 많은 정보를 접하고 계시겠지만 몇몇 주요 자료를 모아 알려드립니다. 한국화학연구원 감염병제어기술연구단(단장: 한수봉 박사)의 자문과 유기화학분과회 운영진의 도움을 받았습니다. 추가로 공유하시고 싶으신 기사나 논문을 알려주시면 5월호에 신도록 하겠습니다.

[바이োস펙테이터] 韓 '코로나19' 임상 6건 승인.."렘데시비르·칼레트라 등"
http://biospectator.com/view/news_view.php?varAtclId=9905

[KBS] 약물재창출 진행 화학연, 코로나19에 '렘데시비르' 약효 우수
<http://news.kbs.co.kr/news/view.do?ncd=4410765&ref=A>

[대한약사저널] 코로나19 치료제 대두 'Remdesivir-favipiravir' 기전
https://blog.naver.com/sky_nblue/221868016201

[MediGate] 렘데시비르, 코로나19 치료제로 순식간에 '뚝딱' 임상에 들어가는 이유는
<http://medigatenews.com/news/2746973250>

[Science] Race to find COVID-19 treatments accelerates
<http://science.sciencemag.org/content/367/6485/1412>

[C&EN] Can old drugs take down a new coronavirus?
<https://cen.acs.org/sections/coronavirus/biological-chemistry/infectious-disease/coronavirus-drug-repurposing.html>

[ACS Cent. Sci.] Research and Development on Therapeutic Agents and Vaccines for COVID-19 and Related Human Coronavirus Diseases
<https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acscentsci.0c00272>

Coronavirus (SARS-Cov-2) - Remdesivir Antiviral Mechanism of Action for Possible Treatment
<https://www.youtube.com/watch?v=8oEM55AtpEs>

분과회비 납부 안내

유기화학분과회 연회비는 3만원입니다. 분과회비 납부방법은 아래와 같습니다.

1. 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 출력 하실 수 있습니다.

(결제 페이지 http://new.kcsnet.or.kr/pay_select, 로그인 후 사용 가능)

2. 현장결제

유기화학분과회 행사(분과회 총회, 하계워크샵 및 유기화학세미나) 시 현금으로 직접 결제 가능합니다. 결제 후 증빙서류로 유기화학분과회 회장 명의의 간이 영수증이 발행됩니다.

3. 계좌이체

유기화학분과회 운영계좌로 이체도 가능합니다 (우체국, 012500-02-208233, 예금주: 신승훈). 이체 시 보내신 분의 성함 혹은 핸드폰번호를 반드시 남겨주시고, 김은경 실장님께 이메일(jesus6294@kaist.ac.kr)로, 1) 성함, 2) 소속, 3) 이메일, 4) 핸드폰 번호를 보내주시기 바랍니다. 증빙이 필요하신 경우, 유기화학분과회 회장 명의의 간이 영수증이 발행됩니다.

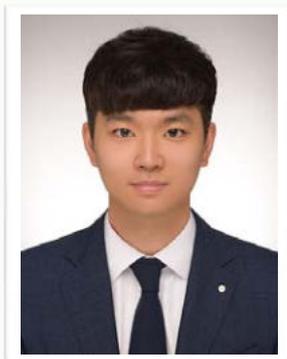
회비 납부자 명단 (74명, 2020년 3월24일 기준)

강경태	강동진	강성민	고혜민	공영대	권태혁	김도경	김민	김병수	김병현
김상혁	김선대	김성국	김연수	김윤경	김재녕	김정곤	김해조	김현석	김희권
김희진	모준태	문봉진	박상준	박영아	박영철	박정민	박정수	박지훈	박철민
백무현	서영준	서지원	손정유	신승훈	신인재	안양수	양시경	엄다한	오경수
유태규	윤소원	윤재숙	유효재	이기승	이기연	이덕형	이동환	이성호	이송이
이안나	이용록	이윤미	이정규	이정태	이준석	이준희	이필호	이현수	이형진
이희봉	이희윤	임상민	임지우	장두옥	정병혁	정시원	주정민	천철홍	최기향
한서정	홍석원	홍순혁	Jean Bouffard						

다음과 같이 유기화학분과 회원들이 지원할 수 있는 여러 상이 있습니다. 시상 내역과 시행시기 확인 후 적극적인 추천과 지원을 통해 많은 회원들이 수상할 수 있기를 바랍니다.

번호	외부 시상명	주관단체 (웹사이트)	시행시기	
			후보 추천	시상식
1	과학기술진흥정부포상	한국과학기술단체총연합회 http://prize.kofst.or.kr	전년도 11월~당해년도 1월	당해년도 4월
	▲과학기술 발전 및 국민 실생활 향상에 기여한 공적이 현저한 사람			
2	대한민국최고과학기술인상	한국과학기술단체총연합회 http://brain.kofst.or.kr	전년도 12월~당해년도 2월	당해년도 7월
	▲세계적인 연구개발 업적 및 기술혁신으로 국가 발전과 국민복지 향상에 크게 기여하고 과학기술계와 국민들로부터 존경받는 자(동일업적 공동)			
3	한성과학상	한성손재한장학회 http://sonjaehan.org	당해년도 2월	당해년도 8월
	▲대한민국 국민(대한민국 국적을 소지한 재외국민 포함)으로서 현재 독창적인 연구를 하고 있으며, 장래 발전 가능성이 큰 젊은 과학자			
4	한국도레이 과학기술상	한국도레이과학진흥재단 www.koreatoraysf.org	당해년도 4월	당해년도 10월
	▲화학 및 재료 기초분야에서, 학술상 업적이 뛰어나거나 현저한 발견을 한 과학자/공학자			
5	화학산업 유공자 포상	한국석유화학협회 www.kpia.or.kr	당해년도 4월	당해년도 10월
	▲대한민국 국민으로 화학관련 기업체, 연구기관, 학계 등 각 분야에서 화학산업 발전에 현저하게 공헌한 자			
6	과학기술인 명예의전당 선정대상	한국과학기술한림원 http://kast.or.kr/HALL/	당해년도 5월	당해년도 11월
	▲역사적 정통성을 지닌 우리나라 과학기술선현 또는 원칙적으로 대한민국 국적을 보유한 과학기술인			
7	인촌상(과학기술분야)	인촌상 운영위원회 www.inchonmemorial.co.kr	당해년도 5월	당해년도 10월
	▲대한민국 국민으로서 과학기술 부문에서 우리나라에 큰 공로가 있는 자. (단, 외국인의 공적도 이에 해당 될 때에는 대상이 될 수 있음.)			
8	이달의 과학기술자상(상반기, 하반기)	한국연구재단 https://sci.sedaily.com/#1	상반기: 전년도 9월 하반기: 당해년도 3월	상반기: 당해년도 5월 하반기: 당해년도 11월
	제 4분과: 화학, 화공, 에너지 등 관련 분야			
9	학술상	한국과학기술한림원 http://kast.or.kr	당해년도 6월	당해년도 11월
	▲과학기술 발전에 공이 지대하여 국내외에서 높은 평가를 받고있는 훌륭한 과학기술자			
10	정회원 및 준회원(이학부 제3분과)	한국과학기술한림원 http://kast.or.kr	당해년도 6월	당해년도 11월
	▲(정회원)교육법에 의한 대학 또는 이와 동등 이상의 학교를 졸업하고 해당 전공분야에서 경력이 20년 이상인 자로서 과학기술발전에 현저한 업			
11	FILA 기초과학상	한국과학기술한림원 http://kast.or.kr	당해년도 6월	당해년도 11월
	▲기초과학분야의 과학기술인으로서 대한민국 국민과 교포과학자			
12	삼성행복대상(여성창조상)	삼성생명공익재단 http://www.samsungfoundation.org	당해년도 5월	당해년도 11월
	▲한국인 및 한국계 인사로 하며, 여성선도상, 여성창조상 수상자는 여성을 원칙으로 한다.			
13	미래인재상	한국여성과학기술단체총연합회 http://kofwst.org	당해년도 5월	당해년도 10월
	▲박사학위 취득 후 5년 이내, 지원마감일 기준 만 40세 미만인 여성과학기술인으로 연구업적이 우수한 자			
14	경암상(자연과학분야)	경암교육문화재단 www.kafound.or.kr	당해년도 5월	당해년도 11월
	▲대한민국 국민 또는 한국계 인사로 인격과 덕망을 겸비하고 학술활동을 통하여 국가&사회 발전에 탁월한 업적을 남기신 분			
15	젊은과학자상(자연과학-제3군: 화학분야 1인)	한국과학기술한림원 http://kast.or.kr	당해년도 5월	당해년도 12월
	▲2020.1.1 기준 현재 만 40세 미만인 자			
16	에스-오일 우수학위논문상	한국과학기술한림원 http://kast.or.kr	당해년도 6월	당해년도 11월
	▲대상논문기간 내에 국내 대학에 박사학위 논문을 제출한 학생과 지도교수			
17	올해의 여성과학기술자상(이학)	한국여성과학기술인지원센터 www.wiset.or.kr	당해년도 7월	당해년도 12월
	▲국내에서 활동하는 한국인 및 한국계 여성 과학기술자로 국가과학기술 발전에 크게 기여한 자			

번호	외부 시상명	주관단체 (웹사이트)	시행시기	
			후보 추천	시상식
18	삼일문화상 학술상(자연과학분야)	삼일문화재단 http://www.31cf.or.kr/	당해년도 8월	차년도 3월
	▲자연과학분야에서 창의성을 발휘하여 연구, 저작, 발표를 계속하고 획기적인 업적을 이룩한 자로 누적된 업적과 최근 5년간의 업적을 감안하여			
19	올해의 과학교사상	한국과학창의재단 http://www.kofac.re.kr	당해년도 8월	당해년도 12월
	▲과학, 수학교육 및 과학문화 확산에 기여한 중,고등학교 과학,수학교사 및 초등학교 교사 (5년 이상 재직)			
20	한국공학한림원 포상 (대상, 젊은공학인상, 일진상, 해동상)	한국공학한림원 https://www.naek.or.kr	당해년도 8월	당해년도 12월
	▲공학과 관련된 경영, 기술, 교육 및 연구의 부문에서 대한민국의 산업 발전에 크게 기여한 공학인 및 기술인 (특히 한국공학한림원 대상 및 젊은			
21	포스코(청암과학상)	포스코 청암재단 www.postf.org	당해년도 6월	차년도 4월
	▲자연과학과 공학분야에서 창의적인 연구업적을 이룩한 인사			
22	한국과학상	한국연구재단 www.nrf.re.kr	당해년도 8월	당해년도 12월
	▲이학분야에서 자연현상의 주요원리를 규명하여 세계정상 수준의 탁월한 연구업적을 이룩한 과학자			
23	대한민국과학문화상(과학문화창달분야)	한국과학창의재단 http://www.kofac.re.kr	당해년도 9월	당해년도 12월
	▲과학 문화 : 다양한 과학 활동으로 과학문화발전에 기여한 자			
24	호암상(과학상)	호암재단 www.hoamprize.org	당해년도 10월	차년도 6월
	▲기초과학 분야에서 탁월한 연구 업적을 이룩한 인사			
25	수당상	수당재단(기초과학분야) www.samyang.com	당해년도 12월	차년도 5월
	▲기초과학 분야에서 훌륭한 연구업적을 이룩한 인사			
26	대한민국학술원상	대한민국학술원 http://www.nas.go.kr	당해년도 11월	차년도 9월
	▲대한민국 국민으로서 학술연구 또는 저작이 매우 우수하여 학술발전에 현저한 공로가 있다고 인정된 자			



신 광 민

성균관대학교 화학과 조교수

Email: kmshin@skku.edu

Tel: 031-290-7060

2020-현재: 성균관대학교 화학과

2017-2020: 기초과학연구원 (IBS) Post-Doc./MIT Post-Doc.

2017: 한국과학기술원 (KAIST) Ph.D. (지도교수: 장석복)

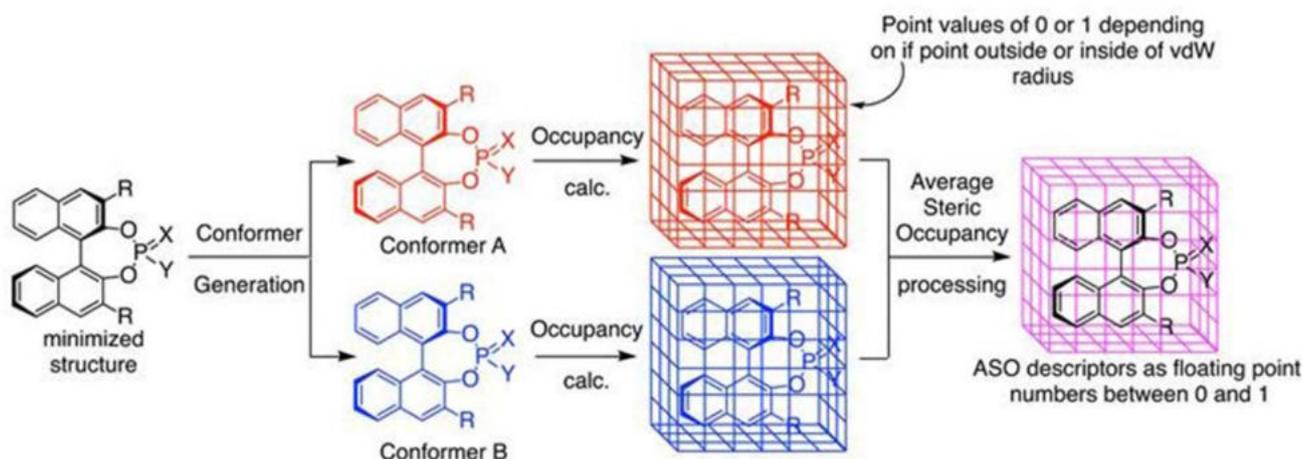
대표 논문

1. Li, C.†; Shin, K.†; Liu, R.Y.; Buchwald, S. L.* Engaging Aldehydes in CuH-Catalyzed Reductive Coupling Reactions: Stereoselective Allylation with Unactivated 1,3-Diene Pronucleophiles. *Angew. Chem., Int. Ed.* **2019**, *58*, 17074-17080. († equal contribution.)
2. Kim, J.†; Shin, K.†; Jin, S.; Kim, D.; Chang, S.* Oxidatively Induced Reductive Elimination: Exploring the Scope and Catalyst Systems with Ir, Rh, and Ru Complexes. *J. Am. Chem. Soc.* **2019**, *141*, 4137-4146. († equal contribution.)
3. Shin, K.; Park, Y.; Baik, M.-H.*; Chang, S.* Iridium-Catalysed Arylation of C-H Bonds Enabled by Oxidatively Induced Reductive Elimination. *Nat. Chem.* **2018**, *10*, 218-224.
4. Shin, K.; Park, S.-W.; Chang, S.* Cp*Ir(III)-Catalyzed Mild and Broad C-H Arylation of Arenes and Alkenes with Aryldiazonium Salts Leading to the External Oxidant-Free Approach. *J. Am. Chem. Soc.* **2015**, *137*, 8584-8592.
5. Shin, K.; Baek, Y.; Chang, S.* Direct C-H Amination of Arenes with Alkyl Azides under Rhodium Catalysis. *Angew. Chem., Int. Ed.* **2013**, *52*, 8031-8036.

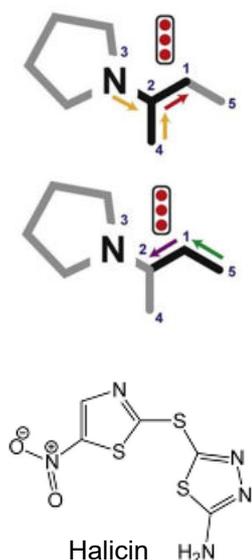
Prediction of Higher-Selectivity Catalysts by Computer-Driven Workflow and Machine Learning

Scott E. Denmark *et al.* *Science* **2019**, *363*, eaau5631. DOI: 10.1126/science.aau5631.

합성유기화학자의 경험과 지식에 기반한 비대칭 촉매 설계 방법과 상보적으로 통계 분석에 기반한 화학정보학(chemoinformatics) 방법으로 효율적인 비대칭 촉매를 개발하고자 하는 연구가 진행되고 있었는데, 최근 Scott Denmark 그룹은 기계학습(machine learning) 기반 분석을 사용하여 비대칭 촉매 반응 선택성(selectivity)을 예측할 수 있다는 것을 발표하였다. 기계학습 모델로 사용한 반응은, *N*-acylimine과 thiol이 반응물이고 BINOL-derived, chiral phosphonic acid가 촉매인 enantioselective *N,S*-acetal 형성 반응이다. 비대칭 촉매 반응 예측을 위한 기계학습 알고리즘을 개발한 것이 아닌 본 연구의 진보성은, 기계학습 입력 데이터로서 새로운 molecular descriptor를 제안했다는 점에 있다(통계학적 회귀분석법 보다는 기계학습 분석이 화학반응 예측에 우월하다는 연구 발표는 꾸준히 있었다. 예, *Science* **2018**, *360*, 186-190). 즉, 기존의 steric descriptor는 가장 안정한 conformer 구조 정보만을 사용하였다면, 본 연구에서는 다양한 conformer들의 원자들 위치를 평균적으로 표현한 descriptor (average steric occupancy, ASO)를 제안하였다. 하나의 conformer로 분자를 나타내는 것에 비해 conformer distribution을 고려하였을 때에 개선된 촉매 반응 예측 성능이 나타났으며, 특히, 논문 제목에서 알 수 있듯이, 기계학습 자체에 사용한 여러 BINOL 기반 촉매들의 선택성 범위보다 더 높은 선택성을 가지는 촉매를 예측할 수 있다는 것을 보여주었다.



A Deep Learning Approach to Antibiotic Discovery

James J. Collins, Regina Barzilay *et al.* *Cell* **2020**, *180*, 688-702. DOI: 10.1016/j.cell.2020.01.021.

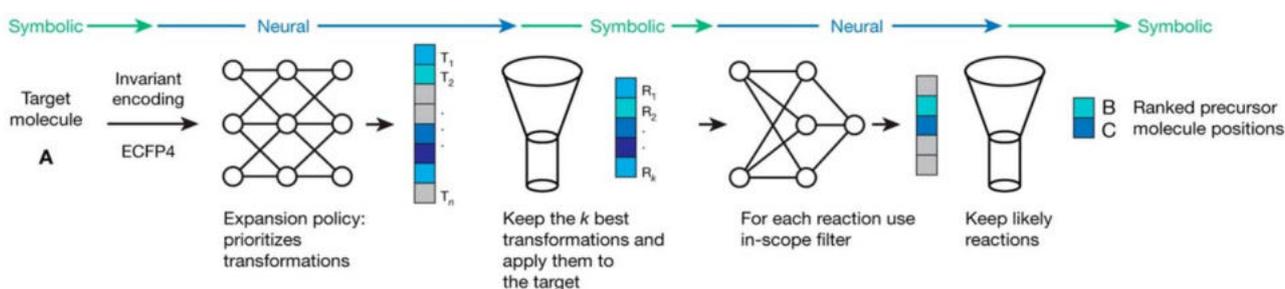
심층학습(deep learning)을 통해 새로운 구조의 항생제를 발견한 논문이다. Regina Barzilay와 James J. Collins 그룹은 심층학습을 사용하여 1억 개 이상의 분자 라이브러리에서 기존에 알려지지 않은 항생제 구조들을 찾아내었다. 심층학습에 사용한 알고리즘은 directed message passing neural network (D-MPNN 또는 structure2vec)로서(*J. Chem. Inf. Model.* **2019**, *59*, 3370-3388), 분자 구조를 방향성 그래프(directed graph)로 간주하여 분자표현(molecular representation)을 만든다. 이 알고리즘은 다른 그래프 기반 심층학습 모델과 달리 결합의 방향성에 따라 서로 다른 은닉층(hidden layer)을 업데이트하는 것이 특징으로, 업데이트를 반복적으로 수행함으로써 분자 전체 구조를 표현하는 하나의 벡터를 형성한다. *JCIM* 논문 저자들이 언급하였듯이, 분자 구조에 대한 아주 기초적인 형태의 3차원 정보(예: 원자 특성에서의 chirality 그리고 결합 특성에서의 stereochemistry)만을 사용하였기 때문에, 분자의 3차원 정보를 충실하게 표현하지 못한다는 단점이 있다. 그럼에도 불구하고, D-MPNN 알고리즘을 사용하여 기존의 항생제와는 구조적으로 다른 새로운 분자(예: halicin)를 발견하였으며, halicin은 내성균을 포함한 다양한 병원균에 효과가 있음을 보고하였다.

<http://news.mit.edu/2020/artificial-intelligence-identifies-new-antibiotic-0220>

Planning Chemical Syntheses with Deep Neural Networks and Symbolic AI

Mark P. Waller et al. Nature 2018, 555, 604-609. DOI: 10.1038/nature25978.

Mark Waller 그룹은 AI 분야에서 잘 알려져 있는 몬테카를로 트리 탐색(Monte Carlo tree search; MCTS) 알고리즘과 심층신경망(deep neural network; DNN)을 접목하여 효율적인 retrosynthetic analysis 방법론을 발표하였다. MCTS가 활용된 대표적인 AI는 AlphaGo로, 매 수를 둘에 따라 최적의 선택지가 달라지는 문제에서 방대한 모든 경우의 수를 전부 탐색할 수 없기에 제한된 범위를 효율적으로 탐색하기 위해 사용되었다. Retrosynthetic analysis 또한 수많은 경로가 가능하지만 그 중 더 정교하고 효율적인 방법을 찾는 문제로, 연구팀은 MCTS를 기반으로 경로를 생성 및 평가하고 최선의 경로를 선택하는 알고리즘을 개발하였다. 이를 위해 화학 데이터베이스를 입력 데이터로 사용하는 3개의 DNN을 MCTS와 연동하였다. 특히, expansion 과정에서 사용되는 DNN은 우선 순위의 반응들 중에서 화학 데이터베이스에 기반하여 불가능할 것 같은 반응들은 제외한다. 즉, DNN을 사용하여 retrosynthetic analysis 상의 각 단계에서 simulation할 반응들의 우선 순위를 매기고, simulation을 하여 우선 순위를 업데이트하게 된다. Double-blinded AB test에서 45명의 중국과 독일의 대학원생 수준 유기화학자들은 3N-MCTS라고 부르는 본 알고리즘이 제안한 retrosynthetic route와 논문으로 발표된 route 사이에 비슷한 선호도를 보였다.



A Robotic Platform for Flow Synthesis of Organic Compounds Informed by AI Planning

Klavs F. Jensen, Timothy F. Jamison *et al.* Science 2019, 365, eaax1566. DOI: 10.1126/science.aax1566.

AI를 이용한 retrosynthetic analysis 분야에서는 위의 Waller 그룹이 제안한 3N-MCTS와 더불어 MIT의 ASKCOS, IBM의 RXN, 그리고 Grzybowski 그룹의 전문가시스템 Chematica를 대표적으로 들 수 있다. Timothy Jamison과 Klavs Jensen 공동연구팀은 ASKCOS를 기반으로 한 retrosynthetic analysis를 flow chemistry platform에 접목한 연구 결과를 발표하였다. Automated synthesis platform 개발을 위한 작은 도약 중의 하나인 본 연구에서 15가지의 분자 합성을 시연하였지만, 본 논문은 해결해야 할 많은 문제점을 제시하였다는 데 더 큰 의미가 있다. 아래 그림은 safinamide를 합성 타겟으로 입력하였을 때에 출력으로 나오는 예이다.

Initial Query

Target compound: safinamide Draw

Parsed structure:

Proposed Synthetic Route

- 6 precedents as reactant
54 precedents as product
not buyable
- 27 examples
FF score: 1.000
- 2 precedents as reactant
3 precedents as product
not buyable
- 105 examples
FF score: 0.999
- 340 precedents as reactant
44 precedents as product
\$7/g
- 54 precedents as reactant
30 precedents as product
\$33/g
- 5298 examples
FF score: 1.000
- 567 precedents as reactant
38 precedents as product
\$2/g
- 34647 precedents as reactant
2313 precedents as product
\$1/g

Context Recommendation

#1: K_2CO_3 , DMF, 73 °C

#2: K_2CO_3 , acetone, 59 °C

#3: K_2CO_3 , ACN, 72 °C

#4: K_2CO_3 , KI, DMF, 79 °C

#5: K_2CO_3 , KI, acetone, 61 °C

#6: Ca_2CO_3 , DMF, 71 °C

#7: K_2CO_3 , KI, ACN, 80 °C

#8: K_2CO_3 , NaI, acetone, 66 °C

#9: K_2CO_3 , $BnN(Et)_2Cl$, ACN, 79 °C

#10: K_2CO_3 , Bu_4NBr , acetone, 61 °C

Major Product Prediction

#1 ($p > 99.9\%$):

#2 ($p < 0.01\%$):

#3 ($p < 0.01\%$):

#4 ($p < 0.01\%$):

Template Precedents

Template ID 59c511705581eb9f5759f60
Template ID 59c511705581eb9f5759f60
5298 total references

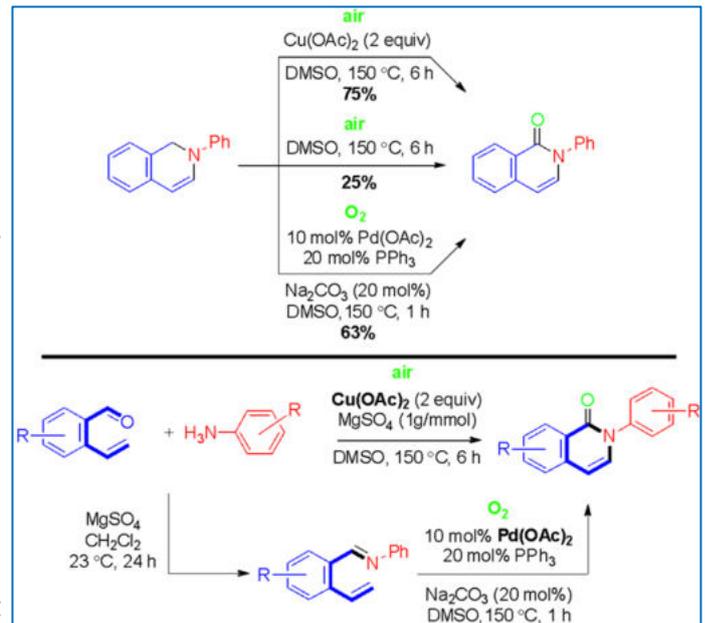
e.g., Reaxys ID 10417958

(100%)

Tandem Reaction Approaches to Isoquinolones from 2-Vinylbenzaldehydes and Anilines via Imine Formation–6π-Electrocyclization–Aerobic Oxidation Sequence

Kyungsoo Oh et al. *Org. Lett.* **2020**, *22*, 474. DOI: [10.1021/acs.orglett.9b04233](https://doi.org/10.1021/acs.orglett.9b04233)

Tandem 반응 개발을 통하여 확보되는 화합물들의 구조적 다양성은 라이브러리 구축의 근간이 되며, 기질-반응성 및 기질-선택성 상관관계에 대한 이해를 돕는다. 1-Azatriene의 6π-electrocyclization 반응의 결과물인 dihydroquinoline이 공기 중에서 자발적으로 산화되어 isoquinolone들을 형성함을 발견하였다. 그러나 dihydroquinoline의 자가산화 반응은 다른 decomposition 경로들과 경쟁하여 isoquinolone 수득율이 25% 정도로 매우 낮았다. 공기 중 산소를 이용한 Cu(II) 기반 산화반응 개발을 통하여 isoquinolone계열 화합물들이 효율적으로 얻어졌으며, 사용된 2 당량의 Cu(OAc)₂ 촉매는 6π-electrocyclization의 기질 합성에 영향을 미치지 않음을 알 수 있었다. 이러한 각각의 반응에 대한 기질-촉매의 적합성 확인을 통해, 2-vinylbenzaldehydes와 anilines을 시작으로 하는 imine formation, 6π-electrocyclization, aerobic oxidation의 tandem 반응 개발이 가능하였다.

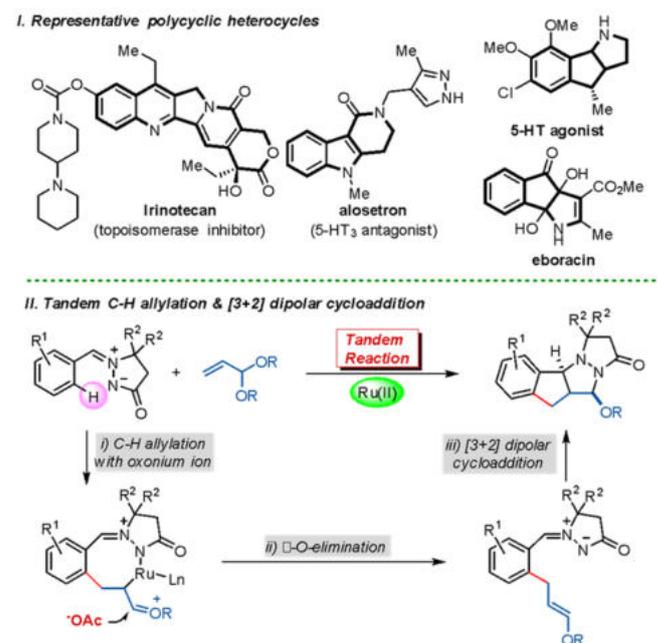


또한, 산화 반응의 Cu(II) 금속 촉매를 10 mol%의 Pd(OAc)₂로 대치가 가능하다는 것을 발견하였다. 이를 바탕으로 각각의 금속 촉매-기질의 상관관계를 정립하였으며, 두 가지의 상이한 공기 중 촉매 산화반응 기전을 제시하였다. 본 논문의 결과로 얻어진 isoquinolone계열의 화합물들은 의약화학 연구에 유용하여, 공기 중 산소를 이용한 금속 촉매 기반 산화반응 개발 및 응용에 새로운 가능성을 제시하였다. [중앙대 오경수 교수]

Allylic Acetals as Acrolein Oxonium Precursors in Tandem C–H Allylation and [3+2] Dipolar Cycloaddition

In Su Kim et al. *Angew. Chem., Int. Ed.* **2019**, *58*, 9470-9474. DOI: [10.1002/anie.201903983](https://doi.org/10.1002/anie.201903983)

루테늄 촉매를 활용하여 2중 고리 출발물질로부터 단일단계 반응을 통해 4중 연속고리 화합물을 입체선택적으로 합성하는 방법에 대한 연구이다. 전통적으로 알데하이드(aldehyde)의 전구체 또는 보호기로서 사용되어 온 아세탈(acetal)을 이용하여 탄소-수소 결합의 직접적인 알릴화 반응 및 분자 내 [3+2] 고리화반응을 통해 의약품의 핵심골격으로 알려져 있는 4중 연속고리 화합물을 제조하는 합성법을 세계 최초로 제시하였다. 특히 본 합성법은 질소 원자 두 개가 연속적으로 연결된 피라졸리딘온 (*N,N*-bicyclic pyrazolidin-3-one) 골격구조를 합성할 수 있는 합성법으로서, 다중 연속고리 화합물은 irinotecan, alosetron 등을 포함하는 다양한 생리활성 화합물에서 발견되는 핵심 구조이다. 이러한 다중 연속고리 화합물은 DNA intercalation 및 Protein-Protein Interaction 저해효과를 나타낼 수 있는 약물 구조가 될 수 있으며, 최근 신약개발 연구의 새로운 블루오션 영역으로 각광받고 있다. 본 연구는 의약품의 설계 및 신규 물질의 도출을 위한 새로운 대안을 제시한 것이라 할 수 있으며, 기존 다단계의 합성공정에 기반한 제조방법을 획기적으로 개선한 최적의 합성 공정이 될 수 있을 것으로 기대된다. 더 나아가 레이트스테인지 구조변환 반응을 성공적으로 적용함으로써 의약화학 및 제약공정 연구 발전에 기여할 것으로 기대된다. [성균관대 김인수 교수]



설계 및 신규 물질의 도출을 위한 새로운 대안을 제시한 것이라 할 수 있으며, 기존 다단계의 합성공정에 기반한 제조방법을 획기적으로 개선한 최적의 합성 공정이 될 수 있을 것으로 기대된다. 더 나아가 레이트스테인지 구조변환 반응을 성공적으로 적용함으로써 의약화학 및 제약공정 연구 발전에 기여할 것으로 기대된다. [성균관대 김인수 교수]

Distinct Phosphorylation and Dephosphorylation Dynamics of Protein Arginine Kinases Revealed by Fluorescent Activity Probes

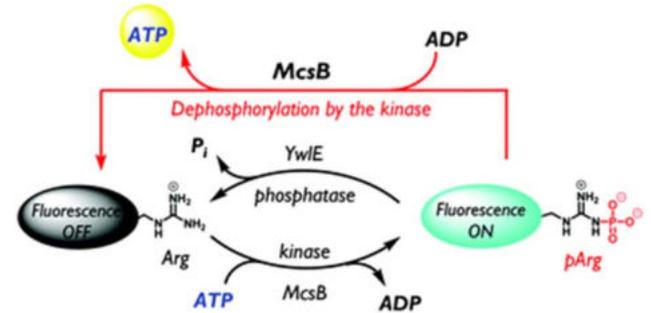
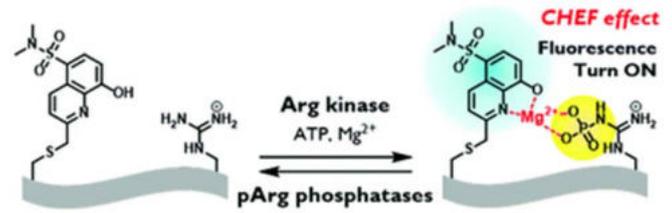
J.-M. Kee et al. *Chem. Commun.* **2019**, 55, 7482-7485. DOI: [10.1039/C9CC03285A](https://doi.org/10.1039/C9CC03285A)

단백질의 인산화는 생물학적으로 매우 중요하며, 이를 매개하는 kinase와 phosphatase는 중요한 drug target이 된다. 특히 아르기닌(Arg) 잔기의 인산화는 박테리아의 스트레스 저항성을 조절하므로, 유망한 신규 항생제 타겟으로 주목받고 있으나, 그 kinase와 phosphatase 효소 활성 측정을 방사성 동위원소에 의존해 왔다. 그 결과 이들 효소의 메커니즘 연구에 큰 어려움이 있었으며, 이를 타겟하는 신약 후보 물질의 스크리닝도 진행되지 못하였다.

이를 극복하기 위해 본 연구에서는 CHEF (chelation-enhanced fluorescence) 효과를 이용하여 Arg kinase와 phosphatase의 활성을 실시간으로 형광으로 측정할 수 있는 activity probe를 설계하였고, 고체상 펩타이드 합성법으로 합성하였다.

그 결과 박테리아의 Arg kinase인 McsB의 활성 조절 기작을 규명할 수 있었으며, 특히 McsB가 ADP를 기질로 사용하여 인산화된 기질을 탈인산화시키는 현상을 발견하였다.

이는 생체내에서 단백질 인산화의 동적 조절을 위해 서로 반대의 작용을 하는 kinase와 phosphatase가 필요하다는 기존의 패러다임과는 달리, Arg인산화에서는 McsB kinase만으로도 ATP/ADP의 비율에 따라 인산화/탈인산화의 과정이 모두 조절 가능하다는 점에서 의미가 있다. [UNIST 기정민 교수]

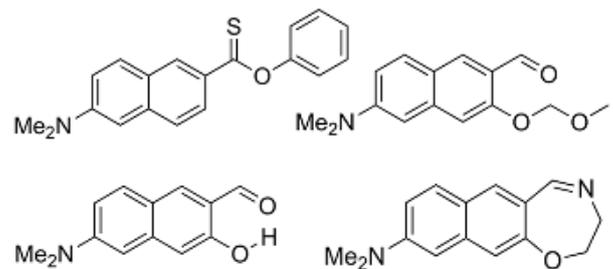
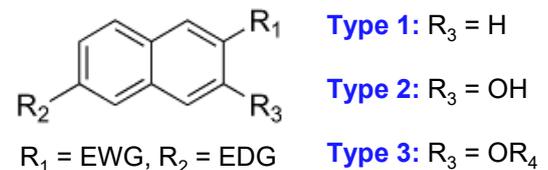


Fluorescent Probes based on Functionalized Dipolar Naphthalene Core Skeleton

Dokyoung Kim et al. *ACS Sens.* **2019**, 4, 441. DOI: [10.1021/acssensors.8b01429](https://doi.org/10.1021/acssensors.8b01429), *Org. Lett.* **2019**, 21, 3877. DOI: [10.1021/acs.orglett.9b00784](https://doi.org/10.1021/acs.orglett.9b00784), *Dyes & Pigments.* **2019**, 171, 107764. DOI: [10.1016/j.dyepig.2019.107764](https://doi.org/10.1016/j.dyepig.2019.107764).

형광 분자 프로브 (fluorescent probe)는 생물학적 주요 요소의 모니터링에 폭넓게 활용되고 있으며, 최근에는 질병의 진단과 치료, 생물학적 위험물질의 감지 등으로 그 응용 범위가 확장되고 있다. 본 연구팀에서는, 나프탈렌 기반의 기능화 된 신규 형광 분자 프로브를 개발하고, 이를 이용하여 하이드라진 (hydrazine), 신경작용제(nerve agent), 말로노나이트릴 (malononitrile)과 같은 독성물질의 감지 시스템에 적용하였다. 이와 더불어, 생물학적 주요 아미노산의 검출, 암세포 특이적 영상화, 알츠하이머병 바이오마커 영상화 등으로 활용 가능한 프로브도 소개하였다. 나프탈렌을 기반으로 한 새로운 형태의 형광체 (fluorophore)도 개발하였으며, 이를 이용한 세포 소기관 특이적 염색, 이광자(two-photon) 조직 영상화 등의 활용 가능성을 보였다.

본 연구팀은, 나프탈렌을 기반으로 한 다기능성 형광 분자 프로브의 발굴과 이를 이용한 질병 특이적 생체 영상화 시스템 개발, 나아가 이의 임상학적 적용 가능성을 확인하는 연구를 수행 중이다. 또한, 발굴된 시스템을 나노 소재와 융합하여 세포특이성과 조직특이성을 가지는 새로운 형태의 영상화 조영제 개발 연구를 수행 중이다. [경희대 김도경 교수]



대한민국을 빛낸 유기화학자: 김용해 (金容海) KAIST 교수 (1939 ~)



한국 유기화학분야의 선구적 역할을 하신 김용해(金容海) KAIST (한국과학기술원) 명예교수님(재직 기간: 1979~2004)에 대한 간단한 소개 글입니다.

‘김용해 교수님’ 아마도 그는 태어나면서부터 숙명적으로 화학자의 길을 가시도록 되어 있었나 보다. 물론 한자 뜻은 다르지만, 우리말로 무엇을 녹이거나 녹는다는 뜻의 용해를 그 이름에 가지고 있는 것이다. 그 이름에 걸맞게 한평생을 화학자로서의 길을 걸으면서 화학, 그 중에서도 특별히 유기화학의 발전에 큰 족적을 남겼다. 오늘 그가 있기까지 교수님께서서는 오직 한 길 유기화학을 연구하며 가르치는 일에만 전력을 다한 것이다.

김용해 교수님은 1939년에 출생했으며 일본 오카야마 대학에서 화학을 전공하고 오사카 시립대학에서 유기화학을 연구하여 석사 및 박사학위를 받았다. 1971년부터 미국 스탠포드 대학교와 국립보건원(NIH)에서 연구원으로 활동하다가, 1975년 일본 쓰쿠바 대학 조교수로 부임해 부교수를 지냈고, 1979년 KAIST 부교수로 부임해 2004년까지 교수를 역임하고 석좌교수를 지냈다. 1983년 미국 국립보건원 객원교수를 지냈으며, 1992년 프랑스 스트라스부르 대학 대학원 강의 교수와 1996년 파리 IV 대학 초빙교수를 지냈으며 중국 산서대 명예석좌교수와 현재는 제주대학교 석좌교수로 활동 중이다. 현재 KAIST 명예석좌교수, 2007년부터 대한민국학술원 종신회원, 1995년부터 한국과학기술한림원 종신회원, 제3세계 학술회의 회원 등으로 활동하고 있다.

40여 년간 국내외에서 유기화학 연구 및 교육 활동을 활발히 해왔으며, 연구업적으로 SCI 등록 논문 250여 편, 영문 총설 15편, 영문 저서 8편과 등록 특허 40여 개가 있고, 석·박사학위 연구자 100여 명을 양성했다. 학술 활동으로는 초청강연이 167회이며 이중 국제학술회의 기조(Plenary)강연 16회, 국제학술회의 초청강연 40회, 기타 대학 및 연구소 강연 111회에 이르고 있다. 이러한 결과로 1996년 KAIST 연구특별상, 1999년 KAIST 학술상, 2000년 상허학술대상, 2001년 3·1문화상, 2003년 카이스트 학술대상, 2004년 과학기술훈장 혁신장(대통령상) 등을 수상했다.

그 외에 대한화학회 등 국내외 학회와 학술지에서도 다양한 활동을 했다. 대한화학회 초록편집위원장(1983~1985), 대한화학회 유기분과회장(1995~1996), 대한화학회 학술위원장 (2002~2003)으로 공헌했고, 국제적으로는 1995년에 IUPAC 및 대한화학회 주최로 3년에 한 번 개최되는 ICHAC(Int. Conference on Heteroatom Chemistry)을 서울에 유치하여 조직위원장을 맡아 33개국으로부터 800여 명이 참석하는 성공적인 학술회의를 이끌며 한국의 유기화학을 전 세계에 널리 알린 바 있다. 이외에 국제학술지인 Chem. Lett., Int. Heteroatom Chem.과 Int. Physical Org. Chem.의 편집위원을 역임했다.

김용해 교수님의 주요 연구 분야와 업적을 살펴보면 헤테로원자 유기화학에서 황 및 질소와 산소를 포함한 유기화합물의 새로운 합성법 개발과 키랄 촉매와 보조기를 사용한 비대칭 합성법의 개발, 그리고 생리활성이 흥미 있는 천연물들에 관하여 주로 연구하여 많은 업적을 남겼다. 주요 연구업적으로 대표적인 논문 5개를 소개하면 다음과 같다. Science(1975)에 처음으로 중남미 아텔로퍼스 개구리로부터 강력한 신경계 활성물질인 새로운 테트로도톡신 유도체를 발견하여 보고하였다.

또 다른 Science(1980)에는 희귀한 아이소과노신 유도체의 분리, 구조결정 및 생리활성을 규명하였고, Angew. Chem. Int. Ed. (2000)에 Pinacol 결합 반응에서 1단계로 각각 *R,R*형 *S,S*형의 높은 광학순도로 분자간의 반응에서는 처음으로 높은 선택성을 입체 제어에 의해서 얻어지는 논문을 발표하였다. Acc. Chem. Res. (2001)에 지금까지 발표된 논문 내용을 인정받아 초대된 논문 ‘유기금속 $S_{MI}2$ 을 사용하여 입체선택성이 매우 높은 양쪽 enantiomer 합성’은 새로운 비대칭 합성의 체계적인 논문으로 인정받고 있다. Proc. Natl. Acad. Sci. USA (2004)에는 새로운 신경계독성 유기화합물의 구조를 밝히고 생리활성이 매우 흥미 있는 신규 물질임을 입증하였다.

김용해 교수님은 KAIST 재직 시절부터 꾸준히 기부를 하던 중에 3·1 문화상 상금 등의 일부를 기부해 대학원생 우수논문상을 제정했다. 특히 정년퇴임 시에는 1억 원을 기부해 국제 세미나 개최에 사용하고 있어 그 의미가 깊다. 그는 한 언론과의 인터뷰에서 기부하게 된 동기와 목적에 대해 밝힌 적이 있다. “1억이라는 거액을 기부하게 된 동기는 KAIST는 수준 높은 교육으로 이공계 인재를 양성하는 우리나라의 대표 대학이다. 그럼에도 세계의 최신 기술 동향과 첨단 학문에 대해 배울 수 있는 국제 세미나가 자주 열리지 않는다는 점이 늘 안타까웠다. 학생들에게 우수 석학의 강의를 접할 기회를 더욱 많이 제공하고자 적극적으로 참여하게 되었다.” 기부한 금액은 학과에서 기부금으로 ‘김용해 렉처(Lecture)’를 만들어 국내외 유명 석학을 초청해 세미나를 개최하고 있다. 김용해 렉처는 매년 한 번 정도 개최되고 있다. 이 외에도 2011년에는 석좌교수로 있었던 제주대학교에도 5천만원의 발전기금을 기부한 바 있다.

김용해 교수님은 최근에 근거 중심의학 전문가인 일본인 의사 나고 나오키의 책을 번역하여 약과 건강검진에서 벗어나 행복한 노년을 보내는 최선의 비결 <적당히 건강하라>를 발간하기도 했다(2019년). 의료 과잉시대에 세계 최장수 국가 일본에서 배우는 노인 적정 의료의 기본 원리를 담은 책이다. 이 책의 내용에서 건강하게 장수하기 위해서 “과학적으로 생각하라”고 조언한 것처럼 김용해 교수님께서도 항상 건강하신 가운데 행복하게 지내시기 바란다.

삼육보건대학교 총장 박두한

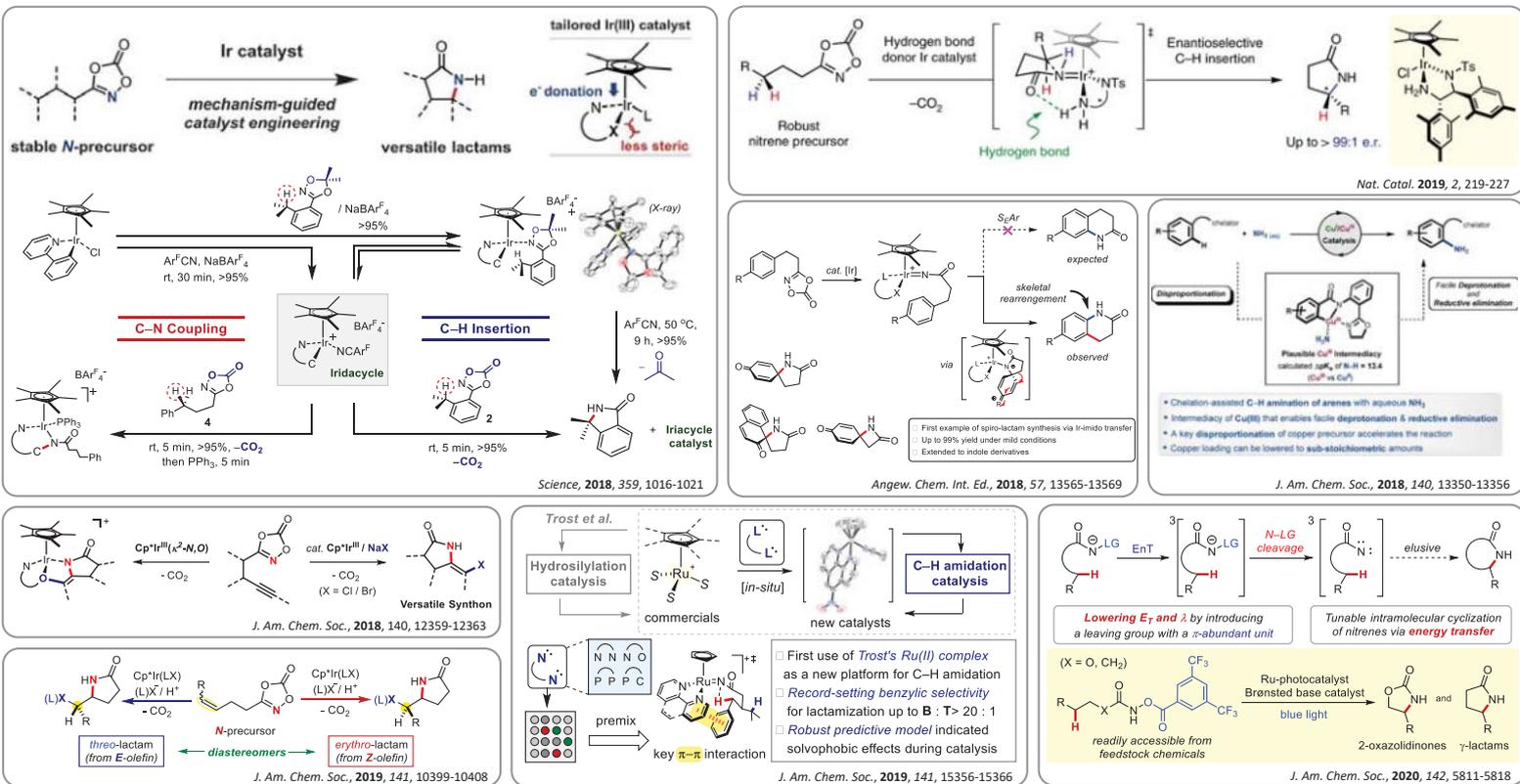
연구실 소개

탄소 골격을 기반으로 한 유기화학물의 활용연구는 합성화학은 물론 의학 및 재료산업등에도 그 응용 가능성이 크다. 특히 반응성이 낮은 탄화수소를 활성화시켜 필요한 작용기를 도입하거나 보다 가치가 높은 유기화학물을 제조할 수 있는 방법의 개발은 중요한 연구 주제로 고려된다. 장석복교수 연구팀은 탄화수소 분자의 탄소-수소결합을 활성화시키는 반응경로의 규명과 이를 이용한 반응개발을 수행하고 있다. 특히, 반응속도 결정단계의 활성화에너지를 조절 할 수 있는 전이금속 촉매를 개발하고 이를 유기분자에 적용하여 적절한 작용기를 도입하는 연구에 주력하고 있다. 또한, 비 전이금속 혹은 금속이 없는 효율적이며 선택적인 반응도 개발하고 이를 응용연구에도 적용하는 부분에서도 소정의 성과를 거두고 있다. 본 연구실은 2012년 12월부터 Institute for Basic Science (IBS) 프로그램에 의해 "Center for Catalytic Hydrocarbon Functionalizations" 연구단을 구성하여 운영되고 있다.

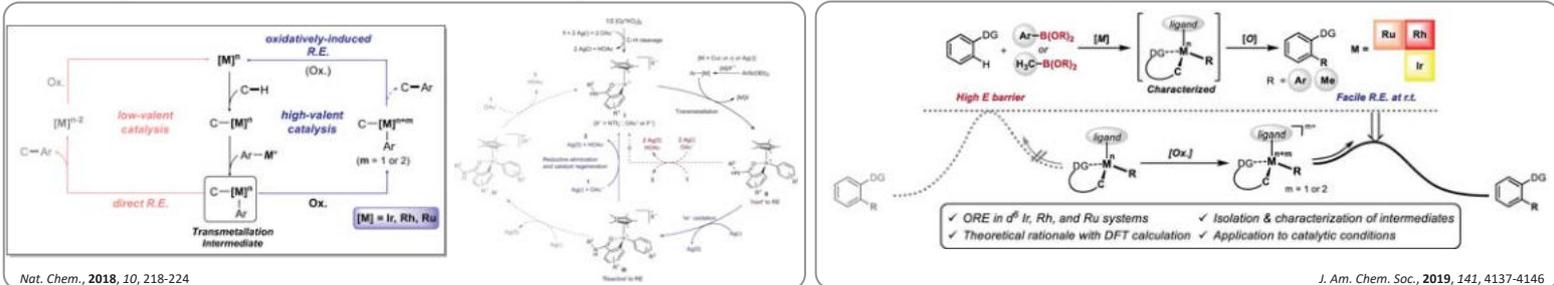


최근의 대표적 연구내용 (2018~)

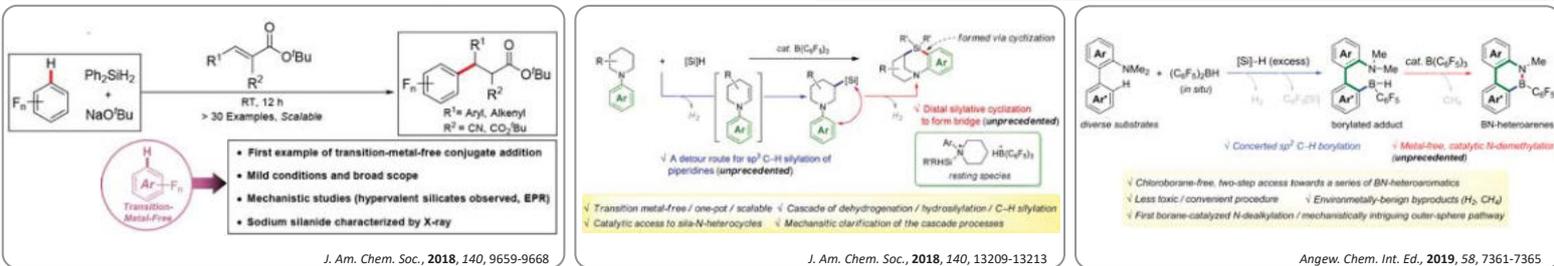
Metal-Catalyzed C-H Amidation: Tailored Catalyst Systems with New Nitrenoid Sources



Oxidatively-Induced Reductive Elimination: Investigation of Mechanistic Details for Reaction Developments



Transition Metal-Free Systems: New Approaches for Bond Connectivity



#물러가라, 코로나-19

TCI와 함께 이겨내요!

TCI·세진시아이는 연구하시는 모든 분들을 응원합니다.

유기분과회 공식후원사

TCI · SEJIN CI



GL Biochem(Shanghai) Ltd.

Peptide & Reagent for Peptide Synthesis and CombiChem

Featured Products

Peptide coupling reagents: BOP reagent, HBTU, HOBt, TBTU

Fmoc-amino acids, Boc-Amino Acids, Z-Amino Acids

Protecting reagents: Fmoc-Cl, Fmoc-OSu

Linkers for solid phase synthesis: HMP linker, DHP linker, Rink amide linker

Unusual amino acids: Homo-tyrosine, DL-m-tyrosine, Nal, Pal, 4-Cl-Phe-OH

Generic Peptide: Octreotide...

cGMP Peptide

Featured Services

Custom Organic Synthesis

Custom Peptide Synthesis

Contract Research

Symbol	Structure	Name	Formula	MW
Acm		Acetamidomethyl	C ₄ H ₉ ON	72.1
Z (CBZ)		Benzyloxycarbonyl	C ₉ H ₉ O ₂	135.1
Boc		t-Butoxycarbonyl	C ₈ H ₁₅ O ₂	101.1
tBu		t-Butyl	C ₄ H ₉	57.1
DMT		4,4'-Dimethoxytrityl	C ₂₁ H ₁₉ O ₂	303.3
Fmoc		Fluorenylmethoxy-carbonyl	C ₁₈ H ₁₇ O ₂	223.3
Pbf		2,2,4,6,7-Pentamethylidihydrobenzofuran-5-sulfonyl	C ₁₇ H ₁₇ O ₂ S	253.3
Trt		Trityl	C ₁₉ H ₁₅	243.3

PeptART

Your Swiss pARTner in Peptide Chemistry

Amino Acid Derivatives >

Pseudoprolines

Cys-Pseudoprolines

Dipeptides

PeptART Bioscience GmbH is a Swiss chemical manufacturing company located near Basel. Since 2008 our group has been manufacturing high quality products, on schedule, meeting industry standards in quality, occupational and environmental safety. The product range includes pseudoproline building blocks, amino acid derivatives, peptides and related products from the field of peptide chemistry.

We comply with ISO 9001:2015 and have our facility regularly inspected and approved by the Swiss Association for Quality and Management Systems (SQS) and various API manufacturers, qualifying us as a supplier of GMP starting materials.

New Product

Product name	Product Code	CAS Number
Fmoc-D-Pro-OPfp	2540-00	125281-38-1
Fmoc-Aib-OPfp	2521-00	n/a
H-Ser(tBu)-NH ₂	2438-00	n/a
N,N-Dimethylglycine	2440-00	1118-68-9



"최신 FT-IR"

- 최신 FT-IR 기술
- Warranty : 3년
- 10년 유지비 제로(Max. 20년)
- 특히 간섭계 채택
- 합리적 가격

