

TOP 10 RESEARCH
ACHIEVEMENTS

분자 내 모든 원자들이 움직이는 위치를 실시간 관측

Tracking the movements of all atoms in a molecule

소속학과 화학과

연구책임자 이효철

홈페이지 <http://time.kaist.ac.kr>

화학 반응에 대한 기초 연구를 위해 반응 좌표에서의 분자동역학을 고려하는 경우가 많다. 하지만, 에너지 표면상의 반응 좌표는 주로 계산이나 상상에 의해 제안되어 왔고, 이를 실험적으로 직접 관측하는 것은 매우 어려운 과제이다. 실제로 반응 중인 분자 내의 모든 원자의 위치를 추적하여 반응 좌표를 밝혀내는 일은 매우 단순한 삼원자분자에 대해서도 실현된 바가 없다. 본 연구에서는 펨토초 엑스선 회절법을 통해 금 삼합체의 화학결합 형성 반응 동안의 금 원자의 움직임을 실시간으로 추적하였다. 금 원자의 운동을 추적한 결과, 반응 시작 후 처음 35펨토초 내에 첫 번째 공유 결합이 형성되고, 그 이후 360펨토초 내에 두 번째 공유 결합이 형성된다는 것을 밝혀낼 수 있었다. 펨토초 엑스선 회절법을 통해 분자 내의 원자의 움직임을 실시간으로 추적함으로써 많은 화학 반응과 관련된 원자 운동을 추적할 수 있을 것으로 기대한다.

1. 연구배경

물질의 특성을 결정짓는 기본 단위는 분자이고 분자를 이루는 기본 단위는 원자라고 할 수 있다. 즉 이런 원자들이 화학결합을 통해 뭉쳐져 있는 것이 분자이다. 단백질과 같은 분자는 수천 개의 원자로 이루어져 있지만 이러한 원자들이 실제로 어떻게 움직이고 있는지를 밝히는 것은 겨우 3개의 원자로 이루어져 있는 극히 단순한 분자의 경우에 대해서도 직접적으로 관찰한 경우가 없었다. 예를 들어 3개의 원자로 이루어진 분자의 경우 두 개의 화학결합을 가지는데 이 두 개의 화학결합이 동시에 형성되는지 아니면 하나씩 차례대로 형성되는지와 같은 기초적인 질문에 대한 답도 사실상 실험적으로 관측하고 규명하는 것이 쉽지 않다. 그 이유는 이러한 원자들의 움직임이 매우 빠르고 원자의 크기가 작기에 이것을 실시간으로 포착하는 것이 쉽지 않기 때문이다. 이러한 기초적인 질문에 대한 답을 찾기 위해 평소에는 가까운 곳에 흩어져 있다가 레이저 빛을 쏘아주면 반응하여 화학적으로 결합하는 성질이 있는 세 개의 금 원자들이 모여 있는 금 삼합체(gold trimer)를 실험모델로 삼아 금 삼합체 내의 화학 결합이 생성되기 이전의 분자 내의 모든 원자의 움직임을 실시간으로 관측함으로써 반응 메커니즘을 구체적으로 밝히는 것을 목표로 하였다.

2. 연구내용

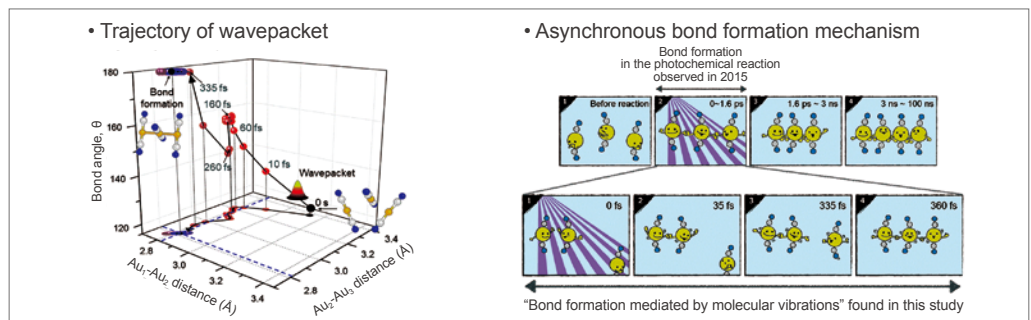
원자의 움직임은 시간적으로는 펨토초(1천조분 1초) 수준으로 그 속도가 매우 빠르고, 공간적으로는

용스트림(100억분의 1미터) 수준으로 이동량이 매우 작기 때문에 원자의 움직임을 실시간으로 포착하는 것은 결코 쉬운 일이 아니다. 이 고난도 과제를 풀기 위해 PAL-XFEL(선형4세대방사광가속기)에서 제공하는 펨토초 엑스선 펄스를 이용한 ‘펨토초 엑스선 회절법’ 실험 기법으로 수용액 내의 금 삼합체 분자의 실시간 삼차원 분자 구조를 분석하였다. 레이저 기술과 엑스선 회절법 기술을 결합한 ‘펨토초 엑스선 회절법’ 실험을 통해 레이저를 조사하여 금 삼합체의 화학결합 형성 반응을 개시하고, 펨토초 엑스선 펄스라는 특수 광원을 이용하여 시간에 따른 금 삼합체 내의 세 개의 금 원자의 실시간 위치 변화를 엑스선 회절 이미지의 분석을 통해 추적한 것이다. 시간에 따른 분자 내의 금 원자의 위치를 실시간으로 추적한 결과, 금 삼합체의 경우에 두 개의 화학결합이 동시에 형성되지 않고 하나의 화학결합이 아주 빠른 속도로 먼저 형성된 후에 나머지 화학결합이 한참 후에야 차례대로 형성되는 것으로 밝혀졌다. 화학결합 형성이 끝난 이후의 원자 움직임 역시 관측하였는데, 금 원자들이 같은 자리에 머무는 것이 아니라 진동 운동을 하게 되는 것을 알아냈다. 화학결합이 형성된 이후의 금 삼합체 분자의 진동 운동은 대칭적으로 거리가 늘어나고 줄어드는 형태의 ‘대칭 진동 운동’을 따르는 것이 밝혀졌고, 그 진동 운동이 얼마나 빠른지를 나타내는 주기(period) 역시 밝혀낼 수 있었다.

3. 기대효과

본 연구를 통해 실현된 ‘펨토초 엑스선 회절법을 이용한 반응 경로의 실시간 추적’ 방법을 산업적, 공업적 가치를 갖는 다양한 유기, 무기 촉매 반응들과 수용액 상의 단백질의 반응을 위한 연구에까지 확장시킬 계획이다. 기존의 연구들이 바닥상태나 반응중간체와 같은 평형 혹은 준평형상태에 있는 분자에 대한 연구에 집중되어 있던 것과 비교하여 본 연구는 획기적으로 향상된 시간, 공간분해능을 바탕으로 평형 상태들 사이의 비평형 전이 과정을 관측하는 데 성공한 것으로 다양한 반응에서의 전이 상태(transition state)에 대한 정보를 제공하고 실제 반응 경로를 특정 짓는 것이 가능하다. 이에 따라 다양한 반응의 메커니즘을 명확히 규명하고 반응의 효율을 극대화시키기 위한 전략을 세우기 위한 핵심 정보를 제공할 수 있다. 유기, 무기 촉매 반응에 대한 적용을 통해 산업, 공업적으로 사용되고 있는 다양한 반응의 효율을 극대화시키기 위한 정보를 알아낼 수 있다. 또한 단백질이 관여하는 체내의 다양한 반응에의 적용을 통해 반응 메커니즘을 정확히 이해할 수 있다. 이를 바탕으로 반응의 제어는 물론이고, 질병 치료, 신약 개발에 필요한 기초 정보를 제공할 수 있을 것으로 기대된다.

참고 그림.
 펨토초 엑스선 회절법 실험을 통해 반응의 개시 이후의 시간별 엑스선 산란 이미지를 얻고, 이를 분석하여 분자 내 모든 원자의 움직임을 결정하여 반응 메커니즘을 규명한다.



연구 성과 [논문] "Mapping the emergence of molecular vibrations mediating bond formation", Nature, 582, 520-524 (2020) [2019 Impact Factor = 42.778]

연구비 지원 기초과학연구원 (과제명: 나노구조 물질의 합성 및 화학반응 메커니즘 연구)