

송실대학교 분자설계연구센터 노경태 교수

대담: 연구개발정보센터 초고속정보망기술지원실 이서홍 (E-mail: s0231sh@hpcnet.se.kr)

연구개발정보센터 초고속정보망기술지원실 이희열 (E-mail: leehi@hpcnet.se.kr)



최근 분자모델링을 이용한 신물질설계 기술(Computer Aided Material Design)이 재료과학이나 생명과학분야의 획기적인 성공사례를 통하여 신물질개발연구에 실제적인 도움을 줄 수 있는 매우 효율적인 방법이라는 인식이 보편화되었다. 최근 미국, 유럽 등 기술선진국에서는 신제품 개발시 기존의 실험실적 연구가 아닌 모델링 방법의 분자설계 기술을 이용하여 신약이나 기능성 첨가제 등의 개발로 엄청난 부가 가치를 창출하고 있다. 과학적 기반이 발생하고, 산업기술의 수준이 상대적으로 중간적 지위에 있는 우리나라는 신물질 및 신제품 개발을 위한 첨단 기술의 확보가 다가오는 21세기 국가산업 경쟁력 제고에 필수적이라는 인식 아래 분자설계연구센터는 산업자원부의 기술혁신센터(Technology Innovation Center)로 지정받아 컴퓨터모델링을 이용한 화학신소재 분자설계 기술 보급에 힘쓰고 있다. 산업체에 첨단 기술 보급을 위하여 기술혁신센터를 운영하고 있으며 또한, 초고속정보망 지원실 등에서 정보통신부의 지원으로 올해 '9차년도 초고속응용기술지원사업'을 수행하고 있는 송실대학교 분자설계연구센터의 소장인 노경태 교수를 찾아보았다.

질문 분자설계 기술이란 어떤 것이며, 분자설계 연구 센터에서 수행중인 연구분야는?

화학신소재나 신약 개발을 위한 전통적인 방법은 수많은 화학실험에 의한 과학자의 경험과 직관을 통하여 이루어져 왔습니다. 그러나 컴퓨터의 성능이 획기적으로 발전하고 분자설계 기술이 발달하면서 실험의 상당 부분을 컴퓨터가 대신할 수 있는 시대가 오고 있는 것이고, 이러한 컴퓨터분자설계 기술은 현재까지 개발된 모든 과학적 지식을 기반으로 물질의 기하학, 전자적, 광학적, 열적, 자기적 성질 등을 포함한 다양한 물리화학적 성질을 컴퓨터에서 예측하고, 첨가제의 특성소재로 가장 적합한 물성을 갖는 신물질을 설계하고 개발하는 일련의 과정을 컴퓨터를 이용한 신물질설계 기술 또는 분자설계 기술이라고 합니다.

컴퓨터모델링 신물질설계 기술은 신소재 개발과 기초학문의 전 분야에 걸쳐서 매우 큰 역할을 하고 있는데, 특히 활성화된 연구개발 분야는 재료과학(전기전자재료, 반도체, 촉매, 고분자, 나노물질, 에너지관련, 임

안료, 개편활성제, 화장품, 향료 등), 환경과학(환경숙미, 독성연구, 성분해독질 등), 생명과학(신약개발, 생체분자구조, 생물정보, 농약설계 등), 그리고 기타 기능성분자설계, 신물질설계(대사촉매제 개발) 등을 말할 수 있습니다. 특히, 산업체와의 공동연구를 통하여 컴퓨터모델링을 이용한 신소재 및 신의약설계 개발에 매진하고 있습니다. 현재 모델링 소프트웨어를 탑재한 32비트 엑스태이션 시스템과 대용량계산을 위한 P3 2000MHz CPU의 모뎀 서버를 이용하여 노경태 교수를 중심으로 18명의 연구진이 기업체와의 공동연구를 활발히 수행하고 있습니다.

질문 신약설계와 국내의 현황과 전망 그리고 슈퍼컴퓨터와의 연관성?

신약개발에 분자설계연구 기술의 도입이 당연한 것으로 여길 정도로 신약개발을 추진하는 대부분의 산업체에서는 분자모델링을 매우 중요한 기술로 활용하고 있

습니다. 전 세계 신물질개발시장당 국유 현황으로는 제약, 생명공학, 식품, 농화학, 석유화학, 전자재료 및 소재공학 분야 등에 (Allied-Signal, BASF, British Petroleum, Ciba-Geigy, Ciba-Wallone, DuPont, Eli Lilly, Fujil, GE, GM, ICI, Mitsubishi, Monsanto, NASA, Pfizer, SONY 등) 약 6,000개 이상의 대부분의 우수한 기업체에서는 신물질개발 기술을 모두 사용하고 있습니다. 대표적인 성공사례로는 Poly-urethane 합성소제 95%에서 98%로 향상, CPC 대체물질 개발, 고기능 Polycarbonate 개발, 항암제신약(Triaryldiylate Synthesis Inhibition, AIDS 치료제, 농약 Herbicides-Resistance를 가지는 Tobacco의 개발을 생각할 수 있습니다. 물론 최근에는 신의약품, 특성소재 분야에서 수많은 성공사례가 속속 보고되어지고 있습니다.

국내에서도 첨단 기술 확보의 중요성을 깊이 인식하고 일부 기업체에서 선소재설계, 신약설계, 생명정보기술 등의 일부 분야에서 시도되고 있으나 도입 초기 단계이며, 전문연구인력의 절대부족과 고가의 분자설계소프트웨어를 비롯한 연구개발 시설확보의 어려움으로 매우 미미한 정도에 머물고 있습니다. 이러한 국내 첨단소재산업의 국제경쟁력 확보를 위하여 연구개발의 기간과 경비를 획기적으로 줄여줄 수 있는 신물질설계 기술의 정착은 매우 시급히 요구되어지고 있습니다.

신약설계에서 분자설계 기술은 가래간 생체분자의 구조와 특성, 신약 후보 화합물의 성질 그리고 생체분자와 화합물 간의 구조적 특성 및 물리화학적 성질의 계산을 필요로 합니다. 이때 분자 간의 상호작용을 기술하는 분자역학 함수나 양자역학적인 항할 계산을 수행하여야 하는데, 저비용으로 이용하는 컴퓨터공역 만으로는 한계를 갖고 있으며 매우 큰 분자나 대안이 정밀한 양자역학적인 계산에는 슈퍼컴퓨팅 자원을 활용하고 있습니다.

질문 최근 신약설계에 데이터베이스가 매우 중요한 의미를 띠는지요?

신약설계에는 수용체의 구조에 기반을 둔 방법과 각

종 계산이나 실험적 자료를 이용하여 만든 화학데이터베이스를 이용한 구조-활성 상관관계 방법이 있습니다.

최근 화학데이터베이스를 이용한 신약설계 기술이 매우 발달하고 대단히 유용한 방법이라는 실증적 경험을 통하여, 이러한 데이터베이스의 구축과 활용기술 개발에 많은 투자를 아끼지 않고 있습니다. 신약설계 연구를 수행하기 위해서는, 치환기의 특성에 관한 정보를 이용해야 하며, 화학적 경우의 모든 수를 검토하고, 생물학적 지식을 최대한 활용해야 하므로, 신약개발 연구에서 데이터베이스의 활용은 필수적인 것입니다. 신약개발을 최종목표로 하는 다수의 제약업체나 이와 관련된 정부출연, 대학 연구소들은 적은 경비(연구인력, 소요시간)로 그 목적을 달성하고자 이에 적합한 데이터베이스의 이용을 계획하지만 경제적 어려움이 많고, 이는 결국 기존의 전통적인 신약개발 과정을 답습하는 것으로 귀결되고 있는데 안타까운 일입니다. 본 센터는 정보통신부에서 지원하는 '2000년도 지식정보안전개발 금융추진사업'의 전담기관인 한국전선연, 주관기관을 연구개발정보안전화하는 과학기술 종합정보 시스템 구축의 하나로 첨단과학 정보 DB 구축을 위하여 초고속정보망 기술지원실과 화학데이터베이스 구축과 분자설계 연계를 개발하여 기업체나 연구소에 신약개발에 필요한 정보를 제공할 예정으로 사업을 수행중에 있습니다.

질문 슈퍼컴퓨터의 도입에 바라는 사항이 있다면?

아직도 많은 중소기업체들은 전문연구인력이나 연구 시설을 제대로 갖추지 못한 채 국가산업의 부흥을 위하여 세계의 무한한 기업들과 경쟁하여 노력하고 있습니다. 슈퍼컴의 자원을 보다 많은 기업체에 지원하기 위하여 우수연구 후자를 발굴하고 인프라를 구축하여 대학의 전문인력을 확보하여 신약산업의 공동연구 사업을 확대 발전시키는 것은 매우 고무적인 일이라고 봅니다.

