싸이클 분자와 금속 이온의 결합 에너지 계산을 통한 분자구조 영향성 연구

정태성, 김민식, 전상구, 홍순호[1], 나정걸†
한국에너지기술연구원; [1]울산대학교
(narosu@kier.re.kr†)

Valinomycin, amanitin, beauvericin 등은 싸이클 구조를 가진 펩타이드로서, 이온-쌍극자간 힘에 의해 수용액 중의 금속 이온과 결합할 수 있는 것으로 알려져 있다. 이는 펩타이드 분자를 이루는 아미노산 잔기 중의 카르보닐 그룹이 비공유 전자쌍을 포함하고 있고, 이들이 탈수화된 금속 이온에 이끌려 강한 결합을 하기 때문이다. 특히, 펩타이드 분자가 싸이클 형태를 이루고 있는 경우, 왕관형 에터 등의 경우와 같이 금속 이온과 보다 강한 결합을 이룰 수 있으며 특정 금속 이온에 대해 선택적인 결합을 하기도 한다. 본 연구에서는 금속 이온과 결합이 기대되는 싸이클 구조의 모델 펩타이드를 선택하여, 펩타이드 분자와 금속 이온이 결합하는 힘을 양자역학 계산을 통해 구하였다. 이를 통해 이온과의 결합에 미치는 펩타이드 구조의 영향성에 대한 해석을 시도하였고, 펩타이드 분자에 의한 금속 이온의 선택적인 결합에 대한 가능성을 검토해 보았다.