

배포 일자
2026.8.26.(수)

보도 희망 일시	☒ 엠바고 없음(즉시)		☐ 엠바고 별도 기재		
연구참여 (문의)	소속	성명	저자구분	연락처	이메일
	서울대학교 화학부	송윤주	교신저자	02-880-4374	woonjusong@snu.ac.kr
	서울대학교 화학부	최예린	제1저자	02-880-6636	ccakooh@snu.ac.kr
	서울대학교 법학과	박민찬	제1저자	02-880-6636	chanpapa@snu.ac.kr

□ 연구 제목/부제

제목	A minimal photoreactive metallocofactor for carbon-sulfur bond formation in small molecules and proteins (소분자 및 단백질에서 탄소-황 결합을 만드는 초소형 광반응성 금속보조인자의 개발), Elucidating Light-Driven Carbon-Sulfur Bond Formation in Small Molecules and Proteins (빛 에너지를 이용한 소분자 및 단백질 내 새로운 탄소-황 결합생성 원리 규명)
----	---

□ 연구 요약

연구 필요성	태양빛과 같은 풍부한 빛에너지를 화학에너지로 전환하는 광합성은 자연이 구현한 가장 아름다운 에너지 전환 과정 중 하나로, 지속 가능한 에너지 생산과 친환경적인 화학 반응 개발을 위해 인류가 모방하고자 하는 대표적인 화학 시스템이다. 이러한 원리를 인공적으로 구현하기 위해서는 빛을 흡수하고 그 에너지를 화학 반응에 전달하는 감광제(photosensitizer)가 필요하다. 기존의 고성능 감광제는 복잡한 구조의 유기분자를 여러 단계에 걸쳐 합성하거나, 루테늄·이리듐과 같이 희소하고 값비싼 귀금속을 사용하는 경우가 많아 경제성과 지속가능성 측면에서 한계가 있다. 따라서 지구상에 풍부하고 상대적으로 저렴한 1주기 전이금속을 이용해 단순하면서도 효율적으로 작동하는 새로운 광반응 시스템을 개발하는 것이 중요한 과제로 떠오르고 있다. 특히 니켈은 다양한 산화상태를 오갈 수 있어 화학결합을 형성하는 촉매로 널리 활용되고 있지만, 니켈 자체가 빛을 흡수하여 에너지를 얻고 이를 직접 결합 형성 반응으로 연결하는 원리는 아직 충분히 활용되지 못하고 있다. 본 연구에서는 이러한 한계를 극복하기 위해 가시광선을 흡수하고 그 에너지를 이용해 새로운 화학결합을 형성할 수 있는 최소한의 니켈 중심 광활성 구조를 구현하고자 하였다. 이러한 구조가 작은 분자뿐 아니라 단백질과 같은 복잡한 생체분자 환경에서도 작동할 수 있는지를 규명함으로써, 값비싼 귀금속과 복잡한 감광제에 대한 의존도를 낮추고 향후 빛으로 구동되는 친환경 촉매와 인공 광효소를 개발할 수 있는 새로운 설계 원리를 제시하고자 하였다.
연구성과/ 기대효과	이번 연구에서는 값싸고 지구상에 풍부한 니켈 금속을 이용하여, 복잡한 분자 합성이나 별도의 감광제 없이도 반응 용액상에서 (in situ) 광반응성을 나타낼 수 있는 최소 분자구조를 규명했다는 점이다. 연구팀은 니켈과 황을 포함하는 단순한 배위구조가 가시광선을 흡수하여 스스로 광활성 상태를 형성하고, 이를 통해 새로운 탄소-황(C-S) 결합을 만들 수 있음을 확인하였다. 즉, 빛을 흡수하는 감광제와 화학결합을 만드는 금속촉매의 역할을 하나의 최소 금속보조인자 안에 통합함으로써, 기존 광촉매 시스템을 한층 단순화할 수 있는 새로운 개념을 제시하였다. 특히 연구팀은 이러한 원리가 특정 소분자 반응에만 국한되지 않음을 보여주었다. 새롭게 규명한 니켈-싸이올(Ni-thiolate) 광활성 구조를 소분자 수준에서 구현하여 가시광선에 의한 C-S 결합 형성을 확인했으며, 나아가 황을 포함하는 아미노산인 시스테인(cysteine)을 배위자로 활용하는 단백질 내부에서도 동일한 광화학적 원리를 구현하였다. 이는 단순한 금속-아미노산 조합만으로도 단백질 안에 빛으로 구동되는 반응 중심을 형성할 수 있음을 보여주는 결과로, 향후 인공 광효소를 설계하는 데 활용할 수 있는 새로운 최소 단위의 금속보조인자를 제시한다. 또한 이번 연구에서는 여러 분야의 연구진과의 공동연구를 통해 단순히 광반응의 가능성을 확인하는 데 그치지 않고, 반응이 일어나는 근본적인 광화학적·전자구조적 메커니즘을 다각적으로 규명하였다. 정상상태 및 시간분해 분광학을 비롯한 다양한 분광학적 분석과 금속 중심의 배위구조, 전자구조 분석, 반응성 및 기작 연구를 종합하여, 빛을 흡수한 니켈-싸이올 중심에서 어떠한 전자적 변화가 일어나고 이것이 금속-황 결합의 반응성과 C-S 결합 형성으로 어떻게 이어지는지를 체계적으로 추적하였다. 이러한 융합적 접근을 통해 관찰된 광반응을 현상적으로 제시하는 것을 넘어, 1주기 전이금속 착물의 광화학적 거동을 이해할 수 있는 분자 수준의 작동 원리를 제시했다는 점에서도 의미가 크다.

Abstract (영문)	The demand for more efficient, cost-effective, and biocompatible photosensitizers remains pressing. Here, we elucidate the molecular basis for the activity of readily synthesized mononuclear nickel (Ni)-thiolate species in visible-light-driven cross-coupling under aqueous conditions. The in situ-generated mononuclear Ni-thiolate complex adopts a square-planar geometry with a singlet ground state, absorbs visible light, and undergoes ligand-to-metal charge transfer upon excitation, generating an Ni(I) intermediate that enables oxidative addition of aryl halides followed by carbon-sulfur bond formation. The simplicity, reactivity, and tunability of this minimal photoreactive metallocofactor further enable various light-mediated thiol transformations, including the modification of cysteine residues within proteins. These findings establish a minimal design principle for inorganic photosensitizers that operate without exogenous chromophores and are intrinsically compatible with diverse organic and genetically encoded thiols, providing a foundation for designing minimal light-responsive metallocofactors effective across various molecular scales.
연구 추진 배경, 성과, 기대효과 등	빛에너지를 화학반응에 활용하기 위해서는 빛을 흡수하고 이를 화학에너지로 전환하는 광감각제가 필요하다. 그러나 기존의 고성능 광감각제는 복잡한 유기분자나 고가의 귀금속을 사용하는 경우가 많아, 효율성과 경제성, 생체적합성을 동시에 갖춘 새로운 광반응 시스템의 개발이 요구되어 왔다. 이에 본 연구에서는 지구상에 풍부하고 비교적 저렴한 1주기 전이금속인 니켈을 이용해, 단순한 구조만으로 가시광선을 흡수하고 화학결합을 형성할 수 있는 광활성 금속보조인자를 개발하고자 하였다. 연구팀은 반응 과정에서 쉽게 만들 수 있는 단핵 니켈-싸이올레이트(Ni-thiolate) 착물 자체가 외부 광감각제 없이 가시광선을 흡수하여 탄소-황(C-S) 결합 형성을 유도할 수 있음을 밝혔다. 또한 다양한 분광학적 분석과 공동연구를 통해 빛을 흡수한 니켈-싸이올레이트에서 리간드-금속 전하이동(LMCT)이 일어나 Ni(I) 중간체가 형성되고, 이후 결합 형성 반응으로 이어지는 광화학적 작동 원리를 규명하였다. 나아가 이러한 최소형 광반응성 금속보조인자가 소분자뿐 아니라 단백질 내 시스테인 잔기의 광화학적 변환에도 적용될 수 있음을 입증하였다. 이번 연구는 복잡한 발색단이나 고가의 귀금속 없이 작동하는 최소형 무기 광감각제의 설계 원리를 제시했다는 데 의미가 있다. 특히 다양한 유기 싸이올뿐 아니라 단백질과 같은 생체분자에서도 적용할 수 있어, 향후 경제적이고 지속가능한 광촉매 개발, 단백질의 선택적 광수식, 맞춤형 인공 광효소 설계 및 새로운 친환경 합성기술 개발에 활용될 것으로 기대된다. 또한 1주기 전이금속의 광화학적 반응성을 이해하고 새로운 광활성 메탈로코펙터를 설계하는 기초 모델로 활용될 수 있다.
Journal Link	doi.org/10.1016/j.chempr.2026.103205

□ 본문

연구 내용	“니켈로 빛을 화학반응에 쓴다” 서울대 송윤주 교수팀, 빛으로 새로운 화학결합 만드는 ‘최소형 광반응성 금속보조인자 원리 규명’ 원리 규명하고 단백질에서도 구현. 국제 학술지 'Chem'에 게재 ○ 빛 에너지를 화학반응에 활용하는 광촉매 기술은 에너지 소비와 화학폐기물을 줄일 수 있는 친환경 합성법으로 주목받고 있으며, 새로운 합성 기술에도 폭넓게 활용되고 있다. 그러나 현재 널리 사용되는 고성능 광감각제 가운데 상당수는 이리듐이나 루테튬과 같이 지구상에 희소하고 값비싼 귀금속을 사용하거나, 복잡한 유기분자의 합성을 필요로 한다는 한계가 있다.
---------------------	---

	○ 서울대학교 송윤주 교수 연구팀(제1저자 최예린, 박민찬)은 이러한 한계를 극복하기 위해 지구상에 비교적 풍부하고 가격이 저렴한 1주기 전이금속인 니켈(Ni)에 주목했다. 연구팀은 니켈과 황을 포함하는 간단한 분자구조만으로 가시광선을 흡수하고 그 에너지를 새로운 화학결합 형성에 이용할 수 있는 ‘최소형 광반응성 금속보조인자(metallocofactor)’의 설계 원리를 밝혀냈다. ○ 연구팀은 니켈에 황을 포함하는 싸이올레이트(thiolate)가 결합하면 매우 단순한 구조임에도 가시광선을 흡수하고 화학반응을 유도할 수 있다는 점에 주목했다. 이를 이용해 단핵 니켈-싸이올레이트(Ni-thiolate) 착물을 형성하고, 별도의 외부 광감각제 없이 빛에너지만으로 새로운 탄소-황(C-S) 결합을 만드는 광반응성을 구현했다. 특히 이 분자는 복잡한 합성과정 없이, 니켈과 싸이올을 적절한 반응 조건에서 섞어주기만 하면 즉석(in situ)으로 만들 수 있었다. ○ 연구팀은 국내 연구진(서울대 김지환 교수팀, 주상훈 교수팀, 카이스트 김태규 교수팀, 연세대 김우재 교수팀)과의 긴밀한 공동연구를 통해, 다양한 분광학적·광물리학적 분석을 수행해 이 초소형 촉매가 작동하는 과정도 분자 수준에서 규명했다. 니켈-싸이올레이트가 가시광선을 흡수하면 리간드에서 금속으로 전자가 이동하는 ‘리간드-금속 전하이동(LMCT)’이 일어나고, 이어 니켈 중심의 전자구조와 배위환경이 변화하면서 반응성이 높은 상태가 형성되는 것을 제안하였다. 이러한 과정에서 생성되는 Ni(I) 중간체가 할로젠화물과 반응하고 최종적으로 새로운 C-S 결합 형성으로 이어지는 메커니즘을 제시했다. 이는 반응의 성공 여부를 보여주는 데 그치지 않고, 1주기 전이금속이 빛에너지를 받아 화학반응을 일으키는 근본적인 원리를 규명했다는 점에서 의미가 있다. ○ 연구팀은 한 걸음 더 나아가, 최소형 광반응성을 가지는 니켈 분자를 단백질 환경에서도 구현했다. 황을 포함하는 아미노산인 시스테인을 금속 결합 부위에 갖는 단백질에 니켈을 도입하자, 단백질 내부에서 형성된 니켈-싸이올레이트 구조 자체가 가시광선을 흡수하는 광활성 중심으로 작동했다. 실제로 빛을 조사했을 때 단백질의 시스테인에 새로운 탄소-황 결합이 형성되는 것을 확인함으로써, 소분자에서 발견한 광화학 원리를 복잡한 생체분자 환경으로 확장할 수 있음을 입증했다. 이는 향후 빛으로 작동하는 맞춤형 인공효소 등을 개발하는 새로운 출발점이 될 것으로 기대된다.
연구 결과	이번 연구는 매우 단순한 니켈-싸이올레이트 구조가 어떻게 빛을 흡수하고 화학결합 형성으로 이어지는지를 분자 수준에서 규명하고, 광반응성 금속보조인자의 최소 설계 원리를 제시했다는 데 의미가 있다. 앞으로 니켈뿐 아니라 다양한 1주기 전이금속으로 이러한 원리를 확장해 경제적이고 지속가능한 광촉매와 빛으로 작동하는 인공효소를 개발하는 데 활용할 수 있을 것으로 기대한다. 이번 연구결과는 셀 프레스(Cell Press)가 발행하는 화학 분야 국제학술지 ‘켄(Chem)’에 게재되었다.
그림 설명 (선택)	빛을 받아 작동하는 초소형 니켈 촉매의 작동 원리. 니켈-싸이올레이트가 가시광선을 흡수하면 전하이동(LMCT)을 거쳐 반응성이 높은 Ni(I) 중간체가 형성되고, 이를 통해 새로운 탄소-황 결합이 만들어진다. 이러한 원리는 작은 유기분자뿐 아니라 단백질의 시스테인 잔기에도 적용할 수 있었다.

