

할로젠, 인, 규소를 포함하는 유기화합물에 대한 REACH 제도 대응 물성 예측: 정상끓는점, 인화점, 밀도, 수용해도

양대륙[†]

고려대학교 화공생명공학과

(dryang@korea.ac.kr[†])

전세계적으로 화학물질에 대한 체계적인 관리의 필요성이 이슈화되고 있으며 이에 따라 각국에서는 REACH 제도와 같은 엄격한 화학물질 규제제도를 마련하고 있다. 따라서 제품 수출 시 요구되는 물성정보를 실험을 반복할 필요없이 정확한 예측모델을 통해 제공할 수 있다면 관련된 비용을 획기적으로 절감할 수 있다. 물성예측모델은 QSPR (Quantitative Structure-Property Relationship)을 이용하여 만들어졌다. QSPR이 의미하는 바와 같이 유기화합물의 분자구조와 물성을 연결시키기 위하여 Density Functional Theory를 기반으로 한 양자역학적 계산을 통해 유기화합물의 3D 분자구조를 최적화하였으며 이를 바탕으로 각 분자 당 1900개 이상의 Descriptor를 계산하였다. QSPR 알고리즘은 Forward Selection Regression, Genetic Algorithm, Multi Linear Regression, Neural Network로 구성되었으며 이 중 Forward Selection Regression과 Genetic Algorithm은 계산된 모든 Descriptor 중 각 물성과 상관관계가 높은 Descriptor를 결정하는 역할을 수행하고 Multi Linear Regression과 Neural Network는 각각 선별된 Descriptor와 물성간에 Linear, Nonlinear Relationship을 분석하는 역할을 수행한다. 본 발표에서는 REACH 제도 대응 물성인 정상끓는점, 인화점, 298.15K에서의 밀도, 수용해도에 대한 QSPR 모델 예측 결과를 발표한다.