

1. 서론 : 시간 분해 회절법

화학 반응은 원자나 분자가 서로 작용하여 결합이 분해되거나 생성되는 동적인 과정이다. 일반적으로 이러한 동적인 과정은 매우 빠른 시간 내에 일어나기 때문에(보통 수 펨토초에서 수 피코초 내에 일어난다) 화학 반응 도중에 나타나는 중간체(transient structure)의 구조 변화나 분자의 움직임을 실시간으로 잡기 위해서는 매우 높은 시간 분해능이 필요하다. 이러한 중간체의 구조 동역학(structural dynamics)은 그 대상이 되는 분자의 화학적/생물적 기능에 매우 중요한 정보를 제공하기 때문에 실시간 분자 동역학 연구는 복잡한 화학적/생물적 시스템의 메커니즘 규명 연구에 필수적이라고 할 수 있다. 지난 10여 년간의 펨토초 레이저의 발달로 지금은 보통 수십

못한다. 이런 관점으로 볼 때 시간 분해 회절 기술은 분자 내 모든 핵 좌표에 대한 정보를 매우 높은 공간 분해능으로 제공하기 때문에 실시간 구조 동역학 연구에 매우 중요한 도구임을 알 수 있다¹⁾.

시간 분해 회절법은 회절 펄스로 전자나 X선을 사용하는 방법으로 크게 나눌 수 있다. 그 실험적 방법은 그림 1에 나타나 있다. 연구하고자 하는 분자 시스템, 예를 들어 나노 입자나 단백질에 외부에서 온도나 빛 펄스로 새로운 반응을 시작 시키면, 이 분자 시스템에서는 여러 가지 구조의 변화가 일어날 것이다. 이 변화의 시간대는 빠르게는 펨토초 대에서 느린 것은 피코초, 나노초, 더 나아가서 밀리초가 걸리는데, 이러한 구조변화를 직접적으로 알아내기 위해서 회절에 사용할 수 있는 입자 펄스, 즉 극초단 전자 펄스나 극초단 X선 펄스를 반응이 일어나고 있는

특집 ■ Femtochemistry I

시간 분해 회절법 (Time-resolved Diffraction)

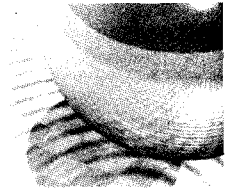
김태규*, 이효철*

펨토초 정도의 시간 분해능을 가지고, 여러 가지 분광학적 방법을 통해서 실시간 분자 동역학이 연구되고 있다. 기본적으로 시간 분해 분광법에서는 짧은 펄스 형태의 레이저인 여기(pump) 펄스로 대상이 되는 분자에 반응을 시작 시키고 원하는 시간 차이를 두고 탐색(probe) 펄스를 보내어 원하는 원자나 분자의 운동을 잡아낸다. 이러한 펌프-프로브 방법은 지금까지 간단한 분자의 구조 동역학이나 때로는 복잡한 단백질 분자에 적용되어 성공적으로 실시간 동역학을 묘사하는데 큰 역할을 하였지만 그 방법 자체가 분자 에너지 레벨 사이의 전이 현상에 기초하기 때문에 화학 반응의 도중에 생성되는 중간체의 3차원적 구조(예를 들면 원자-원자 사이의 거리 및 각도에 대한 정보)에 대한 직접적이고 정확한 정보를 제공하지

물질에 보내어 그 회절 신호를 잡아내게 된다. 반응을 시킬 때 사용한 레이저 펄스와 이 회절 펄스 사이의 시간차를 바꾸어 주면서 회절 신호를 얻게 되면 그 회절 신호는 각 시점에서의 구조 변화에 대한 직접적인 정보를 담게 되는 것이다. 따라서 시간 분해 회절 실험에서는 시간 분해능을 결정하는 전자나 X선 펄스의 펄스 폭이 상당히 중요하다고 할 수 있다.

이 글에서는 시간 분해 회절법 연구 주제를 중심으로 전 세계에서 진행 중인 이 분야의 현황을 소개하고 이 발전 방향을 모색하려고 한다. 크게 두 부분으로 나누어 첫 번째는 회절 펄스로 전자를 사용하는 시간 분해 전자 회절법에 대해서 알아보고 두 번째는 X선을 회절 펄스로 이용하는 시간 분해 X선 회절법에 대해서 소개하도록 하겠다.

* KAIST 화학과 구조반응동역학연구실



Time Resolved Diffraction Techniques

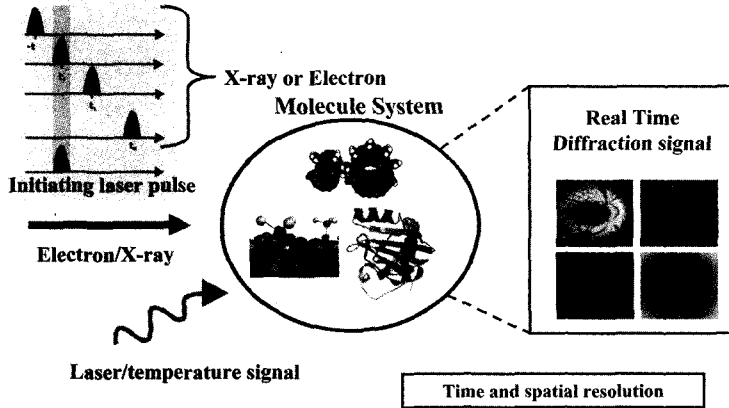


그림 1. 시간 분해 회절법의 개념.

Time Resolved Electron Diffraction Experiment

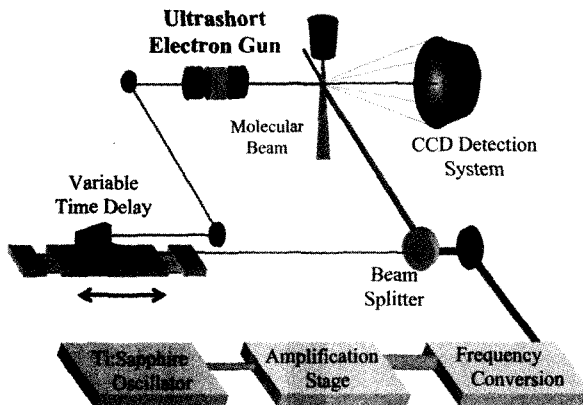


그림 2. 시간 분해 전자 회절법의 실험 장치 개략도^(2,3).

2. 시간 분해 전자 회절법을 이용한 다양한 화학 반응의 연구

시간 분해 전자 회절법은 회절 펄스로 전자를 사용한다. 시간 분해 전자 회절법의 개략적인 실험 장치를 그림 2⁽²⁾에 나타내었다. 현재 시간 분해 전자 회절법에서 가장 많이 쓰이는 펨토초 광원 레이저는 안정된 출력을 보이는 증폭된 모드-락 타이타늄 사파이어 레이저이다. 발전된 펨토초 레이저 펄스는 무기물질 비선형 광학 결정에 의해 가시광선 또는 자외선 영역대로 파장이 가변되고 둘로 갈라진다. 하나는 시료에 조사되어 원하는 분자 시스템에 반응을 시작시킨다. 반면 다른 하나의 펄스는 일정한 시

간 뒤에 전자총 내의 광음극판(photocathode)에 조사되어 짧은 시간 폭을 가지는 전자 펄스를 생성시킨다. 생성된 전자 펄스는 반응이 시작된 뒤 일정한 시간 간격 후에 시료에 조사되어 회절 패턴을 만들어 내게 된다. 형성된 회절 패턴은 CCD 카메라와 같은 검출기에 영상으로 저장된다. 이 때 펨토초 레이저 펄스와 전자 펄스 사이의 특정 시간 간격을 두고 얻어진 영상에 참조 영상(보통 전자 펄스가 레이저 펄스보다 먼저 시료를 통과하여 얻어진 영상)을 수식적으로 제거하여 일정 시간 동안의 시료 내의 동역학 구조 정보를 얻어 낼 수 있다(그림 3). 따라서 시작 레이저 펄스와 전자 펄스 사이의 시간 차이를 변화 시켜가며 영상을 얻으면 원하는 분자 시스템의 시간 분

시간 분해 회절법 (Time-resolved Diffraction)

해 정보를 얻을 수 있다. 이 방법은 전자 자체가 X선 보다 훨씬 더 강한 산란 효과를 가지기 때문에 그 특성이 잘 응용될 수 있는 기체 상태에서 일어나는 분자들의 구조 동역학 연구⁽³⁻⁵⁾, 표면이나 얇은 막에서 일어나는 동역학 연구⁽⁶⁻⁷⁾들에 주로 이용되었다.

2.1 기체 상 분자들에 대한 구조 동역학 연구

시간 분해 전자 회절 장치는 지난 십여 년간의 연구로 안정성, 감도와 그 시간, 공간 분해능이 크게 향상되었다. 현재 그 성능은 시간 분해능이 약 수 피코초, 공간 분해능이 약 0.01 옴스트롱에 이르며, 전체의 1% 정도의 화학 변화도 충분한 감도를 가지고 관찰할 수 있게 되었다. 시간 분해 전자 회절법의 이러한 성능을 가지고 기체 상태에서 일어나는 여러 종류의 반응들의 시간에 따른 구조 변화를 관찰할 수 있었는데 그 중 가장 대표적이고 중요한 결과는 $C_2F_4I_2$ 에서 요오드 원자가 분해될 때의 중간체 규명 연구이다⁽³⁾. $C_2F_4I_2$ 에 자외선 영역의 빛을 조사시키게 되면 요오드 원자가 연속적으로 분해되는 광분해 현상이 일어나는데 하나의 요오드 원자가 분해되고 생성되는 중간체($C_2F_4I\cdot$)의 구조 규명은 유기화학에서의 입체 반응의 선택성을 결정할 수 있는 중요한 문제이기 때문에는 화학에서 상당히 중요한 이슈가 되어 왔다(그림 4-1). 이 연구에서는 펨토초 레이저를 전자총 내의 광음극관에 조사시켜 생성된 시간 폭이 약 1 피코초 정도인 전자 펄스를 $C_2F_4I_2$ 가 267nm의 펨토초 레이저 펄스를 맞고 분해되고 있는 동안 다시 조사시켜 생성되는 반응 중간체의 구조를 회절 패턴을 통해 관찰하였다. 이 연구

를 통해 밝혀진 반응 중간체의 구조는 그림 4-2에 나타난 것처럼 남아있는 요오드 원자가 두 개의 탄소 원자와 동시에 결합한 삼원자 링(bridged structure) 구조가 아니라 하나의 탄소에만 결합되어 있는 구조(classical structure)라는 것이 밝혀졌다. 이는 기존의 유기화학에서 입체 반응 선택성을 설명할 때 흔히 가정하고 있는 삼원자 링 구조가 아니라는 것을 처음으로 실험적으로 밝힌 놀랍고도 중요한 결과였는데 링 구조가 아닌 이유는

Ground State Structural Analysis

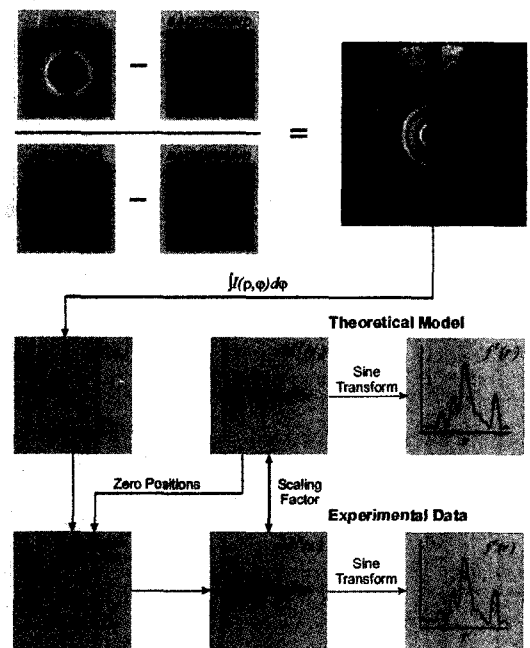


그림 3. 시간 분해 전자 회절법의 구조 분석 과정의 개략도⁽³⁾.

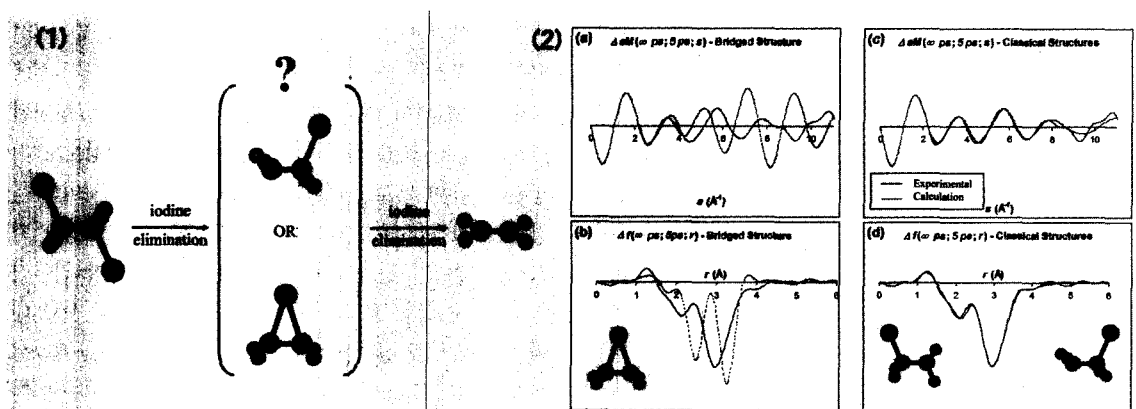
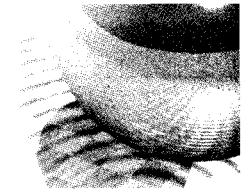


그림 4. (1) $C_2F_4I_2$ 분자의 I 원자 분해 과정 (2) $C_2F_4I_2$ 광분해 과정의 시간 분해 전자 회절법 결과와 규명된 C_2F_4I 라디칼의 구조⁽³⁾.



바로 F 원자들의 영향임이 이후에 이론적으로 뒷받침되었다(F 대신에 H 원자들이 치환되면 삼원자 링 구조를 가질 것으로 예상되고 실제 본 실험실에서 얻은 최근 결과는 그것을 뒷받침하고 있다). 이 결과 외에 현재까지 시간 분해 전자 회절법은 유기금속화합물⁽⁴⁾이나 할로젠 알칸⁽³⁾, 탄화수소화합물^(5,8) 등에 적용되어, 피코초 시간 분해능 내에서 여러 화합물들의 반응 동역학이 밝혀지게 되었다. 궁극적으로는 단백질이나 DNA와 같은 거대 분자에 적용되어, 생체 내에서 일어나는 여러 반응들의 실시간 구조 동역학 연구에 응용될 것이라고 전망된다.

2.2 표면에서 일어나는 구조 동역학 연구

표면에서 일어나는 분자집합체(molecular assembly)들의 구조 변화 및 그 반응은 화학뿐 아니라 생체 내에서 일어나는 반응을 이해하는데 매우 중요하다. 따라서 최근의 시간 분해 전자 회절법은 비단 기체 상태에서 일어나는 반응뿐 만 아니라 이러한 표면에서 일어나는 분자 집합체들의 반응의 동역학 연구에 그 초점을 맞추고 있다. 가장 대표적인 연구 결과로 고체 표면에 빠른 시간 내에 급격한 온도 변화가 일어났을 때 그 위에 흡착된 물 분자들의 시간에 따른 결정 구조 변화를 실시간으로 관찰한 결과⁽⁶⁾를 예를 들 수 있다(그림 5). 표면의 끝이 염소 원자로 치환된 친수성 규소 표면 위에 얼음 형태의 물 분자를 흡착 시킨 뒤 적외선 영역의 펨토초 레이저를 조사시켜서 짧은 시간 내에 표면의 급격한 온도 상승을 유도하였다. 이러한 급격한 온도 상승에 의해 잘 정돈된 얼음 형태의 물 분자의 결정 구조가 변하는데, 이 변화를 관찰하기 위해 자외선 레이저 펄스 조사 후 일정 시간 간격을 두고 수 피코초 전자 펄스를 고체 표면에 조사하여 그 회절 패턴을 관찰, 분석하였다. 그 결과 평형에 도달하기 전에 물 분자들의 규칙적인 결정 구조의 변화를 실시간으로 관측할 수 있었고, 다시 새로운 안정된 결정 구조로 도달하는 시간을 측정할 수 있었다. 이 연구뿐 만 아니라 시간 분해 전자 회절법을 알루미늄 표면에 적용하여, 고체 알루미늄이 액체 알루미늄으로 변할 때 평형에 도달하기 전 알루미늄 결정 구조(원자의 공간적 배치)의 시간에 따른 변화를 관측한 결과도 발표되었다⁽⁹⁾. 아직 많은 연구 결과들이 발표되지는 않았지만 이러한 연구들은 시간 분해 전자 회절법이 표면에서의 시간에 따른 결정 구조

변화와 흡착 구조 변화 연구에 응용될 수 있다는 사실을 보여준다. 현재 이러한 방향으로 시분해 전자 회절법 연구가 활발히 수행되고 있다.

3. 시간 분해 X선 회절법을 이용한 구조 동역학 연구

앞에서 말한 시간 분해 전자 회절법은 매우 높은 시간/공간 분해능을 가지고 그 응용 가능성이 매우 높은 좋은 연구 도구가 될 수 있지만 이 방법에는 몇 가지 한계가 존재한다. 전자는 자체의 산란 강도가 매우 크기 때문에 대상이 되는 분자 시스템에 대한 침투 깊이가 매우 얕다. 따라서 시간 분해 전자 회절법을 액체나 용액 상태에 있는 분자 시스템에 적용하는 것은 어렵다고 할 수 있다. 이런 제약은 전자 펄스 대신 회절 펄스로 X선 펄스를 사용하면 극복할 수 있다. 이런 방법을 시간 분해 X선 회절법이라고 한다. 현재까지 개발된 시간 폭이 매우 짧은 X선 펄스를 얻을 수 있는 방법들은 제 3세대 입자가속기(third-generation synchrotron source), 기체가 고체 표면에서 나오는 고차 -하모닉(high-order harmonic generation), 레이저 유도 플라즈마(laser-produced plasma source), 자유전자레이저(free electron laser) 등이 있다. 제 3세대 입자 가속기를 제외하고 다른 방법들에서 생성되는 X선 펄스는 낮은 세기 강도를 가지기 때문에 시간 분해 회절 실험에 응용되기엔 아직까지 무리가 있다. 최근에 입자가속기와 검출기 기술의 발달로 제 3세대 입자가속기의 특수 작동 모드에서 생성되는 X선 펄스의 시간 폭은 약 100 피코초 정도에 도달하였다⁽¹⁰⁾. 제 3세대 입자 가속기의 특수 작동 모드에서 나오는 X선 펄스를 사용한 액체 또는 용액 상태의 분자 시스템이나 단백질 단결정 안에서 일어나는 화학 반응의 구조 동역학 연구가 활발히 수행되고 있는 중이다. 만일 일부 선진국에서 설치 중인 자유전자레이저가 현실화된다면 시간 분해 X선 회절법의 시간 분해능은 더욱 더 향상될 것이라고 전망된다.

3.1 액체 상태의 시간 분해 X선 회절법 연구

일반적으로 액체 상태에서 일어나는 반응은 우리가 관심 있는 용질 분자 주위에 수 많은 용매 분자가 존재하기

시간 분해 회절법 (Time-resolved Diffraction)

때문에 기체 상태 보다 훨씬 더 많은 정보를 담고 있으며 복잡하다. 용매 분자들은 때때로 용질 분자를 감싸는 구조를 형성하여 용질 분자에서 일어나는 반응을 직간접적으로 촉진 시키거나 방해한다. 이러한 과정에서 일어나는 동역학적 정보를 얻기 위해 주로 초고속 분광법이 사용되었지만 앞서 기술하였듯이 화학 반응 도중에 일어나는 변화에 대한 직접적인 구조 정보를 얻기가 어려웠다. 하지만 최근에 제 3세대 입자가속기의 특수 작동 모드에서 나오는 X선 펄스를 회절 펄스로 사용하여 CCl_4 용액 안의 I_2 분자의 광분해 반응에 대한 실시간 구조 정보(원자-원자 사이의 거리)를 얻은 실험 결과가 처음으로 발표되었다^[11]. 이러한 시간 분해 X선 회절 기술 장치의 개략적인 모식도를 그림 6-1에 나타내었다. 시간 분해 전자 회절 실험과 비슷하게 펄드초 레이저 펄스에 의해 CCl_4 용매 안의 I_2 분자가 들뜬 상태로 전이되어 광분해 된다. 분해된 I 원자는 CCl_4 용매 분자에 잡혀 다시 I_2 분자로 재결합(geminate recombination)되거나 CCl_4 용매 분자들을 빠져 나와 다른 I 원자와 재결합(non-geminate recombination) 할 수 있다. 이 연구에서는 복잡한 용액 내에서의 용매-용질 분자 사이의 실시간 반응을 연구하기 위해서, 레이저를 조사 시킨 후 일정 시간 간격으로 입자가속기의 특수 작동모드에서 나오는 100 피코초 복색(polychromatic) X선을 I_2/CCl_4 용액 샘플에 조사시켜 얻어지는 회절 패턴을 관찰, 분석하였다. 그 결과 반응 중에 일어나는 I 원자 사이 그리고 주변에 있는 CCl_4 분자

들 사이의 결합 길이 변화를 구하여 용액 상태에서 일어나는 반응에 대한 실시간 구조 동역학 정보를 도출할 수 있었다(그림 6-2). 이러한 액체 상태에서의 시간 분해 X선 회절법은 그 실험상의 어려움으로 아직까지는 많이 연구되고 있지 않다. 또한 복잡한 용매 분자의 동역학을 이해하기 위해서는 Molecular Dynamics Simulation과 같은 이론 계산도 함께 수반되어야 한다^[12]. 최근에 액체 상태의 시간 분해 X선 회절법의 응용성을 넓히기 위해 보다 크고 복잡한 분자에 대한 연구가 진행 중에 있다.

3.2 시간 분해 라우에 X선 결정학 - 단백질 단결정의 실시간 구조 변화 연구

단백질의 작용 과정에서 일어나는 직접적이고 실시간적인 구조 정보를 얻기 위해 개발된 방법이 바로 시간 분해 라우에 X선 결정학이다^[13,14]. 이 방법은 실험 장치나 방법은 액체 상태의 시간 분해 X선 회절법과 거의 같지만 액체 시료 대신에 좋은 회절 패턴을 보이는 단백질 단결정을 쓴다는 것이 다른 점이다. 이 연구에 사용된 가장 대표적인 예로 광흡수 단백질인 Photoactive Yellow Protein(PYP)를 들 수 있다. PYP는 여러 박테리아의 광합성 현상에 관여하는 전체적인 신호 전달의 시작점으로 알려져 있다. PYP는 푸른색 영역의 빛을 흡수하여 그림 7-1에 나타낸 광순환 과정을 거치게 되는데 과정중에 일어나는 실시간 분자 구조 변화는 생체 내의 신호 전달 메

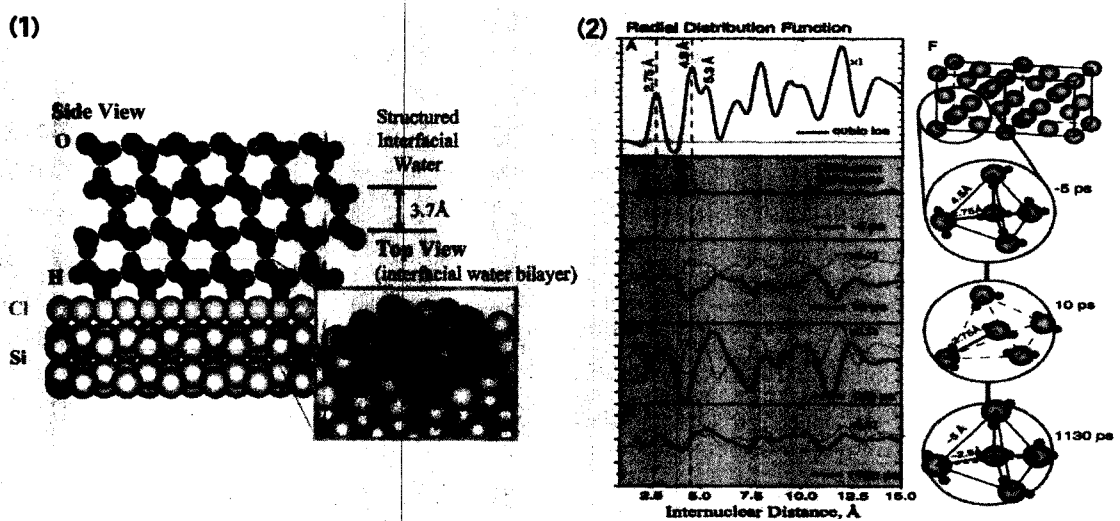


그림 5. (1) 염소 원자가 끝에 달려있는 규소 고체 표면에 흡착된 물 분자의 구조 (2) 시분해 전자 회절법으로 밝혀진 급격한 온도 상승 후 시간에 따른 물 분자의 구조 변화^[6].

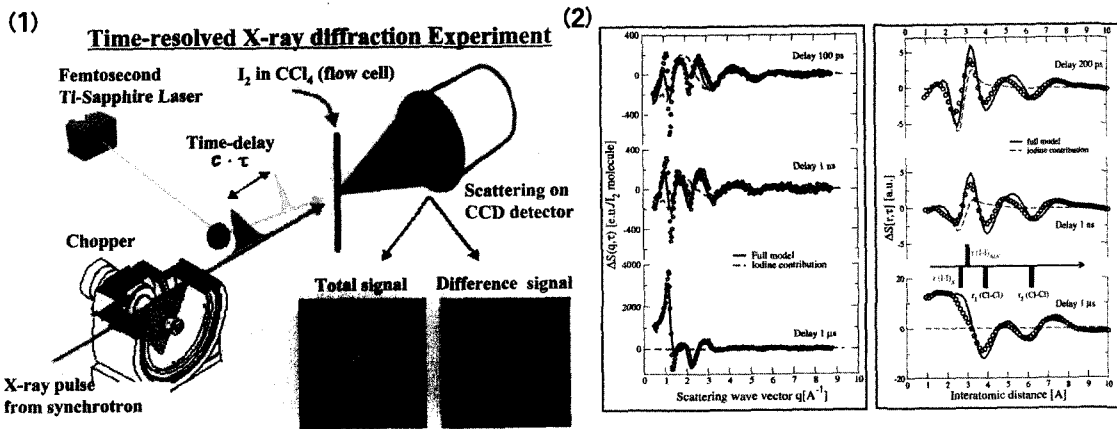
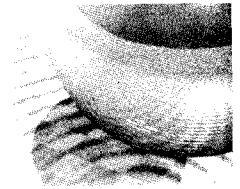


그림 6. (1) 시간 분해 X선 회절 실험의 장치도 (2) CCl₄ 용액 속의 I₂ 분자의 시간 분해 X선 회절 실험 결과^[11].

커니즘에 매우 중요한 정보를 제공한다. 최근의 연구 결과에서는 이 PYP를 7 나노초의 펄스 폭을 가지는 가시광선 영역의 레이저로 광순환 반응을 시작 시킨 뒤 일어나는 구조 변화를 제 3세대 입자 가속기에서 나오는 100 피코초 X선 펄스를 조사시켜 관측하였다^[13]. 레이저 펄스 조사 후 1 나노초에서 1 밀리초 사이의 여러 시간대에서 얻은 단백질의 구조 그림 7-2는 일종의 “분자 영화”로서 이 단백질의 광순환 과정에서 일어나는 구조 변화를 실시간으로 보여준다. 그러나 광순환 과정에서 나타나는 일부 중간체의 3차원적인 구조와 상세 동역학적인 면은 아직 자세히 밝혀지지 않았으며 이를 규명하기 위한 연구가 현재 진행 중이다. 또한 PYP 뿐 아니라 myoglobin, hemoglobin, bacteriorhodopsin 등과 같은 다른 광흡수 단백질의 실시간 구조 변화에 대한 연구도 이루어지고 있다.

3.3 시간 분해 대각 X선 산란법 - 용액 중의 단백질의 실시간 구조 변화 연구

앞에서 언급한 시간 분해 라우에 결정학은 좋은 회절 패턴을 만들어 내기 위해서 단백질 단결정이 필요하다는 단점이 있다. 따라서 실제 단백질이 작용하고 반응하는 용액 하에서의 구조변화를 정확히 묘사 할 수 있는가 하는 의문이 남는다. 따라서 용액 중의 단백질의 구조 분석과 변화를 관찰할 수 있는 도구가 필요하다. 이러한 목적을 위해 소각 X선 산란법(small-angle X-ray scattering)이 사용되었다. 그 동안 소각 X선 산란법을 사용하여 단백

질 전체의 모양이나 구조에 대한 정보는 얻을 수 있었지만, 작은 범위의 산란 벡터($q=4\pi\sin\theta/\lambda$, λ : X선 파장, θ : 산란 각도) 안에 있는 제한된 정보로 인해 단백질 분자의 미세 구조 및 도메인 구조를 규명하는 것은 힘들었다. 따라서 측정하는 산란 벡터 범위를 넓은 범위로 확장시켜야 한다. 이 측정 방법을 대각 X선 산란법이라고 하는데, 신호/잡음비가 좋지 않아서 그 동안 그 측정이 힘들었다. 최근에 들어서야 강한 세기 강도를 가지는 제 3세대 입자 가속기를 이용하여 용액 중의 단백질에 대해서 대각 X선 산란법을 적용하여 그 연구가 이루어지고 있다^[15](그림 8). 한편 대각 X선 산란법에 앞서 기술한 시간 분해 기술을 적용한 시간 분해 대각 X선 산란법은 아직까지는 실험이 이루어지고 있지 않아 그 연구 결과가 거의 전무한 상태이다. 그러나 PYP의 광순환 과정에서 나타나는 여러 가지 중간체들에 대한 정보를 얻을 수 있다는 이론 분석 결과가 보고 되었고 현재 연구가 진행 중이다^[16].

4. 맺음말

이상에서 살펴 본 바와 같이 전자 및 X선을 사용하는 시간 분해 회절법은 화학반응에서 일어나는 원자 및 분자에 대한 3차원적인 구조 정보를 직접적으로 제공한다. 그 적용 대상도 아주 작은 기체 상태의 분자에서부터 복잡한 유기 분자 및 유기 금속 분자, 그리고 최근에는 표면 위의 분자 집합체와 DNA 및 단백질 분자에 이르기까지

시간 분해 회절법 (Time-resolved Diffraction)

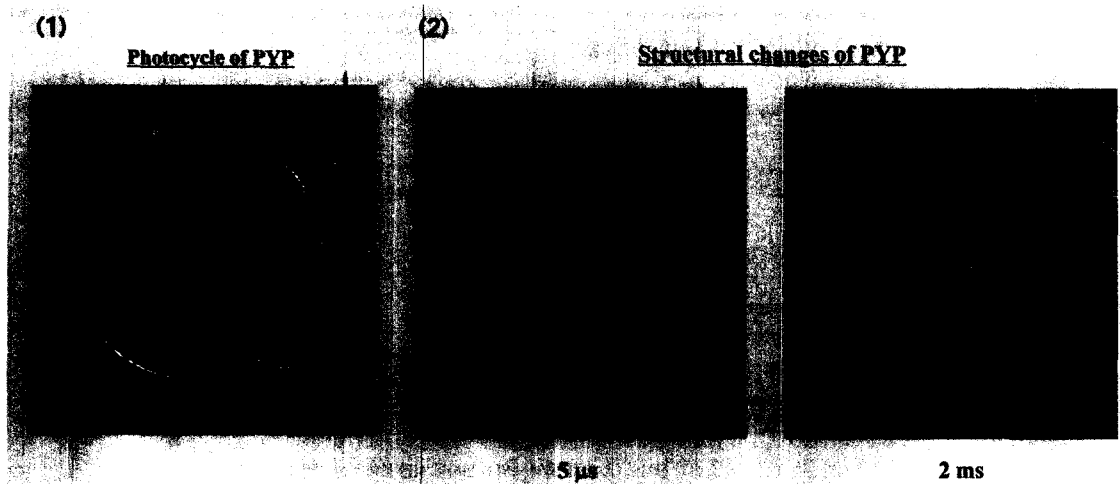


그림 7. (1) PYP의 광순환 과정 (2) PYP의 광순환 과정의 실시간 구조 변화⁽¹⁾.

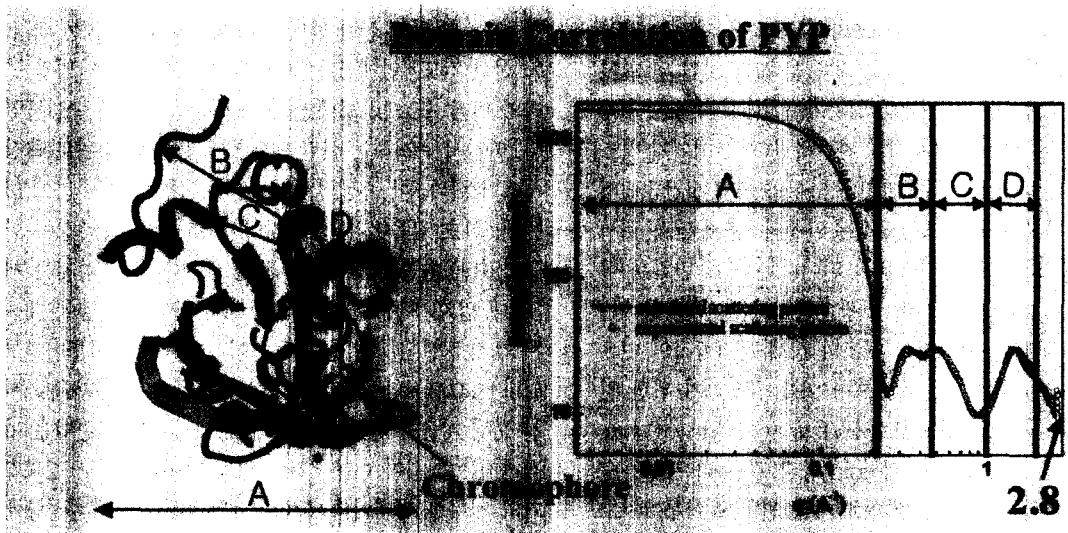


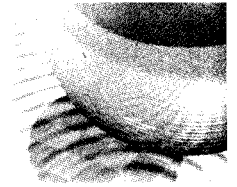
그림 8. PYP의 구조와 정지 상태 대각 X선 산란법으로 얻어진 실험 결과⁽¹⁶⁾.

거의 모든 종류의 분자를 포괄할 정도로 확대되었다. 하지만 현재까지 개발된 시간 분해 전자 및 X선 회절법들은 그 시간 분해능이 각각 1 피코초와 100 피코초이며, 화학반응에서 가장 중요한 결합의 형성 및 분해, 분자 진동 현상을 실시간으로 관측하기 위해서는 회절 펄스로 쓰이는 전자 및 X선들의 펄스 시간 폭을 더 줄어야 한다. 현재 전자 펄스의 펄스 폭을 100 펨토초 정도로 줄이려는 노력이 이루어지고 있으며, 선진국에서 설치, 연구되고 있는 자유 전자 레이저도 시간 분해 X선 회절법 시간 분해능을 크게 향상 시킬 것으로 예상된다. 따라서 향후 개발될 매우 높은 시간 및 공간 분해능을 가진 시간 분해

회절법은 펨토초 연구 분야에 매우 중심적인 역할을 할 것이라 기대되며 이 분야에 우리의 적극적인 참여가 요구된다.

참고문헌

- (1) Srinivasan R. et al. "Ultrafast Electron Diffraction (UED) - A New Development for the 4D Determination of Transient Molecular Structures", *Helv. Chim. Acta* **86**, 1763, 2003.
- (2) Ihee, H. et al. "Direct Imaging of Transient Molecular Structures with Ultrafast Diffraction", *Science* **291**, 458, 2001.



- (3) Ihee, H. et al. "Ultrafast Electron Diffraction and Structural Dynamics: Transient Intermediates in the Elimination Reaction of $C_2F_4I_2$ " J. Phys. Chem. A **106**, 4087, 2001.
- (4) Ihee, H. et al. "Ultrafast Electron Diffraction of Transient $[Fe(CO)_4]$: Determination of Molecular Structure and Reaction Pathway" Angew. Chem., Int. Ed. **40**, 1532, 2001.
- (5) Lobastov, R. "Ultrafast Diffraction of Transient Molecular Structures in Radiationless Transitions", J. Phys. Chem. A **105**, 11159, 2001.
- (6) Ruan, C. Y. et al. "Ultrafast Electron Crystallography of Interfacial Water" Science **304**, 80, 2004.
- (7) Ruan, C. Y. et al. "Ultrafast Electron Crystallography: Transient Structures of Molecules, Surfaces, and Phase Transitions" Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. **101**, 1123, 2004.
- (8) Ihee, H. et al. "Ultrafast Electron Diffraction of Transient Cyclopentadienyl Radical: A Dynamic Pseudorotary Structure", Chem. Phys. Lett. **353**, 325, 2002.
- (9) Swick, B. J. et al. "An Atomic-Level View of Melting Using Femtosecond Electron Diffraction", Science **302**, 1382, 2003.
- (10) Wulff, M. et al. "The Realization of Sub-Nanosecond Pump and Probe Experiments at the ESRF", Faraday Discuss. **122**, 13, 2003
- (11) Plech, A. et al. "Visualizing Chemical Reactions in Solution by Picosecond X-ray Diffraction", Phys. Rev. Lett. **92**, 125505, 2004.
- (12) Bratos, S. et al. "Time-Resolved X-ray Diffraction: Statistical Theory and its Application to the Photo-Physics of Molecular Iodine", J. Chem. Phys. **116**, 10615, 2002.
- (13) Ren, Z. et al. "A Molecular Movie at 1.8 Angstrom Resolution Displays the Photocycle of Photoactive Yellow Protein, a Eubacterial Blue-Light Receptor, from Nanoseconds to Seconds", Biochemistry **40**, 13788, 2001.
- (14) Schotte, F. et al. "Watching a Protein as it Functions with 150-ps Time-Resolved X-ray Crystallography", Science **300**, 1944, 2003.
- (15) Tiede, D. M. et al. "Protein Conformations Explored by Difference High-Angle Solution X-ray Scattering: Oxidation State and Temperature Dependent Changes in Cytochrome C", Biochemistry **41**, 6605, 2002.
- (16) Kim, T. K. et al. "Exploring Fine Structures of Photoactive Yellow Protein in Solution Using Wide-Angle X-ray Scattering", accepted in Bull. Kor. Chem. Soc.

약 령



김태규

1994-1998 한국과학기술원 화학과 학사
1998-2000 한국과학기술원 화학과 석사
2000-2004 한국과학기술원 화학과 박사(지도교수: 정경훈)
2004-현재 한국과학기술원 화학과 박사 후 연구원



이효철

1990 - 1994 한국과학기술원 화학과 학사
1994 - 2001 California Institute of Technology 화학과 이학 박사(지도교수: A. H. Zewail)
2001 California Institute of Technology 화학과 박사 후 연구원
2001 - 2003 The University of Chicago 생화학 및 분자생물학과 박사 후 연구원(지도교수: K. Moffat)