

Web based DB system to design novel explosive molecules

이성광*, 인영용, 정재은, 조수경¹, 노경태²

연세대학교 분자설계연구소;

¹국방과학연구소; ²연세대학교 생명공학과

(lsk@bmdrc.org*)

현대의 화약 개발 방향은 고성능이면서도 동시에 둔감하며 안전성이 높은 화약을 무기체계의 주 장약으로 요구하고 있다. 이러한 화약을 개발하기 위해서는 성능/감도 등에 영향을 미치는 분자 특성과 화약 분자 구조 간의 정량적인 상관관계를 찾아내고, 이를 모델화하여 실험 전에 미리 결과들을 예측하여 가장 적절한 화약 분자를 도출하여야 한다. 이상과 같은 모델화 연구를 진행하기 위해서는 기존의 화약 분자 자료들을 수집/저장/검색하는 작업이 중요하다. 본 연구에서는 화약 분자들의 정보를 웹 기반으로 검색이 가능한 시스템을 개발하였다. 특히 본 DB 내에 화약 분자의 안전성과 중요한 관련이 있는 충격 감도 예측용 QSPR 모델을 구현하였다. 자체적으로 개발한 1000여종의 분자 표현자 중에서 유전 알고리즘을 이용해 충격 감도와 상관성이 높은 표현자들을 선택하고, 이를 Rprop neural net 방법으로 모델화하였다. 현재 98개의 화약 분자에 대한 blind test 결과 R²=0.75 이상의 예측도를 나타내었다.