

정보보호과 프로젝트 보고서

프로젝트 주제	효소의 활성화 에너지와 반응 속도 수학적 표현 및 분석		
참가자 구성 및 역할 분담	학번	이름	역할
	10211	박초은	프로젝트 기획, 효소 연구, 모델링 프로그램 제작

프로젝트 소개

기획 배경	과학 시간에 생체 촉매 효소를 배우면서 효소가 발효식품 제조와 같은 식품 분야뿐만 아니라 소화제 혈당 측정처럼 의약품 분야, 산업 분야까지 다양하게 활용된다는 것을 알았다. 이렇게 여러 분야에서 활용되는 효소가 각각 어떤 원리로 반응하는지 알아보고 싶어졌다. 화학 반응에서는 활성화 에너지 조절에 따라 반응속도가 달라진다고 하는데, 효소가 활성화 에너지를 조절한다고 해서 활성화 에너지와 그 반응속도를 수학적으로 어떤 관계가 있는지 궁금해졌다.
개요	궁금했던 효소의 활성화 에너지와 반응 속도의 관계를 알 수 있다. 다양한 수학적 개념을 활용해 활성화 에너지 변화 요인에 따른 반응 속도 공식을 이해하고, 효소의 활성화 에너지 조절에 따른 반응 속도를 모델링함으로써 효소의 반응 원리를 이해할 수 있다.

프로젝트 추진 일정

기간	과제명	내용
2023.12.04 ~ 12.08	프로젝트 설계	개발환경 설정, 효소 및 활성화에너지 기본 개념 연구
2023.12.09 ~ 12.13	효소 연구	효소의 활성화 에너지, 반응 속도 수학적 연구 및 보고서 작성
2023.12.14 ~ 12.20	산출물 제작	효소 연구 내용을 바탕으로 모델링 프로그램 제작

1.프로젝트 소개

이 부분은 보고서의 서론으로 프로젝트가 어떤 목적으로 기획되었고 어떤 의미가 있는지 설명합니다.

※ 내용 예시 ※

- 어떤 문제를 해결하고자 이 프로젝트를 기획하게 되었는지
- 문제를 발견하게 된 배경은 무엇인지
- 이 문제를 해결하는 것이 왜 중요한지 등

처음에는 단순히 효소는 김치, 유제품 등을 발효시키는 물질이라고 알고 있었는데 과학 수업 시간에 배우는 생체 촉매가 특정 화학 반응을 유도하기 위해 활성화 에너지를 어떻게 조절하고, 그에 따른 반응 속도에는 어떠한 관계가 있는지 탐구하고 싶다는 생각에서 기획하게 되었습니다. 수업을 듣다 보니 효소가 생체 촉매, 식품 분야뿐만 아니라 다양한 의학, 생명공학, 산업 분야에서 활용된다는 것을 알게 되어 효소가 어떻게 반응하는지 더 궁금해졌습니다. 효소가 무엇에 활용되는지 조금 더 구체적으로 찾아보았는데 돌연변이 DNA를 찾아 고치는 효소가 발견되어 생명공학 분야에서 활용되고 있고, 효소를 활용해 산업 폐가스를 화학 원료로 만드는 사례도 있다는 것을 알게 되어 효소에 대한 관심이 더 커졌습니다. 이렇게 효소의 응용 범위가 계속해서 다양하게 확대되고 있는데, 효소의 활성화 에너지와 반응속도에 대해 정확히 알고 새로운 응용 가능성이 있는 분야를 생각해 보고 싶어졌습니다.

효소의 활성화 에너지와 반응 속도는 세포 내에서 물질대사 및 에너지 전달에 핵심적인 역할을 하기 때문에 특히 약물 개발이나 질병 치료에 관련된 연구에서 중요한 변수로 작용합니다. 이렇게 의학 분야에서의 효소는 우리 몸에 직접적으로 영향을 미치기 때문에 그 반응 원리를 정확히 알고 있어야 안전하게 활용할 수 있다고 생각했습니다. 또한 산업적으로는 효소에 대해 정확히 알고 있어야 화합물 생산 및 화학 원료 제조 과정에서 더욱 효율적인 방법으로 개발을 할 수 있습니다. 작은 변화라고 하더라도 의학, 산업 분야에서의 발전은 사회적, 경제적으로 큰 영향을 끼칠 것으로 생각합니다. 따라서 효소의 활성화 에너지 및 반응 속도를 수학적으로 연구해 보고, 반응 과정을 구현해 보는 프로젝트를 진행하기로 마음먹었습니다.

이 프로젝트의 산출물은 효소의 활성화 에너지 조절에 관여하는 다양한 인자들을 탐구하고, 탐구한 내용을 바탕으로 사용자가 인자값을 조절하면 그에 따라 활성화 에너지의 양이 조절되고, 그에 따른 반응 속도의 변화를 보여주는 C언어 프로그램입니다. 프로그래밍 시간에 배운 C언어의 다양한 문법들을 활용하여 콘솔에서 동작하는 프로그램을 개발할 수 있고, 이 프로그램을 활용해 의약품 개발이나 산업 활용 전에 해당 효소에서 최적의 반응을 유도하는 인자들의 값을 얻어 더 효율적으로 효소를 활용할 수 있습니다.

2.프로젝트 기획

이 부분은 보고서의 본문으로 프로젝트가 어떻게 설계되었고 어떻게 진행되었는지 설명합니다.

※ 내용 예시 ※

- 이론적 배경 소개
- 관련 기술 소개
- 시스템 설계 및 구성도 소개
- 개발 환경(재료 및 도구) 소개
- 데이터 세트 소개
- 연구 방법 소개 등

먼저 효소는 '기질'이라는 것과 결합해 효소-기질 복합체를 형성해 화학 반응의 활성화 에너지를 낮춰 물질대사의 속도를 증가시키는 생체 촉매입니다. 기질이란 반응물과 같은 말이며, 화학 반응에 참여하여 생성물을 만드는 물질입니다. 특별히 효소의 기질은 효소가 작용하는 물질로, 효소의 반응물입니다.

촉매가 반응속도를 조절하기 위해 활성화 에너지를 조절하는데, 활성화 에너지란 화학 반응이 진행되기 위해 필요한 최소한의 에너지를 뜻합니다. 반응물들이 존재한다고 해서 무조건 화학 반응이 일어나는 것은 아닙니다. 화학 반응이 진행되려면 입자의 충돌이 많아야 하고, 입자 자체가 일정한 양 이상의 에너지를 가지고 있어야 하는데, 여기에서 '일정한 에너지'가 바로 활성화 에너지입니다. 활성화 에너지의 영향은 화학반응의 속도에 영향을 미칩니다. 활성화 에너지가 작으면 활성화 에너지보다 높은 에너지를 갖는 입자 수가 증가해 반응 속도가 빨라집니다. 반대로 활성화 에너지가 높다면 활성화 에너지 이상의 에너지를 갖는 입자가 줄어들어 반응 속도가 느려집니다. 활성화 에너지의 크기에 영향을 미치는 주요 요인으로 촉매가 있습니다.

촉매는 반응 과정에서 소모되지 않으면서 반응속도를 변화시키는 물질을 말합니다. 촉매는 아주 조금만 있어도 반응 속도에 영향을 미칠 수 있습니다. 촉매에는 정촉매와 부촉매가 있습니다. 정촉매는 활성화에너지를 낮춰 반응 속도를 빨라지게 하고, 부촉매는 활성화 에너지를 높여 반응을 더 느리게 합니다. 촉매들은 반응물과 생성물의 양과 관련된 관계에는 영향을 미치지 않으며, 반응 속도에만 영향을 미칩니다. 효소는 활성화에너지를 낮춰 반응 속도를 줄이는 정촉매입니다.

다시 효소로 돌아가 효소는 기질을 다른 분자로, 즉, 반응물을 생성물로 전환합니다. 효소는 생체 촉매이기 때문에 우리 몸속 세포 등에 영향을 미치는데, 세포 대부분의 대사 과정을 생명을 유지할 만큼 빠르게 일어나야 하므로 효소의 촉매작용이 꼭 필요합니다.

효소가 활성화 에너지를 조절하는 데 영향을 미치는 요인은 온도, pH, 효소의 농도, 기질의 농도 등이 있습니다. 먼저 효소는 일반적인 화학반응처럼 온도가 증가할수록 반응 속도가 증가합니다. 특정한 온도 범위에서 최대의 활성화 에너지를 낼 수 있는 온도를 최적온도라고 합니다. 최적온도를 지나 더 높아지면 단백질이 변성되어 반응속도가 감소합니다.

pH는 물질의 산성과 알칼리성 정도를 나타내는 수치로, 수소 이온 농도 지수라고 합니다. 물질마다 특정 pH 범위 안에서 최적의 활성도를 내는 최적 pH가 있습니다.

pH와 온도, 기질의 농도가 일정할 때 효소 농도가 낮은 경우에는 효소의 농도와 반응 속도가 직선적 비례관계를 띕니다. 효소의 농도가 이미 높을 때는 효소 농도가 더욱 증가해도 반응속도는 증가하지 않고, 기질을 더 첨가해야 반응속도가 증가합니다.

pH와 온도, 효소의 농도가 일정할 때 기질의 농도가 낮은 경우에는 기질 농도와 반응 속도가 비례합니다. 마찬가지로 기질의 농도가 이미 높을 때는 기질 농도가 증가해도 반응속도에 큰 영향을 주지 않습니다.

온도가 증가함에 따라 활성화 에너지가 감소하는 것을 아레니우스(Arrhenius) 방정식으로 나타낼 수 있습니다.

$$k = A \cdot e^{-\frac{E_a}{RT}}$$

k는 반응 속도 상수를 나타내는데, k값이 클수록 반응 속도가 빠른 것입니다. 분자의 충돌이 많이 일어날수록 화학 반응이 활발하고, 화학 반응이 일어나려면 분자들이 일정한 방식으로 정렬되어야 하기 때문에 A는 물리적 충돌 및 정렬을 나타내는 인자입니다. E_a 는 반응에 대한 활성화에너지 값을 나타내고, R은 기체의 열적인 에너지와 온도 간

의 관계를 나타내는 기체 상수입니다. 기체 상수의 값은 8.314입니다. T는 켈빈 단위의 온도를 나타냅니다. 한마디로 이 방정식은 분자들 간의 유효한 충돌 횟수를 계산 하고, 최종적으로 그 충돌들이 반응을 일으킬 확률을 계산하는 식입니다.

반응 속도 상수 k를 구하기 위해서는 자연로그함수의 극한값에 충돌 및 정렬 선행인자 값을 곱해야 합니다. 먼저 활성화 에너지 값을 기체상수와 절대온도를 곱한 값으로 나눕니다. 이 값을 음수로 만든 다음 자연상수 e의 지수로 하는 지수함수를 만듭니다. 만든 지수함수의 극한값에 선행인자 A를 곱하면 반응 속도 상수 k를 구할 수 있습니다.

자연상수란 계산의 간편함을 위해 정의된, 파이처럼 무한소수 값입니다. 주로 극한을 이용해 정의합니다.

pH나 농도 등은 반응물에 따라 차이가 커서 공식으로 정리되지는 않지만 반응속도가 기질 농도의 영향을 받는 경우가 있습니다. 이를 미카엘(Michaelis-Menten) 방정식으로 나타낼 수 있습니다.

$$V_0 = \frac{V_{\max} \cdot [S]}{K_m + [S]}$$

V0은 반응이 시작될 때의 속도인 초기 반응 속도입니다. 초기에는 효소와 기질이 결합하는 속도가 빠르고, 시간이 지날수록 반응 속도가 감소합니다. Vmax는 효소가 포화 상태에서 동작할 때의 반응 속도입니다. 이때에는 기질이 효소에 충분히 많아서 효소의 모든 활성 부위가 기질로 채워진 상태입니다. [S]는 반응물인 기질의 농도를 나타냅니다. Km은 '미카엘 상수'로, 기질에 대한 특성을 나타내는 값입니다. Km의 값이 작을수록 효소와 기질 간의 결합이 강하고, 기질이 낮은 농도에서 반응합니다. Km의 값이 클수록 결합이 약하며, 높은 농도의 기질이 필요합니다.

이 방정식은 정적인 효소와 기질 간의 상호 작용을 나타내는데, 현실에서는 다양한 요인에 의해 상호 작용이 동적으로 변화할 수 있기 때문에 다른 더 정교한 공식이 사용됩니다.

기질의 온도에 따른 효소의 활성화 에너지, 반응속도의 변화를 나타내는 아레니우스 방정식을 계산해 반응 속도를 구하는 C언어 프로그램에서는 우리에게 익숙한 섭씨온도를 입력받아서 절대온도로 환산한 다음, 반응 속도를 결정하는 다른 요인인 충돌 횟수와 활성화 에너지 크기를 입력받고 반응 속도를 계산해 출력합니다.





3.프로젝트 결과

이 부분은 보고서의 결론으로 프로젝트의 결과로 알아낸 사실 또는 산출물을 소개합니다.

※내용 예시 ※

-사용자 인터페이스 소개

-사용자 매뉴얼 작성

-핵심 기능 소개

-알고리즘 및 구현 설명

-실험 결과 보고

-성능 평가 보고 등

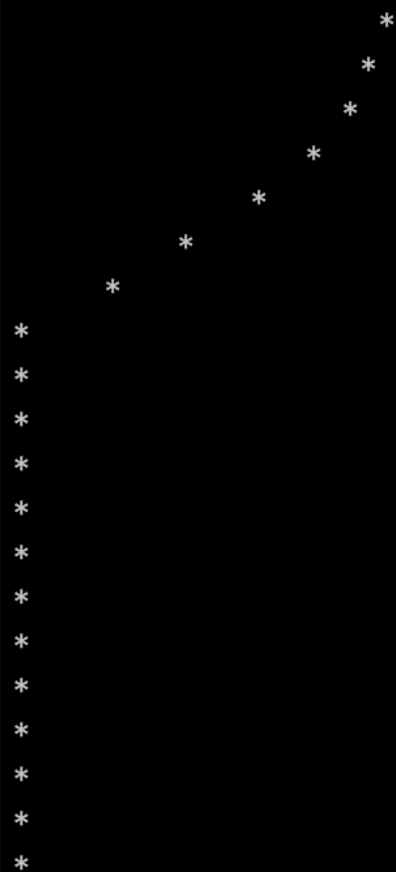
※코드 설명 시 소스 코드 전체를 붙여넣지 말고 핵심적인 부분만 선별해 상세하게 설명할 것

온도를 입력하세요 (°C) : 36

선행인자 값을 입력하세요 (양의 정수) : 1

활성화 에너지 값을 입력하세요 (20kJ/mol ~ 200kJ/mol): 165

활성화 에너지 그래프 :



이 효소의 반응 속도 상수는 9.377924e-01 입니다 .

사용자가 반응에 요소가 될 섭씨 온도, 충돌 및 정렬 선행인자 값, 활성화 에너지 값을 입력하면 활성화 에너지의 그래프를 출력하고 반응 속도 상수를 알려줍니다. 출력되는 활성화 에너지 함수의 곡선 부분이 짧을수록 활성화 에너지가 큰 그래프입니다.

```
#include <stdio.h>
#include <math.h>

double calcRate(double T, int A, double Ea);
void drawGraph(double activationEnergy);
```

stdio.h 헤더파일과 math.h 헤더파일을 사용했고, 온도, 선행인자, 활성화에너지를 받아 아레니우스 방정식으로 반응 속도 상수를 계산하는 calcRate 함수와 활성화 에너지 그래프를 그려주는 drawGraph 함수를 만들었습니다.

```
int main() {
    double temperature; //온도
    printf("온도를 입력하세요 (°C) : ");
    scanf("%lf", &temperature);

    int collisions; //충돌 횟수
    printf("선행인자 값을 입력하세요 (양의 정수) : ");
    scanf("%d", &collisions);

    double Energy; //활성화 에너지
    printf("활성화 에너지 값을 입력하세요 (20kJ/mol ~ 200kJ/mol): ");
    scanf("%lf", &Energy);

    printf("\n활성화 에너지 그래프 : \n");
    drawGraph(Energy); //활성화 에너지 그래프

    double Rate = calcRate(temperature, collisions, Energy);
    printf("이 효소의 반응 속도 상수는 %e 입니다.\n", Rate); //반응 속도 출력

    return 0;
}
```

메인 함수에서는 사용자에게 필요한 값을 입력받고 그래프와 반응 속도를 출력해주는 함수들을 각각 출력합니다.

```
double calcRate(double T, int A, double Ea) {
    const double R = 8.314; //기체 상수

    double k = A * exp(-Ea / (R * (T+273))); //반응 속도 계산
    // 자연상수 e의 지수제곱 exp 함수

    return k;
}
```

아레니우스 방정식을 그대로 구현해 반응 속도 상수를 구하는 calcRate 함수입니다. math.h 헤더파일에 내장되어 있는 함수인 exp를 사용해 자연로그 함수를 계산했습니다. main에서 섭씨 온도로 입력받은 T값에 섭씨온도와 절대온도의 어는점 차이인 273을 더해 절대 온도로 환산한 후 계산합니다.

```

void drawGraph(double activationEnergy) {
    int i, j;
    int maxEnergy = 20; // 그래프의 최대 높이
    int width = 20;      // 그래프의 폭
    double pi = 3.14159;

    // 활성화 에너지 함수
    for (i = 0; i < width; i++) {
        double activationFunction = -pow((double)i / width, 2) * activationEnergy;

        // 그래프 출력
        int height = activationFunction + maxEnergy;
        for (j = 0; j < height; j++) {
            if (j == maxEnergy) {
                printf("|");
            } else {
                printf(" ");
            }
        }
        printf("*\n");
    }
}
}

```

활성화 에너지의 함수를 출력하기 위해서 $y = -x^2$ 이차함수를 활용했습니다. 이중반복문을 활용해서 각 위치에서의 활성화 에너지 값을 구하고 높이를 계산해 그래프를 출력하는 drawGraph 함수입니다.

4.느낀 점

※ 어려웠다 뿌듯했다 등 감상적인 느낌을 기술하는 데 그치지 않고 아래와 같은 내용을 반드시 포함 시킬 것

- 개인별 수행한 역할
- 프로젝트를 통해 배운 점 또는 새롭게 알게 된 점
- 프로젝트에서 겪은 어려움 또는 오류와 이를 해결한 방법
- 프로젝트의 아쉬운 점 및 개선 방안
- 프로젝트의 추후 활용 방안 또는 기대 효과

1학기부터 계속해 보고 싶었던 효소 연구를 제대로 할 수 있어서 재미있었습니다. 1학기에 통합과학에서 배웠던 개념들도 복습할 수 있었고, 더 깊이 각 용어의 정의와 활성화 에너지, 반응 속도의 관계를 탐구할 수 있어서 좋았습니다. 수학적으로 접근하려다 보니 처음 접하는 아레니우스 방정식, 미카엘 방정식이 어려웠지만 가장 궁금했던 활성화 에너지를 변화시키는 요인인 온도, 농도에 따라 반응 속도가 어떻게 변하는지를 알 수 있어서 후련했습니다. 하지만 온도만큼 궁금했던 pH에 따른 변화도 공식화할 수 있는 방법이 있을 것 같은데 찾지 못한 것 같아 아쉬움이 남았습니다.

2학년 수학에 나올 지수 로그 함수 개념과 어려운 자연상수, 미적분 등이 복잡하게 연관되어 있어서 공식 산출 과정을 완벽하게 이해하지는 못했지만 앞으로 나올 수학 개념인 지수, 로그, 미적분 등을 재미있게 배울 수 있을 것 같다고 생각했습니다. 그리고 배운 내용을 바탕으로 아레니우스 방정식을 완전히 이해해 보고 싶습니다. 아레니우스 방정식은 효소 반응뿐만 아니라 온도와 반응 속도의 상호작용과 관련된 다양한 현상에서 쓰인다고 하는데 아레니우스 방정식이 쓰이는 다른 사례도 연구해 보고 싶어졌습니다.

C언어로 개발할 때는 아레니우스 방정식이 주어져 있고, 알고리즘 짜는 데에도 어려움이 없었습니다. 하지만 활성화 에너지 그래프를 그리는 함수의 코드를 짤 때, 아스키 아트로 곡선 그래프를 그리는 데에 한계가 있어서 원하던 계형의 그래프를 그리지 못한 것이 아쉬웠습니다. x축과 y축의 값을 정확하게 정의해 두고 그에 따른 활성화 에너지의 그래프를 그려보고 싶습니다. math.h 헤더파일을 공부한 지 시간이 지나서 내장 함수들을 많이 까먹었는데 복습할 수 있는 기회도 되었던 것 같습니다. 처음 보는 exp 함수로 편리하게 자연로그 함수를 계산할 수 있다는 것이 신기했습니다. 생각보다 다양한 내장 함수들이 있는 것 같아 더 다양한 함수들을 활용한 프로그램도 개발해 보고 싶어졌습니다. 시간이 부족해 수업량 유연화 기간에 미카엘 방정식은 프로그램으로 구현하지 못했지만 이후에 개인적으로 농도와 관련된 효소기질 상호작용도 만들어보고 싶습니다.

노트북 환경과 맞지 않아 Visual Studio로 C언어 개발을 할 수 없어 Visual Studio Code로 C언어 코드를 짤 때 터미널 환경에서 gcc와 명령어로 빌드하고 실행하는 작업이 익숙해진 것 같아 앞으로도 잘 활용할 수 있을 것 같습니다.

참고자료

※ 참고자료 및 출처를 반드시 밝힐 것

효소 관련 참고자료

<https://ko.wikipedia.org/wiki/효소> - 위키백과

https://www.dbpia.co.kr/pdf/pdfView.do?nodeId=NODE02289648&googleIPSandBox=false&mark=0&ipRange=false&b2cLoginYN=false&isPDFSizeAllowed=true&accessgl=Y&language=ko_KR&hasTopBanner=true - DBpia 논문

미래엔 통합과학 교과서

활성화 에너지 관련 참고자료

https://nutri.fandom.com/ko/wiki/효소_반응에_영향을_미치는_인자

https://blog.naver.com/PostView.naver?blogId=magician_e&logNo=220486650172 - 수능 재수생 모임 블로그

https://ko.wikipedia.org/wiki/활성화_에너지 - 위키백과

인자, 활성화 에너지, 반응속도 간 수학적 관계 관련 참고자료

https://ko.wikipedia.org/wiki/아레니우스_방정식 - 위키백과

https://ko.wikipedia.org/wiki/미카엘리스-멘텐_반응속도론 - 위키백과

<https://someting-new1.tistory.com/77> - 개인 블로그

<http://contents.kocw.or.kr/document/wcu/2012/Seoul/KimByungGee/Ch8-TStheory-enzymeinhibition.pdf> - KOCW

지수, 로그, 자연상수 관련 참고자료

<https://blog.naver.com/prayer2k/222471310302> - 수냐 블로그

부록

※ 본론에서 다루지 않았지만 첨부하고 싶은 추가적인 내용이 있다면 부록에 작성 (소스 코드, 데이터, *github* 링크, 블로그 링크 등)

<https://github.com/pce0303/Enzyme-kinetic-modeling.git> - 깃허브 링크