

방향족 아미노산 기반 실크 나노 소재 물성 분석: 분자동역학 전산해석 기법

Aromatic Amino Acid-based Property Analysis of Silk Nano Materials: a Molecular Dynamics Computational Analysis Method

박우범* · 나성수†
Wooboom Park* and Sungsoo Na†

(Received November 5, 2025 ; Revised January 3, 2026 ; Accepted January 7, 2026)

Key Words : Silk-peptide(실크 펩타이드), Aromatic Amino Acids(방향족 아미노산), Molecular Dynamics(분자동역학), Elastic-network Model(탄성 네트워크 모델)

ABSTRACT

In this study, we systematically investigated the structural and mechanical properties of silk β -sheet models through the targeted substitution of aromatic amino acids phenylalanine, tyrosine, and tryptophan. We performed molecular dynamics simulations on uniformly scaled β -sheet models containing 120 amino acids, allowing for consistent comparative analyses. Secondary structure and hydrogen bonding analyses revealed that the phenylalanine-substituted model exhibited the most stable β -sheet formation and the highest hydrogen-bond density. Although the tryptophan-substituted model revealed increased structural irregularity, strong hydrophobic interactions enhanced interchain attraction, resulting in improved hydrogen bonding and mechanical performance. In contrast, the tyrosine-substituted model displayed the lowest hydrogen-bond density and mechanical properties. Correspondingly, Young's modulus followed the order of phenylalanine > tryptophan > tyrosine. These results demonstrate that amino acid sequence engineering serves as an effective strategy for tuning the mechanical performance of silk-based materials and expanding the functional design space of silk-derived nanomaterials.

1. 서 론

실크 기반 나노 소재는 천연 아미노산 서열로 이루어진 생체 재료이다. 실크 기반 소재는 천연 아미노산의 서열 조합과 길이를 조절하여 목적에 맞는 생체 적합성, 생분해성 및 우수한 기계적 물성을 달성할 수 있기 때문에 웨어러블 디바이스, 소형 전자장치

및 바이오센서 분야 등에서 널리 사용된다⁽¹⁻³⁾. 특히 합성 생물학을 기반으로 엔지니어링된 아미노산 기반의 실크 소재를 통해 실크 기반 나노 소재의 적용 범위를 확대할 수 있다^(4,5). 예를 들어, 티로신(tyrosine) 기반 실크 소재에 대해서 라이신(lysine) 아미노산을 엔지니어링하여 구조적 안정성 및 광 화학적 반응 효율성을 모두 향상시키는 감광 소재가 사용되었다⁽⁶⁾. 그럼에도 불구하고 아미노산 서열에 대한 엔지니어링

† Corresponding Author ; Member, Department of Mechanical Engineering, Korea University, Professor
E-mail : nass@korea.ac.kr

* Member, Department of Mechanical Engineering, Korea University, Student

‡ Recommended by Editor Sang Wook Kang
© The Korean Society for Noise and Vibration Engineering

$$G_A = \frac{\rho L^2}{\pi^2} \omega_A^2 \tag{3}$$

$$Y_T = \frac{\rho L^2}{\pi^2} \omega_T^2 \tag{4}$$

여기서, E_B , G_B , 그리고 Y_T 는 각각 실크 단백질에 대한 굽힘 강성, 비틀림 전단 계수 및 축 탄성 계수이고, ω_B , ω_A , 그리고 ω_T 는 각각 굽힘, 비틀림, 축 탄성 변형에 대한 해당 고유 진동수이다. 기호 ρ 는 구조의 질량 밀도를 나타내고, L 은 특성 길이이며, A 는 단면적, β_n 은 모드 형상에 대한 종속 상수이다. 굽힘, 비틀림 및 축강성 모드에 해당하는 고유진동수와 각각의 굽힘, 비틀림 및 축 강성 계수와 같은 기계적 특성은 변형 모드에 대한 고유진동수와 관련하여 식 (2)~식 (4)와 같이 나타낼 수 있다. 이 연구에서는 ENM-NMA로부터 도출된 저차 고유진동 모드를 연속체 빔 거동으로 해석하기 위해, 실크 단백질을 한쪽 끝이 고정되고 다른 쪽 끝이 자유로운 캔틸레버(clamped-free) 오일러-베르누이 빔으로 이상화하였다. 해당 경계조건은 단백질 집합 구조 또는 기관에 의해 한쪽이 구속되고 반대쪽이 자유롭게 변형되는 실제 실크 섬유 및 나노구조의 물리적 구속 상태를 합리적으로 반영하며, 굽힘 모드 기반 영률 산출에 널리 사용된다. 특히 굽힘 모드에 대해서는 실크의 방향인 X축을 제외한 Y축 및 Z축에서의 굽힘을 고려하여 각각의 단면 계수를 고려하여 해당 모드 및 영률(Young's modulus)를 계산하였다.

2.4 데이터 분석 방법

방향족 아미노산 기반 실크 나노 소재에 대한 구조적 안정성은 단백질 2차 구조 분석과 수소 결합의 분포 분석을 이용하였다. 이 때 2차 구조 분포는 VMD (visual molecular dynamics) 1.9.3. 타임라인 콘솔을 사용하여 궤적 구조에서 계산하였고, 수소 결합의 수는 GROMACS상의 gmx_hbond 모듈을 통해서 계산을 진행하였다.

3. 결과 및 토론

3.1 방향족 아미노산 기반 실크 나노 소재 구조 분석

실크 베타시트는 실크 고유의 결정 영역으로서 기

계적 강도에 핵심적인 역할을 하며, 방향족 아미노산에 따른 구조적 영향을 분석하기 위하여 이 연구에서는 실크 베타시트 구조의 크기를 기존 연구를 참고하여 총 120개의 아미노산을 균일하게 배열하였으며, 각 모델에는 티로신, 페닐알라닌, 트립토판을 개별적으로 변형(mutation)하여 비교군을 구성하였다(Fig. 1).

방향족 아미노산 기반 실크 나노 소재의 단백질 2차 구조 분석 결과는 각각 티로신 40.1%, 페닐알라닌 58.3% 및 트립토판은 23.4%의 베타시트 비율이 계산되었다(Fig. 2(a)). 이러한 이유는 페닐알라닌은 대표적인 소수성 아미노산으로 페닐알라닌 측쇄간의 소수성 상호작용이 강하게 작용하여 베타 시트 비율이 높아졌기 때문이다^(14,15). 또한, 트립토판 아미노산은 상대적으로 측쇄의 기하학적 크기가 크기 때문에 베타시트 구조를 이루는 층간(layer by layer)의 상호작용을 방해하는 것으로 보인다. 하지만 평균 수소 결합의 수를 비교하면 각각 페닐알라닌은 874개, 트립토판은 845개 및 티로신은 768개의 순서로 높은 것을 확인하였다(Fig. 2(b)). 트립토판은 베타시트 2차 구조 형성에 대해서는 다른 방향족 아미노산과 비교하였을 때 형성이 되지 않는 것이 관찰되었지만 측쇄에 대한 강한 소수성인 인들 고리는 인접 사슬 간의 인력을 증가

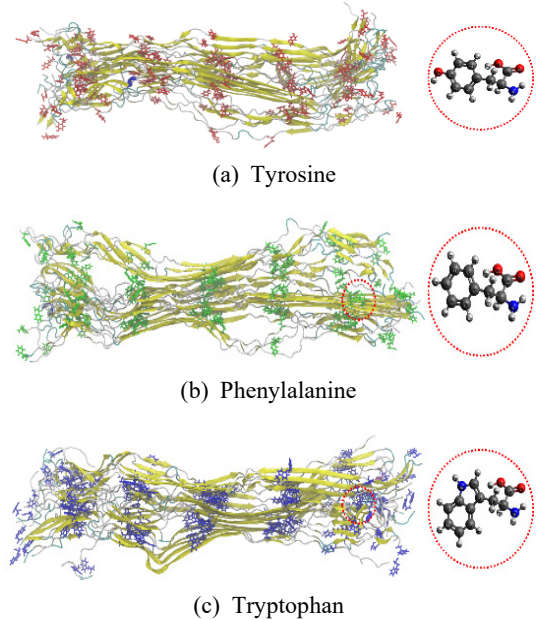
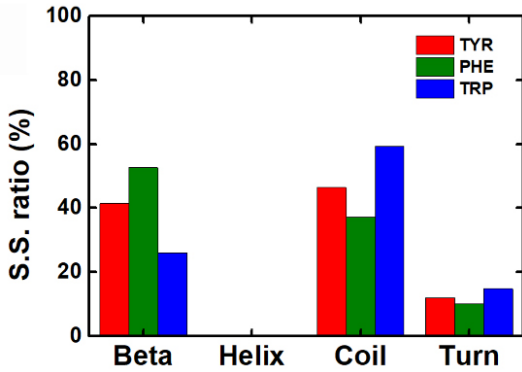
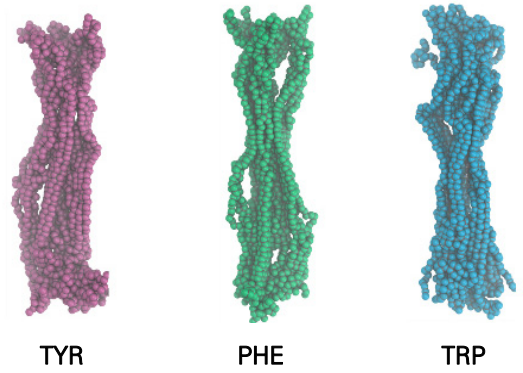


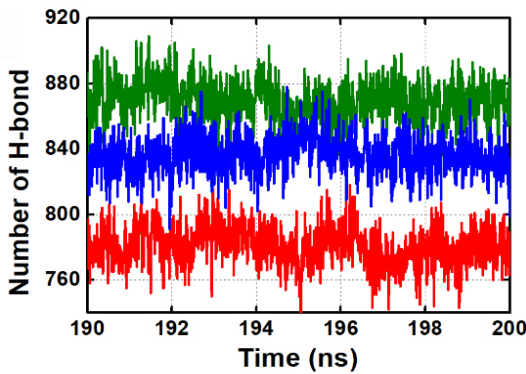
Fig. 1 Molecular dynamics model of amino acids-based silk beta-sheet



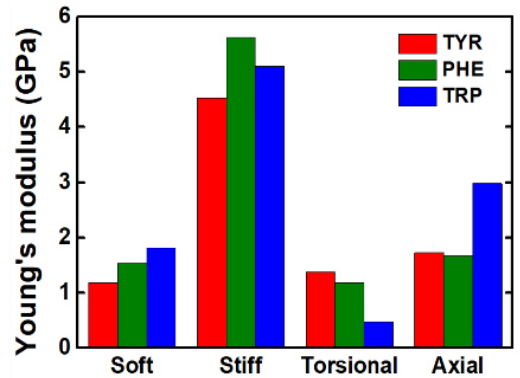
(a) Secondary structure ratio of aromatic amino acids-based silk beta-sheet



(a) Elastic network model



(b) Number of hydrogen bonds



(b) Young's modulus

Fig. 2 Aromatic amino acids-based silk beta-sheet

Fig. 3 Each mode of aromatic amino acids-based silk beta-sheet

시켜 수소 결합 수를 증가시킨 것을 보여준다. 흥미롭 게도, 티로신은 극성(OH잔기) 페놀기를 가진 아미노 산이지만 아미노산간의 상호작용과 물과의 상호작용 간의 경쟁때문에 평균 수소 결합의 수가 가장 낮은 것 을 확인하였다. 이는 아미노산의 측쇄간의 소수성 상호작용이 실크 기반 나노 소재의 구조적 안정성에 중요한 영향을 미치는 것을 의미한다⁽⁹⁾. 더 나아가, 이러한 결과는 아미노산의 서열 엔지니어링을 통해서 실크 기반 나노 소재의 구조적 안정성과 구조 형성 메커니즘을 제어할 수 있다는 것을 시사한다.

3.2 방향족 아미노산 기반 실크 나노 소재의 기계적 물성 분석

실크 기반 나노 소재를 활용한 공정에서 실크 기반 나노 소재가 가지는 기계적 물성은 매우 중요하다. 따라서 방향족 아미노산 기반 실크 나노 소재에 대한

밀도에 따른 영률(Young's modulus)을 비교 분석하였다. 우수한 기계적 물성은 특히 포토리소그래피 공정에서 감광 소재의 굽힘 힘에 대한 강성이 높을수록 패턴 붕괴 저항성이 높아진다는 결과가 보고되었다⁽¹⁶⁾. 그러므로 기계적 물성을 계산할 때, 단면적의 이방성으로 인한 두 가지 기본적인 굽힘 모드, 즉 soft. 굽힘 모드와 stiff. 굽힘 모드를 고려하였다(Fig. 3). 방향족 아미노산에 따른 실크 포토레지스트의 영률은 티로신 경우는 soft. 굽힘(1.1 GPa), stiff. 굽힘(4.3 GPa), 페닐알라닌 경우는 soft. 굽힘(1.7 GPa), stiff. 굽힘(5.8 GPa), 그리고 트립토판 경우는 soft. 굽힘(1.9 GPa), stiff. 굽힘(5.1 GPa)로 계산되었다. 특히, soft. 굽힘 및 stiff. 굽힘에 대한 탄성계수가 비틀림 및 인장의 탄성계수가 높은 것을 알 수 있는데, 이는 실크 기반 나노 소재에 대한 우세한 변형이 굽힘 변형임을 의미한다. 포토리소그래피 공정을 고려하였을 때, 기존 감광 소

Table 1 Comparison of Young's modulus according to each engineered aromatic amino acid

Aromatic amino acid	Density [kg/m ³]	Young's modulus [GPa]
Tyrosine	1041.54	4.30
Phenylalanine	1040.83	5.80
Tryptophan	1042.36	5.10

재에 대한 영률은 약 0.45 GPa ~ 3.20 GPa로 알려져 있는데⁽¹⁶⁻²¹⁾, 이와 비교하였을 때 이 연구의 방향족 기반 실크 나노 소재가 더 우수한 기계적 물성을 가진 것을 확인하였다(Table 1). 우수한 기계적 물성의 원인은 실크 단백질의 결정질 중에서 베타 시트 형성 비율과 수소결합이 높아짐에 따라 더 강화되는 것을 알 수 있다. 이에 대한 이유는 베타 시트 형성의 중요한 원인은 수소 결합, 소수성 효과, 반데르발스 결합으로 알려져 있는데 베타 시트 구조는 이를 통해서 구조적으로 강하게 결합한 상태로 존재하기 때문이다⁽⁹⁾. 따라서, 방향족 아미노산 기반 실크 나노 소재의 기계적 물성에 미치는 중요한 요인은 반데르발스 결합과 소수성 작용인 것을 추가적으로 알 수 있었다.

4. 결 론

이 연구에서는 실크 베타-시트 구조에 방향족 아미노산(티로신, 페닐알라닌, 트립토판)을 엔지니어링하여 실크 기반 나노 소재의 구조적 안정성과 기계적 특성을 평가하였다. 각각의 나노 소재에 대한 수소 결합 수와 2차 구조를 분석하였을 때, 페닐알라닌 기반 실크 나노 소재가 베타 시트 비율과 수소 결합 수가 가장 높은 것으로 나타났다. 특히 트립토판은 베타 시트 비율이 가장 낮은 것으로 나타났지만 아미노산 측쇄간의 상호작용으로 인해 높은 수소 결합의 수와 기계적 물성을 달성하는 것을 확인하였다. 이를 통해서 아미노산 측쇄간의 상호작용이 베타시트 구조적 정성에 영향을 미치는 중요한 요소인 것을 보여주었다. 이와 반대로, 티로신은 구조적 안정성과 기계적 물성이 가장 낮았다. 이러한 결과는 티로신 아미노산의 측쇄에 대한 OH 잔기에 따른 물과의 친수성 작용 때문인 것으로 나타났다. 이러한 결과를 통해서, 방향족 아미노산 서열의 제어를 통해서 실크 기반 나노 소재의 구조 및 기계적 성능을 제어할 수 있음을

시사하며, 이는 실크 기반 나노 소재의 분야 적용성을 확대하는 방향을 제시하였다고 판단된다.

후 기

이 논문은 2025년도 정부의 재원으로 한국연구재단의 지원을 받아 수행된 연구임(RS-2023-00207833).

References

- (1) Kang, Y. K., Lee, S. J., Eom, S., Kim, B. G., Hwang, C.-C. et al., 2024, Recent Progress of Inorganic Photoresists for Next-generation EUV Lithography, *Journal of Materials Chemistry C*, Vol. 12, No. 39, pp. 15855~15887.
- (2) Chen, F.-M. and Liu, X., 2016, Advancing Biomaterials of Human Origin for Tissue Engineering, *Progress in Polymer Science*, Vol. 53, pp. 86~168.
- (3) Trikeriotis, M., Bae, W. J., Schwartz, E., Krysak, M., Lafferty, N. et al., 2010, Development of an Inorganic Photoresist for DUV, EUV, and Electron Beam Imaging, *Proceedings of SPIE*, Vol. 7639, 76390E-1.
- (4) Yoon, T., Park, W., Kim, Y., Choi, H., Chung, S. et al., 2023, Silk-based Organic Photoresists for Extreme Ultraviolet Lithography: A Multiscale in Silico Study, *Journal of Materials Chemistry C*, Vol. 11, No. 13, pp. 4415~4425.
- (5) Chung, S.-C., Park, J.-S., Jha, R. K., Kim, J., Kim, J. et al., 2022, Engineering Silk Protein to Modulate Polymorphic Transitions for Green Lithography Resists, *ACS Applied Materials & Interfaces*, Vol. 14, No. 51, pp. 56623~56634.
- (6) Tseng, C.-M., Dyakov, Y. A., Huang, H. C., Huang, K. Y., Lee, Y. T. et al., 2010, Photodissociation Dynamics of Tryptophan and the Implication of Asymmetric Photolysis, *Journal of Chemical Physics*, Vol. 133, No. 7, 074307.
- (7) Johari, N., Moroni, L. and Samadikuchaksaraei, A., 2020, Tuning the Conformation and Mechanical Properties of Silk Fibroin Hydrogels, *European Polymer Journal*, Vol. 134, 109842.
- (8) Guo, C., Zhang, J., Jordan, J. S., Wang, X., Henning, R. W. et al., 2018, Structural Comparison of

Various Silkworm Silks: An Insight into the Structure-property Relationship, *Biomacromolecules*, Vol. 19, No. 3, pp. 906~917.

(9) Qiu, W., Patil, A., Hu, F. and Liu, X. Y., 2019, Hierarchical Structure of Silk Materials Versus Mechanical Performance and Mesoscopic Engineering Principles, *Small*, Vol. 15, No. 51, 1903948.

(10) Park, W. B., Yoon, T. Y., Kim, Y. J. and Na, S. S., 2023, Mechanical Property Analysis of Eco-friendly Nano Silk Peptide: A Molecular Dynamics and Elastic Network Model Study, *Transactions of the Korean Society for Noise and Vibration Engineering*, Vol. 33, No. 2, pp. 128~134.

(11) Lindorff-Larsen, K., Piana, S., Palmo, K., Maragakis, P., Klepeis, J. L. et al., 2010, Improved Side-chain Torsion Potentials for the Amber ff99SB Protein Force Field, *Proteins Structure, Function, and Bioinformatics*, Vol. 78, No. 8, pp. 1950~1958.

(12) Xiao, S., Stacklies, W., Cetinkaya, M., Markert, B. and Grater, F., 2009, Mechanical Response of Silk Crystalline Units from Force-distribution Analysis, *Biophysical Journal*, Vol. 96, No. 10, pp. 3997~4005.

(13) Atukgamb, A. R., Durell, S. R., Jernigan, R. L., Demirel, M. C., Keskin, O. et al., 2001, Anisotropy of Fluctuation Dynamics of Proteins with an Elastic Network Model, *Biophysical Journal*, Vol. 80, No. 1, pp. 505~515.

(14) Yoon, G., Kwak, J., Kim, J. I., Na, S., Eom, K., 2011, Mechanical Characterization of Amyloid Fibrils using Coarse-grained Normal Mode Analysis, *Advanced Functional Materials*, Vol. 21, No. 18, pp. 3454~3463.

(15) Luan, C.-H., Parker, T. M., Gowda, D. C. and

Urry, D. W., 1992, Hydrophobicity of Amino Acid Residues: Differential Scanning Calorimetry and Synthesis of the Aromatic Analogues of the Polypentapeptide of Elastin, *Biopolymer*, Vol. 32, No. 9, pp. 1251~1261.

(16) Lawson, R. A. and Robinson, A. P. G., 2019, Overview of Materials and Processes for Lithography, *Frontiers Nanoscience*, Vol. 11, pp. 1~90.

(17) Kim, M., Park, S., Choi, J., Moon, J. and Cho, M., 2021, Tailoring Polymer Microstructure for the Mitigation of the Pattern Collapse in Sub-10 nm EUV Lithography: Multiscale Simulation Study, *Applied Surface Science*, Vol. 536, 147514.

(18) D'Silva, S., Mülders, T., Stock, H.-J. and Erdmann, A., 2021, Modeling the Impact of Shrinkage Effects on Photoresist Development, *Journal of Micro/Nanopatterning, Materials, and Metrology*, Vol. 20, No. 1, 014602.

(19) Hong, S. J., Choi, S., Choi, Y., Allen, M. and May, G. S., 2004, Characterization of Low-temperature SU-8 Photoresist Processing for MEMS Applications, *Proceedings of the IEEE/SEMI Advanced Semiconductor Manufacturing Conference and Workshop (IEEE Cat. No.04CH37530)*, MA, United States. pp. 404~408.

(20) Pan, J. C., Lang, F. C., Zhao, X. P., Hou, X. H. and Li, J. J., 2021, Nanomechanical Properties of the ZEP-520 Electron Beam Resist Film, *Materials Today Communications*, Vol. 27, 102442.

(21) Kawai, A. and Moriike, N., 2001, Adhesion and Cohesion Analysis of ArF/SOR Resist Patterns with Microtip of Atomic Force Microscope (AFM), *Journal of Photopolymer Science and Technology*, Vol. 14, No. 4, pp. 507~512.