사물인터넷융복합논문지 Vol. 12, No. 5, pp. 121-128, 2026 https://doi.org/10.20465/KIOTS.2026.12.5.121

유기화학의 3차원 분자 구조 및 반응 메커니즘 학습을 위한 웹 기반 인터랙티브 시각화 시스템의 설계

김수균[1], 김소은[2], 김예진[2], 최세연[2], 김현민[2], 하민우[3,4*]
[1]제주대학교 컴퓨터공학과 교수, [2]제주대학교 컴퓨터공학과 학생,
[3]제주대학교 약학과 부교수, [4]제주대학교 합성생물화학융합연구센터 부교수

Design of a Web-Based Interactive Visualization System for Learning 3D Molecular Structures and Reaction Mechanisms in Organic Chemistry

Soo Kyun Kim[1], Soeun Kim[2], Yejin Kim[2], Seyeon Choi[2], Hyun Min Kim[2], Min Woo Ha[3,4*]
[1]Professor, Department of Computer Engineering, Jeju National University
[2]Student, Department of Computer Engineering, Jeju National University
[3]Associate Professor, College of Pharmacy, Jeju National University
[4]Associate Professor, SynBioChem Convergence Institute, Jeju National University

요 약 본 논문은 유기화학 학습자의 3차원 분자 구조 및 반응 메커니즘 이해를 지원하기 위한 웹 기반 인터랙티브 3D 분자 시각화 시스템을 설계한다. 기존의 2차원 구조식과 평면 중심의 학습 자료는 분자의 입체적 배향과 반응 과정에서 발생하는 구조 변화를 직관적으로 표현하는 데 한계가 있다. 제안 시스템은 미쓰노부(Mitsunobu) 반응, CuAAC 반응 및 1,2-dibromocyclohexane의 형태 상호전환을 주요 학습 모델로 구성한다. 유니티와 WebGL을 기반으로 3D 분자 모델을 구현하고, 웹 브라우저에서 회전 및 확대·축소를 통해 다양한 시점의 분자 구조를 탐색할 수 있는 인터랙션 기능을 제공한다. 또한 반응 메커니즘과 형태 변화 과정을 단계별 애니메이션으로 시각화하고, Q&A 게시판과 QR 코드를 활용한 학습 자료 연계 기능을 통합한다. 제안 시스템의 주요 3D 탐색 및 애니메이션 기능에 대해 PC와 스마트폰 환경에서 기능 검증을 수행한다. 본 연구는 유기화학의 입체적 분자 구조와 반응 과정을 웹 기반 인터랙티브 콘텐츠로 시각화하고 이를 학습에 활용할 수 있는 교육 시스템을 제시한 것이 특징이다.

주제어 : 유기화학 교육, 3차원 분자 시각화, 반응 메커니즘, 웹 기반 학습, 인터랙티브 학습, Unity WebGL

Abstract This paper proposes a web-based interactive 3D molecular visualization system to support the understanding of three-dimensional molecular structures and reaction mechanisms in organic chemistry. Conventional two-dimensional structural formulas and planar learning materials have limitations in representing spatial molecular arrangements and structural changes during reactions. The proposed system includes the Mitsunobu reaction, the CuAAC reaction, and the conformational interconversion of 1,2-dibromocyclohexane as major learning models. Three-dimensional molecular models are implemented using Unity and WebGL, providing interactive functions for rotation and zooming in a web browser. Reaction mechanisms and conformational changes are visualized through step-by-step animations, and a Q&A board and QR-code-based learning links are integrated into the system. The major 3D exploration and animation functions are functionally evaluated in PC and smartphone environments. The proposed system presents a web-based interactive educational approach for visualizing three-dimensional molecular structures and reaction processes in organic chemistry.

Key Words : Organic Chemistry Education, 3D Molecular Visualization, Reaction Mechanism, Web-Based Learning, Interactive Learning, Unity WebGL

본 논문은 정부(과학기술정보통신부)의 재원으로 한국연구재단의 지원을 받아 수행된 연구임 (RS-2026-25596026).
*교신저자 : 하민우(minuha@jejunu.ac.kr)
접수일 2026년 09월 20일 수정일 2026년 10월 07일 심사완료일 2026년 10월 12일

www.kci.go.kr

1. 서론

유기화학 교육 과정에서 학습자가 겪는 주된 진입 장벽 중 하나는 3차원 공간에서의 분자 구조 및 입체화학적 변환에 대한 높은 인지적 상상 요구도(cognitive demand)이다. 유기 분자는 본질적으로 3차원 공간 점유를 가지며 동일한 분자식을 공유하더라도 원자 간의 공간적 배향과 배치에 따라 물리·화학적 성질 및 생리활성 반응성이 현저히 달라진다[1]. 예를 들어, 거울상 이성질체(enantiomer)는 평면 구조식상으로는 동일해 보이지만 생체 내 표적과의 공간적 상호작용 방식에 따라 완전히 상이한 약리 반응을 나타내며, 이는 의약품 설계 및 제제 개발에서 입체화학적 관찰이 중요함을 보여준다. 나아가, 화학 결합의 공간적 배향성과 복잡한 반응 메커니즘 또한 3차원적 관점이 배제된 상태에서는 원자 간 상호작용과 입체 변화 과정을 직관적으로 파악하는 데 한계가 따른다.

친핵성 치환 반응(S_N2)의 역전 메커니즘, 고리형 전이 상태를 거치는 반응, 그리고 입체선택성(stereo selectivity)이 결과를 결정짓는 반응들은 2D 구조식만으로는 공간적 상호작용을 직관적으로 파악하는 데 본질적인 한계가 있다.

이러한 학습의 어려움은 다음 세 가지 사례에서 특히 두드러진다. 미쓰노부 반응[2]은 입체 화학적 반전(inversion)이 핵심 원리로, 반응 중심의 3차원적 전자 흐름을 이해하지 못하면 생성물의 입체배열을 예측할 수 없다. CuAAC(구리 촉매 아자이드–알카인 고리화 첨가) 반응[3-5]은 1,2,3-트리아졸 고리가 형성되는 과정에서 반응물의 공간적 배향과 구리 촉매와의 상호작용을 이해하는 것이 중요하다.

마지막으로 1,2-디브로모사이클로헥세인의 의자–보트–의자 형태 변환은 axial/equatorial 배향과 분자 형태의 상호전환을 이해하는 데 적합한 입체화학적 사례이다. 이러한 구조 변화는 2차원 구조식만으로는 분자의 공간적 배향과 형태 변화를 직관적으로 이해하는 데 한계가 있다.

이 세 사례는 각각 입체 반전, 구리 촉매와 반응물의 상호작용, 그리고 분자 형태의 상호전환이라는 서로 다른 유형의 3차원적 이해를 요구한다. 따라서 본 연구에서는 유기화학의 입체 구조와 반응 과정을 효과적으로 시각화할 수 있는 대표적인 학습 사례로 이들 세 가지 모델을 선정하였다.

현재 iMolview[6], Jmol/JSmol[7], ChemDraw[8] 등의 분자 구조 시각화 및 화학 구조 작성 프로그램이 활용되고 있다. 이들 도구는 분자 구조의 시각화, 구조식 작성 및 연구 목적의 활용에 유용하지만, 유기화학 반응 메커니즘을 단계적으로 학습하기 위한 교육 콘텐츠와의 연계에는 한계가 있다. 또한 일부 프로그램은 유료 라이선스가 필요하거나 다양한 기능을 활용하기 위해 별도의 사용법 또는 스크립트에 대한 학습이 요구된다. 한편, 선행 연구에서는 3D 시각화 및 인터랙티브 학습 도구가 분자 구조와 화학 개념의 이해를 지원할 수 있음을 제시하였다[9]. 특히 인터랙티브 3D 및 증강현실 기반의 화학 교육 도구는 학습자의 분자 구조 이해와 학습 경험을 지원하는 데 활용되고 있으며[10,11], 공간적 사고 능력 역시 유기화학의 분자 구조를 이해하는 데 중요한 요소로 다루어지고 있다[12-15].

이러한 기존 학습 도구의 한계를 보완하기 위해 본 논문에서는 접근성, 교육 콘텐츠 연계 및 사용자 상호작용을 고려한 웹 기반 인터랙티브 3D 분자 시각화 시스템을 제안한다. 본 시스템은 기존 도구와 달리 3D 분자 모델의 자유로운 탐색(회전·확대·진동), 2D 이미지 기반 반응 메커니즘 단계별 애니메이션, 3D 공간상의 형태 변환 시각화라는 세 가지 핵심 구현 범위를 명확히 설정하여 학습자의 직관적 이해를 지원한다. 나아가, 별도의 프로그램 설치 없이 QR 코드를 통해 오프라인 교안과 3D 콘텐츠를 연계하고, Q&A 게시판을 통합 제공함으로써 웹 기반의 유기화학 학습 환경 구축 및 교육 연계성 측면에서의 차별성을 확보하였다.

〈Table 1〉 Comparison of Existing Molecular Visualization Tools and the Proposed System

Program	Main Features	Limitations	Proposed System
iMolview	PDB/DrugBank/PubChem support, 3D viewing	Limited reaction learning	Step-by-step animations, QR links
Jmol / JSmol	Open-source, web-based 3D visualization	Requires scripting	Simple UI, reaction visualization
Chem Draw	Chemical drawing and reaction schemes	Limited interactive 3D learning	Free web-based 3D interaction

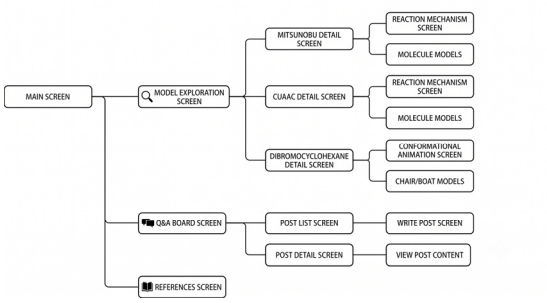
2. 시스템 설계

2.1 시스템 구조 설계

시스템 구조는 메인 화면을 허브로 하여 모델 탐색,

www.kci.go.kr

Q&A, 레퍼런스의 세 가지 섹션으로 구성된다. 인터페이스 복잡도를 최소화하여 사용자가 원하는 기능으로 빠르게 이동할 수 있도록 하였다. 메인화면에서 분자 모델 화면, 게시판 화면, 레퍼런스 화면으로 연결된다. 그림 1을 통해 본 시스템의 구조를 파악할 수 있다.



[Fig. 1] Overview of the Proposed System

2.2 반응 및 형태 모델 설계

본 시스템에서는 세 가지 화학 모델을 지원하며, 초기 분자부터 생성 분자, 애니메이션을 포함한다.

미쓰노부(Mitsunobu) 반응: 알코올의 치환 과정에서 입체 중심의 반전이 나타나는 대표적인 유기합성 반응으로, 입체화학적 변화를 이해하는 데 적합하다.

CuAAC(구리(I) 촉매 아자이드-알카인 고리첨가) 반응: 구리(I) 촉매를 이용하여 아자이드와 알카인으로부터 1,2,3-트리아졸 고리를 형성하는 대표적인 클릭 화학 반응이다.

1,2-디브로모사이클로헥세인 형태 변환: trans-1,2-dibromocyclohexane의 고리 뒤집힘(ring flip)에 따른 형태 상호전환을 나타내며, 치환기의 axial/equatorial 배향 변화를 3차원적으로 이해하는 데 적합하다. 본 모델은 화학 반응이 아닌 형태 변화(conformational change)를 대상으로 하며, 학습자가 두 의자형 구조 사이의 공간적 변화를 관찰할 수 있도록 구성하였다.

본 연구에서는 입체 반전, 고리 형성 및 분자 형태 상호전환과 같이 서로 다른 입체화학적 특성을 시각화하기 위해 세 가지 모델을 선정하였다.

2.3 분자 탐색 화면 설계

모델 탐색에서는 각 반응 및 형태 모델에 포함된 분자 목록을 카드형 레이아웃으로 제공한다. 사용자가 모델을 선택하면 해당 모델에 포함된 분자의 이름과 구조식 이미지가 목록으로 표시되며, 특정 분자를 선택하면 3D 모델 상세 화면으로 이동한다. 상세 화면에서는 마우스 또는 터치 입력을 이용하여 분자 모델을 회전하고 확대·축소할 수 있도록 구성하였다. 또한 원자의 움직임을 시각적으로 표현하기 위한 진동 기능을 제공하여 분자 모델의 동적인 특성을 관찰할 수 있도록 설계하였다.

2.4 반응 애니메이션 설계

반응 메커니즘과 분자 형태의 변화를 단계적으로 시각화하기 위한 애니메이션 기능을 설계하였다. 미쓰노부 반응과 CuAAC 반응은 2D 이미지 기반의 단계별 애니메이션으로 반응 과정을 표현하고, 1,2-디브로모사이클로헥세인은 3D 공간에서 분자 형태가 변화하는 과정을 직접 관찰할 수 있도록 구성하였다. 각 애니메이션은 반복 재생이 가능하도록 하여 학습자가 반응 과정과 형태 변화를 반복적으로 관찰할 수 있도록 하였다.

2.5 Q&A 게시판 설계

학습자가 질문을 남길 수 있는 Q&A 게시판을 설계하였다. 게시글 등록 시 제목, 내용, 닉네임, 암호 코드를 입력하도록 구성하였으며, 댓글 기능을 통해 사용자와 관리자 간의 소통이 가능하도록 하였다. 별도의 로그인 없이 암호 코드만으로 게시물 수정·삭제 권한을 부여하여 접근성을 높였으며, 관리자 마스터 코드를 통해 교수자가 전체 게시판을 효율적으로 관리할 수 있도록 하였다.

3. 시스템 구현

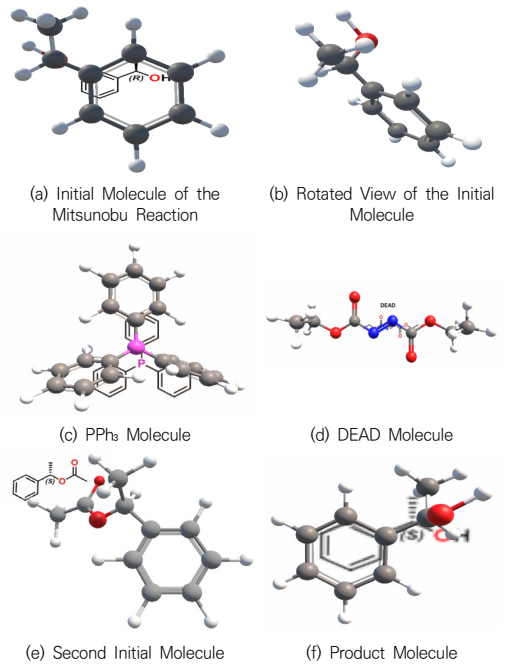
3.1 분자 모델 구현

각 분자의 3D 모형은 Unity의 3D 오브젝트 시스템을 활용하여 구현하였고, 원자는 구(sphere) 오브젝트로, 결합은 원통(cylinder) 오브젝트로 표현하였으며, 표준 CPK 색상 규칙에 따라 각 원소를 색상(탄소, 수소, 산소, 질소)으로 구분하였다. 원통 오브젝트는 구 오브젝트의 중심을 기준으로 결합 구조에 따라 서로 109.5°, 120°, 180°의 각도를 가지도록 배치하였다. 본 시스템에 구현된 각 분자 모델의 결합각 및 입체배열(axial/equatorial 배향)은 표준 유기화학 교재 및 참고 문헌의 분자 결정 구조 데이터를 기반으로 검증 및 모델링되었다.

미쓰노부 반응 모델: 미쓰노부 반응의 특징인 페닐기(벤젠 고리)의 탄소 결합각이 약 120°이며, 중심 인 원자

www.kci.go.kr

는 정사면체 구조를 가져 결합각이 약 109.5°(실제는 약간 더 작음)인 것을 구현하였다. 그림 2(a)는 초기 분자 모형, (b)는 회전, (c)~(e)는 참여 반응 시약인 PPh_3·DEAD와 초기 분자2, (f)는 생성 분자 모형을 나타낸다.



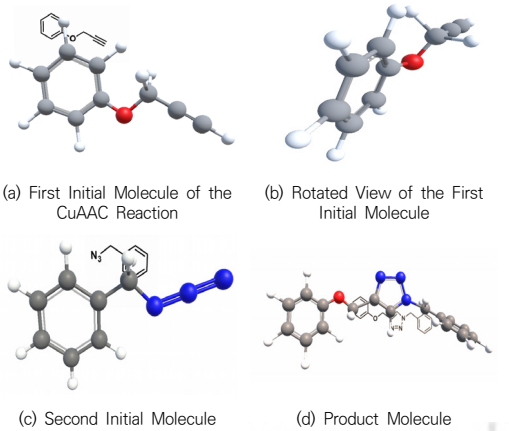
(a) Initial Molecule of the Mitsunobu Reaction (b) Rotated View of the Initial Molecule

(c) PPh_3 Molecule (d) DEAD Molecule

(e) Second Initial Molecule (f) Product Molecule

[Fig. 2] 3D Molecular Models for the Mitsunobu Reaction

CuAAC 반응 모델: CuAAC 반응의 특징인 페닐기의 탄소 결합각이 약 120°이며, 고리 구조 외각에 위치한 치환기의 결합 방향이 선형(180.0°)인 것을 구현하였고, 그림 3(a)는 첫 번째 초기 분자, (b)는 회전 관찰, (c)는 두 번째 초기 분자, (d)는 생성 분자를 나타낸다.

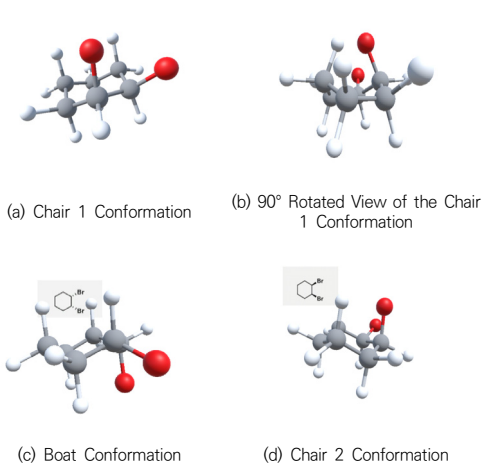


(a) First Initial Molecule of the CuAAC Reaction (b) Rotated View of the First Initial Molecule

(c) Second Initial Molecule (d) Product Molecule

[Fig. 3] 3D Molecular Models for the CuAAC Reaction

1,2-디브로모사이클로헥세인 모델: 사이클로헥산의 결합각이 약 109.5°이며, 치환기의 탄소 결합각이 약 109.5°로 구현했다. 그림 4(a)는 첫 번째 의자(Chair) 구조, (b)는 90도 회전, (c)는 보트(Boat) 구조로 전환된 상태, (d)는 구조 전환을 통해 형성된 두 번째 의자 구조를 보여준다.



(a) Chair 1 Conformation (b) 90° Rotated View of the Chair 1 Conformation

(c) Boat Conformation (d) Chair 2 Conformation

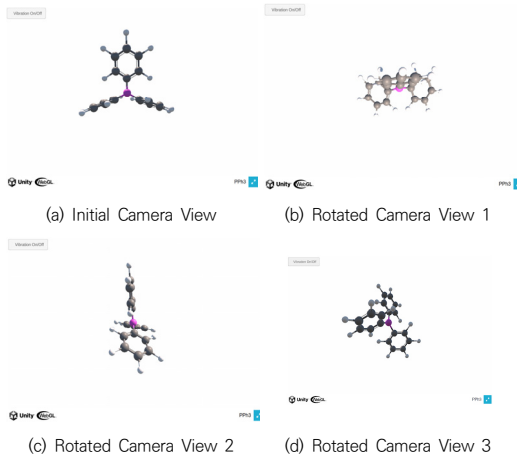
[Fig. 4] 3D Molecular Models of 1,2-Dibromocyclohexane

3.2 화면 내 기능 구현

PC에서는 마우스 입력을, 모바일에서는 터치 입력을 처리하는 방식으로 구현하였다. 입력값은 프레임마다 변화량을 계산하여 분자 회전, 확대·축소, 진동 애니메이션에 반영된다.

회전 기능: PC 환경에서는 마우스 드래그를, 모바일 환경에서는 한 손가락 드래그(single-finger drag)를 이용하여 분자 모델을 회전할 수 있도록 구현하였다. 사용자의 드래그 방향과 이동량을 계산하고, 이를 카메라 시점을 기준으로 분자 모델의 회전 방향과 각도에 반영하였다. 그림 5(a)는 회전 전 초기 화면을 나타내며, 그림 5(b)~(d)는 드래그를 통해 분자 모델을 다양한 방향으로 회전한 화면을 보여준다.

www.kci.go.kr



(a) Initial Camera View (b) Rotated Camera View 1

(c) Rotated Camera View 2 (d) Rotated Camera View 3

[Fig. 5] Camera View Rotation Control

줌 기능: PC 환경에서는 마우스 스크롤 휠을, 모바일 환경에서는 두 손가락 핀치 줌(two-finger pinch zoom)을 이용하여 분자 모델을 확대하거나 축소할 수 있도록 구현하였다. 모바일 환경에서는 두 손가락 사이의 거리가 이전 프레임보다 멀어지거나 가까워지는 정도를 계산하고, 그 변화량을 줌 배율에 반영하였다.

분자 진동 기능: 분자의 동적 특성을 시각화하기 위해 진동(Vibration) On/Off 토글 기능을 구현하였다. 각 오브젝트는 고유 중심 좌표를 기준으로 업데이트 루프 내에서 Random.Range 함수를 통해 X·Y·Z축에 독립적인 변위값을 프레임 단위로 산출하고 이를transform.localPosition에 직접 적용하는 방식으로 무작위 진동을 구현하였다. 다만, 본 시스템의 무작위 진동 및 보간 기반 애니메이션은 양자역학적·물리적 실시간 계산 시뮬레이션 결과가 아니며, 열운동에 따른 분자의 동적 특성을 정성적으로 전달하기 위한 '시각적 근사(visual approximation)' 모델임을 명시하고 학습 화면에서도 이를 명확히 안내하도록 구성하였다.

3.3 애니메이션 구현

2D 애니메이션 미쓰노부와 CuAAC 반응식의 메커니즘을 나타내기 위해, 각 이미지의 위치 데이터와 카메라 줌 크기를 구조체 배열로 묶어 관리했다. 단계가 진행될 때마다 해당 반응식 이미지를 활성화하고, 카메라가 목표 위치와 줌 크기를 향해 매 프레임 남은 거리의 일정 비율만큼 이동하는 선형 보간(Lerp) 방식을 반복 적용하여 목표값으로 점근적으로 수렴시켰다.

이때 보간 계수는 수렴 속도 상수와 프레임 간격의 곱으로 결정되며, 보간 계수를 프레임 간격에 비례하도록 설정하여 서로 다른 프레임률에서도 카메라 이동의 체감 속도 편차를 완화하였다. 그 결과 메커니즘이 진행될수록 카메라가 목표 지점으로 부드럽게 이동·확대하며 반응 단계를 자연스럽게 보여준다.

3D 애니메이션: 디브로모사이클로헥세인의 의자–보트–의자 구조 변화를 표현하기 위해 유니티 엔진의 코루틴 함수와 DOTween을 결합하였고, 각 원자 구조의 동적 경로 연산을 위해 DOTween 내부의 Catmull–Rom 스플라인 곡선 알고리즘을 활용하여 부드러운 곡선으로 개별 원자들이 목표 원자 형태로 이동하도록 하였다. 원자 간의 결합선은 실시간 매핑 스크립트를 통해 갱신하도록 연동하였으며, 분자 형태 변화를 관찰할 수 있도록 start/stop 토글 기능을 구현하였다.

3.4 Q&A 게시판 및 QR 코드 연계 구현

학습자와 교수자 간의 질의응답을 지원하기 위해 Firebase 기반의 Q&A 게시판을 구현하였다. Firebase를 활용하여 별도의 백엔드 서버 구축 없이 게시글 데이터를 저장하고 웹 환경에서 실시간으로 연동할 수 있도록 구성하였다. 게시글은 제목, 작성자, 내용, 암호 코드 및 작성 시간 등의 정보로 구성되며, 등록된 게시글은 최신순으로 화면에 표시된다. 사용자는 게시글 작성 시 설정한 암호 코드를 이용하여 해당 게시글을 수정하거나 삭제할 수 있도록 하였다. 또한 관리자 권한을 통해 전체 게시글을 관리할 수 있는 기능을 구현하였다. 이를 통해 별도의 회원가입이나 로그인 과정 없이 학습자가 질문을 등록하고 관리할 수 있는 간단한 질의응답 환경을 제공한다.

각 분자 페이지는 고유한 URL을 가지므로, 이를 기반으로 QR 코드를 생성하여 교안에 삽입할 수 있다. 학습자가 스마트폰의 기본 카메라로 QR 코드를 스캔하면 해당 분자의 3D 모형 페이지로 즉시 이동한다. 이를 통해 오프라인 교안과 디지털 3D 시각화를 자연스럽게 연결할 수 있다.

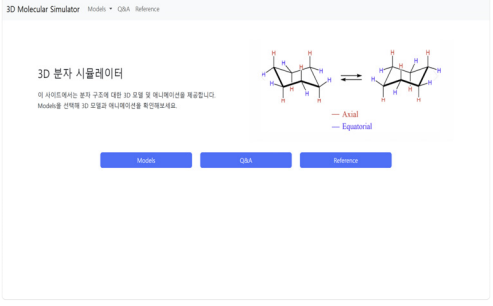
4. 실험 환경

본 절은 개발 환경을 보여주며, 개발 환경은 다음과 같다. 인텔 코어 i5-1340P(1.90 GHz) CPU, 16GB 메모리 및 인텔 아이리스 Xe Graphics GPU를 사용하였고, 분자 모델링 개발 엔진으로 Unity 2022.3.62f3[16]

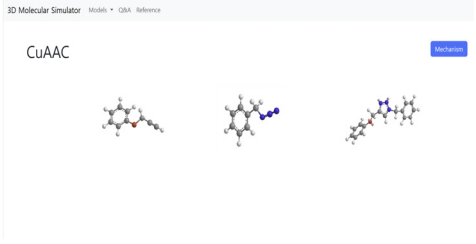
www.kci.go.kr

를 사용하였으며, 분자 모델의 회전·진동 및 카메라 제어를 위한 스크립트는 Visual Studio 2022 환경에서 C#으로 구현하였다. 웹 환경 배포를 위해 WebGL 빌드기능[17]을 활용하였으며, 웹 인터페이스는 Visual Studio Code를 이용하여 HTML 기반으로 구현하였다. Q&A 게시판의 백엔드 데이터베이스로 파이어베이스[18]를 사용하였고, 완성된 시스템은 Vercel[19] 플랫폼을 통해 배포하였다. 또한 선정한 노트북 및 스마트폰 환경에서 크롬과 에지 브라우저를 이용하여 주요 기능의 동작을 검증하였다.

프로그램을 실행하면 그림 6과 같은 메인 화면이 나타난다. 메인 화면에서 CuAAC 반응을 선택하면 그림 7와 같이 해당 반응에 포함된 분자 모델과 애니메이션을 선택할 수 있는 상세 화면으로 이동한다.



[Fig. 6] Main Interface of the Proposed System



[Fig. 7] CuAAC Molecular Model Selection Interface

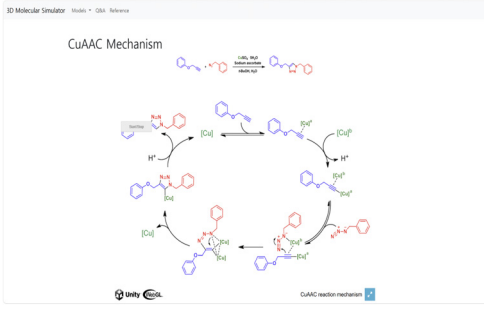
그림 7에서 '초기분자2'를 선택하면 그림 8과 같이 CuAAC 반응의 두 번째 초기 분자를 3D 모델로 확인할 수 있다. 학습자는 마우스 또는 터치 입력을 이용하여 분자 모델을 회전하거나 확대·축소할 수 있으며, 'Vibration On/Off' 기능을 통해 원자의 진동 표현을 활성화하거나 비활성화할 수 있다. 그림 8(a)는 초기 렌더링 화면을 나타내며, 그림 8(b)는 분자 모델을 회전하거나 확대하여 관찰한 화면을 보여준다.



(a) Initial Rendering of the Second CuAAC Reactant (b) Rotated and Enlarged View of the Second CuAAC Reactant

[Fig. 8] Rendering of the Second Initial Molecule in the CuAAC Reaction

각 반응의 애니메이션 화면에서는 반응 메커니즘 또는 분자의 형태 변화를 단계적으로 확인할 수 있다. 그림 9는 CuAAC 반응 메커니즘의 애니메이션 화면으로, 화면의 'Start/Stop' 버튼을 통해 애니메이션을 실행하거나 정지할 수 있다. 이를 통해 학습자는 반응 과정에 따른 구조 변화를 순차적으로 관찰할 수 있다.



[Fig. 9] Animation of the CuAAC Reaction Mechanism

테스트한 브라우저와 기기 전반에서 배포된 WebGL 빌드는 기능적 오류 없이 로딩·실행되었으며, 회전·줌·진동·애니메이션 기능이 데스크톱과 모바일 모두에서 일관되게 동작하였고, 이는 본 시스템이 별도 설치 없이 표준 웹 브라우저에서 접근 가능한 휴대성 학습 교구로 동작함을 보여준다.

제안 시스템의 웹 기반 크로스 플랫폼 호환성 및 주요 기능의 정상 동작 여부를 검증하기 위해 PC 및 모바일 환경에서 기능 평가를 수행하였다 〈Table 2〉. 데스크톱 PC와 모바일 기기(Android, iOS) 전반에서 WebGL 기반 3D 모델 탐색(회전·확대·진동), 메커니즘 애니메이션, QR 코드 연계 및 Q&A 게시판 권한 관리 기능이 오류 없이 정상 작동함을 확인하였다. 이는 본 시스템이 사용자의 기기 환경에 제약받지 않고 표준 웹 브라우저를 통해 일관된 3D 인터랙티브 학습 환경을 제공함을 보여준다.

www.kci.go.kr

〈Table 2〉 Functional Verification Results across Test Environments

Test Items	Desktop PC	Mobile
OS & Browser	Windows 11 (Chrome, Edge)	Android / iOS (Chrome, Safari)
3D & Animation	Mouse control & Play/Stop	ouch gestures & Play/Stop
System Links	Q&A Password Auth	QR Code Redirection
Result	Pass (Normal Operation)	Pass (Normal Operation)

5. 결론 및 향후 연구

본 연구에서는 화학 및 약학 교육에서 2D 학습 교구의 한계를 극복하기 위해 웹 기반 3D 분자 시뮬레이터를 개발하였다. 유니티를 기반으로 미쓰노부, CuAAC 반응과1,2-디브로모사이클로헥세인의 의자–보트–의자 형태 변환이라는 세 가지 핵심 주제에 대한 인터랙티브3D 분자 모형과 메커니즘 애니메이션을 구현하였다. 완성된 시스템은 분자 3D 탐색(회전·확대·진동) 기능, 반응 메커니즘 애니메이션, Q&A 게시판, QR 코드 교안 연계 기능을 포함하며, Vercel을 통해 웹으로 배포되었다. 이를 통해 학습자가 별도의 프로그램 설치 없이 표준 웹 브라우저 환경에서 입체 분자 구조와 반응 과정을 탐색할 수 있는 보조 교육 플랫폼 구성을 확인하였다. 본 연구는 시스템의 웹 기반 시각화 설계 및 기술적 구현 성과에 초점을 맞추었으며, 실제 학습자를 대상으로 한 정량적 학습 효과 및 성취도 평가는 이번 연구 범위에서 제외하였다.

향후 연구에서는 지원 모델의 확대, 학습자 이해도를 평가하는 퀴즈 기능 추가, 모바일 환경 UI/UX 개선, 그리고 실제 수업 환경에서의 사용성·학습 효과 평가를 통해 시스템을 고도화하고 교육적 효과를 정량화할 계획이다.

REFERENCES

[1] Clayden, J., Greeves, N., Warren, S. Organic Chemistry, 2nd ed., Oxford University Press, 2012.

[2] Mitsunobu, O., Yamada, M. Preparation of Esters of Carboxylic and Phosphoric Acid via Quaternary Phosphonium Salts. *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, Vol. 40, No. 10, pp. 2380–2382, 1967.

[3] Rostovtsev, V.V., Green, L.G.., Fokin, V.V., Sharpless, K.B. A Stepwise Huisgen Cycloaddition Process: Copper(I)-Catalyzed Regioselective Ligation of Azides and Terminal Alkynes. *Angew. Chem. Int. Ed.,* Vol. 41, No. 14, pp. 2596–2599, 2002

[4] Tornoe, C.W., Christensen, C., Meldal, M. Peptidotriazoles on Solid Phase: [1,2,3]-Triazoles by Regiospecific Copper(I)-Catalyzed 1,3-Dipolar Cycloadditions of Terminal Alkynes to Azides. *J. Org. Chem.,* Vol. 67, No. 9, pp. 3057–3064. 2002.

[5] Kolb, H.C., Finn, M.G., Sharpless, K.B.. Click Chemistry: Diverse Chemical Function from a Few Good Reactions. *Angew. Chem Int. Ed.,* Vol. 40 No. 11, pp. 2004–2021, 2001.

[6] MolSoft LLC. iMolview. https://www.molsoft.com/ (2026).

[7] Jmol Development Team. Jmol: An Open-Source Java Viewer for Chemical Structures in 3D. http://www.jmol.org/ (2026).

[8] Revvity Signals Software. ChemDraw. https://revvitysignals.com/products/research/chemdraw (2026).

[9] Almasri, F. Cognitive Learning Approach to Enhance University Students' Visualization of Molecular Geometry in Chemical Compounds: A Case Study in Saudi Arabia. *J. Radiat. Res. Appl. Sci.,* Vol. 18, pp. 101283, 2025.

[10] Abdinejad, M., Talaie, B., Qorbani, H.S., Dalili, S. Student Perceptions Using Augmented Reality and 3D Visualization Technologies in Chemistry Education. *J. Sci. Educ. Technol.* Vol. 30, No. 1, pp. 87–96, 2021.

[11] Abdinejad, M., Ferrag, C., Qorbani, H.S., Dalili, S. Developing a Simple and Cost-Effective Markerless Augmented Reality Tool for Chemistry Education. *J. Chem. Educ.,* Vol. 98, No. 5, pp. 1783–1788, 2021.

[12] Wu, H.-K., Shah, P. Exploring Visuospatial Thinking in Chemistry Learning. *Sci. Educ.,* Vol. 88, No. 3, pp. 465–492, 2004.

[13] Springer, M.T. Improving Students' Understanding of Molecular Structure through Broad-Based Use of Computer Models. *J. Chem. Educ.,* Vol. 91, No. 8, pp. 1162–1168, 2014.

[14] Mayer, R.E. Multimedia Learning, 2nd ed.; Cambridge University Press, 2009.

[15] Barak, M., Hussein-Farraj, R. Integrating Model-Based Learning and Animations for Enhancing Students' Understanding of Proteins Structure and Function. *Res. Sci. Educ.,* Vol. 43, No. 2, pp. 619–636, 2013.

[16] Unity Technologies. Unity User Manual 2022.3 (LTS). https://docs.unity3d.com/2022.3/ (2026).

[17] Unity Technologies. Unity WebGL: Building and Running — Unity Manual 2022.3. https://docs.unity3d.com/2022.3/Manual/webgl.html (2026).

[18] Google LLC. Firebase Documentation. https://firebase.google.com/docs (2026).

[19] Vercel Inc. Vercel Documentation. https://vercel.com/docs (2026).

www.kci.go.kr

김 수 균(Soo Kyun Kim) [종신회원]



■ 2006년 2월 : 고려대학교 컴퓨터학과 (이학박사)
■ 2026년 3월 ~ 현재 : 제주대학교 컴퓨터공학과 교수

〈관심분야〉
멀티미디어, 패턴 인식, 이미지 전처리, 모바일 그래픽, 기하 모델링, 그래픽 상호작용

김 소 은(Soeun Kim) [준회원]



■ 2024년 2월 ~ : 제주대학교 컴퓨터공학과 재학

〈관심분야〉
LLM 에이전트, 데이터 분석, 클라우드 시스템

김 예 진(Yejin Kim) [준회원]



■ 2023년 2월 ~ : 제주대학교 컴퓨터공학과 재학

〈관심분야〉
컴퓨터비전, 임베디드 비전, 엣지 AI, 모바일 그래픽

최 세 연(Seyeon Choi) [준회원]



■ 2023년 2월 ~ : 제주대학교 컴퓨터공학과 재학

〈관심분야〉
컴퓨터 비전, 그래픽 상호작용, 인공지능, IoT

김 현 민(Hyun Min Kim) [준회원]



■ 2024년 2월 ~ : 제주대학교 컴퓨터공학과 재학

〈관심분야〉
공간 컴퓨팅, IoT, 딥 러닝

하 민 우(Min Woo Ha) [정회원]



■ 2015년 2월 : 서울대학교 대학원 약학과 (약학박사)
■ 2020년 4월 ~ 2024년 3월 : 제주대학교 약학과 조교수
■ 2024년 4월 ~ 현재 : 제주대학교 약학과 부교수

〈관심분야〉
3D 시뮬레이션, 컴퓨터 기반 신약개발, 유기물 설계

www.kci.go.kr