



# 지스트(광주과학기술원) 보도자료

<http://www.gist.ac.kr>

보도시점	2021년 2월 3일(수) 조간(온라인 2월 2일 낮 12:00)부터 보도해 주시기 바랍니다.	
배포일	2021.02.02.(화)	
보도자료 담당	홍보팀 조동선 팀장	062-715-2061
	홍보팀 이나영 선임행정원	062-715-2062
자료 문의	신소재공학부 최창혁 교수	062-715-2317

## 고성능 이산화탄소 전환용 촉매 소재 개발

### - 고성능 촉매 소재 개발을 위한 핵심적인 접근법 제공

- 효과적인 이산화탄소 전환을 위한 촉매 소재 실마리가 나왔다.
  - 지스트(광주과학기술원, 총장 김기선) 신소재공학부 최창혁 교수, 화학과 서지원 교수, 김형준 교수(한국과학기술원) 공동 연구팀은 고성능 이산화탄소 촉매 소재 설계기술을 개발했다.
- 이산화탄소 전환은 이산화탄소와 물의 반응으로 고부가가치 화합물을 생산하는 기술로 실용화를 위한 연구가 활발하다. 이 중 효율적인 촉매의 개발은 탄소중립정책의 성공을 좌우할 중요한 요소로 꼽힌다.
  - 원자수준에서 배열된 전이금속\* 촉매는 효율적으로 이산화탄소 전환을 할 수 있다는 점에서 주목받고 있다.
    - \* 전이금속 : 주기율표상에 위치하는 4~7주기, 3~11족의 금속원소.
  - 하지만 다양한 구조가 섞여 있는 탓에 활성점 파악과 같은 촉매에 대한 이해가 부족하다. 실용화가 가능한 고성능 촉매 개발을 위해 촉매의 활성점\* 규명과 합리적인 활성점의 설계가 관건이다.
    - \* 활성점 : 촉매 표면에서 반응물질이 촉매 작용을 받는 부위.

□ 연구팀은 전기화학적 방식의 이산화탄소 전환에 뛰어난 단원자 전이금속 촉매\*의 활성점을 도출하고자 원자수준에서 정확하게 제어된 구조체를 도입하였다.

\* 단원자 전이금속 촉매 : 촉매의 활성점이 금속원자 한 개로 구성된 촉매를 지칭함. 단원자 촉매는 금속 촉매에 필적하는 성능을 보이며, 상대적으로 저렴한 전이금속을 소량 사용함으로써 촉매생산에 필요한 비용을 절감할 수 있음.

○ 대칭적인 구조와 대칭이 깨어진 구조 두 가지를 합성하고, 다양한 전기화학 및 분광학적 접근과 계산화학을 통해 대칭이 깨어진 구조에서 이산화탄소 전환이 효율적으로 이뤄지는 것을 확인하였다. 대칭이 깨어진 구조가 반응중간체\* 생성을 유리하게 하여 촉매의 성능을 높인 것이다.

\* 반응 중간체 : 화학반응에서 반응물이 생성물로 전환되는 과정에서 생성되는 물질.

□ 활성점 주변의 원자 수준에서 뒤뜰린 대칭성이 고성능 이산화탄소 전환에 핵심 요소임을 밝힌 이번 연구결과가 고성능 이산화탄소 전환 촉매 개발에 도움이 될 것으로 기대된다.

□ 과학기술정보통신부·한국연구재단이 추진하는 미래소재디스커버리, 개 인기초연구 사업의 지원으로 수행된 이번 연구의 성과는 화학분야 국제학술지 ‘미국화학회지(Journal of the American Chemical Society)’에 1월 7일 게재되었다. <끝>

# 논문의 주요 내용

## 1. 논문명, 저자정보

- 저널명 : Journal of the American Chemical Society
- 논문명 : Identification of Single-Atom Ni Site Active toward Electrochemical CO<sub>2</sub> Conversion to CO
- 저자 정보 : 최창혁 부교수(교신저자/광주과학기술원),  
김형준 부교수(교신저자/한국과학기술원),  
서지원 부교수(교신저자/광주과학기술원),  
김해솔 박사과정(공동 제1저자/광주과학기술원),  
신동엽 박사과정(공동 제1저자/한국과학기술원),  
양우진 박사과정(공동 제1저자/광주과학기술원),  
원다혜 선임연구원(공동 제1저자/한국과학기술연구원) 외 8명

## 2. 연구의 필요성

- 화석연료의 무분별한 사용으로 배출된 이산화탄소는 지구온난화의 원인으로 지목되고 있다. 탄소중립정책의 일환으로 배출된 이산화탄소를 고부가가치의 화합물로 전환하는 기술이 제안되었다. 특히 신재생에너지를 이용한 전기화학적 전환기술은 물과 이산화탄소를 통해 고부가가치의 화합물을 생산 가능한 기술로 큰 주목을 받고 있다.
- 이산화탄소 전환의 실용화를 위해서는 촉매의 가격을 낮춤과 동시에 높은 성능의 촉매 소재 개발이 필요하다. 지금까지 개발된 금속 촉매는 반응을 위해 많은 양의 금속 소재를 요구하며, 낮은 내구성을 보여 실제 실용화에 걸림돌이 되어왔다.
- 최근 원자 수준으로 구조가 제어된 전이금속 촉매가 높은 이산화탄소 전환 효율 및 안정성을 나타내는 것이 알려졌다. 그러나 합성 중 발생하는 복잡한 구조는 활성점 파악과 같은 촉매에 대한 이해를 어렵게 한다. 향후 실용화 가능한 고성능 촉매 소재 개발을 위해 촉매의 활성점 규명 및 합리적인 활성점 설계는 해결해야 할 난제로 남아있다.

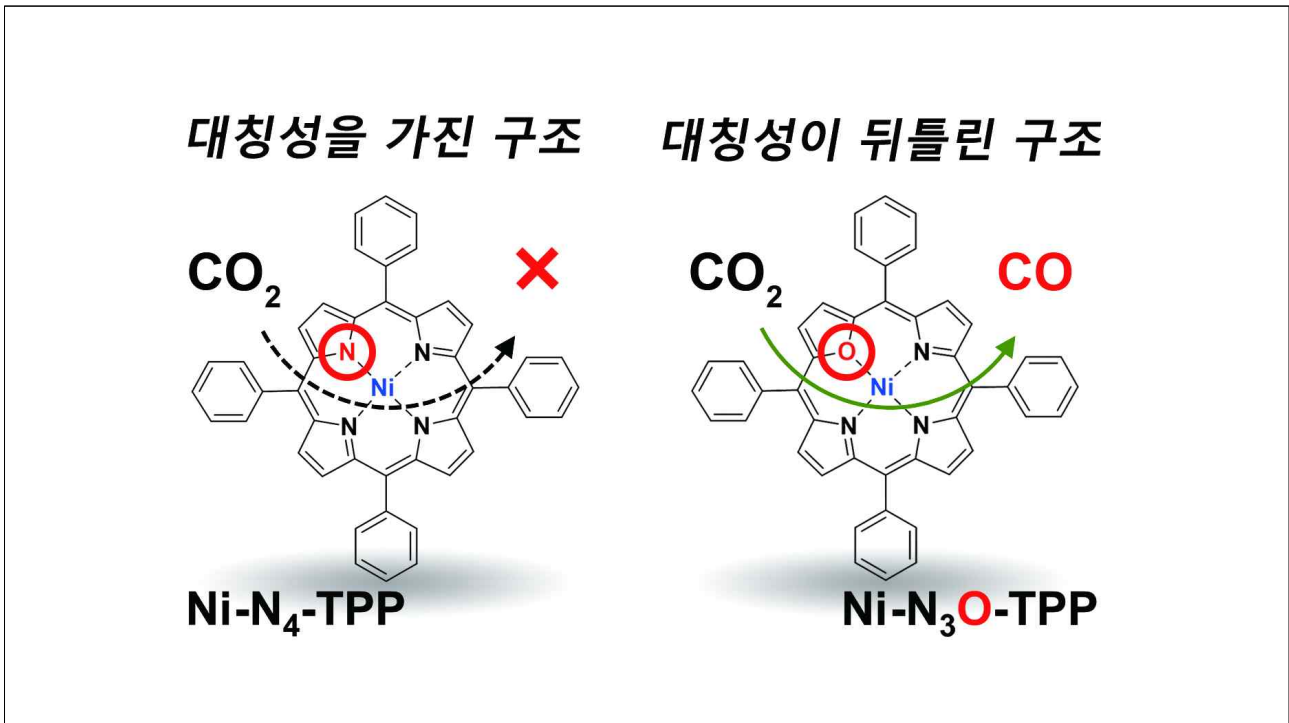
### 3. 연구내용

- 연구팀은 전기화학적 이산화탄소 전환에 고활성을 보이는 단원자 니켈 촉매의 활성점을 도출하고자, 정확하게 제어된 구조를 갖는 두 유기 금속복합체를 도입하였다. 첫 번째 분자로 네 개의 질소원자로 둘러싸인 단원자 니켈을 포함한 구조(Ni-N<sub>4</sub>-TPP)와 두 번째 분자로 하나의 질소가 산소로 치환되어 대칭성이 뒤틀린 구조(Ni-N<sub>3</sub>O-TPP)를 합성하였다.
- 다양한 전기화학적 그리고 분광학적 접근을 통해, 대칭성이 뒤틀린 구조가 높은 이산화탄소 전환성능을 보임을 확인할 수 있었다. 계산화학을 통해 활성점의 뒤틀린 대칭성이 반응중간체 생성에 필요한 에너지를 효과적으로 낮추어 결과적으로 높은 전환성능을 보인다는 것을 밝혔다.
- 연구팀은 단원자 금속 주변의 원자 수준 구조제어가 이산화탄소 전환용 촉매 소재의 성능을 결정하는 핵심 요소임을 도출할 수 있었다. 이를 바탕으로 고성능의 촉매 개발을 위한 원천기술을 제공할 수 있었다.

### 4. 연구성과/기대효과

- 본 연구는 단원자 전이금속 촉매의 활성점 규명에 핵심적인 정보를 제공한다. 전기화학 및 계산화학적 접근을 통해 활성점 주변의 원자 수준에서 뒤틀린 대칭성이 고성능 이산화탄소 전환에 핵심 요소임을 밝힐 수 있었다.
- 이는 향후 고성능 촉매 소재 개발을 위한 핵심적인 접근법을 제공하며, 이산화탄소의 전기화학적 전환기술 외에도 탄소중립정책을 위한 연료전지 및 수전해 등의 촉매 소재 개발에 폭넓게 활용 가능할 것으로 기대된다.

## 그림 설명



(그림) 각기 다른 대칭성을 가진 단원자 촉매의 전기화학적 이산화탄소 전환

대칭성을 갖춘 구조의 경우(Ni-N<sub>4</sub>-TPP), 전기화학적 이산화탄소 전환에 활성을 거의 보이지 않지만, 대칭성이 뒤틀린 구조의 경우 (Ni-N<sub>3</sub>O-TPP), 이산화탄소의 일산화탄소 전환에 높은 활성을 보인다. 활성점 주변의 원자 수준에서 뒤틀린 대칭성이 고성능 이산화탄소 전환에 핵심 요소임을 보여준다.

# 연구 이야기

<작성 : 광주과학기술원 최창혁 부교수>

## □ 연구를 시작한 계기나 배경은?

본 연구는 4년 전 미래소재디스커버리 사업 (“생체촉매 모방 멀티머 구현 촉매”, 단장 서울대학교 재료공학부 남기태 교수)을 시작할 때 처음으로 논의했던 연구입니다. 생명화학, 전기화학, 계산화학 등 다양한 분야 전문가들의 협업을 통해, 세상의 난제를 해결하고 인류에 보탬이 될 수 있는 연구를 고민하였습니다. 본 연구 결과는 그 노력의 대표적인 성과로서, 탄소중립 핵심기술개발에 관한 연구입니다. 기초과학과 공학의 접목을 위해 본 연구단은 지난 4년간 지속적인 지원을 아끼지 않았으며, 이러한 배경을 바탕으로 연구에 집중할 수 있었습니다.

## □ 이번 성과, 무엇이 다른가?

이번 연구성과는 실제 복잡하고 이해하기 힘든 실용촉매를 바탕으로 한 연구가 아닌, 원자수준에서 정밀한 제어가 가능한 구조체를 활용하여 고부가가치 화합물 생산의 핵심 기술을 도출하였습니다. 이는 일반적인 전기 그리고 촉매 화학적 접근이 아닌, 생명 그리고 계산화학의 관점에서 상당히 새로운 형태의 난제 해결 접근법이었습니다. 이를 통해 탄소중립 성공의 핵심기술이 활성점 주변 구조를 원자수준으로 제어하는 것임을 밝힐 수 있었습니다.

## □ 실용화된다면 어떻게 활용될 수 있나? 실용화를 위한 과제는?

본 기술개발을 통해 실제 단원자 촉매에서 이러한 구조적 뒤틀림을 유도하는 합성적 접근이 이루어져야 합니다. 이를 바탕으로 촉매개발이 이루어진다면 친환경에너지를 이용하여 효율적으로 이산화탄소를 일산화탄소로 전환 가능합니다. 이렇게 생성된 일산화탄소는 다양한 석유화학기반 화합물을 생산하는 데 매우 중요하게 활용됩니다.