

# “다양한 에너지 전환 화학 반응에 적용 기대” GIST, 전자스핀 상호작용 현상 기반 수소생산 반응경로 세계 최초 규명

- 화학과 서준혁 교수팀, 양성자와 전자의 이동경로 제어하고 수소생산 반응 메커니즘 규명... 강자성과 반강자성 성질 띠는 두 종류의 코발트 화합물 설계
- 반강자성 코발트 촉매 화합물이 강자성에 비해 수소전환 효율 높고(100%), 수소가스 생산량도 2배 많아... 국제학술지 《Nature Communications》 게재



▲ (왼쪽부터) 화학과 서준혁 교수, 이주은 박사과정 학생

환경 오염과 자원 고갈의 문제가 심각해지면서 화석 연료를 대체할 친환경 에너지 원으로 수소가 주목받고 있는 가운데 수소 생산을 위한 촉매 개발에 대한 관심도 집중되고 있다.

광주과학기술원(GIST, 총장 임기철)은 화학과 서준혁 교수 연구팀이 코발트 촉매의 교환결합\* 성질을 이용해 전자와 양성자의 이동을 제어하고 수소 생산 반응 메커니즘을 규명했다고 밝혔다.

이번 연구는 기초과학 현상에 대한 이해를 수소 생산 촉매 개발에 적용한 사례로서, 전자와 양성자의 이동경로 제어 방법은 다양한 화학 반응의 반응성과 선택성 연구에 도움이 될 뿐만 아니라, 촉매 반응 효율을 높이는 데에도 기여할 수 있을 것으로 기대된다.

\* 교환결합(exchange coupling): 서로 다른 원자나 이온에 있는 두 개의 홀전자가 상호작용하는 현상을 의미하며, 이러한 상호작용을 통해 전자스핀이 같은 방향으로 정렬되거나(강자성 스핀 상호작용, ferromagnetic coupling), 반대 방향으로 정렬(반강자성 스핀 상호작용, antiferromagnetic coupling)될 수 있다.

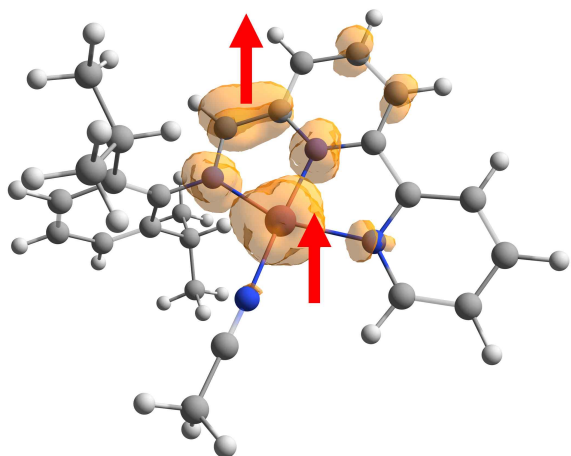
전기화학적으로 수소 가스를 생산하는 촉매 반응이 기존 연구에서 다수 보고된 바 있으나 전자스핀\*의 상호작용 현상을 이용해 양성자와 전자의 이동경로를 제어하고 수소 생산 반응 메커니즘을 규명한 연구 결과는 아직 보고된 사례가 없다.

\* 전자스핀(electron spin): 전자스핀은 전자의 질량이나 전하와 같은 기본 성질 중 하나로 각운동량 단위를 갖는 물리량이다.

연구팀은 수소 생산 반응의 기본 단위인 전자와 양성자의 이동경로 제어에 주목하였다. 새로운 제어 방법을 적용해 수소 반응 메커니즘을 규명함으로써 매우 높은 효율로 수소를 생산하는 방법을 개발할 수 있다.

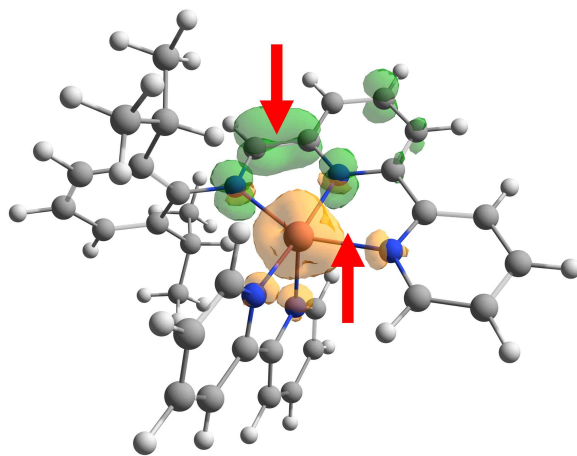
연구팀은 서로 다른 '전자스핀 상호작용', 즉, 강자성과 반강자성 성질을 각각 띠는 두 종류의 코발트 화합물을 설계하였다.

### 강자성 스핀 상호작용



VS.

### 반강자성 스핀 상호작용



▲ 서로 다른 스핀 상호작용을 가지는 코발트 화합물의 스핀 밀도. (좌) 중심 금속과 리간드에 각각 업(up) 스핀이 분포. (우) 중심 금속에는 업(up) 스핀이, 리간드에는 다운(down) 스핀이 분포.

'전자스핀 상호작용'은 촉매 시스템으로 유입된 전자스핀이 상호작용을 통해 마치 무대 위에서 두 명의 무용수가 한 방향으로 함께 춤을 추거나 반대로 춤을 추면서 서로의 이동에 영향을 주는 것처럼 **화합물의 에너지 상태에 영향을 주고, 다른 전자스핀의 이동에 영향을** 주기도 한다.

이번 연구에서 개발한 반강자성 코발트 촉매 화합물은 전기화학 셀의 환원전극에서 공급된 전하량 대비 100%의 전환 효율로 수소를 생산하고, 단위 초당  $11 \times 10^3$ 개 이상의 수소가스를 생산하는 높은 촉매 반응성을 보여 주었다.

이에 반해, 강자성 코발트 촉매 화합물은 반강자성 화합물의 절반 수준인 단위 초당  $6 \times 10^3$ 개 정도의 수소가스를 생산하였다. 이는 반강자성 스핀 상호작용이 전자를 쉽게 전달할 수 있도록 하며 결과적으로 수소 생산 촉매 반응 효율을 높이는 것으로 설명할 수 있다.

서준혁 교수는 "이번 연구로 수소 생산 반응에서 전자와 양성자의 이동을 제어하는 방법을 이해하게 되었다"며 "앞으로 다양한 에너지 전환 화학 반응에 이 방법을 적용할 수 있을 것으로 기대한다"고 설명했다.

GIST 화학과 서준혁 교수가 지도하고 이주은 박사과정생이 수행한 이번 연구는 한국연구재단 기초연구사업과 해양수산과학기술진흥원 해양수산 신사업 기술사업화 지원 사업의 지원을 받아 국제학술지 《네이처 커뮤니케이션즈(Nature Communications)》에 2024년 10월 7일 게재되었다.

## 논문의 주요 정보

### 1. 논문명, 저자정보

- 저널명 : Nature Communications (IF: 14.7 , 2023년 기준)
- 논문명 : Exchange coupling states of cobalt complexes to control proton-coupled electron transfer
- 저자 정보 : 이주은 (제1저자, GIST), 이준승 (공저자, 전남대) 서준혁 (교신저자, GIST)