



# 지스트(광주과학기술원) 보도자료

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

보도시점	<b>배포 즉시 보도하여 주시기 바랍니다.</b>	
배포일	2020.11.09.(월)	
보도자료 담당	홍보팀 김효정 팀장	062-715-2061
	홍보팀 이나영 선임행정원	062-715-2062
자료 문의	물리·광과학과 문봉진 교수	062-715-2882

## 국내 연구진, 온실가스 분자의 분해과정 실시간 포착하는데 성공

**- 이산화탄소 분자 분해과정 초미세 수준에서 관찰... 이산화탄소 제거 및 유용 물질로 전환 가능한 화학반응의 직접 증거 제시**

- 지스트(광주과학기술원, 총장 김기선) 문봉진 교수(물리·광과학과, SRC 극미세 초고속 X-선과학 연구센터, C-AXS)는 기초과학연구원(IBS, 원장 노도영) 나노물질 및 화학반응 연구단(단장 유용)의 박정영 부연구단장(KAIST 화학과 교수) 연구팀 및 충남대학교 김현유 교수(신소재공학과) 연구팀과 함께 이산화탄소 분자가 로듐(Rh) 촉매 표면에서 분해되는 순간을 직접 관찰하는데 성공했다.
  - 이번 연구결과는 지구온난화의 주범인 이산화탄소를 제거해 유용 물질로 전환할 수 있는 화학반응의 직접 증거를 제시하였다.
- 기후변화로 인한 피해가 해마다 증가함에 따라 지구온난화를 가속시키는 온실가스인 이산화탄소를 유용한 물질로 전환할 수 있는 기술이 최근 활발히 연구되고 있다. 포집된 이산화탄소를 메탄 혹은 메탄올과 같은 청정 연료로 전환한다면, 환경 및 석유 에너지 의존 문제를 해결할 수 있기 때문이다.

○ 문제는 이산화탄소(CO<sub>2</sub>)는 화학적으로 매우 안정하기 때문에 전환을 위해 높은 에너지가 소모된다는 점이다. 이산화탄소를 일산화탄소(CO)와 산소(O)로 분해시키는 초기 과정에는 수십 기압에 이르는 고압 반응이 요구된다. 이 때문에 최적의 반응경로를 설계하고, 전환 효율을 향상시키려면 이산화탄소의 분해 메커니즘을 면밀히 파악하는 것이 중요하다. 하지만 지금까지 분광학적 분석 등 제한적인 증거만 제시됐을 뿐, 이산화탄소 분해 과정의 화학적 메커니즘을 원자 수준에서 정확히 제시한 연구는 없었다.

□ 연구진은 실제 반응 환경에서 이산화탄소 분해과정을 실시간 관찰하기 위해 연구를 시작했다. 크기가 수 옹스트롬(Å · 100억분의 1미터)에 불과한 이산화탄소 분자는 화학 반응기\* 내부 압력이 충분히 증가할 경우, 촉매 표면에서 스스로 구조변화를 일으킬 수 있다는 이론적 예측에서 아이디어를 얻었다.

\* 화학 반응기: 최적의 화학반응을 진행시키기 위해서 반응물 공급과 온도와 압력이 조절되는 부분

□ 김현유 충남대 교수는 “우리가 살아가는 상압 환경은 크기가 작은 이산화탄소 분자 입장에서는 상당한 에너지를 공급받는 고압 환경”이라며 “주변 압력으로 인해 단위 면적 당 분자 간 충돌횟수가 비약적으로 높아지며 분자가 불안정해지고, 최종적으로 분해에 이르는 것을 확인할 수 있었다”고 설명했다.

○ 이후 연구진은 ‘거대 빛 현미경’으로 불리는 방사광가속기를 활용해 로듐 촉매 표면의 미세한 화학 결합 에너지 변화를 측정했다. 이를 통해 상압 환경에서 반응이 시작한 뒤 일산화탄소가 서서히 증가함을 확인할 수 있었다. 또한, 구조변화를 일으킨 이산화탄소의 전자구름\*\* 밀도 차이가 로듐 촉매 표면에서 극대화됨을 발견했다. 로듐 촉매의 표면에서 이산화탄소의 분해가 시작된다는 증거를 제시한 셈이다.

\*\* 전자구름: 원자내부의 특정 위치에 존재할 수 있는 전자 위치의 확률적 분포

- 문봉진 교수는 “지구온난화의 원인으로 지적받는 이산화탄소의 효과적인 제거와 활용을 위해서는 이산화탄소의 분해 메커니즘을 낱알이 파헤쳐야 한다” 며 “이번 연구는 실험과 계산과학 분야 공동연구를 통해 표면 이산화탄소의 변화를 원자 수준에서 관찰하고, 후속 연구를 위한 표준 연구 방법론을 제시했다는 의미가 있다” 고 말했다.
- 이어 박정영 IBS 부연구단장은 “이산화탄소가 촉매 표면에서 스스로 분해된다는 이론은 오래 전 제시됐지만, 그간 직접적인 실험 증거가 제시된 적이 없어 40여 년간 난제로 여겨졌다” 며 “향후 이산화탄소의 전환률에 영향을 미치는 핵심 연결고리를 규명하기 위한 연구를 진행할 계획” 이라고 말했다.
- 이번 연구성과는 11월 6일(금) 오후 7시(한국시간) 국제학술지 네이처 커뮤니케이션스(Nature Communications, IF 12.121) 온라인 판에 게재됐다. <끝>

## 논문의 주요 내용

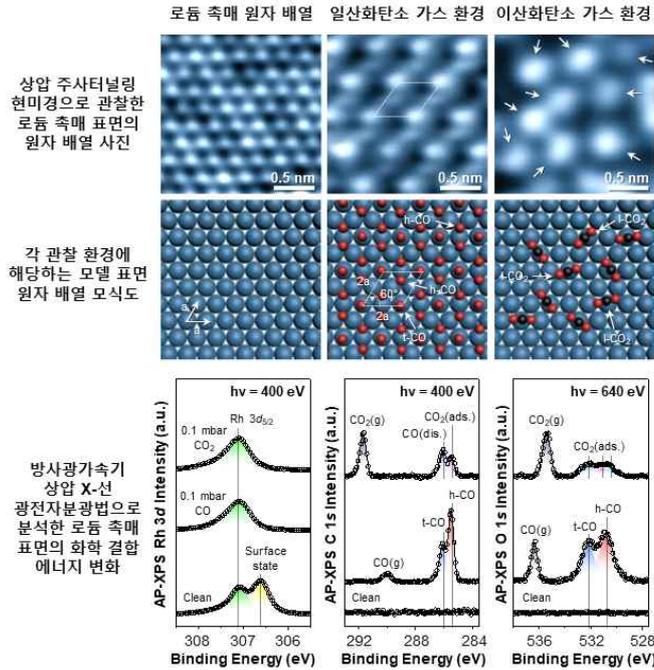
### 1. 논문명, 저자정보

- 논문명 : How Rh surface breaks CO<sub>2</sub> molecules under ambient pressure / Nature Communications
- 저자 정보 : Jeongjin Kim, Hyunwoo Ha, Won Hui Doh, Kohei Ueda, Kazuhiko Mase, Hiroshi Kondoh, Bongjin Simon Mun\*, Hyun You Kim\* and Jeong Young Park\* (\* 교신 저자)

## 용 어 설 명

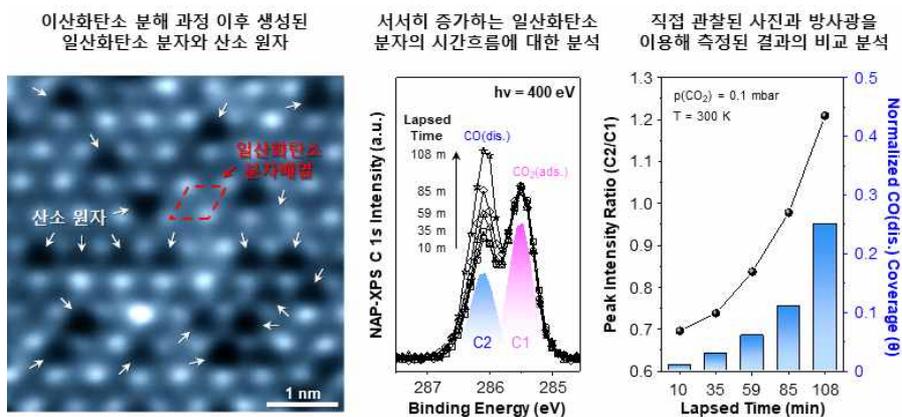
1. 상압 광전자분광기(Ambient Pressure X-ray Photoelectron Spectroscopy, AP-XPS)  
: 기존의 초고진공상태에서 작동하는 광전자분광기를 상압의 환경에서 작동할 수 있게 특수 제작된 장비로서 실제 반응상황에서 표면의 화학적/물리적 특성을 측정할 수 있는 장비
2. 상압 주사터널링 현미경(Ambient Pressure Scanning Tunneling Microscope, AP-STM)  
: 화학반응환경에서 작동할 수 있게 특수 제작된 장비로서 실제 촉매반응상황에서 표면의 구조를 원자단위에서 측정할 수 있는 장비
3. 밀도범함수이론(Density Functional Theory, DFT)  
: 물질의 전자의 모양과 그 에너지를 양자역학으로 계산하기 위한 이론으로 가장 널리 사용되는 양자역학 계산분야이다.

# 그림 설명



[그림 1] 각 가스 환경에서 실시간 관찰된 로듐 촉매 표면의 모습

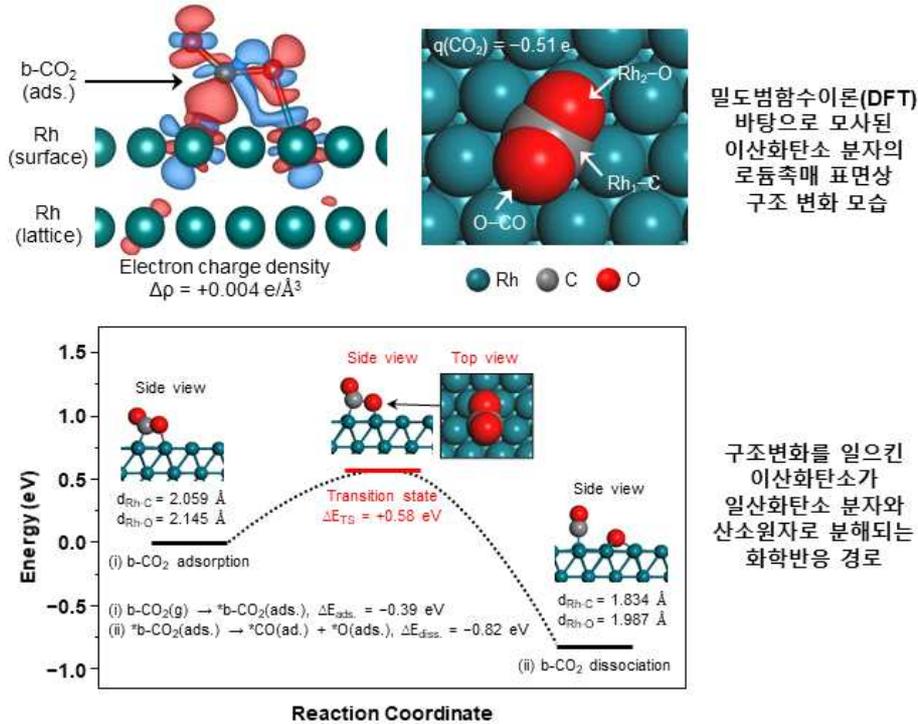
상압 주사터널링 현미경(AP-STM)으로 관찰한 로듐 촉매 표면의 균일한 원자배열과 일산화탄소와 이산화탄소 가스 환경에서 각각 관찰된 분자 흡착 배열 모습. 방사광가속기 시설의 상압 X-선 광전자분광법(AP-XPS)으로 분석된 각 가스 환경에서의 화학 결합 에너지 변화.



[그림 2] 이산화탄소 분해 과정의 시간 흐름에 대한 관찰 결과

상압 환경에서 직접 관찰한 현미경 사진에서 이산화탄소의 분해 결과 비교적 균

일하게 배열된 일산화탄소와 군데군데 붙어있는 산소 원자가 형성됨을 알 수 있다. 방사광을 활용해 시간의 흐름에 따라 로듐 촉매 표면을 분석한 결과, 일산화탄소의 생성량이 서서히 증가함을 마찬가지로 확인할 수 있다.



[그림 3] 밀도범함수이론(DFT)으로 모사된 이산화탄소의 분해과정

실험에서 관찰된 이산화탄소의 분해 결과는 상압 환경에서 구조변화를 일으킨 이산화탄소 분자의 로듐 촉매와의 상호 작용에서 비롯된다. 구조변화로 인해 다소 불안정해진 이산화탄소 분자는 로듐 촉매 표면에서 불균일한 전자 구름 밀도를 형성하며, 그 결과 일산화탄소 분자와 산소 원자로 분해되는 촉매 반응 경로를 갖게 된다.