

“수소를 고체 속에서 ‘액체처럼’ 빠르게 이동시킨다”

GIST-KAERI-도쿄과학대,

착이온에 의한 수소음이온 전도 세계 첫 구현 음이온 수소로 에너지 혁명

- GIST 화학과 김상륜 교수가 이끈 한일 국제공동연구팀, 분자성 착이온에 의한 수소 음이온의 전도 가속 현상 확인... 전도도 1천배 향상 및 차세대 수소 에너지 기술 실현 가능성 제시
- 기존 리튬이온전지와는 다른 방식의 새로운 에너지 이동 원리 규명 통해 친환경 이차전지·연료전지·수전해 기술 새로운 전기 마련... 《미국화학회지(JACS)》 게재



▲ (왼쪽부터) 김상륜 교수, 김태현·김태승·이태경 석박사통합과정 학생

수소를 음이온 상태로 만들어 고체 속에서 마치 액체처럼 빠르게 이동시키는 새로운 기술이 한일 국제공동연구를 통해 개발됐다.

이번 연구는 기존의 리튬이온전지나 전고체전지와는 전혀 다른 방식의 에너지 이동 기술로, 수소음이온(H^-)을 활용한 친환경 이차전지, 연료전지, 수전해 기술의 실현 가능성을 한층 끌어올렸다는 점에서 학술적·산업적 가치가 높다.

광주과학기술원(GIST, 총장 임기철)은 화학과(에너지융합대학원 겸임) 김상륜 교수 연구팀이 한국원자력연구원 및 일본 도쿄과학대학(Institute of Science Tokyo)과의 공동연구를 통해 분자성 착이온*을 활용해 고체 내 수소음이온의 전도 속도를 획기적으로 높일 수 있다는 사실을 규명했다.

* **착이온** : 중심 원자에 여러 개의 분자 또는 이온이 붙어 있는 구조로, 전하를 띤 다원자 이온이다. 본 연구에서는 BH_4^- (수소화붕소 음이온)이 사용됐다.

일반적으로 고체 상태에서는 이온이 자유롭게 움직이기 어렵지만, 특정 이온이 고체 내에서도 빠르게 이동할 수 있다면 리튬이온 전고체전지와 같은 에너지 저장·변환 기술에 혁신적인 전기를 마련할 수 있다.

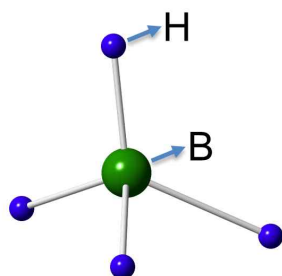
이러한 이유로 새로운 전도성 이온의 발견은 학문적 의미뿐만 아니라 향후 산업적 응용 가능성 측면에서도 매우 중요한 성과로 평가된다.

수소는 친환경 에너지원으로 각광받고 있지만, 다른 물질과 쉽게 반응하는 성질 때문에 안정적으로 다루기 어렵다는 한계가 있다.

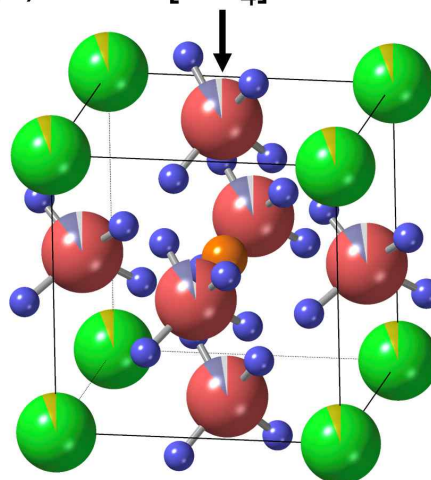
이에 연구팀은 수소를 음이온(H^-) 형태로 안정화하고, 고체 내에서 빠르게 이동할 수 있도록 분자성 착이온을 활용한 새로운 구조를 설계했다.

연구팀은 수소음이온을 안정화시키고 이동 속도를 높이기 위해 페로브스카이트 구조*의 결정 내에 착이온 BH_4^- 와 수소음이온을 함께 배치하는 독자적인 설계 원리를 제안했다.

(a) 분자성 착이온 BH_4^-



(b) H^- 과 $[BH_4]^-$ 이 공존



▲ 분자성 착이온을 포함하는 수소음이온 전도성 페로브스카이트 구조. (a) 본 연구에서 사용된 분자성 착이온 BH_4^- 의 구조. (b) 수소음이온 H^- 와 분자성 착이온 BH_4^- 이 공존하는 페로브스카이트 구조의 개략도. 페로브스카이트의 ABC_3 구조에서, H^- 와 BH_4^- 는 C site에 무질서한 상태로 존재.

원자 수준에서 이들의 상호작용을 분석한 결과, 착이온의 고환원성(전자를 내주는 성질)에 의해 수소음이온이 안정화될 뿐만 아니라, 착이온의 정전기적 상호작용*이 약한 영역에서는 낮은 에너지 장벽*이 형성되어 수소음이온이 보다 쉽게 이동할 수 있음이 확인되었다.

* 페로브스카이드(Perovskite) 구조: 광석인 $CaTiO_3$ 와과 같이 ABX_3 로 표현되는 결정 구조

* 정전기적 상호작용: 전하를 띤 입자들(이온, 분자 등) 사이에서 발생하는 인력 또는 반발력

* 에너지 장벽: 이온이 이동할 때 넘어야 하는 에너지

연구팀은 먼저 전자를 잘 내주는 성질(고환원성)을 가진 착이온 BH_4^- (수소화붕소이온)이 수소를 음이온 상태로 안정화시킬 수 있다는 사실을 밝혀냈다.

이 결과를 바탕으로, BH_4^- 와 수소음이온이 공존하는 새로운 물질($Sr_{0.925}Na_{0.075}LiH_{2.625}(BH_4)_{0.3}$)을 단일상(균일한 결정 구조)으로 합성하는 데 성공했다.

연구팀은 착이온과 수소음이온이 함께 존재하는 단일상 구조와 이온의 이동 특성을 보다 정밀하게 분석하기 위해, 수소 대신 중수소(D)*를 넣은 화합물 ($\text{Sr}_{0.925}\text{Na}_{0.075}\text{LiD}_{2.625}({}^{11}\text{BD}_4)_{0.3}$)을 합성하고 중성자 회절 실험*을 진행했다.

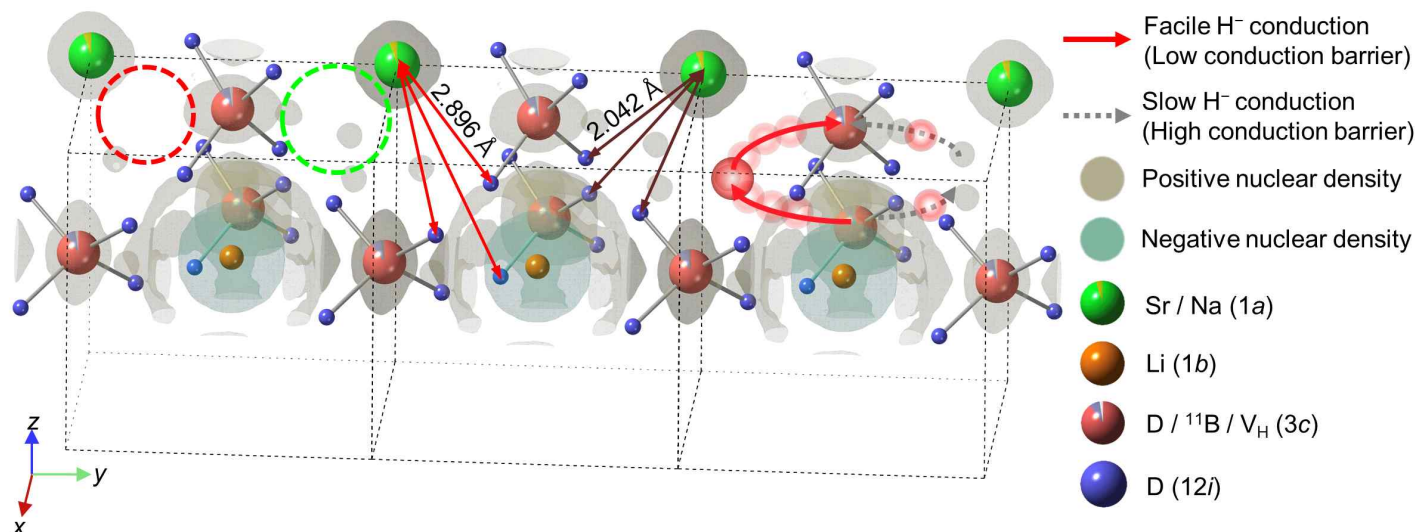
그 결과, 페로브스카이트 격자* 안에서 착이온과 수소음이온이 무질서하게 섞여 있는 상태임을 밝혀냈으며, 이러한 무질서한 배열(높은 엔트로피*) 덕분에 단일상 구조가 더 안정적으로 유지된다는 사실을 확인했다.

* **중수소(D):** 수소의 한 종류로, 양성자 1개와 중성자 1개를 가지고 있다. 일반 수소보다 무겁고, 원자 번호는 같지만 질량은 약 2배이다. 중성자 회절 실험에서 더 강한 신호를 주기 때문에 정밀한 원자 수준 분석에 유리하다.

* **중성자 회절 실험:** 중성자를 물질에 쏘아서 그것이 원자에 부딪혀 반사되는 패턴을 분석하는 실험이다. 중성자는 전기를 띠지 않아, 원자 구조나 원자핵의 배열을 정밀하게 알아보는 데 적합하다.

* **격자:** 원자들이 규칙적으로 반복되어 배열된 3차원 구조이며, 물질의 기본 틀(뼈대)이라 볼 수 있다.

* **엔트로피(Entropy):** 어느 정도 무질서한 상태인지를 나타내는 개념으로, 구조가 복잡하거나 섞여 있을수록 엔트로피가 높다고 표현한다.



▲ **중성자 회절 실험 결과.** 점선으로 표기된 3개의 정육면체는 각각 페로브스카이트 구조의 격자를 의미. 왼쪽 격자: 붉은색 원에 비하여 녹색 원의 내부가 BD_4^- 주위의 높은 핵밀도, 즉 강한 정전기적 상호작용을 나타냄. 중간 격자: 강한 정전기적 상호작용을 보여주는 곳(갈색선)이 BD_4^- 와 주위 이온간의 거리가 짧아서, 높은 에너지 장벽이 형성됨. 오른쪽 격자: 수소음이온은 BD_4^- 의 정전기적 상호작용이 약한 곳을 따라 전도되는 것으로 해석됨.

또한 연구팀은 MEM(Maximum Entropy Method)* 분석을 통해, 착이온이 주변 이온들과 비대칭적으로 상호작용하며 제자리에 고정되어 있다는 사실을 밝혀냈다.

특히 주목할 만한 점은, 이러한 비대칭적 착이온이 만든 정전기적 상호작용이 약한 경로를 따라 수소음이온이 훨씬 더 빠르게 이동했다는 것이다.

실제로 착이온이 없는 기존 구조와 비교했을 때, 수소음이온의 이온전도도가 무려 1,000배 이상 증가한 것으로 확인됐다.

* **MEM(Maximum Entropy Method)**: 중성자 회절 데이터를 바탕으로 원자나 분자의 분포를 재현하는 방식이다. 가장 무질서한 상태를 기준으로 구조를 추정한다는 특징이 있다.

* **이온전도도(Ionic Conductivity)**: 전하를 띤 입자(이온)가 얼마나 잘 이동하는지를 나타내는 정도로, 숫자가 높을수록 이온이 더 잘 이동한다는 것을 의미한다.

김상륜 교수는 “이번 연구는 세계 최초로 착이온에 의한 수소음이온 전도를 구현한 사례로, 앞으로 수소 기반의 새로운 친환경 에너지 기술 개발에 중요한 전환점을 마련할 수 있을 것”이라고 말했다.

GIST 화학과 김상륜 교수가 지도하고 석박사통합과정 김태현·김태승·이태경 연구원이 공동 주저자로 참여한 이번 연구는 한국연구재단 개인기초연구사업의 지원을 받았다. 연구 결과는 화학 분야의 권위 있는 국제학술지 《Journal of the American Chemical Society》에 2025년 4월 17일 온라인 게재됐다.

논문의 주요 내용

1. 논문명, 저자정보

- 저널명 : Journal of the American Chemical Society (IF: 14.5, 2023년 기준)
- 논문명 : Hydride ion conductors with polyanionic complex anions
- 저자 정보 : 김태현(공동 1저자, GIST), 김태승(공동 1저자, GIST), 이태경(공동 1저자, GIST), 박예은(공동 저자, GIST), 김정현(공동 저자, GIST), 강승재(공동 저자, GIST), 김혜림(공동 저자, GIST), 홍석재(공동 저자, KAERI), Matsui Naoki(공동 저자, 도쿄과학대학), 김형섭(공동 저자, KAERI), 김상륜(교신저자, GIST)