

# 지스트-카이스트, 이산화탄소 분자 반응 실시간 포착 및 효과적 분해 방법 제시

- 길이 100억 분의 1미터의 초미세 영역에서 관찰된 이산화탄소 화학반응 실시간 포착
- 온실가스 전환 효율 높일 새로운 촉매 개발 기대...「Nature Communication」게재



**[사진]** (왼쪽부터) 지스트 물리·광과학과 문봉진 교수, 카이스트 화학과 박정영 교수, BNL 김정진 박사(제1저자)

지스트(광주과학기술원, 총장직무대행 박래길) 물리·광과학과 문봉진 교수 연구팀이 카이스트(한국과학기술원, 총장 이광형) 화학과 박정영 교수 연구팀과 함께 **초미세 계단형 구리(Cu) 촉매 표면이 이산화탄소(CO<sub>2</sub>) 분자를 보다 효과적으로 분해할 수 있음**을 입증했다고 26일 밝혔다.

연구팀은 상압 전자터널링 현미경 기술을 활용해 머리카락 두께의 10만 분의 1 크기의 **계단형 표면 구조가 온실가스의 분해 반응 향상에 크게 기여한다는 증거**를 처음으로 시각적으로 제시했다. 이번 결과는 기존 측정기술의 한계를 극복하고 마치 살아있는 듯한 촉매의 실제 모습을 구체적으로 보여줬다는 평가를 받았다.

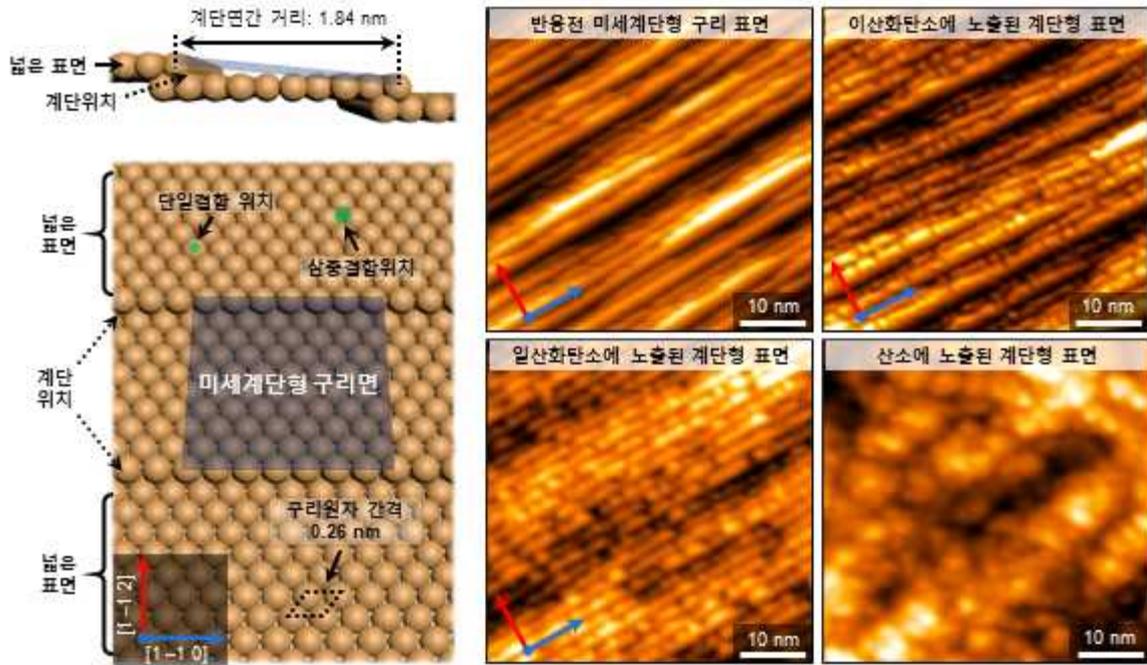
이 연구성과는 **온실가스의 전환 효율을 획기적으로 높일 수 있는 새로운 촉매 개발에 활용될 수 있어 기대를 모으고 있다**. 온실가스 전환 기술은 최근 G7 국가를 비롯한 OECD 회원국들을 중심으로 많은 논의가 이뤄지고 있으며, 우리나라 역시 2050년까지 탄소중립 글로벌 스탠다드를 달성하기 위해 산학연 및 민관 협력 연구를 활발히 추진하고 있다.

대기 중 온실가스를 제거함과 동시에 미래 청정 연료인 메탄올을 합성하는데 필요한 이산화탄소 분해 반응은 탄소중립 달성의 핵심 기술이지만, 이산화탄소 분자가 화학적으로 매우 안정된 탓에 **공업적으로 유용한 화학 물질로의 전환은 여전히 난**

제로 여겨진다.

온실가스가 포집되면 일반적으로 고온·고압의 촉매 화학반응 환경에서 전환되는데, 수십 년 전 상용화된 후 가장 많이 이용되고 있는 구리 기반 촉매 물질의 경우 이산화탄소 분자가 일산화탄소(CO) 및 산소 원자(O)로 분해될 때 **수십 기압에 이르는 고압 반응환경이 필요하다**. 이에 기존 촉매 물질을 개선하고 최적의 이산화탄소 전환 반응을 유도함으로써 **온실가스의 전환 효율을 높일 촉매 개발이 필요한 실정**이다.

연구팀은 그 크기가 수 옹스트롬( $\text{\AA}$ :100억 분의 1 미터)에 불과한 이산화탄소 분자는 **촉매 물질의 표면 구조에 따라서 반응 활성도가 달라질 수 있다는 점에 착안해**, 반응환경에서도 고해상도 직접 관찰이 가능한 상압 전자 터널링 현미경(AP-STM)으로 머리카락 두께의 10만 분의 1에 불과한 **계단형 초미세 구리 표면과 반응하는 이산화탄소 분자의 분해 과정을 실시간 포착했다**.



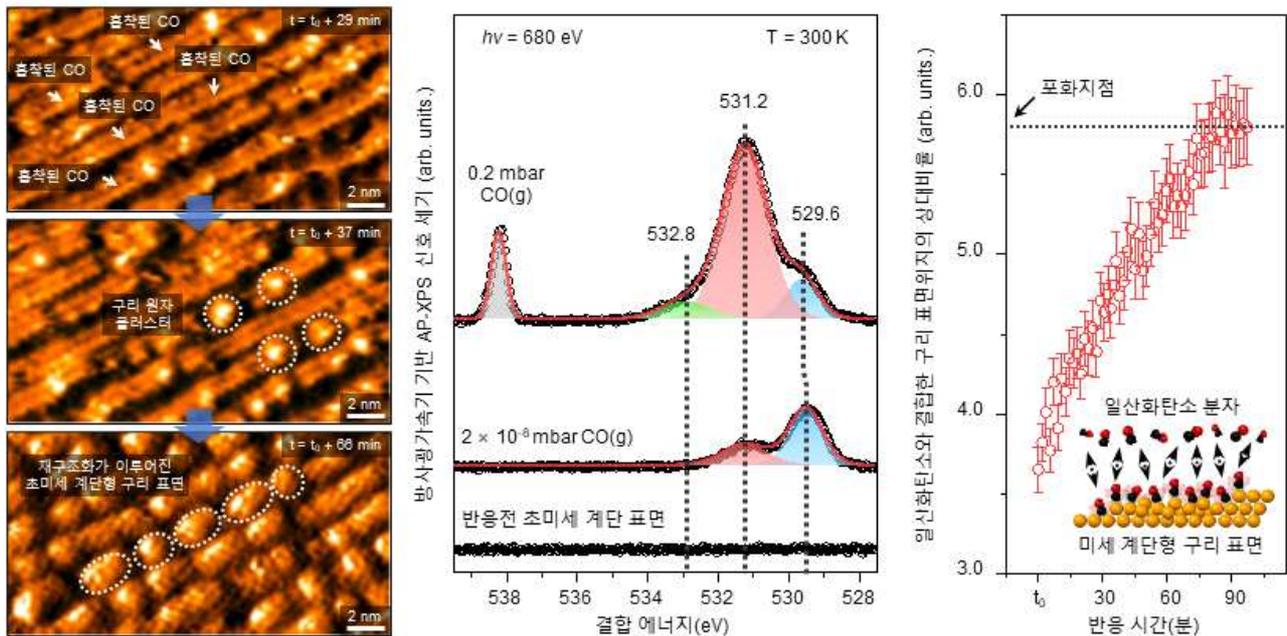
**[그림1]** 실시간 직접 관찰된 초미세 계단형 구리 촉매의 표면 구조

- 상압 전자터널링 현미경을 이용해 실시간으로 직접 관찰한 초미세 계단형 구리 표면의 모습. 약 1.8 나노미터( $\text{nm}$ ·10억분의 1미터) 간격을 갖는 미세 계단형 구리면은 상압 환경에서 이산화탄소 분자들에 노출된 이후, 각 계단면이 불규칙하게 분해되는 경향을 보인다. 이는 이산화탄소 분자들이 초미세 계단 구조를 통해 일산화탄소 분자 및 산소 원자로 분해되면서 구리 촉매의 표면이 재구조화되는데 기인한다.

초미세 계단형 구조를 갖는 구리 원자의 표면 배열은 평평한 구조를 갖는 넓은 구리 표면 구조에 비해 훨씬 낮은 활성화 에너지를 필요로 하기 때문에 **온실가스의 분해가 상대적으로 용이하다**. 구리 촉매 표면의 계단 위치와 충돌한 이산화탄소 분자가 상온에서도 쉽게 분해됐고, 나아가 분해된 일산화탄소 분자와 산소 원자가 표

면의 구조변화를 유도해 촉매반응 경로에 영향을 끼칠 수 있음이 발견됐다.

연구팀은 계단형 구리 표면의 화학 반응성을 실시간으로 파악하고자 프랑스 파리 SOLEIL 방사광가속기 시설에 설치된 상압 광전자 분광기(AP-XPS)를 활용해 초미세 계단형 구리 표면이 일산화탄소와 반응하면서 이루고 있는 화학 결합을 규명하고, 이를 통해 구조적 변화를 초래하는 화학 결합 종의 상태를 연이어 발견했다. 아울러 평평한 구조를 갖는 넓은 구리 표면과의 비교를 통해 초미세 영역에서 벌어지는 이산화탄소 분자의 초기 분해 반응 경로를 실증적으로 제시했다.



**[그림2]** 방사광가속기 시설을 활용한 표면 구조 재구조화 현상의 규명

- 이산화탄소 분자의 분해 결과 생성된 일산화탄소 분자는 초미세 계단형 구리 표면 구조와 강하게 반응하고, 직접 관찰된 바와 같이 표면 구조의 재구조화 현상을 유도한다. 방사광가속기 기반의 상압 환경 X-선 광전자분광(AP-XPS) 기법을 통해 분석된 화학 결합 에너지 변화 결과는 일산화탄소 가스 반응환경에서 주입된 가스의 압력과 노출 시간에 따라 달라짐을 알 수 있다.

지스트 문봉진 교수는 “이번 연구는 기존에 진행된 구리 표면에서의 이산화탄소 촉매 현상의 이해를 뛰어넘는 새로운 발견으로, 온실가스로 인한 지구온난화 문제 해결에 가장 시급한 연구 분야인 이산화탄소 분해.활용 촉매개발에 중요한 기초지식을 제공할 수 있게 됐다”고 밝혔다.

카이스트 박정영 교수는 “단결정 물질과 상용화된 촉매 사이의 거동의 차이를 이해할 수 있는 단초를 얻게 돼 고효율 이산화탄소 촉매 개발에 기여할 것”이라고 밝혔다.

문봉진 교수와 박정영 교수가 지도하고 미국 BNL(Brookhaven National Laboratory) 김정진 박사가 수행한 이번 연구는 한국연구재단(NRF) 중견연구자지원사업, 과학기

술분야 기초연구사업과 한-프랑스 협력기반조성사업(STAR) 등의 지원을 받았으며 연구성과는 국제학술지 「네이처 커뮤니케이션스(Nature Communications)」에 지난 6일 게재됐다.

## 논문의 주요 정보

### 1. 논문명, 저자정보

- 저널명 : Nature Communication (IF 17.694, 2022년 기준)
- 논문명 : Revealing CO<sub>2</sub> dissociation pathways at vicinal copper (997) interfaces
- 저자 정보 : 김정진(제1저자, BNL), 유영석(공동저자, BNL 박사후 연구원/지스트 졸업), 고태원 (공동저자, 카이스트) Jean-Jacques Gallet 교수, Fabrice Bournel 교수 (공동저자, 프랑스 소르본대학), 문봉진 교수(교신저자, 지스트), 박정영 교수(교신저자, 카이스트)