

★ 2026년 7월 28일(화) 조간 (온라인 7.27.(월), 낮 12:00 이후) 보도해 주시기 바랍니다.

보도자료	 한국연구재단 National Research Foundation of Korea
청렴한 연구지원 신뢰받는 NRF	<대외홍보실> 조은혜 팀장, 고흥숙 연구원 ☎ 042-869-6119

<자료문의> 성균관대학교 화학과 이효영 교수(031-299-4566)

온실가스 이산화탄소를 고부가가치 에탄올로...

- 상업용 시스템서 전환 선택률 69% 달성,
에탄올을 효율적으로 생산할 수 있는 경로 제시 -

- 부산물 분리 없이 고순도 에탄올*을 선택적으로 생산할 수 있는 기술이 개발돼 주목된다.

* 에탄올 : 재생가능한 바이오 연료, 용매, 소독제로 널리 사용되는 고부가가치 화학물질

- 한국연구재단(이사장 홍원화)은 성균관대학교 이효영 교수 연구팀이 이산화탄소를 에탄올로 고효율 전환하는 단일 원자 이합체 전기촉매 기술*을 개발했다고 밝혔다.

* 단일 원자 이합체 전기촉매 : 촉매 활성을 높이고, 생성물 선택성을 개선하며, 원자 활용을 극대화하기 위해 협력하는 두 개의 인접한 고립된 금속 원자로 구성된 촉매

- 이번 연구 성과는 과학기술정보통신부와 한국연구재단의 중견연구지원사업으로 수행됐으며, 국제 학술지 ‘어플라이드 카탈리시스 B: 엔바이론멘탈 앤 에너지(Applied Catalysis B: Environment and Energy)’에 7월 1일자로 게재됐다.

- 이산화탄소를 포집·활용해 고부가가치 화합물로 재탄생시키는 기술은 탄소중립의 핵심 열쇠로 꼽힌다. 그러나 기존 촉매 기술은 반응 과정에서 여러 부산물을 만들어내기 때문에, 이를 고순도로 추출하기 위한 대형 정제 설비와 추가 에너지가 필수적이었으며 이는 곧 상업적 경제성을 떨어뜨리는 주요 원인이 되었다.

- 이 때문에 실험실을 넘어 실제 상업용 셀 환경에서도 부산물 분리 없이 고순도 화합물만을 선택적으로 생산할 수 있는 이산화탄소 환원(CO₂RR) 촉매 기술* 개발이 시급한 과제로 요구되어 왔다.

* 이산화탄소 환원(CO₂RR) 촉매 기술 : 공기 중이나 공장에서 포집한 이산화탄소를 전기에너지를 더해 유용한 화학물질이나 연료로 바꾸는 꿈의 친환경 기술

- 이를 위해 연구팀은 뛰어난 전도성을 가진 N-도핑 그래핀 기판 위에 구리(Cu)와 아연(Zn) 금속 원자를 1개씩 짝을 지어 배치된 단일 원자 이합체 촉매를 새로 개발했다.

- 단일 원자 촉매는 원자 활용도가 극대화된다는 장점이 있지만, 원자 1개 만으로는 이산화탄소를 복잡한 에탄올 분자로 바꾸기에는 한계가 있었다.

- 이번에 연구팀이 개발한 단일 원자 이합체 촉매는 두 개의 인접한 금속 원자가 서로 협력하여 반응을 촉진, 이산화탄소를 에탄올로 전환하는 데 가장 까다롭고 중요한 탄소 간 결합(C-C 결합) 반응을 효과적으로 촉진하고 전환 효율을 극대화했다.

- 특히 이번 연구는 실험실 수준의 기본 테스트(3전극 방식)를 넘어, 실제 산업 현장에서 사용하는 상업용 멤브레인 전극 조립체(MEA)* 셀 시스템에 직접 적용해 그 성능을 검증했다.

* 멤브레인 전극 조립체(MEA) : 기준 전극 없이 작동하는 2전극 시스템으로, 주로 실험실 연구에 사용되는 3전극 시스템과 달리 실제 응용 분야에 적합함

- 기존 촉매는 실제 상업용 셀에 적용하면 성능이 급격히 떨어지는 한계를 보였으나, 이번에 개발된 촉매는 별도의 정제 공정 없이도 보고된 값 중 최고 수준인 69%의 에탄올 선택성을 기록했다.

- 이효영 교수는 “이번 연구는 실제 상업용 MEA 셀 환경에서 이산화탄소로부터 높은 선택성을 갖는 에탄올을 직접 생산하는 가능성을 제시함으로써 미래 친환경 산업으로의 응용 가능성을 크게 열었다는 데 중요한 의의가 있다”고 전했다.

주요내용 설명

<작성 : 성균관대학교 Kainat Talat 박사과정생>

논문명	Atomic-Scale Cu-Zn Synergy Directs Asymmetric C-C Coupling for Ethanol-Selective CO ₂ Electroreduction
저널명	Applied Catalysis B: Environment and Energy
키워드	Electrochemical CO ₂ reduction (전기화학적 CO ₂ 환원), Single atom dimer (단일 원자 이합체), N-doped carbon (질소 도핑 탄소), High selectivity (높은 선택성), MEA system (MEA 시스템)
DOI	https://doi.org/10.1016/j.apcatb.2026.127179
저자	이효영 교수(교신저자/성균관대학교), 카이낫 탈라트 (Kainat Talat)(제1저자/성균관대학교), 실람바라산 페루말(Silambarasan Perumal)(제1저자/성균관대학교), 우메어 무함마드(Umair Muhammad), 이은지 (Eunji Lee),(Ta Thi Thuy Nga), 만수르 알리(Mansoor Ali), 김민서(Minseo Kim), 최정수(Jungsue Choi), 청리동(Chung-Li Dong), 이한돌(Handol Lee)

1. 연구의 필요성

- 에탄올은 친환경 운송 연료부터 연료 첨가제, 용매, 소독제, 석유화학 원료에 이르기까지 산업 전반에서 널리 쓰이는 고부가가치 화학 물질입니다. 이에 따라 이산화탄소(CO₂)를 직접 전기화학 반응시켜 에탄올로 전환하는 기술은 탄소를 자원화하는 지속 가능한 대안으로 크게 주목받고 있습니다.
- 하지만 CO₂를 에탄올로 전환하는 기술은 복잡한 탄소-탄소(C-C) 결합을 유도하는 동시에, 수소 발생과 같은 원치 않는 부반응을 억제해야 해서 기술적 난이도가 매우 높습니다. 특히 실제 산업에 적용할 수 있는 상업용 조건에서 높은 에탄올 선택성을 확보하는 것은 그동안 해결되지 않은 과제였습니다. 본 연구는 단일 원자 이합체(다이머) 전기촉매를 멤브레인 전극 조립체(MEA) 전해조에 적용하여 CO₂로부터 에탄올을

고효율로 생산할 수 있음을 입증했으며, 이는 CO₂ 환원 기술(CO₂RR)의 실용화를 위한 유망한 전략을 제시합니다.

2. 연구 내용

- 연구진은 상온·상압의 온화한 조건에서도 에탄올을 선택적으로 합성해 내는 단일 원자 이합체 전기촉매(CuZn-SAD-NC)를 개발했습니다. 질소(N)가 도핑된 그래핀 기판 위에 구리와 아연 원자가 단일 원자 형태로 짝을 이뤄 고르게 분산되어 있을 때만 에탄올 생성 효율이 극대화되며, 이들이 뭉쳐 나노클러스터 형태가 되면 선택성을 잃고 많은 부산물이 발생하는 현상을 확인했습니다.
- 단일 원자 이합체 내부에서 아연(Zn) 원자는 이산화탄소를 일산화탄소(CO)로 먼저 전환하는 역할을 맡고, 인접한 구리(Cu) 원자가 이 일산화탄소를 받아 탄소 결합 반응을 이끌어내며 에탄올을 생성합니다.
- 연구팀은 실시간 라만 분광학(In-situ Raman), 동위원소 표지 실험, 밀도 범함수 이론(DFT) 계산을 활용하여 이합체 촉매의 전하 이동과 반응 메커니즘을 규명했습니다.
- 분석 결과, 아연은 구리에 직접 결합하여 CO를 공급할 뿐만 아니라 구리의 산화 상태를 전자적으로 조절해 줍니다. 이를 통해 구리 표면에서 CO의 양성자화(COH)가 촉진되고, 비대칭적인 CO-COH 결합이 활성화됩니다. 이후 생성된 중간체 OCCH₂가 추가 양성자화 과정을 거치며 최종적으로 에탄올이 합성됩니다.

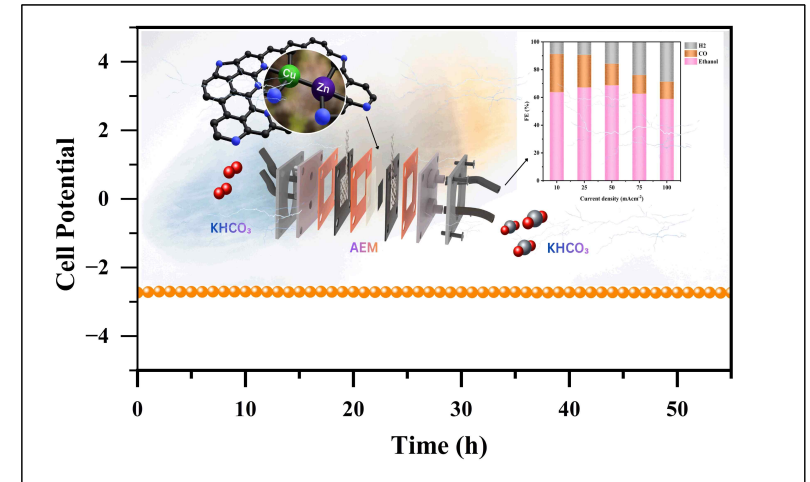
3. 연구 결과/예상 효과

- 본 연구팀이 개발한 단일 원자 이합체 촉매는 전기에너지를 활용한 이산화탄소 환원 반응(CO₂RR)을 통해 고부가가치 물질인 에탄올을 성공적으로 합성해 냈습니다. 특히 69%에 달하는 높은 에탄올 선택성을 달성했으며, 성능 저하 없이 55시간 동안 안정적으로 반응을

유지했습니다.

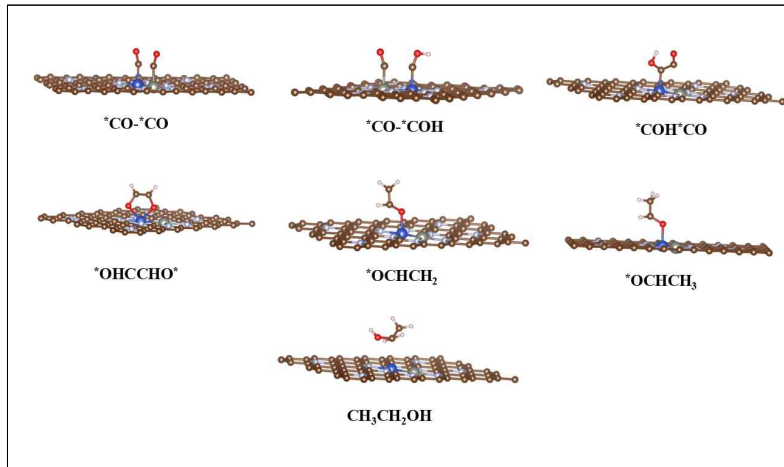
- 이 전기 촉매는 온화한 환경 조건에서 높은 선택성을 가진 에탄올을 효율적으로 생산할 수 있는 경로를 제공합니다. 또한 촉매의 정밀한 설계를 통해 이산화탄소 환원을 통해 높은 선택성을 달성한다는 개념도 제시되었습니다. 이를 통해 많은 CO₂RR 연구자들이 CO₂RR 기술을 상용화하는 데 도움이 될 것으로 기대됩니다.

그림 설명



(그림1) 단일 원자 이합체 촉매가 특징인 MEA 시스템의 개략도는 Cu-Zn 직접 결합의 확대된 모습과 55시간 안정성 및 에탄올 선택성을 보여줌.

그림설명 및 그림제공 : 성균관대학교 화학과 이효영 교수



(그림2) CuZn-SAD-NC 촉매의 인접한 Zn-Cu 이원자 쌍 위에서 두 개의 *CO 중간체가 결합(C-C coupling)해 *OHCCHO를 형성한 뒤, 단계적 양성자화·탈수 과정(*OCHCH₂ → *OCHCH₃)을 거쳐 최종적으로 에탄올(CH₃CH₂OH)이 생성되는 반응 경로를 DFT로 규명한 그림임. 이 인접 이원자 자리가 C1 생성물이 아닌 C2 생성물(에탄올)로의 높은 선택성(69%)을 가능하게 하는 메커니즘적 근거를 제공함.(Zn: 은, Cu: 파란색).

그림설명 및 그림제공 : 성균관대학교 화학과 이효영 교수

연구 이야기

<작성 : 성균관대학교 Kainat Talat 박사과정생>

□ 연구를 시작한 계기나 배경은?

첫째, 이산화탄소(CO₂) 배출량의 급격한 증가로 기후 변화가 가속화됨에 따라 CO₂을 가치 있는 화학 물질로 전환할 수 있는 기술 개발의 중요성이 커지고 있습니다. 둘째, 에탄올은 재생 가능 연료, 용매, 소독제, 산업 원료로 널리 사용되는 고부가가치 화학물질로 지속 가능한 생산이 매우 매력적입니다. 셋째, 전기화학적 CO₂ 저감은 에탄올 생산에 유망한 경로를 제공하지만, 특히 경쟁적인 부작용으로 인해 MEA 시스템에서 높은 선택성을 달성하는 것은 여전히 어려운 과제입니다.

이러한 배경에서 연구팀은 CO₂을 에탄올로 효율적으로 전환하기 위해 단일 원자 이합체 전기촉매(CuZn-SAD-NC)를 개발했습니다. 이 촉매는 인접한 구리 및 아연 단일 원자 활성 부위를 정밀하게 설계하여 멤브레인 전극 조립(MEA) 전해조에서 상업적으로 관련된 조건에서 매우 선택적인 에탄올 생산을 가능하게 합니다.

□ 연구 전개 과정에 대한 소개

먼저 구리(Cu)와 아연(Zn)을 N이 도핑된 그래핀에서 합성했습니다. 둘째, 합성된 촉매의 성능을 검증하기 위해 다양한 실험을 수행했습니다. 에탄올의 선택성을 측정하기 위해 -12.5mAcm⁻²의 전류 밀도에서 24시간 동안 반응을 수행했습니다. 그 결과 CuZn-SAD-NC 촉매의 선택성은 69%, 안정성은 55시간인 것으로 나타났습니다. 셋째, 에탄올 형성 메커니즘을 이해하기 위해 체계적인 동위원소 표지 실험, 필드 라만 분석, 밀도 범함수 이론(DFT) 계산을 수행했습니다. 이를 통해 아연(Zn)은 CO₂를 CO로 환원하는 데 중요한 역할을 하고 구리(Cu)는 이 CO를 *COH에 추가로 결합하여 에탄올을 생성하는 데 기여한다는 것을 확인했습니다.

□ 연구하면서 어려웠던 점이나 장애요소는 무엇인지? 어떻게 극복(해결)하였는지?

반응 메커니즘을 탐구하는 과정에는 몇 가지 도전과 어려움이 있습니다. 특히 에탄올로의 CO₂ 환원은 다단계 전자 및 양성자 전달 과정으로, 에탄올 형성 과정의 메커니즘을 탐구하기 위해서는 정확한 특성 분석과 실험이 필요합니다. 이 문제를 해결하기 위해 동위원소 표지 실험, 현장 라만 분석, DFT 계산과 같은 첨단 분석 기법을 사용하여 반응 중간체와 메커니즘을 체계적으로 연구한 결과, CO₂ 환원은 아연(Zn)과 구리(Cu) 반응 부위에서 각각 CO와 *COH 중간체를 생성하는 경향이 있으며, 그 후 중간체는 결합 과정을 거쳐 에탄올을 생성하는 것으로 나타났습니다.

□ 이번 성과, 무엇이 다른가?

단일 원자 이합체(CuZn-SAD-NC)의 사용은 잘 분산되어 있기 때문에 선택성이 매우 높은 CO₂ 환원 반응(CO₂RR)을 촉진합니다. 이는 CO₂를 고부가가치 화학 에탄올로 선택적으로 전환하는 혁신적인 방법입니다. 또한 에탄올 형성의 다단계 PCET 메커니즘을 체계적으로 설명합니다. 본 연구에서는 CO₂를 유용한 화합물로 전환하는 것이 기후변화 문제 해결에 기여할 수 있으며, 전기에너지를 친환경적으로 활용하여 에탄올을 생산할 수 있는 가능성을 제안합니다.

□ 실용화된다면 어떻게 활용될 수 있나? 실용화를 위한 과제는?

이번 연구 결과가 실용화되면 CO₂를 고부가가치 화합물인 에탄올로 전환하는 기술이 기후변화 문제 해결에 크게 기여할 것으로 기대됩니다. 이번 연구는 상업화 가능한 막전극조립체(MEA) 전해조에서 에탄올 선택성이 높은 것으로 나타났지만, 전류 밀도, 장기 안정성, 에너지 효율 등을 더욱 개선하면 좋을 것으로 보입니다. 연구팀은 촉매 설계와 MEA 기술의 지속적인 개발이 CO₂ 전기 환원 상용화를 앞당기는 데 도움이 될 것으로 보고 있습니다.

□ 꼭 이루고 싶은 목표나 후속 연구계획은?

단일 원자 다이머(CuZn-SAD-NC) 촉매의 전류 밀도와 안정성을 더욱 향상시키기 위한 연구를 지속하고, 성능과 안전성을 더욱 향상시킬 수 있는 화학적 전략에 대해 고민해 보겠습니다. 또한 CO₂를 다양한 고부가가치 화합물로 전환할 수 있는 다양한 촉매를 개발하고자 합니다. 향후 이러한 연구를 바탕으로 저비용으로 이산화탄소를 줄이면서 고부가가치 화합물을 생산하는 실용적인 시스템을 개발하고자 합니다.