

보도자료



서울대학교
SEOUL NATIONAL UNIVERSITY

보도일시	즉시 보도
	2025. 3. 21.(금)
문의	연구단장/연구책임자 황윤정 교수(02-880-4831) / 교신저자
	연구단/연구진 윤혜원 연구원, 유수환 연구원 / 공동 제1저자

■ 제목/부제

제목	이산화탄소 전환 속도 향상 극대화, 전해질 내 물 역할 조절이 관건
부제	산성 환경 가져온 이산화탄소 전환 속도 향상의 새로운 역발상

■ 요약

연구 필요성	<p>이산화탄소는 지구 온난화의 원인 기체로 지목되어, 세계 각국은 이산화탄소를 활용하는 기술을 개발하여 탄소 중립을 달성하고자 노력하고 있다. 그 중 전기화학적 이산화탄소 전환 기술은 상온 상압의 조건에서도 활용도 높은 화합물을 합성할 수 있다는 장점을 가지고 있어 활발히 연구되고 있다. 또한, 그린 수소 생산을 하는 수전해 시스템과 유사한 전해조 반응기에서 반응이 일어난다는 점에서 기존 기술을 활용하여 기술 성장을 이뤄왔다. 이산화탄소의 전환은 산성 용액 속에서는 수소가 생성되는 경쟁 반응이 우월하게 일어나 이산화탄소 전환의 반응성이 낮다고 알려져, 중성 및 알칼라인 용액 조건에서 전환 기술이 개발되어 왔다.</p> <p>그러나, 이산화탄소가 알칼라인 용액에 녹아 전환되지 않는 문제점으로 인해 전환율을 향상시키는데 한계가 있어, 최근에는 산성 용액에서도 이산화탄소를 전환 할 수 있는 기술에 대한 필요성이 대두되었다.</p>
연구성과/ 기대효과	서울대 화학부 황윤정 교수 연구팀과 충남대 신혜영 교수 연구팀은 기존 중성 및 염기성 조건에서 발생하는 이산화탄소 손실 문제를 해결하기 위해 산성 전해질을

	<p>적용한 시스템에서 성능 향상의 새로운 전략을 제시하였다고 보고하였다. 산성 전해질에 많이 존재하는 H⁺ (수소 이온, 양성자)은 이산화탄소 전환에 쓰이기 보다는 단순한 수전해를 통한 수소 기체 생성이 우월하게 일어나는 문제점이 있어 활용에 한계가 있었다. 이번 연구는 높은 성능과 선택도를 갖춘 촉매 설계를 목표로 진행되었으며, 산성 환경에서도 효과적인 이산화탄소 환원이 가능함을 입증했다.</p> <p>연구결과는 “산성 CO₂ 환원 반응 가속화를 위한 Ni-N-C 전기촉매의 강한 양이온 농도 효과(Strong cation concentration effect of Ni-N-C electrocatalysts in accelerating acidic CO₂ reduction reaction)” 제목으로 2025년 3월 5일, 에너지 및 화학 분야의 국제 저명 학술지 ‘Chem’ 에 온라인 게재되었다.</p> <p>연구팀은 니켈과 질소가 도입된 탄소 (Ni-N-C) 단원자 촉매 소재를 개발하고 은 나노 금속 촉매와 전기화학적 촉매 반응 특성을 비교 분석하여 산성 용액이 오히려 이산화탄소 전환 반응 속도를 높일 수 있는 역발상 전략을 수립하였다. 이산화탄소 전환 속도를 높이기 위해 지금까지는 전해질 속의 양이온 농도를 증가시켜서 이산화탄소 전환의 활성화 에너지를 낮추고자 하는 전략이 적용되었고, 상대적으로 전해질에 있는 수소 이온이나 물 분자의 기여에 대해서는 관심을 두지 못하였다. 연구팀은 전기화학적 이산화탄소 환원 반응은 수용액 속의 수소 이온의 농도가 낮을 때는 물 분자가 직접 깨지면서 촉매 반응에 관여하게 되는 것을 확인하였다. 은 나노 금속 촉매와 비교하여, 개발한 Ni-N-C 단원자 촉매는 물 분자를 깨는데 과전압이 커져서, 중성이나 염기성 용액에서는 반응이 느리고 양이온에 의해서 이산화탄소 활성이 빨라지더라도 그 효과를 충분히 극대화 할 수 없음을 확인하였다.</p> <p>그러나, 산성 조건에서는 환원 반응이 빨라지며 중성보다 오히려 높은 이산화탄소 환원 효율을 얻을 수 있음을 보고하였다. 계산화학 시뮬레이션은 이러한 전해질 내의 양이온과 물분자의 시너지 효과를 뒷받침 하였다. 또한, 실시간 분광 분석을 활용해 양성자 공여체에 따른 양이온 효과를 규명함으로써 반응 메커니즘을 보다 정밀하게 이해하는 데 기여하고 이산화탄소 전환 속도를 향상시킬 수 있는 전략을 제안하였다.</p> <p>특히, 연구팀이 개발한 Ni-N-C 촉매는 산성 환경에서도 높은 안정성과 선택성을 유지하며, 기존 중성·염기성 조건 대비 성능을 크게 향상시켜 산성 환경이 줄 수 있는 새로운 이점을 제안하였다. 이를 상업화 가능한 기상투과전극 기반 반응 시스템에 적용하여 95 % 이상의 높은 전환 효율을 달성 하였다.</p> <p>황윤정 교수 연구팀의 이번 연구 결과는 향후 탄소중립 기술 개발 및 친환경 에너지 전환에 중요한 기초 자료로 활용될 것으로 기대된다.</p>
<p>Abstract</p>	<p>Professor Yun Jeong Hwang's research team from the Department of Chemistry at SNU identified a new strategy to enhance the performance of electrochemical CO₂ reduction by applying an acidic electrolyte. The research demonstrated that neutral conditions can rather limit CO₂ reaction kinetics</p>

	<p>due to slow water dissociation rate, while acidic conditions provide advantages by promoting the rate of the protonation step during CO₂ reduction reaction as well as mitigate CO₂ loss. The findings provide insights into catalyst design for efficient CO₂ reduction. The study was published in the journal <i>Chem</i> on March 5, 2025.</p> <p>Understanding the intricacies of electron and proton transfer steps is imperative to exploiting the CO₂ reduction reaction (CO₂RR). Here, we highlight the significance of proton transfer by demonstrating that switching the proton supplier from H₂O to H₃O⁺ in a strongly acidic electrolyte (pH<2) accelerates CO₂RR kinetics and allows Ni-N-C to achieve higher CO activities. Conversely, under mildly acidic conditions, CO production rate remains similar even with concentrated K⁺. <i>Operando</i> infrared spectroscopy supports pH-dependent changes in interfacial water structures, and density function theory simulations reveal a synergistic effect of cations and H₃O⁺ to stabilize intermediates. Ni-N-C, exhibiting a large overpotential for hydrogen evolution, promotes CO₂RR with prominent *CO adsorption at pH 1.7 under higher cation concentrations. Its membrane electrode assembly (MEA) system achieves 95% CO₂ conversion efficiency and high CO selectivity for 50 h by optimizing proton and cation transport. This study presents opportunities to accelerate CO₂RR in acidic environments by H₃O⁺.</p>
Journal Link	https://doi.org/10.1016/j.chempr.2025.102461

■ 본문

□ 문단 1

○ 서울대 화학부 황윤정 교수 연구팀, 충남대 에너지과학기술대학원 신혜영 교수 연구팀

단원자 촉매를 활용해 산성 전해질에서 이산화탄소 환원 반응이 중성 전해질에서 보다 가속화될 수 있음을 입증

전해질 내의 양이온과 물분자의 시너지 효과에 의한 이산화탄소 전환 속도 향상 제시

실시간 분석기술을 통해 양성자 공여체에 따른 양이온 효과를 규명, 반응 메커니즘의 정밀한 이해로 성능 향상의 역발상 전략을 제시

본 연구는 현대자동차와 서울대학교의 공동 연구 프로젝트 및 한국연구재단(NRF) 지원을 받아 수행됨.

서울대 화학부 황윤정 교수 연구팀은 산성 환경에서 전기화학적 CO₂ 환원 반응의 성능을 향상시킬 수 있는 새로운 전략을 제시했다. 전기화학적 CO₂ 전환 기술은 상온 상압에서 활용도 높은 화합물을 합성할 수 있어 탄소중립 실현을 위한 핵심 기술로 주목받고 있다. 그러나 기존 중성 및 염기성 전해질에서는 CO₂가 전환되기 전에 전해질과 반응하면서 상당한 이산화탄소 손실이 발생해 효율 개선에 한계가 있었다. 반면, 산성 전해질은 CO₂ 손실 문제를 해결할 수 있지만, 물 분해 반응이 우세하게 일어나 선택성이 낮아지는 한계를 가지고 있었다. 이에 연구팀은 산성 환경에서도 높은 성능과 선택도를 유지할 수 있는 촉매 설계를 목표로 연구를 진행했으며, CO₂ 전환 반응 속도를 향상 시키기 위해서는 촉매 표면에서 CO₂의 활성화 단계 뿐만 아니라 수용액

전해질에 의해서 양성자화되는 단계의 속도도 중요함을 규명하였다. 그 결과, 수소 발생 반응 속도를 억제하도록 설계된 Ni-N-C 단원자 촉매가 H₂O 대신 H₃O⁺ 를 양성자 공급원으로 활용하는 강산성 조건에서도 높은 CO 전류 밀도를 달성할 수 있음을 입증했다. 또한, 실시간 분광 분석을 통해 강산성 조건에서 양이온 효과가 강해지면서 CO₂ 환원 중간체가 더욱 안정화됨을 확인했다. 이번 연구는 산성 환경에서도 우수한 성능을 발휘하는 촉매 시스템 개발의 새로운 가능성을 제시했다.

□ 연구결과

서울대 화학부 황윤정 교수 연구팀은 산성 환경에서 전기화학적 CO₂ 환원 반응(CO₂RR)의 성능을 향상시킬 수 있는 촉매 설계 전략을 발표했다. 연구 결과는 2025년 3월 5일, 에너지 및 화학 분야의 국제 저명 학술지 '(Chem)' 온라인 판에 게재되었다. <그림 1>

전기화학적 CO₂ 전환 기술은 상온 상압에서 활용도 높은 화합물을 합성할 수 있어 온실가스 감축과 탄소중립 달성을 위한 핵심 기술로 주목받고 있다. 특히 가스 확산 전극(GDE) 기반 전해전을 활용하면 높은 전류 밀도와 패러데이 효율을 확보할 수 있다. 그러나 기존의 중성 및 염기성 전해질을 사용하는 시스템에서는 CO₂가 전환되기 전에 탄산염(HCO₃⁻/CO₃²⁻)으로 변환되어 최소 50% 이상의 CO₂ 손실이 발생한다. 이에 대한 대안으로 산성 환경에서의 CO₂RR 시스템은 이러한 손실을 줄일 수 있으나, 높은 양성자 농도로 인해 수소 발생 반응이 우세해지는 문제가 발생하며, 반응 선택성이 낮아지는 한계를 갖고 있다. 또한, 산성 조건에서는 금속 촉매의 구조적 불안정성이 커지면서 활용할 수 있는 금속의 종류가 제한되는 점도 해결해야 할 과제 중 하나다. 따라서 CO₂RR의 효율성과 선택성을 동시에 개선하기 위해서는 산성 환경에서도 안정적으로 작동할 수 있는 새로운 촉매 설계와 반응 메커니즘에 대한 심층적인 연구가 필요한 실정이다.

이에 본 연구에서는 산성 환경에서도 높은 성능과 선택도를 유지할 수 있도록, 수소 발생 반응 속도를 억제하도록 설계된 Ni-N-C 단원자 촉매를 활용해 H₂O 대신 H₃O⁺ 를 양성자 공급원으로 사용하여 강산성 조건에서 높은 CO 전류 밀도를 달성할 수 있음을 입증했다. 본 연구에서는 강산성 전해질(pH<2)에서 양성자 공급원이 전환됨으로써 CO₂ 환원 반응(CO₂RR) 속도가 가속되며, 양이온 농도 증가에 따라 높은 CO 생성 활성을 나타내는 것을 확인하였다. <그림 2>

연구진은 실시간 적외선 분광 분석(ATR-SEIRAS)을 통해 전극 계면의 물 구조가 pH에 따라 변화하는 양상을 규명하였으며, 밀도 범함수 이론(DFT) 시뮬레이션을 통해 양이온과 H₃O⁺가 반응 중간체를 안정화하는 상호작용을 확인하였다. 특히, Ni-N-C 촉매는 HER에 대한 과전압이 높아 CO₂RR을 더욱 촉진하며, pH 1.7에서 양이온 농도 증가에 따라 *CO 흡착이 뚜렷하게 증가하는 것이 관찰되었다. 이를 통해 연구팀은 Ni-N-C 촉매가 강산성 조건에서도 우수한 CO₂RR 선택성을 유지할 수 있는 원리를 규명하였다. <그림 3>

또한, 막전극 접합체(MEA) 시스템을 적용하여 양성자 및 양이온 전달을 최적화함으로써 50시간 동안 95%의 CO₂ 전환 효율과 높은 CO 선택성을 유지할 수 있음을 입증했다. <그림 4> 본 연구는 산성 환경에서 H₃O⁺를 활용하여 CO₂RR을 가속화할 수 있는 새로운 가능성을 제시하며, 촉매 설계 및 반응 환경 최적화를 통해 산성 조건에서도 높은 성능을 유지할 수 있는 전략을 마련하는 데 기여할 것으로 기대된다.

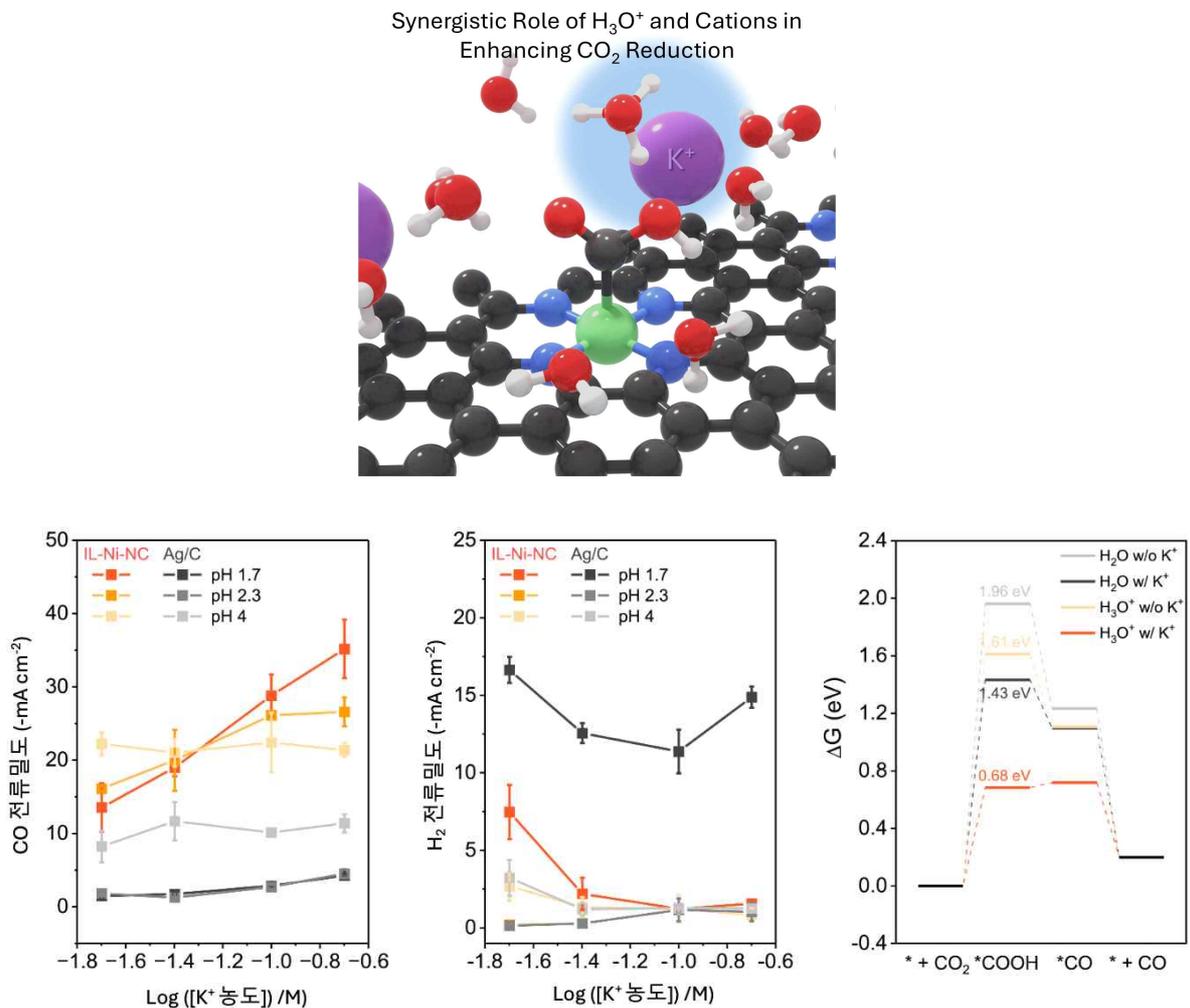
<그림 1> 해당 논문의 대표이미지: 양이온과 H₃O⁺가 반응 중간체를 안정화하는 상호작용을 나타낸 그림.

Article

Strong cation concentration effect of Ni-N-C electrocatalysts in accelerating acidic CO₂ reduction reaction

Hyewon Yun,^{1,2,7} Suhwan Yoo,^{1,2,7} Jihoon Son,³ Jae Hyung Kim,⁴ Jingwen Wu,^{5,6} Kun Jiang,^{5,6} Hyeoung Shin,^{3,*} and Yun Jeong Hwang^{1,2,8,*}

<그림 2> 전해질 pH에 따른 양이온 효과

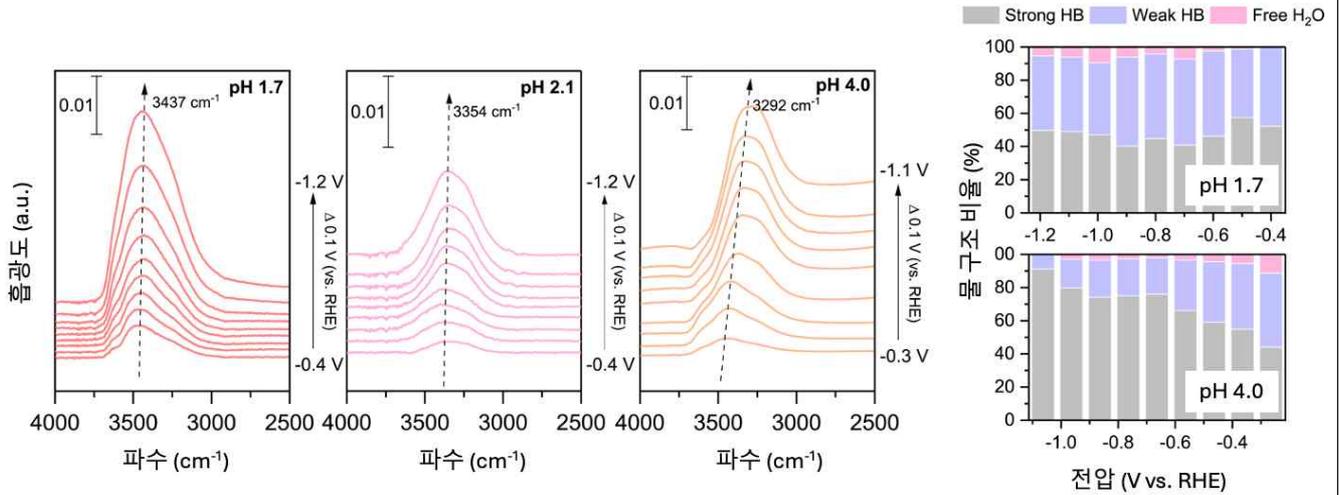


(좌, 중간) 전해질 pH에 따라 서로 다른 양이온 효과를 보여주는 결과. 강산성(pH 1.7)에서는 약산성(pH 4)보다 양이온 농도 증가에 따라 CO 전류 밀도가 더욱 향상되었다. 특히, 이 현상은 수소 발생 반응이 억제된 Ni-N-C에서 더욱 두드러졌다.

(우) 밀도 범함수 이론(DFT) 시뮬레이션을 통해 양이온과 H₃O⁺가 반응 중간체를 안정화하는 상호작용을

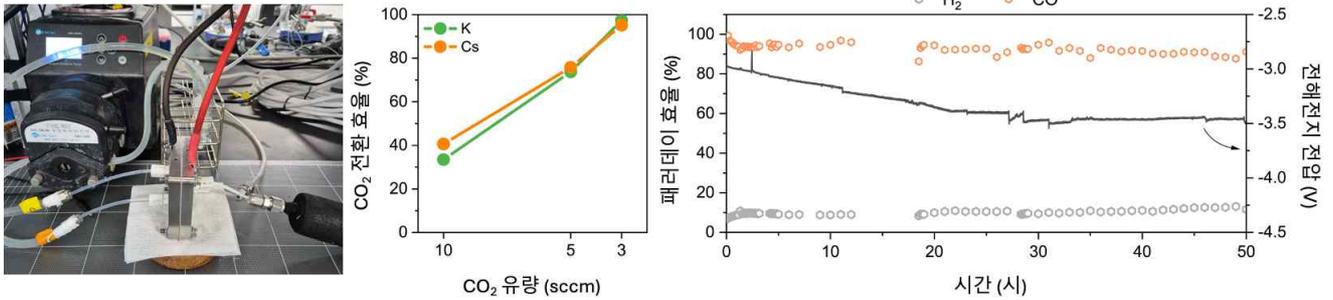
확인하였다.

<그림 3> 실시간 적외선 분광 분석(ATR-SEIRAS)을 통해 pH에 따른 전극 계면의 물 구조 변화를 규명



pH 2 미만의 강산성 전해질에서는 양성자 공급원이 H_3O^+ 로 전환되며, pH 1.7에서는 실시간 반응 중에도 안정한 물 구조를 유지하여 CO_2RR 에서 프로톤화 단계를 촉진함을 확인하였다.

<그림 4> 막전극 접합체(MEA) 시스템에의 적용



(좌) 막전극 접합체(MEA; Membrane electrode assembly) 시스템 사진

(중간) pH 2의 MEA에서 Ni-N-C는 CO_2 전환 효율을 극대화하여 CO_2 손실을 5% 미만으로 감소시켰다.

(우) 양성자 및 양이온 전달 최적화를 통해 50시간 동안 90% 이상의 높은 CO 선택성 유지 입증하였다.

□ 연구자

- 연구원

- 성 명 : 윤혜원
- 소 속 : 서울대학교 화학부 박사과정
- 연락처 : 02-880-4831, yunhw@snu.ac.kr

- 성 명 : 유수환
- 소 속 : 서울대학교 화학부 석박사통합과정
- 연락처 : 02-880-4831, yshwan0615@snu.ac.kr

- 성 명 : 손지훈
- 소 속 : 충남대학교 에너지과학기술대학원
- 연락처 : 042-821-8602 jihoon_son@o.cnu.ac.kr

-교신저자

- 성 명 : 신혜영
- 소 속 : 충남대학교 에너지과학기술대학원
- 연락처 : 042-821-8602, shinhy@cnu.ac.kr

- 성 명 : 황윤정
- 소 속 : 서울대학교 화학부 교수
- 연락처 : 02-880-4831, yjhwang1@snu.ac.kr