

2026.10.30.(금) 03:00

(국제엠바고)

보도시점

배포 2026.10.29.(목) 09:00

(2026.10.30.(금) 조간)

더 정교한 촉매 설계의 실마리 찾았다... 화학 결합의 장거리 영향 규명

- IBS·독일 막스플랑크, 멀리 떨어진 금속 표면의 원자 구조가 분자 결합에 미치는 영향 규명 -
- 분자와 금속의 전자적 상호작용에 대한 새로운 이론 모델 제시, 사이언스誌 게재 -

화학제품 생산과 에너지 산업의 핵심인 금속 촉매의 새로운 작동 원리가 밝혀졌다. 기존에 알려지지 않았던 화학 결합의 특성으로, 촉매의 성능을 보다 정확하게 예측하고 개선하는 데 기여할 것으로 기대된다.

과학기술정보통신부(부총리 겸 과학기술정보통신부 장관 배경훈, 이하 ‘과기정통부’)는 기초과학연구원(원장 장석복, 이하 ‘IBS’) 양자나노과학 연구단과 막스플랑크 다학제 과학연구소 공동연구팀이 금속 촉매 표면에서 분자가 결합한 지점으로부터 수 나노미터(nm) 멀리 떨어진 원자 구조도 화학 결합의 세기에 영향을 미친다는 사실을 규명했다고 밝혔다.

이번 연구는 과기정통부의 IBS 기초과학연구단 지원 사업을 통해 수행됐으며, 연구 결과는 세계적 학술지 「사이언스(Science)」에 10월 30일(금) 오전 3시(KST) 게재됐다.

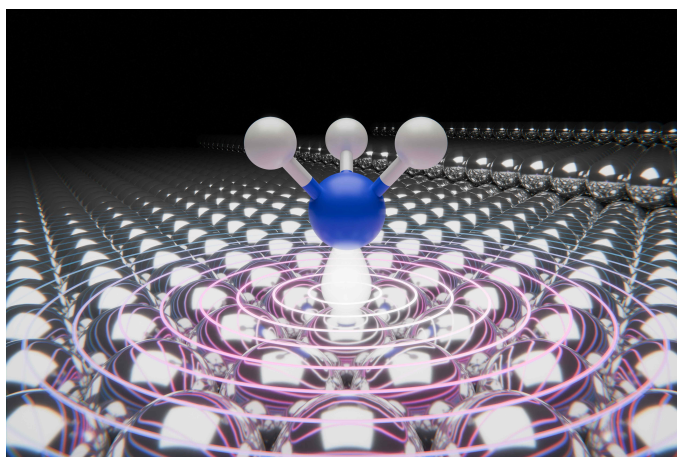
금속 촉매는 화학 반응을 촉진하는 물질로, 화학제품과 연료 생산 등 다양한 산업 분야에서 활용된다. 대표적으로 약 100년 전 개발된 암모니아 합성 기술은 금속 촉매를 이용해 질소와 수소로부터 화학비료의 원료인 암모니아를 대량 생산할 수 있게 하면서 현대 농업의 발전에 크게 기여했다.

금속 촉매를 이용한 화학 반응은 반응물인 분자가 금속 표면에 달라붙는 과정에서 시작된다. 이때 분자와 금속 사이의 결합 세기는 이후 화학 반응이 얼마나 원활하게 진행되는지를 좌우하는 핵심 요인이다. 따라서 분자가 금속 표면에 어떤 원리로 결합하는지 이해하는 것은 촉매의 성능을 예측하고 개선하는 데 중요하다.

그동안 분자와 금속 사이의 화학 결합은 주로 분자가 직접 맞닿는 주변 원자들과의 상호작용을 중심으로 설명돼 왔다. 금속 표면에 붙은 원자나 분자가 멀리 떨어진 영역의 전자에도 영향을 미칠 수 있다는 사실은 알려져 있었지만, 이러한 현상은 주로 매우 낮은 온도에서 관찰됐으며 실제 촉매 반응에서 화학 결합의 세기에 거의 영향을 미치지 않는 것으로 여겨졌다.

연구진은 이러한 기존 인식과 달리, 장거리 전자 효과가 금속 촉매 표면에서 분자와 금속 사이의 결합 세기를 변화시킬 수 있다는 사실을 실험적으로 확인했다. 이를 위해 원자들이 층층이 쌓여 계단 모양을 이루는 백금 표면을 이용했다. 원자계단 사이의 간격이 서로 다른 백금 표면을 제작하고, 암모니아(NH_3), 일산화탄소(CO), 일산화질소(NO) 분자가 금속과 결합하는 세기를 정밀하게 측정·비교했다.

그 결과, 분자가 붙는 지점의 구조가 유사해도 이웃한 계단까지의 거리에 따라 결합 세기가 달라지는 현상을 확인했다. 결합 에너지 차이는 최대 약 0.2 전자볼트(eV)로 결합의 안정성이 크게 달라질 수 있는 수준이다. 장거리 영향이 나타나는 특성 거리는 분자 종류에 따라 약 4~7 나노미터로, 이는 원자 수십 개를 나란히 늘어놓은 정도의 거리다.



연구진은 이러한 현상의 원인도 밝혀냈다. 금속 안에서는 수많은 전자가 특정 원자에 머무르지 않고 넓게 퍼져 있어, 마치 거대한 ‘전자 바다’를 이룬다. 분자가 금속 표면에 붙으면 분자의 전자와 금속의 전자 바다가 상호작용하면서 멀리 떨어진 원자 구조의 영향까지 받게 된다.

즉, 분자와 금속 사이의 화학 결합은 넓은 영역에 걸친 전자적 상호작용에 의해 영향을 받을 수 있다는 것이다.

또한 연구진은 분자마다 장거리 영향이 다르게 나타나는 이유를 설명하기 위해 화학의 분자 궤도*와 물리학의 전자띠** 개념을 결합한 '프런티어 오비탈-밴드 모델(Frontier Orbital-Band Model)'을 제시했다. 이 모델은 분자마다 전자

상태의 특성이 달라 금속 내부의 서로 다른 전자 상태와 상호작용하며, 이에 따라 같은 금속 표면에서도 분자의 종류에 따라 장거리 영향이 달라진다는 점을 설명한다.

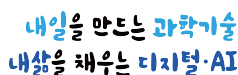
- * 분자 궤도(Molecular Orbital): 분자 안에서 전자가 어떤 에너지와 공간적 분포를 갖는지 나타내는 개념으로, 분자의 화학 결합과 반응 특성을 이해하는 데 활용
- ** 전자띠(Electronic Band): 고체를 이루는 수많은 원자의 전자 상태가 결합해 형성하는 에너지 영역으로, 금속의 전기적 특성과 전자의 움직임을 설명하는 데 활용

플로리안 니츠(Florian Nitz) 막스플랑크 다학제과학연구소 연구원(제1저자)은 “표면 화학을 올바르게 이해하려면 분자를 중심으로 보는 화학과 금속의 전자적 특성을 다루는 물리학의 관점을 통합해야 한다”며, “이번 성과는 막스플랑크 연구진의 금속 표면 정밀 측정 기술과 IBS 연구진의 고체물리학적 분석을 결합해 이뤄낸 결과”라고 의미를 전했다.

드미트리 보로딘(Dmitriy Borodin) IBS 양자나노과학 연구단 그룹리더(공동 교신저자)는 “과거 촉매 개발은 오랜 실험과 시행착오에 의존해 왔지만, 이제는 화학 반응의 원리를 바탕으로 원하는 특성을 예측하고 설계하는 방향으로 나아가고 있다”며, “이번 연구가 화학 결합에 대한 이해를 넓혀 보다 정교한 계산과 효율적인 촉매 설계에 기여할 것으로 기대한다”고 말했다.

김성수 과기정통부 연구개발정책실장은 “복잡한 과학적 난제를 해결하기 위해 학문 간 경계를 넘어 서로 다른 분야의 전문성을 모으는 협력이 중요하다”며, “우리 연구자들이 전문 분야의 연구역량을 마음껏 발휘하고 세계적 연구기관과 함께 도전적인 연구에 나설 수 있도록 국제공동연구 기반을 지속적으로 강화해 나가겠다”고 밝혔다.

담당 부서	과학기술정보통신부 기초연구진흥과	책임자	과 장	박시정 044-202-4530
		담당자	서기관	정꽃보라 044-202-4532
연구 기관	기초과학연구원(IBS) 양자나노과학 연구단	(공동)교신저자	그룹리더	Dmitriy Borodin (borodin.dmitriy@ibs.science)
		책임자	팀장	김혜민 (042-878-8227)
	기초과학연구원(IBS) 홍보팀	담당자	행정원	김원겸 (042-878-8258)

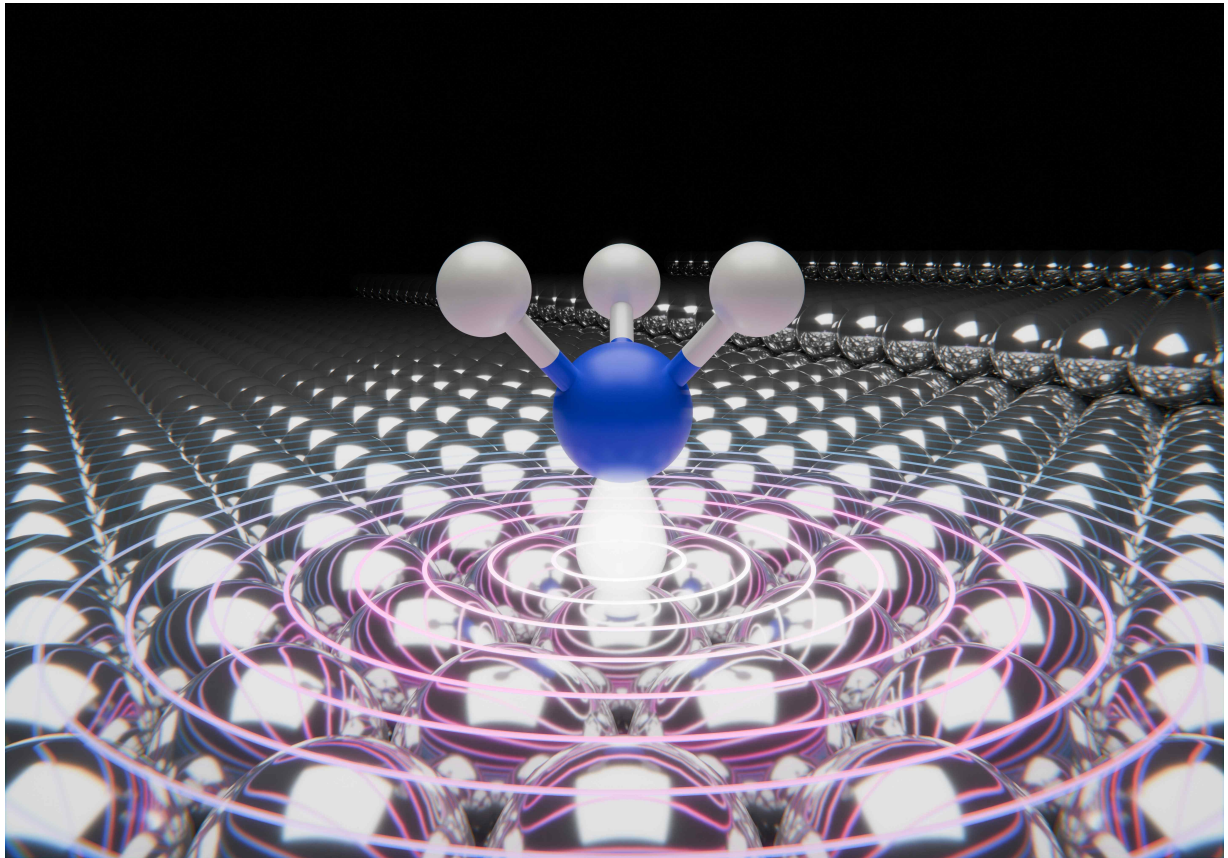


*

연구 추가 설명

논문/저널 /저자	<p>The delocalized nature of chemical bonding at a catalytic metal surface / Science (2026)</p> <p>Florian Nitz(제1저자), Stefan Hörandl, Jonathan Pätzold, Alexander Kandratsenka, Theofanis N. Kitsopoulos, Daniel J. Auerbach, Alec M. Wodtke*, Dmitriy Borodin*(공동 교신저자, IBS)</p>
연구내용 보충설명	<p>① 전자구름의 형태와 화학 결합 전자구름은 서로 다른 형태를 가지며, 그 형태가 호환될 때 결합이 형성된다. 플러그가 맞는 소켓에 연결되는 것과 비슷하다. 주로 독립된 원자나 분자에 적용돼 온 이 규칙이 금속 표면에서도 적용됨을 이번 실험은 보여줬다. 전자구름의 형태가 다른 분자는 표면과 상호작용하는 방식도 달라 결합의 공간적 범위가 서로 다르게 나타난다.</p> <p>② 기존 장거리 전자 효과와 이번 연구의 차이 금속 표면에 붙은 원자나 분자가 멀리 떨어진 전자에 영향을 줄 수 있다는 사실은 이미 알려져 있었다. 그러나 이러한 효과는 매우 낮은 온도에서 관찰됐고, 화학 결합의 세기에는 거의 기여하지 않아 고온에서 진행되는 실제 화학 반응과 무관한 것으로 여겨졌다. 이번 연구는 이러한 가정이 성립하지 않음을 보여줬다.</p> <p>③ 시행착오에서 계산 기반으로 변화하는 촉매 개발 과거 촉매는 주로 실험을 통해 발견됐다. 최근에는 계산을 바탕으로 한 지식 기반 촉매 개발이 확대되고 있다. 분자가 촉매에 결합하는 방식을 보다 정확하게 이해하면 앞으로 더 나은 촉매를 찾는 데 도움이 될 수 있다.</p>
연구 이야기	<p>[연구 과정] 측정은 알렉 M. 보트케가 이끄는 MPI-NAT 표면동역학 부서에서 수행됐다. 이곳에서는 분자빔과 레이저를 이용해 표면에서 분자의 결합 세기를 정밀하게 정량화하는 방법을 개발해 왔다. QNS는 개별 원자와 스핀이 표면과 상호작용하는 방식을 연구한다. 드미트리 보로딘 박사는 MPI-NAT 박사과정 중 측정 방법을 공동 개발한 뒤 QNS에 합류해 두 관점을 연결했다. 제1저자인 괴팅겐대학교 박사과정 연구원 플로리안 니츠는 실험 결과를 설명하는 이론을 개발해 연구의 성공에 핵심적인 역할을 했다.</p> <p>[어려웠던 점] 처음에는 효과 자체가 알려져 있지 않아 이를 연구 질문으로 제시하기 어려웠다. 첫 측정에서 정량적인 설명까지 수년이 걸렸으며, 분자를 중심으로 생각하는 화학의 관점과 고체를 중심으로 접근하는 물리학의 관점을 하나의 개념으로 통합해야 했다.</p> <p>[성과 차별점] 이번 연구는 장거리 전자 효과가 화학 결합의 세기에는 거의 기여하지 않는다는 기존 인식을 바꾸고, 전자구름의 형태에 관한 결합 규칙이 금속 표면에서도 적용됨을 보여줬다. 연구진은 실험으로부터 백금 표면에서 결합이 일산화질소는 43Å, 암모니아는 71Å까지 확장됨을 추론했다.</p> <p>[향후 연구계획] 분자가 촉매에 결합하는 방식을 보다 정밀하게 이해하면 계산을 바탕으로 앞으로 더 나은 촉매를 찾는 데 기여할 수 있다.</p>

그림 설명



[그림] 촉매 금속 표면에서 멀리 퍼지는 화학 결합의 전자적 영향

분자가 금속 표면에 결합할 때 전자적 반응이 결합 지점 주변을 넘어 표면을 따라 퍼지는 모습을 표현한 모식도. 금속의 전자 바다가 분자의 존재에 반응하며 결합의 영향이 넓은 영역으로 확장될 수 있음을 보여준다.

연구진 이력사항

<Dmitriy Borodin IBS 양자나노과학 연구단 그룹리더, 교신저자>

1. 인적사항

- 소 속 : 기초과학연구원(IBS) 양자나노과학연구단
이화여자대학교 물리학과 연구교수
- e-mail : borodin.dmitriy@qns.science



2. 학력

- 2017 석사, University of Göttingen, Germany
- 2021 박사, University of Göttingen, Germany

3. 경력사항

- 2024 - 현재 : IBS 양자나노과학 연구단 그룹리더
- 2023 - 2024 : IBS 양자나노과학 연구단 박사후연구원
- 2022 - 2023 : 독일 괴팅겐 막스플랑크 자연과학연구소 박사후연구원