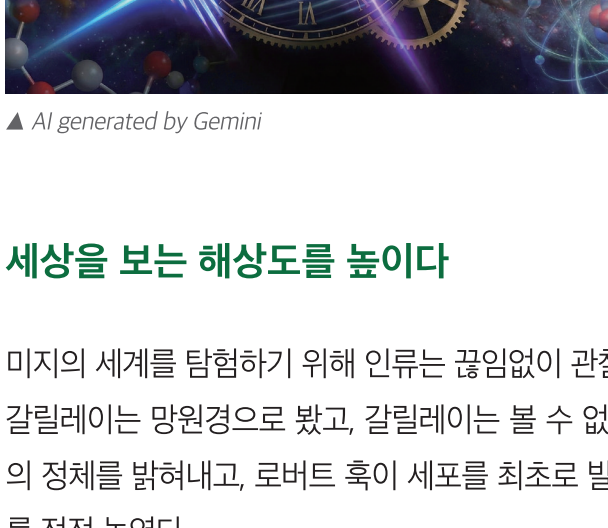


우수성과	분자 이온의 생성 및 구조 전이 과정의 실시간 포착
연구자	이효철 (기초과학연구원 첨단 반응동역학연구단장)

빛보다 빠른 순간을 향한 도전, 한계를 넘다



▲ AI generated by Gemini

The femtosecond is to chemistry what the microscope is to biology.

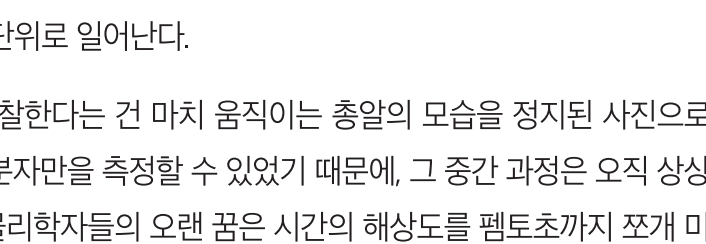
(화학에서 펨토초란, 생물의 현미경 같은 거죠.)

-1999년 노벨 화학상 수상 강연에서 아메드 즈웨일 교수

세상을 보는 해상도를 높인다

미지의 세계를 탐험하기 위해 인류는 끊임없이 관찰 도구를 발전시켜 왔다. 아리스토텔레스가 맨눈으로 보던 별을 갈릴레이는 망원경으로 봤고, 갈릴레이는 볼 수 없던 걸 로버트 훅이 현미경으로 봤다. 그렇게 갈릴레이가 은하수의 정체를 밝혀내고, 로버트 훅이 세포를 최초로 발견했다. 이처럼 관찰 도구의 발전은 우리가 세상을 보는 해상도를 점점 높였다.

다만 이 해상도는 공간적 해상도에만 해당했다. 과학자들이 마주한 가장 큰 난제는 바로 ‘시간의 해상도’였다. 뉴턴 역학의 세계에서는 초 단위의 느린 변화를 다뤘지만, 화학과 생명의 세계에서는 눈 깜짝할 사이에 모든 일이 일어나기 때문이다. 분자 수준에서는 변화가 더욱 빨라진다. 분자가 결합하고 끊어지는 화학 반응은 밀리초(1000분의 1초), 마이크로초(100만분의 1초) 단위를 넘어 나노초(10억분의 1초) 단위, 심지어 피코초(1조분의 1초)와 펨토초(1000조분의 1초) 단위에서 일어난다. 예를 들어 세포가 다음 신경세포로 신호를 전달하는 데는 수 밀리초, 무언가를 몰에 녹일 때 일어나는 분자 간 상호작용은 피코초~나노초 단위로 일어난다.



▲ 사람들에게 망원경을 보여주는 갈릴레이. 위키미디어

이런 현상이 워낙 빨리 일어나다 보니, 화학 현상을 관찰한다는 건 마치 움직이는 총알의 모습을 정지된 사진으로 포착하는 것과 같았다. 과거에는 반응 전과 반응 후의 분자만을 측정할 수 있었기 때문에, 그 중간 과정은 오직 상상과 추론에 의존할 수밖에 없었다. 따라서 화학자들과 물리학자들의 오랜 꿈은 시간의 해상도를 펨토초까지 쪼개 미지의 화학 반응 중간 과정을 ‘라이브’로 포착하는 것이었다.

순간 포착의 혁명이 일어난다



▲ 펨토초 화학의 문을 연 아메드 즈웨일 교수. 위키미디어

초고속 반응의 찰나를 포착하기 위한 결정적인 혁신은 1980년대 후반에 일어났다. 초고속 레이저 연구가 등장한 것이다. 미국 화학자 아메드 즈웨일 박사가 초고속 레이저로 펨토초(1000조분의 1초) 단위의 짧은 펄스를 만들었는데, 이 짧은 레이저 펄스를 마치 초고속 카메라의 플래시처럼 사용해 화학 반응이 일어나는 순간의 분자 구조를 포착했다.

1펨토초는 빛이 수백 나노미터, 즉 바이러스 하나 정도를 겨우 지나가는 데 걸리는 시간이다. 이 찰나의 순간을 잡기 위해 즈웨일 박사는 ‘펌프-프로브(Pump-Probe)’라 불리는 기법을 도입했다. 먼저 강한 레이저 펄스(펌프)를 쏘아 화학 반응을 일으키고, 수 펨토초 후에 아주 약한 두 번째 레이저 펄스(프로브)를 쏘아 그 순간 분자의 상태를 촬영하는 방식이다. 아주 어두운 방에서 빠르게 움직이는 물체를 강력한 조명으로 연속 촬영해 정지 화면으로 만드는 것과 비슷하다.

즈웨일 박사는 이 기술로 아이오딘화 나트륨(NaI)과 같은 분자의 결합이 끊어지는 찰나를 실시간으로 추적했다. 이전까지 화학 반응의 중간체(Transition State)는 펨토초 단위로 사라지는 유령 같은 존재였는데, 즈웨일 박사는 원자들이 서로 밀고 당기며 진동하는 미세한 움직임까지 포착해 냈다. 인류 역사상 처음으로 화학 반응을 ‘정지 화면’이 아닌 ‘라이브 영상’으로 보게 된 셈이다.

이 연구는 펨토초 화학(Femtochemistry)이라는 새로운 학문 분야를 개척했다. 이 공로로 즈웨일 박사는 1999년 노벨 화학상을 단독 수상했다. 당시 노벨 위원회는 즈웨일 박사 수상 보도자료에서 “우리는 길의 끝에 도달했습니다. 이보다 더 빨리 일어나는 화학 반응은 없습니다”라고 시간의 장벽을 넘은 박사의 공로를 인정했다.

하지만 펨토초 화학의 등장은 끝이 아니라 새로운 출발점이었다. 초기의 펨토초 화학은 에너지 준위 변화에 초점을 맞춘 ‘분광학적 관측’에 기반을 두고 있었다. 즉, 분자의 구조 변화보다는 전자 상태 전이 등 간접적인 정보를 통해 반응을 해석하는 접근이 주류였다. 하지만 이후 기술이 발전하면서 과학자들은 단순한 스펙트럼 해석을 넘어, 화학 반응 중 실제 분자 구조가 시간에 따라 어떻게 바뀌는지를 직접적으로 밝히는 데 관심을 두기 시작했다. 이러한 흐름 속에서 초고속 전자회절(UED)과 X선 자유전자레이저(XFEL)를 이용한 기법 등도 등장했다. 이제 펨토초 화학은 에너지 중심 관점에서 구조 동역학 중심의 ‘영상화’ 시대로 진입하게 되었다.

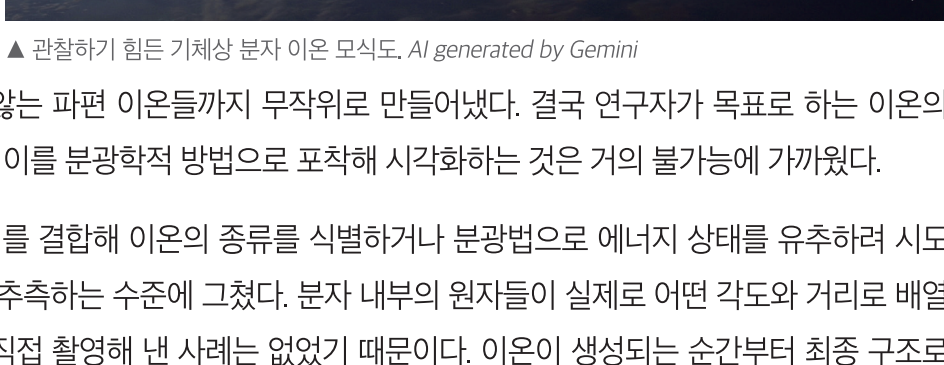


▲ 즈웨일 교수의 펌프-프로브 실험 방법을 나타낸 모식도. 위키미디어

기체 속에서 사라지는 분자

펨토초 화학이 일반적인 화학 반응의 비밀을 밝혀냈지만, 과학자들은 이제 이온 화학이라는 더 깊은 난제에 봉착했다. 이온 화학은 우주 공간이나 대기권 상층부처럼 분자가 전자를 잃거나 얻어 이온 상태로 존재하는 환경의 반응을 다룬다. 이온은 일반 분자와 달리 매우 불안정하고 반응성이 높다. 특히 기체 상태의 분자 이온은 생성되자마자 수 피코초(1조분의 1초)라는 찰나에 구조가 변하거나 흩어져 버린다. 이 때문에 이온이 도대체 어떤 구조의 중간체를 거쳐 최종 산물로 변하는지를 알아내는 것은 과학자들의 오랜 숙제였다.

이온 화학을 연구하는 과학자들은 이온화 후 분자가 겪는 초미세 구조 변화를 ‘라이브’로 보고 싶었지만, 현실적인 장벽은 높았다. 가장 큰 문제는 신호의 세기였다. 기존에는 강한 레이저를 쏘아 이온을 만드는 ‘강한 장 이온화’ 방식을 주로 사용했다. 하지만 이 방식은 분자를 거칠게 때려 부수는 것과 같아서, 정작 관찰하고 싶은 특정 이온뿐만 아니라 원치 않는 파편 이온들까지 무작위로 만들어냈다. 결국 연구자가 목표로 하는 이온의 신호는 다른 잡음들에 묻혀버렸고, 이를 분광학적 방법으로 포착해 시각화하는 것은 거의 불가능에 가까웠다.



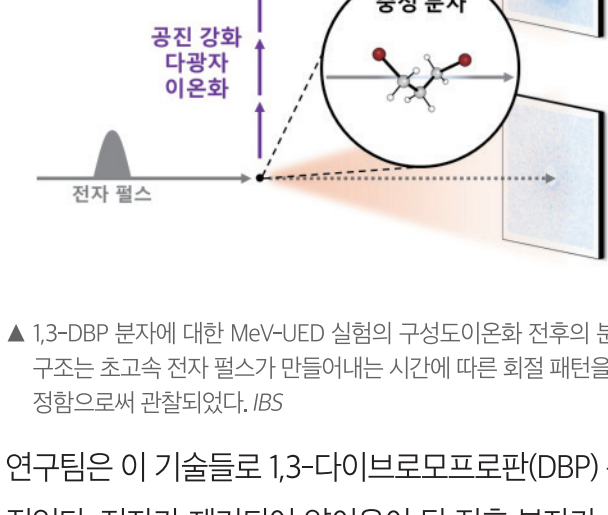
▲ 관찰하기 힘든 기체상 분자 이온 모식도. AI generated by Gemini

실제로 많은 연구팀이 질량 분석기를 결합해 이온의 종류를 식별하거나 분광법으로 에너지 상태를 유추하려 시도했으나, 이는 ‘지문’을 더고 범인을 추적하는 수준에 그쳤다. 분자 내부의 원자들이 실제로 어떤 각도와 거리로 배열되어 움직이는지, 그 실물 구조를 직접 촬영해 낸 사례는 없었기 때문이다. 이온이 생성되는 순간부터 최종 구조로 바뀌는 전 과정을 직접 관찰하는 건 여전히 이온 화학 분야의 거대한 구멍으로 남아 있었다.

오랜 한계를 깨뜨린 ‘기체상 이온 동역학 시각화’

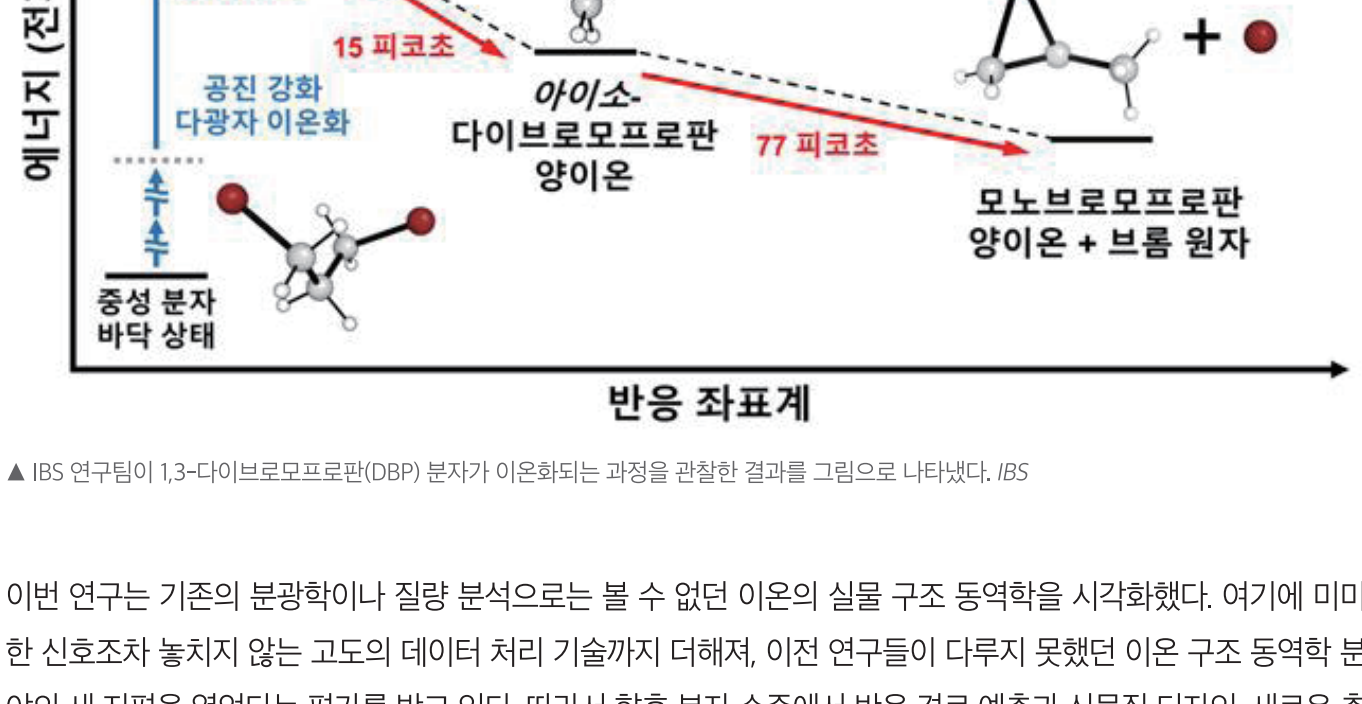
화학자들에게 기체 상태의 이온은 오랫동안 ‘잡지’가 아닌 ‘유령’과 같았다. 전자를 잃고 불안정해진 이온은 찰나의 순간에 모습을 바꾸거나 사라져 버렸기 때문이다. 하지만 이온은 우주 탄생의 비밀이나 지구 대기 상층부의 화학 변화를 설명할 핵심 열쇠를 쥐고 있다. 과학자들이 그토록 이온을 직접 관찰하려는 연구를 이어가는 이유다.

최근 우리나라 연구팀도 이 영역에 도전해 세계 과학계를 놀라게 한 성과를 냈다. 이효철 박사가 이끄는 기초과학연구원(IBS) 첨단 반응동역학 연구단의 연구다. 세계 최초로 이 기체 상태의 분자 이온이 생성되는 순간부터 최종 구조로 변화하는 전 과정을 ‘메가전자볼트 초고속 전자회절(MeV-UED)’로 실시간 관찰하는 데 성공한 것이다. 이는 마치 정지된 스틸 컷을 더듬듯 보이던 무성 영화 시대에서, 모든 움직임을 생생하게 연결되는 4K 라이브 영상 시대로 도약한 것 같은 성과다.



▲ 1.3-DBP 분자에 대한 MeV-UED 실험의 구성도(이온화 전후의 분자 구조는 초고속 전자 펄스가 만들어내는 시간에 따른 회절 패턴을 측정함으로써 관찰되었다. IBS)

연구팀은 이 기술들로 1,3-다이브로모프로판(DBP) 분자가 이온화되는 과정을 추적했는데, 그 결과는 기존 상식을 뒤집었다. 전자가 제거되어 양이온이 된 직후 분자가 즉시 재배열될 것이라는 예상과 달리, 약 3.6피코초 동안 구조 변화가 멈춘 듯한 암흑 상태(Dark State)가 지속된다는 걸 발견한 것이다. 이후 분자는 잠시 숨을 고르던 4원자 고리 구조의 중간체를 거쳤다가, 최종적으로 브롬 원자를 떨쳐내며 안정적인 3원자 고리 구조(브로모늄 이온)로 변해갔다.



▲ IBS 연구팀이 1,3-다이브로모프로판(DBP) 분자가 이온화되는 과정을 관찰한 결과를 그림으로 나타냈다. IBS

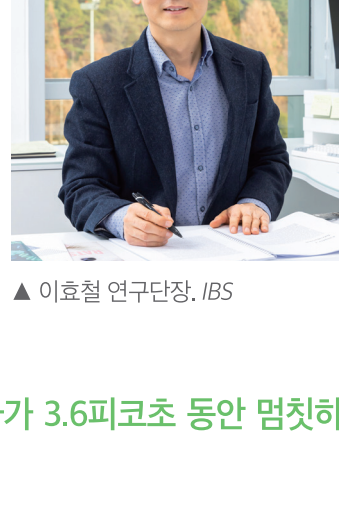
이번 연구는 기존의 분광학이나 질량 분석으로는 볼 수 없던 이온의 실물 구조 동역학을 시각화했다. 여기에 미미한 신호조차 놓치지 않는 고도의 데이터 처리 기술까지 더해져, 이전 연구들이 다루지 못했던 이온 구조 동역학 분야의 새 지평을 열었다는 평가를 받고 있다. 따라서 향후 분자 수준에서 반응 경로 예측과 신물질 디자인, 새로운 촉정 설계 등에 활용될 수 있을 것으로 보인다. 특히 이온 구조 제어 기술로 발전한다면 고효율 에너지 장치나 정밀 촉매 설계, 플라즈마 공정 최적화 등 다양한 산업으로 확장될 수도 있다.

과거 갈릴레이의 망원경과 로버트 훅의 현미경이 우리가 볼 수 없던 공간의 한계를 넓혔다면, 펨토초 화학과 이번 IBS의 초고속 구조 동역학 연구는 우리가 포착할 수 없던 시간의 한계를 무너뜨리고 있다.

《》미니 인터뷰

Q 이번 연구성과가 갖는 가장 큰 의미는 무엇인가요?

A 분자 이온은 배터리, 촉매, 대기 화학 등 다양한 실생활 분야에서 핵심적인 역할을 담당하지만, 그 구조는 매우 불안정하고 변화가 빨라 실시간 관찰이 어려웠습니다. 이번 연구에서는 이온이 생성된 직후부터 구조가 어떻게 변화하는지를 펨토초 시간 해상도로 직접 추적함으로써, 이온 반응성의 근본적인 이해에 한 걸음 더 다가갈 수 있었습니다. 특히, 그동안 이론적으로만 예측되던 초기 구조 변화의 실제 경로를 시계열로 관찰했다는 점에서 학문적 의미가 크며, 향후 이온 기반 소재의 반응성 제어나 설계에 기초 데이터를 제공하는 데 중요한 토대가 될 수 있습니다.



▲ 이효철 연구단장, IBS

Q ‘암흑 상태(Dark State)’라는 개념이 매우 흥미롭습니다. 이온화 직후 분자가 3.6피코초 동안 멈춰 있는 이유는 무엇이며, 이것이 화학 반응에서 어떤 역할을 하나요?

A 분자가 이온화되면 곧바로 구조가 바뀔 것이라 생각하기 쉽지만, 이번 연구에서는 약 3.6피코초 동안 구조 변화가 거의 일어나지 않는 일종의 ‘구조적 정체 구간’이 존재함을 밝혀냈습니다. 이는 이온의 내부 에너지 분포가 즉각적인 구조 변화로 이어지지 않고, 일시적인 정체 상태를 거친 결과로 해석될 수 있습니다. 이러한 암흑 상태는 이온이 어떤 경로로 반응하게 될지를 결정짓는 중요한 지점으로, 향후 화학 반응의 초기 조건을 제어하는 데 있어 매우 중요한 열쇠가 될 수 있습니다.

Q 이번 연구 결과가 어떻게 활용될 거라고 보시나요?

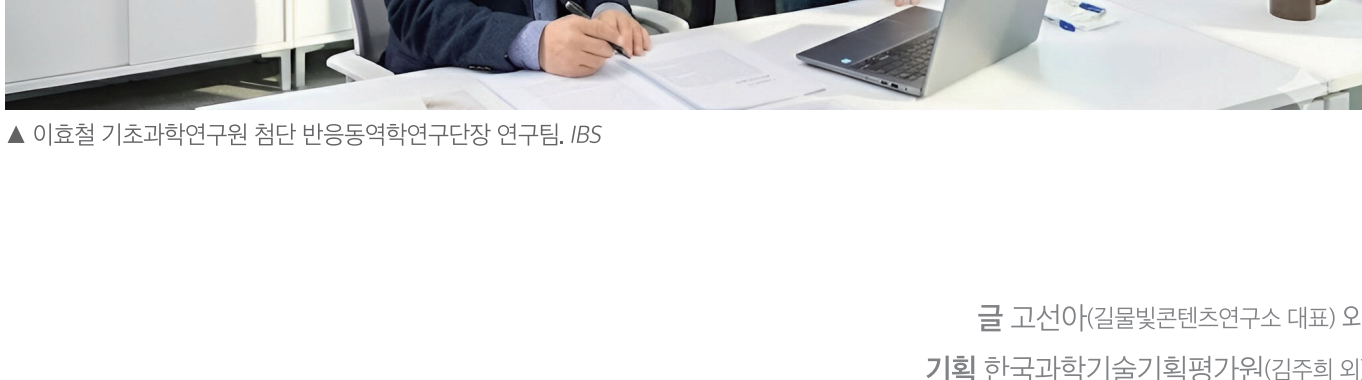
A 이번 연구 결과는 앞으로 분자 기반 정보 저장, 에너지 전환 소재, 정밀 센서 등 다양한 분야로 확장될 수 있다고 봅니다. 특히 이온의 동역학 제어가 가능해진다면 반응성 제어 및 전기화학 시스템의 혁신적 개선도 기대됩니다. 본 연구는 이와 같은 미래 기술의 핵심 원천이 되는 기초 데이터를 제공하는 사례로, 향후 기업 협업을 위한 대항 프로젝트로 확장될 가능성도 크다고 생각합니다.

Q 펨토초 화학에서 앞으로 남은 과제는 어떤 게 있을까요?

A 펨토초 화학은 과거에는 분광학적 방법을 통해 원자와 분자의 에너지 변화만을 관찰할 수 있었지만, 구조 동역학의 발달로 이제는 그 움직임을 실시간으로 ‘영상화’할 수 있는 단계에 이르렀습니다. 그럼에도 불구하고 여전히 많은 도전 과제가 남아 있습니다. 특히 액체나 고체 환경 속에서 일어나는 복잡한 반응, 혹은 여러 분자가 동시에 얽히는 상호작용을 시공간 해상도로 추적하는 일은 아직 초기 단계입니다. 저 역시 이온 간 상호작용이나 용매 효과가 구조 변화에 미치는 영향을 더 깊이 탐구하고 싶습니다. 이번 연구를 통해 ‘이온 구조가 시간에 따라 어떻게 바뀌는가’에 대한 중요한 실마리를 얻었지만, 여전히 이온 간 상호작용이나 용매 같은 환경이 주는 영향 등은 미지의 영역입니다. 특히 액상 상태에서의 이온 구조 제어나, 펨토초라는 극초단 시간 스케일에서 반응이 여러 방향으로 갈라지는 과정을 영상화하는 연구도 진행하고 싶습니다.

Q 이번 연구를 진행하는 과정에서 가장 결정적인 순간을 꼽는다면?

A 먼저, 실험결과로 이전까지와는 전혀 다른 형태의 신호가 나타났던 때입니다. 생성된 분자 이온의 영향을 받아서였는데, 이 신호가 실제 분자의 구조 정보를 담고 있는 신호인지, 아니면 그와 완전히 무관한 잡음인지를 구분하기가 매우 어려웠습니다. 그래서 기존에 사용하던 수학적 신호 분해 방법을 연구 목적에 맞게 변형해 해결했습니다. 이를 통해 전체 2D 패턴에서 왜곡 성분을 분리해내고, 구조 정보만이 담긴 신호를 추출할 수 있었습니다. 이런 순간들을 극복하고 성취해 왔기에 이번 연구 성과를 낼 수 있었다고 생각합니다. 앞으로도 연구에 매진해 이런 결정적 순간을 계속 경험하고 싶습니다.



▲ 이효철 기초과학연구원 첨단 반응동역학연구단장 연구팀, IBS