

# STI Brief

2026 VOL.01

전기화학 이산화탄소 전환 및  
수소 전환용 촉매의 계산과학 기반 설계 동향



# STI Brief

2026 VOL.01

전기화학 이산화탄소 전환 및  
수소 전환용 촉매의 계산과학 기반 설계 동향





# 전기화학 이산화탄소 전환 및 수소 전환용 촉매의 계산과학 기반 설계

주저자 김미연 박사 (서울대학교)  
공동저자 김이곤 석박통합과정 (서울대학교)  
공동저자 김호연 석박통합과정 (서울대학교)  
공동저자 손유빈 석박통합과정 (서울대학교)  
공동저자 신기훈 석박통합과정 (서울대학교)  
교신저자 한정우 교수 (서울대학교)

I. 서론  
II. 해외 동향  
III. 국내 동향  
IV. 결론

참고문헌

전 세계 탄소배출 저감 압력과 청정수소 전환 수요 확대로 전기화학 기반 탈탄소 기술의 중요성이 강화되는 가운데 고성능 촉매 확보를 위한 AI-계산과학 기반 설계체계로 연구 패러다임 전환

미국·EU·일본 등 주요국과 글로벌 빅테크는 대규모 공개 데이터셋·범용 MLP·생성형 AI·자율실험 기반 차세대 촉매 탐색 체계를 구축하며 계산·실험 통합 연구체계로 전환

글로벌 계산·실험 통합 연구 경쟁에 대응하여 국내 전기화학 촉매 특화 HPC 인프라·오픈 데이터 생태계 구축과 계산설계 성과의 파일럿 실증·상용화 연계 전주기 체계 확보

## 1. 배경 및 필요성

### 환경변화

탄소배출 저감과 청정수소 전환 요구 확대로 전기화학 기반 탈탄소 기술의 중요성 강화 속 고성능 촉매 확보를 위한 AI 기반 차세대 촉매 설계체계로 연구 패러다임 전환 확대

- ◎ (전기화학 기반 탈탄소 기술 부상) 탄소중립 및 청정수소 전환 대응을 위한 전기화학 기반 탄소자원화수소 기술 중요성 확대
  - 전 세계 화석연료 기반 CO<sub>2</sub> 배출량이 38.1GtCO<sub>2</sub>를 기록하는 등 탄소배출 저감 압력이 증가하면서 CO<sub>2</sub>RR·수전해·수소 저장·운반·연료전지 등 제조업의 화석연료 기반 공정 한계를 보완할 전기화학 기반 탈탄소 기술 수요 확대
- ◎ (AI 기반 촉매 설계 패러다임 전환) 전기화학 공정의 효율과 경제성을 좌우하는 고효성·고선택성 촉매 확보를 위한 AI 기반 계산과학 활용 확대
  - MLIP 기반 계산 가속화와 생성형 AI 기반 신규 촉매 구조 설계 기술이 확산되며 기존 실험 중심 촉매 탐색의 시간·비용 한계를 극복하기 위한 차세대 촉매 설계체계로 전환 가속화

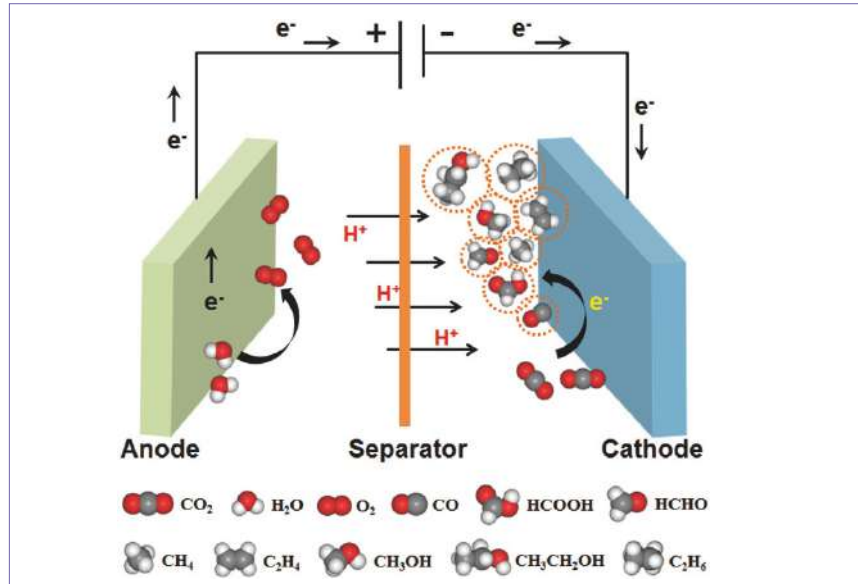
### 상용화 제약

전기화학 기반 탈탄소 공정은 반응 선택성·촉매 경제성·장기 내구성 한계와 실험 중심 촉매 탐색의 비효율성으로 상용화에 제약 발생

- ◎ (반응 선택성 및 촉매 경제성 한계) 고효율 전기화학 반응 구현을 위한 촉매 성능 및 경제성 확보 필요
  - CO<sub>2</sub>RR은 다전자 전달 및 HER 경쟁반응 특성으로 높은 과전압과 낮은 다탄소(C2+) 생성물 선택성 한계를 보이며, OER·ORR은 Ir·Ru·Pt 기반 귀금속 촉매 의존도가 높아 비귀금속 기반 고효율·고선택성 촉매 개발 필요성 확대
- ◎ (내구성 및 촉매 탐색 한계) 장시간 운전 안정성과 고속 촉매 탐색을 위한 계산과학 기반 연구 필요성 확대
  - 전기화학 촉매는 장시간 운전 중 표면 재구성·계면 열화·물질전달 제한 등에 따른 성능 저하가 발생하며 실험 기반 탐색만으로는 복잡한 반응 메커니즘 규명과 후보물질 발굴에 한계가 존재하여 계산과학 기반 설계 고도화 필요성 증대

## [그림 1-1]

전기화학적 이산화탄소  
전환 반응(CO<sub>2</sub>RR) 시스템의  
모식도 및 주요 생성물



자료: W. Zhang 외, "Progress and Perspective of Electrocatalytic CO<sub>2</sub> Reduction for Renewable Carbonaceous Fuels and Chemicals", Adv. Sci. vol. 5, no. 1, pp. 1700275, 2018.

## 글로벌 계산과학 연구 경쟁 심화

주요국은 AI·데이터·HPC 기반 계산과학 연구 인프라를 국가 전략 투자 분야로  
육성하며 계산·실험 통합 연구체계 중심으로 전환

- ◎ (계산과학 인프라 투자 확대) 미국·유럽·중국 등은 AI 기반 재료 설계를 국가 R&D 전략으로 추진하며 HPC·공개 데이터셋, MLIP 모델 플랫폼 구축 확대
  - 미국 Materials Genome Initiative, 유럽 BATTERY 2030+, 중국 AI for Science 등 대규모 프로젝트 추진
- ◎ (계산·실험 통합 연구체계 전환) 촉매 연구는 실험 단독 접근에서 계산 예측 → 실험 검증 → 데이터 피드백 순환 구조로 전환
  - Open Catalyst Project, Materials Project 등 대규모 공개 데이터·모델 공유 플랫폼이 연구 생태계 핵심 인프라로 부상

## 계산과학 기반 연구 필요성

전기화학 탈탄소 기술의 상용화 병목을 극복하고 글로벌 AI 기반 촉매 설계 경쟁에  
대응하기 위해 메커니즘 규명, 고속 촉매 탐색, 계산·실험 통합 인프라 구축 필요

- ◎ (계산과학 기반 상용화 제약 해소) 반응 선택성·촉매 경제성·장기 내구성 한계를  
극복하기 위해 계산과학 기반 반응 메커니즘 정량 분석과 촉매 설계 고도화 필요

- DFT·AIMD 기반 흡착·활성화에너지 분석과 계산 기반 활성점·도펀트 최적화를 통해 CO<sub>2</sub>RR 다탄소 선택도 및 OER·ORR 비귀금속 촉매 활성·장시간 운전 내구성 향상 전략 확보
- ◎ (AI 기반 대규모 촉매 탐색체계 구축) 실험 중심 탐색의 시간·비용 한계를 극복하고 글로벌 AI 촉매 설계 경쟁에 대응하기 위해 MLIP·생성형 AI 기반 고속 탐색 역량 조기 확보 필요
- MLIP·고처리량 스크리닝과 생성형 AI 기반 구조 설계를 통해 대규모 후보 탐색 시간 단축 및 기존 조성 공간을 넘어선 차세대 촉매 발굴 추진
- ◎ (계산·실험 통합 연구 인프라 구축) 주요국이 데이터·AI·HPC 기반 통합 연구체제로 전환하는 상황에서 국내도 계산·실험 연계 플랫폼과 공개 데이터 활용 기반 조기 마련 필요
- HPC 기반 대규모 계산, 공개 데이터셋 활용 및 자율실험·능동학습 등 차세대 연구 방법론 도입

## 2. 기술의 정의 및 범위

### 정의

전기화학 기반 탈탄소 촉매 기술은 전기화학 반응을 활용하여 이산화탄소 전환 및 청정수소 생산·활용을 수행하고 계산과학 기반 촉매 설계를 통해 반응 메커니즘과 촉매 특성을 분석·최적화하는 융합형 기술 분야

- ◎ (전기화학 기반 탈탄소 반응 기술) CO<sub>2</sub> 전환과 수소 생산·활용을 위한 핵심 전기화학 반응 기반 기술로 구성
  - CO<sub>2</sub> 환원반응(CO<sub>2</sub>RR), 수전해(HER/OER), 연료전지(ORR/HOR) 등 다양한 반응계를 포함하며 촉매·전극·전해질·계면 설계 기술이 유기적으로 결합된 형태
- ◎ (계산과학 기반 촉매 설계 기술) 전기화학 촉매 연구는 실험 중심 접근을 넘어 계산과학·AI 기반 설계체계와 융합되는 방향으로 확대
  - 제1원리 계산(DFT), 분자동역학(MD/AIMD), 기계학습 원자간 포텐셜(MLIP), 생성형 AI 기반 설계 기술을 활용하여 반응 메커니즘 분석과 고성능 촉매 구조 설계 수행
- ◎ (통합형 데이터·연구 인프라 기술) 촉매 연구는 데이터·AI·HPC 기반의 통합형 연구체제로 발전
  - 공개 데이터셋, 고성능컴퓨팅(HPC), 고속 스크리닝, 자율실험 및 공정 최적화를 연계하여 데이터 기반 촉매 탐색과 계산·실험 통합 연구환경 구축

### 기술 범위

전기화학 기반 탈탄소 촉매 기술은 반응계·촉매 설계·계산 기술·데이터 인프라 4개 계층 통합 연구체제로 구성되며 범용 MLIP·생성형 AI 등 차세대 핵심 기술 중심으로 고도화 확대

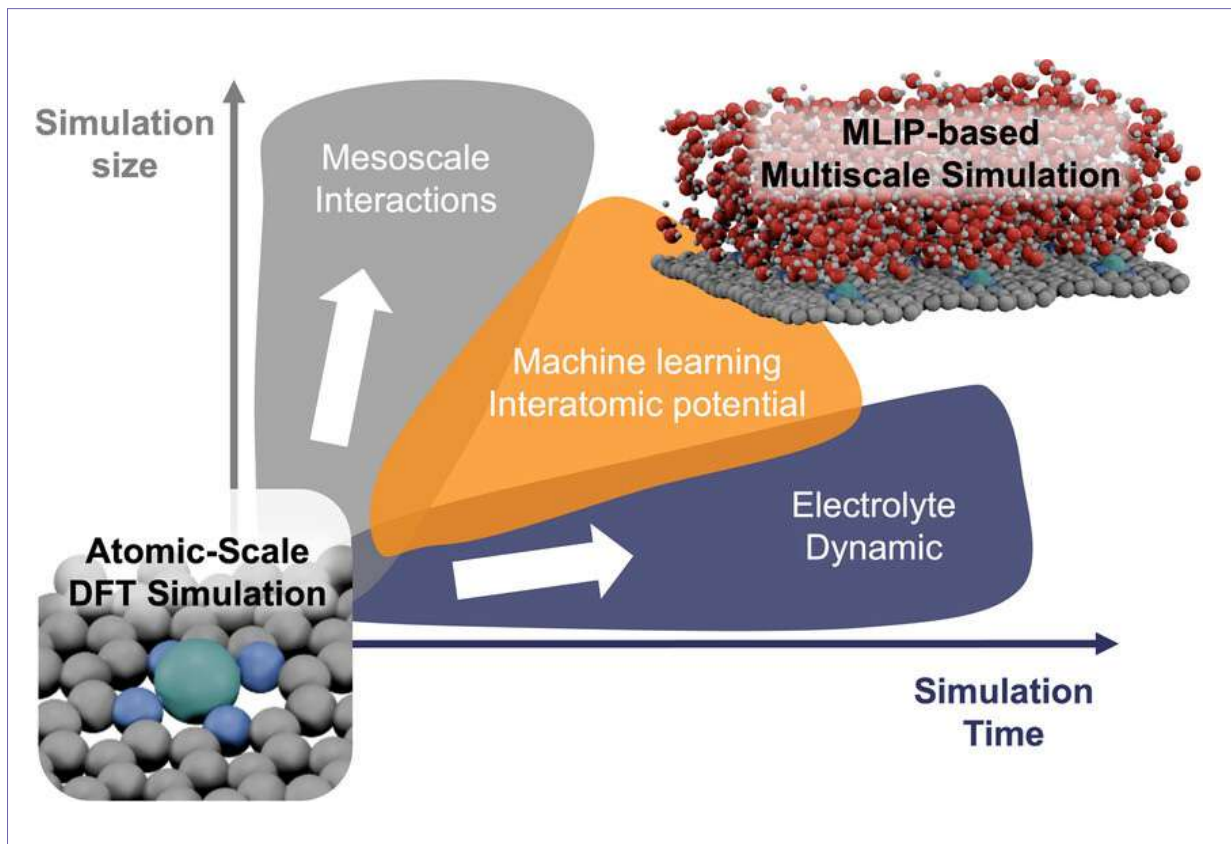
- ◎ (기술 범위 구성 체계) 전기화학 촉매 기술은 반응계 정의부터 데이터 기반 연구환경까지 4개 계층 연계 구조로 확대

| 표 1-1 | 전기화학 기반 탈탄소 촉매 기술 범위 및 주요 기술 구성

기술 계층	주요 기술 구성	역할
전기화학 반응	• CO <sub>2</sub> RR, HER/OER, ORR/HOR	• 이산화탄소 전환, 수소 생산 및 전력 변환 반응
촉매-계면 설계	• 흡착 에너지, 활성점, 전기이중층(EDL), 전해질 효과	• 반응 선택도·과전압·내구성 최적화
계산과학 기반 설계	• DFT, AIMD, MD, MLIP	• 전자구조 해석, 계면 동역학 분석, 고처리량 탐색
데이터 기반 연구환경	• 공개 데이터셋, HPC, 고속 스크리닝	• 데이터 기반 촉매 탐색 및 계산-실험 연계

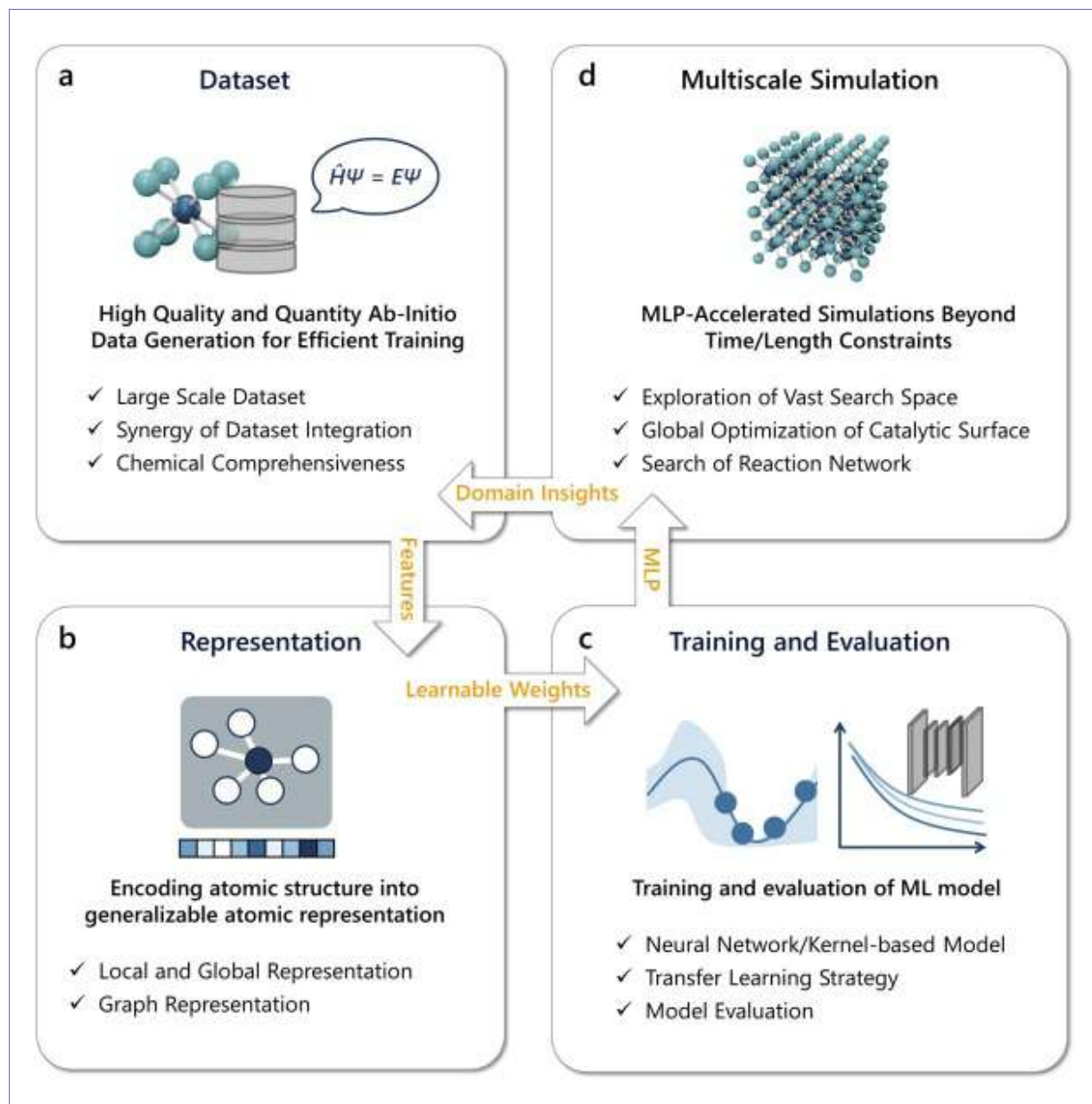
- ◉ (계층 간 유기적 연계 구조) 4개 계층은 독립적으로 작동하지 않으며 전기화학 반응계 정의 → 촉매-계면 설계로 반응 최적화 → 계산과학으로 설계 가속화 → 데이터HPC로 연구체계 고도화 방향으로 연쇄 연결
- ◉ (차세대 핵심 기술영역) 범용 MLIP, 생성형 AI, 멀티스케일 계산이 차세대 핵심 기술로 부상
  - 범용 MLIP 기반 계산 가속화, 생성형 AI 기반 구조 설계, 멀티스케일 계산으로 촉매 표면 재구성-계면 변화-복합 반응환경 반영

| 그림 1-2 | MLIP 기반 계산과학 시뮬레이션 방법론 확장 가능성



자료: S. Choung 외, "From Atomic Motif to Realistic Single Atom Catalysts through Machine Learning Interatomic Potentials", ACS Energy Lett. vol. 10, no. 12, pp. 6288-6296, 2025.

[그림 1-3] MLIP 구축 과정



자료: S. Choung 외, "Rise of machine learning potentials in heterogeneous catalysis: Developments, applications, and prospects", Chem. Eng. J. vol. 494, no. 152757, 2024.

## II

## 해외 동향





## 1. 정책 동향

청정수소·  
계산과학 기반 정책

주요국은 청정수소·CO<sub>2</sub> 전환을 탄소중립 핵심 전략으로 설정하고 수소 공급망·전해조·탄소전환 기술과 AI·HPC·계산과학 인프라를 연계한 통합 정책체계 구축 추진

- (미국) Hydrogen Shot(2021) 및 IRA(2022)를 통해 청정수소 생산단가 목표와 세액공제 기반 수소 허브 구축, AI·HPC 기반 촉매 탐색 연구체계 고도화 추진
- (EU) European Green Deal(2019) 및 EU Hydrogen Strategy(2020)를 통해 탄소중립 전환과 재생수소 확대, 청정에너지 연구혁신 투자 병행
- (일본) 수소사회추진법(2024)을 통해 법제화 기반 수소 허브 구축 및 2040년 수소 이용 1,200만 톤 목표 설정, AI·HPC 기반 계산과학 인프라 고도화 추진
- (중국) 수소에너지산업 발전 중장기 계획(2022)을 통해 중앙-지방 연계 기반 재생수소 확대 및 지역 수소산업 육성 전략 추진
- (국가별 정책) 주요국은 청정수소 생산 목표 및 법제·재원 확대, CO<sub>2</sub> 전환·전기화학 촉매 기술개발, AI·HPC 기반 계산과학 인프라 투자를 통합 정책체계로 추진

【표 II-1】 주요국 청정수소·전기화학 촉매 정책 추진 방향

국가	주요 정책 및 운영 전략	주요 내용
 미국	IRA 45V·H2Hubs (2022.08)	• 세액공제 및 70억 달러 규모 지역 수소 허브 구축 추진
	H2@Scale (2016.06)	• 청정수소 생산·저장·활용을 전력망·천연가스망과 연계한 통합수소 에너지 시스템 구축 추진
	Hydrogen Shot (2021.06)	• 2031년까지 청정수소 생산단가 1달러/kg 달성 목표 제시
	Materials Genome Initiative(MGI) (2011.06)	• AI·HPC·계산과학 기반 소재·촉매 탐색 연구체계 고도화
 유럽	REPowerEU (2022.05)	• 재생수소 확대 및 에너지 공급망 다변화 추진
	Horizon Europe (2021.01)	• 청정에너지·전기화학 시스템 분야 대규모 연구 혁신 투자 지원
	EU Hydrogen Strategy (2020.07)	• 재생수소 생산 확대 및 전해조 확산 전략 추진
	European Green Deal (2019.12)	• 탄소중립 기반 기후·산업·에너지 전환 정책 추진
 일본	수소사회추진법 (2024.05)	• 수소 허브 및 탄소집약도 기반 인증체계 법제화
	FugakuNEXT 개발 추진 (2024.04)	• AI·HPC 기반 계산과학 및 데이터 기반 연구 인프라 고도화
	수소기본 전략 방향 (2023.06)	• 2040년 수소 이용 1,200만 톤 목표 및 전략 기술 지정
	NEDO 그린노베이션 기금 (2021.03)	• 장기 실증·상용화 연계 및 수소 공급망 구축 지원
 중국	지방정부 수소 특별 정책 확대 (2024)	• 중앙-지방 연계 기반 지역 수소산업 육성 확대
	수소에너지산업 발전 중장기 계획 (2022.03)	• 수소산업 발전체계 구축 및 재생수소 확대 추진

## 1 미국

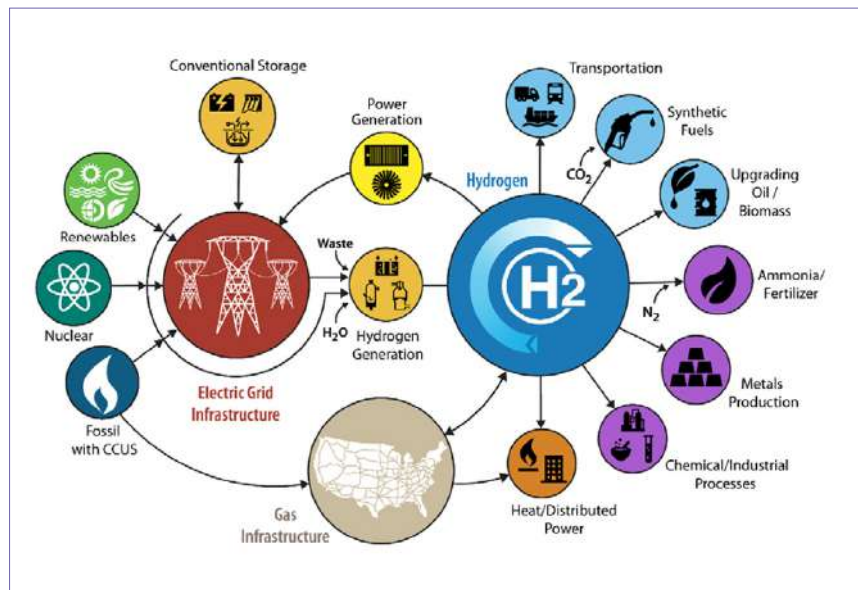
### 청정수소 중심 전략

미국은 청정수소를 전력·산업·수송 부문을 연결하는 핵심 에너지 매개체로 설정하고 수소 허브·세액공제·계산과학·HPC 인프라를 연계한 미션형 R&D 및 산업 생태계 구축 추진

- (수소·탄소 전략) DOE는 H2@Scale 프레임워크를 기반으로 청정수소 생산·저장·활용을 전력망·천연가스망과 연계하는 통합 수소 에너지 시스템 구축 추진
  - 2024년 「Hydrogen Program Plan」에서 H2@Scale 전략을 핵심 정책 비전으로 재확인
- (청정수소 상용화 목표) 미국은 청정수소 생산 단가 절감과 지역 기반 수소 생태계 구축을 중심으로 대규모 실행사업 확대
  - Hydrogen Shot 기반 2031년까지 청정수소 1달러/kg 생산 목표 제시
  - IRA 45V 세액공제 및 BIL 기반 70억 달러 규모의 7대 지역 수소 허브(H2Hubs) 사업 추진

[그림 II-1]

미국 DOE H2@Scale  
통합 수소 에너지 시스템 개념도



자료: U.S. Department of Energy's H2@Scale Concept Framework, "U.S. Department of Energy (DOE) Technical Report, 2024.

### 미션형 R&D 및 산업 연계

미국은 청정에너지 기술을 미션형 기술개발 과제로 설정하고 계산과학 기반 촉매·전해조·탄소전환 기술의 상용화 및 산업 연계 강화 추진

- (미션형 연구개발 체계 운영) DOE는 촉매·전해조·탄소전환 기술을 전략 기술개발 분야로 설정하고 상용화 기반 연구개발에 정책적 자원 집중
  - ARPA-E 및 NSF를 중심으로 전기화학 시스템·촉매·데이터 기반 재료 설계 연구 병행 지원
- (산업계-연구기관 협력 확대) 수소·탄소포집·에너지전환 분야에서는 ALCC-HPC4EI 등 산업계-국립연구소 협력 프로그램 기반 계산과학 활용과 대규모 산업 연계 연구 확대

## 계산과학·HPC 기반 연구체계 고도화

AI·엑사스케일·차세대 HPC 인프라와 계산과학 기반 소재 탐색 체계를 연계한 국가 전략형 연구개발 체계 구축 추진

- ◎ (AI·엑사스케일 전략 투자 확대) DOE Office of Science는 ASCR 프로그램 중심 AI·기계학습·엑사스케일·양자정보과학(QIS) 분야 투자 지속
- ◎ (차세대 HPC 인프라 구축) ORNL<sup>1)</sup>, ANL<sup>2)</sup>, LBNL<sup>3)</sup> 등 국립연구소는 Frontier, Aurora, NERSC-10 등 차세대 HPC 인프라 구축 및 고도화 추진
- ◎ (계산과학 기반 소재 탐색 제도화) MGI<sup>4)</sup>, Genesis Mission Consortium 등은 계산과학 기반 소재 탐색 체계를 국가 전략 차원에서 운영 및 제도화 추진

## ② 유럽연합(EU)

### 탄소중립 기반 통합 정책체계 강화

- ◎ (통합 정책 프레임워크) EU는 탄소중립 목표와 연계하여 청정에너지·전기화학 분야 연구혁신 투자 확대
  - Green Deal·REPowerEU·CBAM·2030 감축 목표 기반 청정에너지 연구혁신 투자 추진
- ◎ (대규모 연구혁신 투자 확대) Horizon Europe을 중심으로 청정에너지·전기화학 시스템 분야 대규모 재정 지원 추진
  - Horizon Europe(2021~2027)는 약 935억 유로 규모의 연구혁신 프로그램으로, Pillar II 내 Cluster 5를 중심으로 청정에너지·전기화학 시스템 분야 R&D 직접 지원 추진

### 재생수소 중심 정책 확대

EU는 재생수소 공급 확대와 전해조 확산을 중심으로 수전해·전기화학 시스템 기반 정책 지원 강화

- ◎ (재생수소 전략 추진) 유럽연합은 수소 전략과 European Hydrogen Bank를 기반으로 재생수소 프로젝트 및 전해조 확산 촉진
  - Hydrogen Mechanism 기반 수소 수급 매칭 플랫폼 구축 및 프로젝트 자금 지원 추진
- ◎ (회원국 연계 자원 확대) Auctions-as-a-Service 기반 지원체계는 회원국별 추가 자원 투입과 경매 기반 지원을 연계하여 재생수소 시장 확대 추진

1) Oak Ridge National Laboratory

2) Argonne National Laboratory

3) Lawrence Berkeley National Laboratory

4) Materials Genome Initiative

## R&D 프로그램 및 계산 인프라 연계 강화

EU는 청정수소·전기화학 분야 연구개발과 HPC·오픈데이터 인프라를 연계한 연구생태계 구축 추진

- ◎ (프로젝트형 연구개발 지원 확대) Clean Hydrogen Partnership은 전해조·저장·수소밸리 중심 실증 프로젝트 지원 확대  
- CO<sub>2</sub>RR 및 전기화학 촉매 설계 분야에서 DFT·기계학습·자동화 실험 기반 프로젝트형 연구 지원을 강화
- ◎ (대형 HPC 인프라 구축) EuroHPC는 차세대 슈퍼컴퓨팅 인프라 구축과 대규모 시뮬레이션 연구환경 확대 추진  
- JUPITER(독일)·LUMI(핀란드)·Leonardo(이탈리아)·MareNostrum 5(스페인) 등 주요 HPC 인프라 운영
- ◎ (오픈데이터 기반 연구환경 구축) Materials Cloud, AiiDA, OPTIMADE 등 오픈 인프라는 데이터 상호운용성과 국제 공동연구 재현성 강화 지원

## 3 일본

### 수소사회 기반 국가 전략 강화

일본은 수소를 탄소중립 및 산업경쟁력 확보를 위한 핵심 에너지원으로 설정하고 수소 공급망·법제·실증사업을 연계한 장기 수소사회 구축 추진

- ◎ (수소 전략 체계 고도화) 일본은 「수소기본전략(2023)」 개정을 통해 수소 공급·활용 분야를 포함하는 국가 전략체계 강화  
- 2023년 전략 개정을 통해 2040년 수소 이용량 1,200만 톤 목표를 제시하고, 수소 공급·연료전지·수소화합물 활용 등 9대 전략기술 중심 수소산업 육성 추진
- ◎ (수소 공급망 및 전해조 확대) 2030년까지 일본 관련 기업은 수전해 장치 도입 목표를 15GW로 설정하여 수소 공급망 구축 및 관련 실증사업 확대 추진
- ◎ (법제·재원 기반 정책 지원 강화) 일본은 2024년 「수소사회추진법」 제정·시행하여 수소 허브 인프라 지원 및 탄소집약도 기반 인증체계 법제화  
- NEDO 그린이노베이션 기금 약 2조 엔(10년) 지원 및 세제 혜택 기반 장기 실증·상용화 연계 추진

### AI·계산과학 인프라

일본 정부는 AI·HPC 기반 계산과학 인프라를 고도화하며 데이터 기반 소재·촉매 연구체계 구축 추진

- ◎ (차세대 HPC 인프라 구축) RIKEN은 Fujitsu·NVIDIA와 FugakuNEXT 공동 개발 및 TRIP-AGIS 프로그램 기반 과학 연구용 파운데이션 모델 개발을 추진하며 차세대 슈퍼컴퓨팅 연구 인프라 고도화

- ◎ (AI 기반 연구 인프라 강화) AIST는 ABCI 3.0(AI Bridging Cloud Infrastructure 3.0) 구축을 기반으로 AI 연구개발용 대규모 클라우드 컴퓨팅 인프라와 AI-데이터 과학 활용 연구환경 확대 추진
- ◎ (계산과학 기반 연구개발 지원 확대) JST는 CREST·PRESTO 등 전략기초연구 프로그램을 통해 혁신 촉매·데이터과학·계산과학 기반 소재 탐색 연구 지원 확대

## 4 중국

### 국가 주도 수소산업 및 연구지원 강화

중장기 국가 전략과 지방정부 정책을 연계하여 수소산업 육성, 재생수소 확대 및 핵심기술 자립 추진

- ◎ (수소 전략 체계 구축) 중국은 「수소에너지산업 발전 중장기 계획(2021~2035)」을 기반으로 수소산업 발전체계 구축 추진
- ◎ (산업 육성 목표 제시) 2025년까지 핵심기술-제조공정 자립을 추진하고 재생에너지 기반 수소 연간 10만~20만 톤 생산 목표 제시
- ◎ (지방정부 기반 수소산업 확대) 중앙정부 정책과 연계하여 지방정부 중심 수소산업 육성 확대
  - 2024년 정부업무 과제에 22개 성(省)이 수소를 포함 및 지방 수준 수소 특별 정책 560개 이상 운영

### AI·계산과학 연구 인프라 강화

중국은 AI for Science 전략과 슈퍼컴퓨팅 인프라를 기반으로 계산과학 기반 촉매·재료 연구 지원체계 구축

- ◎ (AI for Science 전략) NSFC<sup>5)</sup>는 AI·기계학습 기반 과학 연구를 국가 전략으로 추진하며 촉매·재료·에너지 분야 AI 융합 연구 지원 확대
  - NSFC는 AI for Science 전용 연구 프로그램을 통해 전기화학·촉매·재료 분야 기초·응용연구 병행 지원
- ◎ (슈퍼컴퓨팅 인프라) 중국은 엑사스케일급 슈퍼컴퓨터 인프라 구축을 통해 대규모 계산과학 연구환경 확대
  - Sunway TaihuLight·Tianhe-3 등 세계 최고 수준 HPC 인프라와 국가 슈퍼컴퓨팅센터 네트워크 운영을 기반으로 연구기관·대학·산업계 대상 HPC 활용 접근성 확대 추진
- ◎ (기초·응용연구 지원체계 운영) NSFC와 국가 과학기술 지원체계를 기반으로 촉매·전기화학·재료·에너지 분야 기초·응용연구 병행 지원

5) National Natural Science Foundation of China

## 2. 시장·산업 동향

### 글로벌 시장

수전해 시장은 설치용량과 전해조 제조규모가 빠르게 확대되고 CO<sub>2</sub> 전환 기반 e-연료 시장이 본격화되는 가운데 청정에너지 투자는 2024년 2조 달러 규모로 사상 최고치 기록

- ⦿ (수전해 시장 성장) 2024년 세계 수전해 설치용량 2GW 도달, 전해조 제조용량 25GW/년 규모로 확대되며 중국 중심 생산 확대와 미국·유럽 중심 대규모 실증 본격화

  - 2025년 7월까지 추가 1GW 규모 전해조 설치를 통해 본격 상용화 단계로 전환되었으며 중국은 글로벌 전해조 시장 점유 주도
- ⦿ (CO<sub>2</sub> 전환 시장 부상) e-SAF, e-메탄올, 포메이트 등 CO<sub>2</sub> 전환 제품 상용화 및 장기 공급계약 확대로 전기화학 기반 탄소전환 시장 본격화

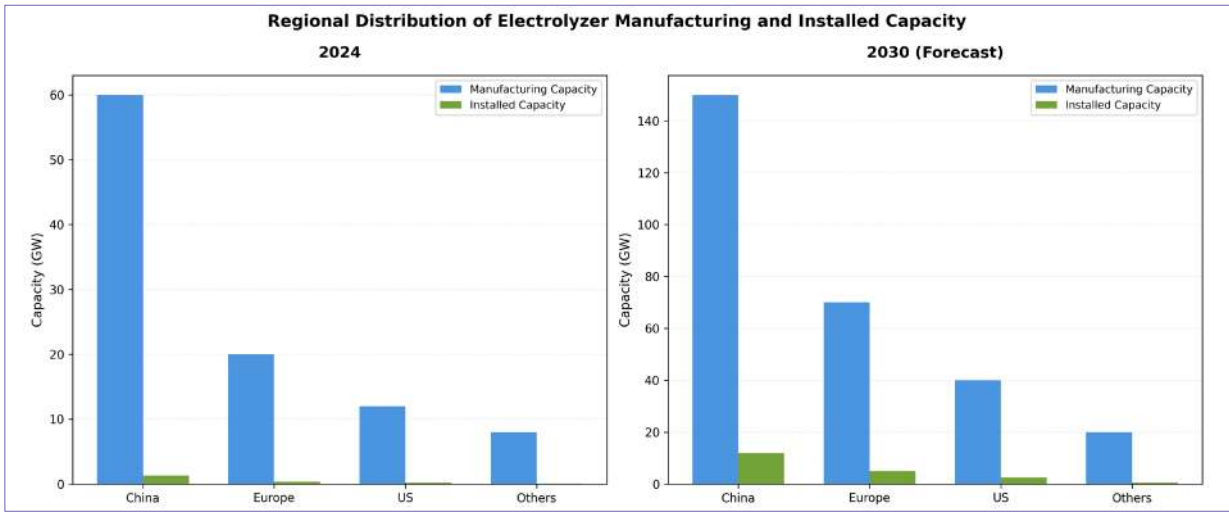
  - 미국·유럽 중심 CO<sub>2</sub> 전환 기업들이 항공·해운·화학 산업과 대규모 공급계약 체결
- ⦿ (청정에너지 투자 확대) IEA 「World Energy Investment 2024」에 따르면 2024년 글로벌 청정에너지 투자는 약 2조 달러로 화석연료 투자(1조 달러)의 2배 수준 기록

  - 중국·미국·EU가 글로벌 청정에너지 투자의 60% 이상을 차지하는 가운데 2019년 대비 2024년 투자 규모가 전반적으로 확대되었으며 특히 중국 투자 확대 중
- ⦿ (프로젝트 실현성 과제) 2030년 기준 발표된 저배출 수소 프로젝트는 연간 3,700만 톤 수준이나 실현 가능성이 높은 물량은 약 1,020만 톤 수준에 그쳐 프로젝트 실행력 확보 필요

[표 II-2] 주요국 수전해·CO<sub>2</sub> 전환 산업 특징

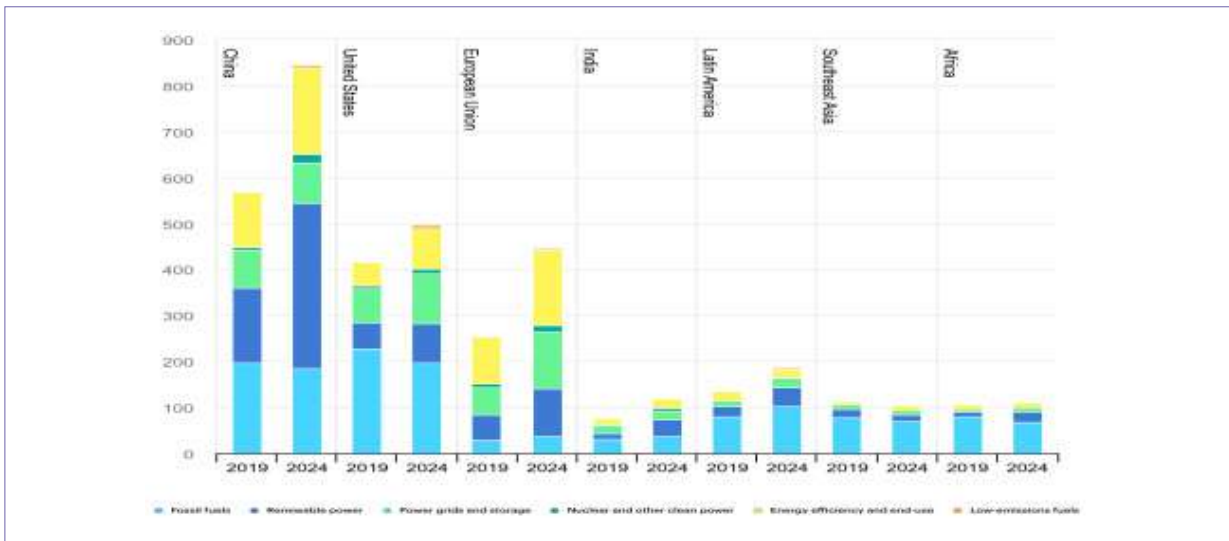
국가	산업 특징	주요 기업·플랫폼	핵심 경쟁력
 미국	수소 허브·실증 중심 산업 확대	Bloom Energy, Plug Power, Twelve	GW급 실증·연료전지·eSAF
 유럽	핵심 소재·고효율 시스템 중심 산업 확대	Topsoe, Johnson Matthey, Enapter	SOEC·귀금속·핵심부품
 중국	대규모 제조 기반 시장 확대	LONGi, Sinopec	저가전해조·제조능력
 일본	고효율 SOEC·장기 실증 중심	Toshiba, Mitsubishi	SOEC 기술 장기 실증

[그림 II-2] 2024년 및 2030년 전방 전해조 생산능력 및 보급 규모의 지역별 분포



자료: International Energy Agency (IEA), Advancing Clean Technology Manufacturing: An Energy Technology Perspectives Special Report, 2024.

[그림 II-3] 주요 지역별 청정에너지 투자 규모 변화 (2019년 대비 2024년)



자료: 국제에너지기구(IEA), "선택된 국가 및 권역별 청정에너지 연간 투자 규모 현황(2019년 및 2024년)," IEA 세계 에너지 투자(World Energy Investment) 보고서 데이터 통계 센터, 2024.

## 1 미국

### 수소 실증 및 산업 확대

미국은 GW급 수소 실증사업과 연료전지-전기화학 기반 탄소전환 상용화 및 핵심 소재·순환형 공급망 구축 중심 산업 생태계 확대

- ◎ (대규모 수소 실증 확대) 7대 청정수소 허브(H2Hubs)를 중심으로 GW급 저배출 수소 생산·저장·활용 실증사업 확대
- ◎ (연료전지 시장 성장) Bloom Energy는 2025년 매출 20.2억 달러 및 총 수주잔고 약 200억 달러를 기록했으며 Plug Power는 서비스-PPA-연료 판매 기반 운영계약형 매출구조 확대

- (전기화학 기반 탄소전환 사업화) 미국 기업들은 e-SAF-포메이트 중심 전기화학 기반 탄소전환 사업 확대
  - Twelve는 IAG와 14년간 총 78.5만 톤 규모 eSAF 공급계약을 체결했으며, OCOchem은 연 60톤 규모 포메이트 생산 파일럿 운영
- (핵심 소재·순환형 공급망 확대) DOE는 저귀금속화와 순환형 공급망 구축을 기반으로 PEM·MEA·이오노머 등 핵심 소재 생산과 재활용 체계 확대
  - DOE는 2026년 PEM 총 귀금속 로딩 목표를 0.1g/kW로 제시했으며 H2CIRC·H2LinkSC 등을 통해 촉매·분리막·이오노머 회수·재활용 체계 운영

## 2 중국

### 대규모 생산체계 기반 시장 주도

중국은 세계 최대 수준의 수소 생산과 전해조 제조 능력 기반으로 글로벌 수전해 시장 점유율 및 가격 경쟁력 강화

- (수소 생산·소비 확대) 중국은 세계 최대 수준의 수소 생산·소비 규모 유지중이며 NEA에 따르면 2024년 기준 수소 생산·소비량은 3,650만 톤 초과
- (전해조 제조규모 확대) 중국은 알칼라인 전해조 중심 제조규모 확대와 저가 전해조 공급을 기반으로 글로벌 가격 경쟁 주도
  - 전해조 제조능력 기준 글로벌 약 60% 점유 및 LONGi, Sinopec 등 주요 기업들이 대규모 제조능력 구축
- (저가 공급 기반 시장 확대) 중국산 전해조 자본비는 비중국권 대비 낮은 수준을 유지하며 글로벌 수전해 프로젝트 확대와 가격 경쟁력 강화에 영향
- (전기화학 산업 및 CO<sub>2</sub> 전환 확대) 양이온 교환막 전해조(AEM) 중심 핵심기술 자립화와 전기화학 산업 확대
  - 중국은 국가 전략 차원에서 CO<sub>2</sub> 포집·활용(CCU) 기술개발 및 실증사업 확대를 추진하고 있으며 전기화학 기반 CO<sub>2</sub> 전환 기술 연구개발과 파일럿 규모 실증 확대 병행 추진

## 3 유럽

### 고효율 전해조·핵심 소재 중심 산업 확대

유럽은 저배출 수소 실증과 고효율 전해조, 핵심 소재·부품 중심 산업 생태계 확대

- (e-연료 생산 실증 확대) EU는 European Hydrogen Bank 기반 GW급 저배출 수소 프로젝트 확대와 함께 덴마크 Topsoe 중심 55MW SOEC 기반 연 4만 톤 규모 e-메탄올 생산 및 EPC·장기 서비스 보증 모델 운영 확대
- (플로우 플레이트 공급모델 운영) 스웨덴 Cell Impact는 DFM 설계·툴링·생산장비·현지 생산 라이선스를 결합한 공급모델 운영

- ◎ (귀금속 촉매 수급 이슈 부각) 영국 Johnson Matthey는 PEM 수전해 확대에 따른 이리듐 수요 증가 전망
  - 현재 기술 기준 PEM 수전해 1GW당 약 400kg 수준 이리듐이 필요하며 공급의 최대 95%가 남아프리카공화국·짐바브웨 백금 부산물에 의존
- ◎ (비귀금속 기반 수전해 기술 확대) 독일 Enapter는 티타늄-이리듐 없이 35bar·99.9% 순도 수소 생산이 가능한 음이온 교환막 수전해 시스템 제시

## 4 일본

### 고효율 SOEC· 장기 실증 중심 산업 확대

일본은 고온 고체산화물 수전해(SOEC) 기술개발과 장기 실증사업 중심 수소산업 생태계 구축

- ◎ (SOEC 기술 중심 산업 확대) 일본 기업들은 고효율 SOEC 시스템 개발 및 상용화 추진
  - Toshiba는 SOEC 기반 수소 생산 시스템 개발 및 실증사업 확대 중이며 Mitsubishi Power는 고온 SOEC 기술개발과 재생에너지 연계 수소 생산 시스템 구축
- ◎ (장기 실증사업 운영) NEDO 그린이노베이션 기금 기반 장기 실증사업 중심 수소 생산·저장·활용 통합 체계 구축
  - 수소사회 구축을 위한 10년 단위 장기 실증사업 추진하여 수소 공급망·저장·운송 기술 실증 확대
- ◎ (수소사회 기반 산업 생태계 조성) 일본 정부와 산업계는 수소사회추진법 기반 수소 인프라·활용·인증체계 확대를 통한 장기 수소산업 생태계 구축 추진

### 3. 기술개발 동향

#### 글로벌 전기화학 촉매 기술개발 동향

전기화학 기반 탄소전환·수소 생산 기술은 반응 선택도·촉매 성능·시스템 효율 향상 중심의 전기화학 기술 고도화와 계산과학·AI 기반 설계 자동화 중심으로 발전

- ◎ (전기화학 기술 고도화) CO<sub>2</sub>RR 다탄소 생성물 선택도 향상 과 비귀금속 기반 OER·ORR 촉매 개발 및 고효율 SOEC·AEM 전해조 기술 확대 등 실험 기반 전기화학 반응·촉매·시스템 기술 고도화 추진
- ◎ (계산·AI 기반 설계 체계 전환) DFT·MLIP 기반 계산 가속화 와 생성형 AI 기반 촉매 역설계와 자율실험·LLM 기반 연구 자동화 등 계산과학·AI 기술을 활용한 촉매 설계 및 연구개발 체계 전환 가속화
- ◎ (기술 융합 심화) 전기화학 실험 기술과 계산과학·AI 기술이 계산·실험 연계형 통합 연구체계로 융합되며 촉매 탐색·검증 속도 및 연구생산성 향상

#### CO<sub>2</sub>RR·수전해 반응 고도화

전기화학 기반 탄소전환 및 수소 생산 분야에서는 반응 선택도·에너지 효율·생성물 제어 향상을 위한 촉매·계면 기반 반응 고도화 연구 확대

- ◎ (CO<sub>2</sub>RR 선택도 향상 연구 확대) 전기화학적 이산화탄소 환원반응에서는 다탄소(C<sub>2</sub>+) 생성물 선택도 향상을 위한 촉매 구조·반응 경로 제어 연구 진행  
- Cu 기반 촉매의 결정면·결함·산소공공(Oxygen vacancy) 제어를 통한 에틸렌·에탄올 생성 선택도 향상 연구
- ◎ (전극-전해질 계면 제어 확대) 전기이중층(EDL<sup>6</sup>)과 이온 전달 특성 제어 기반 반응 중간체 안정화 및 HER 경쟁반응 억제 연구 강화
- ◎ (고전류밀도 수전해 기술 확대) 고전류밀도 환경에서 에너지 효율과 내구성을 확보하기 위한 수전해 시스템 및 전극 구조 고도화
- ◎ (대체 산화 반응 기반 시스템 확대) 요소·질산염·메탄올 산화 반응 기반 저전압 구동형 전기화학 시스템 연구 본격화

#### 비귀금속·고내구성 촉매 기술 확대

귀금속 의존도 저감과 장시간 운전 안정성 확보를 위한 비귀금속 기반 촉매 및 고내구성 전극 기술 확대

- ◎ (비귀금속 촉매 개발 확대) Fe·Ni·Co 기반 전이금속 촉매 연구에서는 전자구조·활성점 제어를 통한 OER·ORR 활성 향상과 비귀금속 기반 산소 발생·환원 촉매 개발
- ◎ (단원자 촉매 연구 확대) 단원자 촉매(Single Atom Catalyst, SAC) 기반 활성점 활용 극대화 및 귀금속 사용량 저감 연구 활성화
- ◎ (촉매 내구성 향상 연구 확대) 촉매 표면 재구성·용출·응집 억제를 위한 계면 안정화 및 보호층 설계 연구 강화

6) Electric Double Layer

- ◎ (전극 구조 최적화 확대) 기공 구조-물질 전달가스 확산 특성 최적화를 통한 고효율 전극 구조 설계 기술 고도화

## 고효율 전해조 및 시스템 기술 확대

전력 효율과 수소 생산성을 동시에 향상시키기 위한 차세대 전해조 및 전기화학 시스템 기술 전환

- ◎ (SOEC 기반 고효율 수전해 확대) 고체산화물 수전해(SOEC)는 고온 반응 기반 고효율 수소 생산기술로 적용 범위 확장
  - 폐열 활용 기반 전력 소비 저감 및 e-Fuel-e-메탄올 연계 기술
- ◎ (AEM 수전해 기술 확대) 음이온 교환막(AEM) 기반 수전해는 비귀금속 촉매 적용 가능성과 시스템 비용 절감 측면에서 기술 성능 개선 지속
- ◎ (고전류밀도·대면적 시스템 확대) MW~GW급 상용 시스템 대응을 위한 대면적 전극 및 고전류밀도 운전 확보
- ◎ (모듈형 전해조 시스템 확대) 재생에너지 연계형 모듈형 전해조와 분산형 수소 생산 시스템 적용 범위 확대

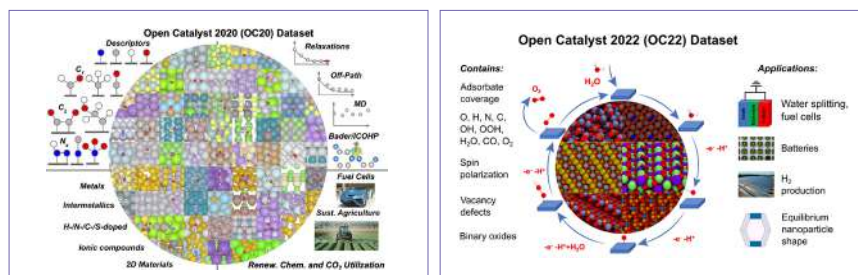
## 계산과학 기반 촉매 설계 체계 진화

전기화학 촉매 연구에서는 반응 메커니즘 해석과 촉매 탐색 효율 향상을 위한 계산과학 기반 설계 기술 활용 심화

- ◎ (DFT 기반 전자구조 해석 고도화) 제1원리 계산(DFT) 기반 촉매 활성점·흡착 자유에너지·반응 경로 해석 연구 정교화
  - d-band 중심·흡착에너지·활성화 장벽 기반 생성물 선택도 예측 연구 수행

### [그림 II-4]

다양한 촉매 표면과 흡착 구조를 포함하는 대규모 DFT 기반 데이터셋



자료: (좌)L. Chanussot et al., "Open Catalyst 2020 (OC20) Dataset and Community Challenges," ACS Catal., vol. 11, no. 10, pp. 6059-6072, 2021. (우) R. Tran 외, "The Open Catalyst 2022 (OC22) Dataset and Challenges for Oxide Electrocatalysts", ACS Catal. vol. 13, no. 5, pp. 3066-3084, 2023.

- ◎ (분자동역학 기반 계면 해석 심화) MD-AIMD 기반 전극-전해질 계면 구조 변화와 용매 효과 해석 연구 활성화
- ◎ (MLIP 기반 계산 가속 구현) 범용 MLIP(universal MLIP)는 DFT 수준 정확도를 유지하면서 계산 비용 절감과 대규모 원자 수준 시뮬레이션 수행 가능성 확보
- ◎ (고처리량 스크리닝 적용 확대) 계산 기반 고속 스크리닝을 활용한 도펀트·합금 조성-산소공공 기반 촉매 후보군 탐색 수행 확대

|그림 II-5|

MatBench Discovery  
머신러닝 원자간 포텐셜 (MLIP) 모델  
성능 평가 결과

Model	CPS ↑	Acc	F1	DAF	Prec	MAE	R <sup>2</sup>	K <sub>SRME</sub>	RMSD	Training Set
EquiformerV3+DeNS-OAM	0.902	0.978	0.931	6.074	0.928	0.018	0.868	0.118	0.059	6.6M (113M) OMat24+MPtrj+Alex
PET-OAM-XL	0.898	0.977	0.924	6.075	0.929	0.019	0.864	0.119	0.060	6.6M (113M) OMat24+sAlex+MPtrj
TACE-OAM-L	0.889	0.972	0.910	5.898	0.902	0.020	0.868	0.126	0.061	6.6M (113M) OMat24+sAlex+MPtrj
eSEN-30M-OAM	0.888	0.977	0.925	6.069	0.928	0.018	0.866	0.170	0.061	6.6M (113M) OMat24+MPtrj+sAlex
EquiFlash	0.888	0.975	0.919	5.983	0.915	0.019	0.871	0.158	0.060	6.6M (113M) OMat24+MPtrj+sAlex
Nequip-OAM-XL	0.886	0.971	0.906	5.869	0.897	0.020	0.872	0.125	0.063	6.6M (113M) OMat24+sAlex+MPtrj
MatRIS-10M-OAM	0.877	0.976	0.921	6.039	0.923	0.019	0.871	0.218	0.060	6.6M (113M) OMat24+sAlex+MPtrj
SevenNet-Omni-i12	0.873	0.971	0.906	5.954	0.910	0.021	0.868	0.192	0.062	243M COSMOSDataset
Nequip-OAM-L	0.870	0.967	0.893	5.823	0.890	0.022	0.865	0.166	0.065	6.6M (113M) OMat24+sAlex+MPtrj
GRACE-2L-OAM-L	0.865	0.964	0.883	5.840	0.893	0.022	0.862	0.169	0.064	6.6M (113M) OMat24+sAlex+MPtrj
ORB v3	0.860	0.971	0.905	5.912	0.904	0.024	0.821	0.210	0.075	6.47M (133M) MPtrj+Alex+OMat24
Allegro-OAM-L	0.840	0.966	0.895	5.674	0.867	0.022	0.868	0.319	0.065	6.6M (113M) OMat24+sAlex+MPtrj
GRACE-2L-OAM	0.837	0.963	0.880	5.774	0.883	0.023	0.862	0.294	0.067	6.6M (113M) OMat24+sAlex+MPtrj
EquiformerV3+DeNS-MP	0.830	0.956	0.863	5.479	0.838	0.029	0.840	0.275	0.070	146k (1.58M) MPtrj
DPA-3.1-3M-FT	0.802	0.963	0.884	5.667	0.866	0.023	0.869	0.469	0.069	163M OpenLAM
eSEN-30M-MP	0.797	0.946	0.831	5.260	0.804	0.033	0.822	0.340	0.075	146k (1.58M) MPtrj
MACE-MPA-0	0.795	0.954	0.852	5.582	0.853	0.028	0.842	0.412	0.073	3.37M (12M) MPtrj+Alex

자료: Matbench Discovery Leaderboard (matbench-discovery.materialsproject.org).

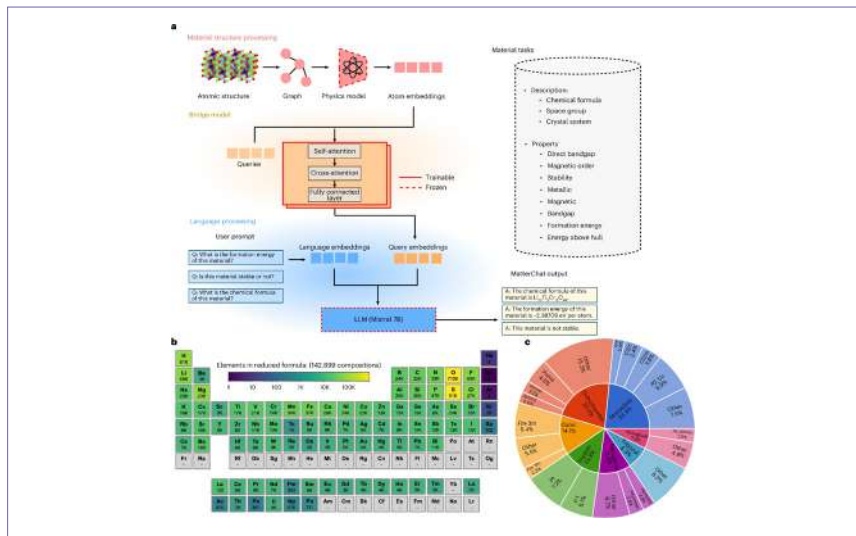
## AI·자동화 기반 연구개발 체계 전환

생성형 AI·자율실험·LLM 기반 자동화 기술과 결합된 데이터 기반 전기화학 촉매 연구개발 체계 전환 가속화

- (생성형 AI 기반 촉매 역설계 적용) VAE<sup>7)</sup>·GAN<sup>8)</sup>·Diffusion model 기반 신규 촉매 구조·조성 역설계(Inverse design) 연구 활성화
- (자율실험 기반 연구 자동화) 로봇 기반 합성·측정·데이터 분석을 연계한 자율실험 (Self-driving Lab) 기반 연구 자동화 구현
- (LLM 기반 연구자동화 고도화) 대규모 언어모델(LLM)을 활용한 계산 조건 생성·논문 분석·촉매 특성 예측 기술 활용 확대
- (데이터 기반 연구생태계 구축) 공개 데이터셋·HPC·오픈소스 플랫폼 기반 계산·실험 연계형 연구환경 구축 확대

|그림 II-6|

멀티모달 LLM 기반  
계산과학 최신 연구 예시



자료: Y. Tang 외, "A multimodal large language model for materials science", Nat. Mach. Intell. vol. 8, pp. 588-601, 2026.

7) Variational Autoencoder  
8) Generative Adversarial Network

## 4. 국제협력 동향

### 양자·다자 공동연구

전기화학 촉매 연구는 양자·다자협력과 공공 플랫폼·민간 클라우드 기반 계산·실험 연계형 국제공동연구 생태계로 발전하고 있으며 주요국은 수소·전기화학·계산과학 분야 공동연구·인프라 공유·정책 연계 확대 추진

- (미국-EU 공동연구 협력 확대) 미국과 EU는 청정수소·전기화학 시스템 분야 공동연구와 HPC 인프라 협력 확대
- (EU-일본 디지털·에너지 파트너십 강화) EU와 일본은 디지털 파트너십과 그린 전환 공동선언 기반 HPC·AI·수소 분야 협력 확대
- (한국-일본 전기화학 공동연구 확대) 한국과 일본은 SOEC·수전해·전기화학 촉매 분야 연구기관 간 공동연구 확대
  - 한국 KIST, UNIST와 일본 AIST, RIKEN 간 SOEC 기술·전기화학 촉매 공동연구 추진하여 한·일 양국 연구자 교류 및 HPC 공동활용 기반 계산과학 협력 확대
- (국제기구 기반 다자협력 확대) IEA, Mission Innovation 등 국제기구는 수소·전기화학 분야 다자협력 플랫폼 운영
  - IEA Hydrogen TCP는 39개국 참여 기반 수소 기술개발·정책 협력을 추진하며 글로벌 수소 연구협력 네트워크 운영
  - Mission Innovation Hydrogen Mission과 CEM Clean Energy Ministerial은 청정수소 생산비용 절감, 청정에너지 기술협력 및 정책 대화 기반 국제협력 추진

【표 II-3】 미국-EU 청정에너지·전기화학 촉매 분야 국제협력 현황

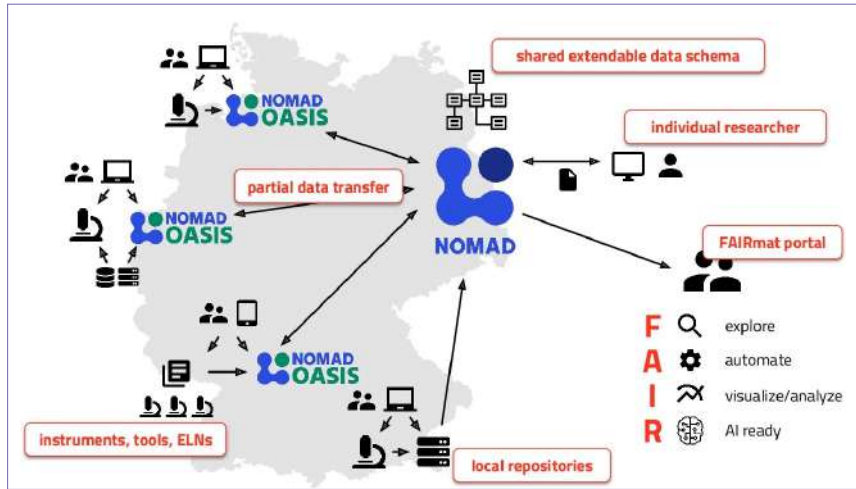
구분	주요 협력 주체	주요 내용	협력 분야
국제 공동연구	• 미국 에너지부(DOE), 유럽연합집행위원회(EC)	• Clean Hydrogen Partnership 기반 수전해·연료전지·CO <sub>2</sub> 전환 공동연구 추진	• 청정수소·전기화학
HPC 기반 연구협력	• 오크리지 국립연구소(ORNL), 아르곤 국립연구소(ANL), 로렌스버클리국립연구소(LBNL) • EU 연구기관	• HPC 공동활용 기반 전기화학 촉매 계산과학 협력 추진	• HPC·촉매 계산과학
정책·표준 협력	• 미국-EU무역기술위원회(TTC)	• 청정에너지·AI·표준화 분야 협력체계 운영	• 청정에너지·AI·표준화

### 공공 인프라·HPC 기반 협력 확대

Materials Project, NOMAD 등 공공 데이터 플랫폼과 EuroHPC 등 대형 HPC 인프라 공동활용 기반 개방형 국제공동연구 체계 확대

- (공공 인프라 기반 협력 확대) Materials Project·NOMAD 등 공공 데이터 플랫폼의 분산형 데이터 공유 체계 및 EuroHPC 등 대형 HPC 인프라 공동활용을 통한 개방형 국제공동연구 협력 기반 확대

[그림 II-기]  
NOMAD 분산형  
데이터 인프라 아키텍처



자료: Scheidgen, M. et al., "NOMAD: A distributed web-based platform for managing materials science research data," Journal of Open Source Software, 8(90), 5388, 2023.

- (HPC·초고속 네트워크 기반 공동연구 확대) 대형 슈퍼컴퓨팅 인프라와 연구 네트워크 공동활용을 기반으로 계산과학 중심 국제 공동연구 확대
  - EuroHPC는 JUPITER·LUMI·Leonardo 등 엑사스케일급 슈퍼컴퓨터 공동 활용과 GÉANT 초고속 연구 네트워크 연계를 통해 계산자원 공유, 대규모 데이터 이동 및 국제 공동연구 지원 강화
  - 미국 DOE는 Frontier·Aurora·NERSC-10 등 국립연구소 HPC 인프라를 국제협력 연구 프로젝트에 개방하여 전기화학·촉매·재료 분야 공동연구 지원
- (HPC 기반 연구생태계 협력) LUMI 기반 수전해·CO<sub>2</sub>RR 촉매 MLIP 학습 및 대규모 스크리닝 연구 확대 등 공공 인프라 기반 연구생태계 협력 확대

## 빅테크·민간 클라우드 기반 협력 확대

글로벌 빅테크 기업은 AI 모델·데이터셋·클라우드 인프라를 기반으로 개방형 계산과학 국제협력 환경 구축

- (빅테크 기반 전기화학 촉매 연구 플랫폼 확대) Meta, Google, Microsoft 등은 AI-클라우드 기반 전기화학 촉매 연구 플랫폼 구축 및 국제공동연구 지원 확대
  - Meta AI는 Open Catalyst Project를 통해 CO<sub>2</sub>RR·수전해 촉매 데이터셋·MLIP 모델·학습 코드를 공개하며 글로벌 연구자 대상 계산 인프라 지원
  - Google DeepMind와 Microsoft는 GNoME 기반 신규 재료 예측 데이터와 Azure Quantum Elements 기반 AI·양자화학 연구환경을 제공하며 촉매·전극 소재 탐색 국제협력 지원
- (공통 벤치마크 기반 협력 확대) 글로벌 연구자 간 동일 기준 기반 성능 검증과 모델 비교를 위한 공통 평가체계 확대

- Matbench Discovery는 빅테크·학계·스타트업 MLIP 모델의 성능을 동일 기준으로 비교·검증할 수 있는 공통 벤치마크 환경을 제공하며 모델 재현성과 협력 효율성 강화
- Open Catalyst Challenge는 CO<sub>2</sub>RR 촉매 활성 예측 성능 경쟁 기반 글로벌 연구자 간 협력과 전기화학 촉매 AI 기술 발전 촉진

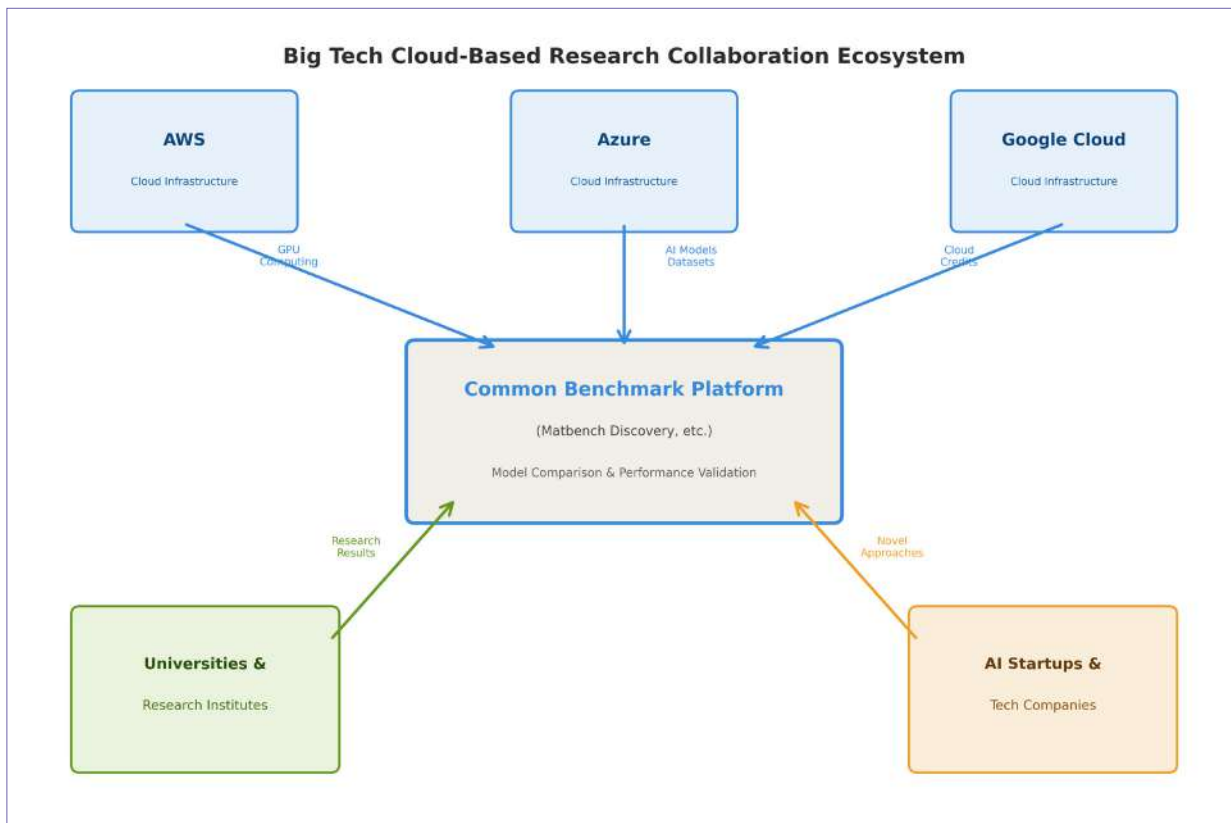
◎ (클라우드 기반 계산협력 확대) 민간 클라우드 기반 계산환경이 국가 HPC를 보완하는 국제공동연구 인프라로 전환

- AWS·Azure·Google Cloud 등은 연구용 GPU·대규모 모델 학습환경·클라우드 크레딧을 제공하며 국가 슈퍼컴퓨터 접근이 제한적인 연구자 대상 협력 기반 강화

◎ (양자컴퓨팅 기반 차세대 협력 확대) 양자컴퓨팅과 AI를 결합한 하이브리드 계산 기반 국제협력 확대

- Microsoft·Quantinuum·PNNL 등은 양자컴퓨팅 기반 촉매 반응 및 복잡 화학 시스템 해석 연구를 추진하며 차세대 계산과학 협력체계 고도화

[그림 II-8] 빅테크 클라우드 기반 계산과학 국제협력 생태계





# 국내 동향

## 1. 정책 동향

### 전기화학 기반 탈탄소 촉매 정책 강화

정부는 탄소중립·수소경제 정책 기반과 기후환경 R&D 투자·계산과학 연구혁신을 연계하여 전기화학 촉매 기술의 정책적 기반 강화

- (탄소중립 이행 기반 강화) 「탄소중립·녹색성장 국가전략」(2023)을 중심으로 산업·에너지 부문의 탄소배출 감축과 저탄소 공정 전환 정책 추진
- (수소경제 생태계 조성) 「수소경제 육성법」(2020)을 기반으로 수소 생산·저장·운송·활용 전주기 산업 생태계 구축
- (청정수소 시장 제도화) 「청정수소 인증제도」(2024)를 기반으로 청정수소 생산·유통·활용에 대한 인증 및 정책지원 체계 운영 강화
- (기후·환경 연구개발 투자 확대) 정부는 「기후·환경 연구개발사업 추진계획」(2026)을 중심으로 CCU·청정수소·탄소자원화 분야 연구개발 투자 확대
- (계산과학 기반 연구혁신 확대) 정부는 데이터·AI·HPC·양자시뮬레이터를 활용한 디지털 연구혁신 체계와 계산과학 기반 연구지원 체계 고도화

표 III-1 | 주요 정책·전략 현황

정책·전략	주요 내용
기후·환경 연구개발사업 추진계획(2026)	CCU·청정수소 분야 투자 확대
청정수소 인증제도(2024)	청정수소 인증 및 정책 지원체계 운영
탄소중립·녹색성장 국가전략 및 제1차 국가 기본계획(2023)	2050 탄소중립 및 2030 NDC 이행
수소경제 육성 및 수소 안전관리에 관한 법률(2020)	수소경제 기반 조성 및 산업 생태계 구축
계산과학 기반 연구혁신 정책	AI·HPC 기반 디지털 연구개발 체계 확대

### 탄소중립 이행 기반 강화

정부는 「탄소중립·녹색성장 국가전략 및 제1차 국가 기본계획」을 중심으로 산업·에너지 부문의 탄소배출 감축과 저탄소 공정 전환 정책 추진

- (탄소중립 국가전략 추진) 2050 탄소중립과 2030 국가온실가스감축목표(NDC) 달성을 위한 국가 차원의 중장기 전략체계 구축
  - 제조·에너지 산업의 저탄소 공정 전환과 CCU·청정수소 등 탄소저감 기술개발 확대 추진
- (산업 탈탄소 공정 전환 확대) 화석연료 기반 공정의 한계를 보완하기 위한 전기화학 기반 탈탄소 기술 적용 확대
  - CO<sub>2</sub> 전환, 수전해, 연료전지 등 전기화학 기반 공정 기술을 산업 탈탄소 핵심 기술로 육성 추진

## 수소경제 생태계 조성

정부는 「수소경제 육성 및 수소 안전관리에 관한 법률」을 기반으로 수소 생산·저장·운송·활용 전주기 산업 생태계 구축

- ◎ (청정수소 생산기반 확대) 수전해 기반 청정수소 생산과 저장·운송 기술 확보 중심 정책 확대
  - 수소 생산 효율 향상과 시스템 경제성 확보를 위한 고효율·고내구 촉매 기술개발 확보
- ◎ (수소 활용 산업 확산) 연료전지·모빌리티·발전 등 수소 활용 산업 중심 생태계 고도화
  - 연료전지 기반 전력 변환 효율 향상과 시스템 안정성 확보를 위한 전기화학 촉매 기술 수요 증가

## 청정수소 시장 제도화

정부는 「청정수소 인증제도」를 기반으로 청정수소 생산·유통·활용에 대한 인증 및 정책지원 체계 운영 강화

- ◎ (청정수소 인증체계 구축) 수소 생산과정의 탄소배출량 기준 기반 청정수소 인증제도 운영 마련
  - 저탄소 수소 생산 확대와 연계하여 수전해·촉매 기반 청정수소 기술 중요성 확대
- ◎ (정책지원 및 시장 활성화 확대) 청정수소 활용 확대를 위한 정책지원 및 산업 생태계 조성 추진
  - 청정수소 공급 안정성과 가격 경쟁력 확보를 위한 고효율 촉매·시스템 기술개발 필요성 증가

## 기후·환경 연구개발 투자 확대

정부는 「기후·환경 연구개발사업 추진계획」을 중심으로 CCU·청정수소·탄소자원화 분야 연구개발 투자 확대 추진

- ◎ (CCU·청정수소 핵심기술 투자 확대) 탄소포집활용(CCU)과 청정수소 생산 분야 중심 국가 연구개발 투자 강화
  - 전기화학 기반 CO<sub>2</sub> 환원 및 수전해 기술을 탄소중립 핵심기술로 육성
- ◎ (차세대 촉매·소재 연구 확대) 고효율·저비용 탈탄소 공정 구현을 위한 촉매·소재 기술개발 확대
  - 비귀금속 기반 고효율 촉매, 장수명 전극 소재 및 계면 제어 기술 연구개발 지원 강화

## 계산과학 기반 연구혁신 확대

정부는 데이터·AI·초고성능컴퓨팅(HPC)·양자시뮬레이터를 활용한 디지털 연구 혁신 체계와 계산과학 기반 연구지원 체계 고도화

- ◎ (디지털 연구환경 및 계산과학 기반 조성) 국가 초고성능컴퓨팅 인프라와 전문 지원체계를 기반으로 계산과학 활용 분야를 소재·에너지·바이오 등으로 확대
  - 국가 초고성능컴퓨팅 육성 기본계획, KISTI 슈퍼컴퓨팅 활용 지원, HPC 전문센터 운영 등을 통해 대규모 계산·시뮬레이션 기반 연구환경 구축 지원

표 Ⅲ-2 | 국내 계산과학의 발전 변천 과정

정책 전략	주요 내용
80~90년대	<ul style="list-style-type: none"> <li>정부 및 민간 주도의 국산 서버 개발을 위한 대규모 프로젝트 시도되었으나 지속적 투자 실패</li> <li>90년대 이후 국가 차원의 일원화된 정책 및 개발 주체 없이 산발적·소규모 연구 진행</li> </ul>
2000년대	<ul style="list-style-type: none"> <li>1999년 한국고등과학원 계산과학 비학위 전문 과정, 2004년 서울대 계산과학 학위과정 개설 등으로 학문으로서 관심이 확대</li> <li>제 18대 국회 발의문은 의학연구, 재난 방지 등 초고성능컴퓨팅의 활용 가능성을 제기하고, 자원 배분, 인력 양성 등 초고성능컴퓨팅 육성에 있어 국가의 역할 제기</li> </ul>
2011~2016년 (제도화)	<ul style="list-style-type: none"> <li>국가 초고성능컴퓨터 활용 및 육성에 관한 법률 (2011) 제정</li> <li>국가초고성능컴퓨팅 육성 기본계획 (2013 ~ 2017) 수립</li> <li>연구개발 부문에서 과학기술분야 일부 출연연에 한정되었던 연구수행을 국가센터사업으로 확대</li> <li>KISTI는 한국원자력연구원, 한국화학연구원 등 정부출연(연)을 중심으로 특화 연구 분야에 대한 업무협약을 통해 계산자원 활용사업 추진</li> </ul>
2017~2022년 (활용확산)	<ul style="list-style-type: none"> <li>슈퍼컴퓨터 5호기(누리온, 25.7PF급)를 중심으로 계산과학 활용이 기초과학을 넘어 소재, 에너지, 제조, 바이오 등으로 확산</li> <li>2019년 데이터관리계획(DMP) 시행과 함께 국가연구개발사업의 연구데이터 개방·공유 요구가 강화</li> </ul>
2023~2026년 (AI 기반 고도화)	<ul style="list-style-type: none"> <li>10대 전략분야별 전문센터 운영, 맞춤형 활용 지원, HPC 전문인력 양성, 산업계 활용 활성화가 정책 목표로 명문화</li> <li>국가 슈퍼컴퓨터 6호기 구축 본격화 및 양자시뮬레이터 개발</li> <li>과기정통부는 2026년 'AI 기반 대학 과학기술 혁신사업'과 AI+S&amp;T 계열 사업을 통해 과학기술 연구 자체를 AI 기반으로 전환하는 정책을 본격화</li> </ul>

- ⦿ (연구데이터 구축 및 개방 확대) 소재·축매 연구데이터의 생산·축적·공유 기반을 강화하여 데이터·AI 기반 연구 생태계 조성

그림 Ⅲ-1 | K-MDS 데이터 통계 자료



- ◎ (AI-HPC·양자시뮬레이터 기반 연구지원 강화) AI 모델, 고성능 계산자원, 양자 시뮬레이터를 연계하여 촉매·소재 설계와 실험 분석의 연구 효율성 제고

| 표 III-3 | 양자 시뮬레이터 개발 사업

정책·전략	주요 내용		
중점 추진방향	• (분자 열역학 양자시뮬레이터) 분자의 열역학 특성을 계산하기 위한 양자알고리즘 개발 및 분자의 열역학 특성 계산을 위한 양자시뮬레이터 하드웨어 개발		
	• (분자 동역학 양자시뮬레이터) 분자동역학을 모사하는 양자알고리즘개발 및 분자동역학을 모사하는 양자시뮬레이터 하드웨어 개발		
	• (양자시뮬레이터 수소 적용 등) 수소생산 촉매 후보물질 발굴 및 액상 유기 수소 운반체(LOHC) 개발, 사업 관리 등		
투자계획	구분	'23년 예산	'24년 예산
	사업: (혁신도전형) 소재 혁신 양자시뮬레이터 개발	7,600	9,300

## 2. 시장·산업 동향

### 청정수소·CO<sub>2</sub> 전환·계산과학 중심 시장 확대

국내 전기화학 촉매 시장은 청정수소 생산 중심 대규모 투자 확대, CO<sub>2</sub> 전환 초기 시장 형성, AI·계산과학 기반 촉매 설계 산업화가 동시 진행

- ◎ (청정수소 시장 본격 확대) 300여 개 기업 참여, 50조 원 규모 투자 기반 생산·저장·운송·활용 전주기 밸류체인 중심 청정수소 시장 본격 성장
- ◎ (CO<sub>2</sub> 전환 시장 초기 진입) 대기업 실증·파일럿과 출연연·대학 기술 실증 중심 전기화학 기반 CO<sub>2</sub> 전환 초기 시장 형성 진행
- ◎ (계산과학 기반 촉매 산업화 확대) AI·DFT 기반 촉매 설계·탐색 기술의 산학 협력 기반 산업 적용과 촉매 개발 주기 단축 가속화

| 표 III-4 | 국내 전기화학 촉매 시장 현황

구분	시장현황	주요 기업·주체	전망
수소	50조 원 투자	현대차·SK·포스코	2030년 390만 톤 2050년 2,790만 톤
CO <sub>2</sub> 전환	초기 단계	SK·LG·서울대·UNIST	초기 시장 진입
계산과학 촉매 설계	산업 적용 확대	KIST·KAIST+기업	산업 적용 확대

### 청정수소 중심 시장 확대

국내 수소 시장은 청정수소 전환과 대기업 중심 투자 확대를 기반으로 생산·저장·운송·활용 전주기 산업 생태계 중심으로 성장

- ◎ (수소 산업 생태계 성장) 국내 수소 산업은 생산·저장·운송·활용 중심 전주기 밸류체인 형성과 함께 기업 참여 확대
  - 약 300여 개 기업 참여, 약 50조 원 규모 투자, 2030년 390만 톤·2050년 2,790만 톤 수소 수요 전망
- ◎ (수소 활용 시장 성장) 국내 수소 시장은 연료전지 발전과 액화수소 인프라 중심 활용 시장 성장세 지속
  - 글로벌 수소 생산 시장은 2020~2025년 연평균 9.7% 성장과 약 1,500억 달러 규모 전망
- ◎ (청정수소 중심 시장 구조 전환) 국내 수소 시장은 회색수소 중심 구조에서 청정수소 중심 구조로 전환 진행
  - 현재 회색수소 95%·청색수소 4%·녹색수소 1% 수준이며 2050년 청정수소 비중 78% 전망

|그림 III-2|

수소 생산·저장·운송·활용  
전주기 밸류체인 구조



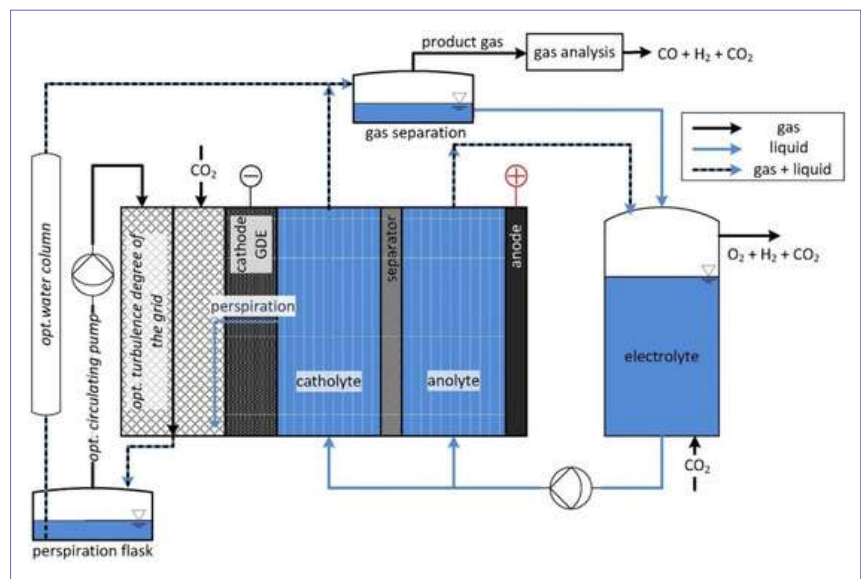
## 이산화탄소 전환 및 계산과학 기반 촉매 산업 확대

국내 이산화탄소 전환 산업은 출연연대학 중심 원천기술과 AI·계산과학 기반 촉매 설계 기술을 중심으로 초기 시장 형성 단계 진입

- ◎ (이산화탄소 전환 산업 확대) 국내 기업은 전기화학 기반 이산화탄소 전환 기술 실증과 파일럿 사업 확대
  - SK이노베이션·LG화학 중심 전기화학 기반 이산화탄소 전환 기술 실증 진행
- ◎ (대학·출연연 기반 기술 실증 확대) 대학·출연연은 전기화학 촉매 및 저전력 이산화탄소 전환 기술 실증과 상용화 연계 연구 확대
  - 서울대는 이산화탄소→에틸렌 전환 촉매 연구를 수행하고 UNIST는 초저전압 기반 이산화탄소→포름산 전환 시스템 개발 진행

|그림 III-3|

전기화학 기반 이산화탄소 전환  
반응기 시스템 구조도



자료: Endródi, B. et al., "Continuous-flow electroreduction of carbon dioxide in a gas diffusion electrode flow cell," Progress in Energy, 2(2), 022003, 2020. <https://doi.org/10.1088/2516-1083/ab51fb>

- ◎ (AI·계산과학 기반 촉매 산업 확대) KIST·KAIST는 AI·계산과학 기반 촉매 설계와 소재 탐색 기술의 산업 적용 확대
  - AI 기반 소재 역설계와 계산 가속화 기술을 활용한 촉매 개발 연구 진행
- ◎ (산학 협력 기반 촉매 개발 확대) KIST·KAIST·기업은 DFT 계산·AI 예측·실험 검증 연계형 촉매 개발 협력체계 구축 확대
  - 촉매 개발·기술 이전·상용화 주기 단축 중심 산업 생태계 형성 진행

### 3. 기술개발 동향

#### 계산과학 기반 수소·CO<sub>2</sub> 전환 촉매 기술 확대

국내 전기화학 촉매 기술개발은 수소 전환 촉매 고도화, CO<sub>2</sub> 전환 촉매 상용화, AI·기계학습 기반 촉매 설계 자동화 중심으로 발전

- (수소 전환 촉매 기술 고도화) 계산과학 기반 비귀금속 HER·OER 촉매와 AEM 수전해 시스템 개발 중심 기업·학계 연구 확대
- (CO<sub>2</sub> 전환 촉매 기술 상용화) 계산과학 기반 이원금속 촉매 설계와 선택도·안정성 향상 중심 원천기술 및 실증 연구 확대
- (AI·기계학습 기반 설계 자동화) 고처리량 스크리닝 및 범용 MLIP 개발 중심 촉매 개발 주기 단축과 연구 효율화

#### 수소 전환 촉매 기술 고도화

국내 수소 전환 촉매 기술은 계산과학 기반 비귀금속 촉매 설계와 AEM 수전해 시스템 개발 중심으로 기업 자체 R&D 및 학계 연구 확대

- (기업 중심 수소 촉매 R&D 확대) 국내 기업은 계산과학 기반 비귀금속 HER·OER 촉매 및 AEM 수전해 시스템 자체 연구개발 확대

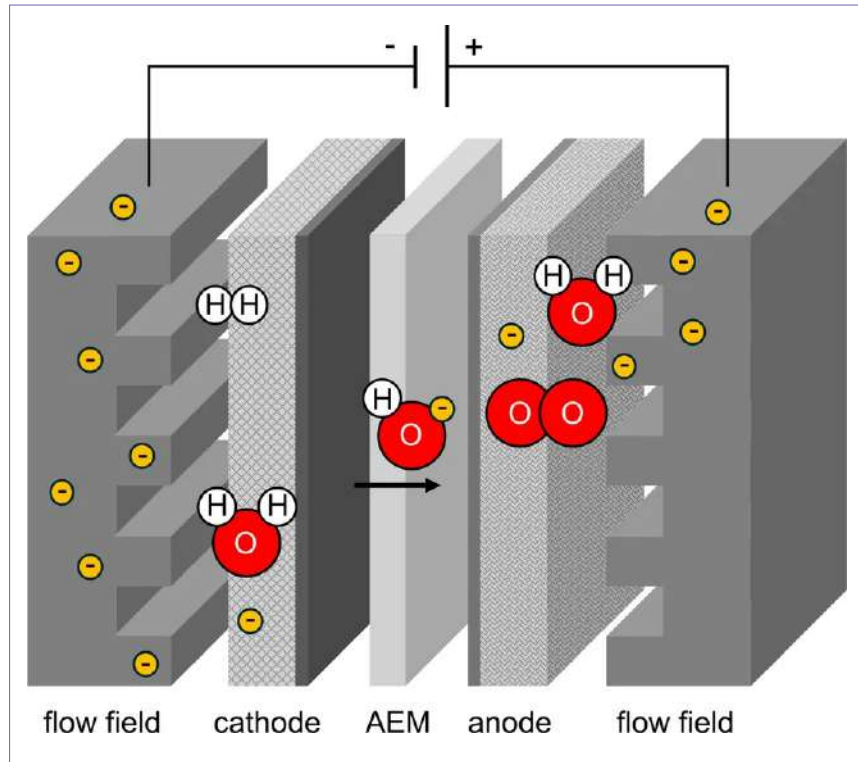
표 III-5 | 국내 기업 전기화학 촉매·수전해 기술개발 현황

구분	주요 연구내용	주요 성과·특징
HD한국조선해양	<ul style="list-style-type: none"> <li>• 학계 공동연구 기반 계산과학 활용 해수 환경용 OER·HER 촉매 연구 수행</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Pt 대체 수준 비귀금속 HER 촉매 성능·내구성 확보</li> <li>• 국내 특허 6건·해외 특허 1건 출원 및 국제학술지 게재</li> </ul>
한화솔루션	<ul style="list-style-type: none"> <li>• 수소기술연구센터 기반 음이온교환막(AEM) 수전해 시스템 및 AI 기반 데이터 중심 촉매·부품 개발 추진</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• 비백금계 촉매·MEA·BoP·셀 제작·평가 및 AI·기계학습 기반 촉매·막 설계 연구 수행</li> </ul>

- (학계 중심 수소 촉매 연구 확대) 국내 대학은 초고성능컴퓨팅 기반 단원자·이원자 촉매 설계 중심 수소 전환 촉매 연구 수행
  - 연세대·KAIST·고려대·서울대·성균관대 중심 계산과학 기반 촉매 설계 연구 확대
  - NTIS 기준 계산과학 관련 과제 약 4.6만 건과 논문 약 5.3만 건이 수행되었으며 2017년 이후 연구과제 수 증가
- (글로벌 연구 경쟁력 확보) 국내 수소 전환 촉매 연구는 계산과학 기반 단원자·이원자 촉매 설계 중심으로 글로벌 상위 연구 경쟁력 확보
  - 세계 4위 연구 경쟁력(2021~2025) 보유하며 Advanced Materials·JACS 등 국제 저명 학술지 게재

|그림 III-4|

AEM(음이온교환막)  
수전해 셀 구조 모식도



자료: Zhu, J., Hu, L., Zhao, P., Lee, L. Y. S., & Wong, K.-Y., "Recent Advances in Electrocatalytic Hydrogen Evolution Using Nanoparticles," Chemical Reviews, 122(9), 10, 2022.

## CO<sub>2</sub> 전환 촉매 기술 상용화

국내 CO<sub>2</sub> 전환 촉매 기술은 계산과학 기반 이원금속 촉매 설계와 선택도·안정성 향상 중심으로 기업 실증 및 학계 원천기술 연구 확대

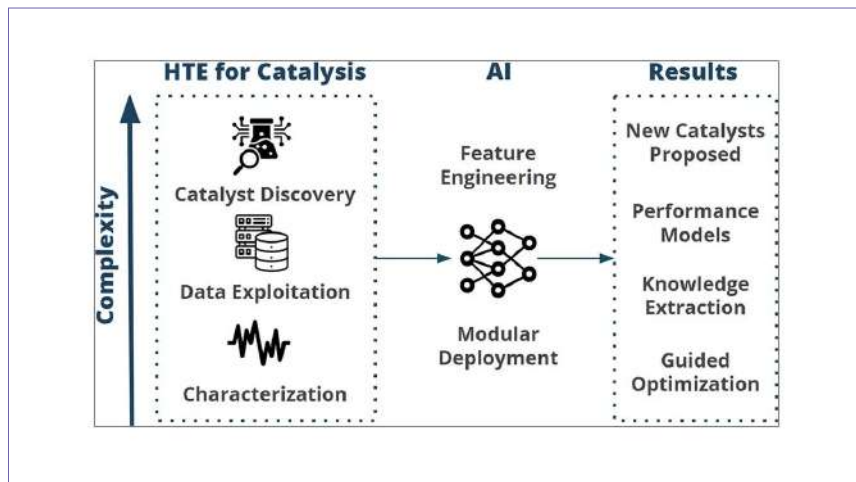
- ◎ (기업 중심 CO<sub>2</sub> 전환 기술 실증) 국내 기업은 계산과학 조직 신설과 전기화학 기반 CO<sub>2</sub> 전환 기술 실증 확대
  - 롯데케미칼은 2024년 기초·첨단 소재 산업을 위한 개별 AI 조직을 신설하고, 계산과학 기반의 물성 개선·촉매 특성 예측·반응기 설계 업무를 본격 추진
  - SK이노베이션·LG화학 중심 전기화학 기반 이산화탄소 전환 기술 실증 진행
- ◎ (학계 중심 CO<sub>2</sub> 촉매 원천기술 연구) 국내 대학과 연구기관은 계산과학 기반 이원금속 촉매 설계와 선택도·안정성 향상 중심 CO<sub>2</sub> 전환 촉매 연구 수행
  - 서울대는 이산화탄소→에틸렌 전환 촉매 연구를 수행하고 UNIST는 초저전압 기반 이산화탄소→포름산 전환 시스템 개발 진행
- ◎ (연구 성과 확대) 국내 CO<sub>2</sub> 전환 촉매 연구는 국제 학술지 중심 연구성과 발표 확대
  - NTIS 기준 관련 과제 271건·논문 65건 수행되었으며 연세대·KAIST 등을 중심으로 Advanced Materials·JACS 등 국제 학술지 연구성과 발표

## AI·기계학습 기반 촉매 설계 기술 확대

국내 AI·기계학습 기반 계산과학 기술은 고처리량 스크리닝 및 대규모 분자동역학 시뮬레이션 중심으로 기업·학계 연구 확대

- (기업 중심 AI 기반 촉매 설계 확대) 국내 기업은 AI·기계학습 조직 신설과 데이터 기반 촉매·소재 설계 연구 확대
  - 롯데케미칼과 한화솔루션은 AI·기계학습 기반 촉매 특성 예측, 반응기·막 설계 등 전기화학 소재·공정 최적화 연구 확대 추진

[그림 III-5]  
HTE-AI 통합 촉매 설계  
프레임워크



자료: Lohn, S., Holena, M., & Kruse, N., "From Characterization to Discovery: Artificial Intelligence, Machine Learning and High-Throughput Experimentation for Heterogeneous Catalysis Research," ACS Catalysis, 14(15), 11372-11403, 2024.

- (학계 중심 고처리량 스크리닝 연구 확대) 국내 대학은 AI 기반 수소·CO<sub>2</sub> 전환 촉매 설계 및 고처리량 스크리닝 연구 확대
  - KAIST·고려대·성균관대·서울대·연세대 등을 중심으로 AI 기반 수소·CO<sub>2</sub> 전환 촉매 설계 연구 확대
  - 국내 연구진은 2021~2025년 약 79건 연구 수행 및 Energy & Environmental Science, Advanced Functional Materials, Nature Communications 등 국제학술지 게재
- (범용 MLIP 개발 확대) 국내 대학은 범용 기계학습 원자간 포텐셜(MLIP) 개발 기반 대규모 분자동역학 시뮬레이션 기술 개발
  - 서울대는 범용 기계학습 원자간 포텐셜 SevenNet 기반 대규모 분자동역학 시뮬레이션 기술개발
  - 기존 그래프 신경망 포텐셜의 대규모 병렬화 한계를 극복하며 수만~수십만 원자 규모 시뮬레이션 가능성 제시

[표 III-6] NTIS 연도별 성과 추이



## 4. 국제협력 동향

### 정부·민간 주도 국제협력

정부는 주요국·국제기구 기반 공동연구 및 정책협력을 확대하고 있으며 민간은 청정수소 공급망·실증 중심 글로벌 협력체계를 강화하며 국제협력 다변화 추진

- ◎ (정부 주도 양자·다자 협력) 한-EU 녹색동반자, 한-체코 에너지기술포럼 등 양자협력과 Mission Innovation·IEA Hydrogen TCP 등 다자 플랫폼 기반 청정에너지 기술 공동연구 확대
- ◎ (민간 주도 실증·사업화 협력) 호주·미국·일본·중동 중심 청정수소 공급망·실증 프로젝트 및 국제 포럼 참여 기반 글로벌 협력 확대

표 III-기 | 국내 국제협력 현황

구분	주요 협력	내용
정부 주도	• 한-EU, 한-체코 Mission Innovation IEA Hydrogen TCP	• 양자 공동연구 다자 플랫폼 협력 • 수전해 촉매·전해조 연구·기술평가
민간 주도	• 호주·미국·일본·중동 국제 포럼	• 청정수소 공급망·실증 프로젝트 • WHE 2025 글로벌 협력 확대

### 정부 주도 국제협력 확대

정부는 EU·체코 등 주요국 및 국제기구와의 협력체계 구축과 다자 연구플랫폼 참여를 기반으로 청정수소·탄소무배출 에너지기술 분야 국제공동연구 확대

- ◎ (한-EU 연구협력 확대) 한국과 EU는 「한-EU 녹색동반자(Green Partnership)」를 기반으로 청정에너지·기후변화 대응·에너지 전환 분야 공동연구 협력 강화
  - 2025년부터 Horizon Europe Pillar II 연계를 통해 유럽 연구기관과의 컨소시엄형 공동연구 및 탄소중립 기술 협력 확대
- ◎ (한-체코 에너지기술 협력 확대) 한국과 체코는 에너지기술포럼과 정부 간 협력채널을 기반으로 청정수소·탄소무배출 기술 분야 공동연구 추진
  - MOTIE-체코 산업통상부, KETEP-TACR 협력체계를 통해 신규 공동연구 과제 발굴 및 기술협력 확대
- ◎ (다자 연구플랫폼 기반 협력 확대) 정부는 Mission Innovation 및 IEA Hydrogen TCP 등 글로벌 연구플랫폼 중심 국제협력 확대
  - Clean Hydrogen Mission, IEA Hydrogen TCP Task 45 등을 통해 재생수소 생산기술 데이터 분석, 수전해 촉매·전해조 연구 및 국제 공동기술평가 추진

## |그림 III-6|

KHNP-HYTEP  
원자력 기반 청정수소 기술개발 및  
사업협력 MOU 체결



자료: 한국수력원자력(KHNP), "KHNP, 체코 HYTEP과 청정수소 사업협력 MOU 체결,"  
보도자료, 2024년 9월 23일

## 민간 주도 국제협력 확대

국내 기업과 연구기관은 청정수소 공급망, 글로벌 수소 프로젝트, 국제 포럼 참여를  
기반으로 실증·사업화 중심 국제협력 확대

- ◎ (청정수소 공급망 및 실증협력 확대) 국내 기업은 호주·미국·일본·중동 등 주요국과 청정수소 생산·운송·실증 프로젝트 중심 협력 확대
  - 고려아연은 호주 퀸즐랜드 썬HQ 및 Arc Energy 기반 그린수소 사업을 추진하고, 삼성물산은 브리즈번 포트 기반 그린수소 프로젝트 참여 확대
- ◎ (한·미·한·일 수소시장 협력 확대) 미국 IRA 기반 청정수소 허브와 동북아 액화수소 무역 중심 협력 확대
  - 미국은 IRA 45V 세액공제와 7대 청정수소 허브 프로그램을 운영 중이며, 일본은 KHI 중심 액화수소 해상운송 실증과 동북아 청정수소 거래시장 구축 추진
- ◎ (중동 기반 청정수소·디지털 협력 확대) 중동 재생에너지 기반 청정수소 프로젝트와 AI·디지털 기반 수소산업 협력 확대
  - UAE·사우디 중심 청정수소 프로젝트에 국내 기업 참여가 확대되고 있으며, 사우디
  - 아람코와 국내 기업 간 AI·디지털 기반 수소산업 협력 추진
- ◎ (국제 포럼 및 글로벌 네트워크 확대) 국내 기업과 연구기관은 글로벌 수소 포럼과 국제 네트워크 참여를 기반으로 협력 기반 확대
  - WHE<sup>9)</sup> 2025 등 글로벌 수소 포럼에 다수 국가·기업이 참여하고 있으며, 국내 기업은 국제 포럼 연계를 통해 글로벌 수소 가치사슬 협력 강화

## |그림 III-7|

국제 수소 무역(IHTF) -  
World Hydrogen Summit 2025



9) World Hydrogen Economy

자료: World Hydrogen, World Hydrogen 2025 Summit & Exhibition, Rotterdam,  
Netherlands, May 2025.

## 1. 시사점

### 기술적 시사점

글로벌 빅테크 및 주요국은 MLIP·생성형 AI·자율실험 기반 차세대 촉매 탐색 체계로 전환 중인 반면 국내는 AMD·MLIP·멀티스케일 계산 기반 통합 설계 체계는 상대적으로 미흡한 수준

- ◎ (차세대 촉매 탐색 체계 전환 대응) 글로벌 빅테크는 대규모 공개 데이터셋·범용 MLIP·생성모델·자율실험실 기반 촉매 탐색 가속화 체계 구축 확대
- ◎ (국내 차세대 계산설계 역량 고도화) 국내는 DFT 기반 메커니즘 분석 역량은 확보하였으나 AMD·MLIP·생성형 AI 기반 차세대 계산설계 역량은 상대적으로 미흡
  - CO<sub>2</sub>RR·HER·연료전지 전반에서 계산·합성·평가 연계 기반 반복적 설계 체계 구축 필요
- ◎ (멀티스케일 기반 전기화학 반응 해석) 실제 전기화학 환경의 동적 계면 거동을 반영할 수 있는 AMD·MLIP 기반 계산 체계 확대 필요
  - 전기이중층(EDL), 양이온 효과, 계면 물의 수소결합 네트워크 등 동적 구조 변화 반영 요구
- ◎ (고처리량 탐색 및 실증 연계 강화 필요) 대규모 고처리량 탐색과 산업 규모 장시간 검증을 연계할 수 있는 차세대 촉매 검증 체계 구축 필요
  - 스케일링 관계를 넘어 피복물·전해질·계면 전기장 등 복합 인자를 반영한 설계 방법론 확대

### 정책적 시사점

전기화학 촉매 특화 계산과학 인프라·오픈 데이터 생태계·범부처 연계체계 구축 기반 차세대 계산설계 연구환경 고도화 필요

- ◎ (전기화학 촉매 특화 계산과학 인프라 확대 필요) 국가 슈퍼컴퓨터 및 AI+HPC 기반 전기화학 촉매 특화 계산 플랫폼 구축 필요
  - 초고성능컴퓨팅 인프라와 전기화학 반응계 특화 워크플로우 연계 기반 계산설계 환경 고도화 필요
- ◎ (오픈 데이터 생태계 구축 필요) 글로벌 개방형 데이터·모델 플랫폼과 연계 가능한 국내 전기화학 촉매 데이터 생태계 구축 필요
  - 촉매 조성·활성도·반응속도 등 성능 데이터를 포함한 국내 데이터베이스 확장 및 상호운용 체계 구축 필요
- ◎ (양자컴퓨팅 설계 대응) 글로벌 양자컴퓨팅 융합 흐름 대응 기반 차세대 촉매 계산설계 체계 확대
  - 수소 촉매 특화 양자시뮬레이터 및 차세대 계산 플랫폼 연계 연구 확대 필요
- ◎ (융합형 전문인력 및 범부처 연계) AI 기반 설계·데이터 기반 고처리량 탐색이 가능한 융합형 전문인력 및 범부처 협력 체계 구축
  - AI·CCU·소재 데이터·계산과학 관련 분산 사업 간 연계·조정 체계 마련

## 산업적 시사점

(산업적 시사점) 계산과학 기반 촉매 설계 성과를 파일럿 실증·상용화·소부장 국산화와 연계하는 산업 전주기 체계 구축 필요

- ◎ (계산설계 기반 실증·상용화 연계체계) 우리나라 이산화탄소 전환 산업은 출연연·학계 중심 연구 및 기업 기술이전 단계에 머물러 있어 계산설계 성과의 산업 적용 연계체계 고도화 필요
  - 수전해·CO<sub>2</sub> 전환·연료전지 분야 전반에서 계산설계-소재 합성-전극 제조-시스템 실증 연계 기반 전주기 연구개발 체계 구축
  - 파일럿 실증 테스트베드, 산·학·연 협력 기반 상용화 체계 확보
- ◎ (소부장 국산화 연계 산업 경쟁력 강화 필요) 귀금속 촉매 의존도 절감 및 비귀금속·단원자·합금 촉매 개발 중심 공급망 대응 필요
  - 계산설계 기반 핵심 촉매 소재 개발을 통해 공급망 리스크 완화 및 국산 소재 부품 경쟁력 확보
- ◎ (기업 주도 계산·실증 연계모델 확대 필요) 국내 산업계의 계산과학 기반 R&D 확대 흐름을 활용한 기업 주도형 계산·실증 연계체계 추진 필요
  - HD한국조선해양·롯데케미칼 등 산업계 참여 확대 기반 계산설계 성과 산업화 연계 속도 제고 중요
- ◎ (국제협력 기반 실증 역량 확보 필요) 다자 연구 플랫폼 및 국제 공동연구 기반 실증 경험 및 조기 기술 확보 확대
  - Horizon Europe·Mission Innovation·IEA Hydrogen TCP 등 국제협력 플랫폼 활용 기반 기술협력 확대

## 참고 문헌

- 1 Global Carbon Project(2025), 「Global Carbon Budget 2025」
- 2 Advanced Science 2018, 5, 1700275.
- 3 npj Mater. Sustain. 2025, 3, 22.
- 4 Adv. Energy Sustain. Res. 2021, 2, 2100019.
- 5 Nat. Commun. 2025, 16, 10636.
- 6 Nat. Commun. 2024, 15, 5893.
- 7 Joule 2024, 8, 1890-1918.
- 8 Nat. Commun. 2025, 16, 4955.
- 9 Nat. Commun. 2025, 16, 10504.
- 10 International Energy Agency(2025), 「Global Hydrogen Review 2025」
- 11 Catalysts 2025, 15, 237.
- 12 Nat. Energy 2024, 9, 1485-1496.
- 13 Precis. Chem. 2024, 2, 447-470.
- 14 Chem. Eng. J. 2025, 518, 164743.
- 15 ACS Catal. 2024, 14, 2264-2283.
- 16 International Energy Agency, 「Annual investment in clean energy by selected country and region, 2019 and 2024」
- 17 METI·ANRE Japan(2023), 「Basic Hydrogen Strategy (Revised June 6, 2023)」
- 18 Government of Japan(2024), 「Act on Promotion of Supply and Use of Low-Carbon Hydrogen, etc., for Smooth Transition to a Decarbonized Growth-Oriented Economic Structure (Hydrogen Society Promotion Act)」
- 19 NEDO (New Energy and Industrial Technology Development Organization), 「Green Innovation Fund」
- 20 National Development and Reform Commission and National Energy Administration, People's Republic of China(2022), 「Medium and Long-Term Plan for the Development of Hydrogen Energy Industry (2021~2035)」
- 21 Bloom Energy Corporation(2026), 「Bloom Energy Reports Fourth Quarter and Full Year 2025 Financial Results with Record Full Year Revenues」

- 22 Ballard Power Systems(2026), 「Ballard Reports Q4 2025 and Full Year Results」
- 23 Plug Power Inc.(2025), 「Annual Report on Form 10-K for the Fiscal Year Ended December 31, 2024」, U.S. Securities and Exchange Commission.
- 24 Twelve, 「Twelve and IAG Sign Historic Long-Term Multi-Million Gallon SAF Offtake Agreement」
- 25 Topsoe, 「Forestal Client Case」
- 26 OCOchem, 「OCOchem Commissions World's First Pilot Plant Using Multiple Industrial-Scale Cells to Directly Convert CO<sub>2</sub> and Water into Organic Molecules」
- 27 W. L. Gore & Associates, 「GORE-SELECT Membrane」
- 28 Cell Impact AB, 「Vision and Business Concept」
- 29 Johnson Matthey(2022), 「Recycling and Thrifting: the Answer to the Iridium Question in Electrolyser Growth」
- 30 U.S. DOE, 「Technical Targets for Proton Exchange Membrane Electrolysis」
- 31 Enapter AG, 「AEM Electrolysis Technology」
- 32 U.S. DOE, 「H2-AMP: Hydrogen Shot Workshop on Advanced Materials for PEM Electrolyzers」
- 33 Chemours Company(2023), 「Chemours Expands Nafion Ion Exchange Material Production in France to Support Growing Market Demand」
- 34 EuroHPC Joint Undertaking, 「Our Supercomputers」
- 35 관계부처 합동(2020), 「2050 탄소중립 추진전략」
- 36 환경부(2021), 「2030 국가 온실가스 감축목표(NDC)」
- 37 국무조정실(2023), 「탄소중립·녹색성장 기본계획」
- 38 과학기술정보통신부(2026), 「기후·환경 연구개발사업 시행계획」
- 39 과학기술정보통신부(2025), 「2026년 과학기술분야별 세부사업 추진계획」
- 40 한국연구재단(2017), 「R&D 혁신을 위한 계산과학 활용 활성화 방안 기획 연구」, 연구책임자: 조맹호, 연구원: 최준명
- 41 한국에너지기술평가원(2025), 「2022년 국제에너지기구(IEA) 기술협력(TCP) 활동현황(AFC)」
- 42 Adv. Funct. Mater. 2025, e16387.
- 43 Energy Environ. Sci. 2021, 14, 3053-3063.
- 44 Adv. Energy Mater. 2024, 14, 2401426.
- 45 Angew. Chem. Int. Ed. 2021, 60, 7382-7388.

- 46 Adv. Mater. 2023, 35, 2208224.
- 47 J. Am. Chem. Soc. 2022, 144, 16131-16138.
- 48 Energy Environ. Sci. 2021, 14, 3455-3468.
- 49 Adv. Funct. Mater. 2021, 31, 2100547.
- 50 Nat. Commun. 2023, 14, 7303.
- 51 J. Chem. Theory Comput. 2024, 20, 4857-4868.
- 52 Nat. Commun. 2023, 14, 7210.
- 53 Nat. Commun. 2024, 15, 9781.
- 54 J. Am. Chem. Soc. 2025, 147, 6536-6548.
- 55 ACS Energy Letters 2025, 10, 6288-6296. Licensed under CC BY-NC-ND 4.0.
- 56 Chemical Engineering Journal 2024, 494, 152757. Reproduced with permission. Copyright © 2024 Elsevier
- 57 IEA, "Annual investment in clean energy by selected country and region, 2019 and 2024", Licensed under CC BY 4.0.B.V.
- 58 자료: U.S. Department of Energy, Hydrogen and Fuel Cell Technologies Office (2024). Public domain image.
- 그림1 W. Zhang, "Progress and Perspective of Electrocatalytic CO<sub>2</sub> Reduction for Renewable Carbonaceous Fuels and Chemicals," Advanced Science, vol. 5, no. 1, pp. 1700275, 2018.
- 그림2 S. Choung et al., "From Atomic Motif to Realistic Single Atom Catalysts through Machine Learning Interatomic Potentials," ACS Energy Letters, vol. 10, no. 12, pp. 6288-6296, 2025.
- 그림3 S. Choung et al., "Rise of Machine Learning Potentials in Heterogeneous Catalysis: Developments, Applications, and Prospects," Chemical Engineering Journal, vol. 494, no. 152757, 2024.
- 그림4 U.S. Department of Energy (DOE), H2Scale Concept Framework, DOE Technical Report, 2024.
- 그림5 International Energy Agency (IEA), Advancing Clean Technology Manufacturing: An Energy Technology Perspectives Special Report, IEA, Paris, 2024.
- 그림6 IEA, "Annual Investment in Clean Energy by Selected Country and Region, 2019 and 2024," IEA, Paris, 2024.
- 그림7 (좌) L. Chanussot et al., "Open Catalyst 2020 (OC20) Dataset and Community Challenges," ACS Catalysis, vol. 11, no. 10, pp. 6059-6072, 2021. / (우) R. Tran et al., "The Open Catalyst

2022 (OC22) Dataset and Challenges for Oxide Electrocatalysts," ACS Catalysis, vol. 13, no. 5, pp. 3066-3084, 2023.

그림8 Matbench Discovery Leaderboard, [matbench-discovery.materialsproject.org](https://matbench-discovery.materialsproject.org).

그림9 Y. Tang et al., "A Multimodal Large Language Model for Materials Science," Nature Machine Intelligence, vol. 8, pp. 588-601, 2026.

그림10 Scheidgen, M. et al., "NOMAD: A Distributed Web-based Platform for Managing Materials Science Research Data," Journal of Open Source Software, 8(90), 5388, 2023.

그림11 두산퓨얼셀, "세계 최대 수소 연료전지 발전소 준공 — 신인천 빛드림 80MW," 보도자료, 2021.

그림12 Endrődi, B. et al., "Continuous-flow Electroreduction of Carbon Dioxide in a Gas Diffusion Electrode Flow Cell," Progress in Energy, 2(2), 022003, 2020.

그림13 Zhu, J., Hu, L., Zhao, P., Lee, L. Y. S., & Wong, K.-Y., "Recent Advances in Electrocatalytic Hydrogen Evolution Using Nanoparticles," Chemical Reviews, 122(9), 2022.

그림14 Lohn, S., Holena, M., & Kruse, N., "From Characterization to Discovery: Artificial Intelligence, Machine Learning and High-Throughput Experimentation for Heterogeneous Catalysis Research," ACS Catalysis, 14(15), 11372-11403, 2024.

그림15 한국수력원자력(KHNP), "KHNP-HYTEP 원자력 기반 청정수소 기술개발 및 사업협력 MOU 체결," 보도자료, 2024년 9월 23일.

그림16 World Hydrogen Summit & Exhibition, Rotterdam, Netherlands, May 2025.

# STI Brief

---

**발행일** 2026년 6월 19일

**발행처** (주)이니씽크(INITHiNK)

서울특별시 송파구 법원로 11길 7

T. 02-468-4137

[inithink.co.kr](http://inithink.co.kr)

**출 갈** Top-Tier 사업 출갈지원단

# STI Brief

---

STI 브리프는 연구단별 핵심분야에 대한 글로벌 정책·기술·산업 등 최신 동향 및 트렌드 정보와 더불어 다양한 시각과 심층분석을 제공하기 위해 발간하고 있습니다. 동 브리프는 저자의 개인적 견해이며 (주)이니씽크의 공식 견해가 아님을 알려드립니다.