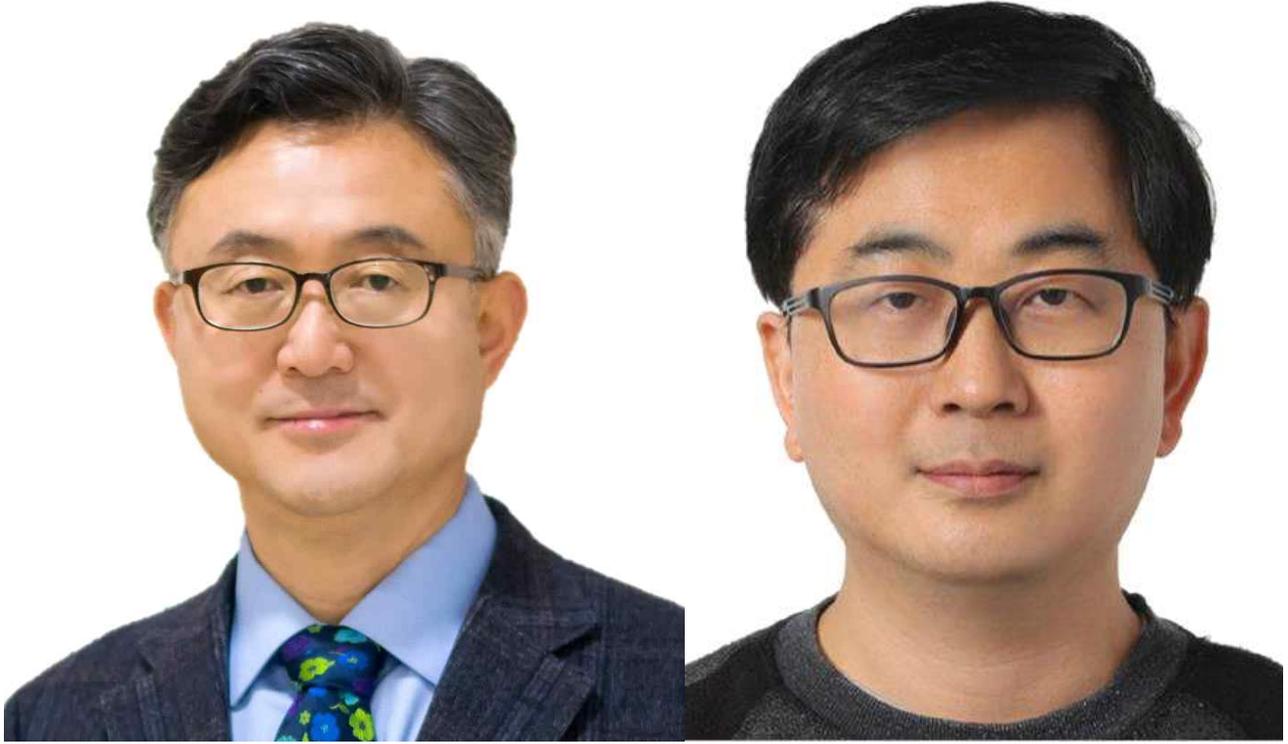


# 결함없는 '준이차원' 페로브스카이트 태양전지 소재 개발

- 다양한 광전자반도체 소자에 적용 가능할 것으로 기대 -



▲ (왼쪽부터) 신소재공학부 이광희 교수, 에너지융합대학원 김희주 교수

한국연구재단은 광주과학기술원(총장 임기철) 이광희 교수(신소재공학부), 김희주 교수(에너지융합대학원) 공동 연구팀이 준이차원(quasi-2D)\* 페로브스카이트\*\* 소재에 간단한 후처리 기술을 적용해 소재의 결함\*\*\*을 해결하고, 효율 및 안정성을 확보한 태양전지 소재를 개발했다고 밝혔다.

\* 준이차원(quasi-two dimension): 수학적 평면 내에서 주기적인 삼차원 구조가 아니며 완전한 이차원 구조가 아닌 것으로 유한한 원자 혹은 나노 단위 크기의 두께를 가지고 있는 것.

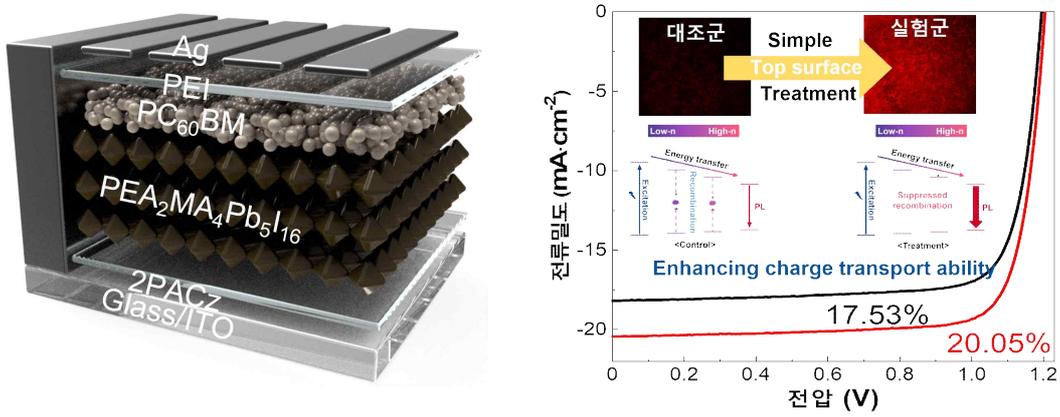
\*\* 페로브스카이트(perovskite): 1839년 러시아 우랄산맥에서 발견된 광물의 결정구조로서 광물학자 Lev Perovski(1792-1856)의 이름에서 유래됨. 페로브스카이트 구조는 높은 전하이동 능력과 빛 흡수성으로 차세대 태양전지 소재로 각광 받고 있음.

\*\*\* 결함(defect): 결정에서 원자의 주기적인 배열이 깨지는 부분. 페로브스카이트 태양전지의 성능을 저하시키는 원인 중 하나로 알려져 있음.

페로브스카이트 태양전지는 기존의 상용화된 실리콘 기반 태양전지와 비슷한 효율을 보여 차세대 태양전지로 주목받고 있다.

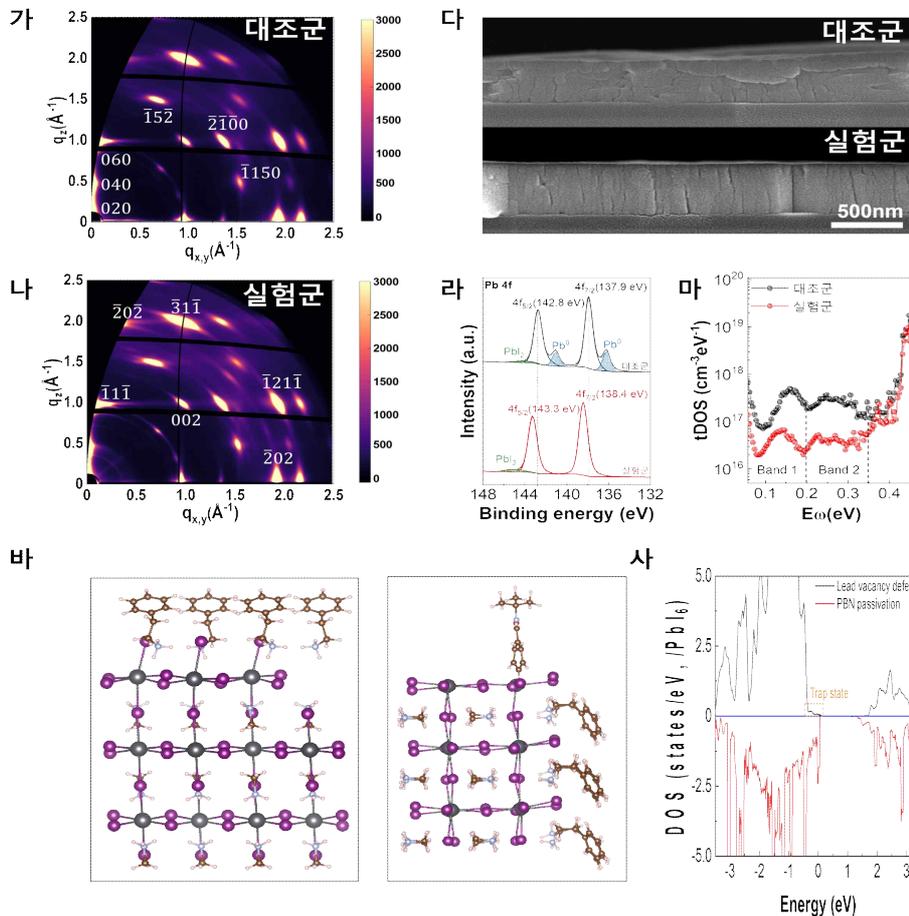
하지만 상용화를 위해선 효율뿐만 아니라 장기안정성 확보가 필수적인데, 페로브스카이트 소재 자체의 흡습성\*적인 성질로 인한 소자 성능 저하로 인해 장기안정성 확보에 큰 걸림돌이 되고 있다.

\* 흡습성(hygroscopic): 물질이 공기 중의 수분을 흡수하는 성질.



(그림1) 본 연구에서 제작한 준이차원 페로브스카이트 소재 기반 태양전지의 구조 (좌) 및 개발된 기능성 단분자 후처리를 통해 향상된 준이차원 페로브스카이트 소재 및 태양전지 특성 그림 (우).

- 준이차원 페로브스카이트 소재에 본 연구에서 개발한 기능성 단분자 후처리 방법을 통하여 소재의 결정배열을 수직방향으로 제어할 뿐만 아니라 표면 및 내부에 존재하는 결함을 부동태화시켜 더욱 효율적인 전하 수송을 가지게 하였다. 이를 통해 소재 자체의 향상된 광학적 특성 및 더욱 고성능의 준이차원 페로브스카이트 소재 기반 태양전지 개발에 성공하였다.



(그림2) 본 연구 기술을 통해 개발한 준이차원 페로브스카이트 소재의 결정성에 대한 분석 (가, 나), 준이차원 페로브스카이트 소재의 단면 관측 사진 (다), 결함 부동태화 효과 (라, 마) 및 분자 시뮬레이션 관련 데이터 (바, 사).

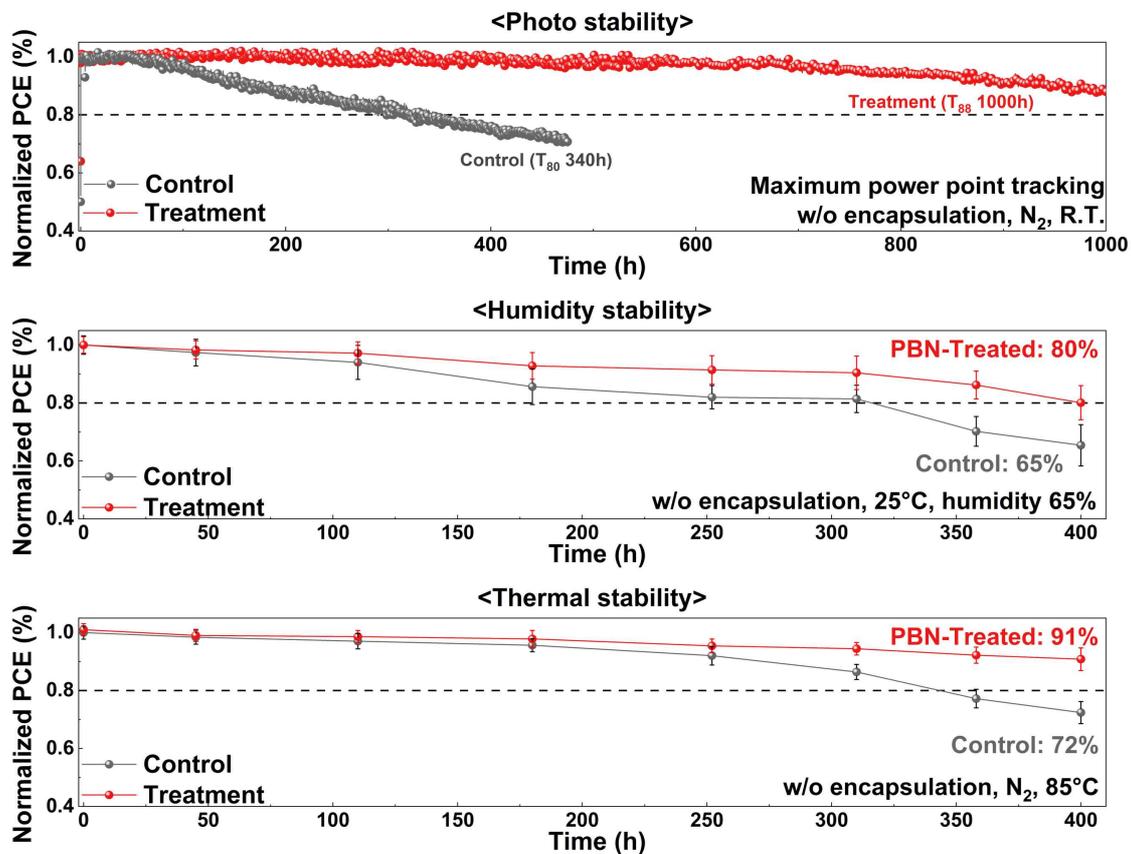
- 본 연구에서 개발한 기능성 단분자 후처리 방법을 준이차원 페로브스카이트 소재에 적용하였을 때 수직방향의 결정 배열을 유도한 것을 포항가속기연구소에 있는 시설을 이용한 스침각 엑스선 회절 측정법 및 주사전자현미경 분석을 통하여 확인하였다. 또한 처리한 단분자 분자의 페로브스카이트 소재 내부에 존재하는 결함의 부동태화 기능을 확인하기 엑스레이, 어드미턴스 및 분자 시뮬레이션 분석기법들을 이용하여 본 연구에서 개발한 기능성 단분자에 의해 소재내부의 결함이 줄어든 것을 확인하였다.

뛰어난 환경적 안정성을 가진 준이차원 페로브스카이트 소재는 기존 소재의 낮은 장기안정성을 극복할 수 있어 학계의 많은 주목을 받고 있지만, 결정 성장 제어의 어려움과 소재 자체의 결함에 의한 낮은 전기적 성질이 태양전지의 성능을 떨어뜨린다는 한계가 있다.

이에 연구팀은 간단한 용액공정을 이용해 준이차원 페로브스카이트 소재의 결함·결정 제어를 하는데 성공했다.

연구팀이 개발한 기능성 단분자 후처리 방법을 도입한 준이차원 페로브스카이트 소재는 기능성 단분자에 의해 소재 표면 및 내부에 존재하는 이온성 결함을 부동태화 시켜 소재의 품질을 높였다.

\* 부동태: 금속이 보통 상태에서 나타내는 반응성을 잃은 상태.

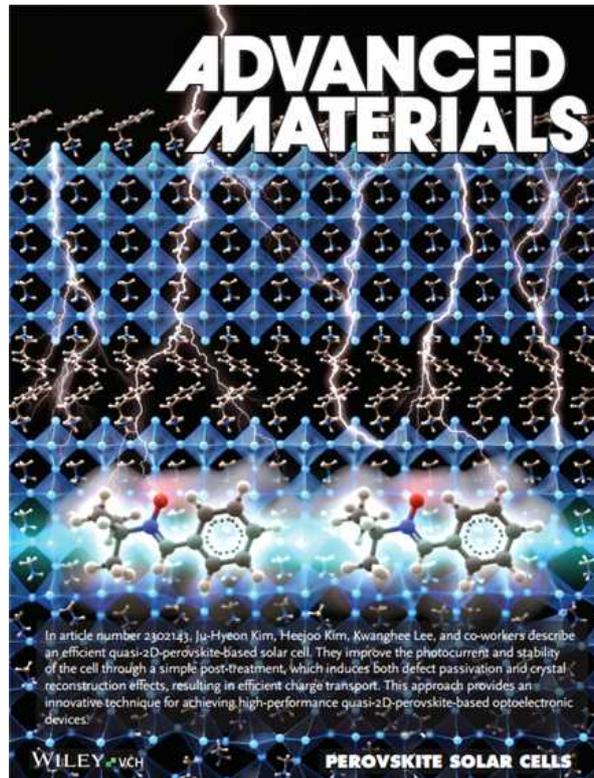


(그림3) 본 연구 기술을 통해 향상된 준이차원 페로브스카이트 태양전지 안정성 관련 그래프. 위에서부터 각각 광안정성, 습도안정성, 열안정성 테스트.

- 본 연구에서 개발한 기능성 단분자 후처리 방법을 준이차원 페로브스카이트 태양전지에 적용하였을 때 광, 습도, 열 등 각각의 항목에 대한 장기안정성 테스트에서 기존 태양전지 대비 더욱 높은 안정성을 가지는 것을 확인하였다.

개발된 준이차원 페로브스카이트 소재를 활용한 태양전지는 20.05%의 높은 효율을 보였으며 1,000시간의 가속 실험 후에도 초기 효율 대비 12% 정도의 감소를 보이는 우수한 광안정성 뿐만 아니라 높은 열적 및 수분 안정성 또한 갖는 것으로 나타났다.

이광희 교수는 “이번 연구를 통해 고성능의 준이차원 페로브스카이트 소재 기반 광전자 소자 개발에 대한 실마리를 제시했다”라며, “향후 차량 및 건물 일체형 태양전지 개발, 고성능의 페로브스카이트 소재 기반 반도체 소자 등 실생활과 밀접한 다양한 분야에 활용 가능할 것으로 기대된다”고 설명했다.



(그림4) 권두표지 논문으로 선정된 본 연구 그림.

- 준이차원 페로브스카이트 소재에 본 연구에서 개발한 기능성 단분자 후처리 방법을 통하여 소재의 결정성 및 전기적 특성이 증가한 그림.

과학기술정보통신부와 한국연구재단이 추진하는 중견연구, 기후변화대응기술개발사업 등의 지원으로 수행된 이번 연구 성과는 재료분야 국제학술지 '어드밴스드 머티리얼즈(Advanced Materials)'에 권두 표지 논문(frontispiece)으로 선정되었으며 8월 3일 게재되었다.

# 주요내용 설명

<작성 : 광주과학기술원 이광희 교수>

논문명	Efficient and Stable Quasi-2D Ruddlesden-Popper Perovskite Solar Cells by Tailoring Crystal Orientation and Passivating Surface Defects
저널명	Advanced Materials
키워드	Ruddlesden-Popper perovskite (유·무기 혼합 페로브스카이트), perovskite solar cell (페로브스카이트 태양전지), defect passivation (결함 부동태화), charge transport (전하 이동), crystallography (결정학)
저자	이광희 교수(대표 교신저자/GIST), 김희주 교수(공동 교신저자/GIST), 김주현 박사(제 1저자/GIST)

## 1. 연구의 필요성

- 가볍고 유연할 뿐만 아니라 성능 면에서도 기존의 상용화된 실리콘 기반의 태양전지와 비슷한 수준의 단위소자 효율을 보이고 있는 페로브스카이트 태양전지는 차세대 태양전지로 급부상하고 있다. 하지만 페로브스카이트 태양전지의 상용화를 위해선 고효율뿐만 아니라 장기안정성을 확보하는 것이 꼭 필요하다.
- 대부분의 태양전지에 사용하는 페로브스카이트 소재는 친수성적인 측면이 강하여 물이나 공기 중의 습도에 약한 특성을 가지고 있다. 이를 해결하기 위해 개발된 것이 준이차원 페로브스카이트 소재이다. 하지만 높은 환경적 안정성에도 불구하고 준이차원 페로브스카이트 소재 기반 태양전지는 기존의 페로브스카이트 소재 대비 낮은 전력변환 효율을 보인다.
- 준이차원 페로브스카이트 소재는 열역학적으로 수평배열의 결정성장을 선호하며 이에 의해 빛을 받아서 생성된 전자들의 수직 방향에 존재하는 전극으로의 이동이 용이하지 않아 낮은 전력변환 효율을 가지게 된다. 최근 이러한 결정배열 및 소재의 순도를 높이기 위한 연구가 활발히 진행되고 있지만 이를 해결하기 위한 더욱 근본적인 접근법이 필요하다.

## 2. 연구내용

- 연구팀은 기능성 단분자를 간단한 용액공정을 이용하여 준이차원 페로브스카이트 소재의 결함·결정 제어를 하는데 성공하였다.
- 연구팀이 개발한 기능성 단분자 후처리 방법을 도입한 준이차원 페로브스카이트 소재는 기능성 단분자에 의해 소재 표면 및 내부에 존재하는 이온성 결함을 부동태화 시켜 소재의 품질을 높였다. 이는 x선 분석, 열적 어드미턴스 측정, 밀도 범함수이론을 바탕으로 한 분자 시뮬레이션 등을 통하여 그 효과를 입증하였다.

- 또한, 준이차원 페로브스카이트 소재의 수직방향으로의 결정 배열을 유도하여 빛에 의해 생성된 광전자를 더욱 효과적으로 수송하는 것을 가속기를 이용한 결정성 분석 및 펄스 세컨즈 레이저를 이용한 순간 흡수 분광법 등을 이용하여 이를 확인하였다.
- 본 연구팀이 개발한 기능성 단분자 후처리를 적용시킨 페로브스카이트 태양전지는 기존의 태양전지에 비해 높은 광전류를 보여 20.05%의 에너지 전환효율을 기록하였다. 또한 약 1000시간 동안 태양전지 작동 시에도 초기효율의 12%만 감소하는 높은 광안정성을 나타내며 광안정성 뿐만 아니라 열·습도에 대한 안정성 테스트에서도 높은 안정성을 가지는 것을 확인하였다.

### 3. 연구성과/기대효과

- 본 연구팀은 준이차원 페로브스카이트 소재 기반 태양전지의 성능저하에 가장 큰 영향을 미치는 결정배열을 간단한 용액공정이 가능한 기능성 단분자 후처리 방법을 통해 제어시킴으로써 높은 효율과 안정성을 유지하는 태양전지 소자를 개발하였다. 향후, 본 기술은 대면적 태양전지 모듈, 건물 및 차량 일체형 태양전지 등에 응용 가능할 것으로 기대된다.
- 고품질의 준이차원 페로브스카이트 소재 개발에 관한 이번 연구는 태양전지뿐만 아니라 다른 여러 광전자 소자인 전계발광다이오드, 박막 트랜지스터 등에도 적용이 가능할 것으로 기대된다.

## 연구 이야기

<작성 : 광주과학기술원 이광희 교수>

### 연구를 시작한 계기나 배경은?

최근 급격한 기후변화에 대응하기 위한 전 세계적 추세인 탄소 중립을 이루기 위해서 신재생에너지인 태양에너지의 사용은 더 이상 선택이 아닌 필수가 되었습니다. 최근 차세대 태양전지로 각광받고 있는 페로브스카이트 태양전지는 상용화된 실리콘 기반의 태양전지와 비슷한 수준의 단위소자 효율을 보고하고 있어, 태양전지의 저변확대를 통한 탄소 중립의 발판이 될 것으로 기대되고 있습니다. 하지만 페로브스카이트 태양전지의 상용화를 위해선 태양전지의 장기 안정성 확보가 필수적입니다. 따라서, 본 연구진은 페로브스카이트의 소재 종류 중 뛰어난 환경적 안정성을 가지는 준이차원 페로브스카이트 소재 연구에 집중하였으며 이를 이용한 고성능·고안정성의 페로브스카이트 태양전지를 개발하고자 하였습니다.

## 이번 성과, 무엇이 다른가?

준이차원 페로브스카이트 소재는 기존의 태양전지 분야에서 사용하던 페로브스카이트 소재의 고질적인 문제인 친수성적인 성질을 개선한 소재입니다. 하지만 열역학적으로 수평배열을 선호하는 특성으로 인해 태양전지 작동 시에 내부에 생성된 광전하들 수직 방향에 위치한 전극으로 쉽게 빠져나가지 못해 에너지 변환효율이 낮아지게 됩니다. 이번 연구 성과는 간단한 용액공정을 통하여 준이차원 페로브스카이트 소재의 수직방향의 배열을 유도하며 소재 내부에 존재하는 결함 또한 부동태화 시켜 기존의 태양전지 대비 더욱 고성능·고안정성의 준이차원 페로브스카이트 소재 기반의 태양전지를 개발했다는 것에 의의가 있습니다.

## 실용화된다면 어떻게 활용될 수 있나? 실용화를 위한 과제는?

뛰어난 환경적 안정성을 가지는 준이차원 페로브스카이트 소재는 태양전지 뿐만 아니라 여러 다른 광전자 반도체 소자에 적용될 수 있을 것으로 기대됩니다. 또한 기존에 사용하던 페로브스카이트 소재와는 다른 유니크한 광전기적 특성도 가지고 있어 이에 대해 앞으로 더욱 깊은 연구가 필요한 상황입니다. 이를 위해선 다양한 학제 간의 공동연구가 필요하며 국내뿐만 아니라 다른 여러 나라들 간의 공동연구가 필요합니다.