

# 한국-스위스 공동연구팀, 태양전지 효율과 안정성 대폭 높인 페로브스카이트 결함제어 신기술 개발

- GIST 김호범 교수팀-스위스 로잔 연방공대-한국화학연구원 공동연구팀, '6H 페로브스카이트 결정다형체' 도입해 새로운 페로브스카이트 결함제어 기술 개발
- 소재 균일도와 결정성 유지하면서도 효과적인 결함제어 가능해 다양한 광전자소자 응용 기대... 페로브스카이트 태양광 모듈 세계 최고 수준 효율 21.92% 달성(美 Newport 공식인증)
- 국제학술지「Nature Communications」게재... 최근 출판된 해당 분야 최고 논문 50편 가려내는 편집자 하이라이트(Editor's Highlights)에 선정



▲ (왼쪽부터) GIST 김호범 교수, 스위스 로잔 연방공대 Nazeeruddin 교수, Paul Dyson 교수, 한국화학연구원 전남중 책임연구원·유소민 박사

광주과학기술원(GIST, 총장 임기철)은 신소재공학부 김호범 교수팀과 스위스 로잔 연방공대(EPFL), 한국화학연구원(KRICT) 공동연구팀이 페로브스카이트 태양전지\*의 **효율과 안정성을 획기적으로 향상시킬 수 있는 결함\*제어 기술을 개발**했다고 밝혔다.

'6H 페로브스카이트 결정다형체\*'를 활용하여 페로브스카이트 소재 **균일도 및 결정성 보존 측면에서 기존 페로브스카이트 결함제어 기술이 갖는 한계를 극복**하고 페로브스카이트 결함제어 연구의 새로운 패러다임을 열 것으로 기대된다.

\* **페로브스카이트 태양전지**: 금속 할라이드 페로브스카이트 소재를 태양광 흡수를 위한 광활성층으로 사용하는 태양전지. 최근 실리콘 태양전지와 동등한 수준의 효율이 보고되었다. 낮은 제작 단가, 용이한 생산 공정, 유연화 가능 등의 장점이 있어 실리콘 태양전지를 이을 차세대 태양전지로 크게 주목받고 있다.

\* **결함**: 결정 구조에서 이상적인 원자 배열을 벗어난 부분. 페로브스카이트의 결함은 소재의 광전자적 특성 및 구조적 안정성을 저하시킨다.

\* **결정다형체**: 동일한 화학 조성을 갖지만 적층 순서가 상이해 결정 구조가 다른 물질을 의미한다. 페로브스카이트 태양전지에 대표적으로 사용되는 페로브스카이트 소재인 FAPbI<sub>3</sub>의 경우 [PbI<sub>6</sub>]<sup>4-</sup> 팔면체의 적층 순서에 따라 3C, 2H, 6H 등 다양한 페로브스카이트 결정다형체가 존재한다. 여기서 숫자는 적층 단위 내 팔면체의 층수를 의미하며, 알파벳은 결정 구조(C: cubic, H: hexagonal)를 의미한다.

우수한 광전자적 특성을 바탕으로 페로브스카이트는 차세대 태양전지의 흡광소재로 각광받고 있지만, **결정 결함은 페로브스카이트 태양전지의 효율과 안정성을 저해하는 요소로 알려져 있다.**

따라서 상용화를 위한 고효율·고안정성 페로브스카이트 태양전지를 구현하기 위해서는 결합제어가 필수적이며, 현재까지는 주로 **외부 화학종\*** 및 **저차원 페로브스카이트\*** 를 도입하는 방법을 택해 왔다.

그러나 이종 분자 도입을 통한 결합제어 방식은 **페로브스카이트의 소재 균일도와 결정성을 낮춘다는 한계**가 있으며, 이러한 한계를 극복하기 위한 새로운 결합제어 기술 개발이 요구되고 있는 실정이다.

\* **외부 화학종:** 페로브스카이트 전구체를 제외한 다른 화학 첨가제들을 의미한다. 페로브스카이트 결합제어를 위해 Lewis-base 제제, 알칼리 금속, 고분자 등 외부화학종을 도입하는 연구가 지속적으로 보고되고 있다.

\* **저차원 페로브스카이트:** 페로브스카이트 구조를 가지지만 차원이 낮아진 형태로 2차원 또는 준 2차원(quasi-2D) 페로브스카이트를 지칭한다. 높은 형성에너지를 바탕으로 우수한 열역학적 안정성을 가져 페로브스카이트 결합제어 요소로 사용될 수 있다.

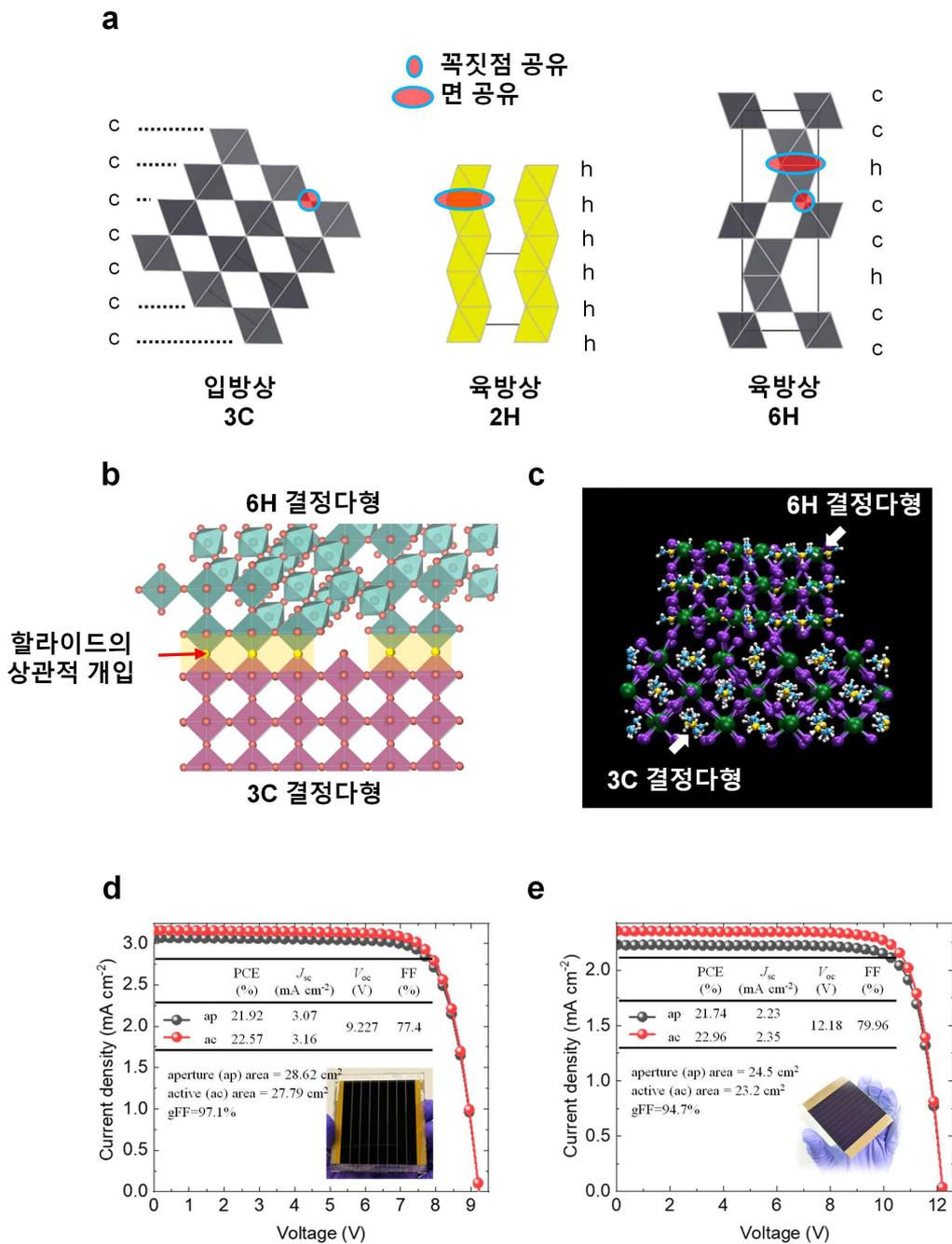
GIST 신소재공학부 김호범 교수팀은 **스위스 로잔 연방공대 Nazeeruddin 교수팀, Dyson 교수팀, 한국화학연구원 전남중 책임연구원팀**과의 공동연구를 통해 **'꼭짓점 공유 성분을 포함하는 6H 페로브스카이트 결정다형체'**를 활용한 페로브스카이트 결합제어 신기술을 개발했으며, 이를 적용한 **고효율 고안정성 페로브스카이트 태양전지 소자 및 모듈을 구현했다.**

페로브스카이트 태양전지에 주로 사용되는 페로브스카이트 소재인  $FAPbI_3$ 는 다양한 결정다형체가 존재하며, 대표적으로 **우수한 광전자적 특성을 나타내는 3C(100% 꼭짓점(corner-sharing) 공유로 구성)와 열등한 광전자적 특성을 가지는 2H(100% 면공유(face-sharing)로 구성)가 있다.**

6H 결정다형체는 66%의 꼭짓점 공유 성분을 포함하기 때문에 **광활성층용 3C 결정다형체와 높은 격자 상관성(lattice coherency)**을 가진다. 따라서 6H 결정다형은 3C 결정다형의 효과적인 결합제어 요소로 사용 가능하며, 3C 결정다형과 완전히 동일한 화학 조성을 가지므로 **페로브스카이트의 소재 균일도와 결정성을 유지할 수 있다.**

연구팀은 XRD(X-선 회절분석기) 분석과 분자동역학 시뮬레이션 등을 통해 **3C와 6H 두 상(phase)간 꼭짓점 공유 위치에 할라이드의 상관적 개입(coherent intervention)\*이 가능하다는 것을 제시했으며, 이를 통한 3C/6H 이종결정다형체(hetero-polytype)의 형성을 확인했다.**

\* **할라이드의 상관적 개입:** 3C와 6H 사이 높은 격자 상관성을 바탕으로 두 상간  $[PbI_6]^{4-}$  팔면체의 꼭짓점에 위치하는 할라이드의 공유 및 개입이 가능하다.

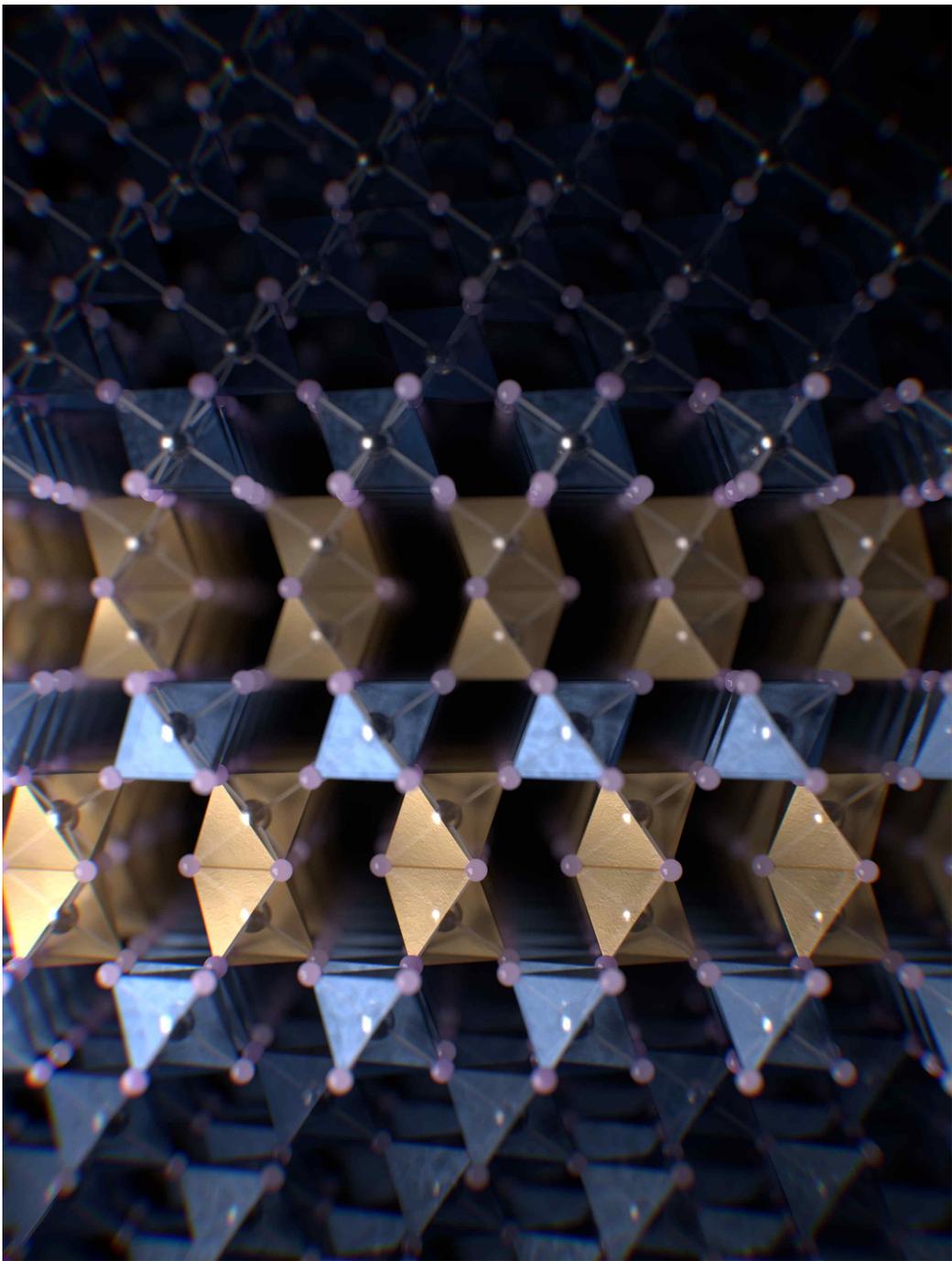


[그림1] 3C/6H 이종결정다형체와 이를 적용한 페로브스카이트 태양전지

- (a) 3C-, 2H-, 6H 페로브스카이트 결정다형체의 결정구조
- (b) 개발된 3C/6H 이종결정다형체의 구조
- (c) 6H 결정다형체 도입에 의해 안정화되는 3C 결정다형체를 보여주는 분자동역학 시뮬레이션
- (d) 3C/6H 이종결정다형과 표면 패시베이션이 적용된 페로브스카이트 태양전지 모듈의 성능 및 사진
- (e) 3C/6H 이종결정다형과 표면 패시베이션이 적용된 저온 공정 페로브스카이트 태양전지 모듈의 성능 및 사진

이 같은 3C/6H 이종결정다형 페로브스카이트는 6H의 결함제어 효과를 바탕으로 3C 페로브스카이트에 비해 훨씬 우수한 광전자적 특성을 나타낸다는 것이 확인되었다.

3C/6H 이종결정다형 페로브스카이트와 표면 패시베이션(보호막 씌우기)을 적용하여 21.92%의 모듈 효율(면적: 28.62cm<sup>2</sup>), 21.74%의 저온 공정 모듈 효율(면적: 24.5cm<sup>2</sup>)을 달성했다. 이는 비슷한 면적의 페로브스카이트 모듈 중 세계 최고 수준으로, 미국 태양전지효율 공인기관인 Newport 사로부터 공식 인증(인증효율: 21.44%)을 받았다.



▲ 3C/6H 이종결정다형체 일러스트

김호범 교수는 “이번 연구 성과는 기존 페로브스카이트 결함제어 기술과 달리 소재 균일도와 결정성을 유지하면서도 효과적인 페로브스카이트 결함제어가 가능하다”며 “향후 페로브스카이트 결함제어 연구의 새로운 장을 여는 한편, 페로브스카이트 발광다이오드, 광검출기 등 다양한 페로브스카이트 광전자소자로의 응용 또한 기대된다”고 말했다.

GIST 김호범 교수팀이 수행한 이번 연구는 한국연구재단(NRF), 국가과학기술연구회(NST), 한국화학연구원, 스위스국립과학재단(SNSF), 유럽연합 Horizon 2020 연구 및 혁신 프로그램의 지원을 받아 수행되었다.

국제학술지 ‘Nature Communications’에 2024년 7월 4일 온라인 게재된 연구 결과는 최근 출판된 해당 분야 최고의 논문 50편을 가려내는 편집자 하이라이트 (Editors' Highlights)에 선정되었다.

# 논문의 주요 정보

## 1. 논문명, 저자정보

- 저널명 : Nature Communications (IF: 14.7, 2023년 기준)
- 논문명 : Shallow-level defect passivation by 6H perovskite polytype for highly efficient and stable perovskite solar cells
- 저자 정보 : 김호범 교수(공동 제1저자 및 공동교신저자 GIST 신소재공학부), 유소민 박사(공동 제1저자, 한국화학연구원), Bin Ding(공동 제1저자, 스위스 로잔 연방공대), 전남중 책임연구원(공동 교신저자, 한국화학연구원), Paul Dyson 교수 (공동교신저자, 스위스 로잔 연방공대), Mohammad Khaja Nazeeruddin 교수 (공동교신저자, 스위스 로잔 연방공대)