

“분자 ‘출세우기’로 전하 손실 줄였다”

GIST, 새로운 분자 배열 제어로

고효율 대면적 페로브스카이트 태양전지 구현

- 인돌(Ind) 분자의 비대칭 전하 분포로 규칙적인 ‘면대면 배열’ 유도해 전하 손실 억제
- 대면적 모듈 23.21% 인증 효율 달성... 연속 광조사 1,800시간 후에도 초기 효율 85% 유지
- 대면적 제조공정·모듈화 적용 기대... 국제학술지《Advanced Materials》게재



▲ (앞줄 왼쪽부터) GIST 화학과 홍석원 교수, ‘세계 최초 페로브스카이트 태양전지 상용화 전략연구사업단(전략연구사업단)’ 이광희 단장, 차세대에너지연구소 강홍규 부소장, (뒷줄 왼쪽부터) 화학과 김상진 박사과정생, 히거신소재연구센터 기태윤 박사, 차세대에너지연구소 김상조 연구원

광주과학기술원(GIST·지스트, 총장 임기철)은 ‘세계 최초 페로브스카이트 태양전지 상용화 전략연구사업단(이하 전략연구사업단)’ 이광희 사업단장(신소재공학과 초빙 석학) 연구팀이 페로브스카이트 태양전지의 계면*에서 분자의 배열을 제어해 전하 손실을 줄이고, 대면적 소자에서 발생하는 성능 저하를 완화할 수 있는 새로운 분자 설계 원리를 제시했다고 밝혔다.

연구진은 계면의 결함을 줄이는 데 집중해 온 기존 방식에서 한 걸음 더 나아가, 계면을 이루는 분자들이 규칙적으로 배열되도록 유도함으로써 전하가 보다 균일하

게 이동할 수 있는 **계면 구조를 구현했다**.

* **계면**: 태양전지를 이루는 서로 다른 두 물질(층)이 맞닿는 경계면으로, 전하가 한 층에서 다른 층으로 이동하는 통로 역할을 한다.

페로브스카이트 태양전지는 **빛을 전기로 바꾸는 ‘광전변환효율’이 높아** 차세대 태양전지로 주목받고 있다.

태양전지가 높은 효율을 내기 위해서는 **빛을 흡수하는 ‘광흡수층’에서 생성된 전하가 ‘전자수송층’으로 원활하게 이동**해야 한다. 그러나 소자의 면적을 넓히면 두 층이 맞닿는 계면의 상태가 위치에 따라 달라지면서 **전하 이동이 불균일해지고, 이에 따라 효율이 떨어질 수 있다**.

특히 페로브스카이트 표면에 유기 분자를 도입하는 **기존 계면 처리 기술은 전하 손실을 일으키는 표면 결함을 줄이는 데 효과적**이지만, **분자들이 불규칙하게 배열되면 전하의 이동을 방해**해 계면에서 추가적인 손실이 발생할 수 있다.

공동연구팀은 이러한 문제를 해결하기 위해 **‘인돌계 유기 암모늄 분자(이하 인돌 분자)*’라는 유기 분자에 주목**했다. 이 분자는 질소 원자가 포함된 고리 모양의 구조를 갖고 있어 **전하가 분자 내부에서 한쪽으로 치우쳐 분포**하는 특징이 있다.

연구팀은 이러한 특성이 인돌 분자들이 서로 일정한 방향으로 정렬되는 데 영향을 줄 수 있다고 보고, **구조가 다른 두 종류의 유기 분자와 비교해 분자 배열에 영향을 미치는 요인을 분석**했다.

그 결과 인돌 분자는 **서로 마주보는 방향으로 안정적으로 결합하면서 규칙적인 ‘면대면 적층 구조’를 형성**하는 것으로 나타났다. 이는 단순히 고리 구조의 크기보다 **분자 내부의 전하 분포가 분자의 규칙적인 배열을 유도**하는 데 중요한 역할을 한다는 것을 보여준다.

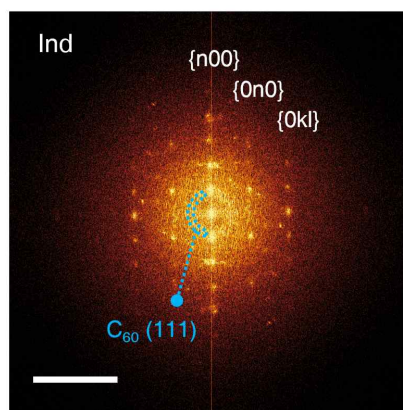
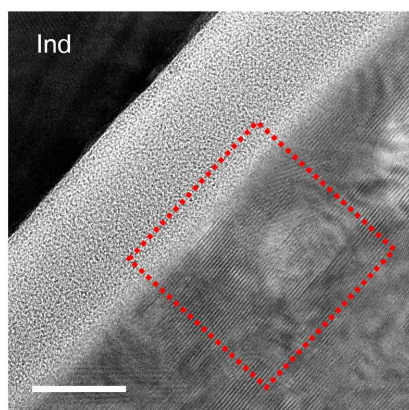
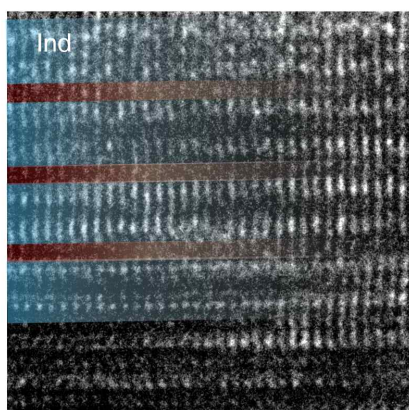
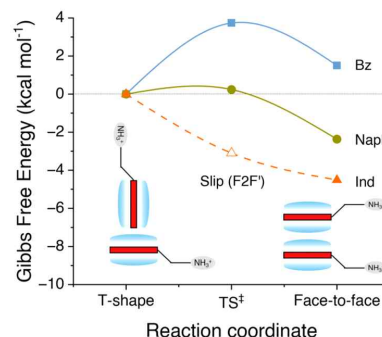
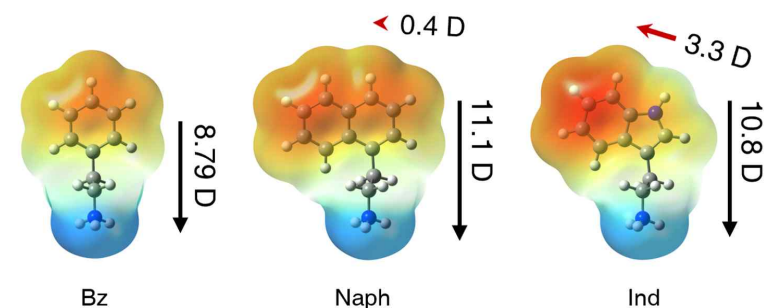
* **인돌계 유기 암모늄 분자(Indol-3-ylethylammonium iodide, Ind)**: 인돌 구조를 포함하는 유기 암모늄 분자로, 본 연구에서는 페로브스카이트 표면의 결함을 억제하고 분자 간 층상 배열을 유도하는 계면 조절 소재로 사용됐다.

이렇게 규칙적으로 배열된 인돌 분자는 페로브스카이트 표면에서 **일정한 방향과 간격으로 고르게 배열**되고, 그 위에 형성되는 전자수송층 **‘C₆₀(씨 식스티)*’와의 접촉면도 균일하게 만드는 것으로 나타났다**.

그 결과 전하가 소실되는 **‘비방사 재결합**’을 억제**하면서도 페로브스카이트에서 **C₆₀로의 전자 이동을 원활하게 유지**해, 계면에서 발생하는 전하 손실을 줄일 수 있었다.

* **C₆₀**: 탄소 원자 60개로 이루어진 구형 분자로, 페로브스카이트 태양전지에서 전자를 선택적으로 이동시키는 전자수송층으로 널리 사용된다.

** **비방사 재결합**: 빛을 받아 만들어진 전하가 전기로 활용되지 못하고 소멸하는 현상으로, 태양 전지의 전압과 효율을 떨어뜨리는 주요 원인이다.



▲ **분자의 전하 분포에 따른 규칙적인 배열과 계면 층상 구조 형성 원리.** 상단은 페네틸암모늄(Bz), 나프틸에틸암모늄(Naph), 인돌(Ind) 분자의 전하 분포와 배열에 따른 에너지 안정성을 비교한 결과로, 인돌 분자는 측면의 비대칭적인 전하 분포로 인해 서로 마주보는 '면대면 배열'이 가장 안정적으로 형성되는 것을 보여준다. 하단은 고해상도 투과전자현미경과 회절 분석을 통해 인돌 분자가 규칙적인 층상 구조를 이루고, 페로브스카이트와 C₆₀ 사이에 이러한 계면 구조가 형성된 것을 확인한 결과이다.

이러한 계면 설계 원리를 실제 페로브스카이트 태양전지에 적용한 결과, 소면적 태양전지에서 26.94%의 인증 광전변환효율을 기록했으며, 25cm² 대면적 태양전지에서도 23.21%의 인증 효율을 달성했다.

특히 이 25cm² 대면적 모듈은 10개의 태양전지를 하나로 연결한 일체형(모놀리식) 구조로 제작됐으며, 독립 인증을 통해 성능을 확인했다. 이는 연구진이 제안한 계면 설계가 소면적 소자뿐 아니라 대면적 모듈에서도 높은 효율을 구현하는 데 효과적임을 보여준다.

또한 장기 안정성 평가에서 85°C의 고온 환경에서 1,000시간 후 초기 효율의 93% 이상을 유지했으며, 실제 태양광과 유사한 세기의 빛을 지속적으로 비추는 조건에서도 1,800시간 후 초기 효율의 85%를 유지했다.

이번 연구에서 제시한 분자 설계 원리가 **향후 연속 제조공정 등 대량생산 기술과 결합할 경우 건물일체형 태양광(BIPV), 경량·유연 태양전지, 모바일 전원 등 다양한 분야로 페로브스카이트 태양전지의 활용 범위를 넓히는 데 기여할 것으로 기대된다.**

이광희 전략연구사업단장은 “페로브스카이트 태양전지의 높은 효율을 **대면적에서도 구현하는 것은 상용화를 위해 반드시 해결해야 할 과제**”라며, “이번에 제시한 분자 설계 원리가 대면적화 과정에서 발생하는 계면 손실을 줄이고 **페로브스카이트 태양전지의 상용화를 앞당기는 기반 기술로 활용되기를 기대한다**”고 말했다.

GIST 차세대에너지연구소 강홍규 부소장은 “이번 성과는 **소면적 태양전지의 높은 효율을 대면적 모듈에서도 구현했다는 점**에서 의미가 있다”며, “앞으로도 연구성과가 대면적 제조공정과 모듈화, 실증 및 산업화로 이어질 수 있도록 **연구 인프라와 산학협력 기반을 지속적으로 강화**하겠다”고 밝혔다.

GIST 이광희 전략연구사업단장과 차세대에너지연구소 강홍규 부소장, 화학과 홍석원 교수가 공동 교신저자로 참여하고, 신소재공학과 기태윤 박사가 제1저자로 수행한 이번 연구에는 기초과학연구원(IBS), 한국과학기술원(KAIST), 한국에너지공과대학교(KENTECH), 경상국립대학교, 일본 이화학연구소(RIKEN)·도쿄대학교, 스웨덴 린셰핑대학교 연구진이 공동으로 참여했다.

이번 연구는 ▲과학기술정보통신부·한국연구재단 기후변화대응기술개발사업 및 중견연구자지원사업 ▲교육부·한국연구재단 이공분야 대학중점연구소지원사업 ▲기후에너지환경부·한국에너지기술평가원 신재생에너지핵심기술개발사업 ▲과학기술정보통신부·GIST 전략연구사업의 지원을 받아 수행됐다.

연구 결과는 **재료과학 분야 국제학술지 《어드밴스드 머티리얼즈(Advanced Materials)》에 2026년 7월 30일 온라인으로 게재됐다.**

한편 GIST는 이번 연구 성과가 **학술적 의의와 함께 산업적 응용 가능성까지 고려한 것으로, 기술이전 관련 협의는 기술사업화센터(hgmoon@gist.ac.kr)를 통해 진행할 수 있다고 밝혔다.**

논문 정보

○ 논문명, 저자정보

- 저널명 : Advanced Materials

- 논문명 : Asymmetric Lamellar Templating of the Perovskite/C₆₀ Interface for Scalable Inverted Perovskite Photovoltaics
- 저자 정보 : 기태윤(제1저자, GIST), 안종국(공저자, IBS), 김상조(공저자, GIST), 김상진(공저자, GIST), 이민호(공저자, KAIST), 황인욱(공저자, GIST), 정진주(공저자, KENTECH), 심수빈(공저자, 경상국립대), 안재봉(공저자, GIST), 박준홍(공저자, 경상국립대), 이승진(공저자, KENTECH), 이정용(공저자, KAIST), 김유수(공저자, IBS), 김주현(공저자, 스웨덴 링셰핑 대학), 강홍규(공동교신저자, GIST), 홍석원(공동교신저자, GIST), 이광희(공동교신저자, GIST)