

보도 희망 일시	☒ 엠바고 없음(즉시)		☐ 엠바고 별도 기재		
연구참여 (문의)	소속	성명	저자구분	연락처	이메일
	자연과학대학 화학부	손창윤	교신저자	02-880-6652	changyunson@snu.ac.kr
	자연과학대학 화학부	홍승빈	1저자 (공동)	-	hsv1472@snu.ac.k

□ 연구 제목/부제

제목	이온이 만든 ‘전하 고속도로’ 태양전지 효율과 수명 함께 높였다 - 분자 시뮬레이션으로 전하 이동 경로 설계하고 실제 소자로 구현 - Ion-mediated ‘Charge Highway’ elaborate efficiency and stability of solar cell - Charge transport pathways designed via molecular simulations and implemented in working devices -
----	---

□ 연구 요약

연구 필요성	In recent, the morphological change of the hole hopping pathway by the dopant may improve hole transfer even spiro-OMeTAD shows morphous characteristics. To increase the hole concentration or other properties of HTL (hole transport layer), the dopant can be a key factor in forming an efficient hole hopping 'stepping stone' through nanoscale morphological control of spiro-OMeTAD. Although the local molecular packing around dopants is expected to govern charge transport in the HTL, this molecular-level structure remains difficult to resolve experimentally. Molecular dynamics simulations are therefore needed to elucidate how dopant-induced changes in molecular packing determine the charge-transport properties of the HTL.
-----------	---

연구성과/ 기대효과	(연구성과) 이번 연구는 페로브스카이트 태양전지의 정공수송층 소재인 spiro-OMeTAD에서 도펀트가 단순히 정공 농도를 높이는 데 그치지 않는다는 점을 밝혔다. 도펀트는 라디칼 양이온과 정전기적으로 상호작용해, 이온들이 서로 이어진 '퍼콜레이션 이온 네트워크(PIN)'를 형성하는 것을 확인하였고, 이 네트워크가 정공 이동의 핵심 경로라는 점을 규명했다. 전원자 분자동역학 시뮬레이션에서 도펀트가 있는 계는 라디칼의 60% 이상이 연결된 네트워크에 참여했지만, 도펀트가 없는 계에서는 네트워크가 형성되지 않았다. 이 결과는 투과전자현미경 관찰과 정공 이동도 측정(최대 약 1.5배 향상)으로도 확인할 수 있었다. 이후, 이 도펀트를 박막 안에서 중합시켜 네트워크 구조를 고정했다. 그 결과 25.59%의 광전변환효율을 달성했다. 또한 85 °C에서 1,600시간 이상 초기 효율의 90% 이상을, 상대습도 60% 조건에서 800시간 동안 95% 이상을 유지했다. (기대효과) 기존 Li-TFSI·tBP 기반 도핑은 수분과 열에 의한 열화를 일으켜왔다. 이번 연구는 이 문제를 줄이면서 효율과 안정성을 함께 높이는 도펀트 설계 원리를 제시했다. 나아가 도펀트로 퍼콜레이션 네트워크를 제어해 전하 수송을 높이는 전략은 비정질 유기반도체 전반에 적용할 수 있어, 열전소자와 유기박막트랜지스터 등 다른 분야로도 확장될 것으로 기대된다.
Abstract (영문)	Professor Chang Yun Son's research team from the Department of Chemistry at SNU and collaborators found that ionic dopants link radical cations in spiro-OMeTAD into a percolating network that accelerate hole transport. Then, fixing it by polymerizing the dopant gave perovskite solar cells higher efficiency and stability.

연구 추진 배경, 성과, 기대효과 등	Doping spiro-OMeTAD has contributed to the power conversion efficiency (PCE) improvement of perovskite solar cells. Nevertheless, the actual roles of the radical and dopant, and their influence on the hole transport, have not been identified much. Herein, we explore the roles of the radical and dopant in doped spiro-OMeTAD and study their effects on hole transport. In particular, we identify the formation of a percolating ionic network (PIN), driven by cooperative radical-dopant interactions, as a previously unrecognized origin of efficient hole transport in doped spiro-OMeTAD. Moreover, we optimized the dopant design by changing the cation bulkiness to maximize hole transport without co-solvents. Finally, we introduce in situ polymerization of the dopant for fixation of the percolated network to improve morphological stability. As a result, we achieve 25.59% PCE with improved stability, retaining over 90% of its initial efficiency after 1600 h under 85 °C and over 95% after 800 h under 60 ± 10% relative humidity.
Journal Link	https://doi.org/10.1021/acsenenergylett.6c01191

□ 본문

연구 내용	□ 문단 1 ○ 서울대학교 자연과학대학 화학부 손창윤 교수 연구팀이 POSTECH·KAIST 연구진과 함께, 페로브스카이트 태양전지 안에서 정공이 빠르게 이동할 수 있는 ‘전하 고속도로’가 만들어지는 원리를 밝혀냈다. 연구팀은 기존에 전하의 양을 늘리는 첨가제로만 여겨졌던 이온성 도펀트가 흩어져 있던 전하 운반 지점을 서로 연결해 박막 전체를 관통하는 ‘퍼콜레이션 이온 네트워크 (Percolating Ionic Network, PIN)’를 형성한다는 사실을 분자동역학 시뮬레이션으로 규명하고, 이를 실제 태양전지에서 실증하여 태양전지의 효율과 안정성을 동시에 높였다. 연구 결과는 에너지 분야 국제학술지 'ACS 에너지 레터스(ACS Energy Letters)'에 게재됐다. □ 문단 2 ○ 태양전지가 빛을 받으면 음전하를 띤 전자와 양전하에 해당하는 ‘정공’이 만들어진다. 이 정공을 전극까지 운반하는 역할을 하는 것이 정공수송층이다. 대표적인 정공수송 소재인 Spiro-OMeTAD에서는 산화된 분자가 정공이 이동하는 ‘징검다리’ 역할을 한다. 하지만 이 지점들이 작은 무리로 흩어져 있으면 이동 경로가 자주 끊겨 전하 손실이 커진다. 연구팀은 이온성 도펀트를
-------	--

	이용해 떨어져 있던 지점들을 서로 연결했다. 흩어진 골목길을 이어 재료 전체를 가로지르는 전하고속도로를 만든 셈이다. 형성된 네트워크에는 전체 전하 운반 지점의 60% 이상이 참여했으며, 최적 조건에서는 정공 이동도가 약 48% 증가했다. ○ 연구팀은 여기에 그치지 않고 이 전하고속도로를 박막 안에서 중합을 통해 고정했다. 그 결과 최고 25.59%의 광전변환효율을 달성했으며, 밀봉하지 않은 소자도 85℃에서 1,639시간이 지난 뒤 초기 효율의 90%를 유지했다. 즉, 전하가 잘 이동하는 길을 만드는 것과 그 길이 열과 습기에도 무너지지 않도록 고정하는 것을 동시에 구현한 것이다. ○ 이번 연구는 도펀트를 단순히 ‘전하의 수를 늘리는 첨가제’가 아니라 ‘전하가 이동할 길을 설계하는 물질’로 바라봤다는 데 의미가 있다. 이러한 접근은 태양전지와 유기반도체를 넘어, 향후 배터리·전기화학 소자·센서·에너지 저장 및 변환 소재처럼 이온과 전하의 이동을 정밀하게 제어해야 하는 분야에도 새로운 소재 설계 개념을 제공할 수 있을 것으로 기대된다. □ 문단 3 ○ 손창윤 교수는 “이번 연구는 시뮬레이션을 통해 분자 수준에서 전하가 이동할 길을 설계하고, 이를 실제 소재 합성과 소자 실험으로 구현해 성능 향상까지 확인했다는 데 의미가 있다”며 “앞으로 계산과 실험을 연결하는 분자 수준의 소재 설계를 통해 에너지·전자 소재의 새로운 기능을 보다 빠르게 발굴할 수 있을 것으로 기대한다”고 말했다. 한편, 화학부 손창윤 교수, 홍승빈 통합과정, 포스텍 김도현 박사, KAIST(한국과학기술원) 생명화학공학과 문홍철 교수, 김성룡 박사 공동 연구팀이 수행한 이번 연구는 미래소재디스커버리+사업, AI+S&T혁신사업, 도레이펠로우십, 중견연구사업 등의 지원을 받아 이뤄졌다.
연구 결과	서울대학교 자연과학대학 화학부 손창윤 교수 연구팀이 POSTECH·KAIST 연구진과 함께, 페로브스카이트 태양전지 안에서 정공이 빠르게 이동할 수 있는 ‘전하 고속도로’가 만들어지는 원리를 밝혀냈다. 연구팀은 기존에 전하의 양을 늘리는 첨가제로만 여겨졌던 이온성 도펀트가 흩어져 있던 전하 운반 지점을 서로 연결해 박막 전체를 관통하는 ‘퍼콜레이션 이온 네트워크(Percolating Ionic Network, PIN)’를 형성한다는 사실을 분자동역학 시뮬레이션으로 규명하고, 이를 실제 태양전지에서 실증하여 태양전지의 효율과 안정성을 동시에 높였다. 연구 결과는 에너지 분야 국제학술지 'ACS 에너지 레터스(ACS Energy Letters)'에 게재됐다.

용어 설명 (선택)	※ 보도자료에 포함된 전문 용어에 대한 간단한 설명
그림 설명 (선택)	전체적인 시스템과 현상의 설명입니다