



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2024-0162633
(43) 공개일자 2024년11월18일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)

C07C 309/11 (2006.01) C07D 471/06 (2006.01)
H10K 30/15 (2023.01) H10K 30/81 (2023.01)
H10K 30/85 (2023.01) H10K 30/86 (2023.01)
H10K 85/50 (2023.01)

(52) CPC특허분류

C07C 309/11 (2013.01)
C07D 471/06 (2013.01)

(21) 출원번호 10-2023-0059392

(22) 출원일자 2023년05월08일

심사청구일자 2023년05월08일

(71) 출원인

울산과학기술원

울산광역시 울주군 언양읍 유니스트길 50

고려대학교 산학협력단

서울특별시 성북구 안암로 145, 고려대학교 (안암
동5가)

(72) 발명자

송명훈

울산광역시 울주군 언양읍 유니스트길 50

노영욱

울산광역시 울주군 언양읍 유니스트길 50

(뒷면에 계속)

(74) 대리인

특허법인 무한

전체 청구항 수 : 총 14 항

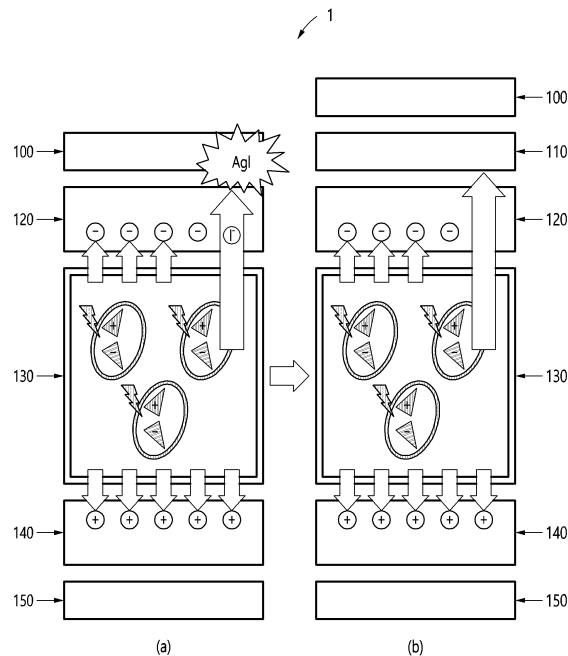
(54) 발명의 명칭 고효율, 고안정성 페로브스카이트 태양전지를 위한 이온포획층

(57) 요약

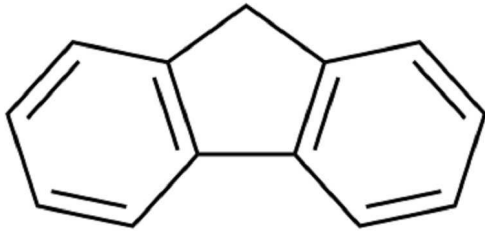
본 발명은 하기의 화학식 1 또는 화학식 2 를 포함하는 주쇄; 탄소수 2 내지 20의 알킬기, 아릴기(aryl), 알콕시
기 및 벤질기로 이루어진 군으로부터 선택되는 적어도 어느 하나를 포함하는 부쇄(-R); 및 이온성 작용기;를 포
함하는, 공액계 화합물에 관한 것이다.

(뒷면에 계속)

대표도 - 도1

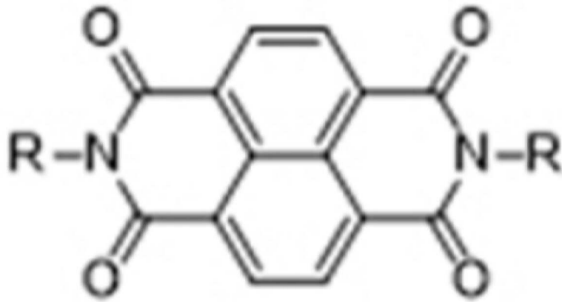


[화학식 1]



(화학식 1은 플루오렌 단분자 또는 플루오렌 고분자를 포함한다.)

[화학식 2]



(화학식 2는 나프탈렌 다이이미이드 단분자 또는 나프탈렌 다이이미이드 고분자를 포함한다.)

(52) CPC특허분류

H10K 30/15 (2023.02)

H10K 30/81 (2023.02)

H10K 30/85 (2023.02)

H10K 30/86 (2023.02)

H10K 85/50 (2023.02)

(72) 발명자

우한영

서울특별시 강남구 선릉로69길 19, 107동 2003호
(역삼동, 역삼래미안아파트)

하정민

서울특별시 성북구 고려대로30길, 8502호

이 발명을 지원한 국가연구개발사업

과제고유번호 1415186730
 과제번호 20213091010010
 부처명 산업통상자원부
 과제관리(전문)기관명 한국에너지기술평가원
 연구사업명 신재생에너지핵심기술개발
 연구과제명 슈퍼 태양전지 - 실리콘 이론한계 돌파형 (> 35%) 이중접합 태양전지 개발
 기 여 율 25/100
 과제수행기관명 울산과학기술원
 연구기간 2023.01.01 ~ 2023.12.31

이 발명을 지원한 국가연구개발사업

과제고유번호 1711156711
 과제번호 2019M1A2A2072416
 부처명 기획재정부
 과제관리(전문)기관명 한국연구재단
 연구사업명 기후변화대응기술개발
 연구과제명 투광형 탠덤 지향 고효율 페로브스카이트 태양전지 기술과 상용화를 위한 대면적화
 및 안정성 향상 기술 개발
 기 여 율 25/100
 과제수행기관명 울산과학기술원
 연구기간 2022.01.01 ~ 2022.12.31

이 발명을 지원한 국가연구개발사업

과제고유번호 1711188171
 과제번호 2019R1A2C2085290
 부처명 과학기술정보통신부
 과제관리(전문)기관명 한국연구재단
 연구사업명 개인기초연구(과기정통부)
 연구과제명 자가 정렬 유도 신개념 에너지 하베스팅 도너-억셉터 분자 시스템
 기 여 율 40/100
 과제수행기관명 고려대학교 산학협력단
 연구기간 2023.03.01 ~ 2024.02.29

이 발명을 지원한 국가연구개발사업

과제고유번호 1345364286
 과제번호 2019R1A6A1A11044070
 부처명 교육부
 과제관리(전문)기관명 한국연구재단
 연구사업명 이공학학술연구기반구축
 연구과제명 기초과학연구소
 기 여 율 10/100
 과제수행기관명 고려대학교 산학협력단
 연구기간 2023.03.01 ~ 2024.02.29

명세서

청구범위

청구항 1

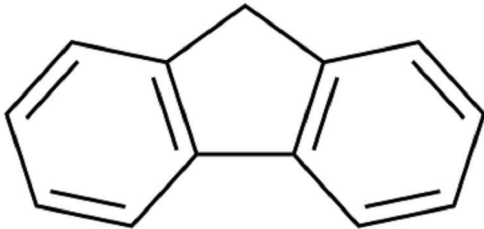
하기의 화학식 1 또는 화학식 2 를 포함하는 주쇄;

탄소수 2 내지 20의 알킬기, 아릴기(aryl), 알콕시기 및 벤질기로 이루어진 군으로부터 선택되는 적어도 어느 하나를 포함하는 부쇄(-R); 및

이온성 작용기;를 포함하는,

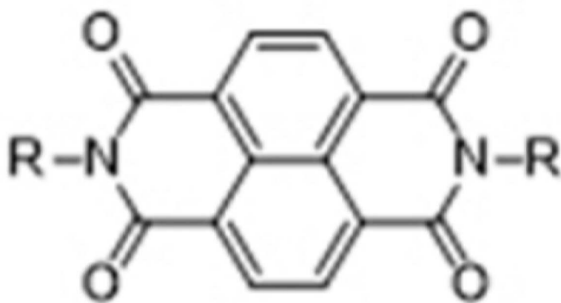
공액계 화합물.

[화학식 1]



(화학식 1은 플루오렌 단분자 또는 플루오렌 고분자를 포함한다.)

[화학식 2]



(화학식 2는 나프탈렌 다이이미이드 단분자 또는 나프탈렌 다이이미이드 고분자를 포함한다.)

청구항 2

제1항에 있어서,

상기 이온성 작용기는,

프비터 이온성 작용기, 음이온성 작용기, 양이온성 작용기로 이루어진 군으로부터 선택되는 적어도 어느 하나를 포함하는 것인,

공액계 화합물.

청구항 3

제2항에 있어서,

상기 이온성 작용기는,

카복실레이트($-\text{CO}_2^-$), 카보네이트($-\text{OCO}_2^-$), 포스페이트($-\text{PO}_4^{2-}$), 포스포네이트($-\text{PO}_3^{2-}$), 포스파이트($-\text{OPO}_2^{2-}$), 술포네이트($-\text{SO}_3^-$), 술페이트($-\text{SO}_4^-$), 할로젠 음이온(halogen anion), BF_4^- , ClO_4^- , BrO_4^- , AsF_6^- , PF_6^- , SbF_6^- , 암모늄성 작용기($-\text{N}^+\text{R}_3$, R은 H, 알킬기 또는 아릴기), 소듐(Na^+), 포타슘(K^+), 리튬(Li^+), 암모늄(NR_4^+ , R은 H, 알킬기, 또는 아릴기) 및 포스포늄(PR_4^+ , R은 H, 알킬기, 또는 아릴기)으로 이루어진 군에서 선택되는 적어도 어느 하나를 포함하는 것인,

공액계 화합물.

청구항 4

제1항에 있어서,

상기 공액계 화합물은 단위체당 2개 이상의 상기 이온성 작용기를 포함하는 것인,

공액계 화합물.

청구항 5

제1항에 있어서,

상기 공액계 화합물 중 상기 주쇄가 포함하는 탄소와 상기 부쇄가 포함하는 탄소의 몰 비율이 1 : 0.4 내지 5 인 것인,

공액계 화합물.

청구항 6

제1항에 있어서,

상기 공액계 화합물은, NDI-ZI 또는 MPS-TMA인 것인,

공액계 화합물.

청구항 7

제1 전극;

상기 제1 전극 상에 형성되는 정공 수송층;

상기 정공 수송층 상에 형성되는 페로브스카이트 화합물을 포함하는 광활성층;

상기 광활성층 상에 형성되는 전자 수송층; 및

상기 이온포획층 상에 형성되는 제2 전극; 을 포함하고,
상기 제1 전극, 상기 정공 수송층, 상기 광활성층 또는 전자 수송층 상에 형성되고, 제1항 내지 제6항 중 어느 한 항의 공액계 화합물을 포함하는 이온포획층; 을 포함하는,
페로브스카이트 태양전지.

청구항 8

제7항에 있어서,
상기 이온포획층의 두께는 2 nm 내지 10 nm 인 것인,
페로브스카이트 태양전지.

청구항 9

제7항에 있어서,
상기 페로브스카이트 태양전지 전체 두께 대비 상기 이온포획층의 두께비는 1 : 0.002 내지 1 : 0.01인 것인,
페로브스카이트 태양전지.

청구항 10

제7항에 있어서,
상기 페로브스카이트 태양전지 중 상기 이온포획층의 중량%는 0.01 중량% 내지 0.05 중량%인 것인,
페로브스카이트 태양전지.

청구항 11

제7항에 있어서,
상기 페로브스카이트 태양전지는,
500 시간의 구동에서 광전효율이 85 % 이상인 것인,
페로브스카이트 태양전지.

청구항 12

제7항에 있어서,
상기 제1 전극은,
유연 투명 전극 기관, 인듐 틴 옥사이드(ITO), 플루오린 틴 옥사이드(FTO), 알루미늄 징크 옥사이드(AZO), 보론 도핑된 징크 옥사이드(BZO), 니오븀 티타늄 옥사이드(NTO), 징크 틴 옥사이드(ZTO) 및 인듐 징크 틴 옥사이드(IZTO)로 이루어진 군으로부터 선택되는 적어도 어느 하나를 포함하고,
상기 제2 전극은,
은(Ag), 알루미늄(Al), 백금(Pt), 텅스텐(W), 구리(Cu), 몰리브덴(Mo), 금(Au), 니켈(Ni), 팔라듐(Pd) 및 탄소(C)로 이루어진 군으로부터 선택되는 적어도 어느 하나를 포함하는 것인,

페로브스카이트 태양전지.

청구항 13

제7항에 있어서,

상기 전자 수송층은, ZnO, ZnO:Al, ZnO:B, ZnO:Ga, ZnO:N, SnO, SnO₂, ITO, TiO₂, Cs₂CO₃, 6,6-페닐-C61-부틸릭 엑시드메틸에스터(PCBM(C61)), PCBM(C60), PCBM(C70), PCBM(C71), PCBM(C76), PCBM(C80), PCBM(C82), indene-C60 bisadduct(ICBA) 및 6,6-페닐-C61-부틸릭엑시드콜레스테릴에스터(PCBCR) 중에서 선택되는 플러렌 유도체, 폴리벤지미다졸(polybenzimidazole), 페릴렌(perylene), poly[[N,N'-bis(2-octyldodecyl)-naphthalene-1,4,5,8-bis(dicarboximide)-2,6-diyl]-alt-5,5'-(2,2'-bithiophene)](NDI2OD-T2), naphthalene diimide(NDI)-selenophene copolymer(PNDIS-HD), poly[(E)-2,7-bis(2-decyltetradecyl)-4-methyl-9-(5-(2-(5-methylthiophen-2-yl)vinyl)thiophen-2-yl)benzo[lmn][3,8]phenanthroline-1,3,6,8(2H, 7H)-tetraone](PNDI-TVT), poly[[N,N'-bis(2-hexyldecyl)naphthalene-1,4,5,8-bis(dicarboximide)-2,6-diyl]-alt-5,5'-thiophene](PNDI2HD-T), NiOx 및 P형 산화물 반도체로 이루어지는 균으로부터 선택되는 적어도 어느 하나를 포함하는 것인,

페로브스카이트 태양전지.

청구항 14

제7항에 있어서,

상기 정공 수송층은,

Spiro-OMeTAL, PTAA (poly(triarylamine), poly[bis(4-phenyl)(2,4,6-trimethylphenyl)amine]), PEDOT:PSS(Poly(3,4-ethylenedioxythiophene doped with poly(styrenesulfonic acid), 사이클로펜타-[2,1-b;3,4-b']-디티오펜(cyclopenta-[2,1-b;3,4-b']-dithiophene), 벤조티아디아졸(benzothiadiazole), 디케토피롤로피롤(diketopyrrolopyrrole), 티에노[3,4-b]티오펜(thieno[3,4-b]thiophene), 벤조디티오펜(benzodithiophene), 카르바졸(carbazole), 플루오렌(fluorene), PEDOT:PSS (poly(3,4-ethylenedioxythiophene) poly(styrenesulfonate), PS-PAA (polystyrene-polyacrylic acid block copolymer), poly-TPD(Poly(4-butylphenyl-diphenyl-amine)), PPV (polyphenylene vinylene), PVP (polyvinylpyrrolidone), NiOx 및 p형 산화물 소재로 이루어지는 균으로부터 선택되는 적어도 어느 하나를 포함하는 것인,

페로브스카이트 태양전지.

발명의 설명

기술 분야

[0001] 본 발명은 고효율, 고안정성 페로브스카이트 태양전지를 위한 이온포획층에 관한 것이다.

배경 기술

[0003] 태양 전지는 태양광 발전의 핵심 부품으로, 광원인 빛에너지를 전기로 전환하여 발전한다. 태양 전지의 효율은 발전량과 직결되기 때문에 이를 높이기 위한 소재 연구가 계속되었고, 태양 전지는 다결정질(polycrystalline) 또는 단결정질(single crystalline) 실리콘을 이용하여 만들어진 1세대 태양 전지 및 박막(thin film)의 2세대 태양 전지를 거쳐 페로브스카이트 태양 전지(perovskite solar cell, PSC)를 포함하는 3세대 태양 전지까지 지속적으로 발전하고 있다.

[0004] 페로브스카이트 태양전지에서 안정성 및 성능을 향상시키고, 효율을 높이기 위한 다양한 방법들이 연구되고 있다. 페로브스카이트 내부의 아이오다이드 확산에 의한 열화현상을 막기 위하여 계면층을 도입하여 아이오다이드

를 물리적으로 막아 소자의 안정성을 향상시켰으나, 물리적인 이온의 방해로 소자의 안정성이 상업적으로 쓰이기에는 매우 부족하고, 기존의 사용하던 전극인 은을 사용하지 않고 1D/2D/1D 구조를 사용하여 공정상 매우 어렵다. (*Nano Energy* 71. (2020) 104567) 최근에는, 암모니아를 이용하여 페로브스카이트의 결정 성장을 조절하고 이를 통하여 높은 품질의 페로브스카이트 필름을 형성하여 고효율 고안정성의 소자를 제작한 논문이 보고되었으나 (*Nat. Comm.* 13. 1. (2022) 4417), 페로브스카이트층 열화에 따른 아이오다이드 이탈 및 은 전극과의 반응이 일어나, 페로브스카이트 열분해로 인한 이온의 이동에 대한 분석이 이루어지지 않았고, 이온의 이동으로 인한 은 전극의 열화는 안정성에서 고려하지 않은 한계점이 있다.

[0005] 전술한 배경기술은 발명자가 본원의 개시 내용을 도출하는 과정에서 보유하거나 습득한 것으로서, 반드시 본 출원 전에 일반 공중에 공개된 공지기술이라고 할 수는 없다.

발명의 내용

해결하려는 과제

[0007] 본 발명은 상술한 문제를 해결하기 위해, 고효율, 고안정성 페로브스카이트 태양전지를 위한 이온포획층을 제공하고자 한다.

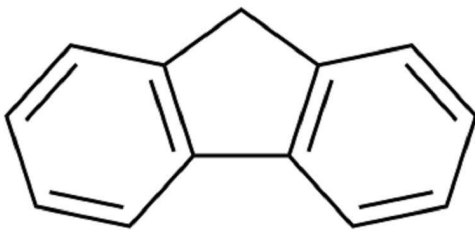
[0008] 구체적으로, 본 발명에 따르면, 페로브스카이트 태양전지에 이온 포획층을 전자수송층과 은 전극 사이에 도입하여 전하전달을 향상시킴과 동시에 아이오다이드 이온의 확산 및 은 전극과 상호간의 반응을 저지하여 안정성을 향상시키고, 전체적인 성능을 개선시킨 고효율, 고안정성 페로브스카이트 태양전지를 제공하고자 한다.

[0009] 그러나, 본 발명이 해결하고자 하는 과제는 이상에서 언급한 과제로 제한되지 않으며, 언급되지 않은 또 다른 과제들은 아래의 기재로부터 해당 기술분야의 통상의 지식을 가진 자에게 명확하게 이해될 수 있을 것이다.

과제의 해결 수단

[0011] 본 발명의 공역계 화합물은, 하기의 화학식 1 또는 화학식 2 를 포함하는 주쇄; 탄소수 2 내지 20의 알킬기, 아릴기(aryl), 알콕시기 및 벤질기로 이루어진 군으로부터 선택되는 적어도 어느 하나를 포함하는 부쇄(-R); 및 이온성 작용기;를 포함한다.

[0012] [화학식 1]

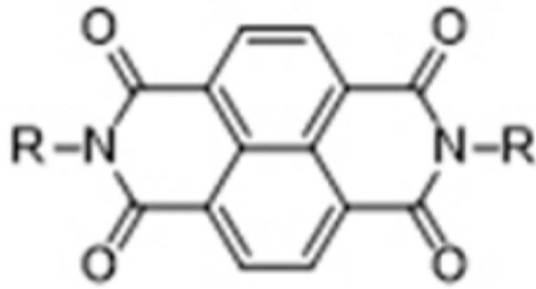


[0013]

[0014] (화학식 1은 플루오렌 단분자 또는 플루오렌 고분자를 포함한다.)

[0015]

[0016] [화학식 2]



[0017]

[0018] (화학식 2는 나프탈렌 다이이미이드 단분자 또는 나프탈렌 다이이미이드 고분자를 포함한다.)

[0019] 일 실시예에 따르면, 상기 이온성 작용기는, 쯔비터 이온성 작용기, 음이온성 작용기, 양이온성 작용기로 이루어진 군으로부터 선택되는 적어도 어느 하나를 포함하는 것일 수 있다.

[0020] 일 실시예에 따르면, 상기 이온성 작용기는, 카복실레이트($-\text{CO}_2^-$), 카보네이트($-\text{OCO}_2^-$), 포스페이트($-\text{PO}_4^{2-}$), 포스포네이트($-\text{PO}_3^{2-}$), 포스파이트($-\text{OPO}_2^{2-}$), 술포네이트($-\text{SO}_3^-$), 술페이트($-\text{SO}_4^-$), 할로젠 음이온(halogen anion), BF_4^- , ClO_4^- , BrO_4^- , AsF_6^- , PF_6^- , SbF_6^- , 암모늄성 작용기($-\text{N}^+\text{R}_3$, R은 H, 알킬기 또는 아릴기), 소듐(Na^+), 포타슘(K^+), 리튬(Li^+), 암모늄(NR_4^+ , R은 H, 알킬기, 또는 아릴기) 및 포스포늄(PR_4^+ , R은 H, 알킬기, 또는 아릴기)으로 이루어진 군에서 선택되는 적어도 어느 하나를 포함하는 것일 수 있다.

[0021] 일 실시예에 따르면, 상기 공액계 화합물은 단위체당 2개 이상의 상기 이온성 작용기를 포함하는 것일 수 있다.

[0022] 일 실시예에 따르면, 상기 공액계 화합물 중 상기 주쇄가 포함하는 탄소와 상기 부쇄가 포함하는 탄소의 몰 비율이 1 : 0.4 내지 5 인 것일 수 있다.

[0023] 일 실시예에 따르면, 상기 공액계 화합물은, NDI-ZI 또는 MPS-TMA인 것일 수 있다.

[0024] 본 발명의 페로브스카이트 태양전지는 제1 전극; 상기 제1 전극 상에 형성되는 정공 수송층; 상기 정공 수송층 상에 형성되는 페로브스카이트 화합물을 포함하는 광활성층; 상기 광활성층 상에 형성되는 전자 수송층; 및 상기 이온포획층 상에 형성되는 제2 전극;을 포함하고, 상기 제1 전극, 상기 정공 수송층, 상기 광활성층 또는 전자 수송층 상에 형성되고, 제1항 내지 제6항 중 어느 한 항의 공액계 화합물을 포함하는 이온포획층;을 포함한다.

[0025] 일 실시예에 따르면, 상기 이온포획층의 두께는 2 nm 내지 10 nm 인 것일 수 있다.

[0026] 일 실시예에 따르면, 상기 페로브스카이트 태양전지 전체 두께 대비 상기 이온포획층의 두께비는 1 : 0.002 내지 1 : 0.01 인 것일 수 있다.

[0027] 일 실시예에 따르면, 상기 페로브스카이트 태양전지 중 상기 이온포획층의 중량%는 0.01 중량% 내지 0.05 중량% 인 것일 수 있다.

[0028] 일 실시예에 따르면, 상기 페로브스카이트 태양전지는, 500 시간의 구동에서 광전효율이 85 % 이상인 것일 수 있다.

[0029] 일 실시예에 따르면, 상기 제1 전극은, 유연 투명 전극 기관, 인듐 틴 옥사이드(ITO), 플루오린 틴 옥사이드(FTO), 알루미늄 징크 옥사이드(AZO), 보론 도핑된 징크 옥사이드(BZO), 니오븀 티타늄 옥사이드(NTO), 징크 틴 옥사이드(ZTO) 및 인듐 징크 틴 옥사이드(IZTO)로 이루어진 군으로부터 선택되는 적어도 어느 하나를 포함하고, 상기 제2 전극은, 은(Ag), 알루미늄(Al), 백금(Pt), 텅스텐(W), 구리(Cu), 몰리브덴(Mo), 금(Au), 니켈(Ni), 팔라듐(Pd) 및 탄소(C)로 이루어진 군으로부터 선택되는 적어도 어느 하나를 포함하는 것일 수 있다.

[0030] 일 실시예에 따르면, 상기 전자 수송층은, ZnO , ZnO:Al , ZnO:B , ZnO:Ga , ZnO:N , SnO , SnO_2 , ITO, TiO_2 , Cs_2CO_3 , 6,6-페닐-C61-부틸릭에시드메틸에스터(PCBM(C61)), PCBM(C60), PCBM(C70), PCBM(C71), PCBM(C76), PCBM(C80),

PCBM(C82), indene-C60 bisadduct(ICBA) 및 6,6-페닐-C61-부틸릭엑시드콜레스테릴에스터(PCBCR) 중에서 선택되는 플러렌 유도체, 폴리벤지미다졸(polybenzimidazole), 페릴렌(perylene), poly[[N,N'-bis(2-octyldodecyl)-naphthalene-1,4,5,8-bis(dicarboximide)-2,6-diyl]-alt-5,5'-(2,2'-bithiophene)](NDI2OD-T2), naphthalene diimide(NDI)-selenophene copolymer(PNDIS-HD), poly[(E)-2,7-bis(2-decyltetradecyl)-4-methyl-9-(5-(5-methylthiophen-2-yl)vinyl)thiophen-2-yl)benzo[lmn][3,8] phenanthroline-1,3,6,8(2H, 7H)-tetraone](PNDI-TVT), poly[[N,N'-bis(2-hexyldecyl)naphthalene-1,4,5,8-bis(dicarboximide)-2,6-diyl]-alt-5,5'-thiophene](PNDI2HD-T), NiOx 및 P형 산화물 반도체로 이루어지는 균으로부터 선택되는 적어도 어느 하나를 포함하는 것일 수 있다.

[0031] 일 실시예에 따르면, 상기 정공 수송층은, Spiro-OMeTAL, PTAA (poly(triarylamine), poly[bis(4-phenyl)(2,4,6-trimethylphenyl)amine]), PEDOT:PSS(Poly(3,4-ethylenedioxythiophene doped with poly(styrenesulfonic acid), 사이클로펜타-[2,1-b;3,4-b']-디티오펜 (cyclopenta-[2,1-b;3,4-b']-dithiophene), 벤조티아디아졸 (benzothiadiazole), 디케토피롤로피롤 (diketopyrrolopyrrole), 티에노[3,4-b]티오펜(thieno[3,4-b]thiophene), 벤조디티오펜 (benzodithiophene), 카르바졸 (carbazole), 플루오렌 (fluorene), PEDOT:PSS (poly(3,4-ethylenedioxythiophene) poly(styrenesulfonate), PS-PAA (polystyrene-polyacrylic acid block copolymer), poly-TPD(Poly(4-butylphenyl-diphenyl-amine)), PPV (polyphenylene vinylene), PVP (polyvinylpyrrolidone), NiOx 및 p형 산화물 소재로 이루어지는 균으로부터 선택되는 적어도 어느 하나를 포함하는 것일 수 있다.

발명의 효과

[0033] 본 발명은 고효율, 고안정성 페로브스카이트 태양전지를 위한 이온포획층을 제공할 수 있다.

[0034] 본 발명에 따른 이온포획층은 페로브스카이트 태양전지에서 아이오다이드 이온(I^-)의 확산 방지를 위해 물리적 차단이 아닌 화학적 포획 능력을 갖는 이온성 작용기를 도입하여 페로브스카이트 태양전지의 장기 안정성을 향상시킬 수 있다. 또한, 본 발명에 따른 이온포획층은 페로브스카이트 태양전지에서 전하전달층의 분리를 막아 암전류를 억제하고, 단락전류와 충전율을 높여 소자의 전체적인 성능을 개선할 수 있다. 본 발명에 따른 페로브스카이트 태양전지는 빛과 열에 높은 안정성을 보일 수 있고, 충전율 및 광전효율이 향상된 페로브스카이트 태양전지를 제공할 수 있다.

도면의 간단한 설명

[0036] 도 1은 본 발명의 실시예에 따른 페로브스카이트 태양 전지(1)의 단면도이다.

도 2는 본 발명의 실시예에 따른 이온포획층이 포함하고 있는 공액계 화합물의 분자 구조를 나타낸 것이다.

도 3은 본 발명의 실시예 및 비교예에 따른 페로브스카이트 태양 전지의 (a) 빛 안정성 및 (b) 열 안정성을 나타낸 그래프이다.

도 4는 본 발명의 실시예 및 비교예에 따른 페로브스카이트 태양 전지의 (a) 충전율 및 (b) 광전효율을 나타낸 그래프이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0037] 이하에서, 첨부된 도면을 참조하여 실시예들을 상세하게 설명한다. 그러나, 실시예들에는 다양한 변경이 가해질 수 있어서 특허출원의 권리 범위가 이러한 실시예들에 의해 제한되거나 한정되는 것은 아니다. 실시예들에 대한 모든 변경, 균등물 내지 대체물이 권리 범위에 포함되는 것으로 이해되어야 한다.

[0038] 실시예에서 사용한 용어는 단지 설명을 목적으로 사용된 것으로, 한정하려는 의도로 해석되어서는 안된다. 단수의 표현은 문맥상 명백하게 다르게 뜻하지 않는 한, 복수의 표현을 포함한다. 본 명세서에서, "포함하다" 또는 "가지다" 등의 용어는 명세서 상에 기재된 특징, 숫자, 단계, 동작, 구성요소, 부품 또는 이들을 조합한 것이 존재함을 지정하려는 것이지, 하나 또는 그 이상의 다른 특징들이나 숫자, 단계, 동작, 구성요소, 부품 또는 이들을 조합한 것들의 존재 또는 부가 가능성을 미리 배제하지 않는 것으로 이해되어야 한다.

[0039] 다르게 정의되지 않는 한, 기술적이거나 과학적인 용어를 포함해서 여기서 사용되는 모든 용어들은 실시예가 속하는 기술 분야에서 통상의 지식을 가진 자에 의해 일반적으로 이해되는 것과 동일한 의미를 가지고 있다. 일반적으로 사용되는 사전에 정의되어 있는 것과 같은 용어들은 관련 기술의 문맥 상 가지는 의미와 일치하는 의미를 가지는 것으로 해석되어야 하며, 본 출원에서 명백하게 정의하지 않는 한, 이상적이거나 과도하게 형식적인 의미로 해석되지 않는다.

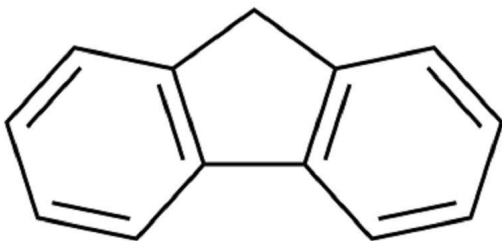
[0040] 또한, 첨부 도면을 참조하여 설명함에 있어, 도면 부호에 관계없이 동일한 구성 요소는 동일한 참조부호를 부여하고 이에 대한 중복되는 설명은 생략하기로 한다. 실시예를 설명함에 있어서 관련된 공지 기술에 대한 구체적인 설명이 실시예의 요지를 불필요하게 흐릴 수 있다고 판단되는 경우 그 상세한 설명을 생략한다. 또한, 실시예의 구성 요소를 설명하는 데 있어서, 제 1, 제 2, A, B, (a), (b) 등의 용어를 사용할 수 있다. 이러한 용어는 그 구성 요소를 다른 구성 요소와 구별하기 위한 것일 뿐, 그 용어에 의해 해당 구성 요소의 본질이나 차례 또는 순서 등이 한정되지 않는다.

[0041] 어느 하나의 실시 예에 포함된 구성요소와, 공통적인 기능을 포함하는 구성요소는, 다른 실시 예에서 동일한 명칭을 사용하여 설명하기로 한다. 반대되는 기재가 없는 이상, 어느 하나의 실시 예에 기재한 설명은 다른 실시 예에도 적용될 수 있으며, 중복되는 범위에서 구체적인 설명은 생략하기로 한다.

[0042] 이하, 본 발명의 고효율, 고안정성 페로브스카이트 태양전지를 위한 이온포획층에 대하여 실시예 및 도면을 참조하여 구체적으로 설명하도록 한다. 그러나, 본 발명이 이러한 실시예 및 도면에 제한되는 것은 아니다.

[0044] 본 발명의 공액계 화합물은, 하기의 화학식 1 또는 화학식 2 를 포함하는 주쇄; 탄소수 2 내지 20의 알킬기, 아릴기(aryl), 알콕시기 및 벤질기로 이루어진 군으로부터 선택되는 적어도 어느 하나를 포함하는 부쇄(-R); 및 이온성 작용기;를 포함한다.

[0045] [화학식 1]

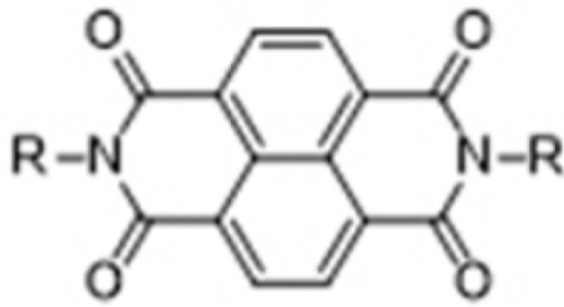


[0046]

[0047] (화학식 1은 플루오렌 단분자 또는 플루오렌 고분자를 포함한다.)

[0048]

[0049] [화학식 2]



[0050]

[0051] (화학식 2는 나프탈렌 다이이미이드 단분자 또는 나프탈렌 다이이미이드 고분자를 포함한다.)

[0053] 일 실시예에 따르면, 본 발명의 페로브스카이트 태양전지는 이온포획층을 포함하는 것일 수 있고, 상기 이온포획층은 상기 공액계 화합물을 포함하는 것일 수 있다.

[0054] 일 실시예에 따르면, 상기 공액계 화합물을 포함하는 이온포획층은 상기 페로브스카이트 태양전지의 구조 변화에 따라 상기 제1 전극, 상기 정공 수송층, 상기 광활성층 또는 전자 수송층 상에 형성될 수 있다.

[0055] 일 실시예에 따르면, 상기 공액계 화합물을 포함하는 이온포획층은 공액구조 분자를 전자전달층 위에 도입하여 분로를 차단할 수 있고, 암전류를 억제하여 상기 페로브스카이트 태양전지의 단락전류 및 충전율을 향상시킬 수 있다.

[0056] 일 실시예에 따르면, 상기 공액계 화합물을 포함하는 이온포획층은 단일 화합물을 용액 공정을 통해 얇은 계면층으로 형성하여 페로브스카이트 태양전지로의 도입이 가능할 수 있다.

[0058] 일 실시예에 따르면, 상기 이온성 작용기는, 쯔비터 이온성 작용기, 음이온성 작용기, 양이온성 작용기로 이루어진 군으로부터 선택되는 적어도 어느 하나를 포함하는 것일 수 있다.

[0059] 일 실시예에 따르면, 상기 이온성 작용기의 강한 이온 상호작용에 의해 상기 태양전지의 구성 요소로부터 열화 및 확산되는 아이오다이드 이온(I^-)의 확산을 방지할 수 있고, 은을 포획할 수 있어, 아이오딘화 은(AgI)의 형성을 근본적으로 차단할 수 있다.

[0061] 일 실시예에 따르면, 상기 이온성 작용기는, 카복실레이트($-CO_2^-$), 카보네이트($-OCO_2^-$), 포스페이트($-PO_4^{2-}$), 포스포네이트($-PO_3^{2-}$), 포스파이트($-OPO_2^{2-}$), 술포네이트($-SO_3^-$), 술페이트($-SO_4^-$), 할로겐 음이온(halogen anion), BF_4^- , ClO_4^- , BrO_4^- , AsF_6^- , PF_6^- , SbF_6^- , 암모늄성 작용기($-N^+R_3$, R은 H, 알킬기 또는 아릴기), 소듐(Na^+), 포타슘(K^+), 리튬(Li^+), 암모늄(NR_4^+ , R은 H, 알킬기, 또는 아릴기) 및 포스포늄(PR_4^+ , R은 H, 알킬기, 또는 아릴기)로 이루어진 군에서 선택되는 적어도 어느 하나를 포함하는 것일 수 있다.

[0062] 일 실시예에 따르면, 상기 이온포획층은 페로브스카이트 태양전지에서 아이오다이드 이온(I^-)의 확산 방지를 위해 물리적 차단이 아닌 화학적 포획 능력을 갖는 상기 이온성 작용기를 도입하여 페로브스카이트 태양전지의 장기 안정성을 향상시킬 수 있어, 전체적인 성능을 개선시킨 고효율, 고안정성 페로브스카이트 태양전지를 제공할 수 있다.

[0064] 일 실시예에 따르면, 상기 공액계 화합물은 단위체당 2개 이상의 상기 이온성 작용기를 포함하는 것일 수 있다.

[0065] 일 실시예에 따르면, 상기 공액계 화합물은, 단위체당 2 개 이상; 3 개 이상; 또는 5 개 이상의 이온성 작용기

를 포함하는 것일 수 있다. 이러한 이온성 작용기에 의해서 상기 페로브스카이트 태양전지의 효율 및 성능을 향상시킬 수 있다. 상기 공액계 화합물은, 소수성의 주쇄 및 부쇄와 이온성 작용기를 도입하여 친수성을 동시에 부여할 수 있다. 상기 공액계 화합물을 포함하는 이온포획층은 양친성 표면 특성을 나타낼 수 있다.

[0067] 일 실시예에 따르면, 상기 공액계 화합물 중 상기 주쇄가 포함하는 탄소와 상기 부쇄가 포함하는 탄소의 몰 비율이 1 : 0.4 내지 5 인 것일 수 있다.

[0068] 일 실시예에 따르면, 상기 공액계 화합물 중 상기 주쇄가 포함하는 탄소와 상기 부쇄가 포함하는 탄소의 몰 비율이 1: 0.4 내지 0.6; 1: 0.4 내지 0.8; 1: 0.4 내지 1; 1: 0.4 내지 1.5; 1: 0.4 내지 2; 1: 0.5 내지 2.5; 1: 0.7 내지 3; 1: 0.9 내지 3.5; 1: 1 내지 4; 1: 1.5 내지 4.5; 1: 2 내지 5;인 것일 수 있다.

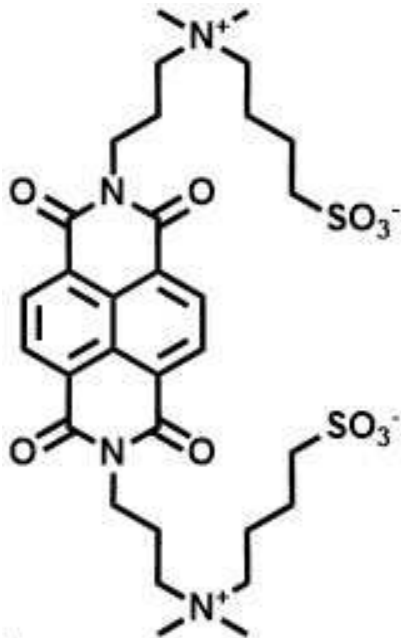
[0069] 일 실시예에 따르면, 상기 공액계 화합물 중 상기 주쇄가 포함하는 탄소와 상기 부쇄가 포함하는 탄소의 몰 비율이 1 : 0.4 미만이면, 용액 공정상 문제가 발생할 수 있고, 1 : 5 초과면, 소자 도입 시 전하 이동을 저해할 가능성이 있다.

[0071] 일 실시예에 따르면, 상기 공액계 화합물은, NDI-ZI 또는 MPS-TMA인 것일 수 있다.

[0072] 도 2는 본 발명의 실시예에 따른 이온포획층이 포함하고 있는 공액계 화합물의 분자구조를 나타낸 것이다. 상기 공액계 화합물은 상기 화학식 1 또는 상기 화학식 2을 포함하는 주쇄, 및 탄소수 2 내지 20의 알킬기, 아릴기(aryl), 알콕시기 및 벤질기로 이루어진 군으로부터 선택되는 적어도 어느 하나를 포함하는 부쇄를 포함하는 공액구조 코어와 이온성 작용기를 포함하는 것일 수 있다.

[0073] 일 실시예에 따르면, 상기 공액계 화합물은, NDI-ZI일 수 있고, 하기의 화학식 3으로 표시되는 화합물인 것일 수 있다. 상기 NDI-ZI는 양,음이온을 모두 구조내 포함하는 켄비터 이온성 작용기를 갖는 공액계 화합물인 것일 수 있다.

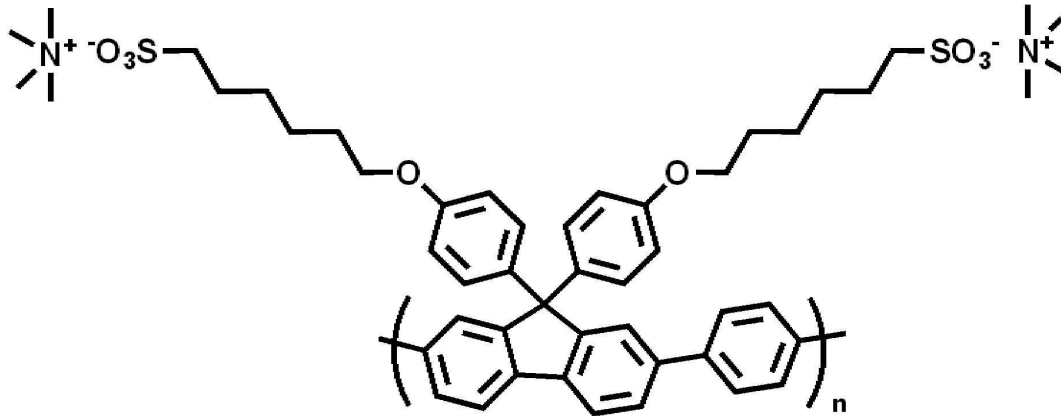
[0074] [화학식 3]



[0075]

[0077] 일 실시예에 따르면, 상기 공액계 화합물은, MPS-TMA일 수 있고, 하기의 화학식 4로 표시되는 화합물인 것일 수 있다. 상기 MPS-TMA는 음이온성 작용기 및 양이온성 켄이온을 갖는 공액계 화합물인 것일 수 있다.

[0079] [화학식 4]



[0080]

[0081] 도 3은 본 발명의 실시예 및 비교예에 따른 페로브스카이트 태양 전지의 (a) 빛 안정성 및 (b) 열 안정성을 나타낸 그래프이다.

[0082] 도 3의 (a)는 본 발명의 실시예에 따른 상기 공액계 화합물로 NDI-ZI 및 MPS-TMA 을 포함하는 이온포획층을 포함한 태양전지와 비교예로 사용된 이온 포획층을 사용하지 않은 기준 태양전지의 빛 안정성을 나타낸 그래프로, 비교예의 태양전지의 경우, 빛에 낮은 안정성을 보이며 급격한 전지 성능의 열화를 나타낸 것일 수 있다.

[0083] 도 3의 (b)는 본 발명의 실시예에 따른 상기 공액계 화합물로 NDI-ZI 및 MPS-TMA 을 포함하는 이온포획층을 포함한 태양전지와 비교예로 사용된 이온 포획층을 사용하지 않은 기준 태양전지의 열 안정성을 나타낸 그래프로, 비교예의 태양전지의 경우, 열에 낮은 안정성을 보이며 급격한 전지 성능의 열화를 나타낸 것일 수 있다.

[0085] 본 발명의 페로브스카이트 태양전지는 제1 전극; 상기 제1 전극 상에 형성되는 정공 수송층; 상기 정공 수송층 상에 형성되는 페로브스카이트 화합물을 포함하는 광활성층; 상기 광활성층 상에 형성되는 전자 수송층; 및 상기 이온포획층 상에 형성되는 제2 전극; 을 포함하고, 상기 제1 전극, 상기 정공 수송층, 상기 광활성층 또는 전자 수송층 상에 형성되고, 제1항 내지 제6항 중 어느 한 항의 공액계 화합물을 포함하는 이온포획층;을 포함한다.

[0086] 도 1은 본 발명의 실시예에 따른 페로브스카이트 태양 전지(1)의 단면도이다.

[0087] 도 1을 참조하면, 도 1의 (a)는 기준 페로브스카이트 태양전지(1)의 단면도를 나타낸 것으로, 제1 전극(150); 상기 제1 전극 상에 형성되는 정공 수송층(140); 상기 정공 수송층 상에 형성되는 페로브스카이트 화합물을 포함하는 광활성층(130); 상기 광활성층 상에 형성되는 전자 수송층(120); 및 상기 전자 수송층 상에 형성되는 제 2 전극(100)을 포함한다. 상기 페로브스카이트를 포함하는 광활성층(130)의 열화가 발생하면 아이오다이드 이온(I⁻)의 이탈할 수 있고, 그에 따라 제1 전극(100)(예:은 전극)과 아이오다이드 이온(I⁻)이 반응하여 아이오딘화 은(AgI)이 형성될 수 있어, 페로브스카이트 태양전지의 성능이 저하될 수 있다.

[0088] 도 1의 (b)는 본 발명의 실시예에 따른 페로브스카이트 태양 전지(1)의 단면도를 나타낸 것으로, 제1 전극(150); 상기 제1 전극 상에 형성되는 정공 수송층(140); 상기 정공 수송층 상에 형성되는 페로브스카이트 화합물을 포함하는 광활성층(130); 상기 광활성층 상에 형성되는 전자 수송층(120); 및 상기 전자 수송층 상에 형성되는 이온 포획층(110); 상기 이온포획층 상에 형성되는 제2 전극(100); 을 포함한다. 상기 공액계 화합물을 포함하는 이온 포획층(110)을 전자수송층(120)과 제2 전극(100) 사이에 도입하여 전하전달을 향상시킬 수 있다. 상기 공액계 화합물을 포함하는 이온 포획층(110)은 아이오다이드 이온(I⁻)의 확산 및 상기 제2 전극(100)과의 상호간의 반응을 저지하여 소자의 안정성을 향상시킬 수 있다. 상기 공액계 화합물을 포함하는 이온 포획층(110)은 아이오다이드 이온(I⁻)의 확산 방지를 위해 물리적 차단이 아닌 화학적 포획 능력을 갖는 이온성 작용기를 포함하는 것일 수 있다. 본 발명의 페로브스카이트 태양전지(1)는 상기 공액계 화합물을 포함하는 이온 포획층(110)을 포함하여, 상기 페로브스카이트 태양전지의 장기 안정성을 향상시킬 수 있고, 전하전달층의 분포를 막아 암전류를 억제할 수 있으며, 단락전류와 충전율을 높여 소자의 전체적인 성능을 개선할 수 있다.

- [0090] 일 실시예에 따르면, 상기 페로브스카이트는 무기금속할라이드 페로브스카이트, 유기 하이브리드 페로브스카이트 등일 수 있다. 예를 들어, 상기 페로브스카이트는 ABX_3 , A_2BX_4 , ABX_4 , $APbX_3$, $A_{n-1}Pb_nI_{3n+1}$ (n 은 2 내지 6사이의 정수) 등의 화학식으로 표시되는 구조일 수 있다. 어떤 예에서 상기 화학식에서 A는 알칼리금속, 유기 양이온(예를 들어, 유기암모늄) 및/또는 무기 양이온이며, B는 금속물질이고, X는 할로겐 음이온, 칼코게나이드 음이온 및 SCN-(thiocyanate)에서 선택될 수 있다. 예를 들어, A는 Na, K, Rb, Cs 또는 Fr의 알칼리금속; $(CH_3NH_3)_n$, $((C_xH_{2x+1})_nNH_3)_2(CH_3NH_3)_n$, $(RNH_3)_2$, $(C_nH_{2n+1}NH_3)_2$, $(CF_3NH_3)_n$, $(CF_3NH_3)_n$, $((C_xF_{2x+1})_nNH_3)_2(CF_3NH_3)_n$, $((C_xF_{2x+1})_nNH_3)_2$ 또는 $(C_nF_{2n+1}NH_3)_2$ (n 은 1이상인 정수, x 는 1 이상인 정수)이고, B는 2가의 전이 금속, 희토류 금속, 알칼리토류 금속, Pb, Sn, Ge, Ga, In, Al, Sb, Bi, Po 등이고, X는 P, Cl, Br, I 등일 수 있다. 어떤 예에서 상기 페로브스카이트는 $CH_3NH_3PbI_3$, $CH_3NH_3PbBr_3$, $CH_3NH_3PbI_2Cl$, $CH_3NH_3PbI_2Br$ 등일 수 있다. 어떤 예에서 상기 페로브스카이트 화합물 중 2종 이상을 포함할 경우에, 제 1 페로브스카이트 화합물 대 제2 페로브스카이트 화합물의 비율은 5:5 내지 9:1일 수 있다. 어떤 예에서 또한, NaX' , ZnX' , KX' 및 CsX' (X 는 Cl, Br 및 I에서 선택 된다.) 등의 화학식으로 표시되는 화합물을 더 포함하고, 전체 페로브스카이트 화합물 중 10 % 이하; 또는 5 % 이하로 포함될 수 있다.
- [0091] 일 실시예에 따르면, 상기 광활성층은 전자와 정공을 두 전극으로 분리하고 전자 및 정공을 각각 전자 수송층 및 정공 수송층으로 분리하는 역할을 수행할 수 있다.
- [0092] 일 실시예에 따르면, 상기 광활성층 중 페로브스카이트 결정립의 크기는 1 nm 내지 900 nm; 1 nm 내지 800 nm; 5 nm 내지 600 nm; 5 nm 내지 300 nm; 10 nm 내지 300 nm; 10 nm 내지 100 nm; 또는 10 nm 내지 50 nm인 것일 수 있다.
- [0093] 일 실시예에 따르면, 상기 광활성층의 두께는, 500 nm 내지 800 nm; 550 nm 내지 700 nm; 바람직하게는, 광활성층의 성능 향상을 위해서 550 nm 내지 650 nm일 수 있다.
- [0094] 일 실시예에 따르면, 상기 제1 전극을 형성할 시, 본 발명에서 언급한 제1 전극을 준비하고, 예를 들어, 기판 상에 전도성 물질층이 코팅된 기판 또는 기판 상에 스퍼터링, CVD, 증착, 용액 공정, 코팅, 프린팅 등을 이용하여 전도성 물질층을 형성할 수 있다.
- [0095] 일 실시예에 따르면, 상기 정공 수송층을 형성할 시, 스퍼터링, CVD, 증착, 용액 공정 코팅, 프린팅 등을 이용하여 정공 수송층을 형성할 수 있으나, 이에 제한되지 않는다.
- [0096] 일 실시예에 따르면, 상기 광활성층을 형성할 시, 코팅 또는 증착 공정을 이용할 수 있으며, 예를 들어, 스핀 코팅, 스프레이 코팅, 슬롯 다이 코팅, 블레이드 코팅 및 증착 중 적어도 하나 이상의 방법으로 페로브스카이트층을 형성할 수 있다. 예를 들어, 증착은 화학기상증착 (CVD), 원자층 증착법 (ALD), 플라즈마 강화 원자층 증착 (PEALD), 분자 빔 에피택시 증착 및 물리기상증착 중 적어도 하나 이상을 이용할 수 있으나, 이에 제한되지 않는다.
- [0097] 일 실시예에 따르면, 상기 전자 수송층을 형성할 시, 코팅 공정을 이용할 수 있으며, 코팅 공정은 스핀 코팅, 스프레이 코팅, 슬롯 다이 코팅 및 블레이드 코팅 중 적어도 하나 이상의 방법을 이용할 수 있으나, 이에 제한되지 않는다.
- [0098] 일 실시예에 따르면, 상기 이온 포획층을 형성할 시, 스퍼터링, CVD, 증착, 용액 공정 코팅, 프린팅 등을 이용하여 정공 수송층을 형성할 수 있으나, 이에 제한되지 않는다.
- [0099] 일 실시예에 따르면, 상기 제2 전극을 형성할 시, 고온 공정에 의해서 전극을 형성하는 것으로, 예를 들어, 10 W 내지 200 W, 25 °C 내지 100 °C 온도 및 0 sccm 내지 100 sccm 산소유량 중 적어도 어느 하나의 공정 조건에서 스퍼터링 공정으로 전극을 형성할 수 있다.
- [0100] 일 실시예에 따르면, 상기 언급한 스퍼터링은, 이온-빔 스퍼터링(Ion-beam sputtering), 반응성 스퍼터링(Reactive sputtering), 이온 보조 증착(Ion-assisted deposition), HiTUS(High-target-utilization sputtering), HiPIMS(High-power impulse magnetron sputtering), 가스-흐름 스퍼터링(Gas flow sputtering), 플라즈마 스퍼터링(plasma sputtering) 등을 이용하고, 상기 증착은, CVD, 열증착(thermal evaporation), 플라즈마 증착(plasma sputtering), 전자빔 증착(e-beam evaporation), 원자층 증착(ALD) 등을 이용하는 것일 수 있다. 상기 코팅은, 용액공정을 이용하고, 예를 들어, 스핀 코팅, 스프레이 코팅, 딥 코팅, 잉크 젯 인쇄, 롤투

를 인쇄, 스크린 인쇄 등의 액상 용매를 사용하여 성막하는 공정을 의미하는 것일 수 있다.

- [0102] 일 실시예에 따르면, 상기 이온포획층의 두께는 2 nm 내지 10 nm인 것일 수 있다.
- [0103] 일 실시예에 따르면, 상기 이온포획층의 두께는 2 nm 내지 3.5 nm; 2 nm 내지 4 nm; 2 nm 내지 5 nm; 2 nm 내지 6 nm; 3 nm 내지 6.5 nm; 4 nm 내지 8 nm; 4.5 nm 내지 8.5 nm; 5 nm 내지 9 nm; 7 nm 내지 10 nm;인 것일 수 있다.
- [0104] 일 실시예에 따르면, 상기 이온포획층의 두께는 2 nm 미만이면, 커버리지(coverage)가 저하되는 문제가 있을 수 있고, 10 nm 초과면, 전하 수송 효율이 감소할 수 있는 문제가 있을 수 있다.
- [0106] 일 실시예에 따르면, 상기 페로브스카이트 태양전지 전체 두께 대비 상기 이온포획층의 두께비는 1 : 0.002 내지 1 : 0.01인 것일 수 있다.
- [0107] 일 실시예에 따르면, 상기 페로브스카이트 태양전지 전체 두께 대비 상기 이온포획층의 두께비는 1 : 0.002 내지 1 : 0.003; 1 : 0.002 내지 1 : 0.004; 1 : 0.002 내지 1 : 0.005; 1 : 0.002 내지 1 : 0.006; 1 : 0.002 내지 1 : 0.008; 1 : 0.003 내지 1 : 0.009; 1 : 0.004 내지 1 : 0.01;인 것일 수 있다.
- [0108] 일 실시예에 따르면, 상기 페로브스카이트 태양전지 전체 두께 대비 상기 이온포획층의 두께비는 1 : 0.002 미만이면, 커버리지(coverage)가 저하되는 문제가 있을 수 있고, 1 : 0.01 초과면, 전하 수송 효율이 감소할 수 있는 문제가 있을 수 있다
- [0110] 일 실시예에 따르면, 상기 페로브스카이트 태양전지 중 상기 이온포획층의 중량%는 0.01 중량% 내지 0.05 중량%인 것일 수 있다.
- [0111] 일 실시예에 따르면, 상기 페로브스카이트 태양전지 중 상기 이온포획층의 중량%는 0.01 중량% 내지 0.015 중량%; 0.01 중량% 내지 0.02 중량%; 0.01 중량% 내지 0.025 중량%; 0.01 중량% 내지 0.03 중량%; 0.015 중량% 내지 0.035 중량%; 0.02 중량% 내지 0.04 중량%; 0.025 중량% 내지 0.05 중량%;인 것일 수 있다.
- [0112] 일 실시예에 따르면, 상기 페로브스카이트 태양전지 중 상기 이온포획층의 중량%는 0.01 중량% 미만이면, 커버리지(coverage)가 저하되는 문제가 있을 수 있고, 0.05 중량% 초과면, 전하 수송 효율이 감소할 수 있는 문제가 있을 수 있다.
- [0114] 일 실시예에 따르면, 상기 페로브스카이트 태양전지는, 500 시간의 구동에서 광전효율이 85 % 이상인 것일 수 있다.
- [0115] 도 4는 본 발명의 실시예 및 비교예에 따른 페로브스카이트 태양 전지의 (a) 충전율 및 (b) 광전효율을 나타낸 그래프이다.
- [0116] 도 4의 (a)는 본 발명의 실시예에 따른 상기 공액계 화합물로 NDI-ZI 및 MPS-TMA 을 포함하는 이온포획층을 포함한 태양전지와 비교예로 사용된 이온 포획층을 사용하지 않은 기준 태양전지의 충전율을 나타낸 그래프로, 실시예는 비교예에 비해 향상된 충전율을 나타내는 것일 수 있다.
- [0117] 도 4의 (b)는 본 발명의 실시예에 따른 상기 공액계 화합물로 NDI-ZI 및 MPS-TMA 을 포함하는 이온포획층을 포함한 태양전지와 비교예로 사용된 이온 포획층을 사용하지 않은 기준 태양전지의 광전효율을 나타낸 그래프로 이온 포획층을 사용하지 않은 비교예의 경우 400 시간 이상의 구동에서 광전효율이 초기값의 80 % 이하로 저하됐으나 이온 포획층을 적용한 실시예의 경우 모두 500 시간 이상 안정한 구동 확인할 수 있다. 따라서, 실시예는 비교예에 비해 향상된 광전효율을 나타내는 것일 수 있다.
- [0119] 일 실시예에 따르면, 상기 제1 전극은, 유연 투명 전극 기판, 인듐 틴 옥사이드(ITO), 플루오린 틴 옥사이드(FTO), 알루미늄 징크 옥사이드(AZO), 보론 도핑된 징크 옥사이드(BZO), 니오븀 티타늄 옥사이드(NTO), 징크 틴 옥사이드(ZTO) 및 인듐 징크 틴 옥사이드(IZTO)로 이루어진 군으로부터 선택되는 적어도 어느 하나를 포함하고,

상기 제2 전극은, 은(Ag), 알루미늄(Al), 백금(Pt), 텅스텐(W), 구리(Cu), 몰리브덴(Mo), 금(Au), 니켈(Ni), 팔라듐(Pd) 및 탄소(C)로 이루어진 군으로부터 선택되는 적어도 어느 하나를 포함하는 것일 수 있다.

[0120] 일 실시예에 따르면, 상기 유연 투명 전극 기판은, 폴리에틸렌 테레프탈레이트 (PET), 폴리에틸렌 설펜(PES), 폴리에틸렌 나프탈레이트(PEN), 폴리카보네이트(PC), 폴리메틸메타크릴레이트(PMMA), 폴리이미드 (PI), 에틸렌 비닐아세테이트(EVA), 아몰포스폴리에틸렌테레프탈레이트(APET), 폴리프로필렌테레프탈레이트(PPT), 폴리에틸렌 테레프탈레이트글리세롤(PETG), 폴리사이클로헥실렌디메틸렌테레프탈레이트(PCTG), 변성트리아세틸셀룰로스 (TAC), 사이클로올레핀폴리머(COP), 사이클로올레핀코폴리머(COC), 디시클로펜타디엔폴리머(DCPD), 시클로펜타 디엔폴리머(CPD), 폴리아릴레이트(PAR), 폴리에테르이미드(PEI), 폴리다이메틸실론세인(PDMS), 실리콘수지, 불 소수지 및 변성에폭시수지로 이루어지는 군으로부터 선택되는 적어도 어느 하나를 포함하는 것일 수 있다.

[0121] 일 실시예에 따르면, 상기 제1 전극은, 캐소드 또는 애노드 전극일 수 있고 탄소나노튜브(CNT), 그래핀, 흑연 등의 탄소동소체, 및 폴리아세틸렌 (polyacetylene), 폴리아닐린 (polyaniline), 폴리티오펜 (polythiophene), 폴리피롤 (polypyrrole) 등과 같은 전도성 고분자 물질을 더 포함할 수 있다. 또한, 상기 제1 전극은, 10 nm 내지 200 nm; 또는 50 nm 내지 150 nm 두께를 가질 수 있다.

[0122] 일 실시예에 따르면, 상기 제2 전극은, 캐소드 또는 애노드 전극일 수 있고, 예를 들어, 투명 전도성, 반투명 전도성 물질 등을 포함할 수 있고, 예를 들어, Co, Ir, Ta, Cr, Mn, Mo, Tc, W, Re, Fe, Sc, Ti, Ge, Sb, Al, Pt, Ni, Cu, Rh, Au, V, Nb, Ag, Pd, Zn, Ni, Si, Sn 및 Ru; 이들의 합금; 및 이들의 산화물;로 이루어진 군에 서 선택된 적어도 어느 하나를 포함하고, 상기 산화물은, ITO, ZITO, ZIO, GIO, ZTO, FTO, AZO, GZO 등의 투명 성 전도성 산화물(TCO) 중 적어도 어느 하나를 포함할 수 있다. 또한, 탄소나노튜브(CNT), 그래핀, 흑연 등의 탄소동소체, 및 폴리아세틸렌(polyacetylene), 폴리아닐린(polyaniline), 폴리티오펜(polythiophene), 폴리피 롤(polypyrrole) 등과 같은 전도성 고분자 물질을 더 포함할 수 있다. 또한, 상기 제2 전극은, 10 nm 내지 200 nm; 또는 50 nm 내지 150 nm 두께를 가질 수 있다.

[0124] 일 실시예에 따르면, 상기 전자 수송층은, ZnO, ZnO:Al, ZnO:B, ZnO:Ga, ZnO:N, SnO, SnO₂, ITO, TiO₂, Cs₂CO₃, 6,6-페닐-C61-부틸릭엑시드메틸에스터(PCBM(C61)), PCBM(C60), PCBM(C70), PCBM(C71), PCBM(C76), PCBM(C80), PCBM(C82), indene-C60 bisadduct(ICBA) 및 6,6-페닐-C61-부틸릭엑시드콜레스테릴에스터(PCBCR) 중에서 선택되 는 플러렌 유도체, 폴리벤지미다졸(polybenzimidazole), 페릴렌(perylene), poly[[N,N'-bis(2-octyldodecyl)- naphthalene-1,4,5,8-bis(dicarboximide)-2,6- diyl]-alt-5,5'-(2,2'-bithiophene)](NDI2OD-T2), naphthalene diimide(NDI)- selenophene copolymer(PNDIS-HD), poly[(E)-2,7-bis(2-decyltetradecyl)-4- methyl-9-(5-(2-(5-methylthiophen-2-yl)vinyl)thiophen-2-yl)benzo[lmn][3,8] phenanthroline-1,3,6,8(2H, 7H)-tetraone] (PNDI-TVT), poly[[N,N' -bis(2-hexyldecyl)naphthalene-1,4,5,8-bis(dicarboximide)-2,6-diyl]-alt-5,5' -thiophene] (PNDI2HD-T), NiOx 및 P형 산화물 반도체로 이루어지는 군으로부터 선택되는 적어도 어느 하나를 포 함하는 것일 수 있다.

[0125] 일 실시예에 따르면, 상기 전자 수송층은, 알루미늄 트리(8-하이드록시퀴놀린)(aluminium tris(8-hydroxyquinoline), Alq3), 리튬플로라이드(LiF), 리튬착체(8-hydroxy-quinolinato lithium, Liq), 비공액 고 분자, 비공액고분자 전해질, 공액고분자 전해질, 또는 n-형 금속 산화물, 저차원 탄소계 물질 등과 같은 재료를 사용하여 형성할 수 있다. 상기 n-형 금속 산화물은 일례로, TiOx, ZnO 또는 Cs₂CO₃ 일 수 있다. 또한, 상기 전 자 수송층으로 금속층의 자기조립 박막을 사용할 수 있다. 저차원 탄소계 물질은, 저차원 탄소계 유기물, 무기 물 또는 이 둘을 포함하고, 예를 들어, C60, C70, C71, C76, C78, C80, C82, C84, C92 PC60BM, PC61BM, PC71BM, ICBA, BCP, PC70BM, IC70BA, PC84BM, 인텐 C60, 인텐 C70, 엔도히드럴 플러렌 등의 플러렌계 화합물; 페릴렌, PTCDA, PTCBI, BCP(bathocuproine), Bphen(4, 7-diphenyl-1,10-phenanthroline), TppPyPB 및 DPPS으로 이루어진 군에서 선택된 적어도 어느 하나 이상을 포함할 수 있으나, 이에 제한되지 않는다.

[0126] 일 실시예에 따르면, 상기 전자 수송층은, 1 nm 내지 100 nm 두께; 1 nm 내지 90 nm; 1 nm 내지 50 nm; 1 nm 내지 20 nm; 또는 1 nm 내지 10 nm일 수 있다. 상기 범위 내에 포함될 경우에, 광흡수층의 손상 방지를 위한 보 호층 기능뿐만 아니라, 전자수송층으로의 기능을 수행할 수 있다.

[0128] 일 실시예에 따르면, 상기 정공 수송층은, Spiro-OMeTAL, PTAA (poly(triarylamine), poly[bis(4-

phenyl)(2,4,6-trimethylphenyl)amine], PEDOT:PSS(Poly(3,4-ethylenedioxythiophene doped with poly(styrenesulfonic acid), 사이클로펜타-[2,1-b;3,4-b']-디티오펜 (cyclopenta-[2,1-b;3,4-b']-dithiophene), 벤조티아디아졸 (benzothiadiazole), 디케토피롤로피롤 (diketopyrrolopyrrole), 티에노[3,4-b]티오펜(thieno[3,4-b]thiophene), 벤조디티오펜 (benzodithiophene), 카르바졸 (carbazole), 플루오렌 (fluorene), PEDOT:PSS (poly(3,4-ethylenedioxythiophene) poly(styrenesulfonate), PS-PAA (polystyrene-polyacrylic acid block copolymer), poly-TPD(Poly(4-butylphenyl-diphenyl-amine)), PPV (polyphenylene vinylene), PVP (polyvinylpyrrolidone), NiOx 및 p형 산화물 소재로 이루어지는 군으로부터 선택되는 적어도 어느 하나를 포함하는 것일 수 있다. 또한, 상기 언급한 화합물을 단위체로 포함하는 중합체 및/또는 공중합체를 포함할 수 있다.

[0129] 일 실시예에 따르면, 상기 정공 수송층은, 전자 및/또는 정공 전달 물질을 포함하며, 공액고분자 전해질, 금속 산화물, 또는 소수성 전하수송층을 포함할 수 있다. 또한, 상기 정공 수송층은, 1 nm 내지 100 nm 두께; 1 nm 내지 90 nm; 1 nm 내지 50 nm; 1 nm 내지 20 nm; 또는 1 nm 내지 10 nm일 수 있다.

[0130] 일 실시예에 따르면, 상기 금속 산화물은 니켈 산화물(NiO_x), 구리 산화물(CuO_x), 구리 티오시아네이트 (CopperThiocyanate), 구리 갈륨 산화물(CuGaO₂), 구리 크롬 산화물(CuCrO₂) 일 수 있으며, 산화니켈(NiO), 산화구리(II)(CuO), 산화코발트(II)(CoO), 오산화바나듐(V₂O₅), 산화 바나듐(V)(VO₂), 산화코발트(IV)코발트(II)(Co₃O₄) 및 이들의 조합 중 적어도 하나 이상을 포함하는 것일 수 있으나, 이에 제한되지 않는다.

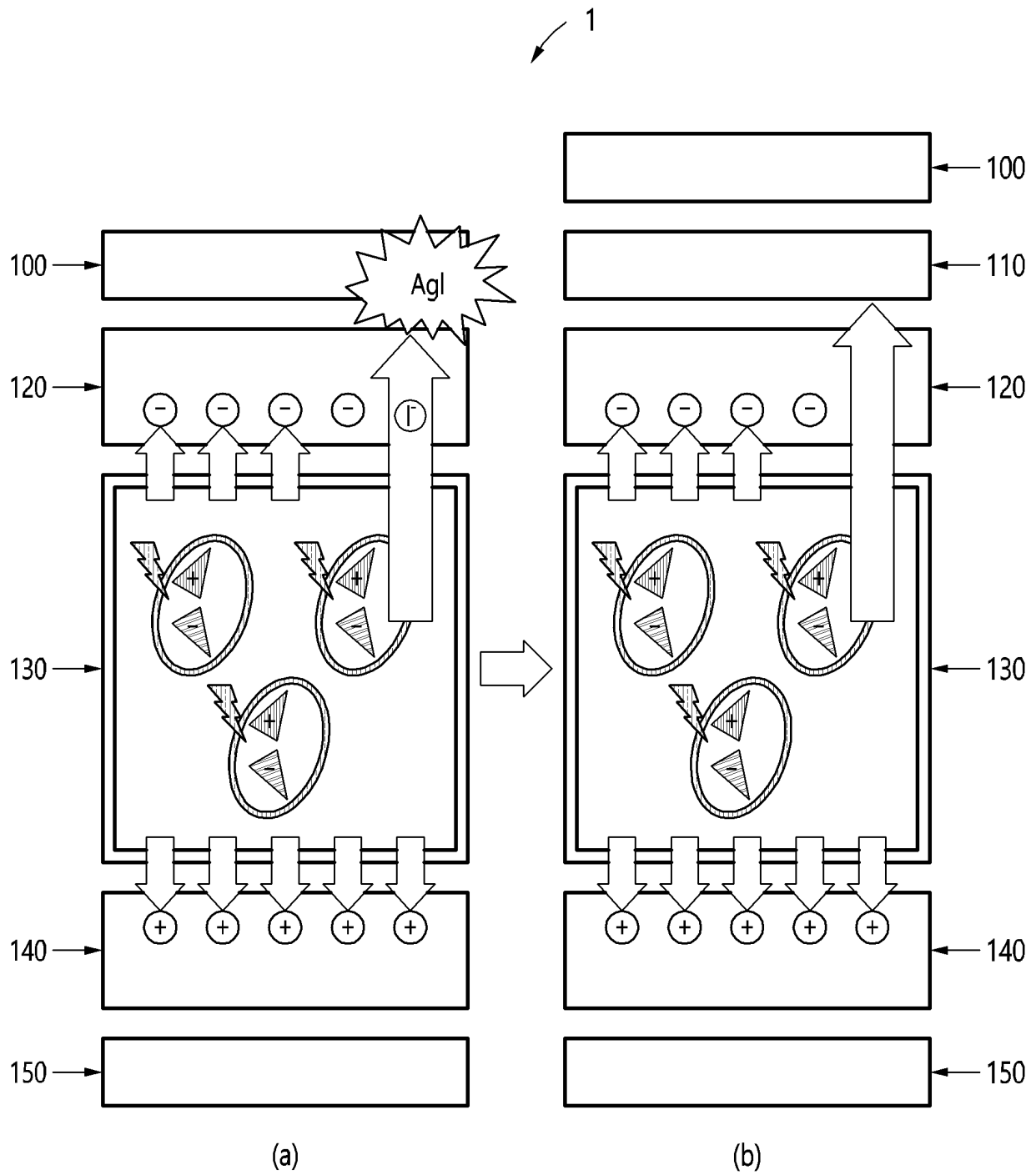
[0131] 일 실시예에 따르면, 상기 정공 수송층은, 상기 제1 전극 상에 형성되는 것으로서, 빛이 조사되어 페로브스카이트 광활성층 내에서 생성 및 분리된 정공이 주입될 수 있다.

[0133] 이상과 같이 실시예들이 설명되었으나, 해당 기술분야에서 통상의 지식을 가진 자라면 상기를 기초로 다양한 기술적 수정 및 변형을 적용할 수 있다. 예를 들어, 설명된 기술들이 설명된 방법과 다른 순서로 수행되거나, 및/또는 설명된 시스템, 구조, 장치, 회로 등의 구성요소들이 설명된 방법과 다른 형태로 결합 또는 조합되거나, 다른 구성요소 또는 균등물에 의하여 대치되거나 치환되더라도 적절한 결과가 달성될 수 있다.

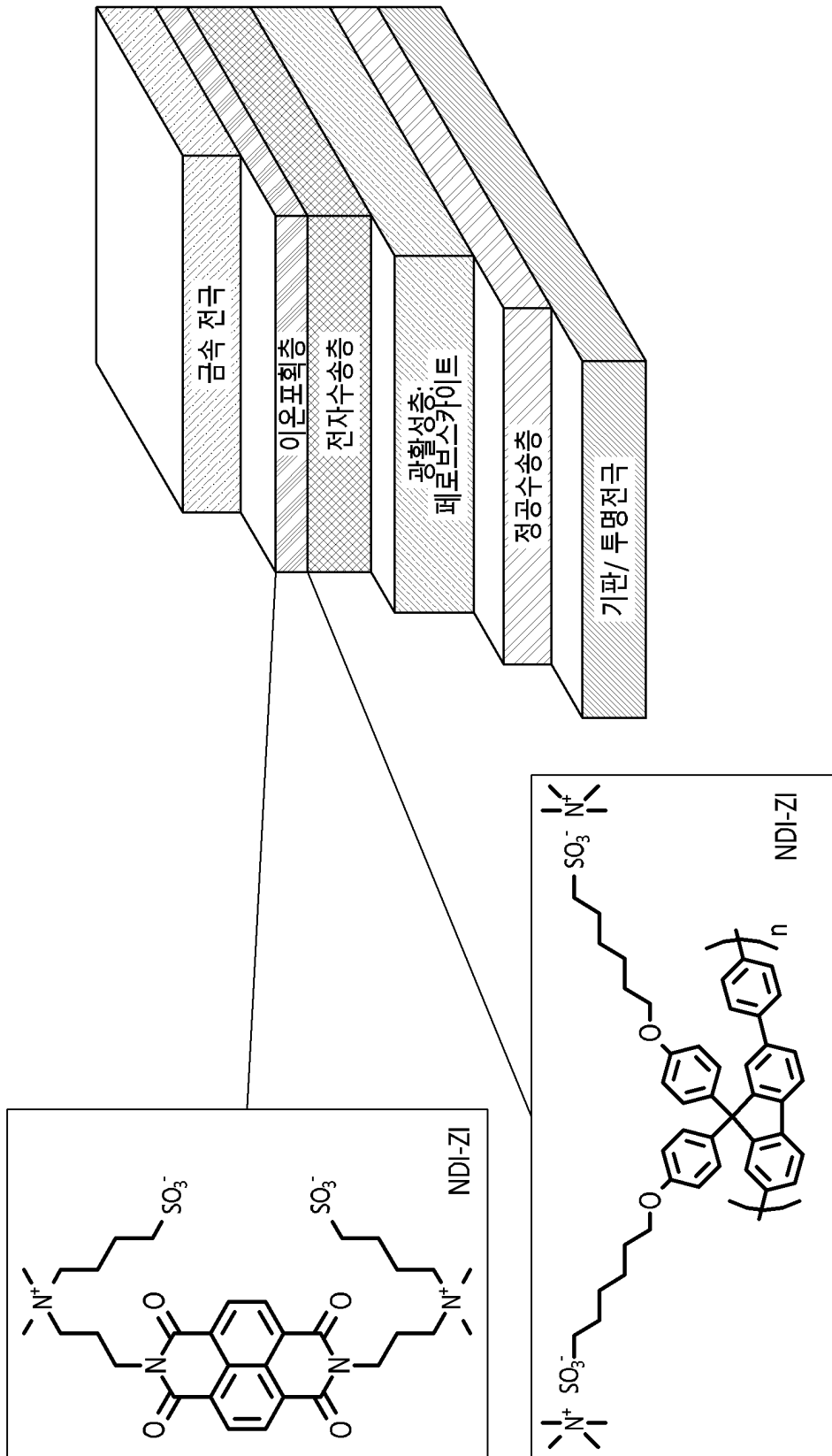
[0134] 그러므로, 다른 구현들, 다른 실시예들 및 특허청구범위와 균등한 것들도 후술하는 청구범위의 범위에 속한다.

도면

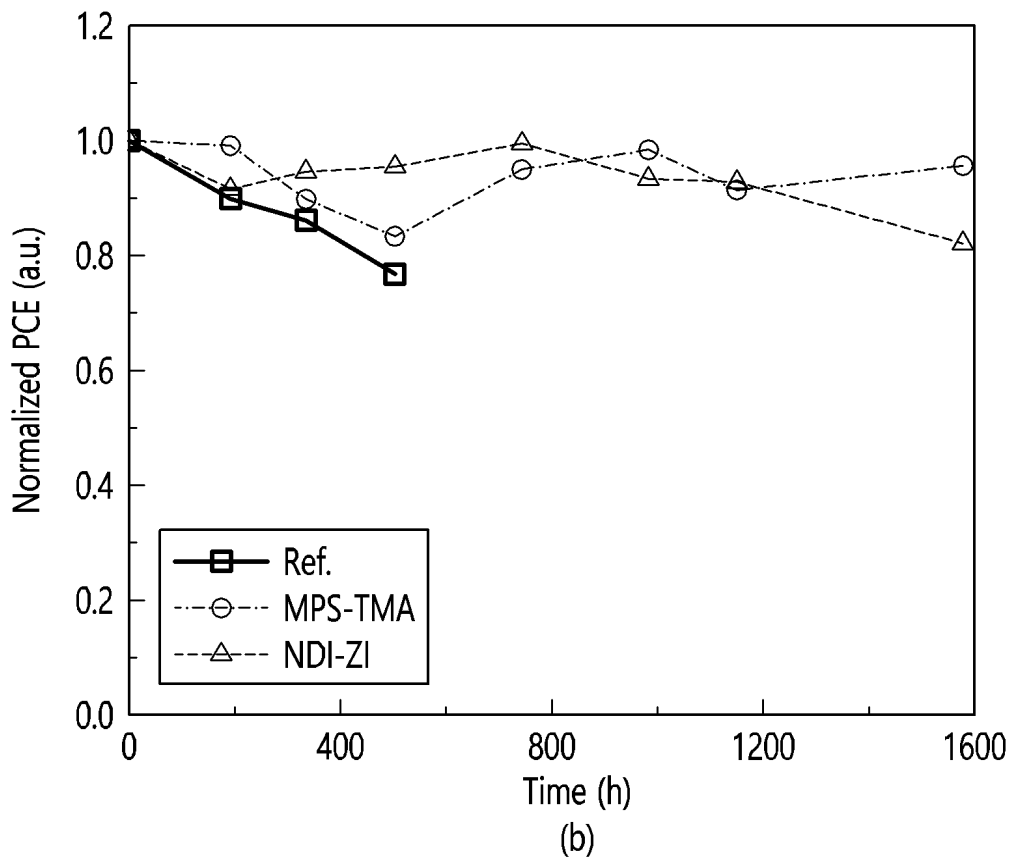
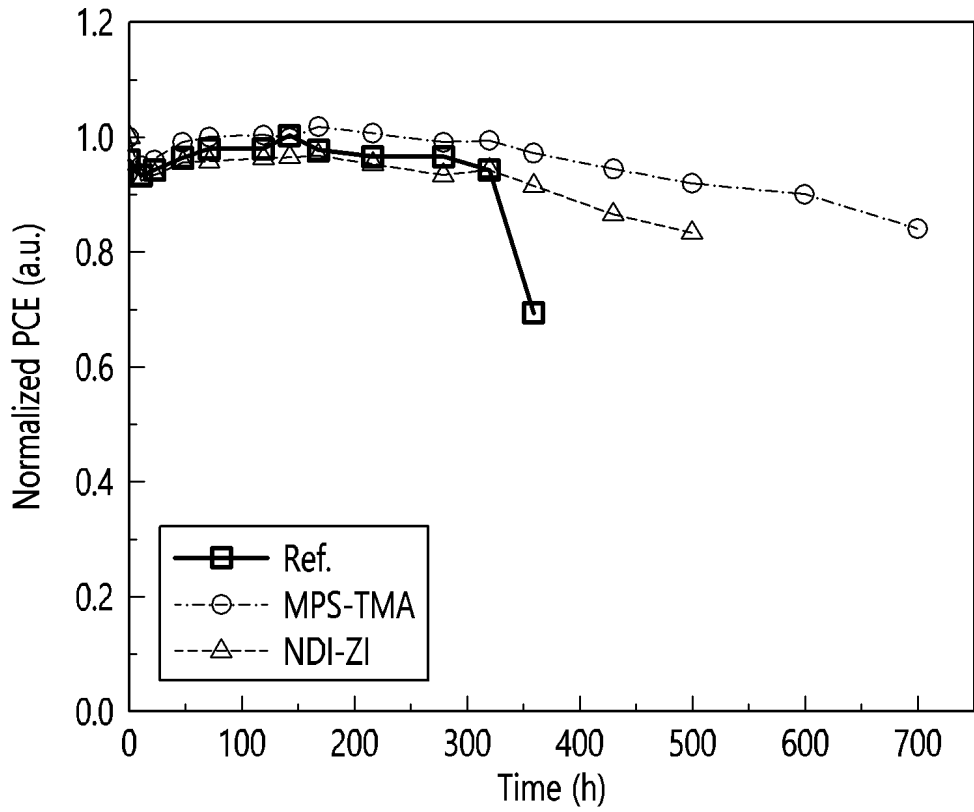
도면1



도면2



도면3



도면4

