

PM6:Y6를 기반으로 한 삼중 혼합 유기 태양전지 동향

윤동환 · 신광용 · 정윤혜 · 하영우 · 김기환*
나노신소재융합공학과, 경상국립대학교, 진주, 52828

Ternary Blend Organic Solar Cells Trends based on PM6:Y6

Dong Hwan Yun · Gwang Yong Shin · Yun Hye Jung · YeongWoo Ha · Gi-Hwan Kim*

Department of Materials Engineering and Convergence Technology, Gyeongsang National University, Jinju, 52828, Korea

Received June 8, 2023; Revised July 17, 2023; Accepted July 27, 2023

ABSTRACT: As we strive to mitigate the environmental impact caused by the use of fossil fuels, the exploration of alternative energy sources has gained significant attention. Solar energy, in particular, has emerged as a promising solution due to its eco-friendly nature and virtually limitless availability. Among the various types of solar cells that harness this abundant energy source, organic solar cells have garnered considerable interest. Organic solar cells feature a photo-active layer composed of organic semiconductors, offering a range of appealing advantages such as cost-effectiveness, flexibility, translucency, and the ability to produce customizable colors. However, the commercialization of organic solar cells has been impeded by certain challenges, notably their relatively low efficiency and stability. To overcome these obstacles and pave the way for wider adoption, researchers have been exploring innovative approaches, including the implementation of ternary blend organic solar cells. This strategy involves introducing a third component into the photo-active layer alongside the organic semiconductors, with the aim of enhancing the overall performance of the solar cell. In this paper, we delve into the issues associated with organic solar cells and focus on one potential solution: ternary blend organic solar cells. Specifically, we examine the application of this approach to PM6:Y6, which stands as one of the most popular combinations of organic semiconductors. By investigating the potential of ternary blends, particularly utilizing PM6:Y6, we aim to accelerate the commercialization of organic solar cells.

Key words: Alternative energy, Organic solar cell, Ternary blend, PM6:Y6

1. 서론

현재 환경에 대한 관심은 끊임없이 증가하고 있으며, 이에 따라 화석연료 사용을 감소시키고 대체 에너지의 이용을 증대시키는 노력이 계속되고 있습니다. 그 중에서도 태양광 에너지는 거의 무한한 공급 가능성과 친환경성으로 인해, 현대 사회에서 가장 중요한 대체 에너지 자원으로 주목받고 있습니다. 이러한 태양광 에너지를 활용하는 태양전지는 다양한 유형이 연구되고 있지만, 그 중에서도 유기 태양전지(Organic Solar Cells, OSCs)는 더욱 큰 관심을 받고 있습니다. 유기 태양전지는 미래의 핵심 전자소자로서, 다른 태양전지와 비교했을 때 여러 가지 장점을 갖고 있다. 먼저, 유기 태양전지는 제조 비용이 저렴하고 용액 상에서 연속적인 공정이 가능하여 유연하고 반투명한 소자를 제작할 수 있다. 이러한 특성은 유기 태양전지를 다양한 용도로 활용할 수 있는 가능성을 열어줍니다. 또한, 수백 나노미터 크기의

박막으로도 효율적인 전력 생산이 가능하다는 점도 유기 태양전지의 강점 중 하나이다. 이는 미래에는 건물의 외벽과 같은 다양한 곳에 유기 태양전지를 적용할 수 있을 것으로 기대된다¹⁻⁷⁾. 그러나 유기 태양전지는 흡수 스펙트럼이 제한되어 효율이 낮고 안정성에도 문제가 있어, 현재는 상용화에 어려움을 겪고 있다. 이러한 문제를 해결하기 위해 많은 연구가 진행되고 있고, 그 중에서도 PM6:Y6를 기반으로 한 삼중 혼합(Ternary blend) 유기 태양전지는 현재 고효율을 보이고 있는 기술이다. 본 논문에서는 이러한 유기 태양전지의 필요성을 강조하며, PM6:Y6를 활용한 삼중 혼합 유기 태양전지에 대한 연구를 통해 고효율의 유기 태양전지 제작에 대한 방향성을 탐구하고자 한다⁸⁻¹¹⁾.

2. 태양전지 구조

태양전지는 빛의 에너지를 활용하여 전기 에너지를 생성하는 전자 소자로서, 전자와 양공의 흐름을 통해 전력을 생산한다. 이때, 태양전지는 전자와 양공의 흐름 방향에 따라 정구조

*Corresponding author: yundongwhan@naver.com

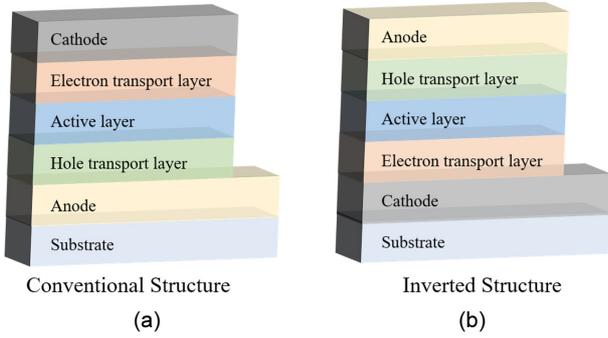


Fig. 1. General OSCs (a) conventional structure, (b) Inverted structure

(Conventional structure)와 역구조(Inverted structure)로 구분되며 Fig. 1에서 나타낸다. 광활성층(Active layer)에 빛의 에너지가 조사되면 전자와 양공이 형성되며, 양공은 양극(Anode) 방향으로, 전자는 음극(Cathode) 방향으로 이동하며, 따라서, 양공이 기판(Substrate) 방향으로 흐르면 정구조를, 전자가 흐르면 역구조를 가지는 것이다. 유기 태양전지에서 구조는 매우 중요한 역할을 수행한다. 구조의 선택은 전하의 분리 및 수송 특성, 에너지 손실, 안정성 등의 성능에 직접적인 영향을 미치는 아주 중요한 요소이다. 정구조와 역구조는 각각의 장단점을 가지며, 성능과 안정성을 균형 있게 조절하는 것이 중요하다¹¹⁾. 정구조에서는 기판 쪽으로 양공이 흐르기 때문에 양공이 빠르게 수집되어 전하 분리 손실을 최소화할 수 있지만, 반면에 역구조에서는 기판에 직접적으로 전자가 흐르기 때문에 전하 분리 및 전자 수송 특성이 개선될 수 있다. 각 구조는 특정한 응용에 맞게 선택되며, 유기 태양전지의 성능 향상과 상용화를 위해서는 구조의 중요성을 고려하여 연구와 개발을 진행해야 한다.

3. 유기 태양전지 원리

유기 태양전지는 광활성층에 유기반도체 소재를 사용하여

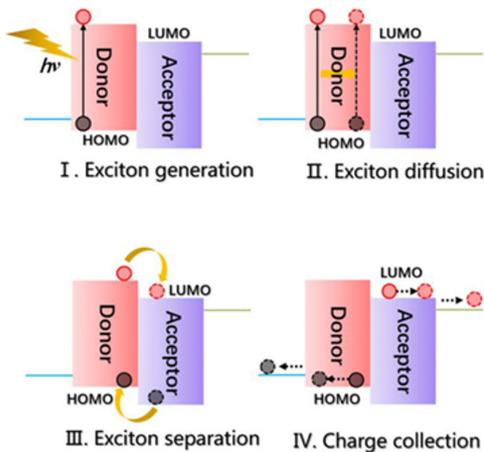


Fig. 2. OSCs charge extraction mechanism¹²⁾

태양광 에너지를 전기 에너지로 변환하는 태양전지이다. Fig. 2는 유기 태양전지에서의 전하 이동 메커니즘을 나타낸 것이다. 이 동작 원리에 대해 자세히 알아보면, 태양광이 광활성층에 조사되면, 광활성층의 물질이 갖는 밴드갭(Band gap) 이상의 에너지를 가진 광자(태양광)는 전자의 가전자대(Valence band)에서 전도대(Conduction band)로 전자를 확산시킨다. 이 과정에서 전자와 정공의 쌍인 엑시톤(Exciton)이 형성된다. 엑시톤은 광활성층 내에서 확산을 통해 이동하며, 도너(Donor)와 억셉터(Acceptor) 경계면에서 전자와 정공으로 분리된다. 이렇게 생성된 전자와 정공은 각각 전극으로 이동하면서 전력을 생성한다. 전자는 음극(Cathode)으로 이동하여 전기 회로를 통해 전류를 공급하고, 정공은 양극(Anode)으로 이동하여 회로를 완성한다. 이 전류 흐름은 유기 태양전지에서 전력을 공급하는 주요 원리이다¹²⁻¹³⁾. 유기 태양전지는 태양광 에너지를 효율적으로 수집하고, 엑시톤을 분리하여 전자와 정공을 각각 수집하는 과정을 통해 전력을 생성한다. 이를 통해 친환경적이고 지속 가능한 에너지 공급이 가능해진다.

3.1 태양전지의 측정 원리 및 방법

일반적으로 태양전지의 성능을 평가할 때, 전류밀도-전압 그래프(J-V curve)를 사용한다. 이 그래프는 태양전지의 전류와 전압 간의 관계를 나타내는데, 보통 Fig. 3과 같은 형태로 표현된다. 성능 평가를 위해 대부분의 측정 방법은 가변저항을 이용한다. 이 방법을 사용하면 태양전지의 성능 지표 중 개방 회로 전압(Open circuit voltage, Voc)와 단락 전류 밀도(Short circuit current density, Jsc)를 측정할 수 있다. 개방 회로 전압은 전류가 흐르지 않는 상태에서의 전압을 의미한다. 다시 말해, 회로 내에 흐르는 전류가 0일 때의 전압을 측정하는 값이고, 단락 전류 밀도는 양극 사이의 전압이 0V 일 때, 회로 내에서 흐르는 전류의 밀도를 나타냅니다. J-V 그래프를 통해 설명하면, y=0일 때의 전압이 개방 회로 전압(Voc)이고, x=0일 때의 전류밀도가 단락 전류 밀도(Jsc)라고 할 수 있다. 전류밀도-전압 그래프는 태양전지의

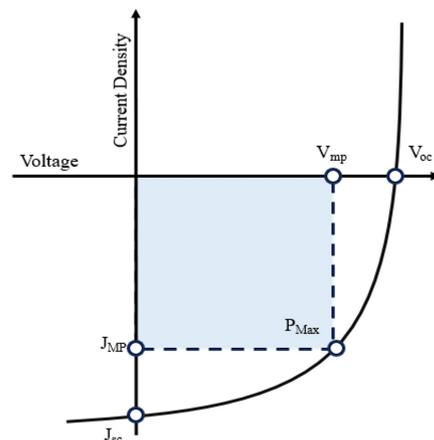


Fig. 3. Typical solar cells J-V curve

성능을 평가하고 최적화하는 데 매우 유용한 방법이다. 이 그래프를 분석하여 태양전지의 효율성, 안정성, 그리고 다양한 조건에서의 성능을 평가할 수 있다.

$$\text{Fill factor} = \frac{V_{MP} * J_{MP}}{V_{OC} * J_{SC}} \tag{1}$$

$$\text{PCE} = \frac{P_{out}}{P_{in}} = \frac{J_{SC} * V_{OC} * FF}{P_{in}} \tag{2}$$

충진율(Fill factor)은 태양전지의 성능 평가를 위한 지표 중 하나로, 개방 회로 전압과 단락 전류 밀도의 곱에 대한 최대 출력의 비율을 나타냅니다. 충진율은 식 (1)을 통해 계산할 수 있다. 전력 변환 효율(Power conversion efficiency, PCE)은 실질적인 태양전지의 성능을 나타내는 주요 지표이다. PCE는 출력 전력과 입력 전력의 비율로 정의된다. PCE는 태양전지가 입력되는 태양광 에너지를 얼마나 효율적으로 전기 에너지로 변환하는지를 나타내는 지표로 사용된다. PCE는 식 (2)를 사용하여 계산할 수 있습니다. 충진율과 전력 변환 효율은 태양전지의 성능과 효율성을 정량화하고 비교하는 데 유용한 도구이다. 이러한 지표를 통해 태양전지의 설계 및 최적화를 진행하며, 높은 충진율과 전력 변환 효율을 가진 태양전지를 개발하여 더 효율적이고 지속 가능한 에너지 공급을 실현하는 데 기여할 수 있다¹⁴⁻¹⁶.

4. 유기 태양전지 구조

태양전지의 종류는 광활성층의 물질에 따라 나눌 수 있다. 그 중, 유기 태양전지는 광활성층이 유기반도체로 이루어진다. 초기의 유기 태양전지는 Fig. 4 (a) 그림과 같이 하나의 전도성 유기반도체를 이용한 단일층으로 이루어져 있었다. 이는 매우 낮은 효율을 보여, 좀더 높은 효율 증대를 위하여 Fig. 4 (b)의 구조처럼 도너(Donor)와 억셉터(Acceptor) 이중층 구조로 제작하여 단점을 보완하였다. 도너와 억셉터가 층을 이루는 이중층(Bilayer) 구조는 기존 단일층에 비해 더 많은 엑시톤과 개선된 효율을 보여주지만 엑시톤 확산 거리가 10~20 nm로 매우 짧아 높은 효율 및 원활한 전하 이동에 여전히 높은 성능을 보여주지

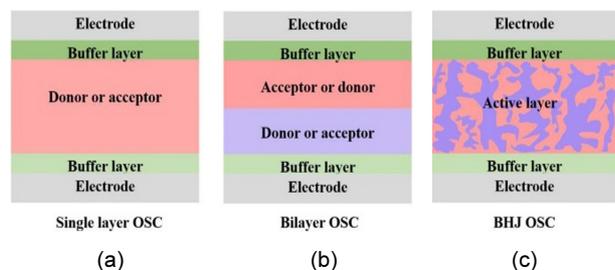


Fig. 4. The schematic diagrams of various OSCs structures¹⁷

못하는 소자 구조였다¹⁶⁻¹⁹. 많은 과학자들이 연구한 결과, Fig. 4 (c)처럼 도너와 억셉터를 섞어 하나의 층으로 만든 벌크 이종접합(Bulk-heterojunction, BHJ) 구조가 개발됐다. 벌크 이종접합 구조는 도너와 억셉터 간 표면적을 넓히고 전하의 이동을 원활하게 하여 소자의 성능을 개선했다¹⁹. 현재 사용되는 유기 태양전지 구조는 대부분이 이러한 벌크 이종접합 구조로 제작되고 있다.

유기 태양전지에 활용되는 초기형태의 도너 고분자로는 donating group만을 사용하여 전자를 주는 성질을 가진 고분자를 사용하였다. 하지만 분자 간 전하 이동에 한계가 있어, 도너와 억셉터가 혼합된 D-A (도너-억셉터) 공중합체를 합성하는 방법이 도입되었고, 이를 통해 도너와 억셉터의 단량체를 결합시켜 전하 이동이 원활하게 이루어지는 고분자를 합성할 수 있었다. 대표적인 예로는 Poly[(2,6-(4,8-bis(5-(2-ethylhexyl)-3-fluoro)thiophen-2-yl)-benzo[1,2-b:4,5-b']dithiophene))-alt-(5,5-(1',3'-di-2-thienyl-5',7'-bis(2-ethylhexyl)benzo[1',2'-c:4',5'-c']dithiophene-4,8-dione)] (PM6)가 있습니다. PM6은 pull-push 효과를

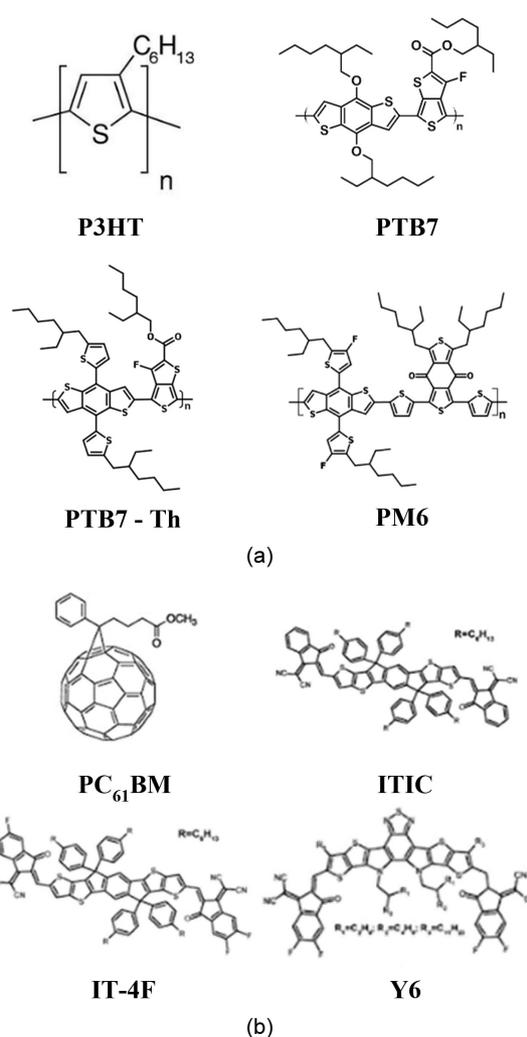


Fig. 5. Widely used OSCs semiconductors (a) donor, (b) acceptor

통해 분자 내 전하 이동이 원활하게 이루어져 기존의 도너보다 더 우수한 전력 생산이 가능했다²¹⁾.

유기 태양전지에 활용되는 초기형태의 엑셉터로는 풀러렌(Fullerene) 엑셉터가 사용되었으나, 이는 광흡수 영역이 제한되어 낮은 성능을 보여주며, 도너와의 혼화성 및 열적 화학적 안정성도 좋지 않았다. 또한, 풀러렌 엑셉터는 빛에 노출되면 dimer 형태의 클러스터가 형성되어 전하 이동에 부정적인 영향을 미쳤다. 이에 따라 현재는 많은 형태의 비풀러렌 엑셉터(Non-fullerene acceptor)가 개발되고 활발히 사용되고 있다. 비풀러렌 엑셉터는 합성과정에서 화학 구조를 조절하여 광학적 및 전기적 특성을 조절할 수 있어 높은 전력 변환 효율을 가진다. 예를 들어, 2,2'-((2Z,2'Z)-((12,13-bis(2-ethylhexyl)-3,9-diundecyl-12,13-dihydro-[1,2,5]thiadiazolo[3,4-e]thieno[2",3":4',5']thieno[2',3':4,5]pyrrolo[3,2g]thieno[2',3':4,5]thieno[3,2-b]indole-2,10-diyl)bis(methanlylidene))bis(5,6-difluoro3-oxo-2,3-dihydro-1H-indene2,1-diylidene))dimalononitrile (Y6)을 기반으로 하는 엑셉터는 15% 이상의 고효율을 보고하고 있다. 하지만 Y6 엑셉터는 분자 크기가 작아 도너 도메인으로부터 엑셉터 도메인으로의 확산이 더 어려워져 엑셉터가 고립되는 문제가 발생하여 효율이 감소시키는 문제가 발생하고 있다. 또한, 풀러렌 엑셉터에 비해 구조적으로 불안정하므로 안정성 측면에서는 여전히 개선의 여지가 있다. 따라서, 현재에도 많은 연구가 진행 중이다²⁸⁻²⁹⁾.

5. 유기 태양전지의 문제점

유기 태양전지의 주요한 한계 중 하나는 실리콘 태양전지에 비해 낮은 효율성이다. 이는 전자와 정공의 재결합(recombination)으로 인한 것이 주요한 원인이다. 태양전지에서 전력을 생성하기 위해서는 전자와 정공이 음극과 양극에 도달해야 한다. 그러나 재결합으로 인해 전자들이 LUMO (Lowest unoccupied molecular orbitals)에서 HOMO (Highest occupied molecular orbitals)로 떨어지게 되면 전극에 도달하지 못하고 재결합이 일

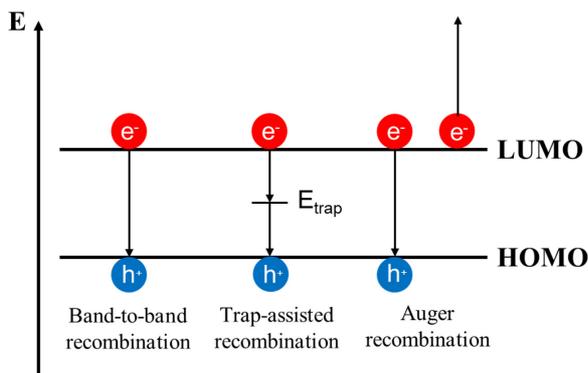


Fig. 6. Type of OSCs recombination

어나게 된다. 이는 일반적으로 유기물의 엑시톤 확산 거리가 매우 짧기 때문에 발생한다. 재결합은 Fig. 6에서 보여주듯이 밴드 투 밴드 재결합(Band to band recombination), 트랩-보조 재결합(Trap-assisted recombination), 오제 재결합(Auger recombination)으로 분류된다. 밴드 투 밴드 재결합은 LUMO의 전자와 HOMO의 정공이 만나 재결합이 일어나는 것을 말한다. 트랩-보조 재결합은 전자가 트랩 준위(trap level)를 거쳐 재결합이 일어나는 경우이다. 재결합은 한 엑시톤 내에서 발생하는 것이지만, 오제 재결합은 재결합이 일어날 때 빛이나 에너지가 방출되지 않고 다른 엑시톤으로 에너지가 전달되는 것이다. 이러한 재결합 현상으로 인해 전자와 정공이 각 전극으로 이동하여 수집되지 못하고 전력 변환 효율이 낮아지게 된다³⁰⁻³¹⁾. 이러한 재결합 문제를 해결하기 위해서는 흡수 범위를 늘려 더 많은 전하를 생성하거나, 재결합을 막기 위해 이상적인 상분리나 더 우수한 유기 반도체를 합성하는 것이 필요하다. 또한, 유기 태양전지는 안정성 측면에서도 제한적인 성질을 가진다. 일반적으로 유기 반도체 소재는 낮은 Glass transition temperature (T_g)을 가지므로 열에 민감한 특성을 가진다. 이러한 낮은 열적, 물리적 안정성 때문에 물리적이거나 화학적인 자극에 의해 유기 반도체 소재가 쉽게 손상될 수 있다. 특히 낮은 T_g 값을 가지는 특징 때문에 열적 불안정성으로 인해 이상적인 상분리가 발생하더라도 열에 의해 물질의 확산이 일어나 효율이 감소하고 소자의 안정성이 감소한다. 또한, 지속적인 태양광 조사로 인해 유기 분자 결합이 끊어지거나 고분자 사슬의 라멜라(Lamellar)가 끊어져 공액길이(Conjugation length)에 영향을 주어 전하 이동을 방해할 수 있다. 따라서, 물질을 설계할 때, 분자 내 전하 특성뿐만 아니라 열적 및 화학적 특성이 우수한 유기 물질의 중요성이 증가하고 있다³²⁻³⁵⁾.

이러한 문제를 해결하기 위해선 T_g 가 높은 유기 반도체 소재를 사용해야 한다. T_g 가 낮은 소재는 확산 계수가 높아지며, 특히 광활성층에서 확산이 발생하면 이상적인 상분리가 일어나지 못해 효율적인 소자 안정성이 감소한다. 따라서, T_g 가 높은 유기 반도체를 사용하는 것이 필요하다. 또한, 분자 간 힘이 강한 새로운 엑셉터를 도입하여 분자의 확산이나 dimer 형태 변화를 억제할 수 있다³⁴⁻³⁶⁾.

6. 삼중 혼합 유기 태양전지

유기태양전지의 단점을 보완하기 위해 여러가지 방법이 모색되어 왔다. 그 중에서 전하의 확산거리와 재결합 문제를 해결하기 위해서 삼중 혼합 유기태양전지에 대한 연구가 많이 진행되고 있다. 삼중 혼합 구조는 기존 도너 1종류와, 엑셉터 1종류에, 추가적으로 다른 물질의 도너 혹은 엑셉터를 첨가하여 도너 2 엑셉터 1 혹은 도너 1 엑셉터 2 종류의 물질을 혼합하여 고효율, 고안성을 얻기 위해 만들어진 새로운 광활성층 구조이다. 이러

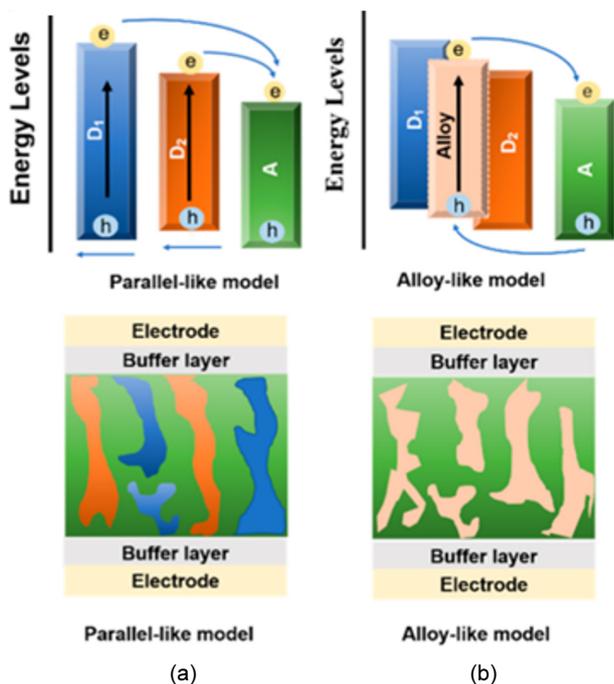


Fig. 7. Charge modeling of ternary blend OSCs, (a) parallel-like model, (b) alloy-like model²⁰⁾

한 방법을 통하여 다양한 영역의 태양광을 흡수는 소자 구조를 개발하고 소자 효율을 증가시킬 수 있다²⁰⁾.

기존 도너와 엑셉터 비율에 추가로 첨가되는 3번째 재료는 몇 가지 고려사항이 있다. 첫째, 적절한 혼화성을 갖는 것이 중요하다. 너무 잘 혼합되면 수직적인 상분리가 일어나지 않아 효율이 저하될 수 있고, 반대로 잘 혼합되지 않으면 3번째 재료가 홀로 고립되어 이상적인 상분리를 방해할 수 있다. 둘째, 에너지 레벨이 중요하다. 전하 이동에 가장 중요한 것은 HOMO와 LUMO 레벨의 계단 형태이다. HOMO 레벨이 매우 낮거나 LUMO 레벨이 매우 높으면 전하 이동을 방해하는 장벽 역할을 할 수 있으므로 물질의 에너지 레벨은 신중히 고려해야 한다. 삼중 혼합 유기 태양전지는 3번째 추가 물질의 화학적 구조와 에너지 레벨에 따라 parallel-like 모델과 alloy-like 모델로 나뉜다. Parallel-like 모델은 각 도너나 엑셉터가 서로 독립적인 에너지 레벨을 가지고 전하 이동 경로가 상이한 것을 말한다. 이는 주로 혼화성이 서로 다르거나 각기 다른 라멜라 또는 분자 패키징이 일어날 경우 나타난다. 반면, alloy-like 모델은 도너 1과 도너 2 또는 엑셉터 1과 엑셉터 2 간의 혼화성이 우수하여 하나의 합금처럼 동작하는 모델이다. 이를 통해 에너지 레벨을 조절하고 전하의 이동을 개선하여 우수한 소자를 만들 수 있다^{20, 39-41)}.

이 두 모델의 장단점은 다음과 같다. Parallel-like 모델은 각 물질의 혼화성이 부족해 도메인-도메인 간 전하 이동에 불리한 구조로 이어져 도메인-도메인 간의 누설전류가 많은 단점이 있다. 그러나 alloy-like 모델은 도메인-도메인 간의 인터디지테드 패키징(interdigitated packing)으로 인해 도메인 간 전하 이동이

원활하게 이루어져 낮은 누설전류로 인해 높은 성능을 얻을 수 있다^{20, 36)}.

7. PM6:Y6 기반 삼중 혼합 유기태양전지

PM6:Y6는 현재 가장 많이 연구되고 있는 유기반도체 물질 중 하나로, 최근 연구들에서는 16% 이상의 고효율을 보여주고 있다. 그러나 여전히 실리콘 태양전지에 비해 낮은 효율과 안정성을 보여주고 있다. 이에 따라 전하 수송 능력을 개선하기 위해 계면 간 물질을 추가하거나, 새로운 물질을 합성하는 등 다양한 연구가 진행되고 있으며, 특히 삼중 혼합 유기태양전지에 대한 연구가 활발히 진행되고 있다. 삼중 혼합 구조는 흡수 영역의 보안을 통해 더 많은 엑시톤을 생성하고, 에너지 준위의 조절을 통해 개선된 소자 효율을 보여준다. 최근 17% 이상의 고효율 유기 태양전지 역시 PM6:Y6를 기반으로 하는 다양한 삼중 혼합 유기 태양전지가 연구되고 있다. 처음에 연구된 구조는 PM6:Y6:PC₆₀BM으로, 이로 인해 흡수 범위가 넓어져 더 우수한 태양전지 소자가 개발되었다. 하지만, 이 구조는 parallel-like 모델로 작용하며, 이는 도메인 간 전하 이동에 불리한 구조로 인해 PM6에

Table 1. Photovoltaic parameters of the PM6:Y6-based ternary blend OSCs

Parameters Active layers	V _{oc} (V)	J _{sc} (mA/cm ²)	FF (%)	PCE (%)	ref
PM6:Y6	0.83	25.3	74.8	15.7	21)
PM6:Y6 :PCBM ^{a)}	0.861	25.1	77.2	16.7	42)
PM6:Y6 TZ-PDI ^{a)}	0.86	25.95	76.5	17.01	43)
PM6:SM1: Y6 ^{a)}	0.831	25.7	77.5	16.55	44)
PM6:BTR:Y6 ^{a)}	0.839	25.8	76.7	16.6	45)
PM6:Y6: Cor-T-PDI ^{a)}	0.852	25.99	75.98	16.82	46)
PM6:Y6 :AQX ^{b)}	0.870	26.8	77.2	18.0	47)
PM6:Y6: MOITIC ^{b)}	0.882	25.6	75.7	17.1	48)
PM6:Y6: m-BTP-PhC6 ^{b)}	0.87	26.28	78.21	18.05	49)
PM6:Y6: TIT-2Cl ^{b)}	0.876	26.49	73.25	17.0	50)
PM6:Y6: Y-T ^{b)}	0.865	26.9	74.97	17.37	51)
PM6:Y6: MF1 ^{b)}	0.853	25.68	78.61	17.22	52)
PM6:Y6: BTP-M ^{b)}	0.875	26.56	73.46	17.03	53)

a) parallel like model b) alloy like model

서 PCBM으로의 전하 이동에서 누설전류가 많이 발생하는 결과를 초래하여 결과적으로 흡수 범위의 개선에 비해 상대적으로 큰 변화가 단락 전류 밀도에 나타나지 않았다^{20, 42}.

최근 비폴러렌 계열의 엑셉터가 많이 개발되고 효율 개선을 위해서 삼중 혼합 유기태양전지가 많이 연구되었다. 높은 효율을 보이는 삼중 혼합 유기태양전지의 경우 alloy-like 모델 형태의 구조로 보고되고 있다. 이는 도메인 간 전하 이동이 원활하게 일어나기 때문에 추가적인 물질 첨가에 대한 누설전류가 줄어들었다. 또한, 에너지 레벨을 조절할 수 있어 개방 회로 전압과 단락 전류 밀도를 모두 개선할 수 있다. 다만, alloy-like 모델은 합금 형태로 동작하며, free volume을 완벽히 채우지 못해 최상의 조건을 갖는 태양전지로서의 어려움이 있다. 이러한 문제로 인해서 아직도 많은 연구자들이 더 높은 유기 태양전지 효율을 얻기 위해서 새로운 저분자와 고분자를 개발하고 삼중 혼합 형태의 유기태양전지 소자개발에 많은 연구를 진행하고 있다.

또한, 삼중 혼합 구조는 소자의 수명에도 영향을 미친다. 특히, 유기 태양전지의 수명은 Tg 값이 낮은 비폴러렌 엑셉터에 의해 결정되므로, Tg 값이 높은 분자를 첨가하거나, 비폴러렌 엑셉터 간의 stacking을 강화하여 도메인 간 확산을 억제함으로써 광활성층의 결정 구조를 안정화시키고 소자의 효율을 개선할 수 있다. 이러한 삼중 혼합 구조는 유기 태양전지의 단점인 낮은 효율과 안정성을 보완하기 위한 중요한 방향성을 제시하며, 상용화를 위한 유기태양전지의 연구 및 개발에 큰 도움이 될 것이다³⁶⁻³⁸.

8. 결론

유기태양전지는 매력적인 차세대 전자소자로 간주되며, 용액 공정으로 인한 낮은 비용, 유연성, 반투명성, 그리고 색상 조절 가능성과 같은 장점을 가지기 때문에 다양한 분야에서 지속적으로 관심을 받고 있다. 그러나 낮은 안정성과 효율로 인해 상용화에는 여전히 어려움을 겪고 있어 이러한 문제를 극복하기 위한 연구들이 계속 진행되고 있다. 현재, PM6:Y6를 기반으로 한 유기태양전지의 개발로 인해 다른 태양전지와 격차를 줄이고 있지만, 실제 상용화에는 여전히 어려움이 있어 이를 극복하기 위해 새로운 접근 방법이 모색되고 있다. 그 중 삼중 혼합 유기태양전지는 태양빛의 흡수 영역을 확대하고 에너지 레벨을 조절하여 소자의 성능을 개선하는 방법으로 다른 태양전지와 격차를 줄이고 있다. 그러나 여전히 유기태양전지는 실리콘 태양전지에 비해 낮은 안정성과 효율을 가지고 있기 때문에 이러한 단점을 극복하기 위해 계속해서 연구가 이루어질 것으로 예상된다. 최근 많은 연구진들은 새로운 소재, 전극 구조, 계면 공학 기술 등을 활용하여 유기태양전지의 안정성과 효율을 개선하고 상용화 가능성을 높이기 위한 노력을 기울이고 있다. 이를 통해 유기태양전지가 근 미래에 상업화에 성공하여 차세

대 태양전지 기술로서의 잠재력을 실현할 수 있을 것으로 기대된다.

후 기

본 연구는 이공분야기초연구사업- 기본연구(NRF-2022R1F1A1069529)와 스마트센서 전문인력양성(N0001415182419)의 지원으로 수행되었습니다.

References

1. Changyun Pang, Geunhee Park, Dong-geun Jung, Heeyeop Chae, "Recent Development Status of Organic Solar Cells," Applied Science and Convergence Technology, 16.3, 167-171 (2007).
2. Yu, G., Gao, J., Hummelen, J. C., Wudl, F., Heeger, A. J., "Polymer photovoltaic cells: enhanced efficiencies via a network of internal donor-acceptor heterojunctions," Science, 270(5243), 1789-1791 (1995).
3. Wang, X., Perzon, E., Delgado, J. L., de la Cruz, P., Zhang, F., Langa, F., Inganäs, O., "Infrared photocurrent spectral response from plastic solar cell with low-band-gap polyfluorene and fullerene derivative," Applied physics letters, 85(21), 5081-5083 (2004).
4. Won Suk Shin, Sung-Ho Jin, "Recent Development of Polymer Solar Cells," Polymer Science and Technology, 17(4), 416-424 (2006).
5. Ma, W., Yang, C., Gong, X., Lee, K., Heeger, A. J., "Thermally stable, efficient polymer solar cells with nanoscale control of the interpenetrating network morphology," Advanced functional materials, 15(10), 1617-1622 (2005).
6. Tang, Ching W., "Two-layer organic photovoltaic cell," Applied physics letters, 48(2), 183-185 (1986).
7. Kim, G. A., Yun, D., Park, M. J., Gong, M., Park, K. H., Jeong, D. W., Kim, G. H., "Utilize the UV-Visible Region for Reduction of NO by Methylene Blue-Doped TiO₂ for Photocatalysis," Transactions on Electrical and Electronic Materials, 23(6), 588-594 (2022).
8. Wöhrl, Dieter, Dieter Meissner, "Organic solar cells," Advanced Materials, 3(3), 129-138 (1991).
9. Nelson, Jenny, "Organic photovoltaic films," Current Opinion in Solid State and Materials Science, 6(1), 87-95 (2002).
10. Yu-eun Kim, Gi-Hwan Kim, "Trend Efficiency of Organic Solar Cells with Respect to the Types of Photoactive Layer," J. Korean Inst. Electr. Electron. Mater. Eng. 35(6), 581-593 (2022).
11. Lee HK, Song CE, Lee SK, Lee JC, Shin WS, "Trends of Organic Solar Cell Development," Korean Industrial Chemistry News, 20(2), 36-58 (2017).
12. Bi, P., Zhang, S., Wang, J., Ren, J., Hou, J., "Progress in organic solar cells: materials, physics and device engineering,"

- Chinese Journal of Chemistry, 39(9), 2607-2625 (2021).
13. Yu, G., Alan J. Heeger, "Charge separation and photovoltaic conversion in polymer composites with internal donor/acceptor heterojunctions," *Journal of Applied Physics*, 78(7), 4510-4515 (1995).
 14. Li, Gang, Rui Zhu, Yang Yang, "Polymer solar cells," *Nature photonics*, 6(3), 153-161 (2012).
 15. Ahn Seung Kyu, Shin Kee Shik Yoon Kyung Hoon, "Performance Evaluation Technique for Solar Cells (Measurement and Correction)," *Polymer Science and Technology*, 22(6), 570-576 (2011).
 16. Thompson, B. C., Fréchet, J. M., "Polymer-fullerene composite solar cells," *Angewandte chemie international edition*, 47(1), 58-77 (2008).
 17. Gereanu, A. G., Sartorio, C., Bonasera, A., Giuliano, G., Cataldo, S., Scopelliti, M., ... Pignataro, B., "Pseudo-planar organic heterojunctions by sequential printing of quasi-miscible inks," *Coatings*, 11(5), 586 (2021).
 18. Halls, J. J., Pichler, K., Friend, R. H., Moratti, S. C., Holmes, A. B., "Exciton diffusion and dissociation in a poly (p-phenylenevinylene) /C60 heterojunction photovoltaic cell," *Applied Physics Letters*, 68(22), 3120-3122 (1996).
 19. Mikhnenko, O. V., Blom, P. W., Nguyen, T. Q., "Exciton diffusion in organic semiconductors," *Energy & Environmental Science*, 8(7), 1867-1888 (2015).
 20. Zhang, Y., Li, G., "Functional third components in nonfullerene acceptor-based ternary organic solar cells," *Accounts of Materials Research*, 1(2), 158-171 (2020).
 21. Yuan, J., Zhang, Y., Zhou, L., Zhang, G., Yip, H. L., Lau, T. K., ... Zou, Y., "Single-junction organic solar cell with over 15% efficiency using fused-ring acceptor with electron deficient core," *Joule*, 3(4), 1140-1151 (2019).
 22. Qin, Y., Balar, N., Peng, Z., Gadisa, A., Angunawela, I., Bagui, A., ... Ade, H., "The performance-stability conundrum of BTP-based organic solar cells," *Joule*, 5(8), 2129-2147 (2021).
 23. Ye, L., Collins, B. A., Jiao, X., Zhao, J., Yan, H., Ade, H., "Miscibility-function relations in organic solar cells: significance of optimal miscibility in relation to percolation," *Advanced Energy Materials*, 8(28), 1703058 (2018).
 24. Piersimoni, F., Degutis, G., Bertho, S., Vandewal, K., Spoltore, D., Vangerven, T., Drijkoningen, Van Bael, MK., Hardy, A., D'Haen, J., Maes, W., Vanderzande, D., Nesladek, M., Manca, J., "Influence of fullerene photodimerization on the PCBM crystallization in polymer: fullerene bulk heterojunctions under thermal stress," *Journal of Polymer Science Part B: Polymer Physics*, 51(16), 1209-1214 (2013).
 25. Groves, C., "Suppression of geminate charge recombination in organic photovoltaic devices with a cascaded energy heterojunction," *Energy & Environmental Science*, 6(5), 1546-1551 (2013).
 26. Jørgensen, M., Norrman, K., Gevorgyan, S. A., Tromholt, T., Andreasen, B., Krebs, F. C., "Stability of polymer solar cells," *Advanced materials*, 24(5), 580-612 (2012).
 27. Lai, Y. Y., Cheng, Y. J., Hsu, C. S., "Applications of functional fullerene materials in polymer solar cells," *Energy & Environmental Science*, 7(6), 1866-1883 (2014).
 28. Nielsen, C. B., Holliday, S., Chen, H. Y., Cryer, S. J., McCulloch, I., "Non-fullerene electron acceptors for use in organic solar cells," *Accounts of chemical research*, 48(11), 2803-2812 (2015).
 29. Li, H., Hwang, Y. J., Courtright, B. A., Eberle, F. N., Subramaniyan, S., Jenekhe, S. A., "Fine-tuning the 3D structure of nonfullerene electron acceptors toward high-performance polymer solar cells," *Advanced materials*, 27(21), 3266-3272 (2015).
 30. Proctor, C. M., Kuik, M., Nguyen, T. Q., "Charge carrier recombination in organic solar cells," *Progress in Polymer Science*, 38(12), 1941-1960 (2013).
 31. Pivrikas, A., Sariciftci, N. S., Juška, G., Österbacka, R., "A review of charge transport and recombination in polymer/fullerene organic solar cells," *Progress in Photovoltaics: Research and Applications*, 15(8), 677-696 (2007).
 32. Ghasemi, M., Hu, H., Peng, Z., Rech, J. J., Angunawela, I., Carpenter, J. H., Stuard, S. J., Wadsworth, A., McCulloch, I., You, W., Ade, H., "Delineation of thermodynamic and kinetic factors that control stability in non-fullerene organic solar cells," *Joule*, 3(5), 1328-1348 (2019).
 33. Tu, S., Lin, X., Xiao, L., Zhen, H., Wang, W., Ling, Q., "Boosting the overall stability of organic solar cells by crosslinking vinyl-functionalized polymer derived from PM6," *Materials Chemistry Frontiers*, 6(9), 1150-1160 (2022).
 34. Li, N., Perea, J. D., Kassas, T., Richter, M., Heumueller, T., Matt, G. J., Hou, Y., Guldal, N. S., Chen, H., Chen, S., Langner, S., Berlinghof, M., Unruh, T., Brabec, C. J., "Abnormal strong burn-in degradation of highly efficient polymer solar cells caused by spinodal donor-acceptor demixing," *Nature communications*, 8(1), 14541 (2017).
 35. Lee, J., Kim, J. W., Park, S. A., Son, S. Y., Choi, K., Lee, W., Kim, W., Kim, J. Y., Park, T., "Study of burn-in loss in green solvent-processed ternary blended organic photovoltaics derived from UV-crosslinkable semiconducting polymers and non-fullerene acceptors," *Advanced Energy Materials*, 9(34), 1901829 (2019).
 36. Li, S., Zhang, R., Zhang, M., Yao, J., Peng, Z., Chen, Q., Zhang, C., Chang, B., Bai, Yang., Fu, H., Ouyang, Yanni., Zhang, C., Steele, J. A., Alshahrani, T., Roeyfaers, M. B. J., Solano, E., Meng, L., Gao, F., Li, Y., Zhang, Z. G., "Tethered Small-Molecule Acceptors Simultaneously Enhance the Efficiency and Stability of Polymer Solar Cells," *Advanced Materials*, 35(2), 2206563 (2023).
 37. Zhang, C., Zhang, M., Zhou, Q., Chen, S., Kim, S., Yao, J., Zhang, Z., Bai, Y., Chen, Q., Chang, B., Fu, H., Xue, L., Wang, C., Zhang, Z. G., "Diffusion-Limited Acceptor Alloy Enables Highly Efficient and Stable Organic Solar Cells," *Advanced Functional Materials*, 2214392 (2023).
 38. Ghasemi, M., Balar, N., Peng, Z., Hu, H., Qin, Y., Kim, T., Rech, J. J., Bidwell, M., Mask, Walker., McCulloch, I., You, W., Amassian, A., Risko, C., O'Connor, B. T., Ade, H., "A

- molecular interaction-diffusion framework for predicting organic solar cell stability,” *Nature materials*, 20(4), 525-532 (2021).
39. Zhang, W., Huang, J., Xu, J., Han, M., Su, D., Wu, N., Zhang, C., Xu, A., Zhan, C., “Phthalimide polymer donor guests enable over 17% efficient organic solar cells via parallel-like ternary and quaternary strategies,” *Advanced Energy Materials*, 10(32), 2001436 (2020).
 40. Yan, C., Barlow, S., Wang, Z., Yan, H., Jen, A. K. Y., Marder, S. R., Zhan, X., “Non-fullerene acceptors for organic solar cells,” *Nature Reviews Materials*, 3(3), 1-19 (2018).
 41. Guo, Q., Guo, Q., Geng, Y., Tang, A., Zhang, M., Du, M., Sun, X., Zhou, E., “Recent advances in PM6: Y6-based organic solar cells,” *Materials Chemistry Frontiers*, 5(8), 3257-3280 (2021).
 42. Pan, M. A., Lau, T. K., Tang, Y., Wu, Y. C., Liu, T., Li, K., Chen, M. C., Lu, X., Ma, W., Zhan, C., “16.7%-efficiency ternary blended organic photovoltaic cells with PCBM as the acceptor additive to increase the open-circuit voltage and phase purity,” *Journal of Materials Chemistry A*, 7(36), 20713-20722 (2019).
 43. Yu, L., Zhang, M., Tang, J., Li, R., Xu, X., Peng, Q., “Wide Bandgap Perylene Diimide Derivatives as an Effective Third Component for Parallel Connected Ternary Blend Polymer Solar Cells,” *Chemistry of Materials*, 33(18), 7396-7407 (2021).
 44. Yan, T., Ge, J., Lei, T., Zhang, W., Song, W., Fanady, B., ... Ge, Z., “16.55% efficiency ternary organic solar cells enabled by incorporating a small molecular donor,” *Journal of Materials Chemistry A*, 7(45), 25894-25899 (2019).
 45. Yan, C., Tang, H., Ma, R., Zhang, M., Liu, T., Lv, J., Huang, J., Yang, Y. K., Xu, T., Kan, Z., Yan, He., Liu, F., Lu, S., Li, G., “Synergy of liquid-crystalline small-molecule and polymeric donors delivers uncommon morphology evolution and 16.6% efficiency organic photovoltaics,” *Advanced Science*, 7(15), 2000149 (2020).
 46. Ni, M. Y., Leng, S. F., Liu, H., Yang, Y. K., Li, Q. H., Sheng, C. Q., Lu, X., Liu, F., Wan, J. H., “Ternary organic solar cells with 16.88% efficiency enabled by a twisted perylene diimide derivative to enhance the open-circuit voltage,” *Journal of Materials Chemistry C*, 9(11), 3826-3834 (2021).
 47. Liu, F., Zhou, L., Liu, W., Zhou, Z., Yue, Q., Zheng, W., Sun, R., Liu, W., Xu, S., Fan, H., Feng, L., Yi, Y., Zhang, W., Zhu, X., “Organic solar cells with 18% efficiency enabled by an alloy acceptor: a two-in-one strategy,” *Advanced Materials*, 33(27), 2100830 (2021).
 48. Xiong, M., Wu, J., Fan, Q., Liu, Q., Lv, J., Ou, X., Guo, X., Zhang, M., “Ternary organic solar cells with improved efficiency and stability enabled by compatible dual-acceptor strategy,” *Organic Electronics*, 96, 106227 (2021).
 49. Zhang, S., Ma, X., Xu, C., Xu, W., Jeong, S. Y., Woo, H. Y., Zhou, Z., Zhang, X., Zhang, F., “Boosted efficiency over 18.1% of polymer solar cells by employing large extinction coefficients material as the third component,” *Macromolecular Rapid Communications*, 43(15), 2200345 (2022).
 50. Chen, J., Cao, J., Liu, L., Xie, L., Zhou, H., Zhang, J., Zhang, K., Xiao, M., Huang, F., “Layer-by-layer processed PM6: Y6-based stable ternary polymer solar cells with improved efficiency over 18% by incorporating an asymmetric thieno[3,2-b] indole-based acceptor,” *Advanced Functional Materials*, 32(25), 2200629 (2022).
 51. Yin, Y., Zhan, L., Liu, M., Yang, C., Guo, F., Liu, Y., Gao, S., Zhao, L., Chen, H., Zhang, Y., “Boosting photovoltaic performance of ternary organic solar cells by integrating a multi-functional guest acceptor,” *Nano Energy*, 90, 106538 (2021).
 52. An, Q., Wang, J., Gao, W., Ma, X., Hu, Z., Gao, J., Xu, C., Hao, M., Zhang, X., Yang, C., Zhang, F., “Alloy-like ternary polymer solar cells with over 17.2% efficiency,” *Science Bulletin*, 65(7), 538-545 (2020).
 53. Zhan, L., Li, S., Lau, T. K., Cui, Y., Lu, X., Shi, M., Li, C. Z., Li, H., Hou, J., Chen, H., “Over 17% efficiency ternary organic solar cells enabled by two non-fullerene acceptors working in an alloy-like model,” *Energy & Environmental Science*, 13 (2), 635-645 (2020).