

# 광전소자 공간 내 전하 수집 효율 평가

## Spatial Collection Efficiency of Thin Film Optoelectronic Device

김동언 · 백세웅 | Dong Eon Kim · Se-Woong Baek

Department of Chemical and Biological Engineering, Korea University,  
New Engineering hall #615, 145 Anam-ro, Seongbuk-Gu, Seoul 02841, Korea  
E-mail: sewoongbaek@korea.ac.kr

### 1. 서론

지구온난화로 인한 기후변화를 저감하기 위해 국제사회는 2015년 파리에서 신기후체제인 파리협정을 체결하였다. 그 이전의 합의인 교토체제는 2020년 만료되어 2021년부터는 195개를 넘는 국가들에서 온실가스 감축 의무가 발생한다. 우리나라도 2050년까지 탄소 순 배출량 0의 탄소 중립을 목표로 계획을 수립 및 시행하고 있다. 이 때문에 탄소 중립을 달성하기 위한 핵심 기술인 태양전지에 산학연을 포함해 각계각층의 다양한 관심이 쏟아지고 있다.

태양광발전은 빛에너지를 흡수하여 다른 에너지로의 변환 없이 전기 에너지를 얻을 수 있는 발전방식이다. 반도체 소재는 자신의 띠틈(band gap)보다 더 큰 에너지를 가진 태양빛을 흡수하여 전자-양공 쌍(electron-hole pair)을 형성한다. 소재 내부 양공이 많은 p 타입 반도체와 전자가 많은 n 타입 반도체를 접합하면 접합면에서 확산에 의해 전자와 양공이 재결합하고 자유 전하 운반자가 없는 공핍층이 형성된다. 공핍층에는 자유 전하 운반자가 사라져 고정 이온이 남아 전기장을 형성한다. 소자 내에 형성된 전자-양공 쌍은 소자 내부 접합으로 생긴 내부 전기장에 의해 분리되어 서로 반대 전극으로 이동하여 수집된다(그림 1).<sup>1</sup>

태양전지 작동 시, 흡수된 빛 전부가 수집되어 광전류 형성에 기여하지는 못한다. 큰 에너지를 가지는 단파장의 빛은 소자의 비교적 얇은 부분에서 흡수되고 작은 에너지를 가지는 단파장의 빛은 소자 내 깊은 부분에서 흡수된다. 흡수된 빛의 위치에 따라 전류로 수집될 확률이 다르다. 공핍층에서 형성된 전자와 양공은 내부 전기장에 의해 쉽게 양쪽 전극으로 이동이 가능하다. 내부 전기장에서 멀어질수록 전하가 수집될 확률이 지속적으로 감소하는 것을 알 수 있다. 이러한 확률을 공간 전하 수집 효율(spatial collection efficiency, SCE)이라 부르며 이를 통해 태양전지의 주요한 에너지 손실 원인에 대해 파악해 볼 수 있다.<sup>2</sup> 본 글에서는 최근 주목받고 있는 박막형 태양전지의 공간 내 전하 수집 효율을 분석하는 방법 및 그 활용에 대해 알아볼 예정이다.

### 2. 본론

#### 2.1 실리콘 태양전지에서의 공간수집효율

전하의 공간 수집 효율은 Fredholm 적분식에 의해서 소자의 위치에 대한 함수로 구할 수 있다. Fredholm

적분식은  $\eta = \int_0^t G(z, \lambda) \phi(z) dz$ 로 나타낼 수 있다.  $\eta(\lambda)$ 는 파장에 따른 소자의 내부 광자 효율(internal quantum

Author



김동언

2021 고려대학교 화공생명공학전공 (학사)  
2022-현재 고려대학교 화공생명공학전공 (석사)



백세웅

2011 KAIST 생명화학공학과 (학사)  
2013 KAIST EEWs 대학원 (석사)  
2017 KAIST EEWs 대학원 (박사)  
2020 University of Toronto (박사후 연구원)  
2020-현재 고려대학교 화공생명공학과 조교수

efficiency, IQE)로 태양 전지 내부에 흡수된 광자의 개수 대비 태양전지에서 추출된 전류의 비로 구할 수 있다.  $G(z, \lambda)$ 는 소자 내 깊이와 파장에 따른 자유 전하 생성 확률 (generation probability)이다.  $\phi(z)$ 는 소자내 깊이에 따른 전하의 공간 수집효율이다.

실리콘 태양전지에서 자유전하 생성확률은 단순한 지수 함수 형태로 표현된다. 따라서 실리콘에서 Fredholm 적분식은 쉽게 해석적, 수치적으로 풀리고 해를 얻을 수 있다. 실리콘의 경우 적분식은  $SR(\alpha) = \int_0^\infty dz a \exp(-\alpha z) C(z)$ 의 형태로 표현된다.  $a$ 는 실리콘 태양전지의 흡수계수를 의미한다. 이를 라플라스 변환을 통해 풀면 그림 2와 같은 해를 얻을 수 있다.<sup>3</sup> 이 해를 통해 앞서 언급했듯이 실리콘의 공핍영역에서는 전하 수집이 잘되지만 거기서 멀어질수록 효율이 지수적으로 감소하는 것을 알 수 있다.

### 2.2 박막 태양전지에서 공간수집효율 분석

최근 주목받고 있는 박막형 태양전지에서의 공간 전하 추출 효율을 구하는 방법에 대해서 살펴보자. 앞서 살펴봤

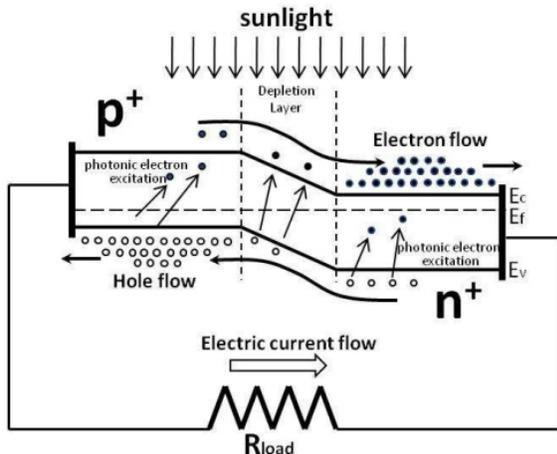


그림 1. 태양전지 작동 원리 모식도.<sup>1</sup>

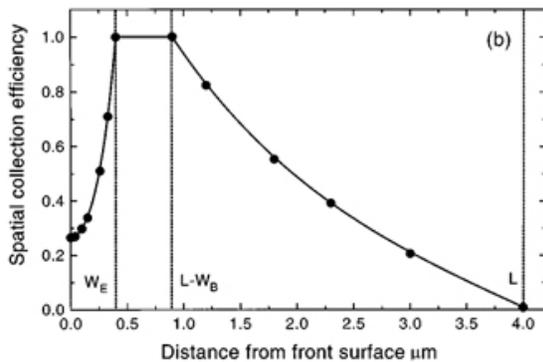


그림 2. 실리콘 태양전지 내부의 공간 추출 효율.<sup>3</sup>

듯이 박막 태양전지에서도 내부 양자 효율과 전하 생성 확률만 구할 수 있다면 공간 전하 추출 효율에 대해서 구할 수 있다. 내부 양자 효율은 전압을 가한 외부 양자 효율 (external quantum efficiency, EQE)를 통해 구할 수 있다. 그리고 전하 생성 확률은 광학적 계산 기법인 전달행렬기법 (transfer matrix method, TMM)으로 구할 수 있다. 실험적으로 구한 IQE 값과 이론적으로 구한 전하 생성 확률로 공간 전하 추출 효율을 측정할 수 있다.

박막 태양전지의 경우에는 실리콘과 같이 단순히 해를 구할 수 없다. 박막 태양전지의 경우 박막 내부의 빛이 간섭 현상에 의해 전하 생성 확률이 단순한 지수함수 형태에서 크게 벗어나 곡선에 피크와 골짜기를 가지게 된다.<sup>4</sup> 따라서 Fredholm 적분식 그대로를 푸는 것은 큰 조건수를 갖게 되어 무한에 가까운 해를 가지게 된다. 이를 해결하기 위해서는 다른 수학적 방법이 필요하다.

#### 2.2.1 외부양자효율을 이용한 내부양자효율 측정

앞서 설명한 내부양자효율을 구하려면 소자 내부에 흡수된 광자의 양을 알아야한다. 하지만 일부의 빛은 소자 내부에서 흡수되면서 태양전지 내 반도체 흡수층이 아닌 곳에서 전자-양공쌍을 만들지 않는 parasitic absorption의 형태로 흡수된다. 따라서 흡수되어 전자-양공 쌍을 만든 광자의 양을 간단히 측정할 수 없다. 한편, 소자에 음전압을 가하면 공핍층의 영역이 넓어진다. 소자의 접합면에는 남은 이온에 의해 내부 전기장이 생기는데 외부에 전압을 가해주면 내부 전기장이 미치는 범위인 공핍층의 두께가 넓어진다. 태양전지 내 공핍층에서 흡수되는 광자의 경우 전기장에 의해 높은 전하 추출 효율을 가진다. 결과적으로, 소자 내부 흡수층이 모두 공핍층 정도의 큰 음전압을 가한 상태에서 추출된 전류의 양은 흡수된 광자의 양과 일치하게 될 것이다. 전압을 가한 외부양자효율을 이용하면 내부양자효율에 근접한 값을 구할 수 있다. 외부양자효율은 소자에 입사한 광자 전체 중에서 추출된 전류의 양을 의미한다. 소자가 무너지지 (breakdown) 않을 정도의 높은 음전압을 가한 상태에서 외부양자효율을 구하면 소자가 흡수한 광자의 양에 밀접한 값을 구할 수 있다. 그리고 다른 작동 전압을 가해준 상태에서 외부양자효율을 측정하고 음전압에서 측정된 외부양자 효율로 나눠주면 내부양자효율을 구할 수 있다<sup>5</sup>(그림 3<sup>6</sup>).

#### 2.2.2 전달 행렬 방법을 통한 소자 내 광 흡수 분석

전달 행렬 방법은 박막형 태양전지의 광학 시뮬레이션에 많이 사용되는 방법이다. 이 방법은 소재의 굴절계수(refraction index)와 흡광계수(extinction coefficient)를 활용하여 박막 내부의 전기장 변화를 분석한다. 아래의 그림 4에서 보듯이 이 박막의 소자와 두께가 결정되면 각 층의 경계면에서 투

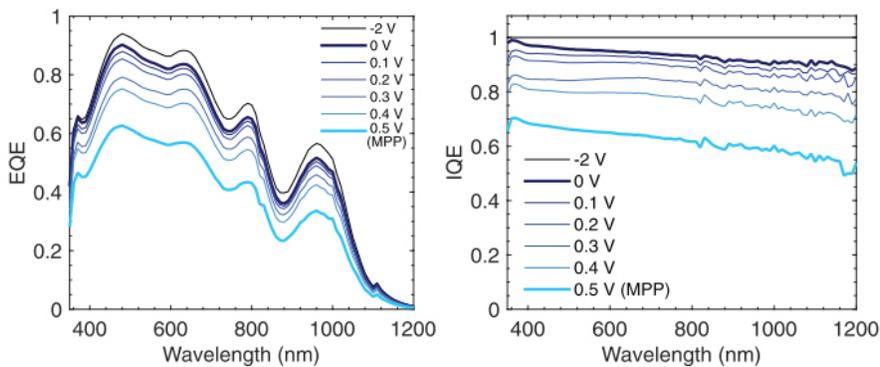


그림 3. 전압에 따른 양자효율과 이를 이용한 내부양자효율 곡선.<sup>6</sup>

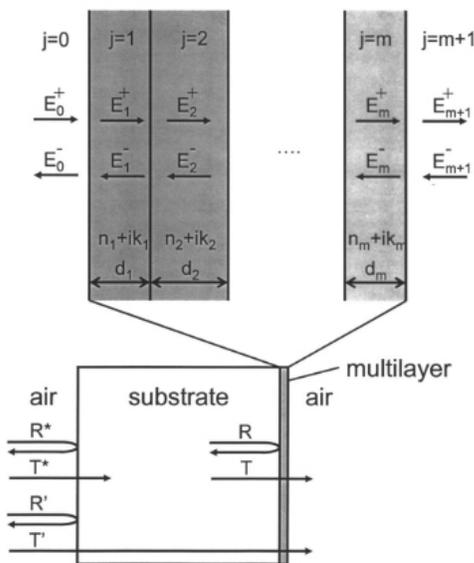


그림 4. 다층 박막 소자의 전기장 계산 모식도.

과되는 빛의 양과 반사되는 빛의 양을 결정할 수 있다. 프레넬 방정식(Fresnel equation)에 의한 j번째 층과 k번째 층 사이의 빛의 전파에 반사계수  $r_{jk} = (\bar{n}_j - \bar{n}_k) / (\bar{n}_j + \bar{n}_k)$ 과 투과계수  $t_{jk} = 2\bar{n}_j / (\bar{n}_j + \bar{n}_k)$ 를 구할 수 있다. 그러면 전달 행렬방식에 의해 전기장은 아래와 같이 표현 된다.<sup>7</sup>

$$\begin{bmatrix} \bar{E}_j^+ \\ \bar{E}_j^- \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & r_{jk} \\ t_{jk} & t_{jk} \\ r_{jk} & 1 \\ t_{jk} & t_{jk} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{E}_k^+ \\ \bar{E}_k^- \end{bmatrix}$$

결과적으로 각 층에 전후로 통과하는 빛의 세기와 소자 내 각 층에서 흡수된 빛의 계산할 수 있다. 이런 TMF를 이용하면 소자 내부에 두께별 파장별 이론상 흡수된 광자의 양을 계산할 수 있다. 이 결과는 음전압을 가한 EQE의 값과 일치하는 값을 가져야 한다. 또한 공간 전하 추출 효율의 경

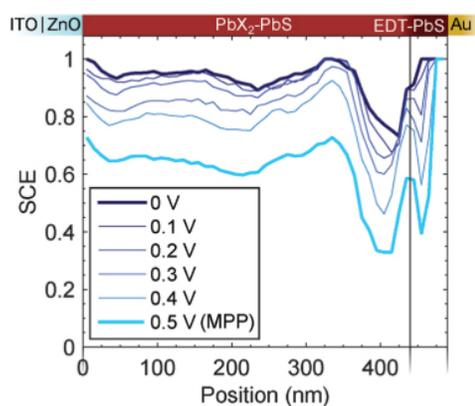


그림 5. 다층 박막 소자의 전기장 계산 모식도.

우 1이하의 값을 가져야 하므로 생성 확률 행렬 또한 각 두께에서 확률의 합이 1이 되도록 정규화(normalization)가 필요하다.

### 2.2.3 공간 전하 수집 효율 계산

해를 구하기 힘든 Fredholm 적분식은 정규화를 통해서 해를 구할 수 있다. 선행연구에서 Pang *et al.*은 절단된 특이값 분해(truncated singular value decomposition)를 통해서 Fredholm의 식을 구했다. 이는 방정식의 정확한 해를 얻을 수 있었으나 해가 과적합(overfitted)되는 단점이 존재한다. 이로 얻어진 해는 물리적으로 불가능하거나 쉽게 진동한다는 단점을 가지고 있다. Segev *et al.*은 Tikhonov 정규화를 통해 해를 구했다.<sup>2</sup> 이 방법은 정규화 파라미터를 수동으로 고쳐주고 공간 전하 수집 효율에 가정을 설정하기에 이중접합이 필요한 박막형 태양전지에는 사용하기 어렵다는 단점이 있다. 이를 극복하기 위해 Olivier *et al.*은 실험값에 가우시안 노이즈를 주는 것으로 극복하였다. 실험값에 가우시안 노이즈를 주고 평균을 구함으로써 노이즈에 안정한 공간 전하 수집 효율을 얻을 수 있었다. 또한 Fredholm 적분식을 최소제곱법(least square method)에 의한 식으로 변형시켰다.

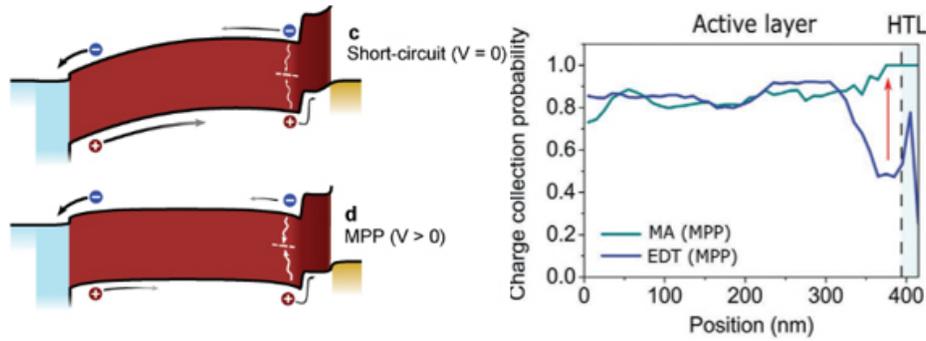


그림 6. 공간 내 전하 효율 측정을 통한 태양전지 내 문제 구간 분석.<sup>3</sup>

결과적으로  $\phi = \operatorname{argmin} \|\bar{G}\phi - \bar{\eta}\|_2^2 (\phi \in [0, 1]^m)$  의 식을 얻게 되고 이 식의 값을 최소화하는 값을 공간 전하 수집효율로 얻게 된다.<sup>6</sup>

### 2.3 공간 전하 수집 효율 활용

공간 전하 수집 효율을 활용하면 태양전지 내부의 문제점에 대해서 쉽게 파악할 수 있다. 그림 6의 황화납 양자점 태양전지의 공간전하 효율 그래프를 보면 흡수층인 PbX<sub>2</sub>-PbS와 양공수송층인 EDT-PbS의 계면에서 전하 추출 효율이 급격히 감소하는 것을 알 수 있다. 이런 경향은 특히 작동전압이 높아지면 높아질수록 심해지는 것을 알 수 있다. 이를 통해 현 황화납 양자점 태양전지의 양공수송층으로 사용되는 EDT(ethanedithiol)가 전류 수집의 방해를 일으킨다는 것을 알 수 있다.

이를 바탕으로 그림 6 좌측그림을 보면 광흡수층의 페르미 레벨이 양공수송층의 페르미 레벨보다 높아서 이 두 층의 계면에서 전하의 수송에 지장이 생긴 것을 알 수 있다. 특히, 높은 양의 전압을 가했을 때는 밴드 전체가 평탄하게 되고 전하의 추출에 큰 지장을 받는 것을 사실을 알 수 있다. 또한 앞서 전달 행렬 방법으로 구한 광 흡수 행렬과 공간 전하 수집 효율을 곱해주면 각 소자의 두께에서 얼마만큼의 전류에 기여하는지를 분석할 수 있다.

소자내부의 문제점 파악은 이를 개선하는 데 유용하게 사용될 수 있다. 그림 6 우측그림은 EDT와 MA(malonic acid)를 사용한 양자점 정공 수송층을 비교한 것이다. MA를 사용한 정공 수송 층의 경우 EDT와 다르게 흡수층과 정공 수송 층 계면에서 전하 추출에서의 손실이 줄어드는 것을 확인할 수 있다. 따라서 근적외선에 해당하는 장파장 대의 외부양자효율을 개선하고 태양전지의 효율을 증가시킬 수 있었다.<sup>8</sup>

### 3. 결론

본 글에서는 박막형 태양전지의 공간 전하 추출 효율의

개념 및 분석하는 방법에 대하여 자세히 소개하였다. 이를 분석함에 있어 필요한 이론적인 광학 분석 시뮬레이션인 전달 행렬 방법과 내부양자효율의 개념과 분석, 측정 방법을 설명함으로써 공간 전하 추출 효율을 구하는 총체적인 지식을 전달해 이에 대한 이해를 높였다. 마지막으로 이를 공간 전하 추출 효율을 활용하여 광전 소자의 문제점을 분석하는 방법과 이를 개선한 사례를 제시함으로써 이 효율의 유용성을 보였다. 뿐만 아니라 본 제안한 방식은 비파괴 방식으로 한 소자를 반복적으로 분석 가능하므로, 소자 신뢰성 원인 분석 혹은 유연/신축성 소자들의 기계적 결합에 의한 공간 내 효율 변화 예측 등이 가능해 그 응용분야가 크다고 할 수 있다.

### 참고문헌

1. P. S. Priambodo, N. R. Poespawati, and D. Hartanto. *Solar Cell*, IntechOpen, 2011.
2. G. Segev, H. Dotan, D. S. Ellis, Y. Piekner, D. Klotz, J. W. Beeman, J. K. Cooper, D. A. Grave, I. D. Sharp, and A. Rothschild, *Joule*, **2**, 210 (2018).
3. J. Sinkkonen, J. Ruokolainen, P. Uotila, and A. Hovinen, *Appl. Phys. Lett.*, **66**, 206 (1995).
4. G. F. Burkhard, E. T. Hoke, and M. D. McGehee, *Adv. Mater.*, **22**, 3293 (2010).
5. *Advanced Characterization Techniques for Thin Film Solar Cells*, D. Abou-Ras, T. Kirchartz, and U. Rau, Editors, John Wiley & Sons, Weinheim, 2016.
6. O. Ouellette, A. Lesage-Landry, B. Scheffel, S. Hoogland, F. P. García de Arquer, and E. H. Sargent, *Adv. Funct. Mater.*, **30**, 1908200 (2020).
7. P. Peumans, A. Yakimov, and S. R. Forrest, *J. Appl. Phys.*, **93**, 3693 (2003).
8. M. Biondi, M. J. Choi, O. Ouellette, S. W. Baek, P. Todorović, B. Sun, S. Lee, M. Wei, P. Li, A. R. Kirmani, L. K. Sagar, L. J. Richter, S. Hoogland, Z.-H. Lu, F. P. G. de Arquer, and E. H. Sargent, *Adv. Mater.*, **32**, 1906199 (2020).