



산학연 연구실 소개(2)

포항공과대학교 화학공학과 고분자화학 및 전자재료 연구실

(POLYMER Chemistry & Electronics LAB. (PCEL), POSTECH)

주소: 경상북도 포항시 남구 청암로 77 포항공과대학교 화학공학과 (포항산업과학연구원 3동) (우: 37673)
 전화: 054-279-2394
 E-mail: taihopark@postech.ac.kr, Homepage: <https://sites.google.com/site/postechpolymer>



연구책임자 | 박태호 교수
 포항공과대학교
 화학공학과

1. 연구실 소개

재료 특성과 전자소자의 성능 사이에는 깊은 상관관계가 있으며, 두 가지 측면을 모두 이해하는 것은 재료 화학자와 엔지니어가 광전자 장치를 기반의 신기술을 실제 시장에 이전하기 위하여 매우 중요하다. 특히, 트랜지스터, 발광다이오드, 센서, 태양전지와 같은 광전소자는 금속/유기, 유기/유기, 유/무기 반도체 이종접합 사이의 물리적 또는 화학적 접촉에 의해 구성되는 계면을 포함하는데, 여기서의 전하 이동 과정이 광전소자 기술 분야에서 중요한 역할을 한다. 따라서, 광전소자의 성능을 최적화하려면 계면 특성에 대한 이론적 설명 및 실험적 증명이 필요하다. 이러한 연구 동기를 바탕으로 본 연구실은 새로운 전도성 고분자 물질의 효율적인 설계 및 합성, 반도체 접합부에서의 계면 전하 이동 반응의 광물리적 연구 및 장치 기능과 물질 특성 사이의 상관관계에 대한 연구를 진행하고 있다. 주요 응용분야로 유기태양전지 및 유기발광다이오드는 물론, 유/무기 하이브리드 구조를 가지는 페로브스카이트 태양전지의 효율과 안정성을 향상시키는 연구를 진행해왔다. 또한, 최근 들어 광전소자 이외에도 에너지 생산 및 저장소자 연구도 활발히 수행 중이다. 이를 위해 전해질, 분리막, 바인더 등에 적용가능한 소재인 고분자 구조에 이온을 도입하여 전도할 수 있는 작용기 기반의 이온성 고분자 합성 연구도 진행하고 있다.

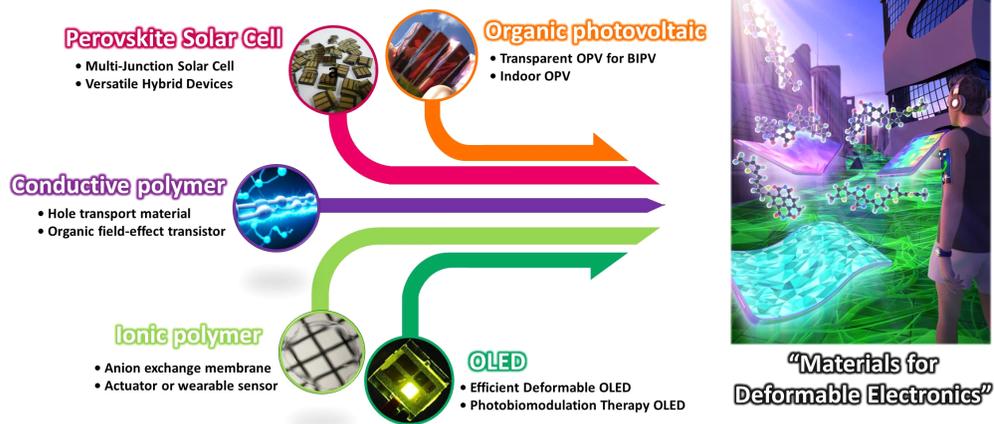


그림 1. "고분자화학 및 전자재료 연구실"의 주요 연구분야.

2. 주요 연구분야

2.1 전도성 고분자

본 연구실에서는 태양전지 내에서 정공을 원활하게 수송하고 전하가 재결합되는 현상을 억제하여 소자의 성능을 향상시키는 정공수송층으로써 전도성 고분자 개발을 활발히 수행하고 있다. 전도성 고분자는 고분자 사슬이 규칙적으로 배열되어 있는 결정 영역과 무작위로 존재하는 비결정 영역이 존재한다. 결정 영역에서는 효과적인 전하이동이 가능하지만, 비결정 영역에서는 고분자 사슬 간의 연결성이 낮아 전하의 이동을 저하시킨다. 하지만 전도성 고분자의 과도한 결정성은 광활성 물질과의 접촉성을 저해하고, 이는 소자 효율을 감소시키는 결과로 이어질 수 있기 때문에 결정 및 영역의 적절한 균형이 중요하다. 이에 본 연구실은 그림 2와 같이 고분자의 상호작용을 조절하는 비대칭 알킬 치환기와 효율적인 전하 호핑 채널을 생성하는 평면구조의 강성 분절을 동시에 적용한 전도성 고분자의 설계를 제안했다. 새로 개발된 고분자는 (Asy-PDTS, Asy-PSDTS, Asy-PSeDTS) 기존 정공수송층 고분자에서 발생하던 한계점을 극복하여 향상된 전하이동도를 보였으며, 이를 페로브스카이트 양자점 태양전지에 적용하여 최대 15.2%의 높은 광전변환효율을 달성하였다. 해당 소자 성능은 지금까지 보고된 첨가제가 없는 정공수송층 기반 페로브스카이트 양자점 태양전지에서 세계 최고성능이며, 이러한 공액고분자 설계는 기존 전하수송층에 새로운 패러다임을 제시하여 다양한 광전소자에 적용 가능성을 보여주었다.

2.2 유기태양전지

유기태양전지는 유기물의 유연성, 경량성 및 밴드갭 조절이 자유롭다는 장점으로 인하여 투명, 신축 가능한 차세대 태양전지의 가능성으로 주목받고 있다. 기존 유기 반도체 재료는 낮은 확산 계수로 인해 생성된 엑시톤이 빠르게 재결합하여, 다른 태양전지에 비해 낮은 효율을 보였다. 이러한 문제를 해결하기 위해 도너(donor)와 억셉터(acceptor) 계면을

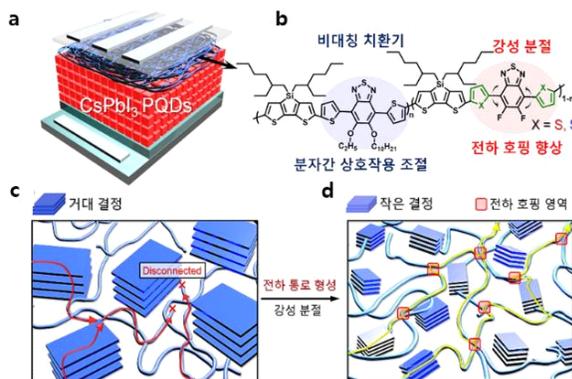


그림 2. (a) 신규 전도성 고분자가 도입된 페로브스카이트 양자점 태양전지 구조, (b) 치환기와 강성분절이 도입된 신규 정공수송층 분자구조, (c) 일반적인 전도성 고분자의 결정구조로 전하 이동의 저하 현상, (d) 강성 분절의 도입으로 전하 통로가 마련돼 나타나는 효과적인 전하 전달.

3차원적 무작위로 접촉한 이종접합구조(bulk heterojunction)가 도입되었다. 도너와 억셉터 조합의 지속적인 발전과 최적화된 이종접합구조의 구현을 통해 유기태양전지는 현재 19% 이상의 광전변환효율을 보이고 있으며, 실리콘 태양전지를 대체할 유망한 후보로 부상하고 있다. 하지만, 이종접합구조의 구조적 불안정성으로 인하여 시간이 지나면 효율이 급격히 감소하는 번인로스(burn-in loss)는 유기태양전지의 상용화를 가로막는 원인으로 지적되었다. 이러한 문제를 해결하기 위해, 본 연구실은 광가고 전략을 통해 준안정(meta-stable) 이종 접합구조를 고정하는 방법을 제안하였다(그림 3). 기존 도너 고분자 작용기 끝에 브로민기를 도입하여 낮은 광에너지 하에서 라디칼을 형성하였다. 이는 도너(donor) 고분자의 네트워크 상을 형성하여 저분자인 억셉터(acceptor)의 움직임을 효과적으로 막았을 뿐만 아니라, 광안정성도 크게 개선하였다. 이를 발전시켜, 다양한 도너-억셉터 조합에 모두 적용 가능하도록 가교가능한 첨가제(1,8-dibromooctane)를 제안하였다. 첨가제는 최고 효율을 위한 이종 접합구조의 준안정상태를 더욱 최적화할 수 있는 용매로서의 역할뿐만 아니라, 가교제, 그리고 자유 라디칼 제거제로서의 다중 역할을 수행하여 번인로스를 개선하고 광안정성을 향상시켰다.

2.3 페로브스카이트 태양전지

유/무기 하이브리드 페로브스카이트는 1가의 유기 양이온과 2가의 무기 양이온, 그리고 1가의 할로젠 음이온으로 이루어진 결정 구조를 가지는 물질을 말한다. 특히 납할라이드계 페로브스카이트 물질은 실리콘에 비해 우수한 광학적/전기적 특성, 조정가능한 밴드갭, 낮은 제조비용 및 용액공정이 가능하다는 점, 그리고 우수한 광전변환 특성 등의 장점들을 가지고 있어 차세대 태양전지 소재로 각광받고 있다. 그러나

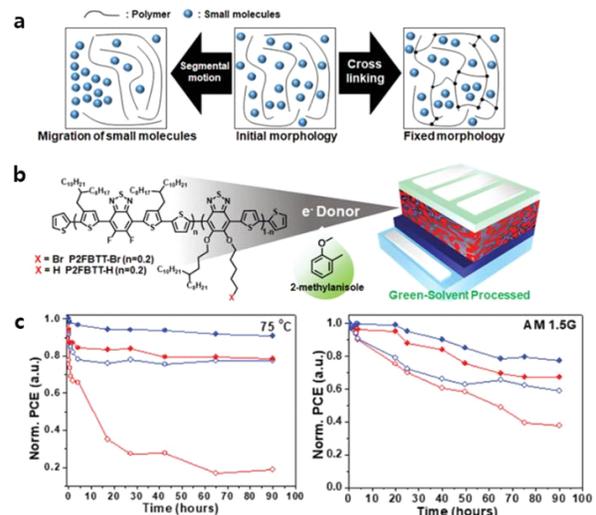


그림 3. (a) 이종 접합구조에 가교를 통한 모폴로지 제어 전략 모식도, (b) 브로민기가 달린 합성 도너 구조 및 소자 구성재료, (c) 합성한 도너를 첨가한 유기태양전지의 광가고 이후 열 및 광안정성실험 결과.

페로브스카이트 결정이 형성되는 과정에서 생기는 다양한 결함들은 페로브스카이트의 광전변환 특성을 저해할 뿐만 아니라 수분, 열, 빛 등의 외부적 요소에 의한 분해를 촉진시킨다. 따라서 페로브스카이트에서 생기는 결함을 패시베이션(passivation)하는 전략은 페로브스카이트 태양전지의 고효율과 고안정성을 달성하는데 필수적이다. 이에 본 연구실에서는 페로브스카이트의 결함이 표면과 결정립계(grain boundary)에 주요하게 생긴다는 점에 주목해 페로브스카이트 표면 및 결정립계에 존재하는 결함에 대한 패시베이션 연구를 수행하고 있다. 특히, 최근에 패시베이션에 이용하는 첨가제의 상변환을 이용한 표면 패시베이션 전략을 개발했다(그림 4). Alkylammonium formate라는 물질을 패시베이션 첨가제로 이용하여, 고체 첨가제의 액상 변환이 첨가제가 단순히 표면에 고정되어 있는 상태를 극복하고 시간에 따라 결함이 많은 곳으로 자발적인 움직임을 유도할 수 있어 페로브스카이트의 더욱 효과적인 결함 패시베이션이 가능함을 확인하였다. 이를 바탕으로 본 연구진은 소면적 및 대면적에서 각각 25.0% 및 20.8%에 달하는 광전변환효율과 1,000시간 후에도 초기 효율의 95% 이상의 안정성을 보이는 우수한 페로브스카이트 태양전지를 보고했다.

2.4 유기발광다이오드

유기발광다이오드에 사용되는 공액 단분자로 인해 나타나는 고유한 발광 특성은 차세대 디스플레이뿐만 아니라 바이오 융합 기술에도 적용되는 핵심 기술이다. 1세대 발광체인 형광(fluorescence) 재료는 25%의 단일항 엑시톤만을 사용하여

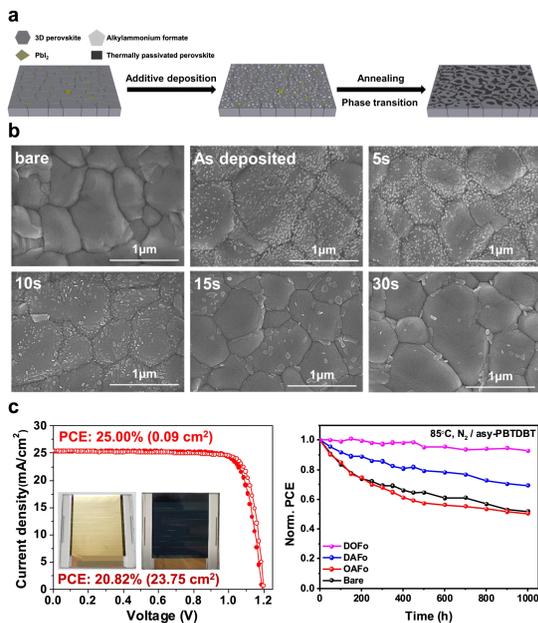


그림 4. (a) 첨가제의 상변환을 이용한 표면 패시베이션 전략 모식도, (b) 첨가제의 표면 패시베이션에 의한 시간에 따른 페로브스카이트 표면 변화, (c) 첨가제의 상변환을 이용한 표면 패시베이션 전략을 통해 제작한 페로브스카이트 태양전지의 면적별 효율과 첨가제의 구조에 따른 열 안정성 실험 결과.

낮은 내부양자효율을 가진다. 반면 2세대 발광체인 인광(phosphorescence) 재료와 3세대 발광체인 열활성지연형광(TADF) 재료는 75%의 삼중항 엑시톤을 함께 사용하여 100%의 내부양자효율을 달성할 수 있다. 하지만 적색과 근적외선 영역의 파장을 발광하는 재료들은 에너지 갭 법칙에 의해 비발광 프로세스가 촉진되어 낮은 발광 효율을 나타낸다. 따라서 발광 재료들의 발광 파장 조절과 효율 개선에 대한 연구가 필수적이다. 본 연구실에서는 적색과 근적외선의 파장 영역을 발광하는 이리듐(III) 기반의 신규 유/무기 하이브리드 재료들을 합성하였고, 중심 금속과 착화된 유기 리간드의 치환기에 따른 차이가 발광 특성에 어떠한 영향을 미치는지에 대한 연구를 진행했다(그림 5). 먼저, 하메트 식을 통해 이리듐 중심 금속에 착화되어 있는 발색단 유기 리간드의 치환기 위치 효과에 대해 탐구하였고 para 위치의 치환기가 전자 주개 능력과 받게 능력에 큰 영향을 미침을 밝혀냈다. 이를 통해 다양한 치환체 공정을 진행하여 적색과 근적외선 파장 영역을 발광하는 인광 재료들을 합성하고 용액 공정을 통해 유기발광소자를 제작하여 높은 효율을 달성한 바 있다. 더 나아가, 본 연구실은 인광 재료의 발색단 유기 리간드가 아닌 보조 리간드의 유연성과 강직성을 비교하여 발광 특성 개선을 가능하게 하는 전략에 대한 연구를 진행했다. 기존 유연한 구조를 평평한 공액 구조의 보조 리간드로 대체함으로써 유기 리간드의 강직도 증대가 비발광 프로세스를 억제할 수 있음을 밝혀내었다. 그리고 유기발광소자에 적용하여 높은 발광 효율을 달성함으로써 유기 리간드의 강직도가 발광 효율을 증대시킬 수 있음을 보고한 바 있다. 또한, 치환체 공정에 따른 단량체가 아닌 이량체 혹은 그 이상의 응집체들의 발광 특성 변화 및 개선에 대한 연구를 진행하였다. 발광층에 적용되었을 경우 응집된 형태의 필름 상태로써 발광하게 되는데, 이때 응집으로 인한 발광 효율 저하를 방지할 필요가 있다. 본 연구실은 다양한 치환체 공정을 통하여 응집되어도 발광 효율 향상시킬 수 있는 이리듐 기반의 신규 AIPE (aggregation-induced phosphorescence enhancement) 재료를 합성하고 유기발광소자에 적용하여 발광 효율을 개선하였고 이를 보고하였다. 고도화된 합성 능력을 통해 다양한 치환체 공정이 가능했으며 이를 통해 발광 특성에 대한 연구를 진행하고 있다.

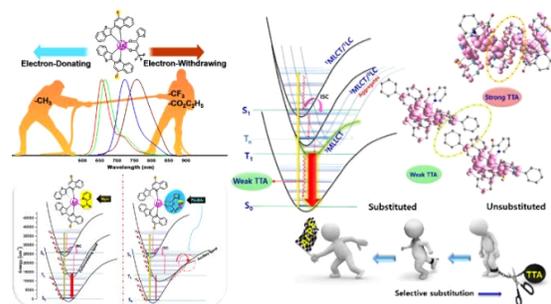


그림 5. 이리듐(III) 기반 유/무기 하이브리드 인광 재료의 치환기 공정을 통한 발광 특성에 대한 연구.

2.5 이온성 고분자

이온성 고분자(ionic polymer)는 고분자 구조에 양이온 또는 음이온을 전도할 수 있는 작용기가 도입된 물질로, 다양한 분야에서 활용되어 왔다. 최근에는 신재생 에너지 생산 및 저장 소자와 액추에이터(actuator) 그리고 웨어러블 센서 등에 매우 활발하게 적용되고 있다. 본 연구실은 고분자 결사술에 암모늄 작용기가 도입된 고분자를 합성하고, 수산화 이온(OH-)을 전도할 수 있는 음이온 교환막(anion exchange membrane)을 제조하였다(그림 6a). 음이온 교환막은 막전극 접합체(membrane electrode assembly) 제조를 통하여 물을 고순도의 수소로 변환시키는 수전해 셀을 제작하는데 중요한 소재이다. 수전해 셀의 높은 효율을 확보하기 위하여 본 연구실에서는 이온전도 채널을 효과적으로 형성할 수 있는 고분자의 구조 설계 및 합성을 진행하였다. 추가적으로, 강한 친핵성을 가지는 수산화 이온에 의한 고분자의 열화를 방지하기 위하여 이중 원자가 없는(hetero-atom free) 높은 알칼리 안정성을 가지는 고분자 전해질을 개발하는 연구를 진행 중이다.

최근에는, 이동성 이온(mobile ion)과 고분자 사이의 상 분리를 막아 높은 열 안정성을 확보할 수 있는 술포산염 작용기가 도입된 고분자를 개발하였다. 고분자의 결사술이 도입된 술포산염 작용기와 이동성 이온 사이에 이온결합이 형성되어 고분자에 자가회복 특성을 부여할 수 있었으며, 높은 극성을 지닌 술포산염 작용기와 알칼리 이온으로 인해 고분자가 물에 대한 높은 용해도를 보였다. 또한, 물을 이용한 친환경 공정이 가능한 이온성 고분자를 액추에이터와 웨어러블 열 센서 소자 제작에 적용하는 연구를 진행하였다(그림 6b).

알칼리 이온을 이동성 이온으로 사용하는 고분자의 경우, 높은 신축성 및 이온 전도도를 위해 알칼리 이온의 강한

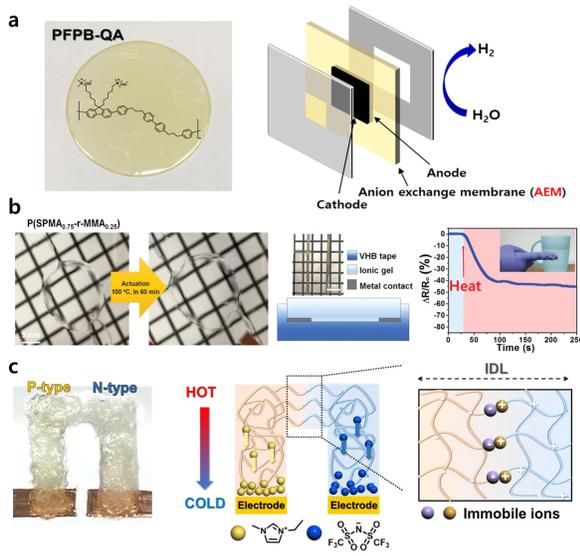


그림 6. (a) 수산화 이온을 전도하는 음이온 교환막 및 막전극접합체의 모식도, (b) 이온 전도체를 이용한 액추에이터 및 열 센서, (c) 전기 없이 이온 전도체만으로 구성된 p-type 및 n-type 열전 발전기.

이온결합을 막아줄 수 있는 첨가제를 사용한다. 하지만, 첨가제의 사용은 성능 저하를 일으키는 문제가 있어, 기존의 알칼리 이온에서 분자의 크기가 큰 액체성 이온(ionic liquid)을 도입하여 가소제가 없는 조건에도 높은 신축성을 지닌 고분자를 구현하고자 하였다. 그뿐만 아니라, 양이온 또는 음이온만을 이동성 이온으로 사용하는 단일 유형 이온성 고분자(single type ionic polymer)는 두 고분자 사이의 계면에서 이온 이중층(ionic double layer)을 형성하였고, 이를 이용하여 금속 전극을 사용하지 않은 완전한 신축성 열전소자에 적용하기 위한 연구를 진행하고 있다(그림 6c).

3. 연구실 현황 및 비전

본 “고분자화학 및 전자재료 연구실”은 지난 15여 년간 전도성 고분자의 합성과 광전소자로의 응용에 관해 집중적으로 연구해왔으며, 최근에는 이온성 고분자를 활용한 다양한 응용연구까지 연구분야를 확장하고 있다. 이를 통해 현재까지 국내외 학술 논문 180여 편을 게재하였으며(최근 5년 피인용 횟수: 6,000여 회), 그 중 27편의 논문이 100회 이상 인용되었다. 본 연구실은 유기, 무기, 그리고 유기 하이브리드 소재 합성 기술을 가지고 있으며, 대면적 소자공정 제작을 포함한 다양한 광전소자로의 응용 기술과 경험을 보유하고 있다. 한편, 본 연구실은 향후 전자소자의 패러다임을 바꿀 것으로 기대되는 신축성 전자소자에 대한 연구를 활발히 진행하고자 한다(그림 7). 신축성 전자소자는 굽힘, 접힘, 연신 등을 포함한 다양한 물리적 변형에 의해 자유롭게 형태를 조절할 수 있는 전자소자를 의미하며, 태양전지, 웨어러블 소자, 자동차 및 건물에 적용할 수 있는 부착형 소자 등 다양한 산업에서 응용될 수 있다. 이러한 신축성 전자소자 개발을 위해서 해결해야 할 과제로는 연신 시 발생하는 기판과 소자 간의 분리문제, 연신 시 소재의 결정구조가 파괴되면서 발생하는 전기적 특성 저하문제, 연신층 사이의 박리현상 등이 있다. 이러한 문제점들을 해결하기 위해서 본 연구실에서는 연신과 복원 과정에서도 우수한 전기적 특성을 유지할 수 있는 전도성 및 반도체 고분자 구조를 디자인하고 개발하여 분석하는 연구를 진행하고 있다. 또한, 박리현상을 방지할 수 있는 물질 사이의 계면 엔지니어링을 통해 계면 간의 접착력을 향상시켜 연신 안정성을 높이는 연구 또한 수행하고 있다.



그림 7. 본 연구실의 주요 미래 비전인 신축성 전자소자.