Vol. 2026-10

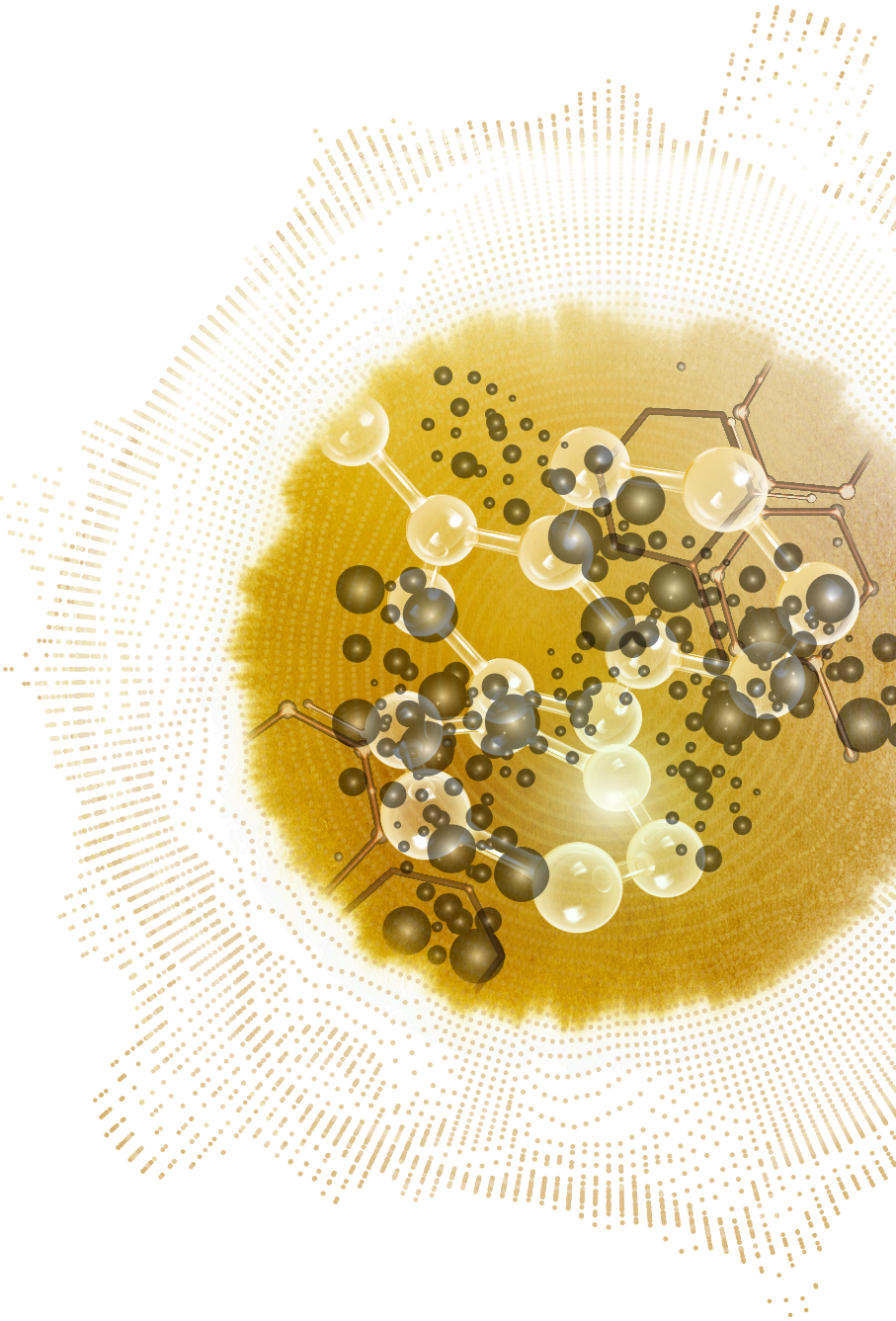
2026

나노 리서치 트렌드 리포트

Nano Research Trend Report

나노기술연구협의회 나노소재분회

고효율·고안정성
차세대 태양전지용
정공전달층 설계 연구



나노기술연구협의회
Korea Nanotechnology Research Society

2026

나노 리서치 트렌드 리포트

Nano Research Trend Report

고효율·고안정성 차세대 태양전지용 정공전달층 설계 연구

〈나노 리서치 트렌드 리포트〉는 나노기술 핵심 이슈와 최신 연구 트렌드를 전문가 시사점 중심으로 정리한 리포트로, 나노기술연구협의회 산하 6대 나노기술 분야별 전문가 네트워크인 '기술분회' 소속 전문가를 통해 작성되었습니다. 본 리포트는 기술분야별 국내외 주요 학회에 기술분회 소속 전문가들이 직접 참여하여, 학회에서 발표된 연구 성과와 논의 내용을 조사·분석하고, 이를 바탕으로 전문가의 시사점을 반영한 최신 연구 트렌드를 제시하고자 기획되었습니다. 이를 통해 연구자들의 창의적인 선행연구와 향후 핵심 이슈로 부상할 가능성이 높은 주제를 선제적으로 발굴함으로써, 연구현장의 흐름을 파악하는 선행지표로 활용하고자 합니다. 〈나노 리서치 트렌드 리포트〉에 많은 관심 부탁드리며, 나노기술연구협의회는 앞으로도 미래 나노기술 이슈를 지속적으로 발굴하고 공유함으로써, 국가 나노기술 연구 및 산업 발전에 기여할 수 있도록 노력하겠습니다.

발간번호 | 2026-10
I S S N | 3140-2151
집 필 자 | 나노소재분회 김동회 (고려대학교 신소재공학부 교수)
발행연월 | 2026년 10월
발 행 처 | 나노기술연구협의회
발 행 인 | 김주선 회장
주　　소 | 서울특별시 서초구 남부순환로 354길 14, 3층
전　　화 | 02-2057-8506
홈페이지 | https://www.kontrs.or.kr
담 당 자 | 곽정원 팀장, 손소미 대리

본 콘텐츠는 과학기술정보통신부 「나노과학기술 연구진흥 및 협력 네트워크 확산 연구」 사업을 통해 제작되었습니다.
본 리포트의 무단 전재 및 재배포를 금합니다.

Nano Research Trend Report

IPS-25

나노기술연구협의회 나노소재분회 – **김동희** (고려대학교 / 교수)

요약문

학회명	IPS-25 (25th International Conference on Photochemical Conversion and Storage of Solar Energy)
개최 기간	**2026. 7. 12.(일)~17.(금)**
개최 장소	**국 가** | 대한민국 / **도 시** | 서울특별시 / **장 소** | 서울대학교
주관 기관	한국광과학회, KPS Forum

학회 소개

- IPS (International Conference on Photochemical Conversion and Storage of Solar Energy) 학회는 1974년 미국 매사추세츠에서 첫 개최 후 2년마다 세계 주요 도시를 순회하며 반세기 동안 개최된 격년제 국제 학술행사로 광화학, 광촉매, 광전기화학, 태양연료 및 차세대 태양광 발전 분야에서 세계적인 석학과 산업계 연구진이 대거 참석하는 가장 높은 위상의 플래그쉽 심포지엄 중 하나임
- IPS-25에서는 할라이드 페로브스카이트 태양광, 유기・염료 태양광, 양자점 광전자공학, 태양광 발전을 위한 신소재・소자・특성 분석, 에너지 및 환경 응용 분야를 위한 광촉매, 태양에너지를 X선으로 변환하는 광전기화학 전지, 태양전지 소재 및 소자의 광분해 등 광에너지 과학 혁신의 최전선에 대한 주제를 다룸

해당 기술분야 및 발표규모

- 해당 기술분야: 태양전지, 광촉매 등 태양에너지 광화학 변환 및 저장 분야
- 본 학회의 해당 분야 발표규모: 국외 199편・국내 86편의 키노트・초청연사 발표, 일반 구두 발표가 진행되었고, 포스터는 국외 69편, 국내 263편이 발표됨

주요 발표내용

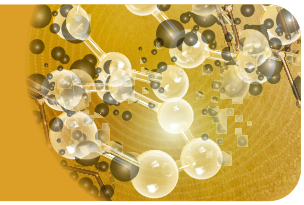
- **Jingjing Xue** (Professor, Zhejiang University, China)
  - 발표제목 Regulating the Organic Moieties in Perovskite Solar Cells
  - 발표내용 직교 구조의 SAX 분자 설계를 통하여 정공수송층 내 불규칙한 분자 배열에서도 정공수송 특성을 유지하여 구동 안정성을 높이는 분자 설계 전략과 SiO_2 나노입자에 Self-assemble molecule (SAM) 유기 분자를 결합하여 표면 커버리지 특성을 향상시키는 3차원 계면 형성 전략을 소개함
- **Tsutomu Miyasaka** (Professor, Toin University of Yokohama, Japan)
  - 발표제목 Emerging Interfacial Materials and Methods in Perovskite Photovoltaics
  - 발표내용 n-i-p 구조의 페로브스카이트 태양전지용 정공전달층 SAM 소재로 자가 배열 결합 간격이 페로브스카이트의 원자 배열 간격과 유사한 TTP-COOMA 분자를 신규 도입하여 계면 응력을 완화하는 전략을 소개함. 분자와 접촉 물질 사이의 구조적 적합성을 새로운 분자 설계 요소로 제시함

핵심 키워드

- 정공전달층용 자기조립 분자 (SAM) 구조 설계
- 유무기 복합 나노계면
- 구동 안정성 및 대면적 균일성

시사점 요약

- 페로브스카이트 태양전지의 정공전달층 연구는 전하 손실을 줄이는 화학적·전기적 특성 제어 위주였으나 최근, 분자 배열과 결합 구조, 표면 커버리지 향상을 위한 복합 구조 설계 등으로 확장되고 있음
- 이번 학회에서 소개된 두 발표는 분자 구조 설계를 통한 비정질 상태에서 정공 수송 특성 유지 및 페로브스카이트 표면 결합 간격 제어를 통한 계면 응력 완화, 유무기 복합 구조를 통한 커버리지 향상 등을 신규 설계 요소로 활용함. 이는 정공전달층의 구조를 나노 수준에서 조절하여 정공수송과 계면 구동 안정성, 대면적 코팅성을 함께 개선할 수 있음을 시사함
- 이러한 접근은 차세대 태양전지 상용화에 필수인 대면적 모듈과 탠덤 태양전지의 제조 재현성 및 장기 구동 안정성을 확보하는 연구로 발전할 가능성이 있음. 향후 실제 구동 조건에서의 검증과 데이터 축적을 통해 인공지능 기반 분자 설계 및 성능 예측으로 확장할 수 있을 것으로 기대됨
- 차세대 태양전지 분야의 핵심 연구개발 이슈로 “대면적 제조와 실제 구동 환경에서 고효율·고안정성을 유지하는 정공전달 분자 및 나노계면 통합 설계 기술 개발”을 제시함



고효율·고안정성 차세대 태양전지용 정공전달층 설계 연구

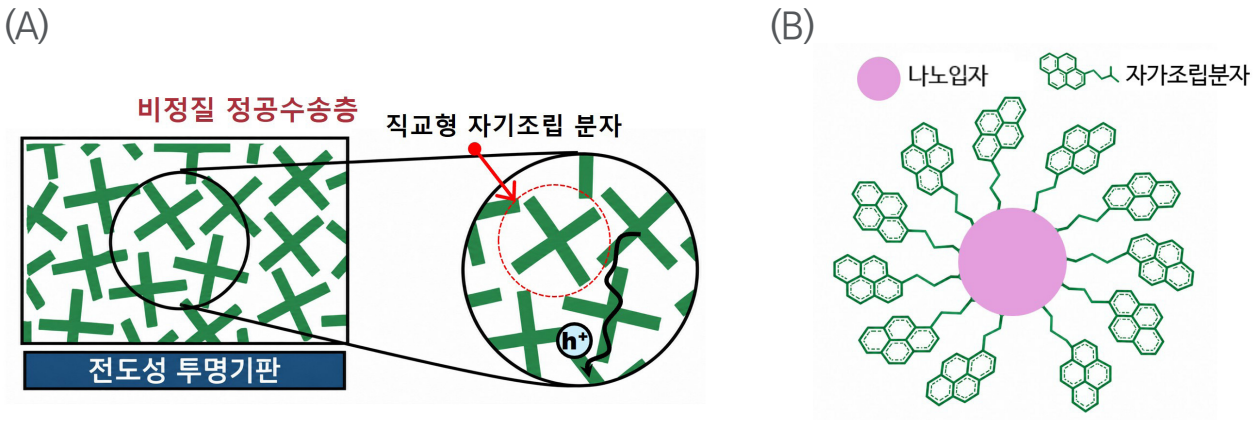
1 | 연구 트렌드 소개

최근 차세대 태양전지로 주목받고 있는 페로브스카이트 태양전지의 계면 연구는 전하 손실을 줄이는 분자 설계에 더해, 상용화 관점에서 중요시되는 장기 구동과 대면적 제조에서 그 기능을 유지하는 방향으로 확장되고 있음. 정공전달층 (Hole transport layer, HTL)은 빛으로 생성된 정공, 즉 양의 전하처럼 이동하는 전자의 빈자리를 전극으로 전달하는 층임. 특히, 최근에는 표면에 자기 결합해 얇은 층을 이루는 자기조립 분자 (Self-Assembled Molecules, SAM)가 주요 연구 대상임

소재 관점으로는 불규칙한 분자 배열로 구조 변형에 대한 내성을 높이거나, 분자 사이를 화학적으로 연결하는 가교 결합으로 열에 의한 배열 변화를 억제하는 전략이 보고됨 [1, 2]. 다른 방향으로 나노구조 지지체로 분자를 고정하는 접근과 분자 설계·용매 조절을 결합한 대면적 도포 연구도 제시됨 [3, 4].

소자 관점에서는 서로 다른 태양전지를 적층하는 탠덤 구조와 대면적 모듈 신뢰성에 대해 다루어짐. 실리콘과 탠덤 태양전지 형성 시 실리콘의 요철 표면 위에서 균일한 분자층을 형성하고, 부분 음영 시 가해질 수 있는 역방향 전압에 대한 내구성을 높이는 연구가 대표적임 [5, 6]. HTL의 전기적 특성뿐 아니라 계면의 결합·피복·구동 중 변화까지 고려해야 함을 보여줌. 본 리포트의 두 발표는 이러한 흐름을 분자 배열과 결합 구조의 관점에서 설명하는 사례임

2 | 연구의 특징 및 핵심 기술



[그림 1] (A) 비정질 정공수송층 및 직교형 자기조립 분자와 정공수송 모식도, (B) 무기 나노입자-유기 자기조립 분자 복합 구조 모식도

Jingjing Xue 교수 (Zhejiang University)의 “Regulating the Organic Moieties in Perovskite Solar Cells” 발표에서는 p-i-n 구조 페로브스카이트 태양전지 내 HTL 유기 분자의 구조 및 배열 제어와 표면 피복 균일성 향상 연구를 다룸. 기존에 활용되는 규칙적인 배열의 4PACz 계열 분자와 비교하여, 결정성이 없고 불규칙적으로 배향되는 (4-(10H-spiro[acridine-9,9′-xanthen]-10-yl) butyl)phosphonic acid (SAX) 분자의 직교형 구조적 특성을 활용하여 정공수송 특성과 구동 안정성을 개선한 연구 결과를 제시함. 이를 통하여 분자 배열이 일부 변형되더라도 전하 이동 경로가 쉽게 손상되지 않는 분자층 설계의 중요성을 보고함 [1]

또한, SiO_2 나노입자 층을 기판 표면에 도포한 뒤 SAM을 코팅하는 3차원 결합 방법을 통하여 투명전극 위에 SAM을 직접 도포하는 방식에 비해 기판 커버리지 불균일성과 분자 적층 문제를 완화하는 전략을 소개함. 이는 분자 자체의 구조 설계와 나노입자를 이용한 계면 형성 공정이 함께 작용할 수 있음을 보여줌 [3]

Tsutomu Miyasaka 교수 (Toin University of Yokohama)의 “Emerging Interfacial Materials and Methods in Perovskite Photovoltaics”발표에서는 n-i-p 구조의 페로브스카이트 태양전지에 적합한 신규 SAM 소재로서 methylammonium 2,5-bis(5-(4-(bis(4-methoxyphenyl)amino)phenyl)thiophen-2-yl)terephthalate (TTP-COOMA)를 보고함. TTP-COOMA의 특징으로는 $FAPbI_3$ 페로브스카이트 소재의 격자 상수인 0.633 nm와 유사한 0.636 nm의 결합 간격을 갖도록 설계하여 $FAPbI_3$ 페로브스카이트와의 계면에서의 응력을 완화하여 구조적 적합성을 확보하고 이런 결합 간격을 새로운 분자 설계 요소로 제시함 [7]

3 기존과 비교 시 연구 (기술)의 우수성과 가능성

기존 정공전달층 소재 연구에서는 정공이 이동하기 쉬운 에너지 준위를 확보하고, 계면에서 전하 손실을 유발하는 결함을 줄이는 데 중점을 두어 왔음. 그러나 분자의 전기적 특성이 우수하더라도 실제 기판에서 분자가 불균일하게 배열되거나 구동 중 결합 구조가 변하면 성능을 유지하기 어려움. 따라서 분자 자체의 특성과 함께, 분자가 표면을 덮는 방식과 주변 물질과의 결합 구조를 고려하는 것이 중요함

Xue 교수의 SAX 분자 연구는 규칙적인 분자 배열이 반드시 정공수송과 안정성 확보에 유리한 것은 아니라는 점을 보여줌. 규칙적인 배열에 의존하는 전하 이동 경로는 외부 자극에 의해 구조가 변할 경우 영향을 받을 수 있음. 반면 서로 직교하는 분자 골격의 SAX 분자는 불규칙한 배열에서도 정공수송이 가능한 구조를 형성함. 이는 정공전달층 소재의 구조 설계를 통하여 구동 중 배열이 변하더라도 성능을 유지할 수 있어 안정성을 향상시킬 수 있음을 의미함

또한, 나노입자와 결합한 HTL의 입체적 결합 형성은 입자 크기와 분산 상태, SAM 도포량 등이 기판 커버리지를 결정하는 주요 변수가 됨. 다만 입자층이 지나치게 두꺼워지거나 뭉치면 전하 이동에 불리할 수 있으므로, 균일성과 전기적 특성 사이의 최적점을 확보할 수 있도록 설계해야 함

Miyasaka 교수의 보고에서는 기존 SAM 설계 시 고려했던 에너지 준위 조절, 페로브스카이트 표면 반응을 통한 결함 제어 등에 더하여, 분자의 결합 간격과 페로브스카이트 결정 격자 간격 간의 차이를 변수로 포함함. 이러한 연구 방향은 단순히 SAM의 화학적, 전기적 특성뿐만 아니라 결정 구조적 응력 제어 역시 중요한 요소로 작용함을 보여줌

이러한 연구는 정공전달층 소재를 선택할 때 화학적, 전기적 특성뿐 아니라 분자 구조, 접합 소재와의 결정 구조적 적합성도 함께 고려해야 함을 시사함. 또한, 페로브스카이트의 조성과 기판의 표면 상태에 따라 표면 커버리지를 위해서 적합한 분자 구조가 달라질 수 있음을 보여줌

표1 차세대 페로브스카이트 태양전지 정공수송층 분야 연구 트렌드 변화

NO	항목	기존 연구 트렌드	최신 연구 트렌드
1	정공전달층용 자기조립 분자 구조 설계	• 전하 이동에 유리한 에너지 준위와 계면 결함 제어	• 분자 자체 배열 및 계면에서 결합 간격을 함께 고려
2	계면 형성	• 평면 전극 위 분자층 형성과 도포 조건 조절	• 나노입자를 활용한 3차원 유무기 복합 계면 형성을 통한 커버리지 개선
3	성능 평가	• 초기 효율과 전하 추출 특성	• 외부 환경에 의한 장기 구동 안정성과 더불어 대면적 균일성까지 연계

4 향후 전망 및 기대

향후 정공전달층 연구는 분자의 전기적 특성과 구조적 특성을 함께 설계하고, 이를 실제 박막 형성 공정으로 구현하는 방향으로 확대될 것으로 전망됨. 분자 골격과 결합기의 위치, 주변 물질과의 결합 방식을 조절함으로써 정공수송과 구동 중 구조 안정성을 함께 확보하는 연구가 중요해질 것으로 보임. 특히 HTL 형성뿐만 아니라 실제 구동 중 가해지는 빛과 열에 의한 부하 상황에서도 배열과 결합이 어떻게 변하는지 확인할 필요가 있음. 이러한 관점에서 Jingjing Xue 교수 그룹은 지속적으로 신규 SAM 소재 설계 혹은 다중 SAM 소재 활용을 통한 균일한 커버리지 확보 등 제시된 연구 방향을 선도하면서 해당 연구의 필요성을 제시함. IPS-25에서는 중국 Westlake University의 Rui Wang 교수나 일본 Kyoto University의 Atushi Wakamiya 교수 그룹에서도 소수성/친수성 제어를 위한 작용기 개선 등 SAM 소재의 분자 구조 설계 연구 사례를 보고함

응용 측면에서는 대면적 모듈과 탠덤 태양전지로의 확장이 기대됨. 넓은 면적이나 요철이 있는 기판에서도 균일한 표면 커버리지를 확보하려면 분자 설계와 도포 조건을 함께 최적화해야 함. 또한, 탠덤 태양전지로 확장 시 필수인 주석·납 혼합 페로브스카이트 조성 또는 요오드·브롬 혼합 페로브스카이트 조성 등 서로 다른 조성에 적용할 경우, 에너지 준위뿐 아니라 표면에서의 결합 구조의 적합성까지 고려할 필요가 있음

성능 평가 역시 초기 효율과 저장 수명에서 실제 발전 조건을 반영하는 방향으로 확대될 필요가 있음. 고온 구동, 반복적인 온도 변화, 부분 음영에 따른 역방향 전압을 함께 고려해야 함. 이러한 정공수송층 계면 기술이 반복 제조에서도 재현된다면 태양광 모듈의 성능 편차와 열화를 줄이고 누적 발전량을 높이는 데 기여할 수 있음. 다만 실험실 가속시험 결과를 옥외 수명으로 연결하는 검증은 추가로 요구됨

5 연구개발 이슈 제시

두 발표뿐만 아니라 IPS-25 기간 동안 다수의 세계적인 석학들의 발표를 바탕으로 도출한 차세대 태양전지의 주요 연구개발 방향은 SAM 관련 분자의 구조 설계와 균일한 계면 형성 기술을 연계한 정공전달층 연구임. 특히, 대면적 코팅과 같은 제조관점의 문제점과 소자 구동 조건에서도 우수한 성능을 유지할 수 있는 안정성과 관련된 부분을 다룸. 해당 관점에서 미뤄볼 때, 향후에는 분자 배열과 결합 간격, 표면 커버리지가 정공수송 및 계면 안정성에 미치는 영향을 보다 체계적으로 규명할 필요가 있음

단기적으로는 분자 골격과 결합기의 위치·간격을 조절한 소재를 동일한 기판과 페로브스카이트 조성에서 비교하는 연구를 생각해볼 수 있음. 특히 규칙적인 배열과 불규칙한 배열의 효과를 구분하고, SAM과 페로브스카이트 표면의 결합 구조가 계면 변형과 전하 손실에

미치는 영향 등을 고려할 수 있음. 유무기 복합 구조 형성에 있어서는 무기 나노입자의 크기와 분산 상태, SAM과 결합 형성 시 표면 커버리지 균일성뿐만 아니라 유무기 하이브리드 HTL의 전기적, 화학적 특성의 변화도 살펴볼 필요가 있음

중기적으로는 이를 대면적 코팅과 탠덤 소자에 적용 시 공정 조건의 허용 범위, 제조 수율, 소자 간 편차를 개선할 수 있는 방향의 연구가 필요함. 광조사·고온·최대 전력 생산 상태 등 다양한 구동 환경에서의 성능 유지율과 함께 온도 반복 및 역방향 전압 내구성 등 실제 구동 중 발생할 수 있는 공통 조건에서 비교할 필요가 있음. 장기적으로는 소재 합성의 재현성 및 수율 향상, 생산 경제성 확보, 용매 사용량과 공정 시간 측면의 연구를 통한 제조 적용성 역시 고려할 필요가 있음

이를 위해 분자 합성·계면 분석·모듈 제작을 연계하고, 성공 사례뿐 아니라 열화 원인과 공정 편차도 공유하는 연구 기반이 요구됨. 이에 핵심 연구개발 이슈로 "대면적 제조와 실제 구동 환경에서 고효율·고안정성을 유지하는 정공전달 분자 및 나노계면 통합 설계 기술 개발"을 제시함. 또한, 이렇게 얻어진 데이터를 활용하여 분자 설계 AI 모델과 구동 예측 AI 모델 등을 개발함으로써 차세대 태양전지 개발 연구를 가속화 할 수 있는 토대를 구축할 필요가 있음

표2 주요 기술용어 설명

NO	용어명	최신 연구 트렌드
1	정공전달층 (Hole transport layer, HTL)	• 정공을 전극으로 전달하는 층
2	자기조립 분자 (Self-assembled molecule, SAM)	• 표면 결합 시 자기조립을 하려는 성향을 지닌 분자. 실제 도포 시 단층부터 다층 형성이 가능하고, 자기조립 성향으로 인해 빈공간이 발생하기도 함
3	표면 커버리지와 결합기	• 표면 커버리지: 분자가 표면을 덮는 정도 • 결합기: 분자가 전극이나 반도체 표면에 붙도록 하는 화학적 부분
4	분자 배열과 구조적 적합성	• 분자 배열: 분자가 놓이는 방향과 규칙성을 뜻함 • 구조적 적합성: 분자의 결합 위치와 표면 원자 배치가 잘 맞는 정도로, 두 개념은 구분하여 평가해야 함
5	격자상수와 계면 응력	• 격자상수: 결정 배열이 반복되는 기본 길이 • 계면 응력: 접촉한 물질 사이에 작용하는 기계적 힘의 정도이며, 구조와 열팽창 차이 등의 영향을 받음

참고문헌

[1] Zhou, J. et al. Nat. Chem. 17, 564–570 (2025)
[2] Jiang, W. et al. Nature 646, 95–101 (2025)
[3] Luo, Y. et al. Nat. Mater. 25, 1607–1613 (2026)
[4] Qu, G. et al. Nat. Synth. (2026), online published, doi.org/10.1038/s44160-026-01089-2
[5] Jia, L. et al. Nature 644, 912–919 (2025)
[6] Wang, X. et al. Nat. Energy 11, 818–829 (2026)
[7] Wu, T. et al. Adv. Mater. 37, 2414576 (2024)



2026

나노 리서치 트렌드 리포트

나노기술연구협의회
Korea Nanotechnology Research Society