

논문 2025-4-14 <http://dx.doi.org/10.29056/jsav.2025.12.14>

새로운 BTD 기반의 홀전달체 합성 및 소자 응용

백상현*†

Synthesis and device applications of novel BTD-based hole transporting materials

Sanghyun Paek*†

요 약

유기금속 할라이드인 페로브스카이트 태양전지는 매우 우수한 광전 변환 효율을 갖는다. 공정이 간단하며, 저비용의 소재를 활용함으로 각광받고 있다. 본 연구는 D-A-D 구조를 갖는 새로운 HTM을 개발하였다. 그들의 광학적 특성을 분석 하였고, 특히 BT-Me는 열적으로 매우 안정성을 갖는다. 이를 활용하여 소자를 제작하였으며, 광전변환 효율이 약 10%에 가까운 결과를 얻었다. 효율은 기대한 만큼의 효과를 보이지 않지만, Benzothiadiazole에 methyl기를 치환함으로 열적으로 매우 안정한 HTM을 합성 하였다. 이는 앞으로 페로브스카이트 태양전지의 안정성 문제를 해결할 수 있는 부분으로 좋은 영향을 미칠 수 있다.

Abstract

Perovskite solar cells, which are organometal halide solar cells, have excellent photoelectric conversion efficiencies. Their simple fabrication and use of low-cost materials have attracted considerable attention. This study developed a novel HTM with a D-A-D structure. Their optical properties were analyzed, in particular, BT-Me HTM demonstrated excellent thermal stability. A device was fabricated using a new HTM, and a photoelectric conversion efficiency of approximately 10 % was obtained. While the efficiency was not as high as expected, a highly thermally stable HTM was synthesized by substituting a methyl group in benzothiadiazole. This finding could have a positive impact on solving the stability issue of perovskite solar cells in the future.

한글키워드 : 페로브스카이트 태양전지, 홀전달체, 벤조티아디아졸 유도체, 유기합성, 열적안정성

keywords : perovskite solar cell, Hole transporting materials, benzothiadiazole derivatives, organic synthesis, Thermal stability

1. 서 론

유기금속 할라이드 페로브스카이트 태양전지

(PSCs)는 매우 우수한 광전변환 효율 (PCE)을 나타내며, 저비용 소재와 제작 공정을 통해 가격이 고 재생 가능한 태양 전력을 제공할 수 있다[1-3]. PSC의 PCE는 가시광 영역에서의 넓은 흡수 범위[5], 높은 흡수 계수[6], 높은 전하 이동도[7], 그리고 긴 확산 길이[8]와 같은 고유

* 상명대학교 화학에너지 공학

† 교신저자: 백상현(email: sanghyun.paek@smu.ac.kr)
접수일자: 2025.12.02. 심사완료: 2025.12.15.
게재확정: 2025.12.20.

한 장점 덕분에 3.8 %에서 27.0 %까지 빠르게 증가하였으며, 이는 미국 국립재생에너지연구소(NREL)에 의해 입증되었다[4]. 페로브스카이트 태양전지 구조는 전자 전달층(HTL), 광흡수층, 정공 수송층(HTL) 그리고 상대전극으로 구성되어 있으며 그중 정공 수송층은 페로브스카이트 광흡수층을 보호하며 정공의 추출/수송 그리고 전자의 차단과 직접적인 관련이 있으며 광전변환 효율과 안정성에 핵심적인 역할을 한다[9-12].

정공수송층으로 잘 알려진 화합물인 2,2',7,7'-tetrakis(N,N-di-p-methoxyphenylamine)-9,9-spirobifluorene (Spiro-OMeTAD)는 PSCs에서 널리 사용되는 대표적인 정공 수송 물질이다. 그러나 높은 순도 유지를 위한 비용, 에너지 준위 조절의 어려움, 낮은 홀 이동도를 보이며 홀 이동도의 증가를 위한 다양한 첨가제 사용으로 PSCs 소자의 안정성 문제가 야기되어 상업적 사용에는 제약이 있다.

현재까지 페로브스카이트 태양전지의 HTM은 유기, 무기, 고분자 소재들을 사용하고 있다. 이중 유기 HTM은 간단한 제조 공정과 에너지 준위 조절이 용이하다는 장점을 통해 널리 활용되고 있다. 다양한 작용기 활용을 통해 에너지 준위 조절이 가능하고 광전 특성을 미세하게 조절할 수 있기 때문에 더 많은 연구를 진행하고 있다.

HTM의 설계는 전자를 주는 Donor 그룹으로 트라이페닐 아민[13], 카바졸[14] 등을 활용하였으며 전자 전달을 위한 그룹으로 싸이오펜 유도체[15,16], 벤조다이싸이오펜[17] 등을 포함하는 새로운 HTM 설계로 성능을 개선해 왔다. 다른 한편으로는 전자 받개 그룹을 활용하여 대칭 D-A-D (donor-acceptor-donor) 구조의 HTM도 개발함으로써 정공 수송 능력을 향상시키는 방향으로 연구가 활발히 이루어지고 있다. 대표적인 전자 받개 그룹으로는 BTD (Benzothiadia

-zole) 작용기가 사용되어 합성이 용이하고 비용 저감을 위해 많이 연구되고 있다. 또한 전자결핍 특성을 갖는 D-A-D 구조는 분자 내 전하 이동 및 분자 간 π - π 스택킹이 증가되어 정공 수송을 더욱 향상 시킬 것으로 예상된다.

2018년 Peng Xu 연구진은 트라이페닐 아민을 donor로, BTD 기반의 유도체를 acceptor로 D-A-D 구조의 HTM을 합성하여 그들의 광학적 특성을 보고하였다[18]. YN2 기반 PSC는 공기 조건에서 19.27%라는 인상적인 PCE 값을 보였으며, 이는 Spiro-OMeTAD로 제작된 태양전지(17.8 %)보다 우수한 결과를 얻었다. 반면, YN1을 HTM으로 사용한 PSC는 16.03 %로 훨씬 낮은 PCE를 보고하였다. 또 다른 연구로는 2020년 Xiang Zhou 연구진이 BTD에 각각 DOlctyloxy, difluoro를 치환한 새로운 HTM을 개발하였다. Dopant-free 기반으로 HTM을 사용하였고 비록 광전변환 효율이 12.1%로 낮은 효율을 보이지만 안정성을 크게 향상 시키는 결과를 보고하였다[19]. 그리고 2025년 Tianqi 연구진은 BTD에 Fluoro가 치환된 SF-1, SF-2를 개발하여 폴리머와 함께 사용함으로써 광전변환 효율이 18 % 이상 되는 결과를 보고하였다[20]. 휘발성 고체 첨가제의 활용을 통하여 박막의 형태를 재구성하여 계면에 다중 스케일 도메인을 형성할 수 있어서 효율을 증가시키고, 엑시톤 추출 및 전하 수송을 빠르게 진행 시켰다. 마지막으로 Zhu-Zhu Sun 연구진은 BTD를 활용한 D-A-D 구조의 계산 화학을 통한 연구를 보고하였다. 기하학적 구조 및 전자구조, 광 흡수, 정공 수송 및 계면 특성을 이론적 화학 계산을 통해 조사하였고, 모든 HTM은 페로브스카이트층과 적절한 에너지 준위를 나타냄을 보고하였다. SM37의 HTM은 전하 재분배와 더 많은 전하 전달을 관찰하여 HTM의 잠재적인 후보군 물질이라 판단됨을 보고하였다[21].

본 연구에서는 대칭 D-A-D 구조의 HTM을 활용하고자 전자주개 그룹인 dimethyl기가 치환된 BTD를 합성하였고, 이와 비교군 실험을 위해 치환되지 않은 BTD를 Acceptor로 활용하였다. Donor 그룹으로는 dimethoxy기가 치환된 트리아페닐 아민을 사용하였다. 자세한 분자 구조 및 합성방법에 대해 그림 1.에 나타내었다. 우선 BTD와 methyl기가 양쪽으로 치환된 BTD를 합성하여 bromination을 진행하여 acceptor에 dibromo가 치환된 화합물을 준비하였다. 양쪽의 전자주개 그룹으로 dimethoxy기가 붙어 있는 트리아페닐 아민에 trimethylsilyl기가 붙은 화합물을 준비하여 Pd(PPh₃)₄ 를 촉매로 넣은 stille coupling을 진행하여 최종화합물인 BT와 BT-Me를 합성하였다. 합성된 HTM은 PL quenching에서 보듯이 우수한 홀 이동의 역할을 하였다. 이를 통한 소자의 제작에서 안정성의 결과를 보기 위한 도펀트가 없는 HTM을 활용하였을 때, 광전변환 효율이 약 10 %에 가까운 소자의 결과를 얻었다.

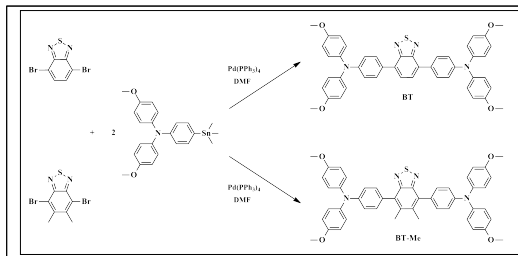


그림 1. BT, BT-Me HTM 합성 및 구조
Fig. 1. Synthesis and structure of BT and BT-Me HTMs

2. 실험 방법

2.1 HTM 합성 및 NMR 분석

콘덴서가 장착된 250mL 2구 둥근 바닥 플라스크에 4,7-dibromo-5,6-dimethylbenzo[c][1,2,5]

-thiadiazole (1 g, 3.1 mmol), 과량의 Sn이 치환된 N,N-디페닐-4-(5-트리메틸스타닐)티오펜-2-일)아닐린, 그리고 N,N-디메틸포름아미드 30 mL를 넣고 질소 가스로 충분히 안정한 상태를 만들었다. Pd(PPh₃)₄ (55 mg, 0.15 mmol)를 촉매량만큼 첨가하고 반응 혼합물을 3일 동안 가열 환류하였다. 반응 혼합물을 실온으로 냉각하고 용매를 증발시킨 후, EA 유기 용매로 유기물을 추출하여 솔벤트를 제거하였다. 생성물을 컬럼 크로마토그래피(실리카겔, 용리액: 에틸 아세테이트/헥산=1:10)로 정제하였다. (BT-Me) : ¹H NMR (300 MHz, CDCl₃): δ 7.26-7.15 (m, 10H, Ar), δ 7.08-7.01 (m, 6H, Ar), δ 6.94-6.78 (m, 8H, Ar), δ 3.81 (s, 12H, -OCH₃), δ 2.39 (s, 6H, -CH₃). ¹³C NMR (75 MHz, CDCl₃): δ 156.18, 148.20, 140.85, 137.78, 131.62, 129.11, 127.27, 126.49, 114.85, 114.76, 55.60, 18.91.

2.2 PSCs 소자 제작

에칭되어진 FTO 기판 (Philkington, TEC8, 8 Ω cm⁻²)은 계면활성제 수용액, 아세톤, 이소프로판올을 사용하여 각 30분씩 세척하였다. 30분 동안 UV-O3 처리를 한 뒤, SnO₂ 콜로이드 용액을 3000 rpm에서 30초 동안 스핀 코팅하고, 150°C에서 1시간 동안 어닐링 하였다. 페로브스카이트 전구체는 DMF와 DMSO (8:1, v:v) 혼합 용매에 1.4 M FAI, 1.4 M PbI₂, 0.07 M MABr, 0.07 M PbBr₂, 0.5 M MACl을 혼합하여 제작하였다. 만들어진 전구체 용액을 이용하여 1000 rpm 10초, 5000 rpm에서 30초 총 2단계의 스핀 코팅을 통해 도포하였다. 2번째 단계에서 안티솔벤트로 사용하였으며, 이후 150 °C에서 열처리를 하여 페로브스카이트 박막을 형성하였다. CB에 녹인 5 mM, 10 mM, 15 mM의 도펀트를 첨가하지 않은 BT 및 유도체 용액을 제조하였다. 준비된 홀 전달물질 용액은 3000 rpm에서 30초 동안 스핀 코

표 1. HTM의 광학적 특성 분석
Table 1. Optical properties of HTMs

홀 전달체	$\lambda_{abs}[nm]$ ($[M^{-1}cm^{-1}]$)	λ_{em} [nm]	$E_{0-0}^{a)}$ [eV]	$E_{ox}^{0 b)}$ [V]	E_{HOMO}^c [eV]	E_{LUMO}^d [eV]
BT	314 (66,400), 482 (31,700)	687	2.162	0.215	-5.295	-3.133
BT-Me	308 (58,200), 421 (7,900)	626	2.419	0.205	-5.285	-2.866

a) E_{0-0} 은 THF 용매에서 흡수, 방출 스펙트럼의 교차점을 활용; b) CV측정은 스캔 비율이 50 mV s^{-1} (vs Fc/Fc+)을 사용하여 계산 c) E_{HOMO} 는 CV의 산화 준위를 계산하여 페로센을 기준으로 변경하여 NHE 전위 변환 (Fc/Fc++ 0.64 versus NHE + 4.44 versus vacuum); d) E_{LUMO} 는 밴드갭과 E_{HOMO} 의 차이를 계산.

팅하여 기판 위에 도포하였다. 이후 100 nm 두께의 Ag 전극을 증착하였다.

2.3 광학 분석 장비

태양전지 성능 측정은 Ivium 소프트웨어가 포함된 Peccell의 PEC-L01을 사용하여 50 mV s^{-1} 의 스캔 속도로 표준 모사 AM 1.5G 조사 조건 하에서 분석하였다. 외부양자효율 (External Quantum Efficiency, EQE)는 HS Technologies의 PEIPCE 상용 시스템을 사용하여 측정하였다. 자외선-가시광선 스펙트럼 (UV-VIS)은 CARY 5000으로 200-800 nm의 파장 범위에서 분석하였다. 광발광 (Photoluminescence, PL) 스펙트럼은 형광 분광계 FL 6500을 통해 500-800 nm의 파장 범위에서 측정하였다. 열중량 분석 (Thermogravimetric Analysis, TGA)은 TGA Q50을 활용하였다.

3. HTM 광학 분석 및 소자 효율

3.1 HTM의 광학 및 열 특성

본 연구진은 합성된 HTM의 광학적, 열적 특성을 분석하기 위하여, UV, PL, CV, TGA를 측

정하여 그림 2, 3 그리고 표 1에 정리하였다. 클로로 벤젠 솔벤트를 사용하여 BT와 BT-Me의 UV-vis 흡수 및 방출 스펙트럼을 측정하여 그림 2. a)에 나타내었다.

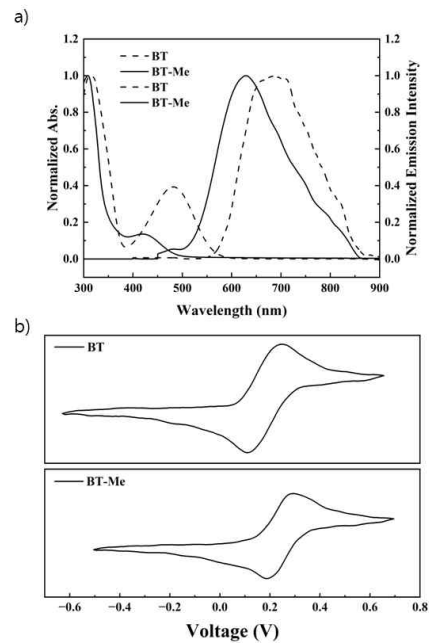


그림 2. a) BT와 BT-Me의 흡수 및 방출 스펙트럼. b) BT와 BT-Me의 CV 측정
Fig. 2. a) Absorption and emission spectra of BT and BT-Me. b) CV measurements of BT and BT-Me.

BT 화합물은 두 개의 흡수 밴드를 보인다. 단 파장 (BT : 314, BT-Me : 308 nm) 에서 관찰되는 전이는 $\pi-\pi^*$ 에 의한 흡수 파장이다. 각각 482, 421 nm에서 최대 흡수를 보이는 것은 $n-\pi^*$ 전이로 장파장의 흡수가 관찰된다. 2개의 HTM 은 비슷한 전이를 보이지만, methyl기가 치환됨으로 band gab은 증가되어 관찰되었고, 전반적인 HOMO 레벨은 양의 방향으로 이동하여 페로브스카이트의 valence band와의 적절한 차이를 보인다.

방출 스펙트럼은 각각 687, 626 nm에서 관찰되었고 각 HTM은 stock shifts가 크게 발생함을 확인하였다. 이는 분자가 excitation 되었을 때, 큰 차이의 분자 구조 변화가 일어남을 확인할 수 있다. 각 화합물의 band gab은 UV와 PL의 교차 지점을 통해 계산될 수 있으며, 각각 BT는 2.162 eV이고 BT-Me는 2.419 eV 값을 얻었다.

각 화합물들의 홀 전달이 가능한지 확인하기 위하여 Cyclic voltammetry (CV)를 측정하였다. 이는 Ag/AgCl 전해질에 0.1M tetrabutyl-ammonium hexafluorophosphate를 다이클로 메탄에 녹여 사용하였고, Ferrocene을 이용하여 NHE 기준으로 변환하였다.

BT HTM의 HOMO 레벨은 0.215 V이고 BT-Me HTM은 0.205 V 로 메틸기를 치환한 HTM의 HOMO 레벨이 더 높아지는 결과로 앞의 연구와 동일한 양상의 결과를 얻었다[21].

그림 3. a)는 소자 제작에 있어 각 구성성분의 에너지 다이어그램을 통해 새로운 HTM이 적절한 에너지 레벨을 갖는지 도식하였다. SnO₂, perovskite 레벨은 보고된 결과를 가져왔고, BT, BT-Me HTM은 밴드갭 계산과 CV 측정된 HOMO 레벨을 활용하여 계산되었다. 모든 HTM 은 적절한 에너지 레벨을 갖고 있으며 이를 통한 소자의 구동은 적절하다고 판단된다. 또한, 소자 제작시 HTM의 안정성을 확보하기 위하여 열중

량분석 (TGA) 측정하였다. 그림 3. b)에서 보듯이 각각의 HTM은 300도 이상에서 분해가 시작되고 있다. 이는 소자 제작 과정의 150도 열에 충분한 안정성을 보이며, 특히 Me기가 치환된 BT-Me는 BT에 비해 열적 안정성이 매우 우수함을 확인할 수 있었다. 현재 문제점으로 대두되는 소자의 안정성을 크게 확보할 수 있다는 장점을 보인다.

3.2 HTM을 활용한 광전변환 효율 및 안정성 분석

HTM의 구동을 확인하기 위하여 본 연구진은 FTO/SnO₂/Perovskite/HTM의 구조를 갖는 소자가 구동할 수 있는지 확인을 하였다. 그림 3. a)에서 보듯이 각각의 HTM을 도핑하였을 때,

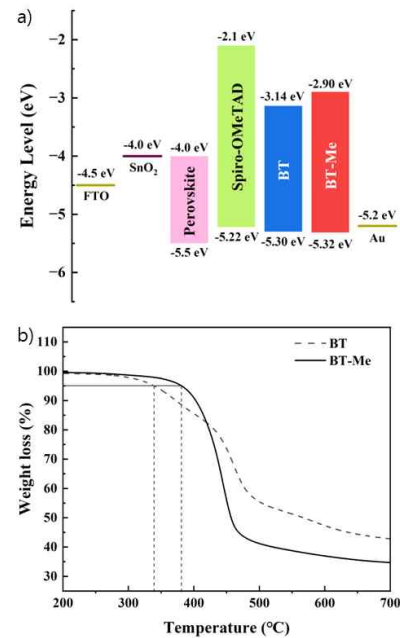


그림 3. a) BT와 BT-Me를 활용한 소자 에너지 다이어그램. b) BT와 BT-Me의 열중량분석

Fig. 3. a) Device energy diagrams using BT and BT-Me. b) Thermogravimetric analysis of BT and BT-Me

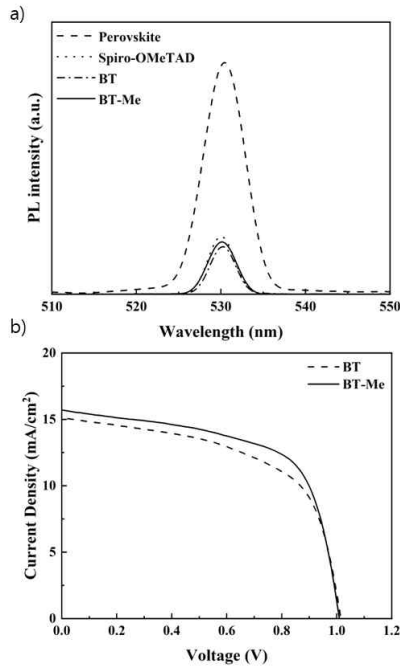


그림 4. a) BT와 BT-Me의 PL quenching 측정
 b) BT와 BT-Me의 광전변환 효율 측정
 Fig. 4. a) PL quenching measurements of BT and BT-Me. b) Photoelectric conversion efficiency measurements of BT and BT-Me.

PL Quenching 실험을 통해 페로브스카이트 정공이 HTM에 잘 전달됨을 확인하였다. HTM이 없는 조건에서는 방출이 크게 발생하여 HTM의 유무에 따라 차이가 크다는 걸 확인하였다. 동일한 소자에 Ag를 증착하여 광전변환 효율을 측정하였다. 그림 4. b)는 광 흡수체로 FAPbI₃ 기반에 MAPbBr₃가 95:5로 조성된 페로브스카이트를 사용하였고 표준 전역 AM 1.5 조명 하의 전류-전압 (J-V)을 나타내었다. 열중량 분석의 결과에서 보듯이 BT-Me는 매우 우수한 안정성을 가지고 있으므로 소자 제작에 있어서 다른 첨가제를 사용하지 않고 소자를 제작하였다.

효율 측정은 각각 5, 10, 15 mM의 농도를 사용하여 HTM을 도포하였다. 그중 가장 좋은 효

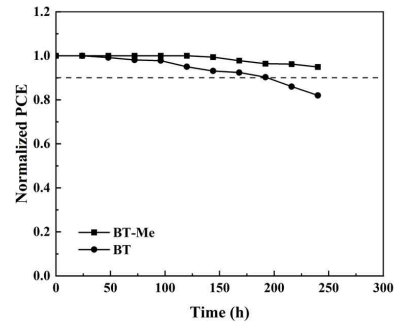


그림 5. BT와 BT-Me를 활용한 소자의 장기 안정성 테스트
 Fig. 5. Long-term stability of the devices with BT and BT-Me.

율만 그림 4. b)에 나타내었다. BT HTM을 사용한 소자는 8.87 %의 광전변환 효율을 얻었으며, 단락 전류 밀도 (J_{sc})는 15.12 mA/cm², 개방전압 (V_{oc})는 1.04 V, 곡선인자 (FF) 57.8 %의 값이 측정되었다. 반면에 밴드갭이 증가하고 안정성 향상을 보인 BT-Me HTM은 광전변환 효율이 9.92 %를 얻었고, 단락전류밀도 (J_{sc})는 15.7 mA/cm², 개방전압 (V_{oc})는 1.09 V, 곡선인자 (FF) 62.6 %가 측정되었다.

BT와 BT-Me를 활용하여 제작한 소자의 수명 특성을 비교 분석하기 위해 240 시간 동안 상온 및 상대습도 25~30 % 환경에 소자를 노출하며 일정 시간동안 효율 특성을 확인하였다. 결과적으로 BT-Me의 도입이 소자의 안정성 확보에 중요한 역할을 수행함을 확인하였다. BT 소자는 240 시간 후 초기 효율의 82 %까지 성능이 저하된 것과 대조적으로, BT-Me를 도입한 소자는 초기 효율의 94 %로 높은 효율 유지를 보였다. 이는 BT-Me가 가진 구조적 및 물리적 특성에 의해 열 및 습도에 강하며 외부 환경으로부터 수분 침투를 효과적으로 차단하여 페로브스카이트 층의 열화를 지연시켰기 때문으로 판단된다.

4. 결론

본 연구는 페로브스카이트 태양전지 분야에서 새로운 홀 전달체를 합성하고 그들의 광학적 특성을 분석하였다. 많은 연구자들이 효율을 향상시키기 위해서 페로브스카이트 전구체의 개발과 계면에서의 효과적인 전자-전공 분리에 대한 연구를 진행한다. 하지만, 소자의 중요한 부분인 홀 전달체의 연구도 매우 중요하다. D-A-D 구조를 갖는 홀 전달체는 전자-전공 분리에 효과적인 구조이다. 이를 위해 Benzothiadiazole에 대한 연구는 중요한 부분 중 하나이다. 비록 낮은 효율을 가지지만 새롭게 합성한 BT-Me를 활용하여 제작한 소자는 240 시간 경과 이후에도 초기 효율의 94 %를 유지하는 우수한 안정성을 확보한 재료이다. 앞으로 새로운 연구 분야의 발전에 꼭 필요한 연구로 더 많은 연구가 진행될 수 있는 발판을 마련하였다.

참고 문헌

- [1] A. Kojima, K. Teshima, Y. Shirai and T. Miyasaka, "Organometal Halide Perovskites as Visible-Light Sensitizers for Photovoltaic Cells", *J. Am. Chem. Soc.*, 131, pp.6050 - 6051, 2009, DOI: <https://doi.org/10.1021/ja809598r>
- [2] P. Gao, M. Grätzel and M. K. Nazeeruddin, "Organohalide lead perovskites for photovoltaic applications" *Energy Environ. Sci.*, 7, p.2448, 2014, DOI : <https://doi.org/10.1039/C4EE00942H>
- [3] S. Pang, H. Hu, J. Zhang, S. Lv, Y. Yu, F. Wei, T. Qin, H. Xu, Z. Liu and G. Cui, "NH₂CH=NH₂PbI₃: An Alternative Organolead Iodide Perovskite Sensitizer for Mesoscopic Solar Cells" *Chem. Mater.*, 26, pp.1485 - 1491, 2014, DOI : <https://doi.org/10.1021/cm404006p>
- [4] Best Research-Cell Efficiency Chart | Photovoltaic Research | NREL
- [5] C. C. Stoumpos, C. D. Malliakas, M. G. Kanatzidis, "Semiconducting Tin and Lead Iodide Perovskites with Organic Cations: Phase Transitions, High Mobilities, and Near-Infrared Photoluminescent Properties" *Inorg. Chem.*, 52, pp.9019 - 9038, 2013, DOI : <https://doi.org/10.1021/ic401215x>
- [6] H.-S. Kim, C.-R. Lee, J.-H. Im, K.-B. Lee, T. Moehl, A. Marchioro, S.-J. Moon, R. Humphry-Baker, J.-H. Yum, J. E. Moser, M. Grätzel, N.-G. Park, "Lead Iodide Perovskite Sensitized All-Solid-State Submicron Thin Film Mesoscopic Solar Cell with Efficiency Exceeding 9%", *Sci. Rep.*, 2, p.591, 2012, DOI : <https://doi.org/10.1038/srep00591>
- [7] S. D. Stranks, H. J. Snaith, "Metal-halide perovskites for photovoltaic and light-emitting devices" *Nat. Nanotechnol.*, 10, pp.391 - 402, 2015, DOI : <https://doi.org/10.1038/nnano.2015.90>
- [8] Q. Dong, Y. Fang, Y. Shao, P. Mulligan, J. Qiu, L. Cao, J. Huang, "Electron-hole diffusion lengths > 175 μm in solution-grown CH₃NH₃PbI₃ single crystals" *Science*, 347, pp.967 - 970, 2015, DOI : <https://doi.org/doi:10.1126/science.aaa5760>
- [9] K. Yang, Q. Liao, J. Huang, Z. Zhang, M. Su, Z. Chen, Z. Wu, D. Wang, Z. Lai, H. Y. Woo, Y. Cao, P. Gao, X. Guo, "Intramolecular Noncovalent Interaction-Enabled Dopant-Free Hole-Transporting Materials for High-Performance Inverted Perovskite Solar Cells" *Angew. Chem., Int. Ed.*, 6, p.202113749, 2021, DOI : <https://doi.org/https://doi.org/10.1002/anie.202113749>
- [10] J. Zhou, L. Tan, Y. Liu, H. Li, X. Liu, M. Li, S. Wang, Y. Zhang, C. Jiang, R. Hua, W. Tress, S. Meloni, C. Yi, "Highly

- efficient and stable perovskite solar cells via a multifunctional hole transporting material” *Joule*, 8, pp.1691 - 1706, 2024, DOI : <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.joule.2024.02.019>
- [11] G.Xie, J. Wang, S. Yin, A. Liang, W. Wang, Z. Chen, C. Feng, J. Yu, X. Liao, Q. Xue, Y. Fu, Y. Min, X. Lu, Y. Chen, “Dual-Strategy Tailoring Molecular Structures of Dopant-Free Hole Transport Materials for Efficient and Stable Perovskite Solar Cells” *Angew. Chem., Int. Ed.*, 63, p.e202403083, 2024, DOI : <https://doi.org/https://doi.org/10.1002/anie.202403083>
- [12] Y. S. Tingare, C.-H. Lin, C. Su, S.-C. Chou, Y.-C. Hsu, D. Ghosh, N.-W. Lai, X.-R. Lew, S. Tretiak, H. Tsai, W. Nie, W.-R. Li, “Ionization of hole-transporting materials as a method for improving the photovoltaic performance of perovskite solar cells” *J. Mater. Chem. A*, 12, pp.2140 - 2150, 2024, DOI : <https://doi.org/10.1039/D3TA06427A>
- [13] D. Bi, W. Tress, M. I. Dar, P. Gao, J. Luo, C. Renevier, K. Schenk, A. Abate, F. Giordano, J.-P. Correa Baena, J.-D. Decoppet, S. M. Zakeeruddin, M. K. Nazeeruddin, M. Gratzel, A. Hagfeldt, “Efficient luminescent solar cells based on tailored mixed-cation perovskites” *Sci. Adv.*, 2, p.e1501170, 2016, DOI : <https://doi.org/doi:10.1126/sciadv.1501170>
- [14] H. Wu, J. Wu, Z. Zhang, X. Guan, L. Wang, L. Deng, G. Li, A. Abate, M. Li “Tailored Lattice-Matched Carbazole Self-Assembled Molecule for Efficient and Stable Perovskite Solar Cells”, *J. Am. Soc. Chem.*, 147, 9, pp.8004-8011, 2025, DOI : <https://doi.org/10.1021/jacs.5c00629>
- [15] H. Li, K. Fu, P. P. Boix, L. H. Wong, A. Hagfeldt, M. Gratzel, S. G. Mhaisalkar, A. C. Grimsdale, “Hole-Transporting Small Molecules Based on Thiophene Cores for High Efficiency Perovskite Solar Cells” *ChemSusChem*, 7, pp.3420 - 3425, 2014, DOI : <https://doi.org/https://doi.org/10.1002/cssc.201402587>
- [16] T. Krishnamoorthy, F. Kunwu, P. P. Boix, H. Li, T. M. Koh, W. L. Leong, S. Powar, A. Grimsdale, M. Gratzel, N. Mathews, S. G. Mhaisalkar, “A swivel-cruciform thiophene based hole-transporting material for efficient perovskite solar cells” *J. Mater. Chem. A*, 2, p.6305, 2014, DOI : <https://doi.org/10.1039/C4TA00486H>
- [17] Yao, H., Ye, L., Zhang, H., Li, S., Zhang, S., Hou, J. “Molecular Design of Benzodithiophene-Based Organic Photovoltaic Materials” *Chemical Reviews*, 116(12), pp.7397 - 7457, 2016, DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.6b00176>
- [18] P. Xu, P. Liu, Y. Li, B. Xu, L. Kloo, L. Sun, Y. Hua, “D-A-D-typed Hole Transport Materials for Efficient Perovskite Solar Cells: Tuning Photovoltaic Properties via the Acceptor Group” *ACS Appl. Mater. Interfaces* 10(23), pp.19697 - 19703, 2018, DOI : <https://doi.org/10.1021/acsami.8b04003>
- [19] X. Zhou, F. Kong, Y. Sun, Y. Huang, X. Zhang, R. Ghadari, “Dopant-free benzothiadiazole bridged hole transport materials for highly stable and efficient perovskite solar cells”, *Dyes and Pigments* 173, p.107954, 2020, DOI : <https://doi.org/10.1016/j.dyepig.2019.107954>
- [20] T. Chen, Y. Zhong, T. Duan, X. Tang, W. Zhao, J. Wang, G. Lu, G. Long, J. Zhang, K. Han, X. Wan, B. Kan, Y. Chen, “Asymmetrified Benzothiadiazole Based Solid Additives Enable All Polymer Solar Cells with Efficiency Over 19 %” *Angew. Chem. Int. Ed.* 64, p.e202412983, 2025, DOI: <https://doi.org/https://doi.org/10.1002/anie.202412983>

- [21] Z. Sun, Y. Li, X. Xu, “Donor engineering of a benzothiadiazole- based D - A - D-type molecular semiconductor for perovskite solar cells: a theoretical study”, Phys. Chem. Chem. Phys., 26, pp.6817 - 6825, 2024, DOI : <https://doi.org/10.1039/D3CP05766F>

저 자 소 개



백상현(Sanghyun Paek)

2007.2 고려대학교 화학과 졸업
2009.2 고려대학교 소재화학 석사
2013.2 고려대학교 태양전지소재 박사
2014.9-2020.2 EPFL 박사후 연구원
2020.3-현재 : 상명대학교 교수
<주관심분야> 에너지, 페로브스카이트 태양전지, 유기합성 재료