

Design of electrode materials for Li rechargeable batteries by integrating ab initio calculations with experiments

강기석[†], Gerbrand Ceder^{*}, Ying Shirley Meng^{**}, Clare P. Grey^{***}, Julien Breger^{***}

KAIST 신소재 공학과; ^{*}MIT; ^{**}University of Florida; ^{***}State University of New York at Stony Brook
(matlgen1@kaist.ac.kr[†])

We have combined theoretical investigation using ab initio calculations with experimental realization to develop an advanced high power Li battery electrode material. Li diffusion in electrode materials was thoroughly investigated by performing systematic ab-initio computations on the factors affecting Li motion. The power capability of the Li rechargeable battery is critically dependent on how fast Li ions and electrons can move in the battery, especially in the electrode. In this theoretical investigation, we found the cause for the low rate behavior of the promising electrode material, LiNi_{0.5}Mn_{0.5}O₂. Based on this knowledge, we were able to judiciously re-engineer the crystal structure. A new processing scheme was developed in order to realize the desirable structure that circumvents the cause of poor rate capability. LiNi_{0.5}Mn_{0.5}O₂ with modified structure obtained by the new process resulted in excellent rate behavior in a good agreement with our prediction.

Keywords: 리튬 이차전지, 양극활물질 설계

고효율 CIGS 화합물 박막 태양전지 연구

윤재호[†], 안세진, 윤경훈, 안병태^{*}

한국에너지기술연구원 태양전지연구단; ^{*}한국과학기술원 신소재공학과
(yunjh92@kier.re.kr[†])

CIGS (CuIn_xGa_{1-x}Se₂) 박막은 광흡수계수가 높고 화학적으로 안정하여 박막 태양전지 광흡수층 소재로 매우 적합하다. 미국의 NREL(National Renewable Energy Laboratory)에서 최근 19.9%의 최고효율을 보고하였는데 이는 다결정 실리콘 태양전지와 같은 수준이다. 대면적 모듈의 경우에도 11%-13%의 효율을 보고하고 있으며 이는 박막 태양전지 중에서 가장 높은 수준이다. 이러한 장점들로 인하여 최근 미국, 일본, 독일의 많은 기업들이 대면적 CIGS 박막 모듈 양산을 추진하고 있다. 하지만 궁극적으로 화석연료과경쟁하기 위해서는 CIGS 박막 태양전지의 저가·고효율화를 실현해야 한다. 기존의 유리기판을 값싸고 기능성 있는 금속호일 및 폴리머 소재를 기판으로 활용하는 기술, 현재의 광흡수층의 두께를 1/2 이상 감소시켜 태양전지의 원소재 소비량을 줄이는 기술, 나노 입자를 이용한 비진공 성막 기술, 그리고 와이드밴드갭 태양전지 개발에 의한 이중접합 태양전지 기술 등이 저가 고효율화를 실현할 수 있는 방법이다.

본 발표에서는 CIGS 박막 태양전지의 기본구조 및 공정에 대한 분석을 바탕으로 하여 위에서 제시한 차세대 기술에 대한 장단점 및 기술적 이슈를 소개하고 향후 연구방향에 대해 소개하고자 한다.

Keywords: 박막 태양전지, CIGS, Flexible, 탠덤구조