



<연구논문>

ISSN 1225-8024(Print)
ISSN 2288-8403(Online)

한국표면공학회지
J. Kor. Inst. Surf. Eng.
Vol. 48, No. 1, 2015.

<http://dx.doi.org/10.5695/JKISE.2015.48.1.023>

유한요소해석을 이용한 CIGS 박막 태양전지용 Fe-Ni 합금 기판재 열적 거동 연구

한윤호^a, 이민수^a, 김동환^b, 임태홍^{a*}

^a한국생산기술연구원, ^b고려대학교 신소재공학과

Study on Thermal behavior of Flexible CIGS Thin Film Solar Cell on Fe-Ni Alloy Substrates using Finite Element Analysis

Yun-Ho Han^a, Min-Su Lee^a, Dong-Hwan Kim^b, Tai-Hong Yim^{a*}

^aKorea Institute of Industrial Technology (KITECH), 7-47, Songdo-Dong, Yeonsu-Gu,
Incheon 406-840, Republic of Korea

^bDepartment of Materials Science and Engineering, Korea University, Anamdong, Seongbuk-Gu,
Seoul 136-713, Republic of Korea

(Received December 12, 2014 ; revised January 25, 2015 ; accepted January 26, 2015)

Abstract

What causes the transformation of a solar cell is the behavior difference of thermal expansion occurred between the substrate and the layer of semiconductor used in the solar cell. Therefore, the substrate has to possess a behavior of thermal expansion that is similar with that of semiconductor layer. This study employed electroforming to manufacture Fe-Ni alloy materials of different compositions. To verify the result from a finite element analysis, a two-dimensional Mo substrate was calculated and its verification experiment was conducted. The absolute values from the finite element analysis of Mo/substrate structure and its verification experiment showed a difference. However, the size of residual stress of individual substrate compositions had a similar tendency. Two-dimensional CIGS/Mo/SiO₂/substrate was modeled. Looking into the residual stress of CIGS layer occurred while the temperature declined from 550°C to room temperature, the smallest residual stress was found with the use of Fe-52 wt%Ni substrate material.

keywords : CIGS Solar Cell, Fe-Ni alloy, Thermal Behavior, Flexible Solar Cell

1. 서 론

연성 태양전지(Flexible CIGS Solar Cell)를 제작하기 위해서는 연성 기판재(Flexible Substrate)의 적용이 필요하다. 연성 기판 소재의 경우 가격, 열안정성, 내부식성, 진공공정 적합성, 열팽창 특성이 중요하게 고려되어야 한다. 상용되는 연성 기판재로는 플라스틱, 박형유리, 금속포일이 있으며, 표 1에서는 연성 기판재의 열팽창 특성과 공정가능 온도를 보

여주고 있다¹⁾. 이중 플라스틱은 고효율의 CIGS 흡수층을 제조하기 위한 550°C의 고온 공정에 적합하지 못하고 박형유리의 경우 내구성이 취약하다는 단점이 있다. 금속포일의 종류에는 몰리브덴, 알루미늄, 티타늄, 크롬강, 스테인레스강, Ni-Fe합금재 등이 있으며, 표면이 거칠고 전기적 절연성을 확보하기 위해 절연체를 코팅하는 과정이 부수적으로 필요하다는 단점이 있으나 roll-to-roll 공정에 적합하여 금속포일을 활용한 연구 및 생산이 활발히 진행되고 있다^{2,3)}. 선행 연구를 통하여 연성 CIGS 태양전지의 금속 기판재(metal substrate)로 열팽창 계수가 흡수층과 유사한 스테인레스강 400번 계열과

*Corresponding Author : Tai-Hong Yim

Korea Institute of Industrial Technology (KITECH)
E-mail : thyim@kitech.re.kr

Table 1. Properties of flexible substrate materials, active solar cell¹⁾

Material	CTE(10^{-6} K^{-1})	Ts,max ($^{\circ}\text{C}$)	Notes
SLG	9 (20 ~ 300 $^{\circ}\text{C}$)	~ 600	Standard glass substrate, contains Na, K, etc.
Corning 7059	4.6	> 600	Alkali-free glass
Cr Steel	10 ~ 11	> 600	Diffusion of Fe, Ni, Cr, etc.; low-cost substrate
Ti	8.6	> 600	Low Ti diffusion, restricted Ti purity
Ni/Fe-alloy, e.g. Kovar	5 ~ 11	> 600	CTE can be well-matched
Al	23 ~ 24	600	Low cost, low weight, very high CTE
Kapton [®] E	17 (20 ~ 200 $^{\circ}\text{C}$)	< 500a	Polyimide
Upilex [®] S	12 ~ 24 (20 ~ 400 $^{\circ}\text{C}$)	< 500a	Polyimide
ETH-PI	3	< 500b	Polyimideb
Mo	4.8 ~ 5.9 (20 ~ 600 $^{\circ}\text{C}$)	> 600	Back contact

Fe-Ni 합금재를 확인 하였다⁴⁾.

본 연구에서는 다양한 열팽창 특성 조건을 가지는 Fe-Ni 합금 박판재를 기판재로 선택하였다. 유한요소해석(Finite element analysis) 프로그램인 Algor를 이용하여 2D 구조의 Mo/Substrate를 설계하고 계산하였다. Mo/Substrate 구조를 전산해석과 같은 조건으로 실증 실험을 진행하여 검증하였다. 따라서 최종 목표인 CIGS/Mo/SiO₂/Substrate 구조의 CIGS Solar Cell 모델을 설계하고 550 $^{\circ}\text{C}$ 의 고온에서 상온으로 내려올 때 기판재의 조성에 따른 열적 거동이 CIGS층의 잔류응력에 미치는 영향을 고찰하고자 하였다.

2. 실험방법

계산에 사용된 금속 기판재는 Fe-Ni 합금재이며 조성 간격은 2 wt%, 열팽창 계수는 $2 \sim 11 \times 10^{-6} / ^{\circ}\text{C}$ 이다. 금속 기판재의 제작은 전주성형법(electroplating)을 이용하여 제작하였다⁵⁾. XRF (X-Ray Fluorescence Analyzer)를 이용하여 기판을 구성하는 철과 니켈의 조성을 확인 하였다. 유한요소해석(Finite element analysis)의 계산에 필요한 기판재의 열팽창 계수를 확보하기 위하여 수소 분위기에서 열처리를 진행하고 기판재를 TMA (Thermo Mechanical Analyzer)를 이용하여 온도 구간별 열팽창 계수를 구하였다.

그림 1은 조성별 Fe-Ni 합금기판재의 열처리 공정 후 측정된 온도 구간별 열팽창 계수이다. 또한, 기판재의 인장시험을 통하여 계산에 필요한 추가적인 인장강도, 항복강도를 확보하였다. CIGS 태양전지를 구성하는 박막층의 일부인 Mo, SiO₂, CIGS의 고유 물성값은 문헌값을 참고하였으며, 표 2에서 나타내고 있다⁶⁾.

유한요소해석 프로그램으로는 Autodesk사의 Algor를 이용하였다. 유한요소해석의 신뢰도를 평가하기

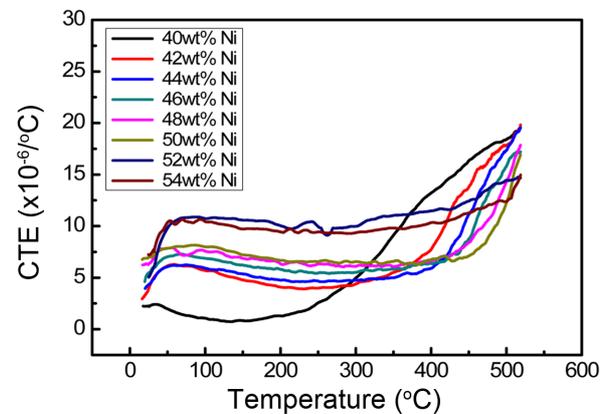


Fig. 1. The CTE with variation of Ni content of annealed Fe-Ni alloys at 600 $^{\circ}\text{C}$.

Table 2. Properties of CIGS cell materials⁶⁾

Properties materials	Density (g/cm^3)	Elasticity modulus (GPa)	Poisson's ratio
CIGS	5.77	110	0.34
Mo	10.22	310	0.31
SiO ₂	2.2	75	0.12

위하여 검증하기 위한 단계를 진행하였다. 2D 구조는 Mo/Fe-Ni Substrate 형상으로 모델링 하였다. 시뮬레이션 계산에 사용된 기판재의 두께는 50 μm 이며, Mo층의 두께는 1 μm 이다. 유한요소해석의 검증을 위한 실증 실험으로는 시뮬레이션과 같은 조건으로 진행하였다. 그림 2는 Mo를 증착하기 전의 Ni 조성이 다른 기판재를 보여주고 있다. 열처리 공정을 통하여 기판재의 잔류응력을 제거하였고 평판의 기판재 위에 DC sputtering system을 이용하여 Mo 1 μm 를 증착하였다. 기판재의 크기는 70 mm \times 7 mm \times 50 μm 이다. 잔류응력측정은 R&D Tech사의 Residual Stress Tester를 이용하여 측정하였다.

신뢰도 평가 연구의 결과를 바탕으로 최종 목표인 CIGS/Mo/SiO₂/Fe-Ni Substrate 구조를 계산하였

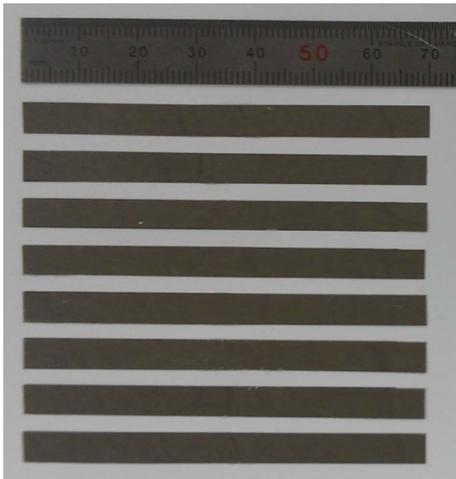


Fig. 2. The Sample according to the amount of nickel.

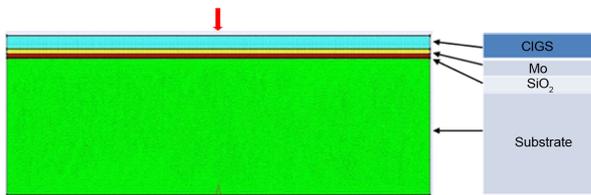


Fig. 3. Schematic 2D model of CIGS Solar Cell.

다. 시뮬레이션은 그림 3과 같이 2D 구조(CIGS/Mo/SiO₂/Fe-Ni Substrate)로 모델링 하였다. CIGS (Absorb layer)의 두께는 3 μm, SiO₂(Barrier layer)의 두께는 1 μm, Mo(Back contact)은 1 μm로 조건을 주었다. 기관재의 중앙 하단부에 한점을 고정점으로 하는 경계조건을 주어 X, Y축을 제외한 Z축의 변형은 무시하였다. 박막제조 공정인 550°C에서는 잔류응력이 없다고 가정하였다. 또한 공정에서 각각의 박막층간 접촉 조건은 치밀하게 접합되는 조건으로 설정하여 박막층간의 미끄러짐이 발생하지 않도록 설정 하였다. 시뮬레이션을 통한 잔류응력 값의 확인은 기관재의 휘어짐으로 인하여 가장 큰 잔류응력이 집중 될 것으로 예상되는 모델링의 중앙 상단부이며 그림 3에 붉은색으로 표시하였다.

3. 결과 및 고찰

그림 4의 하단은 기관재로 사용한 기본 시편 중에서 Fe-40 wt%Ni Substrate이며 열처리를 통한 잔류응력이 제거되어 편평한 형상을 보여주고 있다. 상단부의 기관재는 Fe-40 wt%Ni Substrate위에 Mo를 300°C에서 증착하고 상온으로 내린 후의 비교 사진이다. 300°C에서 Mo를 증착하고 상온으로 내려오면서 박막층과 기관재 사이에서 발생하는 잔류응력으로 인하여 변형된 모습을 보여주고 있다. 그

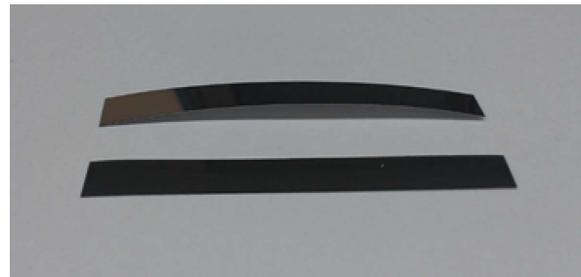


Fig. 4. Sample (70 mm x 7 mm x 50 μm).

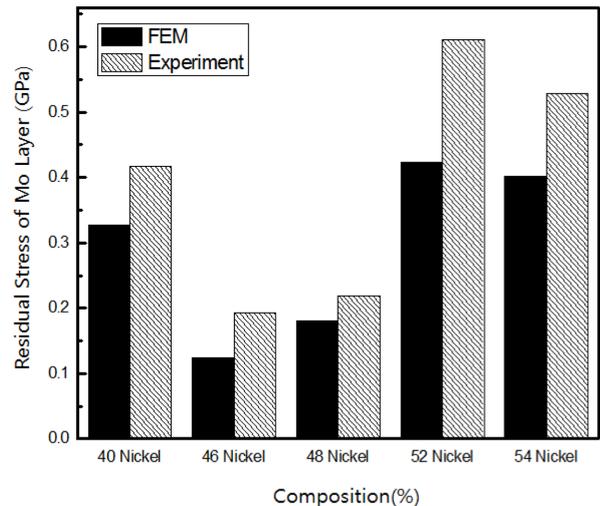


Fig. 5. Comparison of result values between finite element analysis and verification experiment. (Mo/Substrates)

림 5는 유한요소해석을 통한 Mo/Fe-Ni Substrate 구조의 잔류응력 해석값과 실증실험을 통하여 측정된 잔류응력 결과값을 비교한 것이다. 전체적인 결과값에서 유한요소 해석값에 비하여 실증실험을 통하여 측정된 잔류응력값이 크게 나타났다. 유한요소 해석과 실증실험의 절대값이 일치하지는 않았지만 기관재의 조성 변화에 따른 잔류응력값의 변화는 경향성 있게 나타남을 확인하였다. 잔류응력값의 크기는 40 wt%Ni~48 wt%Ni 영역에 비하여 52 wt%Ni~54 wt%Ni 영역이 평균적으로 더 크게 나타났다.

이중에서 Mo/Fe-Ni Substrate 구조의 최저 잔류응력은 46 wt%Ni 기관재를 사용했을 때이며 잔류응력이 가장 크게 나타난 시편은 52 wt%Ni 기관재를 적용한 경우이다. 그림 6는 CIGS 박막층이 증착되는 온도로 적용한 550°C조건에서 상온으로 온도가 내려올 때 온도변화에 따른 CIGS 박막층에서 나타나는 잔류응력 변화를 나타낸 것이다. 550°C에서 상온으로 내려올 때 샘플 전체에서 CIGS 박막층의 잔류응력은 점진적으로 증가하는 것을 확인할 수 있다.

42 wt%Ni, 44 wt%Ni, 46 wt%Ni, 48 wt%Ni, 50 wt%Ni,

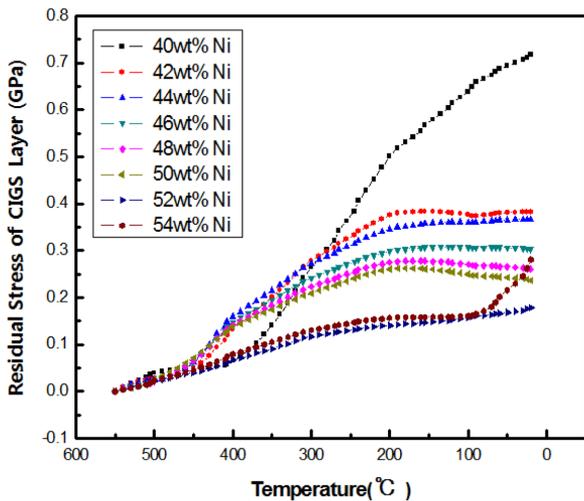


Fig. 6. Residual stresses of the CIGS/Mo/SiO₂/Substrates structure by using Fe-Ni substrate materials of individual compositions.

52 wt%Ni 샘플은 잔류응력이 점점 증가하다가 200°C 이하 영역에서는 일정하게 유지되는 경향을 보여주었다. 40 wt%Ni 샘플의 경우 380°C 부근에서 급격하게 상승하는 것을 볼 수 있다. 해당 시편(40 wt%Ni)의 경우 평균 열팽창 계수는 $3 \times 10^{-6}/^{\circ}\text{C}$ 이며 최종 잔류응력은 0.75 GPa로 가장 크게 나타났다. 52 wt%Ni 샘플의 경우 고온에서 상온까지 일정하게 증가하였다. 해당 시편(52 wt%Ni)의 경우 기판재 열팽창 계수는 $8 \times 10^{-6}/^{\circ}\text{C}$ 이며 최종 잔류응력은 0.2 GPa로 가장 작게 나타났다. 54 wt%Ni 샘플의 경우 52 wt%Ni 샘플과 비슷하게 증가하였으나 약 70°C 이하 구간부터 급격하게 상승하여 0.3 GPa의 잔류응력을 나타내었다.

4. 결 론

다양한 실험과 문헌값의 자료를 참고하여 유한요소해석에 필요한 물성값을 확보하였다. 유한요소해석 결과값의 타당성을 확보하기 위하여 Mo/Fe-Ni

Substrates 구조의 2D 모델링을 계산하였고 실증실험을 통하여 검증하였다. 유한요소해석 결과값에 비하여 실증실험의 결과값이 전체적으로 크게 나타났다. 이러한 이유는 Mo 박막층의 물성값을 확보하여 적용하는 과정에서 발생한 오차라고 판단된다. 그러나 조성별 Fe-Ni 합금재의 열팽창 특성에 따라 Mo 박막층의 잔류응력이 규칙적으로 증가 및 감소하는 경향성을 보여줬다.

따라서 본 연구의 최종 목표인 CIGS/Mo/SiO₂/Fe-Ni Substrates 구조의 해석에 있어서 CIGS층의 절대적인 잔류응력값을 확인하기는 어려우나 가장 적합한 Fe-Ni 합금재를 판별할 수 있었다.

열팽창 계수가 $4 \times 10^{-6}/^{\circ}\text{C}$ 인 Fe-Ni 기판재를 사용할 때 CIGS 박막층에 가장 큰 잔류응력이 발생하였으며, 셀의 변형량도 가장 컸다. 그리고 $8 \times 10^{-6}/^{\circ}\text{C}$ 인 Fe-Ni 기판재를 사용했을 때 CIGS 박막층의 잔류응력과 셀의 변형량이 가장 작았다.

유한요소 해석을 통해 금속 기판재의 잔류응력 평가 시 열팽창 계수는 셀의 변형과 잔류응력에 큰 영향을 미친다는 것을 확인하였다. 따라서 CIGS 흡수층의 열팽창 계수와 유사한 기판재의 적용이 필요하다고 판단되었다.

References

1. F. Kessler, D. Rudmann, Solar Energy, 77 (2004) 685.
2. F. Kessler, D. Herrmann, M. Powalla, Thin Solid Films, 480-481 (2005) 491.
3. S. Khelifi, A. Belghachi, J. Lauwaert, K. Decock, J. Wienke, R. Caballero, C. A. Kaufmann, M. Burgelman, Energy Procedia, 2 (2010) 109.
4. S. H. Koo, H. Y. Lee, T. H. Yim, Journal of The Korean Society for New and Renewable Energy, (2008) 382.
5. T. Hart, A. Watson, Electroforming, 388.
6. L. Bornstein, Group III Condensed Matter, Springer Materials, 41E (2000), 125.