



# Elektrochemische Modellierung großer Zellen

Lithium-Ionen Batterien sind in vielen Anwendungen allgegenwärtig. Dabei liefert Lithium, als das leichteste feste Element im Periodensystem mit dem höchsten elektrochemischen Standardpotential, hervorragende Eigenschaften als Elektrodenwerkstoff für Batterien. Die daraus resultierenden Vorteile hinsichtlich Leistungs- und Energiedichte machen die Lithium-Ionen Batterie mittel- und langfristig zum aussichtsreichsten Speichermedium für elektrisch angetriebene Kraftfahrzeuge

Dabei werden vornehmlich hochkapazitive Batteriezellen mit Kapazitäten im Bereich von 20 - 100 Ah eingesetzt. Die Baugröße dieser Zellen führt zu einer anisotropen räumlichen Verteilung der elektrischen und thermischen Transportpfade. Es stellen sich inhomogene Temperatur-, Ladungs- und Stromdichteverteilungen innerhalb der Zelle ein, die Auswirkungen auf die Dynamik aber auch auf die vorherrschenden Schädigungsmechanismen in der Zelle haben.

Für die Auslegung großer Zellen und die Entwicklung effizienter Batteriemanagementsysteme ist ein tiefreichendes Verständnis dieser Zusammenhänge unerlässlich, das über multiphysikalisch gekoppelte Simulationen gewonnen werden kann.

Die komplexen Wechselwirkungen zwischen den elektrochemischen, thermischen und mechanischen Prozessen wirken sich auf unterschiedlichen Größenskalen aus. Diese Multiskalarität der Batteriezellen stellt eine besondere Herausforderung für die Modellierung dar. So müssen für die Abbildung der Elektrochemie Mikrostrukturprozesse im sub- $\mu\text{m}$  Bereich aufgelöst werden, wohin-

gegen die gesamte Zelle mit einigen cm mehr als 4 Größenordnungen darüber liegt.

Mit aktuellen Rechnerkapazitäten ist es nicht möglich, alle Skalen gleichzeitig in einer Simulation abzubilden. Deshalb soll die Modellkomplexität mittels eines Multi-scale multi-domain Ansatzes (MSMD) reduziert werden. Ziel dabei ist die Abbildung aller relevanten Prozesse in separaten Modellen verschiedener Größenordnungen (Abb. 1).

Das Elektrodenmodell beinhaltet die Prozesse der ionischen und elektronischen Leitung sowie der Ladungstransferreaktion.

Die integralen Größen dieser Prozesse werden wiederum an ein Modell auf Gesamtzelebene übergeben, indem die äußeren Randbedingungen implementiert sind. Als Simulationstool steht hierfür am Institut die Software COMSOL Multiphysics zur Verfügung. Die Parametrierung und Validierung der Modelle erfolgt durch den Vergleich von Simulationsergebnissen mit Messdaten. Hier kommen verschiedene Zellaufbauten in Experimentalzellen und verschiedene Messverfahren, wie beispielsweise die elektrochemische/elektrothermische Impedanzspektroskopie, zum Einsatz. So sollen effektivere Simulationsmodelle aufgestellt werden, die zuverlässig das Gesamtzellverhalten abbilden und die Ursachen für eingeschränkte Kapazitäts- oder Leistungsdichten aber auch für Alterungsprozesse einer Zelle aufzeigen. Im Fokus liegt aber auch der Entwurf intelligenter Betriebsstrategien oder die Optimierung von Elektrodenmaterialien und Mikrostrukturen.

Interesse an diesem Thema? Dann kontaktieren Sie uns einfach und fragen nach zu vergebenden Bachelor- und Masterarbeiten!

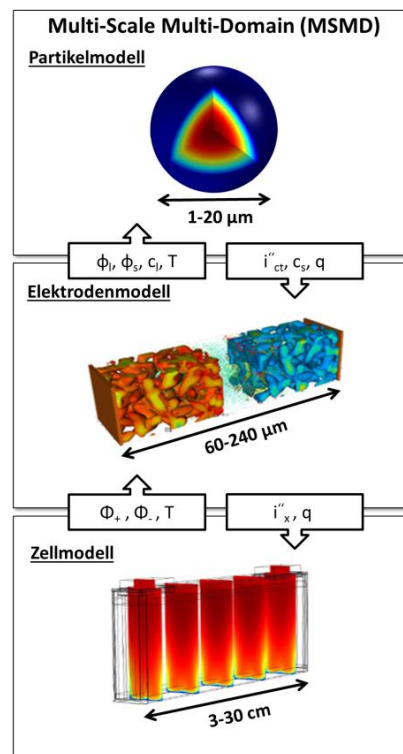


Abb. 1: Multi-Scale Multi-Domain Ansatz: Modellierung der zellinternen Prozesse in separaten Modellen verschiedener Größenordnungen

So sollen die Vorgänge innerhalb der Elektrodenpartikel, wie beispielsweise die Festkörperdiffusion, in einem Partikelmodell im sub- $\mu\text{m}$  Bereich aufgelöst werden und relevante Größen an ein weiteres Modell auf Elektrodenpaarebene übergeben werden.

**INSTITUT FÜR ANGEWANDTE MATERIALIEN - WERKSTOFFE DER ELEKTROTECHNIK (IAM-WET)**

FZU, Bau 50.40  
Adenauerring 20 b  
76131 Karlsruhe

Tel. +49-721-608-47491  
Fax +49-721-608-47492  
<http://www.iam.kit.edu/wet>

Ansprechpartner:  
M. Sc. Adrian Schmidt  
Tel. +49-721-608-47583  
[Adrian.Schmidt@kit.edu](mailto:Adrian.Schmidt@kit.edu)