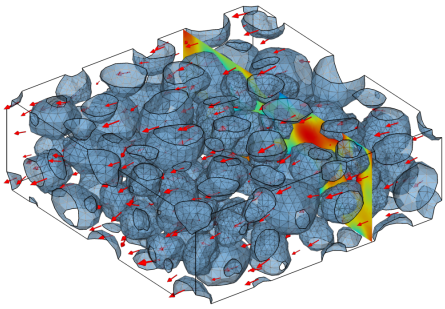
Lithium-Ionen-Batterien

Mathematische Modellierung und Simulation

Hintergrund

Elektrochemische Speichertechnologien sind weltweit ein zentraler Baustein der Energie- und Mobilitätswende. Lithium-Ionen-Batterien (LIB) sind in diesem Kontext von erheblicher Bedeutung, insbesondere aufgrund der technolgischen Weiterentwicklungen der letzten Jahrzehnte. Durch die enorme wirtschaftliche Bedeutung ensteht auch ein großer Bedarf an mathematischen Modellen für LIBs, welche eine Vielzahl verschiedener Fragen addressieren. Mathematische Modelle auf Grundlage der Nichtgleichgewichts-Thermodynamik können bereits heute präzise Vorhersagen für die Zellspannung in Abhängikeit des Ladezustands und des (Ent-)Ladestroms liefern, Aussagen über die Verteilung von Lithium in porösen Elektroden treffen sowie Hysterese-Effekte vorhersagen.



Ausschnitt einer porösen Batterie-Elektrode mit numerischer Lösungen eines Batteriemodells (WIAS 3D Gitter).

Unser Service

Wir entwickeln neue mathematische Modelle für alle Komponenten von Lithium-Ionen-Batterien sowie deren aktuelle Weiterentwicklungen. Hierzu gehören Modelle für verschiedene Anoden- und Kathoden-Materialien, flüssige und feste Elektrolyte, poröse Elektroden sowie Elektroden-Elektrolyt-Grenzflächen an welchen elektrochemische Reaktionen ablaufen. Ferner entwickeln wir Modelle für verschiedene Alterungseffekte, validieren unsere Modelle an experimentellen Daten, und entwickeln numerische Methoden für poröse Elektroden. Die Modelle beschreiben elektrochemische Prozesse und Transportphänomene mittels partieller Differentialgleichungen, welche mit numerischen Verfahren auf unseren Computern und Clustern gelöst werden.

Leistungen

- Herleitung von homogenisierten Modellen für poröse Elektroden (*Newman*–artige Modelle P1+1D, P3+1D, P3+N· 1D)
- *Cahn-Hilliard*–artige Modelle für Vielteilchenelektroden mit Phasenseperation (N-Teilchen, M-Phasen) zur Beschreibung von Graphit, $LiFePO_4$, und weiterer Aktivmaterialien
- Modelle mit Kopplung von Diffusion und mechanischen Spannungen innerhalb der Elektroden sowie in Festelektrolyten
- Realistische 3D-Modelle für poröse Elektroden, inklusive Netzgenerierung, welche die Elektrolytphase, Leitzusätze und Interkalationspartikel vollständig auflösen
- Bestimmung von porösen Medien-Paramter (Diffusionskorrektor, Tortuosität, spezifische Oberfläche) auf Grundlage der Homogenisierungstheorie
- Thermodynamisch konsistente Transportmodelle für Ionen in Elektrolyten, welche Solvatisierungseffekte, Inkompressibilität, sterische Effekte sowie den hydrostatischen Druck berückstigen
- Thermodynamisch konsistente Reaktionsmodelle für die Interkalationsreaktion $Li^+ + e^- \rightleftharpoons Li$ sowie weiterer Nebenreaktionen (SEI, metallische Lithium Ablagerung, ...) unter Berücksichtung von Solvathülleneffekten sowie die Herleitung von *Butler-Volmer*-artigen Reaktionsraten

Anwendungsbeispiel

- Wissenschaftliche Einrichtungen im Bereich der Materialentwicklung, Regelungstechnik, Elektrochemie
- Material- und Zell-Hersteller von Lithium-Ionen-Batterien
- Automobilindustrie

Dr. Manuel Landstorfer
Weierstraß-Institut füur Angewandte Analysis und Stochastik · Mohrenstraße 39 · 10117 Berlin · Germany
Fon 030 203 72-529 · landstor@wias-berlin.de · www.wias-berlin.de