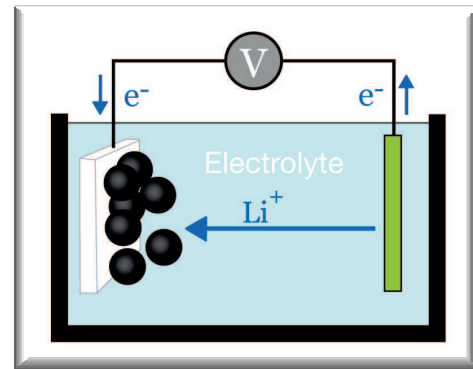


# Lithium-Ionen-Batterien

## Mathematische Modellierung und Simulation

### Hintergrund

Die Speicherung von Energie ist ein großer Engpass bei allen Konzepten für die Umstellung der Energieversorgung auf erneuerbare Energien. Für Lithium-Ionen-Batterien, denen in diesem Kontext eine erhebliche Bedeutung zukommt, besteht ein großer Bedarf zur Entwicklung neuer Batteriemodelle. Während beispielsweise klassische Modelle auf der Annahme beruhen, dass die Lithium-Atome gleichzeitig in den Teilchen der Kathode gespeichert werden, verkörpert die nunmehr zugrunde gelegte Fokker-Planck-Gleichung die Idee, dass die Teilchen der Kathode eines nach dem anderen geladen werden. Die Spannungs-Ladungs-Kurve zeigt Hysterese und einen Phasenübergang während des Ladevorgangs. Unser Modell sagt dieses Verhalten nunmehr korrekt voraus.



### Unser Service

Wir entwickeln neue mathematische Modelle für alle Komponenten von Lithium-Ionen-Batterien. Hierzu gehören Vielteilchenelektroden, Graphit-Elektroden, der Elektrolyt sowie Elektrolyt-Elektroden-Grenzflächen. Die Modelle beschreiben elektrochemische Prozesse und Transportphänomene mittels partieller Differentialgleichungen im Volumen und durch Übergangsbedingungen an den Grenzflächen. Sie sind geeignet, die Spannungs-Ladungs-Eigenschaften der entsprechenden Komponente vorherzusagen.

### Leistungen

- Der langsame Lade- und Entladevorgang wird durch eine Fokker-Planck-Gleichung für eine Vielteilchenkathode beschrieben.
- Das Schnelllade-Regime wird durch ein gekoppeltes System von viskosen Cahn-Hilliard- und Lamé-Gleichungen modelliert, welche die Kopplung von Diffusion und mechanischen Spannungen innerhalb der Elektrode berücksichtigt.
- Die Anoden sind üblicherweise durch Graphit-Elektroden mit einer geschichteten Struktur dargestellt. Das Modell beschreibt die reversible Speicherung von Lithium-Ionen in den Schichten. Der Speichervorgang wird auch durch eine Fokker-Planck-Gleichung beschrieben.
- Der Elektrolyt wird durch ein völlig neues Modell beschrieben, das die Defizite der etablierten Nernst-Planck-Modelle, die in der Regel die Grundlage für die bestehenden kommerziellen numerischen Codes bilden, überwindet.
- Die Kontaktfläche zwischen dem Elektrolyten und der Elektrode wird durch neue Sprungbedingungen modelliert, welche die chemischen Reaktionen an der Elektroden-Oberfläche berücksichtigen. Die Modell-Gleichungen verallgemeinern und korrigieren die Butler-Volmer Formeln.

### Anwendungsbeispiel

- Automobilindustrie
- Industrie- und Konsumgüterbereich (Smartphones, Notebooks, Tablet-PCs, etc.)

**Dr. Clemens Guhlke**

Weierstraß-Institut für Angewandte Analysis und Stochastik · Mohrenstraße 39 · 10117 Berlin · Germany  
 Fon 030 203 72-518 · guhlke@wias-berlin.de · www.wias-berlin.de