

**Projekt:** Modellierung und Simulation der Zelleigenschaften auf Basis von zeitvarianten Stoffdaten (GEENI)

---

**Problem:** Eine erfolgreiche Modellierung von Lithium-Ionen-Batterien muss alle physikalischen und elektrochemischen Vorgänge, wie beispielsweise die elektrochemischen Reaktionen an den Elektroden, die Diffusion und Migration von Ionen im Elektrolyten, den Transport elektrischer Ladungen und den Wärmetransport abbilden. Zusätzlich kann es zu Beeinflussungen der Eigenschaften durch Volumenänderungen und mechanischen Spannungen in den Elektroden kommen. Ein umfassendes Modell muss in der Lage sein, nicht nur die resultierende Zellspannung beim Laden und Entladen, sondern auch die sich in der Batterie einstellenden Temperaturverläufe und mechanischen Spannungen auf der Mikroebene abzubilden. Weiterhin muss ein solches Modell die alterungsbedingten Veränderungen der Materialeigenschaften berücksichtigen.

Lokale Stromdichten, Temperaturen und Potenziale innerhalb einer Batteriezelle werden von mehreren Faktoren beeinflusst. Bestimmende Parameter sind vor allem die Geometrie einer Zelle und die Materialeigenschaften. Weiterhin werden die Elektrodenmaterialien von Akkumulatoren in Abhängigkeit verschiedener Betriebsbedingungen (z.B. Umgebungstemperatur, Ladezustand, Höhe des Lade- und Entladestroms) unterschiedlich belastet.

**Ziel:** Ziel dieses Projektes ist eine genaue Bestimmung der lokalen Zustandsgrößen in Abhängigkeit der Zellkonstruktion und der Materialeigenschaften. Inhaltlich wird der Aufbau einer Simulation auf der Elektroden- und Zellebene behandelt. Ergebnis ist ein ortsaufgelöstes, mehrdimensionales Simulationsmodell zur Darstellung der Stromdichte-, Spannungs- und Temperaturverteilung innerhalb einer Vollzelle. Durch die Simulation sollen lokale Materialfehler (z.B. Verunreinigungen), wie sie bei der Produktion von Batterien entstehen können, und die Materialermüdung durch Betrieb der Zellen anhand der Ausgabegrößen erkannt werden.

**Stand der Technik:** Zur Modellierung von Lithium-Ionen-Batterien wurden diverse Modelle vorgestellt. Diese besitzen verschiedenste Ansätze und weisen unterschiedliche Eigenschaften auf. Beispielsweise existieren isotherme, dynamische 2D-Modelle, die den Ladungs- und Ionen transport sehr detailliert abbilden. Solche Modelle besitzen eine hohe Rechenzeit, die sich nur durch geeignete Vereinfachungen reduzieren lässt. Weiterhin gibt es Modelle, die zur tiefergehenden Betrachtung nur einzelne Bereiche einer Zelle betrachten oder unter Verwendung verschiedener Ersatzschaltbilder eine Modellierung auf Systemebene gestatten.

Thermische Modelle, die einzelne Wärmeerzeugungsmechanismen, abbilden sind aus verschiedenen Bereichen, wie beispielsweise der Brennstoffzellenforschung, bekannt. Hier stehen die elektrochemischen Reaktionen, ohmschen Überspannungen und Diffusionsüberspannungen unter Berücksichtigung der drei Wärmeübertragungsmechanismen im Vordergrund.

**Lösungsweg:** Basis für die Modellierung des zu betrachtenden Systems ist ein elektrotechnisches Netzwerk, dem verschiedene Verfahren zur Analyse zu Grunde liegen. Beispielsweise werden Maschenströme, Knotenpotenziale und Ersatzquellen innerhalb der untersuchten Zelle ermittelt. Die Vorgehensweise wird in Simulationen auf unterschiedlichen Skalengrößen verwendet. Die Betrachtung beginnt im Aufbau der Elektroden und endet auf Ebene der Zelle. Die errechneten Daten werden den höher aggregierten Simulationsmodellen übergeben. In diese Modelle wird in einem zweiten Schritt ein thermisches Ersatzschaltbild integriert, welches Wärmeentwicklung und -transport innerhalb der Zelle abbildet. Die Erstellung des Simulationsprogramms erfolgt mittels MATLAB/ Simulink.

**Projektstand:** Zur Schaffung einer geeigneten Datengrundlage für die Modellbildung und Simulation wurden in Absprache mit den verbundenen Forschungsinstituten verschiedene standardisierte Prüfverfahren und Messroutinen erarbeitet. Dies beinhaltet die Verwendung von einheitlichen Materialien und Herstellungsverfahren für die zu betrachtenden Lithium-Ionen-Batterien. Weiterhin wurde eine umfangreiche Datensammlung durch mehrere Forschungsstellen zusammengetragen. Durch eigene Messungen im Speicherlabor des IEE werden Daten, die als Grundlage für die Berechnungen dienen, ermittelt.

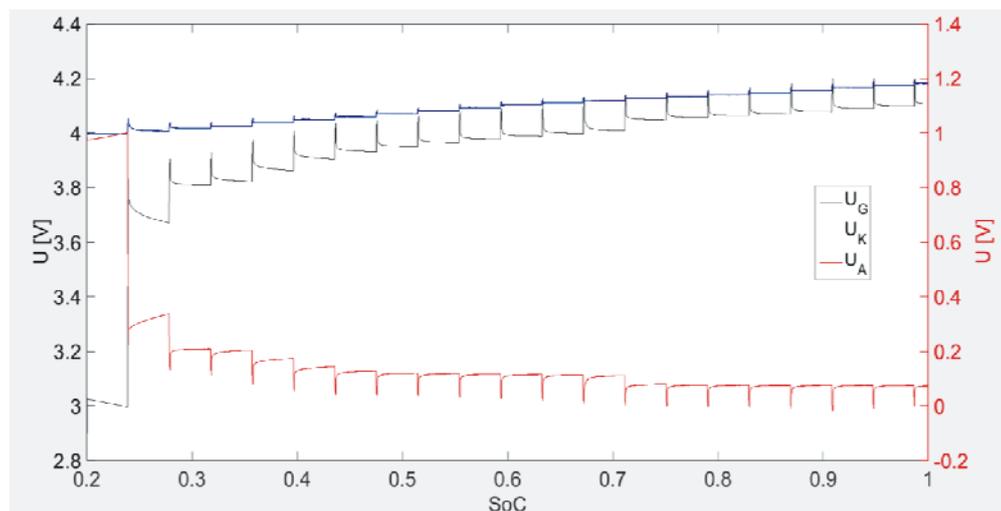


Abbildung 1: Messung der Spannung von Anode ( $U_A$ ), Kathode ( $U_K$ ) und der Gesamtspannung ( $U_G$ ) einer LMO-Zelle in Abhängigkeit des Ladezustands (SoC)

**Projekt:** Modellierung und Simulation der Zelleigenschaften auf Basis von zeitvarianten Stoffdaten (GEENI)

---

Diese Messungen werden mit Hilfe einer 3-Elektrodenanordnung durchgeführt. Aus den Messergebnissen werden Funktionen abgeleitet, die zur Simulation im Modell hinterlegt werden. Weiterhin werden Daten aus Impedanzmessungen (vgl. Abbildung 2) und Sprungantworten auf Strompulse gewonnen.

Zur Ermittlung von thermischen Stoffdaten der Aktivmaterialien werden Verfahren der dynamischen Differenzkalometrie verwendet.

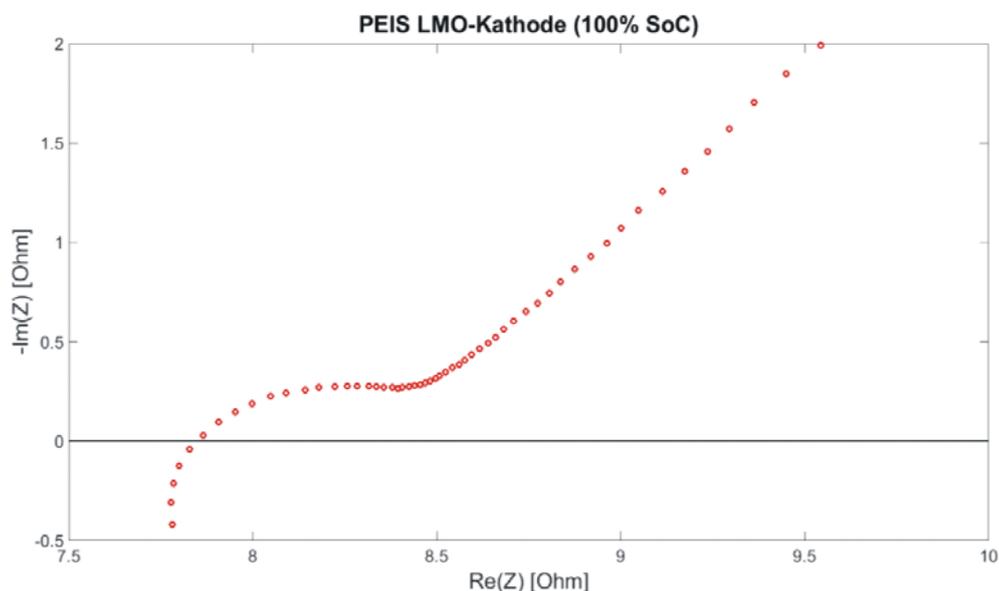


Abbildung 2: Potentiostatische Impedanzmessung LMO-Kathode ( $U_K$ ) bei einem Ladezustand (SoC) von 100%

Die Grundlagen des elektrischen Ersatzschaltbildmodells wurden auf mögliche Vereinfachungen geprüft und werden derzeit in MATLAB/Simulink umgesetzt. Erste Simulationen nach dem in Abbildung 3 dargestellten Ersatzschaltbild wurden erfolgreich durchgeführt.

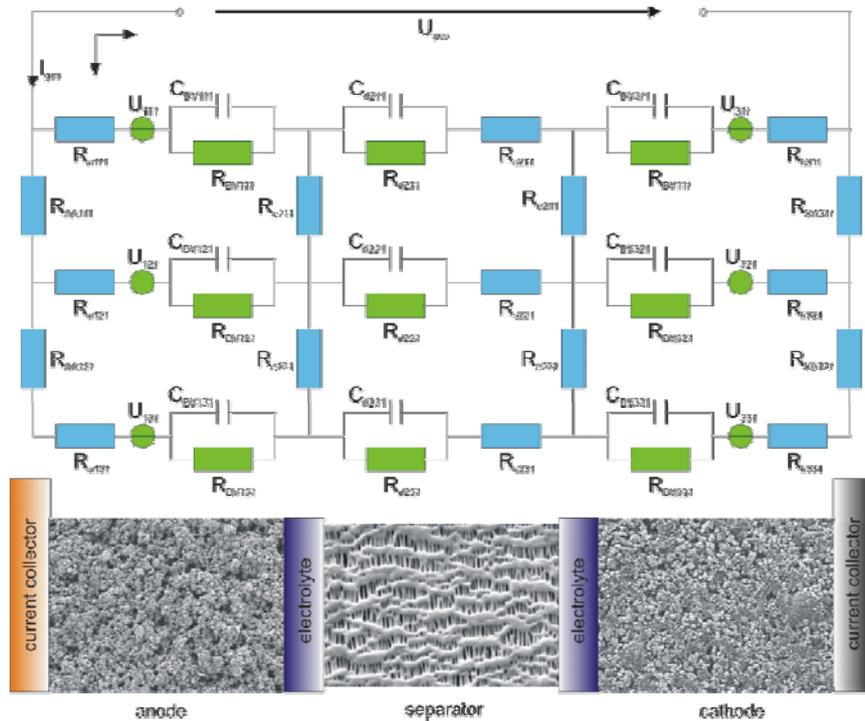


Abbildung 3: 2D-Darstellung des elektrischen Ersatzschaltbilds

Abbildung 4 zeigt die Verteilung der Stromdichte einer Zelle mit einer Kapazität von 10 Ah an den anodenseitigen Kontrollpunkten bei einer Belastung mit 1 C. Die Entladung beginnt bei einem Ladezustand von 85 %. Die Batterie wird über den dargestellten Zeitraum vollständig entladen.

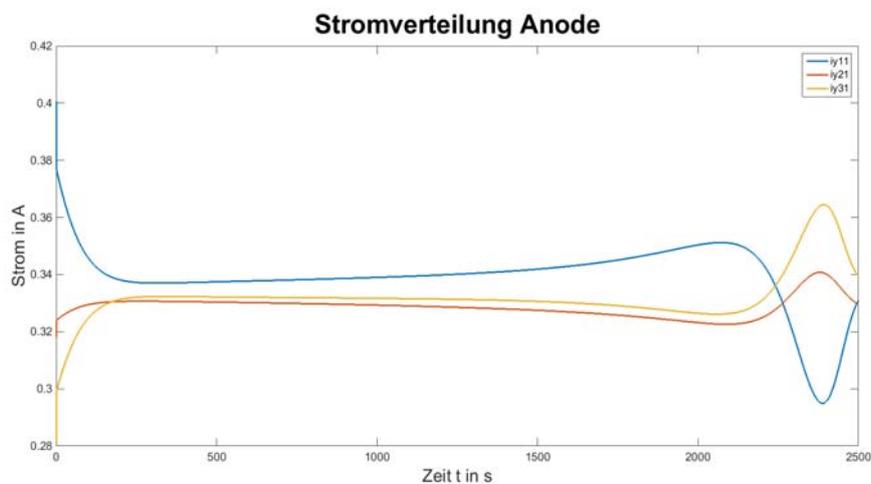


Abbildung 4: Ergebnisse für die Stromverteilung anodenseitig für eine 2-D Simulation

**Projekt:** Modellierung und Simulation der Zelleigenschaften auf Basis von zeitvarianten Stoffdaten (GEENI)

---

Nach der Erstellung eines Ersatzschaltbilds, das sich zur Modellierung auf Zell- und Systemebene eignet, wird derzeit ein Ansatz für ein thermisches Modell erarbeitet. Unter Berücksichtigung der verschiedenen Wärmequellen und der relevanten Wärmeübertragungsmechanismen wird ein thermisches Ersatzschaltbild entwickelt. Vereinfachungen, die zur Reduzierung der Rechenzeit beitragen, um auf Zellebene in angemessener Zeit das Verhalten simulieren zu können, werden derzeit geprüft.

Messungen die zur Validierung und Verifizierung des Modells nötig sind, werden parallel zur Modellbildung, Datenermittlung und Programmierung des Simulationsmodells durchgeführt.

**Forschungspartner:** Verschiedene Institute der

- Technischen Universität Braunschweig
- Georg-August-Universität Göttingen
- Leibniz Universität Hannover
- Carl von Ossietzky Universität Oldenburg
- Westfälische Wilhelms-Universität Münster
- Hochschule für angewandte Wissenschaften und Kunst Göttingen

**Bearbeiter:** Dipl.-Ing. Alexander Oberland  
alexander.oberland@tu-clausthal.de (Tel:72-2938)

**Projektleiter:** Prof. Dr. rer. nat. Heinz Wenzl (Tel: 05522/919170)  
heinz.wenzl@t-online.de