



**Diese Arbeit wurde vorgelegt am Lehrstuhl für Production Engineering of
E-Mobility Components (PEM) der RWTH Aachen.**

Bachelorarbeit

Name: Julian Callard

Matr.-Nr.: 377888

Thema: Innovative Batteriezellkonzepte für eine optimale thermische Anbindung

Betreuender Assistent: Jonas Gorsch, M.Sc.

1. Prüfer: Prof. Dr.-Ing. Peter Mustermann

2. Prüfer: Dr.-Ing. Thomas Mustermann

Aachen, den 1. Juni 2021

Inhalt und Ergebnis dieser Arbeit sind ausschließlich zum internen Gebrauch bestimmt. Alle Urheberrechte liegen bei der RWTH Aachen. Ohne ausdrückliche Genehmigung des betreuenden Lehrstuhls ist es nicht gestattet, diese Arbeit oder Teile daraus an Dritte weiterzugeben.

I. Inhaltsverzeichnis

I	Inhaltsverzeichnis	i
II	Formelzeichen und Abkürzungen	ii
III	Abbildungsverzeichnis	iii
IV	Tabellenverzeichnis	iv
1	Einleitung	v
1.1	Abstract	v
1.2	Aufbau der Arbeit	v
2	Motivation	1
3	Grundlagen und Stand der Technik	2
3.1	Lithium-Ionen-Batterietechnologie	2
3.2	Das Tesla-Patent	8
3.3	Batteriesimulation	15
3.4	Wärmeübertragungsmechanismen	20
4	Methodik	23
5	Auswertung	24
6	Zusammenfassung und Ausblick	25
V	Literatur	26
VI	Anhang	28
VII	Eidesstattliche Versicherung	29

II. Formelzeichen und Abkürzungen

Formelzeichen	Einheit	Beschreibung
$a(t)$	$\frac{m}{s^2}$	Beschleunigungsverlauf
b_{Fzg}	m	Fahrzeugbreite

Abkürzung	Beschreibung
KFZ	Kraftfahrzeug
PEM	Production Engineering E-Mobility Components

III. Abbildungsverzeichnis

Abbildung 3.1: Blah	2
Abbildung 3.2: Blah	5
Abbildung 3.3: Blah	10
Abbildung 3.4: Blah	11
Abbildung 3.5: Blah	12
Abbildung 3.6: Blah	13
Abbildung 3.7: Blah	14
Abbildung 3.8: Schichtenmodell der ET und EC Modelle nach Fink 2014	17
Abbildung 3.9: Wärmeleitung nach Böckh und Wenkel	20

IV. Tabellenverzeichnis

Tabelle 2.1: Vergleich der Energiedichten von Energieträgern in Fahrzeugen	1
Tabelle 3.1: Bauformen der Batteriezellen	3
Tabelle 3.2: Variablen aus Gleichung 2	6
Tabelle 3.3: Beschriftung von Abbildung 3.3	10
Tabelle 3.4: Beschriftung von Abbildung 3.4	11
Tabelle 3.5: Beschriftung von Abbildung 3.5	12
Tabelle 3.6: Beschriftung von Abbildung 3.6	13

1. Einleitung

1.1. Abstract

Durch fortlaufende Entwicklung im Bereich der elektro-chemischen Energiespeicher in Form von Lithium-Ionen-Batterien (LIB's) gewinnen diese als Energieträger in der Mobilitätsbranche stetig an Relevanz. Sowohl in Elektrofahrzeugen als auch in Konzepten und Neuentwicklungen in der Light-Aircraft-Branche finden LIB's immer mehr Anwendungen. Da die Energiedichte dieser Batteriezellen aktuell noch einen Bruchteil der Energiedichte von konventionellen Treibstoffen beträgt und die Ladezeiten aufgrund geringer C-Raten ein Vielfaches der zum Tanken von Treibstoff benötigten Zeit betragen, haben Verluste und Leistung, die für die Kühlung/Aufheizung der Energiespeicher aufgewendet werden muss, zusammen mit dem benötigten Gewicht für Kühlkreisläufe bei der Reichweite und Effizienz der Luft- und Kraftfahrzeuge einen signifikant negativen Effekt. Daher ist die optimale thermische Anbindung der Batteriezellen wünschenswert. Durch optimierte Wärmeleitung und geringerem Ohm'schen Widerstand können die Systemeffizienz erhöht und die Ladedauer reduziert werden.

In dieser Arbeit soll ein Konzept für eine thermisch optimierte prismatische Zelle aus bereits existierenden Konzepten für andere Zelltypen erarbeitet und dann anhand einer thermischen Simulation validiert werden.

1.2. Aufbau der Arbeit

2. Motivation

Der Transportsektor trägt in der EU mit einem Anteil von ca. 25% signifikant zu der gesamten Treibhausgasemission (THG) bei. Um die Ziele der EU-Kommission zu erreichen, soll bis 2030 die Anzahl der Fahrzeuge mit konventionellem Antrieb halbiert werden. Bis 2050 soll auf Fahrzeuge mit Benzin- oder Diesel-Motoren komplett verzichtet werden. Eines der Hindernisse für eine Marktdurchdringung der Fahrzeuge mit elektrochemischen Energiespeicher in Form von Lithium-Ionen-Batterien (LIB's) ist die begrenzte Reichweite dieser Fahrzeugklasse¹.

Die Energiedichte von aktuellen LIB's² liegt nach Tabelle 2.1 weit unter der von konventionellen Treibstoffen³, ist jedoch verglichen mit älteren Batterietechnologien erheblich höher⁴. Da auch die Batterie-Aufladezeiten ein Vielfaches der Dauer einer Tankfüllung mit einem Flüssigtreibstoff beträgt, haben Verluste die durch Widerstand oder Abwärme entstehen, zusammen mit Leistung die für das Kühlen bzw. Aufheizen der Batterie aufgewendet werden muss, einen signifikant negativen Effekt auf die Reichweite und Effizienz der Fahrzeuge.

Tabelle 2.1: Vergleich der Energiedichten von Energieträgern in Fahrzeugen

Typ	Wert	Einheit
Lithium-Ionen-Batterie:	430 - 800	Wh/l
Nickel-Cadmium-Batterie:	130	Wh/l
Benzin:	9700	Wh/l
Diesel:	10700	Wh/l

Besonders deutlich ist dieser Effekt in der Luftfahrtbranche.

Die früheren Konzepte des elektrischen Fliegens waren zwar erfolgreich darin, dass sie das Fliegen mit elektrischem Antrieb ermöglichten, scheiterten jedoch an der geringen Energiedichte verfügbarer Energiespeicher wie Nickel-Cadmium-Batterien und der damit verbundenen möglichen Reichweite⁵.

Durch die Entwicklung von Lithium-Ionen-Batterietechnologie haben die elektrochemischen Energiespeicher erstmals eine ausreichende Energiedichte um relevante Reichweiten von bis zu 250km zu ermöglichen.⁶

Da die Reichweite sich antiproportional zum Gewicht verhält resultiert ein geringeres Gewicht bei gleicher Batteriekapazität in erweiterter Reichweite⁷.

Daher kann die Effizienz, Ladezeit und Reichweite von elektrischen Fahrzeugen mithilfe innovativer Kühlkonzepte gesteigert werden. In dieser Arbeit sollen diese Konzepte erarbeitet und validiert werden.

¹ Vgl. Ajanovic und Glatt (Wirtschaftliche und ökologische Aspekte der Elektromobilität: Economic and ecological aspects of electric vehicles) 2020, S.136-146.

² Vgl. Hettesheimer et al. (Entwicklungsperspektiven für Zellformate von Lithium-Ionen-Batterien in der Elektromobilität) 2017, S. 11.

³ Vgl. Beloit EDU (Energy Density Table).

⁴ Vgl. Sollmann (Nickel-Cadmium-Batterien) 2018.

⁵ Vgl. Hepperle (Electric Flight - Potential and Limitations) 2012, S. 4.

⁶ Vgl. Lilium (Lilium Jet).

⁷ Vgl. Traub (Range and Endurance Estimates for Battery-Powered Aircraft) 2011, S. 705.

3. Grundlagen und Stand der Technik

3.1. Lithium-Ionen-Batterietechnologie

In diesem Kapitel wird ein Überblick über die Lithium-Ionen-Batterietechnologie verschafft. Außerdem wird das thermische und elektrische Verhalten der Zellen erläutert. Zuletzt werden noch Alterungsmechanismen und Temperaturabhängigkeiten betrachtet.

Aufbau und Funktionsweise

Der Begriff Lithium-Ionen-Batterie umfasst viele verschiedene Batterietechnologien, welche alle auf dem gleichen Wirkprinzip beruhen. Analog zu allen anderen Batterietypen besteht eine Lithium-Ionen-Batterie aus dem Elektrolyten, einem Separator und zwei Elektroden.

Nach Konvention wird nach den elektrischen Zuständen beim Entladevorgang die negativ geladene Elektrode als Anode und die positiv geladene Elektrode als Kathode bezeichnet.

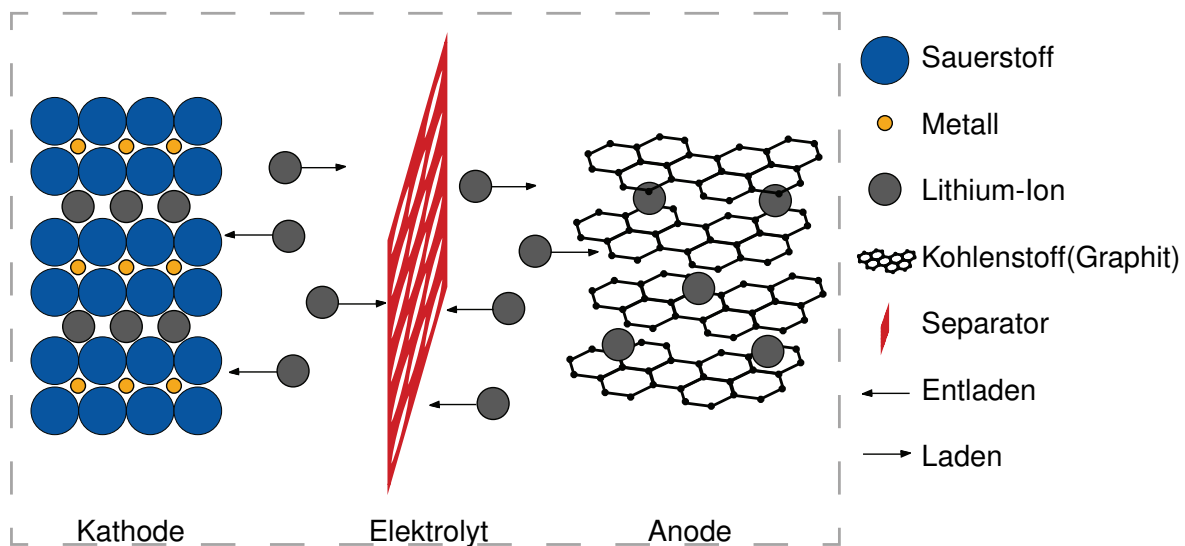


Abbildung 3.1: Aufbau Lithium-Ionen-Batteriezelle in Anlehnung an Ecker u. Sauer 2013

Wie in Abbildung 3.1 dargestellt, können die Lithium-Ionen durch das Elektrolyt von der Kathode zur Anode oder umgekehrt wandern?

Um die Oberfläche für das Einlagern der Ionen möglichst groß zu gestalten, sind die Materialien der beiden Elektroden hochporös. Dies ermöglicht zudem eine hohe Reaktionsrate.

Die Kathode einer **LIB** (Lithium-Ionen-Batterie) besteht meist aus einem Metalloxid, die Anode aus einer Kohlenstoffmodifikation, oftmals Graphit. Für die Bindung der Elektrodenmaterialien wird häufig Polyvinylidenfluorid (PVDF) in verschiedenen Formen verwendet.

Diese Materialien werden dann auf einer dünnen Metallfolie aufgetragen. An der Kathode kommt hierfür Aluminium zum Einsatz, an der Anode wird Kupfer verwendet. Diese Metallfolien dienen gleichzeitig als Stromableiter.

Der Separator besteht normalerweise aus einem porösen Polymer. Die Bauteile der Batterie, Elektroden und Separator sind in einem Elektrolyt getränkt. Dieses besteht aus Lithiumsalz das in einem organischem Solvat gelöst ist. Das Solvat wird so gewählt, dass es bei den im Betrieb auftretenden Spannungszuständen trotzdem weitgehend stabil ist.

Die Bauform der Batteriezellen ist meist einer von drei etablierten Typen, wie in Tabelle 3.1 dargestellt ist. Bei allen Typen bestehen die Zellen aus mehreren Lagen von Elektroden-Separator-Elektroden-Stapeln, die je nach Typ geschichtet oder gewickelt werden.

Das Gehäuse oder das Verpackungsmaterial der Batteriezellen ist ausschließlich aus Metall.

Diese Maßnahme dient der Abdichtung der Zelle, da Wassereintritt die Hydrolyse des Leitsalzes $LiPF_6$ zu Fluorwasserstoff anstoßen kann. Zudem verhindert das Metall das Diffundieren des Elektrolyten aus der Zelle nach außen⁸.

Tabelle 3.1: Bauformen der Batteriezellen

Bauform	Geschichtet	Gewickelt
Zylindrisch		Ja
Prismatisch	Ja	Ja
Pouch-Bag	Ja	

Je nachdem ob eine höhere Energiedichte oder Leistungsdichte bei den Batteriezellen gewünscht ist, können die Aktivmaterialsichten den Anforderungen entsprechend ausgelegt werden. Bei dünneren Schichten ist die Leistungsdichte, bei gleichzeitig geringerer Energiedichte, höher⁹.

Batterietechnologien

Der größte Unterschied zwischen den LIB-Technologien liegt in der Materialzusammensetzung der Elektroden.

Beginnend mit der Lithium-Kobalt-Oxid-Batterie (LCO) von Sony in den 1990er-Jahren, wurden seitdem auch Lithium-Nickel-Oxid- (LNO) oder Lithium-Mangan-Oxid-Batteriezellen (LMO) entwickelt. LNO und LCO weisen beide eine hohe Kapazität auf, LNO besitzt jedoch eine geringe thermische Stabilität und LCO ist aufgrund des Kobaltgehalts in Sachen Kosten, Sicherheit und Umweltverträglichkeit nicht ideal für den Massenmarkt. LMO ist zwar stabil, löst sich jedoch bei Raumtemperatur teilweise im Elektrolyten.

Um diese Nachteile auszugleichen wurden beispielsweise die Lithium-Nickel-Mangan-Kobalt-Batteriezelle (NCM) oder die Lithium-Nickel-Kobalt-Aluminium-Batteriezelle (NCA) entwickelt. Eine weitere Variation ist die Batteriezelle mit einer Kathode auf Eisenphosphatbasis (LFP). Diese besitzt verglichen mit den anderen Varianten eine geringere Spannungslage und gravimetrische Energiedichte. Da aber kein Kobalt verbaut wird, besitzt diese Technologie relevante Umweltvorteile.

Auch eine alternative Anoden-Technologie, die sogenannte LTO-Zelle (Lithiumtitanat), kommt aktuell auf den Markt. Sie besitzt zwar eine geringere Energiedichte im Vergleich zu anderen Technologien, weist sich jedoch durch eine hohe Leistungsdichte und Lebensdauer aus¹⁰.

In der Industrie setzt sich jedoch die NCM-Kathoden-Technologie durch. Zwar sind aktuell in der Transportbranche alle Technologien vertreten, jedoch stellen Produzenten wie Panasonic ihre NCA-Technologie auf die NCM-basierten Zellen um. In der Gigafactory die Panasonic in Zusammenarbeit mit Tesla in Nevada (USA) seit 2017 in Betrieb hat sollen ab 2025 nur noch NCM-Zellen produziert werden. Die Anoden-Technologie wendet weitgehend Graphit basierte Lösungen an.

Diese Entwicklung ist auf die Batterie-Roadmaps der OEM-Hersteller zurückzuführen. In diesen Roadmaps stellen Hochenergie-LIB's mit NCM-Basierten Kathoden die aussichtsreichste Wahl was Kosten und Energiedichte angeht dar¹¹.

Daher wird in dieser Arbeit die NMC-Kathoden-Technologie betrachtet.

⁸ Vgl. Wöhrle (Lithium-Ionen-Zelle) 2013, S.107-117.

⁹ Vgl. Ecker und Sauer, Prof. Dr. rer. nat. D. U. (Batterietechnik - Lithium-Ionen-Batterien) 2013, S.66-67.

¹⁰ Vgl. Fußnote 9, Ecker und Sauer 2013

¹¹ Vgl. Fußnote 2, Hettenheimer et al. 2017

Elektrische Funktionsweise und Kenngrößen der Lithium-Ionen-Batterietechnologie

Während des Entladevorgangs, was dem Auslagern von Lithium aus der negativen Elektrode entspricht, werden Elektronen ausgegeben. Die Lithium-Ionen wandern durch das Elektrolyt und den Separator zur positiven Elektrode und lagern sich dort ein. Gleichzeitig fließen die Elektronen durch die externe Verbindung über einen Verbraucher zur positiven Elektrode wo Aluminium als Stromableiter dient. Beim Laden wird dieser Prozess umgekehrt¹².

Der Interkalationsprozess der Lithium-Ionen ist nahezu reversibel. Daher tritt unter normalem Gebrauch meist kein Lithium-Plating auf¹³.

Beim Lithium-Plating setzt sich Lithium an der Anode ab und verringert so die Kapazität der Batterie.

Die gebräuchlichen Kenngrößen der Batteriezelle sind meist die nominale Kapazität, elektrische Energie und Leistung.

Die Kapazität ist die Menge an elektrischer Ladung, welche von einer Leistungsquelle während der Entladung geliefert werden kann. Sie wird primär von dem Entladestrom, der Temperatur, der Entladeschlussspannung und der Art und Menge der Aktivmaterialien auf den Elektroden beeinflusst. Die Einheit ist [Ah].

Die Energie einer Batteriezelle berechnet sich aus der Kapazität und der mittleren Entladespannung und wird in der Einheit [Wh] angegeben. Die Energiedichte bezieht sich auf das Volumen der Batterie und wird in [Wh/l] gerechnet. Die spezifische Energiedichte referenziert die Masse der Batterie und wird dementsprechend in [Wh/kg] angegeben.

Um die Leistung zu berechnen wird der Strom mit der Spannung multipliziert, was die Einheit Watt [W] ergibt. Durch den nahezu reversiblen Prozess ist der Wirkungsgrad von Lithium-Ionen-Batterien sehr hoch. Dieser ist nach Gleichung 1 definiert als die Energie die bei der Entladung frei wird geteilt durch die Energie, die beim Laden aufgewendet wird¹⁴.

$$\text{Wirkungsgrad} = \frac{\text{Entladeenergie}}{\text{Ladeenergie}} \quad (1)$$

Bauformen der Lithium-Ionen-Batterien

Wie in Tabelle 3.1 dargestellt, gibt es drei Bauformen von Lithium-Ionen-Batterien. Da in dieser Arbeit nur die zylindrische und prismatische Bauform relevant ist, werden nur sie hier behandelt. Die zylindrische Zelle besitzt gewickelte Elektroden-Separator-Elektroden-Paare. Analog zu einer klassischen AA-Batterie sind die positiven und negativen Anschlüsse auf jeweils einer der beiden Stirnseiten angebracht. In der konventionellen Batteriezelle wird der Strom durch ein sogenanntes "Tab" aus den Kathoden-Anoden-Paaren entnommen. Der Tab der Kathode oder Anode ist demnach an einer Stelle der Elektrode angebracht. Dadurch muss der Strom zum Teil große Distanzen zurücklegen um über die Tab-Verbindung zum elektrischen Leitstück am Ende der Batterieöhle, oder Can, zu gelangen. In Kapitel ?? wird dieser Prozess näher erläutert.

Die Bauform der zylindrischen Zelle wird häufig durch ein Zahlenkürzel angegeben, bei dem die ersten beiden Ziffern den Durchmesser in [mm] vorgeben. Die nächsten beiden Ziffern stehen für die Zellhöhe, wieder in [mm]. Die letzte Ziffer ist eine 0 und schließt die Zahl ab. Zum Beispiel ist eine häufige Bauform die 18650er Zelle mit einem Durchmesser von 18 mm und einer Höhe von 65 mm. Auch viel verwendet werden die 26650er- und die 21700er-Zellgrößen¹⁵.

¹² Vgl. Leuthner (Übersicht zu Lithium-Ionen-Batterien) 2013, S. 13-19.

¹³ Vgl. DAHN et al. (Thermal stability of LiCoO_2 , LiNiO_2 and 2-MnO_2 and consequences for the safety of Li-ion cells) 1994, S. 265-270.

¹⁴ Vgl. Fußnote 12, Leuthner 2013

¹⁵ Vgl. (Lithium-Ionen-Batterietechnik: Zylindrische Zellen) 2021.

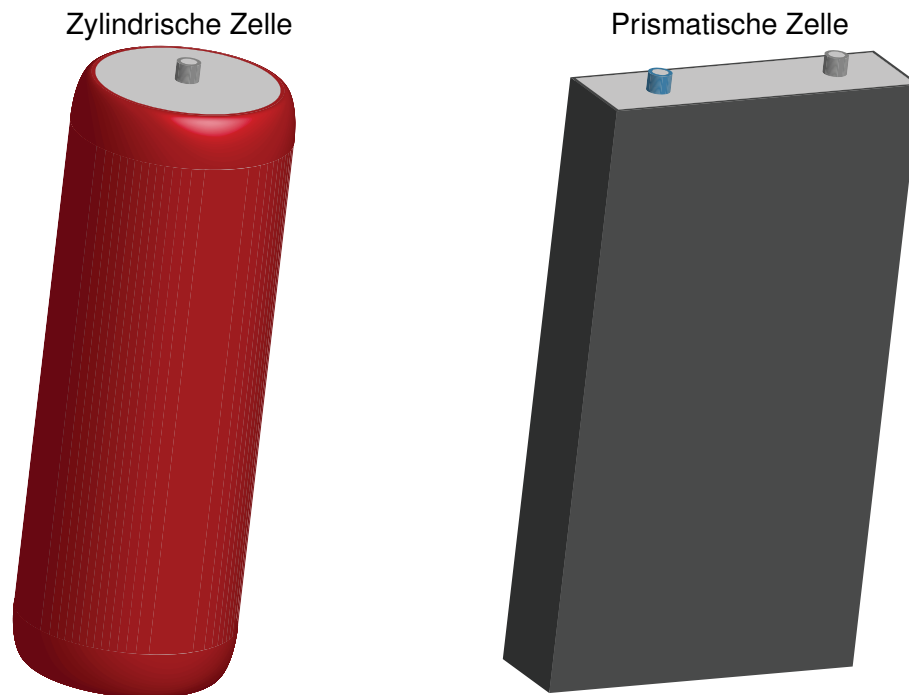


Abbildung 3.2: Prismatische und zylindrische Batteriezelle in Anlehnung an Ecker u. Sauer 2013

Der Aufbau der prismatischen Zelle (siehe Abbildung 3.2) ist relativ einfach. In diesem Bauformat werden gewickelte oder geschichtete Elektrodenpaare verwendet. Die Spannungs-, bzw. Stromentnahme erfolgt analog zu der konventionellen zylindrischen Batteriezelle über "Tabs" und wird über an der Kopfseite der Batteriezelle angebrachte Anschlüsse entnommen.

Die Größe der prismatischen Zellen variiert stark und wird je nach Anwendungsfall bestimmt¹⁶.

Alterungsmechanismen

Die Temperaturgradienten die sich beim Benutzen der Batterie in der Zelle ausbilden, können auch Alterungsgradienten hervorrufen. Hinzu kommt, dass starke Temperaturgradienten, die z.B. während hoher C-Raten auftreten, Verformungen der Elektrodenwickel induzieren können¹⁷.

Es ist also zu Schlussfolgern, dass eine homogene Temperaturverteilung innerhalb der Zelle von Vorteil ist. Im weiteren werden drei häufig auftretende Alterungsmechanismen erläutert.

Beim Lithium-Plating setzen sich Lithium-Ionen auf der Trennschicht, oder "Solid Electrolyte Interface"(SEI), zwischen Elektrode und Elektrolyt durch irreversible chemische Reaktionen ab. Diese Ablagerungen verdicken die Trennschicht, was zu einem Anstieg des Stofftransportwiderstands und dadurch zu einem Anstieg des ohm'schen Widerstands führt. Da die Konzentration der Lithium-Ionen im Elektrolyt auch abnimmt, kommt es außerdem zu einem Kapazitätsverlust. Alterung kann außerdem durch mechanische Spannungen ausgelöst werden. Diese entstehen, wenn Lithium-Ionen sich in die Aktivmaterialien einlagern. Die Spannung innerhalb der Partikel kann hierbei zur Rissbildung führen. Durch die Risse sind die Teile des Aktivmaterials nicht mehr elektrisch angebunden und werden als "Dead-Lithium" bezeichnet.

Der letzte hier behandelte Alterungsvorgang entsteht aus Dehnvorgängen bei der Lithium-Einlagerung. Diese Belastung kann den Leitruß, einen speziellen Kohlenstoffleiter der Leitpfade

¹⁶ Vgl. (Lithium-Ionen.Batterietechnik: Prismatische Zellen) 2021.

¹⁷ Vgl. Waldmann et al. (Influence of Cell Design on Temperatures and Temperature Gradients in Lithium-Ion Cells: An In Operando Study) 2015, S.921-927.

zwischen Stromableitern und Partikeln bereitstellt, auftrennen. Dadurch sind die Aktivmaterialpartikel nicht mehr mit dem Stromableiter verbunden. Dieser Alterungsvorgang kann sowohl an Kathode, als auch an der Anode auftreten.¹⁸

Wärmeentwicklung und Temperatureinfluss auf die Batteriezelle

Die Leistung von LIB's hängt stark von der Zelltemperatur ab.

Mit sinkender Temperatur steigt der innere Widerstand der Zelle und die verfügbare Kapazität nimmt ab. Dies führt zu verminderter abnehmbarer Energie und geringerer maximaler Leistung. Bei hoher Zelltemperatur kann jedoch die Sicherheit der Batteriezelle nicht mehr gewährleistet werden und es finden Alterungsprozesse statt. Die Zelltemperatur ist hierbei von der Außentemperatur und der Wärmeentstehung beim Laden bzw. Entladen der Batterie abhängig.¹⁹

Liu et al. stellen Gleichung 2 für die Berechnung der Wärmegeneration in der Batteriezelle während der Ladezyklen auf.

$$\dot{Q} = I \cdot (U_{OCV} - U_t) - I \cdot T \frac{\partial U_{OCV}}{\partial T} - \sum_i \Delta S_i^{avg} r_i - \int \sum_j (\bar{S}_j - \bar{S}_j^{avg}) \cdot \frac{\partial c_j}{\partial t} dv \quad (2)$$

Tabelle 3.2: Variablen aus Gleichung 2

Nummer	Beschreibung
\dot{Q}	Wärmeentstehungsrate
I	Batteriestrom
U_t	Klemmenspannung der Batterie
U_{OCV}	Leerlaufspannung der Batterie
T	Batterietemperatur
ΔS_i	Entropieänderung der i -ten Reaktion
r_i	Reaktionsrate der i -ten Reaktion
\bar{S}_j	Molare Entropie des j -ten Teils der Batterie
c_j	Ionenkonzentration im j -ten Teil
v	Volumen
\bar{X}^{avg}	Entspricht der Durchschnittskonzentration in einem Teilvolumen

Der erste Term von Gleichung 2 auf der rechten Seite entspricht der ohm'schen Wärmeentstehung, kurz \dot{Q}_{jou} . Der zweite Term ist die reversible Entropiewärme oder Reaktionswärme, \dot{Q}_{re} . Der dritte Term ist die Wärme aus Nebenreaktionen, \dot{Q}_{sr} . Dieser beschreibt die Alterung der Batteriezelle und kann für wenige Testzyklen vernachlässigt werden²⁰. Der letzte Term, \dot{Q}_{mix} , entspricht der Wärme im Mischprozess der Batterie. Die Mischprozesswärme entsteht durch die Bildung und Entspannung von Zellkonzentrationsgradienten. Für dynamische Belastungsprofile ist sie daher signifikant und kann nicht vernachlässigt werden²¹.

¹⁸ Vgl. Fußnote 12, Leuthner 2013

¹⁹ Vgl. Liu et al. (Analysis of the heat generation of lithium-ion battery during charging and discharging considering different influencing factors) 2014, S.1001-1010.

²⁰ Vgl. Forgez et al. (Thermal modeling of a cylindrical LiFePO₄/graphite lithium-ion battery) 2010.

²¹ Vgl. Thomas und Newman (Thermal Modeling of Porous Insertion Electrodes) 2003.

Zusammengefasst verkürzt sich Gleichung 2 demnach zu Gleichung 3, bzw. Gleichung 4.

$$\dot{Q} = I \cdot (U_{OCV} - U_t) - I \cdot T \frac{\partial U_{OCV}}{\partial T} - \int \sum_i (\bar{H}_j - \bar{H}_j^{avg}) \cdot \frac{\partial c_j}{\partial t} dv \quad (3)$$

$$\dot{Q} = \dot{Q}_{jou} + \dot{Q}_{sr} + \dot{Q}_{mix} \quad (4)$$

Nach Gleichung 2 ist die ohm'sche Wärme von dem Stromfluss und der Überpotential abhängig. Das Überpotential entsteht durch den Potentialverlust durch einen erhöhten inneren Widerstand der Batteriezelle.

Folgend kann der innere Zellwiderstand R_{in} nach Gleichung 5 definiert werden.²²

$$R_{in} = \frac{U_{OCV} - U_t}{I} \quad (5)$$

Der innere Widerstand einer Lithium-Ionen-Batterie wird durch das State-Of-Charge (SOC), die Zellalterung und die Zelltemperatur beeinflusst. Im Allgemeinen sind die Kausalitäten bereits bekannt. Der Widerstand nimmt mit fallender Zelltemperatur zu. Außerdem variiert er mit dem SOC und steigt über die Lebensdauer mit dem Auftreten von Alterungsmechanismen.^{23 24}

Interessant ist auch, dass der Ladewiderstand kleiner als der Entladewiderstand ist. Daher wird während dem Ladeprozess weniger ohm'sche Wärme produziert als beim Entladeprozess. Andererseits beeinflusst die Zelldegradation den Ladewiderstand mehr als den Entladewiderstand, wodurch Alterungseffekte beim Berechnen der Wärmeentstehung während Ladezyklen signifikant sind.

Bei der Reaktionswärme ist der dominierende Einfluss nach Liu et al. das SOC. In manchen SOC-Bereichen sollten Alterungseffekte berücksichtigt werden und der Temperatureinfluss ist nicht vernachlässigbar.²⁵

²² Vgl. Fußnote 19, Lui et al. 2014

²³ Vgl. Andre et al. (Characterization of high-power lithium-ion batteries by electrochemical impedance spectroscopy. I. Experimental investigation) 2011.

²⁴ Vgl. Ecker, Gerschler et al. (Development of a lifetime prediction model for lithium-ion batteries based on extended accelerated aging test data) 2012.

²⁵ Vgl. Fußnote 19, Liu et al. 2014

3.2. Das Tesla-Patent

Im Folgenden wird das Patent von Tesla für eine innovative thermische und elektrische Anbindung des Elektrodenwickels an das Batteriegehäuse für die Leistungsabnahme behandelt.

Das Patent wurde von Tesla Inc. mit den Erfindern Tsuruta et al am 4. November 2019 eingereicht und am 7. Mai 2020 unter der *Publishing No.* **US 2020/0144676 A1** veröffentlicht²⁶.

Der Abstract der Veröffentlichung fasst die Erfindung, bei der es sich um eine zylindrische Zelle handelt, wie folgt zusammen:

“Eine Zelle eines Energiespeichergeräts mit mindestens einer Elektrode die ohne *Tab* konstruiert wird und Herstellungsmethoden dieser.”

In der konventionellen Batteriezelle, ob zylindrisch oder prismatisch, werden die Kathode und Anode mit den positiven und negativen Anschlüssen mithilfe von *Tabs* verbunden (Beispiel *Tab* siehe Abbildung 3.3 mit Tabelle 3.3).

Diese *Tabs* dienen als sogenannte “Current collectors”, d.h. durch sie fließt der gesamte Strom den die Batteriezelle abgibt oder aufnimmt.

Da der Widerstand nach Gleichung 6 von der Dichte des Materials (ρ), der Länge die der Strom zurücklegt (l) und der Fläche (A) durch den er fließt abhängt, haben Tsuruta et al in ihrem Patent die zurückgelegte Distanz reduziert und die Fläche vergrößert um den Widerstand zu verringern²⁷.

$$R = \rho \cdot \frac{l}{A} \quad (6)$$

Im konventionellen Design sind die *Tabs* entweder in der Mitte oder an einem Ende der Elektrode angebracht. Daher muss der Strom zuerst mindestens die Hälfte, beim *Tab* am Ende der Elektrode die gesamte Länge der Elektrode zurücklegen.

Bei dem innovativen Entwurf ist die maximale Distanz die der Strom zurücklegen muss die Höhe der Elektrode. Abhängend vom Batteriezellenformfaktor entspricht die Höhe der Elektrode typischerweise 5% – 20% der Länge. Es folgt, dass der ohm'sche Widerstand des elektrochemischen Zyklus' des innovativen Konzepts 5- bis 20-Mal kleiner ist als der Widerstand des konventionellen Konzepts²⁸.

Ein weiterer Effekt der durch das innovative Konzept hervorgerufen wird ist, dass signifikant weniger Stromabweichungen (Checken mit Jonas) (Stromverteilung auf der Elektrode) auftreten. Stromabweichung ist das Phänomen bei dem manche Elektrodenregionen mehr oder weniger Strom als andere Regionen auf der selben Elektrode während der Zyklendauer leiten.

Nach Ohm fließt Strom bevorzugt entlang der Strecke mit dem geringsten Widerstand (siehe Gleichung 7). In dem konventionellen Design entspricht dies dem Bereich auf der Elektrode nahe des *Tabs*. Die auftretenden Stromabweichungen sind unerwünscht, da es zur Entstehung von lokalen “Elektroden-Hotspots“ führt. Hier treten Spannungsüberhöhungen auf, welche chemische Reaktionen hervorrufen die die Lebensdauer der Zelle reduzieren. Ein Beispiel einer solchen Reaktion ist Lithium-Plating²⁹.

$$I = \frac{V}{R} \quad (7)$$

Die innovativen Konzepte bieten laut Patentschrift auch verbesserte Wärmeentstehungs- und Wärmeübertragungseigenschaften.

Nach Gleichung 8 ist die ohm'sche Erhitzung in $[W]$ abhängig von dem Strom und dem Wider-

²⁶ Vgl. Tsuruta et al. (Cell with a tabless electrode) 2020.

²⁷ Vgl. Fußnote 26, Tsuruta et al. 2020

²⁸ Vgl. Fußnote 26, Tsuruta et al. 2020

²⁹ Vgl. Fußnote 26, Tsuruta et al. 2020

stand.

$$P \approx I^2 \cdot R \quad (8)$$

Da der Widerstand **R** zwischen 5 und 20 mal kleiner ist als beim konventionelle Entwurf ist zu erwarten, dass beim innovativen Design die ohm'sche Wärmeproduktion signifikant reduziert ist. Die trotz der Maßnahmen entstehende Wärme kann effizienter abgeführt werden.

$$\dot{Q} = \frac{k \cdot A \cdot (T_2 - T_1)}{d} \quad (9)$$

Gleichung 9 beschreibt den Wärmetransport durch ein wärmeleitendes Medium. \dot{Q} ist der Wärmestrom in $[\frac{\text{Joule}}{\text{Sekunde}}]$. k ist der Wärmeleitkoeffizient des Materials in $[\frac{\text{W}}{\text{mK}}]$. Die Fläche A in $[\text{m}^2]$ und die Distanz d in $[\text{m}]$ sind die geometrischen Dimensionen über die der Transfer stattfindet. Der Term $(T_2 - T_1)$ entspricht der Temperaturdifferenz über d .

In konventionellen Batteriezellen wird die Kontaktfläche zwischen Elektrode und Batteriegehäuse vom *Tab* realisiert. Beim innovativen Entwurf entspricht der Kontakt zwischen Elektrode und Gehäuse der gesamten Elektrodenlänge. Der Bereich (1) der Elektrode in Abbildung 3.3 befindet sich im Kontakt mit dem Gehäuse und nimmt effektiv 100% des Durchmessers des Batteriezylinders ein. Die signifikant größere Kontaktfläche ermöglicht erhöhte Wärmeleitung und dadurch eine optimierte Temperaturkontrolle der Batteriezelle³⁰.

Inhalte des Patents

In der Patentschrift wird auch auf mögliche Herstellungsvorgänge für die Elektrodenbeschichtung eingegangen. Da diese Arbeit sich mit den physikalischen Vorgängen in der Batteriezelle auseinandersetzt wird die Produktion an dieser Stelle nicht weiter behandelt. Bei Interesse an der Produktion wird die Patentschrift als weiterführende Literatur empfohlen.

Es werden verschiedene Konfigurationen der Elektrodenwickel beschrieben. In Abbildung 3.3 ist ein Beispiel für eine "Jelly-Roll" zu sehen.

Die Kathode oder Anode (3) wird mit dem Aktivmaterial beschichtet. Dabei kann der leitende Teil an dem unteren Ende der Elektrode (1) durch eine isolierende Schicht (2) von dem Aktivmaterial getrennt werden. Diese Schicht ist in manchen Konfigurationen des Patents jedoch nicht vorhanden.

Zwischen die beiden Elektroden wird eine Trennschicht eingebracht (4). Da die Elektroden gewickelt werden, wird nach der Anode oder Kathode (5) eine weitere, äußere Trennschicht (6) eingebracht. Diese 4 Schichten werden dann um eine zentrale Achse **AA'** gewickelt. (7) zeigt das *Tab* der Anode oder Kathode, welches mit der oberen Seite des Gehäuses verbunden wird.

³⁰ Vgl. Fußnote 26, Tsuruta et al. 2020

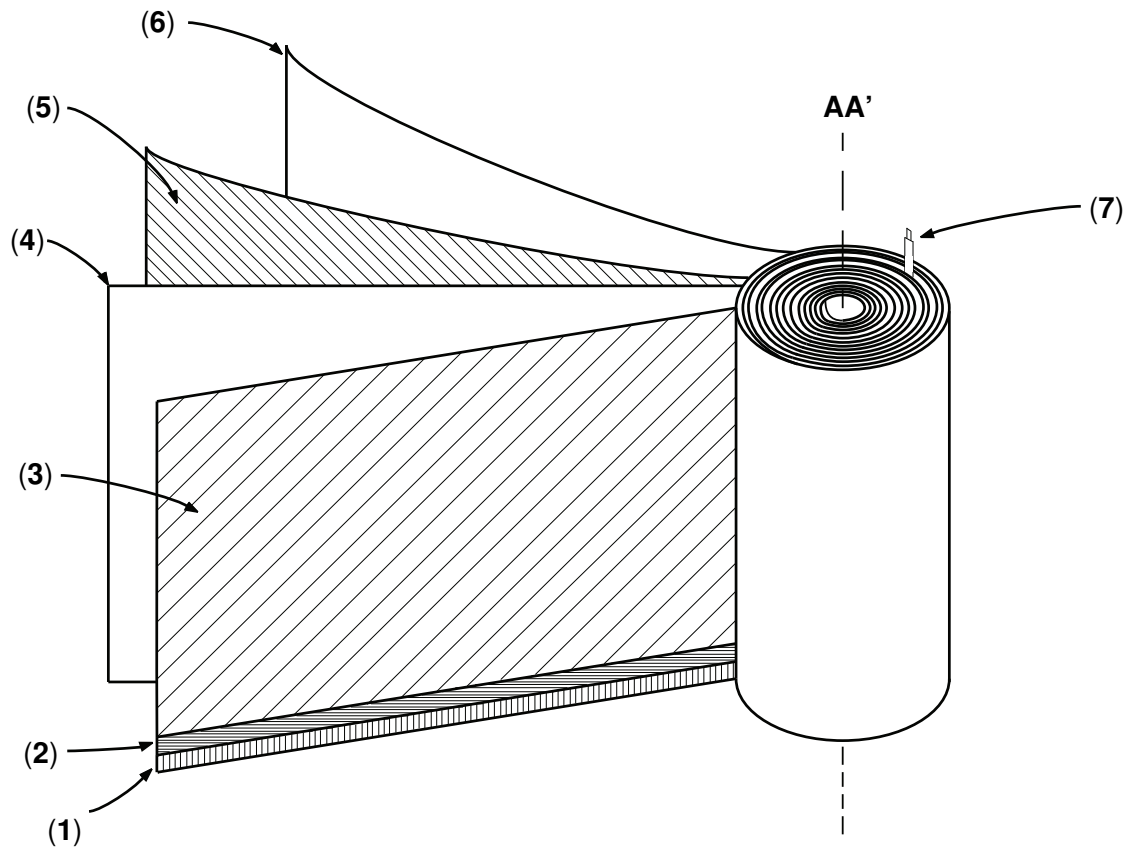


Abbildung 3.3: Aufbau des Elektrodenwickels in der zylindrischen Zelle in Anlehnung an Tesla Patent, Tsuruta et al. 2020

Tabelle 3.3: Beschriftung von Abbildung 3.3

Nummer	Beschreibung
(1)	Leitfähiges Material
(2)	Isolierendes Material
(3)	Kathode/Anode
(4)	Innere Trennschicht
(5)	Anode/Kathode
(6)	Äußere Trennschicht
(7)	Tab

Der Kontakt zwischen Elektrodenwickel und Cap

Damit der leitende Teil der Elektrode Kontakt zum entsprechenden Pol des Batteriegehäuses hat, wird ein Ende des Batteriezylinders mit einer *Cap* versehen. Das *Cap* besteht aus einem leitenden Material, zum Beispiel einer Nickel-Legierung³¹.

Dieser Deckel kann für eine optimierte Anbindung des Elektrodenwickels in verschiedenen Konfigurationen vorhanden sein. Diese Modifikationen der *Cap* können unter anderem Nuten, Erhebungen und Aussparungen, sowie andere nicht beschriebene Merkmale sein.

Der Kontakt zwischen Elektrodenwickel und *Cap* kann mit mehreren Konzepten verwirklicht

³¹ Vgl. Fußnote 26, Tsuruta et al. 2020, S. 1

werden. Einer davon ist eine Pressverbindung, bei der das *Cap* und die Kathode oder Anode durch Druck miteinander in Berührung kommen.

Damit der Verbindung zwischen *Cap* und Kathode, bzw. Anode mehr Oberfläche verfügbar ist, kann das *Cap* so ausgelegt sein, dass es mit dem leitenden Teil der Elektrode (Abbildung 3.3 (1)) einen möglichst schlüssigen Kontakt hat. Um die benötigte Presskraft aufzubringen kann oberhalb des Elektrodenwickels ein isolierendes Material eingebracht werden, welches die Elektrode gegen die *Cap* presst. Die Verbindung kann auch durch Anschwellen der Anode durch den Elektrolyten oder durch Laser- oder Ultraschallschweißen realisiert werden.

Für einen möglichst guten Kontakt können wie in Abbildung 3.4 Nuten in das *Cap* gefräst werden. Die Nuten sollten in der Größenordnung des leitenden Elektrodenteils sein. In der Patentschrift sind hier zwischen 0.01 mm und 0.1 mm angegeben.

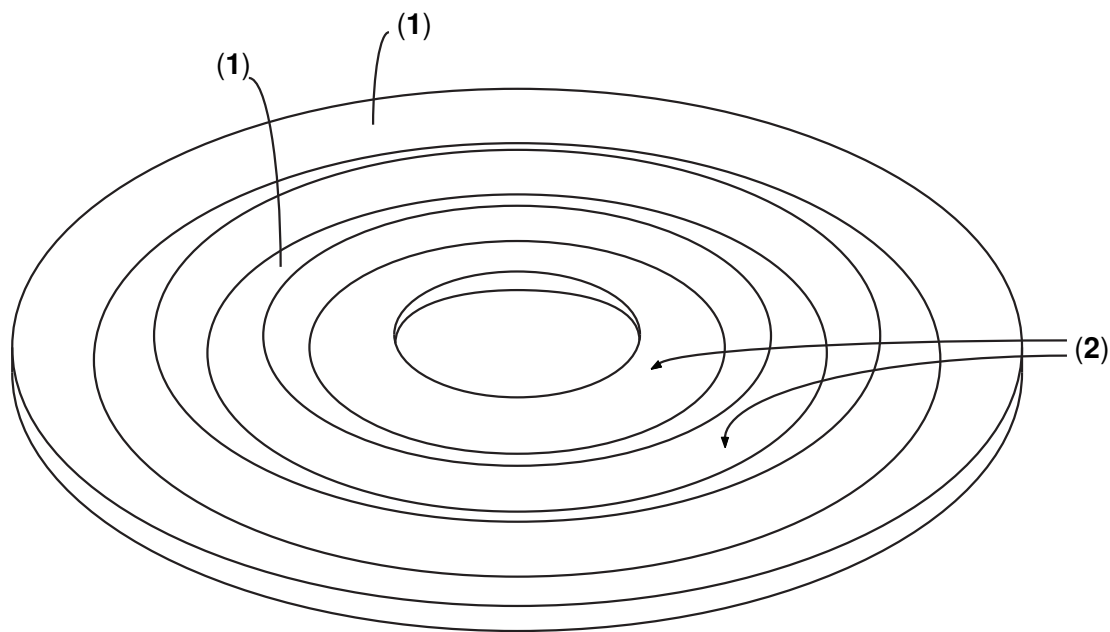


Abbildung 3.4: Beispielhafter Deckel oder Cap des Batteriezellgehäuses in Anlehnung an Tesla Patent, Tsuruta et al. 2020

Tabelle 3.4: Beschriftung von Abbildung 3.4

Nummer	Beschreibung
(1)	Nut
(2)	Kontaktfläche

Wie in Abbildung 3.5 b) gezeigt kann die Verbindung zwischen Elektrode und Batteriegehäuse auch ohne eine spezielle *Cap* hergestellt werden. Hierzu werden die leitenden Teile des Elektrodenwickels zum Teil miteinander oder direkt mit dem Gehäuse verbunden.

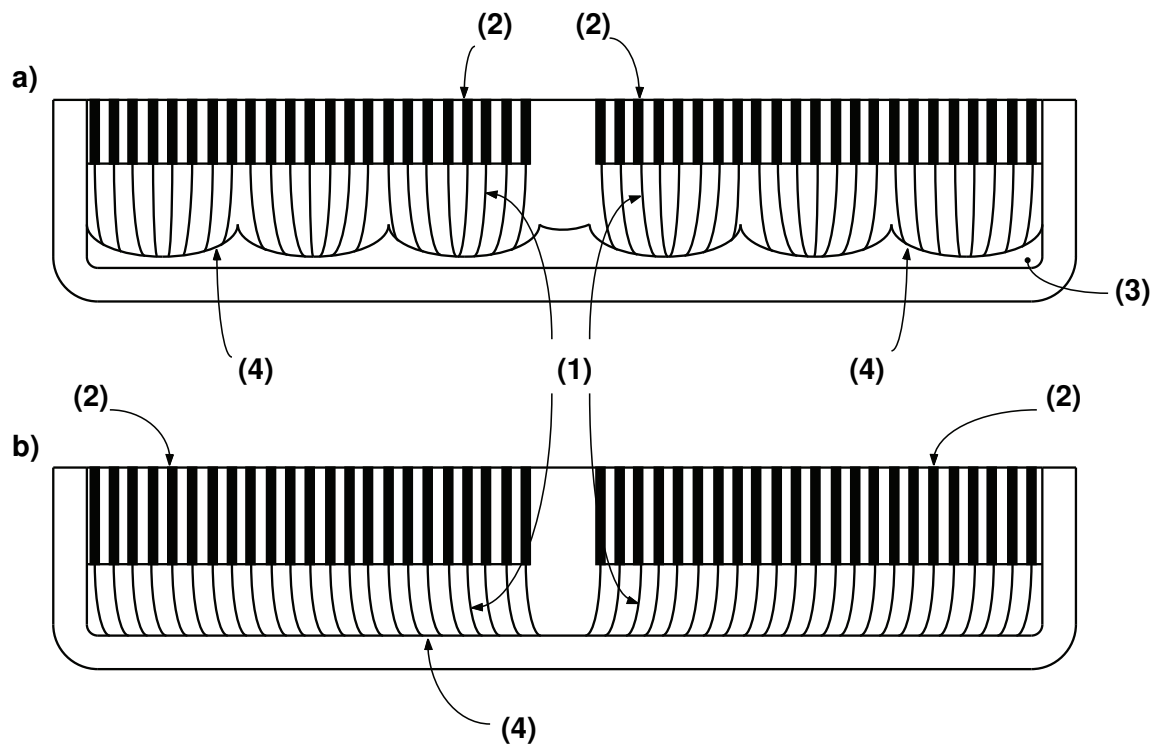


Abbildung 3.5: Verbindungsmöglichkeiten des Elektrodenwickels mit dem Batteriegehäuse nach Tesla Patent, Tsuruta et al. 2020

a) Verbindung mit Cap
b) Verbindung ohne Cap

Tabelle 3.5: Beschriftung von Abbildung 3.5

Nummer	Beschreibung
(1)	Leitender Elektrodenteil
(2)	Elektrodenwickel
(3)	Cap
(4)	Kontaktfläche

Imperfektionen können durch Fehler im Herstellungsprozess entstehen. Leitendes Material kann über sich selbst gefaltet sein und dadurch den Kontakt zwischen Elektrodenwickel und Cap, bzw. Gehäuse negativ beeinflussen. Um diesen Effekten entgegen zu wirken können wie in Abbildung 3.7 gezeigt ist Abschnitte des leitenden Teils der Elektrode entfernt werden. Mögliche Vorgehensweisen sind die Entfernung von Material in festen Abständen (Abbildung 3.6 a)) oder in größer werdenden Abständen (Abbildung 3.6 b)). Bei b) kann die Anordnung so gewählt werden, dass nach der Wicklung der Elektrode die leitenden Teile ein rotationssymmetrisches Muster bilden.³²

³² Vgl. Fußnote 26, Tsuruta et al. 2020, S. 5

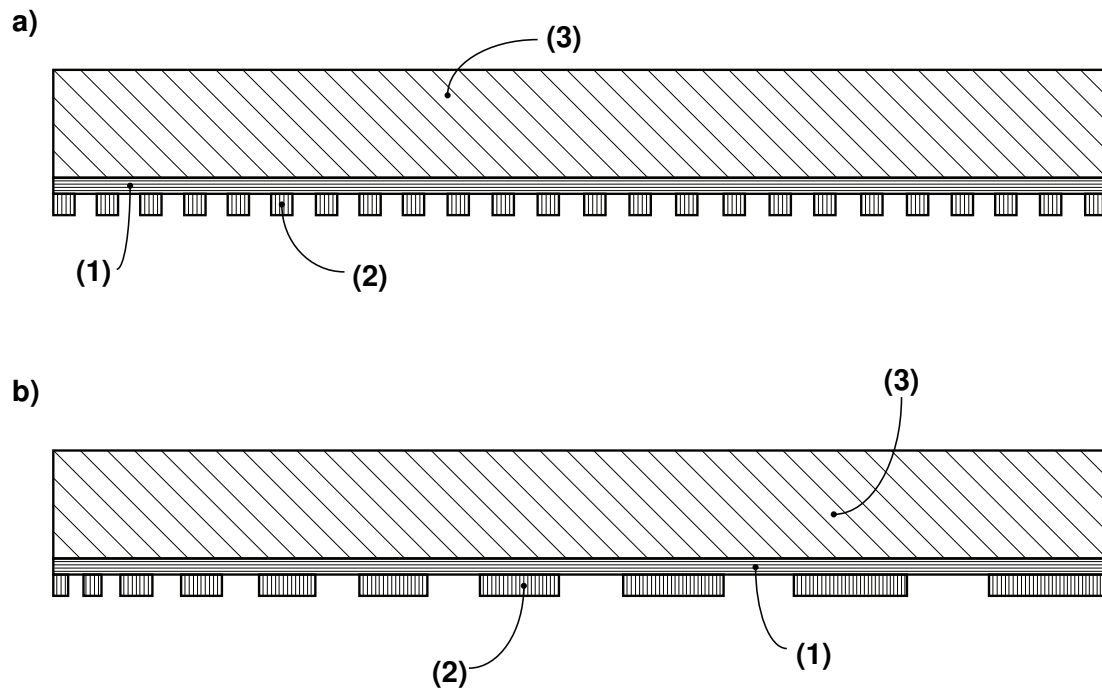


Abbildung 3.6: Verschiedene Varianten der Auslegung des leitenden Teils der Elektrode nach Tesla Patent, Tsuruta et al. 2020

Tabelle 3.6: Beschriftung von Abbildung 3.6

Nummer	Beschreibung
(1)	Isolierende Schicht
(2)	Leitender Teil
(3)	Elektrode

Ist zwischen Elektrode und Batteriegehäuse ein *Cap* eingebracht kann diese so ausgelegt werden, dass der leitende Teil der Elektrode einfach mit der *Cap* in Verbindung gebracht wird. Abbildung 3.7 a), b) und c) zeigen verschiedene Ansätze für die Verbindung mit dem leitenden Teil.

Bei a) kann der leitende Teil wie in Abbildung 3.6 b) dargestellt ist angebracht werden. Das *Cap* ist mit konzentrischen Nuten versehen, die wie in dem Querschnitt zu erkennen ist, mit einer 90°-Kante versehen ist.

C) verfolgt das gleiche Konzept wie a), jedoch ist hier die Auslegung der Nut spiralförmig gewählt. So kann die spiralförmige Wicklung der zu verbindenden Elektrode passgenau an der *Cap* angebracht werden.

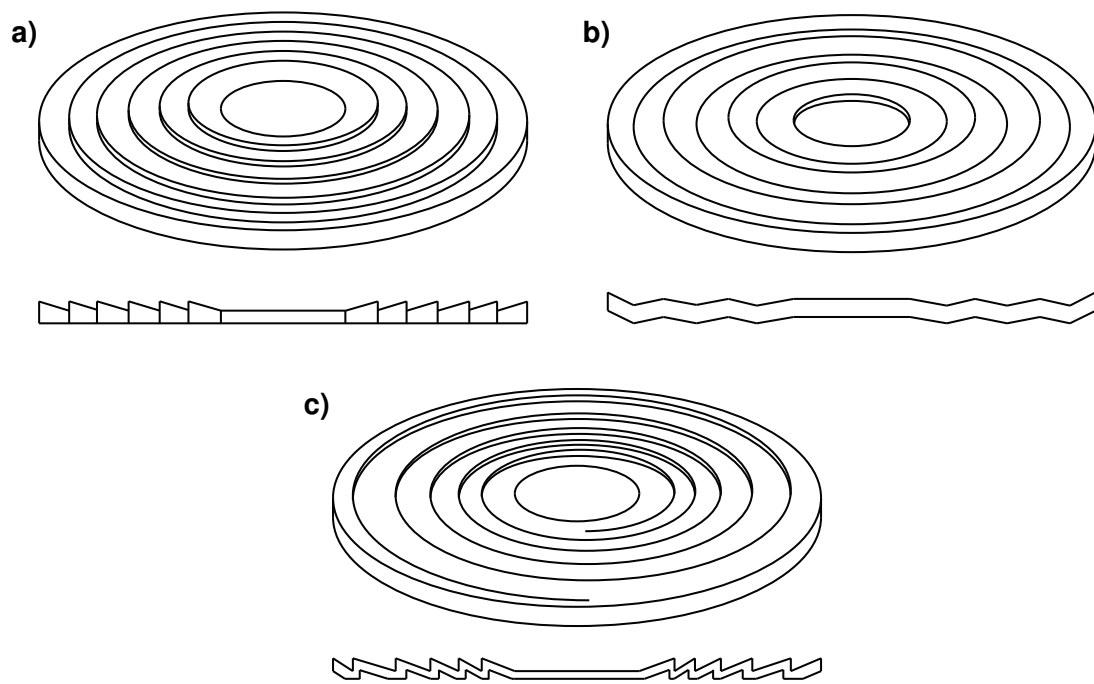


Abbildung 3.7: Verschiedene Cap-Varianten mit Schnittansicht nach Tesla Patent, Tsuruta et al. 2020

3.3. Batteriesimulation

Das Simulationsprogramm

Um die prismatische Batterie zu modellieren und simulieren sind die Programme ANSYS® und COMSOL Multiphysics® geeignet.

COMSOL Multiphysics® (auch bekannt als FEMLAB vor 2005) ist ein kommerzielles Simulationsprogramm auf Basis der Finite-Elemente-Methode³³. Das Programm wird vermehrt in analytischer Elektrochemie eingesetzt³⁴. Da COMSOL® dem Benutzer erlaubt über “physics interfaces” direkt auf die partiellen Differentialgleichungen des Simulationsmodells Einfluss zu nehmen, ist es für Benutzer kontrollierte Physik-Konfigurationen gut geeignet. Nach Klymenko et al. sind die Resultate aus COMSOL® mit entsprechender Benutzerexpertise von hohem Gütegrad³⁵.

ANSYS® stellt eine gute Alternative für die Simulation dar. Aufgrund seiner effizienten Solver ist es vor allem für industrielle Anwendungen geeignet, während COMSOL® sich im Forschungsbe-
reich als anwendungsfreundlicher erweist. Beide Programme eignen sich gut für die Simulation von Lithium-Ionen Batterien. Jedoch ermöglicht COMSOL Multiphysics® im Vergleich zu Ansys® einen flexibleren Modellaufbau, weshalb es für die Simulation in dieser Arbeit ausgewählt wurde.³⁶

COMSOL Multiphysics®

Der Term “Multiphysics” beschreibt die Zusammenführung und Kopplung verschiedener physikalischer Phänomene. In Praxis ist es die Zusammenstellung diverser partieller Differentialgleichungen in einem Modell.

Beispielsweise kombiniert die Analyse von Brennstoffzellen Strömungsmechanik, Massentransport, Wärmeübertragung und Ladungsübertragung. In COMSOL® werden die benötigten Differentialgleichungen in “physics interfaces” implementiert. Diese bestehen aus verfügbaren Paketen von physikalischen Gleichungen. Die Randbedingungen können auch in den Interfaces gewählt werden.

Klassisch werden in der Modellierung von elektrochemischen Energiespeichern die folgenden Interfaces eingebunden:³⁷

- Primary/Secondary/Tertiary Current Distribution
- Electroanalysis

In COMSOL® existiert bereits ein mathematisches Modell einer Lithium-Ionen-Batterie. Dieses ist ausreichend für die Simulation, muss jedoch noch um den thermischen Aspekt erweitert werden.

Modellierung einer Lithium-Ionen-Batterie in COMSOL® mit thermischen Effekten

Um Lithium-Ionen-Batterien zu simulieren, müssen thermische und elektrochemische Vorgänge simultan berechnet werden. Aufbauend von den Modellen von Shepherd³⁸ und Nasar und

³³ Vgl. COMSOL (Comsol Website) 2021.

³⁴ Vgl. Dickinson et al. (COMSOL Multiphysics®: Finite element software for electrochemical analysis. A mini-review) 2014, S.74.

³⁵ Vgl. Klymenko et al. (A new approach for the simulation of electrochemiluminescence (ECL)) 2013.

³⁶ Vgl. Salvi et al. (Numerical modeling of continuous flow microwave heating: a critical comparison of COMSOL and ANSYS) 2010, S.196.

³⁷ Vgl. Fußnote 34, Dickinson et al. 2014, S. 72

³⁸ Vgl. Shepherd (Design of Primary and Secondary Cells) 1965.

Unnewehr³⁹, welche nur Ladezyklen mit konstantem Stromfluss abbilden können, beschreiben Fink und Kaltenegger ein elektrothermisches Modell (ET) das die dynamische Entspannung und das zeitabhängige Verhalten der Batterie aufgrund von Stromimpulsen beschreiben kann.⁴⁰ Das elektrochemische Modell der Batterie bauen Fink und Kaltenegger auf dem ein-dimensionalen Modell von Doyle⁴¹ auf. Das Modell kann die zeitliche Ausbildung und räumliche Verteilung von elektronischen und ionischen Potentialen, Lithiumkonzentrationen in Feststoffen und dem Elektrolyten, sowie die Temperatur für arbiträre Lastprofile abbilden.⁴² Im Folgenden wird zunächst ein Überblick über die mathematischen Modelle gegeben. Die Simulationsumgebung, Randbedingung, Materialien und Parameter werden in Kapitel [RE-FERENZ SIMULATIONSKAPITEL] ausgeführt.

Stromabnehmer

Das elektronische Potential Φ_{ele} wird mit Hilfe der Erhaltungsgleichung elektrischer Ladung, Gleichung 10, in beiden Modellen (ET und EC) berechnet.

$$\nabla \cdot \vec{i}_{ele} = 0 \quad (10)$$

$$\vec{i}_{ele} = -\sigma_c \nabla \Phi_{ele} \quad (11)$$

$$\frac{\partial(\rho_c c_{p,c} T)}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{q} = -\vec{i}_{ele} \cdot \nabla \Phi_{ele} \quad (12)$$

Gleichung 11 beschreibt hier die Stromdichte, Gleichung 12 die Energiegleichung.

$$\vec{q} = \lambda_c T \quad (13)$$

Der Wärmeleitstrom wird in Gleichung 13 aufgestellt.

³⁹ Vgl. Nasar und Unnewehr (Electric Vehicle Technology) 1982.

⁴⁰ Vgl. Fink und Kaltenegger (Electrothermal and Electrochemical Modeling of Lithium-ion Batteries: 3D Simulation with Experimental Validation) 2014, S. 105-124.

⁴¹ Vgl. Doyle und Newman (Comparison of Modeling Predictions with Experimental Data from Plastic Lithium Ion Cells) 1996, S. 1890-1903.

⁴² Vgl. Fußnote 40, Fink und Kaltenegger 2014, S. 106

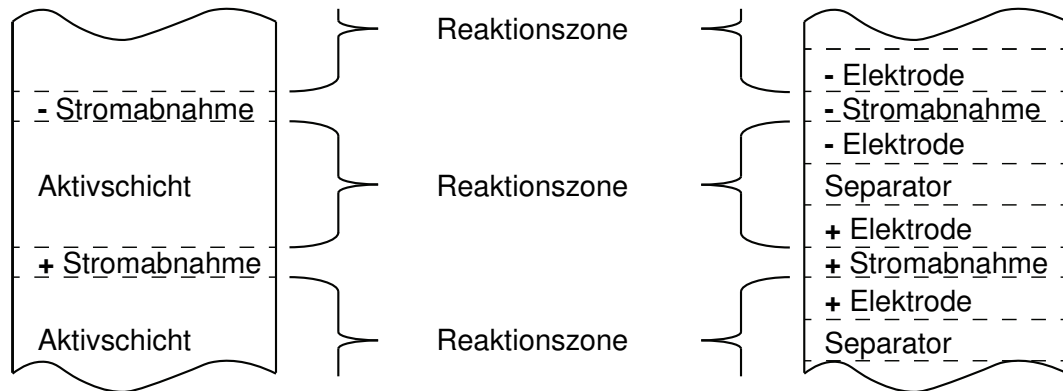


Abbildung 3.8: Vgl. Schichtenmodell der EC- und ET-Modelle nach Fink 2014

Reaktionszone - ET-Modell

Die Reaktionszone besteht wie in Abbildung 3.8 gezeigt aus positiver und negativer Elektrode und einem Separator.

Im elektrothermischen Modell (ET) sind die drei Teile zu einer Aktivschicht vereint. Hier befindet sich im Modell eine Wärmequelle. Die Reaktionsstromdichte wird in dem Interface Aktivschicht/Stromabnehmer aus einer empirischen Gleichung berechnet. Die Energiegleichung in der Aktivschicht ist in Gleichung 14 beschrieben.

$$\frac{\partial(\rho_{al} c_{p,al} T)}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{q} = \frac{i_{emp}(V_{oc,emp} - \Delta\Phi_{ele})}{L_{al}} \quad (14)$$

Der Wärmeleitstrom folgt nach Gleichung 13 mit Gleichung 15.

$$\vec{q} = - \begin{pmatrix} \lambda_{al,x} & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_{al,y} & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_{al,z} \end{pmatrix} \nabla T \quad (15)$$

Die Variablen i_{emp} und $V_{oc,emp}$ werden aus den Interfaceverbindungsgleichungen nach Fink und Kaltenegger berechnet.⁴³

$\Delta\Phi_{ele}$ ist die lokale Potentialdifferenz zwischen positiver und negativer Elektrode und L_{al} ist die Dicke der Aktivschicht.

Reaktionszone - EC-Modell

Mit Hilfe der Ladungserhaltungsgleichungen 16 werden die elektrischen und ionischen Potentiale im Elektrolyt gelöst.

$$\nabla \cdot \vec{i}_{ele} = -i_r a_s, \quad \nabla \cdot \vec{i}_{ion} = i_r a_s \quad (16)$$

⁴³ Vgl. Fußnote 40, Fink und Kaltenegger 2014, S. 110

Die elektrischen und ionischen Stromdichten werden nach Gleichung 17 bestimmt.

$$\vec{i}_{ele} = -\sigma_s \varepsilon_s \nabla \Phi_{ele}, \quad \vec{i}_{ion} = -\kappa \varepsilon_e^q \left(\nabla \Phi_{ion} - \frac{2 \cdot RT(1 - t^+) \nabla c_e}{F c_e} \right) \quad (17)$$

Die ionische Leitfähigkeit κ ist von der Lithium-Salz-Konzentration und der Temperatur abhängig, nach Gleichung 18

$$\kappa = \kappa_{ref}(c_e) \cdot \exp \left[\frac{E_{act,\kappa}}{R} \cdot \left(\frac{1}{T_{ref}} - \frac{1}{T} \right) \right] \quad (18)$$

Die Reaktionsstromdichte i_r aus Gleichung 16 erhält man aus der Butler-Volmer-Gleichung (Gleichung 19)

$$i_r = r_0 \left[\exp \left(\frac{k_a F}{RT} \eta_{act} \right) - \exp \left(-\frac{k_c F}{RT} \eta_{act} \right) \right] \quad (19)$$

mit dem Aktivierungsüberpotential η_{act} aus Gleichung 20 und der Austauschstromdichte i_0 aus Gleichung 21.

$$\eta_{act} = \Phi_{ele} - \Phi_{ion} - \Phi_{oc} \quad (20)$$

$$i_0 = i_{0,ini} \left(\frac{c_e}{c_{e,ini}} \right)^{k_a} \left(\frac{c_{s,max} - c_{se}}{c_{s,max} - c_{s,ini}} \right)^{k_a} \left(\frac{c_{se}}{c_{s,ini}} \right)^{k_c} \exp \left[\frac{E_{act,i_0}}{R} \cdot \left(\frac{1}{T_{ref}} - \frac{1}{T} \right) \right] \quad (21)$$

Mit der Annahme, dass die Elektrodenpartikel sphärisch mit einem durchschnittlichen Radius r_s sind, folgt die Partikeloberfläche pro Volumen a_s nach Gleichung 22.

$$a_s = \frac{3 \cdot \varepsilon_s}{r_s} = \frac{3 \cdot (1 - \varepsilon_e - \varepsilon_f)}{r_s} \quad (22)$$

Um die Lithiumkonzentration in den Feststoffpartikeln c_s und die Lithium-Salz-Konzentration c_e im Elektrolyten zu berechnen werden die Transportgleichungen 23 und 24 verwendet.

$$\frac{\partial c_s}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial r} \cdot \left(D_s \frac{\partial c_s}{\partial r} \right) - \frac{2}{r} \cdot D_s \cdot \frac{\partial c_s}{\partial r} = 0 \quad (23)$$

$$\frac{\partial(\varepsilon_e c_e)}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{j}_e = \frac{(1 - t^+) i_r a_s}{F} \quad (24)$$

Die Diffusionskoeffizienten D_s und D_e und der Lithium-Salz-Diffusionsstrom \vec{j}_e folgen aus Gleichungen 25 bis 27.

$$\vec{j}_e = -D_e \varepsilon_e^q \nabla c_e \quad (25)$$

$$D_s = D_{s,ref} \cdot \exp \left[\frac{E_{act,D_s}}{R} \cdot \left(\frac{1}{T_{ref}} - \frac{1}{T} \right) \right] \quad (26)$$

$$D_e = D_{e,ref} + \delta_1(T - T_{ref}) + \delta_2(T - T_{ref})^2 + \delta_3(T - T_{ref})^3 \quad (27)$$

Weiter werden für das EC-Modell das State-Of-Charge (SoC) und die mittlere Stöchiometrie Θ benötigt. Das SoC ist eine Zahl zwischen null und eins und referenziert die verfügbare Kapazität bezogen auf die maximale Kapazität der Batterie. Es wird nach Gleichung 28 definiert.

$$\mathbf{SoC} = \frac{\Theta - \Theta_0}{\Theta_1 - \Theta_0} \quad (28)$$

Die mittlere Stöchiometrie folgt mit der durchschnittlichen Lithiumkonzentration im Partikel \bar{c}_s aus Gleichung 30 nach Gleichung 29.

$$\Theta = \frac{\bar{c}_s}{c_{s,max}} \quad (29)$$

$$\bar{c}_s = \frac{1}{r_s} \int_0^{r_s} c_s(r, t) dr \quad (30)$$

Die maximale Kapazität jeder Elektrode werden aus elektrochemischen und geometrischen Parametern nach Gleichung 31 bestimmt.

$$Q_{max}^+ = \varepsilon_s^+ \cdot V^+ \cdot c_{s,max}^+ \cdot (\Theta_0^+ - \Theta_1^+) \cdot F, \quad Q_{max}^- = \varepsilon_s^- \cdot V^- \cdot c_{s,max}^- \cdot (\Theta_0^- - \Theta_1^-) \cdot F \quad (31)$$

Es wird angenommen, dass die Elektrodenpartikel und der Elektrolyt in thermischem Gleichgewicht stehen. Die Energiegleichung für dieses Gleichgewicht folgt nach Gleichung 32 mit dem phasengemittelten Wärmestrom $\vec{q} = -\bar{\lambda} \nabla T$.⁴⁴

$$\frac{\partial(\rho c_p T)}{\partial t} = \nabla \cdot \vec{q} = -\vec{i}_{ele} \cdot \nabla \phi_{ele} - \vec{i}_{ion} \cdot \nabla \phi_{ion} + i_r a_s \eta_{act} \quad (32)$$

ES FEHLEN NOCH BOUNDARY UND COUPLING CONDITIONS, EINFÜGEN INSOFERN ES BENOETIGT WIRD 909090909()()()()

⁴⁴ Vgl. Fußnote 40, Fink und Kaltenegger 2014, S. 108-110

3.4. Wärmeübertragungsmechanismen

Im folgenden Abschnitt werden die für die Simulation und den Entwurf der Batteriezelle benötigten Grundlagen der Wärmeübertragung erläutert.

Nach Böckh und Wetzel wird die Wärmeübertragung in zwei primäre Klassen unterteilt:⁴⁵

Wärmeleitung in Stoffen

In Stoffen die einen Temperaturgradienten aufweisen entsteht Wärmeleitung. Es wird weiter zwischen ruhenden und fließenden Stoffen unterschieden, jedoch sind für diese Arbeit nur die ruhenden Feststoffe relevant. Daher hängt die Wärmeleitung nur von den Stoffeigenschaften und dem Temperaturgradienten ab.

Je größer der Temperaturgradient, desto mehr Wärme fließt in Richtung der niedrigeren Temperatur.

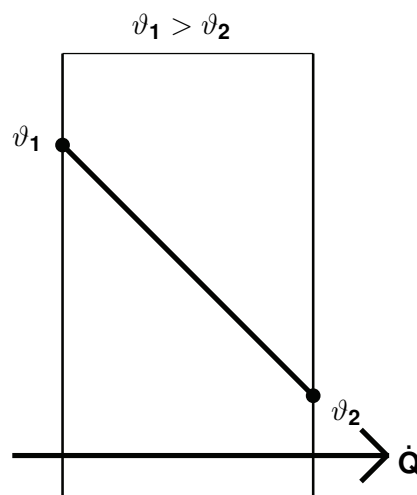


Abbildung 3.9: Vgl. Wärmeleitung nach Böckh und Wenkel 2017

Um die Nomenklatur zu vereinfachen, wird hier analog zu Böckh und Wetzel⁴⁶ ϑ für die Temperatur in Celsius und für die absolute Temperatur T verwendet.

Wärmeleitung - Wärmestrom und Wärmestromdichte

Wärmeströme \dot{Q} werden in Watt [W] angegeben. Sie sind ein Maß dafür, wie viel Wärme pro Zeiteinheit übertragen wird. Bezieht man den Wärmestrom auf die Fläche durch den er fließt wird daraus die Wärmestromdichte \dot{q} in [W/m²].⁴⁷

Wärmeleitung - Wärmeübergangszahl α

Die Wärmeübergangszahl wird in der Einheit [W/m²K] angegeben und beschreibt den Wärmestrom der pro Flächeneinheit und Grad Temperaturdifferenz übertragen wird.⁴⁸

Wärmeleitung - Wärmeleitfähigkeit λ

⁴⁵ Vgl. Böckh und Wetzel (Wärmeübertragung) 2017, S. 4.

⁴⁶ Vgl. Fußnote 45, Böckh und Wetzel 2017, S. 5

⁴⁷ Vgl. Fußnote 45, Böckh und Wetzel 2017, S. 5

⁴⁸ Vgl. Fußnote 45, Böckh und Wetzel 2017, S. 6

Die Wärmeleitfähigkeit λ gibt den Wärmestrom, der pro Längeneinheit entlang des Wärmegradienten und pro Grad Temperaturdifferenz in einem Material übertragen werden kann. Sie wird in der Dimension $[\text{W}/\text{mK}]$ angegeben. In Feststoffen kann die Druckabhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit meist vernachlässigt werden.

Für diese Arbeit ist auch relevant, dass gute elektrische Leiter meist auch gute Wärmeleiter sind.⁴⁹

Instationäre Wärmeleitung

Böckh und Wetzel⁵⁰ leiten am Beispiel der unendlich großen, ebenen Platte die partielle Differentialgleichung der instationären, dreidimensionalen Wärmeleitung in Gleichung 33 her.⁵¹

$$\frac{\partial \vartheta}{\partial t} = a \cdot \frac{\partial^2 \vartheta}{\partial r^2} = a \cdot \nabla^2 \vartheta \quad (33)$$

Dabei ist a die *Temperaturleitfähigkeit* des Materials mit der Dimension $[\text{m}^2/\text{s}]$. Sie hängt nach Gleichung 34 von der Wärmeleitfähigkeit λ , der Dichte ρ und der spezifischen Wärmekapazität c_p des Materials ab.⁵²

$$a = \frac{\lambda}{\rho c_p} \quad (34)$$

Eine wichtige Kennzahl für Wärmeübertragungsprobleme ist die Biot-Zahl (**Bi**). Sie gibt nach Gleichung 35 das Verhältnis der inneren zu der äußeren Wärmeübergangszahl eines Körpers an.

$$Bi = \frac{\alpha \cdot s}{\lambda} \quad (35)$$

Mit Hilfe der mittleren Temperatur kann auch die über einen Zeitraum zugeführte oder entfernte Wärme bestimmt werden. Die Enthalpie wird mit der mittleren und der Anfangstemperatur berechnet.⁵³

$$Q = H_a - \bar{H} = m \cdot (h_a - \bar{h}) = m \cdot c_p \cdot (\vartheta_A - \bar{\vartheta}) \quad (36)$$

Wärmeübertragung zwischen zwei Festkörpern (Gekoppelte Systeme)

Miteinander im Kontakt stehende Festkörper unterschiedlicher Temperaturen weisen nach beliebig kurzer Zeit an den sich berührenden Oberflächen die Kontakttemperatur ϑ_K auf.⁵⁴ Lässt man den Wärmestrom in beiden Körpern nach den Gesetzen der Energieerhaltung gleich sein, folgt mit den Gleichungen für den Wärmestrom an der Oberfläche eines Festkörpers nach Böckh und Wetzel 2017, S. 66 (Gleichung 2.77), Gleichung 37.

$$\sqrt{\lambda_1 \cdot \rho_1 \cdot c_{p,1}} \cdot (\vartheta_{A1} - \vartheta_K) = \sqrt{\lambda_2 \cdot \rho_2 \cdot c_{p,2}} \cdot (\vartheta_K - \vartheta_{A2}) \quad (37)$$

⁴⁹ Vgl. Fußnote 45, Böckh und Wetzel 2017, S. 10

⁵⁰ Vgl. Fußnote 45, Böckh und Wetzel 2017, S. 50

⁵¹ Vgl. Fußnote 45, Böckh und Wetzel 2017, S. 52

⁵² Vgl. Fußnote 45, Böckh und Wetzel 2017, S. 51

⁵³ Vgl. Fußnote 45, Böckh und Wetzel 2017, S. 56

⁵⁴ Vgl. Fußnote 45, Böckh und Wetzel 2017, S. 66

Gleichung 37 kann man nach ϑ_K umstellen und erhält Gleichung 38.

$$\vartheta_K = \left(\vartheta_{A1} + \sqrt{\frac{\lambda_2 \cdot \rho_2 \cdot c_{p,2}}{\lambda_1 \cdot \rho_1 \cdot c_{p,1}}} \cdot \vartheta_{A2} \right) \cdot \left(1 + \sqrt{\frac{\lambda_2 \cdot \rho_2 \cdot c_{p,2}}{\lambda_1 \cdot \rho_1 \cdot c_{p,1}}} \right)^{-1} \quad (38)$$

Lösung der instationären, dreidimensionalen Wärmeleitungsgleichung

Momentan ist Gleichung 33 nur numerisch lösbar. Daher muss Gleichung 33 zuerst diskretisiert werden. Diskretisierung ist der Vorgang, bei dem ein kontinuierliches, reales System in viele individuelle Punkte unterteilt wird. Zwischen diesen Punkten können dann die Differenzen der gesuchten physikalischen Größen mit weniger Rechenaufwand ermittelt werden.

Mit Hilfe der Taylor-Reihe aus Gleichung 39 kann man die Differentialgleichung zu einer Differenzengleichung annähern.⁵⁵

$$f(\xi + \Delta\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} \left. \frac{\partial^n f}{\partial \xi^n} \right|_{\xi} \frac{(\Delta\xi)^n}{n!} \quad (39)$$

Wenn man für die benachbarten Punkte eines beliebigen Punktes $P(i, j, k)$ im Raum zum Zeitpunkt t die Taylor-Reihen aufschreibt und dann die entstehenden Gleichungen ineinander einsetzt, erhält man eine diskretisierte Differenzengleichung.

Dieses Verfahren bildet jeweils zentrale Differenzen, weshalb es auch als FTCS-Verfahren (Forward Time Center Space) bezeichnet wird.⁵⁶

⁵⁵ Vgl. Fußnote 45, Böckh und Wetzel 2017, S. 77

⁵⁶ Vgl. Fußnote 45, Böckh und Wetzel 2017, S. 80

4. Methodik

5. Auswertung

6. Zusammenfassung und Ausblick

V. Literatur

- Ajanovic, A.; Glatt, A.** Wirtschaftliche und ökologische Aspekte der Elektromobilität: Economic and ecological aspects of electric vehicles. In: *e & i Elektrotechnik und Informationstechnik* 137, 2020, S. 136–146.
- Andre, D.; Meiler, M.; Steiner, K.; Wimmer, C.; Soczka-Guth, T.; Sauer, D. U.** Characterization of high-power lithium-ion batteries by electrochemical impedance spectroscopy. I. Experimental investigation. In: *Journal of Power Sources* 196.12, 2011, S. 5334–5341.
- Beloit EDU.** Energy Density Table.
- Böckh, P.; Wetzel, T.** Wärmeübertragung. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2017.
- COMSOL.** Comsol Website. 2021.
- DAHN, J.; Fuller, E. W.; OBROVAC, M.; Sacken, U. von.** Thermal stability of Li_xCoO_2 , Li_xNiO_2 and 2-MnO_2 and consequences for the safety of Li-ion cells. In: *Solid State Ionics* 69, 1994, S. 265–270.
- Dickinson, E. J.; Ekström, H.; Fontes, E.** COMSOL Multiphysics®: Finite element software for electrochemical analysis. A mini-review. In: *Electrochemistry Communications* 40, 2014, S. 71–74.
- Doyle, M.; Newman, J.** Comparison of Modeling Predictions with Experimental Data from Plastic Lithium Ion Cells. In: *Journal of The Electrochemical Society* 143.6, 1996, S. 1890–1903.
- Ecker, M.; Sauer, Prof. Dr. rer. nat. D. U.** Batterietechnik - Lithium-Ionen-Batterien. In: *MTZ Wissen*, 2013, S. 66–70.
- Ecker, M.; Gerschler, J. B.; Vogel, J.; Käbitz, S.; Hust, F.; Dechent, P.; Sauer, D. U.** Development of a lifetime prediction model for lithium-ion batteries based on extended accelerated aging test data. In: *Journal of Power Sources* 215, 2012, S. 248–257.
- Fink, C.; Kaltenegger, B.** Electrothermal and Electrochemical Modeling of Lithium-ion Batteries: 3D Simulation with Experimental Validation. In: *ECS Trans.* 61.27, 2014, S. 105–124.
- Forgez, C.; Vinh Do, D.; Friedrich, G.; Morcrette, M.; Delacourt, C.** Thermal modeling of a cylindrical $\text{LiFePO}_4/\text{graphite}$ lithium-ion battery. In: *Journal of Power Sources* 195.9, 2010, S. 2961–2968.
- Hepperle, M.** Electric Flight - Potential and Limitations. Germany, 2012.
- Hettesheimer, T.; Thielmann, A.; Neef, C.; Möller, K.-C.; Wolter, M.; Lorentz, V.; Gepp, M.; Wenger, M.; Prill, T.; Zausch, J.; Kitzler, P.; Montnacher, J.; Miller, M.; Hagen, M.; Fanz, P.** Entwicklungsperspektiven für Zellformate von Lithium-Ionen-Batterien in der Elektromobilität. Fraunhofer-Allianz-Batterien, 2017.

- Klymenko, O. V.; Svir, I.; Amatore, C.** A new approach for the simulation of electrochemiluminescence (ECL). In: *Chemphyschem : a European journal of chemical physics and physical chemistry* 14.10, 2013, S. 2237–2250.
- Leuthner, S.** Übersicht zu Lithium-Ionen-Batterien. In: *Handbuch Lithium-Ionen-Batterien*. Hrsg. von R. Korthauer. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2013, S. 13–19.
- Lilium.** Lilium Jet.
- Lithium-Ionen-Batterietechnik: Zylindrische Zellen. 2021.
- Lithium-Ionen-Batterietechnik: Prismatische Zellen. 2021.
- Liu, G.; Ouyang, M.; Lu, L.; Li, J.; Han, X.** Analysis of the heat generation of lithium-ion battery during charging and discharging considering different influencing factors. In: *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry* 116.2, 2014, S. 1001–1010.
- Nasar, S. A.; Unnewehr, L. E.** Electric Vehicle Technology. New York, 1982.
- Salvi, D.; Boldor, D.; Ortego, J.; Aita, G. M.; Sabliov, C. M.** Numerical modeling of continuous flow microwave heating: a critical comparison of COMSOL and ANSYS. In: *The Journal of microwave power and electromagnetic energy : a publication of the International Microwave Power Institute* 44.4, 2010, S. 187–197.
- Shepherd, C. M.** Design of Primary and Secondary Cells. In: *Journal of The Electrochemical Society* 112.7, 1965, S. 657.
- Sollmann, D.** Nickel-Cadmium-Batterien. 2018.
- Thomas, K. E.; Newman, J.** Thermal Modeling of Porous Insertion Electrodes. In: *Journal of The Electrochemical Society* 150.2, 2003, A176.
- Traub, L. W.** Range and Endurance Estimates for Battery-Powered Aircraft. In: *Journal of Aircraft* 48.2, 2011, S. 703–707.
- Tsuruta, K.; Dermer, M. E.; Dhiman, R.** Cell with a tabless electrode. US 2020/0144676 A1. 2020.
- Waldmann, T.; Bisle, G.; Hogg, B.; Stumpp, S.; Danzer, M. A.; Kasper, M.; Axmann, P.; Wohlfahrt-Mehrens, M.** Influence of Cell Design on Temperatures and Temperature Gradients in Lithium-Ion Cells: An In Operando Study. In: *Journal of The Electrochemical Society* 162.6, 2015, A921–A927.
- Wöhrlé, T.** Lithium-Ionen-Zelle. Springer Verlag, 2013.

VI. Anhang

VII. Eidesstattliche Versicherung

Callard, Julian

Matrikelnummer: 377888

Ich versichere hiermit an Eides Statt, dass ich die vorliegende Bachelorarbeit mit dem Titel HIER DEN TITEL EINFÜGEN selbstständig und ohne unzulässige fremde Hilfe erbracht habe. Ich habe keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt. Für den Fall, dass die Arbeit zusätzlich auf einem Datenträger eingereicht wird, erkläre ich, dass die schriftliche und die elektronische Form vollständig übereinstimmen. Die Arbeit hat in gleicher oder ähnlicher Form noch keiner Prüfungsbehörde vorgelegen.

Ort, Datum

Unterschrift

Belehrung:

§156 StGB: Falsche Versicherung an Eides Statt

Wer vor einer zur Abnahme einer Versicherung an Eides Statt zuständigen Behörde eine solche Versicherung falsch abgibt oder unter Berufung auf eine solche Versicherung falsch aussagt, wird mit Freiheitsstrafe bis zu drei Jahren oder mit Geldstrafe bestraft.

§161 StGB: Fahrlässiger Falscheid; fahrlässige falsche Versicherung an Eides Statt

(1) Wenn eine der in den §§154 bis 156 bezeichneten Handlungen aus Fahrlässigkeit begangen worden ist, so tritt Freiheitsstrafe bis zu einem Jahr oder Geldstrafe ein.

(2) Straflosigkeit tritt ein, wenn der Täter die falsche Angabe rechtzeitig berichtigt. Die Vorschriften des §158 Abs. 2 und 3 gelten entsprechend.

Die vorstehende Belehrung habe ich zur Kenntnis genommen:

Ort, Datum

Unterschrift