

## SimCP

Simulationsgestützter Zellproduktionsprozess – Untersuchung der Expansion von Li-Ionen Zellen mit Si-basierten Anoden

|                                 |   |                        |               |
|---------------------------------|---|------------------------|---------------|
| <b>Programm / Ausschreibung</b> | FORPA, Forschungspartnerschaften NATS/Ö-Fonds, FORPA NFTE2018 | <b>Status</b>          | abgeschlossen |
| <b>Projektstart</b>             | 01.10.2018  | <b>Projektende</b>     | 31.12.2021    |
| <b>Zeitraum</b>                 | 2018 - 2021   | <b>Projektlaufzeit</b> | 39 Monate     |
| <b>Keywords</b>                 | Batterie, Produktion, Simulation, Silizium, Dilatometrie      |                        |               |

### Projektbeschreibung

Li-Ionen Zellen sind derzeit hinsichtlich Kapazität und Energiedichte die führende Batterietechnologie für den Einsatz in Elektrofahrzeugen und zeigen auch Potential für die Zukunft. Für eine substantielle Verbesserung der Zellperformance ist der Einsatz neuartiger Materialien erforderlich. Si und Si-Verbindungen haben sich als vielversprechende Kandidaten für Anodenmaterialien erwiesen, da sie eine sehr hohe Kapazität für die Einlagerung von Li-Ionen aufweisen. Ein großer Nachteil dieser Materialien ist ihre mit der Einlagerung einhergehende starke Ausdehnung, die bis heute eine Kommerzialisierung verhindert hat. Ein genaues Verständnis der Materialien und des Ausdehnungsverhaltens in der Zelle ist daher für eine Weiterentwicklung und Optimierung unerlässlich.

Diese Charakterisierung von Zellen mit Si-basierten Anoden bildet die erste wichtige Säule des geplanten Dissertationsprojektes. Aufgrund des Mangels an standardisierten Messverfahren für Li-Ionen Zellen sollen daher neue, auf Dilatometrie basierende, Messmethoden entwickelt und bereits bestehende Verfahren optimiert werden. Die damit generierten Messdaten sollen als Grundlage für ein besseres Verständnis der gewählten Zellchemie dienen und damit eine Basis für Weiterentwicklung und Optimierung schaffen.

Durch die Messungen unter realen Bedingungen ist nur das Ausdehnungsverhalten der ganzen Zelle zugänglich, welches sich aus der Differenz der Dehnung der Anode und der Schrumpfung der Kathode ergibt. Die Verteilung mechanischer Größen (Kräfte, mech. Spannungen) in der Zelle kann damit nicht im Detail abgebildet werden. Diese Lücke soll mit Finite-Elemente Simulationen geschlossen werden, die die zweite wichtige Säule im Projekt bilden. Als erster Schritt soll ein Modell für Pouch-Zellen aufgesetzt werden, welches mit den generierten Messdaten parametrisiert und validiert werden soll. Mit diesem Modell kann das Ausdehnungsverhalten von Pouch-Zellen auf Elektrodenlevel abgebildet werden.

In einem zweiten Schritt soll das Modell auf prismatische/zylindrische Zellen mit gewickelten Elektroden übertragen werden. Dazu soll auch der Wicklungsprozess der Elektroden selbst simuliert werden um Kenntnis über bereits bestehende mechanische Spannungen vor Betrieb zu erlangen. Die Simulationen sollen detaillierte Kenntnisse über das mechanische Verhalten des Elektrodenwickels und der Zelle geben, damit das Verständnis für die internen Vorgänge in der Zelle

verbessern und Zell- und Modulherstellern wichtige Informationen für Verbesserungen im Zelldesign und im Produktionsprozess geben.

### **Projektpartner**

- Virtual Vehicle Research GmbH