



PROZESSE IN DER PRODUKTION VON LITHIUM-IONEN-BATTERIEN SIMULIEREN

Im Kompetenzcluster zur Batteriezellproduktion (ProZell) arbeiten zwölf deutsche Universitäten und Forschungseinrichtungen daran, den Produktionsprozess von Batteriezellen und dessen Einfluss auf die Zelleigenschaften sowie die Produktentstehungskosten zu erforschen und zu verbessern. Dies soll die wissenschaftliche Basis für den Aufbau und die nachhaltige Weiterentwicklung einer international führenden, wettbewerbsfähigen Batteriezellproduktion in Deutschland legen. Wir sind hier im Projekt Cell-Fi beteiligt, das sich um die optimale Elektrolytbefüllung von Batteriezellen dreht.

Cell-Fi: Simulation der Elektrolytbefüllung von Batteriezellen

Im Projekt geht es um die Beschleunigung der Elektrolytaufnahme durch optimierte Befüllungs- und Benetzungsprozesse (Wetting): Nach der Assemblierung, dem Zusammenbau der Zelle, werden nämlich Milliarden maximal nur wenige Mikrometer große Poren der Batteriekomponenten mit der flüssigen Elektrolytlösung gefüllt. Dieser Prozess dauert mehrere Stunden, weil die Flüssigkeit nur über kleine Randflächen in das Porenvolumen eindringt und die wesentliche Triebkraft hierfür Kapillarkräfte sind. Zudem ist es schwer abzuschätzen, welche Zeit es überhaupt braucht, um eine gleichmäßige Benetzung zu gewährleisten. Wissenschaftlich ist die Elektrolytbefüllung bisher kaum untersucht. Es besteht hohes Potential, dass Unternehmen hier einen höheren Durchsatz in der Produktion erreichen und Kosten sparen, wenn die Zusammenhänge zwischen Prozessparametern und Benetzungsgeschwindigkeit und -qualität besser verstanden sind.

Mikrometerskala und makroskopische Skala berechnen

Unsere Aufgabe in diesem Projekt ist die Entwicklung von Simulationen, die die von Kapillarkräften getriebene Strömung – in der aus verschiedenen porösen Schichten bestehenden Zelle – berechnen. Das umfasst mehrere Längenskalen: Die Porenmorphologie auf der Mikrometerskala beeinflusst zusammen mit den physikalischen Oberflächeneigenschaften der beteiligten Materialien die kapillaren Kräfte, die für die Benetzungsgeschwindigkeit sorgen. Den notwendigen Parameterinput von der Mikroskala berechnen wir durch Simulationen mit der Software GeoDict der Math2Market GmbH.

Auf der makroskopischen Skala sind es hauptsächlich die Zellabmessungen und die Lage der Flächen, durch die Elektrolyt eindringen kann, die beeinflussen, wie sich die Flüssigkeit in der Zelle ausbreitet. Hierfür nutzen wir unsere ITWM-Softwareplattform CoRheoS. Mithilfe der beiden Werkzeuge GeoDict und CoRheoS sagen wir die Benetzungszeiten für unterschiedliche Zell-Geometrien und Porenverteilungen, aber auch Materialeigenschaften vorher.

1 *Elektrolytsättigungsverteilung in einer Elektroden-schicht zu verschiedenen Zeitpunkten des Benetzungs-vorgangs*

2 *Vergleich des Flüssigkeits-anstiegs einer porösen Elektrode in Simulation und Experiment*

(Exp. Daten: IWF, TU Braunschweig)

