

리튬이온 전지의 충방전 특성에 대한 전산 모델링

이대현 · 윤도영[†]

광운대학교 화학공학과 / 녹색기술연구소

(2011년 10월 3일 접수, 2011년 11월 22일 수정, 2011년 11월 22일 채택)

Computational Modeling of Charge-Discharge Characteristics of Lithium-Ion Batteries

Dae-Hyun Lee and Do-Young Yoon[†]

Department of Chemical Engineering, Kwangwoon University

(Received 3 October 2011, Revised 22 November 2011, Accepted 22 November 2011)

요 약

본 연구에서는 리튬이온 전지의 충방전 특성에 관한 모델링과 전산모사를 수행하였다. 전지의 시스템 구성은 단순화된 2차원 형태의 단일셀에 대하여 모델링하였고, 공학적 편미분방정식 풀이자인 FEMLAB을 이용하여 288 K와 318 K 범위내에서 충방전 특성에 대한 열적 모델링을 수행하였다. 모델링에 채택한 물성치 변수들에 대하여 온도특성을 고려하였으며, 이를 통하여 전지의 특징적인 충방전의 사이클 변화와 충방전 전하량의 변화를 체계적으로 전산모사하였다. 그 결과 충방전 속도에 상관없이 충방전의 주기가 온도가 낮아질수록 짧아짐을 정량적으로 해석할 수 있었다. 이에 부가하여 전지내에서 리튬이온의 물질전달 현상을 해석하여, 전지의 충방전 특성과의 상관관계를 고찰하였다.

주요어 : 리튬-이온 전지, 충방전 모델링, FEMLAB

Abstract — Computational modelling and simulation for the charge-discharge characteristics of Lithium-ion batteries have been carried out. The battery system consists of a simplified 2-dimensional single cell for the modelling, in which the thermal modelling on the charge-discharge characteristics was conducted in the temperature range from 288 K through 318 K by using FEMLAB as an engineering PDE solver. While material parameters adopted in the present modelling were dependent on the system temperature, their thermal modelling were applied on the simulations of the charge-discharge period and the rate of transferring charges systematically. The resulting simulation shows that the cycle of the charge-discharge shorten itself by reducing the system temperature, regardless of the charge-discharge rates. In addition, the mass-transport phenomena of Lithium ion have been discussed in connection with the charge-discharge characteristics in the battery.

Key words : Lithium-ion battery, Charge-discharge modelling, FEMLAB

1. 서 론

1990년부터 상용화가 된 이후로 휴대용 전자기기에 많이 활용되고 있는 리튬이온전지는 다른 이차전지에

비해 가벼운 무게와 함께 높은 에너지 밀도와 전압을 가지고 있다. 사용 목적에 따라 전지의 형태와 재료의 최적화가 용이하므로, 최근 차세대 에너지원은 물론 Hybrid Electric Vehicle(HEV)등과 같은 신재생 에너지를 저장할 수 있는 에너지 저장 매체로도 각광받고 있다 [1].

리튬 이온전지는 여러 분야에서 다양하게 연구하고 있는데, 특히 전지내에서 리튬이온이 방전되는 동안

[†]To whom corresponding should be addressed.
447-1 Wolgye-dong, Nowon-gu, Seoul 139-701, Korea
Tel : 02-940-5178; Fax : 02-909-0665;
E-mail : yoondy@daisy.kw.ac.kr

비가역적인 부반응이 진행되거나 심한 경우 폭발이 일어날 수 있기 때문에 전지의 온도 민감성이 큰 문제가 되고 있다. 따라서 리튬이온전지의 안정성을 확보하기 위해서, 열적모델링을 통한 리튬 이온전지의 특성을 이해하는데 중요하다. 리튬 이온전지에 대한 전산모사는 전지의 충방전 거동을 이론적으로 접근하면서 실험을 하는데 있어 시간과 비용을 덜어줄 뿐만 아니라 실험적으로 찾기 힘든 변수를 수치적으로 파악할 수 있어, 전지를 최적화 시키는데 도움이 된다. 그 중 전지의 등온 전산모사는 열적 모델링을 수행함에 있어 온도에 따라 전지의 충방전 특성이 어떻게 변할 수 있는지를 매우 정확하게 파악할 수 있다. 또한 열적 모델링을 통하여 이온의 충방전 거동의 최대 온도범위를 설정 할 수 있는지, 동시에 온도 의존성 판단 여부와 함께, 어떤 부가적인 변수에 의해 온도 의존성이 고려될 수 있는지에 대한 가이드라인을 제시해줄 수 있다 [2].

이차전지에 대한 전산모사는 Doyle과 Newman에 의하여 체계적으로 수행되었는데, 그들은 $\text{Li}_2\text{Mn}_2\text{O}_4$ 전지의 충방전 시스템을 다양한 방전 양에 따른 셀 포텐셜(cell potential) 변화를 이론적으로 계산하였고 이를 실험데이터와 비교하여 일치하는 결과를 보였다 [3]. 이후, 모델링을 실제 상용 전지에 적용하여 이론적인 데이터와 실험값이 부합되는 것을 확인하였고, 이전의 전산모사의 신뢰성을 입증하기도 하였다 [4]. 특히, 이차전지의 열적 민감성이 큰 문제로 대두 되면서 Pals와 Newman은 여러 가지 온도에서 등온 시뮬레이션을 통해 온도에 따른 전해질의 농도와 셀 포텐셜의 변화를 계산하였다 [5]. Valoen와 Reimers은 전해질의 비이상성을 나타내는 열역학적 요인(thermodynamic factor)를 측정하여 이를 선형화를 하였으며 [6], Kumaresan 등은 이를 모델링에 적용하여 전지의 열적 상태 모델

링을 계산하기도 하였다 [7].

본 연구에서는 상용 편미분 풀이자인 FEMLAB을 이용하여 일반적인 리튬 이온전지의 충방전 특성을 모델링하고 이를 위한 전산모사 기법을 제안하였다. 특히 본 연구에서는 여러 온도에서 전극과 전해질의 물질전달 방정식과, 수정된 Ohm의 법칙을 적용하여 전하방정식 중심으로 계산을 수행하였다. 계산된 결과를 근거로 충방전량을 조작변수로 설정하여 시간에 따른 전지 셀의 전압 변화를 산출하고 이에 따른 리튬이온전지의 충방전 특성을 이론적으로 조사하였다.

2. 수학적 모델링

본 연구에서 도입된 리튬이온 셀은 Fig. 1에 보이는 바와 같이 단일 셀(single cell)로 설정하였으며, 분리막을 중심으로 양쪽에 음극과 양극이 위치해 있다. 방전시 음극에 있는 리튬은 전기 반응에 의해 리튬이온이 되고 전해질을 통하여 양극 삽입되고, 충전은 그 역으로 진행된다. 충방전 형태를 수학적으로 표현하기 위하여 해당하는 변수와 조건 환경은 Kumaresan의 연구결과 자료들 [7]을 이용하였다. 음극물질은 Meso Carbon Micro Bead(MCMB)이며 양극물질은 LiCoO_2 ,

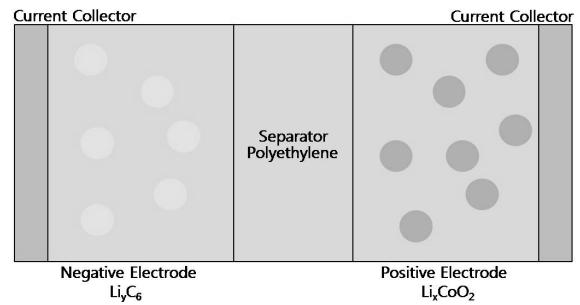


Fig. 1. Schematic diagram of a Lithium-ion cell.

Table 1. Design parameters of the cell [7].

Parameters	Negative(Li_yC_6)	Separator	Positive(Li_xCoO_2)
Thickness (μm)	73.50	25.00	70.00
Particle radius (μm)	12.50	-	8.50
Initial electrolyte concentration (mol/m^3)	-	1000.00	-
Max solid phase concentration (mol/m^3)	3.19×10^4	-	4.99×10^4
Active material density (kg/m^3)	5031.67	-	2292.00
Porosity of region	0.44	0.45	0.30
Solid-phase diffusion coefficient (m^2/s)	See Eq.13	-	1.00×10^{-11}
Reaction rate ($\text{mol}^{-3/2} \text{m}^{1/2} \text{s}^{-1}$)	1.76×10^{-11}	-	6.67×10^{-11}
Electronic conductivity (S/m)	100.00	-	10.00
Bruggeman's number	4.10	2.30	1.50
Transference number	-	0.44	-

분리막은 상업용 리튬이온전지에서 널리 활용되고 있는 Celgard사 제품의 자료들을 적용하였다. 본 연구에서 적용된 리튬이온 전지의 기본정보는 Table 1에 나타낸 바와 같다 [7].

2-1. 지배 방정식과 열역학적 변수

전산모사를 수행하기 위한 편미분 지배 방정식들은 고체상(전극 부분)과 액체상(전해질 부분)으로 나뉜다. 또한 고체상과 액체상은 각각 물질전달 방정식과 전하방정식(charge balance equation)으로 나뉘지게 되어 총 4개의 지배방정식을 연립하여 계산을 수행하여야 한다 [7,8]. 고체상에서 전하방정식은 Ohm의 법칙으로부터 다음의 식과 같다.

$$-\sigma_i \nabla \Phi_1 = i_1 \quad (1)$$

여기서 Φ 와 i 는 각각 전위와 전류를 나타내며, 하첨자 1은 고체상, 2는 액체상을 나타낸다. σ 은 고체상의 전도도를 의미하며 하첨자 i 는 전극의 각 지점(음극- n , 분리막- s , 양극- p)을 의미한다. 액체상에서의 전하방정식은 다음의 식과 같다.

$$-\kappa_i \nabla \Phi_2 + \frac{2k_i RT}{F} \left(1 + \frac{d \ln f_{\pm}}{d \ln c} \right) (1 - t_+) \nabla \ln c_2 = i_2 \quad (2)$$

여기서 κ 는 액체상에서의 전도도를, c 는 리튬의 농도를 나타낸다. 식에서 $(1 + d \ln f_{\pm} / d \ln c)(1 - t_+)$ 는 열역학적 변수를 의미하며, 식 (2)의 경우 Ohm의 법칙과 함께 농도 차에 관한 항도 같이 존재한다. 한편, 전하량 보존에 의해 다음 식이 성립된다.

$$\nabla i_1 + \nabla i_2 = 0 \quad (3)$$

전해질에서 발산하는 몰 유동(mole flow)의 양인 j_{loc} 는 Faraday 법칙에 의해 다음의 식과 같이 된다.

$$\nabla i_2 = a_i F j_{loc} \quad (4)$$

Butler-Volmer 방정식과 그에 해당하는 과전압 변수들은 다음과 같다.

$$j_{loc} = k^{1/2} (c_{1,t}^t - c_{1,i,surf})^{1/2} \left\{ \exp\left(\frac{\eta F}{2RT}\right) - \exp\left(\frac{-\eta F}{2RT}\right) \right\} \quad (5)$$

$$\eta = \Phi_1 - \Phi_2 - U_i \quad (6)$$

여기서 k 는 표면 전기화학의 반응상수이고, $c_{s,i,surf}$ 는 전극표면에서의 농도, $c_{s,t}^t$ 는 고체상에서 리튬의 최대 농도를 각각 의미하고, η 는 표면에서의 과전압을 나타낸다. 액체상의 전하방정식과 고체상의 물질전달 방정식은 공극률인 ϵ 과 함께 다음과 같이 표시된다.

$$\epsilon_i \frac{\partial c_2}{\partial t} = \nabla \cdot (D_{e,i} \nabla c_2) - \frac{i_2 \nabla t}{F} + a j_{loc} (1 - t_+) \quad (7)$$

$$\frac{\partial c_1}{\partial t} = D_{1,i} \left[\frac{\partial^2 c_1}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial c_1}{\partial r} \right] \quad (8)$$

1차원 지배방정식인 위의 식 (1), (2)와 (7)의 연산에서 필요한 경계조건들은 Table 2와 같이 정하였고, 2차원인 식 (8)의 경우 지배방정식은 양극과 음극 모두에서 적용하며, 입자의 중심과 표면($r = R$)에서의 경계조건은 다음과 같이 설정하였다.

$$-D_1 \nabla c_1 = 0 \quad \text{at} \quad r = 0 \quad (9)$$

$$-D_1 \nabla c_1 = j_{loc} \quad \text{at} \quad r = R \quad (10)$$

본 연구에서는 1차원과 2차원 식을 동시에 계산하기 위해서 FEMLAB의 Extrusion Coupling Variables 법을 이용하여 j_{loc} 는 Butler-Volmer 식에서 2차원 지배방정식의 경계조건으로, 그리고 c_1 는 Butler-Volmer 식을 통하여 1차원식으로 결합하였다.

Table 2. Boundary conditions for FEMLAB modeling.

Variable	Negative electrode	Negative electrode/seperator	Separator/positive electrode	Positive electrode
c_2	$\nabla c_2 = 0$	$-D_n \nabla c_2 = -D_s \nabla c_2$	$-D_s \nabla c_2 = -D_n \nabla c_2$	$\nabla c_2 = 0$
Φ_2	$i_2 = 0$	-	-	$i_2 = 0$
Φ_1	$\Phi_1 = 0$	$\sigma_n \nabla \Phi_1 = 0$	$\sigma_p \nabla \Phi_1 = 0$	$\sigma_p \nabla \Phi_1 = I_{app}$

2-2. 온도 의존성 변수 설정

여러가지 온도에 따른 충방전 상태를 보기 위해서는 온도에 의존하는 변수들을 결정하여야 한다. 대표적인 온도 의존성 변수는 전지의 평형전위, 고체상의 물질전달계수, 액체상의 물질전달계수, 그리고 이온 전도성으로 고려할 수 있다. 이 변수들은 모두 실험을 통해서 얻는 결과 값이므로, 본 연구에서는 Kumaresan 과 Valeon의 선형 결과 값들을 이용하여 결정하였다 [6,7]. 한편, 평형전위는 다음의 식 (11)과 같이 기준 온도에서의 평형전위와 각 극의 엔트로피의 식을 적용하여 결정하였다 [7].

$$U_i = U_{i,ref} + (T - T_{ref}) \frac{\partial U_i}{\partial T} \tag{11}$$

여기서 기준온도의 평형전위는 Fig. 2a와 2b의 형태를 따르며, 각 전극의 $\frac{\partial U_i}{\partial T}$ 는 전하상태(State of charge)에 의해 값이 결정되는데 그 결과는 Fig. 2c와 2d와 같다.

이때 평형전위에서 기준온도는 298 K로 설정하였다. 한편, 액체상의 물질전달계수와 이온 전도성, 그리고 음극 고체상의 물질전달계수는 다음 식 (12), (13) 그리고 (14)와 같다. 식 (14)의 각 항은 Table 3에 결정되어 있다 [6,7].

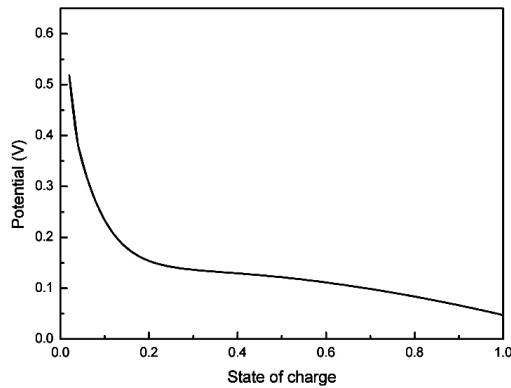
$$D_{e,bulk} = 1 \times 10^{-4} \times 10^{[-4.43 - 54/(T - 0.005c_2 - 229.5) - 2.2 \times 10^{-4}c_2]} \tag{12}$$

$$D_1 = 1.4623 \times 10^{-13} e^{[68026.7/(R(1/318 - 1/T))]} \tag{13}$$

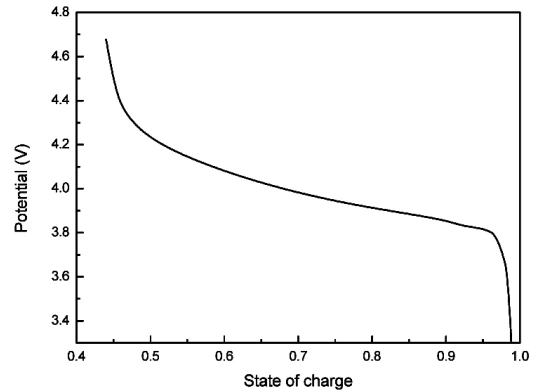
$$\kappa_{bulk} = \sqrt{\frac{\kappa(c_2, T)}{c_2}} = \sum_{i=0}^n \sum_{j=0}^k \kappa_{i,j} c^{i_2} T^j \tag{14}$$

Table 3. κ_{ij} coefficients of Eq.14 from the experimental data [6].

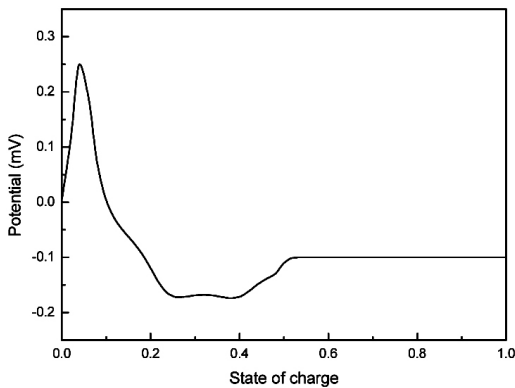
κ_{ij}	$j = 0$	$j = 1$	$j = 2$
$i = 0$	-10.50	7.40×10^{-2}	-6.96×10^{-5}
$i = 1$	0.67	-1.78×10^{-2}	2.80×10^{-5}
$i = 2$	0.49	-8.86×10^{-4}	0.00



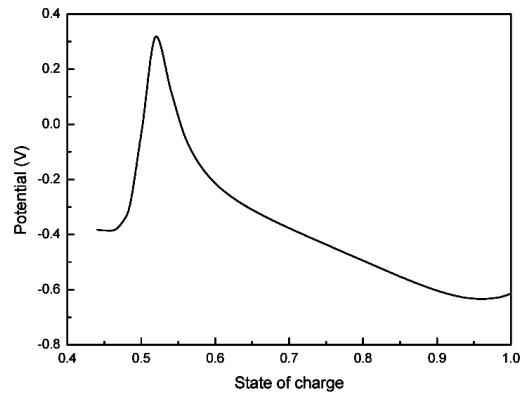
(a) Open circuit potential of MCMB



(b) Open circuit potential of Li_xCoO_2



(c) $\partial U_i / \partial T$ of MCMB



(d) $\partial U_i / \partial T$ of Li_xCoO_2

Fig. 2. State of charge profile at both electrodes [7].

식 (12)-(14)는 온도와 농도에 의존적인 형태를 나타낸다. 또한, 양극, 음극, 분리막 모두 공극률이 영향을 미치기 때문에 Bruggeman의 관계에 따라 다음과 같이 적용하였다 [7].

$$D_{1,i} = D_i \epsilon_i^{brugg_i} \tag{15}$$

$$D_{e,i} = D_{e,bulk} \epsilon_i^{brugg_i} \tag{16}$$

$$\kappa_i = \kappa_{bulk} \epsilon_i^{brugg_i} \tag{17}$$

3. 결과 및 고찰

온도에 따른 충방전 사이클 변화를 알아보기 위해 충방전 전류량을 20 A/m²로 일정하게 하여 288 K, 298 K, 308 K와 318 K에서의 충방전 상태를 계산하였다. Fig. 3에서 실 선(solid line)은 전지의 전압, 점

선은 전지에 적용된 충방전 전류량으로 전류가 양의 값으로 고정될 때 방전이 일어나고 음의 값으로 고정될 때 충전이 된다. 전지의 전압이 3.1 V로 떨어질 때 방전이 완료되는 시점을 기준으로 10000초까지 충방전 시 전압의 변화를 살펴본 결과, 최초 전압이 3.1 V까지 도달하는데 시간은 288 K에서 약 2524초, 298 K에서 3100초, 308 K에서 3232초 318 K에서 3244초로 상대적으로 낮은 온도에서 방전되는 시간이 빨랐다. Fig. 3과 같이 10000초를 기준으로 각 온도별 전체적인 충방전 모습을 계산한 결과 288 K에서는 7580초에서 두번째 방전이 완료하였다. 10000초에서는 4.25 V으로 첫 번째 충전이 약 4.3 V에서 끝났을 때를 비교해 볼때 두번째 충전 역시 거의 끝나가는 것을 알 수 있었다. 298 K에서는 9308초에서 두번째 방전이 완료와 함께 10000초에서 3.85 V까지 충전이 되었으며, 308 K에서는 9704초에서 두번째 방전이 완료하였다. 10000초에서 3.78 V까지 충전이 되었고, 318 K에

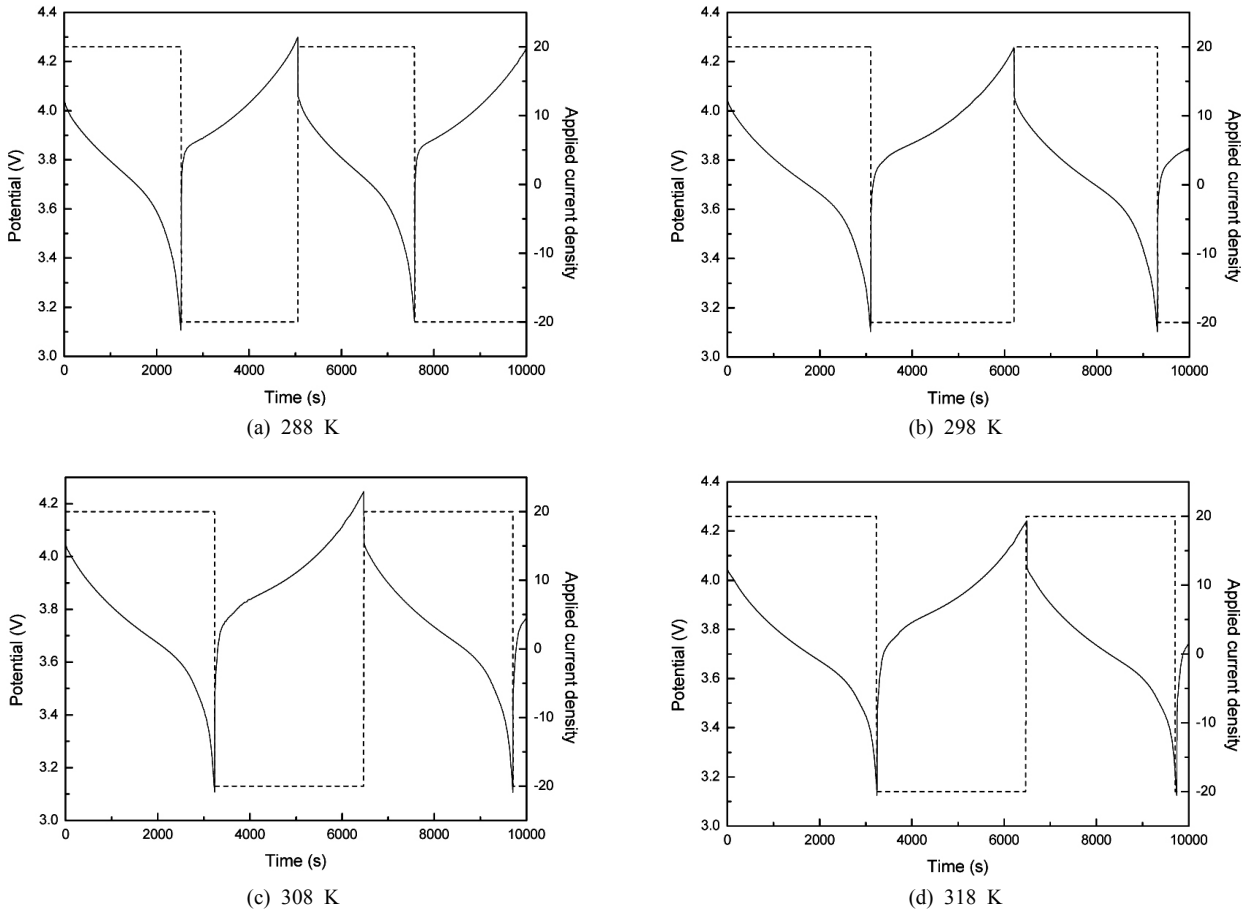


Fig. 3. Discharge and applied current density profiles at 20 A/m² : Solid line is applied current density and dash line is potential.

서는 9708초에서 두번째 방전이 완료와 함께 10000초에서 3.74 V까지 충전이 되었다. 두 번째 방전 완료된 시점을 기준으로 288 K에서의 시간이 318 K에 비해 약 22% 빨라지는 것으로 볼 때 충방전 사이클이 걸리는 시간이 낮은 온도에서 더 빨리 진행된다는 사실을 확인할 수 있다.

위의 Fig. 3의 결과가 온도가 아닌 충방전 전류량에 의해 지배적으로 발생하는지 여부를 판단하기 위해, 온도에 따라 일정한 전류량에 따라 방전이 진행된 정도에 대하여 전산모사결과를 분석하였다. 298 K를 기준으로 충방전량을 10 A/m², 20 A/m², 30 A/m², 그리고 40 A/m²로 각각 달리 하여 1회 방전시 전압이 3.1 V까지 떨어지는데 걸리는 시간을 계산하였으며, 그 결과를 Fig. 4에 나타내었다. 20 A/m²에서는 Fig. 3에서의 결과와 같이 288 K에서 약 2524초, 298 K에서 3100초, 308 K에서 3232초, 318 K에서 3244초가

걸렸고, 10 A/m²에서는 288 K에서 6048초, 298 K에서 6484초, 308 K에서 6524초, 318 K에서 6528초가 걸렸다. 30 A/m²에서는 288 K에서 1404초, 298 K에서 1928초, 308 K에서 2120초, 318 K에서 2152초가 걸렸으며, 40 A/m²에서는 288 K에서 892초, 298 K에서 1344초, 308 K에서 1556초, 318 K에서 1600초가 걸렸다. 288 K의 방전 시간이 318 K 비해 10 A/m², 20 A/m², 30 A/m² 그리고 40 A/m²에서 각각 7%, 22%, 34% 그리고 44%으로 볼 때, 같은 충방전량에서 온도가 낮아짐에 따라 방전 속도가 빨라짐을 Fig. 4를 통해서도 알 수 있다. 전압이 많이 떨어졌다는 의미는, 등전류 방전에서 완전 방전에 더 가까이 진행되었다는 의미이며, 앞선 결과와 마찬가지로 낮은 온도에서 방전이 더 빨리 진행된다는 것을 확인할 수 있었다. 위의 Fig. 3, 4의 그래프의 경향성은 Pals의 연구에서 등은 모델링 결과와 같게 나타난다 [5]. Pals

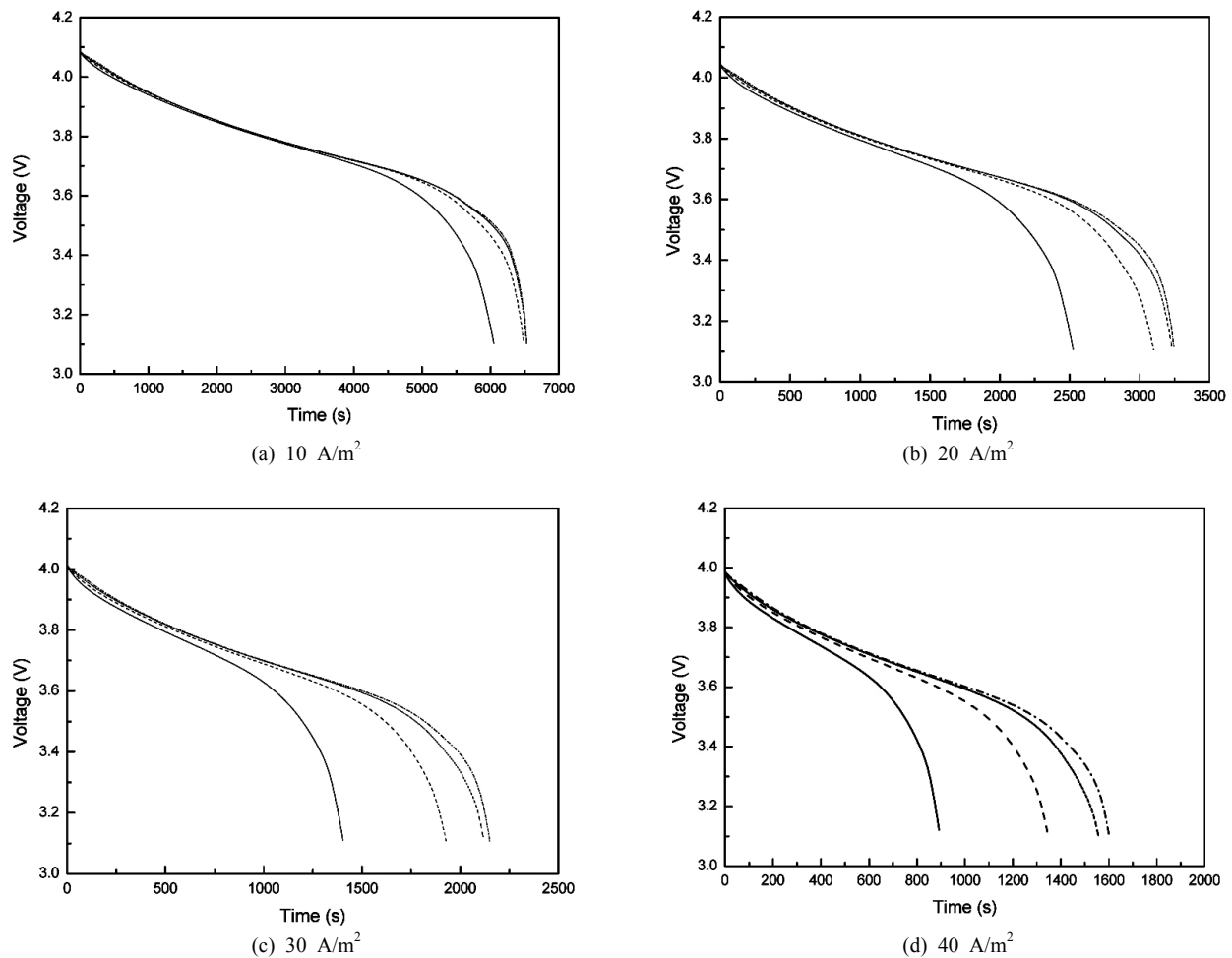


Fig. 4. Discharge profiles at various temperatures: 288 K (solid), 298 K (dash), 308 K (dot), 318 K (dash dot).

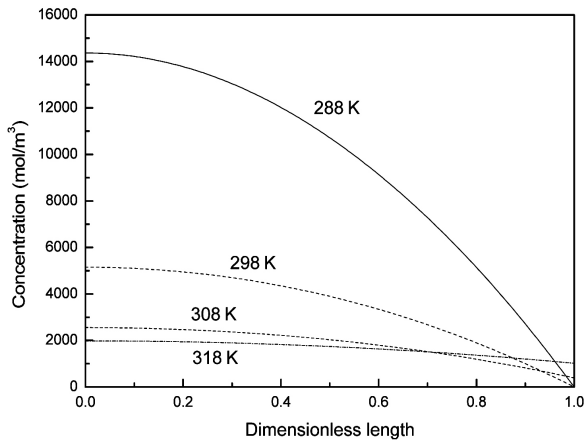


Fig. 5. Profile of active material at the surface of negative electrode.

의 연구에서 역시 온도가 높은 온도에서 완전 방전에 더욱 가깝게 진행되었으며 그 원인이 온도가 상승할수록 확산계수와 이온 전도도의 값이 상승하는 것으로 보았다. 본 연구에서 식 (12), (13), (14)가 온도에 관한 함수이고 온도가 상승함에 따라 변수들의 값 역시 상승함을 볼 때 온도에 따라 충방전 특성이 다른 요인이 확산계수와 이온 전도도에 결정되는 것을 확인할 수 있다. 하지만 Pals의 결과와 달리 Fig. 4에서 방전 중 보다 방전이 종료되는 시점에서 온도 변화에 따른 경향성이 더 크게 나타나는 것으로 볼 때, 이온 전도도보다 확산계수에 따른 물질전달에서 더 큰 원인으로 작용하는 것으로 볼 수 있다.

물질전달에서 그 원인으로 볼 때 농도가 감소하는 음극 입자 중심에서 표면 사이의 리튬 농도분포를 살펴보는 것이 중요하다. 다음의 Fig. 5는 방전 완료시점에서의 음극 전극의 농도 분포를 나타낸 그래프이다. 물질 전달 제한이 걸리는 것을 확인하기 위해 Cut-off voltage는 적용하지 않았으며 계산이 가능할 때까지 방전을 실시하였다. 15°C에서 입자 중심의 리튬 농도가 약 14360 mol/m³이고 표면에서의 농도가 없는 반면, 45°C에서 입자 중심의 리튬 농도가 약 1978 mol/m³, 표면에서의 농도가 1018.2 mol/m³으로 볼 때, 온도가 올라갈수록 전극 중심과 표면사이의 농도차가 더욱 심해지는 것을 확인할 수 있다. 또한 45°C를 제외한 나머지 온도에서 입자 표면의 농도가 모두 0이 되는데 전기화학 반응이 입자 표면에서 반응하는 것으로 볼 때 표면의 농도가 없다면 반응을 더 이상 진행할 수 없음을 의미하며 이에 따라 전지 시스템 내에 에

너지 손실이 크게 작용한다. Fig. 5와 같은 현상은 Pals의 연구와 함께 Doyle과 Siska의 연구에서도 확인할 수가 있다 [8,9]. 앞선 연구에서는 농도 확산에 제한이 걸리는 부분이 전극에서의 고체상 리튬 물질이 아닌, 전해질에서의 리튬이온 농도이지만, Doyle의 연구에서 전해질과 전극에서의 물질전달 해석을 유사하게 한 것으로 볼 때 그 원인은 비슷하게 알아낼 수 있다. 앞선 두 연구 모두 전해질의 물질전달 계수를 중점으로 전해질의 농도가 0이 되는 부분을 전지의 전압이 급격하게 떨어지는 가장 큰 요소로 판단하였는데, 방전속도에 비해 확산속도가 느려서 확산에 제한이 걸리는 것으로 보았다 [8,9]. 이 경우 본 연구에서 적용된 전지 시스템에서도 적용할 수 있었다. 방전 속도에 비해 확산속도가 빠를 경우에는 표면에서 반응하여 농도가 감소한 만큼 전극 중심에서 물질이 원활하게 확산이 되면서 중심과 표면과의 농도차가 줄어들 뿐만 아니라 농도 분포가 준정상상태(quasi-steady-state)에 도달해 확산 제한을 무시할 수 있다. 하지만 Fig. 5에서 낮은 온도에서 318 K에 비해 높은 농도차와 표면에서의 리튬이온 부족이 나타나는 것으로 볼 때, 식 (13)이 본 연구에서의 등온 모델링에서 전지 전체 성능에 영향을 미치는 변수라고 볼 수 있다.

4. 결 론

본 연구에서는 물질전달 방정식과 전하 방정식을 조합하여 일반적인 리튬이차전지의 충방전 거동을 모델링하고, FEMLAB을 이용하여 전산 모사를 수행하였다. 288 K부터 318 K까지의 온도범위에 대하여 충방전 특성을 계산한 결과 온도가 낮아짐에 따라 전압이 떨어지는 속도가 빨라지고 이에 따라 충방전이 진행되는 속도 역시 빨라지는 것을 정량적으로 확인할 수 있었다. 또한 낮은 온도에서 방전속도에 비해 상대적으로 느린 확산속도에 의해 확산제한이 걸리는 것을 확인 하였으며, 물질전달 계수, 이온 전도성 등 온도 의존성의 변수들에 의해 리튬이온 전지의 열적 거동이 민감하게 발생할 수 있다는 것을 계산을 통하여 확인하였다. 본 연구는 리튬이온전지의 충방전 특성에 대한 모델링을 통해 전산모사 기법을 구축하고 동시에 전지의 제반특성을 이해하는데 있어 좋은 자료를 제공할 수 있을 것이다.

참고문헌

1. Winter, M. and Brodd, R. J.: "What are batteries, fuel cells, and supercapacitors?", *Chemical Review*, Vol. 104, 4245-4269, (2004).
2. Fuller, T.F., Doyle, M., and Newman, J.: "Simulation and optimization of the dual lithium ion insertion cell", *J. Electrochem. Soc.*, Vol. 141(1), 1-10, (1995).
3. Doyle, M. and Newman, J.: "Comparison of modeling predictions with experimental data from plastic lithium ion cells", *J. Electrochem. Soc.*, Vol. 143(6), 1890-1899. (1996).
4. Arora, P., Doyle, M., Gozdz, A. S., White, R. E. and Newman, J.: "Comparison between computer simulations and experimental data for high-rate discharges of plastic lithium-ion batteries", *J. Power Sources.*, Vol. 88, 219-231, (2000).
5. Pals, R, C. and Newman, J.: "Thermal modeling of the lithium/polymer battery", *J. Electrochem. Soc.*, Vol. 142, 3274-3281 (1995).
6. Valoen, L. O. and Reimers, J.N.: "Transport Properties of LiPF₆-based Li-ion battery electrolytes", *J. Electrochem. Soc.*, Vol. 152(5), A882-A891, (2005).
7. Kumaresan, K., Sikha, G., White, R.E.: "Thermal model for a Li-ion cell", *J. Electrochem. Soc.*, Vol. 155(2), A164-A171, (2008).
8. Doyle, M., Fuller, T. F., and Newman, J.: "Modeling of galvanostatic charge and discharge of the lithium/polymer/insertion cell", *J. Electrochem. Soc.*, Vol. 140(6), 1526-1533, (1993).
9. Sikha, G., Popov, N. B., and White, R. E.: "Effect of porosity on the capacity fade of a lithium-ion battery", *J. Electrochem. Soc.*, Vol. 151(7), A1104-A1114, (2004).