

## شبیه سازی و بررسی رفتار دمایی باتری لیتیم-یون

ابوالفضل فتح الهی<sup>۱</sup>، حامد پور فرزاد<sup>۲</sup>، امین زبردست<sup>۳</sup>

<sup>۱</sup>دکترای، شیمی کاربردی، دانشگاه صنعتی مالک اشتر

<sup>۲</sup>دکترای، شیمی تجزیه، دانشگاه تهران

<sup>۳</sup>کارشناسی ارشد، مهندسی شیمی، دانشگاه شیراز

نام نویسنده مسئول:

امین زبردست

### چکیده

شرایط ایمنی یکی از مسائل بسیار مهم و جدی در طراحی باتری های لیتیم-یون می باشد. عوامل مختلفی سبب می شوند که ایمنی این باتری ها به خطر بیافتد. یکی از این عوامل افزایش دمای درونی باتری است. در صورت افزایش بیش از حد دمای باتری وضعیت خطرناکی برای آن ایجاد می شود و حتی سبب آتش گرفتن و انفجار باتری می شود. افزایش نرخ تخلیه شارژ و هم چنین نبود یک سیستم خنک کننده مطلوب در افزایش دمای باتری تاثیر گذار خواهد بود. در این تحقیق رفتار دمایی باتری لیتیم-یون شبیه سازی شده است و وضعیت آن در نرخ های مختلف تخلیه شارژ و هم چنین شرایط متفاوت خنک سازی مورد بررسی قرار گرفته است. در صورتی که باتری در شرایط آدیباتیک قرار بگیرد، بالا رفتن دمای باتری با سرعت بیشتری صورت می گیرد و باتری را سریع تر در وضعیت خطرناک و فرار دمایی قرار می دهد. با افزایش مقدار ضریب انتقال حرارت دمای باتری به طور قابل توجهی کاهش می یابد و دمای باتری در محدوده ی عملیاتی حفظ می شود.

**واژگان کلیدی:** باتری لیتیم-یون، فرار دمایی، حالت آدیباتیک، ضریب انتقال حرارت.

## ۱- مقدمه

امروزه سوخت های فسیلی جهت تامین انرژی منازل، صنایع مختلف، وسایل حمل و نقل کاربرد فراوانی دارند. اما به دلیل این که این قبیل سوخت ها تجدید ناپذیر هستند و میلیون ها سال طول می کشد تا دوباره تولید شوند و هم چنین اثرات زیست محیطی شدیدی که این سوخت ها بر وضعیت جوی و آلودگی محیط می گذارند، نیاز و توجه به منابع انرژی تجدید پذیر و پاک بیش از پیش ضروری است [۱].

باتری های لیتیم-یون می توانند به عنوان یک منبع انرژی پاک جایگزین خوبی برای منابع انرژی تجدید ناپذیر باشند. این باتری ها امروزه به طور گسترده در وسایل الکترونیکی و خودرو های برقی استفاده می شوند. استفاده ی فراوان از این باتری ها به دلیل ولتاژ بالا، دانسیته انرژی بالا، تخلیه شارژ خود به خودی پایین و طول عمر بالا می باشد [۲]. از آن جایی که این باتری ها در صنایع مختلفی کاربرد دارند، توجه به مسائل ایمنی آن ها بسیار قابل توجه است. عواملی نظیر افزایش شارژ بیش از حد، اتصال کوتاه، افزایش دمای درونی باتری (فرار دمایی)، افزایش فشار داخلی و... باعث بر هم زدن ایمنی این باتری ها می شوند [۳]. از میان این عوامل، شرایط دمایی و افزایش دمای درونی باتری بیش از سایر شرایط می تواند باتری را در شرایط خطرناکی قرار دهد. در واقع بر هم خوردن تعادل دمایی باتری لیتیم-یون، حاصل افزایش نرخ گرمای تولیدی می باشد. رفتار گرمای تولیدی در باتری به صورت تابع نمایی می باشد. در حالی که تابع رفتار پراکندگی دما به محیط در باتری لیتیم-یون به صورت خطی است. در صورتی که گرمای تولیدی ناشی از واکنش های شیمیایی بین الکتروود ها و الکتروولیت بیش از میزان پراکندگی گرما به محیط باشد، آن گاه فرایند گرما زا شرایطی شبیه به وضعیت آدیاباتیک درون باتری ایجاد می کند و باعث افزایش سریع دمای باتری می شود. این افزایش دما باعث سرعت بخشیدن به واکنش های شیمیایی می شود و به جای یک واکنش گالوانیک مطلوب سبب افزایش گرمای تولیدی می گردد و در نهایت منجر به گسستگی، آتش گرفتن و حتی انفجار باتری می شود. بنابراین با توجه به این شرایط توجه به مسائل ایمنی باتری ها بسیار مهم است. اما فرایند فرار دمایی یک فرایند پیچیده است و در بر گیرنده ی علوم مختلفی نظیر شیمی، مواد و مهندسی می شود [۴]. بنابراین محققان برای دست یابی به راهکار هایی که بتوانند ایمنی این باتری ها را در شرایط مختلف حفظ کنند، نیاز به توجه به تمامی این علوم دارند. از جمله روش هایی که جهت حفظ ایمنی باتری های لیتیم-یون و محافظت از آن ها در برابر شرایط ناهنجار دمایی ابداع و به کار گرفته شده است، می توان به افزودنی های الکتروود، تاخیر انداز های اشتعال، قطع کننده جدا کننده، تجهیزات ضریب مثبت دمایی (PTC) اشاره کرد [۵]. هر یک از این روش ها متناسب با کارایی و هدفی که دارند جهت پایداری دمایی باتری لیتیم-یون تلاش می کنند و سعی می کنند وضعیت دمایی باتری را در شرایط عملیاتی آن نگاه دارند.

در زمینه بررسی و پیش بینی شرایط دمایی باتری های لیتیم-یون تحقیقات زیادی توسط محققان صورت گرفته است و شبیه سازی هایی جهت پیش بینی وضعیت دمایی باتری لیتیم-یون در شرایط مختلف توسط نرم افزار های شبیه سازی صورت گرفته است. پیش بینی و شناسایی شرایط دمایی باعث می شود که بتوان شرایط خطرناک را به خوبی شناسایی کرد و در طراحی باتری ها این عوامل و شرایط را در نظر گرفت. کومار سان<sup>۱</sup> و همکاران شبیه سازی بر روی باتری لیتیم-یون در شرایط دمای محیط و نرخ تخلیه شارژ بالا انجام دادند. آن ها به این نتیجه رسیدند که تاثیرات دمایی به هدایت یونی فاز مایع، ضریب نفوذ نمک، ضریب نفوذ فاز جامد الکتروود منفی و فاکتور های تر

<sup>1</sup> K.Kumaresan

مو دینامیکی وابسته است [۶]. منگ ژو<sup>۲</sup> و همکاران مدل سازی ترمودینامیک-دمایی دو بعدی بر روی باتری لیتیم-یون انجام دادند. نتایج مدل نشان می دهد که پتانسیل هر دو جمع کننده مثبت و منفی در راستای محوری، تغییرات یکسانی دارند که این امر به خاطر نحوه ی جایگیری آن ها در باتری استوانه ای است. هم چنین نتیجه گرفتند که مجموع گرمای آهمی تولید شده در جمع کننده های مثبت و منفی در باتری استوانه ای نسبت به باتری هرمی در راستای محوری نسبتاً یک نواخت تر است [۷]. آل جلاج<sup>۳</sup> و همکاران مدل یک بعدی حرارتی جهت شبیه سازی رفتار حرارتی باتری لیتیم-یون در طول تخلیه شارژ را انجام دادند. تحقیقات آن ها نشان داد، در یک سل با سطح شارژ اندک، فرار دمایی در دمای پایین تری نسبت به یک سل با شارژ کامل اتفاق می افتد [۸]. وایت<sup>۴</sup> و همکاران در تحقیقی دیگر شرایط آدیاباتیک در باتری لیتیم-یون را شبیه سازی کردند. این شرایط باعث افزایش شدید دما در باتری می شود و خطر ایجاد فرار دمایی در سل با سرعت بیشتری ایجاد می شود [۹]. ژو چیان ژانگ<sup>۵</sup> و همکاران مدل سه بعدی حرارتی در حالت ناپایا را جهت شبیه سازی رفتار دمایی باتری لیتیم-یون در حالت تخلیه شارژ را برگزیدند. نتایج تحقیقات آن ها نشان داد که، نرخ جریان خنک کننده تاثیر قابل توجهی در بالا رفتن دما دارد. هم چنین نتیجه گرفتند در نرخ های پایین تخلیه شارژ دمای سطح نسبتاً یک نواخت تر است. هم چنین در انتهای تخلیه شارژ دمای سل بالا می رود و رفتار دمایی غیر یکنواختی مشاهده می شود [۱۰]. یانکینگ لای<sup>۶</sup> و همکاران نیز یک مدل الکترو شیمیایی-حرارتی جهت آنالیز و بررسی رفتار حرارتی باتری لیتیم-یون ارائه کردند. آن ها بیان کردند که گرمای تولیدی در باتری به گرمای برگشت پذیر و برگشت ناپذیر تقسیم می شود. گرمای تولیدی در جمع کننده های جریان و جداکننده، گرمای برگشت ناپذیر ژول است که از نظر مقداری کم است و تاثیر زیادی در بالا رفتن دما ندارد. هم چنین در شبیه سازی که انجام دادند، نشان دادند که در طول تخلیه شارژ با نرخ ۵C، دما به بالای ۵۰ درجه سانتی گراد افزایش می یابد که ثابت می کند که برخی معیار های خنک سازی باید در هنگام طراحی یک باتری به منظور اطمینان از حفظ دمای باتری در محدوده ی عملیاتی آن لحاظ شود. به علاوه در این تحقیق مشخص شده است که به کار گیری مواد فعال در فرایند تخلیه شارژ با نرخ ثابت، یک نواخت نیست. به طوری که بخشی از مواد فعال حتی زمانی که فرایند تخلیه شارژ به پایان می رسد، استفاده نشده باقی می ماند. به منظور اطمینان از به کار گیری کامل مواد فعال، باید پارامتر های بهینه سازی در طراحی باتری اختصاص داده شود [۱۱]. در شبیه سازی دیگری که توسط شینگ سون وانگ<sup>۷</sup> و همکاران انجام شد به این نتیجه رسیدند که با افزایش نرخ تخلیه شارژ، مقدار گرمای درونی و به طور متقابل مقدار گرمای تولیدی افزایش می یابد و افزایش گرمای درونی با افت ظرفیت سل همراه خواهد بود. علاوه بر این، تحقیقات آن ها نشان می دهد، زمانی که باتری در دمای بالاتری تخلیه می شود، پایداری حرارتی آن به شدت کاهش می یابد و می توان نتیجه گرفت نرخ تخلیه شارژ، دمای محیط و ظرفیت اسمی بر روی ایجاد شرایط فرار دمایی تاثیر گذار خواهند بود. در ادامه ی تحقیقات آن ها تاثیر ظرفیت باتری بر گرمای تولیدی را بررسی کردند و نتیجه گرفتند که باتری با ظرفیت بالا تر میزان گرمای بیشتری تولید می کند [۴]. در این تحقیق نیز شبیه سازی رفتار دمایی باتری لیتیم-یون ۱۸۶۵۰ با کاتد  $\text{LiFePO}_4$  و آند گرافیت همراه با الکترولیت  $\text{LiPF}_6$  محلول در هیدروکربن های EC و DEC، تحت شرایط مختلف خنک سازی

<sup>2</sup> Meng Xu<sup>3</sup> Al Hallaj<sup>4</sup> E. White<sup>5</sup> Zhuqian Zhang<sup>6</sup> Yanqing Lai<sup>7</sup> Qingsong Wang

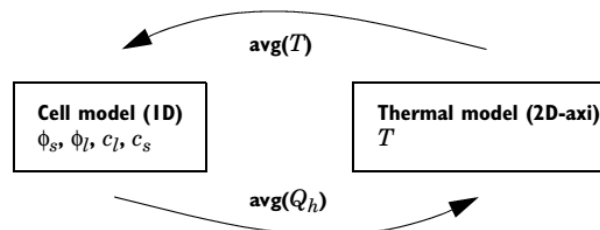
صورت گرفته است. هم چنین در این تحقیق شرایط آدیاباتیک در باتری لیتیم-یون ارائه شده و نحوه ی عملکرد توزیع دما در این حالت نیز بررسی شده است.

## ۲- مدل و نتایج

در این پژوهش مدل باتری لیتیم یون توسط نرم افزار COSMOL Multiphysics 3.5a با اضافه کردن تعادل انرژی و استفاده از وابستگی دمایی خواص باتری ارائه شده است. این مدل حرارتی بر اساس مدل شبه دوبعدی (P2D) می باشد که در یک مدل ترکیبی الکترو شیمیایی و حرارتی طراحی و ارائه شده است. در این پژوهش پارامترهایی نظیر ضریب نفوذ یون لیتیم در فاز جامد و الکترولیت، ثابت های سرعت واکنش در واکنش های الکتروشیمیایی و هدایت حرارتی الکترولیت به درجه حرارت در مدل ارائه شده وابسته به دما در نظر گرفته شده اند. مدل باتری لیتیم-یون ارائه شده در نرم افزار برای بررسی تغییرات حرارتی و دمایی گسترش یافته است. رفتار دمایی باتری لیتیم یون در طی فرایند با ضریب انتقال حرارت مختلف و شرایط آدیاباتیک مورد بررسی قرار گرفته است.

### ۲-۱- روابط مربوط به مدل حرارتی

مدل شبیه سازی شده یک مدل به صورت نشان داده شده در شکل ۱ است که در آن یک سل باتری تعریف شده که درون آن فرایندهای الکتروشیمیایی انجام شده (باکس سمت چپ) که نتیجه این فرایند تولید گرما است. در مدل دیگر که هم زمان با مدل باتری و به همراه آن تعریف شده است که در آن مدل انتقال حرارت درون باتری شبیه سازی شده است. در قسمت انتقال حرارت (باکس سمت راست) گرمای تولید شده در قسمت باتری دریافت شده و محاسبات انتقال حرارت و پیوستگی انرژی انجام می شود که نتیجه این محاسبات، توزیع دمای باتری است.



شکل ۱- اتصال بین سلول و مدل حرارتی با استفاده از مقادیر متوسط دما و حرارت تولید شده

روابط و معادلات به کار گرفته شده در این شبیه سازی به صورت زیر می باشند. روابط اولیه مربوط به انتقال جرم و نفوذ یون های لیتیم و قسمت دوم مربوط به روابط انتقال حرارت در باتری لیتیم-یون می باشد. روابط از مراجع [۱۲] و [۱۳] استخراج شده اند.

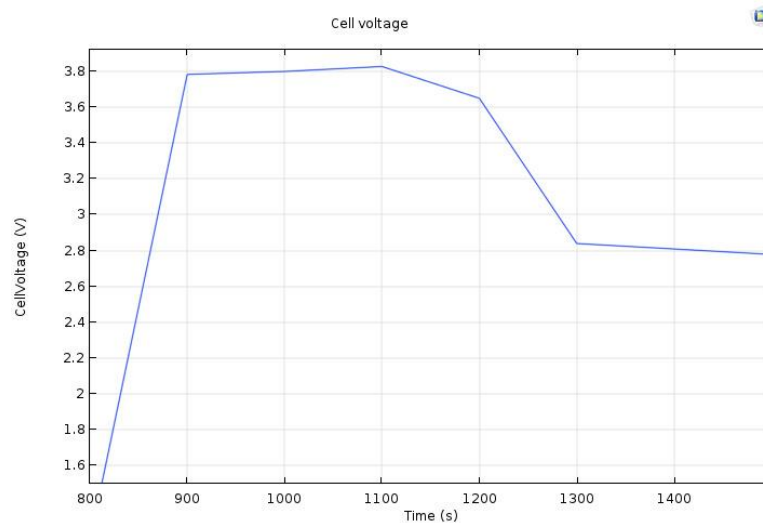
$$\begin{aligned} \epsilon \frac{\partial c}{\partial t} &= \nabla \cdot (\nabla c) - \frac{i_2 \cdot \nabla t_+^0}{F} + a j_n (1 - t_+^0) & -1 \\ i_2 &= -k \nabla \phi_2 + \frac{2kRT}{F} \left(1 + \frac{\partial \ln f_{\pm}}{\partial \ln c}\right) (1 - t_+^0) \nabla \ln c & -2 \\ a j_n &= \frac{1}{F} \nabla \cdot i_2 & -3 \\ i_1 &= -\sigma \nabla \phi_1 & -4 \\ \rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} &= \frac{K}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\partial T}{\partial r}\right) + K \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} + Q & -5 \\ Q(t, r, z) &= \frac{Q_\eta(t) + Q_s(t, r, z)}{V_c} & -6 \\ Q_\eta &= \eta_t(t) I_t(t) & -7 \\ \eta_t(t) &= E(t) - E_{eq}(t) & -8 \\ Q_s(t, r, z) &= I_t(t) T(t, r, z) \frac{\Delta S(t)}{nF} & -9 \\ \Delta S(t) &= nF \left(\frac{\partial E_{eq}}{\partial T}\right)_{\xi, P} & -10 \end{aligned}$$

روابط ۱ تا ۴ مربوط به انتقال جرم می باشند و روابط ۵ تا ۱۰ مربوط به روابط انتقال حرارت در باتری لیتیم-یون است. ترم Q مربوط به گرمای تولیدی در باتری است که به گرمای برگشت پذیر و گرمای برگشت ناپذیر تقسیم بندی می شود. گرمای برگشت پذیر ناشی از تغییرات آنتروپی و گرمای برگشت ناپذیر مربوط به گرمای اهمی در باتری لیتیم-یون است. برای این مسئله انتقال جرم در یک بعد و انتقال حرارت در دو بعد در نظر گرفته شده است و دمای اولیه کل سیستم ثابت و برابر با محیط تعریف شده است. شرایط مرزی در نظر گرفته شده برای باتری به این صورت است که انتقال حرارت در  $r=R$  و  $z=L$  برابر با انتقال حرارت جابجایی در نظر گرفته شده است.

$$\begin{aligned} T(0, r, z) &= T_a & -11 \\ n \cdot (k \nabla T) &= h(T - T_a) & -12 \end{aligned}$$

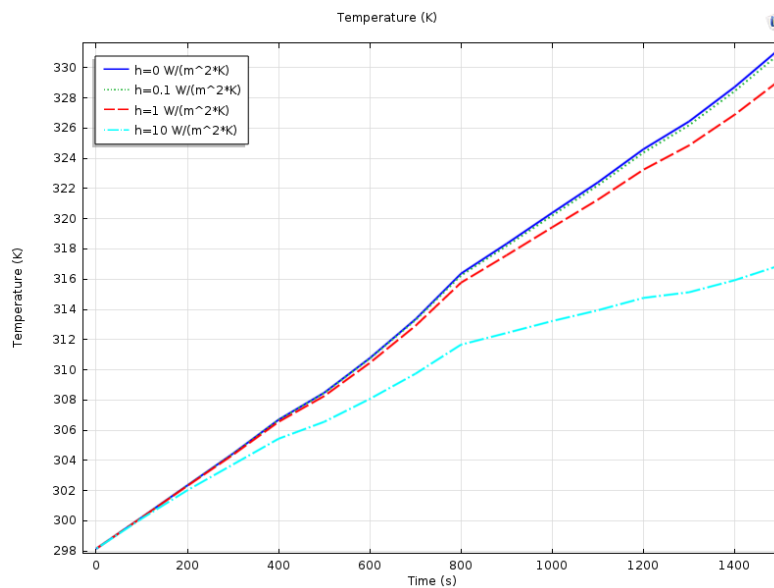
### ۳-۲- نتایج

شبه سازی صورت گرفته برای باتری لیتیم-یون در طول ۱۵۰۰ ثانیه می باشد. هر سیکل شارژ و تخلیه شارژ با نرخ جریان 5/7 C، 400 ثانیه به طول می انجامد. در واقع مقدار جریان در ۴۰۰ ثانیه اول که در حال شارژ می باشد افزایش می یابد و بعد از مدت زمان استراحت، تخلیه شارژ صورت می گیرد. در شکل ۲ که مربوط به تغییرات پتانسیل سل نسبت به زمان است مشاهده می شود که پتانسیل سل در طول شارژ افزایش پیدا می کند و پس از گذشت مدت زمان مشخص طی فرایند تخلیه شارژ پتانسیل کاهش یافته و تا حدود مقدار ۲/۵ ولت می رسد. به طور کلی طی یک فرایند طبیعی، در حالت شارژ مقدار ولتاژ که متناسب با اجزای تشکیل دهنده ی آن است، از یک مقدار ماکزیمم نباید افزایش یابد و در حالت تخلیه شارژ نیز از یک مقدار حداقل نباید پایین تر آید. در صورتی که ولتاژ سل از محدوده ماکزیمم افزایش یابد، دچار شارژ بیش از حد شده است و در صورت کاهش بیش از حداقل مقدار، سل در شرایط تخلیه شارژ بیش از حد قرار می گیرد.



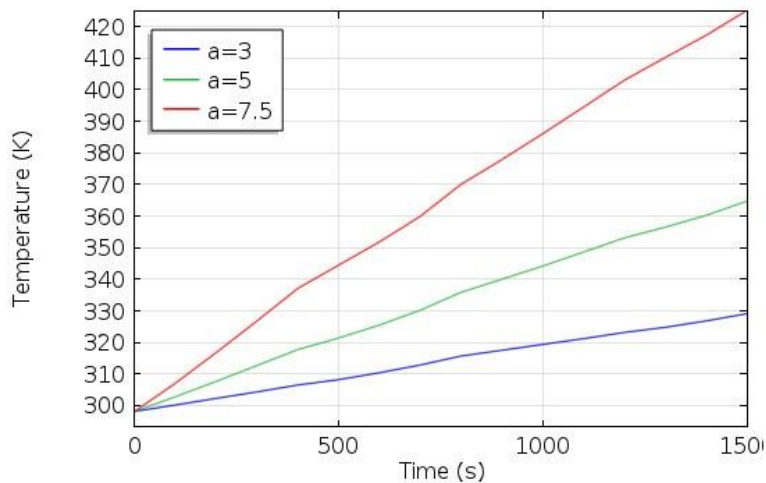
شکل ۲- تغییرات ولتاژ سل نسبت به زمان در حالت شارژ و تخلیه شارژ با نرخ جریان ۷/۵ C

در شکل ۳ می‌توان دمای سل را طی یک مرحله فرایند تخلیه شارژ با ضریب انتقال حرارت ۰، ۱۰، ۰/۱ و 1 Wm-2K-1 مشاهده کرد. همان‌طور که انتظار می‌رود، با افزایش نرخ جریان تخلیه شارژ، سل به تدریج گرم‌تر می‌شود. دلیل این گرم‌تر شدن، افزایش جنب‌وجوش ذرات موجود در باتری می‌باشد، که این فرایند باعث افزایش دما درون سل می‌شود. همچنین ملاحظه می‌شود که هرچه ضریب انتقال حرارت در سطح (h) بیشتر باشد، دمای سطح در ضمن افزایش دمای سل کمتر خواهد شد و طبق نمودار شکل ۵ کمترین دمای سطح مربوط به حالت  $h = 10 \text{ W m}^{-2} \text{ K}^{-1}$  است که حدود ۳۳۶ کلوین می‌باشد و تفاوت قابل ملاحظه‌ای با حالت  $h = 0 \text{ W m}^{-2} \text{ K}^{-1}$  با گذشت زمان از خود نشان می‌دهد. در حالی که هر چه مقدار ضریب انتقال حرارت کوچک‌تر باشد میزان افزایش دما نیز درون باتری بیشتر است. به طوری که در شکل ۳ مشاهده می‌کنید، در صورتی که  $h$  برابر با صفر باشد و در واقع در شرایطی مانند شرایط آدیاباتیک قرار بگیرد مقدار دمای داخل باتری به دلیل عدم انتقال حرارت جابه‌جایی با محیط به شدت افزایش می‌یابد. بنابراین در صورتی که میزان ضریب انتقال حرارت کوچک باشد، با کاهش انتقال حرارت، افزایش دمای سل را به دنبال دارد و افزایش دما بیش از میزان عملیاتی سل، انتظار می‌رود باتری به مرحله آغاز شرایط فرار دمایی برسد.



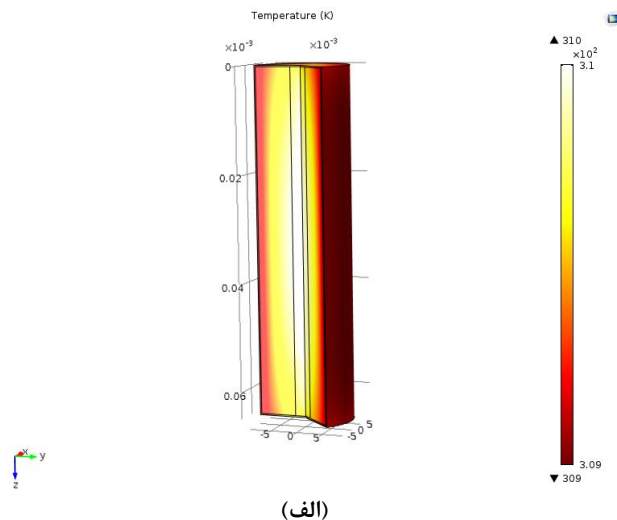
شکل ۳- تغییرات دمایی باتری طی یک مرحله فرایند تخلیه شارژ تحت شرایط خنک‌کنندگی متفاوت

شرایط دمایی باتری لیتیم-یون یکی از مهم ترین عوامل جهت پایداری باتری می باشد. هرچه باتری بتواند فعالیت خود را در دمای عملکردی حفظ کند پایداری باتری نیز حفظ می شود. اما در صورت افزایش بیش از حد دما و شروع فرایند فرار دمایی، شرایط خطرناک و ناهنجار بر باتری غلبه می کند و ممکن است باتری هر لحظه دچار حادثه گردد. افزایش دما در داخل باتری به گرمای تولیدی در آن بستگی دارد. به طور کلی گرمای تولیدی در باتری از مجموع گرما های تولیدی برگشت پذیر و گرما های تولیدی غیر بازگشت پذیر حاصل می شود. گرمای برگشت پذیر در واقع گرمایی است که از تغییرات آنتروپی ایجاد می شود و گرمای برگشت ناپذیر در اثر غلظت، اکتیواسیون و گرمای اهمی حاصل می شود. در صورتی که مقدار کل گرمای تولیدی در باتری افزایش یابد، در نتیجه آن دمای باتری نیز به سرعت افزایش می یابد. در شکل های ۳ تا ۶ تغییرات دمای باتری تحت شرایط مختلف نشان داده شده است. در شکل ۴ می توان دمای سل را طی یک مرحله فرایند تخلیه شارژ در نرخ های مختلف تخلیه شارژ مشاهده کرد. همان طور که انتظار می رود، با افزایش نرخ جریان تخلیه، سل گرم تر می شود و به این ترتیب دما نیز افزایش می یابد. دلیل این گرم تر شدن، افزایش جنب و جوش ذرات موجود در باتری می باشد. در واقع هر چه نرخ تخلیه شارژ با سرعت بالاتری صورت گیرد تغییرات گرمایی درون باتری نیز افزایش می یابد. در نرخ های پایین تخلیه شارژ گرمای برگشت پذیر غالب است و می توان پایداری باتری را از طریق پراکندگی دما به اطراف کنترل نمود اما با افزایش نرخ تخلیه شارژ به تدریج گرمای برگشت ناپذیر غالب می شود و باعث می شود مقدار دما در داخل باتری افزایش یابد.

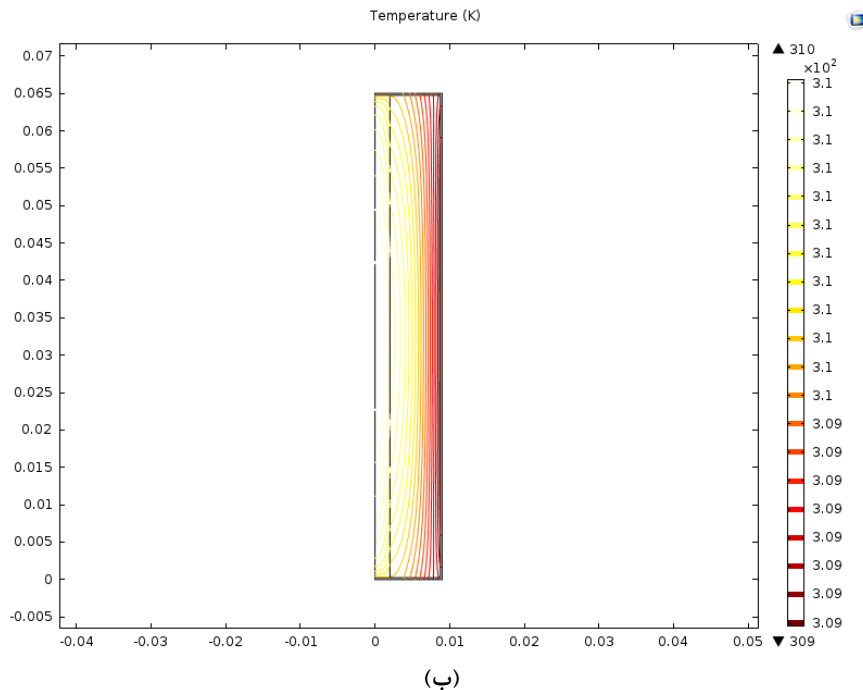


شکل ۴- تغییرات دمایی سل در نرخ های مختلف تخلیه شارژ

در شکل ۵ نحوه توزیع گرما در محور های مختصات استوانه ای قابل مشاهده است. در شکل ۵ (الف) مشاهده می شود که با نزدیک شدن به برش مرکزی باتری دما بالاتر رفته و گرمای بیشتری قابل اندازه گیری است. درحالی که با فاصله گرفتن از محور میانی باتری به تدریج از گرمای ایجاد شده کاسته شده و دمای کمتری قابل اندازه گیری می باشد. این موضوع در شکل ۵ (ب) نیز قابل مشاهده است. در این شکل که خطوط دمایی را نشان می دهد مشخص می کند که با فاصله گرفتن از هسته مرکزی باتری خطوط دمایی از حالت منحنی به حالت صاف تغییر شکل می دهند و به تدریج از مرکز تا سطح روند کاهش دما قابل مشاهده خواهد بود. در واقع بالا بودن دما در مرکز باتری اینگونه قابل شرح است که در مرکز باتری ترکیباتی نظیر بایندر و مواد پلیمری موجود در جداکننده وجود دارند. وجود این ترکیبات پایداری باتری را افزایش می دهند، اما به علت مقاومت حرارتی بالای این ترکیبات، انتقال حرارت در مرکز باتری محدود می شود و در نتیجه مقدار دما در مرکز باتری نسبت به نقاط نزدیک به سطح بالاتر می باشد. نکته ی دیگری که در شکل ۵ (ب) قابل توجه است شکل تقارنی نمودار دمایی می باشد. در واقع این حالت تقارنی به خاطر محل قرار گیری پایانه های مثبت و منفی در انتهای باتری استوانه ای می باشند و در واقع این محل قرار گیری پایانه ها در نحوه ی توزیع جریان و دما در باتری تاثیر گذار می باشند.







شکل ۵- پروفایل دمایی و نحوه توزیع خطوط برشی الف) سه بعدی و ب) دو بعدی باتری لیتیم-یون

## ۲- نتیجه گیری

با توجه به کاربرد بسیار باتری های لیتیم-یون در تجهیزات مختلف توجه به ایمنی باتری های لیتیم-یون امری بسیار مهم و ضروری است. شناسایی و توجه به عواملی که ایمنی باتری لیتیم-یون را بر هم بزند و یا باتری را در شرایط خطرناک و ناهنجار قرار دهد از اهمیت بالایی برخوردار است. یکی از این عوامل خطر ساز تغییرات شدید دمایی و تولید گرما درون باتری است. افزایش دمای باتری و عدم توانایی در پراکندگی این افزایش باعث می شود که باتری لیتیم-یون از نظر پایداری دمایی دچار اختلال شود و در نتیجه باتری در وضعیت فرار دمایی قرار گیرد. شرایط قرار گیری یک باتری لیتیم-یون در حالت فرار دمایی به پایداری دمایی ترکیبات سازنده ی آن بستگی دارد و در صورتی که در طراحی باتری از ترکیباتی استفاده شود که تا دما های بالاتری بتوانند پایداری خود را حفظ کنند، سبب افزایش پایداری باتری می شوند. علاوه بر انتخاب مناسب ترکیبات سازنده، نرخ جریان شارژ و تخلیه شارژ نیز بر میزان افزایش دما تاثیرگذار است. در صورتی که میزان نرخ جریان بیش از حد باشد سبب می شود که سرعت تولید گرما درون باتری افزایش یابد و در نتیجه دمای باتری نیز افزایش می یابد. در کنار این عوامل وجود یک سیستم خنک کننده جهت افزایش سرعت انتقال حرارت به پیرامون، در کاهش میزان دما بسیار تاثیر گذار است. به طوری که همان طور که در نتایج شبیه سازی نشان داده شد، در حالتی که میزان ضریب انتقال حرارت برابر با  $h = 10 \text{ W m}^{-2} \text{ K}^{-1}$  مقدار دمای سطح باتری به حدود  $362$  درجه کلوین می رسد. این در حالی است که در صورت کاهش ضریب انتقال حرارت مقدار دمای سطح بیشتر می شود و سرعت انتقال حرارت نیز کاهش می یابد. در هنگامی که مقدار ضریب انتقال حرارت برابر با صفر و شرایط نزدیک به حالت آدیاباتیک باشد، مقدار دمای سطح به شدت افزایش می یابد و باتری را با سرعت بیشتری در وضعیت خطرناک و فرار دمایی قرار می دهد. علاوه بر این توزیع دما درون باتری به نحوی است که میزان دما در نزدیکی هسته باتری نسبت به دما

در نقاط نزدیک به سطح باتری بسیار بیشتر است و سرعت پراکندگی دما بسیار کند تر می باشد. علت این امر وجود ترکیباتی نظیر بایندر و مواد پلیمری موجود در جدا کننده هستند که مقاومت حرارتی بالایی دارند و سبب کاهش سرعت انتقال حرارت در مرکز باتری می شوند.

### علائم اختصاری

$i_1$  : دانسیته جریان ظاهری در فاز جامد ( $\text{mA/cm}^2$ )

$i_2$  : دانسیته ظاهری جریان در فاز محلول ( $\text{mA/cm}^2$ )

$c$  : غلظت فاز محلول ( $\text{mol/m}^3$ )

$t_+^0$  : تعداد کاتیون منتقل شده

$a$  : سطح ویژه ناحیه متخلخل ( $\text{m}^2/\text{m}^3$ )

$j_n$  : فلاکس دیواره منافذ یون های لیتیم ( $\text{mol/m}^2\text{s}$ )

$k_i$  : هدایت یونی الکتروولیت ( $\text{S/cm}$ )

$T$  : دما ( $\text{K}$ )

$F$  : ثابت فارادی ( $96487 \text{ C/mol}$ )

$R$  : ثابت جهانی گازها ( $8.314 \text{ J/mol K}$ )

$K$  : ضریب هدایت حرارتی ( $\text{W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ )

$C_p$  : ظرفیت حرارتی ویژه ( $\text{J/gK}$ )

$Q$  : گرمای کل تولیدی ( $\text{W/m}^3$ )

$Q_n$  : گرمای افزایش ولتاژ ( $\text{W/m}^3$ )

$Q_s$  : گرمای آنتروپی ( $\text{W/m}^3$ )

$V_c$  : حجم باتری ( $\text{m}^3$ )

$I_t$  : جریان عبوری از الکتروود ( $\text{A}$ )

$E$  : پتانسیل عملیاتی سل ( $\text{V}$ )

$E_{eq}$  : پتانسیل تعادلی سل ( $\text{V}$ )

$n$  : تعداد الکترون

$\Delta S$  : تغییرات آنتروپی واکنش ( $\text{J/mol K}$ )

$\eta_t$  : اختلاف پتانسیل ( $\text{V}$ )

$\zeta$  : ترم واکنش

$\rho$  : دانسیته ( $\text{g/m}^3$ )

$\varepsilon$  : ضریب تخلخل ناحیه  $i$

$\phi_1$  : پتانسیل فاز جامد ( $\text{V}$ )

$\phi_2$  : پتانسیل فاز مایع ( $\zeta$ )

## منابع و مراجع

- [1] Q.Wang,P.Pinga, X.Zhao,G.Chu,J.Sun,C.Chen, Thermal runaway caused fire and explosion of lithium ion battery, *Journal of Power Sources*,vol 208,210–224 (2012).
- [2] T.Horiba,T.Maeshima,T.Matsumura,M.Koseki,J.Arai,Y.Muranaka, Applications of high power density lithium ion batteries, *Journal of Power Sources*,vol 146,107–110 (2005).
- [3] J.Wen,Y.Yu,C.Chen,A review on lithium-ion batteries safety issues: Existing Problems and possible Solutions, *Materials Express*,vol. 2,197-212 (2012).
- [4] Q.Wang,X.Zhao,J.Ye,Q.Sun,P.Ping,J.Sun,Thermal response of lithium-ion battery during charging and discharging under adiabatic conditions, *Journal Therm Anal Calorim*,vol 124,417–428 (2016).
- [5] P.G.Balakrishnan,R.Ramesh,T.Prem Kumar,Safety mechanisms in lithium-ion batteries, *Journal of Power Sources*,vol 155,401–414 (2006).
- [6] K.Kumaresan,G.Sikha,R.E.White,Thermal model for a li-ion cell,*Journal of the electrochemical society*,vol 155,164-171 (2008).
- [7] M.Xu,Z.Zhang,X.Wang,L.Jia ,L.Yang,Two-dimensional electrochemicalethermal coupled modeling of cylindrical LiFePO<sub>4</sub> batteries, *Journal of Power Sources*,vol 256,233-243 (2014).
- [8] S.Al Hallaj,H.Maleki,J.S.Hong,J.R.Selman, Thermal modeling and design considerations of lithium- ion batteries, *Journal of Power Sources*,vol 83,1–8 (1999).
- [9] L.Cai,R.E. White, Mathematical modeling of a lithium ion battery with thermal effects in COMSOL Inc. Multiphysics (MP) software, *Journal of Power Sources*,vol 196,5985–5989 (2011).
- [10] Z.Zhang,L.Jia,N.Zhao,L.Yang, Thermal modeling and cooling analysis of high-power lithium ion cells, *Journal of thermal science*,vol 20,570-575 (2011).
- [11] Y.Lai,S.Du,L.Ai,Li.Ai,Y.Cheng,Y.Tang,M.Jia,Insight into heat generation of lithium ion batteries based on the electrochemical-thermal model at high discharge rates,*international journal of hydrogen energy*,vol 40,3039-3049 (2015).
- [12] M.Doyle,J.Newman,Comparison of modeling predictions with experimental data from plastic lithium ion cells, *Journal Electrochem soc*,Vol 143,1890-1903(1996).
- [13] M.Shadman Rad,D.L.Danilov,M.Baghalha,M.Kazemeini,P.H.L.Notten,Thermal modeling of cylindrical LiFePO<sub>4</sub> batteries, *Journal of Modern Physics*,vol 4,1-7,(2013).