

리튬 금속 배터리 상태 진단을 위한 다중물리적 설계인자 파악

Multi-physical Factor for Lithium Metal Battery State Diagnosis

Gwanghyeon Choi^{1,2}, Youngoh Kim⁴, Won-Yong Shin^{2,5,6}, Jun-Chae Na^{2,5}, Sung-Il Yang^{2,5}, Yong-Jin Yu^{2,5}, Jy-Hye Lee^{2,5}, Seung-Jun Han^{2,5}, Juncheol Hwang^{1,2}, Tae-Soo Kim^{1,2}, Seung-Un Shin^{1,2}, Seok-Hyun Lee^{1,2}, Joonmyung Choi⁴ and Duho Kim^{1,2,3*}

¹Department of Mechanical Engineering (Integrated Engineering Program), Kyung Hee University, 1732, Deogyong-daero, Giheung-gu, Yongin-si, Gyeonggi-do, Republic of Korea

²Prediction Co. Ltd., Yongin 17107, Republic of Korea

³Department of KHU-KIST Convergence Science and Technology, Kyung Hee University, Republic of Korea

⁴Department of Mechanical Design Engineering, Hanyang University, Seongdong-gu, Seoul 04763, Republic of Korea

⁵KAILOS LAB Co. Ltd., Seoul 06349, Republic of Korea

⁶School of Mathematics and Computing (CSE), Yonsei University, Seoul 03722, Republic of Korea

Email: gwangh159@khu.ac.kr, duhokim@khu.ac.kr

Abstract

본 논문에서는 차세대 고성능 배터리로 평가받는 리튬 금속 배터리의 상태를 진단하기 위한 열역학적, 기계역학적 설계인자를 소개한다. 빅데이터 및 기계학습을 기반으로 열역학적 인자인 Disordered Phase Energy Level (이하, DPEL)을 제안 및 검증하였고, 기계적 변형에 따른 결합길이 변형과 DPEL의 변화의 관계를 기반으로 기계물리적 설계인자인 effective cluster interactions (이하, ECI)를 제안하였다. 이를 통해 배터리 소재의 상태를 정밀하게 진단 및 예측하기 위한 물리적 인자를 구축하였다.

I. Introduction

전기차 시장의 수요가 증가됨에 따라 고성능의 배터리 소재의 연구의 중요성도 커지고 있다. 리튬 금속 배터리는 기존 소재의 10 배 이상의 용량을 가진다는 장점으로 인해 차세대 배터리의 후보군으로 평가받고 있다. 하지만 증방전단 수지상의 형성으로 인한 내부 화재 및 폭발 등 안전상의 문제로 인해 지속적인 상태 검진이 필요하다. 본 논문에서는 리튬 메탈 배터리의 다중 물리적 설계 인자를 소개하여 효율적인 상태검진을 가능하게 하고자 한다.

II. Result and Discussion

리튬 금속 음극의 수지상 성장(dendritic growth)은 리튬 금속 배터리의 높은 에너지 밀도 성능을 유지하는데 있어 매우 중요한 요소로 평가된다. 먼저, 우리는 밀도 범함수 이론(DFT) 계산기반 전이 상태로서 세 가지 알칼리 금속(AM: Li, Na, K) 무질서 상(disordered phase)의 열역학적 에너지 빅 데이터 세트를 생성하였다. 이를 기반으로 전기화학적 증착 동안 균일성의 정도를 제어하는 데 결정적인 설계 인자인 Disordered Phase Energy Level (이하, DPEL)을 제안하였으며, 분자 동역학 시뮬레이션을 통해 해당 설계인자와 수지상 형성 간의 밀접한 관계성을 증명하였다.^[1]

이러한 열역학적 이해를 바탕으로 균일한 수지상 형성을 진단할 수 있는 기계적인 요인을 제안했다. 먼저, 두 가지 무질서 모델인 i) 압축 ii) 과압축의 대형 형성 에너지 데이터 세트를 생성하였고, 머신 러닝을 기반으로 i) 결정상, ii) 긴 그리고 iii) 짧은 결합의 세 가지 구성요소로 리튬 결합 (Li-Li) 유효 클러스터 상호작용 인자를 도출하였으며, 이 역시 분자 동역학 시뮬레이션을 통해 수지상 형성 간의 관계성을 증명하였다.^[2]

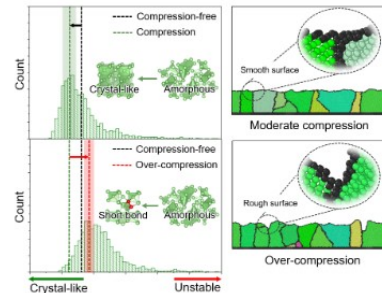


그림 2 기계역학적 인자에 따른 리튬 금속 성장 경향성 변화

III. Conclusion

제안된 다중 물리적 인자는 리튬 금속 기반 배터리의 사전 상태 진단을 위한 중요한 설계인자로 기대되며 균일한 리튬 금속 수지상 성장을 가능하게 하는 근본적인 통찰력을 제공할 것으로 기대된다.

ACKNOWLEDGMENT

This research was supported by the National Research Foundation of Korea (NRF) grant funded by the Korea government (MSIT) (No. 2022M3J7A1062940).

REFERENCES

- [1] G Choi. "Thermodynamic factor for facilitating homogeneous dendrite growth in alkali metal batteries" Advanced Energy Materials, 2022
- [2] G Choi. "Mechanical seed mechanism to facilitate homogeneous Li metal growth" Advanced Energy Materials, 2023

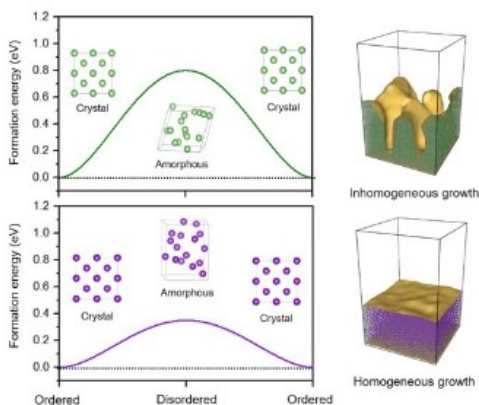


그림 1. 열역학적 에너지에 따른 알칼리 금속 성장 경향성 변화