



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2019년03월11일
 (11) 등록번호 10-1956266
 (24) 등록일자 2019년03월04일

- (51) 국제특허분류(Int. Cl.)
 G06F 17/50 (2006.01) G01R 31/36 (2019.01)
 H01M 10/42 (2014.01)
- (52) CPC특허분류
 G06F 17/5009 (2013.01)
 G01R 31/367 (2019.01)
- (21) 출원번호 10-2017-0091423
- (22) 출원일자 2017년07월19일
 심사청구일자 2017년07월19일
- (65) 공개번호 10-2019-0009867
- (43) 공개일자 2019년01월30일
- (56) 선행기술조사문헌
 KR101675348 B1*
 US20120046776 A1*
 JP2015135286 A
 JP2012154665 A
 *는 심사관에 의하여 인용된 문헌

- (73) 특허권자
 서울대학교산학협력단
 서울특별시 관악구 관악로 1 (신림동)
 한국과학기술연구원
 서울특별시 성북구 화랑로14길 5 (하월곡동)
- (72) 발명자
 이광렬
 서울특별시 성북구 화랑로14길 5
 한상수
 서울특별시 성북구 화랑로14길 5
 (뒷면에 계속)
- (74) 대리인
 박중환

전체 청구항 수 : 총 11 항

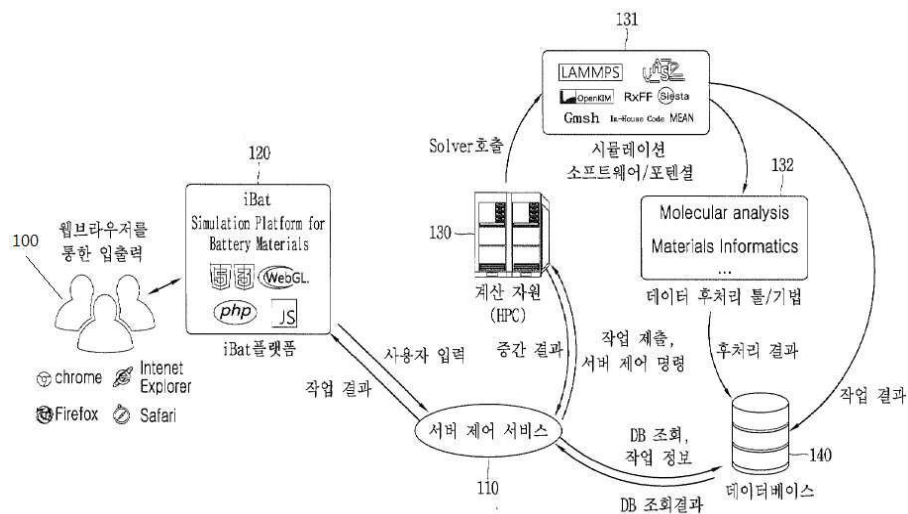
심사관 : 박승철

(54) 발명의 명칭 이차 전지 특성 시뮬레이션 방법 및 이를 지원하는 전자 장치

(57) 요약

본 발명은 이차 전지 특성 시뮬레이션 방법 및 이를 지원하는 전자 장치에 관한 것이다. 본 발명에 따른 전자 장치는 이차 전지 특성 분석을 컴퓨팅 장치 기반으로 수행하는데 관련된 적어도 하나의 데이터를 저장하는 메모리와, 메모리에 전기적으로 연결되는 프로세서를 포함한다. 프로세서는 사용자 입력에 따라 이차 전지의 특성 분석과 관련한 적어도 하나의 물질을 선택하거나 또는 특성의 종류 중 적어도 하나를 선택할 수 있도록 구성된 로비 페이지, 또는 물질 관련 정보 입력을 지원하는 입력 영역 및 물질에 대한 특성 분석 결과를 포함하는 결과 영역 중 적어도 하나를 포함하는 작업 페이지 중 어느 하나를 출력하도록 설정된다.

대표도 - 도1



(52) CPC특허분류
H01M 10/4285 (2013.01)

(72) 발명자
이민호
서울특별시 성북구 화랑로14길 5

조맹효
서울특별시 관악구 관악로 1 서울대학교 301동
1524호

곽윤기
서울특별시 관악구 관악로 1 (신림동, 서울대학교)

문장혁

서울특별시 관악구 관악로 1 (신림동, 서울대학교)

김성섭

서울특별시 관악구 관악로 1 (신림동, 서울대학교)

이 발명을 지원한 국가연구개발사업

과제고유번호 10041589

부처명 산업통상자원부

연구관리전문기관 한국산업기술평가관리원

연구사업명 산업융합기술산업원천기술개발사업

연구과제명 에너지용 나노소재의 효율적 설계를 위한 웹기반 멀티스케일 시뮬레이션 플랫폼 개발

기여율 1/1

주관기관 한국과학기술연구원

연구기간 2015.06.01 ~ 2016.05.31

명세서

청구범위

청구항 1

이차 전지 특성 분석을 컴퓨팅 장치 기반으로 수행하는데 관련된 적어도 하나의 데이터를 저장하는 메모리;

상기 메모리에 전기적으로 연결되며, 사용자 입력에 따라 이차 전지의 특성 분석과 관련한 적어도 하나의 물질을 선택하거나 또는 상기 특성의 종류 중 적어도 하나를 선택할 수 있도록 구성된 로비 페이지, 또는 상기 물질 관련 정보 입력을 지원하는 입력 영역 및 상기 물질에 대한 특성 분석 결과를 포함하는 결과 영역 중 적어도 하나를 포함하는 작업 페이지 중 어느 하나를 출력하도록 설정된 프로세서;를 포함하고,

상기 프로세서는

상기 이차 전지의 특성 중 응력 분석 항목, 풀셀 분석 항목, 크랙 분석 항목에 대응하는 아이콘을 포함하는 분석 영역을 출력하고, 사용자 입력에 따라 선택된 아이콘에 대응하는 모델의 분석 결과를 상기 작업 페이지에 출력하도록 설정된 전자 장치.

청구항 2

제1항에 있어서,

상기 프로세서는

응력 분석 항목, 크랙 전과 분석 항목, 풀셀 분석 항목에 의해 분석할 적어도 하나의 물질의 선택 또는 상기 항목들 중 적어도 하나를 선택할 수 있도록 구성된 상기 로비 페이지를 출력하도록 설정된 전자 장치.

청구항 3

제1항에 있어서,

상기 프로세서는

상기 이차 전지 특성 중 응력 분석과 관련한 모델의 기하학적 구조의 설계를 지원하는 샘플 영역, 모델의 경계 조건을 설정하는 메쉬 영역, 분석의 동작 또는 실행 조건을 설정하는 시뮬레이션 영역 중 적어도 하나를 포함하는 사용자 인터페이스를 출력하도록 설정된 전자 장치.

청구항 4

제3항에 있어서,

상기 프로세서는

고정 경계 조건 또는 리튬 플럭스 경계 조건 중 적어도 하나의 설정을 지원하는 상기 메쉬 영역을 출력하도록 설정된 전자 장치.

청구항 5

제1항에 있어서,

상기 프로세서는

실리콘 박막 필름에서 크랙 전과 시뮬레이션에 이용되는 크랙 전과 모델의 분석을 처리하도록 설정된 전자 장치.

청구항 6

삭제

청구항 7

제1항에 있어서,

상기 프로세서는

상기 이차 전지 특성 중 크랙 전파 분석과 관련하여, 상기 크랙 전파 분석에 적용될 물질 선택의 입력을 지원하는 시스템 버퍼 영역, 분석과 관련한 적어도 하나의 기능 아이콘을 포함하고 기능 아이콘 선택에 따른 모델 분석 결과를 제공하는 분석 영역, 크랙 발생의 정도를 시각적으로 표시하는 구조 영역 및 리튬 산화의 정도와 Li (리튬) 농도에 대응하는 응력 발생의 정도를 나타내는 응력 영역 중 적어도 하나를 출력하도록 설정된 전자 장치.

청구항 8

제1항에 있어서,

상기 프로세서는

상기 이차 전지의 특성 중 풀셀 분석과 관련하여, 풀셀 분석을 위한 물질을 선택할 수 있는 물질 선택 테이블 영역, 풀셀 분석에 이용되는 전극을 선택할 수 있는 전극 작업 테이블 영역, 풀셀 분석에 이용될 수 있는 다양한 재료들에 대한 리스트가 표시되는 풀셀 작업 테이블 영역 중 적어도 하나를 포함하는 상기 로비 페이지를 출력하도록 설정된 전자 장치.

청구항 9

제8항에 있어서,

상기 프로세서는

상기 풀셀 분석의 요청에 따라, 애노드 속성을 기입하는 영역, 캐소드 속성을 기입하는 영역, 전해질 속성을 기입하는 영역을 포함하는 물질 속성 영역;

입력된 개방 회로 전압 데이터에 대응하여 용적량과 전압 관계 그래프를 출력하는 개방 회로 전압 영역; 및 방전 전류, 컷 오프 전압, 시간, 싸이클 수 및 작업 이름 중 적어도 하나의 기입을 지원하는 시뮬레이션 영역; 중 적어도 하나를 상기 작업 페이지에 출력하도록 설정된 전자 장치.

청구항 10

제1항에 있어서,

상기 프로세서는

순환 거동을 위한 2D를 생성하는 용량 전압 비교 아이콘, 용량 변이를 위한 2D 플롯을 생성하는 순환 용량 아이콘, 각 전극에서의 Li 농도를 위한 2D 플롯을 생성하는 농도 아이콘, 고체 전해질 인터페이스의 2D 이미지를 생성하는 SEI(Solid Electrolyte Interface) 아이콘 중 적어도 하나를 포함하는 분석 영역을 상기 작업 페이지에 출력하도록 설정된 전자 장치.

청구항 11

제10항에 있어서,

상기 프로세서는

사용자 입력에 대응하여, 용량 대비 전압 분석 그래프, 순환 용량 그래프, 농도 그래프, SEI 그래프 중 적어도 하나를 상기 작업 페이지에 출력하도록 설정된 전자 장치.

청구항 12

사용자 입력에 따라 이차 전지의 특성 분석과 관련한 적어도 하나의 물질을 선택하거나 또는 상기 이차 전지의 응력 발생 분석, 크랙 전파 분석 또는 풀셀 분석 중 적어도 하나를 선택할 수 있도록 구성된 로비 페이지를 출력하는 동작;

사용자 입력을 수신하는 동작;

상기 사용자 입력에 대응하여 상기 물질 관련 정보 입력을 지원하는 입력 영역 및 상기 물질에 대한 응력 분석 결과, 크랙 전파 분석 결과 또는 풀셀 분석 결과 중 적어도 하나의 분석 결과를 포함하는 결과 영역 중 적어도 하나를 포함하는 작업 페이지를 출력하는 동작;을 포함하고,

상기 작업 페이지를 출력하는 동작에서,

상기 이차 전지의 특성 중 응력 분석 항목, 풀셀 분석 항목, 크랙 분석 항목에 대응하는 아이콘을 포함하는 분석 영역을 상기 작업 페이지에 출력하고, 사용자 입력에 따라 선택된 아이콘에 대응하는 모델의 분석 결과를 상기 작업 페이지에 출력하는 이차 전지 특성 시뮬레이션 방법.

발명의 설명

기술 분야

[0001] 본 발명은 이차 전지 특성 시뮬레이션 방법 및 전자 장치에 관한 것으로, 더욱 상세하게는 컴퓨팅 장치를 이용하여 이차 전지의 신뢰성 및 풀셀 구조의 안정성 등을 시뮬레이션할 수 있는 사용자 인터페이스를 제공하는 방법 및 전자 장치에 관한 것이다.

배경 기술

[0002] 종래 이차 전지는 휴대폰, 노트북, 스마트폰, 태블릿 PC 등의 전자용품 및 휴대용품에 광범위하게 사용되고 있다. 또한, 최근 전기 자동차가 부각되면서 대용량 및 고안정성의 이차 전지를 요구하고 있다.

[0003] 이러한 이차 전지는 크게 애노드(anode, 음극), 캐소드(cathode, 양극) 및 전해질을 포함한다. 애노드 소재로는 흑연과 같은 탄소계 소재가 사용되고 있다. 캐소드 소재로는 리튬 코발트 산화물과 같은 금속 산화물계 소재가 사용되고 있다. 그리고 전해질 소재로는 카보네이트와 같은 유기 소재가 사용되고 있다. 이와 같이 이차 전지에 사용되는 소재는 다양하다.

[0004] 이에 따라, 최적의 이차전지 소재를 개발하기 위해서는 다양한 소재물성변수(조성, 결정구조, 입자크기 등)에 대한 분석과 주변 상황에 따른 물성의 변화를 신속하게 파악하는 것이 중요하다.

[0005] 이러한 자료 수집을 위하여, 매우 많은 실험과 데이터 작성이 필요하기 때문에, 이차 전지에 관한 연구 개발에 매우 많은 비용과 인력이 요구되고 있다.

선행기술문헌

특허문헌

[0006] (특허문헌 0001) 한국등록특허 제10-0918387호(2009.09.15.)

발명의 내용

해결하려는 과제

[0007] 이러한 요구에 따라 컴퓨터 시뮬레이션은 이차 전지의 소재 개발 시 매우 유용하게 활용될 수 있을 것으로 예상된다. 하지만 실험연구자가 컴퓨터 시뮬레이션을 활용하기에는 초기 진입 장벽이 높기 때문에, 이러한 컴퓨터 시뮬레이션이 소재 개발 연구에 활발하게 활용되고 있지 못한 실정이다.

[0008] 이러한 관점에서 초보 실험연구자도 손쉽게 컴퓨터 시뮬레이션을 이용할 수 있게 해 주는 플랫폼 개발은 소재 개발에 유용하게 활용될 수 있으며, 향후 소재 개발의 새로운 패러다임을 제공할 것으로 예상된다.

[0009] 따라서 본 발명은 이차 전지 신뢰성 및 풀셀 구조의 안정성 시뮬레이션을 보다 간단하고 용이하게 할 수 있도록 하는 이차 전지 특성 시뮬레이션 방법 및 이를 지원하는 전자 장치를 제공함에 있다.

과제의 해결 수단

[0010] 상술한 목적을 달성하기 위하여, 본 발명의 이차 전지 특성 시뮬레이션 방법은 사용자 입력에 따라 이차 전지의 특성 분석과 관련한 적어도 하나의 물질을 선택하거나 또는 상기 이차 전지의 응력 발생 분석, 크랙 전파 분석

또는 풀셀 분석 중 적어도 하나를 선택할 수 있도록 구성된 로비 페이지를 출력하는 동작, 사용자 입력을 수신하는 동작, 상기 사용자 입력에 대응하여 상기 물질 관련 정보 입력을 지원하는 입력 영역 및 상기 물질에 대한 응력 분석 결과, 크랙 전과 분석 결과 또는 풀셀 분석 결과 중 적어도 하나의 분석 결과를 포함하는 결과 영역 중 적어도 하나를 포함하는 작업 페이지를 출력하는 동작을 포함하는 것을 특징으로 한다.

- [0011] 본 발명의 이차 전지 특성 시뮬레이션을 지원하는 전자 장치는 이차 전지 특성 분석을 컴퓨팅 장치 기반으로 수행하는데 관련된 적어도 하나의 데이터를 저장하는 메모리, 상기 메모리에 전기적으로 연결되는 프로세서를 포함하고, 상기 프로세서는 사용자 입력에 따라 이차 전지의 특성 분석과 관련한 적어도 하나의 물질을 선택하거나 또는 상기 특성의 종류 중 적어도 하나를 선택할 수 있도록 구성된 로비 페이지, 또는 상기 물질 관련 정보 입력을 지원하는 입력 영역 및 상기 물질에 대한 특성 분석 결과를 포함하는 결과 영역 중 적어도 하나를 포함하는 작업 페이지 중 어느 하나를 출력하도록 설정될 수 있다.
- [0012] 상기 프로세서는 응력 분석 항목, 크랙 전과 분석 항목, 풀셀 분석 항목에 의해 분석할 적어도 하나의 물질의 선택 또는 상기 항목들 중 적어도 하나를 선택할 수 있도록 구성된 상기 로비 페이지를 출력하도록 설정될 수 있다.
- [0013] 상기 프로세서는 상기 이차 전지 특성 중 응력 분석과 관련한 모델의 기하학적 구조의 설계를 지원하는 샘플 영역, 모델의 경계 조건을 설정하는 메쉬 영역, 분석의 동작 또는 실행 조건을 설정하는 시뮬레이션 영역 중 적어도 하나를 포함하는 사용자 인터페이스를 출력하도록 설정될 수 있다.
- [0014] 상기 프로세서는 고정 경계 조건 또는 리튬 플럭스 경계 조건 중 적어도 하나의 설정을 지원하는 상기 메쉬 영역을 출력하도록 설정될 수 있다.
- [0015] 상기 프로세서는 실리콘 박막 필름에서 크랙 전과 시뮬레이션에 이용되는 크랙 전과 모델의 분석을 처리하도록 설정될 수 있다.
- [0016] 상기 프로세서는 상기 이차 전지 특성 중 크랙 전과 분석과 관련하여, 상기 크랙 전과 분석에 적용될 물질 선택의 입력을 지원하는 시스템 버퍼 영역, 분석과 관련한 적어도 하나의 기능 아이콘을 포함하고 기능 아이콘 선택에 따른 모델 분석 결과를 제공하는 분석 영역, 크랙 발생의 정도를 시각적으로 표시하는 구조 영역, 리튬 산화의 정도와 Li 농도에 대응하는 응력 발생의 정도를 나타내는 응력 영역 중 적어도 하나를 출력하도록 설정될 수 있다.
- [0017] 상기 프로세서는 응력 분석 항목, 풀셀 분석 항목, 크랙 분석 항목에 대응하는 아이콘을 포함하는 분석 영역을 출력하고, 사용자 입력에 따라 선택된 아이콘에 대응하는 모델의 분석 결과를 출력하도록 설정될 수 있다.
- [0018] 상기 프로세서는 상기 이차 전지의 특성 중 풀셀 분석과 관련하여, 풀셀 분석을 위한 물질을 선택할 수 있는 물질 선택 테이블 영역, 풀셀 분석에 이용되는 전극을 선택할 수 있는 전극 작업 테이블 영역, 풀셀 분석에 이용될 수 있는 다양한 재료들에 대한 리스트가 표시되는 풀셀 작업 테이블 영역 중 적어도 하나를 포함하는 상기 로비 페이지를 출력하도록 설정될 수 있다.
- [0019] 상기 프로세서는 상기 풀셀 분석의 요청에 따라, 애노드 속성을 기입하는 영역, 캐소드 속성을 기입하는 영역, 전해질 속성을 기입하는 영역을 포함하는 물질 속성 영역, 입력된 개방 회로 전압 데이터에 대응하여 용적량과 전압 관계 그래프를 출력하는 개방 회로 전압 영역, 방전 전류, 컷 오프 전압, 시간, 싸이클 수 및 작업 이름 중 적어도 하나의 기입을 지원하는 시뮬레이션 영역 중 적어도 하나를 상기 작업 페이지에 출력하도록 설정될 수 있다.
- [0020] 상기 프로세서는 순환 거동을 위한 2D를 생성하는 용량 전압 비교 아이콘, 용량 변이를 위한 2D 플롯을 생성하는 순환 용량 아이콘, 각 전극에서의 Li 농도를 위한 2D 플롯을 생성하는 농도 아이콘, SEI 2D 이미지를 생성하는 SEI 아이콘 중 적어도 하나를 포함하는 분석 영역을 상기 작업 페이지에 출력하도록 설정될 수 있다.
- [0021] 상기 프로세서는 사용자 입력에 대응하여, 용량 대비 전압 분석 그래프, 순환 용량 그래프, 농도 그래프, SEI 그래프 중 적어도 하나를 상기 작업 페이지에 출력하도록 설정될 수 있다.

발명의 효과

- [0022] 이상에서 살펴본 바와 같이 본 발명에서 제시하는 이차 전지 특성 시뮬레이션 방법 및 이를 지원하는 전자 장치는 이차 전지의 신뢰성 및 풀셀 안정성의 분석을 간단하고 용이하게 수행할 수 있도록 지원한다.
- [0023] 이에 따라, 본 발명은 이차 전지 개발에 소요되는 시행착오를 줄이고 시간, 비용, 인력 등의 최적화를 달성할

수 있도록 지원한다.

도면의 간단한 설명

[0024]

- 도 1은 본 발명의 실시예에 따른 이차 전지 특성 시뮬레이션 플랫폼을 개략적으로 나타낸 도면,
- 도 2는 본 발명의 실시예에 따른 응력 분석 모델 인터페이스의 한 예를 나타낸 도면,
- 도 3은 본 발명의 실시예에 따른 모델의 기하학적 구조 설계와 관련한 샘플 영역 도면,
- 도 4는 본 발명의 실시예에 따른 기하학적 구조 타입들의 예를 나타낸 도면,
- 도 5는 본 발명의 실시예에 따른 샘플 모델의 한 예를 나타낸 도면,
- 도 6은 본 발명의 실시예에 따른 메쉬 영역 설정과 관련한 도면,
- 도 7은 본 발명의 실시예에 따른 메쉬의 밀도 생성과 관련한 도면,
- 도 8은 본 발명의 실시예에 따른 메쉬 밀도 설정 입력과 관련한 도면,
- 도 9는 본 발명의 실시예에 따른 서로 다른 메쉬 밀도의 예를 나타낸 도면,
- 도 10은 본 발명의 실시예에 따른 일정 크기의 메쉬 밀도를 가지는 예를 나타낸 도면,
- 도 11은 본 발명의 실시예에 따른 응력 분석의 동작 조건 및 실행과 관련한 도면,
- 도 12는 본 발명의 실시예에 따른 응력 분석 결과 중 플롯의 일 형태를 나타낸 도면,
- 도 13은 본 발명의 실시예에 따른 응력 분석 결과 중 응력 발생과 Li 농도 그래프를 나타낸 도면,
- 도 14는 본 발명의 실시예에 따른 크랙 전과 분석 인터페이스의 한 예를 나타낸 도면,
- 도 15는 본 발명의 실시예에 따른 크랙 전과 분석에 이용되는 유한 요소 근사식을 나타낸 도면,
- 도 16은 본 발명의 실시예에 따른 수정된 시차 근사를 나타낸 도면,
- 도 17은 본 발명의 실시예에 따른 크랙 전과 모델의 경계 조건을 나타낸 도면,
- 도 18은 본 발명의 실시예에 따른 크랙 전과와 관련한 모델 파라미터들의 한 예를 나타낸 도면,
- 도 19는 본 발명의 실시예에 따른 풀셀 구조의 한 예를 나타낸 도면,
- 도 20은 본 발명의 실시예에 따른 단입자 풀셀 구조의 한 예를 나타낸 도면,
- 도 21은 본 발명의 실시예에 따른 활성 및 비활성 SEI에 관한 도면,
- 도 22는 본 발명의 실시예에 따른 SEI의 반응 설명을 나타낸 도면,
- 도 23은 본 발명의 실시예에 따른 SEI 성장 이미지에 관한 도면,
- 도 24는 본 발명의 실시예에 따른 활성화 SEI 및 패시브 SEI 성장률을 나타낸 도면,
- 도 25는 본 발명의 실시예에 따른 풀셀 분석과 관련한 로비 페이지의 한 예를 나타낸 도면,
- 도 26은 본 발명의 실시예에 따른 풀셀 분석과 관련한 물질 모델 선택과 도면,
- 도 27은 본 발명의 실시예에 따른 풀셀 분석과 관련한 작업 페이지 전환과 관련한 상태바를 나타낸 도면,
- 도 28은 본 발명의 실시예에 따른 풀셀 분석 윈도우의 한 예를 나타낸 도면,
- 도 29는 본 발명의 실시예에 따른 풀셀 분석 윈도우 중 물질 특성 입력 화면을 나타낸 도면,
- 도 30은 본 발명의 실시예에 따른 개방 회로 전압 설정과 관련한 도면,
- 도 31은 본 발명의 실시예에 따른 용적량과 전압과의 그래프를 나타낸 도면,
- 도 32는 본 발명의 실시예에 따른 풀셀 시뮬레이션 설정 화면을 나타낸 도면,
- 도 33은 본 발명의 실시예에 따른 풀셀 분석 모델 결과 아이콘들을 나타낸 도면,

도 34는 본 발명의 실시예에 따른 풀셀 분석 모델 결과를 나타낸 도면,

도 35는 본 발명의 실시예에 따른 이차 전지 특성 시뮬레이션 방법을 설명하는 도면이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

- [0025] 이하, 첨부 도면을 참조하여 본 발명의 실시예를 보다 상세하게 설명하고자 한다. 하기의 설명에서는 본 발명의 실시예를 이해하는데 필요한 부분만이 설명되며, 그 이외 부분의 설명은 본 발명의 요지를 흐트리지 않도록 생략될 것이라는 것을 유의하여야 한다.
- [0026] 이하에서 설명되는 본 명세서 및 청구범위에 사용된 용어나 단어는 통상적이거나 사전적인 의미로 한정해서 해석되어서는 아니 되며, 발명자는 그 자신의 발명을 가장 최선의 방법으로 설명하기 위해 용어의 개념으로 적절하게 정의할 수 있다는 원칙에 입각하여 본 발명의 기술적 사상에 부합하는 의미와 개념으로 해석되어야만 한다. 따라서 본 명세서에 기재된 실시예와 도면에 도시된 구성은 본 발명의 바람직한 실시예에 불과할 뿐이고, 본 발명의 기술적 사상을 모두 대변하는 것은 아니므로, 본 출원시점에 있어서 이들을 대체할 수 있는 다양한 균등물과 변형 예들이 있을 수 있음을 이해하여야 한다.
- [0027] 이하, 상기한 목적을 달성하기 위한 본 발명의 바람직한 실시예를 첨부된 도면을 참조하여 상세히 설명하면 다음과 같다.
- [0028] 도 1은 본 발명의 실시예에 따른 이차 전지 특성 시뮬레이션 플랫폼을 개략적으로 나타낸 도면이다.
- [0029] 도 1을 참조하면, 이차전지 시뮬레이션 시스템은 사용자 장치(100), 메인 서버, 복수의 시뮬레이션 서버들, 데이터베이스(140)를 포함할 수 있다.
- [0030] 메인 서버는 사용자 장치(100)(예: 사용자 컴퓨팅 장치)에게 서버 제어 서비스(110)를 제공하며, 데이터베이스(140)에 데이터를 저장하거나, 데이터베이스(140)에 저장된 데이터를 사용자 장치(100)에게 제공한다.
- [0031] 복수의 시뮬레이션 서버들은 계산 자원(HPC)(130)으로 표현될 수 있으며, 서로 다른 시뮬레이션 소프트웨어/포텐셜(131)을 이용하여 이차전지와 관련된 시뮬레이션을 수행한다. 구체적으로, 사용자 장치(100)는 이차 전지 특성 시뮬레이션 플랫폼(120, 예: iBat 플랫폼)을 기반으로 메인 서버에 접속하여 이차 전지 특성 시뮬레이션 플랫폼이 제공하는 사용자 인터페이스를 통해, 신뢰성 물질 설계와 관련한 작업을 수행한다. 메인 서버는 설정 정보를 계산 자원(130)으로 전송한다. 여기서, 메인 서버는 복수의 시뮬레이션 서버들 중에서 설정 정보를 전송할 적어도 하나의 서버를 선택할 수 있다.
- [0032] 설정 정보를 수신한 시뮬레이션 서버는 시뮬레이션 소프트웨어 및 포텐셜(131)을 호출하여 시뮬레이션을 수행하거나, 데이터 후처리 툴/기법(132)을 통해 시뮬레이션을 수행하고, 시뮬레이션 결과를 데이터베이스(140)에 저장한다. 이때, 메인 서버는 데이터베이스(140)와 연동하여, 시뮬레이션 중간결과 및 최종결과를 사용자 장치(100)에게 전송한다. 이를 통해, 사용자 장치(100)는 메인 서버 접속을 통해, 시뮬레이션 중간결과 및 최종결과를 확인할 수 있다.
- [0033] 여기서, 시뮬레이션 소프트웨어 및 포텐셜(131)은 제일원리계산, 분자동역학, Reactive force field, MEAM, Phase field, 유한요소법의 상용 소프트웨어 및 In-House 소프트웨어를 포함할 수 있다.
- [0034] 상술한 이차 전지 특성 시뮬레이션 시스템은 적어도 하나의 서버들(예: 메인 서버, 시뮬레이션 서버들 및 데이터베이스(140))에 접속되는 사용자 장치(100)를 기반으로 이차 전지 특성시뮬레이션 기능을 수행하는 예를 설명하였으나, 본 발명이 이에 한정되는 것은 아니다. 예컨대, 이차 전지 특성 시뮬레이션 시스템에서 메인 서버, 시뮬레이션 서버 및 데이터베이스(140)는 사용자 장치(100)에서의 프로세서와, 메모리 및 시뮬레이션 모듈(하드웨어 또는 소프트웨어 모듈)로 대체될 수 있다. 사용자 장치(100)는 디스플레이와, 입력부(예: 키보드, 마우스 등)를 더 포함하며, 사용자 입력에 대응하여 이차 전지 특성 시뮬레이션과 관련한 다양한 사용자 인터페이스를 제공할 수 있다.
- [0035] 또는, 이차 전지 특성 시뮬레이션 시스템은 메인 서버, 시뮬레이션 서버 및 데이터베이스(140)를 포함하는 하나의 서버 장치로 구성될 수 있다. 이 경우 서버 장치는 사용자 장치(100) 접속 및 사용자 입력에 대응하여, 이차 전지 특성 시뮬레이션과 관련한 적어도 하나의 사용자 인터페이스를 사용자 장치(100)에 제공할 수 있다. 하나의 서버 장치는 서버 프로세서, 서버 메모리, 사용자 장치(100)와 통신할 수 있는 통신 인터페이스 등을 포함하고, 이차 전지 특성 시뮬레이션과 관련한 데이터의 전송 또는 사용자 입력 수신 등을 처리할 수 있다. 이하, 복수개의 서버들로 구성된 이차 전지 특성 시뮬레이션 플랫폼 또는 이차 전지 특성 시뮬레이션 기능을 제공하는

사용자 장치(100) 또는 하나의 서버가 사용자 장치(100)의 디스플레이에 통해 제공하는 이차 전지 특성 시물레이션과 관련한 사용자 인터페이스에 대하여 설명하기로 한다.

- [0036] 사용자 장치(100)의 디스플레이는 이차 전지 특성 시물레이션과 관련한 물질 선택 및 분석과 관련하여, 로비 페이지와 작업 페이지를 출력할 수 있다. 예컨대, 사용자 장치(100)가 이차 전지 특성 시물레이션 플랫폼을 기반으로 메인 서버(예: 서버 제어 서비스)에 접속하면, 사용자 장치(100)는 메인 서버로부터 로비 페이지를 수신하여 출력할 수 있다. 로비 페이지는 이차 전지 특성 분석과 관련한 물질 선택 또는 이차 전지 특성의 종류(예: 응력 분석, 크랙 전파, 풀셀 분석 등) 중 적어도 하나를 선택할 수 있는 객체를 포함할 수 있다.
- [0037] 사용자 장치(100)는 로비 페이지에서 지정된 입력이 발생하면, 해당 입력을 메인 서버에 전송하고, 입력에 대응하는 작업 페이지를 수신하여 출력할 수 있다. 로비 페이지 및 작업 페이지는 프로세서에 의해 디스플레이에 출력될 수 있다. 이 동작에서 사용자 장치(100)는 로비 페이지 또는 작업 페이지와 관련한 데이터를 메모리에 저장할 수 있다. 또는 적어도 하나의 서버가 이차 전지 특성 시물레이션 운용과 관련한 데이터를 사용자 장치(100)에 제공하면, 사용자 장치(100)는 이를 수신하고 디스플레이에 출력할 수 있다. 이에 따라, 본 발명의 이차 전지 특성 시물레이션을 지원하는 전자 장치는 상술한 적어도 하나의 서버 및 사용자 장치(100) 중 적어도 하나를 포함할 수 있다.
- [0038] 본 발명의 이차 전지 특성 시물레이션 플랫폼은 예컨대, 사용자 장치의 메모리에 저장된 후 사용자 장치의 프로세서에 의해 운용되거나, 또는 서버 장치의 메모리에 저장된 후, 서버 장치의 프로세서에 의해 운용될 수 있다. 서버 장치에서 시물레이션 플랫폼이 운용되는 경우, 서버 장치는 사용자 장치의 접속에 따라, 이하에서 설명하는 이차 전지 특성 시물레이션과 관련한 적어도 하나의 사용자 인터페이스를 사용자 장치에 제공할 수 있다. 이에 따라, 이하에서 설명하는 사용자 인터페이스는 예컨대, 서버 장치에서 생성되어 사용자 장치에 제공되거나 또는 사용자 장치의 프로세서 제어에 따라 생성되어 사용자 장치의 디스플레이에 출력될 수 있다.
- [0039] 본 발명의 이차 전지 특성 시물레이션 플랫폼은 이차 전지에 관한 응력 분석, 크랙 전파 분석, 풀셀 분석 중 적어도 하나의 기능 실행을 포함하는 페이지를 제공할 수 있다. 예컨대, 이차 전지 특성 시물레이션 플랫폼은 이차 전지에 관한 응력 분석 항목, 크랙 전파 분석 항목, 풀셀 분석 항목을 포함하는 로비 페이지를 제공할 수 있다. 이차 전지 특성 시물레이션 플랫폼은 로비 페이지에서 제공된 특정 항목이 선택되면, 선택된 항목에 대응하는 작업 페이지를 제공할 수 있다.
- [0040] 응력 분석 항목은 모델 정의, 모델의 기하학적 구조, 경계 조건, 메쉬잉, 동작 조건 및 실행과 관련한 입력 영역과, 입력에 따른 결과 분석 영역을 제공할 수 있다. 크랙 전파 분석 항목은 모델 정의, 모델의 기하학적 구조, 경계 조건, 메쉬잉, 모델 파라미터들, 세팅 및 초기 크랙 중 적어도 하나와 관련한 입력 영역과, 입력에 따른 결과 분석 영역을 제공할 수 있다. 풀셀 분석 항목은 모델 정의, 단입자 풀셀 모델, 활성 입자들에서의 Li 확산, 고체 전해질 인터페이스(Solid Electrolyte Interface, 이하 SEI) 성장 모델, 풀셀 모델 시물레이팅을 위한 모델링 물질들 선택하기, 파라미터들, 세팅 평형 개방 전위, 세팅 동작 조건 등을 입력할 수 있는 입력 영역과, 입력에 따른 결과 분석 영역을 포함할 수 있다. 이하에서, 상술한 각 항목들에 대응하는 페이지에 대하여 설명하기로 한다.
- [0041] 도 2는 본 발명의 실시예에 따른 응력 분석 모델 인터페이스의 한 예를 나타낸 도면이다.
- [0042] 도 2를 참조하면, 본 발명의 응력 분석 모델 인터페이스는 샘플 영역(201), 메쉬 영역(202), 시물레이션 영역(203) 중 적어도 하나를 포함하는 입력 영역과, 입력 영역에서 입력되는 항목들에 대응하는 응력 분석 결과를 제공하는 결과 영역(204)을 포함할 수 있다. 샘플 영역(201)은 샘플의 물질 특성을 입력하는데 이용될 수 있다. 메쉬 영역(202)은 경계 조건을 설정하는데 이용될 수 있다. 시물레이션은 실험 조건을 설정하는데 이용될 수 있다.
- [0043] 응력 분석과 관련하여, 확산유기응력(DIS, diffusion induced stress) 모델은 Li 이온 배터리들의 사용을 위해 전극 물질의 기계적 응력을 분석하는데 이용된다. 다양한 전극 형태를 위한 DIS를 확인하기 위하여, 완전 유한요소 구조(full finite element scheme)는 리튬 삼입 및 추출에 의해 유도되는 응력을 시물레이션하여 구한다. 일반적으로 탄성을 가지는 케이스가 일반적이고, 물질들의 동역학, 지배 방정식들, 평형 방정식 및 보존 법칙들이 온전하게 적용된다. 시물레이션 동안, 응력 분석 모델은 리튬 농도 분포 및 웹에서 설계된 전극의 응력을 나타낼 수 있다. 상호 작용의 결과 및 이전 처리된 결과들은 3D 이미지들 또는 2D 윤곽 플롯으로 표시된다.
- [0044] 응력 분석 모델의 정의에서, 응력 효과들과 연결되는 보존 법칙(픽스의 두 번째 법칙)은 다음 수학적 1에서와 같이 화학적 전위로부터 도출된다.

[0045] [수학식 1]

$$\mu = \mu_0 + RT \ln X - \Omega \sigma_h$$

[0046]

[0047] 여기서, μ_0 는 초기 화학적 전위이다. R은 기체 상수, T는 절대 온도, X는 리튬 이온의 몰분율, Ω 은 Li_xSi 에서 Li의 몰부피, σ_h 은 응력 성분들의 대각 평균으로 표현되는 등방응력을 나타낸다.

[0048] Li 플럭스는 화학적 전위 및 리튬 확산도들의 기울기의 곱으로 표현된다. 픽스 두 번째 방정식은 다음 수학식 2와 같다.

[0049] [수학식 2]

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot \mathcal{J} = 0, \quad \frac{\partial c}{\partial t} = D \left(\nabla^2 c - \frac{\Omega}{RT} \nabla c \nabla \sigma_h - \frac{\Omega c}{RT} \nabla^2 \sigma_h \right)$$

[0050]

[0051] 여기서, D는 확산계수이고, c는 리튬 농도이다.

[0052] Li의 삽입 또는 추출 동안, 호스트 전극의 부피 변화는 삽입된 Li의 볼륨과 선형적으로 변하는 것으로 가정될 수 있다. 그래서 탄성체의 응력 변형 관계는 다음 수학식 3과 같다.

[0053] [수학식 3]

$$\epsilon_{ij} = \frac{1}{Y} [(1 + \nu)\sigma_h - \nu\sigma_{kk}\delta_{ij}] + \frac{c - c_0}{3} \Omega \delta_{ij}$$

[0054]

[0055] 여기서, Y와 ν 들은 Li 농도의 함수로서 각각 세로 탄성 계수 및 뺄외종의 비율이다. 응력 성분은 다음 수학식 4와 같다.

[0056] [수학식 4]

$$\sigma_{ij} = 2\mu\epsilon_{ij} + (\lambda\epsilon_{kk} - \beta(c - c_0))\delta_{ij}$$

[0057]

$$\mu = \frac{Y}{2(1 + \nu)}, \quad \lambda = \frac{2\nu\mu}{1 - 2\nu}, \quad \beta = \frac{\Omega(3\lambda + 2\mu)}{3}$$

[0058]

여기서, 이고, 이다.

[0059] 마지막으로, 확산 유도 응력은 다음 평형 방정식에 해당하는 수학식 5로부터 획득된다.

[0060] [수학식 5]

$$\nabla \cdot \sigma = 0$$

[0061]

[0062] 응력 분석 모델에 적용되는 예제 모델의 기하학적 구조는 반경 100nm이고 높이 1000nm 나노와이어로 구성된다. 시뮬레이션을 위한 전극 물질들은 로비 페이지의 물질 데이터베이스에서 선택될 수 있다. 튜토리얼에서의 물질은 실리콘 특성으로 주어진다. 사용자들은 실리콘 물질 외에 새로운 물질을 삽입할 수 있다.

[0063] 도 3은 본 발명의 실시예에 따른 모델의 기하학적 구조 설계와 관련한 샘플 영역 도면이며, 도 4는 본 발명의 실시예에 따른 기하학적 구조 타입들의 예를 나타낸 도면이고, 도 5는 본 발명의 실시예에 따른 샘플 모델의 한 예를 나타낸 도면이다.

[0064] 도 3을 참조하면, 모델의 기하학적 구조(Geometry of model)를 설계하기 위하여, 사용자는 샘플 영역(201)에서, 차원(예: 2D or 3D)을 선택하고, 사용자가 원하는 크기를 가지는 샘플 모양을 입력할 수 있다. 정보 입력 후, "Build" 버튼(301)이 선택되면, 도 4에 도시된 바와 같이 이차 전지 특성 시뮬레이션 플랫폼은 해당 입력에 대응하는 기하학적 구조를 출력할 수 있다.

[0065] 도 3의 샘플 영역의 입력에 따른 기하학적 구조의 설계가 요청되면, 도 5에 도시된 바와 같이, 실린더

타입이고, 반경 및 높이가 100nm 및 1000nm이 모델이 제공될 수 있다.

- [0066] 도 6은 본 발명의 실시예에 따른 메쉬 영역 설정과 관련한 도면이며, 도 7은 본 발명의 실시예에 따른 메쉬의 밀도 생성과 관련한 도면이고, 도 8은 본 발명의 실시예에 따른 메쉬 밀도 설정 입력과 관련한 도면이다. 도 9는 본 발명의 실시예에 따른 서로 다른 메쉬 밀도의 예를 나타낸 도면이다. 도 10은 본 발명의 실시예에 따른 일정 크기의 메쉬 밀도를 가지는 예를 나타낸 도면이다.
- [0067] 경계 조건(Boundary conditions)은 메쉬 영역(202)에서 설정될 수 있다. 메쉬 영역(202)에서 선택된 경계 조건들은 리스트 될 수 있다. 고정 경계 조건들을 위하여, 1, 2, 3, 4 평면들은 고정 경계 탭(601)에서 평면 선택 아이콘을 사용하여 선택된다. 플렉스 경계 탭(602)에서 평면 선택 아이콘 클릭 후, 9, 10, 11, 12 평면들이 리튬 플렉스 경계 조건을 위해 선택될 수 있다. 상술한 메쉬 영역(202)에서의 설정에 따른 경계 조건을 가지는 모델이 도 7과 같이 나타날 수 있다.
- [0068] 도 8에 도시된 바와 같이, 메쉬는 밀도 탭에서 생성된다. 각 라인의 노드의 수는 모델 구조에서 요소 밀도를 제어한다. 이에 따라, 수가 증가할수록 밀도가 증가하고, 수가 작을수록 밀도가 감소할 수 있다. 노드의 수의 크기에 따라, 도 9에 도시된 바와 같이 다양한 메쉬 밀도가 제공될 수 있다. 앞서 샘플 영역에서 설정된 실린더 형태의 모델에 대한 밀도 예제를 위해 밀도가 7로 설정되는 경우, 도 10에 도시된 바와 같은 밀도로 표시될 수 있다.
- [0069] 도 11은 본 발명의 실시예에 따른 응력 분석의 동작 조건 및 실행과 관련한 도면이다.
- [0070] 도 11에 도시된 바와 같이, 시뮬레이션 영역(203)에서 시간, 충전율, 순환의 수, 크랙, 작업 이름이 각각 입력되고, "submit" 버튼(1001)이 선택되면, 응력 분석의 동작 조건이 설정될 수 있다. 도시된 도면에서는 시간 단위는 10초로 세팅되고, 충전율은 2.0C(1c는 1시간 동안의 충전전 사이클의 수). 사이클의 수는 1인 예제를 예시한 것이다.
- [0071] 도 12는 본 발명의 실시예에 따른 응력 분석 결과 중 플롯의 일 형태를 나타낸 도면이며, 도 13은 본 발명의 실시예에 따른 응력 분석 결과 중 응력 발생과 Li 농도 그래프를 나타낸 도면이다.
- [0072] 도 12를 참조하면, 앞서 설명한 샘플 영역(201)에서의 샘플 설정, 메쉬 영역(202)에서의 경계 조건 설정, 시뮬레이션 영역(203)에서의 동작 조건 설정 등에 대응하는 응력 분석 모델에 대한 결과 분석은 결과 영역에 출력될 수 있다. 응력의 시뮬레이션 결과 및 Li 농도는 매 반복 시마다 분할된다. 3D 기하학적 구조에서 중간 표면의 윤곽 플롯은 결과 윈도우에서 좌측 부분에 표시된다. 도 13에 도시된 바와 같이 응력 발생 수준 및 Li 농도를 나타내는 그래프는 시뮬레이션 기간 동안 시간에 비례하는 것으로 나타난다.
- [0073] 도 14는 본 발명의 실시예에 따른 크랙 전파 분석 인터페이스의 한 예를 나타낸 도면이다.
- [0074] 크랙 전파(Crack propagation)와 관련하여, 배터리는 긴 시간 동안 사용되며, 용량 감소는 불가피하다. 배터리가 충전 사이클을 겪는 동안, 리튬은 용적팽창 상의 확장 및 수축을 이끄는 애노드로 확산된다. 이러한 반복되는 부피 변화는 응력 농도의 변화를 야기하고, 마지막으로 배터리 셀 내측으로 크랙을 증가시킨다. 제공되는 크랙 전파 모델은 배터리 애노드에 사용되는 공통 실리콘 박막 필름에서 크랙 전파 시뮬레이션에 이용될 수 있다.
- [0075] 확산 방정식은 확산 유기 응력주기에 픽스 두 번째 범칙에 기반을 둔다. 확산 방정식이 한번 해결되면, 리튬 이온의 농도 및 대응되는 응력 분포를 획득할 수 있다. XFEM은 크랙 전파 시뮬레이션에 적용될 수 있다. 전극에서의 동시 확산 크랙 전파 분석은 대변형 및 비선형 거동을 고려한다.
- [0076] 도시된 크랙 전파 분석 인터페이스는 예컨대, 시스템 버퍼 영역(1401), 분석 영역(1402), 구조 영역(1403) 및 응력 영역(1404)을 포함할 수 있다. 시스템 버퍼 영역(1401)은 크랙 전파 분석에 적용될 물질 선택의 입력을 지원한다. 분석 영역(1402)은 분석과 관련한 적어도 하나의 기능 아이콘을 포함하고, 기능 아이콘 선택에 따라 다른 모델 분석 결과를 제공할 수 있다. 예컨대, 분석 영역(1402)은 응력, 풀셀, 크랙에 대응하는 아이콘을 포함하고, 아이콘 선택 시, 해당 모델의 분석 결과를 표시할 수 있다. 구조 영역(1403)에서는 크랙 발생의 정도를 시각적으로 표시할 수 있다. 응력 영역(1402)에는 리튬 산화의 정도와 Li 농도에 대응하는 응력 발생의 정도를 나타낼 수 있다.
- [0077] 도 15는 본 발명의 실시예에 따른 크랙 전파 분석에 이용되는 유한 요소 근사식을 나타낸 도면이며, 도 16은 본 발명의 실시예에 따른 수정된 시차 근사를 나타낸 도면이다.

[0078] 충전 사이클에서, 리튬 이온들은 애노드로 확산된다. 이것을 시뮬레이션하기 위하여, 다음 수학적 식 6에서와 같은 확산 방정식이 해결되어야 한다.

[0079] [수학적 식 6]

$$\frac{\partial c}{\partial t} - \nabla \cdot \left[D \left(\nabla c - \frac{\Omega c}{RT} \nabla \sigma_h \right) \right] = 0$$

[0080] 이 확산 방정식은 DIS 모델에서와 같이 확산 유기 응력 기간에서 픽스의 두 번째 법칙에 기반을 둔다. 확산 방정식 해결에 의하여, 리튬 이온의 농도 및 대응되는 응력 분포를 획득할 수 있다. XFEM은 크랙 전파 시뮬레이션에 적용될 수 있다. XFEM은 요소망 재구성(remeshing) 없이 크랙 전파를 시뮬레이션할 수 있는 확장 유한 요소법의 약어이다. 먼저, XFEM은 레벨 세팅에 의해 메쉬의 독립적인 크랙 기하학적 구조를 정의한다. 그리고 특정 값이 크랙 팁 요소 및 강화된 요소로 불리는 크랙 성분에 할당된다. 마지막으로, 도 15에 도시된 바와 같은 유한 요소 근사식이 이용될 수 있다.

[0082] 한편, 도 16에 도시한 수정된 시차 근사는 시간 효과를 설명하기 위해 고려될 수 있다. 확산은 크랙 전파 현상보다 더 많은 시간이 걸린다. 그래서 크랙 정지까지 몇몇 XFEM 분석이 해결될 수 있다. 그리고 다음 반복 기간 동안 확산 분석이 해결된다. 크랙 정지 기준은 임계 응력 강도 계수 및 유효 델타 K 값 비교에 의해 정의된다. 전극에서의 동시 확산 크랙 전파 분석은 대변형 및 비선형 거동을 고려한다.

[0083] 도 17은 본 발명의 실시예에 따른 크랙 전파 모델의 경계 조건을 나타낸 도면이다.

[0084] 모델 기하학적 구조는 면 변형 조건으로 가정되는 유한 요소법(finite element method(FEM)) 환경에서 200nm 넓이와 50nm 높이의 비결정질 실리콘 박막 필름이다. 실리콘 박막 필름은 상부 표면에서 반복 플렉스(충전율) 규정에 의해 리튬 산화된다. 기하학적 제약은 도시된 바와 같이 좌하단부가 우하단에 비하여 높은 상태를 의미하며, 필름의 상부 자유 수면이 무마찰될 수 있다. 이에 따라, 도시된 모델 기하학적 구조에서는 좌측 중단부에 초기 크랙(Initial crack)이 적용될 수 있다.

[0085] 도 18은 본 발명의 실시예에 따른 크랙 전파와 관련한 모델 파라미터들의 한 예를 나타낸 도면이다.

[0086] 도 18을 참조하면, 시스템 버퍼 영역(1401)에서는 크랙 항목, 기하학적 구조 항목, 시간 단위 항목, 충전을 항목, 순환 수 항목, 확산 계수 항목, Young's modulus(GPa) 항목, Shear modulus(GPa) 항목, Poisson's ratio 항목, 부피 확장률 항목, 초기 크랙 위치 항목, 작업 이름 항목을 포함할 수 있다. 상술한 각각의 항목들에 대한 값이 입력되면, 크랙 전파 분석과 관련한 입력이 완료될 수 있다. 크랙 전파와 관련한 설정이 완료된 후, 작업 이름 항목을 기입하고, "submit" 버튼(1801)이 선택되면, 이차 전지 특성 시뮬레이션 플랫폼은 크랙 전파 분석을 위한 계산을 수행할 수 있다. 크랙 전파 분석 결과는 도 14에 제시된 바와 같이, 구조 영역(1403) 및 응력 영역(1404)에 각각 제공될 수 있다.

[0087] 도 19는 본 발명의 실시예에 따른 풀셀 구조의 한 예를 나타낸 도면이며, 도 20은 본 발명의 실시예에 따른 단입자 풀셀 구조의 한 예를 나타낸 도면이다.

[0088] 도 19를 참조하면, 풀셀 모델은 주어진 물질 특성 셋을 위한 충방전 거동을 특징짓기 위한 리튬 이온 배터리 풀셀 인터페이스를 제공한다. 이 모델은 배터리 개발자들을 위한 다양한 설계 파라미터의 영향을 조사하는데 이용될 수 있다. 다양한 연구 결과에 기반하여 다른 동작 조건들 하에서 배터리 성능을 시뮬레이션할 수 있다.

[0089] 도 20에 도시한 단일 입자 풀셀 모델(Single particle full cell model)은 1차원 모델이다. 부극 및 정극은 1차원에서 등온 단일 입자로 가정한다. 전해질에서의 전위는 용액 저항으로 가정한다. 부가적으로, 전극의 전위 변화도는 무시하고, 반응 전류 밀도는 전극 내에서 균일하다. 이러한 가정들은 높은 전도성 전극들과 박막 구조 전극들에서 적절한 결과를 제공할 수 있다. 활성 입자들에서 리튬 확산(Li diffusion in active particles)과 관련하여, 전극에서 활성 입자들은 동일 크기를 가지는 구면형 입자로서 고려된다. 픽스 제2 법칙(수학적 식 7)은 정극 및 부극 내, 활성 입자에서 리튬 확산을 시뮬레이션하기 위해 추정된다.

[0090] [수학식 7]

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \left[\frac{\partial^2 C}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial C}{\partial r} \right]$$

[0091]

[0092] 도 21은 본 발명의 실시예에 따른 활성 및 비활성 SEI에 관한 도면이며, 도 22는 본 발명의 실시예에 따른 SEI의 반응 설명을 나타낸 도면이다. 도 23은 본 발명의 실시예에 따른 SEI 성장 이미지에 관한 도면이며, 도 24는 본 발명의 실시예에 따른 활성화 SEI 및 패시브 SEI 성장률을 나타낸 도면이다.

[0093] 활성 및 비활성 SEI(Solid Electrolyte interface) 순환 성장 모델은 동역학 몬테카를로 법칙에 의해 시뮬레이션된다. 흡착, 탈착, 확산, 패시브(또는 비활성) 물질 형성과 같은 현상이 고려된다. 활성(또는 액티브) SEI는 탈착 및 확산과 관계된 것이지만, 패시브 SEI 레이어는 흡착 및 패시브 물질들의 형성에 관계된다.

[0094] 도 22에서, K_1 , K_2 는 표면 커버리지 θ 에서의 함수로서 고려된다. η 은($\eta = V - U_n$) 과전위, K_3 는 교환 전류 밀도 함수이다.

[0095] 도 23에 나타낸 바와 같이, 충전 사이클 동안 SEI가 성장되고, 도 24에 도시된 바와 같이, 충전 기간 동안 활성 SEI는 일정하지만, 비활성화 SEI는 선형적으로 증가하다가 포화된다. 또한, 방전 기간 동안 활성 SEI는 단계적으로 증가하고, 비활성화 SEI는 완만한 곡선으로 감소한다. 수치 시뮬레이션에 의한 유효 확산도(Effective diffusivity by numerical simulation)는 수치 근사에 의해 계산될 수 있다.

[0096] 도 25는 본 발명의 실시예에 따른 풀셀 분석과 관련한 로비 페이지의 한 예를 나타낸 도면이다.

[0097] 이차 전지 특성 시뮬레이션 플랫폼(예: 신뢰도 플랫폼)을 운용하면, 로비 윈도우가 표시될 수 있다. 풀셀 분석과 관련한 로비 페이지는 예컨대, 시각화 윈도우 영역(2501), 물질 선택 테이블 영역(2502), 전극 작업 테이블 영역(2503), 풀셀 작업 테이블 영역(2504)을 포함할 수 있다. 물질 선택 테이블 영역(2502)은 풀셀 분석을 위한 물질을 선택할 수 있는 영역일 수 있다. 전극 작업 테이블 영역(2503)은 풀셀 분석에 이용되는 전극을 선택할 수 있는 영역이며, 풀셀 작업 테이블 영역(2504)은 풀셀 분석에 이용될 수 있는 다양한 재료들에 대한 리스트가 표시될 수 있다.

[0098] 도 26은 본 발명의 실시예에 따른 풀셀 분석과 관련한 물질 모델 선택과 도면이다. 도 27은 본 발명의 실시예에 따른 풀셀 분석과 관련한 작업 페이지 전환과 관련한 상태바를 나타낸 도면이고, 도 28은 본 발명의 실시예에 따른 풀셀 분석 윈도우의 한 예를 나타낸 도면이다. 도 29는 본 발명의 실시예에 따른 풀셀 분석 윈도우 중 물질 특성 입력 화면을 나타낸 도면이고, 도 30은 본 발명의 실시예에 따른 개방 회로 전압 설정과 관련한 도면이며, 도 31은 본 발명의 실시예에 따른 용적량과 전압과의 그래프를 나타낸 도면이다. 도 32는 본 발명의 실시예에 따른 풀셀 시뮬레이션 설정 화면을 나타낸 도면이며, 도 33은 본 발명의 실시예에 따른 풀셀 분석 모델 결과 아이콘들을 나타낸 도면이다. 도 34는 본 발명의 실시예에 따른 풀셀 분석 모델 결과를 나타낸 도면이다.

[0099] 도 26에 도시된 바와 같이, 물질 선택 테이블 영역(2502)에서 풀셀 모델 시뮬레이션하기 위한 적어도 하나 예컨대, 두 개의 물질들이 선택될 수 있다. 물질 선택 후, 작업 페이지로 전환할 수 있는 작업 객체를 도 27에 도시된 바와 같이 선택하면, 도 28에 도시한 바와 같이, 풀셀 분석 윈도우가 표시될 수 있다.

[0100] 풀셀 분석 윈도우는 도 28에 도시된 바와 같이, 물질 속성 영역(2801), 개방 회로 전압 영역(2802), 시뮬레이션 영역(2803) 및 분석 영역(2804)을 포함할 수 있다.

[0101] 풀셀 분석 윈도우 중 도 29에 도시된 바와 같이, 물질 속성 영역(2801)을 통하여 다양한 파라미터 기입이 수행될 수 있다. 예컨대, 물질 속성 영역(2801)은 애노드 속성을 기입하는 영역, 캐소드 속성을 기입하는 영역, 전해질 속성을 기입하는 영역을 포함할 수 있다. 상술한 물질 속성 영역(2801)은 로비 페이지에서 물질 선택에 의하여 자동으로 기입될 수도 있다.

[0102] 개방 회로 전압 영역(2802)을 통하여 평형 개방 전위(Setting Equilibrium open potential)가 설정될 수 있다. 이와 관련하여 개방 회로 전압 영역(2802)에서, 평형 개방 전압 아이콘(2820)이 선택될 수 있다. 평형 개방 전위와 관련한 OCV 데이터가 도 30에 도시된 바와 같이 기입되면, 도 31에서와 같이 용적량과 전압 관계 그래프가 2D 플롯으로 출력될 수 있다.

[0103] 동작 조건 세팅(Setting operating condition)과 관련하여, 도 32에서와 같이, 시뮬레이션 영역(2803)이 제공될 수 있다. 시뮬레이션 영역(2803)은 경계 조건들, 예컨대, 방전 전류, 컷 오프 전압, 시간, 사이클 수 및 작

업 이름을 기입할 수 있는 항목을 제공할 수 있다.

- [0104] 결과 분석(Result analysis)과 관련하여, 시뮬레이션 종료 후, 로비 페이지에서 특정 작업이 선택되면, 도 33에 도시된 바와 같이, 풀셀 분석 윈도우에서, 2D 플롯 및 분석을 위한 2D 이미지를 생성하기 위한 결과 아이콘이 제공될 수 있다. 예컨대, 순환 거동을 위한 2D를 생성하는 용량 전압 비교 아이콘(3301), 용량 변이를 위한 2D 플롯을 생성하는 순환 용량 아이콘(3302), 각 전극에서의 Li 농도를 위한 2D 플롯을 생성하는 농도 아이콘(3303), SEI 2D 이미지를 생성하는 SEI 아이콘(3304)이 제공될 수 있다.
- [0105] 상술한 결과 분석 아이콘 선택에 따라, 도 34에 도시된 바와 같이, 용량 대비 전압 분석 그래프(3401), 순환 용량 그래프(3402), 농도 그래프(3403), SEI 그래프(3404) 중 적어도 하나가 표시될 수 있다.
- [0106] 도 35는 본 발명의 실시예에 따른 이차 전지 특성 시뮬레이션 방법을 설명하는 도면이다.
- [0107] 도 35를 참조하면, 본 발명의 실시예에 따른 이차 전지 특성 시뮬레이션 방법은 3501 과정에서, 전자 장치(예: 사용자 장치 또는 서버)가 이차 전지 특성 시뮬레이션과 관련한 로비 페이지를 출력할 수 있다. 로비 페이지는 응력 분석 항목, 크랙 전과 분석 항목 및 풀셀 분석 항목 중 적어도 하나의 항목을 포함할 수 있다. 또는, 로비 페이지는 응력 분석 항목, 크랙 전과 분석 항목 및 풀셀 분석 항목 중 적어도 하나에 의한 분석을 수행할 물질을 선택할 수 있는 테이블들을 포함할 수 있다. 로비 페이지에서 제공되는 물질들은 가상 애노드 시뮬레이션 플랫폼 및 가상 캐소드 시뮬레이션 플랫폼 등에서 모델링된 물질들일 수 있다. 또는, 로비 페이지에서 물질 선택 및 항목 선택이 함께 수행될 수 있다.
- [0108] 3503 과정에서, 전자 장치는 항목 선택과 관련한 사용자 입력이 수신되는지 확인할 수 있다. 전자 장치는 항목 선택과 관련한 사용자 입력이 없는 경우 이전 과정 3501 상태를 유지할 수 있다. 3501 상태에서, 전자 장치는 사용자 입력에 따른 로비 페이지 운용을 처리할 수 있다.
- [0109] 항목 선택과 관련한 사용자 입력이 발생하면, 3505 과정에서, 전자 장치는 선택된 항목에 대응하는 입력 영역 및 결과 영역을 포함하는 사용자 인터페이스(예: 작업 페이지)를 출력할 수 있다. 예컨대, 전자 장치는 응력 분석, 크랙 전과 분석 또는 풀셀 분석과 관련하여 물질의 종류, 물질의 속성, 물질의 동작 조건 등을 입력할 수 있는 입력 영역, 입력에 따른 결과를 출력할 수 있는 출력 영역을 제공할 수 있다. 전자 장치는 우선적으로 입력 영역을 제공하고, 입력 영역에서 정보 입력 후, 실행이 요청되면, 그에 대응하는 결과 영역을 출력할 수 있다. 이때, 전자 장치는 입력 영역과 결과 영역을 하나의 윈도우에서 출력하거나 또는 입력 영역과 구분되는 별도의 윈도우를 생성하여 결과 영역을 출력할 수 있다. 결과 영역을 별도의 윈도우로 출력하는 경우, 결과 영역을 포함하는 결과 윈도우는 입력 영역을 포함하는 입력 윈도우 상에 오버랩되어 출력될 수 있다.
- [0110] 3507 과정에서, 전자 장치는 페이지 전환(예: 로비 페이지로의 전환)과 관련한 사용자 입력이 발생하는지 확인할 수 있다. 페이지 전환과 관련한 입력이 발생하지 않으면, 3507 과정에서, 전자 장치는 이차 전지 특성 시뮬레이션 기능과 관련한 종료 입력이 발생하는지 확인할 수 있다. 종료 입력이 발생하지 않으면, 전자 장치는 3505 이전으로 분기하여 이하 과정을 재수행할 수 있다. 3507 과정에서, 페이지 전환과 관련한 사용자 입력이 수신되면, 전자 장치는 3501 과정으로 분기하여 이하 과정을 재수행할 수 있다.
- [0111] 한편, 상술한 설명에서는 물질에 대한 응력 분석, 크랙 전과 분석, 풀셀 분석 등과 관련한 항목이 로비 페이지에서 제공되는 것으로 설명하였으나, 본 발명이 이에 한정되는 것은 아니다. 예컨대, 로비 페이지는 적어도 하나의 물질을 선택할 수 있는 적어도 하나의 테이블을 제공하고, 테이블에서 특정 물질 선택 시, 선택된 물질에 대한 응력 분석, 크랙 전과 분석, 풀셀 분석과 관련한 항목은 작업 페이지에서 제공될 수 있다. 또는, 이차 전지 특성 시뮬레이션 플랫폼은 응력 분석과 관련한 로비 페이지와 작업 페이지, 크랙 전과 분석과 관련한 로비 페이지와 작업 페이지, 풀셀 분석과 관련한 로비 페이지와 작업 페이지를 구분하여 제공할 수도 있다.
- [0112] 한편, 본 명세서와 도면에 개시된 본 발명의 실시예들은 이해를 돕기 위해 특정 예를 제시한 것에 지나지 않으며, 본 발명의 범위를 한정하고자 하는 것은 아니다. 여기에 개시된 실시예들 이외에도 본 발명의 기술적 사상에 바탕을 둔 다른 변형 예들이 실시 가능하다는 것은, 본 발명이 속하는 기술분야에서 통상의 지식을 가진 자에게 자명한 것이다.

부호의 설명

- [0113] 사용자 장치 : 100
- 메인 서버 : 110

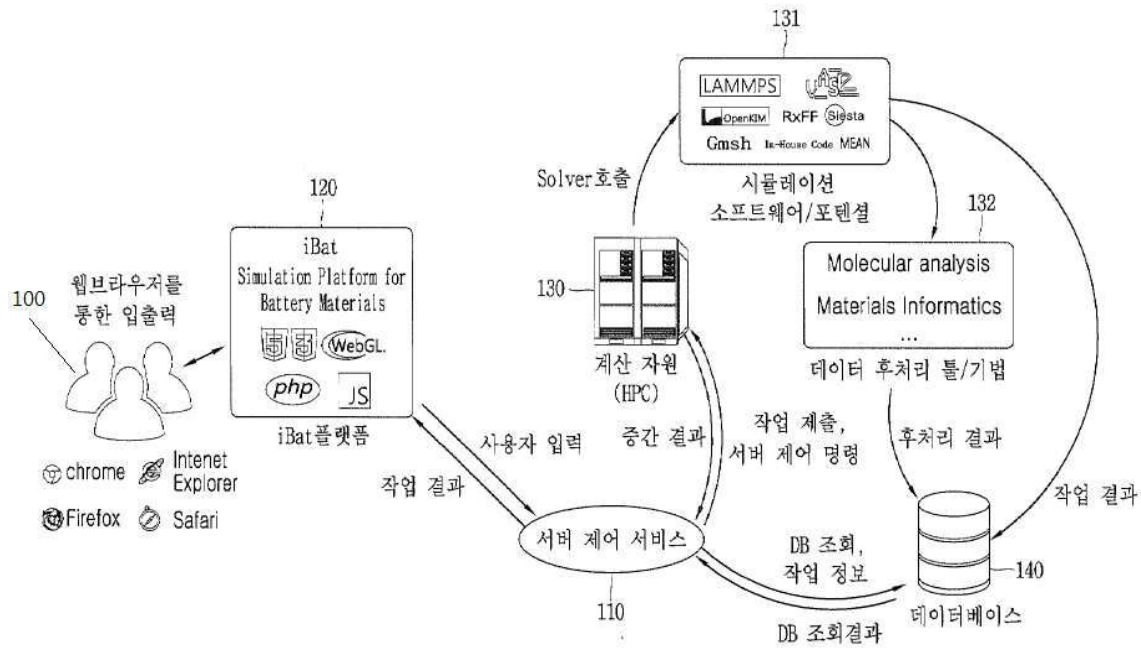
사용자 인터페이스 : 120

시뮬레이션 서버 : 130

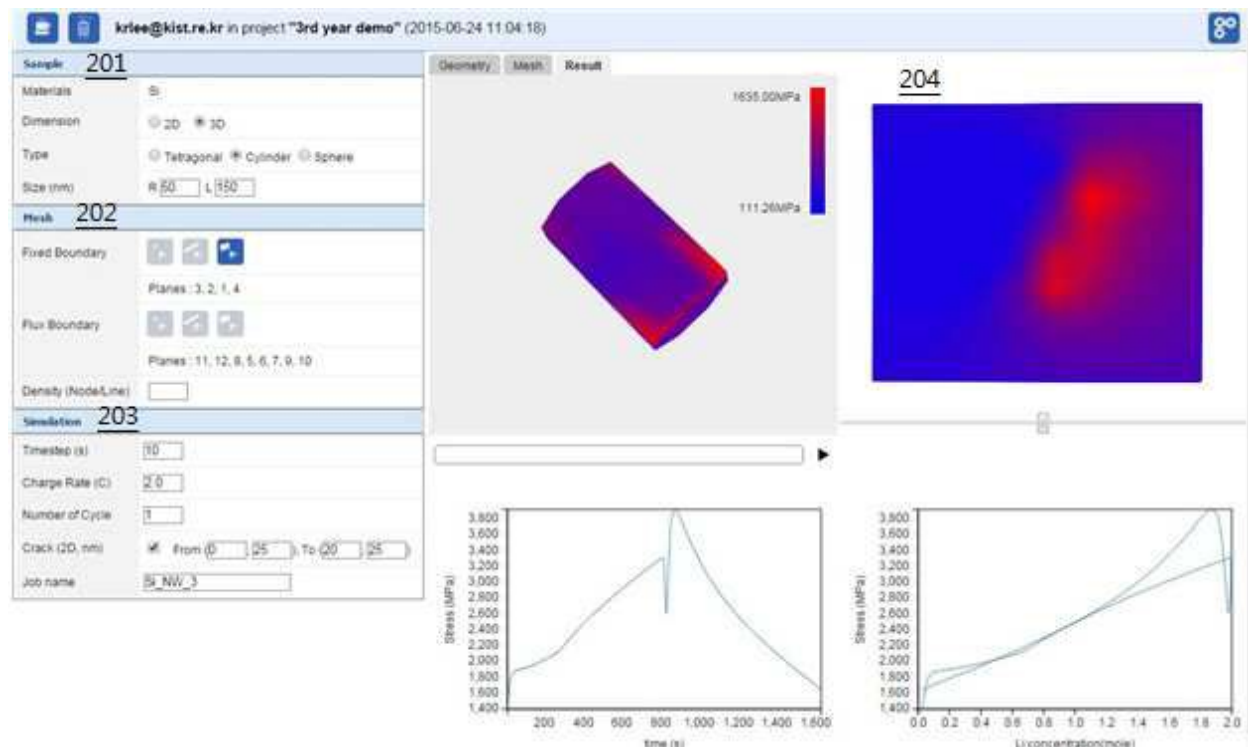
데이터베이스 : 140

도면

도면1



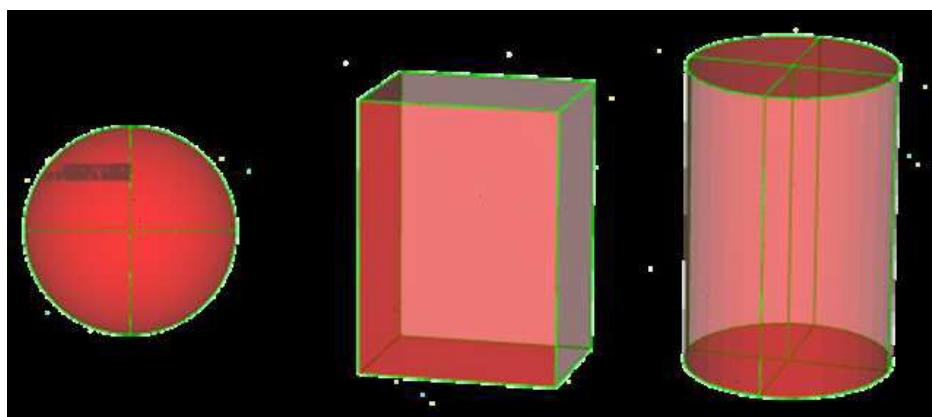
도면2



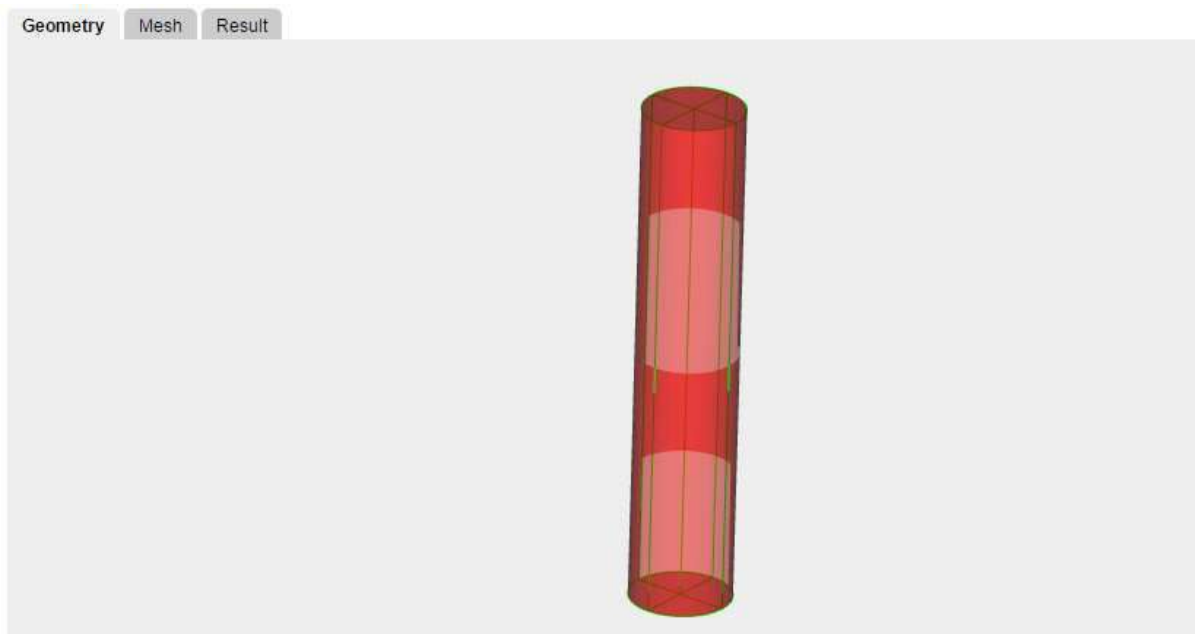
도면3

Sample	201	
Materials	Silicon	
Dimension	<input type="radio"/> 2D <input checked="" type="radio"/> 3D	
Type	<input type="radio"/> Tetragonal <input checked="" type="radio"/> Cylinder <input type="radio"/> Sphere	
Size (nm)	R <input type="text" value="100"/> L <input type="text" value="500"/>	Build <input type="text" value="301"/>

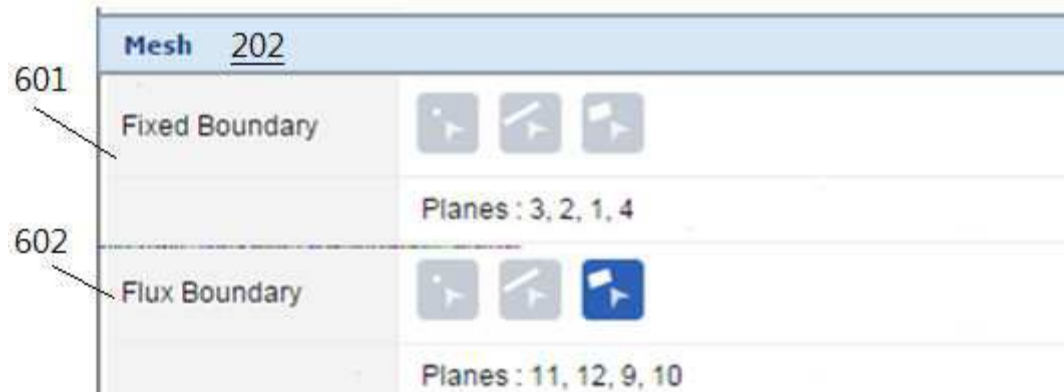
도면4



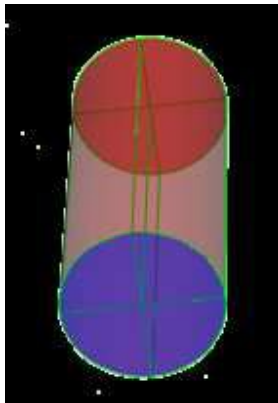
도면5



도면6



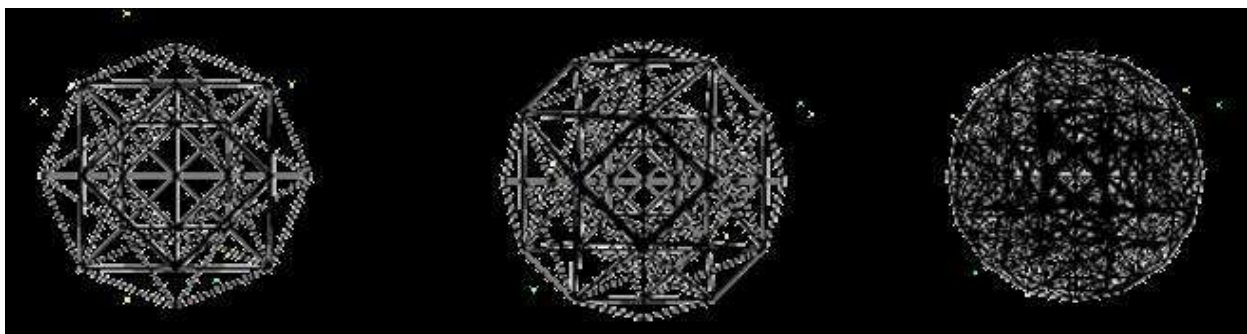
도면7



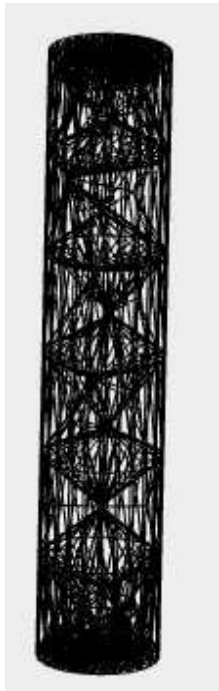
도면8



도면9



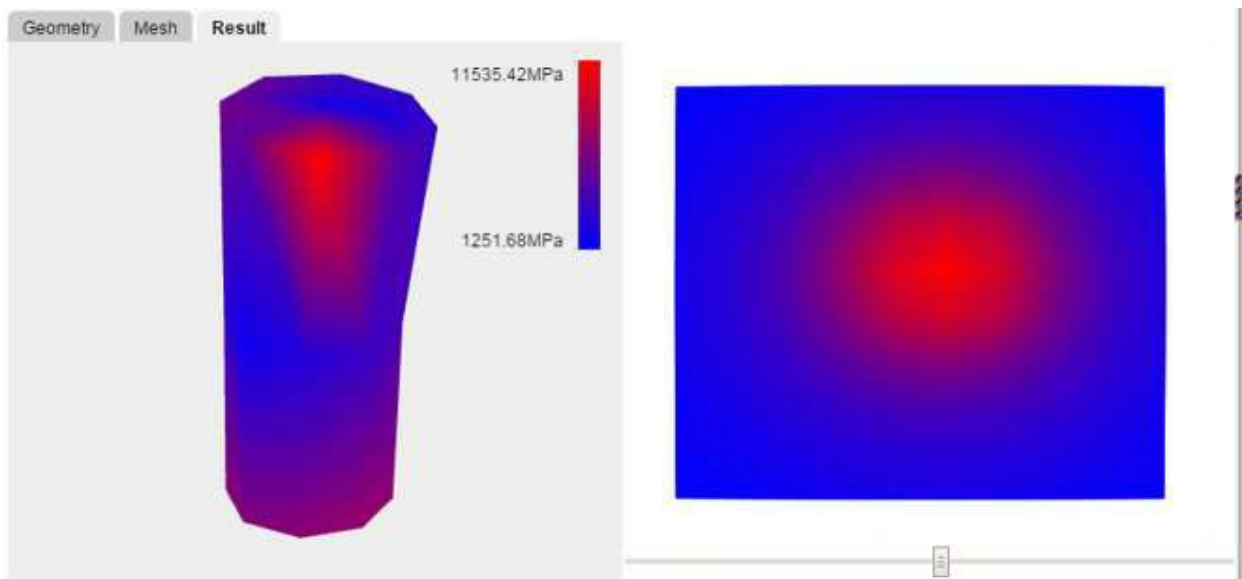
도면10



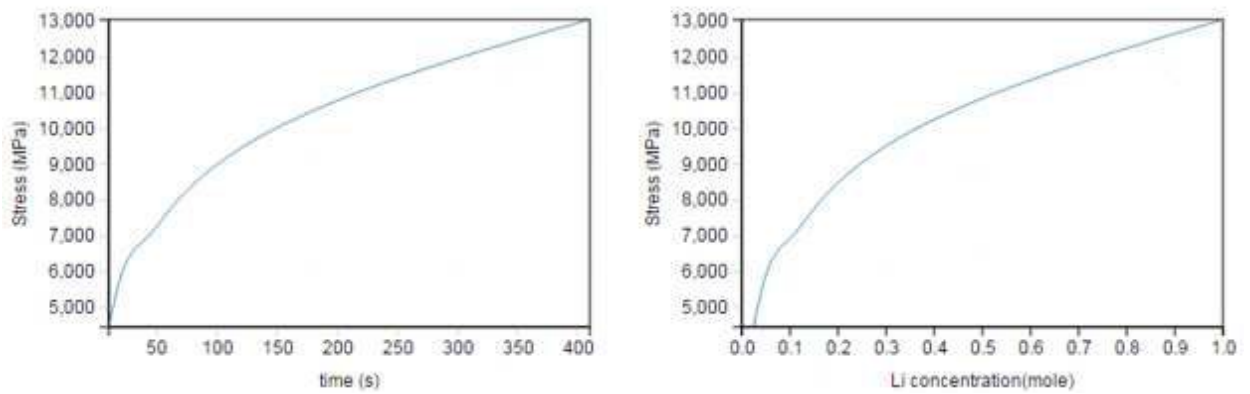
도면11

Simulation	
Timestep (s)	<input type="text" value="10"/>
Charge Rate (C)	<input type="text" value="2.0"/>
Number of Cycle	<input type="text" value="1"/>
Crack (2D, nm)	<input type="checkbox"/> From (<input type="text" value="0"/> , <input type="text" value="25"/>) , To (<input type="text" value="20"/> , <input type="text" value="25"/>)
Job name	<input type="text" value="SSND_test"/> <input type="button" value="Submit"/>

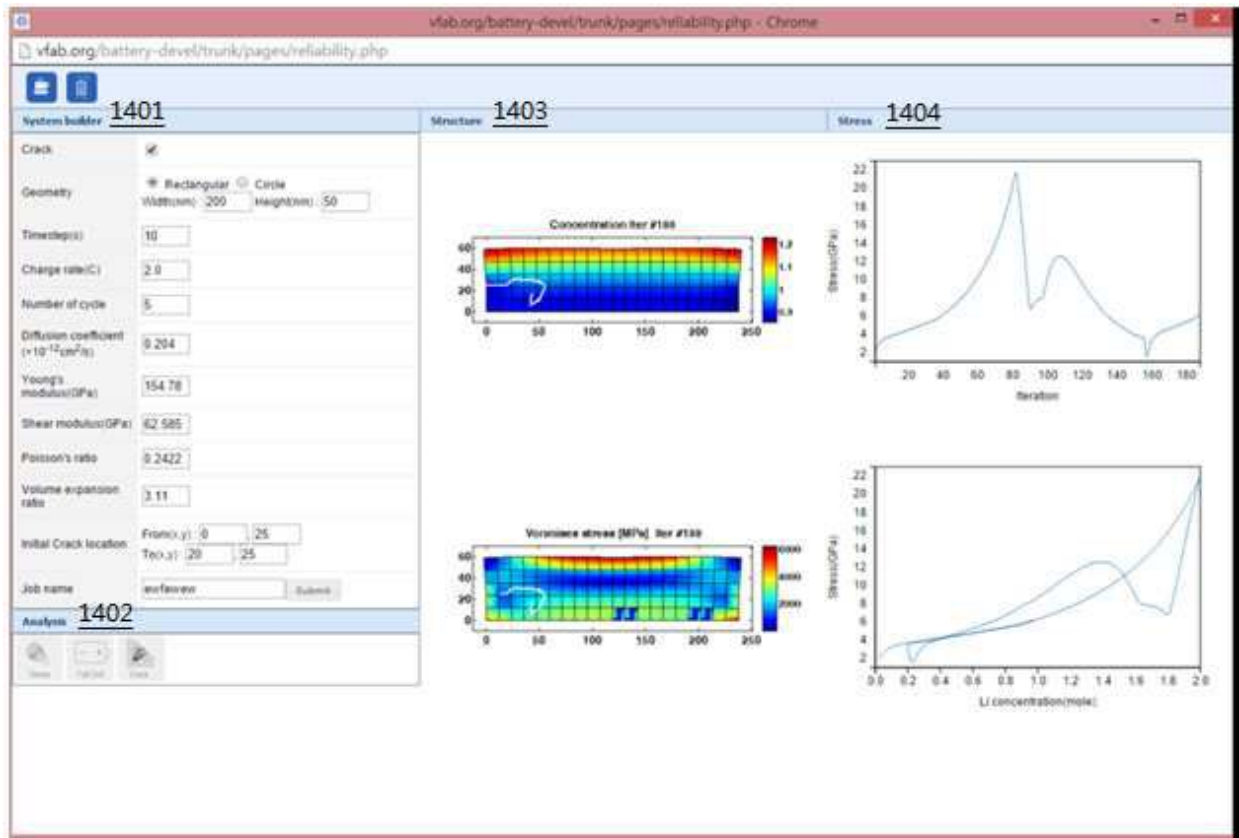
도면12



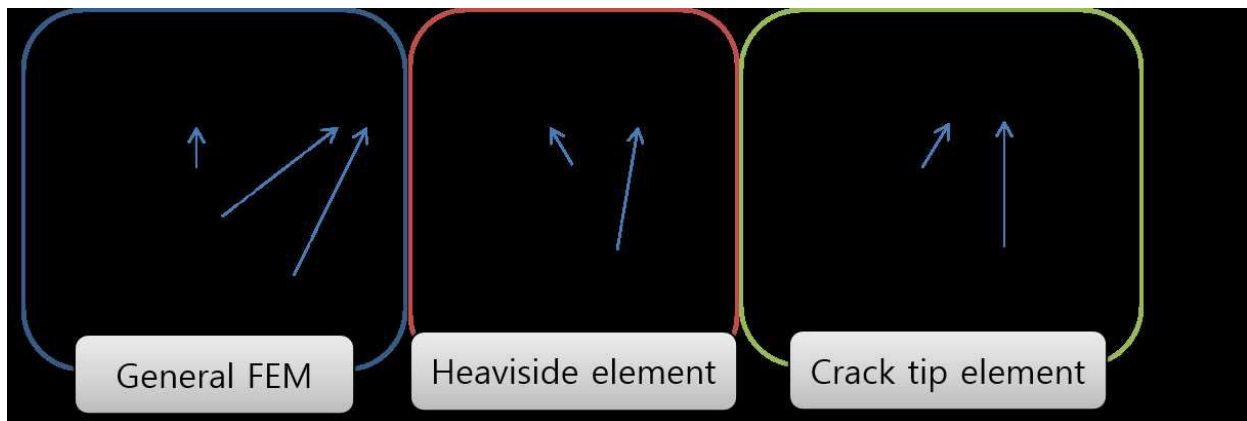
도면13



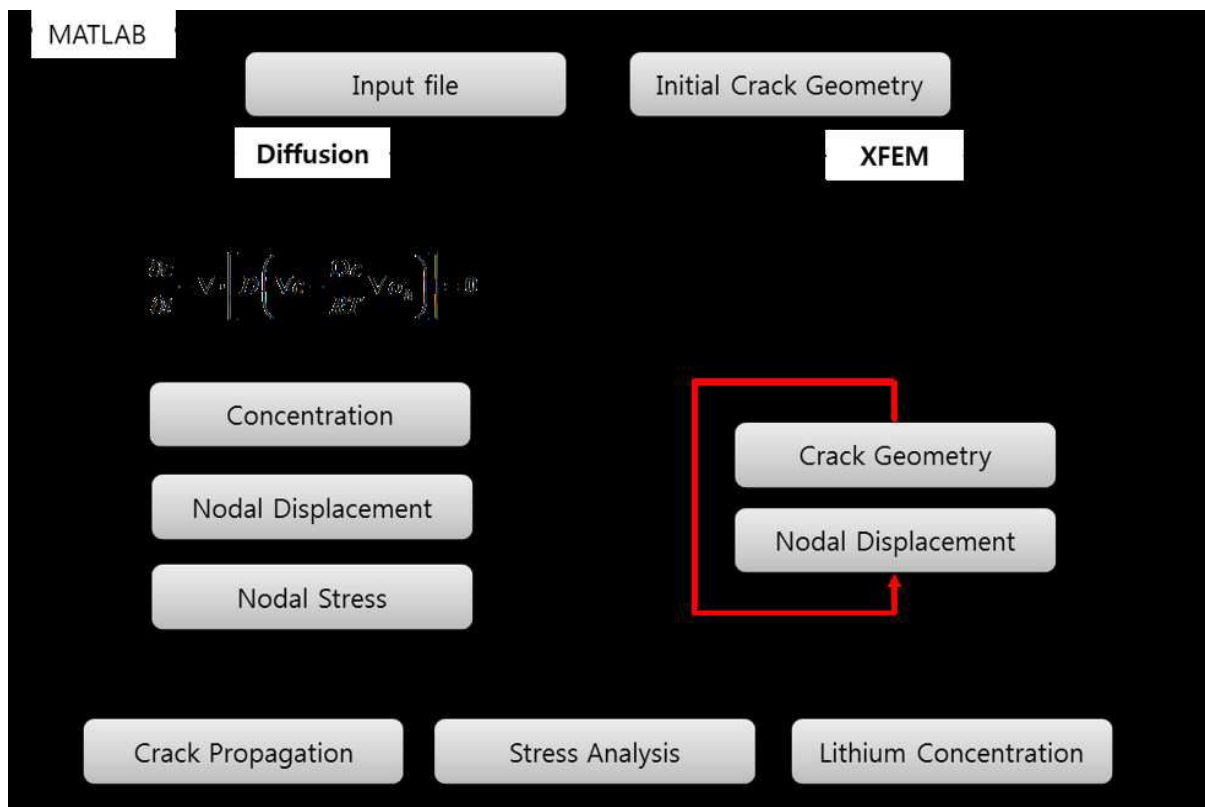
도면14



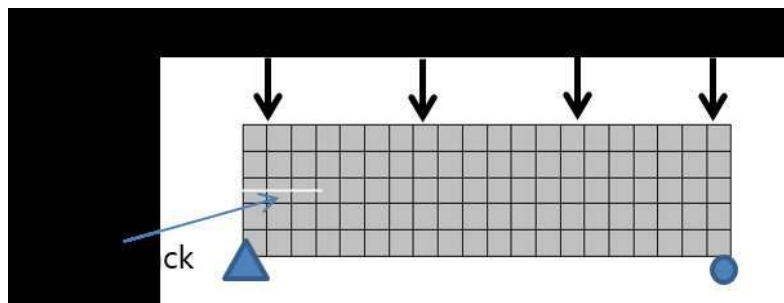
도면15



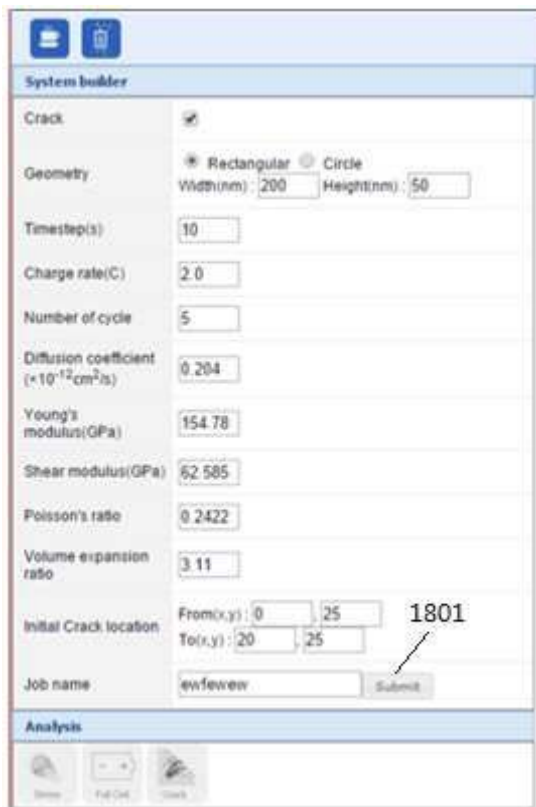
도면16



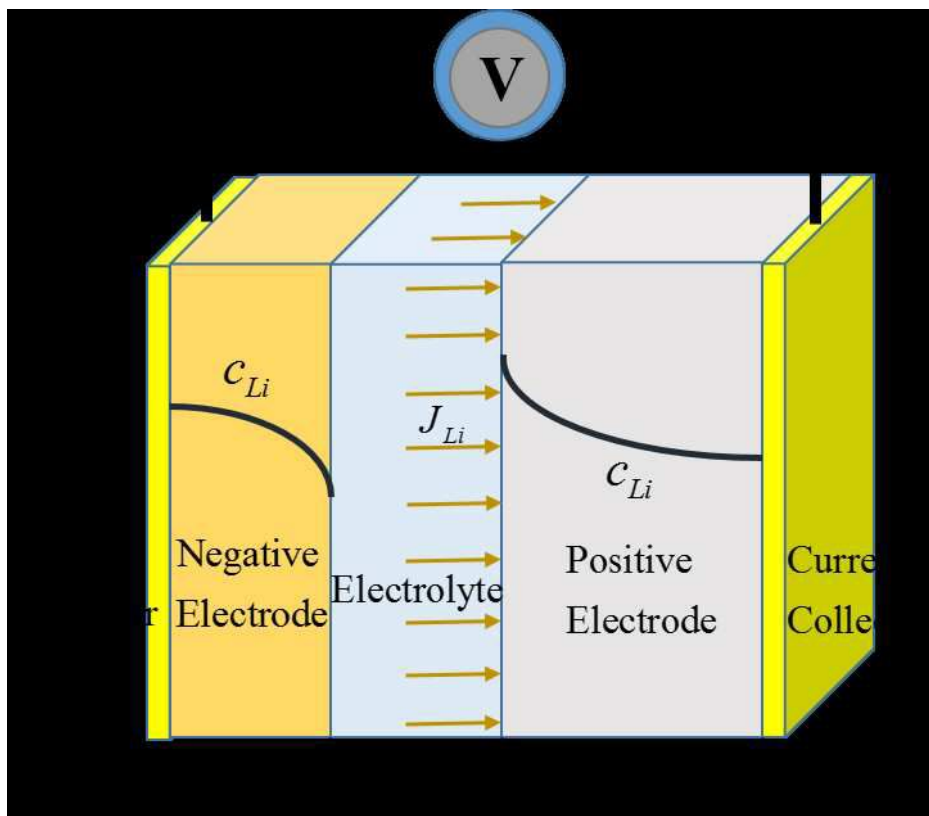
도면17



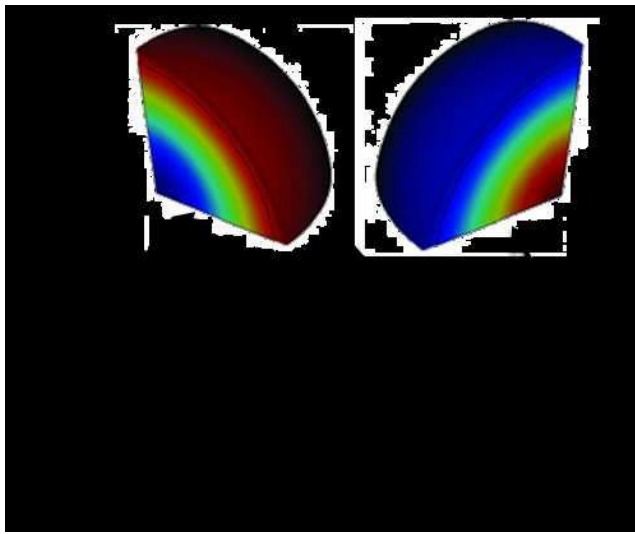
도면18



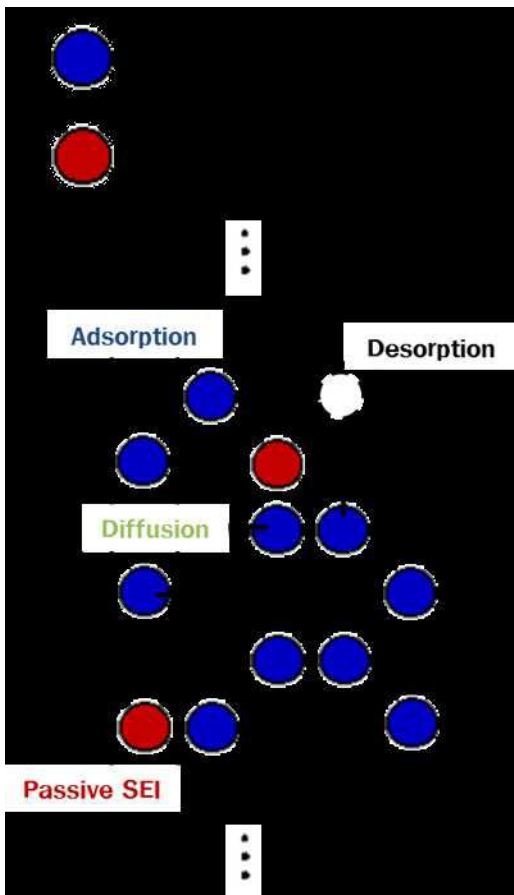
도면19



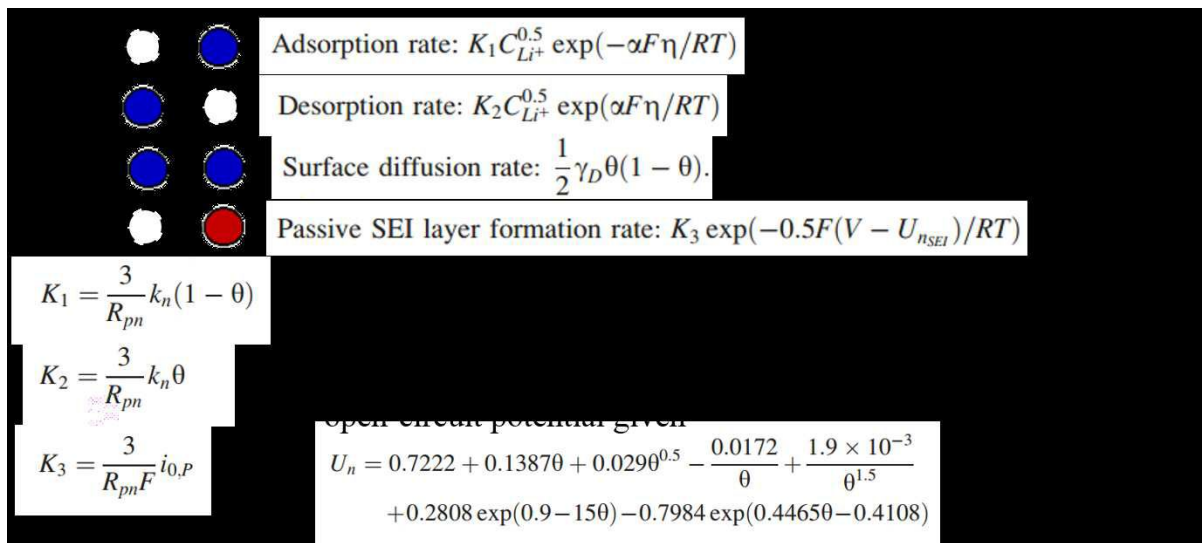
도면20



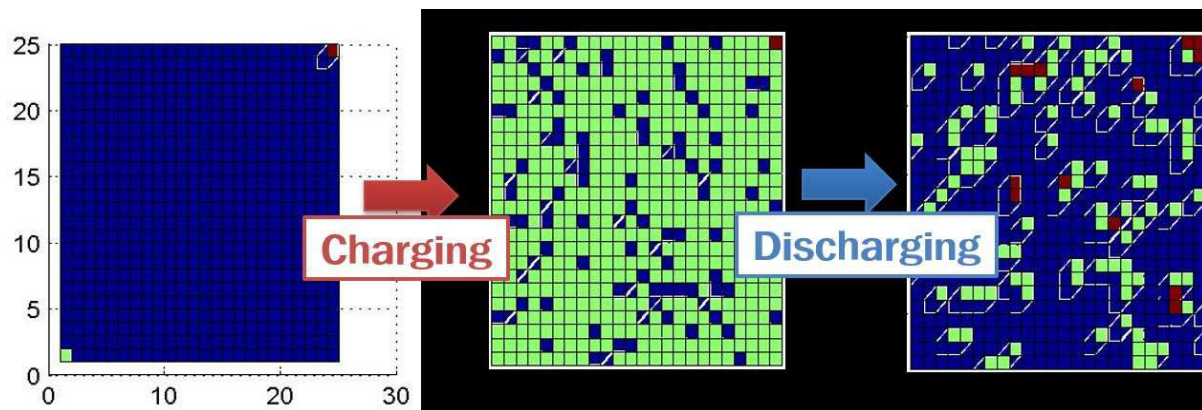
도면21



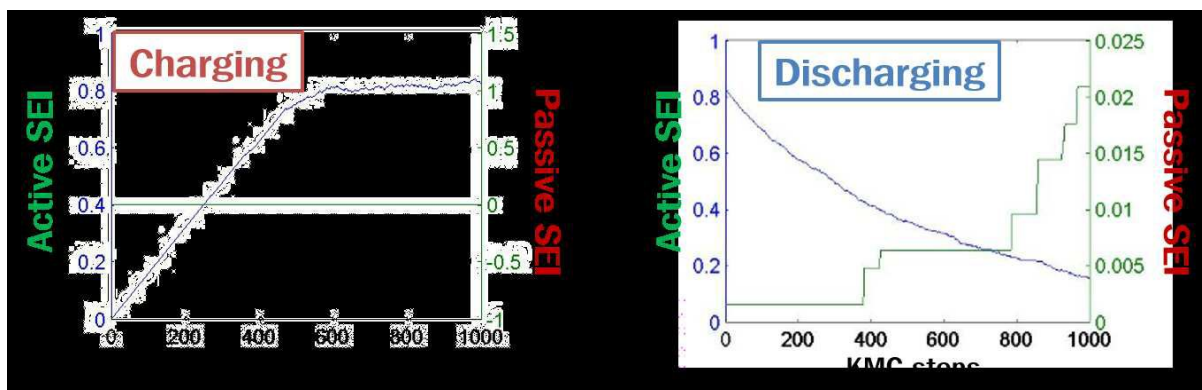
도면22



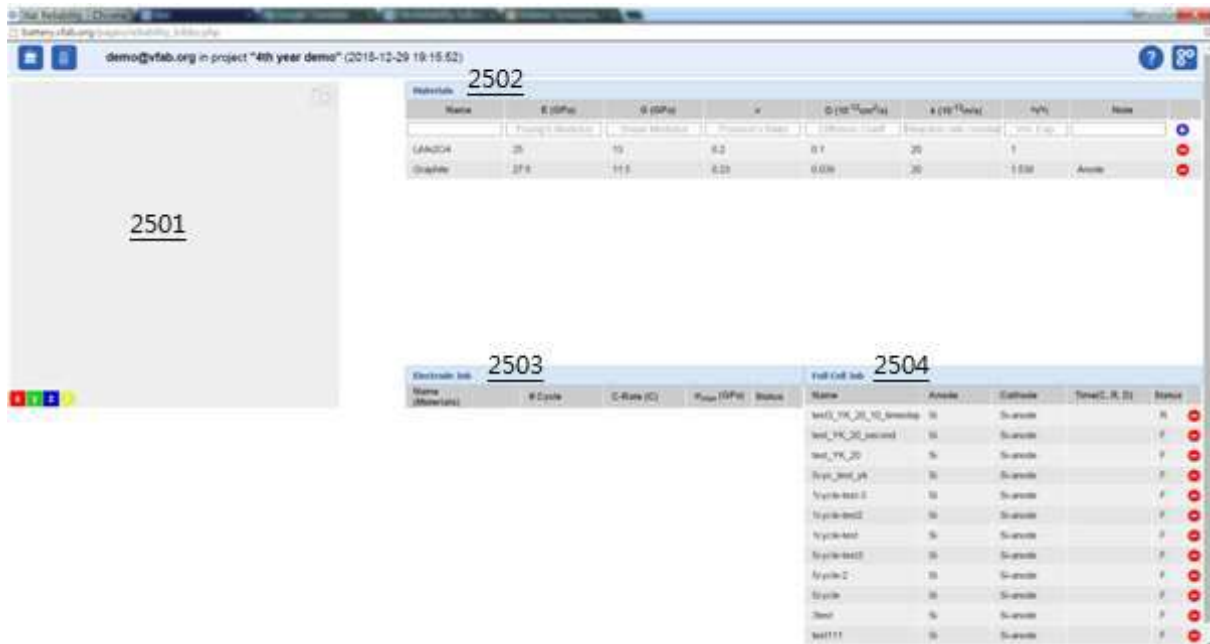
도면23



도면24



도면25



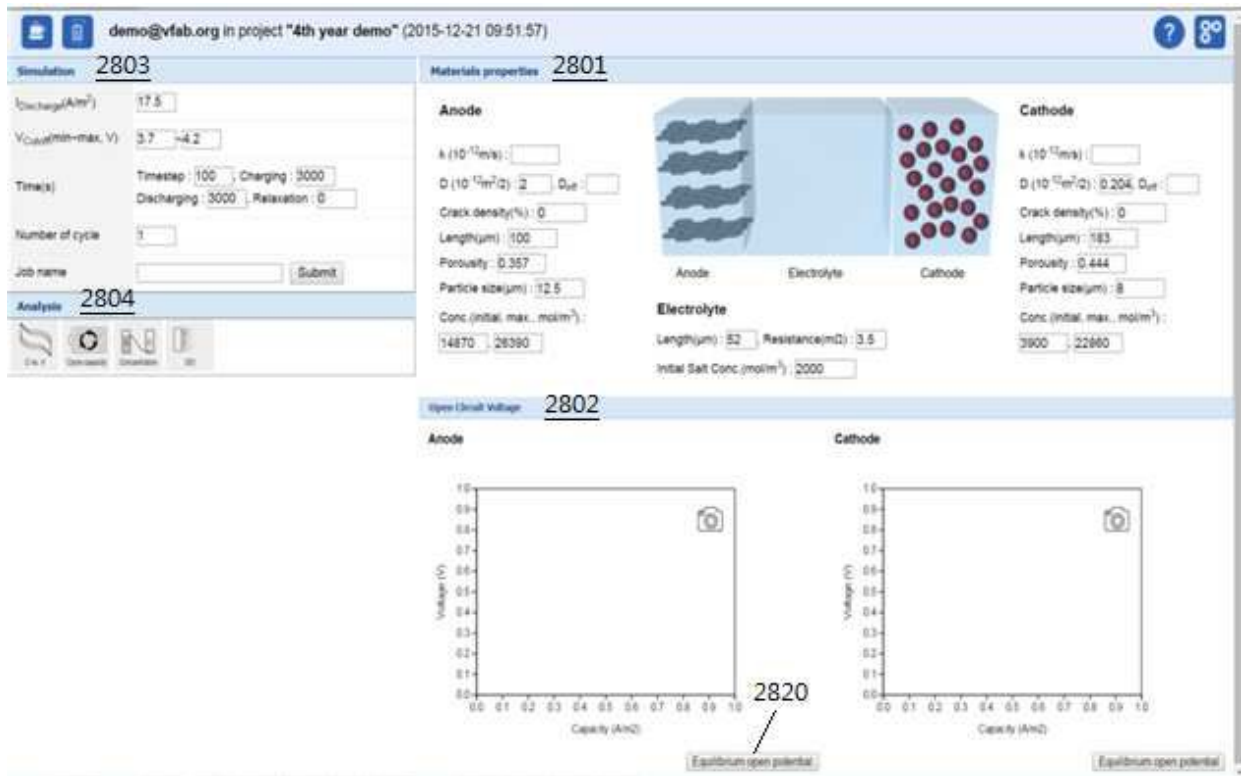
도면26

Materials							
Name	E (GPa)	G (GPa)	ν	D ($10^{-12} \text{cm}^2/\text{s}$)	k (10^{-12}m/s)	V_f/V_i	Note
	Young's Modulus	Shear Modulus	Poisson's Ratio	Diffusion Coeff.	Reaction rate constan	Vol. Exp.	
LiMn2O4	25	13	0.2	0.1	20	1	
Graphite	27.6	11.5	0.23	0.039	20	1.538	Anode

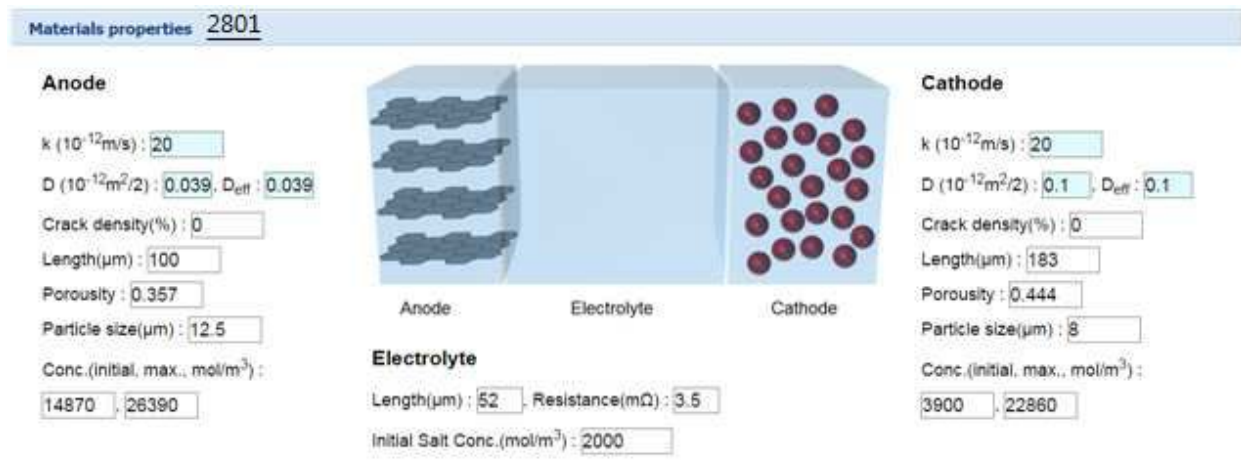
도면27



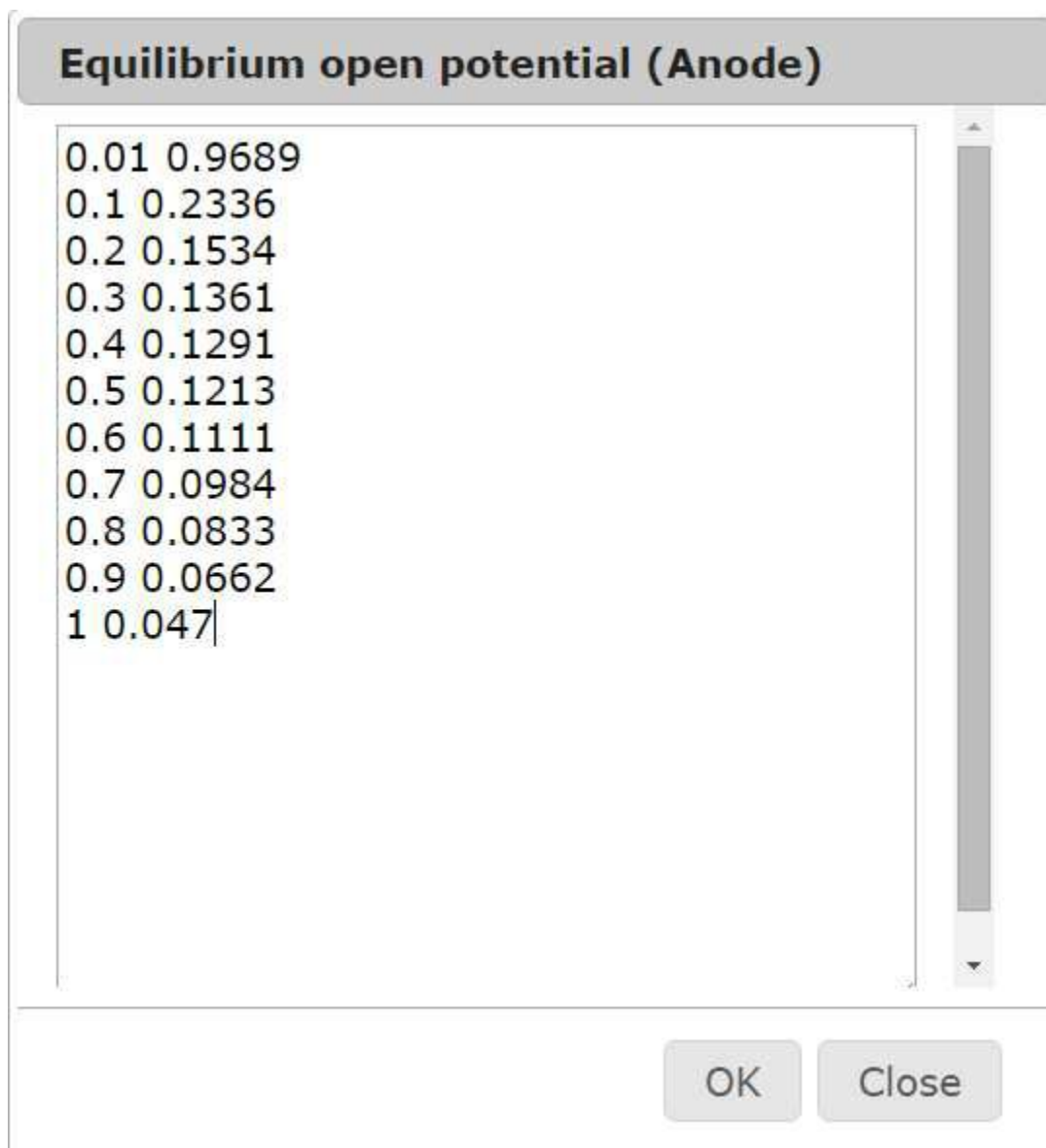
도면28



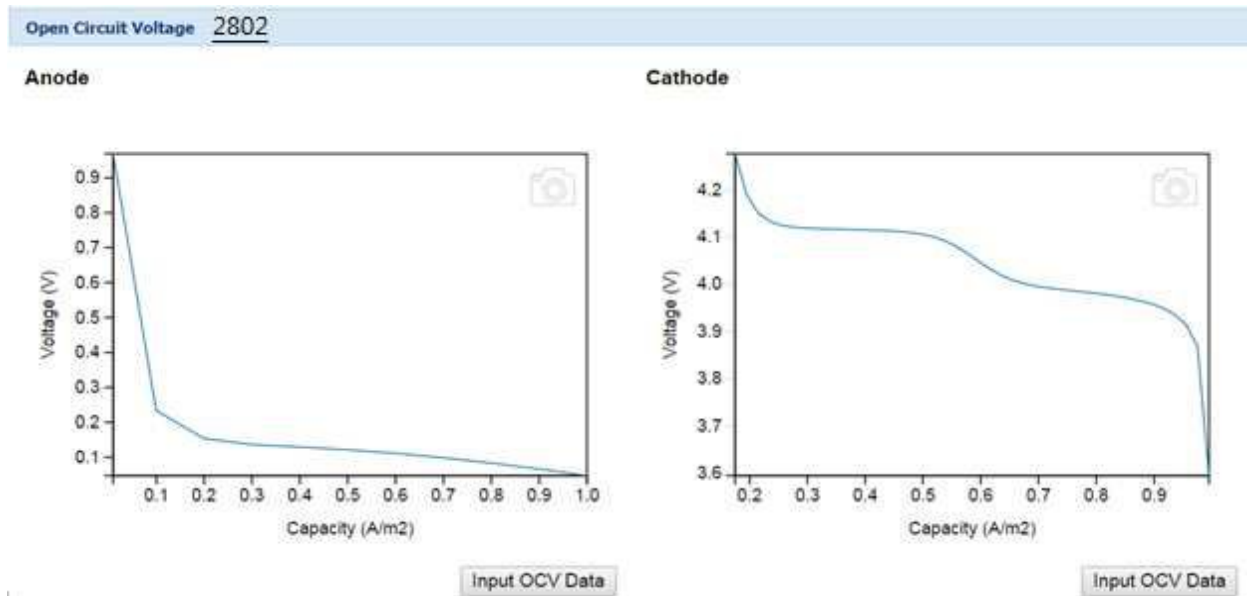
도면29



도면30



도면31

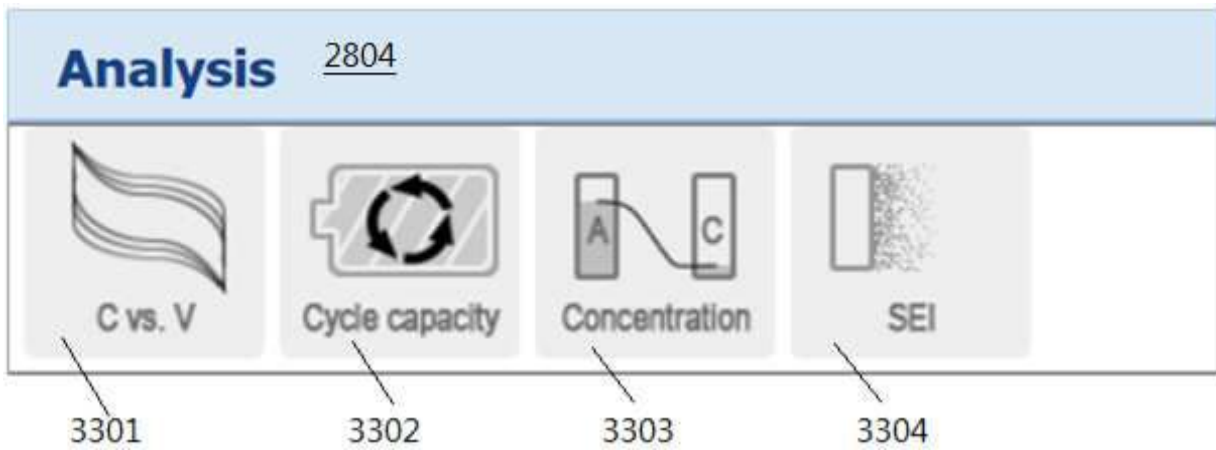


도면32

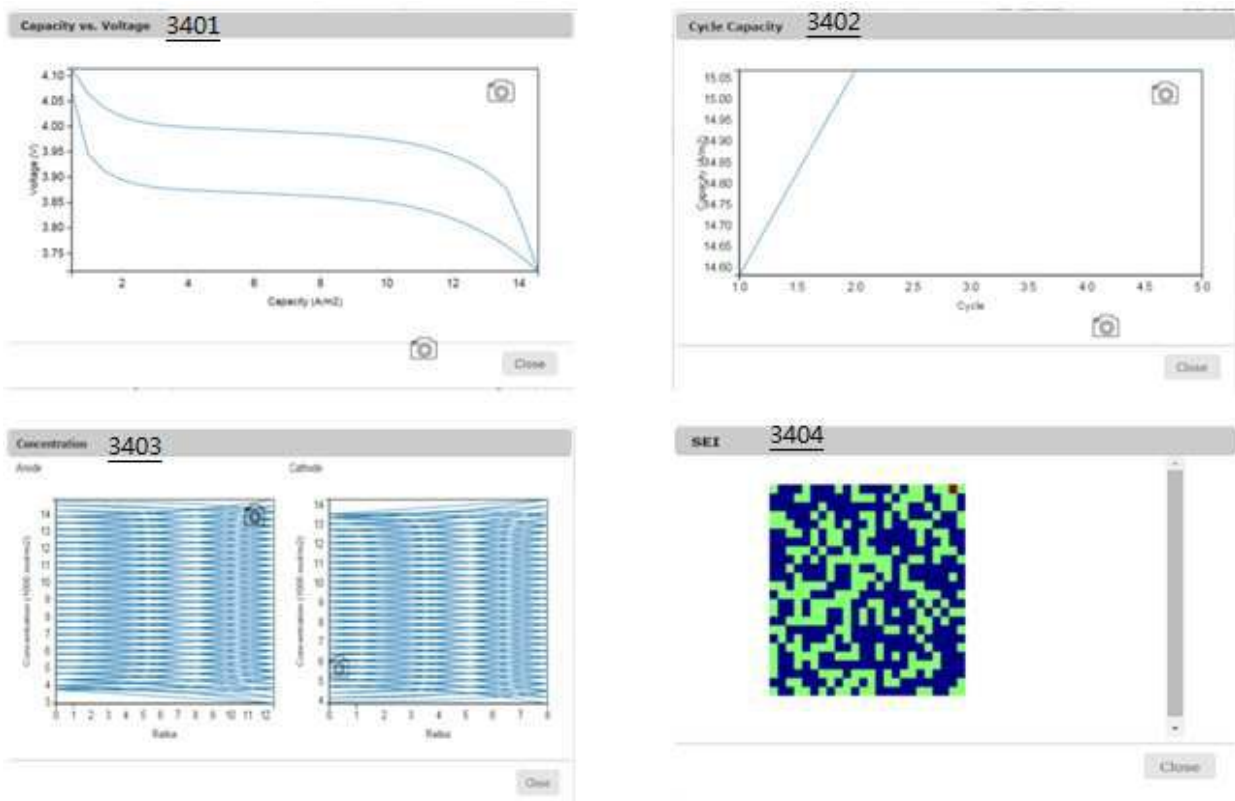
Simulation 2803

I _{Discharge} (A/m ²)	<input type="text" value="17.5"/>
V _{Cutoff} (min~max, V)	<input type="text" value="3.7"/> ~ <input type="text" value="4.2"/>
Time(s)	Timestep : <input type="text" value="100"/> , Charging : <input type="text" value="3000"/> Discharging : <input type="text" value="3000"/> , Relaxation : <input type="text" value="0"/>
Number of cycle	<input type="text" value="1"/>
Job name	<input type="text"/> <input type="button" value="Submit"/>

도면33



도면34



도면35

