

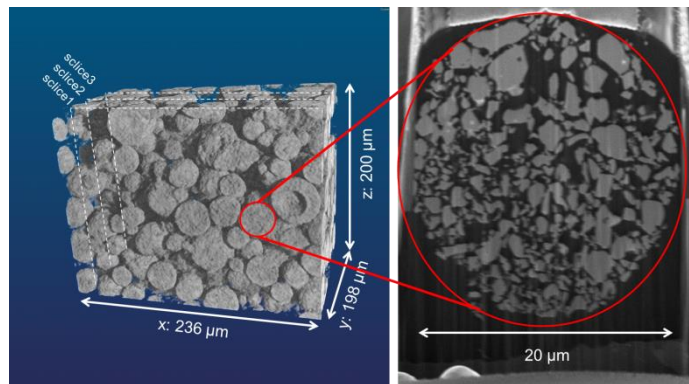
Masterarbeit

Mathematisches Modell für Lithium-Ionen-Batteriezellen mit porösen Aktivmaterialpartikeln

Motivation und Zielsetzung

Die Kathode von Lithium-Ionen-Zellen besteht aus kugelförmigen Aktivmaterialpartikeln, in die das Lithium bei Betrieb und Laden ein- und ausgebaut wird. Derzeit sind diese Partikel weitgehend dicht, d.h. frei von Porosität. Aus diesem Grund wird auch beim klassischen Newmanmodell für das elektrochemische Verhalten einer Zelle davon ausgegangen, dass die Partikel dicht sind und keine freie Oberfläche im Inneren besitzen.

Im BMWi-Forschungsprojekt [HiKoMat](#) werden zur Verbesserung der Zelleigenschaften gezielt strukturierte Elektrodenpartikel entwickelt. Ziel ist die Verbesserung der Transporteigenschaften, d.h. der elektronischen und ionischen Leitfähigkeiten. Im Rahmen einer Promotionsarbeit wurde ein Modell entwickelt für die Berechnung der effektiven Transporteigenschaften granularer Elektroden und poröser Partikel. Ziel dieser Masterarbeit ist es, unter Verwendung dieser effektiven Transporteigenschaften das bestehende Newmanmodell zu erweitern für poröse Aktivmaterialpartikel.



Aufgabestellung und Arbeitsschritte

In einem ersten Schritt ist das System partieller Differentialgleichungen des klassischen Newmanmodells (Doyle, Fuller, & Newman, J. Electrochem. Soc., 1993) aus der Literatur im Finite-Elemente Programm COMSOL Multiphysics© zu implementieren und die Implementierung durch Vergleich mit Rechnung in der Literatur zu überprüfen. Dabei soll eine Halbzelle mit Lithium-Anode und flüssigem Elektrolyt betrachtet werden. Dieser Schritt hat zum Ziel, die Arbeitsweise einer Zelle und die entsprechenden Gleichungen im Modell zu verstehen.

Anschließend soll das Modell für poröse Aktivmaterialpartikel erweitert werden. Hierfür gibt es zum einen ein Modell in der Literatur (Lueth, Sauter & Bessler, J. Electrochem. Soc., 2016). Zum anderen soll eine im Rahmen von HiKoMat entstandene Modellidee ausformuliert und getestet werden.

Voraussetzungen

Dieses Masterarbeitsthema richtet sich an Studierende der Ingenieur- oder Naturwissenschaften mit Interesse an mathematischer Modellierung und numerischer Simulation. Kenntnisse in Thermodynamik oder Transportprozessen wären von Vorteil.

Bei Interesse wenden Sie sich bitte an Prof. Dr.-Ing. Marc Kamlah (<mailto:marc.kamlah@kit.edu>)