



## Bachelor-/Masterarbeit

# Modellbasierte Analyse elektrostatischer Kräfte auf den initialen Aufbau von Passivierungsschichten an Li-Metall Anoden

### Forschungsbereich

- Batterien
- Brennstoffzellen und Elektrolyse
- Elektrokatalyse

### Ausrichtung

- Experimentell
- Elektrische Charakterisierung
- Werkstoffanalytik
- Entwicklung von Messtechnik
- Modellierung
- Simulation
- Literatur und Recherche

### Studiengang

- Elektro- und Informationstechnik
- Maschinenbau
- Chemieingenieurwesen
- Chemie/ Physik
- Technomathematik
- Wirtschaftsingenieurwesen

### Einstieg

Ab sofort

### Ansprechpartner

Janika Wagner, M.Sc.  
Raum 330  
Tel: +49 721 608-41732  
E-Mail: [janika.wagner@kit.edu](mailto:janika.wagner@kit.edu)  
<http://www.iam.kit.edu/et/>

### Quellen:

[1] *Solid State Ionics* 178, 195 – 205 (2007)

### Motivation

Akkumulatoren mit Anoden aus reinem **Li-Metall** gelten als vielversprechende Vertreter der nächsten Generation von Sekundärbatterien. Im Vergleich zu den etablierten Li-Ionen Zellen zeichnen sie sich durch deutlich höhere Energiedichten aus, wodurch bspw. Reichweitenprobleme von Elektrofahrzeugen gelöst werden könnten. Einer Kommerzialisierung solcher Zellen steht jedoch bisher die hohe Reaktivität des Lithium-Metalls gegenüber den Elektrolytkomponenten im Weg. Diese führt zur Ausbildung einer komplexen Grenzschicht – der so genannten **Solid Electrolyte Interphase (SEI)**. Eine sichere und zuverlässige Wiederaufladbarkeit der Batterien wird durch eine solche unkontrollierte Schichtbildung verhindert.

Am IAM-ET arbeiten wir daher unter Anwendung **innovativer Multiskalensimulationen** daran, den initialen Aufbau dieser SEI-Schicht sowie die zugrunde liegenden **molekularen Prozesse** und ihre **Reaktionskinetiken** besser zu verstehen.

### Aufgabenstellung

Basierend auf einem am Institut vorhanden kinetischen Monte Carlo Modells (kMC) soll im Rahmen dieser Arbeit der Einfluss elektrostatischer Wechselwirkungen (Coulombkräfte) auf die Ausbildung der SEI analysiert werden. Dazu soll ein bereits bestehender Ansatz aus der Literatur ausgewählt und in das bestehende MATLAB-Modell implementiert werden (siehe z.B. [1]). Mit dem erweiterten Modell soll dann der Ablauf des Schichtaufbaus sowie die Zusammensetzung analysiert und mit den Ergebnissen des ursprünglichen Modells verglichen werden.

### Geplante Arbeitspakete:

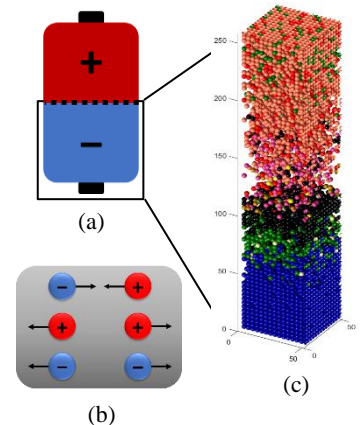
- Literaturrecherche zu elektrostatischen Wechselwirkungen in kMC-Modellen
- Auswahl eines geeigneten Ansatzes und Implementierung in das vorgegebene kMC-Modell in MATLAB
- Parameterstudie und Simulation des initialen Schichtaufbaus
- Auswertung der Ergebnisse und Vergleich mit den Ergebnissen des gegebenen Modells

**Der Bearbeitungsumfang kann je nach Art der Abschlussarbeit angepasst werden!**

### Hinweise

Bitte fügen Sie der Bewerbung einen **Lebenslauf** sowie eine aktuelle **Notenübersicht** bei. Wir bieten Ihnen hervorragende Betreuung und die Möglichkeit in einem interdisziplinären Team auf einem zukunftsweisenden Themengebiet mitzuarbeiten. Vorausgesetzt werden **selbständiges Arbeiten** und die Motivation, sich in neue Themengebiete einzuarbeiten. **Programmiererfahrung in MATLAB** ist wünschenswert. Nähere Auskünfte erhalten Sie bei Ihrer Ansprechpartnerin Frau Janika Wagner.

Prof. Dr.-Ing. Ulrike Krewer



**Abbildung 1:** (a) Batterie (b) Coulombkräfte (c) Simulierte SEI