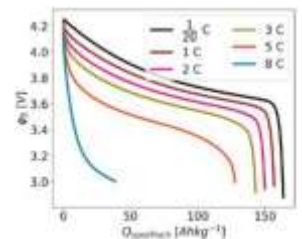
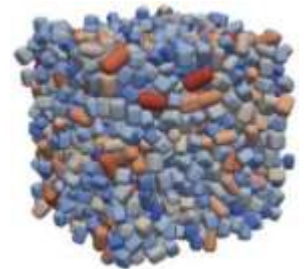


Doktorarbeit: Mikromechanische Modellierung der Wechselwirkung von effektiven Transporteigenschaften und Mechanik in Elektroden von Lithium-Ionen-Batterien

Aufgabenstellung:

Im Rahmen des DFG-Graduiertenkollegs [SiMET – Simulation mechanisch-elektrisch-thermischer Effekte in Lithium-Ionen-Batterien](#) arbeiten Sie gemeinsam mit Kollegiatinnen und Kollegiaten aus verschiedenen Disziplinen aus Verfahrenstechnik, Elektrotechnik, Maschinenbau, Materialwissenschaften, Chemie, Physik und Mathematik an der Untersuchung der eng miteinander verknüpften mechanisch-elektrisch-thermischen Prozesse in Lithium-Ionen Batterien und entwickeln dafür gemeinsam geeignete Modelle und numerische Simulationsmethoden. Ziel dieser auf der Partikel- und Elektrodenoberfläche angesiedelten Doktorarbeit ist, aufbauend auf Vorarbeiten in SiMET, die Entwicklung eines Modells der effektiven Transporteigenschaften einer Blendelektrode und deren Implementierung in einen Simulationscode. Das besondere Merkmal dieser Arbeit ist dabei die Kopplung mit mechanischen Prozessen, insbesondere Volumendehnung der Partikel infolge Lithium-Ein- und Auslagerung, sowie Partikelverschiebung und Rotation durch Kalandrierung. Bei den Aktivmaterialien sollen Volumen- und Oberflächen-Transportprozesse erfasst werden. Im Komplementärraum muss der ionische Transport im Elektrolyt und der elektronische Transport in den Additivphasen räumlich richtig zugeordnet werden. Als Methoden setzen Sie die Diskrete-Elemente-Methode und die Widerstandsnetzwerk-Methode ein. Die Diskrete-Elemente-Methode erfasst die Physik des Zusammenhangs zwischen der Mechanik einzelner Partikel und dem kollektiven, d.h. effektiven Verhalten des granularen Verbundes. Die Widerstandsnetzwerk-Methode ordnet den Netzwerken der unterschiedlichen Phasen effektive Transporteigenschaften zu, abhängig vom mechanischen Zustand, von den Stoff- und Grenzflächeneigenschaften. So entwickeln Sie ein mit kontinuums-mischungstheoretischen Modellen (sog. Newman- bzw. P2D-Modellen) koppelbares Werkzeug für simulative Parameterstudien (Stoff- und Grenzflächeneigenschaften, Geometrie, Mechanik, Schädigung durch Risse) und wenden dieses zur Vorhersage der Zellperformance an.



Becker, 2021

Wir bieten:

- eine hervorragend ausgestattete Forschungsumgebung
- eine strukturierte Ausbildung auf individueller, kollegübergreifender und internationaler Ebene
- ein breites fachliches und überfachliches Kursprogramm
- Teilnahme an Konferenzen und Förderung Ihrer Teilnahme daran
- Ermöglichung nationaler und internationaler Gastaufenthalte in Industrie und Forschung
- aktive Unterstützung der beruflichen Gleichstellung von Frauen und Männern
- eine Vergütung nach E13 TV-L (100 %).

Ihre Qualifikation:

- überdurchschnittlicher Master-Abschluss in einer der o.g. Disziplinen oder kurz davor
- sehr gute Kenntnisse in und starkes Interesse an mikromechanischen und kontinuumsmechanischen Modellierungsmethoden
- Programmierkenntnisse bevorzugt in C++

Kontakt bei Interesse:

apl. Prof. Dr.-Ing. habil. Marc Kamlah, marc.kamlah@kit.edu