

Bachelor – oder Masterarbeit

Asymptotische Homogenisierung – Virtuelles Elektrodendesign von Li-Ionen-Batterien

Prof. Dr.-Ing. Ulrich Nicken
Böblinger Straße 78
70199 Stuttgart

Stuttgart, 26.09.2023



Schlüsselwörter: Elektromobilität, Material-design, elektrochemische Transportprozesse, Optimierung

Motivation

Im Kommunikations-, Mobilitäts- oder dem Medizinsektor spielen Li-Ionen-Batterien bereits seit mehreren Jahrzehnten eine fundamentale Rolle. Mit der voranschreitenden Elektrifizierung, wie zum Beispiel im Mobilitätssektor, wird sich der Anwendungsbereich dieser Batterien zukünftig weiter vergrößern.

In vielen dieser potenziellen Anwendungen kann die gewünschte Leistungsfähigkeit der Batterien aufgrund auftretender Transportlimitierungen nicht abgerufen werden. Ein Werkzeug, um diese Limitierungen zu verringern und somit die Leistungsfähigkeit zu steigern, ist die Optimierung der Elektrodenstruktur mittels virtuellen Materialdesigns. Um diese Optimierung durchzuführen, muss das Batterieverhalten während der Be- bzw. Entladung mit angemessenem Aufwand modelliert werden können.

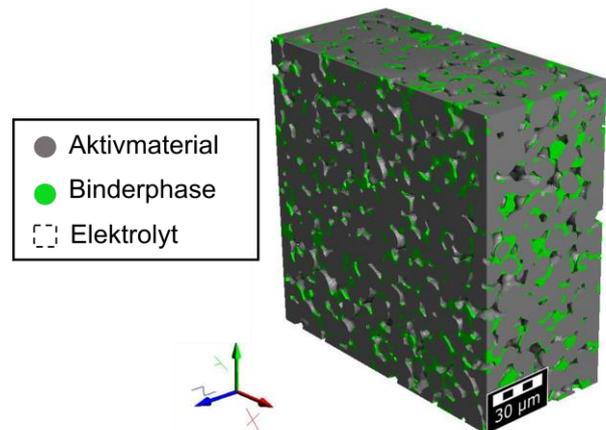


Abbildung 1: Mikrostruktur einer Graphitelektrode

Die dafür zu Verfügung stehende elektrochemischen Batteriemodelle lassen sich in Mikro- und Makroskalenmodelle aufteilen. Hinsichtlich der Optimierung sind Mikroskalenmodelle ungeeignet, da die dreidimensionale Elektrodengeometrie vollständig aufgelöst wird und daher der Rechenaufwand sehr hoch ist. Um dieses Problem zu umgehen, wurde durch Mittelungsoperationen ein eindimensionales Makroskalenmodell entwickelt. Dieses 1D-Modell ermöglicht die zuverlässige Vorhersage des Batterieverhaltens trotz geringer Rechenzeit.

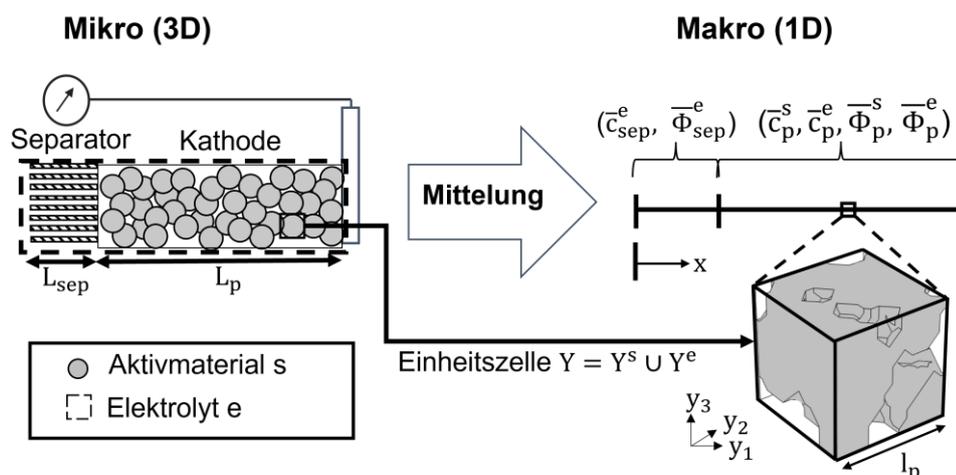


Abbildung 2: Entwicklung des Makroskalenmodells durch Mittelung (Asymptotische Homogenisierung) des Mikroskalenmodells

Aufgabenstellung

Im Rahmen dieser Arbeit soll das entwickelte Makroskalenmodell für das virtuelle Elektrodendesign angepasst und angewendet werden.

Arbeitspakete:

- Einarbeitung in die Elektrochemie und der damit verbundenen Transportprozesse
- Validierung der Modellergebnisse anhand experimenteller Daten
- Anwendung des Modells: Virtuelles Materialdesign der Elektrodenstruktur anhand geeigneter Strukturparameter

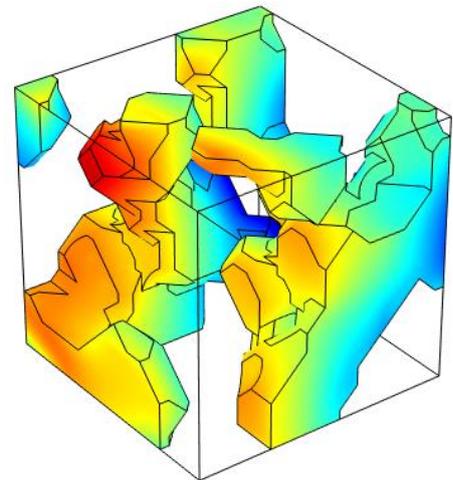


Abbildung 3: Lösung des Zellproblems in der Einheitszelle

Qualifikation und Vorkenntnisse

- Interesse an elektrochemischer Modellierung und Batteriesimulationen
- Kenntnisse in Thermodynamik, Numerische Methoden sowie der Modellierung verfahrenstechnischer Prozesse (MVP) von Vorteil
- Erfahrung im Programmieren (Matlab, Python)

Ansprechpartner

Giuliano Lombardo, Raum 2.022, Böblingerstr. 78, Stuttgart, giuliano.lombardo@icvt.uni-stuttgart.de