



MASTERARBEIT

Hydrodynamische Verdrängung in Lithium-Schwefel-Zellen

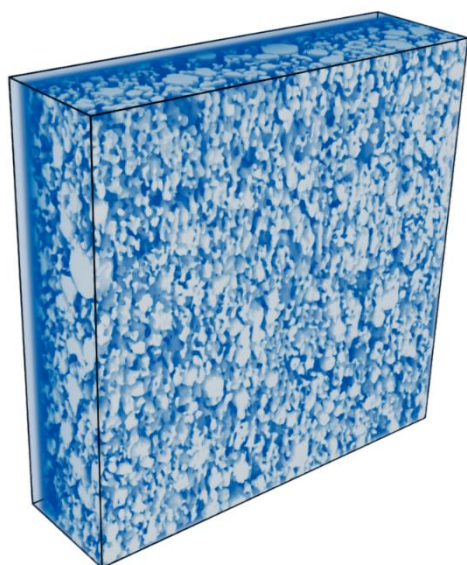
In der Abteilung Computergestützte Elektrochemie werden mathematische Modelle der chemischen und physikalischen Prozesse in Batterien entwickelt, um diese mittels numerischer Simulationen zu erforschen. Hieraus sollen detaillierte Einblicke in die komplexen Multiskalenprozesse gewonnen werden, die die Optimierung des Designs hinsichtlich Leistung und Lebensdauer erlauben.

Im Rahmen dieser Masterarbeit stehen Next-Gen-Lithium-Schwefel-Zellen mit sulfuriertem Polyacrylnitril (SPAN) als neuartigem Kathodenmaterial im Fokus. Es handelt sich um eine Zellchemie, die insbesondere im Kontext des hybrid-elektrischen Fliegens von Interesse ist. Ein Problem dieser Zellchemie ist, dass während des Zyklierens starke, chemisch bedingte Volumenänderungen im Aktivmaterial der Kathode auftreten, die zur hydrodynamischen Verdrängung des Elektrolyten führen. Neuerdings ist bekannt, dass selbst in kommerziellen Lithium-Ionen-Zellen solche Effekte, trotz schwächerer Ausprägung, maßgeblich die Alterung der Zelle beeinflussen.

Aus diesem Grund soll in dieser Arbeit die hydrodynamische Verdrängung mithilfe numerischer Simulationen im Python-Löser Firedrake entschlüsselt werden. Die Masterarbeit gliedert sich in folgende Arbeitspakete:

- Literaturstudie zu numerischer Strömungsmechanik in porösen Medien
- Auswahl, Implementierung und Evaluation eines geeigneten Lösungsansatzes
- Durchführung von Simulationsstudien unter Berücksichtigung realistischer Zellbedingungen
- Vorschläge für Optimierungsmaßnahmen der Kathodenstruktur
- Dokumentation der Arbeit

Die Arbeit bietet Potential, Pionierarbeit im Kontext der Stabilität von Lithium-Schwefel-Batterien zu leisten und stellt somit einen wichtigen Beitrag zur Etablierung des Systems in Luftfahrtanwendungen dar.



Vorkenntnisse

Transportprozesse & Poröse Medien
Numerische Methoden
Python Programmierung

Ansprechpartner

Dr.-Ing. Max Okrashevski
Institut für Technische
Thermodynamik – Abteilung
Computergestützte Elektrochemie
Email: max.okrashevski@dlr.de