



## MASTERARBEIT

# Hydrodynamische Instabilitäten in ratenfähigen 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. Verglichen mit herkömmlichen Lithium-Schwefel-Zellen ist dieses System zwar ratenfähig und somit für Luft- und Raumfahrtanwendungen geeignet, neigt dann allerdings wieder zu dendritischen Alterserscheinungen an der Lithiumanode. Letzteres könnte mit der Entwicklung hydrodynamischer Instabilitäten, die zu chaotischer Elektrokonvektion führen, in Verbindung stehen.

Ob Elektrokonvektion für höhere Ströme relevant wird, soll in dieser Arbeit evaluiert werden. Hierfür ist ein entsprechendes detailliertes Zoom-In-Modell im Python Löser Firedrake zu implementieren. Die Masterarbeit gliedert sich in folgende Arbeitspakete:

- Literaturstudie zu Elektrokonvektion
- Auswahl, Implementierung und Evaluation eines geeigneten Modellansatzes
- Durchführung von Simulationsstudien unter Berücksichtigung realistischer Zellbedingungen
- Untersuchung des Einflusses gekrümmter Oberflächen auf Elektrokonvektion
- Dokumentation der Arbeit

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

### Vorkenntnisse

Transportprozessen & Turbulenz  
Numerische Methoden  
Python Programmierung

### Ansprechpartner

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