



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 Lithium-Schwefel-Zellen mit hoher Energiedichte im Fokus, die perspektivisch für Luft- und Raumfahrtanwendungen entwickelt werden. Ein Problem besagter Zellen ist, dass während der Zyklierens starke, chemisch bedingt Volumenänderungen im Aktivmaterial der Kathode auftreten, die zur hydrodynamischen Verdrängung des Elektrolyten führen. Letzteres könnte 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 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

Strömungsmechanik & Transportprozessen

Numerische Methoden

Python Programmierung

Ansprechpartner

Dr.-Ing. Max Okraschevski

Institut für Technische Thermodynamik –

Abteilung Computergestützte Elektrochemie

Email: max.okraschevski@dlr.de