Prof. Dr.-Ing. H. Kruggel-Emden
Technische Universität Berlin | 10587 Berlin | Germany

Institut für Prozess- und Verfahrenstechnik

24.11.2023

Projekt-, Bachelor-, Masterarbeit

Thema: **Simulation der elektrischen und ionischen Leitfähigkeit von Kathodenmaterialien für Festelektrolytbatterien**

Hintergrund:

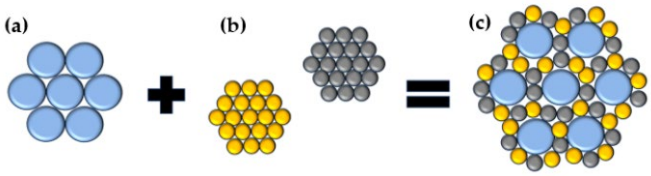

Abb. 1: Schematische Darstellung der Mischung von Batteriematerialien [1]

Als Alternative zu herkömmlichen Lithium-Ionen-Batterien bieten Batterien, in denen der Elektrolyt als Feststoff vorliegt, einige Vorteile. Sie zeichnen sich unter anderem durch eine höhere Sicherheit und Energiedichte, als auch durch eine größere Lebensdauer sowie einer möglichen Verwendung nachhaltigerer Materialien aus. Die Funktionalität dieser Batterien hängt jedoch stark von der Durchmischung der Ausgangsmaterialien und der sich daraus ergebenden elektrischen und Ionischen Leitfähigkeit ab. Am MVTA wird daher an einem Herstellungsprozess für entsprechende Kathodenmaterialien geforscht, bei dem das Aktivmaterial, der Festelektrolyt und das elektrisch leitfähige Additiv zunächst in Form von Nanopartikeln vorliegen und in dieser Größenordnung zu einem Kathodenverbund gemischt werden. Während der Fokus der Forschungsarbeiten derzeit auf dem Herstellungsprozess selbst liegt, wird die Verknüpfung von der Struktur der hergestellten Komposite mit den sich daraus resultierenden elektrochemischen Eigenschaften eine wichtige Rolle spielen.

Aufgabenstellung:

Ziel dieser Arbeit ist die Simulation der elektrischen und ionischen Leitfähigkeit von fiktiven Kathodenverbundstoffen und der dafür notwendigen Realisierung eines Voxel-basierten 3D Mikrostrukturmodells in einer frei wählbaren Programmiersprache (z.B. Fortran, Python). In einem ersten Schritt muss dafür ein Strukturgenerationsalgorithmus entwickelt werden, der zunächst künstliche, beliebige Mischstrukturen in Form von 3D-Voxeln als Grundlage für die eigentlichen Leitfähigkeitssimulationen liefert. Um solche durchführen zu können, müssen entsprechende Ionen- und Elektronentransportmechanismen zwischen den Voxeln implementiert und diese im Anschluss mit entsprechender Literatur verglichen werden. Darüber hinaus ist eine Erweiterung auf ein Superstrukturansatz möglich, in dem kleinere repräsentative Volumina zu größeren Strukturen kombiniert werden.

Voraussetzungen: Gute Programmierkenntnisse

Ansprechpartner:
M.Sc. Victor Kolck
kolck@tu-berlin.de
BH-N 406; Tel.: 030-314 70791

[1] Witte et al., 2023, Processes 2023 11(11), 3243. https://doi.org/10.3390/pr11113243