

– Forschungspraxis –

# Simulation von Silizium Anoden für Festkörperbatterien

## Hintergrund

Silizium ist aufgrund seiner hohen spezifischen Kapazität von 3579 mAh/g und seinem niedrigen Potential vs. Li/Li<sup>+</sup> ein zukunftssträchtiges Material um hohe Energiedichten zu erreichen. Neben dem Einsatz in klassischen Li-Ionen-Batterien mit Flüssigelektrolyt erscheint auch der Einsatz in Festkörperbatterien als vielversprechend. Ein bestehendes Modell berücksichtigt dabei die Änderung der Morphologie während der Lithiierung von Silizium, um ein besseres Verständnis für die Limitierungseffekte und die Ratenfähigkeit der Elektrode zu erhalten.

## Aufgaben

Im Rahmen dieser Forschungspraxis soll ein bestehendes Simulationsmodell einer Silizium Anode optimiert und erweitert werden. Hierzu soll die initiale Parametrierung des Diffusionsprozesses optimiert werden, sodass das reale Zellverhalten (Messdaten) mit dem Modell besser abgebildet werden kann. Die aus der Optimierung abgeleiteten Parameterkombinationen werden anschließend hinsichtlich ihrer physikalischen Gültigkeit analysiert. Hierzu wird unterstützend eine Literaturrecherche durchgeführt.

Die Datenauswertung soll mithilfe von MATLAB erfolgen. Die Aufgaben sind:

- AP1. Einarbeitung in bestehendes Si-Anoden Modell (COMSOL Multiphysics)
- AP2. Parameterfitting für Diffusionsprozess zur besseren Reproduktion des gemessenen Elektrodenverhaltens (Optimierung Matlab)
- AP3. Physikalische Interpretation möglicher Parameterkombinationen aus der Optimierung

## Anforderungen

- Vorkenntnisse zur Modellierung von Lithium-Ionen-Batterien mit COMSOL Multiphysics notwendig (z.B. Praktikum Modellierung von Lithium-Ionen Zellen)
- Vorkenntnisse in Lithium-Ionen-Batterien sind von Vorteil
- Vorkenntnisse in MATLAB erforderlich (Parameter Fitting und Optimierung)

## Ausrichtung

- Zellcharakterisierung
- Messreihenstudie
- Hardwareentwicklung
- Softwaredesign
- Modellierung
- Simulation
- Literaturrecherche

## Studiengang

- Elektro-/Informationstechnik
- Informatik
- Maschinenbau
- Physik
- Mathematik
- Chemieingenieurwesen
- Wirtschaftsingenieurwesen

## Startdatum

ab 01.11.2023

## Ansprechpartner

Maximilian Scheller

[maximilian.scheller@tum.de](mailto:maximilian.scheller@tum.de)

Telefon: +49 (0) 89 / 289 - 26984

Raum: 1020

<https://www.epe.ed.tum.de/ees/startseite/>