



Universität Stuttgart

Institut für Photovoltaik (*ipv*)
Elektrische Energiespeichersysteme (*ipv-EES*),
Batteriesysteme



Studentische
Arbeit
(MA, BA, FA)

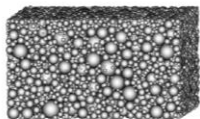
Modellierung der Porosität in siliziumhaltigen Anoden für Lithium-Ionen-Batteriezellen

Die Porosität der Elektroden in einer Lithium-Ionen-Batterie ist elementar für deren elektrochemisches und mechanisches Verhalten, da die Diffusionswege der Ionen und die Struktur der Elektrode durch die Porosität mitbestimmt wird [1]. Durch die Volumenänderungen der Elektrodenpartikel beim Laden und Entladen, insbesondere bei siliziumhaltigen Elektroden, verändert sich neben der Elektrodendicke auch die Porosität der Elektrode und beeinflusst damit die elektrochemischen Prozesse innerhalb der Zelle [2]. Dies soll durch ein Modell zur Partikelsimulation analysiert werden.

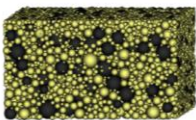
Deshalb soll in dieser Arbeit mit Hilfe der Partikelsimulationssoftware LIGGGHTS, die auf der Diskrete-Elemente-Methode basiert, die Struktur der Elektrode nachgebildet und untersucht werden. Als Eingangsgrößen dienen dabei bspw. die bereits gemessenen Größen Partikeldurchmesser, Porosität und Ausdehnung der Elektroden während des Lade- und Entladevorgangs. Ziel der Arbeit ist es, ein Simulationsmodell zu entwickeln, um u. a. die aktive Oberfläche, Tortuosität und Porosität zu bestimmen, während sich die Partikelgröße und Elektrodendicke mit dem Ladezustand verändern. Die daraus errechneten Parameter dienen wiederum als Eingangsgrößen für physikalisch-chemische Batteriezellmodelle (nicht Teil dieser Arbeit).

[1] Beuse (2021), <https://doi.org/10.3390/batteries7040070>

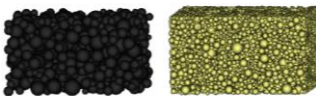
[2] Dhillon (2021), <https://doi.org/10.1016/j.electacta.2021.138067>



Raw structure



Cathode microstructure



Separation possible

Aus Bazzoun (2023), LIGGGHTS introduction

Aufgaben:

- Einarbeitung in die Partikelsimulationssoftware LIGGGHTS
- Aufbau eines statischen Modells zur Partikelsimulation mit Silizium(-oxid)-partikeln, Graphitpartikeln, Binder und Leitruß
- Parametrierung des Modells gemäß Literaturwerten für die Batteriezelle LG M50
- Implementierung der Elektrodendickenänderung und Partikelgrößenänderung in das Modell
- Validierung und Plausibilisierung der Ergebnisse
- Auswertung der Modellergebnisse u. a. hinsichtlich aktiver Oberfläche, Tortuosität, Porositätsänderung und Vergleich mit gegebenen Messwerten
- Optional:
 - Variation der Volumenanteile von Silizium, Graphit sowie Zusätzen und Fitten an vorhandene Messdaten
 - Leitungspfade der Lithium-Ionen aufzeigen

Anforderungen:

- Interesse an Modellierung
- Grundlegende Batteriekennnisse

Beginn **zum nächstmöglichen Termin**. Der Abschlussbericht kann **auf Deutsch oder auf Englisch** verfasst werden. Bei Interesse wenden Sie sich bitte an:

Betreuer: Nicolas Stapf

E-Mail: nicolas.stapf@ipv.uni-stuttgart.de

Tel: +49 711 695-68187

Raum: 0.238, Pfaffenwaldring 47, 70569 Stuttgart

www.ipv.uni-stuttgart.de





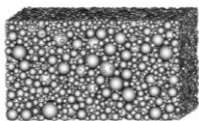
Modelling of porosity in silicon-containing anodes for lithium-ion battery cells

The porosity of the electrodes in a lithium-ion battery is elementary for its electrochemical and mechanical behaviour, as the diffusion paths of the ions and the structure of the electrodes are also determined by the porosity [1]. Due to the volume changes of the electrode particles during charging and discharging, especially in the case of silicon-containing electrodes, the porosity of the electrode changes in addition to the electrode thickness and thus influences the electrochemical processes within the cell [2]. This is to be analysed using a model for particle simulation.

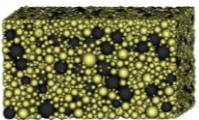
Therefore, the structure of the electrode is to be modelled and investigated in this work with the help of the particle simulation software LIGGGHTS, which is based on the discrete element method. The input variables used include the particle diameter, porosity and expansion of the electrodes during the charging and discharging process, which have already been measured. The aim of this work is to develop a simulation model to determine e.g. the active surface area, tortuosity and porosity, while the particle size and electrode thickness change with the state of charge. The parameters calculated from this serve as input variables for physico-chemical battery cell models (not part of this work).

[1] Beuse (2021), <https://doi.org/10.3390/batteries7040070>

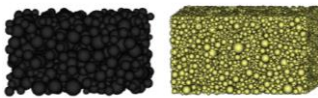
[2] Dhillon (2021), <https://doi.org/10.1016/j.electacta.2021.138067>



Raw structure



Cathode microstructure



Separation possible

From Bazzoun (2023), LIGGGHTS introduction

Tasks:

- Induction into the particle simulation software LIGGGHTS
- Development of a static model for particle simulation with silicon (oxide) particles, graphite particles, binder and conductive soot
- Parameterisation of the model according to literature values for the LG M50 battery cell
- Implementation of the electrode thickness change and particle size change in the model
- Validation and plausibility check of the results
- Evaluation of the model results with regard to e. g. active surface area, tortuosity, porosity change and comparison with given measured values
- Optional:
 - Variation of the volume fractions of silicon, graphite and additives and fitting to existing measurement data
 - Show conduction pathways of the lithium ions

Requirements:

- Interest in modelling
- Basic battery knowledge

Start at **the next possible date**. The final report can be written **in German or in English**. If you are interested, please contact:

Supervisor: Nicolas Stapf

Email: nicolas.stapf@ipv.uni-stuttgart.de

Phone: +49 711 695-68187

Room: 0.238, Pfaffenwaldring 47, 70569 Stuttgart

www.ipv.uni-stuttgart.de

