



Karlsruher Institut für Technologie

KIT| MVM | Straße am Forum 8 | 76131 Karlsruhe

**Institut für Mechanische  
Verfahrenstechnik und Mechanik  
Arbeitsgruppe:  
Verfahrenstechnische Maschinen  
Leiter:** Prof. Dr.-Ing. Hermann Nirschl

Straße am Forum 8  
76131 Karlsruhe

Betreuer: Anshuman Chauhan, M. Sc.

Telefon: 0721 608-4-2427

E-Mail: anshuman.chauhan@kit.edu

Datum: 03.08.2023



## MASTERARBEIT AUSCHREIBUNG

### **Numerische Untersuchung zum Einfluss der *Intensiv-Trocken-Mischung* auf die effektiven Eigenschaften von *NMC-basierten Lithium-Ionen-Batteriekathoden***

*Numerical investigation on the influence of Intensive-Dry-Mixing on the Effective Properties of NMC based Lithium-ion Battery Cathodes*

Leitfähigkeitsadditive wie Ruß werden häufig in modernen Lithium-Ionen-Batteriekathoden in Kombination mit Lithiummetalloxiden wie Lithium-Nickel-Mangan-Kobalt-Oxid (NMC) verwendet. Der Ruß soll die elektrischen Eigenschaften der Kathode verbessern. Seine Verteilung hat jedoch einen großen Einfluss auf die Mikrostruktur der Kathode und damit auf ihre elektrochemische Leistung. Eine intensive Trockenmischung der Pulverkomponenten ist ein möglicher Weg, um eine geeignete Rußdispersion zu erreichen. Es ist jedoch wenig darüber bekannt, wie die verschiedenen Dispersionszustände, die sich aus dem Mischen ergeben, die mikrostrukturellen Eigenschaften beeinflussen.

In dieser Studie werden drei verschiedene Dispersionszustände auf der Basis von Schüttdichtemessungen, die während des Mischprozesses in einem Intensiv-Trockenmischer bei unterschiedlichen Zeiten und Geschwindigkeiten durchgeführt wurden, numerisch in idealisierten Geometrien rekonstruiert. Anschließend werden die numerisch generierten Geometrien Charakterisierungssimulationen unterzogen, um effektive Eigenschaften wie die effektive elektrische Leitfähigkeit, die Tortuosität und die spezifische aktive Oberfläche zu bestimmen. Es wird erwartet, dass die Simulationen zur strukturellen Charakterisierung in der Lage sein werden, die experimentell ermittelten Trends der effektiven elektrischen Leitfähigkeit zu reproduzieren, indem das bestehende Modell erweitert wird, um den Kontaktwiderstand zwischen den einzelnen Partikeln zu berücksichtigen. Die daraus resultierende Kalibrierung wird als Input für skalenaufgelöste elektrochemische Simulationen dienen, die mikrostrukturelle Veränderungen mit der Leistung von NMC-basierten Halbzellen verknüpfen.

1. Chauhan, A.; Asylbekov, E.; Kespe, S.; Nirschl, H. *Electrochemical Science Adv* 2022, e2100151. DOI: 10.1002/elsa.202100151.
2. Kespe, M.; Nirschl, H. *Int. J. Energy Res.* 2015, 39 (15), 2062–2074. DOI: 10.1002/er.3459.

Karlsruher Institut für Technologie (KIT)  
Kaiserstraße 12  
76131 Karlsruhe  
UST-IdNr. DE266749428

Präsident: Prof. Dr.-Ing. Holger Hanselka  
Vizepräsidenten: Michael Ganß, Prof. Dr. Thomas Hirth,  
Prof. Dr. Oliver Kraft, Christine von Vangerow,  
Prof. Dr. Alexander Wanner

LBBW/BW Bank  
IBAN: DE44 6005 0101 7495 5001 49  
BIC/SWIFT: SOLADEST600

LBBW/BW Bank  
IBAN: DE18 6005 0101 7495 5012 96  
BIC/SWIFT: SOLADEST600

**Eintrittstermin**

Ab sofort

**Persönliche Qualifikation**

Spezielle Vorkenntnisse sind nicht erforderlich. Erfahrung im Umgang mit CAE Software sowie OpenFOAM oder STAR-CCM+ sind vorteilhaft, aber keine Voraussetzung.

**Ansprechpartner:**

Anshuman Chauhan, M.Sc.  
Wissenschaftlicher Mitarbeiter

Karlsruher Institut für Technologie (KIT)  
Institut für Mechanische Verfahrenstechnik und Mechanik  
Bereich: Verfahrenstechnische Maschinen

Straße am Forum 8  
Gebäude 30.70, Raum 001  
76131 Karlsruhe

Telefon: +49 721 608-42427  
E-Mail: [anshuman.chauhan@kit.edu](mailto:anshuman.chauhan@kit.edu)  
Web: <https://www.mvm.kit.edu/>