

Bachelor-/ Diplomarbeit

Bestimmung und Untersuchung von Ionenplätzen und Leitungspfad in ionisch leitenden Gläsern

Ionenleitfähige Gläser können zur Herstellung von Batterien, Akkus oder sogenannten Smart Windows verwendet werden. Sie entstehen durch die Hinzufügung von Metalloxiden (Netzwerkmodifizierer) zur Glasschmelze beim Herstellungsprozess. Besonders geeignet als bewegliche Ladungsträger innerhalb des Glasnetzwerkes sind Alkalikationen wie Lithium und Natrium. Das Thema der Arbeit steht in einem engen thematischen Zusammenhang mit dem EU Projekt HICONDELEC, in dem mehrere experimentelle und theoretische Arbeitsgruppen an verschiedenen europäischen Universitäten und Firmen Forschung zur Konstruktion von Batterien mit ionenleitfähigen Gläsern in Dünnschichttechnologie betreiben.

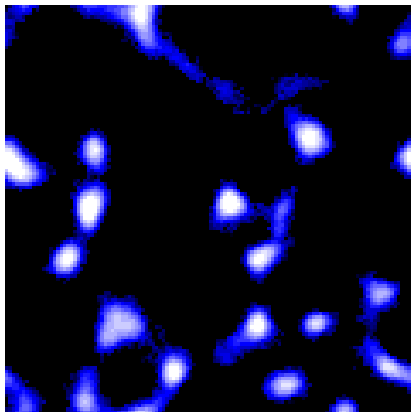


Abbildung:

Zweidimensionaler Schnitt des Leitungspfad für eine MD-Simulation eines Lithiumsilikatglases. Weiß codiert sind die Bereiche mit der höchsten Wahrscheinlichkeit, ein Lithiumion vorzufinden (Plätze). Blau bedeutet eine kleine Wahrscheinlichkeit (Pfade für Hopping zwischen den Plätze). Schwarz entspricht Wahrscheinlichkeit null und kennzeichnet das vom Netzwerk bedeckte Volumen im Glas.

Ziel der Bachelor-/Diplomarbeit ist die Weiterentwicklung und Überprüfung von Methoden zur numerische Berechnung von Ionenplätzen und des Leitungspfad innerhalb eines gegebenen Glasnetzwerkes. Zu diesem Zweck sind molekulardynamische (MD) Simulationen und Monte Carlo (MC) Simulationen an Lithiumsilikat und -boratgläsern durchzuführen. Glasnetzwerkstrukturen für Boratgläser, die mit Reverse Monte Carlo (RMC) Simulationen aufgrund von Neutronenstreuexperimenten berechnet wurden, stehen zur Verfügung. Die berechneten Ionenplätze sowie der Leitungspfad sollen weiter analysiert werden, um nähere Informationen über die Leitungsmechanismen in ionisch leitenden Gläsern zu gewinnen (z.B. Konnektivität der Ionenplätze untereinander und Energiebarrieren für Hopping-Modelle). Gesucht wird eine Student oder eine Studentin mit Interesse für theoretische und numerische Arbeit in dem interdisziplinären und internationalen Umfeld des Projektes.