电池的电化学极化仿真

孙言飞[1], 夏厚勇[1], 韩威振[1], 苗萌[1], 樊煜[1]
1.电池研究院，合肥国轩高科动力能源有限公司，安徽，合肥

简介:寻求一种能够量化的手段从而来衡量电池的极化大小。通过极化的占比分析还可以分析哪一种极化影响较大，从而为电池的设计优化提供可靠的方向指导。

计算方法:在COMSOL® 软件的一维模型中定义编辑正负极以及隔膜电解液处反应极化方程和积分，然后利用“电池与燃料电池模块”中锂离子电池物理接口来仿真锂离子电池的电化学充放电过程，在单体电池的传热过程我们利用“传热模块”的固体传热物理接口来仿真单体电池随着充放电过程热量的产生以及传递。其中一维的电化学产热作为三维固体产热的热源，产生的热同时影响着一维电化学反应过程，从而达到一维的“电池物理场”与三维的“传热物理场”耦合，另外整个模型研究步骤中设置为“电流分布初始化”和“瞬态”。

液相扩散极化 $$-\frac{1}{j_{tot}}\int_0^L \frac{2RT}{c_L F}\kappa_c \frac{ac_L}{ax} j_L dx$$

固相扩散极化 $$\frac{1}{j_{tot}}\int_0^L aj_{loc}(E_{surf}-E_{ave})\,dx$$

液相欧姆极化 $$\frac{1}{j_{tot}}\int_0^L \frac{j_L{}^2}{\kappa_{eff}}dx$$

固相欧姆极化 $$\frac{1}{j_{tot}}\int_0^L \frac{j_S{}^2}{\sigma_{eff}}dx$$

电化学反应极化 $$\frac{1}{j_{tot}}\int_0^L aj_{loc}(\varphi_S-\varphi_L-Esurf)\,dx$$

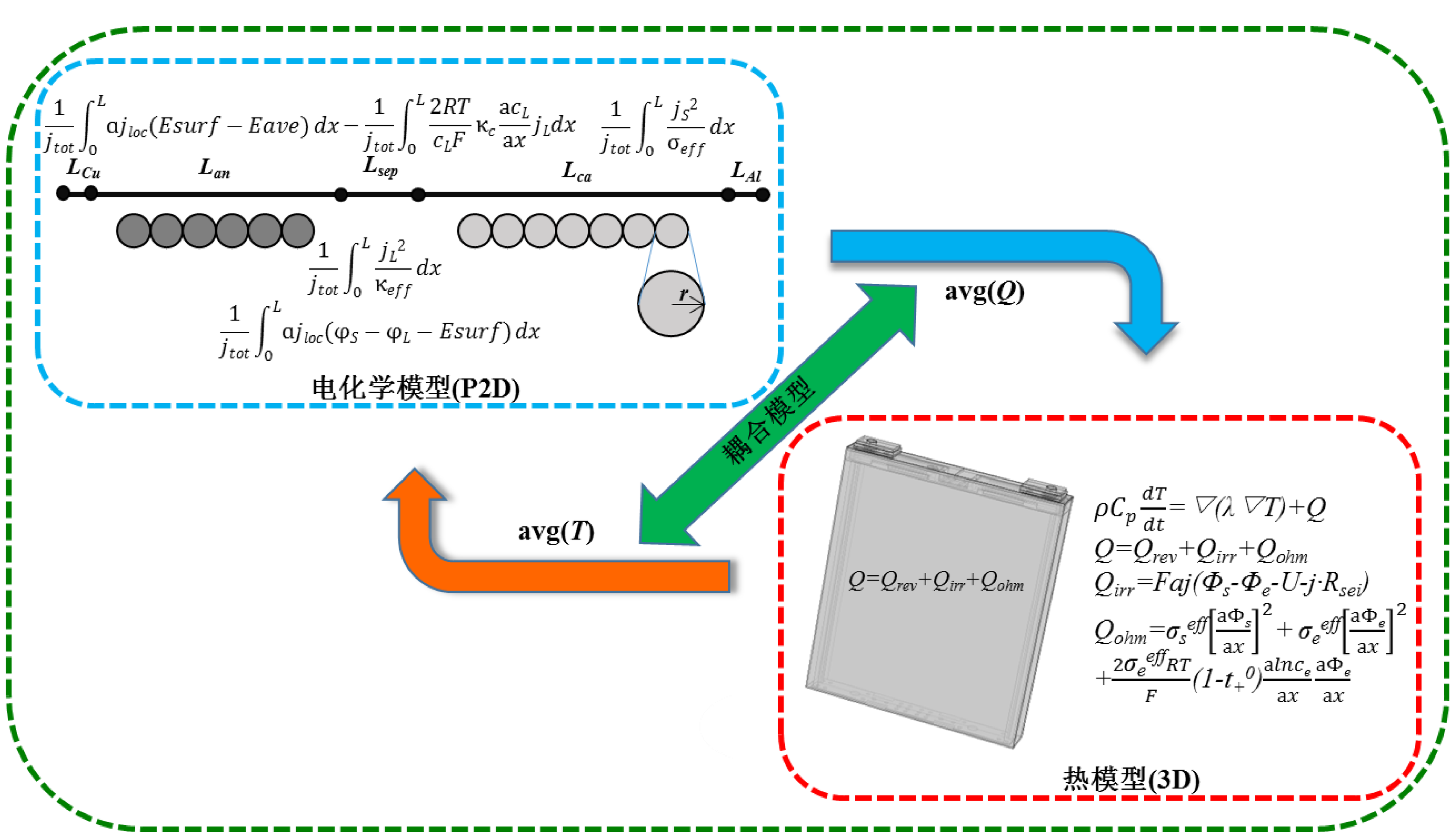

图 1.电化学极化耦合模型示意图

结果:

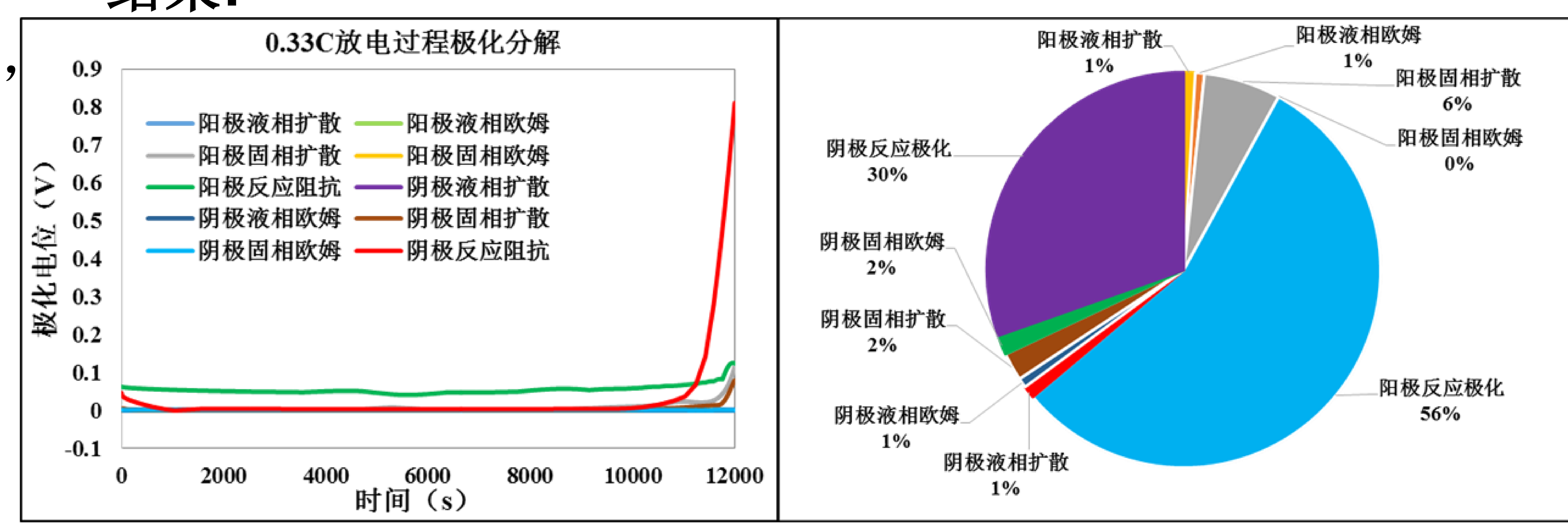

图 2.0.33C放电过程极化分解及占比

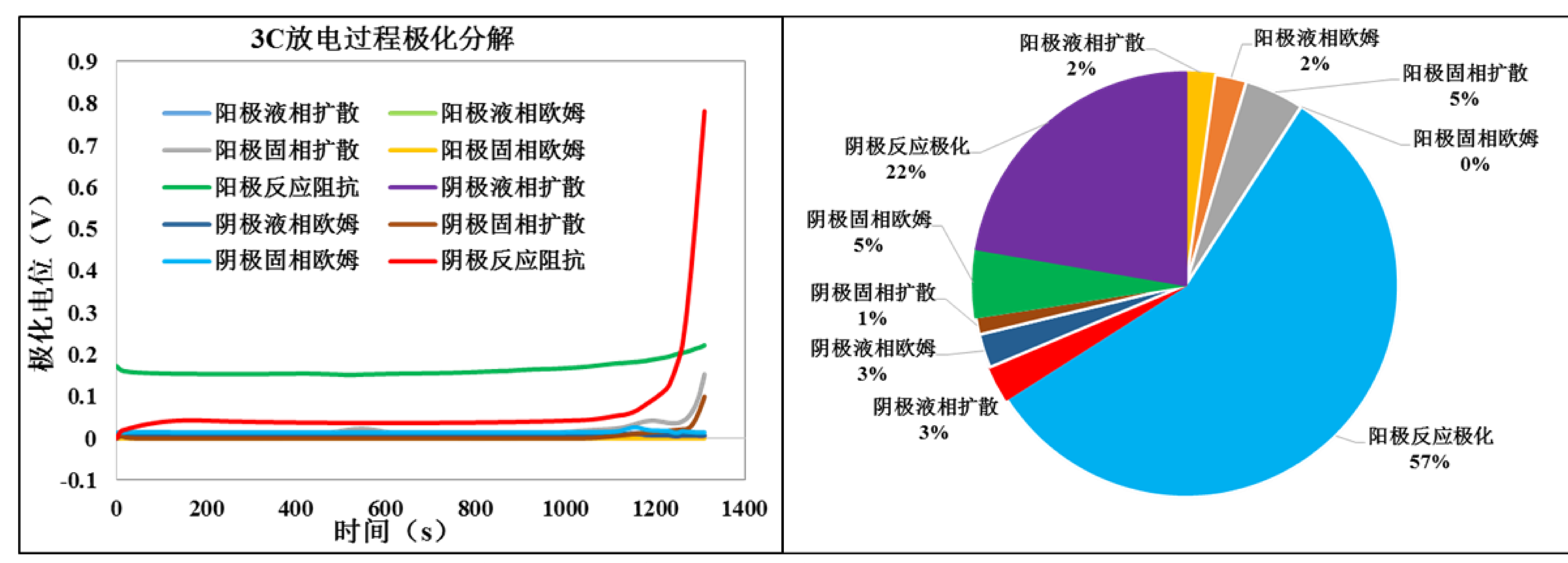

图 3.3C放电过程极化分解及占比

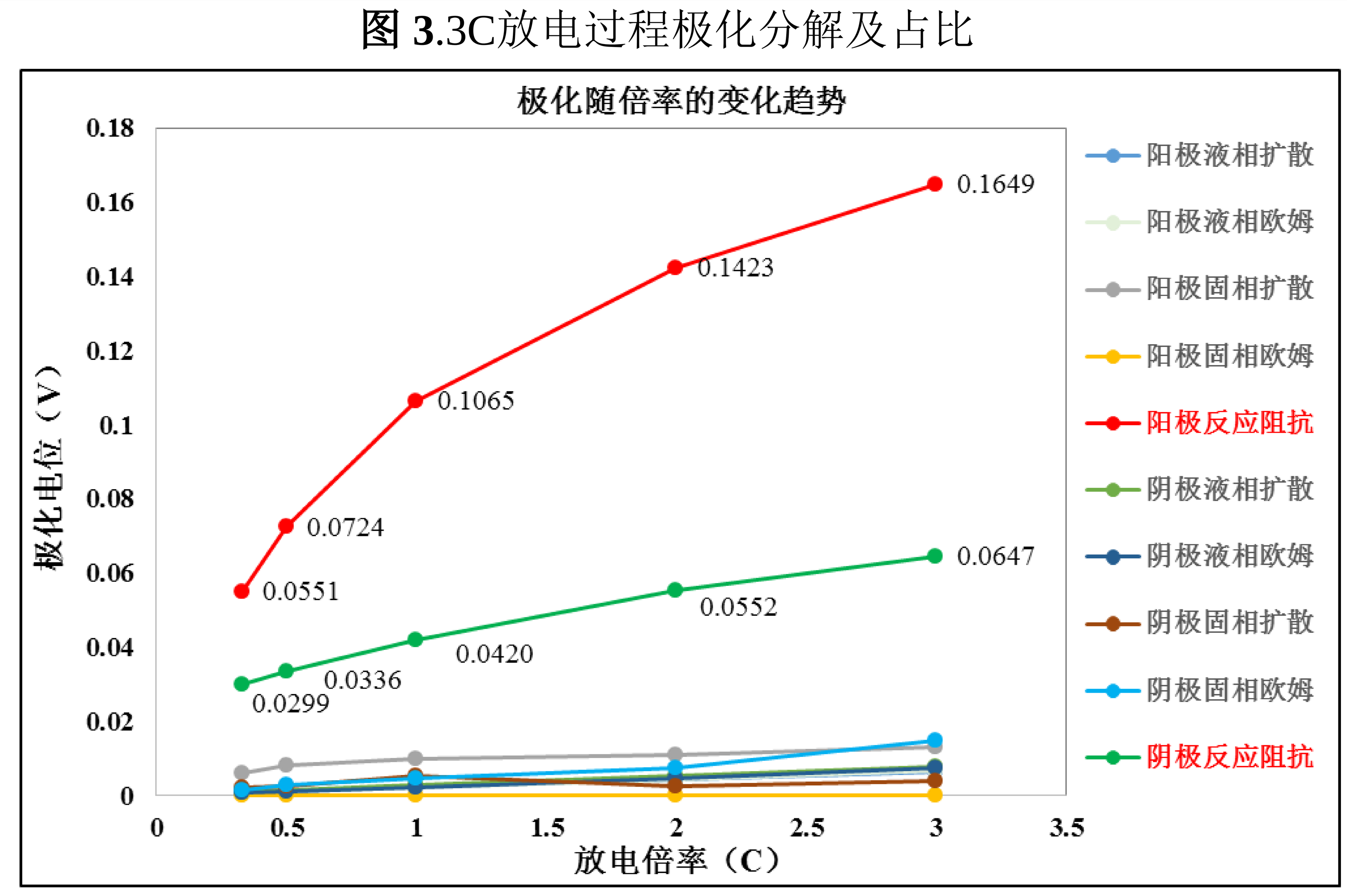

图 4.0.33C～3C放电过程极化变化趋势

结论: 通过以上分析可以得出随着放电倍率的增加其中阴阳极反应极化变化明显，固也是导致产热增加的主要原因，所以在电池的优化方向可以沿着此方向进行优化，从而得到较大改善结果，减少实验的迷茫性。

参考文献:

1. Andreas Nyman, Tommy Georgios Zavalis, Ragna Elger, Mårten Behm, and Göran Lindbergh, Analysis of the Polarization in a Li-Ion Battery Cell by Numerical Simulations, *Journal of The Electrochemical Society*, 157, A1236-A1246（2010）
2. Bo Yan, Cheolwoong Lim, Zhibin Song, and Likun Zhu, Analysis of Polarization in Realistic Li Ion Battery Electrode Microstructure Using Numerical Simulation, *Electrochimica Acta*, 185, 125-141（2015）
3. Yiwei Tang, Ming Jia, Lihua Ai, Baohua Yin, Yun Cheng, and Yexiang Liu, Capacity Fade Analysis of the Lithium-Ion Power Battery Cycling Process Based on an Electrochemical-Thermal Coupling Model, *Energy Technology*, 3, 1250-1259（2015）
4. Matilda Klett, Marianne Giesecke, Andreas Nyman, Fredrik Hallberg, Rakel Wreland Lindström, Göran Lindbergh, and Istvan Furo´, Quantifying Mass Transport during Polarization in a Li Ion Battery Electrolyte by in Situ 7Li NMR Imaging, *Journal of the American Chemical Society*, 134, 14654-14657（2012）
5. J. David Bazak, Sergey A. Krachkovskiy, and Gillian R. Goward, Multi-Temperature in Situ Magnetic Resonance Imaging of Polarization and Salt Precipitation in Lithium-Ion Battery Electrolytes, *The Journal of Physical Chemistry C*, 121, 20704-20713（2017）