

复合电极的开路电势曲线的仿真方法

何见超, 陈森, 李峰宇, 王旭, 王连旭, 陈思
平台开发部, 蜂巢能源科技有限公司保定分公司, 河北省, 保定市

简介: 复合电极（即电极中至少含有两种活性材料）被广泛采用于锂离子电池设计中。但是，实测复合电极的周期长，且现阶段还没有一种准确度高且简单实用的复合电极开路电势曲线的仿真方法。鉴于此，本工作的目的在于开发出一种准确度高、简单实用的复合电极开路电势曲线的仿真方法，进而使得对于全电池的放电曲线的仿真收敛性更好、周期更短且准确度更高。

计算方法: 本模型使用锂离子电池模块。

- 步骤1：建立以复合电极为工作电极、锂为对电极的半电池的一维有限元几何模型（图1）。两线S1、S2分别代表具有厚度 l_1 的复合电极、具有厚度 l_2 的隔离膜，线条的长度即代表厚度，而三点a1、a2、a3分别代表集流体、复合电极与隔离膜的界面、锂片。
- 步骤2：定义半电池的材料参数和边界条件。
- 步骤3：对半电池的一维几何模型进行网格划分。
- 步骤4：运算，获得半电池的开路电势曲线，即复合电极的开路电势曲线。

通过以上步骤获得的复合电极OCV曲线可放进COMSOL材料库，作为全电池的电极（正极或负极）OCV曲线。

- 步骤5：建立全电池的一维有限元几何模型（图2），为五线六点型。线T1代表正极集流体、线T2代表正极、线T3代表隔离膜、线T4代表负极、线T5代表负极集流体，而点b1代表正极集流体的第一末端、点b2代表正极集流体与正极的第一界面、点b3代表正极与隔离膜的第二界面、点b4代表隔离膜与负极的第三界面、点b5代表负极与负极集流体的第四界面、点b6代表负极集流体的第二末端。
- 步骤6：定义全电池的材料参数和边界条件，进行网格划分，运算，获得全电池的放电曲线。

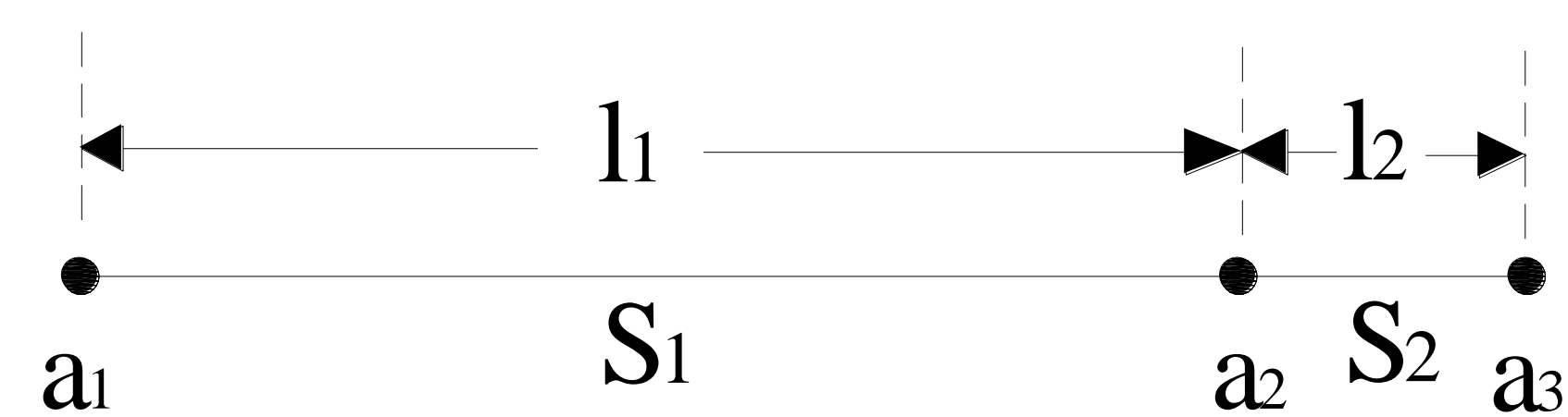


图1. 半电池的几何模型

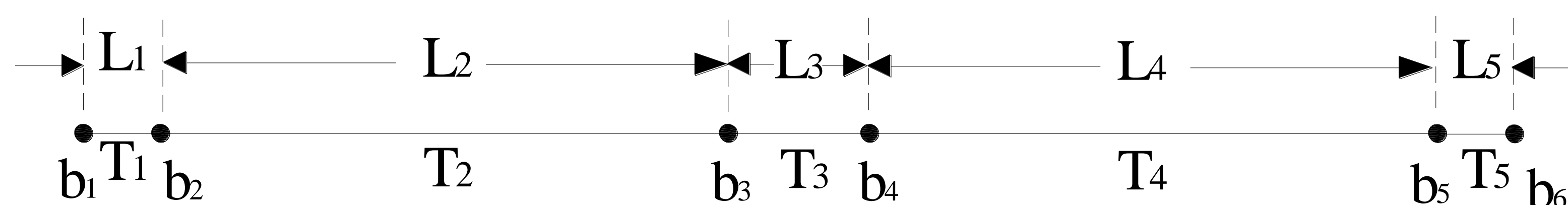


图2. 全电池的几何模型

结果: 根据电池设计方案中SiO与石墨的质量百分比为10%:90%，仿真得到负极复合电极的开路电势曲线如图3所示，横坐标为荷电状态（SOC）、纵坐标为开路电压（OCV）。此外，还可根据电池设计方案的变动来调整SiO与石墨的质量百分比，得出不同质量比例的SiO/石墨复合电极的开路电势仿真曲线。

将步骤6计算得到的全电池nC放电曲线与实际测试得到的全电池nC放电曲线进行对比，检验仿真结果准确性，如图4所示。可看出，仿真结果（实线）与实测数据（虚线）的吻合度非常高。后续还可通过修改材料属性主要参数（如Bruggeman系数）进一步提高仿真结果与实测数据的吻合度。

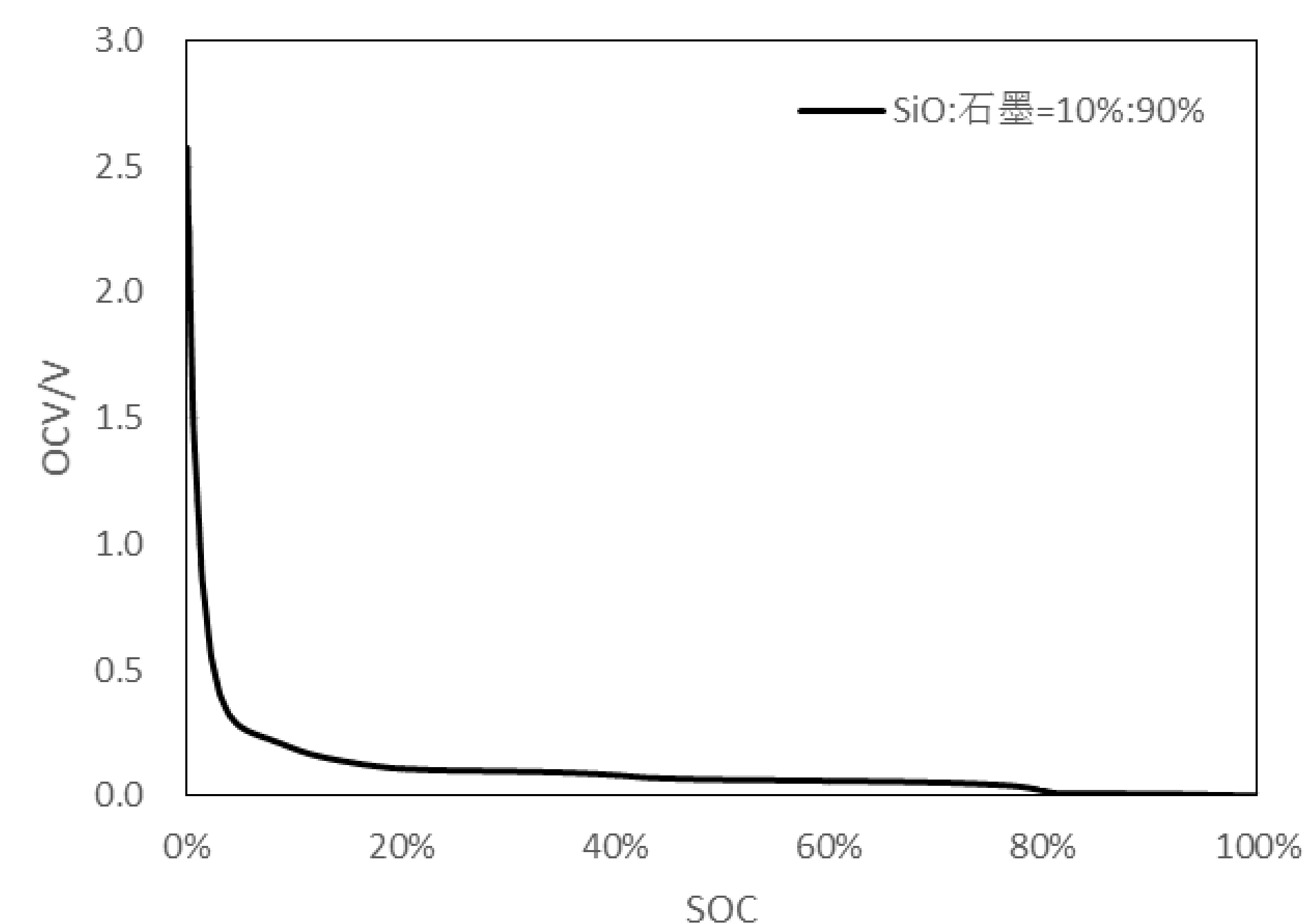


图3. 重量比为1:9的SiO与C组成的复合电极的开路电势仿真曲线

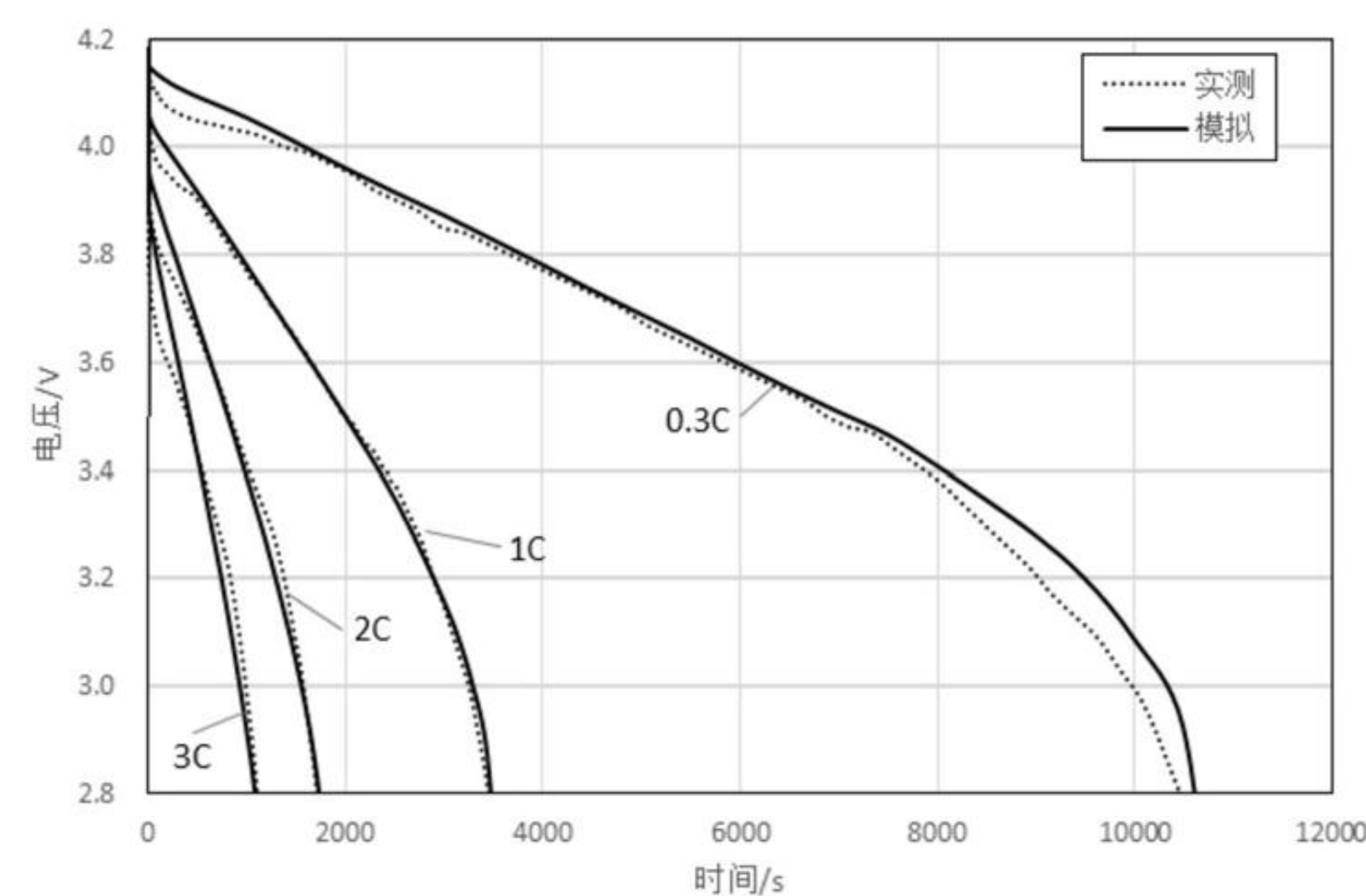


图4. 全电池的倍率放电仿真曲线与实测曲线的对比

结论: 1. 比案例所示方法的收敛性好，尤其是当负极为复合电极时。2. 简单灵活：当电池设计方案发生变动（例如复合电极中两种活性材料的种类或者比例发生变动），本模型只需相应地调整电极的关键参数即可。