

锂离子电池的析锂三维模型研究

丁小建¹, 项李志¹

1. Central Lab-仿真中心, 宁德新能源科技有限公司, 宁德, 福建, 中国

简介: 析锂是限制锂电池快充与安全性能的关键因素。通过增加析锂反应动力学方程, 在 COMSOL Multiphysics 中的锂离子电池模块可以对锂电池的析锂反应进行分析: 电流密度分布、电势分布、析锂量, 及析锂位置等

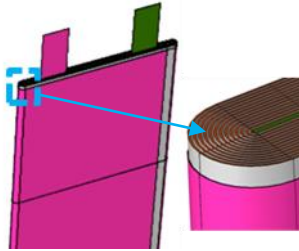


图 1. 软包电芯三维卷绕结构

计算方法: 使用COMSOL Multiphysics中的锂离子电池接口, 并且添加析锂反应过程(作用在负极活性物质区域)。

$$j_1 = i_0 * \left[\exp\left(\frac{\alpha_a F \eta_{Li}}{RT}\right) - \exp\left(\frac{\alpha_c F \eta_{Li}}{RT}\right) \right], \eta_{Li} < 0 \quad (1)$$

$$i_0 = k_{Li} * c_e^{\alpha_a} \quad (2)$$

$$\eta_{Li} = \Phi_s - \Phi_e - U_{Li} - FjR_{SEI} \quad (3)$$

$$j_2 = i_0 * \left[\exp\left(\frac{\alpha_a F \eta_{Li}}{RT}\right) - \exp\left(\frac{\alpha_c F \eta_{Li}}{RT}\right) \right] * \frac{\beta * n_{Li,rev}}{1 + \beta * n_{Li,rev}}$$

$$\eta_{Li} > 0 \ \& \ n_{Li,rev} > 0 \quad (4)$$

通过COMSOL按照真实尺寸参数构建软包卷绕模型, 搭建电芯内部铝箔-正极-隔膜-负极-铜箔真实结构, 能够体现拐角及内外层不同位置的极片差异。

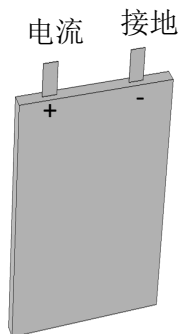


图 2. 施加边界条件

结果:

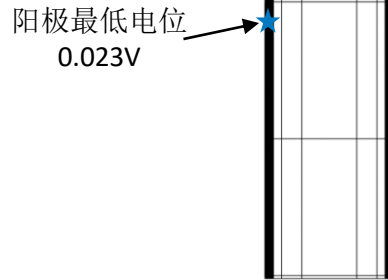


图 3. 阳极最低电位位置, 主要集中在最内圈拐角阳极处

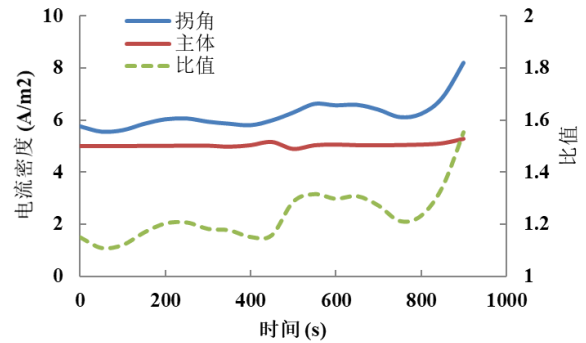


图 4. 最内圈阳极拐角与主体区域的嵌锂反应电流密度对比

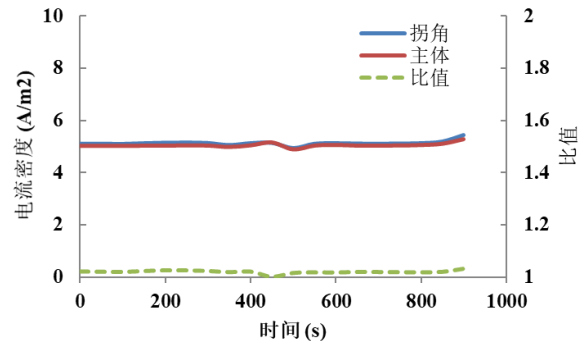


图 5. 最外圈阳极拐角与主体区域的嵌锂反应电流密度对比

结论: 使用COMSOL Multiphysics构建三维锂离子电池模型, 更加准确分析电芯的析锂风险, 并验证改善方法。通过仿真模型, 还可以分析电势分布, 电流密度分布均匀性。结合仿真DOE, 指导电池设计, 优化充电方案, 实现安全可靠的超级快充。

参考文献:

1. Dongsheng Ren, Investigation of Lithium Plating-Stripping Process in Li-Ion Batteries at Low Temperature Using an Electrochemical Model, Journal of The Electrochemical Society, 165 (10), 165 (10) A2167-A2178 (2018)
2. R. Spotnitz, Simulation of capacity fade in lithium-ion batteries, Journal of Power Sources, 113(1), 72-80(2003)