

华中科技大学

# 利用COMSOL Multiphysics®对铅空气电池的性能预测

李金东<sup>1</sup>, 邓成智<sup>2</sup>, 郭志刚<sup>2</sup>, 吴旭<sup>1</sup>

1.环境科学与工程学院, 华中科技大学, 湖北, 武汉

2.天能电池集团有限公司, 浙江, 长兴

**简介:** 铅酸电池能量密度较低等缺点限制了它在诸如电动汽车等领域的应用。为拓展铅酸电池的应用范围, 提出了一种新型铅酸电池——铅空气电池, 将传统铅酸电池中氧化铅电极替换为空气电极, 示意图见图1。并通过数学模型仿真对其性能进行预测, 为后续的研发提供指导。

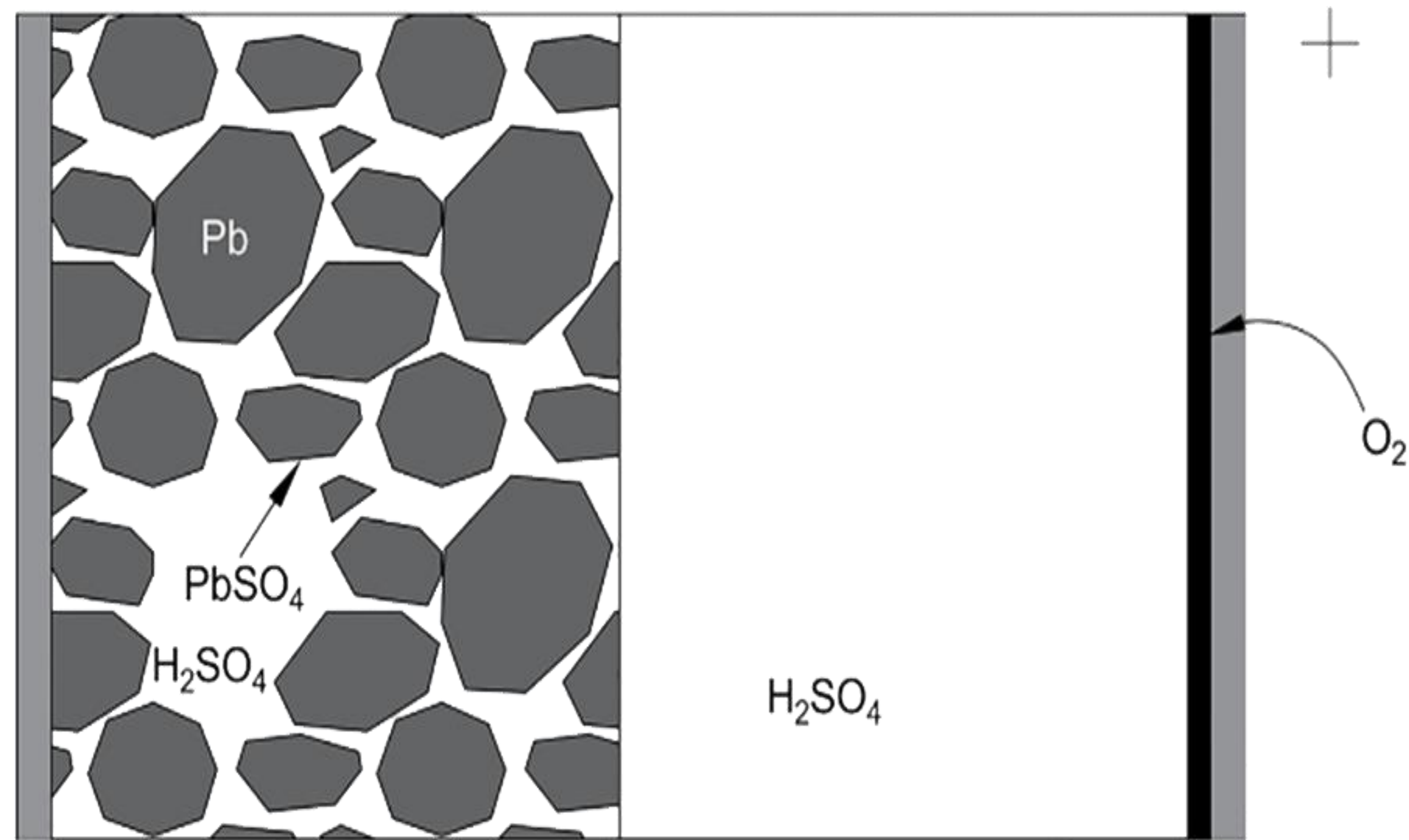


图 1. 铅空气电池结构示意图

**计算方法:** 采用铅酸电池接口模拟电极反应, 电极孔隙率变化, 电解质传递行为和浓度变化, 使用多孔介质稀物质传递接口模拟氧气在空气电极中的传递行为和浓度变化。关键方程式如下

□ 电极孔隙率变化:

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \frac{1}{2F} \left( \frac{M_{PbSO_4}}{\rho_{PbSO_4}} - \frac{M_{Pb}}{\rho_{Pb}} \right) \frac{\partial i_2}{\partial x} = 0$$

□ 与电解液相关的物料平衡:

$$\varepsilon \frac{\partial c}{\partial t} - \frac{1}{2F} [2\bar{V}_o - (3 - 2t_0^+) \bar{V}_e] i_2 \frac{\partial c}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \left( \varepsilon^{ex3} D \frac{\partial c}{\partial x} \right) + \left\{ -\frac{1}{2F} [2\bar{V}_o - (3 - 2t_0^+) \bar{V}_e] c - \frac{3-2t_0^+}{2F} \right\} \frac{\partial i_2}{\partial x} = 0$$

□ 与氧气相关的物料平衡:

$$\frac{\partial c_{O_2}}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left( \varepsilon^{ex3} D_{O_2} \frac{\partial c_{O_2}}{\partial x} \right) - a_{pos} \left\{ k_a (c_{H_2O}) \exp \left[ \frac{\alpha_{a3} F}{RT} (\Phi_1 - \Phi_2 - U_{pos}) \right] - k_c c^2 (c_{O_2})^{0.5} \exp \left[ \frac{-\alpha_{c3} F}{RT} (\Phi_1 - \Phi_2 - U_{pos}) \right] \right\} = 0$$

□ 电极动力学方程:

$$\frac{\partial i_2}{\partial x} - a_{pos} i_{0d} \left\{ k_a \exp \left[ \frac{\alpha_{a3} F}{RT} (\Phi_1 - \Phi_2 - U_{pos}) \right] - k_c c^2 (c_{O_2})^{0.5} \exp \left[ \frac{-\alpha_{c3} F}{RT} (\Phi_1 - \Phi_2 - U_{pos}) \right] \right\} - C_{dl} a_{max} \left( \frac{\partial \Phi_1}{\partial t} - \frac{\partial \Phi_2}{\partial t} \right) = 0$$

**结果:** 仿真的电池极化曲线, 放电曲线的模拟见下图。

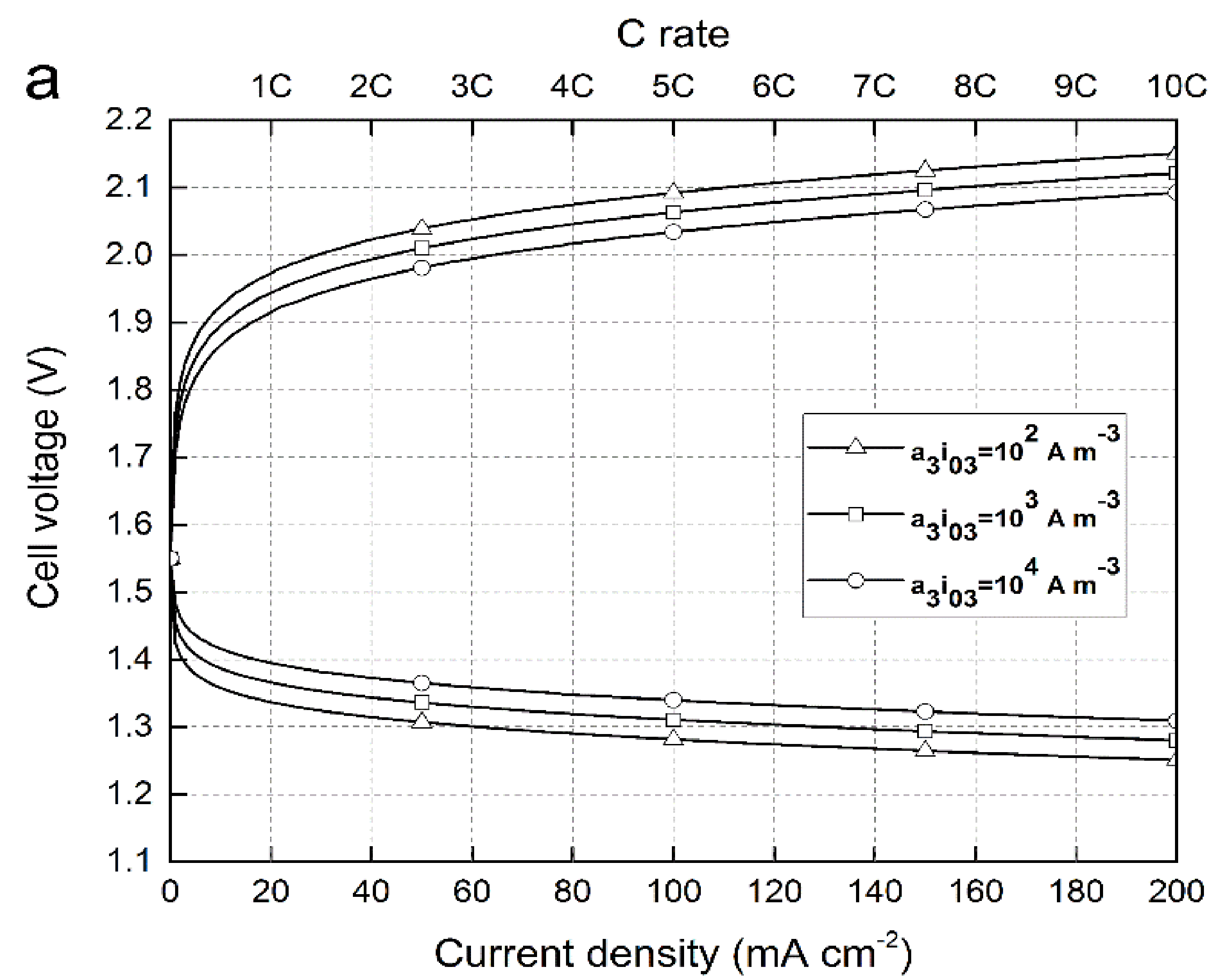


图 2. 电池极化曲线模拟

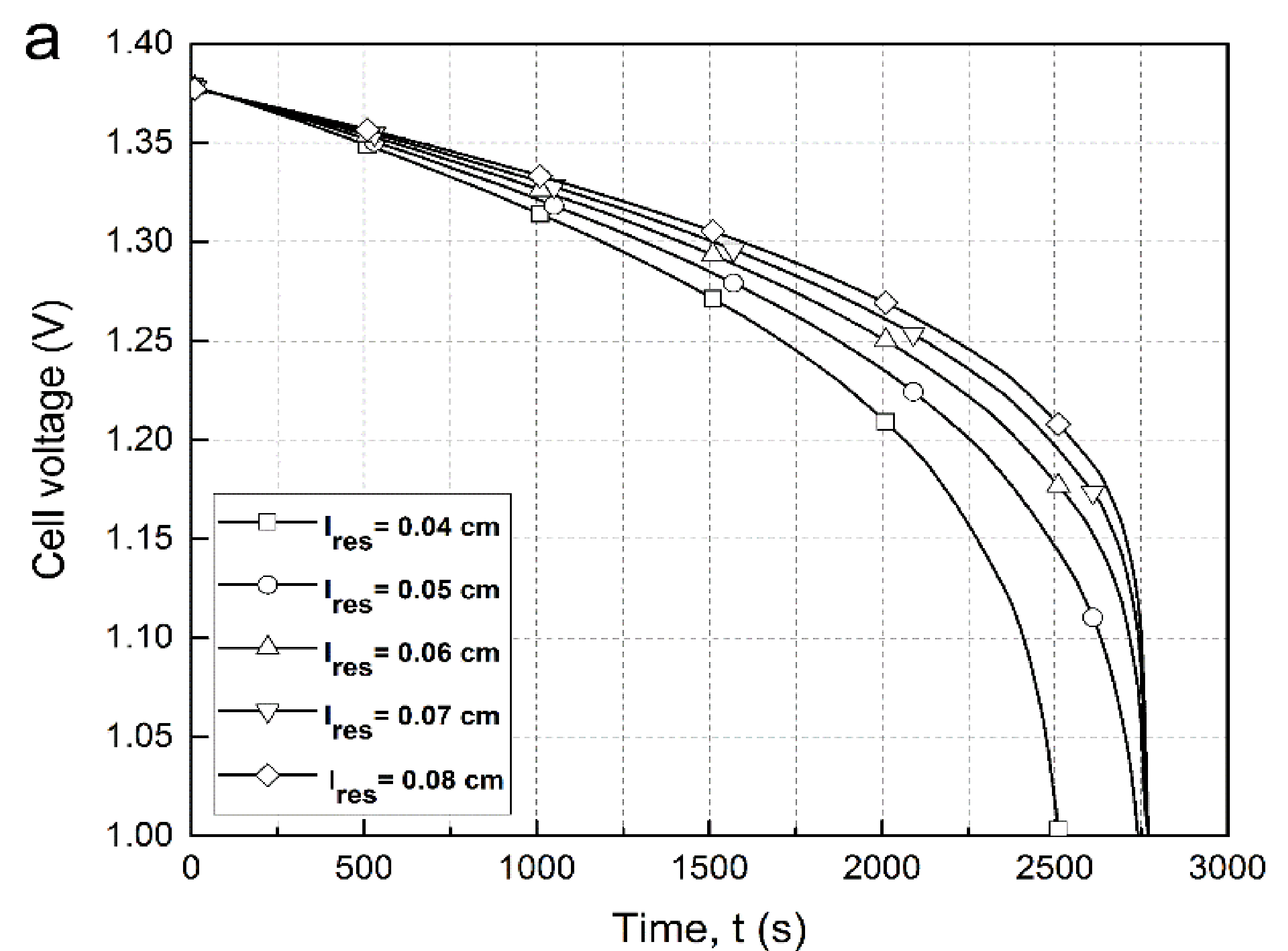


图 3. 电池恒流放电图

**结论:** 用数学模型和原型样品进行性能研究发现, 铅空气电池的理论能量密度可以达到 60.4Wh kg<sup>-1</sup>, 与传统铅酸电池的典型能量密度 (30Wh kg<sup>-1</sup>) 相比有了显著提升。

**参考文献:**

1. Gu H, Nguyen T V, White R E. A Mathematical Model of a Lead-Acid Cell Discharge, Rest, and Charge[J]. Journal of The Electrochemical Society, 1987, 134(12): 2953-2960
2. Sahapatsombut U, Cheng H, Scott K. Modelling the micro-macro homogeneous cycling behaviour of a lithium-air battery [J]. Journal of Power Sources, 2013, 227: 243-253.