

强化传递的层级结构空气电极

周川冀越¹, 王贵欣¹, 王丽², 朱铎丞³

1. 化学工程学院, 四川大学, 四川, 成都 2. 成都建中锂电池有限公司, 四川, 成都 3. 电子信息学院, 四川大学, 四川, 成都

引言: 锂-空气电池中空气电极是阴极反应的重要场所, 空气电极结构设计的好坏极大地影响了氧气分子的传递效率进而影响锂空气电池的能量效率、倍率性能和循环寿命。为了强化氧气在空气电极中的传递过程, 本文对一种层级结构空气电极进行研究: 由泡沫铝制成的氧气分布板承载排列有序的碳纳米管阵列, 氧气在阵列管中有规律传输、排布、反应。

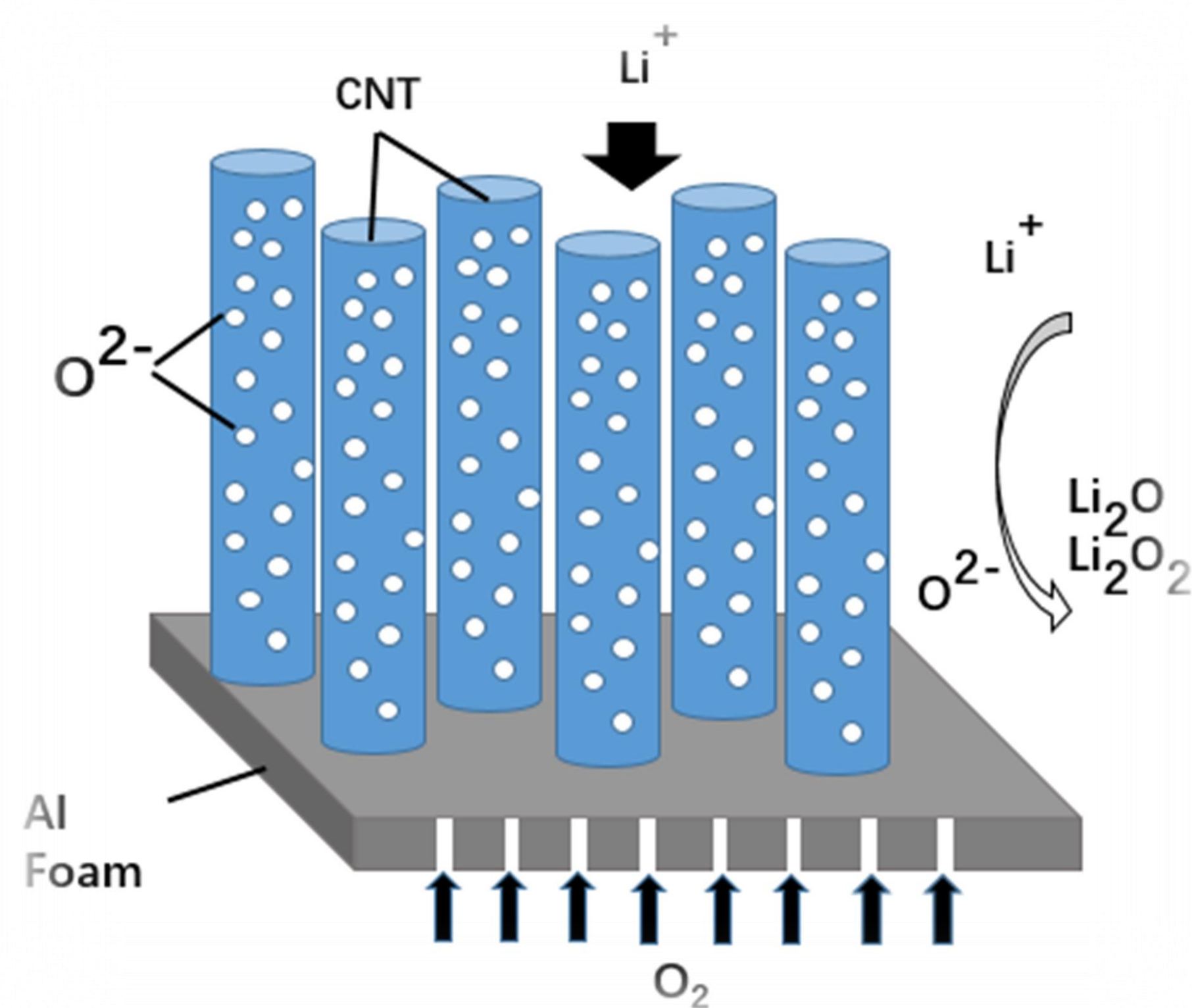


图 1. 空气电极结构示意图

计算方法: 经初步计算得 COMSOL 模拟所需的阵列管规格为内径 900、1100、1300 nm; 管长 35000、43000、49000 nm。需要比较在不同管内径与管长情况下氧气传输效果的优劣。模型导入 COMSOL Multiphysics 5.2 中, 运用多孔介质稀物质传递接口, 模拟出氧气在空气电极内部传递过程与达到稳态后的氧气分布结果。

多孔介质稀物质传递:

$$\nabla \cdot \Gamma_i + u \cdot \nabla c_i = R_i + S_i$$

$$N_i = \Gamma_i + u c_i = -D_{ei} \nabla c_i + u c_i$$

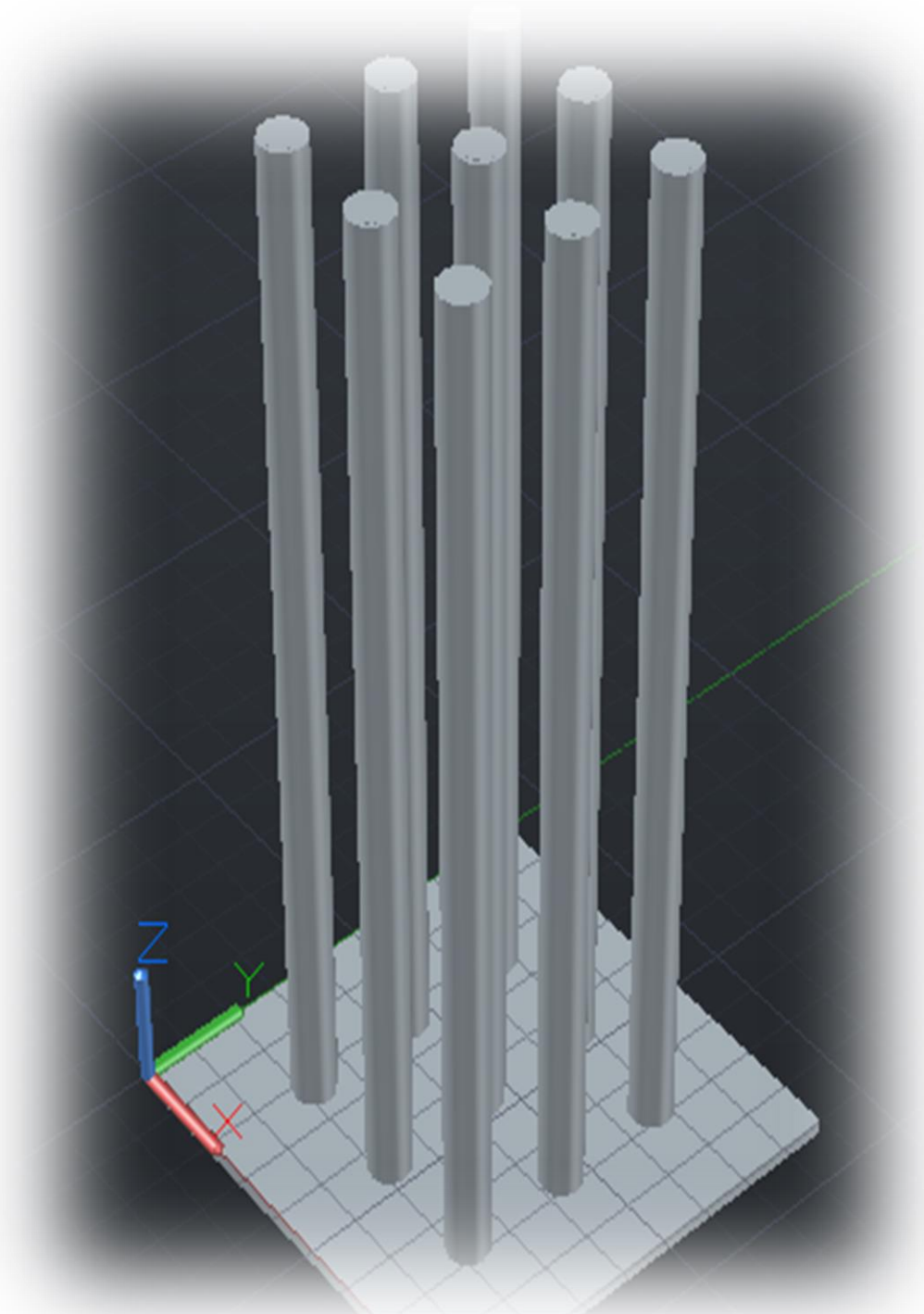


图 2. 空气电极三维立体图

结果: 通过 COMSOL 模拟得到了达到稳态过后的氧气在分布板与阵列管上的三维分布图, 对氧气的分布情况有了大致的了解。

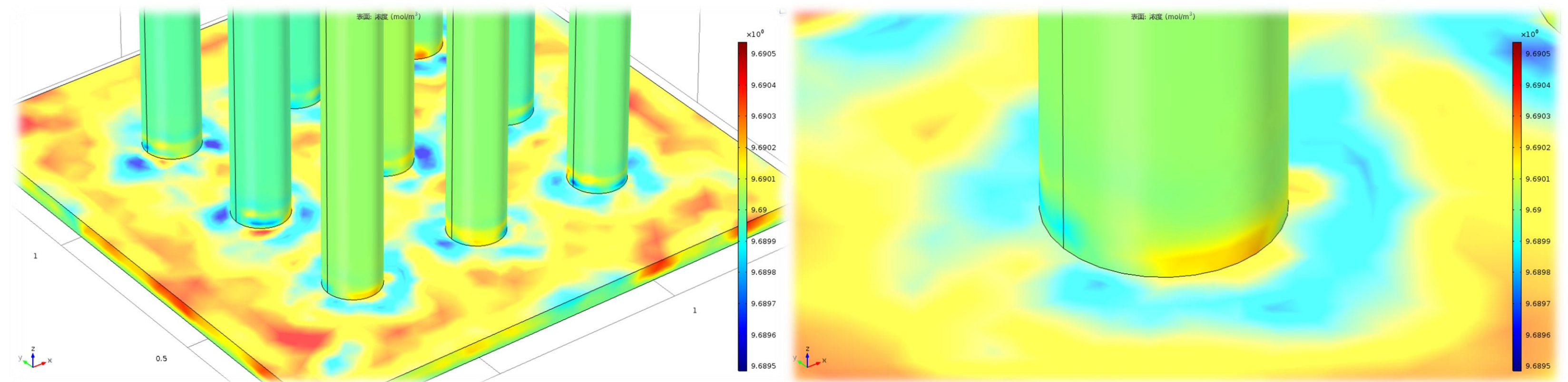


图 3. 模拟过程选用多孔介质稀物质传递模块, 图 4. 放大 100 倍进行观察, 发现阵列管所以氧气分布板上是不规则的孔道, 氧气分布趋向于随机排布, 阵列管与分布板连接部位氧气浓度较低, 此处氧气转移迅速, 可见阵列管的氧气传输性能良好

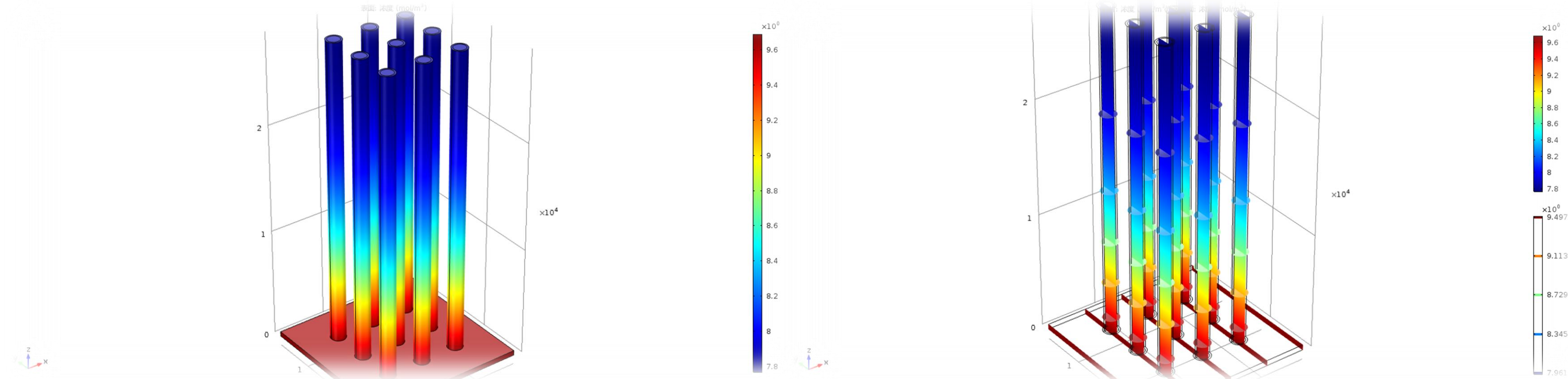


图 5. 阵列管氧气分布表面模拟结果, 与预期结果一致, 随着距离氧气分布板越来越远, 即 z 坐标越大, 氧气逐渐被消耗, 浓度越低 图 6. 阵列管氧气分布切片模拟结果

表 3-3 距离氧气分布板 20000nm 处的氧气浓度随内径与管长的变化

内径 D (nm)	管长 L (nm)		
	35000	42000	49000
900	7.02	6.26	5.56
1100	7.40	6.60	6.08
1300	7.60	7.03	6.40

表 1. 距离氧气分布板 20000nm 处的氧气浓度随内径与管长的变化

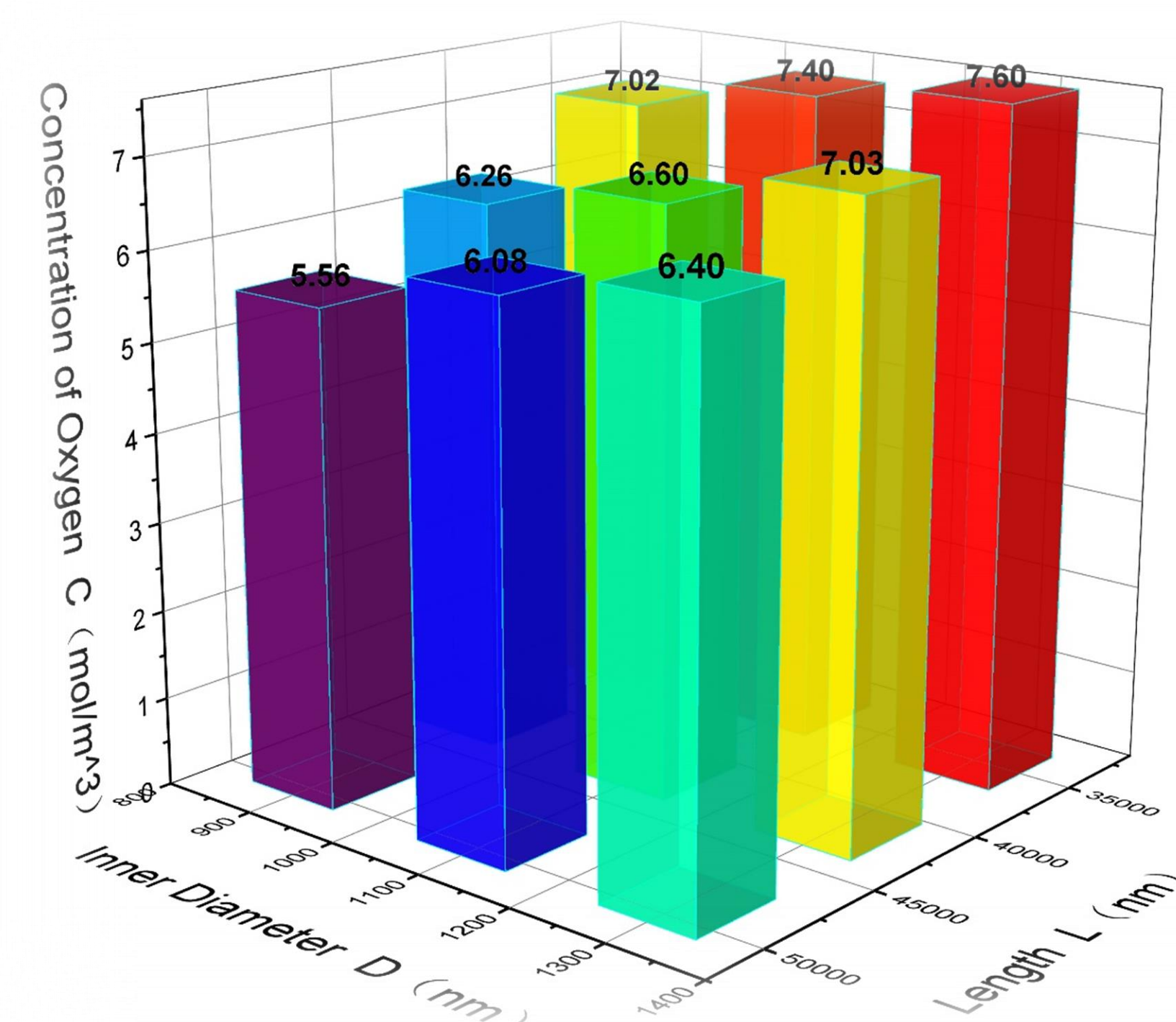


图 7. 距离氧气分布板 20000 nm 处的氧气浓度随阵列管内径 D 与管长 L 的变化

结论: 比较九组数据, 发现当阵列管规格为内径 1300 nm, 管长 35000 nm 时氧气传递效果最佳。本文运用 COMSOL Multiphysics 5.2 对此空气电极模型进行数值模拟, 作为实际实验数据的参考, 相辅相成。最终将模拟计算所得较好数据运用于实验室里锂空电池模具的制造。