

恒流充电有限柱体电极浓度分布及扩散诱导应力解析分析

彭颖吒 张锴† 郑百林‡

(同济大学航空航天与力学学院, 上海 200092)

(2023年11月3日收到; 2024年5月20日收到修改稿)

常见的柱状电极模型中, 在轴向方向一般采用无限长假设广义平面应变分析方法, 本文考虑恒流充电下有限柱形电极模型, 基于力-化耦合一般方程, 推导出位移与扩散诱导应力解析解. 有限柱体电极中浓度分布由仅考虑径向扩散和仅考虑轴向扩散两部分叠加求解. 将浓度函数代入力学方程, 使用 Boussinesq-Papkovich 函数得到应力分量解析解. 计算了表面自由柱状电极中浓度和应力场, 并将其结果与有限元软件计算的结果进行对比计算. 结果表明, 理论解和数值解中浓度分布一致, 应力分量趋势一致数值相差较小, 在荷电状态为 17.9% 时径向应力在中心处相对误差最大约为 4%. 本文分析了不同长径比柱状电极中径向和轴向单向扩散对应力场的影响, 结果表明, 随着长径比的增大, 轴向扩散对浓度分布影响下降, 径向扩散对应力场影响上升.

关键词: 锂离子电池, 有限柱体电极, 扩散诱导应力, Boussinesq-Papkovich 函数

PACS: 82.47.Aa, 82.56.Lz, 46.05.+b

DOI: 10.7498/aps.73.20231753

1 引言

近年来, 随着社会能源矛盾日益尖锐, 以电动机替代传统内燃机驱动的大型设备如飞机、汽车等是未来科技发展重要趋势之一. 目前在已有的电力来源中, 锂离子电池由于其具有比能量大、工作电压高、自放电小、循环寿命长等优势, 成为提供动力来源的首选之一^[1].

锂离子电池是依靠锂离子在正负极之间嵌入和脱出来实现电源的储存和释放的. 锂离子嵌入/脱出会引起材料层间距的变化, 导致材料局部变形, 体积变化. 在工作状态下, 其他组分如黏结剂、导电剂、集流体等制约电极材料的体积变形, 从而导致电极中扩散诱导应力 (diffusion-induced stress, DIS) 的出现. 当电极变形过大, 材料中应力超过极限时, 这会导致电极大学失效, 如活性颗粒的粉化^[2]、

活性材料与集流体/黏结剂的脱黏^[3,4]以及固态电解质界面膜 (solid electrolyte interphase, SEI) 破损^[5], 最终导致电池容量的不可逆降低. 科研工作者做了很多尝试来提升硅电极在电化学循环过程中的稳定性, 常见的方式有电极纳米化、电极结构化设计及复合材料等. 已有研究表明, 应力与电极颗粒尺寸相关, 降低电极颗粒尺寸能够有效地降低电极中应力, 且颗粒尺寸越小时内部具有更大的空间缓解锂化过程中的体积变化, 所受体积效应影响越小^[6,7]. 当材料降至纳米尺度时, 材料的性质也发生改变, 如较高的强度和韧性^[7]. 纳米电极按照维度可大致分为零维 (球形纳米颗粒)^[8]、一维 (纳米线、纳米管)^[9]和二维 (纳米薄膜)^[10].

纳米颗粒作为一种零维纳米电极, 其容量相对较大且拥有一定的抵抗断裂的能力, 是最有潜力的新一代锂离子电池电极材料之一. 由于纳米颗粒之间的电子传输路径受限导电率低^[11], 因此一般会在

† 通信作者. E-mail: zhangkai@tongji.edu.cn

‡ 通信作者. E-mail: blzheng@tongji.edu.cn

纳米硅颗粒电极中引入添加导电剂、黏结剂, 最终将活性材料经过压实处理后沉积在集流体上, 这会导致纳米颗粒电极的比容量下降, 电化学性能降低.

相较于颗粒电极, 一维电极材料直接与集流体相连, 这种结构为电子传输提供了固定通路, 导电率更高, 不需要在活性材料中添加额外导电剂^[12]. 此外, 一维电极之间具有一定的空间, 这有利于缓解体积膨胀而引起的应力. 一维材料被视为最有应用前景的电极结构之一. 不同于其他电极结构的几何形状, 一维电极材料在锂化过程中粒子传输路径及力学行为也有不同, 因此对一维电极材料在锂化过程力学行为研究对提升电池性能具有一定意义.

近年来对电极中扩散诱导应力的计算, 最早来于 1961 年, Prussin^[13] 将由浓度梯度引起的应力与温度梯度产生的应力作类比, 计算扩散诱导应力. 在 Prussin 的工作基础上, 许多学者对各类形状电极中扩散诱导应力进行计算. Li^[14] 对实心球、实心柱体和薄板电极中的扩散诱导应力进行了计算. Deshpande 等^[15] 在计算纳米线电极中应力分布时考虑了表面应力. 以上工作仅考虑了扩散对变形的影响, 忽略了应力对扩散的影响. Song 等^[16] 针对多层柱状电极建立了模型, 计算分析了各几何参数、材料参数对扩散诱导应力的影响. 结果表明, 不仅活性层中会产生应力, 集流体中也有应力生成. Yang^[17] 给出了考虑双相耦合时静态下薄板中化学应力的解析解, 并计算了不同形状电极中的浓度和应力分布. Wang 等^[18] 分析了空心柱形电极中化学应力对扩散的影响, 结果表明, 电极中的化学应力不仅促进锂的扩散, 也会改变材料扩散系数. Hao 与 Fang^[19] 计算分析了核壳结构纳米管中应力分布, 研究表明, 碳壳的厚度对扩散诱导应力影响较大, 核壳结构有利于提升纳米管电极循环稳定性.

这些柱状电极力学行为的研究中, 理论模型大都在长度方向做一定假设. 这些假设都忽略浓度在长度方向上的变化, 这与实际情况具有一定差距. Vanimisetti 和 Ramakrishnan^[20] 利用叠加法得到了有限柱形电极中应变能近似解, 该工作将有限柱形电极分为两个区域, 两端处采用了厚板模型的解, 其余区域采用了长柱形电极的解. Chen 等^[21] 基于不可逆热力学理论建立了力-化-扩散耦合模型, 并利用有限单元法计算了柱形电极与刚性基底相连中三维应力分布. 由于锂离子电池力学分析涉及到多物理场耦合, 现有的考虑有限柱形电极工作大都通过多物理场仿真软件对耦合方程直接求解

得到浓度、扩散诱导应力的数值解, 理论求解工作相对涉及较少. 但实际工况中边界条件十分复杂, 数值计算规模巨大, 浓度和应力分布的解析解可以提升数值计算效率, 并在理论上提供基准解^[22]. 但耦合方程在数学上求解难度过大, 在进行浓度和应力解析解推导过程中, 一般假设电池中电极颗粒形状和尺寸一致, 且忽略粒子在电解质中传递, 这与实际情况具有一定差距^[23].

本文在之前工作基础上^[24] 进一步考虑了一个恒流充电下有限柱形电极, 给出浓度场和应力场三维分布解析解. 由于控制方程及边界条件符合叠加原理适用条件, 恒流条件下柱状电极浓度可认为由仅考虑径向扩散和轴向扩散两部分组成. 利用变量替换法和分离变量法可分别求解单向扩散时浓度分布, 最终相加得到恒流充电下浓度分布函数. 将浓度函数代入力学方程, 利用 Boussinesq-Papkovich 函数给出电极位移和应力函数的解析解. 计算了表面自由, 长径比 $L/R = 1$ 柱形电极中浓度和应力分布, 并将结果与有限元软件得到结果进行对比; 同时对比了相同荷电状态时, 不同长径比柱形电极中应力分布, 分析了不同长径比柱状电极中轴向扩散和径向扩散对活性电极与集流体交界面处应力分布的影响.

2 理论模型

考虑一个长度为 $2L$, 半径为 R 的柱状电极, 柱坐标 (r, θ, z) 的原点与柱形电极下表面圆心重合, 如图 1 所示. 认为活性材料中无初始裂纹且循环过程中无破坏, 由于柱形电极直接生长在集流体上, 则锂离子从上表面和侧面进入电极.

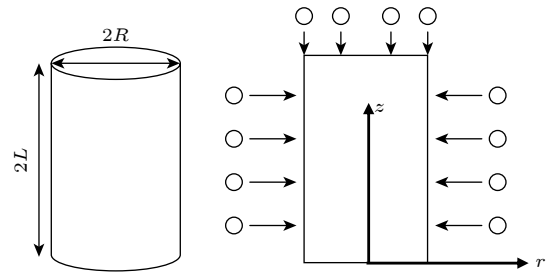


图 1 有限柱形电极嵌锂示意图

Fig. 1. Schematic of the finite-length cylindrical electrode structure.

2.1 扩散模型

为降低数学上求解困难, 在粒子传输模型中采

取以下假设, 忽略应力对扩散的影响, 忽略锂化过程中浓度和温度变化对材料属性和扩散系数的影响, 即在循环过程中材料参数保持不变. 由于电极结构和边界条件都是轴对称, 浓度 C 仅是空间坐标 r , z 和时间 t 的函数, 柱坐标系下单向耦合的扩散控制方程为^[25]

$$\frac{\partial^2 C}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial C}{\partial r} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} = \frac{1}{D} \frac{\partial C}{\partial t}, \quad (1)$$

其中 D 为扩散系数. 在一维纳米电极结构中, 电极直接与集流体相连, 即电极与集流体交界面 ($z=0$) 没有粒子传输. 这样, 初始条件、边界条件可写为

$$C(r, z, 0) = 0, \quad (2)$$

$$D \frac{\partial C(r, 2L, t)}{\partial z} = \frac{i_n}{F}, \quad (3)$$

$$D \frac{\partial C(r, 0, t)}{\partial z} = 0, \quad (4)$$

$$D \frac{\partial C(R, z, t)}{\partial r} = \frac{i_n}{F}, \quad (5)$$

其中 i_n 为表面电流; F 为法拉第常数, (2) 式表示电极中初始浓度为 0. 由于本文中扩散方程和边界条件均为线性的, 满足叠加定理, 认为锂离子浓度 C 由轴向扩散 C_1 (仅考虑锂从上表面扩散) 和径向扩散 C_2 (仅考虑锂离子从侧面扩散) 两部分组成. 值得注意的是, 实际工况中物质扩散是多个物理场耦合作用, 叠加定理不适用. 引入无量纲变量:

$$\zeta = \frac{z}{R}, \quad \rho = \frac{r}{R}, \quad \tau = \frac{Dt}{R^2}, \quad \overline{C}_1 = \frac{C_1 FD}{i_n R},$$

$$\overline{C}_2 = \frac{C_2 FD}{i_n R}, \quad \overline{C} = \frac{CFD}{i_n R}. \quad (6)$$

当锂离子仅从电极上表面扩散时, 无量纲浓度 \overline{C}_1 仅沿空间坐标 z 变化. 为了求解上述方程, 令 $\overline{C}_1^* = \overline{C}_1 - \frac{R}{4L} \zeta^2 - \frac{R}{2L} \tau$, 则方程 (1) 可写为

$$\frac{\partial^2 \overline{C}_1^*}{\partial \zeta^2} = \frac{\partial \overline{C}_1^*}{\partial \tau}. \quad (7)$$

初始和边界条件改写为

$$\overline{C}_1^*(\zeta, 0) = -\frac{R}{4L} \zeta^2, \quad (8)$$

$$\frac{\partial \overline{C}_1^*(2L/R, \tau)}{\partial \zeta} = 0, \quad (9)$$

$$\frac{\partial \overline{C}_1^*(0, \tau)}{\partial \zeta} = 0. \quad (10)$$

偏微分方程的非齐次边界条件转化为齐次边

界条件, 利用分离变量法, 满足边界条件无量纲浓度可写为 $\overline{C}_1^* = K_m T(\tau) \cos\left(\frac{mR\pi\zeta}{2L}\right)$ ($m = 0, 1, 2, 3, \dots$). 将 \overline{C}_1^* 的表达式代入到 (7) 式, 可得 $T(\tau) = \exp\left(-\frac{R^2 m^2 \pi^2}{4L^2} \tau\right)$. 其中 $m \neq 0$ 时,

$$K_m = -\int_0^{2L/R} \frac{R^2}{4L^2} \zeta^2 \cos\left(\frac{mR\pi\zeta}{2L}\right) d\zeta = -\frac{4L(-1)^m}{Rm^2\pi^2};$$

当 $m = 0$ 时, $K_0 = -L/(3R)$. 则将 K_m 和 K_0 代入上述表达式, 最终可得 C_1 的表达式为

$$C_1 = \frac{i_n R}{FD} \left[\frac{R\zeta^2}{4L} - \frac{L}{3R} + \frac{R}{2L} \tau - \frac{4L}{R\pi^2} \times \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^m \cos(mR\pi\zeta/2L) e^{-\frac{R^2 m^2 \pi^2}{4L^2} \tau}}{m^2} \right]. \quad (11)$$

类似地, 令变量 $\overline{C}_2^* = \overline{C}_2 - \rho^2/2 - 2\tau$, 则方程 (1) 及初始、边界条件可写为

$$\frac{\partial^2 \overline{C}_2^*}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial \overline{C}_2^*}{\partial \rho} = \frac{\partial \overline{C}_2^*}{\partial \tau}, \quad (12)$$

$$\overline{C}_2^*(\rho, 0) = \rho^2/2, \quad (13)$$

$$\frac{\partial \overline{C}_2^*(1, \tau)}{\partial \rho} = 0. \quad (14)$$

偏微分方程的非齐次边界条件转化为齐次边界条件, 为了满足边界条件, $\overline{C}_2^* = F_n T(\tau) J_0(u_n \rho)$, u_n 为方程 $J_1(u_n) = 0$ 的根, 则 $T(\tau) = e^{-u_n^2 \tau}$, $J_0(\cdot)$ 和 $J_1(\cdot)$ 分别为零阶和一阶第一类贝塞尔函数. 其中当 $n \neq 0$ 时,

$$F_n = -\int_0^1 \rho^3 J_0(u_n \rho) d\rho / \left[2 \int_0^1 \rho (J_0(u_n \rho))^2 d\rho \right];$$

$n = 0$ 时, $F_0 = -1/4$. 将 F_n 和 F_0 的表达式代入 \overline{C}_2^* 的表达式, 最终写出

$$C_2 = \frac{i_n R}{FD} \left[\frac{\rho^2}{2} - \frac{1}{4} + 2\tau - \sum_{m=1}^{\infty} \frac{2J_0(u_n \rho) e^{-u_n^2 \tau}}{u_n^2 J_0(u_n)} \right]. \quad (15)$$

结合方程 (11) 和方程 (15), 最终可以得到恒流充电下有限柱形电极中浓度分布函数为

$$C = \frac{i_n R}{FD} \left[\frac{R\zeta^2}{4L} + \frac{\rho^2}{2} - \left(\frac{L}{3R} + \frac{1}{4} \right) + \left(\frac{R}{2L} + 2 \right) \tau \right] - \frac{i_n R}{FD} \left[\frac{4L}{R\pi^2} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^m \cos(mR\pi\zeta/2L) e^{-\frac{R^2 m^2 \pi^2}{4L^2} \tau}}{m^2} \right] + \sum_{m=1}^{\infty} \frac{2J_0(u_n \rho) e^{-u_n^2 \tau}}{u_n^2 J_0(u_n)}. \quad (16)$$

2.2 力学模型

类比于热应力, 当电极中初始锂的浓度为 0 时浓度改变引起弹性体内产生微小的应变 ΩC , 其中 Ω 是偏摩尔体积, 量纲为 mol/m^3 . 本文仅考虑线弹性范围内变形, 扩散引起弹性体产生的附加形变满足胡克定律, 故有限柱状电极中本构方程可写为

$$\sigma_r = \lambda e + 2\mu \varepsilon_r - \frac{3\lambda + 2\mu}{3} \Omega C, \quad (17)$$

$$\sigma_\theta = \lambda e + 2\mu \varepsilon_\theta - \frac{3\lambda + 2\mu}{3} \Omega C, \quad (18)$$

$$\sigma_z = \lambda e + 2\mu \varepsilon_z - \frac{3\lambda + 2\mu}{3} \Omega C, \quad (19)$$

$$\tau_{rz} = \mu \gamma_{rz}, \quad (20)$$

其中 λ 和 μ 为拉梅常数; e 为体应变; $\sigma_r, \sigma_\theta, \sigma_z$ 和 τ_{rz} 为电极材料中的应力分量. 电极材料应变分量 $\varepsilon_r, \varepsilon_\theta, \varepsilon_z, \gamma_{rz}$ 与位移分量 u_r, u_z 的关系为

$$\varepsilon_r = \frac{\partial u_r}{\partial r}, \quad \varepsilon_\theta = \frac{u_r}{r}, \quad \varepsilon_z = \frac{\partial u_z}{\partial z}, \quad \gamma_{rz} = \frac{\partial u_r}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial r}. \quad (21)$$

柱坐标系下轴对称问题的平衡方程为

$$\frac{\partial \sigma_r}{\partial r} + \frac{\sigma_r - \sigma_\theta}{r} + \frac{\partial \tau_{rz}}{\partial z} = 0, \quad (22)$$

$$\frac{\partial \tau_{rz}}{\partial r} + \frac{\tau_{rz}}{r} + \frac{\partial \sigma_z}{\partial z} = 0. \quad (23)$$

假设电极不受约束, 表面自由则边界条件为

$$\sigma_r(R, z, t) = 0, \quad (24a)$$

$$\tau_{rz}(R, z, t) = 0, \quad (24b)$$

$$\sigma_z(r, 2L, t) = 0, \quad (25a)$$

$$\tau_{rz}(r, 2L, t) = 0, \quad (25b)$$

将上述变量进行无量化, 考虑无量纲形式

$$(\bar{\sigma}_r, \bar{\sigma}_\theta, \bar{\sigma}_z, \bar{\lambda}, \bar{\mu}) = \frac{1}{E} (\sigma_r, \sigma_\theta, \sigma_z, \lambda, \mu), \quad (26)$$

其中 E 为电极材料的弹性模量. 引入 Boussinesq-Papkovich 函数求解上述方程, 无量纲形式 Boussinesq-Papkovich 函数^[26]表示为

$$(\bar{\Phi}, \bar{\Psi}) = \frac{1}{2\mu} \left(\frac{\Phi}{R^2}, \frac{\Psi}{R} \right). \quad (27)$$

无量纲位移矢量 $\bar{\mathbf{u}}$ ($\bar{\mathbf{u}} = \mathbf{u}/R = (u_r \mathbf{r} + u_z \mathbf{k})/R$) 与无量纲形式 Boussinesq-Papkovich 函数关系为

$$\bar{\mathbf{u}} = \bar{\nabla}(\bar{\Phi} + \zeta \bar{\Psi}_z) - 4(1-v) \mathbf{k} \bar{\Psi}_z. \quad (28)$$

这里 \mathbf{r} 和 \mathbf{k} 为径向和轴向单位矢量, v 为泊松比.

无量纲形式 Boussinesq-Papkovich 函数满足下列方程:

$$\bar{\nabla}^2 \bar{\Phi} = \frac{\Omega C(1+v)}{3(1-v)}, \quad (29a)$$

$$\bar{\nabla}^2 \bar{\Psi}_z = 0. \quad (29b)$$

拉普拉斯算子 $\bar{\nabla}^2 = \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{\partial^2}{\partial \zeta^2}$. 函数 $\bar{\Phi}(\rho, \zeta, \tau)$ 由通解 $\bar{\Phi}_1$ 和特解 $\bar{\Phi}_2$ 组成, 其中通解满足以下方程:

$$\bar{\nabla}^2 \bar{\Phi}_1 = 0. \quad (30)$$

考虑 $\bar{\Phi}_1$ 是三个自变量的函数, 运用分离变量法, 将其构造为三个变量函数的积, 即 $\bar{\Phi}_1 = R_1(\rho) Z_1(\zeta) T(\tau)$. 将其代入方程 (30), 可以得到

$$\frac{1}{R_1} \left(\frac{d^2 R_1}{d\rho^2} + \frac{dR_1}{\rho d\rho} \right) = -\frac{1}{Z_1} \frac{d^2 Z_1}{d\zeta^2} = \lambda. \quad (31)$$

这里 λ 为不依赖于自变量 ρ 和 ζ 的常数. 根据 λ 不同取值 (正实数、负实数和零), $Z_1(\zeta) R_1(\rho)$ 的解可分为三种, 且径向位移关于 $z = 0$ 对称, $u_r|_{r=0} = \text{finite}$, 这样通解 $\bar{\Phi}_1$ 可写为

$$\begin{aligned} \bar{\Phi}_1 = & \sum_{m=1}^{\infty} g_{1m}(\tau) J_0(C_m \rho) \cosh(C_m \zeta) \\ & + \sum_{m=1}^{\infty} g_{2m}(\tau) I_0(D_m \rho) \cos(D_m \zeta), \end{aligned} \quad (32)$$

其中 $g_{1m}(\tau), g_{2m}(\tau)$ 是依赖于边界条件的函数; C_m 是 $J_1(C_m) = 0$ 的正实数根; $D_m = m\pi/\delta$ ($m = 1, 2, 3, \dots$); $I_0(\cdot)$ 为零阶第一类修正贝塞尔函数. 将浓度函数代入方程, 可以得到特解 $\bar{\Phi}_2$:

$$\begin{aligned} \bar{\Phi}_2 = & \frac{-4L^2 \beta (\bar{C}_1^* + L/3R)}{R^2 (m\pi)^2} + \frac{-\beta (\bar{C}_2^* + 1/4)}{u_n^2} \\ & + \frac{\beta R \zeta^2 \tau}{4L} - \frac{\beta L \zeta^2}{6R} + \beta \frac{R(\zeta)^4}{48L} \\ & - \frac{\beta \rho^2}{16} + \frac{\beta \rho^4}{32} + \frac{\beta \rho^2 \tau}{2}, \end{aligned} \quad (33)$$

式中 $\beta = \frac{\Omega(1+v)}{3(1-v)} \frac{i_n R}{FD}$. 类似地, 由于柱形电极的轴向位移 u_z 是 z 的奇函数, 则可以写出方程 (29b) 的解为

$$\begin{aligned} \bar{\Psi}_z = & \sum_{m=1}^{\infty} f_{1m}(\tau) J_0(C_m \rho) \sinh(C_m \zeta) \\ & + \sum_{m=1}^{\infty} f_{2m}(\tau) I_0(D_m \rho) \sin(D_m \zeta) + f_3(\tau) \zeta. \end{aligned} \quad (34)$$

这里 $f_{1m}(\tau)$, $f_{2m}(\tau)$, $f_3(\tau)$ 仅为变量 τ 的函数, 可以通过边界条件进行确定. 综合方程 (17) 和方程 (32) 可以得到恒流充电下柱状电极材料中应变分量:

$$\begin{aligned} \bar{\sigma}_r = \bar{\lambda} & \left[\beta \bar{C} - 2(1-2\nu) \left(\sum_{m=1}^{\infty} f_{1m} C_m J_0(C_m \rho) \cosh(C_m \zeta) + \sum_{m=1}^{\infty} f_{2m} D_m I_0(D_m \rho) \cos(D_m \zeta) + f_3 \right) \right] \\ & + 2\bar{\mu} \left\{ \beta \left[\sum_{m=1}^{\infty} \frac{2(J_1(u_m \rho)/\rho - u_m J_0(u_m \rho)) e^{-u_m^2 \tau}}{u_m^3 J_0(u_m R)} \right] - \frac{\beta}{8} + \frac{3\beta \rho^2}{8} + \beta \tau \right. \\ & + \sum_{m=1}^{\infty} g_{1m} C_m \left(\frac{J_1(C_m \rho)}{\rho} - C_m J_0(C_m \rho) \right) \cosh(C_m \zeta) \\ & + \sum_{m=1}^{\infty} g_{2m} D_m \left(-\frac{I_1(D_m \rho)}{\rho} + D_m I_0(D_m \rho) \right) \cos(D_m \zeta) \\ & + \sum_{m=1}^{\infty} f_{1m} C_m \left(\frac{J_1(C_m \rho)}{\rho} - C_m J_0(C_m \rho) \right) \zeta \sinh(C_m \zeta) \\ & \left. + \sum_{m=1}^{\infty} f_{2m} D_m \left(-\frac{I_1(D_m \rho)}{\rho} + D_m I_0(D_m \rho) \right) \zeta \sin(D_m \zeta) \right\} - \frac{3\bar{\lambda} + 2\bar{\mu}}{3} \Omega C, \end{aligned} \quad (35)$$

$$\begin{aligned} \bar{\sigma}_\theta = \bar{\lambda} & \left[\beta \bar{C} - 2(1-2\nu) \left(\sum_{m=1}^{\infty} f_{1m} C_m J_0(C_m \rho) \cosh(C_m \zeta) + \sum_{m=1}^{\infty} f_{2m} D_m I_0(D_m \rho) \cos(D_m \zeta) + f_3 \right) \right] \\ & + \frac{2\bar{\mu}}{\rho} \left[\frac{\beta}{u_n} \left(-\sum_{m=1}^{\infty} \frac{2J_1(u_n \rho) e^{-u_n^2 \tau}}{\rho u_n^2 J_0(u_n R)} \right) - \frac{\beta \rho}{8} + \frac{3\beta \rho^3}{8} + \beta \rho \tau - \sum_{m=1}^{\infty} g_{1m} C_m J_1(C_m \rho) \cosh(C_m \zeta) \right. \\ & + \sum_{m=1}^{\infty} g_{2m} D_m I_1(D_m \rho) \cos(D_m \zeta) - \sum_{m=1}^{\infty} f_{1m} C_m J_1(C_m \rho) \zeta \sinh(C_m \zeta) + \sum_{m=1}^{\infty} f_{2m} D_m I_1(D_m \rho) \zeta \sin(D_m \zeta) \left. \right] \\ & - \frac{3\bar{\lambda} + 2\bar{\mu}}{3} \Omega C, \end{aligned} \quad (36)$$

$$\begin{aligned} \bar{\sigma}_z = \bar{\lambda} & \left[\beta \bar{C}_1 - 2(1-2\nu) \left(\sum_{m=1}^{\infty} f_{1m} C_m J_0(C_m \rho) \cosh(C_m \zeta) + \sum_{m=1}^{\infty} f_{2m} D_m I_0(D_m \rho) \cos(D_m \zeta) + f_3 \right) \right] \\ & + 2\bar{\mu} \left\{ \sum_{m=1}^{\infty} g_{1m} C_m^2 J_0(C_m \rho) \cosh(C_m \zeta) - \sum_{m=1}^{\infty} g_{2m} D_m^2 I_0(D_m \rho) \cos(D_m \zeta) \right. \\ & + \beta \left[\frac{R\zeta^2}{4L} - \frac{L}{3R} + \frac{R}{2L} \tau - \frac{4L}{R\pi^2} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^m \cos(mR\pi\zeta/2L) e^{-\frac{R^2 m^2 \pi^2}{4L^2} \tau}}{m^2} \right] \\ & \left. + \sum_{m=1}^{\infty} f_{1m} C_m^2 J_0(C_m \rho) \zeta \sinh(C_m \zeta) - \sum_{m=1}^{\infty} f_{2m} D_m^2 I_0(D_m \rho) \zeta \sin(D_m \zeta) \right\} - \frac{3\bar{\lambda} + 2\bar{\mu}}{3} \Omega C_1 \\ & - 4\bar{\mu}(1-2\nu) \left[\sum_{m=1}^{\infty} f_{1m} C_m J_0(C_m \rho) \cosh(C_m \zeta) + \sum_{m=1}^{\infty} f_{2m} D_m I_0(D_m \rho) \cos(D_m \zeta) + f_3 \right], \end{aligned} \quad (37)$$

$$\begin{aligned} \bar{\tau}_{rz} = & -2\bar{\mu} \left[\sum_{m=1}^{\infty} g_{1m} C_m^2 J_1(C_m \rho) \sinh(C_m \zeta) + \sum_{m=1}^{\infty} g_{2m} D_m^2 I_1(D_m \rho) \sin(D_m \zeta) \right. \\ & + \sum_{m=1}^{\infty} f_{1m} C_m^2 J_1(C_m \rho) \zeta \cosh(C_m \zeta) - \sum_{m=1}^{\infty} f_{2m} D_m^2 I_1(D_m \rho) \zeta \cos(D_m \zeta) \\ & \left. - (1-2\nu) \sum_{m=1}^{\infty} f_{1m} C_m J_1(C_m \rho) \sinh(C_m \zeta) + (1-2\nu) \sum_{m=1}^{\infty} f_{2m} D_m I_1(D_m \rho) \sin(D_m \zeta) \right]. \quad (38) \end{aligned}$$

3 结果与讨论

以长径比 L/R 为 1 柱体电极为例, 计算和分析了有限柱形电极中浓度和应力空间分布. 利用边界条件上的点确定应力函数中未知参数, 其中点的个数、点的分布对计算结果影响较大. 计算采用二分之一模型, 当 $L/R = 1$ 时长度方向取点个数为径向方向取点的两倍. 为验证理论解的收敛性, 分别对应力函数中 $m = 30$ 和 $m = 50$ 进行计算, 结果表明, $m = 30$ 和 $m = 50$ 时数值结果一致. 本文以 LiMn_2O_4 为例, 泊松比 $\nu = 0.3$ ^[27], 偏摩尔体积 $\Omega = 3.497 \times 10^{-6} \text{ m}^3/\text{mol}$ ^[28], 弹性模量 $E = 1.9 \times 10^{11} \text{ Pa}$ ^[27], $i_0 R / (FD) = 21850 \text{ mol/m}^3$. 为较为直

观衡量电极的充电状态, 引入荷电状态 SOC (state of charge), 其定义为

$$C_{\text{SOC}} = \frac{\int_0^{2L/R} \int_0^1 c(r, z, t) dr dz}{\int_0^{2L/R} \int_0^1 c_{\text{max}} dr dz}. \quad (39)$$

为了验证理论解, 将理论解与有限元软件计算的数值结果对比, 有限元仿真通过多耦合场分析软件 Comsol 开展. 已有研究表明, 柱体电极与集流体相连处应力和电流最大, 过大的应力会引起电极材料破损和活性锂的持续消耗, 最终导致靠近集流体处电极半径变小^[29]. 不同初始条件、边界条件下柱形中浓度和电极分布不同, 图 2 给出了恒流条件

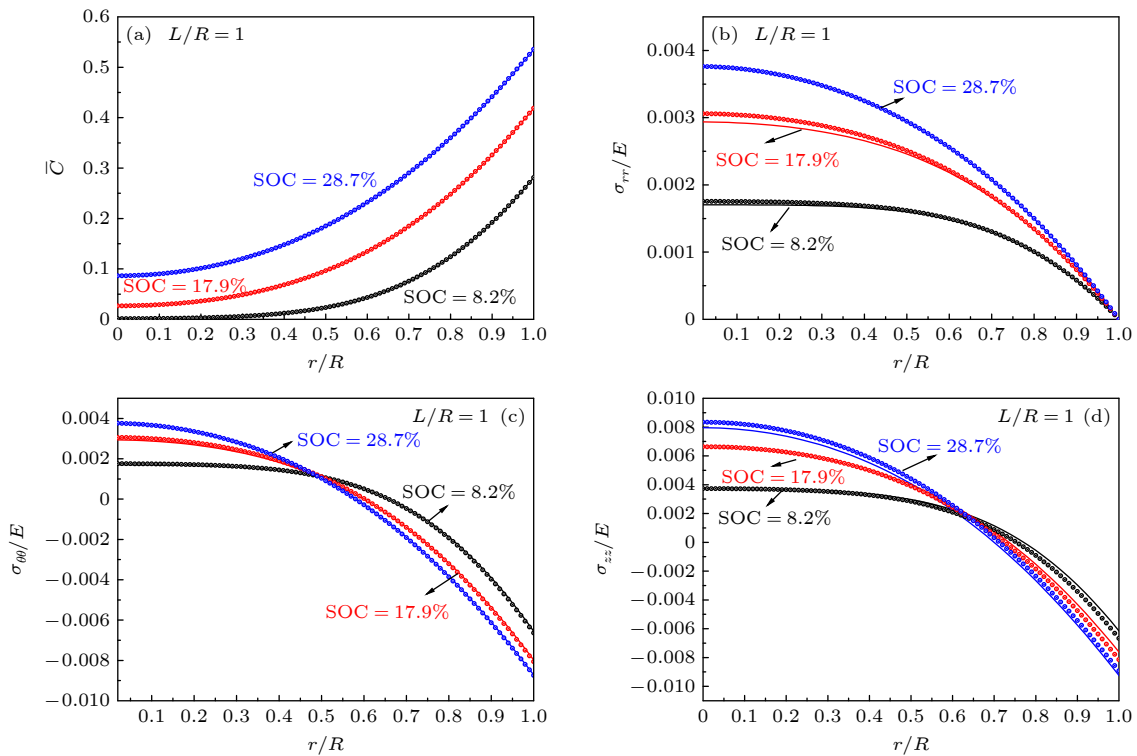


图 2 不同充电状态下 $z = 0$ 时锂离子浓度 (a) 和应力分量 (b)–(d) 沿径向分布曲线 (实线为理论解; 圆圈图形为数值解)

Fig. 2. Radial distribution of Li-concentration (a) and stress components (b)–(d) under different SOC's and $z = 0$ (solid lines, theoretical results; circle symbols, FEM results).

下表面自由 (理想状态) 有限柱形电极与集流体交界面上浓度 (图 2(a)) 与应力 (图 2(b)–(d)) 分布曲线, 实线为理论解, 圆圈图形为有限元解. 有限元计算的本质思想是对偏微分方程组初边值问题进行离散计算, 最终取得该问题的近似解. 恒流条件下有限柱体中粒子扩散问题解析解为封闭形式的函数, 而应力函数中未知参数由边界条件上取点的位置和个数决定, 是一个半解析解. 这解释了, 不同荷电状态下, 浓度的理论解和数值解一致, 而两个解中各应力分量趋势一致, 数值有一定误差.

图 2(b)–(d) 分别为径向应力、环向应力、轴向应力沿径向分布曲线, 不同颜色表示所在荷电状态不同. 径向应力随着坐标 r 的增大应力下降, 表面处降为 0, 符合自由边界条件. 从图 2(b) 可以看出, 中心处径向应力相对误差最大, 随着径向坐标增大误差降低, 在 SOC 为 17.9% 时在圆心处径向应力的相对误差达到最大值约 4%. 如图 2(c) 所示, 中心处的环向应力为拉应力, 随着与原点距离增大逐渐转为压应力, 环向应力在中心处相对误差最大, 其最大相对误差约为 4%, 并且中心处的环向应力和径向应力数值接近. 对比图 2(c) 和图 2(d), 可以看出沿径向方向上轴向应力与环向应力具有分布趋势类似, 轴向应力的相对误差在两端处取值较大, 在 SOC 为 8.2% 时达到最大相对误差约 7.8%.

由于本文仅考虑弹性范围内的变形, 忽略电极材料在循环工作中产生的塑性变形, von Mises 应力作为等效应力, 是描述材料破坏及塑性变形的指标. 根据应力分布函数, 进而可得到 von Mises 应力空间分布情况, 图 3(a) 绘制了不同充电状态下 $z = 0$ 上 von Mises 应力分布. 可以看出: von Mises 应力随着径向坐标先降低, 在 $r/R = 0.65$ 附近处值达到最小, 随后逐渐上升在表面处取得最大值; 随着材料嵌锂量的持续增加, 浓度梯度增大, von Mises 应力数值上升. 这表明恒流充电下, 柱形电极表面处最先进入塑性区域, 这与恒压条件下结果一致 [24]. 图 3(b) 为 $z = 0$ 和 $r = R$ 上等效力随充电时间变化曲线. 可以看出随着充电过程进行 von Mises 应力上升, 在初始锂化阶段, 等效应力变化速率较快, 随着嵌锂量的增加, 等效应力增长速度减缓.

恒流充电下, 电极中锂离子浓度是仅考虑轴向和径向单向扩散浓度的叠加, 因此恒流条件下柱形电极中应力也可认为是由两个单向扩散所引起应力的叠加. 扩散过程与电极的几何尺寸紧密相关,

为分析柱状电极的长径比对应力的影响, 本文计算了 SOC 为 63.4% 时 $L/R = 0.5$ 和 1 在 $z = 0$ 处各应力分量沿径向分布. 在图 4(a) 和图 4(b) 中, 黑线代表径向应力、红线环向应力、蓝线轴向应力, 实线为考虑轴向和径向方向扩散时应力沿径向分布, 圆圈形状图案为仅考虑径向扩散即 $C_1 = 0$, 方形形状图案为仅考虑轴向扩散即 $C_2 = 0$. 在长径比为 0.5 柱形电极中, 三种工况下柱状电极中心处径向应力、环向应力及轴向应力均为正值, 表面处环向应力和轴向应力为负值. 不同的是在长径比为 1 柱形电极中, 仅考虑轴向单向扩散时靠近中心处的径向应力和环向应力为压应力, 这表明此时柱形电极的下表面受压. 观察图 4(a) 和图 4(b) 可以看出, 恒流条件下 SOC 相同时, 小长径比柱形电极中应力大于大长径比电极中应力. 当半径一定时, 随着长径比的增大, 扩散对应力场的影响变小, 应力场主要受径向浓度变化影响. 在长径比 $L/R = 1$ 电极中, 应力场主要受径向浓度变化影响, 这是由于随着柱形电极长径比增大, 锂离子从上表面扩散到下表面所需时间更长.

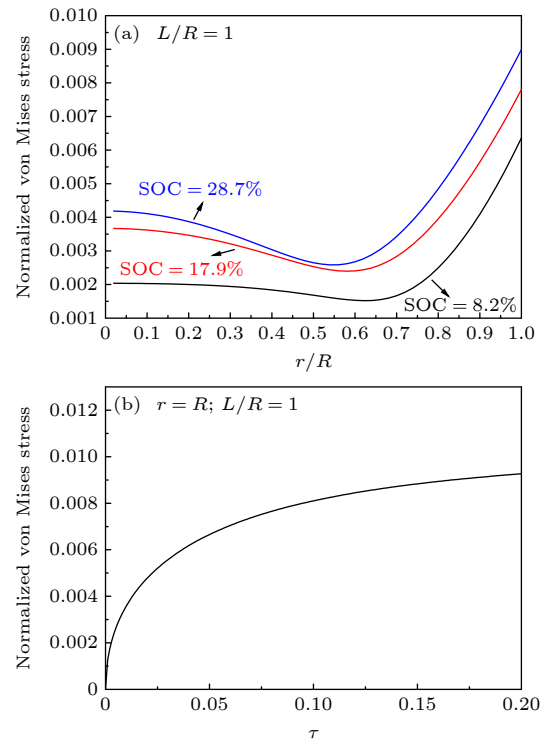


图 3 (a) 不同充电状态下 $z = 0$ 处 von Mises 应力分布; (b) $z = 0, r = R$ 处 von Mises 应力随无量纲时间的变化

Fig. 3. (a) Radial distribution of normalized von Mises stress under different SOC and $z = 0$; (b) variation of normalized von Mises stress at $z = 0, r = R$ with dimensionless time.

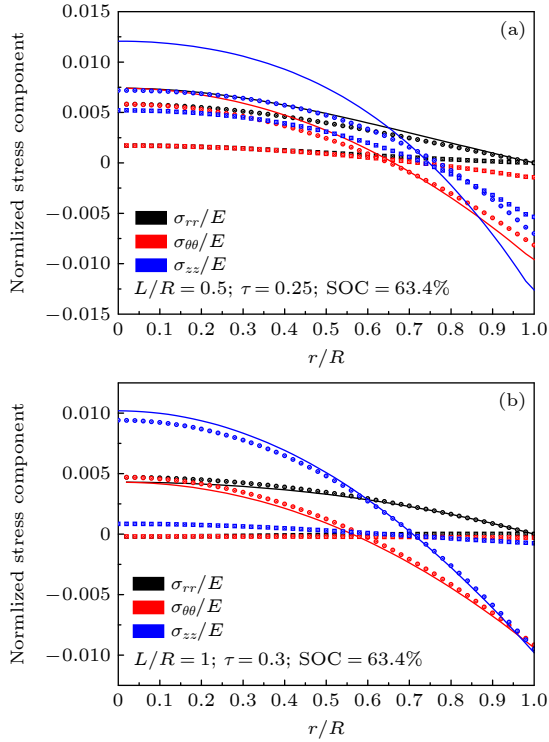


图4 长径比为0.5 (a), 1 (b) 柱形电极中 $z = 0$ 无量纲应力分量径向分布曲线 (实线, $C_1 \neq 0, C_2 = 0$; 圆形符号, $C_1 = 0, C_2 \neq 0$; 方形符号, $C_2 = 0$)

Fig. 4. Radial distribution of normalized stress component for aspect ratios of $L/R = 0.5$ (a), 1 (b) (solid lines, $C_1 \neq 0, C_2 \neq 0$; circle symbols, $C_1 = 0, C_2 \neq 0$; square symbols, $C_2 = 0$).

值得注意的是, 本文仅考虑电极材料在线弹性范围内的变形, 这对于完全锂化后变形较小的材料如石墨 (10%)^[30]、 LiMn_2O_4 (6.5%)^[31] 较为适用, 对于锂化变形较大且发生塑性变形的电极材料如硅 (300%)^[32]、锗 (260%)^[33] 等, 忽略塑性变形将带来较大的误差. 基于小变形、线弹性理论的理论模型预测裂纹首先在电极中心处生成, 这与实验^[34] 观测到裂纹首先出现在硅纳米线电极表面不符, 而研究证明塑性变形会导致电极外表面环向受拉, 从而导致表面裂纹的出现^[35].

在循环充放电过程中, 电极材料中存储的应变能克服材料阻力所需要形成新表面所需要的功, 则裂纹扩展. 这里定义无量纲应变能为

$$\begin{aligned} \Pi_{\text{bulk}} = \frac{E_{\text{bulk}}}{2\pi ER^3} = \int_0^{L/R} \int_0^1 \left[\frac{1}{2} (\bar{\sigma}_r^2 + \bar{\sigma}_\theta^2 + \bar{\sigma}_z^2) \right. \\ \left. - \nu (\bar{\sigma}_r \bar{\sigma}_\theta + \bar{\sigma}_r \bar{\sigma}_z + \bar{\sigma}_z \bar{\sigma}_\theta) + (1 + \nu) \bar{\tau}_{rz}^2 \right] \rho d\rho d\zeta. \end{aligned} \quad (40)$$

柱形电极中常见的有两种断裂形式: 轴向断裂和环向断裂^[34]. 轴向断裂会导致柱形电极生成两

个小于原电极尺寸的碎片, 其可认为是轴向应力作用的结果. 环向断裂中裂纹会沿长度方向扩展, 其可视为环向应力作用的结果. 以 $2\pi ER^3$ 对轴向断裂能和环向断裂能进行无量纲化, 则无量纲化轴向、环向断裂能为^[36]

$$\Pi_{f,\text{axial}} = \frac{2\pi\gamma_{\text{surface}}R^2}{2\pi ER^3}, \quad (41a)$$

$$\Pi_{f,\text{tangential}} = \frac{2\gamma_{\text{surface}}RL}{2\pi ER^3}, \quad (41b)$$

其中 γ_{surface} 为形成单位表面所需的表面能. 在以下计算中 $\gamma_{\text{surface}} = 5 \text{ J}\cdot\text{m}^{-2}$, $R = 1 \times 10^{-6} \text{ m}$. 图5为考虑不同长径比柱形电极中应变能与断裂能的比值随时间的变化, 黑色、红色和蓝色分别表示长径比 $L/R = 1, 0.5$ 和 0.25 时柱状电极中无量纲断裂能演化的结果, 实线为应变能与轴向断裂能的比值, 虚线为应变能与环向断裂能的比值. 从图5可以看出, 随着柱体电极长径比增大, 应变能与轴向断裂能的比值增大. 在不同长径比电极中, 长径比为0.5柱状电极的应变能与环向断裂能比值最大, 应变能与环向断裂能的比值与电极的几何形状有关. 在三种不同长径比柱形电极中, 应变能与环向断裂能比值大于应变能与轴向断裂能的比值. 这说明在这三种长径比电极中发生环向断裂可能性更大. 根据轴向、环向断裂能表达式 (41a) 和 (41b), 存在一个临界长径比 $(L/R)_{\text{cr}} = \pi$, 当长径比低于这个临界值时, 电极中更容易出现环向断裂, 高于临界值时, 更容易发生轴向断裂. 柱体电极直接生长在集流体上, 电子运动具有定向性, 轴向断裂会导致部分电极材料与集流体脱离, 导电率下降, 因此相对于环向断裂, 轴向断裂在柱状电极中更为危险.

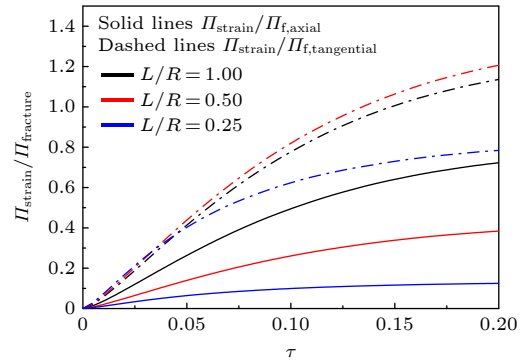


图5 不同长径比柱形电极中无量纲断裂能随时间的变化
Fig. 5. Variation of strain energy normalized with fracture energy for the cylindrical electrodes with different aspect ratios of L/R .

4 结 论

本文针对恒流条件下有限柱形电极建立了扩散模型和力学模型,给出了位移和应力分量的解析解.运用叠加定理和分离变量法,得到有限柱形电极在恒流充电下浓度分布函数.将浓度函数代入力学模型,利用 Boussinesq-Papkovich 函数得到了应力函数的半解析解.计算了长径比 $L/R = 1$ 柱形电极中的浓度和应力分布,将理论解与有限元软件计算的数值解进行对比验证,结果表明两个解中浓度结果一致,应力分量的结果分布趋势相同且数值相差较小.分析计算了不同充电状态下 $z = 0$ 截面上等效应力径向分布曲线,结果表明,随着锂的持续嵌入 von Mises 应力增大,且在表面处取值最大,这表明恒流充电下,塑性变形首先出现在电极表面区域.计算分析了长径比 $L/R = 1$ 和 0.5 时柱状电极在 $z = 0$ 处的应力分布,结果表明, SOC 相同时小长径柱状电极中应力较大,随着长径比的增大,轴向扩散对应力场的影响减弱.计算分析了不同长径比下应变能与断裂能比值随无量纲锂化时间变化曲线,结果表明存在一个临界长径比 $(L/R)_{cr} = \pi$,当长径比低于这个临界长径比时,电极容易出现环向断裂,高于临界值时,更容易发生轴向断裂.

参考文献

- [1] Tarascon J M, Armand M 2001 *Nature* **414** 359
- [2] Liu X H, Zhong L, Huang S, Mao S X, Zhu T, Huang J Y 2012 *ACS Nano* **6** 1522
- [3] Maranchi J, Hepp A, Evans A, Nuhfer N, Kumta P 2006 *J. Electrochem. Soc.* **153** A1246
- [4] Ning G, Haran B, Popov B N 2003 *J. Power Sources* **117** 160
- [5] Sun H, Xin G, Hu T, Yu M, Shao D, Sun X, Lian J 2014 *Nat. Commun.* **5** 4526
- [6] Zhao Y, Stein P, Bai Y, et al. 2019 *J. Power Sources* **413** 259
- [7] Jung S K, Hwang I, Chang D, Park K Y, Kim S J, Seong W M, Eum D, Park J, Kim B, Kim J 2020 *Chem. Rev.* **120** 6684
- [8] Gan C, Zhang C, Liu P, Liu Y, Wen W, Liu B, Xie Q, Huang L, Luo X 2019 *Electrochim. Acta* **307** 107
- [9] Jaramillo-Cabanzo D, Ajayi B, Meduri P, Sunkara M 2020 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **54** 083001
- [10] Xiao X, Liu P, Verbrugge M, Haftbaradaran H, Gao H 2011 *J. Power Sources* **196** 1409
- [11] Xu Z L, Liu X M, Luo Y S, Zhou L M, Kim J K 2017 *Prog. Mater. Sci.* **90** 1
- [12] Yang Y, Yuan W, Kang W, Ye Y, Pan Q, Zhang X, Ke Y, Wang C, Qiu Z, Tang Y 2020 *Sustainable Energy Fuels* **4** 1577
- [13] Prussin S 1961 *J. Appl. Phys.* **32** 1876
- [14] Li C M 1978 *Metall. Trans. A* **9** 1353
- [15] Deshpande R, Cheng Y T, Verbrugge M W 2010 *J. Power Sources* **195** 5081
- [16] Song Y, Lu B, Ji X, Zhang J 2012 *J. Electrochem. Soc.* **159** A2060
- [17] Yang F 2005 *Mater. Sci. Eng., A* **409** 153
- [18] Wang W, Lee S, Chen J 2002 *J. Appl. Phys.* **91** 9584
- [19] Hao F, Fang D 2013 *J. Appl. Phys.* **113** 0130
- [20] Vanimisetti S K, Ramakrishnan N 2012 *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers Part C Journal of Mechanical Engineering Science* **226** 2192
- [21] Chen J, Wang H, Liew K, Shen S 2019 *J. Appl. Mech.* **86** 041006
- [22] Li J, Lotfi N, Landers R G, Park J 2017 *J. Electrochem. Soc.* **164** A874
- [23] Planella F B, Ai W, Boyce A M, Ghosh A, Korotkin I, Sahu S, Sulzer V, Timms R, Tranter T G, Zyskin M, Cooper S J, Edge J S, Foster J M, Marinescu M, Wu N, Richardson G 2022 *Prog. Energy* **4** 042003
- [24] Peng Y, Zhang K, Zheng B, Yang F. 2019 *J. Energy Storage* **25** 100834
- [25] Crank J 1979 *The Mathematics of Diffusion* (New York: Oxford University Press) pp4, 5
- [26] Sternberg E, McDowell E 1957 *Q. Appl. Math.* **14** 381
- [27] Qi Y, Hector L G, James C, Kim K J 2014 *J. Electrochem. Soc.* **161** F3010
- [28] Zhang X, Shyy W, Sastry A M 2007 *J. Electrochem. Soc.* **154** A910
- [29] Cho J H, Picraux S T 2014 *Nano Lett.* **14** 3088
- [30] Kohanoff J, Galli G, Parrinello M 1991 *J. Phys. IV* **1** 351
- [31] David W, Thackeray M, De Picciotto L, Goodenough J 1987 *J. Solid State Chem.* **67** 316
- [32] Beaulieu L, Eberman K, Turner R, Krause L, Dahn J J E, Letters S S 2001 *Electrochem. Solid-State Lett.* **4** A137
- [33] Gu M, Yang H, Perea D E, Zhang J G, Zhang S, Wang C M 2014 *Nano Lett.* **14** 4622
- [34] Ryu I, Choi J W, Cui Y, Nix W D 2011 *J. Mech. Phys. Solids* **59** 1717
- [35] Liu X H, Zheng H, Zhong L, Huang S, Karki K, Zhang L Q, Liu Y, Kushima A, Liang W T, Wang J W, Cho J H, Epstein E, Dayeh S, Picraux S. T, Zhu T, Li J, Sullivan J P, Cumming J, Wang C, Mao S X, Ye Z Z, Zhang S L, Tang Y 2011 *Nano Lett.* **11** 3312
- [36] Wu Q L, Li J, Deshpande R D, Subramanian N, Rankin S E, Yang F, Cheng Y T 2012 *J. Phys. Chem. C* **116** 18669

Analytical analysis of concentration distribution and diffusion-induced stress of finite-length cylindrical electrode under galvanostatic operation

Peng Ying-Zha Zhang Kai[†] Zheng Bai-Lin[‡]

(School of Aerospace Engineering and Applied Mechanics, Tongji University, Shanghai 200092, China)

(Received 3 November 2023; revised manuscript received 20 May 2024)

Abstract

A cylindrical electrode is approximated as a long cylinder in most of existing models in which a generalized plane strain condition/plane strain is used. Based on the theory of elasticity, analytical expressions are derived for concentration distribution and stress component in a finite-length cylindrical electrode under galvanostatic operation. Using the superposition theorem, the Li-concentration is a sum of the concentration due to axial diffusion and the concentration due to lateral diffusion, and the separation of variable method is used to solve diffusion equations. By using the Boussinesq-Papkovich function, the generalized stress component distribution of a linearly combined product of the exponential-type Fourier-Bessel series is derived. The spatiotemporal distribution of concentration and diffusion-induced stresses are calculated in a cylindrical electrode with traction-free condition. The results are compared with the simulation results from a finite element software. For the concentration distribution, the numerical result and simulation result are almost the same. For the stress component, no significant difference exists between the two results, the largest relative difference for radial stress in the center is found to be about 4% and state of charge (SOC) = 17.9%. The radial stress decreases with radial position increasing, and decreases to zero at the surface, which is consistent with the results under the boundary condition. The hoop stress is tensile stress around the center of electrode, and becomes a compressive stress near the surface. Owing to the fact that the tensile hoop stress is attributed to the crack initiation, this implies that when plastic deformation is negligible, cracks first form in the center. The stress components with different length-to-radius ratios are calculated. It is found that the stress caused by lateral diffusion increases with length-to-radius ratio increasing, while the stress induced by axial diffusion decreases with length-to-radius ratio increasing. This is because the lateral diffusion has a greater influence on Li-concentration distribution in a cylinder electrode with length-to-radius ratio increasing.

Keywords: lithium-ion batteries, finite-length cylindrical electrode, diffusion-induced stress, Boussinesq-Papkovich function

PACS: 82.47.Aa, 82.56.Lz, 46.05.+b

DOI: [10.7498/aps.73.20231753](https://doi.org/10.7498/aps.73.20231753)

[†] Corresponding author. E-mail: zhangkai@tongji.edu.cn

[‡] Corresponding author. E-mail: blzheng@tongji.edu.cn

恒流充电有限柱体电极浓度分布及扩散诱导应力解析分析

彭颖吒 张锴 郑百林

Analytical analysis of concentration distribution and diffusion-induced stress of finite-length cylindrical electrode under galvanostatic operation

Peng Ying-Zha Zhang Kai Zheng Bai-Lin

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 73, 158201 (2024) DOI: 10.7498/aps.73.20231753

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.73.20231753>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

一种求解锂离子电池单粒子模型液相扩散方程的新方法

A new method to solve electrolyte diffusion equations for single particle model of lithium-ion batteries

物理学报. 2022, 71(4): 048201 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211619>

基于电化学-应力耦合模型的锂离子电池硅/碳核壳结构的模拟与优化

Simulation and optimization of silicon/carbon core-shell structures in lithium-ion batteries based on electrochemical-mechanical coupling model

物理学报. 2021, 70(17): 178201 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210455>

表面效应对纳米线电极屈曲失稳的影响

Surface effects on buckling of nanowire electrode

物理学报. 2022, 71(3): 033101 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211864>

锂离子电池电化学降阶模型性能对比

Comparative study of reduced-order electrochemical models of the lithium-ion battery

物理学报. 2021, 70(13): 138801 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201894>

VS₂作为锂离子电池负极材料的第一性原理研究

First-principles study of VS₂ as anode material for Li-ion batteries

物理学报. 2024, 73(11): 113101 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20231681>

基于电化学老化衰退模型的锂离子动力电池外特性

External characteristics of lithium-ion power battery based on electrochemical aging decay model

物理学报. 2022, 71(3): 038803 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211401>