COMSOL 用户年会 2026

真实结构驱动的锂离子电池多尺度力-电化学耦合模拟

谢鸿盛，张海潮，王雪龙*
中国科学院物理研究所，北京清洁能源前沿研究中心

中國科學院物理研究所 Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences | 懷柔研究部 Huairou Division

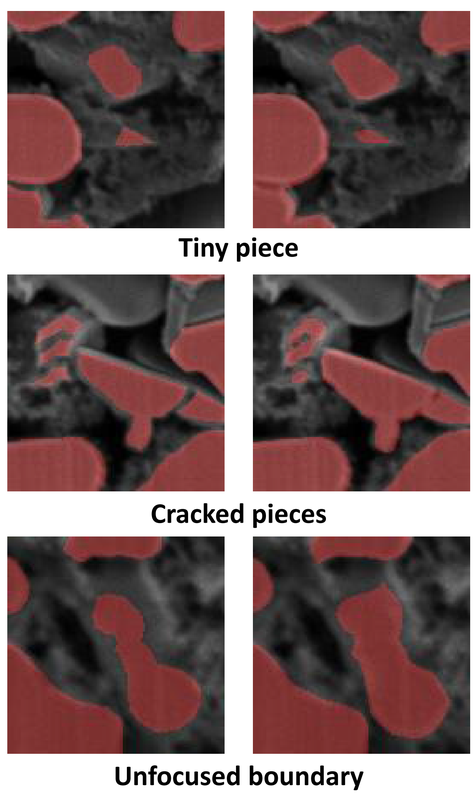
* wangxuelong@iphy.ac.cn

结合 DFT 计算、XCT / SEM 表征与图像分割，将锂含量相关材料性质和真实结构信息引入多尺度模型。研究关注颗粒应力分布，并将其与电极形变、电池膨胀及电化学响应联系起来。

01 真实结构与解析

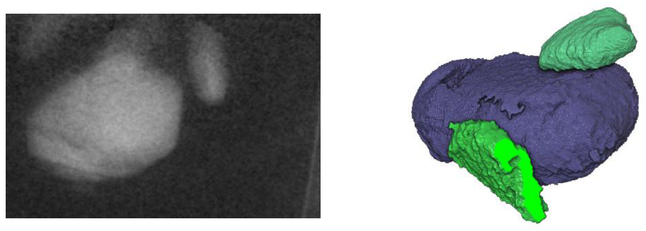
采用 Swin-Fuse 图像分割，识别颗粒、孔隙及复杂边界，为真实结构建模提供几何输入。

颗粒边界识别与分割结果对比



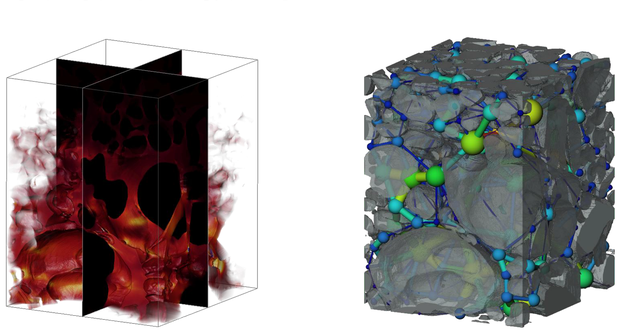
不同分割结果在小碎片、裂纹和模糊边界处的表现存在差异。

XCT 切片与颗粒形貌重建



真实颗粒形貌作为模型几何输入，保留真实不规则结构特征。

三维孔隙与电极重构

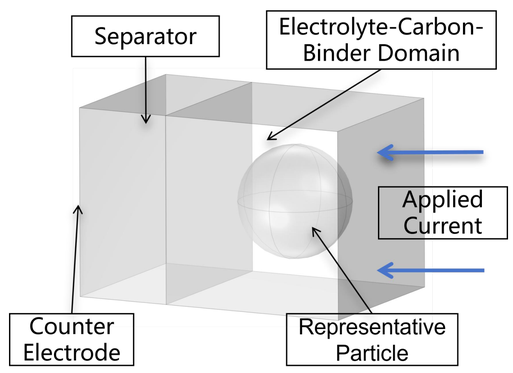


孔隙连通性为有效传输分析提供结构依据。
曲折度需结合三维结构与传输求解。

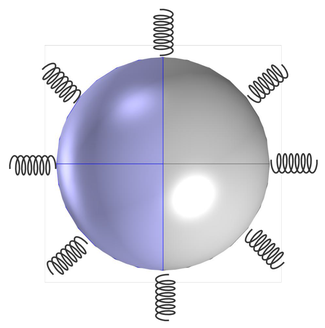
Appl. Phys. Lett. 2024, 125, 173902

02 颗粒力电耦合模拟

DFT 计算提供锂含量相关的杨氏模量与晶格应变，并将其传递至单颗粒耦合模型。



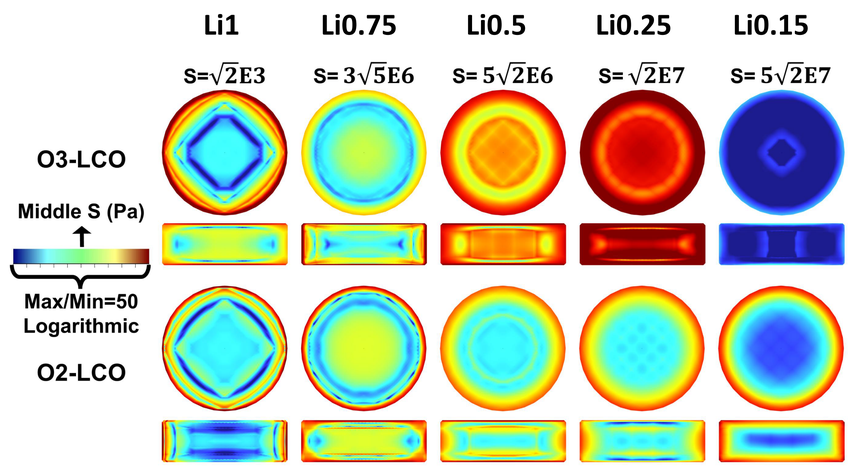
单颗粒电化学模型



机械约束示意

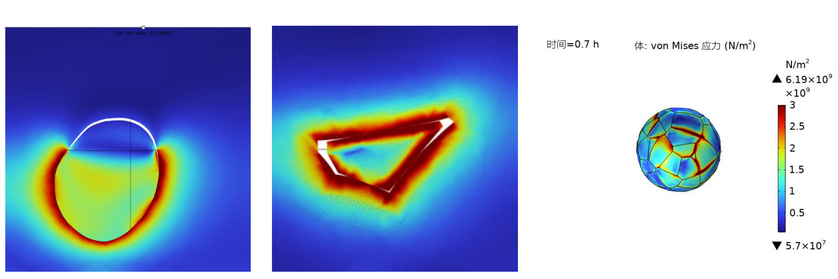
COMSOL 建模思路：耦合锂扩散、嵌脱锂应变与机械约束，分析颗粒应力随锂含量和材料性质的演化。

层状$LiCoO_2$的颗粒应力分布



O2/O3-LCO 应力分布（原图采用对数色标）。
各状态应力不同，颜色仅用于比较空间分布。

颗粒形貌与局部场分布

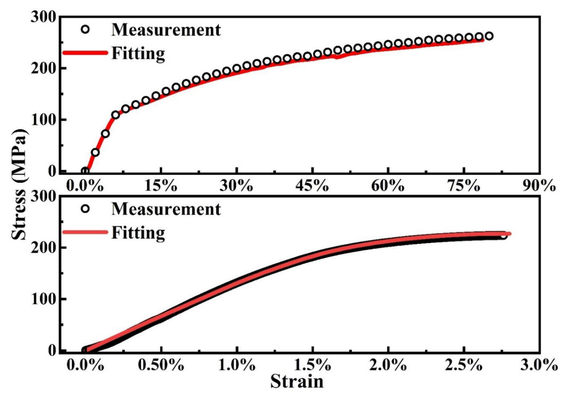


不规则形貌与多晶结构对应不同的局部场分布。
右图为 0.7 h 时的 von Mises 应力（N/m^2）。

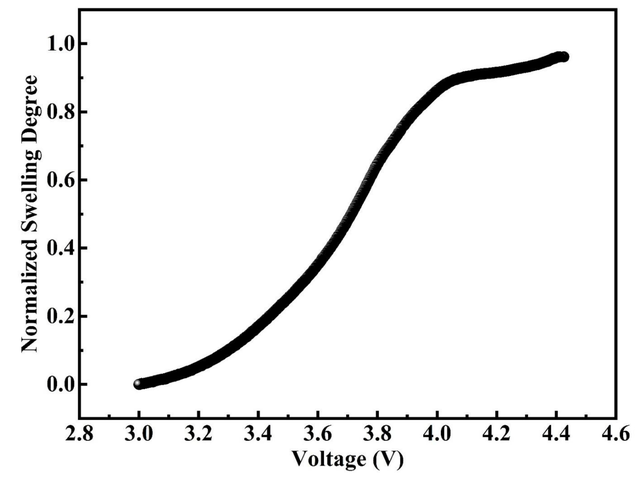
Small Sci. 2024, 4, 2400162

03 复合电极力学响应

力学与电池膨胀表征约束材料输入，
结合电极结构模型与电压曲线，
分析结构与性能的联系。

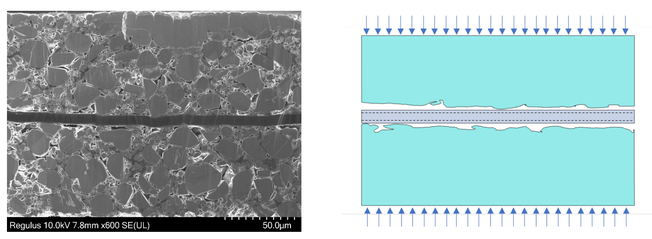


应力-应变测量与本构拟合

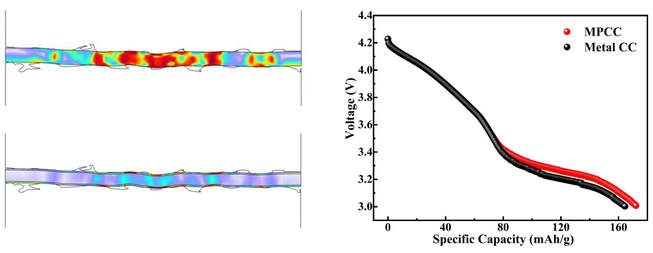


电池归一化膨胀随电压的变化

复合集流体力学模拟



SEM 截面与电极结构模型



不同集流体力学场　　不同集流体电化学对比

Adv. Funct. Mater., 2026; 0:e77067

建模认识 真实几何与材料参数共同影响局部应力。
多尺度模拟连接颗粒响应与电极形变，为结构设计提供机理依据。

中华人民共和国科学技术部 Ministry of Science and Technology of the People's Republic of China
国家自然科学基金委员会 NSFC

建模方法参考：COMSOL Application Library，Heterogeneous NMC Electrode 和 Diffusion-Induced Stress in a Lithium-Ion Battery