

MODELAGEM DOS PROCESSOS DE DESCARGA EM ELETRODOS DE BATERIAS DE CHUMBO-ÁCIDO

Patricio Rodolfo Impinnisi
rodolfo@lactec.org.br

Luis Felipe Siqueira
luisfelipesiqueira@yahoo.com.br



institutos **lactec**

INOVADORES POR NATUREZA



institutos lactec
INOVADORES POR NATUREZA

APRESENTAÇÃO

- 1. Introdução**
- 2. Modelo: Geometria**
- 3. Modelo: Equações**
- 4. Simulações**
- 5. Resultados**
- 6. Conclusões**

**SOMOS
INOVADORES
POR
NATUREZA.**

NOSSOS PESQUISADORES,
TÉCNICOS, ENGENHEIROS,
PROFESSORES,
CONSULTORES E
FUNCIONÁRIOS
ADMINISTRATIVOS
ESTÃO COMPROMETIDOS
COM A ÉTICA E O RESPEITO
ÀS PESSOAS
E AO AMBIENTE.

INTRODUÇÃO



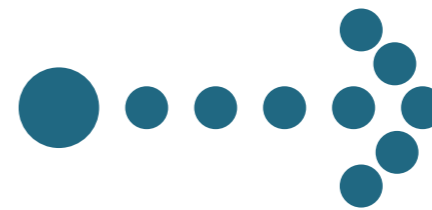
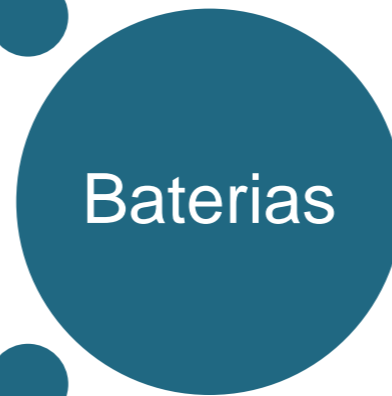
Mobilidade



Portabilidade



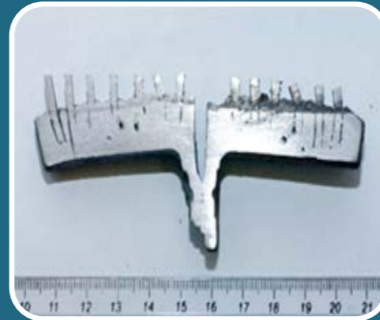
Energias
alternativas



Sistemas Complexos

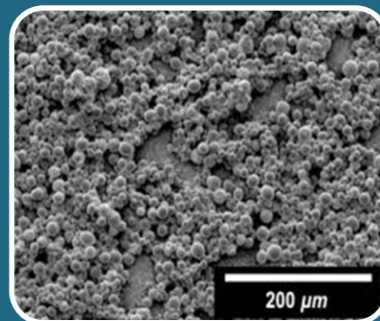
INTRODUÇÃO

Baterias



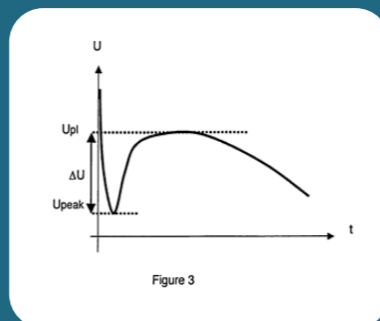
Difícil previsibilidade

- Muitos mecanismos de degradação
- Falhas inesperadas



Envolvem múltiplas físicas

- Descrições empíricas
- Aproximações



Análises demoradas

- Ensaios elétricos
- Análises químicas

Novas técnicas de análise: Impedância eletroquímica

INTRODUÇÃO



O espectro de impedância eletroquímica contém **todas as informações** que podem ser extraídas do sistema por métodos lineares de perturbação elétrica

James Ross Macdonald

INTRODUÇÃO

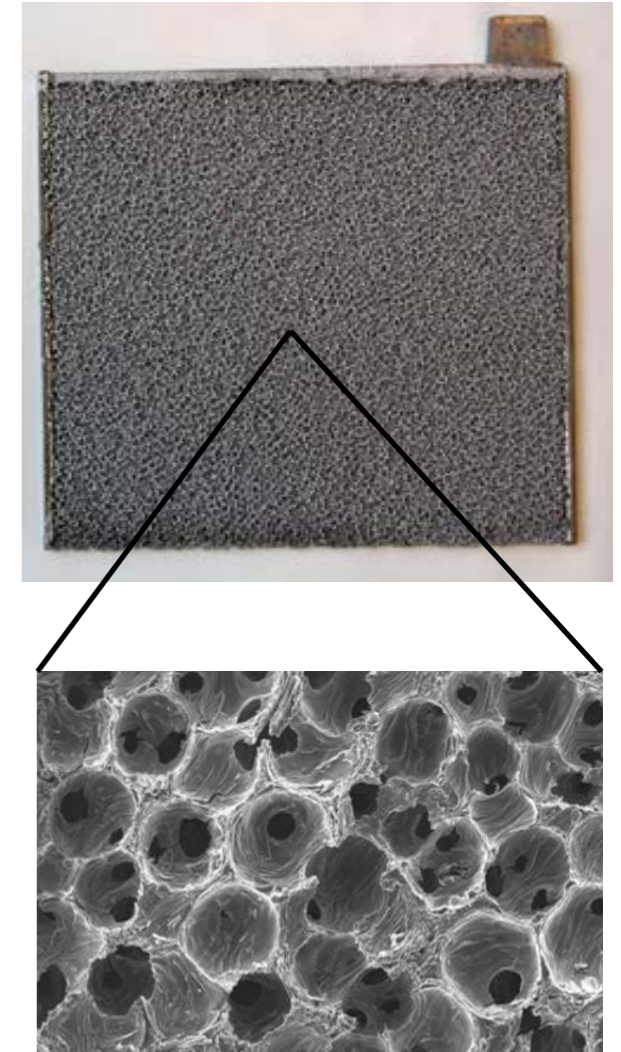
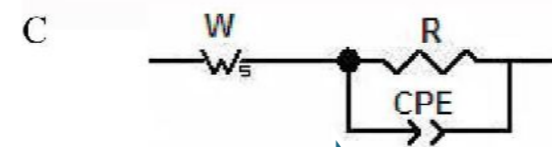
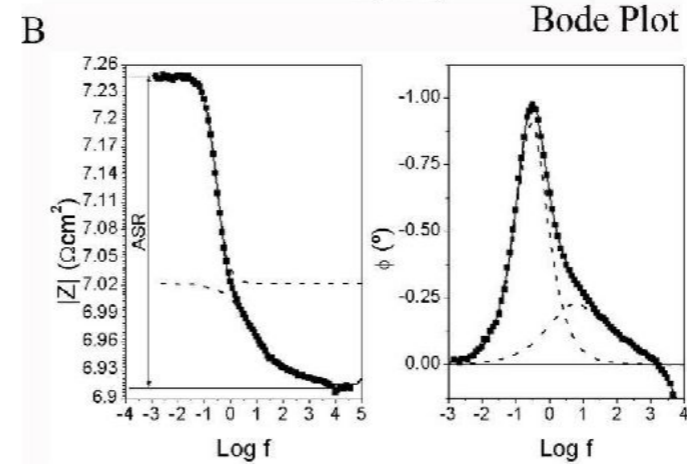
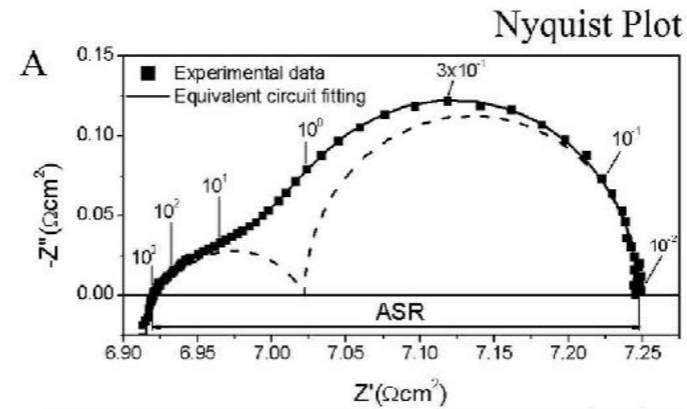
Matemática

Eletroquímica

Impedância

Física

Programação



Simple implementação

Unívocos?

Interpretação física?

Circuitos
equivalentes

Modelos
físicos

Física, química, matemática, etc.

Conhecimento multidisciplinar

Equações diferenciais acopladas

INTRODUÇÃO

Comsol
Multiphysics

1D



2D



3D



Distribuição de linhas de corrente

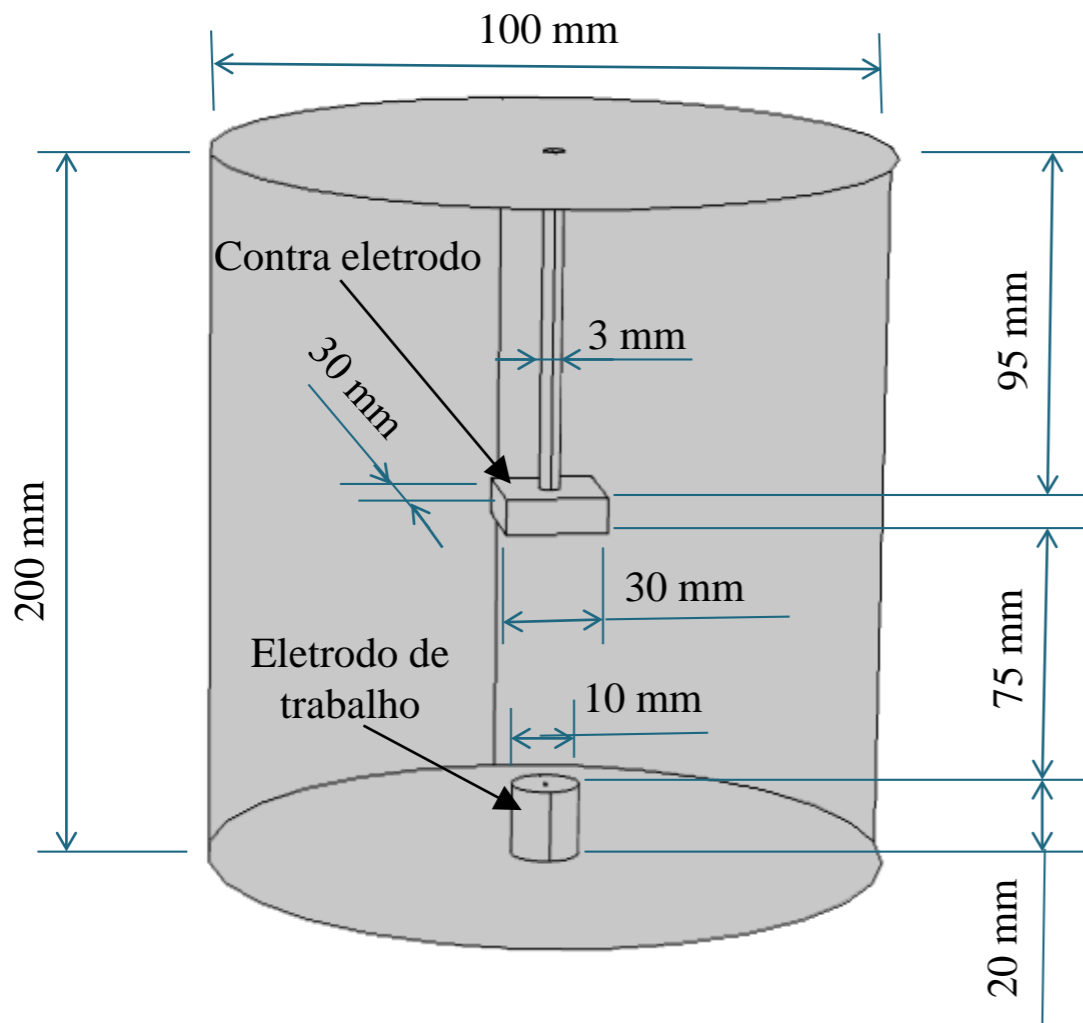
Efeitos de bordas

Evolução dos frentes de reação

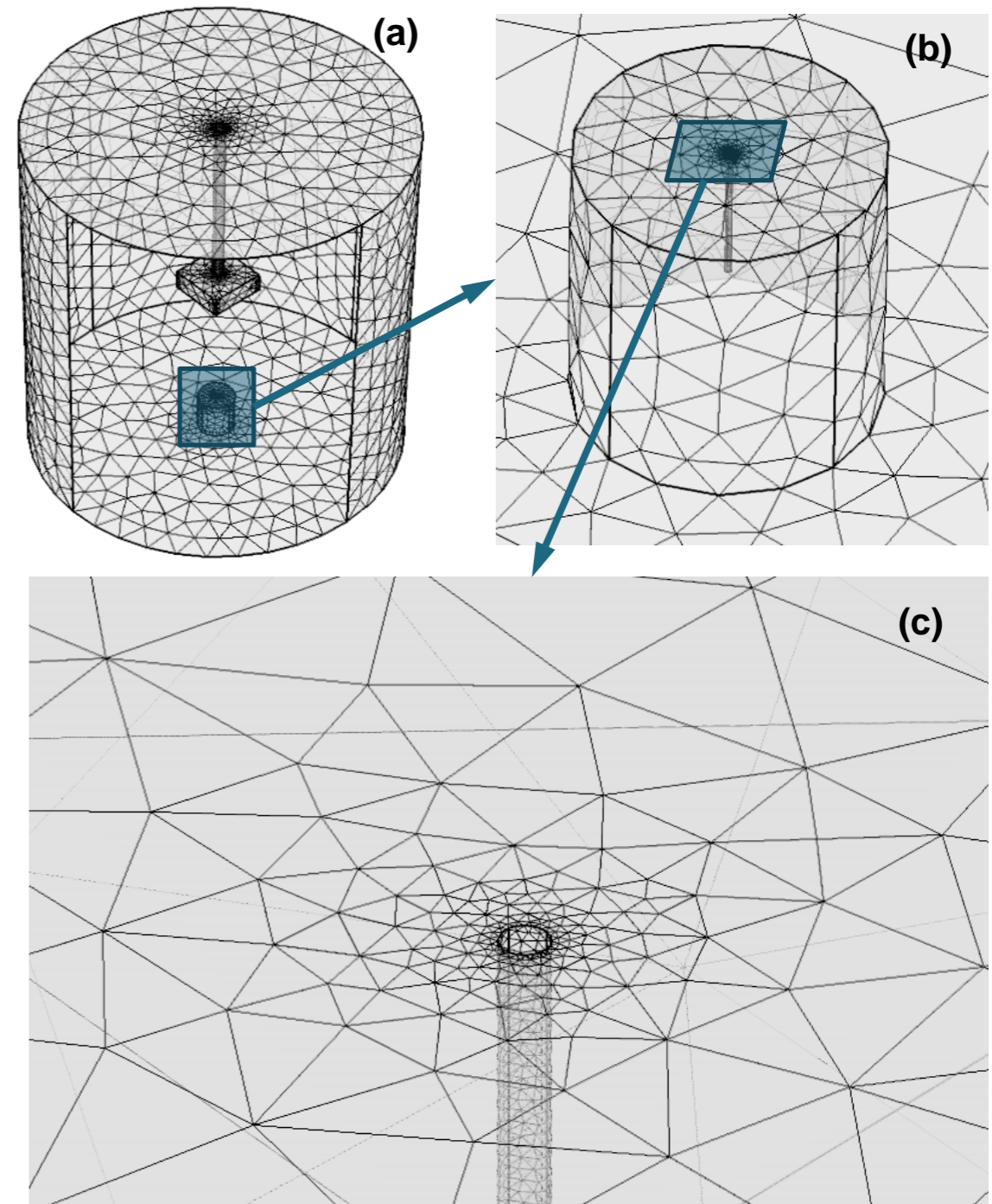
Distribuição de espessuras de filmes isolantes

MODELO: GEOMETRIA

Modelo 3D



Malha 3D Tetraédrica



MODELO: EQUAÇÕES

Transporte

$$N_i = -D_i \nabla c_i - z_i u_{m,i} F c_i \nabla \phi_l + \mathbf{u} c_i$$

Densidade de corrente

$$i_l = F \sum_i z_i (-D_i \nabla c_i - z_i u_{m,i} F c_i \nabla \phi_l + \mathbf{u} c_i)$$

Conservação da massa

$$\nabla \cdot (-D_i \nabla c_i - z_i u_{m,i} F c_i \nabla \phi_l) + \mathbf{u} \cdot \nabla c_i = R_{i,src}$$

Conservação da carga

$$\nabla \cdot \mathbf{i}_l = F \sum_i z_i R_{1,src} + Q_l$$

Eletroneutralidade

$$\sum_i z_i c_i = 0$$

Butler-Volmer

$$i = i_0 \left(e^{\frac{\alpha_a n F}{RT} \eta_s} - e^{-\frac{\alpha_c n F}{RT} \eta_s} \right)$$

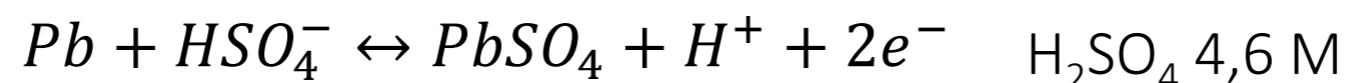
Condição de contorno

$$i_l = -\sigma_l \left. \frac{\partial \phi_l}{\partial y} \right|_{y=0} = f(\eta_s) \quad \mathbf{n} \cdot \mathbf{i}_l = 0 \quad \mathbf{n} \cdot \mathbf{i}_s = 0 \quad \mathbf{n} \cdot \mathbf{N}_i = 0$$

Equações particulares

$$\eta_s = \phi_{s,ext} - \Delta \phi_{s,filme} - \phi_l - E_{eq} \quad \Delta \phi_{s,filme} = i_{tot} R_{filme}$$

$$R_{filme} = \frac{S_0 + \Delta S}{\sigma_{filme}}$$



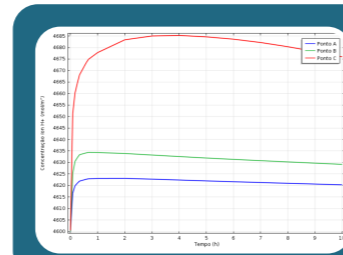
Distribuição de corrente e potencial: **Terciária**

SIMULAÇÕES

Descarga
potenciostática

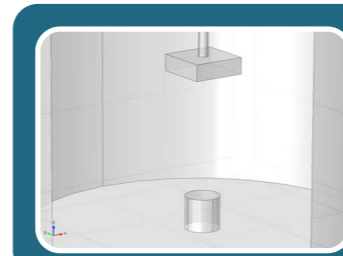
20 mV

Eletrodo negativo



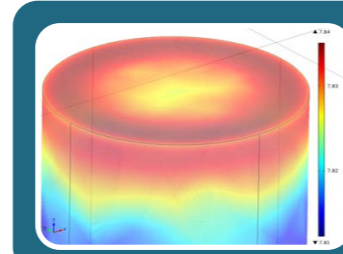
Gradientes de Concentração

- Regiões externas
- Regiões internas (poro)



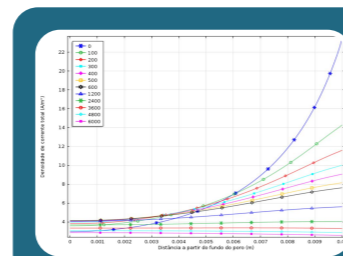
Distribuição de Linhas de Corrente

- Regiões externas
- Regiões internas (poro)



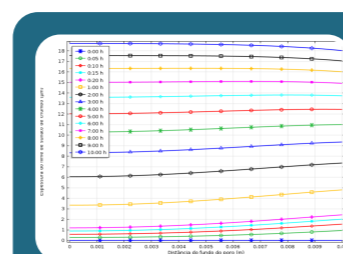
Efeitos de Borda

- Concentração das linhas de corrente



Reação Zonal

- Formação da zona de reação
- Características

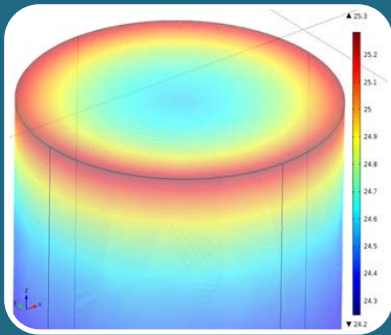


Evolução dos Filmes de Passivação

- Espessura do filme em função do tempo
- Distribuição de espessuras

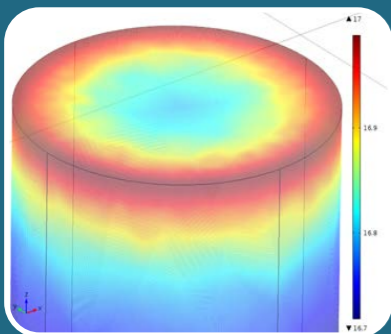
RESULTADOS

Efeito de Borda



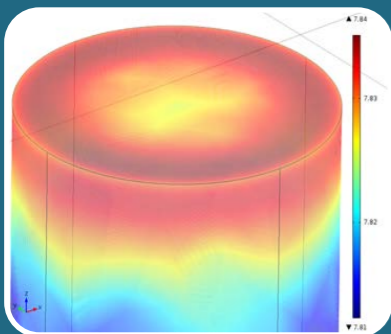
Tempo: **0 segundos**

- Concentração de linhas de corrente preferencialmente nas bordas



Tempo: **60 segundos**

- Formação de filme de PbSO_4
- Crescimento do filme



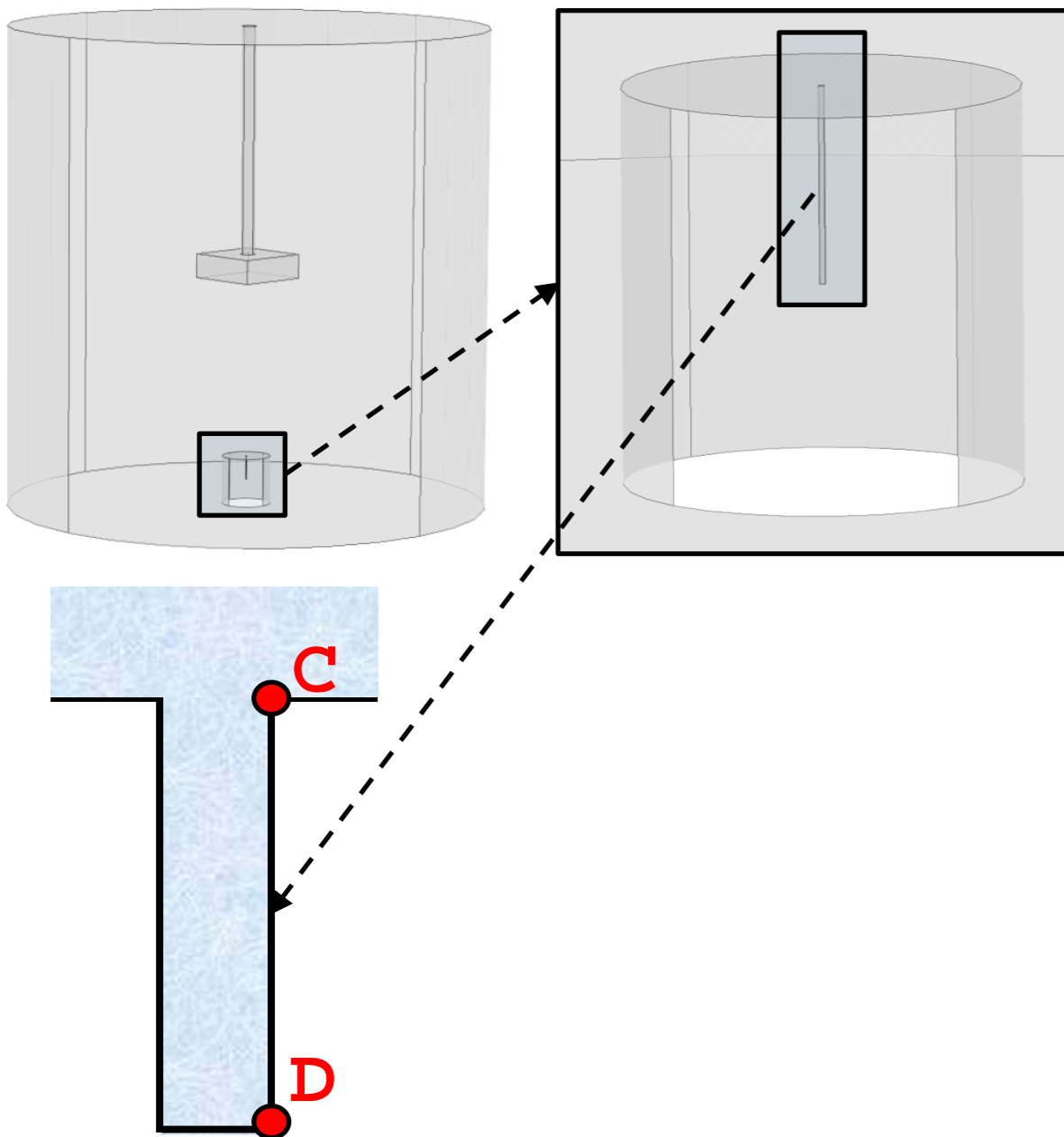
Tempo: **600 segundos**

- Uniformização das linhas de corrente
- Distribuição de espessuras do filme

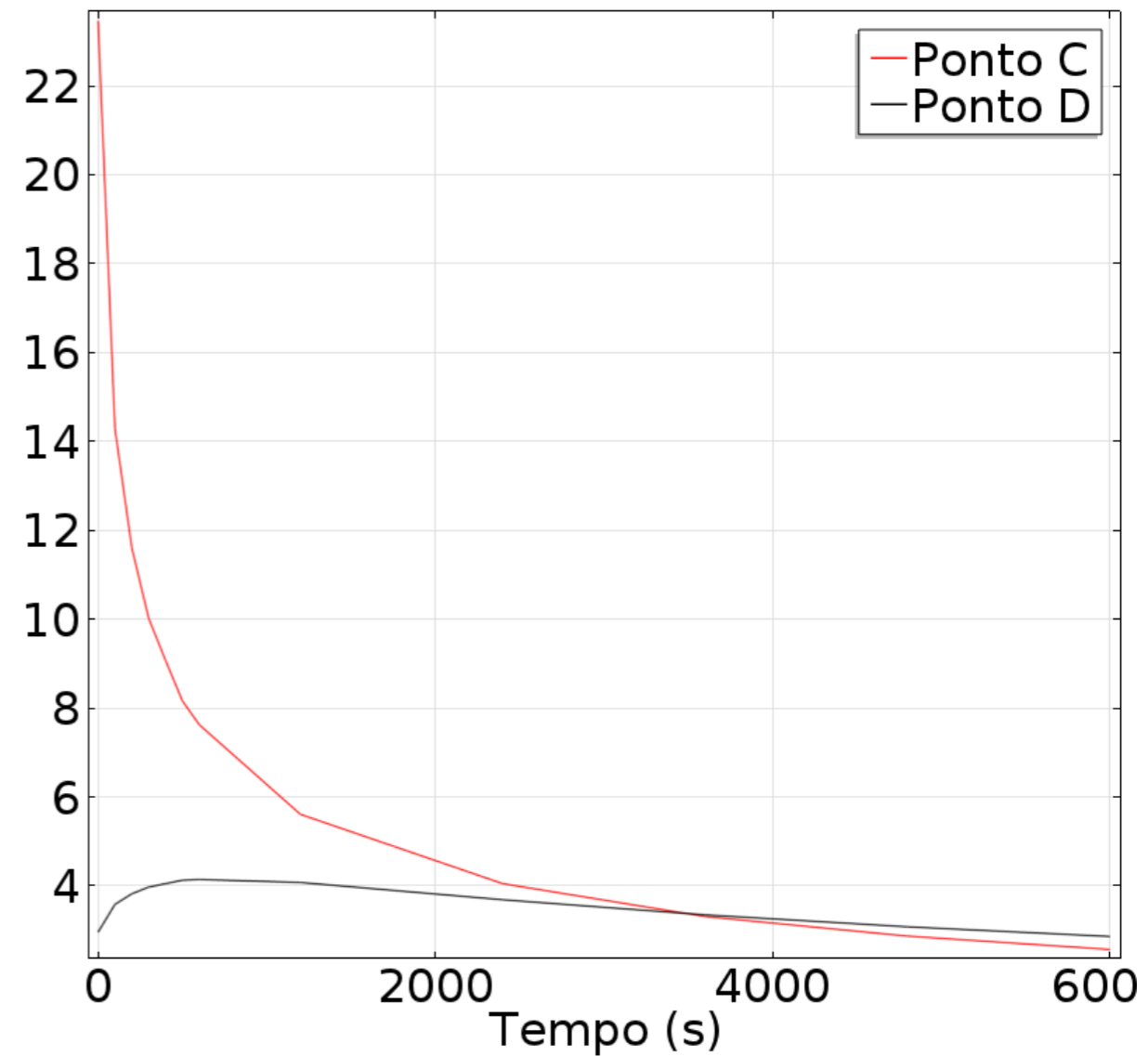
A cor representa a densidade de linhas de corrente
maior = vermelho
menor = azul

RESULTADOS

Reação Zonal em pontos interiores do poro

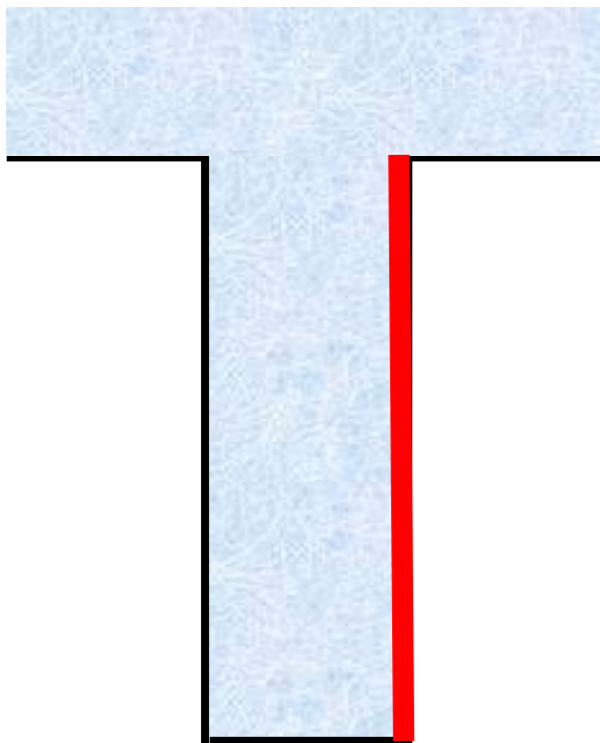


Densidade de corrente total (A/m^2)

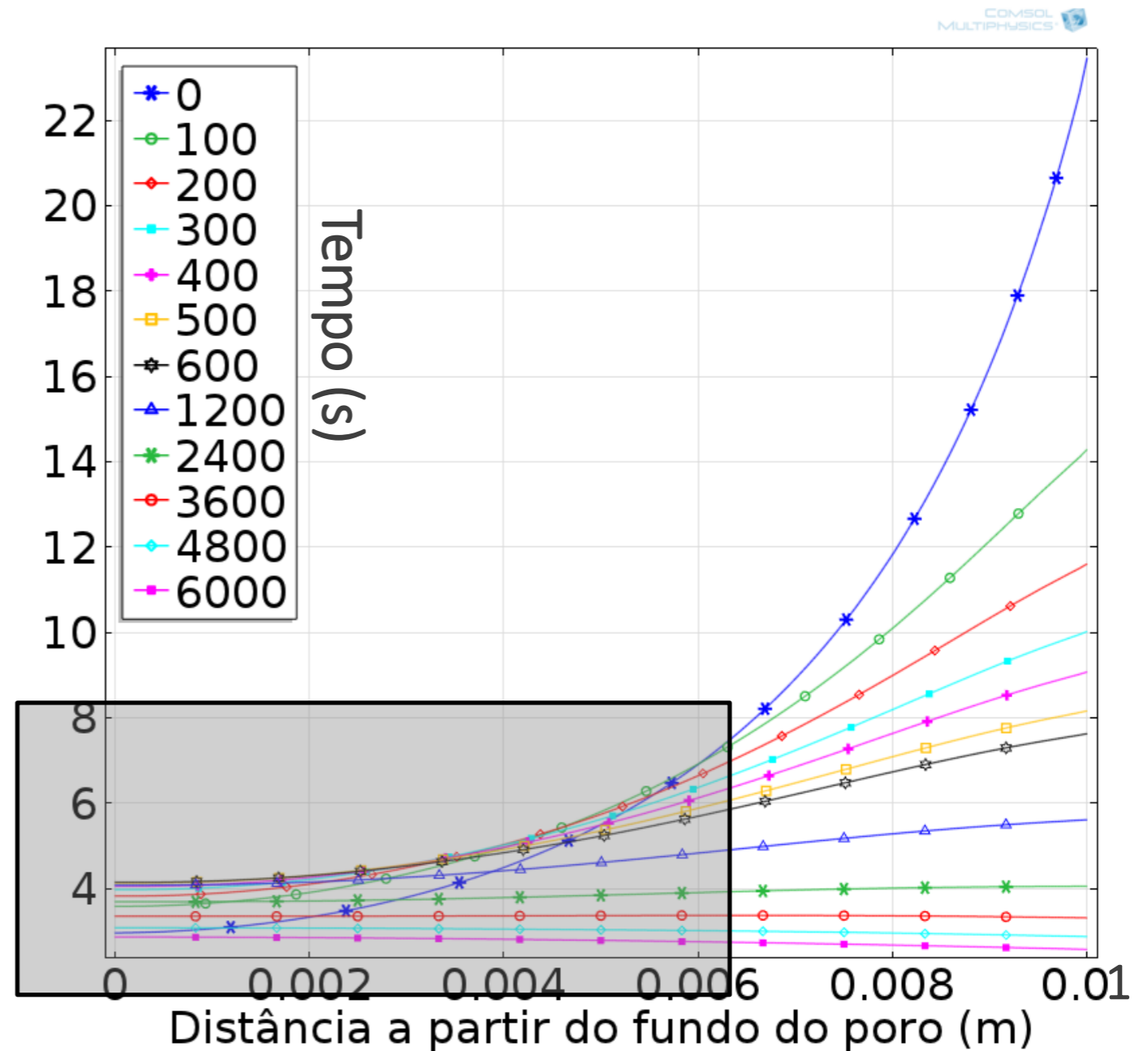


RESULTADOS

Reação Zonal na lateral interior do poro



Densidade de corrente total (A/m^2)



CONCLUSÕES

Principais pontos de destaque:

- ✓ Foi desenvolvido um modelo 3D que inclui a formação de um filme isolante (PbSO_4)
- ✓ O modelo permitiu observar e identificar fenômenos como:
 - o efeito de bordas
 - a formação da reação zonal e suas causas
 - e fenômenos relacionados à presença de poros
- ✓ Apesar do modelo ser inerentemente simples, a complexidade que se observa vem do acoplamento de diferentes fenômenos
- ✓ **Aprimoramentos simples:** inserir outros íons e reações (paralelas), incluir o eletrodo positivo, configurar descargas galvanostáticas e cargas
- ✓ **Aprimoramentos difíceis:** filme heterogêneo, distribuição e fechamento de poros (malha deformável), inserir fases gasosas e seu transporte

CONTATO

**Patricio R.
Impinnisi**

rodolfo@lactec.org.br

+55 41 3361- 6266

www.institutoslactec.org.br

OBRIGADO