

EDN: XRLAWI

УДК 544.46; 544.47:544.344

2.2.6

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ В ПРОТОЧНЫХ ОКИСЛИТЕЛЬНО- ВОССТАНОВИТЕЛЬНЫХ БАТАРЕЯХ

В.Ю. Чебакова^{1,2}, Н.Ф. Кашипов^{1,2}, А.Д. Хафизова¹

¹Казанский федеральный университет
Российская Федерация, 420008, г. Казань, ул. Кремлевская, д. 18

²Институт прикладных исследований Академии наук Республики Татарстан
Российская Федерация, 420111, г. Казань, ул. Баумана, 20

Аннотация. В работе разработан алгоритм решения задачи численного исследования электрохимических процессов в гетерогенных системах, основанных на электролизе щелочных растворов, в частности проточных редокс батарей. Данный численный алгоритм позволяет прогнозировать выход выделяемых компонент, а также рассчитывать концентрации веществ, участвующих в приэлектродных процессах и их пространственное распределение.

Ключевые слова: электролиз, численное моделирование, редокс батареи.

Введение

В связи с переходом на «зеленую» энергетику большое значение придается разработке новых технологий для выравнивания подачи электроэнергии, вырабатываемой ветровыми и солнечными электростанциями. Одним из примеров новых технологий являются источники тока, основанные на электрохимическом взаимодействии - проточные редокс батареи. В работе [1-2] рассмотрена возможность создания топливных элементов на основе образования водорода в результате реакции между алюминием и водой, в частности активирование алюминия добавлением щелочных растворов. Среди водных электролитов чаще всего рассматриваются щелочные растворы из-за более высокого теоретического потенциала ячейки и более высокой достижимой мощности, чем нейтральные или кислотные растворы. Обычно при моделировании используется механический подход, в то время как сейчас большое значение имеет электрохимическая составляющая. Алгоритм, разработанный авторами, состоит из двух блоков. Первый блок является самостоятельной задачей по поиску констант скоростей процессов. Второй блок представляет собой решение начально-краевых и краевых задач в «одномерном» приближении. Алгоритм [3] реализован в среде разработки MatLab. Расчет количества выделенного газа показал хорошее схождение как на катоде, так и на аноде. Расчет пространственных показателей показал характерные градиенты т.е. скорее качественное схождение. Результаты расчетов верифицировались на экспериментальных данных. На данном этапе работ идет адаптация алгоритма к исследованию процессов окисления алюминиевого электрода.

Финансирование

Работа выполнена за счет гранта Академии наук Республики Татарстан, предоставленного молодым кандидатам наук (постдокторантам) с целью защиты докторской диссер-

тации, выполнения научно-исследовательских работ, а также выполнения трудовых функций в научных и образовательных организациях Республики Татарстан в рамках Государственной программы Республики Татарстан «Научно-технологическое развитие Республики Татарстан.

Список литературы

1. X.Huang, T. Gao, X. Pan, D. Wei, Ch. Lv, L. Qin, Y. Huang, Journal of Power Sources, 229, 133-140 (2013) <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2012.12.016>.
2. R. Buckingham, T. Asset, P. Atanassov, Journal of Power Sources, Volume 498, 229762 (2021) <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2021.229762>.
3. Асхатов Р.М., Буянов В.Ю., Кудрявый А.Д., Хафизова А.Д., Чебакова В.Ю., Чебакова Е.В. //Свидетельство о регистрации программы для ЭВМ RU 2025619226, 14.04.2025. Заявка № 2025618007 от 10.04.2025.

NUMERICAL STUDY OF ELECTROCHEMICAL PROCESSES IN FLOW-THROUGH REDOX BATTERIES

V.Y. Chebakova^{1,2}, N.F. Kashapov^{1,2}, A.D. Khafizova¹

¹ Kazan Federal University
building 18, Kremlovskaya St., Kazan, 420008, Russian Federation

² Institute of Applied Research of Tatarstan Academy of Sciences
20, Bauman St., Kazan, 420111, Russian Federation

Absrtact. The work developed an algorithm for solving the problem of numerical investigation of electro-chemical processes in heterogeneous systems based on the electrolysis of alkaline solutions, in particular, flow-through redox batteries. This numerical algorithm allows to predict the yield of the released components, as well as to calculate the concentrations of substances participating in the near-electrode processes and their spatial distribution.

Keywords: electrolysis, numerical modeling, redox batteries.

Материалы представлены на Международной научно-практической конференции «Современные подходы и практические инициативы в инженерных науках» (г. Казань, 2-3 октября 2025 года).

Статья представлена в редакцию 15 августа 2025 г.