

## Modeling and Simulation of Lithium-Ion Batteries Using Silicon-Based Anodes

Anh Duong Van<sup>1\*</sup>, Thanh Tuan Pham<sup>1</sup>, Khanh Huy Ho<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Ho Chi Minh City University of Technology and Engineering, Vietnam

<sup>2</sup>Bluebolt Technology Solution Company Limited, Vietnam

\*Corresponding author. Email: [duongva@hcmute.edu.vn](mailto:duongva@hcmute.edu.vn)

### ARTICLE INFO

Received: 24/03/2026  
Revised: 24/04/2026  
Accepted: 20/05/2026  
Online First: 28/05/2026  
Published: 28/05/2026

### KEYWORDS

Lithium-ion battery;  
Silicon anode;  
MATLAB/Simulink modeling;  
CC-CV charging;  
Thermal-electrochemical simulation.

### ABSTRACT

Lithium-ion batteries employing silicon-based anodes exhibit significantly higher lithium storage capacity than conventional graphite anodes, thereby improving overall capacity and energy density. However, silicon undergoes substantial volume expansion during repeated charge and discharge cycles, which adversely affects structural integrity, durability, and electrochemical performance. To investigate these effects, a simulation model was developed using MATLAB and Simulink, integrating electrical, thermal, and state-of-charge (SOC) components. The model evaluates Constant Current – Constant Voltage (CC-CV) charging and discharging behavior under different C-rate conditions, including 1C, 3C, and 5C. Simulation results show that voltage response, temperature variation, and SOC dynamics are strongly influenced by both the anode material and applied current load. Silicon-based anodes generate more heat and display greater voltage fluctuations compared to graphite. To address these limitations, several strategies such as surface coatings, hollow structural designs, and silicon-carbon composite materials are proposed to reduce volume expansion and improve stability. Overall, the simulation provides valuable insights for material selection and battery design optimization.

## Mô hình hoá, mô phỏng Pin Lithium sử dụng điện cực âm bằng chất liệu Silic

Văn Ánh Dương<sup>1\*</sup>, Phạm Thanh Tuấn<sup>1</sup>, Hồ Khánh Huy<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Trường Đại học Công nghệ Kỹ thuật Thành phố Hồ Chí Minh, Việt Nam

<sup>2</sup>Công Ty TNHH Giải Pháp Công Nghệ Tia Chớp Xanh, Việt Nam

\*Tác giả liên hệ. Email: [duongva@hcmute.edu.vn](mailto:duongva@hcmute.edu.vn)

### THÔNG TIN BÀI BÁO

Ngày nhận bài: 24/03/2026  
Ngày hoàn thiện: 24/04/2026  
Ngày chấp nhận đăng: 20/05/2026  
Ngày đăng trực tuyến: 28/05/2026  
Ngày xuất bản: 28/05/2026

### TỪ KHÓA

Pin lithium-ion;  
Cực âm silic;  
Mô phỏng Matlab/Simulink;  
Quá trình sạc CC-CV;  
Mô hình nhiệt-điện hóa.

### TÓM TẮT

Pin lithium-ion sử dụng cực âm silic có khả năng lưu trữ ion lithium cao gấp nhiều lần so với graphite, giúp tăng dung lượng và mật độ năng lượng. Tuy nhiên, vật liệu này dễ bị giãn nở thể tích khi sạc/xả, ảnh hưởng đến độ bền và hiệu suất. Mô hình mô phỏng được xây dựng trên MATLAB/Simulink, bao gồm các khối tính toán điện, nhiệt và trạng thái sạc (SOC), cho phép đánh giá chi tiết quá trình sạc CC-CV (Chế độ dòng không đổi – Chế độ điện áp không đổi) và xả với nhiều tốc độ theo dung lượng (C-rate: 1C, 3C, 5C). Kết quả cho thấy điện áp, nhiệt độ và tốc độ thay đổi SOC phụ thuộc mạnh vào vật liệu cực âm và dòng tải. Cực âm silic tạo ra nhiệt cao hơn và thay đổi điện áp rõ rệt hơn so với graphite. Một số giải pháp cải tiến như phủ bề mặt, thiết kế cấu trúc rỗng hoặc kết hợp với cacbon giúp giảm giãn nở và tăng độ ổn định. Mô phỏng cung cấp dữ liệu trực quan hỗ trợ lựa chọn vật liệu và thiết kế pin phù hợp với yêu cầu thực tế.

Doi: <https://doi.org/10.54644/jte.2026.2128>

Copyright © JTE. This is an open access article distributed under the terms and conditions of the [Creative Commons Attribution-NonCommercial 4.0 International License](https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/) which permits unrestricted use, distribution, and reproduction in any medium for non-commercial purpose, provided the original work is properly cited.

## 1. Giới thiệu

### 1.1. Nghiên cứu trong nước

Tại Việt Nam, các nghiên cứu về pin lithium-ion chủ yếu tập trung vào tổng hợp và cải tiến vật liệu cực âm như graphite/nano-silic/nano cacbon hoặc composite Si-C nhằm nâng cao khả năng lưu trữ điện và độ bền chu kỳ [1]-[4]. Các hướng nghiên cứu này cho thấy tiềm năng ứng dụng silic trong cải thiện mật độ năng lượng của pin. Tuy nhiên, số lượng công trình tiếp cận theo hướng mô hình hóa tích hợp điện-nhiệt-SOC cho phần tử sử dụng cực âm silic vẫn còn hạn chế. Đặc biệt, các mô phỏng định lượng quá trình sạc CC-CV và xả ở các C-rate cao nhằm đánh giá biến thiên điện áp, nhiệt độ và SOC chưa được khai thác đầy đủ.

### 1.2. Nghiên cứu ngoài nước

Pin lithium-ion là một trong những công nghệ lưu trữ năng lượng quan trọng nhờ mật độ năng lượng cao, hiệu suất tốt và khả năng ứng dụng rộng rãi trong thiết bị di động, xe điện và hệ thống lưu trữ năng lượng [5]. Trên thế giới, silic được đánh giá là vật liệu làm cực âm triển vọng nhờ dung lượng lý thuyết cao, nhưng lại chịu ảnh hưởng mạnh bởi sự giãn nở thể tích lớn (~300%) khi tạo các pha Li-Si, do silic chèn được lượng Li<sup>+</sup> cao hơn graphite nhiều lần, dẫn đến phá vỡ cấu trúc và suy thoái chu kỳ [6]-[8]. Các hướng cải tiến phổ biến bao gồm chế tạo cấu trúc nano, điện cực rỗng và composite Si-C nhằm cải thiện ổn định cơ-nhiệt [9]-[11]. Đồng thời, các mô hình pin trên MATLAB/Simulink cũng được phát triển để mô phỏng đáp ứng điện và hỗ trợ phân tích vận hành dưới các chế độ sạc/xả khác nhau [12].

Tổng quan cho thấy nghiên cứu về vật liệu silic đã đạt được nhiều kết quả đáng chú ý, nhưng các mô hình mô phỏng tích hợp điện-nhiệt-SOC cho phần tử sử dụng cực âm silic vẫn còn thiếu, đặc biệt trong việc đánh giá định lượng sự thay đổi điện áp, SOC và nhiệt độ ở các chế độ CC-CV và đa C-rate. Xuất phát từ khoảng trống này, bài báo xây dựng mô hình mô phỏng trên Matlab/Simulink nhằm phân tích hành vi điện-nhiệt của phần tử dùng cực âm silic và so sánh trực tiếp với graphite trong điều kiện vận hành thực tế.

## 2. Phương pháp nghiên cứu

Nghiên cứu sử dụng tài liệu tham khảo từ các công bố khoa học quốc tế, tài liệu kỹ thuật từ các nhà sản xuất.

Tham khảo các mô hình pin thực tế; tiến hành phân tích, đánh giá dựa trên những dữ liệu đã thu thập, từ đó xây dựng mô hình tính toán và mô phỏng.

Xây dựng các mô hình mô phỏng từ đó đánh giá một cách toàn diện về pin lithium sử dụng điện cực âm là silic.

## 3. Cơ sở lý thuyết

### 3.1. Cơ sở để phát triển pin lithium-ion với cực âm silic

Pin lithium-ion hiện nay chủ yếu sử dụng graphite làm vật liệu cực âm nhờ tính ổn định cơ-lý và khả năng chèn lithium tương đối. Tuy nhiên, dung lượng lý thuyết của graphite chỉ đạt khoảng 372 mAh/g, giới hạn tiềm năng nâng cao mật độ năng lượng của phần tử. Trong bối cảnh nhu cầu về pin công suất cao ngày càng tăng, việc tìm kiếm vật liệu cực âm thay thế trở nên cấp thiết.

Silic nổi lên như một ứng viên triển vọng nhờ dung lượng lý thuyết cao tới 3.579 mAh/g [13], gần gấp 10 lần graphite. Cấu trúc tinh thể của Silic cho phép hình thành hợp chất Li<sub>x</sub>Si (với x lên đến 4,4), nhờ đó tăng đáng kể khả năng tích trữ lithium trên cùng một đơn vị khối lượng. Tuy nhiên, việc ứng dụng silic yêu cầu cân nhắc các yếu tố kỹ thuật để duy trì ổn định cơ-lý và điện hóa, chẳng hạn như chế tạo composite Si-C, cấu trúc rỗng, hoặc phủ bề mặt. Những cơ sở này cung cấp nền tảng lý thuyết để xây dựng các mô hình mô phỏng điện-nhiệt-SOC, phục vụ đánh giá hiệu suất pin dưới các điều kiện vận hành thực tế.

### 3.2. Đặc tính vật liệu cực âm

Để đánh giá ảnh hưởng của vật liệu cực âm đến hiệu suất pin, nghiên cứu này tập trung so sánh hai vật liệu phổ biến: graphite truyền thống và silic. Bảng 1 trình bày các thông số đặc trưng ảnh hưởng trực tiếp đến khả năng tích điện, độ ổn định và sinh nhiệt trong quá trình sạc/xả [14]:

**Bảng 1.** Thông số các giá trị của vật liệu silic và graphite ở cực âm.

Thông số	Ký hiệu	Silic	Graphite
Phần tử type		Lithium sử dụng điện cực âm silic	Lithium sử dụng điện cực âm graphite
Dung lượng danh định	$C_{rated}$	5 Ah	5 Ah
Điện áp hở mạch	$U_{OC}$	3,0–4,2 V	3,0–4,2 V
Điện trở nội	$R_{int}$	0,02–0,04 $\Omega$	0,015–0,03 $\Omega$
Hệ số nhiệt độ	$dUOC/dT$	0,0001–0,0003 V/K	0,0001–0,0003 V/K
Tốc độ xả/sạc	$C_{rate}$	1C–6C	1C–5C
Dòng xả/sạc	$I$	5 A	5 A
Mật độ phần tử	$P$	2.600–2.830 kg/m <sup>3</sup>	2.800–3.000 kg/m <sup>3</sup>
Thể tích phần tử	$V_{phần tử}$	$2,42 \times 10^{-5} m^3$	$2,42 \times 10^{-5} m^3$
Khối lượng phần tử	$M$	0,06 kg	0,07 kg
Nhiệt dung riêng	$C_p$	1.300 J/(kg·K)	1.200 J/(kg·K)
Diện tích bề mặt tán	$A$	0,0023 m <sup>2</sup>	0,0023 m <sup>2</sup>
Hệ số đối lưu	$H$	10–50 W/(m <sup>2</sup> ·K)	10–50 W/(m <sup>2</sup> ·K)
Nhiệt độ môi trường	$T_a$	298 K (25 °C)	298 K (25°C)
Nhiệt độ pin	$T_{phần tử} (t)$	298–333 K	298–333 K
Kích thước		Pin 21700 có đường kính là 21 mm và chiều cao 70 mm	

Nhìn chung, phần tử Silic nổi bật với khả năng tích trữ năng lượng cao hơn, nhưng đi kèm nội trở lớn và hệ số dẫn nhiệt thấp hơn graphite. Những đặc điểm này trực tiếp ảnh hưởng đến dao động điện áp, sinh nhiệt và tốc độ thay đổi SOC trong quá trình sạc/xả, do đó được đưa vào mô hình mô phỏng để phân tích hiệu suất pin một cách toàn diện.

### 3.3. Nguyên nhân giãn nở thể tích của cực âm silic

Một trong những thách thức chính khi sử dụng silic làm cực âm là sự giãn nở thể tích đáng kể trong quá trình sạc/xả. Khi ion lithium chèn vào cấu trúc silic để hình thành hợp chất  $Li_xSi$ , thể tích cực âm có thể tăng tới khoảng 300%, trong khi graphite chỉ giãn nở khoảng 10% do giới hạn chèn lithium ở  $LiC_6$  [15].

Hiện tượng này xuất phát từ khả năng tích trữ lithium vượt trội của silic, tạo ra áp lực cơ học trong khối vật liệu, dẫn tới biến dạng và rạn nứt cấu trúc tinh thể. Sự giãn nở thể tích ảnh hưởng trực tiếp đến nội trở phần tử, phân cực điện hóa và sinh nhiệt cục bộ, đồng thời làm giảm độ bền chu kỳ nếu không có các biện pháp kiểm soát thích hợp. Hiểu rõ cơ chế này là cơ sở để phát triển các chiến lược cải tiến vật liệu, bao gồm phủ bề mặt, thiết kế cấu trúc rỗng hoặc composite Si-C, nhằm giảm thiểu giãn nở và cải thiện ổn định cơ-nhiệt của pin.

### 3.4. Mô hình điện

Điện áp đầu ra của pin được xác định dựa trên mạch tương đương phân cực kép (DP-Dual Polarization) [16], [17]:

$$U_{\text{term}}(t) = U_{\text{oc}}(\text{SOC}(t), T_{\text{phần tử}}(t)) - I(t)R_{\text{int}} \quad (1)$$

Trong đó:

- $U_{\text{term}}(t)$  [V]: điện áp đầu ra tức thời của phần tử
- $U_{\text{oc}}$  [V]: điện áp hở mạch, phụ thuộc vào trạng thái SOC và nhiệt độ T
- $I(t)$  [A]: dòng điện tại thời điểm t
- $R_{\text{int}}$  [ $\Omega$ ]: điện trở nội của pin

Mô hình DP giúp phản ánh chính xác hơn các biến động điện áp trong quá trình sạc/xả, đặc biệt ở vật liệu silic vốn có hiện tượng phân cực mạnh hơn graphite.

### 3.5. Mô hình nhiệt

Sự thay đổi nhiệt độ tuân theo phương trình cân bằng năng lượng [18]:

$$mC_p \frac{dT_{\text{phần tử}}}{dt} = Q_{\text{gen}}(t) - hA(T_{\text{phần tử}}(t) - T_a) \quad (2)$$

Ta có tổng nhiệt sinh ra trong phần tử gồm 3 thành phần chính:

$$Q_{\text{gen}}(t) = Q_{\text{ohm}} + Q_{\text{rxn}} + Q_{\text{rev}} \quad (3)$$

$$\text{Nhiệt Joule (nhiệt điện trở): } Q_{\text{ohm}} = I^2(t)R_{\text{int}} \quad (4)$$

$$\text{Nhiệt phản ứng điện hoá: } Q_{\text{rxn}} = I(t)(U_{\text{oc}}(\text{SOC}, T) - U_{\text{term}}) \quad (5)$$

$$\text{Nhiệt entropy: } Q_{\text{rev}} = I(t)T_{\text{phần tử}}(t) \frac{dU_{\text{oc}}}{dT} \quad (6)$$

Trong đó:

- $m$  [kg]: khối lượng của phần tử
- $C_p$  [J/kg·K]: nhiệt dung riêng
- $T_a$  [K]: nhiệt độ môi trường
- $h$  [W/m<sup>2</sup>·K]: hệ số truyền nhiệt đối lưu
- $A$  [m<sup>2</sup>]: diện tích bề mặt truyền nhiệt

Mô hình này cho phép dự đoán chi tiết ảnh hưởng của nội trở và động học phản ứng đến sự tăng nhiệt, một yếu tố then chốt trong thiết kế hệ thống quản lý nhiệt cho pin.

### 3.6. Mô hình SOC

Trạng thái sạc được xác định theo phương pháp Coulomb Counting [19]:

$$\frac{d\text{SOC}(t)}{dt} = -\frac{I(t)}{C_{\text{rated}} \times 3600} \quad (7)$$

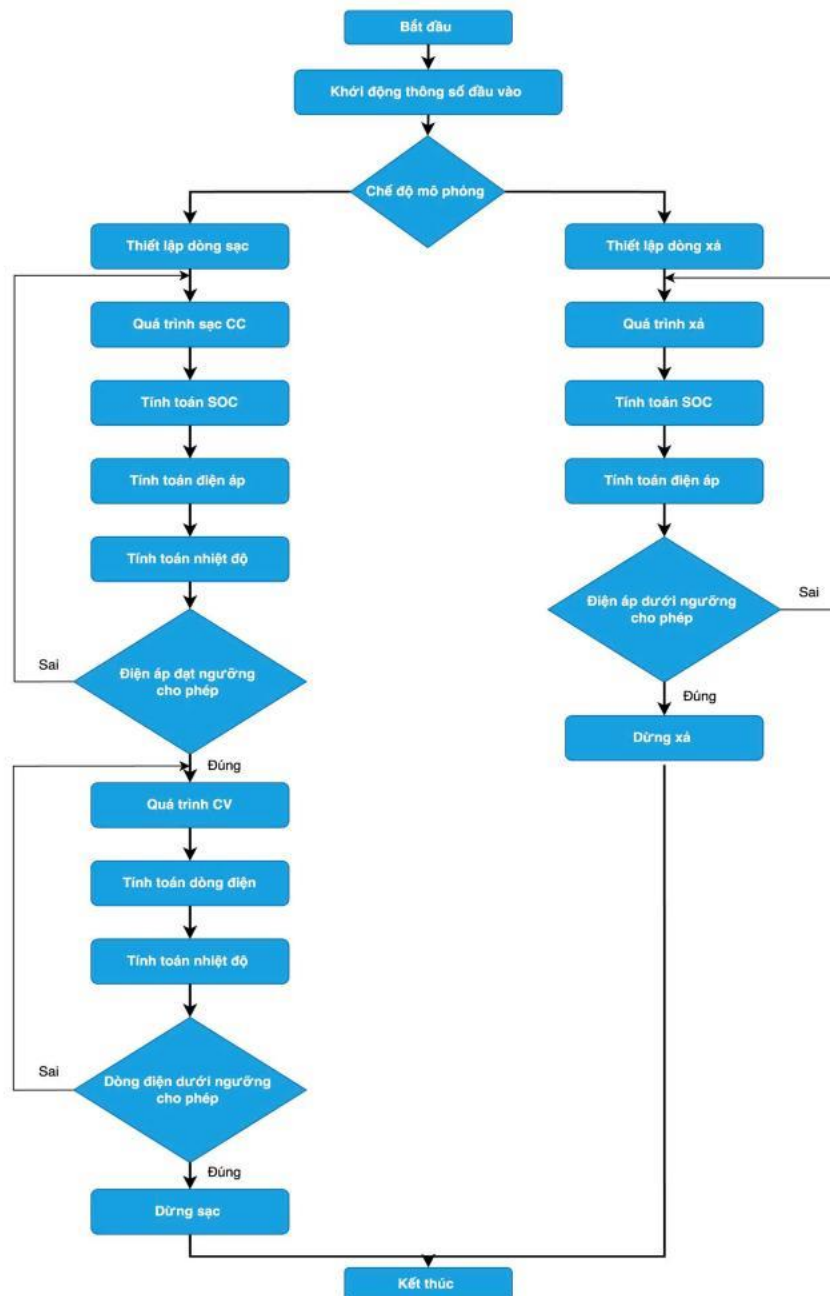
Trong đó:

- $\text{SOC}(t)$  [%]: trạng thái sạc tại thời điểm t
- $C_{\text{rated}}$  [Ah]: dung lượng danh định của pin

Phương pháp này đơn giản, dễ triển khai và phù hợp để mô phỏng quá trình sạc/xả theo chuẩn CC-CV.

## 4. Kết quả và bàn luận

### 4.1. Sơ đồ khối mô phỏng



**Hình 1.** Sơ đồ khối chế độ mô phỏng pin lithium.

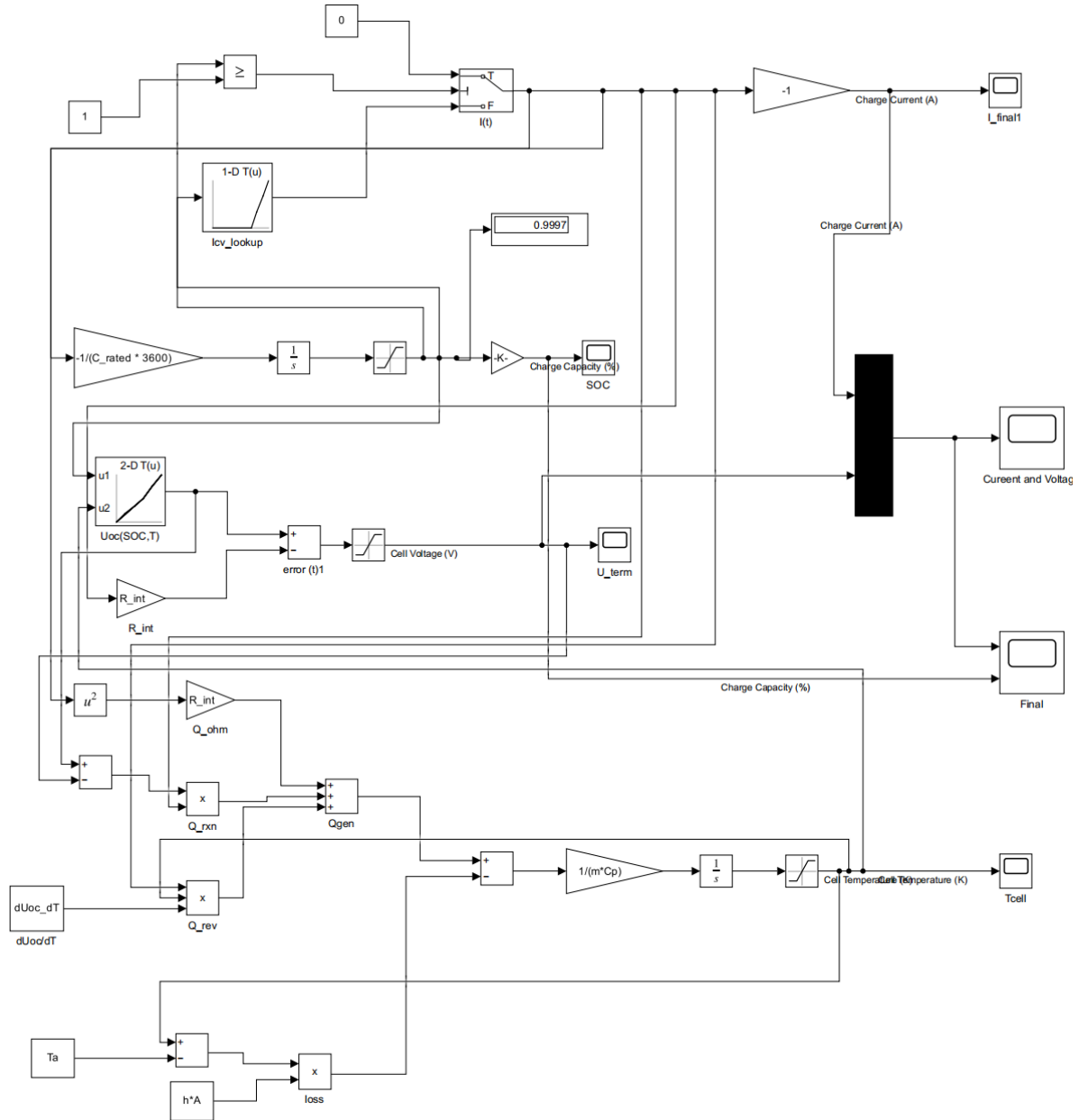
Theo Hình 1, khối khởi tạo tham số đầu vào thiết lập các thông số đặc trưng của phần tử pin, gồm dung lượng danh định, điện trở nội, nhiệt dung riêng, khối lượng, nhiệt độ ban đầu và các ngưỡng giới hạn vận hành.

Khối lựa chọn chế độ mô phỏng xác định trạng thái sạc hoặc xả của hệ thống. Trong chế độ sạc, dòng sạc ban đầu được đặt và duy trì ở chế độ dòng không đổi (CC) cho đến khi điện áp đạt ngưỡng cài đặt trên, tiếp theo sẽ chuyển sang chế độ điện áp không đổi (CV), trong đó điện áp được giữ cố định còn dòng sạc giảm dần theo trạng thái của pin và kết thúc khi dòng giảm xuống dưới ngưỡng cài đặt. Ở chế độ xả, dòng tải được thiết lập không đổi và quá trình xả dừng khi điện áp chạm ngưỡng dưới.

Trong cả hai chế độ, các khối tính toán SOC, điện áp và nhiệt độ được sử dụng để mô phỏng và giám sát đáp ứng theo thời gian của phần tử pin.

## 4.2. Tổng quan mô hình mô phỏng

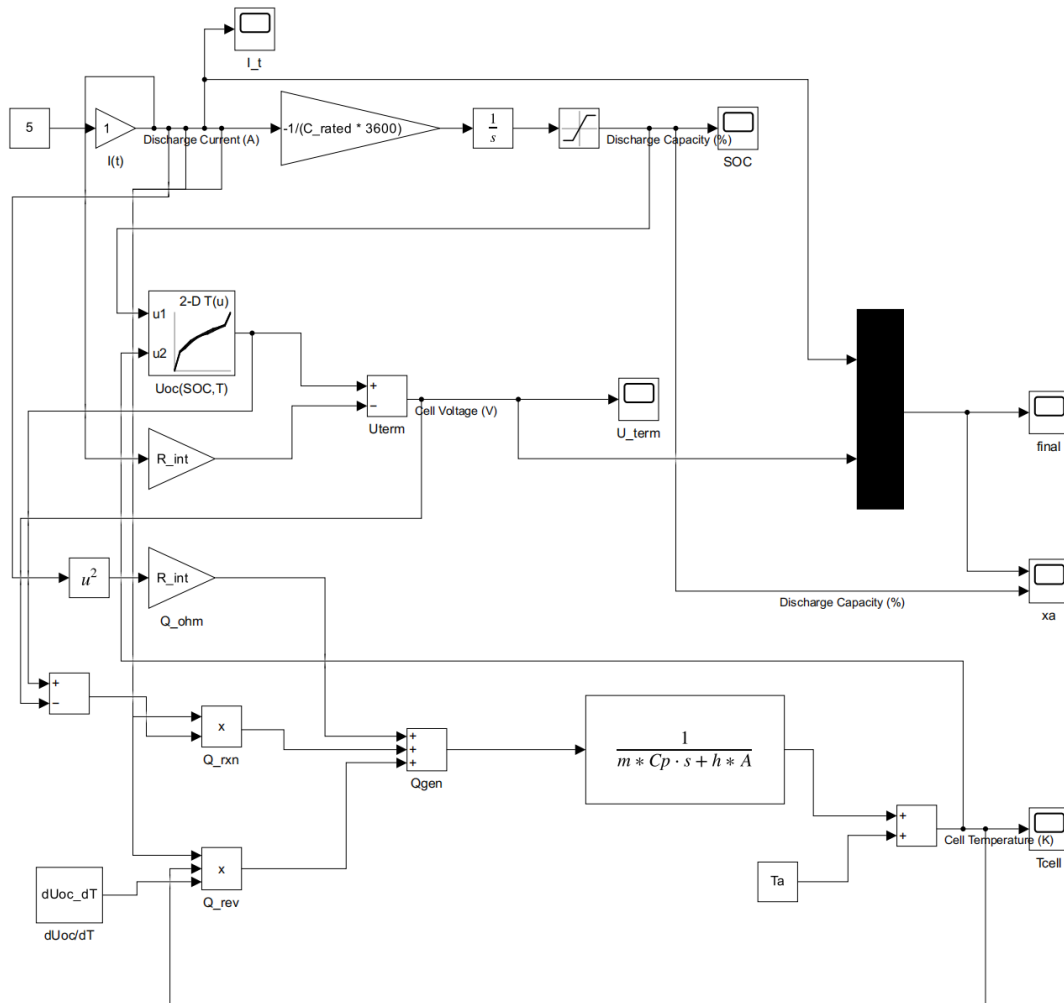
### 4.2.1. Mô hình mô phỏng quá trình sạc



**Hình 2.** Mô hình mô phỏng quá trình sạc pin lithium.

Hình 2 trình bày mô hình mô phỏng quá trình sạc pin lithium được xây dựng trên MATLAB/Simulink. Mô hình này được thiết kế để theo dõi sự thay đổi của điện áp, nhiệt độ và trạng thái sạc (SOC) trong suốt quá trình cấp dòng không đổi vào pin. Các khối mô phỏng điện và nhiệt hoạt động dựa trên các phương trình mô tả phản ứng điện hóa và cân bằng năng lượng, trong khi giá trị SOC được tính thông qua việc tích phân dòng điện theo thời gian. Cơ chế chuyển từ sạc dòng không đổi sang giữ điện áp không đổi được điều khiển bằng các khối logic so sánh, đồng thời hệ thống cũng tự động ngắt sạc khi dòng giảm xuống dưới 3% so với giá trị ban đầu.

4.2.2. Mô hình mô phỏng quá trình xả



**Hình 3.** Mô hình mô phỏng quá trình xả pin lithium.

Hình 3 trình bày mô hình mô phỏng quá trình xả pin lithium với dòng xả cố định. Mô hình này được thiết lập để khảo sát sự thay đổi của điện áp, nhiệt độ và dung lượng còn lại của pin khi dòng xả cố định được duy trì. Dòng điện đầu ra được đưa vào mô hình và đồng thời sử dụng để tính toán điện áp thông qua mô hình điện hóa và nội trở tương đương. Mức SOC được xác định dựa trên tích phân dòng theo thời gian, trong khi nhiệt độ được tính từ phương trình cân bằng năng lượng, bao gồm các thành phần nhiệt do điện trở, phản ứng và hiệu ứng entropy. Các khối đo lường được tích hợp nhằm theo dõi liên tục điện áp, SOC và nhiệt độ trong suốt quá trình xả, hỗ trợ đánh giá hiệu suất và độ ổn định nhiệt của vật liệu điện cực trong điều kiện tải thực tế.

Các phương trình chi tiết mô tả điện áp, nhiệt độ và SOC được trình bày trong các mục 3.4–3.6 nhằm mô tả rõ hơn cơ chế tính toán trong từng khối.

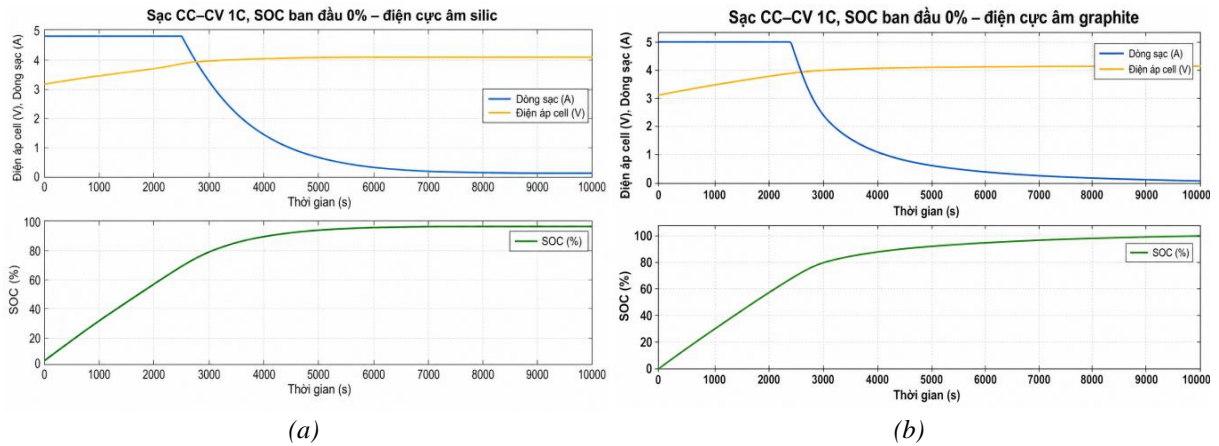
4.3. Kết quả và đánh giá

4.3.1. Quá trình sạc 1C ở mức 0% dung lượng

a. Tính toán SOC, điện áp, dòng điện quá trình sạc 1C

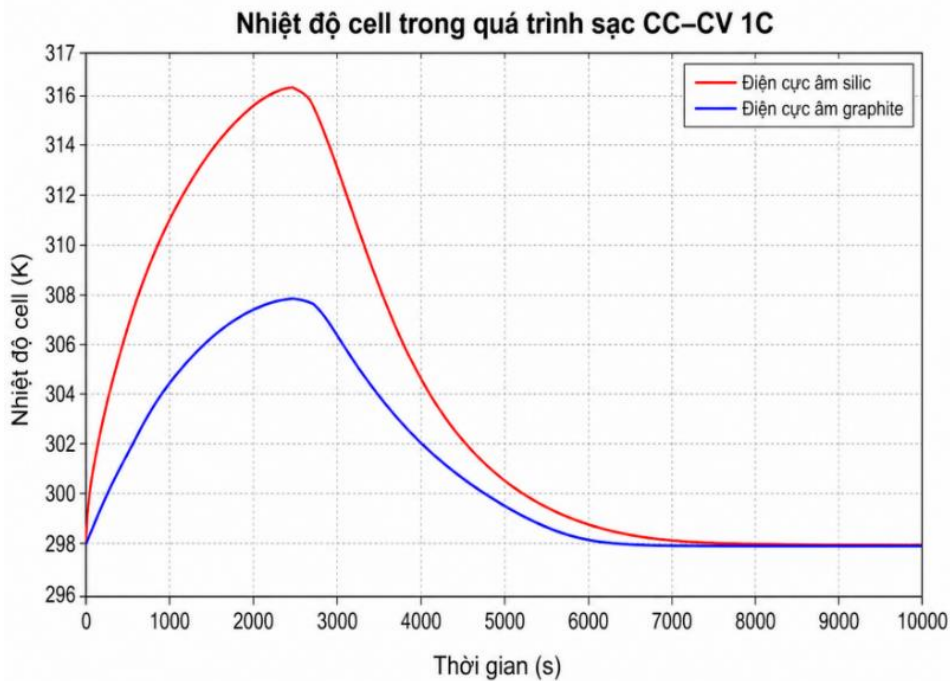
Hình 4 thể hiện đáp ứng dòng điện, điện áp và SOC trong quá trình sạc CC-CV ở tốc độ 1C đối với hai loại cực âm silic và graphite. Ở chế độ sạc này, cả hai phần tử pin đều tăng từ SOC ban đầu 0% lên

gần 100%. Trong giai đoạn CC, dòng sạc duy trì khoảng 5 A, điện áp tăng dần đến khoảng 4,0–4,1 V và chuyển sang chế độ sạc CV tại khoảng 2.500–2.700 s. Sau đó, dòng sạc giảm dần về gần 0 A, trong khi SOC tiếp tục tăng đến gần 100% vào cuối quá trình sạc. So với graphite, phần tử pin sử dụng điện cực âm silic có biến thiên điện áp rõ hơn tại vùng chuyển CC-CV và dòng sạc giảm nhanh hơn, cho thấy ảnh hưởng của nội trở và phân cực điện hóa lớn hơn.



**Hình 4.** Đồ thị mô phỏng quá trình sạc 1C ở mức 0% dung lượng: (a) Cực âm là silic; (b) Cực âm là graphite.

*b. Tính toán nhiệt độ sạc quá trình sạc 1C*

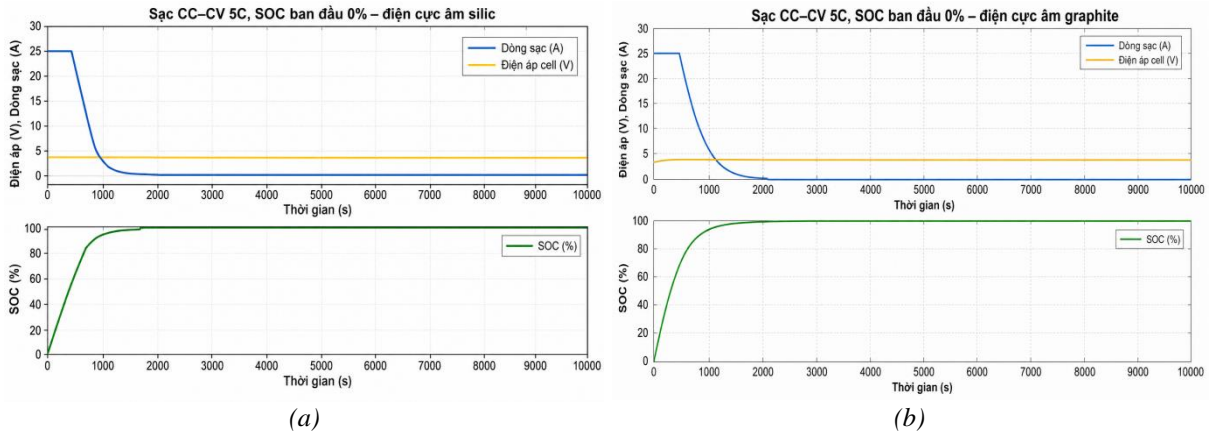


**Hình 5.** Đồ thị nhiệt độ quá trình sạc 1C ở mức 0% dung lượng.

Hình 5 cho thấy sự thay đổi nhiệt độ của phần tử pin trong quá trình sạc CC–CV ở tốc độ 1C. Trong quá trình này, nhiệt độ phần tử pin sử dụng điện cực âm silic đạt cực đại khoảng 316 K, cao hơn phần tử pin sử dụng cực âm graphite khoảng 10 K so với mức 306 K, tương đương 3,27%. Kết quả này cho thấy phần tử pin silic sinh nhiệt lớn hơn trong quá trình sạc, chủ yếu do nội trở và phân cực điện hóa cao hơn.

### 4.3.2. Quá trình sạc 5C ở mức 0% dung lượng

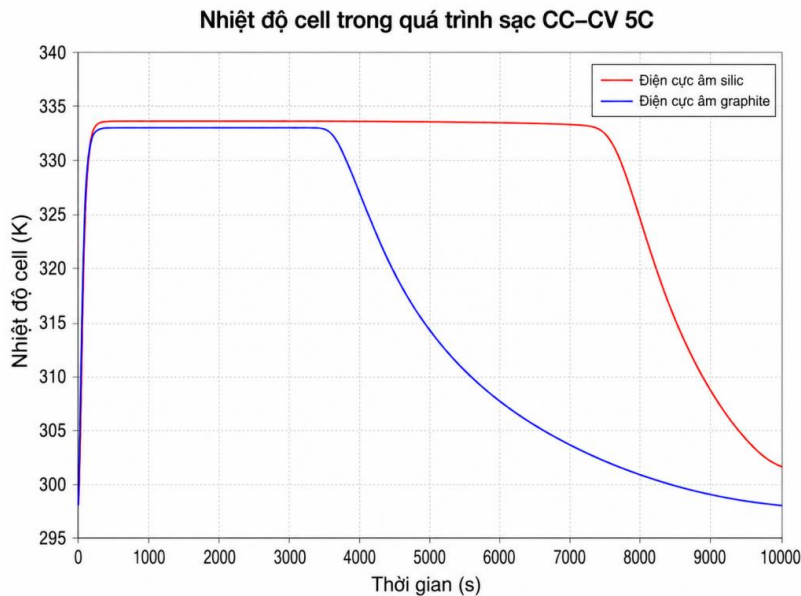
#### a. Tính toán SOC, điện áp, dòng điện quá trình sạc 5C



**Hình 6.** Đồ thị mô phỏng quá trình sạc 5C ở mức 0% dung lượng: (a) Cực âm là silic; (b) Cực âm là graphite.

Hình 6 trình bày đáp ứng dòng điện, điện áp và SOC trong quá trình sạc CC-CV ở tốc độ 5C đối với hai loại cực âm. Ở chế độ sạc này, cả hai phần tử pin đạt gần 100% SOC trong thời gian ngắn, khoảng 1.500–2.000 s, nhanh hơn rõ rệt so với trường hợp sạc tốc độ 1C. Dòng sạc ban đầu đạt khoảng 25 A, sau đó giảm nhanh về gần 0 A khi chuyển sang chế độ sạc CV, trong khi điện áp phần tử được duy trì quanh mức 4,0–4,2 V. So với graphite, phần tử pin sử dụng điện cực âm silic có xu hướng dao động điện áp và suy giảm dòng sạc rõ hơn ở giai đoạn đầu, phản ánh ảnh hưởng của nội trở và phân cực lớn hơn khi sạc ở tốc độ sạc cao.

#### b. Tính toán nhiệt độ quá trình sạc 5C

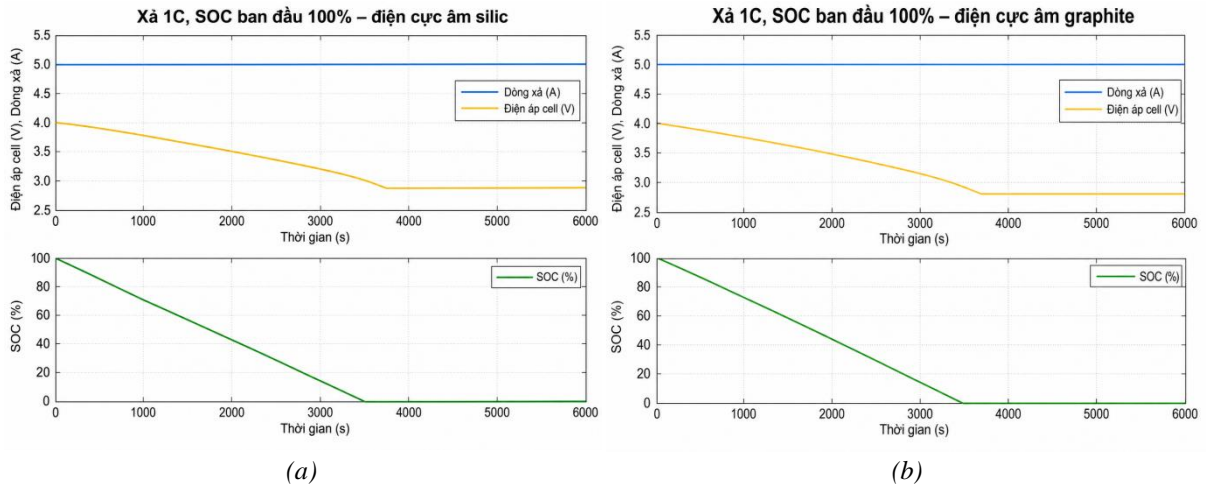


**Hình 7.** Đồ thị nhiệt độ quá trình sạc 5C ở mức 0% dung lượng.

Hình 7 thể hiện diễn biến nhiệt độ của phần tử pin trong quá trình sạc CC-CV ở tốc độ 5C. Trong chế độ này, cả hai phần tử pin đều đạt nhiệt độ cực đại khoảng 333–335 K. Tuy nhiên, phần tử pin sử dụng điện cực âm graphite bắt đầu giảm nhiệt rõ từ khoảng 4.000 s, trong khi phần tử pin sử dụng điện cực âm silic duy trì vùng nhiệt cao đến khoảng 7.800 s. Kết quả này cho thấy phần tử pin silic tích lũy nhiệt lâu hơn và có khả năng tản nhiệt chậm hơn khi sạc ở tốc độ sạc cao.

### 4.3.3. Quá trình xả 1C ở mức 100% dung lượng

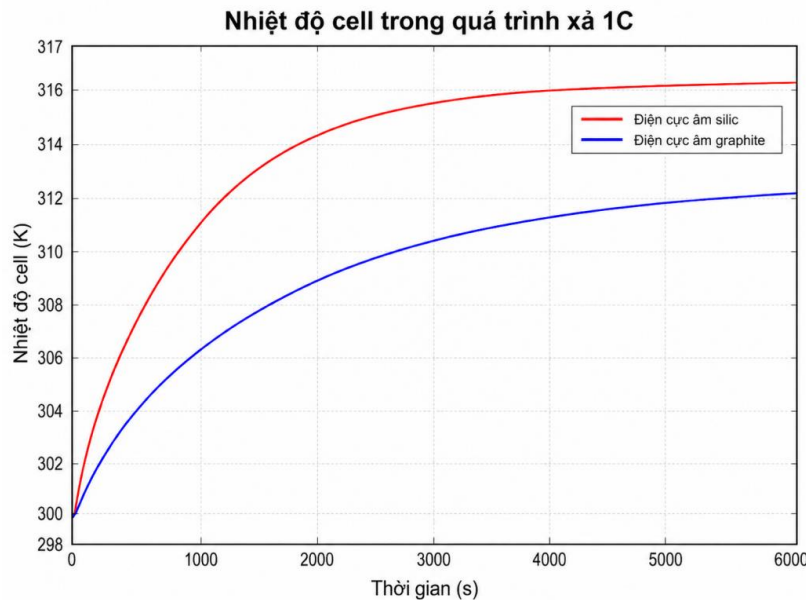
#### a. Tính toán SOC, điện áp, dòng điện quá trình xả 1C



**Hình 8.** Đồ thị mô phỏng quá trình xả 1C ở mức 100% dung lượng: (a) Cực âm là silic; (b) Cực âm là graphite.

Hình 8 trình bày đáp ứng dòng điện, điện áp và SOC trong quá trình xả ở tốc độ 1C đối với cực âm silic và graphite. Ở chế độ xả này, cả hai phân tử pin đều giảm từ SOC ban đầu 100% về gần 0% trong khoảng 3.500–3.700 s, với dòng xả duy trì gần như không đổi ở mức 5 A. Điện áp phân tử giảm dần từ khoảng 4,0 V xuống khoảng 2,8–2,9 V vào cuối quá trình xả. Trong điều kiện mô phỏng này, phân tử pin sử dụng điện cực âm silic duy trì điện áp đầu cực cao hơn so với graphite ở giai đoạn cuối, cho thấy khả năng duy trì điện áp ổn định hơn trong quá trình xả 1C.

#### b. Tính toán nhiệt độ quá trình xả 1C

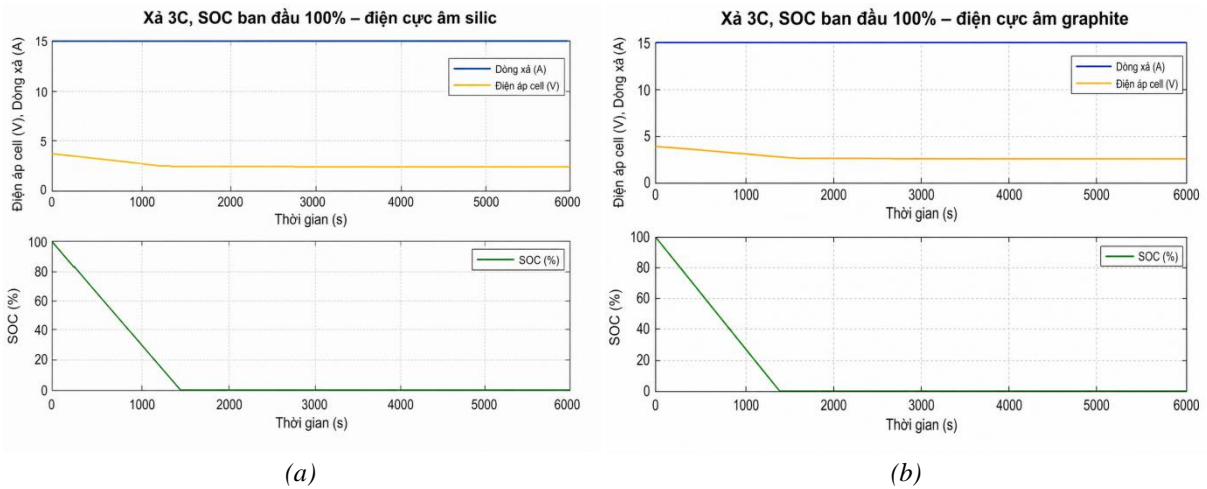


**Hình 9.** Đồ thị nhiệt độ quá trình xả 1C ở mức 100% dung lượng.

Hình 9 cho thấy sự thay đổi nhiệt độ của phân tử pin trong quá trình xả ở tốc độ 1C. Trong quá trình này, nhiệt độ phân tử pin sử dụng điện cực âm silic tăng đến khoảng 316 K, cao hơn phân tử pin graphite khoảng 4 K so với mức 312 K, tương đương 1,28%. Kết quả này cho thấy phân tử pin silic sinh nhiệt nhanh và lớn hơn trong quá trình xả với tốc độ 1C.

#### 4.3.4. Quá trình xả 3C ở mức 100% dung lượng

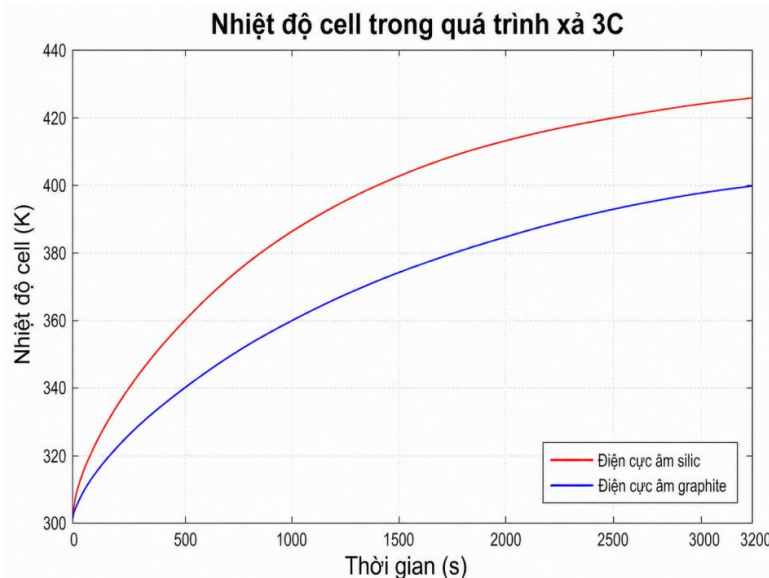
##### a. Tính toán SOC, điện áp, dòng điện quá trình xả 3C



**Hình 10.** Đồ thị mô phỏng quá trình xả 3C ở mức 100% dung lượng: (a) Cực âm là Silic; (b) Cực âm là Graphite.

Hình 10 trình bày đáp ứng dòng điện, điện áp và SOC trong quá trình xả ở tốc độ 3C. Ở chế độ xả này, cả hai phân tử pin giảm từ SOC ban đầu 100% về gần 0% trong khoảng 1.200–1.500 s, nhanh hơn rõ rệt so với trường hợp xả với tốc độ 1C. Dòng xả được duy trì gần như không đổi ở mức 15 A, trong khi điện áp phân tử giảm từ khoảng 4,0 V xuống gần 2,7–2,9 V. So với graphite, phân tử pin sử dụng điện cực âm silic có xu hướng sụt áp rõ hơn, cho thấy ảnh hưởng của nội trở và phân cực điện hóa lớn hơn ở dòng xả cao.

##### b. Tính toán nhiệt độ quá trình xả 3C



**Hình 11.** Đồ thị nhiệt độ quá trình xả 3C ở mức 100% dung lượng.

Hình 11 thể hiện diễn biến nhiệt độ của phân tử pin trong quá trình xả ở tốc độ 3C. Trong quá trình này, nhiệt độ cực đại của phân tử pin sử dụng điện cực âm silic đạt khoảng 425 K, cao hơn phân tử pin graphite khoảng 23 K so với mức 402 K, tương đương 5,72%. Kết quả này cho thấy phân tử pin silic sinh nhiệt lớn hơn rõ rệt ở dòng xả cao, do đó cần kiểm soát nhiệt hiệu quả để bảo đảm an toàn làm việc.

## 5. Kết luận

Nghiên cứu đã xây dựng thành công mô hình mô phỏng pin lithium sử dụng cực âm silic, tích hợp đầy đủ các khối điện, nhiệt và SOC. Kết quả mô phỏng cho thấy silic vượt trội về dung lượng tích trữ năng lượng so với graphite, dẫn đến dao động điện áp và sinh nhiệt cao hơn, đồng thời trải qua giãn nở thể tích mạnh hơn trong quá trình sạc/xả.

Điểm nổi bật của nghiên cứu là mô hình phản ánh toàn diện các yếu tố sinh nhiệt (Joule, phản ứng điện hóa, entropy) và khả năng đánh giá hành vi pin dưới các chế độ CC-CV và đa C-rate, cho phép so sánh trực tiếp giữa silic và graphite.

Tuy nhiên, mô hình chưa xét đến suy giảm công suất theo chu kỳ, sự phát triển lớp SEI và các cấu trúc composite tiên tiến. Trong tương lai, nghiên cứu nên mở rộng đề mô phỏng chính xác hơn các ảnh hưởng của chu kỳ lặp, vật liệu composite silic–cacbon, và các chiến lược giảm giãn nở nhằm nâng cao độ ổn định và tuổi thọ pin.

## Lời cảm ơn

Nghiên cứu này là sản phẩm thuộc đề tài mã số T2026-82 do Trường Đại học Công nghệ Kỹ thuật TP HCM tài trợ kinh phí thực hiện

## Xung đột lợi ích

Các tác giả tuyên bố không có xung đột lợi ích trong bài báo này.

## TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] N. T. Ngọc, B. X. Thành, N. V. Hoàng, N. T. Lan, and D. T. Tùng, “Chế tạo vật liệu tổ hợp than chì/nano silic/nano cacbon cho điện cực anode trong pin Lithium-ion,” *TNU Journal of Science and Technology*, 2023, doi: 10.34238/tnu-jst.5428.
- [2] V. T. Phát *et al.*, “Chế tạo pin sạc Li-ion từ vỏ trái,” *Vietnam Science and Technology Information Agency Journal*, 2023.
- [3] N. Đ. Nhân, P. T. Nhung, P. T. T. Trang, N. T. Lan, N. V. Thắng, and V. Viễn, “Synthesis of g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>-based layered silicon as anode material for Lithium-ion batteries,” *HUST-VAST Technical Report*, 2022.
- [4] Đ. T. Hương *et al.*, “Nghiên cứu, chế tạo vật liệu anode nanocarbon composite từ nguồn than đá Việt Nam định hướng ứng dụng cho pin Li-ion,” *Vietnam Academy of Science and Technology Technical Report*, 2024.
- [5] J. B. Goodenough and K. S. Park, “The Li-ion rechargeable battery: A perspective,” *J. Am. Chem. Soc.*, vol. 135, no. 4, pp. 1167–1176, Feb. 2013, doi: 10.1021/ja3091438.
- [6] D. A. Stevens, M. Y. Huang, and P. N. Ross, “Electrochemical impedance spectroscopy study on Lithium-ion battery electrodes,” *Electrochim. Acta*, vol. 49, no. 10, pp. 1679–1689, May 2004, doi: 10.1016/j.electacta.2003.09.041.
- [7] E. Quiroga-González and M. Holzapfel, “Fast charging protocols and degradation of silicon nanowire electrodes,” *J. Power Sources*, vol. 241, pp. 477–486, Oct. 2013, doi: 10.1016/j.jpowsour.2013.03.094.
- [8] S. Tepavcevic *et al.*, “Nanostructured silicon anodes for Lithium-ion batteries: A review,” *Adv. Energy Mater.*, vol. 6, no. 15, Art. no. 1600917, Aug. 2016, doi: 10.1002/aenm.201600917.
- [9] X. Liao and M. Zhang, “Layered silicon electrodes for high-performance Li-ion batteries,” *Nano Energy*, vol. 49, pp. 202–212, Jul. 2018, doi: 10.1016/j.nanoen.2018.04.027.
- [10] Y. Zhang and L. Wei, “Flexible Si/C composites for long-life Lithium batteries,” *J. Mater. Chem. A*, vol. 11, no. 7, pp. 3654–3664, Feb. 2023, doi: 10.1039/D2TA09512B.
- [11] A. R. Raza and H. Patel, “Design and analysis of Si@void@C nanocomposite for high-performance anodes in Lithium-ion batteries,” *Nano Energy*, vol. 87, Art. no. 106225, Mar. 2024, doi: 10.1016/j.nanoen.2023.106225.
- [12] A. K. Sinha and R. Jain, *Battery Modeling Techniques in MATLAB/Simulink*. Amsterdam, The Netherlands: Elsevier, 2001.
- [13] C. Zhao, M. Huang, and J. Wu, “Comparative study on Si and graphite anodes in Li-ion cells at different C-rates,” *Mater. Today Energy*, vol. 25, Art. no. 100964, Dec. 2022, doi: 10.1016/j.mtener.2022.100964.
- [14] S. Choi and K. Lee, “Integrated thermal–electrical modeling of Si-anode Lithium-ion batteries under high C-rates using MATLAB/Simulink,” *J. Power Sources*, vol. 574, Art. no. 233756, Jan. 2024, doi: 10.1016/j.jpowsour.2023.233756.
- [15] L. Liu, D. Kim, and S. Tanaka, “Mechanics-informed P2D modeling for silicon electrodes in Lithium-ion batteries,” *Electrochim. Acta*, vol. 457, Art. no. 143279, Mar. 2023, doi: 10.1016/j.electacta.2023.143279.
- [16] J. Martinez and J. Zamora, “MATLAB modeling of equivalent circuit models for Lithium batteries,” *Energy Reports*, vol. 4, pp. 351–359, Nov. 2018, doi: 10.1016/j.egy.2018.10.001.
- [17] M. Doyle, T. F. Fuller, and J. Newman, “Modeling of galvanostatic charge and discharge of the Lithium/polymer/insertion cell,” *J. Electrochem. Soc.*, vol. 140, no. 6, pp. 1526–1533, Jun. 1993, doi: 10.1149/1.2221597.
- [18] J. H. Kim, S. Park, and D. Kim, “Advanced thermal integration in Lithium-ion batteries for electric vehicles,” *Appl. Energy*, vol. 330, Art. no. 120980, Apr. 2024, doi: 10.1016/j.apenergy.2023.120980.
- [19] K. S. Ng, C. S. Moo, Y. P. Chen, and Y. C. Hsieh, “Enhanced coulomb counting method for estimating state-of-charge and state-of-health of lithium-ion batteries,” *Applied Energy*, vol. 86, no. 9, pp. 1506–1511, Sep. 2009, doi: 10.1016/j.apenergy.2008.11.021.

**Anh Duong Van** received engineer's degree in Automotive engineering, in 2013, and Master's degree, in 2015 from Ho Chi Minh city, University of Technology and Education. From 2014-2021, he is a Lecturer at Cao Thang Technical College. He had instructed his students when they competed in Minicar Racing Contest, Eco Mileage Challenge in Ha Noi. From 2022, he is a Lecturer at Ho Chi Minh City, University of Technology and Education (HCMUTE). In 2023, his students participated in Robocon 2023 with him. Besides, He still guides graduation thesis for his students. His research includes Automotive Powertrains system, Automotive Chassis System, Vehicle Stability Control and material for batteries for EV.

Email address: [duongva@hcmute.edu.vn](mailto:duongva@hcmute.edu.vn). ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-1572-4266>

**Thanh Tuan Pham** received the Bachelor of Science with Honor program in Physics, from University of Science – Vietnam National University, Ho Chi Minh city, in 2009 and Master degree in Optics, in 2013. He joined the Applied Material Science Institute (IAMS) – Vietnam Academy Science and Technology (VAST) in 2009. He had worked as a researcher in IAMS from 2009 to 2015 before studying Doctoral Program in Myongji University - Korea. He hold Ph.D. degree in 2019 in Myongji University. After that he worked as a Professor Researcher in the same University. Currently, he is a Lecturer at University of Technology and Education – HCMUTE at Renewable Energy Department. He have published 28 papers in International Journals and International Conference. Furthermore, He have three Patents in Industry about Photovoltaic technology and Optics. His current research interests include daylighting, photovoltaic system, thin film, optical material and material for batteries for large scale energy storage.

Email address: [tuanpt@hcmute.edu.vn](mailto:tuanpt@hcmute.edu.vn). ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-2682-1427>.

**Khanh Huy Ho** was born in 2003 in Vietnam. He is a senior at the Faculty of Vehicle and Energy Engineering, majoring in Automotive Engineering Technology at Ho Chi Minh City University of Technology and Education (HCMUTE). His research focus is on Lithium-ion battery modeling and simulation, especially with silicon-based anodes. He has developed a MATLAB/Simulink model to simulate CC-CV charging/discharging and compare the thermal and electrical behavior of silicon and graphite anodes.

Email address: [khanhhuyho1201@gmail.com](mailto:khanhhuyho1201@gmail.com). ORCID: <https://orcid.org/0009-0008-1285-4085>.