

公告本

申請日期	84.9.5
案 號	8P1180P0
類 別	H01M 10/50, 10/38

A4
C4

475285

(以上各欄由本局填註)

發 明 專 利 說 明 書

一、發明 名稱	中 文	用以使用自量熱法獲得的功率函數特徵化高能量電化學電池的方法和裝置
	英 文	"METHOD AND APPARATUS FOR CHARACTERIZING HIGH-ENERGY ELECTROCHEMICAL CELLS USING POWER FUNCTIONS OBTAINED FROM CALORIMETRY"
二、發明 人	姓 名	1. 傑弗瑞 雷孟德 達恩 2. 迪恩 戴利漢堤 麥克尼爾 3. 堤摩西 大衛 哈特查德
	國 籍	均加拿大
三、申請人	住、居所	1. 加拿大諾瓦史可堤省賀利費司市達豪西大學 2. 加拿大諾瓦史可堤省賀利費司市達豪西大學 3. 加拿大諾瓦史可堤省賀利費司市達豪西大學
	姓 名 (名稱)	美商3M新設資產公司
三、申請人	國 籍	美國
	住、居所 (事務所)	美國明尼蘇答州聖保羅市3M中心
三、申請人	代 表 人 姓 名	吉拉德 F. 柴爾尼維

裝

訂

線

(由本局填寫)

承辦人代碼：
大類：
I P C 分類：

A6
B6

本案已向：

國（地區）

申請專利，申請日期：

案號：

，☐有 ☐無主張優先權

美國

1999 年 12 月 29 日

09/473,569

☒有 ☐無主張優先權

有關微生物已寄存於：

，寄存日期：

，寄存號碼：

(請先閱讀背面之注意事項再填寫本頁各欄)

裝

訂

線

經濟部智慧財產局員工消費合作社印製

五、發明說明(1)

發明範疇

本發明一般係關於高能量電化學電池，例如以鋰為主的電池，其它次級電池，及由以上材料所構成的電池。更特定而言，本發明係關於系統與方法，其用以特徵化電化學電池，並根據由自量熱法所得到的功率函數，進行預測這種電池對於熱能，機械或電氣式侵擾的反應。

發明背景

可充電電池目前係用於供給電力給許多的攜帶式電子裝置，包含例如膝上型電腦，行動電話，相機，及個人記事本等。由於更廣泛地使用行動裝置，因此對電池製造商有更大的要求來提供高功率的電池，並能夠安全地及廣泛地用於消費及工業應用。為了使尺寸及重量最小化，通常使用高能量密度的電池技術。這種技術的較大的版本，例如可用於複合式或全電子式的汽車。高能量密度電池儲存了相對於小體積的大量能源。如果此能量被快速地釋放並以一未受控制的方式，然而仍有可能逸出熱能而牽涉到安全性的考量。

鋰離子及鋰離子聚合物電池(在下面的討論中皆稱為鋰離子電池)，例如可以呈現出所有環境溫度可充電電池技術的最大的能量密度。鋰離子電池係經過詳細的工程過程而能夠符合許多的安全測試標準，例如包含 UL-1642 (Underwriters Laboratories)，及 IEC-61960 (International Electrotechnical Commission) 標準。由這些標準所定義的測試包含烤爐烘烤，短路，強制過電壓，強制放電，電擊及

(請先閱讀背面之注意事項再填寫本頁)

訂線

五、發明說明(2)

振動。其它所提出的測試包含釘狀穿透測試。有需要使由這種電池所構建的電池能夠不發射煙霧或火燄，其係在接收到關於上述測試的熱能，電子，及機械應力。

除了鋰離子電池在放電時所能提供的電能，這些及其它種高能量電池也可因為電極材料與電解質的反應而發出大量的熱量。例如將一電池短路期間，電池的電能及化學熱量係由於在電池中電極/電解質反應所放射出來。如果這些熱功率的總和大於能夠由電池傳送到環境中的功率時，將發生熱量的逸出。

UL 及 IEC 烤爐曝露測試探測電極/電解質反應的承受度。這些反應在電池完全充飽時是最為嚴苛的。根據這些烤爐曝露測試，一完全充電的電池係放置在一烤爐中，並曝露在 150 °C (UL) 或 130 °C (IEC) 的溫度中一段預定的時間。在測試中通常不會有電池短路，而電池溫度會提高到超過烤爐溫度，而達到由電極/電解質反應所產生的功率相等於能夠傳送到環境的功率。但是，如果前者一直大於後者，則會發生熱量逸出。其應注意的是，雖然消費者不會在像是烤爐中那樣的高溫下來使用電池，在電池外殼中也可能會超過 85 °C，該外殼並未經過良好的隔熱。如果電極/電解質的反應在該溫度下有效地進行，隔熱的電池也會存在熱量逸出。

由電極/電解質反應所產生的整體功率(在一特定的條件下)，係正比於電池的總體積。意即，如果兩個電池具有相同的化學成分，及相同的細部結構與相同的充電歷史，

五、發明說明 (3)

但一個電池為另一個電池的兩倍體積，較大的電池將因為在升高的溫度下的電解質/電極反應，會比較小者釋放出兩倍的功率。但是，能夠被傳送到環境中的功率係正比於電池表面面積。因此，可預期電池表面面積與體積的比例必須最大化，而可使電池安全性最佳化。因為製造電池的限制或包覆電池之中一裝置的實體尺寸等限制，以上的方式並不都適用。

依前所述，其可瞭解到電池設計者正面對一個複雜的工作。電池設計者通常被要求使電池的效能，電池能量密度，及電池的安全性能夠最大化。但是設計上若使能量密度最大化，卻不利於安全性。設計改變電池形狀及電池尺寸也會影響安全性。對於電極材料及電解質的選擇，則影響到效能及安全性。

基本上，設計者能夠依據由實驗性電池所收集到的資料而得的設計而簡化電池效能與能量密度的估計。但是，目前為止仍不能根據實驗性的尺寸所得到的測試結果來可靠地預測實際電池的安全性測試結果(例如完整的消費者電池)。為了發展可靠的安全性研究，有必要將一可能的產品以實際的電池硬體的雛型構成，並配合嚴格的測試。再者，為了適當地構建用於安全性測試及評估的雛型電池，必須生產大量的電極材料。習用的電池設計及研發技術基本上需要生產 10 公斤或更多的可用的樣本電極材料。對那些本技藝的專業人士而言可以瞭解，對於電化學電池的設計，研發及測試等，特別是那些具有一顧客化及非工業

(請先閱讀背面之注意事項再填寫本頁)

訂

線

五、發明說明(4)

標準的架構，若使用習用的方法將會特別地耗時及昂貴。

因此對於電池製造業有需要一種系統及方法能夠協助以不同技術設計電化學電池，而需要生產小量的樣本電極材料。並存在有對於這樣的系統及方法的另一個需要是，爲了完整地評估一給定的電池設計的安全性，必須降低目前需要構建全尺寸的電池雛型的需求。而本發明可以滿足這些以及其它的需要。

發明概述

本發明係揭示用於特徵化電化學組件的方法及裝置，並用以特徵化一電化學電池對於一特定的運作條件的反應。根據本發明的一具體實施例，特徵化電化學組件牽涉到製備一電極材料的樣本來與一電解質接觸。利用自量熱技術，對於該樣本可以得到自我加熱，功率-溫度，或功率-時間資料，例如使用一加速度自量熱技術，或是一差異掃描自量熱技術。爲獲致自我加熱資料，舉例而言，在實際絕熱的反應中，可得到樣本之溫度對於時間的資料。

一功率函數係利用自我加熱，功率-溫度或功率-時間的資料而針對樣本發展出來。功率函數代表了該樣本的單位重量的熱功率，並以溫度及從樣本電極材料及電解質反應中所剩餘的反應物數量爲函數。

一般而言，製備電解材料樣本牽涉到使用少於約 100 克的電極材料的樣本。根據一具體實施例，製備電極材料樣本牽涉到使用在約 1 克及約 10 克之間的電極材料來製備樣本。在另一具體實施例中，製備該電極材料樣本牽涉到

(請先閱讀背面之注意事項再填寫本頁)

訂

線

五、發明說明(5)

使用約 1 毫克到約 1 克之間的電極材料來製備該樣本。為改善自量熱技術，其可做為使用十億分之一克的電極材料樣本之電極材料樣本之功率函數的發展。該電極材料可以是一陰極材料或一陽極材料。而該電極材料可包含鋰。

根據另一具體實施例，特徵化電化學電池組件包含製備一陰極材料的第一樣本而與電解質接觸，並製備一陽極材料的一第二樣本與電解質接觸。第一及第二自我加熱，功率-溫度，或功率-時間資料係分別由該第一及第二樣本中取得，其係藉由自量熱技術。一用於第一樣本的第一功率函數及用於第二樣本的第二功率函數係分別使用該第一及第二自我加熱，功率-溫度或功率-時間資料所發展出來。該第一功率函數係特徵化該陽極材料及電解質之間的反應，而以每單位重量的陽極樣本材料的熱功率為函數，以及第二功率函數係特徵化該陰極材料及電解質之間的反應，而以單位重量的陰極樣本材料的熱功率為函數。

要製備該第一樣本基本上牽涉到使用少於約 100 克的陰極材料來製備該第一樣本，而製備該第二樣本則基本上牽涉到使用少於約 100 克的陽極材料來製備該第二樣本。根據一具體實施例，製備該第一樣本牽涉到使用約 1 到 10 克之間的陰極材料來製備該第一樣本，而製備該第二樣本則牽涉到使用約 1 到 10 克之間的陽極材料來製備該第二樣本。在另一具體實施例中，製備該第一樣本牽涉到使用約 1 毫克到約 1 克的陰極材料來製備該第一樣本，而製備該第二樣本則牽涉到使用約 1 毫克到約 1 克的陽極材料來

(請先閱讀背面之注意事項再填寫本頁)

訂

線

五、發明說明(6)

製備該第二樣本。該陰極與陽極材料個別皆可包含鋰。所使用的自量熱技術可以是一加速度自量熱技術，或是一差異掃描自量熱技術。

根據本發明的另一具體實施例，特徵化一電化學電池牽涉到定義一個或多個電化學電池的物理參數。此處提出了一第一功率函數，以每單位重量的陰極材料的熱功率來特徵化一陰極與電解質之間的反應。同時也提出一第二功率函數，其以每單位重量的陽極材料的熱功率來特徵化一陽極與電解質之間的反應。該電池對於一特定運作條件的反應係使用該第一及第二功率函數，以及該電化學電池的物理參數來預測。在一具體實施例中，此方法中的特徵化電化學電池係使用一電腦及電腦上的使用者介面來實施。

定義電池的一個或多個物理參數另會牽涉到調整該電池的物理參數。在此例中，對該電池的反應預測牽涉到使用該第一及第二功率函數，及該電池的經調整過的物理參數，進行電池反應的預測。

該電池的一個或多個物理參數之定義，另也牽涉到接收代表該電池的物理參數的使用者輸入資料。接收使用者資料另可牽涉到將相關於每個電池的物理參數的輸入欄位呈現給使用者，並由每個輸入欄位中接收來自使用者的輸入資料。定義一個或多個電池的物理參數也可牽涉到以電子方式來接收該電池的物理參數，例如來自一外部的本地或遠端的主控處理器。

定義一個或多個電池的物理參數另可牽涉到定義每個電

(請先閱讀背面之注意事項再填寫本頁)

訂

線

五、發明說明(7)

池之陽極與陰極的一個或多個物理參數。定義每個電池之陽極與陰極的物理參數另可牽涉到調整陽極與陰極兩者或其中之一的物理參數。在此例中預測該電池的反應另牽涉到使用該第一及第二功率函數來預測電池的反應，及該陽極與陰極兩者或其中之一經調整過的物理參數。

所指定的運作條件，例如，可包含恆定的或變化的週遭溫度的條件，及施加一恆定或變化的電流到電池上，將一外部短路連接到此電池的條件，或是在電池內部的一短路條件。

根據本發明的另一具體實施例，一用以特徵化一電化學電池的系統係包含一處理器，及結合到處理器的一使用者介面。該使用者介面包含一輸入裝置，由一使用者用來輸入一個或多個該電化學電池的物理參數。該系統另可包含記憶體而結合到該處理器。該記憶體儲存一陰極功率函數，用於以每單位重量的熱功率來特徵化一陰極與一電解質之間的反應，並且另外儲存了一陽極功率函數，用於以每單位重量的熱功率來特徵化一陽極與一電解質之間的反應。該處理器係利用該陰極與陽極功率函數及該電化學電池的物理參數，來計算一電化學電池對於一特定的運作條件的反應。

該輸入裝置另由該使用者操作來輸入該電池的一陽極與一陰極的物理參數。根據此具體實施例，該處理器會使用該陰極與陽極功率函數及該使用者所輸入的該電化學電池的該陽極與陰極的物理參數，來計算該電化學電池對於一

(請先閱讀背面之注意事項再填寫本頁)

訂

線

五、發明說明（8）

特定操作條件的反應。該輸入裝置亦可由使用者操作來調整該電池的物理參數，而該處理器另會使用該陰極與陽極功率函數，及經調整過的該電化學電池的物理參數來計算該電化學電池對於一指定的操作條件之反應。一使用者也可使用輸入裝置來調整該電池的一陽極與一陰極的物理參數，並且處理器使用陰極以及陽極功率因數以及調整過的電化學電池陽極與陰極之物理參數，計算電化學電池對於特定操作情況的反應。

該系統另包含一顯示器。該輸入裝置係由使用者用來將該電化學電池的物理參數輸入到顯示在顯示器上的輸入欄位。該電化學電池的一陽極與陰極的物理參數也可利用該輸入裝置而被輸入到呈現在顯示器上的輸入欄位。該系統另可包含一結合到該處理器的一熱量計系統。此熱量計系統可包含一加速度熱量計或一差異掃描熱量計。

該系統的記憶體可設置在靠近處理器，遠離該處理器，或是分散在相鄰及/或遠離該處理器的地方。該記憶體儲存了該陽極與陰極的功率函數，舉例而言，其可部份或完全地遠離該處理器。其所發展用於數個電極/電解質組合的功率函數可以儲存在一資料庫或是函式庫中。功率函數及功率函數的函式庫可經由一網路連接來存取。

根據本發明的另一具體實施例而特徵化電化學電池組件，其牽涉到定義一個或多個電化學電池的物理參數，及藉由定義一第一功率函數，而以每單位重量的陰極材料的熱功率來特徵化一陰極與電解質之間的反應。一以單位重

（請先閱讀背面之注意事項再填寫本頁）

訂

線

五、發明說明(9)

量的陽極材料為函數的一陽極與該電解質之間的反應，也藉由定義一第二功率函數進行特徵化。該電池對於一特定運作條件的反應係使用該第一及第二功率函數，及該電化學電池的物理參數進行估計。

根據此具體實施例所特徵化個別的陰極/電解質及陽極/電解質反應，其牽涉到假設一自動催化反應機制而對個別的反應進行模型化。第一功率函數， P_c ，係關於陰極/電解質反應者，可由下式進行特徵化：

$$\frac{du}{dt} = k(1-u)(\beta + u^{0.5})$$

$$\frac{dT}{dt} = \frac{h}{C'_{tot}} * \frac{du}{dt}$$

$$P_c = H \, du/dt$$

其中， u 代表無單位的轉換分數度， k 代表一由 $k = \gamma \exp(-E_a/k_b T)$ ， γ 代表一頻率因子，以分鐘⁻¹為單位， E_a 代表催化能量， k_b 代表 Boltzmann 常數， T 代表電池的溫度， β 代表自動催化的無單位參數， h 表示在以焦耳為函數表示的反應中，一陰極樣本所發出的總熱量， C'_{tot} 代表反應物的總熱容量，及一以 J/K 為單為的一樣本熱量計炸彈，及 H 代表每克陰極材料在陰極/電解質反應所產生的總熱量。

該第二功率函數， P_a ，關於添加鋰的碳陽極/電解質反應，可由下式特徵化：

五、發明說明 (10)

$$P_a = H_2 \left| \frac{dx_2}{dt} \right| + H_1 \left| \frac{dx_1}{dt} \right| \quad [13]$$

其中，

$$\frac{dx_2}{dt} = -\gamma_2 \exp^{-E_2/k_b T} x_2^{0.5} \quad [14]$$

及，

$$\frac{dx_3}{dt} = -\frac{dx_1}{dt} - \frac{dx_2}{dt} \quad [16]$$

$$\frac{dx_1}{dt} = -\gamma_1 \exp^{-E_1/k_b T} x_1 \exp^{-((x_{30}+x_{20})+f(x_{10}-x_1))/(x_{30}+x_{20})} \quad [15]$$

其中， x_1 代表在 Li_xC_6 中所量測到種類 1 的鋰的量，而 x_2 為種類 2 的鋰之量，其係每六個碳原子為基礎所量測，而 x_3 為種類 3 的鋰之量，其係每六個碳原子為基礎所量測， x_{10} ， x_{20} 及 x_{30} 為在電化學放電之後，而在加熱之前的鋰的初始量， E_1 及 E_2 為催化能量，而 γ_1 及 γ_2 為頻率因子， f 為比例常數，其控制了當種類 1 的鋰轉換到種類 3 的鋰時，在碳表面之反應產物的成長速度，而 H_1 及 H_2 為分別根據變化量 $\Delta x_1 = -1$ 及 $\Delta x_2 = -1$ 之每克碳的熱量。

對陰極/電解質反應的特徵化係牽涉到使用少於約 100 克的陰極材料進行特徵化該陰極/電解質反應，特徵化陽極/電解質反應則會牽涉到使用少於約 100 克的陽極材料所特徵化的陽極/電解質反應。根據一具體實施例，特徵化該

五、發明說明 (11)

陰極/電解質反應，係牽涉到使用約 1 到 10 克的陰極材料做特徵化陰極/電解質反應，而且特徵化該陽極/電解質反應，則牽涉到使用約 1 到 10 克的陽極材料來進行特徵化該陽極/電解質反應。在另一具體實施例中，特徵化陰極/電解質反應牽涉到使用約 1 毫克到約 1 克的陰極材料來特徵化該陰極/電解質反應，而特徵化該陽極/電解質反應牽涉到使用約 1 毫克到約 1 克的陽極材料來特徵化該陽極/電解質反應。該陰極與陽極材料皆包含有鋰。

特徵化該第一及第二功率函數會牽涉到要取得溫度對於時間的資料，功率對於溫度資料，或是功率對於時間資料，其係針對於每個陰極/電解質，及陽極/電解質反應。該第一及第二功率函數最好是使用自量熱技術來特徵化，例如一加速度自量熱技術，或一差異掃描自量熱技術。該特定的操作條件可牽涉到一恆定的或變化的周遭溫度條件，施加給電池的一恆定電流或變動電流的條件，一外部連接到電池的短路條件，或是電池內部的短路條件。

根據另一個具體實施例，其提出了一電腦可讀取媒體包含了程式指令，用於特徵化電化學電池組件。該電腦媒體包含由一處理器執行的程式指令，並以藉由定義一第一功率函數的單位重量的陽極材料的熱功率來特徵化一陰極與一電解質之間的反應，並另藉由定義一第二功率函數的單位重量的陰極材料的熱功率來特徵化一陽極與一電解質之間的反應。由處理器可執行的程式指令另用於定義一個或多個電化學電池的物理參數，並利用電化學電池的該第一

(請先閱讀背面之注意事項再填寫本頁)

訂

線

五、發明說明（12）

及第二功率函數及該物理參數來預測該電池對於一特定的運作條件的反應。

根據此具體實施例，特徵化個別陰極/電解質，及陽極/電解質反應，牽涉到以假設一自動催化反應機制來對個別的反應做特徵化。該第一功率函數， P_c ，相關於該陰極/電解質反應，及該第二功率函數， P_a ，關於該陽極/電解質反應，皆可使用上述的等式來分別地計算。

定義該電池的一個或多個物理參數另會牽涉到調整該電池的物理參數，而預測該電池的反應，另會牽涉到使用該第一及第二功率函數，及經調整過的電池的物理參數來預測該電池的反應。定義該電池的一個或多個物理參數也會牽涉到接收代表該電池的物理參數的使用者輸入資料。接收使用者輸入資料另可牽涉到將一關於每個電池物理參數的輸入欄位呈現給使用者，並從每個輸入欄位中接收來自使用者的輸入資料。定義一個或多個該電池的物理參數另可牽涉到電子式地接收該電池的物理參數。

一個或多個該電池的物理參數可對該電池的每個陽極及陰極來加以定義。定義該電池的每個陽極與陰極的物理參數可牽涉到調整陽極與陰極兩者或其中之一的物理參數，並使用該第一及第二功率函數及經調整過的該陽極與陰極兩者或其中之一的物理參數，來預測該電池的反應。該特定的運作條件可牽涉到一恆定的或變化的周遭溫度條件，施加給電池的一恆定電流或變動電流的條件，一外部連接到電池的短路條件，或是電池內部的短路條件。

五、發明說明 (13)

以上本發明的總結並不是用來說明本發明的每個具體實施例或每個施行方法。對本發明的好處及成就，以及更詳細的瞭解，將可藉由下述詳細的說明及申請專利範圍，並配合所附圖面，而可更加清楚。

圖式簡單說明

圖 1 所示為根據本發明的原理的一加速熱量計的細部圖，其可用來決定電化學電池的自我加熱程度，而可得到熱功率；

圖 2 所示為根據本發明的一具體實施例之一硬幣電池的結構圖，其用於準備加速度熱量計試驗的碳電極；

圖 3 所示為根據本發明的一具體實施例之一鋰離子硬幣電池的結構圖，其用於準備加速度熱量計樣本的 Li_xCoO_2 ；

圖 4 所示為根據本發明的一具體實施例之溫度對於時間資料的圖形，其係使用一 Li_xCoO_2 /電解質樣本之一加速度熱量計試驗；

圖 5 所示為根據本發明的一具體實施例之自我加熱速率對於溫度的自然對數圖形，其係在電解質中使用一 Li_xCoO_2 (4.2V)，並加熱到不同的初期開始溫度之加速度熱量計試驗；

圖 6A-6E 所示為根據本發明的一具體實施例中，自我加熱速度對於溫度的自然對數圖形，其係對一 Li_xCoO_2 的加速度熱量計試驗，分別加熱到 (A) 150 °C，(B) 160 °C，(C) 170 °C，(D) 175 °C，及 (E) 180 °C。

五、發明說明 (14)

圖 7A-7B 為根據本發明的一具體實施例之電解質中鋰化的 mesocarbon microbeads (MCMB) 之資料，其是在兩個不同的啓始溫度而相較於以特定功率函數參數所計算的外形；

圖 8 所示為根據本發明的一具體實施例之圓柱形電池的橫剖面圖；

圖 9 所示為根據本發明的一具體實施例之稜柱形電池的橫剖面圖；

圖 10A-10B 為根據本發明的一具體實施例中，溫度對於時間圖形，所示為來自一第一製造商(製造商 A)的電池之計算出的，及量測的烤爐曝曬圖形之比較。

圖 11A-11B 為根據本發明的一具體實施例中，溫度對於時間圖形，所示為來自一第二製造商(製造商 B)的電池之計算出的，及量測的烤爐曝曬圖形之比較。

圖 12 所示為一溫度對於時間的圖形，其係使用下表 2 中的參數，以電池半徑為函數之計算出的烤爐曝曬圖形 (150 °C)；

圖 13 所示為根據本發明的原理之在一電腦系統顯示器上之一使用者介面螢幕的描述，而使用一電池模型化程式進行使用者交談介面；

圖 14 所示為根據本發明的一電池模型化程式具體實施例之在一電腦系統顯示器上之一使用者介面螢幕的描述，用於讓使用者輸入及調整不同的陰極參數；

圖 15 所示為根據本發明的一電池模型化程式具體實施例之在一電腦系統顯示器上之一使用者介面螢幕的描述，

(請先閱讀背面之注意事項再填寫本頁)

訂

線

五、發明說明 (15)

用於讓使用者輸入及調整不同的資料，而考慮加速度熱量計的陰極計算；

圖 16 所示為根據本發明的一電池模型化程式具體實施例之在一電腦系統顯示器上之一使用者介面螢幕的描述，用於讓使用者輸入及調整不同的資料，而考慮差異掃描熱量計的陰極計算；

圖 17 所示為根據本發明的一電池模型化程式具體實施例之在一電腦系統顯示器上之一使用者介面螢幕的描述，用於讓使用者輸入及調整不同的資料，而考慮加速度熱量計的陰極計算；

圖 18 所示為根據本發明的一電池模型化程式具體實施例之在一電腦系統顯示器上之一使用者介面螢幕的描述，用於使用者輸入及調整不同的電池參數；

圖 19 所示為根據本發明的一電池模型化程式具體實施例之在一電腦系統顯示器上之一使用者介面螢幕的描述，用於使用者輸入及調整不同的電池參數，其具有一圓柱形架構；

圖 20 所示為根據本發明的一電池模型化程式具體實施例之在一電腦系統顯示器上之一使用者介面螢幕的描述，用於使用者輸入及調整不同的電池參數，其具有一稜柱形架構；

當本發明可應用於不同的修改及另一種形式，其中所顯示的及圖面中的範例將在以下做詳細說明。但是，其可瞭解到此目的並不是要將本發明限制於所說明的特殊具體實

(請先閱讀背面之注意事項再填寫本頁)

訂

線

五、發明說明 (16)

施例。相反地，本發明是要包含所有的修正，等同原理，及其它由所附申請專利範圍所定義的本發明範圍內的另外可行的方法。

不同具體實施例的詳細說明

在下述所示具體實施例的說明中，所附的圖面為其中的一部份，而其中經由圖示及不同具體實施例而可實施本發明。其可瞭解到也可使用其它的具體實施例，並在不背離本發明的範圍之下進行結構性及功能性的改變。

根據本發明的原理，高能量電化學電池，例如以鋰為主的電池，對於熱性，電性及機械性侵擾的反應，使用經由對於電解質中電極材料的自量熱研究所收集的試驗資料來進行預測。在實驗電池中所進行的小量電極材料之加速度自量熱法，或另外一種差異掃描自量熱試驗，可以用於得到數學式，此處稱之為"功率函數"，用於以溫度為函數的該特殊電極/電解質配對，及化學反應歷史。一種發展來用於一特殊電極材料的一功率函數，其係因為電極/電解質反應，而將電解質中每克的電極材料之熱功率，以溫度及剩餘的反應物量的函數，進行特徵化。

對於一電池的正極與負極之功率函數，該電池的熱傳導性，該電池的熱容量，在電池中的電極重量，及電池表面熱傳導率，係可用於準確地預測對不同安全性及效能試驗之任意尺寸及形狀的電池的反應，例如一烤爐曝曬試驗。電池對於一過電量試驗的反應需要上述的資料輸入，以及在電池中所發散的電功率。在電池周圍之R值絕緣的效應

五、發明說明 (17)

也可馬上地評估。所熟知的熱量等式及 Newton 的冷卻率，並配合在此處所揭示的由發明者所發展出的等式及方法論，皆係用於執行關於每項測試的計算。根據本發明原理所實施的方法及裝置，對於電池設計者及電池包裝的設計者將特別有用，尤其是那些設計用於攜帶式電子裝置，汽車，及備援電力模組的電池。

功率函數可針對許多種的電極/電解質組合來發展。這些功率函數可安排來形成功率函數的函式庫，其可根據使用者的需要而以許多不同的方法進行安排。功率函數及功率函數的函式庫可儲存在一永久儲存媒體上，或是組合式的邏輯裝置(例如：非揮發性記憶體，像是快閃記憶體，電性可抹除程式化唯讀記憶體(EEPROM)，閘極陣列等等)。一電池設計者可由功率函數函式庫中，直接或間接地選擇關於所選取電極/電解質組合之功率函數，所發展的電池的效能及反應之模型。對於本技藝的專業人士而言，可以立即瞭解到，根據本發明的原理，而使用以功率函數為主的模型化方法所設計的電池，所能得到實質上的時間與成本的節省。

藉由另一個範例，由一電池設計者使用的一電腦系統，可由位在鄰近或遠離設計者電腦系統之記憶體或其它處理裝置中來存取功率函數及/或功率函數函式庫。一功率函數函式庫或服務，可以做成由電池設計者來存取，而由其中取得所選取的功率函數或功率函數函式庫。這樣的服務可以有效地協助許多電池製造商的設計及製造的過程。例

五、發明說明 (18)

如，一給定的電池製造商可以在設計及評估任意尺寸與形狀的"虛擬"電池期間，可以對特定的電極材料/電解質組合來存取及使用所建立的功率函數，而不需要構建實際的全尺寸的電池雛型。

其可注意到，爲了簡化及清楚的目的，本發明的角度將主要參考鋰離子電池做說明，其係用於代表任何的以鋰爲主的電池技術。本發明的方法及裝置也包含有用之物來克服關於一具有非鋰化學之電池的熱散逸的問題，例如一鎳金數氫化勿，鎳鎘，鉛酸，或以硫化鈉爲主的化學作用等。其可瞭解到，本發明的原理可應用到許多種的電池技術，而不受限於此處所特別說明的那些電池(如鋰離子)。

在對於一特定電池化學作用來發展功率函數時，一樣本電池係使用一給定的電極材料/電解質組合來發展。重要地是，此樣本電池僅需要對一給定的電極材料/電解質組合做一次的發展。由此範例電池，功率函數可由與樣本電池相同的電極材料/電解質組合所製造的不同形狀及尺寸的電池之不同特徵(例如熱性特徵)的特徵化來得到。很明顯地，只有相當少量的樣本電池材料需要爲了發展功率函數的目的而製造出來，而其可用於特徵化電池組件，其它們對特定運作條件的反應(如：不良的溫度條件，一短路條件，一超載條件，一釘子穿透條件等)。

如在發明背景中所說明的，習用的電池設計與研發技術基本上需要生產可用的 10 公斤或更多的樣本電極材料。與習用方法很明顯的對比是，根據本發明，只需要少於約

(請先閱讀背面之注意事項再填寫本頁)

訂

線

五、發明說明 (19)

100 克的樣本電極材料來發展功率函數，即可特徵化一給定的電極/電解質組合。在一較佳具體實施例中，則需要約 1 到 10 克之間的樣本電極材料。根據本發明的原理，只需要進行一次的樣本電極材料製備。在完成對一特定電極材料/電解質組合的功率函數之後，此功率函數即可儲存做為未來之用。對於許多不同的電極材料/電解質的組合之功率函數，皆可從這些小量的電極材料樣本來開發出來。

請參考圖面，特別是圖 1，所示為一加速度熱量計 (ARC) 100 的一具體實施例，其根據本發明的原理，可以適用於由所發展的功率函數來量測電化學電池樣本自我加熱。在圖 1 所示的加速度熱量計 100，最初是由 Dow Chemical 公所發展出來的一種裝置，但之後即由 Columbia Scientific 來商品化，型號為 ARC-2000。此加速度熱量計 100 在一旦偵測到一放熱反應後即保持樣本在絕熱的狀況，並量測以時間為函數的樣本溫度變化。

該加速度熱量計 100 包含一基座罐 102，及一上罐 103，其可與基座罐 102 分離。該基座罐 102 包含一鍍鎳的銅罐 104，其中一樣本炸彈，如圖 1 中一般即為球形炸彈 114，當上部 103 安裝在基座罐 102 時即安置於其中。外殼 104 即以絕緣體 106 包覆，並定義了三個加熱區，稱之為頂部，側邊及基座之加熱區，分別由加熱器 116，108 及 110 提供。每個加熱區皆個別地加熱，並分別由 Nicrosil/Nisil 之 N 型熱電偶 118，114 及 112 監視，每個皆是參考到一冰點

(請先閱讀背面之注意事項再填寫本頁)

訂
線

五、發明說明 (20)

的參考點。

加速度熱量計 100 的罐 102，103 係位在一 1 英吋厚的鋼殼中，做為萬一在試驗中爆炸的一種屏障。此殼也包含四個微動開關(未示出)，在提供任何熱量給儀器之前皆必須被按下。該樣本炸彈 114 及炸彈熱電偶 120 架構由於樣本電池的反應材料的限制，而由圖 1 所示的架構進行修正，其可由下述的範例來加以說明。修正後的炸彈 114 係直接安裝於一熱電偶 120，而以魚鉤的方法懸吊於外殼 104 的中央。

該加速度熱量計 100 藉由將炸彈及外殼的溫度保持相等所構成的絕熱環境中，來量測樣本自我加熱，因此沒有熱量流入或流出該樣本。雖然這些是由設計者所設定的想法，實際上熱量計 100 會比樣本的溫度稍低，所以其並不供應熱量給炸彈，而可得到準確的樣本自我加熱的外形。熱量計 100 在分析中的溫度變化， $\Delta T(K)$ ，係與放熱過程中釋放的熱能成正比，而特定反應所釋放的熱能由量 $Q(J)$ 係與反應物及炸彈的整體比熱 $C_{tot}(JK^{-1}g^{-1})$ ，及反應物與炸彈的重量 $m_{tot}(g)$ 成正比。這些關係可組合成：

$$Q = C_{tot}m_{tot}\Delta T, \quad [1]$$

上面的等式 [1] 控制了所有在加速度熱量計 100 中所發生的反應。等式 [1] 係等於樣本的整體熱容量 $C'_{tot}(JK^{-1})$ 乘以溫度的變化。對於一多種成份的混合物，例如根據本發

(請先閱讀背面之注意事項再填寫本頁)

訂
線

五、發明說明 (21)

明的一樣本電池，該混合物的整體熱容量係相等於個別熱容量的總和，如下式所述：

$$\text{Total Heat Capacity} = \Sigma \text{ Individual Heat Capacities} \quad [2]$$

$$C'_{\text{tot}} = m_{\text{tot}} C_{\text{tot}} = \sum_i m_i C_i \quad [3]$$

其中， m_i 為組件 i 的重量， C_i 為其比熱。藉由重新安排以上的等式 [1]，並求出溫度，以及對時間的微分，該反應等式的自我加熱速率可以下式表示：

$$dT/dt = dQ/dt [m_{\text{tot}} C'_{\text{tot}}]^{-1} \quad [4]$$

dQ/dt 的大小即為該樣本所發出的功率 P (單位為瓦特 W)。根據本發明，對於一特定樣本之電極材料，溫度及條件所做之不同的自我加熱速率的變化，必須掌握來適當地取得功率函數。

在適當的校正之後，加速度熱量計 100 能夠測定不同樣本自我加熱外形。該加速度熱量計 100 在牽涉到加熱至一預定的溫度之熱量-等待-搜尋(HWS)模式，並等待一設定的時間而達到熱平衡，然後搜尋溫度增加大於或等於所設定的敏感度(通常為 $0.02\text{ }^{\circ}\text{C}/\text{min}$)。如果在搜尋時間之後，該速率小於預先設定的敏感度，該加速度熱量計 100 即可進行到下一個溫度步驟，而此 HWS 程序即會持續，

五、發明說明 (22)

直到偵測到一放熱狀況，或是到達一停止溫度。如果偵測到一放熱狀況，該加速度熱量計 100 即會藉由保持絕熱條件來追蹤它，直到放熱完成。操作者能夠改變加熱速率，以及在試驗運轉之設定中的等待及搜尋次數。

爲了研究發生在加速度熱量計 100 中的反應的運動學，通常很有幫助的是使加速度熱量計樣本的溫度高於已知的放熱開始狀態。初始的自我加熱速率係以開始溫度爲函數來量測，並可用於取得重要的運動學參數，其將在下面做詳細的討論。

對於一特殊樣本電池的製備將爲了圖示的目的來加以說明。其可瞭解到，下面對於一樣本鋰離子電池的說明並不構成對本發明原理的範圍及應用性，以及其它電極/電解質組合的限制。根據下述範例具體實施例，製備了正極材料 Li_xCoO_2 及負極材料 Li_xC_6 ，並對每個電極材料與一選定的電解質加以組合，而由此建構了一樣本硬幣電池。然後每個電極/電解質組合(例如： Li_xCoO_2 /電解質，及 Li_xC_6 /電解質)即會進行加速度自量熱試驗，由此而得到每個電極/電解質組合的功率函數。

在此範例具體實施例的說明中，因爲充電了一鋰離子電池，鋰原子即離開 Li_xCoO_2 正極，並進入負極的碳之中。 Li_xCoO_2 及 Li_xC_6 在電解質中反應。爲了檢視由每個電極所產生的熱功率，其有必要建構加速度熱量計樣本，其只有一個電極及電解質相接觸。往例皆是在實驗室的硬幣形式的電池中完成，其係使用彈丸形狀電極來完成，如下述範

(請先閱讀背面之注意事項再填寫本頁)

訂

線

五、發明說明 (23)

例中之說明。

範例 1

樣本電極係利用結合電極粉末，及重量 7% 的 Super S carbon black (MMM carbon, Belgium) 及 polyvinylidene difluoride (PVDF) 黏合劑 (9.5% 之 n-methyl-pyrrolidinone (NMP)，及 National Research Council of Canada (NRC), Ottawa, Canada)。此碳黑可保證在電極中所有顆粒之間的電性接觸，當此黏合劑係用於保證可將電極保持在一起。然後即加入過量的 N-methyl pyrrolidinone 來製造一泥漿。該泥漿被倒在一薄層中，並在 105 °C 下乾燥來移除 NMP。在乾燥之後，該粉末即在灰泥中輕微地接地，然後即穿透過一 300 μm 的篩網。此連續的程序對於碳及 LiCoO_2 會有不同，係分別參考圖 2 及 3 來加以說明。

然後會將約 300 毫克的碳/黏合劑混合物放置在一不鏽鋼模具中，並施加 2,000 psi (13.8 MPa) 來產生 1 mm 的厚碳錠。參考圖 2，然後此碳錠 134 係放置在一電池外殼底部 132 中，該電池 130 即在一充滿氫氣玻璃容器中加以組合，如圖 2 所示。電解質 (1M LiPF_6 EC:DEC 33:67，vol:vol，Mitsubishi Chemicals)，可加入到電極錠 134 中，直到它完全濕透，然後兩個聚丙烯隔離劑 136 (Celgard 2502, Celanese) 則放置在濕錠 134 的頂部。四片的 125 μm 厚的鋰箔 (FMC) 140 會加到一不鏽鋼網 138 的頂部，而可保證與所有的鋰之完全的電性接觸。一不鏽鋼隔離器 142 被加到鋰箔層 140 之上，而提供在該電池 130 的內容上的壓力。最

(請先閱讀背面之注意事項再填寫本頁)

訂

線

五、發明說明 (24)

後，該電池頂部 146，附著了聚丙烯填塞物 144，而該電池 130 即被捲起封閉，並與外界環境隔絕。

該鋰/碳電化學電池 130 可完全放電到 0 V，直到在開路下該電池的釋放電壓在 24 小時之後小於 50 mV。然後，該電池 130 即可傳送到一充滿氬氣的玻璃容器，而用於加速度熱量計樣本製備，其將在下面做詳細的說明。

範例 2

請參考圖 3 中所示的電池 160，0.75 克的 LiCoO_2 /黏合劑混合物將放置在一不鏽鋼模具中，並施加 2000 psi (13.8 MPa) 來產生一電極錠。碳(以上述方法所製)及鋰鈷氧化物錠接著被傳送到該玻璃箱中，該電池如圖 3 中所示的方式組合起來。首先，電解質 (1M LiPF_6 EC:DEC 33:67，vol:vol，Mitsubishi Chemicals) 被加入到在外殼底部 162 的碳電極 164，直到其完全的濕透，然後即加入三個聚丙烯隔離劑 166 到其頂部，並加入該鋰鈷氧化物錠 168。一外殼頂部 172 及填塞物 170 被加入到鋰鈷氧化物電極 168，而罐子 162，172 即被捲起封閉。

當電化學電池 130，160 由玻璃箱中移除時，不鏽鋼標籤即被點焊到外殼上，然後電池 130，160 即被連接到一充電器系統。不同的試驗可應用到充電系統上的電池 130，160，來模擬不同的充電特性。在完成這些測試之後，該電池 130，160 及被傳送到一充滿氬氣的玻璃箱中，並用於加速度熱量計樣本的製備。

加速度熱量計樣本則被包覆在焊接的不鏽鋼 304 型的管

(請先閱讀背面之注意事項再填寫本頁)

訂
線

五、發明說明 (25)

中。該管具有一 0.006 英吋(0.152 mm)的壁厚，一 0.250 英吋(6.35 mm)直徑，及 1.54 英吋(39.1 mm)的長度。一以 0.001 英吋厚度薄膜製成的不鏽鋼"口袋"，即以點焊方式附著於該管的側邊。因為樣本的濕度敏感性，即發展出一種在一惰性氣體中來密封該管。鎢惰氣(TIG)焊接係用於在玻璃箱中自行密封不鏽鋼管的末端。

該電化學電池 130，160 係在玻璃箱中被小心地分解，並再得到錠 134，164。濕的錠 134，164 係輕微地接地，然後每個即被傳送到該加速度熱量計樣本炸彈，如先前圖 1 中所示。該炸彈的一端先前即由鎢惰氣(TIG)焊接進行焊接封閉。基本上，即會傳送 350 毫克(碳)或 400 毫克(LiCoO_2)的濕電極，並以等量的電解質加入到炸彈。然後，該炸彈即被捲起，最後是以 TIG 焊接封閉。該加速度熱量計樣本係以類似魚鉤的方式而將不鏽鋼管的口袋懸掛於熱電偶之上，並安裝在熱量計上，正如前所述。然後該熱量計即被密封，並進行試驗。

圖 4 所示為一標準的溫度-時間資料 180，用於在將一 LiCoO_2 樣本充電到 4.2V，對應於鋰濃度的一加速度熱量計試驗。在溫度低於 150°C 時，自我加熱速率最初是高於 $0.02^\circ\text{C}/\text{min}$ ，所以該加速度熱量計即伴隨著在絕熱條件下的放熱。當樣本自我加熱時，因為反應速率會隨著溫度增加而加速，自我加熱速率即會持續地增加。

為了詳細地測定反應的運動學，很有用地是繪出自我加熱速率的自然對數， $\ln dT/dt$ 對於 T 的關係。圖 5 所示為

五、發明說明 (26)

$\ln dT/dt$ 對於溫度的結果，對於電解質中 Li_xCoO_2 中被初期加熱到不同的啓始溫度。一旦此種加速度熱量計的結果被收集起來，即可得到該功率函數，將在此加以詳細說明。

一般而言，功率函數係針對個別的電極/電解質材料組合來取得。特別是，功率函數係使用加速度自量熱法或差異掃描自量熱技術。一旦取得了對於特定的電極/電解質材料組合的功率函數，它們即儲存起來做為後續之用。習用電池設計技術為了評估一給定的設計，需要開發全尺寸的電池雛型，與其完全相反地是，根據本發明而由相對少量的樣本電池電極材料所得到的功率函數，係用以對於具有任何想要的尺寸，形狀，重量，外型及操作溫度特性的類似的電極材料所構建的電池，進行特徵化及預測。

範例 3

根據下面的範例，對於一特殊化合物的陰極之功率函數將加以詳細地說明。本發明者已仔細地進行對於 Li_xCoO_2 及電解質之間的反應的加速度熱量計研究。請參考下列所述的樣本 #1 及樣本 #2 的兩個不同的樣本，其皆經過研究，並發現到會顯示出類似的行為。在兩例中，在電解質中的 Li_xCoO_2 的反應可利用假設一自動催化反應機制的方式來準確地模型化。

為了對 4.2V 下的電解質中的 Li_xCoO_2 電極材料的反應模型化，係假設了一反應的路徑。在圖 5 中所示的試驗資料提出了一可能的自動催化機制，其由於 150 °C 啓始溫度而加熱到 160 °C 的樣本自我加熱速率，其會大於直接加熱

五、發明說明 (27)

到 160 °C 的相同樣本。同樣地，以 160 °C 啓始溫度而加熱到 170 °C 的樣本自我加熱速率，其會大於直接加熱到 170 °C 的相同樣本。這種行為與文獻中所提出的目前產品的反應的加速度相吻合（例如請參見 T. Grever，*Thermochimica Acta*, 225, 165(1993)）。用於立即樣本中來描述自動催化模型的微分方程式為：

$$\frac{du}{dt} = k(1-u)(\beta + u^{0.5}) \quad [5]$$

其中， u 為無單位的轉換分數度數， k 為一反應速率常數 ($k = \gamma \exp(-E_a/k_b T)$)， β 為自動催化的參數，而 k_b 代表 Boltzmann 常數。描述此自動催化過程的反應描述如下：



其中，物質 B 在 A 的存在之下被轉換到產品 P 及 A 。

因此，當反應繼續進行時，因為更多的 A 產品的存在而增加了反應速率，然後當 B 反應物的量用完之後，反應速率即降低。如果上式 [5] 中 $u=0$ ，自動催化反應並未啟動，而當 u 增加時，所存在的反應物的部份量即會減少。一高度的自動催化作用即包含了很小的 β 值。該溫度會影響了運動學，並透過與溫度相關的 k 值，而由等式 [2] 做特徵化。在上式 [5] 中的指數 0.5 表示在反應開始時的催化劑會有更大的效果。

五、發明說明 (28)

在自動催化反應中的溫度升高係正比於等式 [5]，並可由下式特徵化：

$$\frac{dT}{dt} = \frac{h}{C'_{tot}} * \frac{du}{dt} \quad [7]$$

其中， h 為樣本因為反應 (焦耳) 所發出的整體熱量，而 C'_{tot} 為反應物與炸彈 (JK^{-1}) 的整體熱容量。該項 $h/$ 係選用來自放熱開始的溫度上昇，到該第一放熱行為的終止 (參見圖 5， ΔT ， $60^{\circ}C$)，因為

$$\int_0^{\infty} \frac{dT}{dt} dt = \Delta T, \text{ 及} \quad [8]$$

$$\int_0^{\infty} \frac{h}{C'_{tot}} \frac{du}{dt} dt = \frac{h}{C'_{tot}} \Delta u = \frac{h}{C'_{tot}}, \text{ 及} \quad [9]$$

因為 $\Delta u=1$ 表示反應物消耗完成，因此，

$$\Delta T = \frac{h}{C'_{tot}} \quad [10]$$

圖 6A-6E 所示為上式 [5] 及 [7]，在特定選擇參數 E_a ， γ ， β 及 h/C'_{tot} 之下，而可相當接近於圖 5 的加速度熱量計的結果。圖 6A-6E 係為自我加熱速度對溫度的自然對數的圖形，其係對上述範例 1 (此後即稱之為範例 1) 中 Li_xCoO_2 樣本被分別初始加熱到 $150^{\circ}C$ (圖 6A)， $160^{\circ}C$ (圖

(請先閱讀背面之注意事項再填寫本頁)

訂

線

五、發明說明 (29)

6B) , 170 °C (圖 6C) , 175 °C (圖 6D) 及 180 °C (圖 6E) 。要符合圖 6A-6E 的圖形 , 參數為 $E_a = 1.6 \text{ eV}$, $\gamma = 1.9 \times 10^{16} \text{ min}^{-1}$, $\beta=0.2$ 及 $h/C'_{\text{tot}} = 60 \text{ }^{\circ}\text{C}$ 。

該模型僅適用於最低溫的放熱過程。此過程為控制鋰離子電池的熱量逸出 , 由以下所提出的說明中即可瞭解。相同的模型可被用於電解質的不同電壓時對於 Li_xCoO_2 的加速度熱量計試驗的結果。以下的表 1 所示為在不同的電壓之下 , 能夠符合兩個不同 Li_xCoO_2 樣本的加速度熱量計結果之參數。在表 1 中所示的資料為功率函數的參數 , 可使用以下的等式 [11] 來進行特徵化 , 並由以上的樣本 #1 及 #2 得到 Li_xCoO_2 樣本的資料 , 其是在選定的電壓對於鋰濃度的結果。

表 1

Voltage(V)	$E_a(\text{eV})$	β	$\gamma(\text{min}^{-1})$	$h/C'_{\text{tot}} (^{\circ}\text{C})$	$H(\text{J/g})$
樣本 1-4.1	1.6	0.15	1.9×10^{16}	60	270
樣本 1-4.2	1.6	0.20	1.9×10^{16}	60	270
樣本 1-4.3	1.6	0.25	2.8×10^{16}	60	270
樣本 2-4.1	1.6	0.15	2.2×10^{15}	75	410

為了計算出在一實際電池中 Li_xCoO_2 及電解質反應所發出的功率 , 每克樣本的反應功率即可計算出來。每克 LiCoO_2 的功率可由下式表示 :

五、發明說明 (30)

$$P_c = H \, du/dt \quad [11]$$

其中，H 為由每克 LiCoO_2 的反應所產生的整體熱量，u 及 t 則同先前所述。使用上式 [7] 中 h 的定義， $H=h/m$ ，其中 m 為在加速度熱量計樣本中的 LiCoO_2 的重量。

為了得到上述範例 #1 的樣本 #1 的 h 值，係使用 $h/C'_{\text{tot}}=60^\circ\text{C}$ 的值，即為樣本 #1 的熱容量。 C'_{tot} 可由樣本 #1 中該材料的比熱 c_i 及重量 m_i 計算得到。該電解質與不鏽鋼的 EC 及 DEC 的比熱可由下面的文獻中得到 (Y.S. Touloukian 及 E.H. Buyco, "The Thermophysical Properties of Matter - The TRPC Data Series, Volume 5, Specific Heat - Nonmetallic Solids", Plenum(1970))，以及由 Dulong 及 Petit 定律所預估得到的 LiCoO_2 值 (請參見如 C. Kittel, "Introduction to Solid State Physics", 7th ed., Wiley and Sons, New York(1996))。對於一標準的 LiCoO_2 的加速度熱量計樣本，該熱容量可用下式來近似：

$$C_{\text{tot}} = \sum_i c_i m_i = 1.0 \frac{\text{J}}{\text{gK}} 0.3\text{g} + 0.46 \frac{\text{J}}{\text{gK}} 0.9\text{g} + 1.5 \frac{\text{J}}{\text{gK}} 0.4\text{g} = 1.3 \frac{\text{J}}{\text{K}} \quad [12]$$

其中由 LiCoO_2 及不鏽鋼與電解質所得到的項次即由上式指出，並假設所加入的 0.35 克的濕電極係以 0.3 克 Li_xCoO_2 及 0.05 克的電解質所製成。因此， $h=60^\circ\text{C} \quad 1.3 \text{ J/K}=80\text{J}$ ，及 $H=h/0.3\text{g}=270 \text{ J/g}$ 。上表 1 中樣本 #2 的加速度熱量計樣本中類似的計算可得出 $H=410 \text{ J/g}$ 。

五、發明說明 (31)

現在將指定出電解質中 Li_xCoO_2 的功率函數。上式[5]係用於計算 du/dt ，而上式[11]則用於計算每克 Li_xCoO_2 所發出的功率。同時也會使用到表 1 中的參數。本技藝的專藝人士可以瞭解，對於其它陰極樣本的功率函數的參數也可以相似的方式來決定。只要給定 u 的開始值，開始溫度，及該熱邊界條件， Li_xCoO_2 /電解質混合物的溫度-時間圖形可被計算出來。

範例 4

根據以下範例，一特定化學物質的陽極的功率函數將用來說明。以電化學方式製備的含碳的鋰，具有三種的鋰原子：1)那些插入於結構中的；2)那些由於鋰原子與電解質之間的反應，而包含於碳表面的亞穩態產物中；及3)那些在碳表面的穩定反應產物。種類 1 及 2 的鋰原子在當溫度升高時另會與電解質反應，但種類 3 則不會。種類 1 的鋰原子在它們能夠到達電解質並與其反應之前，必須穿過反應產物的薄膜(由於種類 2 及種類 3 的鋰)。種類 2 的鋰原子在反應之後即成為種類 3 的鋰原子。種類 1 的鋰原子也會在反應之後即成為種類 3 的鋰原子。

在包含種類 2 及種類 3 的鋰原子的碳之初始表面層，係稱之為"固態電解質中間相"(參見如，M.N. Richard 及 J.R. Dahn 所著，J. Electrochem. Soc. 146, 2078-2086 (1999))，而此層保護插入的鋰，以避免與電解質同時發生反應。如果溫度變高(意即高於 80°C)，此表面層即開始分解(種類 2 的鋰反應成為種類 3 的鋰)，然後鋰/電解質即開始反應。

五、發明說明 (32)

由種類 2 的鋰反應成種類 3 的鋰，以及由種類 1 的鋰反應成種類 3 的鋰，兩者都會釋放熱量。在 1M LiPF₆/EC/DEC (33:67 v:v) 電解質中的 LiC₆ (mesocarbon micro beads from Osaka Gas) 的功率函數，由下式表達：

$$P_a = H_2 \left| \frac{dx_2}{dt} \right| + H_1 \left| \frac{dx_1}{dt} \right| \tag{13}$$

其中，

$$\frac{dx_2}{dt} = -\gamma_2 \exp^{-E_2/k_b T} x_2^{0.5} \tag{14}$$

及，

$$\frac{dx_1}{dt} = -\gamma_1 \exp^{-E_1/k_b T} x_1 \exp^{-((x_{30}+x_{20})+f(x_{10}-x_1))/(x_{30}+x_{20})} \tag{15}$$

$$\frac{dx_3}{dt} = -\frac{dx_1}{dt} - \frac{dx_2}{dt} \tag{16}$$

在上式 [13] 到 [16] 中， x_1 為以 x 在 Li _{x} C₆ 中所量測出的種類 1 的鋰之量， x_2 則為種類 2 的鋰之量，同樣也是針對每 6 個碳原子來量測，而 x_3 則為種類 3 的鋰之量，再次是針對主體中的每 6 個碳原子來量測。 x_{10} ， x_{20} ， x_{30} 為電化學放電之後，加熱之前的鋰的初始量。對於由 MCMB 放電到 0.0V 而對於鋰濃度的碳而言， x_{10} 約為 0.8， x_{20} 約為 0.1，而 x_{30} 約為 0.05。 E_1 及 E_2 項次為活化能，而 γ_1 及 γ_2

五、發明說明 (33)

為頻率因子。對於由 MCMB 放電到 0.0V 而對於鋰濃度的碳而言， E_1 及 E_2 約為 1.4 eV， γ_1 約為 $4 \times 10^{15} \text{ min}^{-1}$ ，而 γ_2 約為 $7.5 \times 10^{16} \text{ min}^{-1}$ 。

參數 f 為一比例常數，其控制了反應產物層中由種類 1 的鋰轉變成種類 3 的鋰的速度。 F 項係與碳表面面積有關。對於將近 $1 \text{ m}^2/\text{g}$ 的表面面積的碳而言， f 約為 2 到 5。 H_1 及 H_2 項次則分別為改變量 $\Delta x_1 = -1$ 及 $\Delta x_2 = -1$ 之下的每克碳的熱量。對於由 MCMB 放電到 0.0V 而對於鋰濃度的碳而言， H_1 約為 1700 J/g，而 H_2 約為 600 J/g。

利用上式 [4]，[12] 及 [13]，其有可能計算出加速度熱量計樣本的反應。圖 7A-7B 所示為分別為在 80°C 及 100°C 的開始溫度之下的電解質中之鋰化的 MCMB，其係與利用下列功率函數之參數計算所得的圖形做比較： $x_{10} = 0.75$ ； $x_{20} = 0.1$ ； $x_{30} = 0.033$ ； $E_1 = E_2 = 1.4 \text{ eV}$ ； $h_1/C = 400$ ； $h_2/C = 150$ ； $\gamma_1 = 4 \times 10^{15}$ ；及 $\gamma_2 = 7.5 \times 10^{16}$ ，其中， h_1 為經由種類 1 的鋰完全反應成種類 3 的鋰，而由加速度熱量計樣本所產生的熱量，而 h_2 為經由種類 2 的鋰完全反應成種類 3 的鋰，而由加速度熱量計樣本所產生的熱量， C 則為樣本加上該管/炸彈(前述稱之為 C'_{tot})的整體熱容量。由圖 7A-7B 中可看出，試驗數據與預測數據的吻合性相當高。

如前述，另有一種方式來使用加速度自量熱法，即差異掃描自量熱試驗的結果可以用於取得功率函數。根據此方法，需要一系列在不同掃描速率之下的差異掃描自量熱試驗。一差異掃描熱量計利用將一樣本視為以固定速率加

(請先閱讀背面之注意事項再填寫本頁)

訂
線

五、發明說明 (34)

熱，來量測其所產生的功率(Watts/g)。差異掃描自量熱試驗基本上可產生功率對於溫度的資料(即 power-temperature)，或是功率對於時間的資料(即 power-time)。但是，可以發現到其很難區別自動催化反應與遵照第一階反應運動學的簡單反應。因此，使用加速度熱量計的方法比較好，但並不是必須。

一旦得到了特定電極/電解質組合的電極/電解質功率函數，任何型態的全尺寸的電池對於熱性，機械性或電性的侵擾之反應皆可計算出來。此係利用一數值方法來達到，其假設為輻射狀的熱流，也就是假設沒有穿過罐子末端的熱流，其可瞭解到，此亦可假設與一輻射熱流模型不同的模型，例如一完全三度空間的熱流模型。

圖 8 所示為一圓柱形電池的截面，其為膠狀物卷型的電池，內徑為 r_a ，外徑為 r_b ，而電池外殼的內徑及外徑分別為 r_b 及 r_c 。然後該膠狀卷即區分為 n 個相同厚度的環狀物。最大的環狀物的外徑為 r_n ，即為 r_b ，而第 i 個環的外徑即為所示的 r_i 。

對於第 i 個內環，其在時間區間 Δt 內的溫度改變 ΔT_i 即如下式：

$$\Delta T_i = \left\{ [P_{ai}\rho_a + P_{ci}\rho_c + P_{ai}] \pi L (r_i^2 - r_{i-1}^2) + \frac{\kappa(T_{i+1} - T_i) 2\pi r_i L}{(r_{i+1} - r_i)} + \frac{\kappa(T_i - T_{i-1}) 2\pi r_{i-1} L}{(r_i - r_{i-1})} \right\} \left\{ \frac{\Delta t}{C\rho\pi(r_i^2 - r_{i-1}^2)L} \right\} [17]$$

在上式 [17] 中， P_{ai} 及 P_{ci} 為陽極與陰極的功率函數(分別為每克陽極材料或陰極材料)， L 為圓柱的長度，而 ρ_a 及 ρ_c

(請先閱讀背面之注意事項再填寫本頁)

訂
線

五、發明說明 (35)

為每單位體積的膠狀卷的活性陽極或陰極材料的平均密度。 P_{ei} 項為每單位體積電池所產生的電能， $\pi L(r_i^2 - r_{i-1}^2)$ 為第 i 個環狀物的體積。 κ 項為膠狀卷的平均熱傳導率， T_i 為第 i 個環的溫度， C 則為平均的膠狀卷比熱容量，而 ρ 為平均的膠狀卷密度。

在上式 [17] 中的項次對於本技藝的專業人士應該很容易可以理解。第一項為由化學反應及電能釋放所加入到第 i 個環的熱量(在時間 Δt 之內)。第二項則為第 i 個環由其外側鄰接環所傳導進來的熱量，第三項則為由其內側鄰接環所傳導進來的熱量。

對於與罐體接觸的環狀物，在時間區間 Δt 中的溫度改變量 ΔT_i 為：

$$\Delta T_n = \left\{ [P_{ai}\rho_a + P_{ci}\rho_c + P_{ei}] \pi L (r_n^2 - r_{n-1}^2) + \frac{\kappa_{can}(T_{can} - T_n) 2\pi r_n L}{(r_c - r_n)} + \frac{\kappa(T_n - T_{n-1}) 2\pi r_{n-1} L}{(r_i - r_{i-1})} \right\} \left\{ \frac{\Delta t}{C \rho \pi (r_n^2 - r_{n-1}^2) L} \right\} [18]$$

其中， κ_{can} 為罐體的熱傳導率， T_{can} 為罐體表面溫度。

對於罐體表面，在時間區間 Δt 中的溫度改變量 ΔT_{can} 為，

$$\Delta T_{can} = \left\{ \frac{\kappa_{can}(T_{can} - T_n) 2\pi r_n L}{(r_c - r_n)} + (T_e - T_c) A 2\pi r_c L \right\} \left\{ \frac{\Delta t}{C_{can} \rho_{can} \pi (r_c^2 - r_n^2) L} \right\} [19]$$

其中， A 為單位面積的罐體表面熱傳導率， $2\pi r_c L$ 為電池的表面積， T_e 為電池所在的環境溫度。 C_{can} 及 ρ_{can} 分別為罐體材料的比熱容量及密度。上式 [19] 的第一項為由罐體

(請先閱讀背面之注意事項再填寫本頁)

表

訂

線

五、發明說明 (36)

傳導到膠狀卷的外環的熱量。第二項則為由電池罐體傳送到，或傳送自外界環境的熱量。

式 [17-19] 係由電腦來遞迴式地求解。每個用於陽極 (x_1 , x_2 及 x_3) 及陰極 (u) 反應歷史的變數即構成一電池半徑的函數，也就是 $x_1 = x_{1i}$ 等。設定電池的初始邊界條件，也就是 T_0 及每個 T_i 皆被初始化，而將 x_{1i} , x_{2i} , x_{3i} 及 u_i 皆設定為其初始值。

為了說明起見，其假設為一 150°C 烤爐曝曬試驗，而將一完全充電 (4.2V) 的電池在室溫之下置入一加熱的烤爐，其設定為： $T_0 = 150^\circ\text{C}$ ， $T_{\text{can}} = 21^\circ\text{C}$ ，對所有的 i 之 $T_i = 21^\circ\text{C}$ ，對所有的 i 之 $u_i = 0$ ，對所有的 i 之 $x_{1i} = 0.8$ ，對所有的 i 之 $x_{2i} = 0.1$ ，對所有的 i 之 $x_{3i} = 0.05$ 。取用小的時間區段 (如 0.1 秒)，上式 [5, 11, 13-19] 即用於計算反應歷史參數的改變，及在該小時間區段中計算出該環狀物的溫度。這些改變即加入到初始值，而計算則會重覆相當多次，直到消耗完反應物 (意即對於所有的環狀物之 $u = 1$, $x_1 = 0$)，或是達到不會發生逸出反應的狀態為止。一用於此模型的電腦程式已同時採用一 Fortran 程式及一 Visual C++ 程式，而可降低運算到實用的層次。

式 [17-19] 對於平面形狀可以輕易地修正，其係假設熱流僅發生於垂直電池的平面。此假設對於常見的稜柱形鋰離子及鋰離子聚合物電池皆為有效，其中該電池厚度通常小於該電池長度或寬度的十分之一。圖 9 所示為一稜柱形電池的橫截面。該電池的長度為 L ，寬度 W ，及一厚度

(請先閱讀背面之注意事項再填寫本頁)

訂
線

五、發明說明 (37)

$2r_c$ 。該電池堆疊的整體厚度為 $2r_n$ 。該電池堆疊被區分為 $2n$ 個厚板，如圖中所示。在某些情況下，在電池表面有對稱的加熱或冷卻，並不會有熱流穿過電池的中心，其由厚實心線表示。

對於第 i 個內部厚板，在時間 Δt 所發生的溫度改變 ΔT_i (對比於圓柱形電池) 表示如下：

$$\Delta T_i = \left\{ [P_a \rho_a + P_c \rho_c + P_a] [LW(r_i - r_{i-1})] + \frac{\kappa(T_{i+1} - T_i)WL}{(r_{i+1} - r_i)} + \frac{\kappa(T_i - T_{i-1})WL}{(r_i - r_{i-1})} \right\} \left\{ \frac{\Delta t}{C_p W(r_i - r_{i-1})L} \right\} \quad [20]$$

如果 $i=1$ ，等式 [20] 的右側的第三項則可省略，因為沒有熱量流動到該電池的中心。

對於第 n 個內部厚板，在時間 Δt 所發生的溫度改變 ΔT_n (對比於圓柱形電池) 表示如下：

$$\Delta T_i = \left\{ [P_a \rho_a + P_c \rho_c + P_a] [LW(r_n - r_{n-1})] + \frac{\kappa(T_{can} - T_n)WL}{(r_c - r_n)} + \frac{\kappa(T_n - T_{n-1})WL}{(r_n - r_{n-1})} \right\} \left\{ \frac{\Delta t}{C_p W(r_n - r_{n-1})L} \right\} \quad [21]$$

對於罐體表面，在時間 Δt 所發生的溫度改變 ΔT_{can} 表示如下：

$$\Delta T_{can} = \left\{ \frac{\kappa_{can}(T_{can} - T_n)WL}{(r_c - r_n)} + (T_o - T_c)AWL \right\} \left\{ \frac{\Delta t}{C_{can} \rho_{can} W(r_c - r_n)L} \right\} \quad [22]$$

上式 [20-22] 係由電腦遞迴式地求解。每個用於陽極 (x_1, x_2 及 x_3) 及陰極 (u) 反應歷史的變數即構成一電池厚度

(請先閱讀背面之注意事項再填寫本頁)

訂
線

五、發明說明 (38)

的函數，也就是 $x_1 = x_{1i}$ 等。設定電池的初始邊界條件，也就是 T_0 及每個 T_i 皆被初始化，而將 x_{1i} ， x_{2i} ， x_{3i} 及 u_i 皆設定為其初始值。舉例而言，其假設為一 150°C 烤爐曝曬試驗，而將一完全充電 (4.2V) 的電池在室溫之下置入一加熱的烤爐，其設定為： $T_0 = 150^\circ\text{C}$ ， $T_{\text{can}} = 21^\circ\text{C}$ ，對所有的 i 之 $T_i = 21^\circ\text{C}$ ，對所有的 i 之 $u_i = 0$ ，對所有的 i 之 $x_{1i} = 0.8$ ，對所有的 i 之 $x_{2i} = 0.1$ ，對所有的 i 之 $x_{3i} = 0.05$ 。取用小的時間區段 (如 0.1 秒)，上式 [5, 11, 13-16, 20-22] 即用於計算反應歷史參數的改變，及在該小時間區段中計算出該厚板的溫度。這些改變即加入到初始值，而計算則會重複相當多次，直到消耗完反應物 (意即對於所有的環狀物之 $u = 1$ ， $x_1 = 0$)，或是達到不會發生逸出反應的狀態為止。

為了確認上述方法的預測功率，對放置到一加熱的烤爐中圓柱形的鋰離子電池，必須取得其正確的溫度-時間資料。根據此方法，係使用一 VWR Scientific 1330 GM 重力烤爐。該烤爐具有一 3 英吋直徑的孔，位於其中央，電池即透過一附著的熱電偶而被降低。一第二熱電偶則位在烤爐架中一小的黃銅區塊中，來監視烤爐的溫度。該烤爐可允許保持測試溫度至少四個小時，並且烤爐溫度可穩定維持在設定溫度的 $\pm 0.2^\circ\text{C}$ 之內。

電池熱電偶係以 3 個小電纜綁在電池上，就像是絞在一起的結。有小量的 Wakefield 熱複合物係放置在熱電偶接頭接觸電池的地方，藉以保證其間良好的熱性接觸。然後該

(請先閱讀背面之注意事項再填寫本頁)

表

訂

線

五、發明說明 (39)

熱電偶接頭則以小量的玻璃毛線覆蓋。

在測試開始時，該電池與附著的熱電偶即被降下到已穩定的烤爐中，並懸吊在該烤爐的中心。該電池至少離烤爐架或其牆至少 5 公分。然後，該烤爐及電池溫度係由電腦自動量測，直到先發生熱量逸出或是已達 24 小時。

爲了使用上式 [17-22]，需要不同的參數。其中包括單位面積的表面熱傳導率 A ，電池熱傳導率 κ ，及膠狀卷比熱 C 。表面熱傳導率 A ，係由實心不鏽鋼，黃銅或鋁製的圓柱，具有已知的半徑 r ，重量 m ，比熱 C 及密度 ρ ，量測而得。一熱電偶則附加在圓柱上，而該圓柱則被降下至烤爐中。該圓柱的溫度係以時間爲函數來量測。假設在圓柱之中的溫度是均勻的，(因爲金屬的熱傳導率較大，故此爲良好的估計)，而可得到下式的烤爐溫度與時間的關係：

$$AL2\pi r(T_e - T) = Cm \, dT/dt \quad [23]$$

其中， T_e 爲環境溫度(即爲烤爐溫度)，而 T 爲電池溫度。

將上式 [23] 重新安排後，得到下式：

$$dT/dt = 2A(T_e - T)/(rCp) \quad [24]$$

dT/dt 對於 $(T_e - T)$ 的圖形則以 $2A/(rCp)$ 爲斜率。因爲 C 及 ρ 對於常用金屬而言爲已知，即可決定出 A ，如對於不鏽

(請先閱讀背面之注意事項再填寫本頁)

表

訂

線

五、發明說明 (40)

鋼， $A=0.00127 \text{ W}/(\text{cm}^2\text{K})$ 。

其可瞭解到，表面熱傳導率與表面的細節有關。舉例而言，一不鏽鋼圓柱以一電池標籤包覆起來，其表面熱傳導率與一裸露的不鏽鋼圓柱不同(即沒有標籤的圓柱)。在此例中，在一實際電池上使用的實際標籤，舉例而言，可以應用到一已知的圓柱，而即可得出表面熱傳導率。

該膠狀卷的熱傳導率可由下列文獻中取得， H.Maleki, A.Said, J.R. Selman, R. Dinwiddie, H.Wang, *J. Electrochem. Soc.*, 146 947 (1999)。來自製造商 A 的 18650 電池的熱容量也可由製造商取得。這些參數對於任意的電池皆可由下列文獻中所述方法來決定， H. Maleki, A. Said, J.R. Selman, R. Dinwiddie, H. Wang, *J. Electrochem. Soc.*, 146 947 (1999)。

範例 5

在以下範例中，烤爐曝曬測試結果可以計算出來，並與根據本發明原理所得到的預測結果相比較。MCMB 及 LiCoO_2 粉末可由電池製造商 A 取得。這些粉末皆與由該製造商製造的 18650 尺寸的鋰離子電池中的那些材料類似。利用該加速度熱量計，對於該陽極/電解質(0V)及陰極/電解質(4.2V)反應的功率函數可由上述方法得到。對於陰極/電解質反應的功率函數可由式[7]得到，而對於陽極電解質反應則由式[13]得到。對這些功率函數所使用的參數列於表 2 中。

五、發明說明 (41)

表 2

部份模型	參數	數值	單位
陰極/電解質			
	H	270	J/g
	γ	1.9×10^{16}	min^{-1}
	β	0.2	無單位
	Ea	1.6	eV
陽極/電解質			
	H ₁	1700	J/g
	γ_1	4×10^{15}	min^{-1}
	E ₁ =E ₂	1.4	eV
	x ₁₀	0.75	無單位
	F	4.5	無單位
	H ₂	600	J/g
	γ_2	7.5×10^{16}	min^{-1}
	x ₂₀	0.1	無單位
	x ₃₀	0.05	無單位
電池			
	A	0.00127	W/(cm ² K)
	C (ref.13)	0.75	J/(gK)
	r _c	0.90	cm
	r _n -(N.B.可在此計算中省略)	0.90	cm
	ρ	2.68	g/cm ³
	ρ_a	0.36	g/cm ³
	κ	0.034	W/(K cm)
	ρ_c	0.72	g/cm ³

(請先閱讀背面之注意事項再填寫本頁)

訂 線

五、發明說明 (42)

烤爐曝曬測試預測係使用這些功率函數，及將 P_e 設成 0.0 之式 [17-19]。即可模擬 140°C ， 145°C ， 150°C 及 155°C 。圖 10A 即顯示出結果。

烤爐曝曬試驗係針對製造商 A 的 18650 尺寸的鋰離子電池，並使用開始溫度 140°C ， 145°C ， 150°C 及 155°C 。試驗結果繪製於圖 10B。很明顯地，該計算同時預測了烤爐曝曬結果。其可注意的，熱性逸出的大小 (對於 155°C 的烤爐測試) 在計算中較小，因為只有該第一陰極/電解質放熱被包含在該模型中。

烤爐曝曬試驗也對於製造商 B 所生產的 17670 電池加以進行。其中並未對那些電池所用的電極材料加以發展。圖 11B 所示為烤爐曝曬測試結果。明顯地，由製造商 B 所生產的電池與製造商 A 的電池之穩定性較差。如果對於製造商 B 的材料的功率函數已發展出來，在圖 11B 中的結果即可預測。另一方面，嘗試要吻合圖 11B 中的結果，例如藉由改變功率函數的參數，其允許進行合理的估計。圖 11A 所示為計算模擬出圖 11B 的試驗。其中僅改變了上表 2 中所列的陰極功率函數值。參數 H 係增加到 450 J/g ， γ 則增加到 $1.5 \times 10^{17} \text{ min}^{-1}$ 。利用此參數的估計組合，即可進行對於其它電池尺寸與形狀的安全性的預測。

範例 6

一旦建立起對此方法的信心，然後即可能對不同直徑的電池進行烤爐曝曬結果的預測。舉例而言，圖 12 所示為對於製造商 A 的電池，以電池半徑為函數，在 150°C 烤爐

五、發明說明 (43)

曝曬測試的預測值。很明顯地，降低電池的半徑可以改善電池的熱穩定性。可找到對該電池的一關鍵的半徑 1.2 cm，能夠通過持續的曝曬於 150 °C。其可瞭解到利用本發明的模型化方法，而來決定一特定電池設計的關鍵半徑，可以非常簡單，並且節省時間與成本，相較於要組合許多不同直徑的電池，然後測試該組合好的電池。類似的預測也可對平面電池進行，而不需要實際構建平面的離型電池。

以上所說明，用於取得功率函數的方法論，以及使用相同的方法來模型化根據使用者所指定的熱條件及/或熱侵擾之下的電池位準反應，也可用於預測其它形式的環境條件/侵擾之下這種電池的反應，例如機械式及電子式的侵擾。目前所揭示的說明皆針對如何藉由加速度自量熱法，或是差異掃描自量熱法來決定出功率函數，但也可用於預測在烤爐曝曬測試中的鋰離子電池的行為。功率函數也可用於在接受例如一過充電測試，一短路測試，及一釘子穿透測試等，建立模型化電池行為之用。

爲了預測圓柱形與平面電池對於過充電的反應，僅需要加入單位體積所產生的電功率 P。到烤爐曝曬程序中，並設定環境溫度到一接近室溫的溫度。此電氣式產生的功率可藉由電流與電池過充電壓相乘來近似。該電池過電壓係定義成在負載之下的終端電壓減去在最大正規電量時的開電路電壓。舉例而言，如果一 3A 充電電流以 4V 的過電壓施加穿過一電池，然後 12W 的電功率即散佈在電池中。該電

(請先閱讀背面之注意事項再填寫本頁)

表

訂

線

五、發明說明 (44)

功率的值除以電池體積，即得到 P_v 。接下來就可直接地計算了。

根據過充電測試模型法的一具體實施例，一電池以其額定容量充電數次，並使用一電流值，可以在由一小時的 $1/C$ 所定義的時間中，通常即達到完全的充電。通常 C 在此測試中選定為 1 或 3。一旦充電過程的正常化學反應已經完成，該電池電壓即升高到值 V ，其可相等於充電好的電池的開路電壓 V_o ，或者是更高。該散佈在電池中的電功率，隨即由 $P=I(V-V_o)$ 等式來近似。由此即使電池加熱到高於週遭溫度。

最後，該電池將可達到一個溫度，其中由電極所產生的化學性產生的功率成為主要部份，此即可藉由上述的功率函數方法進行計算。為了對於在過充電當中的電池行為做合理的預測，在過充電過程中，需要一關於時間與電流的電池電壓變化的合理瞭解，同時也需要對於在過充電過程中，在該負極上電鍍上的金屬鋰的含量的瞭解。對於大多數的鋰離子電池而言，也會考慮到這個項目。

對於負極中含有電鍍的金屬鋰的功率函數，有需要在此例中被發展出來。另外，也需要對於正極功率函數中，在正極處電解質分解產物的影響進行瞭解。對於一過充電狀況下的電池行為的模型化，可藉由首先決定不同的未知數，並進行試驗的方式來加強，否則也可在模型化過程中，利用合理的預估及對該預估的調整來取得。

根據一短路試驗模型化方法的一具體實施例，一完全充

(請先閱讀背面之注意事項再填寫本頁)

表

訂

線

五、發明說明 (45)

電的電池係在某溫度 T 之下達到平衡。然後該電池即經由一低阻抗的連接而被外部短路，電流極開始流動，而電池中的功率即根據其內部阻抗 (I^2R) 而發出。該阻抗為一隨著溫度變化的函數。該電池的溫度上升，電極的充電狀態即隨著電極放電而改變。一旦該電池達到該隔離器關閉點 (例如對於一鋰離子電池約為將近 130°C)，該電流流動即停止，而在該電池中所產生的熱量可藉由關於該電池目前的充電狀態的功率函數來加以預測。Newton 的冷卻律可用來估計傳送到環境中的熱量。

對於短路試驗的模型化是非常直接的，係假設使用了以溫度及充電狀態為函數之電池阻抗的良好模型，量測結果可以準確地決定此點。該短路試驗的直接模型化也假設了在短路狀態中，對於該電池所涵蓋的充電狀態的範圍之功率函數為已知，此點即需要對於正極與負極在幾種鋰濃度狀況下進行功率函數的量測。

根據一釘子穿透模型化方法的一具體實施例，一具有指定半徑的尖端的釘子即被強迫地以一指定速率送入電池，由此將可造成該電池的內部短路，因此會帶來在短路處的集中發熱，而會造成熱量逸出。通常電池在測試前皆被完全充電。由此，就需要完全充電材料的功率函數。

僅由溶劑 (非電解質) 填充的電池可利用釘子穿透來特徵化。在電池電極之間的阻力為時間的函數，並在釘子插入時進行量測。一旦此阻力為已知，然後短路電流即會流動，因為該釘子插入到一充滿電解質的電池中，即可進行

(請先閱讀背面之注意事項再填寫本頁)

表

訂

線

五、發明說明 (46)

預測。

電性產生的功率 V^2/R 係在釘子尖端附近發出，此將造成局部加熱。由該尖端所流出的電流可利用上述的熱量等式來處理，較佳地是使用一三度空間形式的小的空間網格。當溫度上升時，該化學性產生的功率即可使用功率函數來估計，因此可以得到該釘子穿透過程的一完整的描述。

根據本發明原理所發展的功率函數為主的一電池行為模型化方法，可利用在一電腦處理設備上執行的模型化軟體來實施，例如在一工作站上，或是個人電腦，及其它以微處理器為主的計算系統。

根據一具體實施例，有一軟體程式使用一視窗介面來提供使用者交談式電池行為模型化。圖 13-20 為根據本發明的一具體實施例的這種介面的螢幕影像。一般而言，該使用者介面允許電池設計者來產生任何形狀及尺寸的"虛擬"電池，並根據使用者指定的熱性，電性及機械性侵擾條件來預估該虛擬電池的反應。該使用者介面允許電池設計者來載入，修改陽極，陰極，電池及環境參數等，並圖形化地顯示根據載入/修正的參數所預測的該陽極，陰極及電池的行為。由此，可對不同的虛擬電池參數做逐步的改變，並調整一特定電池設計的行為。

本發明的電池模型化軟體，係根據由加速度自量熱法或差異掃描自量熱試驗，針對在實驗室電池中所製備的小量的特殊電極/電解質材料所發展出的功率函數，而提供了

(請先閱讀背面之注意事項再填寫本頁)

表

訂

線

五、發明說明 (47)

虛擬電池行為的準確的數學模型化。對本技藝的專業人士可以瞭解到，對一電池設計及模型化的方法，可以節省相當的成本及時間，並僅需要小量的樣本電極/電解質材料，而且其中可以省略構建及測試電池雛型的步驟，因此有很大的效益。

本發明的電池設計及模型化方法在當開發"新"的或先進的電極/電解質材料時，僅需要製造少量的材料，而避免製造大量材料所需要的時間及成本，因此特別有用。因為對於一新的電極/電解質材料進行需要完全地特徵化電池位準行為的功率函數，可由小量的新材料，透過自量熱試驗而發展出來，因此本發明的電池模型化系統與軟體相信可以對先進的電池技術的研究及發展有很大的幫助。

根據一具體實施例，當進行一熱侵擾試驗時，一已知電池的行為資料(如一商用的 18650 鋰離子電池)，對於電池設計者可以提供已知的電池技術的效能基準或標準。舉例而言，對於任何數目的已知電池或電池形式所得到的試驗性溫度-時間資料，可以儲存起來，並提供電池使用者應用。假設一"新"的電池材料開發出來，並根據上述方法由小量的樣本中得到功率函數，本發明的模型化軟體即可用於針對具有新電池材料的 18650 電池來繪製溫度-時間資料。此圖形可與一個或多個已知的 18650 電池形式做比較，來決定出是否新的電池與已知的電池是同樣安全，較不安全，或是更為安全。其可瞭解到，用來特徵化已知電池的資料對於本發明而言並不是必須的，但可以用於根據

(請先閱讀背面之注意事項再填寫本頁)

訂

線

五、發明說明 (48)

與已知電池設計的關係來改善評估新的部同的電池化學反應及架構的過程。

現在請參考圖 13，其為根據本發明的一具體實施例的一使用者介面的一主畫面 300，一主要功能棒 302 及一樣板區域 304。該主功能棒 302 包含數個控制鈕，特別是包含了一陰極(Cathode)鈕 306，一陽極(Anode)鈕 307，及一電池(Battery)鈕 309。每個陰極，陽極與電池按鈕 306，307，309 在啟動時，即提供了額外的特定功能的選擇。如圖 13 所示，一陰極鈕 306 被啟動，其允許關於一虛擬電池的陰極模型化的額外選擇。

圖 14 所示為一輸入畫面或對話盒 308，其由選擇參數(Parameters)按鈕來啟動，係由主功能棒 302 中啟動陰極鈕 306 來得到，如圖 13 所示。啟動參數按鈕可帶出一陰極參數對話盒 308，其提供電池設計者來載入或調整不同的陰極特定參數。陰及參數對話盒 308 可透過另外的路徑來取用。對於載入參數組(Load Parameters Set)按鈕的啟動，也如圖 13 所示，會帶出一開啓檔案的對話盒，使用者可在其中選擇一檔案。在選擇檔案時，會有陰極參數對話盒 308，其提供了關於所選擇檔案中載入及調整不同的陰極特定參數。

其提供了一輸入欄位 310，用於輸入一 Gamma 值， γ ，其代表了以 minutes^{-1} 為單位的頻率因子。一輸入欄位 312 則用於輸入活化能 E_a 的值，其以電子伏特(eV)表示。參數 u ，其為轉換的度量分數(即為百分比)，其可由輸入欄位

五、發明說明 (49)

314 來輸入。一輸入欄位 316 可用來輸入 $-\beta$ 值，其代表了自動催化的無單位參數。 h/C'_{tot} 也可使用輸入欄位 318 來輸入，其中代表了由於反應，反應物的整體熱容量 (C'_{tot})，及以 $^{\circ}C$ 所表示的樣本炸彈，而由樣本所發散出的整體熱量 (h) 的比例。

圖 15 及 16 所示為用於輸入分別使用加速度自量熱及差異掃描自量熱技術的陰極計算的影響參數。每個對話盒 321 及 320 提供一開始溫度 (Starting Temperature) 輸入欄位 323, 322，而以 $^{\circ}C$ 表示。用於輸入陰極加速度自量熱計算參數的對話盒 321 包含了一時間 (Time) 輸入欄位 325，而以小時表示。用於輸入陰極差異掃描自量熱計算參數的對話盒 320 包含了一加熱速率 (Heating Rate) 輸入欄位 324，而以每分鐘小時 $^{\circ}C$ 表示。

圖 17 顯示為一陽極參數對話盒 330，其係由主功能棒 320 上啟動陽極鈕 307，再由選擇參數按鈕來啟動。參數鈕的啟動，即造成開啓陽極參數對話盒 330，其提供了由電池設計者來載入及調整不同的陽極特定參數。陽極參數對話盒 330 可由一不同的操作路徑來取用。啟動載入參數組按鈕，其可由圖 13 中啟動陽極按鈕 307 而取得，並帶出一開啓檔案對話盒來讓使用者選取一檔案。在選擇一檔案時，即出現陽極參數對話盒 330，其提供了關於所選擇檔案之載入及調整不同的陽極特定參數。

一輸入欄位 332 係用於輸入 Gamma-1 的值， γ_1 ，而輸入欄位 334 則用於輸入 Gamma-2 的值， γ_2 ，兩者分別代表以

五、發明說明 (50)

minutes⁻¹ 為單位的頻率因子。輸入欄位 336 及 338 則用於輸入活化能量參數的值， E_1 及 E_2 ，每一個皆以電子伏特 (eV) 為單位。 h_1/C'_{tot} 及 h_2/C'_{tot} 則使用輸入欄位 340 及 342 來輸入，其中 h_1/C'_{tot} 及 h_2/C'_{tot} 的單位即如上述範例 #4 所說明的。

陽極參數對話盒 330 另包含一陽極 m 輸入欄位 344，其中陽極 m 代表種類 1 到種類 3 的鋰之反應的反應順序。一順序輸入 (Order input) 欄位 356 允許設計者輸入一順序值，其代表了種類 2 到種類 3 的鋰之反應的反應順序。一 Xfo 輸入欄位 348 係用於允許輸入該陽極參數 Xfo 的值，其代表了項次 x_{20} ，具有如前述範例 #4 中所做說明的單位。陽極參數 Xio，其代表了項次 x_{10} ，具有如前述範例 #4 中所做說明的單位，其可使用 Xio 輸入欄位 350 來輸入。一 Zo 輸入欄位 352 提供來輸入該陽極參數 Zo 的值，其代表了項次 x_{30} ，具有如前述範例 #4 中所做說明的單位。

圖 18 所示為對話盒 360，其係在主功能棒 302 上選擇電池按鈕 309 所啟動的。一電池參數對話盒 360 提供給電池設計者來載入及調整不同的電池位準參數。輸入欄位 362 及 364 係分別用來輸入時間 (Time, hrs)，及開始溫度 (°C) 值。一烤爐溫度 (Oven Temperature) 欄位 366 允許使用者來輸入烤爐的溫度 (°C)，其係根據一烤爐曝曬測試而置入該電池。其可留意到該電池起初是處於開始溫度。

重量輸入 (Mass input) 欄位 368 及 370 係分別用來輸入陽極與陰極的重量值 (g)。在圖 18 中，重量輸入欄位 368 及

(請先閱讀背面之注意事項再填寫本頁)

表

訂

線

五、發明說明 (51)

370 分別針對碳及以鉻為主的電極，而係用於一虛擬鋰離子電池。電池熱容量的值(J/gK)，熱傳導率(W/cmK)及密度(g/cc)皆可分別利用輸入欄位 372，374 及 376 來輸入。電池參數對話盒 360 另包含一罐體參數(Can Parameters)區域 380，其允許輸入特徵化該罐體的不同資料，或是虛擬電池的保護外殼。罐體參數區域 380 包含輸入欄位 382，384，386 及 388，其分別用來輸入罐體密度(g/cc)，熱容量(J/gK)，罐表面熱傳導率(W/cm²K)，及罐本體熱傳導率(W/cmK)。

電池參數對話盒 360 另包含一電池幾何(Battery Geometry)區域 390，其提供了數個不同的虛擬電池幾何的選擇。在圖 18 所示的具體實施例中，一設計者可以啟動一圓柱形幾何(Cylindrical Geometry)按鈕 392 或是一稜柱形幾何(Prismatic Geometry)按鈕 394。圖 19 所示為一圓柱計算(Cylindrical Calculation)對話盒 400，其係根據啟動在電池幾何區域 390 中的圓柱幾何按鈕 392，而呈現給使用者。設計者可以分別利用長度與半徑輸入欄位 402，404，來輸入罐體長度(cm)及半徑值(cm)。

圓柱計算對話盒 400 另包含一詳細位準(Detail Level)區域 406，其可允許設計者啟動一完全細節(Full Detail)按鈕 408 及一均勻溫度(Uniform Temperature)按鈕 410。完全細節按鈕 408 的啟動會造成一個運算，其假設了在該虛擬電池內的溫度隨著半徑而改變，如前述熱等式中所示。對於一搭載了 266 MHz Pentium II 處理器的個人電腦，該完全細節運

五、發明說明 (52)

算需要數分鐘即可完成。

均勻溫度按鈕 410 的啟動，會形成假設在該虛擬電池之中的溫度分佈是均勻之運算(意即與半徑無關)。此運算為近似值，但可在數秒內完成。但是此近似值已經合理地正確。模擬之後顯示，該標準的核心-罐體溫度差異僅是數 $^{\circ}\text{C}$ 之差別，甚至在熱量逸出之中也是一樣。

圖 20 所示為一稜柱計算對話盒 420，其係根據啟動在電池幾何區域 390 中的稜柱幾何(Prismatic Geometry)按鈕 394，如圖 18 所示。設計者可以分別利用長度，寬度及厚度輸入欄位 422，424 及 425 來輸入罐體長度(cm)，寬度(cm)及厚度(cm)。該稜柱計算對話盒 420 同時也包含一細節位準(Detail Level)區域 426，其允許設計者來啟動完全細節及均勻溫度按鈕 428 及 430。

完全細節按鈕 428 的啟動會造成一個運算，其假設了在該虛擬電池中溫度是隨著厚度改變，如前述熱等式中所所述。如同在一圓柱電池幾何的外殼中，該均勻溫度按鈕 430 的啟動則會造成一個運算，其假設在該虛擬電池之內的溫度是均勻的(也就是與厚度無關)。

根據本發明的一種電腦輔助方法，可用於預測電化學電池對於熱性，電子，及/或機械式侵擾的反應等，因此可以發揮效用，舉例而言，可由處理器實施一系列的機器可讀取指令。這些指令可以存在於不同形式的信號承載媒體。在此方面，本發明的另一具體實施例係考慮一程式化的產品，其包含了一信號承載媒體而包含有機器可讀取指

(請先閱讀背面之注意事項再填寫本頁)

表

訂

線

五、發明說明 (53)

令，其可由一數位處理器來執行方法步驟，並會影響電池模型化及本發明的行為預測程序的，例如信號承載媒體可包含像是在處理器中，或是以其它方式耦合到處理器的隨機存取記憶體(RAM)。

另外，該指令也可包含於其它的信號承載媒體，例如一個或多個磁性資料儲存碟片，直接存取資料儲存磁碟(例如一習用的硬碟或一 RAID 陣列)，磁帶，可修改或非修改性的電子唯讀記憶體(如 EEPROM 或 ROM)，快閃記憶體，光學儲存裝置(如 CDROM 或 WORM)，信號承載媒體具有傳輸媒介，像是數位，類比，及通訊鏈結，無線及傳送信號媒體等。在一用以說明的具體實施例中，該機器可讀取指令可由經編譯過的"C"語言碼或"C++"物件導向碼所構成。

前述對於本發明的不同具體實施例的說明已經呈現用來達到說明的目的。但其目的並不是將本發明限制在所揭示的型式當中。根據以上的原理，可能有許多的修改及變化。因此本發明的範圍並不限於此詳細說明，而是以下列的申請專利範圍為主。

四、中文發明摘要 (發明之名稱： 用以使用自量熱法獲得的功率函數特徵化高能量電化學電池的方法和裝置)

將電化學電池組件及一電化學電池的反應特徵化到一特定的運作狀態，其牽涉到製備一與電解質接觸之電極材料的樣本。對於樣本所進行的自我加熱，功率-溫度，或功率-時間資料，係使用自量熱技術，例如藉由一加速度自量熱技術，或一差異掃描自量熱技術。一功率函數係代表樣本的單位重量的熱功率，而做為在樣本電極材料及電解質的反應之下剩餘的溫度函數及反應物的數量。一第一功率函數係開發來特徵化陰極樣本材料和電解質之間的反應，並以一陰極樣本材料的單位重量的熱功率為其變數，而一第二功率函數則開發來特徵化陽極樣本材料和電解質

英文發明摘要 (發明之名稱： "METHOD AND APPARATUS FOR CHARACTERIZING HIGH-ENERGY ELECTROCHEMICAL CELLS USING POWER FUNCTIONS OBTAINED FROM CALORIMETRY")

Characterizing electrochemical cell components and a response of an electrochemical cell to a specified operating condition involves preparing a sample of an electrode material in contact with an electrolyte. Self-heating, power-temperature or power-time data is obtained for the sample using a calorimetry technique, such as by use of an accelerating rate calorimetry technique or a differential scanning calorimetry technique. A power function is developed for the sample using the self-heating, power-temperature or power-time data. The power function is representative of thermal power per unit mass of the sample as a function of temperature and amount of reactant remaining from a reaction of the sample electrode material and electrolyte. A first power function is developed that characterizes a reaction between the cathode material and the electrolyte in terms of thermal power per unit mass of a cathode sample material, and a second power

四、中文發明摘要 (發明之名稱：

)

之間的反應，並以一陽極樣本材料的單位重量的熱功率為其變數。由功率函數所發展的一電極材料樣本，係使用少於約100克的電極材料來製備，例如在約1及10克之間，但是也可少於1毫克到1克之間。一電腦系統及電腦可讀取媒體係用於電子式的設計及測試任意尺寸及形狀的電池，並使用所發展的功率函數用於個別的電極/電解質組合。

(請先閱讀背面之注意事項再填寫本頁各欄)

裝

訂

線

英文發明摘要 (發明之名稱：

)

function is developed that characterizes a reaction between the anode material and the electrolyte in terms of thermal power per unit mass of the anode sample material. An electrode material sample from which a power function is developed is prepared using less than about 100 grams of the electrode material, such as between about 1 and 10 grams, but may be as little as between about 1 milligram and 1 gram. A computer system and computer-readable medium are provided to electronically design and test cells of arbitrary size and shape using power functions developed for individual electrode/electrolyte combinations.

經濟部智慧財產局員工消費合作社印製

六、申請專利範圍

1. 一種特徵化電化學電池組件的方法，其包含：
 - 製備與電解質相接觸之電極材料的樣本；
 - 利用自量熱技術，對於該樣本來取得自我加熱資料、功率-溫度資料，或是功率-時間資料；及
 - 利用該自我加熱資料，功率-溫度資料，或是功率-時間資料，針對該樣本發展一功率函數，該功率函數代表每單位重量的該樣本的熱功率，其為溫度及在該電極材料與該樣本的電解質反應之後剩餘的反應物量之函數。
2. 如申請專利範圍第 1 項之方法，其中製備該樣本包含使用少於約 100 克的該電極材料來製備該樣本。
3. 如申請專利範圍第 1 項之方法，其中該電極材料包含陰極材料或陽極材料。
4. 如申請專利範圍第 1 項之方法，其中取得該自我加熱資料包含在大體上絕熱的條件下，在反應過程中取得該樣本的溫度對於時間的資料。
5. 一種特徵化電化學電池組件的方法，其包含：
 - 製備一與電解質相接觸之陰極材料的第一樣本；
 - 製備一與電解質相接觸之陽極材料的第二樣本；
 - 利用自量熱技術，對於該第一及第二樣本來取得第一及第二自我加熱、功率-溫度或是功率-時間資料；及
 - 利用該第一及第二自我加熱、功率-溫度或是功率-時間資料，分別針對該第一樣本發展一第一功率函

六、申請專利範圍

數，與針對該第二樣本發展一第二功率函數，該第一功率函數係以每單位重量的該陰極樣本材料的熱功率來特徵化該陰極材料與該電解質之間的反應，而第二功率函數係以每單位重量的該陽極樣本材料的熱功率來特徵化該陽極材料與該電解質之間的反應。

6. 如申請專利範圍第 5 項之方法，其中取得該第一及第二自我加熱資料包含在大體上絕熱的條件下，在反應過程中分別取得該第一及第二樣本的溫度對於時間的資料。

7. 一種特徵化電化學電池組件的方法，其包含：

定義出該電化學電池的一個或多個物理參數；

提供一第一功率函數，用於以每單位重量的陰極材料之熱功率來特徵化一陰極與一電解質之間的反應；

提供一第二功率函數，用於以每單位重量的陽極材料之熱功率來特徵化一陽極與一電解質之間的反應；
及

利用該第一及第二功率函數，及該電化學電池的該物理參數來預測該電池對於一特定的運作條件下的反應。

8. 如申請專利範圍第 7 項之方法，其中：

定義出該電池的一個或多個物理參數，另包含調整該電池的該物理參數；及

預測該電池的該反應，另包含使用該第一及第二功率函數，及該電池的調整過的物理參數來預測該電池的反應。

六、申請專利範圍

9. 如申請專利範圍第 7 項之方法，其中定義出該電池的一個或多個物理參數另包含：

對於該電池的每個陽極與陰極皆定義出物理參數；

調整該陽極與陰極兩者或其中之一的該物理參數；

藉由利用該第一及第二功率函數，及經調整的該陽極與陰極兩者或其中之一的該物理參數來預測該電池的反應。

10. 一種特徵化一電化學電池的系統，其包含：

一處理器，

一使用者介面，其與該處理器結合，包含一由使用者操作的一輸入裝置，用於輸入該電化學電池的一個或多個物理參數；及

記憶體，其與該處理器結合，能夠儲存一陰極功率函數，用於以每單位重量的陰極材料之熱功率來特徵化一陰極與一電解質之間的反應，另可儲存一陽極功率函數，用於以每單位重量的陽極材料之熱功率來特徵化一陽極與一電解質之間的反應，該處理器利用該陰極與陽極功率函數，及該電化學電池的該物理參數，來計算一電化學電池對於一特定的運作條件下的反應。

11. 如申請專利範圍第 10 項之系統，其中

該輸入裝置係由使用者操作來調整該電池的物理參數；及

該處理器利用該陰極與陽極功率函數，及經調整個

六、申請專利範圍

的該電化學電池的該物理參數，來計算該電化學電池對於該特定運作條件下的反應。

12. 如申請專利範圍第 10 項之系統，其中

該輸入裝置係由使用者操作來調整該電池的一陽極與一陰極的物理參數；及

該處理器利用該陰極與陽極功率函數，及經調整個的該電化學電池的該陽極與陰極的物理參數，來計算該電化學電池對於該特定運作條件下的反應。

13. 如申請專利範圍第 10 項之系統，另包含一與該處理器結合的一熱量計系統。

14. 一種特徵化電化學電池組件的方法，其包含：

定義出該電化學電池的一個或多個物理參數；

藉由定義一第一功率函數，而以每單位重量的陰極材料之熱功率來特徵化一陰極與一電解質之間的反應；

藉由定義一第二功率函數，而以每單位重量的陽極材料之熱功率來特徵化一陽極與一電解質之間的反應；

利用該第一及第二功率函數，及該電化學電池的該物理參數來預測該電池對於一特定的運作條件下的反應。

15. 一種電腦可讀取媒體，包含有程式指令，用於特徵化電化學電池元件，其包含：

藉由定義一第一功率函數，而以每單位重量的陰極

六、申請專利範圍

材料之熱功率來特徵化一陰極與一電解質之間的反應；

藉由定義一第二功率函數，而以每單位重量的陽極材料之熱功率來特徵化一陽極與一電解質之間的反應；

定義出該電化學電池的一個或多個物理參數；及

利用該第一及第二功率函數，及該電化學電池的該物理參數來預測該電池對於一特定的運作條件下的反應。

16. 如申請專利範圍第 14 項之方法，其中分別特徵化該陰極/電解質，及陽極/電解質反應，另包含假設一自動催化反應機制來模型化個別的反應。
17. 如申請專利範圍第 14 項之方法，其中特徵化該第一及第二功率函數包含使用一自量熱技術。
18. 如申請專利範圍第 1、5 或 17 項之方法，其中該自量熱技術包含一加速度自量熱技術，或一差異掃描自量熱技術。
19. 如申請專利範圍第 7 或 14 項之方法，其中該特定的運作條件包含有一恆定或變化的週遭溫度的條件，施加一恆定或變化電流到該電池的條件，一連接外部短路到該電池的條件，或是在該電池內部短路的條件。
20. 如申請專利範圍第 14 項之方法，其中特徵化該第一及第二功率函數包含有取得每個該陰極/電解質，及陽極/電解質反應之溫度對於時間的資料。

六、申請專利範圍

21. 如申請專利範圍第 14 項之方法，其中：特徵化該陰極/電解質反應，包含利用少於約 100 克的陰極材料來特徵化該陰極/電解質反應；及，特徵化該陽極/電解質反應，包含利用少於約 100 克的陽極材料來特徵化該陽極/電解質反應。
22. 如申請專利範圍第 15 項之媒體，其中分別特徵化該陰極/電解質，及陽極/電解質反應，另包含假設一自動催化反應機制來模型化個別的反應。
23. 如申請專利範圍第 15 項之媒體，其中特徵化該第一及第二功率函數包含使用一自量熱技術。
24. 如申請專利範圍第 15 項之媒體，其中該自量熱技術包含一加速度自量熱技術，或一差異掃描自量熱技術。
25. 如申請專利範圍第 15 項之媒體，其中特徵化該第一及第二功率函數包含有取得每個該陰極/電解質，及陽極/電解質反應之溫度對於時間的資料。
26. 如申請專利範圍第 15 項之媒體，其中：特徵化該陰極/電解質反應，包含利用少於約 100 克的陰極材料來特徵化該陰極/電解質反應；及，特徵化該陽極/電解質反應，包含利用少於約 100 克的陽極材料來特徵化該陽極/電解質反應。

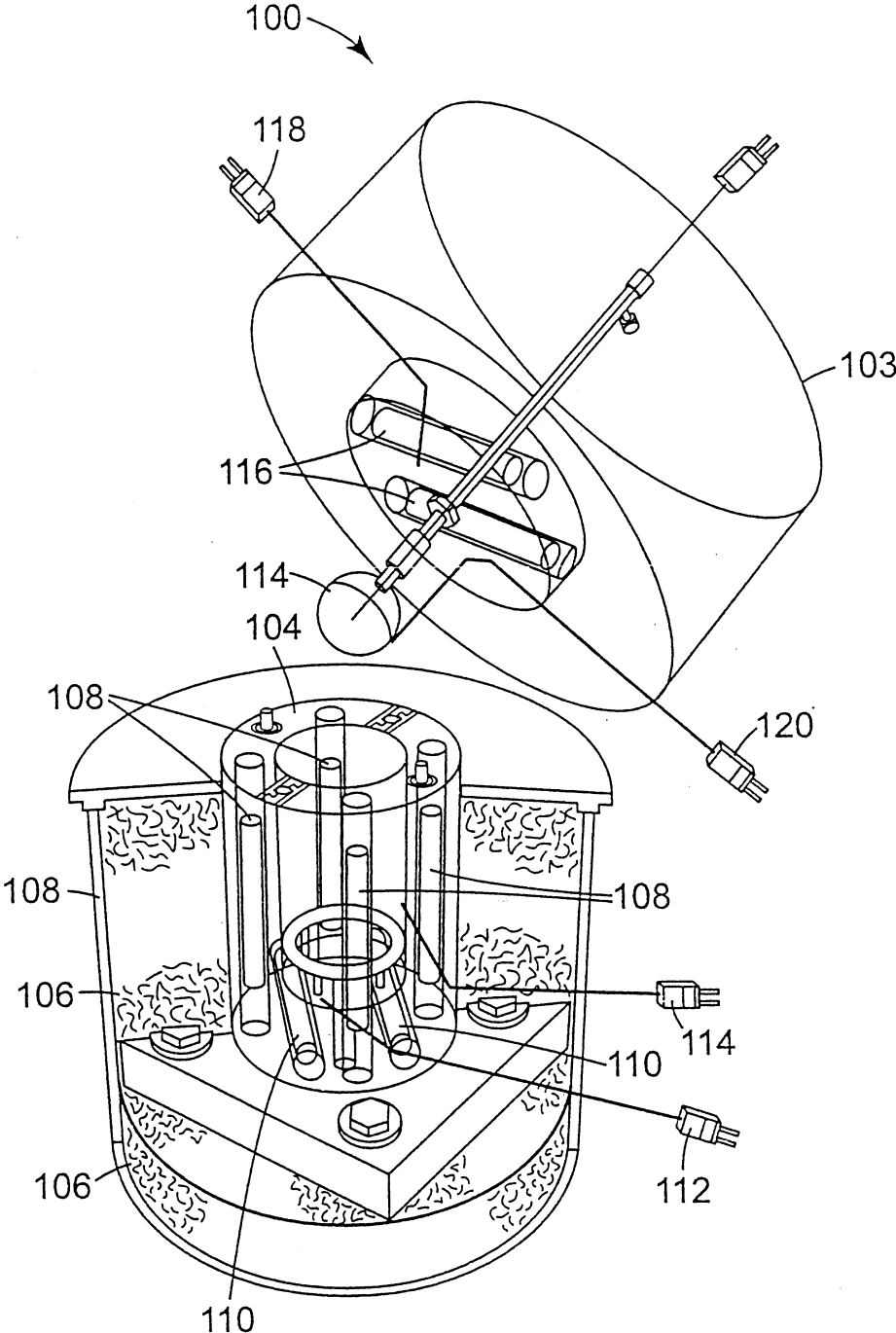


圖 1

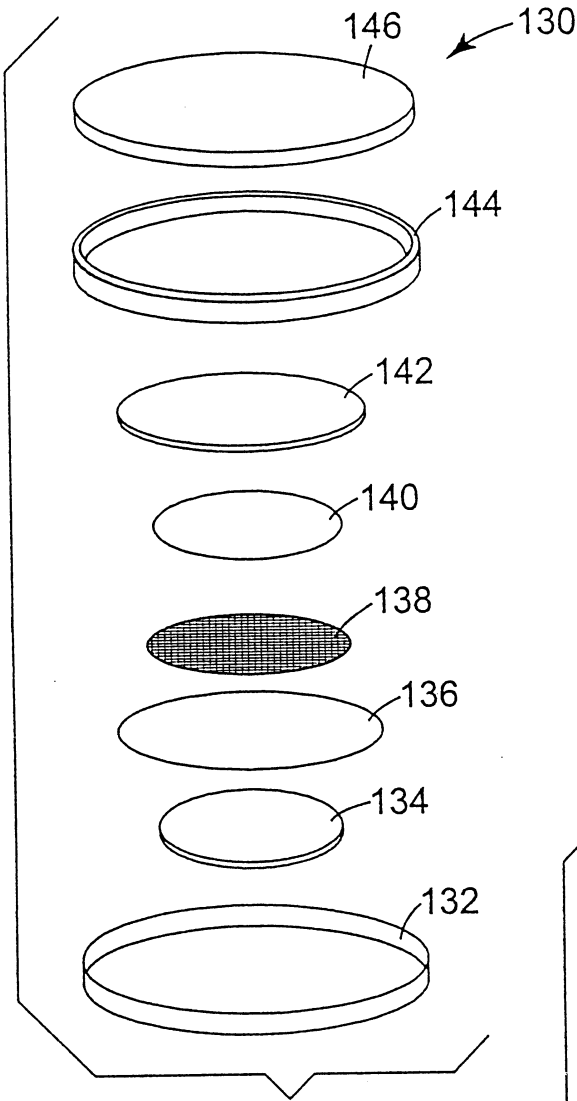


圖 2

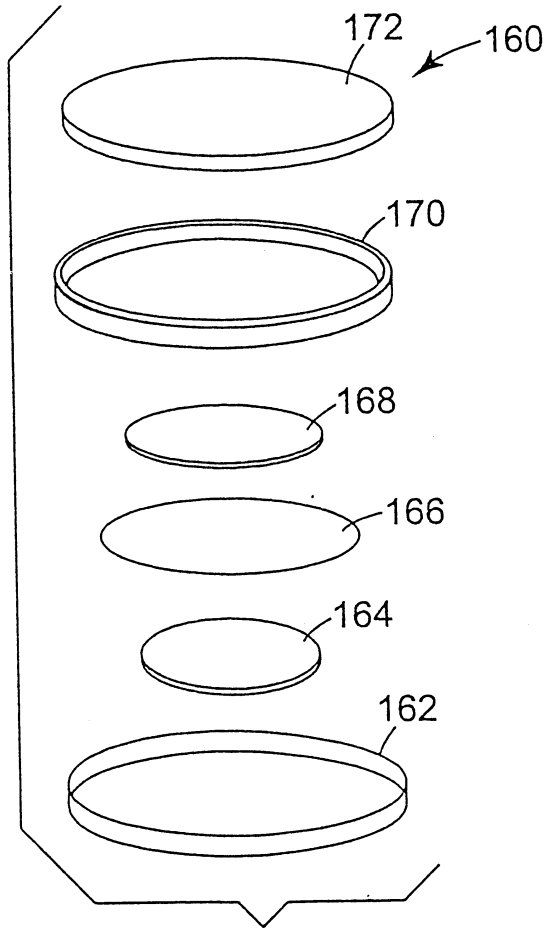


圖 3

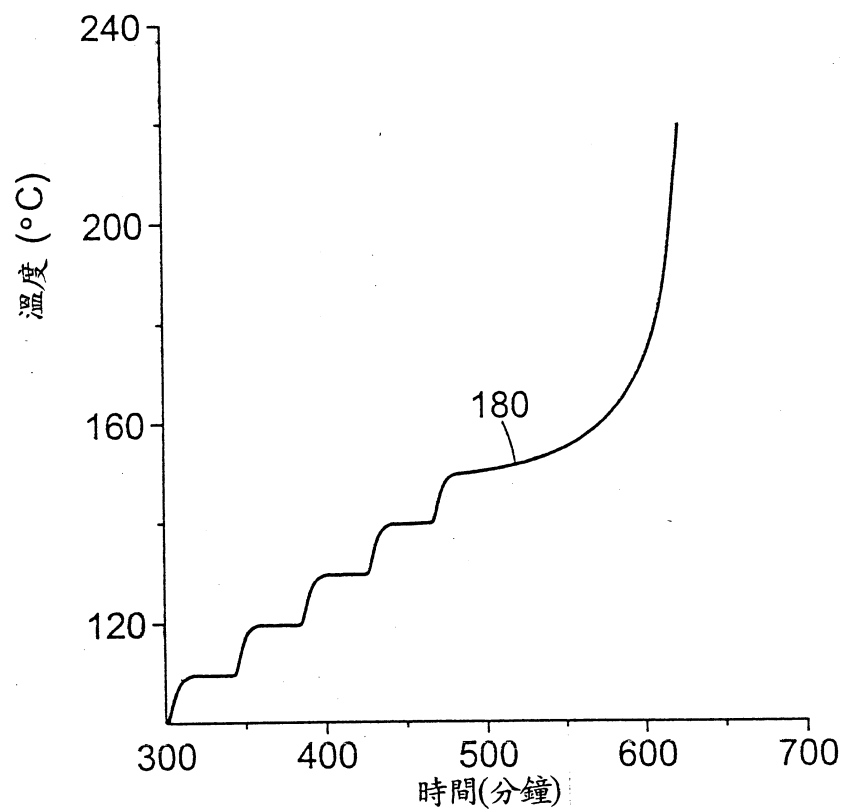


圖 4

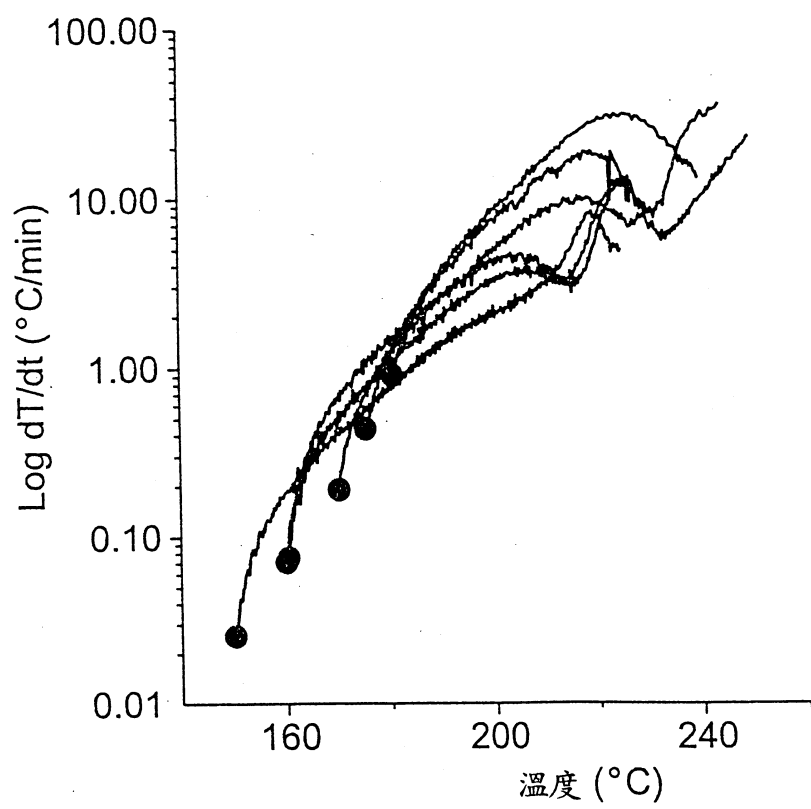


圖 5

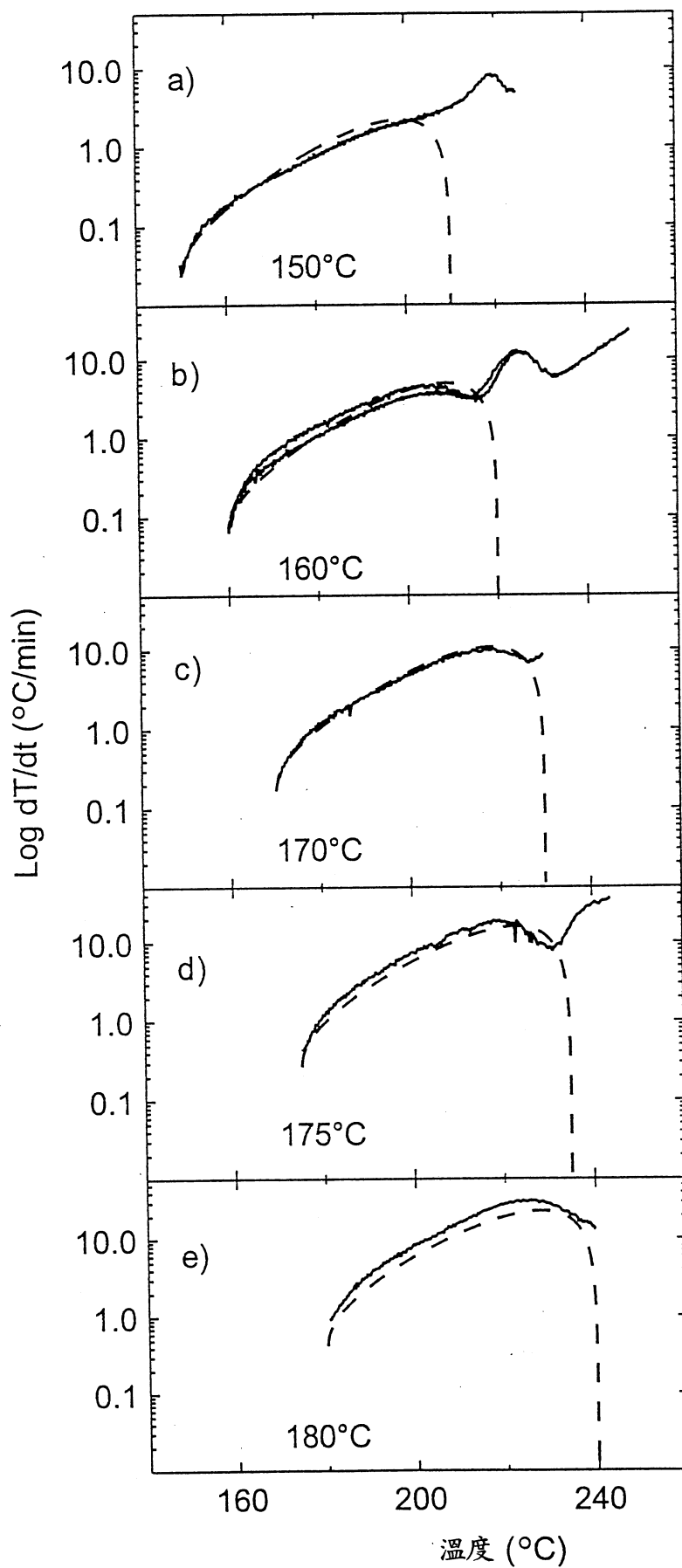


圖 6A

圖 6B

圖 6C

圖 6D

圖 6E

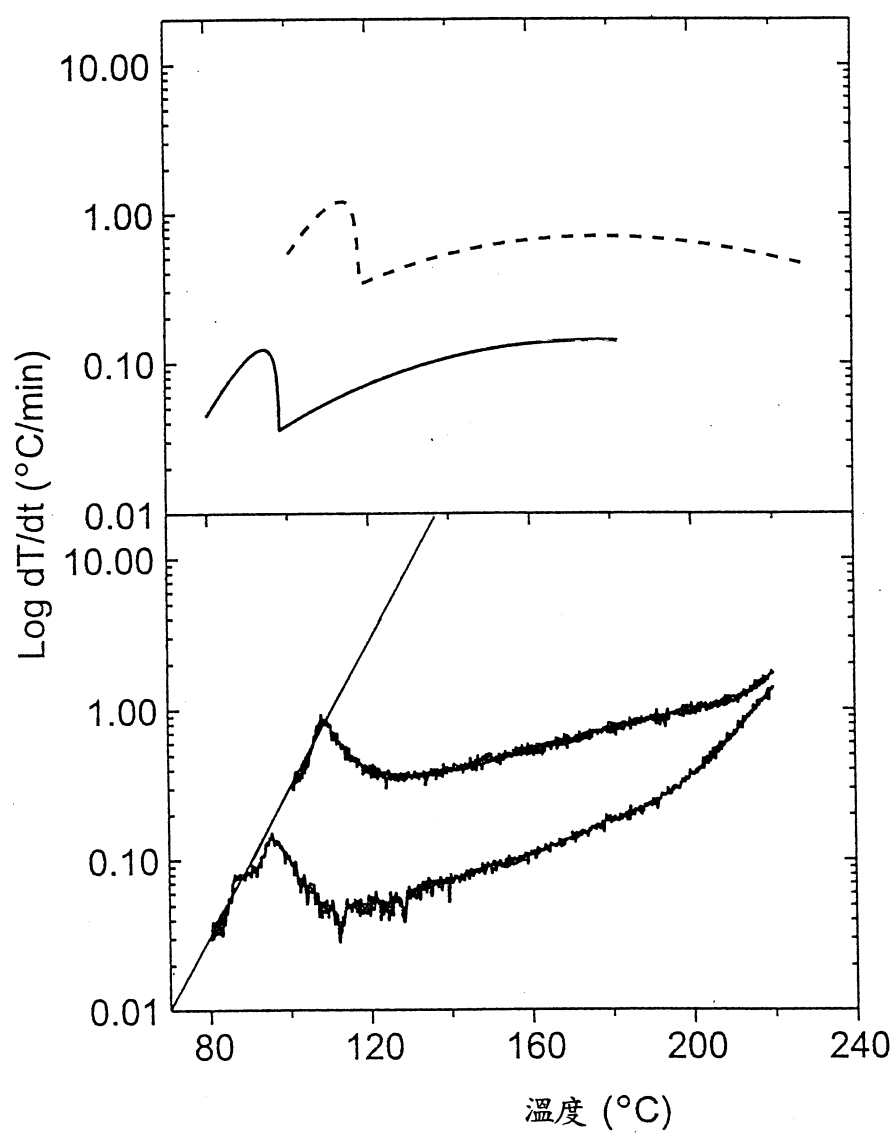


圖 7A

圖 7B

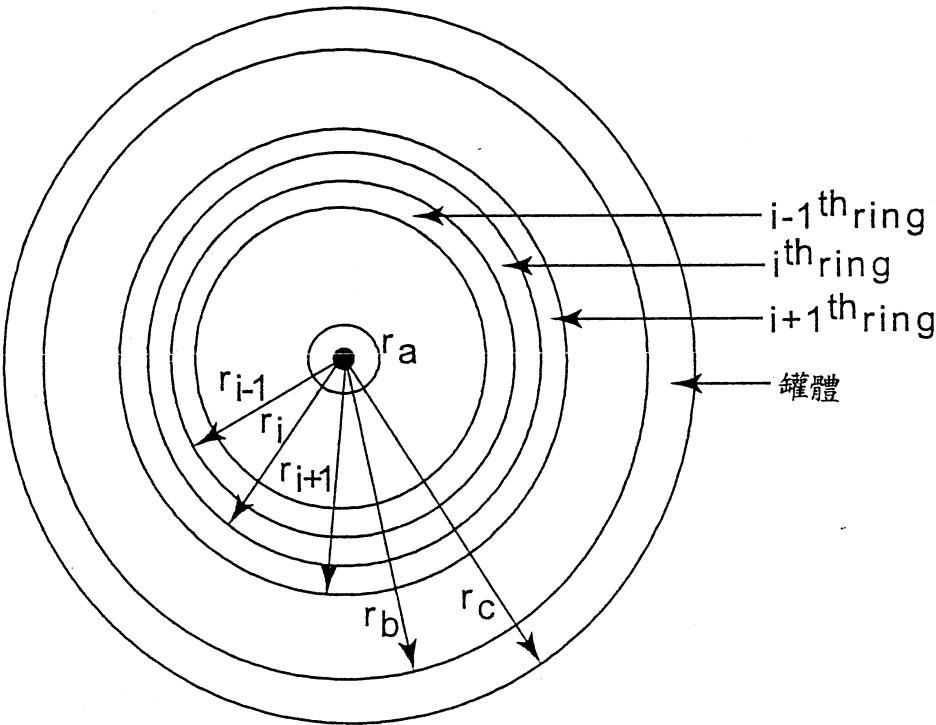


圖 8

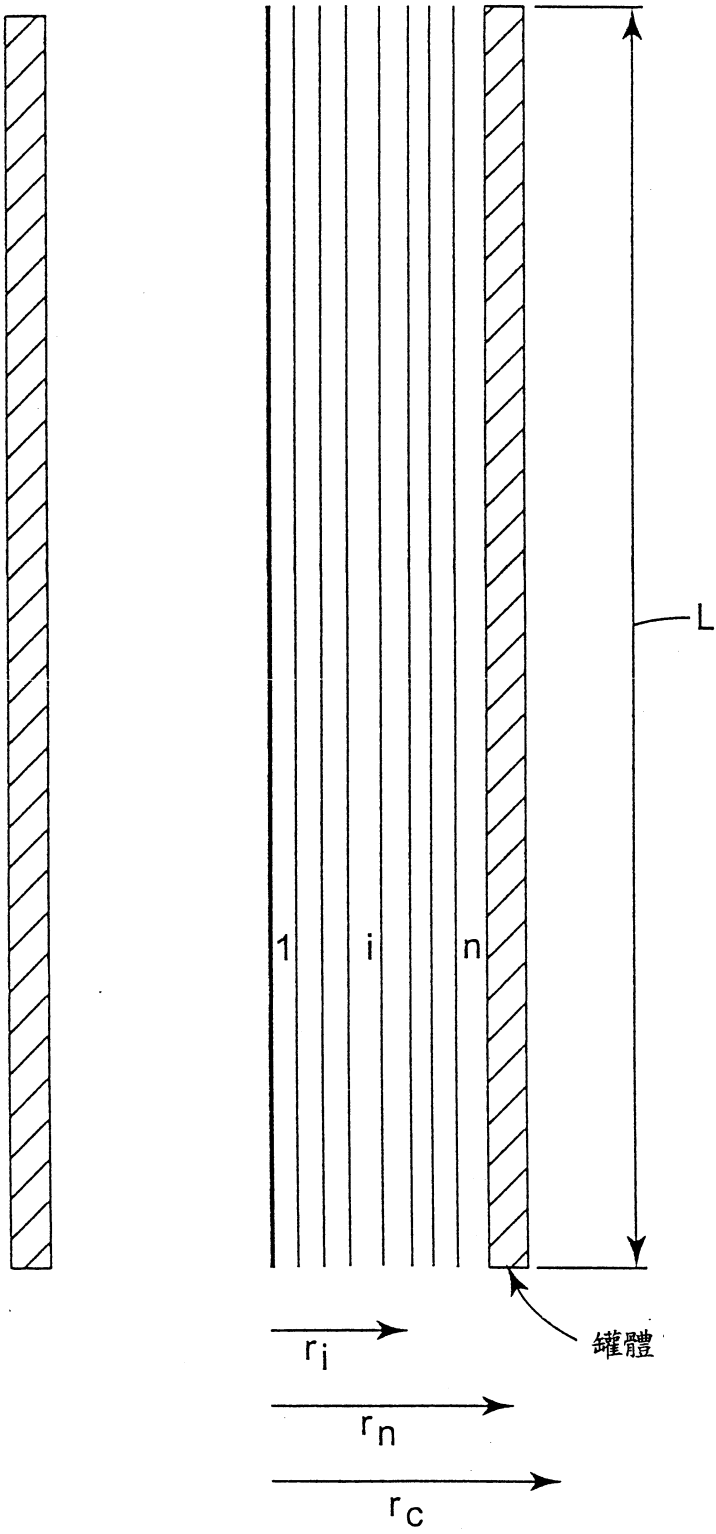


圖 9

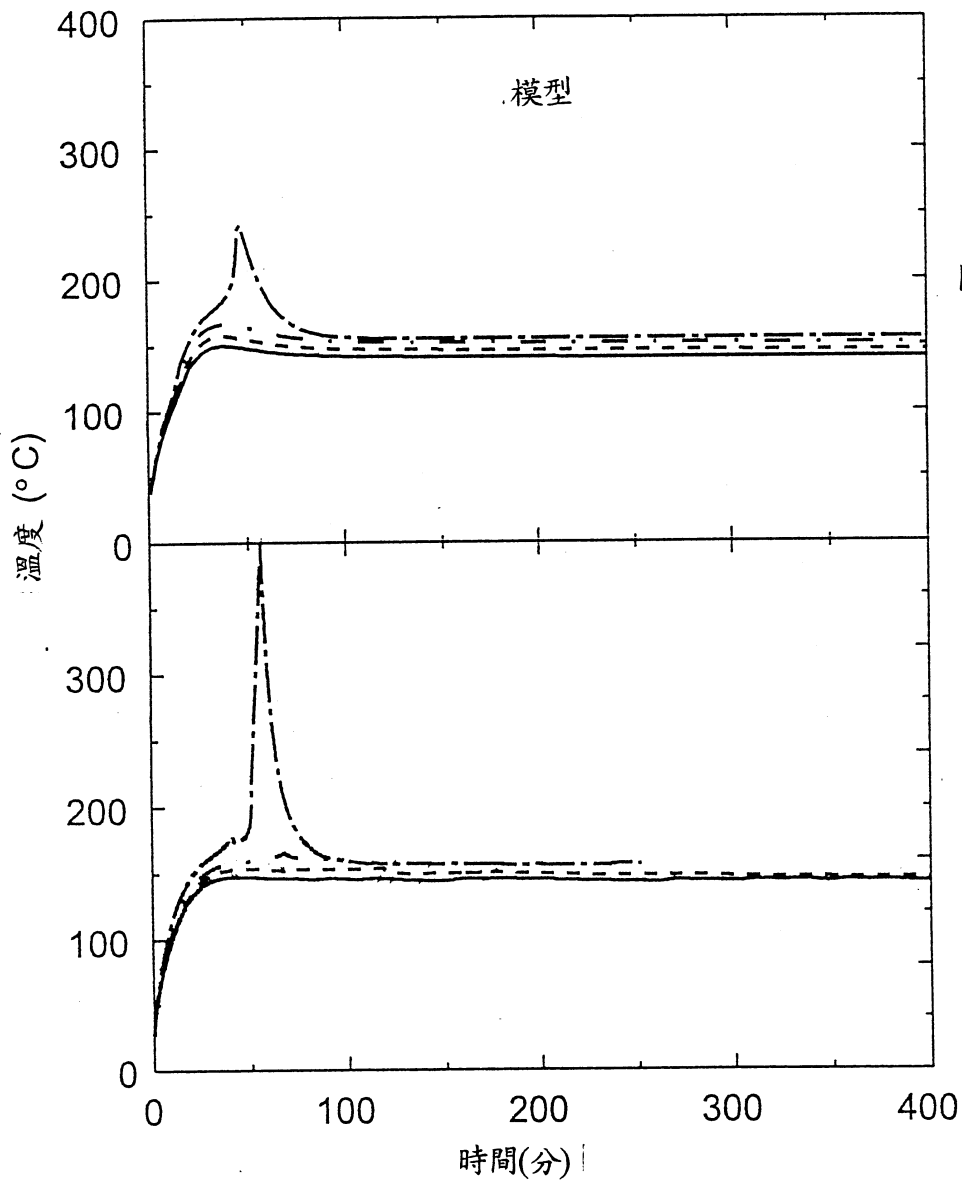
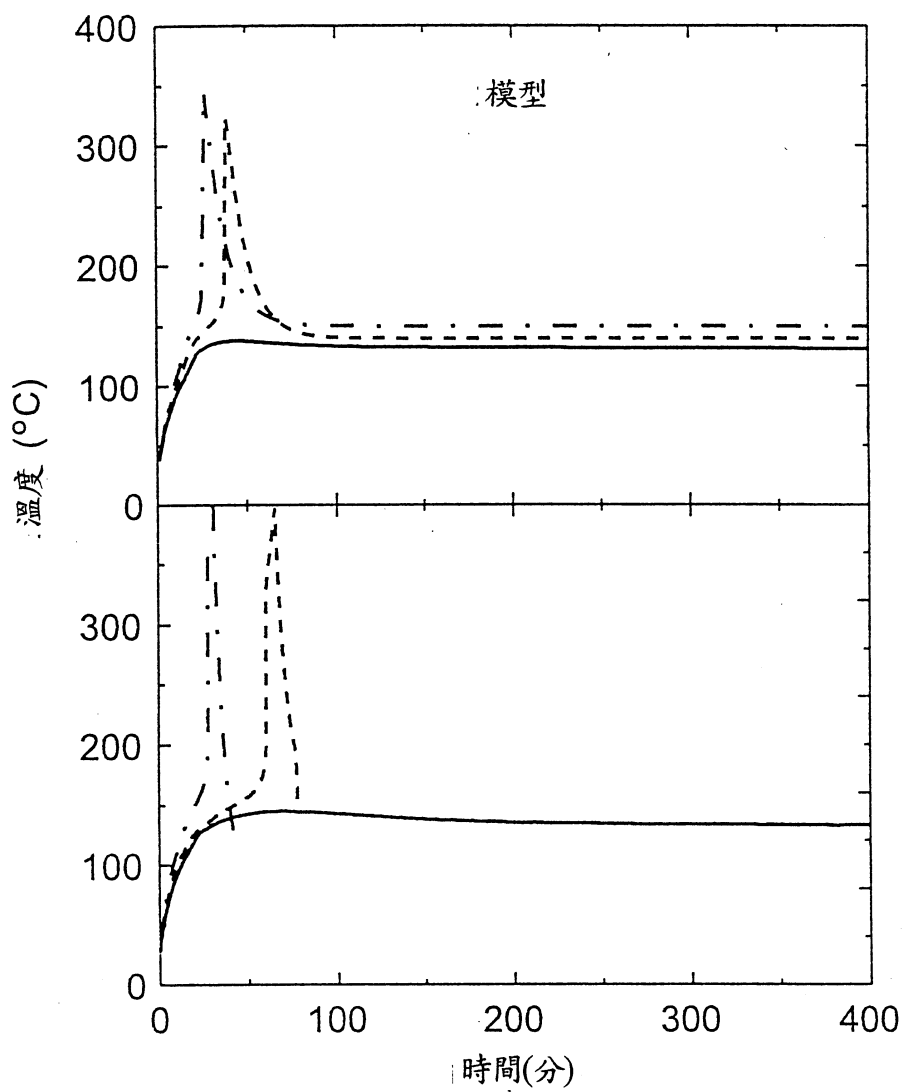


圖 10A

圖 10B

製造商 A 烤爐曝曬
4.2 volts
—— 140 deg
---- 145 deg
- . - 150 deg
- - - 155 deg



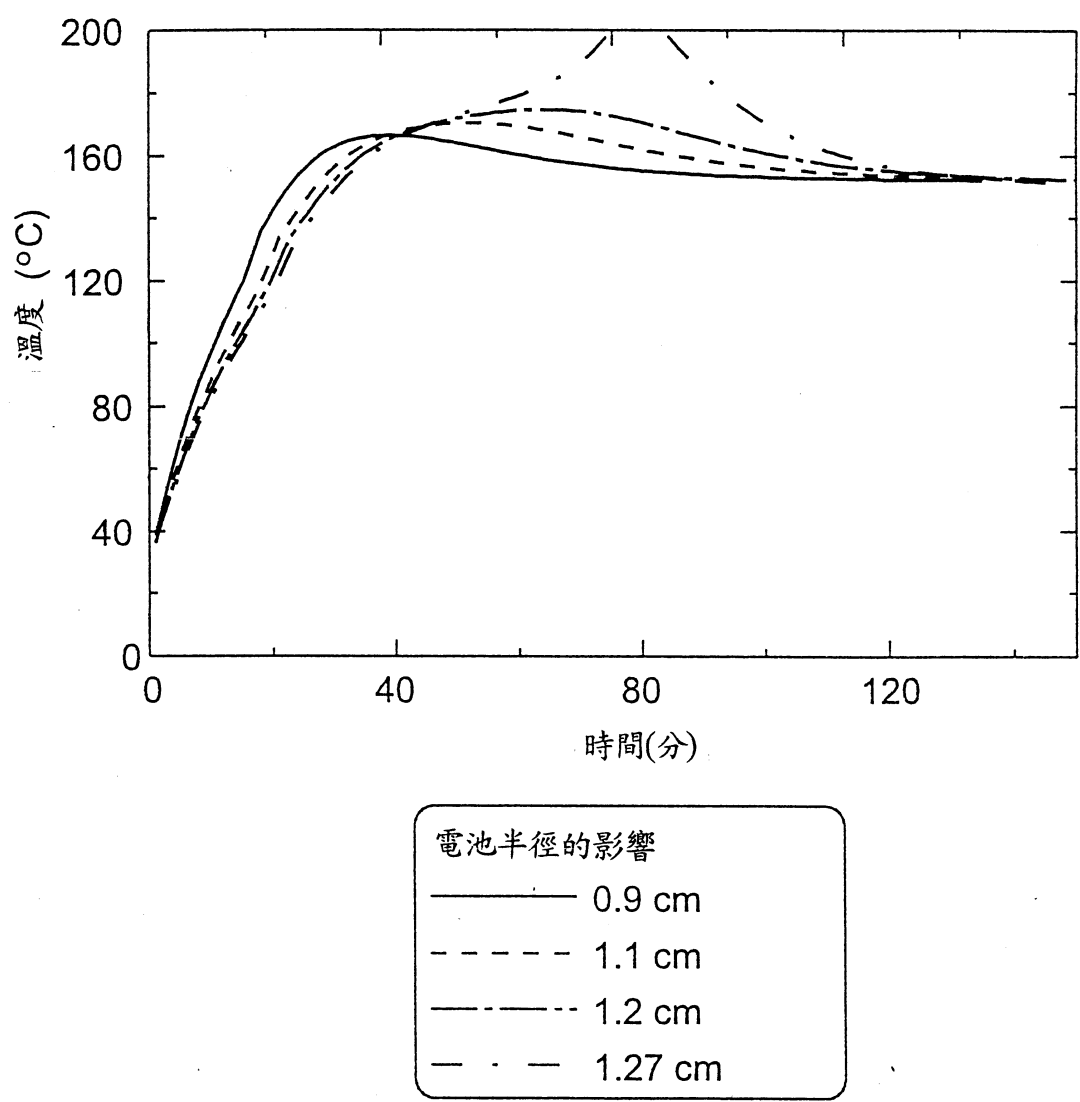
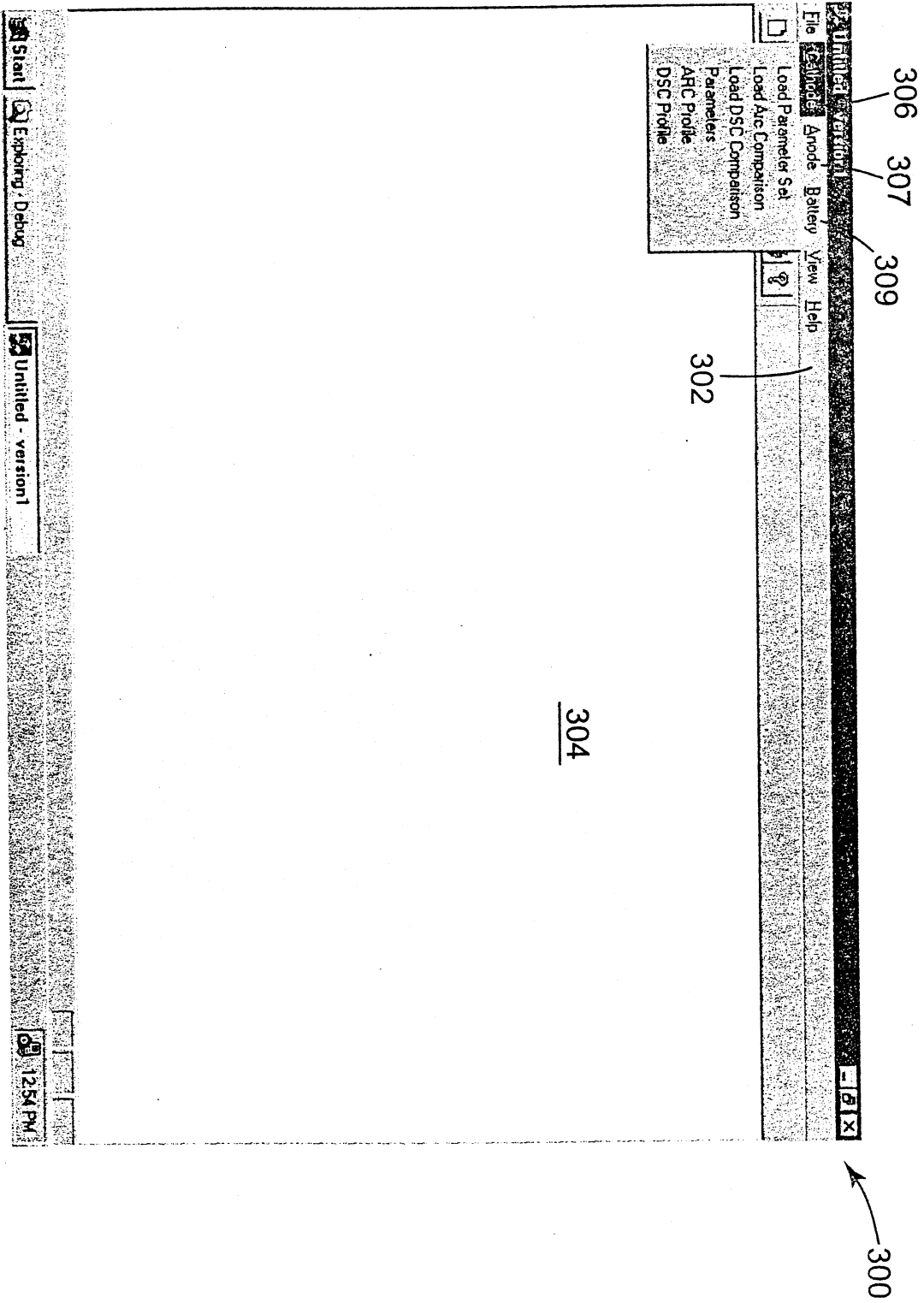
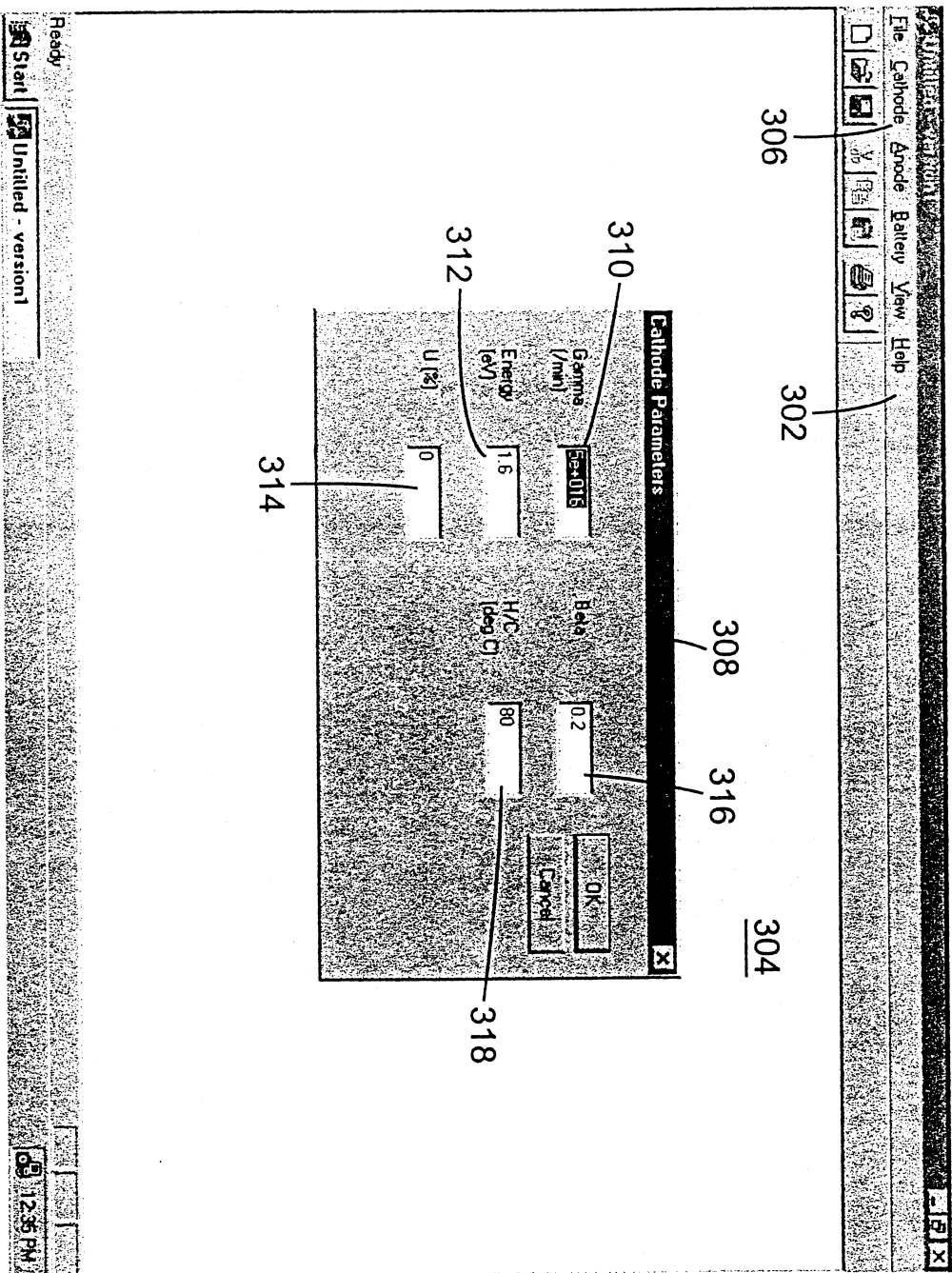
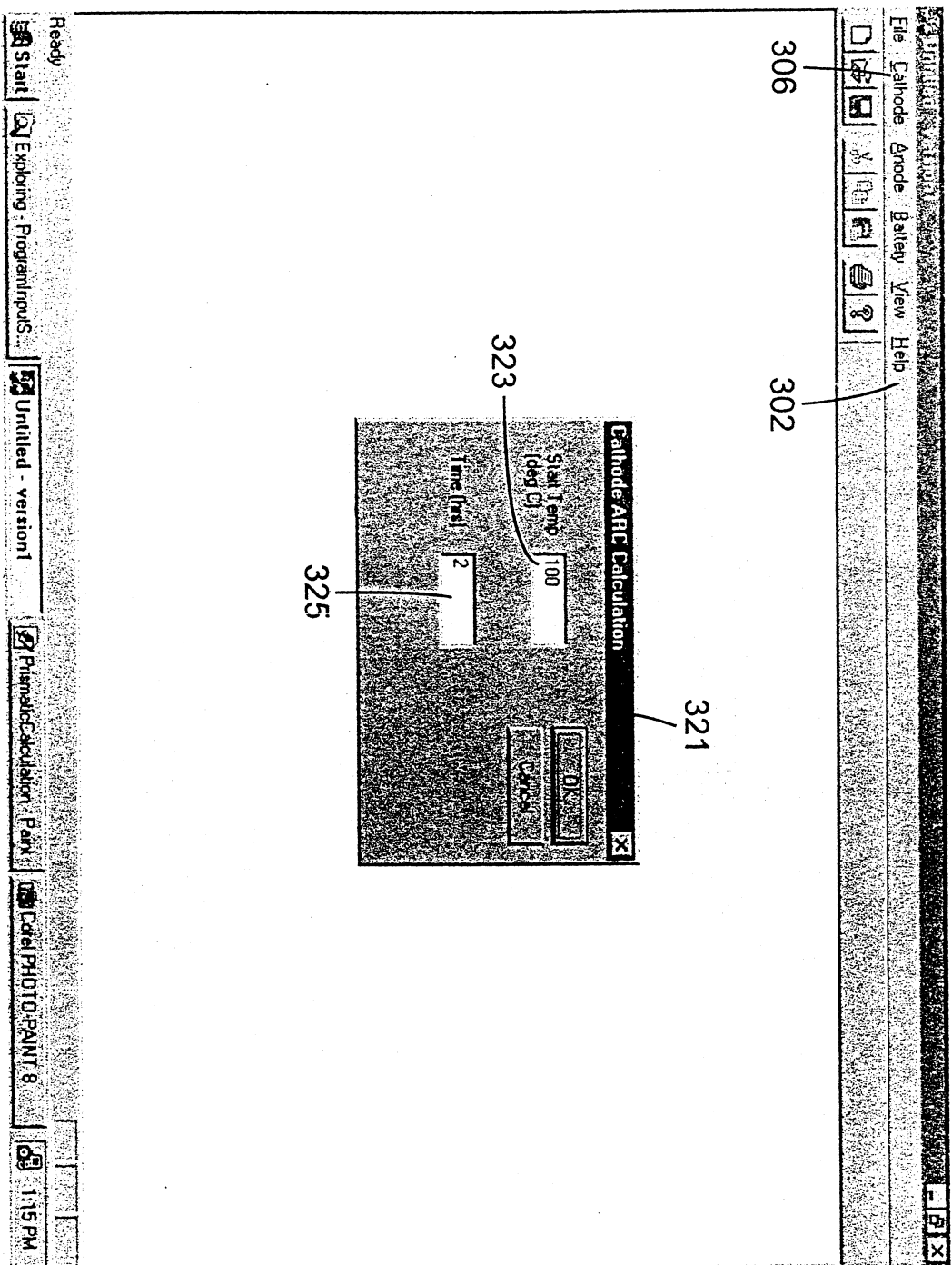
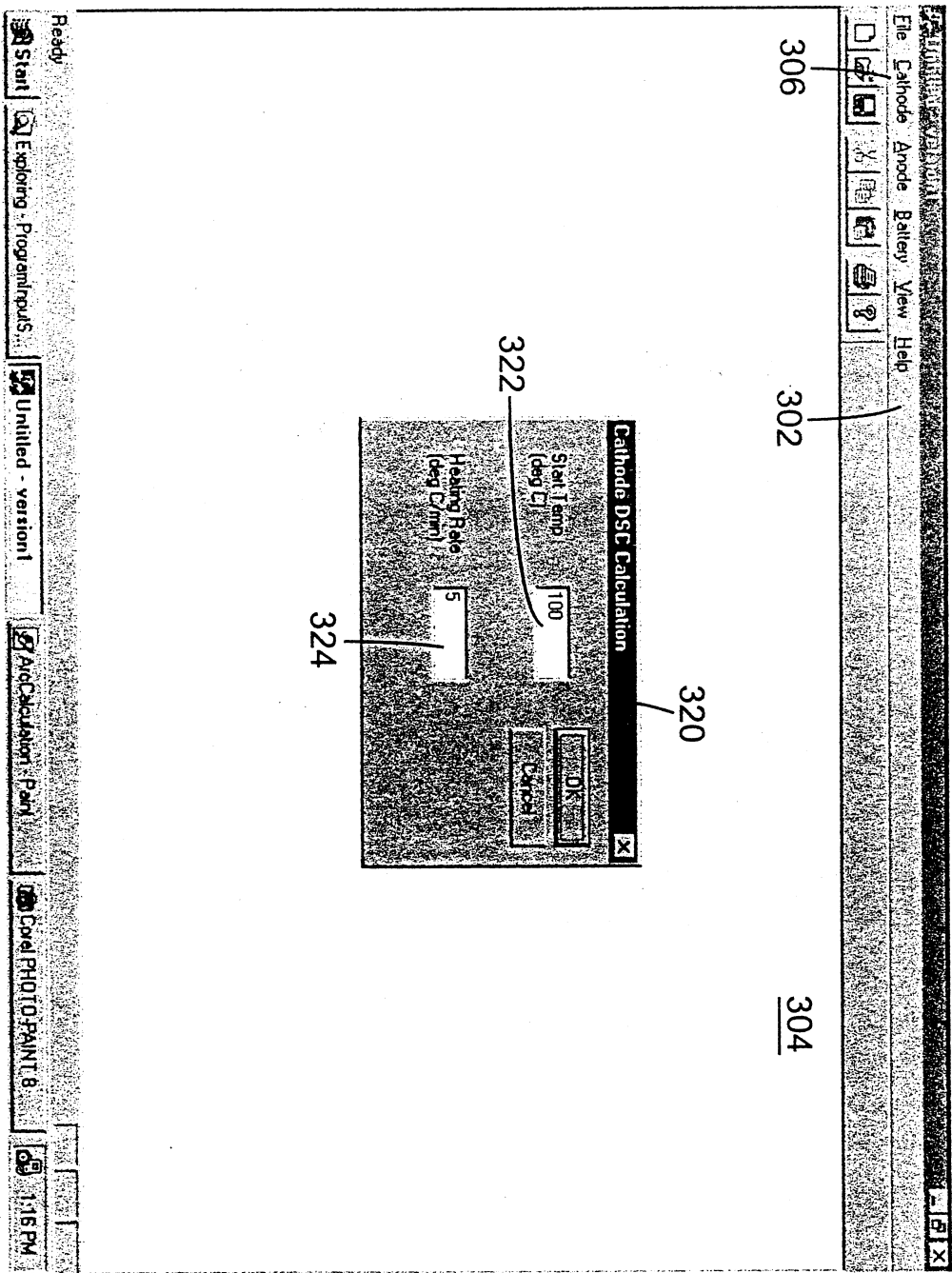


圖 12









File Cathode Anode Battery View Help

Start

Exploring - ProgramInputs...

Untitled - version1

Corel PHOTO-PAINT 8

1:03 PM

307

302

330

342

304

Anode Parameters

Gamma1 (/mm)	75±016	H2/C (deg C)	400	OK
Gamma2 (/mm)	4e+015	Anode m	1	Cancel
Energy1 (eV)	1.4	Order	0.5	2.5
Energy2 (eV)	1.4	X0	0.1	0.05
H1/C (deg C)	150	X0	0.75	

340

350

344

352

346

348

