

## (12) 按照专利合作条约所公布的国际申请

(19) 世界知识产权组织  
国际局

(43) 国际公布日  
2020 年 10 月 8 日 (08.10.2020)



(10) 国际公布号  
**WO 2020/199417 A1**

(51) 国际专利分类号:  
**G01R 31/374** (2019.01) **G01R 31/385** (2019.01)

(21) 国际申请号: PCT/CN2019/095778

(22) 国际申请日: 2019 年 7 月 12 日 (12.07.2019)

(25) 申请语言: 中文

(26) 公布语言: 中文

(30) 优先权:  
201910260025.8 2019 年 4 月 2 日 (02.04.2019) CN

(71) 申请人: 清华大学(TSINGHUA UNIVERSITY) [CN/  
CN]; 中国北京市海淀区清华园 1 号,  
Beijing 100084 (CN)。

(72) 发明人: 王昱(WANG, Yu); 中国北京市海淀区清  
华园 1 号, Beijing 100084 (CN)。 冯旭宁(FENG,

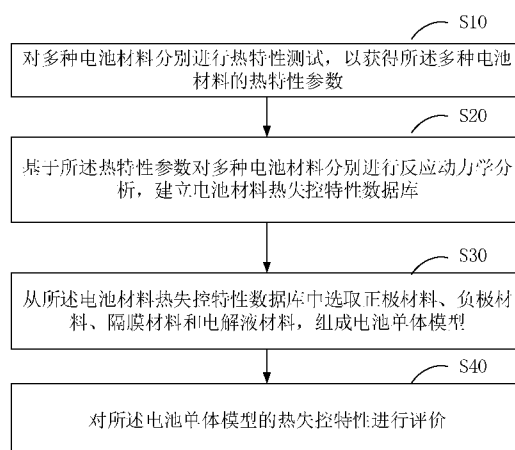
Xuning); 中国北京市海淀区清华园 1 号, Beijing  
100084 (CN)。 任东生(REN, Dongsheng); 中国北  
京市海淀区清华园 1 号, Beijing 100084 (CN)。 卢  
兰光(LU, Languang); 中国北京市海淀区清华园  
1 号, Beijing 100084 (CN)。 欧阳明高(OUYANG,  
Minggao); 中国北京市海淀区清华园 1 号,  
Beijing 100084 (CN)。 何向明(HE, Xiangming);  
中国北京市海淀区清华园 1 号, Beijing 100084  
(CN)。 王莉(WANG, Li); 中国北京市海淀区  
清华园 1 号, Beijing 100084 (CN)。

(74) 代理人: 北京华进京联知识产权代理有限公司  
(ACIP LAW OFFICES); 中国北京市海淀区知春路  
7 号致真大厦 A1403, Beijing 100191 (CN)。

(81) 指定国(除另有指明, 要求每一种可提供的国家  
保护): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG,

(54) **Title:** DATABASE-DRIVEN METHOD AND APPARATUS FOR POSITIVE EVALUATION OF THERMAL RUNAWAY  
SAFETY OF TRACTION BATTERY

(54) 发明名称: 数据库驱动的动力电池热失控安全性正向评价方法及装置



- S10 Perform a thermal characteristic test on multiple battery materials respectively to obtain thermal characteristic parameters of the multiple battery materials
- S20 Perform, based on the thermal characteristic parameters, a reaction kinetics analysis on the multiple battery materials respectively to build a battery material thermal runaway characteristic database
- S30 Select, from the battery material thermal runaway characteristic database, a positive electrode material, a negative electrode material, a diaphragm material and an electrolyte material to form a battery cell model
- S40 Evaluate thermal runaway characteristics of the battery cell model

图 1

(57) **Abstract:** A database-driven method for positive evaluation of thermal runaway safety of a traction battery. The method comprises: obtaining thermal characteristic parameters by means of performing a thermal characteristic test on multiple battery materials respectively; performing, based on the thermal characteristic parameters, a reaction kinetics analysis on the multiple battery materials respectively to build a battery material thermal runaway characteristic database; selecting, from the battery material thermal runaway characteristic database, different battery materials to form a battery cell model; and finally, evaluating thermal runaway characteristics

[见续页]

BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DJ, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IR, IS, JO, JP, KE, KG, KH, KN, KP, KR, KW, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK, SL, SM, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, ZA, ZM, ZW。

- (84) 指定国 (除另有指明, 要求每一种可提供的地区保护): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SD, SL, ST, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), 欧亚 (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), 欧洲 (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG)。

本国际公布:

- 包括国际检索报告 (条约第21条(3))。

of the battery cell model. Based on a battery material thermal runaway characteristic database, thermal characteristic parameters of different battery materials are obtained, and thermal runaway characteristics of a traction battery are evaluated and predicted where the battery is not wholly assembled. The evaluation method improves traction battery safety design efficiency, saves on the research and development cost of the battery, and has an important practical value and guiding significance for the safety design and prevention and control of the traction battery for an electric vehicle.

(57) 摘要: 一种数据库驱动的动力电池热失控安全性正向评价方法, 所述方法通过对多种电池材料分别进行热特性测试, 获得热特性参数。基于所述热特性参数对多种电池材料分别进行反应动力学分析, 建立电池材料热失控特性数据库。从所述电池材料热失控特性数据库中选取不同的电池材料, 组成电池单体模型。最终实现对所述电池单体模型的热失控特性进行评价。基于所述电池材料热失控特性数据库, 获得不同电池材料的热特性参数, 在不组装出全电池的情况下对动力电池的热失控特性进行评价和预测。所述评价方法提高了动力电池安全性设计的效率, 节约电池研发成本, 对于电动车用动力电池的安全设计与防控具有重要的实用价值和指导意义。

## 数据库驱动的动力电池热失控安全性正向评价方法及装置

### 相关申请

本申请要求 2019 年 04 月 02 日申请的，申请号为 201910260025.8，名称为“数据库驱动的动力电池热失控安全性正向评价方法及装置”的中国专利申请的优先权，在此将其全文引入作为参考。

### 技术领域

本申请涉及电池技术领域，特别是涉及一种数据库驱动的动力电池热失控安全性正向评价方法及装置。

### 背景技术

电动汽车是新能源汽车的主体，动力电池是电动汽车的核心能量源。电动汽车的续航里程取决于动力电池的比能量和电动汽车搭载的电池数量。由于电动汽车的空间和成本的限制，提高动力电池的比能量成为增加电动汽车续航里程的关键。一般地，相同体积下更高比能量的动力电池存储的能量更多，在热失控时可能释放出更多的能量，带来更加严重的安全隐患。因此，需要在动力电池设计过程中就对所设计体系的动力电池的热失控安全性进行充分评价和考量。

传统的，动力电池设计过程中的动力电池安全性主要通过“试错”的方法进行逆向改进。开发一款满足电性能需求的新电池周期约为 12 个月。开发成功之后再对电池单体进行不同滥用条件下的热失控测试，并根据测试结果调整工艺参数，不断重复“试制-测试-调整”的工艺过程直到电池的安全性满足要求。这种安全性逆向改进的方法大大增加了新电池研发成本和研发时间。

### 发明内容

基于此，有必要针对传统的电池安全性逆向评估方法大大增加新电池研发成本和研发时间的问题，提供一种基于材料数据库的数据库驱动的动力电池热失控安全性正向评价方法及装置。

一种数据库驱动的动力电池热失控安全性正向评价方法，基于电池材料热失控特性数据库，实现对动力电池热失控安全性的正向评价，所述评价方法包括：

对多种电池材料分别进行热特性测试，以获得所述多种电池材料的热特性参数；

基于所述热特性参数对多种电池材料分别进行反应动力学分析，建立电池材料热失控特性数据库；

从所述电池材料热失控特性数据库中选取正极材料、负极材料、隔膜材料和电解液材料，组成电池单体模型；以及

对所述电池单体模型的热失控特性进行评价。

在一个实施例中，所述对于电池材料的热特性测试，包括：

对正极材料、负极材料、隔膜材料、电解液材料及不同组分间的耦合热特性进行测试和分析。

在一个实施例中，所述基于所述热特性参数对多种电池材料分别进行反应动力学分析，包括：

材料热失控过程主反应的确定、材料热失控主反应动力学参数拟合和热失控材料数据库的建立。

在一个实施例中，所述热特性测试包括：

所述电池材料的获取；

单独的所述电池材料热特性测试；以及

不同的所述电池材料耦合热特性测试。

在一个实施例中，所述对多种电池材料分别进行热特性测试，获得多种电池材料的热特性参数，包括：

从所述多种电池材料中选取一种电池材料，制备待测试样品；

对所述待测试样品在某一升温速率下进行多次恒升温扫描速率的测试，记录第一类测试结果；

改变升温扫描速率重复多次，以获得不同升温速率下，所述待测试样品的多个所述第一类测试结果；

根据不同升温速率下所述待测试样品的测试结果，生成所述待测试样品在不同升温速率下的恒升温速率热特性曲线；

从所述待测试样品不同升温速率下的恒升温速率热特性曲线中，获取所述待测试样品的热特性参数。

在一个实施例中，所述对多种电池材料分别进行热特性测试，获得多种电池材料的热特性参数，包括：

从所述多种电池材料中选取至少两种电池材料，制备待测试耦合样品；

对所述待测试耦合样品在某一升温速率下进行多次恒升温扫描速率的测试，记录第二类测试结果；

改变升温扫描速率重复多次，以获得不同升温速率下，所述待测试耦合样品的多个所述第二类测试结果；

根据不同升温速率下所述待测试耦合样品的测试结果，生成所述待测试耦合样品在不同升温速率下的恒升温速率热特性曲线；

从所述待测试耦合样品不同升温速率下的恒升温速率热特性曲线中，获取所述待测试耦合样品的热特性参数。

在一个实施例中，制备所述待测试样品和制备所述待测试耦合样品的具体步骤，包括：

将需要测试的正极材料和负极材料混浆后分别涂覆在铝箔或铜箔上，干燥后裁成纽扣电池或三电极电池电极片大小，并再次干燥；

在手套箱内将裁好的电极片与金属锂极片组成“正极/锂”半电池、“负极/锂”半电池或者“正极/锂/负极”三电极电池；

使用充放电台架调整所述“正极/锂”半电池、所述“负极/锂”半电池或者所述“正极/锂/负极”三电极电池的电位；

在手套箱内拆解所述“正极/锂”半电池、所述“负极/锂”半电池或者所述“正极/锂/负极”三电极电池，取出电池中的正极片、负极片、隔膜，并使用绝缘容器分别保存；

根据测试需要，对所述正极片、所述负极片或者所述隔膜进行洗涤；以及

从洗涤后的所述正极片、所述负极片或者所述隔膜中选取电池材料制备所述待测试样品和所述待测试耦合样品。

在一个实施例中，所述基于所述热特性参数对多种电池材料分别进行反应动力学分析，建立电池材料热失控特性数据库，包括：

根据所述恒升温速率热特性曲线判断所述电池材料的主反应；

基于化学反应动力学方程，拟合所述主反应的反应动力学基本参数；

结合所述电池材料的原始数据和拟合得到的反应动力学基本参数建立电池材料热失控特性数据库。

在一个实施例中，所述电池材料热失控特性数据库，包括：

电池材料种类、每一种电池材料的测试数据、每一种电池材料的测试结果以及每一种电池材料的反应动力学基本参数；

所述反应动力学基本参数包括活化能、前向因子、反应焓变和反应级数中的一种或多种。

在一个实施例中，所述电池材料热失控特性数据库，包括：

数据库层、单一材料层、组合材料层和反应记录层。

在一个实施例中，建立所述电池材料热失控特性数据库的步骤，包括：

新建所述待测试样品或者所述待测试耦合样品的热特性数据条目；

确认所述待测试样品或者所述待测试耦合样品的基本信息；

确认所述待测试样品或者所述待测试耦合样品测试数据的基本情况；

确认所述待测试样品或者所述待测试耦合样品中所述测试原始数据；

确认所述待测试样品或者所述待测试耦合样品中所述测试原始数据的处理结果；

以上步骤均确认无误后，保存上述的数据库条目，以形成所述电池材料热失控特性数据库。

在一个实施例中，所述对所述电池单体模型的热失控特性进行评价，包括：

对所述电池单体模型热失控特性的定性评价；以及

对所述电池单体模型热失控特性的定量评价。

在一个实施例中，所述对所述电池单体模型热失控特性的定性评价，包括：

从所述电池材料热失控特性数据库中查找所述电池单体模型第一个界面开始失去稳定性时的温度参数；

确认所述电池单体模型负极与电解液反应峰的起始温度、最高温度与终止温度；

确认所述电池单体模型正极第一个分解反应峰的起始温度、最高温度与终止温度；

确认所述电池单体模型正负极混合后主产热峰的起始温度；

确认所述电池单体模型隔膜开始分解的温度和隔膜完全崩溃的温度；

根据时间和所述温度参数，生成所述电池单体模型的热失控副反应温度序列图，对所述电池单体模型的热失控特性进行定性预测。

在一个实施例中，所述对所述电池单体模型热失控特性的定量评价，包括：

从所述电池材料热失控特性数据库中，获得负极材料和电解液材料耦合样品热稳定性测试的各主反应的反应动力学参数；

从所述电池材料热失控特性数据库中，获得正极材料和负极材料耦合样品热稳定性测试的各主反应的反应动力学参数；

从所述电池材料热失控特性数据库中，获得隔膜材料样品的各主反应的反应动力学参数；

基于叠加原理与能量守恒方程，定量预测所述电池单体模型在热失控过程中的温度变化。

一种动力电池热失控安全性正向评价装置。所述装置包括：

热特性参数获取模块，用于对多种电池材料分别进行热特性测试，以获得所述多种电池材料的热特性参数；

电池材料热失控特性数据库建立模块，用于基于所述热特性参数对多种电池材料分别进行反应动力学分析，建立电池材料热失控特性数据库；

电池单体模型建立模块，用于从所述电池材料热失控特性数据库中选取正极材料、负极材料、隔膜材料和电解液材料，组成电池单体模型；以及

热失控评价模块，用于对所述电池单体模型的热失控特性进行评价。

一种计算机设备，包括存储器和处理器，所述存储器存储有计算机程序，所述处理器执行所述计算机程序时实现上述任一项所述方法的步骤。

一种计算机可读存储介质，其上存储有计算机程序，所述计算机程序被处理器执行时实现上述任一项所述的方法的步骤。

本申请涉及一种数据库驱动的动力电池热失控安全性正向评价方法。所述评价方法通过对多种电池材料分别进行热特性测试，获得热特性参数。并基于所述热特性参数对多种电池材料分别进行反应动力学分析，建立电池材料热失控特性数据库。进一步从所述电池材料热失控特性数据库中选取不同的电池材料，组成电池单体模型。最终实现对所述电池单体模型的热失控特性进行评价。本申请可以基于所述电池材料热失控特性数据库，获得不同电池材料的热特性参数，在不组装出全电池的情况下对动力电池的热失控特性进行评价和预测。本申请的评价方法提高了动力电池安全性设计的效率，节约电池研发成本，对于电动车用动力电池的安全设计与防控具有重要的实用价值和指导意义。

## 附图说明

为了更清楚地说明本申请实施例或现有技术中的技术方案，下面将对实施例或现有技术描述中所需要使用的附图作简单地介绍，显而易见地，下面描述中的附图仅仅是本申请的实施例，对于本领域普通技术人员来讲，在不付出创造性劳动的前提下，还可以根据公

开的附图获得其他的附图。

图 1 为本申请一个实施例中提供的一种数据库驱动的动力电池热失控安全性正向评价方法的流程示意图；

图 2 为本申请一个实施例中提供的一种获得电池材料的热特性参数的方法流程示意图；

图 3 为本申请一个实施例中提供的一种获得电池材料的热特性参数的方法流程示意图；

图 4 为本申请实施例中提供的电池材料差示扫描量热仪测试结果示意图；

图 5 为本申请一个实施例中提供的一种建立电池材料热失控特性数据库的方法流程示意图；

图 6 为本申请实施例中提供的电池材料热失控数据库的数据存储条目示意图；

图 7 为本申请实施例中提供的电池材料热失控数据库的存储结构示意图；

图 8 为本申请一个实施例中提供的一种电池单体模型热失控特性的定性评价方法的流程示意图；

图 9 为本申请一个实施例中提供的一种电池单体模型热失控特性的定量评价方法的流程示意图；

图 10 为本申请实施例中提供的电池单体热失控特性定性预测示意图。

## 具体实施方式

下面将结合本申请实施例中的附图，对本申请实施例中的技术方案进行清楚、完整地描述，显然，所描述的实施例仅仅是本申请一部分实施例，而不是全部的实施例。基于本申请中的实施例，本领域普通技术人员在没有做出创造性劳动前提下所获得的所有其他实施例，都属于本申请保护的范围。

由于动力电池热失控时的反应过程较为复杂，动力电池受热发展成为热失控是多种材料间的耦合反应共同作用的结果。在动力电池受热后，内部会依次发生电池界面失去热稳定性、负极与电解液反应、隔膜融化、正极分解反应、以及大规模内短路的放热过程，并最终导致动力电池的热失控。

基于上述分析，需要提供一种在电池设计的过程中就可以对电池单体热失控特性进行正向预测的方法。这种正向预测的方法不仅需要考虑电池内部不同组分材料单独的放热反应，也需要考虑多种材料间的耦合热失控特性。如果可以建立以材料热失控、材料耦合热失控数据为基础的材料热失控特性数据库，就能够在电池设计阶段，对不同种类材料组合制成的全电池的热失控行为进行预测。基于电池材料热失控特性数据库来设计电动车用动力电池，可以进一步提高动力电池安全性设计的效率、节约电池研发成本，对于电动车用动力电池的安全设计与防控具有重要的实用价值和指导意义。

请参阅图 1，本申请实施例提供一种数据库驱动的动力电池热失控安全性正向评价方法。所述数据库驱动的动力电池热失控安全性正向评价方法基于电池材料热失控特性数据库来设计电动车用动力电池。

所述数据库驱动的动力电池热失控安全性正向评价方法包括:

S10, 对多种电池材料分别进行热特性测试, 获得多种电池材料的热特性参数。

本步骤中, 对于电池材料的热特性测试主要包括对正极材料、负极材料、隔膜材料、电解液材料及不同组分间的耦合热特性进行测试和分析。

S20, 基于所述热特性参数对多种电池材料分别进行反应动力学分析, 建立电池材料热失控特性数据库;

本步骤中, 所述基于所述热特性参数对多种电池材料分别进行反应动力学分析可以包括材料热失控过程主反应的确定、材料热失控主反应动力学参数拟合和热失控材料数据库的建立三个部分。

S30, 从所述电池材料热失控特性数据库中选取正极材料、负极材料、隔膜材料和电解液材料, 组成电池单体模型。

本步骤中, 可以任意选取和切换电池材料组成多种不同类型的电池单体模型。具体的可以根据实际需求进行设计, 对于能组成的所述电池单体模型的结构, 在此不作具体的限定。

S40, 对所述电池单体模型的热失控特性进行评价。

本步骤中, 对所述电池单体模型的热失控特性评价可以分为两部分。第一部分对所述电池单体模型的热失控特性的定性评价。第二部分对所述电池单体模型热失控特性定量评价。

本实施例中, 对多种电池材料分别进行热特性测试, 获得多种电池材料的热特性参数。并基于所述热特性参数对多种电池材料分别进行反应动力学分析, 建立电池材料热失控特性数据库。进一步从所述电池材料热失控特性数据库中选取正极材料、负极材料、隔膜材料和电解液材料, 组成电池单体模型。最终实现对所述电池单体模型的热失控特性进行评价。本申请可以基于所述电池材料热失控特性数据库, 获得不同电池材料的热特性参数, 在不组装出全电池的情况下对动力电池的热失控特性进行评价和预测。本申请的评价方法提高了动力电池安全性设计的效率, 节约电池研发成本, 对于电动车用动力电池的安全设计与防控具有重要的实用价值和指导意义

在一个实施例中, 所述热特性测试包括: 电池材料的获取, 单独的电池材料热特性测试以及不同电池材料耦合热特性测试三部分。

第一部分, 电池材料的获取: 在测试前对正负极材料进行循环嵌锂。因此在电池材料获取环节中, 正极材料和负极材料需要通过制备和拆解纽扣电池或者三电极电池得到。隔膜和电解液可以使用未经循环的新鲜材料。

第二部分, 单一的电池材料热特性测试: 测试对象为正极材料、负极材料、隔膜材料以及电解液材料。主要测试内容为电池正极材料、负极材料、隔膜材料和电解液材料的热稳定性。测试可使用的测试仪器为差示扫描量热仪。最终获得单独的电池材料热特性测试的热特性参数。

第三部分, 不同电池材料耦合热特性测试: 测试对象为正极材料+电解液材料、负极材料+电解液材料、隔膜材料+电解液材料以及正极材料+负极材料+电解液材料。主要测试

内容为以上测试对象的耦合热稳定性。测试可使用的测试仪器为差示扫描量热仪。最终获得不同电池材料耦合热特性测试的热特性参数。

请参阅图 2, 在一个实施例中, 所述对多种电池材料分别进行热特性测试, 获得多种电池材料的热特性参数, 包括:

S110, 从所述多种电池材料中选取一种电池材料, 制备待测试样品。制备所述待测试样品的具体操作步骤并不一一限定, 可以参阅后述的操作步骤进行。

S112, 对所述待测试样品进行多次恒升温扫描速率的测试, 记录第一类测试结果。

S114, 重复多次改变扫描速率, 以获得不同升温速率下, 所述待测试样品的多个所述第一类测试结果。S116, 根据不同升温速率下所述待测试样品的测试结果, 生成所述待测试样品不同升温速率下的恒升温速率热特性曲线。步骤 S112-步骤 S116 绘制了所述待测试样品不同升温速率下的恒升温速率热特性曲线。

S118, 从所述待测试样品不同升温速率下的恒升温速率热特性曲线中, 获取所述待测试样品的热特性参数。

本实施例中, 利用恒升温扫描测试的方式绘制出了所述待测试样品的恒升温速率热特性曲线。根据所述待测试样品不同升温速率下的恒升温速率热特性曲线可以方便准确的获取所述待测试样品的热特性参数。

请参阅图 3, 在一个实施例中, 所述对多种电池材料分别进行热特性测试, 获得多种电池材料的热特性参数, 包括:

S111, 从所述多种电池材料中选取至少两种电池材料, 制备待测试耦合样品。制备所述待测试耦合样品的具体操作步骤并不一一限定, 可以参阅后述的操作步骤进行。

S113, 对所述待测试耦合样品进行多次恒升温扫描速率的测试, 记录第二类测试结果。

S115, 重复多次改变扫描速率, 以获得不同升温速率下, 所述待测试耦合样品的多个所述第二类测试结果。S117, 根据不同升温速率下所述待测试耦合样品的测试结果, 生成所述待测试耦合样品不同升温速率下的恒升温速率热特性曲线。步骤 S113-步骤 S117 绘制了所述待测试耦合样品不同升温速率下的恒升温速率热特性曲线。

S119, 从所述待测试耦合样品不同升温速率下的恒升温速率热特性曲线中, 获取所述待测试耦合样品的热特性参数。

本实施例中, 利用恒升温扫描测试的方式绘制出了所述待测试耦合样品的恒升温速率热特性曲线。根据所述待测试耦合样品不同升温速率下的恒升温速率热特性曲线可以方便准确的获取所述待测试耦合样品的热特性参数。

以上两个实施例, 在步骤 S110 和步骤 S111 中制备待测试样品和制备待测试耦合样品的具体步骤可以包括:

S101, 将需要测试的正极材料和负极材料混浆后分别涂覆在铝箔或铜箔上, 干燥后裁成纽扣电池或三电极电池电极片大小, 并再次干燥。所述正极材料和所述负极材料混浆时可以使用经验比例, 质量比正极材料:PVDF(粘结剂):石墨=8:1:1, 质量比负极材料:PVDF(粘结剂)=94:6。具体的, 在实际操作中还可以根据不同的正负极材料采用其他的配方比例。

S102, 在手套箱内将装载好的电极片与金属锂极片组成“正极/锂”和“负极/锂”半

电池或者“正极/锂/负极”三电极电池;

S103, 使用充放电台架调整半电池或三电极电池电位, 即调整正极或负极对锂电位, 使极片达到所需要的嵌锂程度 (0-100%)。

S104, 在手套箱内拆解半电池或金属锂电池, 取出电池中的正极片、负极片、隔膜, 使用绝缘容器分别保存。

S105, 根据测试需要, 可以对取出的样品进行洗涤。洗涤的具体方法为在碳酸二甲酯中浸泡 30 分钟-2 小时后取出。然后在手套箱惰性气氛内进行干燥, 干燥后使用绝缘容器保存。

S106, 根据测试的需要制备待测试样品。所述待测试样品在制备时使用陶瓷剪刀剪取少量电极片, 或用刮刀刮取一定量的活性材料用于恒升温扫描测试, 并进行后续分析。

以上两个实施例中, 在步骤 S112、步骤 S114 以及步骤 S116 和步骤 S113、步骤 S115 以及步骤 S117 的具体步骤可以参考以下的操作:

在手套箱中取用中保存好的电池材料。按照测试需要制备待测试样品或者待测试耦合样品并放入测试容器。在制备耦合热特性测试的样品时, 不同电池组分需要按照单体电池/纽扣电池中的实际质量比例或经验比例制备。样品制备好之后, 可以使用差示扫描量热仪对待测试样品或者待测试耦合样品进行恒升温扫描速率的测试。具体的, 差示扫描量热仪的扫描速率可以为 1°C/min, 2°C/min, 5°C/min, 10°C/min, 15°C/min, 20°C/min 中的任意 5 个。改变扫描速率, 重复进行恒升温扫描速率的测试。得到至少 5 组不同扫描速率的样品恒升温速率热特性曲线。如图 4 所示, 提供了四种不同的电池材料制备的所述待测试样品和所述待测试耦合样品的恒升温速率热特性曲线。

请参阅图 5, 在一个实施例中, 所述基于所述热特性参数对多种电池材料分别进行反应动力学分析, 建立电池材料热失控特性数据库, 包括:

S210, 根据所述恒升温速率热特性曲线判断所述电池材料的主反应。本步骤中, 主反应确认需要依据如图 4 所示的材料热稳定性测试结果。如图 4 所示, 正极材料分解有三个主要的放热峰, 可以判定为三个主反应。负极材料有三个主要的放热峰, 也为三个主反应。正极材料+负极材料有三个主要的放热峰, 可以判定为三个主反应。隔膜材料只有在约 140°C 处的一个明显的吸热峰, 判定为一个主反应。

S220, 基于化学反应动力学方程 Arrhenius, 拟合所述主反应的反应动力学基本参数。具体的, 在一个实施例中, 所述反应动力学基本参数包括活化能、前向因子、反应焓变和反应级数。

利用各个电池材料的所述热特性参数确认各主反应的反应动力学参数。在此给出一种基于 Arrhenius 方程的 n 级反应动力学参数拟合方法。首先确认不同主反应在不同升温速率下的峰值温度, 如表 1 是某种三元材料的峰值温度:

表 1 某三元正极材料不同升温速率峰值温度:

| 峰/升温速率   | 2°C/分钟 | 5°C/分钟 | 10°C/分钟 | 15°C/分钟 | 20°C/分钟 |
|----------|--------|--------|---------|---------|---------|
| 峰 1 峰值温度 | 237.4  | 250    | 260.3   | 267.8   | 269     |
| 峰 2 峰值温度 | 391.8  | 409.2  | 423.8   | 434     | 435.7   |

|          |       |       |       |       |       |
|----------|-------|-------|-------|-------|-------|
| 峰 3 峰值温度 | 439.7 | 453.9 | 466.2 | 479.1 | 484.3 |
|----------|-------|-------|-------|-------|-------|

对于峰 1, 峰值温度与升温速率满足的公式:

$$\ln\left(\frac{\beta}{T_p^2}\right) = \ln\left(\frac{AR}{E}\right) - \frac{E}{RT_p} \quad (1)$$

得到反应活化能和反应前向因子, 其中,  $\beta$  为升温速率,  $\alpha$  为反应的转化率,  $A$  为反应前向因子,  $E$  为反应活化能,  $T_p$  为反应峰值温度,  $R$  为理想气体常数  $8.314\text{J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ 。

根据反应放热公式, 结合遗传算法和非线性拟合方法得到反应焓变和反应级数。所述反应放热公式包括:

$$\frac{d\alpha(t)}{dt} = A \cdot \exp\left(-\frac{E}{RT(t)}\right) \cdot f(\alpha(t)) \quad (2)$$

$$\alpha(t) = 1 - \int_0^t \frac{d\alpha(\tau)}{d\tau} d\tau \quad (3)$$

$$f(\alpha(t)) = (\alpha(t))^n \quad (4)$$

$$Q = \Delta H \cdot \frac{d\alpha(t)}{dt} \quad (5)$$

其中,  $\alpha$  为反应的转化率, 反应起始可设为 1,  $n$  为反应级数,  $\Delta H$  为反应焓变,  $Q$  为反应放热功率,  $A$  为反应前向因子,  $E$  为反应活化能,  $T$  为反应温度,  $R$  为理想气体常数  $8.314\text{J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ 。

根据式(1)线性拟合可以得到峰 1 反应的活化能及前向因子, 再根据反应放热公式(2)-(5), 采用遗传算法等非线性拟合方法可以得到峰 1 反应的焓变及反应级数。对于峰 2 和峰 3 的反应动力学参数可以用同样的方法获得。如表 2 所示, 是某种三元材料拟合得到的反应动力学参数示意:

表 2 某三元正极材料各主反应反应动力学参数拟合结果

| 反应动力学参数/反应峰                          | 峰 1                  | 峰 2                   | 峰 3                   |
|--------------------------------------|----------------------|-----------------------|-----------------------|
| $A / \text{s}^{-1}$                  | $7.1 \times 10^{12}$ | $8.71 \times 10^{12}$ | $8.71 \times 10^{12}$ |
| $E / \text{J} \cdot \text{mol}^{-1}$ | $1.51 \times 10^5$   | $2.00 \times 10^5$    | $2.13 \times 10^5$    |
| $n$                                  | 1.14                 | 1.61                  | 1.65                  |
| $\Delta H / \text{J}$                | 50                   | 78.5                  | 15.6                  |

S230, 结合所述电池材料的原始数据和拟合得到的反应动力学基本参数建立电池材料热失控特性数据库。

具体的, 建立电池材料热失控特性数据库可以包括以下步骤:

S231, 新建所述待测试样品或者所述待测试耦合样品的热特性数据条目。具体的本步骤中, 在数据库中新建待测试样品、待测试耦合样品的热特性数据条目。本步骤中, 数据条目按照样品的分类和名称进行存储。其中在存储时, 电解液可以按照主要的盐成分进行命名。

S232, 确认所述待测试样品或者所述待测试耦合样品的基本信息。具体的本步骤中, 确认存储样品的基本信息, 包括样品名称、测试样品量、样品不同组分的组成/化学式、厂商、批次以及其它已知信息, 并填入数据库条目中。本步骤中与样品相关的信息均需要记录, 包括但不限于正负极活性物质材料的粒度、比表面积、比容量、添加导电石墨和粘结剂量, 以及电解液的添加剂及含量。

S233, 确认所述待测试样品或者所述待测试耦合样品测试数据的基本情况。具体的本步骤中, 确认测试数据的基本情况, 包括测试时间、使用的仪器型号、使用坩埚型号、温升速率选取以及其它测试相关信息, 并填入数据库条目中。

S234, 确认所述待测试样品或者所述待测试耦合样品中所述测试原始数据。具体的本步骤中, 确认测试原始数据, 即不同温升速率的原始时间、温度、热流量, 并填入数据库条目中。此处如果设备有连接其他的同步测试仪器, 如质谱仪等, 原始数据需要一并记录和存储。本步骤中, 至少存储 5 组不同温升速率的样品测试原始数据, 如有连接其他的同步测试仪器, 包括但不限于气相色谱仪、质谱仪等, 原始数据需要一并记录和存储。

S235, 确认所述待测试样品或者所述待测试耦合样品中所述测试原始数据的处理结果。具体的本步骤中, 确认原始数据的处理结果。本步骤中还包括确认不同温升速率曲线的温度峰位置、以及不同峰值的反应动力学参数, 并填入数据库条目中。本步骤中, 样品不同峰值的反应动力学参数包括但不限于反应活化能  $E$ , 反应前向因子  $A$ , 反应级数  $n$ , 反应焓变  $\Delta H$ 。如果某个反应峰不属于标准  $n$  级反应类型, 需要记录该反应峰对应的反应类型 (如连续反应、自催化反应等) 及相应的反应动力学参数。

S236, 以上步骤均确认无误后, 保存上述的数据库条目, 以形成所述电池材料热失控特性数据库。具体的本步骤中, 确认无误后, 保存该数据库条目。

具体的, 请参阅图 6 在一个实施例中, 所述电池材料热失控特性数据库是针对三元 111 ( $\text{Li}_y(\text{Ni}_{0.33}\text{Co}_{0.33}\text{Mn}_{0.33})\text{O}_2$ ) + 电解液 ( $1\text{mol LiPF}_6 \text{ EC:EMC:DMC}=1:1:1$ ) 组成的所述电池单体模型建立的。图 6 中所述电池材料热失控特性数据库包括: 电池材料种类、每一种电池材料的测试数据、每一种电池材料的测试结果以及每一种电池材料的动力学基本参数。具体的, 请参阅图 7 在一个实施例中, 所述电池材料热失控特性数据库是针对三元 111 ( $\text{Li}_y(\text{Ni}_{0.33}\text{Co}_{0.33}\text{Mn}_{0.33})\text{O}_2$ ) + 电解液 ( $1\text{mol LiPF}_6 \text{ EC:EMC:DMC}=1:1:1$ ) 组成的所述电池单体模型建立的。所述电池材料热失控特性数据库, 包括: 数据库层、单一材料层、组合材料层和反应记录层。在数据进行查找时, 首先按照样品名称进行查找, 如有多条记录, 可以辅助样品量、厂商、型号等信息查找。

本实施例中, 在所述电池材料热失控特性数据库的建立时, 系统地存储不同种类电池材料热特性测试的原始数据及参数拟合结果。在进行不同材料体系电池单体的热失控特性预测时, 可以直接从材料热特性数据库中提取已有的数据进行分析。也可以更改某一材料组分, 对改变后的电池热失控特性进行对比预测。进一步可根据预测结果, 选取较为安全的材料体系, 或对已确定的材料体系热失控特性进行改进。

本实施例中, 通过对多种电池材料分别进行反应动力学分析, 建立电池材料热失控特

性数据库。所述电池材料热失控特性数据库可以清楚、明了的显示所述电池材料的反应动力学参数。

由于电池热失控是由一系列链式反应过程最终导致的，对于目前广泛使用的液态有机电解质锂离子动力电池，在受热时首先是负极的固体电解质膜（Solid Electrolyte Interface, SEI）界面失去稳定性。在实际电池热失控的过程中，各副反应的顺序并不是确定的，对于不同的电池材料和耦合过程，各副反应的起始温度、放热量也有很大差别。因此，需要确认电池单体在热失控的过程中，各副反应的发生顺序与温度，以及各副反应放热对电池热失控的贡献。

在一个实施例中，所述步骤 S40 对所述电池单体模型的热失控特性进行评价，包括对所述电池单体模型热失控特性的定性评价以及对所述电池单体模型热失控特性的定量评价。简单来说是根据所建立的所述电池材料热失控特性数据库，查找对应材料及组合的热失控数据，对电池单体模型的热失控特性进行预测。

请参阅图 8，在一个实施例中，所述单体电池模型包括正极材料（Ca\_A）、负极材料（An\_B）、隔膜材料（Sep\_C）和电解液材料（Ele\_D）。所述 S40，对所述电池单体模型热失控特性的定性评价，包括：

S401，从所述电池材料热失控特性数据库中查找所述电池单体模型第一个界面开始失去稳定性时的温度参数。在所述电池材料热失控特性数据库中根据样品名称查找数据。由负极材料（An\_B）+电解液材料（Ele\_D），或正极材料（Ca\_A）+电解液材料（Ele\_D）的热稳定性测试的结果，确认首个界面开始失去稳定性的起始温度、最高温度与终止温度。其中首个界面开始失去稳定性是指对于常规液态有机电解质体系为负极的固体电解质膜分解峰。本步骤中，对于常规的液态有机电解液体系，SEI 分解峰的位置为 100℃左右，即图 4 中所示的负极材料的峰 1。

S402，确认所述电池单体模型负极与电解液反应峰的起始温度、最高温度与终止温度。在所述电池材料热失控特性数据库中根据样品名称查找数据。由负极材料（An\_B）+电解液材料（Ele\_D）热稳定性测试的结果，确认负极与电解液反应峰的起始温度、最高温度与终止温度。本步骤中负极材料与电解液材料的反应峰紧随 SEI 分解峰之后，即图 4 中负极材料的峰 2。

S403，确认所述电池单体模型正极第一个分解反应峰的起始温度、最高温度与终止温度。在所述电池材料热失控特性数据库中根据样品名称查找数据。由正极材料（Ca\_A）热稳定性测试的结果，确认正极第一个分解反应峰的起始温度、最高温度与终止温度。本步骤中正极材料的第一个热分解峰即图 4 中正极材料的峰 1。

S404，确认所述电池单体模型正负极混合后主产热峰的起始温度。在所述电池材料热失控特性数据库中根据样品名称查找数据。由正极材料（Ca\_A）+负极材料（An\_B）耦合热稳定性测试的结果，确认正极材料和负极材料混合后主产热峰的起始温度。本步骤中正极材料+负极材料的主产热峰即图 4 中正极材料+负极材料的峰 4。

S405，确认所述电池单体模型隔膜开始分解的温度和隔膜完全崩溃的温度。在所述电池材料热失控特性数据库中根据样品名称查找数据。由隔膜材料（Sep\_C）+电解液材料

(Ele\_D) 材料热稳定性测试的结果, 确认隔膜材料开始分解与完全崩溃的温度。本步骤中, 大规模内短路开始温度为图 4 中隔膜材料完全崩溃的温度。

S406, 根据时间和所述温度参数, 生成所述电池单体模型的热失控副反应温度序列图, 对所述电池单体模型的热失控特性进行定性预测。上述步骤 S401-S405 中温度参数的获取顺序可以自行调整, 在此不仅仅限定为以上的一种获取顺序。根据以上 S401-S405 中确认的温度范围, 生成热失控副反应温度序列图。对由正极材料 (Ca\_A)、负极材料 (An\_B)、隔膜材料 (Sep\_C)、电解液材料 (Ele\_D) 组成的电池单体模型的热失控特性进行定性预测。

请参阅图 9, 在一个实施例中, 所述对所述电池单体模型热失控特性的定量评价, 包括:

S411, 从所述电池材料热失控特性数据库中, 获得负极材料和电解液材料耦合样品热稳定性测试的各主反应的反应动力学参数。本步骤中, 可以根据样品名称, 从所述电池材料热失控特性数据库中, 获得负极材料 (An\_B)+电解液材料 (Ele\_D) 耦合热稳定性测试的各主反应的反应动力学参数。

S412, 从所述电池材料热失控特性数据库中, 获得正极材料和负极材料耦合样品热稳定性测试的各主反应的反应动力学参数。本步骤中, 可以根据样品名称, 从所述电池材料热失控特性数据库中, 获得正极材料 (Ca\_A)+负极材料 (An\_B) 耦合热稳定性测试的各主反应的反应动力学参数。

S413, 从所述电池材料热失控特性数据库中, 获得隔膜材料样品的各主反应的反应动力学参数。本步骤中, 可以根据样品名称, 从所述电池材料热失控特性数据库中, 获得隔膜材料 (Sep\_C) 的各主反应的反应动力学参数。

S414, 基于叠加原理与能量守恒方程, 定量预测所述电池单体模型在热失控过程中的温度变化。

本步骤中, 定量预测电池热失控温度变化的方法如下:

假设在 S411 中, 负极材料 (An\_B)+电解液材料 (Ele\_D) 的总产热功率为  $Q_1$ , 产热曲线共有三个主反应, 根据产热叠加原理, 对应主反应的产热功率为  $Q_{11}$ ,  $Q_{12}$ ,  $Q_{13}$  则,

$$Q_1 = Q_{11} + Q_{12} + Q_{13} \quad (6)$$

各主反应的反应动力学参数可以在所述电池材料热失控特性数据库中获得, 则能够通过公式(2)-(5)计算得到  $Q_{11}$ ,  $Q_{12}$ ,  $Q_{13}$ , 进而根据公式(6)获得  $Q_1$ ;

同理可以获得正极材料 (Ca\_A)+负极材料 (An\_B) 耦合产热功率  $Q_2$  和隔膜产热功率  $Q_3$ , 根据产热叠加原理, 所述电池单体模型的总产热功率  $Q$  为:

$$Q = Q_1 + Q_2 + Q_3 \quad (7)$$

根据能量守恒方程, 在绝热条件下电池的温升速率满足公式:

$$\frac{dT}{dt} = \frac{Q}{M \cdot C_p} \quad (8)$$

再对所述电池单体模型的温升速率积分，就可以得到电池在绝热热失控条件下，单体温度随时间的变化规律，即对电池单体在热失控过程中的温度特性进行定量预测。

请参阅图 10，为由正极材料（Ca\_A）、负极材料（An\_B）、隔膜材料（Sep\_C）、电解液材料（Ele\_D）组成的电池单体模型的热失控特性预测图。图 10 示出了对应热失控副反应的温度范围，标注为对应的副反应过程。如图 10 所示的电池单体模型热失控特性预测图，可以预测该电池单体约在 100℃左右开始自产热，在 220℃左右由于隔膜崩溃发生内短路，并在 220℃左右由正负极的大规模放热发生热失控。

应该理解的是，虽然图 1-图 3、图 5 和图 8-图 9 的流程图中的各个步骤按照箭头的指示依次显示，但是这些步骤并不是必然按照箭头指示的顺序依次执行。除非本文中有明确的说明，这些步骤的执行并没有严格的顺序限制，这些步骤可以以其它的顺序执行。而且，图 1-图 3、图 5 和图 8-图 9 的至少一部分步骤可以包括多个子步骤或者多个阶段，这些子步骤或者阶段并不必然是在同一时刻执行完成，而是可以在不同的时刻执行，这些子步骤或者阶段的执行顺序也不必然是依次进行，而是可以与其它步骤或者其它步骤的子步骤或者阶段的至少一部分轮流或者交替地执行。

一种数据库驱动的动力电池热失控安全性正向评价装置。所述装置包括：

热特性参数获取模块，用于对多种电池材料分别进行热特性测试，以获得所述多种电池材料的热特性参数；

电池材料热失控特性数据库建立模块，用于基于所述热特性参数对多种电池材料分别进行反应动力学分析，建立电池材料热失控特性数据库；

电池单体模型建立模块，用于从所述电池材料热失控特性数据库中选取正极材料、负极材料、隔膜材料和电解液材料，组成电池单体模型；以及

热失控评价模块，用于对所述电池单体模型的热失控特性进行评价。

一种计算机设备，包括存储器和处理器，所述存储器存储有计算机程序，所述处理器执行所述计算机程序时实现上述任一项所述方法的步骤。

一种计算机可读存储介质，其上存储有计算机程序，所述计算机程序被处理器执行时实现上述任一项所述的方法的步骤。

本领域普通技术人员可以理解实现上述实施例方法中的全部或部分流程，是可以通过计算机程序来指令相关的硬件来完成，所述的计算机程序可存储于一非易失性计算机可读存储介质中，该计算机程序在执行时，可包括如上述各方法的实施例的流程。其中，本申请所提供的各实施例中所使用的对存储器、存储、数据库或其它介质的任何引用，均可包括非易失性和/或易失性存储器。非易失性存储器可包括只读存储器（ROM）、可编程 ROM（PROM）、电可编程 ROM（EPROM）、电可擦除可编程 ROM（EEPROM）或闪存。易失性存储器可包括随机存取存储器（RAM）或者外部高速缓冲存储器。作为说明而非局限，RAM 以多种形式可得，诸如静态 RAM（SRAM）、动态 RAM（DRAM）、同步 DRAM（SDRAM）、双数据率 SDRAM（DDRSDRAM）、增强型 SDRAM（ESDRAM）、同步链路（Synchlink）DRAM（SLDRAM）、存储器总线（Rambus）直接 RAM（RDRAM）、直接存储器总线动态 RAM（DRDRAM）、以及存储器总线动态 RAM（RDRAM）等。

最后，还需要说明的是，在本文中，诸如第一和第二等之类的关系术语仅仅用来将一个实体或者操作与另一个实体或操作区分开来，而不一定要求或者暗示这些实体或操作之间存在任何这种实际的关系或者顺序。而且，术语“包括”、“包含”或者其任何其他变体意在涵盖非排他性的包含，从而使得包括一系列要素的过程、方法、物品或者设备不仅包括那些要素，而且还包括没有明确列出的其他要素，或者是还包括为这种过程、方法、物品或者设备所固有的要素。在没有更多限制的情况下，由语句“包括一个……”限定的要素，并不排除在包括所述要素的过程、方法、物品或者设备中还存在另外的相同要素。

本说明书中各个实施例采用递进的方式描述，每个实施例重点说明的都是与其他实施例的不同之处，各个实施例之间相同相似部分互相参见即可。

对所公开的实施例的上述说明，使本领域专业技术人员能够实现或使用本申请。对这些实施例的多种修改对本领域的专业技术人员来说将是显而易见的，本文中所定义的一般原理可以在不脱离本申请的精神或范围的情况下，在其它实施例中实现。因此，本申请将不会被限制于本文所示的这些实施例，而是要符合与本文所公开的原理和新颖特点相一致的最宽的范围。

## 权利要求

1、一种数据库驱动的动力电池热失控安全性正向评价方法，其特征在于，基于电池材料热失控特性数据库，实现对动力电池热失控安全性的正向评价，所述评价方法包括：

对多种电池材料分别进行热特性测试，以获得所述多种电池材料的热特性参数；

基于所述热特性参数对多种电池材料分别进行反应动力学分析，建立电池材料热失控特性数据库；

从所述电池材料热失控特性数据库中选取正极材料、负极材料、隔膜材料和电解液材料，组成电池单体模型；以及

对所述电池单体模型的热失控特性进行评价。

2、如权利要求 1 所述的数据库驱动的动力电池热失控安全性正向评价方法，其特征在于，所述对于电池材料的热特性测试，包括：

对正极材料、负极材料、隔膜材料、电解液材料及不同组分间的耦合热特性进行测试和分析。

3、如权利要求 1 所述的数据库驱动的动力电池热失控安全性正向评价方法，其特征在于，所述基于所述热特性参数对多种电池材料分别进行反应动力学分析，包括：

材料热失控过程主反应的确定、材料热失控主反应动力学参数拟合和热失控材料数据库的建立。

4、如权利要求 1 所述的数据库驱动的动力电池热失控安全性正向评价方法，其特征在于，所述热特性测试包括：

所述电池材料的获取；

单独的所述电池材料热特性测试；以及

不同的所述电池材料耦合热特性测试。

5、如权利要求 4 所述的数据库驱动的动力电池热失控安全性正向评价方法，其特征在于，所述对多种电池材料分别进行热特性测试，获得多种电池材料的热特性参数，包括：

从所述多种电池材料中选取一种电池材料，制备待测试样品；

对所述待测试样品在某一升温速率下进行多次恒升温扫描速率的测试，记录第一类测试结果；

改变升温扫描速率重复多次，以获得不同升温速率下，所述待测试样品的多个所述第一类测试结果；

根据不同升温速率下所述待测试样品的测试结果，生成所述待测试样品在不同升温速率下的恒升温速率热特性曲线；

从所述待测试样品不同升温速率下的恒升温速率热特性曲线中，获取所述待测试样品的热特性参数。

6、如权利要求 5 所述的数据库驱动的动力电池热失控安全性正向评价方法，其特征在于，所述对多种电池材料分别进行热特性测试，获得多种电池材料的热特性参数，包括：

从所述多种电池材料中选取至少两种电池材料，制备待测试耦合样品；

对所述待测试耦合样品在某一升温速率下进行多次恒升温扫描速率的测试，记录第二类测试结果；

改变升温扫描速率重复多次，以获得不同升温速率下，所述待测试耦合样品的多个所述第二类测试结果；

根据不同升温速率下所述待测试耦合样品的测试结果，生成所述待测试耦合样品在不同升温速率下的恒升温速率热特性曲线；

从所述待测试耦合样品不同升温速率下的恒升温速率热特性曲线中，获取所述待测试耦合样品的热特性参数。

7、如权利要求 6 所述的数据库驱动的动力电池热失控安全性正向评价方法，其特征在于，制备所述待测试样品和制备所述待测试耦合样品的具体步骤，包括：

将需要测试的正极材料和负极材料混浆后分别涂覆在铝箔或铜箔上，干燥后裁成纽扣电池或三电极电池电极片大小，并再次干燥；

在手套箱内将裁好的电极片与金属锂极片组成“正极/锂”半电池、“负极/锂”半电池或者“正极/锂/负极”三电极电池；

使用充放电台架调整所述“正极/锂”半电池、所述“负极/锂”半电池或者所述“正极/锂/负极”三电极电池的电位；

在手套箱内拆解所述“正极/锂”半电池、所述“负极/锂”半电池或者所述“正极/锂/负极”三电极电池，取出电池中的正极片、负极片、隔膜，并使用绝缘容器分别保存；

根据测试需要，对所述正极片、所述负极片或者所述隔膜进行洗涤；以及

从洗涤后的所述正极片、所述负极片或者所述隔膜中选取电池材料制备所述待测试样品和所述待测试耦合样品。

8、如权利要求 6 所述的数据库驱动的动力电池热失控安全性正向评价方法，其特征在于，所述基于所述热特性参数对多种电池材料分别进行反应动力学分析，建立电池材料热失控特性数据库，包括：

根据所述恒升温速率热特性曲线判断所述电池材料的主反应；

基于化学反应动力学方程，拟合所述主反应的反应动力学基本参数；

结合所述电池材料的原始数据和拟合得到的反应动力学基本参数建立电池材料热失控特性数据库。

9、如权利要求 8 所述的数据库驱动的动力电池热失控安全性正向评价方法，其特征在于，

所述电池材料热失控特性数据库，包括：

电池材料种类、每一种电池材料的测试数据、每一种电池材料的测试结果以及每一种电池材料的反应动力学基本参数；

所述反应动力学基本参数包括活化能、前向因子、反应焓变和反应级数中的一种或多种。

10、如权利要求 9 所述的数据库驱动的动力电池热失控安全性正向评价方法，其特征在于，所述电池材料热失控特性数据库，包括：

数据库层、单一材料层、组合材料层和反应记录层。

11、如权利要求 10 所述的数据库驱动的动力电池热失控安全性正向评价方法，其特征在于，建立所述电池材料热失控特性数据库的步骤，包括：

新建所述待测试样品或者所述待测试耦合样品的热特性数据条目；

确认所述待测试样品或者所述待测试耦合样品的基本信息；

确认所述待测试样品或者所述待测试耦合样品测试数据的基本情况；

确认所述待测试样品或者所述待测试耦合样品中所述测试原始数据；

确认所述待测试样品或者所述待测试耦合样品中所述测试原始数据的处理结果；

以上步骤均确认无误后，保存上述的数据库条目，以形成所述电池材料热失控特性数据库。

12、如权利要求 11 所述的数据库驱动的动力电池热失控安全性正向评价方法，其特征在于，所述对所述电池单体模型的热失控特性进行评价，包括：

对所述电池单体模型热失控特性的定性评价；以及

对所述电池单体模型热失控特性的定量评价。

13、如权利要求 12 所述的数据库驱动的动力电池热失控安全性正向评价方法，其特征在于，所述对所述电池单体模型热失控特性的定性评价，包括：

从所述电池材料热失控特性数据库中查找所述电池单体模型第一个界面开始失去稳定性时的温度参数；

确认所述电池单体模型负极与电解液反应峰的起始温度、最高温度与终止温度；

确认所述电池单体模型正极第一个分解反应峰的起始温度、最高温度与终止温度；

确认所述电池单体模型正负极混合后主产热峰的起始温度；

确认所述电池单体模型隔膜开始分解的温度和隔膜完全崩溃的温度；

根据时间和所述温度参数，生成所述电池单体模型的热失控副反应温度序列图，对所述电池单体模型的热失控特性进行定性预测。

14、如权利要求 13 所述的数据库驱动的动力电池热失控安全性正向评价方法，其特征在于，所述对所述电池单体模型热失控特性的定量评价，包括：

从所述电池材料热失控特性数据库中，获得负极材料和电解液材料耦合样品热稳定性测试的各主反应的反应动力学参数；

从所述电池材料热失控特性数据库中，获得正极材料和负极材料耦合样品热稳定性测试的各主反应的反应动力学参数；

从所述电池材料热失控特性数据库中，获得隔膜材料样品的各主反应的反应动力学参数；

基于叠加原理与能量守恒方程，定量预测所述电池单体模型在热失控过程中的温度变化。

15、一种动力电池热失控安全性正向评价装置，其特征在于，所述装置包括：

热特性参数获取模块，用于对多种电池材料分别进行热特性测试，以获得所述多种电池材料的热特性参数；

电池材料热失控特性数据库建立模块，用于基于所述热特性参数对多种电池材料分别进行反应动力学分析，建立电池材料热失控特性数据库；

电池单体模型建立模块，用于从所述电池材料热失控特性数据库中选取正极材料、负极材料、隔膜材料和电解液材料，组成电池单体模型；以及

热失控评价模块，用于对所述电池单体模型的热失控特性进行评价。

16、一种计算机设备，包括存储器和处理器，所述存储器存储有计算机程序，其特征在于，所述处理器执行所述计算机程序时实现权利要求 1 至 14 中任一项所述方法的步骤。

17、一种计算机可读存储介质，其上存储有计算机程序，其特征在于，所述计算机程序被处理器执行时实现权利要求 1 至 14 中任一项所述的方法的步骤。

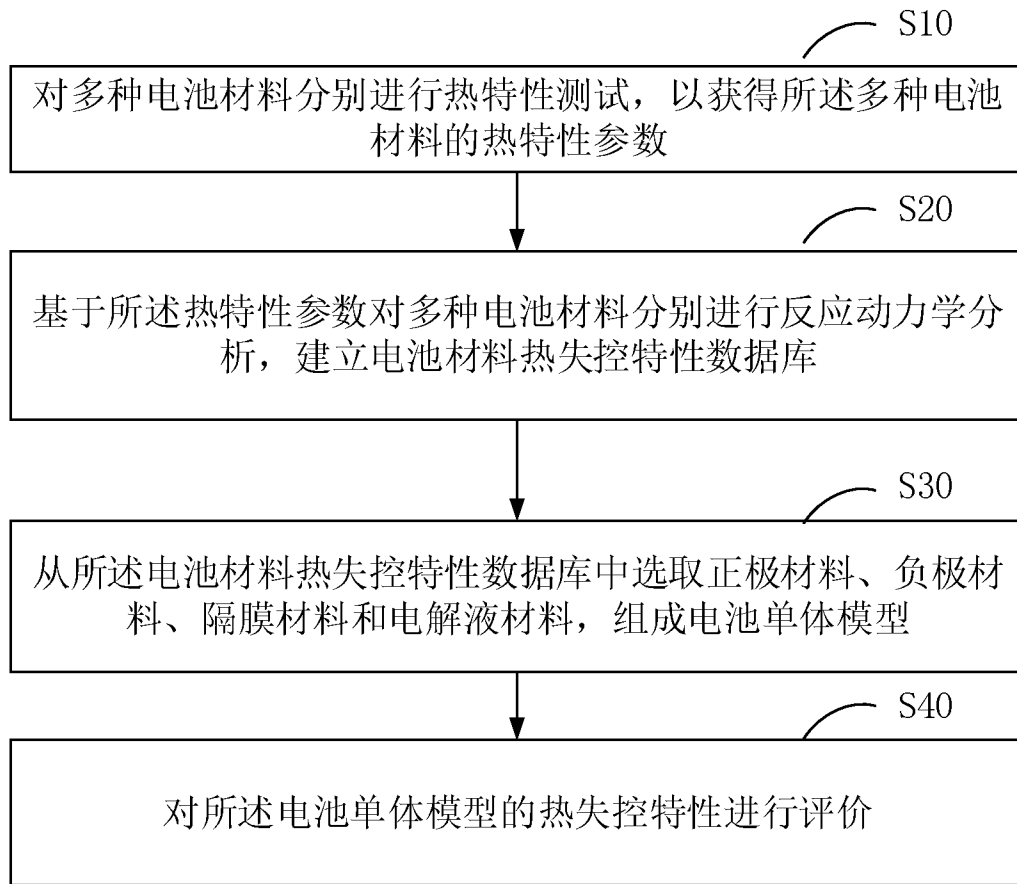


图 1

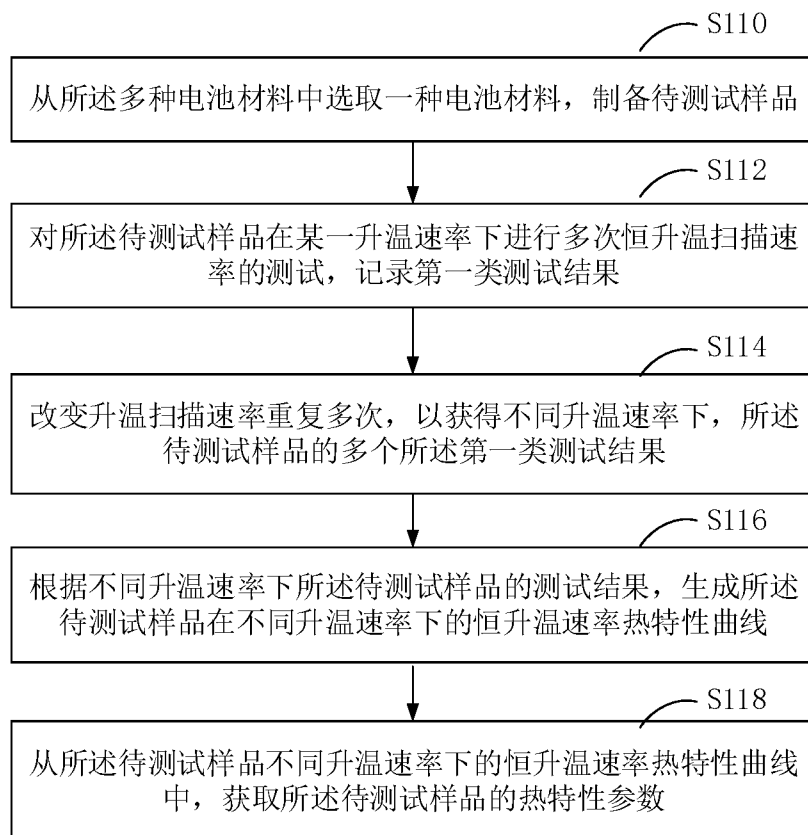


图 2

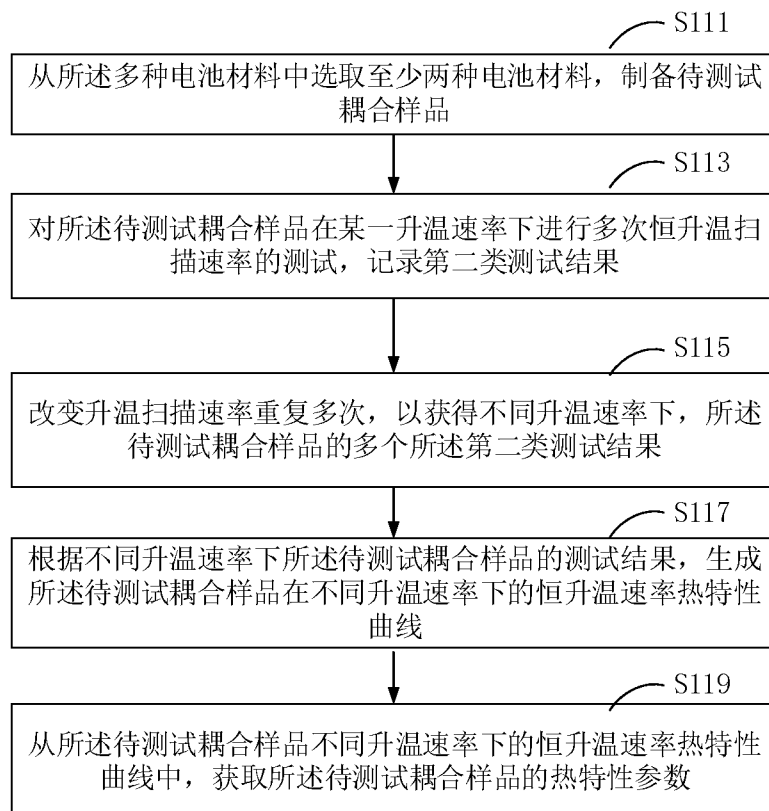


图 3

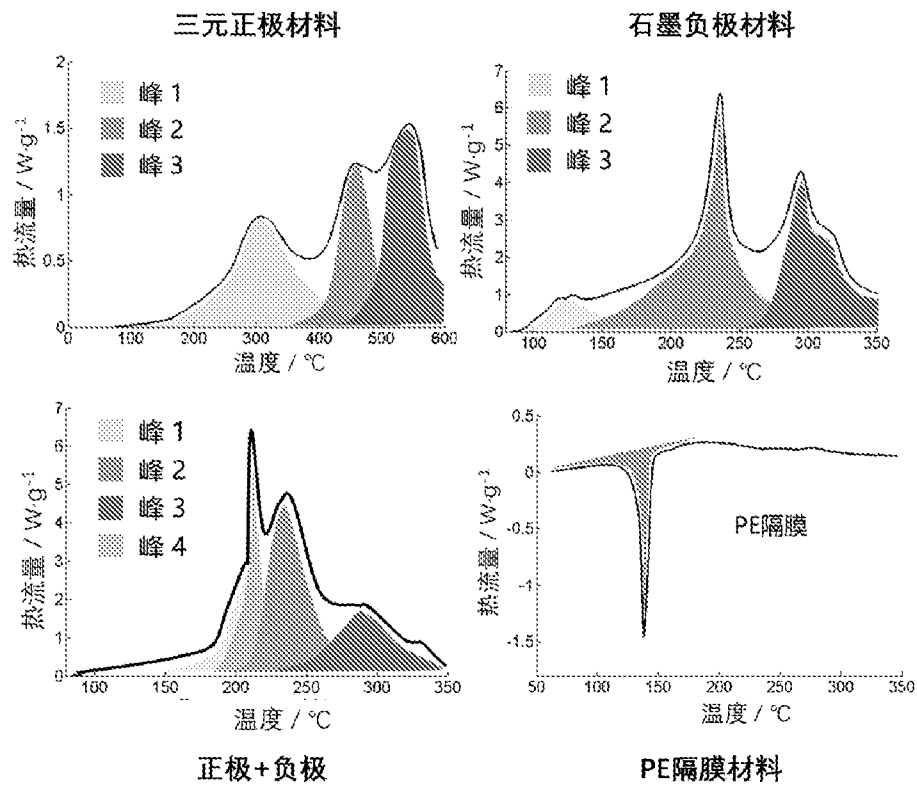


图 4

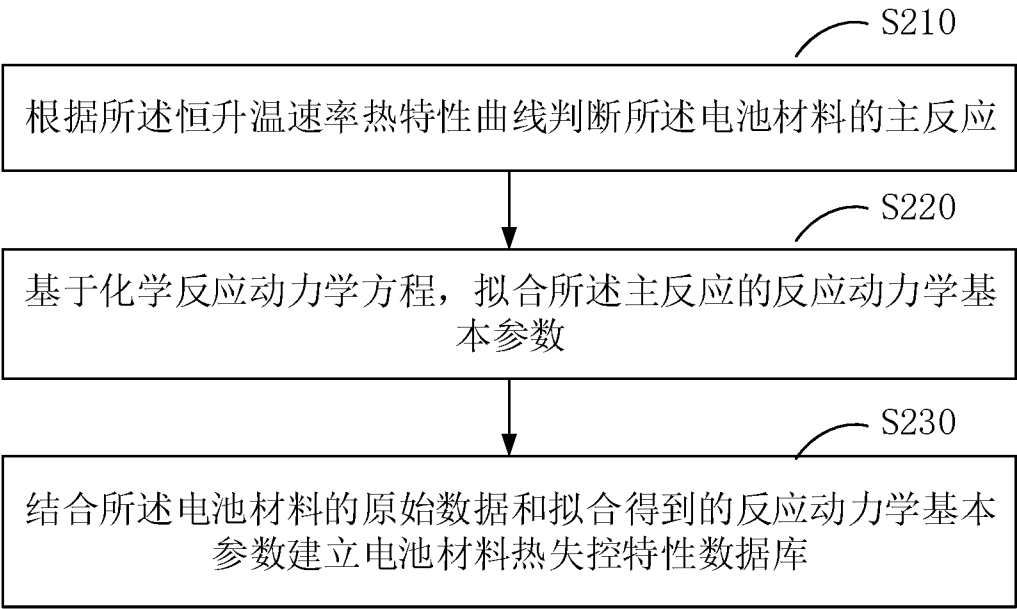


图 5

|                                                                                                                                               |                         |                                                                                        |    |    |       |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------|----|----|-------|
| 样品名称：三元111 (3mg) + LiPF <sub>6</sub> 电解液 (3μL)                                                                                                |                         | 测试时间：20190101                                                                          |    |    |       |
| 样品信息：                                                                                                                                         |                         |                                                                                        |    |    |       |
| 名称：三元111<br>组成：Li <sub>1</sub> (Ni <sub>0.33</sub> Co <sub>0.33</sub> Mn <sub>0.33</sub> )O <sub>2</sub><br>厂商：<br>批次：<br>其他信息：（粒度、比表面积、比容量等） |                         | 名称：电解液<br>组成：1 mol LiPF <sub>6</sub> EC: EMC: DMC=1: 1: 1<br>厂商：<br>批次：<br>其他信息：（添加剂等） |    |    |       |
| 热特性：                                                                                                                                          |                         |                                                                                        |    |    |       |
| DSC测试信息：                                                                                                                                      |                         | 反应动力学参数：                                                                               |    |    |       |
| 使用仪器型号：                                                                                                                                       |                         | 峰1                                                                                     | 峰2 | 峰3 | ..... |
| 使用坩埚型号：                                                                                                                                       | A / s <sup>-1</sup>     |                                                                                        |    |    |       |
| 温升速率选取：                                                                                                                                       | E / J·mol <sup>-1</sup> |                                                                                        |    |    |       |
| 测试原始数据及峰值温度：                                                                                                                                  | n                       |                                                                                        |    |    |       |
| 其它：                                                                                                                                           | ΔH / J                  |                                                                                        |    |    |       |

图 6

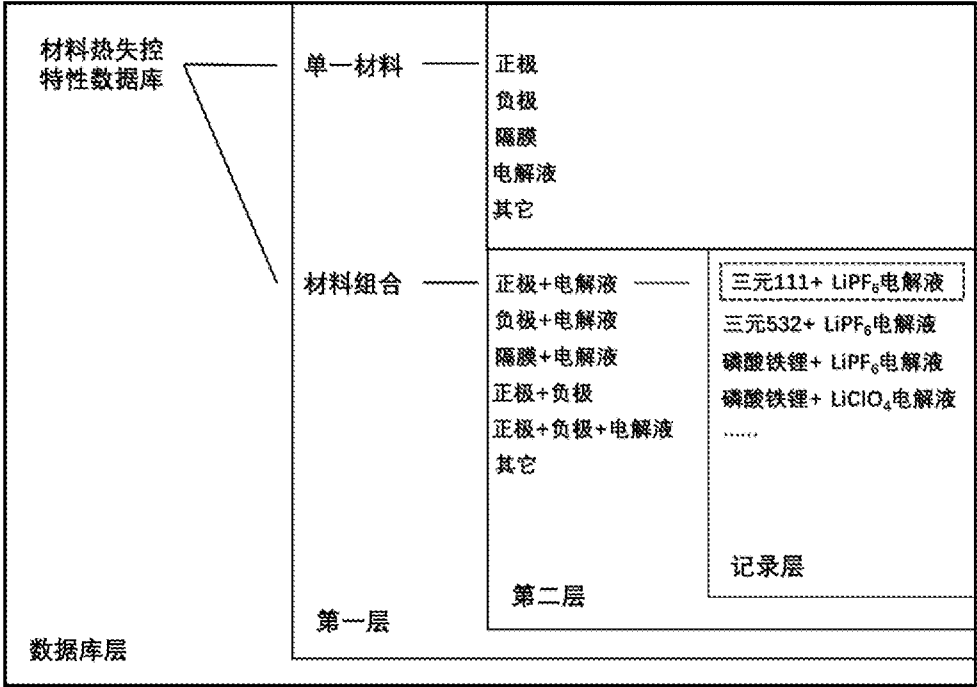


图 7

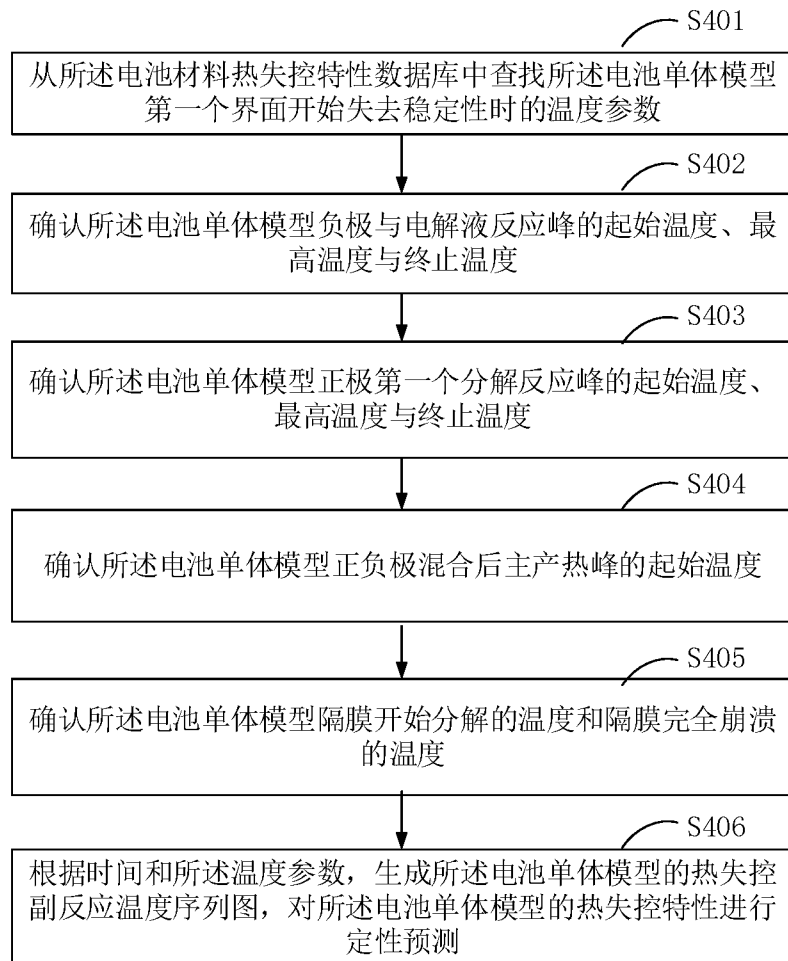


图 8

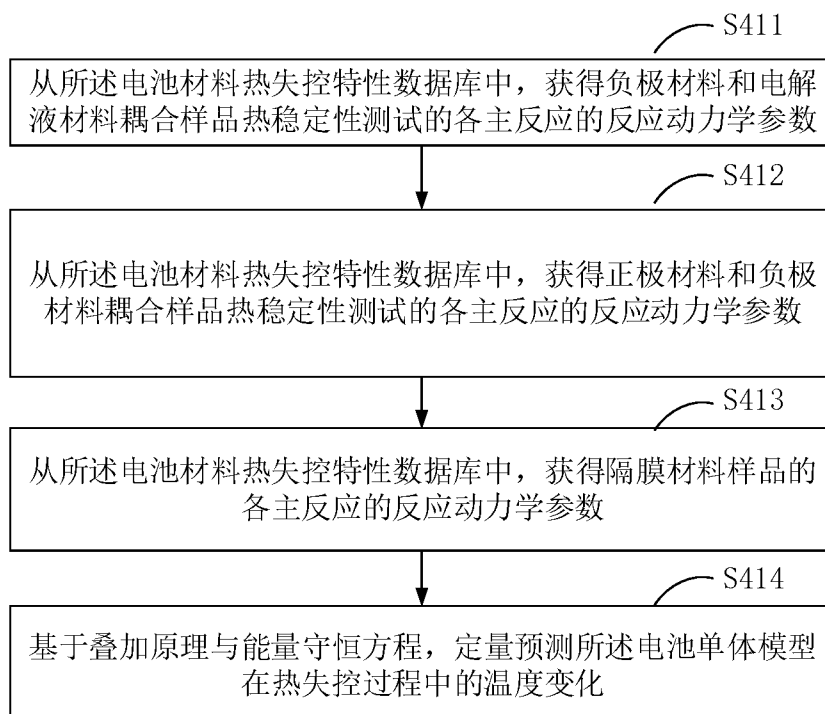


图 9

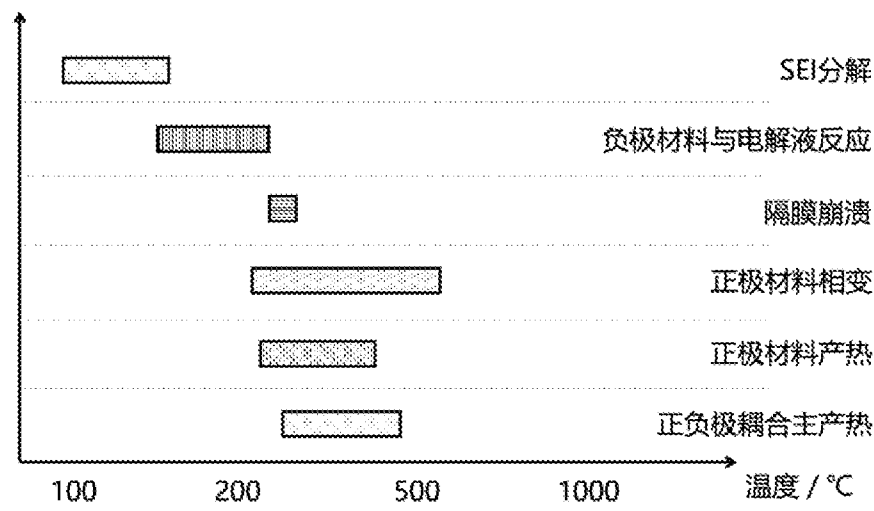


图 10

## INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/CN2019/095778

**A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER**

G01R 31/374(2019.01)i; G01R 31/385(2019.01)i

According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC

**B. FIELDS SEARCHED**

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)

G01R

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched

Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used)

CNPAT, WPI, EPODOC, CNKI: 电池, 热失控, 评价, 评估, 材料, 热特性, 反应动力学, 测试, 热, 数据库, battery, thermal, "out of control", evaluat+, material, runaway, temperature, character+, database

**C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT**

| Category* | Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages                                | Relevant to claim No. |
|-----------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------|
| A         | CN 108446434 A (TSINGHUA UNIVERSITY) 24 August 2018 (2018-08-24)<br>description, paragraphs 5-57, and figures 1-4 | 1-17                  |
| A         | CN 108446435 A (TSINGHUA UNIVERSITY) 24 August 2018 (2018-08-24)<br>entire document                               | 1-17                  |
| A         | CN 108445039 A (TSINGHUA UNIVERSITY) 24 August 2018 (2018-08-24)<br>entire document                               | 1-17                  |
| A         | CN 1987508 A (TIANJIN LISHEN BATTERY JOINT-STOCK CO., LTD.) 27 June 2007<br>(2007-06-27)<br>entire document       | 1-17                  |
| A         | US 2017117725 A1 (OXFORDIAN, LLC) 27 April 2017 (2017-04-27)<br>entire document                                   | 1-17                  |



Further documents are listed in the continuation of Box C.



See patent family annex.

\* Special categories of cited documents:

"A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance

"E" earlier application or patent but published on or after the international filing date

"L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)

"O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means

"P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed

"T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention

"X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone

"Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art

"&" document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search

04 December 2019

Date of mailing of the international search report

02 January 2020

Name and mailing address of the ISA/CN

China National Intellectual Property Administration  
No. 6, Xitucheng Road, Jimenqiao Haidian District, Beijing  
100088  
China

Facsimile No. (86-10)62019451

Authorized officer

Telephone No.

**INTERNATIONAL SEARCH REPORT**  
**Information on patent family members**

International application No.

**PCT/CN2019/095778**

| Patent document<br>cited in search report |            |    | Publication date<br>(day/month/year) | Patent family member(s) |            |    | Publication date<br>(day/month/year) |
|-------------------------------------------|------------|----|--------------------------------------|-------------------------|------------|----|--------------------------------------|
| CN                                        | 108446434  | A  | 24 August 2018                       | US                      | 2019243931 | A1 | 08 August 2019                       |
| CN                                        | 108446435  | A  | 24 August 2018                       | None                    |            |    |                                      |
| CN                                        | 108445039  | A  | 24 August 2018                       | WO                      | 2019153806 | A9 | 10 October 2019                      |
|                                           |            |    |                                      | WO                      | 2019153806 | A1 | 15 August 2019                       |
| CN                                        | 1987508    | A  | 27 June 2007                         | CN                      | 100465658  | C  | 04 March 2009                        |
| US                                        | 2017117725 | A1 | 27 April 2017                        | None                    |            |    |                                      |

## 国际检索报告

国际申请号

PCT/CN2019/095778

| <b>A. 主题的分类</b><br>G01R 31/374(2019.01)i; G01R 31/385(2019.01)i<br>按照国际专利分类(IPC)或者同时按照国家分类和IPC两种分类                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       |                                                                        |                                      |      |                   |         |   |                                                                        |      |   |                                                           |      |   |                                                           |      |   |                                                                 |      |   |                                                                       |      |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------|------|-------------------|---------|---|------------------------------------------------------------------------|------|---|-----------------------------------------------------------|------|---|-----------------------------------------------------------|------|---|-----------------------------------------------------------------|------|---|-----------------------------------------------------------------------|------|
| <b>B. 检索领域</b><br>检索的最低限度文献(标明分类系统和分类号)<br>G01R<br>包含在检索领域中的除最低限度文献以外的检索文献<br>在国际检索时查阅的电子数据库(数据库的名称, 和使用的检索词(如使用))<br>CNPAT, WPI, EPDOC, CNKI: 电池, 热失控, 评价, 评估, 材料, 热特性, 反应动力学, 测试, 热, 数据库, battery, thermal, "out of control", evaluat+, material, runaway, temperature, character+, database                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                           |                                                                        |                                      |      |                   |         |   |                                                                        |      |   |                                                           |      |   |                                                           |      |   |                                                                 |      |   |                                                                       |      |
| <b>C. 相关文件</b> <table border="1"> <thead> <tr> <th>类 型*</th> <th>引用文件, 必要时, 指明相关段落</th> <th>相关的权利要求</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>A</td> <td>CN 108446434 A (清华大学) 2018年 8月 24日 (2018 - 08 - 24)<br/>说明书第5-57段, 图1-4</td> <td>1-17</td> </tr> <tr> <td>A</td> <td>CN 108446435 A (清华大学) 2018年 8月 24日 (2018 - 08 - 24)<br/>全文</td> <td>1-17</td> </tr> <tr> <td>A</td> <td>CN 108445039 A (清华大学) 2018年 8月 24日 (2018 - 08 - 24)<br/>全文</td> <td>1-17</td> </tr> <tr> <td>A</td> <td>CN 1987508 A (天津力神电池股份有限公司) 2007年 6月 27日 (2007 - 06 - 27)<br/>全文</td> <td>1-17</td> </tr> <tr> <td>A</td> <td>US 2017117725 A1 (OXFORDIAN, LLC) 2017年 4月 27日 (2017 - 04 - 27)<br/>全文</td> <td>1-17</td> </tr> </tbody> </table> |                                                                        |                                      | 类 型* | 引用文件, 必要时, 指明相关段落 | 相关的权利要求 | A | CN 108446434 A (清华大学) 2018年 8月 24日 (2018 - 08 - 24)<br>说明书第5-57段, 图1-4 | 1-17 | A | CN 108446435 A (清华大学) 2018年 8月 24日 (2018 - 08 - 24)<br>全文 | 1-17 | A | CN 108445039 A (清华大学) 2018年 8月 24日 (2018 - 08 - 24)<br>全文 | 1-17 | A | CN 1987508 A (天津力神电池股份有限公司) 2007年 6月 27日 (2007 - 06 - 27)<br>全文 | 1-17 | A | US 2017117725 A1 (OXFORDIAN, LLC) 2017年 4月 27日 (2017 - 04 - 27)<br>全文 | 1-17 |
| 类 型*                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     | 引用文件, 必要时, 指明相关段落                                                      | 相关的权利要求                              |      |                   |         |   |                                                                        |      |   |                                                           |      |   |                                                           |      |   |                                                                 |      |   |                                                                       |      |
| A                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        | CN 108446434 A (清华大学) 2018年 8月 24日 (2018 - 08 - 24)<br>说明书第5-57段, 图1-4 | 1-17                                 |      |                   |         |   |                                                                        |      |   |                                                           |      |   |                                                           |      |   |                                                                 |      |   |                                                                       |      |
| A                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        | CN 108446435 A (清华大学) 2018年 8月 24日 (2018 - 08 - 24)<br>全文              | 1-17                                 |      |                   |         |   |                                                                        |      |   |                                                           |      |   |                                                           |      |   |                                                                 |      |   |                                                                       |      |
| A                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        | CN 108445039 A (清华大学) 2018年 8月 24日 (2018 - 08 - 24)<br>全文              | 1-17                                 |      |                   |         |   |                                                                        |      |   |                                                           |      |   |                                                           |      |   |                                                                 |      |   |                                                                       |      |
| A                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        | CN 1987508 A (天津力神电池股份有限公司) 2007年 6月 27日 (2007 - 06 - 27)<br>全文        | 1-17                                 |      |                   |         |   |                                                                        |      |   |                                                           |      |   |                                                           |      |   |                                                                 |      |   |                                                                       |      |
| A                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        | US 2017117725 A1 (OXFORDIAN, LLC) 2017年 4月 27日 (2017 - 04 - 27)<br>全文  | 1-17                                 |      |                   |         |   |                                                                        |      |   |                                                           |      |   |                                                           |      |   |                                                                 |      |   |                                                                       |      |
| <input type="checkbox"/> 其余文件在C栏的续页中列出。 <input checked="" type="checkbox"/> 见同族专利附件。                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     |                                                                        |                                      |      |                   |         |   |                                                                        |      |   |                                                           |      |   |                                                           |      |   |                                                                 |      |   |                                                                       |      |
| * 引用文件的具体类型:<br>"A" 认为不特别相关的表示了现有技术一般状态的文件<br>"E" 在国际申请日的当天或之后公布的在先申请或专利<br>"L" 可能对优先权要求构成怀疑的文件, 或为确定另一篇引用文件的公布日而引用的或者因其他特殊理由而引用的文件(如具体说明的)<br>"O" 涉及口头公开、使用、展览或其他方式公开的文件<br>"P" 公布日先于国际申请日但迟于所要求的优先权日的文件<br>"T" 在申请日或优先权日之后公布, 与申请不相抵触, 但为了理解发明之理论或原理的在后文件<br>"X" 特别相关的文件, 单独考虑该文件, 认定要求保护的发明不是新颖的或不具有创造性<br>"Y" 特别相关的文件, 当该文件与另一篇或者多篇该类文件结合并且这种结合对于本领域技术人员为显而易见时, 要求保护的发明不具有创造性<br>"&" 同族专利的文件                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         |                                                                        |                                      |      |                   |         |   |                                                                        |      |   |                                                           |      |   |                                                           |      |   |                                                                 |      |   |                                                                       |      |
| 国际检索实际完成的日期<br>2019年 12月 4日                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                              |                                                                        | 国际检索报告邮寄日期<br>2020年 1月 2日            |      |                   |         |   |                                                                        |      |   |                                                           |      |   |                                                           |      |   |                                                                 |      |   |                                                                       |      |
| ISA/CN的名称和邮寄地址<br>中国国家知识产权局(ISA/CN)<br>中国北京市海淀区蓟门桥西土城路6号 100088<br>传真号 (86-10)62019451                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   |                                                                        | 授权官员<br>李发喜<br>电话号码 86-(10)-53961280 |      |                   |         |   |                                                                        |      |   |                                                           |      |   |                                                           |      |   |                                                                 |      |   |                                                                       |      |

国际检索报告  
关于同族专利的信息

国际申请号

PCT/CN2019/095778

| 检索报告引用的专利文件 |            |    | 公布日<br>(年/月/日) | 同族专利 |            |    | 公布日<br>(年/月/日) |
|-------------|------------|----|----------------|------|------------|----|----------------|
| CN          | 108446434  | A  | 2018年 8月 24日   | US   | 2019243931 | A1 | 2019年 8月 8日    |
| CN          | 108446435  | A  | 2018年 8月 24日   | 无    |            |    |                |
| CN          | 108445039  | A  | 2018年 8月 24日   | WO   | 2019153806 | A9 | 2019年 10月 10日  |
|             |            |    |                | WO   | 2019153806 | A1 | 2019年 8月 15日   |
| CN          | 1987508    | A  | 2007年 6月 27日   | CN   | 100465658  | C  | 2009年 3月 4日    |
| US          | 2017117725 | A1 | 2017年 4月 27日   | 无    |            |    |                |