

# 三元动力锂离子电池的热仿真与安全改进方法探究

刘冀鹏

蓝京新能源(嘉兴)有限公司 浙江嘉兴 314000

**【摘要】**随着新能源汽车和随身电子设备快速发展,三元动力锂离子电池凭借高能量存储能力和出色的循环使用表现,在多个领域获得了广泛应用。不过三元动力锂离子电池抗高温故障能力不足,复杂使用场景中易出现温度异常飙升的不可逆故障,对实际使用安全构成隐患。文章研究了三元动力锂离子电池的热仿真与安全改进方法,期望为增强电池系统运行稳定性,延长使用时长提供参考。

**【关键词】**三元动力锂离子电池;热仿真;热失控;安全改进;热管理系统

Exploration of Thermal Simulation and Safety Improvement Methods for Ternary Power Lithium-Ion Batteries

Liu Jipeng

Lanjing New Energy (Jiaxing) Co., Ltd., Jiaxing, Zhejiang 314000

**【Abstract】** With the rapid development of new energy vehicles and portable electronic devices, ternary power lithium-ion batteries have found widespread application across various fields due to their high energy storage capacity and excellent cycling performance. However, these batteries exhibit insufficient resistance to high-temperature failures and are prone to irreversible temperature spikes under complex operating conditions, posing safety risks in practical applications. This paper investigates thermal simulation and safety improvement methods for ternary power lithium-ion batteries, aiming to provide insights for enhancing battery system operational stability and extending service life.

**【Key words】** ternary power lithium-ion battery; thermal simulation; thermal runaway; safety improvement; thermal management system

近年来,动力电池作为新能源汽车的重要组成部分,其安全问题一直受到行业广泛重视。当前动力电池用的三元锂电池配方体系,凭借高能量存储特点占据市场主流份额,但随着镍占比提升,电池抗高温故障能力下滑,当电池过充电、处于高温环境或受外力挤压碰撞时,有起火甚至爆炸的隐患,即便材料配方和结构设计一直在调整,电池温控相关工作仍存在许多待解问题。研究电池实际使用中的发热变化规律,是搭建完善安全防护体系的基础条件,能为行业技术更新提供重要支撑。

## 一、三元动力锂离子电池热特性

搭载三元材料的动力锂离子电池,其热表现会覆盖充电、放电的完整过程,也会出现在电池被过度加热等异常使用场景中,整体表现出多个互不相同的特征。这种电池的产热过程来自三种热量的共同作用,分别是充放电本身的可逆产热、电流流过电池导体产生的焦耳热,还有因为电流分布不均引发的极化产热。在不同使用条件下,这三种热源所占

的比例会有明显变化,当环境温度较低时,电池负极部位的可逆产热会占据更大的份额,而当放电的电流比较大时,集流部件产生的热量占比会不断升高。电池内部的导热能力并非均匀分布,沿着电芯堆叠的方向,热量传导的速度比垂直于该方向的区域更快,这种差异会让电池内部和外壳表面出现温度差。当出现极端的热失控情况时,电池内部和外壳表面的最大温度差甚至可以达到几百摄氏度。电池的热稳定程度会受到多种因素的影响,当正极材料中镍元素占比提升时,整体的热稳定程度会相应降低。负极表面形成的固态电解质界面膜发生破裂分解,是热失控最先启动的触发环节,随后会引发正极、负极和内部电解液的连锁反应,快速释放出大量热量和微小固体颗粒。在电池模组中,热失控向外蔓延的过程,需要消耗部分已经发生热失控的电池释放出的能量。电池整体的热表现情况,会直接影响电池的安全表现和使用时长,同时也为负责调控电池温度的系统设计带来很高的设计标准。

## 二、三元动力锂离子电池失效机制

### （一）正极材料多尺度结构衰退失效

三元正极材料的失效是从原子层级到电极整体的多层次联动过程,主要源于晶体内部框架不稳定以及表面额外发生的化学反应的持续出现。从微观原子尺度来看,当正极材料的镍元素占比偏高时,带正电的金属离子排列会变得更加混乱,原本处于镍离子位点的离子会跑到锂离子本该占据的存储层中,打乱了晶体内部的整体结构稳定性,同时在高电压的工作环境中,晶体中的氧元素很容易脱离原有的位置,会结合成两个氧原子组成的不稳定团簇并释放出氧气,让材料储存和释放电能的能力出现明显下降。从颗粒尺度来看,锂离子在嵌入和脱出的过程中,材料会出现不同方向的体积变化,这种变化会不断积累机械压力,最终导致晶体内部出现细小裂痕并逐渐变大,随后引发颗粒整体碎裂,破坏了电极结构的整体连续性。

### （二）负极界面 SEI 膜异常生长与反应失效

负极表面固态电解质界面膜 (SEI) 的异常变化,是电池寿命衰减的主要诱因,这类失效主要体现在膜层厚度持续增加,部分位置出现不均匀破裂,同时随着 SEI 膜反复生成又破损的恶性循环。在电池持续循环的过程中,电解液会在负极的低电位环境下不断发生还原分解反应,让 SEI 膜的厚度持续增加,同时消耗掉大量可以用于反应的活性锂离子,造成电池出现不可恢复的容量损耗。高温环境、高电量存储以及高功率循环等情况,会加快 SEI 膜的成分变化速度,其中无机成分占比上升会让膜层变得发脆易破,在负极体积出现收缩时很容易发生破裂,刚破裂的位置重新生成的 SEI 膜还会继续消耗电池中的活性物质和电解液,让电池内部的电阻变大,自耗电的比例也随之上升,同时裸露在外的负极会和电解液发生剧烈的放热反应,加快电池失效的整体速度。

### （三）电解液劣化与界面副反应协同失效

电解液作为锂离子传输的载体,其自身变质和界面上额外发生的化学反应的共同作用,是导致电池失效的重要原因,且会和正负极的失效情况互相影响,彼此加重损坏的程度。电解液在高温、高电压环境或是金属离子的催化作用下,会发生分解反应,生成一氧化碳、甲烷之类的可燃气体和氢氟酸等具有腐蚀性的物质,不光会让锂离子传输的效率下降,还会腐蚀电极材料和电流收集用的金属部件。同时,正极材料溶出的过渡金属离子会迁移到负极表面,会让 SEI 膜出现异常生长,还会覆盖负极上用于存储锂离子的活性位置,阻拦锂离子的正常传输。

## 三、三元动力锂离子电池的热仿真与安全改进策略

### （一）热仿真模型的构建与精度优化

三元动力锂离子电池热仿真工作的重点是通过数字化建模,模拟出电池在所有使用场景下的热变化过程,为后续的安全调整提供准确的参考数据,模型构建的过程需要兼顾物理层面的真实情况与计算过程的便捷性。模型构建的第一步是完成对整体结构简化与网格划分,将电芯分为主要组成部分和其他不影响整体热行为的辅助结构,针对电芯表面和流体通道等需要重点关注的区域进行网格加密,平衡计算过程中的精度要求与计算资源的占用情况;同时还要整合多种材料的热传导相关物性参数,建立包含正负极材料的热参数数据库,还要纳入电解液与隔膜的热物性信息,保证热量传递和热辐射这类热交换过程的模拟结果的准确性。

在热仿真模型的构建过程中,需要准确输入各关键材料的热物性参数以确保仿真结果的可靠性。三元锂离子电池各组件的热物性参数如表 1 所示,这些数据为建立精确的热仿真模型提供了基础支撑。

表 1 三元锂离子电池关键组件热物性参数

材料组件	密度(kg/m <sup>3</sup> )	比热容(J/(kg·K))	热导率(W/(m·K))
正极材料	4800	700	2.8
负极材料	2200	850	1.2
电解液	1200	1350	0.45
隔膜	900	1400	0.35
铝集流体	2700	900	237
铜集流体	8960	385	398

从表 1 可以看出,不同材料的热物性参数差异显著,金属集流体的热导率远高于电极材料,这说明热量在金属部件中的传导速度更快,需要重点关注集流体与电极界面处的热阻问题。电解液和隔膜的热导率较低,会导致热量在电池内部的分布不均匀,在模型构建时需要考虑这种各向异性特征。可以搭建包含电、热、化学反应的多物理场耦合模型,依据相关的计算方程来推算电池反应产生的热量,结合流体湍流模型捕捉流体通道内的流体流动特性,还原充电、放电以及极端环境等不同使用场景下的产热过程。为提升模拟的精度,需要通过实际测试获取的数据来校准模型中的参数,采用分阶段的校准方式,依据热失控不同阶段的材料状态,动态调整热传导的阻力数值,结合测试得到的数据来调整相关参数,降低模拟过程中的误差,同时可以搭建模块化的模拟模板库,提升模拟的效率,为后续的安全调整提供可靠的

虚拟测试基础。

## (二) 电池材料层面的安全调整

材料是三元动力锂离子电池热安全的基础前提,结合热模拟得到的结果,可以从材料的基础构成进行调整入手,实现本质层面的安全提升,从根源上抑制热失控发生。针对模拟中识别的材料热稳定性不足问题,优化正极材料体系,通过减少正极材料中的钴元素占比,在表面施加陶瓷涂层进行包覆这类方式,提升正极材料的热分解的温度,降低副反应过程中产生的热量;升级负极材料,采用硅碳复合体系并优化制备工艺,缩小充电和放电过程中的体积变化幅度,避免因锂析出导致的短路问题引发的热风险。调整电解液的配方,加入防火成分和稳定成分,提升电解液的不易燃烧的特点与热稳定性能,减少漏液以及热分解过程中的风险。尝试使用固态电解质替代当前的液态电解质方案,彻底解决液态电解液容易燃烧和爆炸的问题。还可以优化隔膜材料的相关参数,使用高熔点的陶瓷材料涂覆隔膜表面,提升隔膜的热稳定性和机械强度,推迟内部短路问题发生。

## (三) 电池结构与热管理系统优化

结构与热管理系统是抑制热失控传播、保障电池安全的重要屏障,结合热模拟得到的结果,可以实现结构与热管理系统之间的协同优化。在结构设计环节,依据模拟得出的热传播路径来调整电池包的整体布局结构,采用多个腔室分开设计来进行震动隔离和碰撞能量管理的方案,提升整体结构的结实程度,还要在电芯和电池模组之间设置高效的隔热结构,阻碍热失控蔓延的速度。优化泄压阀的设计,通过模拟泄压过程的具体情况,保证热失控产生的高温和高压气体可以及时被快速排出,降低电池包出现爆炸的可能性。推广一体化集中结构的相关技术,提升电池组合的效率,同时强化整体结构的安全程。在热管理系统的优化环节,依据模拟得到的温度分布规律,调整液体冷却板的流体通道设计,使用模仿生物特征的分流流体通道或者微型通道结构,提升热量交换的效率,结合相变换热材料以及热管技术,实

现短时间内峰值热量的快速吸收与导出,控制电芯之间的温度差控制在安全范围之内。

## (四) 电池全生命周期的安全模拟与长期的安全调整

三元动力锂离子电池的热安全风险贯穿整个使用周期,需要通过全生命周期的热模拟工作来辨别不同使用阶段存在的安全风险,制定长期的安全调整措施。基于模拟技术搭建全生命周期热安全模型,模拟电池在生产、使用、老化、退役等不同阶段的热行为变化,分析老化过程中SEI膜变厚以及材料性能下降对热安全方面的影响,预判退役过程中的电池出现热失控的可能性。依据不同生命周期阶段的安全特点,制定有区别的调整措施生产阶段调整电池的制造流程,减少电芯内部存在的缺陷,降低最开始的热安全方面的风险。使用阶段通过模拟调整充电和使用的相关策略,避免电池处于完全充满后静置、过度充电或者过度放电这类极端使用情况,降低热失控出现的概率。退役阶段通过模拟评估电池的剩余使用价值,制定合理的退役处理和分级利用的方案。通过储能系统中的主动消防和温度监测机制,降低老化后的电池出现起火的可能性。同时,搭建热安全模拟和实际使用之间的衔接机制,定期通过模拟手段反复调整改进策略,结合人工智能算法实现热失控发生的提前预警,构建“模拟预判-调整实行-验证优化”的完整流程,保证电池整个使用过程中的热安全稳定程度。

## 结语

提升三元动力锂离子电池的安全性能,要从材料层面、结构设计、整体系统搭建以及智能调控这些方向开展创新改进工作。结合对材料本身性能的优化调整以及更完善的热量调控手段,可以有效阻止热量异常失控之后的情况进一步向外扩散。运用精细的热量模拟推演手段,可以准确找出电池中容易出现热量异常的隐患位置,为后续的安全设计提供对应的理论参考。

## 参考文献

- [1]熊永莲,尚瑾,何可漂,等.不同老化状态三元锂离子电池热特性[J].电源技术,2023.
- [2]李昂,刘卫国,喻成,等.三元锂离子电池包热失控蔓延数值分析[J].电源技术,2023(1).
- [3]李为轮,陈永明,李帅,等.废三元锂离子电池正极材料脱锂渣的淀粉还原浸出动力学[J].我国有色金属学报:英文版,2023(2).

作者简介:刘冀鹏,出生年月:1990.02.10,男,汉族,籍贯:河北省衡水市,学历:硕士,职称:工程师,研究方向:新能源、蓄电池等技术设计、研发。