

# 使用 FTIR 光谱仪对锂离子电池隔膜进行材料鉴定

使用 Agilent Cary 630 FTIR 光谱仪快速分析新隔膜和废旧隔膜



## 作者

Wesam Alwan  
安捷伦科技有限公司

## 前言

锂离子电池 (LIBs) 已成为一系列应用 (包括电动汽车、便携式电子产品和可再生能源储存系统) 中不可或缺电源。LIBs 由四个主要组件 (正极、负极、隔膜和电解液) 组成, 需要对所有电池原料和组件进行严格的质量控制 (QC), 以确保安全性、性能和耐久性。

LIBs 的一个关键组件是隔膜 — 一种物理分离负极和正极的多孔薄膜。该组件可防止电极直接接触、避免潜在短路和热失控, 对于电池安全性和性能发挥着至关重要的作用。隔膜也有利于充放电过程中离子在电极间流动。

聚合物材料（例如聚乙烯 (PE) 或聚丙烯 (PP)）通常用于制造 LIB 隔膜。选择这些材料是因为它们具有稳定的机械强度与化学稳定性，同时能够使离子在电极之间流动。研究证明，傅里叶变换红外 (FTIR) 光谱法能够通过材料的不同 FTIR 光谱将其区分开来，非常适合用于聚合物分析<sup>[1]</sup>。

本研究的重点集中在使用 Agilent Cary 630 FTIR 光谱仪对 LIB 隔膜进行材料鉴定，并考察该光谱仪在 LIB 组件中所用盐和溶剂的 QC 检测中的作用<sup>[2,3]</sup>。由于仪器采用超紧凑的设计，如有必要，可以在手套箱内湿度受控的环境中进行潜在有害物质的分析<sup>[1]</sup>。Cary 630 FTIR 还广泛应用于推动和改进电池材料的研发活动中<sup>[4]</sup>。

## 实验部分

### 仪器

利用配备单反射钻石晶体衰减全反射 (ATR) 采样头的 **Agilent Cary 630 FTIR**，快速、简便地实现新的和废旧 LIB 隔膜的材料鉴定 (ID) (图 1)。



图 1. 配备 ATR 采样模块的 Agilent Cary 630 FTIR 光谱仪，适用于鉴定聚合物和薄膜

## 软件

使用直观的 **Agilent MicroLab** 软件（图 2）和安捷伦生成的聚合物光谱库，通过应用相似度检索算法来鉴定两个隔膜。仪器操作参数如表 1 所示。

## 样品

本研究分析了两个 LIB 隔膜：

- 一个新的多层隔膜
- 一个从 LIB 回收设施获得的废旧隔膜

表 1. Agilent Cary 630 FTIR-ATR 操作参数

参数	设置
方法	谱库搜索
所用谱库	用户生成的聚合物谱库（安捷伦内部聚合物谱库）
光谱范围	4000–650 $\text{cm}^{-1}$
样品/背景扫描次数	32
光谱分辨率	4 $\text{cm}^{-1}$
背景校正	空气
不同颜色表示的置信度阈值	绿色（高置信度）：> 0.90 黄色（中置信度）：0.80–0.90 红色（低置信度）：< 0.80

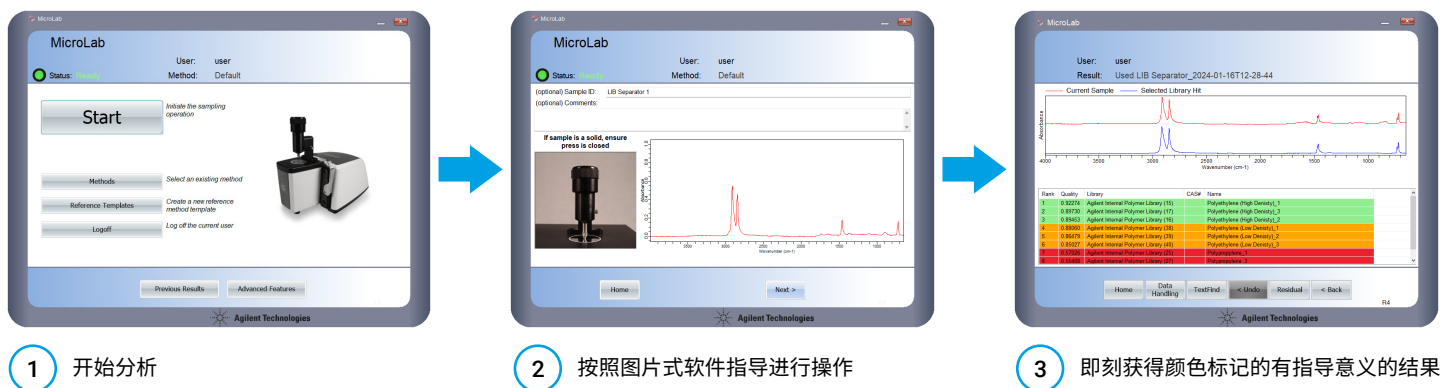


图 2. Agilent MicroLab 软件使用图片式界面，减少了培训需求，并大幅降低了用户引起错误的风险

## 结果与讨论

使用相似度算法搜索用户生成的内部光谱库，发现这两种隔膜均以 0.90–0.99（绿色）的置信度阈值范围内的高匹配质量指数 (HQI) 得到鉴定。

新隔膜被鉴定为聚丙烯，HQI 为 0.94064 (PP) (图 3A)。HQI 反映出隔膜具有多层结构，与用于生成库光谱的标准物质相比，可能包含 PP 添加剂。然而，可以利用更加匹配的标准物质改善 HQI，使用 MicroLab 软件在几秒钟内更新或创建光谱库。可以在创建时或其他任意时间点，直接从结果界面向谱库中添加谱图。

废旧隔膜材料被鉴定为聚乙烯 (PE)，HQI 为 0.92274 (图 3B)。如图 4 所示，来自其他 LIB 组件的污染物可能对 HQI 结果产生影响。

针对每个谱库条目，软件会自动计算 HQI，该值表示实测光谱与谱库谱图的匹配程度。在基于 HQI 阈值设置的材料鉴定和确认工作流程中，结果通常以符合/不符合标准的方式进行解读，这些设置在 MicroLab 软件中可以由用户进行调整。在本研究中，将 HQI 高于 0.90 的结果用绿色编码。

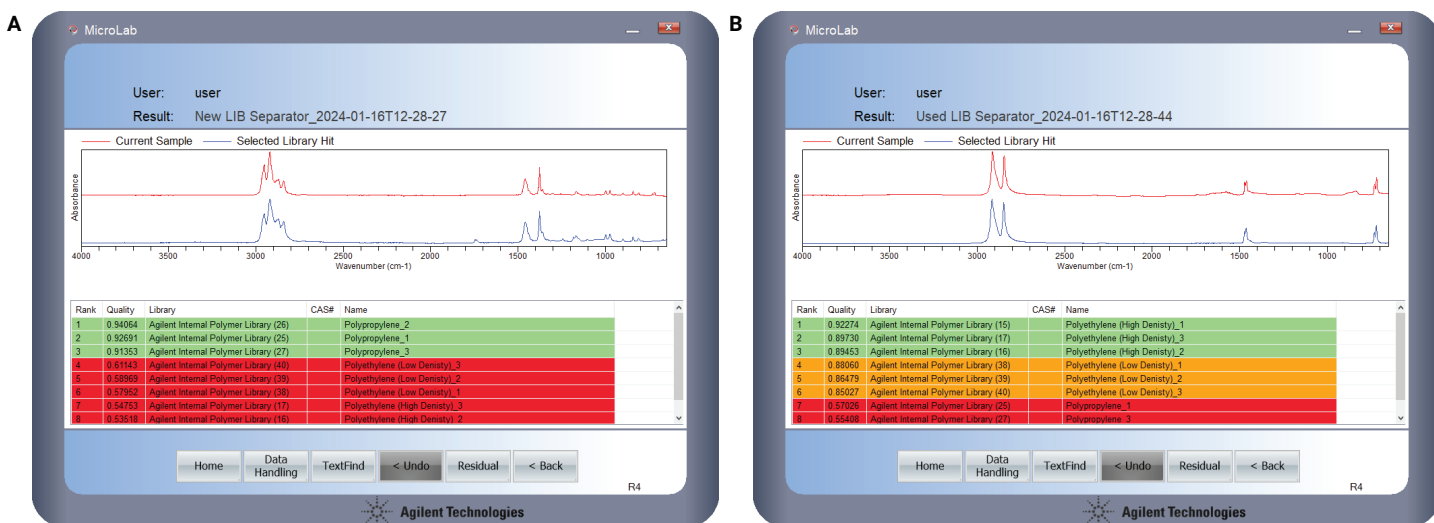


图 3. Agilent Cary 630 FTIR 光谱仪对 LIB 隔膜样品的鉴定分析结果（红色曲线）以及谱库匹配结果（蓝色曲线）。该表显示了结果的质量 (HQI)、所用的谱库以及未使用的隔膜 (A) 和废旧隔膜 (B) 的材料匹配结果名称

对结果进行颜色标记使 Cary 630 FTIR 系统成为一种简便易用的一站式解决方案，有助于快速做出决策。样品测量完成后，MicroLab 软件会在屏幕上直接显示最终结果，无需用户进行任何输入。

该软件自动执行谱库搜索，并向操作人员提供最终的用颜色标记的结果，从而降低分析的复杂性，并为材料的鉴定结果提供可信度。

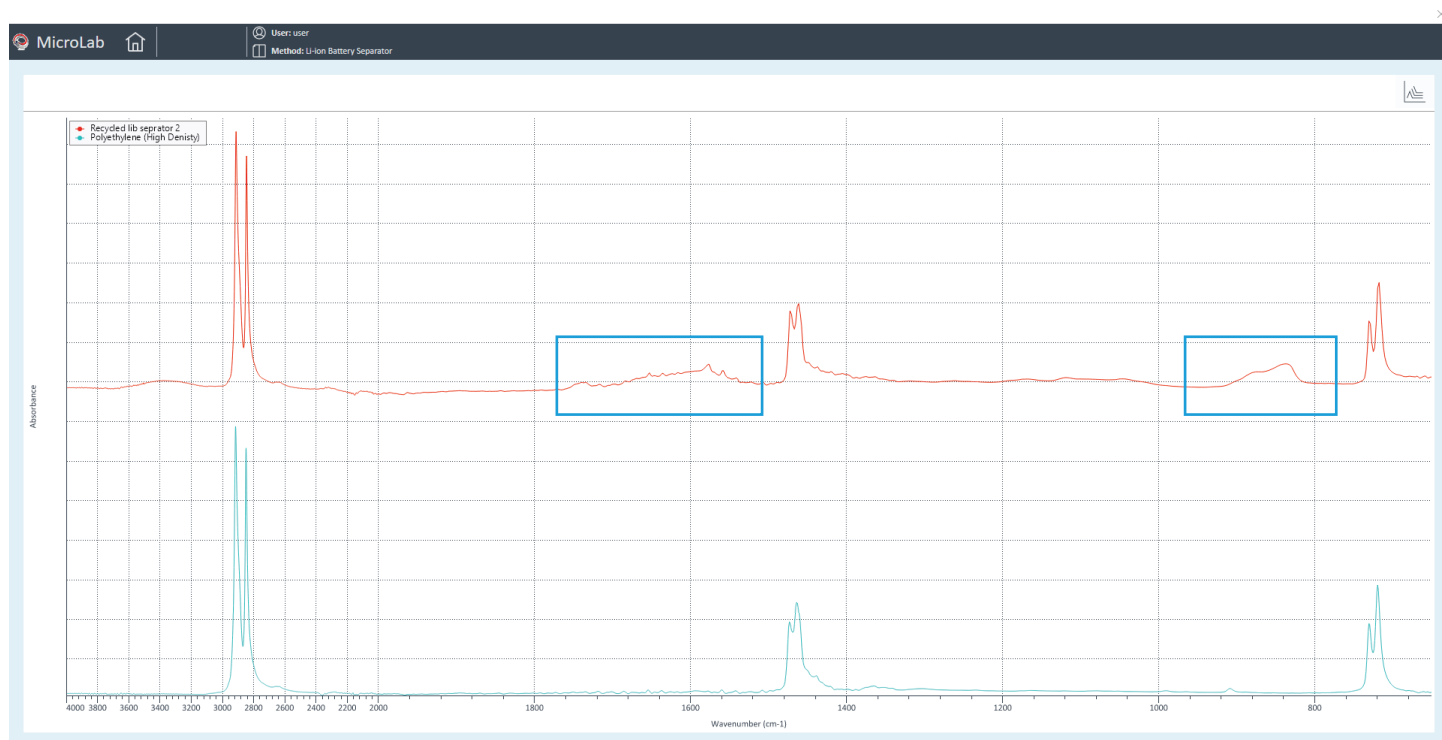


图 4. 在精简视图中显示的废旧 LIB 隔膜（红色迹线）和谱库匹配结果（蓝色迹线）的叠加谱图。通过 Agilent MicroLab 软件中的波数比例因子能够更详细地查看目标光谱范围。用于突出显示顶部光谱区域的黑框表示来自其他 LIB 组件的潜在污染物

## 结论

Agilent Cary 630 FTIR 光谱仪和 Agilent MicroLab 软件为新的和废旧锂离子电池隔膜快速提供了准确的材料鉴定结果。

在 MicroLab 软件中使用现有的用户生成的聚合物光谱库，使 Cary 630 FTIR 能够将两个隔膜样品分别鉴定为聚丙烯和聚乙烯。通过在谱库中添加更具有代表性的参比光谱，可进一步提高结果的置信度。可以在 MicroLab 软件中轻松维护和管理光谱库，并可以在几秒内新建谱库。MicroLab 软件根据 HQI 对新的和废旧隔膜样品的鉴定结果进行颜色标记，从而能够快速、轻松地审查数据的质量。两个样品均以高置信度得到鉴定。

本研究表明，配备 ATR 采样附件的 Cary 630 FTIR 可有效用于根据 LIB 制造商的要求对材料进行 QC 检测。该方法也适用于致力开发或改进电池材料的研发团队。

## 参考文献

1. Dutta, A. Chapter 4 - Fourier Transform Infrared Spectroscopy. Spectroscopic Methods for Nanomaterials Characterization, Elsevier, **2017**, pp. 73–93. <https://doi.org/10.1016/B978-0-323-46140-5.00004-2>.
2. Alwan, W.; Babu, S.; Zieschang, F. 利用 FTIR 快速、轻松地对锂离子电池中所用的盐进行材料鉴定, *安捷伦科技公司应用简报*, 出版号 **5994-6243ZH-CN**, **2023**
3. Babu, S.; Alwan, W.; Zieschang, F. 利用 FTIR 快速、轻松地对锂离子电池中所用的溶剂进行材料鉴定, *安捷伦科技公司应用简报*, 出版号 **5994-6182ZH-CN**, **2023**
4. Alwan, W.; Zieschang, F. 使用 Agilent Cary 630 FTIR 光谱仪推动锂离子电池研究, *安捷伦科技公司白皮书*, 出版号 **5994-6144ZH-CN**, **2023**

## 更多信息

[Agilent Cary 630 FTIR 光谱仪](#)

[MicroLab FTIR 软件](#)

[MicroLab Expert](#)

[FTIR 分析与应用指南](#)

[FTIR 光谱基本原理 — 常见问题解答](#)

[ATR-FTIR 光谱概述](#)

查找当地的安捷伦客户中心:

[www.agilent.com/chem/contactus-cn](http://www.agilent.com/chem/contactus-cn)

免费专线:

**800-820-3278, 400-820-3278 (手机用户)**

联系我们:

[LSCA-China\\_800@agilent.com](mailto:LSCA-China_800@agilent.com)

在线询价:

[www.agilent.com/chem/erfq-cn](http://www.agilent.com/chem/erfq-cn)

[www.agilent.com/chem/cary630](http://www.agilent.com/chem/cary630)

DE84755018

本文中的信息、说明和指标如有变更,恕不另行通知。

© 安捷伦科技(中国)有限公司, 2024  
2024年2月26日, 中国出版  
5994-7071ZH-CN