

Proposition de sujets de thèse 2019-2020

Sujet	Etude du phénomène de Lithium-plating : Caractérisation <i>operando</i> et simulation du phénomène
Encadrant(s)	M. BARDET, M. CHANDESRIS, S. GENIES
Directeur de thèse	M. BARDET (IRIG)
Localisation	CEA (Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives), 17, rue des Martyrs, 38054 Grenoble Cedex 9, France
CV et lettre de motivation à envoyer par mail à :	michel.bardet@cea.fr marion.chandesris@cea.fr sylvie.genies@cea.fr

Etude du phénomène de Lithium-plating : Caractérisation *operando* et simulation du phénomène

Cette thèse s'écrit dans le cadre du programme FOCUS « Simulation multi-échelle des batteries appliquée au matériaux d'électrodes ».

Au sein d'un pack de véhicules électriques, les batteries Lithium-ion doivent pouvoir accepter des charges rapides, même à basse température. Or en charge, la formation de lithium sous forme métallique à la surface de l'électrode négative à base de graphite, ou d'un mélange graphite et silicium, peut survenir et accélérer la perte de la capacité de la batterie et donc l'autonomie du véhicule. L'étude de ce phénomène connu sous le nom de Lithium-plating est donc un axe clé qui permettrait d'envisager une prolongation de la durée de vie des batteries. Etant un phénomène apparaissant sous courant, il est nécessaire de disposer de méthodes expérimentales *operando* afin de pouvoir le caractériser en temps réel et d'étudier sa cinétique en fonctions des conditions locales au sein de l'électrode négative. L'objectif de la thèse est d'étudier ce phénomène de Lithium-plating en couplant les tests électrochimiques et la technique de RMN du lithium. En effet, cette technique permet d'identifier l'environnement électronique du lithium, soit métallique, à l'état oxydé ou intercalée au sein de la matrice carbonée et d'en donner une quantification. Ces données *operando* permettront d'alimenter et de valider un modèle multi-physique à l'échelle de l'électrode, développé dans le cadre d'une précédente thèse. Une fois validé, l'outil de simulation sera utilisé pour faire varier l'ensemble des paramètres influents afin d'optimiser le design des électrodes, en particulier pour les électrodes négatives contenant du silicium, et fournir des recommandations afin de développer des algorithmes de charge innovants et ainsi gagner en durée de vie des batteries.

Study of Lithium-plating phenomenon: Characterization and phenomenon simulation

This thesis will be made in the framework of the FOCUS program "Multi-scale simulation of batteries applied to electrode materials"

In electric vehicles battery pack, Lithium-ion batteries must be able to accept fast charges, even at low temperatures. However, during charge process, formation of metallic lithium on the surface of the carbon-based, negative electrode or made of graphite and silicon mixture, can occur and accelerate the capacity loss of the battery and thus the autonomy of the vehicle. The study of this phenomenon known as Lithium-plating is therefore a key axis that would allow extending the life of batteries. Being a phenomenon appearing under current, it is necessary to use *operando* experimental methods in order to be able to characterize it in real time and to study its kinetics in function of the local conditions within the negative electrode. The thesis objective is to study this lithium-plating phenomenon by coupling electrochemical tests and lithium NMR technique. Indeed, this technique allows to identify the electronic environment of lithium, either metallic, in the oxidized state or intercalated within the carbon matrix and to give a quantification. These *operando* data will be used to feed and validate a multi-physics model at the electrode scale, developed in the framework of a previous thesis. Once validated, the simulation tool will be used to vary all main parameters to optimize the design of the electrodes and thus provide gain in battery life.

Liens / Links :

Site LITEN : <http://liten.cea.fr/cea-tech/liten/Pages/actualites/2020/FOCUS-Batteries.aspx> (ou version courte : <https://bit.ly/2whq3Nm>, ou le QR Code ci-contre)

Twitter : https://twitter.com/CEA_Liten/status/1242091124803715073

LinkedIn : <https://www.linkedin.com/feed/update/urn:li:activity:6647861676723044352>

