



**Type of position:** PhD thesis

**Title:** 3D-resolved computational modeling of mechano-electrochemistry in solid state batteries - DESTINY Marie Skłodowska-Curie Actions COFUND (H/F) – M/F

**Context:**

Modern All Solid-State Batteries (ASSBs) with composite electrodes (i.e. made of blends of active material and electrolyte particles) give the promise of high energy density storage devices. However, they usually have significant performance limitations due to limited ionic and electronic percolation within the composite electrodes. Furthermore, mechanical aging is expected to impact the battery cell power-density as fracture in the electrolyte represents a barrier for lithium ion transport inducing rate performance decay.

This PhD thesis aims to develop a deep understanding of ASSB working principles by developing and experimentally validating a unique computational model accounting in 3D for the composite electrode microstructure and its corresponding evolution upon electrochemical cycling. Such a model will consider the interplays between electrochemical reactions, ionic and electronic transport and mechanics. The model will be able to calculate pressure fields as function of applied pressure on the cell, track microstructure evolution and its impact on the galvanostatic charge-discharge profiles. The electrode microstructures will consider realistic particle shapes and sizes. The latter will be characterized using Scanning Electron Microscopy and Computer Tomography (CT). The microstructures will arise from electrode manufacturing process simulations performed by another DESTINY PhD student (Cohort #1) and from CT characterizations. The simulations and experimental characterizations will focus in particular on active material volume changes, cracking, loss of contact between active material and electrolyte particles, as well as implicated mechanical stresses, as function of formulation, particle size distributions (and modality) and their shapes. For that, tape casted electrodes will be fabricated and implemented in electrochemical devices in order to perform electrochemical experiments such as EIS spectroscopy and galvanostatic measurements. The model should allow providing guidelines for the microstructure optimization in terms of mechanical stability. A starting point for this fascinating model will be an adaptation of the methodology for simulating mechano-electrochemistry in Lithium Ion Batteries recently developed by the LRCS team.

Secondment will take place at UMICORE for 3 months in Olen, Belgium.

**BEFORE SUBMITTING YOUR APPLICATION:**

- Please read carefully the "Guide for Applicants" [on the DESTINY website](#) which explains the eligibility requirements and the application form (Application Forms N°1 and N°2) with the supporting documents to be provided.
- Please upload your Application Form N°1 in PDF in the "CV" box and your Application Form N°2 in PDF in the "cover letter" box.

The European Union's Horizon2020 research and innovation programme has launched a major MSCA COFUND project entitled "Doctorate programme on Emerging battery Storage Technologies INspiring Young scientists", [DESTINY](#).

CNRS, acting as coordinator, and 42 European partner institutions working on future battery and energy storage issues, have committed to an ambitious participation in the long-term research initiative Battery 2030+. An innovative change in battery research is planned. The project aims to give European industry and universities a competitive edge in the fast-growing green technologies of electromobility and large-scale energy storage. In this context, DESTINY, a highly advanced doctoral



This project has received funding from the European Union's Horizon 2020 research and innovation programme under Grant Agreement N° 945357



training program, is opening a call for applications for the offer entitled "3D-resolved computational modeling of mechano-electrochemistry in solid state batteries".

**Constraints and risks:** The position is located in a protected area under the Protection of Scientific and Technical Potential and therefore requires, in accordance with the regulations, that the arrival of the candidate be authorized by the competent authority of the Ministry of Higher Education, Research and Innovation.

**Skills:** Materials, nanomaterials and processes chemistry

**Place of work:** LRCS (Hosting Laboratory) & UMICORE (Olen) – Secondment 3 months

**Starting date:** 1 June 2023

**Supervisors:** Prof. Alejandro A. Franco (LRCS), Vincent SEZNEC (LRCS) et Jérémie AUVERGNIOT (UMICORE)

**Contact :** [alejandro.franco@u-picardie.fr](mailto:alejandro.franco@u-picardie.fr)

**DESTINY Team:** [louise-vrand@u-picardie.fr](mailto:louise-vrand@u-picardie.fr)



This project has received funding from the European Union's Horizon 2020 research and innovation programme under Grant Agreement N° 945357



FRENCH VERSION

**Titre : Modélisation informatique résolue en 3D de la mécano-électrochimie dans les batteries à l'état solide**

**Contexte :**

Les batteries modernes à l'état solide (ASSB) dotées d'électrodes composites (c'est-à-dire constituées de mélanges de matériaux actifs et de particules d'électrolyte) promettent des dispositifs de stockage à haute densité d'énergie. Cependant, elles présentent généralement des limitations de performance importantes en raison de la percolation ionique et électronique limitée au sein des électrodes composites. En outre, le vieillissement mécanique a un impact sur la performance de la cellule de la batterie car la fracture dans l'électrolyte représente une barrière pour le transport des ions lithium. Cette thèse de doctorat vise à développer une compréhension approfondie des principes de fonctionnement de l'ASSB en développant et en validant expérimentalement un modèle de calcul unique tenant compte en 3D de la microstructure de l'électrode composite et de son évolution au cours du cycle électrochimique. Ce modèle prendra en compte les interactions entre les réactions électrochimiques, le transport ionique et électronique et la mécanique. Le modèle sera capable de calculer les champs de pression en fonction de la pression appliquée sur la cellule, de suivre l'évolution de la microstructure et son impact sur les profils de charge-décharge galvano-statiques. Les microstructures des électrodes prendront en compte des formes et des tailles de particules réalistes. Ces dernières seront caractérisées à l'aide de la microscopie électronique à balayage et de la tomographie assistée par ordinateur. Les microstructures proviendront des simulations du processus de fabrication des électrodes réalisées par un autre doctorant de DESTINY (Cohorte #1) et des caractérisations par tomographie assistée par ordinateur. Les simulations et les caractérisations expérimentales se concentreront en particulier sur les changements de volume du matériau actif, la fissuration, la perte de contact entre le matériau actif et les particules d'électrolyte, ainsi que sur les contraintes mécaniques impliquées, en fonction de la formulation, de la distribution de la taille des particules (et de la modalité) et de leurs formes. Pour cela, des électrodes seront fabriquées afin de réaliser des expériences électrochimiques telles que la spectroscopie EIS et les mesures galvano-statiques. Le modèle devrait permettre de fournir des lignes directrices pour l'optimisation de la microstructure en termes de stabilité mécanique. Le point de départ de ce modèle fascinant sera une adaptation de la méthodologie de simulation de la mécano-électrochimie dans les batteries au lithium-ion récemment développée par l'équipe du LRCS.

Le stage aura lieu à UMICORE pendant 3 mois à Olen, Belgique.

**AVANT DE DÉPOSER VOTRE CANDIDATURE :**

- Merci de lire attentivement le "Guide for Applicants" [sur le site web DESTINY](#) qui explique les modalités d'éligibilité et le dossier de candidature (Application Forms N°1 et N°2) avec les pièces justificatives à fournir
- Veuillez télécharger votre Application Form N°1 en PDF dans le bloc « CV » et votre Application Form N°2 en PDF dans le bloc « lettre de motivation ».

Le programme de recherche et d'innovation Horizon2020 de l'Union européenne a lancé un projet d'envergure MSCA COFUND intitulé "Doctorate programme on Emerging battery Storage Technologies



This project has received funding from the European Union's Horizon 2020 research and innovation programme under Grant Agreement N° 945357



INSpiring Young scientists", [DESTINY](#) Le CNRS, agissant en tant que coordinateur, et 42 institutions européennes partenaires travaillant sur les batteries de demain et les questions relatives au stockage de l'énergie, se sont engagés à participer de manière ambitieuse à l'initiative de recherche à long terme Batterie 2030+. Un changement innovant dans la recherche sur les batteries est prévu. Le projet consiste à donner un avantage concurrentiel à l'industrie et aux universités européennes dans les domaines des technologies vertes en plein essor que sont l'électromobilité et le stockage d'énergie à grande échelle. Dans ce contexte, DESTINY, un programme de formation doctorale très avancé, ouvre un appel à candidatures pour l'offre intitulée « 3D-resolved computational modeling of mechano-electrochemistry in solid state batteries ».

#### **Contraintes et risques :**

Le poste se situe dans un secteur protégé relevant de la Protection du Potentiel Scientifique et Technique et nécessite donc, conformément à la réglementation, que l'arrivée du/de la candidat.e soit autorisé.e par l'autorité compétente du Ministère de l'Enseignement Supérieur de la Recherche et de l'Innovation.

**Compétences :** Chimie des matériaux, nanomatériaux et procédés

**Lieu :** Laboratoire de Réactivité et Chimie des Solides -LRCS- (UMR CNRS 7314), Université de Picardie Jules Verne – 15, rue Baudelocque, 80039 Amiens Cedex, France.

**Date de démarrage de la thèse :** 1<sup>er</sup> juin 2023

**Superviseurs :** Alejandro A.A. FRANCO (LRCS), Vincent SEZNEC (LRCS) et Jérémie AUVERGNIOT (UMICORE)

**Contact :** [alejandro.franco@u-picardie.fr](mailto:alejandro.franco@u-picardie.fr)

**DESTINY Team:** [louise-vrand@u-picardie.fr](mailto:louise-vrand@u-picardie.fr)



This project has received funding from the European Union's Horizon 2020 research and innovation programme under Grant Agreement N° 945357