



Modélisation et synthèse d'un électrolyte polymère structuré en 3D pour réguler la formation de dendrites Li pendant le cyclage d'une batterie Li métal

Contexte

Pour que les véhicules électriques connaissent le succès, il est essentiel d'améliorer la densité énergétique des batteries. Parmi les différents systèmes de batteries, les batteries au Li métal sont apparues comme l'une des options les plus prometteuses, car elles offrent la capacité théorique la plus élevée et le potentiel électrochimique négatif le plus bas. Cependant, la commercialisation des batteries Li métal a été confrontée à des défis, principalement attribués à la formation incontrôlable de dendrites Li pendant le cycle de la batterie. Ce problème devient encore plus critique lors de l'application d'une tension élevée pour l'utilisation de la batterie dans les véhicules électriques. Pour y remédier, des recherches importantes ont été menées sur les électrolytes polymères pour les batteries Li métal, car ils ont le potentiel de révolutionner l'industrie des véhicules électriques. Divers électrolytes polymères à structure 3D synthétisés par différentes méthodes de polymérisation ont montré des capacités remarquables dans la régulation de la formation des dendrites Li. La durée de vie de la batterie est plus longue avec l'électrolyte polymère structuré en 3D qu'avec l'électrolyte liquide commun ; cela semble prometteur pour la conception des futures batteries Li métal. Néanmoins, le mécanisme précis de régulation de la formation des dendrites Li par ces électrolytes polymères structurés en 3D n'est toujours pas élucidé.

Objectifs

Notre objectif principal est de comprendre la formation de dendrites de Li à l'interface entre le métal Li et les matériaux polymères structurés en 3D. Sur la base de ces connaissances, nous visons à concevoir un nouvel électrolyte polymère qui relève les défis associés à la formation de dendrites de Li. Pour atteindre nos objectifs, nous utiliserons une approche combinée de méthodes expérimentales et théoriques. Au cours du projet, le candidat au doctorat synthétisera et caractérisera l'électrolyte polymère structuré en 3D. En parallèle, l'étudiant modélisera le système d'électrolyte polymère en utilisant une solution de modélisation de pointe. Nous formerons le candidat au doctorat pour lui permettre de mener des recherches de manière indépendante et de devenir un expert de l'électrochimie et du niveau atomistique de la simulation.

Prérequis

- Nous recherchons pour cette thèse un(e) candidat(e) motivé(e) ayant de solides connaissances en matière de synthèse et de caractérisation des polymères. En outre, les candidats ayant une expérience en chimie computationnelle, en particulier dans l'exécution de calculs DFT et de simulations MD, ainsi qu'une expérience dans l'analyse électrochimique pour les tests de batteries, seront préférés.
- La maîtrise de l'anglais est essentielle, car le candidat devra rédiger des manuscrits et communiquer les résultats de ses recherches en anglais.

Contact : matthieu.becuwe@u-picardie.fr (LRCS) / junghan.son@renault.com (Renault)

Liste des documents requis : CV (pas plus d'une page), lettre de motivation (pas plus d'une page), lettres de recommandation (idéalement les lettres de 2 personnes, les coordonnées de la personne de référence doivent être présentées).

Date de démarrage du projet : fin 2023 **Durée :** 36 mois

Localisation*: Laboratoire de Réactivité et Chimie des Solides (CNRS UMR 7314) à Amiens, France // Technocentre (TCR) Renault, à Guyancourt.

* La plupart des activités de recherche seront effectuées à Amiens, vous vous rendez au TCR environ une fois tous les deux mois.