



Proposition de sujet de thèse 2022

Sujet :	Modélisation avancée des phénomènes de dégradation dans les batteries lithium-ions tout solide
Lieu :	CEA Grenoble, LITEN, Département électricité et hydrogène pour les transports, Laboratoire de Modélisation
Encadrants :	Eric Woillez (eric.woillez@cea.fr)
Directrice de thèse :	Marion Chandesris (marion.chandesris@cea.fr)
Techniques utilisées :	Homogénéisation des modèles électrochimiques de microstructure, simulations numériques 3D, approches de type « champ moyen » sur des milieux poreux
Financement :	Oui
Profil du candidat :	Master de physique ou chimie physique orienté théorie avec formation de base en simulation

Depuis quelques années, les batteries Li-ions sont devenues la technologie de référence pour le marché mondial des batteries, et elles ont supplanté les anciennes technologies Nickel-Cadmium et Alcalines. Leur importante capacité énergétique massique en fait d'excellents candidats pour l'alimentation des véhicules tout électriques actuels et futurs.

Pourtant, après des années de recherche académique et industrielle sur ce sujet [1-4], les batteries Li-ions n'ont pas encore livré tous leurs secrets : ce sont des systèmes multiphysiques très complexes dans lesquels les phénomènes mécaniques, électrochimiques et de transport sont couplés depuis l'échelle microscopique jusqu'à l'échelle du pack batterie. Les modèles prédictifs actuels sont conçus dans une optique d'ingénierie, et sont simplement construits à partir d'une remontée d'échelle moyennée des équations physiques et électrochimiques fondamentales. Ces modèles ne permettent pas à l'heure actuelle de rendre compte de toutes les caractéristiques des électrodes modernes, et en particulier de celles des nouvelles générations de batteries tout-solide.

La thèse proposée vise à attaquer le problème des performances de batteries directement à partir des équations de transport à l'échelle de la microstructure des électrodes [4]. Il s'agit de combiner les techniques analytiques de remontée d'échelle avec du moyennage de simulations numériques 3D pour déterminer les éléments de la microstructure (en particulier les caractéristiques mécaniques et chimiques des interfaces) à utiliser dans les modèles macroscopiques de batteries. La thèse a une claire orientation théorique et numérique, mais on s'attend à ce que le candidat reste en contact avec les laboratoires expérimentaux pour travailler sur des modèles réalistes d'électrodes.

[1] Doyle, M., & Newman, J. (1995). Modeling the performance of rechargeable lithium-based cells: design correlations for limiting cases. *Journal of Power Sources*, 54(1), 46-51.

[2] Thomas, K. E., Newman, J., & Darling, R. M. (2002). Mathematical modeling of lithium batteries. In *Advances in lithium-ion batteries* (pp. 345-392)

[3] Delacourt, C., & Safari, M. (2016). Mathematical modeling of aging of Li-Ion batteries. In *Physical Multiscale Modeling and Numerical Simulation of Electrochemical Devices for Energy Conversion and Storage* (pp. 151-190)

[4] Kerdja, Y., Chandesris, M., & Martinet, S. (2021). Microscopy imaging based numerical model of Li-ion batteries electrode: A parametric study through a design of experiment approach. *Journal of Power Sources*, 507, 23025