



## Suivi in situ des batteries sodium-oxygène par spectroscopie RMN à l'état solide

**Spécialité** CHIMIE

**Niveau d'étude** Bac+5

**Formation** Master 2

**Unité d'accueil** [NIMBE/LEEL](#)

**Candidature avant le** 29/03/2019

**Durée** 6 mois

**Poursuite possible en thèse** oui

**Contact** [GAUTHIER Magali/ WONG Alan](#)  
+33 1 69 08 45 30  
[magali.gauthier@cea.fr](mailto:magali.gauthier@cea.fr)

**Autre lien**  
<https://sites.google.com/site/alanwongnmr/home>

### Résumé

L'objectif du projet est de comprendre à l'aide de la spectroscopie de résonance magnétique nucléaire (RMN) in situ les mécanismes de réaction dans les batteries sodium-oxygène.

### Sujet détaillé

Les batteries métal-O<sub>2</sub> ont attiré beaucoup d'attention ces dernières années en tant que possible solution de remplacement aux batteries lithium-ion largement utilisées aujourd'hui. Cela concerne en particulier les batteries sodium-oxygène (Na-O<sub>2</sub>) en raison de leur haute densité d'énergie théorique, de leur faible polarisation et, plus important encore, du faible coût et de l'aspect plus respectueux de l'environnement du sodium. Cependant, le développement des batteries au Na-O<sub>2</sub> présente de nombreux défis tels que la stabilisation des produits de décharge, la faible cyclabilité et la nécessité de concevoir des cathodes performantes. Sur un aspect plus fondamental, il est nécessaire de comprendre les mécanismes électrochimiques régissant le fonctionnement des batteries Na-O<sub>2</sub>. L'identification précise des chemins réactionnels lors de la décharge et des produits formés (NaO<sub>2</sub> ou Na<sub>2</sub>O<sub>2</sub>), ainsi que l'étude de la réactivité avec l'électrolyte, sont cruciales. Les techniques in situ / operando peuvent capturer sans équivoque les changements dynamiques dans l'environnement de la cellule pendant le cyclage et fournir des informations essentielles sur des phases intermédiaires qui peuvent être indétectables lors d'analyses ex situ. L'objectif de l'étudiant sera d'identifier les réactions électrochimiques et chimiques dans les batteries Na-O<sub>2</sub> en temps réel lors du cyclage en utilisant la spectroscopie de résonance magnétique nucléaire (RMN) in situ. Le travail consistera à 1) optimiser les conditions de cyclage de la cellule in situ RMN récemment conçue au NIMBE pour étudier les batteries métal-O<sub>2</sub> et 2) comprendre les mécanismes de réduction et d'évolution de l'oxygène (ORR/OER) ainsi que les mécanismes de dégradation de l'électrolyte dans une cellule Na-O<sub>2</sub> comprenant une électrode positive à base de carbone et un électrolyte à base d'un solvant de type glyme.

### Mots clés

---

## **Compétences**

Electrochimie, RMN

## **Logiciels**

---

## Investigating of sodium-oxygen batteries using in situ solid-state NMR spectroscopy

### Summary

The aim of the project is to understand using in situ solid-state Nuclear Magnetic Resonance (NMR) the reactions mechanisms in sodium-oxygen batteries.

### Full description

Rechargeable metal-O<sub>2</sub> batteries have attracted much attention in recent years as a possible alternative to the widely used lithium-ion batteries. Particularly for sodium-oxygen batteries (Na-O<sub>2</sub>), this is due to their potential high energy density, low polarization, and more importantly low-cost and eco-friendly aspect of sodium. However, great challenges remain in the development of Na-O<sub>2</sub> batteries, including the stabilization of the discharge products, poor cyclability and the need for new cathode design. On a more fundamental aspect, one much completely grasps the understanding of the underlying electrochemical mechanisms taking place inside the Na-O<sub>2</sub> battery.<sup>1</sup> Clear identifications of the discharge electrochemical pathways and their products (NaO<sub>2</sub> or Na<sub>2</sub>O<sub>2</sub>), as well as the reactivity of the electrolyte, are crucial. In situ/operando techniques can capture the dynamic changes unequivocally in the cell working environment during cycling and provide unprecedented information on intermediate phases that may be undetectable through ex situ analyses. The master student's objective will be to investigate the electrochemical and chemical reactions in Na-O<sub>2</sub> batteries under real-time potential cycling using recently emerged in situ solid-state Nuclear Magnetic Resonance (NMR) spectroscopy. The work will consist of 1) optimizing the cycling conditions of the newly designed in situ solid-state NMR cell at NIMBE for studying metal-O<sub>2</sub> batteries and 2) understanding the oxygen reduction and evolution reactions (ORR/OER) mechanisms as well as electrolyte's degradation in a Na-O<sub>2</sub> cell comprising a carbon-based positive electrode and an electrolyte based on glyme solvents.

### Keywords

### Skills

Electrochemistry, NMR

### Softwares