IRAMIS : Institut Rayonnement Matlère de Saclay

Saclay

NIMBE/LEDNA

Synthèse et exploration des propriétés électrochimiques d'électrolytes solides à base d'halogénures pour les applications de batteries

Spécialité CHIMIE

Niveau d'étude Bac+5

Formation Master 2

Unité d'accueil NIMBE/LEDNA

Candidature avant le 21/04/2023

Durée 6 mois

Poursuite possible en thèse oui

Contact PONGILAT Remith
+33 1 69 08 51 27
remith.pongilat@cea.fr

Résumé

Sujet détaillé

Les batteries au lithium à l'état solide offrent d'excellentes caractéristiques en particulier en matière de sécurité et de densité d'énergie, pour les systèmes de batteries mobiles et les packs pour véhicule électrique (EV). Les batteries solides en céramique sont constituées d'une cathode composite et d'un électrolyte solide, densifiés par co-frittage et empilés avec une anode en lithium métallique ou en silicium.

Dans cette étude, nous avons choisi un matériau d'électrolyte solide à base d'halogénure Li3MCl3 (M=In, Er, Y) pour les études électrochimiques d'une configuration de batterie solide [2]. Ces électrolytes solides à base d'halogénure souffrent cependant d'une instabilité interfaciale lorsqu'ils sont en contact avec le lithium métallique, ce qui empêche leur application dans les systèmes de batteries solides à haute densité énergétique à base de lithium métallique.

Comme alternative, nous prévoyons dans ce projet d'étudier les propriétés électrochimiques et physiques d'une anode composite de nanoparticules de silicium recouvertes de carbone avec un électrolyte solide halogéné. Les anodes de silicium ont une capacité spécifique théorique élevée de 4 200 mAh/g et sont faciles à préparer sous forme de films minces, ce qui augmente leur densité énergétique [3]. Dans un premier temps, les anodes de silicium seront assemblées dans des cellules à base d'électrolyte liquide pour créer une base de référence. Des caractérisations physiques, dont la XRD, la TGA et la spectrométrie Raman, seront effectuées sur les matériaux tels que synthétisés, suivies de caractérisations électrochimiques telles que l'analyse des cycles et l'analyse EIS. Pour une analyse détaillée de l'interface, une analyse par faisceau d'ions sera effectuée sur des batteries solides plus performantes avec une anode en Si@C. Les tâches suivantes seront successivemnt abordées :

- Évaluation des performances électrochimiques des cellules avec anodes en silicium
- Préparation d'une électrode composite avec un électrolyte solide halogéné et une anode en Si@C

- Études de cyclage sur la configuration de la batterie à l'état solide
- Analyse par faisceau d'ions pour la caractérisation de l'interface

Techniques utilisées : Étude électrochimique : cyclage galvanostatique, impédance, capacité de débit et cyclage à long terme, dans divers montages électrochimiques (cellules sous pression Swagelok et pellets) et analyse par faisceau d'ions avec la microsonde nucléaire.

Profil : Étudiant en M2 avec une solide formation en électrochimie/science des matériaux/technologies de l'énergie. Une bonne connaissance des batteries au lithium et des compétences expérimentales seront appréciées.

Mots clés

Electrochimie

Compétences

Cyclage galvanostatique, impédance, capacité de débit et cyclage à long terme, dans divers montages électrochimiques.

Logiciels

Synthesis and exploration of electrochemical properties of halide-based solid electrolytes for battery applications

Summary

Full description

Solid-state lithium batteries offer the most desirable characteristics such as safety and higher energy densities for mobile and electric vehicle pack battery systems. All ceramic solid-state batteries consist of a composite cathode and solid electrolyte, densified by co-sintering and stacked with a metallic lithium anode or silicon anode. [1] In this study, we selected Halide-based Li3MCl3 (M=In, Er, Y) solid electrolyte material for the electrochemical experiments in solid-state battery configuration. [2] However, halide solid electrolytes are suffering from interfacial instability when in contact with lithium metal, which hinders their application in high energy density lithium metal-based solid-state battery systems. As an alternative, in this project we plan to study the electrochemical and physical properties of composite anode of carbon coated silicon nanoparticles with halide solid electrolyte. Silicon anodes are having high theoretical specific capacity of 4,200 mAh/g and are easy to prepare in thin film forms; subsequently increasing their energy density.[3] Initially, silicon anodes will be assembled in liquid electrolyte-based cells to create a baseline. Physical characterizations including XRD, TGA and Raman spectrometry will be performed on the as-synthesized materials followed by electrochemical characterizations such as cycling and EIS analysis. For detailed interface analysis, ion-beam analysis will be carried out on better-performing solid-state batteries with Si@C anode. In general, the following tasks will be tackled:

• Electrochemical performance evaluation of cells with silicon anodes
• Composite electrode preparation with halide solid electrolyte and Si@C anode
• Cycling studies on the solid-state battery configuration
• Ion-beam analysis for interface characterization

Techniques used: Electrochemical performance tests (galvanostatic cycling, impedance, rate capability, and long-term cycling) in various electrochemical setups (Swagelok and pellet pressure cells) and ion-beam analysis with the nuclear microprobe.

Profile: M2 student with strong background in Electrochemistry/Material Science/Energy technologies. A good knowledge in lithium batteries and experimental skills will be appreciated.

[1] J. C. Bachman, et. al., Chem. Rev. 2016, 116, 140−162
[2] J. Liang, et. al., Acc. Chem. Res. 2021, 54, 1023−1033
[3] C. Keller, et. al., Nanomaterials 2021, 11, 307

Keywords

Electrochemistry

Skills

Electrochemical performance tests (galvanostatic cycling, impedance, rate capability, and long-term cycling) in various electrochemical setups

Softwares