



Mécanique et Verres - IPR UMR 6251

Université de Rennes, CNRS, IPR - UMR 6251, F-35000 Rennes, France
Phone: +33-2-23-23-67-18 Fax: +33-2-23-23-61-11
E-mails: Tanguy.Rouxel@univ-rennes.fr / yann.gueguen@univ-rennes.fr

Titre de la thèse :

Comportement mécanique de verre innovants pour applications dans les électrolytes solides

Direction : Tanguy Rouxel (Prof.) et Yann Gueguen (Maître de conf.)

Contexte :

Les batteries « tout solide », à électrolyte et électrodes solides, présentent plusieurs avantages par rapport aux batteries à électrolytes liquides. Elles sont plus performantes en termes de capacité de stockage, de rapidité de charge/décharge, de fiabilité et de sûreté, et sont regardées comme l'avenir du stockage électrochimique d'énergie. Cependant, ces batteries posent des problèmes mécaniques difficiles. Notamment, les contraintes qui se développent dans les matériaux actifs, en raison des variations de volume engendrées par les cycles d'incorporation et de désincorporation des cations porteurs de charge, sont susceptibles d'affecter le processus de réaction électrochimique et d'engendrer de la fissuration. Les processus d'endommagement limitent le nombre de cycles et donc la durée de vie de la batterie. Ce projet propose de répondre à cette problématique en apportant une compréhension des mécanismes d'endommagement ainsi que des solutions pour améliorer la résistance à la fissuration, la durabilité chimique, la résistance à la fatigue et la sécurité, tout en optimisant l'autonomie et l'éco-compatibilité (matériaux abondants, procédés de recyclage, diagnostic-autoréparation).

Projet :

Les électrolytes solides sont avantagés par une conductivité ionique élevée ainsi que par de meilleures stabilités thermique et chimique vis-à-vis des matériaux actifs des électrodes. Par rapport aux matériaux cristallins principalement considérés jusqu'à présent (sulfures, oxysulfures et oxydes), les électrolytes en verre présentent plusieurs avantages : 1) leur capacité de formage viscoplastique se traduit par une bonne liaison aux interfaces solide-solide (électrodes et interphases) ; 2) l'absence de joints de grains réduit les risques de court-circuit dû à la croissance de dendrites métalliques ; 3) la souplesse au niveau de la composition permet d'optimiser la stabilité électrochimique et l'efficacité de l'électrolyte, qui peut atteindre une conductivité de plus de 10^{-3} S. cm^{-1} .

Le principal objectif de l'étude proposée est d'identifier les problèmes relevant du comportement mécanique des matériaux choisis pour les électrolytes solides, en lien avec leurs natures physico-chimiques, et de proposer une modélisation et une simulation pertinente pour les phénomènes couplés mécaniques/électrochimiques/chimiques.

Salaire et financement : environ 2150 € brut mensuel

Période : 1^{er} Oct. 2024 – 30 Sept. 2027

Profil du candidat (interdisciplinarité) : Mécanique, Modélisation, simulation, science et Ingénierie des Matériaux, Mécanique des Matériaux – Chemical and/or Mechanical Engineering, Material Sciences and Engineering.

Références :

1. Y. Daiko, E. Takahashi, Y. Gueguen, H. Muto, A. Matsuda, T. Yazawa, T. Rouxel, and Y. Iwamoto, "Indentation-induced stress distribution and pressure effect on the resistivity of YSZ", *Solid State Ionics*, 286 96 (2016). doi: 10.1016/j.ssi.2015.12.0
2. S. Kalnaus, N.J. Dudney, A.S. Westover, E. Herbert and S. Hackney, "Solid-state batteries: The critical role of mechanics", *Science*, 381, 1300 (2023). doi: 10.1126/science.abg5998
- A. Kato, M. Nose, M. Yamamoto, et al., "Mechanical properties of sulfide glasses in all-solid-state batteries", *J. Ceram. Society of Japan*, 126 [9] 719 (2018). doi: 10.2109/jcersj2.18022
3. Y.F. Gao and M. Zhou, "Strong stress-enhanced diffusion in amorphous lithium alloy nanowire electrodes", *J. Appl. Phys.*, 109, 014310 (2011). doi: 10.1063/1.3530738
4. J.A. Lewis, J. Tippens, F.J.Q. Cortes and M.T. McDowell, "Chemo-mechanical challenges in solid-state batteries", *Trends in Chemistry* 1 [9] 845 (2019). doi: 10.1016/j.trechm.2019.06.013
5. Y. Zhao, P. Stein, Y. Bai, M. Al-Siraj, Y. Yang, and B.X. Xu, "A review on modeling of electro-chemo-mechanics in lithium-ion batteries", *J. Power Sources*, 413, 259-283 (2019). doi: 10.1016/j.jpowsour.2018.12.011