

Sujet de Stage M2 :

Modélisation du comportement électrochimique d'une cellule de batterie par expérimentation et simulation numérique

Contacts :

- Ayda HALOUANI, SATIE, e-mail: ayda.halouani@univ-eiffel.fr, tel: 0130843975
- Zoubir KHATIR, SATIE, e-mail: zoubir.khatir@univ-eiffel.fr

Lieu : Université Gustave Eiffel, Campus Versailles, 25 allée des marronniers, 78000 Versailles, France

Contexte :

Les batteries jouent un rôle essentiel dans le stockage et la fourniture d'énergie dans de nombreuses applications, allant des dispositifs électroniques portables aux véhicules électriques et aux systèmes d'énergie renouvelable. Afin d'optimiser leurs performances et leur durabilité, il est essentiel de comprendre en détail leur comportement électrique. Pour les batteries, la spectroscopie d'impédance électrochimique (EIS) joue un rôle essentiel dans la caractérisation, l'analyse et l'amélioration de leurs performances. L'EIS est utilisée pour caractériser les propriétés électrochimiques, comprendre les mécanismes de dégradation, ainsi que pour évaluer la stabilité et la performance à long terme des batteries. Pour une interprétation approfondie des résultats obtenues en EIS, la modélisation des mécanismes électrochimiques s'avère essentielle. Elle permet de mieux comprendre, analyser, prédire et optimiser le fonctionnement des batteries. Ainsi, ce stage offre une opportunité de combiner ces approches expérimentales et numériques pour caractériser les cellules de batteries. En utilisant des équipements spécialisés et des logiciels de simulation avancés, le stagiaire aura l'occasion d'acquérir une expérience pratique dans le domaine de la caractérisation des batteries et de contribuer au développement des solutions pour ces applications énergétiques.

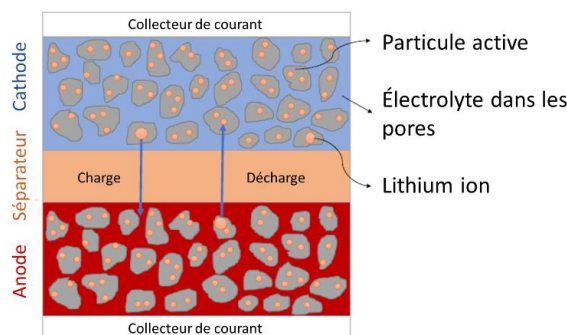


Figure 1: Illustration d'une batterie lithium-ion composée de collecteurs de courant, d'électrodes poreuses et le séparateur d'électrolyte.

La caractérisation fréquentielle permet d'explorer les phénomènes électriques qui se produisent à différentes échelles de temps. Les réponses électriques des cellules de batteries peuvent varier en fonction de la fréquence des signaux appliqués, ce qui peut être lié aux phénomènes de diffusion, de relaxation, de polarisation et d'autres mécanismes électrochimiques. En utilisant une approche expérimentale, il est possible de mesurer directement les réponses électriques des cellules de batteries à différentes fréquences. Cependant, ces mesures peuvent être coûteuses et limitées en termes de plage de fréquences. Les simulations numériques basées sur la méthode des éléments finis sont efficaces pour étendre la plage de fréquences étudiée. En modélisant les propriétés physiques et électrochimiques des cellules de batteries, il est possible d'explorer différents scénarios et de proposer des modifications de conception pour optimiser les performances des cellules de batteries.

Mission

Ce stage vise à étudier la caractérisation fréquentielle des cellules de batteries en combinant des techniques expérimentales et des simulations numériques basées sur la méthode des éléments finis. L'objectif est de comprendre le comportement électrique des cellules de batteries sur une plage de fréquences étendue, ce qui permettra d'optimiser leur performance et leur durabilité.

Pour cela, le candidat doit dans un premier temps participer à la mise en place des expérimentations nécessaires pour caractériser les cellules de batteries lithium-ion sur une plage de fréquences [mHz - kHz]. Le principe de la méthode est d'appliquer une faible excitation de tension/courant sinusoïdal aux bornes de la cellule pendant un état de tension à circuit ouvert et en enregistrant la réponse en courant/tension alternatif. Pour une cellule Li-ion, un résultat typique de l'analyseur d'impédance ressemble au graphique de la Figure 2.

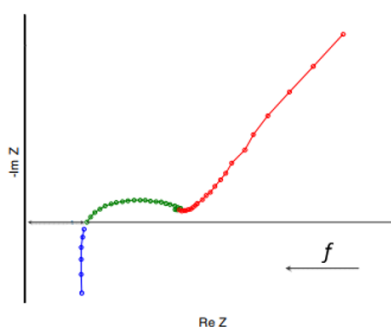


Figure 2: Spectre d'impédance typique d'une cellule Li-ion

Dans un deuxième temps, se familiariser avec le logiciel de simulation COMSOL Multiphysics et simuler la caractérisation électrochimique de la cellule de batterie. Une première étape consiste à faire une étude bibliographique afin de définir les propriétés des matériaux (conductivité électrique, permittivité, etc) pour chaque composant de la cellule de batterie ainsi que les équations de transport de masse et de charge. Une deuxième étape consiste à modéliser le comportement électrochimique des cellules en prenant compte les conditions initiales de l'expérimentation. Enfin, les résultats des simulations, doivent être validés par comparaison avec les résultats expérimentaux de ses caractéristiques électriques.

Références bibliographiques :

- 1) R-Smith, Nawfal Al-Zubaidi, et al. "Assessment of lithium ion battery ageing by combined impedance spectroscopy, functional microscopy and finite element modelling." *Journal of Power Sources* 512 (2021): 230459.
- 2) Abraham, D. P., S. Kawauchi, and D. W. Dees. "Modeling the impedance versus voltage characteristics of LiNiO. 8Co0. 15AlO. 05O2." *Electrochimica Acta* 53.5 (2008): 2121-2129.
- 3) Wang, Fu-Ming, and John Rick. "Synergy of Nyquist and Bode electrochemical impedance spectroscopy studies to commercial type lithium ion batteries." *Solid State Ionics* 268 (2014): 31-34.
- 4) Chabrak, Zeineb. Caractérisation et vieillissement de composants supercondensateurs hybrides: étude sous contrainte de températures négatives. Diss. Université Paris-Saclay, 2021.
- 5) <https://www.comsol.fr/>

Modalité de candidature

- Envoyez votre candidature (CV, lettre de motivation et relevés de notes des 2 dernières années).

Informations pratiques :

- Le stage est rémunéré.
- Le stage débutera idéalement en février/mars 2024 à temps plein pour une durée de 5 à 6 mois.
- Possibilité de prolongation en thèse.