



HAL
open science

Apport de l'analyse par Eléments finis à la conception d'un électrolyte de batterie Lithium Métal Polymère

G Dufaye, Frédéric Lebon, D Gigmes, C Hochard, A Maurel, S Maria, R Bouchet

► To cite this version:

G Dufaye, Frédéric Lebon, D Gigmes, C Hochard, A Maurel, et al.. Apport de l'analyse par Eléments finis à la conception d'un électrolyte de batterie Lithium Métal Polymère. 45eme colloque du Groupe Français des Polymères, Nov 2016, Marseille, France. , 2016. hal-01422007

HAL Id: hal-01422007

<https://hal.science/hal-01422007>

Submitted on 23 Dec 2016

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Apport de l'analyse par Eléments finis à la conception d'un électrolyte de batterie Lithium Métal Polymère



G. Dufaye ^a, F. Lebon ^a, D. Gignes ^b, C. Hochard ^a, A. Maurel ^a, S. Maria ^b, R. Bouchet ^c.

^a Laboratoire de Mécanique et d'Acoustique, CNRS, UPR 7051, Aix-Marseille Univ., Centrale Marseille, Marseille (France)

^b Institut de Chimie Radicalaire, CNRS, UMR 7273, Aix-Marseille Univ., St Jérôme, Marseille (France)

^c Laboratoire d'Electrochimie et de Physicochimie des Matériaux et des Interfaces, CNRS, UMR 5279, Saint Martin d'Hères (France)

Contact: dufaye@lma.cnrs-mrs.fr

Contexte

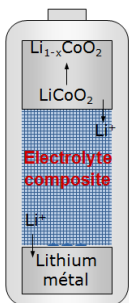
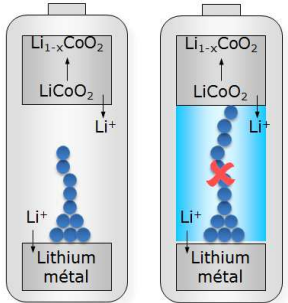
Motivation du Projet ECOBATT : développer des électrolytes solides pour les batteries Lithium Métal Polymère (LMP).

Compromis pour les électrolytes des batteries LMP : allier de bonnes propriétés de conductivité ionique à de bonnes propriétés de résistance mécanique.

Cahier des charges complexe : développer une méthodologie originale basée sur la modélisation par éléments finis des électrolytes à matrice de polymères à base de Poly(Oxyde d'Ethylène) (POE).

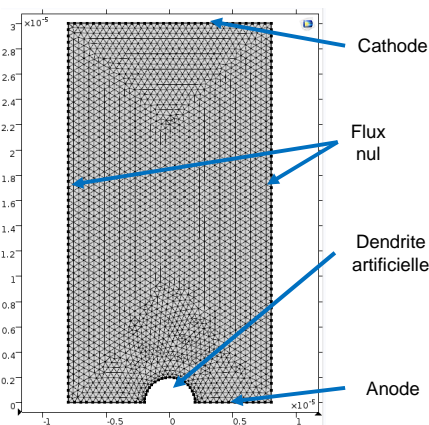
Simuler la croissance dendritique : ralentir ou empêcher cette croissance responsable des courts-circuits limitant la durée de vie des batteries LMP.

Couplage mécano-électro-chimique : équation de Butler-Volmer modifiée et résolution spatiale et temporelle par éléments finis (Monroe et Newman [1][2]) (Wood et al. [3]).

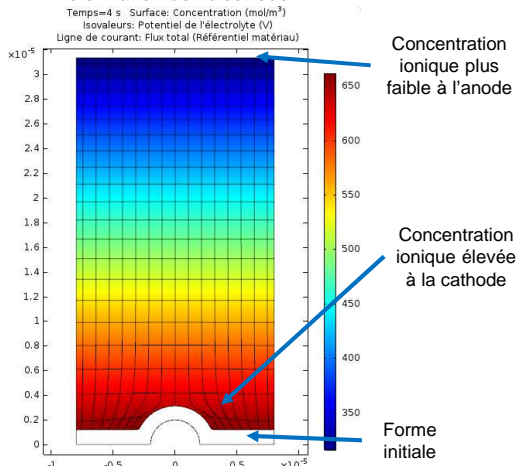


Modélisation numérique d'une batterie LMP

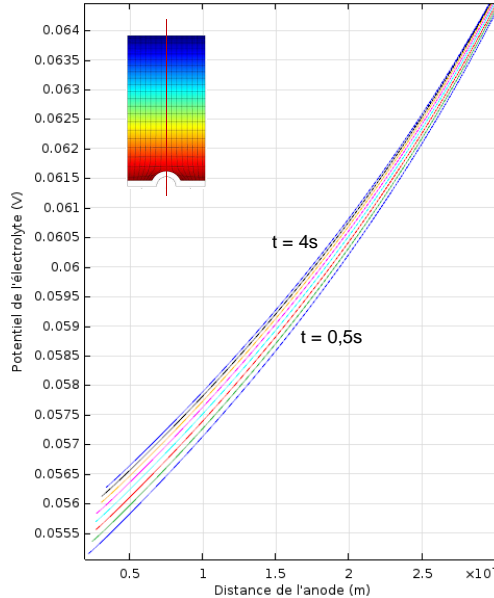
Maillage de l'électrolyte



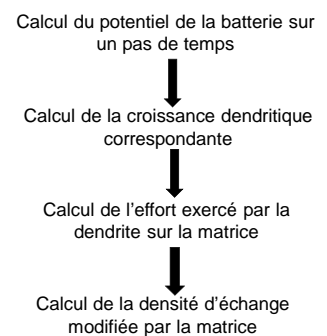
Déformation de l'électrode



Potentiel de l'électrolyte au cours du temps



Principe du couplage mécano-électro-chimique



Relation de Butler-Volmer modifiée [1][2]

Densité de courant d'échange i :
$$i_n = i_{0,ref} \exp \left[\frac{(1 - \alpha_a) \Delta \mu_{e^-}}{RT} \right] \left[\exp \left(\frac{\alpha_a F \eta_s}{RT} \right) - \exp \left(- \frac{\alpha_c F \eta_s}{RT} \right) \right]$$

Influence du volume molaire \bar{V} du séparateur :
$$\Delta \mu_{e^-} = - \frac{1}{2} (\bar{V}_{Li} - t_0 \bar{V}_{LiX})$$

Tension de surface γ et tenseur des contraintes τ :
$$\times \left\{ -\gamma \bar{v}_s \cdot e_n + e_n \cdot \left[\bar{\tau}_d^{électrode} - \bar{\tau}_d^{séparateur} \right] \right\}$$

Pression hydrostatique Δp pour chaque phase :
$$+ \frac{1}{2} (\bar{V}_{Li} - t_0 \bar{V}_{LiX}) (\Delta p^{électrode} + \Delta p^{séparateur})$$

η_s : surpotentiel de l'électrode

F : constante de Faraday

$i_{0,ref}$: densité de courant d'échange de référence

R : constante des gaz parfaits

α_a et α_c : coefficients de transfert de charge de l'anode et de la cathode

T : température (en K)

Références

- [1] C. Monroe et J. Newman, The Effect of Interfacial Deformation on Electrodeposition Kinetics, Journal of The Electrochemical Society, 2004, 151 (6) A880-A886.
- [2] C. Monroe et J. Newman, The Impact of Elastic Deformation on Deposition Kinetics at Lithium Polymer Interfaces, Journal of The Electrochemical Society, 2005, 152 (2) A396-A404.
- [3] Kevin N.Wood, Dendrites and Pits : Untangling the Complex Behavior of Lithium Metal Anodes through Operando Video Microscopy, ACS Central Science, 2016.

Perspectives

Cours terme :

- **Comparison** des résultats numériques aux travaux d'analyses expérimentales de croissance dendritique disponibles dans la littérature.
 - **Validation** du modèle couplé avec une batterie LMP identique.
- Moyen terme :
- **Optimisation** des caractéristiques de la matrice polymère de la batterie, emploi de fibres (verre, carbone, etc.) de diamètre micrométrique.

