

Contrat doctoral (Octobre 2023- Octobre 2026)

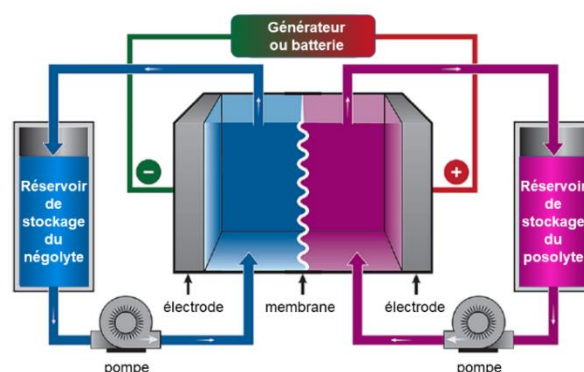
Elaboration, caractérisation et mise en œuvre de nouveaux posolytes organiques pour les batteries rédox flow (RFB)

Direction : Dr Vincent CESAR (LCC), Pr. Théo TZEDAKIS (LGC) ; Co-encadrement : Dr Yves CANAC (LCC)

CONTEXTE

Les **énergies renouvelables décarbonées** telles que le solaire et l'éolien, qui jouent d'ores et déjà un rôle essentiel dans la **transition énergétique**, sont par nature intermittentes et les pics de production et de consommation sont décalés dans le temps. Le **stockage électrochimique** de l'énergie est un moyen particulièrement adapté, de nombreuses batteries étant déjà commercialisées à différentes échelles.

Les batteries lithium-ion dominent actuellement le marché du stockage électrochimique (automobile, portable ...) du fait de leur densité énergétique élevée (entre 50 et 250 Wh/kg selon la matrice d'insertion). Dans le domaine du stockage énergétique en 'stationnaire', les **batteries à flux rédox (RFB)** sont particulièrement bien adaptées (simplicité, capacité à stocker de grandes quantités d'énergie via le stockage de matière active, longévité) et pour ces raisons elles connaissent depuis peu un essor spectaculaire. Comme montré dans la figure ci-contre, les RFB sont constituées de deux électrolytes liquides ou semi-liquides (**négolyte** et **posolyte**) stockés dans deux réservoirs externes de capacité modulable. Ces électrolytes contenant les matières électroactives, sont acheminés par un système de pompage vers le réacteur (ou batterie selon l'opération menée), dans lequel les espèces rédox-actives réagissent au contact de collecteurs électroniques inertes. Cette conception permet de **découpler l'énergie stockée** (fonction de la quantité de matière active, i.e. volume des réservoirs de stockage) **de la puissance générée** (fonction de la taille du réacteur/batterie, càd, du courant généré, la tension quant à elle étant fixé par le système rédox sélectionné).¹ Cette propriété associée aux avantages des RFB annoncées ci-dessus rend ces dernières particulièrement adaptées au stockage stationnaire de grandes quantités d'énergie (Actuellement des petites villes de quelques milliers d'habitants peuvent être alimentées par des RFB).



DESCRIPTION DU SUJET : OBJECTIFS ET CHALLENGES

Les électrolytes rédox-actifs sont les éléments clés des systèmes RFB car leurs propriétés déterminent leurs performances (densité d'énergie, voltage, stabilité en cyclage et dans le temps, coût). **Ce projet vise à développer des posolytes organiques performants et offrant des capacités énergétiques supérieures à 50 Wh/L.**

Ce projet interdisciplinaire sera réalisé entre le Laboratoire de Chimie de Coordination du CNRS (LCC, UPR 8241) et le Laboratoire de Génie Chimique (LGC, UMR 5503) à Toulouse et mettra en œuvre de la



synthèse organique hétérocyclique, des techniques de caractérisations spectroscopiques, analytiques électrochimiques, et la mise en œuvre dans des dispositifs électrochimiques.

Plus précisément, les objectifs de la thèse consistent en : *i*) La synthèse des molécules hétérocycliques cibles et leur caractérisation (RMN, MS, analyse élémentaire ...) (LCC). *ii*) La caractérisation électrochimique préliminaire des molécules obtenues (voltammétrie cyclique / mesures de leur potentiels redox et de leur réversibilité), afin de réaliser une analyse structure/propriétés. *iii*) Enfin, la mise en œuvre des posolytes synthétisés ayant les propriétés optimales, dans des batteries à échelle laboratoire ($S=10\text{ cm}^2$) et l'étude des bilans de matière, de charge et d'énergie lors des opérations de cyclage de la batterie. Un négolyte adapté sera choisi parmi ceux existants pour constituer la batterie d'étude.

PROFIL ET COMPÉTENCES RECHERCHÉS

Le/la candidat(e) doit être titulaire d'un master en chimie et posséder une solide formation en synthèse moléculaire. Des connaissances complémentaires en électrochimie seront également appréciées. Il/elle doit être très motivé(e), enthousiaste, autonome et aimer travailler en équipe.

SALAIRE ET FINANCEMENT

Co-financement université de Toulouse / région Occitanie

Salaire : ~ 1650 € net qui sera révisé chaque année

CANDIDATURE

Merci d'adresser une lettre de motivation, un CV détaillé, le relevé de notes du master, ainsi que les coordonnées (e-mail et/ou téléphone) de deux personnes susceptibles de donner une appréciation sur le candidat / la candidate.

Contacts : vincent.cesar@lcc-toulouse.fr, theodore.tzedakis@univ-tlse3.fr, yves.canac@lcc-toulouse.fr

¹ Pour une revue, voir : X. Wei, W. Pan, W. Duan, A. Hollas, Z. Yang, B. Li, Z. Nie, J. Liu, D. Reed, W. Wang, V. Sprenkle, *ACS Energy Lett.* **2017**, 2, 2187.