

AVIS DE SOUTENANCE DE THÈSE

Madame Gaëlle BOUDER

Candidate au Doctorat de Chimie,
de l'Université de Pau et des Pays de l'Adour

Soutiendra publiquement sa thèse intitulée :

Modélisation à l'échelle atomique de la réactivité aux interfaces électrode-électrolyte de batteries lithium tout solide dans lesquelles l'électrolyte est un polymère.

Dirigée par Monsieur PHILIPPE CARBONNIERE

le 22 septembre 2025 à 14h00

Lieu : IPREM , Technopôle Helioparc, 2 Av. du Président Pierre Angot, 64053 Pau Cedex 9

Salle : Amphithéâtre

Composition du jury :

M. Philippe CARBONNIERE, Professeur des universités	Université de Pau et des Pays de l'Adour	Directeur de thèse
M. Mathias RAPACIOLI, Chargé de recherche	Université de Toulouse	Rapporteur
M. Xavier ROCQUEFELTE, Professeur des universités	Université de Rennes	Rapporteur
Mme Caroline LAMBERT-MAURIAT, Maître de conférences	Université Aix-Marseille	Examinatrice
M. Germain VALLVERDU, Maître de conférences HDR	Université de Pau et des Pays de l'Adour	Examineur
M. Jean-Marc SOTIROPOULOS , Directeur de recherche	Université de Pau et des Pays de l'Adour	Examineur
M. Hamza BOUHANI, Professeur assistant	Ecole Centrale Casablanca	Invité
M. Hervé MARTINEZ, Professeur des Universités	Université de Pau et des Pays de l'Adour	Invité

Mots-clés : Batterie tout solide, chimie informatique, Dynamique Moléculaire, AIMD, Algorithme d'évolution par mutation, SEI

Résumé :

Les batteries tout-solide (ASSBs) à électrolyte polymère apparaissent comme une solution prometteuse pour répondre à la demande croissante en systèmes de stockage d'énergie à haute performance, tout en contribuant à la réduction de la consommation énergétique globale. Ces dispositifs utilisent un électrolyte solide à base de polymères, qui présente plusieurs avantages par rapport aux électrolytes liquides conventionnels, tels que la stabilité thermique, la sécurité et la flexibilité. Cependant, l'utilisation d'une électrode en lithium métallique soulève plusieurs défis, notamment en ce qui concerne les mécanismes de dégradation de l'électrolyte et la croissance dendritiques à l'interface électrode-électrolyte, responsables du vieillissement prématuré de la batterie. Ce travail de thèse s'appuie sur des outils de modélisation moléculaires à l'échelle atomique, la dynamique moléculaire ab-initio (AIMD) et un algorithme d'évolution par mutation (EA), en conjonction avec des calculs basés sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT), afin d'explorer la dégradation d'un électrolyte polymère fluoré (LiFSI, FEC et PVDF) à la surface de différents plans cristallographiques du lithium métallique. Une comparaison détaillée entre les méthodes AIMD et EA a ainsi été réalisée en termes de coût computationnel et de diversité des produits obtenus. L'étude a ensuite été approfondie pour inclure l'interaction de ces molécules avec des substrats inorganiques (LiF, Li_2O et Li_2CO_3), représentatifs des produits formés lors de la formation de la couche d'interphase solide-électrolyte (SEI) naturelle, ainsi qu'avec des feuillets bidimensionnels à base de carbone (graphyne et graphdiyne), explorés en tant que coating (revêtements protecteurs). Les résultats obtenus permettent d'identifier les premières étapes de formation de la SEI, et de fournir des pistes rationnelles pour la conception de couches protectrices adaptées aux batteries lithium-métal à électrolyte polymère.