

Cycle thématique : *Enjeux du stockage électrochimique de l'énergie* – conférence 3/5

# L'apport indispensable de la chimie théorique pour mieux comprendre les batteries lithium-ion

Dr. **Matthieu SAUBANÈRE**, C.R. CNRS

Équipe CTMM *Chimie Théorique Méthodologies Modélisation*,  
ICGM *Institut Charles Gerhardt* – UMR 5253, CNRS, ENSCM, Université de Montpellier

Pour concevoir les prochaines générations de batteries Li-ion, de nouveaux matériaux d'électrodes et/ou concepts redox devront être élaborés pour stocker plus, moins cher et mieux. Dans ce contexte, une compréhension fine des mécanismes présents dans les matériaux d'électrodes d'aujourd'hui est indispensable. Dans cet exposé, nous utiliserons des concepts de chimie théorique et quantique pour décrire les phénomènes redox agissant dans les matériaux d'électrodes pour batteries Li-ion et nous isolerons des descripteurs chimiques simples et intuitifs qui gouvernent leurs performances électrochimiques (potentiel, capacité, densité d'énergie, cyclabilité). Finalement, l'extension de ces concepts à d'autres dispositifs de stockage électrochimique sera discuté, ainsi que les défis théoriques et méthodologiques à lever dans les prochaines années.

---

Cycle thématique de séminaires ED459

**Enjeux du stockage électrochimique de l'énergie**

*...Avez-vous toujours rêvé de comprendre le stockage électrochimique de l'énergie électrique ? Ou bien même de comprendre les réactions redox impliquées dans une batterie ? Des jeunes chercheurs de l'Institut Charles Gerhardt Montpellier se proposent de vous initier à ces sujets à travers leur activité. Cette série de séminaires se donne pour objectif d'aborder les différents aspects du stockage (électrolytes, matériaux, interfaces, nouveaux dispositifs, ainsi que les théories associées), elle se veut principalement pédagogique pour être accessible au plus grand nombre.*