

---

# Développement théorique du potentiel des batteries Lithium-ions

Matthieu Saubanere\*<sup>†1,2</sup>, Mouna Ben Yahia<sup>1,2</sup>, Sebastien Lebegue<sup>2,3</sup>, and Marie-Liesse Doublet<sup>‡1,2</sup>

<sup>1</sup>ICG Montpellier – Université Montpellier II - Sciences et Techniques du Languedoc – France

<sup>2</sup>Réseau sur le stockage électrochimique de l'énergie (RS2E) – CNRS : UMR3459 – France

<sup>3</sup>Institut Jean Barriol – Université de Lorraine – France

## Résumé

Depuis plus de 10 ans, d'intenses efforts ont été déployés pour augmenter la quantité d'énergie stockable par une batterie Lithium-ion. Pour cela, il faut soit augmenter le potentiel, soit augmenter la capacité du matériaux de cathode. Si les définitions du potentiel et de la capacité sont en théorie simples, il n'est pas évident en pratique de les contrôler. En particulier la littérature montre que l'augmentation de l'un se fait souvent au détriment de l'autre.

Depuis 1997 et l'introduction par J. B. Goodenough du concept d'effet inductif, il n'y a pas eu de nouveaux apports théoriques pour guider les expérimentateurs dans leur recherche de nouveaux matériaux. De plus, l'existence d'autres mécanismes permettant d'augmenter le potentiel ont été mis en évidence expérimentalement.

Nous proposons une approche théorique qui rationalise les différentes contributions au potentiel, prenant en compte tant les contributions courtes portées ou intra-orbitales (champs de ligand, corrélation électron-électron) que les contributions électrostatiques longue portée. En particulier, ces dernières sont responsables des différences de potentiel observées entre les phases ayant des mêmes champ de ligands comme par exemple dans le cas des LiFeSO<sub>4</sub>F tavorite-triplite.

Cette démarche est testée avec succès sur un jeu de différents matériaux d'électrode connus. Nous pensons qu'une telle approche est nécessaire dans l'optique de développer des matériaux d'électrode plus performants.

**Mots-Clés:** batteries, Lithium, potentiel

---

\*Intervenant

<sup>†</sup>Auteur correspondant: matthieu.saubanere@univ-montp2.fr

<sup>‡</sup>Auteur correspondant: Marie-Liesse.Doublet@univ-montp2.fr