

**Date d'affichage :** 2023-05-09

## **Diagrammes de phases complexes pour électrolytes de batteries Li-ion**

Support financier disponible

Les piles de stockage d'énergie Li-ion utilisées dans les véhicules électriques et les appareils électroniques portatifs possèdent un liquide électrolyte qui démontre un point de congélation autour de  $-25^{\circ}\text{C}$ , ce qui limite l'utilisation des piles à basse température. Comme ce point de solidification peut être réduit par le contrôle de la composition chimique, le projet consiste à élaborer des diagrammes de phases pour les liquides électrolytes d'intérêt. Le projet consistera à développer du code informatique (e.g. Python) de même que l'utilisation de logiciels et codes développés in-house au CRCT (Centre de Recherche et Calcul de Thermochimie). Ce travail est principalement informatique et théorique.

Formation antérieure suggérée:

Suivi un cours en thermodynamique (e.g. comment lire un diagramme de phase)

Expérience minimale en programmation (e.g. Python)

### **Complex phase diagrams for Li-ion battery electrolytes**

Financial support is available

Current Li-ion batteries used in electric vehicles and portable electronics generally hold a liquid electrolyte that shows freezing around  $-25^{\circ}\text{C}$ , leading to inoperability of the batteries. As this freezing point can be reduced through the control of chemical composition, the current project consists in drawing out the relevant phase diagrams of the liquid electrolytes of interest. The project will require both elaboration of in-house code (e.g. using Python language and libraries) as well as in-house software and code developed in the CRCT (Computational Center for Thermochemistry). This work is primarily computational and theoretical.

Suggested background:

Knowledge of thermodynamics (e.g. how to read a phase diagram)

Minimal knowledge of programming (e.g. Python)

**Contact:** [julian.self@polymtl.ca](mailto:julian.self@polymtl.ca) (professeur adjoint dans le département de génie chimique)

