

Estimation de la force électromotrice des systèmes électrolytes/membrane par des méthodes de simulation hors-équilibre

Le développement des batteries à flux redox (BFR) suscite beaucoup d'attentions en tant que technologie de stockage d'énergie à grande échelle pour les sources d'énergie renouvelable intermittente en raison de leurs caractéristiques spécifiques: puissance et capacité flexible, longue durée de vie, temps de réponse rapide et énergie élevée. L'un des composants principaux des dispositifs RFB est la membrane semi-perméable requise pour séparer les deux compartiments d'électrolyte tout en permettant une conductivité ionique. L'un des points clés d'amélioration de ce type de batterie réside dans l'optimisation de la perméabilité de la membrane tout en maintenant sa haute sélectivité. Ce processus d'optimisation doit être effectué de telle façon à garder la force électromotrice (FEM) de la batterie inchangée. L'utilisation de techniques de simulation moléculaire (atomistique ou mésoscopique) peut aider ce processus d'optimisation en permettant l'examen de différentes configurations potentielles. L'idée principale est donc de modéliser la diffusion des ions et le transport des différentes espèces d'électrolytes à travers la membrane sous l'effet d'un champ électrique.

L'objectif du stage proposé est d'utiliser différentes méthodes de simulation pour valider et tester une méthodologie robuste permettant d'estimer la FEM sur des systèmes électrolyte / membrane complexes. Ce stage fournira également des informations difficilement accessibles expérimentalement, tel que la composition aux interfaces électrolyte / membrane. Cela permettra de mieux comprendre les phénomènes physico-chimiques ayant lieu au sein de cette membrane.

Formation requise : L'étudiant / étudiante doit être inscrit (e) dans un programme de master et doit avoir une formation en génie chimique, chimie physique, physique, chimie ou en électrochimie. Une expérience supplémentaire des techniques de simulation moléculaire / mésoscopique sera utile.

Durée du stage : 4 à 6 mois

Rémunération : de 700 à 1000€ selon l'expérience du candidat

Personne à contacter : Carlos Nieto-Draghi (carlos.nieto@ifpen.fr) et/ou Theodorus de Bruin (theodorus.de-bruin@ifpen.fr)

Localisation : IFP Energies nouvelles, 1 & 4 avenue de Bois-Préau, 92852 Rueil-Malmaison, France.

Merci de nous transmettre un CV, une lettre de motivation et les noms et adresses électroniques de deux personnes de référence.

Title: Estimation of electromotive force of electrolyte/membrane systems by non-equilibrium molecular simulations

The development of redox flow batteries (RFB) has received a lot of attention as a large-scale energy storage technology for intermittent renewable energy sources because of their specific characteristics: tunable power and capacity, long life-cycle, rapid response time, and high energy efficiency. One of the main constituents of RFB devices is the semipermeable membrane required to separate the two electrolyte compartments, while allowing ionic continuity. One of the key points in the improvement of this kind of batteries is the optimization of the membrane's permeability, while keeping its high selectivity. This optimization process should be done under the constraint of conserving the electromotive force (EMF) of the battery. The use of molecular simulation techniques (atomistic or mesoscopic) can help in this optimization process. The main idea is to model the ion diffusion and transport of the different electrolyte species through the membrane under the effect of an electric field.

The objective of the proposed internship is to use different simulation methods to test and validate a robust methodology to estimate the EFM on complex electrolyte/membrane systems. This internship will also provide information that is not accessible experimentally, such as the composition at the electrolyte/membrane interfaces.

Required background: Student must be in a Master degree program. Students must have a Chemical Engineering, Physical Chemistry, Physics or Chemistry or electrochemical background. Additional experience in Molecular/Mesosopic Simulation techniques will be useful.

Internship period: 4-6 months

Monthly fellowship: between 600€ to 1000€ based on educational level and experience. Foreign students will receive a single additional compensation of 500€ at arrival.

Interested candidates should contact Dr. Carlos Nieto-Draghi (carlos.nieto@ifpen.fr) or Dr. Theodorus De Bruin (theodorus.de-bruin@ifpen.fr).

The complete application should include: (i) a motivation letter; ii) a detailed CV, iii) the name and email address of two references.