



Ecole Doctorale - 104

Sciences de la Matière, du Rayonnement
et de l'Environnement

ETABLISSEMENT : Université de Lille et ENSCR

Laboratoire(s) de Rattachement : Unité de Catalyse et Chimie du Solide (UCCS) et Institut des Sciences Chimiques de Rennes (ISCR)

Domaine scientifique, Spécialité :

DS4 | Chimie des matériaux

Direction de thèse : LAFON Olivier, Univ. Lille, olivier.lafon@univ-lille.fr

Co-direction : FURET Éric, ENSCR, eric.furet@ensc-rennes.fr

Titre de la thèse : Electrolytes en couches minces amorphes : pourquoi l'ajout de modificateurs de réseau améliore la conductivité ionique ?

SUJET DE THESE (environ 1/2 page)

Les électrolytes amorphes à couche mince, tels que ceux à base de LiPON, sont des composants indispensables des microbatteries, qui sont de plus en plus utilisées dans le secteur de la santé. Ils constituent également des revêtements prometteurs pour les électrodes des batteries à l'état solide. Cependant, l'une de leurs principales limitations est leur conductivité ionique modérée. Une approche prometteuse pour lever ce verrou consiste à incorporer d'autres modificateurs de réseau que le P, tels que le Si ou le B. Néanmoins, notre connaissance limitée de la structure à l'échelle atomique de ces matériaux amorphes, à l'exception du LiPON, restreint les possibilités d'amélioration raisonnée de leur conductivité à l'aide de cette stratégie. La caractérisation des films minces par spectroscopie RMN par exemple, est d'autant plus complexe que les éléments B et Si sont sensiblement plus difficiles à observer par cette technique que le P. Ce projet vise à surmonter ces obstacles et à comprendre comment la combinaison de différents modificateurs de réseau influence l'organisation structurale de ces électrolytes en couche mince et permet d'augmenter ainsi leur conductivité ionique.

Pour répondre à cette question, nous étudierons leur structure et leur dynamique à l'échelle atomique en combinant des techniques avancées de spectroscopie RMN à l'état solide et de dynamique moléculaire *ab initio*. Nous démontrerons en particulier la possibilité de détecter les isotopes ^{11}B , ^{14}N , ^{15}N et ^{29}Si dans ces films minces. Les gains en résolution et en sensibilité offerts par les champs magnétiques ultra-élevés (jusqu'à 28 T) du spectromètre RMN 1,2 GHz seront particulièrement utiles pour observer les noyaux quadripolaires avec un spin $I > 1/2$ (^{11}B , ^{14}N). Ces données expérimentales seront confrontées à des modèles structuraux et aux coefficients de diffusion des ions Li^+ calculés par dynamique moléculaire *ab initio*.

Date de recrutement envisagée : 01/10/2026

Contact (adresse e-mail) : olivier.lafon@univ-lille.fr, eric.furet@ensc-rennes.fr

Remarques/commentaires supplémentaires : Thèse financée par le projet ANR Ampère.





Ecole Doctorale - 104

Sciences de la Matière, du Rayonnement
et de l'Environnement

INSTITUTION: University of Lille and ENSCR

Laboratory(s) to which they are attached : Unité de Catalyse et Chimie du Solide (UCCS) et Institut des Sciences Chimiques de Rennes (ISCR)

Scientific field, Specialty :

DS4 | Materials Chemistry

Thesis supervision : LAFON Olivier, professor Univ. Lille, olivier.lafon@univ-lille.fr

Co-supervision : FURET Éric, ENSCR, eric.furet@ensc-rennes.fr

Thesis title: Amorphous thin-film electrolytes: why can additional network formers and anionic substitutions improve their ionic conductivity?

THESIS SUBJECT (about 1/2 page)

Thin-film amorphous electrolytes, such as those based on LiPON, are at the heart of microbatteries, which are increasingly used in the health sectors. They also represent promising coatings for electrodes in solid-state batteries. However, one of their major limitations is their moderate ionic conductivity. A promising approach to circumvent this issue is to incorporate other network formers than P, such as Si or B. Nevertheless, our limited understanding of the atomic-scale structure of these amorphous materials, except for LiPON, restricts the possibilities for rationally improving their conductivity using this strategy. In particular, a major question is whether all the chemical elements are incorporated into the same phase or a separation between different amorphous phases occurs. Additional challenges in the characterisation of thin films by NMR spectroscopy arise from the fact that B and Si are more difficult to observe than P. This project aims to overcome these obstacles and understand how the combination of different network formers impact the atomic-scale structure of these thin-film electrolytes and thus increases their ionic conductivity.

To answer this question, we will probe the local environments of P, Si, N and B atoms and the mobility of Li⁺ ions using solid-state NMR spectroscopy. In particular, we will demonstrate the possibility of detecting ¹¹B, ¹⁴N, ¹⁵N and ²⁹Si in these thin films. The gains in resolution and sensitivity offered by ultra-high magnetic fields (up to 28 T) will be particularly useful to observe quadrupolar nuclei with spin $I > 1/2$ (¹¹B, ¹⁴N). The experimental NMR data will be compared with structural models and diffusion coefficients for Li⁺ ions calculated by *ab initio* molecular dynamics.

Planned recruitment date: 01/10/2026

Contact (email address) : olivier.lafon@univ-lille.fr, eric.furet@ensc-rennes.fr

Additional Notes/Comments: Thesis funded by ANR project Ampère

