

## "Diffraction de neutrons et spectroscopie RMN dans la caractérisation de conducteurs par ions lithium avec structure NASICON"

Résumé :

L'étude de la mobilité des ions  $\text{Li}^+$  permet d'expliquer les propriétés de transport dans les électrolytes solides des batteries d'ion lithium. Pour mieux comprendre cette mobilité, il faut d'abord identifier les sites structuraux occupés, le temps de résidence dans ces sites et les sites vacants où se déplacer (chemin de conduction). L'utilisation parallèle des techniques de diffraction (DRX, DN) et de RMN permet de résoudre la plupart de ces questions. Dans cette présentation, on discutera la mobilité des ions lithium dans différentes solutions solides de matériaux avec structure NASICON. En particulier on analysera les raisons structurales qui favorisent la mobilité ionique dans des séries de composés dérivés du phosphate  $\text{LiTi}_2(\text{PO}_4)_3$ , par substitution de  $\text{Ti}^{4+}$  par des cations tri, tétra ou pentavalents. L'utilisation de la technique de différences de Fourier a permis de localiser les ions  $\text{Li}^+$  et de discuter des possibles chemins de conduction. La technique RMN a permis d'étudier le temps de résidence, les mécanismes de conduction et de déterminer des coefficients de diffusion. Des conclusions déduites ont été comparées avec celles déduites par des techniques de simulation DFT et de dynamique moléculaire.