

## **Modélisation thermodynamique de l'activité et de la solubilité pour le système ternaire $\text{Li}_2\text{SO}_4 - \text{Na}_2\text{SO}_4 - \text{H}_2\text{O}$ de 273.15 à 373.15 K.**

*Mathilde Pellegrin, IFPEN, 1-4 Av. du Bois Préau 92852 Rueil-Malmaison*

### **Résumé**

Dans la conception du processus de recyclage des batteries lithium-ion, des étapes d'évaporation, de cristallisation et de séchage sont étudiées dans le but de séparer le sulfate de lithium du sulfate de sodium. Cette étude nécessite l'utilisation de modèles thermodynamiques fiables pour prévoir la nature des solides précipités dans des conditions spécifiques de température, pression, pH et concentration. Cette présentation introduit une compréhension du système ternaire  $\text{Li}_2\text{SO}_4/\text{Na}_2\text{SO}_4/\text{H}_2\text{O}$  dans la plage de température de 0 à 100°C. Dans cette plage de température, deux solides stœchiométriques,  $\text{Li}_2\text{SO}_4 \cdot 3\text{Na}_2\text{SO}_4 \cdot 12\text{H}_2\text{O}$  et  $\text{Li}_2\text{SO}_4 \cdot \text{Na}_2\text{SO}_4$ , peuvent éventuellement se former dans le système et complexifier la conception du processus. Le modèle d'activité de Pitzer et les constantes d'équilibre pour toutes les espèces impliquées dans le système ternaire ont été établis sur la base des données expérimentales trouvées dans la littérature. PHREEQC sert d'outil principal dans ce travail pour la paramétrisation et la validation du modèle. Les paramètres résultants ont ensuite été modifiés pour se conformer au formalisme d'ASPEN, permettant ainsi la simulation du processus de séparation. La présentation du travail inclut également des comparaisons avec le logiciel OLI Systems.