

Conception d'une structure type supercondensateur

H. Lou Chao

3 juillet 2023

Table des matières

1	Description de la structure	1
2	Construction de la structure	2
2.1	Méthode adoptée	2
3	Résultats obtenus	2
3.1	Simulation d'électrodes parfaites	3
3.2	Simulation avec cathode défectueuse	3
A	Conversion de fichiers de configuration en données compatibles LAMMPS	3

Introduction

1 Description de la structure

Un supercondensateur à double couche électrochimique, présenté FIG. 1, est constitué de deux électrodes séparées par une électrolyte et un séparateur (une membrane perméable). Dans le cadre de notre étude, ces électrodes sont modélisées par des plaques de graphite, l'électrolyte est une solution de soude, et la membrane perméable peut être ignorée.

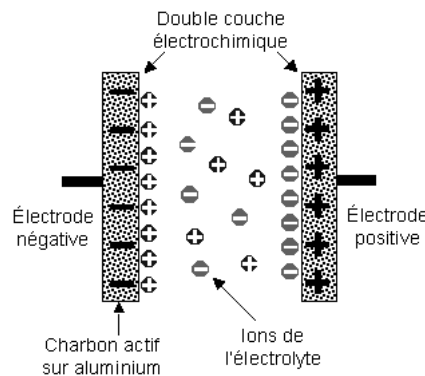


FIGURE 1 – Schéma d'un supercondensateur

Aussi, la distance séparant les électrodes capacitatives est petite (de 3 Å à 8 Å), la conductivité de l'électrolyte est élevée (de l'ordre de 100 mS cm^{-1} à 1000 mS cm^{-1}), et la différence de potentiel entre les électrodes est relativement basse (de 2.1 V à 2.3 V).

Cependant, pour nous concentrer sur l'adsorption des ions et la répartition des charges sur les électrodes capacitatives nous ne tentons pas de reproduire une structure réelle et construisons plutôt une structure modèle (FIG. 2) :

- les électrodes capacitatives sont séparées d'environ 40 Å
- l'électrolyte contient 20 ions hydroxyde et 20 ions sodium
- le voltage appliqué entre les électrodes est de 4 V

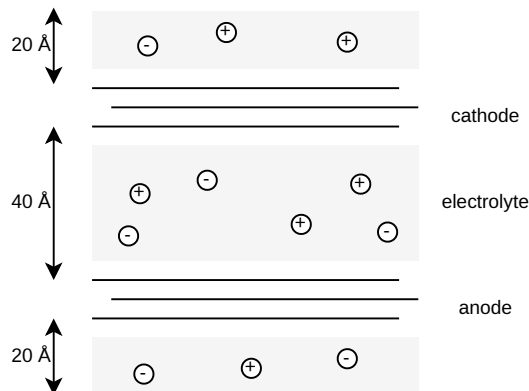


FIGURE 2 – Structure modèle construite pour cette étude

2 Construction de la structure

2.1 Méthode adoptée

Pour la construction de la structure, la démarche FIG. 3 a été adoptée. Les fichiers initiaux ont été trouvés dans des bases de données comme les bases de données American Mineralogist Crystal Structure (AMCS), National Institute of Standards and Technology (NIST), etc., pour l'agencement des entités chimiques le package *Packmol*[1] a été utilisé, et un script dédié à la conversion de la structure en données LAMMPS a été développé (voir ANNEXE A).

Avant de pouvoir lancer une simulation à partir de ce système, il est nécessaire de réaliser une minimisation de l'énergie et une relaxation du système.

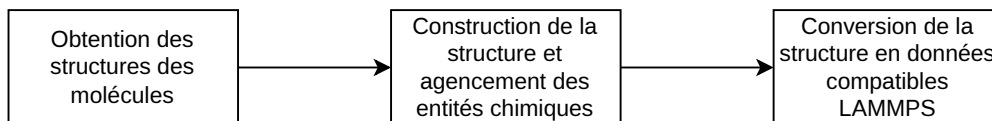


FIGURE 3 – Démarche de construction du système

3 Résultats obtenus

Après l'obtention de la structure nous sommes en mesure de réaliser des simulations. Puisque la ligne directrice de notre étude est l'adsorption des ions, nous observons dans un premier temps l'adsorption des ions par des électrodes capacitatives en graphite parfait. Nous étudions ensuite le comportement du système avec une cathode portant un défaut, dans notre cas ce défaut est un atome de carbone manquant.

3.1 Simulation d'électrodes parfaites

3.2 Simulation avec cathode défectueuse

A Conversion de fichiers de configuration en données compatibles LAMMPS

Références

- [1] L. MARTÍNEZ et al. "PACKMOL : A package for building initial configurations for molecular dynamics simulations". In : *Journal of Computational Chemistry* 30.13 (oct. 2009), p. 2157-2164. ISSN : 01928651, 1096987X. DOI : 10.1002/jcc.21224. URL : <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/jcc.21224> (visité le 23/06/2023).