



Rapport de stage :
Simulations moléculaires d'électrodes capacitives

LOU CHAO Heiarri M2 Physique Numérique
Établissement d'accueil : Laboratoire de Mécanique et de
Génie Civil
Encadrants : Katerina Ioannidou, Romain Dupuis

Table des matières

1	Présentation du système modèle	3
2	Présentation des méthodes utilisées	3
3	Résultats et discussion	3
4	Conclusion	3

Introduction

En 2019, la consommation mondiale d'énergie finale a doublé par rapport à 1973 et a dépassé la barre des 400 EJ, dont 19.7 % d'électricité [1].

Il est donc nécessaire de pouvoir stocker efficacement l'énergie produite, c'est-à-dire avec un minimum de pertes, une grande capacité de stockage, et des temps de charge et de décharge courts.

Les supercondensateurs sont des systèmes de stockage d'énergie caractérisés par une haute densité de puissance. À l'inverse des condensateurs habituels, ils sont capables de stocker de plus grandes quantités d'énergie. Bien que leurs réserves soient bien loin des batteries, ils ont l'avantage de pouvoir se charger ou se décharger bien plus rapidement.

Ceci explique donc leur utilisation répandue pour les véhicules électriques, systèmes d'alimentation sans fil ou encore appareils portables.

Enfin, malgré le nombre d'études ayant déjà été menées, le fonctionnement de ces appareils reste encore peu compris. Ainsi, nous suivons une piste sérieuse[2] pour approfondir notre compréhension avec les simulations de Dynamique Moléculaire d'électrodes capacitatives.

Les supercondensateurs sont composés d'électrodes poreuses séparées par une membrane perméable et plongées dans un électrolyte. Ceci permet le déplacement des charges d'une électrode à l'autre lorsque l'appareil est en charge ou en décharge (FIG. 1).

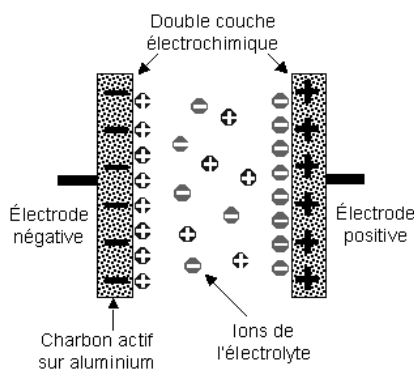


FIGURE 1 – Schéma d'un supercondensateur

Les électrodes capacitatives sont généralement constituées de charbon actif : la porosité de telles électrodes permet d'augmenter la surface de contact avec l'électrolyte pour atteindre des capacitance spécifique de 100 à 300 F.g⁻¹.

Quant aux électrolytes, ils peuvent être groupés en fonction de leur nature : aqueux, organiques et ioniques. Parmi les électrolytes aqueux se démarquent[3] les électrolytes acides (H₂SO₄), alcalins (KOH), et neutres (Na₂SO₄).

Lors de cette étude, nous utilisons *Large Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator* (LAMMPS) pour effectuer des simulations de Dynamique Moléculaire. En effet, cet outil permet de mettre en place des simulations et d'en contrôler les conditions relativement facilement (contrôle du/des potentiel/s, de l'ensemble thermodynamique, thermostat, barostat, etc.). Aussi, l'extraction et le traitement des données de simulations ont été une tâche non-négligeable. Pour cela, nous avons utilisé majoritairement des programmes écrits en C dont la conception et réalisation sont détaillées en annexes.

Enfin, pour des outils supplémentaires ont été utilisés pour les tâches restantes comme la visualisation des trajectoires[ovito] ou encore la réalisation de configurations initiales[4].

La structure des électrodes capacitives étant très complexe du fait du grand nombre de pores et de leur diversité, nous avons préféré adopter un système modèle, que nous présentons en première section.

Puis, nous présenterons les outils que nous utilisons pour simuler un supercondensateur en charge, à savoir le potentiel réactif *ReaxFF*[5][6][7] et *EChemDID*[8].

Enfin, nous présentons les résultats obtenus et observations faites lors de cette étude, notamment par rapport à l'adsorption des ions à la surface des électrodes et la répartition des charges en leur sein.

1 Présentation du système modèle

Comme mentionné précédemment, il est préférable pour cette étude de considérer un système modèle à cause de la complexité du système réel, notamment en terme de porosité.

2 Présentation des méthodes utilisées

3 Résultats et discussion

4 Conclusion

Références

- [1] Dr Fatih BIROL. “Key World Energy Statistics 2021”. In : ().
- [2] Zheng BO et al. “Design of Supercapacitor Electrodes Using Molecular Dynamics Simulations”. In : *Nano-Micro Letters* 10.2 (avr. 2018), p. 33. ISSN : 2311-6706, 2150-5551. DOI : 10.1007/s40820-018-0188-2. URL : <http://link.springer.com/10.1007/s40820-018-0188-2> (visité le 05/07/2023).
- [3] Cheng ZHONG et al. “A review of electrolyte materials and compositions for electrochemical supercapacitors”. In : *Chemical Society Reviews* 44.21 (2015), p. 7484-7539. ISSN : 0306-0012, 1460-4744. DOI : 10.1039/C5CS00303B. URL : <http://xlink.rsc.org/?DOI=C5CS00303B> (visité le 16/07/2023).
- [4] 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).
- [5] Adri C. T. VAN DUIN et al. “ReaxFF : A Reactive Force Field for Hydrocarbons”. In : *The Journal of Physical Chemistry A* 105.41 (1^{er} oct. 2001), p. 9396-9409. ISSN : 1089-5639, 1520-5215. DOI : 10.1021/jp004368u. URL : <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/jp004368u> (visité le 05/07/2023).
- [6] Michael F. RUSSO et Adri C.T. van DUIN. “Atomistic-scale simulations of chemical reactions : Bridging from quantum chemistry to engineering”. In : *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B : Beam Interactions with Materials and Atoms* 269.14 (juill. 2011), p. 1549-1554. ISSN : 0168583X. DOI : 10.1016/j.nimb.2010.12.053. URL : <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0168583X10009869> (visité le 16/03/2023).
- [7] Thomas P. SENFTLE et al. “The ReaxFF reactive force-field : development, applications and future directions”. In : *npj Computational Materials* 2.1 (4 mars 2016). Number : 1 Publisher : Nature Publishing Group, p. 1-14. ISSN : 2057-3960. DOI : 10.1038/npjcompumats.2015.11. URL : <https://www.nature.com/articles/npjcompumats201511> (visité le 16/03/2023).
- [8] Nicolas ONOFRIO et Alejandro STRACHAN. “Voltage equilibration for reactive atomistic simulations of electrochemical processes”. In : *The Journal of Chemical Physics* 143.5 (7 août 2015), p. 054109. ISSN : 0021-9606, 1089-7690. DOI : 10.1063/1.4927562. arXiv : 1504.03621[cond-mat]. URL : <http://arxiv.org/abs/1504.03621> (visité le 03/07/2023).