



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	2
2	Présentation des méthodes utilisées	2
3	Résultats et discussion	2
4	Conclusion	2

Introduction

En 2019, la consommation mondiale d'énergie finale a doublé par rapport à 1973 et a dépassé la barre des 400 EJ, avec une part d'électricité de 19.7 %. De plus, il va de soi qu'il est important de pouvoir stocker l'énergie produite efficacement, 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. Malgré 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, bien que ces appareils soient déjà largement utilisés leur fonctionnement reste encore peu compris, malgré le nombre d'études ayant déjà été menées, il reste encore beaucoup à faire.

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

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 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 les électrolytes acides (H_2SO_4), alcalins (KOH), et neutres (Na_2SO_4).

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