

# Séminaire de Chimie Théorique

Salle conférences Auguste Laurent, Bat. A11  
Jeudi 12 Juin à 16:00

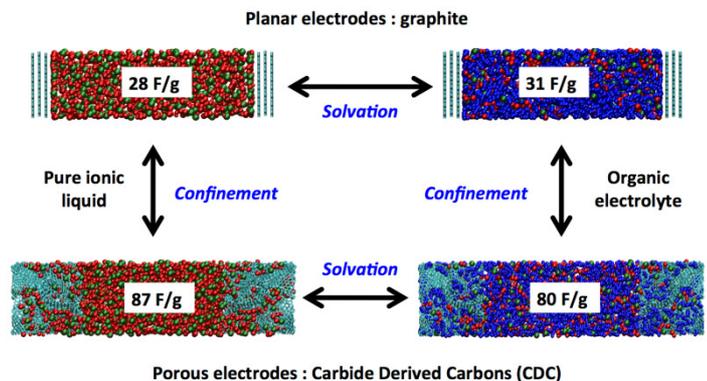
**Dr. Benjamin Rotenberg**

Laboratoire PHENIX, CNRS et UPMC, Paris  
RS2E (Réseau sur le Stockage Electrochimique de l'Energie)  
benjamin.rotenberg@upmc.fr -- <http://www.phenix.cnrs.fr>

## Stockage de charge dans les carbones nanoporeux: L'origine moléculaire de la super-capacité

**Dr. Benjamin Rotenberg**, Celine Merlet, Clarisse Péan et Mathieu Salanne  
Laboratoire PHENIX, CNRS et UPMC, Paris  
RS2E (Réseau sur le Stockage Electrochimique de l'Energie)

Très performants en puissance, les supercondensateurs sont actuellement utilisés pour la récupération de l'énergie de freinage dans certaines voitures, ou encore pour assurer l'ouverture d'urgence de l'avion A380. Ils fonctionnent grâce à deux électrodes en carbone plongées dans une solution ionique ou un liquide ionique pur (Room Temperature Ionic Liquid, RTIL). C'est l'adsorption d'ions à la surface des électrodes qui permet de stocker l'électricité, mais le mécanisme microscopique à l'origine des performances exceptionnelles des carbones dérivés de carbures (CDC) pour le stockage de la charge restait à établir [1]. Par simulation moléculaire, nous avons étudié les effets du confinement et de la solvatation sur le mécanisme de charge, en prenant en compte deux éléments essentiels: d'une part la simulation d'électrodes à potentiel constant et d'autre part une géométrie réaliste pour les CDC. La comparaison entre électrodes de graphite et de CDC nous a permis de révéler comment la séparation des ions s'effectue aux sein de ses derniers [2], ainsi que l'influence du degré de confinement sur l'efficacité du stockage de charge [3]. La comparaison entre un RTIL et les mêmes ions en solution dans l'acétonitrile permet quant à elle de préciser l'influence de la solvatation sur ce stockage. La simulation moléculaire permet enfin d'étudier la dynamique du processus de charge et de faire le lien avec les modèles utilisés par les électrochimistes [4].



- [1] Chmiola et al., Science 313, 1760–1763 (2006)  
[2] Merlet et al., Nature Materials 11, 306 (2012)  
[3] Merlet et al., Nature Communications 4, 2701 (2013)  
[4] Péan et al., ACS Nano 8, 1576 (2014)

Contact : [jc.rayez@ism.u-bordeaux1.fr](mailto:jc.rayez@ism.u-bordeaux1.fr)