

Vitrine d'expertise des professeurs

Université de Montréal

Profil du chercheur externe

Sommaire du profil

Portrait

Expertise(s) de recherche

Biographie

Unité(s) de recherche

Formation(s)

Activité(s)

Projet(s) de recherche



MATHIEU SALANNE

Simulation de supercondensateurs

Maître de Conférences

Laboratoire Physico-chimie des Electrolytes et
Nanosystèmes Interfaciaux
Université Pierre et Marie Curie

(+33)(0)1 44 27 32 65

@ mathieu.salanne@upmc.fr

 [Site web](#)

Portrait

Activité(s)

EXPERTISE(S) DE RECHERCHE

Champs d'expertise

- Simulation moléculaire de liquides ioniques, de conducteurs ioniques et de verres à base d'oxydes
- Recherches sur les mécanismes de fonctionnement des supercondensateurs de type carbone/carbone
- Recherches sur la physico-chimie des sels fondus utilisés dans les réacteurs nucléaires de Génération IV et pour la production d'aluminium
- Etudes des verres utilisés comme matrice de confinement des déchets nucléaires
- Développement d'un code de dynamique moléculaire dédié à la simulation des systèmes électrochimiques, adapté aux calculateurs haute performance

Performance
Systèmes électrochimiques
Stockage d'énergie
Nanosystèmes
Innovations technologiques

Objet(s)

Chimie
Physique

Discipline(s)

Sciences naturelles et
génie

Secteur(s)

BIOGRAPHIE

Carrière scientifique: Maître de Conférences au laboratoire Physico-chimie des Electrolytes et Nanosystèmes Interfaciaux de l'Université Pierre et Marie Curie, Mathieu Salanne détient un diplôme d'ingénieur de ChimieParisTech (2004) et un doctorat de l'Université Pierre et Marie Curie (2006). Depuis septembre 2014 il occupe une chaire d'excellence au sein de la Maison de la Simulation, pour un projet portant sur le design de supercondensateurs à l'aide de calculateurs haute performance.

Par le passé, Mathieu Salanne a été professeur invité à l'Université Fédérale de Sao Paulo au Brésil et à l'Université de Niigata au Japon (bourse de la Japan Society for the Promotion of Science).

Distinction: Il a été colauréat du prix du magazine *La Recherche* à deux reprises, en 2007 (mention énergie pour des travaux concernant la modélisation pour l'énergie nucléaire du futur) et en 2013 (mention physique pour la compréhension du mécanisme de charge des supercondensateurs). Il a également reçu le prix « jeune chercheur » 2014 de la commission Computational Physics de l'IUPAP.

Il a donné 20 conférences invitées aux Etats-Unis, en Europe, en Amérique du Sud et en Asie.

Publication: Il a copublié plus de 70 articles dont les plus notables sont :

- «On the molecular origin of supercapacitance in nanoporous carbon electrodes», *Nature Materials*, 11,306, 2012.
- «Charge fluctuations in nanoscale capacitors», *Phys. Rev. Lett.*, 111, 106102, 2013,
«Highly confined ions store charge more efficiently in supercapacitors», *Nature Communications*, 4, 2701, 2013.

UNITÉ(S) DE RECHERCHE

Titulaire

- Chaire d'excellence, Maison de la Simulation
CNRS / CEA / INRIA /
Université Paris Sud /
Université de Versailles

Membre

- Laboratoire PHENIX
Université Pierre et Marie Curie /
CNRS, équipe Electrochimie et
Liquides Ioniques

FORMATION(S)

Chimie

- | | |
|------|---|
| 2012 | Habilitation à diriger des recherches
Université Pierre et Marie Curie |
| 2006 | Doctorat en chimie physique
Université Pierre et Marie Curie |
| 2004 | Diplôme d'ingénieur
Ecole Nationale Supérieure de Chimie Paris (ChimieParisTech) |

PROJET(S) DE RECHERCHE

Computer-aided design of high performance supercapacitors

Chercheur principal : Mathieu Salanne

Co-chercheurs : Benjamin Rotenberg (CR CNRS, laboratoire PHENIX); Clarisse Péan (doctorante);
Équipe de Patrice Simon (CIRIMAT, université Paul Sabatier, Toulouse); Paul Madden (Université
d'Oxford)

Durée du projet: 2014 – 2019

Source(s) de financement: CEA / CNRS

Lieu(x) de recherche

- France, Royaume-Uni

Le stockage de l'électricité est un enjeu majeur pour nos sociétés. Dans la panoplie de solutions étudiées, les supercondensateurs sont parmi les plus prometteurs. Dans ces dispositifs, l'énergie est stockée sur la surface d'une électrode de carbone nanoporeuse par adsorption réversible des ions issus d'un électrolyte. Les supercondensateurs sont notamment utilisés dans les systèmes Start/Stop des voitures récentes ou pour le lissage des pics de production des sources d'énergie intermittentes comme le solaire et l'éolien. L'objectif de ce projet est de proposer de nouvelles structures de matériaux permettant d'augmenter la quantité d'électricité pouvant être stockée dans les supercondensateurs. Notre équipe a effectué ces dernières années les premières simulations de dynamique moléculaire mettant en oeuvre des supercondensateurs modélisés de manière réalistes, ce qui nous a permis d'élucider le mécanisme de charge dans les carbones nanoporeux. Dans ce projet, nous souhaitons mettre en place une nouvelle méthodologie permettant de simuler de nombreux systèmes et de sélectionner progressivement les plus prometteurs. De nouveaux outils numériques devront être développés afin de passer au crible toutes les combinaisons de structures d'électrode et de compositions d'électrolytes possibles. Pour cela, nous disposons des infrastructures de la Maison de la Simulation ; les simulations sont menées sur les centres de calcul haute performance français et européens.

Objet(s)

Physique

Discipline(s)

Sciences naturelles et
génie

Secteur(s)

Molecular dynamics study on structure and transport properties of molten salts and oxide glasses with polarizable ions model

Chercheurs principaux : Mathieu Salanne & Norikazu Ohtori (Université de Niigata, Japon)

Co-chercheurs Yoshiki Ishii; Paul Madden (Université d'Oxford)

Durée du projet: 2014 – 2017

Source(s) de financement: Université de Niigata

Lieu(x) de recherche

- France, Japon, Royaume-Uni

Inorganic ionic materials, such as molten salts and oxide glasses, show high chemical stability in the liquid and solid states under a wide range of temperature and high durability under intense radiation. They are therefore very useful as solvents in various nuclear engineering technologies. Molten fluoride salts are good candidate as solvents in prospective Generation IV nuclear reactor and as blankets in nuclear fusion reactor, and borosilicate glasses as media for nuclear waste immobilization. Practical problems for a widespread use of these liquids are the lack of experimental data for the transport properties and the absence of knowledge about their behaviour under high temperature and/or high pressure. Indeed, experiments are generically difficult owing to the extreme conditions of operation. In particular, the measurement of thermal conductivity is extremely difficult for molten salts, and there is no reliable data in the case of molten fluorides. In this work, our objective is to determine the thermal conductivity of a variety of ionic materials using molecular dynamics simulations. We will examine the dependence of the thermodynamic and transport properties on the structure of the melts. In particular, we expect that complex, crosslinked structure arising from the presence of multivalent ions will significantly affect transport phenomena.

Compréhension des mécanismes de diffusion du lithium à l'échelle atomique

Chercheur principal : Mathieu Salanne

Co-chercheurs : Mario-Burbano (postdoc); Dany Carlier (ICMCB, Bordeaux); Florent Boucher (IMN Nantes)

Durée du projet: 2014 – 2015

Source(s) de financement: CNRS (RS2E)

Lieu(x) de recherche

- France

La vitesse de diffusion des ions Li⁺ est une propriété importante des matériaux constitutifs des batteries Li-ion. Elle doit être la plus élevée possible, que ce soit au sein des électrodes pour assurer une meilleure insertion ou de l'électrolyte afin d'améliorer les performances en puissance du dispositif. Sur le plan expérimental, la RMN à gradient de champ doit permettre de mesurer directement les coefficients de diffusion dans certaines gammes, et cette technique est actuellement employée pour caractériser les propriétés dynamiques de plusieurs matériaux prometteurs dans le cadre du RS2E (équipe de M. Deschamps). Pour la majorité des matériaux, la seule quantité connue actuellement reste cependant la conductivité électrique. L'objectif de ce projet est de déterminer les propriétés de transport des matériaux de batterie Li-ion (électrode et électrolytes) par dynamique moléculaire. En particulier, nous souhaiterions tester l'existence de mécanismes coopératifs, qui nous permettraient d'expliquer la diffusivité élevée observée dans certains matériaux. Nous souhaitons également établir des lois prédictives reliant les propriétés de transport aux motifs structuraux (forme et longueur des canaux, coordination du lithium dans les sites...) des matériaux.

Modélisation par dynamique moléculaire ab initio et classique des propriétés physico-chimiques de verres de borosilicates de lanthanides fondus

Chercheur principal : Mathieu Salanne

Co-chercheurs : Fabien Pacaud (doctorant); Jean-Marc Delaye (CEA Marcoule)

Durée du projet: 2013 – 2016

Source(s) de financement: CEA

Lieu(x) de recherche

- France

L'élaboration des colis de verres de confinement nécessite l'homogénéisation d'une charge de verre fondu à des températures aux alentours de 1100°C-1200°C avant la coulée en container métallique. De la qualité de la fonte verrière dépend celle du colis final. Les mécanismes de réactivité au sein de la fonte verrière sont en lien direct avec ses propriétés rhéologiques, électriques, ou thermiques. C'est pourquoi il est important d'en comprendre l'origine, notamment le rôle joué par les différents constituants. La modélisation atomistique est l'approche choisie ici pour traiter cette question. Simuler des verres d'oxydes à basse ou haute température par des méthodes de dynamique moléculaire classique nécessite de disposer de potentiels d'interaction validés sur des grandeurs issues de l'expérience ou de calculs ab initio. Dans un premier temps, de tels potentiels seront ajustés pour représenter une série de compositions vitreuses à base de SiO₂ - B₂O₃ - Na₂O - La₂O₃. Dans un second temps, la simulation des systèmes vitreux entre l'ambiante et 2000°C permettra d'étudier l'évolution en température d'un certain nombre de propriétés physiques pour comprendre le rôle des différents constituants. Pour l'analyse des propriétés macroscopiques, la série de verres retenue sera modélisée à différentes températures et notamment à l'état fondu pour mettre en évidence les évolutions de la viscosité, de la conductivité électrique, de la conductivité thermique, de la densité, et de la capacité calorifique et pour identifier les corrélations entre ces grandeurs et les caractéristiques structurales. Ainsi, il deviendra possible de déterminer l'influence de chacun des constituants du verre sur ses propriétés. Au final, une meilleure compréhension des relations entre la structure et les propriétés macroscopiques des verres fondus pourra être acquise.

