

Projekt 3.2 Opis fizyczny mechanizmów ładowania i optymalizacja wydajności nanoporowatych superkondensatorów

Promotor: dr hab. Svyatoslav Kondrat

Instytut: Chemii Fizycznej

Zespół: Fizykochemia układów złożonych - prof. dr hab. Wojciech Gózdź

www: <https://ichf.edu.pl/en/groups/physical-chemistry-of-complex-systems>

Opis:

Stale rosnące globalne zapotrzebowanie na energię wymaga opracowania nowatorskich technologii magazynowania energii w celu zwiększenia produkcji energii ze źródeł odnawialnych oraz przejścia z paliw na bazie węglowodorów na napęd elektryczny. Superkondensatory z nanoporowatymi elektrodami stały się kluczową technologią magazynowania energii, oferującą wysoką gęstość mocy i niezwykłą cykliczność. Zapewniają jednak tylko umiarkowaną gęstość energii w porównaniu z konwencjonalnymi akumulatorami. Czyste ciecze jonowe jako elektrolity pozwalają na wysokie napięcia robocze (nawet powyżej 4 V), zwiększając magazynowanie energii, ale zmniejszona ruchliwość jonów obniża gęstość mocy. Zwiększenie magazynowania energii bez obniżania gęstości mocy umożliwiłoby szersze zastosowanie tych przyjaznych dla środowiska systemów magazynowania energii.

Cel projektu:

Opracujemy wieloskalowe metody, aby zbadać, jak magazynowanie energii i gęstość mocy korelują z właściwościami elektrod. Przyjrzymy się dynamice jonów w porach za pomocą symulacji molekularnych i opracujemy modele ciągłe, aby znaleźć optymalny protokół ładowania, zwiększyć wydajność mocy i ocenić ją za pomocą pomiarów elektrochemicznych. Zdobyta wiedza przełoży się na działający zestaw narzędzi do inteligentnego projektowania i optymalizacji superkondensatorów nowej generacji o wysokiej wydajności.

Wymagania:

- MSc z fizyki lub dyscyplin pokrewnych,
- doświadczenie w symulacjach i HPC,
- znajomość Pythona,
- entuzjazm i zainteresowanie badaniami multidyscyplinarnymi.