

## **Projekt 3.12 Opis fizyczny mechanizmów ładowania i optymalizacja wydajności nanoporowatych superkondensatorów**

**Promotor:** dr hab. S. Kondrat

**Instytut:** Instytut Chemii Fizycznej PAN

**Zespół:** Zespół 13. Fizykochemia układów złożonych

**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.