

Projekt 3.12 Mieszanki cieczy jonowych do zastosowań w superkondensatorach: Teoria i symulacje

Promotor: dr hab S. Kondrat, profesor instytutu

Instytut: Instytut Chemii Fizycznej PAN

Zespół: Zespół 13. Fizykochemia układów złożonych - prof. dr hab. Wojciech Gózdź

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

(e-mail to: skondrat[at]ichf.edu.pl)

Opis:

Obecnie jesteśmy świadkami szybkiego rozwoju wielu technologii magazynowania energii, które znacząco wpływają na nasze codzienne życie. Superkondensatory okazały się obiecującymi urządzeniami do magazynowania energii elektrochemicznej, które zapewniają wysoką gęstość mocy, doskonałą stabilność cyklu i odwracalność. Jednak pomimo ogromnych wysiłków badawczych, niska gęstość energii i ograniczona wydajność w niskich temperaturach pozostają ich głównymi wadami, utrudniającymi szerokie zastosowanie tych przyjaznych dla środowiska systemów magazynowania energii. Jak dotąd mechanizmy magazynowania energii zaangażowane na styku elektroda/elektrolit podczas procesów ładowania i rozładowywania nie zostały w pełni poznane. W ramach tego międzynarodowego i multidyscyplinarnego projektu, wybrane zostaną różne mieszanki cieczy jonowych i nanoporowate węgle za pomocą pomiarów elektrochemicznych, eksperymentów NMR i symulacji molekularnych, aby osiągnąć te ambitne cele.

Cel projektu:

Zbadanie, w jaki sposób wydajność elektrochemiczna jest skorelowana z właściwościami mieszanin cieczy jonowych i nanoporowatych elektrod. Zbadamy dynamikę jonów w objętości i w porach za pomocą symulacji molekularnych, aby znaleźć optymalną parę elektrolit/elektroda zwiększającą wydajność mocy, którą ocenimy za pomocą pomiarów elektrochemicznych wykonanych przez naszych partnerów z Uniwersytetu Warszawskiego i INM (Niemcy). Nadrzędnym celem jest opracowanie użytecznych narzędzi do projektowania superkondensatorów nowej generacji o wysokiej wydajności.

Wymagania:

- MSc fizyki lub dyscyplin pokrewnych, doświadczenie w symulacjach i HPC,
- znajomość Python