

Obecnie jesteśmy świadkami gwałtownego rozwoju technologii magazynowania energii, które mają znaczący wpływ na nasze codzienne życie. Rozwój ten jest widoczny w wielu sektorach przemysłu, od przenośnej elektroniki i systemów monitorowania zdrowia do przyjaznych dla środowiska pojazdów elektrycznych. Zastosowania te wymagają szybkiego dostarczania energii w skali minutowej lub nawet sekundowej oraz długiej żywotności. Obiecującymi urządzeniami elektrochemicznymi spełniającymi wspomniane wymagania okazały się superkondensatory, dzięki ich dużej gęstości mocy, odwracalności oraz niewielkiej zmianie właściwości przy wielokrotnym rozładowaniu i ładowaniu. Już obecnie superkondensatory znajdują komercyjne zastosowanie, np. w technologii magazynowania energii hamowania pojazdów, czy w napędach autobusów elektrycznych. Jednak niska gęstość energii i kompromis między energią i mocą superkondensatorów utrudniają zastosowanie tych ekologicznych systemów magazynowania energii na szeroką skalę.

Pomimo ogromnych wysiłków badawczych, mechanizmy magazynowania energii i dynamika ładowania superkondensatorów ze złożonymi elektrodami nanoporowatymi nie zostały jeszcze w pełni poznane. Modelowanie numeryczne odgrywa kluczową rolę w zdobywaniu nowych informacji niezbędnych do opracowania superkondensatorów następnej generacji. Jednak obecnie dostępne zasoby obliczeniowe ograniczają symulacje do prostych modeli i elektrod o rozmiarach w nanoskali. Stworzymy metody obliczeniowe i eksperymentalne wykorzystujące modele wieloskalowe do łączenia symulacji w nanoskali z realistycznymi elektrodami o wielkości mikrometrów. Magazynowanie energii i gęstość mocy będą skorelowane ze strukturą elektrod przy użyciu multidyscyplinarnego podejścia opartego na elektrochemii, modelowaniu w nano- i mezoskali oraz pomiarach dyfrakcji promieniowania rentgenowskiego i sorpcji gazu. Wiedza i narzędzia zdobyte w tym projekcie otworzą nowe horyzonty w projektowaniu i optymalizacji superkondensatorów o wysokiej wydajności.