

# Атомистическое моделирование взаимодействия электролита с графитовыми наноструктурами в перспективных суперконденсаторах.

Ланкин А.В., Норман Г.Э., Стегайлов В.В.  
ОИВТ РАН

Углеродные суперконденсаторы представляют собой перспективные устройства для хранения энергии, основанные на адсорбции ионов жидкого электролита на поверхности высокопористого углерода [1]. Наличие развитой поверхности с размерами пор вплоть до единиц нанометров обеспечивает большую площадь контактной поверхности на единицу массы. Для оптимизации подобного рода технологии требуется детальное понимание физики образования двойного электрического слоя и его поведения при зарядке и разрядке суперконденсаторов, информация о механизмах диффузии электролита в нанопорах.

Уровень развития методов классической и квантовой молекулярной динамики и использование параллельных высокопроизводительных вычислений позволяет строить реалистические модели подобных процессов. Наиболее точно особенности растворов электролитов могут быть учтены с использованием методов *ab initio* молекулярной динамики в рамках приближения DFT [2]. Такой подход позволил изучить взаимодействие ионной подсистемы электролита с поверхностью углеродного материала, что дало возможность рассмотреть особенности адсорбции компонент электролита на границе раздела фаз. В частности сделать вывод о сильной адсорбции ионов щелочных металлов на поверхности углеродного материала. Кроме того, установлено, что именно электрон-дырочная плазма углеродного материала определяет ёмкость системы. При этом отношение ёмкости ионной подсистемы раствора и полной ёмкости системы имеет порядок  $C_3/C \sim U/\Delta U_3 > 4$ , где  $U$  – полное падение потенциала наложенного на систему. Также выполнена оценка максимальной ёмкости углеродного электрода из чистого бездефектного графита и показано, что она не может превышать величину  $C_{\max} \sim 22\Phi/\text{см}^3$ .

1. Kovalyuk Z.D., Yrtsenyuk S.P., Mintyanskii I.V., Savitskii P.I. Activated carbon based supercapacitors // *Functional Materials*. – 2002. – V.9, N.3. – P. 550
2. *Modern Methods and Algorithms of Quantum Chemistry* / ed. By J. Grotendorst - Julich: John von Neumann Institute for Computing, 2000. - pp. 301-449