



## 新闻资讯

当前位置: 网站首页 > 新闻公告 > 新闻资讯 > 正文

新闻资讯 | 通知公告

# 《自然·计算科学》发表冯光课题组有关超级电容器模拟的新成果

发布时间: 2021-11-23 来源:

11月22日,《自然·计算科学》(Nature Computational Science)以研究长文形式在线刊发了冯光教授课题组关于超级电容器分子模拟方法的最新研究成果。论文题目为“Modeling galvanostatic charge-discharge of nanoporous supercapacitors”;华中科技大学为第一单位,课题组博士生曾良、硕士生吴泰征分别为第一、二作者,冯光为通讯作者。

实现我国“碳达峰、碳中和”目标,先进的储能技术必不可少。因其功率密度高、循环寿命长、工作温度宽等优点,超级电容器在储能领域内正扮演着重要的角色。由于能直观分析双电层的微观结构以及其形成过程,分子模拟常用来研究超级电容器——特别是具有纳米多孔电极的超级电容器——的储能性能及其热力学/动力学储能机理。在超级电容器的分子模拟中,如何模拟电极的极化是相关模拟方法中的关键。目前采用最多的方法是将电荷均匀地分布在电极原子上(即等电荷法, constant charge method)。相比等电荷法,等电势法(constant potential method)是一种计算成本较高但能准确模拟电极极化的方法:它根据施加电压和电解质环境来调节电极原子上的电荷,使电极在充放电过程中保持等电势。在超级电容器容量性能的研究中,等电荷法可用于研究理想的开放电极系统,但对纳米多孔电极系统的模拟却不准确。而对于超级电容器充放电等动态过程的模拟研究,只能使用等电势法——这是因为等电势法可以实现对电极电荷的自主调节(等电荷法并不具备),从而得到正确的充放电动态过程和准确的产热量。对于超级电容器充放电过程的研究,之前的分子模拟要么基于等电荷法,要么采用电压调控模式——这些模拟无法探究电流控制模式下的储能机理。考虑到电流模式已广泛用于超级电容器的实际测量以及基础电化学研究(如恒电流充放电, galvanostatic charge discharge),为准确模拟超级电容器在电流调控条件下的充放电过程,目前亟需既能实现电流调控又能让电极时时保持等电势的分子模拟方法。

针对上述问题,冯光教授课题组开发了一种基于等电势法的分子模拟方法,来模拟超级电容器的恒电流充放电过程。结果表明,对于具有纳米多孔电极的超级电容器,该等电势的恒电流充放电模拟方法可以得到与实验测量相符的充放电过程;同时,利用该方法,在分子尺度上揭示了充放电过程中电解质离子吸附-解吸的动力学滞后机理——源于电解质响应滞后于电极电荷对极化的响应。

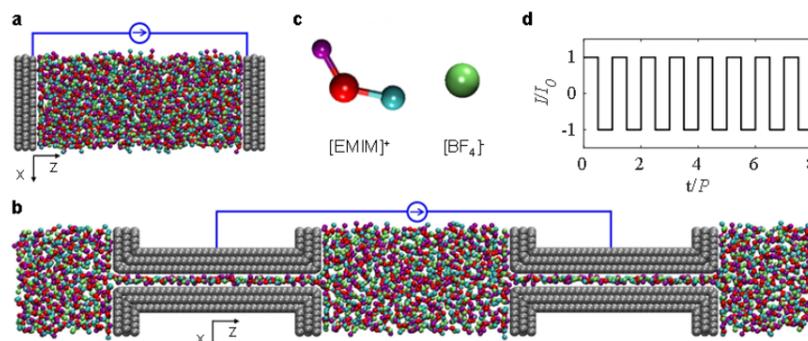


图 1 超级电容器恒电流充放电的分子模拟系统

该方法不仅可以模拟超级电容器在施加任何形式电流下的充放电过程,还可以与电压调控模式的等电势法相结合,深入了解充放电过程的动力学机制并获得最优的充放电模式。同时,该方法也可用于模拟研究其他涉及双电层的动态形成过程,例如电池、电容去离子、电润湿和电解质门控等。此外,该工作也为不同模拟系统采用何种分子模拟方法提供了指导。

该工作得到了国家自然科学基金项目和湖北省自然科学基金项目以及华中科技大学学术前沿青年团队的资助。

冯光教授自2013年入职以来,一直从事有关超级电容器储能机理与优化设计方面的基础研究,工作具有能源、物理、化学、材料等方向综合交叉的学科特点;近三年在该方向上取得了一些创新性成果(以我校为第一单位发表在Nature Materials、Nature Computational Science、Nature Communications、Physical Review X等期刊上)。

论文链接: <https://www.nature.com/articles/s43588-021-00153-5>

上一篇: 国家重点研发计划“燃煤过程中砷、硒、铅等重金属的控制技术”项目顺利通过综合绩效评价

下一篇: 2021重金属污染控制及资源化前沿技术国际论坛暨华中科技大学学术前沿青年团队前沿探索论坛第83期顺利召开

[仪器预约](#)

[文件下载](#)

[基金申报](#)

[失物招领](#)

[研究基地](#)



## 联系我们 CONTACT US

联系地址：湖北省武汉市洪山区珞喻路1037号

联系电话：027-87545526

邮政编码：430074



© Copyright 2015 华中科技大学煤燃烧国家重点实验室版权所有

技术支持：华中科技大学