

Российские исследователи разработали метод компьютерного моделирования, который позволяет детально изучать поведение ионов и молекул внутри суперконденсаторов. Этот подход помогает точнее предсказывать характеристики устройств при разных условиях без дорогостоящих экспериментов.

Учёные из НИУ ВШЭ и Института химии растворов РАН создали модель, воспроизводящую процессы в нанопорах углеродных материалов. С помощью суперкомпьютера они впервые рассчитали дифференциальную ёмкость устройства на основе полноатомной молекулярной динамики, а не упрощённых теорий.

Исследование показало, как даже незначительные примеси воды влияют на свойства электролита в зависимости от заряда электрода. Эти данные помогут оптимизировать состав электролитов и конструкцию суперконденсаторов для повышения их эффективности.

Суперконденсаторы отличаются от аккумуляторов способностью быстро накапливать и отдавать энергию, но пока уступают по плотности хранения. Новые разработки направлены на устранение этого недостатка. Такие устройства уже применяют в электротранспорте для снижения нагрузки на основные батареи.