

# Программа дисциплины

## Методы молекулярного моделирования в электрохимии

### Программу составил:

С.А. Кисленко, канд. ф.-м. наук

### Цель дисциплины

Изучение основных явлений и процессов в электролитах и на границе фаз электрод/электролит, принципов работы электрохимических источников тока, методов и подходом атомистического моделирования электрохимических систем.

### Задачи дисциплины

- Введение основных понятий, явлений и процессов, изучаемых в электрохимии.
- Ознакомление с физическими принципами преобразования энергии в химических источниках тока и существующими ограничениями.
- Изучение теоретических подходов исследования электрохимических систем в рамках различных методов атомистического моделирования.
- Формирование у студентов способности использовать полученные знания для моделирования новых функциональных материалов для электрохимических приложений.

### Содержание дисциплины

1. Электролиты. Взаимодействие между ионами и растворителем, сольватация. Соотношение Борна для свободной энергии сольватации. Методы расчета свободной энергии сольватации в рамках атомистического моделирования. Влияние сольватации на диффузию ионов по результатам молекулярного моделирования.

2. Межфазная граница электрод/электролит на поверхности идеально поляризуемого электрода. Двойной слой в разбавленных электролитах. Модель Гельмгольца, Гуи-Чапмена, Штерна. Структура двойного слоя в концентрированных электролитах и ионных жидкостях: результаты молекулярно-динамического моделирования. Электрохимические суперконденсаторы. Влияние пористости на удельные характеристики суперконденсаторов: результаты моделирования и эксперимента. Квантовая емкость на поверхности полупроводников и двумерных материалов. Расчет квантовой емкости на основе данных DFT моделирования.

3. Гетерогенный перенос электрона. Адиабатический и неадиабатический перенос. Теория Маркуса. Понятие энергии реорганизации растворителя. Формализм Геришера. Метод расчета профиля свободной энергии реакции внешнесферного электронного переноса в рамках МД моделирования. Методы расчета свободной энергии компонент электролита на границе фаз электрод/электролит (метод зонтичной выборки, метод термодинамического интегрирования). Влияние электронных свойств поверхности на кинетику неадиабатического электронного переноса.

4. Интеркаляция. Принцип работы металл-ионных аккумуляторов. Фазовые переходы при интеркаляции; связь с разрядными характеристиками. Метод расчета напряжения холостого хода металл-ионных аккумуляторов с помощью теории функционала плотности; примеры.

5. Водородный топливный элемент. Электрокатализ. Механизмы реакции восстановления кислорода и окисления водорода. Метод Норскова для расчета профиля свободной энергии многостадийных электрокаталитических реакций. Примеры расчетов. Механизмы электрокаталитического действия. Ограничения метода Норскова.

6. Перспективные химические источники тока. Литий-серные аккумуляторы, литий-воздушные аккумуляторы, пост-литиевые аккумуляторы.