

DOKTORANTŪROS STUDIJŲ DALYKO SANDAS

Dalyko pavadinimas	Mokslo kryptis (šaka) kodas	Fakultetas / Centras	Katedra
Elektrocheminės energijos konversijos sistemos	Chemija N 003	FTMC	Cheminės inžinerijos ir technologijų skyrius
Studijų būdas	Kreditų skaičius	Studijų būdas	Kreditų skaičius
Paskaitos	2	Konsultacijos	0
Individualus	6	Seminarai	2

Kurso anotacija

Kurso santrauka ir tikslas:

Šiame doktorantūros lygmens kurse išsamiai aptariami elektrocheminių procesų principai ir taikymas energijos konversijai ir kaupimui. Temos apima elektrocheminių sistemų termodinamiką, kinetiką, masės ir krūvio pernašą. Aptariami elektrocheminės energijos konversijos sistemų, tokių kaip kuro ir elektrolizės elementai, fotoelektrocheminiai elementai, baterijos ir hibridinės sistemos, taikymai. Kurso tikslas - doktorantams suteikti žinių, reikalingų tolimesnei mokslinei karjerai ir tyrimams

Kurso turinys:

1. Elektrocheminių celių termodinamika ir potencialai
 - a) Elektrocheminė termodinamika
 - b) Pusiausvyriniai ir elektrocheminiai potencialai
 - c) Tarpfaziniai potencialai
 - d) Sandūros potencialai
 - e) Formalieji potencialai ir palyginamieji elektrodai
 - f) Temperatūros ir slėgio priklausomybė
2. Dvigubas elektrinis sluoksnis
 - a) Idealiai poliarizuojami elektrodai
 - b) Dvigubo elektrinio sluoksnio modeliai
 - c) Specifinė adsorbcija
 - d) Dvigubo elektrinio sluoksnio įtaka reakcijos kinetikai
3. Elektrokinetika
 - a) Fenomenologinė Butler-Vollmer kinetika
 - b) Mikroskopinė Marcus teorija
 - c) Daugiapakopės reakcijos
4. Elektrokinetiniai ir elektrokapiliariniai reiškiniai
 - a) Elektroosmozė
 - b) Elektroforezė
 - c) Elektrokapiliarinis judėjimas
5. Elektrolitų tirpalų termodinamika ir transportas
 - a) Aktyvumai
 - b) Praskiesti elektrolitai ir Debye-Hückel teorija
 - c) Pernašos dėsniai
 - d) Difuzija, laidumas, pernašos skaičiai
 - e) Koncentruoti elektrolitai
6. Transportas kietuosiuose kūnuose
 - a) Pusiausvyrinė termodinamika realiuose kietuosiuose kūnuose
 - b) Negrįžtamoji termodinamika ir kinetika kietuosiuose kūnuose
 - c) Fenomenologiniai difuzijos koeficientai
 - d) Krūvio judėjimas
 - e) Koncentracijos profiliai
7. Masės ir krūvio pernaša elektrocheminėse sistemose
 - a) Masės pernašos lygtys
 - b) Elektroneutralumo sąlygos
 - c) Migracija ir difuzija elektrodo paviršiuje
 - d) Konvekcinė pernaša
 - e) Koncentracijos viršįtampis
8. Porėti elektrodai
 - a) Mikroskopinis aprašymas
 - b) Masės pernaša

- c) Reakcijos greičių netolygumas
- d) Taikomieji aspektai
- 9. Elektrocheminis impedansas
 - a) Ekvivalentinės kintamosios srovės grandinės
 - b) Kramers-Kronig sąryšiai
 - c) Matavimo prietaisai
 - d) Fizikiniai modeliai
- 10. Fotoelektrochemija
 - a) Puslaidininkio ir elektrolito sandūra
 - b) Fotoelektrocheminiai elementai
 - c) Paviršinė fotokatalizė
 - d) Elektrochemiliuminescencija ir elektrochromizmas
- 11. Jonų įterpimo sistemos
 - a) Dvinariai ir trinariai elektrodai arti pusiausvyros
 - b) Redokso ir įterpimo reakcijų potencialai
 - c) Vienfazės ir dvifazės reakcijos
 - d) Įterpimo elektrodų tipai
- 12. Jonų baterijos
 - a) Jonų įterpimo baterijų medžiagos ir sistemos
 - b) Konversijos (lydinių) baterijų medžiagos ir sistemos
 - c) Taikomieji elektrocheminių baterijų aspektai
- 13. Srautinės baterijos
 - a) Srautinių baterijų struktūra ir sudedamosios dalys
 - b) Redokso ir redokso-tarpininkaujami procesai
 - c) Taikomieji srautinių baterijų aspektai
- 14. Kuro ir elektrolizės elementai
 - a) Kuro ir elektrolizės elementų klasifikacijos
 - b) Struktūra ir komponentai
 - c) Elektrokatalizė
 - d) Elektrolitai ir membranos
 - e) Aukštos ir žemos temperatūros sistemos
- 15. Hibridinės elektrocheminės energijos konversijos sistemos
 - a) Dvigubo elektrinio sluoksnio kondensatoriai
 - b) Pseudotalpa ir superkondensatoriai
 - c) Taikomieji hibridinės elektrocheminės energijos konversijos aspektai
- 16. Papildomi elektrocheminės energijos konversijos aspektai
 - a) Biologinės elektrocheminės energijos konversijos sistemos
 - b) Techniniai-ekonominiai elektrocheminės energijos konversijos aspektai

Pagrindinė literatūra

1. Newman, John, and Balsara, Nitash P. *Electrochemical systems*. John Wiley & Sons, 2021.
2. Bockris, John O'M., Reddy, Amulya KN and Gamboa-Adelco, Maria E. *Modern Electrochemistry 1, 2A, and 2B*. Springer US, 2006.
3. Bard, Allen J., Faulkner, Larry R. and White, Henry S. *Electrochemical methods: fundamentals and applications*. John Wiley & Sons, 2022.
4. Hamann, Carl, Hamnett, Andrew and Vielstich, Wolf. *Electrochemistry*. John Wiley & Sons, 2007.
5. Bagotsky, Vladimir S., *Fundamentals of electrochemistry*. John Wiley & Sons, 2005.
6. Eliaz, Noam, and Gileadi, Eliezer. *Physical electrochemistry: fundamentals, techniques, and applications*. John Wiley & Sons, 2019.
7. Schmickler, Wolfgang, and Santos, Elizabeth. *Interfacial electrochemistry*. Springer Science & Business Media, 2010.
8. Hammou, Abdelkader, and Georges, Samuel. *Solid-state electrochemistry: essential course notes and solved exercises*. Springer Nature, 2020.
9. Bagotsky, Vladimir S., Skundin, Alexander M. and Volfkovich, Yuriy M.. *Electrochemical power sources: batteries, fuel cells, and supercapacitors*. John Wiley & Sons, 2015.
10. Huggins, Robert. *Advanced batteries: materials science aspects*. Springer Science & Business Media, 2008.
11. Orazem, Mark E., and Tribollet, Bernard. *Electrochemical impedance spectroscopy*. John Wiley & Sons, 2017.
12. Dicks, Andrew L., and Rand, David AJ. *Fuel cell systems explained*. John Wiley & Sons, 2018.
13. O'Hayre, Ryan,. *Fuel cell fundamentals*. John Wiley & Sons, 2016.
14. Memming, Rüdiger. *Semiconductor electrochemistry*. John Wiley & Sons, 2015.

15. Lewerenz, Hans-Joachim and Laurence, Peter. *Photoelectrochemical Water Splitting. Materials, Processes and Architectures*. RSC Publishing, 2013.
16. Gimenes, Sixto and Bisquert, Juan. *Photoelectrochemical Solar Fuel Production*. Springer, 2016.
17. Oldham, Keith, Myland, Jan and Bond, Alan. *Electrochemical science and technology: fundamentals and applications*. John Wiley & Sons, 2011.
18. Fuller, Thomas F. and Harb, John N. *Electrochemical engineering*. John Wiley & Sons, 2018.

Konsultuojančiųjų dėstytojų vardas, pavardė	Mokslo laipsnis	Svarbiausieji darbai mokslo kryptyje (šakoje) paskelbti per pastaruosius 5 metus
Linus Vilčiauskas Jurga Juodkazytė	Dr. Dr.	1. J Juodkazytė, B Šebeka, I Savickaja, M Petrulevičienė, S Butkutė, V Jasulaitienė, A Selskis, R Ramanauskas; Electrolytic splitting of saline water: Durable nickel oxide anode for selective oxygen evolution, <i>International Journal of Hydrogen Energy</i>, 44, 5929 (2019). 2. Pilipavičius, J.; Traškina, N.; Juodkazytė, J.; Vilčiauskas, L.; The mechanism of $\text{NaTi}_2(\text{PO}_4)_3$ aqueous electrochemical degradation revisited, <i>Electrochimica Acta</i>, 465, 142993 (2023). doi:10.1016/j.electacta.2023.142993 3. Petrulevičienė, M.; Traškina, N.; Pilipavičius, J.; Juodkazytė, J.; Vilčiauskas, L.; The Use of Reductive Agents for Developing Capacity Balanced Aqueous Sodium Ion Batteries, <i>Batteries & Supercapacitors</i>, 6, e202300129 (2023). doi:10.1002/batt.202300129 4. Petrulevičienė, M.; Pilipavičius, J.; Juodkazytė, J.; Gryaznov, D.; Vilčiauskas, L.; Electrochemical Performance of NASICON-structured $\text{Na}_{3-x}\text{V}_{2-x}\text{Ti}_x(\text{PO}_4)_3$ ($0.0 < x < 1.0$) as Aqueous Na-ion Battery Positive Electrodes, <i>Electrochimica Acta</i>, 424, 140580 (2022). doi:10.1016/j.electacta.2022.140580 5. Snarskis, G.; Pilipavičius, J.; Gryaznov, D.; Mikoliūnaitė, L.; Vilčiauskas, L.; Peculiarities of Phase Formation in Mn-Based Na Superionic Conductor (NASICON) Systems: The Case of $\text{Na}_{1+2x}\text{Mn}_x\text{Ti}_{2-x}(\text{PO}_4)_3$ ($0.0 \leq x \leq 1.5$), <i>Chemistry of Materials</i>, 33, 8394 (2021). doi:10.1021/acs.chemmater.1c02775 6. Plečkaitytė, G.; Petrulevičienė, M.; Staišiūnas, L.; Tediashvili, D.; Pilipavičius, J.; Juodkazytė, J.; Vilčiauskas, L.; Understanding and mitigation of $\text{NaTi}_2(\text{PO}_4)_3$ degradation in aqueous Na-ion batteries, <i>Journal of Materials Chemistry A</i>, 9, 12670 (2021). doi:10.1039/D1TA01215K 7. Petrulėviciene, M., Savickaja, I., Grigučeviciene, A., Naujokaitis, A., Ramanauskas, R., Juodkazyte, J., Optimization of BiVO_4 coatings for high yield photoelectrochemical production of reactive chlorine species, <i>Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry</i>, 443, 114842 (2023). doi:10.1016/j.jphotochem.2023.114842

Patvirtinta Vilniaus universiteto ir Fizinių ir technologijos mokslų centro Chemijos mokslo krypties doktorantūros komitete 2025 m. kovo 3 d., protokolo Nr. 15600-KT-79.

Komiteto pirmininkas prof. habil. dr. Audrius Padarauskas.