

# 基于分子动力学模拟的电化学界面储能 虚拟仿真教学设计

徐 葵

南京工业大学柔性电子(未来技术)学院, 江苏 南京

收稿日期: 2023年12月10日; 录用日期: 2024年1月8日; 发布日期: 2024年1月16日

## 摘 要

电化学界面是电化学储能系统中的关键组成部分, 电化学界面仿真实验在电化学实验教学中占有重要的地位。合理地设计基于分子动力学模拟算法的教学辅助仿真实验, 使学生能够“看到”原子和分子层面的互动, 从而深化对电化学原理的理解。基于经典伦纳德-琼斯(Lennard-Jones)势, 采用分子动力学模拟技术构建多种典型电极/电解质界面模型, 在模拟中引入与电化学实验测试中对应的循环伏安和恒流充放电技术, 开展原位电化学充放电模拟, 通过输出电极和电解质位置和数目动态变化曲线及原子位置演化轨迹, 向学生展示了充放电过程中电极/电解质的微观结构变化。这种直观展示不仅帮助学生更好地吸收和理解复杂的科学知识, 而且激发了他们对学科的兴趣。同时, 虚拟仿真还提高了教学的互动性和学生的参与度, 有利于丰富实验内容增加实验趣味性提高教学质量。

## 关键词

智慧高教, 虚拟仿真, 实验教学, 电化学储能, 电极/电解质界面

# Virtual Simulation Teaching Design of Electrochemical Interface Energy Storage Based on Molecular Dynamics Simulation

Kui Xu

School of Flexible Electronics (Future Technologies), Nanjing Tech University, Nanjing Jiangsu

Received: Dec. 10<sup>th</sup>, 2023; accepted: Jan. 8<sup>th</sup>, 2024; published: Jan. 16<sup>th</sup>, 2024

## Abstract

Electrochemical interfaces play a crucial role in electrochemical energy storage systems, occupy-

ing a significant position in electrochemical experimental teaching. The rational design of teaching-assisted simulation experiments based on molecular dynamics simulation algorithms allows students to “visualize” the interactions at the atomic and molecular levels, thereby deepening their understanding of electrochemical principles. Utilizing the classical Lennard-Jones potential, various typical electrode/electrolyte interface models are constructed using molecular dynamics simulation technology. In the simulation, cyclic voltammetry and constant current charge-discharge techniques corresponding to electrochemical experimental tests are introduced. *In-situ* electrochemical charge-discharge simulations are conducted, demonstrating to students the dynamic changes in electrode/electrolyte microstructures through outputting curves depicting the dynamic variations in electrode and electrolyte positions and quantities, as well as atomic position evolution trajectories. This intuitive presentation not only aids students in better absorbing and comprehending complex scientific knowledge but also stimulates their interest in the discipline. Moreover, virtual simulation enhances the interactivity of teaching and increases student engagement, contributing to the enrichment of experimental content, the enhancement of experimental appeal, and the improvement of teaching quality.

## Keywords

Smart Higher Education, Virtual Simulation, Experimental Teaching, Electrochemical Energy Storage, Electrode/Electrolyte Interfaces

Copyright © 2024 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

## 1. 引言

电化学和电化学测量是化工类、能源与环境类、材料与冶金类等本科专业的专业基础课程。其中电化学测量是一种通过测量电流、电压和其他与电荷转移过程相关的电学参数来研究化学反应和材料性质的方法。主要的电化学测量方法包括循环伏安、恒流充放电、电化学石英晶体微天平等，这些测量方法可用于研究多种系统，包括电化学电池、电化学储能、电解过程以及生物体系中的电化学现象等[1]。教育数字化战略的实施在当前社会中变得越来越重要，而在高等教育领域，随着教育部提出建设“智慧高教”平台的目标，在电化学储能领域，开展虚拟仿真教学设计具有显著的必要性。

在电化学界面储能教学中，选择合适的虚拟仿真工具至关重要。理想的工具应该具备高度的真实性、易用性和灵活性。首先，工具需要能够准确模拟电化学界面的物理和化学过程，包括电荷转移、离子迁移和电极材料的反应动力学。此外，用户界面应直观易懂，以便学生和教师能够轻松操作和理解复杂的电化学概念。最后，工具应具备一定的灵活性，以适应不同教学需求，例如可以调整参数来模拟不同条件下的电化学过程。传统的大多数仿真软件为基于连续介质力学模型，依赖经典的电化学界面理论和物理模型(如 Helmholtz 模型、Gouy-Chapman 模型及 Stern 模型等)，不再适用于描述纳米尺度下的电极/电解质界面结构和输运等特性[2]。在实验上如要观察到上述纳米尺度下电化学界面信息，通常需要使用到价格昂贵的电子显微镜，且需要进行原位改装。此外，在实验上大多数先进表征技术无法精准测得纳米级孔内受限液相的原位物理化学性质，无法实现直接量化孔道内特定种类分子/离子数目、原位动态迁移特性、分布结构等目标[3]。高昂的使用成本和较为复杂的使用方法使得此类先进实验设备无法在本科生实验教学中进行普及，因此在本科生实验教学中亟需经济成本、学习成本均较为低廉的虚拟仿真技术，以克服理论研究和实验研究中受到的限制。

基于分子动力学方法的仿真模拟技术是一种强大的计算工具，它通过模拟原子和分子的运动来预测材料的性质和行为[4] [5]。在电化学界面储能领域，这种模拟方法可以用于深入理解电极材料和电解质之间复杂的相互作用。通过计算模拟学生们能够观察到微观层面上的离子迁移、电荷分布和电极表面反应，这些都是传统实验方法难以直接探测的。在电化学界面储能的学习中，许多概念和机制在传统教学方法中难以直观展示。因此，分子动力学模拟为揭示电化学储能系统的内在工作机制提供了一个强有力的视角。最新开发的分子模拟技术更是实现了在分子模拟中引入实验中常用的循环伏安、恒流充放电等外加控制条件[6] [7]。这使得在分子模拟中能更真实地模拟电化学电极/电解质界面的工作状态，获得电化学界面处液相分子/离子的原位动态物理/化学行为和机理信息。

本文拟采用分子动力学算法以包含石墨烯、碳纳米管、多孔碳等典型纳米电极材料为对象，配合水系、有机系典型电解质溶液开展电化学储能器件的原位充放电过程模拟。通过基于分子动力学的电化学反应和储能过程仿真模拟，使学生能够“看到”原子和分子层面的互动，从而深化对电化学原理的理解。这种直观的展示不仅帮助学生更好地吸收和理解复杂的科学知识，而且能激发他们对电化学学科和计算机仿真技术的兴趣。

## 2. 模拟方法

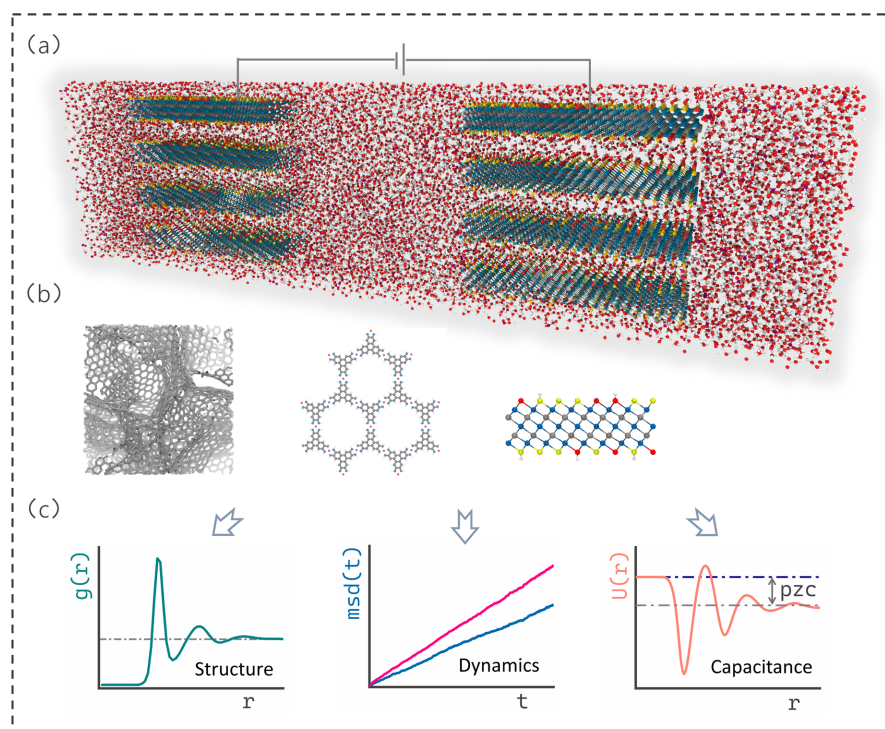
采用美国能源部的桑迪亚国家实验室开发的 Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator (LAMMPS) [8]分子动力学模拟软件配合科学可视化和分析的软件 Open Visualization Tool (OVITO) [9]开展本课题的电化学储能充放电实验项目的仿真模拟。LAMMPS 软件是一款开源免费的分子动力学模拟软件，广泛应用于物理、化学、材料科学等学科领域，支持多种势能模型，适用于各种类型的物理和化学过程。此外 LAMMPS 软件高度可定制，能根据具体的实验仿真需求自行添加代码实现添加新的功能和特性。在电化学储能模拟这一实验场景下，通过自行添加代码能实现将电化学实验中常用的循环伏安、恒流充放电等实验技术引入到分子模拟实验中。OVITO 软件是一款开源免费的科学可视化和分析的软件，专门设计用于显示和分析分子动力学模拟过程和结果，具有强大的数据可视化功能，能清晰地展示原子级的计算模拟结果，包含如晶体结果分析、原子轨迹跟踪等。

在本实验中，将使用基于 LAMMPS 软件开发的循环伏安和恒流充放电模块，配合 OVITO 软件的实时显示功能，实现在计算机上开展对电化学原理的原位仿真模拟。在模拟过程中通过导入选定的电极材料和电解质溶液，一键完成电池或超级电容器器件模拟模型的搭建，随后能方便地选择循环伏安或恒流充放电等电化学测试技术，设置完成后即可开始模拟。模拟过程中实时接入 OVITO 软件，OVITO 同步获得 LAMMPS 计算得到的实时结果，在显示窗口中显示电极/电解质界面的原子实时动态变化情况，实现识别电极表面的结构变化、计算离子分布等，帮助学生理解电化学储能的微观机制和影响因素。

电化学储能仿真模型如下图 1(a)所示，模拟模型由两侧正负电极和包围电极的电解液组成。正负电极可选多种典型纳米电极材料(图中以二维过渡金属碳氮化物 MXene 电极示意，可替换为共价有机框架电极 COF 材料或多孔碳等其他电极材料，图 1(b))。左右正负两电极均完全的浸润在电解液中，电解液可选水系氯化钠水溶液电解质、有机离子液体等典型电解质溶液。在模拟仿真过程中，在左右电极板上加上外加电势实现模拟电化学器件充电过程。充电模拟状态中，左侧电极为负电极，右侧电极为正电极。逐渐移除左右电极的外加电势实现模拟电化学器件的放电过程。在模拟中通过算法模块连续改变两侧电极之间的相对电势差或两侧电极上的净电荷差，能实现模拟与实验中电化学工作站中对应循环伏安和恒流充放电测试过程。

电化学储能仿真模型在 XYZ 方向上大小分别取  $24 \text{ nm} \times 4 \text{ nm} \times 10 \text{ nm}$ ，模型中总共包含~12 万个原子。每个电极大小设置为  $4.0 \text{ nm} \times 6.0 \text{ nm}$ ，左右两侧正负电极距离为  $6.0 \text{ nm}$ ，电解质溶液密度设置参照

实验测量值, 为 $\sim 1.5 \text{ g/cm}^3$ 。在模拟中为了更接近真实的实验情况, 在 XYZ 三个方向上均使用周期性边界条件(Periodic Boundary Conditions, PBC)。模拟过程中步长设置为 1 fs, 温度设置为 300 K 室温。选取 NVT 正则系综维持模拟体系中的原子数、体积和温度恒定在设定值。选用 Lennard-Jones 势函数描述模型内原子间非键范德化相互作用, particle-particle particle-mesh (PPPM)算法计算原子间长程静电相互作用。



**Figure 1.** (a) Schematic diagram of the simulated model of nanomaterial electrochemical energy storage devices. Reproduced with permission [10] Copyright 2022, Oxford Academic. (b) Schematic diagrams of the atomic structures of porous carbon, COF, and MXene materials (from left to right). (c) Typical characteristic curves calculated in the simulation: static structural characteristics Radial Distribution Function (RDF) coordination number, dynamic characteristics Mean Square Displacement (MSD) diffusion rate, and energy storage capacity  $C_i$  specific capacitance. Reproduced with permission [7] Copyright 2020, Wiley

**图 1.** (a) 纳米材料电化学储能器件模拟模型示意图。Reproduced with permission [10] Copyright 2022, Oxford Academic. (b) 多孔碳、COF、MXene 材料原子结构示意图(从左至右)。(c) 模拟中计算的典型特性曲线:静态结构特性 Radial distribution function (RDF) 配位数、动态特性均方差位移 Mean Square Displacement (MSD)扩散率、储能能力  $C_i$  比电容。Reproduced with permission [7] Copyright 2020, Wiley

### 3. 仿真实验

#### 3.1. 基本实验

##### 3.1.1. 充放电过程中电解质动态行为

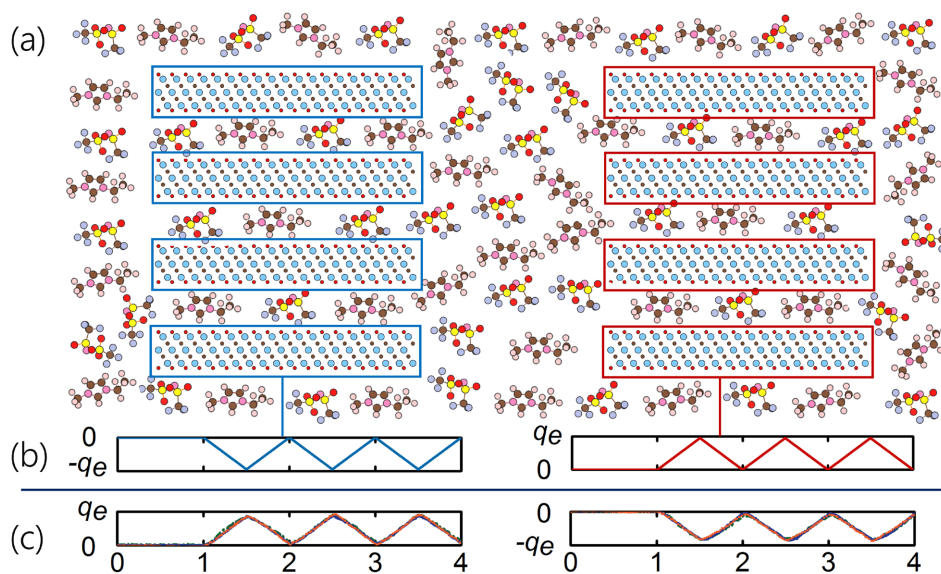
电化学储能器件的实验测量通常采用电化学工作站, 搭建三电极测试体系进行测试, 测试中采用循环伏安或恒流充放电方法作为激励, 将电极上测量得到的电势 - 电流信号记录, 并绘制成相应的曲线, 作为分析储能器件电化学性能的依据。在储能器件充放电过程中, 电极上额外净电荷发生连续的变化(如图 2(a)和图 2(b)所示), 电解质在静电势的作用下会发生定向的迁移实现电能的储存。通常的实验技术无法观测到纳米尺度下电极材料内部的电解质的动态行为, 如电极材料孔中阴阳离子数目的具体变化情况

等。因此无法直观的向学生展示由于静电势的存在导致的电解质原子级的动态行为和响应过程。

本虚拟实验采用基于分子动力学的模拟仿真方法，在解决此类纳米尺度下的电解质动态迁移问题有着天然的优势，在电化学储能充放电模拟过程中，配合 OVITO 软件的 IMD 模块能实时获取 LAMMPS 软件计算的实时原子动态三维坐标和速度信息，并基于原子的坐标和电荷信息实时渲染出电解质的运动状态轨迹，让学生能够“看到”原子和分子层面的电极和电解质的互动。同时，分子动力学模拟中能根据时间序列保存大量的轨迹坐标文件，文件中包含了每一时间帧下每个原子的三维坐标、速度、受力情况、荷电情况、电解质溶剂的数目变化情况、电解质离子配位数及基于均方位移的动态扩散率(图 1(c))等重要的物理化学参数。对这些轨迹坐标文件中的数据进行系统性抽取和统计，可以获得诸多能与实验测量值直接对比的可量化参数，如孔内电解质质量的变化  $\Delta M$ ，计算公式由下式给出

$$\Delta M = \Delta N_+ \times m_+ + \Delta N_- \times m_- + \Delta N_0 \times m_0$$

式中， $\Delta N_+$ 、 $\Delta N_-$ 、 $\Delta N_0$  分别为电极孔中阳离子、阴离子、中性溶剂分子的数目变化， $m_+$ 、 $m_-$ 、 $m_0$  分别阳离子、阴离子、中性溶剂分子的相对分子质量。在电化学实验测量中通常可以使用电化学石英微晶天平简介测得器件单电极整体的质量变化，无法获得细分的各不同种类分子的质量变化。基于模拟获得质量变化数据，学生能更细致的分析充放电过程中电解质每一具体组分的动态行为，将对充放电过程中电解质的作用获得更深刻的理解。



**Figure 2.** (a) Schematic diagram of constant current charge-discharge simulation, where the electrode material is MXene, and the electrolyte solution is the ionic liquid [EMIM] [TFSI], Reproduced with permission [11] Copyright 2018, Wiley; (b) Schematic diagram of the net charge on the negative electrode and positive electrode over time; (c) Schematic diagram of the net charge inside the electrode pores in response to ions over time

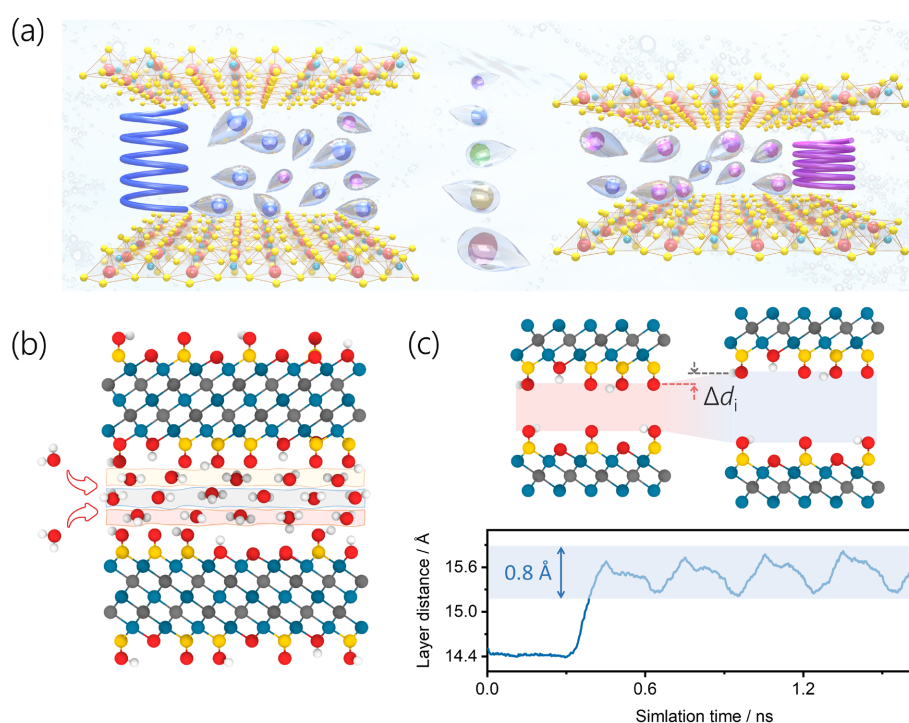
**图 2.** (a) 恒流充放电模拟示意图, 电极材料为 MXene, 电解质溶液为离子液体 [EMIM] [TFSI], Reproduced with permission [11] Copyright 2018, Wiley; (b) 正负电极上净电荷随时间变化示意图; (c) 电极孔内离子响应净电荷随时间变化示意图

### 3.1.2. 充放电过程中电极动态行为

储能器件在充放电过程中，随着电解质离子连续嵌入脱出电极孔，在静电作用和范德华作用的共同作用下，电极孔内溶液的密度和电极孔内壁所受压力发生变化，电极材料会发生连续的体积变化，包括电解质离子嵌入或脱出时发生的体积扩张或收缩(如图 3(a)和图 3(b)所示)等。电极材料的动态行为对储能

器件的性能有着显著影响, 这些体积变化不仅影响储能器件的能量密度, 还影响其循环稳定性和寿命。在实验测量中通常需要借助 X 射线衍射(XRD)或电化学膨胀技术, 才能测量得到电极局部层间或整体电极体积的变化。这些测量技术受限于成本和操作复杂度, 目前也未能在实验教学课程中展开使用。

虚拟仿真实验可以精确地模拟这一过程, 在虚拟仿真实验中通过调用质心计算模块可以非常方便的实输出包含二维片层材料的片层间距变化或多孔材料整体体积的变化。同时基于 OVITO 软件还能实时可视化输出每个原子的受力情况, 并以矢量箭头的方式实时展示。因此, 从此仿真实验学生们可以更直观的观察在静电势作用和电解质原子间相互作用下导致的合力变化, 学生可以更清晰地理解电极材料在充放电过程中的力学行为和结构变化, 明确电极整体体积和层间距的演化情况(图 3(c))和变化原因, 达到知其然更知其所以然的效果。虚拟仿真不仅提供了一个强大的工具来研究和理解电极材料的动态行为, 也为教学中难以实现的实验操作提供了有效的替代方案。通过这种仿真, 学生可以更深入地理解储能器件在充放电过程中的复杂物理化学过程。



**Figure 3.** (a) Schematic diagram illustrating the expansion and contraction of the interlayer spacing of layered electrode materials during the charge-discharge process, Reproduced with permission [12] Copyright 2020, Elsevier; (b) Schematic diagram illustrating the entry of electrolyte solution into the electrode interlayer, using water molecules as a solvent example; (c) Curve depicting the variation of interlayer spacing of electrode material layers over time during the charge-discharge process

**图 3.** (a) 充放电过程中片层电极材料层间距膨胀和收缩示意图, Reproduced with permission [12] Copyright 2020, Elsevier; (b) 电解质溶液进入电极层间示意图, 此处以水分子溶剂为例示意; (c) 充放电过程中电极材料片层层间距随着时间变化曲线

## 3.2. 扩展实验

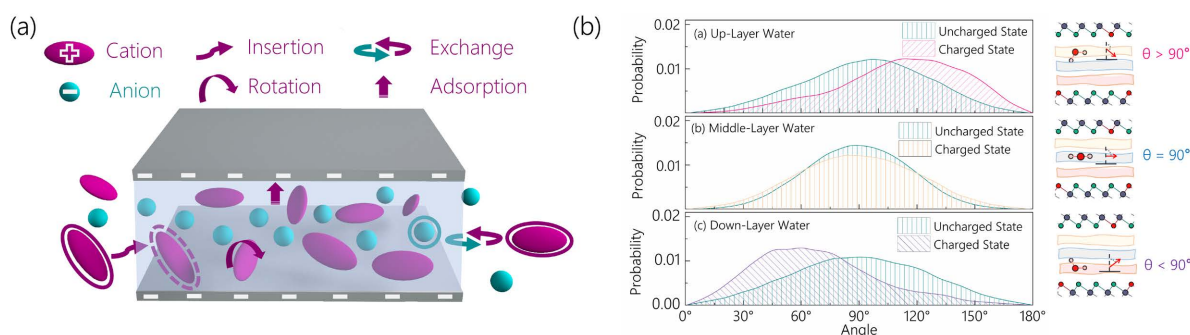
### 3.2.1. 电极内部电荷变化

电极内部电荷变化是电化学储能器件性能的关键决定因素之一, 电化学储能器件通过静电作用将电

荷吸附在电极表面储存电能，其储存电荷的多少直接决定了器件的储能能力。分子动力学方法不但可以方便的模拟和观察电极/电解质界面的原子动态演化过程，还可以非常方便的分析和观察电极/电解质界面的电荷分布和变化过程(图 2(c))。这一过程对于理解和优化电化学储能器件至关重要。在电化学储能过程中，电极表面的电荷分布影响着离子的吸附和脱附行为，进而影响整个系统的储能效率和稳定性。分子动力学模拟可以提供关于电荷分布、界面电荷密度以及电极材料的电子结构的详细信息。这些信息有助于深入理解电极材料的储能机制，如电极表面的离子吸附能力和电解质中离子的迁移动力学。此外，分子动力学模拟还可以用于评估不同电极材料和电解质组合对电荷存储和释放的影响。通过模拟不同条件下(如不同充放电速度、不同实验温度等)的电荷变化情况，学生们可以在实验中可以尝试设计和探索具有更高能量密度和更好循环稳定性的电化学储能器件。

### 3.2.2. 电极内部电解质偶极变化

在电化学储能器件的仿真模拟过程中，电极孔内部电解质的偶极变化是另一个影响其储能性能的关键因素。由电容器储能公式  $C = \epsilon S/d$  ( $\epsilon$  为电极/电解质界面介电常数， $S$  为电极/电解质界面面积， $d$  为界面电荷层间的距离)可知，孔内电解质的偶极变化将直接影响电极/电解质界面的介电性能，进而影响整个电化学系统的储能性能。电解质的偶极变化包括电解质分子的取向和排列方式的改变(如图 4(a)和图 4(b)所示)，这些改变在充放电过程中尤为显著。理解这些微观层面的变化对于优化电极设计和提高储能器件的效率至关重要，然而目前还没有有效的测量方法能测量出充放电过程中电极内部电解质偶极的具体变化情况。



**Figure 4.** (a) Different motion modes of electrolyte solution in electrode pores, including embedding, exchanging, rotating, and adsorbing, Reproduced with permission [13] Copyright 2016, Elsevier; (b) Illustration of the dipole deflection of polar solvent molecules (using water molecules as an example) inside the interlayer of layered electrodes on the charged electrode surface

**图 4.** (a) 电解质溶液的在电极孔中的不同运动模式：包含嵌入、交换、旋转、吸附等。Reproduced with permission [13] Copyright 2016, Elsevier; (b) 片层电极孔内极性溶剂分子(此处以水分子为例)在电极荷电表面的偶极偏转情况

选用基于分子动力学的模拟仿真技术，可以观察和分析电解质分子在不同电化学条件下的行为，如电解质分子的取向和排列方式等。学生们通过模拟仿真可以直观地观察到电解质分子在电场作用下的取向变化，以及了解这些变化如何影响电极界面的电荷分布和离子迁移。将电解质偶极变化的模拟应用于教学中，可以帮助学生更深入地理解电化学储能系统的复杂性。通过实际的模拟数据和可视化结果，学生可以直观地观察到微观层面的物理化学变化，如电解质分子在电极表面的排列和取向变化。这种直观的学习体验不仅加深了学生对电化学储能原理的理解，也激发了他们对科学研究的兴趣和探索欲望。

## 4. 结论

虚拟仿真作为一种先进的教学工具，极大地增强了学生对复杂概念和过程的理解。在电化学界面储

能的学习中,许多概念和机制在传统教学方法中难以直观展示。虚拟仿真通过模拟电化学反应和储能过程,使学生能够“看到”原子和分子层面的互动,从而深化对电化学原理的理解。这种直观的展示不仅帮助学生更好地吸收和理解复杂的科学知识,而且激发了他们对学科的兴趣。此外,虚拟仿真环境为学生提供了一个安全、可控的实践平台。在这个环境中,学生可以自由地实验和探索,不必担心实验室中可能出现的安全问题或资源限制。例如,他们可以模拟不同材料和条件下的电化学储能过程,观察并分析各种因素对系统性能的影响。这种实践学习方法不仅提高了学生解决实际问题的能力,而且培养了他们的创新思维和科学探究精神。最后,虚拟仿真还提高了教学的互动性和学生的参与度。传统的课堂讲授往往是单向的,而虚拟仿真使学习过程变得更加动态和参与性。学生可以在虚拟环境中与教材互动,甚至可以与同学或教师在仿真环境中协作,共同解决问题。这种互动性不仅增强了学生对知识的掌握,而且改善了他们的沟通和团队合作技能。

## 基金项目

国家自然科学基金青年科学基金项目(22202102)。

## 参考文献

- [1] 朱晟, 彭怡婷, 闵宇霖, 刘海梅, 徐群杰. 电化学储能材料及储能技术研究进展[J]. 化工进展, 2021, 40(9): 4837-4852.
- [2] Simon, P. and Gogotsi, Y. (2020) Perspectives for Electrochemical Capacitors and Related Devices. *Nature Materials*, **19**, 1151-1163. <https://doi.org/10.1038/s41563-020-0747-z>
- [3] Lin, Z.F., Taberna, P.L. and Simon, P. (2018) Advanced Analytical Techniques to Characterize Materials for Electrochemical Capacitors. *Current Opinion in Electrochemistry*, **9**, 18-25. <https://doi.org/10.1016/j.coelec.2018.03.004>
- [4] Bo, Z., Li, C., Yang, H., Ostrikov, K., Yan, J. and Cen, K. (2018) Design of Supercapacitor Electrodes Using Molecular Dynamics Simulations. *Nano-Micro Letters*, **10**, 33. <https://doi.org/10.1007/s40820-018-0188-2>
- [5] 杨亮, 邓乔元, 战光辉, 林仕伟. 基于分子动力学的纳米压痕虚拟仿真教学设计[J]. 教育进展, 2021(11): 1752.
- [6] Zeng, L., Wu, T., Ye, T., Mo, T., Qiao, R. and Feng, G. (2021) Modeling Galvanostatic Charge-Discharge of Nanoporous Supercapacitors. *Nature Computational Science*, **1**, 725-731. <https://doi.org/10.1038/s43588-021-00153-5>
- [7] Xu, K., Shao, H., Lin, Z., Merlet, C., Feng, G., Zhu, J. and Simon, P. (2020) Computational Insights into Charge Storage Mechanisms of Supercapacitors. *Energy & Environmental Materials*, **3**, 235-246. <https://doi.org/10.1002/eeem2.12124>
- [8] Thompson, A.P., Aktulga, H.M., Berger, R., Bolintineanu, D.S., Brown, W.M., Crozier, P.S.; in't Veld, P.J., Kohlmeyer, A., Moore, S.G., Nguyen, T.D., Shan, R., Stevens, M.J., Tranchida, J., Trott, C. and Plimpton, S.J. (2022) LAMMPS—A Flexible Simulation Tool for Particle-Based Materials Modeling at the Atomic, Meso, and Continuum Scales. *Computer Physics Communications*, **271**, 108171. <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2021.108171>
- [9] Stukowski, A. (2010) Visualization and Analysis of Atomistic Simulation Data with OVITO—The Open Visualization Tool. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, **18**, 015012. <https://doi.org/10.1088/0965-0393/18/1/015012>
- [10] Li, H., Xu, K., Chen, P., Yuan, Y., Qiu, Y., Wang, L., Zhu, L., Wang, X., Cai, G., Zheng, L., Dai, C., Zhou, D., Zhang, N., Zhu, J., Xie, J., Liao, F., Peng, H., Peng, Y., Ju, J., Lin, Z. and Sun, J. (2022) Achieving Ultrahigh Electrochemical Performance by Surface Design and Nanoconfined Water Manipulation. *National Science Review*, **9**, nwac079. <https://doi.org/10.1093/nsr/nwac079>
- [11] Xu, K., Lin, Z., Merlet, C., Taberna, P.-L., Miao, L., Jiang, J. and Simon, P. (2018) Tracking Ionic Rearrangements and Interpreting Dynamic Volumetric Changes in Two-Dimensional Metal Carbide Supercapacitors: A Molecular Dynamics Simulation Study. *ChemSusChem*, **11**, 1892-1899. <https://doi.org/10.1002/cssc.201702068>
- [12] Xu, K., Merlet, C., Lin, Z.F., Shao, H., Taberna, P.L., Miao, L., Jiang, J.J., Zhu, J.X. and Simon, P. (2020) Effects of Functional Groups and Anion Size on the Charging Mechanisms in Layered Electrode Materials. *Energy Storage Materials*, **33**, 460-469. <https://doi.org/10.1016/j.ensm.2020.08.030>
- [13] Xu, K., Ji, X., Zhang, B., Chen, C., Ruan, Y.J., Miao, L. and Jiang, J.J. (2016) Charging/Discharging Dynamics in Two-Dimensional Titanium Carbide (MXene) Slit Nanopore: Insights from Molecular Dynamic Study. *Electrochimica Acta*, **196**, 75-83. <https://doi.org/10.1016/j.electacta.2016.02.165>