

## РАСЧЕТ ВОДОРОД-СОРБЦИОННОЙ ЕМКОСТИ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК

Ян Ин

Научный руководитель: ассистент, Гулидова Людмила Владимировна  
Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г.Томск, пр.Ленина, 30, 634050

E-mail: [yanginglady1994@gmail.com](mailto:yanginglady1994@gmail.com)

## CALCULATION OF HYDROGEN SORPTION CAPACITY OF CARBON NANOTUBES

Yang Ying

Scientific Supervisor: Assistant L.V. Gulidova

Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenina str., 30, 634050

E-mail: [yanginglady1994@gmail.com](mailto:yanginglady1994@gmail.com)

***Abstract.** Through the establishment of geometric model expect the ability of hydrogen adsorption in carbon nanotubes, in the process of calculation consider the influence of the structural characteristics and stacking manner of carbon nanotubes on the amount of hydrogen adsorption, calculate the mass fraction of hydrogen adsorption under different conditions. The paper introduces calculation process of hydrogen adsorption capacity of carbon nanotubes, the structural characteristics and accumulation mode how to influence the calculation method.*

Для решения основной проблемы при изучении углеродных материалов-накопителей водорода, а именно плохой повторяемости экспериментальных результатов, необходимо проводить расчеты с применением разнообразных моделей сорбции водорода. Наиболее простой является геометрическая модель с учетом структурных характеристик материала. Данная модель не требует больших затрат и применения мощной вычислительной техники, а также сложного математического аппарата, что является несомненным преимуществом, хотя и не устанавливает влияния на процесс сорбции химических и физических воздействий.

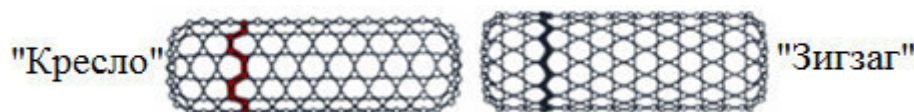


Рис. 1. Нанотрубки с конфигурацией «зигзаг» и «кресло»

На водород-сорбционную емкость углеродных нанотрубок влияют такие факторы как хиральность, места локализации водорода, количество стенок, наличие открытых или закрытых нанотрубок. Хиральность нанотрубок по виду кромки торцов с соответствующей конфигурацией представлены на рис. 1 [1].

По расчетам, в 1 г порошка нанотрубок (массовая доля нанотрубок в образце составляет 90%) количество молекул углерода составляет  $4.52 \cdot 10^{22}$ . Если принять средний диаметр нанотрубок равным  $19.5 \text{ \AA}$ , то по окружности трубки укладывается 26 шестигранников.

По расчетам, в 1 г порошка нанотрубок (массовая доля нанотрубок в образце составляет 90%) количество молекул углерода составляет  $4.52 \cdot 10^{22}$ . Если принять средний диаметр нанотрубок равным 19.5 Å, то по окружности трубки укладывается 26 шестигранников.

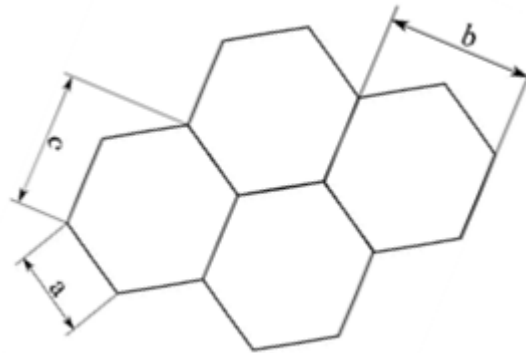


Рис. 2. Структура графеновой поверхности и параметры решетки

Соответствующие параметры решетки представлены на рис.2. Длина связи С-С составляет 1.42 Å [2], высота гексагона  $b=2.46$  Å, а величина продольного параметра составила 2,13 Å. При такой конфигурации суммарная длина всех нанотрубок типа «зигзаг» в образце составляет  $1,86 \cdot 10^{21}$  Å, а для типа «кресло» -  $2,15 \cdot 10^{21}$  Å.

Известно, что газокинетический диаметр молекулы водорода составляет 2.96 Å [3], поэтому для расчетов молекула будет представлена в форме шара. На рис. 3 в качестве примера приведен жгут, состоящий из 37 нанотрубок, и указаны возможные места сорбции примеси водорода.

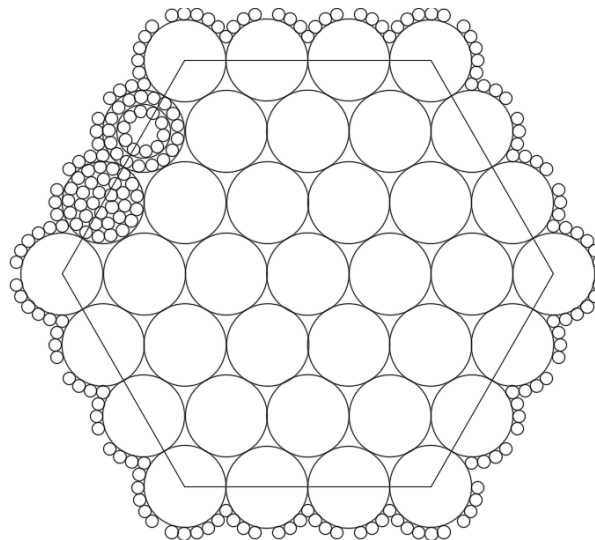


Рис.3 Схематичное изображение примеси водорода в жгуте из 37 нанотрубок

Из рис. 3 видно, что одностенная нанотрубка (ОУНТ) может сорбировать 33 молекулы водорода в поперечном сечении, а двустенная нанотрубка (ДУНТ) 27 молекул водорода. Исходя из параметров системы жгутов нанотрубок, рассчитаны удельные коэффициенты сорбции водорода (в массовых долях) открытых и закрытых нанотрубок, в зависимости от хиральности. Влияние соотношения одностенных и двустенных открытых нанотрубок на концентрацию поглощенного водорода представлено на рис.4.

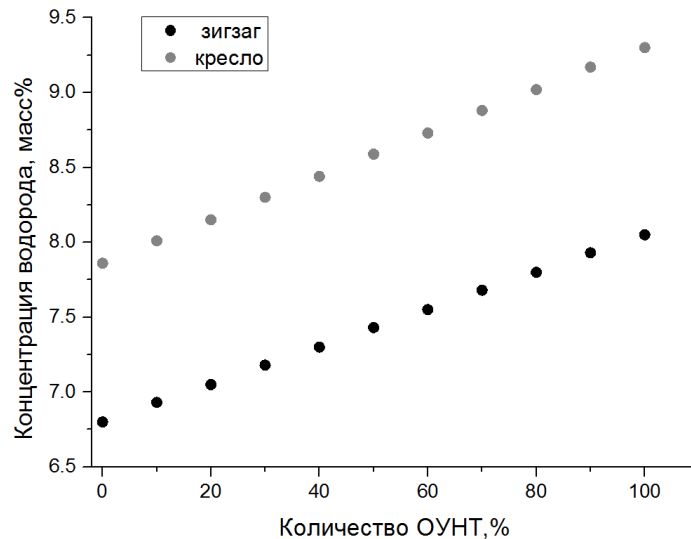


Рис.4 График зависимости концентрации поглощенного образцом водорода от количества ОУНТ в материале.

В случае закрытых нанотрубок сорбция осуществляется только продольной поверхностью и полусферическими торцами. Торцы, закрывающие нанотрубки, препятствуют объемной сорбции. Таким образом, поверхностная сорбция водорода для типа «зигзаг» составила 1.158 масс%, а для типа «кресло» 1.342 масс%. Торцы нанотрубок сорбируют  $2.065 \times 10^{-2}$  масс%.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Budyka M. F. Bond lengths and diameters of armchair single wall carbon nanotubes / M. F. Budyka, T. S. Zyubina, A. G. Ryabenko, S. H. Lin, A. M. Mebel // Chem. Phys. Lett. — 2005. — V. 407, №4-6. — P. 266.
2. Kuznetsova A. Enhancement of adsorption inside of single-walled nanotubes: opening the entry ports / A. Kuznetsova, D. B. Mawhinney, V. Naumenko, J. T. J. Yates, J. Liu, R. E. Smalley // Chem. Phys. Lett. — 2000. — V. 321, №3-4. — P. 292
3. Веркин Б. И., Прихотько А. Ф. Криоцисталлы.— Киев: Наукова думка, 1983. — 527 с.
4. Stan G. Uptake of gases in bundles of carbon nanotubes / G. Stan, M. Bojan, S. Curtarolo, S. M. Gatica, M. W. Cole // Phys. Rev. B — 2000. — V. 62, №3. — P. 2173  
Веркин Б. И., Прихотько А. Ф. Криоцисталлы.— Киев: Наукова думка, 1983. — 527 с.
5. Mawhinney D. B. Surface defect site density on single walled carbon nanotubes by titration / D. B. Mawhinney, V. Naumenko, A. Kuznetsova, J. T. Yates Jr, J. Liu, R. E. Smalley // Chem. Phys. Lett. — 2000. — V. 324, №1-3. — P. 213.