АККУМУЛИРОВАНИЕ ВОДОРОДА УГЛЕРОДСОДЕРЖАЩИМИ НАНОСТРУКТУРНЫМИ СИСТЕМАМИ

Борецкий Е.А.[1], Сидоркин А.С.[2], Савостиков Д.В.[1]
Научный руководитель: Видяев Д.Г.[1], д.т.н., доцент
[1]Томский политехнический университет, 634050, Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30
[2]РГП «Институт ядерной физики» Республика Казахстан, г. Алматы, ул. Ибрагимова,1
E-mail: bambr@tpu.ru

Использование водорода в качестве источника энергии является существенной альтернативой современным двигателям, работающим на углеводородном топливе. Серьезной задачей, которую необходимо решить, становится создание систем для аккумулирования водорода. К таким системам предъявляют высокие требования не только по безопасности и условиям хранения, но также и по емкости таких устройств. Одним из перспективных способов хранения водорода является применение сорбционных систем, где водород находится в связанном состоянии.

Различные аллотропные модификации углерода, обладая высокоорганизованной поверхностной структурой, позволяют использовать их в качестве перспективных сорбционных систем [1]. С целью изучения возможности применения таких систем была проведена теоретическая оценка сорбционной емкости по водороду систем на основе аллотропных форм углерода различной модификации.

Для этого нами были смоделированы три наиболее распространенные формы: фуллерены C_{60}, одностенные углеродные нанотрубки (ОУНТ) и нановолокна (НВ). Моделирование электронной и атомной структуры проводилось с использованием методов квантовой химии и молекулярной динамики с применением программы HyperChem. Для нахождения энергии адсорбции и оптимизации геометрии системы использовали полуэмпирический метод MNDO (модифицированное пренебрежение двухатомным перекрыванием). После моделирования и оптимизации геометрии рассматриваемой системы проводилось химическое присоединение атомов водорода к атомам рассматриваемых наноструктур. Степень покрытия определялась как отношение числа адсорбированных атомов водорода к числу атомов рассматриваемой наноструктуры:

$$\theta = N_H / N, \quad (1)$$

где θ – степень покрытия рассматриваемой наноструктуры водородом; N_H – число адсорбированных атомов водорода; N – количество атомов в рассматриваемой системы.

Удельная энергия адсорбции рассчитывалась по формуле [3]:

$$E_{адс} = (E_{сис} - E_N - N_H E_H)/ N_H , \quad (2)$$

где $E_{адс}$ – удельная энергия адсорбции водорода; $E_{сис}$ – полная энергия системы "наноструктура – адсорбат"; E_N – полная энергия свободной наноструктуры; E_H – энергия одного атома водорода; N_H – общее число адсорбированных атомов водорода.

Энергии $E_{сис}$ и E_N брались для полностью оптимизированной геометрии. Результатом получалась энергия адсорбции на один атом водорода. При этом, если энергия адсорбции имеет отрицательное значение, то рассматриваемая система считалась стабильной.

После определения зависимости энергии адсорбции от степени покрытия и стабильных конформаций системы, определялась предельная сорбционная емкость по водороду из формулы:

$$\eta_H = \frac{m_H}{m_H + m_N} \cdot 100\% , \quad (3)$$

где η_H – предельная сорбционная емкость по водороду, мас.%; m_H – масса адсорбированного водорода; m_N – масса свободной наноструктуры.

Результаты расчетов приведены в таблице.

Таблица. Значение сорбционной емкости системы по водороду, в % масс.

Модификация	Давление p, МПа; T = 80K			Давление p = 10МПа; T = 300K
	0,1	1	10	
Фуллерен C_{60}	0,9	2,7	7,0	3,3
ОУНТ	0,2	1,1	5,3	2,3
НВ	1,0	3,2	9,0	4,7

На основании полученных значений сорбционной емкости по водороду показана перспективность использования в качестве аккумулятора водорода исследованных модификаций углерода.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Hirscher M., Becher M., Haluska M. et al. Hydrogen storage in carbon nanostructures // J. of Alloys and Compounds.– 2002. Vol. 330–332. – P. 654–658.