

ОБ АДСОРБЦИИ МОЛЕКУЛЯРНОГО ВОДОРОДА НА ВНЕШНЕЙ ПОВЕРХНОСТИ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБ

Запороцкова И.В., Лебедев Н.Г., Запороцков П.А.

Волгоградский государственный университет, Университетский пр., 100,
Волгоград, 400062, Россия

* E-mail: irinaz@rbcmail.ru

Введение

Известно, что некоторые вещества, в том числе и углеродные нанотрубки [1 - 3], адсорбируют значительное количество водорода на единицу массы или объема. Такие материалы перспективны как топливные элементы для транспортных средств. А использование нанотруб в качестве материалов, адсорбирующих водород, позволит значительно понизить чистый вес систем путем уменьшения веса сорбента (в нашем случае углерода).

Результаты и обсуждение

Выполнены полуэмпирические исследования адсорбции молекулярного водорода на внешней поверхности однослойной углеродной нанотрубки типа (6, 6) - как одиночного, так и в присутствии катализатора, в качестве которого выбран атом водорода. Молекула водорода H_2 помещалась в центральной части молекулярного кластера выбранного типа тубулена, для того чтобы уменьшить влияние граничных эффектов (рис. 1).

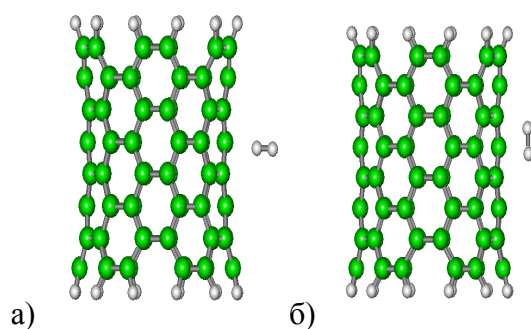


Рис. 1. Фрагмент углеродной нанотрубки (6, 6) с указанием положения адсорбирующейся молекулы водорода:

- а) случай перпендикулярной ориентации молекулы относительно поверхности;
- б) случай параллельной ориентации молекулы относительно поверхности.

Исследованы 12 наиболее вероятных способов адсорбции H_2 на внешней поверхности нанотрубки: 4 варианта для случая перпендикулярной ориентации молекулы H_2 относительно поверхности нанотрубки и 8 вариантов для случая параллельной ориентации молекулы H_2 относительно поверхности тубулена. Установлено, что при приближении молекулы H_2 к поверхности нанотрубки она распадается на два атома водорода, каждый из которых адсорбируется на соседних атомах углерода связи C-C поверхности тубулена.

Как правило, в парах водорода наряду с молекулами H_2 присутствуют и атомы водорода. Поэтому были выполнены исследования адсорбции молекулярного водорода в присутствии адсорбирующегося атомарного водорода. Рассмотрены случаи перпендикулярной и параллельной ориентации молекулы водорода относительно поверхности нанотрубки. Для всех вариантов молекула H_2 присоединялась к некоторому атому углерода поверхности нанотрубки, расположенному в центральной части кластера. Атом водорода помещался последовательно над каждым атомом углерода поверхности по периметру нанотрубки, начиная с ближайшего к тому атому C, над которым находилась молекула H_2 , и заканчивая диаметрально противоположным к нему атомом углерода (рис.2). Обнаружено, что в присутствии атома водорода молекула H_2 не теряет свой целостности. По полученным расчетным данным построены кривые потенциальной энергии адсорбционных комплексов «нанотрубка – молекула H_2 - атом H» для всех предложенных вариантов (характерный вид профиля потенциальной энергии комплекса приведен на рисунке 3) и рассчитаны энергии адсорбции молекулы H_2 и оптимальные расстояния адсорбции.

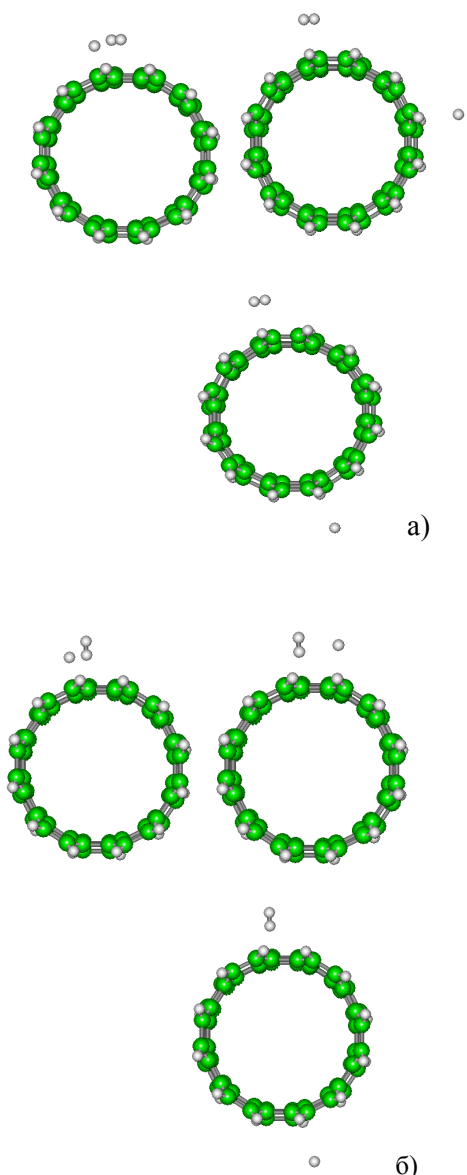


Рис. 2. Фрагмент нанотрубок (6, 6) с указанием положения и ориентации адсорбирующейся молекулы водорода и атома катализатора Н:
 а) H_2 ориентирована параллельно поверхности трубки;
 б) H_2 ориентирована перпендикулярно поверхности трубки.

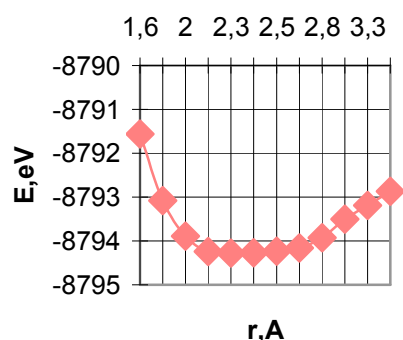


Рис. 3. Характерный профиль потенциальной энергии адсорбционного комплекса «нанотрубка – молекула H_2 – атом Н».

Выводы

Установлено, что в процессе приближения молекулы водорода к поверхности углеродной нанотрубки, она распадается на два атома Н, каждый из которых адсорбируется на соседних атомах углерода связи С–С. То есть адсорбция молекулярного водорода на поверхности однослойной углеродной нанотрубки без дополнительных воздействий на систему невозможна.

Исследование одновременной адсорбции молекулы водорода на поверхность нанотрубки в присутствии катализатора – атома водорода – позволило сделать вывод, что адсорбция H_2 на поверхности углеродной нанотрубки без разрушения молекулы возможна только при условии одновременного присутствия атомарного водорода, выступающего в роли катализатора данного процесса.

Благодарности

Работа выполнена при поддержке Российского Фонда Фундаментальных Исследований (проект 04-03-96501).

Литература

1. Dresselhaus M.S., Dresselhaus G., Eklund P.C. Science of Fullerenes and Carbon Nanotubes, Academic Press, 1996, 965 P.
2. Eletsii A.V. Sorbcionnie svoistva uglerodnih nanostruktur (Sorption properties of carbon nanostructures). Uspehi Fiz. Nauk, 2004, **174**(11), 1191 - 1230.
3. Zaporotskova I.V., Lebedev N.G., Chernozatonskii L.A. Quantum-chemical investigations of single wall carbon nanotube hydrogenation processes. Hydrogen materials science and chemistry of carbon nanomaterials. NATO Science Ser., II Mathematics, Physics and Chemistry, 2004, **172**, 243 - 258.