РОЛЬ ДЕФЕКТОВ ГРАФЕНА В ХРАНЕНИИ ВОДОРОДА

У.Б. Улжаев1\*), И.Д. Ядгаров1), У.Б. Халилов1,2)

1) Институт ионно-плазменных и лазерных технологий

АН РУз. Ташкент, Узбекистан

2) Университет Антверпена, Антверпен, Бельгия

\*)e-mail: uub242526@gmail.com

Сегодня во многих исследованиях сообщается, что наноматериалы на основе углерода обладают возобновляемой емкостью хранения водорода, но способы увеличения их емкости хранения водорода остаются одной из насущных проблем [1]. В данном исследовании методом молекулярной динамики (МД) сравнивалась относительная масса (wt%) физосорбированного водорода в однослойных бездефектных и разнодефектных графенах (Рис.1).



Рис. 1. Зависимость относительной массы молекул водорода от концентрации дефектов в графене.

Результаты показывают, что относительный масса молекул H2, физосорбированных вокруг дефектного графена, в 1,36 раза больше, чем у бездефектного графена. Это исследование способствует пониманию на атомном уровне фундаментальных механизмов хранения водорода в графене с различными дефектами.

ЛИТЕРАТУРА

1. Rahul Krishna et.al. “*Hydrogen Storage for Energy Application*”, 271, (2012)