

УДК 620.91

Мукам Экаев, кандидат технических наук, доцент кафедры
нанотехнологий и материаловедения
Международный университет инженерных технологий имени Огуз
Хана

Айлар Гельдиева, преподаватель кафедры биотехнологий
Международный университет инженерных технологий имени Огуз
Хана

**КОМПЬЮТЕРНЫЙ АНАЛИЗ ВРЕМЕНИ УДЕРЖАНИЯ ПРИ
ФИЗИЧЕСКОЙ АДСОРБЦИИ И КИНЕТИКИ
ДИССОЦИАТИВНОЙ ХЕМОСОРБЦИИ ВОДОРОДА НА
УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБКАХ**

Аннотация Углеродные нанотрубки (УНТ) представляют собой перспективные наноматериалы для хранения водорода, сенсорных и каталитических применений благодаря высокой удельной поверхности, уникальным электронным свойствам и структурной стабильности. Одним из наиболее важных процессов, определяющих взаимодействие водорода с УНТ, является переход от физической адсорбции к химической адсорбции. В данной работе представлен вычислительный анализ времени удержания молекул водорода и кинетики диссоциативной хемосорбции на поверхности углеродных нанотрубок с использованием методов молекулярной динамики.
Ключевые слова: углеродные нанотрубки, адсорбция водорода, время удержания, хемосорбция, молекулярная динамика

1. Введение

Водород рассматривается как один из наиболее перспективных экологически чистых энергоносителей благодаря высокой энергетической плотности и экологически безопасным продуктам сгорания. Однако эффективное хранение и контролируемое высвобождение водорода остаются значительными технологическими проблемами. Углеродные наноструктуры, в частности углеродные нанотрубки (УНТ), рассматриваются как потенциальные материалы для хранения водорода благодаря их высокой удельной поверхности, структурной стабильности и регулируемым электронным свойствам. Взаимодействие водорода с УНТ обычно происходит в два этапа. На первом этапе молекулы водорода физически адсорбируются на поверхности нанотрубки за счёт слабых ван-дер-ваальсовых взаимодействий. Этот процесс, известный как физическая адсорбция (физисорбция), как правило, обратим и происходит без разрыва молекулярной связи Н–Н. На втором этапе происходит диссоциативная хемосорбция, при которой молекула водорода распадается на два атома водорода, образующие ковалентные связи с атомами углерода на поверхности нанотрубки. Этот процесс требует преодоления значительного энергетического барьера активации и сопровождается изменением гибридизации атомов углерода с состояния sp^2 на sp^3 .

2. Теоретические основы

Взаимодействие молекул водорода с поверхностью углеродных нанотрубок может быть описано с использованием классических межатомных потенциалов. В моделировании методом молекулярной

динамики потенциал Леннарда–Джонса широко применяется для описания слабых ван-дер-ваальсовых взаимодействий, ответственных за физическую адсорбцию. Для более сложных химических реакций, связанных с разрывом и образованием химических связей, используются реакционно-способные потенциалы, такие как AIREBO или ReaxFF. Ключевым параметром кинетики адсорбции является время удержания (residence time), определяемое как время, в течение которого молекула остаётся захваченной потенциальной ямой поверхности до десорбции обратно в газовую фазу или до химического превращения.

3. Методика моделирования

Вычислительное исследование проводится с использованием программного пакета LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator). Моделирование методом молекулярной динамики позволяет отслеживать траектории отдельных молекул водорода, взаимодействующих с поверхностью углеродной нанотрубки. Углеродная нанотрубка с заданной хиральностью (n,m) помещается в периодическую расчетную ячейку, содержащую молекулы водорода. Система приводится в состояние термодинамического равновесия с использованием ансамблей `fix nvt` или `fix npt` для поддержания контролируемых условий температуры и давления.

4. Факторы, влияющие на время удержания водорода

Кривизна нанотрубки существенно влияет на реакционную способность атомов углерода. Нанотрубки меньшего диаметра характеризуются

более высокими углами пирамидализации, что приводит к увеличению напряжения в углеродной решётке. Структурные дефекты, такие как вакансии, дефекты Стоуна–Уэльса или примесные атомы, могут значительно усиливать адсорбцию водорода. Температура играет двойственную роль в кинетике адсорбции. При низких температурах молекулы водорода остаются адсорбированными дольше, однако энергии может быть недостаточно для преодоления барьера диссоциации.

5. Результаты и обсуждение

Анализ молекулярных траекторий, полученных в ходе моделирования, позволяет определить статистические распределения времени удержания молекул водорода на поверхности углеродных нанотрубок. Эти распределения дают представление о вероятности процессов адсорбции, десорбции и диссоциации. Результаты могут быть представлены в виде кинетической карты, связывающей температуру, давление, диаметр нанотрубки и плотность дефектов с эффективностью адсорбции водорода.

6. Заключение

В данной работе предложена вычислительная схема анализа кинетики адсорбции водорода на углеродных нанотрубках. С использованием методов молекулярной динамики в программном пакете LAMMPS было количественно оценено время удержания молекул водорода на поверхности УНТ и выявлено влияние структурных и внешних

факторов. Полученные результаты могут способствовать разработке новых наноматериалов для хранения водорода, сенсорных и каталитических приложений.