

УДК 538.911, 544.723.2, 544.723.5

Блохина А.Н

студент

Уфимский университет науки и технологий

Россия, г. Уфа

Научный руководитель: Крылова К.А., к.ф.-м.н., с.н.с.

Институт проблем сверхпластичности металлов РАН

Россия, г. Уфа

**ТЕМПЕРАТУРНО-КОНЦЕНТРАЦИОННАЯ
ЗАВИСИМОСТЬ ВОДОРОД-СОРБЦИОННЫХ СВОЙСТВ,
ЛЕГИРОВАННЫХ ЛИТИЕМ ГРАФЕНОВЫХ ЧЕШУЕК**

Аннотация: методом молекулярной динамики исследована адсорбция водорода на графеновых наночешуйках с разной концентрацией лития (1, 5 и 10 атомов). Установлен характер влияния легирования литием на гравиметрическую плотность водорода в зависимости от температуры. При 77 К максимальная сорбционная емкость достигается на структурах с минимальным содержанием лития, тогда как при 300 К преимущество демонстрируют высоколегированные образцы. Выявленный эффект свидетельствует об изменении доминирующего механизма адсорбции при переходе от криогенных условий к комнатным.

Ключевые слова: графеновые наночешуйки, молекулярная динамика, легирование литием, водородная сорбция, гравиметрическая плотность, температурная зависимость.

Blokhina A.N.

Student

Ufa University of Science and Technology

Russia, Ufa

Scientific supervisor: Krylova K.A., Cand. of Phys.-Math. Sci., Sr.

Institute for Metals Superplasticity Problems of RAN

TEMPERATURE-CONCENTRATION DEPENDENCE OF HYDROGEN SORPTION PROPERTIES OF LITHIUM-DOPED GRAPHENE FLAKES

Abstract: hydrogen adsorption on graphene nanoflakes with different lithium concentrations (1, 5, and 10 atoms) was studied using molecular dynamics simulation. A effect of lithium doping on the gravimetric hydrogen density was found, depending on temperature. At 77 K, the maximum sorption capacity was achieved on structures with minimal lithium atoms, while at 300 K, highly doped samples demonstrated advantage. This finding indicates a change in the dominant adsorption mechanism upon transition from cryogenic to ambient conditions.

Key words: graphene nanoflakes, molecular dynamics, lithium doping, hydrogen sorption, gravimetric density, temperature dependence.

Введение

Водород рассматривается как перспективный энергоноситель, однако его широкому применению препятствуют проблемы эффективного и безопасного хранения [1]. Углеродные наноматериалы, такие как графен и углеродные нанотрубки, обладают высоким потенциалом для сорбции водорода благодаря развитой поверхности [2]. Для повышения их емкости при стандартных условиях перспективным методом является легирование гетероатомами, в частности литием, которое изменяет электронную структуру материала и повышает энергию связи с водородом [3, 4]. Метод молекулярной динамики является инструментом для исследования процессов адсорбции на атомарном уровне [5].

Целью данной работы является исследование влияния концентрации лития и температуры на водород-сорбционные свойства графеновых чешуек методом МД.

Методика исследования

Моделирование проведено в программной среде LAMMPS. Исследовались графеновые наночешуйки, легированные 1, 5 и 10 атомами Li, в атмосфере молекулярного водорода при температурах 77 К и 300 К.

Начальная структура графеновой чешуйки с атомами лития создавалась с помощью программы VMD (Visual Molecular Dynamics). На рис. 1 представлена модель графеновой наночешуйки с равномерно распределенными атомами лития, использованная в качестве начальной конфигурации для моделирования.

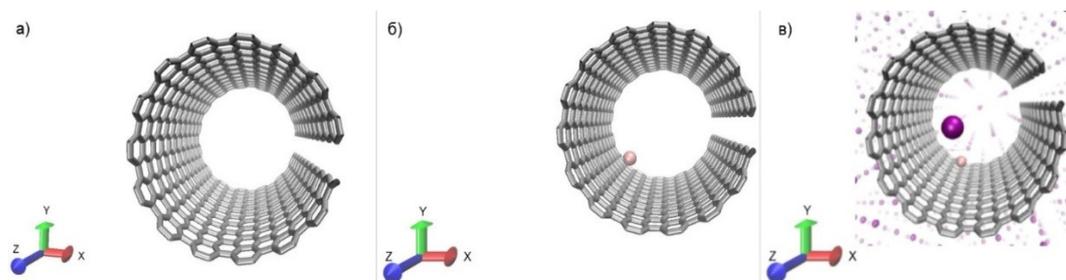


Рис. 1 а) Модель графеновой наночешуйки, использованная для молекулярно-динамического моделирования, б) Наночешуйка, легированная 1 атомом Li, в) Наночешуйка, помещенная в водородную атмосферу

Межатомные взаимодействия C-C и C-H описывались потенциалом AIREBO, который учитывает образование и разрыв химических связей [6]. Для пар Li-Li, C-Li и H-Li применялся потенциал Морзе, параметры которого были оптимизированы для описания соответствующих взаимодействий [7].

Результаты и обсуждение

Результаты моделирования показали, что эффективность сорбции водорода существенно зависит как от степени легирования, так и от температуры (рис. 2).

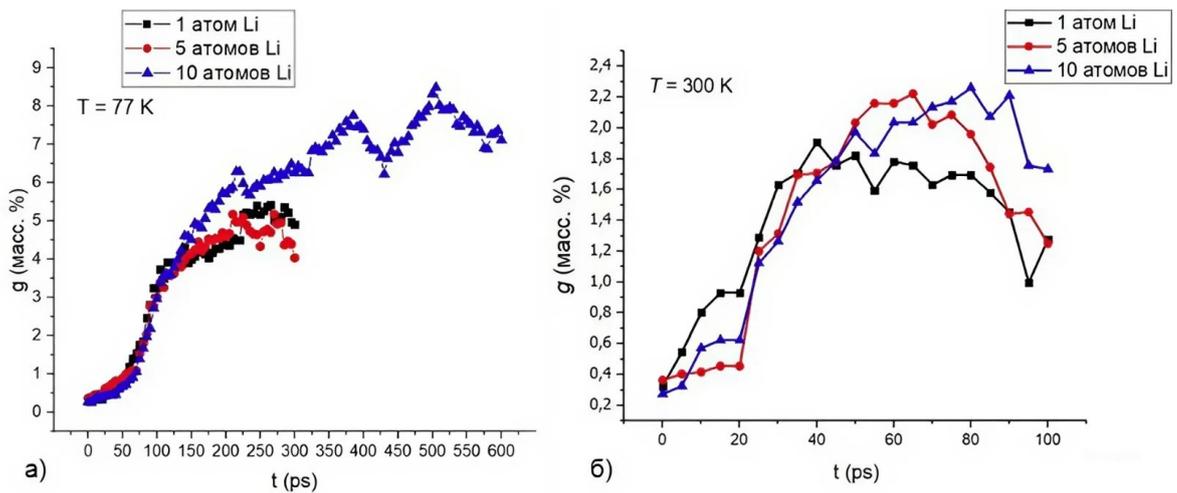


Рис. 2. Зависимость гравиметрической плотности от времени выдержки при 77 К(а) и 300 К (б)

При температуре 77К наилучшая водород-сорбционная емкость наблюдается у структуры с 10 атомами Li. Данный образец демонстрирует стабильный рост гравиметрической плотности с достижением максимального значения после 500 ps до насыщения. Кривые изменения гравиметрической плотности для структур с 1 и 5 атомами Li демонстрируют быстрое насыщение водородом в первые 200 ps с последующей стабилизацией.

При 300К максимальная сорбционная емкость (2,3 масс.%) была достигнута на высоколегированном образце (10 Li). Образцы с 1 и 5 Li показали значения ниже максимальной сорбционной емкости - 1,9 масс.% и 2,1 масс.%.

Заключение

Методом молекулярной динамики установлена сложная зависимость водород-сорбционных свойств, легированных литием графеновых наночешуек от температуры и концентрации легирующего элемента. Показано, что при криогенной температуре (77К) более эффективны высоколегированные структуры, в то время как при комнатной температуре (300К) преимущественная эффективность у всех образцов. Полученные результаты важны для

систем хранения водорода, адаптированных к конкретным температурным условиям эксплуатации.

Использованные источники

1. Novoselov, K. S., Geim, A. K., Morozov, S. V., Jiang, D., Zhang, Y., Dubonos, S. V., Firsov, A. A. Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films // *Science*. 2004. Vol. 306. P. 666-669.

2. Krylova K.A., Baimova J.A., Lobzenko I.P., Rudskoy A.I. Crumpled graphene as a hydrogen storage media: Atomistic simulation // *Physica B: Condensed Matter*. 2020. Vol. 583. P. 412020.

3. Lopez-Urias, F., Terrones, M., Terrones, H., & Charlier, J. C. Lithiated graphene: a mitochondrial delight // *Nanoscale*. 2017. Vol. 9. P. 14299-14307.

4. Liu C., Wang Y., Chen H., et al. Controllable Synthesis of LithiumDoped Porous Carbon with Enhanced Hydrogen Storage // *ACS Applied Materials & Interfaces*. 2017. Vol. 9. P. 15624-15632.

5. Verzhbitskiy, I. A., & Penev, E. S. Structure and Properties of Graphene and its Family Members: A Review // *Journal of Physics: Condensed Matter*. 2019. Vol. 31. P. 353001.

6. Nardecchia, S., Carriazo, D., & Ferrer, M. L. Carbon materials in additive manufacturing // *Carbon*. 2015. Vol. 95. P. 711-733.

7. Chen W., Xu H., Li X., et al. Optimization of Hydrogen Storage Performance of Lithium-Doped Carbon Nanotubes // *Journal of Carbon Research*. 2020. Vol. 6. P. 20-30.