

МОДЕЛИРОВАНИЕ СОРБЦИИ АТОМОВ СКАНДИЯ УГЛЕРОДНОЙ ПОВЕРХНОСТЬЮ

Краснов П.О.

ГОУ ВПО «Сибирский государственный технологический университет»,
факультет автоматизации и информационных технологий, кафедра физики,
Россия, 660049, г. Красноярск, пр. Мира, 82,
Тел.: (391)227-39-25, (908)020-98-30, E-mail: pavel@iph.krasn.ru

Достаточно сильный резонанс получили теоретические исследования [1-3], в которых было предложено использовать в качестве сорбентов молекулярного водорода углеродные наноструктуры (фуллерены, нанотрубы), покрытые слоем переходных металлов, таких как скандий и титан. Процессы сорбции в данных работах моделировались в программном пакете VASP методом DFT с использованием псевдопотенциала Вандербилята в базисе плоских волн. Было показано, что в подобных структурах энергия связывания водорода удовлетворяет требованиям, предъявляемых для их успешного применения. Существенным недостатком этих работ является то, что в них не учитывалась возможность агрегации атомов металла на поверхности углеродных наноструктур в кластеры из-за малой энергии связывания.

В представляемой работе моделированием в программном пакете Gaussian методом DFT B3LYP в атомном базисе 6-31G было показано, что агрегация скандия на поверхности нанотруб в значительной степени снижает полезные для хранения водорода адсорбционные свойства данных материалов. В качестве возможного пути предотвращения кластеризации металла было предложено использовать углеродные структуры, содержащие не только шестичленные, но семичленные и пятичленные углеродные кольца, чтобы усилить связывание скандия.

Для проверки данного предположения были проведены исследования с использованием программного пакета NWChem методом DFT B3LYP в атомном базисе 6-31G**. Рассматривалось взаимодействие атомов скандия с кластерами углеродных поверхностей, содержащих пятичленные, шестичленные и семичленные углеродные кольца. Показано, что энергия сорбции атомов данного металла при его связывании с семичленными кольцами примерно в два раза, а с пятичленными кольцами в полтора раза, превышает энергию связывания с шестичленными кольцами.

Литература.

1. *Zhao Y., Kim Y.-H., Dillon A.C., Heben M.J., Zhang S.B.* Hydrogen Storage in Novel Organometallic Buckyballs // *Physical Review Letters* **94**, 15, 2005. Article 155504.
2. *Yildirim T., Iñiguez J., Ciraci S.* Molecular and dissociative adsorption of multiple hydrogen molecules on transition metal decorated C_{60} // *Physical Review B* **72**, 15, 2005. Article 153403.
3. *Yildirim T., Ciraci S.* Titanium-Decorated Carbon Nanotubes as a Potential High-Capacity Hydrogen Storage Medium // *Physical Review Letters* **94**, 17, 2005. Article 175501.