

О НЕ ПАРНОМ ВЗАИМОДЕЙСТВИИ АТОМОВ ВОДОРОДА НА ПОВЕРХНОСТИ ФУЛЛЕРЕНА

К.П. Катин, А.И. Подливаев

*НИЯУ «Московский Инженерно-физический институт»
Каширское шоссе, дом 31, г. Москва, 115409, Россия
e-mail: KPKatin@yandex.ru*

Адсорбция водорода углеродными наноструктурами представляет значительный интерес, обусловленный необходимостью создания водородного аккумулятора в водородной энергетике. Численное моделирование процесса адсорбции водорода и его миграции по поверхности углеродных наноструктур методами молекулярной динамики позволяет рассчитывать системы, состоящие из нескольких десятков атомов при использовании *ab initio* потенциалов взаимодействия и нескольких сотен атомов при использовании потенциалов сильной связи. Главным препятствием на пути применения этих моделей является быстрый рост времени расчета t энергии системы по мере увеличения в ней количества атомов N : $t=O(N^3)$.

Это препятствие можно было бы обойти, если взаимодействие атомов водорода на поверхности углеродного адсорбента было бы парным. Еще одной предпосылкой к проверке гипотезы о парности взаимодействия водорода на углеродных наноструктурах явилось то обстоятельство, что при исследовании термодиффузии водорода на графене, проведенном в рамках модели сильной связи [1], наблюдается практически недеформируемый углеродный остов на фоне существенного перераспределения атомов водорода на поверхности этой структуры [2].

Проверка парности потенциала водород-водородного взаимодействия проводилась на всевозможных изомерах соединений $C_{20}H_2$ и $C_{20}H_4$, представляющего собой фуллерен C_{20} с атомами водорода, адсорбированными в различных точках поверхности фуллерена.

Наши расчеты показали, что водород-водородное взаимодействие носит существенно непарный характер.

Литература

1. М.М. Maslov, А.И. Podlivaev, L.A. Openov. Phys. Lett. A, 373, 1653 (2009).
2. Л.А. Опенев, А.И. Подливаев, Письма в ЖЭТФ, 90, вып.6, 505 (2009).