

АДсорбЦИЯ ВОДОРОДА В УЛЬТРАНАНОПОРИСТЫХ И НАНОРАЗМЕРНЫХ УГЛЕРОДНЫХ АДсорбЕНТАХ

А.А. Фомкин

*Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН
119991 Москва, Ленинский проспект, 31, e-mail: fomkinaa@mail.ru*

На основе теории объемного заполнения микропор Дубинина с использованием свойства линейности изостер адсорбции рассчитана адсорбция водорода на модельных ультрананопористых (микропористых) адсорбентах. В расчетах использованы модельные адсорбенты двух типов организации порового пространства: а) с щелевидными микропорами; б) с порами, образованными межтрубным пространством углеродных нанотрубок.

Поры с эффективной шириной 0.5, 0.9, 1.2 нм получили путем исключения последовательно одного, двух и трех слоев гексагонального углерода в кристаллической решетке графита. Рассчитана адсорбция водорода в структурах с однослойными и двухслойными углеродными стенками при температурах 20, 33, 77, 200, 300, 400 К и давлениях до 20 МПа. Максимальная десорбция водорода для структуры АУ1:3 при понижении давления от 20 до 0.1 МПа составила 8 %масс при температуре 200 К.

Выполнено моделирование адсорбции водорода в межтрубном пространстве ряда углеродных однослойных нанотрубок (ОСНТ) уложенных в триангулярных упаковках, различающихся параметром решетки при температурах 20, 33, 77, 200, 300, 400 К и давлениях до 20 МПа. При температурах 77, 200, 300, 400 К и давлениях 200 атм на структурах ОСНТ 10:30 гравиметрическая плотность адсорбированного водорода достигает 23-38%масс, а объемная плотность $425-715 \text{ нм}^3(\text{H}_2)/\text{м}^3$.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант 09-03-97550-р_центр_а.