



بررسی تاثیرات دما و فشار بر مقدار جذب هیدروژن بر دسته نانولوله‌های کربنی به وسیله دینامیک مولکولی

سعید اسدی^{۱*}، آرش رحمانی^۲

^۱دانشیار، گروه مهندسی مکانیک، دانشگاه پیام نور، تهران، ایران.

^۲فارغ التحصیل کارشناسی ارشد، گروه مهندسی مکانیک، واحد لاهیجان، دانشگاه آزاد اسلامی، لاهیجان، ایران.

چکیده: استفاده از سوخت هیدروژنی به‌عنوان یکی از منابع جایگزین سوخت‌های فسیلی، اهمیت فراوانی دارد. در این میان، ذخیره‌سازی هیدروژن یکی از چالش‌های مهم و بزرگ استفاده از سوخت هیدروژنی است، بنابراین، جذب و ذخیره‌سازی هیدروژن با نانولوله‌های کربنی اهمیت زیادی پیدا کرده است. جذب هیدروژن در نانولوله‌های کربنی بستگی به عوامل فیزیکی متفاوتی دارد که از مهمترین آن‌ها دما و فشار است. هدف از این پژوهش، مطالعه تاثیرات دما و فشار بر مقدار جذب هیدروژن بر دسته نانولوله‌های کربنی است. در این پژوهش، با شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، مقدار جذب هیدروژن بر یک دسته از نانولوله‌های کربنی بررسی شده و سپس، تغییرات فشار و دما مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج نشان می‌دهد که مقدار جذب هیدروژن وابستگی زیادی به دما و فشار دارد به گونه‌ای که در دماهای پایین مقدار جذب به شکل قابل توجه‌ای افزایش می‌یابد. از نتایج به دست آمده مشخص شد که در یک دسته نانولوله کربنی چهارتایی و در دماهای بین ۱۱۰ تا ۲۱۰ کلوین مقدار جذب ثابت مانده ولی با کاهش دما از ۱۱۰ تا ۵۰ کلوین مقدار جذب به صورت خطی و با شیب قابل توجه‌ای افزایش می‌یابد. همچنین، نتایج نشان می‌دهد که تغییرات فشار با دما به صورت خطی و از مرتبه اول است.

واژه‌های کلیدی: جذب هیدروژن، دسته نانولوله‌های کربنی، دینامیک مولکولی، مدل‌سازی

s_asadi@pnu.ac.ir

۱- مقدمه

فرایند جذب هیدروژن با دینامیک مولکولی، برای به دست آوردن پارامترهای موثر بر این پدیده، بسیار مهم است. شبیه‌سازی دینامیک مولکولی یکی از روش‌های موثر و دقیق برای بررسی پدیده‌های سطحی در ابعاد نانو است [۵-۷]. با شبیه‌سازی با دینامیک مولکولی می‌توان عوامل موثر در جذب را بررسی کرد و مقادیر جذب را در شرایط متفاوت به دست آورد. بررسی نویسندگان این مقاله نشان می‌دهد که پژوهش‌های کمی در زمینه جذب هیدروژن با نانولوله‌های کربنی انجام پذیرفته است.

لیو و همکارانش [۸] با روش‌های آزمایشگاهی، استفاده از نانولوله‌های کربنی در ذخیره‌سازی هیدروژن را بررسی کرده و مقدار جذب را در حدود ۱/۷ درصد وزنی در فشار متوسط و دمای

کاربرد هیدروژن به‌عنوان سوخت و جاگزینی برای سوخت‌های فسیلی، اهمیت روز افزونی پیدا کرده است. این سوخت پاک و قابل تولید از منابع تجدیدپذیر، تاثیر چندانی بر محیط زیست ندارد. ارزش حرارتی هیدروژن بالا و در حدود ۱۲۰ MJ/kg است و در هنگام سوختن ویا اکسید شدن در یک پیل سوختی به آب تبدیل می‌شود. استفاده از هیدروژن به عنوان حامل انرژی با چالش‌های مهمی همراه است که یکی از مهمترین آنها، ذخیره سازی آن است. جذب هیدروژن با نانولوله‌های کربنی، به عنوان یکی از روش‌های موثر در ذخیره‌سازی هیدروژن مطرح شده است [۱-۴]. از طرفی به دلیل هزینه زیاد آزمایش‌ها و یا طراحی وسایل ذخیره‌سازی هیدروژن در نانولوله‌ها، شبیه سازی

معادلات و الگوریتم دینامیک مولکولی انجام شده و سپس، نتایج حاصله با نتایج پژوهش پیشین مقایسه شده است. در قسمت ۳ نتایج حاصل از این پژوهش آورده شده و بر آن بحث شده است. در قسمت ۴ پایداری محیط حل بررسی شده و در نهایت، در قسمت ۵ نتیجه‌گیری این پژوهش آمده است.

۲- تجربی

۲- شبیه سازی دینامیک مولکولی

دینامیک مولکولی یکی از مهمترین روش های شبیه سازی در ابعاد نانو است. در این روش، حرکت و تعامل اتم ها و مولکول ها با کامپیوتر شبیه سازی می شود [۱۳-۱۵]. در بررسی رفتارهای جریانی و انتقال حرارتی نانوسیالات درون میکرو و نانوکanal ها و رفتار ترمودینامیکی مواد در سه فاز جامد، مایع و گاز، استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی، در مقایسه با دیگر روش های مدل سازی در مقیاس نانو، یک روش بسیار مؤثر و دقیق است [۱۴ و ۱۵].

میدان نیرو که پایه شبیه سازی دینامیک مولکولی است وابسته به انرژی پتانسیل مولکول ها و فاصله بین هر دو مولکول است. برای مقاصد متفاوت، میدان نیرو را می توان به اشکال گوناگون، با دامنه و محدودیت های متفاوت تقسیم کرد. پتانسیل لندارد-جونز بطور گسترده ای بصورت تابع پتانسیلی میدان نیرو استفاده می شود که بشکل زیر است:

$$U(r) = 4 \epsilon [(\delta/r)^{12} - (\delta/r)^6] \quad (1)$$

در اینجا $U(r)$ پتانسیل مولکولها در مقدار r است و r فاصله بین مولکولها است. ϵ نشان دهنده عمق چاه پتانسیل و σ فاصله ای است که در آن پتانسیل بین ذرات صفر است [۱۵].

در شبیه سازی از ترموستات لانگوین برای ثابت نگهداشتن دمای لایه نازک طبق معادله $T = 0.793 \epsilon k_B$ استفاده شده است که در آن T درجه حرارت و k_B ثابت بولتزمن هستند [۱۶ و ۱۷].

دینامیک ذرات با معادله دوم نیوتن و به شکل زیر است، تعریف می شود:

محیط به دست آوردند. لی و همکارانش [۹] جذب و دفع هیدروژن را در یک شبکه سه بعدی نانولوله سیلکونی با روش شبیه سازی مونت کارلو بررسی کردند. آنها تاثیر هندسه شبکه و بهم فشردگی آنرا بر جذب هیدروژن بررسی کرده و نمودارهای جذب وزنی را نسبت به کشش تراکمی شبکه، به دست آوردند. مانانگایا و همکارانش [۱۰] ذخیره سازی هیدروژن در نانولوله 4ND-CN_xNT را که بر آن، اسکاندیم و تیتانیم نشست داده شده بود را، بررسی کردند. آنها جذب و دفع را در دمای محیط و در حد مطلوب ۵/۸ درصد وزنی هیدروژن به دست آوردند. مانانگایا و همکارانش [۱۱] مقدار جذب هیدروژن را در نانولوله های BNNTs^۱ مورد بررسی قرار دادند. آنها در دمای ۷۷ K و ۱۰۰۰۰ Kpa مقدار جذب ۷٪ وزنی را به دست آوردند. بیشتر پژوهش های پیشین در مورد جذب هیدروژن بر یک نانولوله کربنی خالص و یا یک نانولوله کربنی لایه نشانی شده با مواد متفاوت بوده و بررسی جذب بردسته نانولوله های کربنی به ندرت انجام شده است. کینیبرگ و استوارت [۱۲] با استفاده از میدان نیرو وابسته به انحنا دسته نانولوله کربنی تک جداره، مقدار جذب هیدروژن را با دینامیک مولکولی، در یک دسته از نانولوله های کربنی یک جداره بررسی کردند. آنها اثر دسته نانولوله های کربنی و اثر ضخامت نانولوله ها را بر روی قدرت جذب هیدروژن بررسی کردند. آنها از پتانسیل ایربو^۲ که برای تعامل بین مولکول های هیدروژن و گرافیت کاربرد دارد، استفاده کردند. آنها به این نتیجه رسیدند که اگر مولکول های هیدروژنی در مجموعه ای از دسته نانولوله های ضخیم تر و ناهمگن تر قرار گیرند، گرمای جذب می تواند کمی افزایش یابد.

بررسی منابع و مقالات گذشته نشان دهنده فقدان بررسی و عدم وجود داده های منتشر شده در مورد بررسی گستره ای از تاثیرات دما و روند تاثیر آن بر جذب هیدروژن است. در واقع در این پژوهش، برای نخستین بار نمودار تاثیر تغییرات دما از ۵۰ الی ۲۰۰ درجه کلون بر جذب هیدروژن در دسته نانولوله ها و همچنین، تغییرات فشار سامانه در طول تغییرات دما آورده شده است. در ادامه این پژوهش، ابتدا در قسمت ۲ مروری بر

¹ Titanium functionalized single-walled BN nanotubes

² AIREBO

$$F=ma, F= m dV/dt, F=md^2r/d^2t \quad (2)$$

که در آن r مقدار جابجایی، v سرعت و a شتاب اتم است. اساس شبیه سازی دینامیک مولکولی محاسبه موقعیت و سرعت گام به گام اتم یا مولکول است. در نهایت، به دست آوردن محل جدید اتم یا مولکول مورد نظر است. روش های زیادی برای حل معادلات حرکت نیوتن وجود دارند، روش ورتل^۱ در بسیاری از برنامه های شبیه سازی مورد استفاده قرار گرفته است که به روش قورباغه جهنده^۲ معروف است و معادلات آن بشکل زیر است.

$$\vec{v}_i(t+1/2\delta t) = \vec{v}_i(t-1/2\delta t) + a_i(t) \delta t \quad (3)$$

$$\vec{v}_i(t+\delta t) = \vec{r}_i(t) + v_i(t+1/2\delta t) \delta t \quad (4)$$

که در آن \vec{r}_i مقدار جابجایی، \vec{v}_i سرعت، \vec{a}_i شتاب و δt گام زمانی است. $\vec{a}_i(t)$ از موقعیت $\vec{r}_i(t)$ در زمان t به آسانی محاسبه می شود. اگر $\vec{v}_i(t - \frac{1}{2}\delta t)$ و $\vec{r}_i(t)$ مشخص باشد، آنگاه می توانیم سرعت را در زمان $t + \frac{1}{2}\delta t$ از دو معادله اخیر بدست آوریم. در نهایت سرعت در زمان t می تواند از معادله زیر محاسبه شود:

$$\vec{v}_i(t) = \frac{1}{2}[\vec{v}_i(t+1/2\delta t) + \vec{v}_i(t-1/2\delta t)] \quad (5)$$

این الگوریتم در بسیاری از برنامه های شبیه سازی بکار برده می شود چرا که در آن تنها نیاز به دانستن سرعت در زمان $t - \frac{1}{2}\delta t$ و موقعیت در زمان t است، که فضای کمتری را بر کامپیوتر اشغال می کند و از طرفی یک روش پایدار است [۱۵ و ۱۸].

در شروع شبیه سازی پیکربندی بسیار نزدیک به تعادل در نظر گرفته شده تا نتایج مناسب بدست آید. اتمها در رئوس و مرکز یک شبکه مکعبی داده شده و سپس، به اتمها سرعت های تصادفی داده می شود تا دمای مورد نظر بدست آید. همچنین، شرایط مرزی متناوب در مرزها اعمال شده است. در این پژوهش نیروی بین اتم ها با پتانسیل هیبریدی لنارد-جونز و ترسوف به دست آمده است.

¹Verlet

²Leap forg

پتانسیل بین اتمی برای کربن با یک پتانسیل سه جسمی به نام ترسوف تعریف می شود که به صورت زیر است:

$$U(r_{ij}, \theta_{ijk}; k \neq l, j) = U_R(r_{ij}) - B_{ij}U_A(r_{ij}) \quad (6)$$

که در آن r_{ij} فاصله بین اتم های i و j ، $V_A(r)$ و $V_R(r)$ جفت ترم های دافع و جاذب هستند که تنها به بستگی دارند و به شکل زیر هستند.

$$U_R(r) = (1 + Q/r)Ae^{-\alpha r} f_c I \quad (7)$$

$$U_A(r) = \sum_{n=1}^3 B_n e^{-\beta_n r} f_c I \quad (8)$$

A ، Q ، α ، B_n ، β_n مقادیر ثابت هستند، f_c تابع قطع کردن^۳ است و پارامتر جفت کننده چند جزئی B_{ij} از رابطه زیر محاسبه می شود:

$$B_{ij} = [1 + \sum_{k \neq l, G(\cos \theta_{ijk}) f_c(r_{ik})}]^{-1/2} \quad (9)$$

که از طریق تابع G به زاویه پیوند θ_{ijk} بین $i-j$ و $j-k$ بستگی دارد.

پیوند واندروالسی بین یک اتم کربن و یک مولکول هیدروژن و یا بین دو مولکول هیدروژن از طریق پتانسیل لنارد جونز (معادله ۱) تعریف می شود.

برای مولکول های هیدروژن $\epsilon_{H_2-H_2} = 3/11 \times 10^{-3} eV$ و $\sigma_{H_2-H_2} = 0/296 nm$ است [۱۹-۲۱]. برای یک اتم کربن و یک مولکول هیدروژن از قاعده ترکیب لورنتز - برتولت^۴ استفاده می شود [۲۲]:

$$\epsilon_{C-H_2} = \sqrt{\epsilon_{C-C} \cdot \epsilon_{H_2-H_2}} = 2/73 \times 10^{-3} eV \quad (10)$$

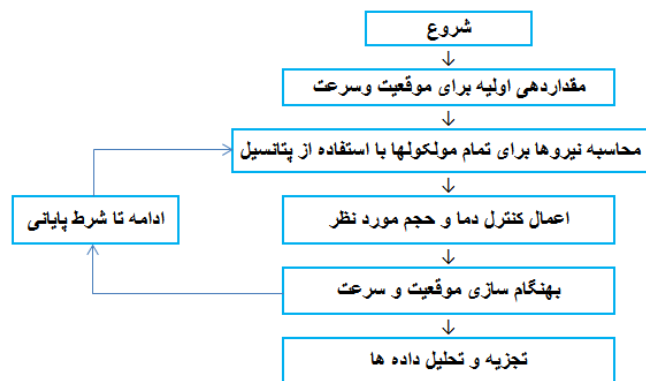
$$\sigma_{C-H_2} = \frac{1}{2} (\sigma_{C-C} + \sigma_{H_2-H_2}) = 0.319 nm \quad (11)$$

که در آن $\epsilon_{C-C} = 2/39 \times 10^{-3} eV$ و $\sigma_{C-C} = 0/342 nm$ است. برای حل و انتگرال گیری عددی از معادلات نیوتنی حاکم، از الگوریتم سرعت-ورتل و ترموستات نوز هوفر در گام

³ cut-off

⁴ Lorentz - Berthelet

های به دست آمده از کد، با کامپیوتر با CPU معادل 2 GHz و RAM برابر 4 GB معادل 32 ساعت است. نمونه‌ای از نتیجه شبیه‌سازی دینامیک مولکولی جذب هیدروژن با دسته نانولوله-های کربنی در شکل ۲ نشان داده شده است. نتایج این پژوهش با آزمایش‌های انجام شده بی و همکارانش [۲۳] که بر نانولوله‌های کربنی تک جداره انجام شده است، مقایسه شده تا اعتبار شبیه‌سازی مشخص شود. شکل ۳ این مقایسه را نشان می‌دهد. مقایسه نتایج نشان می‌دهد که اختلاف بین مقادیر به دست آمده از این شبیه‌سازی با نتایج بی و همکارانش کمتر از 5% است.



شکل ۱ الگوریتم شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

زمانی 0.005 فرمتو ثانیه استفاده شده است. برای اعمال سرعت-های اولیه از توزیع ماکسول - بولتسمان استفاده شده است. در این شبیه‌سازی تعداد ذرات (N) و حجم سامانه (L^3) و دما T ثابت است بنابراین، از هنگرد NVT استفاده شده است [۱۴، ۱۵ و ۱۸]. با توجه به شرایط مرزی پریدیک که در این شبیه‌سازی در نظر گرفته شده است. هر تعداد ذره که از سامانه خارج شود به همان مقدار وارد حجم کنترل می‌شود. بنابراین، تعداد کل مولکول‌های گاز در حجم کنترل در نظر گرفته شده ثابت است [۱۵]. همچنین، ابعاد جعبه شبیه‌سازی 120 \AA در 120 \AA در 60 \AA در نظر گرفته شده است. الگوریتم و مراحل مهم در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی در شکل ۱ نشان داده شده است:

برای تولید هندسه اولیه مولکول هیدروژن و همچنین، نانولوله-های کربنی ابتدا 4 عدد نانولوله کربنی به طول 5 نانو متر و با کایرالیته $(10, 10)$ توسط نرم افزار VMD ساخته شده و سپس، با نرم‌افزار گرومکس یک جعبه شبیه‌سازی ایجاد شده و مختصه این 4 نانولوله را در آن تعیین شده است. برای ساخت مولکول‌ها هیدروژن ابتدا یک مولکول هیدروژن با نرم‌افزار متریال استودیو ساخته شده و با استفاده از آن فایل خروجی آن و نرم افزار $PACMOL$ به تعداد دلخواه مولکول هیدروژن درون جعبه شبیه‌سازی قرار داده شده است و با تعریف پتانسیل‌های حاکم بین آنها هندسه اولیه تولید شده است. با توجه به فشار و دمای سامانه تعداد مولکول‌ها به گونه‌ای تعریف شده است که فشار و دمای جعبه شبیه‌سازی، معادل فشار و دمای در نظر گرفته شده شود. بنابراین، تعداد مولکول‌های هیدروژن کامل وابسته به دما و فشار و حجم جعبه است. با کدنویسی و تهیه فایل ورودی کد $LAMMPS$ نسبت به شبیه‌سازی اقدام شده است. نتایج به دست آمده از شبیه‌سازی با نرم‌افزار VMD نمایش داده شده است. با استفاده از نرم‌افزار VMD تعداد مولکول‌های هیدروژن جذب شده شمرده شده است. در این نرم‌افزار، ابتدا تعداد مولکول‌های جذب نشده هیدروژن حذف می‌شود و سپس، نانولوله‌های کربنی حذف شده و پس از آن تعداد هیدروژن‌های جذب شده شمارش می‌شود. داخل نانولوله نیز جذب داشته‌ایم که آنها نیز شمرده شده‌اند. زمان تقریبی برای هر کدام از جواب-

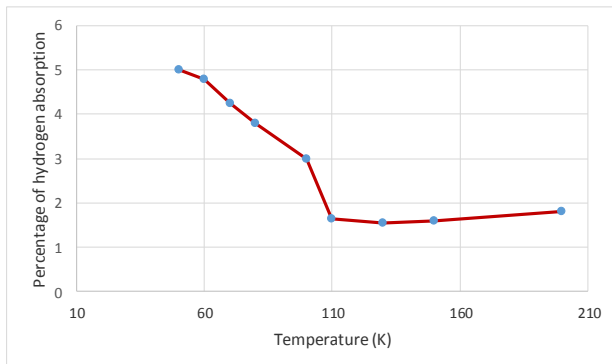
۳- نتایج

در این پژوهش، شبیه‌سازی‌های جذب هیدروژن بر روی دسته چهار تایی نانو لوله های کربنی در ۹ دمای متفاوت از دمای K ۵۰ تا ۲۰۰K انجام شده است. این نتایج در جدول ۱ نشان داده شده است.

جدول ۱ جذب هیدروژن در دماهای متفاوت

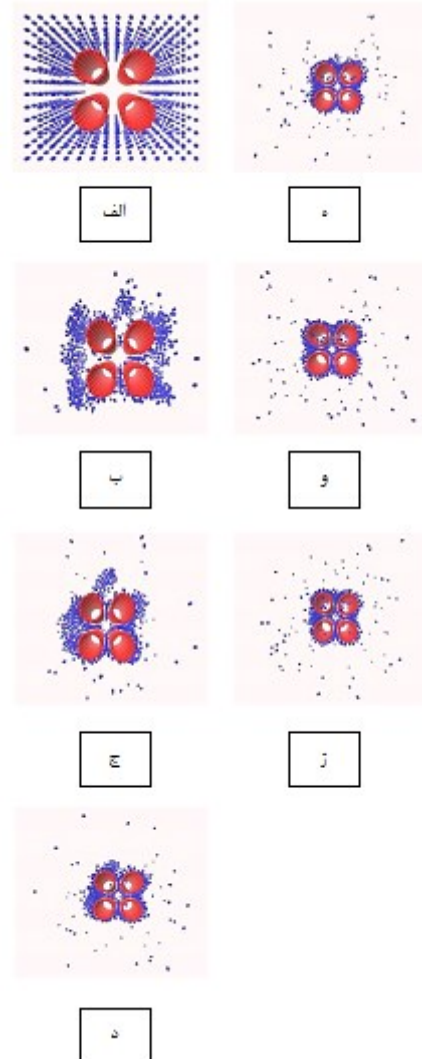
دما بر حسب درجه کلوین	فشار بر حسب بار	د صد جذب مولکول هیدروژن
۵۰	۴	۵
۶۰	۴/۷۳	۴/۸
۷۰	۵	۴/۲۴
۸۰	۶	۳/۸
۱۰۰	۸	۳
۱۱۰	۹	۱/۶۵
۱۳۰	۱۴	۱/۵۵
۱۵۰	۱۸	۱/۶
۲۰۰	۲۷	۱/۸

همچنین، وابستگی مقدار جذب هیدروژن با تغییرات دمای سامانه در شکل ۴ نشان داده شده است.

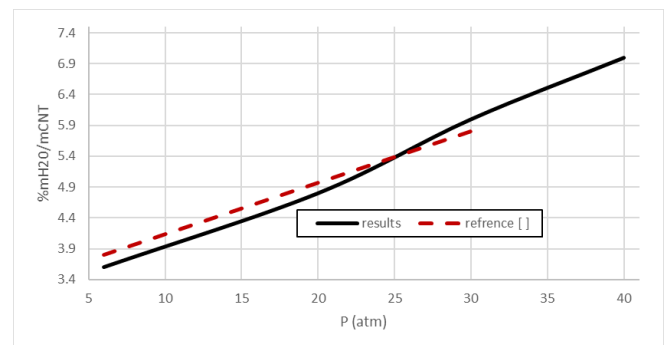


شکل ۴ جذب هیدروژن در دماهای متفاوت

همانگونه که در جدول مشخص شده است، با افزایش دما، فشار سامانه نیز افزایش می‌یابد. بنابراین، دما و فشار از یکدیگر مستقل نیستند. لازم به یادآوری است که در یک حجم بسته و ثابت همیشه با افزایش دما، مقدار فشار نیز افزایش می‌یابد. تغییرات به دست آمده فشار با دما در شکل ۵ نشان داده شده



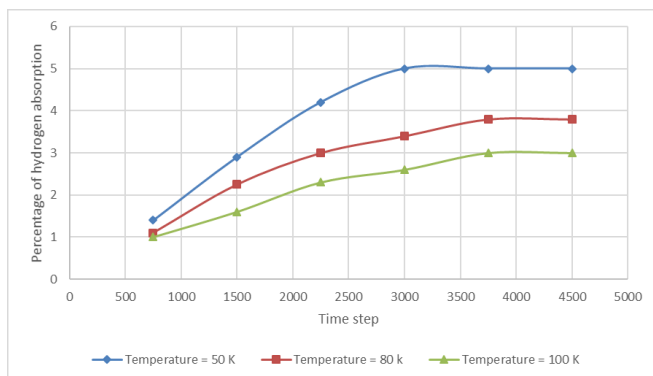
شکل ۲ نتایج به دست آمده از شبیه سازی دینامیک مولکولی برای جذب هیدروژن بر روی یک دسته نانو لوله کربنی در دمای K ۵۰ و فشار اتمسفر الف- پیکربندی اولیه در دمای ب- گام زمانی ۷۵۰ ج- گام زمانی ۱۵۰۰ د- گام زمانی ۲۲۵۰ ه- گام زمانی ۳۰۰۰ و- گام زمانی ۳۷۵۰ ز- گام زمانی ۴۵۰۰ هر گام زمانی معادل فمتوثانیه بوده است.



شکل ۳ نمودار مقیاسه بین نتایج حاصل از این پژوهش و مرجع [۱۹]

۴- بررسی پایداری سامانه

برای بررسی پایداری بودن مقدار جذب در گام های زمانی شبیه-سازی انجام شده، مقدار جذب در گام های زمانی متفاوت برای دماهای ۵۰، ۸۰ و ۱۰۰ درجه کلون بررسی شده است که نتایج آن در شکل ۶ و جدول ۲ آورده شده است.



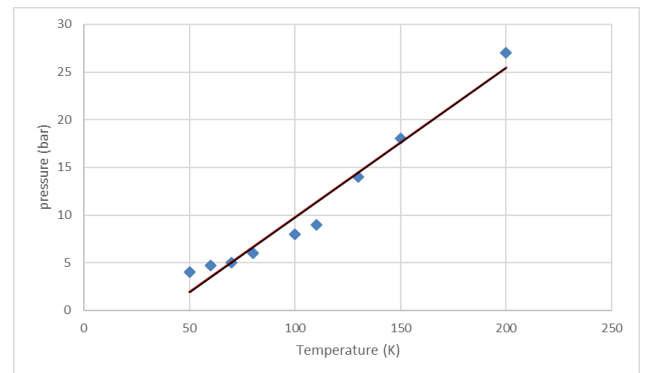
شکل ۶ درصد جذب هیدروژن در گام های زمانی

جدول ۲ درصد جذب هیدروژن در گام های زمانی متفاوت برای دماهای ۵۰، ۸۰ و ۱۰۰ درجه کلون

گام زمانی	درصد جذب هیدروژن		
	دمای ۵۰k	دمای ۸۰k	دمای ۱۰۰k
۷۵۰	۱/۴	۱/۱	۱
۱۵۰۰	۲/۹	۲/۲۵	۱/۶
۲۲۵۰	۴/۲	۳	۲/۳
۳۰۰۰	۵	۳/۴	۲/۶
۳۷۵۰	۵	۳/۸	۳
۴۵۰۰	۵	۳/۸	۳

نمودارهای به دست آمده در شکل ۶ نشان می دهد که دمای ۵۰ درجه کلون تغییرات جذب هیدروژن نسبت به گام های زمانی ابتدا خطی بوده و سپس، پس از گام زمانی ۳۰۰۰ به صورت ثابت باقی می ماند. در دماهای ۸۰ و ۱۰۰ تا گام زمانی ۳۷۵۰ مقدار جذب هیدروژن خطی است ولی با افزایش دما مقدار شیب خط کاهش می یابد. به عبارتی، در دماهای بالاتر به علت جذب کمتر مقدار شیب خط جذب نسبت به گام زمانی در حال کاهش است. در هر دو دمای ۸۰ و ۱۰۰، پس از گام زمانی ۳۷۵۰ مقدار

است.



شکل ۵ تغییرات فشار بر حسب دما

نتایج این مدل سازی نشان می دهد که با افزایش دما از ۵۰ تا ۱۱۰ درجه کلون، مقدار جذب هیدروژن بر دسته نانولوله های کربنی کاهش پیدا کرده که این کاهش تقریبی به صورت خطی است. کاهش جذب با افزایش دما یک فرایند طبیعی است و کامل قابل پیش بینی است. با توجه به اینکه تغییرات انرژی آزاد گیس جذب سطحی با تغییرات دما به صورت خطی است، بنابراین، خطی بودن مقدار جذب در دامنه دمایی مورد نظر مشاهده می شود. از شیب خط به دست آمده می توان برای پیش بینی مقدار جذب هیدروژن در هر نقطه از دامنه دمایی مورد نظر بدون آزمایش یا استفاده از فرمول های ترمودینامیکی استفاده کرد که کاربرد زیادی خواهد داشت. سپس، با افزایش دما از ۱۱۰ تا ۲۱۰ درجه کلون مقدار جذب ثابت و تقریبی برابر ۱/۶ درصد وزنی جذب شده، باقی می ماند. بنابراین، کاهش دما به خصوص از ۱۱۰ درجه به پایین تاثیر فراوانی در جذب هیدروژن دارد. عدم جذب بیشتر در دماهای بالاتر از ۱۱۰ درجه کلون به دلیل اشباع شدن سطح نانولوله های کربنی است. مقدار جذب در دمای ۵۰k و فشار ۴ bar به ۵ wt% می رسد که با خطای اندکی، مطابق مقدار ارائه شده توسط سازمان انرژی آمریکا (۵/۶ wt%) است [۴ و ۱].

با توجه به ثابت نگهداشتن حجم سامانه و ثابت بودن تعداد مولکول های در نظر گفته شده در کل محیط مدل سازی، مقدار فشار با افزایش دما، زیاد شده که مقادیر آن در شکل ۵ آورده شده است. همانگونه که در شکل مشخص است، تغییرات فشار با دما به صورت خطی، در دامنه شبیه سازی انجام شده، است.

است. نتایج نشان می‌دهد که با کاهش دما مقدار جذب هیدروژن در دسته نانولوله‌ها افزایش می‌یابد. همچنین، با افزایش دما از ۵۰ تا ۱۱۰ کلوین، مقدار جذب هیدروژن بر دسته نانولوله‌های کربنی کاهش پیدا کرده که این کاهش تقریبی به صورت خطی است. سپس، با افزایش دما از ۱۱۰ تا ۲۱۰ کلوین مقدار جذب ثابت و تقریبی برابر ۱/۶ درصد وزنی جذب شده، باقی می‌ماند. بنابراین، کاهش دما خصوصا از ۱۱۰ کلوین به پایین، تاثیر زیادتتری در جذب هیدروژن دارد. همچنین، مشاهده شد که تغییرات فشار نسبت به دما دارای تغییرات خطی بوده و شیب ثابتی دارد.

جذب هیدروژن ثابت باقی می‌ماند. به عبارتی پس از این گام زمانی جذب هیدروژن بر نانولوله‌های کربنی مشاهده نمی‌شود، بنابراین، در این گام زمانی فرایند به حالت پایدار می‌رسد.

۵- نتیجه‌گیری

ذخیره‌سازی هیدروژن و استفاده از آن به جای سوخت‌های فسیلی کاربرد وسیعی دارد. یکی از روش‌های ذخیره‌سازی هیدروژن، استفاده از نانولوله‌های کربنی است. در این پژوهش، درصد جذب هیدروژن در یک دسته نانولوله کربنی ۴ تایی تک جداره با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی بررسی شده و تاثیرات دما و فشار بر جذب هیدروژن مورد بررسی قرار گرفته

Processes by Molecular Dynamics", Journal of Surface Science and Engineering, 13, 41-50, 2017.

[8] C. Liu, Y. Chen, C.Z. Wu, S.T. Xu, H.M. Cheng, "Hydrogen storage in carbon nanotubes revisited", Carbon, 48, 452-455, 2010.

[9] M. Li, X. Huang, Z. Kang, "Hydrogen adsorption and desorption with 3D silicon nanotube-network and film-network structures: Monte Carlo simulations", J. Appl. Phys., 118, 084303, 2015.

[10] M. Mananghaya, L.P. Belo, A. Beltran, "Adsorption of hydrogen in scandium/titanium decorated nitrogen doped carbon nanotube", Mater. Chem. Phys., 180, 357-363, 2016.

[11] M.R. Mananghaya, G.N. Santos, D. Yu, "Hydrogen adsorption of Ti-decorated boron nitride nanotube: a density functional based tight binding molecular dynamics study", Adsorption, 24, 683-690, 2018.

[12] M.T. Knippenberg, S.J. Stuart, H. Cheng, "Molecular dynamics simulations on hydrogen adsorption in finite single walled carbon nanotube bundles", J. Mol. Model., 14, 343-351, 2008.

[13] A. Satoh, Introduction to practice of molecular simulation : molecular dynamics, Monte Carlo, Brownian dynamics, Lattice Boltzmann, dissipative particle dynamics, Elsevier, Amsterdam ; Boston, 2011.

مراجع

[1] M. Dresselhaus, K. Williams, P. Eklund, "Hydrogen adsorption in carbon materials", MRS Bull., 24, 45-50, 1999.

[2] M. Shiraishi, T. Takenobu, H. Kataura, M. Ata, "Hydrogen adsorption and desorption in carbon nanotube systems and its mechanisms", Appl. Phys. A, 78, 947-953, 2004.

[3] N. Bouaziz, M. Ben Manaa, M. Bouzid, A. Ben Lamine, "Adsorption of hydrogen in defective carbon nanotube: modelling and consequent investigations using statistical physics formalism", Mol. Phys., 1-13, 2019.

[4] K.A. Williams, P.C. Eklund, "Monte Carlo simulations of H₂ physisorption in finite-diameter carbon nanotube ropes", Chem. Phys. Lett., 320, 352-358, 2000.

[5] H. Panahi, S. Asadi, "Prediction of Nano-Droplet Spreading on the Surface using the Multivariate Non-Linear Regression", Advanced Materials and New Coatings, 7, 1842-1837, 2018.

[6] H. Panahi, S. Asadi, "A New Model Selection Test with Application to the Censored Data of Carbon Nanotubes Coating", Progresss in Color, Colorants and Coatings, 9, 17-28, 20.۱۶

[7] S. Asadi, "Simulation of Nanodroplet Impact on an Oblique Surface in Nano Coating

- [14] M. Griebel, S. Knapek, G.W. Zumbusch, Numerical simulation in molecular dynamics : numerics, algorithms, parallelization, applications, Springer, Berlin, 2007.
- [15] D.C. Rapaport, The art of molecular dynamics simulation, 2nd ed., Cambridge University Press, Cambridge, UK ; New York, NY, 2004.
- [16] G. He, N. Hadjiconstantinou, "A molecular view of Tanner's law: molecular dynamics simulations of droplet spreading", J. Fluid Mech., 497, 123-132, 2003.
- [17] G. He, M.O. Robbins, "Simulations of the static friction due to adsorbed molecules", Physical Review B, 64, 035413, 2001.
- [18] H. Fukumura, Molecular nano dynamics, Wiley-VCH, Weinham, 2009.
- [19] A. Egorov, A. Komolkin, V. Chizhik, "Influence of temperature on the microstructure of the lithium-ion hydration shell. A molecular dynamics description", J. Mol. Liq., 89, 47-55, 2000.
- [20] C.H. Turner, J.K. Brennan, J. Pikunic, K.E. Gubbins, "Simulation of chemical reaction equilibria and kinetics in heterogeneous carbon micropores", Appl. Surf. Sci. 196,366-374,2002..
- [21] M.C. Mitchell, M. Gallo, T.M. Nenoff, "Computer simulations of adsorption and diffusion for binary mixtures of methane and hydrogen in titanosilicates", The Journal of chemical physics, 121, 1910-1916, 2004.
- [22] M. Allen, D. Tildesley, "Computer Simulation of Liquids Oxford University Press Oxford", 1987.
- [23] Y. Ye, C. Ahn, C. Witham, B. Fultz, J. Liu, A. Rinzler, D. Colbert, K. Smith, R. Smalley, "Hydrogen adsorption and cohesive energy of single-walled carbon nanotubes", Appl. Phys. Lett., 74, 2307-2309, 1999.



Study of temperature and pressure effects on the adsorption of hydrogen on carbon nanotubes bundle by molecular dynamics simulation

Saeid Asadi^{1,*}, Arash Rahmani²

1 Department of mechanical engineering, Payame Noor University (PNU), P.O.BOX, 19395-3697, Tehran, Iran.

2.MSc graduate, Department of mechanical engineering, Lahijan Slamic Azad University, Lahijan, Iran.

Abstract: The use of hydrogen fuel is of great importance as an alternative to fossil fuels. Storage of hydrogen is one of the major challenges of using this fuel, so study of the absorption and storage of hydrogen by carbon nanotubes is essential. The absorption of hydrogen in carbon nanotubes depends on various physical factors, that the most important of these factors are temperature and pressure. The aim of this study was to evaluate the effects of temperature and pressure on the hydrogen adsorption of the nanotube bundle. In this study, the amount of hydrogen absorption on carbon nanotube bundle was studied by molecular dynamics simulation, and then analyzed pressure and temperature variations. Hydrogen adsorption simulations were carried out on a quad carbon nanotube bundle and in nine different temperatures from 50 Kelvin to 200 Kelvin. The results show that hydrogen adsorption is highly dependent on temperature and pressure, so that the amount of adsorption increases significantly at low temperatures. It was found that the amount of adsorption was constant in a carbon nanotube bundle at temperatures range of 110 to 210 K, and was linear with increasing of temperature from 50 to 110 K. The results also show that the pressure variations are linear as first order with the temperature.

Keywords: Carbon Nanotube Bundle, Hydrogen Adsorption, Molecular Dynamics, Simulation