

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ



دانشگاه کردستان

دانشکده علوم

گروه شیمی

عنوان:

بررسی نظری جذب هیدروژن بر نانوساختارهای نقره نشانی شده

پژوهشگر:

فهیمة عبدی

استاد راهنما:

دکتر خالد عزیز

پایان نامه کارشناسی ارشد رشته شیمی گرایش شیمی فیزیک

مهر ماه ۱۳۹۱

کلیه حقوق مادی و معنوی مترتب بر نتایج مطالعات،

ابتکارات و نوآوری های ناشی از تحقیق موضوع

این پایان نامه (رساله) متعلق به دانشگاه کردستان است.

*****تعهد نامه*****

اینجانب فهیمه عبدی دانشجوی کارشناسی ارشد رشته شیمی گرایش شیمی فیزیک دانشگاه کردستان، دانشکده علوم گروه شیمی تعهد می نمایم که محتوای این پایان نامه نتیجه تلاش و تحقیقات خود بوده و از جایی کپی برداری نشده و به پایان رسانیدن آن نتیجه تلاش و مطالعات مستمر اینجانب و راهنمایی و مشاوره اساتید بوده است.

با تقدیم احترام

فهیمه عبدی

۱۳۹۱/۰۷/۱۹



دانشگاه کردستان
دانشکده علوم
گروه شیمی

پایان نامه کارشناسی ارشد رشته شیمی گرایش شیمی - فیزیک

عنوان:

بررسی نظری جذب گاز هیدروژن بر نانوساختارهای نقره نشانی شده

پژوهشگر:

فهیمه عبدی

در تاریخ ۱۳۹۱/۰۷/۱۹ توسط کمیته تخصصی و هیات داوران زیر مورد بررسی قرار گرفت و با نمره و درجه به تصویب رسید.

<u>امضاء</u>	<u>مرتبه علمی</u>	<u>نام و نام خانوادگی</u>	<u>هیات داوران</u>
	استادیار	دکتر خالد عزیزی	۱-استاد راهنما
	دانشیار	دکتر رحمت صادقی	۳-استاد داور داخلی
	استادیار	دکتر مهدی ایرانی	۴-استاد داور داخلی

مهر و امضاء معاون آموزشی و تحصیلات تکمیلی

مهر و امضاء گروه

دانشکده

تقدیم به:

خانواده

و

همسرم

به خاطر تمام زحمات و محبت‌هایشان.

تقدیر و تشکر

سپاس خدای را که سخنوران، در ستودن او بمانند و شمارندگان، شمردن نعمت‌های او ندانند و کوشندگان حق او را گزاردن نتوانند.

از جناب آقای دکتر رحمت صادقی و جناب آقای دکتر مهدی ایرانی که علاوه بر زحمت داوری این پایان نامه در طول این دوره افتخار شاگردی ایشان را دارم کمال تشکر را دارم. از خانواده و همسر عزیزم که در نهایت دلسوزی و محبت همواره بهترین مشوقم بوده‌اند صمیمانه تشکر می‌کنم. از زحمات بی‌شائبه استاد ارجمندم جناب آقای دکتر خالد عزیزی تقدیر و تشکر می‌کنم، که با راهنمایی‌های ارزنده‌شان سختی‌های مسیر را بر من هموار کردند.

چکیده

در این تحقیق، جذب مولکول‌های هیدروژن بر فولرن C_{60} نقره نشانی شده، با استفاده از روش DFT مورد بررسی قرار گرفته است. محاسبات نشان می‌دهد تا ۹ مولکول هیدروژن می‌تواند بر سطح AgC_{60} جذب شود که انرژی جذب آن‌ها در محدوده مناسب ذخیره هیدروژن قرار دارد. دو مکانیسم پلاریزه شدن مولکول‌های هیدروژن و دوار-چت-دائکانسون عامل ظرفیت بالای جذب مولکول‌های هیدروژن در اطراف AgC_{60} می‌باشند. ارتباط بین بار اتم نقره، انتقال بار مولکول‌های هیدروژن و شکاف انرژی با انرژی جذب مولکول‌های هیدروژن بر سطح AgC_{60} نیز مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج نشان می‌دهد که داپت اتم‌های بور و نیتروژن در ساختار C_{60} از خوشه سازی اتم‌های نقره بر سطح C_{60} جلوگیری کرده و انرژی جذب مولکول هیدروژن را نسبت به ساختار AgC_{60} افزایش می‌دهد. فرآیند جذب یک مولکول هیدروژن بر ساختارهای نقره نشانی شده نانولوله‌های کربنی تک‌لایه زیگزاگ $(5,0)$ و $(7,0)$ ، نانولوله تک‌لایه بورنیتیریدی $(5,0)$ و صفحه گرافنی نیز مطالعه شده است.

کلیدواژه: جذب، ذخیره هیدروژن، فولرن C_{60} نقره نشانی شده، نانولوله تک‌لایه کربنی، نانولوله تک‌لایه بورنیتیریدی و صفحه گرافن.

فهرست مطالب

صفحه

عنوان

فصل اول: مقدمه و پیشینه‌ی تحقیق

۱-۱- مقدمه	۱
۲-۱- تاریخچه‌ی کشف فولرن	۳
۱-۲-۱- ساختمان فولرن	۴
۳-۱- ذخیره‌ی هیدروژن در C ₆₀	۵
۱-۳-۱- ذخیره‌ی درونی هیدروژن در C ₆₀	۵
۲-۳-۱- فرونشانی عناصر فلزی و غیرفلزی بر روی سطح C ₆₀ برای افزایش ذخیره‌ی هیدروژن	۷
۱-۲-۳-۱- فرونشانی عناصر واسطه بر روی سطح C ₆₀ برای افزایش ذخیره‌ی هیدروژن	۸
۲-۲-۳-۱- فرونشانی فلزات قلیایی و قلیایی خاکی بر سطح C ₆₀ برای افزایش ظرفیت ذخیره‌ی هیدروژن	۱۱
۳-۲-۳-۱- فرونشانی عناصر غیر فلزی بر سطح C ₆₀ برای افزایش ظرفیت ذخیره‌ی هیدروژن	۱۴
۴-۱- ذخیره‌ی هیدروژن در سایر نانوساختارها	۱۶
۱-۴-۱- نانولوله‌های کربنی	۱۷
۱-۱-۴-۱- جذب اتم‌های فلزی بر سطح نانولوله‌های تک‌لایه به منظور افزایش ظرفیت ذخیره‌ی هیدروژن	۱۹
۵-۱- ساختارهای بورنیتریدی	۲۱
۱-۵-۱- جذب اتم‌های پلاتین در سطح نانولوله‌های بور-نیتروژن	۲۲
۲-۵-۱- ذخیره‌ی هیدروژن در قفس بور-نیتروژن	۲۴
۶-۱- بررسی قابلیت جذب هیدروژن بر فولرن سیلیکونی	۲۷
۷-۱- ذخیره‌ی هیدروژن در قفس B-C	۲۹
۸-۱- ذخیره‌ی هیدروژن در نیتrideهای فلز	۲۹

فصل دوم: روش‌های محاسباتی

۱-۲- شیمی محاسباتی	۳۱
--------------------	----

۳۱ ۲-۲- انتخاب روش
۳۲ ۲-۳- روش تابعی دانسیته الکترون
۳۳ ۲-۴- مجموعه پایه
۳۵ ۲-۵- دستور اکسترا بیسیس
۳۶ ۲-۶- نحوه محاسبه بار مولیکن
۳۷ ۲-۷- نحوه محاسبه خواص الکترونی
۳۷ ۲-۷-۱- انرژی جذب
۳۷ ۲-۷-۲- شکاف انرژی
۳۷ ۲-۷-۳- انتقال بار
۳۸ ۲-۸- بهینه‌سازی ساختار هندسی
۳۹ ۲-۹- نرم افزارها
۳۹ ۲-۹-۱- نرم‌افزار نانوتیوب مودلر
۳۹ ۲-۹-۲- نرم‌افزار گوسویو
۳۹ ۲-۹-۳- نرم‌افزار گوسین

فصل سوم: بحث و نتیجه‌گیری

۴۰ ۳-۱- مقدمه و هدف این تحقیق
۴۱ ۳-۲- جذب هیدروژن بر AgC_{60}
۴۵ ۳-۳- انرژی جذب
۴۷ ۳-۴- بار اتم نقره و مولکول‌های هیدروژن
۴۹ ۳-۵- انتقال بار مولکول‌های هیدروژن
۵۰ ۳-۶- توزیع دانسیته الکترونی
۵۲ ۳-۷- طول پیوند مولکول‌های هیدروژن
۵۳ ۳-۸- متوسط فاصله‌ی مولکول‌های هیدروژن از اتم نقره
۵۵ ۳-۹- شکاف انرژی
۵۷ ۳-۱۰- بررسی قابلیت خوشه‌سازی نقره در سطح C_{60}

۶۰	۱۱-۳	بررسی امکان برطرف ساختن خوشه‌سازی اتم‌های نقره بر سطح C_{60}
۶۲	۱۲-۳	بررسی قابلیت جذب مولکول‌های هیدروژن بر ساختار $AgC_{54}N_3B_3$
۶۶	۱۳-۳	بررسی قابلیت جذب مولکول‌های هیدروژن بر ساختار $C_{12}N_{24}B_{24}$
۶۹	۱۴-۳	بررسی قابلیت جذب هیدروژن در نانولوله‌های تک‌لایه خالص کربنی و بورنیتریدی
۷۳	۱۵-۳	صفحه‌ی گرافنی و ذخیره‌ی هیدروژن در آن
۷۶	۱۶-۳	نتیجه‌گیری
۷۷		منابع

- شکل ۱-۱- مقایسه ساختار هندسی (a) یک فولرن C_{60} با (b) با سازه باکمینستر فولر و (c) توپ فوتبال ۴
- شکل ۱-۲- نمودار انرژی تشکیل و میزان کشیدگی پیوند C-C فولرن C_{60} در مقابل تعداد اتم‌های هیدروژن قرار گرفته در داخل فولر C_{60} ۶
- شکل ۱-۳- مراحل باز شدن قفس C_{60} و آزاد شدن اتم‌های هیدروژن از درون قفس ۷
- شکل ۱-۴- ساختار Ti_2C_{60} (a) در حالت جدا (b) در حالت خوشه‌سازی ۹
- شکل ۱-۵- ساختار $Ti_{12}C_{60}$ ، (a) در حالت جدا (b) در حالت خوشه‌سازی و تولید یک ساختار ۲۰ وجهی توسط اتم‌های Ti بر روی سطح C_{60} ۱۰
- شکل ۱-۶- ساختار $Ni_{30}C_{60}(H_2)_{90}$ ؛ در محل هر اتم نیکل ۳ مولکول هیدروژن جذب شده است ۱۱
- شکل ۱-۷- ساختارهای مربوط به $Li_{12}C_{60}$ به دو صورت (a) جدا (b) خوشه‌سازی ۱۲
- شکل ۱-۸- ساختار بهینه شده $Li_{12}C_{60}(H_2)_{60}$ ؛ هر اتم لیتیم ۵ مولکول هیدروژن جذب کرده است ۱۳
- شکل ۱-۹- ساختار $Ca_{32}C_{60}$ همراه با مولکول‌های هیدروژن جذب شده در لایه اول و دوم ۱۵
- شکل ۱-۱۰- ساختار $SiC_{60}(H_2)$ ۱۵
- شکل ۱-۱۱- ساختارهای Si_2C_{60} در حالت‌های (a) خوشه‌سازی (b) عدم خوشه‌سازی توسط اتم‌های Si بر سطح C_{60} [۳۵] ۱۶
- شکل ۱-۱۲- ساختار $Si_2C_{60}(H_2)_2$ بعد از بهینه‌سازی ۱۶
- شکل ۱-۱۳- ساختار نانولوله‌ی کربنی داپت شده با اتم‌های لیتیم همراه با جذب مولکول‌های هیدروژن ۱۹
- شکل ۱-۱۴- جذب مولکول‌های هیدروژن بر نانو ساختار BC_4N در حالت (a) جذب بیرونی تیتانیوم و در حالت (b) جذب درونی تیتانیوم ۲۰

شکل ۱-۱۵- (a) ساختار $Ti_2@BC_4N$ همراه با مولکول‌های هیدروژن جذب شده (b) ساختار

۲۱ $Ti_{18}@BC_4N$

شکل ۱-۱۶- موقعیت‌های مختلف جذب اتم پلاتین در سطح نانولوله‌ی بورنیتريدی ۲۲

شکل ۱-۱۷- جذب مولکول‌های هیدروژن در اطراف اتم پلاتین سطح نانولوله‌ی بورنیتريدی ۲۳

شکل ۱-۱۸- نانولوله‌ی بورنیتريدی همراه با جذب دایمر پلاتین و مولکول‌های هیدروژن ۲۳

شکل ۱-۱۹- برهم‌کنش مولکول هیدروژن به قفس (a) $B_{36}N_{36}$ با محل نیتروژن (b) با حلقه‌ی چهار تایی

(c) با حلقه‌ی شش تایی ۲۵

شکل ۱-۲۰- نمودار انرژی تشکیل بر حسب تعداد مولکول‌های هیدروژن ۲۵

شکل ۱-۲۱- فرآیند باز شدن قفس $B_{36}N_{36}$ در ضمن زیاد شدن مولکول‌های هیدروژن در داخل قفس ۲۶

شکل ۱-۲۲- ساختار بهینه شده‌ی $LiB_{36}N_{36}$ (a) و خطوط شمارنده‌ی بار برای همین ساختار (b) ۲۸

شکل ۱-۲۳- ساختار Si_{60} همراه با جذب ۶۰ اتم هیدروژن در سطح آن ۲۸

شکل ۱-۲۴- ساختار Si_{60} بعد از داپت شدن با ۱۰ اتم فسفر همراه با جذب ۵۰ اتم هیدروژن: $P_{10}Si_{50}H_{50}$ ۲۸

شکل ۱-۲۵- ساختار $Sc_{12}B_{24}C_{36}$ بدون مولکول هیدروژن (a) همراه ۷۲ مولکول هیدروژن (b) ۲۹

شکل ۱-۳- ساختار AgC_{60} و موقعیت‌های مناسب جذب مولکول هیدروژن ۴۱

شکل ۳-۲-(a-d)- حالت‌های مختلف قرار گرفتن اولین مولکول هیدروژن در اطراف اتم نقره ۴۲

شکل ۳-۴- ساختارهای هندسی بهینه شده‌ی $AgC_{60}-(H_2)_3$ (a)، $AgC_{60}-(H_2)_4$ (b)، $AgC_{60}-(H_2)_5$

(c) $AgC_{60}-(H_2)_6$ (d)، $AgC_{60}-(H_2)_7$ (e)، $AgC_{60}-(H_2)_8$ (f) و $AgC_{60}-(H_2)_9$ (g) ۴۴

شکل ۳-۵- نمودار انرژی جذب مولکول‌های هیدروژن بر حسب تعداد مولکول‌های هیدروژن ۴۶

شکل ۳-۶- نمودار بار اتم نقره در مقابل تعداد مولکول‌های هیدروژن جذب شده ۴۸

شکل ۳-۷- نمودار میانگین انتقال بار در مولکول‌های ر مقابل تعداد مولکول‌های هیدروژن جذب شده ۴۹

شکل ۳-۸- توزیع دانسیته الکترونی محاسبه شده با استفاده از Cube آخرین شش اوربیتال مولکولی اشغال

شده برای گونه‌های $AgC_{60}-(H_2)_{1-9}$ ۵۱

شکل ۳-۹- نمودار میانگین طول پیوند مولکول‌های هیدروژن در مقابل تعداد مولکول‌های هیدروژن

جذب شده بر AgC_{60} ۵۳

شکل ۳-۱۰- نمودار فاصله‌ی نزدیک‌ترین، دورترین و متوسط مولکول هیدروژن از اتم نقره در ساختارهای

$AgC_{60}-(H_2)_{1-9}$ در مقابل تعداد مولکول‌های هیدروژن جذب شده ۵۴

شکل ۳-۱۱- نمودار شکاف انرژی مربوط به ساختارهای $AgC_{60}-(H_2)_{1-9}$ در مقابل تعداد مولکول‌های هیدروژن

- جذب شده در AgC_{60} ۵۶
- شکل ۳-۱۲- ساختار Ag_2C_{60} در دو حالت (a) اتم‌های نقره جدا از هم و در حالت (b) اتم‌های نقره متصل به هم ۵۸
- شکل ۳-۱۳- ساختار Ag_2C_{60} در حالت خوشه‌سازی وهنگام جذب اولین مولکول هیدروژن ۵۹
- شکل ۳-۱۴- موقعیت های قرار گرفتن اتم نقره در ساختار $C_{54}N_3B_3$ ۶۱
- شکل ۳-۱۵- ساختار $AgC_{54}N_3B_3-H_2$ بعد از بهینه سازی ۶۲
- شکل ۳-۱۶- ساختار $AgC_{48}N_6B_6$ (a) بدون مولکول هیدروژن و (b) با مولکول هیدروژن ۶۴
- شکل ۳-۱۷- ساختار هندسی بهینه شده (a) $Ag_2C_{48}N_6B_6$ در حالت اتم‌های نقره جدا از هم و (b) در حالت اتم‌های نقره متصل به هم ۶۴
- شکل ۳-۱۸- $Ag_2C_{48}N_6B_6$ همراه با دو مولکول هیدروژن جذب شده بعد از بهینه سازی ۶۵
- شکل ۳-۱۹- ساختار $C_{12}N_{24}B_{24}$ بعد از جذب یک اتم نقره ۶۷
- شکل ۳-۲۰- ساختار $AgC_{12}N_{24}B_{24}-H_2$ بعد از بهینه سازی ۶۷
- شکل ۳-۲۱- ساختار هندسی بهینه شده نقره جذب شده بر نانولوله‌های کربنی و بورنیتريد، (a) $(\delta, 0)$ کربنی، (b) $(\gamma, 0)$ کربنی و (c) $(\delta, 0)$ بور نیتريد ۷۱
- شکل ۳-۲۲- جذب هیدروژن در نانولوله‌ی کربنی نقره نشان شده (a) $(\delta, 0)$ و (b) $(\gamma, 0)$ و (c) نانولوله‌ی بور نیتريدی $(\delta, 0)$ ۷۲
- شکل ۳-۲۳- صفحه‌گرافنی همراه با جذب اتم نقره (a) از کنار (b) از روبه‌رو ۷۴
- شکل ۳-۲۴- نمودار انرژی پتانسیل صفحه‌ی گرافنی بر حسب فاصله‌ی اتم نقره از مرکز حلقه‌ی شش تایی ۷۴
- شکل ۳-۲۵- نمودار انرژی پتانسیل صفحه‌ی گرافنی نقره نشان شده بر حسب فاصله‌ی مولکول هیدروژن از اتم نقره ۷۵
- شکل ۳-۲۶- صفحه‌ی گرافنی نقره نشان شده بعد از جذب مولکول هیدروژن (a) از کنار (b) از روبه‌رو ۷۵

فهرست اول

عنوان	صفحه
جدول ۱-۳: انرژی ساختارهای $AgC_{60}(H_2)_1$ در حالت‌های مختلف شکل (۲-۳)	۴۲
جدول ۲-۳: انرژی جذب مولکول‌های هیدروژن در ساختارهای $AgC_{60}(H_2)_{1-9}$	۴۶
جدول ۳-۳: بار اتم نقره در ساختارهای $AgC_{60}(H_2)_{1-9}$	۴۸
جدول ۴-۳: میانگین انتقال بار در مولکول‌های هیدروژن جذب شده در ساختارهای $AgC_{60}(H_2)_{1-9}$	۴۹
جدول ۵-۳: میانگین طول پیوندهای مولکول هیدروژن در ساختارهای $AgC_{60}(H_2)_{1-9}$	۵۲
جدول ۶-۳: فاصله‌ی نزدیک‌ترین، دورترین و متوسط فاصله مولکول هیدروژن از اتم نقره در ساختارهای $AgC_{60}(H_2)_{1-9}$	۵۴
جدول ۷-۳: مقادیر شکاف انرژی در ساختارهای $AgC_{60}(H_2)_{1-9}$	۵۶
جدول ۸-۳: انرژی ساختار Ag_2C_{60} در دو حالت (a) اتم‌های نقره جدا از هم و (b) اتم‌های نقره متصل به هم	۵۸
جدول ۹-۳: خواص الکترونی و ساختاری سیستم $Ag_2C_{60}-H_2$ در حالت اتم‌های نقره متصل	۵۹
جدول ۱۰-۳: خواص الکترونی و ساختاری سیستم $AgC_{54}N_3B_3-H_2$	۶۲
جدول ۱۱-۳: خواص الکترونی و ساختاری سیستم $AgC_{48}B_6N_6-H_2$	۶۳
جدول ۱۲-۳: انرژی ساختار $AgC_{48}B_6N_6$ در حالت (a) اتم‌های نقره جدا از هم و (b) در حالت اتم‌های نقره متصل به هم	۶۵
جدول ۱۳-۳: ویژگی‌های ساختاری و الکترونی سیستم $Ag_2C_{48}B_6N_6-(H_2)_2$ در حالت اتم‌های نقره جدا از هم ...	۶۵
جدول ۱۴-۳: ویژگی‌های ساختاری و الکترونی ساختار $AgC_{12}N_{24}B_{24}-H_2$	۶۷
جدول ۱۵-۳: مقایسه‌ی خواص ساختاری و الکترونی نانوساختارهای نقره نشان شده	۶۸

جدول ۳-۱۶: خواص ساختاری و الکترونی نانولوله‌های کربنی نقره نشان شده (۵,۰) و (۷,۰)

و نانولوله بورنیتزیدی (۵,۰) بعد از جذب مولکول هیدروژن ۷۳

فصل اول

مقدمه و پیشینه‌ی تحقیق

۱-۱- مقدمه

سوخت‌های فسیلی در حال حاضر منبع اصلی انرژی لازم برای انجام فعالیت‌های بشری بوده و نگرانی‌ها در مورد این‌که آیا سوخت‌های فسیلی و به‌ویژه ذخایر نفتی می‌توانند پاسخ‌گوی نیازهای آینده جهانی باشند، افزایش یافته است. علاوه بر محدودیت منابع سوخت‌های فسیلی، افزایش میزان کربن‌دی‌اکسید و سایر آلاینده‌های موجود در جو زمین ناشی از سوختن آن‌ها نیز بر نگرانی‌های سازمان‌های مرتبط با سلامت محیط زیست انسان افزوده است. افزایش تهدیدهای ناشی از گرم شدن زمین نیز، که یکی از عوامل اصلی آن کربن‌دی‌اکسید تشخیص داده شده، محققین و دست‌اندرکاران امور انرژی را متقاعد ساخته که باید در اندیشه‌ی منابع انرژی جایگزین باشند [۱].

امروزه تحقیقات گسترده‌ای برای پاسخ دادن به این نگرانی‌ها در حال انجام بوده و عمده‌ی آن‌ها مربوط به جنبه‌های مختلف به دام انداختن و ذخیره‌ی گاز کربن‌دی‌اکسید و نیز انتخاب یک منبع انرژی پاک، ایمن و تجدید پذیر نظیر متان، متانول و هیدروژن می‌باشد. هیدروژن به عنوان یک منبع انرژی مناسب مورد توجه بسیاری از محققین قرار گرفته است. انرژی شیمیایی تولید شده توسط هیدروژن برابر 142 MJ/kg است که حداقل سه برابر انرژی شیمیایی تولید شده از سایر سوخت‌های شیمیایی نظیر هیدروکربن‌های مایع بوده و به همین علت تحقیقات گسترده‌ای بر روی تهیه و ذخیره‌ی ایمن و کاربردی آن در حال انجام است [۲].

هیدروژن به عنوان یک حامل انرژی ایده‌آل شناخته شده که می‌تواند مشکلات مربوط به سوخت‌های فسیلی شامل محدود بودن، آسیب رسانی به محیط زیست را برطرف نموده و گرم

شدن زمین را تا حد زیادی کاهش دهد [۳]. البته کاربرد هیدروژن به عنوان منبع انرژی نیز به سادگی مقدور نبوده و مشکلاتی از قبیل ذخیره سازی مناسب و ایمن و برگشت پذیری فرآیند جذب هیدروژن ذخیره شده وجود دارد [۴]. ذخیره‌ی هیدروژن چالش اصلی اقتصاد جدید مبتنی بر کاربرد هیدروژن است، زیرا محیط ذخیره باید شرایط متعددی شامل درصد وزنی بالای هیدروژن جذب شده، سنتیک سریع و ترمودینامیک مطلوب را فراهم سازد [۵].

روش‌های رایج ذخیره‌ی هیدروژن از جمله متراکم کردن آن به صورت گاز یا مایع نمی‌توانند نیازهای صنعتی را برآورده کنند چون چگالی انرژی در آن‌ها بسیار پایین‌تر از بنزین و گازوییل بوده و علاوه بر این مسائل مربوط به ایمنی و هزینه‌ی متراکم کردن گاز تحت فشار بالا و یا مایع کردن آن تحت دماهای بسیار پایین نیز مطرح است. بنابراین روش‌های جدیدی برای ذخیره‌ی هیدروژن پیشنهاد شده که از آن جمله می‌توان به ذخیره‌ی هیدروژن در مواد حالت جامد اشاره نمود [۶].

دلایل زیادی برای ذخیره‌ی هیدروژن در یک ماده‌ی حالت جامد نسبت به حالتی که ذخیره در یک تانک یا محفظه‌ی استوانه مانند انجام شود، وجود دارد، از جمله؛ ۱- به طور نسبی، ذخیره شدن یک گاز در حجم داده شده از یک جامد نسبت به همان حجم از یک محفظه‌ی استوانه شکل، منجر به افزایش چگالی ذخیره می‌شود. ۲- ایمنی ذخیره در داخل یک جامد به طور نسبی بالاست، چون در این روش از تولید فشار بالا در حین ذخیره شدن جلوگیری می‌شود. ۳- مقادیر اندک گاز هم می‌تواند در این حالت مورد استفاده قرار گیرد [۷].

برهم‌کنش هیدروژن با مواد حالت جامد به دو طریق انجام می‌گیرد: ۱- به صورت مولکولی یا اتصال فیزیکی ۲- به صورت اتمی یا اتصال شیمیایی. در حالت اول، انتقال بار الکتریکی قابل ملاحظه‌ای بین سطح جامد و هیدروژن انجام نمی‌شود و در نتیجه اتصال ضعیف است. اما در حالت دوم انتقال الکترون از اتم‌های سطح جامد به اوربیتال ضدپیوندی مولکول هیدروژن رخ می‌دهد که منجر به شکستن پیوند مولکولی آن شده و جذب هیدروژن به صورت اتمی و با یک پیوند شیمیایی و قوی انجام می‌شود. بنابراین دو دسته از مواد جامد^۲ ی برهم‌کنش با هیدروژن وجود دارند: یک دسته نظیر هیدروکربن‌ها که مقدار زیادی هیدروژن، ذخیره می‌کنند اما فرآیند واجذب هیدروژن از این مواد

بسیار مشکل است. دسته‌ی دوم فرآیند واجذب هیدروژن را به آسانی انجام داده اما نمی‌توانند مقدار زیادی هیدروژن ذخیره کنند مانند نانولوله‌های کربنی یا معدنی [۸]. بر این اساس پیشنهاد شده که یک سیستم ذخیره‌ی ایده‌آل هیدروژن باید بتواند این گاز را در شکل مولکولی و با انرژی اتصال حد واسط بین جذب شیمیایی و جذب فیزیکی، یعنی 0.1 eV تا 0.6 eV جذب کند [۹].

با توجه به موضوعات مطرح شده در بالا، ذخیره‌ی گاز هیدروژن در مواد جامد به صورت یک موضوع بسیار مهم ظاهر شده و توجه قابل ملاحظه‌ای را به خود جلب نموده است. از جمله مواد جامدی که می‌تواند به عنوان یک ماده‌ی ذخیره‌ی هیدروژن در نظر گرفته شود فولرن‌ها^۱ هستند [۱۰].

۱-۲- تاریخچه‌ی کشف فولرن

تا اواخر قرن بیستم فقط دو نوع آلوتروپ الماس و گرافیت برای کربن وجود داشت، اما در سال ۱۹۸۵ کشف جالبی توسط روتو^۲ و همکارانش رخ داد که نتیجه‌ی آن یافتن ساختارهای جدیدی برای کربن به نام فولرن بود. فولرن از نام معمار معروف باکمینستر فولر^۳، طراح گنبدهای ژئودزیک، گرفته شده است. از معروف‌ترین فولرن‌ها می‌توان به مولکول C_{60} اشاره نمود که به علت شباهتش به توپ فوتبال آن را باکی‌بال^۴ هم می‌گویند [۱۱].

۱-۲-۱- ساختمان فولرن C_{60}

فولرن C_{60} شبکه‌ای از حلقه‌های پنج و شش گوشه‌ی کربنی می‌باشد. یک فولرن C_{60} دارای ۱۲ حلقه پنج گوشه و ۲۰ حلقه‌ی شش گوشه است و هر حلقه پنج گوشه توسط پنج حلقه شش گوشه

۳

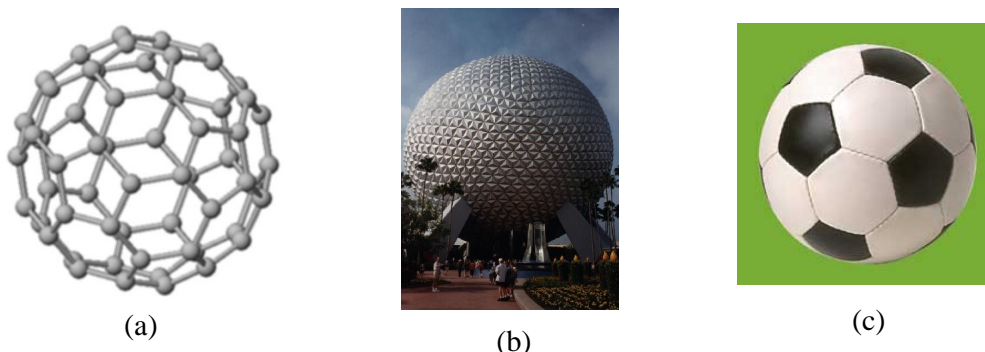
¹ Fullerene

² Kroto

³ Buckminster Fuller

⁴ Bucky ball

احاطه شده است. در شکل (۱-۱) ساختار فولرن C_{60} نشان داده شده و با سازه‌ی باکمینستر فولر و یک توپ فوتبال مقایسه شده است.



شکل (۱-۱): مقایسه ساختار هندسی (a) یک فولرن C_{60} با (b) با سازه باکمینستر فولر و (c) توپ فوتبال.

مطالعات اشعه‌ی ایکس نشان داده که C_{60} از ۶۰ پیوند یگانه (C-C) که اتم‌های کربن قرار گرفته بین حلقه‌های پنج عضوی و شش عضوی را به هم اتصال می‌دهند و ۳۰ پیوند دوگانه (C=C) که اتم‌های کربن قرار گرفته بین حلقه‌های شش عضوی را به هم اتصال می‌دهند، تشکیل شده است. در مولکول C_{60} هر اتم کربن دارای هیبریداسیون sp^2 بوده و با سه اتم دیگر پیوند سیگما تشکیل می‌دهد. الکترون باقی‌مانده از هر اتم کربن درون سیستمی از اوربیتال‌های اتمی در حال گردش است که به کل مولکول ماهیت آروماتیکی می‌بخشد [۱۲]. لازم به ذکر است که در مولکول C_{60} به واسطه انحنای دیواره، هیبریداسیون اتم‌های کربن تا حدودی دارای خصلت sp^3 می‌باشد. این ماده‌ی کربنی کاربردهای فراوانی در صنعت پیدا کرده است که از آن جمله می‌توان به استفاده در ابررساناها، استفاده در مواد دارویی مانند متوقف کننده فعالیت ویروس ایدز، شکستن مولکول‌های DNA به طریق فوتونی و حفاظت عصبی اشاره نمود. کاربرد مهم دیگری که برای فولرن C_{60} گزارش شده، استفاده از آن به عنوان یک منبع ذخیره‌ی هیدروژن است که به‌طور جدی مورد توجه محققین قرار گرفته است [۱۳]. مزیت‌های مختلفی در استفاده از فولرن برای ذخیره‌ی هیدروژن وجود دارد. به عنوان مثال بر خلاف نانولوله‌های کربنی که سنتز آن‌ها در فرم خالص بسیار هزینه‌بردار است سنتز فولرن با درصد خلوص بالا و هزینه متعارف امکان‌پذیر است [۱۴].