به نام خدا

هترواتم‌ها به عنوان مراکز فعالسازی ذخیره هیدروژن در نانوساختارهای کربنی

هیدروژن یک کاندید ایده آل به عنوان حامل انرژی ثانویه جهت توسعه انرژیهای تجدید پذیر و سوختهای پاک می‌باشد در صورتیکه مشکل هزینه‌ی ذخیره سازی وایمنی آن حل گردد. این عنصر سبب تغییر کارکرد موتورهای احتراق داخلی با بازدهی کم وآلوده کننده محیط زیست، به ماشینهای بدون آلودگی می شود. هیدروژن می‌تواند از منابع انرژی تجدیدپذیر تولید شود و بنابراین تولید گازهای گلخانه ای را حذف می کند . همچنین انرژی ویژه بالا و دانسیته بسیار پایین از خصوصیات دیگر این ماده می باشد.

سه روش برای ذخیره سازی هیدروژن وجود دارد:

۱-فشرده سازی گاز در مخازن ۲-ذخیره سازی بصورت مایع ۳-جذب فیزیکی روی مواد جامد

روش اول ودوم دارای محدودیت ها و معایبی است.گاز هیدروژن یک مخلوط قابل اشتعال با هوا تشکیل میدهد و علاوه بر ایمنی پایین، مخازن حاوی گاز، جاگیر و سنگین بوده و بعلاوه از لحاظ اقتصادی مقرون به صرفه نیست.هیدروژن مایع نیز ماده ی فراری با خواص انبساط و انقباض نامطلوب است. همچنین اشکال هر دو روش، دانسیته حجمی پایین هیدروژن است. ذخیره سازی بر مبنای پتانسیل جذب فیزیکی میتواند بازدهی انرژی بالایی داشته باشد.مواد جاذب باید از لحاظ مکانیکی مستحکم بوده،ایمن ،سبک و ارزان باشند. ذخیره سازی روی جامدات به چند گروه زیر طبقه بندی می‌شوند:

۱-هیدرید های فلزی ۲-فلزات سبک برپایه ی هیدریدها ۳-هیدریدهای شیمیایی ٤-مواد نانوساختار

در این سمینار،با بررسی و مقایسه‌ی مطالعات انجام شده ، به چند سوال پاسخ داده خواهد شد:

۱- آیا نانوساختارهای کربنی نسبت به دیگر مواد جاذب،گزینه‌ی مناسب تری برای ذخیره سازی هیدروژن هستند؟

۲- چه نوعی از نانوساختارها وتحت چه شرایطی درصد قابل قبولی برای ذخیره سازی هیدروژن فراهم می‌کنند؟

۳- چه موانعی برای ذخیره سازی بهینه هیدروژن روی نانوساختارها وجود دارد؟

٤- آیا رسیدن به درصدهای وزنی پیش بینی شده ذخیره هیدروژن ازطریق روش های محاسباتی، بصورت تجربی قابل دستیابی است؟

سپس دوپینگ هترواتم ها روی نانوساختارها بعنوان راهکاری جهت افزایش درصد وزنی جذب هیدروژن با ارائه نمونه های زیر پیشنهاد می‌گردد:

۱- مطالعه تاثیر دوپینگ اتم سیلیسیم ولیتیم در فولرن‌ها، گرافن، کورآنولن و... پیشنهاد بهترین ساختارفضایی هترونانوساختارها با تکنیک های محاسباتی

۲- استخلاف اتم های بور، نیتروژن، فسفر و گوگرد بعنوان مراکز فعالسازی جذب هیدروژن روی نانوساختارها و پیشنهاد بهترین گزینه های استخلافی

ودر پایان با مقایسه ی درصد ذخیره سازی روی ترکیبات نانوساختار خالص با هترونانوساختارها ، می‌توان به این نتیجه رسید که دوپینگ اتم ها چنان اثر قابل توجهی در افزایش جذب دارد که حتی استفاده از این تکنیک درسطح تجربی قابل قبول و مقرون به صرفه خواهد بود.