

## ВЛИЯНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ НА ПРОЦЕСС РАЗВОДОРАЖИВАНИЯ СКОМКАННОГО ГРАФЕНА

Крылова К.А., Баимова Ю.А., Мулюков Р.Р.

*Институт проблем сверхпластичности металлов РАН,  
450001, Уфа, Степана Халтурина 39,  
e-mail: bukreevakarina@gmail.ru*

Скомканный графен - это углеродная структура, состоящая из графеновых чешушек. Подобные материалы являются перспективным для водородной энергетики, например, они могут применяться в области хранения и транспортировки водорода<sup>1,2,3</sup>. В данной работе методом молекулярно-динамического моделирования исследовалась возможность удерживать водород в порах скомканного графена с помощью приложения сжимающей гидростатической деформации.

Установлено, что деформация является достаточно эффективным способом увеличения способности к наводороживанию исследуемой углеродной структуры не только при комнатной температуре (300 К), но и при высоких температурах 500 К и 700 К (см. рисунок 1). Однако процесс разводороживания структуры протекает достаточно активно и для его замедления необходимо либо изменить геометрию чешушек графена, либо добавить атомы металлов, которые удержат водород в порах, что и будет объектом дальнейшего исследования.

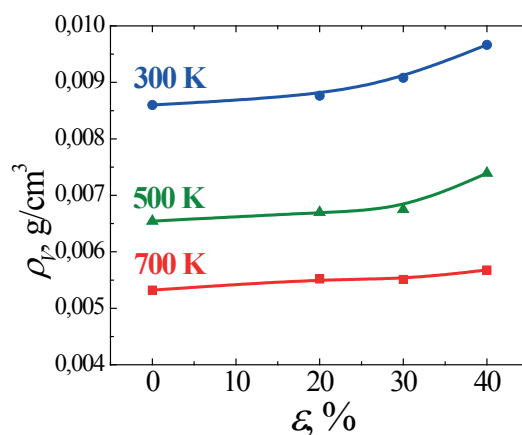


Рисунок 1. Зависимость объемной плотности водорода от степени деформации скомканного графена при 300 К, 500 К и 700 К

### Литература

1. Katin K.P., Prudkovskiy V.S., Maslov M.M. // *Phy. Lett. A* 2017. 381(33). P. 2686-2690.
2. Baimova J.A., Dmitriev S.V., Liu B., Zhou K. // *Journal of Physics D: Applied Physics* 2015, 48(9), 095302.
3. Krylova K.A., Baimova J.A., Mulyukov R.R. *Letters on Materials* 2019, 9(1), 81.

*Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых российских ученых - докторов наук (МД- 1651.2018.2).*