

بررسی ذخیره سازی هیدروژن بر روی نانولوله ی سیلیکون کربید تحت میدان الکتریکی خارجی با روش محاسباتی DFT

احسان معصومیان* و سید مجید هاشمیان زاده

دانشکده ی شیمی، دانشگاه علم و صنعت ایران، تهران، ایران

دریافت: اردیبهشت 1390 : پذیرش: دی 1390

چکیده: با استفاده از محاسبات تابع چگال جذب هیدروژن بر روی نانولوله سیلیکون کربید تحت میدان های الکتریکی در گستره های $0/015$ a.u. $0/025$ a.u. به ترتیب در عرض و طول نانولوله بررسی شده است. هنگامی که هیدروژن در راستای میدان الکتریکی قرار می گیرد در هر دو جهت مثبت و منفی با افزایش میدان الکتریکی انرژی جذب افزایش می یابد. انرژی جذب در راستای عرضی و جهت مثبت هنگامی که میدان $0/015$ a.u می رسد. میدان الکتریکی در راستای طولی نانولوله همانگونه که باعث افزایش جذب هیدروژن می شود تأثیر عکس نیز دارد. هرچند که میزان افزایش انرژی جذب هیدروژن از میزان کاهش آن بیشتر است اما برآیند انرژی های جذب در تمام مکان ها مقدار چشمگیری ندارد. اعمال میدان موجب کاهش انرژی گپ شده اما سامانه خاصیت نیم رسانایی خود را در میدان های $0/025$ a.u $0/015$ a.u حفظ می کند. با حذف میدان الکتریکی از سامانه گاز و نانولوله آن مولکول هایی که به وسیله ی میدان الکتریکی جذب شده اند از نانولوله جدا می شوند و از این رو میدان الکتریکی به انجام هر دو فرایند جذب و واجذب کمک می کند.

کلمات کلیدی: نظریه تابع چگال (DFT)، نانولوله سیلیکون کربید، میدان الکتریکی، انرژی جذب، انرژی پایداری عدم استقرار

که در این زمینه فعالیت دارند، در پی موادی هستند که قابلیت بالای ذخیره ی هیدروژن را در دما و فشار آزمایشگاه داشته باشند. 1997 توانایی نانولوله های کربنی برای جذب و ذخیره ی هیدروژن به وسیله ی دیلون و همکارانش گزارش شد [2]. آن تلاش های گسترده ای به منظور بهینه سازی این نانوساختارها

هیدروژن به دلیل دمای بحرانی پایینی که دارد (33/19 K) راحتی مایع نمی شود و از این رو مساله ای اساسی در حمل و نقل این حامل انرژی وجود دارد [1]. به منظور به کارگیری هیدروژن به عنوان جایگزین سوخت های فسیلی، پژوهشگرانی

SiCNT به طور شیمیایی جذب شوند [6]. جذب این اتم ها از سویی نمایانگر قابلیت واکنش پذیری نانولوله خالص بوده و از سوی دیگر اسبابی برای تغییر ویژگی ها الکترونی و در نتیجه واکنش پذیری نانولوله است. در واقع هنگامی که یک نانولوله عامل دار می شود یا اتم فلزی را جذب می کند یک میدان الکتریکی داخلی در درون ساختار نانولوله اعمال می شود که تغییر قدرت و راستای این میدان مستلزم تغییر نوع و موقعیت اتم داپ شده است. اعمال میدان الکتریکی خارجی می تواند یک ایده ی نوین برای کنترل واکنش پذیری نانولوله به منظور جذب و واجذب هیدروژن باشد. اولین تلاشی که در این زمینه صورت گرفته است اعمال میدان الکتریکی خارجی بر روی یک صفحه بور نیتريد بوده که به وسیله ی جی ژوا و همکارانش در سال 2010 [7]. آن ها توانستند که با یک میدان الکتریکی عمود بر صفحه انرژی جذب هیدروژن را از $0/03 \text{ eV}$ تا $0/14 \text{ eV}$ افزایش دهند. با حذف میدان الکتریکی از سامانه به راحتی عمل واجذب صورت می گیرد و نیازی به تغییرات فشاری و دمایی ناست. مسئله ی چالش برانگیز در این کار راستای میدان اعمال شده است که به طور واضح با تغییر آن نتیجه ی به دست آمده نیز تغییر می کند. در این مقاله با توجه به قابلیت قطبش نانولوله سیلیکون کربید و واکنش پذیری ذاتی آن نسبت به هیدروژن از یک نانولوله سیلیکون کربید که پایداری آن پیش از این ثابت شده است [8 9] به عنوان سوژه ای برای اعمال میدان الکتریکی و بررسی جذب هیدروژن بر روی آن استفاده شده است. اثر میدان الکتریکی اعمال شده در راستاهای متفاوت بر روی جذب هیدروژن بررسی

روش محاسباتی

در این پروژه محاسبات نظریه تابع چگال (DFT) بر روی یک نانولوله آرمچیر (5,5) سیلیکون کربید با استفاده از ترکیبی ازدو مجموعه ی پایه 3-21G و 6-311++G* به وسیله ی نرم افزار گوسین انجام شده است. کلیه محاسبات بهینه سازی ساختارهای پایه و جذب گاز بر روی این ساختارها با استفاده از MP1PW91 انجام گرفت که نسبت به روش B₃LYP گزینه ی مناسب تری برای برهم کنش های واندروالسی است. تمام محاسبات انرژی و بهینه سازی ساختارها با نرم افزار گوسین

صورت گرفت و همچنین نانولوله هایی دیگری با ویژگی ها ویژه سنتز شد. اما هیچ کدام از آن تلاش ها به طور عملی نتوانست که هدف دپارتمان انرژی آمریکا (6,5 wt % 60 kg/m^3 هیدروژن ذخیره شده) را تأمین کند. اگر چه بعضی از پژوهشگران ادعا کردند که به این هدف دست یافته اند، اما نتیجه های آن ها در عمل قابل استفاده نیست.

در سالهای اخیر با به کارگیری عنصر سیلیسیم، موادی نویدبخش با ویژگی های جالب توجه تولید شده اند. سیلیسیم رایج ترین نافلز است که به دلیل ویژگی های منحصر به فردی از قبیل حفظ خاصیت نیم رسانایی در دماهای بالاتر نسبت به ژرمانیم، قابلیت قطبش پذیری بیشتر نسبت به کربن و داشتن اوربیتال های d_p خالی برای پذیرش الکترون های سایر اتم ها، توجه بسیاری از پژوهشگران را به منظور استفاده از این عنصر در توسعه فناوری نانوالکترونیک جلب کرده است. نانولوله های سیلیکون کربید گونه ای از ترکیبات پایدار سیلیسیم هستند که کاربردهای رایجی پیدا کرده اند. این نانو ساختارها به دلیل قابلیت قطبش بیشتر نسبت به نانولوله های کربنی و بورنیتريد، واکنش پذیری بیشتری نشان می دهند. پایداری آن ها نسبت به نوع کربنی به دلیل آروماتیسته ی ضعیفتر، کمتر است، اما از آنجایی که پیوند Si-C Si-Si قویتر است، از نانولوله های سیلیکونی پایداری بیشتری دارد. پایداری SiCNT که در آن اتم های C Si به صورت یک در میان با 1:1 [3 4]. در این

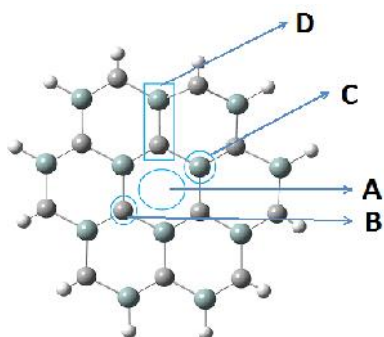
فرم اختلاف الکترونگاتیوی بین دو اتم مجاور (در حدود 0,65 مقیاس پاولینگ) سبب به وجود آمدن بارهای نقطه ای بر روی دیواره ی نانولوله می شود و سطح نانولوله را نسبت به مولکول ها فعالتر می کند. با کمک عامل دار کردن، جذب فلزات واسطه و هیدروژناسیون گزینشی می توان ویژگی ها الکترونیکی این نانولوله ها را دستکاری کرد و واکنش پذیری آن ها را نسبت به مولکول های گازی افزایش داد. به عنوان مثال داپینگ بور $(6,0)@(14,0)$ Li بین تیوب های (6,6) سیلیکون کربید با روش های آغازین مورد بررسی قرار گرفته است که تغییرات محسوسی در ویژگی ها الکترونی نشان [5]. به تقریب تمامی فلزات ردیف اول عناصر واسطه

در جدول تناوبی و همچنین Pd Pt

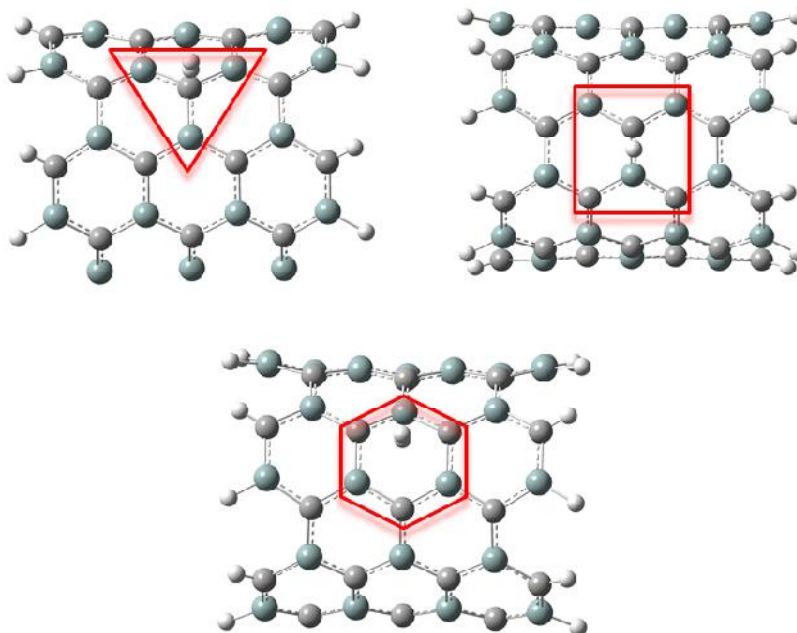
برای مولکول هیدروژن و اتم هایی از نانولوله که بیشترین برهمکنش را از لحاظ الکترونی با هیدروژن دارند از مجموعه ی پایه $6-311++G^*$ و برای سایر اتم ها از مجموعه ی پایه $3-21G$ استفاده شده است تا بین زمان محاسبات و صحت نتیجه ها توازن لازم ایجاد شود. اتم هایی که بیشترین برهم کنش را دارند برای جایگاه های متفاوت در شکل 2

نتیجه ها و بحث

یک نانولوله آرمچیر (5,5) سیلیکون کریبد با 70 اتم سیلیکون و کربن انتخاب شده که دو انتهای آن با اتم های هیدروژن اشباع شده است. چهار جایگاه متفاوت بر روی سطح نانولوله برای جذب مولکول هیدروژن وجود دارد: مرکز حلقه، روی اتم کربن، روی اتم سیلیکون و پیوند Si-C که به ترتیب با حروف A, B, C, D



شکل 1 مکان های متفاوت برای جذب هیدروژن: A مرکز حلقه، B اتم کربن، C روی اتم سیلیکون و D پیوند Si-C.



شکل 2 اتم هایی از نانولوله که بیشترین برهم کنش را با هیدروژن در مکان های متفاوت دارند.

انرژی جذب گاز هیدروژن بر روی نانولوله از رابطه ی زیر محاسبه :

$$E_b = E_{H_2+nano} - (E_{H_2} + E_{nano})$$

که E_{H_2+Nano} انرژی سامانه شامل نانولوله و هیدروژن جذب شده E_{H_2} به ترتیب انرژی هیدروژن و نانولوله به صورت جدا و بدون برهم کنش هستند. مقدار منفی انرژی به دست آمده نشان می دهد که جذب گاز یک فرایند گرماده است. از این به بعد هر جا از انرژی جذب صحبت شود منظور مقدار مطلق آن است. از آنجایی که دستور counterpoise در بسیاری موارد از جمله هنگامی که میدان الکتریکی داریم جواب های قابل قبولی برای خطای مجموعه ی پایه (BSSE) نمی دهد و همچنین با توجه به لزوم داشتن یک مقایسه صحیح بین حالتی که میدان الکتریکی صفر است و حالتی که میدان الکتریکی وجود دارد، مقدار BSSE برای هر دو حالت منظور نشده است، اما حتی الامکان سعی شده است با انتخاب مجموعه ی پایه ی دقیقتر برای مرکز برهمکنش مقدار این خطا را کاهش داد [11].

نتیجه ها به دست آمده از رابطه ی 1 نشان می دهد که مناسب ترین جایگاه از لحاظ انرژی جهت برهم کنش موثر گاز برای نانولوله آرمچیر (5,5) کربید سیلیکون روی اتم کربن است که با توجه به بار جزئی منفی کربن این نتیجه قابل انتظار است. پیوند H-H نسبت به سطح نانولوله عمود قرار می گیرد. بار NBO مولکول هیدروژن جذب شده در حدود 0/004 - است که نمایانگر وجود انتقال الکترونی از نانولوله به هیدروژن است. بر طبق تئوری اختلال مرتبه دوم پایداری به دست آمده از

عدم استقرار الکترون از اوربیتال های کربن به اوربیتال های هیدروژن 3/8 Kcal/mol و از هیدروژن به کربن 1/73 Kcal/mol است که دلیلی دیگر بر انتقال الکترون از کربن به هیدروژن است. از آنجایی که فاصله ی بین کربن و هیدروژن نزدیک 3 آنگستروم است احتمال برهمکنش شیمیایی بسیار ضعیف است و یک فرض برای چگونگی این انتقال الکترون می تواند پدیده ی تونل زدن باشد. اتم سیلیکون جایگاه نامناسبی برای جذب است به شکلی که در حین بهینه سازی مولکول هیدروژن به روی کربن مجاور منتقل می شود و انرژی جذبی برای این مکان در نظر نگرفته ایم. نتایج به دست آمده از انجام این محاسبات برای سه مکان دیگر در جدول 1

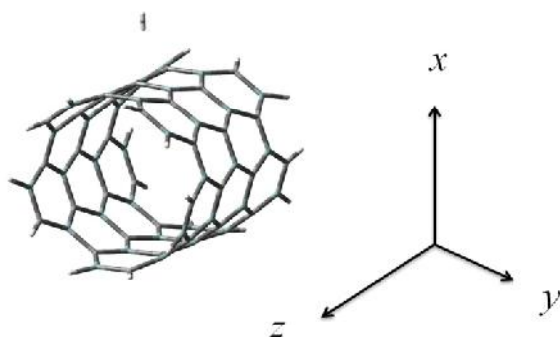
دو راستای کلی برای اعمال میدان الکتریکی بر روی نانولوله در نظر گرفته ایم: یکی در راستای محور نانولوله یا راستای طولی و دیگری عمود بر محور نانولوله یا راستای عرضی. هر کدام از این راستاها دارای دو جهت منفی و مثبت هستند. تعریف ما از جهت مثبت، بردار میدانی است که از یک بار منفی و جهت منفی، بردار میدانی است که از یک بار مثبت خارج می شود. بزرگی میدان الکتریکی بر حسب a.u (واحد اتمی) بیان شده است که هر واحد اتمی میدان الکتریکی برابر با 42/51 Å/V است. کلیه ی راستاها و جهت های ممکن در شکل (3-1)

انرژی جذب گاز هیدروژن بر روی نانولوله در حضور میدان الکتریکی F از رابطه ی زیر محاسبه می شود:

$$E_b(F) = E_{H_2+Nano}(F) - [E_{H_2}(F) + E_{Nano}(F)]$$

1 انرژی های جذب محاسبه شده بر حسب الکترون ولت برای جایگاه های متفاوت در غیاب میدان الکتریکی

Adsorption site	Binding energy (eV)
On C	-0/094
On bridge (Si-C)	-0/075
Hollow	-0/060



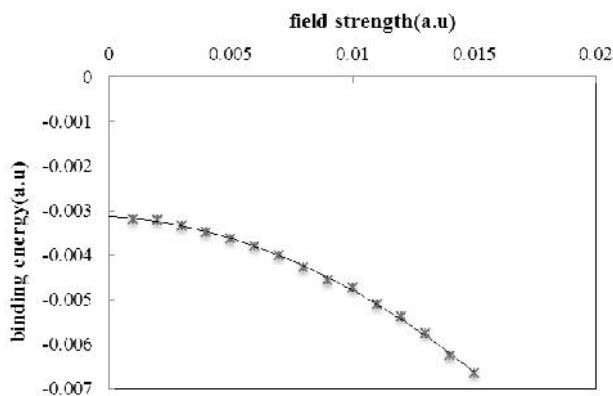
شکل 3 محورهای کارترین برای نانولوله و هیدروژن که میدان الکتریکی در راستای مثبت

کشیده می شود تا اینکه سرانجام به طور کامل از هم می پاشد. طیف چگالی ی حالت ها (DOS) برای میدان های صفر و 0.015 a.u نشان می دهد که اگرچه اعمال میدان موجب کاهش انرژی گپ شده اما سامانه خاصیت نیم رسانایی خود را در 0.015 a.u (شکل 1-5). NBO

برای هیدروژن همراه با افزایش میدان منفی تر می شود (شکل 8). می توان نتیجه گرفت که میدان خارجی تأثیری مشابه بر روی انتقال الکترون ها از نانولوله به هیدروژن و افزایش مقدار مطلق انرژی جذب دارد. یا به عبارت دیگر میدان نیرویی اعمال می کند که باعث تونل زدن الکترون ها شده و یک سامانه دهنده-پذیرنده ی به نسبت قوی به وجود می آید که موجب افزایش مقدار مطلق

که $E_{\text{H}_2+\text{nano}}$ انرژی سامانه شامل نانولوله و هیدروژن جذب شده تحت میدان است و E_{H_2} به ترتیب انرژی هیدروژن و E_{Nano} نانولوله به صورت جدا و بدون برهم کنش اما در حضور میدان الکتریکی هستند. مقدار منفی انرژی به دست آمده نشان می دهد که جذب گاز یک فرایند گرماده است.

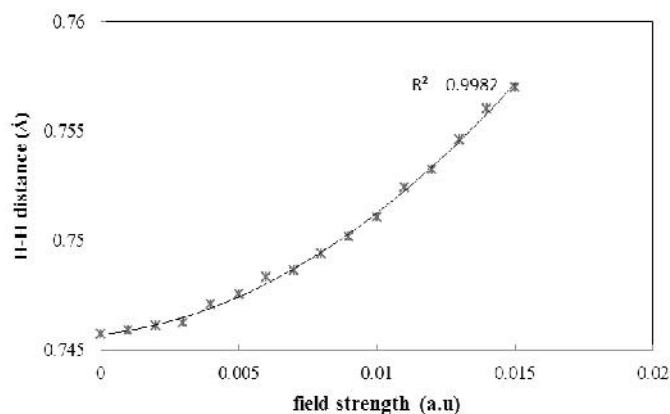
همان طور که در شکل 4 می توان دید با افزایش قدرت میدان الکتریکی در راستای x مقدار مطلق انرژی جذب افزایش می یابد و اعمال میدان موجب پایدارتر شدن سامانه برهم کنش کننده می شود. در حضور میدان 0.015 a.u -0.18 eV می رسد و ساختار نانولوله تغییر چندانی نمی کند. در میدان های بالاتر به تدریج نانولوله در راستای قطری خود



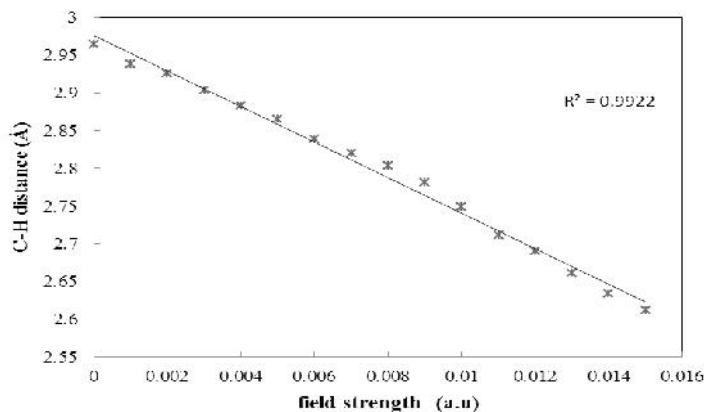
شکل 4 تغییرات انرژی جذب بر حسب میدان الکتریکی در راستای x

باید فاصله ی بین کربن و هیدروژن پایینی کوچکتر شود و طول پیوند H-H افزایش یابد. مشخص شد که فاصله ی بین کربن و هیدروژن به صورت خطی کاهش و طول پیوند H-H نمایی افزایش می یابد (شکل 6 7).

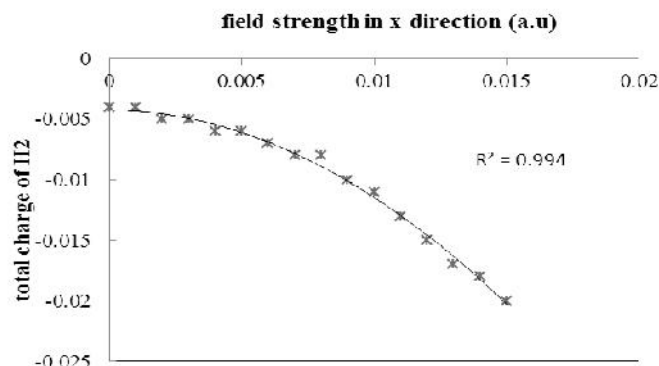
انرژی جذب می شود. افزون بر این پدیده، به دلیل اثر پلاریزاسیون میدان الکتریکی اتم هیدروژن پایینی نسبت به بالایی مثبت تر می شود. بنابراین جاذبه ی الکتروستاتیک بین کربن منفی نانولوله و اتم هیدروژن مثبت زیاد می شود. از این رو با افزایش قدرت میدان



شکل 5 تغییر طول پیوند H-H بر حسب قدرت میدان الکتریکی (واحد طول و میدان به ترتیب (



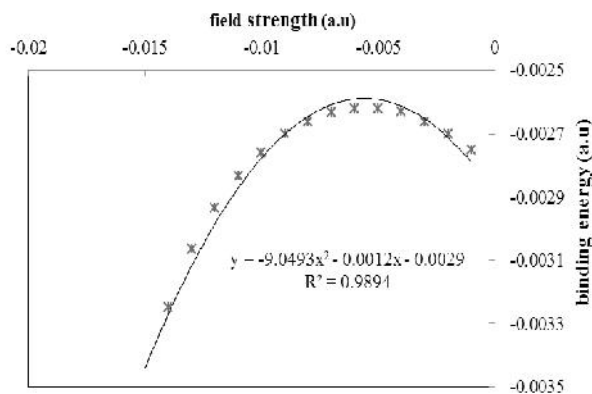
شکل 6 تغییرات فاصله ی هیدروژن تا نانولوله بر حسب میدان الکتریکی در راستای X



شکل 7 تغییرات بار کلی NBO برای هیدروژن بر حسب میدان الکتریکی در راستای X

بوده در صورتی که این انرژی از هیدروژن به پیوند Si-C 5,73 Kcal/mol است. بنابراین جریان الکترونی از پیوند Si-C به هیدروژن خواهد بود. با اعمال میدان الکتریکی در راستای X- نیرویی در مقابل این جریان قرار می گیرد که انرژی عدم استقرار Si-C به هیدروژن را رفته رفته کم می کند و بالطبع انرژی جذب نیز کاهش می یابد. این روند تا جایی ادامه می یابد که Si-C به هیدروژن و هیدروژن به Si-C هم برابر شوند. در میدان 0/006 a.u به تقریب این اتفاق می افتد و بعد از این میدان انرژی جذب افزایش می یابد. در میدان های 0/006 a.u انرژی عدم استقرار از هیدروژن به Si-C اندازه ای بزرگ می شود که جهت جریان الکترونی عوض شود، به شکلی که نانولوله نقش پذیرنده و هیدروژن نقش دهنده ی

هنگامی که میدان در راستای X اعمال می شود پایدارترین مکان برای جذب هیدروژن روی پیوند Si-C میدان اعمال شده سر منفی مولکول هیدروژن قطبیده نزدیک نانولوله و سر مثبت آن بالا قرار می گیرد. دافعه ی الکتروستاتیک ایجاد شده بین دو اتم دارای بارهای هم علامت باعث می شود که دیگر کربن جایگاه مناسبی برای جذب نباشد. نتیجه های به دست آمده نشان می دهند که در ابتدا انرژی جذب هیدروژن بر روی نانولوله کاهش می یابد ولی از میدان 0/006 a.u انرژی جذب زیاد می شود. قبل از اعمال میدان هیدروژن نقش پذیرنده و نانولوله نقش دهنده ی الکترون را بازی می کند. پایداری به دست آمده از عدم استقرار الکترون از پیوند Si-C به اوربیتال های هیدروژن 9,8 Kcal/mol



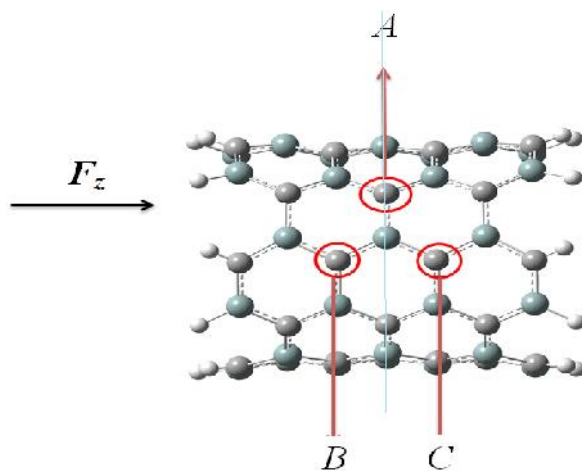
شکل 8 تغییرات انرژی جذب بر حسب میدان الکتریکی در راستای X

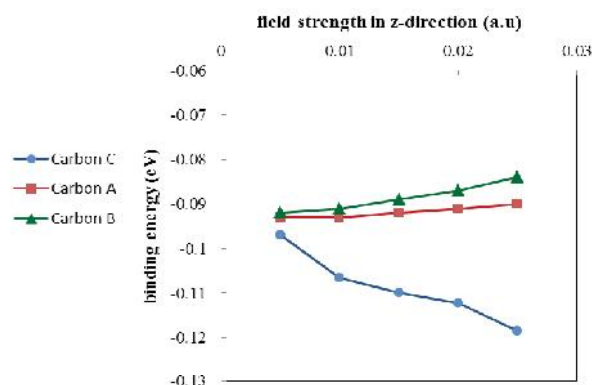
تک پیوند های Si-C بسته به مولفه ای از میدان که به موازات آن ها قرار می گیرد پلاریزه می شوند. در مقیاس دیگر کل استوانه ی نانولوله مانند یک پیوند بزرگ به دلیل سامانه الکترونی π نسبت آزاد پلاریزه می شود. از آنجایی که اتم های C Si متناوب در طول نانولوله ردیف شده اند، نمی توان پیش بینی کرد که بار منفی به دست آمده از قطبش تمایل دارد روی C یا روی Si قرار گیرد. اما نتیجه ها به دست آمده نشان می دهد که با افزایش میدان در نیم ی دوم کربن منفی تر می شود. در نتیجه کربن منفی تمایل بیشتری به جذب هیدروژن پیدا می کند. با توجه به اینکه پلاریزه شدن طولی کل نانولوله موجب می شود که نیم ی دوم نانولوله نسبت به نیمه ی اول آن از لحاظ الکترون غنی تر شود با افزایش میدان الکتریکی جذب در نیم ی دوم نانولوله افزایش می یابد.

در راستای طولی مقاومت نانولوله نسبت به میدان اعمال شده بیشتر بوده و تا میدان های بالاتری نسبت به حالت عرضی دوام می آورد، اما به همین نسبت تأثیر میدان بر افزایش انرژی جذب نیز در حالت طولی کمتر است. از این رو ما توانستیم قدرت میدان $0/025 \text{ a.u}$ افزایش دهیم. در این میدان خاصیت نیم رسانایی نانولوله در آستانه ی از بین رفتن است. طیف چگالی حالت ها (DOS) برای این میدان نشان می دهد که انرژی گپ بسیار کوچک شده است (شکل 12).

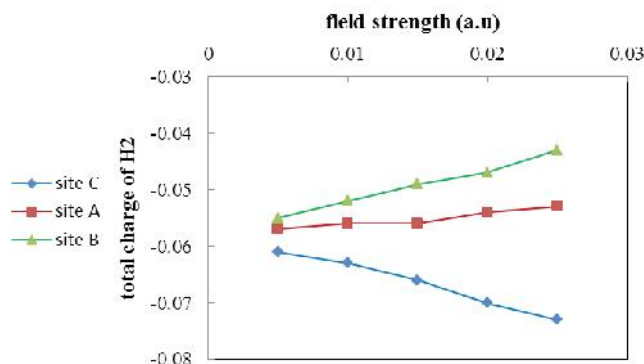
الکترون را بازی می کند.
برای بررسی جذب تحت میدان الکتریکی Z 0 a.u
 $0/025$ $0/005 \text{ a.u}$ بر روی سامانه هیدروژن و نانولوله میدانی اعمال شد. هنگامی که میدان را در راستای Z کنیم هیدروژن اتم کربن را انتخاب می کند. سه کربن متفاوت از 10 ظاهر می شود. اگر نانولوله را از وسط به دو نیم تقسیم آن ها را مشخص کرده ایم. اگر نانولوله را از وسط به دو نیم تقسیم کنیم سه ناحیه مشخص به وجود می آید: نیم ی اول، حلقه ی میانی و نیم ی دوم. مکان A در حلقه ی میانی نانولوله قرار دارد و میدان Z - تأثیر یکسانی بر روی آن دارند. مکان های B و C به ترتیب در نیم ی اول و دوم نانولوله قرار دارند که به دلیل تقارن دونیم نسبت به حلقه ی میانی با عکس شدن جهت میدان Z به هم تبدیل می شوند. از این رو هنگامی که این سه مکان را تحت میدان Z بررسی می کنیم حالتی که میدان Z داریم را نیز در نظر گرفته ایم.

نتیجه های به دست آمده نشان می دهد که برای مکان های A و B با افزایش میدان انرژی جذب با شیب کمی کاهش می یابد که برای مکان A یه نیمی نرسد. بر C همراه با افزایش میدان انرژی جذب نیز افزایش می یابد. میدان اعمال شده نانولوله را در راستای طولی پلاریزه می کند. این پلاریزه شدن در دو مقیاس صورت می گیرد. در یک مقیاس تک

شکل 9 سه مکان متفاوت از لحاظ تأثیر میدان الکتریکی در راستای Z



شکل 10 تغییرات انرژی جذب برای سه مکان A, B, C بر حسب میدان الکتریکی در Z (واحد انرژی، الکترون ولت است)



شکل 11 تغییرات بار کلی مولکول هیدروژن همراه با افزایش قدرت میدان در راستای Z برای سه مکان A, B, C

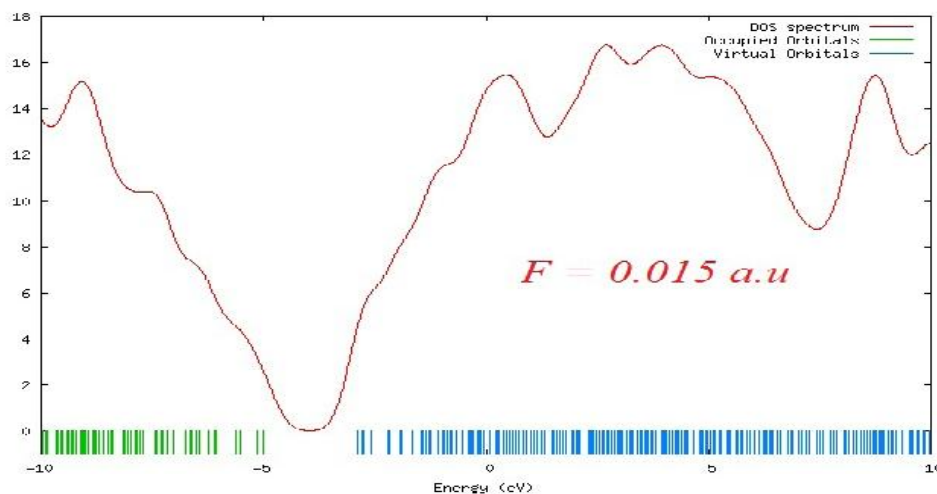
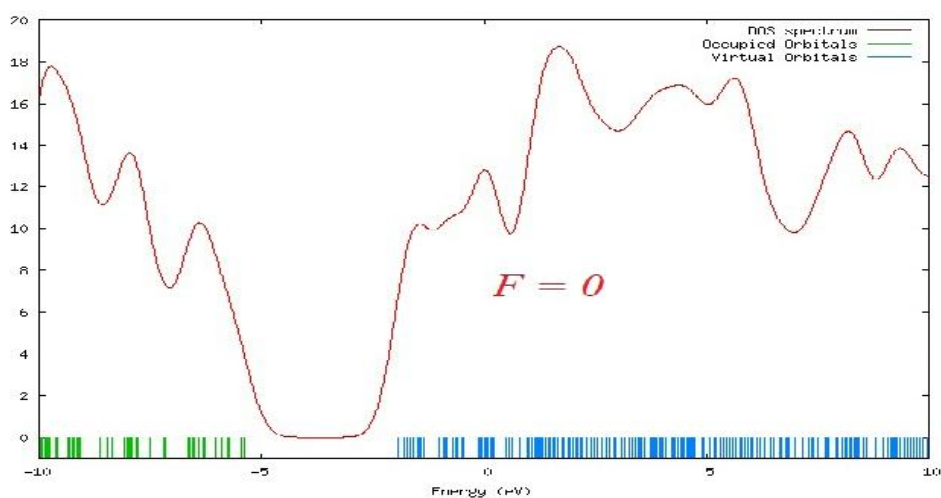
انرژی جذب ندارد و دیگری راستایی است که میدان به موازات پیوند H-H اعمال می شود. هنگامی که هیدروژن در راستای میدان الکتریکی قرار می گیرد در هر دو جهت مثبت و منفی با افزایش میدان الکتریکی انرژی جذب افزایش می یابد. انرژی $-0/18 \text{ eV}$

برسد. این انرژی به تقریب دو برابر انرژی جذب در غیاب میدان الکتریکی است. هر میدانی با هر زاویه ای که فقط در راستای عرضی اعمال شود می تواند به مؤلفه هایی تجزیه شود که این مؤلفه ها بر روی یکی از راستاهای ذکر شده منطبق می شوند. لذا می توان نتیجه گرفت که هر میدانی در راستای عرضی به طور کلی موجب افزایش انرژی جذب می شود. از آنجایی که برآیند ممان دوقطبی نانولوله سیلیکون کربید آرمچیر در راستای عرضی

فاصله ی هیدروژن تا نانولوله با افزایش قدرت میدان در مکان C کمتر می شود اما برای مکان های A, B این فاصله زیادت می شود. در نتیجه می توان گفت در فواصل کمتر انرژی جذب بیشتری برای کلیه ی مکان ها مشاهده می شود.

نتیجه گیری

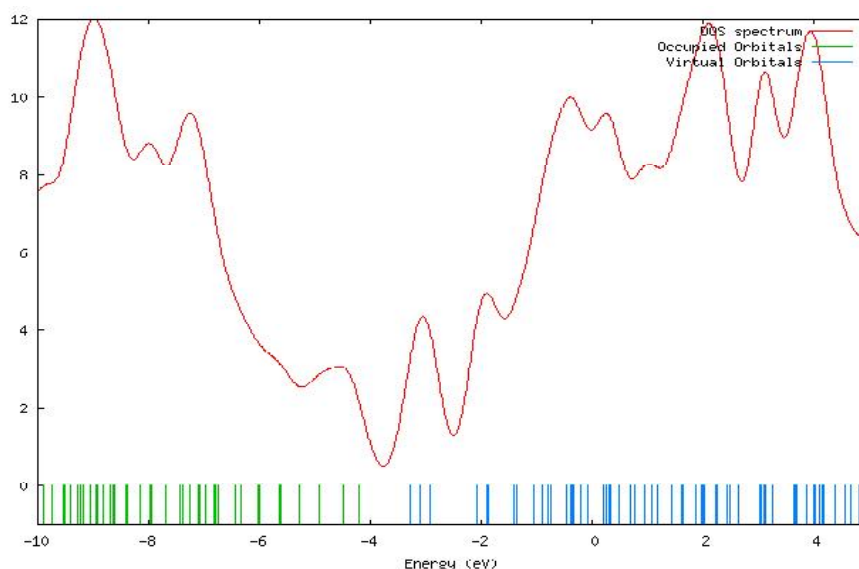
میدان الکتریکی در راستای طولی نانولوله همانگونه که باعث افزایش جذب هیدروژن می شود تأثیر عکس نیز دارد. هرچند که میزان افزایش انرژی جذب هیدروژن از میزان کاهش آن بیشتر است اما برآیند انرژی های جذب در کلیه ی مکان ها مقدار چشمگیری ندارد. میدان اعمال شده در راستای عرضی نانولوله را می توان در دو راستای کلی مورد ارزیابی قرار داد. یکی راستایی است که عمود بر پیوند H-H قرار می گیرد و تأثیر چندانی در



شکل 12 طیف های DOS برای نانولوله در میدان های صفر و 0/015 a.u. که خاصیت نیم رسانایی سامانه حفظ شده است.

هیدروژن بر روی ماده ی جذب کننده قویتر می شود شکست این پیوند و واجذب گاز نیز مشکل تر می شود. برای واجذب در این شرایط از تغییر شرایط دمایی و فشاری بهره می گیرند که گاهی اوقات به صرفه نیست. میدان الکتریکی این مشکل را تا قسمتی حل می کند. کافی است میدان اعمال شده حذف شود تا آن مولکول هایی که به وسیله ی میدان جذب شده اند از ماده ی

آن است می توان پیش بینی کرد که نانولوله ها به طور طبیعی طوری جهت گیری می کنند که میدان الکتریکی در راستای عرضی آن ها قرار گیرد. از آنجایی که هیدروژن ذخیره شده برای استفاده باید از ماده ی ذخیره کننده جدا شود فرایند واجذب هیدروژن اهمیت می یابد. سایر روش های به کار رفته برای افزایش میزان جذب هیدروژن بر روی مواد متفاوت به گونه ای است که همانگونه که پیوند



شکل 13 طیف DOS برای نانولوله تحت میدان الکتریکی 0/025 a.u

R. S. Wang, Chemical Physics Letters, vol. 379, pp. 81-86, 2003.

[9] K. M. Alam and A. K. Ray, Physical Review B, vol. 77, p. 035436, 2008.

[10] M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel, G. E. Scuseria, M. A. Robb, J. R. Cheeseman, J. A. Montgomery, Jr., T. Vreven, K. N. Kudin, J. C. Burant, J. M. Millam, S. S. Iyengar, J. Tomasi, V. Barone, B. Mennucci, M. Cossi, G. Scalmani, N. Rega, G. A. Petersson, H. Nakatsuji, M. Hada, M. Ehara, K. Toyota, R. Fukuda, J. Hasegawa, M. Ishida, T. Nakajima, Y. Honda, O. Kitao, H. Nakai, M. Klene, X. Li, J. E. Knox, H. P. Hratchian, J. B. Cross, C. Adamo, J. Jaramillo, R. Gomperts, R. E. Stratmann, O. Yazyev, A. J. Austin, R. Cammi, C. Pomelli, J. W. Ochterski, P. Y. Ayala, K. Morokuma, G. A. Voth, P. Salvador, J. J. Dannenberg, V. G. Zakrzewski, S. Dapprich, A. D. Daniels, M. C. Strain, O. Farkas, D. K. Malick, A. D. Rabuck, K. Raghavachari, J. B. Foresman, J. V. Ortiz, Q. Cui, A. G. Baboul, S. Clifford, J. Cioslowski, B. B. Stefanov, G. Liu, A. Liashenko, P. Piskorz, I. Komaromi, R. L. Martin, D. J. Fox, T. Keith, M. A. Al-Laham, C. Y. Peng, A. Nanayakkara, M. Challacombe, P. M. W. Gill, B.

[1] T. M. Flynn, McGraw- Hill Encyclopedia of Science & Technology, 7th edition, New York, MacGraw- Hill, Vol. 10, pp-106-109, (1992).

[2] A. C. Dillon, K. M. Jones, T. A. Bekkedahl, C. H. Kiang, D. S. Bethune, and M. J. Heben, Nature, vol. 386, pp. 377-379, 1997.

[3] G. Mpourmpakis, G. E. Froudakis, G. P. Lithoxoos, and J. Samios, Nano Letters, vol. 6, pp. 1581-1583, 2006.

[4] X. -H. Sun, C. -P. Li, W. -K. Wong, N. -B. Wong, C. -S. Lee, S. -T. Lee, and B. -K. Teo, Journal of the American Chemical Society, vol. 124, pp. 14464-14471, 2002.

[5] R. Moradian, S. Behzad, and R. Chegel, Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures, vol. 42, pp. 172-175, 2009.

[6] Jing-xiang Zhao and Yi-hong Ding, Silicon Carbide Nanotubes Functionalized by Transition Metal Atoms: A Density-Functional Study J. Phys. Chem. C 2008, 112, 2558-2564

[7] J.Z., Q.W., and X.C. PNAS, vol. 107, pp. 2801-2806, 2010

[8] M. Zhang, Y. H. Kan, Q. J. Zang, Z. M. Su, and

Johnson, W. Chen, M. W. Wong, C. Gonzalez, and J. A. Pople, Gaussian, Inc., Pittsburgh PA, 2003.

[11] J. A. Sordo, Journal of Molecular Structure, vol. 537, p. 245-251, 2001.

Density Functional study of Hydrogen Storage on Silicon Carbide Nanotube under the external Electric Field

E. Masumian^{1*} and S. M. Hashemianzadeh²

Chemistry Department, Iran University of Science & Technology, Tehran, Iran.

Received: April 2011, Revised: November 2011, Accepted: January 2012

Abstract: Using density functional calculations, hydrogen adsorption has been investigated on silicon carbide nanotube under transverse and longitudinal electric fields of the ranges from 0 to 0.015 and 0 to 0.025 a.u respectively. Once Hydrogen is located parallel to the electric field vector, in both positive and negative directions, the binding energy with increasing the field strength is enhanced finally. The binding energy in the +x-direction, when the electric field reaches 0.015 a.u. become -0.018 eV. The longitudinal electric field on the nanotube increases the binding energy in a position and decreases it in some other positions. Although the amount of adsorption increasing is more than that of decreasing one, the consequent of the binding energies in different sites is not a significant value. Applying electric field causes the reduction of the band gap, but nanotube remains semiconductor in the fields of 0.025 and 0.015 a.u.. When the applied electric field is removed, those molecules which adsorbed with the help of the electric field could be released. Hence, an external electric field can simplify both adsorption and desorption processes.

Keywords: Density Functional Theory (DFT), Silicon Carbide Nanotube, Electric Field, Binding Energy, Delocalization Stability Energy