



**ИРКУТСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ**

Отчет за 2020 год

**Моделирование строения и свойств гетероструктур нитрид бора – графен для
эффективной адсорбции водорода**

Петрушенко Игорь Константинович

руководитель проекта

к.х.н., в.н.с.

Группа перспективных исследований УНД

ИРНТУ

м.т. +7-902-171-83-45

igor.petrushenko@istu.edu

igor.phd@yandex.ru

23 декабря 2020 г.

Аннотация проекта

Мультидисциплинарный проект, посвященный решению прикладных задач физики, химии и энергетики.

Водород в настоящее время считается одним из самых перспективных видов "зеленого" топлива, в связи с его широким распространением в природе, высокой удельной теплотой сгорания, кроме того, продуктом сгорания водорода является вода.

Цель проекта – состоит в создании теоретических и методологических основ численного анализа адсорбции водорода на гибридных структурах B-N-C с несколькими типами адсорбционных центров, позволяющих описывать и прогнозировать взаимодействия адсорбата и адсорбента.

Исполнители проекта:

- Петрушенко Игорь Константинович, к.х.н., в.н.с. группы перспективных исследований НИЧ ИрННТУ, руководитель.
- Богданович Денис Васильевич, к.ф.-м.н., в.н.с. группы перспективных исследований НИЧ ИрННТУ.
- Царькова Александра Ивановна, магистрант 4-ко ИрННТУ.
- Тихонов Николай Иванович, м.н.с. ИрИХ СО РАН.
- Шипицин Николай Викторович, инженер НИЧ ИрННТУ.

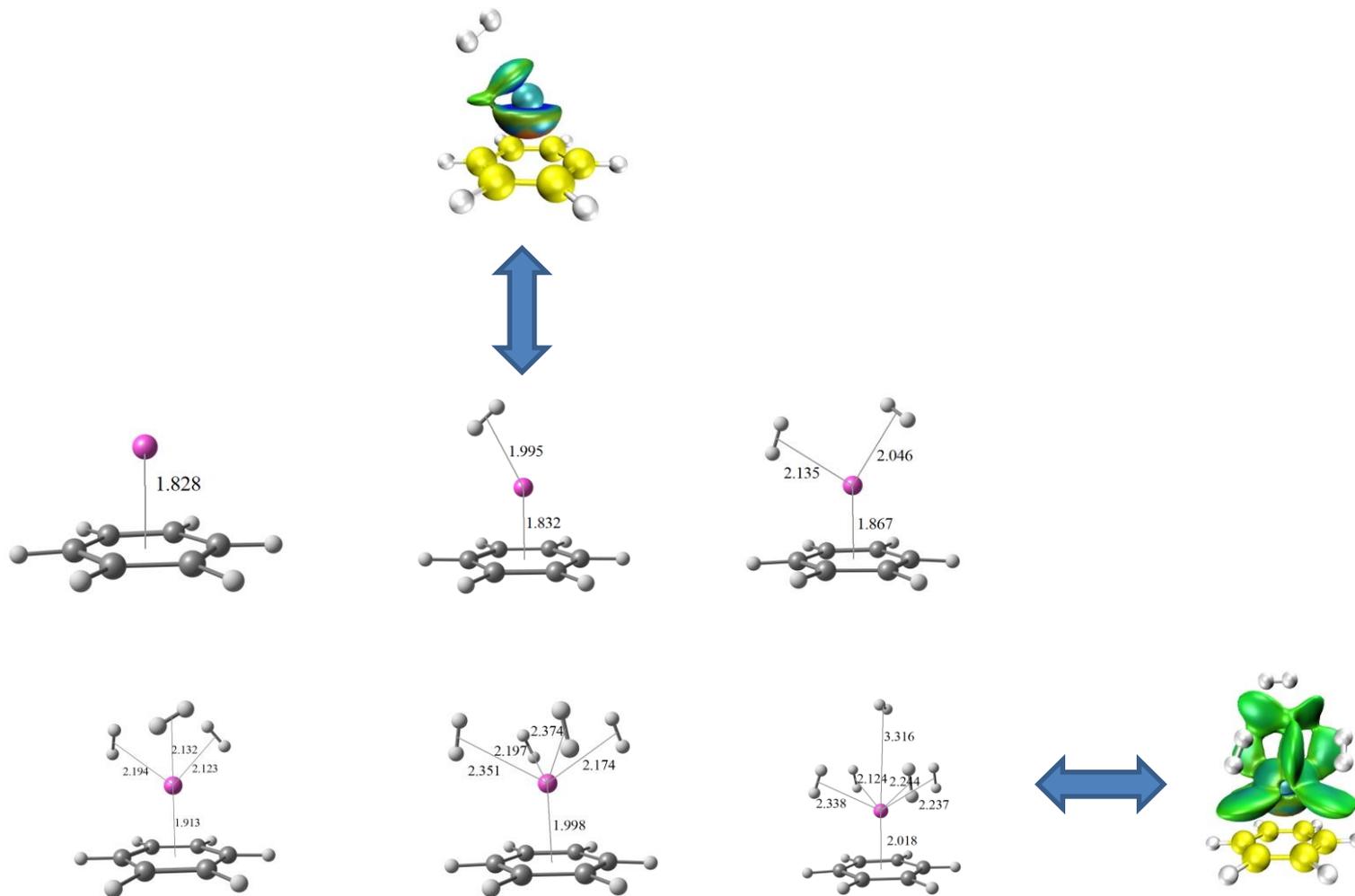
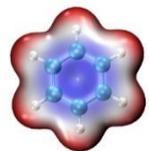


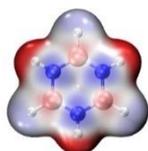
Рисунок. 1-5 молекул H_2 , адсорбированных на $\text{Li}^+@C_6H_6$ комплексах. Серый – углерод, светло-серый – водород, пурпурный – катиона лития. Расстояния в Å.

Таблица. SAPT2/aug-cc-pVTZ энергии(ккал/моль), а также расстояния $\text{H}_2\text{-Li}^+$ ($l_{\text{H}_2\text{-Li}^+}$, Å), длины связей Н-Н ($d_{\text{H-H}}$, Å) молекул водорода на $\text{Li}^+\text{@C}_6\text{H}_6$. Значения в скобках показывают процентный вклад в энергию притяжения.

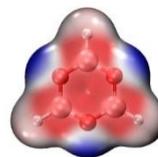
No. of H_2	E_{el}	E_{ex}	E_{ind}	E_{disp}	E_{ad}	$l_{\text{H}_2\text{-Li}^+}$	$d_{\text{H-H}}$
1 H_2	-2.56 (32)	3.67	-4.09 (62)	-1.25 (16)	-4.22	1.995	0.745
2 H_2	-2.41 (32)	3.80	-3.62 (49)	-1.40 (19)	-3.64	2.046	0.745
3 H_2	-2.60 (33)	5.06	-3.09 (40)	-2.13 (27)	-2.75	2.123	0.743
4 H_2	-2.62 (33)	5.96	-2.74 (35)	-2.51 (32)	-1.92	2.197	0.741
5 H_2	-2.15 (31)	5.28	-2.16 (31)	-2.56 (38)	-1.60	3.316	0.740



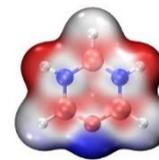
Бензол



Боразин



Бороксин



Бороксазин

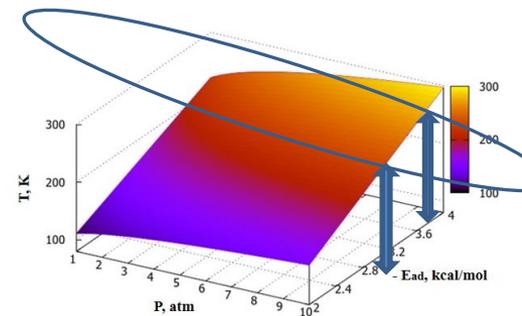
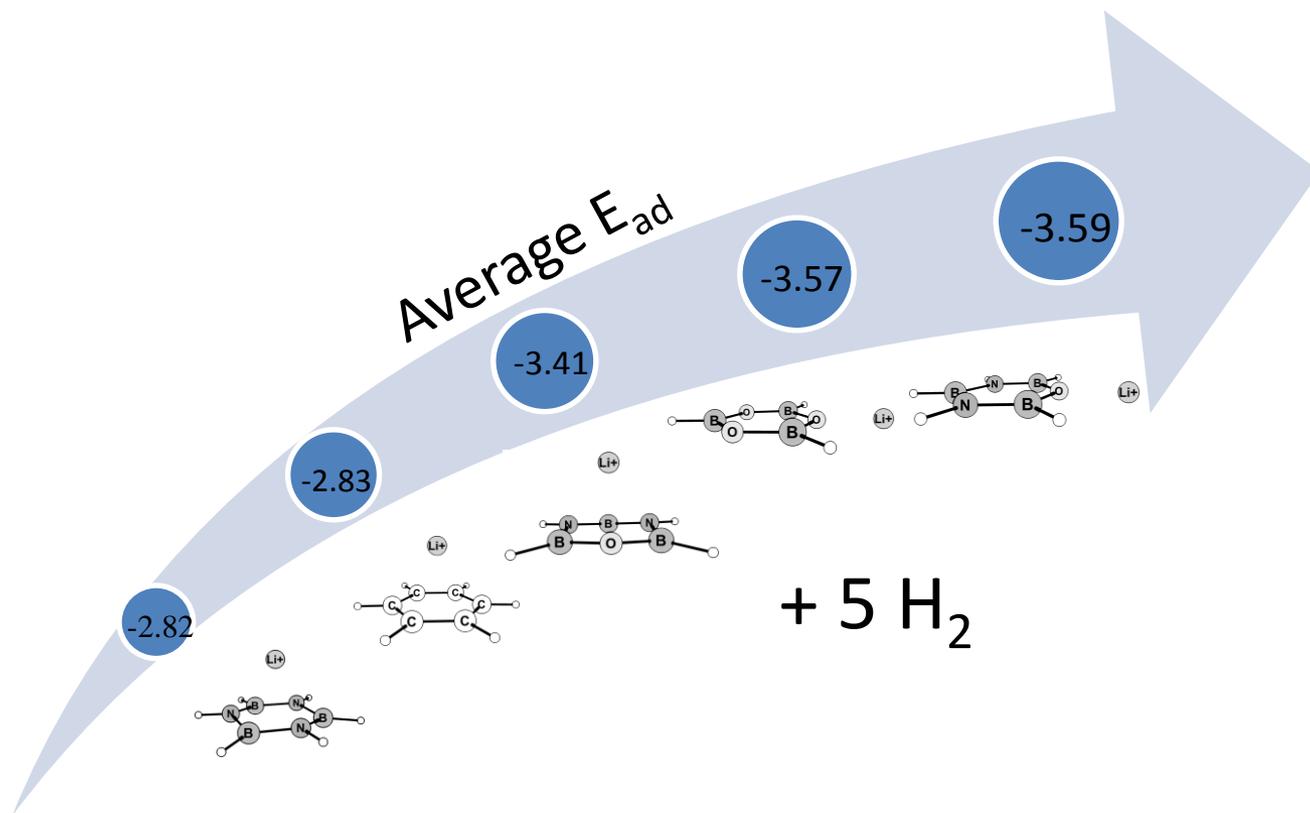
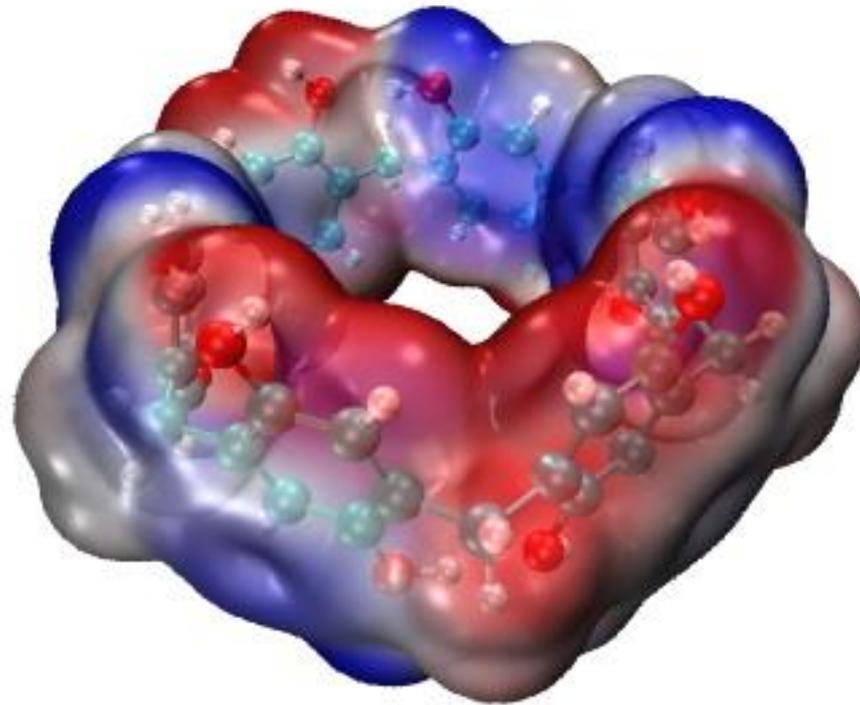


Рисунок. Увеличение средней энергии адсорбции H₂ для различных адсорбентов

Разрабатываемое направление

Пористые адсорбенты



Pillar[*n*]arene

Рисунок. Диаметр поры 6 Å для эффективной адсорбции водорода.

Основные полученные результаты за отчетный период (2020 г.)

1. Изучена адсорбция катионов щелочных и щелочно-земельных металлов на бензоле и неорганических бензолах (боразин, бороксин, бороксазин). Определены вклады различных компонент в полную энергию взаимодействия методом SAPT2.

2. Изучены неорганические компоненты нанокластеров, функционализированные Li^+ , с целью проверки возможности их использования в качестве водородных сорбентов. Показаны перспективы их использования в качестве хранилищ водорода с высокими значениями гравиметрической плотности.

3. С помощью методов теоретической химии обнаружено, что десорбция водорода из данных нанокластеров будет происходить при $T > T_{\text{жидкого азота}}$. Этот факт позволяет утверждать о перспективности использования данных структур на транспорте.

Распределение целевых показателей по годам

№	Название показателя	2019	2020	2021
1	Количество статей в научных журналах, индексируемых в базе данных Web of Science (Scopus), квартили Q1-Q3	4/4	5/5	4

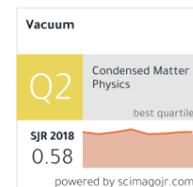
Опубликованные статьи по тематике проекта: 2019

1. Petrushenko I.K. et al. Hydrogen physisorption on nitrogen-doped graphene and graphene-like boron nitride-carbon heterostructures: a DFT study, *Surfaces and Interfaces*, 17, 100355 (2019).
2. Petrushenko I.K. et al. Physical adsorption of hydrogen molecules on single-walled carbon nanotubes and carbon-boron-nitrogen heteronanotubes: A comparative DFT study(2019) *Vacuum*, 167, pp. 280-286.
3. IK Petrushenko, et al. Adsorption of diatomic molecules on graphene, h-BN and their BNC heterostructures: DFT study, *Diamond and Related Materials*, 100, 107575 (2019).
4. IK Petrushenko et al. Valine adsorption on pristine and N-doped graphenes: DFT, AIM, and IGM study, 2019 *Mater. Res. Express* 6 125061.

Scopus WoS



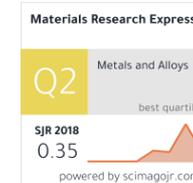
Q1



Q2



Q2



Q3

Распределение целевых показателей по годам

Опубликованные статьи по тематике проекта: 2020

1. IK Petrushenko, et al. Absorption properties of a BODIPY-curved graphene nanoflake system: A theoretical investigation, *Spectrochimica Acta Part A*, 224, 117465 (2020).

Scopus WoS



Q1

2. IK Petrushenko, et al. Graphene-BN-organic nanoflake complexes: DFT, IGM and SAPT0 insights, *Diamond and Related Materials*, 107905 (2020).



Q2

3. IK Petrushenko, et al. Hydrogen adsorption on BN-embedded tetrabenzopentacene as a promising nanoflake for energy storage: Theoretical insights, *Diamond and Related Materials*, 107968 (2020).



Q2

4. IK Petrushenko, et al. Cation- π interactions of inorganic benzenes with Li, Na, and Mg cations: Theoretical insights, *Inorganic Chemistry Communications*, 118, 108043 (2020).



Q3

5. IK Petrushenko, et al. Absorption and fluorescence properties of non-symmetric benzo-, furo-, and thieno-fused structures at the b bonds in the BODIPY frame, *Spectrochimica Acta Part A*, 239, 118472 (2020).



Q1

Статьи, находящиеся в процессе рецензирования:

1. I.K. Petrushenko, and H.F. Bettinger, Hydrogen adsorption on inorganic benzenes decorated with alkali metal cations: theoretical study.

2. DV Bogdanovich, AI Tsar'kova, et al. Hydrogen physisorption on BNC heterostructures: a systematical theoretical study.

Спасибо за внимание!

Петрушенко Игорь Константинович

руководитель проекта

к.х.н., в.н.с.

Группа перспективных исследований УНД

ИРНТУ

м.т. +7-902-171-83-45

igor.petrushenko@istu.edu

igor.phd@yandex.ru