

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА ТЕОРИИ ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ ДЛЯ РЕШЕНИЯ АКТУАЛЬНЫХ ЗАДАЧ ВОДОРОДНОЙ ЭНЕРГЕТИКИ

Шеляпина М.Г.

Санкт-Петербургский государственный университет

Безопасное и экономически эффективное хранение водорода является одной из важнейших проблем, которую необходимо решить для успешного развития водородной энергии [1]. Металлы или сплавы, используемые для хранения водорода, должны удовлетворять ряду критериев, включая удобный рабочий диапазон давления и температуры, высокую обратимую ёмкость хранения водорода, низкие наклон и гистерезис плато давления, высокую кинетику сорбции водорода, большой срок жизни материала, лёгкость активации процесса сорбции водорода, низкую себестоимость и другие. Наиболее эффективными способами изменения характеристик материалов для хранения водорода являются легирование, добавление различных присадок, переход к наноразмерам (наноструктурирование, наноконфинемент) и изменение пути реакции [2,3]. Среди многих металлов и сплавов, реагирующих с водородом, к настоящему моменту не найден такой материала, который отвечал бы всем необходимым критериям: улучшение одной или нескольких характеристик материала приводит к ухудшению других. Для понимания механизмов, регулирующих как стабильность гидридов, так и кинетику сорбции водорода, необходимо проведение систематических исследований влияния состава и структурных особенностей сплавов на исследуемые характеристики.

Метод теории функционала плотности (ТФП) является мощным инструментом для исследования свойств молекул и твёрдых тел, и систем металл-водород в частности. Его применение позволяет не только получить фундаментальное представление об электронных и термодинамических свойствах металл-водородных систем, но и выработать рекомендации по поиску новых материалов для хранения водорода [3].

Лекция посвящена обзору современных работ по применению метода ТФП для исследования ряда задач, связанных с разработкой материалов для эффективного, безопасного и обратимого хранения водорода.

1. Studer S., Stucki S., Speight J.D. Hydrogen as a fuel // Hydrogen as a future energy carrier / под ред. Züttel A., Borgschulte A., Schlapbach L. Weinheim, Germany: Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2008. С. 23–69.
2. Sakintuna B., Lamari-Darkrim F., Hirscher M. Metal hydride materials for solid hydrogen storage: A review // Int. J. Hydrogen Energy. 2007. Т. 32, № 9. С. 1121–1140.
3. Shelyapina M. // Metal Hydrides for Energy Storage, Handbook of Ecomaterials, L.M.T. Martínez et al. (eds.), Springer International Publishing AG (2018) 1-36, doi: 10.1007/978-3-319-48281-1_119-1
4. Shelyapina M. // DFT Study of Metal-Hydrogen Systems for Hydrogen Storage. In: Advances in Materials Science Research Vol. 23, Nova Science Publishers, New York (2016) 185-206.