

PACS numbers: 02.70.Ns, 02.70.Uu, 07.05.Tr, 61.43.Bn, 61.43.Gt, 81.05.U-, 81.07.Bc

## Компьютерная имитация и анализ структуры пор нанопористого углерода, полученного из карбидов

В. В. Картузов, А. А. Крикля

*Институт проблем материаловедения им. И. Н. Францевича НАН Украины,  
ул. Кржижановского, 3,  
03680, ГСП, Киев-142, Украина*

Представлена компьютерная имитация структуры пор пористого пространства нанопористого углерода, полученного из карбида кремния в виде трехмерной ортогональной сети каналов, удовлетворяющая следующим экспериментальным фактам: размер пор соответствует максимуму распределения объема пор по размеру, а удельная площадь поверхности пор — экспериментальному значению. Сечения каналов пор — квадрат, круг, шестиугольник, восьмиугольник. Модели исходных кластеров формируются методом молекулярной динамики. Комплекс компьютерных программ позволяет вычислить распределение пор по размерам, удельную площадь поверхности, гибридизацию, пористость, фрактальность, радиальную функцию распределения, структурные параметры, устойчивость, водородную емкость, а также исследовать влияние температуры на указанные параметры нанопористого кластера.

Наведено комп'ютерну імітацію структури пор пористого простору нанопористого вуглецю, одержаного з карбїду кремнію у вигляді тривимірної ортогональної мережі каналів, що задовольняє наступним експериментальним фактам: розмір пор відповідає максимуму розподілу об'єму пор за розміром, а питома площа поверхні пор — експериментальному значенню. Перетини каналів пор — квадрат, коло, шестикутник, восьмикутник. Моделі вихідних кластерів формуються методом молекулярної динаміки. Комплекс комп'ютерних програм дозволяє обчислити розподіл пор за розмірами, питому площу поверхні, гібридизацію, пористість, фрактальність, радіальну функцію розподілу, структурні параметри, стійкість, водневу місткість, а також досліджувати вплив температури на зазначені параметри нанопористого кластера.

Computer simulation of pore structure in porous space of nanoporous carbide fabricated of silicon carbide in the form of 3D orthogonal net of channels is presented. Model complies with the following experimental facts: pore size corresponds to the maximum of pore-size distribution; specific surface area

corresponds to that observed in experiment. Cross-sections of channels are as follows: circle, square, hexagon, and octagon. Models of initial clusters are formed by molecular dynamics method. Model is realized as software package, which makes possible calculation of pore-size distribution, specific surface area, hybridization, porosity, fractality, radial distribution function, structure parameters, stability, and hydrogen capacity. Software package makes also possible to investigate the temperature influence on parameters of nanoporous cluster.

**Ключевые слова:** математическое моделирование, нанопористый углерод, молекулярная динамика, метод Монте-Карло, водородная емкость.

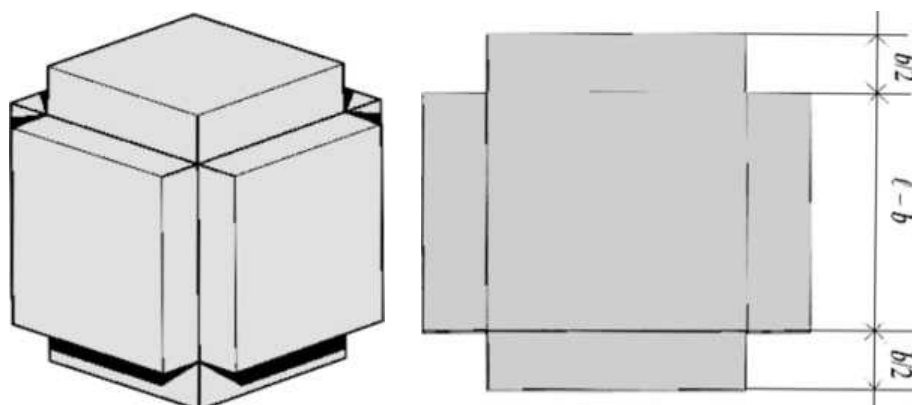
*(Получено 18 февраля 2010 г.)*

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Нанопористый углерод это новый перспективный материал, который уже находит применения в качестве эффективного абсорбента для молекулярных фильтров и электронного материала для сверхвысокоемкостных электролитических конденсаторов, а также в качестве материала для хранения и транспортировки водорода.

В работе [1] проведена первоначальная имитация процесса самоорганизации структуры нанопористого углерода при его образовании путем извлечения атомов кремния из структуры карбида кремния. Технологический процесс получения нанопористого углерода, выбранный как базовый для компьютерного моделирования, описан в работе [2]. Нанопористый углерод получают пропусканием хлора при температуре 400–1200°C и нормальном давлении над твердым SiC в форме параллелепипеда до полного прекращения выхода SiCl<sub>4</sub> с последующим удалением остатков хлора. Нанопористый углерод образуется на подложке SiC. При этом линейные размеры образца практически не изменяются. Представленные результаты достаточно хорошо имитируют ход процесса и дают близкие к эксперименту значения интегральных характеристик полученных кластеров нанопористого углерода. Однако в результате проведенного компьютерного моделирования не получено четкой упорядоченной структуры порового пространства, которую можно было бы использовать в дальнейшем при решении конкретных прикладных задач (например, определение максимальной ёмкости водорода в образце и транспорт заданного типа молекул в смоделированной структуре). Именно компьютерной имитации пористого пространства устраняющей этот недостаток и посвящена данная работа.

Исходная позиция состоит в том, что есть готовый файл с координатами атомов Si и C, соответствующий идеальному кристаллу SiC, полученный методом молекулярной динамики. Координаты



**Рис. 1.** Микрокластер углерода с системой пор в виде параллелепипедных каналов с характерным размером  $b$ .

этих атомов дают структуру физического кластера SiC. В эксперименте [2], объем образца после изъятия Si химической реакцией с HCl не изменялся. Выберем систему пространства пор как параллелепипедные коридоры с характерным размером  $b$  (рис. 1).

Наложим пространство пор на координатное пространство атомов SiC, за исключением области размером 10% по объему снизу по оси  $z$ , составляющей подложку — области, которая не будет подвержена никаким операциям, кроме общей релаксации системы. Принимаем  $l$  и  $b$  такими, чтобы объем пор составил  $a$ -ю долю объема кластера (долю пористости). Удалим в файле все координаты атомов Si и координаты атомов C, лежащие в пространстве пор. После удаления к оставшимся атомам C необходимо добавить недостающие (вырезанные наложением системы пор) атомы C, чтобы плотность кластера стала равна экспериментальной. Пусть  $n$  — исходное количество атомов в кластере образца SiC,  $l$  — ребро каждого из кубов, на которые разбит кластер ( $l$  задается). Объем куба —  $l^3$ .

## 2. РАСЧЕТ

Объем фигуры (микрокластера) после вырезания поровых каналов (рис. 1)

$$V_i = (l - b)^3 + 6 \frac{b}{2} (l - b)^2 = (l - b)^2 (l + 2b). \quad (1)$$

Для приповерхностных и угловых микрокластеров в кластере принимаем такую же систему пор. Система пор — трехмерная параллелепипедная сетка с параметром  $l$  и сечением канала  $b \times b$ . Объемная доля пор

$$a = \frac{(\ell^3 - V_i)}{\ell^3} \quad (2)$$

— это отношение объема области открытых пор микрокластера  $(\ell^3 - V_i)$  к объему микрокластера  $\ell^3$ ,  $V_i$  — объем фигуры на рис. 1; доля объема микрокластеров углерода —  $1 - a$ . Структура микрокластеров без пространства открытых поровых каналов может быть структурой алмаза, графита, или некоторой структурой углерода с определенной долей закрытых пор.

Какова доля  $a$  объема пор? Плотность нанопористого углерода  $\rho_{nC}$ :

$$\rho_{nC} = \rho_{SiC} \frac{m_C}{(m_C + m_{Si})} \quad (3)$$

(поскольку, согласно работе [2] объем полученного образца равен исходному объему SiC). Численно  $\rho_{nC} = 0,96$  г/см<sup>3</sup>. Из (2) следует:

$$a = \frac{(V_o - \sum V_i)}{V_o}, \quad (4)$$

где  $V_o$  — исходный объем кластера SiC;  $\sum V_i$  — суммарный объем углеродной структуры в кластере без учета открытых пор. Например, если структура углерода в объеме  $\sum V_i$  соответствует структуре алмаза, то плотность  $\rho_i$ , соответствующая  $\sum V_i$  равна  $\rho_{алмаза}$ . Отсюда:

$$a = 1 - \frac{\sum V_i}{V_o} = 1 - \frac{\rho_{nC}}{\rho_i} = 1 - \frac{\rho_{nC}}{\rho_{алмаза}}, \quad (4a)$$

$$a = 0,73. \quad (4b)$$

Если принять, что структура микрокластеров иная, то и  $a$ , и  $b$  будут изменяться.

Из экспериментальных данных [2,3] известно, что удельная площадь поверхности пор —  $SSA \approx 2000$  м<sup>2</sup>/г, а максимум объема пор в распределении по размерам приходится на размер пор  $b \approx 8$  Å (рис. 2) [2, 3]. Рассчитаем удельную площадь поверхности открытых пор, без учета конкретной внутренней структуры микрокластеров.

Площадь поверхности пор вырезки (рис. 1):

$$S_i = 12b(\ell - b). \quad (5)$$

Количество микрокластеров  $k$ :

$$k = \frac{V_o}{\ell^3}. \quad (6)$$

Удельная площадь поверхности SSA с учетом (5) и (6):

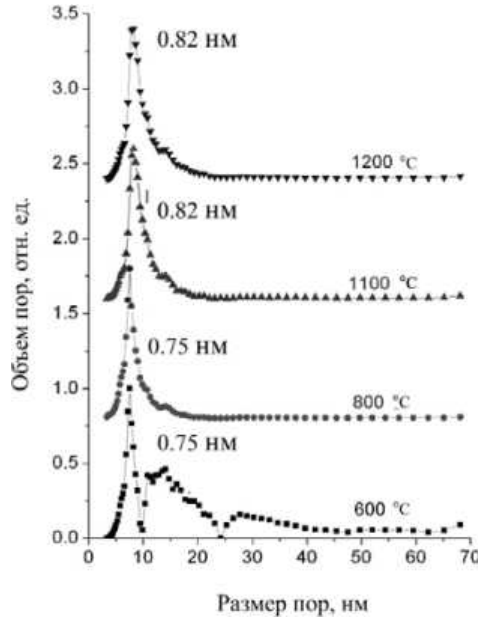


Рис. 2. Распределение пор по размеру [3].

$$SSA = \frac{kS_i}{M} = \frac{V_0 S_i}{M \ell^3} = \frac{S_i}{\rho_{nc} \ell^3} = \frac{12b(\ell - b)}{\rho_{nc} \ell^3}, \quad (7)$$

где  $M$  — масса кластера.

Для  $b = 8 \text{ \AA}$  и  $SSA = 2000 \text{ м}^2/\text{г}$  находим значение  $\ell$  из (7):

$$\frac{SSA \rho_{nc}}{12} = \frac{b(\ell - b)}{\ell^3}, \quad y = \frac{SSA \rho_{nc}}{12}, \quad by = \left(\frac{b}{\ell}\right)^2 \left(1 - \frac{b}{\ell}\right),$$

$$h = by, \quad z = \frac{b}{\ell}, \quad h = z^2(1 - z), \quad z^3 - z^2 + h = 0. \quad (7.1)$$

Решая полученное кубическое уравнение, получим  $z_1 = 0,578$ ; остальные два корня  $z_2 = \bar{z}_3$  (комплексные числа) не имеют физического смысла. Тогда

$$b = 0,578\ell, \text{ и для } b = 8 \text{ \AA} \quad \ell = 13,835 \text{ \AA}. \quad (8)$$

Рассчитав плотность микрокластера, определим его внутреннюю структуру. Внутренняя плотность  $\rho_i$  из (4а) равна:

$$\rho_i = \frac{\rho_{nc}}{1 - a}; \quad (9)$$

с учетом (2)

$$a = 1 - \frac{V_i}{\ell^3} = 1 - \frac{(\ell - b)^2(\ell + 2b)}{\ell^3}. \quad (10)$$

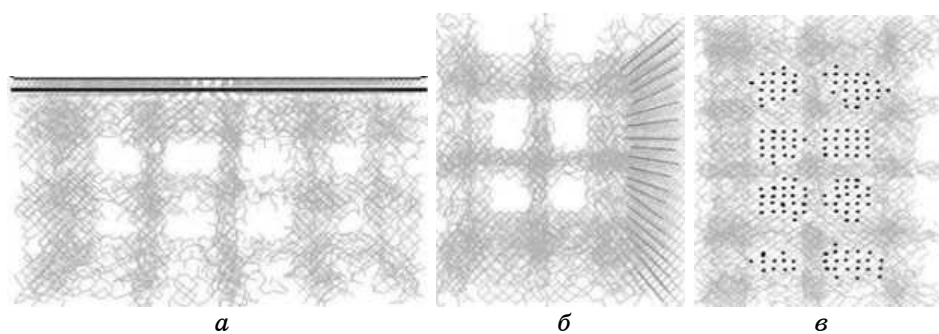
Численно, с учетом (8)  $a = 0,62$ , из (9)  $\rho_i = 2,51$  г/см<sup>3</sup>. Это означает, что возможны два варианта внутренней структуры микрокластеров: она может быть структурой графита (плотность графита 2,28 г/см<sup>3</sup>) с вкраплениями дополнительных атомов углерода для достижения плотности 2,51 г/см<sup>3</sup> или алмазоподобной структурой (плотность алмаза 3,51 г/см<sup>3</sup>) с закрытыми порами. Для последнего случая рассчитаем отношение объема закрытых пор к объему  $V_i$ ; доля закрытых пор —

$$\frac{V_{\text{закрытых пор}}}{V_i} = 1 - \frac{V_{\text{алмаза}}}{V_i} = 1 - \frac{\rho_i}{\rho_{\text{алмаза}}}. \quad (12)$$

Доля закрытых пор = 0,285, т.е. 61,6% всего объема нанопористого кластера занято открытыми порами,  $0,285 \cdot 38,4\% = 11\%$  закрытыми и  $(38,4 - 11)\% = 27,4\%$  собственно алмазоструктурный углерод.

### 3. ПРОЦЕСС МОДЕЛИРОВАНИЯ

Первоначальная структура состоит из транслируемых параллельно осям координат элементарных ячеек SiC в форме бруса. По двум пространственным границам бокса (оси X и Y) заданы периодические граничные условия. Нижние по оси Z 10% атомов образца были зафиксированы и не изменяли своего положения в процессе моделирования МД, атомы кремния из них не удалялись. Все другие атомы кремния были удалены. Эти 10% атомов соответствовали подложке, на которой формируется нанопористый углерод, — той части основной массы SiC, которая не подвергается изменениям в процессе химической реакции. Для исходного кластера SiC в 12000 атомов результирующий расчетный кластер нанопористого углерода состоит из 6000 атомов углерода и 600 атомов кремния. Из них 600 атомов кремния и 600 атомов углерода составляют подложку. Структура нанопористого углерода над подложкой (по Z) образована следующим образом. Производится образование пространства пор  $\Omega(b, \ell)$  вырезанием сети трехмерных перпендикулярных каналов пор по полученным  $b$  и  $\ell$  таким образом, что внутри  $\Omega$  не находится ни одного атома. В геометрический объем исходного кластера карбида кремния, за исключением области подложки и пространства пор  $\Omega$  были равномерно добавлены атомы углерода. Их количество равно количеству атомов углерода находившихся в пространстве пор  $\Omega$  перед вырезанием. Структуру образца полученного нанопористого углерода моделировали методом МД, реализованным в программе XMD [4],



**Рис. 3.** Вид кластера: *a* — вдоль оси *Y*; *б* — вдоль оси *X*; *в* — вдоль оси *Z*. Черные прямые линии — ряды атомов кремния; черные точки (*в*) — атомы кремния подложки, видимые сквозь поры; остальное — атомы углерода. Визуализация производилась с помощью программы Molekel [6].

**ТАБЛИЦА 1.** Среднее минимальное расстояние  $d_{\min}$  к ближайшему соседу, среднее количество соседей для атомов углерода внутри сферы радиуса  $R_{\text{сферы}}$  для разных температур.

$T, \text{K}$	$d_{\min}, \text{Å}$	$R_{\text{сферы}}, \text{Å}$			
		1,50	1,70	1,90	2,10
300	1,6019	0,38	2,13	2,95	2,97
600	1,6014	0,39	2,14	2,96	2,98
800	1,5800	0,42	2,17	2,96	2,97
1200	1,6028	0,38	2,11	2,95	2,97

**ТАБЛИЦА 2.** Количество атомов  $N$ , имеющих ближайших соседей в сфере радиуса  $R$  для температуры 800 К.

$R, \text{Å}$	1,6	1,8	2,0	3,0	4,0	5,0	6,0
$N$	4456	1076	692	13	7	3	1

с потенциалами Терсоффа для кремния и углерода [5].

Моделирование образованной структуры проводили при температурах 300, 600, 800 и 1200 К (рис. 3). Результат моделирования оказался стабильным (табл. 1, 2), визуальнo атомы не расползлись, каналы остались свободны (рис. 3).

По методу [1] вычислена удельная площадь поверхности (табл. 3).

Плотность образца  $\rho_{nc} = 1,0 \text{ г/см}^3$ , доля объема открытых пор  $a = 0,59$ , плотность структуры без открытых пор  $\rho_i = \frac{\rho_{nc}}{1-a}$ ,  $\rho_i = 2,44 \text{ г/см}^3$ .

По методу [1], вычислена водородная емкость образца. Полагаем,

**ТАБЛИЦА 3.** Значения удельной площади поверхности (SSA в [м<sup>2</sup>/г]) для различных температур (в [К]).

$T, K$	SSA, м <sup>2</sup> /г
300	2690
600	2830
800	2600
1200	2570

что водород связывается в интервале приповерхностного слоя пор размером в радиус углерода. Например, для температуры 800 К заполнение водородом образца составило 10% (объемн.).

Итак, для таких размеров пор ( $b = 8 \text{ \AA}$ ,  $\ell = 13,835 \text{ \AA}$ ) после моделирования методом молекулярной динамики (МД) кластер нанопористого углерода с заданной геометрией пористого пространства является устойчивым.

Для решения конкретных прикладных задач, например, определения максимальной ёмкости водорода в образце и транспорта заданного типа молекул в сконструированной структуре, понадобилось продолжение исследования для кластеров с различными размерами и формой пор.

Объектами моделирования являются кластеры SiC из 27000 атомов размером  $15 \times 15 \times 14$  элементарных ячеек и 12000 атомов размером  $15 \times 10 \times 10$  элементарных ячеек. В результате образования системы пор и отделения подложки для представления результатов для нанопористого углерода из кластера в 12000 атомов SiC получен кластер в 5400 атомов углерода с размерами  $6,54 \times 4,36 \times 4,01$  нм, из кластера в 27000 атомов SiC получен кластер из 11700 атомов углерода.

Модель формирования исходного кластера в точности соответствует описанной ранее, с дополнениями, такими, что: диаметр канала, сечение, и расстояние между каналами различны для каждого образца (рис. 4). Сечения каналов: квадрат, круг, шести- и восьмиугольник. Для обоих кластеров диаметры пор: 0,3, 0,6, 0,9 нм, расстояния между каналами пор: 1,2, 1,5, 1,8 нм.

В результате МД-моделирования некоторые атомы углерода могут вырваться за пределы кластера. Если процент таких атомов менее 5, то кластер считается устойчивым. Объем пор, удельная площадь поверхности (УПП) и доля пористости рассчитаны методом Монте-Карло [7] (30000 пробных точек, ван-дер-ваальсовый радиус углерода — 0,171 нм [8]). Время МД-моделирования 6600 атомов (1 кластер) для 4 температур на компьютере Pentium 4, 2 ядра, 1 Gb RAM, ОС Linux — 8 ч. После МД расчета подложка отсекалась, и результаты представлены для чистого нанопористого углерода.



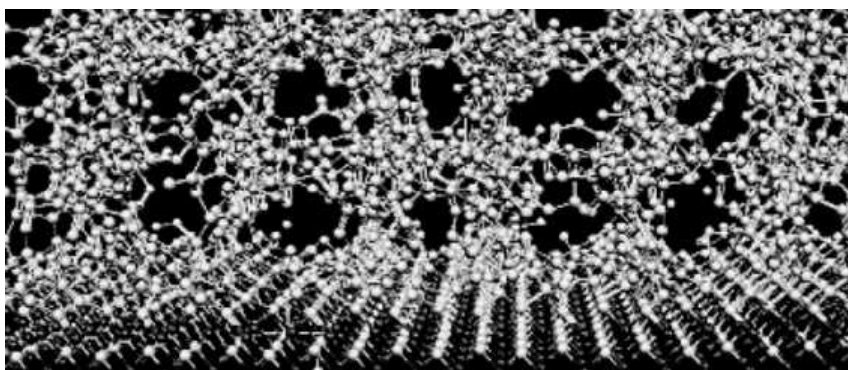


Рис. 4. Модельный кластер с порами кругового сечения.

#### 4. РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЯ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Количество кластеров определялось различными совокупностями диаметров (то есть, фактически размеров) пор 0,3, 0,6 и 0,9 нм, для расстояний между каналами пор 1,2, 1,5 и 1,8 нм, для 4 сечений, для разных температур. Поскольку по оси  $Z$  не заданы граничные условия, в процессе МД-расчета некоторые атомы вырвались за начальные пределы кластера, их относительное количество  $\leq 0,87\%$ . Поэтому можно утверждать, что кластеры стабильны. Для каждого кластера проведено 30000 шагов МД-моделирования, для того чтобы энергия системы достигла минимума;  $\Delta E/E \leq 0,02\%$  на шаг МД расчета (рис. 5).

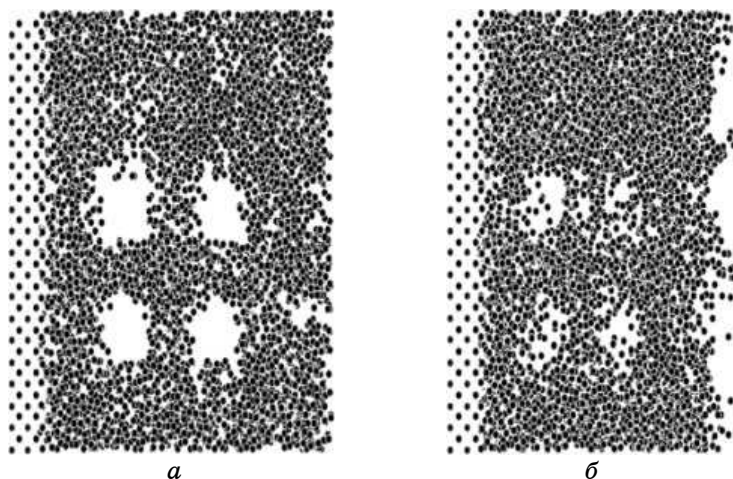


Рис. 5. Первый и последний (30000-й) шаги МД-моделирования (снимок экрана).

Данные для разных сечений отличаются менее чем на 2%, поэтому дальнейшие результаты представлены для круговых сечений.

На всех без исключения графиках зависимость для температуры 300 К можно считать заданным по построению трендом, поскольку при этой температуре изначальная структура кластера практически не изменяется в результате МД-моделирования. (6, 12) обозначает кластер с диаметром каналов 0,6 нм и расстояниями между канала-

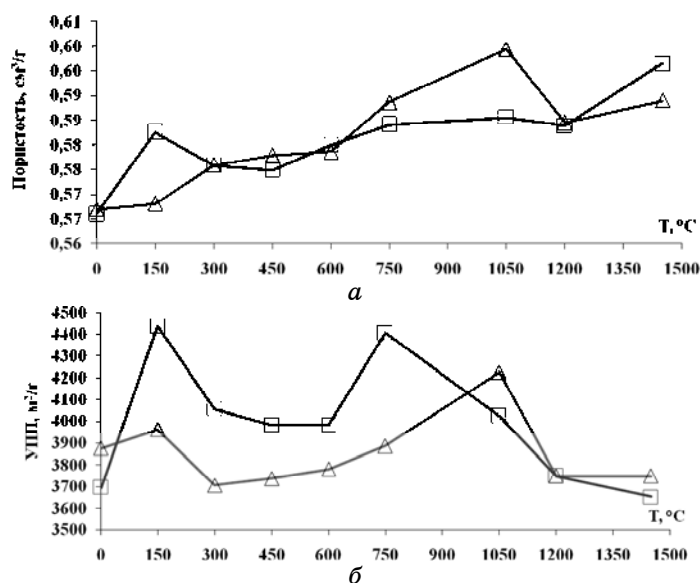


Рис. 6. Зависимости пористости (а), УПП (б) от температуры; квадратный маркер — (6, 18), треугольный — (6, 12).

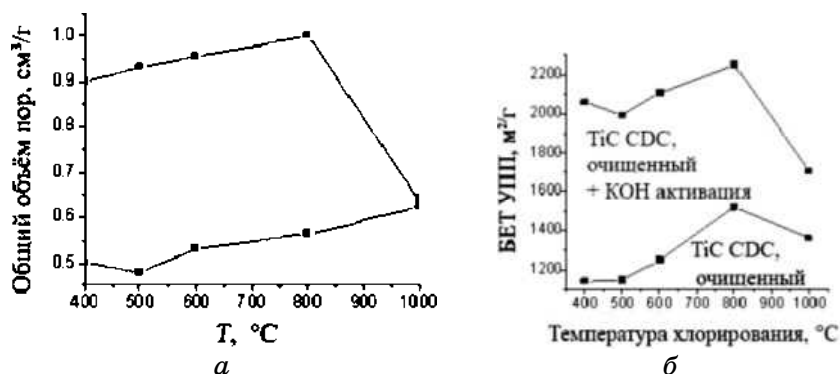


Рис. 7. Зависимость общего объема пор от температуры (а); зависимость УПП от температуры (б).

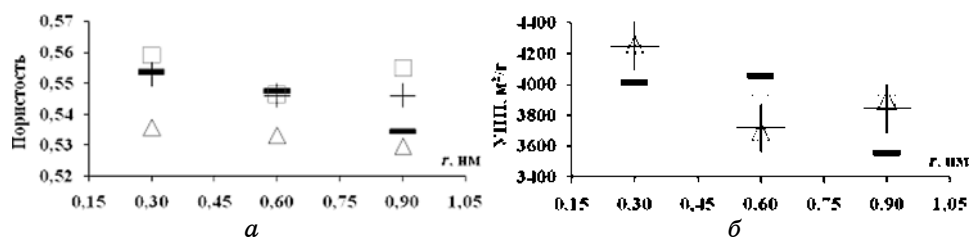


Рис. 8. Зависимости пористости ( $a$ ) и УПП ( $б$ ) от размера пор для расстояния между каналами 1,8 нм: треугольный маркер — 300, прямой — 600, квадратный — 900, плюс — 1200 К.

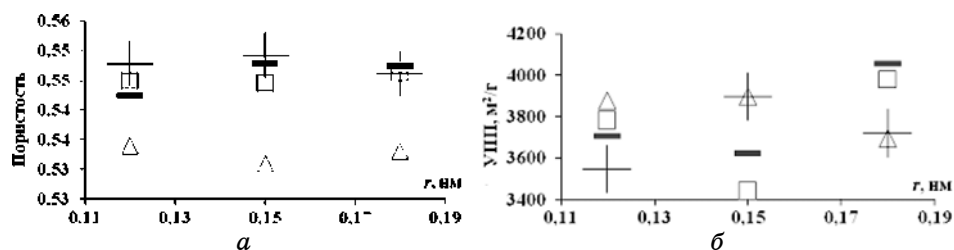


Рис. 9. Зависимости пористости ( $a$ ) и УПП ( $б$ ) от расстояния между каналами для ( $б, r$ ): треугольный маркер — 300, прямой — 600, квадратный — 900, плюс — 1200 К.

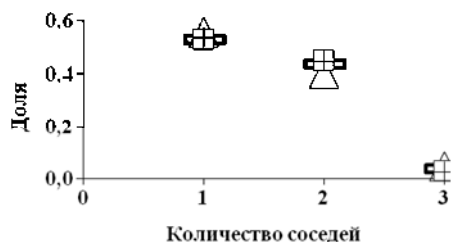
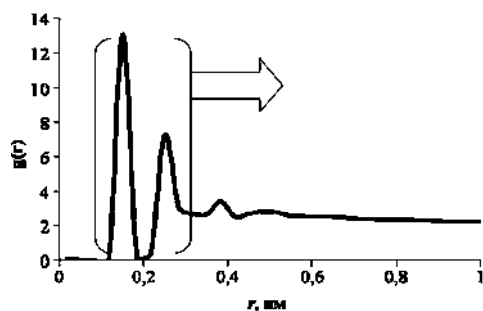
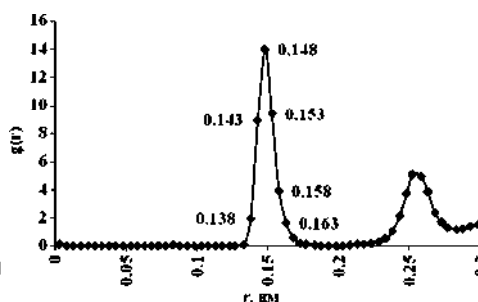
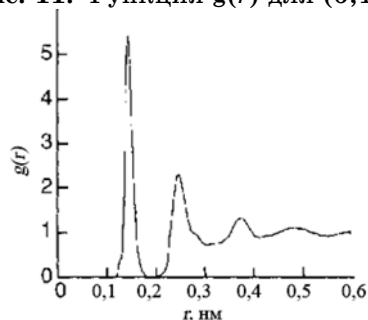
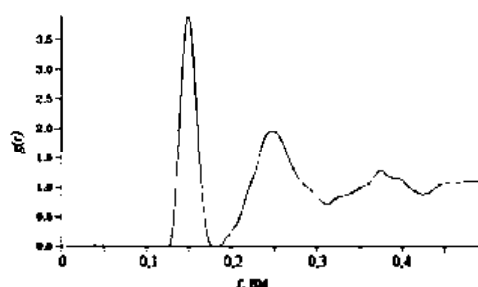


Рис. 10. Доля количества соседей в шаре радиусом 0,16 нм: треугольный маркер — 300; прямой — 600; квадратный — 900; плюс — 1200 К.

ми 0,12 нм; аналогично ( $б, r$ ),  $r$  — расстояние между каналами.

Результаты для кластера в 5400 атомов углерода приведены на рис. 6–12. Для сравнения с рис. 6 приведем зависимости из работы [9], для нанопористого углерода, полученного по той же технологии из TiC, характер зависимостей в случае TiC и SiC одинаков; рис. 7. На рисунке 7,  $б$  по оси ординат отложена УПП, измеренная методом БЕТ [10], а по оси абсцисс отложена температура образования (хлорирования) материала.

По виду функции  $g(r)$  (рис. 11) ясно, что структура кластера —

Рис. 11. Функция  $g(r)$  для (6,12).Рис. 12. Функция  $g(r)$  для (6, 12).Рис. 13. Экспериментальная функция  $g(r)$ .Рис. 14. Модельная функция  $g(r)$  для аморфного углерода.

аморфная. Чтобы уточнить, какие именно длины связей присутствуют,  $g(r)$  была построена более точно на отрезке 0–0,3 нм (рис. 12).

Сравнивая данные табл. 4 и график функции  $g(r)$  (рис. 12) видно, что в образце присутствуют все виды связей, кроме  $sp-sp$  связи, а также то, что относительное количество связей с длинами 0,154 нм (алмаз) и 0,143 нм (графит) приблизительно одинаково. Также присутствуют связи длиннее 0,154 нм. Что это означает, неясно, так как связи таких длин зарегистрированы только в органических соединениях, например [11].

Для сравнения результатов приведем две зависимости. Первая, экспериментальная, описывает графитоподобный аморфный углерод ( $a-C$ ) (рис. 13) [12]. Вторая описывает модельный аморфный углерод (рис. 14) [13]. Как видно, эти зависимости очень близки к полученной функции  $g(r)$ .

Результаты для кластера в 11700 атомов углерода приведены на рис. 15. Доля количества соседей атомов углерода, зависимости пористости и УПП от размера пор и от расстояния между каналами аналогичны им же для кластера в 5400 атомов и не несут новой информации. Радиальная функция распределения для кластера в 11700 атомов углерода в точности совпадает с радиальной функци-

ТАБЛИЦА 4. Длины связи углерод-углерод.

Тип связи	$sp^3-sp^3$	$sp^3-sp^2$	$sp^3-sp$	$sp^2-sp$	$sp^2-sp^2$	$sp-sp$
Длина, нм	0,154	0,150	0,146	0,143	0,135	0,120

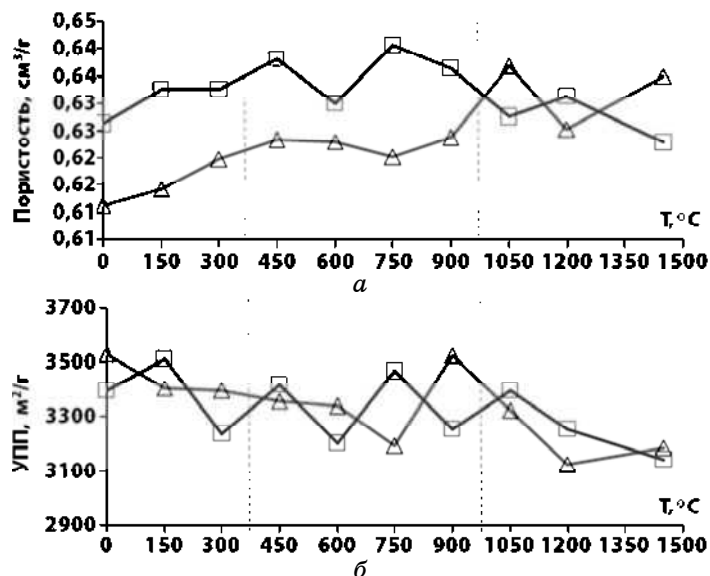


Рис. 15. Зависимости пористости (а), УПП (б) от температуры, квадратный маркер — (6, 18), треугольный — (6, 12).

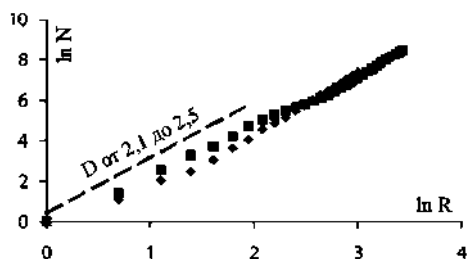
ей распределения для кластера в 5400 атомов углерода.

## 5. РЕЗУЛЬТАТЫ ДЛЯ ОБОИХ КЛАСТЕРОВ

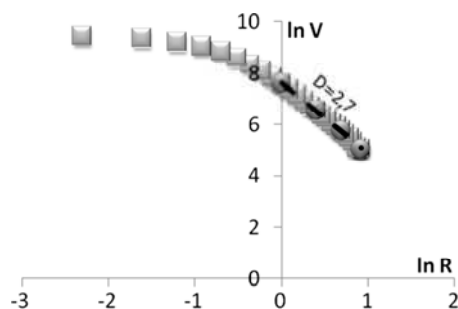
Экспериментальная плотность составляет 0,96, модельная для кластера в 5400 атомов углерода 0,94, а для кластера в 11700 — 1,04 г/см<sup>3</sup>. Усредненные по кластерам с разными  $d$  и  $\ell$  минимальные расстояния между атомами для кластеров в 5400 и 11700 атомов углерода практически не отличались и составили для 600 и 900 К — 1492 и 0,1491 нм, для 300 и 1200 К — 0,1500 и 0,1503 нм.

На рисунках 16, 17 представлены результаты измерения фрактальных характеристик кластеров; на рис. 17 приведен результат измерения фрактальности кластера через пористость [14].

Объем доступного пространства системы пор для молекул водорода определялся методами Монте-Карло: сеянием шаров заданного радиуса (0,04 нм — половина длины связи в молекуле водорода) вдоль стенок пор (считается, что водород адсорбируется вдоль по-



**Рис. 16.** Зависимость количества атомов ( $N$ ) от радиуса измерения ( $R$ ). Ромбовидный маркер — кластер 5400, квадратный — 11700 атомов углерода.



**Рис. 17.** Зависимость объема ( $V$ ) от радиуса пробного шара ( $R$ ) для кластера в 5400 атомов углерода.

верхности пор, и объемное заполнение отсутствует [15]) (табл. 5).

## 6. ВЫВОДЫ

Сконструированная модель нанопористого углерода с открытыми порами достаточно адекватно отражает экспериментальные результаты по значениям пористости, плотности, УПП, водородной емкости. Зависимости пористости и УПП от температуры сходны по характеру с экспериментальными. Для температур 600 и 900 К средние минимальные расстояния являются характерными для нанопористого углерода, поскольку эти температуры соответствуют экспериментальным температурам образования: 0,1492 и 0,1491 нм соответственно. Для 300 и 1200 К эти значения существенно больше и также близки друг к другу — 0,1500 и 0,1503 нм. Дело в том, что при температуре 300 К равновесное состояние после МД-моделирования практически соответствует начальному — температура мала для изменения структуры, — а начальное состояние соответствует большему расстоянию между атомами. Температура 1200 К может быть названа достаточно высокой для увеличения среднего расстояния меж-

**ТАБЛИЦА 5.** Водородная емкость кластеров, определенная методом Монте-Карло для (6, 12).

Количество атомов углерода	5400	11700
Объем исходного кластера, нм <sup>3</sup>	124,32	279,73
Объем конечного кластера, нм <sup>3</sup>	114,34	242,43
Объем пор доступных для водорода, %	2,35	1,31
Доля водорода, масс. %	15,59	8,22

ду атомами в процессе МД-моделирования. Возможно, этот факт влияет на то, что пары зависимостей УПП от размера пор для 600 и 900 К, а также для 300 и 1200 К имеют схожий характер (рис. 8, б); этот вопрос требует дальнейшего изучения. Построенные кластеры нанопористого углерода с заданной геометрией пор имеют функцию радиального распределения такую же, как и у экспериментально полученного аморфного углерода и как у модельно полученного аморфного углерода. Определена фрактальная размерность и водородная емкость кластеров. Вычисленная массовая доля водородной емкости указывает на перспективность нанопористого углерода полученного из карбидов, как материала для водородной энергетики.

## ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. В. В. Каргузов, А. А. Крикля, *Математические модели и вычислительный эксперимент в материаловедении* (Киев: Ин-т пробл. мат.: 2006), т. 8, с. 69.
2. G. Yushin, Y. Gogotsi, and A. Nikitin, *Carbide Derived Carbon* (CRC Press: 2006).
3. R. Dash et al., *Carbon*, **44**: 2489 (2006).
4. <http://xmd.sf.net>
5. J. Tersoff, *Phys. Rev. B*, **39**, No. 8: 5566 (1989); Erratum: J. Tersoff, *Phys. Rev. B*, **41**, No. 5: 3248 (1990).
6. [www.cscs.ch/molekel/](http://www.cscs.ch/molekel/) — opensource (GPL) multiplatform molecular visualization program (Swiss National Supercomputing Centre).
7. N. Metropolis and S. Ulam, *J. of the Amer. Stat. Association*, **44**: 335 (1949).
8. Ю. В. Зефирова, П. М. Зоркий, *Журн. структур. химии*, **15**, № 1: 118 (1974).
9. J. Fischer, Y. Gogotsi, and T. Yildirim, *DOE Hydrogen Program* (2008).
10. S. Brunauer, P. Emmett, and E. Telle, *J. Amer. Chem. Soc.*, **60**: 309 (1938).
11. F. Toda, *European J. of Organic Chemistry*, **8**: 1377 (2000).
12. C. Wang, K. Ho, and C. Chan, *Phys. Rev. Lett.*, **70**: 611 (1993).
13. C. Stewart, <http://cmt.dur.ac.uk/sjc/thesis/thesis/node75.html> — 1996.
14. Н. Медведев, *Метод Вороного–Делоне в исследовании структуры некристаллических систем* (Новосибирск: СО РАН: 2000).
15. А. А. Богданов, *Журнал технической физики*, **75**, № 9: 139 (2005).