

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Η ανακάλυψη των φουλερενίων από τον Kroto et al οδήγησε στη δημιουργία ενός εντελώς νέου κλάδου στη Χημεία ιδιαίτερα με τη συνειδητοποίηση της δυνατότητας ενσωμάτωσης (caging) χημικών στοιχείων ή και ενώσεων εντός της δομής τους. Η ενσωμάτωση υδρογόνου στο C-60 έχει ιδιαίτερο ενδιαφέρον καθώς τα νανοσυστήματα αυτά μπορούν να χρησιμοποιηθούν ως συσσωρευτές υδρογόνου. Είναι κοινός τόπος πλέον ότι η κατάχρηση των καυσίμων υδρογονανθράκων έχει οδηγήσει σε επιβάρυνση του περιβάλλοντος. Η αναζήτηση εναλλακτικών πηγών ενέργειας που δε θα επιβαρύνουν το περιβάλλον είναι επιτακτική ανάγκη για το άμεσο μέλλον. Μία από αυτές είναι το υδρογόνο που αποτελεί και το πιο άφθονο στοιχείο στο σύμπαν. Το H₂ μπορεί να αποδώσει μεγάλα ποσά ενέργειας «καθαρής» μορφής ώστε να καλύψει όλες τις εκφάνσεις της ανθρωπότητας. Πέρα από τη χρήση του για κάλυψη των επίγειων αναγκών, ήδη η NASA βασίζει την τοποθέτηση φορτίου (payload) στο διάστημα στην προώθηση ρουκετών με καύσιμο το υγρό υδρογόνο. Στα μελλοντικά σχέδιά της επίσης είναι η χρήση νερού, που αναζητείται στο φεγγάρι και στον πλανήτη Άρη, προς παραγωγή υδρογόνου για την κάλυψη των ενεργειακών αναγκών των μελλοντικών αποστολών.

Στις μέχρι σήμερα δημοσιεύσεις αναφέρεται πειραματικά η δυνατότητα φόρτισης του φουλερενίου με ένα μόνο μόριο υδρογόνου ενώ στις θεωρητικές μελέτες υπάρχει μεγάλη ασυμφωνία των αποτελεσμάτων όπου αναφέρουν από 2 έως 57 άτομα υδρογόνου εντός του φουλερενίου με διατήρηση της ακεραιότητας του κλωβού.

Στην παρούσα εργασία διερευνάται θεωρητικά η δυνατότητα φόρτισης των φουλερενίων με υδρογόνο και μελετάται η αλληλεπίδραση του υδρογόνου με τον κλωβό του φουλερενίου. Για τη μελέτη αυτή χρησιμοποιούνται Ab initio Car Parinello μοριακές προσωμοιώσεις με χρήση του προγράμματος CPMD. Για την κάλυψη της απαιτούμενης υπολογιστικής ισχύς χρησιμοποιήθηκε το σύστημα

υπερυπολογιστών της νοτιοανατολικής Ευρώπης. Επιλέχθηκε η φόρτιση του φουλερενίου με 2, 16, 26, 38, 50 και 58 άτομα υδρογόνου. Τα υδρίδια του φουλερενίου μελετήθηκαν στα ακρότατα θερμοκρασιακά όρια που έχουν μετρηθεί στον πλανήτη Άρη δηλαδή 122 K και 300 K. Η προσομοιώσεις εκτελέστηκαν σε μικροκανονικό (NVT) σύνολο.

Από την παρούσα μελέτη φαίνεται ότι 50 άτομα υδρογόνου το μέγιστο μπορούν να τοποθετηθούν εντός του φουλερενίου στους 122 Kelvin χωρίς το τελευταίο να διασπαστεί ενώ στους 300 Kelvin με 50 υδρογόνα το φουλερένιο διασπάται. Για μικρότερο αριθμό υδρογόνων το φουλερένιο φαίνεται να διατηρεί την ακεραιότητα του. Για πρώτη φορά βιβλιογραφικά διαφαίνεται η επίδραση της θερμοκρασίας στη σταθερότητα της δομής του C₆₀H_x. Μέσα από τη μελέτη των προσομοιώσεων εξάγονται συμπεράσματα για το μηχανισμό της διάσπασης και τις τεχνολογικές δυνατότητες αυτών των δομών.