



单层石墨烯储氢的蒙特卡罗模拟

张明, 张晋, 郭鹏丽, 郭金花

云南大学物理系, 云南昆明 650091

Monte carlo simulations of hydrogen physisorption on single-layer graphene

ZHANG Ming, ZHANG Jin, GUO Peng-li, GUO Jin-hua

Department of Physics, Yunnan University, Kunming 650091, China

- 摘要
- 参考文献
- 相关文章

全文: [PDF \(1318 KB\)](#) [HTML \(1 KB\)](#) 输出: [BibTeX](#) | [EndNote \(RIS\)](#) [背景资料](#)

摘要 用正则系综蒙特卡罗(GCMC)方法,在77~473K温度和0.1~10MPa压强下,对石墨烯上吸附氢分子进行模拟计算.结果表明:低温及高压条件有利于储氢.在10MPa压强下,随着温度增加,等量吸附热先减少后增加.当温度在291K时,等量吸附热值最低.

关键词: 石墨烯 吸附热 等温线 储氢

Abstract: The physisorption behavior of hydrogen molecules adsorbed on single-layer graphene is simulated using Grand Canonical Monte Carlo(GCMC)approach.The simulations are carried out at temperature 77 — 473 K and under the pressure in the range of 0.1 —10 MPa.The results show that under the conditions of low-temperature and high-pressure the hydrogen storage on single-layer graphene is more effective.At 10 MPa pressure, isosteric heat with increasing temperature first decreases then increases.The lowest isosteric heat is found at 291 K.

Key words:

收稿日期: 2009-10-23;

通讯作者: 张晋(1962-),女,云南人,博士,教授,主要从事低维纳米结构和人工带隙材料的研究.E-mail: zhangjin29@yahoo.cn

引用本文:

张明,张晋,郭鹏丽等. 单层石墨烯储氢的蒙特卡罗模拟[J]. 云南大学学报(自然科学版), 2010, 32(3): 294-298 .

\$author.xingMing_EN,\$author.xingMing_EN,\$author.xingMing_EN et al. Monte carlo simulations of hydrogen physisorption on single-layer graphene[J]. , 2010, 32(3): 294-298 .

没有本文参考文献

没有找到本文相关文章

服务

- ▶ 把本文推荐给朋友
- ▶ 加入我的书架
- ▶ 加入引用管理器
- ▶ E-mail Alert
- ▶ RSS

作者相关文章

- ▶ 张明
- ▶ 张晋
- ▶ 郭鹏丽
- ▶ 郭金花

版权所有 © 《云南大学学报(自然科学版)》编辑部

编辑出版：云南大学学报编辑部（昆明市翠湖北路2号，650091）

电话：0871-5033829(传真) 5031498 5031662 E-mail: yndxxb@ynu.edu.cn yndxxb@163.com