Ain Shams University
Faculty of Education
Physics Department

Theoretical Investigation of Hydrogen Storage Capacity in Defected Carbon Materials

THESIS

Submitted in partial fulfillment
of the requirement for the Master degree of
Teacher Preparation in Science (Physics)

By

Mohamed Ahmed Farea Mohsen Al Khateeb

To
Physics Department
Faculty of Education
Ain Shams University

2011

بسم الله الرحمن الرحيم

{قالوا سبحانك لا علم لنا
إلا ما علمتنا إنك أنت
العليم الحكيم}

صدق الله العظيم

Ain Shams University
Faculty of Education
Physics Department

Researcher Name*: Mohamed Ahmed Farea Mohsen Al-Khateeb*

Title of the thesis: *Theoretical Investigation of Hydrogen Storage Capacity in Defected Carbon Materials*

Submitted to: *Physics Department, Faculty of Education, Ain Shams University*

Supervisors:

1- Prof. Dr. Mohamed Ahmed Kamel

2- Dr. Khaled Mahmoud Ahmed Eid

3- Dr. Ahlam Abd El-Monem Ahmed El-Barbary

Approval Sheet

Title :" Theoretical Investigation of Hydrogen Storage Capacity in Defected Carbon Materials"

Candidate: Mohamed Ahmed Farea Mohsen Al-Khateeb

Degree : Master degree of Teacher Preparation in Science (Physics)

Board of Advisors

Approved by

1. **Prof. Dr/ Mohamed Ahmed Kamel**
   Prof. of Theoretical Physics
   Faculty of Education, Ain Shams University

2. **Dr/ Khaled Mahmoud Ahmed Eid**
   Associate Professor of Theoretical Physics
   Faculty of Education, Ain Shams University

3. **Dr/ Ahlam Abd El-Monem Ahmed El-Barbary**
   Lecturer of Theoretical Physics
   Faculty of Education, Ain Shams University

Date of presentation: / / 2011

Post graduate studies:

Stamp: / / Date of approval: / / 2011

Approval of Faculty Council: / / 2011

Approval of University Council: / / 2011

جامعة عين شمس
كليـــة التربيـــة
قســـم الفيزيـاء

دراسة نظرية لسعة تخزين الهيدروجين في المواد الكربونيه المشوهة

رسالة
مقدمة للحصول على ماجستير إعداد المعلم
فى العلوم (فيزياء)

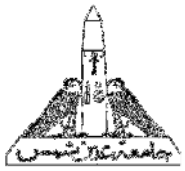
مقدمة من

محمد أحمد فارع محسن الخطيب

إلى

قسم الفيزياء
كلية التربية
جامعة عين شمس

٢٠١١



جامعة عين شمس
كليــة التربيــة
قســم الفيزيــاء

رسالة ماجستير

اسم الطالب **: *محمد أحمد فارع محسن الخطيب***

عنوان الرسالة **:** دراسة نظرية لسعة تخزين الهيدروجين في المواد الكربونيه المشوهة

اسم الدرجة **:** ماجستير إعداد المعلم فى العلوم (فيزياء)

لجنة الإشراف:

١ـ أ. د. محمد أحمد كامل
أستاذ الفيزياء النظرية- كلية التربية- جامعة عين شمس
٢ـ د. خالد محمود احمد عيد
أستاذ مساعد الفيزياء النظرية- كلية التربية- جامعة عين شمس
٣ـ د. أحلام عبد المنعم أحمد البربري
مدرس الفيزياء النظرية- كلية التربية- جامعة عين شمس

تاريخ البحث: / / ٢٠١١

الدراسات العليا

ختم الإجازة — أجيزت الرسالة بتاريخ / /٢٠١١

موافقة مجلس الكلية / /٢٠١١ — موافقة مجلس الجامعة / /٢٠١١

جامعة عين شمس
كليـة التربيـــة
قســم الفيزيـاء

صفحة العنوان

اســـــم الطـــالب : *محمد أحمد فارع محسن الخطيب*

الدرجـــة العلميـــة : المـــاجستـــيرفى اعداد المعلم فى الفيزياء

القسم التـــابع لـــه : الفـــيزيـــاء

اسم الكلـــــيـــة : التـــربـــية

الجـــــامعـــــــة : عيـــن شمس

ســـنة التخـــــرج: ٢٠٠١

سنـــة المنـــــــح : ٢٠١١

جامعة عين شمس
كلية التربية
قسم الفيزياء

شكر و تقدير

اشكر السادة الأساتذة الذين قاموا بالإشراف على هذة الرسالة و هم:

١ـ أ. د/ محمد أحمد كامل
أستاذ الفيزياء النظرية- كلية التربية- جامعة عين شمس

٢ـ د/ خالد محمود احمد عيد
أستاذ مساعد الفيزياءالنظرية - كلية التربية- جامعة عين شمس

٣ـ د/ أحلام عبد المنعم أحمد البربري
مدرس الفيزياء النظرية- كلية التربية- جامعة عين شمس

الإهـــــــــــــــــــــداء

أهــدي هذا العمـــل إلى:

وطنـــــــــي الذي ليس كمثله وطن.....وفاءً بالجميل،

روح أمـــــي الطاهرة.....دعاءً ورحمة،

روح والـــــدي الطاهرة..... دعاءً ورحمة،

زوجتـــــي الغالية، واولادي ..... حبــا، وتقديراً،

كل من اسدل لي معروفاً وانار لي الطريق.....عرفاناً بالجميل،

الباحثون في محراب العلم.....دعاءً، وتوفيقاً.

Abstract

This work is classified as follows:

Hydrogen is abundant, uniformly distributed throughout the Earth`s surface and its oxidation product (water) is environmentally benign. Owing to these features, it is considered as an ideal synthetic fuel for new energetic matrix (renewable, secure and environmentally friendly) that could allow a sustainable future development. However, for this prospect to become a reality, efficient ways to produce, transport and store hydrogen still need to be developed. In this thesis, theoretical studies of a number of potential hydrogen storage materials have been performed using Hartree Fock (HF) and Density Functional (DFT) theories with applying 3-21G and 6-31G basis sets. The hydrogen storage in two different types of carbon materials, pristine- graphite and carbon (5.5) nanotubes, will be investigated. Then, we will explore the role of defects and doping on the cavity of hydrogen storage. Therefore, we will study isolated, mono- and di- vacancy defected graphite and (5.5) carbon nanotubes. The effect of boron and nitrogen doping in graphite and (5.5) carbon nanotubes will be also studied. Mulliken analysis, electron distribution and molecular orbitals will be applied to analyze the obtained results.

Contents

Chapter III
Literature review

Chapter IV
The role of irradiation in graphite for hydrogen storage

Chapter V
Vacancy and Heteroatoms Defects in Carbon Nanotubes for Hydrogen Storage

List of Figures