

CARBON NANOFLOWERS FOR HYDROGEN STORAGE AND AIR PURIFICATION APPLICATIONS

Kostoglou N.^{1,2}, Zeiler S.², Florides F.³, Shucheng C.⁴, Bao Z.⁴, Mitterer C.², Kostoglou K.⁵, Rebholz C.⁶, and Giannakoudakis D.A.³

¹*Institute of Geoenergy, Foundation for Research & Technology – Hellas, Chania, Greece, Email: nkostoglou@ig.forth.gr*

²*Department of Materials Science, Montanuniversität Leoben, Leoben, Austria*

³*Faculty of Chemistry, Maria Curie-Skłodowska University, 20031 Lublin, Poland*

⁴*Department of Chemical Engineering, Stanford University, Stanford, CA, 94305, USA*

⁵*Institute of Neural Engineering, Graz University of Technology, 8010, Graz, Austria*

⁶*Department of Mechanical & Manufacturing Engineering, University of Cyprus, Nicosia, Cyprus*

ABSTRACT

Nanostructured carbon materials with controlled porosity and surface chemistry represent highly promising solutions for both hydrogen (H₂) storage and environmental remediation applications. In this work, four carbon nanoflower (CNF) samples were synthesized via free-radical polymerization of acrylonitrile, followed by stabilization, carbonization and chemical activation with KOH, leading to hierarchical nanoporous structures with tunable physicochemical properties [1]. Comprehensive characterization was performed using N₂ adsorption at 77 K, H₂ adsorption (up to 100 bar at 77 K and 298 K), Raman spectroscopy, X-ray photoelectron spectroscopy (XPS), and scanning electron microscopy (SEM). The CNF materials exhibited very high specific surface areas of up to ~3000 m²/g and total pore volumes up to ~1.3 cm³/g, with dominant microporosity (80-92 %) and narrow pore size distributions (1.1-1.2 nm), features that are particularly favorable for gas adsorption. H₂ storage measurements revealed uptakes of up to ~2.5 wt.% at 77 K and 1 bar, while at higher pressures the maximum excess uptake reached ~5.6 wt.% at 77 K and ~35 bar and the total storage capacity reached ~8.2 wt.% at 77 K and ~95 bar, confirming the high adsorption performance of the materials. A positive relationship between micropore volume and H₂ uptake was observed, highlighting the critical role of narrow microporosity in governing H₂ storage performance. XPS analysis indicated the presence of heteroatoms (O, N), which may enhance surface interactions and contribute to the adsorption of hazardous organic compounds. In this respect, the CNF materials showed strong potential for air purification applications, including the removal of toxic vapors. In particular, towards vapors of a mustard gas simulant, the best performing CNF exhibited showed a gravimetric uptake reaching 1.4 times its own mass (1400 mg/g), with limited desorption, indicating strong adsorption. Finally, a multivariate analysis integrating textural properties, surface composition, H₂ uptake and mustard gas removal performance was carried out to assess similarities among the CNF materials and to identify the key features governing their separation. Overall, carbon nanoflowers emerge as efficient and versatile material platforms that bridge clean energy and environmental protection applications, offering significant potential for advanced adsorption-based systems.

References

[1] Gong, H., Wei, L., Chen, S., Chen, Z., Jaramillo, T. F., Bao, Z. (2023). Carbon flowers as electrocatalysts for the reduction of oxygen to hydrogen peroxide. *Nano Research*, 16(9), 11556-11563.

ΑΝΘΡΑΚΟΥΧΑ ΝΑΝΟΑΝΘΗ ΓΙΑ ΑΠΟΘΗΚΕΥΣΗ ΥΔΡΟΓΟΝΟΥ ΚΑΙ ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ ΚΑΘΑΡΙΣΜΟΥ ΑΕΡΑ

Kostoglou N.^{1,2}, Zeiler S.², Florides F.³, Shucheng C.⁴, Bao Z.⁴, Mitterer C.², Kostoglou K.⁵,
Rebholz C.⁶, and Giannakoudakis D.A.³

¹*Institute of Geoenergy, Foundation for Research & Technology – Hellas, Chania, Greece, Email:*
nkostoglou@ig.forth.gr

²*Department of Materials Science, Montanuniversität Leoben, Leoben, Austria*

³*Faculty of Chemistry, Maria Curie-Skłodowska University, 20031 Lublin, Poland*

⁴*Department of Chemical Engineering, Stanford University, Stanford, CA, 94305, USA*

⁵*Institute of Neural Engineering, Graz University of Technology, 8010, Graz, Austria*

⁶*Department of Mechanical & Manufacturing Engineering, University of Cyprus, Nicosia, Cyprus*

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Τα νανοδομημένα ανθρακούχα υλικά με ελεγχόμενη πορώδη δομή και επιφανειακή χημεία αποτελούν ιδιαίτερα υποσχόμενες λύσεις τόσο για την αποθήκευση υδρογόνου (H₂) όσο και για εφαρμογές περιβαλλοντικής αποκατάστασης. Στην παρούσα εργασία συντέθηκαν τέσσερα δείγματα ανθρακούχων νανοανθέων (carbon nanoflowers, CNFs) μέσω πολυμερισμού ελευθέρων ριζών ακρυλονιτριλίου, ακολουθούμενου από σταθεροποίηση, ανθρακοποίηση και χημική ενεργοποίηση με KOH, οδηγώντας σε ιεραρχικές νανοπορώδεις δομές με ρυθμιζόμενα φυσικοχημικά χαρακτηριστικά [1]. Ο εκτενής χαρακτηρισμός των υλικών πραγματοποιήθηκε με προσρόφηση N₂ στους 77 K, προσρόφηση H₂ (έως 100 bar στους 77 K και 298 K), φασματοσκοπία Raman, φασματοσκοπία φωτοηλεκτρονίων ακτίνων X (XPS) και ηλεκτρονική μικροσκοπία σάρωσης (SEM). Τα CNFs παρουσίασαν πολύ υψηλές ειδικές επιφάνειες έως ~3000 m²/g και συνολικούς όγκους πόρων έως ~1.3 cm³/g, με κυρίαρχη μικροπορώδη δομή (80-92 %) και στενή κατανομή μεγέθους πόρων (1.1-1.2 nm), χαρακτηριστικά που ευνοούν ιδιαίτερα την προσρόφηση αερίων. Οι μετρήσεις αποθήκευσης υδρογόνου έδειξαν προσροφήσεις έως ~2.5 wt.% στους 77 K και 1 bar, ενώ σε υψηλότερες πιέσεις η μέγιστη περίσσεια (excess) προσρόφησης έφτασε ~5.6 wt.% στους 77 K και ~35 bar και η συνολική (total) αποθηκευτική ικανότητα ~8.2 wt.% στους 77 K και ~95 bar, επιβεβαιώνοντας την υψηλή προσροφητική απόδοση των υλικών. Παρατηρήθηκε θετική συσχέτιση μεταξύ μικροπορώδους όγκου και προσρόφησης H₂, αναδεικνύοντας τον καθοριστικό ρόλο της στενής μικροπορώδους δομής στη συμπεριφορά αποθήκευσης υδρογόνου. Η ανάλυση XPS έδειξε την παρουσία ετεροατόμων (O, N), τα οποία ενδέχεται να ενισχύουν τις επιφανειακές αλληλεπιδράσεις και να συμβάλλουν στην προσρόφηση επικίνδυνων οργανικών ενώσεων. Στο πλαίσιο αυτό, τα CNFs παρουσιάζουν σημαντικό δυναμικό για εφαρμογές καθαρισμού αέρα, συμπεριλαμβανομένης της απομάκρυνσης τοξικών ατμών. Ειδικότερα, έναντι ατμών προσομοιωτή αερίου μουστάρδας, το αποδοτικότερο δείγμα εμφάνισε ικανότητα προσρόφησης που έφτασε έως και 1.4 φορές το ίδιο του το βάρος (1400 mg/g), με περιορισμένη εκρόφηση, γεγονός που υποδηλώνει ισχυρή αλληλεπίδραση με την επιφάνεια. Τέλος, πραγματοποιήθηκε πολυπαραμετρική ανάλυση που συνδύασε τα χαρακτηριστικά πορώδους δομής, τη σύσταση επιφάνειας, την προσρόφηση H₂ και την απόδοση απομάκρυνσης αερίου μουστάρδας, με στόχο την αξιολόγηση των ομοιοτήτων μεταξύ των CNFs και τον προσδιορισμό των βασικών παραμέτρων που καθορίζουν τη διαφοροποίησή τους. Συνολικά, τα CNFs αναδεικνύονται ως αποδοτικές και ευέλικτες πλατφόρμες υλικών που γεφυρώνουν τις εφαρμογές καθαρής ενέργειας και περιβαλλοντικής προστασίας, προσφέροντας σημαντικές προοπτικές για προηγμένα συστήματα προσρόφησης.

Βιβλιογραφία

[1] Gong, H., Wei, L., Chen, S., Chen, Z., Jaramillo, T. F., Bao, Z. (2023). Carbon flowers as electrocatalysts for the reduction of oxygen to hydrogen peroxide. *Nano Research*, 16(9), 11556-11563.