

Научная статья

1.3.8. Физика конденсированного состояния (физико-математические науки)

УДК 539.3

doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2026.01.008

## ВОДОРОД-СОРБЦИОННАЯ ЁМКОСТЬ ЧЕШУЙКИ СКОМКАННОГО ГРАФЕНА С ЧАСТИЦАМИ ЛИТИЯ

Бассареев Азат Ахатович<sup>1</sup>, Крылова Карина Александровна<sup>2</sup>

<sup>1,2</sup>Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, ул. Степана Халтурина, 39, 450001, Уфа, Россия

<sup>1</sup>bassareev@gmail.com, <https://orcid.org/0009-0005-7575-977X>

<sup>2</sup>bukreevakarina@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0001-6109-6454>

**Аннотация.** Методом молекулярной динамики исследовано влияние количества атомов лития на водород-сорбционную емкость чешуек скомканного графена. Рассмотрены структуры с разным числом атомов лития: 0, 5,6 и 22,4 ат.% Li соответственно. Наводораживание структур проводилось при температурах 77 и 300 К. Показано, что легирование чешуек скомканного графена литием приводит к увеличению их гравиметрической плотности. Наибольшая водород-сорбционная емкость (5,5 масс. %) достигнута для чешуек с 5,6 ат. % лития при 77 К. Увеличение количества лития до 22,4 ат. % приводит к снижению сорбционной емкости из-за формирования агломератов лития на поверхности графена, что затрудняет адсорбцию водорода. При повышении температуры до 300 К водород-сорбционная емкость снижается до 1,5-2 масс.% у структур с 5,6 ат.% Li. Однако данная сорбционная емкость в два раза выше, чем у графеновой чешуйки без атомов лития. Результаты исследования демонстрируют перспективность использования чешуек скомканного графена модифицированные атомами лития, в качестве материалов для хранения и транспортировки водорода, поскольку они демонстрируют оптимальные показатели водород-сорбционной емкости.

**Ключевые слова:** скомканный графен, атомы лития, водород-сорбционная емкость, молекулярная динамика, гравиметрическая плотность.

**Благодарности:** Работа Бассареева А.А. и Крыловой К.А. поддержана госзаданием ИПСМ РАН.

---

**Для цитирования:** Бассареев А.А., Крылова К.А. Водород-сорбционная емкость чешуйки скомканного графена с частицами лития // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2026. Т. 23, № 1. С. 73-79. doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2026.01.008.

---

Original article

## HYDROGEN SORPTION CAPACITY OF CRUMPLED GRAPHENE FLAKES WITH LITHIUM

Azat A. Bassareev<sup>1</sup>, Karina A. Krylova<sup>2</sup><sup>1,2</sup>Institute for Metals Superplasticity Problems, Russian Academy of Sciences, 39 Stepana Khalturina St., Ufa, 450001, Russia<sup>1</sup>bassareev@gmail.com, <https://orcid.org/0009-0005-7575-977X><sup>2</sup>bukreevakarina@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0001-6109-6454>

**Abstract.** The effect of the number of lithium atoms on the hydrogen sorption capacity of crumpled graphene flakes was studied using molecular dynamics. Structures containing different quantities of lithium atoms were considered: 0, 5.6 and 22.4 at.% Li, respectively. The structures were hydrogenated at 77 and 300 K. It was shown that doping the crumpled graphene flakes with lithium leads to an increase in their gravimetric density. The highest hydrogen sorption capacity (5.5 wt%) was obtained for flakes with 5.6 at.% Li at 77 K. Increasing the lithium content to 22.4 at. % leads to a decrease in sorption capacity due to the formation of lithium agglomerates on the graphene surface, which makes it difficult to adsorb hydrogen. When the temperature rises to 300 K, the hydrogen sorption capacity decreases to 1.5-2 wt.% in structures with 5.6 at.% Li. However, this sorption capacity is twice as high as that of a graphene flake without Li atoms. The results of the study demonstrate the potential for using crumpled graphene flakes modified with lithium atoms to store and transport hydrogen, as they demonstrate an optimal hydrogen sorption capacity.

**Keywords:** crumpled graphene, lithium atoms, hydrogen sorption capacity, molecular dynamics, gravimetric density.

**Acknowledgments:** Work of A.A. Bassareev and K.A. Krylova was supported by the state assignment of the Institute for Metals Superplasticity Problems, Russian Academy of Sciences (IPMS RAS).

**For citation:** Bassareev A.A., Krylova K.A. (2026). Hydrogen sorption capacity of crumpled graphene flakes with lithium. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 23(1), 73-79. (In Russ.). doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2026.01.008.

## Введение

Одной из актуальных задач современности является разработка технологий, направленных на повышение эффективности энергетических систем и снижение их воздействия на окружающую среду. Водород, как перспективный источник энергии, обладает высокой плотностью, экологической чистотой при сгорании и возможностью использования в различных отраслях промышленности, включая электроэнергетику и транспорт. Однако, эффективное хранение и транспортировка водорода имеет большой спектр проблем, решение которых чаще всего основано на поиске новых материалов с высокой сорбционной ёмкостью, стабильностью и экономической целесообразностью [1-6].

Скомканный графен [7-10], благодаря своей высокой пористости, большой удельной площади поверхности и высокой адсорбционной способности к различным газам, является одним из перспективных материалов для хранения водорода. Однако при нормальных усло-

виях (температуре 300 К и давлении 1 атм.) его водород-сорбционная способность ограничена 2 масс.%, что недостаточно для практического применения в водородной энергетике, поскольку мировые требования к минимальной адсорбированной массе водорода для практических приложений должно превышать 3 масс.% [11,12]. Одним из путей повышения этой способности является изменение условий хранения водорода, например, повышение давления или понижение температуры [13-18], а также модификация структуры графена, например, добавление атомов лития. Так в статье [19] показано, что введение двух атомов лития в структуру графен-2(Li-3H<sub>2</sub>) способствует увеличению сорбционной емкости водорода до 10,2 мас.%. В свою очередь, в исследовании [20] установлено, что добавление лития с обеих сторон листа октографена приводит к росту сорбции водорода с 2,4 до 8,1 масс.%.

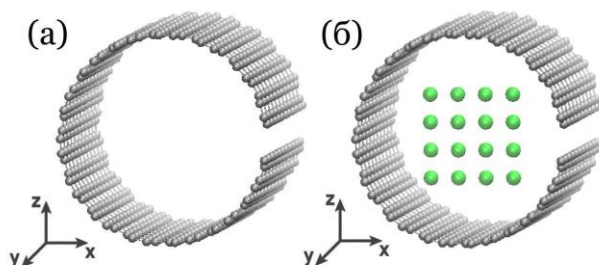
В связи с этим в данной работе методом молекулярной динамики исследуется водород-сорбционные свойства чешуйки скомканного графена, модифицированного атомами Li, для

ее возможного применения в качестве среды хранения водорода. Данный метод позволит изучить процесс наводороживания и определить оптимальную концентрацию лития для достижения наилучших водород-сорбционных свойств. Целью данной работы является исследование влияния количества частиц лития на водород-сорбционную емкость чешуек скомканного графена методом молекулярно-динамического моделирования.

### Детали моделирования

Исходная структура чешуйки скомканного графена показана на рис. 1а. Графеновая чешуйка создавалась из углеродной нанотрубки диаметром 2 нм и длиной 2,5 нм путем вырезания двух атомных рядов вдоль направления «зигзаг» или вдоль длины нанотрубки. После вырезания атомных рядов количество атомов углерода в чешуйке уменьшилось с 308 до 286 атомов.

Атомы лития располагались внутри созданной скомканной графеновой чешуйки, как показано на рис.1б. В работе исследовались структуры без атомов лития и с 16 и 64 атомами лития, что составляет 5,6 и 22,4 ат.% соответственно.

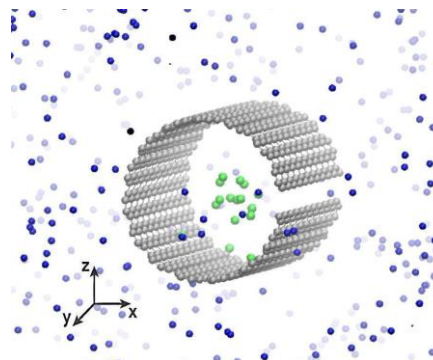


**Рис.1.** Начальная структура чешуйки скомканного графена без атомов Li (а) и модифицированная атомами Li – 5,6 ат.% (б). Атомы С показаны серым цветом, а атомы Li – зеленым.

**Fig.1.** Initial structure of crumpled graphene flake without Li atoms (a) and Li-decorated – 5.6 at.%. C atoms are shown in gray, and Li atoms in green.

Чешуйка скомканного графена с разным количеством атомов лития и без атомов Li размещалась в водородной атмосфере, состоящая из 3 600 атомов водорода. Отметим, что изначально водород в исходной структуре представлял собой отдельные атомы. Однако после релаксации структуры и термической выдержки при температуре 300 К в течении первых 2

пс более 90 % атомов водорода перешли в молекулярное состояние ( $H_2$ ) (см. рис. 2).



**Рис.2.** Чешуйка скомканного графена с 5,6 ат.% Li в атмосфере водорода после релаксации. Атомы и молекулы водорода показаны синим цветом, цвет остальных атомов такой же как на рис. 1.

**Fig.2.** Crumpled graphene flake with 5.6 at.% Li in a hydrogen atmosphere after relaxation. Hydrogen atoms and molecules are shown in blue, the colour of the remaining atoms is the same as in Fig. 1.

Молекулярно-динамическое моделирование проводилось с использованием программного пакета LAMMPS [21]. Расчеты проводились с применением межатомных потенциалов AIREBO и Морзе [22,23]. Потенциал AIREBO описывал взаимодействие между атомами C-C, H-H и C-H. Для описания взаимодействия между атомами Li-C, Li-Li и Li-H использовался межатомный потенциал Морзе. Параметры потенциала Морзе для данных межатомных взаимодействий были взяты из [24,25], соответственно.

Структуры были выдержаны при температурах 77 и 300 К в течение 300 пс. В процессе такой выдержки происходило наводороживание структур. Контроль температуры и давления в системе осуществлялся с помощью термостата Носе-Гувера с ансамблем NPT (постоянное число частиц, давление и температура).

Все расчеты проводились с использованием периодических граничных условий, что позволило моделировать структуру без учета краевых эффектов. Чтобы избежать раскрытия графеновых чешуек при высоких температурах, их положение фиксировалось в процессе моделирования.

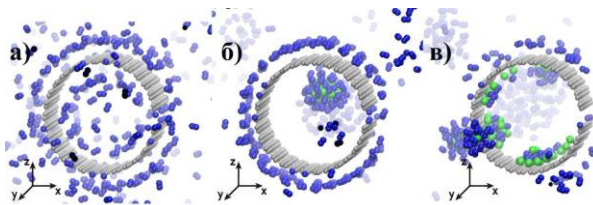
Водород-сорбционная способность исследуемых структур осуществлялась с помощью анализа изменения гравиметрической плотности водорода. Для ее расчета использовалась следующая формула:

$$g = \frac{m_H}{(m_H + m_C)} \cdot 100\%$$

где  $m_H$  - адсорбируемые атомы водорода, а  $m_C$  - атомы углерода. Анализ изменения гравиметрической плотности проводился с использованием собственных программных пакетов. Визуализация структуры выполнялась с помощью программы Visual Molecular Dynamics [26].

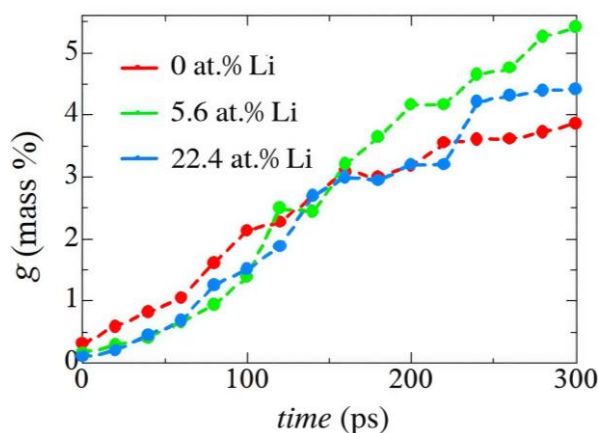
### Результаты и их обсуждение

На рис. 3 представлены структуры чешуек скомканного графена с различным количеством атомов лития после выдержки при температуре 77 К в течение 300 пс. В случае чешуйки без лития (рис. 3а) водород адсорбируется на поверхности графена за счет слабых сил Ван-дер-Ваальса, а также проникает во внутреннюю полость чешуйки. Добавление 5,6 ат.% Li (рис. 3б) приводит к адсорбции водорода как на поверхности графеновой чешуйки, так и внутри структуры на частице Li. Отметим, что атомы лития сформировали внутри графеновой чешуйки агломерат, который стал центром адсорбции атомов водорода во внутренней полости чешуйки. При этом с самой чешуйкой агломерат лития не связан, а в процессе выдержке более 300 пс агломерат из структуры графена не выходит. При увеличении количества лития до 22,4 ат.% (рис. 3в) атомы лития распределяются по внутренней поверхности чешуйки графена более однородно, что приводит к снижению адсорбции водорода на внешней поверхности из-за экранирования активных сорбционных центров графена. При этом внутри чешуйки графена атомов водорода осаждается не много. Большая часть адсорбированного водорода находится на внешней поверхности чешуйки графена.



**Рис.3.** Чешуйки скомканного графена с разным количеством атомов лития: (а) 0, (б) 5,6 и (в) 22,4 ат.% после выдержки при 77 К в течение 300 пс.

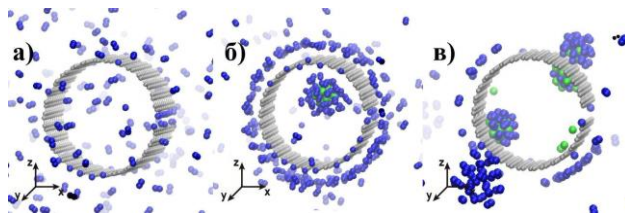
**Fig.3.** Crumpled graphene flakes with Li atoms: (a) 0, (b) 5.6 and (c) 22.4 at.% after exposure at 77 K for 300 ps.



**Рис.4.** Зависимость гравиметрической плотности чешуек скомканного графена с разным количеством атомов лития от времени выдержки при 77 К.

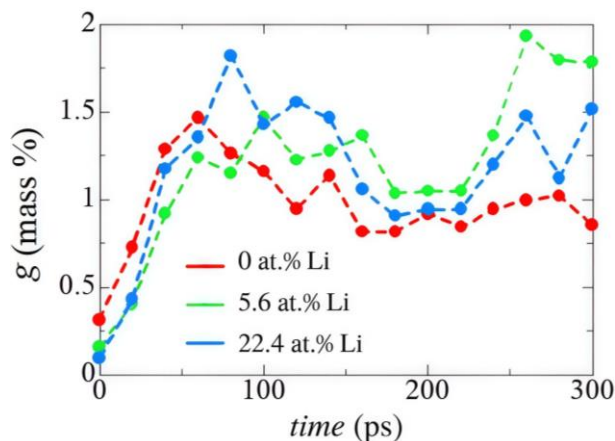
**Fig.4.** Gravimetric density of crumpled graphene flakes with lithium atoms as a function of time at 77 K.

На рис.4 показаны кривые зависимости гравиметрической плотности водорода от времени выдержки при 77 К для различных структур. Наибольшая гравиметрическая плотность достигается для чешуйки с 5,6 ат. % лития и составляет около 5,5 масс.%. При 22,4 ат.% лития наблюдается снижение  $g$  до 4,3 масс.%. Это связано с тем, что избыточное количество лития частично блокирует доступ водорода к углеродной матрице, снижая эффективность адсорбции. Наименьшая гравиметрическая плотность у чешуйки без лития – около 3,8 масс.%.



**Рис.5.** Чешуйки скомканного графена с разным количеством атомов лития: (а) 0, (б) 5,6 и (в) 22,4 ат.% после выдержки при 300 К в течение 300 пс.

**Fig.5.** Crumpled graphene flakes with lithium atoms: (a) 0, (b) 5.6 and (c) 22.4 at.% after exposure at 300 K for 300 ps.

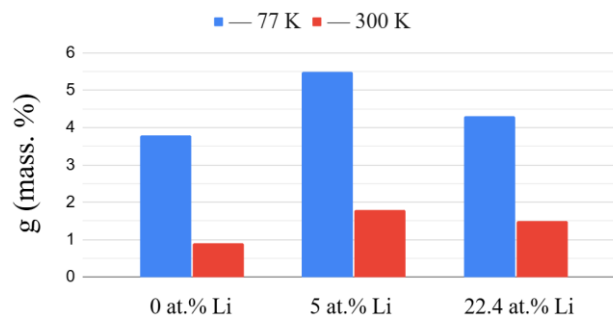


**Рис.6.** Зависимость гравиметрической плотности чешуек скомканного графена с разным количеством атомов лития от времени выдержки при 300 К.

**Fig.6.** Gravimetric density of crumpled graphene flakes with lithium atoms as a function of time at 300 K.

При повышении температуры до 300 К (рис.5) наблюдается значительное снижение адсорбции водорода на чешуйке без лития из-за разрушения слабых межмолекулярных взаимодействий. Гравиметрическая плотность в этом случае снижается до 0,9 масс.%( см. рис.6). Однако модификация структуры графена атомами лития способствует удержанию водорода внутри структуры за счет образования более прочных связей между литием и водородом. Для чешуйки с 5,6 ат.% лития гравиметрическая плотность при 300 К составляет около 1,8 масс.%( рис. 6), что в два раза превышает показатель для чешуйки без лития. При 22,4 ат.% лития гравиметрическая плотность достигает 1,5 масс.%.

Сравнительный анализ гравиметрической плотности чешуек с 16 атомами лития при различных температурах представлен на рис. 7. При 77 К гравиметрическая плотность в три раза выше, чем при 300 К, что обусловлено более эффективной физической адсорбцией водорода при низких температурах. Максимальная сорбционная емкость 5,5 масс.% достигается у чешуйки скомканного графена модифицированного 5,6 ат.% Li после выдержки при 77 К в течение 300 пс. Тем не менее, даже при 300 К легирование литием позволяет значительно повысить сорбционную емкость по сравнению с чистым графеном.



**Рис.7.** Диаграмма зависимости гравиметрической плотности чешуек скомканного графена с атомами лития после выдержки при 77 и 300 К в течение 300 пс.

**Fig.7.** Gravimetric density of crumpled graphene flakes with lithium atoms after exposure at 77 and 300 K for 300 ps.

### Выводы

Таким образом, с помощью молекулярно-динамического моделирования изучено влияние количества атомов лития на водород-сорбционную емкость чешуек скомканного графена. На основании полученных результатов установлено, что легирование чешуек скомканного графена литием приводит к увеличению их гравиметрической плотности. Наибольшая гравиметрическая плотность, достигающая 5,5 масс.%, наблюдалась у чешуек с 5,6 ат.% лития после выдержки при 77 К в течение 300 пс.

Температура оказывает существенное влияние на процесс наводороживания: при 77 К водород-сорбционная емкость выше во всех случаях, что связано с эффективной адсорбцией водорода на углеродной поверхности за счет слабых сил Ван-дер-Ваальса. При повышении температуры до 300 К тепловые флуктуации разрушают эти взаимодействия, приводя к снижению сорбционной емкости чешуек. Однако легирование литием способствует повышению адсорбции водорода в структуре за счет образования более прочных связей между атомами лития и водородом. В результате гравиметрическая плотность чешуек с 5,6 ат.% лития при 300 К на 50% выше, чем у структур без атомов Li.

Полученные результаты демонстрируют перспективность использования чешуек скомканного графена, легированных литием, в качестве материалов для хранения водорода. Оптимальное содержание лития и выбор температурных условий позволяют существенно повысить водород-сорбционную емкость, что важно для разработки эффективных и энергоемких систем хранения водорода.

## Список литературы

1. Xie Z., Jin Q., Su G., Lu W. A review of hydrogen storage and transportation: progresses and challenges. // *Energies*. 2024. V. 17, №16. P. 4070.
2. Patel S.K.S., Gupta R.K., Rohit M.V., Lee J.K. Recent developments in hydrogen production, storage, and transportation: challenges, opportunities, and perspectives. // *Fire*. 2024. V. 7, №7. P. 233.
3. Tarkowski, R.; Uliasz-Misiak, B.; Tarkowski, P. Storage of hydrogen, natural gas, and carbon dioxide—Geological and legal conditions. *Int. J. Hydrogen Energy* 2021, 46, 20010–20022.
4. Crabtree, G. W., Dresselhaus, M. S., & Buchanan, M. V. (2004). The hydrogen economy. *Physics Today*, 57(12), 39–44.
5. Züttel, A., Remhof, A., Borgschulte, A., & Friedrichs, O. (2010). Hydrogen: the future energy carrier. *Philosophical Transactions of the Royal Society A*, 368(1923), 3329–3342.
6. Tarasov, B. P., Lototsky, M. V., & Yartys, V. A. (2008). Hydrogen storage in magnesium-based hydrides.
7. Xia, J., Chen, F., Li, J., & Tao, N. (2009). Measurement of the quantum capacitance of graphene. *Nature Nanotechnology*, 4(8), 505–509.
8. Cranford S.W., Buehler M.J. Packing efficiency and accessible surface area of crumpled graphene. // *Physical Review B*. 2011. V. 84, №20. P. 205451.
9. Leão M.B., Bordin J.R., de Matos C.F. Specific surface area versus adsorptive capacity: an application view of 3D graphene-based materials for the removal of emerging water pollutants. // *Water, Air, & Soil Pollution*. 2023. V. 234. P. 136.
10. Liu, S., Wang, A., Li, Q., Wu, J., Chiu, K., Huang, J., & Luo, J. (2018). Crumpled graphene balls: Stabilized dendrite-free lithium metal anodes. *Joule*, 2(1), 1–3.
11. Schlapbach L., Züttel A. Hydrogen-storage materials for mobile applications. // *Nature*. 2001. V. 414. P. 353–358.
12. Züttel A. Materials for hydrogen storage. // *Materials Today*. 2003. V. 6, №9. P. 24–33.
13. Jain V., Kandasubramanian B. Functionalized graphene materials for hydrogen storage. // *Journal of Materials Science*. 2020. V. 55, №6. P. 1865–1903.
14. Tozzini, V., Pellegrini, V. "Prospects for hydrogen storage in graphene." *Physical Chemistry Chemical Physics*, 15.1 (2013): 80–89.
15. Hirscher, M., Panella, B. "Nanostructures for hydrogen storage." *Journal of Alloys and Compounds*, 404–406 (2005): 399–401.
16. Züttel, A. "Hydrogen storage methods." *Naturwissenschaften*, 91(4), 157–172 (2004).
17. Dillon, A.C., Heben, M.J. "Hydrogen storage using carbon adsorbents: past, present and future." *Applied Physics A*, 72.2 (2001): 133–142.
18. Apkadirova N.G., Krylova K.A., Baimova J.A. Effect of external pressure on the hydrogen storage capacity of a graphene flake: molecular dynamics // *Lett. Mater.* 2022. V. 12(4s). P. 445–450.
19. Alekseeva O.K., Pushkareva I.V., Pushkarev A.S., Fateev V.N. Graphene and graphene-like materials for hydrogen energy. // *Reviews*. 2020. V. 15. P. 273–300.
20. Rekha B., Seenithurai S., Pandyan R.K. High capacity hydrogen storage in Li decorated octagraphene—a first principles study. // *Nano Hybrids and Composites*. 2017. V. 17. P. 131–139.
21. Plimpton S.J. Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics // *Journal of Computational Physics*. 1995. V. 117. P. 1–19.
22. Stuart S.J., Tutein A.B., Harrison J.A. A reactive potential for hydrocarbons with intermolecular interactions. // *Journal of Chemical Physics*. 2000. V. 112, №14. P. 6472–6486.
23. Morse P.M. Diatomic molecules according to the wave mechanics. II. Vibrational levels. // *Physical Review*. 1929. V. 34, №1. P. 57–64.
24. Galashev, A., Ivanichkina, K., Katin, K., & Maslov, M. (2019). Computational study of lithium intercalation in silicene channels on a carbon substrate after nuclear transmutation doping. *Computation*, 7(4), 60.
25. Qiang, W. C., & Dong, S. H. (2007). Arbitrary l-state solutions of the rotating Morse potential through the exact quantization rule method. *Physics Letters A*, 363(3), 169–176.
26. Humphrey, W., Dalke, A., & Schulten, K. (1996). VMD: Visual molecular dynamics. *Journal of Molecular Graphics*, 14(1), 33–38.

## Информация об авторах

А. А. Бассареев – аспирант первого курса Института проблем сверхпластичности металлов РАН.

К. А. Крылова – кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник Института проблем сверхпластичности металлов РАН.

## References

1. Xie Z., Jin Q., Su G., Lu W. A review of hydrogen storage and transportation: progresses and challenges. // *Energies*. 2024. V. 17, №16. P. 4070.
2. Patel S.K.S., Gupta R.K., Rohit M.V., Lee J.K. Recent developments in hydrogen production, storage, and transportation: challenges, opportuni-

- ties, and perspectives. // *Fire*. 2024. V. 7, №7. P. 233.
3. Tarkowski, R.; Uliasz-Misiak, B.; Tarkowski, P. Storage of hydrogen, natural gas, and carbon dioxide—Geological and legal conditions. *Int. J. Hydrogen Energy* 2021, 46, 20010–20022.
  4. Crabtree, G. W., Dresselhaus, M. S., & Buchanan, M. V. (2004). The hydrogen economy. *Physics Today*, 57(12), 39–44.
  5. Züttel, A., Remhof, A., Borgschulte, A., & Friedrichs, O. (2010). Hydrogen: the future energy carrier. *Philosophical Transactions of the Royal Society A*, 368(1923), 3329–3342.
  6. Tarasov, B. P., Lototsky, M. V., & Yartys, V. A. (2008). Hydrogen storage in magnesium-based hydrides.
  7. Xia, J., Chen, F., Li, J., & Tao, N. (2009). Measurement of the quantum capacitance of graphene. *Nature Nanotechnology*, 4(8), 505–509.
  8. Cranford S.W., Buehler M.J. Packing efficiency and accessible surface area of crumpled graphene. // *Physical Review B*. 2011. V. 84, №20. P. 205451.
  9. Leão M.B., Bordin J.R., de Matos C.F. Specific surface area versus adsorptive capacity: an application view of 3D graphene-based materials for the removal of emerging water pollutants. // *Water, Air, & Soil Pollution*. 2023. V. 234. P. 136.
  10. Liu, S., Wang, A., Li, Q., Wu, J., Chiu, K., Huang, J., & Luo, J. (2018). Crumpled graphene balls: Stabilized dendrite-free lithium metal anodes. *Joule*, 2(1), 1–3.
  11. Schlapbach L., Züttel A. Hydrogen-storage materials for mobile applications. // *Nature*. 2001. V. 414. P. 353–358.
  12. Züttel A. Materials for hydrogen storage. // *Materials Today*. 2003. V. 6, №9. P. 24–33.
  13. Jain V., Kandasubramanian B. Functionalized graphene materials for hydrogen storage. // *Journal of Materials Science*. 2020. V. 55, №6. P. 1865–1903.
  14. Tozzini, V., Pellegrini, V. "Prospects for hydrogen storage in graphene." *Physical Chemistry Chemical Physics*, 15.1 (2013): 80–89.
  15. Hirscher, M., Panella, B. "Nanostructures for hydrogen storage." *Journal of Alloys and Compounds*, 404–406 (2005): 399–401.
  16. Züttel, A. "Hydrogen storage methods." *Naturwissenschaften*, 91(4), 157–172 (2004).
  17. Dillon, A.C., Heben, M.J. "Hydrogen storage using carbon adsorbents: past, present and future." *Applied Physics A*, 72.2 (2001): 133–142.
  18. Apkadirova N.G., Krylova K.A., Baimova J.A. Effect of external pressure on the hydrogen storage capacity of a graphene flake: molecular dynamics // *Lett. Mater.* 2022. V. 12(4s). P. 445–450.
  19. Alekseeva O.K., Pushkareva I.V., Pushkarev A.S., Fateev V.N. Graphene and graphene-like materials for hydrogen energy. // *Reviews*. 2020. V. 15. P. 273–300.
  20. Rekha B., Seenithurai S., Pandyan R.K. High capacity hydrogen storage in Li decorated octagraphene—a first principles study. // *Nano Hybrids and Composites*. 2017. V. 17. P. 131–139.
  21. Plimpton S.J. Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics // *Journal of Computational Physics*. 1995. V. 117. P. 1–19.
  22. Stuart S.J., Tutein A.B., Harrison J.A. A reactive potential for hydrocarbons with intermolecular interactions. // *Journal of Chemical Physics*. 2000. V. 112, №14. P. 6472–6486.
  23. Morse P.M. Diatomic molecules according to the wave mechanics. II. Vibrational levels. // *Physical Review*. 1929. V. 34, №1. P. 57–64.
  24. Galashev, A., Ivanichkina, K., Katin, K., & Maslov, M. (2019). Computational study of lithium intercalation in silicene channels on a carbon substrate after nuclear transmutation doping. *Computation*, 7(4), 60.
  25. Qiang, W. C., & Dong, S. H. (2007). Arbitrary l-state solutions of the rotating Morse potential through the exact quantization rule method. *Physics Letters A*, 363(3), 169–176.
  26. Humphrey, W., Dalke, A., & Schulten, K. (1996). VMD: Visual molecular dynamics. *Journal of Molecular Graphics*, 14(1), 33–38.

#### Information about the authors

A. A. Bassareev is a first-year postgraduate student at the Institute for Metals Superplasticity Problems of the Russian Academy of Sciences.  
K. A. Krylova – PhD in Physical and Mathematical Sciences, Senior Researcher at the Institute for Metals Superplasticity Problems of the Russian Academy of Sciences.

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.  
The authors declare that there is no conflict of interest.

Статья поступила в редакцию 23.10.2025; одобрена после рецензирования 23.02.2026; принята к публикации 02.03.2026.

The article was received by the editorial board on 23 Oct. 2025; approved after reviewing 23 Feb.2026; accepted for publication 02 Mar. 2026.