

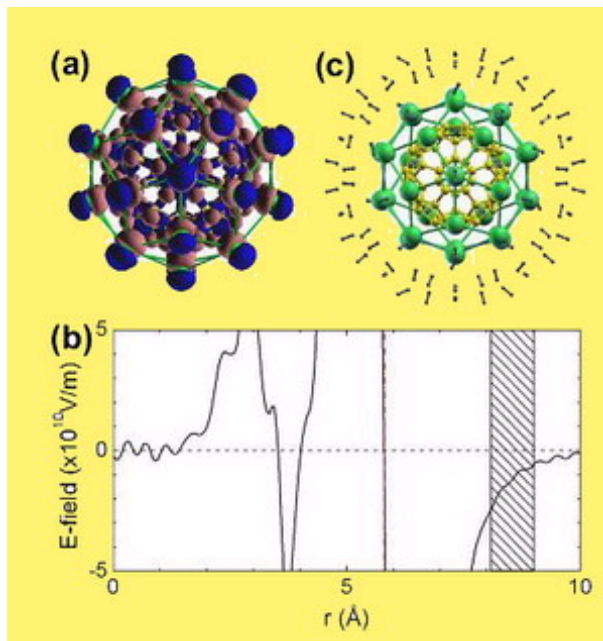
中国科学院—当日要闻

- 德艺双馨感世人
- 中科院召开中央部署救灾重建及筹办奥运等工作会议精神传达会
- 成都山地所全力以赴开展抗震救灾工作纪实
- 《求是》杂志发表中国科学院党组署名文章: 创新为民 科技救灾
- 水利部、交通运输部充分肯定中科院科技救灾工作
- 人民网报道路甬祥讲话: 有效应对自然灾害是一项重大课题
- 用科学的力量支撑希望
- 《国家知识产权战略纲要》正式实施
- 我国SOI技术产业化的火炬接力
- 把抗震救灾热情凝聚到深入推进知识创新工程上来

当前位置: 首页 > 科研 > 科研动态 > 基础研究 >> 正文

## 中美科学家合作发现一种可能的新储氢材料: C<sub>60</sub>+Ca

物理研究所



近日, 中科院物理所/北京凝聚态物理国家实验室博士生杨身园与导师王恩哥及美国橡树岭国家实验室的张振宇等人合作, 发现了一种可能的新储氢材料: C<sub>60</sub>+Ca。有关成果发表在Phys. Rev. Lett. 100, 206806 (2008)上, 并立即被Virtual Journal of Nanoscale Science & Technology转载。

在过去十年间, 碳基纳米材料是一种备受关注的潜在储氢材料。但是, 氢分子在碳材料表面的物理吸附太弱, 不满足常温常压的实际应用要求。为了提高氢分子在碳材料表面的吸附能, 人们提出了多种方法修饰碳材料。例如, 在表面覆盖3d过渡金属或碱金属, 替代掺杂轻元素, 带电等。但每种方法都存在着弊端或不足。

物理所博士生杨身园与导师王恩哥及美国橡树岭国家实验室的张振宇等人, 利用第一性原理计算研究了轻碱土金属覆盖的富勒烯的储氢性质。他们首先发现钙和锶在C<sub>60</sub>上吸附很强, 可以均匀地覆盖在C<sub>60</sub>表面上, 形成M<sub>32</sub>C<sub>60</sub>。它们之间的相互作用机制与金属未占据的d轨道有关。铍和镁没有可利用的d轨道, 因此与C<sub>60</sub>的相互作用很弱。其次, 钙、锶与C<sub>60</sub>间的电荷转移在表面附近产生一个强电场, 能够极化氢分子, 使得氢分子的吸附能分别达到0.4和0.2 eV/H<sub>2</sub>, 非常适于实际应用。第三, 在Ca<sub>32</sub>C<sub>60</sub>上可吸附至少92个氢分子, 由于钙质量较轻, 最后的储氢质量百分比达到8.04 wt%。综合以上三个因素, 他们

认为钙优于以前研究的所有覆盖在C60表面上的金属。

该成果得到了国家自然科学基金委“创新研究群体”基金及中国科学院的资助。

[ 2008年6月19日 ]

[ 评论几句 ] [ 推荐给同事 ] [ 关闭窗口 ]