



固体所在设计新型储氢材料方面取得新进展

文章来源：合肥物质科学研究院

发布时间：2011-07-19

【字号：小 中 大】



钛修饰的sp+sp²结构作为储氢材料

随着全球经济的快速发展，能源需求与日俱增，同时，传统的煤炭、石油和天然气等化石燃料带来了环境污染、温室效应等诸多问题，因此清洁、可再生能源的开发已迫在眉睫。在众多新能源中，氢能被视为连接化石能源和可再生能源的重要桥梁。在整个氢能系统中，储氢是非常关键的环节之一。早期关于储氢材料的研究大多集中在过渡金属、碱金属和碱土金属修饰的sp²型碳纳米材料上。

近期，中科院合肥物质科学研究院固体物理所刘春生博士和曾雄研究员利用全电子的第一性原理方法，研究了过渡族金属Ti修饰的有限长sp杂化的碳原子链的储氢能力。Ti可以稳定的吸附在碳原子链的一端，并且其结合能与碳链的类型有关，呈现明显的奇偶振荡性质。利用过渡态理论计算Ti吸附在链端的路径发现整个过程不存在能垒，这为实验上可以合成这种材料提供了有力的证据。结果表明，Ti原子通过与碳原子的d-p轨道杂化可以形成稳定的TiC_n复合物，这种复合物吸附H₂的数目依赖于碳链的类型。对于polyyne (n取偶数)和cumulene (n取奇数)型的碳链，Ti原子分别吸附五个和六个H₂。研究人员提出C₂₀富勒烯饱和和TiC₅的另外一端能够形成稳定的sp+sp²新型结构，其吸附H₂的结合能为0.52 eV/H₂。

以上研究结果为基于一维碳纳米材料设计高质量密度的储氢媒介提供了一种新思路。相关结果发表在*Phys. Chem. Chem. Phys.* 13, 2323 (2011)。

[打印本页](#)
[关闭本页](#)