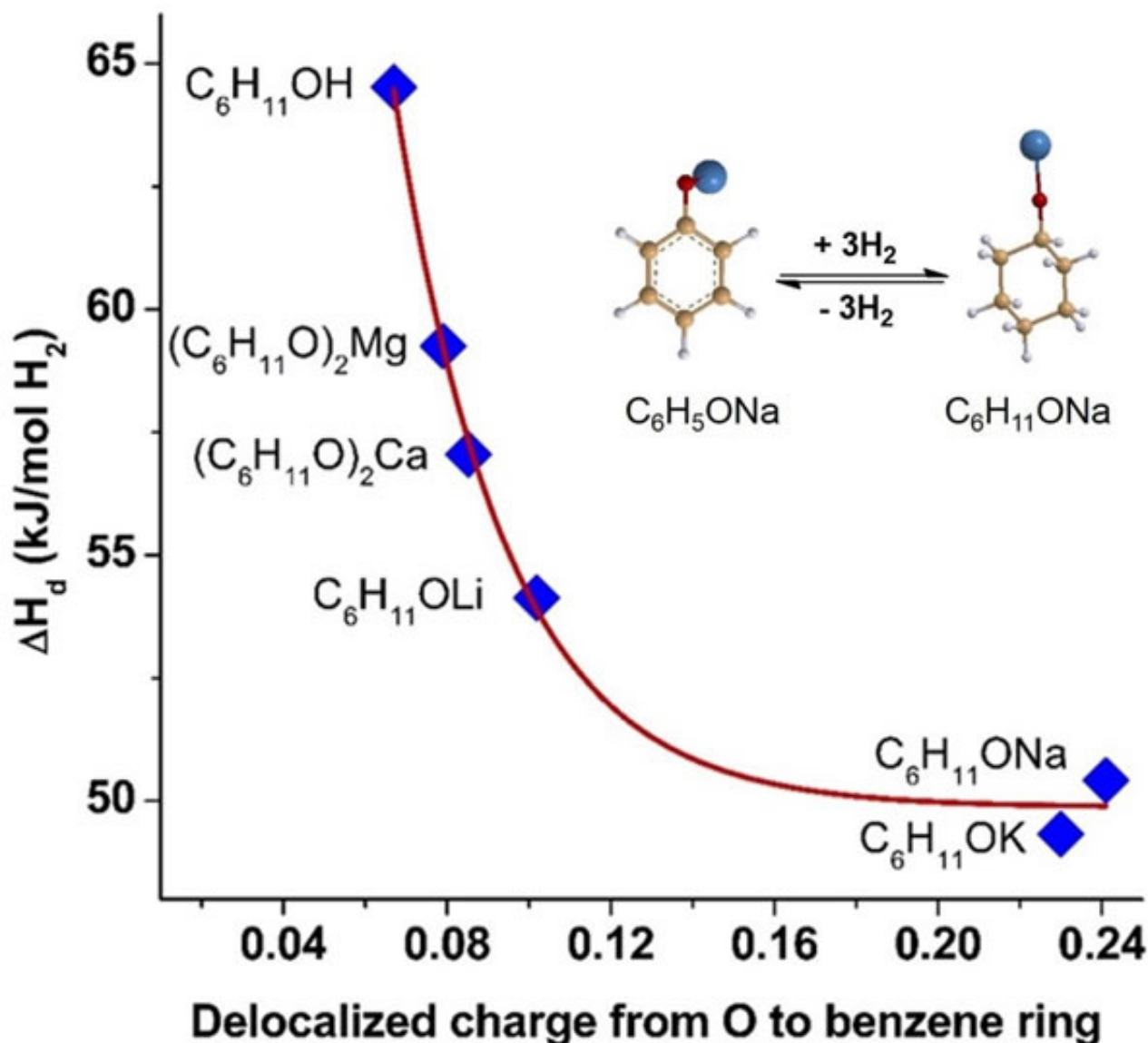


## 大连化物所金属有机化合物用于储氢材料研究取得新进展



近日, 中国科学院大连化学物理研究所复合氢化物材料化学研究组副研究员何腾和研究员陈萍领导的团队与厦门大学教授吴安安、美国西北太平洋国家实验室Tom Autrey等合作, 在储氢材料研究方面取得新进展, 相关研究成果以背页封面形式发表在《德国应用化学》(Angew. Chem. Int. Ed.) 上。

氢以其能量密度高、无污染等优点, 一直被认为是能量储存和运输的理想载体。然而, 缺乏安全高效的储氢介质被认为是氢能应用技术的瓶颈。目前, 世界各大汽车公司均采用高压气罐作为商业燃料电池汽车的储氢系统。然而, 该系统压力高达350-700bar, 安全性一直受到关注; 此外, 高压气罐的罐体材料为高强度碳纤维, 其造价昂贵, 这也是限制燃料电池汽车迅速推广的原因之一。将氢气储存于凝聚态物质中是近二十年储氢材料研究的热点, 各种新颖的材料被陆续开发出来。然而这些材料均存在自身的不足, 因此开发安全、高效、廉价的氢气储存和运输载体, 将为燃料电池汽车推广, 以及氢能规模化应用提供有效的解决方案。

近期, 该团队提出一种全新的策略: 利用金属的电负性差异, 修饰有机储氢材料的电子性质, 合成出了一类新颖的有机-无机杂化储氢体系——金属有机化合物。理论计算表明, 增加有机碳环中的电子密度, 可以显著降低有机物的脱氢焓变, 且电子密度越高, 脱氢焓变越低, 科研人员利用具有较强供电子性质的碱金属或碱土金属改性有机储氢材料, 发现其环中电子密度明显增加, 从而有效地降低了有机材料的脱氢焓变; 同时理论计算还表明, 随着金属的供电

子性质增强，材料的脱氢焓变越低，即通过选择不同的金属，可以可控地调变材料的脱氢焓变，从而在热力学上控制材料的脱氢温度。该工作以钠修饰的苯酚-环己醇为例，计算发现其脱氢焓变可以从64.5kJ/mol-H<sub>2</sub>降低为50.4kJ/mol-H<sub>2</sub>；此外，随着金属给电子能力增强，环己醇钠 $\alpha$ 位C-H键键长增加，二者成线性关系，这说明材料经过有机无机杂化后，已经被活化，并且脱氢过程中 $\alpha$ 位C-H键优先断裂。

实验结果发现，苯酚钠-环己醇钠体系可以在150 °C、商业催化剂下完成可逆储氢循环。而将材料溶解于水中进行储氢循环反应后，可以进一步将材料的加脱氢温度降低至100 °C以下。这相对于常见的液态有机储氢材料有明显的降低，该类金属有机化合物可以在常温常压下存储和运输氢气，避免高压气罐带来的危险。另外，由于有机底物种类多、变化多，与无机金属杂化后可以衍生出更多种类的候选材料，供进一步筛选。因此，该研究为未来低温可逆储氢材料的开发开辟了崭新的思路。

该工作得到国家自然科学基金面上项目、科技部国际合作重点专项、大连化物所自主部署基金的资助。

原文地址：<http://www.china-nengyuan.com/tech/135806.html>