

科研人员模拟储氢反应揭示氢化减缓原因

美国科学家们模拟了储氢反应来分析氢化减缓原因，从而提出改进储氢性能的建议。该研究发表在《应用材料与界面》杂志上。

提高固态材料的储氢能力取决于更好地掌握复杂界面上的多步化学反应过程。在这些复杂界面上，材料组成分子单元与氢反应并结合并重新排列，导致材料从不含氢转变为氢饱和相，这种转换过程控制着各种化学反应和电化学储能环境。科学家团队使用分子动力学模拟，发现镁离子(Mg^{2+})驱动分子单元的电极化和电荷重新分配，从原始 MgB_2

材料中裂解硼(B)并使氢与B原子顺序结合形成氢饱和 $Mg(BH_4)_2$ 相。该研究捕获了 MgB_2 中导致氢吸收的反应途径，还揭示了当形成 $Mg(BH_4)_2$ 时 MgB_2 中氢吸收减慢的原因，下一步研究将重点针对在较低的温度和压力下如何快速吸收氢。

原文地址：<http://www.china-nengyuan.com/tech/183129.html>