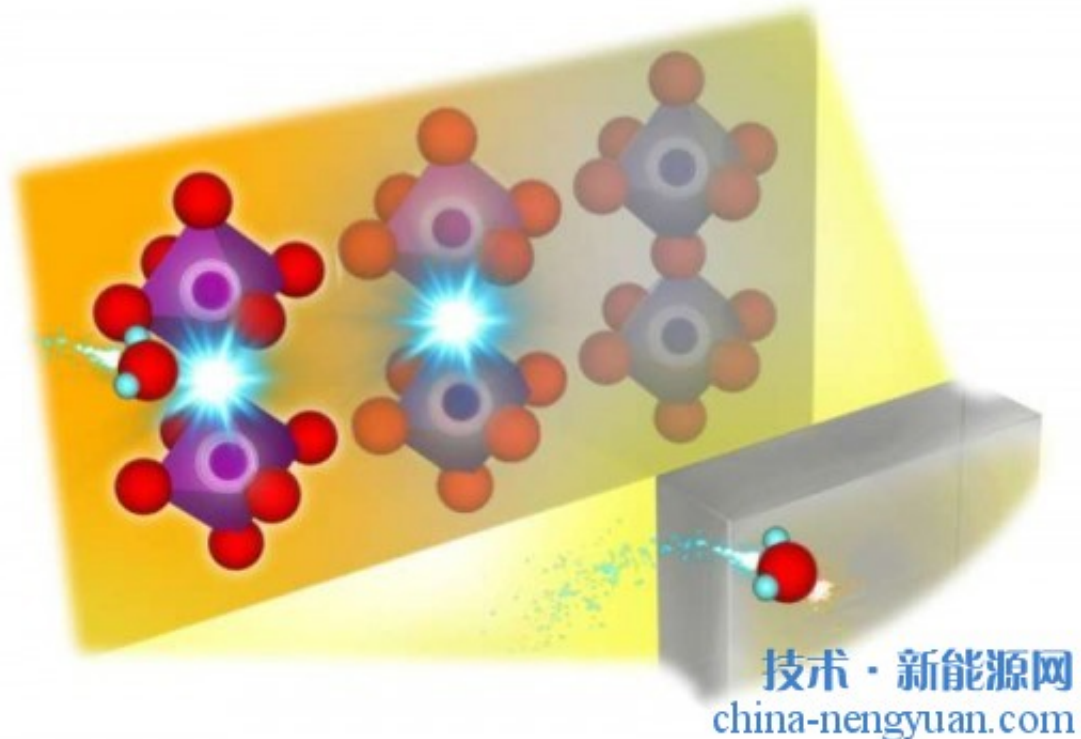


## 探索质子去向，开发更好的钙钛矿SOFC



固体氧化物燃料电池(SOFC)是一种以氢为燃料发电的电化学设备，唯一的“废物”是水。自然，在我们努力减少碳排放和减轻气候危机造成的损失之际，商界和学术界都对SOFC的发展产生了浓厚的兴趣。

日本九州大学(Kyushu University)领导的一个研究小组发现了他们为SOFC开发的钙钛矿基电解质的化学内部工作原理，这可能会加速更高效SOFC的发展。该团队结合同步辐射分析、大规模模拟、机器学习和热分析，揭示了钙钛矿晶格在产生能量的过程中引入氢原子的活性位点。研究结果发表在《材料化学》杂志上。

在基本层面上，燃料电池是一种通过促进氢原子分裂成带正电的质子和带负电的电子来发电的装置。电子被用来发电，然后与质子和氧结合在一起，产生水作为“废物”。

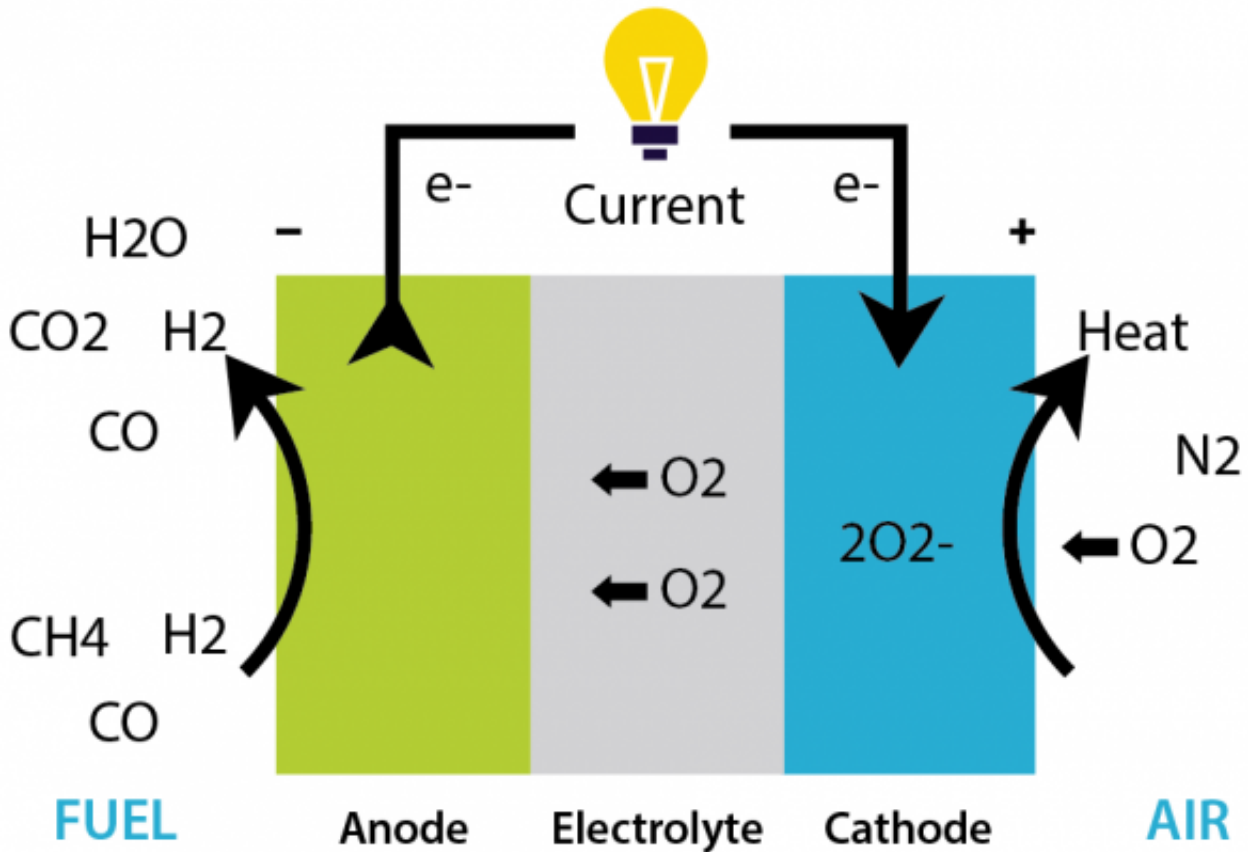
这一切的关键材料是电解质。这种材料充当了一个原子筛，促进了特定原子在燃料电池中的转移。根据燃料电池的类型，这些原子可以是质子或氧。

虽然SOFC对许多人来说可能是一个不常见的术语，但该技术已经在家庭发电机中实现了商业化（大部分在日本）。尽管如此，它们仍然很昂贵，最大的障碍之一是它需要较高的工作温度。

领导这项研究的日本九州大学跨学科能源研究平台的山崎义弘(Yoshihiro Yamazaki)教授解释说：“传统的SOFC需要在700-1000 的温度下才能有效地发挥电解质的作用。”自然，全球都在竞相开发能够在300-450 左右的较低温度下工作的SOFC电解质。其中一种很有前途的材料就是钙钛矿。”

钙钛矿是一类具有特定晶体结构的材料，这使得它们具有独特的物理、光学甚至电学性质。此外，由于它们可以用不同的原子人工合成，大量研究集中在开发和测试几乎无限多的可能的钙钛矿组成上。

其中一个例子就是开发更好的SOFC电解质。



“ 在我们过去的工作中，我们开发了一种化学成分为BaZrO<sub>3</sub>的钡锆基钙钛矿。通过用高浓度的钪或Sc取代Zr位点，我们成功地制造了一种可以在目标温度400 °C下工作的高性能电解质，” 山崎解释道。当然，这只是我们想要找到的一部分。我们还在研究一个30多年来一直没有解决的问题：质子是在电解液晶格的什么地方被引入的？ ”

由于SOFC的高工作温度和水(燃料电池的氢来源)的压力变化，探测其内部工作原理一直很困难。

为了解决这些问题，研究小组利用同步辐射(粒子加速器发射的电磁辐射)对钙钛矿电解质进行了X射线吸收光谱实验，而燃料电池在400 °C左右处于活动状态。

“ 这些结果让我们深入了解了质子在材料化学结构中的位置。在此基础上，我们应用了机器学习，并使用超级计算机计算出了材料可能的结构配置。通过仔细地将预测结果与实验数据进行比较，我们能够阐明电解液在活动时发生的结构变化。 ”

山崎总结道：“ 现在我们已经掌握了电解质的基本内部工作原理，我们可以优化它的纳米结构，甚至可以提出新的材料，从而产生更高效的燃料电池，甚至可以在更宽的温度范围内工作。 ”



日本九州大学(Kyushu University)鸟瞰

（素材来自：Kyushu University 全球氢能网、新能源网综合）

原文地址：<http://www.china-nengyuan.com/tech/193473.html>