工程热物理所钙基热化学储能材料研究取得进展

储能是利用间歇性和波动性能源的重要支撑技术。钙基热化学储能具有储能密度高、热损失小、材料廉价等优势，在工业余热回收、太阳能热储存、建筑供暖、谷电调峰等领域具有广阔的应用前景。制约钙基热化学储能体系大规模应用的重要因素是材料高温反应易团聚和烧结，造成循环稳定性不足。目前，高性能材料挖掘普遍为经验性试错式开发，缺乏内在规律的解读。

中国科学院工程热物理研究所传热传质研究中心在高性能钙基热化学储能材料开发方面开展了深入研究。科研人员采用计算和实验结合方式，通过高通量密度泛函理论计算筛选，发现掺杂稀土金属元素的钙基热化学储能材料表现出极低的过渡态反应能垒。同时，实验结果验证了掺杂稀土金属元素可以将氢氧化钙的起始反应温度降低50 ℃，提高了材料反应动力学性能。较低的脱水反应温度不仅可以扩大材料的适用范围，而且可以显著缓解材料的团聚和烧结问题，进而提高材料的循环稳定性。

此外，该研究基于柯肯达尔效应，采用室温搅拌、无模板低碳环保方法制备得到中空结构微纳米氧化钙材料。该材料具有快速二氧化碳吸附速率和较高的循环稳定性，且该材料中的反应几乎不受扩散阻力限制。该工作利用生物模板制备得到了具有多级孔结构的钙基热化学储能材料。该材料具有较好的二氧化碳吸附特性和循环稳定性，20次循环储能密度在2000 kJ/kg以上。

相关研究成果分别发表在《化学工程杂志》（Chemical Engineering Journal）上。研究工作得到国家自然科学基金和江苏省碳达峰与碳中和科技创新专项资金重大科技示范项目的支持。

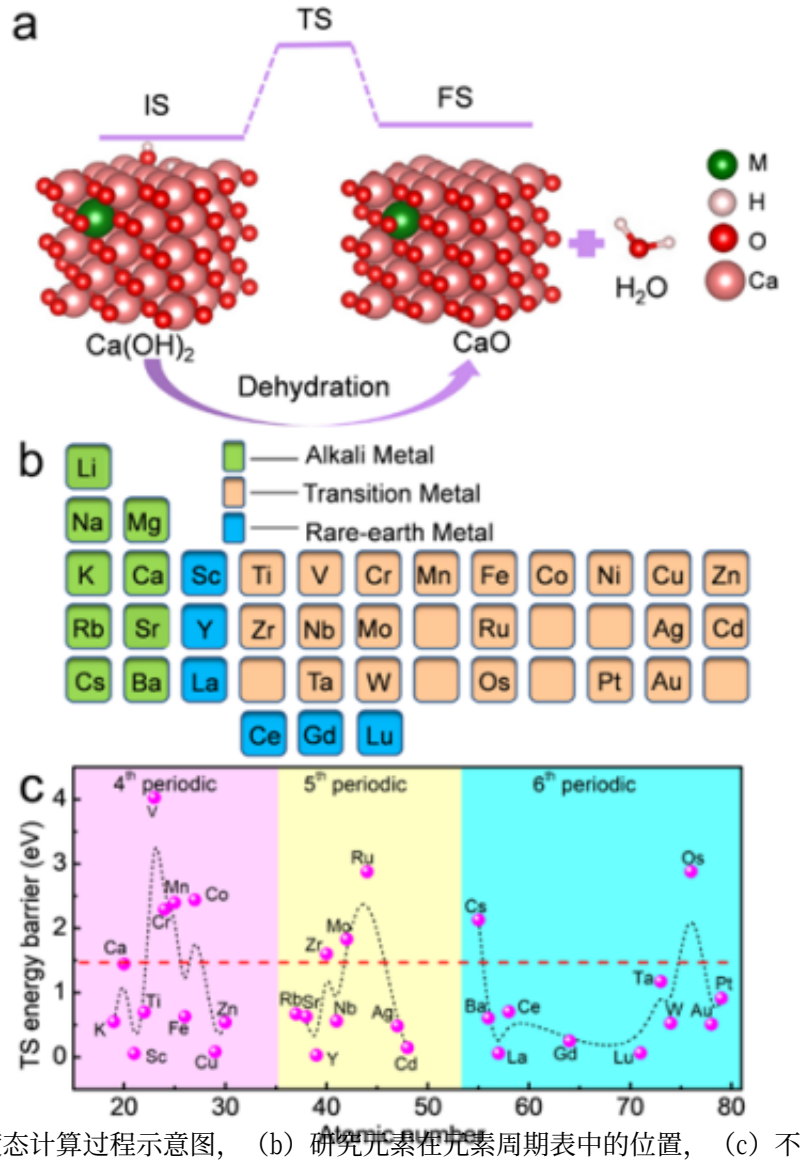

图1.（a）过渡态计算过程示意图，（b）研究元素在元素周期表中的位置，（c）不同元素修饰下氢氧化钙脱水反应的过渡态能垒

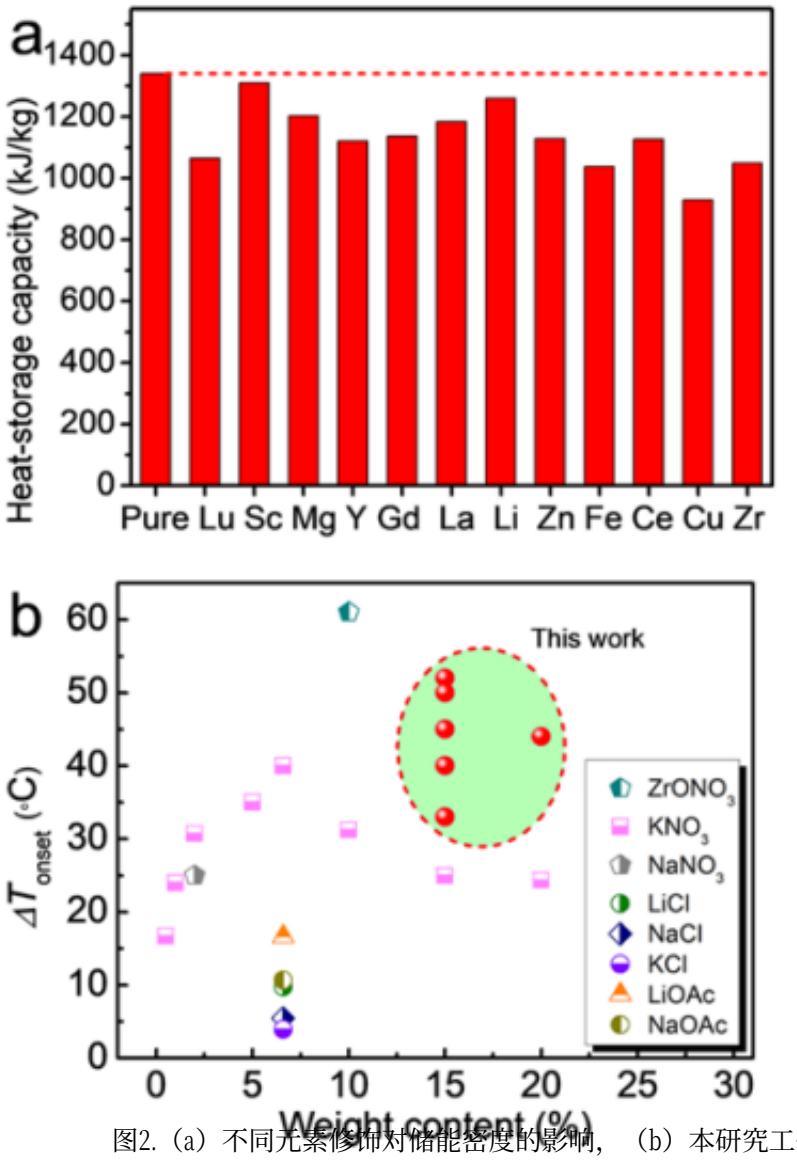

图2.（a）不同元素修饰对储能密度的影响，（b）本研究工作与文献中对比

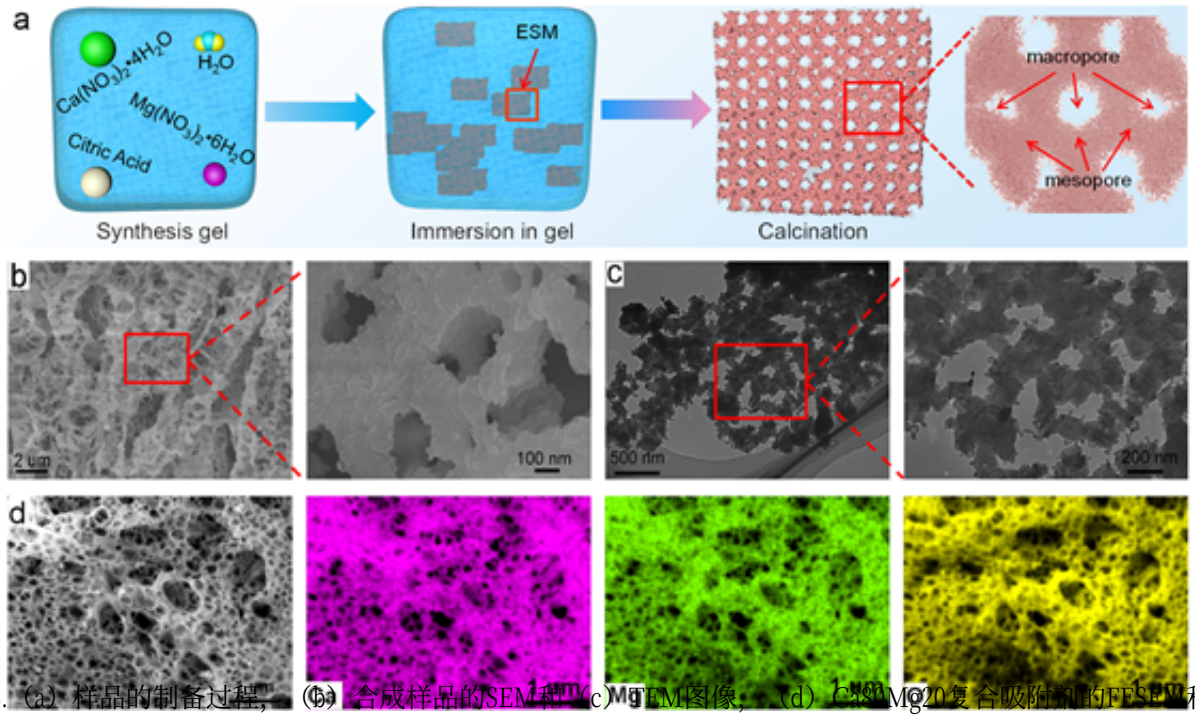

图3. （a）样品的制备过程，（b）合成样品的SEM和（c）TEM图像，（d）Ca80Mg20复合吸附剂的FESEM和各元素分布的Mapping图像

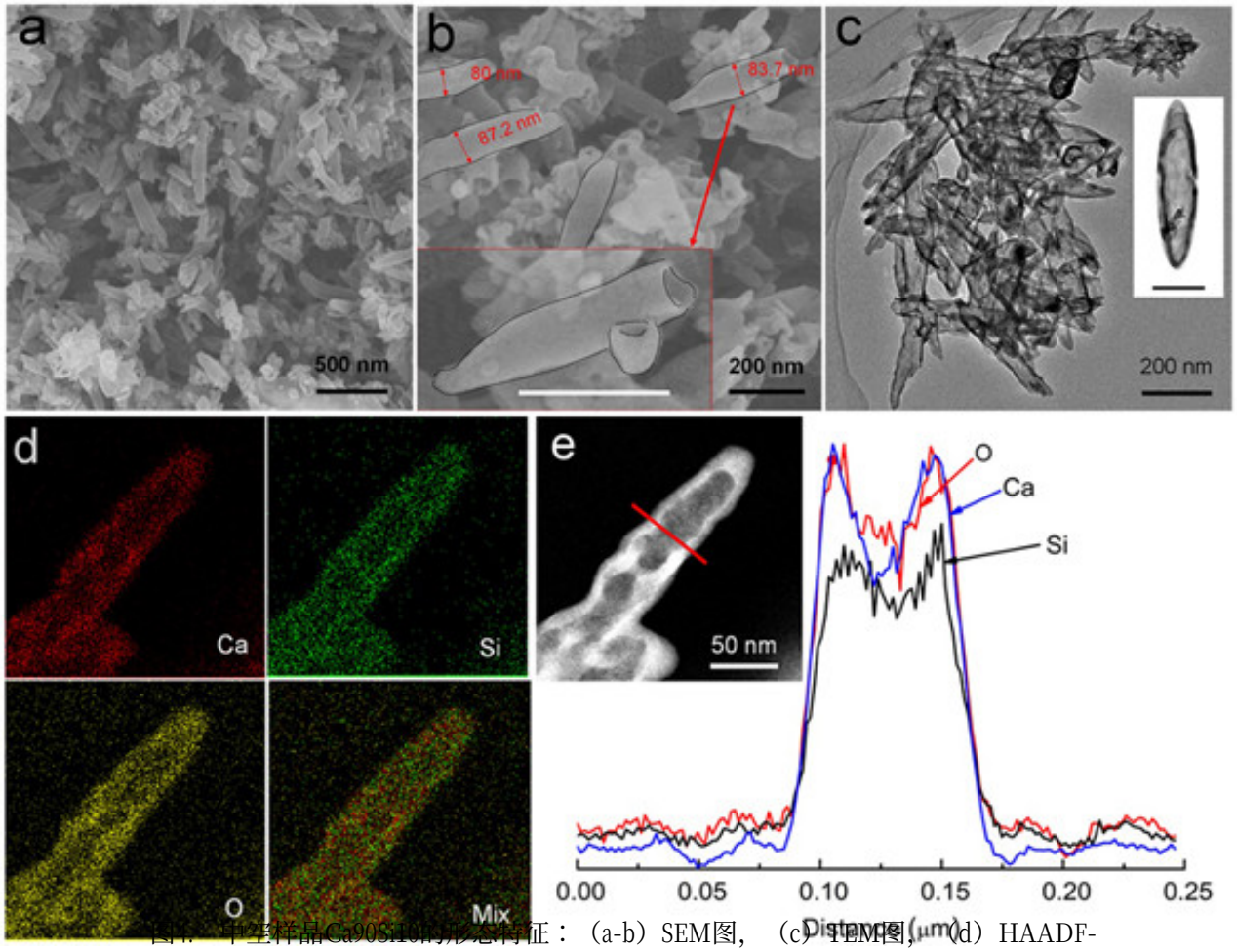

图4. 中空样品Ca90Si10的形态特征：（a-b）SEM图，（c）TEM图，（d）HAADF-STEM图与（e）EDX图和Ca、Si和O元素线扫描分析

原文地址：http://www.china-nengyuan.com/tech/205098.html