

安阳师范学院鞠林博士团队在制氢储氢领域取得进展

近日，安阳师范学院鞠林博士团队在制氢储氢领域取得进展。相关结果以“Sc-Modified C₃N₄ Nanotubes for High-Capacity Hydrogen Storage: A Theoretical Prediction”为题发表在Molecules (Molecules 29(2024), 1966)上。刘书丽博士为第一作者，鞠林博士为通讯作者。

氢能作为化石燃料的可行替代品具有丰富的储量、高比能、良好的燃烧特性、无毒、无害和无污染的特性，是一种极其有效和清洁的能源。尽管近年来通过分解水产生氢气取得了显著进展，但探索具有高容量、高质量和在室温下有效可逆性的储氢材料仍然是一个主要挑战。在本研究中，通过密度泛函理论（DFT），深入研究了Sc改性的C₃N₄纳米管的稳定性和储氢能力。研究发现，Sc-3d轨道和N-2p轨道之间的强耦合促使Sc改性的C₃N₄纳米管在高温（500K）具有良好的稳定性，并且相邻Sc原子之间的高迁移势垒（5.10eV）阻止了金属团簇的发生。进一步研究发现每个Sc改性的C₃N₄纳米管能够吸附高达9个H₂分子（重量密度为7.29 wt%）。此外，氢气的平均吸附能为-0.20 eV，平均解吸温度为258 K，这表明Sc改性的C₃N₄纳米管可以在低温下储存氢气并在室温下利用氢气，这将降低能耗并保护储氢系统免受高解吸温度的影响。该工作证实Sc改性的C₃N₄纳米管作为一种稳定高效的储氢基底具有非凡的潜力。

原文地址：<http://www.china-nengyuan.com/tech/211046.html>