

文章编号:1000-582X(2003)05-0143-04

# 贮氢合金的开发与应用\*

刘守平,赵 罡,李 荣,康人木,周上祺,任 勤

(重庆大学 材料科学与工程学院,重庆 400044)

**摘要:**介绍了金属氢化反应及贮氢合金设计的基本原理,对贮氢合金的基本类型、应用状况及发展趋势进行了较全面的评述。目前已开发研究的贮氢合金品种类型虽然众多,但成熟的主要还是 AB<sub>2</sub>型稀土合金。钒基固溶体合金因贮氢容量大,镁基合金因重量轻、价格低等优点在贮氢合金的开发中具有很大的潜力。贮氢合金应用领域广阔,但在很多领域的应用仍然处于试验开发阶段,只是在镍-氢化物二次电池中获得了产业化,因此贮氢合金的应用及其相关技术还有待进一步开发研究。

**关键词:**贮氢; 贮氢材料; 贮氢合金

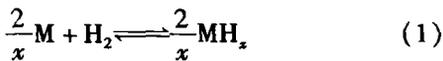
**中图分类号:** TB34

**文献标识码:** A

随着现代科技的飞速发展,特别是氢能的研究开发,贮氢合金作为一种新型的功能材料和能源材料引起了人们极大的关注,成为材料领域研究开发的热点之一。笔者综述了贮氢合金的开发与应用概况。

## 1 金属氢化反应与贮氢合金设计

很多金属都可与氢反应形成金属氢化物:



$$\Delta G^0 = \Delta H^0 - \Delta S^0 T \quad (2)$$

若 M、MH<sub>x</sub>、H<sub>2</sub>都看作纯物质,则有

$$\ln P_{H_2} = \Delta H^0 / RT - \Delta S^0 / R \quad (3)$$

式中, T 为温度; R 为气体常数。

由于气体氢进入金属后氢的熵变值极小,式(2)的熵变  $\Delta S^0$  可近似看作气体氢在 25℃ 时的熵即  $\Delta S^0 = S_{298H_2}^0 = 130 \text{ kJ/mol} \cdot \text{C}^{[1]}$ , 因此不同金属氢化物的稳定性 ( $\Delta G^0$  值) 取决于反应(1)的焓变  $\Delta H^0$  的大小,  $\Delta H^0$  越小则金属氢化物越稳定。表 1 为氢化反应焓变较小的金属氢化物<sup>[1-6]</sup>。

金属氢化反应后,若氢化物相中的金属晶格结构与金属相一样如 LaNi<sub>5</sub>-H, 则称溶解间隙型,若变为与金属相完全不一样的另一种结构如 Ti-H、Mg<sub>2</sub>Ni-H, 则属于变体型<sup>[6]</sup>。氢进入金属或合金晶格间隙后,将使金属晶格膨胀,体积显著增大,其体积增长率与吸氢浓度成正比,且比例系数只与合金的组成元素种类

有关,与合金元素的组成比无关<sup>[6]</sup>。

表 1 金属氢反应热焓  $\Delta H^0$

kJ/mol

金属-氢化物	$-\Delta H^0$	金属-氢化物	$-\Delta H^0$
V - VH <sub>0.95</sub>	33.4	Ca - CaH <sub>2</sub>	174.4
V - VH <sub>2</sub>	40.9	Na - NaH	112.8
La - LaH <sub>2</sub>	209.0	K - KH	115.4
Mg - MgH <sub>2</sub>	74.4	Li - LiH	157.2
Ti - TiH <sub>2</sub>	125.0	Ba - BaH <sub>2</sub>	171.0
Cs - CsH	99.5	Hf - HfH <sub>2</sub>	161.0
Ce - CeH <sub>2</sub>	204.8	Y - YH <sub>2</sub>	188.0
Sr - SrH <sub>2</sub>	176.8	Th - ThH <sub>2</sub>	196.0
Zr - ZrH <sub>2</sub>	165.9	Sc - ScH <sub>2</sub>	185.0
Ta - TaH	75.2		

根据式(3),金属与氢反应的相平衡可用图 1 所示的压力与组成等温曲线(P-C-T)表示。由于金属吸放氢反应前后金属晶粒大小、金属表面积、内部所受应力等变化很大,导致金属吸氢反应与放氢反应的吉布斯能变化的绝对值不相等,从而出现吸氢反应与放氢反应平衡氢压不相等的滞后现象<sup>[5-6]</sup>。金属吸放氢反应为气-固相反应,其反应机理目前还处于探索阶段,但其宏观反应速度可用定容法、定压法、重量法等测定<sup>[7]</sup>。

理论上表 1 中的金属都可用作贮氢合金,但实际工程应用的贮氢合金都是由 A、B 两类元素组成,其中 A 与氢的亲合力强,是氢化物形成元素, B 一般为过渡族金属元素,与氢的亲合力很弱,对合金的氢化反应起催化等作用,调整元素 A 与 B 组成,可使合金的本体

\* 收稿日期:2003-01-16

基金项目:重庆市应用基础研究项目资助(2002069-7262)

作者简介:刘守平(1966-),男,湖南浏阳人,重庆大学副教授,博士,主要从事金属材料教学与科研。

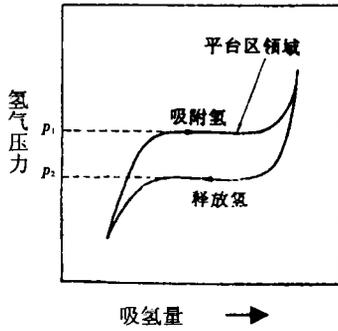


图 1 金属氢化物中氢气贮量的变化

性能达到最佳,但合金的最终性能则还与合金的制备工艺和后续处理有关,如熔炼方法、凝固制度、热处理工艺、纳米化、非晶化等对合金性能也有着至关重要的影响<sup>[7-10]</sup>。

贮氢合金常可从以下几方面进行评价<sup>[6-10]</sup>:1)高的可逆贮氢容量,一般要求大于 1 wt%;2)合适的平台压力和温度,最好 25 ℃ 时放氢压力不大于 5.066 25 MPa;3)良好的吸放氢动力学,较轻的滞后现象;4)长寿命、低成本。

## 2 贮氢合金类型及特性

### 2.1 稀土系贮氢合金(AB<sub>5</sub>型)

LaNi<sub>5</sub>是较早开发的稀土贮氢合金,吸氢焐变为 -30.1 kJ/mol H<sub>2</sub>,贮氢量为 1.4 wt%,吸氢后仍为六方晶结构,但晶格体积膨胀 24%,合金易粉碎,优点是分解氢压适中(20~40 ℃ 时,为 2~4 MPa)、吸放氢平衡压差小、易激活、不易中毒<sup>[4,6,13]</sup>。采用混合稀土 Mm(La、Ce、Nd、Pr 等)取代 LaNi<sub>5</sub> 中的 La,可克服 LaNi<sub>5</sub> 价格昂贵的缺点,由于稀土 Mm 的晶胞体积按 La、Ce、Nd、Pr 的顺序减小,使 MmNi<sub>5</sub> 合金的氢分解压增大,为此在 MmNi<sub>5</sub> 的基础上又开发出了大量的多元合金 Mm<sub>1-x</sub>C<sub>x</sub>Ni<sub>5-y</sub>D<sub>y</sub><sup>[11-14]</sup>,其中 C 有 Al、Cu、Mn、Si、Ca、Ti、Co, D 为 Al、Cu、Mn、Si、Ca、Ti、Co、Cr、Zr、V、Fe,

$x=0.05\sim 0.20, y=0.1\sim 2.5$ 。所有取代 Ni 的元素 D 都可使合金的氢分解压降低,而置换 Mm 的元素 C 则使氢分解压增大。为进一步改善合金吸放氢的平台压力、热焐值、活化速度、吸放氢速度等热力学和动力学性能,近年来对稀土系贮氢合金又发展了非化学计量比的贮氢合金即 A 与 B 之比值大于 5 或小于 5<sup>[11-14]</sup>。

### 2.2 镁系贮氢合金

镁具有吸氢量大(MgH<sub>2</sub> 含氢量为 7.6 wt%)、重量轻、价格低等优点,但放氢温度高且吸放氢速度慢<sup>[6]</sup>。通过合金化可改善镁氢化物的热力学和动力学特性,从而开发出实用的镁基贮氢合金,表 2 为典型的镁基贮氢合金及其特性<sup>[15-17]</sup>。由于过渡族金属元素 Ni、Cu 等对镁氢化反应有很好的催化作用,为进一步改善镁基贮氢合金的性能,又研究开发了一系列的多元镁基合金:Mg<sub>2</sub>Ni<sub>1-x</sub>Cu<sub>x</sub>( $x=0\sim 0.25$ )、A-Mg-Ni(A=La、Zr、Ca)、CeMg<sub>11</sub>M(M=V、Ti、Cr、Mn、Fe、Co、Ni、Cu、Zn)等<sup>[15-17]</sup>,镁系贮氢合金与其它类别的贮氢合金复合化可有效地改善合金的性能,成为镁基贮氢合金开发的重要方向。镁基贮氢合金的制备目前研究较多的是机械球磨法和氢化燃烧法合成。

表 2 典型镁基贮氢合金

合金组成	贮氢量/%	分解温度/℃	
		(分解压为 1.013 25 MPa)	$\Delta H^0/kJ \cdot mol^{-1}$
Mg <sub>2</sub> Ni	3.6	253	-64.37
Mg <sub>2</sub> Cu	2.7	239	-72.73
LaMg <sub>12</sub>	4.5		
CeMg <sub>12</sub>	6	325(30.395 5 MPa)	
Mg <sub>5</sub> Al <sub>8</sub>	3.2	233	

### 2.3 钛系贮氢合金

钛系贮氢合金最大的优点是放氢温度低(可在 -30 ℃ 时放氢)、价格适中,缺点是不易活化、易中毒、滞后现象比较严重。表 3 为目前开发研究的钛系贮氢合金<sup>[6-7,11-12]</sup>。

表 3 钛系贮氢合金

合金种类	合金组成	特 性
钛铁系	TiFe TiFe <sub>1-x</sub> M <sub>x</sub> M=Co、Cr、Cu、Mn、Mo、Ni、V 等过渡族元素	TiFe 与氢反应生成 TiFeH <sub>1.04</sub> (β 相)、TiFe <sub>1.95</sub> (γ 相),贮氢容量约 1.8 wt%,P-C-T 曲线出现双平台,M 的加入,可改善合金的活化性能,但平台曲线倾角增大。
钛钴系	TiCo TiCo <sub>1-x</sub> M <sub>x</sub> M=V、Cr、Cu、Fe、Mn、Mo、Nb、Ni、La 等过渡族元素	与钛铁系相比,贮氢容量相近,易活化,抗毒性强,但放氢温度高(1.013 25 MPa 时为 130 ℃),M 的加入可提高放氢速度;当 M 的原子半径小于 Ti 时 TiCo <sub>1-x</sub> M <sub>x</sub> 比 TiCo 放氢压力升高,反之则降低。
钛锰系	TiMn <sub>1.5</sub> Ti <sub>0.9</sub> Zr <sub>0.1</sub> Mn <sub>1.4</sub> V <sub>0.2</sub> Cr <sub>0.4</sub>	用锆取代部分钛可提高贮氢容量,大幅度减轻合金的滞后现象。
钛铬系	TiCr <sub>2</sub> Ti <sub>1-x</sub> Zr <sub>x</sub> Cr <sub>2-y</sub> Mn <sub>y</sub> , $x\leq 0.4, y\leq 2.0$	TiCr <sub>2</sub> 吸放氢温度低(0 ℃ 以下),分解压高,平台线区域窄;加入锆可降低分解压,加入锰可展宽平台线区域

## 2.4 钒基固溶体型贮氢合金

钒可与氢生成  $\text{VH}_2$ 、 $\text{VH}$  两种氢化物 ( $\text{VH}_2$  的吸氢量达 3.8 wt%)。钒基固溶体型贮氢合金的特点是可逆贮氢量大、可常温下实现吸放氢、吸放氢反应速率大,但合金表面易生成氧化膜,增大激活难度。对钒基固溶体型贮氢合金目前主要研究开发的是镍氢电池用贮氢合金  $\text{V}_3\text{TiNi}_{0.56}\text{M}_x$  ( $x=0.046\sim 0.24$ , M 为 Al、Si、Mn、Fe、Co、Cu、Ge、Zr、Nb、Mo、Pd、Hf、Ta 等元素),其中添加元素 M 可提高合金充放电的循环稳定性,但引起贮氢容量降低<sup>[16-26]</sup>。

## 3 贮氢合金的应用

### 3.1 镍-氢化物二次电池负极材料

镍-氢化物新型二次电池因比能量高、无污染等优点已开始取代传统的镍镉电池在信息产业、航天领域等大规模应用。贮氢合金作为镍-氢化物电池的负极材料,既是电池制备的关键材料,也是目前贮氢合金应用最成熟的领域。用于电池负极的贮氢合金应满足:电化学容量高且稳定,平衡氢压适当(25℃, 0.01~0.5 MPa),对氢的阳极极化具有良好的催化作用,较强的抗阳极氧化、抗碱性溶液腐蚀能力,良好的热、电传导性。目前国内外应用最广泛的是稀土系的  $\text{AB}_2$  型合金,典型合金有  $\text{MmNi}_{3.55}\text{Co}_{0.75}\text{Mn}_{0.4}\text{Al}_{0.3}$ 、 $\text{Mm}(\text{NiCoMnAl})_{4.55-4.76}$  等,其电化学比容量一般为 280~330 mA·h/g,循环寿命超过 500 次,易于活化;另一类已实用的是  $\text{AB}_2$  型  $\text{Ti}-\text{Zr}-\text{V}-\text{Ni}-\text{Cr}$  系合金,如  $\text{Ti}_{16}\text{Zr}_{16}\text{V}_{22}\text{Ni}_{39}\text{Cr}_7$ 、 $\text{Ti}_{17}\text{Zr}_{16}\text{V}_{22}\text{Ni}_{39}\text{Cr}_7$ ,其电化学比容量可达 360~400 mA·h/g,但活化较困难;钒基固溶体型贮氢合金  $\text{V}_{1-x}(\text{NbTaCo})_x\text{Ni}_{0.56}$  因电化学比容量高(理论值高达 1 018 mA·h/g,实测值为 500 mA·h/g 左右)等优点,已引起国内外极大的关注,成为高容量镍-氢化物电池研究开发的重点; $\text{A}_2\text{B}$  型的镁系贮氢合金因资源丰富、价格较低廉等优势作为第三代电极合金也成为研究开发的热点<sup>[23-26]</sup>。

### 3.2 氢的贮存与运输

氢的贮存与运输是氢能利用系统的重要环节,利用贮氢合金制成的氢能贮运装置实际是一个金属-氢气反应器,分为定置式和移动式,它除要求其中的贮氢合金贮氢容量高等基本性能外,还要求此装置具有良好的热交换特性,以便合金吸放氢过程及时排出和供给热量,其次还要求装合金的容器气密性好、耐压、耐腐蚀、抗氢脆。目前试验开发的这类装置有列管式、热

管式、内部隔板型、圆筒式、单元层叠型等,试验的贮氢合金有  $\text{MmNi}_{4.5}\text{Mn}_{0.5}$ 、TiFe 系合金、Mg 系合金等<sup>[6,11,17]</sup>。镁系合金因重量轻、贮氢容量大在汽车等用的移动式贮氢装置中具有特别的优势,但镁系合金属于高温型贮氢合金,必须解决合金吸放氢过程中大量的热量交换问题。

### 3.3 氢的回收、分离、净化

石油化工等行业经常有大量的含氢尾气,如合成氨尾气含有 50%~60%  $\text{H}_2$ ,将含氢尾气流过装有贮氢合金的分离床,其中氢则被合金吸收,然后加热合金则可得纯氢。美国空气产品与化学产品公司和 MPD 公司联合开发的用  $\text{LaNi}_5$  合金做成的回收装置,回收合成氨尾气,氢回收率达 75%~95%,产品氢纯度达 98.9%<sup>[6]</sup>。该贮氢合金还可用于氢的提纯,如利用  $\text{MmNi}_{4.5}\text{Mn}_{0.5}$  合金可将工业普氢纯度提高到 99.999 9%<sup>[6]</sup>。核工业中氢  $\text{H}_2$ 、重氢  $\text{D}_2$ 、氚 T 等氢同位素分离,则是利用同一温度下,  $\text{H}_2$ 、 $\text{D}_2$ 、T 与合金反应的平衡压差实现分离,氢同位素分离使用的合金有  $\text{V}_{0.9}\text{Cr}_{0.1}$ 、TiCr 等<sup>[6-7]</sup>。

氢气中常含有  $\text{O}_2$ 、 $\text{CO}_2$ 、 $\text{CO}$ 、 $\text{SO}_2$ 、 $\text{H}_2\text{O}$  等杂质气体,易使合金中毒,因此用于氢的回收、分离、净化的贮氢合金要求有良好的抗毒性能,氢气中杂质气体种类、含量成了选择此类贮氢合金的重要基准之一。研究表明<sup>[6]</sup>,稀土系贮氢合金抗  $\text{O}_2$ 、 $\text{H}_2\text{O}$  毒害能力较强,而钛系贮氢合金抗  $\text{CO}_2$ 、 $\text{CO}$  毒害能力较强。

### 3.4 热能系统及其他领域的应用

利用贮氢合金吸放氢过程的热效应,可将贮氢合金用于蓄热装置、热泵(制冷、空调)等。贮氢合金蓄热装置一般可用来回收工业废热,用贮氢合金回收工业废热的优点是热损失小,并可得到比废热源温度更高的热能。日本化学技术研究所试验开发的蓄热装置主要由两个相互联通的蓄热槽 A 和 B 组成,蓄热槽内填充约 10 kg 的  $\text{Mg}_2\text{Ni}$  合金,废热源来的热加热蓄热槽 A 内的  $\text{Mg}_2\text{Ni}$  合金,放出的氢流向蓄热槽 B 并贮存起来,实现蓄热,氢反向流动则放热,其蓄热容量约 4 360 kJ,可有效利用 300~500℃ 的工业废热<sup>[6]</sup>。利用贮氢合金蓄热关键是根据废热温度、合金吸放氢压力及热焓等选择合适的贮氢合金。贮氢合金热泵工作原理是:已贮氢的合金在某温度下分解放出氢,并把氢加压到高于其平衡压然后再进行氢化反应,从而获得高于热源的温度,热泵系统中同样有两个填充贮氢合金的容器,但两个容器内填充的贮氢合金的种类不同。

P. P. Turillon<sup>[6]</sup>开发的热泵使用的贮氢合金是 LaNi<sub>5</sub> 和 LaNi<sub>4.7</sub>Al<sub>0.3</sub>, 输入 60 °C 温水或 25 °C 冷水, 循环 10 min, 可得到 95 °C 温水或 100 °C 蒸气。用贮氢合金热泵制冷或做空调效率高、噪声低、无氟利昂污染。

贮氢合金还可用于制备金属粉末、反应催化剂以及利用金属氢化反应压力 - 温度变化规律制作热压传感器等<sup>[6]</sup>

#### 4 结 论

目前已开发研究的贮氢合金品种类型虽然众多, 但成熟的不多, 主要还是稀土系 AB<sub>5</sub> 型合金, 因此应加强金属氢化反应的热力学与动力学、合金组织结构等基础理论的研究, 针对不同的应用条件开发出性能好、成本低、实用的贮氢合金新品种; 贮氢合金应用领域虽然广阔, 但在很多领域的应用仍然处于试验开发阶段, 只是在镍 - 氢化物二次电池中获得了产业化, 因此贮氢合金的应用及其相关技术还有待进一步开发研究。

#### 参 考 文 献:

- [1] 库巴谢夫斯基, 奥尔考克. 冶金热化学 [M]. 北京: 冶金工业出版社, 1985.
- [2] LUNDIN C E, LYNCH F E. A Correlation between the Interstitial Hole Sizes in Intermetallic Compounds and the Thermodynamic Properties of the Hydrides Formed From those Compounds [J]. *J Less - common Metals*, 1977, 56: 19 - 37.
- [3] GRIESSEN R, DRIESSEN A. Heat of Formation and Band Structure of Binary and Ternary Metal Hydrides [J]. *Physical Review B*, 1984, 30(8): 4 372 - 4 380.
- [4] BOWERMAN B S. Hydride Formation Rate of BCC Group V Metals [J]. *J Less - common Metals*, 1980, 73: 1 - 13.
- [5] LIU J, LEE HUSTON E. Calorimetry within Hysteresis Loop Application to LaNi<sub>5</sub> - H [J]. *J Less - common Metals*, 1983, 90: 11 - 20.
- [6] 大角泰章著. 金属氢化物的性质与应用 [M]. 吴永宽译. 北京: 化学工业出版社, 1990.
- [7] 胡子龙. 贮氢材料 [M]. 北京: 化学工业出版社, 2002.
- [8] 山口正治, 马越佑吉. 金属间化合物 [M]. 北京: 科学出版社, 1991.
- [9] MACHIDA K, ENYO M. Hydrides for Energy Storage [J]. *J Less - common Metals*, 1984, 96: 305 - 307.
- [10] 程菊, 徐德明. 镍氢电池用贮氢合金现状与发展 [J]. *金属功能材料*, 2000, 7(5): 13 - 15.
- [11] 颜鸣皋. 材料科学前沿研究 [M]. 北京: 航空工业出版社, 1994.
- [12] 长征. 贮氢合金现状与展望 [J]. *金属功能材料*, 2001, (6): 39 - 44.
- [13] 中国材料研究学会编. 94 秋季中国材料研讨会会议论文集, 第 1 卷, 第 1 分册 [C]. 北京: 化学工业出版社, 1995.
- [14] LEI Y Q, ZHOU Y, LUO Y C. Preparation and Electrochemical Properties of Unidirectionally Solidified MI Alloys [J]. *Journal of alloys and compounds*, 1997, 254: 590 - 593.
- [15] NOHARA S, FUJITA N. Electrochemical Characteristics of a Homogeneous Amorphous Alloys Prepared by Ball Milling Mg<sub>2</sub>Ni with Ni [J]. *Journal of alloys and compounds*, 1998, 267: 76 - 78.
- [16] 吕鸣祥. 化学电源 [M]. 天津: 天津大学出版社, 1992.
- [17] 雷永泉. 新能源材料 [M]. 天津: 天津大学出版社, 2000.
- [18] SAKAI T. V - based Solid Solution Alloys with Laves Phase Network [J]. *Journal of Alloys and Compounds*, 1996, 236: 151 - 155.
- [19] UEHARA I, SAKAI T. Improvement of the Cycle Stability of Vanadium Based Storage Alloys [J]. *Journal of alloys and compounds*, 1997, 253: 635 - 637.
- [20] ZHANG Q A, LEI Y Q. Phase Structures and Electrochemical Properties of V<sub>3</sub>TiNi<sub>0.56</sub>Hf<sub>0.24</sub>Co<sub>x</sub> Alloys [J]. *Journal of alloys and compounds*, 2000, 296: 87 - 91.
- [21] YARTYS V A. Neutron Diffraction Studies of Zr - containing Intermetallic Hydrides [J]. *J Less - Common Metals*, 1983, 89: 495 - 496.
- [22] TSUKAHARA M, TAKAHASHI K. Influence of Various Additives in Vanadium Based Storage Alloys [J]. *Journal of alloys and compounds*, 1999, 287: 215 - 220.
- [23] LI Z P, HIGUCHI E. Electrochemical Properties and Characteristics of a Fluorinated AB<sub>2</sub> Alloys [J]. *Journal of alloys and compounds*, 1999, 295: 564 - 569.
- [24] 雷永泉, 张文魁. ZrM<sub>2</sub> (M = V, Cr, Mn) Laves 相贮氢合金的相组成 [J]. *金属学报*, 1998, 34(1): 45 - 48.
- [25] DAN LUPU. Hydrogen Absorption and Electrode Properties of Zr<sub>1-x</sub>Ti<sub>x</sub>V<sub>1.2</sub>Cr<sub>0.3</sub>Ni<sub>1.5</sub> [J]. *Journal of alloys and compounds*, 2000, 312: 635.
- [26] 启明. 作为镍氢电池负极用的 Zr - Ti - V - Ni 贮氢合金 [J]. *金属功能材料*, 2000, (1): 38.

(下转第 150 页)

- the maximum hardness principle [J]. *J Am Chem Soc*, 1998, 120: 9 053 - 9 060.
- [12] LIU S, SHI Y, LI Z, et al. QSAR study of steroid benchmark and dipeptides based on MEDV-13 [J]. *J Chem Inf Comput Sci*, 2001, 41(2): 321 - 329.
- [13] LIU S, LIU Y, LI Z, et al. An atomic electronegative dis-
- tance vector and carbon-13 nuclear magnetic resonance chemistry shifts of alcohol and alkanes [J]. *Chin J Chem*, 2000, 18(2): 165 - 174.
- [14] 杨频, 高孝恢. 化学键和结构与性质关系 [M]. 北京: 高等教育出版社, 1987. 474 - 510; 附录 7: 549 - 557.

## On Electroaffinity of Atoms and Orbitals: Novel Energy Scale and Related Correlation Analysrs with Other Scales

*LIAO Chun-yang<sup>1</sup>, LIU Zhen-de<sup>1</sup>, HUANG Ying<sup>2</sup>, LI Zhi-liang<sup>1</sup>*

(1. College of Chemistry and Chemical Engineering, Chongqing University, Chongqing 400044, China;

2. College of Pharmaceutical Science and Technology, Hunan Traditional Medical University, Changsha 410007, China)

**Abstract:** Electroaffinity or electronegativity  $X_{LL}$  is approximately proportional to the average ionization energy  $B$ , the total ionization energy  $U$  divided by the number of atomic valence-shell electrons  $N$ , due to its very small electron affinity  $E$ . Furthermore, electroaffinity of the atomic valence and/or hybridization orbital can be also obtained from their individual capability of attracting valence electrons of an atomic valence and/or hybridization orbital by the ionization energies of valence electron in ground stated free atom and its various orbitals.

**Key words:** electroaffinity  $X_{LL}$ , Electronegativity  $X_{LL}$ ; valence-shell electrons; average ionization energy; electron affinity; valence orbital electroaffinity; hybridization orbital electroaffinity

(责任编辑 张 革)

(上接第 146 页)

## Development and Application of Hydrogen Storage Alloys

*LIU Shou-ping, ZHAO Gang, LI Rong, KANG Ren-mu, ZHOU Shang-qj, REN Qin*

(College of Material Science and Engineering, Chongqing University, Chongqing 400044, China)

**Abstract:** The thermodynamics of reaction between some metal elements and hydrogen is introduced. The design, development and application of hydrogen storage alloys are reviewed. Many kinds of hydrogen storage alloys have been developed, but that used commercially is still rare earth alloys. Because the vanadium - based solid solution alloys have a high hydrogen storage capacity property and magnesium is a cheap light metal, is attractive developing vanadium - based solid solution alloys and magnesium - based alloys. Hydrogen storage alloy's application is still on trial except that in Ni - MH cells. It is necessary to enhance the research and development in the application of hydrogen storage alloys.

**Key words:** hydrogen storage; hydrogen storage material; hydrogen storage alloy

(责任编辑 李胜春)