

弘深·科学技术文库

镁基储氢材料

/

Magnesium-based Hydrogen Storage Materials

李谦 潘复生 编著



重庆大学出版社

弘深·科学技术文库

镁基储氢材料

/

Magnesium-based Hydrogen Storage Materials

李谦 潘复生 编著



重庆大学出版社

内容提要

本书详细介绍镁基储氢材料领域的新进展及发展趋势。针对镁基储氢材料应用面临活化困难、放氢温度高、吸放氢速度缓慢,以及吸放氢循环寿命短等应用瓶颈,全面系统介绍镁基储氢材料体系的组分、结构与储氢特性、吸放氢反应的热力学与动力学基本原理、制备方法与储氢性能的测试表征技术、镁基储氢材料热力学与动力学改性方法及其应用。本书围绕镁基储氢材料成分-微观组织-制备技术-储氢性能之间的关联性,重点阐述镁基储氢材料领域发展中的新理论、新技术和典型应用案例。注重总结和体现我国科研人员在镁基储氢材料研究中所做的重要贡献,具有较强的科学性、工程指导性和参考价值。

本书可供从事氢能、材料、化工及其他相关行业领域的科研技术人员阅读参考,也可作为该领域高年级本科生和研究生的教材。

图书在版编目(CIP)数据

镁基储氢材料 / 李谦, 潘复生编著. — 重庆: 重庆大学出版社, 2023. 1

ISBN 978-7-5689-3173-1

I. ①镁… II. ①李… ②潘… III. ①镁基合金-储氢合金 IV. ①TG139

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2022)第 035033 号

镁基储氢材料

MEIJI CHUQING CAILIAO

李 谦 潘复生 编著

策划编辑:杨粮菊

责任编辑:陈 力 版式设计:杨粮菊

责任校对:夏 宇 责任印制:张 策

*

重庆大学出版社出版发行

出版人:饶帮华

社址:重庆市沙坪坝区大学城西路 21 号

邮编:401331

电话:(023)88617190 88617185(中小学)

传真:(023)88617186 88617166

网址:<http://www.cqup.com.cn>

邮箱:fxk@cqup.com.cn (营销中心)

全国新华书店经销

重庆升光电力印务有限公司印刷

*

开本:720mm×1020mm 1/16 印张:16.75 字数:283 千

2023 年 1 月第 1 版 2023 年 1 月第 1 次印刷

ISBN 978-7-5689-3173-1 定价:98.00 元

本书如有印刷、装订等质量问题,本社负责调换

版权所有,请勿擅自翻印和用本书

制作各类出版物及配套用书,违者必究

序

氢能是一种绿色、来源丰富且应用广泛的二次能源。利用太阳能、风能等可再生能源转换成电能电解水制备的“绿氢”，在解决环境污染、能源调配和实现能源转型等方面潜力巨大，正逐步成为新能源体系的重要组成部分。同时“绿氢”能帮助可再生能源消纳，实现电网大规模调峰和跨季节储能。国家发展和改革委员会与国家能源局联合印发了《氢能产业发展中长期规划(2021—2035年)》，将氢能上升至国家能源战略高度。氢能的开发与利用正在引发一场深刻的能源革命，氢能将成为破解能源危机、实现“双碳”目标、构建安全高效能源体系的重要途径。

氢能产业链包含氢气制备、储运及应用等重要环节，其中氢的安全储运是氢能走向规模化的关键环节。虽然我国针对氢气储运已做了大量工作，但现有高压气态和液态储氢技术存在易燃易爆泄漏等问题，已成为氢能战略实施的重大瓶颈。固态储氢技术由于其吸放氢条件温和，不存在氢气压缩耗能、泄漏引发爆炸等问题，所以相较于液态和气态储氢方式更为安全经济，并且绿氢的供应商在制氢生产调度与应用方柔性衔接上更为便利。在各种固态储氢材料中，镁基储氢材料具有密度小、储氢容量高、原材料丰富、制备成本低等优势，并且我国资源极为丰富。但镁基储氢材料存在吸放氢温度高、吸放氢速率慢、循环寿命短、在碱液中抗腐蚀性能差等缺点，使其工业化应用受到限制。近年来，如何改进镁固态储氢的性能，全球各国做了大量工作，论文数和专利数都出现了大幅度增长，诸多关键技术有了重要突破，工程化应用已开始推进，引起了能源产业和材料产业的高度关注。

由李谦教授和潘复生院士编著的《镁基储氢材料》总结介绍了重庆大学、上海大学等国内外优势单位在镁储氢材料方面的重要进展。全书从镁基储氢合金及其氢化物的结构、热力学性质和吸放氢反应动力学出发，阐述了镁基储氢合金吸放氢反应的热力学原理和宏微观过程动力学机制；介绍了镁基储氢合金、镁基纳米及复合

储氢材料的制备方法;浅析了镁基储氢材料的测试技术和表征方法;最后提出了镁基储氢材料热/动力学调控方法,对其应用进行了详细介绍。作者将抽象的反应热力学和动力学理论知识具体应用到镁基储氢材料的制备和吸放氢过程中,并结合对氢能产业发展的调研与思考以及国内外镁基储氢材料发展的最新进展,为读者展示了镁基储氢材料科学研究与工程应用的全景图。

该专著注重科教融合、产教融合、理实融合,聚焦镁基储氢材料的性能提升,从成分、结构、组织、性能四个维度解析了镁基储氢材料的吸放氢反应。该书篇章布局和结构框架清晰,重点和难点一目了然,内容深入浅出,数据丰富翔实,汇集了镁基储氢材料的结构、性质、气固反应基本理论、制备方法和检测技术等较全面的知识体系,是氢能技术和储能材料领域的一本重要参考书籍。相信该书对氢能领域的科研人员、教师及学生、企业家、工程技术人员和投资人都有所裨益。

中国工程院院士



2022年12月8日

前 言

材料、信息、能源是人类社会的三大支柱。随着世界科技的发展与经济规模的不断扩大,人类对能源的需求与日俱增。石油、煤炭和天然气等化石能源引领了 20 世纪人类的工业革命。但化石能源因过度消耗而日渐匮乏,其高污染排放也给生态环境带来了前所未有的压力。开发可持续清洁能源从而满足世界日益增长的能源需求已成为当下研究的热点和前沿方向。基于能源使用的零污染物排放原则,太阳能、潮汐能、风能、地热能等都是潜在的可替代化石能源的再生清洁能源。但上述可再生资源也存在时间局限性、地域局限性等诸多不稳定因素,需要优质的二次能源与之配合,才能实现在空间和时间上的“削峰填谷”。氢能具有能量密度高、功能多样性、无污染、无毒无害、储量丰富和环境兼容性等优势,是匹配一次能源的理想二次能源载体,有望在替代化石能源过程中发挥重大作用。

氢能全产业链包含制氢、储运氢和用氢 3 个关键环节。而氢能的高密度储运则是氢制取到应用的桥梁,也是制约世界和我国氢能布局的瓶颈环节。储氢技术主要分为低温液态储氢、高压气态储氢和固态材料储氢。而固态储氢材料根据氢在结构中的存在形式又可分为物理吸附材料和化学氢化物材料。从 1968 年储氢合金被发现以来,此类储氢材料就以其安全、高效、高储氢密度、便捷等显著优势成为较理想的储氢介质。当前,该领域已经研制出镧(稀土)系、钛铁系、镁系及锆(钒)系四大系列储氢合金。其中,镁基储氢材料具有原材料充裕、理论储氢密度高、充/放氢平台缓、可逆性好等优点,被认为是最具发展前景的大容量储氢材料之一。但镁基储氢材料活化困难、放氢温度高、吸放氢速度缓慢、吸放氢循环寿命短等缺点也成为其实际应用的障碍。镁是活泼金属,表面极易氧化,导致氢在镁表面解离困难。如何解决这些问题是镁基储氢材料领域研究的焦点和热点。早在 20 世纪 70 年代,研究人员就开始探索用镍、铜、钛、铝、铈和稀土元素等与镁进行合金化以改善其动力学

性能,如镁-镍、镁-稀土和镁-过渡金属-稀土等体系。另一方面,随着纳米材料与纳米技术在 20 世纪 80 年代的兴起,“纳米化”也被广泛应用于改善镁基储氢材料的性能。在复合化和纳米化的研究过程中,催化作用越来越得到关注。迄今为止,改善镁基储氢材料吸放氢性能的方法主要有合金化、复合化、纳米化和催化等。未来,镁基储氢材料需要在成分优化和合成方法两个方面进行深入研究,向多元化镁基储氢材料和多方法调控制备技术方向发展。

针对这一备受关注且迅速发展的领域,国内外已经从多个角度出版了一些关于氢能利用和储氢材料方面的书籍。但鲜见系统总结镁基储氢材料研究进展的专业书籍,为了促进镁基储氢材料的发展,帮助读者更好地了解镁基储氢材料的最新进展,我们编写了这本《镁基储氢材料》,力求较全面反映镁基储氢材料领域取得的新进展和发展趋势,同时希望为从事本专业的技术人员,以及有志于本专业的人员提供专业参考。本书重点介绍镁基储氢材料体系的组分、结构与储氢特性、镁基储氢材料的制备方法与表征测试技术、镁基储氢材料热力学与动力学改性方法及其应用。

全书共分为 5 章,由李谦教授、潘复生院士共同编写。第 1 章主要介绍镁基储氢相及其氢化物的结构和性质、镁基材料氢化物的热力学,从简单体系拓展到多元多相体系;第 2 章以理论与实验研究相结合的方式,介绍镁基储氢材料吸放氢反应的宏微观过程动力学模型及影响因素;第 3 章围绕加工工艺—微观组织—储氢性能关系等,重点阐述镁基储氢合金、镁基纳米及复合储氢材料的先进制备技术,并介绍镁基储氢材料的制粉与氢化方法;第 4 章主要阐述镁基储氢材料的测试技术和方法,重点介绍各项性能指标的测试方法、步骤、注意事项以及结构解析和吸放氢机理方面的表征技术;第 5 章从调控镁基储氢材料热力学与动力学出发,重点阐述吸放氢反应热力学与动力学的影响因素和改善方法,同时介绍镁基储氢材料的具体应用实例。本书在内容上力求简明扼要,将反应热力学和动力学理论知识与镁基储氢材料吸放氢过程紧密结合,以我们课题组的工作成果为主线,并总结国内外镁基储氢材料相关的理论和技术最新进展,经过不断完善和调整编写而成。力求新颖,紧跟时代,注重体现我国科研人员在镁基储氢材料研究中所做的贡献,既可作为相关行

业技术从业人员的参考书籍,也可作为高等院校相关专业教学参考书。

鉴于镁基储氢材料发展日新月异,相关文献资料浩如烟海,我们尽量收集国内外的最新研究资料,力求客观准确。但由于编者水平所限,难免以偏概全,甚至有取舍不当、疏漏、不妥乃至错误之处,恳请各位专家和读者批评指正。本书在编写过程中参考了部分参考文献。在此,对文献的作者表示深深的谢意。希望本书能给那些对该领域感兴趣的同行带来帮助,并欢迎大家对本书所覆盖的任何观点和问题进行反馈和开展讨论。



2022年3月

目 录

第 1 章 镁基储氢合金及其氢化物的结构和热力学性质	001
1.1 镁基储氢相的结构和物理性质	001
1.1.1 镁基储氢相的结构	002
1.1.2 镁基储氢相的物理性质	010
1.2 镁基氢化物的结构和物理性质	011
1.2.1 镁基氢化物的结构	011
1.2.2 镁基氢化物的物理性质	014
1.3 镁基储氢合金的吸放氢反应热力学	015
1.3.1 镁基储氢合金吸放氢反应的热力学基础	015
1.3.2 镁基储氢合金的吸放氢反应热力学特性	018
1.3.3 镁基储氢合金的吸放氢反应热力学的改善方式	021
参考文献	023
第 2 章 镁基储氢合金的吸放氢反应动力学	026
2.1 镁基储氢合金吸放氢反应的宏观与微观过程	027
2.1.1 镁基储氢合金吸放氢反应的宏观过程和评价方式	027
2.1.2 镁基储氢合金吸放氢反应的微观过程和评价方式	029
2.1.3 吸放氢反应宏观与微观动力学过程的联系	031
2.2 镁基储氢合金吸放氢反应的微观动力学	032
2.2.1 镁基储氢合金吸放氢反应的微观动力学机理	032
2.2.2 储氢合金吸放氢反应的动力学理论模型	036
2.3 影响镁基储氢合金吸放氢反应动力学的因素	048

2.3.1 温度的影响	048
2.3.2 氢压的影响	052
2.3.3 颗粒尺寸的影响	053
2.3.4 催化剂的影响	055
参考文献	057
第3章 镁基储氢材料的制备	061
3.1 镁基储氢合金的制备方法	062
3.1.1 熔炼法	062
3.1.2 粉末冶金	070
3.2 镁基纳米储氢材料的制备方法	084
3.2.1 球磨法	084
3.2.2 沉积法	094
3.2.3 液相还原法	104
3.3 镁基复合储氢材料的制备方法	105
3.3.1 纳米限域法	105
3.3.2 催化合成法	109
3.4 镁基储氢材料的制粉和氢化方法	113
3.4.1 制粉方法	113
3.4.2 氢化方法	117
参考文献	124
第4章 镁基储氢材料的测试技术和表征方法	136
4.1 镁基储氢材料的性能指标	136
4.2 镁基储氢材料的储氢性能测试技术	139
4.2.1 体积法	139
4.2.2 重量法	149
4.3 镁基储氢材料的晶体结构与显微组织表征技术	152

4.3.1 晶体结构表征技术	153
4.3.2 显微组织表征技术	158
参考文献	166
第5章 镁基储氢材料热/动力学调控及其应用	169
5.1 镁基储氢合金的氢化反应热力学调控	170
5.1.1 影响吸放氢反应热力学的因素	170
5.1.2 合金化和复合化	172
5.1.3 纳米化	182
5.2 镁基储氢合金的氢化反应动力学改性	192
5.2.1 影响吸放氢反应动力学的因素	192
5.2.2 添加催化剂	193
5.2.3 合金化和复合化	198
5.2.4 纳米化	203
5.3 镁基储氢材料的应用	208
5.3.1 储氢	208
5.3.2 储热	220
5.3.3 储能	226
5.3.4 变色薄膜	233
5.3.5 其他应用领域	239
参考文献	243

第 1 章

镁基储氢合金及其氢化物的结构和热力学性质

1.1 镁基储氢相的结构和物理性质

自 1968 年发现储氢合金以来,储氢合金经历了从纯金属到合金,从二元合金到多元合金,从单一系列到多个系列的发展过程。目前,在已经研究的镧(稀土)系、钛铁系、镁系及锆(钒)系四大系列储氢合金中,镁基储氢材料的优点最为明显,镁基储氢材料由于密度小(纯镁密度为 1.74 g/cm^3)、储氢容量高(MgH_2 质量储氢量可达 $w(\text{H}_2) = 7.6 \text{ wt}\%$)、资源丰富(地壳中镁含量约 2.3%)和价格低廉(2~3 美元/kg)而得到广泛研究,是目前颇具发展前景的储氢合金材料之一。但纯镁吸放氢速率慢,放氢温度高,储氢容量衰退快,这些问题限制了其实用化进程。为了解决这些问题,研究者开展了大量的工作来改善镁的储氢性能,比如合金化、纳米化、添加催化剂、利用外部能量场效应等方式。其中合金化是最常见、最简便的方式之一。由此开发出了多种多样的镁基储氢合金。本节按照镁基储氢合金的晶体结构及其物化性质进行描述,并从简单体系拓展到多元多相体系。

1.1.1 镁基储氢相的结构

镁具有银白色金属光泽,化学性质活泼,在空气中就能被快速氧化而变暗,与酸反应生成氢气。镁属于碱土金属,位于元素周期表第三周期,属于 IIA 族,晶体结构为密排六方,如图 1.1 所示,空间群为 $P6_3/mmc$ (194), 常温下晶胞参数 $a = b = 3.1954 \text{ \AA}$, $c = 5.1872 \text{ \AA}$, 晶格内滑移系少。镁的合金化能力强,多种元素如 Al、Zn、Sc、Gd、Y 等都能固溶于镁中,但过渡元素 Ti、V、Fe、Co、Ni、Zr 等在镁中的固溶度小。镁的熔点为 923 K,密度比铝还小 1/3,且在自然界中分布广泛,也是人体必需的元素之一。镁的基本物理性质见表 1.1。

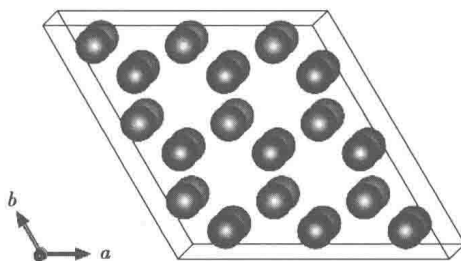


图 1.1 Mg 的晶体结构示意图

表 1.1 镁的基本物理性质

性质	数值	性质	数值
原子序数	12	熔点/K	923±1
原子价	2	沸点/K	1 380±3
相对原子量/(g · mol ⁻¹)	14.305	汽化潜热/(J · g ⁻¹)	5 150 ~ 5 400
原子体积/(cm ³ · mol ⁻¹)	14.0	升华热/(J · g ⁻¹)	6 113 ~ 6 238
原子直径/nm	0.320	燃烧热/(J · g ⁻¹)	24 900 ~ 25 200
泊松比	0.33	镁蒸汽比热容/[J · (g · K) ⁻¹]	0.870 9
密度/(g · cm ⁻³)	1.74	室温电导率/(Ω · m ⁻¹)	23×10 ⁶
电阻率/(nΩ · m)	47	室温热导率/[W · (m · K) ⁻¹]	153.66

镁及其合金具有如下特点:

①密度低。镁合金密度为 1.75 ~ 1.85 g/cm³, 约为铝的 2/3, 钢的 3/4, 塑料的 17/10。

②比强度和比刚度高。镁的比强度明显强于铝合金和钢,但略低于纤维增强材料。镁的比刚度、比弹性模量与高强的铝合金和合金钢相差不大,远超过纤维增强材料。

③弹性模量低,阻尼性能好。在受到同样外力冲击时,应力能更均匀分布,不会导致应力过于集中。在弹性范围内承受冲击载荷时,可比铝多吸收 50% 的能量,适用于抗震部件。

④铸造性和尺寸稳定性好。压铸生产时,由于镁与铁基本不反应,对压铸模的熔蚀少,可延长铸模使用寿命。镁合金铸造加工精度高,高速机械加工同样适用于镁合金。

⑤切削加工性好。可以采用高速、大进给量切削,切削力小,散热快。

⑥热稳定性优良,导热快。

⑦抗电磁干扰和屏蔽性能效果好。

⑧易回收利用,且回收成本低、利用率高,有利于减少矿产资源的开发和改善环境。

⑨镁熔炼时易发生剧烈氧化、燃烧等现象。

当添加元素超过固溶度极限时,将会形成另一种结构的金属间化合物或物相。部分的金属间化合物可以储氢,吸氢后转变为对应结构的氢化物。常见的二元镁基储氢体系包括 Mg-Ni、Mg-Co、Mg-Ti、Mg-Fe、Mg-RE 等,其中可以储氢的金属间化合物列于表 1.2 中。

表 1.2 二元镁基储氢相的晶体结构及其储氢量

二元储氢相	皮尔逊符号 / 结构原型	空间群	晶胞参数/Å	储氢量/wt%
Mg ₂ Ni	hP18 / Mg ₂ Ni	P6 ₂ 22	a=5.19, c=13.21	3.62
Mg ₃ La	cF16 / BiF ₃	Fm3m	a=7.494	2.89
Mg ₁₇ La ₂	hP38 / Th ₂ Ni ₁₇	P6 ₃ /mmc	a=10.359, c=10.240	4.87
Mg ₁₂ Ce	tI26 / ThMn ₁₂	I4/mmm	a=10.33, c=5.96	5.68
Mg ₃ Ce	cF16 / BiF ₃	Fm3m	a=7.428	3.62
Mg ₃ Nd	cF16 / BiF ₃	Fm3m	a=7.37~7.41	1.95
Mg ₁₂ Nd	tI26 / ThMn ₁₂	I4/mmm	a=10.310, c=5.930	5.63
Mg ₂₄ Y ₅	cI58 / αMn	I43m	a=11.25	5.34
Mg ₃ Pr	cF16 / BiF ₃	Fm3m	a=7.425	2.58

Mg-Ni 体系中有两种金属间化合物, Mg_2Ni 和 $MgNi_2$, 其相图如图 1.2 所示^[1]。 Mg_2Ni 是可以储氢的化合物, 熔点为 1 032 K, Ni 含量少于 54.7 wt% 时可与 α -Mg 形成共晶组织, α -Mg 和 Mg_2Ni 的共晶温度较低 (781 K), 通过常规熔炼方法即可制备。 Mg_2Ni 的晶体结构示意图如图 1.3 所示。氢可以间隙形式少量固溶于 Mg_2Ni , 形成 $Mg_2NiH_{0.3}$ 。当氢气压力高于对应温度下的金属与氢化物平衡氢压时, 将会形成 Mg_2NiH_4 氢化物, 且结构不同于 Mg_2Ni 。 Mg -Ni 合金是常用的储氢镁合金, Mg_2Ni 的储氢容量为 3.6 wt%。 Mg -Ni 体系的另一种化合物 $MgNi_2$ 在 623 K 和 40 MPa 氢压以下范围内无法吸氢^[2], 所以通常采用富镁的 Mg -Ni 合金作为储氢合金。利用 Mg_2Ni 本身可以储氢的特性和对镁储氢的催化作用, 极大地改善了纯镁的储氢热力学和动力学行为, 同时使合金的储氢容量保持在 3.6 ~ 7.6 wt%。

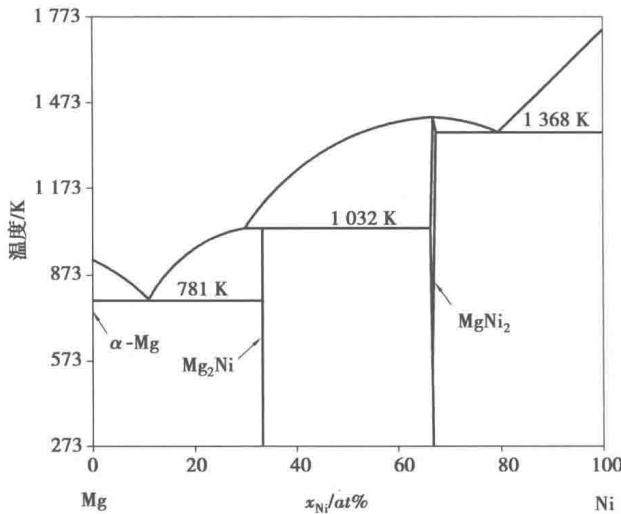


图 1.2 Mg-Ni 二元体系相图^[1]

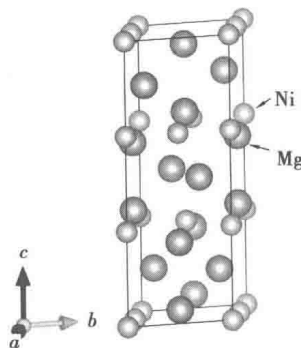


图 1.3 Mg_2Ni 的晶体结构示意图

Mg-Fe、Mg-Co、Mg-Ti 体系都没有稳定的二元金属间化合物,且这些过渡金属元素在 Mg 中的固溶度小于 2 at%。Mg 和 Fe 粉需在高温(约 773 K)和高氢气压力(2~12 MPa)下烧结数天,或在氢气气氛下使用机械合金化才能形成 Mg_2FeH_6 。 Mg_2FeH_6 具有 5.4 wt% 的储氢容量和 $150 \text{ kg H}_2/\text{m}^3$ 的体积密度^[3-5]。Mg-Co 球磨储氢后得到的 Mg_2CoH_5 和 $Mg_6Co_2H_{11}$ 的氢含量分别为 4.5 wt% 和 4 wt%。通过机械合金化的方式可以形成 Mg_xTi_{100-x} 合金的过饱和固溶体,如 $25 \leq x \leq 65$ 范围内形成 BCC 结构固溶体, $35 \leq x \leq 80$ 范围形成 FCC 结构固溶体,以及 $65 \leq x \leq 80$ 范围形成 HCP 结构固溶体^[6-8],但这些过饱和的固溶体在 473 K 以上将分解。

Mg-RE 体系含有较多的金属间化合物。常见的稀土元素 La、Ce、Nd、Y、Pr 等可以与 Mg 形成一系列结构相似的金属间化合物,如 $REMg_{12}$ 、 RE_2Mg_{17} 、 RE_5Mg_{41} 、 $REMg_3$ 、 $REMg_2$ 、 $REMg$ 等。除了尚未报道的 Mg-Pm 相图和金属间化合物,其他轻稀土和镧系稀土的化合物及结构类型列在图 1.4 中。 $REMg$ 相几乎存在于所有 Mg-RE 合金体系,且都为简单的 CsCl 结构类型。 $REMg_2$ 有两种结构类型,分别为 $MgZn_2$ 和 $MgCu_2$ 。 $REMg_3$ 具有 BiF_3 结构,是 Mg-RE 体系中常见的析出强化相,作为金属间化合物稳定存在于 Mg-La/Ce/Pr/Nd/Sm/Gd/Tb/Dy 体系中。越靠近富 Mg 侧,由于结构复杂性提高,能形成富 Mg 的 Mg-RE 金属间化合物的体系越少, RE_5Mg_{41} 只在 Mg-Ce/Pr/Nd/Sm 体系稳定存在, RE_2Mg_{17} 只在 Mg-La/Ce/Eu 体系稳定存在, $REMg_{12}$ 只在 Mg-La/Ce/Pr 体系稳定存在,而 $NdMg_{12}$ 为亚稳相。 $Mg-RE$ 合金氢化后将分解为 REH_x 和 MgH_2 ,其吸氢反应方程见式 1.1,而由于稀土氢化物的分解平台压低,在通常温度范围内很难分解,所以 Mg-RE 合金可循环的储氢容量是其中 MgH_2 的贡献量。常用的 Mg-RE 储氢合金 Mg 含量较高,包含的镁稀土金属间化合物的晶体结构示意图如图 1.5 所示。

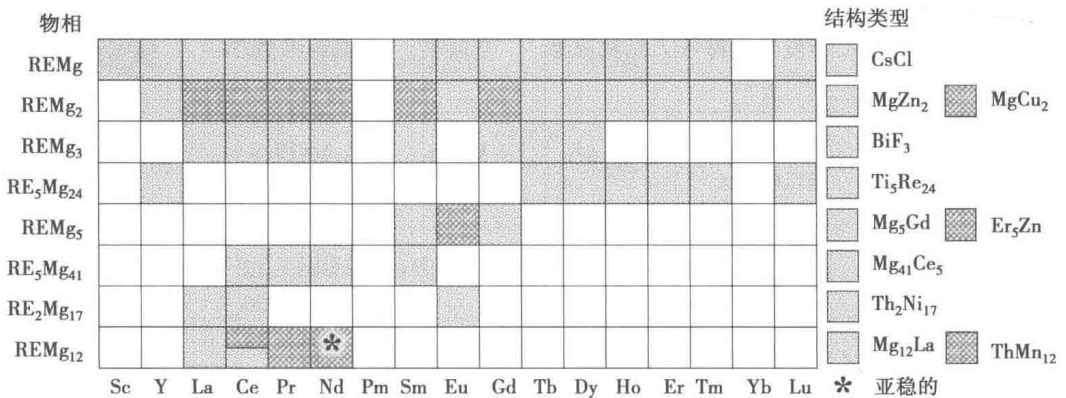


图 1.4 Mg-RE 体系中的金属间化合物及其结构类型^[9]

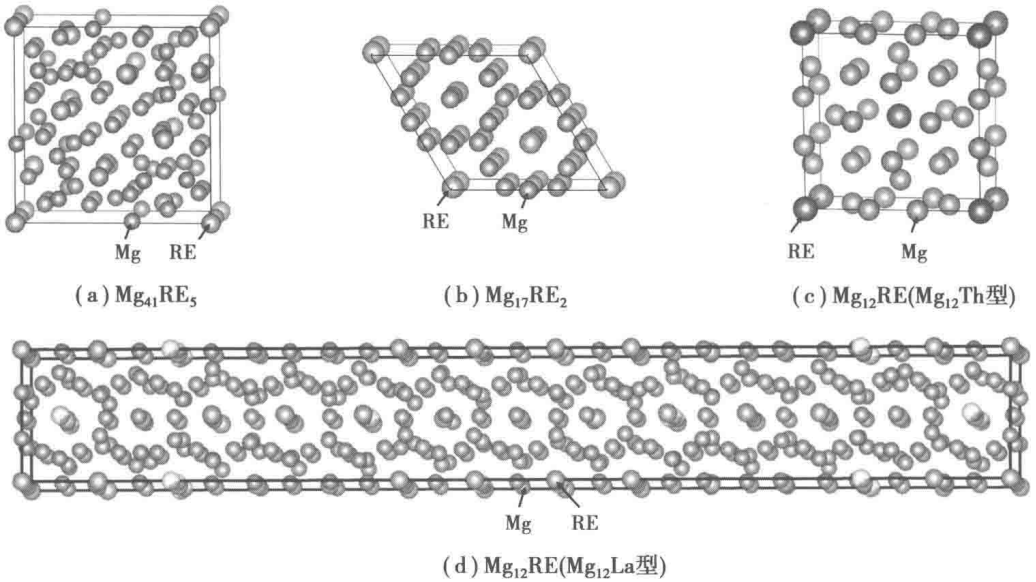
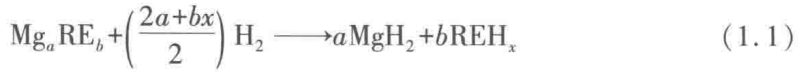


图 1.5 常见的 Mg-RE 合金金属间化合物晶体结构示意图

三元镁基储氢合金大多由 α -Mg 和二元储氢相组成, 它们的储氢性能也通常表现为镁和二元金属间化合物的复合。而在众多的镁基储氢合金中, 镁-过渡金属-稀土体系受到极大关注, 因为这些体系包含众多的三元金属间化合物, 如长周期堆垛有序结构相(long period stacking ordered, LPSO)和准晶相等, 同时过渡金属和稀土元素的添加明显改善了合金的吸放氢热力学和动力学性能。本书将一些三元的金属间化合物结构信息及储氢容量列在表 1.3 中。

表 1.3 三元镁基储氢相的晶体结构及其储氢量

三元储氢相	皮尔逊符号 / 结构原型	空间群	晶胞参数/ \AA	储氢量/ $\text{wt}\%$
18R-LPSO (Mg ₈₅ Zn ₆ Y ₉)	mS144 / Mg ₂₉ Gd ₄ Al ₃	C2/m	$a = 11.1$ $b = 19.3$ $c = 16.0$	4.6 ~ 5.3
18R-LPSO (Mg ₁₂ NiY)	—	—	$a = 11.12$ $b = 19.26$ $c = 46.89$	4.6 ~ 5.1