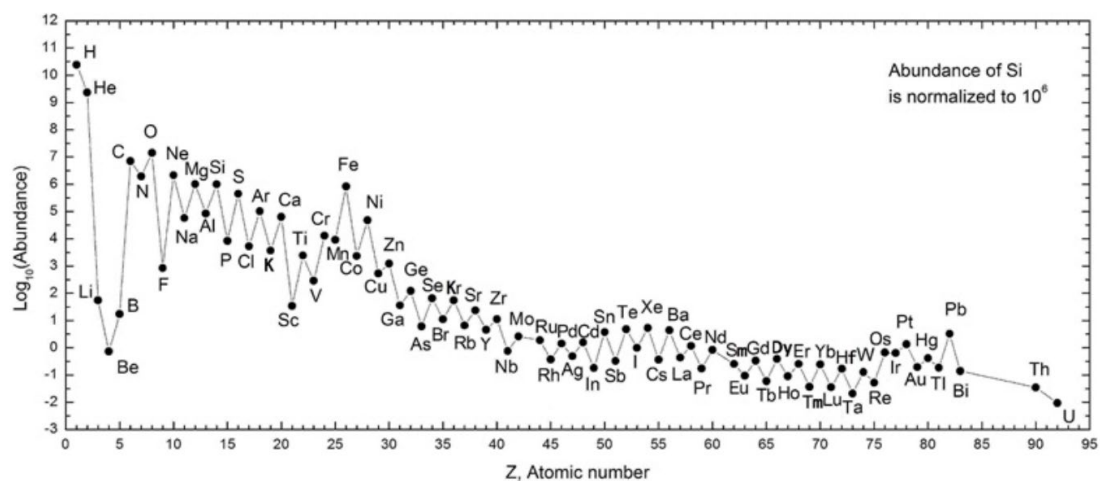


一、化学元素氢

- 1.选择氢气作为燃料的原因：热值高（2.7 倍于汽油，2.4 倍于甲烷）。
- 2.三种同位素：氕 protium(占 99.98%), 氘 deuterium, 氚 tritium
- 3.“21 公分线”：氢原子的质子与电子从自旋方向相同(σH_2)转变为自旋方向相反(πH_2)时，释放的辐射能对应的波长为 0.21m
- 4.宇宙大爆炸，初始温度 $T = 10^9 K$ ，轻原子核合成重原子核； $t=300s$ ，温度降低合成停止。所有的氢原子都是在宇宙大爆炸后 3 分钟内合成的。
- 5.核聚变：只要反应产生的能量大于吸收的能量，过程会持续进行，产生越来越重的元素；铁是核聚变能产生的最重的元素。
- 6.宇宙中元素含量分布



- 7.人体的化学成分更接近于恒星而非地球；太阳由于存在 Fe 元素，所以不是“第一代”恒星。

二、氢能

1. 可持续制氢

① 电解水

② 生物质气化、热解

③ 热熔等离子体

④ 重整固碳

⑤ 净化

2. 氢能的利用

① 燃料电池

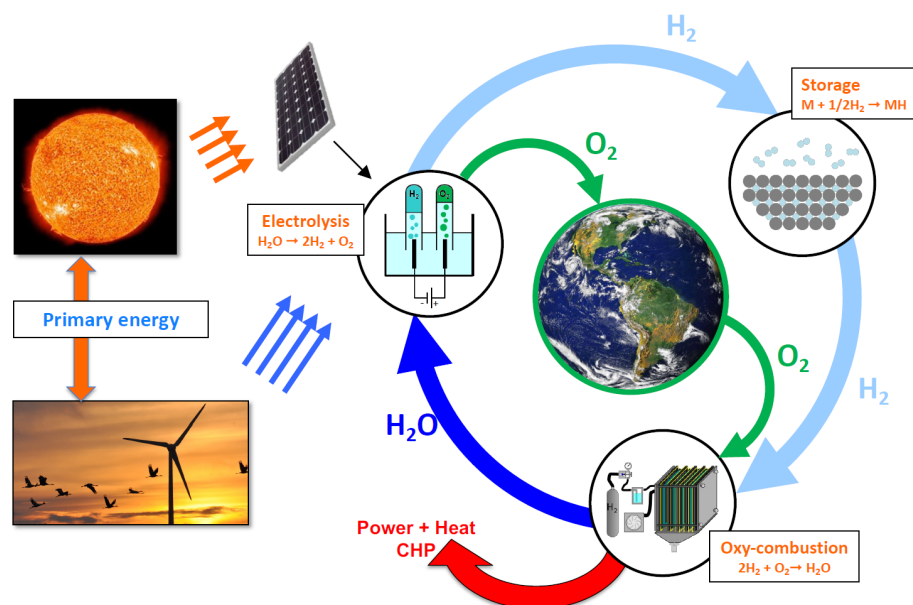
低温 PEMFC：质子交换膜燃料电池

高温 SOFC：固体氧化物燃料电池

② 燃烧

③ 费托合成：以合成气为原料在催化条件下合成液态烃或碳氢化合物。

3. 无碳能源模型中的氢循环

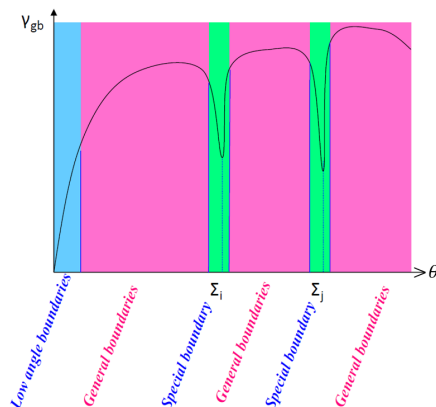


三、材料科学概述

1. 综合考虑能源与环境，提出两种设计材料的方式

- ①功能性：氢的生产、转化与合理使用；节能增效；生产替代燃料、新载体；用于无碳能源；
- ②生态性：良性生命周期、可持续性、可回收性；高效、高性能；廉价、无毒、可拓展；自我诊断、自我修复。

2. 原子形成具有周期性的网络称为晶格 **lattice**，同种原子形成具有边界的晶格称为晶粒 **grain**，不同晶粒的交界处称为晶界 **grain boundary**，晶界由两个参数决定（错位角 θ ，平面 π ）；晶界具有的能量 γ_{gb} 与 θ 的关系如下：



可以看到，除了特殊边界外，晶界能随晶界角的增大而增大，这是因为：只要存在晶界角，就说明处在晶界上的原子偏离平衡位置，其能量高于平衡状态的原子能量，故晶界角越大，偏移越大。

3. 纳米材料的特性

- ①超过 50%的原子在表面；
 - ②结构是准完美的；
 - ③表面曲率很高，因此具有很高的化学反应性；
 - ④表面性质比核心性质活跃；
 - ⑤纳米粒子是约束现象的基础。
4. 金属既可以弹性形变又可以塑性形变；陶瓷只能弹性形变，不能塑性形变。
5. 热特性：声子模型

四、氢与物质的反应

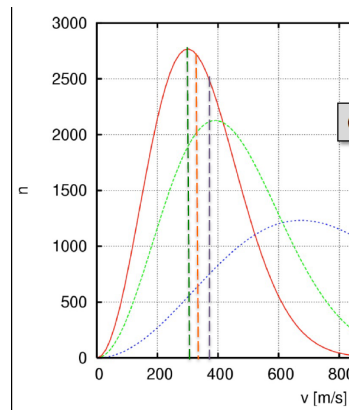
1.为什么地球大气中氢气含量极少？比较分子热速度和逃逸速度。

$$\text{地球逃逸速度 } v_e = \sqrt{\frac{2GM}{R}} = 11200 \text{ m/s}$$

$$343\text{K 时氢气分子平均速度 } v_{rms} = \sqrt{\frac{3kT}{m}} = 1911 \text{ m/s} < v_e$$

由麦克斯韦分布，气体分子的最可能速度为 $\sqrt{\frac{2kT}{m}}$ ，算数平均速度为 $\sqrt{\frac{8kT}{\pi m}}$ ，二次平均速度为

$$\sqrt{\frac{3kT}{m}}$$



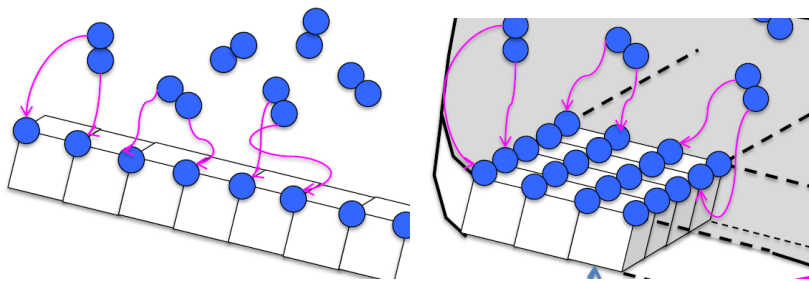
气体分子平均能量 $\overline{W_{th}} = \frac{f}{2} kT$ ，单原子粒子 $f=3$ ，双原子粒子 $f=5$ ，多原子粒子 $f=6$ 。

2.氢气分子如何与物质反应？1mol 氢气需要多少催化剂进行氧化。

催化剂 Ni 的晶胞长度 $a=0.35\text{nm}$

等效长度计算： $L=2a \times N_a = 2 \times 0.35 \times 10^{-9} \times 6.022 \times 10^{23} = 4.22 \times 10^{11} \text{ km} = 0.045 \text{ 光年}$

等效面积计算： $S = 2a^2 \times N_a = 2 \times (0.35 \times 10^{-9})^2 \times 6.022 \times 10^{23} = 150000 \text{ m}^2$



3.燃料电池如何与氢分子反应？略

4.高温燃料电池 SOFC 和 PCFC

	温度 $^{\circ}\text{C}$	带电载体	反应式
SOFC	800-1000	O^{2-}	$\frac{1}{2} O_2 + 2e^- \rightarrow O^{2-}; H_2 + O^{2-} \rightarrow H_2O + 2e^-$
PCFC	500-700	H^+	$H_2 \rightarrow 2H^+ + 2e^-; \frac{1}{2} O_2 + 2H^+ + 2e^- \rightarrow H_2O$

5.燃料电池中消耗 1molH₂ 需要多长时间?

$$Q_{H_2} = 2N_a \times e = 2 \times 6.022 \times 10^{23} \times 1.602 \times 10^{-19} = 192945C$$

在 1cm² 的 SOFC 上, 转移电荷密度为 1A/cm² 的电荷, 需要时间 $t = \frac{Q}{I} = \frac{192945}{1} s = 53.6h$

五、tutorials 见 ppt