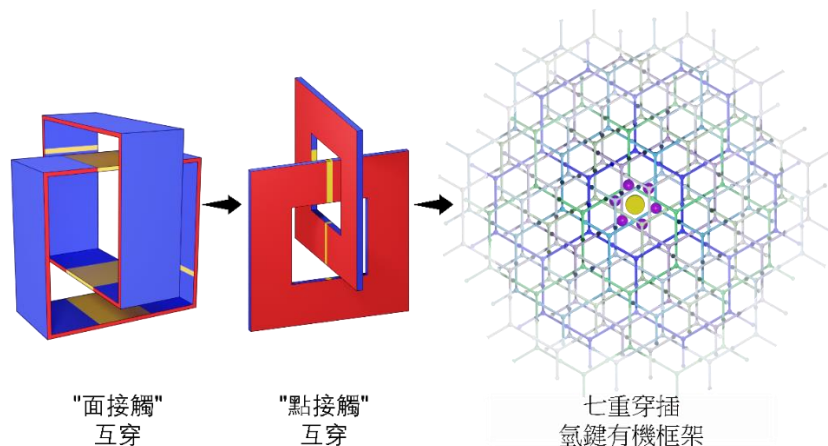


新聞稿

即時發佈

港大化學家研發高性能儲氫有機超分子晶體 有望提升燃料電池汽車的效能

2024 年 9 月 23 日



圖一：利用氫鍵導向點接觸互穿策略，使超分子晶體同時兼具高單位體積和高單位重量的氫儲存能力。

圖片修改自 Zhang et al, 2024, *Nature Chemistry*.

氫氣因其零碳排放以及單位質量儲存的能量遠高於汽油，被譽為「未來燃料」。然而，氫氣的低體積密度導致儲存和運輸時需要佔用大量空間，這對氫氣的有效使用構成了挑戰。為了解決這一問題，當前的氫氣存儲，通常是將氫壓縮至700個大氣壓，但這種高壓儲存方式不僅成本高昂，還存在安全隱患。

為了推動燃料電池汽車（FCV）的普及，美國能源部（DOE）為氫儲存系統設定了具體目標：儲存系統至少應儲存其質量的6.5%氫氣（質量儲存容量），且每公升材料至少能儲存50克以上的氫（體積儲存容量）。這些標準確保汽車能夠在不用頻繁加氫的情況下保持合理的行駛距離。

開發多孔吸附材料 實現高容量氫氣儲存

為了實現這些目標，研究人員開發了多孔吸附材料，如金屬有機框架（MOFs）、共價有機框架（COFs）和多孔有機聚合物（POPs），這些材料的共同特點是擁有多孔結構，能有效捕捉和儲存氫氣。此類材料有望在較低壓力下（如100個大氣壓）實現高容量的氫氣儲存，但目前大多數材料無法同時滿足質量和體積儲存容量的需求。

從工業的角度來看，在氫儲存中，體積容量比質量容量更為重要，原因是車輛中的空間有限，而燃料儲存罐的體積直接影響汽車的行駛距離。因此，開發同時具有高體積和高質量容量的氫吸附劑至關重要。要實現這一點，方法是需要在同一材料中平衡高體積和質量表面積。

有機超分子晶體是一種由有機分子透過非共價作用（**noncovalent interaction**）組裝而成的晶體材料，因其孔徑調節性和易回收性而成為研究重點，被視為一種有潛力的解決方案。然而，設計出能同時平衡高質量和體積容量且結構穩定的超分子晶體，仍然是極具挑戰性的工作，因此其潛力尚未得到充分發掘。

一種被稱為「互穿」的現象，涉及多孔材料中的框架結構的機械鎖定，通常可以提高材料的穩定性。然

而，互穿往往會因為阻擋可接觸的表面而減少材料的表面積，降低材料的多孔性，不適合用於氫儲存。因此，材料設計和合成時通常會努力減少或避免互穿現象。

為了發掘超分子晶體在氫氣儲存中的潛力，港大化學系講座教授Fraser STODDART教授帶領的研究團隊，包括研究助理教授唐淳博士和張瑞華博士，與美國西北大學化學和生物工程系的Randall SNURR教授合作，開發了一種名為「點接觸互穿策略」的創新方法。

傳統的 $[\pi \cdots \pi]$ 堆疊涉及很大的表面積重疊，會造成大量的表面積損失；研究團隊的創新方法是利用氫鍵，其橫切面可被視為一個「點」，以引導超分子晶體中的互穿。基於這種策略，研究人員成功創建了一個具有七重互穿結構的框架，將互穿引起的表面損失降至最低，並形成特定大小的孔徑（~1.2–1.9納米），以實現高效氫氣儲存。

研究團隊最終成功合成了一種超分子晶體，該晶體的單位質量表面積為3,526 平方米/克，和單位體積表面積為1,855平方米/立方厘米。這種超分子晶體是分子晶體中歷來平衡性最佳的材料之一，並且具有極高的穩定性。

此外，這種超分子晶體在壓力和溫度擺動條件下（77 K/100 bar $\rightarrow$ 160 K/5 bar）還實現了優異的材料級單位體積容量（53.7 克/公升）和高單位質量容量（9.3 重量%）的氫氣儲存，該低溫條件下的材料性能同時超越了美國能源部設定的終極系統級目標——單位體積容量：50 克/公升和單位質量容量：6.5 重量%。

設計一種同時具備高穩定性、平衡高單位質量和單位體積表面積的有機超分子晶體，的確是一項巨大的挑戰。然而，研究團隊提出了這一種創新的「氫鍵點接觸互穿策略」，用以減少互穿過程中表面積的損失。這種設計使得超分子晶體能夠在保持高穩定性的同時，也能實現平衡的高單位體積和單位質量表面積，並擁有理想的氫氣儲存孔徑。這項研究表明，有機超分子晶體在車載氫氣儲存方面具有很大的潛力，並突顯了「導向性互穿策略」在設計堅固多孔材料中的應用前景。

關於研究團隊



圖二：左起：港大化學系研究助理教授張瑞華博士、講座教授Fraser Stoddart教授及研究助理教授唐淳博士。

這項研究是由港大化學系講座教授Fraser Stoddart教授領導，研究助理教授唐淳博士、張瑞華博士，以及美國西北大學化學和生物工程系的Randall Snurr教授及其團隊合作完成。來自Stoddart團隊的研究助理教授張瑞華博士，主導了高度互穿的超分子晶體的設計和合成工作，並擔任此論文的第一作者。其他來自港大的研究人員，

包括韓含博士、吳廣成博士、吳勇博士和陳瀟楊教授，他們對這個研究項目做出了貢獻。

有關此研究的論文：<https://www.nature.com/articles/s41557-024-01622-w>

此新聞稿以英文版本為準。

傳媒如有查詢，請聯絡港大理學院助理經理（傳訊）杜之樺（電話：39174948；電郵：caseyto@hku.hk）/ 助理傳訊總監陳詩迪（電話：39175286；電子郵件：cindycst@hku.hk）。

圖片下載及說明文字：<https://www.scifac.hku.hk/press>