

刘启航¹, 罗子峰¹

¹上海大学材料科学与工程学院

Abstract

储氢合金的PCT曲线和氢化动力学性能是描述合金储氢性能的重要标准，目前对合金的PCT曲线测试一般采用体积法，对合金氢化反应动力学的研究一般采用等容差压法。但在实际生产过程中，储氢合金通常是在恒定氢气流速的情况下工作的，所以研究合金在恒定氢气流速条件下的吸氢动力学性能很有必要。与实验相比，采用数值模拟预报合金的吸放氢性能节省了大量的时间和成本，具有突出优势。目前金属Pd及其合金被广泛应用于储氢及氢气纯化等领域，我们通过COMSOL软件建模，构建Pd吸氢热力学与动力学特性模型，选用传热、流体流动、域常微分等物理场模块建立了Pd在恒定氢气流速下吸氢动力学的计算模型，计算结果与实验值基本一致，表明该模型可用于预报Pd在恒定流速下的吸氢特性。

Figures used in the abstract

Figure 1: 钯在不同流速下的吸氢动力学曲线（实心点为实验值，实线为模拟计算结果）