

---

# ECE 综述分享 钒基储氢合金设计与性能调控：多组分协同与机器学习驱动的研究新图景

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/40648.html>

*本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！*

ECE 综述分享

钒基储氢合金设计与性能调控：多组分协同与机器学习驱动的研究新图景。论文标题：Design and performance modulation of V-based hydrogen storage alloys: a review

期刊：ENGINEERING Chemical Engineering

作者：Ziyan Zhang, Congwen Duan, Wenhao Xiao, Yidan Chen, Lunzhi Yin, Yuxuan Cao, Haixiang Huang, Jianguang Yuan, Xiaoying Yang, Sihan Tong, Ying Wu

发表时间：13 Feb 2026

DOI：10.1007/s11705-026-2660-8

微信链接：[点击此处阅读微信文章](#)

文章信息

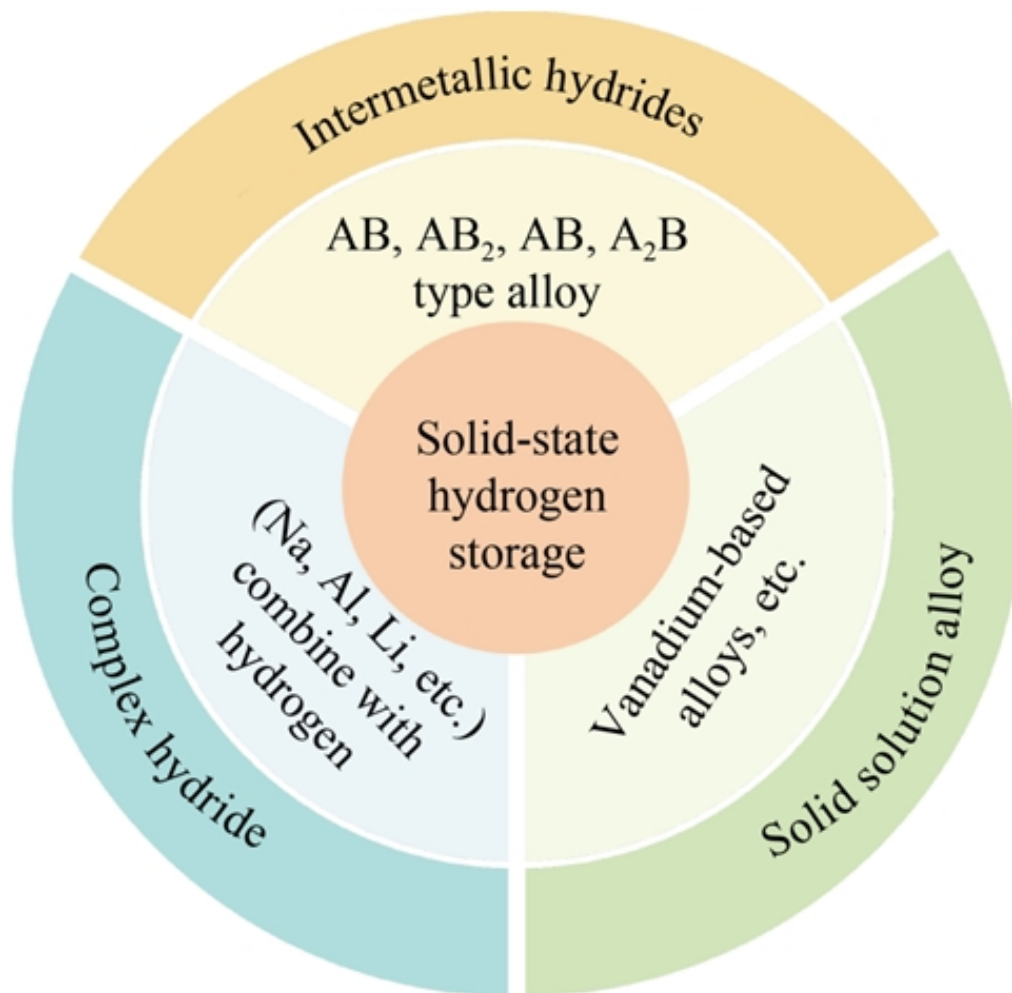
文章题目

Design and performance modulation of V-based hydrogen storage alloys: a review

文章来源

Ziyan Zhang, Congwen Duan, Wenhao Xiao, Yidan Chen, Lunzhi Yin, Yuxuan Cao, Haixiang Huang, Jianguang Yuan, Xiaoying Yang, Sihan Tong, Ying Wu. Design and performance modulation of V-based hydrogen storage alloys: a review. *ENG. Chem. Eng.*, 2026, 20(5): 37

DOI:10.1007/s11705-026-2660-8



## 研究背景

全球能源转型背景下，氢能规模化应用已成为国家重要战略，固态储氢是其核心技术支撑。体心立方结构钒基合金储氢容量高、可近室温吸放氢，是燃料电池理想的储氢材料。华北电力大学段聪文和武英教授团队在*Eng. Chem. Eng.*发表综述，系统地梳理了三元至五元及高元钒基合金体系的成分-结构-性能调控规律，阐释了机器学习在合金高通量筛选中的应用价值与现存挑战，并剖析了复杂服役环境下工程因素对合金长效性能的影响机制。

## 综述亮点

从合金设计到工程应用的全链条储氢策略

多组分合金体系的构效关系与调控规律

---

系统梳理了三元 (V-Ti-Cr、V-Ti-Fe、V-Ti-Mn、V-Ti-Ni)、四元 (V-Ti-Cr-Zr、V-Ti-Cr-Mn、V-Ti-Cr-Fe) 及五元以上高元合金体系。阐明了BCC BCT FCC的氢化相变路径及相热力学过稳机制；揭示了V含量主导BCC相形成与循环稳定性，Ti/Cr比通过晶格畸变调控储氢容量与平台压力，Fe、Mn、Zr等元素分别实现降本、扩温域、改善活化等差异化功能。建立了Ti/(Cr+Fe)比、Ti/(Cr+Mn)比等关键配比参数与有效储氢容量的定量关联。

### 机器学习驱动的成分设计与性能预测

针对传统试错法效率低、成本高的瓶颈，综述讨论了随机森林、深度神经网络、梯度提升回归及贝叶斯优化等算法。基于81种BCC固溶体氢化物等数据集，可实现储氢容量预测相对误差 1.1%；通过特征重要性可分析识别平均离子特征 (MeanIonicChar)、Fe含量、晶格参数等核心描述符；结合遗传算法可完成V-Ti-Cr-Fe系高通量筛选与实验验证。同时批判性指出当前数据样本不足、特征物理意义模糊、验证闭环缺失等挑战，提出了标准化-多尺度-全性能数据集与"物理信息嵌入"描述符框架的发展方向。

### 工程服役环境下的性能退化机制与应对策略

聚焦实际工况中空气毒害和杂质气体 (CO、O<sub>2</sub>、H<sub>2</sub>O)、热效应及循环粉化等工程因素。揭示了O<sub>2</sub>形成致密氧化层阻断氢扩散、CO强吸附阻塞活性位点、N<sub>2</sub>弱吸附仅降动力学的差异化毒害机制；分析了吸放氢焓变 ( - 30 ~ - 50 kJ · mol<sup>-1</sup> H<sub>2</sub>) 导致的热累积/热损失问题；阐明了相变循环带来5%~10% 体积胀缩，诱发内部应力与颗粒粉化失效；提出了Si/稀土表面钝化、Pd/Ni催化涂层、BCC-Laves双相结构缓冲应变、蜂窝/微通道热交换结构等系统优化方案，为合金工程化应用提供了直接指导。

### 未来展望

未来研究应优先关注以下几个方向：构建高质量数据集、发展机理驱动的集成模型、加强对工程因素间耦合效应的研究以及创新实验验证范式。通过将机器学习与高通量实验相结合，开发兼具优异基础性能与高工程适用性的钒基储氢合金，从而推动其在储氢、输运及燃料电池系统中的大规模应用。

### 亮图解读

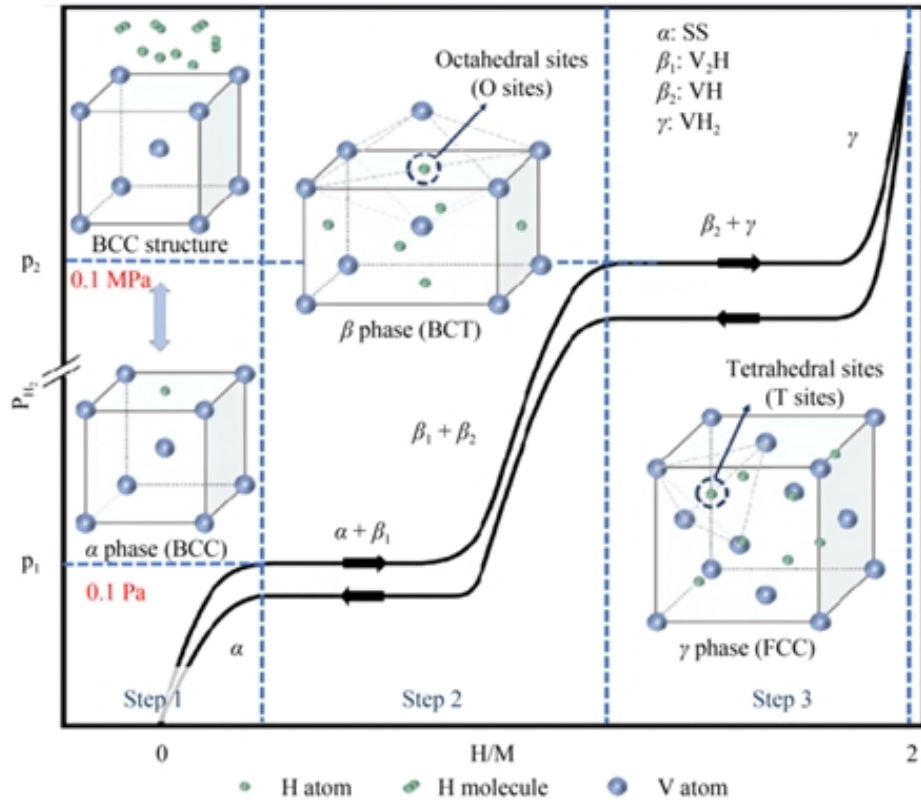


图2 钒吸放氢晶体结构演化规律。完整展示了BCC结构钒在不同氢压下的三阶段相变特征：低氢压氢占据四面体间隙形成相；中压晶格畸变转为BCT结构相；高压氢填充八面体间隙形成FCC结构相，脱氢过程可逆回溯。这张图直观揭示了相热力学稳态是室温有效储氢容量偏低的微观本质，是理解钒基储氢机理的核心原理图。

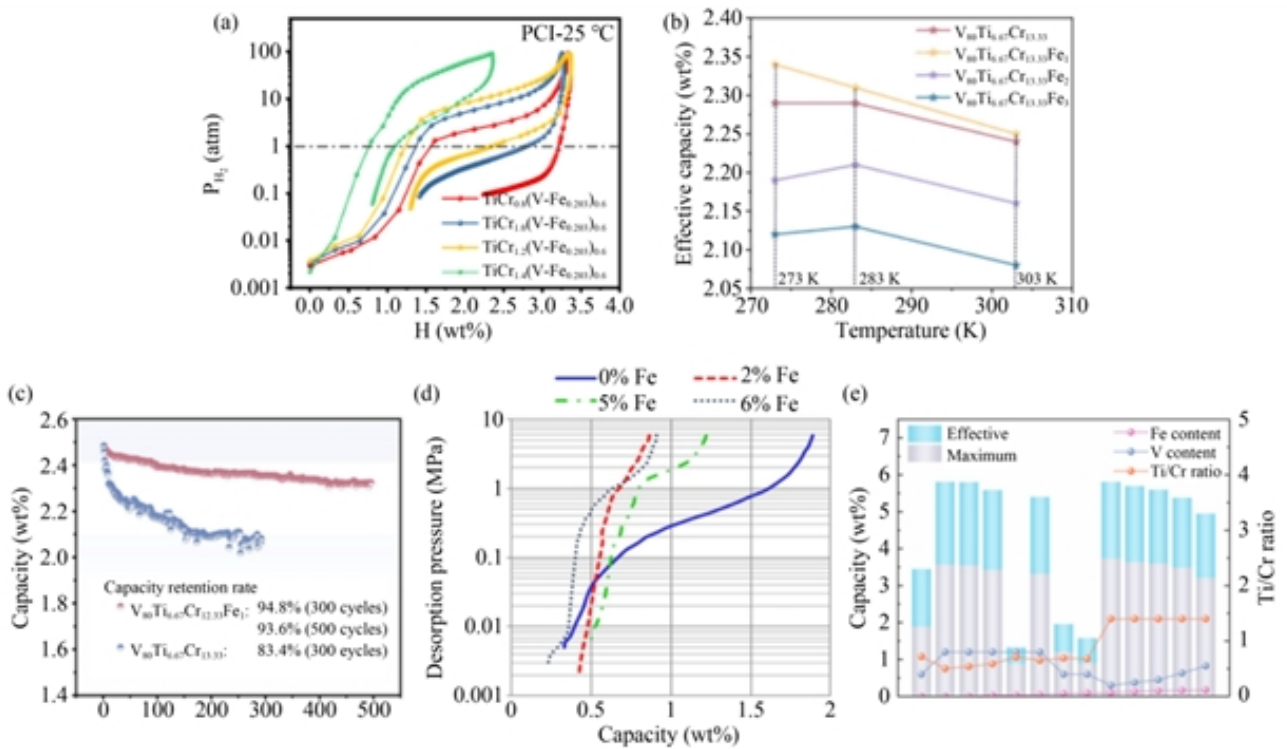


图9 V-Ti-Cr-Fe合金性能调控。量化表征了Cr、Fe含量及Ti/Cr 对比对储氢平台压力、最大容量、有效容量和循环稳定性的影响规律：Cr 可显著提升脱氢平台压力且不损耗储氢容量，微量 Fe 掺杂可将 500 次循环容量保持率提升至 93% 以上，明晰多组分协同调控机制，为低成本高钒系合金配方优化提供直接数据支撑。

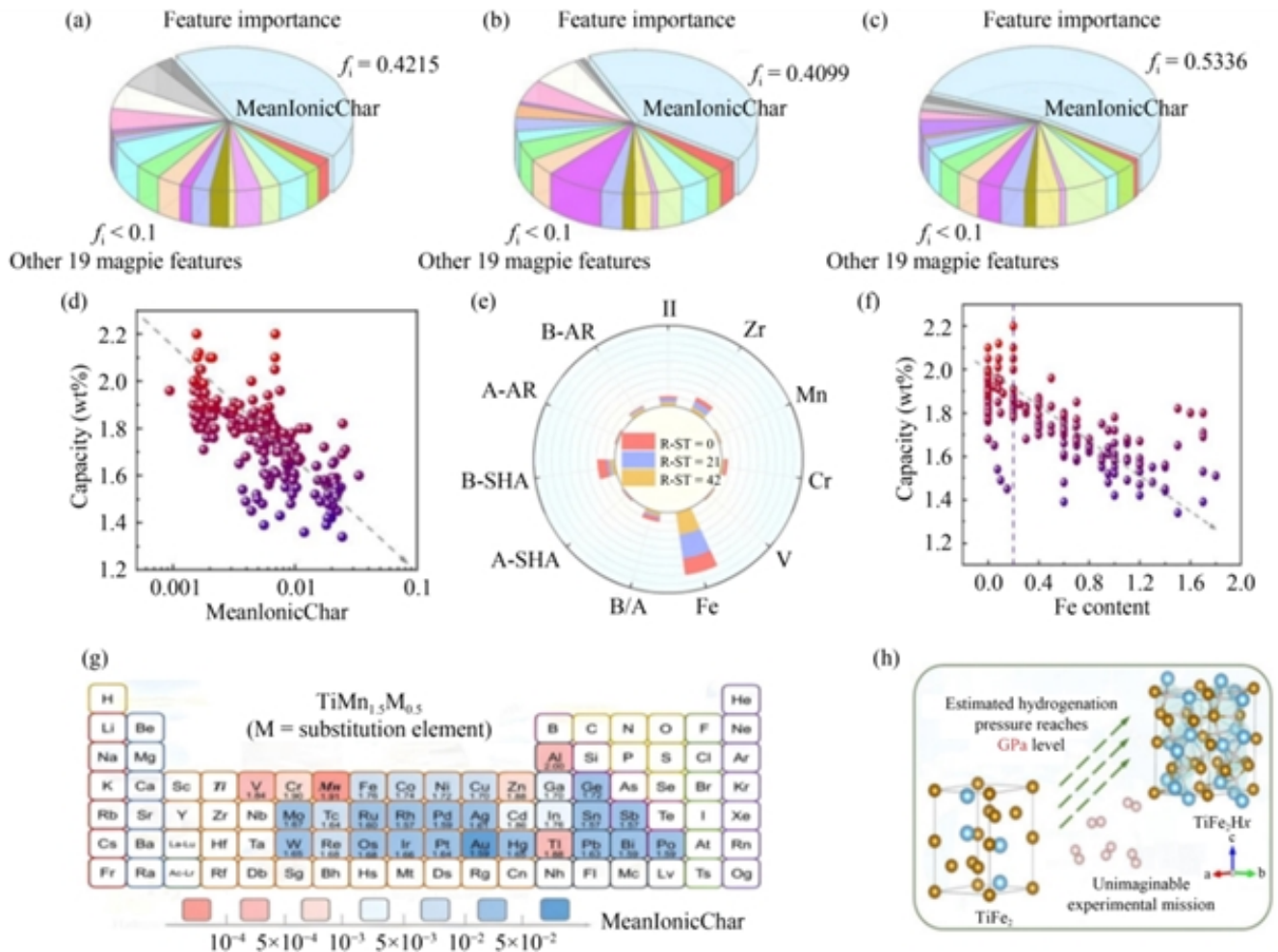


图12 机器学习特征重要性分析。基于多数据集拆分建模，可识别平均离子特征、Fe 含量是决定钒基合金储氢容量的核心主控因子；揭示出高 Fe 含量扰乱 C14-Laves 相结构、劣化储氢性能的微观机制，从特征维度阐明了元素作用本质，为机器学习驱动高通量筛选、定向定制钒基合金提供了理论支撑。

### 作者简介

通讯作者1：段聪文，华北电力大学副教授，主要从事氢能转化、离子液体功能化设计、CO<sub>2</sub> 捕集和转化相关研究，近年来主持和参与过国家重大专项、重点研发项目课题、国家自然科学基金面上项目等。在相关研究方向发表研究论文 20 余篇。

### 免费全文



**DOI:10.1007/s11705-026-2660-8**

来源：ENGINEERING Chemical Engineering

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](http://www.iikx.com)转发