ICS 87.040
CCS T47

团　体　标　准

T/BYXT 168-2026

稀土改性 $LaCeNi_5$ 基储氢合金技术要求

Technical requirements for rare earth modified $LaCeNi_5$-based hydrogen storage alloys

（征求意见稿）

2026-XX-XX 发布　　2026-XX-XX 实施

包头市白云鄂博矿区市场监督管理局
包头市白云鄂博矿区工信和科技局　发布
包头市白云鄂博矿区稀土产业标准化协会

目　次

前　言

本文件按照GB/T 1.1－2020《标准化工作导则 第1部分：标准化文件的结构和起草规则》的规定起草。

请注意本文件的某些内容可能涉及专利。本文件的发布机构不承担识别专利的责任。

本文件由包头市稀谷科技有限公司提出。

本文件由包头市白云鄂博矿区稀土产业标准化协会归口。

本文件起草单位：包头市检验检测中心、呼和浩特海关技术中心、包头市白云鄂博矿区市场监督管理局、包头市白云鄂博矿区工信和科技局、包头市稀谷科技有限公司、内蒙古圣飞运营科技有限公司、北京飞创世桥文化科技有限公司、北京炎黄医养科技有限公司、北京稀造科技有限公司、北京稀谷科技有限公司、三河悟筛健康科技有限公司、内蒙古稀都酒店管理有限公司、内蒙古沸石山生物科技集团有限责任公司、内蒙古润蒙稀超矿科技有限公司、乌拉特前旗石山矿业有限公司、内蒙古蒙稀超分子材料科技有限公司、内蒙古白庙子鸿雁农牧业生态科技发展有限公司、内蒙古稀都科技发展有限公司、吉安稀谷科技产业有限公司、包头市白云鄂博矿区稀土新材料和产业应用研究院、包头市白云鄂博矿区稀土产业标准化协会。

本文件主要起草人为：侯权恒、李信福、焦智斌、侯照东、陈媛媛、段羚、王霄鹏、吴天相、李波、延涵、张晓毅、李永滔、白夜明、王丽、赵艳霞、侯倩文、郝广诚、李荣腾、周泉书、任渊、尹志军、王振洲、白瑞、王鸿宇、石晓丽、莘俊莲、张沛宇、崔晓宇、刘雨、冶建荣、张丽华、湛军平、王强、那剑、袁玉静、张文权、韩乐、武小丽、敖日格乐、李明、王乐、池慧。

本文件为首次发布。

稀土改性 $LaCeNi_5$ 基储氢合金技术要求

1 范围

本文件规定了稀土改性 $LaCeNi_5$ 基储氢合金的术语和定义、分类与牌号、技术要求、试验方法、检验规则及标志、包装、运输、贮存。

本文件适用于采用真空感应熔炼、闪速熔融-气雾化或电子束蒸发沉积（EVD）工艺制备的稀土改性 $LaCeNi_5$ 基储氢合金锭、粉末及表面改性产品。

本文件适用于氢燃料电池商用车、分布式氢储能、低温制冷及氢冶金等领域的固态储氢材料。

2 规范性引用文件

下列文件对于本文件的应用是必不可少的。凡是注日期的引用文件，仅所注日期的版本适用于本文件。凡是不注日期的引用文件，其最新版本（包括所有的修改单）适用于本文件。

GB/T 228.1 金属材料 拉伸试验 第 1 部分：室温试验方法

GB/T 5168 有色金属加工企业电阻退火炉热平衡测试与计算方法

GB/T 14265 金属材料中氢、氧、氮、碳和硫分析方法通则

GB/T 18035 贵金属及其合金牌号表示方法

GB/T 29918 稀土系储氢合金化学分析方法

GB/T 34496-2023 稀土系储氢合金

GB/T 36342-2018 储氢合金 吸放氢循环寿命测试方法

GB/T 37204 储氢合金 氢吸放动力学性能测试方法

GB/T XXXXX 高熵合金 术语与定义（报批稿）

T/BYXT 025-2023 稀土金属及合金化学分析方法 电感耦合等离子体质谱法

T/BYXT 089-2025 固态储氢装置通用技术要求

3 术语和定义

下列术语和定义中的内容适用于本文件。

3.1

稀土改性 $LaCeNi_5$ 基储氢合金 rare earth modified $LaCeNi_5$-based hydrogen storage alloy

以 $LaCeNi_5$ 为基体，通过添加 Pr、Nd、Gd、Y 等稀土元素进行成分优化，和/或通过表面纳米催化层改性，使储氢密度、循环寿命或动力学性能显著提升的 AB_5 型储氢合金。

3.2

高熵氢化物 high-entropy hydride；HEH

由五种及以上主族金属元素（原子分数 5%-35%）构成的储氢合金，其构型熵 $\Delta S_{config} \geq 1.5R$（R 为气体常数），具有迟滞效应低、动力学性能优异的特征。

3.3

磁量子阱扩散系数 magnetic quantum well diffusion coefficient

在含 Gd 的稀土高熵储氢合金中，由于 $Gd^{3+}4f^7$ 局域磁矩与氢核自旋耦合，导致氢扩散势垒降低、扩散系数显著增强的表观扩散系数，记为 D_{MQW}。

3.4

双相氢泵结构 dual-phase hydrogen pump structure

由非晶/纳米晶双相构成的核-壳结构，其中非晶相作为快速氢传输通道，纳米晶相作为高容量储氢基体，两者协同实现动力学-热力学解耦优化的微观结构。

3.5

平台压滞后 pressure plateau hysteresis

在恒定温度下，吸氢平台压与放氢平台压之差与吸氢平台压的比值，记为 $H_f=(P_a-P_d)/P_a\times 100\%$。

4 分类与牌号

4.1 分类

按化学成分、微观结构和性能特征，产品分为三个等级：

V1.0（标准型）：四元改性（La-Ce-Pr-Nd），常规感应熔炼工艺；

V1.2（enhanced 型）：四元改性+表面 EVD 催化层，闪速熔融工艺；

V2.0（高熵磁泵型）：六元高熵（La-Ce-Pr-Nd-Gd-Y）+双相氢泵结构+原位磁化 EVD 工艺。

4.2 牌号表示方法

产品牌号采用以下方式表示：

XT-□□□-□

其中：

XT：稀谷科技（XiguTechnology）代号；

第 1 组□：等级代号（V10、V12、V20）；

第 2 组□：形态代号（I-锭材，P-粉末，C-涂层粉末）；

第 3 组□：规格代号（粒径或厚度，如 50 表示 50 μm）；

第 4 组□：改型序号（A、B、C…）。

示例：XT-V20-P50-A 表示稀谷科技 V2.0 级粉末，粒径 50 μm，第一次改型。

5 技术要求

5.1 化学成分

应符合表 1 的要求。

表 1 化学成分要求（质量分数）

元素	V1.0	V1.2	V2.0	杂质总和*
La	20.0-25.0	20.0-25.0	18.0-22.0	—
Ce	15.0-20.0	15.0-20.0	12.0-16.0	—

元素	V1.0	V1.2	V2.0	杂质总和*
Pr	4.0-7.0	4.0-7.0	4.0-6.0	—
Nd	4.0-7.0	4.0-7.0	4.0-6.0	—
Gd	—	—	5.0-7.0**	—
Y	—	—	1.5-3.0	—
Ni	余量	余量	余量	—
O	≤0.05	≤0.03	≤0.02	—
Fe	≤0.10	≤0.08	≤0.05	—
其他稀土	≤0.50	≤0.30	≤0.20	—
杂质总和	≤0.80	≤0.50	≤0.30	—

杂质包括 Si、Al、Ca、Mg、Mn、Cu 等；

**V2.0 级 Gd 含量应控制在 6.0%±0.5%以优化磁量子阱效应。

5.2 物理性能

5.2.1 储氢性能

应符合表 2 的要求。

表 2 储氢性能要求

项目	V1.0	V1.2	V2.0	试验方法
最大储氢密度（25℃，3MPa），wt%	≥1.80	≥2.00	≥2.20	GB/T 34496-2023 附录 B
可逆储氢密度，wt%	≥1.60	≥1.85	≥2.05	GB/T 34496-2023 附录 B
吸氢动力学（25℃，2MPa，至 90%饱和），s	≤120	≤60	≤30	GB/T 37204
放氢动力学（25℃，0.1MPa，至 90%释放），s	≤180	≤90	≤45	GB/T 37204
氢扩散系数 D（25℃），$10^{-7}cm^2/s$	≥0.8	≥1.5	≥2.5	附录 A

项目	V1.0	V1.2	V2.0	试验方法
脱氢温度（至80%释放），℃	≤280	≤220	≤180	GB/T 34496-2023
平台压（25℃，H/M=0.5），MPa	0.05-0.20	0.05-0.20	0.03-0.15	GB/T 34496-2023
平台压滞后H_f，%	≤15	≤10	≤5	3.5定义计算
循环寿命（25℃，3MPa/0.1MPa，容量保持率≥85%），次	≥2500	≥4000	≥6000	GB/T 36342-2018
粉化率（循环后＜38μm颗粒占比），%	≤20	≤15	≤10	GB/T 34496-2023

5.2.2 **热物性**

导热系数（25℃，氢化态）：≥6W/(m·K)（V1.0/V1.2），≥8W/(m·K)（V2.0）；
体积膨胀率（氢化至饱和）：≤8%（V1.0），≤7%（V1.2），≤6%（V2.0）；
比热容（25℃）：0.42-0.48J/(g·K)。

5.3 电化学性能（适用于镍氢电池负极材料应用）

如需应用于镍氢电池，应符合表3规定。

表3 电化学性能要求

项目	V1.0	V1.2	V2.0	试验方法
放电比容量（0.2C，25℃），mAh/g	≥320	≥340	≥360	GB/T 34496-2023
高倍率放电性能（1C/0.2C），%	≥85	≥90	≥95	GB/T 34496-2023
循环寿命（1C，80%DOD），次	≥500	≥800	≥1200	GB/T 34496-2023

5.4 工艺性能

5.4.1 **粉末流动性（适用于粉末产品）**

霍尔流速：≤35s/50g（V1.0），≤30s/50g（V1.2/V2.0）；
松装密度：≥2.8g/cm^3；
振实密度：≥4.0g/cm^3。

5.4.2 **表面催化层（适用于V1.2和V2.0）**

EVD催化层成分：Pr_6O_{11}/Nd_2O_3非晶混合层；
厚度：3-8nm（V1.2），5-10nm（V2.0）；

结合强度：≥40MPa（划痕法）；
磁化取向度（V2.0）：≥80%（Gd4f 电子自旋极化度）。

5.5 表面质量

锭材表面应无裂纹、夹杂、氧化皮；
粉末应呈球形或近球形，卫星球比例≤5%；
涂层粉末表面应无剥落、团聚。

6 试验方法

6.1 化学成分分析

按 GB/T 29918 或 T/BYXT 025 规定的方法进行。Gd、Y 含量仲裁方法为电感耦合等离子体质谱法（ICP-MS）。

6.2 储氢性能测试

6.2.1 储氢密度与动力学

按 GB/T 34496-2023 附录 B（PCT 法）或 GB/T 37204 进行。测试温度 25℃±0.5℃，最大氢压 5MPa。

6.2.2 磁量子阱扩散系数（V2.0 必测）

按附录 A 进行，采用 THz-TDS 时域光谱法或电化学阻抗谱（EIS）法。

6.2.3 平台压滞后

在 PCT 曲线上，取吸氢和放氢平台中点压力计算：
Hf =Pa,mid Pa,mid -Pd,mid ×100%。

6.3 循环寿命测试

按 GB/T 36342-2018 进行。循环条件：
吸氢：25℃，3MPa，至饱和；
放氢：25℃，0.1MPa，至平台结束；
判定终点：可逆容量衰减至初始值的 85%。

6.4 表面催化层检测

按附录 C 进行，采用 X 射线光电子能谱（XPS）结合氩离子溅射，或透射电镜（TEM）断面分析。

6.5 微观结构表征

晶粒尺寸：XRD 谢乐公式或 TEM 统计；
非晶相比例：XRD 半高宽法或差示扫描量热法（DSC）；
核壳结构：TEM 高分辨成像（HRTEM）。

7 检验规则

7.1 组批

同一熔炼炉次、同一热处理批次、同一 EVD 沉积批次的产品为一批，每批不超过 500kg。

7.2 取样

化学成分：每批取 3 个样品，取自锭材头部、中部、尾部或粉末不同包装单元；
储氢性能：每批取 1 个样品进行全项检测；
循环寿命：每季度取 1 个样品进行验证（例行检验可豁免，仅型式检验进行）。

7.3 检验项目

应符合表 4 的要求。

表 4 检验项目分类

项目	出厂检验	型式检验	判定依据
化学成分	√	√	5.1
储氢密度	√	√	5.2.1
吸放氢动力学	√	√	5.2.1
循环寿命	—	√	5.2.1
粉化率	—	√	5.2.1
扩散系数（V2.0）	√	√	5.2.1
表面催化层	√	√	5.4.2
微观结构	—	√	5.5

型式检验在下列情况时进行：

a) 新产品试制鉴定；
b) 工艺、原材料发生重大变化；
c) 停产 6 个月以上恢复生产；
d) 质量技术监督部门提出要求。

7.4 判定规则

化学成分不合格，整批判废；
储氢密度、扩散系数（V2.0）、脱氢温度不合格，整批判废；
其他项目不合格，允许加倍取样复检，复检仍不合格则判该批不合格。

8 标志、包装、运输、贮存

8.1 标志

产品包装应标明：
产品牌号（如 XT-V20-P50-A）；
等级（V1.0/V1.2/V2.0）；
净重；
批号；
生产日期；
储存条件（惰性气体保护，避免空气氧化）；
含稀土元素警示标识（按 GB 190 规定）。

8.2 包装

锭材：真空塑料袋+铁桶包装，充 Ar 保护；
粉末：真空铝箔袋+铁桶，或 Ar 气手套箱封装；
涂层粉末：真空干燥剂+避光铝箔袋，防止催化层潮解。

8.3 运输

防止剧烈震动、撞击，避免破坏表面催化层；
避免与酸、碱、氧化剂混运；
运输工具应具备防雨、防潮措施。

8.4 贮存

存环境：温度 15-25℃，相对湿度≤60%，Ar 或 N_2 气氛保护；
贮存期限：自生产日起不超过 12 个月（V1.0/V1.2），V2.0 因非晶层稳定性建议不超过 6 个月；
超期复检：贮存超期使用前需复检储氢密度和扩散系数。

附录 A

（规范性附录）

磁量子阱扩散系数测定方法

A.1 原理

基于太赫兹时域光谱（THz-TDS）检测氢化过程中合金的介电响应变化，通过 Drude-Lorentz 模型拟合，计算氢原子在晶格中的扩散系数。

A.2 仪器设备

太赫兹时域光谱仪：频宽 0.1-5THz，时间分辨率＜100fs；
高压样品池：耐压 5MPa，sapphire 窗口；
温控系统：25℃±0.1℃。

A.3 试验步骤

将 100mg 粉末样品装入样品池，抽真空至＜10^{-3}Pa；
充入 0.1MPaH_2，记录时域光谱作为参考；
快速升压至 2MPa，每 10s 记录一次透射谱；
提取群速度 v_g 随时间变化曲线；
按公式计算 D_MQW：
DMQW =2τlag d2 · vg,0 Δvg
其中 d 为平均粒径，τ_lag 为滞后时间。

A.4 结果表示

取 3 次平行试验的平均值，保留两位有效数字，单位 $10^{-7}cm^2/s$。

附录 B

（资料性）

高熵化改性的热力学计算指南

B.1 构型熵计算

对于 n 元合金，构型熵：

$\Delta S_{config} = -R\sum_{i=1}^{n} x_i \ln x_i$

其中 x_i 为第 i 组元的摩尔分数，R=8.314J/(mol·K)。

B.2 高熵判据

满足以下条件可判定为高熵储氢合金：

$\Delta S_{config} \geq 1.5R$；

混合焓 $\Delta H_{mix} \in [-15,5]$kJ/mol；

原子尺寸差 $\delta \leq 6\%$。

B.3 磁量子阱效应预估

Gd 含量与扩散势垒降低的半经验关系：

$\Delta E_b = -0.04\exp(-8(C_{Gd} - 6)^2)$(eV)

其中 C_{Gd} 为 Gd 原子百分数（5-8）.

附录 C

（资料性）

EVD 表面催化层厚度无损检测方法

C.1 XPS 深度剖析法

激发源：AlKα（1486.6eV）；
溅射离子：Ar^+，3kV，溅射速率 0.5nm/min（以 SiO_2 标定）；
判定：Pr3d 或 Nd3d 信号强度降至最大值 50%时的溅射时间×速率即为层厚。

C.2 椭偏仪法（适用于平整样品）

入射角 70°，波长 632.8nm；
光学模型：非晶层（Cauchy 模型）+基体（Drude 模型）；
拟合参数：厚度 d，折射率 n，消光系数 k。

C.3 仲裁方法

以 TEM 断面直接测量为仲裁方法，样品制备采用聚焦离子束（FIB）切割。