



中华人民共和国国家标准

GB/T 26915—2011

太阳能光催化分解水制氢体系的能量 转化效率与量子产率计算

Determination of energy conversion efficiency and quantum yield for hydrogen
production in the solar photocatalytic water splitting system

2011-09-29 发布

2012-03-01 实施

中华人民共和国国家质量监督检验检疫总局 发布
中国国家标准化管理委员会

目 次

前言 I

1 范围 1

2 规范性引用文件 1

3 术语和定义 1

4 符号 7

5 测试基本要求 7

6 测量方法及步骤 9

7 光-氢能量转化效率及量子产率计算 10

8 测试报告..... 12

附录 A (资料性附录) 推荐仪器及装置 13

附录 B (规范性附录) 辐照度测试 18

附录 C (资料性附录) 计算实例 19

前 言

本标准按照 GB/T 1.1—2009 给出的规则起草。

本标准由全国能源基础与管理标准化技术委员会(SAC/TC 20)提出。

本标准由全国氢能标准化技术委员会(SAC/TC 309)归口。

本标准起草单位:西安交通大学、中国标准化研究院、中国电子工程设计研究院、中国科学院兰州化学物理研究所、中国科学院大连化学物理研究所、上海交通大学。

本标准主要起草人:郭烈锦、赵亮、王赓、吕功煊、上官文峰、张卫、敬登伟、李法兵、李越湘、刘欢、李明涛、张凯、张相辉、陈玉彬、刘茂昌。

太阳能光催化分解水制氢体系的能量 转化效率与量子产率计算

1 范围

本标准规定了太阳能光催化分解水制氢体系的能量转化效率与量子产率测试与计算过程应遵守的方法。

本标准适用于自然太阳光和模拟太阳光光催化分解水制氢反应系统。

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 6682 分析实验室用水规格和试验方法

GB/T 8981 气体中微量氢的测定 气相色谱法

HG/T 3579 化工标准物质通则

3 术语和定义

下列术语和定义适用于本文件。

3.1

光催化分解水制氢反应 photocatalytic water splitting reaction for hydrogen production

光催化剂受光激发产生电子空穴对,光生电子与水或水溶液中氢离子发生还原反应产生氢气,同时光生空穴氧化水或牺牲剂而被消耗的过程。

3.2

制氢光催化剂 photocatalyst for hydrogen production

一种在光的照射下,自身不起变化,却可以促进光催化分解水制氢化学反应的物质。

3.3

制氢反应牺牲剂 sacrificial agent for hydrogen production reaction

光催化分解水制氢反应过程中,作为电子给体还原光生空穴,促进制氢反应进行,同时自身发生不可逆化学转化而被消耗的物质。

3.4

光催化制氢反应溶液 photocatalytic reaction solution for hydrogen production

作为原料或反应物参加光催化制氢反应并被分解而产生氢气的溶液,通常为水或含牺牲剂的水溶液,也可非水溶液如乙醇胺等。

3.4.1

无机牺牲剂制氢反应溶液 inorganic sacrificial agent reaction solution for hydrogen production

以无机物作为牺牲剂的光催化制氢反应溶液,如硫化钠/亚硫酸钠牺牲剂。

3.4.2

有机牺牲剂制氢反应溶液 **organic sacrificial agent reaction solution for hydrogen production**

以有机物作为牺牲剂的光催化制氢反应溶液,如醇类、酸类牺牲剂。

3.4.3

海水或天然卤水反应溶液 **sea water or natural brine reaction solution**

以海水或天然卤水作为反应液的光催化制氢反应溶液。

3.4.4

纯水反应溶液 **pure water and aqueous reaction solution**

以不含有牺牲剂的纯水或水溶液作为光催化反应溶液。

3.4.5

非水反应溶液 **non-aqueous reaction solution**

以其他非水介质作为反应液的光催化制氢反应溶液,如三乙醇胺等。

3.5

光催化制氢反应体系 **photocatalytic reaction system for hydrogen production**

包含有制氢光催化剂、反应溶液及反应气氛的反应体系。

3.5.1

非均相光催化制氢反应体系 **heterogeneous photocatalytic reaction system for hydrogen production**

又称多相光催化制氢反应体系,指由气态或液态反应物与固态制氢光催化剂在两相界面上发生光催化制氢反应的体系。

3.5.2

悬浮光催化制氢反应体系 **suspending photocatalytic reaction system for hydrogen production**

制氢光催化剂以离散悬浮颗粒形式随反应液悬浮运动的制氢反应体系。

3.5.3

固定光催化制氢反应体系 **fixed photocatalytic reaction system for hydrogen production**

制氢光催化剂附着在一定的基质上,不随反应溶液运动的制氢反应体系。

3.5.4

均相光催化制氢反应体系 **homogeneous photocatalytic reaction system for hydrogen production**

制氢光催化剂与反应物处于同一物相的光催化制氢反应体系。

3.6

光催化制氢反应器 **photocatalytic reactor for hydrogen production**

具有一定受光面积和有效容积的用于光催化制氢的反应容器或装置。

3.6.1

反应器主要特性参数 **the major parameters of reactor**

3.6.1.1

反应器受光面积(A_R) **the photic area of reactor**

光催化制氢反应器接收入射光源的有效面积。

3.6.1.2

反应器容积(V) **the volume of reactor**

反应器的几何物理空间所具有的体积。

3.6.1.3

有效反应器容积(V_R) **the effective volume of reactor**

指有效利用于制氢反应的反应器容积。

3.6.1.4

反应器比深度 the specific depth of reactor

光催化有效反应器容积 V_R 与受光面积 A_R 的比值,用符号 D_R 表示,反映入射光穿过反应容器的平均深度。

$$D_R = V_R / A_R \quad \dots\dots\dots (1)$$

3.6.2

反应器类别 classification of reactors

3.6.2.1

(光源)内置式光催化制氢反应器 inner-irradiation photocatalytic reactor for hydrogen production

如附录 A 图 A.1 所示,具有内凹空间,对光源形成包围的光催化反应器。

3.6.2.2

(光源)外置式光催化制氢反应器 outer-irradiation photocatalytic reactor for hydrogen production

如附录 A 图 A.2 所示,在位置上和光源独立,可用一平面将其与光源隔离的光催化反应器。

3.7

光催化反应光源 light source for photocatalysis

以辐射形式为光催化分解水制氢反应提供光能的物体,如自然太阳光、自然汇聚光源、人工模拟光源(如高压汞灯、短弧氙灯、二极管阵列光源等)。

3.7.1

光催化反应光源的标准光谱 standard spectrum of light source for photocatalysis

以地面处太阳光的紫外光和可见光的波长范围(300 nm~760 nm)为基准的光谱。

3.7.2

光催化制氢反应效率评价基准光谱 standard spectrum of evaluation photocatalytic hydrogen production efficiency

3.7.2.1

单色[入射]光基准 monochromatic[incident]light benchmark

选取特定波长单色入射光为基准,用以评价光催化分解水制氢体系的量子产率和能量转化效率。

3.7.2.2

窄波段[入射]光基准 narrow-band incident benchmarks

以较窄波段($\lambda - \Delta\lambda \sim \lambda + \Delta\lambda$, $\Delta\lambda \leq 10.0$ nm)的入射光为基准,用以评价光催化分解水制氢体系的量子产率和能量转化效率。

3.7.2.3

宽波段[入射]光基准 wide-band incident benchmarks

以较宽波段($\lambda_1 \sim \lambda_2$, $\lambda_2 - \lambda_1 > 20$ nm)的入射光为基准,用以评价光催化分解水制氢体系的量子产率和能量转化效率。

3.7.3

等效波长 equivalent wavelength

用辐通量(或辐照度)计算光子通量(或光子辐照度)时所用的波长,用符号 $\bar{\lambda}$ 表示;当在指定的波长范围 $\Delta\lambda$ 内,光谱一定时, $\bar{\lambda}$ 是常量。

$$\bar{\lambda} = \frac{N_p hc}{E} = \frac{\int_{\Delta\lambda} \lambda E_\lambda d\lambda}{E} \quad \dots\dots\dots (2)$$

3.8

光催化分解水制氢反应装置 photocatalytic water splitting apparatus for hydrogen production

由光源、光催化反应器以及驱动和测控等辅助设备组成,能够利用光催化剂在光照射下将反应溶液

分解产生氢气的装置。

3.9

光催化分解水制氢系统 photocatalytic water splitting equipment for hydrogen production

由光催化分解水制氢反应体系和反应装置共同组成的制氢系统。

3.9.1

间歇式光催化分解水制氢系统 intermittent photocatalytic water splitting equipment for hydrogen production

制氢系统内反应物和光催化剂一次性地加入,并且反应体系与外界没有质量交换,反应进行一段时间后需补充反应物方可继续进行。

3.9.2

连续式光催化分解水制氢系统 continuous photocatalytic water splitting equipment for hydrogen production

反应物可以连续输送,反应产物连续排出的光催化分解水制氢系统。

3.10

光催化反应的产氢速率 the rate of photocatalytic hydrogen production

单位时间内光催化分解水制氢反应中生成的氢气的物质的量,用符号 R_{H_2} 表示,单位为 $\text{mol} \cdot \text{s}^{-1}$ 。

3.10.1

光催化反应的时间平均产氢速率 the time-averaged rate of photocatalytic hydrogen production

在指定反应时程 Δt 内,光催化反应的产氢速率的时间平均值,用符号 $\overline{R_{\text{H}_2}}$ 表示,单位为 $\text{mol} \cdot \text{s}^{-1}$ 。

$$\overline{R_{\text{H}_2}} = \frac{\int_{\Delta t} R_{\text{H}_2} dt}{\Delta t} \dots\dots\dots (3)$$

3.10.2

光催化反应的最大产氢速率 the maximum rate of photocatalytic hydrogen production

反应时间 t 内,光催化反应的产氢速率的最大值,用符号 $R_{\text{H}_2}^{\text{max}}$ 表示,单位为 $\text{mol} \cdot \text{s}^{-1}$ 。

3.10.3

单波长下的[时间]平均产氢速度 time-averaged rate of photocatalytic hydrogen production under monochromatic light

在指定反应时程 Δt 内,入射的单色光波长为 λ 时的时间平均量子产率,用符号 $\overline{R_{\text{H}_2}}(\lambda)$ 表示。

3.10.4

窄波段下的[时间]平均产氢速率 time-averaged rate of photocatalytic hydrogen production under narrow-band incident light

在指定反应过程 Δt 内,入射光波长范围为 $\lambda - \Delta\lambda \sim \lambda + \Delta\lambda$ ($\Delta\lambda \leq 10 \text{ nm}$) 时的时间平均量子产率,用符号 $\overline{R_{\text{H}_2}}(\lambda^{\pm\Delta\lambda})$ 表示。

3.10.5

宽波段下的[时间]平均产氢速率 time-averaged rate of photocatalytic hydrogen production under wide-band incident light

在指定反应时程 Δt 内,入射光波长范围为 $\lambda_1 \sim \lambda_2$ ($\lambda_2 - \lambda_1 > 20 \text{ nm}$) 时的时间平均量子产率,用符号 $\overline{R_{\text{H}_2}}(\lambda_1 \sim \lambda_2)$ 表示。

3.11

光催化制氢反应的量子产率 quantum yield of photocatalytic hydrogen production

光催化分解水制氢反应过程中,反应产生的氢的原子数与催化剂吸收的光子数的比值,用符号 Φ

表示。

$$\Phi = 2n_{\text{H}_2} / N_{\text{p}}^{\text{a}} = 2R_{\text{H}_2} N_{\text{A}} / \Phi_{\text{p}}^{\text{a}} \quad \dots\dots\dots (4)$$

注：由于实际反应过程中催化剂吸收的光子数以现有手段难以测定，本标准以入射到系统的光子数代替催化剂吸收的光子数进行量子产率计算，称为表观量子产率(apparent quantum yield of photocatalytic hydrogen production)，用符号 Φ_{a} 表示。

$$\Phi_{\text{a}} = 2n_{\text{H}_2} / N_{\text{p}}^{\text{i}} = 2R_{\text{H}_2} N_{\text{A}} / \Phi_{\text{p}}^{\text{i}} \quad \dots\dots\dots (5)$$

3.11.1

单波长下的量子产率 quantum yield of monochromatic light

波长为 λ 的单色入射光的量子产率，用符号 $\Phi_{\text{a}}(\lambda)$ 表示。

3.11.2

窄波段下的量子产率 quantum yield of narrow-band incident light

入射光波长范围为 $\lambda - \Delta\lambda \sim \lambda + \Delta\lambda$ ($\Delta\lambda \leq 10 \text{ nm}$) 时的量子产率，用符号 $\Phi_{\text{a}}(\lambda^{\pm\Delta\lambda})$ 表示。

$$\Phi_{\text{a}}(\lambda^{\pm\Delta\lambda}) = \int_{\lambda-\Delta\lambda}^{\lambda+\Delta\lambda} \left[\Phi_{\text{a}}(\lambda) \frac{N_{\lambda}}{N} \right] d\lambda \quad \dots\dots\dots (6)$$

3.11.3

宽波段下的量子产率 quantum yield under wide-band incident light

入射光波长范围为 $\lambda_1 \sim \lambda_2$ ($\lambda_2 - \lambda_1 > 20 \text{ nm}$) 时的量子产率，用符号 $\Phi_{\text{a}}(\lambda_1 \sim \lambda_2)$ 表示。

$$\Phi_{\text{a}}(\lambda_1 \sim \lambda_2) = \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} \left[\Phi_{\text{a}}(\lambda) \frac{N_{\lambda}}{N} \right] d\lambda \quad \dots\dots\dots (7)$$

3.11.4

[时间]平均量子产率 time-averaged quantum yield

在指定反应时程 Δt 内，光催化分解水制氢反应量子产率的时间平均值，用符号 $\overline{\Phi_{\text{a}}}$ 表示。

$$\overline{\Phi_{\text{a}}} = 2 \overline{n_{\text{H}_2}} / N_{\text{p}}^{\text{i}} = \int_{\Delta t} \Phi_{\text{a}} dt / \Delta t \quad \dots\dots\dots (8)$$

3.11.4.1

单波长下的[时间]平均量子产率 time-averaged quantum yield under monochromatic light

在指定反应时程 Δt 内，入射的单色光波长为 λ 时的时间平均量子产率，用符号 $\overline{\Phi_{\text{a}}(\lambda)}$ 表示。

$$\overline{\Phi_{\text{a}}(\lambda)} = \int_{\Delta t} \Phi_{\text{a}}(\lambda) dt / \Delta t \quad \dots\dots\dots (9)$$

3.11.4.2

窄波段下的[时间]平均量子产率 time-averaged quantum yield under narrow-band incident light

在指定反应时程 Δt 内，入射光波长范围为 $\lambda - \Delta\lambda \sim \lambda + \Delta\lambda$ ($\Delta\lambda \leq 10 \text{ nm}$) 时的时间平均量子产率，用符号 $\overline{\Phi_{\text{a}}(\lambda^{\pm\Delta\lambda})}$ 表示。

$$\overline{\Phi_{\text{a}}(\lambda^{\pm\Delta\lambda})} = \int_{\Delta t} \Phi_{\text{a}}(\lambda^{\pm\Delta\lambda}) dt / \Delta t = \int_{\lambda-\Delta\lambda}^{\lambda+\Delta\lambda} \overline{\Phi_{\text{a}}(\lambda)} d\lambda \quad \dots\dots\dots (10)$$

3.11.4.3

宽波段下的[时间]平均量子产率 time-averaged quantum yield under wide-band incident light

在指定反应时程 Δt 内，入射光波长范围为 $\lambda_1 \sim \lambda_2$ ($\lambda_2 - \lambda_1 > 20 \text{ nm}$) 时的时间平均量子产率，用符号 $\overline{\Phi_{\text{a}}(\lambda_1 \sim \lambda_2)}$ 表示。

$$\overline{\Phi_{\text{a}}(\lambda_1 \sim \lambda_2)} = \int_{\Delta t} \Phi_{\text{a}}(\lambda_1 \sim \lambda_2) dt / \Delta t = \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} \overline{\Phi_{\text{a}}(\lambda)} d\lambda \quad \dots\dots\dots (11)$$

3.12

光催化制氢的光-氢能量转化效率 photon-hydrogen energy conversion efficiency for photocatalytic hydrogen production

光催化分解水制氢反应过程中，生成氢气所储存的化学能与入射到反应器受光面的光辐射能的比

值,也可称为光-氢能量转化效率,用符号 η 表示。

$$\eta = \Delta G_{H_2} R_{H_2} / (E \cdot A_R) \quad \dots\dots\dots (12)$$

3.12.1

单色光下的光-氢能量转化效率 **photon-hydrogen energy conversion efficiency under monochromatic light**

入射光为波长 λ 的单色光时的能量转化效率,用符号 $\eta(\lambda)$ 表示。

3.12.2

窄波段下的光-氢能量转化效率 **photon-hydrogen energy conversion efficiency under narrow-band incident light**

入射光波长范围为 $\lambda - \Delta\lambda \sim \lambda + \Delta\lambda$ ($\Delta\lambda \leq 10$ nm) 时的能量转化效率,用符号 $\eta(\lambda^{\pm\Delta\lambda})$ 表示。

$$\eta(\lambda^{\pm\Delta\lambda}) = \int_{\lambda-\Delta\lambda}^{\lambda+\Delta\lambda} \eta(\lambda) \frac{E_\lambda}{E} d\lambda \quad \dots\dots\dots (13)$$

3.12.3

宽波段下的光-氢能量转化效率 **photon-hydrogen energy conversion efficiency under wide-band incident light**

入射光波长范围为 $\lambda_1 \sim \lambda_2$ ($\lambda_2 - \lambda_1 > 20$ nm) 时的能量转化效率,用符号 $\eta(\lambda_1 \sim \lambda_2)$ 表示。

$$\eta(\lambda_1 \sim \lambda_2) = \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} \eta(\lambda) \frac{E_\lambda}{E} d\lambda \quad \dots\dots\dots (14)$$

3.12.4

[时间]平均光-氢能量转化效率 **time-averaged photon-hydrogen energy conversion efficiency**

在指定反应时程 Δt 内,光催化分解水制氢反应过程能量转化效率的平均值,用符号 $\overline{\eta}$ 表示。

$$\overline{\eta} = \int_{\Delta t} \eta dt / \Delta t \quad \dots\dots\dots (15)$$

3.12.4.1

单色光下的[时间]平均光-氢能量转化效率 **time-averaged photon-hydrogen energy conversion efficiency under monochromatic light**

在指定反应时程 Δt 内,入射光为波长 λ 的单色光时的时间平均能量转化效率,用符号 $\overline{\eta(\lambda)}$ 表示。

$$\overline{\eta(\lambda)} = \int_{\Delta t} \eta(\lambda) dt / \Delta t \quad \dots\dots\dots (16)$$

3.12.4.2

窄波段下的[时间]平均光-氢能量转化效率 **time-averaged photon-hydrogen energy conversion efficiency under narrow-band incident light**

在指定反应时程 Δt 内,入射光波长范围为 $\lambda - \Delta\lambda \sim \lambda + \Delta\lambda$ ($\Delta\lambda \leq 10$ nm) 时的时间平均能量转化效率,用符号 $\overline{\eta(\lambda^{\pm\Delta\lambda})}$ 表示。

$$\overline{\eta(\lambda^{\pm\Delta\lambda})} = \int_{\Delta t} \eta(\lambda^{\pm\Delta\lambda}) dt / \Delta t = \int_{\lambda-\Delta\lambda}^{\lambda+\Delta\lambda} \overline{\eta(\lambda)} d\lambda \quad \dots\dots\dots (17)$$

3.12.4.3

宽波段下的[时间]平均光-氢能量转化效率 **time-averaged photon-hydrogen energy conversion efficiency under wide-band incident light**

在指定反应时程 Δt 内,入射光波长范围为 $\lambda_1 \sim \lambda_2$ ($\lambda_2 - \lambda_1 > 20$ nm) 时的时间平均能量转化效率,用符号 $\overline{\eta(\lambda_1 \sim \lambda_2)}$ 表示。

$$\overline{\eta(\lambda_1 \sim \lambda_2)} = \int_{\Delta t} \eta(\lambda_1 \sim \lambda_2) dt / \Delta t = \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} \overline{\eta(\lambda)} d\lambda \quad \dots\dots\dots (18)$$

4 符号

下列符号适用于本文件。

A_R :反应器受光面积。

c :真空中的光速。

D_R :反应器比深度。

E :光辐射照度。

$\overline{E}$:平均光辐射照度。

E_λ :光谱辐射照度。

h :普朗克常数。

N_A :阿伏伽德罗常数。

N_p^a :吸收光子数。

N_p^i :入射光子数。

n_{H_2} :反应生成的氢分子数。

$\overline{n_{H_2}}$:指定反应时程 Δt 内,生成的氢分子数。

P :辐射通量。

R_{H_2} :产氢速率。

$\overline{R_{H_2}}$:平均产氢速率。

$R_{H_2}^{max}$:最大产氢速率。

t :反应进行的时间。

V :反应器容积。

V_R :反应器有效容积。

ΔG_{H_2} :反应储存的能量。

Φ :光辐射通量。

Φ_a :表观量子产率。

$\overline{\Phi_a}$:[时间]平均表观量子产率。

Φ_p^a :光子通量。

Φ_p^i :吸收光子通量。

η :能量转化效率。

$\overline{\eta}$:[时间]平均能量转化效率。

5 测试基本要求

5.1 测试环境要求

5.1.1 环境温度、环境压力以及环境湿度应符合仪器、设备工作要求。

5.1.2 环境背景光辐照度,不得超过入射光辐照度的 1%。

5.2 光源

5.2.1 自然太阳光

用于光催化分解水制氢反应的自然太阳光应在一次测量期间总辐照度(直接辐射+天空散射)的不

稳定度应不大于 25%。

5.2.2 室内测试光源

5.2.2.1 用于光催化分解水制氢反应的测试光源室内光源,有太阳光模拟器、氙灯、汞灯等。

5.2.2.2 光源的输出光功率波动不超过 3%。

5.2.2.3 光接受面处入射光斑辐照度最小值与最大值之比不小于 75%。

5.2.2.4 入射光散射部分不超过 25%。

5.2.3 滤光装置

5.2.3.1 对于复色光光源,测试需要选取特定波长范围的光谱时,应使用滤光装置。

5.2.3.2 滤光装置应适用于所用光源。

5.2.3.3 波长范围大于 10 nm 时,应使用截止滤光片获取所需光谱范围。

5.2.3.4 波长范围不大于 10 nm 时,应使用带通滤光片或单色仪。

5.2.3.5 带通滤光片半高宽小于 10 nm,单色仪分辨率小于 1 nm。

5.2.3.6 背景截止深度优于 1×10^{-4} 。

5.3 光催化反应器

5.3.1 不与反应溶液、产物及光催化剂发生化学反应。

5.3.2 应具备控温能力,测试期间,温度波动不大于 1℃。

5.3.3 受光面平均透过率(300 nm~760 nm)不低于 90%,应使用派热克斯(Pyrex)玻璃或石英玻璃。

5.3.4 受光面玻璃厚度不超过 2 mm。

5.3.5 光催化反应器比深度为 2 cm~15 cm。

5.3.6 宜可方便测量透过反应器的辐照度。

5.4 测量仪器

5.4.1 辐照计

5.4.1.1 是用于测试入射光辐照度的仪器。

5.4.1.2 应适用于所测试的光源。

5.4.1.3 测量范围 300 nm~760 nm,量程范围 $50.0 \mu\text{W} \cdot \text{cm}^{-2} \sim 5.00 \text{ W} \cdot \text{cm}^{-2}$,测量精度 3.0。

5.4.1.4 自然太阳光测量仪器,应具备自动测量记录的功能。

5.4.2 气相色谱仪

5.4.2.1 用于测量气体样品中氢气含量。

5.4.2.2 测量范围 100 μL 样品气体中($5.0 \times 10^{-4} \sim 5.0$) μmol 氢气,测量精度 3.0。

5.4.2.3 应用氮气或氙气为载气。

5.4.2.4 应用 100 μL 注射进样器为手动微型进样器,0.50 mL~1.0 mL 的定量管为自动采样器。

5.5 测试要求

5.5.1 反应器透过的辐射通量与入射通量的比值小于 15%。

5.5.2 反应器受光面辐照度介于 $50.0 \mu\text{W} \cdot \text{cm}^{-2} \sim 5.00 \text{ W} \cdot \text{cm}^{-2}$ 。

5.5.3 反应液体积宜不超过反应器容积的 2/3。

5.6 光催化剂

5.6.1 对于多相光催化,应对催化剂进行充分研磨,二次聚集态颗粒粒度不大于 $15\ \mu\text{m}$ 。

5.6.2 对于均相光催化,催化剂应完全溶于水,并形成均相的溶液。

5.6.3 无非光催化分解水产氢的能力。

5.6.4 推荐用量 $1.0\ \text{g/L}$ 。

5.7 牺牲剂

5.7.1 应适于所用的光催化剂。

5.7.2 无光照射时,不与水及光催化剂发生化学反应。

5.7.3 推荐浓度(适用于多相光催化)。

5.7.3.1 硫化钠/亚硫酸钠水溶液体系: $(0.35 \pm 0.2)\ \text{mol} \cdot \text{L}^{-1} / (0.25 \pm 0.2)\ \text{mol} \cdot \text{L}^{-1}$ 。

5.7.3.2 醇类水溶液体系:体积分数 $(25 \pm 15)\%$ 。

5.7.3.3 酸类水溶液体系:体积分数 $(25 \pm 15)\%$ 。

5.8 试剂

5.8.1 去离子水

用于配制溶液,应符合 GB/T 6682 实验室用水二级标准以上。

5.8.2 标准气体

用于气相色谱仪的标定,应符合 GB/T 8981 中对标准气体的规定。

5.8.3 其他试剂

其他配制反应溶液的试剂采用分析纯试剂,应符合 HG/T 3579 中的相关要求。

6 测量方法及步骤

6.1 气相色谱仪标准工作曲线标定

6.1.1 在 5.1 规定的测试环境下运行稳定后进行工作曲线标定。

6.1.2 依据 GB/T 8981 中标定方法对色谱进行标定。

6.1.3 建立样品气中氢气体积含量与气相色谱仪氢组分所对应的峰面积之间的关系。

6.1.4 建立样品气中氢气物质的量与其体积含量的关系。

6.2 反应器受光面辐照度测试

6.2.1 以光催化反应器的受光面为准。

6.2.2 室内光源运行稳定后进行测试。

6.2.3 依室内光源入射光分布特性选择测量点,且每点至少测量 3 次,见附录 B。

6.2.4 自然太阳光,宜用自动记录仪进行全程测试。

6.3 测量反应器受光面积

6.4 光催化分解水制氢反应测试

6.4.1 检查光催化反应测试系统、光源、气相色谱仪。

6.4.2 开启光源、气相色谱仪、预热。

- 6.4.3 在光催化反应器中加入适量催化剂及反应溶液。
- 6.4.4 连接反应测试装置,开启磁力搅拌器及控温设备,检查并确认其可正常运行。
- 6.4.5 对系统进行抽真空或以气体吹扫的方式置换其中的氧气。
- 6.4.6 待系统稳定后,加载入射光,开始计时,进行测试。
- 6.4.6.1 手动取样:每隔 1 h,从反应器中取 100 μL 气体样,注射到气相色谱仪中进行气体分析。
- 6.4.6.2 自动取样:调节相应的控制器,每隔 1 h 自动采样进行测试分析,采样量为定量管体积。
- 6.4.7 得到样品氢气色谱峰面积-时间关系。
- 6.4.8 结束实验,整理实验台。

7 光-氢能量转化效率及量子产率计算

注:计算实例见附录 C。

7.1 基本数据

7.1.1 平均辐照度

见附录 B。

7.1.2 入射光平均辐射能通量

$$P = \overline{E} \cdot A_R \quad \dots\dots\dots (19)$$

7.1.3 入射光子数

$$N_p^i = \frac{Pt\lambda}{hc} \quad \dots\dots\dots (20)$$

7.2 反应器有效受光照射面积

测量并计算反应器发生光催化制氢反应的有效受光照射面积 $A(\text{m}^2)$ 。

7.3 平均光催化反应产氢速率

$$\overline{R_{H_2}} = \frac{V_G}{V_0} \times \frac{n^{V_0}}{t} \quad \dots\dots\dots (21)$$

式中:

- t ——反应进行的时间,单位为秒(s);
- V_G ——反应器的空余体积,即反应系统中气体体积,单位为升(L);
- n^{V_0} —— t 时刻, V_0 体积内样品中含有的氢气物质的量,按 GB/T 8981 中方法计算,单位为摩尔(mol)。

7.4 最大光催化反应产氢速率

产氢量与反应时间 t 的关系曲线上斜率最大点,即为最大光催化反应产氢速率 $R_{H_2}^{\max}$ 。

7.5 平均光-氢能量转化效率

7.5.1 单色光下的平均光-氢能量转化效率

$$\overline{\eta(\lambda)} = \frac{\int_0^t \eta(\lambda) dt}{t} = \frac{\Delta G_{H_2} \overline{R_{H_2}}(\lambda)}{\overline{E} A_R} \quad \dots\dots\dots (22)$$

7.5.2 窄波段下的平均光-氢能量转化效率

$$\overline{\eta(\lambda^{\pm\Delta\lambda})} = \frac{\int_0^t \eta(\lambda^{\pm\Delta\lambda}) dt}{t} = \frac{\Delta G_{H_2} \overline{R_{H_2}(\lambda^{\pm\Delta\lambda})}}{\overline{EA_R}} \dots\dots\dots (23)$$

7.5.3 宽波段下的光-氢能量转化效率

$$\overline{\eta(\lambda_1 \sim \lambda_2)} = \frac{\int_0^t \eta(\lambda_1 \sim \lambda_2) dt}{t} = \frac{\Delta G_{H_2} \overline{R_{H_2} \eta(\lambda_1 \sim \lambda_2)}}{\overline{EA_R}} \dots\dots\dots (24)$$

7.6 平均产氢量子产率

7.6.1 单色光下的平均产氢量子产率

$$\overline{\Phi_a(\lambda)} = \frac{2n_{H_2}}{N_p^i(\lambda)} = \frac{2 \overline{R_{H_2}(\lambda)} N_A t}{N_p^i(\lambda)} \dots\dots\dots (25)$$

式中:

$N_p^i(\lambda)$ ——指定反应时程 Δt 内, 波长为 λ 的单色光入射光子数。

7.6.2 窄波段下的平均产氢量子产率

$$\overline{\Phi_a(\lambda^{\pm\Delta\lambda})} = \frac{2n_{H_2}}{N_p^i(\lambda^{\pm\Delta\lambda})} = \frac{2 \overline{R_{H_2}(\lambda^{\pm\Delta\lambda})} N_A t}{N_p^i(\lambda^{\pm\Delta\lambda})} \dots\dots\dots (26)$$

式中:

$N_p^i(\lambda^{\pm\Delta\lambda})$ ——指定反应时程 Δt 内, 波长范围为 $\lambda - \Delta\lambda \sim \lambda + \Delta\lambda$ ($\Delta\lambda \leq 10$ nm) 时窄波段入射光子数。

7.6.3 宽波段下的平均产氢量子产率

$$\overline{\Phi_a(\lambda_1 \sim \lambda_2)} = \frac{2n_{H_2}}{N_p^i(\lambda_1 \sim \lambda_2)} = \frac{2 \overline{R_{H_2} t}}{N_p^i(\lambda_1 \sim \lambda_2)} \dots\dots\dots (27)$$

式中:

$N_p^i(\lambda_1 \sim \lambda_2)$ ——指定反应时程 Δt 内, 波长范围为 $\lambda_1 \sim \lambda_2$ ($\lambda_2 - \lambda_1 > 20$ nm) 时宽波段入射光子数。

7.7 效率评价基准

7.7.1 在确定基准光谱条件下测试的光-氢能量转化效率或产氢量子产率数据

7.7.2 (365 ± 10) nm 平均产氢量子产率

紫外窄波段光基准下, 平均量子产率, 用符号 $\overline{\Phi_a(365^{\pm 10})}$ 表示。

7.7.3 (420 ± 10) nm 平均产氢量子产率

可见窄波段光基准下, 平均量子产率, 用符号 $\overline{\Phi_a(420^{\pm 10})}$ 表示。

7.7.4 420 nm~760 nm 平均产氢量子产率

可见光基准下, 平均量子产率, 用符号 $\overline{\Phi_a(420 \sim 760)}$ 表示。

7.7.5 300 nm~760 nm 平均产氢量子产率

紫外可见光基准下, 平均量子产率, 用符号 $\overline{\Phi_a(300 \sim 760)}$ 表示。

7.7.6 (365 ± 10) nm 平均光-氢能量转化效率

紫外窄波段光基准下,平均能量转化效率,用符号 $\overline{\eta(365^{\pm 10})}$ 表示。

7.7.7 (420 ± 10) nm 平均光-氢能量转化效率

可见窄波段光基准下,平均能量转化效率,用符号 $\eta(420^{\pm 10})$ 表示。

7.7.8 420 nm~760 nm 平均光-氢能量转化效率

可见光基准下,平均能量转化效率,用符号 $\overline{\eta(420\sim760)}$ 表示。

7.7.9 300 nm~760 nm 平均光-氢能量转化效率

紫外可见光基准下,平均能量转化效率,用符号 $\eta(300\sim760)$ 表示。

8 测试报告

测试报告应包括:被测样品的名称、生产单位等说明,试验环境温度、大气压力,测试装置、反应特性(如反应温度、催化剂用量、反应溶液组成等),数据结果(包括所选光源的实际入射光强)、测试人员和测试日期,以及与本标准不一致或本标准未规定的情况的说明,具体按如下格式填写:

XXXXXXXXXXXXXXXXXXXX实验室

测试报告

报告编号

共 页 第 页

样品编号		检测地点	
样品名称		生产日期	
委托单位		样品类别	
生产单位		样品数量	
		送样日期	
		检测时间	
检测依据			
委托单位地址			
检测用仪器和装置			
检测项目			
测试条件			
产氢速率检测结果			
能量转化效率检测结果			
量子效率检测结果			

批准

审核

主检(盖章)

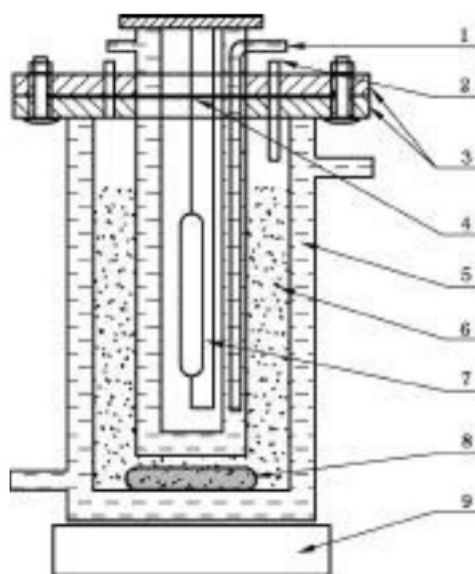
附 录 A
(资料性附录)
推荐仪器及装置

A.1 测量仪器及装置

A.1.1 光催化制氢反应器

推荐以下室内光催化制氢反应器。

A.1.1.1 光源内置式,如图 A.1 所示。



- 1——内循环水套；
- 2——气体出入口；
- 3——有机玻璃夹板；
- 4——密封圈；
- 5——外冷却水套；
- 6——反应液；
- 7——汞灯；
- 8——磁子；
- 9——磁力搅拌器。

图 A.1 内置式光催化制氢反应器

A.1.1.2 光源外置式,如图 A.2 所示。

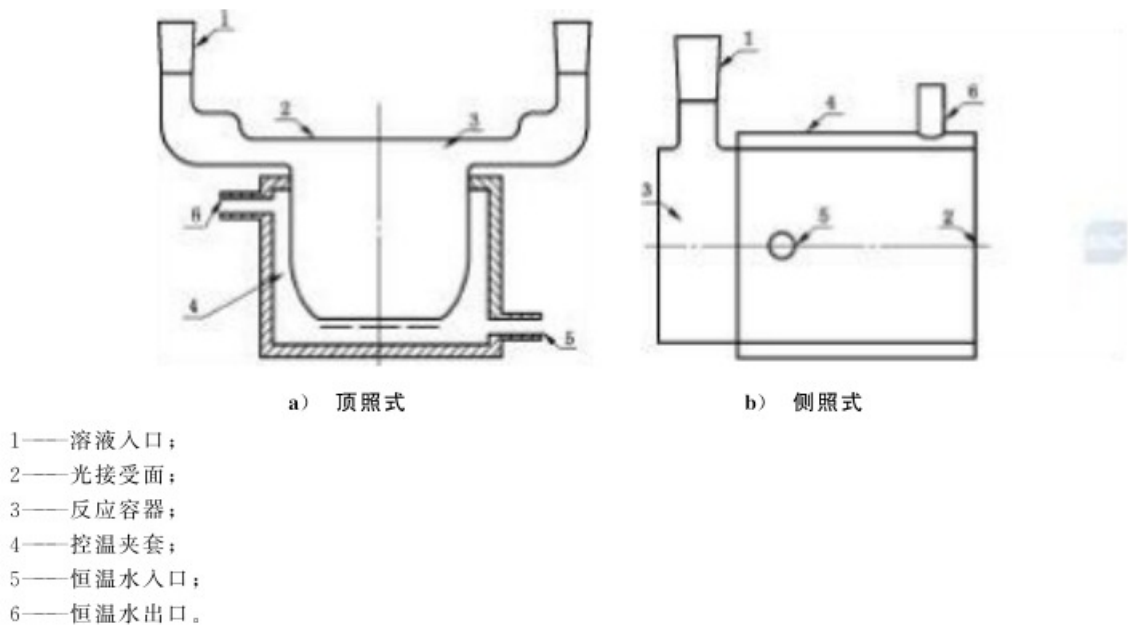


图 A.2 外置式光催化制氢反应器

A.1.2 光源

符合第 5 章中的相关规定。

A.1.3 滤光片

滤光片的基本参数如表 A.1 所示。

表 A.1 滤光片基本参数

滤光片	主波长	半高宽/nm	波形系数	截止范围/nm	背景深度	光源类型
LP420 ^a	420	420~1 150	80%~10% $\Delta\lambda<10$ nm	200~1 150	<0.01%	强光源
BP420 ^a	420	5~10	<1.2			
BP340	340	5~15	<1.5			
BP365	365					
BP380	380					
BP450	450					
BP480	480					
BP510	510					
BP540	540					
BP570	570					
BP600	600					
BP630	630					
BP670	670					
BP700	700					
BP730	730					
LP——长波通型,主波长为其截止波长。 BP——带通型,主波长为其中心波长,半高宽。 ^a 主要使用,其他滤光片为选配。						

A.1.4 辐照计

A.1.4.1 光电式辐照计,须标定 (340 ± 10) nm、 (360 ± 10) nm、 (380 ± 10) nm、 (420 ± 10) nm、 (450 ± 10) nm、 (480 ± 10) nm、 (510 ± 10) nm、 (540 ± 10) nm、 (570 ± 10) nm、 (600 ± 10) nm、 (630 ± 10) nm、 (670 ± 10) nm、 (700 ± 10) nm、 (730 ± 10) nm 对应的测试系数,测量范围 $(0.1\sim 199.9\times 10^3)\mu\text{W}\cdot\text{cm}^{-2}$,误差 $\pm 3\%$ 。

A.1.4.2 太阳总辐射表,波长范围 $0.3\mu\text{m}\sim 3.0\mu\text{m}$;分光辐射表,波长范围 $0.76\mu\text{m}\sim 3.0\mu\text{m}$,测量范围 $(10.0\sim 200.0)\text{mW}\cdot\text{cm}^{-2}$,误差 $\pm 3\%$ 。

A.1.5 气相色谱仪

符合 5.4.2 中的相关规定。

A.1.6 产氢测试系统

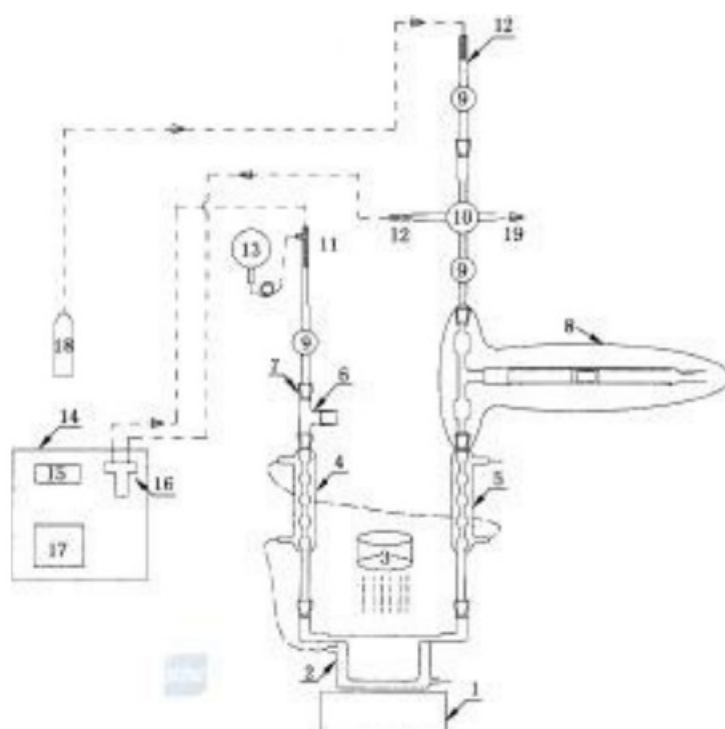
A.1.6.1 手动测试系统

用手动注射进样器取样的测试系统。

定时用 $100\mu\text{L}$ 微型进样器取样,测得样品气中氢气的含量,进而得产氢数据。

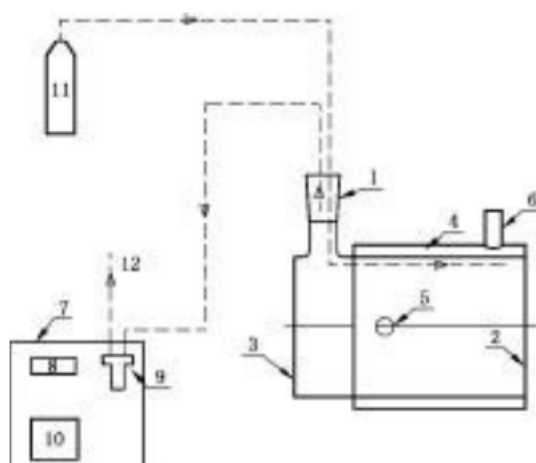
A.1.6.2 自动测试系统

如图 A.3 和图 A.4 所示,该系统可实现数据自动采集及处理的测试系统,能够直接获得产氢量与时间的关系。积分型系统所测为产氢积累量与时间的关系;微分型系统所测为产氢速率与时间的关系。



- 1 —— 磁力搅拌器；
- 2 —— 光催化反应器；
- 3 —— 光源；
- 4,5 —— 球形玻璃冷凝管；
- 6 —— 手动采样配件；
- 7 —— 玻璃磨口；
- 8 —— 玻璃磁力活塞泵；
- 9 —— 直形单通真空活塞；
- 10 —— 十形四通真空活塞；
- 11,12 —— 玻璃可伐连接；
- 13 —— 精密真空压力表；
- 14 —— 气相色谱；
- 15 —— 时间控制器；
- 16 —— 自动六通阀；
- 17 —— 热导检测器；
- 18 —— 洗气气瓶(吹扫用)；
- 19 —— 抽真空接口。

图 A.3 积分型自动产氢测试系统



- 1 —— 溶液入口；
- 2 —— 光接受面；
- 3 —— 反应容器；
- 4 —— 控温夹套；
- 5 —— 恒温水入口；
- 6 —— 恒温水出口；
- 7 —— 气相色谱仪；
- 8 —— 时间控制器；
- 9 —— 自动六通阀；
- 10 —— 热导检测器；
- 11 —— 高压气瓶(“载气”)；
- 12 —— 出气口。

图 A. 4 微分型自动产氢测试系统

附录 B
(规范性附录)
辐照度测试

B.1 测量点的选取

入射到光催化反应器的光斑,一般是圆形、条形,或光斑曲面展开后是圆形、条形;根据光斑的形状以及光分布特性,进行测量;建议如图 B.1 方式取测量点。

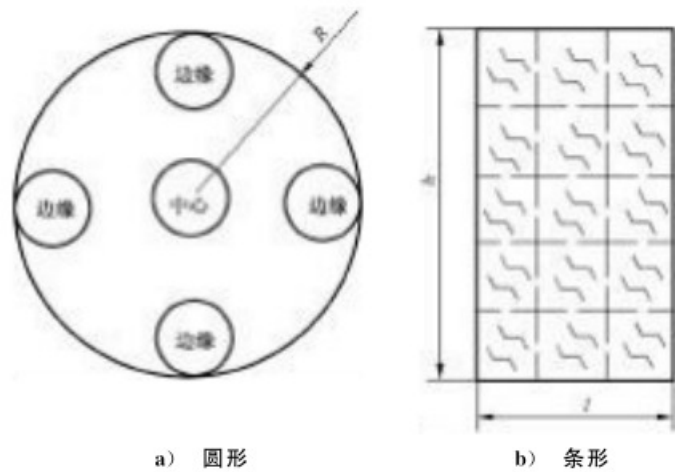


图 B.1 测量点分布示意图

B.2 平均辐照度

B.2.1 圆形光斑

$$\overline{E} = \overline{E}_{\text{center}}/3 + 2\overline{E}_{\text{edge}}/3 \quad \dots\dots\dots (\text{B.1})$$

式中:
 $\overline{E}_{\text{center}}$ ——光斑中心处平均辐照度,单位为瓦每平方米($\text{W} \cdot \text{m}^{-2}$);
 $\overline{E}_{\text{edge}}$ ——光斑边缘处平均辐照度,单位为瓦每平方米($\text{W} \cdot \text{m}^{-2}$)。

B.2.2 条形光斑(或曲面展开后为条形)

$$\overline{E} = \sum_N E_N / N \quad \dots\dots\dots (\text{B.2})$$

式中:
 E_N ——测量点的辐照度,单位为瓦每平方米($\text{W} \cdot \text{m}^{-2}$);
 N ——测量点的数目。

附 录 C

(资料性附录)

计 算 实 例

C.1 计算实例 1

入射光为较窄波段下光催化分解水产氢量子产率、光-氢能量转换效率的测定；针对可见光响应制氢光催化剂，使用中心波长为 420 nm，半高宽为 10 nm 的带通滤光片，测试相应窄波段的产氢性能。

C.1.1 实验

环境压力 97.50 kPa，温度 25.0 ℃；

使用附录 A 中的顶照式光催化反应器，系统空余体积 30 mL；

制氢光催化剂 0.2 g， $0.35 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1} \text{Na}_2\text{S}/0.25 \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1} \text{Na}_2\text{SO}_3$ 牺牲剂溶液 200 mL；

连接恒温循环水泵，设置反应温度 25.0 ℃；

光源：平行光源系统（氙灯），滤光片：BP 420（见附录 A）；

气相色谱仪器：北分瑞利 SP 2100 气相色谱仪；

辐照计：FZ-A 型辐照计（已标定）。

C.1.2 数据

25 ℃、标准压力下，100 μL 气体其物质的量为 4.034 μmol 。按 6.1 要求，标定色谱工作曲线，得 100 μL 注射器进样时，100 μL 气体中含有的氢气物质的量 n^{V_0} (μmol) 与氢气对应的峰面积 S_{H_2} 之间的关系为：

$$n^{\text{V}_0} = k S_{\text{H}_2} \quad \dots\dots\dots (\text{C.1})$$

其中 k 为比例系数，标定得到 k 为 4.45×10^{-6} 。

以中心波长 420 nm，半高宽 8 nm 的带通滤光片，放置于光源外置式反应器受光面前进行产氢量子产率的测定。

光源测量数据如表 C.1 所示。

表 C.1 光源测量数据

项目	背景	中心	上	下	左	右	边缘
FZ-A/($\text{mW} \cdot \text{cm}^{-2}$)	1.40	1.030	0.570	0.850	0.750	0.560	—
×仪器系数 2.06	2.88	2.122	—	—	—	—	1.406

有效光斑半径：1.8 cm。

产氢数据，(时间)平均峰面积：10 538。

C.1.3 计算

C.1.3.1 平均辐照度

按式(B.1)计算：

$$\overline{E} = \overline{E}_{\text{center}}/3 + 2\overline{E}_{\text{edge}}/3 = (2.122/3 + 2 \times 1.406/3) \text{ mW} \cdot \text{cm}^{-2} = 1.645 \text{ mW} \cdot \text{cm}^{-2} = 16.45 \text{ W} \cdot \text{m}^{-2}$$

C.1.3.2 反应器受光面积

$$A_R = \pi R^2 = 3.1416 \times 1.8^2 \text{ cm}^2 = 10.18 \text{ cm}^2 = 1.018 \times 10^{-3} \text{ m}^2$$

C.1.3.3 入射光平均辐射通量

按式(19)计算:

$$P = \overline{E} \cdot A_R = 16.45 \times 1.018 \times 10^{-3} \text{ W} = 1.6746 \times 10^{-2} \text{ W}$$

C.1.3.4 入射光子数

按式(20)进行计算:

$$N_p(420^{\pm 10}) = \frac{Pt\lambda}{hc} = \frac{1.6746 \times 10^{-2} \times 3600 \times 420 \times 10^{-9}}{6.6260693 \times 10^{-34} \times 299792458} = 1.2746 \times 10^{20}$$

C.1.3.5 平均光催化反应产氢速率

按式(21)及式(C.1)进行计算:

$$\begin{aligned} \overline{R_{H_2}}(420^{\pm 10}) &= \frac{V_G}{V_0} \times \frac{n^{V_0}}{t} = \frac{V}{V_0} \frac{kS_{H_2}}{t_0} \\ &= \frac{30 \text{ mL}}{100 \text{ mL}} \times \frac{4.45 \times 10^{-6} \times 10538}{3600} \mu\text{mol} \cdot \text{s}^{-1} \\ &= 3.908 \times 10^{-9} \text{ mol} \cdot \text{s}^{-1} \end{aligned}$$

C.1.3.6 平均产氢量子产率

按式(26)进行计算:

$$\begin{aligned} \overline{\Phi_s}(420^{\pm 10}) &= \frac{2\overline{R_{H_2}}(420^{\pm 10})N_A t}{N_p(420^{\pm 10})} \\ &= \frac{2 \times 3.908 \times 10^{-9} \times 6.0221367 \times 10^{23} \times 3600}{1.2746 \times 10^{20}} \times 100\% \\ &= 13.3\% \end{aligned}$$

C.1.3.7 平均光-氢能量转化效率

按式(23)进行计算:

$$\overline{\eta}(420^{\pm 10}) = \frac{\Delta G_{H_2} \overline{R_{H_2}}(420^{\pm 10})}{\overline{E} A_R} = \frac{\Delta G_{H_2} \overline{R_{H_2}}(420^{\pm 10})}{P}$$

不考虑反应压力影响时, ΔG_{H_2} 为反应储存的能量, 取值 $237130 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1}$ 。

$$\overline{\eta}(420^{\pm 10}) = \frac{237130 \times 3.908 \times 10^{-9}}{1.6746 \times 10^{-2}} \times 100\% = 5.53\%$$

考虑反应氢气压力影响时, ΔG_{H_2} 按式(C.2)计算:

$$\Delta G_{H_2} = \Delta G_{H_2}^\ominus - RT \ln(P^\ominus/P_{H_2}) \quad \dots\dots\dots (C.2)$$

式中:

$\Delta G_{H_2}^\ominus$ ——反应标准状态时, 储存的能量, $237130 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1}$;

R ——气体常数, $8.3145 \text{ J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$;

T ——反应温度, 单位为开(K);

$P^{\ominus}$ ——标准状态压力, 100 kPa;

P^{H_2} ——反应氢分压, 单位为帕(Pa)。

其中, 取 $T=298.15\text{ K}$,

$P^{\text{H}_2} = P n^{\text{V}_0} / 4.034 = (97.5 \times 4.45 \times 10^{-6} \times 10\,538 / 4.034)\text{ kPa} = 1.133\text{ kPa}$ 。

代入得:

$\Delta G_{\text{H}_2} = 237\,130\text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} - 8.314\,5 \times 298.15 \times \ln(100/1.133)\text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} = 226\,023\text{ J} \cdot \text{mol}^{-1}$

$\eta(420^{\pm 10}) = \frac{226\,023 \times 3.908 \times 10^{-9}}{1.674\,6 \times 10^{-2}} \times 100\% \approx 5.27\%$

C.2 计算实例 2

入射光为较宽波段下光催化分解水产氢量子产率、光-氢能量转换效率的测定; 使用 LP420 nm 截止滤光片测试光催化剂在 420 nm~760 nm 产氢性能。

C.2.1 实验

环境压力 97.00 kPa, 温度 25.0 °C;

使用附录 A 中所示的积分型自动产氢测试系统, 测试 8 h, 系统空余体积 330.0 mL;

制氢光催化剂 0.2 g, 0.2 mol · L⁻¹ Na₂S/0.3 mol · L⁻¹ Na₂SO₃ 牺牲剂溶液 150 mL;

连接恒温循环水泵, 设置反应液温度 80 °C, 设置气体部分温度 25.0 °C; 测试表压 -85.0 kPa~-76.0 kPa;

光源: 平行光源系统(氙灯), 滤光片: LP 420(见附录 A);

气相色谱仪器: 北分瑞利 SP 2100 气相色谱仪;

辐照计: TBQ-2 太阳总辐射表(热电式中性探测器), 波长范围 300 nm~3 000 nm、TBQ-4-3 分光辐射表, 波长范围 760 nm~3 000 nm。

C.2.2 数据

光源测量数据如表 C.2 所示。

表 C.2 光源测量数据

项目	背景	中心	上	下	左	右	边缘
TBQ-2 总辐射表	0.02	25.20	18.95	20.30	20.55	19.00	19.70
(示值×1 000/9.865)/(W · m ⁻²)	2.03	2 554.5	—	—	—	—	1 997.0
TBQ-4-3 分光辐射表	0.01	14.85	11.30	11.85	12.02	11.25	11.61
(示值×1 000/7.873)/(W · m ⁻²)	1.27	1 886.2	—	—	—	—	1 474.7

有效光斑半径: 2.25 cm。

产氢数据如表 C.3 所示。

表 C.3 产氢量数据

时间/h	0.0	1.0	2.0	3.0	4.0	5.0	6.0	7.0	8.0
产氢量/μmol	0.00	91.50	147.3	231.0	292.7	358.4	440.6	507.4	584.0

C.2.3 计算

C.2.3.1 平均辐照度

按式(B.1)计算:

$$\begin{aligned}\overline{E(420 \sim 760)} &= \overline{E(420 \sim 3\,000)} - \overline{E(760 \sim 3\,000)} \\ &= \left(\frac{2\,554.5}{3} + \frac{2 \times 1\,997.0}{3} \right) \text{W} \cdot \text{m}^{-2} - \left(\frac{1\,886.2}{3} + \frac{2 \times 1\,474.7}{3} \right) \text{W} \cdot \text{m}^{-2} \\ &= 570.9 \text{ W} \cdot \text{m}^{-2}\end{aligned}$$

C.2.3.2 反应器受光面积

$$A_R = \pi R^2 = 3.141\,6 \times 2.25^2 \text{ cm}^2 = 15.90 \text{ cm}^2 = 1.590 \times 10^{-3} \text{ m}^2$$

C.2.3.3 入射光平均辐射通量

按式(19)计算:

$$P = \overline{E(420 \sim 760)} \cdot A_R = 570.9 \times 1.590 \times 10^{-3} \text{ W} = 0.907\,7 \text{ W}$$

C.2.3.4 等效波长

若有氙灯光源在 420 nm~760 nm 的光谱,按式(2)计算;若认为此区间氙灯光谱和 AM 1.5 太阳光谱接近,则 $\bar{\lambda} \approx 584.3 \text{ nm}$ 。

C.2.3.5 入射光子数

按式(20)进行计算:

$$N_p^i(420 \sim 760) = \frac{Pt\bar{\lambda}}{hc} = \frac{0.907\,7 \times 3\,600 \times 584.3 \times 10^{-9}}{6.626\,069\,3 \times 10^{-34} \times 299\,792\,458} = 9.612\,0 \times 10^{21}$$

C.2.3.6 平均光催化反应产氢速率

根据表 C.3,进行线性拟合,得产氢速率:

$$\overline{R_{\text{H}_2}(420 \sim 760)} = 73.1 \times 10^{-6} \text{ mol} \cdot \text{h}^{-1} = 2.031 \times 10^{-8} \text{ mol} \cdot \text{s}^{-1}$$

C.2.3.7 平均产氢量子产率

按式(27)进行计算:

$$\begin{aligned}\Phi_a(420 \sim 760) &= \frac{2 \overline{R_{\text{H}_2}(420 \sim 760)} N_A t}{N_p^i(420 \sim 760)} \\ &= \frac{2 \times 2.031 \times 10^{-8} \times 6.022\,136\,7 \times 10^{23} \times 3\,600}{9.612\,0 \times 10^{21}} \times 100\% \\ &= 0.916\%\end{aligned}$$

C.2.3.8 平均光-氢能量转化效率

按式(24)进行计算:

$$\overline{\eta(420 \sim 760)} = \frac{\Delta G_{\text{H}_2} \overline{R_{\text{H}_2}(420 \sim 760)}}{\overline{E(420 \sim 760)} A_R} = \frac{\Delta G_{\text{H}_2} \overline{R_{\text{H}_2}(420 \sim 760)}}{P}$$

不考虑反应压力影响时, ΔG_{H_2} 为反应储存的能量,取值 $237\,130 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1}$ 。

$$\overline{\eta(420 \sim 760)} = \frac{237\,130 \times 2.031 \times 10^{-8}}{0.907\,7} \times 100\% = 0.531\%$$

考虑反应氢气压力影响时,取始末态氢分压的平均值:

$$P = \frac{0 + 584.0 \times 10^{-6} \times 8.314\,5 \times 298.15 / (330.0 \times 10^{-6})}{2} = 2.193\,\text{kPa}$$

ΔG_{H_2} 按式(C.2)计算:

其中,取 $T = 298.15\,\text{K}$, $P^{\text{H}_2} = 2.193\,\text{kPa}$ 。

代入,得:

$$\Delta G_{\text{H}_2} = 237\,130\,\text{J} \cdot \text{mol}^{-1} - 8.314\,5 \times 298.15 \times \ln(100/2.193)\,\text{J} \cdot \text{mol}^{-1} = 227\,660\,\text{J} \cdot \text{mol}^{-1}$$

$$\overline{\eta(420 \sim 760)} = \frac{227\,660 \times 2.031 \times 10^{-8}}{0.907\,7} \times 100\% \approx 0.509\%$$

中 华 人 民 共 和 国
国 家 标 准
太阳能光催化分解水制氢体系的能量
转化效率与量子产率计算

GB/T 26915—2011

*

中国标准出版社出版发行
北京市朝阳区和平里西街甲2号(100013)
北京市西城区三里河北街16号(100045)

网址: www.gb168.cn

服务热线: 010-68522006

2012年3月第一版

*

书号: 155066 · 1-44324

版权专有 侵权必究



GB/T 26915-2011