



**Edda Sif Aradóttir**  
**meistaraneini við efnafræðiskor HÍ**  
**einn styrkþega Landsvirkjunar 2005**

**Magnésínmálmblendi sem vetnisgeymsla**

**Samráðsfundur Landsvirkjunar**  
**6. apríl 2006**

Áhugi á notkun vetnis sem orkugjafa hefur vaxið mikið á undanförunum árum, einna helst vegna þverrandi olíu- og kolefnaorkulinda. Vetni má brenna í hreyflum líkum venjulegum bensínhreyflum en rúmlega tvöföld nýtni, miðað við brunahreyfil, fæst ef bruninn fer fram í efnarafölum, nýjum gerðum véla sem eru í örri þróun. Þá efnarafala sem notaðir eru í dag þarf að mata á mjög hreinu vetnisgasi.

Helsti vandinn samfara notkun vetnis í bílum og skipum er geymsla þess um borð. Með þeim efnarafölum sem til eru í dag dugar 1 kg af vetni til að keyra venjulegan einkabíl um 100 km. Til að jafnast á við akstursgetu sambærilegs bensínbíls þarf slíkur bíll því að geta borið um 5 kg af nýtanlegu vetni. Samgönguviðnaðurinn gerir kröfur um að massahlutfall vetnis í vetnisgeymslunni sé a.m.k. 6,5% til að tankurinn verði ekki of þungur. Einnig skiptir rúmmálið miklu máli og þarf eðlismassi vetnis í geymslunni að vera a.m.k. 60 kg/m<sup>3</sup>. Loks þarf losun vetnisgass úr geymslunni að eiga sér stað við tiltölulega lágt hitastig, 50-100°C.

Í vetnisstrætisvögnunum sem keyrt hafa á götum Reykjavíkur er vetni geymt sem gas undir 350 loftþyngda þrýstingi. Það hefur reynst ágætlega en þykir ekki heppileg lausn fyrir einkabíla. Enn betri þjöppun fæst með því að kæla vetnið niður og geyma það á fljótandi formi, en þannig má helminga rúmtak vetnisins. Hins vegar er orkufrekt að kæla og þjappa vetninu á fljótandi form svo um 30-40% af orkuinnihaldi vetnisins tapast.

Lengi hefur verið vitað að vetni gengur í samband við marga málma og myndar málmhýdríð. Málmarir virka sem nokkurs konar svampar og sjúga í sig vetni með því að hýsa vetnisatóm milli málmatóma. Geyma má mikið magn vetnis á rúmmálseiningu í slíkum samböndum og er eðlismassi vetnis hærri þar en í fljótandi vetni. Flestir málmar eru þó of þungir og því óheppilegir til vetnisgeymslu í farartækjum. Magnésín er, hins vegar, léttur, ódýr málmur sem hvarfast við vetni og myndar hýdríðið MgH<sub>2</sub>. Massahlutfall vetnis í hýdríðinu er 7,6%. Þó þarf að hita hýdríðið í a.m.k. 250°C til að losa vetnið úr málminum auk þess sem sveim vetnisatóma í gegnum hýdríðið er of hægt ferli. Nýlegar mælingar hafa sýnt fram á að lækka megi losunarhitastigið og auka hraða sveims með því að bæta

aðeins litlu magni af hliðarmálmi í magnesínkristalinn. Enn hefur þó ekki tekist að finna stöðugt magnesínmálmblendi sem heppilegt er til vetnisgeymslu í farartækjum.

Við höfum beitt smásæjum tölvuútreikningum, byggðum á grundvallarjöfnum eðlisfræðinnar og þéttifellafræði, til að kanna hvernig losunarhitastig vetnis og sveimhraði vetnis í magnesínhýdríði breytast þegar litlu magni af hliðarmálmi er bætt í kristalinn. Útreikningarnir sýna að við það að bæta litlu magni af titani í magnesínkristalinn lækkar losunarhitastigið úr 250°C í 55°C auk þess sem sveimhraði eykst verulega. Vandamálið er hins vegar að málmanir aðskiljast þegar vetnið er losað úr kristalnum og því erfitt að mynda magnesíntítanhýdríðið aftur við áfyllingu vetnis.

Kerfisbundum útreikningum hefur verið beitt í leit að hliðarmálmi sem líklegur er til að mynda stöðugt magnesínmálmblendi. Notast var við byggingu magnesíntítanhýdríðsins í útreikningunum en titani skipt út fyrir aðra hliðarmálma. Útreikningarnir voru framkvæmdir fyrir tíu léttustu hliðarmálmana (Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu og Zn) og var vetnismagn orkulægstu kristalseiningarinnar fundið fyrir sérhvert hýdríðanna. Áhrif mismunandi hliðarmálma á massahlutfall, bindiorku og sveim vetnis í málmblendishýdríðunum voru skoðuð og reynt að greina kerfisbundnar breytingar. Útreikningarnir sýna að hliðarmálmanir skandín (Sc) og sink (Zn) eru líklegastir til að mynda stöðugt magnesínmálmblendi og þar með auðvelda endurmyndun hýdríðsins við áfyllingu vetnis.