

# Projektbeskrivelse

Hydrogenlagring i Alkalijordmetaldopet C<sub>60</sub>

Søren Strandskov Sørensen

Unge forskere 2014

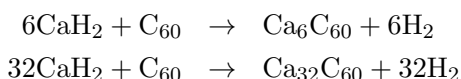
Et af de store problemer med implementering af ny hydrogen teknologi har indtil videre været lagringsmetoder. De allerede producerede løsninger har ofte været ubrugelige og har haft deciderede dårlige egenskaber. Bl. a. kræves et meget højt tryk i de traditionelle tryktanke.

Derfor er der i dette projekt blevet fokuseret på at undersøge mulige hydrogenlagringsmaterialer baseret på C<sub>60</sub> dopet med Ca og Mg, der vil kunne have et potentiale mhp. implementering i transportsektoren og lignende.

Fulleren har i de seneste år fået øget opmærksomhed mht. dets egenskaber som hydrogenlagringsmateriale, og det blev i 2013 vist, at stofferne Li<sub>6</sub>C<sub>60</sub> og Na<sub>6</sub>C<sub>60</sub> kan produceres og, at de har gode egenskaber mhp. hydrogenlagring med et målt reversibelt optag på hhv. 5,0 og 4,0 vægt pct. H<sub>2</sub> [1].

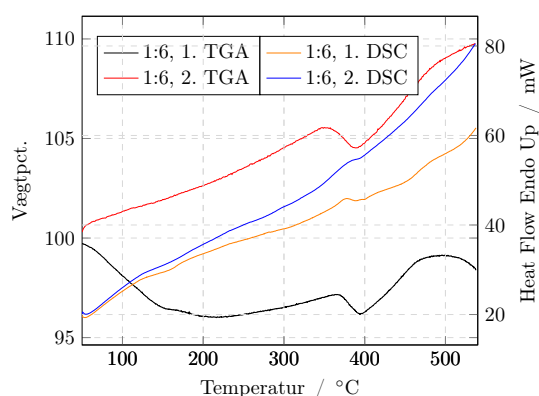
Flere videnskabelige grupper har ud fra Density Functional Theory (DFT - typisk omtalt som computerkemi, idet det er en ikke-eksperimentiel metode) forudsagt, at stoffet Ca<sub>32</sub>C<sub>60</sub> er et rigtigt godt hydrogenlagringsmateriale, der kan optage omkring 8 vægt pct. eller derover [2] [3] [4]. Derfor har dette projekt netop forsøgt at producere dette stof samt Ca<sub>6</sub>C<sub>60</sub>, da denne støkiometri tidligere har vist gode resultater.

Det er således følgende reaktioner det ønskes at få til at ske:

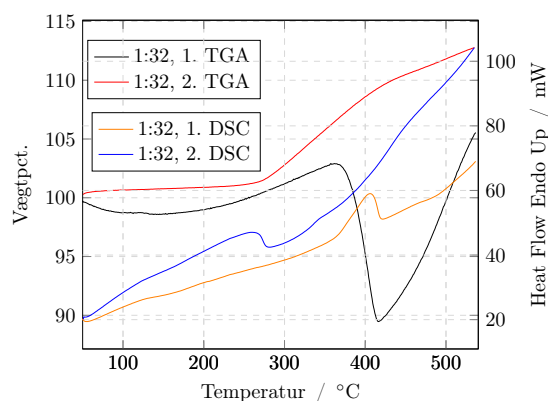


Som udgangspunkt er det meningen, at de producerede prøver skal undersøges mht. deres hydrogenlagringsegenskaber, stabilitet og indhold. Dette skal teoretisk set gøres med Pressure-Composition-Temperature-udstyr (PCT), der kan måle trykforhold som en funktion af temperatur af en prøve under en H<sub>2</sub>-atmosfære, røntgendiffraction (XRD), der måler hvordan krystallens struktur er udformet, mens massespektroskopi er tiltænkt til at undersøge stoffernes sammensætning.

Der er blevet udført et pilotforsøg ved Aalborg Universitets Institut for Kemi og Bioteknologi. Der blev udført en vådsyntese i THF efterfulgt af en opvarmning af to prøver mhp. at danne Ca<sub>6</sub>C<sub>60</sub> og Ca<sub>32</sub>C<sub>60</sub><sup>1</sup>. Der blev udført XRD-analyser på de to prøver både før og efter opvarmning, mens der blev udført TGA/DSC-analyser på de to prøver fra ureageret tilstand. Disse data ses plottet nedenfor:

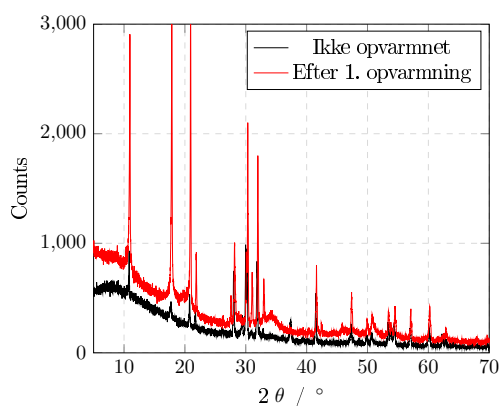


(a) 1:6 TGA/DSC-data

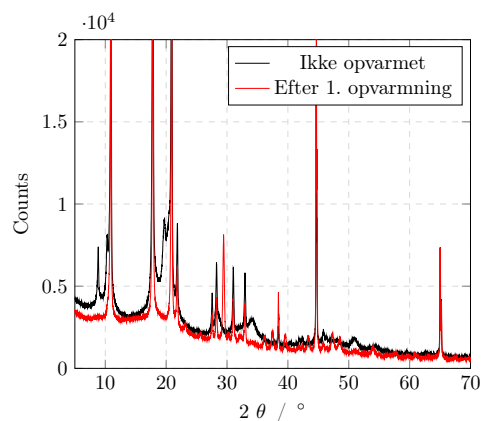


(b) 1:32 TGA/DSC-data

<sup>1</sup>Se bilag 1's forsøg # 1 og # 2 for prøvemasser



(a) 1:6 XRD-data



(b) 1:32 XRD-data

Ud fra XRD-data ses det, at der er blevet dannet en ny krystalstruktur, hvilket indikerer en reaktion mellem reaktanterne. Desuden ses høje optag på 4 og 10 vægt pct. for 1:6-prøven og 15 og 13 vægt pct. for 1:32-prøven for hhv. første og anden opvarmning. Det optagne stof er i alle tilfælde  $N_2$  grundet et  $N_2$ -flow over prøven, og trykket har ved de viste målinger været omkring 1 bar.

Hvis der skulle udføres flere forsøg, så ville det være meget relevant at lave PCT-forsøg samt lave kontrollforsøg med TGA-udstyret. Desuden ville det være interessant at følge en opvarmning samt en nedkøling af stofferne for at følge absorptionens temperaturafhængighed. Ligeledes ville trykændringer være meget interessante at undersøge mhp. at ændre reaktionskinetikken samt optaget af gas og ligeledes undersøge andre mulige dopanter som eksempelvis magnesium for at kunne lave sammenligninger indenfor sammen hovedgruppe og mellem hovedgrupper.

Såfremt stofferne viser sig at have gode hydrogenlagringsegenskaber, så vil de kunne vise sig at have en åbenlys anvendelse i transportsektoren mhp. indførslen af hydrogensamfundet. Ligeledes kan stofferne vise sig at få andre praktiske anvendelser inden for industrien eller evt. videnskabelige formål, idet stoffet jo har vist, at det faktisk også er meget brugbart til at absorbere  $N_2$ . Dette kan tyde på, at andre gasser også vil kunne absorberes og lagres, hvilket netop kan vise sig at være meget brugbart.

Samlet set er der altså ingen tvivl om, at disse stoffer, såfremt de kan gøres decideret brugbare, vil kunne revolutionere verden og afhjælpe store samfundsmæssige problemstillinger.

## Litteratur

- [1] Peters Brent Joseph A. Teprovich Jr., Douglas A. K. Douglas and Ragaiy Zidan. Comparative study of reversible hydrogen storage in alkali-doped fullerenes. *Journal of Alloys and Compounds*, 580:364–367, December 2013.
- [2] Mina Yoon; Shenyuan Yang; Christian Hicke; Enge Wang; David Geohegan og Zhenyu Zhang. Calcium as the Superior Coating Metal in Functionalization of Carbon Fullerenes for High-Capacity Hydrogen Storage. *Physical Review Letters*, 100, Maj 2008.
- [3] Qian Wang; Qiang Sun; Puru Jena og Yoshiyuki Kawazoe. Theoretical Study of Hydrogen Storage in Ca-Coated Fullerenes. *J. Chem. Theory Comput.*, 5:374–379, 2009.
- [4] X. G. Gong og Vijay Kumar. Metallic coverings of calcium on  $C_{60}$ . *Chemical Physics Letters*, 334:238–244, Februar 2001.