



A hidrogén tárolása és annak korlátai

A tárolás kritikus szerepet játszik a hidrogén energetikai felhasználásában. A jelenleg elterjedt tárolási eljárások, mint a gáz állapotú, folyékony vagy egyszerű hidridekben megvalósított tárolás lehetőségei egyaránt messze vannak a járművek meghajtásához szükséges követelményektől. Ezen eljárások további fokozatos fejlesztése nem kecsegtet a szükséges mértékű javulással. A fizikai és kémiai folyamatok megismerése viszont elvezethet gyökeresen új, sokkal jobb megoldásokhoz is. A legnagyobb jövője a nanostruktúrájú anyagok felhasználásának van, mind szénelapú, mind egyéb anyagok felhasználásával kialakított nanoszerkezetek esetén.

Tárgyszavak: hidrogén; tárolás; hidrid; nanostruktúra.

A fűtő- és üzemanyagként a felhasználók igényeinek kielégítésére rendelkezésre bocsátandó hidrogén tárolása a teljes szolgáltatórendszer fontos fázisa. Az itt felhasznált anyagokkal vagy rendszerekkel kapcsolatos műszaki problémák megoldásában az USA még messze áll attól, hogy teljesíteni tudja az erre vonatkozóan 2010-re vagy 2015-re megállapított célkitűzéseit. A hidrogén hatékony tárolásához és szállításához ugyanis két, egymástól nagymértékben eltérő funkciónak kell eleget tenni. Amennyiben helyhez kötött felhasználásról – lakások fűtéséről és légkondicionálásáról, egy lakóközvet vagy éppen egyes ipari felhasználók villamosenergia-igényeinek biztosításáról – van szó, a hidrogént tároló rendszerek számára sokféle megoldás áll rendelkezésre; többlépcsős, kémiai folyamatokra alapozott feltöltési/újrátöltési ciklusokat és magas hőmérsékletet/nyomást alkalmazhatnak, és a folyamat viszonylagos lassúságát többletkapacitás beépítésével ellensúlyozhatják. Ha viszont egy gépjármű üzemanyag-ellátását kell megoldani, úgy szigorú térfogat- és súlyköve-

telmények teljesítésére van szükség ahhoz, hogy újratöltés nélkül meg lehessen valósítani az adott jármű 480 kilométeres minimális hatósugarát, miközben az utántöltésre közel szobahőmérsékleten kerül sor, és a hidrogént elég gyorsan kell kinyerni a tárolóból ahhoz, hogy a személyautót, autóbust vagy teherautót hajtó hidrogénes tüzelőanyag-elem kellő mennyiségű villamos energiát tudjon termelni.

Mivel az USA kőolaj-felhasználásának közel kétharmada a közlekedés energiaigényeinek kielégítését szolgálja, e szektor nemcsak komoly kihívást, de egyben jelentős hajtóerőt is képvisel az alap kutatás számára, a hidrogéne alapuló energiagazdaság létrehozására. A közlekedés által felhasznált hidrogén hatékony tárolásával kapcsolatban többek között a következő működési követelmények emelhetők ki:

- megfelelő termodinamikai jellemzők,
- gyorsan lebonyolítható műveletek,
- nagy fajlagos tárolókapacitás,
- hatékony hőátadás,
- a hidrogént elnyelő/felszabadító készülékek hosszú élettartama,
- nagy mechanikai szilárdság és tűrőképesség,
- normális üzembiztonság és megfelelő kockázatkezelés a rendkívüli körülmények esetén.

Egy tüzelőanyag-elemes/villanymotoros jármű hajtásához típusától függően, 480 kilométeres

hatósugárból kiindulva körülbelül 5–10 kg felhasználható hidrogén szükséges. Az újratöltéshez szükséges idő (2015 tervezete) legfeljebb 5 perc. A jelenleg alkalmazott technológiák szerint a hidrogént sűrített gáz, vagy mélyhűtött folyadék formájában tartják készletben, ami könnyen hozzáférhetővé teszi ezt az energiahordozót. Ahhoz azonban, hogy a jelenlegi technológiával is ki tudják elégíteni az idevágó jövőbeni (a FreedomCAR programban lefektetett) követelményeket, igen nagy térfogatú tartályokra lenne szükség. E követelmények kielégítése szempontjából a hidrogén tárolása szilárd anyag által elnyelt formában ígéretes megoldásnak tekinthető, de az ezzel kapcsolatos követelményeket minden tekintetben kielégítő anyagot még nem sikerült megtalálni.

Ez az összeállítás a jelenleg alkalmazott módszerekről, valamint azokról az alapvető kérdésekről ad áttekintést, amelyeket a hidrogén tárolásával kapcsolatos célok eléréséhez meg kellene oldani.

A gáznemű és folyékony hidrogén tárolása

A hidrogéngáz tárolása megfelelő tartályokban már érett, jól bevált technológiának tekinthető, amit az is tanúsít, hogy nemrég már 10 000 psi

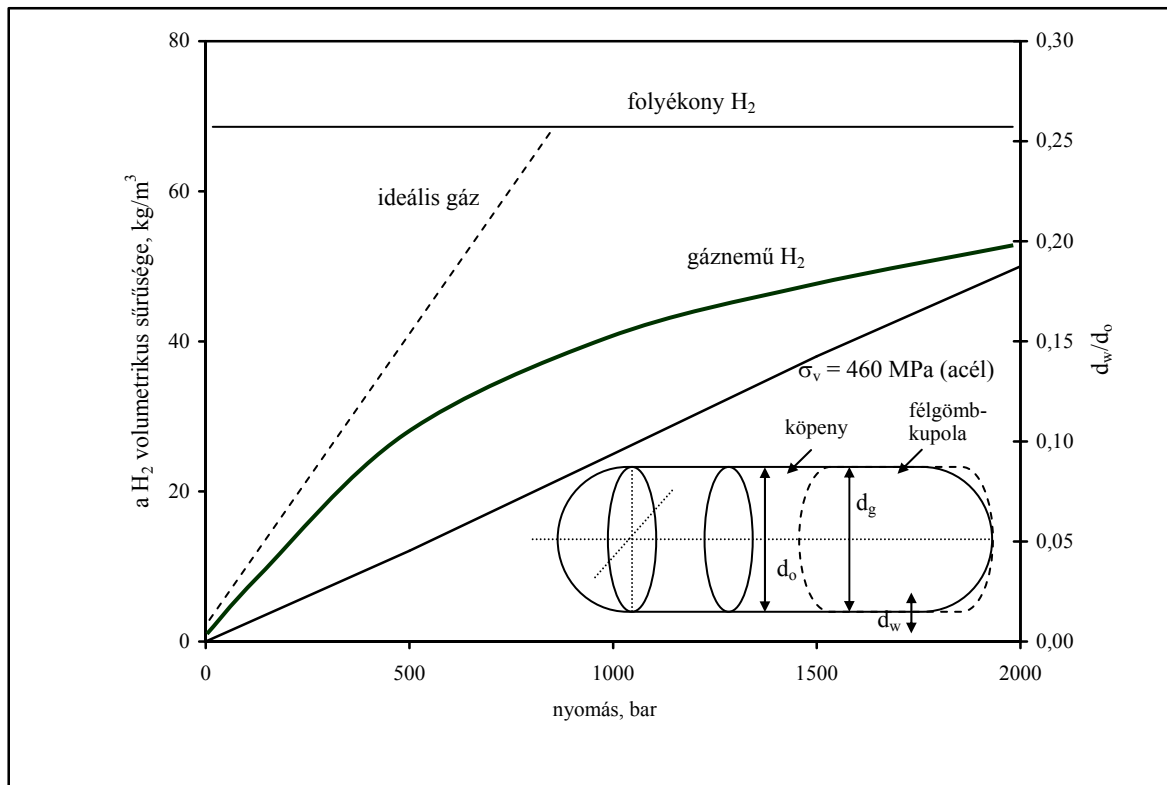
(680 atm) nyomást tűrő tartályokat is sikerült gyártani. E nyomástartó edények olyan könnyű alapanyagokból készülnek, mint például a karbonszálakkal erősített kompozit szerkezeti anyagok. Közlekedési eszközökön való alkalmazás esetén azonban a gáz halmazállapotban tárolás nem előnyös, mivel adott térfogatban csak viszonylag kis mennyiség tárolható belőle. Az összepréselt hidrogéngáz energiataralma (4,4 MJ/liter) még 10 000 psi nyomáson is elmarad az ugyanolyan térfogatú benzinétől (31,6 MJ/liter). Gondot jelent itt a gáz összepréselésére felhasznált energia és a felhasználás során bekövetkező nagymértékű nyomáscsökkenés is. Miután a rendszer elemeinek jelentős része fémekből készül, az esetleges üzemzavarok kiküszöbölése érdekében a kutatóknak az atomok szintjén is tanulmányozniuk kell azokat a folyamatokat, amelyek a hidrogénnel érintkező anyagokat hosszabb távon ridegebbé (törékenyebbé) teszik.

Cseppfolyósított hidrogén esetében a kutatók 10 000 psi nyomáson már 8,4 MJ/literes energiataralommal számolnak, normál hőmérsékleten és nyomáson az anyag sűrűsége 70,8 kg/m³. Ezek az értékek a FreedomCAR programban megállapított elérendő szinteknek még a felét sem érik el. A folyékony állapotban tárolás jelentős hátránya a cseppfolyósításhoz felhasznált igen nagy mennyiségű energia, de

gondot okoz a párolgási veszteség is – különösen kisméretű üzemanyagtartályok esetén. Hogy enyhíteni lehessen a mélyhűtés mértékét, igen nagy nyomást tűrő hűtött tartályokkal is folytatnak kísérleteket. A cseppfolyósítás költségeinek csökkentésére lehetőséget adó, energetikai szempontból hatékonyabb új cseppfolyósítási eljárások kidolgozására lenne ezért szükség. Az 1. ábrán a tartályban található hidrogén térfogat szerinti (volumetrikus) sűrűsége, illetve a nyomástűrő henger falvastagságának és külső átmérőjének hányadosa közötti összefüggés látható 460 MPa szakítószilárdságú rozsdamentes acélhenger esetén (a jobboldali ordináta-tengelyen). A volumetrikus sűrűség a nyomástól függően nő és – az anyag szakítószilárdságának megfelelően – 1000 bar fölött éri el maximális értékét.

Tárolás szilárd halmazállapotban

Szilárd halmazállapotban a hidrogén fémhidridekben, megfelelő vegyi anyagokban és különféle, nanométeres szinten strukturált anyagokban tárolható. E technológia különösen a mozgó járműveken való tároláshoz előnyös. A hidrogén ezekben az anyagokban mind állandó jelleggel, mind reverzibilisen is tárolható. Az utóbbi azt jelenti, hogy az adott anyag – például egy fémhidrid – hőmérsékletét alkalmas nyomáson megnövelve, hidrogén



1. ábra A nyomás alá helyezett hidrogén, az ideális gáz és a cseppfolyósított hidrogén volumetrikus sűrűsége a gáznyomás függvényében

szabadulhat fel. Noha e folyamatok termodinamikai szabályozására rendszerint a hőmérséklet és a nyomás a legalkalmasabb paraméter, a hidrogén lekötése/leadása más energiafajtákkal (például mechanikai vagy akusztikus energiával) is szabályozható. Ideális esetben e folyamatoknak 0 és 100 °C közötti hőmérsékleten és 1–10 bar közötti nyomáson, a közlekedési eszközökön való felhasználáshoz illeszkedő, vagyis viszonylag rövid idő alatt kell végbemenniük. Egyes anyagokban a hidrogén erős kémiai kötésbe kerül, ezért csak nehezen szabadítható fel – közlekedési eszközökön

ezért ezek nem alkalmazhatók. Egyes anyagokból, köztük különböző hidridekből a hidrogén más anyagokkal (például vízzel) reagálva tehető szabaddá, a hidrolízis kapcsán keletkező hőenergia hasznosítható. A hidrolízis kapcsán keletkező termék csak megfelelő kémiai kezelés után alkalmas hidrogén tárolására. Újrafelhasználható szénhidrogén hordozókkal – például hexametilénnel – is folytattak hidrogén tárolására irányuló kísérleteket, de e folyékony anyagokban jelentős fajsúlyuk miatt kémiai átalakítás nélkül csak kis mennyiségű hidrogén tárolható. Emellett problémát jelent itt az is,

hogyan a hidrogén szabaddá tételét segítő katalizátort először kellő hőmérsékletre kell melegíteni, amihez túl sok idő szükséges.

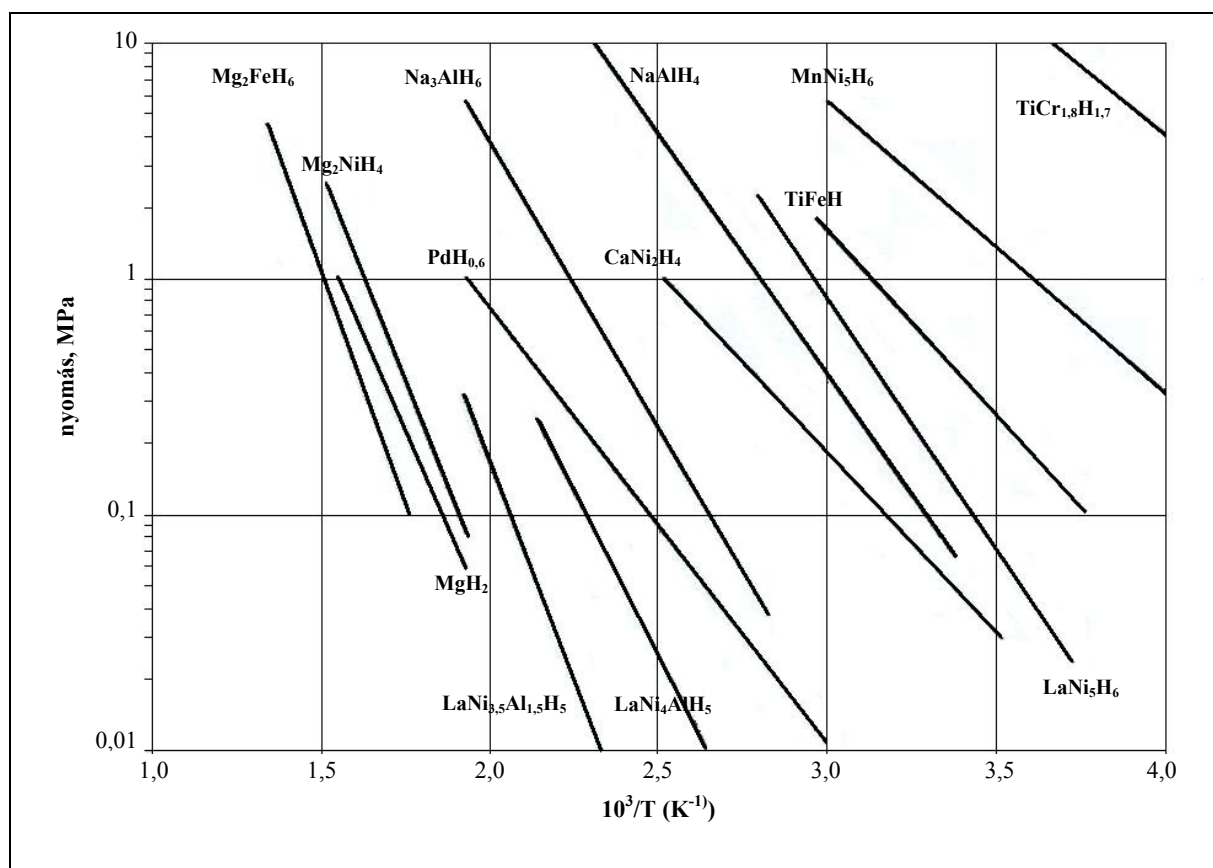
Bár a Sandia National Laboratory által vezetett nyilvántartás eddig több mint 2000, hidrid képződésére alkalmas kémiai elemet, vegyület és ötvözetet ismer, a FreedomCAR fejlesztési program által támasztott követelményeket eddig még egyikük sem képes teljesíteni. A térközi hidrogén tárolására vonatkozóan szóba jöhető hagyományos fémhidridekhez kétkomponensű AB, AB₂, AB₅, A₂B típusú intermetallikus vegyületek (például a TiFe, ZnMn₂, LaNi₅ és a Mg₂Ni) és tércentrált köbös kristályszerkezetű fémek tartoznak. Ezek az anyagok jellemzően 1,4–3,6 % (m/m) mennyiségben képesek hidrogént lekötni, ami mintegy harmada a FreedomCAR által előírt szintnek.

Fémhidridek és komplex hidrid jellegű anyagok

Az elmúlt négy évtized folyamán hidrogén szilárd anyagokban való tárolására alig alkalmaztak mást, mint fémhidrideket és fémötvözeteket, amelyekben a fém kristályrácsát kiegészítve a rendszerint tetraédes és oktaédes kristályrács térközöit abszorbeált hidrogénnel töltötték ki. Amikor hidrogén szabadul fel belőlük, a hidrogénatomok a részecskék felületé-

re jutva molekulákba rendeződnek. A technológiával összefüggő kutatások főként a hidrogén lekötésére fordítják a figyelmet, ennek eredményeként már egy fématomra számítva kettőnél is több hidrogénatomot sikerült lekötteni. Az eddig vizsgált anyagok rácsszerkezetében azonban többnyire viszonylag nehéz elemek találhatók, ezért a nagyjából átmeneti fémekből álló anyagokban a tárolt mennyiség rendszerint nem haladja meg a 2 % (m/m) értéket. Ígéretes eredményt (3–7 % (m/m)) a könnyűfémek közül magnéziummal sikerült elérni, de ebben az esetben a hidrogén csak magas hőmérsékleten (atmoszferikus nyomáson például 552 K-on) tehető szabaddá az anyagból. Bár magnéziumötvözetekben, nanométeres nagyságrendű struktúrák kialakításával és bizonyos katalizátorok hozzáadásával sikerült javítani a folyamatok kinetikáján, termodinamikai jellemzőik csaknem változatlanok maradtak.

A hidrogént alacsony hőmérsékleten tároló hidridek közé sorolható NaAlH₄ és a közepes hőmérsékleten tároló Na₃AlH₆ együtt alkalmazva például a hidrogén felszabadításához alacsonyabb hőmérsékletet és nagy tárolási kapacitást (körülbelül 5 % (m/m) arány) tesz lehetővé. A hidridek képződése csaknem minden fém esetében 15–25%-os térfogatnövekedéssel jár, amit számításba kell venni a megfelelő tárolóedények méretezésénél is. Emellett



2. ábra Egyes hidridek Van't Hoff féle grafikonjai

kezelné kell az abszorpció és a deszorpció során keletkező/lekötött hőmennyiségeket is, hogy a rendszer hidrogénnel való feltöltése és kiürítése során megfelelő reakciósebességet lehessen elérni – anélkül, hogy ez hosszabb távon az adott anyagokat károsítaná. A fémhidridek stabilitását általában a Van't Hoff-féle grafikonok formájában fejezik ki (2. ábra). A legstabilabbnak számító kétkomponensű hidridek képződési entalpiája $\Delta H_f = -226$ kJ/mol H_2 . A legkevésbé stabil hidridek közé a $FeH_{0.5}$, a $NiH_{0.5}$ és a $MoH_{0.5}$ sorolható, képződési entalpiájuk rendre $\Delta H_f = +20$ kJ/mol H_2 , $\Delta H_f = +20$ kJ/mol H_2 és $\Delta H_f = +92$ kJ/mol H_2 .

A hidrogén tárolásának másik lehetséges módja a lekötés kémiai vegyületben, amire a legjobb példa az egy szénatom mellett négy hidrogénatomot tartalmazó metán (CH_4). Mivel azonban a metán gáznemű, aligha előnyösebb a hidrogéngáz közvetlen tárolásához képest. Nem beszélve arról, hogy a szén-hidrogén túl erős kémiai kötése miatt a hidrogént nem könnyű szabadrá tenni e vegyületből. Újabban kifejlesztett szilárd anyagok, mint például az alanátok (alumínium-hidridek), bór-hidridek és az imidek, amelyekben a fématomot 4–6 hidrogénatom veszi körül negatív töltésű komplex aniont képezve, jól imitálják a metán felépíté-

sét és áttörést hozhatnak a hidrogén szilárd anyagban tárolása terén. E vegyületek ugyanis elméletileg 7–18 % (m/m)-ig tartalmazhatnak hidrogént. Amennyiben sikerülne a hidrogént nagy térfogatsűrűséggel (100 g H₂/liter) tároló szilárd anyagot találni, ezzel felül lehetne múlni a mélyhűtött cseppfolyós hidrogén sűrűségét, ami 20 K-on 70 g H₂/liter. Ezen anyagok gyakorlati hasznossága a legnagyobb mértékben attól függ, hogy mennyire elfogadható a hidrogén kellő mennyiségben való felszabadításához szükséges hőmérséklet, nemkülönben attól is, hogy miként lehet őket újra feltölteni hidrogénnel. Többkomponensű hidrid keverékek előállításával valószínűleg a kívánt tulajdonságokkal rendelkező anyag is előállítható. Ha például hidrogénben dús [MeH_n]^{p-} típusú anionokat különböző könnyű elemek kationjaival elegyítenek, úgy a kationos rácsszerkezetben lehetővé válik a pontos kémiai helyettesítés, áthidalva a szakadékot a hidrogénben szegény intermetallikus hidridek és a hidrogénben dús LiH, BeH₂ és MgH₂ vegyületek között. Ennek köszönhetően talán e komplex hidridek lehetnek a legalkalmasabbak arra, hogy nagy arányban hidrogént tartalmazó, ugyanakkor a hidrogént könnyen leadni/felvenni képes tárolóközeget képezzenek.

A komplex hidridek többségét hosszadalmas, oldószerben lejátszódó szintézis révén állítják

elő, oldószer nélkül csak néhányuk (így például a LiAlH₄ és a NaBH₄) szintetizálható. Ezek, és más hasonló anyagok esetében ezért új kiindulási összetevőket és technológiai eljárásokat kell kidolgozni a megfelelő könnyű hidridek előállításához. A komplex hidridek reverzibilis viselkedése és elfogadható kinetikai jellemzői szempontjából fontos, de ma még kevésbé érthető szerepük van egyes adalékanyagoknak. Titánalapú vegyületek, például (TiCl₃ vagy Ti[OBu]₄) hozzáadása NaAlH₄-hez oly mértékben csökkenti a hidridek első bomlási hőmérsékletét, hogy 353 K-on 3,7 % (m/m) hidrogén tehető katalizátor nélkül szabaddá. Ha pedig TiCl₄ katalizátor jelenlétében LiAlH₄-et mechanikai-kémiai eljárással kezelnek, úgy szobahőmérsékleten 5,0 % (m/m) hidrogén szabadítható fel, míg 423 K-ra melegítve az anyagot további 2,5 % (m/m). Ebben az esetben azonban még nem sikerült kimutatni az anyag reverzibilis viselkedését.

Egy nemrég végzett kutatás során lítium-nitridben, nyomás alatt sikerült lekötöni 11,4 % (m/m) hidrogént, ami a nitridekre és az imidekre, mint hidrogént tároló anyagokra irányította rá a szakemberek figyelmét. Noha e vizsgálatok során a hidrogént csak magas hőmérsékleten tudták szabaddá tenni a tárolóanyagból, érdemes lenne az alkálifém-hidridekkel és vegyületeikkel további vizsgálatokat folytatni.

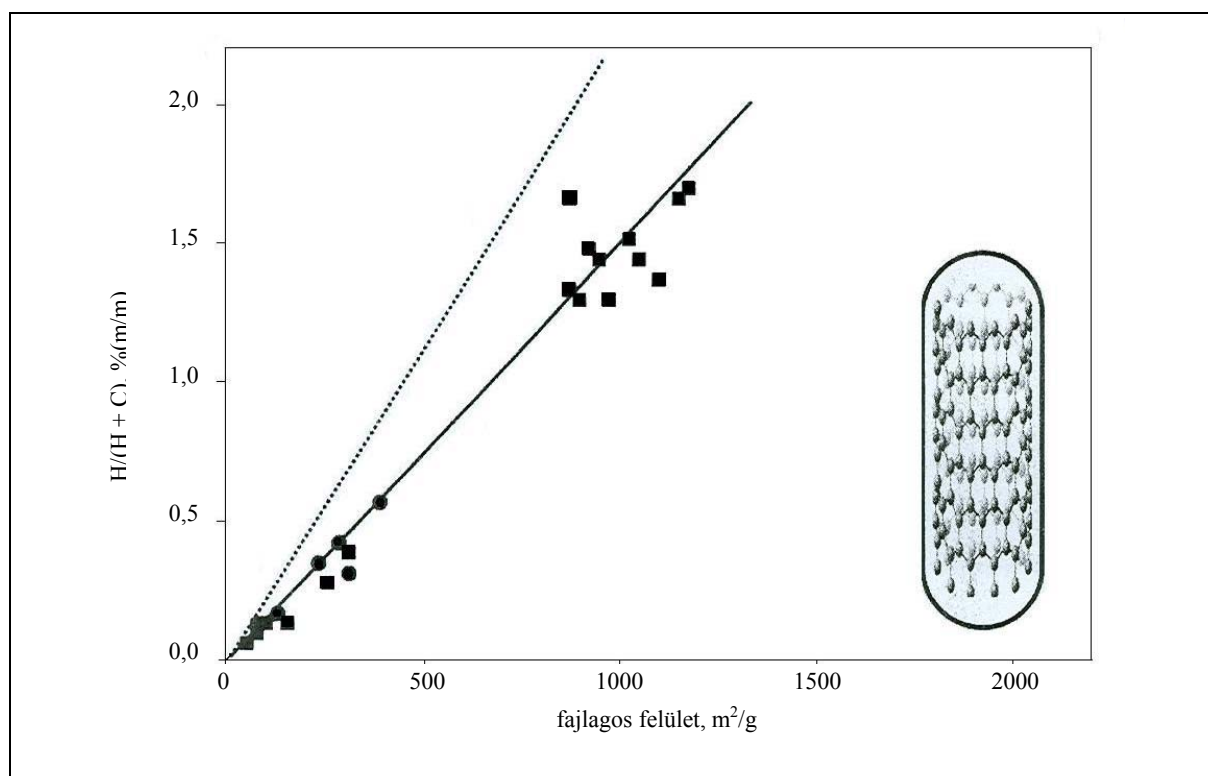
Nanostrukturált anyagok

A kutatások kimutatták, hogy nanométeres mérettartományban az anyagok határozottan eltérő tulajdonságokat mutatnak, mint nagyobb méretek esetén. A nemrég kifejlesztett új szintetizálási eljárások lehetővé tették, hogy megfelelő térbeli felépítésű, meghatározott tulajdonságokkal rendelkező anyagokat hozzanak létre. Szakmai körökben élénk érdeklődéssel fogadták, hogy a fentieknek tulajdoníthatóan olyan, teljesen újfajta anyagok állíthatóak elő, amelyek tulajdonságait viszonylag kis hosszúságú (1 < d < 100 nm) határozza meg. Ilyen nanostrukturált anyagok például a szén bázisán is készíthetők – nanocsövek, nanokürtök, fullerének –, nemkülönben más anyagokból, így különböző hidridekből is. Kis méreteik jelentős mértékben befolyásolják a hidrogén abszorpcióját és disszociációját ezekben az anyagokban, különös tekintettel e folyamatok termodinamikai és kinetikai jellemzőire, mivel növelik a diffúzió sebességét, miközben mérséklék a diffúziós úthosszt. Általában véve a diffúzió sebessége az anyagtranszport sebességét közvetlenül befolyásoló fonon-módus változtatásával is módosítható. Ehhez adódik az a hatás, hogy az adott anyag paraméterei nanoszinten függetlenebb módon befolyásolhatók, mint nagyobb anyagmennyiségek esetén. Ezeket az előnyöket kiaknázva elkerülhetők egyes, nagyobb mennyiségű hidridekben

ma még érvényesülő korlátozó tényezők, lehetővé téve a hidrogén tárolását nagyobb tömegarányban is.

A nanostrukturált anyagok fontos előnye, hogy bennük olyan speciális mikroszerkezetek is kialakíthatóak, amelyek lehetővé teszik a tárolt hidrogén tömegszázalékban kifejezett mennyiségének növelését, nemkülönben a hidrogén abszorpcióhoz/kibocsátáshoz kapcsolódó kinetikai jellemzők szabályozását is. Előre meghatározott nanostrukturák kialakításával a jelenleg a hidrogén disszociatív tárolására használatos fémalapú és komplex hidridek hidrogéntárolási jellemzői is jelentős mértékben javíthatók. Ami viszont a hidrogén hatékony, nem disszociatív tárolását illeti, ezzel kapcsolatban a szénalapú nanostrukturák (köztük a nanocsövek és a nanokürtök) és más hasonló, szént nem tartalmazó anyagok kecsegtetnek jó eredményekkel. Ahhoz, hogy jobb hidrogéntárolási jellemzőkkel jellemezhető anyagokat lehessen létrehozni, mindkét fent említett tárolási mód esetében a hidrogén adszorpciójával és felszabadításával összefüggő folyamatok további atomi és molekuláris szintű elemzésére lenne szükség.

A 3. ábra a szénalapú nanocsövekben lekötött hidrogén maximális mennyiségeit mutatja súlyszázalékban. Folyamatos falú nanocsövekben az elméleti maximális érték 77 K-on,



3. ábra Szénalápú nanocsövekben reverzibilisen lekötött hidrogén mennyisége a minta felszínének függvényében (tele körökkel jelölve), beleértve két, nagyfelületű grafitmintán végzett mérést is. A 77 K-on mért hidrogén-adszorpcióra vonatkozó szakirodalmi adatok tele négyzetekkel szerepelnek. A szaggatott vonal a szubsztrátumra egy rétegben felvitt anyag által lekötött hidrogén számított mennyiségét mutatja

1315 m²/g fajlagos felület mellett 3,0 %(m/m). Nagyszámú kísérletben, különböző struktúrájú szénalápú nanocsőben 77 K-on túlnyomásos mikromérleggel, volumetrikus (tömegáram) gázfázisú méréssel, illetve szobahőmérsékleten végzett elektrokémiai galvanosztatikus méréssel megállapították, hogy minden vizsgált mintában lejátszódott a megfordítható hidrogén adszorpció/deszorpció. Az adszorbeált hidrogén mennyisége összefügg a minták fajlagos felületével.

A nanoméretekben hidrogén tárolására alkalmas anyagok a következő két általános kategóriába sorolhatók. Mindenekelőtt a hidrogént „atomok szintjén” tároló anyagok („disszociatív” anyagok), amelyekben a hidrogénmolekulának hidrogén atomokra való megfordíthatóan bomlására (disszociációjára), és az így keletkező hidrogénatomoknak a tárolóközeg szerkezetébe épülésére van szükség. A fent tárgyalt komplex hidridek is a disszociatív tárolásra alkalmas anyagokhoz tartoznak. A máso-

dik csoportba a hidrogént „molekuláris” formában tároló („nem disszociatív”), anyagok sorolhatók – ezekben a hidrogénmolekulákat gyenge felületi molekuláris hatóerők (pl. a van der Waals erő) kötik az anyag struktúrájához. Nanocsövek és nanokürtők, valamint különböző nanoméretű struktúrákba rendezett nem-szénalapú anyagok tartoznak ide, amelyeknél az anyag fizikai jellemzőit a méretek mellett a felület nagyságával és minőségével, valamint más tulajdonságain keresztül szabályozzák. Ahhoz, hogy a nem disszociatív, a hidrogént molekulák formájában tároló anyagokban a kiválasztott üzemi hőmérsékleten az adott felület és a hidrogénmolekulák között aktívabb kölcsönhatásra kerüljön sor, megfelelő eljárások kifejlesztésére van még szükség. A molekuláris kötések erőssége például alkalmas adalékanyagok hozzáadásával szabályozható.

Ügyelni kell arra, hogy odaillo paramétereket alkalmazzanak a nagy felületű nanoanyagok szerkezetének, felületének és a hidrogén tárolása/felszabadítása során tanúsított viselkedésének jellemzésére. A hatékony nanoanyagok strukturális jellemzőivel összefüggésbe hozható paraméterek megfelelő modellezéséhez ugyanis a felület és tulajdonságainak világos azonosítása szükséges. Az anyagok nanoszintű jellemzése a kutatók számára azért jelentős kihívás, mert e méretek skálán nem eléggé érzékeny a meglévő analitikai eszköztár. Ezért új, nagyobb

érzékenységű, de kellő szelektivitású mérőeszközök kifejlesztésére van szükség.

Az elmélet és a számítástechnika szerepe

A hidrogén és a tárolóanyagok közötti kölcsönhatások alapjainak megértéséhez az elméletre és a kísérleti fázisra egyaránt kiterjedő, a szinergiákat is számításba vevő megközelítés szükséges. Az elmélet és a számítástechnika ugyanis a kísérleti eredmények értelmezése mellett a kísérletek irányítására is felhasználható. Az utóbbi években a módszertanban (elmélet és algoritmusok), illetve a számítástechnikai kapacitás területén végbement fejlődés új lehetőségeket nyitott a hidrogén tárolásával összefüggő elméleti tanulmányok előtt is. Általában véve e rendszerek tanulmányozása során a következő négyféle módszer vehető igénybe:

1. az elektronszerkezetre és a kötésekre vonatkozó információkat szolgáltató kvantummechanikai megközelítés;
2. a hidrogént csapdába ejtő üres rácshelyekkel és szennyező anyagokkal kapcsolatban atomi szintű információkat szolgáltató kísérleti és félig kísérleti jellegű módszerek;
3. a mezo-szintű megközelítés, amely a rácshibák meghatározott eloszlása mellett ad tájékoztatást a hidrogén befogásának átlagos mértékéről;

4. a kontinuum-módszer, amely a valóságos anyagon áthaladó hidrogén-transzportra vonatkozóan szolgáltat információt.

A molekuláris dinamikával együtt ezekkel a módszerekkel előre jelezhetőek a termodinamikai tulajdonságok, és prognosztizálható a termikus jelenségek által keltett diffúziós és kémiai reakciós folyamatok időbeni lefolyása is. Közvetlen szimulációval és az atomi szintű erők becslésére alkalmas kvantummechanikai módszerekkel a folyamatok akár egy pikoszekundumos (10^{-12} s) időintervallumban is vizsgálhatók, ha viszont kísérleti és félig kísérleti potenciális energiafüggvényeket használnak, úgy az átfogható időköz már nanoszekundum (10^{-9} s) nagyságrendű lehet. Olyan közepes léptékű eljárásokkal, mint például a Monte Carlo kinetika, már ennél jóval hosszabb, másodperces nagyságrendű időközök is átfoghatók, míg kontinuum-módszerekkel a másodperctől akár óráig is terjedhet a kalkuláció. Miután a hidrogén viselkedését vizsgálva a fenti időközök mindegyikére szükség lehet, ez komoly kihívást jelent az elmélet és a számítási módszerek számára egyaránt – a különböző időskálák integrálására ugyanis még nincs általános szimulációs módszer. A hidrogén gyártásával, tárolásával és felhasználásával kapcsolatos problémák kezelésére a kutatóknak megfelelő módszereket kell találniuk az említett eljárások integrálására, méghozzá oly

módon, hogy megbízható fizikai és kémiai alapokon előre lehessen jelezni az egyes anyagok várható sajátosságait.

A számítástechnika segítséget nyújthat a hidrogén és az anyagfelület közötti kölcsönhatások megértéséhez és annak megállapításához, hogy miként lép kölcsönhatásba és diffundál a hidrogén a lépcsős élek mentén. A hidrogén tárolási mechanizmusának feltárásához ismereni kell a hidrogénatomok által kitölthető helyeket az adott anyag belsejében, diffúziójuk energetikai korlátait és a befogadó anyag elektronszerkezetére gyakorolt hatásukat, szintúgy kölcsönhatásaikat is a rácshibákkal (vakanciák, üregek, szennyezőanyagok, szemcsehatárok és diszlokációk), valamint a nyomás és a hőmérséklet által rájuk gyakorolt hatást. Az elmélet viszont arra segíthet fényt deríteni, hogy miként lehet ötvözéssel módosítani a könnyű fémhidrid komplexekben a hidrogén és a fématomok között kialakult ionos vagy kovalens kötéseket, de hasonló mondható el a katalizátorok szerepéről is a hidrogénkötések kialakulásában.

Következtetések

A tárolás kritikus szerepet játszik a hidrogén energetikai felhasználásában. A jelenleg elterjedt tárolási eljárások, mint a gáz állapotú,

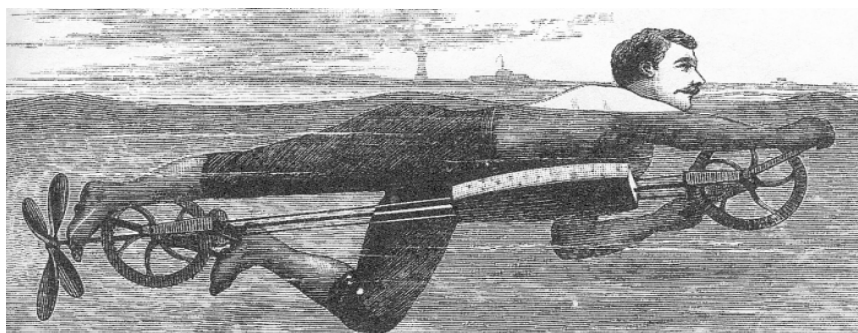
folyékony vagy egyszerű hidridekben megvalósított tárolás lehetőségei egyaránt messze vannak a járművek meghajtásához szükséges követelményektől. Ezen eljárások további fokozatos fejlesztése nem kecsegtet a szükséges mértékű javulással. A fizikai és kémiai folyamatok megismerése viszont elvezethet gyökeresen új, sokkal jobb megoldásokhoz is. A legnagyobb jövője a nanostruktúrájú anyagok felhasználásának van, mind szénalapú, mind egyéb anyagok felhasználásával kialakított nanoszerkezetek esetén. Jelentős elméleti és kísérleti kutatásokra van még szükség a nanoszinten teljesen eltérő folyamatok pontos meg-

ismerésére és megértésére. Ez elengedhetetlen a megbízhatóan működő, a gyakorlatban is alkalmazható tárolási eljárások kidolgozásához. A kezdeti eredmények mindenesetre biztatóak.

Összeállította: Dr. Balog Károly

Irodalom

- [1] Sandi, G.: Hydrogen storage and its limitations. = Interface – Electrochemical Society, 13. k. 3. sz. 2004. p. 40–44.
- [2] A hidrogéntárolási kutatások internetes portálja. = http://www.fuelcellstore.com/information/hydrogen_storage.html.



Az értékteremtő emberi gazdálkodás

HUMÁNERŐFORRÁS-MENEDZSMENT

† bér- és jövedelempolitika † foglalkoztatáspolitikai † munkaerőpiac, munkanélküliség † munkaerő-tervezés	† munkaidő, munkaidő-rendszerek † személyzetfejlesztés, oktatás † szociálpolitika és érdekvédelem † vállalati munkaszervezés
--	---

Havonta a legértékesebb tőkéről!

mgksz@info.omikk.bme.hu 06-1/45-75-322