

THE FORMATE/BICARBONATE SYSTEM AS A HYDROGEN CARRIER

CATALYTIC PERFORMANCE, THERMOPHYSICAL PROPERTIES, AND A STATE OF CHARGE ANALYSIS

VON VOLKAN TURAN

Der Aufbau einer sicheren und wirtschaftlichen Wasserstoffinfrastruktur stellt eine zentrale Herausforderung der Energiewende dar, insbesondere im Bereich der Speicherung und des Transports. Gegenstand dieser Arbeit ist die Untersuchung des Formiat/Bicarbonat-Systems als technischer Ansatz für die chemische Wasserstoffspeicherung, bei dem eine reversible Bindung und Freisetzung von Wasserstoff unter milden Bedingungen in breit verfügbaren und sicheren wässrigen Salzlösungen erfolgt.

Im ersten Teil werden hierfür katalytische Systeme auf Basis homogener Rutheniumkomplexe sowie heterogener Pd/C-Katalysatoren vorgestellt. Für beide Systeme konnte Aktivität bei der reversiblen (De-)Hydrierung unter Bewertung industriell erforderlicher Parameter nachgewiesen werden. Die hohe Selektivität, die Skalierbarkeit der chemischen Reaktion, die erhebliche Reduktion der Kosten und die Anwendung in einem Festbettreaktor verdeutlichen die industrielle Relevanz.

Der zweite Teil umfasst die Erhebung thermophysikalischer Daten zu wässrigen Lösungen von Kaliumformiat, Kaliumbicarbonat und deren Mischungen. Untersucht wurden Dichte, Schallgeschwindigkeit, Viskosität, Wärmekapazität, Brechungsindex und elektrische Leitfähigkeit in Abhängigkeit von Konzentration und Temperatur. Die Überführung der Messdaten in prädiktive mathematische Regressionsmodelle ermöglicht eine Prozessauslegung sowie die Entwicklung simulationsbasierter Modelle.

Darauf aufbauend wird eine Methodik vorgestellt, mit der über thermophysikalische Kenngrößen die Zusammensetzung von ternären Salzlösungen mit hoher industrieller Genauigkeit quantifiziert werden können, wodurch eine indirekte Bestimmung des Wasserstoff-Beladungszustands erfolgen kann. Hierdurch wird auf der einen Seite eine online Quantifizierung des Reaktionsfortschritts zur Überwachung technischer Reaktorsysteme und auf der anderen Seite durch die Kenntnis des Beladungszustands auch die Regelung ganzer Anlagen zur Wasserstoffspeicherung basierend auf dem Salzsystem ermöglicht.

Die Ergebnisse der Arbeit weisen das Formiat/Bicarbonat-System als möglichen Ansatz für den Einsatz in Wasserstoffinfrastrukturen aus und verbinden chemische Grundlagenforschung im Bereich der Katalyse mit industriell relevanten Anforderungen an Systemmodellierung und -regelbarkeit. Offene Fragestellungen ergeben sich insbesondere im Hinblick auf Katalysatorkosten, Langzeitstabilität und Systemintegration, die einer weiterführenden Untersuchung bedürfen.