



ESTUDIO Y CARACTERIZACIÓN DEL EFECTO DE COMPUESTOS CON TITANIO SOBRE EL SISTEMA HIDRURO Li-B-Mg-H CON ALTA CAPACIDAD DE ALMACENAMIENTO DE HIDRÓGENO

Hernán Martinelli^{(1)*}, Victoria Castro Riglos^(2,4) y Julián Puszkiel^(3,4)

⁽¹⁾Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires, Pabellón 1, Ciudad Universitaria, CABA, Argentina.

⁽²⁾División de Física de Metales, Centro Atómico Bariloche, Av. Bustillo 9500, Bariloche, Argentina.

⁽³⁾Departamento de Fisicoquímica de Materiales, Centro Atómico Bariloche, Av. Bustillo 9500, Bariloche, Argentina.

⁽⁴⁾CONICET – Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas, Argentina.

*Correo Electrónico (Hernán Martinelli): hmartinelli1@hotmail.com

RESUMEN

El hidrógeno es una de las fuentes de energía limpia más prometedoras. Sin embargo presenta inconvenientes tecnológicos no resueltos, como lograr almacenarlo de modo eficiente y seguro para aplicaciones fijas y móviles. Una posible solución provendría del empleo de sistemas de almacenamiento de hidrógeno basados en materiales formadores de hidruros. En este contexto la alta capacidad de almacenamiento de hidrógeno (11,4 % p/p) que posee el sistema hidruro reactivo $2\text{LiH} + \text{MgB}_2 / 2\text{LiBH}_4 + \text{MgH}_2$ lo convierte en un interesante candidato [1]. Sin embargo, su pobre comportamiento cinético restringe su empleo para distintas aplicaciones. El agregado de ciertos aditivos de materiales provenientes de metales de transición (TiCl_3 , TiF_3 , etc.) al sistema hidruro ha demostrado tener el potencial para disminuir los tiempos de reacción en los procesos dinámicos de liberación y absorción de H_2 . Sin embargo, el alto costo de estos aditivos no permite su posterior empleo a mayor escala. Trabajos previos han reportado que el agregado de 1% mol de TiO_2 al sistema deshidratado ($2\text{LiH} + \text{MgB}_2$) mejora significativamente la cinética de absorción y desorción de hidrógeno [2], aunque no se sabe con exactitud cuál es el mecanismo de acción del aditivo. Para poder dilucidar el mecanismo del TiO_2 sobre el sistema hidruros reactivo, en el presente trabajo se investiga el efecto de aditivos en base titanio (TiB_2 , TiO_2 , $\text{Li}_{0.5}\text{TiO}_2$) sobre la cinética de deshidratación del sistema hidratado ($2\text{LiBH}_4 + \text{MgH}_2$). Los resultados obtenidos muestran que la presencia de partículas nanométricas de fases titanato (Li_xTiO_2 , $x=0.5$ y 1) mejoran notablemente el proceso de deshidrogenación del $2\text{LiBH}_4 + \text{MgH}_2$, reduciendo el tiempo de liberación completa de hidrógeno desde 35 hasta < 2 horas. Mediante el empleo de técnicas avanzadas como la microscopía electrónica de transmisión y la espectroscopía Raman, se evidenció que dichos titanatos mejoran la cinética de deshidrogenación dado que evitan la formación del compuesto estable y amorfo $\text{Li}_2\text{B}_{12}\text{H}_{12}$.

ABSTRACT

One of the main constraints for the application of hydrogen as energy carrier is the lack of an efficient and safe hydrogen storage system. Hydrogen storage in solid state through hydride compounds formation is a potential alternative to address this problem [1]. The Li-RHC system ($2\text{LiH} + \text{MgB}_2 / 2\text{LiBH}_4 + \text{MgH}_2$) presents potential characteristics as hydrogen storage medium for practical purposes. It has high theoretical gravimetric capacity (11.4 wt. % H). However, due to kinetic constrains, this material takes long times for the hydrogenation-dehydrogenation process even at relative high temperature [2]. The addition of materials composed of transition metals (TiF_3 , TiCl_3 , etc.) has shown to have the potential to decrease the times for the

dynamic processes of H₂ absorption and release. Nonetheless, the high cost of these additives precludes their use at large scale. Previous works have reported that the addition of 1% mol of TiO₂ to the dehydrided system (2LiH+MgB₂) improves its kinetic properties, although its mechanism is not understood yet.

To shed light on the mechanism of TiO₂ on the reactive hydride composite, the effect of different titanium based compounds (TiB₂, TiO₂, Li_{0.5}TiO₂) on the dehydrogenation kinetic behavior of hydrided Li-RHC (2LiBH₄+MgH₂) are investigated in this work. It is found that nanometric particles of Li_xTiO₂, (x=0.5 and 1) noticeably improve the dehydrogenation process of the 2LiBH₄+MgH₂, reducing the complete H₂ release time from 35 hours to < 2 hours. The information gained by advanced techniques such as transmission electron microscopy and Raman spectroscopy help us to elucidate that the Li_xTiO₂ compounds improve the dehydrogenation kinetic behavior by avoiding the formation of stable and amorphous Li₂B₁₂H₁₂ compound.

REFERENCIAS

1. J.J. Vajo, S.L. Skeith and F Mertens, “Reversible Storage of Hydrogen in Destabilized LiBH₄”; *J. Phys. Chem. B*, Vol. 109 (2005), p. 3719-3722.
2. J. Puszkiel, V. Castro Riglos, J. Ramallo-López, M. Mizrahi, P. Arneodo Larochette, F. Gennari, “Efecto de la formación in-situ de nanopartículas con Ti sobre el 2LiH-MgB₂ para almacenamiento de hidrógeno”; *Anales SAM/CONAMET*, T22-ID229, 2015, p. 1-6.

TÓPICO DEL CONGRESO O SIMPOSIO: T22

PRESENTACIÓN (ORAL O PÓSTER): *O (oral)*