



EFECTO DEL MONÓXIDO DE CARBONO EN LAS PROPIEDADES DE ALMACENAMIENTO DE HIDRÓGENO DEL SISTEMA Li-Mg-N-H

Nadia S. Gamba^{(1)*}, Guillermina Amica^(1,2), Pierre Arneodo Larochette^(1,2)
y Fabiana C. Gennari^(1,2)

⁽¹⁾CONICET, Centro Atómico Bariloche (CNEA), Av. Bustillo 9500, Bariloche, Río Negro, Argentina.

⁽²⁾Instituto Balseiro, Universidad Nacional de Cuyo, Centro Atómico Bariloche (CNEA),
Av. Bustillo 9500, Bariloche, Río Negro, Argentina.

*Correo Electrónico (Nadia Gamba): gamba.nadia@gmail.com

RESUMEN

El material compuesto $Mg(NH_2)_2-LiH$ resulta uno de los materiales más prometedores para aplicaciones de almacenamiento de hidrógeno debido a su calor de reacción favorable ($\Delta H=40$ kJ/mol H_2) y su alta capacidad de almacenamiento reversible (5,6% p/p) [1]. Dependiendo del método de producción industrial empleado, el hidrógeno puede estar acompañado de ciertas impurezas como CO , CO_2 , O_2 , N_2 y CH_4 que imposibilitan su empleo en celdas de combustibles y otras aplicaciones. Una propuesta interesante resulta la purificación de corrientes ricas en H_2 a través de la reacción selectiva del hidrógeno con compuestos tipo hidruros o hidruros complejos, donde el H_2 almacenado de alta pureza puede ser transportado y/o separado de una manera segura, dada la naturaleza reversible de la reacción. Recientemente se mostró la posibilidad de emplear los sistemas $LiNH_2-LiH$ y $2LiNH_2-MgH_2$ para purificar mezclas H_2-CO_2 y H_2-CO , respectivamente [2,3].

En el presente trabajo se empleó una corriente rica en hidrógeno que contiene 1000 ppm de CO y se analizó el efecto de este contaminante en las propiedades almacenadoras de $Mg(NH_2)_2-2LiH$ con $LiBH_4$ como aditivo. Este material fue elegido por su buena estabilidad en la capacidad de almacenamiento con el ciclado. Los resultados muestran que hay interacción del sistema Li-Mg-N-H con el CO la cual disminuye la capacidad de almacenamiento de H_2 , en aproximadamente un 20 % luego de 20 ciclos de absorción-desorción. Sin embargo, la velocidad de deshidratación y la temperatura máxima a la que libera el H_2 , no parecen ser afectadas. La principal razón de la pérdida de capacidad puede asociarse a la formación de la cianamida de litio (Li_2CN_2), compuesto observado con las técnicas FTIR y XRD. Este producto surge de una reacción del CO con los grupos $[NH_2]^-$ o $[NH]^{2-}$, causando así la pérdida de estos grupos durante el ciclado.

ABSTRACT

The $Mg(NH_2)_2-LiH$ composite is one of the most promising materials for hydrogen storage applications due to its favorable reaction heat ($\Delta H=40$ kJ/mol H_2) and high reversible storage capacity (5.6 % wt) [1]. Depending on the industrial method to produce H_2 , it can be accompanied by certain impurities such as CO , CO_2 , O_2 , N_2 and CH_4 which restrict its use in fuel cells and other applications. An interesting proposal is the purification of H_2 rich flow through a selective reaction of hydrogen with hydride or complex hydrides compounds, where the stored high purity H_2 can be transported and/or separated safely, due to the reversible character of the reaction. Recently, the possibility of using $LiNH_2-LiH$ and $LiNH_2-MgH_2$ systems to purify H_2-CO_2 and H_2-CO mixtures respectively was demonstrated [2,3].

In the present work, a hydrogen-rich stream containing 1000 ppm CO was employed and the effect of this contaminants on the storage properties of $Mg(NH_2)_2-2LiH$ with $LiBH_4$ additive was analyzed. This material was chosen for its good storage capacity stability with cycling. The results indicate that there is an

interaction of the Li-Mg-N-H system with CO, which reduces the H₂ storage capacity in approximately 20 % after 20 absorption-desorption cycles. However, both the dehydrogenation rate and the maximum temperature at which H₂ is released, do not appear to be affected. The main reason of the capacity loss can be associated with the formation of lithium cyanamide (Li₂CN₂), compound observed with the XRD and FTIR techniques. This product appears from the reaction of CO with [NH₂]⁻ or [NH]²⁻ groups, causing the loss of these groups during cycling.

REFERENCIAS

1. H. Cao, Y. Zhang, J. Wang, Z. Xiong, G. Wu, P. Chen, “Materials design and modification on amide-based composites for hydrogen storage”, *Progress in Natural Science: Materials International*, Vol. 22:6 (2012) p. 550–560.
2. Y. H. Hu and E. Ruckenstein, “Steam-Reforming Product (H₂/CO₂ Mixture) Used as a Hydrogen Source for Hydrogen Storage in Li₃N”, *Industrial and Engineering Chemistry Research* Vol. 46 (2007), p. 5940-5942.
3. F. Sun, M. Yan, X. Liu, J. Ye, Z. Li, S. Wang, L. Jiang, “Effect of CO on hydrogen storage performance of 2LiNH₂ +MgH₂ system”, *International Journal of Hydrogen Energy*, Vol. 39 (2014) p. 9288-9292.

TÓPICO DEL CONGRESO O SIMPOSIO: *T14*

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