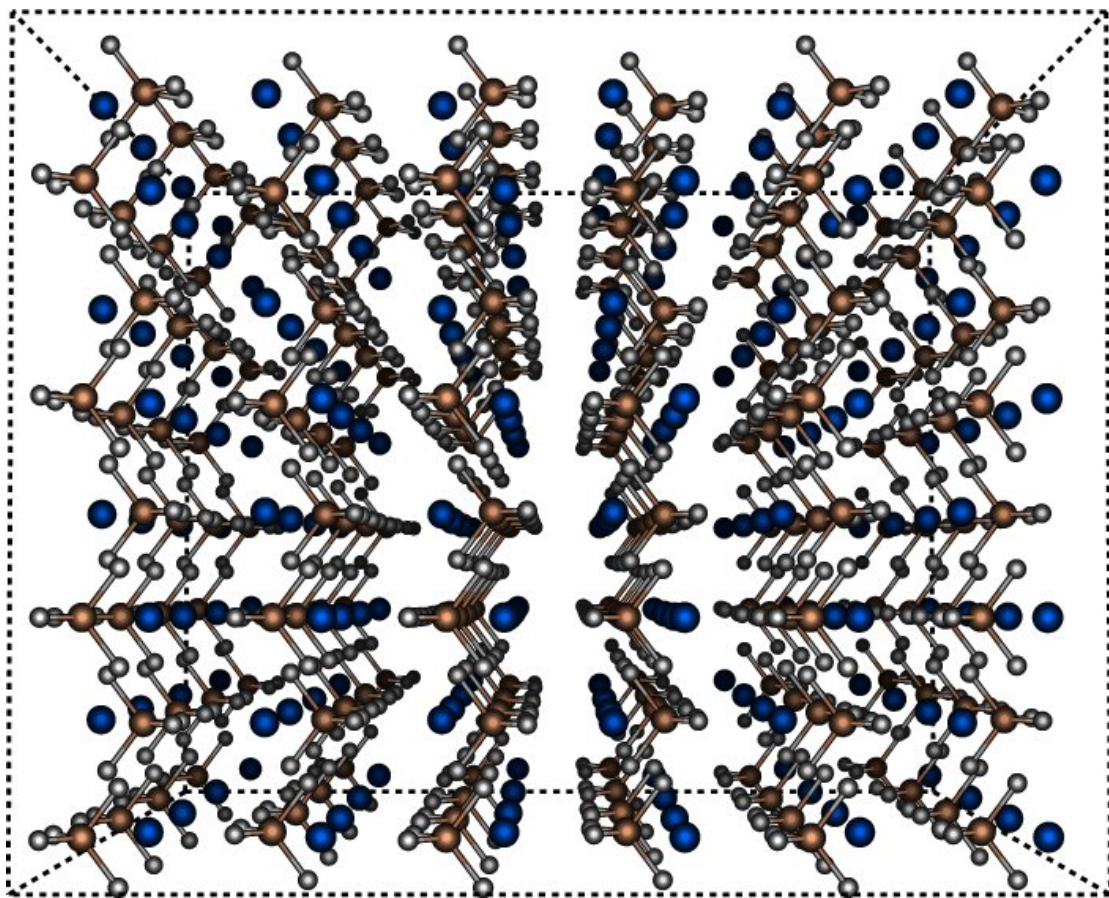


# Brintforskning i Danmark

– udfordringer og perspektiver



Redaktion:

Jens Kehlet Nørskov, DTU

Robert Feidenhans'l, RISØ

Maj 2004

## Skrivegruppe:

Birgitte Ahring, professor, BioCentrum-DTU

Irini Angelidaki, lektor, Miljø & Ressourcer DTU

Per Balslev, manager, business development, Danfoss A/S

Mads Bang, adjunkt, Aalborg Universitet

Flemming Besenbacher, professor, iNANO, Aarhus Universitet.

Niels Bjerrum, professor, Kemisk Institut, DTU

Ib Chorkendorff, professor, CAMP, Institut for Fysik, DTU (redaktør, brændselsceller)

Claus H. Christensen, professor, CAMP, Kemisk Institut, DTU

Bjerne Clausen, afdelingsleder, adjungeret professor, Haldor Topsøe A/S (redaktør, brintproduktion)

Robert Feidenhans'l, afdelingschef, Afd. for Materialeforskning, Risø

Jens Oluf Jensen, lektor, Kemisk Institut, DTU

Torben Jensen, lektor, Kemisk Institut, Aarhus Universitet

Christine McKenzie, lektor, Kemisk Institut, Syddansk Universitet

Mogens Mogensen, forskningsprofessor, Afd. for Materialeforskning, Risø

Mads Pagh Nielsen, adjunkt, Aalborg Universitet

Jens K. Nørskov, professor, CAMP, Institut for Fysik, DTU

Allan Schrøder Pedersen, programleder, Afd. for Materialeforskning, Risø (redaktør, lagring)

Li Qingfeng, forskningslektor, Institut for Kemi, DTU

Jens Ulstrup, professor, Kemisk Institut, DTU

Tejs Vegge, adjunkt, CAMP, Institut for Fysik, DTU

Steen Yde-Andersen, R&D Manager, IRD Fuel Cells A/S

**Forsidebillede:** *Lithium-borohydrid,  $\text{LiBH}_4$ , er et af de mest lovende brintlagringsmedier med en lagringkapacitet på 18.5 vægtprocent; her vist i grundtilstanden (Pnma) [Zbigniew Lodziana og Tejs Vegge, CAMP, DTU].*

# Indhold

Resume.....	4
1. Indledning.....	5
2. Brintproduktion.....	8
3. Brintlagring.....	17
4. Brændselsceller.....	26
5. Konklusioner og perspektiver.....	34
Appendix.....	35

## Resume

Denne hvidbog er et samlet forslag til en forskningsstrategi for Danmark inden for en brintbaseret energiforsyning. Både i USA og i Europa er der sat store initiativer i gang for at udvikle og implementere nye teknologier, der baserer sig på brint som energibærer og brændselsceller som midlet til at konvertere energien til elektricitet og varme. Det langsigtede perspektiv er en forureningsfri energiforsyning til el-produktion og til transportsektoren baseret på vedvarende energi. På kortere sigt er der en række områder, fra energiforsyninger til mobiltelefoner og bærbare computere til elforsyning og opvarmning af geografisk isolerede samfund, hvor en brintteknologi kan være et alternativ til den nuværende teknologi. Der er imidlertid en række teknologiske udfordringer, som skal overvindes for, at en brintteknologi kan implementeres. Det er grunden til den store forskningsmæssige satsning, der er på området de fleste steder i verden. Det er afgørende, at Danmark bidrager til denne udvikling, dels fordi det er af stor betydning for det danske samfund som helhed at få en miljømæssigt forsvarlig og sikker energiforsyning, dels fordi udviklingen af ny energiteknologi kan give dansk erhvervsliv en række nye højteknologiske produkter og markeder.

Hvidbogen er blevet til på basis af en workshop, der blev afholdt den 14. april 2004 med deltagelse fra størstedelen af de danske forskergrupper og industrivirksomheder inden for området. Det kan konkluderes, at danske forskergrupper er i front internationalt inden for flere nøgleteknologier, og at danske virksomheder allerede i dag er førende i verden inden for brintproduktion og veletablerede inden for en række andre teknologier. En række områder, hvor vi i Danmark har et forskningsmæssigt potentiale, og hvor der er mulighed for at omsætte det til nye nøgleteknologier i dansk industri, blev identificeret. Inden for produktion af brint er det tilfældet inden for nye, mere selektive processer på basis af fossile brændstoffer og ikke mindst inden for nye metoder til biologisk og (bio-) elektrokemisk brintproduktion. Brændselsceller til at omdanne brint eller brintholdige brændstoffer er omdrejningspunktet i hele brintteknologien. Behovet for en helt ny type af elektrodematerialer, eventuelt inspireret af biologiske analogier blev identificeret som helt afgørende for teknologiens videre udvikling. Også forskning inden for nye elektrolytter og metoder til integration af enkeltkomponenterne i brændselscellesystemer er af afgørende betydning. Med henblik på den måske største udfordring af dem alle, spørgsmålet om en sikker lagring af brint, blev en række nye spændende muligheder inden for komplekse hydridler, nano-kompositmaterialer og nye kemiske opbevaringsmetoder identificeret.

Alle de forskningsmæssige udfordringer, der er identificeret i hvidbogen, kræver betydelig nytænkning. Der er tale om at udvikle helt nye typer af materialer og processer, og det kræver en grundlæggende forståelse af problemstillingerne. Der er en række forskningsmæssige temaer, som går igen i alle delproblemerne. Et af dem er katalyse, både enzymatisk og uorganisk. Et andet er nanoteknologi, og et tredje er bioteknologi. Hele forskningsfeltet er dermed en kombination af nogle af de vigtigste moderne forskningsfelter. En implementering af en brintforskningsstrategi i Danmark skal således sikre en tværfaglig kombination af grundvidenskab og teknologiudvikling.

## Indledning

Størstedelen af verdens energiforsyning er baseret på fossile brændstoffer. Transportsektoren er således næsten udelukkende baseret på olie. Verdenssamfundets behov for energi er stigende, ikke mindst i de hastigt voksende økonomier i Asien. Selv om olie- og gasreserverne måske er tilstrækkelige 50 år endnu, kan adgangen til olieprodukter nemt indskrænkes inden da med prisstigninger til følge. Derfor skal det teknologiske grundlag for fremtidens energiforsyning udvikles nu. Herudover er der behov for, at den fremtidige energiforsyning baseres på energi produceret på en betydeligt mere bæredygtig måde, end det er tilfældet i dag. Brugen af fossile brændsler øger emissionen af CO<sub>2</sub> til atmosfæren, hvilket leder til global opvarmning via drivhuseffekten. Den tid, det tager for en forsvarlig økonomisk implementering af nye energiteknologier, er meget lang, især på grund af de store forsknings- og udviklingsmæssige udfordringer. Drastiske teknologiskift i energisektoren er ikke mulige uden store samfundsmæssige konsekvenser.

Et muligt alternativ til den oliebaseerede energiforsyning kan findes i en brintbaseret energiforsyning ('brintøkonomien' eller 'brintsamfundet'). Brint er ikke på samme måde som olie et råstof, der forekommer frit i naturen, men skal produceres fra en anden energikilde; man taler om brint som *energibærer*. Brintøkonomien består således af tre komponenter, der hver er af afgørende betydning: *produktion* af brint, *lagring* af brint indtil den skal bruges, og *konvertering* af energiindholdet i brint til elektricitet eller en anden nyttig energiform. Da brint kan anvendes til at lagre overskudsenergi fra f.eks. vindmøller, vil brintøkonomien på længere sigt kunne spille en stor rolle for et samfund, der er baseret på vedvarende energi. Der er både i USA og i Europa sat store initiativer i gang for at udvikle og implementere nye teknologier, der baserer sig på brint som energibærer og brændselsceller som middel til energikonvertering. Der er tre fundamentale bevæggrunde for at satse på et brintsamfund:

- 1) *Renere energi og mindre CO<sub>2</sub>-udslip*. En mere effektiv udnyttelse af de eksisterende energiressourcer samt en større udnyttelse af vedvarende energi vil give et renere miljø og mindske drivhuseffekten.
- 2) *Konkurrencedygtighed*. Indførelsen af nye energiteknologier giver nye industrielle muligheder og dermed vækst og nye arbejdspladser.
- 3) *Større diversitet*. En bredere vifte af energikilder vil øge andelen af vedvarende energi på det danske energimarked, og gøre det mere uafhængigt af olie.

USA har sat nogle meget ambitiøse teknologiske og økonomiske milepæle for den kommende tiårsperiode i den netop offentliggjorte 'Hydrogen Posture Plan'<sup>1</sup>. Disse mål kan ikke nås uden en massiv forsknings- og udviklingsindsats i nye, avancerede teknologier til at producere brint, til at lagre brint og til at konvertere den kemiske energi i brint (eller brintheholdige gasser og væsker) til elektricitet ved hjælp af brændselsceller. Men der er en række helt grundlæggende fysiske, kemiske og biologiske problemstillinger, der skal løses, før de nye teknologier kan indføres, og infrastrukturen kan udbygges. Det amerikanske energiministerium (DOE) har netop udgivet en rapport, der gennemgår disse problemstillinger og angiver

---

<sup>1</sup> [http://www.eere.energy.gov/hydrogenandfuelcells/posture\\_plan04.html](http://www.eere.energy.gov/hydrogenandfuelcells/posture_plan04.html)

forskningsområder, der bør prioriteres, såfremt disse barrierer skal overvindes<sup>2</sup>. I Europa har EU-kommissionen taget en række initiativer inden for brintøkonomien, der skal holde Europa forsknings- og udviklingsmæssigt i front på området for at sikre den europæiske konkurrencedygtighed<sup>3</sup>.

I Danmark er der særdeles gode muligheder for både på det forskningsmæssige og det erhvervmæssige område at være med helt i front. Danmark har en række forskningsgrupper ved universiteterne, ved Forskningscenter Risø og i dansk industri, der er helt fremme ved forsknings- og udviklingsfronten, i nogle tilfælde endda ledende og trendsættende. Det gælder f.eks. inden for den grundlæggende forskning i katalyse, i udvikling af nye og mere effektive brændselsceller og inden for biogas. Større projekter er således i gang sat inden for udvikling af SOFC-brændselsceller (Haldor Topsøe A/S og Risø) og PEM-brændselsceller (IRD Fuel Cells A/S og DTU) med henblik på at starte en egentlig produktion i Danmark. Energistyrelsen har sammen med Eltra og Elkraft System udarbejdet en strategi for den danske forsknings- og udviklingsindsats indenfor brændselscelleområdet<sup>4</sup>, der peger på perspektiverne inden for området og støttebehovene til fortsat udvikling, inden der kan etableres en egentlig kommerciel produktion.

Nærværende hvidbog diskuterer de specielle danske muligheder og perspektiver inden for brintøkonomien. Specielt ønsker vi at pege på områder, hvor øget grundforskning vil kunne løse de problemer, der indtil videre hindrer en udnyttelse af brint som energibærer. Vi ønsker at identificere danske styrkeområder, hvor vi har en mulighed for at kunne gøre en forskel. De danske forskergrupper inden for brint- og brændselscelleforskning har ønsket at understrege disse muligheder ved at udgive en hvidbog, som viser de grundlæggende forskningsmæssige muligheder set i et dansk perspektiv. Ønsket er at påpege, hvordan en øget kohærent, tværfaglig indsats på området vil kunne medvirke til afgørende teknologiske gennembrud, der kan bidrage væsentligt til den erhvervmæssige udvikling på længere sigt.

Hvidbogen er blevet til på et græsrodsinitiativ uden et formelt opdrag. Jens Nørskov, professor ved Institut for Fysik, DTU, og Robert Feidenhans'1, afdelingschef for Afdelingen for Materialeforskning på Risø, følte, at de danske muligheder og perspektiver var så givtige ved en hurtig indsats, at et brainstorm-møde blev iværksat. Alle de danske forskningsgrupper og virksomheder, der blev kontaktet, har bakket op om ideen. Mødet blev afholdt den 14. april 2004 på Kursuscenter Vilvorde. Selve mødeformen er ny, inspireret af lignende møder i USA. Hvidbogen er blevet til på et endagsmøde på baggrund af en række indlæg fra deltagerne. Første udkast til hvidbogen blev forfattet på stedet af deltagerne, der hver skrev ca. 1 sides tekst. Kun den efterfølgende redigering blev foretaget på et senere tidspunkt. Hvidbogen er inddelt i de overordnede temaer

- Brintproduktion (redaktør: Bjerne Clausen)
- Brintlagring (redaktør: Allan Schrøder Pedersen)
- Brændselsceller (redaktør: Ib Chorkendorff)

---

<sup>2</sup> [www.sc.doe.gov/bes/hydrogen.pdf](http://www.sc.doe.gov/bes/hydrogen.pdf)

<sup>3</sup> [http://europa.eu.int/comm/research/energy/pdf/hlg\\_vision\\_report\\_en.pdf](http://europa.eu.int/comm/research/energy/pdf/hlg_vision_report_en.pdf)

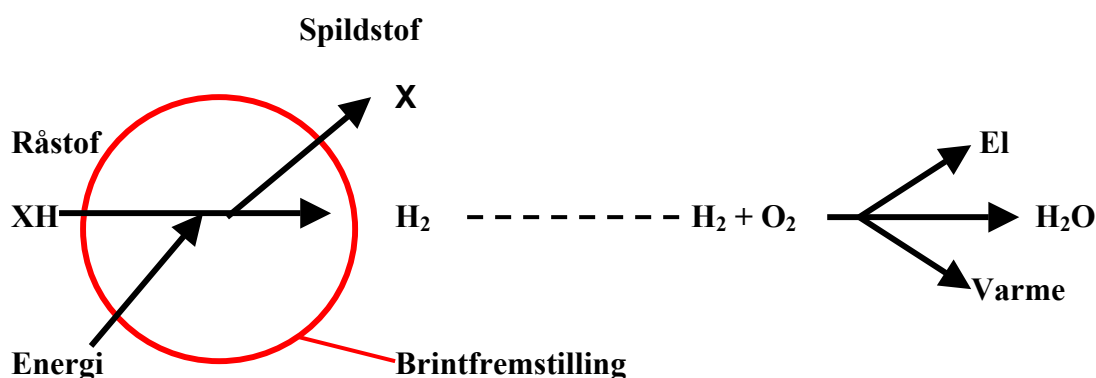
<sup>4</sup> kan downloades fra <http://www.ens.dk/sw3082.asp>

Efter en fælles orientering blev mødet opdelt i de tre ovennævnte grupper/arbejdsområder, som foretog skrivearbejdet.

Med hvidbogen ønsker vi at bidrage med et 'græsrodsindspil' til Energistyrelsens brintstrategi, til det strategiske forskningsråd, til REFU, regeringens energiforskningspolitiske udvalg og til andre initiativer, der sigter mod en øget satsning på højteknologisk udvikling og produktion i Danmark. Da alle de væsentlige danske forskningsgrupper indenfor området er repræsenteret i gruppen bag hvidbogen, er den at betragte som et indspil fra det samlede forskningsmiljø til en fremadrettet forskningsstrategi.

## 2. Brintproduktion

Brint forekommer ikke frit, men skal fremstilles ud fra et råstof (symbolsk kaldet XH), der indeholder grundstoffet brint (H). Fremstillingsprocessen kræver tilførsel af energi og afgiver et spildstof (X), som vist på figur 2.1.



**Figur 2.1** Oversigt over omsætningen af brinholdige råstoffer (XH) til brint (H<sub>2</sub>), der kan udnyttes til fremstilling af elektricitet og varme, og som har vand (H<sub>2</sub>O) som eneste spildprodukt.

Råstofferne kan f.eks. være naturgas, olie, kul, biomasse eller vand. Til omsætningen skal bruges energi, der kan komme fra råstoffet eller fra andre kilder såsom sol (incl. vind og bølgekraft) eller kernekraft. Fra fremstillingsprocessen efterlades et spildprodukt, der afhænger af hvilket råstof, der bliver brugt: Naturgas, olie, kul og biomasse giver CO<sub>2</sub> og svovl (og evt. yderligere spildprodukter), mens spildproduktet fra vand er ilt.

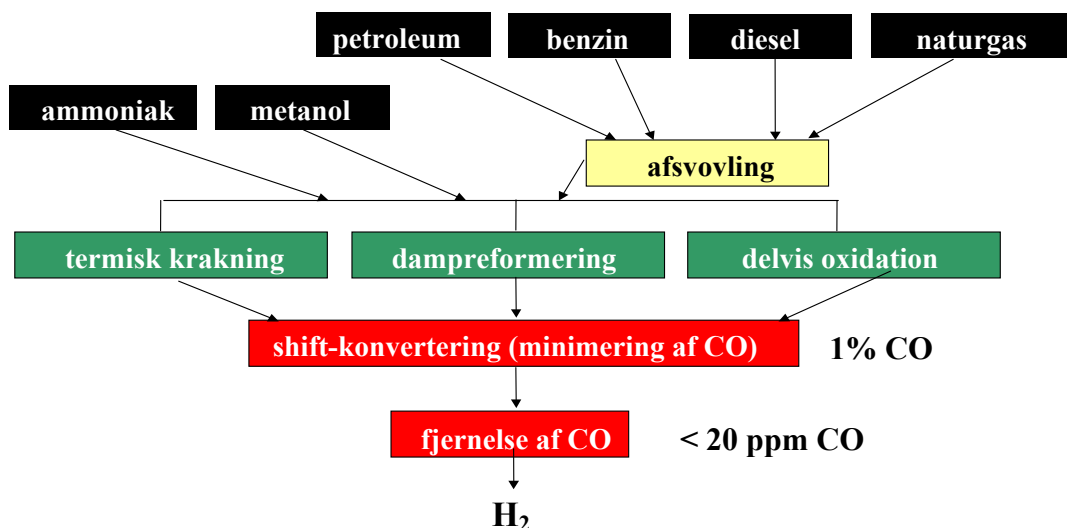
### Brintproduktion fra fossile brændsler

Typisk omdannes fossile brændsler til brint ved en katalytisk reformeringsproces, hvor et organisk brændsel omdannes til såkaldt syntesegas, som består af variable mængder af CO (kulilte), CO<sub>2</sub> (kuldioxid) and H<sub>2</sub>. Dette gøres ved at lade brændslet reagere over en fast katalysator med enten damp (dampreforming) eller ilt (i form af luft eller i ren form – reformering ved delvis oxidation) eller en blanding af begge (autotermisk reformering). Potentielle brændsler er naturgas, benzin, sprit (metanol og etanol) og dimetylæter.

Produktgassen fra en reformer indeholder – ud over brint og CO<sub>2</sub> – store mængder CO, som ved den såkaldte water-gas-shift-reaktion (WGS-reaktion) omdannes til CO<sub>2</sub> og brint. Denne proces bidrager således til yderligere brintproduktion. Skal brinten anvendes i en lavtemperaturbrændselscelle (f.eks. en PEM-brændselscelle), kræves et meget lille indhold af CO (< 20 ppm), hvilket stiller meget store krav til effektiviteten (selektiviteten) af WGS-katalysatoren. Alternativt kan gassen oprenses enten ved at separere brinten gennem en brintselektiv membran eller katalytisk ved en selektiv oxidation af CO til CO<sub>2</sub>.



Produktionen af brint fra fossilt brændsel kan skematisk opstilles som følger:



**Figur 2.2** Delprocesser i brintproduktion fra fossile brændstoffer.

### Storskala-anlæg

I dag fremstilles brint til industrielle formål stort set udelukkende fra naturgas i store anlæg med en meget høj virkningsgrad. Haldor Topsøe A/S har i årtier haft en førerposition i verden inden for både udvikling og produktion af katalysatorer til denne proces samt levering af procesteknologi.

Selvom reformeringsteknologien må betragtes som relativt moden, sker der løbende forbedringer af både katalysatorerne og teknologien drevet af nye krav til procesbetingelserne og anlægsstørrelse. F.eks. er det ønskeligt at sænke damptilsætningen i processen, hvilket betyder, at der er behov for udvikling af nye, mere robuste katalysatorer i forhold til de eksisterende.

Flere grupper på de danske universiteter har en betydelig forskningsindsats inden for brintproduktion fra fossile brændstoffer. Der arbejdes bl.a. eksperimentelt og teoretisk for at opnå en øget forståelse af mekanismen af dampreformerings-katalysatorer samt af de krav, der stilles ved nedskalering af brintproduktionsanlæggene.

### Stationære anlæg i mindre skala

Brintproduktion fra fossile brændsler i mindre skala vil sædvanligvis skulle indgå i mindre decentrale stationære kraftvarmeanlæg. Anvendelserne er typisk husstandskraftvarmeværker, nødstrøms- eller generatoranlæg.

Der stilles væsentligt større krav til driftsdynamikken for sådanne mindre anlæg, idet de oftere vil skulle operere i dellast end de større brintproduktionsenheder. Ligeledes er anlæggenes opstartstid afgørende. Dette betyder, at fundamentalt anderledes

reformerings-teknologier skal tages i brug. Det er således meget vigtigt at finde frem til optimale drifts- og reguleringsstrategier for sådanne anlæg. Forskellige typer af brintlagre kan indgå i anlæggene og tjene som buffer for at udligne driftsvariationerne, men der er stadig et stort behov for forskning i, hvordan dette gøres optimalt. I dag er der kun få erfaringer med driftsdynamikken af sådanne anlæg, og det er nødvendigt med udvikling af nye katalysatormaterialer samt forøget viden om, hvordan anlæggene fysisk skal opbygges.

### **Mikroskala-anlæg**

Brintproduktion i mikroskala er rettet mod anvendelse i transportsektoren og til bærbare apparater. Det kan være fordelagtigt at producere brinten efterhånden som den skal bruges, i stedet for at medbringe den lagret. Mikroskala-anlæg kan omfatte reformeringsenheder (f.eks. til omdannelse af methanol til brint) til elektroniske apparater og transportable generatorer. Det er også muligt, at brændselsceller vil medbringe flydende brændstof, f.eks. benzin, der i bilerne kan omdannes til brint; til en sådan anvendelse er energieffektiviteten ikke afgørende, men derimod kravene om lav temperatur, lille størrelse, høj tolerance overfor variabel last, høj pålidelighed og meget ren (CO-fri) brint. Dette stiller udfordringer til forskning og udvikling af nye typer katalysatorer og processkemaer. Endvidere skal der udvikles nye apparater og andet hjælpeudstyr, f.eks. ventiler og pumper; her har Danmark et godt udgangspunkt for et industrielt vækstområde gennem virksomheder som Danfoss og Grundfos.

Arbejdsgruppen vurderer, at de fossile brændstoffer i adskillige år fremover vil vedblive med at være den vigtigste kilde til brint, især hvis problematikken omkring CO<sub>2</sub>-udslippet løses igennem f.eks. sekvestring (bortskaffelse). Så længe fossile brændstoffer er relativt billige – selv med den forøgede omkostning fra en CO<sub>2</sub>-sekvestring – vil en brintproduktion baseret på vedvarende energikilder kræve udvikling af væsentligt forbedrede teknologier for at blive konkurrencedygtig. Fortsat sikker, vedvarende og billig brintproduktion fra fossile brændstoffer kræver videnskabelige og teknologiske gennembrud inden for katalyse og separation. Hvis produktionen skal ske uden udledning af CO<sub>2</sub> til atmosfæren, kræves en større forståelse af de processer, der er involveret i CO<sub>2</sub>-bortskaffelse ('sekvestring') og -udslip. Katalyseforskningen kan drage nytte af de seneste landvindinger inden for rationelt design (teoretisk såvel som eksperimentelt) af katalysatorer på nanoskala, nye karakteriseringsmetoder, som tillader at undersøge de aktive pladser ('sites') i katalysatorernes atomare struktur direkte, modellering af komplekse kemiske systemer og de såkaldte high-throughput syntese- og evalueringsmetoder.

### **Prioriteringsområder:**

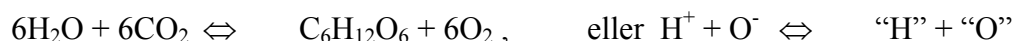
1. Udvikling af dedikeret reformeringsteknologi og nye katalysatormaterialer
2. Udvikling af effektive styrings- og reguleringsmetoder af brintproduktionssystemet ved dynamisk modellering af systemerne
3. Forskning i og udvikling af styrings- og reguleringskomponenter, herunder komponenter til måling og regulering af driftsparametre som massestrøm, tryk, temperatur m.v.
4. Opbygning af demonstrationsanlæg, så der kan opnås praktiske erfaringer med teknologien og til dokumentation af teoretiske modeller.

## Brintproduktion ved biologiske metoder

Ved biologiske brintproduktion udnyttes processer, der kendes fra biologiske systemer. De kan opdeles i bioelektrokemiske processer, der bygger på fotosyntese og respiration, og biomassebaserede metoder, hvor mikroorganismer omsætter organisk materiale til brint i en fermenteringsproces.

### Bioelektrokemiske processer

Bioelektrokemisk brintproduktion og bioelektrokemiske brændselsceller hviler på principper som i naturens egne biologiske kredsløb, skematisk repræsenteret ved den kemiske reaktion:



I fotosyntese, hvor reaktionen forløber fra venstre mod højre, omdanner planter lysenergi til kemisk energi i form af biologiske molekyler som kulhydrater. Kulhydraterne 'forbrændes' i respirationen, hvor reaktionen forløber fra højre mod venstre, under udvikling af energi til de biologiske organismers brug. Det er de samme principper, der indgår i elektrokemisk brintproduktion og -forbrug. Fotosynteseprocessen svarer til elektrolyse, hvor energi tilføres for elektrolytisk at omdanne vand eller organiske molekyler til brint. Respirationen svarer til brændselscellen, hvor brint på fri eller bunden form forbruges under udvikling af energi til nyttig brug. Den bioelektrokemiske brændselscelle vil blive behandlet i afsnit 4 om brændselsceller.

I naturen effektueres fotosyntese og respiration i meget komplicerede processer formidlet af store molekyler som proteiner og enzymer, der sikrer, at hvert trin forløber optimalt. Uden det biologiske system ville processerne være alt for langsomme og aldrig forløbe af sig selv. I bioelektrokemien udnyttes denne effektivitet ved at kombinere enzymer med et elektrokemisk system. Enzymerne kan anbringes på overfladen af en elektrode og bringes til at udveksle elektrisk strøm (elektroner). Analogt med fotosyntese og respiration repræsenterer strømmen også energiudveksling, der sikrer, at processer som brintudvikling og -forbrug kan foregå under langt mindre energitab end uden biologiske katalysatorer.

Det er en nyere erkendelse, at enzymer overhovedet kan udvise elektrokemi. Årsagen er, at enzymer er skrøbelige uden for deres naturlige omgivelser, ikke mindst i de elektriske felter ved den elektrokemiske overflade. Bioelektrokemien har imidlertid udviklet sig som sofistikeret tværvidevidenskab med stærke islæt af kemi, elektrokemi, overfladefysik m.m., herunder nanoteknologi. Hertil kommer hele udviklingen af molekylærbiologi, der muliggør at 'fabrikere' enzymer og at ændre på deres struktur for at optimere deres funktion i ikke-naturlige omgivelser.

### Biomassebaserede processer

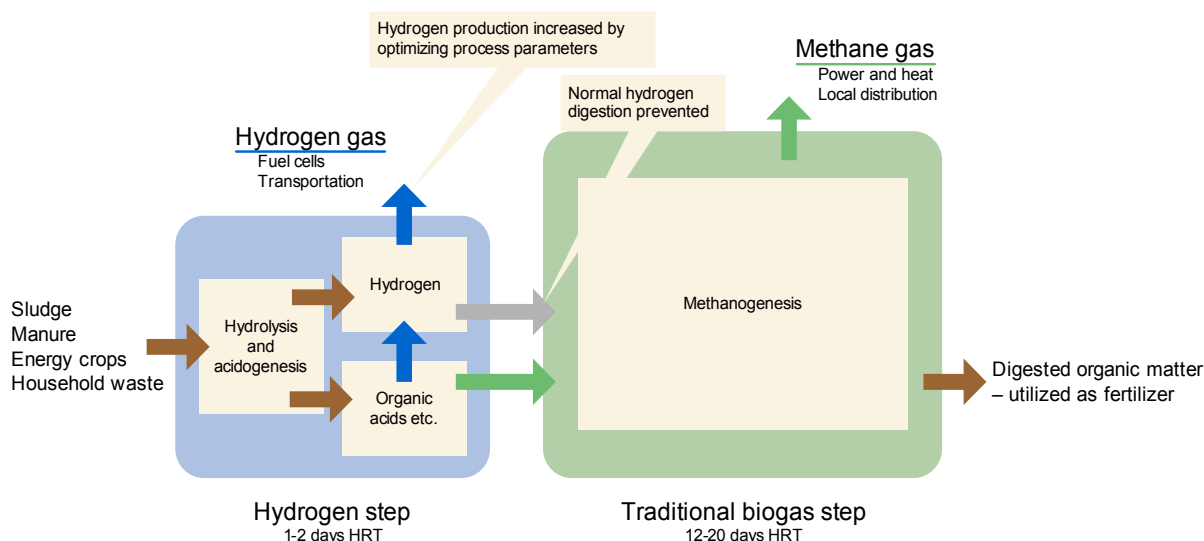
Brint kan produceres ud fra affald og biomasse, herunder energiafgrøder, som er dyrket med henblik på energiproduktion. Der er to biologiske metoder, hvorved brint kan produceres vha. mikroorganismer:

- *lysfermentering*, som er en fotosyntetisk produktion, hvor mikroorganismer har brug for lys for at omsætte organisk materiale til  $\text{H}_2$  og  $\text{CO}_2$ . Lysfermentering

kræver store arealer for at sikre tilstrækkelig belysning af materialet, og der produceres kun små mængder brint. Processen menes derfor ikke umiddelbart at have kommerciel værdi.

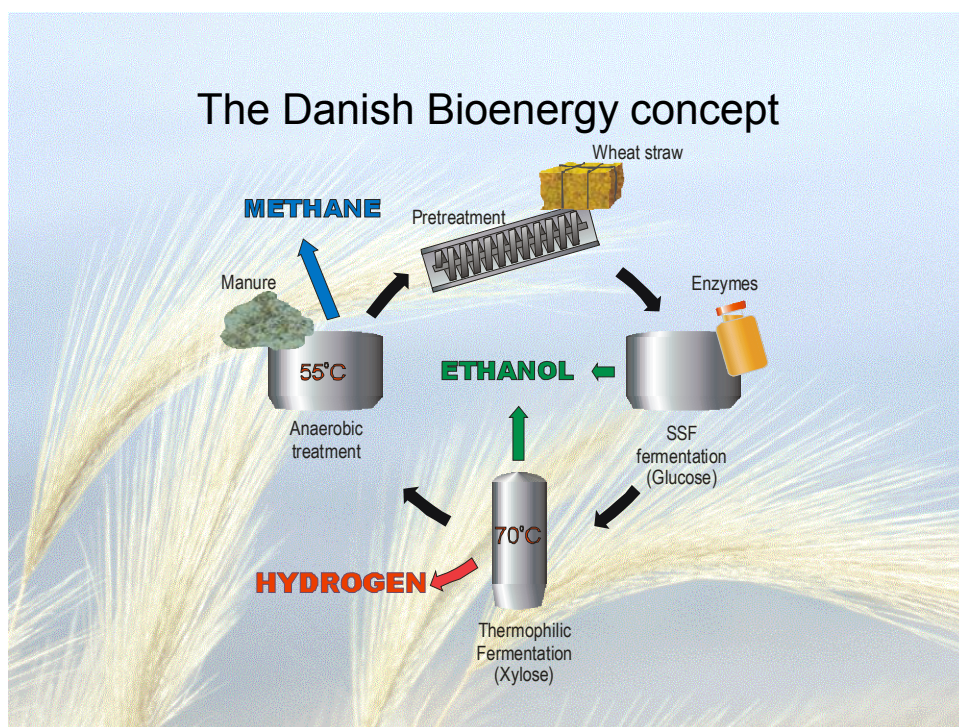
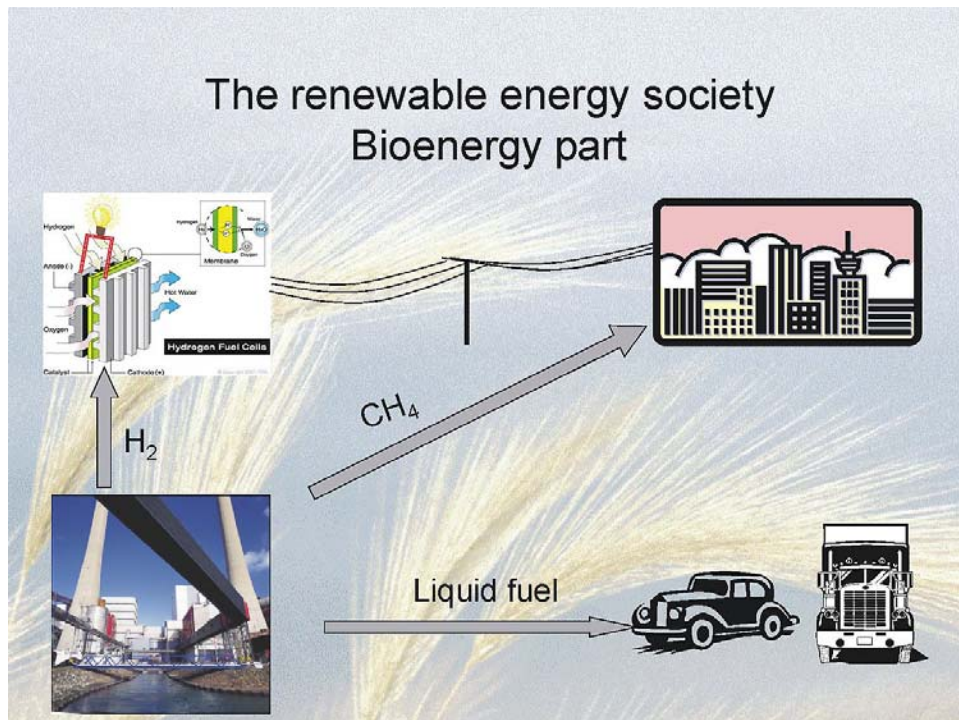
- *mørkefermentering*, hvor brint produceres af mikroorganismer gennem fermentering under iltfrie forhold. Produktion foretages af mikroorganismer, som fermenterer hovedsagelig kulhydrat til brint samt andre produkter såsom lavere fede syrer eller alkoholer.

Hvis fermenteringen foretages af en blandingskultur, vil brintudbyttet ofte være lavere, end hvis processen foretages af en renkultur, som er optimeret mht. udskillelse af brint. Ved hjælp af såkaldt "metabolic engineering" er det muligt at konstruere mikroorganismer, som hovedsageligt producerer brint. Brintudbyttet vil være afhængig af pH og temperatur, og termodynamikken for processen vil forbedres ved høje temperaturer og et lavt pH. Ved anvendelse af biomasse eller affald vil en del af råvaren være tilbage efter brintfermenteringen; det vil derfor være optimalt at producere andre biobrændstoffer såsom etanol og/eller metan samtidig. En høj omsætningsgrad vil samtidig forbedre muligheden for at genbruge procesvand i bioprocessen. Eventuelt kunne der også produceres kemikalier, som har en højere pris på verdensmarkedet, og som derved kan forbedre økonomien af hele bioprocessen.



**Figur 2.3** Skematisk oversigt over to-trins processen, hvor biomasse først omdannes til brint hvorefter resten af energien udvindes som biogas.

Biobrintprocessen kan altså ses som et fortrin til et sædvanligt biogasanlæg, hvor en vis andel af affaldet i det indledende trin kan omdannes til en nyttig energiform med høj værdi (f.eks. til transportformål), medens resten af råvarens energipotential kan danne grundlag for en biogasproduktion for lokalt brug i f.eks. kraftvarmeværker.



**Figur 2.4** Det danske koncept for bioenergi, der tager udgangspunkt i en storstilet produktion af forskellige biobrændsler.

Der er behov for en fortsat fundamental forskningsindsats, hvis biologisk brintproduktion skal blive en teknologisk og økonomisk realitet.

### **Prioriteringsområder:**

1. Udvikling af energiafgrøder med den rigtige sammensætning mht. biologisk energiproduktion, herunder energiafgrøder med et højt indhold af kulhydrat, energiafgrøder med et lavt indhold af lignin samt energiafgrøder, som producerer enzymer, der kan nedbryde lignocellulose.
2. Udvikling af optimerede metoder til forbehandling af biomasse. Specielt bør der sættes på udvikling af metoder til åbning af lignocellulose: Dels termisk-kemiske processer med lave driftsomkostninger, dels enzymer med høj aktivitet og lav pris.
3. Udvikling af optimerede mikroorganismer med høj produktion af brint og andre former for biobrændsler. Optimalt bør disse mikroorganismer være ekstremt termofile. Der bør endvidere arbejdes med frembringelse af optimerede mikroorganismer med høj væksthastighed, som producerer enzymer, der kan anvendes til at forbedre brint- eller brint/etanol-produktionen i forbehandlet biomasse.
4. Afdækning af nicheprodukter, f.eks. kemikalier og farmaceutiske produkter, som kunne produceres samtidig med produktion af brint og andre biobrændstoffer.
5. Udvikling af koncepter, som baserer sig på en stor genanvendelse af procesvand og næringsstoffer i processen.
6. Udvikling af brændselsceller til anvendelse af biobrændsler, der er fremstillet ved bioprocesser.

Andre vigtige forskningsmål er at:

- identificere vigtige parametre, der påvirker omsætningsvejene for anaerob omsætning af organisk materiale, for derigennem at optimere brintproduktionen.
- etablere en kinetisk model, der beskriver biobrintfermentering.
- undersøge processer, hvor mørke- og lysfermentering kombineres i en totrinsproces.
- udvikle membranteknologi for *in-situ*-ekstraktion af brint.
- udvikle en proceskonfiguration for en økonomisk optimal biobrintproduktion.
- demonstrere biobrintproduktion i pilot/storskala. Når laboratoriebaseret forskning viser noget lovende, vil det vil være meget gavnligt at prøve det i demonstrationsskala. De danske kraftværker har stor erfaring i indsamling og processering af store biomasse-mængder, og denne erfaring vil være god at bygge på ved en opskalering.

### **Kemisk brintproduktion**

Produktion af brint ved kemiske metoder kan dels ske ved traditionel elektrolyse, hvor man vha. en elektrisk spænding spalter vand i ilt og brint, dels ved processer, der efterligner de biologiske processer beskrevet ovenfor.

### **Biomimetisk brintproduktion**

Ideer til design af nye systemer (katalysatorer til O<sub>2</sub>- og H<sub>2</sub>-produktion og til reduktion af O<sub>2</sub> og H<sup>+</sup>) kan inspireres af de grundlæggende biologiske processer; sådanne systemer kaldes 'biomimetiske'. Naturen har udviklet systemer til produktion af strøm, brint og andre energibærere (f.eks. ATP og NADH), hvor de essentielle forbindelser er metal-organiske. Metalatomerne er fangede og isolerede i proteinstrukturer, som fordeler sig på en specifik måde i biologiske membraner. Metalatomernes kemiske og fysiske egenskaber kan på denne måde være tilpasset til

at indgå som katalysatorer i de kemiske processer, der fører til fremstillingen af de energibærende produkter som brint, ATP og NADH. Syntetisk fremstillede molekyllære og supramolekyllære metal-organiske forbindelser har et stort potentiale inden for brintproduktion og -opbevaring. I dag er der ingen brintteknologi baseret på sådanne forbindelser. En stærk grundforskningsindsats indenfor dette område kan sandsynligvis give et gennembrud og åbne op for helt nye teknologiske muligheder. Med den eksisterende ekspertise indenfor bio-uorganiske og syntetiske uorganisk kemi kan Danmark blive førende på området.

I fotosyntesen kan lysindsamlingen f.eks. ske ved hjælp af Mg-klorofyl. Ladningsseparation og potentialgradienter opretholdes af elektronoverførselsproteiner som plastocyanin(Cu), azurin(Cu) og ferredoxin(Fe). På denne måde kan et biologisk batteri fremstilles. Kilden til elektronerne kommer fra vandoxidation ( $2\text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{O}_2 + 4\text{H}^+ + 4\text{e}^-$ ), dvs. vand er et brændsel i processen. Vandoxidering sker ved hjælp en  $\text{Mn}_4\text{Ca}$ -klynge i et såkaldt *Oxygen Evolving Center* (OEC). I nogle mikroorganismer kan hydrogenase-enzymet katalysere enten brintoxidation eller den modsatte proces, protonreduktion til brint ( $\text{H}_2 \rightleftharpoons 2\text{H}^+ + 2\text{e}^-$ ). Visse typer grønne alger er oven i købet i stand til kombinere fotosyntese med produktion af brint (biofotolyse). Disse biologiske systemer kan fungere som inspirationskilde til rent syntetiske systemer med forbedrede egenskaber som f.eks. holdbarhed og lavere produktionsomkostninger.

Kunstig fotosyntese, hvor vand spaltes til  $\text{H}_2$  og  $\text{O}_2$  ved brug af sollys, er det ultimative mål. I biologiske systemer sker dette i protein- og membranstrukturer, hvis formål det er at opretholde den nødvendige topologi og orden for, at elektron- og protonoverførslerne er mulige. For at udvikle et langtidsholdbart system baseret på tilsvarende syntetiske komponenter er udfordringen at samle delene på en sådan måde, at en sådan supramolekyllær maskine kan fungere efter hensigten.

### **Elektrolyse**

Effektiviteten af eksisterende elektrolyseanlæg – typisk baserede på alkaliske elektrolyseceller – er for lav til en økonomisk forsvarlig produktion af brint. Grunden til dette er det overpotential, der er nødvendigt for en gasudvikling fra elektroderne. Problemet er størst for iltudviklingen pga. de kinetiske barrierer for reaktionen, der involverer fire elektroner. Det er nødvendigt at udvikle nye typer katalysatorer, der kan sænke disse overpotentialer. Den mest effektive måde er at hæve arbejdstemperaturen af elektrolysatoren. En elektrolysatoren fungerer populært sagt som en omvendt brændselscelle, og skal arbejdstemperaturen hæves, er det naturligt at tænke på de keramisk baserede brændselsceller (SOFC); sådanne elektrolyseceller kaldes SOEC (Solid Oxide Electrolysis Cell). Danmark har stor ekspertise i SOFC i Haldor Topsøe/Risø samarbejdet. Men i lighed med brændselsceller er pris og levetid af sådanne anlæg afgørende for, om teknologien kan slå igennem på markedsvilkår. Især er det vigtigt at forstå og belyse de fundamentale nedbrydnings- og degraderingsmekanismer i især elektroderne i en elektrolysatoren – de samme problemstillinger, som gør sig gældende på brændselscelleområdet. Desuden skal den indre modstand i cellerne formindskes for at gøre processen i cellerne mere effektive. Disse problemstillinger er meget lig problemstillingerne inden for SOFC, og derfor er udviklingen af disse to områder meget tæt beslægtede.

### **Lyskonvertering**

I fotosyntetiske organismer samles sollyset i klorofyl og andre pigmenter. På lignende måde kan syntetiske forbindelser absorbere lys og derved blive bragt i exciterede tilstande, som derefter kan oxidere andre molekyler. Målet er at oxidere vand for at frigive elektroner, ligesom i fotosyntesen. Fotovoltaiske emner baseret på halvledermaterialer, f.eks.  $\text{TiO}_2$ , har vist sig at kunne konvertere sollys direkte til elektrisk strøm. Lysabsorptionsegenskaberne er blevet signifikant forbedrede ved at syntetisere halvlederelektroder med metal-organiske Ru-pigmenter.

### **Prioriteringsområder:**

1. Udvikling af nye elektrodematerialer til elektrolyse, men væsentligt lavere overpotentialer.
2. Studier af nye fotokatalytiske processer, der kan bruge sollys til direkte at splitte vand til brint og ilt. Her er biologisk inspirerede metoder meget vigtige.

### **Termisk-kemisk produktion af brint**

Når kul og biomasse udsættes for høje temperaturer og tryk, sker der en antænding og forgasning af brændslet. Herved dannes en gas, som består af en blanding af  $\text{CO}_2$ ,  $\text{CO}$  og brint. Ved processen dannes endvidere en række tjæreforbindelser, som skal fjernes, før gassen kan anvendes. Fordele ved de termisk-kemiske processer til omdannelse af biomasse er, at de ikke er ligeså følsomme over for ændringer i biomassesammensætningen, som bioprocesserne vil være. En ulempe vil være de store mængder vaskevand, som produceres ved rensning af gassen. Våde biomassetyper, såsom affald, er endvidere ikke egnede som råvarer for en forgasningsproces.



### 3. Brintlagring

Brint har flere meget attraktive egenskaber som energibærer, herunder et højt energiindhold per masseenhed, 120 MJ/kg, hvor benzin har 44 MJ/kg. Desuden er udnyttelse af brintenergien miljøneutral (under forudsætning af miljøneutral produktion), idet restproduktet ved forbrænding er vand.

Brint er imidlertid en gas ved stuetemperatur og har meget lavt koge- og smeltepunkt. Således skal brint nedkøles til  $-252\text{ °C}$  for at bringes på væskeform. Det er derfor vanskeligt at opbevare og lagre brint i en kompakt form, og denne egenskab ved brint er måske den alvorligste hindring på vejen mod et brintsamfund. Problemet er særligt stort for transportsektoren, hvor såvel vægt som volumen af 'brændstoftanken' har stor anvendelsesmæssig betydning.

#### Krav til et brintlager

Til praktiske anvendelser må man stille følgende krav til et brintlager:

- Lav pris
- Høj energitæthed, både på vægt- og volumenbasis
- Hurtig fyldning og tømning (hensigtsmæssig kinetik)
- Lav driftstemperatur og -tryk samt reaktionsvarme (hensigtsmæssig termodynamik)
- Stabilitet ved mange gentagne fyldninger og tømninger
- Høj sikkerhed ved normal brug
- Lav risiko i uheldssituationer

Der findes i dag ikke en teknik til lagring af brint, som tilfredsstiller alle de ønskede krav. Navnlig er energitætheden (for hele lagersystemet) på såvel vægt- som volumenbasis i alle tilfælde væsentlig lavere end for benzin. Det amerikanske energiministerium (DOE) har opstillet mål for hvilke energitætheder, der må tilstræbes for et brintlager, før brint er en realistisk og økonomisk konkurrencedygtig mulighed som brændstof i transportsektoren, se tabel 1.<sup>5</sup> Der tales her om brintindhold på omkring 6 vægt pct. inden for en kortere årrække (og 9 vægt pct. på længere sigt) for hele systemet, dvs. inklusiv beholder, ventiler og alt nødvendigt hjælpeudstyr. Det kan kun opnås ved betydelige videnskabelige og teknologiske gennembrud.

Disse mål er defineret ud fra behovet i transportsektoren, men ideen om anvendelse af brint som energibærer rækker meget længere; i andre (f.eks. stationære) anvendelser spiller vægt og volumen en mindre rolle. I strategien for implementering af brændselsceller i Danmark sigtes der på små kraftvarmeenheder drevet af naturgas. Dette område kunne være et naturligt sted også at introducere brintlagring som et CO<sub>2</sub>-neutralt alternativ til naturgas. Brintlagring kan også spille en rolle i forbindelse med oplagring af energi fra vedvarende energikilder, f.eks. sol-, vind- eller vandkraft,

---

<sup>5</sup> "Basic Research Needs for the Hydrogen Economy", Office of Science, U.S. Department of Energy, May 13-15, 2003.

hvis energiproduktion varierer betydeligt i tid, idet energien kan lagres i form af brint fremstillet ved elektrolyse, som nævnt i det foregående kapitel.

**Tabel 3.1.** Det amerikanske energiministeriums målsætning for brintopbevaring i forbindelse med det såkaldte FreedomCAR-projekt.

Målsætning	2005	2010	2015
Masse-energitæthed (MJ/kg)	5,4	7,2	10,8
Brintindhold (vægt pct.)	4,5	6,0	9,0
Volumenenergitæthed (MJ/L)	4,3	5,4	9,72
Volumenenergitæthed (g H <sub>2</sub> /L) <sup>a</sup>	36	45	81
Pris (\$/kg)	9	6	3
Anvendelsestemperatur (min/max/°C)	-20/50	-20/50	-20/50
Antal anvendelser <sup>b</sup>	500	1000	1500
Brintflowhastighed (g/s)	3	4	5
Brinttryk ved afgivelse (bar)	2,5	2,5	2,5
Responstid (s)	0,5	0,5	0,5
Optankningshastighed (kg H <sub>2</sub> /min)	0,5	1,5	2,0

(a) densiteten af flydende brint er 70.8 g/L (b) antal gentagne absorptions- og desorptionscykler.

## Principper for brintopbevaring

I det følgende beskrives de kendte muligheder for brintopbevaring sammen med nogle eksempler på den danske forskningsindsats på området.

### Brint på væskeform

Lagring af brint på væskeform er allerede en industrielt udviklet teknologi, der anvendes til kommerciel distribution af brint i store mængder. Afhængig af anlæggets størrelse er kondensationen af brint til flydende form forbundet med et energitab svarende til 30-50% af brintens forbrændingsvarme, og samtidig er volumetætheden moderat for flydende brint, 71 g H<sub>2</sub>/L. Lagring af flydende brint kan kun ske i en åben beholder og indebærer en vis, konstant afdampning af brint med deraf følgende energitab; afdampningen kan udgøre en sikkerhedsrisiko i lukkede rum (f.eks. garageanlæg) og kan være en miljørisiko. I Danmark anvendes teknologien ikke, og det vurderes derfor, at der ikke er en national ekspertise til stede, der kan danne grundlag for en uafhængig implementering eller videreudvikling af denne teknologi.

### Brint på gasform

Lagring af brint under tryk er i øjeblikket den dominerende lagringsteknologi til transport af brint (trykflasker) og er veldokumenteret for tryk op til 300 bar med en energitæthed på ca. 25 g H<sub>2</sub>/L og ca. 4,5 vægt pct. for hele systemet. Den teknologiske målsætning er trykcylindre med et arbejdstryk på 700 bar og en energitæthed på ca. 58 g H<sub>2</sub>/L og ca. 6 vægt pct. for hele systemet.

I Danmark findes adskillige virksomheder, bl.a. fabrikanter af vindmøllevinger, der har erfaring og proces teknologisk viden om konstruktion af styrkebærende kompositmaterialer, og der kan være et dansk industrielt potentiale for udvikling og produktion af trykbeholdere med henblik på lagring af brint eller andre energirige

gasarter som f.eks. metan. De lette, brinttætte trykbeholdere kunne også anvendes til opbevaring af hydrider under forudsætning af temperatur-match. Forskningsområder af mulig dansk interesse kan være inden for mekaniske egenskaber af polymermaterialer og liner-teknologi, f.eks. fiberoplægning ved komplekse geometrier, brintgennemtrængelighed og diffusionsspærring. En sådan dansk udvikling af trykbeholderteknologi kan også tænkes at give anledning til spin-off-produkter inden for helt andre anvendelsesområder.

Gasformig brint kan endvidere lagres i store mængder i undergrunden. Teknikken er udviklet og kendes fra naturgaslagre (f.eks. de danske naturgaslagre i Stenlille og Ll. Torup) og benyttes også til brint, bl.a. i England ved Tees Valley.

### **Lagring af brint i et fast stof**

Der findes to principper for brintopbevaring på fast form ved almindelige temperaturer og tryk: 1) binding af brint i en fast kemisk forbindelse (f.eks. et metalhydrid) og 2) adsorption af brintmolekyler ( $H_2$ ) på overflader, hvor brint er svagt bundet vha. van der Waals-kræfter (fysisorption). Mange metaller danner naturligt hydrider, når de udsættes for brint ved højt tryk. Bindingen mellem metal og brint er relativt stærk, så det er i mange tilfælde nødvendigt at opvarme til ret høje temperaturer, før brint frigives. Det forholder sig modsat ved fysisorption af brint, hvor bindingen mellem  $H_2$ -molekylet og det faste stof ofte er relativt svag, og denne type brintadsorption sker kun i væsentligt omfang ved lave temperaturer (meget lavere end  $0\text{ }^\circ\text{C}$ ).

### **Designkriterier for faste brintopbevaringsmaterialer**

Brintoptagelse og -afgivelse fra det faste stof skal forløbe tilstrækkeligt hurtigt ved moderat temperatur, gerne stuetemperatur. I den forbindelse har diffusionshastigheden af atomart brint i materialet stor betydning. Den kan forøges ved at minimere diffusionsvejen, hvilket kan ske ved at finde materialet, så man får nanopartikler. Reaktionen  $H_2 \rightleftharpoons 2H$ , hvor brintmolekyler dissocieres, eller brintatomer omdannes til molekyler på metaloverfladen, er imidlertid ikke nødvendigvis spontan, men kan katalyseres af et overgangsmetal. Overfladeprocesser er således af stor betydning for brintoptagelses- og -afgivelseskinetikken. Desuden skal de generelle krav til brintlagring, som er omtalt ovenfor, også tages i betragtning.

### **Metalhydrider**

Der har i en årrække været meget fokus på det billige letmetal magnesium, som danner hydridet  $MgH_2$  med højt vægtmæssigt brintindhold (7,6 vægt pct. brint). Bindingen mellem brint og magnesium er så stærk, at der skal opvarmes til over  $300\text{ }^\circ\text{C}$ , før brint afgives fra  $MgH_2$  ved atmosfæretryk. Det er en urealistisk høj temperatur for mange praktiske anvendelser, så derfor er der gennem de sidste tre årtier fremstillet og studeret et meget stort antal magnesiumlegeringer for at få reduceret desorptionstemperaturen.

De interstitielle metalhydrider, hvor brint sidder i huller imellem tunge metalatomer, er stadig den gruppe hydrider, der er bedst undersøgt, med over 2000 kendte forbindelser. Brintkapaciteten i denne gruppe af metalhydrider kan næppe overstige de ca. 2,5 vægt pct., der kendes i dag. Alligevel er det fortsat et relevant forskningsområde, da nogle af disse forbindelser opfylder alle de stillede krav bortset fra masse- energitætheden. Med passende delvise substitutioner af de enkelte metaller

i legeringerne kan stort set enhver kombination af desorptionstryk og temperatur opnås. Mange af disse metalhydrider har lille følsomhed overfor fugt og andre urenheder og kan anvendes i f.eks. batterier med vandig elektrolyt, og de regnes for at være det sikreste lagringsmedium for lettilgængelig brint. Flere tusinde absorptions- og desorptionscykler er demonstreret, og mange legeringer, som eksempelvis batterilegeringerne, kan fremstilles relativt billigt, i størrelsesordenen 100 kr./kg. Til anvendelser, hvor vægten ikke er meget kritisk, er interstitielle metalhydrider derfor fortsat et interessant forskningsområde.

I Danmark er der opbygget en betydelig ekspertise i design og fremstilling af nye metallegeringer, som kan udnyttes i den fremtidige forskning i nye materialer til brintopbevaring.

### Komplekse hydrider

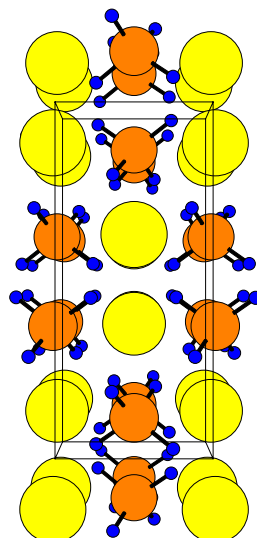
I løbet af de sidste ca. fem år er opmærksomheden omkring de såkaldte komplekse hydrider vokset enormt, og det er en udbredt opfattelse, at det er inden for denne klasse af materialer, at der skal findes en kandidat, som opfylder alle kravene i tabel 3.1. Det skyldes, at brintoptagelse og -afgivelse ofte kan katalyseres, så reaktionen forløber tilstrækkelig hurtigt, selv ved moderat temperatur. Det er dog stadig et åbent spørgsmål, hvorledes katalysatoren virker, ligesom det endnu er usikkert, om der er tale om katalyse i traditionel forstand eller et helt andet fænomen.

Komplekse hydrider består ofte af lette metaller, såsom  $\text{LiBH}_4$  og  $\text{NaAlH}_4$  med et brintindhold på hhv. 18,5 og 7,4 vægt pct. brint, og de har åbnet nye perspektiver for opbevaring af brint til transport, f.eks. i biler. Ikke bare strukturen er 'kompleks' i disse materialer, men i særdeleshed også optagelsen og afgivelsen af brint, der består af en længere række delprocesser. Der er stor forskningsmæssig interesse omkring disse nye materialer, også i Danmark, hvor både teoretiske og eksperimentelle forskningsmiljøer er opbygget. Der er tale om et nyt forskningsområde med et stort og meget lovende potentiale, og det bør have høj prioritet.

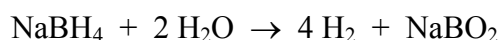
**Tabel 3.2.** Forskellige materialer til opbevaring af hydrogen på fast form.

	H <sub>2</sub> indhold		Temperatur for H <sub>2</sub> -afgivelse (°C)
	Masse- tæthed (vægt pct.)	Volumen- tæthed (g/L)	
<b>Metalhydrider</b>			
MgH <sub>2</sub>	7,6	110	350
LaNi <sub>5</sub> H <sub>6</sub>	1,4		
TiFeH <sub>2</sub>	1,9		320
<b>Komplekse hydrider</b>			
LiBH <sub>4</sub>	18,5	121	380
NaBH <sub>4</sub>	10,7	114	400
LiAlH <sub>4</sub>	10,6	87	>125
NaAlH <sub>4</sub>	7,5	94	210
Mg <sub>2</sub> FeH <sub>6</sub>	5,5	150	320

**Figur 3.1.** Strukturen af det komplekse metalhydrid  $\text{NaAlH}_4$ . Det består af natriumioner ( $\text{Na}^+$ ; markeret med gul) og den sammensatte ion  $\text{AlH}_4^-$ , hvor aluminium er markeret med brunt og brint med blå.



Stort set alle metalhydrider har et større brintindhold pr. rumfangsenhed end flydende ren brint, som har densiteten 71 g/L. Det må dog bemærkes, at der skal tilføres varme, når brint skal frigives fra faste hydrider, og desuden udgør det reversible brintindhold kun 50-90% af det maksimale indhold, som er angivet i tabel 3.2. Reversibel brintopbevaring betyder, at lagringsmaterialet gentagne gange kan optage og afgive brint. I USA og Japan overvejes muligheden for irreversibel brintopbevaring også, hvor et hydrid destrueres ved tilsætning af vand, f.eks. som vist i nedenstående reaktionsskema:



Det teoretiske hydrogen indhold er 6,6 vægt pct. eller 66 g/L, men restproduktet skal bortskaffes eller regenereres ved en energikrævende proces.

**Figur 3.2.** Regneeksempel med en mindre bil, der har en benzinøkonomi på 16 km/L og en rækkevidde på 400 km. Det samlede benzinforbrug bliver ca. 25 L svarende til ca. 7 kg hydrogen forbrændt i en forbrændingsmotor med en virkningsgrad på ca. 15 %. Hvis bilen i stedet var udstyret med en brændselscelle, der elektrokemisk kan forene hydrogen og ilt til vand med en virkningsgrad på f.eks. 30%, var det kun nødvendigt med ca. 3,5 kg hydrogen.



Figur 3.2 illustrerer, hvor betydningsfuld masse- og volumenenergigtæthed er for anvendelsen. Der findes nicheanvendelser, hvor høj vægt ses som en fordel, og hvor hydridlageret samtidig kan bruges til ballast, f.eks. lokomotiver, gaffeltrucks og ubåde. Brintlagringssystemer til mobile anvendelser må naturligvis tilpasses målsætningen fra tabel 3.1, men valget af brændselscelle har også stor betydning. En høj dissociationstemperatur for metalhydrider (f.eks.  $MgH_2$ ) er ikke et problem i forbindelse med højtemperaturbrændselsceller (SOFC), hvor der er en betydelig mængde overskudsvarme til rådighed. Tilsvarende har forskergrupperne, der arbejder med  $NaAlH_4$ -systemet haft som mål at bringe desorptionstemperaturen fra ca. 150 °C til under 80 °C af hensyn til PEM-brændselscellen. Her har Danmark ligeledes et godt udgangspunkt, ved at være helt i front med PEM-brændselsceller med driftstemperatur op til 200 °C, hvor overskudsvarmen kan anvendes direkte til  $NaAlH_4$ -systemet. Vurderingen af et lagersystems egenskaber må altid tage udgangspunkt i anvendelsen.

### **Brintskørhed**

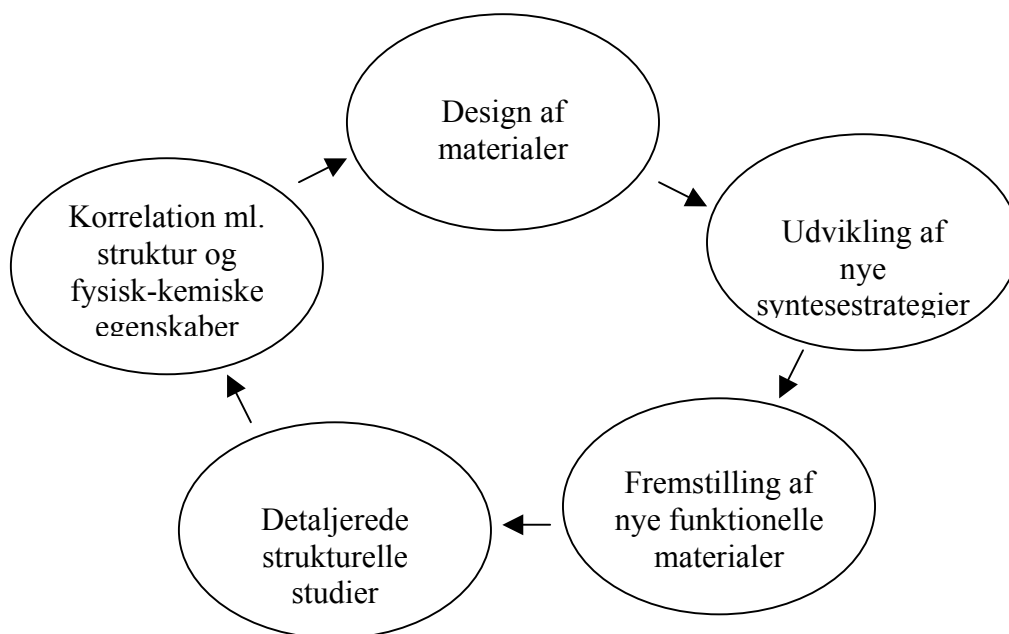
Vekselvirkningen mellem brint og metal udnyttes positivt ved anvendelse af metalhydrider som brintlager. Men vekselvirkningen kan ligeledes være et betydeligt teknisk problem, hvis brint er i kontakt med metalliske konstruktionsmaterialer, der er mekanisk belastede, som f.eks. rørledninger og trykbeholdere. Her kan brint være ødelæggende for materialernes mekaniske egenskaber og medføre katastrofale svækkelser. Fænomenet er kendt som brintskørhed og problemerne er ofte meget uforudsigelige. Der er et indlysende behov for en bred, grundlæggende forståelse af dette problem, der relaterer til metalhydrider.

### **Nanostrukturerede materialer**

Det sidste årtis intensive forskning i nanostrukturerede/-teksturerede materialer har vist, at selv velkendte materialer kan udvise helt nye egenskaber, når deres karakteristiske længdeskala kommer ned i nanometerområdet. Sådanne størrelseseffekter kan have dramatisk indflydelse på eksempelvis de kinetiske egenskaber, da diffusion af atomart brint ofte vil foregå langt hurtigere i f.eks. korngrænser end gennem massive (*bulk*) materialer. Nanostrukturerede/-teksturerede materialer må derfor anbefales som et fremtidigt fokusområde, hvor cyklisk stabilitet og reversibilitet også bør analyseres.

Med henblik på brintlagring i nanostrukturerede materialer har det primære fokus hidtil været på brugen af kulnanorør til lagring af fysisorberet brint. Siden de første, meget optimistiske eksperimentelle data i 1998 viste brintlagringskapaciteter på over 60 vægt pct., har der været forsket intensivt i brugen af kulnanorør til fysisorberet brintlagring. Det har dog senere vist sig umuligt at reproducere selv de mindre lovende af disse målinger, og det er efterhånden tvivlsomt om de rene kulnanorør har lagringsegenskaber, der adskiller sig væsentligt fra grafit med højt overfladeareal, hvor den maksimale lagringskapacitet er et monolag svarende til 4,1 vægt pct. Under sædvanlige atmosfæreforhold falder kapaciteten endda til ca. 1,1 vægt pct.

I øjeblikket er der ikke noget, der berettiger at området bør prioriteres højt i en dansk brintsatsning, den beskedne forskningsindsats og områdets generelt tvivlsomme perspektiver taget i betragtning.



**Figur 3.3.** Illustration af hvorledes detaljerede strukturelle studier og undersøgelse af korrelation mellem struktur og fysiske/kemisk egenskaber kan føre til design af nye materialer. Nye syntese-strategier må udvikles for at fremstille nye funktionelle materialer.

Som det er tilfældet med kulstof, kan der fremstilles nanorør af bor, nitrogen og kulstof: BN, BC<sub>3</sub>, BC<sub>2</sub>N. Selvom der er mange flere variationsmuligheder end for kulnanorør, anses disse materialer ikke på nuværende tidspunkt for at have stort potentiale som brintlagringsmedier.

### **Katalyse**

En bedre forståelse på det atomare niveau af de katalytiske processer i forbindelse med f.eks. dissociation af molekylært brint og dekomponering af komplekse hydrider vil være nødvendig, hvis det skal være muligt i fremtiden at kunne fremstille reversible og cyklisk stabile lagringsmedier. De komplekse hydrider blev f.eks. indtil for få år siden anset for uegnede som brintlagringsmedier, indtil brugen af titanium- og zirkoniumbaserede 'katalysatorer' sænkede desorptionstemperaturen for NaAlH<sub>4</sub> dramatisk. Det er dog som nævnt stadig et helt åbent spørgsmål, hvorledes titanium og zirkonium virker, og om der er tale om katalyse i traditionel forstand eller et helt andet fænomen. Området bør absolut have høj prioritet i en fremtidig dansk indsats på brintenergi.

### **Indirekte lagring af brint.**

Et muligt alternativ til den direkte lagring af brint, eksempelvis som brint på gas- eller væskeform eller i form af forskellige metalhydrider, er lagring af brint i kemiske forbindelser, der kan reformeres til brint. Denne option giver mulighed for bekvemt at transportere brint i egnede kemiske forbindelser, for hvilke en passende infrastruktur allerede findes eller let kan udvikles. Den nødvendige brint genereres herved umiddelbart inden - og på præcis det sted den skal forbruges. Blandt de mest diskutererede sådanne indirekte brintlagre er methanol eller kulbrinter, såsom methan,

nafta, benzin og diesel, der katalytisk kan omdannes til brinholdige strømme som beskrevet i afsnit 2. Efter passende oprensning udgør sådanne en yderst velegnet føde til brændselsceller. Disse muligheder kan alle være attraktive i forskellige scenarier.

En anden mulighed der ikke har problemer med CO<sub>2</sub> udvikling er at lagre brinten som ammoniak, der så katalytisk dekomponeres til N<sub>2</sub> og H<sub>2</sub>. Selvom der eksisterer en infrastruktur til transport af væskeformig ammoniak, må det forventes, at dette ikke vil være en acceptabel løsning i større skala. Det har for nyligt vist sig muligt at lagre ammoniak reversibelt i faste forbindelser, metalammin-komplekser, der er i stand til at binde mere end 10 wt% brint. Frigivelse og dekomponering af lagret ammoniak giver en ideel føde til brændselsceller. Der er dog altid tab i forbindelse med dannelsen og dekomponeringen af ammoniak.

En anden mulighed for at fremstille CO<sub>2</sub>-neutral energi, der studeres parallelt, er muligheden for at bruge carbohydrater, som indirekte brintlagre. Nylig forskning i USA viser, at forskellige carbohydrater, som er den mest tilgængelige bioressource, kan udgøre meget effektive indirekte brintlagre. Over de næste 20 år forventes carbohydrater at blive et hurtigt voksende råstof for den kemiske industri og på længere sigt kan dette udgøre et af de få alternativer til fossile brændstoffer.

Sammenfattende må det siges, at opbevaring af brint udgør et uløst problem, måske det største, på vejen mod et brintsamfund. De materialer og teknologier, man kender i dag, kan ikke opfylde de krav og målsætninger, der er til bl.a. mobil anvendelse af et brintlager. Generelt set er der et behov for udvikling af nye materialer og for en dybere forståelse af vekselvirkningen mellem brint og fast stof. Det er nødvendigt, at identificere helt nye klasser af materialer, der kan danne grundlag for udvikling af brintlagringsteknologi.

Brint bindes ofte for stærkt ved kemisk binding og for svagt ved fysisorption. Måske kan disse to typer binding kombineres i nye typer af nano-kompositmaterialer. De seneste få års intensive forskning i nanomaterialer har vist, at fysiske og kemiske egenskaber kan ændre sig drastisk, når materialernes karakteristiske længdeskala kommer ned i nanometerområdet.

Figur 3.3 illustrerer nogle vigtige delelementer i forbindelse med udvikling af nye funktionelle materialer. Hvert element bør styrkes, så der opbygges ekspertise, udstyr og knowhow, der selvstændigt kan profilere sig i den internationale frontforskning. Det skal sikres, at der er høj grad af interdisciplinært samspil imellem de forskellige elementer, så der kan skabes synergi og symbiose. Det er nødvendigt at opnå en dybere grundvidenskabelig forståelse af de basale processer i forbindelse med brintoptagelse og -afgivelse, herunder katalytiske processer på det atomare niveau. Dernæst skal disse egenskabers sammenhæng med materialesammensætning og -struktur kortlægges. Denne viden kan måske sætte os i stand til at skræddersy nye materialer til specifikke formål.

Et integreret sammenspil mellem teori, modellering og eksperiment bør have høj prioritet i en fremtidig brintsatsning. Niveaut af de teoretiske modeller og den tilgængelige computerbaserede regnekraft har gjort det muligt at bruge beregninger til at foreslå nye materialer og grundstofsammensætninger, der er designet til specifikke formål. Den danske indsats på de nævnte forskningsområder har været stigende i det



sidste par år og et eksperimentelt og teoretisk erfaringsgrundlag har udviklet sig, men der er behov for en betydelig styrkelse af den fremtidige forskningsindsats, hvis Danmark fortsat skal kunne markere sig internationalt, hvor ressourcetilførslen er voldsomt voksende i disse år. Ud fra et dansk perspektiv har det interdisciplinære samarbejde et betydeligt potentiale og bør styrkes.

**Prioriteringsområder:**

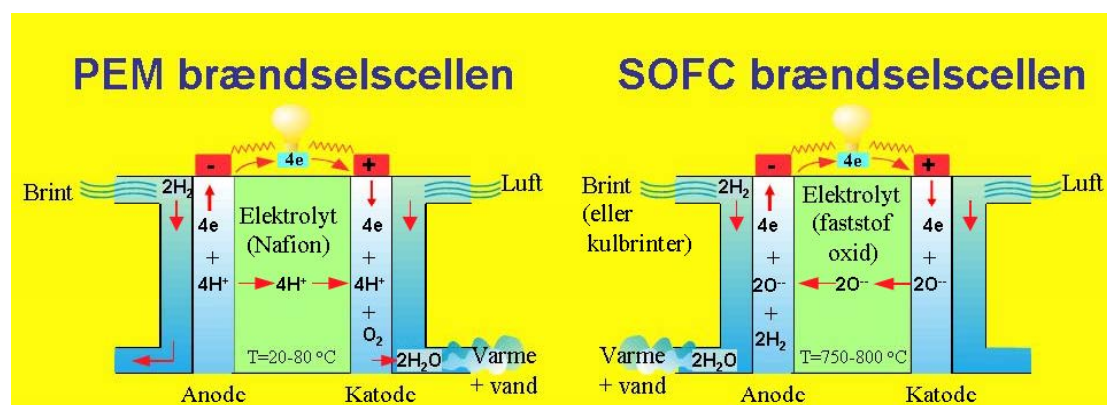
1. Yderligere forståelse af simple og komplekse hydridler (og katalysering af disse)
2. Iværksættelse af integrerede teoretisk-eksperimentelle materialedesign-projekter for at finde nye brintopbevaringsmaterialer – inklusive nanostrukturerede/-teksturerede materialer
3. Studier af alternative, kemiske brintopbevaringsmetoder
4. Udvikling af tryktanke baseret på kompositmaterialer

## 4. Brændselsceller

Brændselsceller anvendes til at omdanne den lagrede energi i brint og brintholdige stoffer til nyttige energiformer. Brændselsceller har et meget stort potentiale og forudses at blive anvendt i fremtidens samfund til kraftvarmeværker, fly, skibe, busser, biler, generatorer, ja selv til forsyning af husstandens mange typer af el-artikler. Brændselsceller er – som tidligere nævnt – forureningsfri, hvis man bruger ren brint, og bidrager ikke med yderligere forurening, hvis der anvendes fossile brændstoffer, selv om CO<sub>2</sub>-belastningen naturligvis ikke fjernes.

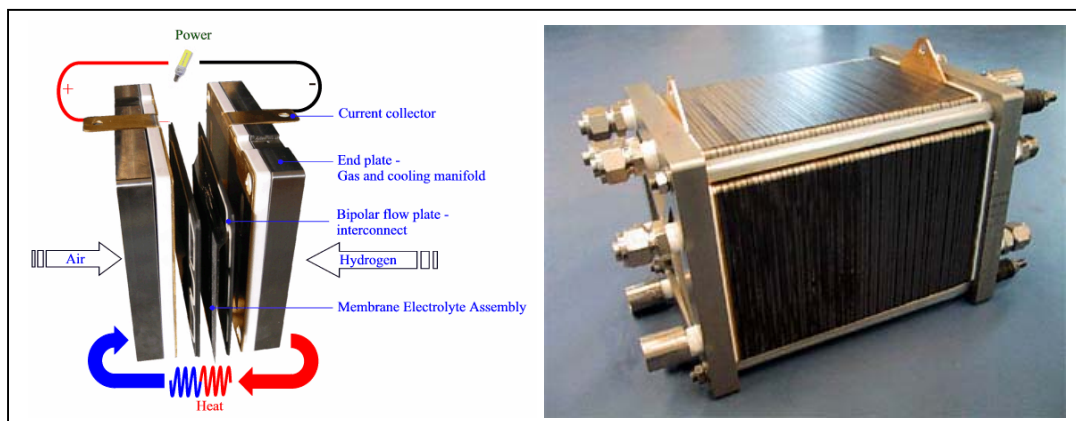
Brændselsceller omdanner brændsel og ilt (luft) direkte til elektricitet, varme og vand i en elektrokemisk proces ved en forholdsvis lav temperatur i forhold til traditionelle maskiner, der er baseret på at omdanne brændslets energi til varme, som så kan omsættes til mekanisk arbejde og derefter til elektricitet. Konventionelle forbrændingsmotorers effektivitet stiger med temperaturen, men bliver begrænset af materialernes styrke- og korrosionsegenskaber ved høje temperaturer. Der er dog sket betydelige landvindinger på netop disse områder, hvilket har forbedret elproduktionseffektiviteten på kraftværker, så den nu nærmer sig 60%.

På grund af deres virkemåde er brændselsceller ikke underlagt de samme termodynamiske begrænsninger som konventionelle forbrændingsmotorer og kan derfor principielt opnå en betydeligt højere effektivitet især ved lave temperaturer, hvilket også eliminerer forureningen. Brændselscellers effektivitet er dog for nuværende ikke bedre end de konventionelle forbrændingsmotorer og gasturbiner.



### Arbejdsprincip for PEM- og SOFC-brændselscellen

Begge celler fungerer ved, at der sker en ladningsadskillelse, og at de elektroner, som skal udvekles mellem ilt og brint, først tvinges ud i et ydre kredsløb. Energien bliver dannet ved, at brint eller andre let omsættelige brændsler ledes ind til anodesiden, mens ilten ledes til katodesiden. Her adskiller de to typer brændselsceller sig så ved, at i en PEM-celle er det protoner, som vandrer over en polymermembran og rekombinerer med ilten på katodesiden, medens det i en SOFC er oxidioner, som vandrer igennem en keramisk elektrolyt. Det sidste kræver ret høje temperaturer, og derfor er driftstemperaturen for SOFC 750-800 °C. PEM-membranen tilader derimod protoner at passere allerede ved stuetemperatur, og hastigheden bliver optimal ved ca. 80 °C. Desværre er det vanskeligt at operere ved meget højere temperatur, da membranen skal indeholde vand for at fungere.



**Figur 4.1.** Tv. et enkelt PEM brændselscelleelement. Th. en brændselscellestak (IRD A/S).

Princippet i en brændselscelle er vist i boksen for både en faststofoxid-brændselscelle (SOFC) og en protonudvekslingsbrændselscelle (PEMFC). Brændselscellen er skalerbar, idet den ønskede effekt opnås med at samle et antal elementer i en såkaldt brændselscellestak som vist på figur 4.1.

På kort sigt vil brændselsceller blive anvendt i nicher som f.eks. batterierstatning og nødstrømsanlæg. På længere sigt vil de kunne trænge ind i den egentlige energisektor, men det vil kræve fundamentale forbedringer, der kan give billigere og mere effektive brændselsceller. Teknologien er således til stede i de to typer brændselsceller, men begge lider under materialebegrænsninger, der kræver egentlige forskningsgennembrud.

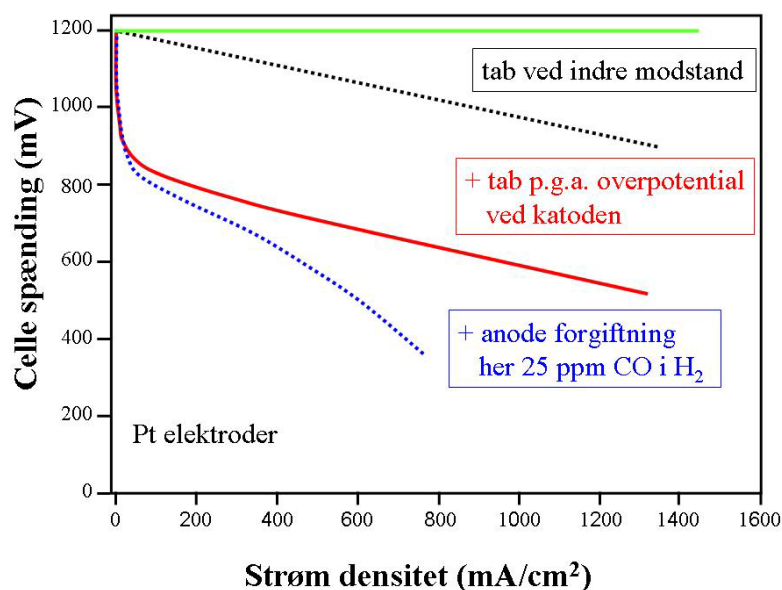
For PEMFC er et af nøgleproblemerne, at elektrodematerialerne er baseret på de meget kostbare platinmetaller. Endvidere er elektrolytten også kostbar og en højere driftstemperatur ville være ønskelig under en række anvendelser.

For SOFC er der et stort behov for at forbedre materialernes robusthed, så de kan tolerere den høje temperatur og eventuelle termiske svingninger. Derudover vil der være økonomiske fordele ved at kunne sænke driftstemperaturen, hvilket også vil kræve udvikling af nye materialer.

For begge typer gælder det, at man ønsker at forbedre levetiden af cellerne samtidig med, at man forventer at øge effektiviteten betydeligt, hvis man kan reducere de såkaldte overpotentialer (indre tab) i katoden og reducere elektrolyttens elektriske modstand.

## Elektrodematerialer

Den mest essentielle del af en brændselscelle er elektroderne, hvor de kemiske processer foregår, og hvor elektroner føres til og fra det ydre kredsløb. Desværre er der store tab forbundet med disse processer og en forbedring af elektrodematerialerne er påkrævet. I figur 4.2 er den elektriske spænding, som en brændselscelle kan levere som funktion af strømmen, vist skematisk; figuren illustrerer problemstillingen med tab i brændselscellen. Ideelt set skulle en brændselscelle, der omsætter brint og



**Figur 4.2.** Effekten af forskellige tab, der forekommer i en brændselscelle, som opererer på brint med platinelektroder. Den grønne line angiver idealcellen.

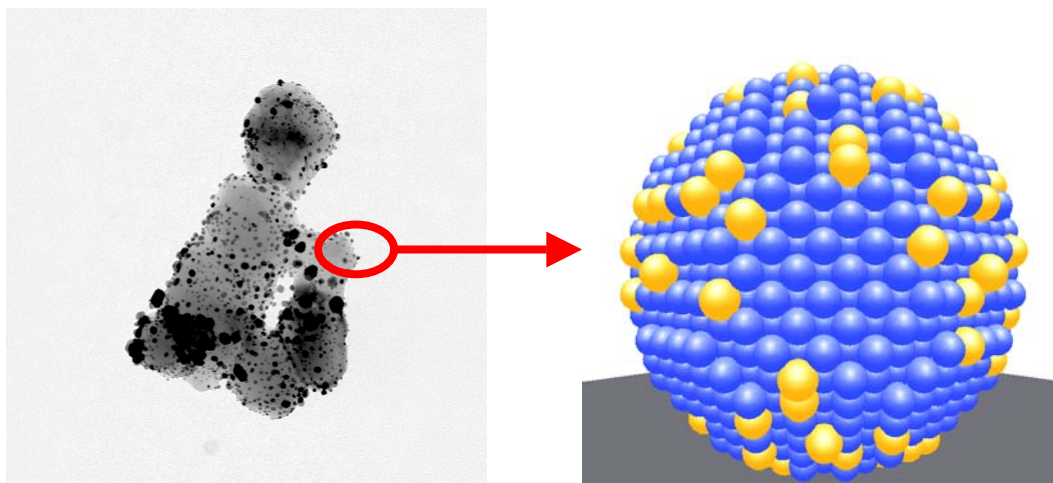
ilt til vand, levere en spænding på ca. 1,2 V uafhængigt af strømmen vist som den grønne linie, men intet system er ideelt. Tabet som følge af den indre modstand i systemet og elektrolytten er illustreret ved den sorte stiplede linie.

De største tab er for alle typer brændselsceller forbundet med den elektrode, hvor oxygen ( $O_2$ ) skal spaltes. For PEM-cellen er der således ved typiske driftsbetingelser et tab på ca. 30 % af spændingen på grund af problemer med aktiveringen af oxygen (illustreret ved den røde linje på figuren). For SOFC-cellen er der tilsvarende problemer, især hvis det skal lykkes at sænke driftstemperaturen.

Et andet problem er forgiftning af elektroden på den side hvor brændslet kommer ind: For PEM-celler, der opereres ved lav temperatur, vil selv ppm-mængder af CO i brændslet helt ødelægge effektiviteten. CO er i det store og hele umulig at undgå som urenhed, hvis brint dannes ved reformering af kulbrinter eller kulhydrater. For SOFC-cellerne er hovedproblemet på brændselsiden, at der dannes kul på elektroden ved spaltningen af kulbrinter. Dette tab er illustreret ved den blå linje.

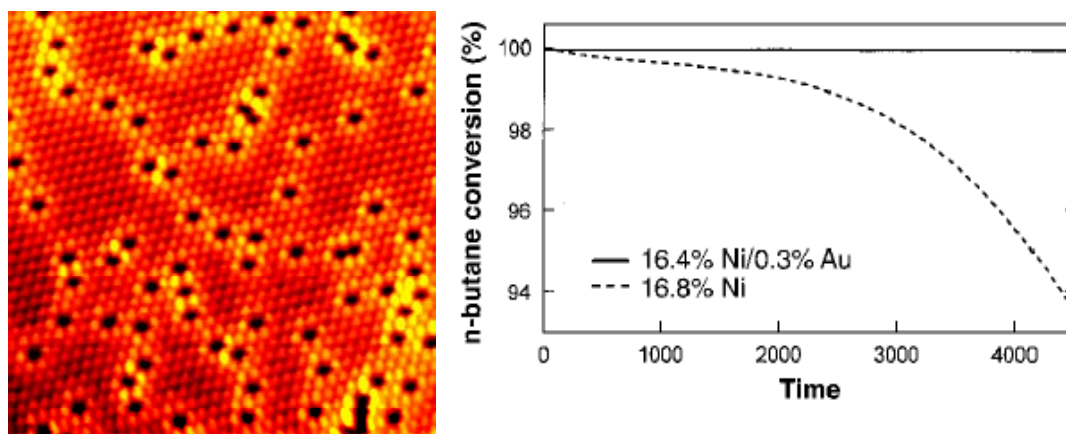
Endelig er der det problem specielt for PEM-cellerne, at de bedste elektrodematerialer er platin eller platinbaserede legeringer. Platin er ekstremt dyrt og de samlede ressourcer er begrænsede.

Som nævnt ovenfor er det de samme elektrodeproblemer også spiller en stor rolle ved fremstilling af brint gennem elektrolyse. Som nævnt kan brændselscellerne i princippet vendes om og producere brint fra vand og elektricitet. Hvis brinten kan lagres på en fornuftig måde kunne et sådant system på længere sigt udgøre et interessant system til at udligne variationer i strømproduktionen fra vedvarende energikilder såsom vindmøller.



**Figur 4.3.** Elektromikroskopbillede (gengivet med tilladelse fra S.Bradley, UOP LLC) af anodematerialet i en PEM-brændselscelle. De enkelte platinkorn er nogle få nanometer i diameter. Til højre er vist en enkelt metalpartikel. For at designe materialer med specifikke katalytiske egenskaber skal opbygningen af overfladen kontrolleres atom for atom.

Nye typer elektrodematerialer, der er afgørende bedre til at katalysere processerne ved de to elektroder, og som ikke er dyre, er helt afgørende for, at brændselsceller bliver konkurrencedygtige. De, der kan finde helt nye materialer med sådanne egenskaber, vil sidde med nøglen til hele markedet.



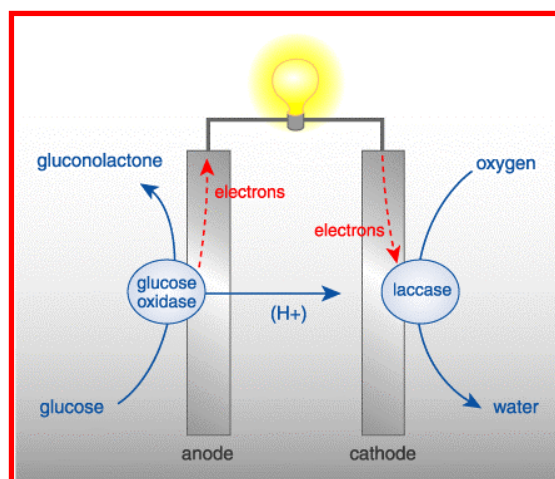
**Figur 4.4.** Design af katalysatormaterialer. Ved at legeres en anelse guld ind i en nikkeloverflade (vist på STM-billedet til venstre) opnås katalysatorer, der er langt mere stabile imod kuldannelse og derfor har væsentligt bedre katalytisk aktivitet over lang tid (grafnen til højre).

De aktive materialer i elektroderne er nogle få nanometer store partikler, og en forbedring af deres egenskaber indebærer kontrol af materialesammensætningen ned på en atomar skala. At udvikle forbedrede elektrodematerialer kræver en fundamental

indsigt i de atomare processer, der er involverede, og denne indsigt kan give anledning til design af nye materialer på nanoskala. F.eks. viser figur 4.4., hvordan man ved at modificere en nikkeloverflade kan fremstille en overflade, der er meget mere resistent mod kuldannelse.

Det er interessant, at der er enzymer, der kan katalysere processer af denne type under meget milde forhold. En strategi er derfor at studere, hvordan disse enzymer fungerer og at undersøge, om det er muligt at designe strukturer inspireret heraf.

Alternativt kan man direkte bruge katalytisk aktive enzymer i såkaldte biobrændselsceller, se figur 4.5. Her omdannes glukose indirekte ved reaktion med ilt. Ilt reagerer ved elektroden til højre, glukose ved elektroden til venstre. Processerne ville ikke forløbe af sig selv, men ved brug af hver sit enzym (laccase og glucose oxidase) forløber processerne under milde betingelser og lille energitab. Ved det indirekte forløb vil den frigjorte energi i form af elektrisk strøm løbe gennem den ydre ledning og kunne anvendes til nyttigt arbejde. Der findes forskellige biobrændselscelletyper. Teknologisk materialeforskning er i fokus for at optimere den elektrokemiske enzymfunktion.



**Figur 4.5** Principskitse af en biobrændselscelle (from R.F. Service, *Science* 296 (2002) 1222-1224).

I relation til brintbaseret energi-omsætning er det af betydning, at metanol og etanol såvel som flere mindre biomolekyler ( $\text{NADH}/\text{NAD}^+$ ) kan indgå som reaktionspartnere. Der er ikke noget principielt til hinder for, at selve brintmolekylet også kunne indgå i en næsten ultimativ energiomsætning, da enzymer hertil (hydrogenaser) er karakteriseret ved en høj detaljegrad. Endelig kan hele mikrobielle systemer (større enzymssystemer) sammenkobles med elektrokemiske systemer, og de kemiske stofskifteprodukter udnyttes i et brændselscellesystem.

Biobrændselscellekonceptet er nyt og frembyder store tværvideenskabelige udfordringer inden for bioteknologi, elektrokemi, nanoteknologi m.m. Danmark har ekspertise inden for de relevante områder, herunder en stærk profil i de nødvendige grundvidenskaber, og dansk ekspertise har bragt væsentlige af områderne, bl.a. den centrale bioelektrokemi, videre. Områdets teknologiske udvikling kan formodes at have virksomhedsinteresse inden for bioteknologi (nye enzymtyper), instrumentering (elektrokemi, skanningsteknologi) og andre områder, herunder biosensorer og mikrobatterier i medikoteknologiske sammenhænge.

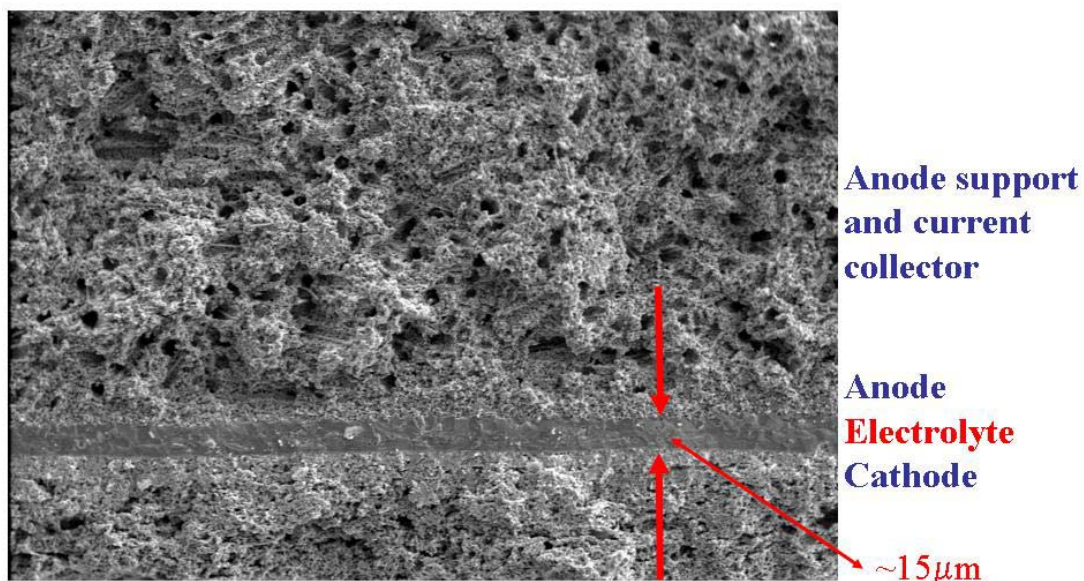
Danmark har et usædvanligt godt udgangspunkt for forskning på området, idet der er en solid basis inden for nanoskala-design af katalytiske materialer og en fremragende kobling mellem den offentlige forskning og industri.

### Prioriteringsområder:

1. Design af nye katodematerialer, specielt oxider, med mindre overpotentialer end kendte materialer.
2. Design af nye anodematerialer til PEM-celler, der er billigere og mere CO-tolerante end platin.
3. Design af nye anodematerialer til SOFC, der er mindre tilbøjelige til at danne kul; igen kunne oxider være en mulighed.
4. Identifikation af de mekanismer, som leder til ældning af katalysatorer/elektroder og reduceret effektivitet.
5. Nye bio-inspirerede tilgange til brændselscelleudvikling.

### Udvikling af nye elektrolytter

Elektrolytten er den komponent, som tillader enten protoner (i en PEMFC) eller oxidioner (i en SOFC) at blive adskilt fra elektronerne, således at disse kan tvinges til at udføre et arbejde i den ydre kreds. Som omtalt ovenfor er det ønskeligt at kunne reducere elektrolyttens indre modstand. Dette bliver af speciel interesse for SOFC-elektrolytten, hvis man skal sænke temperaturen yderligere fra de nuværende 750-800 °C, idet det kræver at modstanden mindskes betydeligt enten gennem bedre eller tyndere lag af elektrolytten.



**Figur 4.6.** Elektronmikroskopibillede af et tværsnit af en SOFC-brændselscelle. Bemærk, at elektrolytten allerede er ganske tynd, her 15 μm. Det er ønskeligt at gøre den endnu tyndere.

For PEMFC-elektrolytten vil man naturligvis også gerne mindske modstanden, men man vil også gerne have elektrolytter, der kan fungere både ved stuetemperatur og ved højere temperaturer end de elektrolytter, man har i dag. Den nuværende PEMFC-elektrolyt er baseret på en protonledende membran bestående af perfluorsulfonsyrepolymerer (f.eks. Nafion fra firmaet DuPont). Disse har høj ledningsevne, men kun i forbindelse med flydende vand, og de kan derfor ikke operere over 100 °C ved normalt tryk.

En højere temperatur vil først og fremmest mindske PEM-cellens følsomhed over for forgiftning af anodesiden. Ligevægten mellem CO og brint på anodeelektroden forskydes med stigende temperatur til fordel for brint, og dette bevirker at CO-tolerancen stiger dramatisk fra 10-20 ppm ved 80 °C til 20.000-30.000 ppm ved 200 °C. Den højere temperatur vil også have umiddelbare fordele på processernes kinetik og vil gøre det lettere at bortskaffe spildvarme. For at opnå en højere arbejdstemperatur ved normalt tryk skal ledningsevnen af elektrolytten være meget mindre afhængig af vandindholdet, hvilket kræver basale ændringer.

Endelig er der også behov for at forbedre elektrolytter, der fungerer godt ved stuetemperatur. Dette er vigtigt ved anvendelse i mindre mobile enheder såsom mobiltelefoner.

Danmark har et godt udgangspunkt inden for dette område, hvor der allerede eksisterer en velfungerende forskning.

#### **Prioriteringsområder:**

1. Design af nye højtemperatur-elektrolytmembraner baseret på syre-base-polymerer bestående af aromatiske polymere, som indeholder funktionelle grupper, der kan gøres protonledende ved reaktion med uorganiske syrer.
2. Design af nye højtemperatur-elektrolytmembraner bestående af uorganisk-organiske kompositmaterialer, f.eks. med termisk stabile polymerer som matrix og uorganiske faststofprotonledere som funktionelle grupper.
3. Design af nye faststofoxid-elektrolytter, som kan gøres tyndere og med højere ledningsevne ved lavere temperaturer.
4. Udvikling af nye elektrolytter, som kan fungere effektivt ved stuetemperatur.

### **Design af brændselscellen**

Baseret på udviklingen ovenfor er der behov for at udvikle og optimere strukturen af den endelige brændselscelle, således at de nye landvindinger, der opnås gennem forskningen, udnyttes og implementeres på den mest optimale måde. For at maksimere udnyttelsen af de processer, som foregår i brændselscellen, er det vigtigt at kunne kontrollere og forstå de driftsbetingelser, som denne virker under. Det være sig temperatur, tryk eller koncentrationer af reaktanter og produkter. Ligeledes er det vigtigt at tænke kendte designproblemer ind i de løsningsforslag, som ovennævnte forskning i elektrode og elektrolytter materialer omhandler. Brændselscellen kan selvsagt kun blive yderligere effektiviseret, hvis man udtænker totale løsninger for systemet som helhed.

Simuleringsværktøjer til simulering af stoftransport, elektrokemiske reaktioner, katalyse, ionisk transport i elektrolytten og ved elektroderne kan medvirke til at forstå, kontrollere og i højere grad udnytte de fundamentale processer, som foregår i brændselscellen. Specielt for koblingen mellem stoftransport, temperatur, tryk, stofkoncentrationer samt elektrokemisk aktivitet er der i dag generelt en lav forståelse.

Specifikt for lavtemperatur-PEM-brændselscellen er vandtransport i den prøve elektrode et vigtigt problem, der kun i begrænset omfang kan håndteres. Ligeledes



kan der i SOFC-cellen opstå f.eks. temperaturvariationer i cellen forårsaget af reaktanternes koncentrationsforskelle (og derved aktivitetsforskelle). Sådanne variationer giver anledning til materialespændinger og derved uønskede revnedannelser.

**Prioriteringsområder:**

1. Udvikling af eksperimentelle metoder til verificering af teoretiske modeller til brug for karakterisering af brændselscellens ydelse, herunder udvikling af *in situ* målemetoder.
2. Udvikling af kombinerede analytiske og sensorbaserede metoder til afdækning af strømtæthedfordelingen, temperaturer samt koncentrationer af reaktanter og produkter. Denne viden vil bidrage til optimering af brændselscellens design.

## Konklusion og perspektiver

Denne hvidbog har identificeret en række problemstillinger og teknologiske udfordringer, hvor der er et særligt dansk perspektiv i form af stærke forskningsgrupper og udviklingsmuligheder for dansk erhvervsliv. En række områder er identificeret, hvor der skal udvikles nye nøgleteknologier og hvor der eksisterer stærke danske forskergrupper med de nødvendige kompetencer. Forskning og udvikling inden for nye brintteknologier vil således give mulighed for en lang række (patenterbare) produkter for dansk industri inden for områder som f.eks.:

- Katalysatorer
- Membraner til oprensning
- Brintlagring
- Brændselsceller (SOFC, PEM)
- Reaktionskamre/holdere
- Styrings- og reguleringsystemer
- Enzymer
- Biologiske strukturer
- Forbehandling af biomasse

Disse er områder, hvor få nøglepatenter kan være afgørende for udviklingen af en hel ny teknologigren.

Med en solid forskningsindsats på brintområdet vil der kunne skabes innovative muligheder for en dansk produktion af en lang række produkter med stort videnindhold. De danske forskningsgrupper har samlet den nødvendige kritiske masse for at kunne hævde sig på højeste internationalt plan, og levere forskning og udvikling der vil være trendsættende, og som vil kunne give dansk erhvervsliv en kritisk konkurrencefordel inden for områder, hvor der forventes en hastig vækst i de kommende år. Dansk industri har med virksomheder inden for produktion af katalysatorer, enzymer, styrings- og reguleringskomponenter samt bioenergiprodukter en specielt god udgangsposition for at udnytte forskningsresultaterne på området.

Arbejdsgruppen bag hvidbogen anbefaler derfor en væsentlig styrket indsats indenfor det samlede område for at øge kohærens mellem forskningsgrupperne og erhvervslivet og derved bidrage til bæredygtige løsninger for det danske samfunds energiforsyning og samtidigt bidrage til et stærkt, innovativt erhvervsliv.

## Appendiks

Adresser på deltagerne i workshopen:

Birgitte Ahring, professor, BioCentrum-DTU, Bygning 227, 2800 Kgs. Lyngby,  
tlf.: 4525 6183, e-mail: [bka@biocentrum.dtu.dk](mailto:bka@biocentrum.dtu.dk)

Irini Angelidaki, lektor, Miljø & Ressourcer DTU, Bygning 113, 2800 Kgs. Lyngby  
tlf.: 4525 1429, e-mail: [ria@er.dtu.dk](mailto:ria@er.dtu.dk)

Per Balslev, Danfoss A/S, 6430 Nordborg, tlf.: 7488 2222, e-mail:  
[balslev@danfoss.com](mailto:balslev@danfoss.com)

Mads Bang, adjunkt, Aalborg Universitet, Pontoppidanstræde 101,  
9220 Aalborg Øst, tlf.: 9635 9259, e-mail: [mba@iet.aau.dk](mailto:mba@iet.aau.dk)

Flemming Besenbacher, professor, Interdisciplinært Nanoscience Center (iNANO),  
Aarhus Universitet, 8000 Aarhus C, tlf.: 8942 3604, e-mail: [fbe@inano.dk](mailto:fbe@inano.dk),

Niels Bjerrum, professor, Kemisk Institut, DTU Bygning 207, 2800 Kgs. Lyngby,  
tlf.: 4525 2307, e-mail: [njb@kemi.dtu.dk](mailto:njb@kemi.dtu.dk)

Ib Chorkendorff, professor, Institut for Fysik, DTU Bygning 312, 2800 Kgs. Lyngby,  
tlf.: 4525 3170, e-mail: [ibchork@fysik.dtu.dk](mailto:ibchork@fysik.dtu.dk)

Claus H. Christensen, professor, Kemisk Institut, DTU Bygning 207, 2800 Kgs.  
Lyngby, tlf.: 4525 2402, e-mail: [chc@kemi.dtu.dk](mailto:chc@kemi.dtu.dk) (var forhindret i at deltage i mødet,  
men bidrog til skrivningen)

Bjerne Clausen, afdelingsleder, associeret professor, Haldor Topsøe A/S, Nymøllevej  
55, 2800 Kgs. Lyngby, tlf.: 4527 2430, e-mail: [bsc@topsoe.dk](mailto:bsc@topsoe.dk)

Robert Feidenhans'l, afdelingschef, Afd. for Materialeforskning, Forskningscenter  
Risø, postboks 49, 4000 Roskilde, tlf.: 4677 5701, e-mail: [robert.feidenhansl@risoe.dk](mailto:robert.feidenhansl@risoe.dk)

Jens Oluf Jensen, lektor, Kemisk Institut, DTU Bygning 207, 2800 Kgs. Lyngby,  
tlf.: 4525 2314, e-mail: [joj@kemi.dtu.dk](mailto:joj@kemi.dtu.dk)

Torben Jensen, lektor, Kemisk Institut, Aarhus Universitet, 8000 Aarhus C,  
tlf.: 8942 3894, e-mail: [trj@chem.au.dk](mailto:trj@chem.au.dk)

Christine McKenzie, lektor, Kemisk Institut, Syddansk Universitet, Campusvej 55,  
5230 Odense M, tlf.: 6550 2518, e-mail: [chk@chem.sdu.dk](mailto:chk@chem.sdu.dk)

Mogens Mogensen, forskningsprofessor, Afd. for Materialeforskning,  
Forskningscenter Risø, postboks 49, 4000 Roskilde, tlf.: 4677 5726, e-mail:  
[mogens.mogensen@risoe.dk](mailto:mogens.mogensen@risoe.dk)

Mads Pagh Nielsen, adjunkt, Aalborg Universitet, Pontoppidanstræde 101,

9220 Aalborg Øst, tlf.: 9635 9259, e-mail: [mpn@iet.aau.dk](mailto:mpn@iet.aau.dk)

Jens K. Nørskov, professor, CAMP, Institut for Fysik, DTU Bygning 307, 2800 Kgs. Lyngby, tlf.: 4525 3175, e-mail: [norskov@fysik.dtu.dk](mailto:norskov@fysik.dtu.dk)

Allan Schrøder Pedersen, programleder, Afd. for Materialeforskning, Forskningscenter Risø, postboks 49, 4000 Roskilde, tlf.: 4677 5705, e-mail: [allan.schroeder.pedersen@risoe.dk](mailto:allan.schroeder.pedersen@risoe.dk)

Li Qingfeng, forskningslektor, Institut for Kemi, DTU Bygning 207, 2800 Kgs. Lyngby, tlf.: 4525 2318, e-mail: [lqf@kemi.dtu.dk](mailto:lqf@kemi.dtu.dk)

Jens Ulstrup, professor, Kemisk Institut, DTU Bygning 207, 2800 Kgs. Lyngby tlf.: 4525 2359, e-mail: [ju@kemi.dtu.dk](mailto:ju@kemi.dtu.dk)

Tejs Vegge, adjunkt, Institut for Fysik, DTU Bygning 307, 2800 Kgs. Lyngby tlf.: 4525 3204, e-mail: [vegge@fysik.dtu.dk](mailto:vegge@fysik.dtu.dk)

Steen Yde-Andersen, R&D Manager, IRD Fuel Cells A/S, Kullinggade 31, 5700 Svendborg, tlf.: 6280 0008, e-mail: [sya@ird.dk](mailto:sya@ird.dk)