

High pressure, high purity, dry hydrogen (Hy & Dry)

Openbare samenvatting eindrapport

RVO Reference	TWAS119009
Partners	TU Delft, HyET Hydrogen, Tielo-Tech (coordinator)
Project duration	1 October 2019 - 1 February 2022
Title	High pressure, high purity, dry hydrogen (Hy & Dry)
Acronym	Hy & Dry
Date	22 April 2022

“Het project is uitgevoerd met subsidie van het Ministerie van Economische Zaken, Nationale regelingen EZ-subsidies, Topsector Energie uitgevoerd door Rijksdienst voor Ondernemend Nederland.”

Introductie

Voor het gebruik van waterstof zijn een aantal toepassingen in ontwikkeling, zoals daar zijn het gebruik in de mobiliteitssector, gebruik in de bebouwde omgeving, en bij verschillende energie-intensieve industrieën (chemie, raffinaderijen, en de staalindustrie). In het Hy & Dry project is gewerkt aan hogedruk waterstof en wel om de waterstof geschikt te maken voor de mobiliteitssectoren, en meer specifiek het gebruik in een waterstoftankstation (*hydrogen refueling station*, HRS).

Een van de belangrijkste doelstelling van het project was om de hoeveelheid water in gecompriëerde waterstof te controleren. Het uitgangspunt is om de waterstof te comprimeren met behulp van een elektrochemische waterstof compressor (*electrochemical hydrogen compressor*, EHC) zoals die wordt ontwikkeld door HyET Hydrogen. Op deze manier kan de waterstof tijdelijk worden opgeslagen bij een HRS en vervolgens worden gebruikt als 'transportbrandstof' voor auto's. Bij de elektrochemische compressie van waterstof is er voor het functioneren van de compressor een kleine hoeveelheid water nodig, en een deel van dit water belandt in de gecompriëerde waterstof.

Echter voor verschillende toepassingen, onder andere dus bij waterstoftankstation maar ook in brandstofcellen, is er een maximum aan de hoeveel water die aanwezig mag zijn in de gecompriëerde waterstof. Voor de optimale werking van een waterstoftankstation dient de waterfractie in waterstof beneden de 5 ppm te zijn.

Voor het beschrijven van het gecombineerde proces van elektrochemische waterstof compressie en het drogen van de waterstof is gebruik gemaakt van zowel experimenteel als modelerend werk. Enerzijds voor het bepalen van het massa transport van water-waterstof mengsels door een Nafion membraan. Een Nafion membraan is een belangrijk onderdeel van de *membrane electrode assembly* (MEA) van de elektrochemische waterstof compressor. De verschillende experimentele en modelerend activiteiten geven inzicht in de hoeveelheid water in de gecompriëerde waterstof aan de uitgang van de EHC. Anderzijds, is zowel experimenteel als theoretisch de hoeveelheid water in gecompriëerd waterstof als functie van de totale druk bepaald. Theoretisch is dit gedaan over een range voor de druk van 100 tot 1000 bar. Vanwege praktische aspecten is het experimenteel werk beperkt tot een maximale druk van ongeveer 300 bar.

De in dit project uitgevoerde werkzaamheden beslaan twee aspecten. Ten eerste het modeleren van het thermodynamische gedrag van mengsels van water en waterstof tot drukken van 1000 bar. Hierbij zijn de volgende aspecten bestudeerd: (1) thermodynamica parameters zoals het fase gedrag (*vapor-liquid equilibrium*, VLE), (2) het massa transport van water-waterstof mengsel door een Nafion membraan. Deze werkzaamheden zijn uitgevoerd bij de Technische Universiteit van Delft (TU Delft) en wel met behulp van *molecular dynamics* simulaties, en (3) het ontwikkelen en testen van een regenereerbare hogedruk waterstof-droger door HyET Hydrogen.

Molecular dynamics simulaties van water-waterstof systemen

Het doel van dit deel van het onderzoek is om de verschillende aspecten die nodig zijn om een mengsel van water en waterstof tot hoge drukken (1000 bar) te beschrijven. Het onderzoek is voornamelijk gebaseerd op computer simulaties op basis van zogenaamde *molecular dynamics*. Hierbij wordt een *force field* gedefinieerd die in dit geval de interacties tussen water en waterstof moleculen beschrijft, waarbij dan verschillende condities voor de druk, de temperatuur, en de samenstelling van het water-waterstof mengsel

kunnen worden gebruikt. Zowel het fase-gedrag van water - waterstof mengsels als het transport van mengsels van water en waterstof door een Nafion membraan zijn succesvol gemodelleerd.

Regeneerbare hogedruk waterstof droger

De statische thermodynamische berekeningen voor het fase gedrag van water - waterstof mengsels zijn gebruikt om de regeneerbare hogedruk waterstof droger te ontwikkelen. In een aantal stappen is een hogedruk droger ontworpen en getest. Er zijn in eerste instantie lab-schaal experimenten gedaan, en vervolgens is het systeem opgeschaald, met de meest uitgebreide test op basis van een duurttest van meer dan 35 uur met een combinatie van een EHC module en de hogedruk droger. Hierbij is waterstof verkregen met vochniveau van een dauwpunt temperatuur van $T = -75\text{ }^{\circ}\text{C}$, wat beduidend lager is dan het doel van $T = -62\text{ }^{\circ}\text{C}$. Tijdens de meeste experimenten is de waterstof van (ruwweg) 1 bar naar maximaal 300 bar gecomprimeerd.

Resultaten en conclusie

Binnen het Hy & Dry project is twee jaar lang samengewerkt gericht op het bereiken van specifieke condities voor de hoeveelheid water dat in gecomprimeerde waterstof van rond de 300 bar is opgelost. De belangrijkste resultaten kunnen als volgt worden samengevat:

1. Binnen het project heeft HyET een hogedruk waterstof droger is ontworpen, gebouwd, en uitgebreid getest. De hogedruk droger is geschikt is om de gecomprimeerde waterstof gasstroom die uit de *electrochemical hydrogen compressor* (EHC) komt te drogen tot de gewenste specificaties. De belangrijkste conclusie op basis van het testen van de hoge druk droger is dat over een langere periode de gewenste specificaties van 5 ppm water (in waterstof) en een dauwpunt temperatuur van $T = -62\text{ }^{\circ}\text{C}$ zijn bereikt. Hierbij is de waterstof beschikbaar op een druk van 300 bar.
2. De werkzaamheden bij de TU Delft hebben geleid tot succesvol modeleren van de thermodynamische eigenschappen voor het fase gedrag van water - waterstof mengsels tot 1000 bar, en het beschrijven van het massa transport van water - waterstof mengsels door een Nafion membraan. Een Nafion membraan is een belangrijk onderdeel van de *membrane electrode assembly* (MEA) van de elektrochemische waterstof compressor. Het massa transport van water - waterstof mengsels door het Nafion membraan bepaalt in grote mate de hoeveelheid water in de gecomprimeerde waterstof. Dit werkt heeft tijdens de twee jaar dat het project heeft gelopen geleid tot drie *peer-reviewed* publicaties.