

Abstract of thesis presented to the Senate of Universiti Malaysia Terengganu in fulfilment of the requirements for the degree of Master of Science

**MODIFICATION OF HYDROGEN STORAGE PERFORMANCE IN LiAlH_4
BY CATALYST ADDITION**

MUHAMMAD AMIRUL NAWI BIN AHMAD

November 2022

Main Supervisor : Associate Professor Ts. Mohammad Bin Ismail, Ph.D.

Faculty : Faculty of Ocean Engineering Technology and Informatics

In comparison to more traditional fuels, such as fossil fuels, hydrogen acts as a kind of free energy carrier. Cleanliness, environmental friendliness and the formation of water as a non-polluting by-product during practical applications are some of the benefits that come with it. Consequently, the use of hydrogen as a main fuel might lead to significant reductions in greenhouse gas emissions and dependency on fossil fuels. With its lightweight, cheap cost, large capacity, and faster kinetics, solid-state hydrogen storage has lately attracted researchers' interest in overcoming the challenges of onboard applications. Most attention was paid to complex hydrides, such as LiAlH_4 , which have gravimetric capacities that can theoretically reach 10.5 wt% of H_2 . The sluggish sorption rate along with considerably high decomposition temperature make it ineffective as practical hydrogen storage material. The goal of this research is to use catalysts or additives to enhance LiAlH_4 's hydrogen sorption characteristics. During this study, LiAlH_4 was milled with a variety of catalysts, including K_2NiF_6 , K_2ZrF_6 and CuFe_2O_4 , and the hydrogen sorption performances, structural characterisation, thermal properties as well as surface morphology were studied. LiAlH_4 's dehydrogenation kinetics and decomposition temperature are considerably improved by the inclusion of these catalysts. With the addition of CuFe_2O_4 , the initial decomposition temperature of LiAlH_4 was lowered to 80 °C compared to other catalysts, making it the most effective. An increase in the dehydrogenation rate of around 3.1 wt% was achieved in the first 100 minutes at 90 °C. The in-situ formation of novel species during the dehydrogenation process is

most likely responsible for these enhancements. For the K_2NiF_6 -doped LiAlH_4 system, the improvement shown in the XRD study was attributed to the production of novel species such as AlNi and LiF . LiF was also observed as one of the in-situ species formed during the dehydrogenation process of K_2ZrF_6 -doped LiAlH_4 system along with other species such as Al_3Zr_4 , ZrH_2 and K-containing. As for CuFe_2O_4 -doped LiAlH_4 system, the Fe, LiFeO_2 , and amorphous Cu or Cu-containing that were generated in situ during the dehydrogenation process are thought to have catalysed the changes in the desorption process.

Abstrak tesis yang dikemukakan kepada Senat Universiti Malaysia Terengganu sebagai memenuhi keperluan untuk Ijazah Sarjana Sains

**PENGUBAHSUAIAN PRESTASI PENYIMPANAN HIDROGEN DALAM
LiAlH₄ DENGAN TAMBAHAN PEMANGKIN**

MUHAMMAD AMIRUL NAWI BIN AHMAD

November 2022

Penyelia Utama : Profesor Madya Ts. Mohammad Bin Ismail, Ph.D.

Fakulti : Fakulti Teknologi Kejuruteraan Kelautan dan Informatik

Berbanding dengan bahan api yang lebih tradisional, seperti bahan api fosil, hidrogen bertindak sebagai sejenis pembawa tenaga bebas. Kebersihan, mesra alam sekitar dan pembentukan molekul air sebagai produk sampingan yang tidak mencemarkan semasa aplikasi praktikal adalah beberapa faedah yang datang dengannya. Oleh itu, penggunaan hidrogen sebagai bahan api utama mungkin membawa kepada pengurangan ketara dalam pelepasan gas rumah hijau dan pergantungan kepada bahan api fosil. Dengan kos yang murah, ringan, kapasiti yang besar, dan kinetik yang lebih cepat, penyimpanan hidrogen keadaan pepejal akhir-akhir ini telah menarik minat penyelidik untuk mengatasi cabaran aplikasi onboard. Kebanyakan perhatian diberikan kepada hidrida kompleks, seperti LiAlH₄, yang mempunyai kapasiti gravimetrik yang secara teorinya boleh mencapai 10.5 wt% daripadanya H₂. Kadar penyerapan yang perlahan bersama-sama dengan suhu penguraian yang sangat tinggi menjadikannya tidak berkesan sebagai bahan penyimpanan hidrogen praktikal. Matlamat penyelidikan ini adalah untuk menggunakan pemangkin atau bahan tambahan untuk meningkatkan ciri-ciri penyerapan hidrogen LiAlH₄. Semasa kajian ini, LiAlH₄ telah dikisar dengan pelbagai pemangkin, termasuk K₂NiF₆, K₂ZrF₆ dan CuFe₂O₄, dan prestasi penyerapan hidrogen, pencirian struktur, sifat terma serta morfologi permukaan telah dikaji. Kinetik dehidrasi dan suhu penguraian LiAlH₄ bertambah baik dengan penggunaan pemangkin ini. Dengan penambahan CuFe₂O₄, suhu penguraian awal LiAlH₄ diturunkan kepada 80 °C berbanding pemangkin lain, menjadikannya yang paling berkesan. Peningkatan kadar dehidrogenasi sekitar 3.1

wt% dicapai dalam 100 minit pertama pada 90 °C. Pembentukan spesies baru in-situ semasa proses dehidrogenasi kemungkinan besar bertanggungjawab untuk peningkatan ini. Untuk sistem LiAlH_4 dicampur K_2NiF_6 , peningkatan yang ditunjukkan dalam kajian XRD adalah disebabkan oleh penghasilan spesies baru seperti AlNi dan LiF . LiF juga diperhatikan sebagai salah satu spesies in-situ yang terbentuk semasa proses dehidrogenasi sistem LiAlH_4 dicampur K_2ZrF_6 bersama-sama dengan spesies lain seperti Al_3Zr_4 , ZrH_2 dan K-mengandungi. Bagi sistem LiAlH_4 dicampur CuFe_2O_4 , Fe , LiFeO_2 , dan Cu amorfus atau Cu -mengandungi yang dihasilkan in-situ semasa proses dehidrogenasi dianggap telah memangkin perubahan dalam proses desorpsi.