

Trójskładnikowy wodorek żelazowo-magnezowy o wzorze chemicznym Mg_2FeH_6 jest materiałem charakteryzującym się największą, wśród wszystkich znanych związków wodorowych, zawartością objętościową wodoru – 150 kg/m^3 . Wartość ta jest ponad dwukrotnie wyższa niż dla ciekłego wodoru oraz siedmiokrotnie wyższa niż dla wodoru sprężonego (przy ciśnieniu około 20 MPa). Zawartość masowa wodoru, w tym związku, to 5,46 % wag. Ze względu na wspomniane właściwości materiał ten jest jednym z najczęściej badanych związków mających potencjalne zastosowanie jako materiał do magazynowania wodoru cieplnej (w temperaturze powyżej $500 \text{ }^\circ\text{C}$).

Niestety synteza tego związku bezpośrednio z czystych pierwiastków jest utrudniona. Dzieje się tak ponieważ w układzie równowagi Mg-Fe nie istnieje żaden związek międzymetaliczny oraz brak jest też rozpuszczalności wzajemnej tych dwóch pierwiastków. Dopiero w trójskładnikowym układzie Mg-Fe-H wodór staje się składnikiem wiążącym i przyczynia się do możliwości wytworzenia związku Mg_2FeH_6 . Po raz pierwszy wodorek ten został wytworzony w roku 1984 przez zespół pod kierownictwem J. Didisheim'a. Jednakże wydajność tego procesu utrzymywała się na poziomie 50 %. Obecnie znanych i dobrze opracowanych jest już kilka sposobów wytwarzania tego wodoru. Jest to między innymi spiekanie proszków elementarnych Fe oraz Mg w podwyższonych temperaturach (około $500 \text{ }^\circ\text{C}$) pod wysokim ciśnieniem wodoru (20 -120 bar) przez długi czas, dochodzący nawet do kilku dni. Kolejny sposób to mechaniczna synteza w atmosferze obojętnej (MA – mechanical alloying) proszków MgH_2 i Fe oraz mechaniczna synteza w atmosferze wodoru (RMA – reactive mechanical alloying) proszków czystych pierwiastków Mg i Fe. Ostatni ze sposobów to mielenie mechaniczne, przez relatywnie krótki czas, proszków wodoru magnezu oraz żelaza i następne wygrzewanie powstałej mieszaniny pod ciśnieniem wodoru. W ten sposób efektywność procesu może wzrosnąć nawet do 97 %.

Jednakże w każdym z wymienionych powyżej przypadków otrzymywania trójskładnikowego wodoru udział bierze proszek żelaza o dużej czystości chemicznej. Żelazo wykorzystywane zwykle do procesu syntezy Mg_2FeH_6 posiada sieć krystaliczną regularnie przestrzenie centrowaną (RPC). Jak powszechnie wiadomo żelazo ma również inną odmianę alotropową o sieci krystalicznej regularnie ściennie centrowanej (RSC). Jest to odmiana alotropowa stabilna w temperaturze powyżej 910°C , ale stopy żelaza o stabilnej sieci A1 uzyskiwane są przez dodatki dostatecznie dużej ilości pierwiastków austenitotwórczych. Stabilność chemiczna austenitu stopowego jest wyjątkowo wysoka i z tego powodu stale austenityczne wykorzystywane są jako materiały kwasoodporne, żarowytrzymałe, implantacyjne. Z czysto naukowego punktu widzenia, bardzo ciekawym zagadnieniem jest zbadanie możliwości wytworzenia Mg_2FeH_6 z prekursora (stali austenitycznej), który zawiera co prawda bardzo znaczne ilości żelaza ale w formie o bardzo niskiej w stosunku do czystego żelaza aktywności chemicznej. Wykorzystanie tej fazy do syntezy trójskładnikowego wodoru żelazowo-magnezowego nie zostało zbadane, choć pojawiają się doniesienia o reakcjach magnezu ze stopowym austenitem w formie nanodrutów. Oprócz charakteru poznawczego, zbadania mechanizmów reakcji, istnieje też kwestia wykorzystania praktycznego w przyszłości przedstawionej powyżej koncepcji wytwarzania wodoru ze stali. Wykorzystanie stali pochodzącej ze złomu może przyczynić się do zwiększenia procesu recyklingu tego rodzaju materiałów oraz znaczącego obniżenia kosztu produkcji wodoru magnezowo-żelazowego, co w obecnym świecie jest bardzo dużą zaletą.

Zasadniczym celem wnioskowanego projektu jest zbadanie wpływu alotropii żelaza na możliwość oraz efektywność syntezy związku Mg_2FeH_6 oraz porównanie właściwości tak wytworzonego wodoru z wodorkiem otrzymywanym ze zwykłego żelaza. W tym celu wykorzystane zostaną takie techniki badawcze jak: dyfrakcja rentgenowska (analiza fazowa proszków wyjściowych oraz materiału po syntezie), skaningowa mikroskopia elektronowa (obserwacja mikroskopowa oraz analiza składu chemicznego zarówno proszków przed jak i po procesie syntezy), skaningowa kalorymetria różnicowa, termogravimetria oraz spektroskopia mas (techniki te pozwolą na obserwację charakteru przemiany oraz wyznaczenie charakteryzujących ją parametrów), dla próbek po wodorowaniu wykonane zostaną również izotermy absorpcji i desorpcji wodoru.

Dotychczas poczyniono już wstępne badania, które udowadniają możliwość syntezy proszku MgH_2 z proszkiem stali austenitycznej (żelazo gamma), badania zaplanowane we wnioskowanym projekcie pozwolą na zbadanie mechanizmów tworzenia oraz wpływu warunków procesu na jego efektywność.