Fantastic Hydrogen and Where to Find It

MAX PLANCK INSTITUTE FOR CHEMISTRY

- Chemische Kopplung von atmosphärischem Wasserstoff und Methan im Hinblick auf eine zukünftige Wasserstoff-Wirtschaft

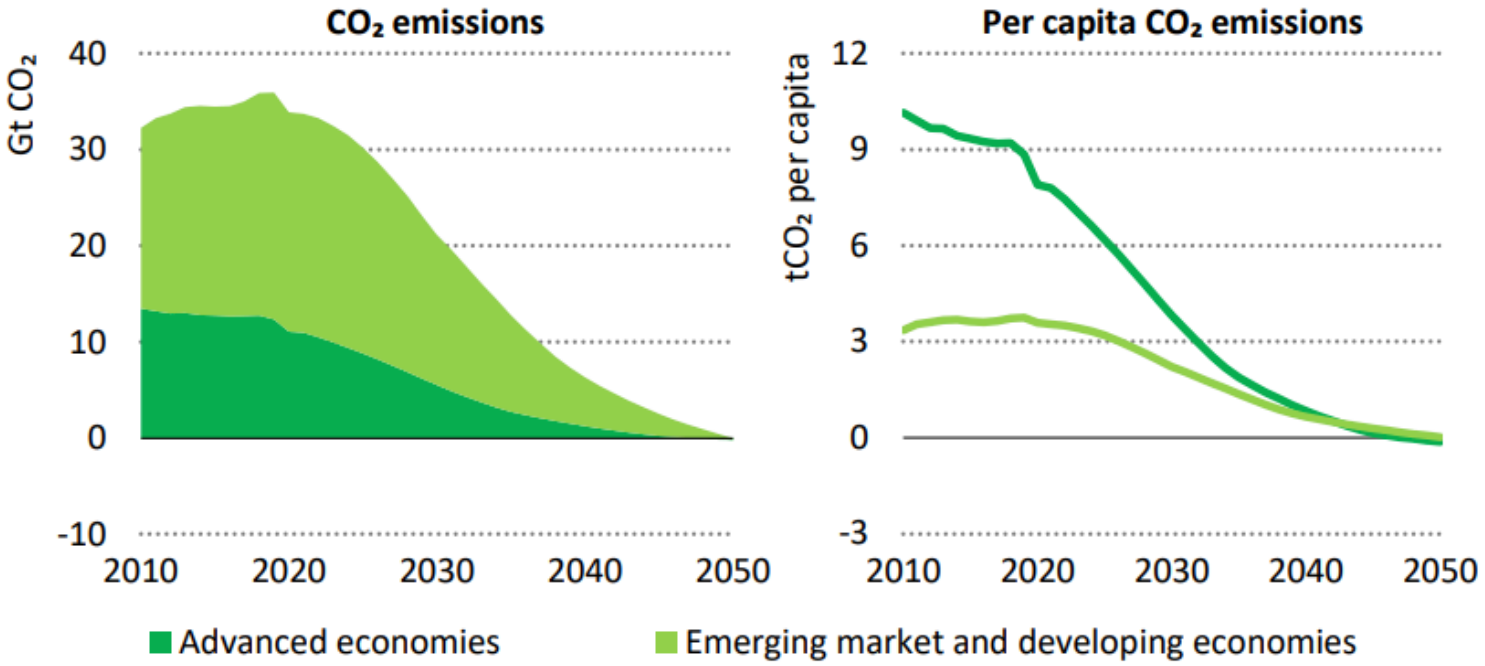
Benedikt Steil, C. Brühl, S. Gromov, K. Klingmüller, J. Lelieveld, A. Pozzer, N. Surawski

- Hintergrund,
  - Was ist globale Wasserstoffwirtschaft?
  - Wo kommt der Wasserstoff (H_2) her?
  - Leckraten

- Wasserstoff in der Atmosphäre
  - Wie gut können wir H_2 modellieren?
  - Wie stark sind atm. Methan (CH_4) und H_2 gekoppelt.
    => atm. chem. Klimawirkung von Wasserstoffemissionen

- Zusammenfassung und Ausblick

Internationale Energie Agentur (IEA), Net Zero by 2050



IEA. All rights reserved.

CO_2 emissions fall to net zero in advanced economies around 2045 and globally by 2050. Per capita emissions globally are similar by the early-2040s.

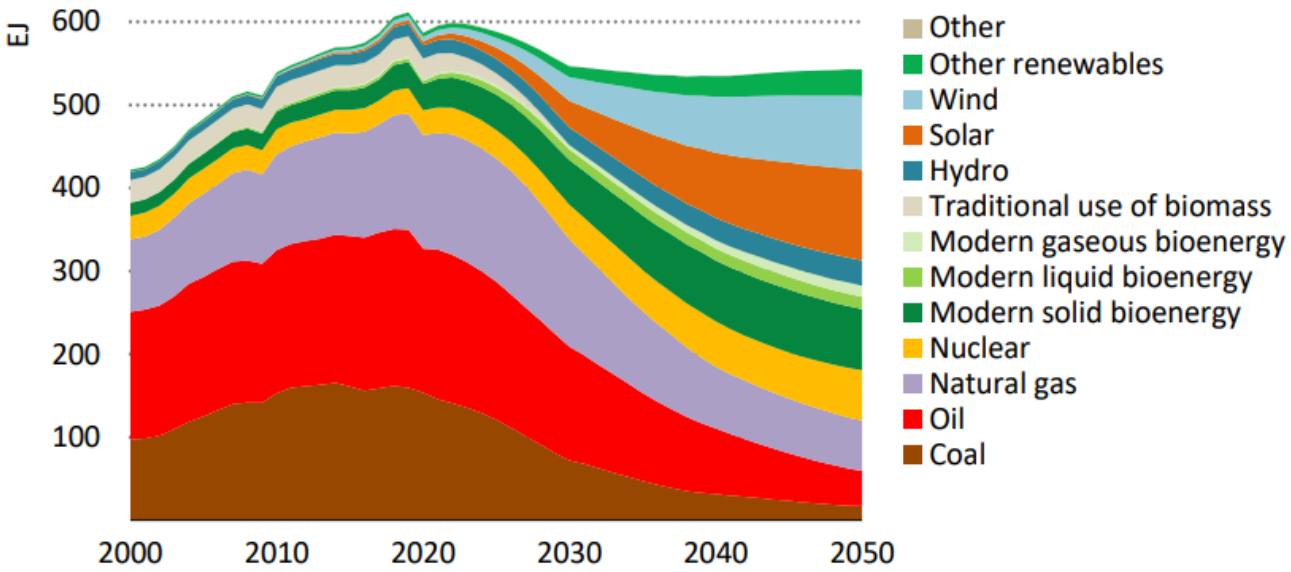
Sozio-ökonomische Randbed.:

Weltbevölkerung in 2050:
10 Milliarden

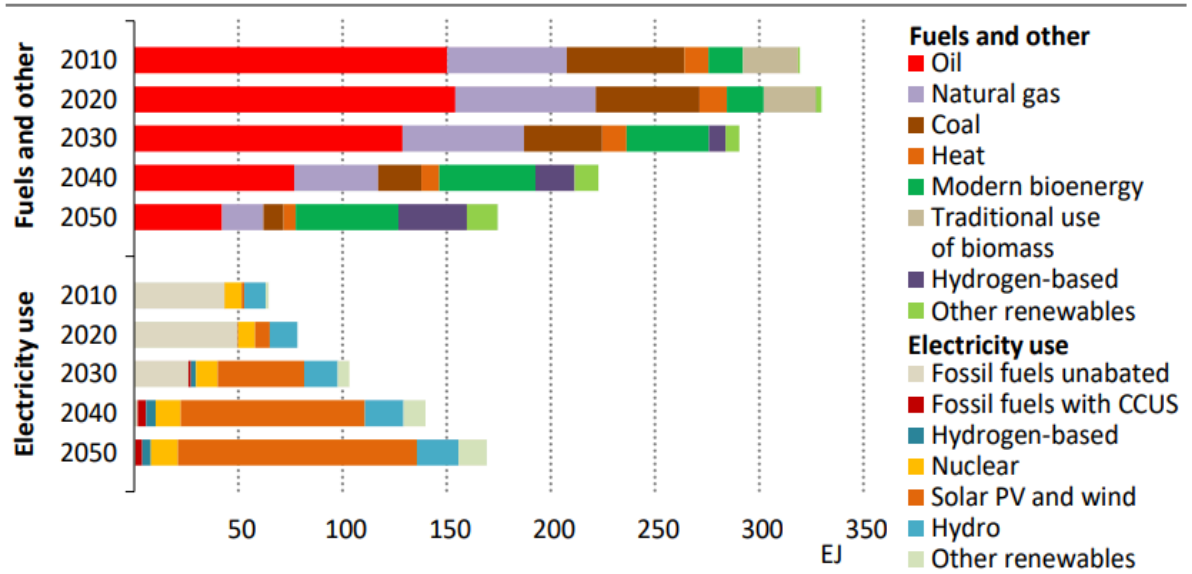
3% reales Wachstum der globalen Wirtschaft (GDP)

IEA, Net Zero by 2050, 2021, p. 53, 57

IEA: Energieprojektion, 2000 - 2050



IEA. All rights reserved.



IEA. All rights reserved.

Erneuerbare – und Kernenergie ersetzen fossile Energieträger. 2020: 80% , 2050: 20%

Anteil der elektrischen Energie steigt von 20% auf 50%

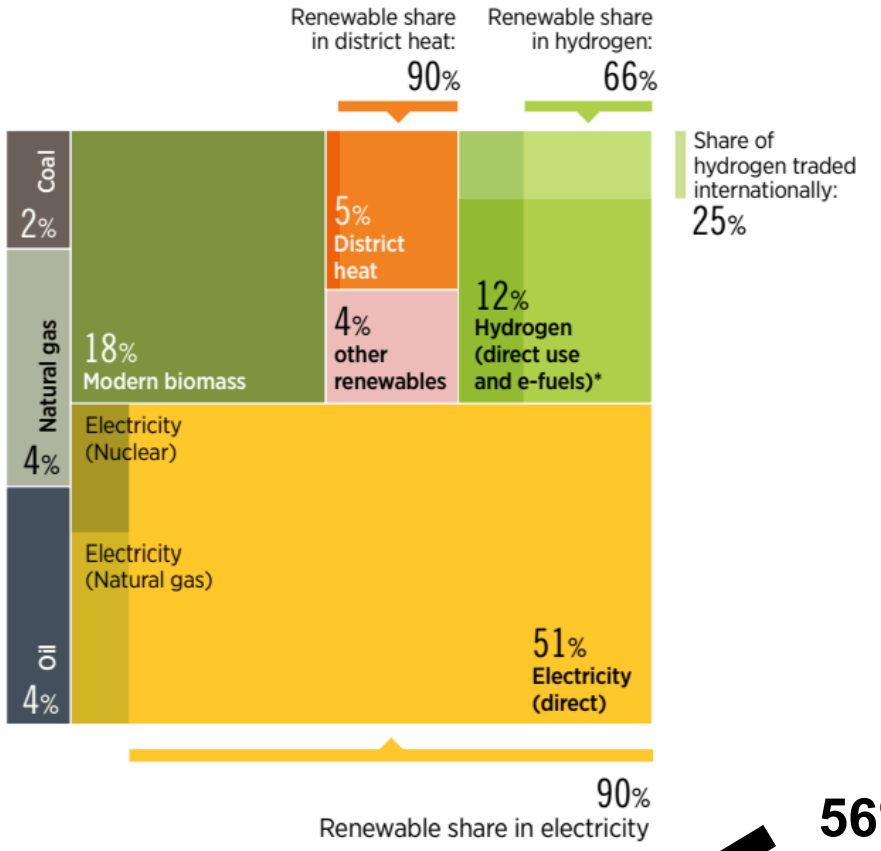
2050 Energieangebot: 550 EJ

2050 Endenergieverbrauch: 340 EJ

IEA, 2021, p. 57, 61

IRENA, International Renewable Energy Agency

2050 Endenergieverbrauch: 348 EJ

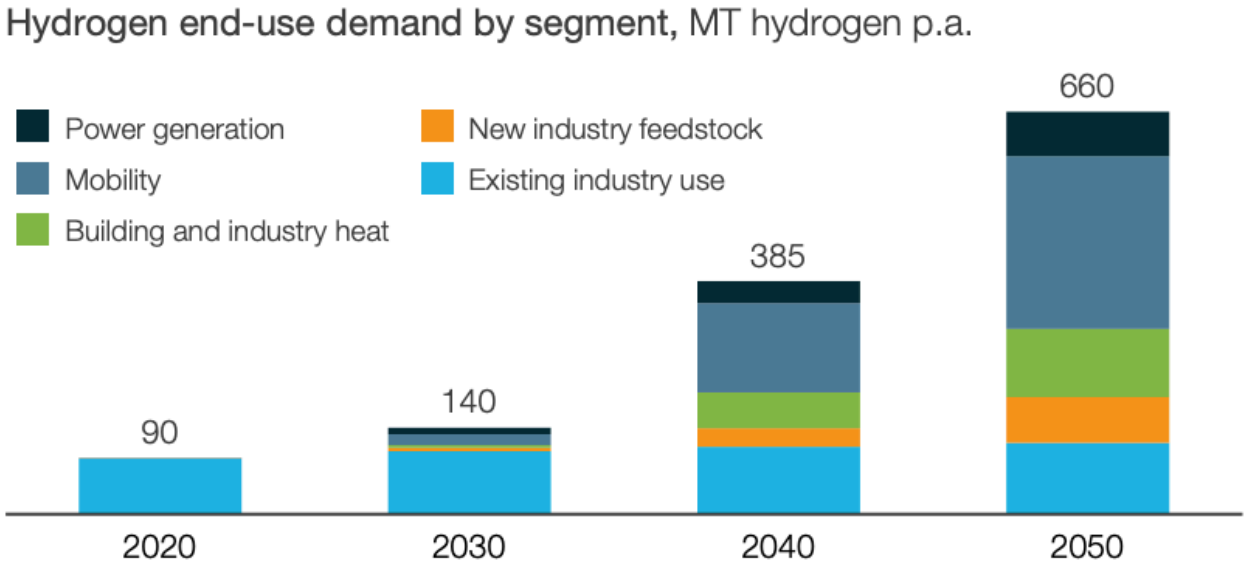


Irena: **522 Mt H_2**, 12% EEV

World Energy Transition Outlook, 2022, p.234-235
www.irena.org/publications

56% Effizienz

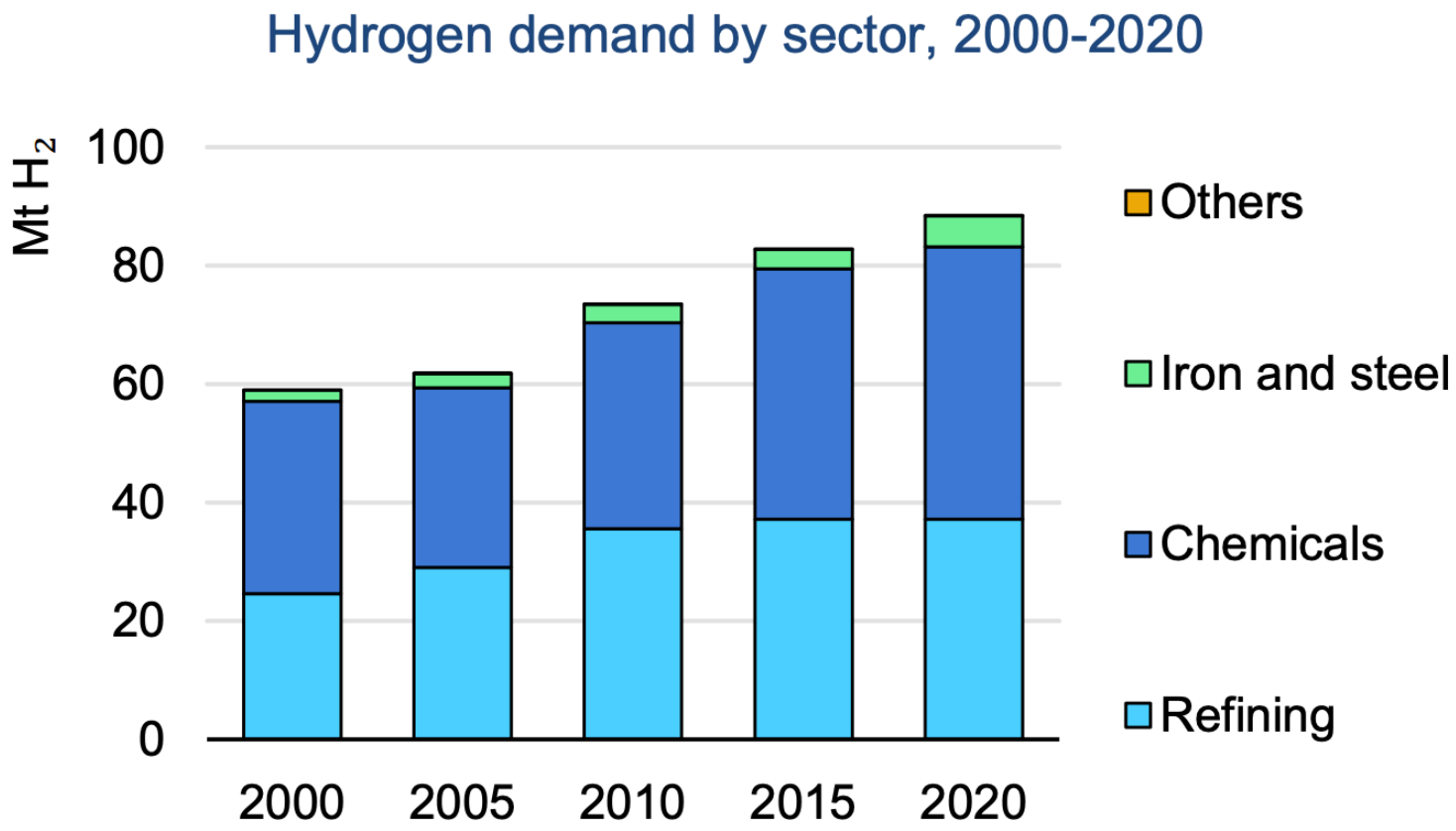
World Hydrogen Council, WHC, Net Zero 2050 (NZ2050)



WHC: **660 Mt H_2**, 15% EEV

Hydrogen for Net-Zero, 2021, p. 13
Hydrogen Council, McKinsey & Company, www.hydrogencouncil.com

Entwicklung der H_2 Nachfrage



IEA. All rights reserved.

Note: "Others" refers to small volumes of demand in industrial applications, transport, grid injection and electricity generation.

IEA, Global Hydrogen Review, 2021

NZ2050 requires a tripling of the growth rate of H_2 productíon

yr	H_2 (Mt)	jährl. Zunahme (%/yr)
2005	60	
		2.7
2020	90	
		4.5
2030	140	
		8
2050	660	

Der Wasserstoff-Regenbogen

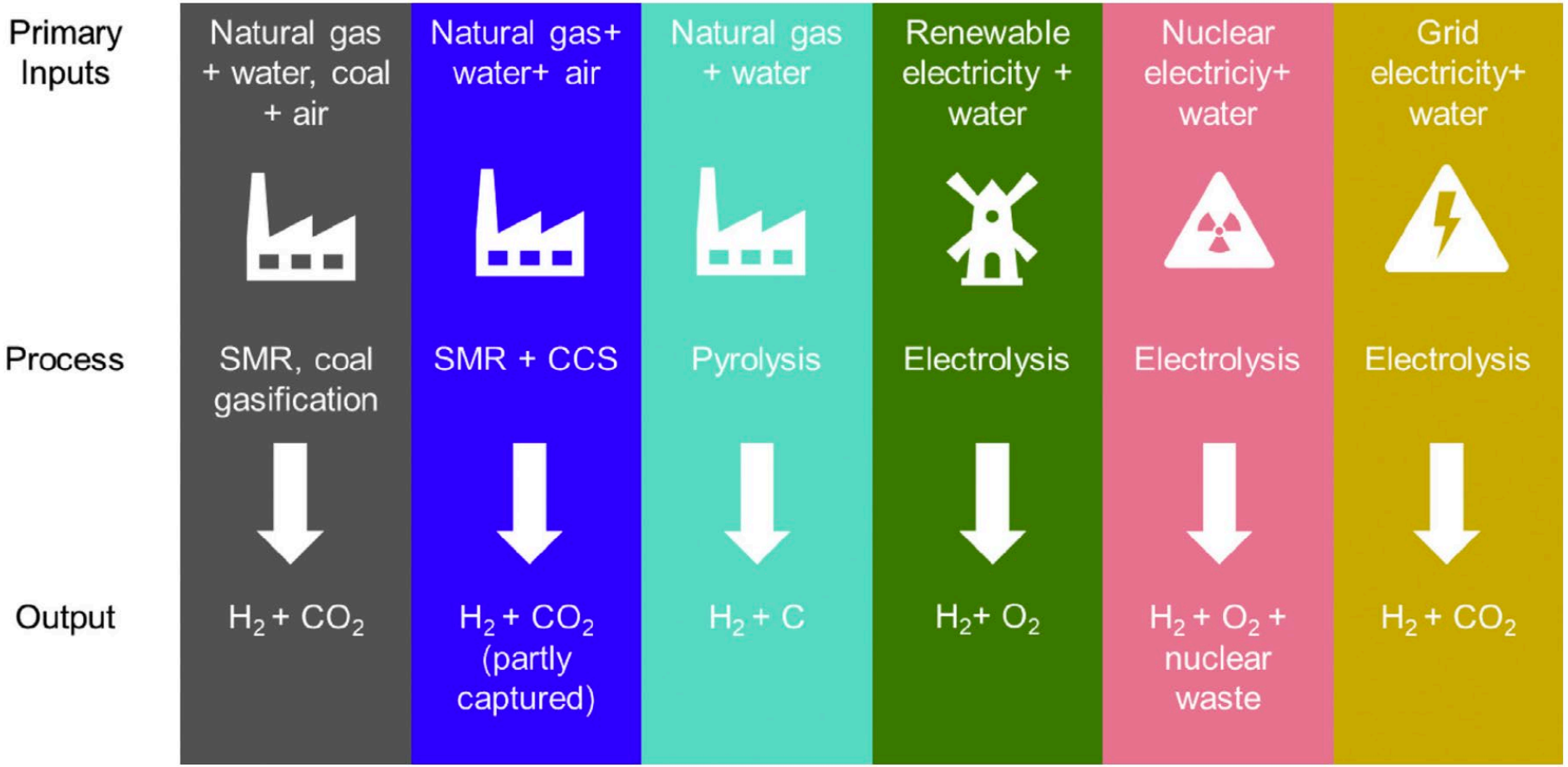


Fig. 8 – Summary of hydrogen production pathways and colors.

SMR: Steam Reforming
Dampfreforming

CCS: Carbon Capture and Storage
CO_2 Abscheidung und Speicherung

Ajanovic et al., 2022

Ein weiter Weg, aktuelle kohlenstoffarme H_2-Prod.

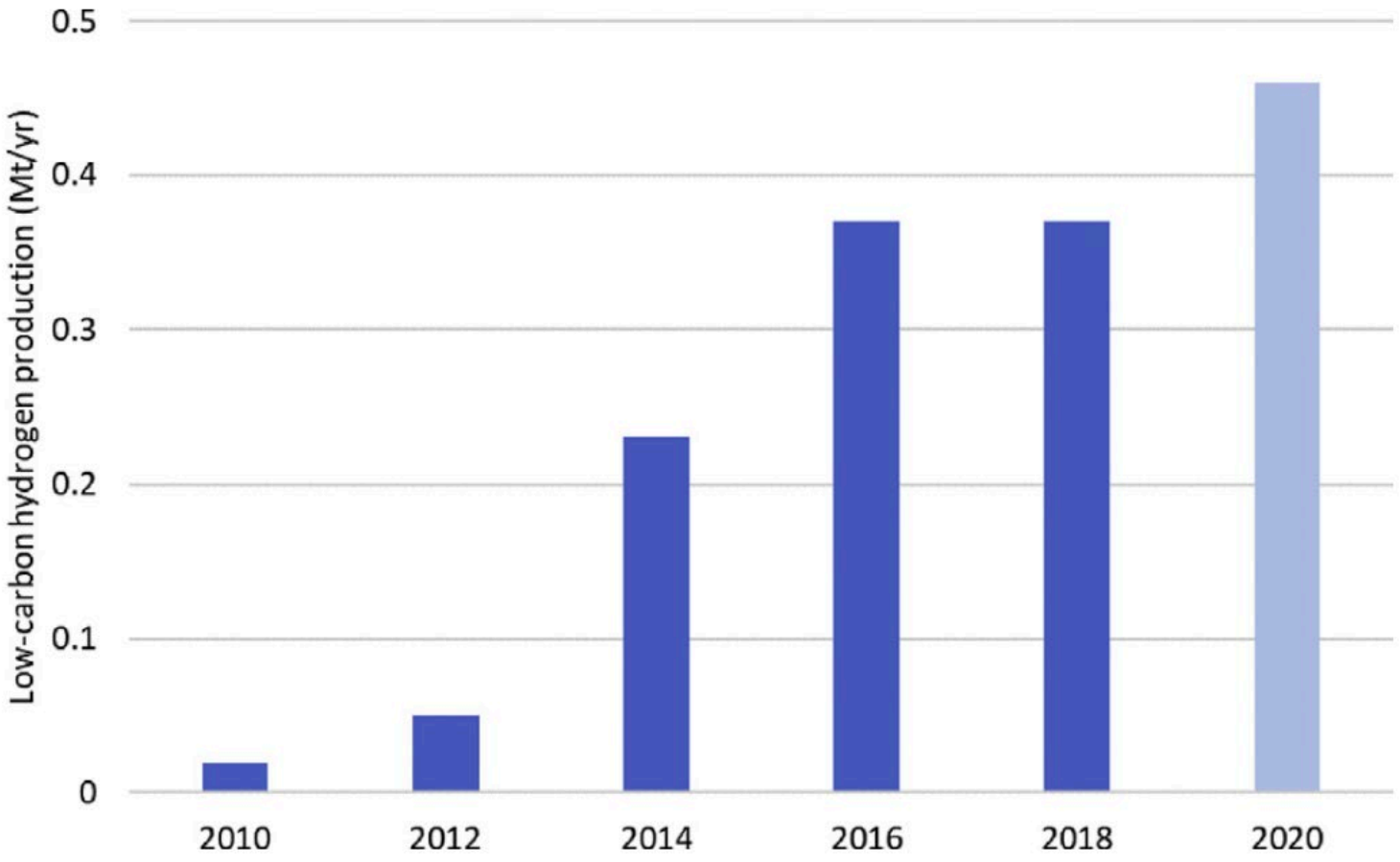


Fig. 1 – Low-carbon hydrogen production, 2010–2020 [2].

Aktuelle H_2 produktion

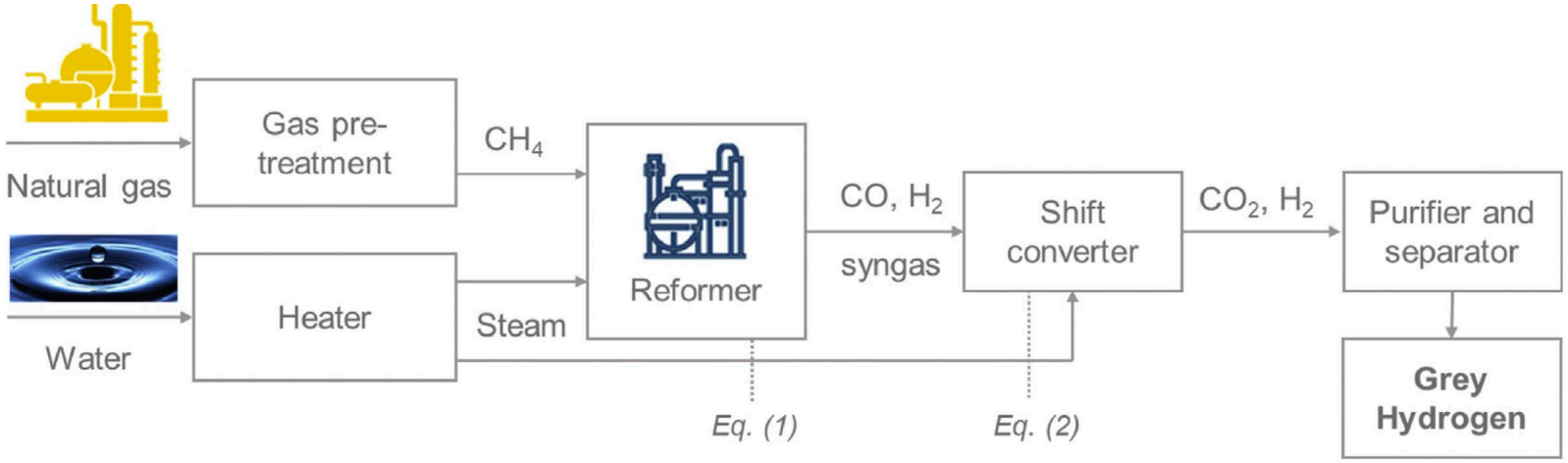
- **60% ist grau**
- **40% aus Kohle, China**
  $C + 2\ H_2O \rightarrow CO_2 + 2\ H_2$
- **40% Produkt der chemischen Industrie**

Ajanovic et al., 2022

H_2 aus Erdgas (NG), Methan CH_4

MAX PLANCK INSTITUTE FOR CHEMISTRY

60 – 85% efficiency



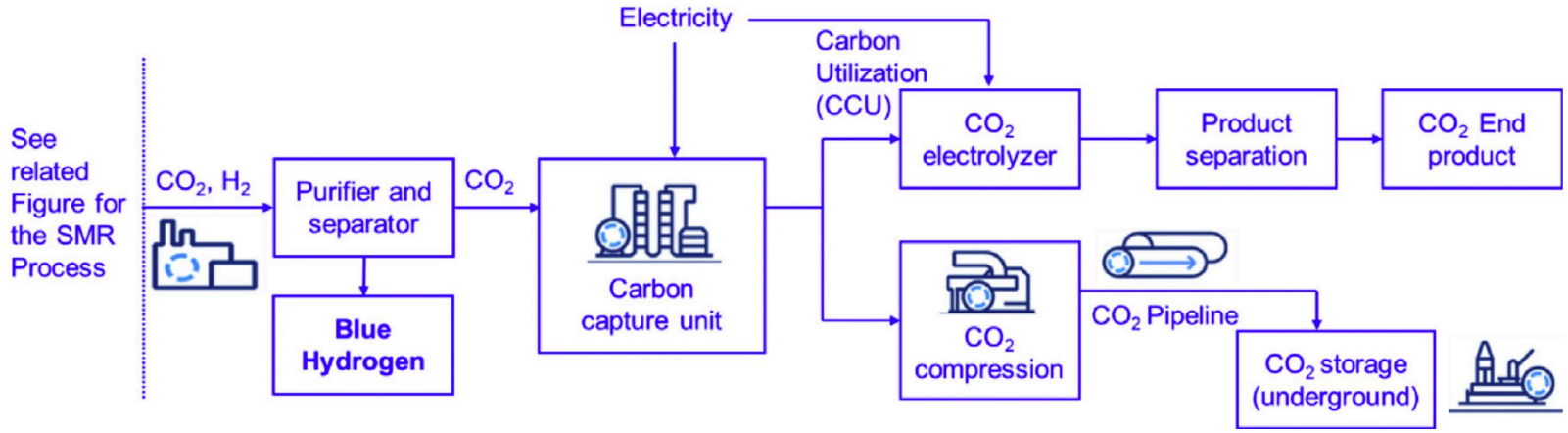
(1) $CH_4 + H_2O \rightarrow CO + 3\,H_2$

(2) $CO + H_2O \rightarrow CO_2 + H_2$

$$CH_4 + 2\,H_2O \rightarrow CO_2 + 4\,H_2$$

Fig. 4 – Schematic production process of Steam reforming of natural gas (SMR).

5 – 14% efficiency loss



Blaues H_2, CO_2 Abscheidung und Speicherung > 90%

Fig. 6 – Schematic production process of carbon capture and utilization (CCU) and carbon capture and storage (CCS) [13], for the preceding SMR process, refer to Fig. 4.

Ajanovic, 2022
Romano, 2021

H_2 leakage rate, LR(H_2)

Leakage source process	Category	Scale (Mt)	2050 high-leakage center case	References	2050 low-leakage center case
Grey hydrogen	Production	8	1.0%	[Xia et al. 2019]	0.5%
Blue hydrogen	Production	197.6	1.5%	[Barrett & Cassarino, 2021	1.0%
Green hydrogen	Production	322.4	4.0% **4%**	[Harrison & Peters, 2013]	2.0% **2%**
Natural gas blending	Application	59.9	0.9%	[Alvarez et al. 2011] [Mejia & Brouwer, 2018]	0.5%
Chemical synthetic fuels	Application	159.7	0.5%		0.2%
Iron and steel	Application	40.4	0.5%		0.2%
Electricity generation	Application	88	3.0%	[Alvarez et al. 2011] [Mejia & Brouwer, 2018]	1.5%
Road transport	Application	93.2	2.3%	[Alvarez et al. 2011] [Mejia & Brouwer, 2018]	1.0%
Aviation	Application	7.8	3.0%		
Shipping	Application	2.9	2.3%		1.0%
Refineries	Application	8.4	0.5%		0.2%
Buildings	Application	16.2	0.8%	[Fischer et al. 2018]	0.5%
Other industries	Application	28.3	0.5%		0.2%
Miscellaneous	Application	23.2	0.5%		0.5%
Pipeline transport and storage	Delivery	143.1	2.0%	[Panfilov, 2015] [US DOE targets, 2022]	1.0%
Pipeline local distribution	Delivery	76.5	0.4%	[Weller et al. 2020] [Mejia & Brouwer, 2018]	0.2%
Truck transport and storage	Delivery	55.9	5.0%	[US DOE, 2017] [Petipas, 2018]	2.5%
Direct use on site	Delivery	252.4	0.2%	[Panifilov, 2015] [Mejia & Brouwer, 2018]	0.2%

MAX PLANCK INSTITUTE FOR CHEMISTRY

Fan et al., 2022, Columbia | SIPA, CGEP, https://www.energypolicy.columbia.edu/wp-content/uploads/2022/07/HydrogenLeakageRegulations_CGEP_Commentary_063022.pdf

- Basierend auf IEA Szenario, 528 Mt H_2, für eine kohlenstoffneutrale Weltwirtschaft
- **Detaillierte Leckanalyse**, basierend auf der Idee, dass H_2 3 Sektoren passieren muss: **Produktion, Transport, Nutzung**
- Totale Leckrate (LR): HL case: 5.58%, LL case: 2.89%

=> Mittlere Leckrate: 4.24%,

e.g. Warwick et al., 2022, total LR: 1% and 10%

Wasserstoff in der Atmosphäre

MAX PLANCK INSTITUTE FOR CHEMISTRY

Atm. Chem. Senke

Reaktion mit Hydroxyl- Radikal

$H_2 + OH \Rightarrow H + H_2O$

Atm. Chem. Produktion

Photolyse von Formaldehyd

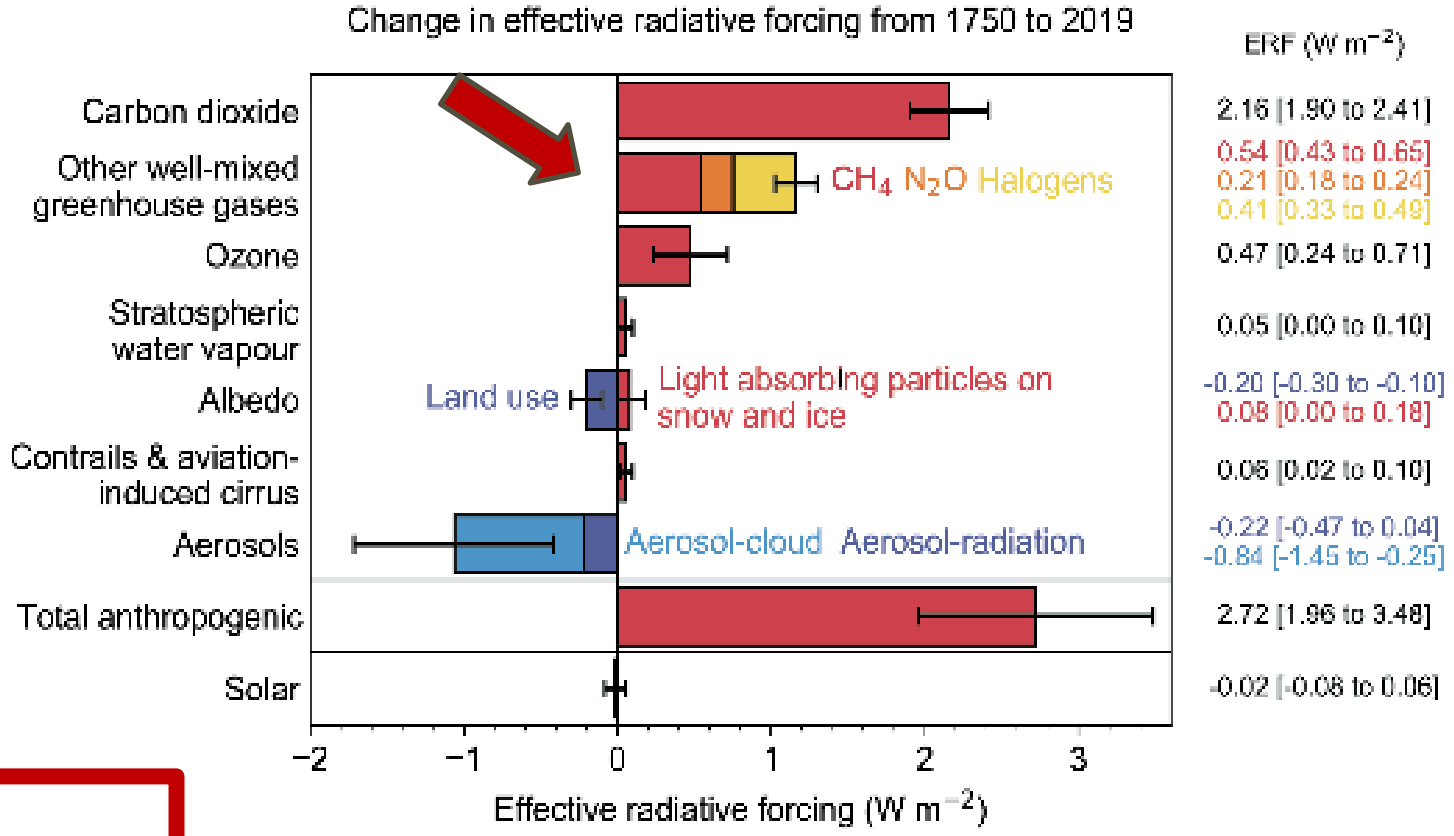
$HCHO + h\nu \Rightarrow H_2 + CO$

Atm. H Chemie

Kein direktes Recycling von OH

$H + O_2 \Rightarrow HO_2$

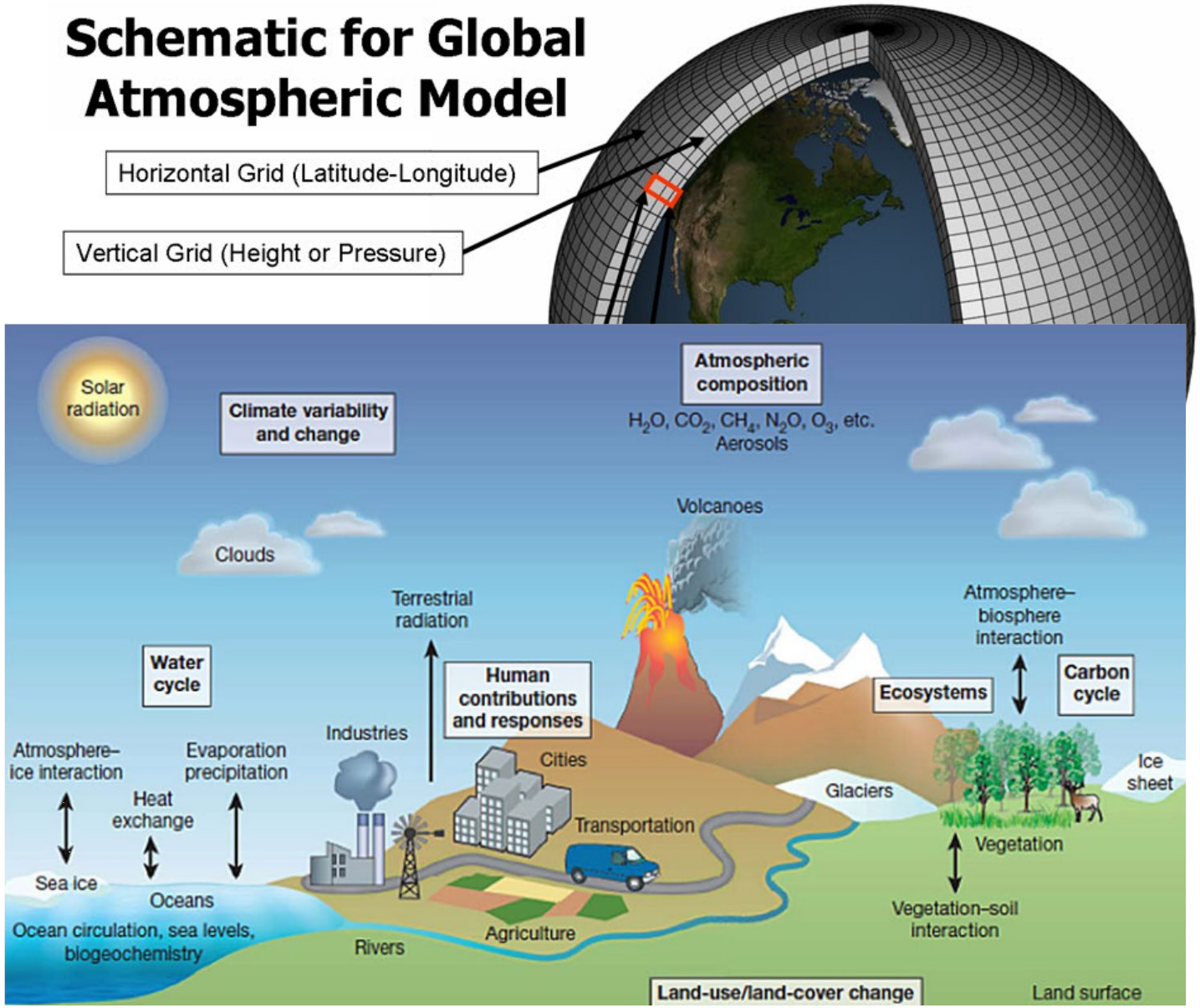
Änderung im Strahlungsantrieb 1750 - 2019



CO_2 : +2.16 W m^{-2} , CH_4 : +0.54 W m^{-2}

Figure AR6 WG1 | Climate Change 2021: The Physical Science Basis

CH_4 + OH ist die bei weitem wichtigste atm. Methansenke!
Wie groß ist der Einfluss von H_2 auf die atm. Lebensdauer von Methan (≈ 10 yrs)?



EMAC
Erdsystemmodell, Klima-Chemie Modell

Horizontale Aufl. 1.9° x 1.9° (200 km),
90 Schichten bis Oberrand in 80 km.

<u>Gasphasenchemie</u>

MIM1P (Mainz Isoprene mechanism plus),
420 Reaktionen, 181 Species

826 zusätzl. diagnostische Reaktionen
220 zusätzl. Species, um verschiedene Aspekte der Methanoxidation zu bilanzieren. (*Sergey Gromov)*

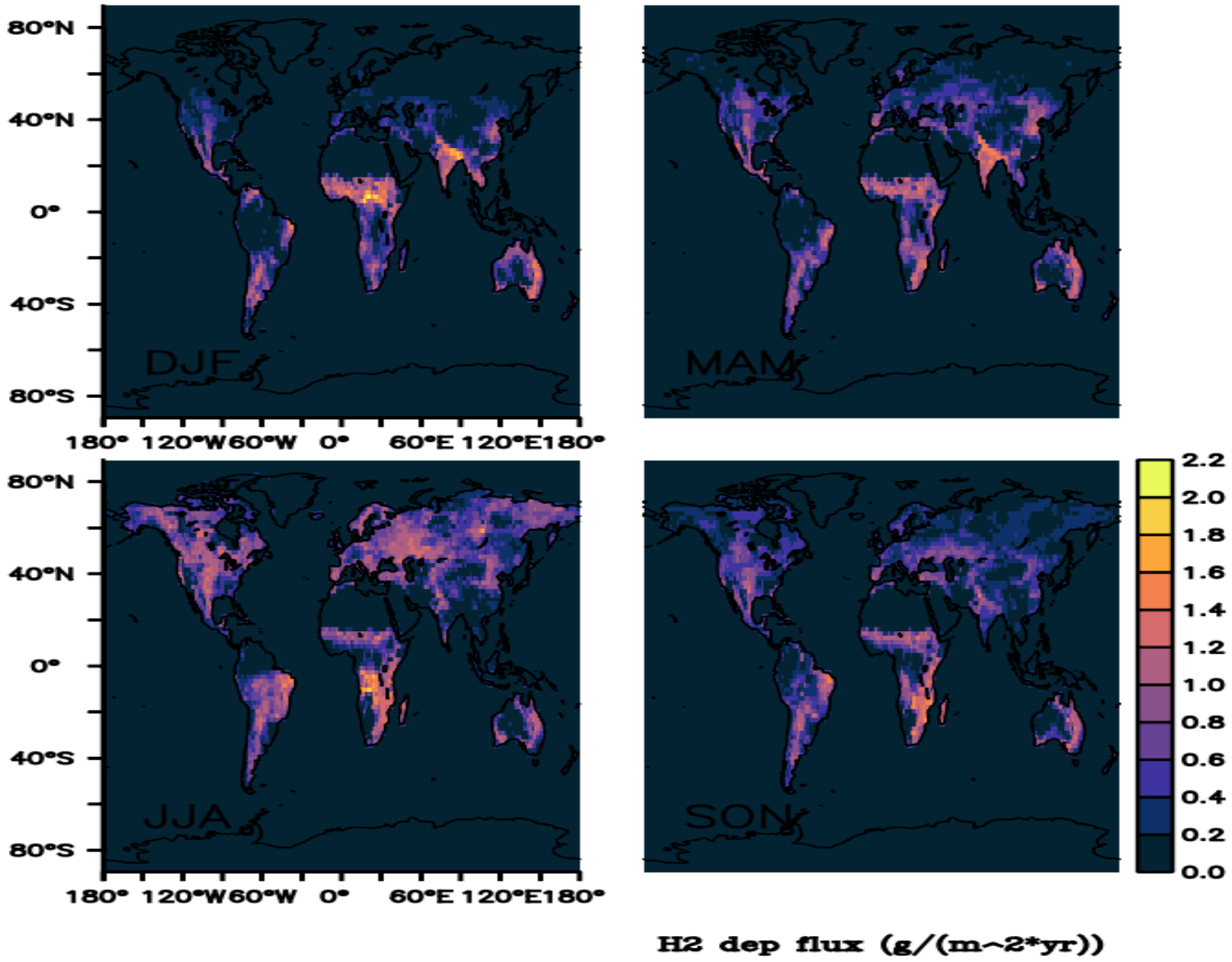
Flussrandbedingungen für H_2 und CH_4, d.h. Emissionen und keine am Boden festgehaltenen Konzentrationen!

Present day H_2 emissions from ECCAD/RETRO

Emis. Tg/yr	glob	extrNH	tropics	extrSH
anthr, retro 2000	14.26	8.540	5.248	0.4710
soil, retro 2000	4.799	1.939	2.470	0.3903
Ocean, retro 2000	4.799	0.9950	1.962	1.842
bb, gfed 2018	7.520	1.569	5.727	0.2249
All, ECCAD	**31.378**	**13.043**	**15.407**	**2.9282**

- Gegenwärtige anthropogene Emissionen **14.26 Tg**
- **30 Tg/yr anthropogene Emissionen in NZ2050.**
- **H_2 Gesamtemissionen** werden von 31.4 Tg auf **47 Tg/yr** steigen.

Emissions of atmospheric Compounds and Compilation of Ancillary Data
https://eccad.aeris-data.fr

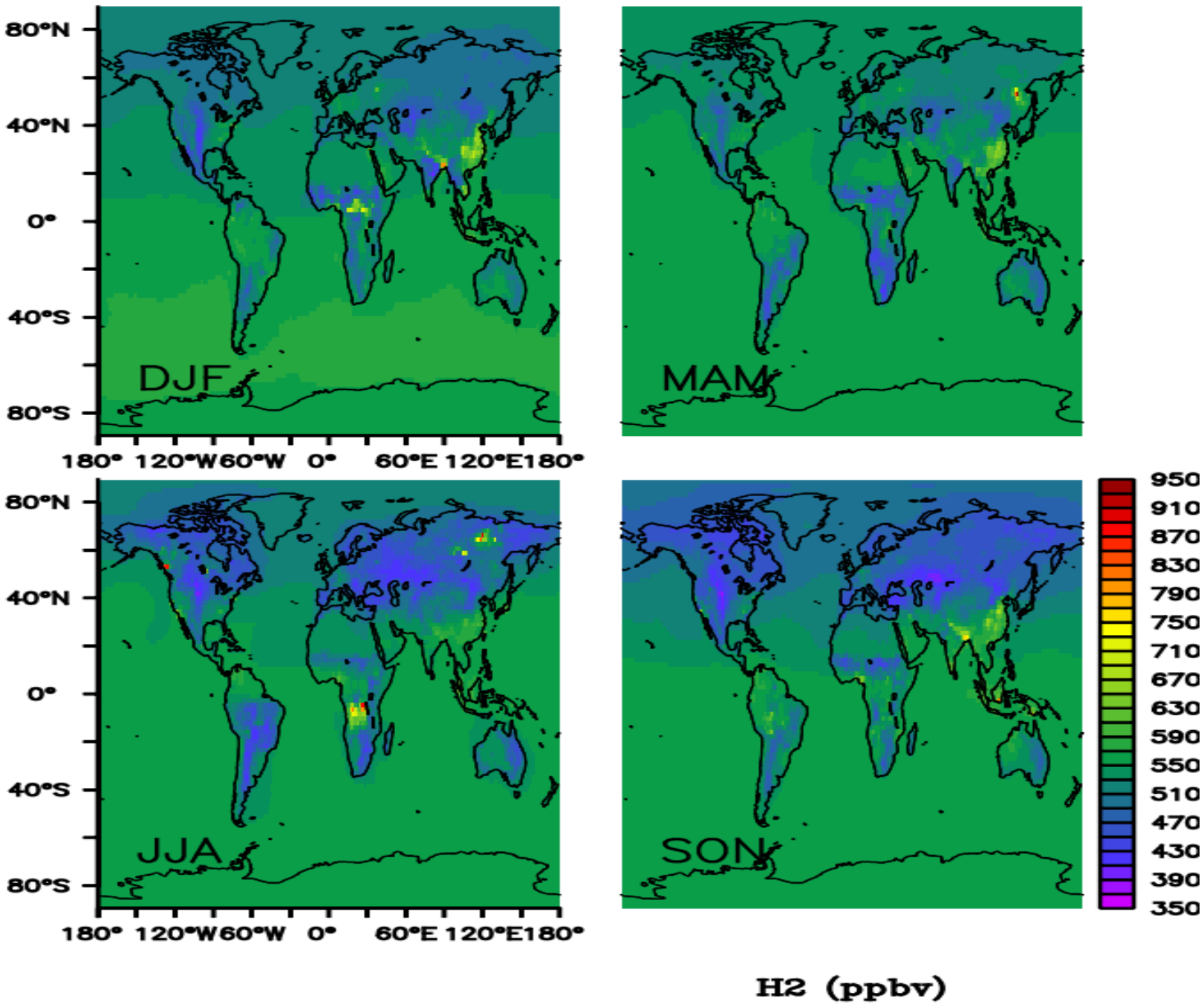


MAX PLANCK INSTITUTE FOR CHEMISTRY

Bodensenke für H_2

- **HA-HOB, High-Affinity Hydrogen-Oxidizing Bacteria**
- average global dry deposition velocity of about v_{dH2}= 0.035 cm/sec
- **Globale jährliche H_2-Senke durch trockene Deposition: 58 Tg/yr**
- **Die Bodensenke nimmt mit steigenden Temperaturen zu, aber veringert sich in zu trockenen oder zu feuchten Böden.**

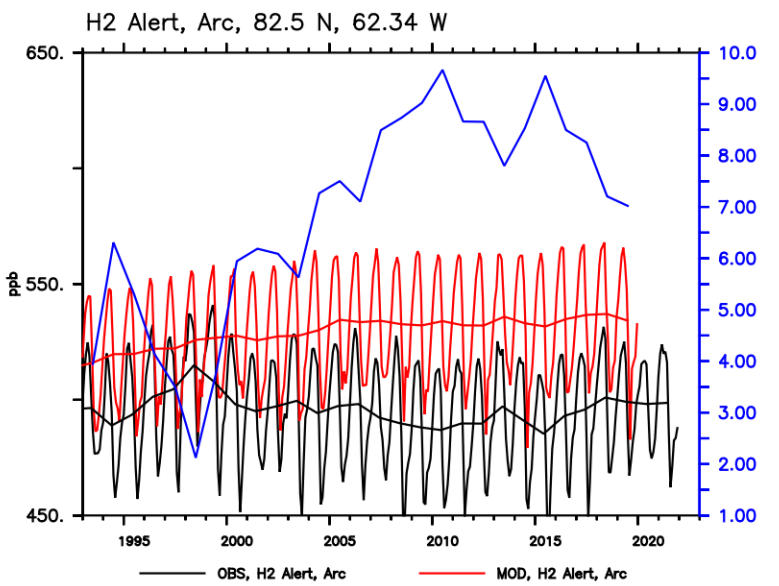
Paulot, 2021, (53.5-56.3 Tg/yr) based on Ehhalt and Rohrer, 2011, adopted to EMAC by K. Klingmüller

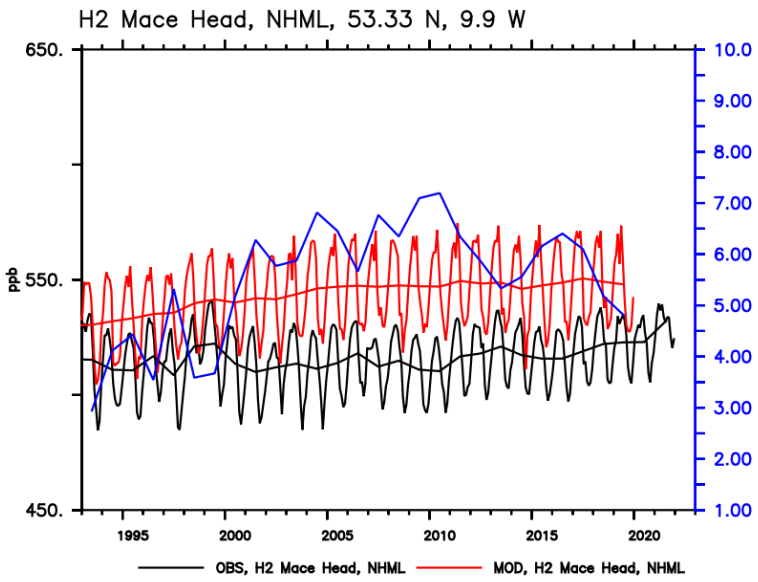


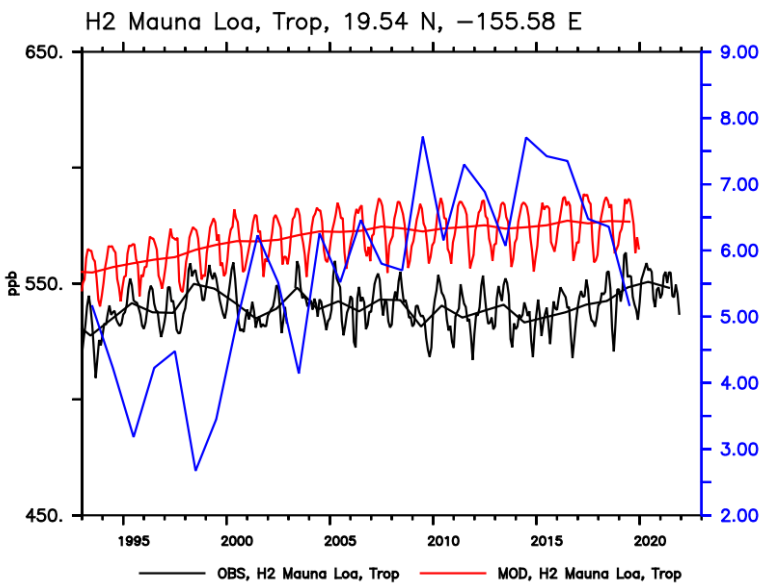
MAX PLANCK INSTITUTE FOR CHEMISTRY

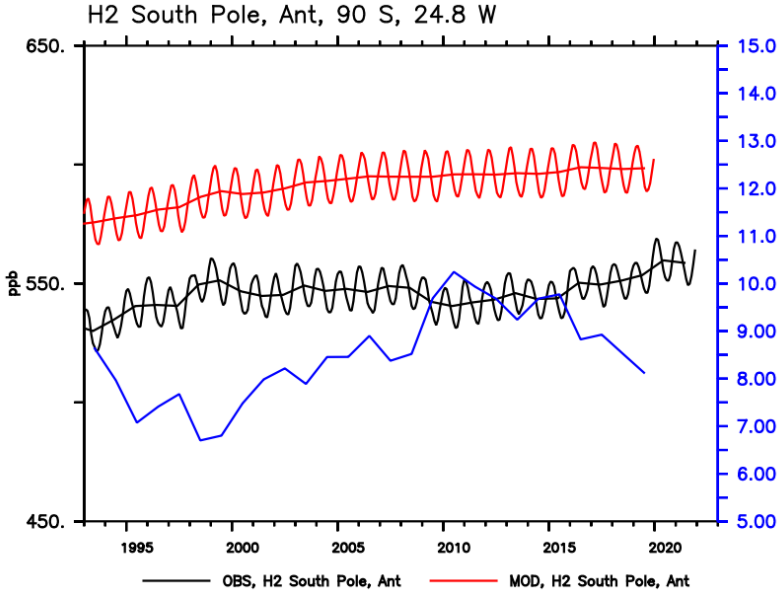
Modellierte saisonale bodennahe H_2-Konzentrationen

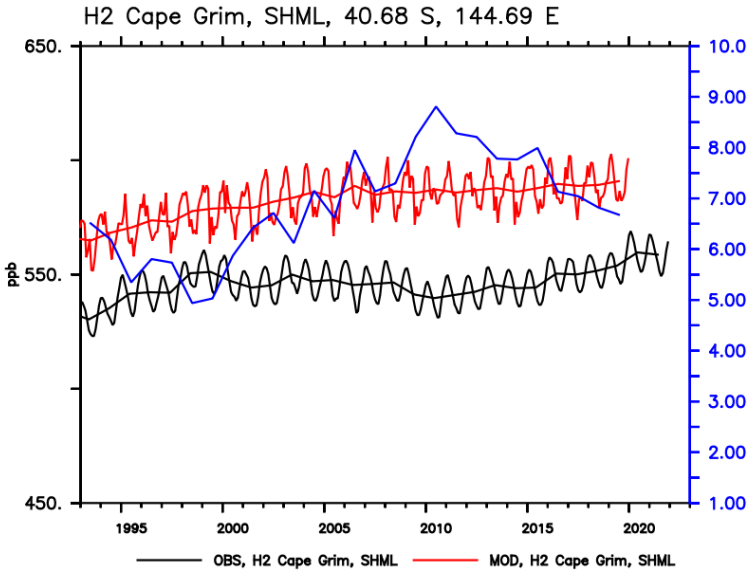
- **Typische Werte 500-550 ppbv.**
- **In der Nordhemisphäre niedrigere Konzentrationen als in der Südhemisphäre.**
- Hohe lokale Konzentrationen durch Emissionen wie z.B. Biomasse-Verbrennung.
- In der NH Minimum in Sommer und Herbst.
- In der SH Minimum in Herbst and Winter über den Kontinenten.









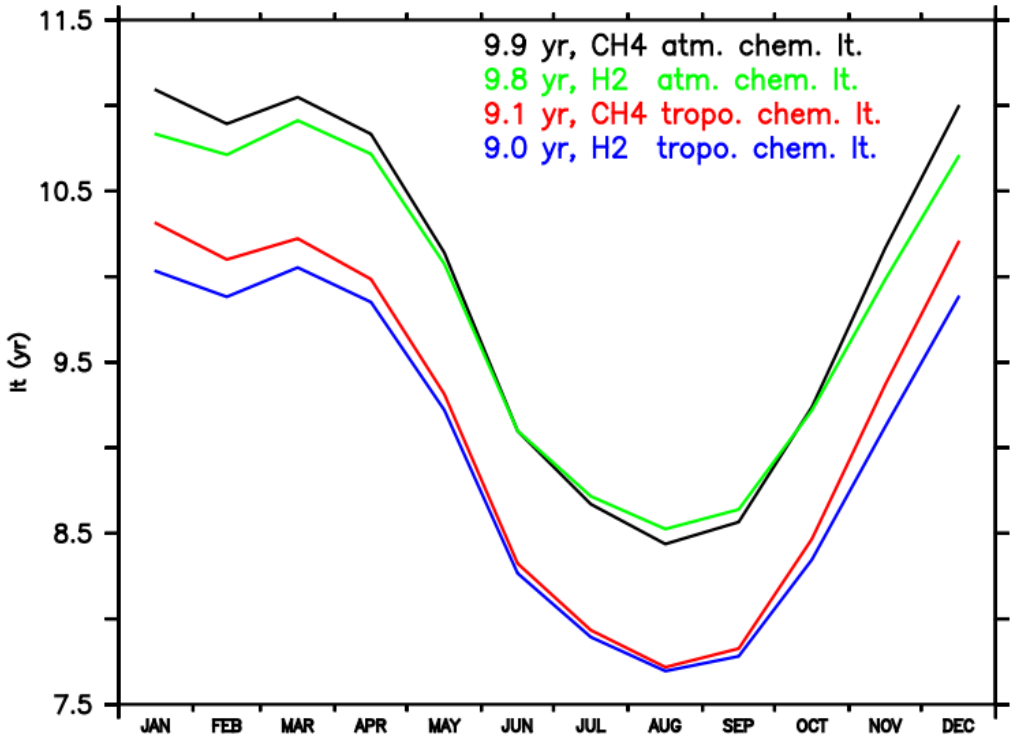


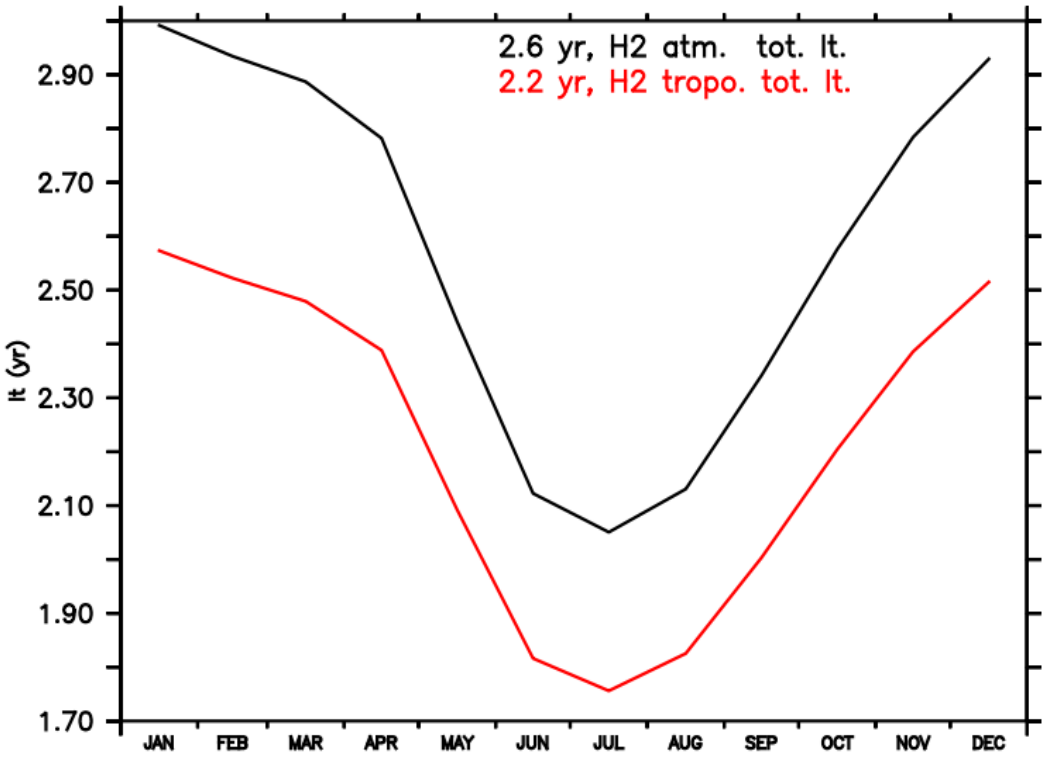
Wir können atm. H_2 gut modellieren.

- Abw. zu Beobachtungen 5 - < 10%

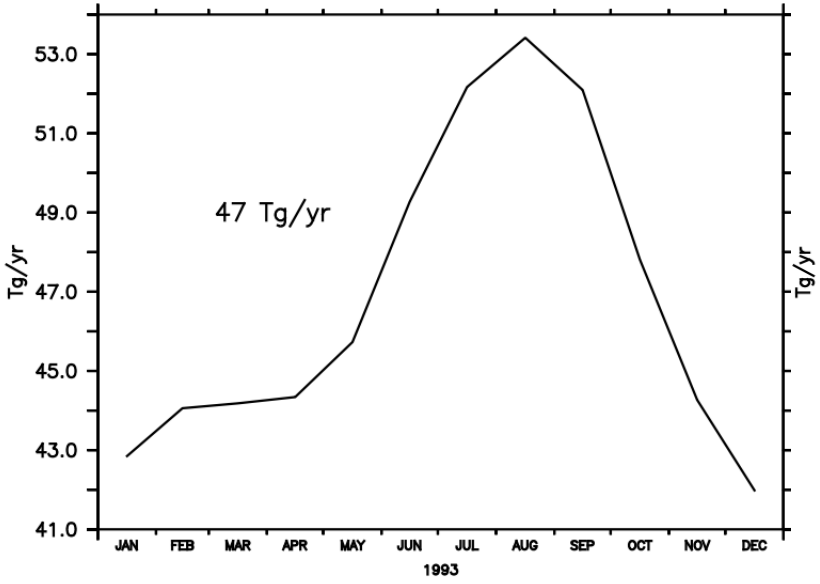
=> Die aus der wiss. Literatur bekannten Fakten beschreiben den atm. H_2- Kreislauf gut.

Obs.: NOAA, National Oceanic and Atmospheric Administration

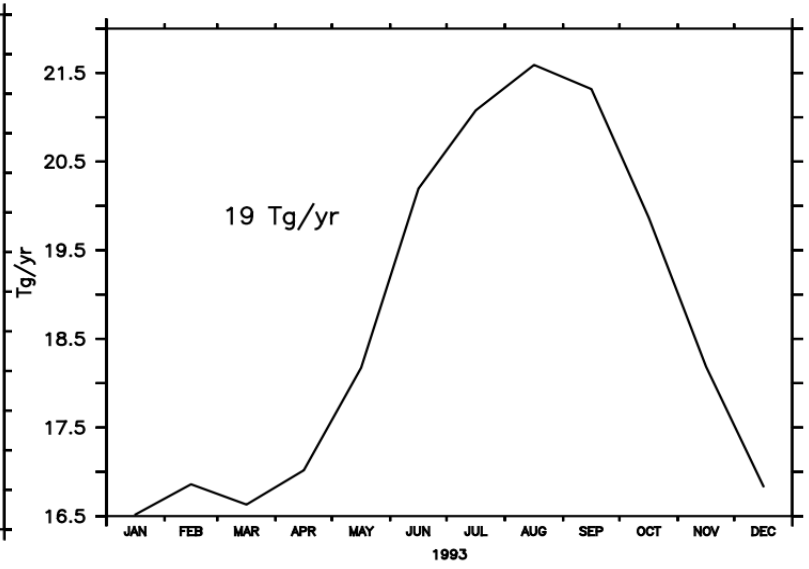




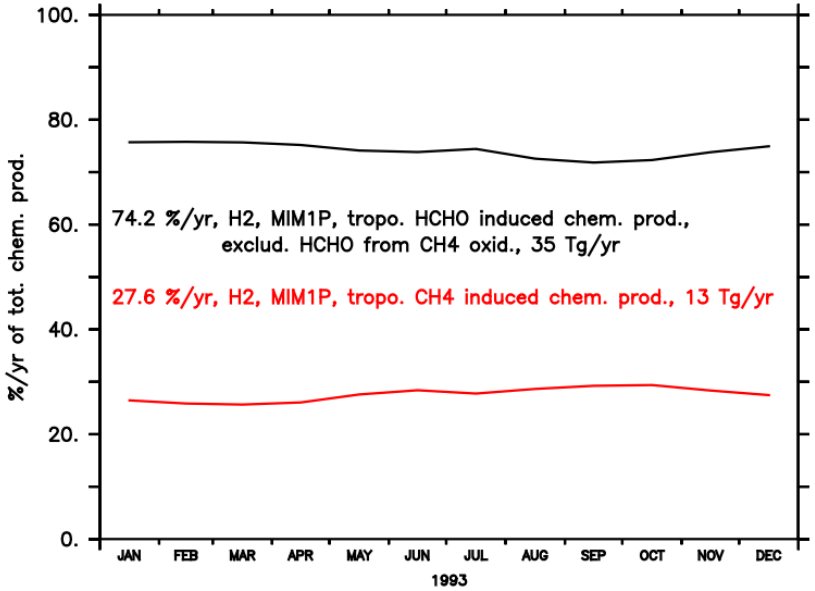
- **H_2 und CH_4 sind chemische Zwillinge.** Ihre globale chemische Lebensdauer ist fast identisch.
- **Die Gesamtlebensdauer und die chemische Lebensdauer von H_2 unterscheiden sich um den Faktor 4, wegen der Dominanz der Bodensenke.**
- Für CH_4 gilt dies nicht, hier entspricht die chemische Lebensdauer fast genau der Gesamtlebensdauer.



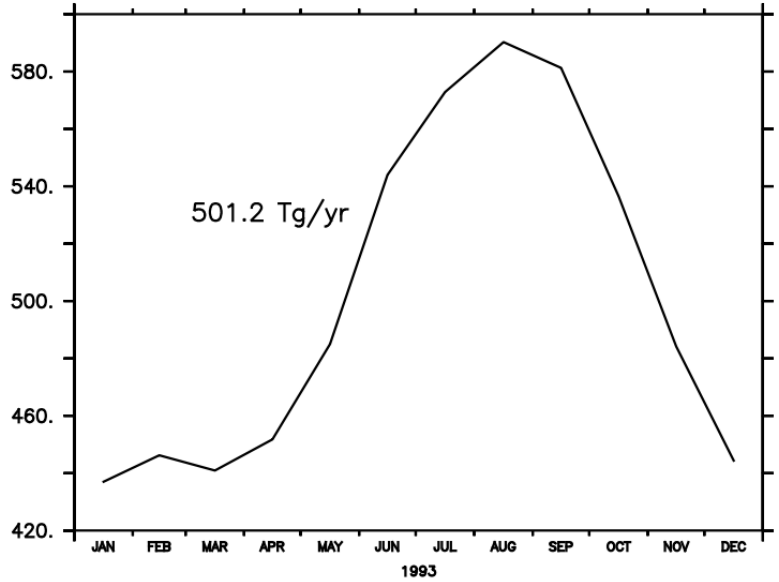
H2, MIM1P, total tropo. chem. prod.



H2, MIM1P, total tropo. chem. sink



H2, MIM1P, annual cycle atm. chem. prod.



CH4, MIM1P, total tropo. chem. sink

MAX PLANCK INSTITUTE FOR CHEMISTRY

Chemische Kopplung

- Die troposphärische chemische H_2 Quelle 47 Tg/yr ist größer als die direkten Emissionen, 31.4 Tg/yr.
- Methanoxidation ist keine dominante Quelle für H_2, **nur 27%**.
- Die tropo. chem. Senke von H_2, 19 Tg/yr, ist klein gegenüber der Bodensenke, 58 Tg/yr.
- **Die tropo. chem. Senke von H_2, 19Tg/yr, ist nur 3.8 % der chem. Methansenke von 501.2 Tg/yr.**

Atm. chemische Kopplung von H_2 und CH_4

- Die chem. Kopplung, d.h. der Einfluss von H_2 auf die Lebensdauer CH_4 ist (noch) begrenzt.

  - Die atm. chem. H_2-Senke ist scheinbar klein gegenüber der Methansenke, aber unter Berücksichtigung der Molekülmassen:
    H_2: 19 Tg * 8 = 152 Tg vs. CH_4: 501.2 Tg => 30%
  - Die Bodensenke dominiert die atm. Wasserstofflebensdauer.
  - Die Methanoxidation leistet nur einen geringen Beitrag (27%) zu H_2.

- ***Paulot et al. 2021*: indirekten Strahlungsantrieb von H_2, 0.13 mW/(m^2 ppbv(H2))**

  +500 ppbv => + 0.065 W/m^2 nur +12% von 0.54 W/m^2 CH_4

- ***=> Entscheidend ist das OH Recycling!***

- 2050: mehr H_2, sauberere Atmosphäre, weniger OH Recycling => größerer Impact von H_2 auf CH4

Game Changer:
Geologischer Wasserstoff? (Goldener oder weißer Wasserstoff)

Science, 2023, 382, Issue 6676
Breakthrough of the Year, Hunt for natural hydrogen heats up.

Unpublished: USGS (United States Geological Survey) Studie: Erdkruste könnte 1 Tt H_2 enthalten. Mehr als der 1000 fache Jahresbedarf einer globalen Wasserstoffwirtschaft!

Reservoir, dass sich möglicherweise in Dekaden neu bildet.
Serpentisierung:
$3\ Fe_2SiO_4 + 2\ H_2O \Rightarrow 2\ Fe_3O_4 + 3\ SiO_2 + 2\ H_2$
$6\ Fe(OH)_2 \Rightarrow 2\ Fe_3O_4 + 4\ H_2O + 2\ H_2$

https://www.youtube.com/watch?v=mtBgoic_ogQ
Trucheet al.,Science383, 618–621 (2024)
Hand, Science, Vol 381, Issue 6662.