

## HYPOLFAIL

Hydrogen-Induced Damage to Polymers at High Pressure: Understanding Interaction and Failure Mechanisms

<b>Programm / Ausschreibung</b>	MW 24/26, MW 24/26, Mobilitätswende, M-ERA.NET Call 2024	<b>Status</b>	laufend
<b>Projektstart</b>	01.05.2025	<b>Projektende</b>	30.04.2028
<b>Zeitraum</b>	2025 - 2028	<b>Projektlaufzeit</b>	36 Monate
<b>Keywords</b>	Advanced simulation, Energy efficiency, Environmental impact, Green energy, Hydrogen, In situ characterization, Material performance, Material design, Materials for energy, Materials safety, Polymers, Renewable energy, Smart materials		

### Projektbeschreibung

Grüner Wasserstoff (gH<sub>2</sub>) spielt eine Schlüsselrolle als Energieträger für eine klimafreundliche Zukunft in den nächsten Jahrzehnten. Es gibt viele potenzielle Anwendungen für grünen Wasserstoff, die von einzelnen Haushalten bis hin zu lokalen kleinen Wasserstoff-Valleys in den Bereichen Mobilität und Energierückgewinnung reichen. Aufgrund der hohen Reaktivität des grünen Wasserstoffs mit konventionellen Werkstoffen und der möglichen Wasserstoffversprödung dieser Werkstoffe ist die sichere und effiziente Handhabung, Lagerung und Beförderung von grünem Wasserstoff in der Versorgungskette - zwischen Elektrolyseurs und der Brennstoffzelle - nach wie vor eine große Herausforderung. Aufgrund ihrer maßgeschneiderten und einzigartigen Materialeigenschaften werden vor allem Polymere als eine besonders wichtige Materialklasse in der Wasserstoffversorgungskette identifiziert. Ein erklärtes Ziel des Projekts ist es daher, ein grundlegendes Verständnis für das Verhalten verschiedener polymerer Werkstoffe unter Einwirkung von gH<sub>2</sub> zu schaffen. HYPOLFAIL wird die Eigenschaften von Polymeren unter extremen Druckbedingungen mit gH<sub>2</sub> bestimmen und innovative Technologien untersuchen, darunter (i) die Entwicklung neuer Materialien für Dichtungen, um die Barriereigenschaften gegenüber kleinen Gasmolekülen zu erhöhen und die Permeation zu verringern, (ii) neue Konzepte für Druckspeicher ohne Polymer-Liner (5. Generation) mit wiederverwendbaren Materialien, (iii) alternative physikalisch-chemische Speicherkonzepte und (iv) Entwicklung und Umsetzung neuer Simulationsstrategien für die Leistungsvorhersage und Lebensdauerabschätzung.

Multiskalenmodelle, die auf die Entwicklung der Struktur abzielen, zeigen eine zu geringe Effizienz, diesbezüglich werden Werkzeuge der künstlichen Intelligenz, wie z. B. neuronale Netze, zur Entwicklung von Ersatzmodellen für die mehrphysikalische Materialreaktion eingesetzt. Dieser durch datengesteuerte Werkzeuge der künstlichen Intelligenz verbesserte Multiskalenansatz umfasst die Modellierung der Wasserstoffpolymer-Ketteninteraktionen auf (sub)molekularer Ebene bis hin zur Vorhersage des makroskopischen thermisch-diffusionsmechanischen Verhaltens auf Komponentenebene. Entsprechende Experimente werden auf makroskopischer Ebene durchgeführt, um Eingangsdaten für modellbasierte Multiskalensimulationen zu liefern.

Zur Überprüfung und Kalibrierung dieser Modelle werden zwei verschiedene „Use Cases“ implementiert: (i) Elastomer-O-Ring

für Hochdruck-Dichtungsanwendungen und (ii) ein faserverstärkter Druckbehälter vom Typ IV, um die wissenschaftliche Grundlage für einen Polymer-Liner freien Druckbehälter (Typ V) zu schaffen.

Darüber hinaus werden auf der Grundlage der oben genannten Simulationen die Spezifikationen neuartiger Werkstoffe, geeignet für Druckwasserstoff, abgeleitet. Diese Struktur-Eigenschafts-Beziehungen können weitere Materialentwicklungen und die Realisierung einer zirkulären Produktion unterstützen. Aufgrund der engen Wechselwirkungen wird die Versorgungskette als System betrachtet und auf Basis der Lebensdauerabschätzung wird die gesamte Betriebszuverlässigkeit für wechselnde Randbedingungen abgeschätzt.

Schließlich eröffnet die Substitution des "Design MIT Materialien" durch das "Design DER Materialien" in der Produktentwicklung, die Möglichkeit der "Nachhaltigkeit-mit-Design" in der gesamten Entwicklungskette für wasserstoffbeanspruchte Bauteile.

## **Abstract**

Green hydrogen (gH<sub>2</sub>) plays a key role as energy carrier for a climate friendly future in energy systems and energy transitions across the world in the next decades. There are many potential applications for green hydrogen ranging from individual households to local small-scale hydrogen valleys in the fields of mobility and energy recuperation. Due to its high reactivity with conventional materials and the potential for hydrogen embrittlement of these materials, the safe and efficient handling, storage and transport of green hydrogen in the supply chain - between the electrolyzer output and the fuel cell input - remains a major challenge. Polymers are identified as a high-impact material class in the hydrogen supply chain due to their tailored and unique material properties. Therefore, a declared goal of the project is to create a basic understanding of the behavior of various polymeric materials exposed to gH<sub>2</sub> and to present and promote alternative material concepts for future applications. HYPOLFAIL will determine the properties of polymers under extreme pressure conditions with gH<sub>2</sub> and investigate innovative technologies, including (i) the development of new materials for seals to increase the barrier properties against small gas molecules (e.g. hydrogen) and thereby reduce permeation, (ii) new concepts for linerless high-pressure gas storage systems (5th generation) with reusable materials, (iii) alternative physical-chemical storage concepts and (iv) development and implementation of new simulation strategies for performance prediction and lifetime estimation. As multi-physics multi-scale models aiming at developing the structure will have a poor efficiency, artificial intelligence tools such as neural-networks will be used to develop surrogate models of the multi-physics material response. This multiscale approach enhanced by data driven artificial intelligence tools involves the modeling of the hydrogen polymer chain interactions at (sub)molecular level up to the prediction of the macroscopic thermal-diffusional-mechanical behavior on a component scale. Corresponding experiments will be performed at macroscopic scale in order to provide input data for model-based multiscale simulations whose parameters can be inferred by unsupervised learning.

For the verification and calibration of these models two different use cases will be implemented; (i) conventional elastomer O-Ring for high pressure sealing application and (ii) the redesign of a Type IV fiber reinforced pressure vessel to enable the scientific base for a liner free Type V pressure vessel.

Furthermore, based on above simulations, the specifications of novel materials - adopted to pressurized hydrogen - will be derived and the bill-of-materials (BOM) will be specified for various parts of the hydrogen supply chain. This structure-property maps may support further material development efforts and the realization of a circular production and use of materials. Due to the close interactions the supply chain will be considered as a system and based on the life time estimation the entire operational reliability will be estimated for changing boundary conditions.

Finally, the substitution the "design WITH materials" with the "design THE materials" in the product development opens the door for "sustainability-by-design" in the entire product development chain for components exposed to hydrogen.

## **Projektkoordinator**

- SCIOFLEX Hydrogen GmbH

## **Projektpartner**

- Seal Maker Produktions- und Vertriebs GmbH
- Universität Linz