

IIIo06-004

Estudo da liga (TiNb)Fe₂ com estrutura de fase Laves C14 para armazenamento de hidrogênio

Nascimento, T.S.(1); Silva, B.H.(2); Strozi, R.B.(2); Oliveira, E.A.(1); Ponsoni, J.B.(2); Zepon, G.(1);

(1) UFSCar; (2) PPGCEM/UFSCar;

A crescente demanda energética contemporânea está modificando a forma como a sociedade se organiza para a produção e consumo de energia. Significativos esforços estão sendo feitos em prol de uma transição da matriz energética atual baseada em combustíveis fósseis para matrizes renováveis e não poluentes. Neste sentido, o uso do hidrogênio como vetor energético pode proporcionar um ciclo energético renovável e sustentável. Entretanto, o armazenamento de hidrogênio apresenta inúmeros desafios, por exemplo, a baixa densidade no estado gasoso e os riscos relacionados as elevadas pressões de armazenagem e inflamabilidade do hidrogênio. O armazenamento de hidrogênio no estado sólido através de hidretos metálicos é um método que visa minimizar essas barreiras. A produção de hidretos metálicos a base de Nb pode favorecer comercial e tecnologicamente o Brasil, visto que o país possui as maiores reservas de Nb do mundo. A abundância de Nb no país conduz à busca por novas aplicações para o metal. Estudos sobre armazenagem de hidrogênio via hidretos metálicos reportam que ligas com estrutura Laves C14 com proporção AB₂ de elementos formadores (A) e não formadores de hidreto (B) tem potencial para apresentar boas propriedades de armazenagem de hidrogênio [Marques, F. et al. Royal society of chemistry, 2021]. Desta forma, neste trabalho foi proposta a síntese e avaliação de propriedades de armazenagem da liga (TiNb)Fe₂ com estrutura Laves C14. Cálculos termodinâmicos computacionais através do método CALPHAD (utilizando o software ThermoCalc e a base de dados TCHEA3) indicam que esta liga apresenta estrutura monofásica Laves C14. A liga foi produzida por fusão à arco elétrico por duas rotas diferentes: 1) Utilizando elementos (Ti, Nb e Fe) de alta pureza (>99,5%) 2) Utilizando uma liga comercial de FeNb como matéria-prima e adicionando teores de Nb e Ti e Fe puros para ajuste da composição. As ligas foram caracterizadas estruturalmente por difração de raios-X (DRX) e microscopia eletrônica de varredura com microanálise química através de espectroscopia de energia dispersiva de raios-X (MEV-EDS). As ligas produzidas apresentaram estruturas monofásicas Laves C14 com morfologias dendríticas e com composições químicas próximas as nominais. As propriedades de armazenagem de hidrogênio das duas ligas foram avaliadas através de medidas de cinéticas de absorção de hidrogênio e isoterma de Pressão-Composição de hidrogênio a temperatura ambiente. Essas análises foram realizadas em aparatos volumétricos do tipo Sieverts. As ligas apresentaram baixos níveis de absorção de hidrogênio a temperatura ambiente. Esse comportamento de absorção foi associado as elevadas entalpias de formação dos hidretos dessas ligas, as quais foram estimadas por dados reportados na literatura e modelos desenvolvidos pelo grupo.