



IIIo28-002

Otimização das propriedades de armazenamento de hidrogênio em ligas de alta entropia do sistema TiZrCrMnFeNi

Andrade, G.(1); Floriano, R.(2);

(1) Unicamp; (2) FCA;

O aumento populacional e, por conseguinte, a crescente demanda por energia, tornou urgente a busca por fontes de energia mais sustentáveis. A redução da dependência de combustíveis fósseis é a chave para a emissão de menores quantidades de gases causadores do efeito estufa. É esperado que o hidrogênio desempenhe um importante papel em uma economia futura baseada em fontes ambientalmente limpas. Isso se justifica pelo fato de o hidrogênio ter característica de baixo peso molecular, conter uma alta densidade de energia e sua combustão não produzir subprodutos nocivos. Além disso, o hidrogênio é considerado como uma fonte de energia limpa, pois pode ser gerado a partir de recursos renováveis e não poluentes. Entretanto, existem desafios significativos que limitam a ampla aplicação do hidrogênio como fonte energética, dentre os quais os mais importantes dizem respeito ao seu armazenamento. O armazenamento de hidrogênio no estado sólido é um método mais seguro e eficaz e não apresenta as limitações existentes nas modalidades de armazenamento gasoso e líquido. Nessa modalidade, os átomos de hidrogênio difundem-se pelo material, estando em solução sólida e formando um composto chamado hidreto, quando a concentração de hidrogênio no material atinge um dado limite. Recentemente, de 2010 em diante, as ligas multicomponentes, em especial as de alta entropia, foram amplamente pesquisadas quanto às suas propriedades de absorção de hidrogênio na forma de hidreto, de modo que elevadas capacidades de armazenamento de hidrogênio (razão H/M), tanto em temperatura elevada quanto em temperatura ambiente, foram observadas. Com o intuito de promover uma possível melhoria da capacidade de armazenamento da liga TiZrCrMnFeNi, já reportada na literatura e, em última análise, contribuir para uma melhor compreensão dos principais fatores microestruturais, termodinâmicos, composicionais e cinéticos que influenciam no armazenamento de hidrogênio em ligas multicomponentes com fase majoritária C14, o presente trabalho tem como objetivo principal o estudo do sistema TiZrCrMnFeNi, em que três ligas variantes foram propostas, alterando-se a fração molar dos elementos com maior afinidade química com o hidrogênio, Zr e Ti. As ligas foram produzidas por forno a arco em atmosfera controlada em diferentes frações molares dos elementos metálicos, cuja composição foi previamente simulada por meio do método termodinâmico computacional CALPHAD. As ligas foram caracterizadas microestruturalmente por técnicas de microscopia óptica e eletrônica de varredura, com EDS. A formação majoritária da fase C14, foi constatada por difratometria de raios-X, seguida por refinamento de Rietveld. Os resultados obtidos indicaram que as ligas propostas, termodinamicamente e microestruturalmente, são promissoras para o armazenamento de hidrogênio em estado sólido.