

IIIo30-003

Armazenagem de Hidrogênio na liga Multicomponente (TiNb)(CrMnFe)₂ com estrutura de fase Laves C14

Aranda, V.(1); Ponsoni, J.B.(1); Leiva, D.R.(1); Botta, W.J.(1); Zepon, G.(1);
(1) UFSCar;

O hidrogênio possui um papel fundamental na luta contra as mudanças climáticas, e no aumento da utilização de energias renováveis rumo a uma sociedade com baixa emissão de carbono. Se produzido a partir de fontes renováveis, seu consumo permite um ciclo fechado de energia limpa por apresentar apenas H₂O como subproduto. A criação de políticas públicas que incentivam o desenvolvimento de tecnologias como esta, e que privilegiem recursos do país, são extremamente importantes. Com isso, o nióbio se apresenta como um elemento estratégico para o Brasil que possui 98,53% da reserva mundial. Além disso, a estocagem de hidrogênio em hidretos metálicos se destaca como uma tecnologia promissora para armazenagem e transporte de energia renovável, já que o hidrogênio é contido em sua estrutura. Dentro deste contexto, ligas de alta entropia (LAE), ou mais genericamente ligas multicomponentes, tem chamado muita atenção. Este interesse se baseia no grande número de composições possíveis de serem investigadas que podem resultar em diferentes propriedades de armazenagem de hidrogênio. Dentro das LAE, se destacam as que cristalizam em fase Laves, principalmente as do tipo C14. Autores vêm reportando que ligas com tal estrutura cristalina apresentam boas propriedades de absorção de hidrogênio em temperatura ambiente. Neste trabalho, foram avaliadas as propriedades de armazenagem de hidrogênio da liga multicomponente (TiNb)₁(CrMnFe)₂, a qual foi derivada a partir da liga TiZrCrMnFeNi. A liga foi sintetizada por fusão à arco e refundida cinco vezes para homogeneização. A caracterização estrutural foi realizada através da difração de raios-X (DRX) e microscopia eletrônica de varredura (MEV). As propriedades de armazenagem de hidrogênio foram medidas usando o aparato do tipo Sieverts. A liga apresenta a formação da estrutura cristalina de fase Laves do tipo C14, com parâmetros de rede $a = 4,87 \text{ \AA}$ e $c = 7,98 \text{ \AA}$. A amostra foi ativada à 450 °C por 2h em vácuo permanente e posteriormente submetida à medida de PCI (pressão-composição-isoterma) até a pressão máxima de 80 bar em temperatura ambiente, com absorção máxima de 0,29%p. (0,18 H/M). Através de um modelo termodinâmico para cálculo de curvas pressão-composição-isoterma (PCI), foi possível comparar e prever o comportamento completo da curva de PCI de absorção, a qual apresenta uma capacidade de absorção de 0,83%p. (0,5 H/M) quando em 400 bar, o que corrobora com a menor capacidade de absorção da liga em 80 bar.