MmeCa09-022

Propriedades de armazenagem de hidrogênio de ligas de alta entropia do sistema TiZrNbFeCrNi

Vicente, I.S.(1); Floriano, R.(1); Andrade, G.(2); Zepon, G.(3); Strozi, R.B.(2);
(1) FCA; (2) UNICAMP; (3) UFSCar;

As ligas de alta entropia (LAEs) têm se destacado devido ao seu extenso conjunto de propriedades superiores em comparação às ligas tradicionais. Recentemente, as LAEs se mostraram uma alternativa promissora para a armazenagem de hidrogênio, ao atuar como hidretos metálicos. Apesar de ser um campo de estudo recente e da alta complexidade em compreender os mecanismos de armazenagem, pesquisas focadas nas LAEs vêm mostrado que a combinação de fatores como a proporção dos elementos dos tipos A e B, onde A refere-se aos elementos de maior afinidade com o hidrogênio e B aos de menor afinidade, o tipo de estrutura da liga (especialmente dos tipos laves C14 e BCC) e parâmetros termodinâmicos são bons critérios para o design de ligas eficientes. Esta pesquisa busca avaliar as diferenças nas propriedades de armazenagem de hidrogênio das LEAs equiatômica TiZrNbFeCrNi (AB), a qual foi desenvolvida pelo nosso grupo de pesquisa e reportada na literatura em 2023, e não-equiatômica Ti18Zr20Nb2Fe20Cr20Ni20 (AB1,5), onde A representa os elementos Ti, Zr e Nb e B os elementos Fe, Cr e Ni. Na caracterização da liga AB (DRX e MEV) foi possível identificar uma microestrutura contendo duas fases C14. Nas curvas PCI em temperatura ambiente, a mesma liga atingiu uma capacidade máxima de absorção de 1,5 wt% de hidrogênio, enquanto sua dessorção foi de apenas 0,9 wt%. Em suas melhores condições (200ºC), ela conseguiu absorver 1,1 wt%, o qual foi possível dessorver completamente. A partir desses resultados, foi proposta a liga AB1,5, cuja quantidade de elementos não-formadores de hidretos se encontra em maior proporção, de modo que é esperado obter melhorias nas condições de reversibilidade à temperatura ambiente. Assim como na liga AB, o design da liga AB1,5 foi conduzido através da combinação de parâmetros semi-empíricos e cálculos termodinâmicos computacionais (método CALPHAD), seguido pela fabricação por fusão a arco elétrico. Por meio do CALPHAD, foi possível prever um grande potencial de formação de estrutura monofásica C14 para a liga AB1,5, o qual foi confirmado por análises de DRX aliadas ao refinamento Rietveld, que revelaram uma microestrutura composta por 89% de C14 e 11% de BCC. Além disso, através do MEV operando no modo BSE foi possível evidenciar uma boa homogeneidade dos elementos, enquanto o mapeamento EDS confirmou a presença da microestrutura bifásica. Para as capacidades de armazenagem de hidrogênio da liga AB1,5, cinéticas de absorção e dessorção foram realizadas em um aparato do tipo Sievert em condições de temperatura ambiente, 100ºC e 200ºC, operando à 30 bar de pressão de hidrogênio. Nessas temperaturas em ciclos de 2h, foi possível obter capacidades de absorção de 1,40 wt%, 1,60 wt% e 1,75 wt%, respectivamente. Em comparação a liga equiatômica AB, a liga AB1,5 apresenta dessorções mais completas nas temperaturas analisadas. Curvas PCI estão sendo conduzidas pelo grupo parceiro da UFSCar para avaliar as condições de reversibilidade da liga AB1,5.