

MmeMge06-002

Avaliação das propriedades de armazenamento de hidrogênio de ligas de alta entropia obtidas a partir do sistema TiZrMnFeCo

Edalati, P.(1); Floriano, R.(2);

(1) Unicamp; (2) FCA;

O consumo excessivo de combustíveis fósseis tem levado a uma crise crítica de aquecimento global nos últimos anos. Além disso, os combustíveis fósseis são limitados e não fornecerão todas as necessidades futuras da humanidade. O uso de combustíveis alternativos limpos e renováveis, como o hidrogênio, é uma estratégia promissora para resolver problemas energéticos e ambientais. No entanto, um dos principais desafios na utilização do hidrogênio como combustível reside em seu armazenamento seguro e compacto. O armazenamento em estado sólido emerge como a tecnologia mais segura e eficiente. Ligas de alta entropia (LAEs) apresentam um potencial significativo para o armazenamento de hidrogênio, principalmente devido ao seu espaço composicional multicomponente, que pode ser adaptado/ajustado para produzir propriedades de armazenamento de hidrogênio altamente desejáveis. Neste estudo, LAEs derivadas do sistema TiZrMnFeCo, constituídas tanto por elementos metálicos do tipo A (como Ti e Zr, com alta afinidade pelo hidrogênio) quanto por elementos metálicos do tipo B (como Mn, Fe e Co, com baixa afinidade pelo hidrogênio), foram projetadas aplicando parâmetros semi-empíricos e cálculos termodinâmicos computacionais via método CALPHAD. As LAEs selecionadas (TiZrMnFeCo e Ti₁₅Zr₂₂Mn₂₇Fe₂₆Co₁₀) foram produzidas por fusão a arco e apresentaram elevada tendência para formar a fase de laves com estrutura C14 junto com proporções menores da fase BCC (compreendendo menos de 10% em peso), conforme confirmado pela análise de difração de raios-X. A análise de MEV, juntamente com EDS, corroborou a presença de duas fases, em concordância com a análise de DRX, sendo a fase secundária associada à fase BCC identificada como uma fase rica em TiCo. Investigações iniciais sobre as propriedades de armazenamento de hidrogênio indicaram cinética rápida em temperaturas ambiente e moderada (< 200°C) após um procedimento de ativação simples para ambas as LAEs. Pesquisas em andamento incluem a avaliação de isotermas de pressão-composição-temperatura (PCT) e a estabilidade dessas fases durante ciclagem, com o objetivo de obter insights mais profundos sobre o comportamento dessas ligas.