

MmeMge09-001

Redução de Custo e Otimização das Propriedades de Armazenamento de Hidrogênio em Ligas Multicomponentes do Sistema ZrNbFeCo

Fontana, G.B.G.(1); Floriano, R.(2); Edalati, P.(3);

(1) UNICAMP; (2) FCA; (3) Unicamp;

Ligas multicomponentes representam uma classe promissora de materiais para armazenamento de hidrogênio (AH?) pois permitem o desenvolvimento de novos hidretos metálicos que podem ser ajustados previamente para exibirem propriedades de interesse, como por exemplo excelente reversibilidade, cinética rápida e boa razão hidrogênio/metalo (H/M). Essas ligas podem formar tanto sistemas monofásicos quanto multifásicos, sendo que neste último caso, a presença majoritária de uma fase Laves C14 pode ser benéfica para as propriedades de AH?. Recentemente, nosso grupo de pesquisa estudou a liga ZrNbFeCo, produzida por fusão a arco voltaico a partir de elementos de alta pureza. Essa liga apresentou excelente desempenho em AH? à temperatura ambiente, com boa capacidade de armazenamento e reversibilidade, após um processo de ativação simples. Neste estudo, pretende-se explorar as propriedades de AH₂ da liga ZrNbFeCo, porém agora partindo da liga comercial FeNb (com resquícios de Al e Si) como base, adicionando-se a ela Zr e Co. Busca-se reduzir o custo da liga, avaliando as condições de composição ideais que resultam em propriedades de AH₂ comparáveis às exibidas pela liga de referência. Cálculos iniciais de parâmetros semi-empíricos e ajustes de composição, posteriormente analisados por meio do método CALPHAD sugerem que as ligas $Zr_{24}Nb_{39}Fe_{18.9}Co_{16}Al_{0.6}Si_{1.5}$ e $Zr_{26.3}Nb_{26.9}Fe_{29}Co_{16.8}Al_{0.9}Si_{0.1}$ apresentam grande potencial para a armazenagem de hidrogênio além de manter a elevada tendência de formação da fase de laves C14. As amostras serão preparadas por fusão a arco voltaico sob atmosfera inerte de argônio. A caracterização microestrutural das ligas será feita utilizando técnicas como difração de raios X (DRX) com o método de refinamento Rietveld, microscopia eletrônica de varredura com espectroscopia por dispersão de energia (MEV/EDS) e microscopia eletrônica de transmissão (MET). O desempenho em relação ao armazenamento de hidrogênio será avaliado através de cinéticas de absorção/dessorção e isotermas de pressão-composição-temperatura (PCT). As simulações e cálculos indicaram forte tendência à formação da fase Laves C14 nas amostras com inclusão da liga comercial FeNb. Resultados preliminares de microscopia para a amostra de referência revelaram a presença de pelo menos três fases, duas delas dispersas em uma matriz dendrítica, com uma terceira na forma de segregações pontuais. Os testes de hidrogenação mostraram que, após um processo de ativação a 450°C, a amostra de referência absorveu 1,14% em peso de hidrogênio à temperatura ambiente, exibindo excelente reversibilidade e estabilidade através de múltiplos ciclos. Análises para as demais amostras serão realizadas e são esperados resultados superiores ou minimamente similares.