

MmeMge32-003

Desenvolvimento de ligas ricas em Nb para armazenagem de hidrogênio

Zepon, G.(1); Silva, B.H.(2); Dias, G.C.M.(1); Leiva, D.R.(1); Botta, W.J.(1);

(1) UFSCar; (2) PPGCEM/UFSCar;

O Brasil detém a maior reserva mundial de minérios de Nb, totalizando 840 milhões de toneladas e representando 98,53% da reserva mundial [1]. Aproximadamente 90% do minério de Nb é processado para a produção de ferronióbio (FeNb) utilizado na produção de aços microligados, de forma que a maior parte do Nb brasileiro é vendido na forma deste commodities, que embora lucrativo, está sujeito aos interesses e demanda do mercado externo. Como interesse de outros países em investir no desenvolvimento de materiais que utilizem um metal que está concentrado em um único território é naturalmente reduzido, cabe ao Brasil e seus pesquisadores e cientistas desenvolver tais materiais e aplicações. Com isso, neste trabalho, ligas ricas em Nb com potencial para aplicação em armazenagem de hidrogênio no estado sólido através da formação de hidretos metálicos foram desenvolvidas. A armazenagem de hidrogênio de modo seguro, eficiente e economicamente viável é um dos maiores desafios para a implementação do uso de hidrogênio como vetor energético de fontes limpas e renováveis em larga escala. Ligas dos sistemas Ti-Nb-Cr, Ti-V-Nb-Cr e Nb-Cr-Mn foram projetadas utilizando ferramentas de termodinâmica computacional tais como: o método CALPHAD para previsão de estabilidade de fases; e modelos termodinâmicos para a previsão de diagramas pressão-composição-temperatura (PCT) que determinam as condições termodinâmicas (pressão-temperatura) nas quais as ligas são capazes de absorver e desorver hidrogênio. As ligas foram produzidas por fusão à arco elétrico e caracterizadas por difração de raios-X (DRX) e microscopia eletrônica de varredura (MEV). As propriedades de armazenagem de hidrogênio foram avaliadas através de medidas manométricas/volumétricas utilizando aparatos do tipo Sieverts e de medidas calorimétricas utilizando um calorímetro diferencial de varredura (DSC). Como previsto pelos cálculos de CALPHAD, as ligas apresentaram uma fase majoritária cúbica de corpo centrado (CCC), que são capazes de absorver hidrogênio através da formação de um hidreto cúbico de fase centrada CFC com capacidade de $H/M \sim 2$ (razão de átomos de hidrogênio por átomos de metal). Este estudo mostrou que é possível obter várias ligas ricas em Nb com capacidade de armazenagem de hidrogênio e que através da variação do seu teor, ou adição de diferentes elementos de liga, as propriedades de armazenagem de hidrogênio podem ser ajustadas para diferentes aplicações. [1] A.R. Alves, A. Dos Reis Coutinho, The evolution of the niobium production in Brazil, Mater. Res. 18 (2015) 106–112. doi:10.1590/1516-1439.276414.