

### MmeMge32-009

#### Armazenamento reversível de hidrogênio induzido pela temperatura na liga multicomponente (TiZr)<sub>1</sub>(MnCr)<sub>2</sub> projetada por ferramentas termodinâmicas computacionais

Ponsoni, J.B.(1); Zepon, G.(2); Botta, W.J.(2);  
(1) PPGCEM/UFSCar; (2) UFSCar;

O hidrogênio é essencial para uma economia sustentável devido à sua eficiência como vetor energético para fontes renováveis. Hidretos metálicos (HMs) são excelentes candidatos para o armazenamento de hidrogênio no estado sólido devido à sua alta densidade volumétrica. Nesse contexto, ligas multicomponentes expandiram as opções de composições a serem avaliadas para encontrar ligas com propriedades de armazenamento de hidrogênio otimizadas para diversas aplicações. Neste estudo, uma abordagem computacional foi usada para projetar uma liga com fase Laves C14 para armazenamento de hidrogênio à temperatura ambiente, baseada em modelos empíricos e termodinâmicos. O modelo empírico considerou fatores geométricos e eletrônicos com base na composição química da liga. O método CALPHAD foi aplicado como uma ferramenta termodinâmica para prever a formação e estabilidade de fases da liga. Além disso, um modelo para prever a termodinâmica dos sistemas metal-hidrogênio foi proposto para calcular a curva isoterma de pressão-composição (PCI) de ligas multicomponentes com a fase C14, visando prever a pressão de equilíbrio da liga projetada. De acordo com essa metodologia de design, a liga (TiZr)<sub>1</sub>(MnCr)<sub>2</sub> solidificaria com a fase C14 e seria capaz de armazenar hidrogênio reversivelmente devido à pressão de equilíbrio calculada ser acima da pressão atmosférica (1,8 bar) a 30 °C. A liga foi produzida por fusão a arco elétrico e caracterizada por técnicas estruturais e volumétricas. A análise por Difração de raios-X indicou a formação da fase C14. O diagrama PCI mostrou que a liga armazenou reversivelmente 1,92 %p de hidrogênio (H/M = 1,14) a 30 °C, com pressão máxima de 50 bar. A pressão de equilíbrio de hidrogênio observada foi aproximadamente 0,43 bar a 30 °C. Apesar do modelo proposto determinar razoavelmente a pressão de equilíbrio da liga (TiZr)<sub>1</sub>(MnCr)<sub>2</sub>, a pressão experimental foi menor que a atmosférica, resultando na dessorção incompleta quando a pressão de hidrogênio foi liberada (sem vácuo), a 30 °C. Para realizar o processo de dessorção completo sem a aplicação de vácuo, propusemos a medida de dessorção induzida por temperatura. Realizamos a medida sob a condição de 90°C, pois a análise do diagrama PCI revelou uma pressão mais elevada da liga nessa temperatura (3,5 bar), o que favorece a dessorção. A amostra dessorveu quase totalmente mesmo sem vácuo dinâmico, quando a pressão de hidrogênio foi reduzida para cerca de 0,2 bar. Avaliamos o desempenho da liga ao longo de dez ciclos de absorção a 30 °C e dessorção a 90 °C. A capacidade de absorção de hidrogênio foi 1,70 %p (H/M = 1,01) no primeiro ciclo, 1,55 %p (H/M = 0,92) no segundo e 1,51 %p (H/M = 0,90) no décimo, indicando ótima reversibilidade da liga nessas condições. O comportamento de dessorção em temperaturas moderadas facilita o uso da liga em tanques para o setor de transporte, que tem potencial para expandir o uso de sistemas baseados na energia do hidrogênio.