

MmeMss33-001

Avaliação e descrição termodinâmica do sistema Cr-Hf-Nb

Oliveira, T.G.(1); Vilas Boas, S.B.(1); Silva, A.A.A.P.(1);

(1) UNIFEI;

Nas últimas décadas, a economia global tem buscado constantemente alternativas para fontes de energias limpas e renováveis. O hidrogênio se apresenta como opção e com grande destaque, principalmente devido às variadas possibilidades de aplicações, como na indústria aeroespacial, células de combustível para veículos e baterias. Contudo, o armazenamento de hidrogênio é um desafio, proporcionado a necessidade de materiais com grande potencial de armazenamento. As ligas multicomponentes (ou ligas de alta entropia), compostas por no mínimo cinco elementos principais, despertam o interesse da comunidade científica devido à ampla capacidade composicional, suas características microestruturais, propriedades mecânicas, químicas e termodinâmicas. Um dos focos de estudo dessas ligas são as fases de Laves, por serem promissoras no armazenamento de hidrogênio e favorecerem esse potencial. Porém, o estudo das ligas multicomponentes é complexo e envolve alto custo, o que sugere seu embasamento com ferramentas computacionais. Este trabalho realizou avaliação e modelagem termodinâmica do sistema Cr-Hf-Nb pelo método CALPHAD (Computer Coupling of Phase Diagrams and Thermochemistry), com o intuito de contribuir para o desenvolvimento de materiais para armazenamento de hidrogênio através da elaboração e/ou aprimoramento de banco de dados de sistemas binários e ternários para sistemas multicomponentes. Os dados teóricos e experimentais dos binários Cr-Hf, Cr-Nb e Hf-Nb foram obtidos da literatura e aplicados à otimização e descrição termodinâmica do sistema ternário. Para este procedimento, utilizou-se o software Thermo-Calc com o módulo Parrot. A aplicação do método CALPHAD possibilitou a descrição das propriedades termodinâmicas das fases presentes no sistema ternário Cr-Hf-Nb (líquido, CCC A2, HC A3, Laves C14 e Laves C15) pela primeira vez na literatura. A representação dos cálculos termodinâmicos é dada pelos diagramas de seções isotérmicas em diferentes temperaturas, projeção liquidus e seção isopleta.