

## Plan Overview

---

*A Data Management Plan created using DMPTool*

**Title:** Melhoria da Capacidade de Armazenamento de Hidrogênio à Temperatura Ambiente da Liga de Alta Entropia  $Ti(2-x)Zr(x)CrMnFeNi$  para  $0 \leq x \leq 1$

**Creator:** Gaspar Andrade

**Affiliation:** Universidade de São Paulo ([www5.usp.br](http://www5.usp.br))

**Principal Investigator:** Ricardo Floriano, Gaspar Andrade

**Data Manager:** Gaspar Andrade

**Template:** UNICAMP-GENERIC: Aplicável a todas as áreas

### Project abstract:

Recentemente as ligas de alta entropia (HEAs - High Entropy Alloys) foram testadas como sistemas armazenadores de hidrogênio e resultados muito promissores foram reportados como, por exemplo, elevadas capacidades de absorção de hidrogênio (elevada razão H/M) com cinéticas rápidas em temperaturas moderadas. Neste projeto de mestrado, será tratado essencialmente da otimização da composição, caracterização microestrutural e das propriedades de armazenagem de hidrogênio da liga de alta entropia  $TiZrCrMnFeNi$ . Tal liga com composição equiatômica, processada por fusão a arco, foi originalmente desenvolvida dentro do projeto FAPESP vigente (Processo:2018/15968-4) e resultados muito promissores foram reportados, como por exemplo, a ótima capacidade reversível de absorver hidrogênio em temperatura ambiente sem a necessidade de etapas prévias de ativação. Porém, em busca de resultados ainda mais superiores, tais como, o aumento da capacidade de armazenamento de hidrogênio à temperatura ambiente aliada à redução do peso e custo da liga, este projeto de mestrado propõe a otimização da composição da seguinte forma:  $Ti(2-x)Zr(x)CrMnFeNi$  para  $x$  entre 0 e 1, através da substituição seletiva de Zr por Ti na liga. Para tanto, faremos uma simulação termodinâmica com auxílio do método CALPHAD usando o software Thermocalc, onde a variação de fases resultantes da mudança de composição da liga e a influência dos elementos adicionados serão analisadas detalhadamente. Acreditamos que a substituição seletiva de Zr por Ti e consequentemente a escolha por composições monofásicas com fases ricas em Ti poderá resultar em pressões de equilíbrio mais baixas, permitindo que a liga atinja maiores capacidades de armazenamento de hidrogênio em comparação com a liga na proporção equiatômica. Cabe ressaltar ainda que, a substituição de Zr por Ti também promove redução de peso e nos custos de produção da liga.

**Start date:** 10-05-2020

**End date:** 10-05-2022

**Last modified:** 01-23-2024

**Copyright information:**

The above plan creator(s) have agreed that others may use as much of the text of this plan as they would like in their own plans, and customize it as necessary. You do not need to credit the creator(s) as the source of the language used, but using any of the plan's text does not imply that the creator(s) endorse, or have any relationship to, your project or proposal

---

## Melhoria da Capacidade de Armazenamento de Hidrogênio à Temperatura Ambiente da Liga de Alta Entropia $Ti(2-x)Zr(x)CrMnFeNi$ para $0 \leq x \leq 1$

Os dados principais a serem criados são curvas que descrevem o comportamento da liga do sistema  $Ti(2-x)Zr(x)CrMnFeNi$  derivada da liga de alta entropia  $TiZrCrMnFeNi$  em termos de performance em armazenar hidrogênio (capacidade reversível e cinética de absorção/dessorção) e medida da razão atômica hidrogênio-metal. Serão obtidos corpos de prova da liga a ser desenvolvida para posterior utilização em medição do desempenho de armazenamento de hidrogênio no estado sólido. Os dados de desempenho serão confrontados com os existentes na literatura relativos à liga  $TiZrCrMnFeNi$ . Esses dados encontram-se publicados na literatura e liberados para consulta.

Os metadados a serem anotados são de origem empírica, em sua quase totalidade. Dentre os resultados experimentais para o alcance dos dados principais incluem-se gráficos, diagramas, medidas de taxas de variação de pressão de gás, medidas de massa e de quantificação atômica, medidas de cinética e de pressão de equilíbrio, aferição de temperatura de equilíbrio, análise de composição química por EDS, análise cristalográfica por DRX, análise microestrutural por MEV e MET. Os metadados derivados de simulação termodinâmica computacional serão curvas de resfriamento de equilíbrio obtidas pelo método CALPHAD, disponível no software Thermocalc, e serão cedidos e compartilhados pelo laboratório do DEMA/UFSCAR por meio de repositório institucional. Os metadados relativos à pesquisa desenvolvida na liga de alta entropia  $TiZrCrMnFeNi$  serão obtidos da literatura já publicada pelos pesquisadores responsáveis com sua prévia autorização e consentimento.

Não existem questões legais e éticas de relevância envolvidas no presente projeto, uma vez que o tema investigado não é parte de segredos industriais, comerciais e patentes, tampouco envolvem experimentos em seres vivos. Por essa razão, não será necessária a consulta a órgãos competentes governamentais ou de qualquer outra natureza.

Não existem restrições ou questões éticas relevantes que devam ser consideradas para o compartilhamento de dados, ressalvando-se apenas o interesse particular dos colaboradores do projeto no ato da decisão do compartilhamento. Todos os dados envolvidos podem ser compartilhados sem nenhuma restrição, desde que dentro dos grupos de pesquisas que estão colaborando no âmbito das ligas de alta entropia para armazenamento de hidrogênio, quais sejam, DEMA/UFSCAR e grupo de pesquisa da Universidade de Kyushu, desde que com prévia comunicação dos pesquisadores responsáveis. Os dados eventualmente compartilhados serão armazenados no repositório Kaggle. Quaisquer referências em literatura devem respeitar o crédito do autor do dado ou resultado publicado.

Os formatos dos arquivos serão PDF, DOCX, XLS, TXT, JPEG, RAR. Os softwares a serem utilizados são Thermocalc, Excel, Word, Adobe Reader e WinRAR.

Os arquivos serão mantidos no repositório Kaggle, pelo período de dois anos, com o título: Non equimolar  $TiZr$  hydrogen storage. Tal repositório possui sistema de backup automático. Os dados serão organizados e classificados de acordo com a fase correspondente do projeto de pesquisa. O acesso será preservado a partir de um DOI - Digital Object Identifier.

---