

SOLUCIONES SÓLIDAS DE Mg-Nb CON ESTRUCTURA BCC

María Belén Moro (1), Facundo Castro (2), Guillermina Urretavizcaya (3)

(1) Instituto Balseiro, UN Cuyo y Centro Atómico Bariloche, CNEA, Bariloche, Argentina. (2) Instituto Balseiro, UN Cuyo y Centro Atómico Bariloche, CONICET, Bariloche, Argentina. (3) Instituto Balseiro, UN Cuyo y Centro Atómico Bariloche, CONICET, Bariloche, Argentina.
mariabelenmoro@gmail.com

En los últimos años se ha incrementado la problemática energética, y con ello la necesidad de desarrollar un combustible alternativo, sustentable y limpio. El H_2 es considerado como una de las mejores opciones para cumplir con estos requerimientos, sin embargo, es preciso aún estudiar, desarrollar y optimizar los aspectos relacionados con su producción, almacenamiento y transporte. En cuanto al almacenamiento en forma de hidruros, el MgH_2 presenta ventajas considerables: elevada capacidad de almacenamiento, abundancia y bajo costo; sin embargo, este hidruro posee una elevada estabilidad termodinámica y una lenta cinética de absorción y desorción de H_2 . Una manera de mejorar estas propiedades es a través de la consideración de sistemas basados en Mg que, mediante la incorporación de otros elementos, permiten obtener diferentes propiedades termodinámicas y cinéticas. En este sentido, estudios recientes [1] indican que el compuesto Mg_3Nb sintetizado en forma de película delgada posee propiedades de almacenamiento de hidrógeno prometedoras. En este trabajo, se presenta un estudio de compuestos Mg-Nb sintetizados por medio de molienda mecánica. Esta técnica de procesamiento permite preparar materiales con características microestructurales interesantes desde el punto de vista del almacenamiento de H_2 , y es especialmente útil para fabricar aleaciones cuyos componentes tienen puntos de fusión muy distintos. Experimentalmente, se preparó una mezcla equimolar de Mg y Nb (Mg, con estructura cristalina hexagonal, y Nb, con estructura cristalina bcc; metales puros y en polvo). La molienda se realizó en un molino Fritsch-Pulverisette P6 durante 50 horas, en atmósfera de argón, a 200 rpm. Como técnicas de caracterización de los materiales se utilizaron microscopía electrónica de transmisión (TEM), microscopía electrónica de barrido (SEM), difracción de rayos X (XRD), termogravimetría (TG) e interacción con H_2 mediante técnicas volumétricas. De manera complementaria, se realizó el refinamiento de los patrones obtenidos por XRD empleando el método de Rietveld. El resultado principal del trabajo es la obtención de una solución sólida Mg-Nb con estructura bcc en la que el Mg ocupa lugares en la red bcc del Nb de manera sustitucional. Ésta es la fase mayoritaria observada por XRD, la cual fue identificada mediante el corrimiento del parámetro de red (3.342 Å), respecto al del Nb metálico (3.307 Å). Adicionalmente, se observan en el difractograma Mg, Nb, MgO y Fe como fases residuales. Mediante SEM se examinó la morfología del material molido (Figura 1a). A gran escala, se observa que el Mg y el Nb se encuentran bien mezclados y el material es composicionalmente uniforme. Sus partículas presentan distintos tamaños (entre 10 y 200 μm). Algunas de ellas tienen caras planas, mientras que otras son irregulares, probablemente formadas por la aglomeración de otras más pequeñas, consecuencia del proceso de soldadura en frío (Figura 1b). Por otro lado, el análisis composicional por EDS indica que el material molido presenta una relación atómica Mg/Nb igual a 51/49. Por medio de TEM se corroboró que la muestra, en su mayoría, se compone de la solución sólida Mg-Nb (Figura 2a). Adicionalmente, no se observó la presencia de Mg amorfo (indistinguible en el difractograma de rayos X), el cual podría haberse formado durante la molienda mecánica. Esto sugiere que la mayor parte del Mg se encuentra disuelto en la solución sólida, que tendría una composición cercana a Mg-Nb. Asimismo, desde el punto de vista microestructural, el tamaño de cristalita observado dentro del rango 5-20 nm (Figura 2b), concuerda con el valor estimado mediante el refinamiento Rietveld del patrón de XRD (7 nm). Por último, mediante el estudio de la interacción de la solución sólida Mg-Nb con H_2 , se observó la formación de un hidruro de la misma. Éste se obtuvo entre 250 y 300 °C, bajo 6000 kPa de H_2 . En conclusión, motivados por la necesidad de desarrollar un material que presente buenas propiedades de almacenamiento de H_2 , se sintetizó una solución sólida de Mg-Nb con estructura cristalina bcc, se caracterizó la misma con técnicas tales como TEM, SEM, XRD, entre otras, y se estudió su interacción con H_2 .

REFERENCIAS

[1] Tan XH, Wang L, Holt, CHMB, Zahiri B, Eikerling MH, Mitlin D, (2012) Body centered cubic magnesium niobium hydride with facile room temperature absorption and four weight percent reversible capacity. Phys. Chem. Chem. Phys. 14 : 10904.

AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen a Paula Troyón, Manuel Corte y Daniel Wilberger por su asistencia en la observación de muestras por SEM y a Alfredo Tolley por su contribución en el estudio de muestras por TEM.

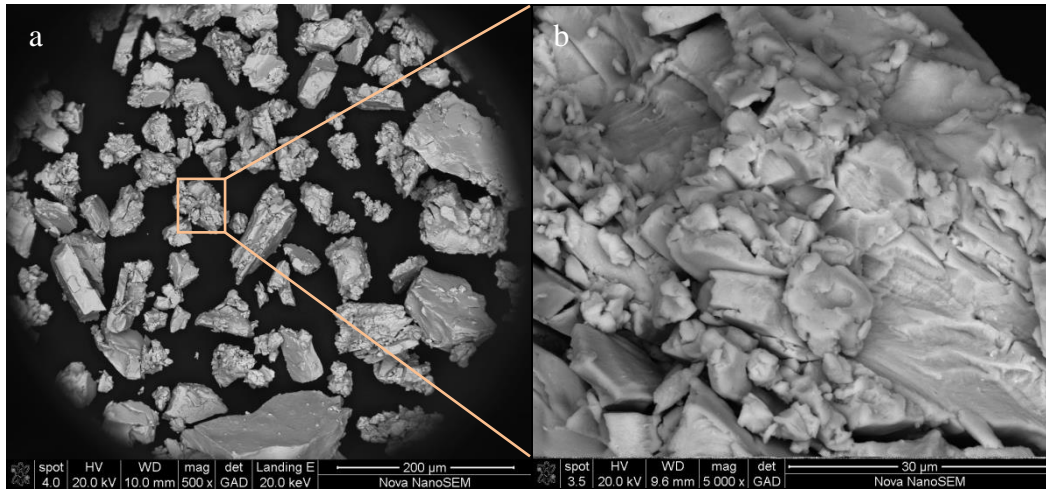
FIGURAS

Figura 1. a) Imagen obtenida con SEM, del material molido utilizando electrones retrodispersados. b) Detalle de una partícula con mayor magnificación.

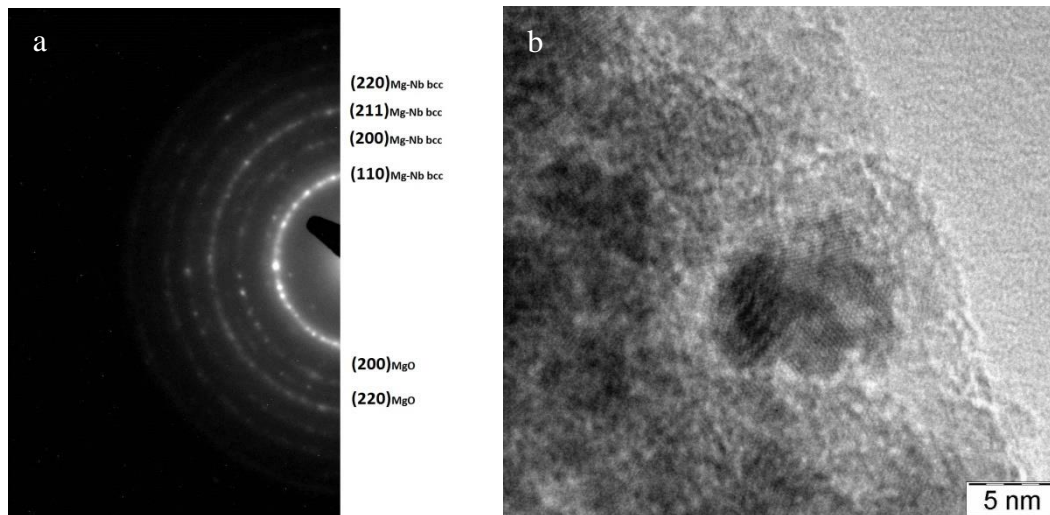


Figura 2. a) Patrón de difracción obtenido con TEM del material molido. b) Imagen de alta resolución de una región representativa en la misma muestra.