

12º CONGRESSO BRASILEIRO DE PESQUISA E DESENVOLVIMENTO EM PETRÓLEO E GÁS



TÍTULO DO TRABALHO:

Modelagem e Simulação da Cinética de Absorção e Liberação de Hidrogênio em Hidretos Metálicos

AUTORES:

Natanaele Soares Medeiros, Antônio G. B. da Cruz, Angela C. Souza, Fernando P. Duda.

INSTITUIÇÃO:

Universidade Federal do Rio de Janeiro

Modelagem e Simulação da Cinética de Absorção e Liberação de Hidrogênio em Hidretos Metálicos

Resumo

Os hidretos metálicos, como paládio e magnésio, são conhecidos por seu potencial no armazenamento de hidrogênio em estado sólido. Entretanto, sua aplicação prática é limitada devido à cinética lenta de absorção e liberação de hidrogênio, o que tem motivado pesquisas detalhadas sobre os mecanismos físicos envolvidos. O processo de absorção de hidrogênio envolve uma captação inicial a partir do ambiente, a difusão através do metal e uma transformação de fase. Para compreender e otimizar esse processo, os diagramas PCI (Pressão-Concentração-Índice) são ferramentas indispensáveis, mapeando a concentração de hidrogênio em equilíbrio em diferentes pressões de gás hidrogênio. Esses diagramas ilustram as pressões críticas de transição em que o metal muda de uma fase de baixa concentração de hidrogênio (fase α) para uma fase de concentração mais alta (fase β) e vice-versa, essencial para a eficiência do armazenamento de hidrogênio. Neste trabalho, propomos uma teoria mecanoquímica para estudar a cinética dessa transição, integrando equilíbrio de forças mecânicas, de conteúdo de hidrogênio e de forças configuracionais. A teoria considera uma rápida difusão do hidrogênio, comportamento elástico no volume e equilíbrio químico local, examinando como efeitos mecânicos, como tensão e deformação, impactam a transição de fase $\alpha - \beta$. Além disso, aborda a definição de condições de contorno para a difusão de hidrogênio a partir de um ambiente gasoso além das suposições usuais de equilíbrio químico local. Esse quadro teórico é aplicado a geometrias esféricas e de filmes finos passíveis de tratamento analítico, e a geometrias mais complexas utilizando simulações numéricas baseadas em elementos finitos.

Palavras-chave: sistemas de armazenamento de hidrogênio, transformação de fase, difusão induzida por tensões, forças configuracionais.

Abstract

Metal hydrides, such as palladium and magnesium, are known for their potential in solid-state hydrogen storage. However, their practical application is limited due to the slow kinetics of hydrogen absorption and release, which has motivated detailed research into the physical mechanisms involved. The hydrogen absorption process involves an initial uptake from the environment, diffusion through the metal, and a phase transformation. To understand and optimize this process, PCI (Pressure-Concentration-Isotherm) diagrams are indispensable tools, mapping the equilibrium hydrogen concentration at different hydrogen gas pressures. These diagrams illustrate the critical transition pressures where the metal changes from a low hydrogen concentration phase (α phase) to a higher concentration phase (β phase) and vice versa, which is essential for hydrogen storage efficiency. In this work, we propose a mechanochemical theory to study the kinetics of this transition, integrating mechanical force equilibrium, hydrogen content, and configurational forces. The theory considers rapid hydrogen diffusion, elastic behavior in the volume, and local chemical equilibrium, examining how mechanical effects, such as stress and strain, impact the α - β phase transition. Additionally, it addresses the definition of boundary conditions for hydrogen diffusion from a gaseous environment beyond the usual assumptions of local chemical equilibrium. This theoretical framework is applied to spherical and thin film geometries amenable to analytical treatment, and to more complex geometries using finite element-based numerical simulations.

Keywords: hydrogen-storage systems, phase transformation, diffusion-induced stress, configurational forces.

Introdução

Apesar de serem considerados candidatos promissores para armazenamento de hidrogênio no estado sólido, materiais metálicos como paládio e magnésio apresentam desafios em aplicações práticas devido à lenta cinética de absorção e liberação de hidrogênio, como enfatizado por Bérubé et al. (2007) em seu trabalho. Essa limitação tem levado a inúmeras investigações sobre a compreensão dos processos físicos subjacentes.

Várias etapas importantes estão envolvidas no processo de absorção de hidrogênio pelos metais, incluindo a absorção de hidrogênio do ambiente, a difusão em massa dentro do metal e a transformação de fase, conforme descrito por Delmelle et al. (2015). Inicialmente, o metal absorve hidrogênio do seu entorno. O hidrogênio absorvido então sofre difusão em massa dentro do metal, movendo-se através de sua estrutura reticulada. À medida que o potencial químico aumenta, o hidrogênio dissolve-se no metal até que um limite de solubilidade seja atingido. A partir desse ponto, inicia-se uma transformação de fase, formando uma fase hidreto com maior teor de hidrogênio. Esses processos contribuem coletivamente para a cinética geral de absorção e liberação de hidrogênio em materiais metálicos, conforme discutido por Cheng et al. (1998).

Identificar o processo cinético responsável por tais características é fundamental para superar a limitação da cinética lenta de hidrogenação e desidrogenação. Ao identificar e estudar os fatores subjacentes que afetam a absorção e a taxa de liberação de hidrogênio, é possível desenvolver estratégias para melhorar a eficiência e a capacidade de armazenamento de hidrogênio no estado sólido em materiais metálicos, como observado por Fortier et al. (2009). Nesse sentido, por exemplo, o papel da tensão na cinética de absorção e liberação de hidrogênio é investigado.

As tensões podem afetar o crescimento de hidretos em metais, e a compreensão de sua influência pode fornecer percepções sobre a otimização da cinética das reações de hidretos, como evidenciado no estudo apresentado por Khan et al. (2020), destacando o papel das tensões na cinética de absorção e dessorção de hidrogênio.

As teorias do contínuo desenvolvidas por Duda et al. (2015, 2016) e ampliadas por Souza et al. (2018) para ter em conta a mobilidade do hidrogênio dependente das tensões foram abordadas na literatura por Zhdanov et al. (2010) e Grönbeck et al. (2011) e forneceram informações valiosas sobre a cinética da transformação de fase em materiais metálicos. Essas teorias consideram a influência das tensões discordantes e da mobilidade do hidrogênio dependente das tensões, permitindo uma compreensão abrangente dos processos de absorção e liberação de hidrogênio.

Neste trabalho, consideramos o trabalho anterior de Souza et al. (2018), relaxando a suposição de que a absorção de hidrogênio através da fronteira do sistema ocorre muito rapidamente. Em vez disso, introduzimos uma condição de contorno modificada que relaciona o influxo de hidrogênio à diferença no potencial químico, semelhante à condição de contorno de convecção na transferência de calor. Essa abordagem, conforme demonstrado por Duda et al. (2021), garante consistência termodinâmica e fornece uma descrição mais precisa do processo de absorção de hidrogênio

Metodologia

As condições de interface são obtidas pela localização do equilíbrio de força e conteúdo de soluto, bem como da desigualdade de energia livre na interface $\alpha - \beta$, com base nas seguintes suposições: a interface é coerente e o equilíbrio químico local prevalece durante sua evolução, o que significa que o deslocamento $\mathbf{u}$ e o potencial químico μ são contínuos através da interface; ela se propaga sem dissipação, levando à validade da condição de Maxwell na interface. Essas condições de interface podem ser expressas como:

1. Continuidade do deslocamento e do potencial químico

$$[|\mathbf{u}|] = 0, \quad [|\mu|] = 0, \quad (1)$$

onde $[|A|] = (A_\beta - A_\alpha)$ denota a variação de um campo A através da interface.

2. Equilíbrio de força e conteúdo de soluto

$$[|\mathbf{T}|]\mathbf{m} = 0, \quad [|\mathbf{c}|]v - [|\mathbf{h}|] \cdot \mathbf{m} = 0, \quad (2)$$

onde v é a velocidade da interface na direção do vetor unitário $\mathbf{m}$.

3. Relação de Maxwell

$$[|\omega - (\nabla\mathbf{u})\mathbf{m} \cdot \mathbf{T}\mathbf{m}|] = 0. \quad (3)$$

Consideramos $\partial\mathbf{B}$ imerso em um reservatório de gás hidrogênio à pressão p . Sob a suposição padrão de que a pressão do gás pode ser negligenciada do ponto de vista mecânico, a condição de contorno mecânica pode ser simplificada da seguinte forma:

$$\mathbf{T}\mathbf{n} | \partial\mathbf{B} = 0, \quad \text{onde } \mathbf{n} \text{ é o campo vetorial normal unitário para fora em } \partial\mathbf{B}. \quad (4)$$

A condição de contorno química é dada por:

$$\mathbf{h} \cdot \mathbf{n} = \varpi(\mu - \mu_R) \quad (5)$$

na entrada do soluto, onde $\varpi > 0$. Esta condição de contorno é consistente com a termodinâmica, conforme discutido por Duda et al. (2021). Pode-se demonstrar que a condição de contorno de equilíbrio químico local ($\mu = \mu_R = \frac{1}{2}\mu_{H_2}$) pode ser obtida no limite em que ϖ tende ao infinito.

Apresentamos uma especialização constitutiva adequada para descrever situações que envolvem pequenas variações do potencial químico de transição μ_{eq} , no qual as fases α e β coexistem em equilíbrio estável e sem tensões, com as correspondentes densidades de conteúdo de soluto dadas por c_α e c_β , onde $c_\beta > c_\alpha$. Esta teoria baseia-se na seguinte suposição:

Decomposição aditiva da deformação total $\mathbf{E}$ em sua parte elástica $\mathbf{E}_e$ e sua parte sem tensões $\mathbf{E}_{0\phi}$, na fase ϕ

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_e + \mathbf{E}_{0\phi} \quad \mathbf{E}_{0\phi} = \epsilon_\phi(c_\phi)\mathbf{I} \quad (6)$$

$$\text{Com, } \hat{\epsilon}_\alpha(c_\alpha) = \eta_\alpha (c_\alpha - c_{0,\alpha}) \text{ e } \hat{\epsilon}_\beta(c_\beta) = \eta_\beta (c_\beta - c_{0,\beta}) + e_T, \quad (7)$$

onde e_T é a deformação de transformação, $c_{0\phi}$ é um valor de referência do conteúdo de soluto na fase ϕ para medir a deformação, η_ϕ é um parâmetro do material. Definimos a deformação de incompatibilidade entre as fases β e α , $\hat{\epsilon}_0 = \epsilon_\beta(c_\beta) - \epsilon_\alpha(c_\alpha)$.

O potencial grand canônico assume a seguinte forma específica:

$$\hat{\omega}_\phi(\mu, E) = -c_\phi, (\mu - \mu_{eq}) + \frac{\lambda}{2} (tr E_e)^2 + G |E_e|^2, \quad (8)$$

onde λ e G representam os módulos elásticos de Lamé, assumidos como os mesmos para ambas as fases.

A função de resposta $\hat{M}_\phi$ depende da tensão $\mathbf{T}$ e do conteúdo de soluto c . Portanto, consideramos a especialização isotrópica dada por, $M_\phi(c_\phi, \mathbf{T}) = M_\phi c_\phi \mathbf{I}$, com $M_\phi = m_\phi f_\phi(tr \mathbf{T})$, em que m_ϕ é a mobilidade do soluto sem tensões, e $f_\phi(tr \mathbf{T}) > 0$, representa o efeito da tensão na mobilidade do soluto M_ϕ através da traça do tensor de tensão $tr \mathbf{T}$. Por exemplo, se considerarmos a dependência da tensão na energia de ativação para a difusão, pode-se mostrar que $f_\phi(tr \mathbf{T})$ pode ser escrita como (Grönbeck and Zhdanov (2011))

$$f_\phi(tr \mathbf{T}) = \exp\left(-\frac{(\eta_{0,\phi} - \eta_{*,\phi}) tr \mathbf{T}}{3k_B T}\right) \quad (9)$$

em que $\eta_{0,\phi}(\eta_\phi)$ é o volume ocupado por um átomo de soluto em seu estado fundamental (ativado), k_B a constante de Boltzmann, e T a temperatura absoluta.

A concentração c é dada por

$$c = \begin{cases} c_\alpha & \text{em } B_\alpha(t) \\ c_\beta & \text{em } B_\beta(t) \end{cases} \quad (10)$$

consequentemente, a densidade de conteúdo de soluto c é um campo homogêneo por partes, e, portanto, $\dot{c}$ no volume. O tensor de tensão $\mathbf{T}$ é dado por $\mathbf{T} = \lambda tr \mathbf{E}_e \mathbf{I} + 2 G \mathbf{E}_e$

Com

$$\mathbf{E}_e = \begin{cases} \mathbf{E} - \hat{\epsilon}_\alpha(c_\alpha) \mathbf{I} & \text{em } B_\alpha(t) \\ \mathbf{E} - \hat{\epsilon}_\beta(c_\beta) \mathbf{I} & \text{em } B_\beta(t) \end{cases} \quad (11)$$

O fluxo de soluto $\mathbf{h}$ é dado por

$$\mathbf{h} = \begin{cases} m_\alpha f_\alpha(tr \mathbf{T}) c_\alpha \nabla \mu & \text{em } B_\alpha(t) \\ m_\beta f_\beta(tr \mathbf{T}) c_\beta \nabla \mu & \text{em } B_\beta(t) \end{cases} \quad (12)$$

Consideremos agora que $\mathbf{B}$ seja uma esfera sólida de raio R , dividida em duas fases α e β por uma interface concêntrica $S(t)$ de raio $\rho(t)$. A região interna é ocupada pela fase α , enquanto a região externa é ocupada pela fase β , e condições de simetria esférica são assumidas.

A interface concêntrica e o valor normal são

$$S(t) = \{ \mathbf{x} : |\mathbf{x}| = \rho(t) \}, \dot{\rho}(t) = v. \quad (13)$$

O campo de tensão, deformação e potencial químico são obtidos a partir do conhecimento da posição atual da interface, conforme será discutido a seguir. Graças à simetria esférica do problema:

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = u(r)\mathbf{e}, \quad \mu(\mathbf{x}) = \mu(r), \quad \mathbf{E} = u' \mathbf{e} \otimes \mathbf{e} + u_r (\mathbf{I} - \mathbf{e} \otimes \mathbf{e}), \quad \mathbf{T} = \sigma_r \mathbf{e} \otimes \mathbf{e} + \sigma_\theta (\mathbf{I} - \mathbf{e} \otimes \mathbf{e}), \quad (14)$$

em que $\mathbf{e} = \frac{\mathbf{x}}{|\mathbf{x}|}$, $r = |\mathbf{x}|$ e a' denota da/dr . Levando em conta o componente de tensão, o balanço de forças descrito como $\text{div} \mathbf{T} = 0$, pode ser reescrito como

$$\frac{d}{dr} \left(\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} (r^2 u(r)) \right) = 0, \quad (15)$$

cujas soluções gerais são dadas por

$$u(r) = \begin{cases} C_1^\alpha r & \text{para } 0 \leq r \leq \rho, \\ C_1^\beta r + C_2^\beta r^2 & \text{para } \rho \leq r \leq R. \end{cases} \quad (16)$$

A partir das condições $(1)_1$, $(2)_1$ e (4), encontramos as constantes C_1^α , C_1^β e C_2^β . Consideramos agora a determinação do potencial químico. A partir do componente radial da trilha de $\mathbf{T}$ e (16), $tr \mathbf{T}$ é piecewise homogênea e, portanto, μ é harmônica no volume. Isso implica que $\mu(r)$ satisfaz a equação

$$\frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \mu(r) \right) = 0, \quad (17)$$

cujas soluções gerais são dadas por

$$\mu(r) = \begin{cases} D_1^\alpha & \text{para } 0 \leq r \leq \rho, \\ D_1^\beta + D_2^\beta r & \text{para } \rho \leq r \leq R. \end{cases} \quad (18)$$

A partir das condições $(1)_2$, (3) e (5), encontramos as constantes D_1^α , D_1^β e D_2^β . Derivando a equação (18) e usando as constantes encontradas, temos

$$\mu'(r) = \begin{cases} 0 & \text{para } 0 \leq r \leq \rho, \\ \left(\frac{\mu_R - \mu_\rho}{R - (1+\zeta)\rho} \right) \frac{\rho R}{r^2} & \text{para } \rho \leq r \leq R. \end{cases} \quad (19)$$

Onde $\zeta = m_\beta c_\beta f_\beta (tr \mathbf{T}) R \varpi$. Como ϖ tende ao infinito, ζ tende a zero, levando aos resultados obtidos por Souza (2018), conforme mencionado anteriormente.

Agora obtemos a equação de evolução da interface.

$$\dot{\rho}(t) = \frac{m_\beta f_\beta (tr \mathbf{T}) c_\beta}{c_\beta - c_\alpha} \left(\frac{\mu_\rho - \mu_R}{R - (1+\zeta)\rho} \right) \frac{R}{\rho}. \quad (20)$$

É importante lembrar que a equação acima foi derivada sob a suposição de que a fase α ocupa o núcleo interno da esfera. No entanto, se a fase β ocupar o núcleo interno, as variáveis c_α e c_β devem ser substituídas por c_β e c_α , respectivamente.

A equação pode ser reescrita como

$$\tau(1 - (1 + \zeta)y)y \dot{y} = \exp(Ay^3)(B(2y^3 - 1) - 1) \quad (21)$$

Onde $y = \frac{\rho}{R}$, $\tau = \left(\frac{c_\beta - c_\alpha}{c_\beta}\right) \frac{R^2}{m_\beta(\mu_R - \mu_{eq})}$, $A = \frac{4\kappa G \epsilon_0 (\eta_{0\beta} - \eta_{*\beta})}{(2G + \lambda) k_B T}$, $B = \frac{\mu_0}{\mu_R - \mu_{eq}}$. Observe que τ é um tempo característico associado à transição de fase na ausência de estresse.

Buscamos soluções da Equação (21) com as condições iniciais $y(0) = 1$ e $\dot{y} < 0$. Esse cenário corresponde à fase inicial do processo onde a esfera está predominantemente na fase α . A fase β começa a nucleação na borda, e a interface move-se em direção ao interior da esfera. Esse processo é chamado de transformação $\alpha \rightarrow \beta$ ou processo de absorção. Por outro lado, se o espécime estiver inicialmente saturado, ou seja, $y(0) = 0$, indicando que toda a esfera está na fase β , e se o processo continuar com $\dot{y} > 0$, a fase α começa a nucleação na borda. Esse processo é chamado de transformação $\beta \rightarrow \alpha$ ou processo de dessorção.

Ao analisar a Equação (21), pode-se determinar as condições necessárias para a ocorrência de transformações de fase e também calcular o tempo necessário para que as transformações ocorram. Para calcular o tempo necessário para que as transformações alcancem a interface na localização y , podemos definir a função

$$f(x) = \frac{(1 - (1 + \zeta)x)x}{\exp(Ax^3)(B(2x^3 - 1) - 1)}. \quad (22)$$

Então, o tempo para a transformação $\alpha \rightarrow \beta$ alcançar a localização y , denotado por $\Gamma_{\alpha \rightarrow \beta}(y)$, é dado por $\Gamma_{\alpha \rightarrow \beta}(y) = \tau \left| \int_0^y f(x) dx \right|$.

Resultados e Discussão

Os resultados apresentados aqui são preliminares e apenas para fins ilustrativos, porém fisicamente consistentes. A Figura 2 mostra a dependência temporal da fração volumétrica da fase de hidreto, $C(t) = g(y(t))$ com:

$$g(y) = \frac{(1 - y^3)c_\beta}{y^3 c_\alpha + (1 + y^3)c_\beta}, \quad (23)$$

durante a transformação de α para β para $c_\beta/c_\alpha = 4$ com parâmetros definidos em $A = 0.0$ e $B = 0.5$ e diferentes valores do parâmetro ζ . Quando a tensão não afeta a mobilidade (ou seja, $A = 0.0$), intensifica-se que a tensão acelera a transformação da fase α para β . No entanto, se considerarmos diferentes valores crescentes do parâmetro adimensional ζ a partir do zero, então a transformação α para β é mais lenta, e o tempo de transformação correspondente é mais longo em comparação com o caso em que $\zeta = 0$.

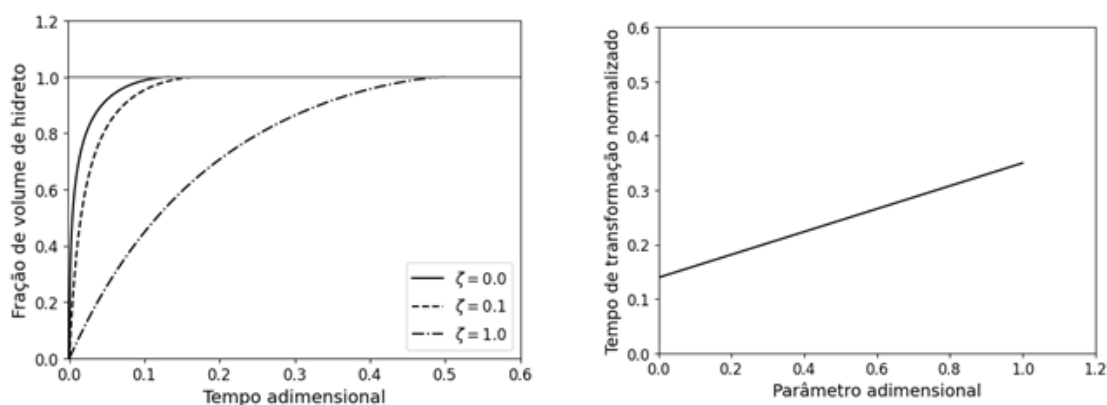


Figura 1. a) Evolução da fração de volume de hidreto ao longo do tempo adimensional t/τ , b) Tempo de transformação de fase adimensionalizado, $\Gamma_{\alpha \rightarrow \beta}(1)/\tau$, em função do parâmetro ζ .

Para ilustrar o efeito do parâmetro ζ no tempo de transformação da fase hidreto, na Figura 3 mostramos o tempo de transformação normalizado ($\Gamma_{\alpha \rightarrow \beta}(1)/\tau$) em função do parâmetro adimensional ζ . Portanto, de acordo com o modelo apresentado neste trabalho, as tensões afetam a cinética da transformação de α para β de duas maneiras opostas, acelerando e desacelerando a transformação de fase.

Conclusões

Analisamos uma teoria do contínuo para descrever os efeitos da tensão na cinética de absorção e liberação de hidrogênio em metais. A teoria foi baseada em várias suposições simplificadoras: (1) a transformação α/β é a etapa determinante da taxa na absorção de hidrogênio, (2) a diferença entre o potencial químico do hidrogênio e o potencial químico de transição, no qual as fases α e β coexistiriam na ausência de tensão, é pequena, (3) em cada uma das fases, a concentração de hidrogênio no volume é constante e dada pelo valor correspondente no potencial químico de transição. Além dessas considerações, uma condição de contorno mais realista para o influxo de hidrogênio foi analisada neste trabalho. Esta generalização estende o estudo anterior conduzido por Souza (2018), em que uma teoria de contínuo foi desenvolvida para descrever os efeitos das tensões na cinética do hidrogênio em metais. Como uma aplicação da teoria, empregamos um tratamento analítico para estudar a cinética de absorção de hidrogênio em uma partícula esférica. Os resultados demonstraram a presença de histerese e uma equação foi derivada para expressar a razão das pressões de H_2 que desencadeiam as transformações $\alpha - \beta$. Além disso, observamos que durante a transformação $\alpha - \beta$, a difusão de hidrogênio desacelera na fase β devido à presença de tensões compressivas. Portanto, com base nessas descobertas, constatamos que a presença de tensão atrasa a transformação da fase α para a fase β .

Agradecimentos

Os autores agradecem o apoio financeiro da ANP e FAPESP.

Referências Bibliográficas

CHENG, Tianning; BRUNSCHWIG, Bruce S.; BULLOCK, R. Morris. Hydride transfer reactions of transition metal hydrides: Kinetic hydricity of metal carbonyl hydrides. *Journal of the American Chemical Society*, v. 120, n. 50, p. 13121-13137, 1998. DOI: 10.1021/ja9820036.

DUDA, Fernando P.; SARMIENTO, Adel F.; FRIED, Eliot. Coupled diffusion and phase transition: Phase fields, constraints, and the Cahn-Hilliard equation. *Meccanica*, v. 56, n. 7, p. 1707-1725, 2021.

DUDA, Fernando P.; TOMASSETTI, Giuseppe. On the effect of elastic distortions on the kinetics of diffusion-induced phase transformations. *Journal of Elasticity*, v. 122, p. 179-195, 2016.

DUDA, Fernando P.; TOMASSETTI, Giuseppe. Stress effects on the kinetics of hydrogen adsorption in a spherical particle: An analytical model. *International Journal of Hydrogen Energy*, v. 40, n. 47, p. 17009-17016, 2015.

DYCK, Alexander; BÖHLKE, Thomas; PUNDT, Astrid; WAGNER, Stefan. Phase transformation in the palladium hydrogen system: Effects of boundary conditions on phase stabilities. *Scripta Materialia*, v. 247, p. 116117, 2024.

FORTIER, Skye; MELOT, Brent C.; WU, Guang; HAYTON, Trevor W. Homoleptic uranium (IV) alkyl complexes: Synthesis and characterization. *Journal of the American Chemical Society*, v. 131, n. 42, p. 15512-15521, 2009. DOI: 10.1021/ja906516e.

GRÖNBECK, Hans; ZHDANOV, V.P. Effect of stress on hydrogen diffusion in metals: A density functional theory study. *Journal of Physical Chemistry C*, v. 115, n. 14, p. 6826-6832, 2011. DOI: 10.1021/jp200014z.

KHAN, Darvaish; ZOU, Jianxin; PANDA, Subrata; DING, Wenjiang. Mechanism of thermodynamic destabilization and fast desorption kinetics in a mechanically alloyed MgH₂--In composite. *The Journal of Physical Chemistry C*, v. 124, n. 18, p. 9685-9695, 2020.

KLOPČIČ, Nejc; GRIMMER, Ilena; WINKLER, Franz; SARTORY, Markus; TRATTNER, Alexander. A review on metal hydride materials for hydrogen storage. *Journal of Energy Storage*, v. 72, p. 108456, 2023.

MARTIN, M.; GOMMEL, Ch.; BORKHART, C.; FROMM, E. Absorption and desorption kinetics of hydrogen storage alloys. *Journal of Alloys and Compounds*, v. 238, n. 1-2, p. 193-201, 1996.

SOUZA, A.C.; DA CRUZ, A.G.; DUDA, Fernando P. Stress effects on the kinetics of hydride formation and growth in metals. *Latin American Journal of Solids and Structures*, v. 15, 2018.

WAGNER, Stefan; KLOSE, Philipp; BURLAKA, Vladimir; NÖRTHEMANN, Kai; HAMM, Magnus; PUNDT, Astrid. Structural phase transitions in niobium hydrogen thin films: Mechanical stress, phase equilibria and critical temperatures. *ChemPhysChem*, v. 20, n. 14, p. 1890-1904, 2019.

YUE, Meiling; LAMBERT, Hugo; PAHON, Elodie; ROCHE, Robin; JEMEI, Samir; HISSEL, Daniel. Hydrogen energy systems: A critical review of technologies, applications, trends and challenges. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, v. 146, p. 111180, 2021.

ZHDANOV, V.P. Effect of stress on hydrogen diffusion in metals. *Journal of Alloys and Compounds*, v. 491, n. 1-2, p. 1-5, 2010. DOI: 10.1016/j.jallcom.2009.10.014.