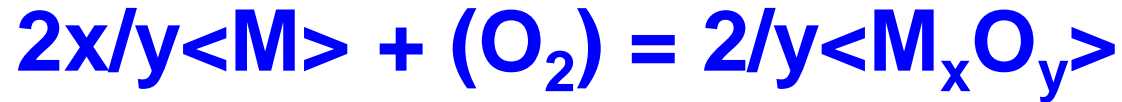


# **PMT 3205**

## **Físico-Química para Metalurgia e Materiais I**

# DIAGRAMAS DE ELLINGHAM

1944



- **No equilíbrio:**

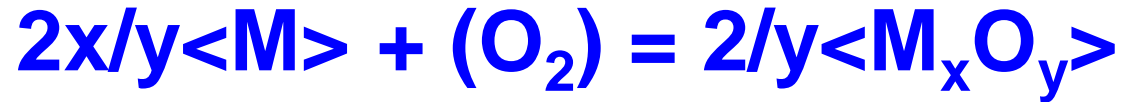
- A  $p_{O_2}$ : **de equilíbrio**

- Varia somente com a temperatura (está dentro da constante de equilíbrio)

$$\Delta G_T = \Delta G_T^{\circ} + R.T.\ln(K) = 0 \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \Delta G_T^{\circ} = -R.T.\ln\left(\frac{1}{p_{O_2}}\right) = R.T.\ln(p_{O_2}) = A + B.T$$

# DIAGRAMAS DE ELLINGHAM

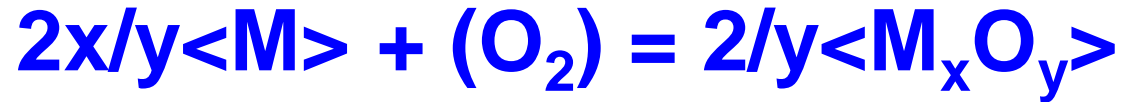


- **Fora do equilíbrio para  $p_{O_2} = 1 \text{ atm}$** 
  - Varia somente com a temperatura (está dentro da constante de equilíbrio)

$$\Delta G_T = \Delta G_T^\circ + R.T.\ln(1/p_{O_2}) = \Delta G_T^\circ + R.T.\ln(1/1) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \Delta G_T = \Delta G_T^\circ = A + B.T$$

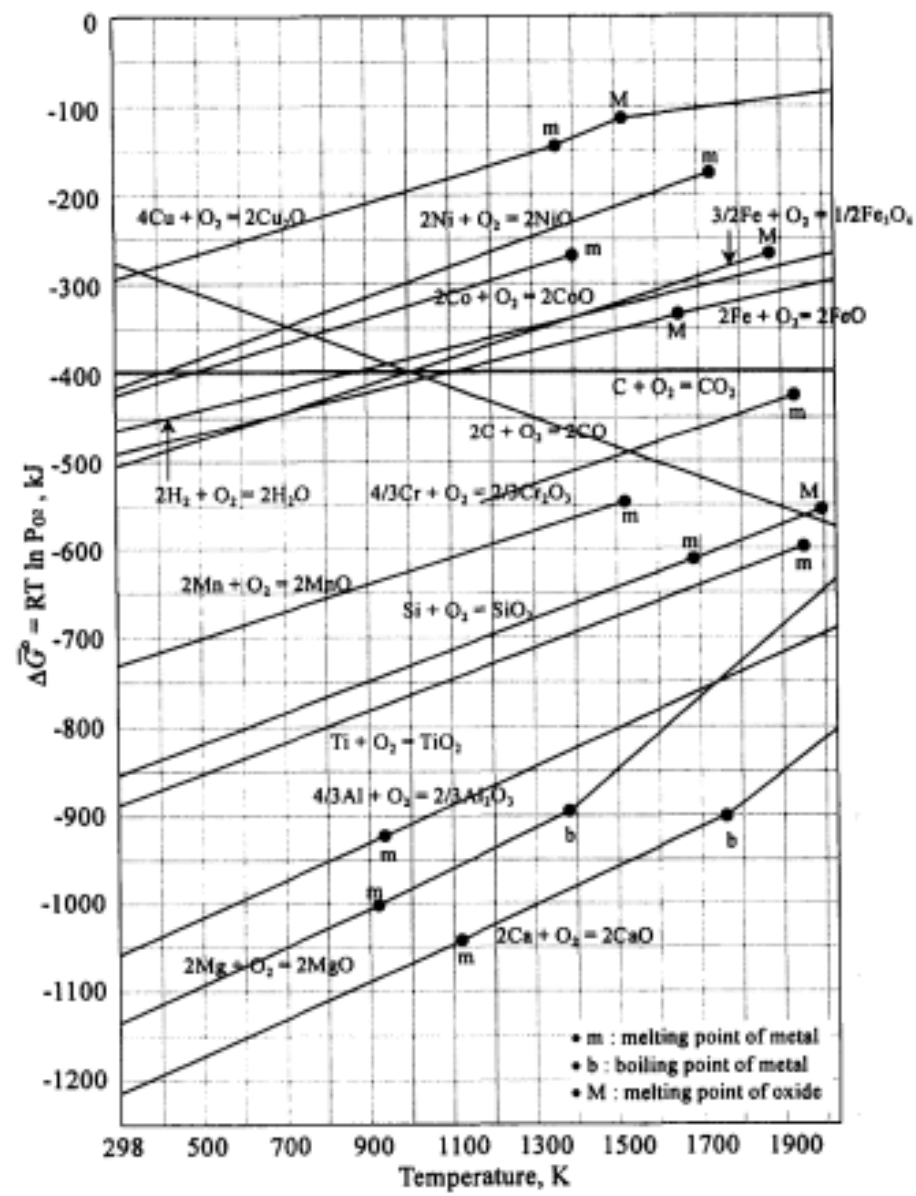
# DIAGRAMAS DE ELLINGHAM



- As duas situações podem ser expressas graficamente  $\Delta G^\circ \times T$  e  $\Delta G \times T$  pela mesma equação
  - Para  $\Delta G^\circ$  - obtém-se a  $p_{O_2}$  de equilíbrio
  - Para  $\Delta G$  - obtém-se a estabilidade relativa
- Deve ser notado que todas as reações têm como base 1 mol de  $O_2$

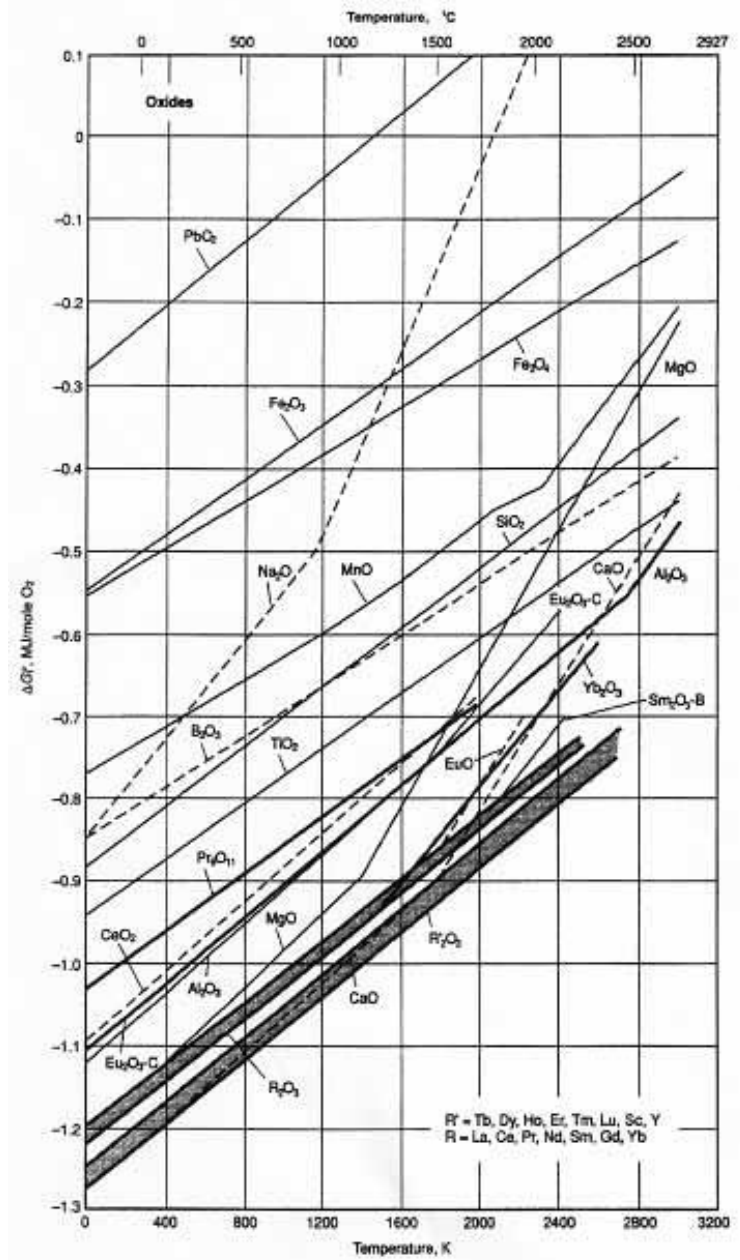


# DIAGRAMAS DE ELLINGHAM





# DIAGRAMAS DE ELLINGHAM



Nos dois websites abaixo este assunto está apresentado de forma bastante didática, principalmente no primeiro. Recomenda-se acessá-los

[http://www.doitpoms.ac.uk/tlplib/ellingham\\_diagrams/index.php](http://www.doitpoms.ac.uk/tlplib/ellingham_diagrams/index.php)

<http://www.engr.sjsu.edu/ellingham/>

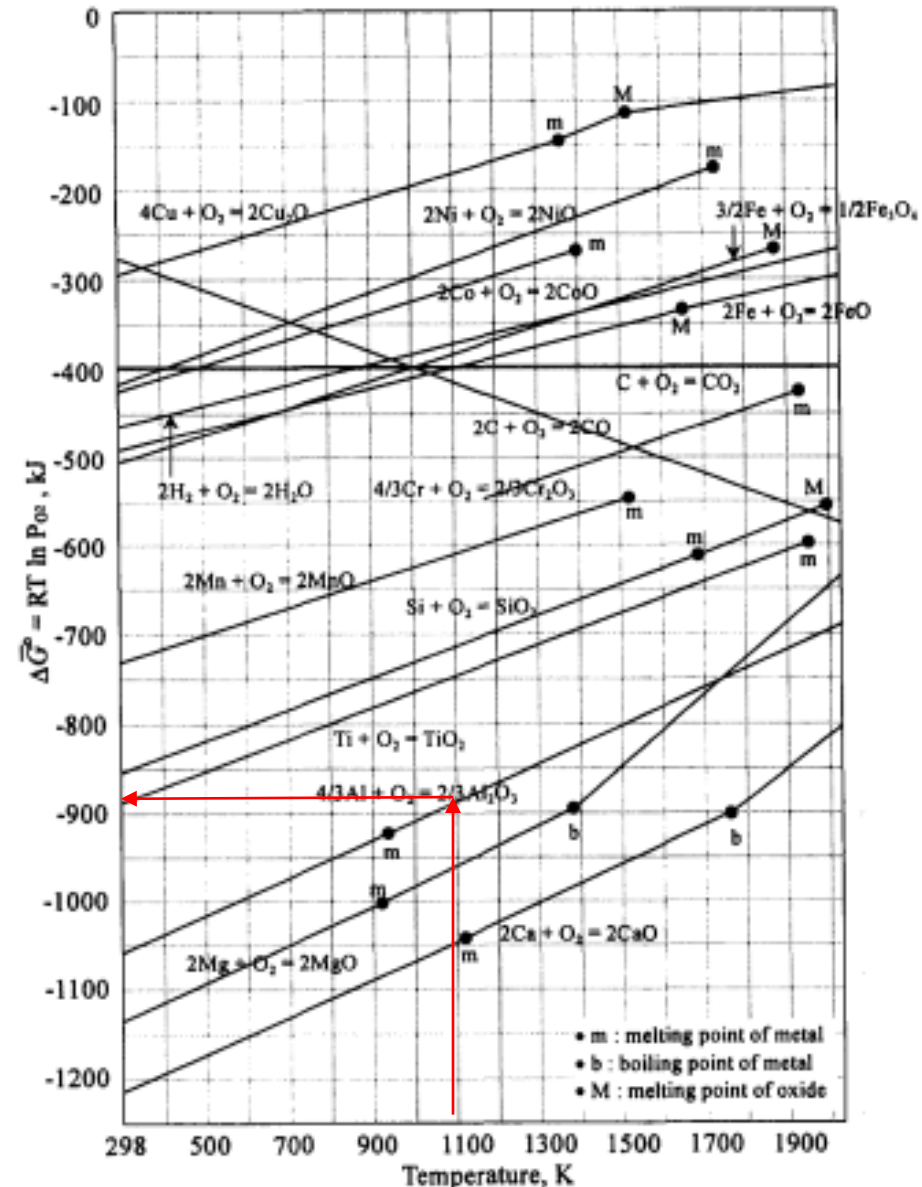
# DIAGRAMAS DE ELLINGHAM

## Para $\Delta G^\circ \times T$

- Para a  $\text{Al}_2\text{O}_3$  a  $800^\circ\text{C}$ :
  - $\Delta G^\circ \cong -880$  kJ ou
  - $R.T. \ln p_{\text{O}_2} = -880.000$
  - $p_{\text{O}_2} \cong 10^{-42}$  atm

## Para $\Delta G \times T$

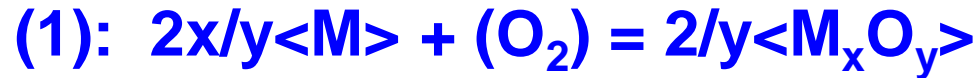
- Para a  $\text{Al}_2\text{O}_3$  a  $800^\circ\text{C}$ :
  - $\Delta G \cong -880$  kJ  $< 0$  ou
  - Reação possível para uma  $p_{\text{O}_2} = 1$  atm





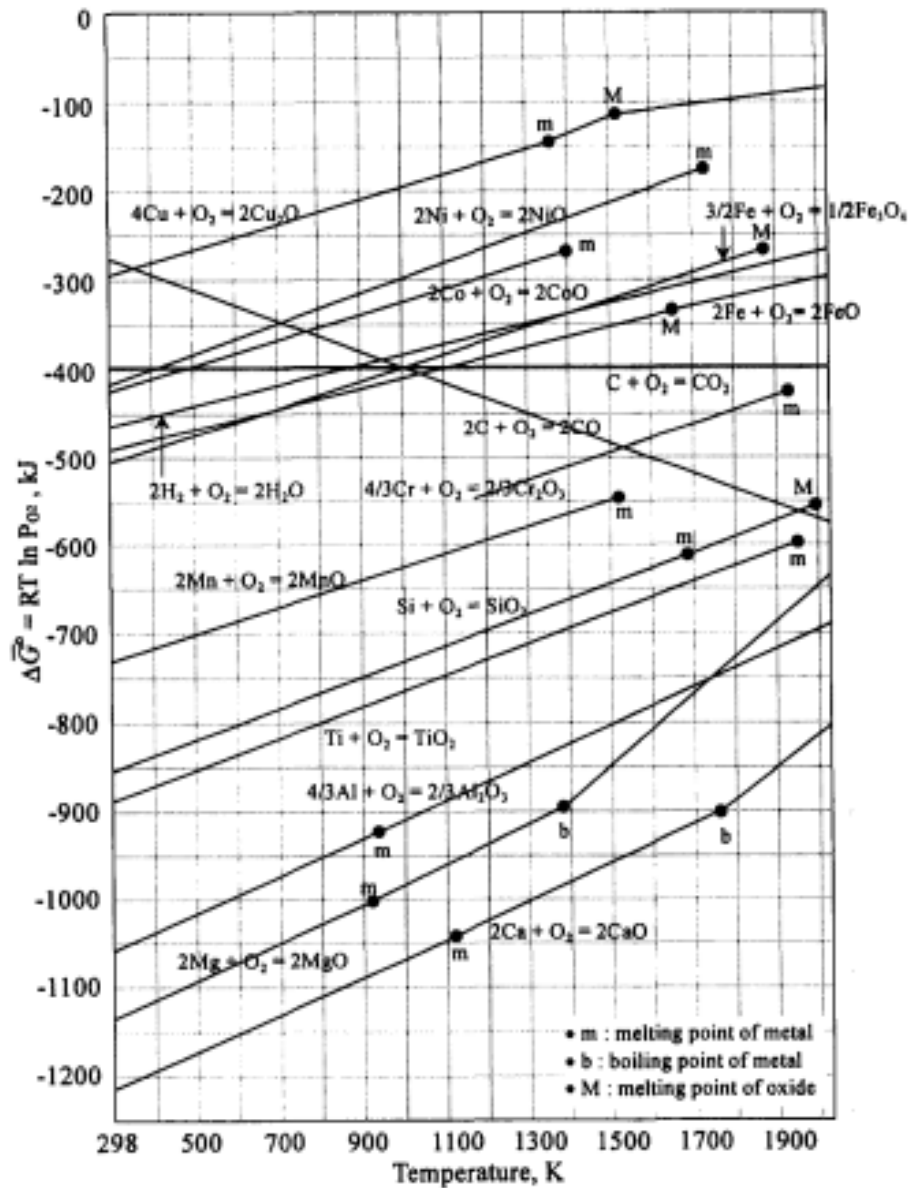
# DIAGRAMAS DE ELLINGHAM

## ESTABILIDADE RELATIVA



- Se  $\Delta G_1 > \Delta G_2 \Rightarrow M'_{x'} O_{y'}$  é mais estável que  $M_x O_y$
- Se  $\Delta G_1 < \Delta G_2 \Rightarrow M_x O_y$  é mais estável que  $M'_{x'} O_{y'}$ 
  - QUANTO MAIS EMBAIXO ESTIVER O ÓXIDO MAIS ESTÁVEL ELE É E SEU METAL É REDUTOR DOS ÓXIDOS ACIMA DELE

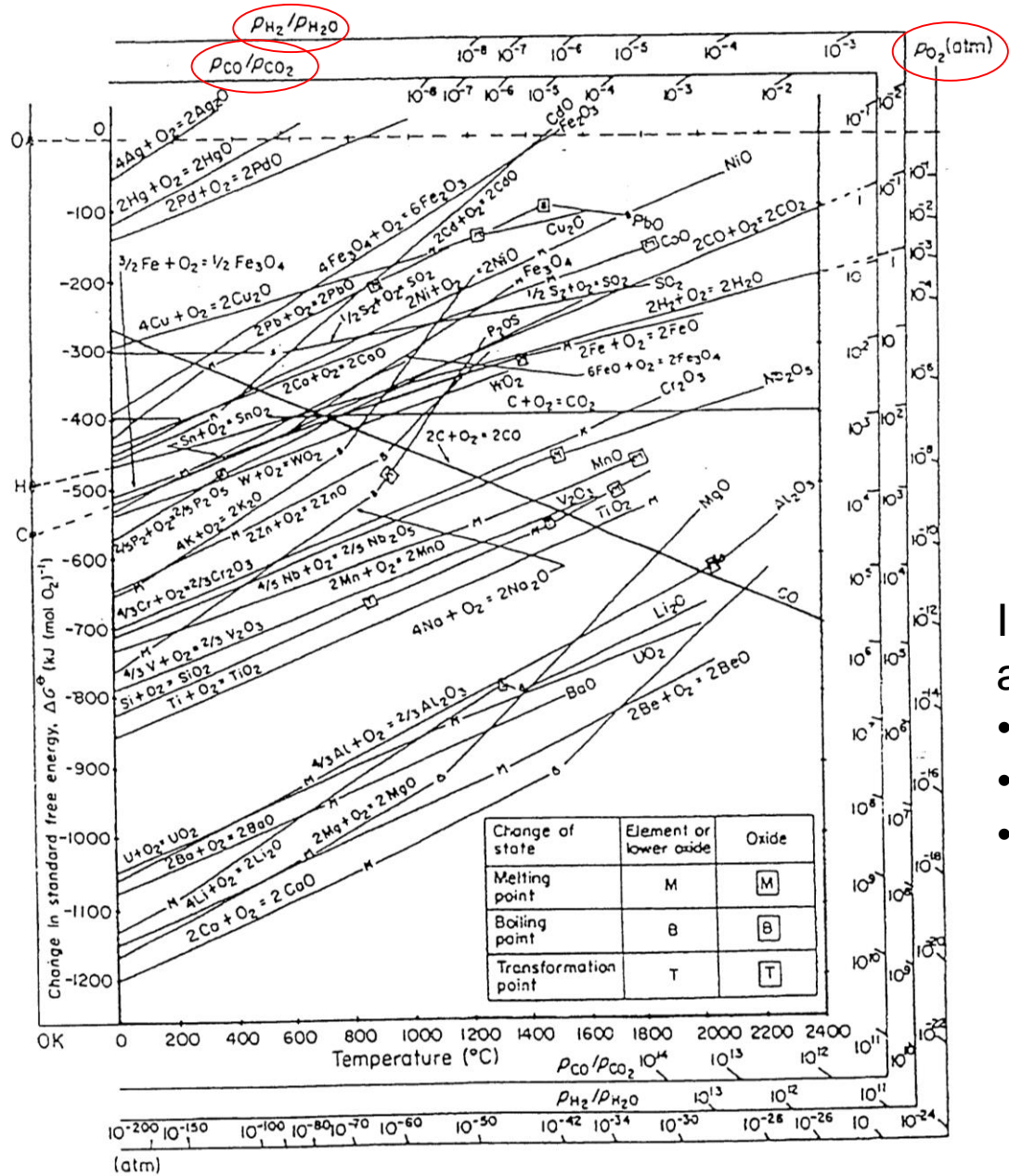
# DIAGRAMAS DE ELLINGHAM



- Estabilidade do óxido
- Poder redutor do metal



# DIAGRAMAS DE ELLINGHAM



## Ellingham-Richardson ou Ellingham-Richardson-Jeffes

Inseriram escalas auxiliares para a determinação :

- $p_{O_2}$  de equilíbrio
- Relação de equilíbrio  $CO/CO_2$
- Relação de equilíbrio  $H_2/H_2O$

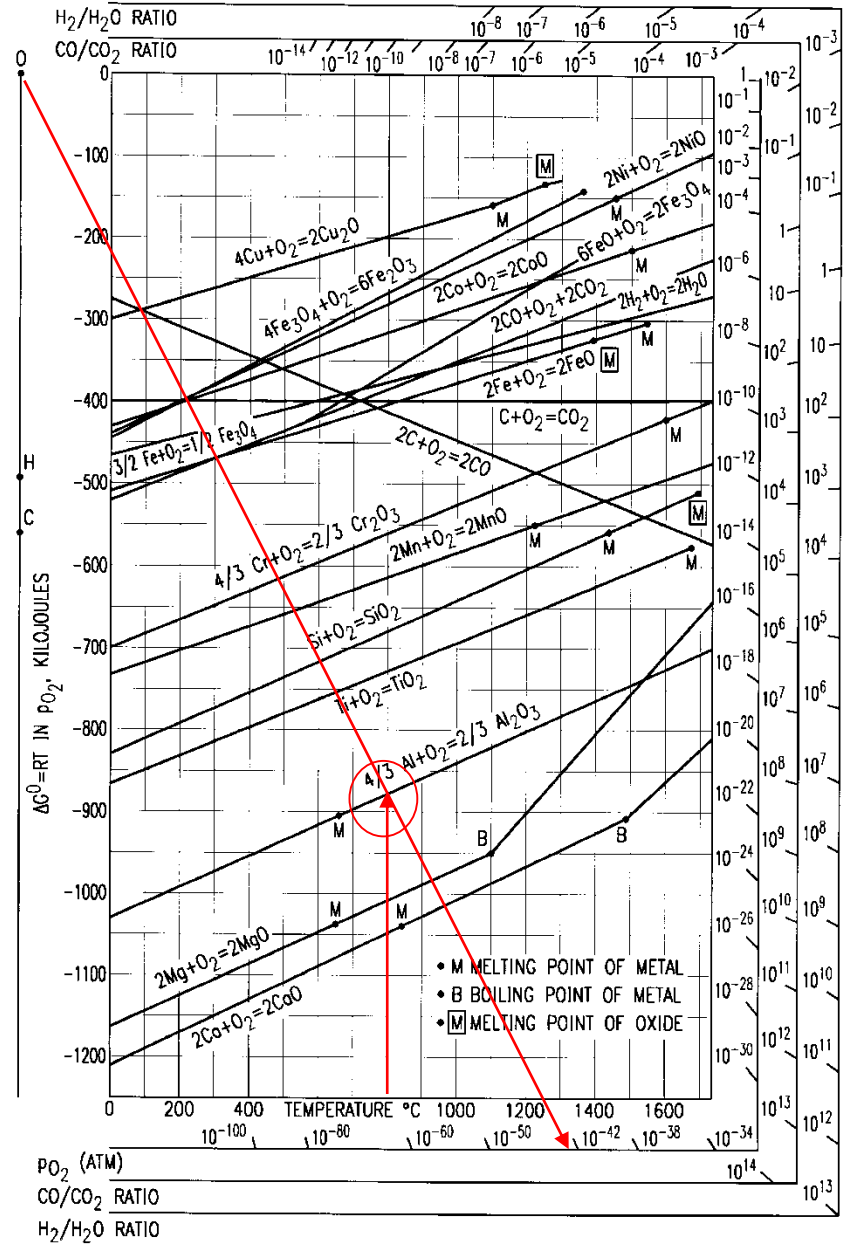


# DIAGRAMAS DE ELLINGHAM

Para a  $Al_2O_3$  a  $800^\circ C$ :

$p_{O_2}$  de equilíbrio

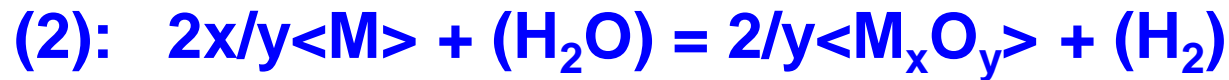
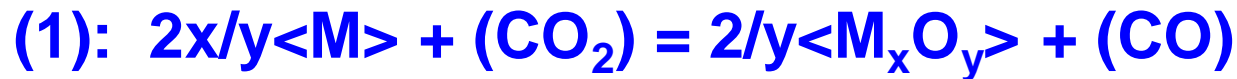
$10^{-43}$



- Notar que qualquer ponto da reta tem a mesma  $p_{O_2}$

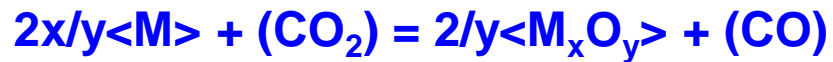
# DIAGRAMAS DE ELLINGHAM

## REAÇÕES DE OXI-REDUÇÃO



- $K_1 = p_{\text{CO}}/p_{\text{CO}_2}$
- Referência: ponto C
  - $K_2 = p_{\text{H}_2}/p_{\text{H}_2\text{O}}$
- Referência: ponto H

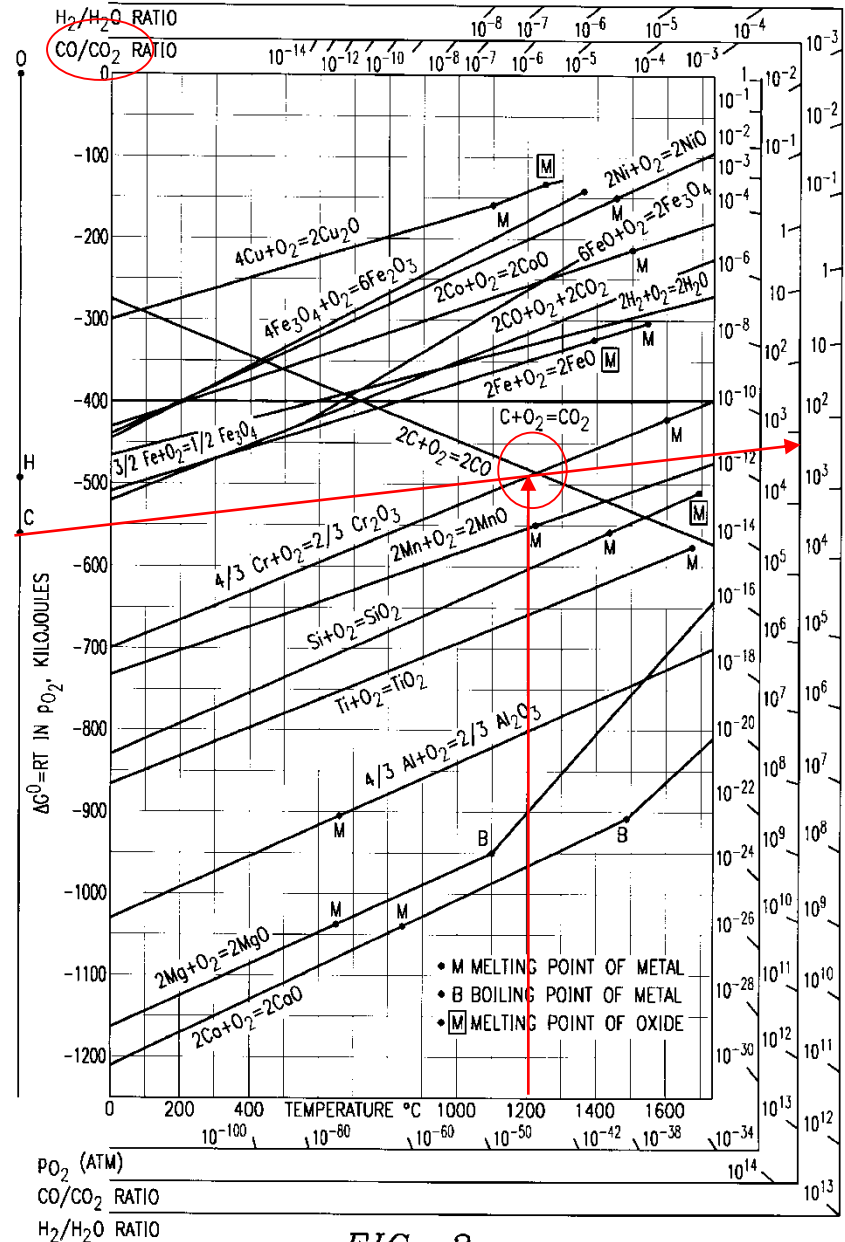
# DIAGRAMAS DE ELLINGHAM



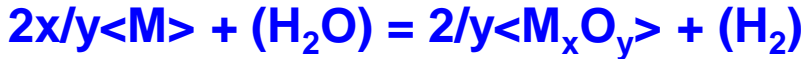
## Relação $p_{CO}/p_{CO_2}$ de equilíbrio

Para o  $Cr_2O_3$  a  $1220^\circ C$ :

- $p_{CO}/p_{CO_2} = 10^{3,2}$
- Qualquer ponto da reta tem a mesma  $p_{CO}/p_{CO_2}$



# DIAGRAMAS DE ELLINGHAM



Relação  $p_{H_2}/p_{H_2O}$  de equilíbrio

Para o  $Cr_2O_3$  a  $1220^\circ C$ :

- $p_{H_2}/p_{H_2O} = 10^{2,8}$
- Qualquer ponto da reta tem a mesma  $p_{H_2}/p_{H_2O}$

