

# PMT 3205

## Físico-Química para Metalurgia e Materiais I



# Termodinâmica

Fe	0	6.49	3.04	7.58	-0.60	25—769	760*,910, 1392	1537	3070	326,215, 165	3 670	*Curie point
			11.13	—	—	769—911						
			5.80	1.98	—	911—1392						
			6.74	1.60	—	1392—1537						
			9.77	0.40	—	1537—2700						
"FeO"*	63 800	13.7	11.66	2.00	0.67	25—1377		1377	dec.		7 490	*Fe <sub>0.917</sub> O, wüstite in equilibrium with iron.
			16.30	—	—	1377—1700						
Fe <sub>3</sub> O <sub>4</sub>	257 800	35.0	21.88	48.20	—	25—627	627	1597	dec.	0	33 000	
			48.00	—	—	627—1597						
Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	196 800	20.9	23.49	18.60	3.55	25—677	677,777		dec.	160,0		
			36.00	—	—	677—777						
"FeS"	22 800	14.1	31.71	1.76	—	777—1500			dec.			
			5.19	26.40	—	25—138	138,325	1195	dec.	570,120	7 730	
			17.40	—	—	138—325						
			12.20	2.38	—	325—1195						
			17.00	—	—	1195—1700						
"FeS <sub>2</sub> "	42 400	12.7	17.88	1.32	3.05	25—700						

## Aquecimento

$$\Delta H = \int_{773}^{1033} c_{P,\alpha} \cdot dT + \Delta H_{\alpha \rightarrow \beta} + \int_{1033}^{1183} c_{P,\beta} \cdot dT + \Delta H_{\beta \rightarrow \gamma} + \int_{1183}^{1665} c_{P,\gamma} \cdot dT + \Delta H_{\gamma \rightarrow \delta} + \int_{1665}^{1773} c_{P,\delta} \cdot dT$$

## Resfriamento

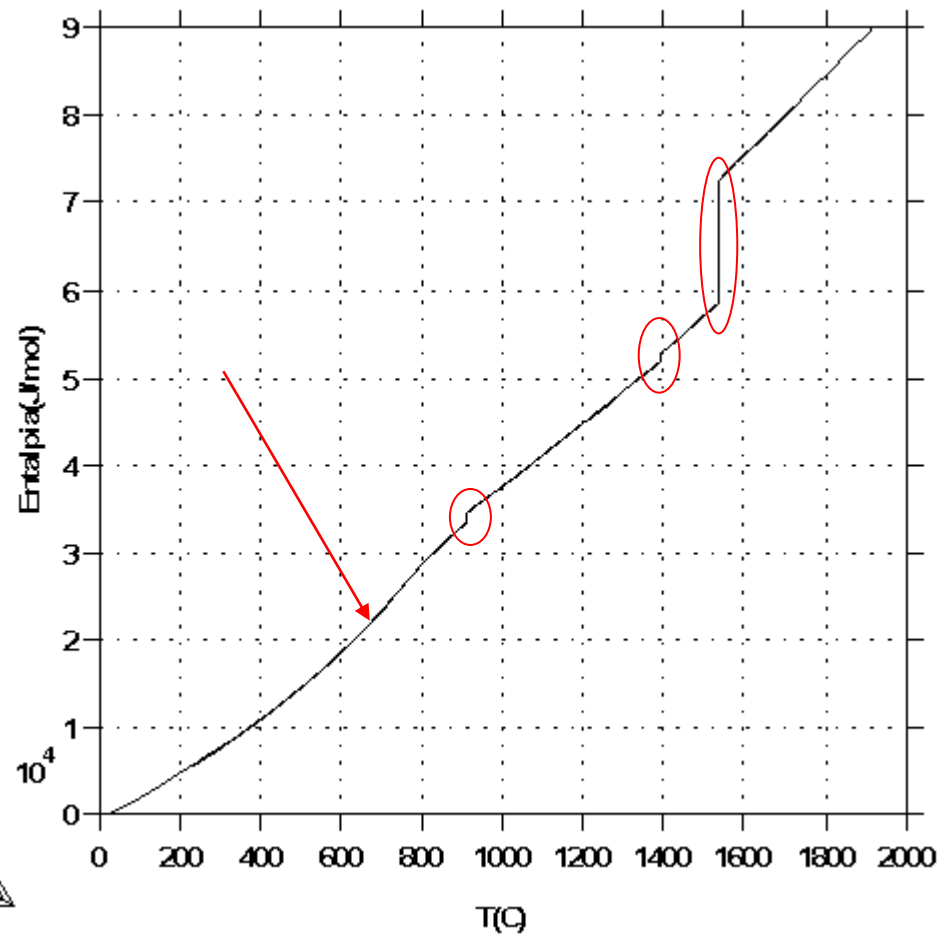
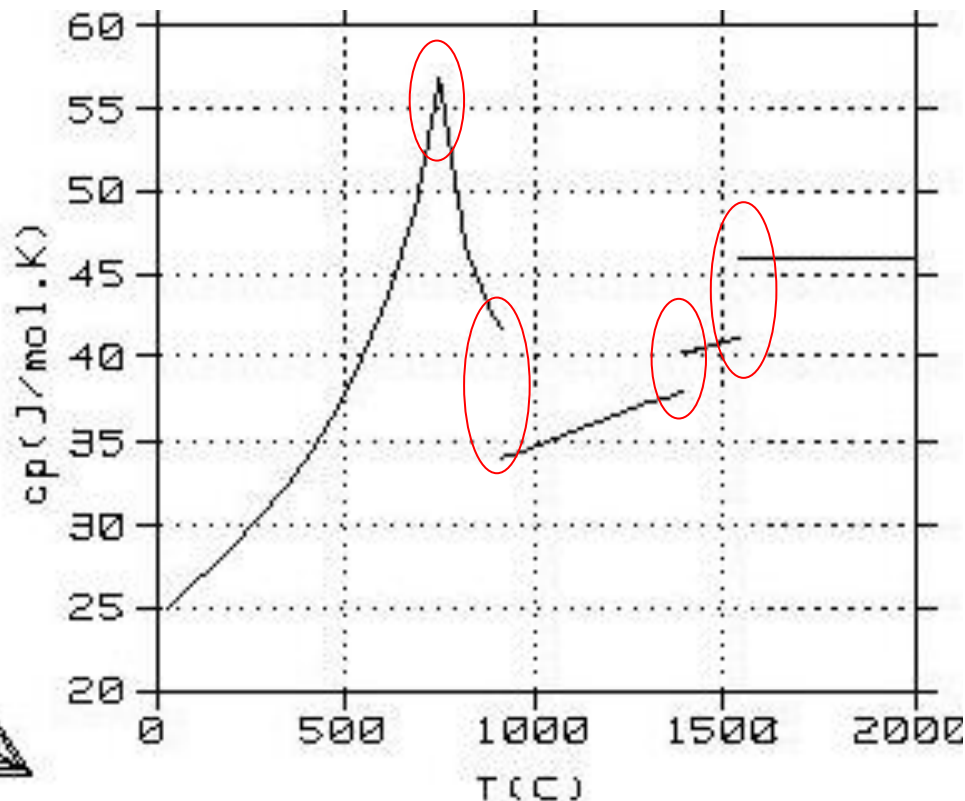
$$\Delta H = \int_{1773}^{1665} c_{P,\delta} \cdot dT + \Delta H_{\delta \rightarrow \gamma} + \int_{1665}^{1183} c_{P,\gamma} \cdot dT + \Delta H_{\gamma \rightarrow \beta} + \int_{1183}^{1033} c_{P,\beta} \cdot dT + \Delta H_{\beta \rightarrow \alpha} + \int_{1033}^{773} c_{P,\alpha} \cdot dT$$


Modos frequentes de apresentação :

- Tabelas de  $\Delta H$  

Nas transformações de fase há uma variação de entalpia característica:

- Fusão:  $\Delta H_f$
- Transformações alotrópicas:  $\Delta H_t$



- Gráficos de  $H_T - H_{298}$ :  $H_T - H_{298} = A.T + B.T^2 + C.T^{-1} + D$  



		$C_p = a + b.T + c.T^{-2}$ cal/mol				$H_T - H_{298} = A.T + B.T^2 + C.T^{-1} + D$ cal/mol					fusão cal/mol	
	fase	a	b	c	faixa T (K)	A	B	C	D	faixa T (K)	$T_f$	$\Delta H_f$
Al	S	4,94	0,00296	0	298-934	4,94	0,00148	0	-1604	298-934	934	2580
Al	L	7,00	0	0	934-1273	7,00	0	0	330	934-1273		
Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	S	25,48	0,00425	-682000	298-1800	27,49	0,00141	838000	-11132	298-1800	2327	26680
Bi	S	4,49	0,00540	0	298-545	4,49	0,00270	0	-1579	298-545	545	2700
Bi	L	4,78	0,00147	505000	545-820	7,50	0	0	180	545-820		
C	diamante	2,18	0,00316	-148000	298-1200	2,27	0,00153	154000	-1329	298-1200		
C	grafite	4,10	0,00102	-210000	298-2300	4,03	0,00057	204000	-1936	298-2300		
CO	G	6,79	0,00098	-11000	298-2500	6,79	0,00049	11000	-2105	298-2500		
CO <sub>2</sub>	G	10,55	0,00216	-204000	298-2500	10,57	0,00105	206000	-3936	298-2500		
CaCO <sub>3</sub>	S				298-1200	59,24	0	1168000	-21580	298-1200		
CaO	S	11,86	0,00108	-166000	298-1178	11,67	0,00054	156000	-4051	298-1178	3200	19000
Co	$\alpha$	5,11	0,00342	-21000	298-700	4,74	0,00200	0	-1591	298-700		
Co	$\beta$	3,30	0,00586	0	700-1394	2,16	0,00351	0	-422	700-1394		
Co	$\gamma$	9,60	0	0	1394-1768	17,49	-0,00246	0	-10190	1394-1768	1768	3700
Co	L	8,30	0	0	1768-1900					1768-1900		
CoO	S	11,54	0,00204	40000	298-1800	9,00	0	0	1230	298-1800		
Cr	S	5,84	0,00236	-88000	298-2130	4,16	0,00181	-30000	-1301	298-2130	2130	
Cr	L	9,40	0	0	2123-	9,40	0	0	890	2123-		
Cr <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	S	28,53	0,00220	-374000	298-1800	28,53	0,00110	374000	-9758	298-1800		
Cu	S	5,41	0,00150	0	298-1358	5,41	0,00075		-1680	298-1358	1358	3120
Cu	L	7,50	0	0	1356-1600	7,50	0	0	-20	1356-1600		
Cu <sub>2</sub> O	S	14,90	0,00570	0	298-1200	14,90	0,00285	0	-4696	298-1200	1517	15353



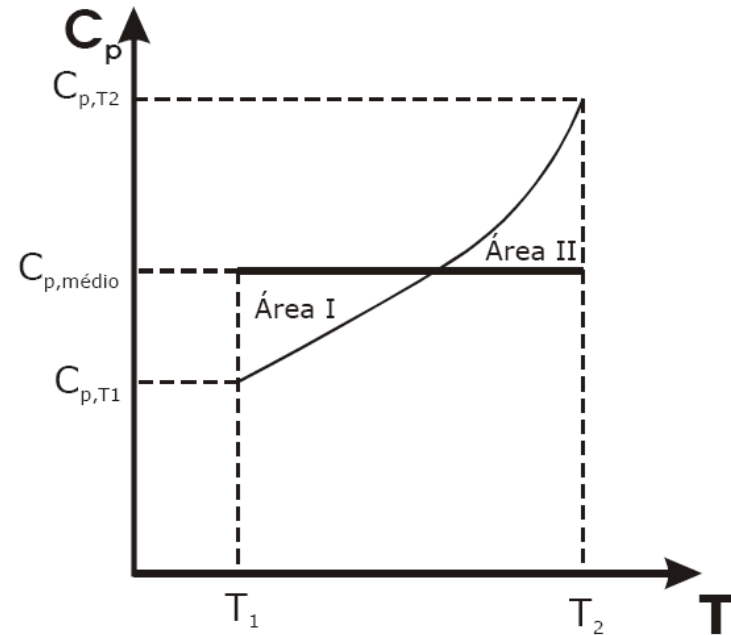
## Capacidade térmica média: $\overline{c_p}$

- Constante e independente da temperatura: facilita a estrutura de cálculos;

$$\Delta H = \int_{T_1}^{T_2} c_p \cdot dT = \overline{c_p} \cdot \Delta T = \overline{c_p} \cdot (T_2 - T_1)$$

$$\overline{c_p} = \frac{\Delta H}{\Delta T} = \frac{\int_{T_1}^{T_2} c_p \cdot dT}{(T_2 - T_1)}$$

Obs: as áreas I e II devem ser próximas



9. Estudando-se a variação de  $c_p$  para o ouro sólido, chegou-se à conclusão que, entre 298 e 1336 K é válida a relação:

$$c_p = 5,66 + 1,24 \cdot 10^{-3} T \text{ (cal/mol.K)}$$

Calcular a capacidade calorífica média do ouro, entre 298 e 1000 K;

$$\Delta H_{aq,298-1000} = \int_{298}^{1000} (5,66 + 1,24 \cdot 10^{-3} T) \cdot dT = 4.538,26 \frac{\text{cal}}{\text{mol}}$$

$$\overline{c_p} = \frac{4.538,26}{1000 - 298} = 6,46 \frac{\text{cal}}{\text{mol.K}}$$



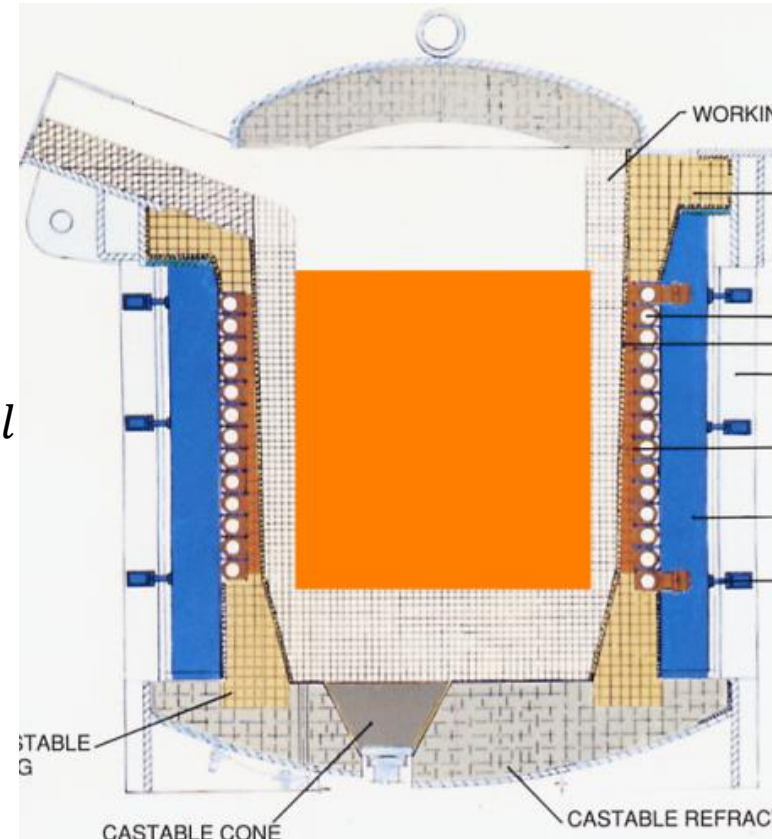
## Exemplo de aplicação:

Um forno de indução contém 1000 kg de Ni puro líquido a 1590°C. A potência líquida transferida pelo forno ao metal é 100 kW. Quantos segundos de aquecimento são necessários para aumentar a temperatura do Ni líquido para 1600°C ? [73]

- $c_p$  do Ni líquido: 9,2 cal/mol.K
- 1 kWh = 860,42 kcal; 1W=1J/s; 1cal=4,18J
- Massa atômica do Ni : 58,7 g/mol

$$\Delta H_{ag,Ni(l)} = \frac{1.000.000}{58,7} \times 9,2 \times (1600 - 1590) = 1.576.291,3 \text{ cal}$$

$$t = \frac{\Delta H_{ag,Ni(l)} \times 4,18}{100.000} = 65,51s = 1,1min$$



11. Em uma panela contendo 1 t de aço são injetados 1000 NI/min de argônio durante 40 min. Admitindo que a temperatura do aço inicial é 1600°C e que o argônio sai da panela a 1000°C, calcule a temperatura do aço após tratamento. Despreze as perdas térmicas. [74]

$$V_{Ar} = 1000 \times 40 = 40000 \text{ NI}$$

$$\Delta H_{aq,Ar} = 20 \times 40000 / 22,4 = 35714,29 \text{ kJ} \quad \blacktriangleright$$

$$\Delta H_{resf,aço} + \Delta H_{aq,Ar} = 0 = \frac{1 \times 10^6}{56} \int_{1873}^T c_{Pliquido} \cdot dT + 35714,29 \times 10^3$$

$$T = 1830 \text{ K} = 1557^\circ \text{C}$$



Determinar a quantidade de sucata de aço a  $25^{\circ}\text{C}$  que deve ser adicionada a uma panela de aço líquido contendo 150 t a  $1650^{\circ}\text{C}$  para abaixar a temperatura para  $1580^{\circ}\text{C}$ . [77]