

Físico-Química 2005 Abril – EEIMVR-UFF
Exercícios

Exercícios usando Thermo-calc for Windows (TCW) e o banco de Dados de L Kaufman (PKP)

Todos os exercícios começam por:

DEFINE MATERIAL, escolher o “database” PKP e selecionar os elementos Cu e Ni. (não é necessário rejeitar nenhuma fase).

DEFINE CONDITIONS (é sempre bom calcular um primeiro equilíbrio antes de fazer cálculos interativos usando MAP ou STEP).

As condições para os cálculos são $P=1E5Pa$, tamanho do sistema=1 Mol, Temperatura que você escolher e uma composição inicial ($W(Cu)=0,5\%$ funciona, por exemplo).

Exercício 1:

Construir o diagrama de equilíbrio de fases:

DEFINE MAP/STEP (MAP/STEP DEFINITION). O diagrama de equilíbrio de fases mais comum é um mapa das condições em que há equilíbrio quando se varia a composição química e temperatura do sistema. Assim, AXIS 1 deve ser $W(Cu)$ variando desde 0% até 100% (a sugestão normal é de 50 pontos intermediários) e AXIS 2 deve ser T (dependendo das suas OPTIONS pode estar em K ou C).

Para este diagrama se variarmos entre 500 e 2000C cobriremos todos os campos interessantes.

Para fazer o gráfico:

DEFINE DIAGRAM (DIAGRAM DEFINITION). Altere as escalas, se quiser. (use REDEFINE)

Inclua LABELS e use o zoom. Salve os diagramas como JPG para uso posterior no relatório.

Exercício 2:

Para uma temperatura totalmente no campo FCC, uma temperatura no campo LIQUIDO e uma temperatura que “corte” o campo bifásico, calcule e faça o gráfico da energia livre de Gibbs de todas as fases. Para isto você precisa:

voltar a DEFINE CONDITIONS e definir a temperatura que você escolheu. Calcular um equilíbrio.

DEFINE MAP/STEP e definir apenas UM eixo AXIS 1, como $W(Cu)$. Selecionar a opção STEP SEPARATE (Normalmente, o programa calcula somente o equilíbrio. Neste caso, estamos pedindo que calcule TODAS as fases, *separadamente*, além do equilíbrio).

Observe a posição relativa das curvas. (Para ter acesso a G, no DIAGRAM, é necessário selecionar a opção MORE no eixo Y.)

Em TYPE, em LABEL CURVE OPTIONS, escolha uma opção que identifique satisfatoriamente as curvas.

Salve os diagramas como JPG para uso posterior no relatório.

Exercício 3:

Para as mesmas temperaturas, repita o STEP, sem usar a opção SEPARATE.

Faça gráficos do POTENCIAL QUÍMICO dos elementos. Em TYPE, em LABEL CURVE OPTIONS, escolha uma opção que identifique satisfatoriamente as curvas.

Observe o que acontece com o potencial químico dos elementos na região bi-fásica.

Faça um gráfico da Energia Livre de Gibbs do sistema, para a temperatura que “corta” o campo bifásico.

Salve os diagramas como JPG para uso posterior no relatório.