# Informações para o TCC - Isabela

# Modelos termodinâmicos de acordo com o modelo CALPHAD

Neste trabalho usaremos modelos para fases do tipo solução e fases estequiométricas, descritos a seguir.

## Fases do tipo solução

A energia molar de Gibbs de uma fase to tipo solução é   
Gmϕ = Grefϕ + Gidϕ + Gexϕ  
sendo Grefϕ a energia molar de Gibbs de referência:   
Grefϕ = xMoϕ°GMoϕ + xZrϕ°GZrϕ  
onde xiϕ é a fração molar do elemento i na fase ϕ e °Giϕ a energia molar de Gibbs do elemento i puro em relação ao estado de referência escolhido. Gidϕ a energia molar de Gibbs ideal:   
Gidϕ = RT(xMoϕlnxMoϕ+xZrϕlnxZrϕ)  
sendo R = 8, 31451 J/mol/K e T a temperatura absoluta. Finalmente, Gexϕ a energia molar de Gibbs de excesso:   
Gexϕ = xMoϕxZrϕ[L0ϕ+L1ϕ(xMoϕ−xZrϕ)+L2ϕ(xMoϕ−xZrϕ)2+…]  
onde os parâmetros Liϕ são geralmente funções lineares da temperatura na forma   
Liϕ = Aiϕ + BiϕT  
sendo que frequentemente adota-se Biϕ = 0.

## Fases estequiométricas

O modelo para fases estequiométricas é parecido com o modelo de fases do tipo solução, mas o termo ideal se anula.

# Descrição termodinâmica do sistema Mo-Zr

Segundo (KAUFMAN e BERNSTEIN, 1970), o sistema binário Mo-Zr é descrito usando o conjunto de equações abaixo para as fases de equiĺíbrio.

## Fases do tipo solução

Neste caso, o estado padrão de referência para os elementos puros é sempre a fase líquida e todas as fases são descritas como soluções regulares, ou seja, apenas os termos L0ϕ estão presentes.

### Líquido

Como o líquido é a fase de referência para os elementos puros, temos que   
Grefliq = 0  
e o termo de excesso é   
Gexliq = 1512xMoliqxZrliq

### Fase CCC

°GMoCCC =  − 5800 + 2T

°GZrCCC =  − 4250 + 2T

GexCCC = 6551xMoCCCxZrCCC

### Fase HCP

°GMoHCP =  − 3800 + 2T

°GZrHCP =  − 5280 + 2.9T

GexHCP = 8981xMoHCPxZrHCP

## Fases estequiométricas

### Fase de Laves

Apenas a fase de Laves Mo2Zr é considerada estequiométrica no sistema. A referência para os elementos puros é neste caso a fase HCP, de forma que

°GMoLaves =  − 3800 + 2T

°GZrLaves =  − 5280 + 2.9T

GexLaves =  − 16488xMoLavesxZrLaves