

UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS GERAIS

MODELAMENTO MATEMÁTICO DE SISTEMAS  
BINÁRIOS METÁLICOS COM REGIÃO DE  
IMISCIBILIDADE LÍQUIDA

Antônio Eduardo Clark Peres

Tese apresentada à Universidade Federal  
de Minas Gerais como requisito parcial  
para obtenção do grau de Mestre em Ciên-  
cias e Técnicas Nucleares

Beló Horizonte - 1973

A meus pais

## AGRADECIMENTOS

O autor deseja expressar seu agradecimento a :

Dr. Vicente Falconi Campos, pela colocação do problema e orientação segura e dedicada durante a execução deste trabalho.

Roberto Augusto Corrieri Moreira, pelo auxílio na elucidação de dúvidas relativas a programação em Fortran.

Ana Salej Gomes, responsável pela datilografia.

Comissão Nacional de Energia Nuclear, pela ajuda financeira prestada. ©

## SINOPSE

É apresentado um algoritmo aplicável a sistemas binários metálicos com região de imiscibilidade líquida. A partir de poucos dados experimentais de temperatura e composição sobre a linha limítrofe da região de imiscibilidade líquida e alguns dados físico-químicos tabelados, são determinados: as constantes da equação de Lumsden, todas as linhas do diagrama de equilíbrio, todos os pontos principais do diagrama, as propriedades termodinâmicas mais importantes do sistema. É determinado um critério de seleção entre dados de vários autores. O algoritmo foi testado para os sistemas: Pb-Zn, Al-In, Bi-Zn e Al-Bi, apresentando excelentes resultados.

## SYNOPSIS

An algorithm which can be used in any binary metallic system having a liquid miscibility gap is introduced. This algorithm calculates the constants of Lumsden's equation, all the lines in the equilibrium diagram, including the critical point, eutectic and monotectic, the most important thermodynamical properties of the system. The operation is performed based solely on a few solubility experimental points on the border line of the miscibility gap and some physico-chemical data in the literature. A criterion for the selection of different experimental data on this type of system is introduced. The test of the algorithm showed excellent results for all the binary systems used, namely : Pb-Zn, Al-In, Bi-Zn and Al-Bi. ©

SUMÁRIO

	Página
AGRADECIMENTOS .....	iii
SINOPSE .....	iv
SYNOPSIS .....	v
1. INTRODUÇÃO .....	1
1.1. Modelamento de sistemas binários...	2
1.1.1. A equação de Lumsden.....	6
2. OBJETIVO .....	10
3. METODOLOGIA .....	15
3.1. Determinação das constantes da equa ção de Lumsden .....	19
3.2. Determinação de pontos sobre as linhas do diagrama de equilíbrio...	22
3.3. Determinação dos pontos principais do diagrama de equilíbrio.....	31
3.4. Determinação de dados termodinâmi - cos .....	32
3.5. Critério de seleção entre dados ex - perimentais na LLRIL .....	34
4. SISTEMA Zn-Pb.....	39
5. SISTEMA Al-In .....	52
6. SISTEMA Zn-Bi .....	65
7. SISTEMA Al-Bi .....	75
8. CONCLUSÕES.....	88
9. BIBLIOGRAFIA .....	89
10. APÊNDICES :.....	92
11. LISTA DE FIGURAS .....	190
12. LISTA DE TABELAS .....	193
13. LISTA DE APÊNDICES .....	194

## 1. INTRODUÇÃO

A atenção daqueles que estudam termodinâmica de soluções é dirigida principalmente para a obtenção da atividade de cada constituinte. O conhecimento de atividades em várias composições e temperaturas é fundamental para a análise de qualquer sistema, porque delas podem ser obtidas as demais propriedades termodinâmicas.

Ultimamente existe uma preocupação crescente com a criação de modelos matemáticos que definam sistemas. Um bom modelo matemático permite correlação, alisamento e extrapolação de dados, cuja medida experimental seria trabalhosa, muitas vezes imprecisa ou mesmo impossível. Esta preocupação atingiu o campo da termodinâmica das soluções, e muitos autores têm tentado o modelamento da atividade em função da composição. A atividade depende também da temperatura, mas a relação é simples, pois ela é função da entalpia e entropia parciais molares. A variação destas grandezas com a temperatura pode ser desprezada na maioria dos casos, pois é função da diferença entre o calor específico a pressão constante da substância pura e da substância em solução; essa diferen

ça é geralmente pequena, causando erros inferiores àqueles gerados pela incerteza nas medidas experimentais envolvidas no processo.

O conhecimento de um modelo de atividade em função da composição, para um sistema binário, permite, conhecidos certos parâmetros, o traçado do diagrama de equilíbrio e a determinação de várias propriedades termodinâmicas.

### 1.1. Modelamento de sistemas binários

O modelo mais simples para um sistema binário é o de solução ideal. Solução ideal é aquela que segue a lei de Raoult. Para estas soluções a atividade é igual à fração molar, em qualquer temperatura e composição. Todos os sistemas binários metálicos afastam-se deste modelo, que é válido somente para o solvente, em baixas concentrações do soluto. Na faixa de composições em que o solvente obedece a lei de Raoult, o soluto obedece a lei de Henry, sendo sua atividade proporcional à fração molar. As leis de Raoult e Henry, respectivamente, são expressas por:



$$a_1 = N_1 \quad (1)$$

$$a_2 = \gamma_2^0 N_2 \quad (2)$$

sendo :

constituente 1 = solvente

constituente 2 = soluto

a = atividade

N = fração molar

$\gamma^0$  = coeficiente de atividade para diluição infinita, que é independente da com posição.

Outro modelo existente, proposto por HILDEBRAND<sup>(1)</sup>

é o de solução estritamente regular, que é aquela pa -  
ra a qual a entropia de mistura, em excesso, é nula. <sup>©</sup>

Para estas soluções :

$$\ln \gamma_1 = \alpha N_2^2 \quad (3)$$

Através de integração da equação de Gibbs-Duhem de -  
monstra-se que :

$$\ln \gamma_2 = \alpha N_1^2 \quad (4)$$

sendo a variação de  $\alpha$  com a temperatura do tipo :

$$\alpha = \frac{\alpha_1}{T} \quad (5)$$

O modelo de solução sub-regular, proposto por HARDY<sup>(2)</sup>, estabelece que :

$$\ln \gamma_1 = \alpha N_2^2 + \beta N_2^3 \quad (6)$$

concluindo-se através de integração da equação de Gibbs-Duhem que :

$$\ln \gamma_2 = (\alpha + 1,5\beta) N_1^2 - \beta N_1^3 \quad (7)$$

onde  $\alpha$  e  $\beta$  dependem somente da temperatura.

TURKDOGAN & DARKEN<sup>(3)</sup> observaram que, para a maioria dos sistemas binários metálicos líquidos, parece existir duas regiões terminais, nas quais o comportamento termodinâmico é descrito por :

$$\log \gamma_2 / \gamma_2^0 = \alpha_{12} (N_1^2 - 1) \quad (8)$$

$$\log \gamma_1 = \alpha_{12} (1 - N_1)^2 \quad (9)$$

sendo o constituinte 1 o solvente e o constituinte 2 o soluto. A variação de  $\alpha_{12}$  com a temperatura é do tipo :

sendo a variação de  $\alpha$  com a temperatura do tipo :

$$\alpha = \frac{\alpha_1}{T} \quad (5)$$

O modelo de solução sub-regular, proposto por HARDY<sup>(2)</sup>, estabelece que :

$$\ln \gamma_1 = \alpha N_2^2 + \beta N_2^3 \quad (6)$$

concluindo-se através de integração da equação de Gibbs-Duhem que :

$$\ln \gamma_2 = (\alpha + 1,5\beta) N_1^2 - \beta N_1^3 \quad (7)$$

onde  $\alpha$  e  $\beta$  dependem somente da temperatura.

TURKDOGAN & DARKEN<sup>(3)</sup> observaram que, para a maioria dos sistemas binários metálicos líquidos, parece existir duas regiões terminais, nas quais o comportamento termodinâmico é descrito por :

$$\log \gamma_2 / \gamma_2^0 = \alpha_{12} (N_1^2 - 1) \quad (8)$$

$$\log \gamma_1 = \alpha_{12} (1 - N_1)^2 \quad (9)$$

sendo o constituinte 1 o solvente e o constituinte 2 o soluto. A variação de  $\alpha_{12}$  com a temperatura é do tipo :

$$\alpha_{12} = \frac{\epsilon_{12}}{4,576 T} + \frac{\delta_{12}}{4,576} \quad (10)$$

onde as constantes  $\epsilon_{12}$  e  $\delta_{12}$  têm a dimensão de entalpia e entropia, respectivamente. O índice inferior 12 caracteriza a região terminal rica no constituinte 1.

Todos os modelos anteriormente citados aplicam-se a regiões limitadas do sistema em estudo. É de todo interesse o estabelecimento de modelos que descrevam o comportamento do sistema em toda a extensão.

KRUPKOWSKI<sup>(4)</sup> apresenta um modelo definido pelas equações :

$$\ln \gamma_1 = w(T) \left[ N_1^m - \frac{m}{m-1} N_1^{m-1} + \frac{1}{m-1} \right] \quad (11)$$

$$\ln \gamma_2 = w(T) N_1^m \quad (12)$$

a função  $w(T)$  podendo ser considerada de uma das formas :

$$w(T) = \frac{\alpha}{T^k} \quad (13)$$

$$w(T) = \frac{\alpha}{T} - \beta \quad (14)$$

As constantes  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $m$  e  $k$  são características para cada sistema. O modelo foi testado com êxito para o sistema zinco-chumbo por seu idealizador e por KOZUKA et alii<sup>(5)</sup>.

HULTGREN et alii<sup>(6)</sup> abordam o problema de uma maneira puramente matemática, selecionando várias funções algébricas, na forma de séries de Taylor, e testando qual destas funções melhor representa o comportamento termodinâmico do sistema.

### 1.1.1. A equação de Lumsden

Utilizando a termodinâmica estatística e baseando-se no tratamento quasi-químico das soluções, LUMSDEN<sup>(7)</sup> estabeleceu a seguinte equação para a energia livre molar de mistura para soluções líquidas :

$$\begin{aligned} \frac{\Delta G_M}{T} = & - R \left[ N_1 \ln \frac{N_1 + N_2}{N_1} + N_2 \ln \frac{N_1 + N_2}{N_2} \right] + \\ & + \left[ \frac{N_1 N_2 r}{r^2 N_1 + N_2} \right] \left( \frac{\epsilon}{T} - \sigma \right) + \left[ \frac{N_1 N_2 r^{2,5}}{r^5 N_1 + N_2} \right] \left( \frac{z}{T} - \psi \right) - \\ & - \frac{1}{RZ} \left[ \frac{N_1^2 N_2^2 r^4}{(r^{8/3} N_1 + N_2)^3} \right] \left( \frac{\epsilon}{T} - \sigma \right)^2 \end{aligned} \quad (15)$$

onde :

$\Delta G_M$  = variação de energia livre molar de mistura

T = temperatura absoluta

R = constante dos gases perfeitos

r = razão dos raios atômicos dos dois metais

$N_1$  = fração molar do metal 1

$N_2$  = fração molar do metal 2

Z = número de coordenação

$\epsilon, \sigma, z, \psi$  = constantes características para cada par de metais.

VAN VLACK<sup>(8)</sup> cita que o número de coordenação médio para líquidos é aproximadamente igual àquele para seus cristais correspondentes, pois os líquidos apresentam uma estrutura de curto alcance, na qual as distâncias interatômicas entre vizinhos mais próximos são bastante uniformes, e semelhantes às dos cristais. O número de coordenação decresce com o aumento da diferença entre os raios atômicos.

KRUPKOWSKI<sup>(4)</sup> menciona que as constantes  $\epsilon$  e  $\sigma$ , da equação de Lumsden, referem-se a correções sobre a variação de energia livre de mistura ideal, devido à energia potencial e entropia de interação

dos vizinhos mais próximos, e  $z$  e  $\psi$  têm o mesmo significado em relação a átomos não adjacentes.

SUNDQUIST<sup>(9)</sup> concluiu que o modelo de Lumsden é adequado para descrição de sistemas que não apresentem fortes tendências de formação de compostos.

A equação (15) permite a determinação da atividade e coeficiente de atividade de cada constituinte, mediante a aplicação do conceito de energia livre parcial molar :

$$\bar{\Delta G}_1 = \left( \frac{\partial \Delta G_M}{\partial N_1} \right)_{N_2} = RT \ln a_1 \quad (16)$$

A diferenciação de (15) resulta em

$$\begin{aligned} \Delta \bar{G}_1 = & -RT \ln \left[ \frac{N_1 + N_2}{N_1} \right] + \\ & + (\epsilon - \sigma T) \left[ \frac{N_2^2 r}{(r^2 N_1 + N_2)^2} \right] + \\ & + (z - \psi T) \left[ \frac{N_2^2 r^{2,5}}{(r^5 N_1 + N_2)^2} \right] - \\ & - \frac{T}{RZ} \left( \frac{\epsilon - \sigma}{T} \right)^2 \left[ \frac{2 r^4 N_1 N_2^3 - r^{20/3} N_1^2 N_2^2}{(r^{8/3} N_1 + N_2)^4} \right] \end{aligned} \quad (17)$$

A atividade de um constituinte é igual ao produto de sua fração molar pelo coeficiente de atividade :

$$a_1 = N_1 \gamma_1 \quad (18)$$

A energia livre parcial molar relaciona-se com o coeficiente de atividade através da expressão :

$$\Delta \bar{G}_1 = RT \ln N_1 \gamma_1 \quad (19)$$

que rearranjada resulta em :

$$RT \ln \gamma_1 = \Delta \bar{G}_1 + RT \ln \frac{1}{N_1} \quad (20)$$

Combinando-se as equações (17) e (20) resulta :

$$\begin{aligned} \ln \gamma_1 = & \frac{1}{R} \left( \frac{\epsilon}{T} - \sigma \right) \left[ \frac{N_2^2 r}{(r^2 N_1 + N_2)^2} \right] + \\ & + \frac{1}{R} \left( \frac{z}{T} - \psi \right) \left[ \frac{N_2^2 r^{2,5}}{(r^5 N_1 + N_2)^2} \right] - \\ & - \frac{1}{ZR^2} \left( \frac{\epsilon}{T} - \sigma \right)^2 \left[ \frac{2 r^4 N_1 N_2^3 - r^{20/3} N_1^2 N_2^2}{(r^{8/3} N_1 + N_2)^4} \right] \end{aligned} \quad (21)$$



LUMSDEN<sup>(7)</sup> calculou os parâmetros de sua equação a partir de dados experimentais de WARING et alii<sup>(10)</sup>. Muitos autores, comparando seus resultados com aqueles obtidos por LUMSDEN<sup>(7)</sup>, criticam seu modelo. Estas críticas são injustificadas, pois não levam em conta dois fatores de suma importância:

i) uma possível imprecisão nos dados experimentais ;

ii) uma possível imprecisão nos cálculos realizados para determinação dos parâmetros. Deve-se frisar que os cálculos de LUMSDEN<sup>(7)</sup> foram efetuados há quinze anos atrás, época em que não existiam os recursos de computação digital disponíveis atualmente.

Muitos autores utilizam seus dados experimentais no cálculo dos parâmetros de um determinado modelo e levantam dúvidas quanto à validade do mesmo, esquecendo-se que os maus resultados obtidos podem ser provenientes de imprecisão de suas próprias medidas.

## 2. OBJETIVO

A equação de Lumsden tem sido utilizada para descrever a termodinâmica do sistema chumbo-zinco. O conhecimento perfeito do diagrama de equilíbrio e de propriedades termodinâmicas deste sistema apresenta grande interesse industrial, sendo a base dos processos de refino dos dois metais.

O processo "Imperial Smelting" é um exemplo da afirmação acima. O aparelho utilizado é um forno de cuba soprado, alimentado com minério de zinco e chumbo. O chumbo produzido é recolhido líquido na parte inferior do forno. A redução do minério de zinco ocorre na zona mais quente do forno e o metal, produzido sob a forma de vapor, deixa o forno misturado com CO. Os gases emergem em temperatura superior àquela em que ocorre a reoxidação do zinco e são submetidos a resfriamento rápido, em banho de chumbo, para liquefação do zinco. A liga líquida, através de resfriamento adicional, separa-se em duas camadas: a menos densa, constituída de zinco e um pouco impurificada pelo chumbo, e a mais densa constituída de chumbo, bastante impurificada pelo zinco. A camada rica em zinco é refinada para obtenção do metal e a rica em chumbo

é recirculada na câmara de condensação. A composição das duas fases líquidas é fixada pelos limites da região de imiscibilidade líquida e o conhecimento de da dos termodinâmicos é importante para a operação de refino do zinco.

Outro exemplo industrial é o processo "Parkes" de desprataamento do chumbo. A operação é realizada em dois estágios. O "bullion" de chumbo é alimentado no primeiro estágio juntamente com a crosta do segundo es estágio, que é rica em zinco e pobre em prata. O zinco combina-se com a prata, formando uma crosta de onde é aproveitada a prata. O "bullion" vai para um segundo estágio, onde recebe zinco, produzindo chumbo desprataado, contendo zinco dissolvido. É desejável, para controle do processo de refino, o conhecimento de da dos termodinâmicos para o sistema ternário chumbo-zinco-prata, mas devido ao baixo teor de prata, dados re ferentes ao sistema binário chumbo-zinco prestam bom auxílio.

Para o sistema zinco-chumbo, a determinação de atividades no estado líquido apresenta certas dificuldades experimentais. Em baixas temperaturas a região de imiscibilidade líquida limita o estudo às

regiões terminais do sistema. Acima do ponto crítico a pressão de vapor do zinco é alta, impedindo medidas precisas de força eletromotriz e exigindo vedação cuidadosa ao empregar-se técnicas calorimétricas.

O presente trabalho visa desenvolver um algoritmo, baseado no modelo de Lumsden, aplicável a sistemas binários metálicos com região de imiscibilidade líquida, que possibilite :

i) determinação de dados termodinâmicos destes sistemas ;

ii) determinação teórica do diagrama de equilíbrio, inclusive em pontos experimentalmente inacessíveis ;

iii) poder de decisão entre dados de vários autores, quando comparados com o diagrama de fases e propriedades termodinâmicas do sistema. ⑥

Uma característica importante do algoritmo é o fato de sua aplicação depender exclusivamente de certos dados físico-químicos tabelados e alguns pontos experimentais sobre a linha limítrofe da região de imiscibilidade líquida. Estes pontos deverão ser, no mínimo dois, em cortes isotérmicos do diagrama, e podem ser

obtidos a partir de experiências relativamente simples.

Serão estudados, a título de teste do algoritmo, os sistemas zinco-chumbo, alumínio-índio, zinco-bismuto e alumínio-bismuto. Pretende-se, entretanto, que o algoritmo seja aplicável a qualquer sistema binário metálico com região de imiscibilidade líquida.

HANSEN & ANDERKO <sup>(11)</sup> mencionam a existência de numerosos sistemas deste tipo, vários deles com diagrama de equilíbrio indeterminado. Em pesquisas que se farão a seguir serão determinados o diagrama de equilíbrio e o comportamento termodinâmico de sistemas desconhecidos, através da medida experimental de alguns pontos no limite da região de imiscibilidade líquida e utilização do algoritmo. Portanto, a presente investigação científica faz parte de um plano de pesquisas mais amplo sobre a termodinâmica de sistemas binários. ©

### 3. METODOLOGIA

A equação de Lumsden se aplica a sistemas com região de imiscibilidade líquida. A existência de duas fases líquidas associa-se a desvios positivos acentuados da lei de Raoult, indicando que as forças atrativas entre átomos de mesma espécie são maiores que aquelas entre átomos de espécies diferentes. A Figura 1 apresenta um diagrama de equilíbrio genérico para um sistema com região de imiscibilidade líquida, detalhando os pontos principais do diagrama, caracterizados por sua temperatura e composição dada em fração molar :

i) ponto crítico (ponto máximo da região de imiscibilidade líquida), definido pela temperatura crítica  $T_C$  e pela composição crítica  $N_C$  ;

ii) pontos monotéticos, definidos pela temperatura monotética  $T_M$  e pelas composições monotéticas  $N_I$  e  $N_{II}$  ;

iii) ponto eutético, definido pela temperatura eutética  $T_E$  e pela composição eutética  $N_E$ .

A linha limítrofe da região de imiscibilidade líquida será designada no presente trabalho por LLRIL .

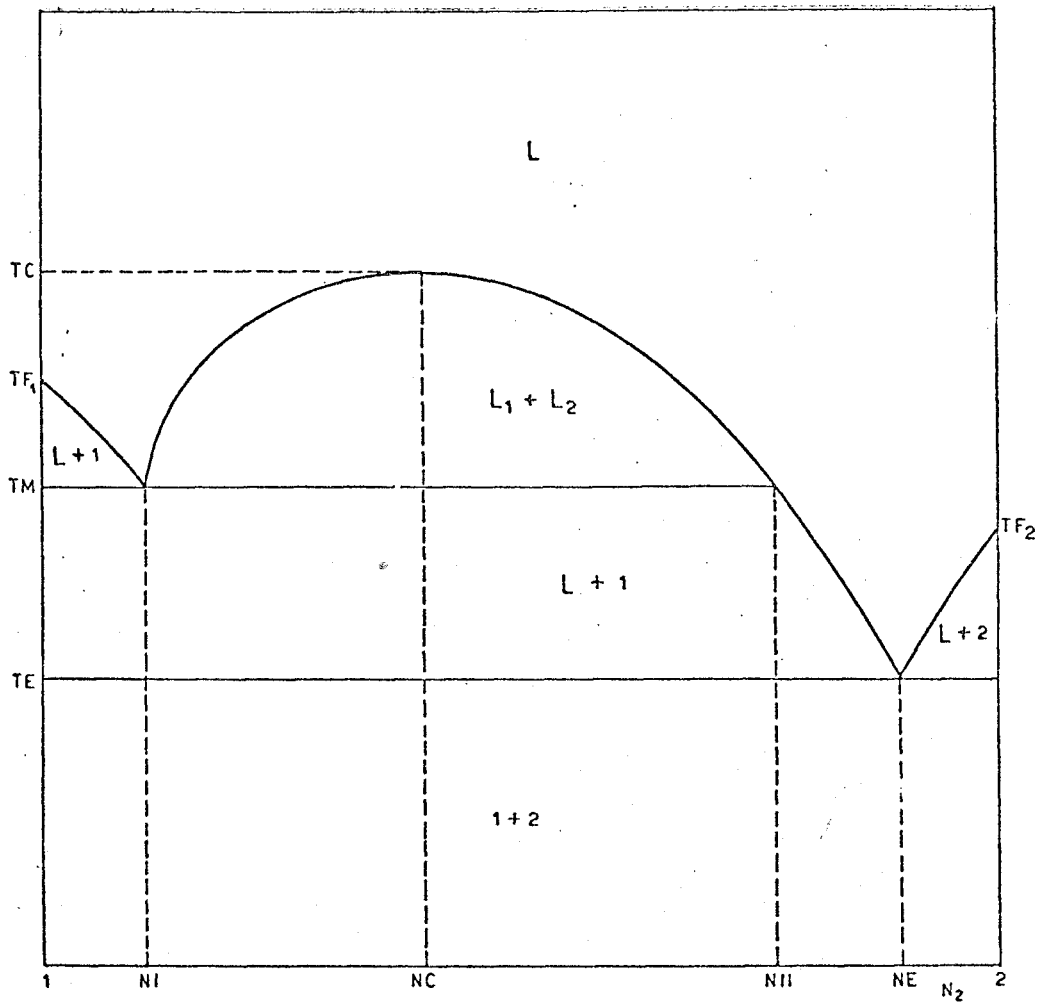


Fig. 1 - Diagrama de equilíbrio genérico para sistema com região de imiscibilida de líquida.

O lado direito do diagrama será definido como sendo aquele em que se situa o ponto eutético.

Na região de imiscibilidade líquida coexistem em equilíbrio duas fases, uma rica no metal 1, ou tra rica no metal 2. O critério de equilíbrio entre fases fixa que o potencial químico (energia livre parcial molar) de cada elemento, em cada fase, é constante ao longo da região bifásica. Resulta daí, que, para uma dada temperatura, a atividade de cada metal é igual no ramo esquerdo e ramo direito do LLRIL. Este fato é a base do algoritmo criado.

A Figura 2 é um esquema dos dados de entrada do algoritmo e daqueles por ele fornecidos. Esta figura evidencia o grande potencial de utilização do algoritmo na simplificação do trabalho experimental de determinação de dados físico-químicos em sistemas desta espécie. ©

O programa principal e as dez subrotinas que constituem o algoritmo são apresentados no Apêndice I.



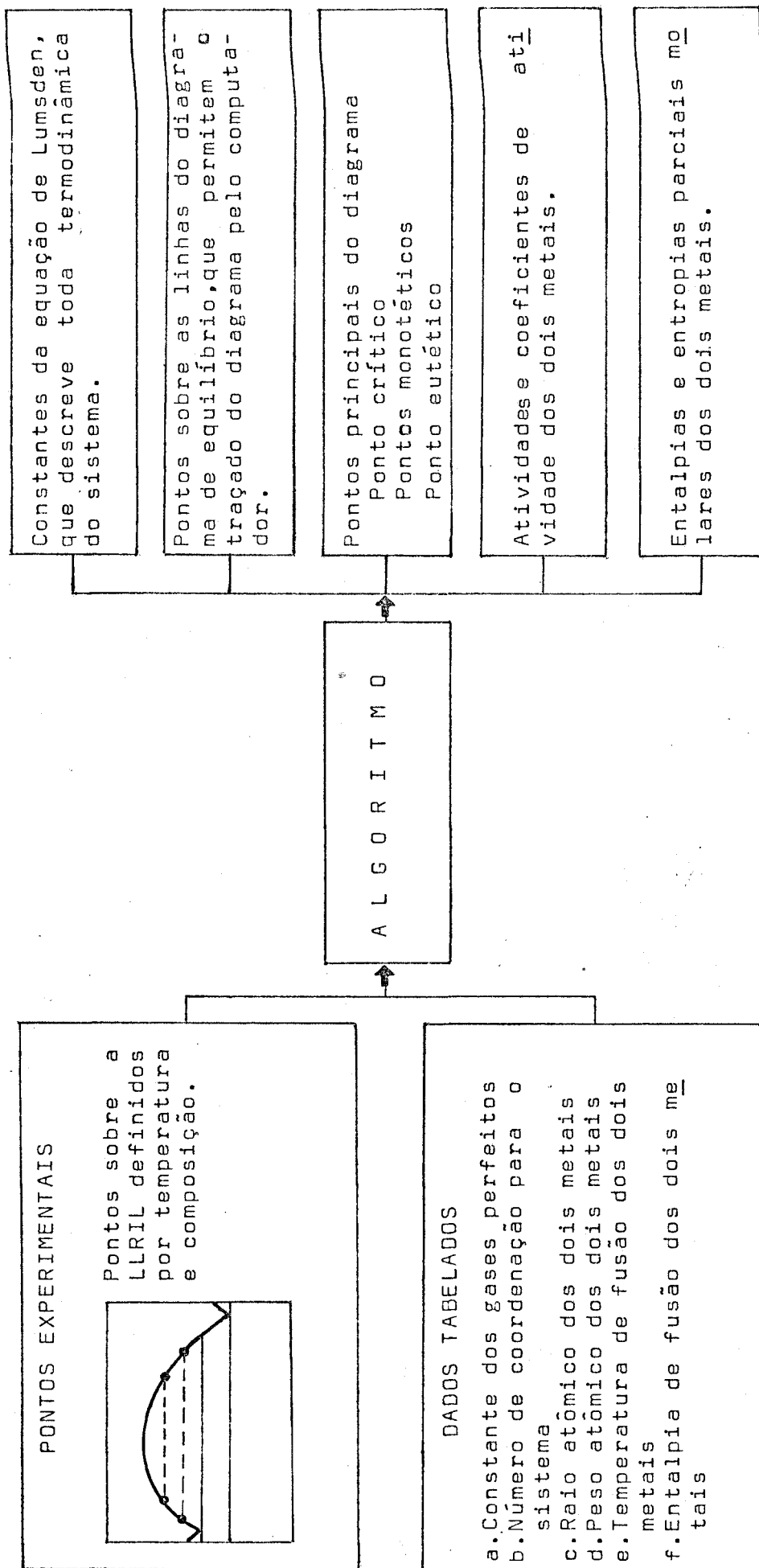


Fig. 2 - Esquema dos dados de entrada e saída do algoritmo criado no presente trabalho.

### 3.1. Determinação das constantes da equação de Lumsden

A determinação das constantes da equação de Lumsden é baseada no fato de que duas fases líquidas em equilíbrio apresentam as seguintes propriedades termodinâmicas :

$$a_1^E = a_1^D \quad \text{ou} \quad N_1^E \gamma_1^E = N_1^D \gamma_1^D \quad (22)$$

$$a_2^E = a_2^D \quad \text{ou} \quad N_2^E \gamma_2^E = N_2^D \gamma_2^D \quad (23)$$

onde os índices superiores E e D representam pontos situados no ramo esquerdo e direito da LLRIL e os índices inferiores representam dois metais.

Por outro lado, a equação (21) pode ser escrita simplificadamente da seguinte maneira :

$$\ln \gamma_1 = X \cdot K_1 + Y \cdot K_2 + X^2 \cdot K_3 \quad (24)$$

onde X e Y são termos que contêm as constantes da equação de Lumsden. Estes termos são independentes da composição e variam linearmente com o inverso da temperatura da seguinte maneira :

$$X = \frac{\epsilon}{T} - \sigma \quad (25)$$

$$Y = \frac{Z}{T} - \psi \quad (26)$$

$K_1$ ,  $K_2$  e  $K_3$  são termos independentes da temperatura e variam peculiarmente com a composição da seguinte maneira :

$$K_1 = \frac{N_2^2 r_1}{R(r_1^2 N_1 + N_2)^2} \quad (27)$$

$$K_2 = \frac{N_2^2 r_1^{2,5}}{R(r_1^5 N_1 + N_2)^2} \quad (28)$$

$$K_3 = - \left[ \frac{2 r_1^4 N_1 N_2^3 - r_1^{20/3} N_1^2 N_2^2}{Z R^2 (r_1^{8/3} N_1 + N_2)^4} \right] \quad (29)$$

sendo :

$r_1$  = raio atômico do metal 1 dividido por raio atômico do metal 2

Combinando-se, então, a equação(24) com as equações (22) e (23) obtem-se um sistema de duas equações e duas incógnitas para cada temperatura. A solução deste sistema exige o conhecimento da composição e temperatura de dois pontos situados em ramos opostos da LLRIL , sobre a mesma isoterma. Obtem-se então valores para X e Y. Se houver pontos experimentais suficientes, de

tal maneira que se possa obter valores de X e Y em várias temperaturas, determinam-se as constantes da equação de Lumsden através das equações (25) e (26), por meio de ajuste linear dos pontos pelo método dos mínimos quadrados.

Em vista do exposto é conveniente frisar que o presente método, ao fornecer os valores das constantes da equação de Lumsden, realizou o alisamento quasi-químico dos dados experimentais sobre a LLRIL.

O método utilizado exige o conhecimento de pontos sobre os ramos opostos da LLRIL, em uma mesma temperatura. Quando são disponíveis pontos em temperaturas diferentes, é feito um ajuste de um dos ramos, em curva do segundo grau, pelo método dos mínimos quadrados. Este ajuste permite a determinação de pontos sobre este ramo, nas mesmas temperaturas em que são conhecidos valores sobre o outro.

A metodologia descrita para dedução das constantes  $\epsilon$ ,  $\sigma$ ,  $z$ , e  $\Psi$ , da equação de Lumsden é executada através da subrotina CONST.

### 3.2. Determinação de pontos sobre as linhas do diagrama de equilíbrio

O diagrama de equilíbrio típico, estudado neste trabalho, apresenta duas linhas horizontais que caracterizam as temperaturas monotética e eutética e linhas limítrofes de fases, assim discriminadas :

i) linha liquidus do lado esquerdo superior, que vai do ponto de fusão do metal 1 puro até o ponto monotético situado no ramo esquerdo da LLRIL;

ii) linha liquidus do lado esquerdo inferior, que vai do ponto monotético situado no ramo direito da LLRIL até o ponto eutético;

iii) linha liquidus do lado direito, que vai do ponto eutético até o ponto de fusão do metal 2 puro ;

iv) LLRIL que delimita a região de imiscibilidade líquida.

A linha liquidus em um diagrama de equilíbrio é aquela que determina a composição do líquido e a linha solidus é aquela que determina a composição do sólido, para cada temperatura, nas regiões em que coexistem em equilíbrio uma fase líquida e uma fase sólida.

A determinação da LLRIL, a partir da equação de Lumsden, é praticamente um cálculo reverso da quele detalhado anteriormente sobre a determinação das constantes da equação de Lumsden. Se esta equação contivesse termos simples de composição, seria mesmo possível estabelecer uma equação matemática da concentração em função da temperatura para a LLRIL. No entanto, é praticamente impossível explicitar  $N$  na equação (21) e este fato concorreu para que se adotasse uma solução de tentativas sucessivas, que parece a mais adequada quando se dispõe de recursos de computação digital. A seguir explica-se o método adotado.

A Figura 3 apresenta o aspecto genérico das curvas de atividade de dois metais contra fração molar do metal 1, para uma dada temperatura, calculadas pela equação de Lumsden. Observa-se que partes destas curvas são de dados imaginários (entre os limites de solubilidade). Cada uma destas curvas possuirá, então, um segmento horizontal de tal maneira que as equações (22) e (23) sejam obedecidas. Os pontos extremos destas horizontais terão, logicamente, a mesma composição. Supondo-se que o ponto  $A_1$  se situe sobre a LLRIL, o outro limite é obtido traçando-se uma horizontal a partir de  $A_1$ , que intercepta a curva do metal 1 em  $B_1$

(a interseção intermediária é desprezada pelo fato da curva ser imaginária neste ponto). A projeção de  $A_1$  e  $B_1$  sobre a curva do metal 2 determina os pontos  $A_2$  e  $B_2$ . A atividade do metal 2 não é a mesma nos pontos  $A_2$  e  $B_2$ , o que significa que estes pontos não se localizam sobre a LLRIL. Alterando-se a posição do ponto  $A_1$ , e conseqüentemente do ponto  $B_1$ , altera-se a inclinação da reta  $A_2B_2$ . Repete-se o processo até que se obtenha uma linha  $A_2B_2$  horizontal. A situação representada pelos pontos  $A'_1, A'_2, B'_1, B'_2$ , indica que para a temperatura em estudo, os limites da região de imiscibilidade líquida são  $N_1 = A'$  e  $N_1 = B'$ . O cálculo é iniciado para uma temperatura abaixo da monotética e repetido sucessivamente, com acréscimos de  $10^\circ\text{C}$  na temperatura.

A metodologia descrita, para determinação de pontos sobre a LLRIL, é executada através da subrotina MIGAP. As curvas de atividade dos metais 1 e 2 são levantadas ponto a ponto pelas subrotinas METAL 1 e METAL 2. Estas subrotinas devem ser bastante rápidas, pois são chamadas repetidas vezes por MIGAP. A inclinação da linha  $A_2B_2$  é determinada pela subrotina GRADT, também chamada inúmeras vezes. A linha é considera -

da horizontal, no presente trabalho, quando o valor absoluto de seu gradiente for inferior a 0,001.

O método de tentativas sucessivas, utilizado em MIGAP, faz com que esta subrotina seja responsável pela maior parte do tempo que o algoritmo leva no computador.

A determinação de pontos sobre a linha líquida é também baseada no critério de equilíbrio entre fases, neste caso uma fase líquida e uma fase sólida. A atividade do metal 1 é a mesma nas duas fases :

$$a_1^l = a_1^s \quad (30)$$

O método desenvolvido aplica-se aos casos em que a intersolubilidade sólida dos dois metais é tão baixa, que pode ser considerada nula. Quando esta solubilidade é um pouco mais elevada, ela geralmente está dentro da faixa em que o metal 1 obedece a lei de Raoult, sendo sua atividade na solução sólida igual à fração molar. A correção a ser introduzida no algoritmo para estes casos é extremamente simples, não acarretando nenhum problema.



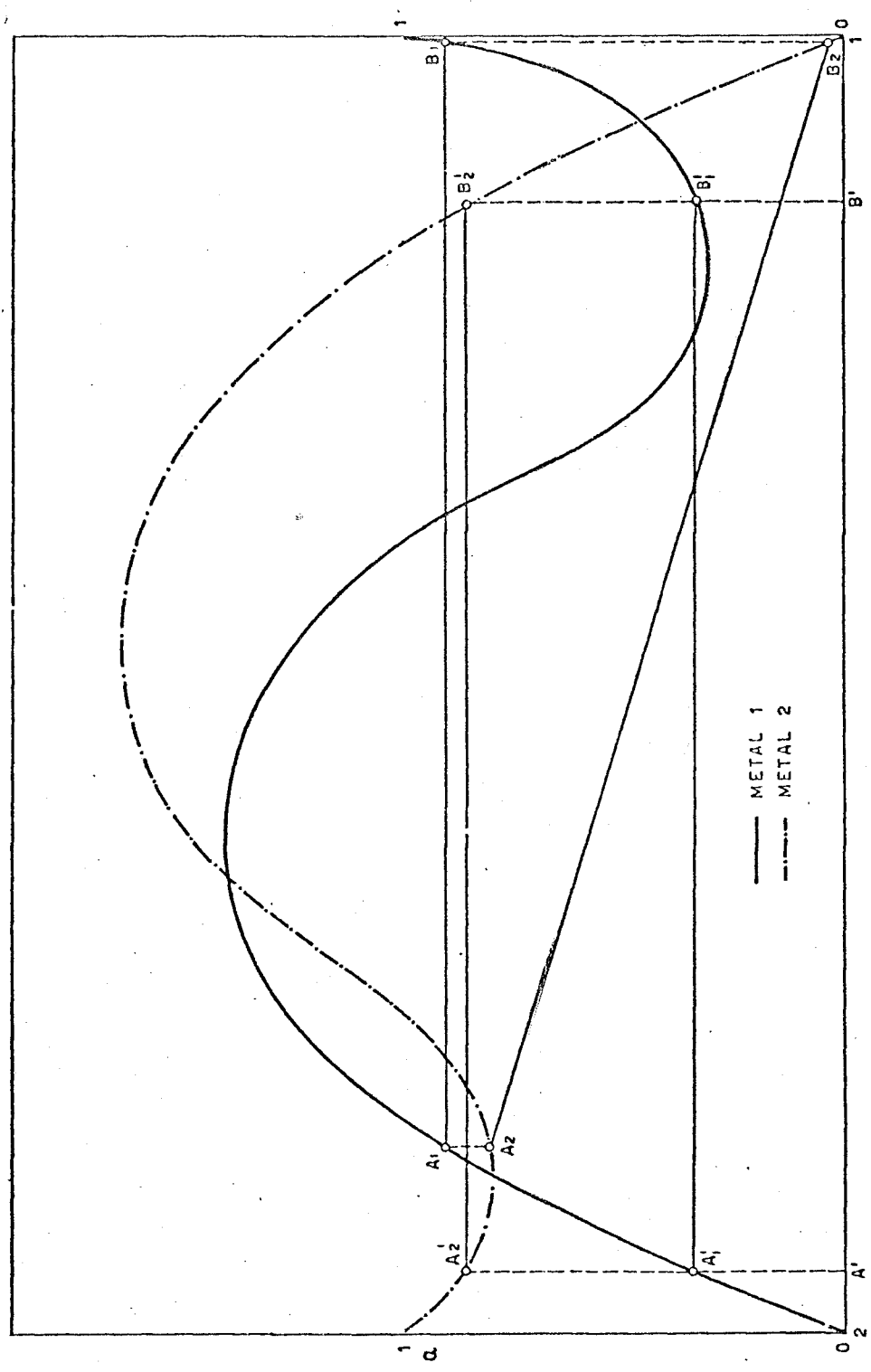
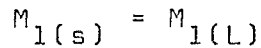


Fig. 3 - Curvas genéricas de atividade de dois metais em função da fração molar do metal 1 .

©

A metodologia desenvolvida pode ser explicada com o auxílio da Figura 4. Como a temperatura dos pontos da linha liquidus é inferior à temperatura de fusão do metal 1, o estado padrão escolhido para o metal 1 é o líquido puro hipotético super-resfriado. A reação de fusão do metal 1 é :



e a variação de energia livre associada a esta reação é expressa por :

$$\Delta G_F^0 = \Delta H_F^0 - T \frac{\Delta H_F^0}{T_F} = RT \ln \frac{a_1^L}{a_1^S} \quad (31)$$

Lembrando-se que  $a_1^L = 1$  (a atividade no estado padrão é unitária) e combinando-se as equações (30) e (31) resulta :

$$\log a_1^S = \frac{\Delta H_F^0 (T - T_F)}{4,576 T \cdot T_F} \quad (32)$$

Igualando-se o valor da atividade do metal 1 no líquido, fornecido pela equação (32), ao obtido através da equação (21), é possível determinar-se a temperatura, para cada valor de composição, sobre o ramo esquerdo da linha liquidus. Para este caso foi adotado o método de acréscimos idênticos no valor da composição, sendo desconsi-

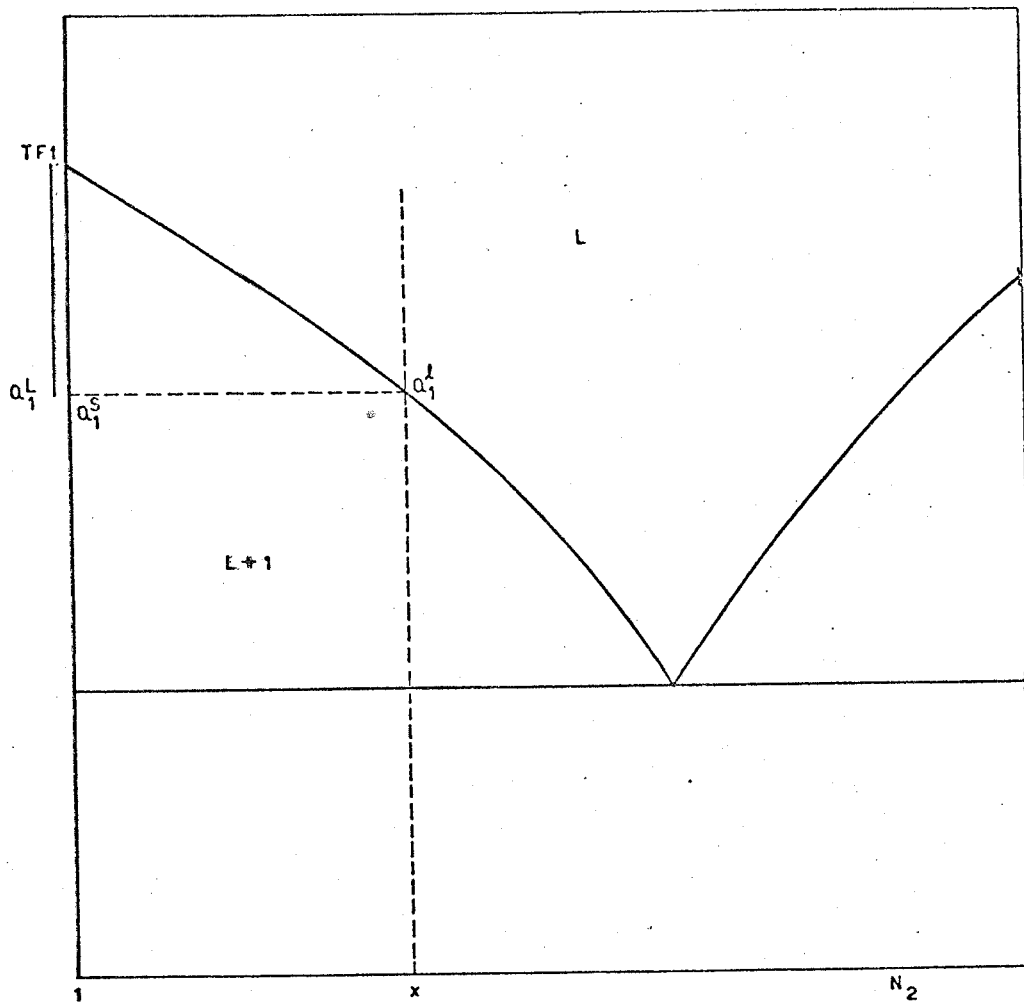


Fig. 4 - Canto de diagrama de equilíbrio genérico, mostrando a solidificação do metal 1.

derado o trecho em que a linha liquidus é imaginária . Este método poderá ocasionar problemas quando a declividade da linha for muito acentuada. No entanto, é possível reduzir-se o acréscimo nestes trechos de maior declividade sem alterar profundamente o algoritmo.

A determinação do ramo direito da linha liquidus obedece ao mesmo raciocínio, usando-se neste caso o metal 2 no equilíbrio.

A metodologia descrita, para determinação de pontos sobre a linha liquidus, é executada através da subrotina DLL. Os resultados desta subrotina são arquivados pela subrotina LIQUD.

A Figura 5 mostra o aspecto genérico da linha liquidus. As partes tracejadas são aquelas em que ela é imaginária. Para melhor ilustração foi incluída a LLRIL.

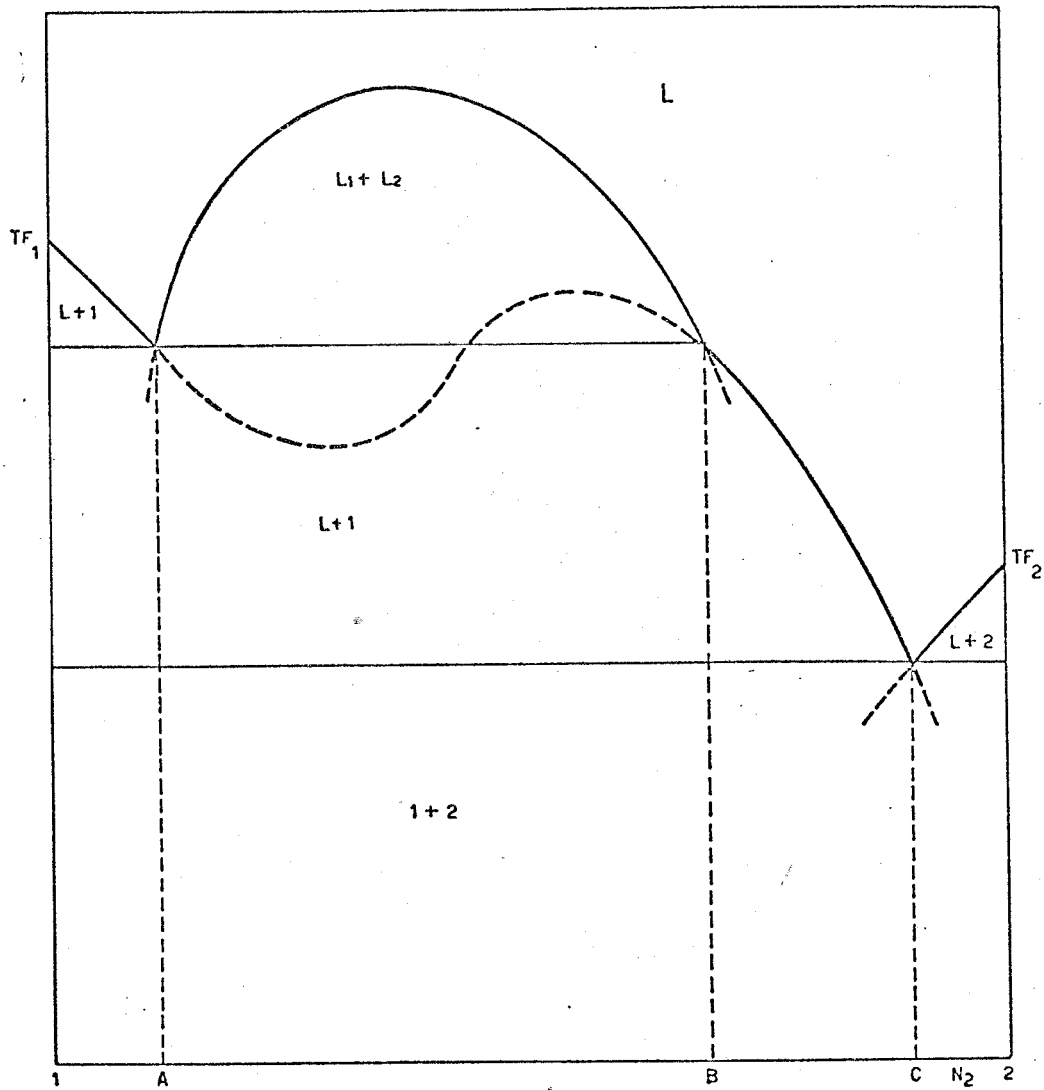


Fig. 5 - Aspecto genérico da linha liquidus, inclusive trechos imaginários.

### 3.3. Determinação dos pontos principais do diagrama de equilíbrio

A lógica para a determinação do ponto crítico é a mesma utilizada para o cálculo de pontos sobre a LLRIL. O acréscimo na temperatura é progressivamente reduzido até que a composição nos dois ramos da LLRIL seja coincidente. O cálculo é feito através da subrotina MIGAP.

Os pontos monotéticos e eutéticos são determinados calculando-se os pontos de interseção de curvas do segundo grau representativas de trechos das linhas liquidus e da LLRIL. Esta aproximação é válida, pois a determinação dos pontos principais se baseia na interseção de trechos relativamente curtos das citadas linhas. O ponto monotético situado na região rica no metal 1 é determinado pela interseção da curva do segundo grau representativa da linha liquidus do lado esquerdo superior com a curva do segundo grau representativa do ramo esquerdo da LLRIL. O ponto monotético situado na região rica no metal 2 é determinado de forma idêntica, através da linha liquidus do lado esquerdo inferior e do ramo direito da LLRIL. O ponto eutético é a interseção da linha liquidus do lado

esquerdo inferior com a linha liquidus do lado direito.

A temperatura monotética calculada em cada ramo da LLRIL deve diferir ligeiramente. Os valores calculados neste trabalho são bastante coerentes, não apresentando em nenhum caso diferenças superiores a  $1^{\circ}\text{C}$ . Toma-se como temperatura monotética a média aritmética das temperaturas calculadas para cada ponto monotético.

A metodologia descrita, para determinação dos pontos monotéticos e eutéticos, é executada através da subrotina INTSC. O ajuste dos pontos sobre as linhas, em curvas do segundo grau, é feito através da subrotina FIT.

A Figura 5 mostra as composições dos pontos monotéticos e eutético : A, B e C respectivamente. ©

#### 3.4. Determinação de dados termodinâmicos

O algoritmo efetua o cálculo de atividades, coeficientes de atividade, entalpias e entropias parciais molares dos dois metais, para fração molar do metal 1 variando de 0,1 a 0,9 com acréscimos de 0,1, em temperaturas selecionadas, nas quais estes dados

são conhecidos na literatura. Os coeficientes de atividade são deduzidos através da equação (21). Seus valores multiplicados pela fração molar do elemento correspondente fornecem as atividades. Conhecendo-se as atividades, determinam-se as energias livres parciais molares com auxílio da equação (16). A energia livre parcial molar de cada constituinte é relacionada com a entalpia e entropia parciais molares através da equação :

$$\Delta \bar{G}_1 = \Delta \bar{H}_1 - T \Delta \bar{S}_1 \quad (33)$$

Em intervalos não muito extensos de temperatura, as entalpias e entropias parciais molares podem ser consideradas constantes com a temperatura. Calculando-se as energias livres parciais molares, 25<sup>o</sup>C acima e 25<sup>o</sup>C abaixo da temperatura em que foram calculadas as atividades, tem-se :

$$\Delta \bar{G}_{T_1} = \Delta \bar{H}_1 - T_1 \Delta \bar{S}_1 \quad (34)$$

$$\Delta \bar{G}_{T_2} = \Delta \bar{H}_1 - T_2 \Delta \bar{S}_1 \quad (35)$$



que é um sistema de duas equações lineares, com duas in cõgnitas, cuja solução fornece as entalpias e entropias parciais molares desejadas.

A metodologia descrita, para determinação de dados termodinâmicos, é executada através da subrotina TERMO.

### 3.5. Critério de seleção entre dados experimentais na LLRIL

O algoritmo criado no presente trabalho visa, entre outros objetivos, estabelecer um critério de seleção entre dados experimentais, sobre a LLRIL, de vários autores.

Qualquer método experimental utilizado para a determinação destes dados, implica na separação das duas fases líquidas por diferença de densidade. Esta diferença de densidade é bastante acentuada em uma faixa de temperaturas próxima à temperatura monotética, pois a composição das duas fases é bastante diferente. Com o aumento da temperatura as densidades aproximam-se. É de se esperar, portanto, uma melhor concordância entre as medidas experimentais de vários autores, numa faixa de

temperaturas mais baixa, e uma dispersão dos resultados, à medida que a temperatura cresce. A Figura 6 ilustra o fato, mostrando o diagrama de equilíbrio para o sistema zinco-chumbo, contendo as LLRIL calculadas através do algoritmo criado neste trabalho, utilizando dados experimentais de WARING et alii<sup>(10)</sup> e HASS & JELLINEK<sup>(12)</sup>. A observação desta figura permite concluir o seguinte :

i) os pontos monotéticos situam-se nas faixas de composições hachuradas, em que há concordância entre os dados experimentais sobre a LLRIL. A comparação entre os valores destes pontos calculados a partir dos dados de diversos autores, com os da literatura, não é bom critério de seleção entre estes dados;

ii) o ponto eutético localiza-se bastante próximo a uma das extremidades do diagrama, região em que as propriedades termodinâmicas do sistema tendem para zero e, conseqüentemente, as linhas do diagrama, calculadas a partir de dados diferentes, tendem a coincidir-se. A comparação entre os valores do ponto eutético, calculados neste trabalho, com os da literatura, também não é bom critério de seleção entre os dados na LLRIL dos vários autores ;

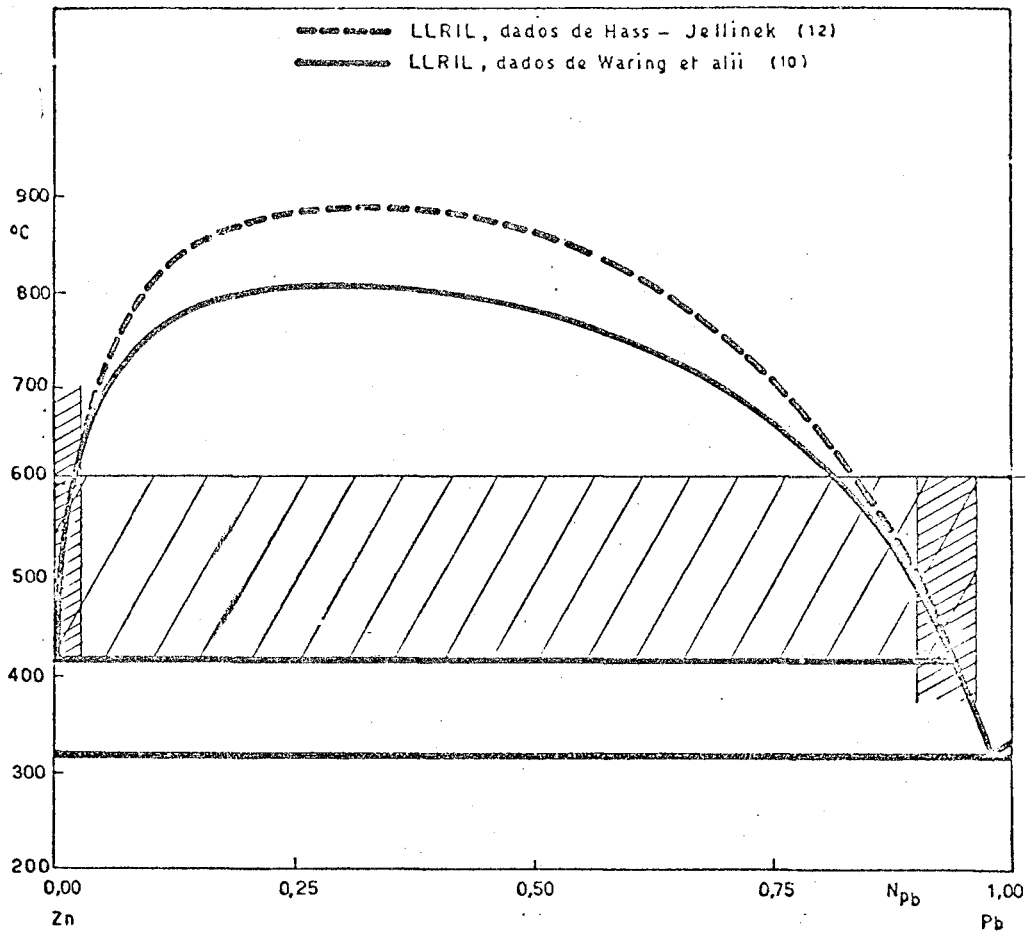


Fig. 6 - Diagrama de equilíbrio para o sistema Zn-Pb, mostrando a posição da LLRIL calculada no presente trabalho, a partir de dados experimentais de dois autores.

iii) o ponto crítico é de difícil determinação experimental, pois nas suas proximidades a diferença de densidade das duas camadas líquidas é pequena, o que acarreta a dispersão dos dados experimentais dos diversos autores. A comparação entre os valores do ponto crítico calculados neste trabalho, com os da literatura, é o único critério real de seleção entre aqueles dados, baseado nos pontos principais do diagrama ;

iv) Na faixa de temperaturas hachurada as atividades calculadas por este algoritmo, a partir dos dados experimentais dos vários autores, não devem apresentar grandes diferenças. Estas diferenças tendem a crescer com o aumento da temperatura, devendo ser bastante acentuadas para temperaturas acima da região de imiscibilidade líquida. O que foi dito revela que a comparação de atividades nesta faixa de temperaturas não é o critério ideal para seleção entre dados de vários autores. No entanto a equação :

$$\ln a_1 = \frac{\Delta \bar{H}_1}{RT} - \frac{\Delta \bar{S}_1}{R} \quad (36)$$

mostra que o logaritmo neperiano da atividade do metal 1 varia linearmente com o inverso da temperatura, sendo  $\Delta\bar{H}_1/R$  e  $\Delta\bar{S}_1/R$  os coeficientes da equação da reta. Se valores das atividades, calculados a partir dos dados de diversos autores, são semelhantes dentro de uma faixa de temperaturas e diferem entre si para temperaturas mais altas, eles serão representados por um feixe de retas que se cortam dentro da faixa de coincidência entre os valores. Os coeficientes das várias retas serão diferentes. Assim sendo, a comparação entre a entalpia e entropia parcial molar de cada metal, calculadas neste trabalho, e, conseqüentemente, da entalpia e entropia de mistura, será o melhor critério de seleção entre os dados dos vários autores, pois é aplicável em qualquer região do diagrama de equilíbrio.

Desta maneira conclui-se que a comparação entre dados de diversos autores será baseada nos seguintes critérios:

i) determinação da composição e temperatura do ponto crítico e ;

ii) determinação das entalpias e entropias de mistura.

## 4. SISTEMA Zn-Pb

Zinco e chumbo são praticamente imiscíveis no estado sólido e apresentam uma extensa região de imiscibilidade líquida. A Figura 7 mostra o diagrama de equilíbrio para o sistema, apresentado por HANSEN & ANDERKO <sup>(11)</sup>. No diagrama foram colocados os pontos experimentais, sobre a LLRIL, disponíveis na literatura para aplicação do algoritmo criado. Os cálculos foram realizados com dados dos seguintes autores :

i) WARING et alii <sup>(10)</sup>, cujos resultados foram obtidos através de métodos envolvendo resfriamento da liga como um todo e amostragem nas duas camadas líquidas. O Apêndice II mostra os dados destes autores, que foram apresentados em tabela para nove temperaturas diferentes ;

ii) HASS & JELLINEK <sup>(12)</sup>, cujos resultados foram obtidos através de amostragem nas duas camadas líquidas. O Apêndice III mostra os dados destes autores, que foram apresentados em tabela para cinco temperaturas diferentes ;

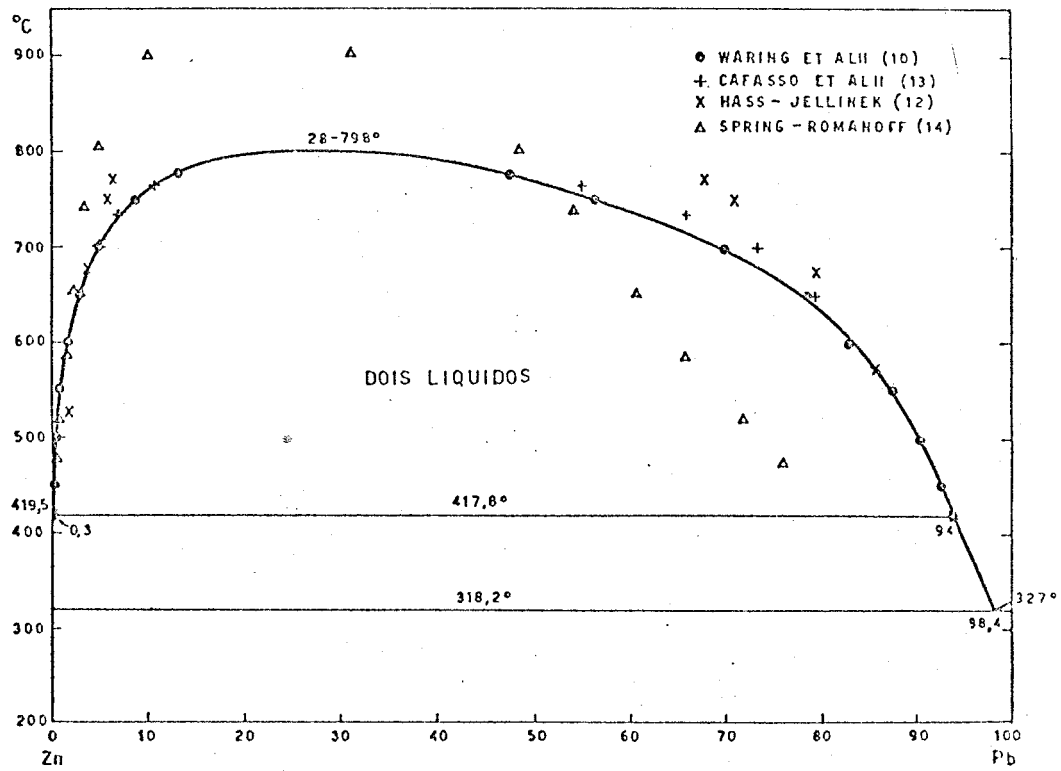


Fig. 7 - Diagrama de equilíbrio para o sistema Zn-Pb.

iii) CAFASSO et alii<sup>(13)</sup>, cujos resultados foram obtidos através de amostragem nas duas camadas líquidas. Os dados destes autores foram apresentados em gráfico, do qual foram lidos pontos em quatro temperaturas diferentes, mostrados no Apêndice IV ;

iv) SPRING & ROMANOFF<sup>(14)</sup>, cujos resultados foram obtidos através de amostragem nas duas camadas líquidas. O Apêndice V mostra os dados destes autores, que foram apresentados em tabela para sete temperaturas diferentes.

Existe boa concordância entre os dados na LLRIL de WARING et alii<sup>(10)</sup>, os de CAFASSO et alii<sup>(13)</sup>, e os de KRUPKOWSKI<sup>(2)</sup>, obtidos a partir de modelo matemático próprio, os de KLEPPA<sup>(15)</sup>, que utilizou o método de medida de força eletromotriz e os de SEITH & JOHNEN<sup>(16)</sup>, medidos por técnica de resfriamento. Os valores das duas últimas referências não foram introduzidos no algoritmo por não preencherem o requisito de disponibilidade de dados nos dois ramos da LLRIL . Os resultados de HASS & JELLINEK<sup>(12)</sup> e SPRING & ROMANOFF<sup>(14)</sup>, obtidos pelo método de amostragem nas duas camadas líquidas, afastam-se dos anteriores, em temperaturas elevadas, indicando uma temperatura crítica mais alta. Os dados de SPRING & ROMANOFF<sup>(14)</sup>



afastam-se bastante dos demais também em temperaturas mais baixas. WARING et alii<sup>(10)</sup>, repetiram os métodos experimentais dos dois trabalhos, concluindo que o procedimento utilizado é inadequado, pois as medidas foram tomadas sem que o sistema atingisse o equilíbrio. As medidas de pressão de vapor de ROSENTHAL et alii<sup>(17)</sup>, determinam uma temperatura crítica igualmente elevada, da ordem de 900°C e afastam-se consideravelmente dos demais, mesmo em temperaturas baixas. Estes dados foram introduzidos no algoritmo e mostraram não serem internamente consistentes, pois foram rejeitados pelo mesmo.

Foi mostrado, que, entre os pontos principais do diagrama, somente a comparação da localização do ponto crítico é um bom critério de seleção entre da ⑥ dos sobre a LLRIL. Os valores de composição e temperatura para este ponto, calculados neste trabalho, são apresentados na Tabela I, comparados com os de outros autores.

HANSEN & ANDERKO<sup>(11)</sup> dizem que o ponto crítico foi calculado por LUMSDEN<sup>(7)</sup> e medido experimentalmente por SEITH & JOHNNEN<sup>(16)</sup>, mas não afirmam explicitamente que o dado apresentado seja o dos últimos au

tores, o que pode ser inferido da coincidência de valores.

TABELA I - Temperatura e composição críticas para o sistema zinco-chumbo.

A U T O R	T <sup>o</sup> C	N <sub>P<sub>b</sub></sub>
HANSEN & ANDERKO <sup>(11)</sup>	798	0,28
HASS & JELLINEK <sup>(12)</sup>	945	
HULTGREN et alii <sup>(18)</sup>	790	0,28
SEITH & JOHNEN <sup>(16)</sup>	798	0,28
KRUPKOWSKI <sup>(2)</sup>	808	0,324
Este trabalho (dados de WARING et alii <sup>(10)</sup> )	804,8	0,299
Este trabalho (dados de HASS & JELLINEK <sup>(12)</sup> )	893,1	0,319
Este trabalho (dados de CAFASSO et alii <sup>(13)</sup> )	813,1	0,274
Este trabalho (dados de SPRING & ROMANOFF <sup>(14)</sup> )	952,6	0,199

As Figuras 8 e 9 mostram os valores de entalpia e entropia de mistura calculados neste trabalho a partir de dados de WARING et alii<sup>(10)</sup>, HASS & JELLINEK<sup>(12)</sup>, CAFASSO et alii<sup>(13)</sup> e SPRING & ROMANOFF<sup>(14)</sup>, comparados com os de :

i) HULTGREN et alii<sup>(6)</sup>, que foram calculados mediante utilização da equação de Lumsden (com as constantes calculadas originalmente por este autor) e apresentados tabelados ;

ii) HULTGREN et alii<sup>(18)</sup>, que foram calculados a partir de medidas de conteúdo calorífico de TODD & OATES<sup>(19)</sup> e TODD et alii<sup>(20)</sup> e apresentados tabelados somente na região de miscibilidade líquida;

iii) ROSENTHAL et alii<sup>(17)</sup>, que foram medidos pelo método de potencial de eletrodo ("electrode-potential") e apresentados em gráficos ;

iv) TODD et alii<sup>(20)</sup>, que foram medidos por meio de "drop-calorimeter" e apresentados em gráficos;

v) KLEPPA<sup>(15)</sup>, valores somente de entalpias de mistura, que foram medidos pelo método de força eletromotriz e apresentados em gráficos.

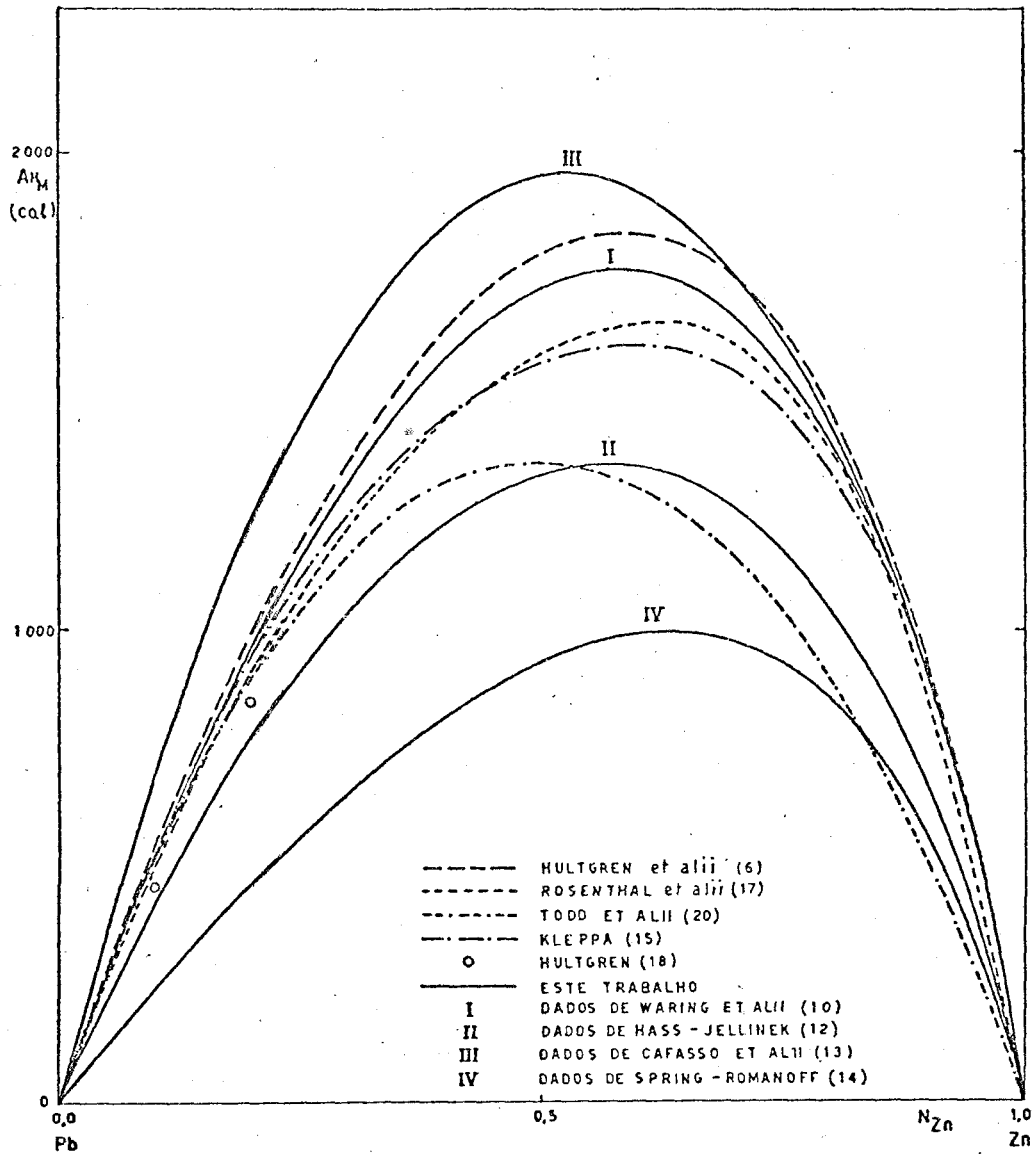


Fig. 8 - Entalpia de mistura em função da fração molar de zinco, para o sistema Zn-Pb .

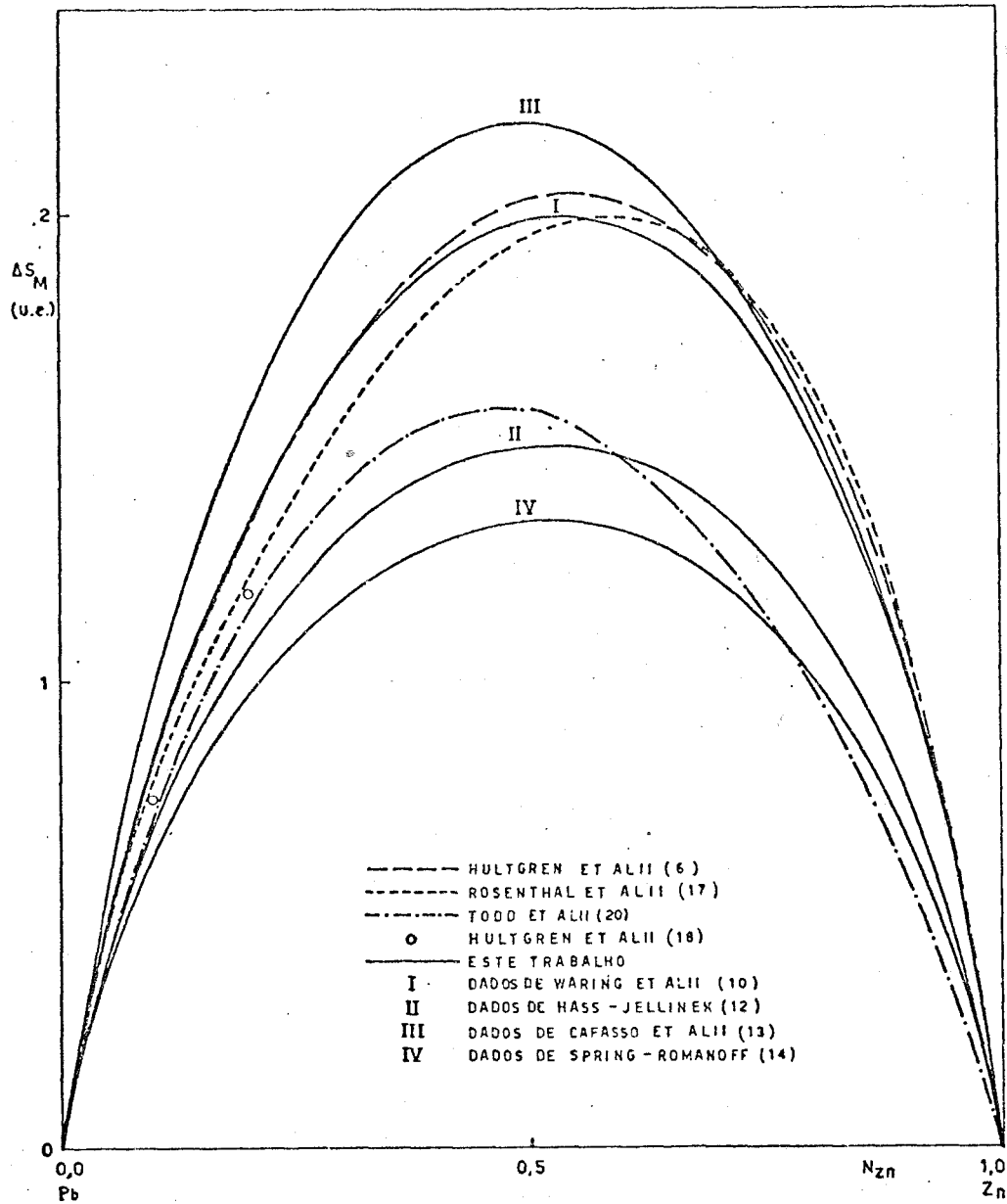


Fig. 9 - Entropia de mistura em função da fração molar de zinco, para o sistema Zn-Pb.

Os dados experimentais de SPRING & ROMANOFF<sup>(14)</sup> estão inteiramente afastados daqueles dos demais autores e conduzem a resultados inconsistentes, portanto não merecem maior atenção. Os dados de HASS & JELLINEK<sup>(12)</sup> conduzem à determinação do ponto crítico em temperatura excessivamente elevada. Levando-se em conta as dificuldades experimentais envolvidas na determinação do ponto crítico, a concordância entre os valores calculados neste trabalho a partir de dados de WARING et alii<sup>(10)</sup> e CAFASSO et alii<sup>(13)</sup> e os valores de outros autores pode ser considerada boa. O critério de seleção entre os dados dos dois autores deverá ser a comparação entre valores de entalpia e entropia de mistura. As Figuras 8 e 9 mostram que os dados de CAFASSO et alii<sup>(13)</sup> conduzem ao cálculo de valores exagerados para as duas propriedades, confirmando ainda a inaceitabilidade dos dados de HASS&JELLINEK<sup>(12)</sup> e SPRING & ROMANOFF<sup>(14)</sup> que levam a entalpias e entropias de mistura muito baixas.

As Figuras 8 e 9 e a Tabela I permitem concluir que os dados experimentais, sobre a LLRIL, de WARING et alii<sup>(10)</sup> são os mais exatos dentre os estudos.

As constantes da equação de LUMSDEN, pontos sobre as linhas que separam fases no diagrama de equilíbrio, pontos principais do diagrama, dados de atividades, coeficientes de atividade, entalpias e entropias parciais molares para os dois metais são apresentados nos Apêndices VI, VII, VIII e IX, calculados através da aplicação do algoritmo criado no presente trabalho, utilizando dados experimentais das quatro referências citadas no início deste item. Os pontos principais do diagrama, apresentados nestes apêndices sob o título "literatura", são os de HANSEN & ANDERKO<sup>(11)</sup>. Os dados termodinâmicos da "literatura" a 926<sup>o</sup>K são de HULTGREN et alii<sup>(6)</sup>, e aqueles a 923<sup>o</sup>K de HULTGREN et alii<sup>(18)</sup>, que não apresentam valores no interior da região de imiscibilidade líquida. No entanto, o funcionamento do algoritmo exige a leitura destes dados, nestas composições. Esta exigência foi satisfeita através da alimentação, nesta faixa, de números que não apresentam significado.

As Tabelas II e III, apresentadas como ilustração, mostram uma comparação entre os pontos monotéticos e eutético calculados neste trabalho a partir dos dados de WARING et alii<sup>(10)</sup> e aqueles apresentados por HANSEN & ANDERKO<sup>(11)</sup>.

TABELA II - Temperatura e composições monotéticas para o sistema zinco-chumbo.

A U T O R	T <sup>o</sup> C	N <sub>Pb</sub> <sup>E</sup>	N <sub>Pb</sub> <sup>D</sup>
HANSEN & ANDERKO <sup>(11)</sup>	417,8	0,003	0,94
Este trabalho (dados de WARING et alii <sup>(10)</sup> )	418,4	0,0027	0,945

TABELA III - Temperatura e composição eutéticas para o sistema zinco-chumbo.

A U T O R	T <sup>o</sup> C	N <sub>Zn</sub>
HANSEN & ANDERKO <sup>(11)</sup>	318,2	0,016
Este trabalho (dados de WARING et alii <sup>(10)</sup> )	316,5	0,0185



A Figura 10, mostrada a título de exemplificação, compara os resultados de atividades dos dois metais, deste trabalho, com os valores apresentados por HULTGREN et alii<sup>(6,18)</sup>, que são valores originados de compilação de dados de diversos autores. Estes valores, e os calculados neste trabalho a partir dos dados WARING et alii<sup>(10)</sup>, apresentam uma notável coincidência.

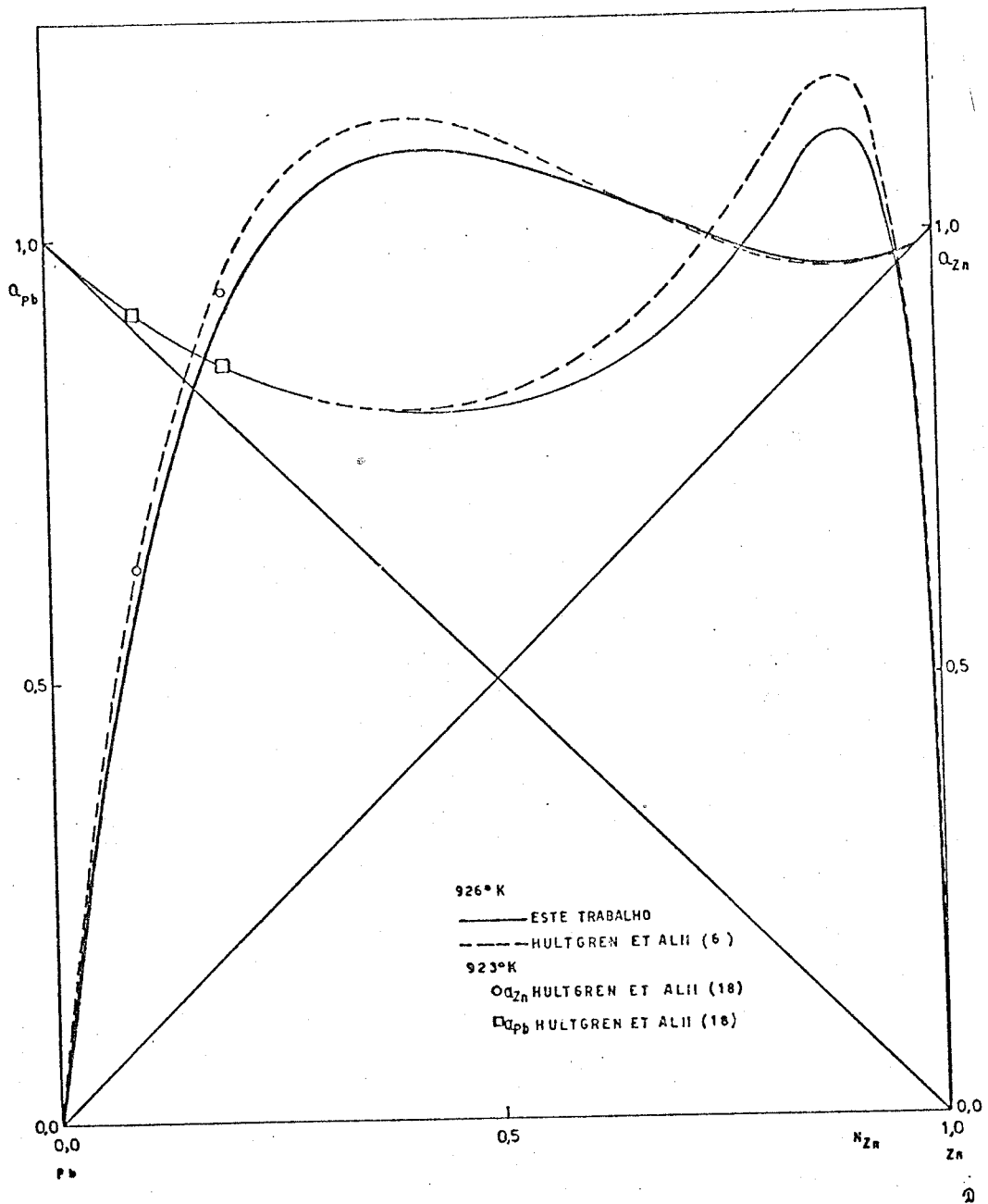


Fig. 10 - Atividades de zinco e chumbo em função da fração molar de zinco, para o sistema Zn-Pb.

## 5. SISTEMA Al-In

Alumínio e índio são praticamente imiscíveis no estado sólido e apresentam uma região de imiscibilidade líquida. A Figura 11 mostra o diagrama de equilíbrio para o sistema, apresentado por HANSEN & ANDERKO<sup>(11)</sup>. No diagrama foram colocados os pontos experimentais, sobre a LLRIL, disponíveis na literatura para aplicação do algoritmo criado. Os cálculos foram realizados com dados dos seguintes autores:

i) CAMPBELL & WAGEMANN<sup>(21)</sup>, cujos resultados foram obtidos através de métodos envolvendo amostragem direta nas duas camadas líquidas em equilíbrio. O Apêndice X mostra os dados destes autores, que foram apresentados em gráfico para seis temperaturas diferentes ;

ii) CAMPBELL et alii<sup>(22)</sup>, cujos resultados foram obtidos através de métodos envolvendo determinação polarográfica do teor de índio, utilizando o polarógrafo de SARGENT-HEYROVSKY, e medidas de diferença de densidade das duas camadas para determinação do teor de alumínio. O Apêndice XI mostra os dados destes autores, que foram apresentados em tabela para quatro temperaturas diferentes.

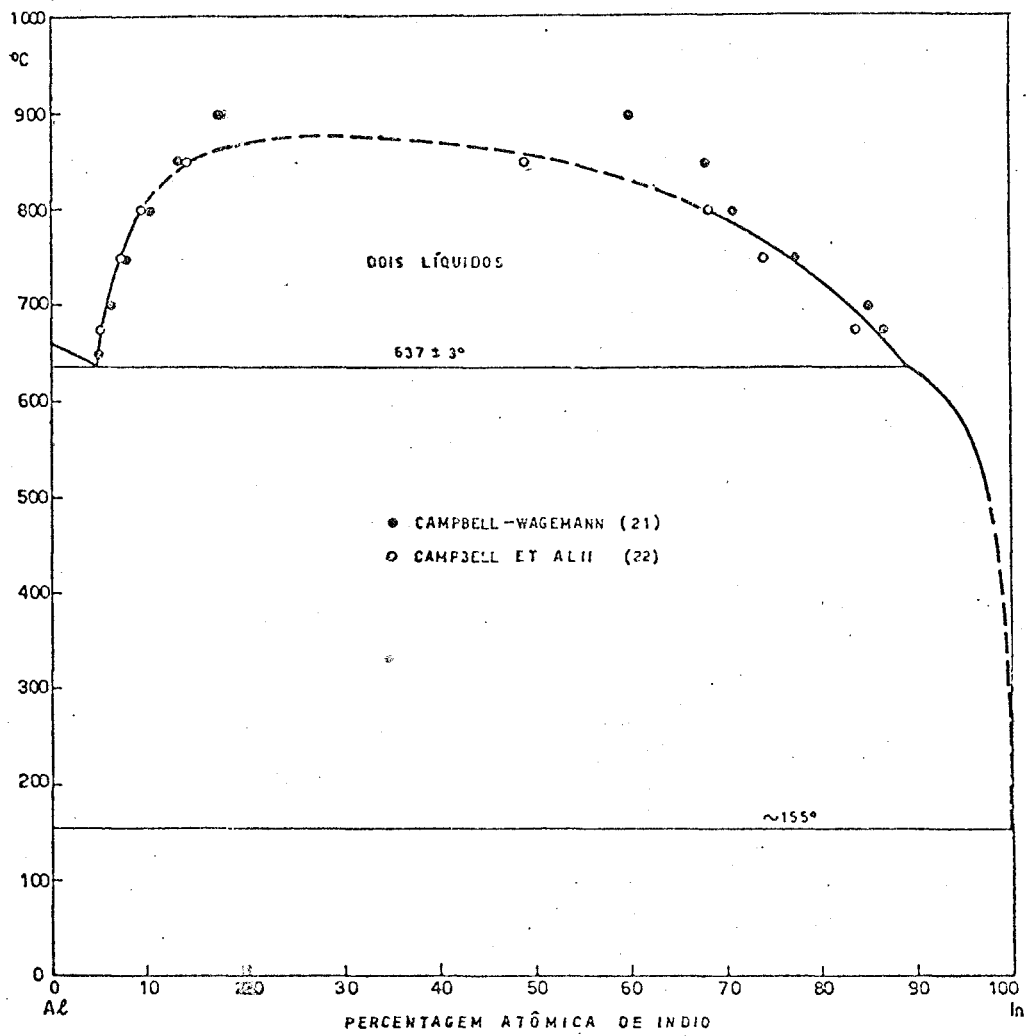


Fig. 11 - Diagrama de equilíbrio para o sistema Al-In.

Os dados sobre a LLRIL das duas referências acima apresentam boa concordância para temperaturas mais baixas, afastando-se com a elevação da temperatura. Os de CAMPBELL & WAGEMANN<sup>(21)</sup> indicam uma temperatura crítica mais elevada.

A comparação da localização do ponto crítico é um dos critérios de seleção entre dados sobre a LLRIL. Os valores da composição e temperatura para este ponto, calculados nesta investigação científica, são apresentados na Tabela IV, comparados com os de outros autores.

TABELA IV - Temperatura e composição críticas para o sistema alumínio-índio.

A U T O R	T <sup>o</sup> C	N <sub>In</sub>
CAMPBELL & WAGEMANN <sup>(21)</sup>	945	0,34
PREDEL & SANDIG <sup>(23)</sup>	830	0,40
Este trabalho (dados de CAMPBELL & WAGEMANN <sup>(21)</sup> )	975,3	0,344
Este trabalho (dados de CAMPBELL et alii <sup>(22)</sup> )	918,9	0,269

As Figuras 12 e 13 mostram os valores de entalpia e entropia de mistura calculados neste trabalho a partir de dados de CAMPBELL & WAGEMANN<sup>(21)</sup> e CAMPBELL et alii<sup>(22)</sup>, comparados com os de :

i) HULTGREN et alii<sup>(18)</sup>, que foram selecionados pelos autores e apresentados em tabelas ;

ii) PREDEL & SANDIG<sup>(23)</sup>, que foram medidos através de calorímetro de alta temperatura e apresentados em gráficos;

iii) YAZAWA & LEE<sup>(24)</sup>, que foram calculados a partir de medidas de força eletromotriz e apresentados em gráficos ;

iv) WITTIG & KEIL<sup>(25)</sup>, (apud PREDEL & SANDIG<sup>(23)</sup>), valores somente de entalpias de mistura, que foram obtidos através de medidas calorimétricas e apresentados em gráfico.

A grande discrepância entre os valores de temperatura do ponto crítico, determinados por CAMPBELL & WAGEMANN<sup>(21)</sup> e PREDEL & SANDIG<sup>(23)</sup>, impede a utilização do critério de seleção entre dados, sobre a LLRIL, baseado no cálculo do citado ponto através do algoritmo criado no presente trabalho. O critério de seleção entre os dados de CAMPBELL & WAGEMANN<sup>(21)</sup> e CAMPBELL et alii<sup>(22)</sup> deverá ser a comparação entre valores de

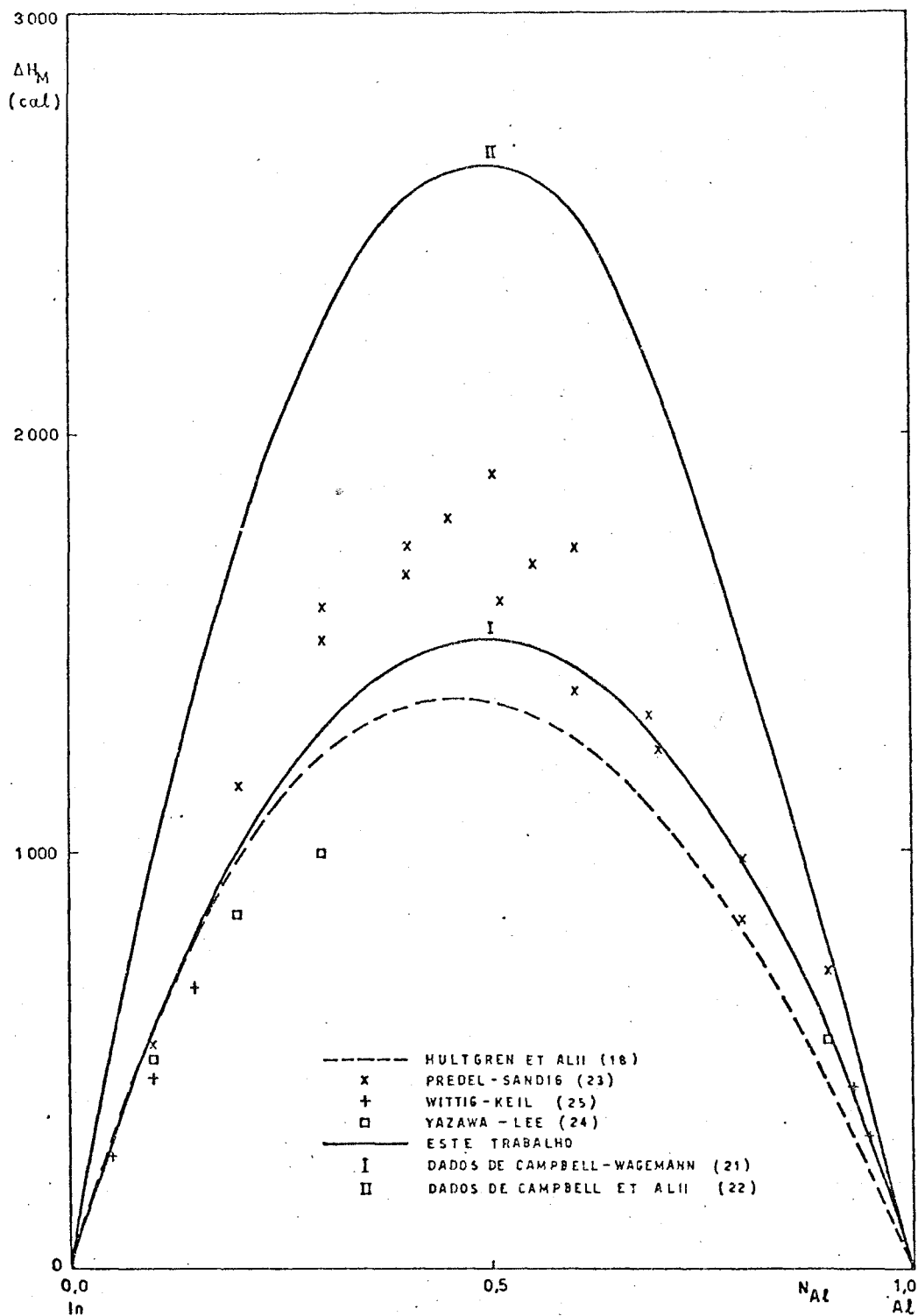


Fig. 12 - Entalpia de mistura em função da fração molar de alumínio, para o sistema Al-In.

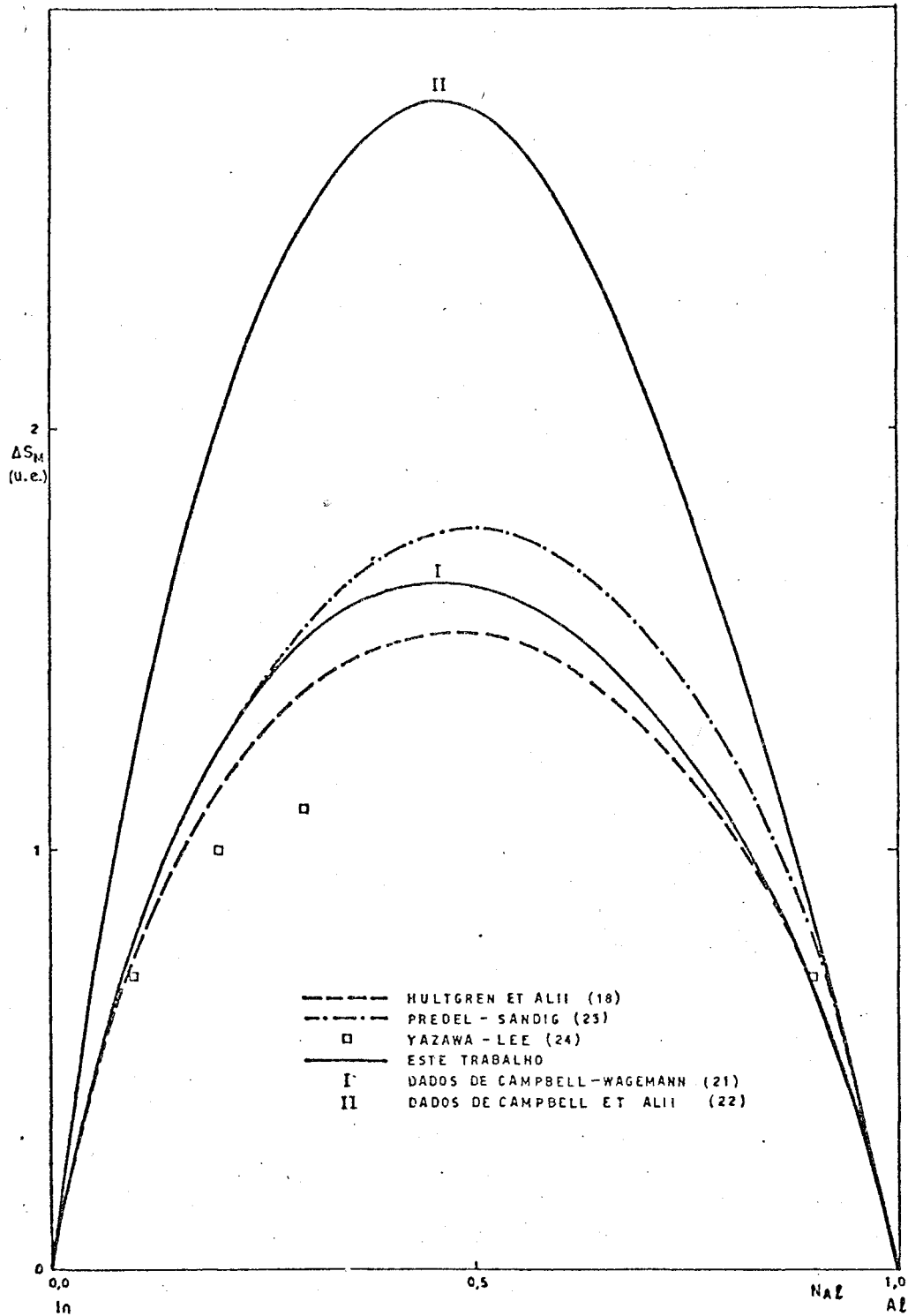


Fig. 13 - Entropia de mistura em função da fração molar de alumínio, para o sistema Al-In.



entalpia e entropia de mistura. As Figuras 12 e 13 mostram que os dados da segunda referência conduzem ao cálculo de valores exagerados para as duas propriedades, causando a inaceitabilidade destes dados sobre a LLRIL.

As Figuras 12 e 13 permitem concluir que os dados experimentais, sobre a LLRIL, de CAMPBELL & WAGEMANN<sup>(21)</sup> são os mais exatos dentre os estudados.

As constantes da equação de Lumsden, pontos sobre as linhas que separam fases no diagrama de equilíbrio, pontos principais do diagrama, dados de atividades, coeficientes de atividade, entalpias e entropias parciais molares para os dois metais são apresentados nos Apêndices XII e XIII, calculados através da aplicação do algoritmo criado no presente trabalho, utilizando dados experimentais das duas referências citadas no início deste item. Os pontos monotéticos e eutético, apresentados nestes apêndices sob o título "literatura", são os de HANSEN & ANDERKO<sup>(11)</sup>, exceto a composição eutética. O ponto eutético localiza-se bastante próximo ao ponto de fusão do índio; e não foi encontrada nenhuma referência bibliográfica que fixasse sua composição. Como o funcionamento do algoritmo exige a leitura deste dado, foi introduzido

um número arbitrário. Os valores de composição e temperatura para o ponto crítico da "literatura", são de CAMPBELL & WAGEMANN<sup>(21)</sup>. Os dados termodinâmicos da "literatura" a 1173°K são de HULTGREN et alii<sup>(18)</sup>.

A Tabela V, apresentada como ilustração, mostra uma comparação entre os pontos monotéticos calculados neste trabalho a partir dos dados de CAMPBELL & WAGEMANN<sup>(21)</sup> e aqueles apresentados por HANSEN & ANDERKO<sup>(11)</sup>.

TABELA V - Temperatura e composições monotéticas para o sistema alumínio-índio.

A U T O R	T <sup>o</sup> C	N <sup>E</sup> <sub>In</sub>	N <sup>D</sup> <sub>In</sub>
HANSEN & ANDERKO <sup>(11)</sup>	637	0,047	0,89
Este trabalho (dados de CAMPBELL & WAGEMANN <sup>(21)</sup> )	635	0,0465	0,879

O algoritmo criado neste trabalho não possibilita a determinação do ponto eutético nos casos em que a declividade do ramo esquerdo inferior da linha líquida, nas vizinhanças deste ponto, é acentuada. A Figura 14, que mostra o ramo esquerdo inferior da linha

liquidus Al-In, contendo os pontos calculados neste trabalho, a partir dos dados de CAMPBELL & WAGEMANN<sup>(21)</sup>, ilustra o problema. O ramo direito da linha liquidus é tão curto que foi impossível sua representação na figura. A determinação da interseção dos ramos direito e esquerdo exigiu uma extrapolação deste último em uma faixa de cerca de 250°C, que tira toda a precisão do método. Seria necessário que o acréscimo na composição fosse progressivamente diminuído, à medida que a declividade da linha liquidus aumentasse, o que propiciaria a obtenção de pontos localizados nas vizinhanças do ponto eutético. Muito embora esta modificação fosse de caráter simples, não foi possível realizá-la por exiguidade de tempo. Foi, então, tentado um ajuste do logaritmo da fração molar de alumínio contra o inverso da temperatura absoluta, mostrado na Figura 15. O método também não é satisfatório, pois envolve a extrapolação de um longo trecho, não linear, do ramo esquerdo inferior da linha liquidus.

A Figura 16, mostrada a título de exemplificação, compara os resultados de atividades dos dois metais, deste trabalho, com os valores apresentados por HULTGREN et alii<sup>(18)</sup>, que são valores originados de compilação de dados de diversos autores. Estes valo

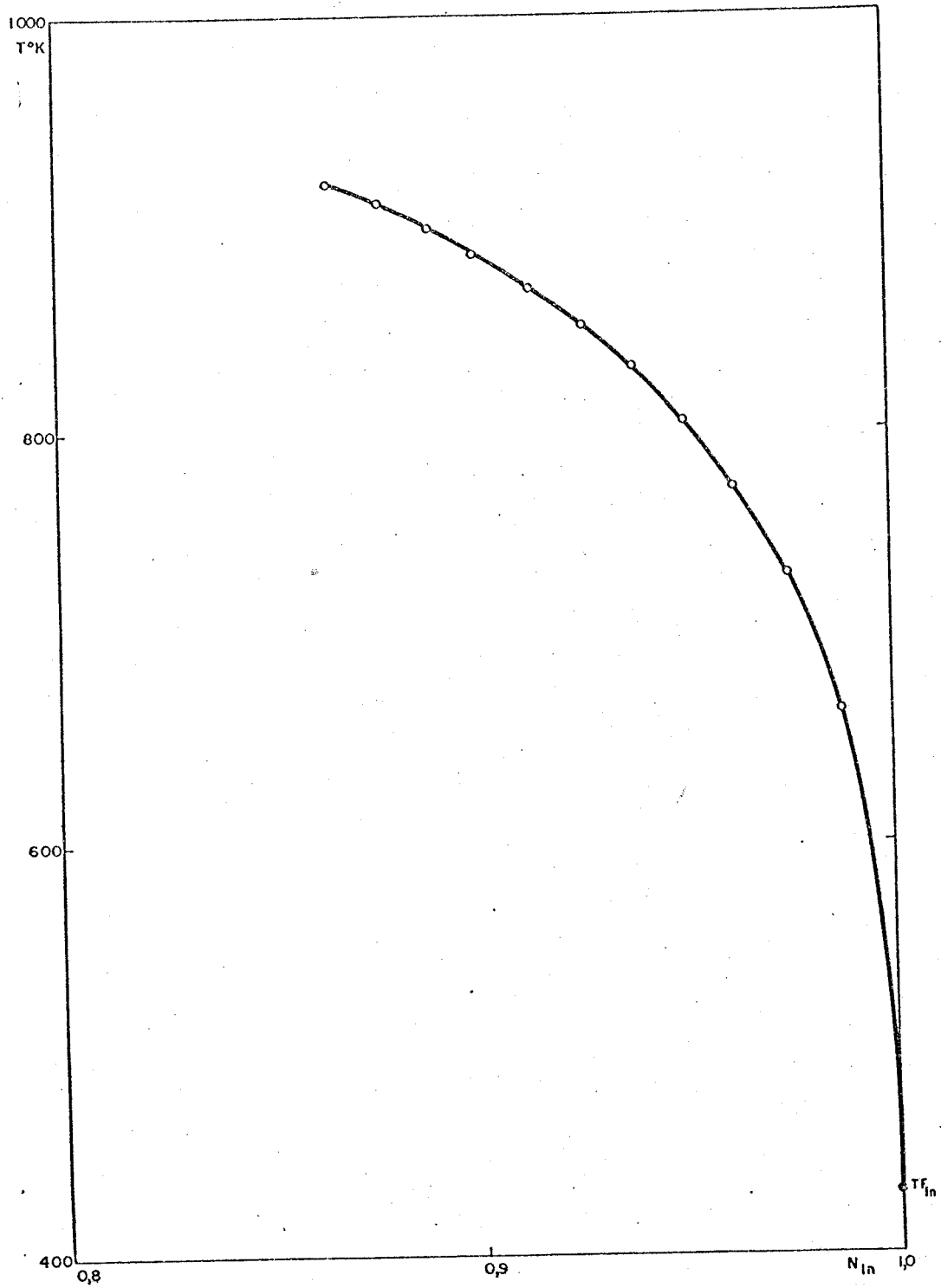


Fig. 14 - Detalhe do diagrama de equilíbrio Al-In, mostrando o ramo esquerdo inferior da linha liquidus.

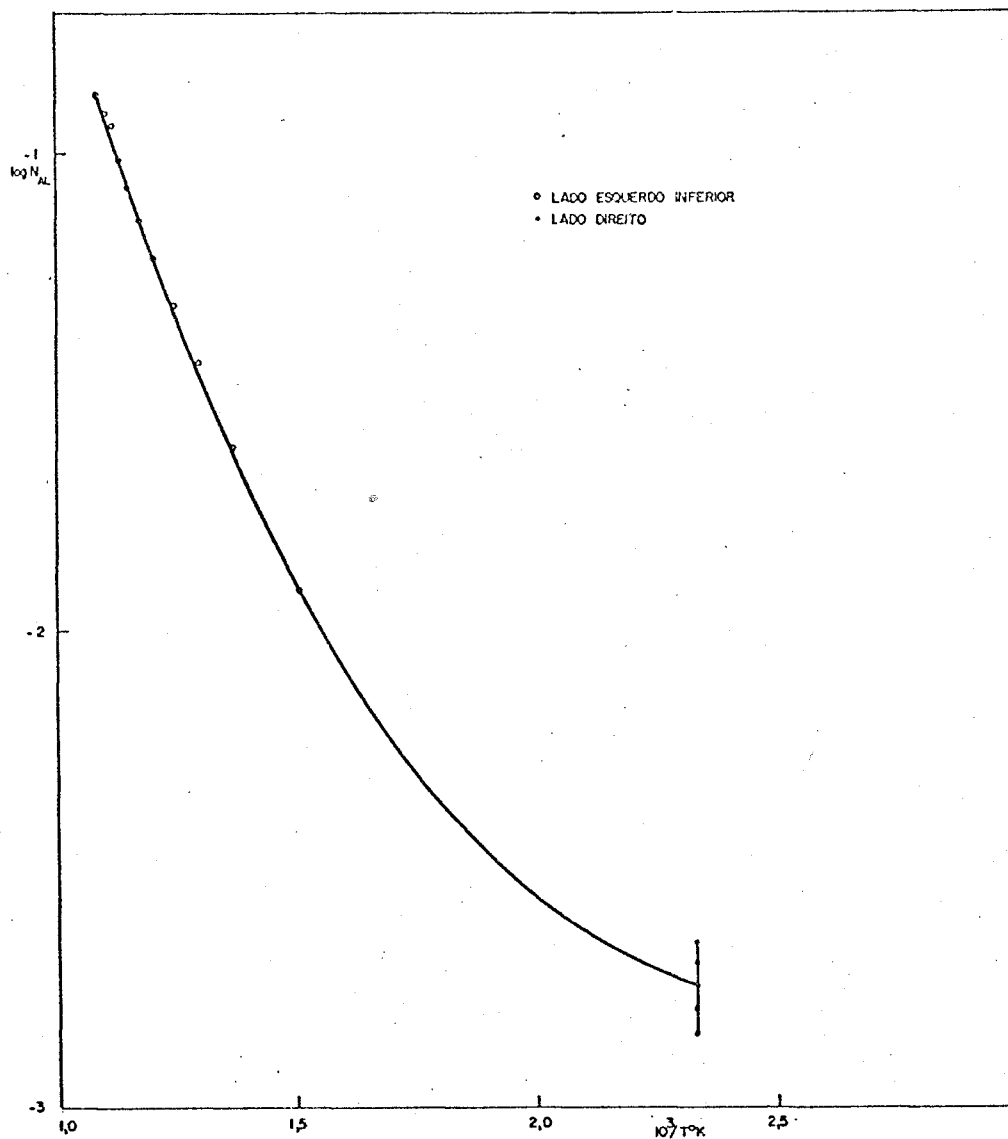


Fig. 15 - Logaritmo da fração molar de alumínio em função do inverso da temperatura, para o ramo esquerdo inferior e o ramo direito da linha liquidus, no sistema Al-In.

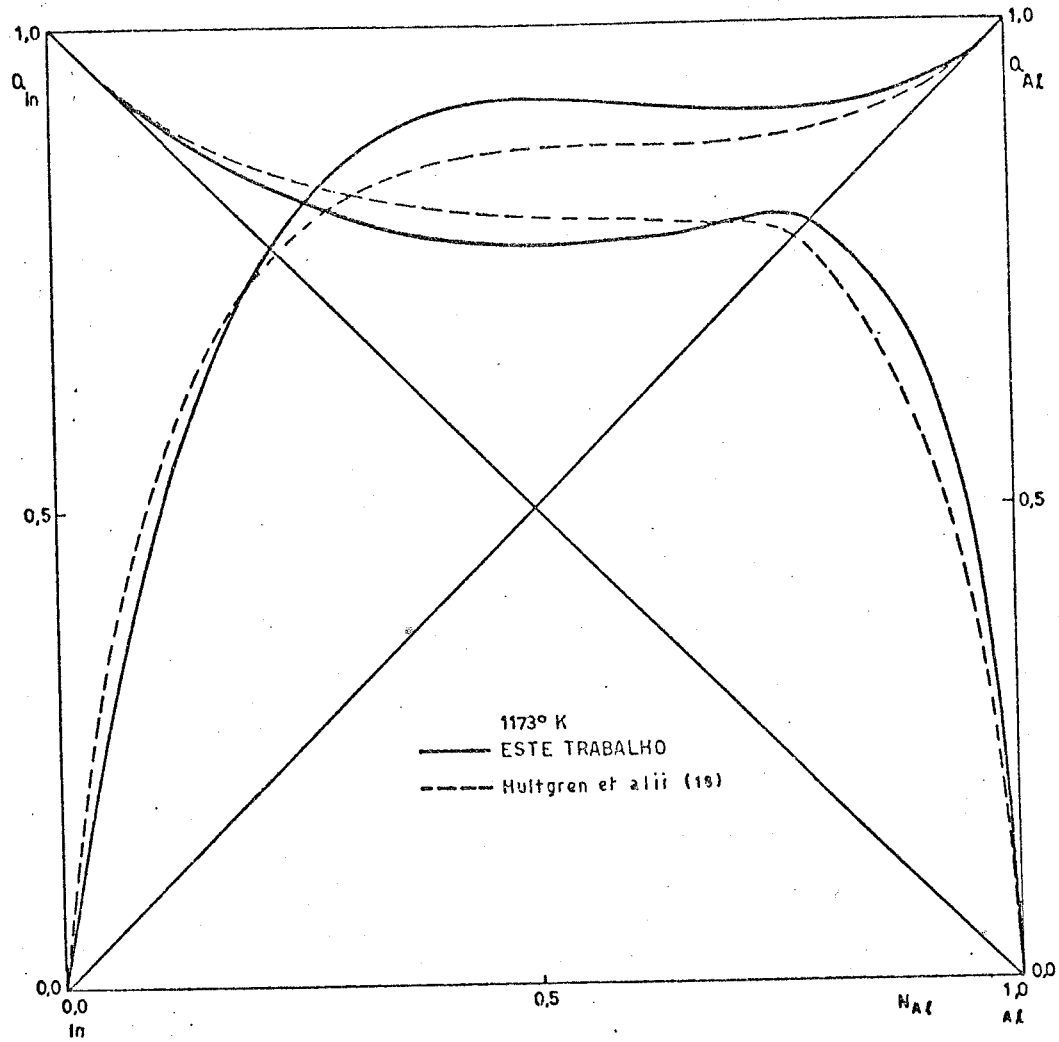


Fig. 16 - Atividades de alumínio e índio em função da fração molar de alumínio, para o sistema Al-In.

res, e os calculados neste trabalho a partir dos dados de CAMPBELL & WAGEMANN<sup>(21)</sup>, apresentam uma notável coincidência.

## 6. SISTEMA Zn-Bi

A solubilidade sólida do bismuto no zinco é extremamente baixa e a do zinco no bismuto é controvertida. MATHEWSON & SCOTT<sup>(26)</sup> (apud HANSEN & ANDERKO<sup>(11)</sup>) determinaram, através de observação microscópica de liga cuidadosamente resfriada, um valor de percentagem atômica de zinco inferior a 0,6%, o qual permite que a solubilidade sólida do zinco no bismuto seja desprezada no presente trabalho. Os dois metais apresentam imiscibilidade líquida numa faixa de temperaturas, não muito ampla, inferior a 200°C. A Figura 17 mostra o diagrama de equilíbrio para o sistema, apresentado por HANSEN & ANDERKO<sup>(11)</sup>. No diagrama foram colocados os pontos experimentais, sobre a LLRIL, disponíveis na literatura para aplicação do algoritmo criado. Os cálculos foram realizados com os dados dos seguintes autores :

i) KLEPPA<sup>(15)</sup>, cujos resultados foram obtidos através de medidas de força eletromotriz e apresentados tabelados. A tabela não contém, entretanto, pontos isotérmicos sobre os dois ramos da LLRIL. Foi feito um ajuste do ramo esquerdo da LLRIL através de curva do segundo grau, e determinados pontos sobre este ramo, nas temperaturas em que são apresentados pontos



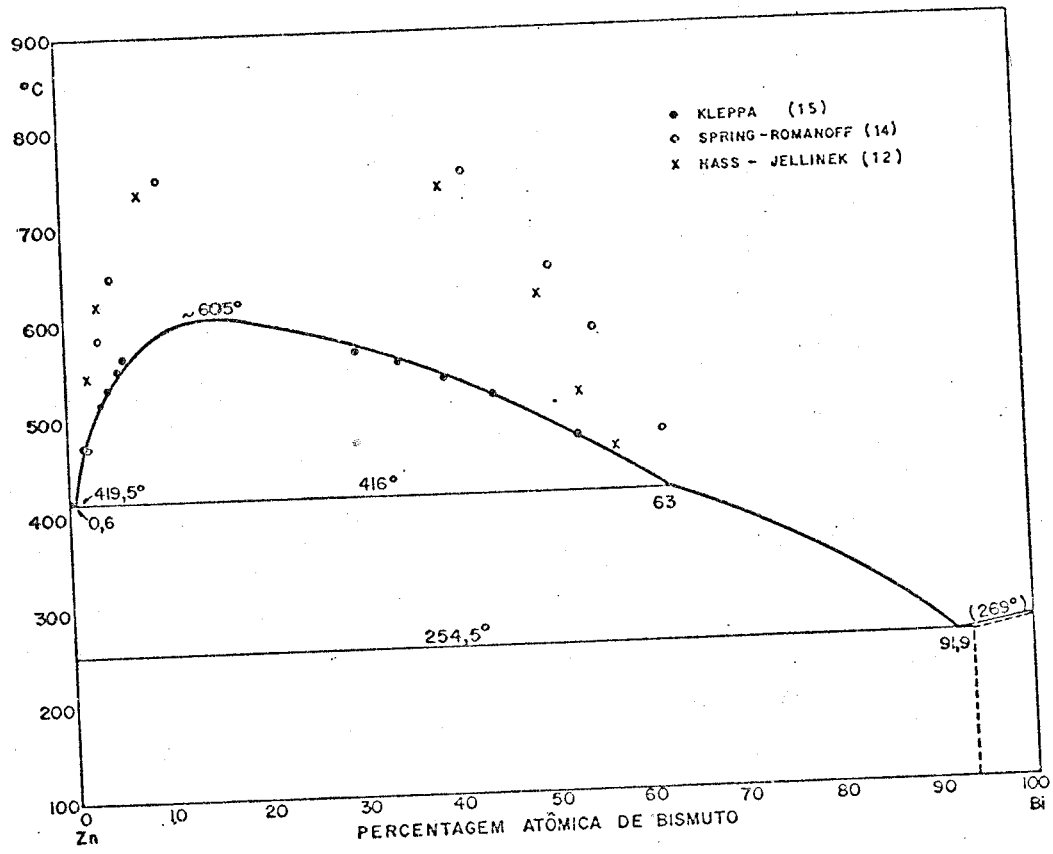


Fig. 17 - Diagrama de equilíbrio para o sistema Zn-Bi.

sobre o ramo direito. Os valores introduzidos no algoritmo, em cinco temperaturas diferentes, são mostrados no Apêndice XIV ;

ii) HASS & JELLINEK<sup>(12)</sup>, cujos resultados foram obtidos através de amostragem nas duas camadas líquidas. O Apêndice XV mostra os dados destes autores, que foram apresentados em tabela para quatro temperaturas diferentes ;

iii) SPRING & ROMANOFF<sup>(14)</sup>, cujos resultados foram obtidos através de amostragem nas duas camadas líquidas. O Apêndice XVI mostra os dados destes autores, que foram apresentados em tabela para quatro temperaturas diferentes.

Existe boa concordância entre os dados na LLRIL de KLEPPA<sup>(15)</sup> e os de SEITH et alii<sup>(27)</sup>. Estes últimos valores não foram introduzidos no algoritmo por não preencherem o requisito de disponibilidade de dados nos dois ramos da LLRIL. Os resultados de HASS & JELLINEK<sup>(12)</sup> e SPRING & ROMANOFF<sup>(14)</sup>, obtidos pelo método de amostragem nas duas camadas líquidas, afastam-se bastante dos anteriores, indicando uma temperatura crítica muito mais elevada. WARING et alii<sup>(10)</sup> mostraram que o procedimento por eles adotado é inadequado para o sistema Zn-Pb, tendo as medi-

das sido tomadas antes que o sistema atingisse o equi  
líbrio. Assim sendo, a validade de seus resultados  
para o sistema Zn-Bi, é também discutível.

Dados relativos ao ponto crítico para este sis  
tema são escassos na literatura. HANSEN & ANDERKO<sup>(11)</sup>  
apresentam uma temperatura crítica de aproximadamente  
605°C e HASS & JELLINEK<sup>(12)</sup> concluem pelo valor de 820°C.  
Assim sendo, é impossível comparar-se os valores pa  
ra este ponto calculados no presente trabalho, a par  
tir de dados de diferentes autores, com os da literatu  
ra.

As Figuras 18 e 19 mostram os valores de ental  
pia e entropia de mistura calculados neste trabalho a  
partir de dados de KLEPPA<sup>(15)</sup>, HASS & JELLINEK<sup>(12)</sup> e  
SPRING & ROMANOFF<sup>(14)</sup>, comparados com os de :

i) HULTGREN et alii<sup>(6)</sup>, que foram calculados  
baseados em medidas de força eletromotriz de KLEPPA<sup>(15)</sup>,  
sendo consistentes com o diagrama de equilíbrio. Os  
valores são apresentados tabelados ;

ii) HULTGREN et alii<sup>(18)</sup>, que foram seleciona  
dos entre resultados de vários autores e apresentados  
tabelados ;

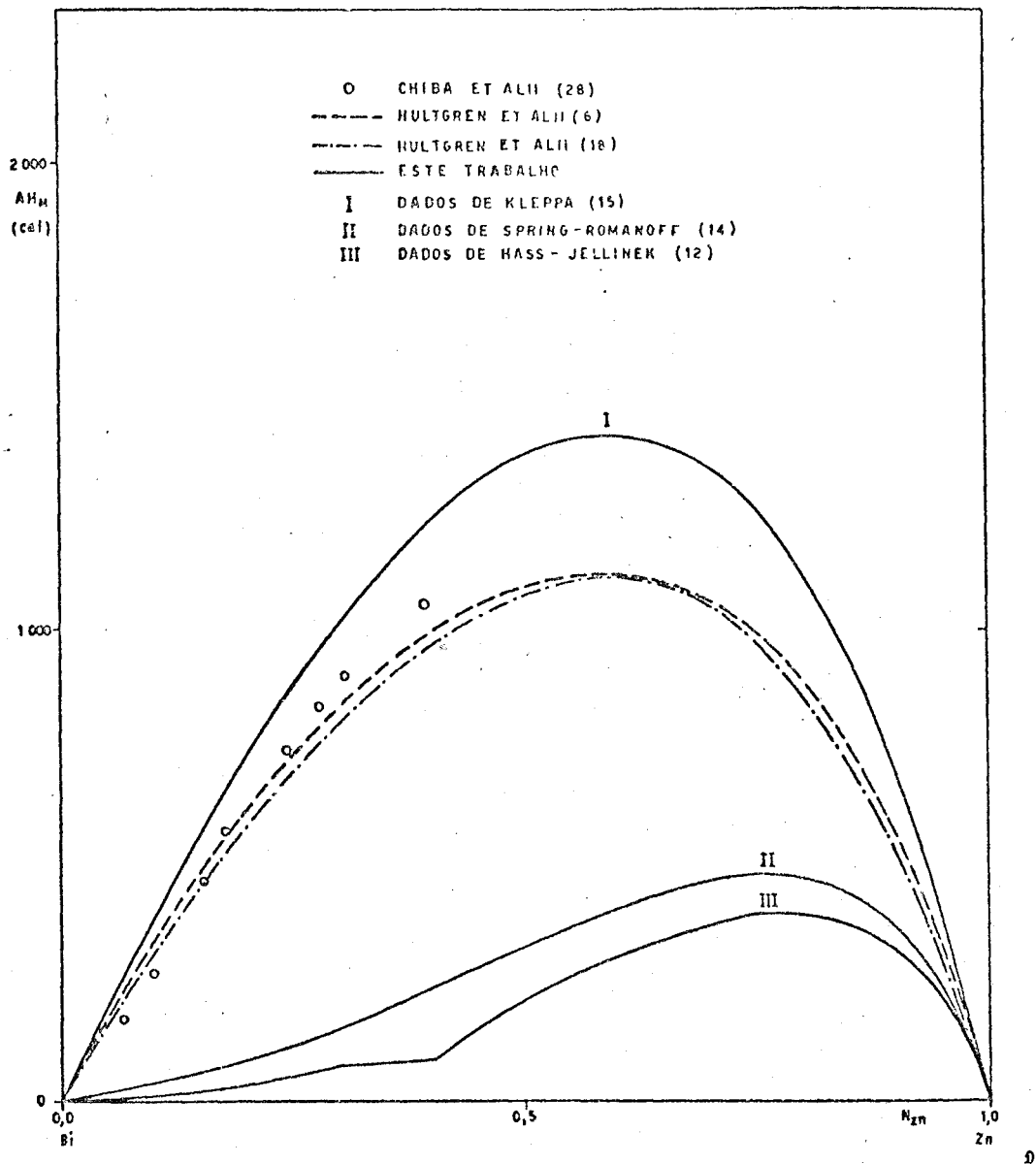


Fig. 18 - Entalpia de mistura em função da fração molar de zinco, para o sistema Zn-Bi.

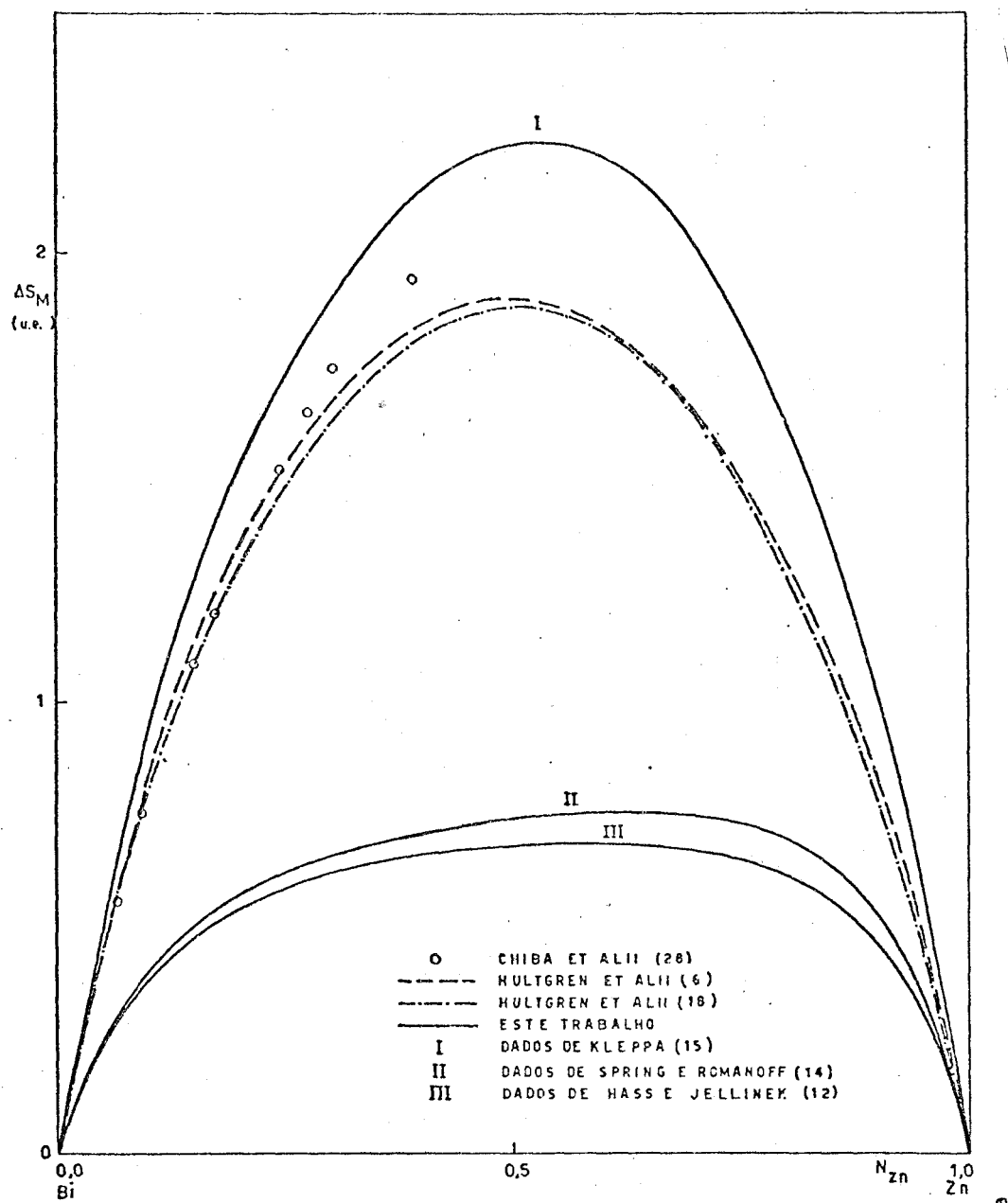


Fig. 19 - Entropia de mistura em função da fração molar de zinco, para o sistema Zn-Bi.

iii) CHIBA et alii<sup>(28)</sup>, que foram determinados através de medidas de força eletromotriz e apresentados tabelados.

As curvas de entalpia e entropia de mistura obtidas a partir dos dados, sobre a LLRIL, de HASS & JELLINEK<sup>(12)</sup> e SPRING & ROMANOFF<sup>(14)</sup>, são inteiramente inaceitáveis.

As Figuras 18 e 19 permitem concluir que os dados experimentais, sobre a LLRIL, de KLEPPA<sup>(15)</sup> são os mais exatos dentre os estudados.

As constantes da equação de Lumsden, pontos sobre as linhas que separam fases no diagrama de equilíbrio, pontos principais do diagrama, dados de atividades, coeficientes de atividade, entalpias e entropias parciais molares para os dois metais são apresentados nos Apêndices XVII, XVIII e XIX, calculados através da aplicação do algoritmo criado no presente trabalho, utilizando dados experimentais das quatro referências citadas no início deste item. Os pontos principais do diagrama, apresentados nestes apêndices sob o título "literatura", são os de HANSEN & ANDERKO<sup>(11)</sup>, sendo que a composição crítica foi lida

do diagrama de equilíbrio. Os dados termodinâmicos da "literatura" a  $873^{\circ}\text{K}$  são de HULTGREN et alii<sup>(6,18)</sup>.

As Tabelas VI e VII, apresentadas como ilustração, mostram uma comparação entre os pontos monotéticos e eutético calculados neste trabalho a partir dos dados de KLEPPA<sup>(15)</sup> e aqueles apresentados por HANSEN & ANDERKO<sup>(11)</sup>.

TABELA VI - Temperatura e composições monotéticas para o sistema zinco-bismuto.

A U T O R	$T^{\circ}\text{C}$	$N_{\text{Bi}}^{\text{E}}$	$N_{\text{Bi}}^{\text{D}}$
HANSEN & ANDERKO <sup>(11)</sup>	416	0,006	0,63
Este trabalho (dados de KLEPPA <sup>(15)</sup> )	414,3	0,0117	0,669

TABELA VII - Temperatura e composição eutéticas para o sistema zinco-bismuto.

A U T O R	$T^{\circ}\text{C}$	$N_{\text{Zn}}$
HANSEN & ANDERKO <sup>(11)</sup>	254,5	0,081
Este trabalho (dados de KLEPPA <sup>(15)</sup> )	257	0,0687

A Figura 20, mostrada a título de exemplificação, compara os resultados de atividades dos dois metais, deste trabalho, com os valores apresentados por HULTGREN et alii<sup>(6)</sup>, que são valores originados de compilação de dados de diversos autores. Estes valores e os calculados neste trabalho, a partir dos dados de KLEPPA<sup>(15)</sup>, apresentam uma notável coincidência.



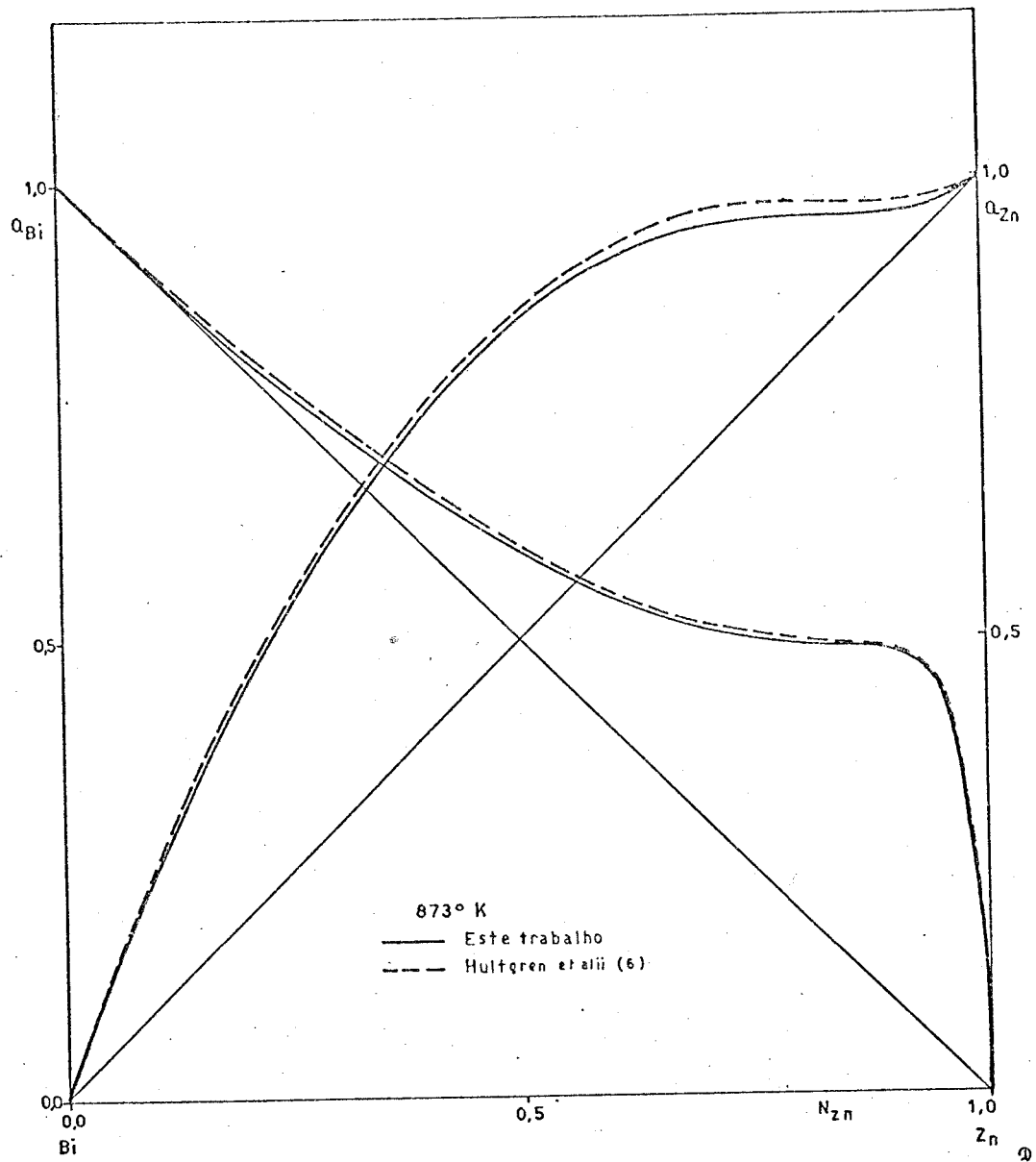


Fig. 20 - Atividades de zinco e bismuto em função da fração molar de zinco, para o sistema Zn-Bi.

## 7. SISTEMA Al-Bi

Alumínio e bismuto são praticamente imiscíveis no estado sólido e apresentam uma extensa região de imiscibilidade líquida. A Figura 21 mostra o diagrama de equilíbrio para o sistema, apresentado por HULTGREN et alii<sup>(18)</sup>. No diagrama foram colocados os pontos experimentais, sobre a LLRIL, disponíveis na literatura para aplicação do algoritmo criado. Os cálculos foram realizados com dados dos seguintes autores :

i) WITTIG & KEIL<sup>(25)</sup> (apud PREDEL & SANDIG<sup>(23)</sup>), cujos resultados foram obtidos através de medidas calorimétricas. Os dados destes autores foram apresentados em gráfico, do qual foram lidos pontos em três temperaturas diferentes, mostrados no Apêndice XX ;

ii) MARTIN-GARIN et alii<sup>(29)</sup> (apud PREDEL & SANDIG<sup>(23)</sup>), cujos resultados foram obtidos através de medidas calorimétricas. Os dados destes autores foram apresentados em gráfico, do qual foram lidos pontos em quatro temperaturas diferentes, mostrados no Apêndice XXI ;

iii) PREDEL & SANDIG<sup>(23)</sup>, cujos resultados foram obtidos através de análise térmica diferencial. Os dados destes autores foram apresentados em gráfico, do qual foram lidos pontos em três temperaturas diferentes,

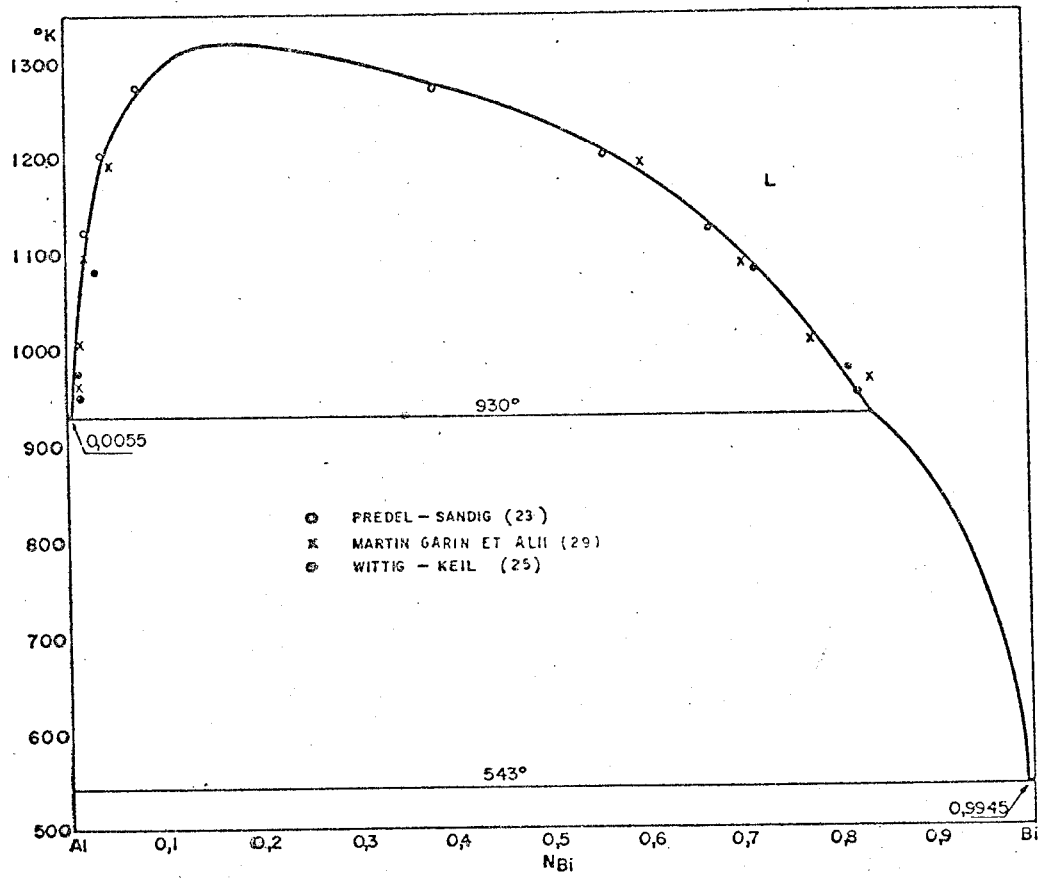


Fig. 21 - Diagrama de equilíbrio para o sistema Al-Bi.

mostrados no Apêndice XXII.

Os valores da temperatura crítica, calculados neste trabalho a partir de dados experimentais dos autores citados acima, são bastante semelhantes. A comparação destes valores com os da literatura não é critério válido de seleção entre os dados. A Tabela VIII apresenta os valores de composição e temperatura para o ponto crítico, calculados neste trabalho, e determinados por PREDEL & SANDIG<sup>(23)</sup>.

TABELA VIII - Temperatura e composição críticas para o sistema alumínio-bismuto.

A U T O R	T <sup>o</sup> C	N <sub>Bi</sub>
PREDEL & SANDIG <sup>(23)</sup>	1050	0,175
Este trabalho (dados de WITTIG & KEIL <sup>(25)</sup> )	1047,2	0,290
Este trabalho (dados de MARTIN-GARIN et alii <sup>(29)</sup> )	1067,4	0,214
Este trabalho (dados de PREDEL & SANDIG <sup>(23)</sup> )	1051,0	0,189

As Figuras 22 e 23 mostram os valores de entalpia e entropia de mistura calculados neste trabalho a partir dos dados na LLRIL de WITTIG & KEIL<sup>(25)</sup>, MARTIN-GARIN et alii<sup>(29)</sup> e PREDEL & SANDIG<sup>(23)</sup>, comparados com os de :

i) HULTGREN et alii<sup>(18)</sup>, que foram selecionados através de compilação de dados de diversos autores e apresentados tabelados ;

ii) PREDEL & SANDIG<sup>(23)</sup>, cujo método de medida não foi citado, e que são apresentados em gráficos.

Os dados experimentais sobre a LLRIL de PREDEL & SANDIG<sup>(23)</sup>, conduzem a valores exagerados para entalpia e entropia de mistura. Os pontos de MARTIN - GARIN et alii<sup>(29)</sup> conduzem a valores um pouco altos em relação aqueles com que foram comparados.

As Figuras 22 e 23 permitem concluir que os dados experimentais, sobre a LLRIL, de WITTIG & KEIL<sup>(25)</sup> são os mais exatos dentre os estudados.

As constantes da equação de Lumsden, pontos sobre as linhas que separam fases no diagrama de equilíbrio, pontos principais do diagrama, dados de atividades, coeficientes de atividade, entalpias e entro

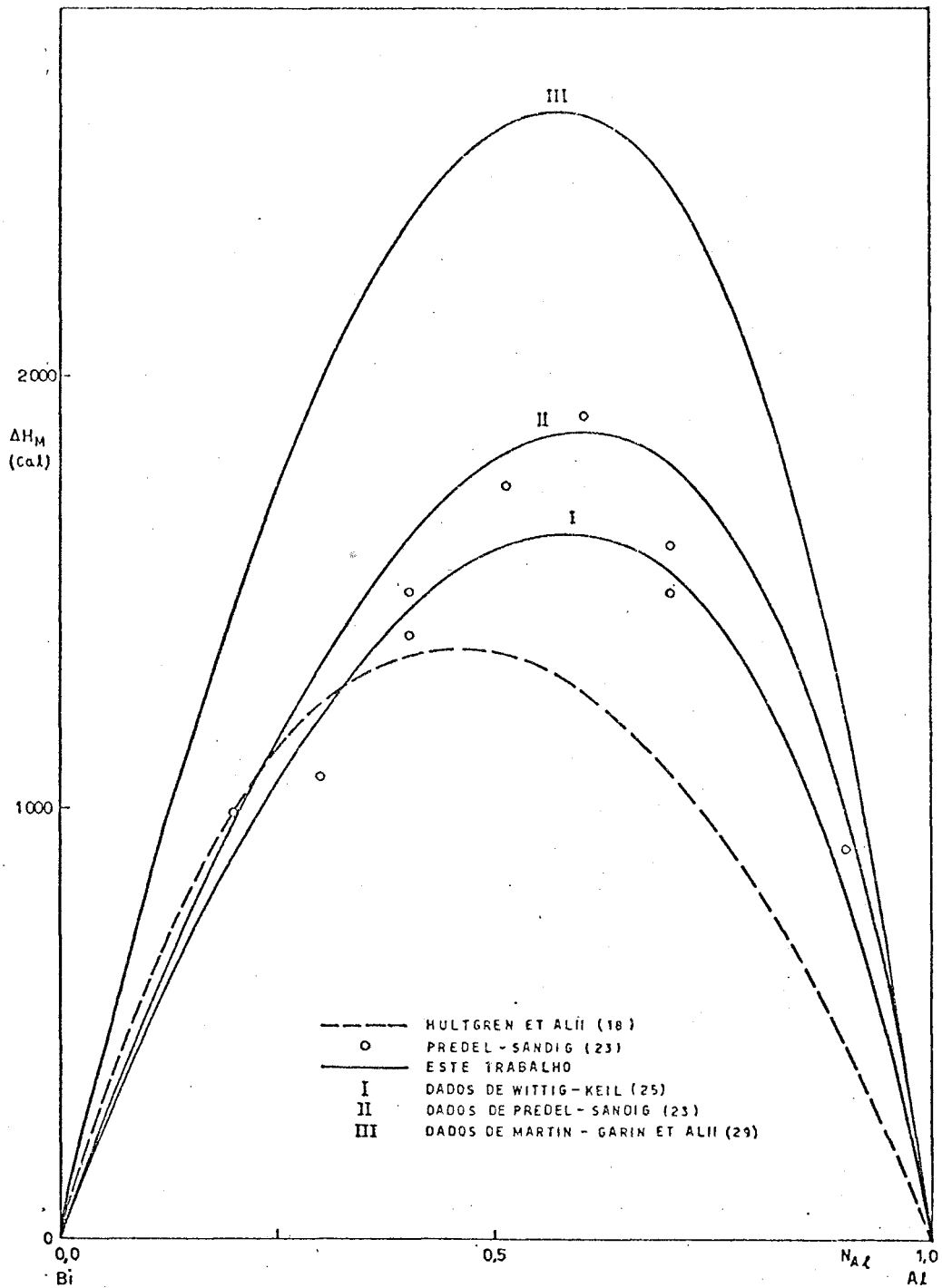


Fig. 22 - Entalpia de mistura em função da fração molar de alumínio, para o sistema Al-Bi.

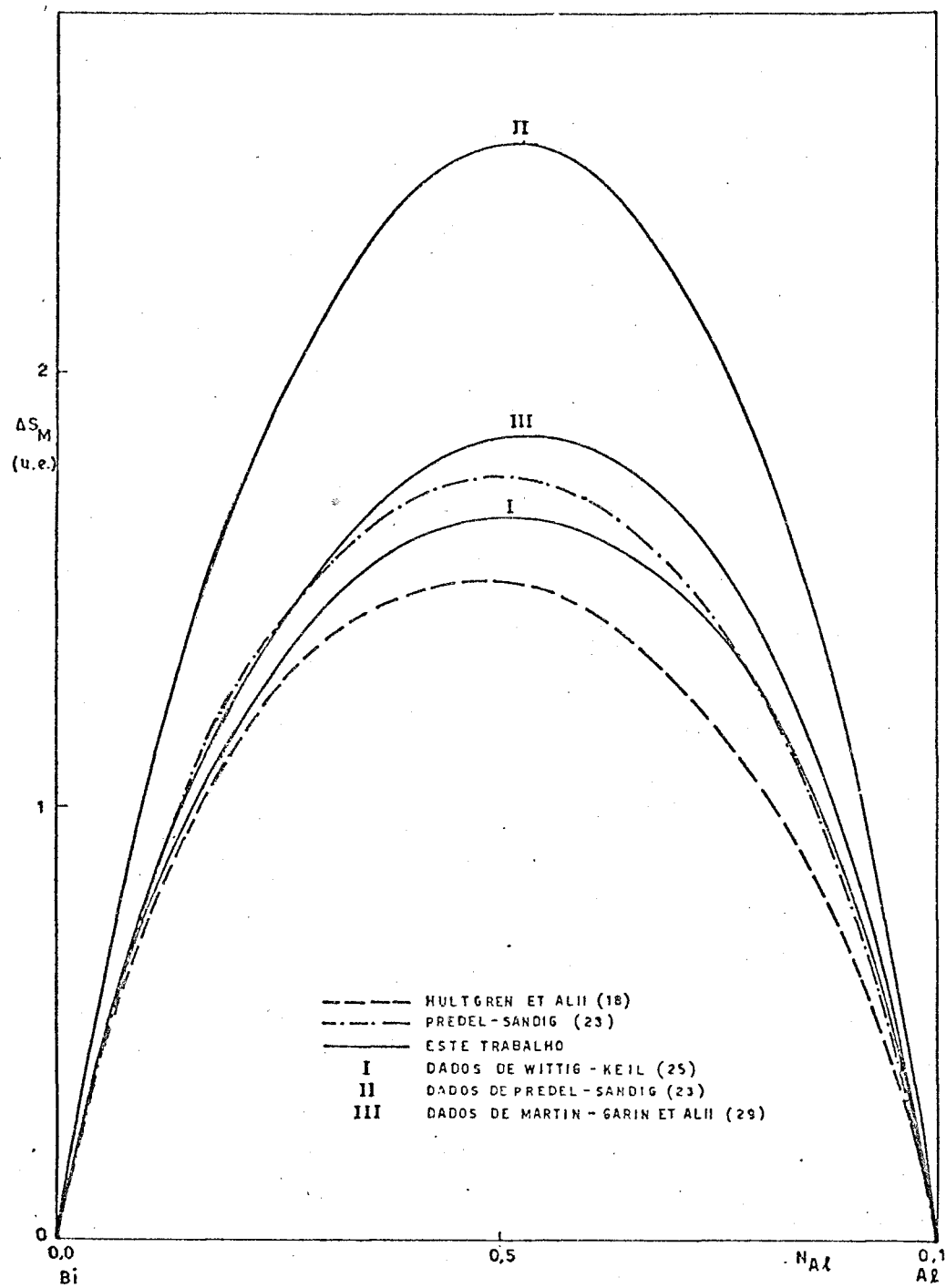


Fig. 23 - Entropia de mistura em função de fração molar de alumínio, para o sistema Al-Bi.

plas parciais molares para os dois metais são apresentados nos Apêndices XXIII, XXIV e XXV, calculados através da aplicação do algoritmo criado no presente trabalho, utilizando dados experimentais das quatro referências citadas no início deste item. Os pontos principais do diagrama, apresentados nestes apêndices sob o título "literatura", são os de PREDEL & SANDIG<sup>(23)</sup>. Os dados termodinâmicos da "literatura" a 1173<sup>o</sup>K são os de HULTGREN et alii<sup>(18)</sup>, que não apresentam valores no interior da região de imiscibilidade líquida. Como o funcionamento do algoritmo exige a leitura destes dados, nestas composições, foram alimentados, nesta faixa, números que não apresentam significado.

A Tabela IX, apresentada como ilustração, mostra uma comparação entre os pontos monotéticos calculados neste trabalho a partir dos dados de WITTIG & KEIL<sup>(25)</sup> e aqueles apresentados por PREDEL & SANDIG<sup>(23)</sup>.



TABELA IX - Temperatura e composições monotéticas para o sistema alumínio-bismuto.

A U T O R	T °C	N <sub>B<sub>i</sub></sub> <sup>E</sup>	N <sub>B<sub>i</sub></sub> <sup>D</sup>
PREDEL & SANDIG (23)	657	0,0055	0,84
Este trabalho (dados de WITTIG & KEIL (25))	653,6	0,0108	0,845

Analogamente ao ocorrido em relação ao sistema alumínio-índio, a declividade do ramo esquerdo inferior da linha liquidus nas proximidades do ponto eutético, para o sistema alumínio-bismuto, é acentuada. Assim sendo, o método de interseção dos ramos esquerdo e direito da linha liquidus, calculados a partir de dados sobre a LLRIL de WITTIG & KEIL (25), desenvolvido no algoritmo para determinação deste ponto, não é válido, pois exige uma extrapolação de um longo trecho da linha, conforme ilustrado na Figura 24. O ajuste do logaritmo da fração molar de alumínio contra o inverso da temperatura absoluta, apresentado na Figura 25, mostra que os três últimos pontos do ramo esquerdo inferior da linha liquidus estão aproximadamente sobre uma mesma reta, o que permite uma

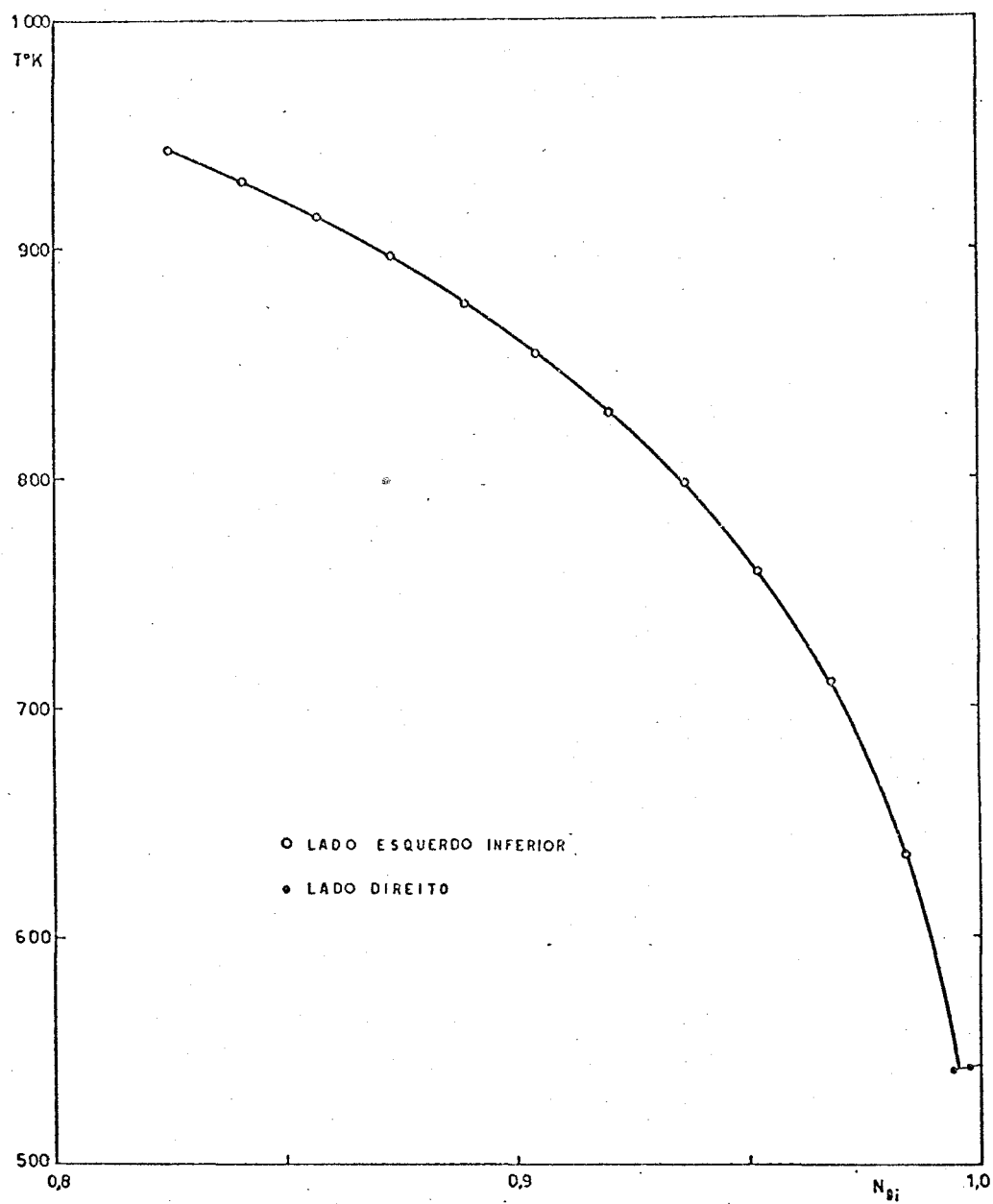


Fig. 24 - Detalhe do diagrama de equilíbrio Al-Bi, mostrando o ramo esquerdo inferior e o ramo direito da linha liquidus.

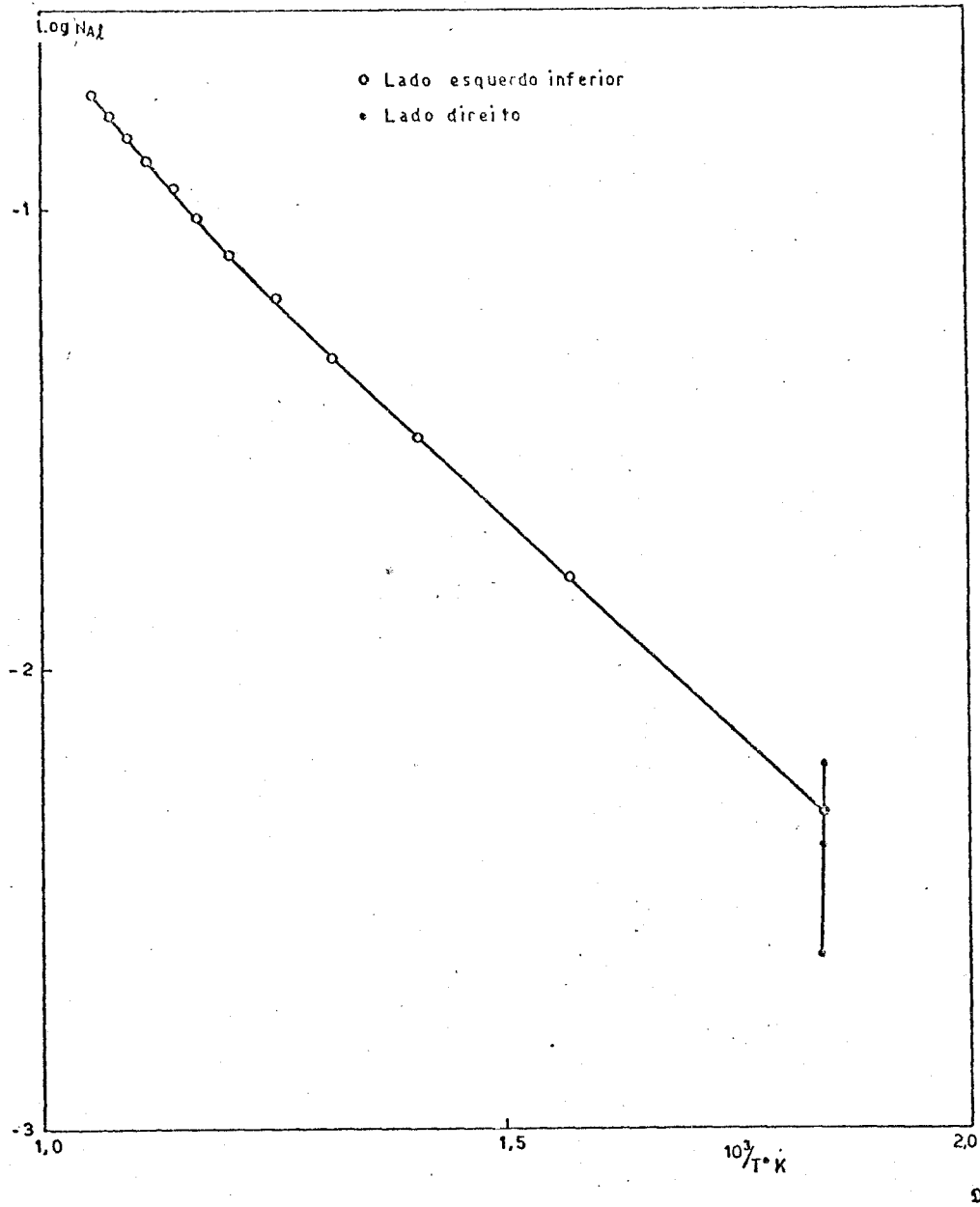


Fig. 25 - Logaritmo da fração molar de alumínio em função do inverso da temperatura, para o ramo esquerdo inferior e o ramo direito da linha liquidus, no sistema Al-Bi.

extrapolação precisa. Através do método dos mínimos quadrados foram determinadas equações lineares para este trecho do ramo esquerdo inferior e para o ramo direito da linha liquidus. A interseção destas duas retas fornece o ponto eutético. Os valores para a temperatura e composição eutéticas, assim calculados, são mostrados na Tabela X, comparados com os apresentados por PREDEL & SANDIG<sup>(23)</sup>.

TABELA X - Temperatura e composição eutéticas para o sistema alumínio-bismuto.

A U T O R	T <sup>o</sup> C	N <sub>Al</sub>
PREDEL & SANDIG <sup>(23)</sup>	270	0,0056
Este trabalho (dados de WITTIG & KEIL <sup>(25)</sup> )	270,1	0,0050

A Figura 26, mostrada a título de exemplificação, compara os resultados de atividades dos dois metais, deste trabalho, com os valores apresentados por HULTGREN et alii<sup>(18)</sup>, que são valores originados de compilação de dados de diversos autores. Estes

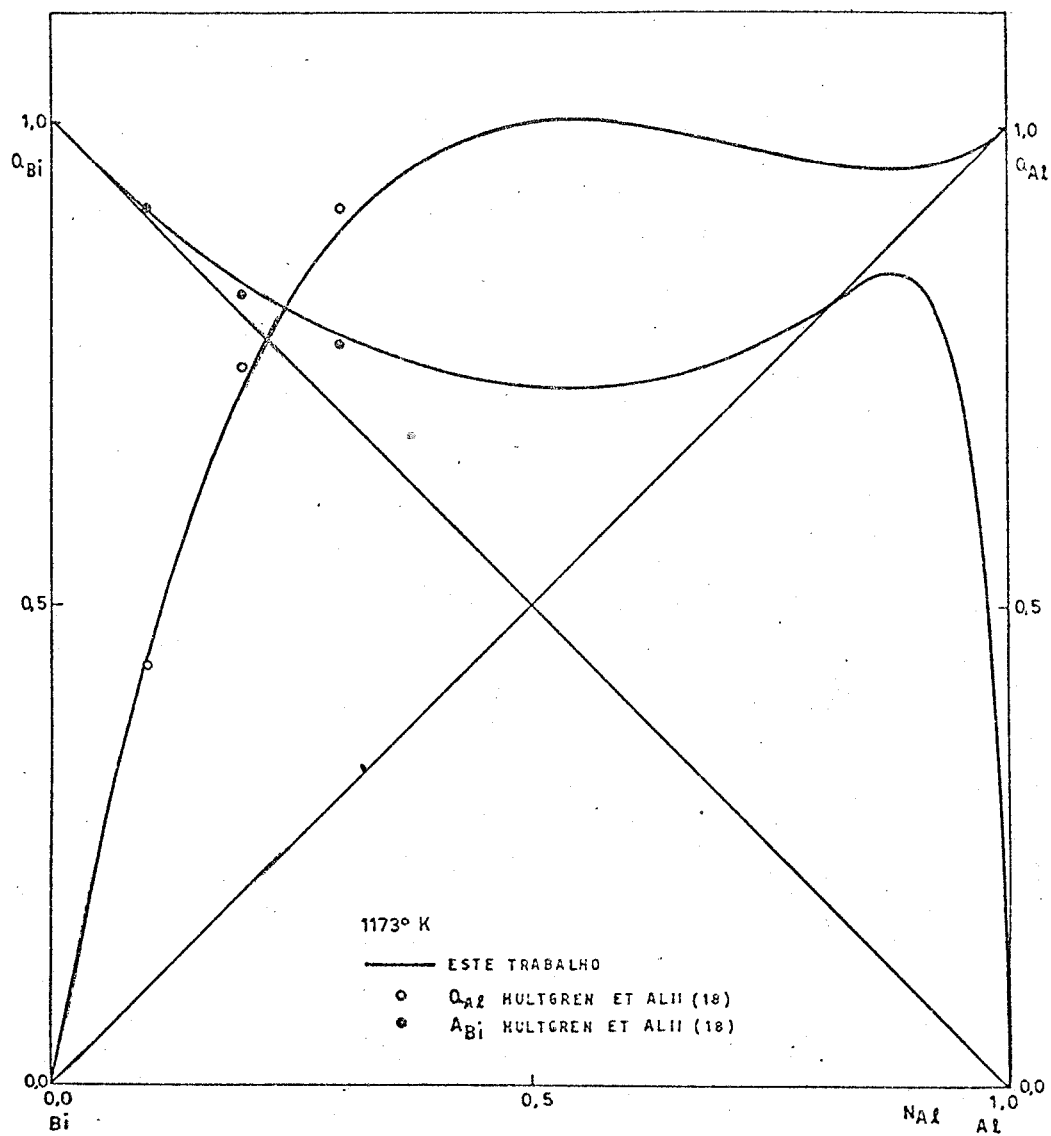


Fig. 26 - Atividades de alumínio e bismuto em função da fração molar de alumínio, para o sistema Al-Bi.

valores e os calculados neste trabalho, a partir dos dados de WITTIG & KEIL<sup>(25)</sup>, apresentam uma notável coincidência.

## 8. CONCLUSÕES

i) A presente investigação científica propiciou a criação de um algoritmo aplicável a sistemas binários metálicos com região de imiscibilidade líquida, que foi testado com sucesso para quatro sistemas .

ii) A escolha dos sistemas deveu-se exclusivamente à disponibilidade de dados experimentais de temperatura e composição sobre a linha limítrofe da região de imiscibilidade líquida, não tendo obedecido a nenhum critério de semelhança entre eles. O caráter aleatório do teste a que foi submetido o algoritmo é uma boa indicação da generalidade de sua aplicação.

iii) Conclusões sobre resultados obtidos para dados físico-químicos dos sistemas estudados estão incluídas nos itens relativos a cada um deles.

iv) O algoritmo permite que seja estabelecido um critério de seleção entre dados experimentais de vários autores.

v) O algoritmo tornou possível o cálculo preciso de dados físico-químicos, para os sistemas analisados, em regiões de difícil acesso ao trabalho experimental.

## BIBLIOGRAFIA

1. HILDEBRAND, J.H. Solubility. XII. Regular solutions. J. Amer. Chem. Soc., 51 : 66-80, 1929.
2. HARDY, H.K. A "Sub-Regular" solution model and its application to some binary alloy systems. Acta Metallurgica, 1 : 202-9, Mar., 1953.
3. TURKDOGAN, E.T. & DARKEN, L.S. Thermodynamics of binary metallic solutions. Part II. Trans. Met. Soc. AIME, 242 : 1997 - 2005, Sept., 1968.
4. KRUPKOWSKI, A. Die thermodynamischen Eigenschaften der flüssigen Zn-Pb - Lösungen im Lichte der Theorie und der experimentellen Ergebnisse. Freiberger Forsch., 67B : 101-16, 1962.
5. KOZUKA, Z. et alii. Thermodynamic study of liquid Zn-Pb alloys. Trans. JIM, 6 : 92-6, 1965.
6. HULTGREN, R. et alii. Selected values of thermodynamic properties of metals and alloys. New York, John Wiley & Sons, 1963. 963 p.
7. LUMSDEN, J. Thermodynamics of lead-zinc alloys. Disc. Faraday Soc., 4 : 60-8, 1948.
8. VAN VLACK, L.H. Elements of materials science. Reading, Massachusetts, Addison-Wesley, 1964. 445 p.
9. SUNDQUIST, B.E. The calculation of thermodynamic properties of miscibility-gap systems. Trans. Met. Soc. AIME, 236: 1111-22, Aug., 1966.
10. WARING, R.K. et alii. Equilibrium in the lead-zinc system with special reference to liquid solubility. Trans. Met. Soc. AIME, 111 : 254 - 63, 1934.



11. HANSEN, M. & ANDERKO, K. Constitution of binary alloys. New York, McGraw-Hill, 1958. 1305 p.
12. HASS, K. & JELLINEK, K. Über die gegenseitige Löslichkeit von Blei-bzw. Wismutschmelzen und geschmolzenem Zink. Z.Anorg.Chem., 212 : 356-61, 1933.
13. CAFASSO, F.A. et alii. Partition of solutes between liquid metals. II. The lead-zinc system. J.Phys.Chem., 68 : 1944-8, 1964.
14. SPRING, W. & ROMANOFF, L. Über die Löslichkeit von Blei und Wismut in Zink. Nachweis einer kritischen Temperatur. Z.Anorg.Chem., 13 : 29-35, 1896.
15. KLEPPA, O.J. A thermodynamic study of liquid metallic solutions.V. The systems zinc-bismuth and zinc-lead. J.Amer.Chem.Soc., 74 : 6052-56, 1952.
16. SEITH, W. & JOHNNEN, H. Über die Mischungslücke in der flüssigen Phase des Systems Blei-Zink-Silber. Z. Elektrochem, 56 : 140-3, 1952.
17. ROSENTHAL, F.D. et alii. Thermodynamic study of liquid Pb-Zn solutions. Trans. Met.Soc. AIME, 212 : 153-61, Apr., 1958.
18. HULTGREN, R. et alii. Supplement to selected values of thermodynamic properties of metals and alloys. Berkeley, Inorganic Materials Research Division, Lawrence Radiation Laboratory, University of California.
19. TODD, D.D. & OATES, W.A. The heats of mixing of molten lead-zinc alloys at 900°C. Trans. Met.Soc.AIME, 230:244-6, Feb., 1964.

20. TODD, D.D. et alii. A calorimetric study of the thermodynamic properties of lead-zinc alloys in the molten state. J. Inst. Metals, 93: 302-8, 1964.
21. CAMPBELL, A.N. & WAGEMANN, R. The system: aluminium-indium, silver. Part I. The binary and ternary miscibility gaps. Canad. J. Chem., 44: 657-60, 1966.
22. CAMPBELL, A.N. et alii. The system aluminum-indium-tin. J. Amer. Chem. Soc., 74 : 1962-6, 1952.
23. PREDEL, B. & SANDIG, H. Thermodynamische Untersuchungen der Systeme Aluminium - Wismut, Aluminium - Indium und Kupfer - Thallium. Mat. Sci. Eng., 4 : 49-57, 1969.
24. YAZAWA, A. & LEE, Y.K. Thermodynamic study of molten aluminum-indium alloy. J. Japan Inst. Metals, 33: 318-23, 1969.
25. WITTIG, F.E. & KEIL, C., op. cit. PREDEL & SANDIG<sup>(23)</sup>
26. MATHEWSON, C.H. & SCOTT, W.M., op. cit. HANSEN & ANDERKO<sup>(11)</sup> ©
27. SEITH, W. et alii. Zur Kenntnis von Mischungslücken im flüssigen Zustand bei metallischen Zwei- und Dreistoffsystem. Z. Metallkunde, 46: 773-9, 1955.
28. CHIBA, Y. et alii. Thermodynamic study of the liquid bismuth-zinc and bismuth-cadmium systems. Tohoku Daigaku Senko Seiren Kenkyusho Iho, 21 : 15-22, 1965
29. MARTIN-GARIN, R. et alii, op. cit. PREDEL & SANDIG<sup>(23)</sup>

APÊNDICE I

PROGRAMA PRINCIPAL E DEZ SUBROTINAS QUE CONSTITUEM O  
ALGORITMO

```

C *****
C
C MODELAGEM MATEMATICA DE SISTEMAS BINARIOS METALICOS COM REGIAO
C DE IMISCIBILIDADE LIQUIDA
C
C *****
C
C PROGRAMADO POR ANTONIO EDUARDO CLARK PERES
C
C *****
C
C O METAL 1 LOCALIZA-SE NO LADO ESQUERDO DO DIAGRAMA
C DEFINE-SE COMO LADO DIREITO AQUELE EM QUE SE LOCALIZA O EUTETICO
C MG = REGIAO DE IMISCIBILIDADE LIQUIDA ( MISCIBILITY GAP )
C
C *****
C
C INDICE DAS VARIAVEIS DE ENTRADA
C
C KSYS = NUMERO DE SISTEMAS ESTUDADOS
C KAUT = NUMERO DE AUTORES PARA CADA SISTEMA
C TITUL = ARRANJO CONTENDO O NOME DOS DOIS METAIS
C AUTOR = ARRANJO CONTENDO O NOME DOS AUTORES CONSULTADOS
C R = CONSTANTE DOS GASES PERFEITOS
C Z = NUMERO DE COORDENACAO PARA O SISTEMA
C RAI01 = DIAMETRO ATOMICO DE GOLDSCHMIDT PARA CN 12 PARA O METAL 1
C RAI02 = DIAMETRO ATOMICO DE GOLDSCHMIDT PARA CN 12 PARA O METAL 2
C NOTA - VER DARKEN AND GURRY PAG 50
C PM1 = MASSA MOLECULAR DO METAL 1
C PM2 = MASSA MOLECULAR DO METAL 2
C MM = INTEIRO COM O SEGUINTE SIGNIFICADO

```

C MM-MAIOR QUE ZERO-COMPOSICAO DOS PONTOS EXPERIMENTAIS EM FRACAO MOLAR  
C MM-MENOR QUE ZERO-COMPOSICAO DOS PONTOS EXPERIMENTAIS EM PCT PONDERAL  
C TFLAG = TEMPERATURA EM QUE SE INICIA A DETERMINACAO DE PONTOS NO MG  
C N = NUMERO DE PONTOS EXPERIMENTAIS NO MG  
C QUE SAO CARACTERISTICOS PARA CADA PAR DE METAIS  
C TC = TEMPERATURA CENTIGRADA DOS PONTOS EXPERIMENTAIS NO MG  
C X1E = COMPOSICAO EXPERIMENTAL NO LADO ESQUERDO DO MG  
C X1D = COMPOSICAO EXPERIMENTAL NO LADO DIREITO DO MG  
C TML, TEL E TCL = TEMPERATURAS MONOTETICA, EUTETICA E CRITICA NA LITERAT.  
C X1CL E X1EL = FRACOES MOLARES CRITICA E EUTETICA DO METAL 1 NA LITER.  
C X1MEL E X1MDL = FRACOES MOLARES MONOTETICAS NOS LADOS ESQUERDO E  
C DIREITO DO MG PARA O METAL 1 NA LITERATURA  
C DHF1 E DHF2 = CALOR DE FUSAO DOS METAIS 1 E 2 EM CAL/MOL  
C NUMTT = NUMERO DE TEMPERATURAS EM QUE EXISTEM DADOS TERMODINAMICOS  
C NA LITERATURA  
C TT = TEMPERATURAS EM QUE EXISTEM DADOS TERMODINAMICOS NA LITERATURA  
C A1L E A2L = ATIVIDADES DOS METAIS 1 E 2 NA LITERATURA  
C G1L E G2L = COEFICIENTES DE ATIVIDADE DOS METAIS 1 E 2 NA LITERATURA  
C DH1L E DH2L = ENTALPIAS PARCIAIS MOLARES DOS METAIS 1 E 2 NA LITERAT.  
C DS1L E DS2L = ENTROPIAS PARCIAIS MOLARES DOS METAIS 1 E 2 NA LITERAT.  
C  
C\*\*\*\*\*  
C  
C INDICE DAS VARIAVEIS DE SAIDA  
C  
C DESIGNACAO DO SISTEMA E AUTOR ESTUDADO  
C EPSIL, SIGMA, FI E ZETA = PARAMETROS DA EQUACAO DE LUMSDEN  
C PONTOS NA LINHA LIQUIDUS E NO MG  
C PONTOS PRINCIPAIS DO DIAGRAMA  
C CRITICO, MONOTETICOS E EUTETICO , CALCULADOS E COMPARADOS C/LITERATURA  
C DADOS DE ATIVIDADES, COEFICIENTES DE ATIVIDADE, ENTALPIAS E ENTROPIAS

C PARCIAIS MOLARES CALCULADOS E COMPARADOS C/LITERATURA

C

C\*\*\*\*\*

C

```
DOUBLE PRECISION X1,W1,W2,W3,A,G,PXINT,GRAD,AG1,AG2,PA,XA,QXINT
DIMENSION TITUL(4),AUTOR(5),X2EMG(80),X2DMG(80),X2LLS(15),X1LL(15)
DIMENSION X2LLI(15),A1L(9),G1L(9),A2L(9),G2L(9),DH1L(9),DS1L(9)
DIMENSION DH2L(9),DS2L(9),A1D(9),A2D(9),G1D(9),G2D(9),DH1D(9)
DIMENSION DS1D(9),DH2D(9),DS2D(9)
COMMON X1,W1,W2,W3,A,G,PXINT,GRAD,AG1,AG2,PA,XA,QXINT,TFLAG
COMMON R,Z,RAIO1,RAIO2,PM1,PM2,EPSIL,SIGMA,FI,ZETA,MM,TML,TEL,VMT
COMMON TCT,X1CT,TMT,X1MET,X1MDT,TET,X1ET,TFCL,DHF1,TF2,DHF2,R1,R2
COMMON TCMG(80),X1EMG(80),X1DMG(80),TCLLS(15),X1LLS(15),TCLLI(15)
COMMON X1LLI(15),TCLL(15),X2LL(15),GAMA1(9),GAMA2(9),A1T(9),A2T(9)
COMMON Z1(9),DH1(9),DH2(9),DS1(9),DS2(9)
COMMON A1MG(80),A2MG(80),A1LLS(15),A2LLS(15),A1LLI(15),A2LLI(15)
COMMON A1LL(15),A2LL(15)
```

READ(1,301)KKSIS,R

301 FORMAT(I3,F7.3)

KKSIS=0

3333 READ(1,302)Z,RAIO1,RAIO2,PM1,PM2

302 FORMAT(5F10.1)

KKSIS=KKSIS+1

READ(1,303)TITUL

303 FORMAT(4A4)

KKAUT=0

READ(1,304)KAUT

304 FORMAT(I3)

2222 KKAUT=KKAUT+1

READ(1,305)AUTOR

305 FORMAT(5A4)

```

READ(1,306)MM,TFLAG
306 FORMAT(I3,F10.1)
CALL CONST
WRITE(3,11)(TITUL(K),K=1,2),(TITUL(K),K=3,4)
11 FORMAT(1H1,55X,'SISTEMA ',2A4,' - ',2A4)
WRITE(3,12)(TITUL(J),J=1,2),(TITUL(J),J=3,4)
12 FORMAT(//56X,'METAL 1 = ',2A4,///56X,'METAL 2 = ',2A4)
WRITE(3,13)(AUTOR(I),I=1,5)
13 FORMAT(//37X,'PONTOS EXPERIMENTAIS NO MG CONSIDERADOS DE ',5A4)
WRITE(3,14)EPSIL,SIGMA,FI,ZETA
14 FORMAT(/////5X,'CONSTANTES DA EQUACAO DE LUMSDEN EPSIL =',F9.2,/,
140X,'SIGMA =',F9.2/40X,'FI =',F9.2,/40X,'ZETA =',F9.2)
CALL MIGAP (KOUNT)
WRITE(3,15)
15 FORMAT(/////5X,'PONTOS NO MISCIBILITY GAP', 9X,'TC',12X,'N1E',12
1X,'N2E',12X,'N1D',12X,'N2D',13X,'A1',13X,'A2')
DO 60 KDO=1,KOUNT
X2EMG(KDO)=1.-X1EMG(KDO)
60 X2DMG(KDO)=1.-X1DMG(KDO)
WRITE(3,16)(TCMG(KDO),X1EMG(KDO),X2EMG(KDO),X1DMG(KDO),X2DMG(KDO),
1A1MG(KDO),A2MG(KDO),KDO=1,KOUNT)
16 FORMAT(34X,F9.1,6F15.4)
READ(1,307)TML,TEL,DHF1,TFC1,DHF2,TFC2
307 FORMAT(6F10.1)
CALL LIQUID(J,L,M)
WRITE(3,17)
17 FORMAT(/////5X,'PONTOS NA LINHA LIQUIDUS',/////10X,'LADO ESQUERDO
1SUPERIOR',8X,'TC',12X,'N1',13X,'N2',13X,'A1',13X,'A2')
DO 61 JDO=1,J
61 X2LLS(JDO)=1.-X1LLS(JDO)
WRITE(3,18)(TCLLS(JDO),X1LLS(JDO),X2LLS(JDO),A1LLS(JDO),A2LLS(JDO)

```

```

1, JDD=1, J)
18 FORMAT(35X, F9.2, 5X, E11.4, 4X, E11.4, 4X, E11.4, 4X, E11.4)
   WRITE(3, 19)
19 FORMAT(///10X, 'LADO ESQUERDO INFERIOR', 8X, 'TC', 12X, 'N1', 13X, 'N2', 1
13X, 'A1', 13X, 'A2')
   DO 62 LDD=1, L
62 X2LLI(LDD)=1.-X1LLI(LDD)
   WRITE(3, 18) (TCLLI(LDD), X1LLI(LDD), X2LLI(LDD), A1LLI(LDD), A2LLI(LDD)
1, LDD=1, L)
   WRITE(3, 20)
20 FORMAT(///10X, 'LADO DIREITO', 18X, 'TC', 12X, 'N1', 13X, 'N2', 13X, 'A1', 1
13X, 'A2')
   DO 63 MDD=1, M
63 X1LL(MDD)=1.-X2LL(MDD)
   WRITE(3, 18) (TCLL(MDD), X1LL(MDD), X2LL(MDD), A1LL(MDD), A2LL(MDD), MDD=
11, M)
   CALL INTSC (J, L, M, X1LL)
   READ(1, 308) TCL, X1CL, X1MEL, X1MDL, X1EL
308 FORMAT(5F10.1)
   X2CT=1.-X1CT
   X2CL=1.-X1CL
   X2MET=1.-X1MET
   X2MEL=1.-X1MEL
   X2MDT=1.-X1MDT
   X2MDL=1.-X1MDL
   X2ET=1.-X1ET
   X2EL=1.-X1EL
   TCD=(TCT-TCL)/TCL*100.
   VMD=(VMT-TML)/TML*100.
   TMD=(TMT-TML)/TML*100.
   TED=(TET-TEL)/TEL*100.

```



```

X1CD=(X1CT-X1CL)/X1CL*100.
X1MED=(X1MET-X1MEL)/X1MEL*100.
X1MDD=(X1MDT-X1MDL)/X1MDL*100.
X1ED=(X1ET-X1EL)/X1EL*100.
X2CD=(X2CT-X2CL)/X2CL*100.
X2MED=(X2MET-X2MEL)/X2MEL*100.
X2MDD=(X2MDT-X2MDL)/X2MDL*100.
X2ED=(X2ET-X2EL)/X2EL*100.
WRITE(3,21)
21 FORMAT(/////5X,'PONTOS PRINCIPAIS DO DIAGRAMA',//41X,'ESTE TRABALH
10',23X,'LITERATURA',19X,'DIFERENCA PERCENTUAL')
WRITE(3,22)TCT,X1CT,X2CT,TCL,X1CL,X2CL,TCD,X1CD,X2CD,TMT,X1MET,X2M
1ET,TML,X1MEL,X2MEL,TMD,X1MED,X2MED,VMT,X1MDT,X2MDT,TML,X1MDL,X2MDL
2,VMD,X1MDD,X2MDD,TET,X1ET,X2ET,TEL,X1EL,X2EL,TED,X1ED,X2ED
22 FORMAT(35X,'TC',9X,'N1',11X,'N2',10X,'TC',9X,'N1',11X,'N2',10X,'TC
1',7X,'N1',7X,'N2'/10X,'PONTO CRITICO',6X,2(F10.1,3X,E10.3,3X,E10.3
2),3F9.2/10X,'MONOTETICO ESQUERDO',2(F10.1,3X,E10.3,3X,E10.3),3F9.2
3/10X,'MONOTETICO DIREITO',1X,2(F10.1,3X,E10.3,3X,E10.3),3F9.2,/10X
4,'EUTETICO',11X,2(F10.1,3X,E10.3,3X,E10.3),3F9.2)
WRITE(3,23)
23 FORMAT(/////5X,'TERMODINAMICA')
READ(1,309)NUMTT
309 FORMAT(I3)
NUMT=0
1111 NUMT=NUMT+1
CALL TERMO (TT)
READ(1,310)(A1L(N),G1L(N),A2L(N),G2L(N),DH1L(N),DS1L(N),DH2L(N),DS
12L(N),N=1,9)
310 FORMAT(8F10.1)
DO 64 N=1,9
A1D(N)=(A1T(N)-A1L(N))/A1L(N)*100.

```

```

A2D(N)=(A2T(N)-A2L(N))/A2L(N)*100.
G1D(N)=(GAMA1(N)-G1L(N))/G1L(N)*100.
G2D(N)=(GAMA2(N)-G2L(N))/G2L(N)*100.
DH1D(N)=(DH1(N)-DH1L(N))/DH1L(N)*100.
DS1D(N)=(DS1(N)-DS1L(N))/DS1L(N)*100.
DH2D(N)=(DH2(N)-DH2L(N))/DH2L(N)*100.
64 DS2D(N)=(DS2(N)-DS2L(N))/DS2L(N)*100.
WRITE(3,24)TT
24 FORMAT(10X,'TEMPERATURA =',F7.1,'GRAUS KELVIN',///10X,'ATIVIDADES
1E COEFICIENTES DE ATIVIDADE DO METAL 1',/17X,'ESTE TRABALHO',18X,'
2LITERATURA',16X,'DIFERENCA PERCENTUAL'/12X,'N1',8X,'A1',6X,'GAMA1'
3,7X,'N1',8X,'A1',6X,'GAMA1',7X,'N1',8X,'A1',6X,'GAMA1')
WRITE(3,25)(Z1(N),A1T(N),GAMA1(N),Z1(N),A1L(N),G1L(N),Z1(N),A1D(N)
1,G1D(N),N=1,9)
25 FORMAT(5X,7F10.3,F9.2,F11.2)
WRITE(3,26)
26 FORMAT(//10X,'ATIVIDADES E COEFICIENTES DE ATIVIDADE DO METAL 2 ',
1/17X,'ESTE TRABALHO',18X,'LITERATURA',16X,'DIFERENCA PERCENTUAL',/
212X,'N1',8X,'A2',6X,'GAMA2',7X,'N1',8X,'A2',6X,'GAMA2',7X,'N1',7X,
3'A2',7X,'GAMA2')
WRITE(3,25)(Z1(N),A2T(N),GAMA2(N),Z1(N),A2L(N),G2L(N),Z1(N),A2D(N)
1,G2D(N),N=1,9)
WRITE(3,27)
27 FORMAT(//10X,'ENTALPIAS E ENTROPIAS PARCIAIS MOLARES DO METAL 1',/
117X,'ESTE TRABALHO',18X,'LITERATURA',16X,'DIFERENCA PERCENTUAL',/1
22X,'N1',8X,'DH1',7X,'DS1',7X,'N1',8X,'DH1',7X,'DS1',7X,'N1',6X,'DH
31',7X,'DS1')
WRITE(3,28)(Z1(N),DH1(N),DS1(N),Z1(N),DH1L(N),DS1L(N),Z1(N),DH1D(N)
1),DS1D(N),N=1,9)
28 FORMAT(6X,F9.3,F11.0,F10.3,F9.3,F11.0,F10.3,F9.3,F9.2,F10.2)
WRITE(3,29)

```

```

29 FORMAT(/,10X,'ENTALPIAS E ENTROPIAS PARCIAIS MOLARES DO METAL 2',/
117X,'ESTE TRABALHO',18X,'LITERATURA',16X,'DIFERENCA PERCENTUAL',/1
22X,'N1',8X,'DH2',7X,'DS2',7X,'N1',8X,'DH2',7X,'DS2',7X,'N1',6X,'DH
32',7X,'DS2')
WRITE(3,28)(Z1(N),DH2(N),DS2(N),Z1(N),DH2L(N),DS2L(N),Z1(N),DH2D(N
1),DS2D(N),N=1,9)
IF(NUMT.LT.NUMTT) GO TO 1111
IF(KKAUT.LT.KAUT) GO TO 2222
IF(KKSIS.LT.KSIS) GO TO 3333
CALL EXIT
END
SUBROUTINE CONST
C
C  ESTA SUBROTINA CALCULA AS CONSTANTES DA EQUACAO DE LUMSDEN
C
DOUBLE PRECISION X1,W1,W2,W3,A,G,PXINT,GRAD,AG1,AG2,PA,XA,QXINT
COMMON X1,W1,W2,W3,A,G,PXINT,GRAD,AG1,AG2,PA,XA,QXINT,TFLAG
COMMON R,Z,RAIO1,RAIO2,PM1,PM2,EPSIL,SIGMA,FI,ZETA,MM,TML,TEL,VMT
COMMON TCT,X1CT,TMT,X1MET,X1MDT,TET,X1ET,TFC1,DHF1,TFC2,DHF2,R1,R2
COMMON TCMG(80),X1EMG(80),X1DMG(80),TCLLS(15),X1LLS(15),TCLLI(15)
COMMON X1LLI(15),TCLL(15),X2LL(15),GAMA1(9),GAMA2(9),A1T(9),A2T(9)
COMMON Z1(9),DH1(9),DH2(9),DS1(9),DS2(9)
COMMON A1MG(80),A2MG(80),A1LLS(15),A2LLS(15),A1LLI(15),A2LLI(15)
COMMON A1LL(15),A2LL(15)
DIMENSION TS(20),CS1(20),CS2(20)
KOUNT=0
READ(1,51)N
FORMAT(I4)
R1=RAIO1/RAIO2
R2=RAIO2/RAIO1
55 READ(1,52)TC,X1E,X1D

```

```
52 FORMAT(F8.2,2F10.7)
   KOUNT=KOUNT+1
   TK=TC+273.16
   IF(MM)53,54,54
53 X1E=(X1E/PM1)/((X1E/PM1)+((100.-X1E)/PM2))
   X1D=(X1D/PM1)/((X1D/PM1)+((100.-X1D)/PM2))
54 X2E=1.-X1E
   X2D=1.-X1D
   X1EQ=X1E**2
   X1DQ=X1D**2
   X2EQ=X2E**2
   X2DQ=X2D**2
   X2EC=X2E**3
   X2DC=X2D**3
   X1EC=X1E**3
   X1DC=X1D**3
   R12=R1**2
   R125=R1**2.5
   R120=R1**((20./3.))
   R18=R1**((8./3.))
   R14=R1**4
   R15=R1**5
   R22=R2**2
   R225=R2**2.5
   R220=R2**((20./3.))
   R28=R2**((8./3.))
   R24=R2**4
   R25=R2**5
   R2Z=R**2*Z
   XKE1=(X2EQ*R1)/(R*(R12*X1E+X2E)**2)
   XKE2=(X2EQ*R125)/(R*(R15*X1E+X2E)**2)
```

```

XKE3=- (2.*R14*X1E*X2EC-R120*X1EQ*X2EQ)/(R2Z*(R18*X1E+X2E)**4)
XKE4=ALOG(X1E)
XKD1=(X2DQ*R1)/(R*(R12*X1D+X2D)**2)
XKD2=(X2DQ*R125)/(R*(R15*X1D+X2D)**2)
XKD3=- (2.*R14*X1D*X2DC-R120*X1DQ*X2DQ)/(R2Z*(R18*X1D+X2D)**4)
XKD4=ALOG(X1D)
HE1=(X1EQ*R2)/(R*(R22*X2E+X1E)**2)
HE2=(X1EQ*R225)/(R*(R25*X2E+X1E)**2)
HE3=- (2.*R24*X2E*X1EC-R220*X2EQ*X1EQ)/(R2Z*(R28*X2E+X1E)**4)
HE4=ALOG(X2E)
HD1=(X1DQ*R2)/(R*(R22*X2D+X1D)**2)
HD2=(X1DQ*R225)/(R*(R25*X2D+X1D)**2)
HD3=- (2.*R24*X2D*X1DC-R220*X2DQ*X1DQ)/(R2Z*(R28*X2D+X1D)**4)
HD4=ALOG(X2D)
A1=HD1-HE1
A2=HD2-HE2
A3=HD3-HE3
A4=HD4-HE4
B1=XKE1-XKD1
B2=XKE2-XKD2
B3=XKE3-XKD3
B4=XKE4-XKD4
C1=- (A2*B3/B2-A3)
C2=A1-A2*B1/B2
C3=- (A2*B4/B2-A4)
X=(-C2+SQRT(C2**2-4.*C1*C3))/(2.*C1)
Y=- (B1*X+B3*X**2+B4)/B2

```

C  
C AS VARIÁVEIS X E Y GUARDAM COM AS CONSTANTES DA EQUACAO DE LUMSDEN AS  
C SEGUINTE RELACOES -  
C X = EPSIL/T-SIGMA

C Y = ZETA/T-FI  
 C O METODO DOS MINIMOS QUADRADOS PERMITE UM AJUSTE LINEAR DE X E Y  
 C VERSUS 1/T QUE FORNECE AS CONSTANTES DESEJADAS  
 C

```

TS(KOUNT)=TK
CS1(KOUNT)=X
CS2(KOUNT)=Y
IF(KOUNT-N)55,56,56
56 D1=0.
   D2=0.
   D3=0.
   D4=0.
DO 57 K=1,N
D1=D1+CS1(K)/TS(K)
D2=D2+1./TS(K)
D3=D3+1./TS(K)**2)
57 D4=D4+CS1(K)
   S=N
   SIGMA=(D1*D2-D3*D4)/(S*D3-D2**2)
   EPSIL=(S*D1-D4*D2)/(S*D3-D2**2)
   E1=0
   E2=0
   E3=0
   E4=0
DO 58 J=1,N
E1=E1+CS2(J)/TS(J)
E2=E2+1./TS(J)
E3=E3+1./TS(J)**2)
58 E4=E4+CS2(J)
   FI=(E1*E2-E3*E4)/(S*E3-E2**2)
   ZETA=(S*E1-E4*E2)/(S*E3-E2**2)

```

```
RETURN
END
SUBROUTINE MIGAP(KOUNT)
```

```
C
C ESTA SUBROTINA CALCULA PONTOS SOBRE A LINHA DO MG E DETERMINA
C O PONTO CRITICO
C
```

```
DOUBLE PRECISION X1,W1,W2,W3,A,G,PXINT,GRAD,AG1,AG2,PA,XA,QXINT
DOUBLE PRECISION XLIM,X1MAX,X1MIN,TC,TINC,T,AMIN,X3,A1,A2,XINC
DOUBLE PRECISION AMAX,A1MAX,A2MIN,A1MIN,XINT
COMMON X1,W1,W2,W3,A,G,PXINT,GRAD,AG1,AG2,PA,XA,QXINT,TFLAG
COMMON R,Z,RAIO1,RAIO2,PM1,PM2,EPSIL,SIGMA,FI,ZETA,MM,TML,TEL,VMT
COMMON TCT,X1CT,TMT,X1MET,X1MDT,TET,X1ET,TFC1,DHF1,TFC2,DHF2,R1,R2
COMMON TCMG(80),X1EMG(80),X1DMG(80),TCLLS(15),X1LLS(15),TCLLI(15)
COMMON X1LLI(15),TCLL(15),X2LL(15),GAMA1(9),GAMA2(9),A1T(9),A2T(9)
COMMON Z1(9),DH1(9),DH2(9),DS1(9),DS2(9)
COMMON AIMG(80),A2MG(80),A1LLS(15),A2LLS(15),A1LLI(15),A2LLI(15)
COMMON A1LL(15),A2LL(15)
R1=RAIO1/RAIO2
R2=RAIO2/RAIO1
XLIM=0.
X1MAX=0.
X1MIN=1.
KOUNT=0
LFLAG=10
TINC=10.
TC=TFLAG
12 TC=TC+TINC
T=TC+273.16
X3=X1
```

```

C   CONSTANTES DA EQUACAO DE LUMSDEN
C
      ESIG=EPSIL/T-SIGMA
      W1=1./((1.987*T)*(EPSIL-SIGMA*T)
      W2=1./((1.987*T)*(ZETA-FI*T)
      W3=1./((1.987*1.987*Z)*ESIG*ESIG
C
C   PONTO MINIMO NA CURVA PARA O METAL I
C   (O PONTO MAXIMO DO MISCIBILITY GAP E TAMBEM ESCOLHIDO AQUI.
C   A LOGICA USADA E A DETERMINACAO DA TEMPERATURA EM QUE A LIMHA DE
C   ATIVIDADE VERSUS FRACAO MOLAR NAO TEM OUTRO MINIMO ALEM DO PARA N=0)
C
      AMIN=1.
      XI=1.
      XINC=0.01
10  XI=XI-XINC
      IF(XI.LT.X1MAX)GO TO 100
      CALL METAL1
      IF(A-AMIN)11,13,13
11  AMIN=A
      GO TO 10
13  IF(DABS(XINC).LE.0.0001)GO TO 14
      AMIN=A
      XINC=-XINC/10.
      GO TO 10
100 IF(TINC.LT.0.1)GO TO 101
      LFLAG=-10
      TC=TC-TINC
      TINC=TINC/10.
      GO TO 12
14  X1MIN=XI

```



```
C      ALMIN=A
C      IF(LFLAG.LT.0)GO TO 12
C      PONTO MAXIMO DA CURVA DO METAL 1
      AMAX=0.
      X1=X1MAX
      XINC=0.01
18     X1=X1+XINC
      CALL METAL1
      IF(A-AMAX)19,19,17
17     AMAX=A
      GO TO 18
19     IF(DABS(XINC).LE.0.0001)GO TO 20
      AMAX=A
      XINC=-XINC/10.
      GO TO 18
20     X1MAX=X1
      ALMAX=A
C      PONTO FINAL DE ITERACAO NO LADO DO METAL 1
C      IF(AMAX.LT.1.)GO TO 22
C      COMPOSICAO DA ATIVIDADE UNITARIA NA CURVA DO METAL 1
      X1=X1IM
      XINC=0.01
21     X1=X1+XINC
      CALL METAL1
      IF(A.LT.1.0)GO TO 21
```

```
IF(XINC.LE.0.0001)GO TO 22
X1=X1-XINC
XINC=XINC/10.
GO TO 21
```

```
22 XLIM=X1
IF(XLIM.LT.0.95)GO TO 23
XLIM=X1MAX
```

```
C
C PONTO MINIMO NA CURVA DO METAL2
C
```

```
23 X1=X1MAX
CALL METAL2
A2MIN=A
```

```
C
C PONTO MAXIMO NA CURVA DO METAL 2
C
```

```
X1=X1MIN
CALL METAL2
A2MAX=A
```

```
C
C MENOR DOS DOIS MINIMOS
C
```

```
IF(A1MIN-A2MIN)50,50,51
50 AMIN=A2MIN
GO TO 52
```

```
51 AMIN=A1MIN
```

```
C
C PONTO INICIAL DA ITERACAO NO LADO DO METAL 1
C
```

```
52 XINC=0.01
X1=0.
```

```
15 X1=X1+XINC
   CALL METAL1
   IF(A.LT.AMIN)GO TO 15
   IF(XINC.LE.0.001)GO TO 16
   X1=X1-XINC
   XINC=XINC/10.
   GO TO 15
16 XINT=X1-XINC

C
C  O PROGRAMA COMECA A PROCURAR O PONTO NA LINHA DE IMISCIBILIDADE
C
XINC=(XLIM-XINT)/10.
PXINT=XINT
755 PXINT=PXINT+XINC
   CALL GRAD1
   IF(GRAD.GT.0.)GO TO 755
   IF(0ABS(GRAD).LE.0.001)GO TO 666
   PXINT=PXINT-XINC
   XINC=XINC/10.
   GO TO 755
666 KOUNT=KOUNT+1
   TCMG(KOUNT)=TC
   XIEMG(KOUNT)=QXINT
   X1DMG(KOUNT)=PXINT
   A1MG(KOUNT)=(PA+XA)/2.
   A2MG(KOUNT)=(AG1+AG2)/2.
   GO TO 12
101 X1=X3
   CALL METAL1
   AI=A
   CALL METAL2
```

```

A2=A
TCT=TC
XICT=X3
RETURN
END
SUBROUTINE METAL1
C
C  ESTA SUBROTINA DETERMINA, BASEADA NA EQUACAO DE LUMSDEN, A ATIVIDADE DO
C  METAL 1 DADAS A TEMPERATURA E COMPOSICAO DA LIGA
C
DOUBLE PRECISION X1,W1,W2,W3,A,G,PXINT,GRAD,AG1,AG2,PA,XA,QXINT
DOUBLE PRECISION XQ,RQ,XRQ,YRQ,ZRQ,X2,D1,D2,D3
COMMON X1,W1,W2,W3,A,G,PXINT,GRAD,AG1,AG2,PA,XA,QXINT,TFLAG
COMMON R,Z,RAI01,RAI02,PM1,PM2,EPSIL,SIGMA,FI,ZETA,MM,TML,TEL,VMT
COMMON TCT,XICT,TMT,XIMET,XIMDT,TFT,XIET,TFC1,DHF1,TFC2,DHF2,R1,R2
COMMON TCMG(80),XIEMG(80),XIOMG(80),TCLLS(15),XILLS(15),TCLLI(15)
COMMON XILLI(15),TCLL(15),X2LL(15),GAMA1(9),GAMA2(9),AIT(9),A2T(9)
COMMON ZI(9),DHI(9),DH2(9),DSI(9),DS2(9)
COMMON AIMG(80),A2MG(80),AILLS(15),A2LLS(15),AILLI(15),A2LLI(15)
COMMON AILL(15),A2LL(15)
X2=1.-X1
XQ=X2*X2
RQ=R1*R1
XRQ=RQ*X1+X2
YRQ=RQ*RQ*R1*X1+X2
ZRQ=R1**2*(8./3.)*X1+X2
D1=XQ*R1/(XRQ*XRQ)
D2=XQ*R1**2.5/(YRQ*YRQ)
D3=(2.*RQ*RQ*X1*XQ*X2-R1**2*(20./3.)*X1*X1*XQ)/(ZRQ*ZRQ*ZRQ*ZRQ)
G=DEXP(W1*D1+W2*D2-W3*D3)
A=G*X1

```

```

RETURN
END
SUBROUTINE METAL2
C
C  ESTA SUBROTINA DETERMINA, BASEADA NA EQUACAO DE LUMSDEN, A ATIVIDADE DO
C  METAL 2 DADAS A TEMPERATURA E COMPOSICAO DA LIGA
C
DOUBLE PRECISION X1,W1,W2,W3,A,G,PXINT,GRAD,AG1,AG2,PA,XA,QXINT
DOUBLE PRECISION XQ1,RQ1,XRQ1,YRQ1,ZRQ1,X2,D1,D2,D3
COMMON R,Z,RAIO1,RAIO2,PM1,PM2,EPSIL,SIGMA,FI,ZETA,MM,TML,TEL,VMT
COMMON TCT,XICT,TMT,XIMET,XIMDT,TET,XIET,TFC1,DHF1,TFC2,DHF2,R1,R2
COMMON TCMG(80),XIEMG(80),XIDMG(80),TCLLS(15),XILLS(15),TCLLI(15)
COMMON XLLI(15),TCLL(15),X2LL(15),GAMA1(9),GAMA2(9),A1T(9),A2T(9)
COMMON Z1(9),DH1(9),DH2(9),DS1(9),DS2(9)
COMMON ALMG(80),A2MG(80),A1LLS(15),A2LLS(15),A1LLI(15),A2LLI(15)
COMMON A1LL(15),A2LL(15)
X2=1.-X1
XQ1=X1*X1
RQ1=R2*R2
XRQ1=RQ1*X2+X1
YRQ1=RQ1*RQ1*R2*X2+X1
ZRQ1=R2*(8./3.)*X2+X1
D1=XQ1*R2/(XRQ1*XRQ1)
D2=XQ1*R2**2.5/(YRQ1*YRQ1)
D3=(2.*RQ1*RQ1*X2*XQ1*X1-R2*(20./3.)*X2*X2*XQ1)/(ZRQ1*ZRQ1*Z
IFQ1)
G=DEXP(W1*D1+W2*D2-W3*D3)
A=G*X2
RETURN
END

```

SUBROUTINE GRADT

C  
 C ESTA SUBROTINA DETERMINA O GRADIENTE FORMADO PELOS PONTOS NA LINHA  
 C DO METAL 2 QUANDO SE TRACA UMA SECAO TRANSVERSAL NA LINHA DO METAL 1  
 C

```

DOUBLE PRECISION X1,W1,W2,W3,A,G,PXINT,GRAD,AG1,AG2,PA,XA,QXINT
DOUBLE PRECISION YINC
COMMON X1,W1,W2,W3,A,G,PXINT,GRAD,AG1,AG2,PA,XA,QXINT,TFLAG
COMMON R,Z,RAIO1,RAIO2,PM1,PM2,EPSIL,SIGMA,FI,ZETA,MM,TML,TEL,VMT
COMMON TCT,X1CT,TMT,X1MET,X1MDT,TET,X1ET,TFC1,DHF1,TFC2,DHF2,R1,R2
COMMON TCMG(80),XIEMG(80),XIDMG(80),TCLLS(15),X1LLS(15),TCLLI(15)
COMMON X1LLI(15),TCLL(15),X2LL(15),GAMA1(9),GAMA2(9),A1T(9),A2T(9)
COMMON Z1(9),DH1(9),DH2(9),DS1(9),DS2(9)
COMMON A1MG(80),A2MG(80),A1LLS(15),A2LLS(15),A1LLI(15),A2LLI(15)
COMMON A1LL(15),A2LL(15)
X1=PXINT
CALL METAL1
PA=A
X1=1.
YINC=0.01
61 X1=X1-YINC
CALL METAL1
XA=A
IF(A-(PA+0.000000000001))65,63,61
65 IF(A-(PA-0.000000000001))62,63,63
62 X1=X1+YINC
YINC=YINC/10.
GO TO 61
63 QXINT=X1
CALL METAL2
AG2=A
  
```

```

X1=PXINT
CALL METAL2
AG1=A
GRAD=(AG2-AG1)/(OXINT-PXINT)
RETURN
END
SUBROUTINE LIQUID(J,L,M)
C
C ESTA SUBROTINA DETERMINA UM ARRANJO DE PONTOS SOBRE A LINHA LIQUIDUS
C
DOUBLE PRECISION X1,W1,W2,W3,A,G,PXINT,GRAD,AG1,AG2,PA,XA,QXINT
COMMON X1,W1,W2,W3,A,G,PXINT,GRAD,AG1,AG2,PA,XA,QXINT,TFLAG
COMMON R,Z,RAIO1,RAIO2,PM1,PM2,EPSIL,SIGMA,FI,ZETA,MM,TML,TEL,VMT
COMMON TCT,XICT,TMT,XIMEI,XIMDI,TET,XIET,TFC1,DHF1,TFC2,DHF2,R1,R2
COMMON TCMG(80),XIEMG(80),XIDMG(80),TCLLS(15),XILLS(15),TCLLI(15)
COMMON XLLI(15),TCLL(15),X2LL(15),GAMA1(9),GAMA2(9),AIT(9),A2T(9)
COMMON Z1(9),DH1(9),DH2(9),DS1(9),DS2(9)
COMMON AIMG(80),A2MG(80),AILLS(15),A2LLS(15),AILLI(15),A2LLI(15)
COMMON AILL(15),A2LL(15)
R1=RAIO1/RAIO2
R2=RAIO2/RAIO1
ACR=0.01
XN2=0.
21 XN2=XN2+ACR
CALL DLL (DHF1,TFC1,XN2,TLC,V1,AA1,AA2)
IF(TLC.GT.TML) GO TO 21
XN2=XN2-ACR
ACR=ACR*.1
IF(ACR.GT.0.001) GO TO 21
XIMI=XN2
ACR=XIMI*.1

```

```

XN2=0.
J=0
22 XN2=XN2+ACR
   IF(XN2.GT.(XLIMI+ACR)) GO TO 23
   J=J+1
   CALL DLL (DHF1,TFC1,XN2,TCLLS(J),X1LLS(J),A1LLS(J),A2LLS(J))
   GO TO 22
23 ACR=0.01
   XN2=1.
24 XN2=XN2-ACR
   CALL DLL (DHF1,TFC1,XN2,TLC,V1,AA1,AA2)
   IF(TLC.LT.TML) GO TO 24
   XN2=XN2+ACR
   ACR=ACR*0.1
   IF(ACR.GT.1.0001) GO TO 24
   XLIM2=XN2
   ACR=(1.-XLIM2)*0.1
   XN2=XLIM2-ACR-ACR
   L=0
25 XN2=XN2+ACR
   L=L+1
   CALL DLL (DHF1,TFC1,XN2,TCLLI(L),X1LLI(L),A1LLI(L),A2LLI(L))
   IF(TCLLI(L).GT.TEL) GO TO 25
   ACR=0.01
   R1=RAI02/RAI01
   R2=RAI01/RAI02
   XN2=0.
27 XN2=XN2+ACR
   CALL DLL (DHF2,TFC2,XN2,TLC,V1,AA1,AA2)
   IF(TLC.GT.TEL) GO TO 27
   XN2=XN2-ACR

```



```

ACR=ACR*0.1
IF(ACR.GT.0.0001) GO TO 27
XLIM3=XN2
ACR=XLIM3*0.1
XN2=0.
M=0
28 XN2=XN2+ACR
IF(XN2.GT.(XLIM3+ACR)) GO TO 29
M=M+1
CALL DLL (DHF2,TFC2,XN2,TCLL(M),X2LL(M),A2LL(M),A1LL(M))
GO TO 28
29 RETURN
END
SUBROUTINE DLL (DHF,TFC,XN2,TLC,V1,AA1,AA2)

```

C

C ESTA SUBROTINA DETERMINA CADA PONTO SOBRE A LINHA LIQUIDUS  
C A LOGICA USADA E IDENTIFICAR A ATIVIDADE CALCULADA ATRAVES DA EQUACAO  
C DE LUMSDEN COM A ATIVIDADE CALCULADA ATRAVES DA REACAO DE FUSAO

C

```

DOUBLE PRECISION X1,W1,W2,W3,A,G,PXINT,GRAD,AG1,AG2,PA,XA,QXINT
COMMON X1,W1,W2,W3,A,G,PXINT,GRAD,AG1,AG2,PA,XA,QXINT,TFLAG
COMMON R,Z,PAI01,PAI02,PM1,PM2,EPSIL,SIGMA,FI,ZETA,MM,TML,TEL,VMT
COMMON TCT,X1CT,TMT,X1MET,X1MOT,TET,X1ET,TFCL,DHF1,TFC2,DHF2,R1,R2
COMMON TCMG(80),X1EMG(80),X1DMG(80),TCLLS(15),X1LLS(15),TCLLI(15)
COMMON X1LLI(15),TCLL(15),X2LL(15),GAMA1(9),GAMA2(9),A1T(9),A2T(9)
COMMON Z1(9),DH1(9),DH2(9),DS1(9),DS2(9)
COMMON A1MG(80),A2MG(80),A1LLS(15),A2LLS(15),A1LLI(15),A2LLI(15)
COMMON A1LL(15),A2LL(15)
TF=TFC+273.16
XN1=1.-XN2
XN10=XN1**2

```

```

XN2Q=XN2**2
XN2C=XN2**3
R12=R1**2
R125=R1**2.5
R126=R1**(2./3.)
R18=R1**(8./3.)
R14=R1**4
R15=R1**5
P2Z=R**2*Z
XN1C=XN1**3
R2Z=R2**2
R225=R2**2.5
P226=R2**(2./3.)
R28=R2**(8./3.)
R24=R2**4
R25=R2**5
A1=(XN2Q*R1)/(R*(R12*XN1+XN2)**2)
A2=(XN2Q*R125)/(R*(R15*XN1+XN2)**2)
A3=-((2.*R14*XN1*XN2C-R126*XN1Q*XN2Q)/(R2Z*(R18*XN1+XN2)**4)
A4=ALOG(XN1)
A5=(XN1Q*R2)/(R*(R22*XN2+XN1)**2)
A6=(XN1Q*R225)/(R*(R25*XN2+XN1)**2)
A7=-((2.*R24*XN2*XN1C-R226*XN2Q*XN1Q)/(R2Z*(R28*XN2+XN1)**4)
A8=ALOG(XN2)
B1=A3*EPSIL**2
B2=A1*EPSIL+A2*ZETA-2.*A3*EPSIL*SIGMA+DHF/R
B3=-A1*SIGMA-A2*FI+A3*SIGMA**2+A4-DHF/(R*TF)
ARG=B2**2-4.*B1*B3
IF(ARG.LT.0.) GO TO 4
DELTA=SQRT(ARG)
TL2=(-B2-DELTA)/(2.*B3)

```

```

TLC=TL2-273.16
ESIG=EPSIL/TL2-SIGMA
ZFI=ZETA/TL2-FI
XLA1=ESIG*A1+7FI*A2+ESIG**2*A3+A4
XLA2=ESIG*A5+ZFI*A6+ESIG**2*A7+A8
AA1=EXP(XLA1)
AA2=EXP(XLA2)
V1=XN1
4 RETURN
END
SUBROUTINE INTSC (J,L,M,XILL)

```

C  
C ESTA SUBROTINA CALCULA OS PONTOS PRINCIPAIS DO DIAGRAMA ATRAVES DA  
C DETERMINACAO DE INTERSECOES DAS LINHAS LIQUIDUS E DO MG  
C OS PONTOS DESTAS LINHAS SAO AJUSTADOS ATRAVES DA SUBROTINA FIT EM  
C CURVAS DO SEGUNDO GRAU

```

C
DOUBLE PRECISION X1,W1,W2,W3,A,G,PXINT,GRAD,AG1,AG2,PA,XA,QXINT
DIMENSION XILL (15)
COMMON X1,W1,W2,W3,A,G,PXINT,GRAD,AG1,AG2,PA,XA,QXINT,TFLAG
COMMON R,Z,RAIO1,RAIO2,PM1,PM2,EPSIL,SIGMA,FI,ZETA,MM,TML,TEL,VMT
COMMON TCT,XICT,TMT,X1MET,X1MDT,TET,X1ET,TFC1,DHF1,TFC2,DHF2,R1,R2
COMMON TCMG(80),X1EMG(80),X1DMG(80),TCLLS(15),XILL(15),TCLLI(15)
COMMON X1LLI(15),TCLL(15),X2LL(15),GAMA1(9),GAMA2(9),A1T(9),A2T(9)
COMMON Z1(9),DH1(9),DH2(9),DS1(9),DS2(9)
COMMON A1MG(80),A2MG(80),A1LLS(15),A2LLS(15),A1LLI(15),A2LLI(15)
COMMON A1LL(15),A2LL(15)
DIMENSION VLLS(15),Z1LLS(15),VLL(15),Z1LL(15),VLLI(15),Z1LLI(15)
IJ=0
DO 20 J=6,15
IF(TCLLS(J).LT.0.0001) GO TO 71

```

```

IJ=IJ+1
VLLS(IJ)=TCLLS(J)
Z1LLS(IJ)=X1LLS(J)
20 CONTINUE
71 N=IJ
CALL FIT (N,VLLS,Z1LLS,A1,B1,C1)
N=5
CALL FIT(N,TCMG,X1EMG,A2,B2,C2)
A3=A1-A2
B3=B1-B2
C3=C1-C2
DELTA=B3**2-4.*A3*C3
ARG=SQRT(DELTA)
X1MET=(-B3+ARG)/(2.*A3)
TMT=A1*X1MET**2+B1*X1MET+C1-273.16
N=5
CALL FIT(N,TCLLI,X1LLI,A1,B1,C1)
N=5
CALL FIT(N,TCMG,X1CMG,A2,B2,C2)
IM=0
DO 30 M=6,15
IF(TCLL(M).LT.0.0001) GO TO 81
IM=IM+1
VLL(IM)=TCLL(M)
Z1LL(IM)=X1LL(M)
30 CONTINUE
81 N=IM
CALL FIT(N,VLL,Z1LL,A3,B3,C3)
A4=A1-A2
B4=B1-B2
C4=C1-C2

```

```

DELTA=B4**2-4.*A4*C4
ARG=SQRT(DELTA)
X1MDT=(-B4-ARG)/(2.*A4)
VMT=A1*X1MDT**2+B1*X1MDT+C1-273.16
IL=0
DO 40 L=6,15
IF(TCLLI(L).LT.0.0001) GO TO 91
IL=IL+1
VLLI(IL)=TCLLI(L)
ZILLI(IL)=X1LLI(L)
40 CONTINUE
91 N=IL
CALL FIT (N,VLLI,ZILLI,A6,B6,C6)
A5=A6-A3
B5=B6-B3
C5=C6-C3
DELTA=B5**2-4.*A5*C5
ARG=SQRT(DELTA)
X1ET=(-B5+ARG)/(2.*A5)
TET=A6*X1ET**2+B6*X1ET+C6-273.16
RETURN
END
SUBROUTINE FIT(N,YTC,YN,A,B,C)

```

C  
C ESTA SUBROTINA AJUSTA PONTOS DAS LINHAS LIQUIDUS E DO MG EM CURVAS  
C DO SEGUNDO GRAU ATRAVES DO METODO DOS MINIMOS QUADRADOS  
C

```

DOUBLE PRECISION X1,X2,X3,X4,X5,X6,X7,Y1,Y2,Y3
DIMENSION YTC(15),YN(15),YT(15),VLLS(15),ZILLS(15),VLL(15)
DIMENSION ZILL(15)
SN=N

```

```

I=0
X1=0.
X2=0.
X3=0.
X4=0.
X5=0.
X6=0.
X7=0.
20 I=I+1
IF(I-N)91,91,92
91 YT(I)=YTC(I)+273.16
X1=X1+YN(I)**4
X2=X2+YN(I)**3
X3=X3+YN(I)**2
X4=X4+YN(I)
X5=X5+YT(I)*YN(I)**2
X6=X6+YT(I)*YN(I)
X7=X7+YT(I)
GO TO 20
92 Y1=X2-X4*X3/SN
Y2=X3-X4**2/SN
Y3=X4*X7/SN-X6
B=(Y3*X1/Y1-X3*X7/SN-X3**2*Y3/(SN*Y1)+X5)/(-Y2*X1/Y1+X2+X3**2*Y2/(
1SN*Y1)-X3*X4/SN)
C=X7/SN+B*X3*Y2/(SN*Y1)+X3*Y3/(SN*Y1)-B*X4/SN
A=(-B*Y2-Y3)/Y1
RETURN
END
SUBROUTINE TERMO (TT)

```

C  
C ESTA SUBROTINA CALCULA AS ATIVIDADES, COEFICIENTES DE ATIVIDADE)

C ENTALPIAS E ENTROPIAS PARCIAIS MOLARES DOS DOIS METAIS EM TEMPERATURAS  
 C E COMPOSICOES EM QUE ESTES DADOS SAO CONHECIDOS NA LITERATURA  
 C AS ATIVIDADES E COEFICIENTES DE ATIVIDADE SAO CALCULADAS A PARTIR DA  
 C EQUACAO DE LUMSDEN  
 C AS ENTALPIAS E ENTROPIAS PARCIAIS MOLARES SAO CALCULADAS  
 C CONSIDERANDO-SE QUE ESTAS GRANDEZAS NAO VARIAM APRECIAVELMENTE COM A  
 C TEMPERATURA NUMA FAIXA NAO MUITO AMPLA DE TEMPERATURAS  
 C CALCULADAS AS ENERGIAS LIVRES PARCIAIS MOLARES EM DUAS TEMPERATURAS  
 C PROXIMAS A DESEJADA OBTÉM-SE AS ENTALPIAS E ENTROPIAS PARCIAIS  
 C MOLARES DIRETAMENTE

C

```

DOUBLE PRECISION X1,W1,W2,W3,A,G,PXINT,GRAD,AG1,AG2,PA,XA,QXINT
COMMON X1,W1,W2,W3,A,G,PXINT,GRAD,AG1,AG2,PA,XA,QXINT,TFLAG
COMMON R,Z,RAIO1,RAIO2,PM1,PM2,EPSIL,SIGMA,FI,ZETA,MM,TML,TEL,VMT
COMMON TCT,XICT,TMT,XIMET,XIMDT,TET,XIET,TFC1,DHF1,TFC2,DHF2,R1,R2
COMMON TCMG(80),XLEMG(80),XIDMG(80),TCLLS(15),XILLS(15),TCLLI(15)
COMMON XILLI(15),TCLL(15),X2LL(15),GAMA1(9),GAMA2(9),AIT(9),A2T(9)
COMMON Z1(9),DH1(9),DH2(9),DSL(9),DS2(9)
COMMON AIMG(80),A2MG(80),AILLS(15),A2LLS(15),AILLI(15),A2LLI(15)
COMMON AILL(15),A2LL(15)
DIMENSION Z2(9)
READ(1,18)IT
18 FORMAT(F10.1)
R1=RAIO1/RAIO2
R2=RAIO2/RAIO1
R10=R1*R1
R20=R2*R2
R14=R10*R10
R24=R20*R20
R15=R14*R1
R25=R24*R2
  
```

```

R125=R1**2./5
R225=R2**2./5
R18=R1**(.8./3.)
R28=R2**(.8./3.)
P120=R1**(.20./3.)
R220=R2**(.20./3.)
R2Z=Z**R*R
T1=TT+25.
T2=TT-25.
ESIG=EPSIL/TT-SIGMA
ZFI=ZETA/TT-FI
ESIG1=EPSIL/TT1-SIGMA
ZFI1=ZETA/TT1-FI
ESIG2=EPSIL/TT2-SIGMA
ZFI2=ZETA/TT2-FI
DO 31 N=1,9
ZZ1=N
ZZ1=ZZ1#.1
Z1(N)=7Z1
Z2(N)=1.-Z1(N)
ZZ2=1.-ZZ1
Z1Q=Z1*ZZ1
Z2Q=Z2*ZZ2
Z1C=Z1Q*ZZ1
Z2C=Z2Q*ZZ2
A1=Z2Q*R1/(R*(R1Q*ZZ1+ZZ2)**2)
B1=Z2Q*R125/(R*(R15*ZZ1+ZZ2)**2)
C1=-(.2.*R14*ZZ1*Z2C-R12Q*Z1Q*Z2Q)/(R2Z*(R18*ZZ1+ZZ2)**4)
A2=Z1Q*R2/(R*(R2Q*ZZ2+ZZ1)**2)
B2=Z1Q*R225/(R*(R25*ZZ2+ZZ1)**2)
C2=-(.2.*R24*ZZ2*Z1C-R22Q*Z2Q*Z1Q)/(R2Z*(R28*ZZ2+ZZ1)**4)

```



```

XLG1=ESIG*A1+ZFI*B1+ESIG**2*C1
XLG2=ESIG*A2+ZFI*B2+ESIG**2*C2
GAMA1(N)=EXP(XLG1)
GAMA2(N)=EXP(XLG2)
A1T(N)=GAMA1(N)*Z1(N)
A2T(N)=GAMA2(N)*Z2(N)
C O PRIMEIRO INDICE RFFERE SE AU METAL E O SEGUNDO A TEMPERATURA
XLA11=ESIG1*A1+ZFI1*B1+ESIG1**2*C1+ALOG(ZZ1)
XLA12=ESIG2*A1+ZFI2*B1+ESIG2**2*C1+ALOG(ZZ1)
XLA21=ESIG1*A2+ZFI1*B2+ESIG1**2*C2+ALOG(ZZ2)
XLA22=ESIG2*A2+ZFI2*B2+ESIG2**2*C2+ALOG(ZZ2)
DG11=R*T1*XLA11
DG12=R*T2*XLA12
DG21=R*T1*XLA21
DG22=R*T2*XLA22
DS1(N)=(DG12-DG11)/(T1-T2)
DH1(N)=DG11+T1*DS1(N)
DS2(N)=(DG22-DG21)/(T1-T2)
31 DH2(N)=DG21+T1*DS2(N)
RETURN
END

```

## APÊNDICE II

Valores experimentais de temperatura e composição sobre a LLRIL, de WARING et alii<sup>(10)</sup>, para o sistema Zn-Pb.

T <sup>o</sup> C	% <sup>E</sup> Zn	% <sup>D</sup> Zn
417,8	99,3	2,0
450	98,6	2,3
500	97,7	3
550	96,0	4
600	94,1	6
650	91	8
700	85	12
750	76	19
775	68	26

NOTA - % refere-se a percentagem ponderal.

## APÊNDICE III

Valores experimentais de temperatura e composição sobre a LLRIL, de HASS & JELLINEK<sup>(12)</sup>, para o sistema Zn-Pb .

T <sup>o</sup> C	% <sup>E</sup> Zn	% <sup>D</sup> Zn
420	98,7	2,0
575	94,0	5,0
675	89,5	7,5
750	83,2	11,5
770	81,8	13,1

NOTA - % refere-se a percentagem ponderal.

## APÊNDICE IV

Valores experimentais de temperatura e composição sobre a LLRIL, de CAFASSO et alii<sup>(13)</sup>, para o sistema Zn-Pb.

T <sup>o</sup> C	% E Zn	% D Zn
651,8	90,23	7,56
702,2	85,77	10,15
734,0	80,95	14,00
763,9	72,29	20,48

NOTA - % refere-se a percentagem ponderal.

## APÊNDICE V

Valores experimentais de temperatura e composição sobre a LLRIL, de SPRING & ROMANOFF<sup>(14)</sup>, para o sistema Zn-Pb.

T <sup>o</sup> C	% <sup>E</sup> Zn	% <sup>D</sup> Zn
475	98,0	9,0
514	97,0	11,0
584	95,0	14,0
650	93,0	17,0
740	90,0	21,0
800	86,0	25,0
900	74,5	41,0

NOTA - % refere-se a percentagem ponderal.

APÊNDICE VI

RESULTADOS FORNECIDOS PELO ALGORITMO, PARA O SISTEMA  
Zn-Pb, UTILIZANDO-SE DADOS EXPERIMENTAIS DE WARING  
et alii (10)

SISTEMA ZINCO - CHUMBO

METAL 1 = ZINCO

METAL 2 = CHUMBO

PONTOS EXPERIMENTAIS NO MG CONSIDERADOS DE WANG ET ALII

CONSTANTES DA EQUACAO DE LUMSDEN  
 EPSIL = 5306,14  
 SIGMA = 1,05  
 FI = 2,22  
 ZETA = 2853,60

PONTOS NO MISCIBILITY GAP

TC	M1E	M2E	N1D	M2D	A1	A2
400,0	0,8930	0,8530	0,6478	0,8572	0,8780	0,9573
410,0	0,8977	0,8563	0,6513	0,8625	0,8877	0,9545
420,0	0,8973	0,8582	0,6574	0,8695	0,9177	0,9512
430,0	0,8945	0,8632	0,6644	0,8765	0,9371	0,9480
440,0	0,8961	0,8639	0,6685	0,8815	0,9367	0,9448
450,0	0,8926	0,8684	0,6733	0,8867	0,8985	0,9412
460,0	0,8950	0,8650	0,6753	0,8217	0,8939	0,8976
470,0	0,8984	0,8685	0,6837	0,8163	0,8954	0,8938
480,0	0,8938	0,8662	0,6863	0,8107	0,8943	0,8928
490,0	0,8930	0,8670	0,6852	0,8144	0,8935	0,8926
500,0	0,8922	0,8679	0,6852	0,8169	0,8930	0,9169
510,0	0,8913	0,8679	0,6852	0,8169	0,8922	0,9129
520,0	0,8913	0,8679	0,6852	0,8169	0,8914	0,9080
530,0	0,8903	0,8679	0,6852	0,8169	0,8914	0,9034
540,0	0,8903	0,8679	0,6852	0,8169	0,8906	0,8997
550,0	0,8903	0,8679	0,6852	0,8169	0,8906	0,8931
560,0	0,8903	0,8679	0,6852	0,8169	0,8906	0,8931
570,0	0,8903	0,8679	0,6852	0,8169	0,8906	0,8931
580,0	0,8903	0,8679	0,6852	0,8169	0,8906	0,8931
590,0	0,8903	0,8679	0,6852	0,8169	0,8906	0,8931
600,0	0,8903	0,8679	0,6852	0,8169	0,8906	0,8931
610,0	0,8903	0,8679	0,6852	0,8169	0,8906	0,8931
620,0	0,8903	0,8679	0,6852	0,8169	0,8906	0,8931
630,0	0,8903	0,8679	0,6852	0,8169	0,8906	0,8931
640,0	0,8903	0,8679	0,6852	0,8169	0,8906	0,8931
650,0	0,8903	0,8679	0,6852	0,8169	0,8906	0,8931
660,0	0,8903	0,8679	0,6852	0,8169	0,8906	0,8931
670,0	0,8903	0,8679	0,6852	0,8169	0,8906	0,8931
680,0	0,8903	0,8679	0,6852	0,8169	0,8906	0,8931
690,0	0,8903	0,8679	0,6852	0,8169	0,8906	0,8931
700,0	0,8903	0,8679	0,6852	0,8169	0,8906	0,8931
710,0	0,8903	0,8679	0,6852	0,8169	0,8906	0,8931
720,0	0,8903	0,8679	0,6852	0,8169	0,8906	0,8931
730,0	0,8903	0,8679	0,6852	0,8169	0,8906	0,8931
740,0	0,8903	0,8679	0,6852	0,8169	0,8906	0,8931
750,0	0,8903	0,8679	0,6852	0,8169	0,8906	0,8931
760,0	0,8903	0,8679	0,6852	0,8169	0,8906	0,8931
770,0	0,8903	0,8679	0,6852	0,8169	0,8906	0,8931
780,0	0,8903	0,8679	0,6852	0,8169	0,8906	0,8931
790,0	0,8903	0,8679	0,6852	0,8169	0,8906	0,8931
800,0	0,8903	0,8679	0,6852	0,8169	0,8906	0,8931



CENTRO DE COMPUTAÇÃO DA U.F.M.G.

PONTOS PRINCIPAIS DO DIAGRAMA

PONTO CRÍTICO	TC	ESTE TRABALHO			TC	LITERATURA			DIFERENÇA PERCENTUAL		
MONOTÉTICO ESQUERDO	TC	N1	N2	N3	TC	N1	N2	N3	N1	N2	N3
MONOTÉTICO DIREITO	804.8	0.701E 00	0.299E 00	0.266E 02	799.8	0.720E 00	0.280E 00	0.380E 00	0.86	-2.65	6.82
EUTÉTICO	418.5	0.997E 00	0.965E 00	0.981E 00	417.8	0.997E 00	0.940E 00	0.940E 00	0.09	0.03	-11.31
	316.5	0.185E 01	0.981E 00		318.2	0.160E 01	0.984E 00		0.18	-8.66	0.55
									-0.53	15.76	-0.26



CENTRO DE COMPUTAÇÃO DA U.F.M.G.

PONTOS NA LINHA LÍQUIDOS

LADO ESQUERDO SUPERIOR

TC	N1	N2	A1	A2
419.38	0.9997E 00	0.3009E 03	0.9997E 00	0.1159E 00
419.22	0.9994E 00	0.5009E 03	0.9994E 00	0.2309E 00
419.06	0.9991E 00	0.7009E 03	0.9991E 00	0.3424E 00
418.90	0.9988E 00	0.1209E 02	0.9988E 00	0.4530E 00
418.75	0.9985E 00	0.1570E 02	0.9985E 00	0.5620E 00
418.60	0.9982E 00	0.1810E 02	0.9982E 00	0.6692E 00
418.44	0.9979E 00	0.2109E 02	0.9980E 00	0.7747E 00
418.29	0.9976E 00	0.2409E 02	0.9977E 00	0.8786E 00
418.15	0.9973E 00	0.2709E 02	0.9974E 00	0.9809E 00
418.00	0.9970E 00	0.3009E 02	0.9971E 00	1.0819E 01
417.85	0.9967E 00	0.3309E 02	0.9969E 00	0.1180E 01

LADO ESQUERDO INFERIOR

TC	N1	N2	A1	A2
426.70	0.5940E 01	0.9275E 00	0.1013E 01	0.9486E 00
416.93	0.5400E 01	0.9467E 00	0.9952E 00	0.9526E 00
416.26	0.4860E 01	0.9514E 00	0.9752E 00	0.9569E 00
394.51	0.4320E 01	0.9561E 00	0.9531E 00	0.9612E 00
381.44	0.3780E 01	0.9622E 00	0.9291E 00	0.9657E 00
366.71	0.3240E 01	0.9676E 00	0.8999E 00	0.9703E 00
349.82	0.2700E 01	0.9730E 00	0.8653E 00	0.9740E 00
329.95	0.2160E 01	0.9784E 00	0.8266E 00	0.9787E 00
309.67	0.1620E 01	0.9838E 00	0.7770E 00	0.9840E 00

LADO DIREITO

TC	N1	N2	A1	A2
326.50	0.1560E 02	0.9855E 00	0.6610E 01	0.9985E 00
325.57	0.1000E 02	0.9970E 00	0.1321E 00	0.9970E 00
324.65	0.4500E 02	0.9955E 00	0.1978E 00	0.9956E 00
323.74	0.6000E 02	0.9940E 00	0.2634E 00	0.9941E 00
322.84	0.7500E 02	0.9925E 00	0.3290E 00	0.9927E 00
321.95	0.9000E 02	0.9910E 00	0.3946E 00	0.9912E 00
321.07	0.1050E 01	0.9895E 00	0.4588E 00	0.9898E 00
320.20	0.1300E 01	0.9880E 00	0.5276E 00	0.9894E 00
319.36	0.1550E 01	0.9865E 00	0.5921E 00	0.9870E 00
318.49	0.1790E 01	0.9850E 00	0.6521E 00	0.9857E 00
317.65	0.1650E 01	0.9835E 00	0.7180E 00	0.9843E 00



TERMODINAMICA  
TEMPERATURA = 926.0GRAUS KELVIN

ATIVIDADES E COEFICIENTES DE ATIVIDADE DO METAL 1

ESTE TRABALHO		LITERATURA		DIFERENCA PERCENTUAL	
NI	A1	NI	A1	NI	A1
0.100	0.606	0.100	0.633	0.100	-4.22
0.200	0.916	0.200	0.957	0.200	-4.31
0.300	1.053	0.300	1.097	0.300	-3.96
0.400	1.095	0.400	1.179	0.400	-3.07
0.500	1.086	0.500	1.112	0.500	-2.28
0.600	1.055	0.600	1.064	0.600	-0.89
0.700	1.016	0.700	1.016	0.700	0.00
0.800	0.980	0.800	0.975	0.800	0.55
0.900	0.961	0.900	0.958	0.900	0.36

ATIVIDADES E COEFICIENTES DE ATIVIDADE DO METAL 2

ESTE TRABALHO		LITERATURA		DIFERENCA PERCENTUAL	
NI	A2	NI	A2	NI	A2
0.100	0.914	0.100	0.914	0.100	0.00
0.200	0.854	0.200	0.854	0.200	0.00
0.300	0.817	0.300	0.818	0.300	-0.16
0.400	0.801	0.400	0.845	0.400	-5.52
0.500	0.807	0.500	0.816	0.500	-1.56
0.600	0.837	0.600	0.841	0.600	-2.52
0.700	0.897	0.700	0.942	0.700	-4.69
0.800	1.001	0.800	1.056	0.800	-6.17
0.900	1.119	0.900	1.169	0.900	-5.08

ENTALPIAS E ENTROPIAS PARCIAIS MOLARES DO METAL 1

ESTE TRABALHO		LITERATURA		DIFERENCA PERCENTUAL	
NI	DS1	NI	DS1	NI	DS1
0.100	4920.	0.100	5010.	0.100	-1.80
0.200	4147.	0.200	4290.	0.200	-3.34
0.300	3436.	0.300	3655.	0.300	-6.74
0.400	2784.	0.400	2955.	0.400	-6.17
0.500	2193.	0.500	2340.	0.500	-6.99
0.600	1653.	0.600	1769.	0.600	-6.05
0.700	1151.	0.700	1140.	0.700	0.90
0.800	672.	0.800	595.	0.800	12.96
0.900	237.	0.900	180.	0.900	31.59

ENTALPIAS E ENTROPIAS PARCIAIS MOLARES DO METAL 2

ESTE TRABALHO		LITERATURA		DIFERENCA PERCENTUAL	
NI	DS2	NI	DS2	NI	DS2
0.100	44.	0.100	40.	0.100	9.77
0.200	181.	0.200	165.	0.200	9.51
0.300	419.	0.300	395.	0.300	6.01
0.400	770.	0.400	745.	0.400	3.32
0.500	1254.	0.500	1255.	0.500	-0.05
0.600	1817.	0.600	1865.	0.600	-2.65
0.700	2559.	0.700	3150.	0.700	-6.19
0.800	4318.	0.800	4450.	0.800	-3.02
0.900	6860.	0.900	7700.	0.900	-10.69

TEMPERATURA = 923.0GRAUS KELVIN

CENTRO DE COMPUTAÇÃO DA U.F.M.G.



CENTRO DE COMPUTAÇÃO DA U.F.M.G.



ATIVIDADES E COEFICIENTES DE ATIVIDADE DO METAL 1

ESTR. TRABALHO		LITERATURA		DIFERENÇA PERCENTUAL	
NI	AI	NI	AI	NI	AI
0.100	0.611	0.100	0.627	0.100	0.611
0.200	0.922	0.200	0.942	0.200	0.922
0.300	1.659	0.300	0.978	0.300	1.659
0.400	1.100	0.400	0.978	0.400	1.100
0.500	1.000	0.500	0.978	0.500	1.000
0.600	1.058	0.600	0.978	0.600	1.058
0.700	1.018	0.700	0.978	0.700	1.018
0.800	0.982	0.800	0.978	0.800	0.982
0.900	0.962	0.900	0.978	0.900	0.962

ATIVIDADES E COEFICIENTES DE ATIVIDADE DO METAL 2

ESTR. TRABALHO		LITERATURA		DIFERENÇA PERCENTUAL	
NI	AI	NI	AI	NI	AI
0.100	0.914	0.100	0.913	0.100	0.914
0.200	0.854	0.200	0.854	0.200	0.854
0.300	0.817	0.300	0.845	0.300	0.817
0.400	0.802	0.400	0.845	0.400	0.802
0.500	0.809	0.500	0.845	0.500	0.809
0.600	0.839	0.600	0.845	0.600	0.839
0.700	0.902	0.700	0.845	0.700	0.902
0.800	1.008	0.800	0.845	0.800	1.008
0.900	1.123	0.900	0.845	0.900	1.123

ENTALPIAS E ENTROPIAS PARCIAIS MOLARES DO METAL 1

ESTR. TRABALHO		LITERATURA		DIFERENÇA PERCENTUAL	
NI	DH1	NI	DH1	NI	DH1
0.100	4919.8	0.100	4293.4	0.100	14.58
0.200	4165.5	0.200	3712.2	0.200	11.68
0.300	3433.2	0.300	3258.8	0.300	7.00
0.400	2732.2	0.400	2730.2	0.400	1.91
0.500	2192.2	0.500	2252.2	0.500	-2.68
0.600	1693.2	0.600	1725.2	0.600	-2.89
0.700	1150.2	0.700	1207.2	0.700	-11.30
0.800	672.2	0.800	819.2	0.800	-17.82
0.900	237.2	0.900	341.2	0.900	-30.51

ENTALPIAS E ENTROPIAS PARCIAIS MOLARES DO METAL 2

ESTR. TRABALHO		LITERATURA		DIFERENÇA PERCENTUAL	
NI	DH2	NI	DH2	NI	DH2
0.100	44.2	0.100	29.2	0.100	51.56
0.200	141.2	0.200	132.2	0.200	6.03
0.300	0.855	0.300	392.2	0.300	36.99
0.400	770.2	0.400	1086.2	0.400	6.88
0.500	1254.2	0.500	1781.2	0.500	-29.11
0.600	1916.2	0.600	2476.2	0.600	-31.90
0.700	2857.2	0.700	3176.2	0.700	-32.02
0.800	4115.2	0.800	3865.2	0.800	-22.61
0.900	6881.2	0.900	4580.2	0.900	-20.01

## APÊNDICE VII

RESULTADOS FORNECIDOS PELO ALGORITMO, PARA O SISTEMA  
Zn-Pb, UTILIZANDO-SE DADOS EXPERIMENTAIS DE HASS &  
JELLINEK<sup>(12)</sup>



CENTRO DE COMPUTAÇÃO DA U.F.M.G.



CENTRO DE COMPUTAÇÃO DA U.F.M.G.

SISTEMA ZINCO - CHUMBO

METAL 1 = ZINCO

METAL 2 = CHUMBO

PONTOS EXPERIMENTAIS NO MG CONSIDERADOS DE HASS-JELLINEK

CONSTANTES DA EQUAÇÃO DE LONSQUEN  
EPSIL = 4731,96  
SIGMA = -0,15  
FI = 1,23  
ZETA = 1645,20

PONTOS NO MISCELLILITY GAP	TC	NIE	NZE	NID	NZD	A1	A2
	4910.0	0.9984	0.9136	0.9540	0.9466	0.9066	0.9528
	410.0	0.9960	0.9095	0.9574	0.9426	0.9043	0.9502
	427.0	0.9956	0.9094	0.9570	0.9426	0.9043	0.9502
	430.0	0.9952	0.9094	0.9567	0.9426	0.9043	0.9502
	441.0	0.9947	0.9093	0.9566	0.9426	0.9043	0.9502
	456.0	0.9941	0.9093	0.9572	0.9426	0.9043	0.9502
	466.0	0.9936	0.9093	0.9584	0.9426	0.9043	0.9502
	470.0	0.9929	0.9091	0.9581	0.9426	0.9043	0.9502
	490.0	0.9923	0.9088	0.9584	0.9426	0.9043	0.9502
	500.0	0.9916	0.9084	0.9592	0.9426	0.9043	0.9502
	510.0	0.9909	0.9080	0.9592	0.9426	0.9043	0.9502
	517.0	0.9891	0.9079	0.9593	0.9426	0.9043	0.9502
	530.0	0.9881	0.9079	0.9593	0.9426	0.9043	0.9502
	540.0	0.9871	0.9079	0.9593	0.9426	0.9043	0.9502
	580.0	0.9860	0.9078	0.9593	0.9426	0.9043	0.9502
	570.0	0.9837	0.9078	0.9593	0.9426	0.9043	0.9502
	580.0	0.9831	0.9078	0.9593	0.9426	0.9043	0.9502
	590.0	0.9829	0.9078	0.9593	0.9426	0.9043	0.9502
	600.0	0.9828	0.9078	0.9593	0.9426	0.9043	0.9502
	610.0	0.9818	0.9078	0.9593	0.9426	0.9043	0.9502
	620.0	0.9816	0.9078	0.9593	0.9426	0.9043	0.9502
	630.0	0.9813	0.9078	0.9593	0.9426	0.9043	0.9502
	640.0	0.9812	0.9078	0.9593	0.9426	0.9043	0.9502
	650.0	0.9812	0.9078	0.9593	0.9426	0.9043	0.9502
	660.0	0.9812	0.9078	0.9593	0.9426	0.9043	0.9502
	670.0	0.9812	0.9078	0.9593	0.9426	0.9043	0.9502
	680.0	0.9812	0.9078	0.9593	0.9426	0.9043	0.9502
	690.0	0.9812	0.9078	0.9593	0.9426	0.9043	0.9502
	700.0	0.9812	0.9078	0.9593	0.9426	0.9043	0.9502
	710.0	0.9812	0.9078	0.9593	0.9426	0.9043	0.9502
	720.0	0.9812	0.9078	0.9593	0.9426	0.9043	0.9502
	730.0	0.9812	0.9078	0.9593	0.9426	0.9043	0.9502
	740.0	0.9812	0.9078	0.9593	0.9426	0.9043	0.9502
	750.0	0.9812	0.9078	0.9593	0.9426	0.9043	0.9502
	760.0	0.9812	0.9078	0.9593	0.9426	0.9043	0.9502
	770.0	0.9812	0.9078	0.9593	0.9426	0.9043	0.9502
	780.0	0.9812	0.9078	0.9593	0.9426	0.9043	0.9502
	790.0	0.9812	0.9078	0.9593	0.9426	0.9043	0.9502
	800.0	0.9812	0.9078	0.9593	0.9426	0.9043	0.9502

810.0	0.6988	0.3834	0.6166	0.6489	0.7843
820.0	0.8921	0.4017	0.5983	0.5465	0.7789
830.0	0.8920	0.4216	0.5784	0.5441	0.7734
840.0	0.8702	0.4433	0.5567	0.5415	0.7678
850.0	0.8568	0.4677	0.5323	0.5389	0.7620
860.0	0.8495	0.4946	0.5054	0.5361	0.7565
870.0	0.8485	0.5267	0.4733	0.5332	0.7507
880.0	0.8491	0.5671	0.4329	0.5303	0.7448
890.0	0.8412	0.6203	0.3697	0.5272	0.7390

PONTOS NA LINHA LIQUIDUS

LADO ESQUERDO SUPERIOR

TC	NI	N2	AI	AZ
419.38	0.9977E 00	0.3011E-03	0.9977E 00	0.7346E-01
419.22	0.9994E 00	0.6000E-03	0.9994E 00	0.1459E 00
419.06	0.9991E 00	0.9000E-03	0.9991E 00	0.2172E 00
418.90	0.9989E 00	0.1200E-02	0.9989E 00	0.2974E 00
418.75	0.9985E 00	0.1500E-02	0.9985E 00	0.3653E 00
418.59	0.9982E 00	0.1800E-02	0.9982E 00	0.4250E 00
418.44	0.9979E 00	0.2100E-02	0.9979E 00	0.4773E 00
418.29	0.9976E 00	0.2400E-02	0.9976E 00	0.5335E 00
418.14	0.9973E 00	0.2700E-02	0.9973E 00	0.5938E 00
417.99	0.9970E 00	0.3000E-02	0.9970E 00	0.6581E 00
417.84	0.9967E 00	0.3300E-02	0.9969E 00	0.7264E 00

LADO ESQUERDO INFERIOR

TC	NI	N2	AI	AZ
428.32	0.6400E-01	0.9340E 00	0.1016E 01	0.6439E 00
417.27	0.6000E-01	0.843E 00	0.843E 00	0.8236E 00
405.18	0.5400E-01	0.6400E 00	0.6400E 00	0.9570E 00
392.95	0.4400E-01	0.3520E 00	0.3431E 00	0.9576E 00
377.10	0.4200E-01	0.9580E 00	0.9191E 00	0.9623E 00
368.49	0.3600E-01	0.9600E 00	0.8974E 00	0.9674E 00
341.50	0.3000E-01	0.9700E 00	0.8497E 00	0.9723E 00
319.27	0.2400E-01	0.9760E 00	0.8042E 00	0.9777E 00
292.27	0.1800E-01	0.9820E 00	0.7493E 00	0.9830E 00

LADO DIREITO

TC	NI	N2	AI	AZ
324.90	0.1500E-02	0.9555E 00	0.5459E-01	0.9994E 00
325.57	0.3000E-02	0.9970E 00	0.1091E 00	0.9970E 00
324.45	0.4500E-02	0.9955E 00	0.1632E 00	0.9956E 00
323.74	0.6000E-02	0.9945E 00	0.2170E 00	0.9941E 00
322.94	0.7500E-02	0.9935E 00	0.2705E 00	0.9927E 00
321.96	0.9000E-02	0.9915E 00	0.3236E 00	0.9912E 00
321.07	0.1050E-01	0.9844E 00	0.3764E 00	0.9898E 00
320.70	0.1200E-01	0.9800E 00	0.4284E 00	0.9884E 00
319.94	0.1350E-01	0.9800E 00	0.4804E 00	0.9870E 00
314.49	0.1500E-01	0.9850E 00	0.5327E 00	0.9857E 00
317.65	0.1650E-01	0.9845E 00	0.5846E 00	0.9843E 00

CENTRO DE COMPUTAÇÃO DA U.F.M.G.



CENTRO DE COMPUTAÇÃO DA U.F.M.G.



PONTOS PRINCIPAIS DO DIAGRAMA

PONTO CRÍTICO	ESTE TRABALHO			LITERATURA			DIFERENÇA PERCENTUAL		
	TC	N1	N2	TC	N1	N2	TC	N1	N2
MONOTÉTICO ESQUERDO	417.6	0.681E-00	0.319E-00	417.8	0.720E-00	0.280E-00	11.02	-5.43	13.96
MONOTÉTICO DIREITO	417.7	0.602E-01	0.940E-00	417.8	0.997E-00	0.390E-02	-0.05	-0.13	43.29
EUTÉTICO	314.2	0.228E-01	0.977E-00	318.2	0.160E-01	0.984E-00	-0.03	0.29	-0.02

TERMODINÂMICA  
TEMPERATURA = 926.0GRAUS KELVIN

ATIVIDADES E COEFICIENTES DE ATIVIDADE DO METAL 1

ESTE TRABALHO			LITERATURA			DIFERENÇA PERCENTUAL		
N1	A1	GAMA1	N1	A1	GAMA1	N1	A1	GAMA1
0.100	0.874	6.734	0.100	0.833	6.327	0.100	6.45	6.50
0.200	0.988	4.939	0.200	0.957	4.783	0.200	3.22	3.26
0.300	1.108	3.692	0.300	1.087	3.655	0.300	0.98	1.02
0.400	1.129	2.822	0.400	1.129	2.823	0.400	-0.02	-0.04
0.500	1.104	2.279	0.500	1.112	2.223	0.500	-0.68	-0.64
0.600	1.063	1.772	0.600	1.064	1.774	0.600	-0.09	-0.12
0.700	1.019	1.456	0.700	1.016	1.451	0.700	0.33	0.36
0.800	0.982	1.227	0.800	0.975	1.219	0.800	0.68	0.66
0.900	0.952	1.069	0.900	0.958	1.064	0.900	0.42	0.46

ATIVIDADES E COEFICIENTES DE ATIVIDADE DO METAL 2

ESTE TRABALHO			LITERATURA			DIFERENÇA PERCENTUAL		
N1	A2	GAMA2	N1	A2	GAMA2	N1	A2	GAMA2
0.100	0.916	1.018	0.100	0.914	1.016	0.100	0.29	0.15
0.200	0.860	1.075	0.200	0.854	1.067	0.200	0.71	0.76
0.300	0.829	1.185	0.300	0.818	1.168	0.300	1.40	1.45
0.400	0.822	1.379	0.400	0.805	1.341	0.400	2.11	2.16
0.500	0.837	1.675	0.500	0.818	1.635	0.500	2.38	2.44
0.600	0.878	2.195	0.600	0.851	2.152	0.600	1.98	2.01
0.700	0.950	3.167	0.700	0.942	3.139	0.700	0.95	0.98
0.800	1.065	5.323	0.800	1.066	5.332	0.800	-0.13	-0.17
0.900	1.186	11.860	0.900	1.169	11.692	0.900	1.46	1.44

ENTALPIAS E ENTROPIAS PARCIAIS MOLARES DO METAL 1

ESTE TRABALHO			LITERATURA			DIFERENÇA PERCENTUAL		
N1	DH1	DS1	N1	DH1	DS1	N1	DH1	DS1
0.100	3961.	4.998	0.100	5010.	6.320	0.100	-22.13	-20.92
0.200	3233.	3.516	0.200	4240.	4.720	0.200	-24.64	-25.51
0.300	2430.	2.638	0.300	3695.	3.710	0.300	-27.03	-28.91
0.400	2697.	2.024	0.400	2955.	2.950	0.400	-29.05	-31.41
0.500	1629.	1.562	0.500	2340.	2.320	0.500	-30.40	-32.69
0.600	1217.	1.193	0.600	1760.	1.770	0.600	-30.93	-32.59
0.700	847.	0.876	0.700	1140.	1.200	0.700	-25.72	-26.97
0.800	499.	0.575	0.800	595.	0.690	0.800	-16.18	-16.61
0.900	179.	0.270	0.900	180.	0.280	0.900	-0.62	-3.66

ENTALPIAS E ENTROPIAS PARCIAIS MOLARES DO METAL 2

ESTE TRABALHO			LITERATURA			DIFERENÇA PERCENTUAL		
N1	DH2	DS2	N1	DH2	DS2	N1	DH2	DS2
0.100	39.	0.216	0.100	40.	0.220	0.100	-3.57	-1.63
0.200	157.	0.469	0.200	165.	0.490	0.200	-5.01	-4.34
0.300	359.	0.759	0.300	395.	0.830	0.300	-9.44	-8.59

0.400	646.	1.097	0.480	745.	1.240	0.460	-13.35	-12.37
0.500	1829.	1.464	0.500	1295.	1.750	0.500	-18.01	-16.36
0.600	1533.	1.914	0.600	1955.	2.620	0.600	-21.97	-20.90
0.700	2277.	2.507	0.700	3.520	3.520	0.700	-28.31	-28.79
0.800	3288.	3.426	0.800	4.850.	4.850.	0.800	-33.59	-34.37
0.900	5146.	5.240	0.900	7.700.	8.000	0.900	-32.31	-34.50

TEMPERATURA = 923.0GRAUS KELVIN

CENTRO DE COMPUTAÇÃO DA U.F.M.G.

ATIVIDADES E COEFICIENTES DE ATIVIDADE DO METAL 1

ESTE TRABALHO		LITERATURA		GAMA1		DIFERENÇA PERCENTUAL	
NI	A1	NI	A1	NI	A1	NI	A1
0.100	0.678	0.100	0.627	0.100	8.21	0.100	8.16
0.200	0.993	0.200	0.942	0.200	5.47	0.200	5.49
0.300	1.113	0.300	0.978	0.300	13.79	0.300	13.79
0.400	1.133	0.400	0.978	0.400	15.65	0.400	15.65
0.500	1.108	0.500	0.918	0.500	13.25	0.500	13.25
0.600	1.165	0.600	0.978	0.600	8.93	0.600	8.93
0.700	1.021	0.700	0.978	0.700	4.34	0.700	4.40
0.800	0.983	0.800	0.975	0.800	0.46	0.800	0.42
0.900	0.962	0.900	0.978	0.900	-1.60	0.900	-1.63

ATIVIDADES E COEFICIENTES DE ATIVIDADE DO METAL 2

ESTE TRABALHO		LITERATURA		GAMA2		DIFERENÇA PERCENTUAL	
NI	A2	NI	A2	NI	A2	NI	A2
0.100	0.916	0.100	0.913	0.100	0.31	0.100	0.36
0.200	0.800	0.200	0.954	0.200	0.79	0.200	0.79
0.300	0.830	0.300	0.945	0.300	-1.78	0.300	-1.77
0.400	0.823	0.400	0.965	0.400	-2.61	0.400	-2.59
0.500	0.839	0.500	0.945	0.500	-0.71	0.500	-0.71
0.600	0.890	0.600	0.920	0.600	4.20	0.600	4.17
0.700	0.954	0.700	0.865	0.700	12.87	0.700	12.86
0.800	1.071	0.800	0.865	0.800	26.72	0.800	26.72
0.900	1.197	0.900	0.865	0.900	41.64	0.900	41.64

ENTALPIAS E ENTROPIAS PARCIAIS MILIARES DO METAL 1

ESTE TRABALHO		LITERATURA		DS1		DIFERENÇA PERCENTUAL	
NI	DS1	NI	DS1	NI	DS1	NI	DS1
0.100	39014.	0.100	42953.	0.100	-9.13	0.100	-10.40
0.200	3232.	0.200	3712.	0.200	-12.74	0.200	-15.13
0.300	2699.	0.300	3209.	0.300	-18.04	0.300	-25.09
0.400	2695.	0.400	2730.	0.400	-21.25	0.400	-32.82
0.500	1624.	0.500	2292.	0.500	-27.73	0.500	-37.18
0.600	1217.	0.600	1775.	0.600	-31.45	0.600	-39.34
0.700	847.	0.700	1237.	0.700	-34.73	0.700	-39.54
0.800	499.	0.800	819.	0.800	-39.10	0.800	-39.20
0.900	179.	0.900	341.	0.900	-47.62	0.900	-34.82

ENTALPIAS E ENTROPIAS PARCIAIS MILIARES DO METAL 2

ESTE TRABALHO		LITERATURA		DS2		DIFERENÇA PERCENTUAL	
NI	DS2	NI	DS2	NI	DS2	NI	DS2
0.100	39.	0.100	29.	0.100	33.12	0.100	1.62
0.200	157.	0.200	137.	0.200	13.82	0.200	2.36
0.300	358.	0.300	392.	0.300	-9.70	0.300	-32.07
0.400	646.	0.400	1086.	0.400	-40.55	0.400	-61.95
0.500	1629.	0.500	1741.	0.500	-42.23	0.500	-44.16
0.600	1513.	0.600	2476.	0.600	-38.09	0.600	-43.28
0.700	2326.	0.700	3170.	0.700	-29.79	0.700	-39.28
0.800	3585.	0.800	4879.	0.800	-14.99	0.800	-29.82
0.900	5164.	0.900	4560.	0.900	13.24	0.900	-6.99

CENTRO DE COMPUTAÇÃO DA U.F.M.G.

APÊNDICE VIII

RESULTADOS FORNECIDOS PELO ALGORITMO, PARA O SISTEMA  
Zn-Pb, UTILIZANDO-SE DADOS EXPERIMENTAIS DE CAFASSO  
et alii<sup>(13)</sup>



## SISTEMA ZINCO - CHUMBO

METAL 1 = ZINCO

METAL 2 = CHUMBO

PONTOS EXPERIMENTAIS NO MG CONSIDERADOS DE CAFASSO ET ALII

CONSTANTES DA EQUACAO DE LUMSDEN    EPSIL = 9837.91  
 SIGMA = 5.38  
 FI = -0.96  
 ZETA = -416.29

## PONTOS NO MISCIBILITY GAP

TC	N1E	N2E	N1O	N2O	A1	A2
400.0	0.9979	0.0021	0.0292	0.9718	0.9990	0.9743
410.0	0.9976	0.0024	0.0310	0.9690	0.9977	0.9720
420.0	0.9973	0.0027	0.0340	0.9660	0.9974	0.9695
430.0	0.9969	0.0031	0.0372	0.9628	0.9970	0.9657
440.0	0.9965	0.0035	0.0406	0.9594	0.9967	0.9640
450.0	0.9960	0.0040	0.0443	0.9557	0.9963	0.9609
460.0	0.9955	0.0045	0.0482	0.9518	0.9958	0.9580
470.0	0.9950	0.0050	0.0524	0.9476	0.9953	0.9547
480.0	0.9943	0.0057	0.0569	0.9431	0.9948	0.9512
490.0	0.9937	0.0063	0.0617	0.9383	0.9942	0.9475
500.0	0.9929	0.0071	0.0668	0.9332	0.9936	0.9438
510.0	0.9921	0.0079	0.0723	0.9277	0.9929	0.9397
520.0	0.9912	0.0089	0.0781	0.9219	0.9922	0.9353
530.0	0.9903	0.0097	0.0842	0.9158	0.9914	0.9311
540.0	0.9892	0.0108	0.0908	0.9092	0.9905	0.9265
550.0	0.9880	0.0120	0.0978	0.9022	0.9896	0.9217
560.0	0.9869	0.0132	0.1052	0.8948	0.9886	0.9167
570.0	0.9854	0.0146	0.1131	0.8869	0.9876	0.9113
580.0	0.9839	0.0151	0.1214	0.8786	0.9865	0.9060
590.0	0.9822	0.0178	0.1304	0.8696	0.9853	0.9002
600.0	0.9804	0.0196	0.1398	0.8602	0.9840	0.8943
610.0	0.9784	0.0216	0.1499	0.8501	0.9827	0.8884
620.0	0.9763	0.0237	0.1606	0.8394	0.9813	0.8820
630.0	0.9739	0.0261	0.1719	0.8281	0.9798	0.8751
640.0	0.9713	0.0287	0.1840	0.8160	0.9781	0.8685
650.0	0.9685	0.0315	0.1969	0.8031	0.9765	0.8611
660.0	0.9654	0.0346	0.2105	0.7894	0.9747	0.8539
670.0	0.9619	0.0381	0.2252	0.7748	0.9728	0.8464
680.0	0.9580	0.0420	0.2407	0.7593	0.9707	0.8387
690.0	0.9539	0.0461	0.2574	0.7426	0.9686	0.8304
700.0	0.9491	0.0509	0.2752	0.7248	0.9664	0.8221
710.0	0.9438	0.0562	0.2943	0.7057	0.9640	0.8136
720.0	0.9380	0.0620	0.3149	0.6851	0.9616	0.8045
730.0	0.9311	0.0683	0.3370	0.6630	0.9590	0.7955
740.0	0.9235	0.0755	0.3611	0.6389	0.9563	0.7860
750.0	0.9148	0.0852	0.3874	0.6126	0.9535	0.7760
760.0	0.9043	0.0957	0.4161	0.5839	0.9504	0.7661
770.0	0.8918	0.1082	0.4481	0.5519	0.9473	0.7558
780.0	0.8763	0.1237	0.4840	0.5160	0.9440	0.7452
790.0	0.8572	0.1428	0.5254	0.4736	0.9406	0.7341
800.0	0.8284	0.1716	0.5771	0.4229	0.9369	0.7231
810.0	0.7799	0.2201	0.6559	0.3441	0.9331	0.7114

## PONTOS NA LINHA LIQUIDUS

## LADO ESQUERDO SUPERIOR

TC	N1	N2	A1	A2
419.38	0.9997E 00	0.3000E-03	0.9997E 00	0.1158E 00
419.22	0.9994E 00	0.6000E-03	0.9994E 00	0.2298E 00
419.66	0.9991E 00	0.9000E-03	0.9991E 00	0.3420E 00
418.90	0.9988E 00	0.1200E-02	0.9988E 00	0.4523E 00
418.75	0.9985E 00	0.1500E-02	0.9985E 00	0.5609E 00
418.60	0.9982E 00	0.1800E-02	0.9983E 00	0.6678E 00
418.45	0.9979E 00	0.2100E-02	0.9980E 00	0.7729E 00
418.30	0.9976E 00	0.2400E-02	0.9977E 00	0.8762E 00
418.15	0.9973E 00	0.2700E-02	0.9974E 00	0.9779E 00
418.00	0.9970E 00	0.3000E-02	0.9971E 00	0.1078E 01
417.85	0.9967E 00	0.3300E-02	0.9969E 00	0.1176E 01

## LADO ESQUERDO INFERIOR

TC	N1	N2	A1	A2
425.43	0.3630E-01	0.9637E 00	0.1011E 01	0.9677E 00
417.12	0.3300E-01	0.9670E 00	0.9955E 00	0.9704E 00
408.66	0.2970E-01	0.9703E 00	0.9786E 00	0.9731E 00
398.08	0.2640E-01	0.9736E 00	0.9598E 00	0.9759E 00
386.97	0.2310E-01	0.9769E 00	0.9387E 00	0.9787E 00
374.44	0.1980E-01	0.9802E 00	0.9146E 00	0.9816E 00
360.01	0.1650E-01	0.9835E 00	0.8864E 00	0.9845E 00
342.97	0.1320E-01	0.9868E 00	0.8527E 00	0.9875E 00
321.99	0.9900E-02	0.9901E 00	0.8104E 00	0.9905E 00
296.30	0.6600E-02	0.9934E 00	0.7535E 00	0.9936E 00

## LADO DIREITO

TC	N1	N2	A1	A2
326.50	0.1500E-02	0.9985E 00	0.1257E 00	0.9985E 00
325.58	0.3000E-02	0.9970E 00	0.2508E 00	0.9970E 00
324.67	0.4500E-02	0.9955E 00	0.3750E 00	0.9956E 00
323.77	0.6000E-02	0.9940E 00	0.4988E 00	0.9942E 00
322.89	0.7500E-02	0.9925E 00	0.6207E 00	0.9927E 00
322.02	0.9000E-02	0.9910E 00	0.7421E 00	0.9913E 00
321.17	0.1050E-01	0.9895E 00	0.8625E 00	0.9900E 00
320.32	0.1200E-01	0.9880E 00	0.9819E 00	0.9886E 00
319.49	0.1350E-01	0.9865E 00	0.1100E 01	0.9873E 00
318.68	0.1500E-01	0.9850E 00	0.1217E 01	0.9860E 00
317.88	0.1650E-01	0.9835E 00	0.1333E 01	0.9847E 00

## PONTOS PRINCIPAIS DO DIAGRAMA

PONTO CRITICO	ESTE TRABALHO			LITERATURA			DIFERENÇA PERCENTUAL		
	TC	N1	N2	TC	N1	N2	TC	N1	N2
MONOTETICO ESQUERDO	418.1	0.997E 00	0.272E-02	417.8	0.997E 00	0.300E-02	0.08	0.03	-9.43
MONOTETICO DIREITO	418.6	0.335E-01	0.966E 00	417.8	0.600E-01	0.940E 00	0.19	-44.11	-2.82
EUTETICO	321.5	0.995E-02	0.990E 00	319.2	0.160E-01	0.984E 00	1.03	-37.79	0.61

TERMODINÂMICA  
TEMPERATURA = 926.0GRAUS KELVIN

ATIVIDADES E COEFICIENTES DE ATIVIDADE DO METAL 1 ESTE TRABALHO			LITERATURA			DIFERENÇA PERCENTUAL		
N1	A1	GAMA1	N1	A1	GAMA1	N1	A1	GAMA1
0.100	0.664	6.636	0.100	0.633	6.327	0.100	4.83	4.88
0.200	0.975	4.873	0.200	0.957	4.783	0.200	1.84	1.89
0.300	1.095	3.650	0.300	1.097	3.655	0.300	-0.19	-0.15
0.400	1.118	2.794	0.400	1.129	2.823	0.400	-1.00	-1.02
0.500	1.095	2.191	0.500	1.112	2.223	0.500	-1.49	-1.44
0.600	1.056	1.761	0.600	1.094	1.774	0.600	-0.72	-0.76
0.700	1.015	1.450	0.700	1.016	1.451	0.700	-0.12	-0.09
0.800	0.979	1.224	0.800	0.975	1.219	0.800	0.41	0.39
0.900	0.961	1.068	0.900	0.958	1.064	0.900	0.32	0.36

ATIVIDADES E COEFICIENTES DE ATIVIDADE DO METAL 2 ESTE TRABALHO			LITERATURA			DIFERENÇA PERCENTUAL		
N1	A2	GAMA2	N1	A2	GAMA2	N1	A2	GAMA2
0.100	0.916	1.817	0.100	0.914	1.816	0.100	0.19	0.14
0.200	0.860	1.075	0.200	0.854	1.067	0.200	0.67	0.72
0.300	0.829	1.184	0.300	0.818	1.168	0.300	1.29	1.34
0.400	0.820	1.367	0.400	0.805	1.341	0.400	1.91	1.96
0.500	0.835	1.669	0.500	0.819	1.635	0.500	2.03	2.09
0.600	0.873	2.183	0.600	0.861	2.152	0.600	1.41	1.44
0.700	0.942	3.139	0.700	0.942	3.139	0.700	-0.65	-0.62
0.800	1.049	5.246	0.800	1.066	5.332	0.800	-1.58	-1.62
0.900	1.157	11.570	0.900	1.169	11.692	0.900	-1.03	-1.05

ENTALPIAS E ENTROPIAS PARCIAIS MOLARES DO METAL 1 ESTE TRABALHO			LITERATURA			DIFERENÇA PERCENTUAL		
N1	DH1	DS1	N1	DH1	DS1	N1	DH1	DS1
0.100	6137.	7.442	0.100	5010.	6.320	0.100	22.49	17.76
0.200	4899.	5.342	0.200	4290.	4.720	0.200	14.19	13.18
0.300	3817.	3.943	0.300	3605.	3.710	0.300	5.88	6.27
0.400	2899.	2.911	0.400	2955.	2.950	0.400	-1.88	-1.34
0.500	2144.	2.134	0.500	2340.	2.320	0.500	-8.39	-8.01
0.600	1534.	1.548	0.600	1760.	1.770	0.600	-12.86	-12.56
0.700	1036.	1.090	0.700	1140.	1.200	0.700	-9.13	-9.19
0.800	665.	0.695	0.800	595.	0.690	0.800	1.68	0.78
0.900	219.	0.315	0.900	190.	0.280	0.900	21.56	12.54

ENTALPIAS E ENTROPIAS PARCIAIS MOLARES DO METAL 2 ESTE TRABALHO			LITERATURA			DIFERENÇA PERCENTUAL		
N1	DH2	DS2	N1	DH2	DS2	N1	DH2	DS2
0.100	73.	0.254	0.100	40.	0.220	0.100	81.89	15.23
0.200	291.	0.615	0.200	165.	0.490	0.200	76.47	25.45
0.300	652.	1.077	0.300	395.	0.830	0.300	64.94	29.77
0.400	1145.	1.630	0.400	745.	1.240	0.400	53.72	31.46
0.500	1763.	2.263	0.500	1255.	1.750	0.500	40.47	29.32
0.600	2509.	2.979	0.600	1965.	2.420	0.600	27.46	23.69
0.700	3437.	3.832	0.700	3150.	3.520	0.700	9.10	8.66
0.800	4747.	5.032	0.800	4950.	5.220	0.800	-4.10	-3.60
0.900	7013.	7.285	0.900	7700.	8.000	0.900	-8.93	-8.94

TEMPERATURA = 923.0GRAUS KELVIN

ATIVIDADES E COEFICIENTES DE ATIVIDADE DO METAL 1

ESTE TRABALHO		LIT. NATURA		DIFERENÇA PERCENTUAL	
N1	A1	GAMA1	N1	A1	GAMA1
0.100	0.671	6.708	0.627	0.978	0.100
0.200	0.981	4.916	0.942	0.978	6.99
0.300	1.185	3.976	0.978	0.978	4.29
0.400	1.123	2.609	0.978	0.978	12.71
0.500	1.059	2.094	0.978	0.978	14.87
0.600	1.059	1.655	0.978	0.978	12.44
0.700	1.017	1.165	0.978	0.978	16.31
0.800	1.022	1.225	0.978	0.978	8.31
0.900	0.961	1.068	0.978	0.978	3.94
					0.700
					0.225
					0.17
					-1.72

ATIVIDADES E COEFICIENTES DE ATIVIDADE DO METAL 2

ESTE TRABALHO		LIT. NATURA		DIFERENÇA PERCENTUAL	
N1	A2	GAMA2	N1	A2	GAMA2
0.100	0.916	1.018	0.100	0.31	0.35
0.200	0.860	1.075	0.200	0.72	0.77
0.300	0.830	1.185	0.300	0.83	-1.82
0.400	0.822	1.370	0.400	0.845	-2.70
0.500	0.837	1.674	0.500	0.845	-0.92
0.600	0.877	2.193	0.600	0.845	3.77
0.700	0.947	3.158	0.700	0.845	12.09
0.800	1.058	5.290	0.800	0.845	25.21
0.900	1.171	11.714	0.900	0.845	38.63

ENTALPIAS E ENTROPIAS PARCIAIS MOLARES DO METAL 1

ESTE TRABALHO		LIT. NATURA		DIFERENÇA PERCENTUAL	
N1	DH1	DS1	N1	DH1	DS1
0.100	6134.	7.439	0.100	42.88	33.39
0.200	4896.	5.337	0.200	31.85	28.88
0.300	3812.	3.937	0.300	18.81	11.87
0.400	2896.	2.905	0.400	6.00	-3.21
0.500	2139.	2.129	0.500	5.01	-16.27
0.600	1531.	1.545	0.600	17.75	-21.44
0.700	1035.	1.088	0.700	26.22	-24.88
0.800	605.	0.695	0.800	26.12	-25.30
0.900	219.	0.316	0.900	35.72	-23.79

ENTALPIAS E ENTROPIAS PARCIAIS MOLARES DO METAL 2

ESTE TRABALHO		LIT. NATURA		DIFERENÇA PERCENTUAL	
N1	DH2	DS2	N1	DH2	DS2
0.100	75.	0.254	0.100	151.37	19.69
0.200	292.	0.615	0.200	120.93	34.32
0.300	652.	1.078	0.300	68.39	-3.41
0.400	1146.	1.631	0.400	5.51	-12.74
0.500	1763.	2.263	0.500	6.500	-13.56
0.600	2506.	2.977	0.600	1.225	-11.78
0.700	3431.	3.826	0.700	4.126	-1.27
0.800	4738.	5.022	0.800	22.58	2.94
0.900	7002.	7.273	0.900	53.56	29.17

CENTRO DE COMPUTAÇÃO DA U.F.M.G.



CENTRO DE COMPUTAÇÃO DA U.F.M.G.



APÊNDICE IX

RESULTADOS FORNECIDOS PELO ALGORITMO, PARA O SISTEMA  
Zn-Pb, UTILIZANDO-SE DADOS EXPERIMENTAIS DE SPRING  
& ROMANOFF<sup>(14)</sup>

SISTEMA ZINCO - CHUMBO  
 METAL 1 = ZINCO  
 METAL 2 = CHUMBO

PONTOS EXPERIMENTAIS NO MG CONSIDERADOS DE SPRING-ROMANOFF

CONSTANTES DA EQUACAO DE LUMSDEN  
 IPSIL = 401.70  
 SIGMA = -0.05  
 FI = 0.97  
 FI1 = 0.9871

PONTOS NO MISCIBILITY GAP

TC	ME	4ZF	MID	42D	A1	A2
400.0	0.9962	0.0038	0.1963	0.9097	0.9064	0.8400
410.0	0.9959	0.0041	0.1872	0.9028	0.9061	0.8350
420.0	0.9955	0.0045	0.2042	0.7958	0.9058	0.9299
430.0	0.9951	0.0049	0.2112	0.7848	0.9055	0.9248
440.0	0.9947	0.0053	0.2184	0.7916	0.9051	0.9187
450.0	0.9942	0.0058	0.2257	0.7743	0.9047	0.9147
460.0	0.9937	0.0063	0.2330	0.7670	0.9043	0.9095
470.0	0.9932	0.0068	0.2404	0.7596	0.9039	0.9044
480.0	0.9927	0.0073	0.2480	0.7520	0.9035	0.7993
490.0	0.9922	0.0078	0.2556	0.7444	0.9030	0.7941
500.0	0.9916	0.0084	0.2632	0.7368	0.9026	0.7889
510.0	0.9910	0.0090	0.2710	0.7290	0.9021	0.7837
520.0	0.9903	0.0097	0.2788	0.7212	0.9016	0.7786
530.0	0.9896	0.0104	0.2868	0.7132	0.9010	0.7734
540.0	0.9889	0.0111	0.2948	0.7052	0.9005	0.7682
550.0	0.9881	0.0119	0.3029	0.6971	0.9000	0.7631
560.0	0.9873	0.0127	0.3111	0.6889	0.9000	0.7579
570.0	0.9865	0.0135	0.3194	0.6806	0.9000	0.7527
580.0	0.9856	0.0144	0.3277	0.6723	0.9000	0.7476
590.0	0.9847	0.0153	0.3362	0.6638	0.9000	0.7424
600.0	0.9837	0.0163	0.3447	0.6553	0.9000	0.7372
610.0	0.9827	0.0173	0.3533	0.6467	0.9000	0.7320
620.0	0.9816	0.0184	0.3620	0.6380	0.9000	0.7267
630.0	0.9804	0.0195	0.3708	0.6292	0.9000	0.7217
640.0	0.9793	0.0207	0.3797	0.6203	0.9000	0.7166
650.0	0.9780	0.0220	0.3887	0.6113	0.9000	0.7115
660.0	0.9767	0.0233	0.3978	0.6022	0.9000	0.7063
670.0	0.9754	0.0246	0.4070	0.5931	0.9000	0.7012
680.0	0.9740	0.0261	0.4163	0.5839	0.9000	0.6960
690.0	0.9724	0.0276	0.4257	0.5743	0.9000	0.6908
700.0	0.9708	0.0292	0.4353	0.5647	0.9000	0.6856
710.0	0.9691	0.0309	0.4449	0.5551	0.9000	0.6804
720.0	0.9673	0.0327	0.4547	0.5453	0.9000	0.6752
730.0	0.9655	0.0345	0.4646	0.5355	0.9000	0.6700
740.0	0.9635	0.0365	0.4746	0.5254	0.9000	0.6648
750.0	0.9614	0.0386	0.4847	0.5153	0.9000	0.6596
760.0	0.9591	0.0409	0.4951	0.5049	0.9000	0.6544
770.0	0.9568	0.0432	0.5056	0.4944	0.9000	0.6492
780.0	0.9543	0.0457	0.5162	0.4838	0.9000	0.6440
790.0	0.9517	0.0483	0.5271	0.4729	0.9000	0.6388

CENTRO DE COMPUTAÇÃO DA U.F.M.G.

CENTRO DE COMPUTAÇÃO DA U.F.M.G.

CENTRO DE COMPUTAÇÃO DA U.F.M.G.

PONTOS NA LINHA LIQUIDOS

LADO ESQUERDO SUPERIOR

896.0	0.9400	0.6510	0.5382	0.4618	0.9690	0.6353
810.0	0.8450	0.6541	0.5493	0.4507	0.9679	0.6305
820.0	0.8627	0.6573	0.5609	0.4391	0.9668	0.6254
830.0	0.8803	0.6607	0.5727	0.4273	0.9656	0.6204
840.0	0.8978	0.6645	0.5847	0.4153	0.9644	0.6156
850.0	0.9151	0.6685	0.5971	0.4032	0.9632	0.6107
860.0	0.9321	0.6729	0.6099	0.3911	0.9620	0.6058
870.0	0.9492	0.6774	0.6231	0.3789	0.9608	0.6009
880.0	0.9663	0.6822	0.6367	0.3669	0.9595	0.5960
890.0	0.9833	0.6871	0.6506	0.3547	0.9582	0.5912
900.0	0.9999	0.6922	0.6648	0.3427	0.9569	0.5863
910.0	0.9969	0.6974	0.6793	0.3307	0.9555	0.5815
920.0	0.9936	0.7027	0.6941	0.3188	0.9543	0.5767
930.0	0.9901	0.7081	0.7092	0.3069	0.9529	0.5720
940.0	0.9864	0.7136	0.7245	0.2951	0.9515	0.5672
950.0	0.9826	0.7191	0.7400	0.2834	0.9501	0.5625

LADO ESQUERDO INFERIOR

419.38	0.9976 00	0.3002-03	0.9976 00	0.6334-01	0.9695 00	0.6353
419.22	0.9984 00	0.6002-03	0.9994 00	0.1256 00	0.9679 00	0.6305
419.06	0.9991 00	0.9002-03	0.9991 00	0.1569 00	0.9668 00	0.6254
418.90	0.9998 00	0.1202-02	0.9998 00	0.2476 00	0.9656 00	0.6204
418.75	0.9995 00	0.1502-02	0.9985 00	0.3062 00	0.9644 00	0.6156
418.60	0.9982 00	0.1802-02	0.9982 00	0.3644 00	0.9632 00	0.6107
418.44	0.9975 00	0.2102-02	0.9975 00	0.4216 00	0.9620 00	0.6058
418.29	0.9972 00	0.2402-02	0.9972 00	0.4778 00	0.9608 00	0.6009
418.15	0.9973 00	0.2702-02	0.9974 00	0.5330 00	0.9595 00	0.5960
418.00	0.9974 00	0.3002-02	0.9975 00	0.5873 00	0.9582 00	0.5912
417.85	0.9975 00	0.3302-02	0.9965 00	0.6406 00	0.9569 00	0.5863

LADO DIREITO

326.80	0.1502-02	0.9985 00	0.1372-01	0.9985 00	0.9695 00	0.6353
325.94	0.1602-02	0.9976 00	0.2744-01	0.9976 00	0.9679 00	0.6305
324.63	0.4502-02	0.9955 00	0.4121-01	0.9955 00	0.9668 00	0.6254
323.70	0.5002-02	0.9946 00	0.5498-01	0.9946 00	0.9656 00	0.6204
322.78	0.5502-02	0.9935 00	0.6876-01	0.9935 00	0.9644 00	0.6156
321.85	0.6002-02	0.9925 00	0.8255-01	0.9925 00	0.9632 00	0.6107
320.94	0.6502-01	0.9916 00	0.9634-01	0.9916 00	0.9620 00	0.6058
320.03	0.7002-01	0.9908 00	0.1102 00	0.9908 00	0.9608 00	0.6009
319.12	0.1302-01	0.9895 00	0.1240 00	0.9895 00	0.9595 00	0.5960
319.21	0.1502-01	0.9885 00	0.1378 00	0.9885 00	0.9582 00	0.5912
317.31	0.1602-01	0.9885 00	0.1517 00	0.9885 00	0.9569 00	0.5863

CENTRO DE COMPUTAÇÃO DA U.F.M.G.

PONTOS PRINCIPAIS DO DIAGRAMA

	TC	N1	N2	LITERATURA	TC	N1	N2	DIFERENÇA PERCENTUAL
PONTO CRÍTICO	952.6	0.801E-00	0.199E-00	708.0	0.720E-00	0.280E-00	39.37	11.24
MONOTÉTICO ESQUERDO	417.2	0.906E-00	0.443E-02	417.8	0.997E-00	0.320E-02	-0.14	-26.89
MONOTÉTICO DIREITO	417.5	0.202E-00	0.798E-00	417.8	0.600E-01	0.94E-00	-0.68	47.78
EUTÉTICO	279.7	0.841E-01	0.916E-00	318.2	0.160E-01	0.984E-00	-12.11	425.83

TERMODINÂMICA  
TEMPERATURA = 926.0GRAUS KELVIN

ATIVIDADES E COEFICIENTES DE ATIVIDADE DO METAL 1

ESTE TRABALHO		LITERATURA		DIFERENÇA PERCENTUAL	
N1	N2	N1	N2	N1	N2
0.100	0.383	0.100	0.433	0.100	0.327
0.200	0.467	0.100	0.577	0.100	0.54
0.300	0.665	0.300	1.097	0.300	0.32
0.400	0.891	0.400	1.179	0.400	-21.11
0.500	1.056	0.500	1.112	0.400	-12.70
0.600	1.172	0.600	1.284	0.500	-8.97
0.700	1.057	0.700	1.316	0.600	0.79
0.800	1.012	0.800	0.975	0.700	3.58
0.900	0.975	0.900	0.958	0.800	3.73
				0.900	1.76

ATIVIDADES E COEFICIENTES DE ATIVIDADE DO METAL 2

ESTE TRABALHO		LITERATURA		DIFERENÇA PERCENTUAL	
N1	N2	N1	N2	N1	N2
0.100	0.906	0.100	0.914	0.100	-0.87
0.200	0.826	0.200	0.854	0.200	-3.30
0.300	0.759	0.300	0.818	0.300	-7.22
0.400	0.706	0.400	0.805	0.400	-12.29
0.500	0.671	0.500	0.818	0.500	-17.95
0.600	0.660	0.600	0.861	0.600	-23.34
0.700	0.685	0.700	0.942	0.700	-27.29
0.800	0.774	0.800	1.066	0.800	-27.42
0.900	0.955	0.900	1.169	0.900	-18.28

ENTALPIAS E ENTROPIAS PARCIAIS MOLARES DO METAL 1

ESTE TRABALHO		LITERATURA		DIFERENÇA PERCENTUAL	
N1	N2	N1	N2	N1	N2
0.100	2325.	0.100	5016.	0.100	-53.59
0.200	2125.	0.200	4290.	0.200	-50.46
0.300	1967.	0.300	3605.	0.300	-47.10
0.400	1669.	0.400	2955.	0.400	-43.54
0.500	1406.	0.500	2320.	0.500	-39.92
0.600	1118.	0.600	1700.	0.600	-36.65
0.700	804.	0.700	1160.	0.700	-29.66
0.800	475.	0.800	595.	0.800	-29.15
0.900	166.	0.900	180.	0.900	-17.87



ENTALPIAS E ENTROPIAS PARCIAIS MOLARES DO METAL 2  
ESTE TRABALHO

ESTE TRABALHO		LITERATURA		DIFERENÇA PERCENTUAL	
N1	DH2	DS2	N1	DH2	DS2
0.100	10.	0.206	0.100	0.220	0.100
0.200	46.	0.430	0.200	0.440	0.100
0.300	119.	0.674	0.300	0.830	0.300
0.400	249.	0.960	0.400	1.240	0.400
0.500	466.	1.295	0.500	1.750	0.500
0.600	829.	1.713	0.600	2.420	0.600
0.700	1411.	2.276	0.700	3.520	0.700
0.800	2418.	3.110	0.800	5.220	0.800
0.900	4228.	4.286	0.900	8.600	0.900

TEMPERATURA = 923.0 GRAUS KELVIN

ATIVIDADES F. COEFICIENTES DE ATIVIDADE DO METAL 1  
ESTE TRABALHO

ESTE TRABALHO		LITERATURA		DIFERENÇA PERCENTUAL	
N1	GAWA1	AI	GAWA1	AI	GAWA1
0.100	0.384	0.607	0.627	0.100	0.223
0.200	0.869	3.347	0.842	0.200	0.387
0.300	0.868	2.895	0.974	0.300	0.106
0.400	0.994	2.485	0.400	0.978	0.578
0.500	1.059	2.118	0.500	1.056	0.540
0.600	1.075	1.791	0.600	0.978	0.097
0.700	1.054	1.505	0.700	1.397	0.343
0.800	1.012	1.266	0.800	0.978	0.166
0.900	0.975	1.083	0.900	1.087	0.114

ATIVIDADES F. COEFICIENTES DE ATIVIDADE DO METAL 2  
ESTE TRABALHO

ESTE TRABALHO		LITERATURA		DIFERENÇA PERCENTUAL	
N1	A2	GAWA2	A2	GAWA2	A2
0.100	0.906	1.007	0.914	0.100	0.092
0.200	0.826	1.032	0.854	0.200	0.028
0.300	0.759	1.094	0.945	0.300	0.154
0.400	0.706	1.177	0.845	0.400	0.331
0.500	0.672	1.343	0.500	0.600	0.072
0.600	0.661	1.652	0.600	0.545	0.057
0.700	0.687	2.249	0.700	0.845	0.142
0.800	0.777	3.887	0.800	0.845	0.000
0.900	0.963	6.626	0.900	0.945	0.018

ENTALPIAS E ENTROPIAS PARCIAIS MOLARES DO METAL 1  
ESTE TRABALHO

ESTE TRABALHO		LITERATURA		DIFERENÇA PERCENTUAL	
N1	DH1	DS1	N1	DH1	DS1
0.100	322.	6.420	0.100	6.937	0.517
0.200	212.	3.100	0.200	9.11.	6.010
0.300	190.	2.347	0.300	3.219	0.872
0.400	166.	1.819	0.400	2.13.	0.311
0.500	140.	1.410	0.500	2.52.	1.110
0.600	111.	1.068	0.600	1.966	0.898
0.700	84.	0.757	0.700	1.297.	0.540
0.800	47.	0.497	0.800	0.819.	0.322
0.900	16.	0.230	0.900	0.414.	0.184

ENTALPIAS E ENTROPIAS PARCIAIS MOLARES DO METAL 2  
ESTE TRABALHO

ESTE TRABALHO		LITERATURA		DIFERENÇA PERCENTUAL	
N1	DH2	DS2	N1	DH2	DS2
0.100	10.	0.206	0.100	0.213	0.007
0.200	46.	0.430	0.200	0.468	0.038
0.300	119.	0.674	0.300	1.116	0.442
0.400	249.	0.960	0.400	1.869	0.909
0.500	466.	1.295	0.500	2.621	1.326
0.600	822.	1.713	0.600	3.374	1.661
0.700	1411.	2.276	0.700	4.126	1.850
0.800	2418.	3.110	0.800	4.879	1.769
0.900	4228.	4.286	0.900	5.631	1.345



## APÊNDICE X

Valores experimentais de temperatura e composição sobre a LLRIL, de CAMPBELL & WAGEMANN<sup>(21)</sup>, para o sistema Al - In.

T <sup>o</sup> C	% E Al	% D Al
650	80,93	3,49
700	77,67	3,95
750	73,26	6,51
800	66,74	8,84
850	60,00	10,00
900	52,23	13,58

NOTA - % refere-se a percentagem ponderal.

## APÊNDICE XI

Valores experimentais de temperatura e composição sobre a LLRIL, de CAMPBELL et alii<sup>(22)</sup>, para o sistema Al-In.

T <sup>o</sup> C	% <sup>E</sup> Al	% <sup>D</sup> Al
675	80,1	4,4
750	74,7	7,7
800	70,7	9,7
850	58,9	19,7

NOTA - % refere-se a percentagem ponderal.

APÊNDICE XII

RESULTADOS FORNECIDOS PELO ALGORITMO, PARA O SISTEMA  
A1-In, UTILIZANDO-SE DADOS EXPERIMENTAIS DE CAMPBELL  
& WAGEMANN<sup>(21)</sup>

SISTEMA ALUMINIO - INOIO

METAL 1 = ALUMINIO

METAL 2 = INOIO

PONTOS EXPERIMENTAIS NO MG CONSIDERADOS DE CAMPBELL-WAGEMANN

CONSTANTES DA EQUACAO DE LUMSDEN

EPSIL = 10595.03  
 SIGMA = 6.44  
 PI = -5.12  
 ZETA = -3953.30

PONTOS NO MISCIBILITY GAP

TC	NIE	N2E	NID	M2D	A1	A2
620.0	0.9570	0.6430	0.1112	0.8888	0.9666	0.9170
630.0	0.9546	0.6454	0.1174	0.8924	0.9692	0.9130
640.0	0.9522	0.6478	0.1239	0.8961	0.9716	0.9093
650.0	0.9497	0.6503	0.1306	0.8994	0.9741	0.9058
660.0	0.9470	0.6528	0.1376	0.9024	0.9765	0.9028
670.0	0.9442	0.6552	0.1447	0.9051	0.9789	0.8997
680.0	0.9414	0.6576	0.1522	0.9076	0.9812	0.8964
690.0	0.9384	0.6601	0.1603	0.9100	0.9835	0.8931
700.0	0.9352	0.6624	0.1689	0.9122	0.9857	0.8897
710.0	0.9319	0.6648	0.1781	0.9143	0.9878	0.8862
720.0	0.9285	0.6671	0.1879	0.9162	0.9898	0.8827
730.0	0.9251	0.6694	0.1984	0.9179	0.9917	0.8791
740.0	0.9213	0.6716	0.2097	0.9194	0.9934	0.8754
750.0	0.9174	0.6738	0.2218	0.9208	0.9949	0.8716
760.0	0.9134	0.6760	0.2344	0.9221	0.9962	0.8678
770.0	0.9092	0.6781	0.2474	0.9233	0.9974	0.8639
780.0	0.9050	0.6803	0.2606	0.9245	0.9985	0.8600
790.0	0.9003	0.6824	0.2741	0.9256	0.9995	0.8561
800.0	0.8953	0.6845	0.2879	0.9266	0.9999	0.8522
810.0	0.8903	0.6865	0.3019	0.9275	0.9999	0.8483
820.0	0.8851	0.6884	0.3161	0.9283	0.9999	0.8444
830.0	0.8792	0.6902	0.3304	0.9291	0.9999	0.8404
840.0	0.8732	0.6919	0.3448	0.9298	0.9999	0.8364
850.0	0.8669	0.6935	0.3593	0.9305	0.9999	0.8324
860.0	0.8602	0.6950	0.3739	0.9311	0.9999	0.8284
870.0	0.8531	0.6964	0.3886	0.9317	0.9999	0.8244
880.0	0.8452	0.6977	0.4034	0.9322	0.9999	0.8204
890.0	0.8367	0.6989	0.4182	0.9327	0.9999	0.8164
900.0	0.8274	0.6999	0.4331	0.9331	0.9999	0.8124
910.0	0.8177	0.7008	0.4481	0.9335	0.9999	0.8084
920.0	0.8068	0.7016	0.4631	0.9339	0.9999	0.8044
930.0	0.7941	0.7023	0.4781	0.9343	0.9999	0.8004
940.0	0.7792	0.7029	0.4931	0.9347	0.9999	0.7964
950.0	0.7622	0.7034	0.5081	0.9350	0.9999	0.7924
960.0	0.7432	0.7038	0.5231	0.9353	0.9999	0.7884
970.0	0.7212	0.7041	0.5381	0.9355	0.9999	0.7844
980.0	0.6972	0.7042	0.5531	0.9357	0.9999	0.7804
990.0	0.6712	0.7042	0.5681	0.9359	0.9999	0.7764
1000.0	0.6432	0.7042	0.5831	0.9360	0.9999	0.7724

PONTOS NA LINHA LIQUIDUS

LADO ESQUERDO SUPERIOR

TC	N1	N2	A1	A2
656.15	0.9998E 00	0.4102E -02	0.9990E 00	0.1151E 00
653.99	0.9997E 00	0.4202E -02	0.9982E 00	0.2224E 00
651.15	0.9987E 00	0.4123E -01	0.9985E 00	0.3221E 00
648.83	0.9993E 00	0.4164E -01	0.9979E 00	0.4147E 00
646.62	0.9795E 00	0.2059E -01	0.9917E 00	0.5609E 00
644.53	0.9754E 00	0.2460E -01	0.9785E 00	0.5800E 00
642.55	0.9713E 00	0.2870E -01	0.9756E 00	0.6593E 00
640.67	0.9672E 00	0.3280E -01	0.9728E 00	0.7210E 00
638.90	0.9631E 00	0.3690E -01	0.9701E 00	0.7832E 00
637.23	0.9590E 00	0.4102E -01	0.9676E 00	0.8404E 00
635.66	0.9549E 00	0.4510E -01	0.9652E 00	0.8928E 00

LADO ESQUERDO INFERIOR

TC	N1	N2	A1	A2
646.81	0.1342E 00	0.8655E 00	0.9822E 00	0.9039E 00
636.32	0.1220E 00	0.8780E 00	0.9662E 00	0.9105E 00
624.46	0.1098E 00	0.882E 00	0.9462E 00	0.9175E 00
610.97	0.0760E -01	0.9024E 00	0.9276E 00	0.9249E 00
595.52	0.8540E -01	0.9146E 00	0.9034E 00	0.9330E 00
577.62	0.7320E -01	0.9263E 00	0.8759E 00	0.9402E 00
556.53	0.6100E -01	0.9394E 00	0.8427E 00	0.9493E 00
531.08	0.4880E -01	0.9512E 00	0.8021E 00	0.9581E 00
499.19	0.3660E -01	0.9634E 00	0.7566E 00	0.9674E 00
456.51	0.2440E -01	0.9756E 00	0.6896E 00	0.9778E 00
390.56	0.1220E -01	0.9878E 00	0.5706E 00	0.9895E 00
-10.96	0.2980E -06	0.1000E 01	0.2987E -01	0.1000E 01

PONTOS PRINCIPAIS DO DIAGRAMA

LADO DIREITO

TC	N1	N2	A1	A2
156.05	0.2000E -03	0.9998E 00	0.1524E 00	0.9998E 00
152.95	0.3989E -03	0.9998E 00	0.3024E 00	0.9998E 00
152.99	0.3900E -03	0.9998E 00	0.2584E 00	0.9998E 00
152.77	0.8000E -03	0.9997E 00	0.6494E 00	0.9992E 00
152.66	0.1000E -02	0.9997E 00	0.7594E 00	0.9992E 00
152.49	0.1200E -02	0.9987E 00	0.9033E 00	0.9982E 00
152.40	0.1400E -02	0.9986E 00	0.1191E 01	0.9980E 00
152.31	0.1600E -02	0.9984E 00	0.1198E 01	0.9974E 00
152.22	0.1800E -02	0.9982E 00	0.1344E 01	0.9972E 00
152.13	0.2000E -02	0.9978E 00	0.1653E 01	0.9970E 00

ESTE TRAPALHO

PUNTO CRITICO  
MAGNETICO ESQUERDO  
MAGNETICO DIREITO  
EUTETICO

TC	N1	N2	TC
975.3	0.656E 00	0.344E 00	0.55.0
634.5	0.993E 00	0.465E -01	637.0
635.4	0.121E 00	0.879E 00	537.0
169.5	-0.231E -01	0.102E 01	155.0

LITERATURA

TC	N1	N2
0.659E 00	0.344E 00	0.9998E 00
0.993E 00	0.470E -01	0.889E 00
0.119E 00	0.119E 00	0.999E 00
0.100E -01	0.100E -01	0.999E 00

DIFERENÇA PERCENTUAL

TC	N1	N2
3.20	-0.44	0.85
-0.40	0.05	-1.02
-0.26	9.85	-1.22
9.33	-330.88	3.34

TERMODINAMICA  
TEMPERATURA = 1173.0GRAUS KELVIN

CENTRO DE COMPUTAÇÃO DA U.F.M.G.

ATIVIDADES E COEFICIENTES DE ATIVIDADE DO METAL 1

ESTE TRABALHO		LITERATURA		DIFERENÇA PERCENTUAL	
N1	A1	N1	A1	N1	A1
0.100	0.472	0.512	0.512	0.100	-7.90
0.200	0.728	3.642	0.200	0.200	0.22
0.300	0.857	2.858	0.300	0.300	4.68
0.400	0.912	2.280	0.400	0.400	6.30
0.500	0.926	1.852	0.500	0.500	6.21
0.600	0.921	1.535	0.600	0.600	5.37
0.700	0.912	1.303	0.700	0.700	4.16
0.800	0.912	1.140	0.800	0.800	2.57
0.900	0.934	1.037	0.900	0.900	0.94

ATIVIDADES E COEFICIENTES DE ATIVIDADE DO METAL 2

ESTE TRABALHO		LITERATURA		DIFERENÇA PERCENTUAL	
N1	A2	N1	A2	N1	A2
0.100	0.913	1.015	0.916	0.100	-0.31
0.200	0.850	1.062	0.865	0.200	-1.74
0.300	0.804	1.152	0.832	0.300	-3.13
0.400	0.781	1.301	0.812	0.400	-3.83
0.500	0.772	1.543	0.803	0.500	-3.73
0.600	0.777	1.843	0.799	0.600	-2.81
0.700	0.781	2.188	0.799	0.700	-0.56
0.800	0.791	2.595	0.759	0.800	4.21
0.900	0.817	3.074	0.590	0.900	14.71

ENTALPIAS E ENTROPIAS PARCIAIS MOLARES DO METAL 1

ESTE TRABALHO		LITERATURA		DIFERENÇA PERCENTUAL	
N1	DH1	DS1	DH1	DS1	DS1
0.100	5075.	5.920	4115.	0.100	20.31
0.200	3690.	3.946	3138.	0.200	16.53
0.300	2905.	2.786	2686.	0.300	8.23
0.400	2111.	1.933	2116.	0.400	-0.13
0.500	1475.	1.410	1594.	0.500	-7.48
0.600	974.	0.994	1118.	0.600	-12.89
0.700	584.	0.681	699.	0.700	-16.43
0.800	289.	0.429	346.	0.800	-18.37
0.900	83.	0.207	93.	0.900	-10.66

ENTALPIAS E ENTROPIAS PARCIAIS MOLARES DO METAL 2

ESTE TRABALHO		LITERATURA		DIFERENÇA PERCENTUAL	
N1	DH2	DS2	DH2	DS2	DS2
0.100	73.	0.243	48.	0.100	52.49
0.200	282.	0.564	185.	0.200	26.36
0.300	608.	0.966	401.	0.300	51.55
0.400	1036.	1.375	711.	0.400	45.71
0.500	1554.	1.842	1137.	0.500	36.33
0.600	2167.	2.349	1716.	0.600	26.31
0.700	2892.	2.931	2506.	0.700	15.40
0.800	3785.	3.693	3594.	0.800	5.44
0.900	4960.	5.003	5310.	0.900	-0.92

CENTRO DE COMPUTAÇÃO DA U.F.M.G.

APÊNDICE XIII

RESULTADOS FORNECIDOS PELO ALGORITMO, PARA O SISTEMA  
A1-In, UTILIZANDO-SE DADOS EXPERIMENTAIS DE CAMPBELL  
et alii<sup>(22)</sup>



SISTEMA ALUMINIO - INDOIO

METAL 1 = ALUMINIO

METAL 2 = INDOIO

PONTOS EXPERIMENTAIS NO MG CONSIDERADOS DE CAMPBELL-BUCHANAN

CONSTANTES DA EQUACAO DE LUMSDEN  
 EPSIL = 25666.91  
 SIGMA = 23.05  
 FI = -18.82  
 ZETA = 16262.71

TC	MI	M2	M3	MI	M2	M3	MI	M2	M3
629.0	0.9591	0.8643	0.8044	0.9594	0.8646	0.8047	0.9597	0.8649	0.8050
630.0	0.9570	0.8622	0.8023	0.9573	0.8625	0.8026	0.9576	0.8628	0.8053
631.0	0.9549	0.8601	0.7999	0.9552	0.8604	0.7982	0.9555	0.8607	0.8056
632.0	0.9528	0.8580	0.7978	0.9531	0.8583	0.7961	0.9534	0.8586	0.8059
633.0	0.9507	0.8559	0.7957	0.9510	0.8562	0.7940	0.9513	0.8565	0.8062
634.0	0.9486	0.8538	0.7936	0.9489	0.8541	0.7919	0.9492	0.8544	0.8065
635.0	0.9465	0.8517	0.7915	0.9468	0.8520	0.7898	0.9471	0.8523	0.8068
636.0	0.9444	0.8496	0.7894	0.9447	0.8500	0.7877	0.9450	0.8503	0.8071
637.0	0.9423	0.8475	0.7873	0.9426	0.8479	0.7856	0.9429	0.8482	0.8074
638.0	0.9402	0.8454	0.7852	0.9405	0.8458	0.7835	0.9408	0.8461	0.8077
639.0	0.9381	0.8433	0.7831	0.9384	0.8437	0.7814	0.9387	0.8440	0.8080
640.0	0.9360	0.8412	0.7810	0.9363	0.8416	0.7793	0.9366	0.8419	0.8083
641.0	0.9339	0.8391	0.7789	0.9342	0.8395	0.7772	0.9345	0.8398	0.8086
642.0	0.9318	0.8370	0.7768	0.9321	0.8374	0.7751	0.9324	0.8377	0.8089
643.0	0.9297	0.8349	0.7747	0.9300	0.8353	0.7730	0.9303	0.8356	0.8092
644.0	0.9276	0.8328	0.7726	0.9279	0.8332	0.7709	0.9282	0.8335	0.8095
645.0	0.9255	0.8307	0.7705	0.9258	0.8311	0.7688	0.9261	0.8314	0.8098
646.0	0.9234	0.8286	0.7684	0.9237	0.8290	0.7667	0.9240	0.8293	0.8101
647.0	0.9213	0.8265	0.7663	0.9216	0.8269	0.7646	0.9219	0.8272	0.8104
648.0	0.9192	0.8244	0.7642	0.9195	0.8248	0.7625	0.9198	0.8251	0.8107
649.0	0.9171	0.8223	0.7621	0.9174	0.8227	0.7604	0.9177	0.8230	0.8110
650.0	0.9150	0.8202	0.7600	0.9153	0.8206	0.7583	0.9156	0.8209	0.8113
651.0	0.9129	0.8181	0.7579	0.9132	0.8185	0.7562	0.9135	0.8188	0.8116
652.0	0.9108	0.8160	0.7558	0.9111	0.8164	0.7541	0.9114	0.8167	0.8119
653.0	0.9087	0.8139	0.7537	0.9090	0.8143	0.7520	0.9093	0.8146	0.8122
654.0	0.9066	0.8118	0.7516	0.9069	0.8122	0.7499	0.9066	0.8125	0.8125
655.0	0.9045	0.8097	0.7495	0.9048	0.8101	0.7478	0.9049	0.8104	0.8128
656.0	0.9024	0.8076	0.7474	0.9027	0.8080	0.7457	0.9028	0.8083	0.8131
657.0	0.9003	0.8055	0.7453	0.9006	0.8059	0.7436	0.9009	0.8062	0.8134
658.0	0.8982	0.8034	0.7432	0.8985	0.8038	0.7415	0.8988	0.8041	0.8137
659.0	0.8961	0.8013	0.7411	0.8964	0.8017	0.7394	0.8967	0.8020	0.8140
660.0	0.8940	0.7992	0.7390	0.8943	0.7996	0.7373	0.8946	0.7999	0.8143
661.0	0.8919	0.7971	0.7369	0.8922	0.7975	0.7352	0.8925	0.7978	0.8146
662.0	0.8898	0.7950	0.7348	0.8901	0.7954	0.7331	0.8904	0.7957	0.8149
663.0	0.8877	0.7929	0.7327	0.8880	0.7933	0.7310	0.8883	0.7936	0.8152
664.0	0.8856	0.7908	0.7306	0.8859	0.7912	0.7289	0.8862	0.7915	0.8155
665.0	0.8835	0.7887	0.7285	0.8838	0.7891	0.7268	0.8841	0.7894	0.8158
666.0	0.8814	0.7866	0.7264	0.8817	0.7870	0.7247	0.8820	0.7873	0.8161
667.0	0.8793	0.7845	0.7243	0.8796	0.7849	0.7226	0.8800	0.7852	0.8164
668.0	0.8772	0.7824	0.7222	0.8775	0.7828	0.7205	0.8779	0.7831	0.8167
669.0	0.8751	0.7803	0.7201	0.8754	0.7807	0.7184	0.8758	0.7810	0.8170
670.0	0.8730	0.7782	0.7180	0.8733	0.7786	0.7163	0.8737	0.7789	0.8173
671.0	0.8709	0.7761	0.7159	0.8712	0.7765	0.7142	0.8716	0.7768	0.8176
672.0	0.8688	0.7740	0.7138	0.8691	0.7744	0.7121	0.8695	0.7747	0.8179
673.0	0.8667	0.7719	0.7117	0.8670	0.7723	0.7100	0.8674	0.7726	0.8182
674.0	0.8646	0.7698	0.7096	0.8649	0.7702	0.7079	0.8653	0.7705	0.8185
675.0	0.8625	0.7677	0.7075	0.8628	0.7681	0.7058	0.8632	0.7684	0.8188
676.0	0.8604	0.7656	0.7054	0.8607	0.7660	0.7037	0.8611	0.7663	0.8191
677.0	0.8583	0.7635	0.7033	0.8586	0.7639	0.7016	0.8590	0.7642	0.8194
678.0	0.8562	0.7614	0.7012	0.8565	0.7618	0.6995	0.8569	0.7621	0.8197
679.0	0.8541	0.7593	0.6991	0.8544	0.7597	0.6974	0.8548	0.7600	0.8200
680.0	0.8520	0.7572	0.6970	0.8523	0.7576	0.6953	0.8527	0.7579	0.8203
681.0	0.8499	0.7551	0.6949	0.8502	0.7555	0.6932	0.8506	0.7558	0.8206
682.0	0.8478	0.7530	0.6928	0.8481	0.7534	0.6911	0.8485	0.7537	0.8209
683.0	0.8457	0.7509	0.6907	0.8460	0.7513	0.6890	0.8464	0.7516	0.8212
684.0	0.8436	0.7488	0.6886	0.8439	0.7492	0.6869	0.8443	0.7495	0.8215
685.0	0.8415	0.7467	0.6865	0.8418	0.7471	0.6848	0.8422	0.7474	0.8218
686.0	0.8394	0.7446	0.6844	0.8397	0.7450	0.6827	0.8401	0.7453	0.8221
687.0	0.8373	0.7425	0.6823	0.8376	0.7429	0.6806	0.8380	0.7432	0.8224
688.0	0.8352	0.7404	0.6802	0.8355	0.7408	0.6785	0.8359	0.7411	0.8227
689.0	0.8331	0.7383	0.6781	0.8334	0.7387	0.6764	0.8338	0.7390	0.8230
690.0	0.8310	0.7362	0.6760	0.8313	0.7366	0.6743	0.8317	0.7369	0.8233
691.0	0.8289	0.7341	0.6739	0.8292	0.7345	0.6722	0.8296	0.7348	0.8236
692.0	0.8268	0.7320	0.6718	0.8271	0.7324	0.6701	0.8275	0.7327	0.8239
693.0	0.8247	0.7299	0.6697	0.8250	0.7303	0.6680	0.8254	0.7306	0.8242
694.0	0.8226	0.7278	0.6676	0.8229	0.7282	0.6659	0.8233	0.7285	0.8245
695.0	0.8205	0.7257	0.6655	0.8208	0.7261	0.6638	0.8212	0.7264	0.8248
696.0	0.8184	0.7236	0.6634	0.8187	0.7240	0.6617	0.8191	0.7243	0.8251
697.0	0.8163	0.7215	0.6613	0.8166	0.7219	0.6596	0.8170	0.7222	0.8254
698.0	0.8142	0.7194	0.6592	0.8145	0.7198	0.6575	0.8149	0.7201	0.8257
699.0	0.8121	0.7173	0.6571	0.8124	0.7177	0.6554	0.8128	0.7180	0.8260
700.0	0.8100	0.7152	0.6550	0.8103	0.7156	0.6533	0.8107	0.7159	0.8263
701.0	0.8079	0.7131	0.6529	0.8082	0.7135	0.6512	0.8086	0.7138	0.8266
702.0	0.8058	0.7110	0.6508	0.8061	0.7114	0.6491	0.8065	0.7117	0.8269
703.0	0.8037	0.7089	0.6487	0.8040	0.7093	0.6470	0.8044	0.7096	0.8272
704.0	0.8016	0.7068	0.6466	0.8019	0.7072	0.6449	0.8023	0.7075	0.8275
705.0	0.7995	0.7047	0.6445	0.7998	0.7051	0.6428	0.8002	0.7054	0.8278
706.0	0.7974	0.7026	0.6424	0.7977	0.7030	0.6407	0.7981	0.7033	0.8281
707.0	0.7953	0.7005	0.6403	0.7956	0.7009	0.6386	0.7960	0.7012	0.8284
708.0	0.7932	0.6984	0.6382	0.7935	0.6988	0.6365	0.7939	0.6991	0.8287
709.0	0.7911	0.6963	0.6361	0.7914	0.6967	0.6344	0.7918	0.6970	0.8290
710.0	0.7890	0.6942	0.6340	0.7893	0.6946	0.6323	0.7897	0.6949	0.8293
711.0	0.7869	0.6921	0.6319	0.7872	0.6925	0.6302	0.7876	0.6928	0.8296
712.0	0.7848	0.6900	0.6298	0.7851	0.6904	0.6281	0.7855	0.6907	0.8299
713.0	0.7827	0.6879	0.6277	0.7830	0.6883	0.6260	0.7834	0.6886	0.8302
714.0	0.7806	0.6858	0.6256	0.7809	0.6862	0.6239	0.7813	0.6865	0.8305
715.0	0.7785	0.6837	0.6235	0.7788	0.6841	0.6218	0.7792	0.6844	0.8308
716.0	0.7764	0.6816	0.6214	0.7767	0.6820	0.6197	0.7771	0.6823	0.8311
717.0	0.7743	0.6795	0.6193	0.7746	0.6799	0.6176	0.7750	0.6802	0.8314
718.0	0.7722	0.6774	0.6172	0.7725	0.6778	0.6155	0.7729	0.6781	0.8317
719.0	0.7701	0.6753	0.6151	0.7704	0.6757	0.6134	0.7708	0.6760	0.8320
720.0	0.7680	0.6732	0.6130	0.7683	0.6736	0.6113	0.7687	0.6739	0.8323
721.0	0.7659	0.6711	0.6109	0.7662	0.6715	0.6092	0.7666	0.6718	0.8326
722.0	0.7638	0.6690	0.6088	0.7641	0.6694	0.6071	0.7645	0.6697	0.8329
723.0	0.7617	0.6669	0.6067	0.7620	0.6673	0.6050	0.7624	0.6676	0.8332
724.0	0.7596	0.6648	0.6046	0.7599	0.6652	0.6029	0.7603	0.6655	0.8335
725.0	0.7575	0.6627	0.6025	0.7578	0.6631	0.6008	0.7582	0.6634	0.8338
726.0	0.7554	0.6606	0.6004	0.7557	0.6610	0.5987	0.7561	0.6613	0.8341
727.0	0.7533	0.6585	0.5983	0.7536	0.6589	0.5966	0.7540	0.6592	0.8344
728.0	0.7512	0.6564	0.5962	0.7515	0.6568	0.5945	0.7519	0.6571	0.8347
729.0	0.7491	0.6543	0.5941	0.7494	0.6547	0.5924	0.7498	0.6550	0.8350
730.0	0.7470	0.6522	0.5920	0.7473	0.6526	0.5903	0.7477	0.6529	0.8353
731.0	0.7449	0.6501	0.5899	0.7452	0.6505	0.5882	0.7456	0.6508	0.8356
732.0	0.7428	0.6480	0.5878	0.7431	0.6484	0.5861	0.7435	0.6487	0.8359
733.0	0.7407	0.6459	0.5857	0.7410	0.6463	0.5840	0.7414	0.6466	

LAO ESQUERDO SUPERIOR

TC	N1	N2	A1	A2
656.15	C.9989E 00	C.4106E C2	C.9868E 00	C.1119E 00
657.59	C.9919E 00	C.4206E C2	C.9920E 00	C.2247E 00
661.15	C.9877E 00	C.4233E C1	C.9958E 00	C.3324E 00
663.83	C.9835E 00	C.4264E C1	C.9996E 00	C.4245E 00
666.63	C.9793E 00	C.4295E C1	C.9934E 00	C.5173E 00
669.55	C.9751E 00	C.4326E C1	C.9872E 00	C.5994E 00
672.57	C.9709E 00	C.4357E C1	C.9810E 00	C.6728E 00
675.71	C.9667E 00	C.4388E C1	C.9748E 00	C.7459E 00
678.95	C.9625E 00	C.4419E C1	C.9686E 00	C.8191E 00
682.29	C.9583E 00	C.4450E C1	C.9624E 00	C.8924E 00
685.73	C.9541E 00	C.4481E C1	C.9562E 00	C.9658E 00

LAO ESQUERDO INFERIOR

TC	N1	N2	A1	A2
645.35	C.1320E 00	C.3680E 00	C.9778E 00	C.9840E 00
646.96	C.1280E 00	C.3720E 00	C.9672E 00	C.9712E 00
647.67	C.1080E 00	C.3760E 00	C.9534E 00	C.9436E 00
647.25	C.9900E C1	C.3800E 00	C.9374E 00	C.9283E 00
650.47	C.9800E C1	C.3840E C1	C.9190E 00	C.9142E 00
651.95	C.9700E C1	C.3880E 00	C.8990E 00	C.8924E 00
646.11	C.4060E C1	C.3920E 00	C.8774E 00	C.8700E 00
647.04	C.4000E C1	C.3960E 00	C.8540E 00	C.8450E 00
648.06	C.3940E C1	C.4000E 00	C.8290E 00	C.8240E 00
649.52	C.3880E C1	C.4040E 00	C.8030E 00	C.7980E 00
648.04	C.3820E C1	C.4080E 00	C.7760E 00	C.7710E 00
648.61	C.3760E C1	C.4120E 00	C.7490E 00	C.7440E 00
		C.4160E 00	C.7220E C1	C.7170E 00

LAO DIREITO

TC	N1	N2	A1	A2
156.05	C.2004E C3	C.9904E 00	C.1904E 01	C.9992E 00
157.95	C.2032E C3	C.9964E 00	C.1804E 01	C.9932E 00
158.36	C.2060E C3	C.9924E 00	C.1704E 01	C.9872E 00
158.77	C.2088E C3	C.9884E 00	C.1604E 01	C.9812E 00
159.18	C.2116E C2	C.9844E 00	C.1504E 01	C.9752E 00
159.60	C.2144E C2	C.9804E 00	C.1404E 02	C.9692E 00
159.91	C.2172E C2	C.9764E 00	C.1304E 02	C.9632E 00
159.43	C.2200E C2	C.9724E 00	C.1204E 02	C.9572E 00
158.94	C.2228E C2	C.9684E 00	C.1104E 02	C.9512E 00
158.46	C.2256E C2	C.9644E 00	C.1004E 02	C.9452E 00
157.98	C.2284E C2	C.9604E 00	C.904E 02	C.9392E 00

PONTOS PRINCIPAIS DO DIAGRAMA

PUNTO CARTICO	ESTE TERRESTRE			LITERRATURA			DIFERENCA PERCENTUAL				
	TC	N1	N2	A1	A2	TC	N1	A2	TC	N1	A2
MONTETICO ESQUERDO	918.9	C.731E 00	C.2286E 00	945.0	C.655E 00	0.341E 00	-2.76	10.91	-21.00		
MONTETICO DIREITO	935.9	C.659E 00	C.4433E C1	937.0	C.653E 00	0.470E C1	-0.17	0.24	-5.47		
POTETICO	936.4	C.135E 00	C.681E 00	927.0	C.110E 00	C.820E 00	-0.10	0.24	-1.00		
	159.0	C.237E C3	C.1010E 01	155.0	C.100E C1	C.100E C1	0.10	-0.73	0.97		

TERMODINAMICA  
TEMPERATURA = 1173.0GRAUS KELVIN



ATIVIDADES E COEFICIENTES DE ATIVIDADE DO METAL 1

ESTE TRABALHO		LITERATURA		DIFERENÇA PERCENTUAL	
NI	GAVAL	NI	GAVAL	NI	GAVAL
0.100	0.378	0.100	3.276	0.100	-30.82
0.200	0.570	0.200	2.859	0.200	-26.82
0.300	0.738	0.300	2.460	0.300	-21.83
0.400	0.884	0.400	2.111	0.400	-16.83
0.500	0.992	0.500	1.864	0.500	-11.83
0.600	0.984	0.600	1.591	0.600	-5.77
0.700	0.927	0.700	1.324	0.700	5.79
0.800	0.929	0.800	1.156	0.800	4.87
0.900	0.939	0.900	1.044	0.900	1.51

ATIVIDADES E COEFICIENTES DE ATIVIDADE DO METAL 2

ESTE TRABALHO		LITERATURA		DIFERENÇA PERCENTUAL	
NI	GAVAL	NI	GAVAL	NI	GAVAL
0.100	0.426	0.100	1.917	0.100	-1.94
0.200	0.626	0.200	1.611	0.200	-4.20
0.300	0.759	0.300	1.389	0.300	-8.78
0.400	0.767	0.400	1.353	0.400	-12.98
0.500	0.671	0.500	1.242	0.500	-16.31
0.600	0.691	0.600	1.099	0.600	-14.92
0.700	0.649	0.700	0.796	0.700	-18.45
0.800	0.632	0.800	0.753	0.800	-14.71
0.900	0.589	0.900	0.590	0.900	-0.33

ENTALPIAS E ENTALPIAS PARCIAIS METAIS DO METAL 1

ESTE TRABALHO		LITERATURA		DIFERENÇA PERCENTUAL	
NI	OS1	NI	OS1	NI	OS1
0.100	8791	0.100	4113	0.100	108.17
0.200	6793	0.200	3333	0.200	108.17
0.300	5256	0.300	2676	0.300	61.99
0.400	3696	0.400	2116	0.400	61.99
0.500	2368	0.500	1594	0.500	36.11
0.600	1295	0.600	1116	0.600	18.74
0.700	564	0.700	699	0.700	-23.39
0.800	172	0.800	340	0.800	-68.15
0.900	-12	0.900	0.233	0.900	-113.42

ENTALPIAS E ENTALPIAS PARCIAIS METAIS DO METAL 2

ESTE TRABALHO		LITERATURA		DIFERENÇA PERCENTUAL	
NI	OS2	NI	OS2	NI	OS2
0.100	99	0.100	42	0.100	26.90
0.200	619	0.200	159	0.200	66.21
0.300	479	0.300	401	0.300	109.35
0.400	189	0.400	711	0.400	170.74
0.500	291.8	0.500	1137	0.500	153.04
0.600	421.7	0.600	1718	0.600	151.11
0.700	569.4	0.700	2564	0.700	121.61
0.800	680	0.800	3660	0.800	67.31
0.900	793.2	0.900	5210	0.900	50.36

CENTRO DE CONSTATO DA UFMG



CENTRO DE CONSTATO DA UFMG



6

## APÊNDICE XIV

Valores experimentais de temperatura e composição sobre a LLRIL, de KLEPPA<sup>(15)</sup>, para o sistema Zn-Bi.

$T^{\circ}\text{C}$	$N_{\text{Zn}}^{\text{E}}$	$N_{\text{Zn}}^{\text{D}}$
475	0,9783	0,4655
520	0,9608	0,5523
536	0,9541	0,6042
556	0,9451	0,6533
567	0,9399	0,6961

NOTA - As frações molares no ramo direito da LLRIL são resultados experimentais de KLEPPA<sup>(15)</sup>. Aquelas no ramo esquerdo são provenientes de ajuste em curva do segundo grau de valores experimentais do mesmo autor.

## APÊNDICE XV

Valores experimentais de temperatura e composição sobre a LLRIL, de HASS & JELLINEK<sup>(12)</sup>, para o sistema Zn-Bi .

T °C	% E Zn	% D Zn
460	95,5	16,8
545	93,4	21,2
620	90,0	24,0
735	77,5	32,0

NOTA - % refere-se a percentagem ponderal.

## APÊNDICE XVI

Valores experimentais de temperatura e composição sobre a LLRIL, de SPRING & ROMANOFF<sup>(14)</sup>, para o sistema Zn-Bi.

T <sup>o</sup> C	% <sup>E</sup> Zn	% <sup>D</sup> Zn
475	95,0	16,0
584	90,0	20,0
650	85,0	23,0
750	73,0	30,0

NOTA - % refere-se a percentagem ponderal.

APÊNDICE XVII

RESULTADOS FORNECIDOS PELO ALGORITMO, PARA O SISTEMA  
Zn-Bi, UTILIZANDO-SE DADOS EXPERIMENTAIS DE KLEPPA<sup>(15)</sup>





LADO ESQUERDO INFERIOR

TC	N1	N2	A1	A2
425.01	0.3696E 00	0.6304E 00	0.1010E 01	0.7262E 00
415.77	0.3360E 00	0.6640E 00	0.9930E 00	0.7453E 00
405.19	0.3024E 00	0.6976E 00	0.9732E 00	0.7656E 00
393.08	0.2688E 00	0.7312E 00	0.9503E 00	0.7870E 00
379.23	0.2352E 00	0.7648E 00	0.9238E 00	0.8095E 00
363.26	0.2016E 00	0.7984E 00	0.8928E 00	0.8331E 00
344.65	0.1680E 00	0.8320E 00	0.8560E 00	0.8577E 00
322.49	0.1344E 00	0.8656E 00	0.8144E 00	0.8834E 00
295.18	0.1008E 00	0.8992E 00	0.7553E 00	0.9102E 00
259.37	0.6720E-01	0.9328E 00	0.6800E 00	0.9344E 00
205.42	0.3360E-01	0.9664E 00	0.5634E 00	0.9481E 00

LADO DIREITO

TC	N1	N2	A1	A2
269.50	0.8208E-02	0.9918E 00	0.6863E-01	0.9919E 00
297.69	0.1644E-01	0.9936E 00	0.1779E 00	0.9839E 00
265.92	0.2466E-01	0.9774E 00	0.2448E 00	0.9741E 00
264.19	0.3288E-01	0.8672E 00	0.3202E 00	0.8685E 00
262.49	0.4100E-01	0.8990E 00	0.4399E 00	0.8811E 00
260.83	0.4920E-01	0.9509E 00	0.5199E 00	0.9338E 00
259.20	0.5740E-01	0.9426E 00	0.5961E 00	0.9457E 00
257.62	0.6560E-01	0.8344E 00	0.6744E 00	0.9388E 00
256.07	0.7380E-01	0.8262E 00	0.7506E 00	0.9330E 00
254.57	0.8200E-01	0.9190E 00	0.8248E 00	0.9285E 00
253.10	0.9020E-01	0.9098E 00	0.8969E 00	0.9201E 00

PONTOS PRINCIPAIS DO DIAGRAMA

	TC	ESTE TRABALHO		LITERATURA		DIFERENÇA PERCENTUAL	
		N1	N2	N1	N2	TC	N1
PONTO CRITICO	601.2	0.856E 00	0.144E 00	0.850E 00	0.150E 00	-0.62	0.66
MONOTETICO ESQUERDO	414.1	0.988E 00	0.117E-01	0.994E 00	0.600E-02	-0.47	-0.57
MONOTETICO DIREITO	414.5	0.321E 00	0.669E 00	0.370E 00	0.630E 00	-0.36	-10.42
EUTETICO	257.0	0.687E-01	0.931E 00	0.810E-01	0.971E 00	1.00	-15.24

TERMODINAMICA  
TEMPERATURA = 873.0GRAUS KELVIN

ATIVIDADES E COEFICIENTES DE ATIVIDADE DO METAL 1

N1	ESTE TRABALHO		LITERATURA		DIFERENÇA PERCENTUAL	
	N1	N2	N1	N2	N1	N2
0.100	0.243	2.432	0.100	0.100	-6.11	-6.15
0.200	0.448	2.242	0.200	0.200	-3.58	-3.50
0.300	0.617	2.055	0.300	0.300	-2.14	-2.04
0.400	0.749	1.873	0.400	0.400	-1.32	-1.34
0.508	0.847	1.694	0.500	0.500	-1.49	-1.55
0.600	0.913	1.522	0.600	0.600	-1.83	-1.82
0.700	0.949	1.376	0.700	0.700	-2.05	-2.03
0.800	0.961	1.201	0.800	0.800	-1.52	-1.45
0.900	0.962	1.069	0.900	0.900	-1.82	-1.83



ATIVIDADES E COEFICIENTES DE ATIVIDADE DO METAL 2

ESTE TRABALHO		LITERATURA		DIFERENÇA PERCENTUAL	
N1	A2	N1	A2	N1	A2
0.100	0.904	0.100	0.905	0.100	-0.1%
0.200	0.815	0.200	0.821	0.200	-0.7%
0.300	0.734	0.300	0.742	0.300	-1.0%
0.400	0.662	0.400	0.672	0.400	-1.0%
0.500	0.599	0.500	0.602	0.500	-0.4%
0.600	0.547	0.600	0.552	0.600	-0.8%
0.700	0.510	0.700	0.513	0.700	-0.5%
0.800	0.492	0.800	0.495	0.800	-2.8%
0.900	0.488	0.900	0.486	0.900	2.5%

ENTALPIAS E ENTROPIAS PARCIAIS MOLARES DO METAL 1

ESTE TRABALHO		LITERATURA		DIFERENÇA PERCENTUAL	
N1	A2	N1	A2	N1	A2
0.100	36.779	0.100	314.6	0.100	17.1%
0.200	32.228	0.200	263.5	0.200	22.5%
0.300	27.711	0.300	218.0	0.300	27.1%
0.400	23.108	0.400	177.0	0.400	30.4%
0.500	18.488	0.500	140.0	0.500	32.0%
0.600	13.922	0.600	105.0	0.600	32.5%
0.700	9.492	0.700	73.0	0.700	29.9%
0.800	5.322	0.800	42.0	0.800	26.7%
0.900	1.792	0.900	17.0	0.900	5.2%

ENTALPIAS E ENTROPIAS PARCIAIS MOLARES DO METAL 2

ESTE TRABALHO		LITERATURA		DIFERENÇA PERCENTUAL	
N1	A2	N1	A2	N1	A2
0.100	24.4	0.100	30.4	0.100	-20.6%
0.200	10.4	0.200	126.4	0.200	-13.2%
0.300	2.58	0.300	276.4	0.300	-4.6%
0.400	5.072	0.400	490.4	0.400	3.5%
0.500	8.872	0.500	790.4	0.500	12.2%
0.600	14.492	0.600	1220.4	0.600	18.7%
0.700	22.802	0.700	1830.4	0.700	24.5%
0.800	35.652	0.800	2780.4	0.800	27.5%
0.900	56.042	0.900	4230.4	0.900	32.4%

TEMPERATURA = 873.0 GRAUS KELVIN

ATIVIDADES E COEFICIENTES DE ATIVIDADE DO METAL 1

ESTE TRABALHO		LITERATURA		DIFERENÇA PERCENTUAL	
N1	A1	N1	A1	N1	A1
0.100	0.243	0.100	0.254	0.100	-4.2%
0.200	0.248	0.200	0.262	0.200	-3.5%
0.300	0.249	0.300	0.281	0.300	-2.8%
0.400	0.247	0.400	0.283	0.400	-2.0%
0.500	0.249	0.500	0.270	0.500	2.6%
0.600	0.249	0.600	0.238	0.600	2.4%
0.700	0.249	0.700	0.269	0.700	-2.0%
0.800	0.241	0.800	0.272	0.800	-1.1%
0.900	0.242	0.900	0.276	0.900	-1.3%

ATIVIDADES E COEFICIENTES DE ATIVIDADE DO METAL 2

ESTE TRABALHO		LITERATURA		DIFERENÇA PERCENTUAL	
N1	A2	N1	A2	N1	A2
0.100	0.904	0.100	0.905	0.100	-0.1%
0.200	0.815	0.200	0.819	0.200	-0.3%
0.300	0.734	0.300	0.737	0.300	-0.3%
0.400	0.662	0.400	0.667	0.400	-0.7%
0.500	0.599	0.500	0.601	0.500	-0.3%
0.600	0.547	0.600	0.550	0.600	-0.4%
0.700	0.510	0.700	0.517	0.700	-1.3%
0.800	0.492	0.800	0.494	0.800	-4.4%
0.900	0.488	0.900	0.494	0.900	-1.1%

ENTALPIAS E ENTROPIAS PARCIAIS MOLARES DO METAL 1  
ESTE TRABALHO

N1	DH1	DS1	N1	DH1	DS1	DIFERENÇA PERCENTUAL		
0.100	3679.	7.024	0.100	2920.	6.069	0.100	26.00	15.74
0.200	3228.	5.292	0.200	2582.	4.492	0.200	25.03	17.81
0.300	2771.	4.135	0.300	2176.	3.408	0.300	27.33	21.33
0.400	2310.	3.220	0.400	1778.	2.569	0.400	29.90	25.34
0.500	1848.	2.447	0.500	1481.	1.973	0.500	24.80	24.02
0.600	1392.	1.776	0.600	1104.	1.395	0.600	26.09	27.28
0.700	949.	1.190	0.700	686.	0.849	0.700	38.28	40.20
0.800	532.	0.689	0.800	361.	0.449	0.800	56.14	53.42
0.900	179.	0.282	0.900	97.	0.160	0.900	84.49	75.99

ENTALPIAS E ENTROPIAS PARCIAIS MOLARES DO METAL 2  
ESTE TRABALHO

N1	DH2	DS2	N1	DH2	DS2	DIFERENÇA PERCENTUAL		
0.100	24.	0.228	0.100	16.	0.217	0.100	48.81	5.25
0.200	104.	0.526	0.200	77.	0.488	0.200	35.20	7.69
0.300	258.	0.909	0.300	215.	0.849	0.300	19.80	7.02
0.400	507.	1.401	0.400	430.	1.299	0.400	17.98	7.82
0.500	887.	2.034	0.500	669.	1.778	0.500	32.58	14.39
0.600	1449.	2.857	0.600	1134.	2.486	0.600	27.73	14.91
0.700	2280.	3.949	0.700	1923.	3.513	0.700	18.54	12.42
0.800	3545.	5.469	0.800	2966.	4.717	0.800	19.54	15.95
0.900	5604.	7.843	0.900	4370.	6.408	0.900	28.23	22.40

APÊNDICE XVIII

RESULTADOS FORNECIDOS PELO ALGORITMO, PARA O SISTEMA  
Zn-Bi, UTILIZANDO-SE DADOS EXPERIMENTAIS DE HASS -  
JELLINEK<sup>(12)</sup>

CENTRO DE COMPUTAÇÃO DA U.F.M.G.



CENTRO DE COMPUTAÇÃO DA U.F.M.G.



SISTEMA ZINCO - BISMUTO

METAL 1 = ZINCO

METAL 2 = BISMUTO

PONTOS EXPERIMENTAIS NO MG CONSIDERAÇOS DE HASS-JELLINEK

CONSTANTES DA EQUAÇÃO DE LUMSDEN

EPSIL	-3306.08
SIGMA	-5.84
F1	3.33
ZETA	4904.41

PONTOS NO MISCIBILITY GAP

TC	N1E	N2E	N1D	N2D	A1	A2
400.0	0.9912	0.0098	0.3976	0.6024	0.9924	0.6825
410.0	0.9905	0.0095	0.4018	0.5982	0.9919	0.6810
420.0	0.9897	0.0103	0.4061	0.5939	0.9914	0.6799
430.0	0.9890	0.0110	0.4105	0.5895	0.9909	0.6786
440.0	0.9882	0.0118	0.4149	0.5851	0.9903	0.6773
450.0	0.9873	0.0127	0.4194	0.5806	0.9897	0.6760
460.0	0.9865	0.0135	0.4240	0.5760	0.9891	0.6745
470.0	0.9855	0.0145	0.4286	0.5714	0.9884	0.6733
480.0	0.9845	0.0155	0.4332	0.5668	0.9878	0.6722
490.0	0.9835	0.0165	0.4380	0.5620	0.9871	0.6708
500.0	0.9824	0.0176	0.4427	0.5573	0.9864	0.6697
510.0	0.9812	0.0188	0.4476	0.5524	0.9857	0.6684
520.0	0.9800	0.0200	0.4526	0.5474	0.9849	0.6671
530.0	0.9787	0.0213	0.4576	0.5424	0.9842	0.6657
540.0	0.9773	0.0227	0.4627	0.5373	0.9834	0.6645
550.0	0.9759	0.0241	0.4679	0.5321	0.9825	0.6635
560.0	0.9744	0.0256	0.4732	0.5268	0.9817	0.6621
570.0	0.9727	0.0273	0.4785	0.5215	0.9808	0.6610
580.0	0.9711	0.0289	0.4840	0.5160	0.9799	0.6598
590.0	0.9693	0.0307	0.4896	0.5104	0.9790	0.6586
600.0	0.9674	0.0326	0.4953	0.5047	0.9781	0.6574
610.0	0.9654	0.0346	0.5011	0.4989	0.9771	0.6562
620.0	0.9633	0.0367	0.5070	0.4930	0.9762	0.6551
630.0	0.9611	0.0389	0.5131	0.4869	0.9752	0.6538
640.0	0.9587	0.0413	0.5193	0.4807	0.9741	0.6526
650.0	0.9562	0.0438	0.5257	0.4743	0.9731	0.6516
660.0	0.9535	0.0465	0.5322	0.4678	0.9720	0.6504
670.0	0.9508	0.0492	0.5388	0.4610	0.9709	0.6491
680.0	0.9478	0.0522	0.5459	0.4541	0.9697	0.6480
690.0	0.9445	0.0555	0.5530	0.4470	0.9686	0.6470
700.0	0.9411	0.0589	0.5603	0.4397	0.9674	0.6458
710.0	0.9374	0.0626	0.5679	0.4321	0.9662	0.6448
720.0	0.9335	0.0665	0.5759	0.4241	0.9649	0.6436
730.0	0.9292	0.0708	0.5840	0.4160	0.9637	0.6426
740.0	0.9246	0.0754	0.5925	0.4075	0.9624	0.6415
750.0	0.9197	0.0803	0.6016	0.3984	0.9611	0.6404
760.0	0.9140	0.0850	0.6108	0.3892	0.9597	0.6395
770.0	0.9090	0.0892	0.6207	0.3793	0.9583	0.6385
780.0	0.9016	0.0944	0.6314	0.3686	0.9569	0.6373
790.0	0.8945	0.1005	0.6430	0.3570	0.9555	0.6363
800.0	0.8862	0.1138	0.6553	0.3447	0.9540	0.6353
810.0	0.8765	0.1235	0.6688	0.3312	0.9525	0.6344
820.0	0.8650	0.1350	0.6839	0.3161	0.9510	0.6334
830.0	0.8507	0.1493	0.7016	0.2984	0.9495	0.6325
840.0	0.8336	0.1664	0.7270	0.2730	0.9479	0.6315

CENTRO DE COMPUTAÇÃO DA UFMG

PONTOS NA LINHA LIQUIDOS

LADO ESQUERDO SUPERIOR

TC	NI	NZ	AI	AZ
419.17	0.9933E 00	0.7000E-03	0.9991E 00	0.6333E-01
418.80	0.9966E 00	0.1400E-02	0.9986E 00	0.1200E 00
418.45	0.9979E 00	0.2100E-02	0.9980E 00	0.1800E 00
418.10	0.9972E 00	0.2800E-02	0.9973E 00	0.2370E 00
417.76	0.9965E 00	0.3500E-02	0.9967E 00	0.2990E 00
417.43	0.9958E 00	0.4200E-02	0.9961E 00	0.3618E 00
417.11	0.9951E 00	0.4800E-02	0.9955E 00	0.4255E 00
416.80	0.9944E 00	0.5600E-02	0.9949E 00	0.4910E 00
416.49	0.9937E 00	0.6300E-02	0.9943E 00	0.5580E 00
416.19	0.9930E 00	0.7000E-02	0.9936E 00	0.6260E 00
415.90	0.9923E 00	0.7700E-02	0.9933E 00	0.6940E 00

LADO ESQUERDO INFERIOR

TC	NI	NZ	AI	AZ
432.84	0.4455E 00	0.5545E 00	0.1024E 01	0.6614E 00
415.53	0.4050E 00	0.5950E 00	0.9926E 00	0.5901E 00
393.77	0.3645E 00	0.6355E 00	0.9517E 00	0.7012E 00
367.16	0.3240E 00	0.6760E 00	0.9304E 00	0.7249E 00
335.27	0.2835E 00	0.7165E 00	0.8373E 00	0.7509E 00
297.72	0.2430E 00	0.7570E 00	0.7626E 00	0.7795E 00
254.14	0.2025E 00	0.7975E 00	0.6683E 00	0.8106E 00

LADO DIREITO

TC	NI	NZ	AI	AZ
269.64	0.7500E-02	0.9925E 00	0.2817E-01	0.9925E 00
267.95	0.1500E-01	0.9850E 00	0.5609E-01	0.9851E 00
266.27	0.2250E-01	0.9775E 00	0.8374E-01	0.9774E 00
264.58	0.3000E-01	0.9700E 00	0.1111E 00	0.9703E 00
262.91	0.3750E-01	0.9625E 00	0.1383E 00	0.9629E 00
261.24	0.4500E-01	0.9550E 00	0.1682E 00	0.9556E 00
259.57	0.5250E-01	0.9475E 00	0.1919E 00	0.9483E 00
257.91	0.6000E-01	0.9400E 00	0.2183E 00	0.9410E 00
256.26	0.6750E-01	0.9325E 00	0.2445E 00	0.9338E 00
254.61	0.7500E-01	0.9250E 00	0.2704E 00	0.9266E 00
252.96	0.8250E-01	0.9175E 00	0.2961E 00	0.9195E 00

PONTOS PRINCIPAIS DO DIAGRAMA

TC	ESTE TRABALHO		LITFERATURA		DIFERENÇA PERCENTUAL	
	NI	NZ	NI	NZ	TC	NZ
850.0	0.784E 00	0.214E 00	0.850E 00	0.156E 00	40.49	42.87
418.9	0.996E 00	0.992E-02	0.996E 00	0.600E-02	-0.27	65.27
419.3	0.484E 00	0.938E 00	0.370E 00	0.630E 00	-0.16	0.25
296.1	0.106E 00	0.111E 01	0.310E-01	0.419E 00	16.33	-231.12
						20.37

TERMODINAMICA  
TEMPERATURA = 873.0GRAUS KELVIN

ATIVIDADES E COEFICIENTES DE ATIVIDADE DO METAL 1

ESTE TRABALHO			LITERATURA			DIFERENÇA PERCENTUAL		
N1	A1	GAMA1	N1	A1	GAMA1	N1	A1	GAMA1
0.100	0.341	3.405	0.100	0.259	2.591	0.100	31.47	31.42
0.200	0.598	2.988	0.200	0.465	2.323	0.200	28.50	28.61
0.300	0.783	2.609	0.300	0.630	2.098	0.300	24.23	24.35
0.400	0.907	2.267	0.400	0.759	1.898	0.400	19.49	19.46
0.500	0.981	1.961	0.500	0.860	1.721	0.500	14.03	13.96
0.600	1.013	1.689	0.600	0.930	1.551	0.600	8.96	8.89
0.700	1.014	1.449	0.700	0.969	1.384	0.700	4.69	4.71
0.800	0.995	1.243	0.800	0.976	1.219	0.800	1.92	2.00
0.900	0.972	1.080	0.900	0.980	1.089	0.900	-0.79	-0.80

ATIVIDADES E COEFICIENTES DE ATIVIDADE DO METAL 2

ESTE TRABALHO			LITERATURA			DIFERENÇA PERCENTUAL		
N1	A2	GAMA2	N1	A2	GAMA2	N1	A2	GAMA2
0.100	0.906	1.007	0.100	0.905	1.006	0.100	0.13	0.08
0.200	0.824	1.031	0.200	0.821	1.026	0.200	0.42	0.45
0.300	0.755	1.079	0.300	0.742	1.060	0.300	1.75	1.75
0.400	0.698	1.164	0.400	0.672	1.120	0.400	3.91	3.91
0.500	0.656	1.312	0.500	0.602	1.213	0.500	9.03	8.12
0.600	0.631	1.577	0.600	0.552	1.391	0.600	14.27	14.19
0.700	0.631	2.102	0.700	0.513	1.711	0.700	22.93	22.86
0.800	0.571	3.355	0.800	0.505	2.524	0.800	32.37	32.93
0.900	0.764	7.645	0.900	0.486	4.857	0.900	57.30	57.39

ENTALPIAS E ENTROPIAS PARCIAIS MOLARES DO METAL 1

ESTE TRABALHO			LITERATURA			DIFERENÇA PERCENTUAL		
N1	DH1	DS1	N1	DH1	DS1	N1	DH1	DS1
0.100	133.	2.293	0.100	3140.	6.280	0.100	-25.76	-63.48
0.200	311.	1.379	0.200	2635.	4.540	0.200	-88.21	-69.62
0.300	458.	1.012	0.300	2180.	3.420	0.300	-78.98	-70.41
0.400	567.	0.843	0.400	1770.	2.580	0.400	-67.98	-67.31
0.500	626.	0.756	0.500	1400.	1.900	0.500	-55.31	-60.23
0.600	623.	0.687	0.600	1050.	1.350	0.600	-40.66	-49.09
0.700	547.	0.597	0.700	730.	0.900	0.700	-25.14	-33.61
0.800	388.	0.455	0.800	420.	0.530	0.800	-7.55	-14.09
0.900	164.	0.244	0.900	170.	0.230	0.900	-3.65	5.90

ENTALPIAS E ENTROPIAS PARCIAIS MOLARES DO METAL 2

ESTE TRABALHO			LITERATURA			DIFERENÇA PERCENTUAL		
N1	DH2	DS2	N1	DH2	DS2	N1	DH2	DS2
0.100	-11.	0.184	0.100	30.	0.230	0.100	-135.20	-20.12
0.200	-42.	0.336	0.200	120.	0.530	0.200	-134.86	-36.48
0.300	-91.	0.454	0.300	270.	0.900	0.300	-133.62	-49.51
0.400	-149.	0.543	0.400	460.	1.350	0.400	-130.34	-59.76
0.500	-196.	0.614	0.500	790.	1.900	0.500	-124.76	-67.67
0.600	-190.	0.639	0.600	1220.	2.580	0.600	-115.54	-72.93
0.700	-40.	0.870	0.700	1830.	3.420	0.700	-102.21	-74.57
0.800	454.	1.313	0.800	2780.	4.540	0.800	-83.97	-71.08
0.900	1801.	2.596	0.900	4230.	6.280	0.900	-57.43	-58.66

TEMPERATURA = 873.0GRAUS KELVIN

ATIVIDADES E COEFICIENTES DE ATIVIDADE DO METAL 1

ESTE TRABALHO		LITERATURA		DIFERENÇA PERCENTUAL	
N1	A1	N1	A1	N1	A1
0.100	0.341	0.100	0.254	0.100	34.06
0.200	0.598	0.200	0.462	0.200	39.33
0.300	0.783	0.300	0.631	0.300	24.03
0.400	0.907	0.400	0.765	0.400	18.52
0.500	0.981	0.500	0.870	0.500	12.72
0.600	1.013	0.600	0.936	0.600	8.27
0.700	1.014	0.700	0.969	0.700	4.69
0.800	0.995	0.800	0.972	0.800	2.34
0.900	0.972	0.900	0.976	0.900	-0.39
			1.084		-0.34

ATIVIDADES E COEFICIENTES DE ATIVIDADE DO METAL 2

ESTE TRABALHO		LITERATURA		DIFERENÇA PERCENTUAL	
N1	A2	N1	A2	N1	A2
0.100	0.906	0.100	0.905	0.100	0.13
0.200	0.824	0.200	0.818	0.200	0.79
0.300	0.755	0.300	0.739	0.300	2.17
0.400	0.698	0.400	0.667	0.400	4.49
0.500	0.656	0.500	0.601	0.500	9.11
0.600	0.631	0.600	0.550	0.600	12.69
0.700	0.631	0.700	0.517	0.700	21.98
0.800	0.671	0.800	0.515	0.800	30.29
0.900	0.764	0.900	0.494	0.900	54.75
			4.938		54.81

ENTALPIAS E ENTROPIAS PARCIAIS MOLARES DO METAL 1

ESTE TRABALHO		LITERATURA		DIFERENÇA PERCENTUAL	
N1	DH1	DS1	DH1	N1	DH1
0.100	133.	2.203	2820.	0.100	-55.44
0.200	311.	1.379	2582.	0.200	-62.22
0.300	459.	1.012	2176.	0.300	-68.28
0.400	567.	0.863	1778.	0.400	-70.31
0.500	626.	0.756	1481.	0.500	-71.17
0.600	672.	0.687	1164.	0.600	-67.75
0.700	677.	0.597	889.	0.700	-55.73
0.800	598.	0.455	641.	0.800	-43.87
0.900	164.	0.244	374.	0.900	-29.42
			974.		-17.81
			0.160		52.23

ENTALPIAS E ENTROPIAS PARCIAIS MOLARES DO METAL 2

ESTE TRABALHO		LITERATURA		DIFERENÇA PERCENTUAL	
N1	DH2	DS2	DH2	N1	DH2
0.100	-11.	0.186	16.	0.100	-166.01
0.200	-42.	0.336	77.	0.200	-159.33
0.300	-91.	0.454	215.	0.300	-142.22
0.400	-149.	0.543	435.	0.400	-136.57
0.500	-195.	0.614	669.	0.500	-129.24
0.600	-190.	0.699	1134.	0.600	-116.72
0.700	-40.	0.700	2486.	0.700	-102.10
0.800	454.	1.313	2966.	0.800	-86.59
0.900	1801.	2.596	4370.	0.900	-59.80
			6.408		-59.48



APÊNDICE XIX

RESULTADOS FORNECIDOS PELO ALGORÍTMO, PARA O SISTEMA  
Zn-Bi, UTILIZANDO-SE DADOS EXPERIMENTAIS DE SPRING-  
ROMANOFF<sup>(14)</sup>



SISTEMA ZINCO - BISMUTO

METAL 1 = ZINCO

METAL 2 = BISMUTO

PONTOS EXPERIMENTAIS NO MG CONSIDERADOS DE SPRING-RODANOFF

CONSTANTES DA EQUAÇÃO DE LUNSDEN

EPSIL = -2839,55  
 SIGMA = -4,00  
 FI = 3,76  
 ZETA = 4838,30

PONTOS NO MISCIBILITY GAP	TC	NIE	NZE	NID	N2D	AI	A2
	400.0	0.9908	0.1092	0.3416	0.6584	0.9271	0.7334
	410.0	0.9901	0.0099	0.3454	0.6546	0.9316	0.7313
	420.0	0.9893	0.0107	0.3513	0.6487	0.9310	0.7292
	430.0	0.9884	0.0116	0.3563	0.6437	0.9303	0.7275
	440.0	0.9875	0.0125	0.3613	0.6387	0.9297	0.7257
	450.0	0.9865	0.0135	0.3664	0.6336	0.9290	0.7238
	460.0	0.9855	0.0145	0.3715	0.6285	0.9283	0.7219
	470.0	0.9844	0.0156	0.3767	0.6233	0.9276	0.7201
	480.0	0.9833	0.0167	0.3820	0.6180	0.9268	0.7183
	490.0	0.9820	0.0180	0.3874	0.6126	0.9260	0.7162
	500.0	0.9807	0.0193	0.3928	0.6072	0.9252	0.7146
	510.0	0.9794	0.0206	0.3983	0.6017	0.9243	0.7129
	520.0	0.9779	0.0221	0.4040	0.5960	0.9235	0.7109
	530.0	0.9763	0.0237	0.4097	0.5903	0.9225	0.7092
	540.0	0.9747	0.0253	0.4155	0.5845	0.9215	0.7075
	550.0	0.9729	0.0271	0.4214	0.5786	0.9206	0.7058
	560.0	0.9711	0.0289	0.4274	0.5726	0.9196	0.7038
	570.0	0.9691	0.0309	0.4335	0.5665	0.9186	0.7023
	580.0	0.9670	0.0330	0.4398	0.5602	0.9175	0.7006
	590.0	0.9648	0.0352	0.4462	0.5538	0.9164	0.6988
	600.0	0.9624	0.0376	0.4528	0.5472	0.9152	0.6972
	610.0	0.9599	0.0401	0.4595	0.5405	0.9141	0.6956
	620.0	0.9572	0.0429	0.4663	0.5337	0.9128	0.6941
	630.0	0.9543	0.0467	0.4733	0.5267	0.9116	0.6924
	640.0	0.9514	0.0506	0.4806	0.5194	0.9103	0.6904
	650.0	0.9480	0.0550	0.4880	0.5120	0.9090	0.6893
	660.0	0.9445	0.0592	0.4957	0.5043	0.9076	0.6875
	670.0	0.9408	0.0635	0.5036	0.4964	0.9062	0.6857
	680.0	0.9366	0.0683	0.5117	0.4883	0.9048	0.6837
	690.0	0.9323	0.0737	0.5200	0.4802	0.9033	0.6816
	700.0	0.9275	0.0795	0.5285	0.4719	0.9018	0.6793
	710.0	0.9223	0.0858	0.5372	0.4635	0.9002	0.6767
	720.0	0.9168	0.0926	0.5461	0.4550	0.8986	0.6739
	730.0	0.9106	0.0999	0.5552	0.4462	0.8970	0.6705
	740.0	0.9038	0.1076	0.5646	0.4371	0.8954	0.6669
	750.0	0.8966	0.1158	0.5743	0.4276	0.8938	0.6624
	760.0	0.8887	0.1245	0.5844	0.4179	0.8922	0.6572
	770.0	0.8802	0.1337	0.5948	0.4080	0.8906	0.6515
	780.0	0.8713	0.1434	0.6055	0.3978	0.8890	0.6453
	790.0	0.8619	0.1536	0.6165	0.3873	0.8874	0.6386
	800.0	0.8523	0.1643	0.6278	0.3766	0.8858	0.6314
	810.0	0.8426	0.1756	0.6394	0.3657	0.8842	0.6237
	820.0	0.8331	0.1879	0.6513	0.3546	0.8826	0.6155
		0.7491	0.2109	0.7137	0.2863	0.8405	0.6557

CENTRO DE COMPUTAÇÃO DA U.F.M.G.

PONTOS NA LINHA LIQUIDOS

LADO ESQUERDO SUPERIOR

TC	N1	N2	A1	A2
419.17	0.9903E 00	0.7600E-03	0.9993E 00	0.6467E-01
418.80	0.9986E 00	0.1400E-02	0.9926E 00	0.1268E 00
418.44	0.9979E 00	0.2100E-02	0.9980E 00	0.1565E 00
418.07	0.9972E 00	0.2800E-02	0.9973E 00	0.2438E 00
417.75	0.9965E 00	0.3500E-02	0.9967E 00	0.2980E 00
417.42	0.9958E 00	0.4200E-02	0.9961E 00	0.3517E 00
417.10	0.9951E 00	0.4900E-02	0.9955E 00	0.4025E 00
416.78	0.9944E 00	0.5600E-02	0.9949E 00	0.4511E 00
416.47	0.9937E 00	0.6300E-02	0.9943E 00	0.4978E 00
416.17	0.9930E 00	0.7000E-02	0.9937E 00	0.5424E 00
415.87	0.9923E 00	0.7700E-02	0.9932E 00	0.5855E 00

LADO ESQUERDO INFERIOR

TC	N1	N2	A1	A2
432.23	0.3961E 00	0.6139E 00	0.1023E 01	0.7132E 00
415.99	0.3710E 00	0.6490E 00	0.9934E 00	0.7294E 00
396.07	0.3159E 00	0.6841E 00	0.9960E 00	0.7477E 00
372.08	0.2598E 00	0.7192E 00	0.9100E 00	0.7679E 00
343.60	0.2457E 00	0.7543E 00	0.8539E 00	0.7900E 00
310.16	0.2106E 00	0.7894E 00	0.7863E 00	0.8142E 00
271.25	0.1755E 00	0.8245E 00	0.7052E 00	0.8404E 00
226.19	0.1404E 00	0.8596E 00	0.6096E 00	0.8657E 00

LADO DIREITO

TC	N1	N2	A1	A2
269.62	0.7600E-02	0.9924E 00	0.3655E-01	0.9924E 00
267.92	0.1528E-01	0.9849E 00	0.7261E-01	0.9849E 00
266.22	0.2280E-01	0.9772E 00	0.1082E 00	0.9775E 00
264.54	0.3040E-01	0.9695E 00	0.1433E 00	0.9700E 00
262.86	0.3800E-01	0.9620E 00	0.1779E 00	0.9627E 00
261.20	0.4560E-01	0.9544E 00	0.2121E 00	0.9554E 00
259.54	0.5320E-01	0.9468E 00	0.2458E 00	0.9482E 00
257.90	0.6080E-01	0.9392E 00	0.2791E 00	0.9410E 00
256.26	0.6840E-01	0.9316E 00	0.3119E 00	0.9339E 00
254.64	0.7600E-01	0.9240E 00	0.3442E 00	0.9268E 00
253.02	0.8360E-01	0.9164E 00	0.3761E 00	0.9198E 00

PONTOS PRINCIPAIS DO DIAGRAMA

	ESTE TRABALHO		LITERATURA		DIFERENÇA PERCENTUAL	
	TC	N1	TC	N1	TC	N1
PONTO CRITICO	823.6	0.7556E 00	605.0	0.850E 00	0.156E 00	36.14
MONOTETICO ESQUERDO	415.6	0.104E-01	416.0	0.994E 00	0.600E-02	-0.44
MONOTETICO DIREITO	415.1	0.748E 00	416.0	0.370E 00	0.630E 00	-0.22
EUTETICO	239.6	0.150E 00	234.5	0.810E-01	0.919E 00	-5.87
						85.60
						-7.55

CENTRO DE COMPUTAÇÃO DA U.F.M.G.



TERMODINAMICA  
TEMPERATURA = 873.0GRAUS KELVIN

ATIVIDADES E COEFICIENTES DE ATIVIDADE DO METAL 1  
ESTE TRABALHO LITERATURA

ESTE TRABALHO			LITERATURA			DIFERENÇA PERCENTUAL		
N1	A1	GAMA1	N1	A1	GAMA1	N1	A1	GAMA1
0.100	0.380	3.797	0.100	0.259	2.591	0.100	46.62	46.56
0.200	0.648	3.242	0.200	0.465	2.323	0.200	39.46	39.58
0.300	0.828	2.762	0.300	0.630	2.098	0.300	31.50	31.63
0.400	0.939	2.348	0.400	0.759	1.898	0.400	23.73	23.70
0.500	0.997	1.994	0.500	0.860	1.721	0.500	15.93	15.87
0.600	1.016	1.694	0.600	0.930	1.551	0.600	9.27	9.20
0.700	1.009	1.441	0.700	0.969	1.384	0.700	4.11	4.13
0.800	0.987	1.234	0.800	0.976	1.219	0.800	1.11	1.10
0.900	0.968	1.075	0.900	0.980	1.089	0.900	-1.24	-1.25

ATIVIDADES E COEFICIENTES DE ATIVIDADE DO METAL 2  
ESTE TRABALHO LITERATURA

ESTE TRABALHO			LITERATURA			DIFERENÇA PERCENTUAL		
N1	A2	GAMA2	N1	A2	GAMA2	N1	A2	GAMA2
0.100	0.908	1.008	0.100	0.905	1.006	0.100	0.28	0.24
0.200	0.830	1.037	0.200	0.821	1.026	0.200	1.06	1.09
0.300	0.766	1.095	0.300	0.742	1.060	0.300	3.26	3.26
0.400	0.717	1.195	0.400	0.672	1.120	0.400	6.71	6.71
0.500	0.684	1.367	0.500	0.602	1.213	0.500	13.55	12.71
0.600	0.669	1.671	0.600	0.552	1.331	0.600	21.12	21.04
0.700	0.679	2.263	0.700	0.513	1.711	0.700	32.31	32.24
0.800	0.727	3.634	0.800	0.505	2.524	0.800	43.93	43.99
0.900	0.810	8.102	0.900	0.486	4.857	0.900	66.70	66.80

ENTALPIAS E ENTROPIAS PARCIAIS MOLARES DO METAL 1  
ESTE TRABALHO LITERATURA

ESTE TRABALHO			LITERATURA			DIFERENÇA PERCENTUAL		
N1	DH1	DS1	N1	DH1	DS1	N1	DH1	DS1
0.100	420.	2.405	0.100	3140.	6.280	0.100	-86.64	-61.71
0.200	562.	1.504	0.200	2635.	4.540	0.200	-78.68	-66.87
0.300	671.	1.143	0.300	2180.	3.420	0.300	-69.21	-66.58
0.400	740.	0.973	0.400	1770.	2.580	0.400	-59.19	-62.30
0.500	758.	0.875	0.500	1400.	1.900	0.500	-45.83	-53.27
0.600	716.	0.788	0.600	1050.	1.350	0.600	-31.86	-41.65
0.700	602.	0.672	0.700	730.	0.900	0.700	-17.57	-25.35
0.800	413.	0.499	0.800	420.	0.530	0.800	-1.69	-5.79
0.900	169.	0.259	0.900	170.	0.230	0.900	-0.53	12.49

ENTALPIAS E ENTROPIAS PARCIAIS MOLARES DO METAL 2  
ESTE TRABALHO LITERATURA

ESTE TRABALHO			LITERATURA			DIFERENÇA PERCENTUAL		
N1	DH2	DS2	N1	DH2	DS2	N1	DH2	DS2
0.100	-9.	0.193	0.100	30.	0.230	0.100	-129.22	-20.55
0.200	-34.	0.332	0.200	120.	0.530	0.200	-128.08	-37.30
0.300	-70.	0.449	0.300	270.	0.900	0.300	-125.90	-50.10
0.400	-106.	0.539	0.400	490.	1.350	0.400	-121.69	-60.07
0.500	-120.	0.619	0.500	790.	1.900	0.500	-115.16	-67.43
0.600	-64.	0.726	0.600	1220.	2.580	0.600	-105.27	-71.85
0.700	154.	0.947	0.700	1850.	3.420	0.700	-91.56	-72.31
0.800	741.	1.483	0.800	2780.	4.540	0.800	-73.34	-67.33
0.900	2197.	2.935	0.900	4230.	6.280	0.900	-48.06	-53.26

TEMPERATURA = 873.0GRAUS KELVIN



ATIVIDADES E COEFICIENTES DE ATIVIDADE DO METAL 1

ESTE TRABALHO		LITERATURA		DIFERENÇA PERCENTUAL	
NI	AI	NI	AI	NI	AI
0.100	0.380	0.100	0.294	0.100	49.51
0.200	0.648	0.200	0.462	0.200	40.36
0.300	0.828	0.300	0.631	0.300	31.29
0.400	0.939	0.400	0.765	0.400	22.75
0.500	0.997	0.500	0.870	0.500	14.60
0.600	1.016	0.600	0.935	0.600	8.57
0.700	1.009	0.700	0.989	0.700	4.11
0.800	0.997	0.800	1.034	0.800	1.53
0.900	0.968	0.900	1.075	0.900	-0.80

ATIVIDADES E COEFICIENTES DE ATIVIDADE DO METAL 2

ESTE TRABALHO		LITERATURA		DIFERENÇA PERCENTUAL	
NI	A2	NI	A2	NI	A2
0.100	0.908	0.100	0.905	0.100	0.28
0.200	0.830	0.200	0.818	0.200	1.43
0.300	0.766	0.300	0.739	0.300	3.48
0.400	0.717	0.400	0.667	0.400	7.51
0.500	0.684	0.500	0.601	0.500	13.74
0.600	0.669	0.600	0.550	0.600	21.56
0.700	0.679	0.700	0.517	0.700	31.29
0.800	0.727	0.800	0.515	0.800	41.16
0.900	0.810	0.900	0.494	0.900	64.00

ENTALPIAS E ENTROPIAS PARCIAIS MOLARES DO METAL 1

ESTE TRABALHO		LITERATURA		DIFERENÇA PERCENTUAL	
NI	DH1	NI	DH1	NI	DH1
0.100	2.405	0.100	2920.	0.100	-85.63
0.200	4.20.	0.200	2582.	0.200	-79.25
0.300	6.71.	0.300	2176.	0.300	-69.15
0.400	7.40.	0.400	1775.	0.400	-58.31
0.500	7.58.	0.500	1481.	0.500	-48.79
0.600	7.16.	0.600	1104.	0.600	-35.19
0.700	6.02.	0.700	686.	0.700	-12.28
0.800	4.13.	0.800	341.	0.800	21.09
0.900	1.69.	0.900	97.	0.900	74.32

ENTALPIAS E ENTROPIAS PARCIAIS MOLARES DO METAL 2

ESTE TRABALHO		LITERATURA		DIFERENÇA PERCENTUAL	
NI	DH2	NI	DH2	NI	DH2
0.100	-9.	0.100	19.	0.100	-154.78
0.200	-34.	0.200	77.	0.200	-143.76
0.300	-70.	0.300	215.	0.300	-132.52
0.400	-106.	0.400	430.	0.400	-126.72
0.500	-120.	0.500	669.	0.500	-117.99
0.600	-64.	0.600	1134.	0.600	-105.67
0.700	154.	0.700	1923.	0.700	-91.87
0.800	741.	0.800	2966.	0.800	-75.01
0.900	2197.	0.900	4370.	0.900	-49.73

## APÊNDICE XX

Valores experimentais de temperatura e composição sobre a LLRIL, de WITTIG & KEIL<sup>(25)</sup>, para o sistema Al-Bi.

$T^{\circ}C$	$N_{Al}^E$	$N_{Al}^D$
677	0,9870	0,1723
704	0,9854	0,1894
809	0,9672	0,2823

## APÊNDICE XXI

Valores experimentais de temperatura e composição sobre a LLRIL, de MARTIN-GARIN et alii<sup>(29)</sup>, para o sistema Al-Bi.

$T^{\circ}\text{C}$	$N_{\text{Al}}^{\text{E}}$	$N_{\text{Al}}^{\text{D}}$
691	0,9910	0,1632
733	0,9899	0,2254
817	0,9827	0,2931
919	0,9507	0,4000

## APÊNDICE XXII

Valores experimentais de temperatura e composição sobre a LLRIL, de PREDEL & SANDIG<sup>(23)</sup>, para o sistema Al-Bi .

$T^{\circ}\text{C}$	$N_{\text{Al}}^{\text{E}}$	$N_{\text{Al}}^{\text{D}}$
855	0,9777	0,33
930	0,9616	0,44
1000	0,9240	0,62



APÊNDICE XXIII

RESULTADOS FORNECIDOS PELO ALGORITMO, PARA O SISTEMA  
A1-B1, UTILIZANDO-SE DADOS EXPERIMENTAIS DE WITTIG  
& KEIL (25)

SISTEMA ALUMINIO - BISMUTO

METAL 1 = ALUMINIO

METAL 2 = BISMUTO

PONTOS EXPERIMENTAIS NO MG CONSIDERADOS DE WITTIG-KEIL

CONSTANTES DA EQUACAO DE LUMSDEN  
 EPSIL = 5334.71  
 SIGMA = 0.43  
 FI = 0.73  
 ZETA = 2055.33

PONTOS NO MISCIRILITY GAP

TC	N1E	N2E	N1O	N2O	A1	A2
640.0	0.9974	0.0096	0.1471	0.9529	0.9915	0.8831
650.0	0.9896	0.0104	0.1534	0.8466	0.9909	0.8790
660.0	0.9898	0.0112	0.1599	0.9401	0.9903	0.8748
670.0	0.9880	0.0123	0.1666	0.8334	0.9897	0.8704
680.0	0.9871	0.0129	0.1735	0.8265	0.9890	0.8660
690.0	0.9862	0.0138	0.1805	0.8195	0.9883	0.8616
700.0	0.9852	0.0148	0.1878	0.8122	0.9876	0.8567
710.0	0.9841	0.0159	0.1953	0.8047	0.9869	0.8525
720.0	0.9830	0.0170	0.2030	0.7970	0.9860	0.8477
730.0	0.9819	0.0181	0.2108	0.7892	0.9852	0.8429
740.0	0.9806	0.0194	0.2190	0.7810	0.9844	0.8382
750.0	0.9793	0.0207	0.2273	0.7727	0.9835	0.8335
760.0	0.9779	0.0221	0.2359	0.7641	0.9826	0.8283
770.0	0.9763	0.0237	0.2447	0.7553	0.9816	0.8234
780.0	0.9748	0.0252	0.2538	0.7462	0.9806	0.8186
790.0	0.9731	0.0269	0.2631	0.7369	0.9796	0.8134
800.0	0.9713	0.0287	0.2728	0.7272	0.9785	0.8082
810.0	0.9694	0.0306	0.2827	0.7173	0.9774	0.8029
820.0	0.9673	0.0327	0.2928	0.7072	0.9763	0.7978
830.0	0.9651	0.0349	0.3033	0.6967	0.9751	0.7926
840.0	0.9629	0.0371	0.3142	0.6858	0.9739	0.7870
850.0	0.9604	0.0396	0.3253	0.6747	0.9726	0.7817
860.0	0.9577	0.0423	0.3368	0.6632	0.9713	0.7764
870.0	0.9549	0.0451	0.3487	0.6513	0.9700	0.7707
880.0	0.9518	0.0482	0.3610	0.6390	0.9686	0.7653
890.0	0.9486	0.0514	0.3737	0.6263	0.9672	0.7596
900.0	0.9450	0.0550	0.3868	0.6132	0.9657	0.7540
910.0	0.9413	0.0587	0.4006	0.5994	0.9642	0.7480
920.0	0.9370	0.0630	0.4147	0.5853	0.9626	0.7425
930.0	0.9325	0.0675	0.4294	0.5706	0.9610	0.7366
940.0	0.9277	0.0723	0.4449	0.5551	0.9594	0.7307
950.0	0.9222	0.0778	0.4610	0.5390	0.9577	0.7248
960.0	0.9163	0.0837	0.4780	0.5220	0.9559	0.7187
970.0	0.9097	0.0903	0.4958	0.5042	0.9541	0.7127
980.0	0.9022	0.0978	0.5148	0.4852	0.9523	0.7066

CENTRO DE COMPUTAÇÃO DA U.F.M.G.



PONTOS NA LINHA LIQUIDUS

LADO ESQUERDO SUPERIOR

TC	NI	N2	A1	A2	
990.0	0.8938	0.1762	0.5152	0.4448	0.9504
1000.0	0.8838	0.1162	0.5570	0.4430	0.9484
1010.0	0.8719	0.1281	0.5607	0.4193	0.9464
1020.0	0.8580	0.1420	0.6080	0.3920	0.9443
1030.0	0.8393	0.1637	0.6195	0.3625	0.9422
1040.0	0.8137	0.1863	0.6835	0.3165	0.9400

TC	NI	N2	A1	A2
658.71	0.9095 00	0.2054E-01	0.9095 00	0.2054E-01
658.57	0.9095 00	0.3999E-03	0.9095 00	0.4001E-01
658.44	0.9095 00	0.2100E-03	0.9095 00	0.4111E-01
658.31	0.9095 00	0.9095E-03	0.9095 00	0.8115E-01
658.18	0.9095 00	0.1000E-02	0.9095 00	0.1010E 00
658.05	0.9098E 00	0.1200E-02	0.9095 00	0.1120E 00
657.92	0.9098E 00	0.1673E-02	0.9095 00	0.1120E 00
657.79	0.9098E 00	0.1673E-02	0.9095 00	0.1120E 00
657.66	0.9098E 00	0.1800E-02	0.9095 00	0.1120E 00
657.53	0.9098E 00	0.2000E-02	0.9095 00	0.1179E 00
657.40	0.9098E 00	0.2200E-02	0.9095 00	0.2168E 00

LADO ESQUERDO INFERIOR

TC	NI	N2	A1	A2
669.72	0.1749E 00	0.8251E 00	0.1016E 01	0.8659E 00
666.18	0.1590E 00	0.9415E 00	0.9095E 00	0.8755E 00
646.95	0.1431E 00	0.8569E 00	0.9733E 00	0.8856E 00
623.85	0.1275E 00	0.8728E 00	0.9095E 00	0.9092E 00
604.40	0.1113E 00	0.8887E 00	0.9175E 00	0.9072E 00
582.10	0.9445E-01	0.9045E 00	0.8829E 00	0.9188E 00
566.16	0.7950E-01	0.9204E 00	0.8421E 00	0.9308E 00
525.33	0.6760E-01	0.9364E 00	0.7829E 00	0.9434E 00
487.41	0.4775E-01	0.9523E 00	0.7146E 00	0.9565E 00
437.83	0.3190E-01	0.9692E 00	0.6466E 00	0.9701E 00
363.67	0.1590E-01	0.9841E 00	0.5256E 00	0.9847E 00
-33.17	0.5960E-06	0.1000E 01	0.1828E-01	0.1000E 01

LADO DIREITO

TC	NI	N2	A1	A2
271.20	0.6000E-03	0.9994E 00	0.4270E-01	0.9994E 00
271.07	0.1200E-02	0.9988E 00	0.9520E-01	0.9988E 00
270.93	0.1900E-02	0.9982E 00	0.1275E 00	0.9982E 00
270.80	0.2400E-02	0.9976E 00	0.1696E 00	0.9976E 00
270.67	0.3000E-02	0.9970E 00	0.2115E 00	0.9970E 00
270.53	0.3400E-02	0.9964E 00	0.2532E 00	0.9964E 00
270.40	0.4200E-02	0.9958E 00	0.2946E 00	0.9958E 00
270.27	0.4800E-02	0.9952E 00	0.3359E 00	0.9952E 00
270.14	0.5600E-02	0.9946E 00	0.3770E 00	0.9946E 00
270.00	0.6000E-02	0.9940E 00	0.4178E 00	0.9940E 00
269.87	0.6600E-02	0.9934E 00	0.4585E 00	0.9934E 00

CENTRO DE COMPUTAÇÃO DA U.F.M.G.



PONTOS PRINCIPAIS DO DIAGRAMA

	ESTE TRABALHO			LITERATURA			DIFERENÇA PERCENTUAL		
	TC	N1	N2	TC	N1	N2	TC	N1	N2
PONTO CRITICO	1047.2	0.710E 00	0.290E 00	1053.0	0.825E 00	0.175E 00	-0.27	-13.94	-05.71
MONOTETICO ESQUERDO	654.2	0.989E 00	0.108E-01	657.9	0.994E 00	0.557E-02	-0.42	-0.53	95.67
MONOTETICO DIREITO	652.9	0.155E 00	0.845E 00	657.0	0.160E 00	0.840E 00	-0.62	-2.54	0.56
EUTETICO	272.3	-0.354E-02	0.100E 01	270.0	0.560E-02	0.994E 00	0.87	-163.30	0.92

TERMODINAMICA  
TEMPERATURA = 1173.0GRAUS KELVIN

ATIVIDADES E COEFICIENTES DE ATIVIDADE DO METAL 1

NI	ESTE TRABALHO			LITERATURA			DIFERENÇA PERCENTUAL		
	GAW1	A1	GAW2	NI	A1	GAW2	NI	A1	GAW2
0.100	0.447	0.410	0.410	0.441	0.410	0.410	0.100	1.44	1.44
0.200	0.757	0.200	0.200	0.751	0.200	0.200	0.200	-3.13	-3.13
0.300	0.860	0.300	0.300	0.815	0.300	0.300	0.300	-2.09	-2.09
0.400	0.973	0.400	0.400	0.964	0.400	0.400	0.400	0.09	0.09
0.500	1.084	0.500	0.500	1.029	0.500	0.500	0.500	4.20	4.20
0.600	1.084	0.600	0.600	1.064	0.600	0.600	0.600	4.17	4.15
0.700	0.837	0.700	0.700	0.864	0.700	0.700	0.700	2.92	2.43
0.800	0.966	0.800	0.800	1.208	0.800	0.800	0.800	0.25	0.25
0.900	0.957	0.900	0.900	1.064	0.900	0.900	0.900	-0.68	-0.67

ATIVIDADES E COEFICIENTES DE ATIVIDADE DO METAL 2

NI	ESTE TRABALHO			LITERATURA			DIFERENÇA PERCENTUAL		
	GAW2	A2	GAW2	NI	A2	GAW2	NI	A2	GAW2
0.100	0.910	0.100	0.100	0.913	0.100	0.100	0.100	-0.32	-0.27
0.200	0.839	0.200	0.200	0.827	0.200	0.200	0.200	1.44	1.44
0.300	0.786	0.300	0.300	0.776	0.300	0.300	0.300	1.32	1.28
0.400	0.750	0.400	0.400	0.756	0.400	0.400	0.400	-0.76	-0.76
0.500	0.732	0.500	0.500	0.756	0.500	0.500	0.500	-3.19	-3.19
0.600	0.733	0.600	0.600	0.756	0.600	0.600	0.600	-3.06	-3.06
0.700	0.757	0.700	0.700	0.756	0.700	0.700	0.700	0.14	0.14
0.800	0.808	0.800	0.800	0.756	0.800	0.800	0.800	6.68	6.68
0.900	0.845	0.900	0.900	0.756	0.900	0.900	0.900	11.81	11.81

ENTALPIAS E ENTROPIAS PARCIAIS MOLARES DO METAL 1

NI	ESTE TRABALHO			LITERATURA			DIFERENÇA PERCENTUAL		
	DH1	DS1	DH1	NI	DH1	DS1	NI	DH1	DS1
0.100	4497.	5.432	0.100	4120.	5.439	0.100	0.100	9.14	5.70
0.200	3845.	3.910	0.200	3648.	3.671	0.200	0.200	5.69	6.52
0.300	3221.	2.977	0.300	3532.	3.188	0.300	0.300	-8.80	-6.61
0.400	2629.	2.295	0.400	3147.	2.754	0.400	0.400	-16.45	-14.66
0.500	2072.	1.758	0.500	2589.	2.265	0.500	0.500	-19.96	-22.39
0.600	1551.	1.314	0.600	2031.	1.777	0.600	0.600	-23.63	-26.06
0.700	1063.	0.932	0.700	1473.	1.286	0.700	0.700	-27.82	-27.72
0.800	609.	0.587	0.800	915.	0.801	0.800	0.800	-33.67	-26.74
0.900	211.	0.266	0.900	357.	0.312	0.900	0.900	-60.92	-14.68

ENTALPIAS E ENTROPIAS PARCIAIS MOLARES DO METAL 2

NI	ESTE TRABALHO			LITERATURA			DIFERENÇA PERCENTUAL		
	DH2	DS2	DH2	NI	DH2	DS2	NI	DH2	DS2
0.100	36.	0.218	0.100	31.	0.206	0.100	0.100	15.90	5.71
0.200	151.	0.477	0.200	117.	0.477	0.200	0.200	29.48	0.06
0.300	360.	0.785	0.300	154.	0.635	0.300	0.300	133.95	23.64
0.400	680.	1.151	0.400	427.	0.820	0.400	0.400	59.29	25.08
0.500	1138.	1.590	0.500	1293.	1.058	0.500	0.500	-12.02	-4.10
0.600	1778.	2.133	0.600	2158.	1.296	0.600	0.600	-10.96	-10.96
0.700	2691.	2.648	0.700	3024.	1.534	0.700	0.700	-11.00	-9.14
0.800	4075.	3.897	0.800	3889.	1.772	0.800	0.800	4.77	0.66
0.900	6399.	5.749	0.900	4755.	2.010	0.900	0.900	34.56	0.00

APÊNDICE XXIV

RESULTADOS FORNECIDOS PELO ALGORITMO, PARA O SISTEMA  
A1-B1, UTILIZANDO-SE DADOS EXPERIMENTAIS DE MARTIN-  
GARIN et alii<sup>(29)</sup>

## SISTEMA ALUMÍNIO - BISMUTO

METAL 1 = ALUMÍNIO

METAL 2 = BISMUTO

PONTOS EXPERIMENTAIS NO MG CONSIDERADOS DE MARTIN-GARIN

CONSTANTES DA EQUAÇÃO DE LUMSDEN    EPSIL = 4576.54  
 SIGMA = 0.78  
 FI = 1.60  
 ZETA = .3829.49

## PONTOS NO MISCIBILITY GAP

TC	N1E	N2E	N1D	N2D	A1	A2
640.0	0.9948	0.0052	0.1427	0.8573	0.0952	0.8929
650.0	0.9943	0.0057	0.1490	0.8510	0.0946	0.8784
660.0	0.9739	0.0261	0.1555	0.8445	0.0944	0.8739
670.0	0.9433	0.0567	0.1622	0.8378	0.0939	0.8674
680.0	0.9127	0.0873	0.1691	0.8309	0.0934	0.8618
690.0	0.8921	0.1079	0.1761	0.8239	0.0929	0.8563
700.0	0.8915	0.1085	0.1834	0.8166	0.0924	0.8507
710.0	0.8908	0.1092	0.1909	0.8091	0.0919	0.8452
720.0	0.8900	0.1100	0.1986	0.8014	0.0913	0.8397
730.0	0.8892	0.1108	0.2065	0.7935	0.0907	0.8342
740.0	0.8884	0.1116	0.2146	0.7854	0.0900	0.8287
750.0	0.8875	0.1125	0.2230	0.7770	0.0893	0.8232
760.0	0.8865	0.1135	0.2316	0.7684	0.0886	0.8177
770.0	0.8854	0.1146	0.2404	0.7596	0.0879	0.8122
780.0	0.8843	0.1157	0.2495	0.7505	0.0871	0.8067
790.0	0.8832	0.1168	0.2588	0.7412	0.0863	0.8012
800.0	0.8819	0.1181	0.2684	0.7316	0.0854	0.7957
810.0	0.8806	0.1194	0.2783	0.7217	0.0845	0.7902
820.0	0.8791	0.1208	0.2885	0.7115	0.0836	0.7847
830.0	0.8776	0.1224	0.2990	0.7010	0.0826	0.7792
840.0	0.8759	0.1241	0.3097	0.6903	0.0816	0.7737
850.0	0.8742	0.1258	0.3208	0.6792	0.0806	0.7682
860.0	0.8723	0.1277	0.3322	0.6678	0.0795	0.7627
870.0	0.8702	0.1298	0.3440	0.6560	0.0783	0.7572
880.0	0.8681	0.1319	0.3561	0.6439	0.0772	0.7517
890.0	0.8657	0.1343	0.3686	0.6314	0.0759	0.7462
900.0	0.8632	0.1368	0.3816	0.6184	0.0746	0.7407
910.0	0.8604	0.1396	0.3950	0.6050	0.0733	0.7352
920.0	0.8574	0.1426	0.4088	0.5912	0.0719	0.7297
930.0	0.8541	0.1459	0.4231	0.5769	0.0705	0.7242
940.0	0.8506	0.1494	0.4379	0.5621	0.0690	0.7187
950.0	0.8467	0.1533	0.4534	0.5466	0.0674	0.7132
960.0	0.8425	0.1575	0.4695	0.5305	0.0658	0.7077
970.0	0.8378	0.1622	0.4863	0.5137	0.0642	0.7022
980.0	0.8326	0.1674	0.5039	0.4961	0.0625	0.6967
990.0	0.8266	0.1734	0.5223	0.4777	0.0607	0.6912
1000.0	0.8200	0.1800	0.5419	0.4581	0.0589	0.6857
1010.0	0.8124	0.1876	0.5627	0.4373	0.0569	0.6802



PONTOS NA LINHA LIQUIDOS

LADO ESQUERDO SUPERIOR

TC	NI	N2	A1	A2	0-9549	0-6671
1020.0	0.9098E 00	0.2005E-03	0.9098E 00	0.1725E-01	0.9549	0.6671
1030.0	0.8893	0.3095E-03	0.9826E 00	0.6765E-01	0.5579	0.5548
1040.0	0.8807	0.4005E-03	0.9844E 00	0.1160E 00	0.9508	0.5475
1050.0	0.8935	0.5005E-03	0.9922E 00	0.1338E 00	0.5404	0.5404
1060.0	0.8372	0.1500E-02	0.9998E 00	0.1564E 00	0.5464	0.6331
658.71	0.9946E 00	0.1204E-02	0.9998E 00	0.2307E 00		
658.57	0.9928E 00	0.1400E-02	0.9998E 00	0.2624E 00		
658.44	0.9928E 00	0.1600E-02	0.9998E 00	0.2938E 00		
658.31	0.9942E 00	0.1800E-02	0.9998E 00	0.3248E 00		
658.18	0.9946E 00	0.2000E-02	0.9998E 00	0.3556E 00		
658.05	0.9988E 00	0.2200E-02	0.9998E 00			
657.92	0.9984E 00					
657.79	0.9984E 00					
657.66	0.9982E 00					
657.54	0.9980E 00					
657.41	0.9978E 00					

LADO ESQUERDO INFERIOR

TC	NI	N2	A1	A2
678.74	0.1694E 00	0.9306E 00	0.1018E 01	0.8651E 00
656.77	0.1545E 00	0.8462E 00	0.9959E 00	0.8752E 00
641.24	0.1384E 00	0.6614E 00	0.9736E 00	0.8456E 00
623.88	0.1232E 00	0.5768E 00	0.9474E 00	0.8085E 00
604.33	0.1078E 00	0.9923E 00	0.9174E 00	0.9073E 00
582.06	0.9245E-01	0.9078E 00	0.8829E 00	0.9195E 00
556.32	0.7707E-01	0.9238E 00	0.8424E 00	0.9317E 00
525.88	0.6160E-01	0.9384E 00	0.7938E 00	0.9443E 00
488.61	0.4620E-01	0.9538E 00	0.7334E 00	0.9573E 00
440.04	0.3695E-01	0.9692E 00	0.6533E 00	0.9709E 00
367.51	0.1540E-01	0.9846E 00	0.5320E 00	0.9851E 00
-25.87	0.5966E-06	0.1000E 01	0.2144E-01	0.1000E 01

LADO DIREITO

TC	NI	N2	A1	A2
271.20	0.4906E-03	0.9994E 00	0.4742E-01	0.9994E 00
271.07	0.1206E-02	0.9988E 00	0.9465E-01	0.9939E 00
270.93	0.1806E-02	0.9982E 00	0.1417E 00	0.9932E 00
270.80	0.2406E-02	0.9976E 00	0.1486E 00	0.9976E 00
270.67	0.3006E-02	0.9970E 00	0.2353E 00	0.9970E 00
270.53	0.3606E-02	0.9964E 00	0.2314E 00	0.9964E 00
270.40	0.4206E-02	0.9958E 00	0.3281E 00	0.9958E 00
270.27	0.4806E-02	0.9952E 00	0.3743E 00	0.9952E 00
270.13	0.5406E-02	0.9946E 00	0.4203E 00	0.9951E 00
270.00	0.6006E-02	0.9940E 00	0.4663E 00	0.9941E 00
269.87	0.6606E-02	0.9934E 00	0.5117E 00	0.9935E 00

PONTOS PRINCIPAIS DO DIAGRAMA

	ESTE TRABALHO			LITERATURA			DIFERENÇA PERCENTUAL		
	TC	NI	NZ	TC	NI	NZ	TC	NI	NZ
PONTO CRÍTICO	1067.4	0.786E 00	0.214E 00	1050.0	0.825E 00	0.175E 00	1.65	-4.78	22.51
MONOTÉTICO ESQUERDO	655.9	0.894E 00	0.601E-02	657.0	0.994E 00	0.550E-02	-0.17	-0.05	9.70
MONOTÉTICO DIREITO	655.5	0.153E 00	0.847E 00	657.0	0.160E 00	0.840E 00	-0.23	-4.67	0.89
EUTÉTICO	272.7	-0.449E-12	0.106E 01	270.0	0.560E-02	0.994E 00	1.61	-170.94	1.01

TERMODINÂMICA

TEMPERATURA = 1173.0GRAUS KELVIN

ATIVIDADES E COEFICIENTES DE ATIVIDADE DO METAL 1

ESTE TRABALHO		LITERATURA		DIFERENÇA PERCENTUAL	
NI	GAVAL	AI	GAVAL	AI	GAVAL
0.100	0.430	0.100	0.410	0.100	-2.30
0.200	0.715	0.200	0.751	0.200	-4.77
0.300	0.991	0.300	0.915	0.300	2.62
0.400	1.098	0.400	0.964	0.400	2.47
0.500	1.032	0.500	0.958	0.500	6.72
0.600	1.013	0.600	0.964	0.600	7.10
0.700	1.013	0.700	0.964	0.700	5.11
0.800	0.985	0.800	0.964	0.800	2.13
0.900	0.965	0.900	0.964	0.900	0.98

ATIVIDADES E COEFICIENTES DE ATIVIDADE DO METAL 2

ESTE TRABALHO		LITERATURA		DIFERENÇA PERCENTUAL	
NI	GAVAZ	A2	GAVAZ	A2	GAVAZ
0.100	0.609	0.100	0.613	0.100	-0.64
0.200	0.815	0.200	0.827	0.200	-0.95
0.300	0.778	0.300	0.776	0.300	0.20
0.400	0.737	0.400	0.756	0.400	-2.57
0.500	0.713	0.500	0.756	0.500	-5.66
0.600	0.711	0.600	0.759	0.600	-5.95
0.700	0.737	0.700	0.758	0.700	-2.46
0.800	0.805	0.800	0.756	0.800	6.51
0.900	0.899	0.900	0.756	0.900	18.96

ENTALPIAS E ENTROPIAS PARCIAIS MOLARES DO METAL 1

ESTE TRABALHO		LITERATURA		DIFERENÇA PERCENTUAL	
NI	OS1	OS1	OS1	OS1	OS1
0.100	4.885	5.840	5.139	0.100	13.63
0.200	4.268	4.305	0.200	3.638	17.27
0.300	3.659	3.469	0.300	3.632	3.60
0.400	3.060	2.633	0.400	3.147	-2.75
0.500	2.472	2.051	0.500	2.589	-2.26
0.600	1.894	1.561	0.600	2.031	-4.51
0.700	1.325	1.104	0.700	1.473	-1.27
0.800	771	0.694	0.800	915	-14.38
0.900	276	0.301	0.900	337	-24.37

ENTALPIAS E ENTROPIAS PARCIAIS MOLARES DO METAL 2

ESTE TRABALHO		LITERATURA		DIFERENÇA PERCENTUAL	
NI	OS2	OS2	OS2	OS2	OS2
0.100	33	0.218	0.100	31	2.52
0.200	143	0.490	0.200	117	22.20
0.300	347	0.796	0.300	156	225.35
0.400	671	1.100	0.400	227	444
0.500	1155	1.456	0.500	329	826
0.600	1667	2.269	0.600	474	1193
0.700	2214	3.104	0.700	672	1542
0.800	2814	4.172	0.800	949	1865
0.900	3474	5.651	0.900	1317	2157



APÊNDICE XXV

RESULTADOS FORNECIDOS PELO ALGORITMO, PARA O SISTEMA  
A1-B1, UTILIZANDO-SE DADOS EXPERIMENTAIS DE PREDEL &  
SANDIG<sup>(23)</sup>

## SISTEMA ALUMINIO - BISMUTO

METAL 1 = ALUMINIO

METAL 2 = BISMUTO

PONTOS EXPERIMENTAIS NO MG CONSIDERADOS DE PREDEL-SANDIG

0

CONSTANTES DA EQUACAO DE LUMSOEN    EPSIL    =    9966.07  
    SIGMA    =    5.87  
    FI        =    -0.83  
    ZETA    =    1489.56

## PONTOS NO MISCIBILITY GAP

TC	N1E	N2E	N1D	N2D	A1	A2
640.0	0.9965	0.8035	0.1020	0.8980	0.9367	0.9134
650.0	0.9962	0.8038	0.1085	0.8915	0.9364	0.9087
660.0	0.9959	0.8042	0.1154	0.8846	0.9361	0.9035
670.0	0.9954	0.8046	0.1225	0.8775	0.9357	0.8982
680.0	0.9949	0.8051	0.1300	0.8700	0.9353	0.8929
690.0	0.9944	0.8055	0.1378	0.8622	0.9349	0.8871
700.0	0.9939	0.8061	0.1460	0.8540	0.9344	0.8811
710.0	0.9933	0.8067	0.1545	0.8455	0.9339	0.8753
720.0	0.9927	0.8073	0.1634	0.8366	0.9334	0.8689
730.0	0.9920	0.8080	0.1727	0.8272	0.9329	0.8627
740.0	0.9913	0.8087	0.1823	0.8177	0.9323	0.8560
750.0	0.9906	0.8094	0.1924	0.8076	0.9317	0.8493
760.0	0.9897	0.8103	0.2029	0.7971	0.9311	0.8422
770.0	0.9889	0.8111	0.2138	0.7862	0.9304	0.8349
780.0	0.9879	0.8121	0.2251	0.7749	0.9297	0.8277
790.0	0.9869	0.8131	0.2369	0.7631	0.9289	0.8202
800.0	0.9858	0.8142	0.2491	0.7509	0.9281	0.8125
810.0	0.9846	0.8154	0.2618	0.7382	0.9273	0.8044
820.0	0.9833	0.8167	0.2750	0.7250	0.9264	0.7961
830.0	0.9819	0.8181	0.2887	0.7113	0.9255	0.7877
840.0	0.9805	0.8195	0.3028	0.6972	0.9245	0.7794
850.0	0.9789	0.8211	0.3175	0.6825	0.9236	0.7705
860.0	0.9772	0.8229	0.3327	0.6673	0.9225	0.7615
870.0	0.9753	0.8247	0.3484	0.6516	0.9214	0.7525
880.0	0.9733	0.8267	0.3647	0.6353	0.9203	0.7432
890.0	0.9711	0.8289	0.3815	0.6185	0.9191	0.7336
900.0	0.9687	0.8313	0.3988	0.6012	0.9178	0.7241
910.0	0.9661	0.8339	0.4169	0.5832	0.9165	0.7144
920.0	0.9634	0.8366	0.4353	0.5647	0.9152	0.7041
930.0	0.9602	0.8398	0.4545	0.5455	0.9138	0.6942
940.0	0.9569	0.8431	0.4743	0.5257	0.9124	0.6837
950.0	0.9531	0.8469	0.4947	0.5053	0.9108	0.6734
960.0	0.9490	0.8510	0.5160	0.4840	0.9093	0.6627
970.0	0.9443	0.8557	0.5379	0.4621	0.9077	0.6519
980.0	0.9391	0.8609	0.5608	0.4392	0.9060	0.6410

CENTRO DE COMPUTAÇÃO DA U.F.M.G.



CENTRO DE COMPUTAÇÃO DA U.F.M.G.



PONTOS NA LINHA LIQUIDUS

990.0	0.9331	0.0669	0.5846	0.4154	0.9643	0.6300
1000.0	0.9242	0.0758	0.6097	0.3903	0.9426	0.6198
1010.0	0.9181	0.0819	0.6363	0.3637	0.9108	0.6075
1020.0	0.9078	0.0922	0.6644	0.3356	0.9549	0.5963
1030.0	0.8950	0.1056	0.6959	0.3041	0.9570	0.5848
1040.0	0.8769	0.1231	0.7332	0.2665	0.9550	0.5732
1050.0	0.8532	0.1608	0.7602	0.2098	0.9529	0.5617

LADO ESQUERDO SUPERIOR

TC	NI	N2	A1	A2
658.71	0.9038E 00	0.2008E-03	0.9998E 00	0.6905E-01
659.57	0.9099E 00	0.4500E-03	0.9998E 00	0.6775E-01
659.44	0.9194E 00	0.6000E-03	0.9998E 00	0.1458E 00
659.31	0.9292E 00	0.8000E-03	0.9998E 00	0.1828E 00
658.18	0.9498E 00	0.1003E-02	0.9998E 00	0.2405E 00
658.05	0.9598E 00	0.1203E-02	0.9998E 00	0.2572E 00
657.92	0.9698E 00	0.1400E-02	0.9998E 00	0.3338E 00
657.79	0.9844E 00	0.1600E-02	0.9998E 00	0.3704E 00
657.67	0.9982E 00	0.1800E-02	0.9998E 00	0.4244E 00
657.54	0.9480E 00	0.2000E-02	0.9998E 00	0.4684E 00
657.41	0.9978E 00	0.2200E-02	0.9978E 00	0.5133E 00

LADO ESQUERDO INFERIOR

TC	NI	N2	A1	A2
667.89	0.1243E 00	0.3757E 00	0.1013E 01	0.8973E 00
656.61	0.1130E 00	0.4879E 00	0.9968E 00	0.9054E 00
643.98	0.1017E 00	0.8983E 00	0.9774E 00	0.9137E 00
630.67	0.8040E-01	0.8094E 00	0.9568E 00	0.9224E 00
614.48	0.7910E-01	0.8203E 00	0.9334E 00	0.9210E 00
596.75	0.6790E-01	0.9324E 00	0.9057E 00	0.9404E 00
576.22	0.5650E-01	0.9435E 00	0.8737E 00	0.9492E 00
561.84	0.4520E-01	0.9568E 00	0.8353E 00	0.9537E 00
521.69	0.3390E-01	0.7661E 00	0.7870E 00	0.9648E 00
481.75	0.2260E-01	0.9774E 00	0.7221E 00	0.9746E 00
420.32	0.1130E-01	0.9847E 00	0.6204E 00	0.9801E 00
38.52	0.5960E-06	0.1000E 01	0.6317E-01	0.1030E 01

LADO DIREITO

TC	NI	N2	A1	A2
271.30	0.6000E-03	0.9998E 00	0.1408E 00	0.9994E 00
271.07	0.1200E-02	0.9982E 00	0.3724E 00	0.9998E 00
270.96	0.1800E-02	0.9982E 00	0.5564E 00	0.9982E 00
270.90	0.2400E-02	0.9976E 00	0.7396E 00	0.9976E 00
270.67	0.3000E-02	0.9976E 00	0.9314E 00	0.9976E 00
270.34	0.3600E-02	0.9968E 00	0.1102E 01	0.9968E 00
270.41	0.4200E-02	0.9958E 00	0.1281E 01	0.9958E 00
270.27	0.4800E-02	0.9952E 00	0.1459E 01	0.9952E 00
270.15	0.5400E-02	0.9946E 00	0.1638E 01	0.9946E 00
270.02	0.6000E-02	0.9944E 00	0.1810E 01	0.9944E 00
269.89	0.6600E-02	0.9934E 00	0.1934E 01	0.9934E 00

PONTOS PRINCIPAIS DO DIAGRAMA

	ESTE TRABALHO		LITERATURA		DIFERENÇA PERCENTUAL	
	TC	N1	TC	N1	TC	N1
PONTO CRÍTICO	1051.2	0.811E 00	1059.0	0.825E 00	0.12	-1.21
MONOTÉTICO ESQUERDO	656.6	0.996E 00	657.0	0.994E 00	-0.66	0.14
MONOTÉTICO DIREITO	656.6	0.113E 00	657.0	0.102E 00	-0.06	-22.36
EUTÉTICO	269.5	0.878E-02	278.0	0.560E-02	0.994E 00	56.81
					-0.19	-0.32

TERMODINÂMICA  
TEMPERATURA = 1173.0 GRAUS KELVIN

ATIVIDADES E COEFICIENTES DE ATIVIDADE DO METAL 1

ESTE TRABALHO	LITERATURA		DIFERENÇA PERCENTUAL	
	GAMA1	GAMA1	N1	GAMA1
N1	0.466	0.441	0.100	-7.93
A1	0.688	0.751	0.200	-8.46
A2	0.871	0.915	0.300	-4.81
A3	0.979	0.984	0.400	1.55
A4	1.030	0.964	0.500	6.88
A5	1.041	0.964	0.600	7.95
A6	1.024	0.964	0.700	6.23
A7	0.993	0.964	0.800	3.06
A8	0.969	0.964	0.900	0.50

ATIVIDADES E COEFICIENTES DE ATIVIDADE DO METAL 2

ESTE TRABALHO	LITERATURA		DIFERENÇA PERCENTUAL	
	GAMA2	GAMA2	N1	GAMA2
N1	0.908	0.914	0.100	-0.55
A1	0.831	0.834	0.200	0.53
A2	0.770	0.790	0.300	-0.79
A3	0.724	0.726	0.400	-4.25
A4	0.695	0.756	0.500	-8.68
A5	0.687	0.890	0.600	-9.09
A6	0.710	0.756	0.700	-6.14
A7	0.779	0.896	0.800	3.06
A8	0.897	0.968	0.900	18.62

ENTALPIAS E ENTROPIAS PARCIAIS MOLARES DO METAL 1

ESTE TRABALHO	LITERATURA		DIFERENÇA PERCENTUAL	
	DS1	DS1	N1	DS1
N1	7317.	6129.	0.100	56.24
A1	6225.	3638.	0.200	64.84
A2	5172.	3532.	0.300	44.84
A3	4176.	3124.	0.400	32.52
A4	3298.	2484.	0.500	18.91
A5	2390.	2031.	0.600	16.01
A6	1961.	1473.	0.700	5.85
A7	455.	913.	0.800	-6.59
A8	280.	357.	0.900	-21.43

ENTALPIAS E ENTROPIAS PARCIAIS MOLARES DO METAL 2

ESTE TRABALHO	LITERATURA		DIFERENÇA PERCENTUAL	
	DS2	DS2	N1	DS2
N1	60.	31.	0.100	93.28
A1	254.	117.	0.200	116.69
A2	606.	154.	0.300	283.68
A3	1147.	427.	0.400	168.73
A4	1921.	1293.	0.500	49.56
A5	2992.	2158.	0.600	38.66
A6	4480.	3024.	0.700	43.62
A7	6622.	4852.	0.800	70.28
A8	9958.	4755.	0.900	109.42

## 11. LISTA DAS FIGURAS

Figura	Página
1. Diagrama de equilíbrio genérico para sistema com região de imiscibilidade líquida.....	16
2. Esquema dos dados de entrada e saída do algoritmo criado no presente trabalho.....	18
3. Curvas genéricas de atividade de dois metais em função da fração molar do metal 1 .....	26
4. Canto de diagrama de equilíbrio genérico, mostrando a solidificação do metal 1 .....	28
5. Aspecto genérico da linha liquidus, inclusive trechos imaginários .....	30
6. Diagrama de equilíbrio para o sistema Zn-Pb, mostrando a posição da LLRIL, calculada no presente trabalho, a partir de dados experimentais de dois autores .....	36
7. Diagrama de equilíbrio para o sistema Zn-Pb .....	40
8. Entalpia de mistura em função da fração molar de zinco, para o sistema Zn-Pb.....	45

Figura		Página
9.	Entropia de mistura em função da fração molar de zinco, para o sistema Zn-Pb.....	46
10.	Atividades de zinco e chumbo em função da fração molar de zinco, para o sistema Zn-Pb.....	51
11.	Diagrama de equilíbrio para o sistema Al-In.....	53
12.	Entalpia de mistura em função da fração molar de alumínio, para o sistema Al-In.....	56
13.	Entropia de mistura em função da fração molar de alumínio, para o sistema Al-In.....	57
14.	Detalhe do diagrama de equilíbrio Al-In, mostrando o ramo esquerdo da linha liquidus .....	61
15.	Logaritmo da fração molar de alumínio em função do inverso da temperatura , para o ramo esquerdo inferior e o ramo direito da linha liquidus, no sistema Al-In.....	62
16.	Atividades de alumínio e índio em função da fração molar de alumínio, para o sistema Al-In.....	63
17.	Diagrama de equilíbrio para o sistema Zn-Bi .....	66

Figura		Página
18.	Entalpia de mistura em função da fração molar de zinco, para o sistema Zn-Bi .....	69
19.	Entropia de mistura em função da fração molar de zinco, para o sistema Zn-Bi.....	70
20.	Atividades de zinco e bismuto em função da fração molar de zinco, para o sistema Zn-Bi.....	74
21.	Diagrama de equilíbrio para o sistema Al-Bi .....	76
22.	Entalpia de mistura em função da fração molar de alumínio, para o sistema Al-Bi .....	79
23.	Entropia de mistura em função da fração molar de alumínio, para o sistema Al-Bi .....	80
24.	Detalhe do diagrama de equilíbrio Al-Bi, mostrando o ramo esquerdo inferior e o ramo direito da linha liquidus..	83
25.	Logaritmo da fração molar de alumínio em função do inverso da temperatura, para o ramo esquerdo inferior e o ramo direito da linha liquidus, no sistema Al-Bi .....	84
26.	Atividades de alumínio e bismuto em função da fração molar de alumínio, para o sistema Al-Bi .....	86

## 12.LISTA DE TABELAS

Tabela	Página
I - Temperatura e composição críticas para o sistema zinco-chumbo.....	43.
II - Temperatura e composições monotéticas para o sistema zinco-chumbo....	49.
III - Temperatura e composição eutéticas para o sistema zinco-chumbo.....	49.
IV - Temperatura e composição críticas para o sistema alumínio-índio.....	54
V - Temperatura e composições monotéticas para o sistema alumínio-índio..	59
VI - Temperatura e composições monotéticas para o sistema zinco-bismuto...	72
VII - Temperatura e composição eutéticas para o sistema zinco-bismuto.....	72
VIII - Temperatura e composição críticas para o sistema alumínio-bismuto....	77
IX - Temperatura e composições monotéticas para o sistema alumínio-bismuto	82
X - Temperatura e composição críticas para o sistema alumínio-bismuto...	85



## 13. LISTA DE APÊNDICES

Apêndice		Página
I	Programa principal e dez subrotinas que constituem o algoritmo...	92
II	Valores experimentais de temperatura e composição sobre a LLRIL, de WARING et alii <sup>(10)</sup> , para o sistema Zn-Pb .....	123
III	Valores experimentais de temperatura e composição sobre a LLRIL, de HASS&JELLINEK <sup>(12)</sup> , para o sistema Zn-Pb .....	124
IV	Valores experimentais de temperatura e composição sobre a LLRIL, de CAFASSO et alii <sup>(13)</sup> , para o sistema Zn-Pb.....	125
V	Valores experimentais de temperatura e composição sobre a LLRIL, de SPRING&ROMANOFF <sup>(14)</sup> , para o sistema Zn-Pb .....	126
VI	Resultados fornecidos pelo algoritmo, para o sistema Zn-Pb, utilizando-se dados experimentais de WARING et alii <sup>(10)</sup> .....	127
VII	Resultados fornecidos pelo algoritmo, para o sistema Zn-Pb, utilizando-se dados experimentais de HASS&JELLINEK <sup>(12)</sup> .....	132

Apêndice		Página
VIII	Resultados fornecidos pelo algoritmo, para o sistema Zn-Pb, utilizando-se dados experimentais de CAFASSO et alii <sup>(13)</sup> .....	137
IX	Resultados fornecidos pelo algoritmo, para o sistema Zn-Pb, utilizando-se dados experimentais de SPRING&ROMANOFF <sup>(14)</sup> .....	142
X	Valores experimentais de temperatura e composição sobre a LLRIL, de CAMPBELL&WAGEMANN <sup>(21)</sup> , para o sistema Al-In .....	147
XI	Valores experimentais de temperatura e composição sobre a LLRIL, de CAMPBELL et alii <sup>(22)</sup> , para o sistema Al-In.....	148
XII	Resultados fornecidos pelo algoritmo, para o sistema Al-In, utilizando-se dados experimentais de CAMPBELL&WAGEMANN <sup>(21)</sup> .....	149
XIII	Resultados fornecidos pelo algoritmo, para o sistema Al-In, utilizando-se dados experimentais de CAMPBELL et alii <sup>(22)</sup> .....	153
XIV	Valores experimentais de temperatura e composição sobre a LLRIL, de KLEPPA <sup>(15)</sup> , para o sistema Zn-Bi .....	157
XV	Valores experimentais de temperatura e composição sobre a LLRIL, de HASS&JELLINEK <sup>(12)</sup> , para o sistema Zn-Bi .....	158

Apêndice		Página
XVI	Valores experimentais de temperatura e composição sobre a LLRIL, de SPRING&ROMANOFF <sup>(14)</sup> , para o sistema Zn-Bi .....	159
XVII	Resultados fornecidos pelo algoritmo, para o sistema Zn-Bi, utilizando-se dados experimentais de KLEPPA <sup>(15)</sup> .....	160
XVIII	Resultados fornecidos pelo algoritmo, para o sistema Zn-Bi, utilizando-se dados experimentais de HASS-JELLINEK <sup>(12)</sup> .....	165
XIX	Resultados fornecidos pelo algoritmo, para o sistema Zn-Bi, utilizando-se dados experimentais de SPRING-ROMANOFF <sup>(14)</sup> .....	170
XX	Valores experimentais de temperatura e composição sobre a LLRIL, de WITTIG&KEIL <sup>(25)</sup> , para o sistema Al-Bi .....	175
XXI	Valores experimentais de temperatura e composição sobre a LLRIL, de MARTIN-GARIN et alii <sup>(29)</sup> , para o sistema Al-Bi .....	176
XXII	Valores experimentais de temperaturas e composição sobre a LLRIL, de PREDEL&SANDIG <sup>(23)</sup> , para o sistema Al-Bi .....	177

Apêndice		Página
XXIII	Resultados fornecidos pelo algoritmo, para o sistema Al-Bi, utilizando-se dados experimentais de WITTIG&KEIL <sup>(25)</sup> .....	178
XXIV	Resultados fornecidos pelo algoritmo, para o sistema Al-Bi, utilizando-se dados experimentais de MARTIN-GARIN et alii <sup>(29)</sup> .....	182
XXV	Resultados fornecidos pelo algoritmo, para o sistema Al-Bi, utilizando-se dados experimentais de PREDEL&SANDIG <sup>(23)</sup> .....	186

UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS GERAIS

MODELAMENTO MATEMÁTICO DE SISTEMAS  
BINÁRIOS METÁLICOS COM REGIÃO DE  
IMISCIBILIDADE LÍQUIDA

Antônio Eduardo Clark Peres

Tese apresentada à Universidade Federal  
de Minas Gerais como requisito parcial  
para obtenção do grau de Mestre em Ciên  
cias e Técnicas Nucleares

Beló Horizonte - 1973