

**UNIVERSIDADE DE SOROCABA  
PRÓ-REITORIA DE PÓS-GRADUAÇÃO, PESQUISA, EXTENSÃO E INOVAÇÃO.  
MESTRADO EM PROCESSOS TECNOLÓGICOS E AMBIENTAIS**

**Rafael Fonseca Beccari**

**PROJETO E CARACTERIZAÇÃO DE LIGAS MULTI-ELEMENTARES**

**Sorocaba/SP  
2019**

**Rafael Fonseca Beccari**

**PROJETO E CARACTERIZAÇÃO DE LIGAS MULTI-ELEMENTARES**

Trabalho de conclusão de curso de Mestrado apresentado à UNISO – Universidade de Sorocaba como parte dos requisitos para conclusão do curso de pós-graduação Stricto sensu – Mestrado profissional em Processos Tecnológicos e Ambientais.

Orientador: Prof. Dr. Thomaz Augusto Guisard Restivo

**Sorocaba/SP  
2019**

### Ficha Catalográfica

B354p Beccari, Rafael Fonseca  
Projeto e caracterização de ligas multi-elementares / Rafael  
Fonseca Beccari. – 2019.  
66 f. : il.

Orientador: Prof. Dr. Thomaz Augusto Guisard Restivo  
Dissertação (Mestrado em Processos Tecnológicos e Ambientais)  
– Universidade de Sorocaba, Sorocaba, SP, 2019.

1. Ligas (Metalurgia). 2. Entropia. 3. Materiais. I. Restivo, Thomaz  
Augusto Guisard, orient. II. Universidade de Sorocaba. III. Título.

**Rafael Fonseca Beccari**

**PROJETO E CARACTERIZAÇÃO DE LIGAS MULTI-ELEMENTARES**

Trabalho de conclusão de curso de Mestrado apresentado à UNISO – Universidade de Sorocaba como parte dos requisitos para conclusão do curso de pós-graduação *Stricto sensu* – Mestrado profissional em Processos Tecnológicos e Ambientais.

Aprovado em:

**BANCA EXAMINADORA:**

Prof. Dr. Thomaz Augusto Guisard Restivo  
Universidade de Sorocaba

Prof.(a) Dr.(a) Rossana Cristina Rossoni Figueira  
Universidade de Sorocaba

Prof.(a) Dr.(a) Andressa Cecília Milanese  
Instituto Federal de São Paulo

## **DEDICATÓRIA**

A minha esposa Magna Helena de Sales Beccari, por toda compreensão e paciência em todos os momentos, noites e horas que fiquei ocupado desenvolvendo este trabalho, também foi fonte de inspiração e coragem para que eu pudesse realizar mais esta etapa em minha vida.

## **AGRADECIMENTOS**

Agradeço ao Professor Dr. Thomaz Augusto Guisard Restivo pelo apoio ao longo desses 2 anos.

Aproveito para agradecer a USP – Universidade de São Paulo pela parceria e ajuda nos ensaios, a todos os colaboradores do IPEN – Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares e em especial ao pessoal do CCN – Centro de Combustível Nuclear que nos deu acesso aos laboratórios e equipamentos.

Agradeço ao IFSP – Instituto Federal de São Paulo pelo tempo cedido e a todas as pessoas que de alguma forma colaboraram com a realização dessa pesquisa.

A minha esposa, Magna, ao meu Pai, Gilberto e minha Mãe Elizabeth, pela constante motivação, pelo incentivo em dar continuidade ao meu projeto e a alcançar mais essa realização.

## **EPIGRAFE**

“Em uma perspectiva da equilibração, deve-se procurar nos desequilíbrios uma das fontes de progresso no desenvolvimento dos conhecimentos, pois só os desequilíbrios obrigam um sujeito a ultrapassar seu estado atual e procurar seja o que for em direções novas.”

Jean Piaget, no livro O desenvolvimento do Pensamento

## RESUMO

Desde a antiguidade a obtenção de ligas utiliza um ou dois metais base com adições de outros elementos para se obter propriedades de resistência, dureza e conformabilidade. Uma nova metalurgia vem surgindo na última década, onde novos processos e novas tecnologias nos permitem desenvolver ligas com o novo conceito de ligas de alta entropia. Esta pesquisa visa o desenvolvimento de ligas equiatômicas de alta entropia compostas de 6 a 9 elementos, tanto no sistema cúbico de corpo centrado quanto no cúbico de face centrada, seguindo as regras de Hume-Rothery, VEC – Elétrons na camada de valência, equivalente de cromo e equivalente de níquel, parâmetro de polidispersão e empacotamento atômico. Os materiais produzidos são testados, tendo suas propriedades físico-químicas e mecânicas avaliadas. Os elementos foram selecionados, pesados, homogeneizados, prensados, fundidos em forno a plasma e a arco elétrico. As amostras foram cortadas, embutidas e polidas, possibilitando a condução de ensaios de dureza Vickers, de onde se pode estimar a tenacidade à fratura, análise metalográfica, fluorescência, difração de raios-X, espectroscopia por energia dispersiva em microscópio eletrônico de varredura e ensaios de corrosão eletroquímica. De modo geral, as ligas preparadas atingiram valores de dureza acima de 800 HV, sendo que uma destas alcançou valores superiores à 2100 HV. A resistência à corrosão das ligas estudadas também mostrou-se superior a materiais convencionais. Os objetivos desta pesquisa visam o desenvolvimento de novas ligas para aplicações inéditas ou alternativas a materiais como o metal duro (widia), ou mesmo substituir ferramentas diamantadas para corte e conformação.

**Palavras-chave:** Ligas de Alta Entropia, Ligas Multi-elementares, Fusão.

## ABSTRACT

Since ancient times the metallurgy techniques employ one or two base metals with additions of other elements to obtain an alloy. High entropy alloys have been considered in the last decade to present a new metallurgy. New processes and new technologies enable us to develop alloys with the new concept of high entropy alloys. The aim of this research is the development of high entropy equiatomic alloys composed of 6 to 9 elements, both in the body centered cubic system and the face centered cubic, following Hume-Rothery rules, VEC - Electrons in the valence layer, equivalent of chromium and nickel equivalent, polydispersity parameter and atomic packing. The prepared materials are tested in order to evaluate their physico-chemical and mechanical properties. The elements were selected, weighed, homogenized, pressed and casted in plasma and arc furnaces. The samples were cut, polished and tested for Vickers hardness besides being the fracture toughness analyzed, metallographic analysis, fluorescence, X-ray diffraction, dispersive energy spectroscopy in scanning electron microscopy and electrochemical corrosion tests. In general, the prepared alloys reached hardness values above 800 HV, with maximum value higher than 2100 HV. The corrosion resistance of some alloys studied was also superior to conventional materials. The objectives of this research is the development of new alloys for novel applications or alternatives to materials such as carbide (widia), or even replace diamond tools for cutting and forming.

**Keywords:** High Entropy Alloys, Multi-Element Alloys, casting.

## LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 - Reticulado cristalino de uma liga CCC de alta entropia.....	14
Figura 2 - Prensa Ribeiro 30 t. ....	26
Figura 3 - Amostra compactada e Matriz de Compactação. ....	27
Figura 4 - Forno a arco elétrico MRC, V4 e Bomba de Vácuo Edwards .....	28
Figura 5 - Equipamento de Corte Microtube.....	28
Figura 6 - Embutidora Fortel EFD30 .....	29
Figura 7 - Microdurômetro Vickers Fishercope HM2000 Linos .....	30
Figura 8 - Indentação do Ensaio Vickers.....	31
Figura 9 - Geometria da trinca (a)Radial Palmqvist e (b)Radial/Media (Half-Penny)	32
Figura 10 - Imagem de Ensaio Vickers com trincas.....	32
Figura 11 - Botão fundido em Forno a Arco .....	34
Figura 12 - Microscopia óptica de algumas ligas brutas e com tratamento térmico com aumento de 200x.....	36
Figura 13 - Imagem de Ensaio Vickers sequencial.....	39
Figura 14 - Curvas cronoamperimétricas das ligas CCC6 e CCC7 e aço 316 em meio salino a 300 mV. ....	51
Figura 15 - Curvas de difração de raio-X.....	52

## LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Raios atômicos.....	17
Tabela 2 - VEC dos Elementos .....	19
Tabela 3 - Composição das ligas em massa (%) .....	34
Tabela 4 - Composição das ligas e parâmetros para formação de solução sólida ...	35
Tabela 5 - Ensaio de dureza Vickers realizado em macrodurômetro.....	37
Tabela 6 - Comparativo de Ensaio de dureza Vickers realizado em microdurômetro com Aços comerciais .....	38
Tabela 7 - Distância da face do material x Dureza da liga CCC4 .....	39
Tabela 8 - Tenacidade .....	40
Tabela 9 - Densidade teórica das ligas .....	41
Tabela 10 - Análise de EDS da liga CCC2 bruta .....	42
Tabela 11 - Análise de EDS da liga CCC4 bruta .....	43
Tabela 12 - Análise de EDS da liga CCC5 bruta .....	44
Tabela 13 - Análise de EDS da liga CCC6 bruta .....	45
Tabela 14 - Cr equivalente – Segundo Equação (2).....	46
Tabela 15 - Cr equivalente – Segundo Equação (3).....	47
Tabela 16 - Ni equivalente – Segundo Equação (4) .....	47
Tabela 17 - Ni equivalente – Segundo Equação (5) .....	48
Tabela 18 - Análise de fluorescência da Liga CCC1 bruta .....	48
Tabela 19 - Análise de fluorescência da Liga CCC2 bruta .....	49
Tabela 20 - Análise de fluorescência da Liga CCC3 bruta .....	49
Tabela 21 - Análise de fluorescência da Liga CCC4 bruta .....	50
Tabela 22 - Análise de fluorescência da Liga CCC5 bruta .....	50
Tabela 23 - Análise de fluorescência da Liga CCC6 bruta .....	50

## LISTA DE SIGLAS E ABREVIATURAS

CFC	Cúbica de Face Centrada
CCC	Cúbica de Corpo Centrado
HC	Hexagonal Compacta
CS	Cúbica Simples
LAE	Ligas de Alta Entropia
VEC	do inglês Valence Electron Concentration
rpm	Rotações Por Minuto

## SUMÁRIO

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO</b>	<b>13</b>
<b>2</b>	<b>REVISÃO BIBLIOGRÁFICA</b>	<b>16</b>
<b>2.1</b>	<b>Regra Hume Rothery</b>	<b>16</b>
<b>2.2</b>	<b>VEC - Elétrons na camada de Valência</b>	<b>18</b>
<b>2.3</b>	<b>Equivalente de Cromo e Equivalente de Níquel</b>	<b>20</b>
<b>2.4</b>	<b>Parâmetros <math>\Delta</math> e <math>\gamma</math></b>	<b>22</b>
<b>3</b>	<b>OBJETIVOS</b>	<b>24</b>
<b>4</b>	<b>MATERIAIS E MÉTODOS</b>	<b>25</b>
<b>5</b>	<b>RESULTADOS E DISCUSSÕES</b>	<b>34</b>
<b>5.1</b>	<b>Ensaio de corrosão eletroquímica</b>	<b>51</b>
<b>5.2</b>	<b>Difração de raios-X</b>	<b>52</b>
<b>6</b>	<b>CONCLUSÕES</b>	<b>53</b>
<b>7</b>	<b>REFERÊNCIAS</b>	<b>54</b>
	<b>APÊNDICE A – MEMORIAL DE CALCULO CCC1</b>	<b>58</b>
	<b>APÊNDICE B – MEMORIAL DE CALCULO CCC2</b>	<b>59</b>
	<b>APÊNDICE C – MEMORIAL DE CALCULO CCC3</b>	<b>60</b>
	<b>APÊNDICE D – MEMORIAL DE CALCULO CCC4</b>	<b>61</b>
	<b>APÊNDICE E – MEMORIAL DE CALCULO CCC5</b>	<b>62</b>
	<b>APÊNDICE F – MEMORIAL DE CALCULO CCC6</b>	<b>63</b>
	<b>APÊNDICE G – MEMORIAL DE CALCULO CCC7</b>	<b>64</b>
	<b>APÊNDICE H – MEMORIAL DE CALCULO CFC1</b>	<b>65</b>
	<b>APÊNDICE I – MEMORIAL DE CALCULO CFC3</b>	<b>66</b>

## 1 INTRODUÇÃO

Cada vez mais estamos dependentes dos metais e buscamos todos os dias por melhorias nos materiais e nos processos, seja por maior desempenho, por menor peso ou por novas aplicações. A civilização humana progride à medida que os materiais progridem. A Era do Metal compreende a Idade do Bronze e a Idade do Ferro e abrange cerca de cinco mil anos até agora. (YEH, 2007)

É interessante notar que a maioria dos metais de alto desempenho foram desenvolvidos nos últimos 150 anos. Este é um tempo muito curto em comparação com toda a era do metal. (YEH, 2007)

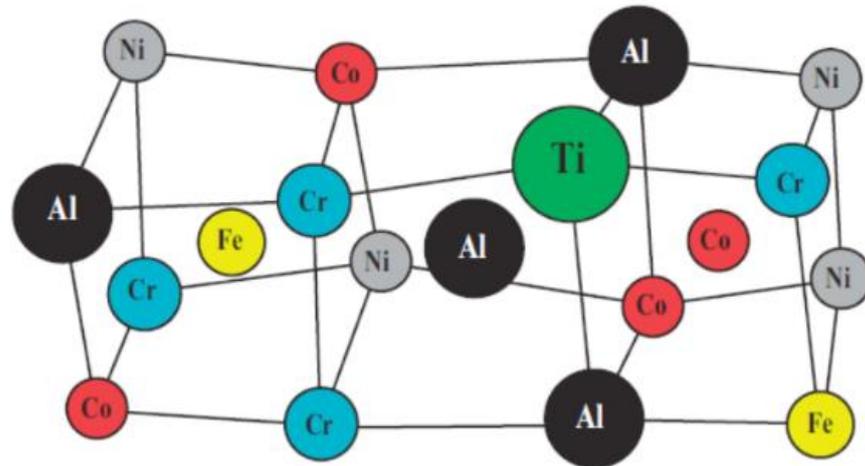
Um novo paradigma para o design de ligas foi proposto há uma década, que envolve a mistura de múltiplos elementos em uma composição equimolar ou quase equimolar para formar ligas, evitando assim o conceito de elemento de base. (YE, 2016)

Nos metais os defeitos podem aparecer de diversas formas, sendo eles, lacunas, defeitos intersticiais, impurezas ou alguns tipos de discordâncias (em cunha, hélice ou mistas). A Figura 1 mostra uma composição de uma liga, onde são utilizados variados elementos e estes átomos possuem tamanhos diferentes, o que geram tensões internas e dificultam a movimentação de discordâncias no seu reticulado metálico. A metalurgia física ensina que, quando as discordâncias têm seu movimento restringido, o metal resiste à deformação e endurece.

A substituição de átomos estranhos em posições do reticulado cristalino metálico dá razão ao efeito de endurecimento por solução sólida. Este mecanismo de endurecimento é o mais efetivo entre os quatro mecanismos existentes: endurecimento por solução sólida, encruamento, precipitação e refino de grão. (CALLISTER, 2016; SHEWMON, 1989)

Assim, as ligas envolvidas no presente trabalho levam o mecanismo de endurecimento por solução sólida ao extremo, uma vez que todas as posições atômicas são ocupadas por átomos distintos. O resultado é um endurecimento fora do comum do material.

Figura 1 - Reticulado cristalino de uma liga CCC de alta entropia



Fonte: SVENSSON, 2015.

Essas ligas foram chamadas de LAE - Ligas de Alta Entropia. Diferentemente das ligas tradicionais, onde se tem um ou dois elementos de base, a adição de diversos elementos pode conferir novas características à liga.

As ligas de alta entropia são definidas como tendo mais de 5 elementos metálicos principais, cada um com uma porcentagem atômica entre 5% e 35%, (YEH, 2007). Quando todos os elementos nas ligas têm uma porcentagem atômica igual, a entropia configuracional da liga atingirá seu máximo (LI, 2016).

Na exploração desse novo campo, descobriu-se que as LAEs são bastante simples de analisar, controlar e podem ser processadas como ligas tradicionais. Existem muitas oportunidades para criar ligas novas, melhores que as tradicionais em uma ampla gama de aplicações. (YEH, 2007)

Por exemplo, as LAEs têm três vantagens sobre os sistemas atuais de ligas metálicas: exibem alta resistência à tração, inibem a formação e crescimento de precipitados a temperaturas mais altas e mostram excelente resistência à corrosão. (YEH, 2004)

Essas LAEs podem ser usadas em aplicações de alta temperatura, como turbinas a gás, bicos de foguetes e construção nuclear, também podem ser aplicadas na indústria aeroespacial, onde materiais leves e tolerantes a altas temperaturas estão em demanda, além de ser uma excelente escolha para aplicações criogênicas, como carcaças de foguetes, tubulações e equipamentos líquidos de O<sub>2</sub> ou N<sub>2</sub> (YE, 2016). O trabalho de Svensson (2015) fornece um panorama de diversas possíveis aplicações das ligas multi-elementares em componentes de turbinas aeronáuticas.

Além da pesquisa das LAE por curiosidade científica, os pesquisadores esperam que essas ligas possam substituir materiais convencionais em condições operacionais difíceis e rigorosas, fornecendo desempenho superior em serviço. Isso conduz a melhoras quanto à economia de energia, economia de materiais, eficiência de desempenho, redução de custos, conservação de recursos, meio ambiente e saúde (MURTY, 2014).

Em resumo, essas ligas têm aplicações potenciais em diferentes campos e espera-se que substituam os materiais tradicionais em muitos setores. Em apenas uma década, a partir de 2004, um progresso extraordinário foi alcançado. Este tema de pesquisa chamou a atenção global. Um futuro brilhante antevisto. (MURTY, 2014)

Esta pesquisa visa elaborar novas ligas multi-elementares equiatômicas monofásicas nos sistemas cúbico de corpo centrado (CCC) e cúbico de face centrada (CFC) e avaliar suas propriedades mecânicas e físico-químicas.

## 2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Para a elaboração das composições e preparo das LAE – Ligas de Alta Entropia foram levadas em consideração características dos elementos químicos, parâmetros científicos e, por fim, o custo dos elementos metálicos individuais.

Um ponto importante é o preparo das soluções sólidas que originará as LAE - Ligas de Alta entropia. Neste sentido, o primeiro grupo de parâmetros abordado considera as quatro regras de Hume-Rothery, que prevê o grau de solubilidade em sistemas de ligas binárias (CAMPBELL, 2008).

### 2.1 Regra Hume Rothery

A diferença mais significativa entre a solução sólida formando ligas de alta entropia está na diferença de tamanhos atômicos. As regras de Hume Rothery fornecem, assim, orientações valiosas para o desenvolvimento futuro de ligas de alta entropia (GUO, 2011).

- 1º Regra: É favorecido a formação de solução sólida quando a diferença dos raios atômicos dos elementos que compõem a liga é menor que 15%;

Um átomo não tem um raio preciso porque, longe do núcleo, a densidade eletrônica cai apenas de forma exponencial... No entanto, podemos esperar que os átomos com numerosos elétrons sejam maiores, em certo sentido, do que os átomos que possuem apenas alguns elétrons. Tais considerações levaram os químicos a propor uma variedade de definições de raio atômico com base em considerações empíricas. (Atkins 2010).

Em um extenso estudo de separações internucleares, em uma ampla variedade de elementos polimórficos e ligas, define-se os raios Goldschmidt, que são valores médios relacionados com o número de coordenação das estruturas (ATKINS, 2010).

A Tabela 1 lista os raios atômicos de diversos elementos considerados para elaboração das LAE para sistemas predominantemente cúbicos de face centrada e cúbicos de corpo centrado. Os valores estão corrigidos para os elementos com número de coordenação 12 e 8.

**Tabela 1 - Raios atômicos**

Nome	Símbolo	Nº Atômico	Raio atômico (pm)		Estrutura Cristalina
			Nº Coordenação 12	Nº Coordenação 8	
Alumínio	Al	13	143,00	147,42	CFC
Titânio	Ti	22	147,00	151,55	HC
Vanádio	V	23	135,00	139,18	CCC
Cromo	Cr	24	129,00	132,99	CCC
Manganês	Mn	25	137,00	141,24	CCC
Ferro	Fe	26	126,00	129,90	CCC
Cobalto	Co	27	125,00	128,87	HC
Níquel	Ni	28	125,00	128,87	CFC
Cobre	Cu	29	128,00	131,96	CFC
Zinco	Zn	30	137,00	141,24	HC
Zircônio	Zr	40	160,00	164,95	HC
Nióbio	Nb	41	147,00	151,55	CCC
Molibdênio	Mo	42	140,00	144,33	CCC
Prata	Ag	47	144,00	148,45	CFC
Tântalo	Ta	73	147,00	151,55	CCC
Tungstênio	W	74	141,00	145,36	CCC
Chumbo	Pb	82	154,00	158,76	CFC

Fonte: Adaptado de ATKINS, 2010 e próprio Autor.

- 2º Regra: Quando a afinidade química de dois metais é grande, é favorecido a formação de componentes intermetálicos ao invés de formação de solução sólida;

A afinidade química é uma propriedade que diz respeito à capacidade que um elemento tem de reagir com a outro, pois mesmo quando os elementos estão no estado líquido, se não houver afinidade entre eles, não ocorrerá a reação.

- 3º Regra: Quanto maior a diferença de eletronegatividade entre os componentes, maior é o favorecimento à formação de componentes intermetálicos ao invés de formação de solução sólida;

De forma resumida, a eletronegatividade corresponde à capacidade que um átomo tem de atrair os elétrons vizinhos (FOGAÇA, 2018 e CALLISTER, 2009).

- 4º Regra: Metais com o mesmo tipo de estrutura cristalina podem formar séries extensas de solução sólida.

Os elementos também são classificados de acordo com sua estrutura cristalina e, quando ocorre a solidificação, os átomos se posicionam em um padrão tridimensional repetitivo, ligados aos seus átomos vizinhos mais próximos. Existe um grande número de estruturas cristalinas diferentes, todas possuindo uma ordenação atômica de longo alcance. Nessas estruturas cristalinas os átomos são considerados

como esferas sólidas com diâmetros bem definidos, sendo que as esferas que representam os átomos vizinhos mais próximos se tocam entre si. (CALLISTER, 2016)

A solução de diversos elementos metálicos distintos em um reticulado cristalino conduz a valores elevados de entropia de mistura. Essa energia pode superar aquela referente à formação de compostos intermetálicos e precipitados, favorecendo a estrutura monofásica de equilíbrio. Isso indica que elementos multi-principais poderiam formar soluções sólidas com uma estrutura cristalina simples CFC ou CCC (YEH, 2007).

## **2.2 VEC - Elétrons na camada de Valência**

Um importante parâmetro levado em conta para a elaboração das composições e preparo das LAE – Ligas de Alta Entropia é o VEC – Elétrons na camada de Valência, sendo calculado a partir das características periódicas dos elementos.

Evidentemente, o VEC das ligas desempenha um papel crucial na determinação da cristalinidade das fases da solução sólida, particularmente para soluções sólidas monofásicas. (YE, 2016)

Mais importante ainda, o VEC é o parâmetro físico que controla a estabilidade de fase das soluções sólidas CFC ou CCC.

Alguns autores defendem que o VEC desempenha um papel decisivo na determinação da solução sólida do tipo CFC ou CCC nos LAEs, e o VEC especialmente maior ( $\geq 8$ ) favorece a formação de soluções sólidas do tipo CFC, enquanto o VEC menor ( $< 6,87$ ) favorece a formação de soluções sólidas do tipo CCC. (GUO, 2011). A Tabela 2 mostra os valores dos VEC individuais dos elementos.

Tabela 2 - VEC dos Elementos

Elemento	Símbolo	Nº Atômico	VEC	Elemento	Símbolo	Nº Atômico	VEC
Alumínio	Al	13	3	Neodímio	Nd	60	3
Bário	Ba	56	2	Nióbio	Nb	41	5
Berílio	Be	4	2	Níquel	Ni	28	10
Boro	B	5	3	Nitrogênio	N	7	5
Cádmio	Cd	48	12	Ósmio	Os	76	8
Cálcio	Ca	20	2	Ouro	Au	79	11
Carbono	C	6	4	Oxigênio	O	8	6
Cério	Ce	58	3	Paládio	Pd	46	10
Césio	Cs	55	1	Platina	Pt	78	10
Chumbo	Pb	82	4	Polônio	Po	84	6
Cobalto	Co	27	9	Potássio	K	19	1
Cobre	Cu	29	11	Praseodímio	Pr	59	3
Cromo	Cr	24	6	Prata	Ag	47	11
Disprósio	Dy	66	3	Promécio	Pm	61	3
Enxofre	S	16	6	protactínio	Pa	91	3
Érbio	Er	68	3	Rênio	Re	75	7
Escândio	Sc	21	3	Ribídio	Rb	37	1
Estanho	Sn	50	4	Ródio	Rh	45	9
Estrôncio	Sr	38	2	Rutênio	Ru	44	8
Európio	Eu	63	3	Samário	Sm	62	3
Ferro	Fe	26	8	Selênio	Se	34	6
Fósforo	P	15	5	Silício	Si	14	4
Gadolínio	Gd	64	3	Sódio	Na	11	1
Gálio	Ga	31	3	Tálio	Tl	81	3
Germânio	Ge	32	4	Tântalo	Ta	73	5
Háfnio	Hf	72	4	Tecnécio	Tc	43	7
Hólmio	Ho	67	3	Telúrio	Te	52	6
Índio	In	49	3	Térbio	Tb	65	3
Iródio	Ir	77	9	Titanio	Ti	22	4
Iritio	Y	39	3	Tório	Th	90	3
Itérbio	Yb	70	3	Túlio	Tm	69	3
Lantânio	La	57	3	Tungstênio	W	74	6
Lítio	Li	3	1	Urânio	U	92	3
Lutécio	Lu	71	3	Vanádio	V	23	5
Magnésio	Mg	12	2	Zinco	Zn	30	12
Manganês	Mn	25	7	Zircônio	Zr	40	4
Molibidênio	Mo	42	6				

Fonte: Adaptado de GUO, 2011

Em uma liga composta de  $i$  elementos distintos, calcula-se o VEC pela equação

1:

$$VEC = \sum_{i=1}^n c_i (VEC)_i \quad \text{Equação (1)}$$

Fonte: GUO, 2011.

VEC = Média aritmética dos VEC  $_i$

$n$  = número de total de componentes na liga (variando de  $i=1$  a  $n$ )

$c_i$  = valor do VEC de cada componente

$\Sigma$  = Soma

### 2.3 Equivalente de Cromo e Equivalente de Níquel

Nas equações de equivalente de Cromo e equivalente de Níquel, os coeficientes associados a cada elemento representam sua capacidade de promover a formação de austenita (CFC) ou ferrita (CCC) nos aços. Quanto maiores forem os coeficientes dos elementos, mais fortes serão seus efeitos (PENG,2014).

Na tentativa de prever a formação de ferrita em aços de alta liga de Cr foi introduzido o conceito de equivalente de Cr, que corresponde estritamente à quantidade equivalente de Cr no sistema binário Fe-Cr (RYU,1998).

É muito importante estimar a quantidade de ferrita embutida na microestrutura de martensita temperada, porque a ferrita é conhecida por reduzir a dureza do material (RYU,1998).

Em seu trabalho, Ryu et al. (1998) utilizaram as composições químicas em peso percentual, e os fatores de potência, coeficientes numéricos à frente de cada elemento de liga foram deduzidos por regressão múltipla. Essa análise de regressão incluiu apenas os principais elementos de liga, como Cr, W, C e Ni inicialmente, mas estendeu-se para cobrir os elementos remanescentes posteriores.

O equivalente de Cromo e o equivalente de Níquel foram calculados utilizando as equações 2 a 5:

$$Cr_{eq} = Cr + 6Si + 4Mo + 1,5W + 11V + 5Nb + 12Al + 8Ti + 2,4Ta - 4Ni - 2Co - 2Mn - 1Cu - 30N - 40C \quad \text{Equação (2)}$$

Fonte: RYU, 1998, apud NEWHOUSE,1965.

$$Cr_{eq} = Cr + 0,8Si + 2Mo + 1W + 4V + 2Nb + 1,7Al + 60B + 2Ti + 1Ta - 2Ni - 0,4Mn - 0,6Co - 0,6Cu - 20N - 20C \quad \text{Equação (3)}$$

Fonte: RYU, 1998.

$$Ni_{eq} = Ni + 0,31Mn + 22C + 14,2N + Cu \quad \text{Equação (4)}$$

Fonte: RYU, 1998.

$$Ni_{eq} = Ni + 0,11Mn - 0,0086Mn^2 + 24,5C + 18,4N + 0,44Cu \quad \text{Equação (5)}$$

Fonte: RYU, 1998.

Buscando prever a solidificação das ligas, diversos autores desenvolveram e defenderam suas fórmulas de equivalente de Cromo e equivalente de Níquel. No entanto foi verificado que cada fórmula possui coeficientes diferentes dos elementos de liga e que algumas fórmulas envolvem diferentes elementos. Em seu trabalho, Peng (2014) questiona diversas dessas fórmulas de equivalente de Cromo e Níquel, afirmando que, após um determinado percentual dos elementos, essas fórmulas não são confiáveis para prever a estrutura resultante de solidificação do material, tendo um comportamento não linear. Defende ainda que para cada taxa de resfriamento, os modos de solidificação podem variar. Apesar dessas restrições, as equações de equivalente de cromo e níquel foram empregadas na seleção dos elementos de liga na medida que são indicadores da estabilidade da fase desejada.

## 2.4 Parâmetros $\Delta$ e $\gamma$

Um ponto importante é o parâmetro Delta ( $\Delta$ ), proposto por Guo (2011) apud Zhang et al. (2008), também chamado de parâmetro de polidispersão. Este parâmetro pondera que cada elemento pode ser considerado como um átomo soluto, portanto, leva em consideração a média de todos os raios dos elementos que compõe uma liga, sendo que o valor entre  $0,04 < \Delta < 0,07$  apresenta a melhor condição para formação de solução sólida e é calculado pela equação 6:

$$\Delta = \sqrt{\sum_{i=1}^N c_i (1 - r_i/\bar{r})^2} \quad \text{Equação (6)}$$

$\Delta$  = parâmetro Delta (polidispersão)

$N$  = número de componentes na Liga

$c_i$  = porcentagem atômica do componente  $i$

$\bar{r}$  = média do raio atômico dos componentes da liga

$r_i$  = raio do componente  $i$

Outro parâmetro importante é  $\gamma$ , chamado de parâmetro de empacotamento atômico, reforçando as regras de Hume-Rothery. Propõe que os átomos de maior e menor raio são os fatores mais importantes para determinar a estabilidade da estrutura, e indica  $\gamma < 1,17$  como o limite para a formação de solução sólida, como calculado pelas equações 7 a 9 (WANG, 2015):

$$W_s = 1 - \sqrt{\frac{(r_s + \bar{r})^2 - \bar{r}^2}{(r_s + \bar{r})^2}} \quad \text{Equação (7)} \quad W_L = 1 - \sqrt{\frac{(r_L + \bar{r})^2 - \bar{r}^2}{(r_L + \bar{r})^2}} \quad \text{Equação (8)}$$

$$\gamma = \frac{W_s}{W_L} \quad \text{Equação (9)}$$

$\gamma$  = parâmetro de empacotamento atômico

$r_s$  = raio do menor átomo;

$r_L$  = raio do maior átomo;

$\bar{r}$  = média do raio atômico dos componentes da liga;

$W_s$  = ângulo sólido menor

$W_L$  = ângulo sólido maior

### **3 OBJETIVOS**

O trabalho tem como objetivo geral elaborar novas ligas multi-elementares equiatômicas monofásicas no sistema cúbico de corpo centrado (CCC) e cúbico de face centrada (CFC), de modo que esses materiais possam apresentar aplicações inovadoras e substituição dos materiais já consolidados no mercado, com ênfase em ferramentas de corte e conformação.

Como objetivos específicos, avaliar e maximizar suas propriedades mecânicas como dureza e tenacidade. As ligas serão analisadas quanto à microestrutura, estrutura cristalina e propriedades físico-químicas e ainda avaliada a resistência a corrosão em meio salino.

## 4 MATERIAIS E MÉTODOS

Alguns parâmetros foram adotados para a seleção dos elementos na formulação das ligas, sendo eles baseados nas propriedades dos metais puros: raios atômicos, densidade, ponto de fusão, valência, Regra de Hume-Rothery, Equivalente de Cromo e Equivalente de Níquel. Após esta seleção iniciou-se a fase de escolha dos elementos de liga.

O projeto de ligas empregou certos critérios de seleção de elementos, de acordo com os parâmetros apontados na seção de Introdução, além de outros parâmetros e conceitos:

- Seleção de elementos com raios atômicos semelhantes, cuja diferença entre os raios extremos esteja próxima ou inferior a 15%.
- Simulações com 6 a 9 elementos com encaixe nos parâmetros  $\Delta$ ,  $\gamma$  e VEC na faixa de valores que favorecem a formação de estrutura CCC e CFC monofásica.
- Seleção de elementos que possuam a mesma estrutura cristalina quando puros, ou seja CCC, ou com certa semelhança, como CFC e HC (os planos densos são idênticos em ambos)
- Eliminação de alguns elementos potenciais que tendem a formar fases intermetálicas, como o Si.
- Seleção de elementos prioritários que possuam maiores coeficientes positivos nas equações de equivalente de cromo ( $Cr_{eq}$ ) e equivalente de níquel ( $Ni_{eq}$ ).

Vale notar que se procurou, na maior parte das ligas elaboradas, projetar a ocupação das 9 posições atômicas disponíveis em uma célula CCC com diferentes elementos.

A elaboração das ligas se deu segundo o procedimento:

- Mistura dos pós metálicos, todos com pureza superior a 99,8 % dos metais individuais para a composição das ligas, sendo os pós pesados individualmente em balança analítica e misturados manualmente por 5 min em um béquer até homogeneização total da amostra.
- Compactação de pastilhas em matriz de aço (Figura 3) com medidas internas de 60 mm de comprimento por 5 mm de largura, com pressões

de 2 ton/cm<sup>2</sup> mantidas por 10 segundos na prensa tipo Ribeiro 30 t (Figura 2).

**Figura 2 - Prensa Ribeiro 30 t.**



Fonte: Elaboração Própria.

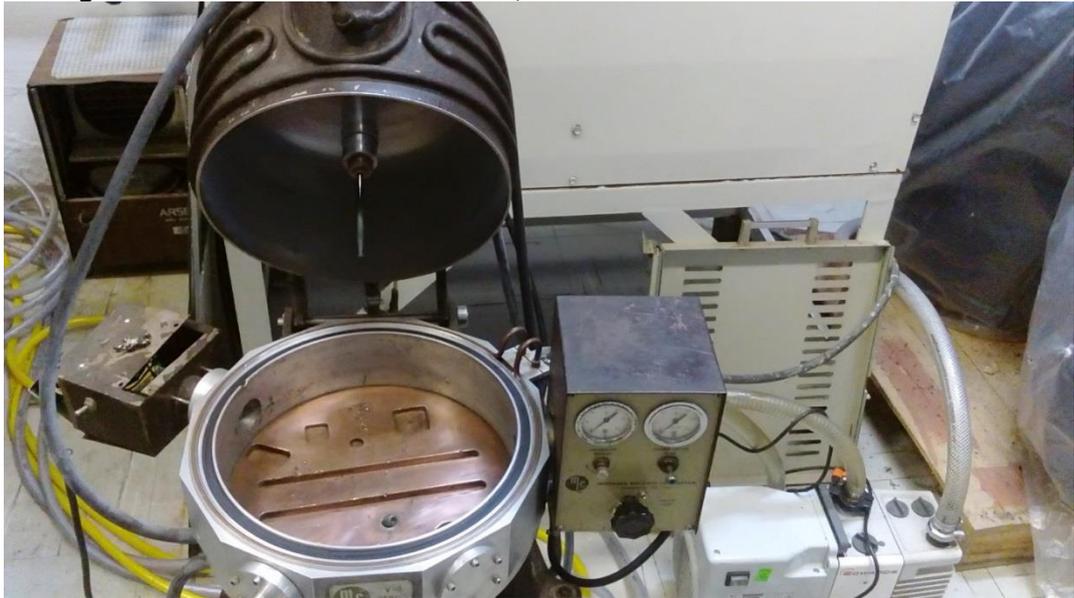
**Figura 3 - Amostra compactada e Matriz de Compactação.**



Fonte: Elaboração Própria.

- Fusão das pastilhas de liga em forno a arco elétrico com atmosfera controlada sob argônio, em soleira de cobre com corrente de 150 A no forno modelo V4 - Series da empresa MRC – Materials Research Corporation, New York (Figura 4).
- Para controle da atmosfera foi utilizada bomba de vácuo Edwards, onde foram executadas “purgas” alternadas com a liberação do argônio sob pressão de 3 Kgf para garantir uma atmosfera livre de oxigênio (Figura 4).

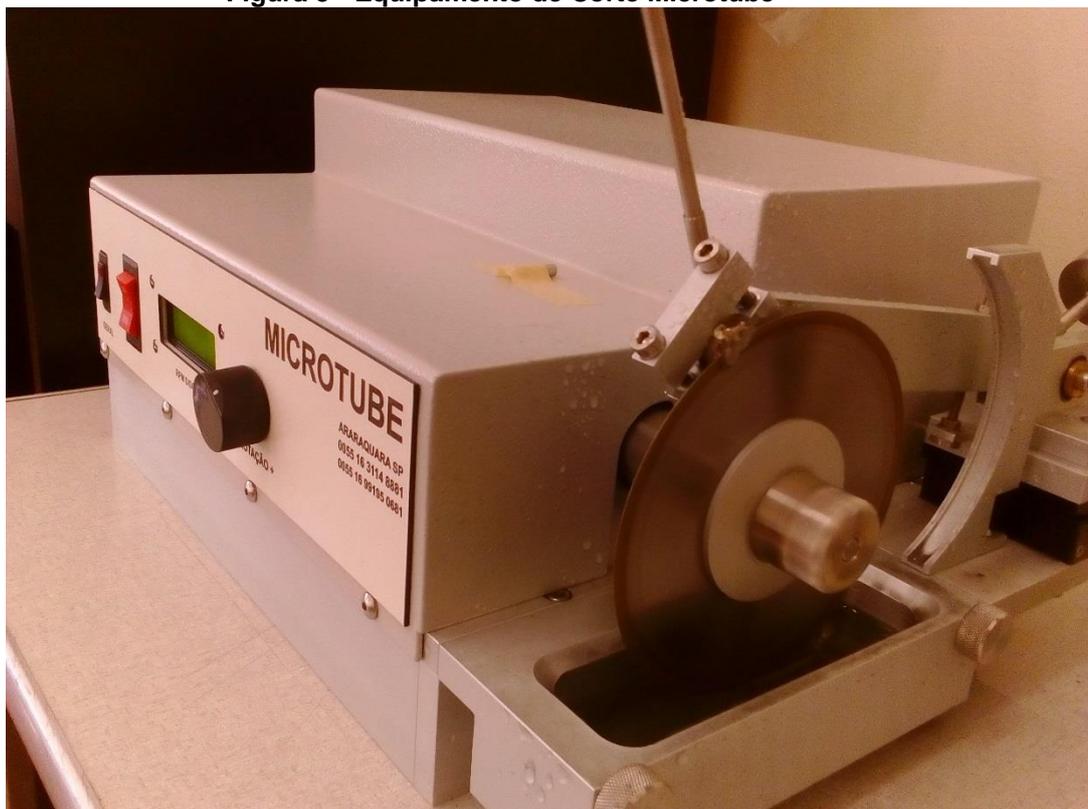
**Figura 4 - Forno a arco elétrico MRC, V4 e Bomba de Vácuo Edwards**



Fonte: Elaboração Própria.

As ligas assim preparadas foram cortadas por eletroerosão a fio e discos de diamante, em Equipamento Microtube com rotação de 400 rpm (Figura 5).

**Figura 5 - Equipamento de Corte Microtube**



Fonte: Elaboração Própria.

Algumas ligas foram cementadas em caixa a 1150 °C / 2 h em meio de grafite, ou tiveram tratamento térmico com 1300 °C, 950 °C, 750 °C e 550 °C por 2 horas com atmosfera controlada de argônio, seguido de resfriamento até 500 °C no interior do forno e posterior resfriamento ao ar. O objetivo de tais tratamentos foi verificar a alteração da microestrutura, homogeneização e recristalização. O tratamento de cementação é investigado em primeira mão neste trabalho. A intenção deste tratamento é preencher com átomos de C os interstícios de uma célula unitária CCC contendo de 6 a 9 metais diferentes, o que pode provocar um endurecimento adicional. Visualiza-se, assim, uma estrutura cujos espaços sejam ocupados em sua quase totalidade.

Após os tratamentos, as amostras foram embutidas em baquelite com auxílio da Embutidora Fortel EFD30 (Figura 6) com pressão de 80 Kgf/cm<sup>2</sup> com temperatura de 150 °C durante um ciclo para posterior lixamento, polimento e realização de análise metalográfica em microscópio ótico e eletrônico.

As ligas se mostraram altamente resistentes aos ataques metalográficos experimentados (água régia, ácido nítrico concentrado, a frio e a quente).

**Figura 6 - Embutidora Fortel EFD30**



Fonte: Elaboração Própria.

As mesmas amostras foram analisadas em difratômetro de raios-X Bruker D8 Advance utilizando tubo de Cu (40 kV/30 mA) em ângulos de  $10^\circ$  a  $100^\circ$ , com passo  $0,04^\circ/\text{min}$ .

As ligas foram analisadas no Laboratório de propriedades termofísicas e prototipação da Uniso por meio de fluorescência Niton XL3t XRF Analyzer.

As propriedades mecânicas das amostras foram avaliadas em macrodurômetro Buehler VH1150 e microdurômetro Vickers Fishercope HM2000 Linos, (Figura 7).

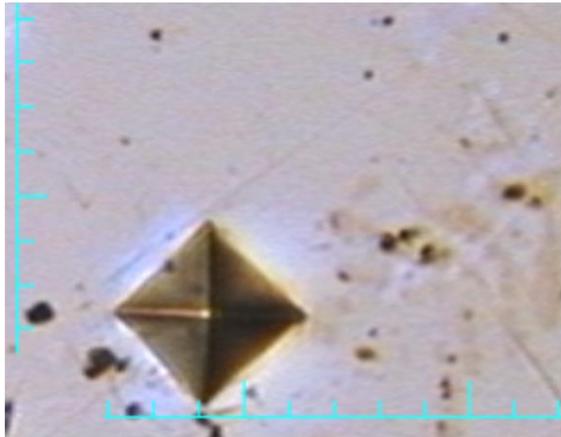
**Figura 7 - Microdurômetro Vickers Fishercope HM2000 Linos**



Fonte: Elaboração Própria.

Para determinar a dureza das ligas foi adotado o método do Ensaio de Dureza Vickers. O ensaio Vickers determina a dureza através da resistência que o material oferece à penetração, sendo esta realizada utilizando um indentador em formato de uma pirâmide quadrada de diamante, com ângulos de  $136^\circ$  entre as faces que penetra o material “imprimindo” uma marca (indentação) conforme ilustra a Figura 8. Essa impressão é medida e a Equação 10 foi utilizada para calcular a dureza (HV) em relação à carga aplicada (CALLISTER, 2009).

**Figura 8 - Indentação do Ensaio Vickers**



Fonte: Elaboração Própria.

$$HV = 1,854 \frac{F}{d^2} \quad \text{Equação (10)}$$

Onde :

HV = Dureza Vickers;

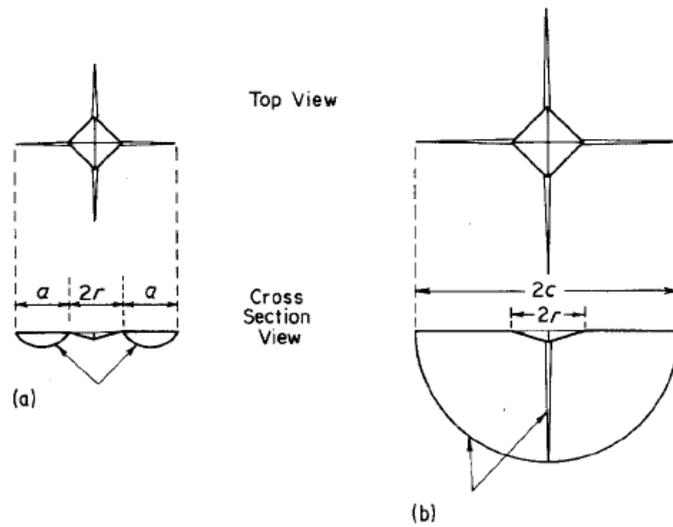
F = Carga aplicada (kgf);

d = diagonal da impressão (mm); caso as diagonais tenham comprimentos diferentes, utiliza-se a média das duas diagonais.

Uma das possibilidades que o ensaio de Dureza Vickers nos fornece é calcular a tenacidade à fratura, relacionando as trincas que ocorrem em determinados materiais, que devem ser avaliadas e calculadas conforme suas características.

Em 1957 Palmqvist iniciou e desenvolveu a ideia de testar a tenacidade usando como medida a soma dos comprimentos das fissuras nos quatro cantos de um recorte de dureza Vickers, segundo a Figura 9 (SHETTY, 1985 apud PALMQVIST, 1957).

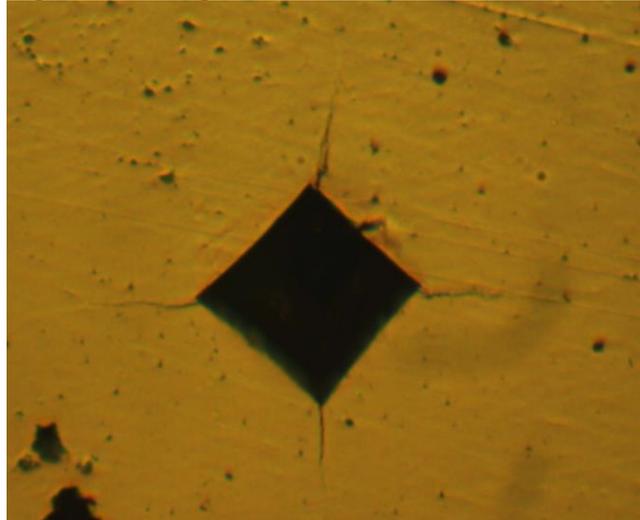
**Figura 9 - Geometria da trinca (a)Radial Palmqvist e (b)Radial/Media (Half-Penny)**



Fonte: (SHETTY,1985).

Não existe um consenso entre os pesquisadores para avaliar e calcular as trincas de indentação, sendo que alguns pesquisadores contestam as teorias de Niihara, e argumentam que as trincas Palmqvist se comportam de maneira idêntica às trincas half-penny totalmente desenvolvidas. (SHETTY,1985)

**Figura 10 - Imagem de Ensaio Vickers com trincas**



Fonte: Elaboração Própria.

Após a realização dos ensaios realiza-se medições das trincas radiais e calcula-se as tenacidades com a equação 11 sugerida por Shetty (1985).

$$K1C = 0,0937 \left( H \frac{P}{4l} \right)^{1/2} \quad \text{Equação (11)}$$

Onde:

K1C = Tenacidade à fratura;

H = Dureza Vickers;

P = Carga aplicada no Ensaio Vickers;

l = Média do comprimento das tricas;

As amostras para a determinação de dureza foram embutidas e polidas em pasta de diamante 3  $\mu\text{m}$ , posicionadas em áreas representativas isentas de poros para a indentação. As cargas utilizadas variaram de 3 a 10 kg (macro-Vickers) e 0,18 kg (1,8 N) (micro-Vickers). Pelo menos 5 diferentes regiões são selecionadas para cada liga, sendo verificada a qualidade da indentação para sua aceitação. Em algumas amostras, como as cementadas, procurou-se medir durezas em profundidades sucessivas a partir da superfície, de modo a estimar a profundidade da camada cementada.

## 5 RESULTADOS E DISCUSSÕES

As ligas fundidas em forno a arco com atmosfera controlada de argônio resultam em formato de botões homogêneos maciços como os mostrados na Figura 11.

Figura 11 - Botão fundido em Forno a Arco



Fonte: Elaboração Própria.

Foram preparadas 15 Ligas e as composições de 9 delas, com as quantidades em massa calculadas de forma equimolar são apresentadas na Tabela 3.

Tabela 3 - Composição das ligas em massa (%)

Liga	Ag (%)	Al (%)	Co (%)	Cr (%)	Cu (%)	Fe (%)	Mn (%)	Mo (%)	Nb (%)	Ni (%)	Ta (%)	Ti (%)	V (%)	W (%)	Zr (%)
CCC1	-	-	-	9,6436	-	10,356	-	17,792	17,23	10,884	-	-	-	34,094	-
CCC2	-	-	9,7511	8,6044	-	9,2398	-	15,875	15,374	9,7114	-	7,921	8,429	-	15,094
CCC3	-	-	8,4049	7,4165	-	7,9642	7,8358	13,683	13,251	8,3707	25,808	-	7,265	-	-
CCC4	-	-	-	22,9260*	-	8,2063	-	14,1	13,654	-	26,9527	7,0351	7,486	-	-
CCC5	-	-	-	7,5567	-	24,3441*	-	13,942	13,502	-	26,2959	6,9565	7,403	-	-
CCC6	-	3,427	-	6,6051	-	7,0929	-	12,186	11,802	-	22,9845	6,0805	6,471	23,352	-
CCC7	-	5,872	-	11,3181	-	12,154	-	-	20,222	-	-	10,419	-	40,014	-
CFC1	-	8,763	-	-	20,642	18,138	17,845	-	-	19,063	-	15,549	-	-	-
CFC3	29,644	7,414	16,195	-	17,464	-	-	-	-	16,129	-	13,155	-	-	-

Fonte: Elaboração Própria.

\* 3x moles de átomo de cada elemento

As composições das ligas CCC4 e CCC5 foram elaboradas com 7 metais diferentes, sendo que Fe e Cr são adicionados com número de moles 3 vezes em relação a outros metais, totalizando 9 posições disponíveis na célula unitária CCC. Tal desenho de ligas busca reduzir o número de metais diferentes empregados, alguns dos quais de alto custo. A liga 6 é otimizada quanto a todos os parâmetros. Já a liga CCC7 é composta de metais mais comuns, disponíveis no mercado nacional, sendo assim uma liga de baixo custo com aspirações comerciais, respeitando os parâmetros ótimos (Tabela 4).

**Tabela 4 - Composição das ligas e parâmetros para formação de solução sólida**

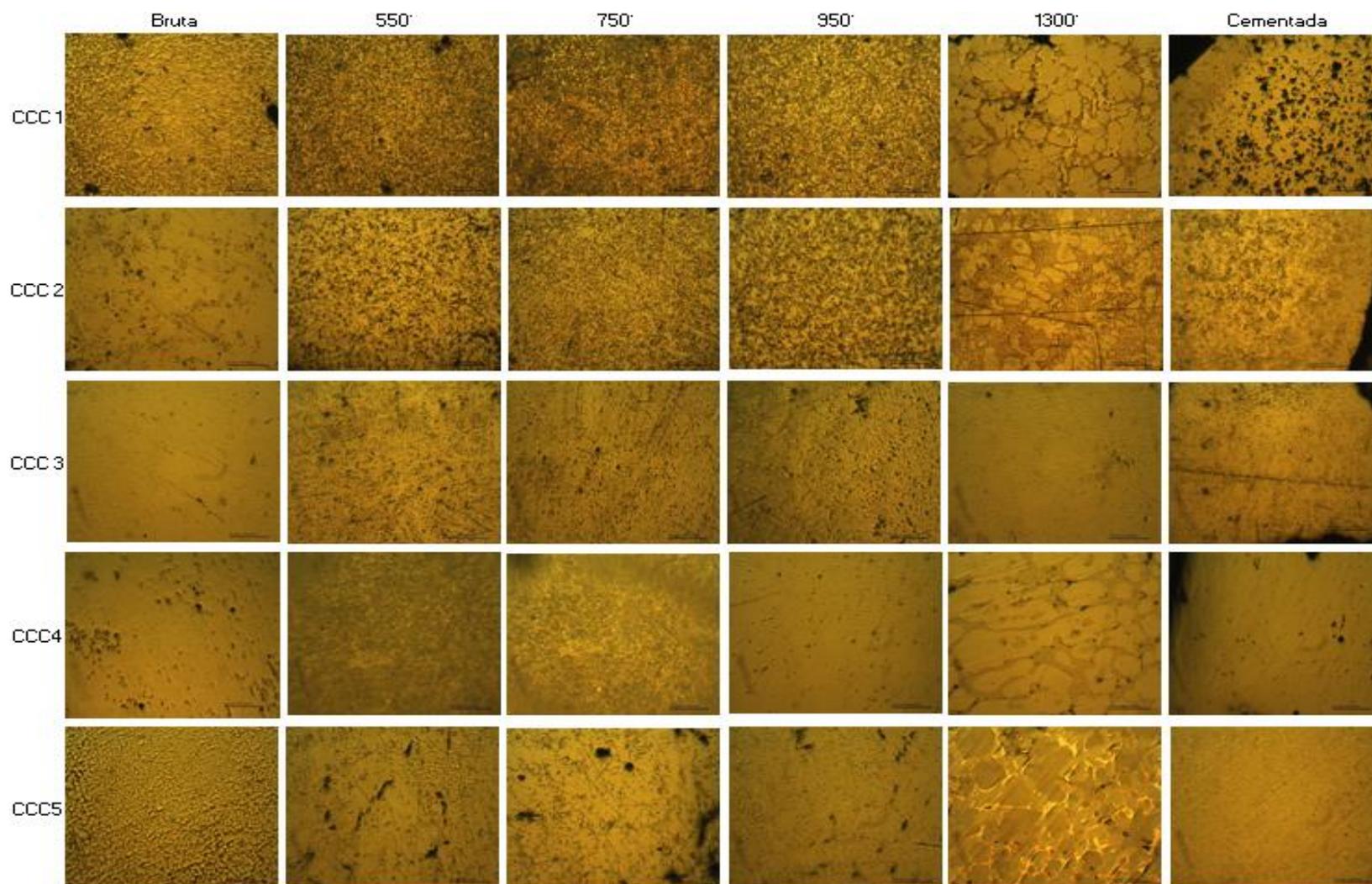
Liga	Composição Molar	≠ Raio (%)	VEC	$\gamma$	$\Delta$	$Cr_{eq}$	$Ni_{eq}$	Estrutura Cristalina
CCC1	CrFeMoNbNiW	14,97	6,83	1,19	0,062	Sim	Sim	-
CCC2	CoCrFeMoNbNiTiVZr	21,88	6,33	1,30	0,084	Sim	Sim	-
CCC3	CoCrFeMnMoNbNiTaV	14,97	6,77	1,19	0,062	Sim	Sim	-
CCC4	Cr <sub>3</sub> FeMoNbTaTiV	14,29	5,66	1,18	0,061	Sim	-	Sim
CCC5	CrFe <sub>3</sub> MoNbTaTiV	14,29	6,11	1,18	0,066	Sim	-	Sim
CCC6	AlCrFeMoNbTaTiVW	14,29	5,33	1,17	0,053	Sim	-	Sim
CCC7	AlCrFeNbTiW	14,29	5,33	1,17	0,060	Sim	-	Sim
CFC1	AlCuFeMnNiTi	14,97	7,16	1,19	0,063	Sim	Sim	Sim
CFC3	AgAlCoCuNiTi	14,97	8,00	1,19	0,069	Sim	Sim	Sim

A declaração “sim” significa que o critério foi empregado - Fonte: Elaboração Própria.

A imagem das microscopias ilustradas na Figura 12 mostram as ligas CCC 1 a CCC5 em estado bruto e após tratamento térmico com temperaturas que variam entre 550 °C até 1300 °C e cementação. É importante notar que, visualmente, a estrutura das ligas não tem nenhuma mudança significativa até 950 °C. Porém, nas imagens que mostram o tratamento com temperatura de 1300 °C é possível visualizar a variação. Nota-se também a presença de camada cementada, principalmente na liga CCC1.

Algumas ligas apresentam óxidos ou poros em sua superfície sendo identificados por pontos pretos.

Figura 12 - Microscopia óptica de algumas ligas brutas e com tratamento térmico com aumento de 200x



Fonte: Elaboração Própria.

A Tabela 5 apresenta os resultados médios e máximos de dureza Vickers das ligas realizados em macrodurômetro, onde se observa que o valor máximo atingido foi na liga 4 cementada e a maior média foi encontrada na liga 5 cementada.

A Tabela 6 mostra os resultados médios e máximos de dureza Vickers das ligas realizados em microdurômetro, onde se observa novamente que o valor máximo atingido foi na liga 4 cementada, cuja dureza máxima foi de 2172 HV. Após extensas pesquisas em diversas bases de artigos, constatou-se que este nível de dureza é o maior já obtido em um material metálico, sendo um possível recorde mundial, comparado com outros materiais como o inox 304, o aço 1020, aços de alta liga, ou mesmo metal duro (widia - WC em matriz de cobalto).

**Tabela 5 - Ensaio de dureza Vickers realizado em macrodurômetro**

Liga	Média (HV)	Máxima (HV)	Obs
Liga 1 CCC 1300 <sup>o</sup> C	420,0 ± 187,34	641,0	Macrodurômetro
Liga 1 CCC Cementada	721,84 ± 106,13	828,1	Macrodurômetro
Liga 2 CCC 1300 <sup>o</sup> C	118,5 ± 43,14	149,0	Macrodurômetro
Liga 2 CCC Cementada	832,2 ± 142,73	1006,0	Macrodurômetro
Liga 3 CCC 1300 <sup>o</sup> C	933,7 ± 24,18	975,0	Macrodurômetro
Liga 3 CCC Cementada	896,0 ± 47,23	957,5	Macrodurômetro
Liga 4 CCC 1300 <sup>o</sup> C	368,6 ± 36,04	429,0	Macrodurômetro
Liga 4 CCC Bruta	1050,8 ± 14,81	1070,0	Macrodurômetro
Liga 4 CCC Cementada	1095,1 ± 90,17	1265,0	Macrodurômetro
Liga 5 CCC 1300 <sup>o</sup> C	308,0 ± 7,07	313,0	Macrodurômetro
Liga 5 CCC Cementada	1107,0 ± 59,39	1199,0	Macrodurômetro
Liga 6 CCC 1300 <sup>o</sup> C	889,4 ± 39,80	928,0	Macrodurômetro
Liga 6 CCC Bruta	648,1 ± 177,42	849,0	Macrodurômetro
Liga 7 CCC 1300 <sup>o</sup> C	836,0 ± 124,97	908,0	Macrodurômetro
Liga 7 CCC Bruta	800,3 ± 19,14	820,0	Macrodurômetro

Fonte: Elaboração Própria.

**Tabela 6 - Comparativo de Ensaio de dureza Vickers realizado em microdurômetro com Aços comerciais**

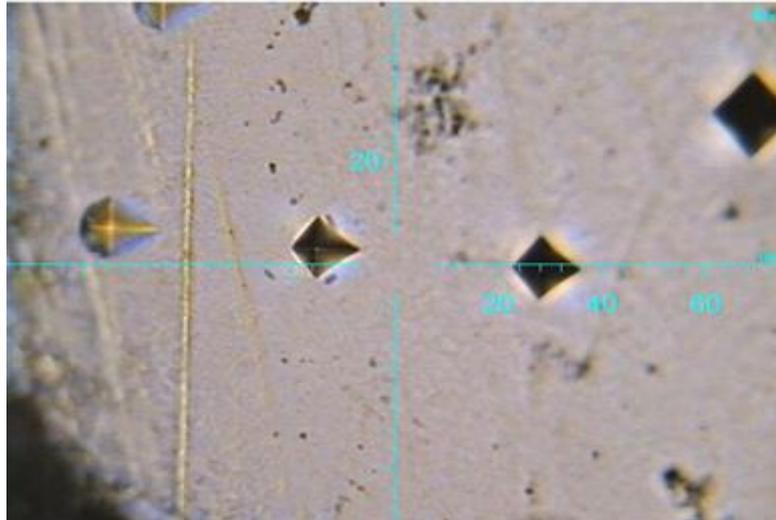
Liga	Média (HV)	Máxima (HV)	Obs
Liga 1 CCC Cementada	935,7 ± 287,34	1243,0	Microdurômetro
Liga 2 CCC Cementada	954,3 ± 221,14	1122,0	Microdurômetro
Liga 3 CCC Cementada	916,3 ± 204,41	1083,0	Microdurômetro
Liga 4 CCC Cementada	1745,5 ± 377,66	2172,0	Microdurômetro
Liga 5 CCC Cementada	1003,5 ± 178,21	1134,0	Microdurômetro
Inox 304	240,0	-	Não Informado
Aço 1020	118,0	-	Não Informado
Aço de Alta Liga	410,0	-	Não Informado
Widia	1500,0	-	Não Informado

Fonte: Elaboração Própria, (DIETER, 1997) e (MIRACLE e DONALSON, 2001)

Observa-se que as ligas CCC1 e CCC4 responderam ao tratamento de cementação em razão do endurecimento adicional. O resultado é dramático para a liga CCC4, que atinge durezas próximas a materiais cerâmicos, como a safira que tem uma dureza de 2345 HV (Hussey, 2012).

A profundidade da camada cementada foi investigada na liga CCC4. Os resultados dos testes (da esquerda para a direita correspondem da face para o centro do material) conforme Figura 13 diminuem, demonstrando visualmente esse endurecimento, confirmado com os dados registrados na Tabela 7.

**Figura 13 - Imagem de Ensaio Vickers sequencial**



Fonte: Elaboração Própria.

**Tabela 7 - Distância da face do material x Dureza da liga CCC4**

Distância da Superfície (microns)	Dureza (HV)
20	2015
40	1911
50	2035
60	2172
100	1945
140	1128

Fonte: Elaboração Própria.

Os resultados indicam que a profundidade da camada cementada é de cerca de 100 microns, correspondendo a distância de difusão do carbono na estrutura cristalina.

A Tabela 8 apresenta os valores de tenacidade das ligas, calculados a partir dos resultados de dureza dos ensaios Vickers realizados em macrodurômetro.

**Tabela 8 - Tenacidade**

Liga	Tenacidade Média K1c (MPa.m <sup>1/2</sup> )	
Liga 1 CCC 1300 <sup>o</sup> C	Tenaz	Não trincou
Liga 1 CCC Cementada	Tenaz	Não trincou
Liga 2 CCC 1300 <sup>o</sup> C	Tenaz	Não trincou
Liga 2 CCC Cementada	3,9 ± 0,44	
Liga 3 CCC 1300 <sup>o</sup> C	3,1 ± 0,33	
Liga 3 CCC Cementada	Tenaz	Não trincou
Liga 4 CCC 1300 <sup>o</sup> C	Tenaz	Não trincou
Liga 4 CCC 750 <sup>o</sup> C	1,2 ± 0,00	
Liga 4 CCC Bruta	Tenaz	Não trincou
Liga 4 CCC Cementada	5,3 ± 2,16	
Liga 5 CCC 1300 <sup>o</sup> C	Tenaz	Não trincou
Liga 5 CCC Cementada	3,2 ± 0,00	
Liga 6 CCC 1300 <sup>o</sup> C	5,9 ± 1,32	
Liga 6 CCC Bruta	5,1 ± 0,55	
Liga 7 CCC 1300 <sup>o</sup> C	4,9 ± 0,84	
Liga 7 CCC Bruta	4,2 ± 0,62	

Fonte: Elaboração Própria.

Analisando a Tabela 8 é possível constatar que a tenacidade das ligas é baixa, indicando que são frágeis e necessitam de um estudo abrangente de tratamentos térmicos para a melhoria desta propriedade a partir do material fundido. A elevada taxa de resfriamento do método de fusão em soleira de cobre refrigerada, embora desfavoreça a formação de fases e intermetálicos, provoca a fragilização das ligas, por outro lado, taxas de resfriamento lentas poderiam dar tempo suficiente à precipitação de fases de equilíbrio.

A Tabela 9 apresenta as densidades teóricas calculadas das ligas, onde a liga CCC 3 foi a com maior densidade e a liga CFC 1 tem a menor densidade.

**Tabela 9 - Densidade teórica das ligas**

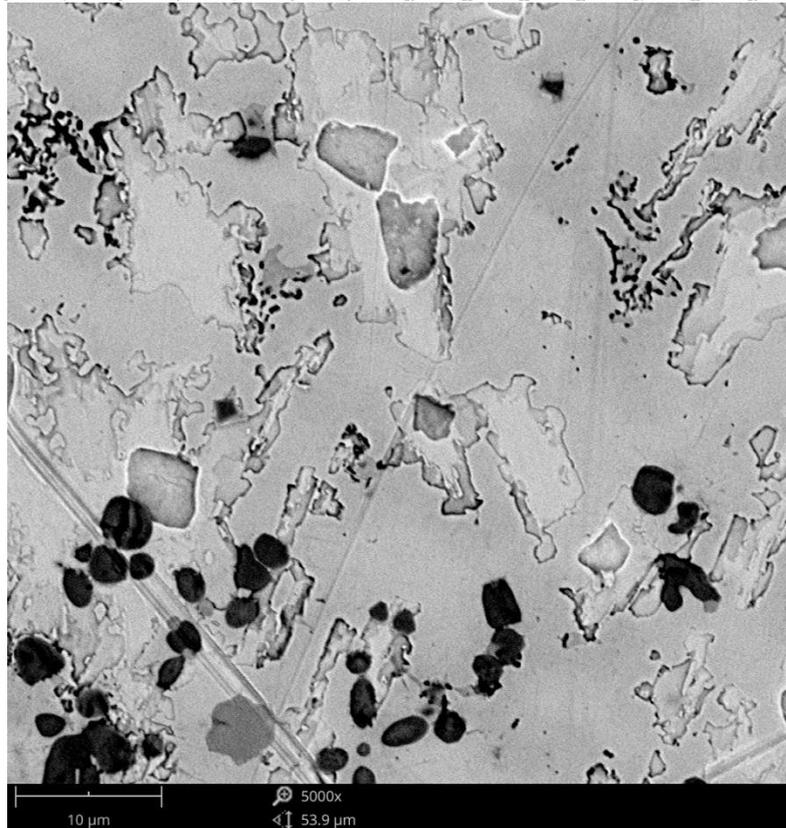
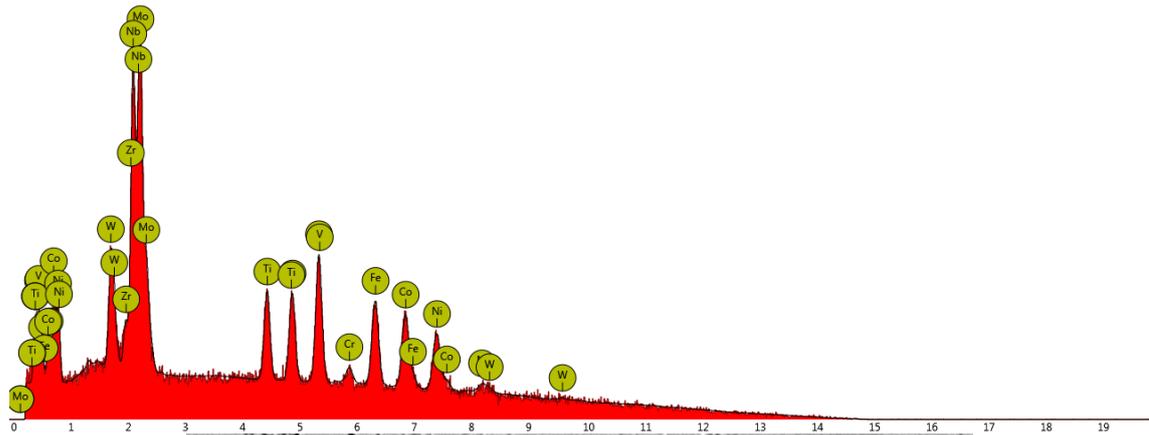
Liga	Densidade teórica (g/cm <sup>3</sup> )
CCC1	10,6405
CCC2	10,9555
CCC3	13,9415
CCC4	11,9049
CCC5	12,0105
CCC6	13,7409
CCC7	8,3135
CFC1	6,3150
CFC3	8,6859

Fonte: Elaboração Própria

As Tabelas 10 a 13 apresentam os resultados EDS - MEV – Espectroscopia por energia dispersiva em microscópio eletrônico de varredura, modo elétrons retroespalhados das ligas cujos resultados são mais promissores.

Tabela 10 - Análise de EDS da liga CCC2 bruta

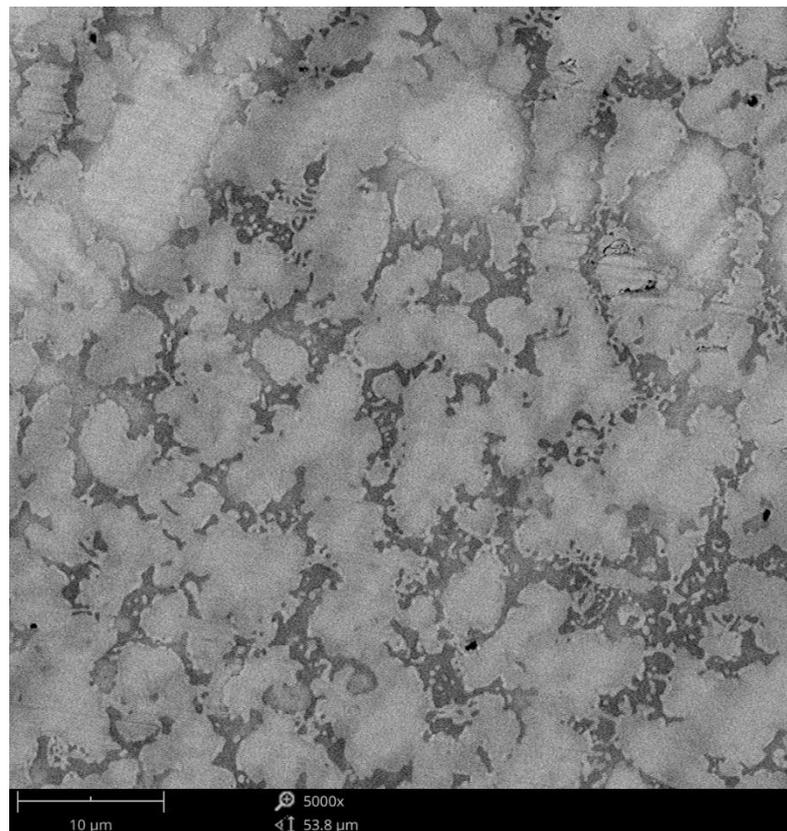
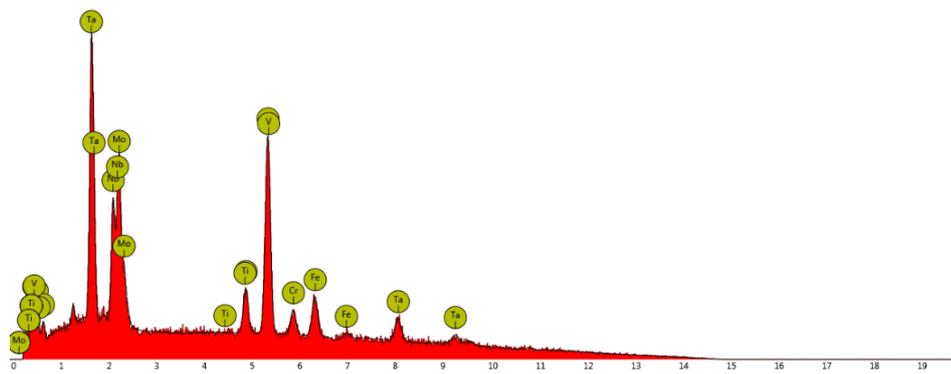
Liga CCC2	EDS Conc. Atomica (%)	EDS Conc. Massa (%)
Ferro	12,74	10,42
Molibdênio	14,52	20,40
Cromo	11,79	8,98
Nióbio	17,09	23,25
Zircônio	2,50	3,34
Níquel	13,41	11,53
Titânio	6,93	4,86
Vanádio	7,85	5,85
Cobalto	13,18	11,38



Fonte: Elaboração Própria.

Tabela 11 - Análise de EDS da liga CCC4 bruta

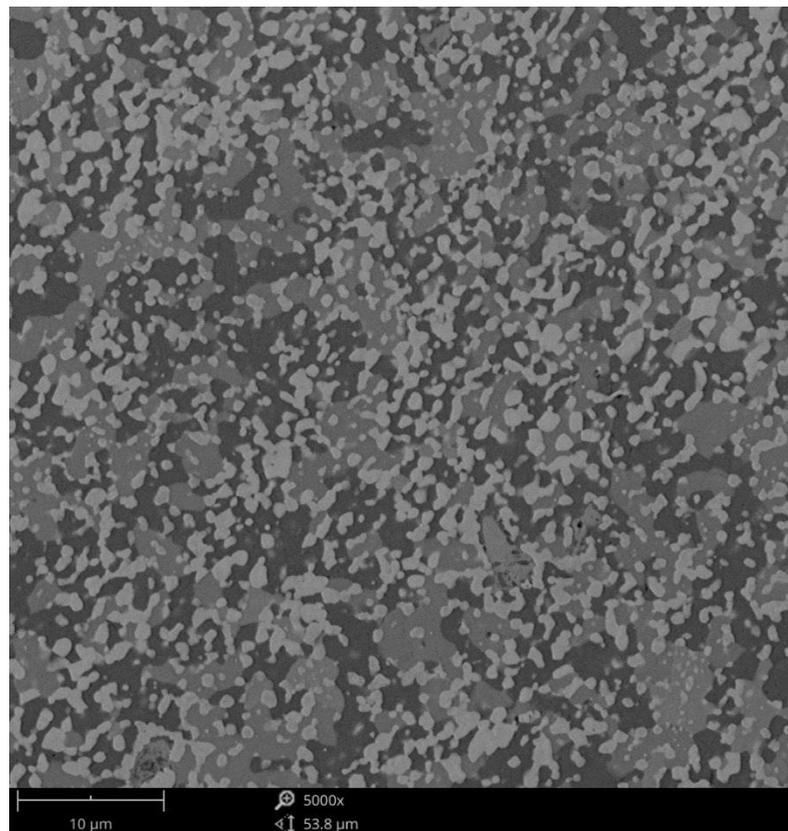
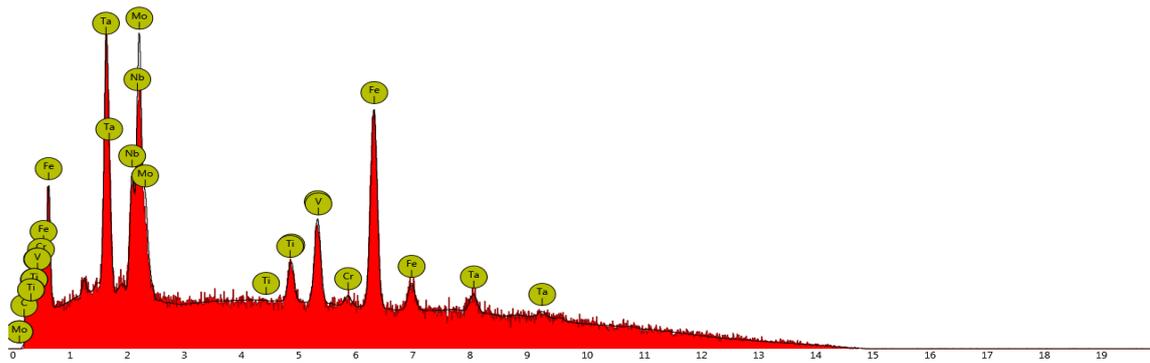
Liga CCC4	EDS Conc. Atomica (%)	EDS Conc. Massa (%)
Ferro	8,47	4,56
Molibdênio	14,34	13,27
Tântalo	30,93	53,96
Nióbio	12,86	11,52
Vanádio	5,79	2,85
Titânio	-	-
Cromo	27,61	13,84



Fonte: Elaboração Própria.

Tabela 12 - Análise de EDS da liga CCC5 bruta

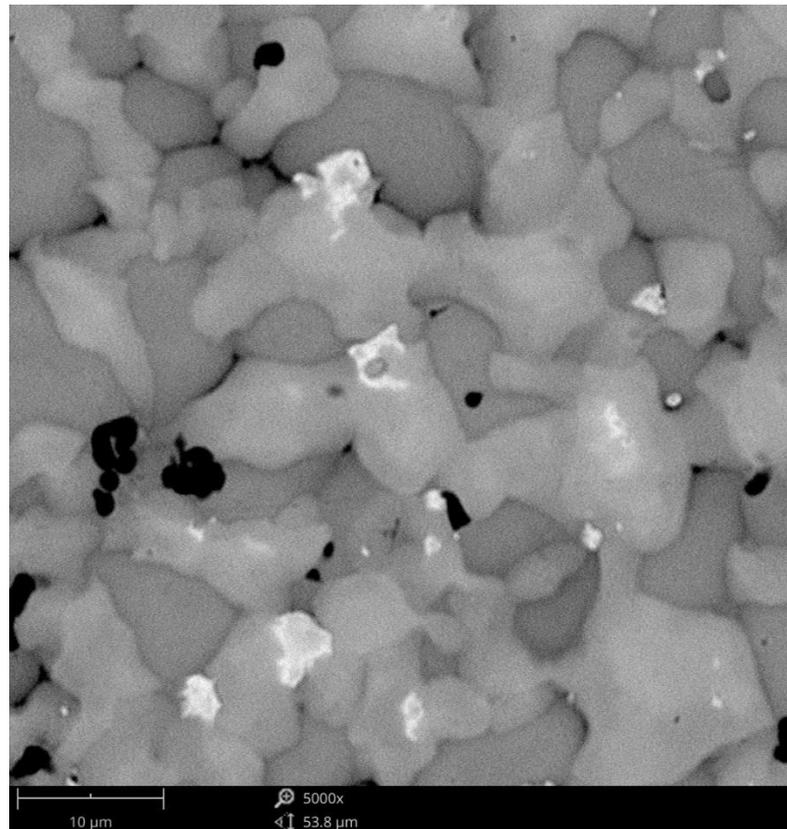
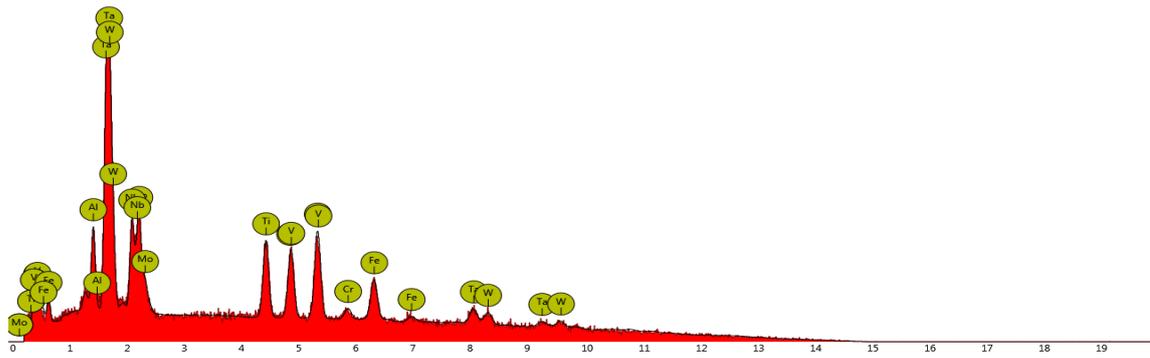
Liga CCC5	EDS Conc. Atômica (%)	EDS Conc. Massa (%)
Cromo	9,30	5,19
Molibdênio	16,13	16,61
Tântalo	22,06	42,84
Nióbio	10,42	10,39
Vanádio	4,53	2,47
Titânio	-	-
Ferro	37,56	22,51



Fonte: Elaboração Própria.

Tabela 13 - Análise de EDS da liga CCC6 bruta

Liga CCC6	EDS Conc. Atômica (%)	EDS Conc. Massa (%)
Cromo	10,90	5,21
Molibdênio	12,06	10,65
Tântalo	18,46	30,73
Nióbio	9,74	8,33
Vanádio	7,16	3,36
Titânio	8,43	3,71
Tungstênio	19,16	32,41
Alumínio	6,19	1,54
Ferro	7,89	4,05



Fonte: Elaboração Própria.

De acordo com as imagens por elétrons retro-espalhados, as ligas apresentam, em sua maioria, 2 ou 3 fases distintas, ou dendritas primárias circundadas por fases interdendríticas. As diferenças de contraste indicam o acúmulo de metais de alta massa atômica (áreas claras) coexistindo com regiões de componentes com baixa massa atômica (áreas escuras). A homogeneização da estrutura monofásica exige tratamentos térmicos subsequentes à fusão e solidificação das ligas ou outras técnicas de solidificação rápida.

As Tabelas 14 a 17 apresentam os resultados dos cálculos referentes ao Cr equivalente e ao Ni equivalente. Em ambos os casos foram escolhidas as equações que continham maior quantidade de elementos utilizados nas ligas, evitando assim que a maior parte das ligas tivessem resultados nulos.

**Tabela 14 - Cr equivalente – Segundo Equação (2)**

Liga	Cr Eq. (%)
CCC1	174,57
CCC2	246,71
CCC3	206,88
CCC4	352,71
CCC5	333,66
CCC6	367,79
CCC7	326,27
CFC1	96,97
CFC3	79,85

Fonte: Elaboração Própria.

Tabela 15 - Cr equivalente – Segundo Equação (3)

Liga	Cr Eq. (%)
CCC1	92,01
CCC2	95,39
CCC3	91,24
CCC4	149,04
CCC5	132,26
CCC6	144,79
CCC7	122,60
CFC1	-11,65
CFC3	-13,54

Fonte: Elaboração Própria.

Tabela 16 - Ni equivalente – Segundo Equação (4)

Liga	Ni Eq. (%)
CCC1	10,88
CCC2	9,71
CCC3	10,80
CCC4	-
CCC5	-
CCC6	-
CCC7	-
CFC1	45,24
CFC3	33,59

Fonte: Elaboração Própria.

**Tabela 17 - Ni equivalente – Segundo Equação (5)**

Liga	Ni Eq. (%)
CCC1	10,88
CCC2	9,71
CCC3	8,70
CCC4	-
CCC5	-
CCC6	-
CCC7	-
CFC1	27,37
CFC3	23,81

Fonte: Elaboração Própria.

As Tabelas 18 a 23 apresentam os valores em % de massa das ligas brutas após ensaio de fluorescência de raio-X e EDS.

**Tabela 18 - Análise de fluorescência da Liga CCC1 bruta**

Liga CCC1	% massa teórica	Análise FRX (%)	EDS Conc. Massa (%)
Ferro	10,36	15,38	-
Molibdênio	17,79	19,64	-
Cromo	9,64	10,91	-
Nióbio	17,23	11,79	-
Tungstênio	34,09	27,48	-
Níquel	10,88	14,81	-

Fonte: Elaboração Própria.

**Tabela 19 - Análise de fluorescência da Liga CCC2 bruta**

Liga CCC2	% massa teórica	Análise FRX (%)	EDS Conc. Massa (%)
Ferro	9,24	13,08	10,42
Molibdênio	15,88	20,90	20,40
Cromo	8,60	10,66	8,98
Nióbio	15,37	13,18	23,25
Zircônio	15,09	2,41	3,34
Níquel	9,71	13,18	11,53
Titânio	7,92	6,40	4,86
Vanádio	8,43	6,53	5,85
Cobalto	9,75	13,68	11,38

Fonte: Elaboração Própria.

**Tabela 20 - Análise de fluorescência da Liga CCC3 bruta**

Liga CCC3	% massa teórica	Análise FRX (%)	EDS Conc. Massa (%)
Ferro	7,96	10,42	-
Molibdênio	13,68	16,54	-
Cromo	7,42	9,26	-
Nióbio	13,25	17,07	-
Vanádio	7,27	4,70	-
Manganês	7,84	6,09	-
Cobalto	8,40	10,87	-
Níquel	8,37	10,63	-
Tântalo	25,81	14,43	-

Fonte: Elaboração Própria.

**Tabela 21 - Análise de fluorescência da Liga CCC4 bruta**

Liga CCC4	% massa teórica	Análise FRX (%)	EDS Conc. Massa (%)
Ferro	8,21	9,71	4,56
Molibdênio	14,10	15,90	13,27
Tântalo	26,59	23,84	53,96
Nióbio	13,65	16,56	11,52
Vanádio	7,49	5,34	2,85
Titânio	7,04	0,24	0
Cromo	22,93	28,42	13,84

Fonte: Elaboração Própria.

**Tabela 22 - Análise de fluorescência da Liga CCC5 bruta**

Liga CCC5	% massa teórica	Análise FRX (%)	EDS Conc. Massa (%)
Cromo	7,56	8,98	5,19
Molibdênio	13,94	14,68	16,61
Tântalo	26,30	27,36	42,84
Nióbio	13,50	15,09	10,39
Vanádio	7,40	3,95	2,47
Titânio	6,96	1,21	0,00
Ferro	24,34	28,72	22,51

Fonte: Elaboração Própria.

**Tabela 23 - Análise de fluorescência da Liga CCC6 bruta**

Liga CCC6	% massa teórica	Análise FRX (%)	EDS Conc. Massa (%)
Cromo	6,61	9,08	5,21
Molibdênio	12,19	10,80	10,65
Tântalo	22,98	21,69	30,73
Nióbio	11,80	11,15	8,33
Vanádio	6,47	3,24	3,36
Titânio	6,08	24,22	3,71
Tungstênio	23,35	3,16	32,41
Alumínio	3,43	8,19	1,54
Ferro	7,09	8,48	4,05

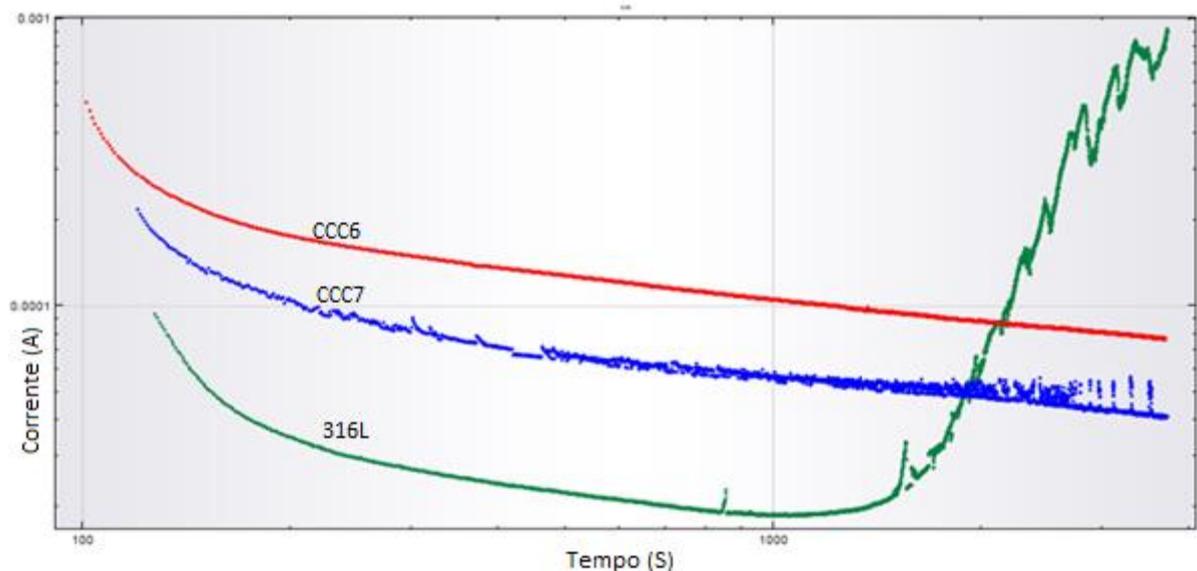
Fonte: Elaboração Própria.

As análises de FRX e EDS mostram, em geral, teores finais das ligas fundidas concordantes com os teores nominais elaborados. Há discrepâncias em alguns casos, como o teor de Ti na liga CCC4 e CCC6, além do teor de W nesta última. As diferenças podem estar relacionadas ao alto caráter oxidante desses metais, os quais podem ter oxidado e segregado para a camada de óxido superficial dos botões fundidos. De todo modo, as referidas análises são consideradas semi-quantitativas.

### 5.1 Ensaio de corrosão eletroquímica

Uma investigação preliminar sobre a resistência à corrosão eletroquímica foi realizada nas ligas CCC6 e 7. As curvas de cronoamperimetria em potencial de 300 mV em meio salino (3,5% NaCl) obtidas para as ligas e aço inoxidável AISI 316L são mostradas na Figura 14. Observa-se que o aço inoxidável sofre corrosão acentuada após 1000 s, constatado pelo aumento da corrente, enquanto que em ambas as ligas permanecem inalteradas, um dos possíveis motivos é a baixa difusividade atômica gerada pelas distorções do reticulado devido a raios atômicos distintos.

**Figura 14 - Curvas cronoamperimétricas das ligas CCC6 e CCC7 e aço 316 em meio salino a 300 mV.**



Fonte: Elaboração Própria.

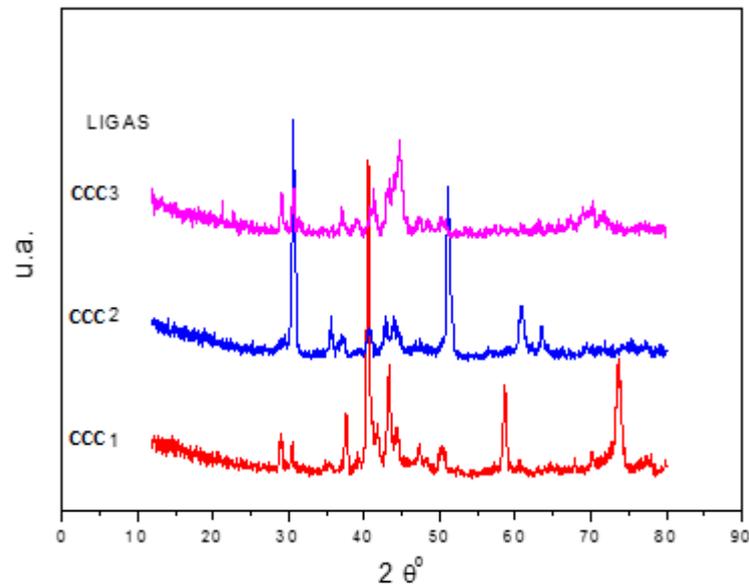
## 5.2 Difração de raios-X

Os resultados de difração de raios-X (DRX) indicam, a priori, que as reflexões não correspondem a quaisquer fichas de elementos e compostos conhecidos. Tal fato era esperado, uma vez que diferentes raios atômicos metálicos dispostos nas posições do reticulado cristalino alteram as distâncias interplanares. Os estudos de DRX estão sendo conduzidos em 2 frentes:

- a) Determinar a presença de fases ou constatar que as ligas são monofásicas
- b) Determinação do raio atômico médio e suas respectivas reflexões através do método de Vegard.

A Figura 15 mostra alguns perfis de difração obtidos com picos definidos, indicando que as ligas são cristalinas.

Figura 15 - Curvas de difração de raio-X



Fonte: Elaboração Própria.

Foram elaboradas planilhas (Apêndice A – I) contendo os memoriais de cálculo de parâmetros de ligas multi-elementares permitindo consolidar e guiar a seleção para a elaboração de novas ligas.

## 6 CONCLUSÕES

As ligas multi-elementos equimolares são preparadas e estudadas no trabalho quanto as suas propriedades mecânicas como dureza e tenacidade, microestrutura, propriedades físico-químicas e resistência a corrosão em meio salino. Alguns novos conceitos e processamentos foram desenvolvidos para o objetivo: emprego de critérios baseados em equivalentes de cromo e níquel e fusão de mistura preparada a partir de pós metálicos. As ligas apresentaram propriedades de dureza excepcionais, superando trabalhos semelhantes da literatura mundial. O tratamento de cementação foi empregado pela primeira vez, conduzindo a endurecimentos contundentes com valores de até 2172 HV. Uma liga metálica comparada às cerâmicas avançadas de elevada dureza foi obtida, permitindo novas aplicações para esse material. A resistência à corrosão em meios salinos mostrou resultados muito superiores em relação a materiais consolidados, como aços inoxidáveis. O estudo de tratamentos térmicos de homogeneização e recristalização são, contudo, necessários em futuros trabalhos de modo a permitir a conformação das ligas.

## 7 REFERÊNCIAS

- ATKINS, P.W. et al. - **Shriver and Atkins' Inorganic Chemistry**, Fifth Edition - W. H. Freeman and Company, New York, 2010.
- CALLISTER, William D.; RETHWISCH, David G. - **Ciência e engenharia de materiais: uma introdução**. 9. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2016.
- CAMPBELL, F.C. **Elements of Metallurgy and Engineering Alloys**. ASM International, 2008
- Ciência dos Materiais Multimídia** <<http://www.cienciadosmateriais.org/index.php?acao=exibir&cap=10&top=18>> acesso em 30/11/2017.
- DIETER, G.E. - **ASM Handbook Materials Selection and Design - Volume 20**, ASM International Handbook Committee, 1997
- FOGAÇA, J. R. V. - **Mundo da Educação**: <<https://mundoeducacao.bol.uol.com.br/quimica/eletronegatividade.htm>> acesso em 11/09/2018
- GUO, S. et al. - **Effect of valence electron concentration on stability of fcc or bcc phase in high entropy alloys (109)** – Journal of Applied Physics, 2011
- GUO, S.; LIU, C. T. - **Phase stability in high entropy alloys: Formation of solid-solution phase or amorphous phase**. Elsevier 2011.
- HUSSEY, R. J., WILSON J. - **Advanced Technical Ceramics Directory and Databook**, Springer Science & Business Media, 2012 - 506 p.
- Li, X. et al. - Microstructure and Properties of Coating of FeAlCuCrCoMn High Entropy Alloy Deposited by Direct Current Magnetron Sputtering. **Materials Research**. 19(4): 802-806, 2016.

MIRACLE, D.B.; DONALDSON, S.L. - **ASM Handbook Vol 21**, International Handbook Committee. pg. 2504, 2001.

MURTY, B.S.; YEH, J.W.; RANGANATHAN S. - **High-Entropy Alloys** - 1Edição, Butterworth-Heinemann. p.218, 2014.

NEWHOUSE, D.L.; BYLE, C.J., CURRAN, R.M. - Preprint of the 68<sup>th</sup> - **ASTM Annual Meeting**, Purdue University, Lafayette, IN, June 13– 18, 1965.

PALMQVIST, S. **Jermkontorests Ann.** 141 (1957) p.300.

PENG, Huabei et al. - A New Set of Creq and Nieq Equations for Predicting Solidification Modes of Cast Austenitic Fe-Mn-Si-Cr-Ni Shape Memory Alloys - **Metallurgical And Materials Transactions** - Volume 45b, February 2014 – 7.

RIVA, S. et all. - Formation and Disruption of W-Phase in High-Entropy Alloys. **MDPI - Metals**, Basel, Switzerland, 2016.

RYU, S. H.; YU, J. - A new equation for the cr equivalent in 9 to 12 pct cr steels - **Metallurgical and materials transactions** - Volume 29a, June, 1998.

SENKOV O. N.; MIRACLE D. B. - Effect of the atomic size distribution on glass forming ability of amorphous metallic alloys. **Materials Research Bulletin**, 36: 2183–2198, 2001.

SENKOV, O.N. et al. *Nature Communications* 6:6529, 1-10, 5 Mar 2015.

SHACKELFORD, J. F.; **Introdução à ciência dos Materiais para Engenheiros** / tradução: Vieira, Daniel; revisão técnica: Cruz, Nilson C. – Editora Pearson Prentice Hall. São Paulo, 2008.

SHETTY, D. K. et al. - Indentation Fracture of WC-Co Cermets. **Journal of Materials Science**. 20, p.1873-1882, 1985.

SHEWMON, P.G.; Transformations in Metals, J. Williams **Book Company**, p.394 – 1983.

SVENSSON, D.O.; High Entropy Alloys: **Breakthrough Materials for Aero Engine Applications**. Chalmers university of technology, Gothenburg, Sweden 2015.

**Tabela Periódica:** <<http://www.tabelaperiodicacompleta.com/wp-content/uploads/tabela-periodica-completa.pdf>> acesso em 19/06/2017.

**The periodic table of the elements:** <<http://www.webelements.com/>>. acesso em 11/09/2018.

TSAI, M.H; YEH, J.W. High-Entropy Alloys: A Critical Review. **Materials Research Letters**, p. 107-123, 2014.

WANG, Z et al. Atomic-size effect and solid solubility of multicomponent alloys. **Scripta Materialia**,p.28-31, 2015.

YE, Y. F. et al. - **High-entropy alloy: challenges and Prospects** - Volume 19, Issue 6, July–August 2016, Pages 349-362. Elsevier, 2016.

YEH, J. W. et al. - High-Entropy Alloys – A New Era of Exploitation, **Materials Science Forum**, Vol. 560, p 1-9: Trans Tech Publications: Switzerland, 2007.

YEH, J.W et al. Nanostructured High-Entropy Alloys with Multiple Principal Elements: Novel Alloy Design Concepts and Outcomes. **Advanced Engineering Materials**, 6, No.5, p.299-303, 2004.

YEH, J.W. Alloy Design Strategies and Future Trends in High-Entropy Alloys. **JOM: the journal of the Minerals, Metals & Materials Society**. Vol 65, No. 12, 2013.

ZHANG, Y., et al., Microstructures and properties of high-entropy alloys. **Progress in Materials Science**, 61: p. 1-93, 2014.

## APÊNDICE A – MEMORIAL DE CALCULO CCC1

Quantidade de elementos na Liga	6
Densidade Teórica da Liga (g/cm <sup>3</sup> )	10,641
Volume da pastilha (cm <sup>3</sup> )	3,00
Qtde de material a ser prod. (g)	30,00

L x C(cm) =	6
h(cm) =	0,5
	
volume(cm <sup>3</sup> ) =	3,000

Maior r (pm)	151,546392
Menor r (pm)	128,865979
%	14,97

Elemento LigaCCC1	Massa Molar (g/mol)	Massa Molar da Amostra (g)	% - massa	Massa(g) Teorica p/1 Past.	Massa(g) da Amostra	Raio Atômico (pm)	Volume (cm <sup>3</sup> )	Parâmetro Delta	VEC	P. Fusão °C	P. Ebulição °C
3 Ferro	55,840	9,307	10,356	3,306	3,107	129,90	7,0952986	0,00069	8	1535	2750
2 Molibdénio	95,940	15,990	17,792	5,680	5,338	144,33	9,38747554	0,00026	6	2623	4639
4 Cromo	52,000	8,667	9,644	3,078	2,893	132,99	7,23226704	0,00030	6	1857	<u>2672</u>
1 Nióbio	92,910	15,485	17,230	5,500	5,169	151,55	10,8413069	0,00140	5	2477	4744
4 Tungstênio	183,840	30,640	34,094	10,883	10,228	145,36	9,5253886	0,00037	6	<u>3422</u>	<u>5555</u>
3 Níquel	58,690	9,782	10,884	3,474	3,265	128,87	6,59438202	0,00086	10	<u>1455</u>	2730
	539,220		100,000	31,922	30,000	832,99	50,676	0,00387	41		

Parâmetro y	
WS	0,144991271
WL	0,121698135
Y	1,19140093

Parâmetro VEC	
VEC	6,833

Delta	138,8316151
	0,06223

## APÊNDICE B – MEMORIAL DE CALCULO CCC2

Quantidade de elementos na Liga	9
Densidade Teórica da Liga (g/cm <sup>3</sup> )	10,956
Volume da pastilha (cm <sup>3</sup> )	3,00
Qtde de material a ser prod. (g)	30,00

L x C(cm) =	6
h(cm) =	0,5
	
volume(cm <sup>3</sup> ) =	3,000

Maior r (pm)	164,948454
Menor r (pm)	128,865979
%	21,88

Elemento LigaCCC2	Massa Molar (g/mol)	Massa Molar da Amostra (g)	% - massa	Massa(g) Teorica p/1 Past.	Massa(g) da Amostra	Raio Atômico (pm)	Volume (cm <sup>3</sup> )	Parâmetro Delta	VEC	P. Fusão °C	P. Ebulição °C
3 Ferro	55,840	6,204	9,240	3,037	2,772	129,90	7,0952986	0,00073	8	1535	2750
2 Molibdénio	95,940	10,660	15,875	5,218	4,763	144,33	9,38747554	0,00005	6	<u>2623</u>	4639
4 Cromo	52,000	5,778	8,604	2,828	2,581	132,99	7,23226704	0,00039	6	1857	<u>2672</u>
1 Nióbio	92,910	10,323	15,374	5,053	4,612	151,55	10,8413069	0,00058	5	2477	<u>4744</u>
3 Zircônio	91,220	10,136	15,094	4,961	4,528	164,95	14,0122888	0,00310	4	1857	4409
3 Níquel	58,690	6,521	9,711	3,192	2,913	128,87	6,59438202	0,00087	10	<u>1455</u>	2730
2 Titânio	47,870	5,319	7,921	2,376	2,376	151,55	10,6141907	0,00058	4	1668	3287
3 Vanádio	50,940	5,660	8,429	2,529	2,529	139,18	8,35081967	0,00003	5	1902	3409
7 Cobalto	58,930	6,548	9,751	2,925	2,925	128,87	6,62134831	0,00087	9	1495	2927
	604,340		100,000	32,118	30,000	1272,165	55,163	0,00718	57		

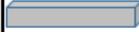
Parâmetro y	
WS	0,147730535
WL	0,11284987
y	1,309089104

Parâmetro VEC	
VEC	6,333

Delta	141,3516609
	0,08474

### APÊNDICE C – MEMORIAL DE CALCULO CCC3

Quantidade de elementos na Liga	9
Densidade Teórica da Liga (g/cm <sup>3</sup> )	13,941
Volume da pastilha (cm <sup>3</sup> )	3,00
Qtde de material a ser prod. (g)	30,00

L x C(cm) =	6
h(cm) =	0,5
	
volume(cm <sup>3</sup> ) =	3,000

Maior r (pm)	151,546392
Menor r (pm)	128,865979
%	14,97

Elemento LigaCCC3	Massa Molar (g/mol)	Massa Molar da Amostra (g)	% - massa	Massa(g) Teórica p/1 Past.	Massa(g) da Amostra	Raio Atômico (pm)	Volume (cm <sup>3</sup> )	Parâmetro Delta	VEC	P. Fusão °C	P. Ebulição °C
Ferro	55,840	6,204	7,964	3,331	2,389	129,90	7,0952986	0,00045	8	1535	2750
Molibdênio	95,940	10,660	13,683	5,723	4,105	144,33	9,38747554	0,00018	6	2623	4639
Cromo	52,000	5,778	7,416	3,102	2,225	132,99	7,23226704	0,00019	6	1857	2672
Nióbio	92,910	10,323	13,251	5,542	3,975	151,55	10,8413069	0,00095	5	2477	4744
Vanádio	50,940	5,660	7,265	3,039	2,180	139,18	8,35081967	0,00000	5	1902	3409
Manganês	54,940	6,104	7,836	3,277	2,351	141,24	7,3844086	0,00004	7	<u>1244</u>	<u>1962</u>
Cobalto	58,930	6,548	8,405	2,521	2,521	128,87	6,62134831	0,00056	9	1495	2927
Níquel	58,690	6,521	8,371	2,511	2,511	128,87	6,59438202	0,00056	10	1455	2730
Tântalo	180,950	20,106	25,808	7,742	7,742	151,55	10,8678679	0,00095	5	<u>3017</u>	<u>5458</u>
	701,140		100,000	36,789	30,000	1248,454	50,292	0,00388	61		

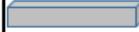
Parâmetro $\gamma$	
WS	0,14486631
WL	0,121586053
$\gamma$	1,191471438

Parâmetro VEC	
VEC	6,778

Delta	138,7170676
	0,06229

## APÊNDICE D – MEMORIAL DE CALCULO CCC4

Quantidade de elementos na Liga	9
Densidade Teórica da Liga (g/cm <sup>3</sup> )	11,905
Volume da pastilha (cm <sup>3</sup> )	3,00
Qtde de material a ser prod. (g)	30,00

L x C(cm) =	6
h(cm) =	0,5
	
volume(cm <sup>3</sup> ) =	3,000

Maior r (pm)	151,546392
Menor r (pm)	129,896907
%	14,29

Elemento LigaCCC4	Massa Molar (g/mol)	Massa Molar da Amostra (g)	% - massa	Massa(g) Teorica p/1 Past.	Massa(g) da Amostra	Raio Atômico (pm)	Volume (cm <sup>3</sup> )	Parâmetro Delta	VEC	P. Fusão °C	P. Ebulição °C
Ferro	55,840	6,204	8,206	2,931	2,462	129,90	7,0952986	0,00066	8	<u>1535</u>	2750
Molibdênio	95,940	10,660	14,099	5,036	4,230	144,33	9,38747554	0,00007	6	2623	4639
Tântalo	180,950	20,106	26,593	9,498	7,978	151,55	10,8678679	0,00065	5	<u>3017</u>	<u>5458</u>
Nióbio	92,910	10,323	13,654	4,877	4,096	151,55	10,8413069	0,00065	5	2477	4744
Vanádio	50,940	5,660	7,486	2,674	2,246	139,18	8,35081967	0,00001	5	1902	3409
Titânio	47,870	5,319	7,035	2,513	2,111	151,55	10,6141907	0,00065	4	1668	3287
Cromo	52,000	5,778	7,642	2,293	2,293	132,99	7,23226704	0,00034	6	1857	<u>2672</u>
Cromo	52,000	5,778	7,642	2,293	2,293	132,99	7,23226704	0,00034	6	1857	<u>2672</u>
Cromo	52,000	5,778	7,642	2,293	2,293	132,99	7,23226704	0,00034	6	1857	<u>2672</u>
	680,450		100,000	34,405	30,000	1267,010	57,157	0,00372	51		

Parâmetro y	
WS	0,145895579
WL	0,123599552
y	1,180389222

Parâmetro VEC	
VEC	5,667

Delta	140,7789233
	0,06099

## APÊNDICE E – MEMORIAL DE CALCULO CCC5

Quantidade de elementos na Liga	9
Densidade Teórica da Liga (g/cm <sup>3</sup> )	12,011
Volume da pastilha (cm <sup>3</sup> )	3,00
Qtde de material a ser prod. (g)	30,00

L x C(cm) =	6
h(cm) =	0,5
	
volume(cm <sup>3</sup> ) =	3,000

Maior r (pm)	151,546392
Menor r (pm)	129,896907
%	4,29

Elemento LigaCCC5	Massa Molar (g/mol)	Massa Molar da Amostra (g)	% - massa	Massa(g) Teorica p/1 Past.	Massa(g) da Amostra	Raio Atômico (pm)	Volume (cm <sup>3</sup> )	Parâmetro Delta	VEC	P. Fusão °C	P. Ebulição °C
Cromo	52,000	5,778	7,557	2,723	2,267	132,99	7,23226704	0,00029	6	1857	<u>2672</u>
Molibdênio	95,940	10,660	13,942	5,024	4,183	144,33	9,38747554	0,00010	6	2623	4639
Tântalo	180,950	20,106	26,296	9,475	7,889	151,55	10,8678679	0,00074	5	<u>3017</u>	<u>5458</u>
Nióbio	92,910	10,323	13,502	4,865	4,051	151,55	10,8413069	0,00074	5	2477	4744
Vanádio	50,940	5,660	7,403	2,667	2,221	139,18	8,35081967	0,00000	5	1902	3409
Titânio	47,870	5,319	6,957	2,507	2,087	151,55	10,6141907	0,00074	4	1668	3287
Ferro	55,840	6,204	8,115	2,434	2,434	129,90	7,0952986	0,00059	8	<u>1535</u>	2750
Ferro	55,840	6,204	8,115	2,434	2,434	129,90	7,0952986	0,00059	8	<u>1535</u>	2750
Ferro	55,840	6,204	8,115	2,434	2,434	129,90	7,0952986	0,00059	8	<u>1535</u>	2750
	688,130		100,000	34,563	30,000	1260,825	57,294	0,00439	55		

Parâmetro y	
WS	0,14515287
WL	0,122929323
y	1,180783121

Parâmetro VEC	
VEC	6,111

Delta	140,091638
	0,06623

## APÊNDICE F – MEMORIAL DE CALCULO CCC6

Quantidade de elementos na Liga	9
Densidade Teórica da Liga (g/cm <sup>3</sup> )	13,741
Volume da pastilha (cm <sup>3</sup> )	3,00
Qtde de material a ser prod. (g)	30,00

L x C(cm) =	6
h(cm) =	0,5
	
volume(cm <sup>3</sup> ) =	3,000

Maior r (pm)	151,546392
Menor r (pm)	129,896907
%	14,29

Elemento LigaCCC6	Massa Molar (g/mol)	Massa Molar da Amostra (g)	% - massa	Massa(g) Teorica p/1 Past.	Massa(g) da Amostra	Raio Atômico (pm)	Volume (cm <sup>3</sup> )	Parâmetro Delta	VEC	P. Fusão °C	P. Ebulição °C
Cromo	52,000	5,778	6,605	2,723	1,982	132,99	7,23226704	0,00062	6	1857	2672
Molibdênio	95,940	10,660	12,186	5,024	3,656	144,33	9,38747554	0,00000	6	2623	4639
Tântalo	180,950	20,106	22,984	9,475	6,895	151,55	10,8678679	0,00033	5	3017	5458
Nióbio	92,910	10,323	11,802	4,865	3,540	151,55	10,8413069	0,00033	5	2477	4744
Vanádio	50,940	5,660	6,470	2,667	1,941	139,18	8,35081967	0,00011	5	1902	3409
Titânio	47,870	5,319	6,081	2,507	1,824	151,55	10,6141907	0,00033	4	1668	3287
Tungstênio	183,840	20,427	23,352	7,005	7,005	145,36	9,5253886	0,00001	6	<u>3422</u>	<u>5555</u>
Alumínio	26,980	2,998	3,427	1,028	1,028	147,42	9,95571956	0,00007	3	<u>660</u>	<u>2467</u>
Ferro	55,840	6,204	7,093	2,128	2,128	129,90	7,0952986	0,00103	8	1535	2750
	787,270		100,000	37,421	30,000	1293,814	57,294	0,00284	48		

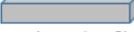
Parâmetro y	
WS	0,149097966
WL	0,126492942
y	1,178705819

Parâmetro VEC	
VEC	5,333

Delta	143,7571592
	0,05325

## APÊNDICE G – MEMORIAL DE CALCULO CCC7

Quantidade de elementos na Liga	6
Densidade Teórica da Liga (g/cm <sup>3</sup> )	8,314
Volume da pastilha (cm <sup>3</sup> )	3,00
Qtde de material a ser prod. (g)	30,00

L x C(cm) =	6
h(cm) =	0,5
	
volume(cm <sup>3</sup> ) =	3,000

Maior r (pm)	151,546392
Menor r (pm)	129,896907
%	14,29

Elemento LigaCCC7	Massa Molar (g/mol)	Massa Molar da Amostra (g)	% - massa	Massa(g) Teorica p/1 Past.	Massa(g) da Amostra	Raio Atômico (pm)	Volume (cm <sup>3</sup> )	Parâmetro Delta	VEC	P. Fusão °C	P. Ebulição °C
Ferro	55,840	9,307	12,154	3,031	3,646	129,90	7,0952986	0,00142	8	1535	2750
Cromo	52,000	8,667	11,318	2,823	3,395	132,99	7,23226704	0,00084	6	1857	2672
Titânio	47,870	7,978	10,419	2,599	3,126	151,55	10,6141907	0,00058	4	1668	3287
Alumínio	26,980	4,497	5,872	1,465	1,762	147,42	9,95571956	0,00015	3	<u>660</u>	<u>2467</u>
Nióbio	92,910	15,485	20,222	5,044	6,067	151,55	10,8413069	0,00058	5	2477	4744
Tungstênio	183,840	30,640	40,014	9,980	12,004	145,36	9,5253886	0,00004	6	<u>3422</u>	<u>5555</u>
	459,440		100,000	24,941	30,000	858,763	55,264	0,00360	32		

Parâmetro y	
WS	0,148422712
WL	0,125882369
y	1,179058778

Parâmetro VEC	
VEC	5,333

Delta	143,1271478
	0,06004

## APÊNDICE H – MEMORIAL DE CALCULO CFC1

Quantidade de elementos na Liga	6
Densidade Téorica da Liga (g/cm <sup>3</sup> )	6,315
Volume da pastilha (cm <sup>3</sup> )	3,00
Qtde de material a ser prod. (g)	30,00

L x C(cm) =	6
h(cm) =	0,5
	
volume(cm <sup>3</sup> ) =	3,000

Maior r (pm)	147
Menor r (pm)	125
%	14,97

Elemento LigaCFC1	Massa Molar (g/mol)	Massa Molar da Amostra (g)	% - massa	Massa(g) Teorica p/1 Past.	Massa(g) da Amostra	Raio Atômico (pm)	Volume (cm <sup>3</sup> )	Parâmetro Delta	VEC	P. Fusão °C	P. Ebulição °C
Alumínio	26,980	4,497	8,763	1,660	2,629	143	9,95571956	0,00069	3	<u>660</u>	2467
Ferro	55,840	9,307	18,138	3,436	5,441	126	7,0952986	0,00064	8	1535	2750
Níquel	58,690	9,782	19,063	3,612	5,719	125	6,59438202	0,00080	10	1455	2730
Cobre	63,550	10,592	20,642	3,911	6,193	128	7,10850112	0,00037	11	1084	2567
Manganês	54,940	9,157	17,845	3,381	5,354	137	7,3844086	0,00007	7	1244	<u>1962</u>
Titânio	47,870	7,978	15,549	2,946	4,665	147	10,6141907	0,00148	4	<u>1668</u>	<u>3287</u>
	307,870		100,000	18,945	30,000	806,000	48,753	0,00406	43		

Parâmetro y	
WS	0,144616269
WL	0,121361812
y	1,19161264

Parâmetro VEC	
VEC	7,167

Delta	134,3333333
	0,06370

## APÊNDICE I – MEMORIAL DE CALCULO CFC3

Quantidade de elementos na Liga	6
Densidade Teórica da Liga (g/cm <sup>3</sup> )	8,686
Volume da pastilha (cm <sup>3</sup> )	3,00
Qtde de material a ser prod. (g)	30,00

L x C(cm) =	6
h(cm) =	0,5
	
volume(cm <sup>3</sup> ) =	3,000

Maior r (pm)	147
Menor r (pm)	125
%	14,97

Elemento LigaCFC3	Massa Molar (g/mol)	Massa Molar da Amostra (g)	% - massa	Massa(g) Teorica p/1 Past.	Massa(g) da Amostra	Raio Atômico (pm)	Volume (cm <sup>3</sup> )	Parâmetro Delta	VEC	P. Fusão °C	P. Ebulição °C
Níquel	58,690	9,782	16,129	4,203	4,839	125	6,59438202	0,00097	10	1455	2730
Cobre	63,550	10,592	17,464	4,551	5,239	128	7,10850112	0,00049	11	1084	2567
Cobalto	58,930	9,822	16,194	4,220	4,858	125	6,62134831	0,00097	9	1495	2927
Alumínio	26,980	4,497	7,414	1,932	2,224	143	9,95571956	0,00053	3	<u>660</u>	2467
Prata	107,870	17,978	29,644	7,724	8,893	144	1	0,00068	11	961	<u>2212</u>
Titânio	47,870	7,978	13,155	3,428	3,947	147	10,6141907	0,00124	4	<u>1668</u>	<u>3287</u>
	363,890		100,000	26,058	30,000	812,000	41,894	0,00489	48		

Parâmetro y	
WS	0,14574022
WL	0,122370082
y	1,190979185

Parâmetro VEC	
VEC	8,000

Delta	135,3333333
	0,06993