

PMT 3205

Físico-Química para Metalurgia e Materiais I

Calcular a concentração de oxigênio numa liga Fe-Si-O contendo 0,10% Si em peso, em equilíbrio com sílica sólida a 1600°C, sabendo que:



$$e_{\text{Si}}^{\text{Si}} = +0,32$$

$$e_{\text{Si}}^{\text{O}} = -0,24$$

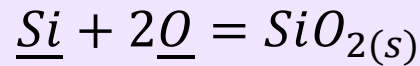
$$e_{\text{O}}^{\text{O}} = -0,20$$

$$e_{\text{O}}^{\text{Si}} = -0,14$$

liga Fe-Si-O c/ 0,10% Si - 1600°C



$$e_{\text{Si}}^{\text{Si}} = +0,32; e_{\text{Si}}^{\text{O}} = -0,24; e_{\text{O}}^{\text{O}} = -0,20; e_{\text{O}}^{\text{Si}} = -0,14$$



$$\Delta G^{\circ} = (-226500 + 47,50.T) - (-55800 - 1,46.T) - (-28500 - 6,1.T)$$

$$\Delta G^{\circ} = -142200 + 55,06.T$$

$$K_{1873} = \exp\left(\frac{+142200 - 55,06.T}{RT}\right) = \exp\left(\frac{+142200 - 55,06 \times 1873}{1,987 \times 1873}\right) = 36270$$

$$36270 = \frac{a_{\text{SiO}_2}}{h_{\text{Si}} \cdot (h_{\text{O}})^2} = \frac{1}{f_{\text{Si}} \cdot \% \text{Si} \cdot (f_{\text{O}} \cdot \% \text{O})^2} = \frac{1}{f_{\text{Si}} \cdot 0,10 \cdot (f_{\text{O}} \cdot \% \text{O})^2}$$

$$\log f_{Si} = \%Si \cdot e_{Si}^{Si} + \%O \cdot e_{Si}^O = 0,10 \times 0,32 + \%O(-0,24)$$
$$\log f_{Si} = 0,032 - 0,24\%O$$

$$\log f_O = \%O \cdot e_O^O + \%Si \cdot e_O^{Si} = \%O(-0,20) + 0,10(-0,14)$$
$$\log f_O = -0,014 - 0,20\%O$$

$$36270 = \frac{1}{f_{Si} \cdot 0,10 \cdot (f_O \cdot \%O)^2}$$
$$\log 36270 = \log 1 - \log f_{Si} - \log 0,10 - 2 \log f_O - 2 \log \%O$$
$$3,560 = -\log f_{Si} - 2 \log f_O - 2 \log \%O$$

com:

$$\log f_{Si} = 0,032 - 0,24\%O$$
$$\log f_O = -0,014 - 0,20\%O \Rightarrow$$

$$3,560 = -0,032 + 0,24\%O - 2(-0,014 - 0,20\%O) - 2 \log \%O$$
$$3,564 = 0,64\%O - 2 \log \%O$$



%O	0,64% O-2log% O
0,01	4,006
0,015	3,657
0,016	3,602
0,0162	3,591
0,0164	3,581
0,0166	3,570
0,0167	3,565
0,01671	3,565
0,01672	3,564
0,01673	3,564
0,01674	3,563
0,0168	3,560
0,0169	3,555
0,017	3,550
0,02	3,411

$$3,564 = 0,64\%O - 2 \log\% O$$

Portanto, o banho estará em equilíbrio com a escória considerada quando o teor de oxigênio no banho atingir $\cong 0,017\%O$.

Alternativa de solução

1. *Considerar válida a lei de Henry:*

$$36270 = \frac{a_{SiO_2}}{h_{Si} \cdot (h_O)^2} = \frac{1}{\%Si \cdot (\%O)^2} = \frac{1}{0,10 \cdot (\%O)^2}$$

$$\%O = \sqrt{\frac{1}{0,10 \times 36270}} = 0,017$$

2. *Com esse resultado, considerar a lei de Henry não válida*

$$\log f_{Si} = 0,032 - 0,24\%O = 0,032 - 0,24 \times 0,017 = 0,028 \therefore f_{Si} = 1,067$$

$$\log f_O = -0,014 - 0,20\%O = -0,014 - 0,20 \times 0,017 = -0,017 \therefore f_O = 0,961$$

$$36270 = \frac{1}{1,067 \cdot 0,10 \cdot (0,961 \cdot \%O)^2} \therefore \%O = 0,017$$

3. *Como repetiu o resultado de %O, esse é o resultado correto. Se não fosse o mesmo resultado, deveria repetir o cálculo com o último resultado até repetir*

PARA CASA

Um banho de aço contém 0,08% C, 0,90% Cr, 0,85% Mn e 0,02% S.

(a) Calcule a atividade h_C do carbono no banho.

(b) Calcule a atividade correspondente do oxigênio no banho se ele estiver em equilíbrio com 1 atm de CO a 1600°C onde o produto $h_C \cdot h_O = 0,002$.

(c) Calcule a porcentagem de oxigênio correspondente. [2-65]

Dados:

$$e_C^C = +0,22$$

$$e_C^{Cr} = -0,024$$

$$e_C^{Mn} = 0$$

$$e_C^S = +0,10$$

$$e_O^C = -0,13$$

$$e_O^O = -0,20$$

$$e_O^{Cr} = -0,041$$

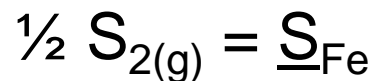
$$e_O^{Mn} = 0$$

$$e_O^S = -0,14$$

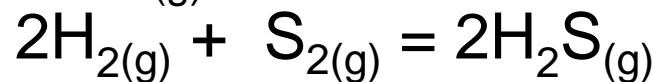


(*Bodsworth & Appleton, 1965; Problem 6.j, p.132*): Uma liga Fe-0,04%S-1,2%C está em equilíbrio com uma mistura gasosa H₂S-H₂ na razão de H₂S/H₂ = 1,40x10⁻⁴, a 1600°C. Em sistemas binários diluídos Fe-S o parâmetro de interação e_S^S é -0,028. Calcule o parâmetro de interação para o efeito do C sobre o S, na liga ternária.

Dados:

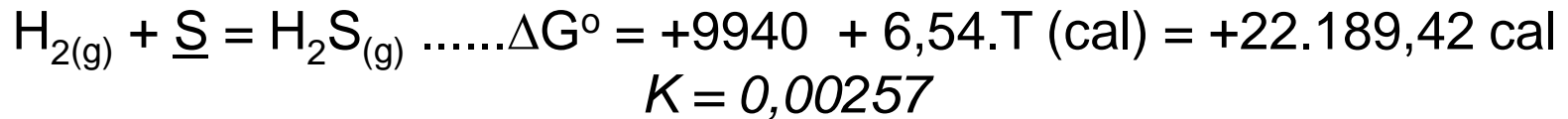
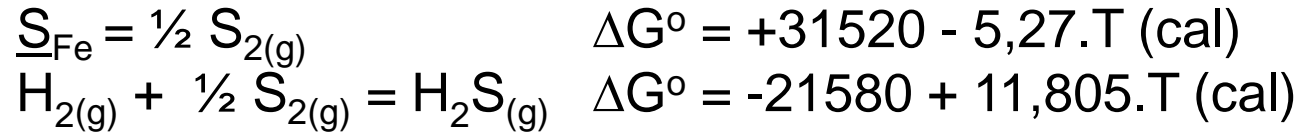


$$\Delta G^\circ = -31520 + 5,27.T \text{ (cal)}$$



$$\Delta G^\circ = -43160 + 23,61.T \text{ (cal)}$$

Fe-0,04%S-1,2%C equilíbrio : $H_2S/H_2 = 1,40 \times 10^{-4}$, a 1600°C
Fe-S o parâmetro de interação e_S^S é -0,028



$$K = 0,00257 = \frac{p_{H_2S}}{p_{H_2} \cdot h_S} = \frac{1,40 \times 10^{-4}}{h_S}$$

$$h_S = 0,0544 \Rightarrow$$

$$f_S \cdot \%S = 0,0544 \Rightarrow$$

$$f_S \cdot 0,04 = 0,0544 \Rightarrow f_S = 1,36$$

$$f_S = 1,36$$
$$\log f_S = 0,13344$$

$$e_S^S \cdot \%S + e_S^C \cdot \%C = 0,13344$$
$$-0,028 \times 0,04 + e_S^C \times 1,2 = 0,13344$$

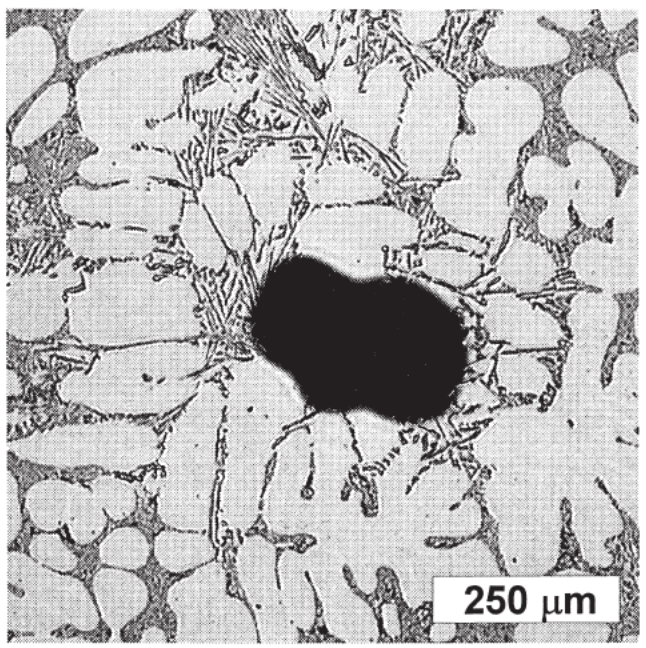
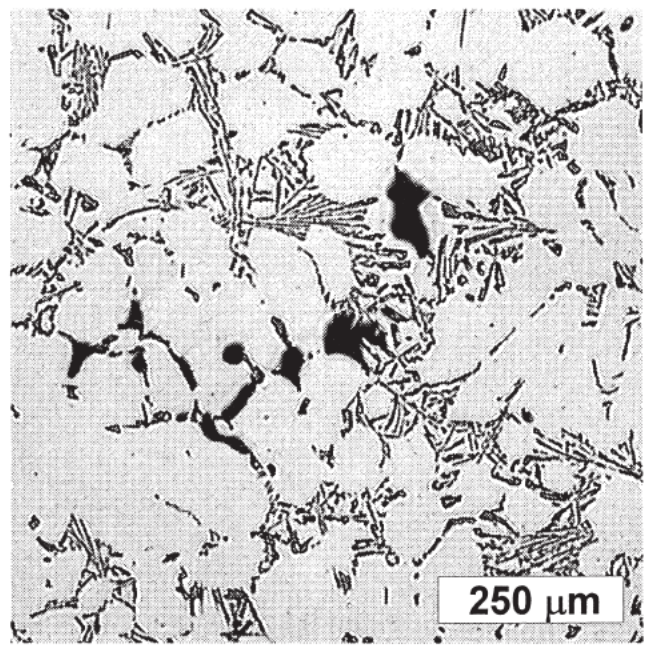
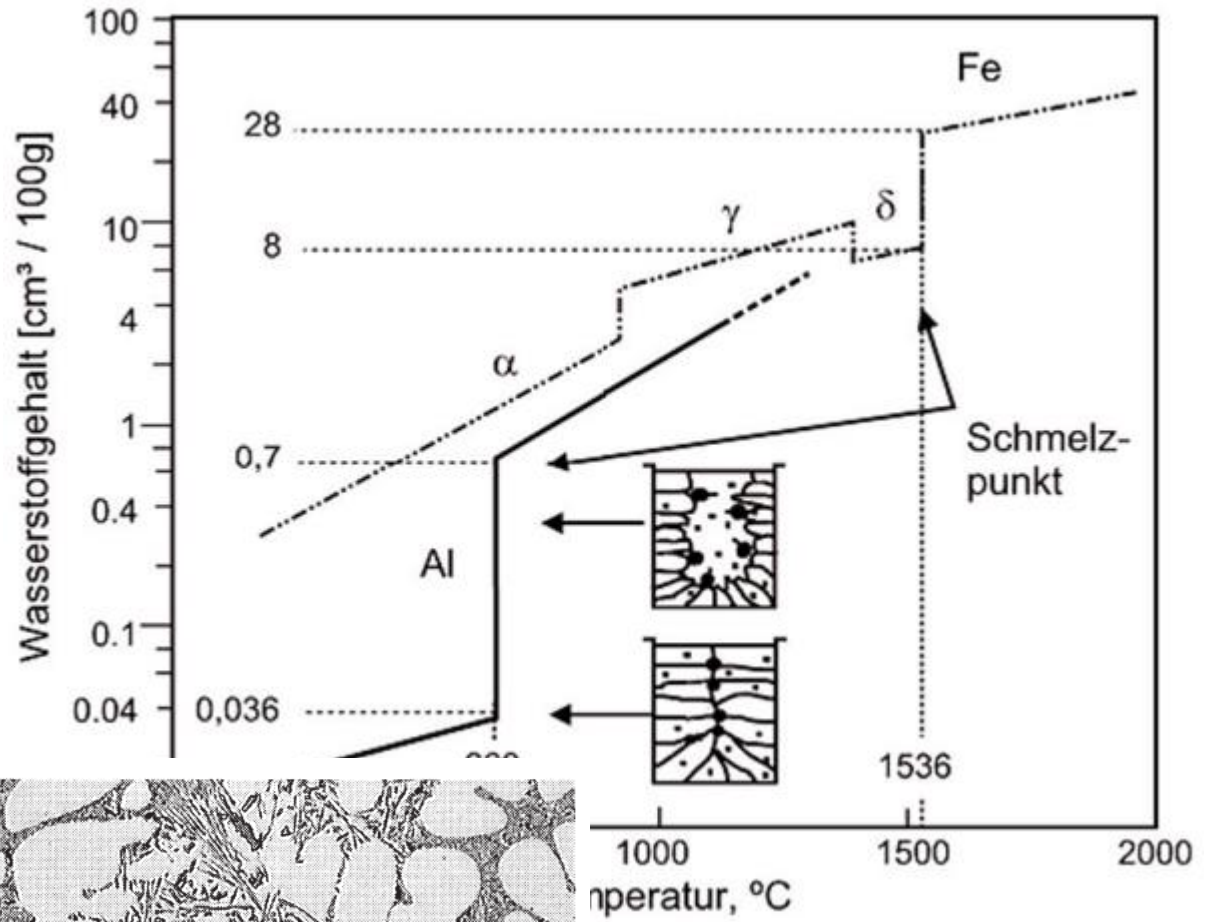
$$e_S^C = +0,112$$

Para a reação $\text{MgO}_{(s)} = \text{Mg}_{(g)} + \underline{\text{O}}_{\text{Fe}}$, $\Delta G^\circ = 53,5 \text{ kcal}$, 1600°C . Calcule a pressão de vapor do magnésio para o equilíbrio entre um cadinho de MgO com aço líquido contendo $10^{-3}\%$ e $10^{-5}\%$ de $\underline{\text{O}}$. Considere válida a lei de Henry. [2-64]

$$K = \frac{p_{\text{Mg}} x h_{\text{O}}}{a_{\text{MgO}}} = \frac{p_{\text{Mg}} x \% \text{O}}{1} = 5,71 \times 10^{-7}$$

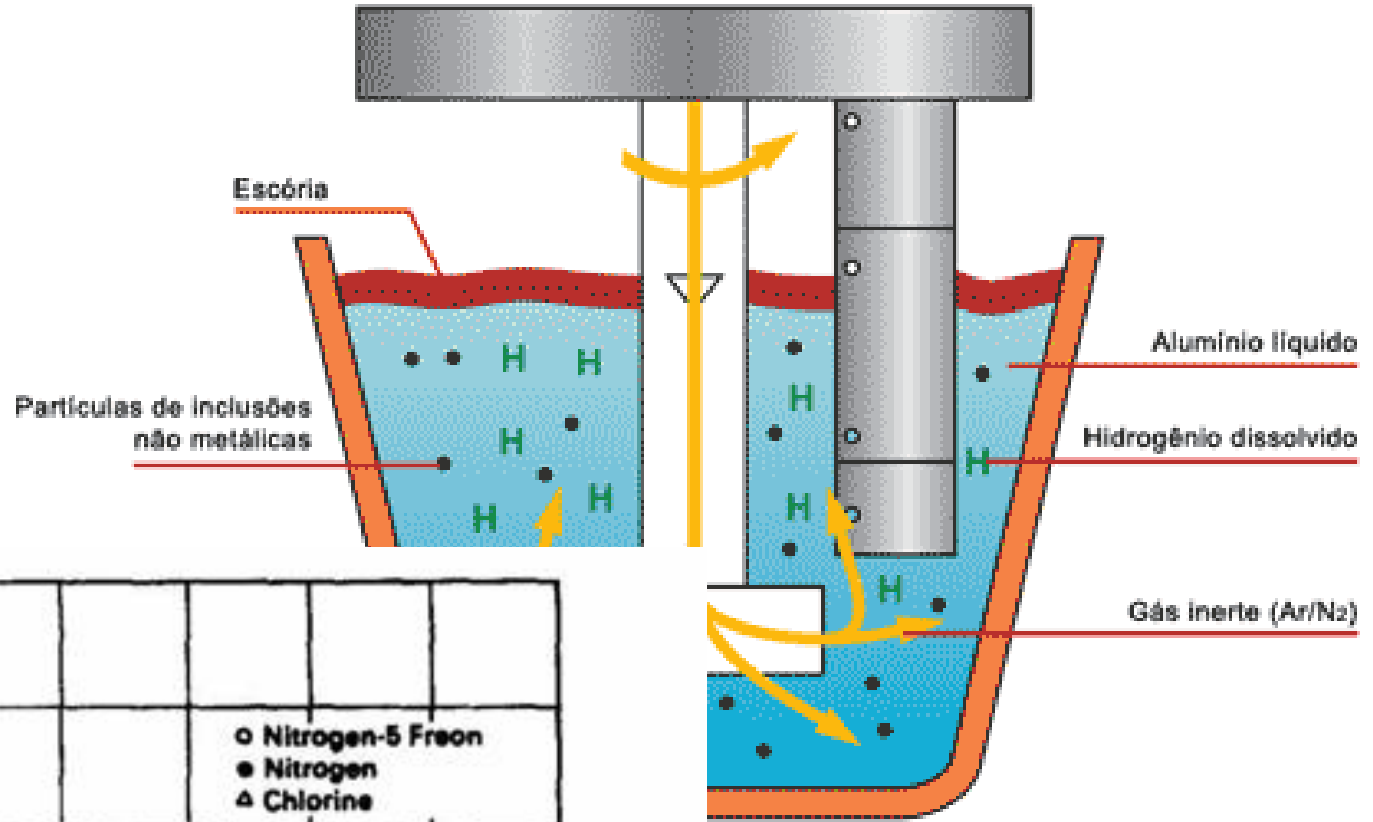
$$p_{\text{Mg}} = 5,71 \times 10^{-4}$$

$$p_{\text{Mg}} = 5,71 \times 10^{-2}$$

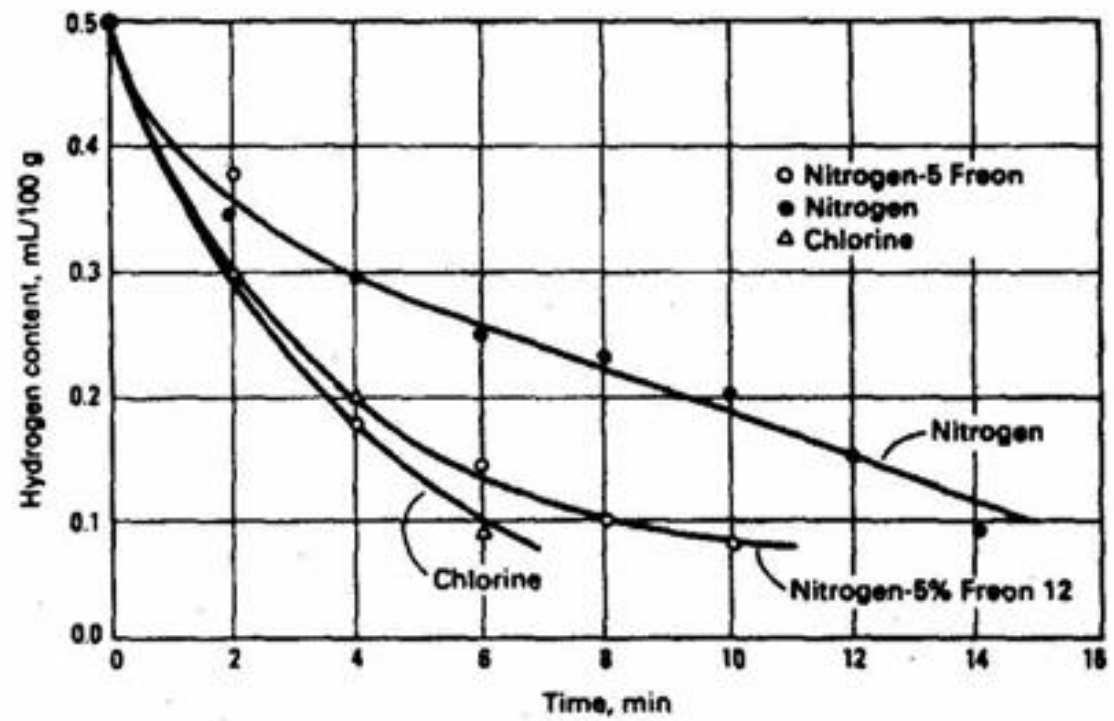




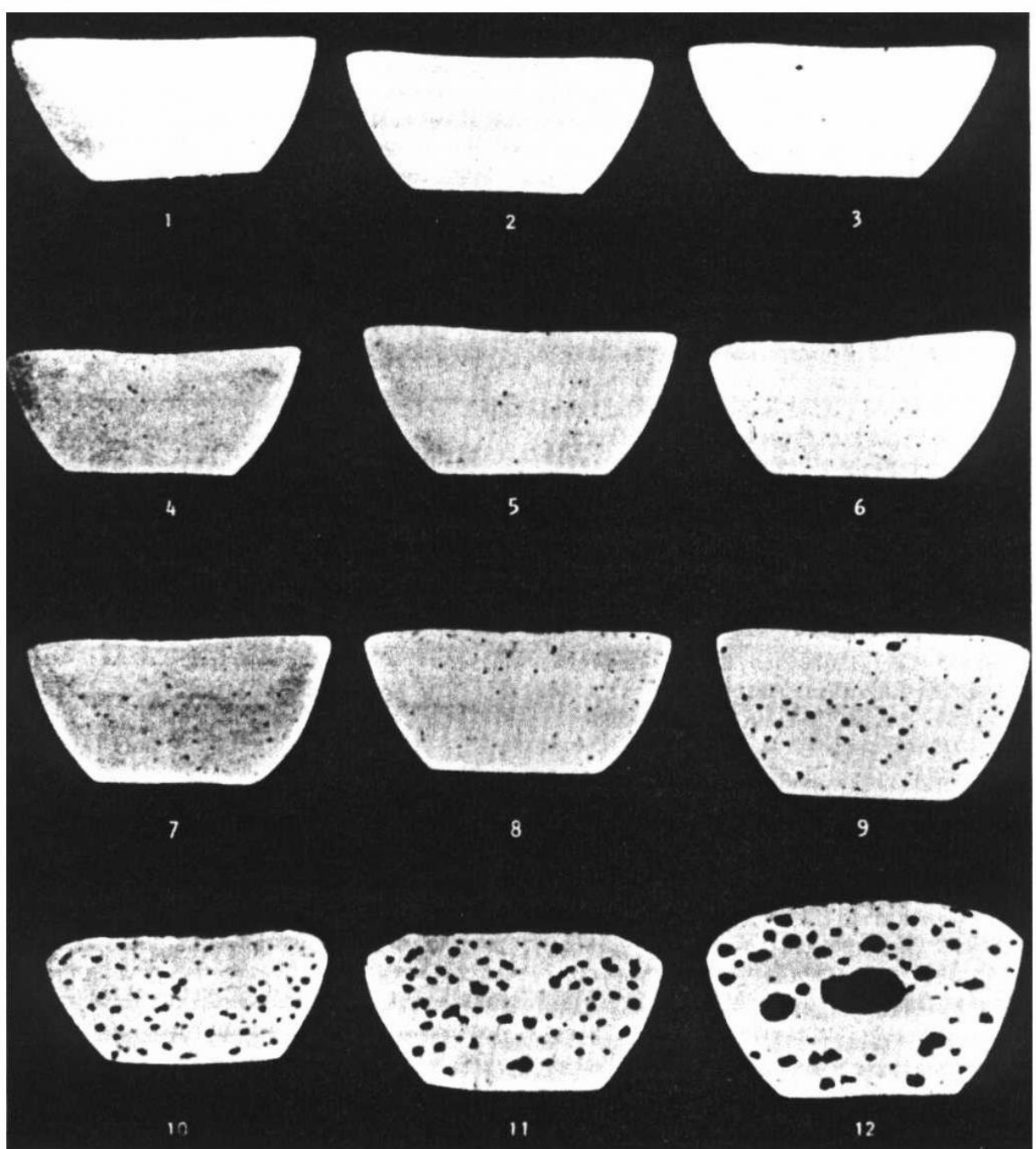
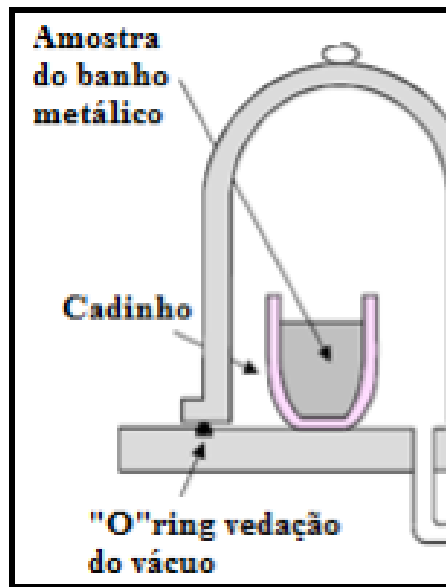
METMAT



ROTOR



Redução do teor de H dissolvido no banho com o tempo de degaseificação.



Amostras obtidas sob pressão reduzida empregadas na avaliação da quantidade de hidrogênio dissolvido em banhos de alumínio. As intensidades de 1 a 12 representam teores crescentes de H.

Calcular a quantidade de Fe-Si (75% Silício) em (kg FeSi/t aço) necessária para desoxidar um aço com 600 ppm inicial de oxigênio visando a obtenção de 50 ppm de oxigênio na T de 1600°C. [1]

Dados:

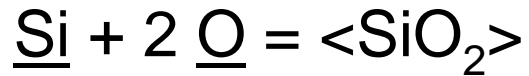


Considere válida a lei de Henry para Si e O dissolvidos no Fe

$$M_{\text{Si}} = 28\text{g/mol}$$

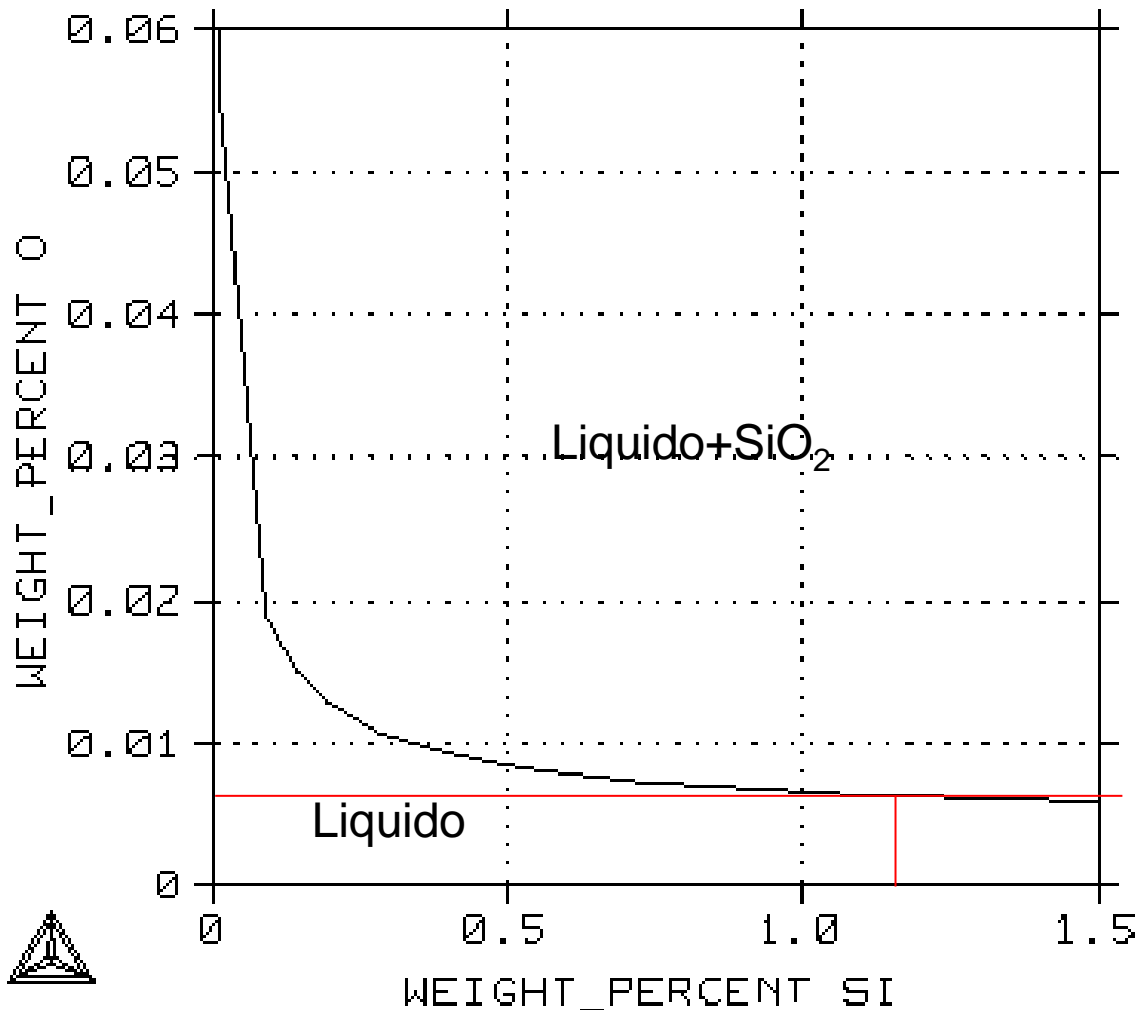
$$M_{\text{O}} = 16\text{g/mol}$$

Obs: O Fe do Fe-Si não participa da reação; SiO₂ que se forma é pura



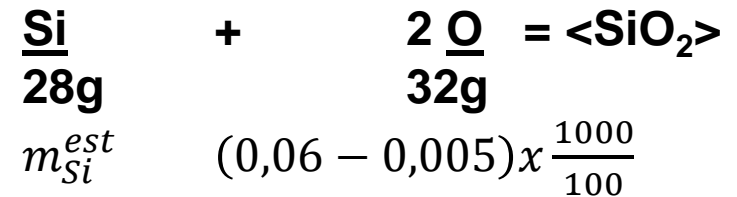
$$K = \frac{a_{\text{SiO}_2}}{h_{\text{Si}} \cdot h_{\text{O}}^2} = \frac{1}{\% \text{Si} \cdot \% \text{O}^2}$$

$$\% \text{Si} \cdot \% \text{O}^2 = \frac{1}{K} = \frac{1}{35.425,6}$$



$$\% \text{Si} = \frac{1}{35.425,6 \times 0,005^2} = 1,13$$

$$m_{\text{Si}}^{\text{term}} = 11,29 \text{ kg}$$



$$m_{\text{Si}}^{\text{est}} = 0,481 \text{ kg}$$

$$m_{\text{Si}}^{\text{total}} = 0,481 + 11,29 = 11,771 \text{ kg}$$

$$m_{\text{FeSi}} = \frac{m_{\text{Si}}^{\text{total}}}{0,75} = 15,7 \text{ kg}$$

PARA CASA

Uma aciaria produz 60 corridas de 200 t de aço por dia. Este aço é produzido em conversor e o teor de C final visado é de 0,05%. O oxigênio e o carbono do aço no fim de sopro estão em equilíbrio aparente com uma pressão de CO de 1,1 atm. Todo o aço produzido é desoxidado com Al visando um teor de O final em solução de 3 ppm. Assumindo que o rendimento de adição de Al é de 85% e que o custo do Al em fio é de R\$5.000/t, determinar o gasto com Al mensal. [3]

Dados:

$$T=1873K$$

$$\underline{C} + \underline{O} = (CO) \dots\dots\dots K_{1873K}=500$$

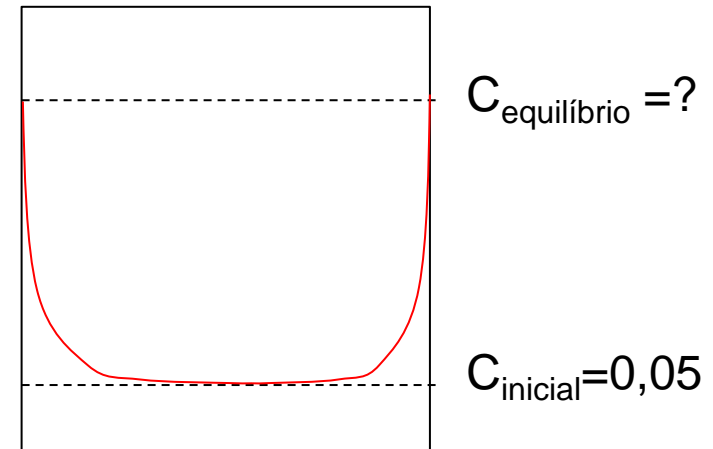
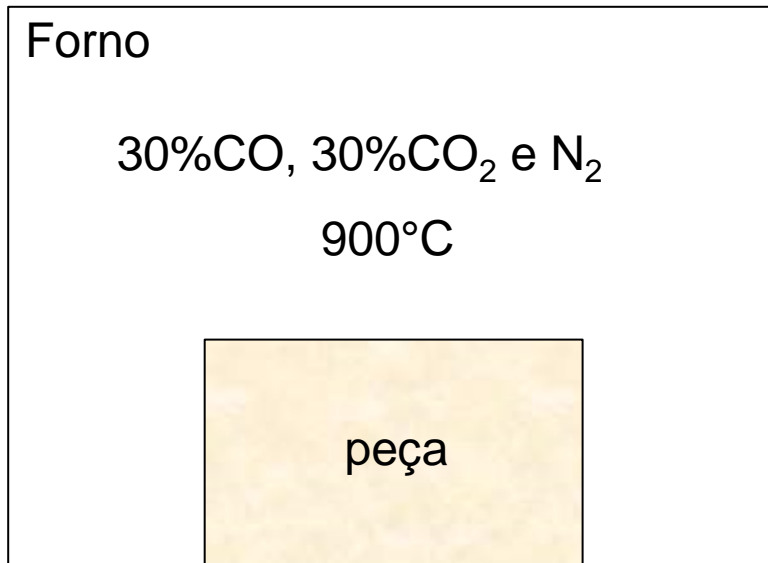
$$2\{Al\} + 1,5(O_2) = \langle Al_2O_3 \rangle \dots \Delta G^\circ = -403.260 + 78,11T \text{ (cal/mol)}$$

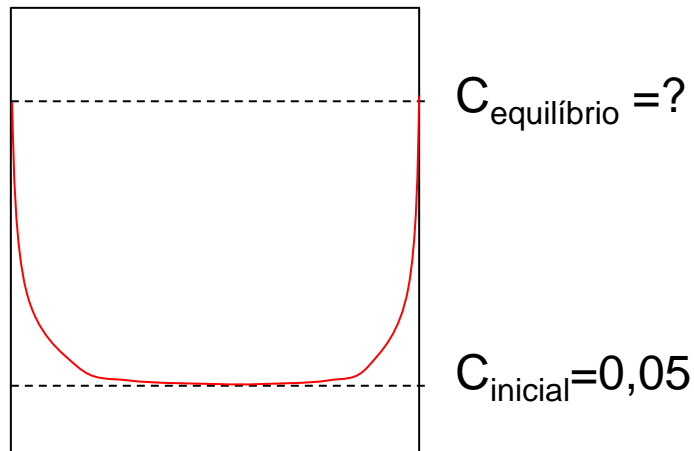
$$\{Al\} = \underline{Al} \dots\dots\dots \Delta G^\circ = -15.046 - 5,33T \text{ (cal/mol)}$$

$$0,5(O_2) = \underline{O} \dots\dots\dots \Delta G^\circ = -28.000 - 0,69T \text{ (cal/mol)}$$

Para casa

Num processo de cementação utilizou-se uma atmosfera contendo 30%CO, 30%CO₂ e N₂ a 900°C. Determinar o teor de C da superfície da peça sabendo que o teor de C inicial era de 0,05%. [89]

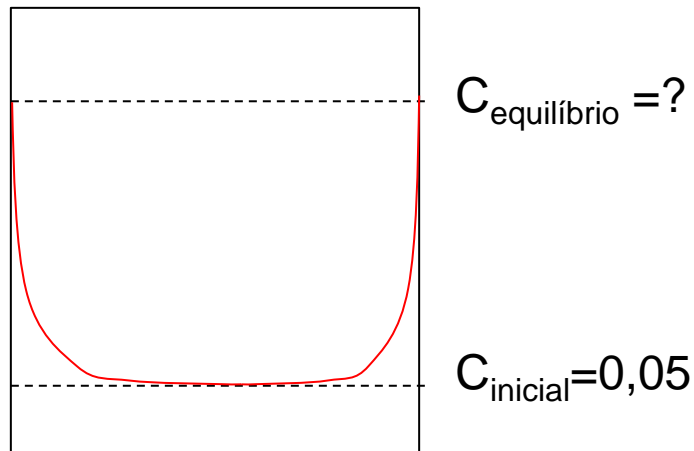




$$1173K \quad \Delta G^\circ = 1764,1 \text{ cal}$$

$$K = 0,4691276$$

$$K = \frac{f_C x\%C x p_{CO_2}}{p_{CO}} = \frac{f_C x\%C x 0,3}{0,3^2}$$



$$K = \frac{f_C \times \%C \times 0,3}{0,3^2} = 0,469$$

$$e_C^C = \frac{158}{T} + 0,0581 = \frac{158}{1173} + 0,0581 = 0,193$$

$$\log f_C = \%C \cdot e_C^C = \%C \times 0,193$$

$$\log 0,469 = \%C \times 0,193 + \log \%C - \log 0,3$$

Portanto,

$$\%C = 0,1325$$