



METMAT

TERMODINÂMICA DAS ESCÓRIAS

TERMODINÂMICA DAS ESCÓRIAS

EXEMPLO

Calcule a quantidade mínima de escória (**kg/t aço**) para DeS um aço rápido de 200ppm para 50 ppm, nas seguintes condições.

a) $T = 1500^{\circ}\text{C}$

M2

Escória: 0,56CaO-0,44SiO₂(molar)

b) $T = 1500^{\circ}\text{C}$

T4

escória: 0,56CaO-0,44SiO₂(molar)

TERMODINÂMICA DAS ESCÓRIAS

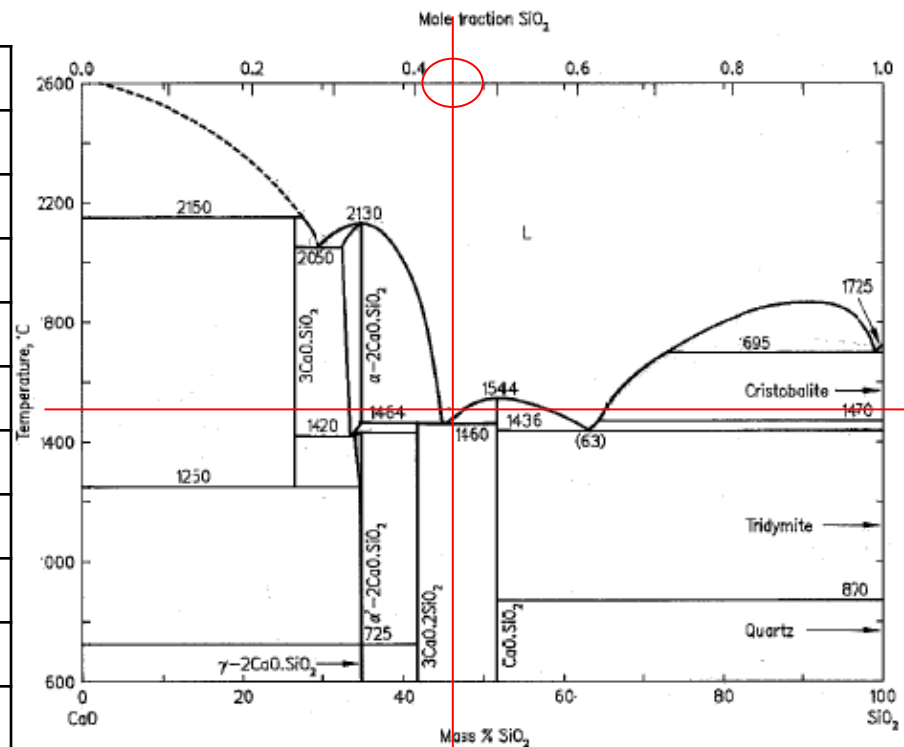
0,56CaO-0,44SiO₂

M2

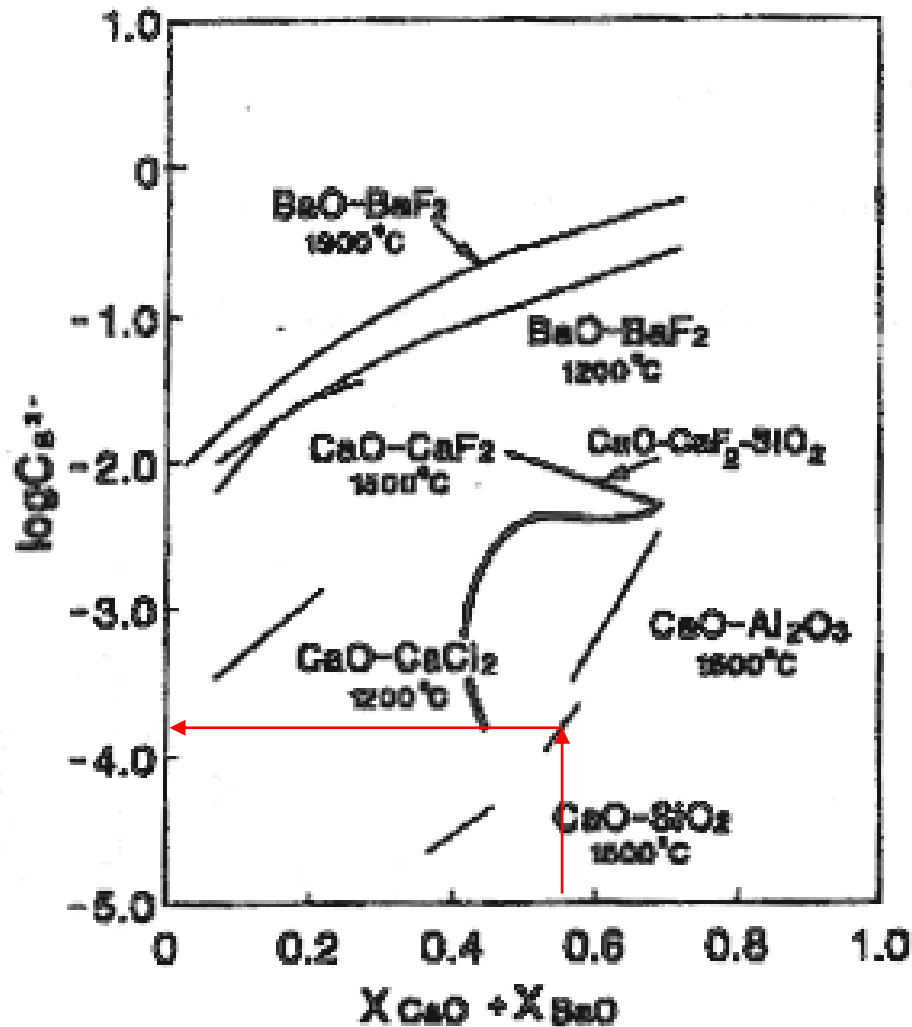
T4

Carbon	0.78 - 1.05
Chromium	3.75 - 4.5
Iron	Balance
Manganese	0.15 - 0.4
Molybdenum	4.5 - 5.5
Phosphorus	0.03 max
Silicon	0.2 - 0.45
Sulphur	0.03 max
Tungsten	5.5 - 6.75
Vanadium	1.75 - 2.2

Carbon	0.7 - 0.8
Chromium	3.75 - 4.5
Cobalt	4.25 - 5.75
Iron	Balance
Manganese	0.1 - 0.4
Molybdenum	0.4 - 1
Phosphorus	0.03 max
Silicon	0.2 - 0.4
Sulphur	0.03 max
Tungsten	17.5 - 19
Vanadium	0.8 - 1.2



TERMODINÂMICA DAS ESCÓRIAS



$$C_{S-2}$$

$$\log C_{S-2} = -3,8$$

$$C_{S-2} = 0,000158$$

$$K_S$$

$$[\underline{S} = 1/2 S_2]$$

$$\Delta G^\circ = 32279,9 - 5,6 T \text{ (cal/mol)}$$

$$K = \exp(-\Delta G^\circ/RT)$$

$$K = 0,00176$$

$$f_S$$

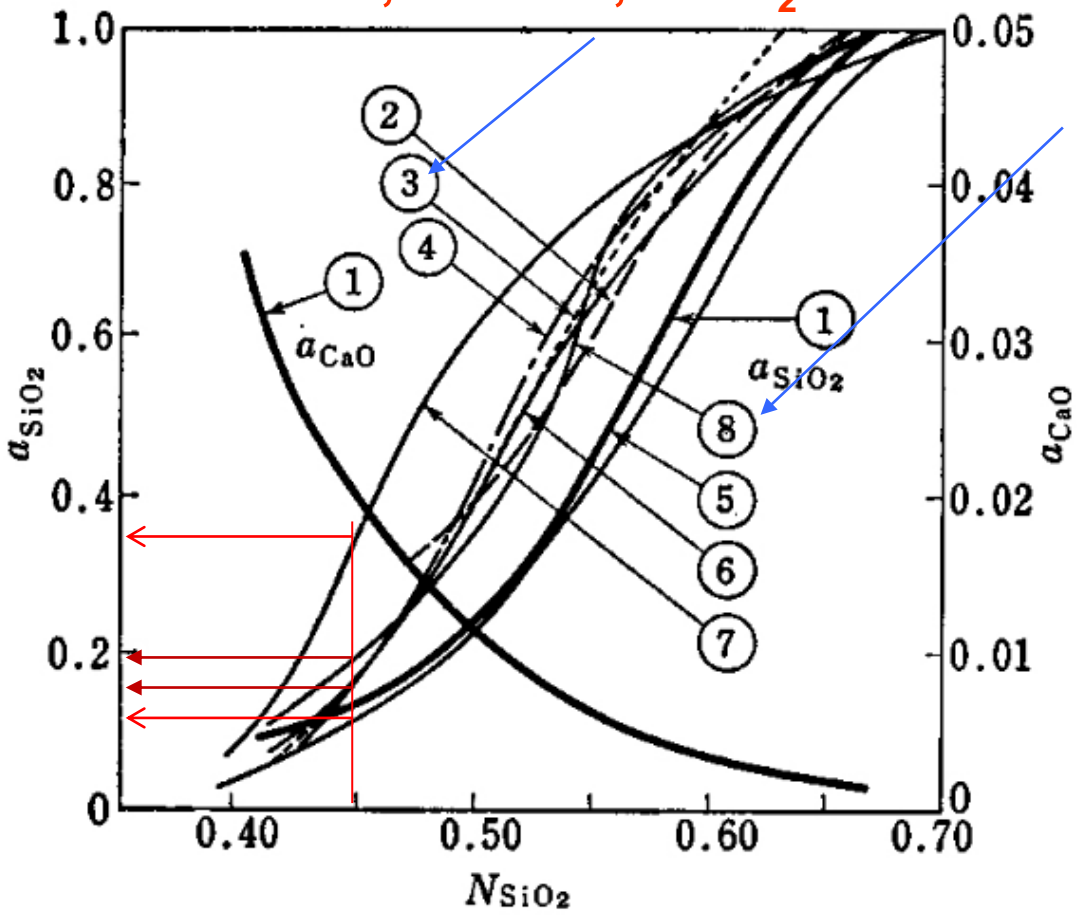
$$\log f_S = \sum e_j^j \%j$$

$$f_S(T4) = 1,35$$

$$f_S(M2) = 1,28$$

Atividades

0,56CaO-0,44SiO₂

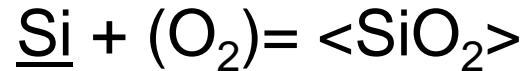


- ① 1600°C, Kay, *et al.*¹³⁹⁾
- ② 1600°C, Chang, *et al.*¹³⁷⁾
- ③ 1500°C, Sharma, *et al.*¹⁴⁰⁾
- ④ 1600°C, Rein, *et al.*¹⁴³⁾
- ⑤ 1630°C, 三本木ら¹⁴¹⁾
- ⑥ 1600°C, Rey¹³⁶⁾
- ⑦ 1637°C, McCabe, *et al.*¹³⁸⁾
- ⑧ 1500°C, Carter, *et al.*¹⁴²⁾

Sistema CaO-SiO₂

Ref.: CaO puro sólido; SiO₂ puro sólido

TERMODINÂMICA DAS ESCÓRIAS



P_{O2}

M2(controlado pelo Si): $8,55 \times 10^{-14}$ atm (1500°C)

T4 (controlado pelo Si): $8,7 \times 10^{-14}$ atm (1500°C)

$$\text{LS} = 1,21 \text{ (T4)}$$

$$\text{LS} = 1,20 \text{ (M2)}$$

$$m_{\text{escória}}(\text{kg}) = \frac{(0,02 - 0,005) \times 1000}{1,21 \times 0,005 - 0}$$

$$m_{\text{escória}}(\text{kg}) = 2479,34 \text{ kg esc/t aço!!!}$$

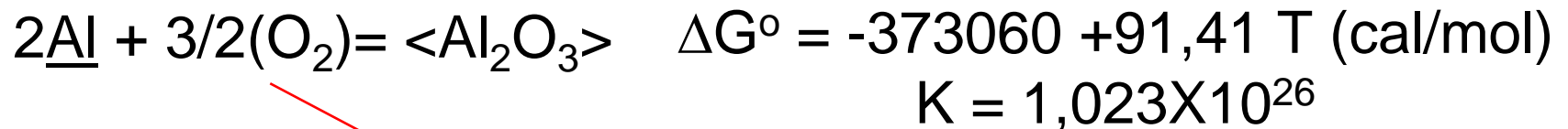
Soluções

$$m_{escória} = \frac{(\%S_{metal}^o - \%S_{metal}^{eq})x m_{metal}}{L_S x \%S_{metal}^{eq} - \%S_{escória}^o}$$

$$\log(LS) = \log \left[\frac{(\%S)_{escória}}{(\%S)_{metal}} \right] = \log(K_S \cdot f_S \cdot C_{S-2}) - \log(p_{O_2}^{1/2})$$

TERMODINÂMICA DAS ESCÓRIAS

DeO com 0,03%Al




$$p_{\text{O}_2} = 3,51 \times 10^{-16}$$

$$\text{LS} = 31,8 \text{ (T4)}$$

$$\text{LS} = 30,2 \text{ (M2)}$$

$$m_{\text{escória}}(\text{kg}) = \frac{0,02 * 1000 - 0,005 * 1000}{31,8 * 0,005 - 0}$$

$$m_{\text{escória}}(\text{kg}) = 94,2 \text{ kg esc/t aço}$$

TERMODINÂMICA DAS ESCÓRIAS

Escória 0,6CaO-Al₂O₃-CaF₂

$(\log C_{S-2} = -2) \Rightarrow C_{S-2} = 0,01$

LS = 34 (M2)

LS = 34,2 (T4)

$m_{\text{escória}} \text{ (kg)} = [(0,02-0,005) * 1000] / [(34 * 0,005) - 0]$

$m_{\text{escória}} \text{ (kg)} = 88,3 \text{ kg esc/t aço}$

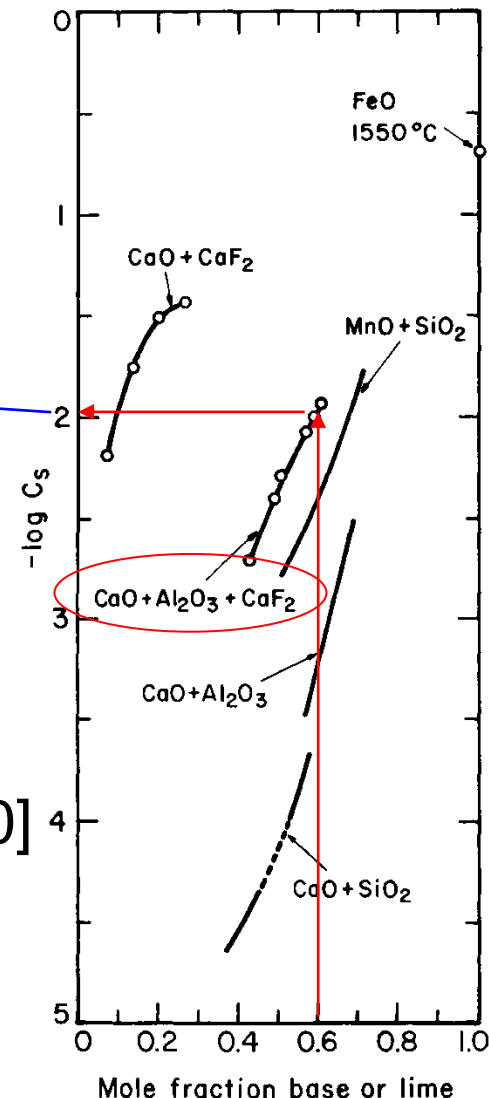


FIG. 22-18. Sulfide capacities of silicate, aluminate, and fluoride slags as a function of the mole fraction of the base at 1500°C; for CaO-Al₂O₃-CaF₂, molar ratio Al₂O₃/CaF₂ = 1.3.^[10]

Abordagem da desfosforação com a teoria molecular da escória

Turkdogan: $2 \underline{P} + 5 \underline{O} = (P_2O_5) \dots \Delta G^\circ = -168000 + 133,0.T \text{ cal}$

$$K = \frac{a_{P_2O_5}}{[\%P]^2 \cdot [\%O]^5} = \frac{\gamma_{P_2O_5} \cdot X_{P_2O_5}}{[\%P]^2 \cdot [\%O]^5}$$

Problema: Determinar $a_{P_2O_5}$ ou $\gamma_{P_2O_5} = f(\text{composição da escória})$

ISIJ International, Vol. 40 (2000), No. 10, pp. 964–970

$$\log(\gamma_{P_2O_5}) = -9.84 - 0.142(\%CaO + 0.3 \times \%MgO)$$

$$\log(\gamma_{P_2O_5}) = -\frac{34950}{T} + 3.85 - 0.058(\%CaO)$$

$$\log(\gamma_{P_2O_5}) = -1.01(23N_{CaO} + 17N_{MgO} + 8N_{FeO}) - \frac{26300}{T} + 11.2$$

Modelos matemáticos

Healy:
$$\log \frac{(\%P)}{[\%P]} = \frac{22350}{T} + 2,5 \cdot \log(\%Fe_tO) + 0,08 \cdot (\%CaO) - 16,0$$

Suito:
$$\log \frac{(\%P)}{[\%P] \cdot (\%Fe_t)^{5/2}} =$$

$$= 0,0720 \cdot [(\%CaO) + 0,3 \cdot (\%MgO) + 0,6 \cdot (\%P_2O_5) + 0,6 \cdot (\%MnO)] + \frac{11570}{T} - 10,520$$

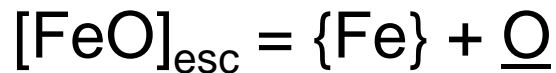
Sommerville:
$$\log \frac{(\%P_2O_5)}{[\%P]} =$$

$$= \frac{11000}{T} + 2,5 \cdot \log(\%FeO) + \frac{1}{T} \cdot [162 \cdot (\%CaO) + 127,5 \cdot (\%MgO) + 28,5 \cdot (\%MnO)] - 6,28 \cdot 10^{-4} \cdot (\%SiO_2)^2 - 10,40$$

TERMODINÂMICA DAS ESCÓRIAS

PODER OXIDANTE DAS ESCÓRIAS

- Está relacionado com o óxido menos estável na escória
- Normalmente o FeO é o menos estável



$$K_1 = \frac{a_{\text{Fe}} \cdot h_{\text{O}}}{a_{\text{FeO}}} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow h_{\text{O}} = K_1 \cdot a_{\text{FeO}}$$



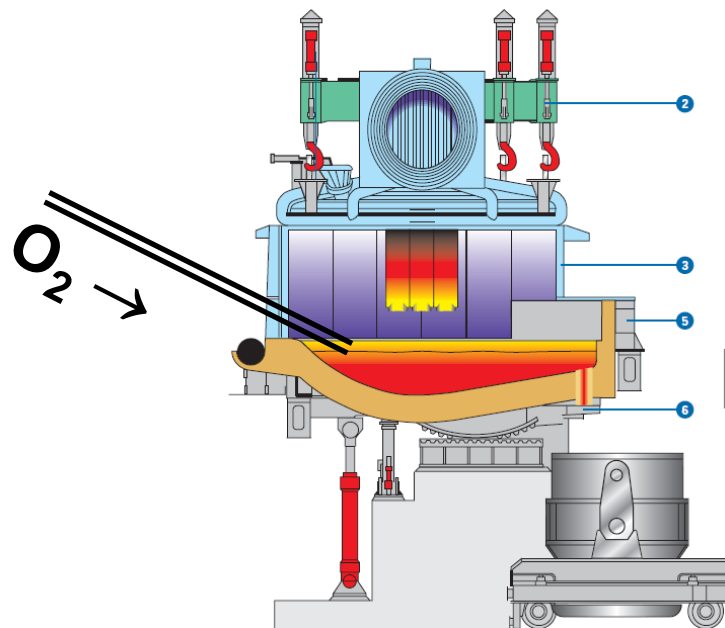
$$K_2 = \frac{a_{\text{Fe}} \cdot p_{\text{O}_2}^{1/2}}{a_{\text{FeO}}} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow p_{\text{O}_2} = (K_2 \cdot a_{\text{FeO}})^2$$

Resultados de medidas de FeO na escória na SIDOR-Venezuela



Data	Corr	Tempo	% FeO
29/10/2008	282381	02:40	25,16
29/10/2008	282382	05:03	24,68
29/10/2008	282383	06:30	26,37
29/10/2008	282383	06:52	32,48
29/10/2008	282384	09:20	36,35
29/10/2008	282384	09:45	33,58
03/11/2008	282421	12:34	28,59
03/11/2008	282421	12:56	38,19
03/11/2008	282423	03:51	30,42
03/11/2008	282423	04:40	28,41
03/11/2008	282424	06:14	34,88
03/11/2008	282424	06:24	34,12
05/11/2008	282441	02:04	33,32
05/11/2008	282442	04:20	28,23
05/11/2008	282442	04:33	29,89
05/11/2008	282443	05:48	28,82
05/11/2008	282443	06:27	23,66
06/11/2008	282452	12:10	37,37
06/11/2008	282452	12:21	33,13
06/11/2008	282453	02:35	30,25



- o sopro de O_2 é fundamental na fabricação de aço em forno elétrico a arco;
- o excesso de oxigênio soprado resulta no excesso de oxidação do Fe que é perdido na forma de FeO para a escória
- como controlar FeO ? como medir FeO ?
- importância do potencial de oxigênio da escória