

# 1

## Introdução e objetivo

Dentre as etapas da produção do aço, a etapa de refino secundário apresenta especial importância. Nessa etapa, a composição do aço pode ser ajustada, de maneira que, após o lingotamento contínuo, suas propriedades atendam as necessidades de mercado.

Das características do refino secundário uma se sobressai às demais: a proximidade da condição de equilíbrio termodinâmico. Essa característica permite que as mudanças composicionais possam ser satisfatoriamente previstas, ou seja, calculadas, desde que modelos termodinâmicos consistentes para todas as fases potencialmente presentes estejam disponíveis.

No forno de refino secundário, coexistem o metal líquido (futuro aço), escória (mistura de óxidos no estado líquido) e gás. Do ponto de vista computacional a fase escória oferece maiores obstáculos. De um lado pela presença no líquido de interações entre espécies iônicas, trazendo consigo a necessidade de se utilizarem modelos termodinâmicos de elevada complexidade, capazes de considerar o efeito do forte ordenamento local sobre as propriedades termodinâmicas do sistema. Por outro lado, ao ser resfriada, a escória gera um complexo conjunto de óxidos simples (ex. CaO, MgO), duplos (ex.  $\text{Al}_2\text{TiO}_5$ ,  $\text{MgTiO}_3$ ,  $\text{Al}_2\text{MnO}_4$ ), e mistos (mais de dois óxidos se combinam). Neste caso, os modelos termodinâmicos devem contemplar a complexa estrutura cristalina dos óxidos, que normalmente apresenta mais de uma sub-rede, e pode abrigar defeitos que afastam o composto da condição estequiométrica.

Na escória de refino secundário, é comum encontrar óxido de alumínio ( $\text{Al}_2\text{O}_3$ ) e óxido de manganês II ( $\text{MnO}$ ). O primeiro é adicionado à escória para controlar sua basicidade e viscosidade [1]. Já o segundo, é formado durante a oxidação do manganês adicionado ao banho metálico, elemento este capaz de melhorar as propriedades mecânicas do aço produzido [2].

Embora o sistema  $\text{Al}_2\text{O}_3$  -  $\text{MnO}$  tenha sido alvo de investigações no passado, o comportamento termodinâmico do espinélio  $\text{Al}_2\text{MnO}_4$  não foi investigado de maneira suficientemente aprofundada; na literatura não existem dados experimentais de capacidade térmica à pressão constante como função da temperatura, informação vital para a construção de um modelo de energia de Gibbs de elevada confiabilidade.

O presente trabalho apresenta como objetivo a construção de um modelo de energia de Gibbs para o espinélio  $\text{Al}_2\text{MnO}_4$  fundamentado em dados experimentais de capacidade térmica à pressão constante ( $C_P$ ) na faixa entre 2 K e 873 K. No tópico (2) será apresentada uma revisão do conhecimento sobre o pseudo-binário  $\text{Al}_2\text{O}_3$  -  $\text{MnO}$ . No tópico

(3), é discutida a modelagem da capacidade térmica a pressão constante, tanto em temperaturas baixas, quanto em temperaturas elevadas. No tópico (4), são apresentados os métodos experimentais utilizados. No tópico (5), os resultados obtidos são apresentados e devidamente discutidos. No tópico (6), os dados termodinâmicos do pseudo-binário  $\text{Al}_2\text{O}_3$  - MnO são reavaliados. No tópico (7), são tecidas as considerações finais a respeito dos resultados obtidos. No tópico (8), são apresentadas sugestões para trabalhos futuros. Finalmente, as referências bibliográficas consultadas se encontram disponíveis no tópico (9).