

10 Perspectivas futuras.

O estudo desenvolvido despertou o interesse do presente autor, no que diz respeito a futuras investigações. Pretende-se continuar empregando o modelo de Gaye et al. (1992) na modelagem termodinâmica de escórias. Como este modelo é construído essencialmente por parâmetros binários, se torna fundamental a obtenção de dados termodinâmicos consistentes, para diferentes soluções pseudobinárias (diagrama de fases, reações invariantes, dados referentes à linha liquidus, atividades químicas na escória e dados calorimétricos de compostos estequiométricos mistos). Poder-se-á desenvolver esta investigação, já de início, para os sistemas investigados na presente dissertação, de maneira a se poder gerar um conjunto de parâmetros de grau de confiança mais elevado, ou seja, mais próximos da realidade, e que permitam extrapolações mais seguras.

A tabela (27) apresenta as necessidades particulares para cada um dos sistemas investigados no presente trabalho, segundo o pensamento do presente autor.

Pseudo-binário	Investigações
Al ₂ O ₃ -TiO ₂	$a_i(T, X_i); G_{m,i}^{\circ}(T)$
MgO-TiO ₂	$T_{\alpha\beta}(X_i); G_{m,i}^{\circ}(T); a_i(T, X_i)$
MnO-TiO ₂	$T_{\alpha\beta}(X_i); G_{m,i}^{\circ}(T); a_i(T, X_i)$
FeO-TiO ₂	$T_{\alpha\beta}(X_i); G_{m,i}^{\circ}(T); a_i(T, X_i)$

Tabela 27: Dados a serem obtidos para os pseudobinários investigados.

Onde, $T_{\alpha\beta}(X_i)$ representa dados de diagramas de fases. Estes dados envolvem principalmente a determinação da linha liquidus, se estendendo também à qualquer linha de coexistência presente no diagrama do pseudo-binário. $a_i(T, X_i)$ representa a atividade química como função da temperatura e composição. Semelhante investigação poderia ser pensada principalmente para a escória, podendo-se naturalmente estender a investigação às soluções sólidas por

ventura existentes. Em relação à escória, o efeito da pressão parcial de O_2 sobre a energia de Gibbs de mistura apresenta especial importância para a construção do banco de dados, pois fornece de maneira indireta informações energéticas associadas às interações envolvendo diferentes estados de oxidação catiônicos. Convém investigar, portanto, pseudobinários contendo óxidos com elementos catiônicos em diferentes estados de oxidação. Dentro do contexto da presente dissertação os sistemas $Fe_2O_3-TiO_2$ e Fe_2O_3-FeO apresentam especial importância.

Finalmente, $G_{m,i}^o(T)$ representa o conjunto de dados calorimétricos necessários à determinação da energia de Gibbs molar de um composto estequiométrico qualquer, principalmente no que tange os óxidos mistos presentes no diagrama de fases do sistema.

Uma consequência imediata de uma investigação extensiva dos pseudobinários de um determinado conjunto de óxidos, consiste na predição de dados associados aos sistemas ternários decorrentes. Naturalmente, as predições devem ser comparadas com dados experimentais, a serem coletados na literatura e ou mensurados.

Como últimas idéias a serem colocadas em prática em um futuro próximo teria-se a inclusão de outros óxidos no banco de dados, bem como a modelagem de escórias polianiónicas, contendo, principalmente, S^{-2} e F^{-1} .

A inclusão dos ânions S^{-2} e F^{-1} no banco de dados é importante de maneira a se poder calcular os limites de solubilidade dos elementos S e F na escória. Este conhecimento poderia ser largamente aplicado em cálculos de equilíbrio envolvendo a escória e um banho metálico, permitindo a produção de aços mais “limpos”.

A inclusão do SiO_2 no conjunto de sistemas modelados seria de especial importância, tanto em função da modelagem do monotético característico de diversos sistemas contendo sílica (ver figura 21), quanto pela possibilidade de verificação da utilização do modelo de Gaye et al. (1992) para a descrição termodinâmica de escórias ácidas.

A inclusão do P_2O_5 também seria interessante, uma vez que a modelagem de escórias contendo este óxido, segundo Gaye et al. (1992), necessita da introdução da entidade catiônica PO^{+3} na sub-rede catiônica da solução.

Pode-se, portanto, observar que um vasto campo de investigações se encontra em aberto, tanto no em nível teórico quanto em nível experimental. A exploração deste campo depende de um esforço em conjunto de diferentes centros de pesquisa, tanto no Brasil como no exterior.