

093

MODELAMENTO TERMODINÂMICO DE SISTEMAS METALÚRGICOS – SIMULAÇÃO DE ATMOSFERAS DE EQUILÍBRIO EM FORNOS. *Sabrina Clausen Pereira e Nestor Cezar Heck* (Departamento de Engenharia Metalúrgica, Escola de Engenharia – UFRGS)

O conhecimento do equilíbrio químico - seja entre fases, ou dentro de uma única fase - é muito importante, pois permite estabelecer quais serão as fases estáveis em um determinado sistema e dentro de cada fase a sua composição. Isso pode ser relacionado, por exemplo, com a produção de uma determinada atmosfera de um forno de cementação. Para o cálculo do equilíbrio químico a Termodinâmica Computacional vem se estabelecendo cada vez mais como uma ferramenta muito importante, pois permite calcular equilíbrios químicos complexos, tanto na metalurgia quanto em outras áreas. Esse trabalho fez uso do software ChemSage 4.1 e de bancos de dados da SGTE para simular (i) reações de combustão e (ii) de geração de atmosfera carbonatante. Os resultados obtidos com o uso do programa nas duas situações acima podem ser confirmados na prática; a quantidade de informações, contudo, é muito maior do que a obtida por cálculos empíricos ou aproximados. Compostos previstos na simulação, por exemplo, nem sempre são considerados na prática - pela baixa importância no processo - mas podem se constituir em espécies químicas perigosas à saúde.