

Nº 178677

Utilização do software factsage na determinação de fases cristalinas em composições cimentícias à base de escória de aciaria

João B. Ferreira Neto
Catia Fredericci
João O. G. Faria
Fabiano F. Chotoli
Tiago R. Ribeiro
Antônio Malynowskyj
Andre L. N. Silva
Valdecir A. Quarcioni
Andre A. Lotto

*Pôster apresentado no WORKSHOP DE
MODELAGEM E SIMULAÇÃO
COMPUTACIONAL DO IPT, INOVAÇÃO E
SUSTENTABILIDADE, 1., 2023, São
Paulo. 1 slides.*

A série "Comunicação Técnica" compreende trabalhos elaborados por técnicos do IPT, apresentados em eventos, publicados em revistas especializadas ou quando seu conteúdo apresentar relevância pública.
PROIDIBO REPRODUÇÃO

UTILIZAÇÃO DO SOFTWARE *FACTSAGE* NA DETERMINAÇÃO DE FASES CRISTALINAS EM COMPOSIÇÕES CIMENTÍCIAS À BASE DE ESCÓRIA DE ACIARIA

João B. Ferreira Neto, C. Fredericci, João O. G. Faria, Fabiano F. Chotoli, Tiago R. Ribeiro, Antônio Malynowskyj, Andre L. N. Silva, Valdecir A. Quarcioni, Andre A. Lotto

Instituto de Pesquisas Tecnológicas do Estado de São Paulo
 Materiais Avançados (MA) - Laboratório de Processos Metalúrgicos - LPM
 Av. Prof. Almeida Prado, 532 - 05508-901 São Paulo/SP
 catiaf@ipt.br

1. RESUMO

A utilização de escória de aciaria, sem modificação química, apresenta efeito deletério nas propriedades mecânicas de cimento Portland, devido à expansão causada pela presença de CaO e MgO livres na escória. Este trabalho trata da modificação de uma escória de aciaria com o objetivo de torná-la um aditivo adequado em formulações de cimento misto. Simulações termodinâmicas foram realizadas utilizando o software *FactSage*TM para prever as fases formadas durante a solidificação das escórias modificadas, auxiliando na formulação das mesmas, possibilitando a otimização de experimentos.

2. MATERIAIS E MÉTODOS

As escórias modificadas foram produzidas em um reator metalúrgico, adicionando agente modificador a 300 kg de escória de aciaria BOF fundida, fornecida por uma empresa siderúrgica brasileira. Tal agente modificador é composto por um subproduto rico em silício proveniente da indústria metalúrgica. Após a modificação química no estado líquido, a escória foi resfriada despejando-a em um recipiente com esferas de aço (Figura 1). As composições químicas da escória de aciaria (EA) e da escória modificada (EM-1) são apresentadas na Tabela 1.

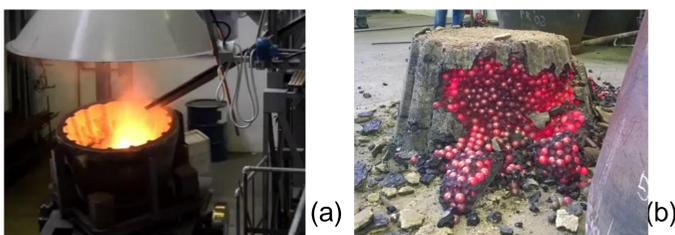


Figura 1 – (a) Escória sendo modificada, (b) resfriamento da escória

Tabela 1 – Composições químicas e basicidades (B=CaO/SiO₂) da escória de aciaria (EA) e escória modificada (% em peso).

Escória	Fe ₂ O ₃	FeO	Fe ⁰	CaO	SiO ₂	Al ₂ O ₃	MgO	TiO ₂	MnO	P ₂ O ₅	I-CaO	B
EA	13.6	18.3	0.2	38.1	9.9	1.7	8.6	0.3	4.4	1.3	5.7	3.8
EM-1	2.5	21.8	0.3	36.2	19.9	2.8	11.2	0.3	4.4	1.4	0.3	1.8

I-CaO = CaO livre

CARACTERIZAÇÕES

- ✓ Fluorescência de raios X – Panalytical – Minipal Cement
- ✓ Microscopia Eletrônica de Varredura (MEV, Zeiss - Quanta 3 D) – Espectroscopia de Energia Dispersiva (EDS – Sistema EDAX)
- ✓ Difração de raios X - Rigaku Windmax 1000
- ✓ Espectroscopia Raman (Witec alpha 300R)
- ✓ *FactSage*TM – versão 6.4 – banco de dados: FToxid e FactPS

Observação: Bredigita não está presente no banco de dados e não foi considerada na simulação.

3. RESULTADOS

3.1 Difração de raios X

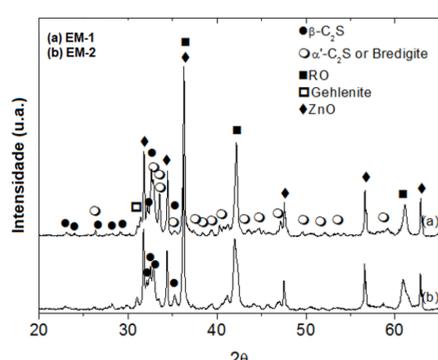


Figura 2 – Difratomogramas de raios X das escórias modificadas.

3.2 Simulação Termodinâmica *FactSage*TM

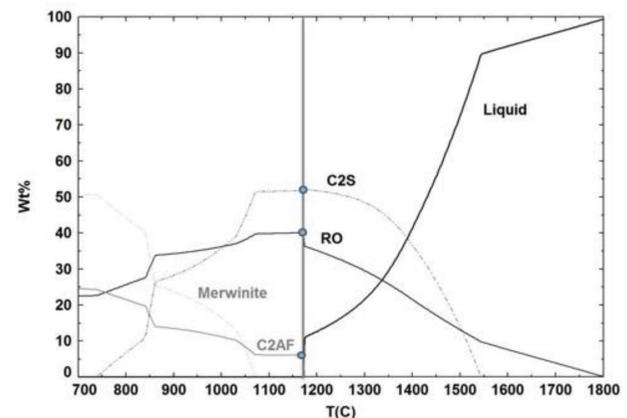


Figura 3 – Simulação termodinâmica da solidificação da escória EM-1 realizada no software *FactSage*TM

3.3 Microscopia Eletrônica de Varredura e Espectroscopia Raman

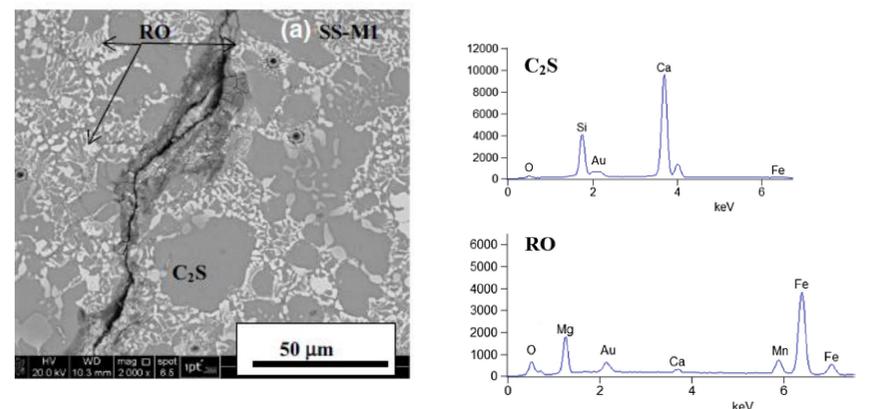


Figura 4 – Microestrutura (MEV) da escória modificada EM-1 e espectros de EDS das regiões indicadas.

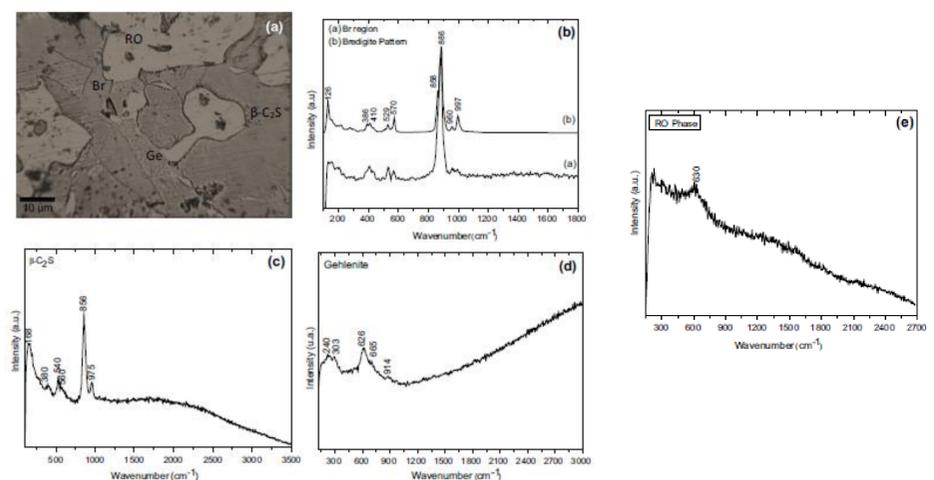


Figura 5 – Micrografia ótica da escória modificada EM-1 e espectros Raman das regiões indicadas.

4. CONCLUSÃO

A simulação computacional (*FactSage*TM) mostrou-se uma ferramenta útil na determinação das fases cristalinas originadas no resfriamento de uma escória de aciaria modificada.

AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem o apoio financeiro da InterCement e da Embrapii.