



MmeMss43-004

Aplicações e perspectivas da termodinâmica computacional na área de materiais - de aços a ligas multicomponentes

Silva, A.L.C.(1);

(1) IBQN;

Keynote: Desde a década de 1970 a termodinâmica computacional vem se desenvolvendo de forma acelerada. Métodos para a estimativa da energia livre de fases inacessíveis experimentalmente, inexistentes ou mesmo "instáveis" do ponto de vista da física, foram desenvolvidos, assim como ferramentas para a extrapolação de propriedades termodinâmicas para sistemas de mais alta ordem a partir do conhecimento de sistemas unários, binários e ternários. Com o aumento da capacidade de computação das últimas décadas e esses fundamentos bem estabelecidos, essa ferramenta se tornou praticamente essencial no desenvolvimento de materiais e de seu processamento. Neste trabalho, os principais pontos do desenvolvimento da termodinâmica computacional são revistos, até o momento atual, com o uso das descrições termodinâmicas de terceira geração e o uso de propriedades calculadas por métodos da física. Paralelamente, aplicações importantes da termodinâmica computacional - inclusive de seus modelos cinéticos - a uma ampla gama de materiais e processos, com ênfase em aços, são apresentadas. O potencial para a aplicação futura no desenvolvimento de novo materiais - evolutivo ou disruptivo - é apresentado e discutido. Conclui-se que a termodinâmica computacional é hoje, junto com a metalografia e outras técnicas de caracterização, ferramenta essencial no desenvolvimento de materiais e de seu processamento.