

101-026

**TERMODINÂMICA COMPUTACIONAL- ESTABILIDADE E METAESTABILIDADE
APLICADAS AO DESENVOLVIMENTO DE LIGAS METÁLICAS**

Costa E Silva, A.L.(1);

Escola de Engenharia Industrial Metalúrgica de Volta Redonda(1);

Os fundamentos da termodinâmica computacional ou da técnica “CALPHAD” (Computer Calculation of Phase Diagrams) foram estabelecidos na década de 1970 e a técnica se consolidou nas décadas seguintes com o desenvolvimento de modelos e métodos eficientes para a descrição das propriedades termodinâmicas de elementos e fases. Desde o início do desenvolvimento da técnica, a questão de como tratar e quantificar as propriedades termodinâmicas de fases experimentalmente inacessíveis (metaestáveis ou instáveis) teve papel fundamental nas discussões e desenvolvimentos. Hoje, a termodinâmica computacional é uma ferramenta bem estabelecida da “ICME” (Integrated Computational Materials Engineering) mas algumas dificuldades e desafios persistem no tratamento de fases metaestáveis ou instáveis. Neste trabalho, a importância do tratamento das fases experimentalmente inacessíveis na termodinâmica computacional é revista através de exemplos relevantes em ligas metálicas. Os métodos de extrapolações aplicados as propriedades da fase líquida a baixas temperaturas e seu impacto no estudo de sistemas em que a cristalização é evitada são descritos e discutidos. A importância deste problema no emprego da técnica “CALPHAD” a previsão da formação de fases vítreas ou amorfas é discutida e a situação atual, na área, revista, sempre que possível através de exemplos de aplicação da técnica a sistemas relevantes. Por fim, o potencial da previsão da transformação destas fases em fases cristalinas é discutido.