

Porque não é preciso preparar um banco de dados para cada propriedade termodinâmica das substâncias?

Porque existem relações matemáticas bem definidas entre as propriedades termodinâmicas. Existindo um banco de dados de G, por exemplo, é possível obter Cp, H, S, potencial químico, etc.

Qual a relação entre Cp e H de uma substância?

$$H = \int C_p dT$$

Quais as três etapas para criar um banco de dados em termodinâmica computacional?

1. Coletar os dados experimentais disponíveis. Avaliar a qualidade dos dados.
2. Escolher um modelo termodinâmico (ou físico-químico) para descrever G de cada elemento ou fase
3. Ajustar a função G aos dados experimentais. (normalmente por mínimos quadrados, o procedimento é chamado de otimização dos parâmetros)

Qual a principal operação matemática que um programa de termodinâmica computacional realiza para determinar o equilíbrio de um Sistema?

A minimização da energia livre do sistema, sujeita as condições de contorno definidas pelas condições termodinâmicas estabelecidas.

É preciso avaliar e descrever termodinamicamente TODOS os sistemas envolvidos, por exemplo, em um aço inoxidável duplex com 8 elementos de liga importantes?

Não. As principais interações importantes entre os elementos aparecem nos sistemas binários e ternários. Para sistemas de ordem mais alta a extrapolação normalmente é muito eficaz.