

IQ775 DIAGRAMA DE FASES

10 UD (3-2-5)

REQUISITOS: (IQ453, IQ462) /AUTOR

OBJETIVOS:

Entregar los conocimientos necesarios para comprender los equilibrios heterogéneos que pueden ser tratados por la Regla de las Fases de J.W. Gibbs.

Con este fin se procederá desde sistemas monocomponentes hasta sistemas policomponentes. Ello implica la manipulación de la ecuación de estado y los adecuados coeficientes de la entalpía libre de Gibbs para los sistemas monocomponentes hasta la integración de Gibbs-Duhamel para los policomponentes, con reiterado uso de las propiedades moleculares parciales.

Se conocerán así diagramas de fases usados en la refinación de líquidos, sólidos y gases.

Aplicaciones que dicen relación principalmente con el campo de la Ingeniería Química y de la Ingeniería de Minas.

Programa

- 1. Propiedades molares parciales:** Representación gráfica de las propiedades molares parciales. Concepto de potencial químico del componente I. Regla de las fases. Representación gráfica de la variación de entalpía libre de Gibbs con la concentración.
- 2. Diagrama de fase de sistemas monocomponentes invariantes:** Equilibrio estable y metaestable. Regla de Ostwald.
- 3. Diagramas de fase de sistemas binarios:** Diagrama P vs X_B . Diagramas T vs X_B . Solubilidad total. Concepto de equilibrio bifásico. Regla de palanca. Destilación fraccionada. Problemas.
- 4. Estudio de diagramas binarios: Invariantes:** Eutéctico, peritáctico, metatáctico, eutactoide. Miscibilidad e inmiscibilidad en binarios. Transformaciones orden-desorden. Fusión congruente e incongruente. Estequiometría y no estequiometría. Refinación por zona. Demixión y extracción por solvente. Problema.

5. Estudio de diagramas ternarios

5.1 Diagramas ternarios: T v/s X_A , X_B , X_C . Isotermas o secciones isotérmicas.

5.2 Diagramas ternarios acuosos: Isotermas. Sistemas de unidades para las coordenadas de concentración. Triángulo de Roozaboom. Pseudo ternarios: pares salinas recíprocos. Pirámide de Löwenherz. Proyección de Schreinemarkers. Proyección de Jänecke.

5.3 Criterio de elección entre extracción por solvente y cristalización. Por variación de la concentración del componente agua o variación de la temperatura. Evaporación y refrigeración. Evaporación isotérmica a presión atmosférica. (Evaporación solar). Evaporación isotérmica a presión reducida. (Enfriamiento adiabático).

6. TERNARIOS EN FASE FUNDIDA. Formación de compuestos binarios y ternarios de fusión congruente e incongruente. Teorema de Roseboom. Línea de Alkemade.

6.1 Camino de cristalización. Simple

6.2 Camino de cristalización con binario de fusión congruente

6.3 Camino de cristalización con binario de fusión incongruente, ternario de composición dentro del área de existencia del binario.

6.3.1 Camino de cristalización. Caso de mezclas o aleaciones de composición inicial entre la primera fase primaria y la línea de Alkemade (LA).

6.3.2 Camino de cristalización. Composición inicial entre la LA y la curva de alteración simple. Resorción.

6.3.3 Composición inicial. Entre la LA y la curva de alteración simple pero encima de la línea que une la fase primaria inicial y el punto triple más cercano.

7. CAMINO DE CRISTALIZACION : con binario de fusión incongruente y de composición fuera del área de existencia del binario.

7.1 Camino de cristalización. Caso de mezclas o aleaciones de composición inicial entre la primera fase primaria y la línea de Alkemade (LA). Resorción recurrente.

7.2 Camino de cristalización. Composición inicial entre la LA y la curva de alteración. (convexa y cóncava).

7.3 Composición inicial entre la LA y la curva de alteración pero encima de la línea que une la fase primaria inicial y el punto triple más cercano.

8. APLICACIONES

8.1 Sistema CaO-SiO₂-Al₂O₃. Lechos de fusión y escorias. Lana de escoria. Basaltos, etc.

9. Los diagramas de fases y la termodinámica experimental.

9.1 Modelos de soluciones

9.1.1 Raoult o ideales

9.1.2 Regulares

9.1.3 Cuasiquímicas

9.2 Gibbs- Duhem y diagramas de fase. Funciones de exceso. Función alpha.

9.2.1 Integración de Gibbs- Duhem para binario

9.2.2 Integración de Gibbs-Duhem para ternarios

9.3 El diagrama de fase y su uso para obtener valores para las funciones termodinámicas. (Experiencia a teoría).

9.3.1 Las funciones termodinámica y su uso para corregir diagramas de fases. (Teoría a experiencia).

Bibliografía:

1. Findlay, Alexander
"The phase rule". Ed. Revisada por A.N. Campbell y N.O. Smith. 1ª. Ed. Dover Publications (1951).
2. Ricci, John E.
"The Phase Rule and Heterogeneous Equilibrium" Toronto Van Nostriand Co. Inc. 1951.
3. Castelan, Gilbert
"Physical chemistry" Mass. Addison Wesley. 1966.
4. Hultgren, R et al
"Selected values of thermodynamic properties of the elements" Vol. I.
"Selected-Values of thermodynamic properties of binary alloys"
New York. John Wiley Sonc. 1963.

Ultima adición. Editada por American Society for Metals Ohio 1973. (NSRDS).
5. Hansen M & K. Anderko
"Constitution of Binary alloy"
2ª. Edición Mc Graw-Hill. New York. 1958.

**DEPARTAMENTO DE INGENIERIA QUIMICA
DOCENCIA**

6. Reisman, A.
"Phase equilibria" 1ª. Ed. Academic Press. New York. 1970
7. Cases, J.
"Termodinámica Química"
Departamento de Ingeniería de Minas, Química y Tecnología Química.
Universidad de Chile. 1979.
8. Purden F.F. y Sister, V.V.
"Aqueous solution and the Phase Diagram", 1ª. Ed. Ed. Arnol & Co. University
Microfilms.
9. D'Ans, J.
"Die Lösungsgleichgewichte der Systema Der Salze ozcanischer Salzablagerungen"
Verlagsgesellschaft für Ackerbau MBH, Berlín, 1933. University Microfilms.
10. Levin, E.M., Robbins, C.R. y Mc Murdis H.F.
"Phase diagrams for ceramists"
The American ceramic Society.
Columbus Ohio. 1964.
11. Ibid
"Phase diagrams for ceramist"
1969. Supplement
The American Ceramic Society
1. Columbus. 1969.