Conceptos de composición y fracción de fases presentes.

Consideremos un sistema binaria A-B; esto es, formado por dos componentes, A y B. Por convención, la composición de un sistema binario y de las fases de dicho sistema que se deban considerar, se expresan siempre en términos del segundo elemento mencionado, en este caso B.

Los componentes podrían ser átomos o bien moléculas que no se descomponen en el marco del problema considerado, por ejemplo, Cu y Zn, o bien agua y azúcar.

A continuación se desarrollará un ejemplo para ilustrar los conceptos de composición y de fracción de las fases de un sistema. Esto para prepararse para el próximo capítulo de la asignatura, referido a diagramas binarios de fases al equilibrio.

Cabe señalar que para referirse a la composición y fracción de las fases, se puede trabajar en términos de peso o bien de moles; para pasar de un tipo de unidades al otro, basta considerar apropiadamente los pesos molares de los componentes involucrados. Además, se puede trabajar en porcentaje (0-100 %) o bien en fracciones (0-1)

<u>Ejemplo</u>

Enunciado

Se tiene un sólido binario formado por átomos A y átomos B. Un análisis de laboratorio revela que:

-el sólido está formado por n_A = 6 moles de A y por n_B = 8 moles de B.

- en el sólido se distinguen dos fases, llamadas fase 1 y fase 2.
    - en la fase 1 hay n_{A1}= 3 moles de A y n_{B1}= 2 moles de B
    - en la fase 2 hay n_{A2}= 3 moles de A y n_{B2}= 6 moles de B

Es claro que los anteriores datos deben cumplir: $n_A = n_{A1} + n_{A2}$; además, similarmente: $n_B = n_{B1} + n_{B2}$.
Por otra parte, el número total de moles en la fase 1, vale $n_1 = n_{A1} + n_{B1}$; además, similarmente: $n_2 = n_{A2} + n_{B2}$.

Cálculo de las composiciones

Se pide calcular la composición (global) del sistema, la composición de la fase1 y la composición de la fase 2, denominadas W_0 ,W_1 y W_2, respectivamente.

Apliquemos las definiciones de estas tres composiciones:

$W_0 = \ n_B \ /(n_A + n_B) \qquad = 8 /(6 + 8) = 0{,}571$, en fracción molar B.
$W_1 = \ n_{1B} \ /(n_{1A} + n_{1B}) \qquad = 2 /(3 + 2) = 0{,}400$, en fracción molar B.
$W_2 = \ n_{2B} \ /(n_{2A} + n_{2B}) \qquad = 6 /(3 + 6) = 0{,}666$, en fracción molar B.

Obtener $W_0 = 0{,}571$, en fracción molar B; esto significa que un 57,1% de los moles en el sistema corresponde a B, resto a A.
Obtener $W_1 = 0{,}400$, en fracción molar B; esto significa que un 40,0% de los moles en la fase 1 corresponde a B, resto a A.

Cálculo de la fracción molar de cada fase

Aquí se trata de determinar el tamaño de cada fase, expresada en moles y como fracción. Es un tamaño relativo de las fases, referido al tamaño de todo el sistema.

Apliquemos las definiciones de la fracción molar de la fase 1, X_B, y de la fracción molar de la fase 2, X_B:
.
$X_1 = \ n_1 / (n_1 + n_2) \quad = \quad (n_{A1} + n_{B1}) / (n_1 + n_2) = 5 / 14 = 0{,}357$, fracción molar

$X_2 = \ n_2 / (n_1 + n_2) \quad = \quad (n_{A2} + n_{B2}) / (n_1 + n_2) = 9 / 14 = 0{,}643$, fracción molar

Obtener $X_1 = 0{,}357$, fracción molar, significa que un 37,7 % de los moles de toda la aleación están en la fase 1.

Es fácilmente demostrable que $X_1 + X_2 = 1$. En efecto, los moles del sistema que no están en una fase deben estar en la otra.

<u>Otro enfoque</u>

¿Qué hemos hecho hasta el momento?

A partir de los datos n, hemos calculados las composiciones W y a partir de esos mismos datos n hemos calculado la fracción de las fases X, ver figura 2. Todo esto empleando definiciones.

No obstante, en los diagramas binarios de fases al equilibrio, la información relacionada con lo anterior ya viene como composición. (Esto es, para preparar el diagrama, ya han sido procesados los datos n para pasar a datos W). Entonces, en el caso de un sistema bifásico, solo queda pasar de los datos de composición W (W_0 ,W_1 y W_2) a los resultados X (X_1, X_2). Veamos cómo se procede en este caso de interés.

Se tienen los datos W_0 ,W_1 y W_2) del sistema bifásico. Por convención, emplearemos $W_1 < W_2$; entonces: $W_1 < W_0 < W_2$), ver Figura 1.

Fase 1 O-------------------O--------0 Fase 2
W_1 W_0 W_2

Figura 1. Esquema de los datos de composición

A partir de las anteriores ecuaciones de definición, es fácil demostrar que:

- la función X_1 (W_1, W_0, W_2) corresponde a $\mathbf{X_1 = (W_2 - W_0) / (W_2 - W_1)}$

- y que la función X_2 (W_1, W_0, W_2) corresponde a $\mathbf{X_2 = (W_0 - W_1) / (W_2 - W_1)}$

Se reitera que es fácilmente demostrable que $X_1 + X_2 = 1$.

Las dos últimas ecuaciones en negrillas corresponden a la denominada Regla de la Palanca.

Esta Regla de la Palanca se usan cuando hay dos fases (fase 1 y fase 2) en un sistema binario (sistema A-B). Ella permite calcular las fracciones de fases presentes (X_1 y X_2) a partir de datos de composición (W_1, W_0, W_2).

La Figura 2 muestra esquemáticamente las dos vías de cálculo expuestas.

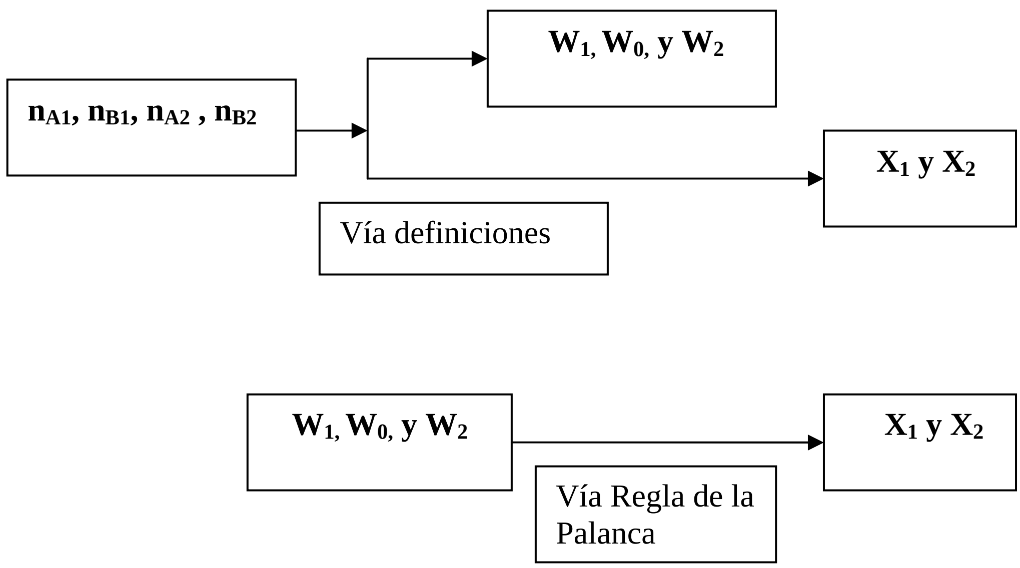

Figura 1 Esquema de las dos vías de cálculo expuestas.

Apliquemos la segunda vía de cálculo al ejemplo ya desarrollado, para ir de los W a los X.

Tenemos W_1 =0,400, W_0, =0,571 y W_2= 0,666, expresadas en fracción de moles de B.
Entonces, aplicando la regla de la Palanca:
X_1 = (0,666 – 0,571) / (0,666-0,400) = 0,357, fracción molar
X_2 = 1 - X_1 = 0,643, fracción molar
Estos dos últimos resultados son consistentes con sus correspondientes obtenidos antes.

Advertencia: siempre se deben indicar las unidades (correctas) en los resultados.