

1. Diagrama de Fase

Los diagramas de fase son la representación gráfica de los estados físicos de una sustancia a diferentes temperaturas y presiones. Las fases están representadas por curvas que denotan el cambio de fase. Por lo tanto, podemos denominar la transición de fase como la transición de un estado de la materia a otro.

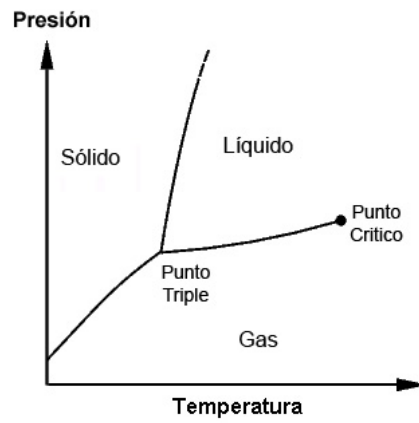


Figura 1: Diagrama de fase.

En los diagramas de fase existen estados termodinámicos en los que se presenta el equilibrio entre fases o estados de agregación. Estos son:

- Punto de fusión normal: coexistencia sólido-líquido
- Punto de ebullición normal: coexistencia líquido-vapor
- Punto triple: coexistencia sólido-líquido-gas
- Punto crítico: punto donde las densidades del estado líquido y gaseoso son iguales.

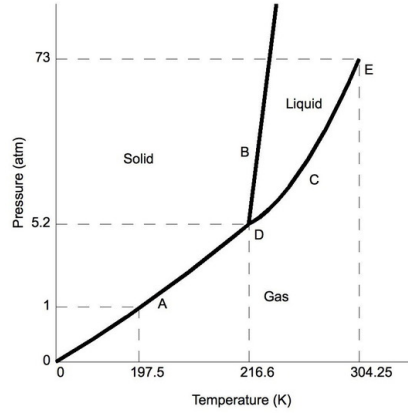


Figura 2: Diagrama de fase del dióxido de carbono (CO_2)

Para la mayoría de los materiales la curva sólido-líquido presenta una pendiente positiva, la cual esta relacionada al aumento de densidad en el estado sólido. Sin embargo, para el agua esta curva presenta una pendiente negativa; por lo tanto, su estado sólido presenta una menor densidad que en su estado líquido. Esto se debe a la cristalización de las moléculas producida por los puentes de hidrógeno, y como las moléculas cristalizadas presentan una separación mayor entre ellas la densidad del sólido es menor al del fluido.

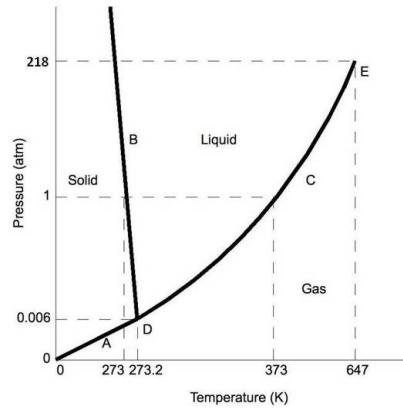


Figura 3: Diagrama de fase del agua (H_2O)

2. CaF_2

El fluoruro de calcio es un compuesto iónico con aplicaciones variadas ya que presenta una excelente transmisión óptica sobre una amplia gamma de longitudes de onda, tiene una brecha energética o de bandas muy grande, es un conductor iónico rápido, entre otras características descritas por Claudio Cazorla (2013). Cazorla estudió el diagrama de fase del fluoruro de calcio utilizando simulaciones de dinámica molecular. Los resultados fueron

obtenidos bajo las siguientes condiciones: 0 P ;20 GPa y 0 T ;4000 K [1]. También se realizaron pruebas experimentales con las siguientes condiciones: 6 P 8 GPa y 1500 T 2750 K [1].

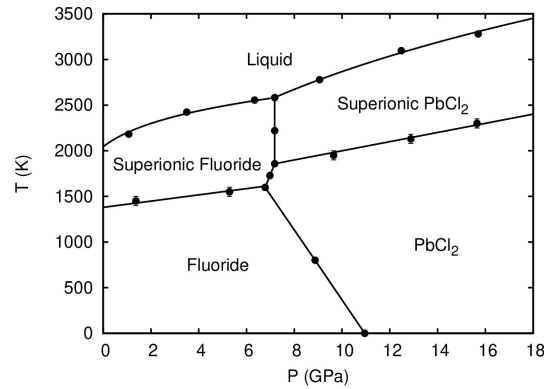


Figura 4: Diagrama de fase del fluoruro de calcio obtenida por simulaciones de dinámica molecular. Las curvas representan las funciones ajustadas y los puntos representan los estados termodinámicos.

Referencias

- [1] Cazorla, C. y Errandonea D. (2013). "The high-pressure high-temperature phase diagram of calcium fluoride from classical atomistic simulations" J. Phys. Chem. C20131172111292-11301. Disponible en: <http://www.claudiocazorla.com/caf2-classic.pdf>
- [2] Matthew McKinnell, et al. (2019). "Phase Diagrams" de Chemistry LibreText Sitio web: https://chem.libretexts.org/Bookshelves/Physical_and_Theoretical_Chemistry_Textbook