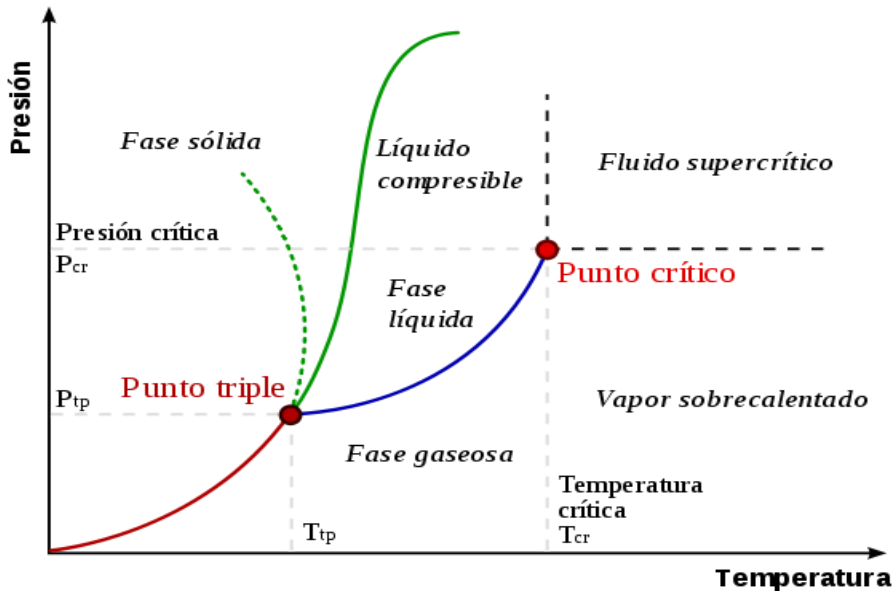


Diagrama de fase

En termodinàmica i ciència de materials s'anomena **diagrama de fase** a la **representació gràfica de les fronteres entre diferents estats de la matèria** d'un sistema, en funció de variables escollides per facilitar l'estudi d'aquest. Quan en una d'aquestes representacions totes les fases corresponen a estats d'agregació diferents se sol anomenar diagrama de canvi d'estat.



Un típic diagrama de fase. La línia de punts mostra el comportament anòmal de l'aigua. La línia verda marca el punt de congelació i la línia blava, el punt d'ebullició. Es mostra com varien amb la pressió.

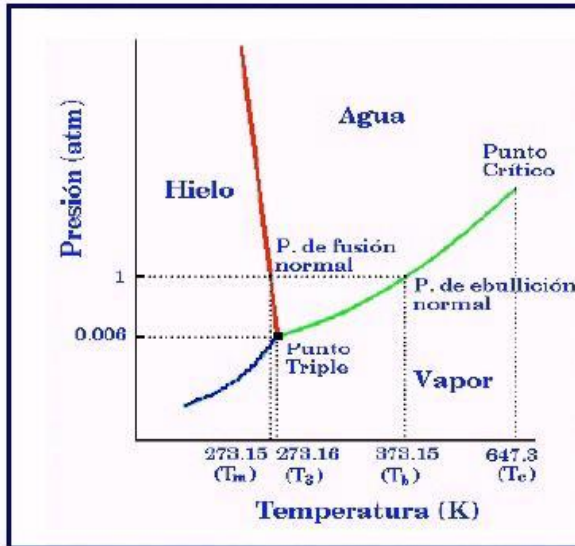
En els punts de p i T sobre les línies de separació hi ha equilibri entre les dues fases. El diagrama de fases explica clarament els efectes que es produeixen en variar la pressió (a temperatura fixa) o en variar la temperatura (a pressió constant). Els diagrames de fase més senzills són els de pressió -- temperatura d'una substància pura, com pot ser el de l'aigua. A l'eix d'ordenades es col·loca la pressió i en el d'abscisses la temperatura. Generalment, per a una pressió i temperatura donades, el cos presenta una única fase excepte en les següents zones:

- **Punt triple:** En aquest punt del diagrama coexisteixen els estats sòlid, líquid i gasós.
- Els parells (pressió, temperatura) que corresponen a una transició de fase entre:
 - Dues fases sòlides: Canvi alotròpics;
 - Entre una fase sòlida i una fase líquida: fusió - solidificació;
 - Entre una fase sòlida i una fase vapor (gas): sublimació - sublimació inversa);
 - Entre una fase líquida i una fase vapor: vaporització - condensació (o liqüefacció).

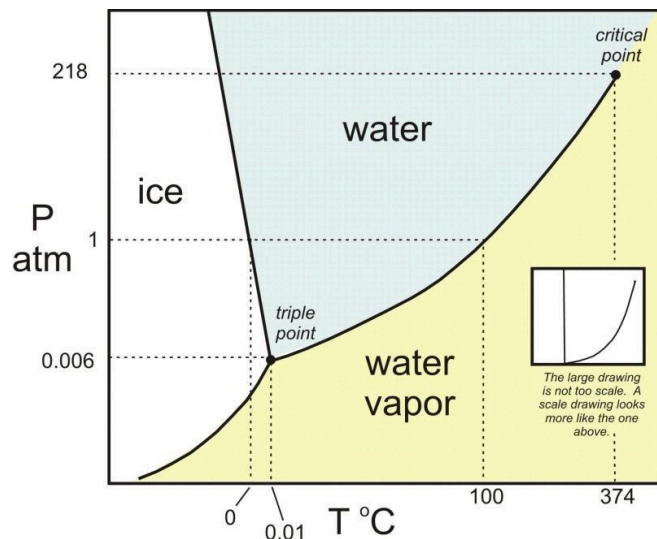
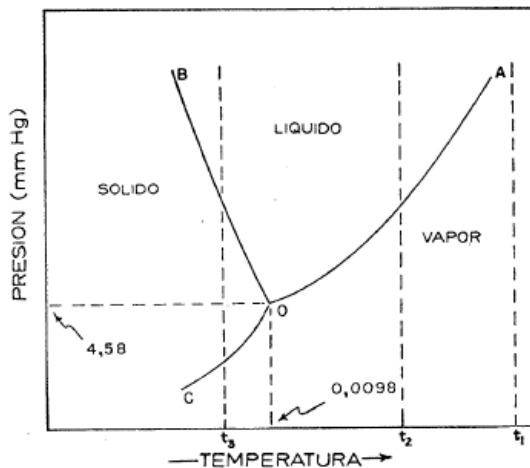
És important assenyalar que la corba que separa les fases vapor-líquid s'atura en un punt anomenat punt crític. Més enllà d'aquest punt, la matèria es presenta com un fluid supercrític que té propietats tant dels líquids com dels gasos. Modificant la pressió i temperatura en valors al voltant del punt crític es produeixen reaccions que poden tenir interès industrial, com ara les utilitzades per obtenir cafè descafeïnat.

DIAGRAMA DE FASES DE L'AIGUA

DIAGRAMA DE FASES DEL AGUA



En condicions normals, d'1 atmosfera de pressió, la temperatura de fusió és de 0°C . Fixem-nos que la corba gel-aigua té una pendent negativa (dp/dT). Per això, un augment en la pressió en el gel va acompanyat d'una disminució de la temperatura de fusió, és a dir, **el gel es fon per compressió, al contrari de la majoria de les substàncies que al comprimir es solidifiquen. Per a grans pressions el gel es fon per sota dels 0°C .**



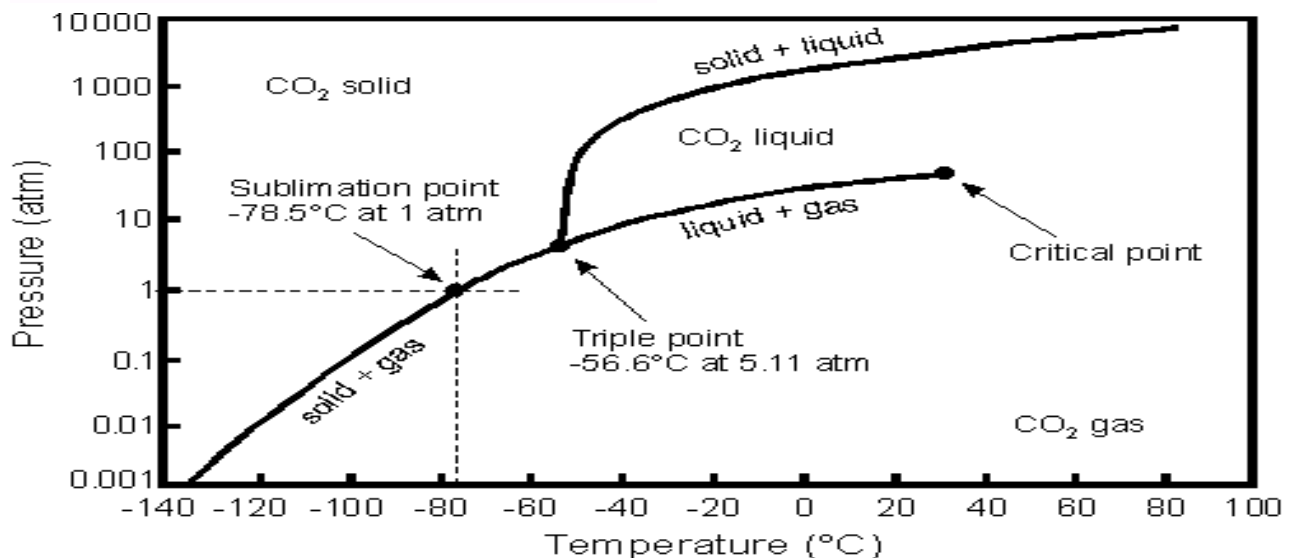
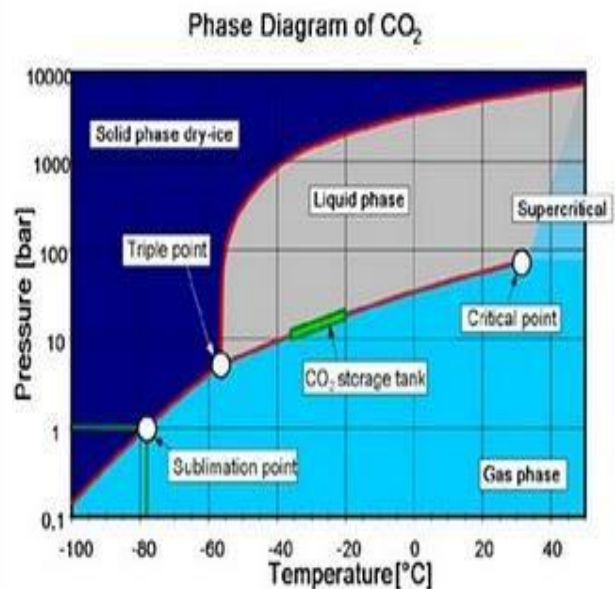
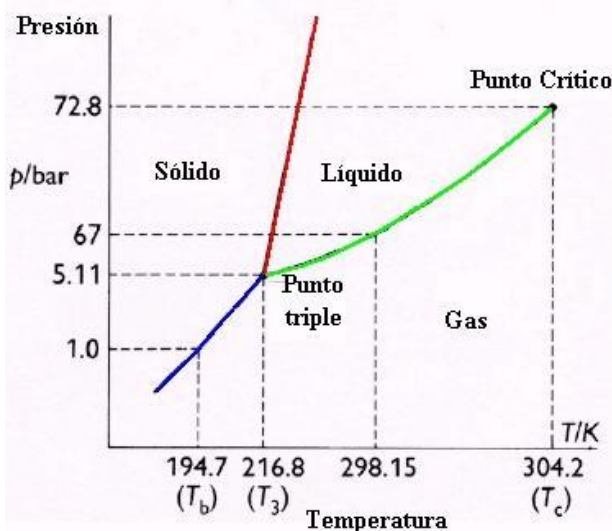
- **Punt triple:** condicions de temperatura i pressió sota les quals hi ha les tres fases gas, líquid i sòlid.
- **A la corba OA** se l'anomena corba de pressió de vapor, la seva límit superior és el que correspon a la temperatura crítica, 374°C per l'aigua, i al seu extrem inferior, a la temperatura de $0,0098^\circ\text{C}$, se l'anomena *punt triple*. Al llarg de la corba de pressió de vapor, el líquid i el vapor coexisteixen en equilibri,
- **La corba OC** és la de sublimació, i en ella estan presents, en equilibri, el vapor i el sòlid.
- **L'OB** és la del punt de fusió en què líquids i sòlids estan en equilibri. El pendent negatiu de OB indica que el **punt de congelació de l'aigua disminueix quan augmenta la pressió**.

- si es manté constant la temperatura en t_1 , a la qual l'aigua estan en estat gasós, i com t_1 és més gran que la temperatura crítica, tot i que s'elevi la pressió, al llarg de la línia de traços, el sistema es manté en estat gasós. No obstant això, a una temperatura t_2 , inferior a la temperatura crítica, el vapor d'aigua es converteix en aigua líquida per l'augment de pressió, pel fet que la compressió fa que les molècules entrin dins la zona d'acció de les forces d'atracció. És interessant el observar que a una temperatura per sota del punt triple, tal com t_3 , Un augment de la pressió sobre l'aigua en la fase de vapor lo transforma primer en gel i després augmentant la pressió lo transforma en líquid. Aquesta seqüència: vapor-> gel -> líquid, és deguda al fet que el gel ocupa un volum més gran que l'aigua per sota del punt triple.

DIAGRAMA DE FASES DEL CO₂

Hem d'observar que les pendents de les corbes acolorides (dp / dT) són totes positives, com en la majoria de les substàncies. Si ens centrem en els canvis de fase sòlid-líquid (línia vermella) tenim que la pendent de la corba és positiva: un augment de pressió en el CO₂ sòlid tendirà a augmentar la temperatura de fusió necessària per passar a líquid.

EL DIAGRAMA DE FASES DEL CO₂



Pressure-Temperature phase diagram for CO₂.

El CO₂ Es ven en ampolles com CO₂ gas a pressió però en realitat es manté en equilibri gas-líquid (gràfic "CO₂ phase diagram").

El CO₂ és líquid a temperatura ambient i a pressió per sobre del punt crític (7,38 Mpa = 75 atm). És un líquid supercrític, apolar (que dissol greixos), molt interessant per a la indústria alimentària en aplicacions, per ex.: extracció de substàncies hidrofòbiques (aromes, colors, sabors), Es manté a quasi 80 graus sota zero i s' "evapora" (en realitat sublima) sense deixar cap residu, ja que el CO₂ a pressió i temperatura ambient és un gas i es perd en la atmosfera ràpidament.