

**UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE QUÍMICA**

Ternary phase diagram with phase envelope

Bruno Borges Vieira
Vanessa Faria Bohrer
Valter Terceiro
Vinicius Cardoso Lucas
Thomaz Edison Mendes da Silva

**SÃO PAULO
2018**

SUMÁRIO

Introdução	
Como ler diagramas de fase ternário	3
- representação em triângulo equilátero e triângulo retângulo	
Características do diagrama ternário	5
- Linha de equilíbrio	
- Ponto crítico da mistura	
- Linhas de união	
Exemplo completo de um diagrama ternário	6

Introdução

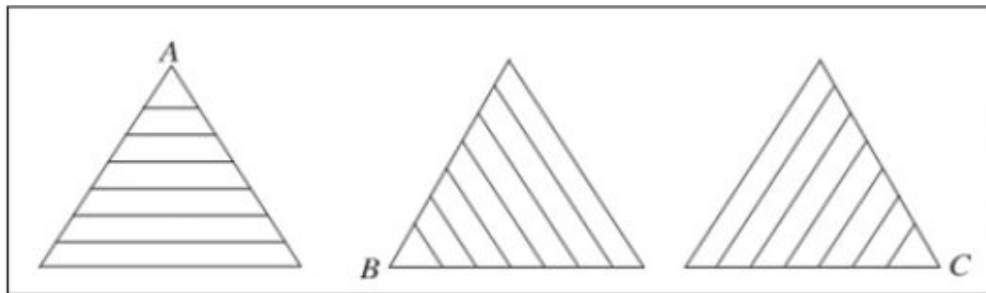
Diagrama de equilíbrio de fases é o resultado após a reação, ou seja, é o equilíbrio termodinâmico de pressão, temperatura e composição do sistema. Eles são como "mapas", os quais indicam em que pressão, temperatura e composição estão estáveis termodinamicamente em determinada fase.

O diagrama de fases ternário é usado para facilitar a leitura da composição do sistema, uma vez que, em um sistema cartesiano normal, teríamos que usar o eixo das cotas, por termos 3 componentes.

Como ler um diagramas de fase ternário

Em soluções parcialmente miscíveis, podemos obter produtos com uma ou duas fases. Os dados de equilíbrios podem ser representados em diagramas ternários. Os quais são representados em triângulos retângulos ou equiláteros à pressões e temperaturas constantes.

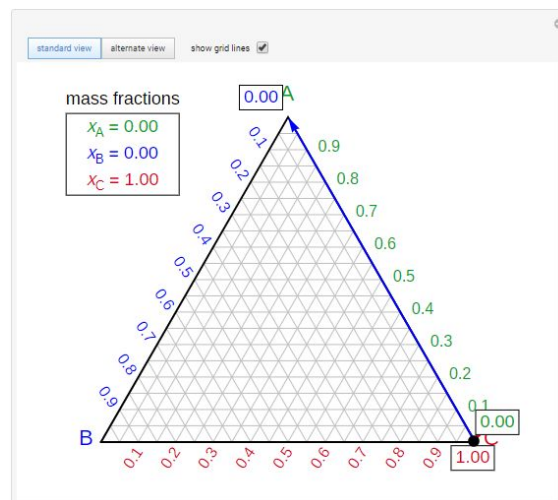
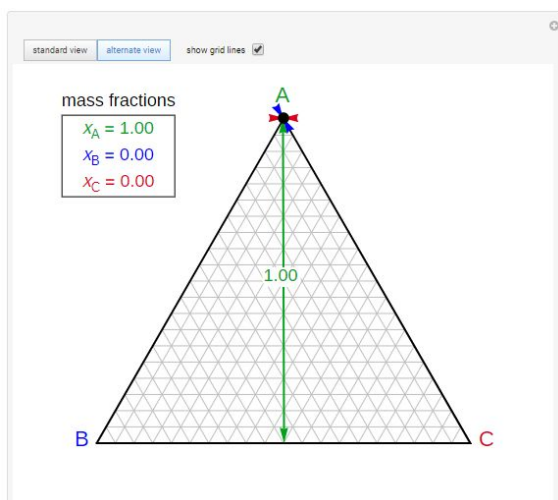
- Diagrama ternário em triângulo equilátero:



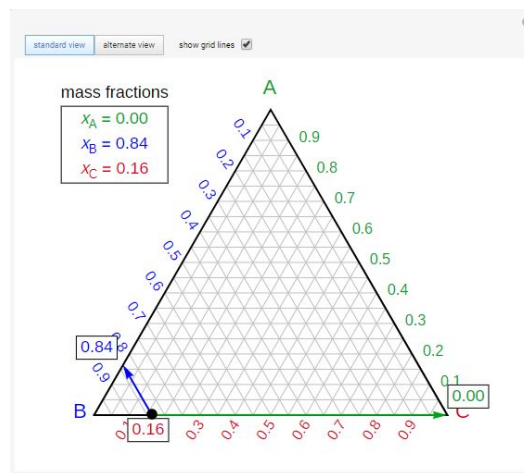
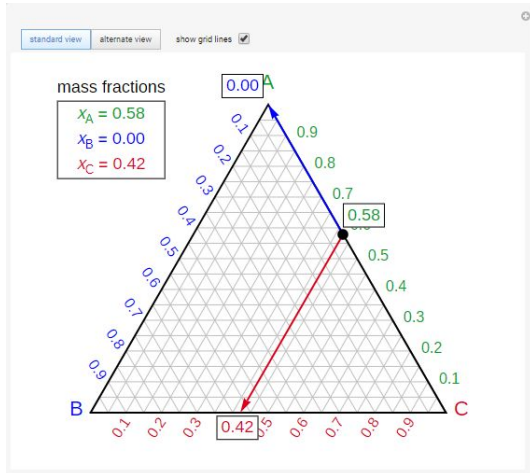
Em diagramas ternários, temos 3 substâncias parcialmente miscíveis, ou seja, que se misturam a dada temperatura e pressão. A leitura de dada substância é lida com base ao lado oposto do vértice do componente, a figura acima representa como é lida a massa ou mol das substâncias A, B e C.

No diagrama de fases ternário simples, podemos ter 3 tipos de casos que podem ocorrer, o ponto pode estar sob um vértice, sobre um lado do triângulo, e dentro do triângulo.

VÉRTICE : Quando um ponto está sob o vértice do triângulo, dizemos que tal substância é pura em A, B ou C. Veja as imagens a seguir.



LADO DO TRIÂNGULO: Quando um ponto está sob um lado do triângulo, chamamos de mistura binária. Veja as imagens a seguir.



DENTRO DO TRIÂNGULO: Quando o ponto está dentro do triângulo, chamamos de mistura ternária.

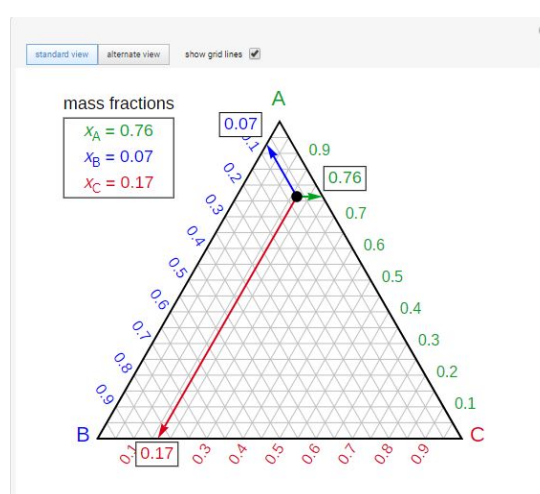
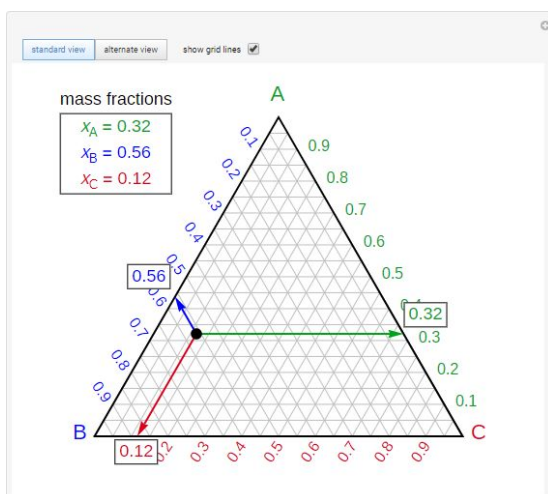
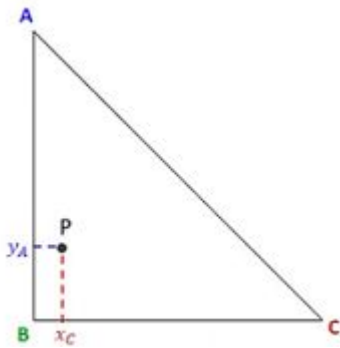


Diagrama ternário em triângulo retângulo:



Tal tipo de representação é menos comum, porém mais simplista que a representação em triângulos equiláteros.

Assim como a em equiláteros, os vértices são substâncias puras.

Entretanto, a substância contida no ângulo reto não é lida, apenas as outras duas, as quais também são lidas a partir do lado oposto. Tal substância contida no ângulo reto é determinada a partir da relação que a soma de todas é igual a um (1).

Características do Diagrama Ternário

-Em triângulos equiláteros:

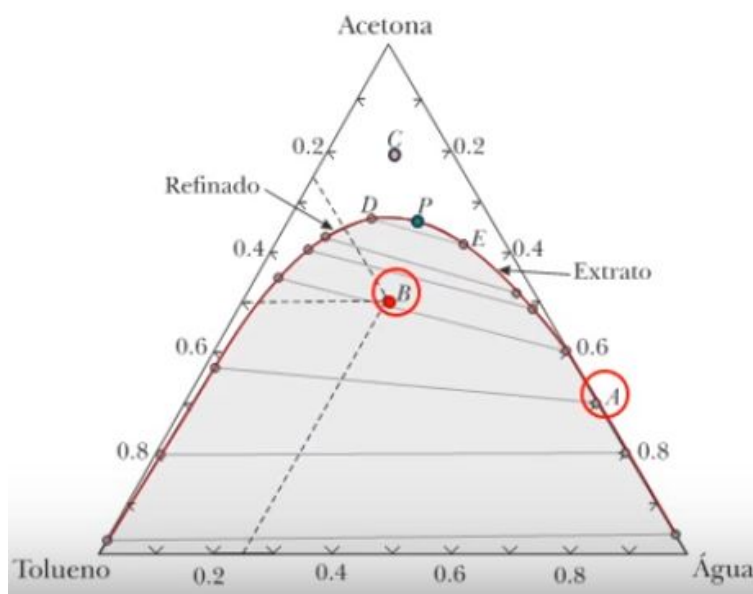
- Linha de equilíbrio ou linha de imiscibilidade

Em diagramas do sistema ternário, as linhas de equilíbrio representam a separação da zona bifásica com a zona monofásica. Ela varia de acordo com a pressão e temperatura.

Ex: Diagrama de fases acetona-tolueno-água a 1atm e 25°C

-Ponto A: Mistura binária acetona-água com 70% de acetona

-Ponto B: Mistura ternária com 25% de água, 50% de acetona e 25% de tolueno.

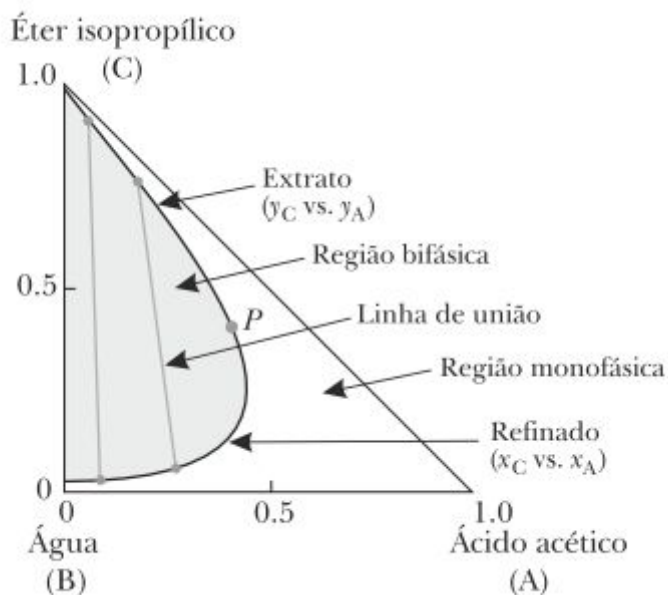


(obs: a linha de equilíbrio está identificada em vermelho)

- **Ponto P:** é o ponto crítico da mistura. Ponto muito importante no diagrama, pois ele nos indica o que é extrato e o que é refinado, quando a mistura atingir o equilíbrio. Exatamente sobre o ponto, tanto refinado quanto extrato contém a mesma composição. Porém qualquer outro ponto sobre a linha de equilíbrio, é possível distinguir refinado de extrato. Da seguinte maneira:
Determinar quem é o soluto e quem é o solvente. Sendo assim, o extrato é a fase rica em solvente e o refinado é a parte rica em diluente.
- **Linhas de União:** Indicam a composição da mistura após atingir o equilíbrio. Mostram exatamente a quantidade de extrato e de refinado em determinado ponto. Essas linhas normalmente são dadas no diagrama, quando não, podem ser traçadas a partir da linha conjugada. (Representadas, na imagem acima, pela linhas em cinza na diagonal dentro da fase ternária)

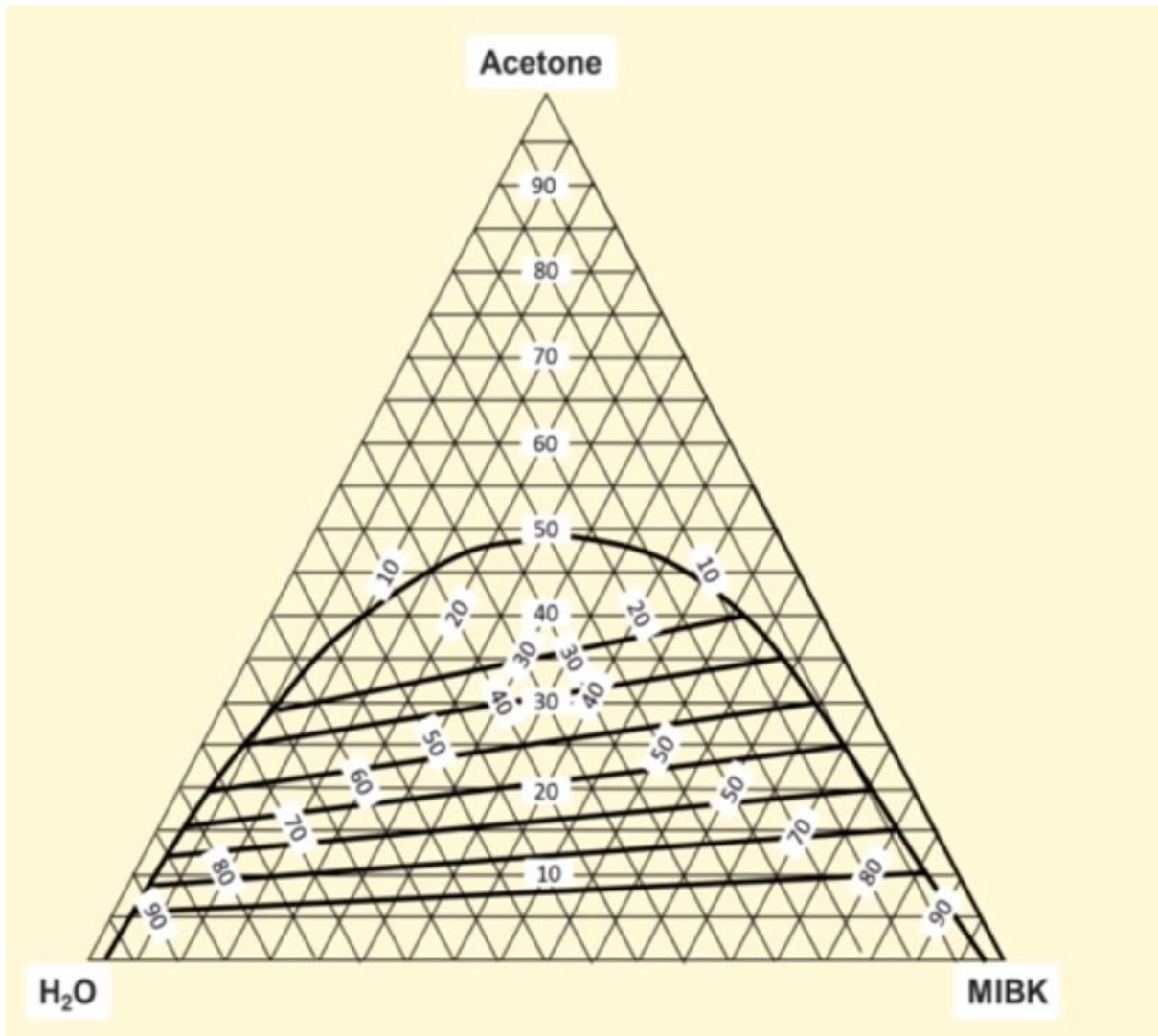
--Em triângulos retângulos:

A representação em triângulos retângulos possui as mesmas características, porém como a leitura é diferente, logo, a representação das características é diferente. Nesse caso, o extrato é encontrado acima do ponto P e o refinado abaixo do mesmo. A figura abaixo exemplifica essa representação.



EXEMPLO: ACETONA, ÁGUA E MIBK (Metil isobutil cetona)

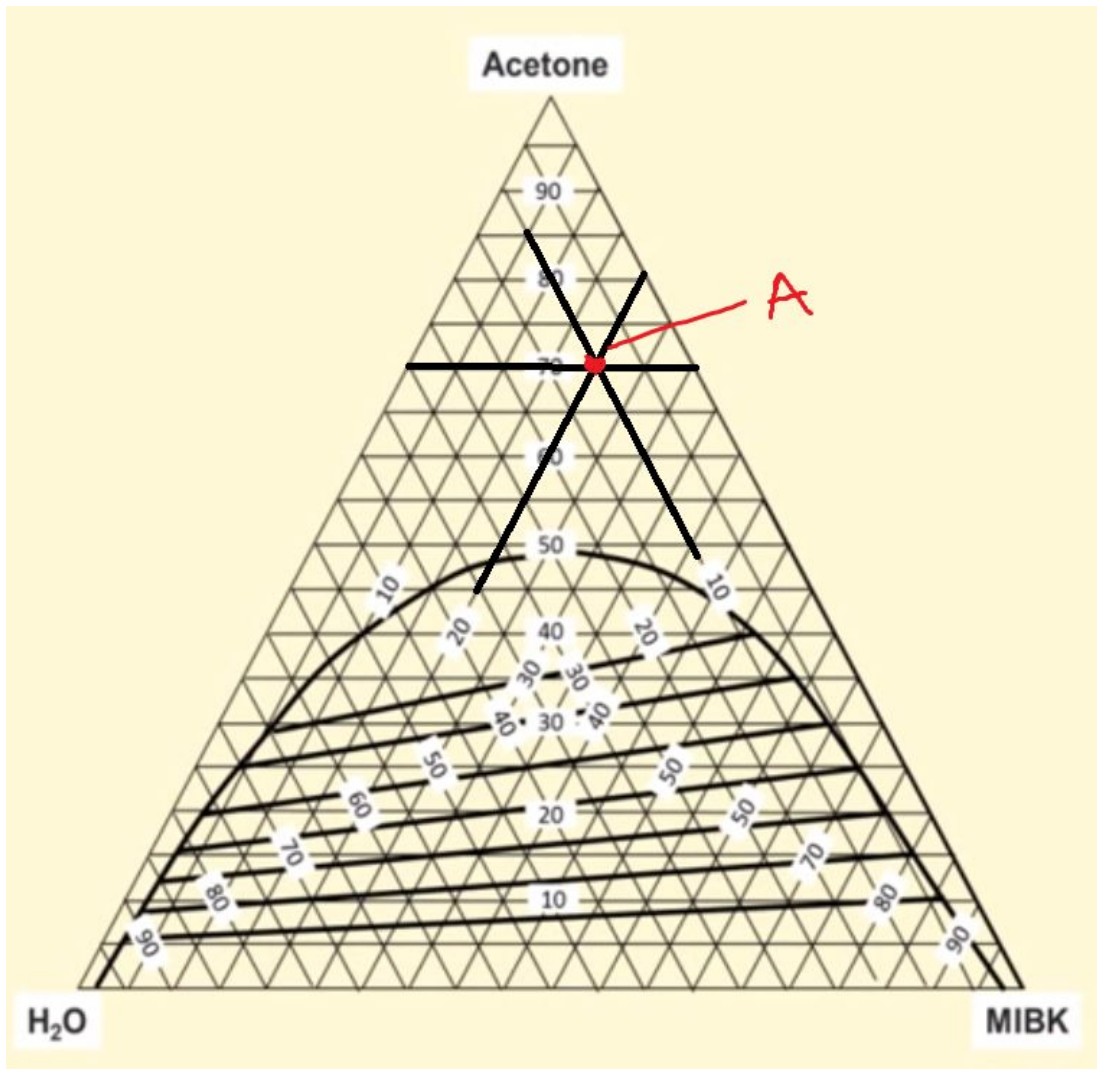
Um exemplo de substância líquido-líquido em substâncias parcialmente miscíveis é a acetona, água e mibk e podemos representá-la neste diagrama de fases triangular equilátero.



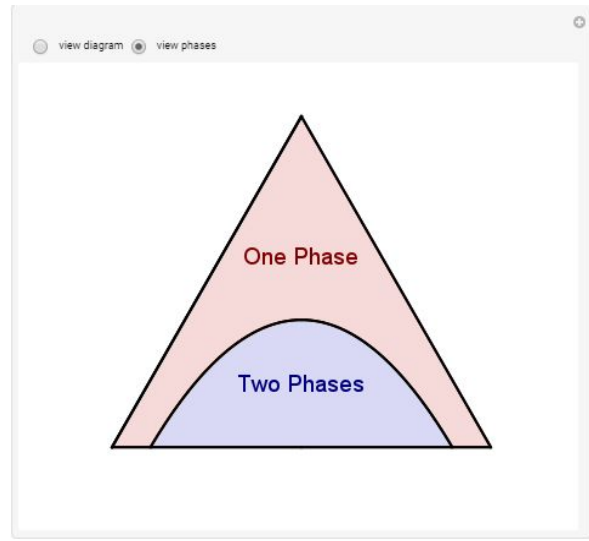
Para este caso, o sistema está representado com substâncias a 25°C e a 1atm.

Duas coisas acontecem quando misturamos essas substâncias nesta temperatura e pressão. Uma é que elas permaneceram em uma fase, (misturadas), e outra é que elas poderiam estar separadas em duas fases. E tudo depende da quantidade de cada substância na solução. Por exemplo:

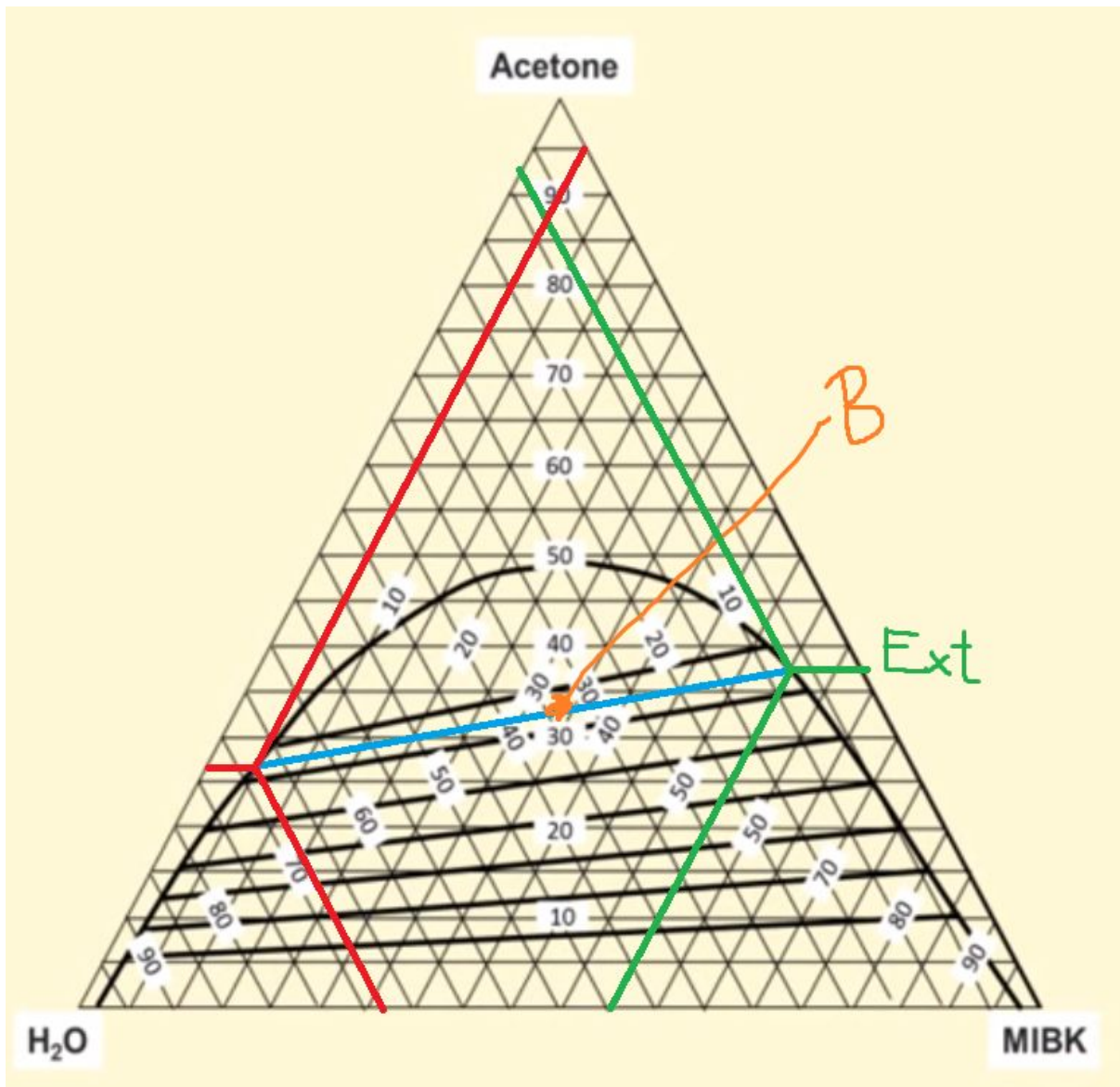
Solução A : 70% acetona, 10% água, e 20% mibk, com estes valores podemos plotar o ponto no diagrama de fases.



Repare que a medida que aumentamos a quantidade de acetona, ou seja, em direção ao topo do triângulo, estaremos dentro da área de uma fase. Como pode ver, a solução a está fora dessa região envelope. Qualquer ponto que cair fora da fase envelope, irá permanecer como um líquido de uma fase. (single fase)



Solução B: 33% acetona, 33% mibk, 33% água.



Como foi mencionado, nesta região temos 2 fases, e temos que separar elas. As linhas que estão dentro do envelope são chamadas de “tie lines”. São linhas de ligação, que ligam composições das duas fases líquidas em equilíbrio que irão guiar para a composição que deseja. Ao lado esquerdo temos uma solução rica em água, e para o lado direito, rico em mibk.

Quando a solução B atingir o estado de equilíbrio, (25°C e 1 atm) ela vai possuir duas fases, chamadas de alfa fase e beta fase, ou região de extrato e solvente. Tudo depende do papel que cada substância tem na mistura.

Seguindo as linhas de amarração, concluímos que para região a direita do ponto crítico temos uma fase com 53% de mibk, 38% acetona, 9% água, e para o lado esquerdo temos uma fase com 67% água, 28% acetona e 5% mibk.

Conclusão

A representação através de diagramas ternários, possibilita a identificação da porcentagem das substâncias presentes, o total de fases que o composto apresenta, a quantidade e a composição dos extratos e refinados. Esse último necessita de ferramentas como a linha de equilíbrio, linha de união (amarração) e ponto P.

A fase envelope que trata nosso trabalho, é justamente a aparição da linha de equilíbrio, a qual separa, envelope, a zona bifásica da monofásica.

Esse método de diagramas ternários auxilia a identificação do melhor caminho de cristalização de soluções.

Bibliografia

<https://www.youtube.com/watch?v=596j7HcdJNU>

<https://www.youtube.com/watch?v=IOOOdCj07AA>