

Seminario 1

Autores: Sara Serena Palomares (Instituto de Cerámica y Vidrio (ICV), Consejo superior de Investigaciones Científicas (CSIC), España)

Resumen

Las características fisicoquímicas y microestructurales de las fases, incluida la porosidad, que constituyen un material son responsables de sus propiedades y decisivas en la respuesta del material en su entorno de trabajo. Identificar y conocer la combinación de fases estables y las que se pueden desarrollar en un conjunto de condiciones externas determinado es, en definitiva, una cuestión central en el desarrollo y la aplicación de nuevos materiales. La termodinámica aplicada a la ciencia de los materiales nos permite realizar estudios previos de simulación de ambas situaciones.

La respuesta a la cuestión sobre las fases presentes y su estabilidad, ha estimulado el desarrollo de métodos de estudio cuyas raíces se encuentran en la termodinámica clásica y la termodinámica química, como son las técnicas CALPHAD (Calculation of Phase Diagrams). Mediante ellas se trata de combinar los diagramas de equilibrio fases y la termoquímica del sistema para obtener una descripción termodinámica que sea consistente con los datos experimentales existentes. Para ello, han de ser establecidas las funciones de energía libre de Gibbs de las distintas fases del sistema, descritas mediante un modelo teórico apropiado.

El desarrollo de modelos termodinámicos y bases de datos generales y consistentes son dos puntos clave en las metodologías actuales, y ampliamente utilizadas en las herramientas termodinámicas disponibles. La gran ventaja de estos métodos es que permiten predecir de forma bastante fiable el comportamiento de las fases de sistemas multicomponentes altamente complejos, basándose en la extrapolación de sus sistemas de orden inferior.

En la actualidad el desarrollo de programas informáticos específicos para este tipo de cálculo, unido al uso universal de ordenadores personales cada vez más potentes, hace posible considerar a los métodos de cálculo termodinámico como verdaderas herramientas de simulación termodinámicas para entender no solo la estabilidad de fases en el material sino su evolución en diversas condiciones.

A lo largo de la exposición, se describirán y comentarán las bases de los métodos CALPHAD, haciendo especial énfasis en los modelos termodinámicos más extendidos, con ejemplos en sistemas multicomponente basados en circona, alúmina o sílice o sistemas basados en fosfatos como CaO-P₂O₅ o ZnO-P₂O₅. Así mismo, se expondrá una revisión de las bases de datos termodinámicas y programas de cálculo existentes en el mercado. Finalmente, se mostrarán algunos ejemplos de aplicación de la técnica tanto en la síntesis o formulación de materiales como en simulaciones de procesos de

reacción en materiales de circonita, disolución-hidratación de biomateriales, procesos de oxidación-reducción y corrosión de refractarios, entre otros.