



IKER
GAZTE
NAZIOARTEKO
IKERKETA EUSKARAZ

I. IKERGAZTE

NAZIOARTEKO IKERKETA EUSKARAZ

2015eko maiatzaren 13, 14 eta 15
Durango, Euskal Herria

ANTOLATZAILEA:
Udako Euskal Unibertsitatea (UEU)

INGENIARITZA ETA ARKITEKTURA

**Garraio propietateak nahasketa
hirutarretan**

*M. Larrañaga, E. Lapeira,
M. M. Bou-Ali, J. A. Madariaga
eta C. Santamaría*

551-556 or.
<https://dx.doi.org/10.26876/ikergazte.i.76>

ANTOLATZAILEA:



udako
euskal unibertsitatea

BABESLEAK:



EUSKO JAURLARITZA
GOBIERNO VASCO



Bizkaiko Foru Aldundia
Diputación Foral de Bizkaia

eman ta zabal zaku



UPV EHU

LAGUNTZAILEAK:



Universidad de Deusto
Deustuko Unibertsitatea



MONDRAGON
UNIBERTSITATEA



UDALBILTZA



Universidad
Pública de Navarra
Nafarroako
Unibertsitate Publikoa

Garraio propietateak nahasketa hirutarretan

Larrañaga, M.^{1a}, Lapeira, E.¹, Bou-Ali, M.M.¹, Madariaga, J.A.², Santamaría, C.²

¹Mondragon Goi Eskola Politeknikoa, Mekanika eta Ekoizpen Industrialeko saila,
Mondragon Unibertsitatea, Loramendi 4 PK. 23, 20500 Arrasate

²Fisika Aplikatua II departamentua, Euskal Herriko Unibertsitatea UPV/EHU, PK.. 644,
48080 Bilbo.

^amlarranaga@mondragon.edu

Laburpena

Lan honetan, nahasketa hirutarretan egindako garraio-propietateen ikerketan lortu diren emaitzak aurkezten dira. Aztertu den nahasketa 1,2,3,4-tetrahidronaftalinak, isobutilbentzenoak eta n-dodekanoak osatzen dute. Nahasketa horretarako termodifusio, difusio molekularreko eta Soret koefizienteak zehaztu dira 25°C-ra. Termodifusio koefizienteak zehazteko teknika termograbitazionala erabili da; Tutu Simetriko Irristagarriko teknika erabili da difusio molekularreko koefizienteak zehazteko; azkenik, termodifusio eta difusio molekularreko koefizienteen neurketen konbinaziotik Soret koefizienteak zehaztu dira, osagaien fluxu-ekuazioaren arabera. Horrez gain, garraio koefizienteak zehazteko behar diren propietate termofisikoak neurtu dira: dentsitatea, errefrakzio-indizea, biskositate dinamiko eta espansio termikoko koefizientea.

Hitz gakoak: Garraio-propietateak, termodifusioa, teknika termograbitazionala, Tutu Simetriko Irristagarriak

Abstract

In this work, we have analysed transport properties in ternary mixture. The analysed mixture is composed by 1,2,3,4-tetrahydronaphthalene, isobutylbenzene and n-dodecane. Thermodiffusion, molecular diffusion and Soret coefficients of this mixture have been measured at 25°C. The thermodiffusion coefficients have been determined by the thermogravitational technique; the molecular diffusion coefficients have been determined by the Sliding Symmetric Tubes technique; finally, Soret coefficients have been determined from the combination of the measurements of thermodiffusion and molecular diffusion coefficients. In addition, the thermophysical properties needed for the determination of the transport coefficients have been measured: density, refractive index, dynamic viscosity and thermal expansion coefficient.

Keywords: Transport properties, thermodiffusion, thermogravitational technique, Sliding Symmetric Tubes technique

1. Sarrera eta motibazioa

Termodifusioa tenperatura gradiente baten eraginagatik sortzen den materiaren mugimenduari deitzen diogu. Materiaren mugimendua kontzentrazio gradiente batengatik sustatuta badago, difusio molekularra deitzen diogu. Bi fenomeno hauen konbinazioari Soret efektu bezala ezagutzen da (Platten (2006)).

Garraio-fenomenoak alor ezberdinetako prozesu natural eta industrial desberdinetan agertzen dira. Adibidez, fluido biologikoetan (Capuano et al. (2011), Martin et al. (2011)), elikagaien industrian (Tello Alonso et al. (2012)) edo petrolio industrian (Montel et al. (2007), Touzet et al. (2011)). Horregatik, oso interesgarriak dira komunitate zientifikorako eta fenomeno hauek aztertzen dituzten hainbat ikerketa proiektuak daude.

2. Arloko egoera eta ikerketaren helburuak

Garraio fenomenoari buruzko interes gorakor horregatik, Europako Agentzia Espazialak eramaten duen nazioarteko proiektu bat, DCMIX izenekoa, sortu zen. Proiektu horren helburua da bibliografian dauden nahasketa likidoetako termodifusioaren portaerari buruzko teoriak kontrastatzea eta zenbakizko, analitiko eta esperimenezko metodologia berrien garapenean

aurrera egitea. Horrekin, bateratutako baliotasun irizpide bat ezarri nahi da ez-oreka garraio fenomenoentzat nahasketa multiosagaietan.

Nahasketa bitarrak sakonki aztertu dira eta garraio-koefizienteak zehazki neurtzeko teknika ezberdinak daude (Platten et al. (2003), Mialdun et al. (2012)). Gaur egungo erronka nahasketa hirutarren ikasketan dago. Orain nahasketa hirutarretan garraio-koefizienteak zehaztea ahalbidetzen duten hainbat teknika ezagutzen dira, adibidez: Optical Digital Interferometry (ODI) teknika (Mialdun et al. (2013)), difusio molekularreko eta Soret koefizienteak zehazteko balio duena; Optical Beam Deflection (OBD) teknika (Königer et al. (2010)), termodifusioeko eta Soret koefizienteak zehazten dituen; teknika termograbitazionala (TG) (Blanco et al. (2010)), termodifusioeko koefizienteak neurtzeko balio duena; eta Tutu Simetriko Irristagarriko (TSI) teknika (Larrañaga et al. (2014)b), difusio molekularreko koefizienteak zehazteko balio duena. Hala ere, teknika horiekin nahasketa ezberdinak aztertu dira eta emaitzak ezin ziren konparatu. Horregatik, komunitate zientifikoak lehenetsutako helburu bezala markatu zuen hidrokarburoz osatutako nahasketa hirutarren *Benchmark* bat egitea. Hartan, lurteko laborategietako teknika ezberdinekin lortutako emaitzak eta Nazioarteko Geltoki Espazialean dagoen SODI instalazioan mikrograbitazionalen baldintzetan lortutako emaitzak konparatu ziren.

Benchmark-erako proposatu zen nahasketa aukeratzeko, DCMIX proiektuaren lehenengo fasean aztertzen den sistema kontutan hartu zen. Nahasketa hirutar hau, 1,2,3,4-tetrahidronaftalinak (THN), isobutilbentzenoak (IBB) eta n-dodekanoak (nC_{12}) osatzen dute, 0.80-0.10-0.10 kontzentrazio masikoan.

Nahasketa horren termodifusioeko, difusio molekularreko eta Soret koefizienteak sei taldek zehaztu zituzten. Sei talde horiek dira:

- W. Köhler burua den taldea, Alemaniako Bayreuth Unibertsitatekoa.
- V. Shevtsova burua den taldea, Belgikako Bruselaseko Libre Unibertsitatekoa (ULB) .
- S. Van Vaerenbergh burua den taldea, Belgikako Bruselaseko Libre Unibertsitatekoa (ULB) .
- Z. Saghir burua den taldea, Kanadako Ryerson Unibertsitatekoa.
- T. Lyubimova burua den taldea, Errusiako Russian Academy of Science-ekoa (RAS)
- M. M. Bou-Ali burua den taldea, Mondragon Goi Eskola Politeknikokoa (MGEP).

Talde bakoitzak bere laborategian garatutako teknikak erabili zituen garraio-koefizienteak zehazteko. Banakako analisia egiteko epea bukatu zenean, Baionan ospatu zen *International Meeting on Thermodiffusion* hamaikagarren kongresuan talde bakoitzak lortutako emaitzak analizatu eta konparatu ziren (Bou-Ali et al. (2015)). *Benchmark* hau oso aurrerapen handia izan zen termodifusioeko arloan, teknikak balioztatzeke gauza izan zelako.

Lan honetako helburu garrantzitsua da DCMIX proiektuaren nahasketaren garraio-proprietateak aztertzea. *Benchmark* nahasketaz aparte beste lau kontzentrazio neurtu dira. Horretarako, teknika termograbitazionala eta Tutu Simetriko Irristagarriko (TSI) teknika erabili dira.

3. Ikerketaren muina

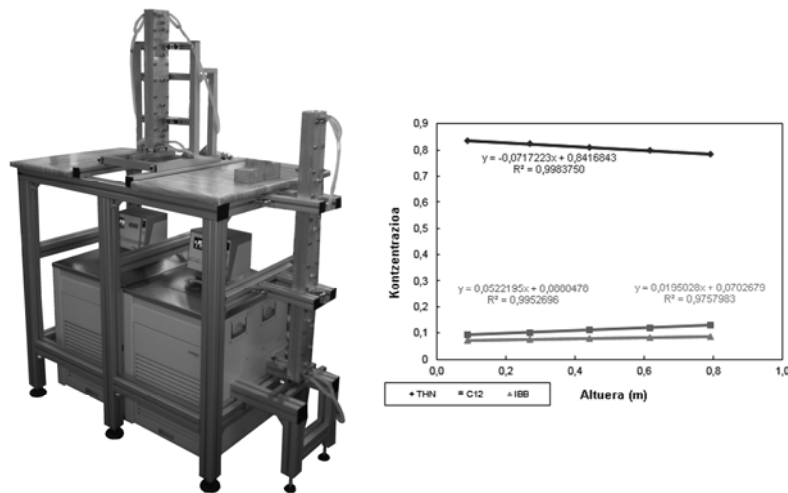
3.1. Teknika esperimentalak

Lan honetan teknika termograbitazionala erabili da termodifusioeko koefizienteak zehazteko. Teknika hau arrakastarekin erabili da nahasketa bitarretan (Mialdun et al. (2012), Larrañaga et al. (2014)a), eta gaur egun nahasketa hirutarren ikerketan ere erabiltzen da (Blanco et al. (2010), Larrañaga et al. (2015)). 1.irudian (Ezk.) gure laborategian erabiltzen ditugun zutabe

termograbitazionalak ikus daitezke. Zutabe hauek Mondragon Goi Eskola Politeknikoan diseinatu eta eraiki ziren.

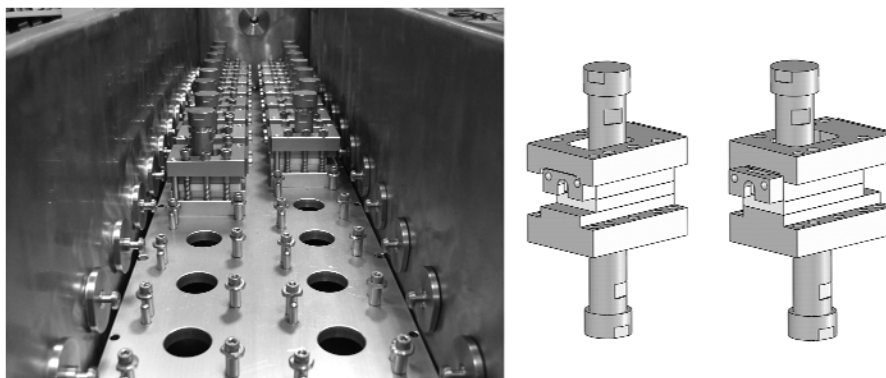
Termodifusio koefizienteak zutabeen zehar gertatzen den kontzentrazioaren bereizkuntzatik zehazten dira, egoera egonkorrean (1. irudia, Esk.). Aurretik, hainbat propietate termofisiko neurtu behar dira eta kalibrazio bat egin behar da. Kalibrazioa egiteko ikertzen dugun kontzentrazioaren inguruan dauden 25 nahasketa prestatu behar dira eta haien dentsitatea eta errefrakzio-indizea neurtu behar da.

1. irudia. Ezk: Instalazio termograbitazionala; Esk: Kontzentrazioaren aldaketa zutabearen altueraren zehar, THN-IBB-nC₁₂ (0.8-0.1-0.1) nahasketarako.

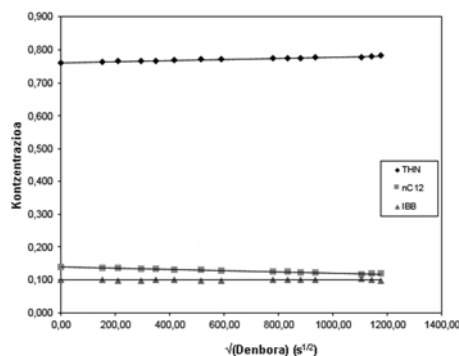


Difusio molekularreko koefizienteak (puruak eta gurutzatuak) zehazteko Tutu Simetriko Irristagarrien teknika erabili da (2.irudia). Teknika honen bidez osagai bakoitzaren kontzentrazioaren aldaketa denboran zehar lortzen da (3. Ir.), nahasketa bitarretan eta hirutarretan.

2. irudia: Tutu Simetriko Irristagarrien instalazioa.



3. irudia: Kontzentrazioaren aldaketa denboraren zehar, denboraren erro karratuaren funtzioan, THN-IBB-nC₁₂ (0.8-0.1-0.1) nahasketarako.



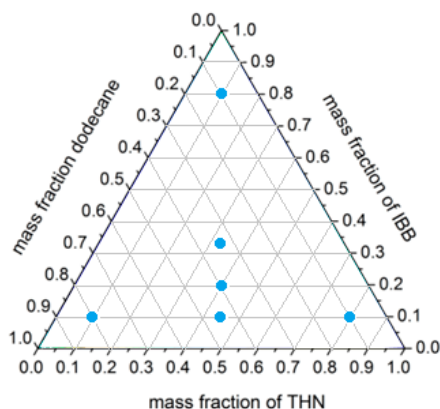
Teknika hau erabili ohi da hainbat lanetan nahasketa bitarretan (Alonso de Mezquía et al. (2012)). Nahasketa hirutarren kasuan, Larrañaga et al. (2014)b lanean difusio molekularreko koefizienteak zehazteko metodologia analitikoak garatu da. Nahasketa baten koefizienteak lortzeko hasierako kontzentrazio ezberdinak dituzten bi saio behar dira.

Azkenik, Soret koefizientea termodifusio eta difusio molekularreko koefizienteen neurketetatik zehaztu da, hiru koefizienteak erlazionatuta baitaude (Bou-Ali et al. (2015)).

3.2. Emaitzak

4. irudian ikusten dira aztertutako sei kontzentrazio ezberdinak.

4. irudia. THN-IBB-nC₁₂ nahasketaren azertu diren kontzentrazio puntuak.



Nahasketa hauetarako zehaztu dira propietate termofisikoak (dentsitatea, errefrakzio indizea, biskositate dinamiko eta espansio termikoko koefizientea) eta termodifusio, difusio molekularreko eta Soret koefizienteak.

Benchmark kontzentrazioaren emaitzak konparatu ziren Bou-Ali et al. (2015) lanean, gure teknikak balioztatzen. Beste kontzentrazioaren emaitzak argitaratzen direnean, nahasketa hirutarrek neurtzeko ahalmena komunitate zientifikoan indartuko da.

4. Ondorioak eta etorkizunerako planteatzen den norabidea

Teknika termograbitazionalaren eta Tutu Simetriko Irristagarrien teknikaren bitartez garraio-koefizienteak neurtu dira nahasketa hirutarretan. Honela, DCMIX proiektuaren helburuak lortu dira.

Nazioarteko *Benchmark*-ri esker, gure laborategian garatu ditugun garraio-koefizienteen teknikak balioztatu ditugu.

THN-IBB-nC₁₂ nahasketaren beste kontzentrazio puntuak neurtu dira eta etortzeko hilabetetan argitaratuko dira. Gero, beste teknikekin lortutako emaitzekin konparatuko dira, neurtze tekniken balioasuna sendotzeko.

DCMIX proiektuaren lehenengo fasearen nahasketa neurtuta, bigarren eta hirugarren faseetako nahasketak erabaki dira. Bigarren fasean, nahasketa kritikoak aztertuko dira eta hirugarrenean ur-disoluzioak analizatuko dira.

Nahasketa ternarioak sakonki aztertu ondoren, nahasketa multi-osagaiak aztertu beharko dira. Aplikazio gehienetan agertzen diren nahasketak ez baitira hain sinpleak.

6. Erreferentziak

- Alonso de Mezquia, D., Bou-Ali, M. M., Larrañaga, M., Madariaga, J. eta Santamaria, C. (2012), Determination of molecular diffusion coefficient in n -alkane binary mixtures: Empirical correlations, *J. Phy. Chem. B*, 116, 2814-2819.
- Blanco, P., Bou-Ali, M.M., Platten, J.K., Alonso de Mezquía, D., Madariaga, J.A. eta Santamaría, C. (2010), Thermodiffusion coefficients of binary nad ternary hydrocarbon mixtures, *J. Chem. Phys.*, 132, 114506.
- Bou-Ali, M.M., Ahadi, A., Alonso de Mezquia, D., Galand, Q., Gebhardt, M., Khlybov, O., Köhler; W., Larrañaga, M., Legros, J.C., Lyubimova, T., Mialdun, A., Ryzhkov, I., Saghir, M.Z., Shevtsova, V., Van Varenbergh, S. (2015), Benchmark values for the Soret, thermodiffusion and molecular diffusion coefficients of the ternary mixture tetralin+isobutylbenzene+n-dodecane with 0.8-0.1-0.1 mass fraction, *Eur. Phys. J. E*, Onartuta.
- Capuano F., Paduano L., D'Errico G., Mangiapia, G. eta Sartorio, R. (2011), Diffusion in ternary aqueous systems containing human serum albumin and precipitants of different classes, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 13, 3319-3327.
- Königer, A., Wunderlich, H. eta Köhler, W. (2010), Measurement of diffusion and thermal diffusion in ternary fluid mixtures using a two-color optical beam deflection technique, *J. Chem. Phys.*, 132, 174506.
- Larrañaga, M., Bou-Ali, M.M., Lapeira, E., Santamaría, C. eta Madariaga, J.A. (2014)a, Effect of thermophysical properties and morphology of the molecules on thermodiffusion coefficient of binary mixtures, *Microgravity Sci. Technol.*, 26, 29-35.
- Larrañaga, M., Rees, D.A.S. eta Bou-Ali, M.M. (2014)b, Determination of the molecular diffusion coefficients in ternary mixtures by the sliding symmetric tubes technique, *J. Chem. Phys.*, 140, 054201.
- Larrañaga, M., Bou-Ali, M.M., Alonso de Mezquia, D., Rees, D.A.S., Madariaga, J.A., Santamaría, C. eta Platten, J.K. (2015), Contribution to the Benchmark for ternary mixtures: determination of Soret coefficients by the Thermogravitational and the Sliding Symmetric Tubes techniques, *Eur. Phys. J. E*, Onartuta.
- Martin A., Bou-Ali, M.M., Barrutia, H. eta Alonso de Mezquía, D. (2011), Microfluidic separation process by the Soret effect in biological fluids, *C. R. Mecanique*, 339, 342-348.
- Mialdun, A., Yasnou, V., Shevtsova, V., Königer, A., Köhler, W., Alonso de Mezquía, D. eta Bou-Ali, M.M. (2012), A comprehensive study of diffusion, thermodiffusion and Soret coefficients of water-isopropanol mixtures, *J. Chem. Phys.*, 136, 244512.
- Mialdun, A., Sechenyh, V., Legros, J.C., Ortiz de Zarate, J. eta Shevtsova, V. (2013), Investigation of Fickian diffusion in the ternary mixture of 1,2,3,4-tetrahydronaphtalene, isobutylbenzene and dodecane, *J. Chem. Phys.*, 139, 104903.

- Montel, F., Bickert, J., Lagisquet, A. eta Galliero, G. (2007), Initial state of petroleum reservoirs: A comprehensive approach, *J. Pet. Sci. Technol.*, 58, 391-402.
- Platten, J.K., Bou-Ali, M.M., Costeséque, P., Dutrieux, J., Köhler, W., Leppla, C., Wiegand, S. eta Wittko, G. (2003), Benchmark values for the Soret, thermal diffusion and diffusion coefficients of three binary organic liquid mixtures, *Philos. Mag.*, 83, 1965-197.
- Platten, J.K. (2006), The Soret effect: a review of recent experimental results, *J. Appl. Mech.*, 73, 5-15.
- Tello Alonso, H., Rubiolo, A.C. eta Zorrilla, S.E. (2012), Prediction of the diffusion coefficients in multicomponent liquid refrigerant solutions, *J. Food Eng.*, 109, 490-495.
- Touzet, M., Galliero, G. Lazzeri, V., Saghir, M.Z., Montel, F. eta Legros J.C. (2011), Thermodiffusion: from microgravity experiments to the initial state of petroleum, *C. R. Mecanique*, 339, 318-323.

7. Eskerrak eta oharrak

Lan hau egin da Eusko Jaurlaritzako MicroCHEAP (IE14-391), Ikerketa taldeak (IT557-10) eta Doktoretza aurreko Beka (BFI-2011-295) proiektuei esker eta Europako Agentzia Espazialaren DCMIX (AO-2009-0858/1056) proiektuari esker.