



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

**Difusioa, Termodifusioa eta Soret
koefizienteak kalkulatzeko
erabiltzen diren teknika
desberdinak**

*E. Lapeira, M. M. Bou-Ali,
A. Mialdun, V. Shevtsova,
W. Koehler, M. Gebhardt eta T. Triller*

545-550 or.

<https://dx.doi.org/10.26876/ikergazte.i.75>

ANTOLATZAILEA:



udako
euskal unibertsitatea

BABESLEAK:



EUSKO JAURLARITZA
GOBIERNO VASCO



Bizkaiko Foru Aldundia
Diputación Foral de Bizkaia

eman ta zabal zazu



UPV EHU

LAGUNTZAILEAK:



Deusto
Universidad de Deusto
Deustuko Unibertsitatea

MONDRAGON
UNIBERTSITATEA



UDALBILTZA

upna
Universidad
Pública de Navarra
Nafarroako
Unibertsitate Publikoa

Difusioa, Termodifusioa eta Soret koefizienteak kalkulatzeko erabiltzen diren teknika desberdinak

Lapeira E.¹, Bou-Ali M. M.¹, Mialdun A.², Shevtsova V.², Koehler W.³, Gebhardt M.³, Triller T.³

¹ *Mekanika eta Ekoizpen Industrialeko saila, Mondragon Goi Eskola Politeknikoa, Loramendi 4 PK. 23, 20500 Arrsate*
elapeira@mondragon.edu, mbouali@mondragon.edu

² *Microgravity Research Center, Université Libre de Bruxelles, av. F.D.Roosevelt, 50, Bruselas, Belgika,*
amialdun@ulb.ac.be, vshev@ulb.ac.be

³ *Physikalisches Institute, Universität Bayreuth, D-95440 Bayreuth, Alemania,*
werner.koehler@uni-bayreuth.de

Laburpena

Lan honetan garraio-propietateak determinatzeko erabiltzen diren teknika desberdinak azaltzen dira. Mondragon Goi Eskola Politeknikoan teknika termograbitazionala eta tutu simetriko irristagarriak erabiltzen dira, Alemaniako Bayreuth unibertsitatean *optical beam deflection* teknika erabiltzen da eta Bruselan aldiz, Bruselako unibertsitatean *optical digital interferometry* erabiltzen da. Aipaturiko tekniken artean dagoen desberdintasun handiena datuak aztertzekeo prozesuan dago, lehenengo bi tekniketean dentsitatearen neurketaren bidez kalkulatuzen dira garraio propietateka eta beste bi tekniketean laserraren aldaketaren biez egiten da.

Hitz gakoak: Garraio-propietateak, termodifusioa, teknika termograbitazionala, tutu Simetriko Irriagarriak, optical beam deflection, optical digital interferometry.

Abstract

This work shows the different techniques that are used to measure the transport properties. In Mondragon Goi Eskola Politeknikoa the thermogravitational technique and the sliding symmetric tubes are used, in Bayreuth university the optical beam deflection is used and in University Libre of Brussels the optical digital interferometry is used. The main difference between this techniques is the analysis method, in thermogravitational and in sliding symmetric tubes is used the density measurement while in other two techniques it is used a laser to measure.

Keywords: transport-properties, thermodiffusion, thermogravitational technique, sliding symmetric tubes, optical beam deflection, optical digital interferometry.

1. Sarrera eta motibazioa

Termodifusio efektua azken hamarkadetan asko aztertzen ari da, fluidoen garraio-propietateak arlo ezberdinetan duten eraginagatik. Besteak beste, separazio prozesuetan (Furry et al., 1939; Platten et al., 2003) edota eremu geologikoak karakterizatzeko prozesuetan (Schott, 1983). Petrolioaren industrian ere esaterako, garrantzia handia du gradiente geotermikoen ondoriozko hidrokarburoen konposizioa ezagutzeak (Ghorayeb et al., 2003) eta baita osagaien distribuzioa jakiteak petrolio putzuak hobeto ustiatu ahal izateko (Montel, 1994). Difusio termikoak hainbat arlo biologikotan ere eragina duela ikusi da azken urteotan, esaterako, garraio biologikoaren mekanismotan zerikusia du (Bonner et al., 1984), eta baita materia bizidunen garraioan ere (Dieter eta Libchaber, 2004), bestalde, tenperatura gradienteak espermatozoideak obulura iristeko faktore garrantzitsua dela frogatu da, fenomeno hau *Thermotaxis* bezala ezagutzen da (Bahat et al., 2003).

Termodifusioa edo Soret efektua difusio molekularra (D) eta difusio termikoaren (DT) arteko erlazioa da (1)

$$S_T = \frac{D_T}{D} \quad (1)$$

Nahasketa bitarretan eta konbekzioa agertzen ez den kasuetan, Soret koefizientea honela definitzen da (2)

$$S_T = \frac{\nabla c}{c(1-c)} \frac{1}{\nabla T} \quad (2)$$

Non, ∇c nahasketako osagaien arteko separazioa den, c dentsitate altuena duen osagaiaren kontzentrazioa den eta ∇T aplikaturiko tenperatura diferentzia den. Soret koefiziente positiboa ala negatiboa izan daiteke, dentsitate altuena duen osagaia inguru hotzera garraiatzen bada, Soret koefiziente positiboa izango da. Bestalde, dentsitate altuena duen osagaia ingurune berora garraiatzen bada, Soret koefizientea negatiboa da.

Nahasketa bitarren Difusio, Termodifusio eta Soret koefizienteen determinatzeko hainbat teoria frogatu dira eta dagoeneko nahasketa bat baino gehiago aztertu dira, baina nahasketa hirutarren kasuan, oraindik idatzirik dauden teoria desberdinak ez dira frogatu. Arazo hori dela eta, DCMIX (*Diffusion and Thermodiffusion Coefficients Measurements in ternary mixtures*) proiektua sortu zen nahasketa hirutarren Difusio, Termodifusio eta Soret koefizienteak determinatu ahal izateko. Proiektu honetan, herrialde desberdinetako 13 taldek parte hartzen dute, Belgika, Alemania, Errusia, Kanada, Frantzia, Japonia, Espainia eta baita ESA-k ere (*Agencia Espacial Europea*). Proiektu honetan fase desberdinak bereizten dira, hauetariko bakoitzean nahasketa hirutar desberdinak aztertzen direlarik. DCMIX 1 esaterako, *Dodecano/Isobutilbenzeno (IBB)/Tetrahidronaftaleno (THN)* osagaiek osatzen dute, hauek petrolotik eratorritakoak dira. DCMIX 2-an *Tolueno/Metanol/Ciclohexano* osagaiak aztertzen dira, nahasketa hirutar hau berezia da kontzentrazio tarte batzuetan osagaiak ez baitira nahasten eta Soret koefizientearen ikur aldaketa ematen da. Azkenik DCMIX 3-an, *Agua/Etanol/Trietilen-Glycol* osagaiez osaturiko nahasketa hirutarrak aztertzen dira, hauek urez osaturiko nahasketak direlarik.

Lerro batzuk gorago aipatu den bezala, proiektu hau talde desberdinez osaturik dago eta talde bakoitzak bere teknikak erabiltzen ditu Difusio, Termodifusio eta Soret koefizienteak determinatzeko. Esaterako, Mondragon Goi Eskola Politeknikoan bi teknika desberdin erabiltzen dira, teknika termograbitazionala (Bou-Ali et al., 1998), eta Tutu Simetriko Irristakorren teknika (Alonso de Mezquia et al., 2012), bestalde Bayreuth-ko Unibertsitatean (Alemanian) *Optical Beam Deflection (OBD)* teknika (Gebhart et al., 2013) erabiltzen da eta Bruselaseko Unibertsitatean (Belgikan) *Optical Digital Interferometry (ODI)* (Mialdun eta Shevtsova, 2011) teknika erabiltzen da.

2. Arloko egoera eta ikerketaren helburuak

Ikerketa honen helburuak oneko hauek dira:

- Osagai askotariko nahasketetan termodifusio efektua ulertzea.
- Nahasketa hirutarrak nahiz lurreko laborategietan nahiz mikrograbitare egoerako balditzetan ikertu ahal izatea, lurreko teknika desberdinak ulertu ahal izateko.
- Difusio eta Termodifusioko Benchmark-a egin ahal izatea, horrek hainbat teoria balioztatzea ahalbidetuko duelako.

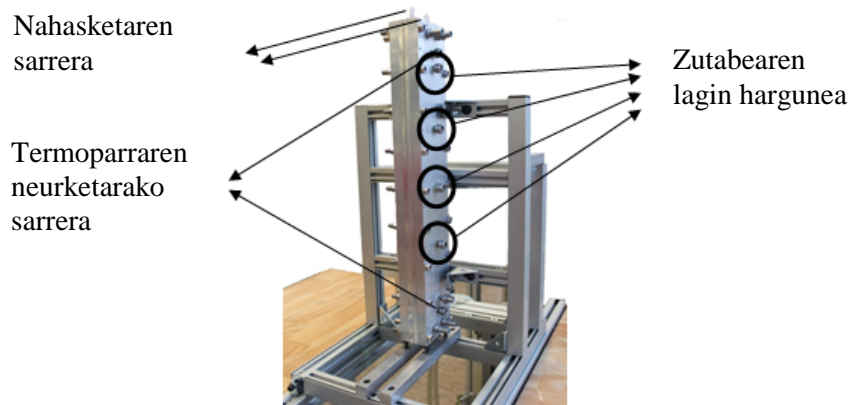
3. Ikerketaren muina

Ikerketa hau burutu ahal izateko, herrialde desberdinetako taldeek teknika desberdinak erabiltzen dituzte. Ondoren teknika esanguratsuenak aipatzen dira.

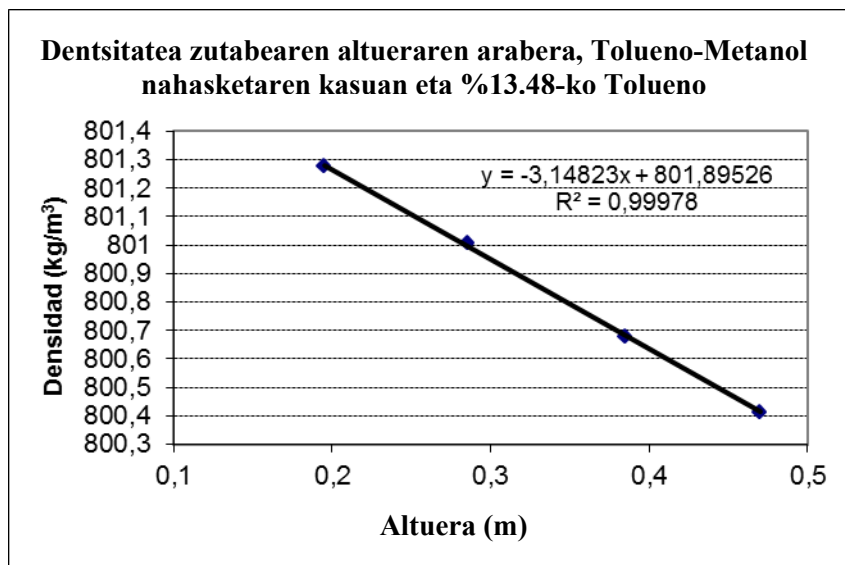
3.1 Teknika Termograbitazionala

Teknika termograbitazionala (ikus 1. irudia), nahasketa bitar eta hirutarren Termodifusio koefizientea (D_T) determinatzeko erabiltzen da. Horretarako zutabeak dituen bi pareten artean temperatura diferentzia bat aplikatzen da, ondoren, 30ml-ko nahasketa prestatzen da eta zutabeko GAP-an sartzen da. Aplikaturiko temperatura diferentzia honen ondorioz, nahasketako osagaiak separatzen hasten dira eta debora jakin bat pasa ondoren nahasketa egoera egonkorra iristen da. Une horretan, nahasketa zutabeak altuera desberdinetan dituen 4 irteeretatik ateratzen da eta lagin horiek dentsimetroan neurtzen dira. Horrela zutabearen altueraren arabera kontzentrazio aldaketa aztertzen da (ikus 2. irudia).

1. irudia. Zutabe termograbitazionalaren eskema.



2. irudia. Zutabeko altuera desberdinetatik ateratako laginen dentsitate aldaketa Tolueno-Metanol nahasketarena %13.48-ko Tolueno kontzentrazioaren kasua.



Dentsitatea aldaketaren malda jakinik, nahasketaren osagaien kontzentrazio aldaketa kalkulatu da eta azkenik Termodifusio koefizientea (3),

$$D_T = -\frac{g \cdot L_x^4}{504} \cdot \frac{\alpha}{c_i \cdot c_j \cdot \beta \cdot \mu} \cdot \frac{\partial \rho}{\partial z} \quad (3)$$

3.2 Tutu Simetriko Irristagarrien teknika (TSI)

Teknika honen bitartez, nahasketa bitar eta hirutarren difusio molekular koefizientea (D) kalkulatu da. Teknika hau, bainu batez (ikus 3a irudia) eta hainbat multzoz osaturik dago (ikus 3b irudia). Multzo hauek bi posizio dituzte, elkartuta eta separatuta, denak separatutik daudenean prestatutako nahasketa sartzen da kontzentrazio diferentzia txiki batekin eta elkartu egiten dira. Une horretatik aurrera, difusio molekularra aztertzen da denbora zehar. Aldiro,

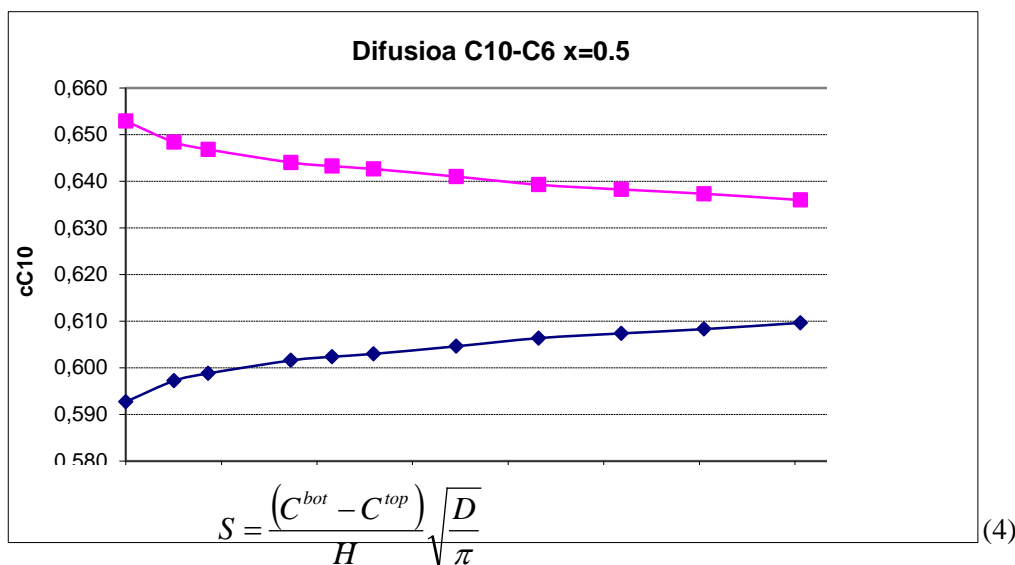
multzoetariko bat separatzen da difusio prozesua amaitzeko eta lagina dentsimetroan aztertzen da kontzentrazioa kalkulatu ahal izateko.

3. irudia. Tutu Simetriko Irristagarrien teknikako bainua eta multzoa.



Azkenik, kontzentrazio aldaketa irudikatzen da denboraren funtzioan (ikus 4. irudia) eta lortzen den maldaren bitartez Difusio koefizientea kalkulatzeko da (4), non S zuzenaren maldak den D difusio koefiziente den, H tutuaren luzera den eta C tutuetako nahasketen kontzentrazioa den.

4. irudia. TSI teknikaren bitartez lortutako emaitza esperimentalak C10-C6 nahasketa bitarren kasurako 0,5-ko frakzio molarrean eta T=25°C den kasurako .

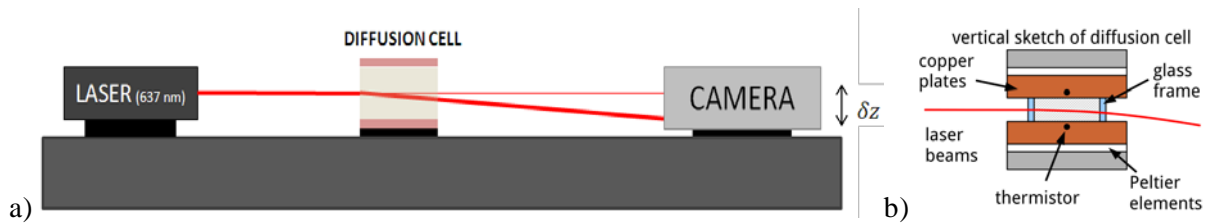


3.2 Optical Beam Deflection (OBD)

Teknika hau laser baten desbideratzean oinarritzen da (ikus 5. Irudia). Berta zelula bat erabiltzen da non prestatutako nahasketa sartzen den eta zelula horretan tenperatura diferentzia bertikala aplikatzen da. Tenperatura diferentzia horren ondorioz, nahasketako osagaiak separatzen hasten dira eta horrek laserraren desbideratzea eragiten du. Desbideratze hori instalazioaren amaieran dagoen kameran grabatzen da eta hortik nahasketak jasate duen separazioa kalkulatu da. Azkenik, separazioa kalkulatu ondoren, Soret koefiziente kalkulatu da (5)

$$S_T = \frac{\Delta c}{c(1-c)} \frac{1}{\Delta T} \tag{5}$$

5. irudia. a) Optical Beam Deflection (OBD) teknikaren eskema; b) teknika honetan erabiltzen den zelularen eskema.

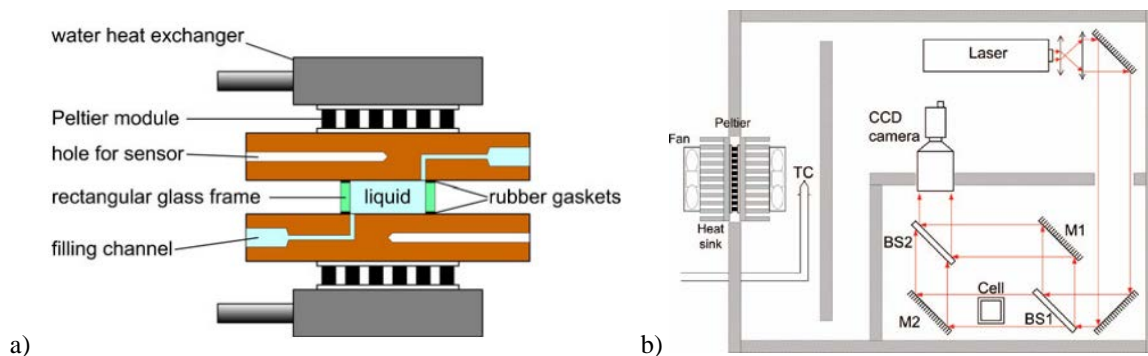


3.4 Optical Digital Interferometry (ODI)

Teknika honen bidez Soret eta Difusio molekular koefizienteak kalkulatu dira. Teknika hau, Mach-Zehnder interferometroan oinarrituta dago (ikus 6. irudia), bertan laser bat erabiltzen eta laser hau bi zatitan separatu da ispilu berezi baten bidez (*Beam Splitter*), hauetariko bat nahasketa dagoen zelulatik pasatzen da eta bestea erreferentziatzat erabiltzen da. Ondoren separaturiko bi laser hauek berriro juntatu dira interferentzia bat sortuz. Interferentzia hori kamera batek grabatu du eta seinale horretan fase aldaketa gertatu da zelulan tenperatura diferentzia bertikala aplikatu denean. Interferentzia horren fase aldaketa neurtuz, nahasketak jasaten duen kontzentrazio aldaketa neurtzen eta azkenik Soret eta Difusio koefizienteak kalkulatu dira. (6),

$$\Delta C(t) = -C_0(1 - C_0)S_T \Delta T \left[1 - \frac{8}{\pi^2} \sum_{n, \text{odd}} \frac{1}{n^2} \exp\left(-n^2 \frac{t}{\tau_r}\right) \right] \quad (6)$$

6. irudia. a) ODI teknikan erabiltzen den zelula; b) ODI teknikaren eskema.



4. Ondorioak

Lan honetan nahasketa bitar eta hirutarren Difusio, Termodifusio eta Soret koefizienteak kalkulatzeko erabiltzen teknika desberdinak erabiltzen dira. Teknika bakoitzean datuak jasotzeko metodologia desberdinak erabiltzen dira, esaterako teknika termograbatationalean eta tutu simetriko irristagarrietan dentsitatea dentsimetroan neurtzen da eta OBD eta ODI tekniketara aldez, laserra erabiltzen da, batean laserrak jasaten duen desbideratzearen bidez kalkulatu dira koefizienteak eta bestean laserraren bidez sortzen den interferentziaz baliatuz kalkulatu dira aipaturiko koefizienteak.

5. Etorkizunerako planteatu den norabidea

Aipaturiko teknikak nahasketa bitarren kasurako balidatu ondoren, nahasketa hirutarren garraio-propietateak determinatzeko teknikak egokitu egin behar dira. Esaterako, laserra erabiltzen tekniketara hiru osagai dituzten nahasketetan bi laser desberdin erabiliz.

6. Erreferentziak

- Alonso de Mezquia, D., Bou-Ali, M.M., Larrañaga, M., Madariaga, J.A. eta Santamaría, C. (2012): *J. Phys. Chem. B.* 116(9), 2814-2819.
- Bahat, A., Tur-Kaspa, I., Gakamsky, A., Giojalas, L. C., Breibart, H. eta Eisenbach, M. (2003): *Nat. Med.*, 9, 149.
- Bonner, F. J., Sundelof, L. O.. (1984): *Z. Naturforsch, C.*, 39, 656.
- Bou-Ali, M. M., Ecenarro, O., Madariaga, J. A., Santamaria, C. M. eta Valencia, J. J. (1998): *Phys.: Condens. Matter*,. 10, 3321-3331.
- Dieter, B. eta Libchaber, A. (2004): *Physical Biology*, 1.
- Furry, W. H., Jones, R. C. Eta Onsager, L. (1939): *Phys. Rev.*, 55, 1083.
- Gebhardt, M. et al. (2013): *The Journal of Chemical Physics* 138, 114503.
- Ghorayeb, K., Firoozabadi, A. eta Anraku, T. (2003): *SPE journal*, 8, 114.
- Mialdun, A. eta Shevtsova, V. (2011): *J. Chem. Phys.* 134, 044524.
- Montel, F. (1994): *Entropie*, 86, 184-185.
- Platten, J. K., Bou-Ali, M. M. eta Dutrieux, J. (2003): *Phys. Chem. B* 107, 11763-11767.
- Schott, J. (1983): *Bulleting Mineralogie*, 106, 247.

7. Eskerrak eta oharrak

- Eusko jaurlaritzari, tesi doktora egin ahal izateko emandako bekagaitik.
- Eusko jaurlaritzaren ikerketa taldeak (IT557-10)
- Europako Agentzia Espazialaren DCMIX (DCMIX-NCR-00022-QS)
- DFG Ko1541/9-2 eta DLR 50WM1130