FIATAL MŰSZAKIAK TUDOMÁNYOS ÜLÉSSZAKA

Kolozsvár, 2003. március 21-22.

AZ INFILTRÁCIÓ ELMÉLETI ALAPJAI

Bárczy Tamás, Kaptay György

Abstract

The aim of this presentation is to create a mathematical model for infiltration. Infiltration is a process, when a liquid flows into the pores of a porous solid body. This process depends on the quality of materials and pressure, which determine infiltration characteristics such as threshold pressure, threshold contact angle and equilibrium height of penetration. In this paper this characteristics will be modeled in the framework of the closely packed, equal spheres structure (CPES). The capillary model of penetration will also be discussed.

Ezen cikk célja, hogy egy összefoglaló, matematikai modellt adjon az infiltrációs/penetrációs folyamatokról. Az infiltráció olyan folyamat, amelynek során folyadék jut egy szilárd anyag nyílt pórusaiba. Ez a folyamat függ az alkalmazott anyagok minőségétől, a hőmérséklettől és a nyomástól. Ezek a paraméterek határozzák meg a folyamat tulajdonságait, mint a küszöbnyomás, a küszöb nedvesítési szög és az egyensúlyi folyadékmagasság. A következőkben ezen tulajdonságok közti összefüggésekre alkottunk matematikai modellt. A kapilláris és a CPES (closely packed, equal spheres) model esetében hasonlítjuk össze a kapott eredményeket.

A kapilláris modell

Ha folyadék infiltrálódik különböző anyagú kapillárisokba, akkor a különböző nedvesítési szögek miatt, különböző egyensúlyi magasságot ér el. Az 1. ábra jól szemlélteti, milyen nagy jelentősége van a folyadékok viselkedésére a nedvesítési szögnek.

1. ábra. Folyadék infiltrálódása nem nedvesítő (a) és nedvesítő kapillárisba (b)

Ha a rendszer az 1. ábrán egyensúlyban van, akkor felírhatjuk a következő összefüggést:

$$F_g + F_0 + F_c = 0$$

$$F_g + F_0 + F_c = 0$$

(1)

ahol F_g , F_o , F_c : a gravitációs, külső nyomásból eredő és a kapilláris erő. Az infiltráció iránya függőlegesen fölfelé mutat. A gravitáció a folyamat ellen hat, a másik két erő hatása a körülményektől függ.

Gravitációs erő

A gravitációs erő egyszerűen számolható, miszerint a folyadék tömegét szorozzuk a gravitációs gyorsulással (g). A kifejezés negatív előjelű, mert a folyamat ellen hat (R : kapilláris sugara; h : folyadék magassága; ρ : folyadék sűrűsége).

$$F_g = -R^2 \pi \cdot h \cdot \rho \cdot g \quad (2)$$

Külső nyomásból eredő erő

Mint tudjuk, a nyomás (p_0) felületen hat:

$$F_o = p_0 \cdot R^2 \pi \quad (3)$$

Kapilláris erő

A kapilláris erő a határfelületi energiákból származtatható a szilárd/folyadék/gáz határfelületen. Az erő az összes határfelületi erőből (G_c) fejezhető ki [A_{lg} , A_{sl} , A_{sg} : érintkező felületek nagysága (l:folyadék; g:gáz; s:szilárd); σ_{lg} , σ_{sl} , σ_{sg} : felületi energiák; Θ : nedvesítési szög]:

$$F_c = -\frac{dG}{dh} \quad \text{és} \quad G = \sigma_{lg} \cdot A_{lg} + \sigma_{sl} \cdot A_{sl} + A_{sg} \cdot \sigma_{sg} \quad (4)$$

Deriválás és behelyettesítések után kapjuk:

$$F_c = \sigma_{lg} \left(\frac{dA_{sl}}{dh} \cos \Theta - \frac{dA_{lg}}{dh} \right) \quad (5)$$

A kapilláris modellre jellemző geometria behelyettesítésével:

$$F_c = 2R\pi \cdot \sigma_{lg} \cdot \cos \Theta \quad (6)$$

Az Egy. 2,3,6 -ot behelyettesítve Egy. 1-be, az egyensúlyi állapotra jellemző összefüggés:

$$2R\pi \cdot \sigma \cdot \cos \Theta + R^2 \pi \cdot (p_0 - h \cdot \rho \cdot g) = 0 \quad (7)$$

Ha nem alkalmazunk külső extra nyomást ($p_0 = 0$), az infiltráció beindulása kizárólag a kapilláris erőktől függ, mert a folyamat elején a gravitációs tagban szereplő h értéke kicsi, ezért elhanyagolható. A kapilláris erő csak akkor pozitív, ha $\cos \Theta > 0$. Ezen okból definiálhatjuk a küszöb nedvesítési szöget.

Ha az adott rendszerben a nedvesítési szög ennél az értéknél kisebb, beindul a spontán infiltráció. A kapilláris modellben ez: $\Theta_{th} = 90^\circ$.

Ha külső nyomást is figyelembe vesszük, akkor definiálhatjuk a küszöbnyomást. Ha a külső nyomás ennél az értéknél nagyobb, spontán beindul az infiltráció. Értékét meghatározhatjuk az Egy. 7-ből, ahol $h=0$:

$$p_{th}^{cap} = -\frac{2}{R} \cdot \sigma \cdot \cos \Theta \tag{8}$$

Ha az aktuális nedvesítési szög kisebb, mint a küszöb nedvesítési szög, a küszöbnyomás értéke negatív lesz. Ha meg kívánjuk akadályozni az infiltrációt, akkor legalább ekkora ellennyomást kell alkalmaznunk a kapilláris csőben.

Ha az infiltráció beindult (mert $\Theta < \Theta_{th}$, vagy $p_o > p_{th}$), akkor addig folytatódik, amíg a folyadék el nem éri az egyensúlyi magasságot. Ezt kifejezhetjük az Egy. 7 és Egy. 8-ból:

$$h = \frac{1}{R \cdot \rho \cdot g} \tag{9}$$

Amint látható, az egyensúlyi magasság csak a kapilláris sugarától, a folyadék sűrűségétől és a gravitációtól függ.

A CPES modell

A CPES (closely packed, equal spheres) struktúra (2.ábra) megegyezik az FCC kristályszerkezettel. Ez a szerkezet már lényegesebben jobban közelíti meg a valós anyagok felépítését, ezáltal pontosabban lehet leírni a valóságos folyamatokat, mint például öntészet, öntözés, törölőkendők. Ezen leírás egy továbbfejlesztett változata egy korábbiak [1]. A szerkezet leírásához választottunk egy térfogategységet. Ez egy hatszög alapú hasáb, ahol a hatszög 2 párhuzamos oldala közti távolság $2R$ (ahol R a gömbök sugara - lásd 2.ábra).

2. ábra. A CPES struktúra a penetráció magasságának (h) függvényében és a térfogategység keresztmetszete (vastag vonal)

Két fontos paraméter meghatározására volt szükség a további számításokhoz. Az első a síkbeli porozitás (ϵ_s), a második az egységnyi területre eső vonalhossz, amelyen mindhárom fázis érintkezik

egymással (ϵ_l). Mindkét paramétert az infiltráció magasságának (h) a függvényében ábrázoltuk (lásd 3. ábra)

3. ábra. Síkbeli porozitás (3.A. ábra) és az egységnyi területre eső vonalhossz (3.B. ábra) az infiltráció magasságának és a gömbök sugarának arányában

Gravitációs erő

A gravitációs erő hasonlóan írható fel, mint a kapilláris modell esetében, csak módosítottuk a térfogati porozitást ($\epsilon \approx 0.26$):

$$F_g = -A \cdot h \cdot \epsilon \cdot \rho \cdot g \tag{10}$$

Külső nyomásból eredő erő

A nyomás mindig az aktuális folyadék/gáz határfelületen hat, ezért módosul az Egy. 3. a következő módon:

$$F_0 = p_0 \cdot A \cdot \epsilon_s \tag{11}$$

Kapilláris erő

Behelyettesítve az aktuális geometriai jellemzőket Egy. 5-be, a következőt kapjuk az $0 < h < 1,63R$ intervallumon (lásd még [2]):

$$F_c = 2R\pi\sigma_{lg} \left(\cos \Theta + 1 - \frac{h}{R} \right) \tag{12}$$

Egy. 10-12-t behelyettesítve Egy. 1-be:

$$2R\pi\sigma_{lg}\left(\cos\Theta+1-\frac{h}{R}\right)+p_0A\varepsilon_s-Ah\varepsilon pg=0 \quad (13)$$

Az Egy. 13-ból kifejezve az alkalmazott nyomást $h=0$ esetben, vagyis a folyamat beindulásakor:

$$p=\frac{\pi}{\sqrt{3}}\cdot\frac{\sigma_{lg}}{R\cdot\varepsilon_s}\left(\frac{h}{R}-1-\cos\Theta\right) \quad (14)$$

Ha az alkalmazott külső nyomás (P_0) nagyobb, mint az Egy. 14-ből kifejezett (P), a folyadék keresztül tud haladni a kritikus h/R magasságban lévő keresztmetszeten. Ezen okokból kifolyólag nevezhetjük a P -t lokális küszöbnyomásnak, amit a 4. ábra szemléltet különböző nedvesítési szögek esetében, h/R függvényében. Mint látható, a küszöbnyomást leíró függvény periodikus

4. ábra. Lokális küszöbnyomás az infiltráció magasságának (h/R) függvényében, különböző nedvesítési szögek esetében

5. ábra- Küszöbnyomás értéke a nedvesítési szög függvényében

Látható, hogy a 4. ábrán minden görbének van egy maximuma. Ez lesz a rendszerre jellemző küszöbnyomás, aminek a nedvesítési szögtől (Θ) való függését mutatja az 5. ábra. Ahol, a küszöbnyomás értéke negatívba fordul, ott lesz a küszöb nedvesítési szög. Ez az a Θ érték, aminél ha kisebb a nedvesítési szög, akkor spontán beindul az infiltráció.

Az Egy. 13 és az 5. ábra felhasználásával kifejezhető az infiltráció egyensúlyi magassága, az alkalmazott külső nyomás függvényében, különböző nedvesítési szögeknél (6. ábra). Észrevehető, hogy az egyenesek meredeksége változik a nedvesítési szögtől függően.

6. ábra. Egyensúlyi infiltrációs magasság a CPES modellnél ($\sigma = 1 \text{ J/m}^2$, $\rho = 10^4 \text{ kg/m}^3$, $R = 10^{-4} \text{ m}$)

Összegzés

Ezen tanulmányban a CPES (closely packed, equal spheres) modellben meghatározható paramétereket vizsgáltuk: a küszöbnyomást, a küszöb nedvesítési szöget és az egyensúlyi folyadékmagasságot.

Mindhárom paraméter lényegesen eltér a hagyományos, kapilláris modellnél tapasztalttól. A jövőben tervezzük a földi kísérletek megismétlését növelt, vagy csökkentett gravitációs térben. Ezzel kívánjuk ellenőrizni az elméleti számításaink helyességét.

Köszönetnyilvánítás

A szerzők ezúton szeretnének külön köszönetet nyilvánítani a Magyar Űrkutatási Hivatalnak, akik anyagi támogatásban részesítették és részesítik ezt a projektet.

Referenciák

[1] G. Kaptay, T. Matsushita, K. Mukai: to be published in Proc. of IAP 2 conference
[2] G.Kaptay: Materials Science Forum Vols. 215-216 (1996) 459-466.

Név	Bárczy Tamás	Dr. Kaptay György
Beosztás	PhD hallgató	tanszékvezető, egyetemi tanár
Munkahely	Miskolci Egyetem, Fizikai Kémia Tanszék	
E-mail	tamas.barczy@uni-miskolc.hu	kaptay@hotmail.com