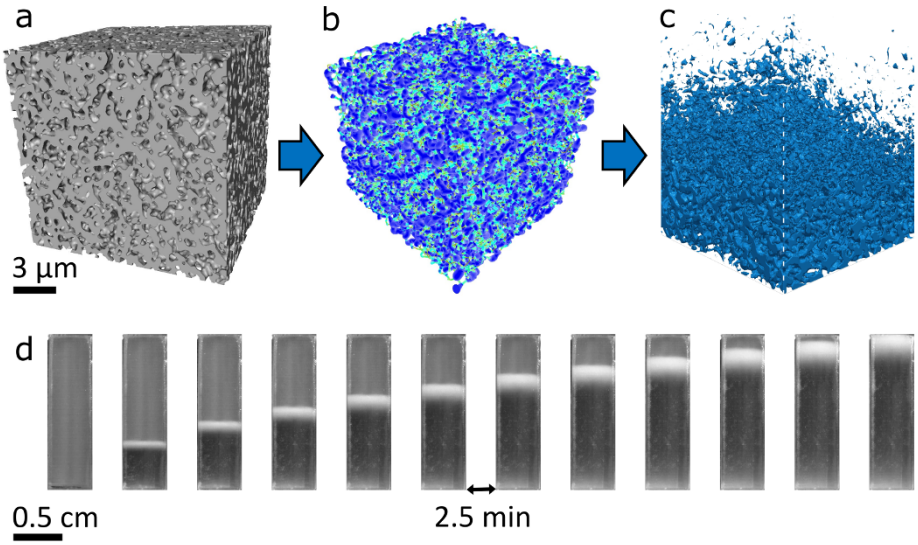
CAPILLARY RISE OF WATER IN NANOPOROUS GLASS AS REVEALED BY X-RAY TOMOGRAPHY-BASED LATTICE-BOLTZMANN SIMULATIONS

Guido Dittrich[1], *Juliana Martins de Souza e Silva*[2,3], *Cristine Santos de Oliveira*[3], *Sahar Bakshian*[4], *Andriy V. Kityk*[5], *Martin Steinhart*[6], *Dirk Enke*[7], *Ralf Wehrspohn*[2], *Nima Shokri*[8], *and Patrick Huber*[1]

[1] Hamburg University of Technology and Deutsches Elektronen-Synchrotron DESY
[2] Institute of Physics, Martin Luther University of Halle-Wittenberg
[3] Fraunhofer Institute for Microstructure of Materials and Systems IMWS, Halle, Germany
[4] Bureau of Economic Geology, Jackson School of Geosciences, The University of Texas at Austin
[5] Faculty of Electrical Engineering, Czestochowa University of Technology
[6] Institute of Chemistry of New Materials, Osnabrück University
[7] Institute of Chemical Reaction Technology, Leipzig University
[8] Institute of Geo-Hydroinformatics, Hamburg University of Technology



Imbibition in a nanoporous solid is governed by a complex interplay of the liquid's viscosity, the liquid-solid interaction and the geometry of the porous medium. Here a tomography of a controlled pore glass (Vycor, CPG) provides the base for Lattice-Boltzmann computer simulations (L-B) of this process from the single-pore up to the Darcy scale. (a) CPG with 400 nm-sized pores reconstructed from X-ray tomography. (b) Representation of the empty pore space. The color shades indicate the pore size distribution. (c) L-B capillary-rise simulation snapshot based on the tomography[1]. (d) Photographic snapshots during water imbibition into 4 nm-CPG[2, 3]. The imbibition is characterized by a Lucas-Washburn square-root-of-time front advancement along with a front broadening that follows in agreement with the L-B simulations also a square-root-of-time dynamics, see white light scattering front[3]. Note that the X-ray tomography is 100 times scaled down to represent the 4 nm-CPG in the simulation, as justified by the scale invariant spinodal demixing-based pore formation in CPGs.

1. Bakhshian S. *et al.* (2020). *Geophys. Res. Lett.*, 47(14).
2. Gruener S. *et al.* (2009). *Phys. Rev. E*, 79(6).
3. Gruener S. *et al.* (2012). *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.*, 109(26):10245.

La imbibición en un sólido nanoporoso es gobernada por una compleja interacción entre la viscosidad del líquido, la interacción líquido-sólido y la geometría del medio poroso. Aquí, la tomografía de un vidrio con tamaño de poro controlado (Vycor, CPG por sus siglas en inglés) proporciona la base para simulaciones computacionales de Lattice-Boltzmann (L-B) de este proceso desde un único poro hasta la escala Darcy. (a) CPG con poros del tamaño de 400 nm reconstruidos de una tomografía de rayos X. (b) Representación del espacio poroso hueco. Las sombras de colores indican la distribución de los tamaños de poro. (c) Visualización de la simulación de L-B del ascenso capilar según la tomografía[1]. (d) Imagen fotográfica durante la imbibición del agua en CPG de 4nm[2, 3]. La imbibición está caracterizada por un desplazamiento del frente tipo raíz cuadrada del tiempo de Lucas-Washburn junto con un ensanchamiento del frente que sigue de acuerdo con las simulaciones de L-B, las cuales también siguen la dinámica de la raíz cuadrada del tiempo, ver dispersión del frente de luz blanca[3]. Obsérvese que la tomografía de rayos X se ha reducido 100 veces para representar el CPG de 4 nm en la simulación, tal y como se justifica por la formación de poros en CPG basados en la separación espinodal invariante en escala.

Contact: Guido Dittrich <guido.dittrich@tuhh.de>

E. F. Médici and A. D. Otero (eds.), *Album of Porous Media*,
https://doi.org/10.1007/978-3-031-23800-0_35