

UNIVERSIDAD DE CONCEPCIÓN
Facultad de Ingeniería
Departamento de Ingeniería Metalúrgica

Profesores Patrocinantes:
Fernando Parada Luna
Dr. Oscar Jerez Riveros

**ESTUDIO EXPERIMENTAL DE LAS VARIABLES HIDRODINÁMICAS
QUE AFECTAN LA MOJABILIDAD E INFILTRACIÓN EN MINERALES
OXIDADOS, DISTRITO NORTE CODELCO**

PABLO EMILIO GARRIDO MUÑOZ

Informe de Memoria de Título
para optar al Título de

Ingeniero Civil Metalúrgico

Febrero 2024

*Esta memoria de título está dedicada con cariño
a mi familia y amigos, presentes y ausentes, que
con su amor y apoyo incondicional,
iluminaron mi camino académico.
En especial dedicada a
Luis Andrés Taucare Oliveira (Requiescat in Pace).*

Agradecimientos

Agradecer enormemente en primer lugar a mi familia, en especial a mis Padres, Luis Garrido y Ana Muñoz, por ser mi ejemplo de superación de cada día y así lograr todas mis metas, por enseñarme que siempre se puede, poniéndole todo el esfuerzo y ganas posible sin importar de donde uno venga, gracias por su esfuerzo que me pusieron para ser una persona comprometida y responsable con los desafíos que presenta en la vida. Espero que se sientan sumamente orgulloso de tener un hijo profesional y que todo el tiempo invertido, dé los resultados correspondientes. A mi hermano Marcelo, por ser la persona que siempre está ahí, te mando todo mi ánimo, en tu desarrollo profesional y ojalas ser tu ejemplo a seguir. De igual manera, agradecer a mi abu, tíos y tías, primos y primas, por todos esos ánimos que alguna vez me dieron.

A mis queridos amigos de toda la vida, Eduardo Bravo, Álvaro “Alva” Contreras, Fabián “Fabi” Contreras, Cristian “Wandy” Gómez, Elías “Cheto” Cid y Eric “Veneno” Lagos, y a sus respectivas familias que son como mi segunda familia, por todo su apoyo, por brindarme el ánimo necesario en los momentos difíciles y por todos esos momentos inolvidables que hemos tenido alguna vez y que seguiremos teniendo.

A mis compañeros de universidad Víctor “Vitoco” Pavez, Julio Plaza de los Reyes, Pedro Baltierra, Pablo “Peña” Peñalozza y Fernando “Zorro” Ortiz, gracias por compartir conmigo este camino, por sus consejos y por creer en mí. Les deseo el mayor de los éxitos en conseguir sus metas personales que se propongan.

A mi primo Gustavo Garrido y su esposa Cinthia Marín, así como a toda su familia ya que a pesar de no conocerme me recibieron y adoptaron en mi paso por Calama.

Además, extendiendo mi profundo agradecimiento a todos los profesores que me brindaron la invaluable oportunidad de colaborar con ellos como ayudante en sus asignaturas, experiencia crucial para mi formación.

A Fernando Parada y Oscar Jerez, mis profesores guías, les dedico un reconocimiento especial por su flexibilidad y las perspicaces ideas que aportaron al desarrollo de esta memoria de título.

Mi reconocimiento también se extiende a los técnicos del DIMET, DIQ y del GEA. Cada grano de su colaboración, por más pequeño que parezca, ha sido esencial para los resultados obtenidos. Asimismo, mi más sincero agradecimiento a la Dirección de Planificación del Distrito Norte de CODELCO por confiar en mi capacidad y permitirme contribuir con el desarrollo de este estudio.

Finalmente, quiero agradecer a todos los científicos e ingenieros, del pasado y del presente, que han hecho de la ciencia y la ingeniería campos tan fascinantes para admirar, aprender, enseñar y compartir. Y a todas las personas que, de una u otra forma, han intercambiado palabras conmigo y me han demostrado que uno puede ser una buena persona, honrada, y lograr el éxito, les dedico mi agradecimiento más sincero.

Resumen

Esta investigación analiza como las variables hidrodinámicas microscópicas, tales como ángulo de contacto, tensión superficial y distribución del tamaño de poro, influyen en la mojabilidad e infiltración de soluciones en muestras de minerales oxidados pertenecientes a dos divisiones de CODELCO: Gabriela Mistral (DGM) y Radomiro Tomic (DRT). La hipótesis sugiere que la condición de saturación a la que está sometida una partícula mineral afecta su capacidad para ser humedecida, y que la presencia de aire atrapado en los poros obstaculiza la infiltración de la solución, reduciendo así la eficiencia en la recuperación del metal en el proceso de lixiviación en pilas. El objetivo es evaluar cuantitativamente la mojabilidad e infiltración de una solución ácida de aglomeración con 14% de ácido sulfúrico mediante experimentos y simulaciones computacionales. Se plantea que existe una correlación entre variables como ángulo de contacto, distribución de tamaño de poros y la dinámica de fluidos.

Se realizó un análisis detallado de los fenómenos hidrodinámicos considerando las mencionadas variables en la mojabilidad e infiltración en los minerales. Un programa experimental fue implementado para explorar estos aspectos bajo diferentes condiciones de saturación en muestras minerales de ambas divisiones. Además, se llevaron a cabo simulaciones CFD en OpenFOAM para examinar cómo la variación de la tensión superficial afecta la dinámica de fluidos de la solución ácida en un modelo de mineral ideal con tamaño de poro uniforme.

El estudio demostró cuantitativamente una correlación entre el ángulo de contacto promedio (28° en la muestra del mineral de DGM y 40° en la muestra del mineral de DRT), distribución de tamaños de poros y la velocidad de infiltración. Los experimentos revelaron que, bajo condiciones no saturadas, la microporosidad facilita mayores alturas por fuerzas capilares (24.3 mm promedio en las muestras del mineral de DGM versus 21.5 mm promedio en las muestras del mineral de DRT). En condiciones de saturación, la presencia de aire dificulta la infiltración en poros pequeños (8.0 mm en la muestra del mineral de DGM versus 12.0 mm en la muestra del mineral de DRT). Las simulaciones CFD confirmaron que, al aumentar la tensión superficial se reduce la velocidad de infiltración del líquido. Además, evidencian que, en condiciones de saturación, la compresión del aire atrapado se intensifica conforme decrece el tamaño de poro, oponiéndose al avance del líquido. Así, se corrobora que las condiciones de saturación influyen significativamente en la dinámica de infiltración.

Los análisis mineralógico mediante DRX y la caracterización BET de la porosidad revelaron diferencias microestructurales entre las muestras de los minerales de DGM y DRT que explican su distinto comportamiento hidrodinámico. La mayor área específica y desarrollo de microporosidad en la muestra de DGM intensifican las fuerzas capilares, mejorando la capacidad de infiltración en condiciones saturadas. La incorporación de estos factores en los modelos hidrodinámicos permitirá optimizar el proceso de lixiviación en pilas al mejorar la predicción de la interacción mineral-solución. Este conocimiento sentará las bases para investigaciones futuras se enfoquen en mejorar la representación de la hidrodinámica de fluidos en medios poros y/o minerales.

Abstract

This research explores the influence of microscopic hydrodynamic variables, such as contact angle, surface tension, and pore size distribution, on the wettability and infiltration of solutions in oxidized mineral samples from two divisions of CODELCO: Gabriela Mistral (DGM) and Radomiro Tomic (DRT). The hypothesis posits that the saturation condition to which a mineral particle is subjected impacts its ability to be wetted, and that the presence of air trapped within the pores obstructs the solution's infiltration, thereby reducing the efficiency of metal recovery in the heap leaching process. The objective is to quantitatively evaluate the wettability and infiltration of an acidic agglomeration solution containing 14% sulfuric acid through both experimental and computational simulation approaches. It is proposed that there exists a correlation among variables such as contact angle, pore size distribution, and fluid dynamics.

A detailed analysis of hydrodynamic phenomena, considering the aforementioned variables in relation to mineral wettability and infiltration, was conducted. An experimental program was initiated to explore these aspects under varying saturation conditions in mineral samples from both divisions. In addition, Computational Fluid Dynamics (CFD) simulations in OpenFOAM were performed to examine how changes in surface tension affect the fluid dynamics of the acidic solution in an idealized mineral model with uniform pore size.

The study quantitatively demonstrated a correlation between the average contact angle (28° in the DGM mineral sample and 40° in the DRT mineral sample), pore size distribution, and infiltration rate. The experiments revealed that under unsaturated conditions, microporosity enables higher capillary-driven heights (24.3 mm average in the DGM mineral samples versus 21.5 mm average in the DRT mineral samples). In saturated conditions, the presence of air impedes infiltration into small pores (8.0 mm in the DGM sample versus 12.0 mm in the DRT sample). The CFD simulations confirmed that an increase in surface tension decreases the liquid's infiltration speed. Moreover, they indicated that under saturated conditions, the compression of trapped air intensifies as the pore size decreases, opposing the liquid's progression. Thus, it is corroborated that saturation conditions significantly influence infiltration dynamics.

Mineralogical analyses using XRD and BET porosity characterization revealed microstructural differences between the mineral samples from DGM and DRT, explaining their distinct hydrodynamic behavior. The increased specific surface area and development of microporosity in the DGM sample enhance capillary forces, improving infiltration capacity under saturated conditions. Integrating these factors into hydrodynamic models will optimize the heap leaching process by enhancing the prediction of mineral-solution interaction. This knowledge lays the groundwork for future research focused on improving the representation of fluid hydrodynamics in porous media and/or minerals.

Índice

CAPÍTULO 1. INTRODUCCIÓN	1
1.1. OBJETIVOS	2
1.1.1 <i>Objetivo general</i>	2
1.1.2 <i>Objetivo específicos</i>	2
CAPÍTULO 2. ANTECEDENTES.....	3
2.1. PROPIEDADES DE UN LÍQUIDO	3
2.1.1 <i>Densidad</i>	3
2.1.2 <i>Viscosidad</i>	3
2.1.3 <i>Tensión superficial</i>	4
2.2. FUNDAMENTOS DE MOJABILIDAD DE SUPERFICIES	5
2.3. FUNDAMENTOS DE INFILTRACIÓN EN MINERALES	11
2.4. DINÁMICA DE FLUIDO COMPUTACIONAL (CFD).....	14
2.4.1 <i>OpenFOAM</i>	15
2.4.2 <i>Ecuaciones de Navier-Stokes</i>	15
2.4.3 <i>InterFOAM</i>	16
CAPÍTULO 3. METODOLOGÍA EXPERIMENTAL.....	18
3.1. CARACTERIZACIÓN QUÍMICA Y MINERALÓGICA	18
3.2. CARACTERIZACIÓN DE LA POROSIDAD	19
3.3. MEDICIÓN DEL ÁNGULO DE CONTACTO (GOTA SÉSIL)	19
3.3.1 <i>Descripción del montaje experimental</i>	20
3.3.2 <i>Preparación de las muestras</i>	21
3.3.3 <i>Configuración experimental</i>	22
3.3.4 <i>Procedimiento experimental</i>	23
3.3.5 <i>Procesamiento de imágenes</i>	24
3.3.6 <i>Validación experimental</i>	25
3.4. MEDICIÓN DEL ÁNGULO DE CONTACTO (GONIÓMETRO).....	27
3.4.1 <i>Descripción experimental</i>	27
3.4.2 <i>Configuración experimental</i>	27
3.4.3 <i>Procedimiento experimental</i>	28
3.5. ENSAYOS DE INFILTRACIÓN	28
3.5.1 <i>Preparación de las muestras</i>	28
3.5.2 <i>Configuración experimental</i>	29
3.5.3 <i>Procedimiento experimental</i>	30
3.5.4 <i>Procesamiento de imágenes</i>	30
CAPÍTULO 4. METODOLOGÍA NUMÉRICA.....	32
4.1. SIMULACIONES POR REALIZAR	32
4.2. GEOMETRÍA DEL PROBLEMA	33
4.3. MALLA NUMÉRICA	34
4.4. CONDICIONES DE BORDES	34
4.4.1 <i>Condición de borde de velocidad</i>	34
4.4.2 <i>Condición de borde de presión</i>	35
4.4.3 <i>Condición de borde de la interfase solución-aire</i>	35
4.4.4 <i>Condición inicial</i>	35
4.4.5 <i>Discretización temporal</i>	36
CAPÍTULO 5. RESULTADOS Y DISCUSIONES.....	37
5.1. CARACTERIZACIÓN QUÍMICA Y MINERALÓGICA	37
5.1.1 <i>Muestra del mineral de División Gabriela Mistral</i>	37
5.1.2 <i>Muestra del mineral de División Radomiro Tomić</i>	38
5.2. CARACTERIZACIÓN DE LA POROSIDAD	41
5.3. MEDICIÓN ÁNGULO DE CONTACTO.....	45

5.3.1	<i>Gota sésil</i>	45
5.3.2	<i>Goniómetro</i>	51
5.3.3	<i>Comparación entre los métodos de medición de ángulo de contacto</i>	51
5.4.	ENSAYOS DE INFILTRACIÓN	52
5.4.1	<i>Condición no saturada</i>	52
5.4.2	<i>Condición saturada</i>	56
5.5.	SIMULACIONES	60
CAPÍTULO 6. CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES		62
6.1.	CONCLUSIONES	62
6.2.	RECOMENDACIONES	63
BIBLIOGRAFÍA		64
ANEXO A. RESULTADOS FRX Y DRX		67
ANEXO B. MEDICIÓN DE ÁNGULOS DE CONTACTO		68
B.1.	MUESTRA DEL MINERAL DE DIVISIÓN GABRIELA MISTRAL	68
B.2.	MUESTRA DEL MINERAL DE DIVISIÓN RADOMIRO TOMIC	78
ANEXO C. ENSAYOS DE INFILTRACIÓN		88
C.1.	MUESTRAS DEL MINERAL DE DIVISIÓN GABRIELA MISTRAL	88
C.2.	MUESTRAS DEL MINERAL DE DIVISIÓN RADOMIRO TOMIC	91
ANEXO D. MEDICIÓN DE PROPIEDADES DEL LÍQUIDO		94
D.1.	TENSIÓN SUPERFICIAL	94
D.2.	DENSIDAD	94
D.3.	VISCOSIDAD	94
ANEXO E. FICHEROS DEL MODELO EN OPENFOAM		96
E.1.	FICHEROS DEL MODELO EN OPENFOAM	96
E.1.1	<i>Condiciones de borde de velocidad</i>	96
E.1.2	<i>Condiciones de borde de presión</i>	97
E.1.3	<i>Condiciones de borde de la interfase</i>	97
E.2.	CARPETA CONSTANT	98
E.2.1	<i>Parámetros de flujo del modelo</i>	98
E.3.	CARPETA SYSTEM	98
E.3.1	<i>setFields</i>	98
ANEXO F. RESULTADOS SIMULACIONES		100
F.1.	CONDICIÓN NO SATURADA	100
F.2.	CONDICIÓN SATURADA	101

Índice de Tablas

Tabla 3.1. Mediciones del ángulo de contacto entre el teflón y agua destilada a los 300 segundos.....	26
Tabla 4.1. Parámetros de las simulaciones a realizar para las 2 condiciones.	33
Tabla 5.1. Composición química obtenido mediante FRX, energía superficial de elementos y su contribución a la hidrofiliidad en las muestras de los minerales de DGM y DRT.	40
Tabla 5.2. Resultados del análisis BET en las muestras de los minerales de DGM y DRT.	45
Tabla 5.3. Mediciones del ángulo de contacto entre la muestra del mineral de DGM y la solución ácida de aglomeración mediante técnica de la gota sésil.	47
Tabla 5.4. Mediciones del ángulo de contacto entre la muestra del mineral de DRT y la solución ácida de aglomeración mediante técnica de la gota sésil.	49
Tabla 5.5. Mediciones del ángulo de contacto entre las muestras de los minerales de DGM y DRT y la solución ácida de aglomeración mediante goniómetro.	51
Tabla 5.6. Mediciones del volumen infiltrado de la solución ácida de aglomeración en las muestras de los minerales de DGM y DRT.	55
Tabla A.1. Composición química obtenidos mediante FRX en las muestras de los minerales de DGM y DRT.	67
Tabla A.2. Mineralogía semicuantificación automática (S-Q) en las muestras de los minerales de DGM y DRT.	67
Tabla D.1. Mediciones de la tensión superficial de los líquidos utilizando un tensiómetro de Anillo de Du Noüy Kruss K6.....	94

Índice de Figuras

Figura 2.1. Esquema de las moléculas que actúan en la tensión superficial.	4
Figura 2.2. Esquema del modelo de Young para el ángulo de contacto, que muestra el equilibrio entre las energías interfaciales sólido-líquido (σ_{sl}), líquido-vapor (σ_{lv}) y sólido-vapor (σ_{sv}), definido por las fuerzas de adhesión y cohesión representadas por los trabajos de adherencia (W_a) y cohesión (W_c).	7
Figura 2.3. Esquema de las distintas mojabilidades entre un líquido y sólido según el ángulo de contacto.	8
Figura 2.4. Esquema de los modelos de mojabilidad para ángulos menores y mayores a 90°	10
Figura 2.5. Esquema de la interfase curva líquido-vapor de acuerdo con la ley de Young-Laplace.	11
Figura 2.6. Esquema del equilibrio de un líquido en un capilar para diferentes ángulos de contacto de acuerdo con la ley de Jurin.	12
Figura 2.7. Esquema del modelo propuesto por Washburn para determinar la velocidad de infiltración de un líquido en un conjunto de capilares.	13
Figura 3.1. Set experimental utilizado para determinar ángulo de contacto mediante la técnica de la gota sésil.	21
Figura 3.2. Muestras utilizadas en mediciones de ángulo de contacto.	22
Figura 3.3. Interfaz de DropSnake y parámetros utilizados en el procesamiento de imágenes.	25
Figura 3.4. Imágenes del ángulo de contacto entre el teflón y agua destilada en los 10 ensayos a los 300 segundos.	26
Figura 3.5. Goniómetro Ramé-Hart utilizado en las mediciones de ángulo de contacto.	27
Figura 3.6. Configuración experimental del ensayo de infiltración.	29
Figura 3.7. Bandeja con las 16 muestras enumeradas en el ensayo de infiltración condición saturada.	31
Figura 4.1 Dominio computacional y condiciones de frontera. Vista frontal.	33
Figura 4.2. Malla numérica utilizada.	34
Figura 4.3. Condición inicial del modelo.	36
Figura 5.1. Difractograma obtenido mediante DRX en la muestra del mineral de DGM.	38
Figura 5.2. Difractograma obtenido mediante DRX en la muestra del mineral de DRT.	39
Figura 5.3. Determinación del volumen de microporos, método HK.	43
Figura 5.4. Determinación del volumen de mesoporos, método DFT.	43
Figura 5.5. Determinación del volumen de poros, método BJH.	44
Figura 5.6. Imágenes del ángulo de contacto entre la muestra del mineral de DGM y la solución ácida de aglomeración en las 10 mediciones a los 300 segundos.	46
Figura 5.7. Evolución de la gota de líquido sobre la muestra del mineral de DGM.	48
Figura 5.8. Imágenes del ángulo de contacto entre la muestra del mineral de DRT y la solución ácida de aglomeración en las 10 mediciones a los 300 segundos.	49
Figura 5.9. Evolución de la gota de líquido sobre la muestra del mineral de DRT.	50
Figura 5.10. Comparación de los métodos para determinar ángulo de contacto en las muestras de los minerales de DGM y DRT.	52
Figura 5.11. Curva promedio de las muestras del mineral de DGM en una condición no saturada.	53
Figura 5.12. Curva promedio de las muestras del mineral de DRT en una condición no saturada.	54
Figura 5.13. Infiltración del líquido en las muestras del mineral de DGM en una condición saturada.	56
Figura 5.14. Secuencia de la infiltración del líquido en los poros de las muestras del mineral de DGM en una condición saturada.	57
Figura 5.15. Infiltración del líquido en las muestras del mineral de DRT en una condición saturada.	58
Figura 5.16. Secuencia de la infiltración del líquido en los poros de las muestras del mineral de DRT en una condición saturada.	58
Figura 5.17. Infiltración de la solución ácida de aglomeración en los minerales DGM y DRT bajo condiciones de saturación y no saturación.	60
Figura 5.18. Variación del flujo y presión cuando el ángulo de contacto es 27° al finalizar la simulación.	61
Figura B.1. Evolución del ángulo de contacto medido en la muestra del mineral de DGM durante la primera medición.	68
Figura B.2. Evolución del ángulo de contacto medido en la muestra del mineral de DGM durante la segunda medición.	69
Figura B.3. Evolución del ángulo de contacto medido en la muestra del mineral de DGM durante la tercera medición.	70
Figura B.4. Evolución del ángulo de contacto medido en la muestra del mineral de DGM durante la cuarta medición.	71
Figura B.5. Evolución del ángulo de contacto medido en la muestra del mineral de DGM durante la quinta medición.	72
Figura B.6. Evolución del ángulo de contacto medido en la muestra del mineral de DGM durante la sexta medición.	73
Figura B.7. Evolución del ángulo de contacto medido en la muestra del mineral de DGM durante la séptima medición.	74
Figura B.8. Evolución del ángulo de contacto medido en la muestra del mineral de DGM durante la octava medición.	75

Figura B.9. Evolución del ángulo de contacto medido en la muestra del mineral de DGM durante la novena medición.	76
Figura B.10. Evolución del ángulo de contacto medido en la muestra del mineral de DGM durante la décima medición.	77
Figura B.11. Evolución del ángulo de contacto medido en la muestra del mineral de DRT durante la primera medición.	78
Figura B.12. Evolución del ángulo de contacto medido en la muestra del mineral de DRT durante la segunda medición.	79
Figura B.13. Evolución del ángulo de contacto medido en la muestra del mineral de DRT durante la tercera medición.	80
Figura B.14. Evolución del ángulo de contacto medido en la muestra del mineral de DRT durante la cuarta medición.	81
Figura B.15. Evolución del ángulo de contacto medido en la muestra del mineral de DRT durante la quinta medición.	82
Figura B.16. Evolución del ángulo de contacto medido en la muestra del mineral de DRT durante la sexta medición.	83
Figura B.17. Evolución del ángulo de contacto medido en la muestra del mineral de DRT durante la séptima medición.	84
Figura B.18. Evolución del ángulo de contacto medido en la muestra del mineral de DRT durante la octava medición.	85
Figura B.19. Evolución del ángulo de contacto medido en la muestra del mineral de DRT durante la novena medición.	86
Figura B.20. Evolución del ángulo de contacto medido en la muestra del mineral de DRT durante la décima medición.	87
Figura C.1. Evolución de la altura de infiltración de la solución ácida de aglomeración en la muestra del mineral de DGM a lo largo del tiempo en una condición no saturada.	90
Figura C.2. Evolución de la altura de infiltración de la solución ácida de aglomeración en las muestras del mineral de DRT a lo largo del tiempo en una condición no saturada.	93
Figura E.1. Estructura de carpetas y archivos del modelo poroso.	96

Nomenclatura

A	: área
ΔG	: cambio de energía libre de Gibbs
ΔP	: diferencia de presión
ε	: factor de rugosidad
f_1	: fracción de área de la especie 1
f_2	: fracción de área de la especie 2
g	: aceleración de gravedad
g_x, g_y, g_z	: componentes de la aceleración de gravedad en las direcciones x, y, z , respectivamente
h	: altura que asciende el líquido en el capilar
L	: longitud del poro
M	: masa
μ	: viscosidad dinámica
ν	: viscosidad cinemática
p	: presión del fluido
P_{atm}	: presión atmosférica
P_c	: presión capilar
P_h	: presión hidrostática
Q	: caudal volumétrico
R	: radio de la interfase curva
r	: radio del poro (o capilar)
ρ	: densidad del fluido
σ	: energía superficial
σ_{LV}	: energía interfacial entre el líquido y el vapor
σ_{SV}	: energía interfacial entre el sólido y el vapor
σ_{SL}	: energía interfacial entre el sólido y el líquido
t	: tiempo
τ	: fuerza de corte
$\dot{\gamma}$: tasa de deformación
∂	: derivada parcial
u, v, w	: componentes de la velocidad del fluido en las direcciones x, y, z , respectivamente
V	: volumen
W_a	: trabajo de adhesión
W_c	: trabajo de cohesión
x, y, z	: coordenadas espaciales
θ	: ángulo de contacto
θ^*	: ángulo de contacto aparente
ϕ_p	: fase porosa
λ	: tensión superficial del líquido

Abreviaturas

ACD	: Ángulo de Contacto Derecho
ACI	: Ángulo de Contacto Izquierdo
ADM	: Ángulo de Contacto Promedio
BET	: Brunauer–Emmett–Teller
BJH	: Barrett-Joyner-Halenda
CAD	: Diseño Asistido por Computadora
CFD	: Dinámica de Fluidos Computacional
CODELCO	: Corporación Nacional del Cobre de Chile
DFT	: Teoría de la Función de Densidad
DGM	: División Gabriela Mistral
DRX	: Difracción de Rayos X
DRT	: División Radomiro Tomic
FDM	: Método de Diferencias Finitas
FEM	: Método de Elementos Finitos
FRX	: Fluorescencia de Rayos X
FVM	: Método de Volumen Finito
HK	: Horvath-Kawazoe
MULES	: Multidimensional Universal Limiter for Explicit Solution
OpenFOAM	: Open Field Operation and Manipulation
PTFE	: Politetrafluoroetileno
SI	: Sistema Internacional
VOF	: Volume of Fluid

Capítulo 1. Introducción

La hidrometalurgia del cobre implica tres operaciones unitarias clave: lixiviación, extracción por solventes y electroobtención. A diferencia de la pirometalurgia, que emplea altas temperaturas, estas operaciones ocurren a temperatura ambiente y se basan en el uso de soluciones acuosas [1].

La lixiviación en pilas, técnica ampliamente utilizada en la hidrometalurgia para la extracción selectiva de elementos valiosos, como el cobre [2], puede enfrentar diversos desafíos, tanto en la etapa de pretratamiento del mineral, como durante el proceso de lixiviación propiamente tal. Problemas de humectación pueden surgir desde por un curado ácido o una aglomeración inadecuadas, resultando en una distribución desigual de la humedad en la pila, y una baja permeabilidad del mineral, lo cual impide la penetración adecuada del agente lixivante, limitando así la disolución uniforme del metal de interés.

Tradicionalmente, se han abordado estos desafíos modelando variables macroscópicas del apilamiento, tales como la porosidad total, la granulometría de las partículas, la permeabilidad del lecho y la altura de la pila. Sin embargo, estos modelos hidrodinámicos, que incluyen estas variables, que se centran principalmente en el flujo entre partículas, solo logran optimizar parcialmente el transporte global de fluidos en la pila. Estos enfoques resultan insuficientes porque omiten la dinámica de fluidos a nivel de partícula, específicamente dentro de los poros del mineral.

En el Distrito Norte de CODELCO, los modelos actuales de lixiviación en pilas no incorporan algunas variables microscópicas críticas, como la tensión superficial, el ángulo de contacto y/o la distribución del tamaño de poros dentro de las partículas minerales. Esta omisión podría deberse a una falta de conocimiento detallado sobre cómo dichos parámetros microscópicos afectan directamente la eficacia de la lixiviación y la eficiencia en la recuperación de minerales. Específicamente, estos parámetros pueden influir en la dinámica de la solución lixivante a medida que percola a través del lecho mineral, afectando la tasa de disolución de los minerales de interés y la uniformidad de la extracción a lo largo de la pila. Además, también se puede deber a la complejidad de estos fenómenos, dados la interacción intrincada entre las partículas y la solución líquida, así como la compleja y heterogénea estructura porosa de los minerales, que presentan defectos en múltiples escalas como poros, cavidades, granos y fisuras.

Este estudio se enfoca en analizar la influencia de variables microscópicas específicas, tales como ángulo de contacto, tensión superficial y distribución del tamaño de poro en la mojabilidad e infiltración de partículas minerales. Además, evalúa el impacto de las condiciones de saturación, tanto en estados saturados como no saturados, sobre la capacidad del mineral a humectarse. Se investigará cómo la presencia de aire atrapado en los poros del mineral puede impedir la correcta infiltración de la solución y, en consecuencia, la humectación

efectiva del mineral.

La investigación tiene el potencial de permitir a CODELCO integrar análisis más detallados de porosidad y variables microscópicas en su conjunto de herramientas de caracterización habituales de minerales. Actualmente, estos factores no se están considerando de manera exhaustiva, la investigación podría revelar aspectos críticos que impactarían directamente en la eficiencia del proceso de recuperación de metales.

Para abordar este desafío, se realizó un análisis exhaustivo de los fenómenos hidrodinámicos y variables microscópicas implicadas en la humectación de minerales. Luego, se implementó un programa experimental de infiltración en diferentes minerales oxidados provenientes de dos divisiones distintas de CODELCO, los cuales fueron caracterizados detalladamente utilizando Fluorescencia de Rayos X (FRX), Difracción de Rayos X (DRX), y análisis Brunauer-Emmett-Teller (BET). Mediante un conjunto de pruebas simples y de bajo costo, se exploró cómo determinar la mojabilidad de un mineral. Además, se llevó a cabo simulaciones de dinámica de fluidos computacional (CFD) con el software OpenFOAM, para observar en detalle aspectos como el movimiento del fluido en el interior de los poros, los gradientes de presión y la influencia de parámetros microscópicos sobre la dinámica de infiltración en el mineral.

1.1. Objetivos

1.1.1 Objetivo general

Analizar las variables hidrodinámicas microscópicas que influyen en el proceso de humectación e infiltración de una solución ácida en minerales oxidados a través de experimentación y simulaciones CFD.

1.1.2 Objetivo específicos

- Realizar un análisis detallado de la hidrodinámica dentro de la partícula mineral, considerando las variables microscópicas ángulo de contacto, tensión superficial y distribución del tamaño de poros.
- Investigar cómo las condiciones de saturación y no saturación, afectan la infiltración de la solución ácida de aglomeración en el mineral.
- Desarrollar un programa experimental que permita explorar y cuantificar la influencia de las variables microscópicas y las condiciones de saturación en la mojabilidad e infiltración de la solución ácida en el mineral.
- Utilizar simulaciones en CFD con el software OpenFOAM para examinar la dinámica del flujo del fluido dentro de los poros del mineral, y determinar el impacto de la tensión superficial y ángulo de contacto en estas dinámicas.
- Proporcionar recomendaciones para optimizar la mojabilidad e infiltración de minerales, basándose en los hallazgos del estudio.

Capítulo 2. Antecedentes

2.1. Propiedades de un líquido

2.1.1 Densidad

La densidad (ρ) de un líquido cuantifica la masa (m) por unidad de volumen (V). Es una propiedad intensiva que depende de la naturaleza química del líquido y las condiciones termodinámicas, descrita por la ecuación (1) [3]:

$$\rho = m/V \quad (1)$$

Donde ρ es la densidad del líquido (kg/m^3), (m) la masa del líquido (kg) y V es el volumen del líquido (m^3). La densidad de un líquido puede determinarse utilizando un instrumento llamado picnómetro. Comprender la densidad es crucial en el estudio de la infiltración de minerales, ya que un líquido con mayor densidad puede infiltrarse más rápidamente debido a la fuerza gravitatoria que actúa sobre las moléculas de él. Es decir, la gravedad impulsa al líquido a través de los poros y fisuras del mineral. Este fenómeno puede ser especialmente relevante en escenarios donde la gravedad es un factor predominante [4].

2.1.2 Viscosidad

La viscosidad, una propiedad intensiva inherente a los líquidos, denota la resistencia interna que éstos presentan al flujo y la deformación bajo la aplicación de una fuerza de corte [5]. Se distingue entre la viscosidad dinámica (μ) y viscosidad cinemática (ν). La primera relaciona el esfuerzo cortante (τ) con la velocidad de deformación ($\dot{\gamma}$) según la ley de Newton:

$$\tau = \mu \dot{\gamma} \quad (2)$$

Donde τ es el esfuerzo cortante (P), μ es la viscosidad dinámica ($\text{Pa}\cdot\text{s}$) y $\dot{\gamma}$ es la velocidad de deformación (s^{-1}). Un líquido con mayor viscosidad dinámica ofrece más resistencia a deformarse cuando se le aplica un esfuerzo de cizallamiento.

La viscosidad cinemática relaciona viscosidad dinámica (μ) con la densidad del líquido (ρ), de acuerdo con la siguiente ecuación:

$$\nu = \frac{\mu}{\rho} \quad (3)$$

En el SI, la viscosidad cinemática se mide en (m^2/s) [6], reflejando la resistencia al flujo de un líquido considerando su densidad. Valores más altos implican mayor resistencia al movimiento.

El estudio de la viscosidad es fundamental para entender la mojabilidad de los minerales. Un líquido con una viscosidad elevada posee una mayor resistencia al flujo, lo que puede incidir en la rapidez con la que dicho

líquido se propaga o acumula en la superficie del mineral. En situaciones dinámicas, esto podría reflejarse en un mayor ángulo de contacto aparente, que es la medida observable del ángulo formado por el líquido en contacto con la superficie del mineral. Sin embargo, este ángulo no necesariamente indica la verdadera afinidad del líquido por la superficie, destacando la importancia de distinguir entre observaciones superficiales y las propiedades fundamentales de interacción entre el líquido y el mineral.

Adicionalmente, la viscosidad también puede influir en la velocidad con la que el líquido penetra en los poros y las grietas del mineral [7].

2.1.3 Tensión superficial

La tensión superficial se puede describir como la fuerza máxima por unidad de longitud que actúa a lo largo de la superficie de un líquido, que mantiene la integridad de la superficie sin que se rompa, y se mide en Newtons por metro (N/m) [8].

La tensión superficial es el resultado de las fuerzas intermoleculares que mantienen unidas a las moléculas en un líquido. Estas fuerzas pueden incluir enlaces de van der Waals, fuerzas electrostáticas o enlaces de hidrógeno, entre otras. Dentro del líquido, las moléculas están rodeadas por otras moléculas y experimentan fuerzas intermoleculares equilibradas en todas las direcciones. Sin embargo, en la superficie las moléculas sufren un desequilibrio de fuerzas intermoleculares al no tener moléculas por encima que las compensen. Esta dinámica genera un exceso de energía en la superficie del líquido, haciendo que las moléculas superficiales experimenten una atracción neta hacia el interior del líquido. Para minimizar esta energía, las moléculas de la superficie tienden a agruparse, creando una capa más ordenada y compacta en la interfase. Esta capa compacta actúa como una película elástica que tiende a minimizar la superficie de contacto (**Figura 2.1**) [2].

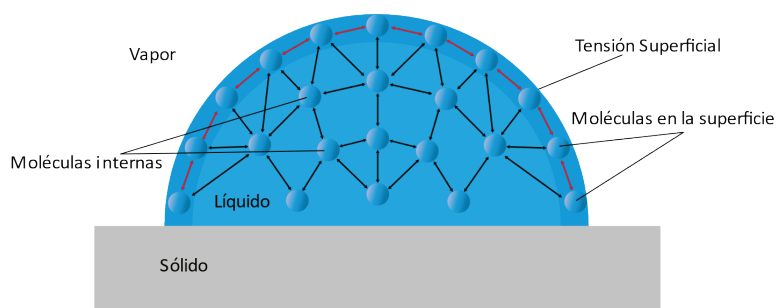


Figura 2.1. Esquema de las moléculas que actúan en la tensión superficial.

La tensión superficial puede verse afectada por varios factores, entre los que se incluyen:

1. Naturaleza del líquido: La tensión superficial depende de las propiedades químicas y moleculares del líquido, como la polaridad, la capacidad de formar enlaces de hidrógeno y el tamaño de las moléculas [9]. Los líquidos que tienen una alta polaridad y que pueden formar enlaces de hidrógeno entre sus

moléculas tienden a tener una tensión superficial más alta que los líquidos con menor polaridad y capacidad para formar enlaces de hidrógeno. Por ejemplo, el agua o el ácido sulfúrico son líquidos altamente polares que forman enlaces de hidrógeno y tiene una tensión superficial relativamente alta en comparación con líquidos menos polares [8].

2. Presencia de tensioactivos: Los tensioactivos, que poseen una estructura molecular única compuesta de partes hidrófobas e hidrófilas, tienen la capacidad de reducir significativamente la tensión superficial cuando se introducen en un sistema líquido. Lo consiguen formando una capa adsorbida en la interfase, lo que minimiza eficazmente la energía superficial. En este sistema, las moléculas de tensioactivo se disponen en la interfase líquido-aire, donde sus segmentos hidrófobos se orientan hacia el aire y sus segmentos hidrófilos hacia el agua. Esta disposición altera las interacciones intermoleculares en la superficie del líquido, lo que reduce la tensión superficial del sistema [8].
3. Temperatura: La tensión superficial generalmente disminuye con el aumento de la temperatura. Al aumentar la temperatura, las moléculas del líquido adquieren más energía cinética, incrementando la intensidad de su movimiento browniano. Esta mayor agitación térmica provoca un aumento en la separación promedio entre las moléculas, debilitando las fuerzas intermoleculares cohesivas y, en consecuencia, reduciendo la tensión superficial del líquido [8].
4. Concentración de solutos: La disolución de solutos en un líquido puede influir significativamente en la tensión superficial. El cambio en la tensión superficial puede ser un aumento o una disminución, dependiendo de las propiedades químicas específicas del soluto y del líquido [8]. Por ejemplo, cuando se añade ácido sulfúrico al agua, la tensión superficial de la solución resultante será menor que la del agua pura. Esta reducción se debe a una disminución de la polaridad, ya que el ácido sulfúrico es menos polar que el agua. Dado que la polaridad del agua contribuye sustancialmente a su elevada tensión superficial, la reducción de la polaridad de la mezcla disminuye en consecuencia su tensión superficial. Además, la presencia de iones hidronio en la mezcla, resultantes de la disociación completa del ácido sulfúrico, un ácido fuerte, en una solución acuosa, reduce aún más la tensión superficial. Estos iones atraen a las moléculas de agua, reduciendo su cohesión y, por tanto, la tensión superficial global [10].

2.2. Fundamentos de mojabilidad de superficies

La energía superficial es la energía adicional que poseen los sólidos y líquidos debido a las fuerzas desequilibradas en la superficie. Esta energía surge debido a que las moléculas en la superficie experimentan interacciones intermoleculares más débiles en comparación con las moléculas en el interior del sólido o líquido, lo que le confiere una energía más alta [9]. Cuantitativamente, la energía superficial representa la

cantidad de energía necesaria para incrementar el área superficial de un material por unidad de área. Por lo general, se expresa en unidades de energía por área, como J/m^2 [8].

Mientras que la energía intrínseca necesaria asociada a las fuerzas de atracción intermoleculares que mantienen unidas a las moléculas en un sólido o líquido, se le conoce como trabajo de cohesión. En el caso de los líquidos, el trabajo de cohesión se puede expresar como el doble de su energía superficial ($W_c = 2\sigma$). Esto se debe a que la cantidad total de energía requerida para crear dos nuevas superficies es el doble de la energía necesaria para crear una única superficie nueva [8].

Por otro lado, la energía interfacial es la energía asociada a la interacción entre dos fases diferentes, en la interfase de contacto. Esta energía surge debido a las diferencias en las interacciones intermoleculares en la interfase entre las dos fases, como un líquido en contacto con un sólido o dos líquidos inmiscibles, y puede estar influenciada por factores como las propiedades químicas y físicas de las superficies [9]. La tensión interfacial es un concepto relacionado que se refiere a la fuerza por unidad de longitud a lo largo de la interfase entre las dos fases, mientras que la energía interfacial se refiere a la energía por unidad de área requerida para aumentar la interfase entre las dos fases [8].

Cuando se tienen dos fases en perfecto contacto, la cantidad de energía requerida para separar completamente las superficies que están en contacto, superando las fuerzas intermoleculares presentes en la interfase entre dichas fases hasta una distancia infinitamente grande desde su estado de equilibrio se le conoce como trabajo de adhesión (W_a) [9]. Cuantitativamente el trabajo de adhesión fue definido por Dupré [11] según la ecuación (4) la cual proporciona una relación para el trabajo de adhesión entre el sólido y líquido en presencia de una fase vapor, la que está intrínsecamente relacionados con la energía interfacial entre ellos. Esta energía interfacial refleja la intensidad de las interacciones entre los átomos superficiales del líquido y el sólido en la interfase:

$$W_a = \sigma_{SV} + \sigma_{LV} - \sigma_{SL} \quad (4)$$

Donde σ_{SV} es la energía interfacial sólido-vapor, σ_{LV} es la energía interfacial líquido-vapor (o tensión superficial del líquido) y σ_{SL} es la energía interfacial sólido-líquido.

Finalmente, cuando se tiene un líquido no reactivo cubriendo una superficie sólida perfectamente plana, lisa, isotrópica y químicamente homogénea en un sistema en equilibrio termodinámico, se forma un ángulo de contacto. Este corresponde al ángulo que se genera entre la interfase líquido-vapor y la superficie sólida en el punto de contacto. La ecuación de Young, ilustrada en la ecuación (5) [12], proporciona una correlación rigurosa entre el ángulo de contacto (θ) y la energía interfacial en un sistema de líquido-sólido-vapor (**Figura 2.2**). Esta relación describe la mojabilidad del sólido en relación con el líquido en dichas condiciones:

$$\sigma_{SV} = \sigma_{SL} + \sigma_{LV} \cos(\theta) \quad (5)$$

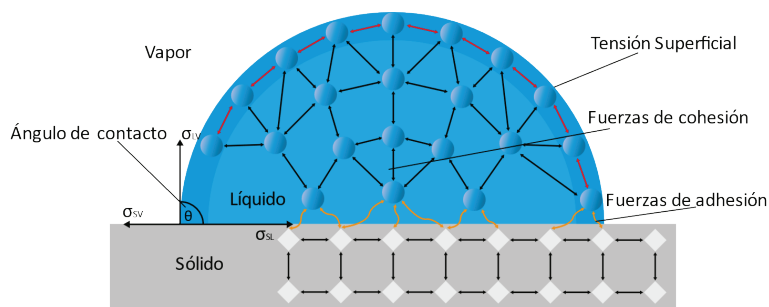


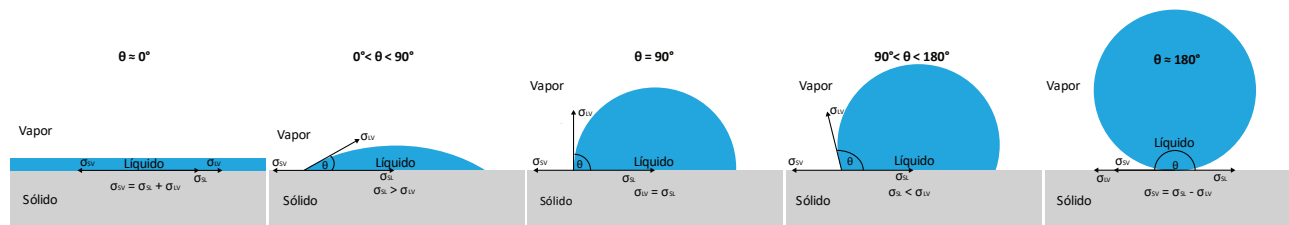
Figura 2.2. Esquema del modelo de Young para el ángulo de contacto, que muestra el equilibrio entre las energías interfaciales sólido-líquido (σ_{sl}), líquido-vapor (σ_{lv}) y sólido-vapor (σ_{sv}), definido por las fuerzas de adhesión y cohesión representadas por los trabajos de adherencia (W_a) y cohesión (W_c).

La relación entre la tensión superficial de un líquido y el ángulo de contacto que forma con una superficie sólida se explica por la ecuación de Young-Dupré. Esta ecuación se deriva de un análisis termodinámico de las interacciones intermoleculares y energías interfaciales en el sistema líquido-sólido-vapor [9]. La deducción de la ecuación de Young-Dupré puede obtenerse al combinar las ecuaciones (4) y (5), ambas relacionadas con el trabajo de adhesión, como se demuestra en la ecuación (6). De este análisis se infiere que el ángulo de contacto es resultado del equilibrio entre dos fuerzas que actúan en la línea de contacto: la fuerza de adhesión del líquido sobre el sólido, que favorece la mojabilidad y la expansión del líquido sobre la superficie sólida, y la fuerza de cohesión del líquido, que representa la atracción entre las moléculas del líquido y actúa en sentido contrario.

$$W_a = \sigma_{LV}(1 + \cos(\theta)) \Rightarrow \cos(\theta) = \frac{W_a}{\sigma_{LV}} - 1 \quad (6)$$

El ángulo de contacto, por lo tanto, proporciona una medida cuantitativa de las interacciones superficiales entre los átomos en la interfase sólido-líquido, donde naturaleza de los enlaces atómicos o moleculares en la interfase desempeña un papel determinante en la caracterización de dichas interacciones superficiales. Como resultado, las propiedades químicas y físicas de las fases involucradas en la interfase influyen considerablemente en el ángulo de contacto, lo que a su vez, afecta la mojabilidad y la adhesión entre las fases en contacto.

La **Figura 2.3** esquematiza las diferentes situaciones de mojabilidad posibles en función del ángulo de contacto (θ) entre un líquido y una superficie sólida, según las ecuaciones anteriores:



(a) (b) (c) (d) (e)
Figura 2.3. Esquema de las distintas mojabilidades entre un líquido y sólido según el ángulo de contacto.
 (a) completa; (b) parcial; (c) neutra; (d) imperfecta; (e) nula

- Ángulo de contacto 0° : En esta situación, se presenta una mojabilidad perfecta, en la que el líquido se extiende sobre la superficie sólida formando una capa uniforme. Esto indica que el líquido tiene una afinidad máxima por el sólido y minimiza la energía interfacial líquido-sólido. En este caso $\sigma_{SV} \approx \sigma_{LV}$ lo que resulta en una tensión superficial líquido-vapor (γ_L) muy cercana a cero.
- Ángulo de contacto entre 0° y 90° : Cuando el ángulo se encuentra en este rango, las fuerzas de adhesión entre el líquido y el sólido superan las fuerzas de cohesión dentro del líquido, lo que causa que el líquido se extiende parcialmente sobre la superficie sólida. En este caso $\sigma_{SL} > \sigma_{LV}$, lo que indica que el trabajo de adhesión es positivo y disminuye a medida que el ángulo de contacto aumenta.
- Ángulo de contacto de 90° : En esta situación, el líquido tiene una mojabilidad neutra en la superficie sólida. El líquido no muestra preferencia particular por extenderse ni por retraerse en forma de gota. En este caso, la ecuación de Young indica que $\sigma_{LV} = \sigma_{SL}$, lo que implica un equilibrio entre las fuerzas de adhesión y cohesión en la interfase líquido-sólido.
- Ángulo de contacto entre 90° y 180° : Cuando el ángulo de contacto se encuentra en este rango, las fuerzas de cohesión dentro del líquido superan las fuerzas de adhesión entre el líquido y el sólido, lo que provoca que el líquido se retraiga y forme una gota más redondeada sobre la superficie sólida en lugar de extenderse. En este caso, $\sigma_{SL} < \sigma_{LV}$, lo que indica que el trabajo de adhesión disminuye a medida que el ángulo de contacto se acerca a 180° .
- Ángulo de contacto 180° : Aquí, el líquido forma una gota perfectamente esférica sobre la superficie sólida, sin extenderse en absoluto. Esto indica una mojabilidad nula, ya que el líquido tiene la menor afinidad posible por el sólido y busca maximizar la energía en la interfase líquido-sólido. En esta situación, $\sigma_{SV} = \sigma_{SL} - \sigma_{LV}$, lo que indica que las fuerzas de cohesión dentro del líquido son más fuertes que las fuerzas de adhesión entre el líquido y el sólido.

Las situaciones anteriormente descritas son aplicables en condiciones ideales propuestas donde un sólido perfectamente liso, isotrópico y homogéneo está en contacto con un líquido que no reacciona químicamente. Sin embargo, este escenario idealizado rara vez coincide con la realidad. Los minerales, por ejemplo, son sólidos con superficies rugosas, que presentan porosidad y poseen una composición no homogénea. Por lo tanto, las interacciones en sistemas reales pueden variar significativamente de las condiciones ideales.

La rugosidad de una superficie ejerce un impacto significativo sobre el ángulo de contacto y, en consecuencia, en la interacción entre un sólido y un líquido. Al incrementar el área de contacto real en

comparación con el área proyectada (superficie plana), una superficie rugosa ofrece más puntos de contacto para el líquido, facilitando su extensión sobre la superficie y aumentando la adhesión sólido-líquido [13]. La ecuación de Wenzel [14] modela este efecto de la siguiente forma:

$$\cos(\theta^*) = \varepsilon \cos(\theta) \quad (7)$$

Donde θ^* es el ángulo de contacto aparente en una superficie rugosa, θ es el ángulo de contacto en una superficie lisa (denominado ángulo de contacto de Young) y ε es el factor de rugosidad, definido como la relación entre el área real y el área proyectada de la superficie.

Si el ángulo de contacto de Young es inferior a 90° , la ecuación de Wenzel predice que, en presencia de una superficie rugosa, el ángulo de contacto aparente será aún menor. Esto sugiere que la rugosidad de la superficie incrementa la mojabilidad, favoreciendo una mayor extensión del líquido sobre la superficie. En cambio, si el ángulo de contacto de Young es mayor a 90° , la ecuación de Wenzel prevé que el ángulo de contacto aparente en una superficie rugosa será mayor. Esto implica que la rugosidad de la superficie intensifica la hidrofobicidad del sólido, amplificando su capacidad para repeler el agua.

En el caso una superficie sólida con distribución heterogénea, Cassie y Baxter [15] propusieron una ecuación para determinar el ángulo de contacto aparente (θ^*) sobre una superficie compuestas por dos o más especies o fases diferentes. Según su modelo, esta superficie se compone de varios dominios pequeños, cada uno correspondiente a una especie distinta. Consideraron una superficie compuesta por dos especies diferentes, cada una ocupando una fracción del área total, denotadas como f_1 y f_2 . La suma de estas fracciones es igual a 1 ($f_1 + f_2 = 1$), lo que significa que juntas cubren completamente la superficie. La ecuación (8) representa el ángulo de contacto aparente teniendo en cuenta estas fracciones de área en la superficie heterogénea.

$$\cos(\theta^*) = f_1 \cos(\theta_1) + f_2 \cos(\theta_2) \quad (8)$$

Donde θ_1 y θ_2 son los ángulos de contacto de Young de las dos fases involucradas.

La **Figura 2.4** muestra esquemáticamente los diferentes modelos conceptuales para el ángulo de contacto para las diferentes situaciones presentadas en las ecuaciones anteriores.

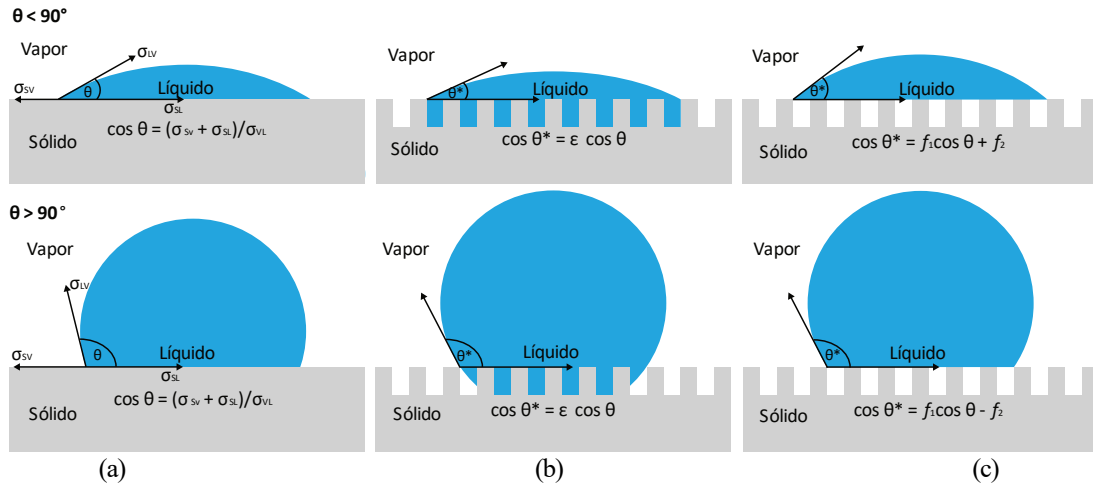


Figura 2.4. Esquema de los modelos de mojabilidad para ángulos menores y mayores a 90° .
(a) Young; (b) Wenzel; (c) Cassie-Baxter

Al considerar un mineral de superficie porosa y se suponiendo que la fase porosa (ϕ_p) tiene una fracción de superficie de poros $f_2 = \phi_p$, se puede explorar el efecto de la porosidad en el ángulo de contacto aparente (θ^*) mediante la ecuación de Cassie-Baxter. Dependiendo del ángulo de contacto de Young, la fase porosa puede interactuar con el líquido de diferentes maneras [16].

Cuando la superficie es hidrofílica, el ángulo de contacto de Young (θ) entre el mineral y el líquido es inferior a 90° . En esta situación el líquido impregna en los poros, estableciendo contacto tanto con la fase sólida ($\theta_1 = \theta$) como con el líquido mismo ($\theta_2 = 0^\circ$). Esta circunstancia se refleja al modificar la ecuación de Cassie-Baxter, como se muestra en la ecuación (9):

$$\cos(\theta^*) = (1 - \phi_p)\cos(\theta) + \phi_p \quad (9)$$

Por otro lado, si la superficie es hidrofóbica, el ángulo de contacto de Young (θ) entre el mineral y el líquido es superior a 90° , el líquido formará una película plana sobre el poro, generando un trabajo de adhesión nulo entre el líquido y sólido inmediatamente por encima del poro. Esto implica que θ_2 es igual a 180° . Esta situación también puede expresarse mediante una modificación de la ecuación de Cassie-Baxter, tal como se muestra en la ecuación (10):

$$\cos(\theta^*) = (1 - \phi_p)\cos(\theta) - \phi_p \quad (10)$$

Al combinar las ecuaciones anteriores, se puede obtener una ecuación general para el ángulo de contacto aparente en la superficie de un mineral que sea rugosa, porosa y de composición heterogénea (de n fases sólidas distintas), como se muestra en las ecuaciones (11) y (12):

$$\cos(\theta^*) = r \left(\sum_{i=1}^n f_i \cos(\theta_i) + \phi_p \right) \quad \theta < 90 \quad (11)$$

$$\cos(\theta^*) = r \left(\sum_{i=1}^n f_i \cos(\theta_i) - \phi_p \right) \quad \theta > 90 \quad (12)$$

2.3. Fundamentos de infiltración en minerales

El fenómeno de la infiltración en minerales puede analizarse inicialmente con la ley de Young-Laplace [17], la cual tiene un rol fundamental en la comprensión de la entrada de un líquido en un poro. Según esta ley, la diferencia de presión (ΔP) existente a través de una interfase líquido-vapor curvada es directamente proporcional a la tensión superficial del líquido (λ) y, en contraposición, es inversamente proporcional al radio de curvatura de dicha interfase (R) (**Figura 2.5**) [8]. Esta relación se manifiesta en la siguiente ecuación:

$$\Delta P = \frac{2\lambda}{R} \quad (13)$$

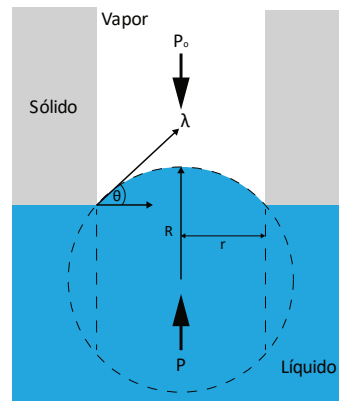


Figura 2.5. Esquema de la interfase curva líquido-vapor de acuerdo con la ley de Young-Laplace.

Esta ecuación resalta que la presión interna en la interfase es superior a la presión externa debido a la tensión superficial, lo que implica que se necesita una presión adicional para impulsar la entrada de un líquido en un poro, particularmente si el poro es de tamaño pequeño.

El análisis anterior supone que la interfase líquido-vapor es perfectamente esférica, lo cual puede no ser cierto en todos los casos reales, ya que esta interfase dependerá de interacciones del líquido con el capilar, el cual es cuantificado por el ángulo de contacto (θ) y del radio del capilar (r), donde $r = R \cos \theta$ [18].

Por ende, cuando el líquido moja la superficie interna del poro (es decir, $\theta < 90^\circ$), el menisco es cóncavo y la presión dentro del poro favorece la entrada del líquido. Por el contrario, si el líquido no moja la superficie interna del poro ($\theta > 90^\circ$), el menisco es convexo y la presión actúa para repeler el líquido del interior del poro [19]. De esta forma la presión capilar se define como:

$$P_c = \Delta P = \frac{2\lambda \cos(\theta)}{r} \quad (14)$$

La **Figura 2.6** ilustra cómo, al entrar el líquido en el capilar, la fuerza gravitatoria ejercerá una presión sobre el líquido, conocida como presión hidrostática (P_h), dada por $P_h = \rho gh$, la cual equilibrará el ascenso del líquido. Este equilibrio en el interior del capilar se describe mediante la ley de Jurin [20], la cual está dada por:

$$\rho gh = \frac{2\lambda \cos(\theta)}{r} \quad (15)$$

Donde g es la aceleración de gravedad, h es la altura que asciende el líquido en el capilar, λ es la tensión superficial del líquido, θ es el ángulo de contacto del líquido con la pared del tubo capilar y r es el radio del capilar.

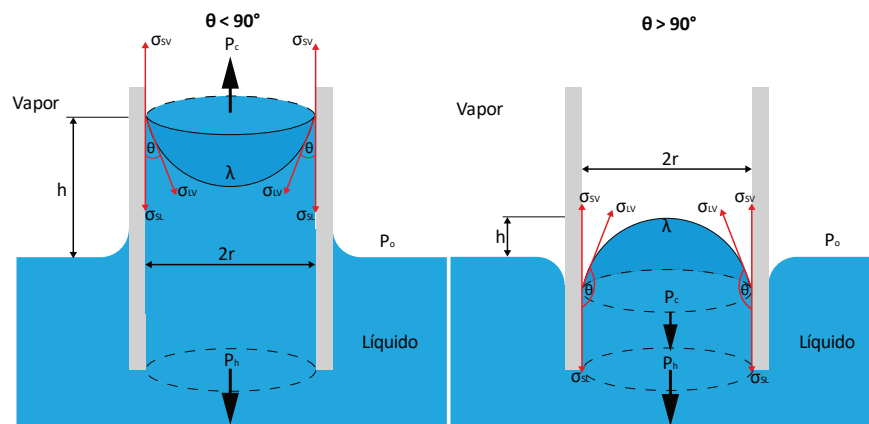


Figura 2.6. Esquema del equilibrio de un líquido en un capilar para diferentes ángulos de contacto de acuerdo con la ley de Jurin.

Aunque la ley de Jurin ofrece una descripción útil del ascenso o descenso de un líquido en capilar, presenta ciertas limitaciones significativas. En particular, no considera la dinámica del flujo de líquido en el tubo capilar, es decir, presupone que el líquido está en reposo, lo que puede no ser el caso en muchas situaciones reales. Además, su aplicabilidad se ve restringida principalmente a los sistemas donde la fuerza capilar es la dominante en comparación a la influencia de la gravedad.

Por ello, la dinámica del flujo en el capilar puede analizarse inicialmente mediante el estudio del flujo laminar de fluidos newtonianos en tubos cilíndricos estrechos, un fenómeno conocido como la ley de Poiseuille propuesta por Jean Louis Marie Poiseuille en 1840 [21]. Esta ley se centra en el flujo laminar de fluidos newtonianos a través de tubos cilíndricos estrechos, y establece que el caudal volumétrico (Q) es proporcional a la cuarta potencia del radio del capilar (r^4) y a la diferencia de presión entre los extremos del tubo (ΔP). Así mismo es inversamente proporcional a la viscosidad dinámica del fluido (μ) y la longitud del capilar (L). Esta relación se puede expresar como sigue:

$$Q = \frac{\pi r^4 \Delta P}{8\mu L} \quad (16)$$

Donde Q representa el caudal (flujo volumétrico) en (m^3/s), r es el radio del tubo en metros (m), ΔP es la diferencia de presión entre los extremos del tubo (Pa) y L es la longitud del tubo (m). Esta ley proporciona un marco sólido para entender cómo los fluidos fluyen a través de los poros de un mineral. Es importante destacar que la ley de Poiseuille es aplicable bajo condiciones específicas, entre las que se incluyen un flujo laminar de fluidos incompresibles y newtonianos y tubos cilíndricos con una sección transversal circular y constante a lo largo de toda su longitud.

En 1921 Washburn a partir de la ley anterior propuso una teoría en el cual supone que un mineral se modela como un conjunto de capilares con un radio interno similar (r), tal como se ilustra en la **Figura 2.7** [22]. Según este modelo en el interior de los capilares actúan tres vectores de presión sobre los líquidos: la presión capilar (P_c), la presión hidrostática (P_h), y la diferencia de presión externa ($\Delta P = P - P_0$), la que en la mayoría de los casos es nula. El cambio en la energía libre que surge al introducir un líquido en un poro se puede expresar mediante la ecuación (17), como se deriva en [23]:

$$\Delta G_{(z-0)} = (2\pi rz)\lambda \cos(\theta) + (\pi r^2 z)\rho gh + (\pi r^2 z)(P - P_0) \quad (17)$$

Aquí, el equilibrio se alcanza en el punto de energía mínima, que se determina al establecer que la derivada de ΔG con respecto a z es igual a cero ($\frac{d\Delta G}{dz} = 0$). Al derivar la ecuación (17) con respecto a z e igualándola a cero, obtenemos que la columna de líquido dentro del capilar alcanza el equilibrio cuando la suma de las tres presiones es cero:

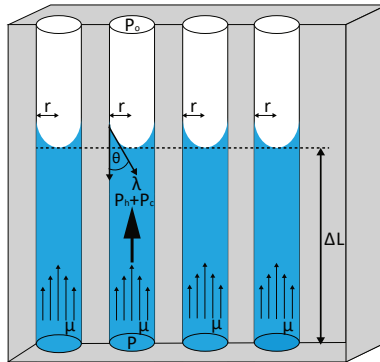


Figura 2.7. Esquema del modelo propuesto por Washburn para determinar la velocidad de infiltración de un líquido en un conjunto de capilares.

$$0 = P_c + P_h + \Delta P = \frac{2\lambda \cos(\theta)}{r} + \rho gh + \Delta P \quad (18)$$

Además, Washburn formuló una ley para determinar la velocidad de infiltración de un líquido en un capilar, como se muestra en la ecuación (19). Esta ecuación permite calcular la tasa a la que un líquido de viscosidad μ penetra una distancia L en un tiempo t :

$$\frac{dL}{dt} = \frac{(P_h + P_c)r^2}{8\mu L} \quad (19)$$

Dicho de otro modo, la velocidad de infiltración de un líquido en un conjunto de capilares es directamente proporcional a la suma de los vectores de presión que actúan sobre el líquido y al cuadrado del radio del capilar e inversamente proporcional a la distancia del capilar infiltrada por el líquido y a la viscosidad dinámica. Si integramos la ecuación de velocidad de infiltración, podemos determinar la distancia que el líquido ha infiltrado en un tiempo dado, como se demuestra en la siguiente ecuación (20):

$$L^2 = \frac{(P_h + P_c)r^2 t}{4\mu} \quad (20)$$

Ahora, para un mineral con poros sumergido en un líquido, la penetración del líquido en el sólido puede considerarse igual a la penetración en n tubos capilares cilíndricos de radios r_1, r_2, \dots, r_n . De esta forma se puede predecir cuanto líquido habrá entrado en los poros en un cierto volumen. Para un único poro cualquiera el volumen infiltrado es:

$$V = \pi r^2 L = (\pi r^2) \sqrt{\frac{(P_h + P_c)r^2 t}{4\mu}} = \left(\frac{\pi r^3}{2}\right) \sqrt{\frac{(P_h + P_c)t}{\mu}} \quad (21)$$

Por lo tanto, el volumen total que se infiltra en todos los poros se puede calcular sumando los volúmenes individuales de infiltración de cada poro:

$$V = \pi \sum r^2 L = \left(\frac{\pi}{2} \left(\frac{t}{\mu}\right)^{1/2}\right) \sum r^3 \sqrt{(P_h + P_c)} \quad (22)$$

2.4. Dinámica de Fluido Computacional (CFD)

La Dinámica de Fluidos Computacional (CFD, por sus siglas en inglés) es una rama de la mecánica de fluidos que se apoya en métodos numéricos, algoritmos y software computacional para analizar y resolver problemas asociados con el flujo de fluidos. CFD simula y predice el comportamiento de fluidos, ya sean líquidos o gases, en diferentes condiciones y geometrías, las cuales pueden ser bidimensionales o tridimensionales.

El proceso comienza generalmente con la creación de la geometría del problema mediante un programa de Diseño Asistido por Computadora (CAD). A continuación, esta geometría se representa por medio de una malla o dominio computacional. La malla divide el dominio en elementos discretos (celdas o elementos finitos) y aloja nodos, que son los puntos donde se realizan los cálculos locales de las propiedades del fluido, tales como velocidad, presión, temperatura, entre otros. El proceso de malla es una etapa crítica en CFD, ya que la calidad de la malla puede tener un impacto significativo en la precisión y eficiencia de la simulación.

Por ello, es esencial seleccionar un tamaño de malla adecuado que logre un equilibrio entre la necesidad de precisión y las limitaciones computacionales [24].

Una vez que la malla está lista, se discretizan las ecuaciones que rigen el flujo de fluidos, como las ecuaciones de continuidad y Navier-Stokes, utilizando métodos numéricos como Método de Diferencias Finitas (FDM), el Método de Elementos Finitos (FEM) o el Método de Volúmenes Finitos (FVM) [25]. Esta discretización convierte las ecuaciones diferenciales en ecuaciones algebraicas que pueden resolverse en los nodos de la malla.

Finalmente, se aplican las condiciones de contorno y se resuelven iterativamente las ecuaciones discretizadas en cada nodo hasta alcanzar la convergencia. La solución resultante proporciona información detallada sobre las propiedades del fluido y su comportamiento a lo largo de todo el dominio.

2.4.1 OpenFOAM

OpenFOAM (Open Field Operation and Manipulation) es una sofisticada suite de software de código abierto, desarrollada en C++, dedicada a proporcionar herramientas integralmente robustas para la mecánica computacional de fluidos.

Además de las capacidades de simulación de flujos de fluidos, OpenFOAM se distingue por sus funcionalidades de preprocesamiento y postprocesamiento de datos. Las operaciones de preprocesamiento facilitan la preparación meticulosa del dominio de simulación, que incluye la generación de la malla y la definición de las condiciones iniciales y de contorno. Por otro lado, las herramientas de postprocesamiento proporcionan un medio eficaz para analizar y visualizar los resultados de las simulaciones, entregando una imagen detallada de las características del fluido y su comportamiento en el dominio de simulación.

Un aspecto que resalta particularmente de OpenFOAM es su naturaleza de código abierto. Esta característica confiere al software un nivel de flexibilidad excepcional, permitiendo a los usuarios modificar y personalizar sus funcionalidades para satisfacer requisitos específicos. Además, OpenFOAM es capaz de llevar a cabo simulaciones en paralelo, un beneficio inestimable que permite manejar problemas de mayor envergadura y complejidad en períodos de tiempo reducidos [26].

2.4.2 Ecuaciones de Navier-Stokes

Las ecuaciones de Navier-Stokes constituyen un sistema de ecuaciones diferenciales parciales que proporcionan una descripción matemática exhaustiva y fundamental de los fenómenos de transporte de los fluidos. Se derivan de la aplicación de las leyes de conservación de la física, específicamente la ley de conservación de la masa (o ecuación de continuidad) y la ley de conservación del momentum (o la segunda ley de Newton) [6].

Es importante destacar que las ecuaciones originales de Navier-Stokes suponen que se está trabajando con un fluido Newtoniano, lo que significa que la viscosidad del fluido es constante. Por lo tanto, para un fluido tridimensional e incompresible, se tienen cuatro ecuaciones en total: una ecuación de continuidad y tres ecuaciones de momentum, una para cada dimensión espacial (x, y, z). Las ecuaciones son las siguientes:

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0 \quad (23)$$

$$\rho \left(\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial x} u + \frac{\partial u}{\partial y} v + \frac{\partial u}{\partial z} w \right) = -\frac{\partial p}{\partial x} + \mu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right) + \rho g_x \quad (24)$$

$$\rho \left(\frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial v}{\partial x} u + \frac{\partial v}{\partial y} v + \frac{\partial v}{\partial z} w \right) = -\frac{\partial p}{\partial y} + \mu \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} \right) + \rho g_y \quad (25)$$

$$\rho \left(\frac{\partial w}{\partial t} + \frac{\partial w}{\partial x} u + \frac{\partial w}{\partial y} v + \frac{\partial w}{\partial z} w \right) = -\frac{\partial p}{\partial z} + \mu \left(\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} \right) + \rho g_z \quad (26)$$

Donde p es la presión, u, v, w son las componentes de la velocidad del fluido en las direcciones x, y, z respectivamente, y g_x, g_y, g_z son las componentes de la aceleración debido a la gravedad en las direcciones x, y, z respectivamente.

En cuanto a su aplicación en OpenFOAM, las ecuaciones de Navier-Stokes se utilizan para modelar y analizar flujos de fluidos. Para resolver estas ecuaciones, OpenFOAM emplea el método de Volúmenes Finitos (FVM). Este método implica la subdivisión del dominio de simulación en un conjunto discreto de volúmenes de control. Dentro de cada uno de estos volúmenes, las ecuaciones de Navier-Stokes se integran en el tiempo para obtener una ecuación integral. Esta ecuación se resuelve de manera iterativa para obtener las propiedades de flujo promediadas en cada volumen de control [27].

La precisión de la solución obtenida por el método de volúmenes finitos está directamente relacionada con el tamaño de las celdas en la malla de cálculo. A medida que se reduce el tamaño de la celda (es decir, se incrementa la cantidad de celdas que componen el dominio), la solución numérica se acerca cada vez más a la solución exacta de las ecuaciones de Navier-Stokes, reduciendo el error de aproximación. Sin embargo, es importante tener en cuenta que una malla más fina también implica un mayor uso de recursos computacionales y tiempo de simulación [28].

2.4.3 InterFOAM

InterFOAM, uno de los solvers integrados en la suite de OpenFOAM, ha sido diseñado para realizar simulaciones de flujos multifásicos donde las fases deben ser inmiscibles y poseen una interfase libre o móvil

[26]. Además, InterFOAM está capacitado para modelar las interacciones entre el líquido y vapores, un factor importante cuando se requiere estudiar el proceso de infiltración de líquidos en los poros de minerales [29].

Para llevar a cabo estas simulaciones, InterFOAM implementa la resolución de las ecuaciones de Navier-Stokes para cada fase involucrada, incorporando aspectos como las fuerzas superficiales y el ángulo de contacto. En el núcleo de InterFOAM se encuentra el método VOF (Volume of Fluid), que opera mediante una ecuación de transporte para una función de fracción de volumen (α). Esta función representa la proporción de una fase presente en una celda de control específica. Los valores de α fluctúan entre 0 y 1, con 0 indicando que la celda está completamente llena de la segunda fase (por ejemplo, un vapor), y 1 significando que la celda está totalmente ocupada por la primera fase (como el líquido). Los valores intermedios sugieren que la celda contiene una mezcla de ambas fases, y, por ende, la interfase entre las fases se ubica dentro de la celda [30].

Para la resolución de la ecuación de transporte para la función de fracción de volumen, OpenFOAM emplea el esquema de advección MULES (Multidimensional Universal Limiter for Explicit Solution). Este esquema está especialmente diseñado para gestionar problemas de advección con fuertes gradientes de la función de fracción de volumen, como los que se encuentran en la interfase entre dos fases [26]. La ecuación (27) representa la ecuación de conservación de momentum para el flujo multifásico, la cual incorpora los términos típicos de convección, fuerzas másicas, tensiones viscosas y cualquiera fuerza F_α actuando sobre la interfase entre las fases.

$$\frac{\partial(\rho U)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho U \otimes U) = -\nabla p + \nabla \cdot (\mu(\nabla U + (\nabla U)^T)) + F_\alpha \quad (27)$$

La ecuación (28) es la ecuación de continuidad que se resuelve para el transporte de la función α , la cual asegura que la suma de las fracciones de volumen de todas las fases en una celda es 1.

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (U\alpha) = 0 \quad (28)$$

Las ecuaciones 29 a 31 muestran cómo se calculan las propiedades efectivas del flujo como velocidad (U), densidad (ρ) y viscosidad (μ) en cada celda, ponderando las propiedades de cada fase de acuerdo con su fracción de volumen local α .

$$U = \alpha U_l + (1 - \alpha) U_g \quad (29)$$

$$\rho = \alpha \rho_l + (1 - \alpha) \rho_g \quad (30)$$

$$\mu = \alpha \mu_l + (1 - \alpha) \mu_g \quad (31)$$

Capítulo 3. Metodología Experimental

A continuación, se describen las técnicas y procedimientos empleados para realizar la medición del ángulo de contacto entre una solución ácida de aglomeración, con una concentración de 14% de ácido sulfúrico (equivalente a una dosificación de 20 kg/ton de mineral) y superficies pulidas de muestras minerales. Así mismo, se detallan los ensayos diseñados para evaluar la infiltración de dicha solución en las muestras de minerales bajo estudio, tanto en condiciones saturadas y no saturadas.

Las muestras minerales, esenciales para este análisis, fueron seleccionadas de dos divisiones de CODELCO, reflejando un enfoque en la diversidad mineralógica de la investigación. La elección específicas de muestras de la División Gabriela Mistral y de la División Radomiro Tomic, recolectadas respectivamente el 10 y 11 de enero del 2023, fue motivada por los desafíos de recuperación experimentados en estas áreas, los cuales se asocian a procesos de infiltración desfavorables. a recolección directa desde el frente de carguío asegura que las muestras sean auténticas y representativas de las condiciones mineralógicas actuales. Posteriormente, las muestras fueron enviadas al laboratorio del Instituto GEA de la Universidad de Concepción, para una exhaustiva determinación de su composición química y mineralógica mediante análisis de fluorescencia de rayos X (FRX) y difracción de rayos X (DRX). Adicionalmente, se realizó una caracterización microestructural de ambos minerales mediante el análisis de adsorción física BET, lo que permitió obtener información detallada sobre la porosidad y superficie específica de los minerales estudiados.

Para medir el ángulo de contacto, un parámetro crucial para entender la mojabilidad de las superficies minerales y su influencia en la infiltración, se empleó la técnica de la gota sésil (*sessile drop*) en un set montado en el laboratorio de electroquímica del Departamento de Ingeniería Metalúrgica de la Universidad de Concepción. Esta técnica, que permite grabar imágenes de las gotas, fue complementada con mediciones adicionales mediante un goniómetro en el laboratorio ASIF del Departamento de Ingeniería Química. Ambas técnicas fueron seleccionadas por su precisión y fiabilidad, las cuales aseguran la obtención de mediciones reproducibles del ángulo de contacto.

Para concluir el estudio, se llevaron a cabo ensayos de infiltración en condiciones de saturación y no saturación, llevados a cabo en el mismo laboratorio de electroquímica. Estos ensayos son fundamentales para determinar la dinámica de la infiltración de la solución ácida de aglomeración en los minerales.

3.1. Caracterización química y mineralógica

Para obtener una comprensión más profunda de la composición mineralógica de las muestras empleadas en los ensayos de infiltración, se implementaron técnicas analíticas de fluorescencia de rayos X (FRX) y semicuantificación de fases mediante difracción de rayos X (DRX) en la roca total.

El análisis por fluorescencia de Rayos X se efectuó utilizando el equipo Rigaku ZSX Primus II (WDS), que opera bajo radiación de Rh, y sin requerir estandarización. La presentación de los resultados se llevó a cabo en forma de porcentajes normalizados de óxidos. Por otro lado, el análisis por difracción de rayos X se realizó aplicando el método del polvo, utilizando un equipo Bruker® D4 Endeavor. Este equipo operó bajo radiación de Cu y contó con un filtro de radiación $K\beta$ de Ni. Las condiciones de lectura aplicadas en este proceso incluyeron un rango 2θ : 3 a 70 ($^{\circ}$), tamaño de paso de 0.02 ($^{\circ}$), un voltaje de 40 (kV) y una corriente de 20 (mA).

Para la identificación y semicuantificación automática (S-Q) de las muestras de los minerales de DGM y DRT presentes, se hizo uso del software DIFFRAC EVA de Bruker®. Este proceso de análisis se apoyó en la base de datos PDF-4/Minerals 2023 de ICDD® para una identificación mineralógica más precisa y completa.

3.2. Caracterización de la porosidad

Las características microestructurales de los minerales bajo estudio fueron examinadas a través del análisis de adsorción física conocido como BET (Brunauer, Emmet y Teller). Para este propósito, se utilizó un analizador de área superficial y tamaño de poros, específicamente el equipo NOVA Quantachrome 2200e. Las muestras empleadas en la medición fueron adecuadamente preparadas hasta alcanzar una granulometría del 100% por debajo de 10# en la escala Tyler.

El análisis BET se utiliza para evaluar el área superficial específica de minerales internos mediante la adsorción de gases. Este procedimiento también facilita la identificación y análisis de la distribución de poros de diferentes tamaños: microporos (diámetro de 0.3 a 2 nm), mesoporos (diámetro de 2 a 36 nm) y poros (con un diámetro de 36 a 400 nm). Todo ello se realiza a través de un examen detallado de la isoterma de adsorción [45].

A pesar que la teoría BET es altamente usada debido a su simplicidad relativa y la precisión que proporciona le han planteado algunas críticas a los largos de los años, como la uniformidad de los sitios de adsorción, que la teoría supone que todos los sitios de adsorción en la superficie del material son equivalentes y tienen la misma energía de adsorción [46]; y supone que la formación de capas sucesivas de moléculas adsorbidas es un proceso independiente, esto significa que la energía de adsorción de una molécula en una capa particular no se ve afectada por las capas por debajo o por encima de ella [47].

3.3. Medición del ángulo de contacto (gota sésil)

La técnica de gota sésil [31] es un método para medir el ángulo de contacto entre un líquido y una superficie sólida. Para llevar a cabo esta técnica, se deposita una pequeña cantidad de gota del líquido sobre la superficie

sólida del material a ensayar. La gota se deja estabilizar durante un período de tiempo suficientemente largo para que no haya variaciones en su forma y tamaño.

Durante el proceso de estabilización, la gota se expande ligeramente y se establece un equilibrio entre las fuerzas de adhesión entre el líquido, la superficie sólida y el vapor presente, y las fuerzas de cohesión dentro del líquido. Este equilibrio se produce debido a las tensiones superficiales entre los diferentes materiales.

El proceso de gota sésil es monitoreado por una cámara de alta resolución que se coloca delante de la muestra. Se utiliza una luz fría para mejorar la visualización del contorno de la gota. Al iluminar la muestra desde atrás, se crea un contraste entre la gota y la superficie sólida, lo que puede ayudar a definir claramente los límites de la gota y hacer más fácil medir el ángulo de contacto.

Se adquieren imágenes de la gota del líquido en diferentes momentos durante el proceso de estabilización. A partir de estas imágenes, se pueden adquirir parámetros geométricos de la evolución de la gota del líquido sobre el mineral, como el ángulo de contacto formado por la gota del líquido con el mineral estudiado, así como sus dimensiones que permiten estimar la evolución del radio de la gota sobre el mineral. Estos parámetros pueden ser utilizados para caracterizar la mojabilidad y la adhesión de la superficie sólida en relación con el líquido en cuestión.

3.3.1 Descripción del montaje experimental

El conjunto experimental para la medición del ángulo de contacto mediante el método de la gota sésil consistió en una cámara réflex Canon EOS 7D Mark II con objetivo macro Canon EF-S 18-135mm f/3.5-5.6 invertido mediante anillo de inversión y montada en trípode con nivel de burbuja para estabilidad; una micropipeta BOECO de volumen variable entre 2-20 μL con puntas desechables que se ajustó a 1.5 mm de la superficie para controlar la deposición de la gota y repetibilidad de las mediciones; una fuente de iluminación fría Zeiss CL 1500 ECO de intensidad variable según la muestra para uniformidad y estabilidad; un soporte universal con nueces y pinzas para fijar la posición de la micropipeta y luz; un portamuestras específico donde se situó la muestra sólida; y un computador portátil HP Victus 16 con el software EOS Utility v3.16.10 para obtener imágenes de alta resolución y nitidez. Todo el montaje experimental se dispuso de forma precisa para asegurar la repetibilidad y exactitud en las mediciones del ángulo de contacto mediante el método de la gota sésil.

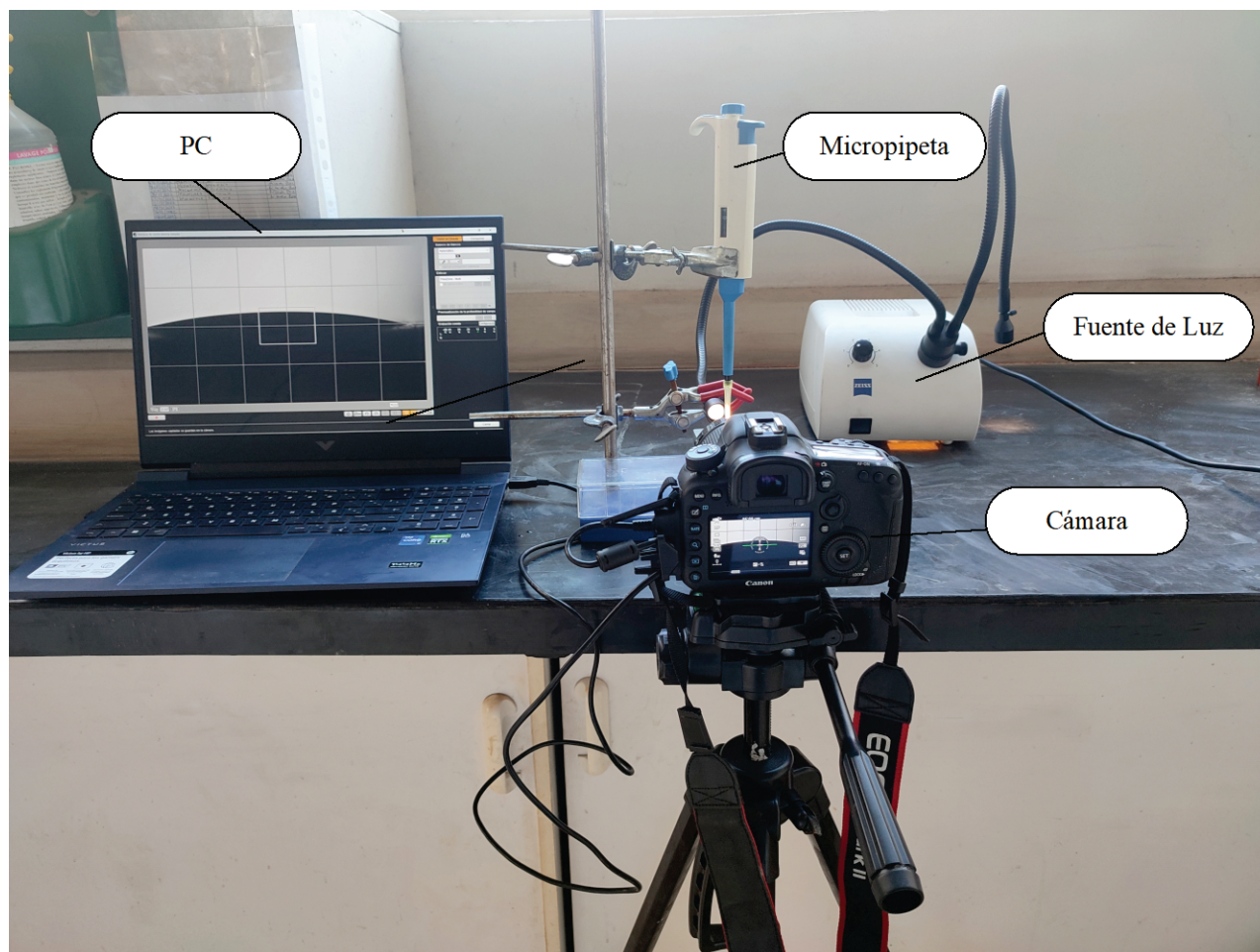


Figura 3.1. Set experimental utilizado para determinar ángulo de contacto mediante la técnica de la gota sésil.

3.3.2 Preparación de las muestras

Preparación mecánica de las muestras: Se cortaron muestras representativas de cada mineral con textura similar de 35 mm (largo) \times 35 mm (ancho) \times 30 mm (altura) (**Figura 3.2**). Cada muestra se dividió en dos mitades iguales de 15 mm de altura para realizar mediciones del ángulo de contacto en cada mitad mediante dos métodos diferentes, asegurando que ambas tuviesen la misma textura superficial. Las muestras se pulieron en una pulidora de plato utilizando una secuencia de abrasivos de granulometría decreciente desde 240 hasta 1000, seguido de una aplicación final con alúmina de 0.3 μm para minimizar el efecto de la rugosidad. Luego se realizó un baño ultrasónico en acetona durante 15 minutos para eliminar impurezas de los poros. Finalmente, las muestras se secaron en un horno a 110 $^{\circ}\text{C}$ durante 24 horas.

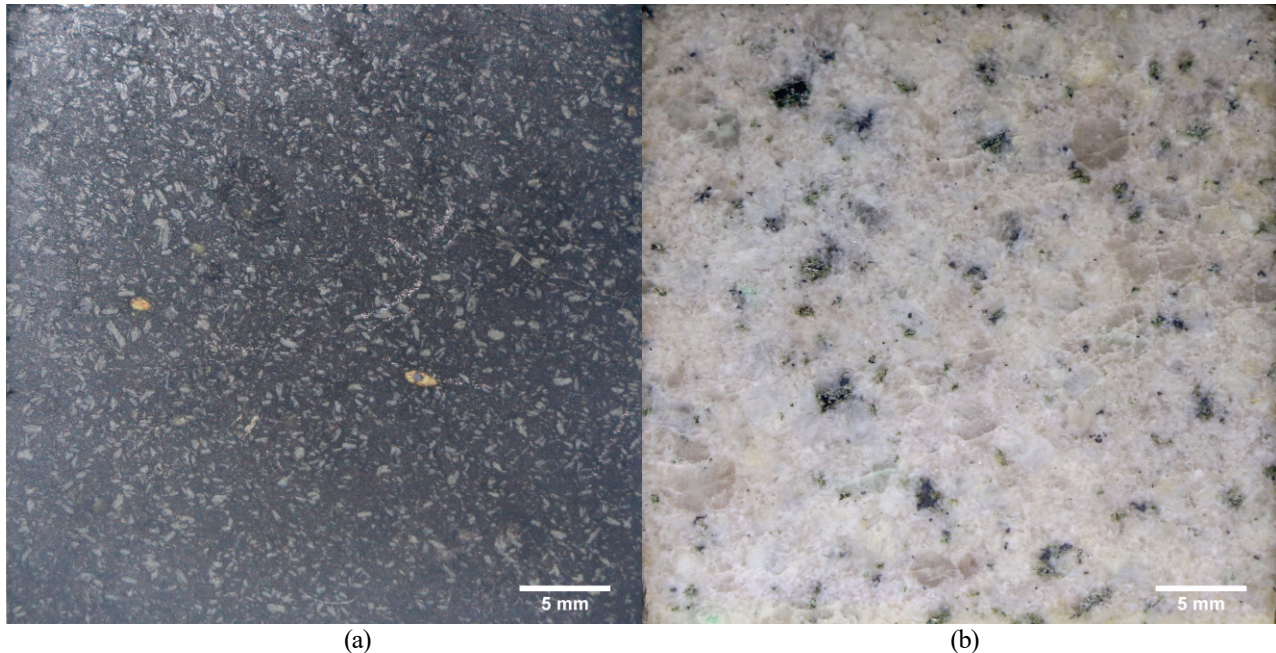


Figura 3.2. Muestras utilizadas en mediciones de ángulo de contacto.
(a) muestra del mineral de DGM; (b) muestra del mineral de DRT.

Preparación de la solución ácida de aglomeración: Se preparó 250 mL de solución ácida de aglomeración, en un matraz aforado de 250 mL, donde se le agregó agua destilada (aproximadamente 100 mL) y se le añadió con precisión 35.57 mL de ácido sulfúrico al 98% utilizando una pipeta parcial. Posteriormente el matraz se dejó enfriar a temperatura ambiente y finalmente se enrasó con agua destilada hasta el aforo. De esta manera, se obtuvo una solución ácida de aglomeración que contiene una cantidad de 14% de ácido sulfúrico, equivalente a una dosificación de 20 kg/ton de mineral.

3.3.3 Configuración experimental

Con el objetivo de obtener resultados representativos del ángulo de contacto, se realizaron 10 ensayos en diferentes puntos de la superficie de la muestra de cada mineral. Esta decisión se fundamentó en dos factores: la alta sensibilidad del sistema experimental implementado para la medición, capaz de detectar variaciones mínimas en el ángulo, y la naturaleza heterogénea de los minerales estudiados, que presentan características distintas dependiendo de la zona.

Cada uno de los ensayos consistió en depositar una gota de 5 μ L de la solución ácida de aglomeración sobre la superficie sólida y dejar que se estabilizara durante un período de 5 minutos antes de proceder a la medición. En estudios previos se ha establecido que un tiempo de 5 minutos resulta suficiente para que la gota depositada alcance un equilibrio, por lo que este lapso se utilizó en cada medición. Todas las pruebas se realizaron a temperatura ambiente constante de 20°C para minimizar la evaporación de la gota y mantener las condiciones experimentales estables a lo largo de la ejecución.

El criterio para evaluar la correcta realización de cada medición se basó en la comparación de los ángulos de contacto finales izquierdo y derecho de la gota. Para considerar el ensayo válido, la discrepancia entre ambos debía ser mínima, estableciéndose un rango aceptable de $\pm 2^\circ$. Esto permitió garantizar que la medición no se viera afectada por irregularidades superficiales del mineral, asegurando la precisión y fiabilidad del resultado obtenido.

En cuanto a la configuración de la cámara se seleccionó el modo de video en la cámara con el formato de archivo MOV y un tamaño de imagen de 1920×1080 píxeles. La frecuencia de fotogramas se estableció en 59.94 fps para lograr una reproducción fluida del video. El modo de exposición se configuró en Prioridad de Velocidad de Obturación (Tv) con una velocidad de obturación de $1/8000$ segundos. La abertura se ajustó en automático para adaptarse a las condiciones de iluminación. El ISO se configuró en automático para ajustarse a las condiciones de luz. El balance de blancos se estableció en automático para una reproducción precisa de los colores. Se eligió el estilo de imagen en monocromo para capturar en blanco y negro. La distancia focal utilizada fue de 24 mm. Durante la captura del video, se utilizó una retícula de 6×4 para facilitar la visualización y el análisis de la muestra. El enfoque se ajustó de forma manual para obtener una imagen nítida. [32].

3.3.4 Procedimiento experimental

Con el objetivo de llevar a cabo cada una de las experiencias de manera segura, consistente y obtener resultados confiables y reproducibles, se ha desarrollado e implementado el siguiente procedimiento para cada medición del ángulo de contacto:

1. Llenado de la micropipeta: Se ajustó el volumen a $5 \mu\text{L}$ para minimizar vibraciones e influencia de la fuerza peso. Se colocó una punta estéril nueva en cada medición, asegurando un correcto ajuste. Luego se aspiró la solución sumergiendo la punta en un tubo Eppendorf, presionando suavemente el émbolo hasta el primer tope y retirando sin formar burbujas, manteniendo una técnica uniforme.
2. Montaje de la muestra: Previo a cada ensayo, la muestra sólida se limpió con alcohol isopropílico y se frotó con paño de seda para eliminar contaminantes. Posteriormente se ubicó en el portamuestras de forma estable y nivelada.
3. Configuración de la cámara: Se ajustó el encuadre para situar la interfase líquido-sólido en el centro de la cuadrícula, se optimizó la iluminación para resaltar el contorno de la gota y se inició la grabación.
4. Dispensación de la gota: Se inició la grabación desde el software EOS Utility y presionando suavemente el émbolo se depositó la gota evitando burbujas de aire. Se dejó reposar durante 5 minutos y luego se detuvo la grabación.

El procedimiento se repitió en diferentes puntos de la muestra en cada mineral.

3.3.5 Procesamiento de imágenes

A partir de los ensayos grabados, se utilizó el software Adobe Premiere Pro 2023 [33] para extraer imágenes en formato TIFF cada 15 segundos desde el momento exacto en que el líquido entró en contacto con la muestra hasta los últimos 5 minutos, obteniéndose un total de 21 imágenes por ensayo. Posteriormente, se determinaron los ángulos de contacto de cada imagen utilizando el complemento llamado DropSnake en el software de procesamiento de imágenes ImageJ, el cual es de código abierto, gratuito y multiplataforma en Java [34] [35].

DropSnake utiliza una curva B-spline para describir la forma de la gota y optimiza una función de energía de imagen avanzada para guiar la evolución de la curva. Esta función de energía combina componentes de gradiente direccional y basados en región, y también incluye una energía interna que controla la elasticidad de la curva. La elasticidad de la curva permite que DropSnake se adapte a la forma global de la gota, al mismo tiempo que mantiene la posición de los puntos de contacto. Además, el algoritmo de DropSnake utiliza simetría de espejo para detectar la posición de los puntos de contacto de la gota en la superficie sólida [36].

En el procesamiento de imágenes, se llevó a cabo la calibración de la imagen, que tenía una resolución de 309 píxeles/mm. A continuación, se agruparon las imágenes extraídas de cada ensayo en un *Stack*, el cual se convirtió a un tipo de imagen de 8 bits. Se aplicó el algoritmo DropSnake a partir de la imagen inicial, definiendo el contorno de la gota desde el punto de interfase izquierdo hasta el punto de interfase derecho a lo largo de la gota. Luego, se ajustó aproximadamente la posición de los nudos azules utilizando *Fast snake actual curve*, aceptando la curva resultante, donde la curva azul fue reemplazada por la curva roja. Se realizó la evolución de la curva azul con *Snake the curve* para refinarla y obtener los datos de los ángulos de contacto y radio de contacto. Al pasar de una imagen a otra en el *Stack*, la curva se refinó y ajustó automáticamente al contorno de la gota. Cuando fue necesario, se extendió la curva utilizando la simetría de espejo para aprovechar la reflexión de la gota sobre la muestra y mejorar la detección de la posición de los puntos. La **Figura 3.3** muestra los parámetros utilizados en la configuración del complemento, donde los únicos parámetros que variaron entre los ensayos fueron *Knot spacing at interfase* y *Knot spacing ratio* [37].

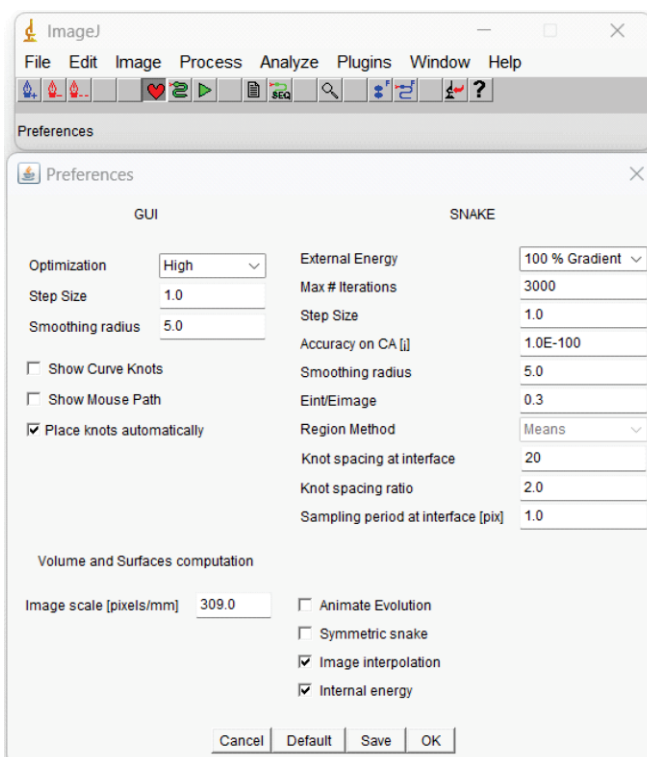


Figura 3.3. Interfaz de DropSnake y parámetros utilizados en el procesamiento de imágenes.

3.3.6 Validación experimental

Para verificar la precisión y confiabilidad de la configuración experimental para medición de ángulos de contacto, se utilizó una lámina de politetrafluoroetileno (PTFE) o teflón como material de referencia. El teflón es reconocido por su marcada hidrofobicidad y baja energía superficial, características que teóricamente se manifiestan en la formación de una gota semiesférica con un ángulo de contacto de aproximadamente 108° cuando se deposita agua sobre su superficie [38].

Siguiendo el mismo procedimiento descrito para los ensayos en las muestras de los minerales, se midió el ángulo de contacto entre el teflón y agua destilada (pH 6.78) a 20°C en 10 repeticiones durante 5 minutos cada una y se obtuvo el ángulo de contacto final mediante el procesamiento de imágenes (**Figura 3.4**). Se promediaron los valores obtenidos para comparar con datos reportados en la literatura. La **Tabla 3.1** muestra los resultados individuales de cada repetición experimental, además del promedio. Se obtuvo un ángulo de contacto promedio de 108.035° , con una desviación estándar de 0.995° .

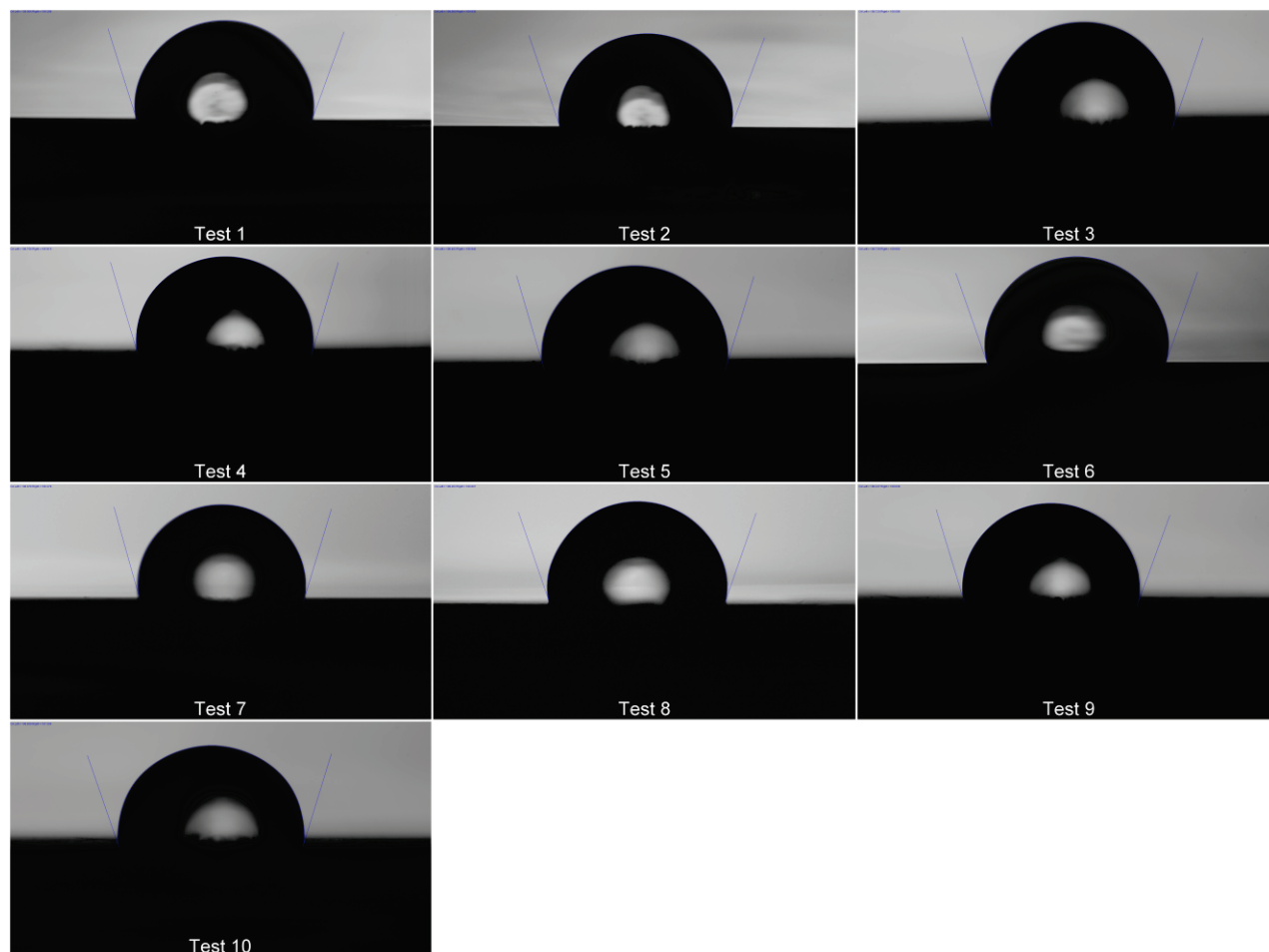


Figura 3.4. Imágenes del ángulo de contacto entre el teflón y agua destilada en los 10 ensayos a los 300 segundos.

Tabla 3.1. Mediciones del ángulo de contacto entre el teflón y agua destilada a los 300 segundos.

Tiempo (s)	Test	ACI (°)	ACD (°)	ACM (°)
300	1	108.004	109.296	108.650
300	2	109.060	109.930	109.495
300	3	108.720	108.006	108.363
300	4	106.758	105.915	106.337
300	5	106.483	106.940	106.712
300	6	108.739	109.603	109.171
300	7	106.078	106.278	106.178
300	8	109.263	108.807	109.035
300	9	108.227	108.639	108.433
300	10	108.659	107.304	107.982
Promedio				108.035

El valor promedio de $108.035^\circ \pm 0.995^\circ$ coincide dentro del error experimental con el ángulo predicho teóricamente y reportado en estudios previos para el sistema teflón-agua. Esta validación experimental comprueba que la metodología y configuración experimental implementadas permiten obtener mediciones de ángulo de contacto precisas y confiables, adecuadas para los objetivos de esta investigación.

3.4. Medición del ángulo de contacto (goniómetro)

3.4.1 Descripción experimental

Para el análisis de los ángulos de contacto también se utilizó un goniómetro Ramé-Hart. El equipo consistía en un soporte ajustable que permitía modificar la altura y el ángulo de la muestra para adaptarla a las necesidades de cada experimento. La muestra sólida y la gota de líquido se depositaban en una cámara acoplada al soporte (**Figura 3.5**).

Como fuente de iluminación se empleó una fuente de luz fría controlada por un transformador, la cual proporcionaba una iluminación uniforme e intensa sobre la muestra para facilitar la visualización y medición de los ángulos. Mediante un visor ajustable se podía observar y medir directamente tanto el ángulo de contacto izquierdo como el derecho, el cual era configurable para obtener la mejor visualización de los ángulos y realizar las mediciones con precisión.

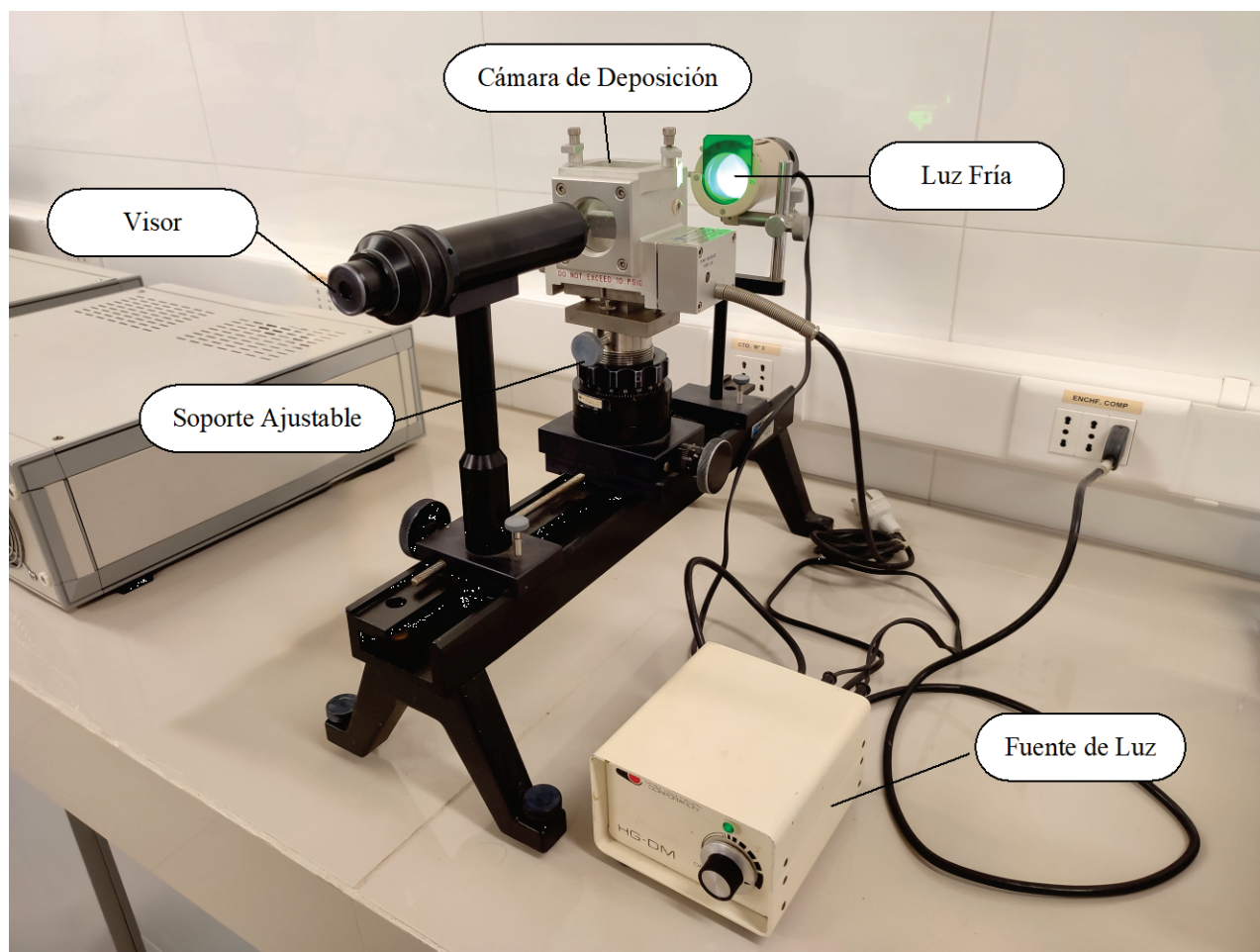


Figura 3.5. Goniómetro Ramé-Hart utilizado en las mediciones de ángulo de contacto.

3.4.2 Configuración experimental

Las mediciones del ángulo de contacto se realizaron siguiendo la misma metodología detallada previamente

para el método de la gota sésil. Específicamente, se llevaron a cabo 10 ensayos en diferentes puntos de la superficie, dejando estabilizar la gota durante 5 minutos en cada caso. Se utilizó el mismo criterio de variación máxima permisible de $\pm 2^\circ$ entre los ángulos de contacto izquierdo y derecho para validar cada medición individual. Esta estandarización metodológica tuvo el propósito de mantener consistencia con el procedimiento empleado en las mediciones de ángulo de contacto mediante análisis de imagen, garantizando así la comparabilidad directa entre los resultados obtenidos con ambos métodos. Todas las pruebas se realizaron a temperatura constante de 20°C para evitar posibles variaciones experimentales

3.4.3 Procedimiento experimental

1. Montaje de la muestra: Previo a cada ensayo, se limpió cuidadosamente con alcohol isopropílico y un paño de seda para eliminar las impurezas presentes en la muestra. A continuación, se colocó en la cámara de porta muestra y se ajustó el soporte de tal forma que la superficie fuera visible en el visor del goniómetro.
2. Llenado y dispensación del líquido: Usando una micropipeta, se ajustó un volumen de $5\ \mu\text{L}$ con una punta estéril nueva y se impulsó suavemente el embolo para aspirar la solución ácida de aglomeración. Con movimientos delicados, se depositó la gota sobre la superficie mineral dirigiendo la punta de la micropipeta, asegurándose de que la gota no contuviese burbujas de aire.
3. Medición del ángulo de contacto: Mientras transcurría el tiempo, se enfocó rápidamente la gota, donde usando el retículo se alinearon las marcas superior e inferior para medir el ángulo de contacto izquierdo y derecho al minuto 5.

Se repitió el procedimiento con mediciones en diferentes puntos de cada muestra con ambos minerales.

3.5. Ensayos de infiltración

El objetivo de este ensayo es cuantificar la variación de la altura de infiltración de una solución ácida de aglomeración en los poros de las muestras de ambos minerales en estudio a lo largo del tiempo. Se plantean dos condiciones experimentales: una condición saturada y otra no saturada.

3.5.1 Preparación de las muestras

Preparación mecánica de las muestras: Se procedió a cortar 11 muestras de cada uno de los minerales, en una sierra circular con disco de diamante, cuyas dimensiones fueron de $35\ \text{mm}$ (largo) \times $35\ \text{mm}$ (ancho) \times $35\ \text{mm}$ (altura). Posteriormente, dichas muestras se lijaron en húmedo en las 6 caras usando una lijadora manual DS20, donde al cambiar de un grano a otro la superficie se rotó en 90° (los granos de lija son 600, 400, 320, 240 respectivamente), el tiempo de lijado en cada grano fue de 10 minutos. Finalmente, se usó un baño

ultrasónico de acetona durante 15 minutos para eliminar las impurezas en los poros, y se secó en el horno durante 24 horas.

Preparación de la solución ácida de aglomeración: La solución utilizada en los ensayos de infiltración fue preparada con la misma concentración que en las pruebas de ángulo de contacto (14% de ácido sulfúrico y 86% de agua destilada). Se midieron con precisión 714 mL de ácido sulfúrico concentrado al 98% y se agregaron lentamente a 1 litro de agua destilada previamente colocada en un matraz aforado de 2 litros. Luego de dejar enfriar a temperatura ambiente, se enrasó el matraz con agua destilada y se homogenizó la solución antes de usarla.

3.5.2 Configuración experimental

La **Figura 3.6** ilustra la configuración experimental del ensayos de infiltración. El ensayo bajo condiciones no saturadas se realizó colocando tres muestras de cada mineral en un recipiente de acrílico, donde se añadió solución hasta alcanzar una profundidad de 5 mm desde la base del recipiente, con el objetivo de cubrir parcialmente el mineral. Esta configuración buscaba minimizar la influencia de la presión hidrostática sobre las muestras. El uso de tres muestras buscaba disponer de replicados para disminuir la variación entre mediciones. Mediante grabación con una cámara de celular durante 48 horas, se documentó la evolución de la altura de infiltración a lo largo del tiempo. En contraste, en la condición saturada se llenó la bandeja de plástico con la solución hasta alcanzar una altura de 10 mm desde la cara superior de 8 muestras representativas de cada mineral. Cada tres días se extrajeron muestras para registrar la altura infiltrada, buscando emular el seguimiento temporal en una única muestra. Ambos ensayos se realizaron inicialmente a una temperatura ambiente de 21 °C.

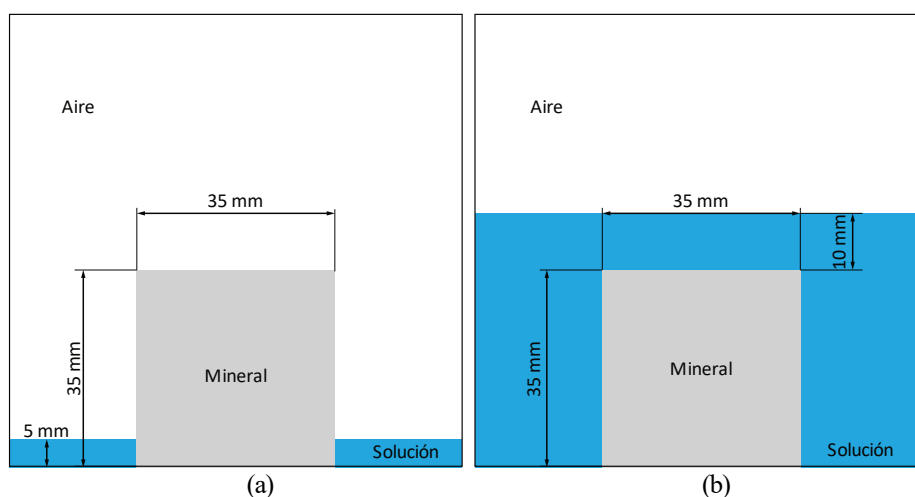


Figura 3.6. Configuración experimental del ensayo de infiltración. (a) condición no saturada; (b) condición saturada.

3.5.3 Procedimiento experimental

A. *Condición no saturada*

1. Preparación de las muestras: Se midió la masa individual de las 3 muestras en una balanza digital y se registraron sus valores. Posteriormente se marcó el frente de cada muestra cada 5.0 mm para facilitar la medición de la altura de infiltración.
2. Preparación del recipiente de acrílico: En el recipiente de acrílico, se depositó una pequeña cantidad de solución ácida de aglomeración con el fin homogeneizar la base de esta. Posteriormente se pusieron las muestras en el recipiente, una al lado de otra y rápidamente se llenó con la solución hasta una altura de 5 mm en las muestras desde la base. Se utilizó una regla con un soporte para asegurar una mayor precisión en la medición de la altura. Se enumeró cada muestra en el recipiente.
3. Inicio de la grabación del ensayo. Se procedió a grabar el ensayo durante un periodo de 48 horas. Al finalizar las 48 horas, las muestras se manipularon cuidadosamente y se volvieron a medir sus masas en una placa Petri utilizando la balanza digital, registrando los nuevos valores.

Se procedió de la misma forma con las muestras del otro mineral.

B. *Condición saturada*

1. Preparación de la bandeja de plástico: En la bandeja de plástico, se depositó una pequeña cantidad de solución ácida de aglomeración con el objetivo de homogeneizar la base. A continuación, se colocaron las 16 muestras (8 de cada mineral) en la bandeja, y se llenó hasta alcanzar una altura de 10 mm desde la cara superior. Las muestras fueron enumeradas para su posterior identificación (**Figura 3.7**).
2. Extracción de las muestras: Cada 3 días, a la misma hora, se extrajo una muestra de cada mineral y se cortó por la mitad utilizando un esmeril angular. Posteriormente, se midió la altura infiltrada de cada mineral con una regla milimétrica, considerando solo la cara inferior desde la base hacia arriba, sin tomar en cuenta las caras laterales ni superior. Esto se realizó así porque la cara inferior es donde se presenta principalmente la infiltración vertical en estas condiciones experimentales. Los valores de altura fueron registrados mediante fotografías para su posterior análisis.

3.5.4 Procesamiento de imágenes

A. *Condición no saturada*

De los dos ensayos grabados, se empleó el software Adobe Premiere Pro 2023 para extraer imágenes en formato TIFF. Inicialmente, se realizaron extracciones de imágenes a intervalos de 10 minutos desde el minuto 0 hasta la primera hora, y a partir de la primera hora, se extrajo una imagen cada hora hasta completar un tiempo total de 48 horas. Este enfoque de extracción de imágenes se implementó con el objetivo de

obtener curvas más pronunciadas que proporcionaran una representación detallada de los cambios ocurridos durante el ensayo.

Las imágenes obtenidas fueron procesadas con el software ImageJ para mejorar su calidad. Se ajustaron el contraste y brillo de cada imagen con el fin de distinguir claramente la altura infiltrada. Sobre las imágenes procesadas se midió con la herramienta de ImageJ la máxima altura alcanzada por el fluido desde la base de la muestra. Esta medición se realizó trazando una línea horizontal desde la regla hasta el punto más alto de ascenso del fluido. La altura registrada de esta manera fue utilizada como dato representativo de la infiltración ocurrida en cada intervalo de tiempo analizado.

B. Condición saturada

De las 16 imágenes obtenidas (8 por mineral), se procesaron con ImageJ midiendo en cada una la máxima altura infiltrada desde la base, excluyendo cualquier infiltración presente en los laterales y en la parte superior de las muestras. Este enfoque se implementó para obtener una medida precisa de la altura de infiltración, centrándose únicamente en la penetración del líquido en el interior de las muestras, sin considerar los bordes externos.

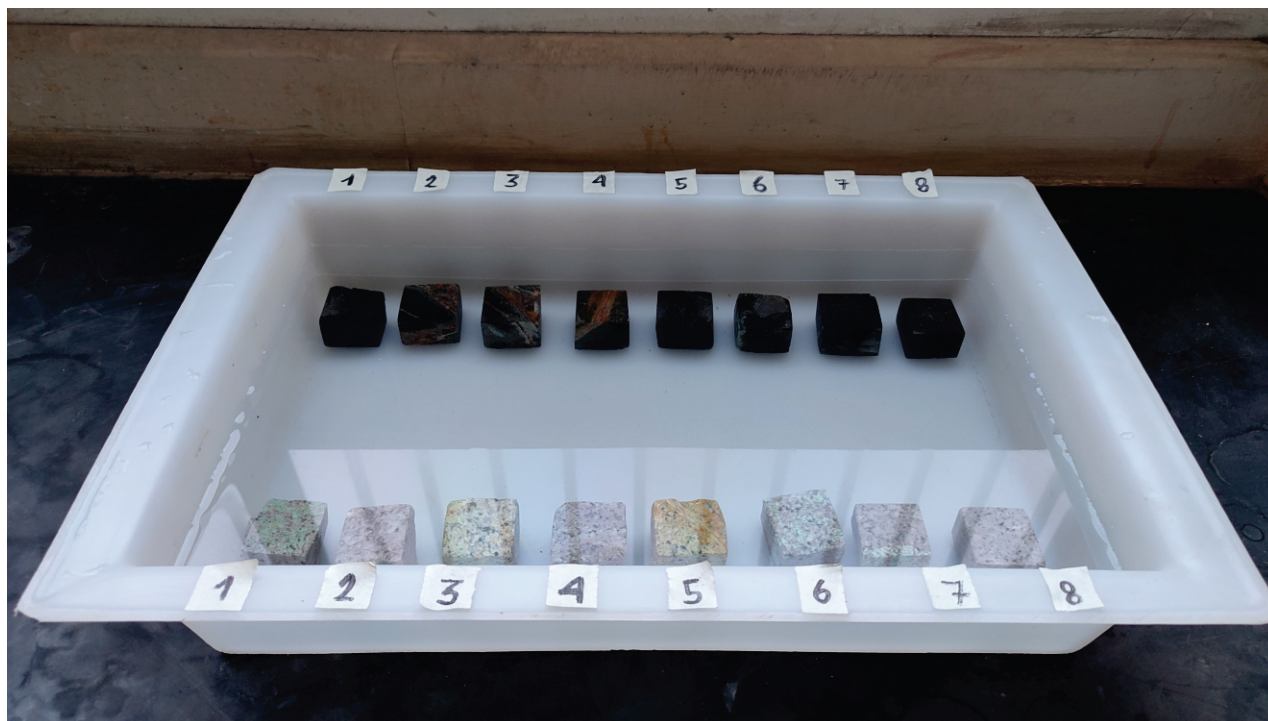


Figura 3.7. Bandeja con las 16 muestras enumeradas en el ensayo de infiltración condición saturada.

Capítulo 4. Metodología Numérica

4.1. Simulaciones por realizar

Se realizaron simulaciones numéricas bidimensionales de flujo capilar mediante el software OpenFOAM 10, aplicando la técnica de Dinámica de Fluidos Computacional (CFD). El propósito de estas simulaciones fue explorar dinámica de infiltración de una solución ácida de aglomeración al 14% de ácido sulfúrico, utilizada previamente en los ensayos experimentales, al hacerle variar su tensión superficial dentro de un modelo de mineral bidimensional, bajo condiciones tanto de saturación como de no saturación.

Con el fin de simplificar el proceso de mallado y en respuesta a las limitaciones de hardware disponible, se optó por un tamaño de poro uniforme como capilares de 300 micras de diámetro distribuidos de forma aleatoria, decisión basada en la necesidad de equilibrar la precisión del modelo y la viabilidad computacional, ya que tamaños de poro inferiores incrementan significativamente el tiempo de simulación, aunque esta simplificación limita la capacidad del modelo para representar con exactitud el comportamiento del flujo de fluidos a través del mineral, al asumir un flujo fluido uniforme a través de estos poros de tamaño homogéneo, el modelo no logra capturar las variaciones locales en las tasas de infiltración, esenciales para entender cómo se mueve el fluido en entornos reales. No obstante, el modelo se diseñó para incluir una diversidad de tipos de poros, tanto cerrados como abiertos, lo que permitió realizar un análisis detallado sobre el impacto de la dinámica de flujo de líquido y aire en el mineral ideal.

Con el fin de simplificar el modelo, se empleó un valor constante para el ángulo de contacto experimental, tratando la muestra como si estuviese compuesta por un único sólido, simplificación que no considera la diversidad de minerales en una muestra típica, cada uno con diferentes propiedades de mojabilidad que pueden influir significativamente en las tasas de infiltración. Además, a pesar de utilizar una solución ácida en las simulaciones, el enfoque se centró exclusivamente en la hidrodinámica, sin tomar en cuenta la reactividad química entre el ácido y los minerales.

Las simulaciones se llevaron a cabo en un procesador Intel® Xeon® Platinum 8268 de 2.90GHz con 48 núcleos trabajando en paralelo, 2 hilos por núcleo y 256 GB de RAM, perteneciente al Departamento de Ingeniería Metalúrgica, UdeC.

Con el objetivo de incrementar el realismo de la simulaciones, se integraron datos experimentales específicos, incluido el ángulo de contacto promedio entre la muestra del mineral de DGM y la solución ácida de aglomeración (27°). Además, se tomaron en cuenta las propiedades fisicoquímicas de la solución, incluyendo tensión superficial (66 mN/m), densidad (1.12 g/cm³) y viscosidad cinemática (8.39×10⁻⁶ m²/s) (ver Anexo D).

Se realizaron un total de 8 simulaciones, explorando una variación controlada de la tensión superficial entre 62 y 151 mN/m, y el ángulo de contacto resultante entre 10° y 100° , extrapolada según la ecuación de Young-Dupré. Las simulaciones consideraron dos condiciones iniciales de saturación: i) no saturada, con un nivel inicial de 5 mm de solución, y ii) saturada, cubriendo totalmente el modelo de mineral ideal. Este enfoque ofreció una comprensión más profunda de cómo las variaciones en la tensión superficial del líquido pueden afectar la mojabilidad y, en consecuencia, la infiltración del líquido en el mineral bajo diversas condiciones de saturación. La **Tabla 4.1** muestra los parámetros utilizados en las simulaciones para ambas condiciones.

Tabla 4.1. Parámetros de las simulaciones a realizar para las 2 condiciones.

Tensión Superficial (mN/m)	Ángulo de Contacto ($^\circ$)
62.881	10
66.000	28
106.341	80
151.150	100

4.2. Geometría del problema

El recipiente se modeló como un cuadrado de 32 mm de alto y 32 mm de ancho. Se estableció la dirección Y como eje principal del flujo. La geometría se dividió en 4 regiones para asignar condiciones de frontera específicas que representen el recipiente, denominadas: superficie, fondo, pared izquierda y derecha (**Figura 4.1**).

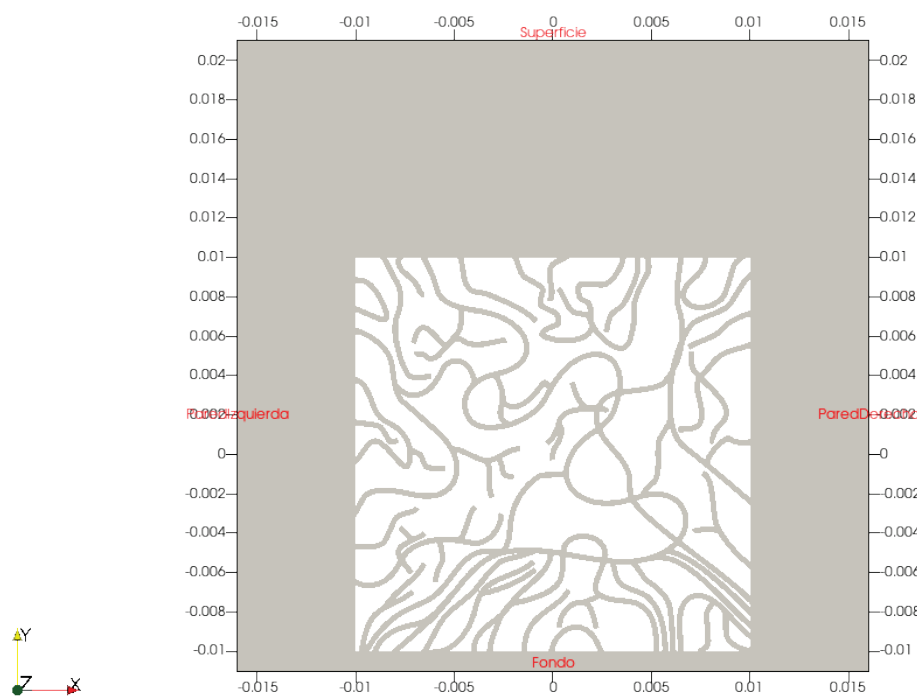


Figura 4.1 Dominio computacional y condiciones de frontera. Vista frontal.

En el interior se modeló el mineral, usando el software Blender como un cuadrado de 20 (largo) mm \times 20

(ancho) mm. Dentro de éste se generaron capilares de 300 micras de diámetro distribuidos aleatoriamente.

4.3. Malla numérica

Para la simulación se empleó una estrategia de mallado dual. En el espacio exterior al mineral se generó una malla hexaédrica estructurada de 0.2 mm en ambas direcciones mediante la herramienta *blockMesh*. Este tamaño de celda captura adecuadamente las interacciones fluido-mineral en estas regiones menos críticas.

Por otro lado, en el interior del mineral se requiere una resolución más fina dada su importancia en el fenómeno físico en estudio por el cual se construyó una malla base hexaédrica estructurada de 10 micras. Esta malla fina permite representar con precisión los poros del mineral a escalas de 300 micras.

Posteriormente, la malla de 50 micras fue adaptada y refinada de forma automática mediante *snappyHexMesh*, generando una malla estructurada hexaédrica que se ajusta a la geometría irregular del mineral. Esta flexibilidad en el mallado garantiza la captura efectiva de los detalles finos de la microestructura mineral.

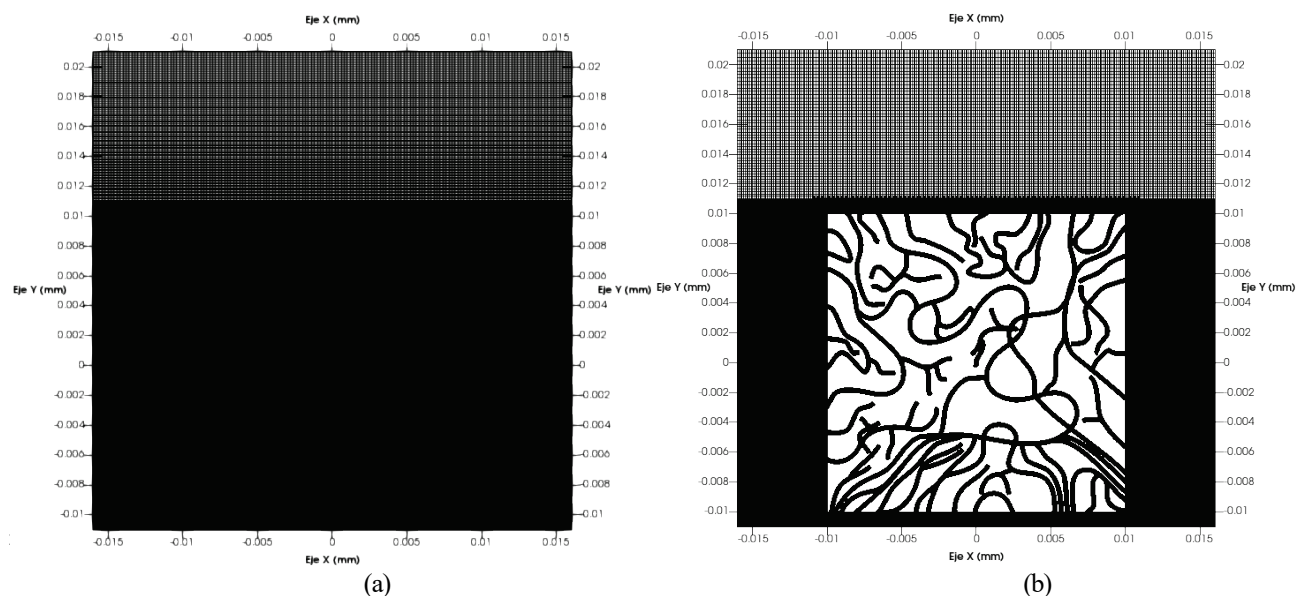


Figura 4.2. Malla numérica utilizada.

(a) creada utilizando *blockMesh*; (b) creada utilizando *snappyHexMesh*. Vista frontal

La malla numérica final contiene 376037 celdas, con 808760 puntos y 15332525 caras.

4.4. Condiciones de bordes

4.4.1 Condición de borde de velocidad

Las condiciones de borde para el campo de velocidad se establecieron de la siguiente manera: en el interior del mineral se utilizó una condición de no deslizamiento (*noSlip*) para acoplar la velocidad calculada en los poros con la del fluido externo, representando adecuadamente el movimiento generado por la presión capilar

e hidrostática en la microescala de la porosidad mineral. En la superficie libre superior se aplicó una condición de velocidad de entrada/salida ajustada a la presión exterior (*pressureInletOutletVelocity*) permitiendo el movimiento inducido por dicha presión atmosférica. Finalmente, en las paredes laterales y el fondo del dominio se impuso una condición de no deslizamiento (*noSlip*), representada matemáticamente como $u|_{\partial\Omega} = 0$ que fija una velocidad de cero en estas fronteras sólidas (ver Anexo E.1.1).

4.4.2 Condición de borde de presión

Se definió como condiciones de borde para el campo de presión del siguiente modo: dentro de la geometría porosa del mineral se utilizó una condición de flujo fijo de presión *fixedFluxPressure* que modela el flujo inducido por diferencias de presión entre los poros a nivel microscópico y el fluido circundante a nivel macroscópico. En la superficie libre superior se aplicó una condición de presión total (*totalPressure*), $p = P_{atm}$ para imponer el valor de presión atmosférica exterior. En las paredes laterales y fondo del recipiente se impuso una condición de gradiente nulo (*zeroGradient*) $\nabla p \cdot \vec{n} = 0$, con \vec{n} siendo la normal exterior, representando variación nula de presión normal a estas fronteras sólidas y un campo dictado por el fluido en reposo (ver Anexo E.1.2).

4.4.3 Condición de borde de la interfase solución-aire

En el mineral, se aplicó una condición de contorno de tipo *constantAlphaContactAngle*. Esta condición permitió establecer un ángulo de contacto constante, brindando una representación precisa del comportamiento de la interfase líquido-mineral en términos de su interacción física directa. En la superficie del recipiente, se eligió una condición de contorno *inletOutlet*, ya permite que el aire entre y/o salga de manera natural resultado de las variaciones de presión durante la simulación. Por el contrario, para todas las demás superficies en el dominio de simulación se definió la condición *zeroGradient*. Esta configuración aseguró que dichas superficies no influenciaran la simulación, permitiendo centrar la atención y el análisis exclusivamente en el comportamiento de la interacción entre el líquido y el mineral (ver Anexo E.1.3).

4.4.4 Condición inicial

El modelo simula el instante cuando el mineral es introducido en el recipiente con líquido, bajo la suposición inicial de que los poros contienen sólo aire. Se definieron dos condiciones iniciales: en la primera, denominada no saturada, el nivel de líquido se estableció 5 mm por encima de la base del mineral, con el resto del recipiente ocupado por aire. En la segunda, denominada saturada, el líquido cubrió totalmente el mineral, fijando su nivel 10 mm por encima de la superficie superior, dejando aire sólo en el interior de la porosidad. Estas dos configuraciones iniciales (ver **Figura 4.3**) permitieron estudiar la evolución del frente de avance del líquido dentro de los poros del mineral, partiendo de un estado parcialmente saturado y otro

completamente saturado. El modelado de estas condiciones transitorias resulta clave para comprender la dinámica de imbibición capilar desde el momento que el mineral entra en contacto con el líquido (ver Anexo E.3.1).

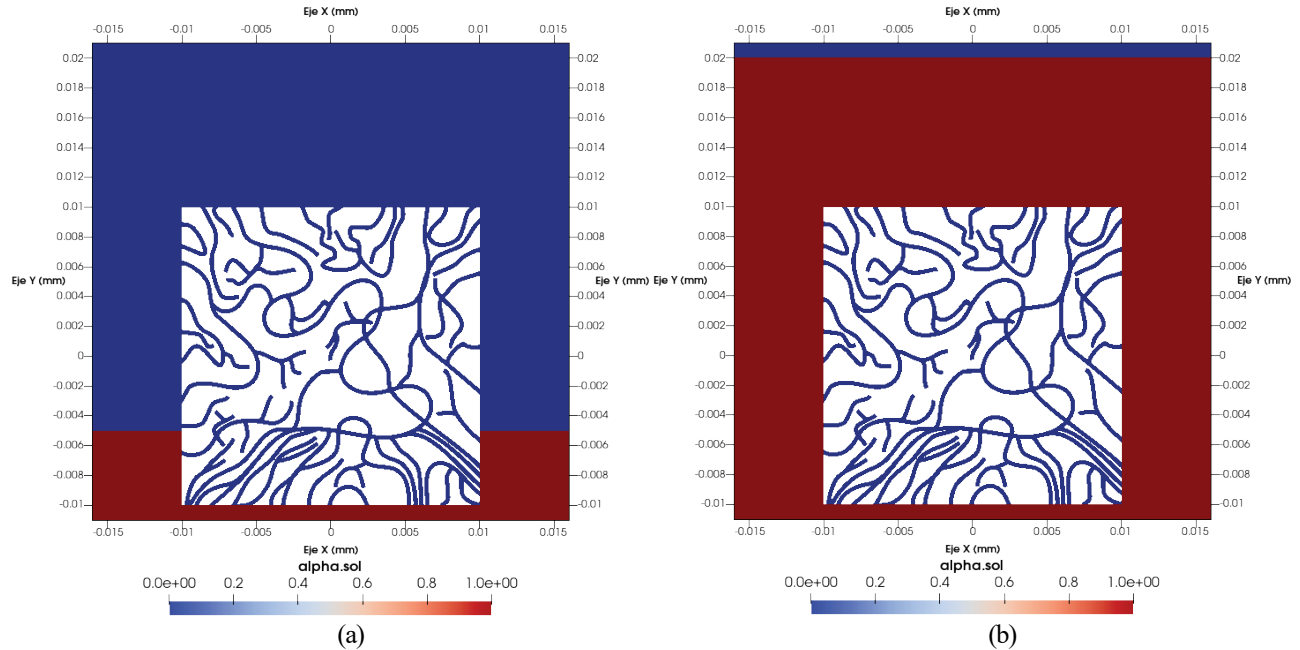


Figura 4.3. Condición inicial del modelo.
(a) condición no saturada; (b) condición saturada.

4.4.5 Discretización temporal

Para garantizar la estabilidad de los modelos numéricos que emplean esquemas explícitos, como el utilizado en este estudio, OpenFOAM calcula el número de Courant (C_o) [39] en cada celda del mallado computacional. Tal como está implementado en OpenFOAM, el cálculo del número de Courant se realiza internamente de la siguiente manera: primero se obtiene la velocidad v del flujo en cada cara de la celda a partir del campo de velocidades resuelto. Luego se calcula el flujo φ a través de cada cara según $\varphi = v \cdot S$, donde S es el vector de área de la cara. Este flujo en cada cara se suma para obtener el flujo total a través de la celda, el cual se divide por el volumen V de dicha celda, resultando en el flujo por unidad de volumen. Finalmente, este valor se multiplica por el paso de tiempo Δt y por 0.5 para obtener el número de Courant [26] según la ecuación (32):

$$C_o = 0.5 \left(\frac{\varphi}{V} \right) \Delta t \quad (32)$$

Un modelo explícito es estable cuando el número de Courant es menor que 1, por lo que la discretización temporal se eligió de tal forma que esta condición se asegure. Todas las simulaciones numéricas se ejecutaron simulando un periodo de 0.5 segundos. Los valores obtenidos de número de Courant para las 8 simulaciones, con una discretización temporal de Δt igual a 1×10^{-3} s estuvieron entre 0.3 y 0.9.

Capítulo 5. Resultados y Discusiones

5.1. Caracterización química y mineralógica

5.1.1 Muestra del mineral de División Gabriela Mistral

La caracterización mediante fluorescencia de rayos X (FRX) reveló un contenido predominante de SiO₂ (52.93%) y Al₂O₃ (19.90%), congruente con la presencia de minerales como cuarzo y feldespatos. También se detectó elementos como Fe₂O₃ (6.81%), MgO (6.49%) y TiO₂ (1.22%), congruentes con la presencia de minerales como biotita y clorita. Además, algunos elementos alcalinos y alcalinotérreos de Na₂O (4.36%), K₂O (4.07%), CaO (2.50%), asociados a feldespatos alcalinos, como albita, así como algunas micas como biotita. Finalmente, detectaron elementos trazas de CuO (0.74%), P₂O₅ (0.37%), BaO (0.08%), MnO (0.07%), SrO (0.05%), WO₃ (0.05%), SO₃ (0.04%), V₂O₅ (0.04%) y Rb₂O (0.02%). Por último, se encontraron algunos elementos halógenos como F (0.11%) y Cl (0.05%).

La **Figura 5.1** ilustra el difractograma obtenido a partir de la técnica de difracción de rayos X (DRX) aplicada a la muestra del mineral de DGM. El patrón de difracción presenta un *peak* sobresaliente en un 2θ de 26.5°, característico de la presencia de una fase cristalina de cuarzo. Esta muestra constituyó cerca del 24.9% en peso de la composición total de la muestra. Asimismo, se distingue otro *peak* notorio en un 2θ de 27.8°, atribuible a la presencia de plagioclasa, concretamente, albita ((Na, Ca) Al (Si, Al)₃O₈), la cual constituyó el 50.1% en peso de la muestra.

El análisis mediante DRX permitió también la identificación de otras fases presentes en proporciones menores. Así, varios *peaks* de intensidad media apuntan a la existencia de biotita (KMg_{0.83}Ti_{0.17}Fe_{1.43}Al_{1.92}S_{2.62}O_{10.46}(OH)_{1.54}), que representó un 17.8% en peso de la muestra. Por último, el 7.2% en peso restante de la muestra, lo constituye varios *peaks* de menor intensidad que sugirieron la presencia de clorita, específicamente una variante de clinocloro ((Mg,Fe)₃(Si, Al)₄O₁₀(OH)₂(Mg,Fe)₃(OH)₆) (ver Anexo A). Estos resultados concordaron con la composición química e indican el desarrollo de una red porosa secundaria, ya que la incorporación de minerales como biotita y clorita en la muestra del mineral de DGM aporta cationes de Fe, Mg y Al, que además de aportar más hidrofiliidad, también que generan distorsiones en la red cristalina silicatada, promoviendo el desarrollo de porosidad secundaria y defectos [40]. Por ende, la red de poros en la muestra del mineral de DGM tenderá a ser más fina, ramificada e irregular, incrementando el área superficial disponible para la mojabilidad.

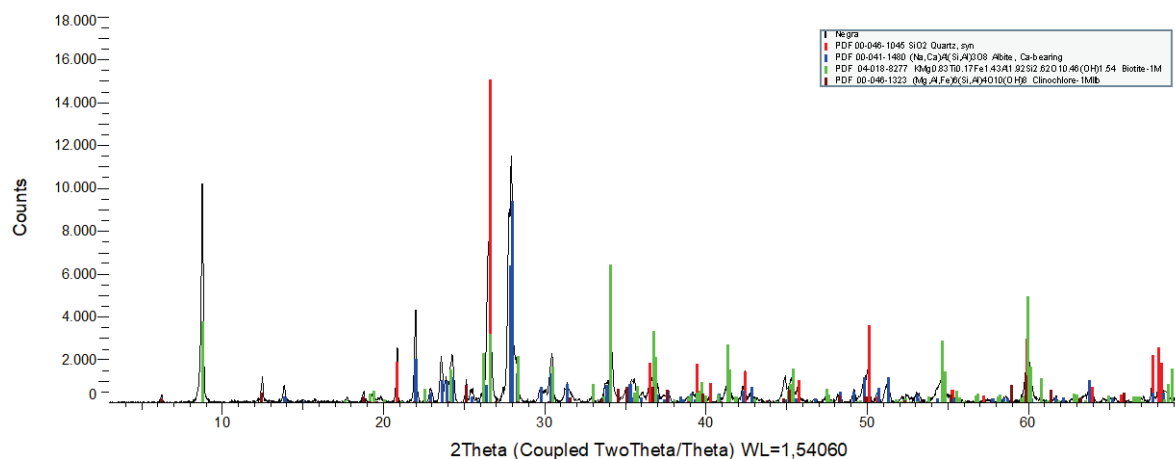


Figura 5.1. Difractograma obtenido mediante DRX en la muestra del mineral de DGM.

5.1.2 Muestra del mineral de División Radomiro Tomic

El análisis por fluorescencia de rayos X reveló una gran cantidad de SiO_2 (71.97%) en comparación a la muestra del mineral de DGM lo que sugiere más presencia abundante de cuarzo. Asimismo, se detectó un porcentaje importante de Al_2O_3 (14.90%), aunque menor que en la muestra del mineral de DGM, lo cual indica una menor presencia de minerales como feldespatos aluminosos. También se encontraron otros elementos como: K_2O (4.81%), Na_2O (4.23%), CaO (1.35%) y Fe_2O_3 (1.09%), referentes a feldespatos alcalinos, como albita y feldespatos potásicos como ortoclasa. En menor proporción se detectaron trazas de: CuO (0.39%), WO_3 (0.36%), MgO (0.27%), TiO_2 (0.17%), BaO (0.06%), SO_3 (0.06%) y P_2O_5 (0.06%) Además, se determinó la presencia de flúor en una cantidad aproximada del 0.07% y cloro en un 0.05%.

La **Figura 5.2** da a conocer el difractograma de la muestra del mineral de DRT. Se destaca notablemente un *peak* principal con un ángulo 2θ de 26.8° , correspondiente a la fase cristalina de cuarzo, la cual representa el 42.7% en peso de la muestra. Así mismo, se observa un *peak* sobresaliente con un 2θ de 27.8° , indicando la presencia de albita ((Na, Ca) Al (Si, Al) $_3\text{O}_8$) que constituye el 40.7% del peso total. Por otro lado, se apreciaron algunos *peak* de menores intensidades que indican la presencia de la fase cristalina ortoclasa (KAlSi_3O_8) perteneciente al 15.3% y una fase en menor proporción equivalente al 1.3% de caolinita ($\text{Al}_2\text{Si}_2\text{O}_5(\text{OH})_4$). La estructura más ordenada y composición predominantemente de cuarzo y feldespato de la muestra del mineral de DRT dificultan la formación de microporosidad [41], presentando una porosidad de tamaño mayor y menos conectada, con menor área interfacial disponible para interactuar con soluciones acuosas (ver Anexo A).

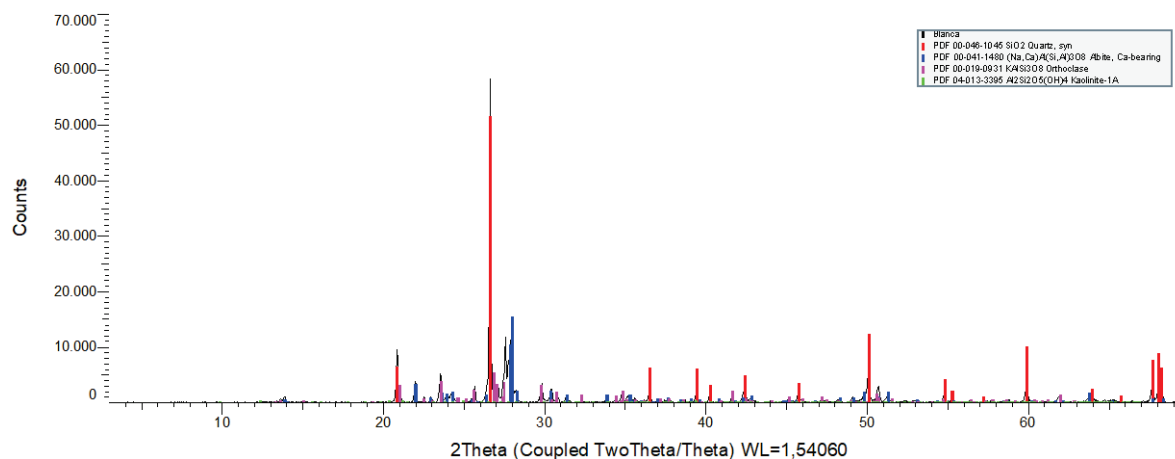


Figura 5.2. Difractograma obtenido mediante DRX en la muestra del mineral de DRT.

En general, las muestras de los mineral de DGM y DRT poseen una tendencia predominante hacia la interacción con la solución, debido a su alto contenido en silicio y aluminio, influencia que se ve reflejada en los minerales que la componen, los cuales confieren una alta energía superficial a las muestras. La mayor presencia de silicio en la muestra del mineral de DRT implicaría necesariamente una hidrofiliidad superior a la muestra del mineral de DGM, a pesar de este de poseer mayor contenido de aluminio, debido a la capacidad que tiene el silicio de formar enlaces covalentes. Esta característica del silicio, esencial en la composición del cuarzo y de los feldespatos, contribuye a la alta energía superficial de estos minerales y, por tanto, una tendencia a interactuar favorablemente con soluciones polares como el ácido sulfúrico diluido, frente al cual son químicamente inertes, por lo cual, es probable que mantengan su hidrofiliidad inherente.

Por otro lado, el mayor contenido de aluminio en la muestra del mineral de DGM puede contribuir a una mojabilidad ligeramente menor en comparación con el silicio, el cual introduce un factor adicional a través de su participación en minerales como las plagioclasas y la biotita. Estos minerales, al incorporar aluminio en su estructura, pueden experimentar variaciones en su interacción con soluciones. Además, el aluminio puede reaccionar con el ácido sulfúrico formando sulfato de aluminio soluble, incrementando así la hidrofiliidad superficial en estas zonas.

Un aspecto distintivo de la muestra del mineral de DGM es su mayor contenido elementos de Fe, Mg y Ti lo cuales le aportan una hidrofiliidad moderada a la muestra, pero en conjunto una alta hidrofiliidad, debido a su alto valor en la energía superficial. Estos elementos pueden influir en la reactividad química de la muestra, particularmente en presencia de ácidos, donde podrían formar sulfatos. Aunque esta reacción puede no aumentar significativamente la afinidad por la solución sí introduce una mayor variabilidad en las propiedades superficiales y químicas de la muestra del mineral de DGM.

En cuanto a los elementos alcalinos y alcalinotérreos, como Na, K, Ca, presentes en cantidades similares en ambas muestras, su influencia en la estructura cristalina de los minerales podría afectar ligeramente las

propiedades superficiales. Por ejemplo, cambios en la composición de los feldespatos, como la sustitución de potasio por sodio, pueden alterar su interacción con la solución. Sin embargo, su impacto directo es menos pronunciado en comparación con los componentes principales como sílice y aluminio.

Los elementos trazas, presentes en bajas concentraciones en ambas muestras, tienen un impacto más localizado sobre la reactividad química y la mojabilidad, a pesar de que algunos posean una alta energía superficial, incluso mayor que los elementos principales, como el CuO, WO₃ o V₂O₅ [44]. Aunque no modifican significativamente la hidrofiliidad general de las muestras, son importantes en reacciones químicas específicas y pueden influir en la formación de minerales secundarios.

La **Tabla 5.1** detalla la composición química de cada muestra obtenidos mediante FRX, indicando los porcentajes de cada elemento presente. Junto a esto, se muestra la energía superficial correspondiente a cada elemento, también proporciona una evaluación del grado de hidrofiliidad que cada elemento aporta a la muestra, basándose en su composición y energía superficial. Esta información permite una comparación directa entre los diferentes elementos en términos de su contribución a la mojabilidad de las muestras.

Tabla 5.1. Composición química obtenido mediante FRX, energía superficial de elementos y su contribución a la hidrofiliidad en las muestras de los minerales de DGM y DRT.

Elementos	Energía Superficial (J/m ²)	Composición (%)		Hidrofiliidad	
		Muestra DGM	Muestra DRT	Muestra DGM	Muestra DRT
SiO ₂	1.347 ^a	52.93	71.97	Alta	Alta
Al ₂ O ₃	1.270 ^b	19.9	14.92	Alta	Alta
Fe ₂ O ₃	2.473 ^b	6.81	1.09	Moderada	Baja
MgO	0.868 ^b	6.49	0.27	Moderada	Baja
Na ₂ O	0.268 ^b	4.36	4.23	Moderada	Moderada
K ₂ O	0.143 ^b	4.07	4.81	Moderada	Moderada
CaO	0.564 ^b	2.50	1.35	Moderada	Moderada
CuO	2.118 ^b	0.74	0.39	Baja	Baja
WO ₃	4.314 ^b	0.05	0.36	Baja	Baja
TiO ₂	2.634 ^b	1.22	0.17	Moderada	Baja
BaO	0.375 ^b	0.08	0.06	Baja	Baja
Rb ₂ O	0.111 ^b	0.02	*	Baja	-
SrO	0.423 ^b	0.05	0.05	Baja	Baja
Cl	-	0.05	0.05	Baja	Baja
P ₂ O ₅	-	0.37	0.06	Baja	Baja
SO ₃	-	0.04	0.06	Baja	Baja
F	-	0.11	0.07	Baja	Baja
V ₂ O ₅	3.303 ^b	0.04	-	Baja	Baja
MnO	3.100 ^b	0.07	?	Baja	-

^a Valor ponderado. Ref. [43].

^b Valor ponderado. Ref. [44].

La presencia de albita en las muestras, especialmente notoria en la muestra del mineral de DGM, confiere una alta facilidad de mojado. Al ser un feldespato sódico con enlaces iónicos Na-O, la albita tiene una energía superficial relativamente alta, reportada en torno a los 72.79 mJ/m² [42], lo que promueve la mojabilidad y la interacción con moléculas de la solución.

El cuarzo, por su parte, proporciona una hidrofiliidad moderada pero menor que la albita. La muestra del mineral de DRT, con un mayor porcentaje de cuarzo (42.7%) en comparación con la muestra del mineral de DGM (24.9%), podría tener una hidrofiliidad ligeramente más baja que la contribución de la albita. La estructura cristalina del cuarzo y su composición química, con enlaces covalentes Si-O, forman una red tetraédrica eléctricamente neutra. Aunque no ioniza en contacto con el agua, puede establecer enlaces de hidrógeno con el H₂O, incrementando su afinidad por el agua con una energía superficial de aproximadamente 55.37 mJ/m² [42].

La biotita, presente solamente en la muestra del mineral de DGM, confiere a la muestra una superficie más heterogénea. Su estructura laminar y la presencia de intercambio iónico resultan en una energía superficial de unos 67.41 mJ/m² [42], lo que introduce variaciones en la hidrofiliidad del muestra del mineral de DGM en comparación con los silicatos más homogéneos como el cuarzo y la albita. Además, la presencia de clorita, con una estructura en capas similar a la biotita, la clorita puede presentar una energía superficial y una hidrofiliidad variables. Aunque su energía superficial podría ser similar a la biotita, su composición y estructura más complejas podrían afectar la hidrofiliidad de diferentes maneras.

En contraste, la caolinita presente en una proporción menor en la muestra del mineral de DRT, tiene una influencia notable en la hidrofiliidad de la muestra debido a su alta energía superficial de 86.95 mJ/m² [42]. Este valor sugiere una mojabilidad significativa, que se debe en gran parte a su estructura en capas y la presencia de grupos hidroxilo (OH) en la superficie, los que pueden formar enlaces de hidrógeno con las moléculas de agua, lo que aumenta notablemente la hidrofiliidad de la caolinita. Además, la ortoclasa en la muestra del mineral de DRT, probablemente tenga una energía superficial menor que la caolinita, aunque no se dispone de un valor específico. Su estructura cristalina y la presencia de enlaces iónicos K-O contribuyen a una hidrofiliidad moderada, complementando al cuarzo y la albita en la muestra.

5.2. Caracterización de la porosidad

La **Tabla 5.2** revela los resultados del área superficial específica de las muestras de los minerales estudiados. Específicamente, el coeficiente de Brunauer-Emmett-Teller (BET) que cuantifica la superficie específica disponible para la adsorción por unidad de masa de cada mineral, se destaca que la muestra del mineral DGM exhibe un área superficial de 6.051 m²/g. Este valor supera notablemente a la muestra del mineral de DRT, el cual cuenta con un área específica de 2.471 m²/g. Esta diferencia sugiere una mayor capacidad de adsorción en la muestra del mineral de DGM en comparación con de la muestra del mineral de DRT, debido a una indicativa de una red de poros más fina en la muestra del mineral de DGM. Este tipo de estructura porosa favorece la impregnación del líquido, maximizando la superficie de contacto sólido-líquido,

mejorando la mojabilidad de acuerdo con el modelo de Wenzel. En contraste, la muestra del mineral de DRT presenta una porosidad más gruesa, con mesoporos más amplios donde la relación área/volumen es menor, resultando en fuerzas capilares más débiles que dificultan la retención de líquidos. Además, se registran bajos valores de desviación estándar para la superficie específica en ambos minerales, lo que indica una variabilidad mínima en las mediciones realizadas. Sin embargo, se debe tener en cuenta el error relativo del 9% presente en ambos minerales.

El valor de “degas” de 0.0029 g/g para la muestra del mineral de DGM, comparado con 0.0046 g/g para la muestra del mineral de DRT, indica una menor cantidad de gas degasificado por gramo de mineral en la muestra de DGM. Esta diferencia podría reflejar no solo la densidad y el tamaño de los poros, sino también la naturaleza de la superficie interna y la química de los minerales. Mientras que un valor menor en la muestra del mineral de DGM podría sugerir una menor cantidad de adsorción inicial debido a poros más finos o una menor accesibilidad de los poros (poros cerrados), también podría indicar diferencias en la composición o la estructura química superficial que afectan la adsorción de gases.

La **Figura 5.3** muestra la evaluación de microporos mediante el método Horvath-Kawazoe (HK), la cual destaca diferencias notables en la variación del volumen de gas adsorbido en función del tamaño predominante de poro por masa que hay en la muestra. La muestra del mineral de DGM presenta un volumen de microporos de 0.002371 (cm³/g) considerablemente mayor que el volumen de 0.000958 cm³/g observado en la muestra del mineral de DRT. Además, para un tamaño de poros efectivo de 1.838 Å, la muestra del mineral de DGM muestra una tasa de volumen de adsorción de 0.0024 (cm³Å⁻¹g⁻¹), superior a la de otros tamaños, que presenta una tasa más baja de 0.0003 (cm³Å⁻¹g⁻¹). En contraste, la muestra del mineral de DRT presenta una tasa de cambio de 0.0011 (cm³Å⁻¹g⁻¹) para el mismo tamaño de poro efectivo, lo que indica una menor concentración de microporos en comparación con la muestra del mineral de DGM, aunque sigue una tendencia cualitativamente similar. Estos resultados sugieren que la muestra del mineral de DGM podría tener una mayor capacidad de adsorción para moléculas que se acomoden dentro de los microporos de tamaño específico, mientras que la muestra del mineral de DRT podría presentar propiedades de adsorción más limitadas debido a su menor microporosidad.

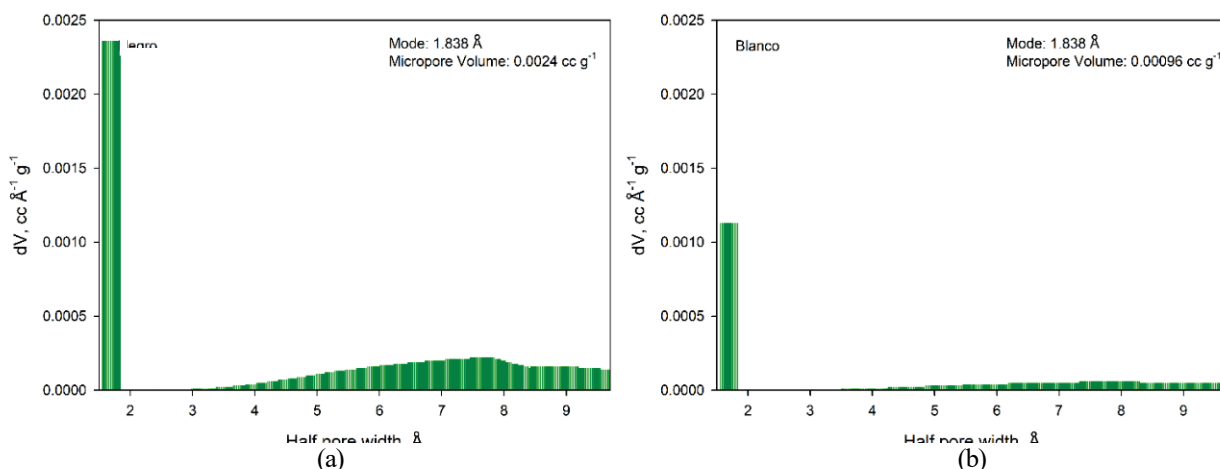


Figura 5.3. Determinación del volumen de microporos, método HK.
(a) muestra del mineral de DGM; (b) muestra del mineral de DRT

La **Figura 5.4** ilustra la caracterización de mesoporos a través del método de la Teoría de la Función de Densidad (DFT), en la cual se observan diferencias en el volumen de gas adsorbido en función del tamaño predominante de poro por masa que hay en la muestra. La muestra del mineral de DRT presenta un volumen de mesoporos de $0.006946 \text{ (cm}^3\text{/g)}$, ligeramente mayor que la muestra del mineral de DGM, que es de $0.006268 \text{ (cm}^3\text{/g)}$. En la distribución de tamaños, la muestra del mineral de DGM muestra un *peak* de adsorción en $39 \times 10^{-5} \text{ (cm}^3\text{Å}^{-1}\text{g}^{-1})$ para un diámetro de poro de 17.34 Å . En contraste, la muestra del mineral de DRT alcanza un pico de adsorción más alto en $29 \times 10^{-5} \text{ (cm}^3\text{Å}^{-1}\text{g}^{-1})$ para un diámetro de poro de 20.76 Å . Estos datos indican que, aunque la muestra del mineral de DRT tiene un volumen total de mesoporos ligeramente mayor, la muestra del mineral de DGM presenta una mayor adsorción por unidad de diámetro de poro específico. Este comportamiento sugiere diferencias en la concentración de poros y posiblemente en la conectividad de estos dentro de la estructura porosa, lo que puede influir directamente en la eficacia de adsorción de cada mineral.

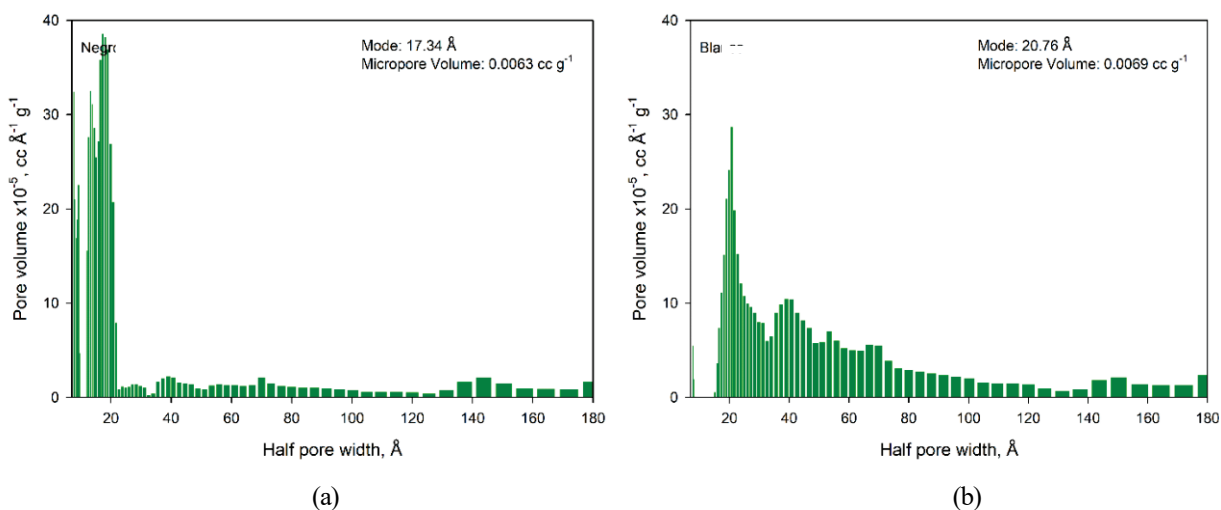


Figura 5.4. Determinación del volumen de mesoporos, método DFT.

(a) muestra del mineral de DGM; (b) muestra del mineral de DRT

La **Figura 5.5** presenta el análisis de los poros realizados mediante el método Barrett, Joyner y Halenda (BJH), la cual muestra el logaritmo de la variación de volumen de gas adsorbido y desorbido por gramo de muestra en función de la distribución de radios de poros. Se destaca que la muestra del mineral de DGM exhibe un volumen de adsorción de $0.005484 \text{ (cm}^3/\text{g)}$, que supera ligeramente su volumen de desorción de $0.0054 \text{ (cm}^3/\text{g)}$. En contraste, la muestra del mineral de DRT presenta volúmenes superiores tanto en adsorción ($0.008374 \text{ cm}^3/\text{g}$) como en desorción ($0.0092 \text{ cm}^3/\text{g}$), siendo este último mayor. Este fenómeno, donde la adsorción y desorción no son iguales, se conoce como histéresis de adsorción-desorción [48].

Además, en ambas muestras destacan que la mayor variación de volumen se da en el rango de radio de poros de 1-2 nm, con la desorción predominando en este intervalo. Para la muestra del mineral de DGM, la adsorción es más significativa en radios de poros más grandes, mientras que para la muestra del mineral de DRT, la desorción se mantiene dominante en un espectro más amplio, desde 1 hasta 9.5 nm. La histéresis evidenciada en los resultados BJH sugiere la ocurrencia de procesos de condensación capilar no reversibles dentro de los poros durante los ciclos de adsorción-desorción, lo que puede atribuirse a variaciones en la red de poros y su conectividad. Durante la adsorción, los líquidos llenan progresivamente los poros más finos, mientras que, en la desorción, el líquido no puede redistribuirse con igual facilidad [49][48].

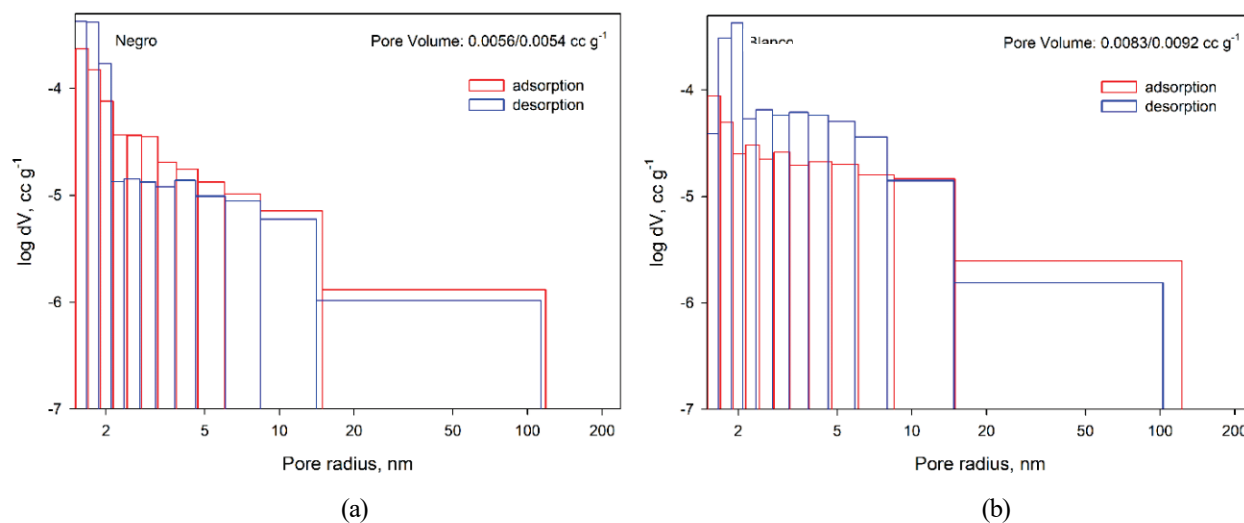


Figura 5.5. Determinación del volumen de poros, método BJH.
 (a) muestra del mineral de DGM; (b) muestra del mineral de DRT

El método BJH revela una mayor histéresis en la muestra del mineral de DRT en comparación con la muestra del mineral de DGM, lo cual es indicativo de una red de poros con mayor complejidad, posiblemente a mayor tortuosidad o variabilidad en el tamaño de los poros, especialmente durante la desorción del gas. Esta mayor histéresis sugiere que los procesos de redistribución e infiltración de líquidos pueden ser más difíciles en la muestra del mineral de DRT, resultando en una velocidad de penetración reducida, de acuerdo con los

hallazgos de estudios anteriores [49]. En contraste, la menor histéresis observada en la muestra del mineral de DGM puede implicar una red de poros con menor complejidad, lo que facilitaría la infiltración de líquidos dentro de su estructura porosa durante tanto la adsorción como la desorción.

En la caracterización de la rugosidad de los poros, se emplean dos parámetros clave: NK Fractal y FHH Fractal. El NK Fractal se utiliza para medir la rugosidad de la totalidad de los poros, mientras que el FHH Fractal se enfoca en los mesoporos en particular. Estos parámetros varían entre 2 y 3, donde un valor de 2 corresponde a una superficie lisa y 3 a una superficie altamente irregular o de naturaleza fractal [50]. De acuerdo con los datos analizados, los valores elevados de las dimensiones fractales NK y FHH en la muestra del mineral de DGM, en comparación con la muestra del mineral de DRT, sugieren una estructura porosa más compleja e irregular. Esto sugiere que la muestra del mineral de DGM posee una superficie interna de los poros más rugosa, lo que aumenta el área de contacto efectiva entre el líquido y el sólido, ampliando el área interfacial sólido-líquido disponible, mejorando la mojabilidad según el modelo de Wenzel. Sin embargo, en términos de infiltración, esta mayor rugosidad podría obstaculizar la infiltración efectiva al crear una resistencia adicional al flujo del líquido dentro de los poros.

Tabla 5.2. Resultados del análisis BET en las muestras de los minerales de DGM y DRT.

Características	Muestra DGM	Muestra DRT
BET (m ² /g)	6.051	2.471
SD (m ² /g)	0.549	0.228
Error relativo (%)	9	9
Degas (10 ⁻³ g/g)	2.9	4.6
Microporos HK (10 ⁻³ cm ³ /g)	2.371	0.958
Mesoporos DFT (10 ⁻³ cm ³ /g)	6.268	6.946
Poros BJH (10 ⁻³ cm ³ /g)	5.484	8.374
NK Fractal	3.014	2.599
FHH Fractal	2.787	2.625

5.3. Medición ángulo de contacto

En esta sección se presentan los resultados obtenidos de la medición del ángulo mediante la técnica de la gota sésil con imágenes y mediante la determinación directa mediante un goniómetro para las muestras de los mineral de DGM y DRT.

5.3.1 Gota sésil

La **Tabla 5.3** muestra los resultados de 10 tests realizados para medir los ángulos de contacto izquierdo y derecho, así como el radio de la gota, en la muestra del mineral de DGM luego de 300 segundos (**Figura 5.6**). Los datos indicaron una mojabilidad parcial de la solución ácida de aglomeración sobre la superficie de la muestra del mineral de DGM en todos los casos. Los ángulos izquierdos variaron entre 15.9° y 35.0°, con un promedio de 28.3° ± 5.6°, mientras que los ángulos derechos oscilaron entre 16.8° y 35.2° con un

promedio de $28.3^\circ \pm 5.3^\circ$. Es decir, se observa una gran similitud entre ambos ángulos, con una diferencia máxima de 0.3° en cualquier test individual. Esta paridad entre los ángulos derecho e izquierdo sugiere una distribución simétrica de las gotas sobre la superficie, validando la representatividad de las mediciones. En conjunto, los resultados cuantitativos y las imágenes de la **Figura 5.6** indican la formación de gotas con forma regular y ángulos de contacto promedio cercanos a 28° , denotando una mojabilidad alta en la muestra del mineral de DGM.

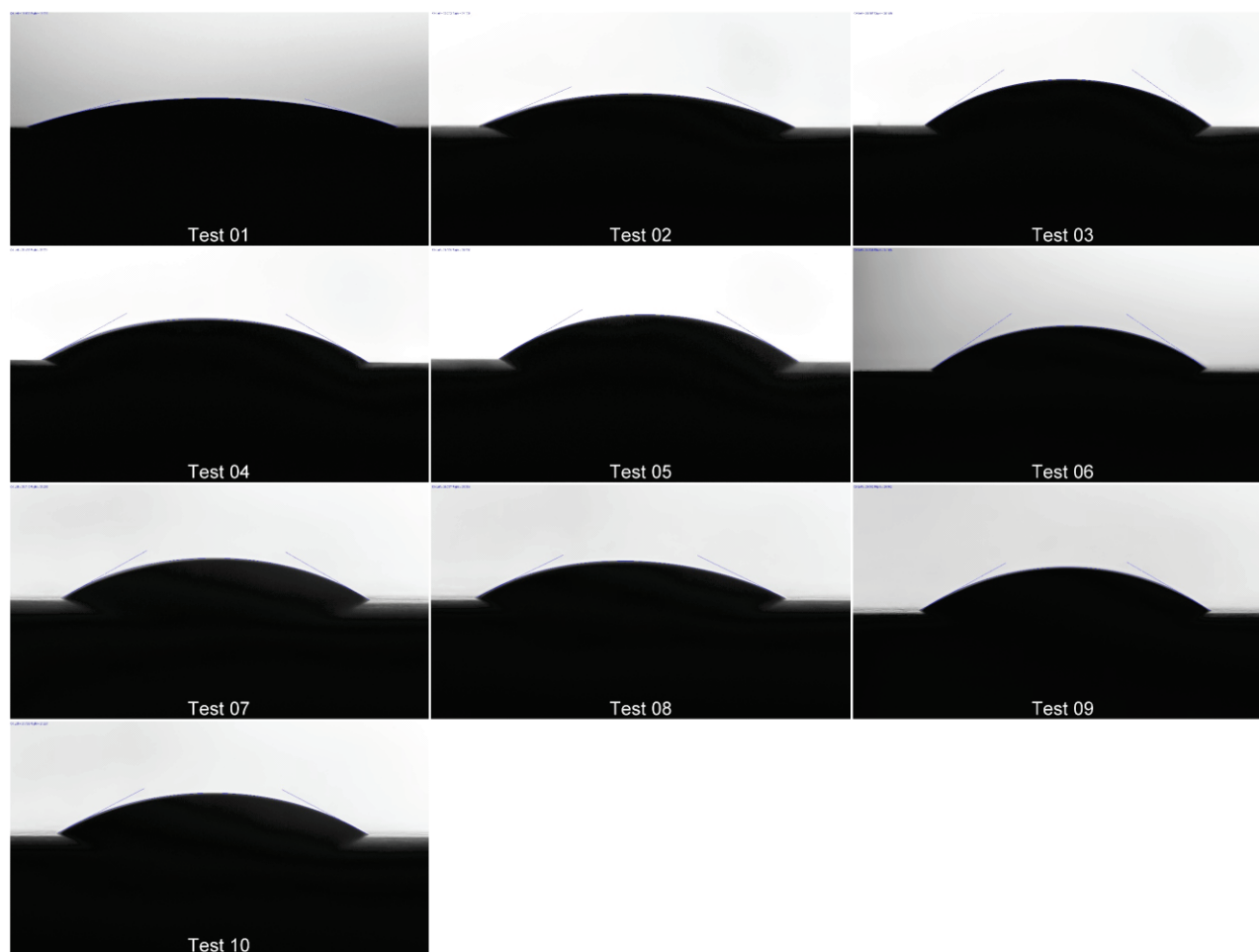


Figura 5.6. Imágenes del ángulo de contacto entre la muestra del mineral de DGM y la solución ácida de aglomeración en las 10 mediciones a los 300 segundos.

En la **Tabla 5.3** se muestran además los radio de contacto de las gotas, donde se observó un promedio de $2.28 \text{ mm} \pm 0.19 \text{ mm}$ sobre la superficie de la muestra del mineral de DGM. Los valores individuales variaron entre 2.02 mm y 2.73 mm . El hecho de que el radio promedio se mantuvo constante, con una desviación estándar baja, indica que el tamaño de la gota fue bastante uniforme entre los diferentes tests realizados. Sin embargo, es importante destacar que el nivel de uniformidad podría verse influenciado por la rugosidad, la porosidad e interacciones superficiales entre la solución y el mineral. La rugosidad y la porosidad afectan cómo se adhiere y se distribuye el líquido, pudiendo alterar el tamaño de las gotas debido a cambios en la

adhesión y la absorción del líquido. Mientras que la presencia de minerales más hidrofílicos podría influir en el radio de contacto, dado estos minerales, por su mayor afinidad por soluciones líquidas, puede reducir el ángulo de contacto, resultando en gotas con radios más amplios.

Tabla 5.3. Mediciones del ángulo de contacto entre la muestra del mineral de DGM y la solución ácida de aglomeración mediante técnica de la gota sésil.

Test	ACI (°)	ACD (°)	ACM (°)	Radio de contacto (mm)
1	15.900	16.768	16.334	2.73
2	23.733	24.039	23.886	2.31
3	35.008	35.159	35.084	2.11
4	29.437	29.731	29.584	2.41
5	31.302	30.936	31.119	2.21
6	34.838	34.166	34.502	2.02
7	29.710	29.286	29.498	2.26
8	26.097	25.964	26.031	2.28
9	29.053	29.992	29.523	2.14
10	27.736	27.297	27.517	2.28
Promedio	28.281	28.334	28.308	2.28

Los resultados experimentales de los ángulos de contacto promedio medidos evidencian una alta mojabilidad en la muestra del mineral de DGM. Esta divergencia se explica por las mayores fuerzas intermoleculares de adhesión sólido-líquido en la muestra del mineral de DGM. Específicamente, el mayor contenido de cuarzo y la presencia de minerales como biotita y clorita en la muestra del mineral de DGM incrementan la energía interfacial sólido-líquido, aumentando el trabajo de adhesión y reduciendo el ángulo de contacto de acuerdo con Young-Dupré. Además, la porosidad secundaria amplía el área de contacto sólido-líquido, aumentando la rugosidad efectiva según el modelo de Wenzel, también intensificando el trabajo de adhesión. Aunque la muestra del mineral de DGM es altamente heterogénea debido a la variedad de sus minerales, incluyendo diferentes bases como óxidos ferromagnesianos y una amplia gama de fases minerales, muestra una desviación estándar baja en los ángulos de contacto. Esta baja variabilidad en los ángulos, a pesar de la heterogeneidad mineral, podría estar más asociada con la presencia de una porosidad fina y bien estructurada en la muestra.

La **Figura 5.7a** revela la variación de los ángulos de contacto izquierdo y derecho promedios durante los primeros 5 minutos de interacción de una gota sobre la superficie de la muestra del mineral de DGM, proceso conocido *spreading time*. Inicialmente, los ángulos fueron 61.7° y 61.0° para los lados izquierdo y derecho respectivamente. En los primeros 15 segundos ocurrió una rápida disminución cercana a los 20°, alcanzando valores próximos a 41°. Posteriormente, la tasa de decrecimiento se hizo más lenta. La **Figura 5.7b** ilustra el aumento del radio de contacto, lo cual confirma una evolución similar entre ambos ángulos de contacto, indicando así una expansión uniforme de la gota sobre la superficie. Hacia el final del ensayo se alcanza una etapa de pseudoequilibrio, con variaciones mínimas en los ángulos de contacto. Esto refleja la compleja

dinámica en la interacción gota-superficie del mineral (ver Anexo B.1).

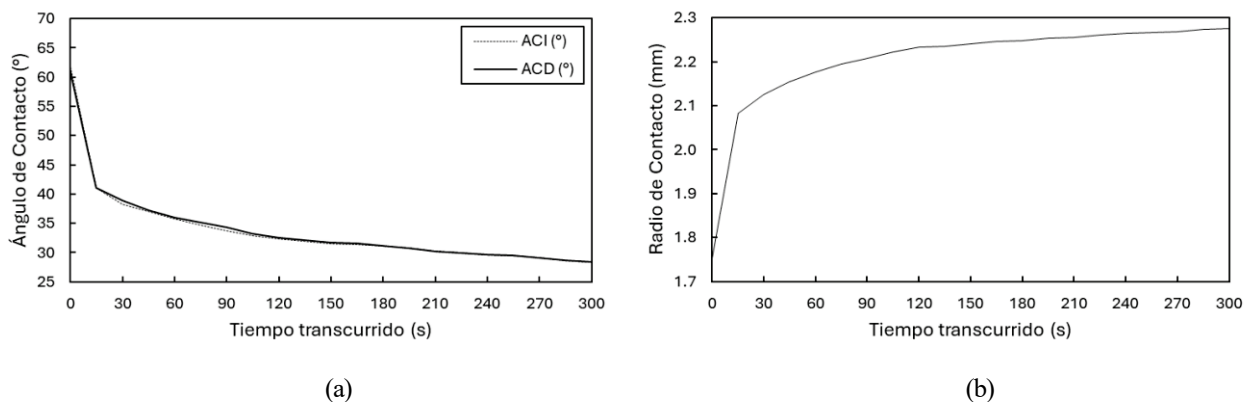


Figura 5.7. Evolución de la gota de líquido sobre la muestra del mineral de DGM.
(a) ángulo de contacto; (b) radio de contacto

La **Tabla 5.4** muestra los resultados de 10 tests realizados para medir los ángulos de contacto izquierdo y derecho, así como el radio de gota, en la muestra del mineral de DRT tras 300 segundos (**Figura 5.8**).

Al igual que en la muestra del mineral de DGM, los datos revelan una mojabilidad parcial de la solución sobre la muestra del mineral de DRT. Sin embargo, se observan diferencias significativas en los valores de los ángulos de contacto entre ambos minerales. Para la muestra del mineral de DRT, los ángulos izquierdos oscilaron entre 31.1° y 48.0° , con un promedio de $39.7^\circ \pm 5.7^\circ$, mientras que los ángulos derechos variaron entre 30.9° y 46.6° , con una media de $39.5^\circ \pm 5.7^\circ$. Nuevamente se observa simetría entre los ángulos derechos e izquierdos, indicando una distribución uniforme de las gotas sobre la superficie.

En promedio, los ángulos de contacto para la muestra del mineral de DRT fueron aproximadamente 12° mayores a los de la muestra del mineral de DGM. Esto sugiere diferencias en la hidrofiliidad entre ambos minerales, siendo mayor en la muestra del mineral de DRT. Los resultados cuantitativos y las imágenes de la **Figura 5.8** corroboran la formación de gotas con ángulos promedio cercanos a 40° sobre la superficie de la muestra del mineral de DRT.

La **Tabla 5.4** da a conocer el radio de contacto promedio de las gotas sobre la superficie de la muestra del mineral de DRT, donde se obtuvo un valor de $2.06 \text{ mm} \pm 0.20 \text{ mm}$. Los radios individuales variaron entre 1.75 mm y 2.32 mm en los diferentes ensayos realizados. Al igual que en el caso de la muestra del mineral de DGM, se aprecia que el tamaño de gota se mantuvo relativamente constante entre mediciones, con una desviación estándar baja. Esto valida que se logró un adecuado control del volumen de gota depositado sobre la superficie de la muestra del mineral de DRT en los diferentes ensayos.

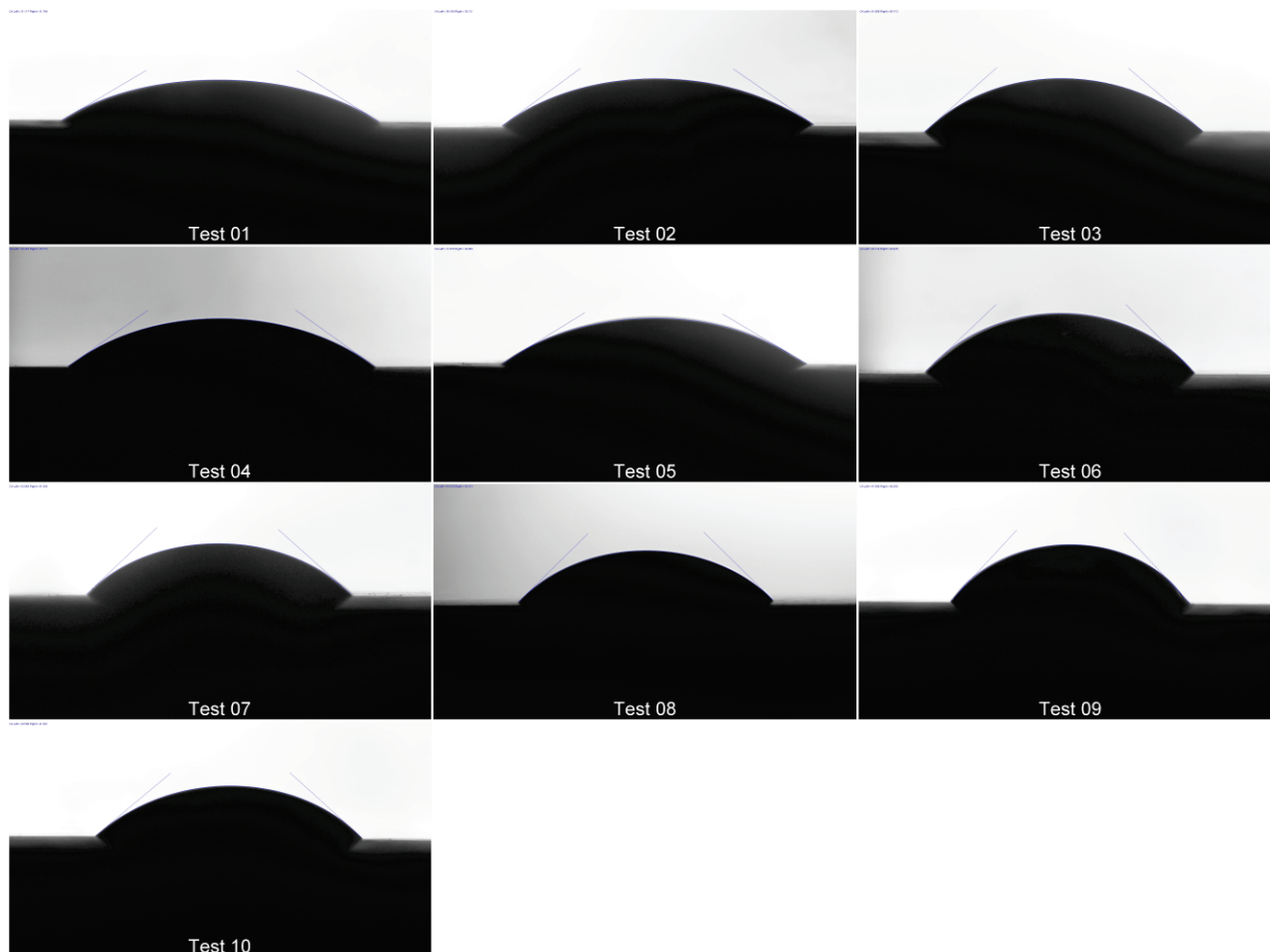


Figura 5.8. Imágenes del ángulo de contacto entre la muestra del mineral de DRT y la solución ácida de aglomeración en las 10 mediciones a los 300 segundos.

Tabla 5.4. Mediciones del ángulo de contacto entre la muestra del mineral de DRT y la solución ácida de aglomeración mediante técnica de la gota sésil.

Test	ACI (°)	ACD (°)	ACM (°)	Radio de contacto (mm)
1	31.118	31.764	31.441	2.32
2	36.160	35.131	35.646	2.28
3	41.671	40.712	41.192	2.04
4	35.298	35.712	35.505	2.24
5	31.875	30.905	31.390	2.22
6	44.132	44.835	44.484	1.97
7	43.548	41.854	42.701	1.93
8	44.425	45.073	44.749	1.86
9	47.998	46.592	47.295	1.75
10	40.589	41.991	41.290	1.95
Promedio	39.681	39.457	39.569	2.06

Los resultados experimentales de los ángulos de contacto promedio medidos evidencian una mayor mojabilidad de la muestra del mineral de DGM (28°) en comparación con la muestra del mineral de DRT (40°). Esto es debido dado que en la muestra del mineral de DRT la mayor concentración relativa de cuarzo junto con feldespatos y la red cristalina más ordenada limitan el desarrollo de microporosidad, disminuyendo la mojabilidad. La composición heterogénea y porosidad más gruesa al ocupar más espacio reduce el número

total de poros, y, por ende, disminuye el área efectiva de contacto. Debido a esto el efecto de la rugosidad en la mojabilidad no es tan pronunciado en la muestra del mineral de DRT, lo que no conduce a una mejora en el ángulo de contacto aparente según el modelo de Wenzel.

La mayor variabilidad en las mediciones de ángulo de contacto en la muestra del mineral de DRT en comparación con la muestra del mineral de DGM, se atribuye principalmente a la heterogeneidad en su composición mineralógica y porosidad. La presencia de múltiples fases como cuarzo, feldespatos y caolinita en proporciones similares se traduce en variaciones locales de mojabilidad. Asimismo, la porosidad más gruesa y menos desarrollada crean variaciones en la forma en que el líquido interactúa con diferentes partes de la superficie provocando diferencias entre puntos de medición.

La **Figura 5.9a** muestra la variación temporal de los ángulos de contacto izquierdo y derecho durante los primeros 5 minutos de interacción de una gota sobre la superficie de la muestra del mineral de DRT. Inicialmente, los valores fueron 67.3° para ambos lados. En los primeros 15 segundos ocurrió una rápida disminución de aproximadamente 16° , alcanzando ángulos cercanos a 51° . Posteriormente, la tasa de decrecimiento se hizo más lenta. La **Figura 5.9b** evidencia la expansión del radio de gota de 1.72 mm a 2.06 mm durante el ensayo. Este aumento, aunque relativamente pequeño, es consistente y valida la tendencia al esparcimiento de la gota con el tiempo.

Hacia el final del ensayo, tanto los ángulos de contacto como el radio de gota se estabilizan, alcanzando una etapa de pseudoequilibrio, en esta etapa se representa un estado en el que los cambios futuros en los ángulos de contacto y en el radio de la gota son mínimos o inexistentes (ver Anexo B.2).

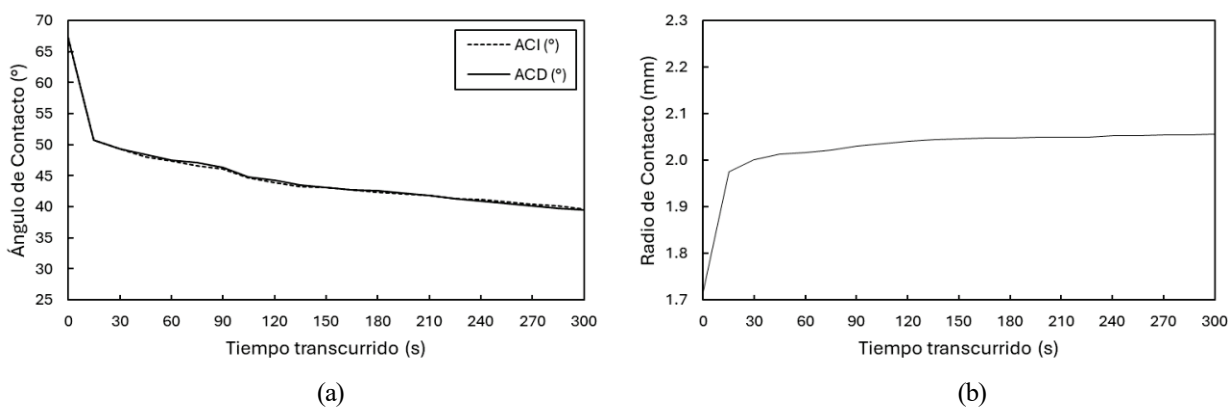


Figura 5.9. Evolución de la gota de líquido sobre la muestra del mineral de DRT. (a) ángulo de contacto; (b) radio de contacto

La disminución temporal del ángulo de contacto durante el proceso de *spreading* se atribuye principalmente al equilibrio dinámico entre fuerzas intermoleculares de adhesión y cohesión. Inicialmente, la gota experimenta una rápida expansión impulsada por las fuerzas de adhesión sólido-líquido que buscan maximizar el área de contacto con la superficie. Sin embargo, conforme la gota se expande, se intensifican las

fuerzas cohesivas dentro del líquido, las cuales se oponen a la propagación. La microporosidad de la muestra del mineral de DGM ofrece menor resistencia a estas fuerzas cohesivas, facilitando la tasa de expansión en comparación con la muestra del mineral de DRT [51].

5.3.2 Goniómetro

En la **Tabla 5.5** se presentan los resultados de las mediciones de ángulos de contacto realizados en las muestras de minerales de DGM y DRT mediante el uso del goniómetro. Los datos muestran una clara heterogeneidad en las propiedades superficiales de ambas muestras, reflejada en la variabilidad de los ángulos registrados.

Para la muestra del mineral de DGM, el rango del ángulo de contacto izquierdo osciló entre 14° y 34° , con una media de $27^\circ \pm 5.8^\circ$. El ángulo de contacto derecho varió de 14° a 33° , con un promedio también de $27^\circ \pm 5.9^\circ$. Es decir, se observa simetría entre los ángulos de contacto izquierdo y derecho en este mineral. En contraste, en la muestra del mineral de DRT los ángulos izquierdos registraron valores más altos, de 29° a 46° (promedio de $38^\circ \pm 4.5^\circ$), mientras que los ángulos derechos oscilaron entre 29° y 45° , con una media de $38^\circ \pm 4.0^\circ$. Por lo tanto, el promedio de ángulos de contacto de la muestra del mineral de DRT fue aproximadamente 10° mayor que. Esta variabilidad cuantitativa en los ángulos de contacto proporciona información relevante sobre el comportamiento de los minerales en su interacción con líquidos, siendo el ángulo directamente proporcional a la hidrofobicidad superficial.

Tabla 5.5. Mediciones del ángulo de contacto entre las muestras de los minerales de DGM y DRT y la solución ácida de aglomeración mediante goniómetro.

Test	Muestra DGM			Muestra DRT		
	ACI ($^\circ$)	ACD ($^\circ$)	ACM ($^\circ$)	ACI ($^\circ$)	ACD ($^\circ$)	ACM ($^\circ$)
1	18	18	18	32	32	32
2	14	14	14	34	34	34
3	27	28	28	40	39	40
4	25	25	25	36	35	36
5	31	30	31	45	44	45
6	28	29	29	43	42	43
7	29	30	30	30	30	30
8	29	28	29	44	44	44
9	31	32	32	46	46	46
10	34	33	34	29	29	29
Promedio	27	27	27	38	38	38

5.3.3 Comparación entre los métodos de medición de ángulo de contacto

La **Figura 5.10** revela los datos de ángulo de contacto izquierdo (ACI) y derecho (ACD) para la muestra ambos minerales utilizando dos métodos diferentes: la gota sésil y el goniómetro. Para la muestra del mineral de DGM, el promedio de ACI medido con la gota sésil fue de $28.3^\circ \pm 5.6^\circ$, mientras que con el goniómetro fue de $26.6^\circ \pm 6.2^\circ$. El promedio de ACD con el método de la gota sésil fue de $28.3^\circ \pm 5.3^\circ$, comparado con

$26.7^\circ \pm 6.1^\circ$ obtenido con el goniómetro. Esto indica una diferencia promedio de aproximadamente 2° entre los métodos para la muestra del mineral de DGM.

En el caso de la muestra del mineral de DRT, el promedio de ACI con la gota sésil se registró en $39.7^\circ \pm 5.7^\circ$, en contraste con $37.9^\circ \pm 6.5^\circ$ medido con el goniómetro. Para el ACD, los valores con la gota sésil fueron de $39.5^\circ \pm 5.7^\circ$, frente a $37.5^\circ \pm 6.3^\circ$ con el goniómetro. Similar a la muestra del mineral de DGM, los valores obtenidos mediante la gota sésil fueron aproximadamente $2\text{-}3^\circ$ más altos que aquellos medidos con el goniómetro. Además, se observa una dispersión similar entre los métodos para ambos minerales, aunque la amplitud del rango es levemente mayor con la gota sésil.

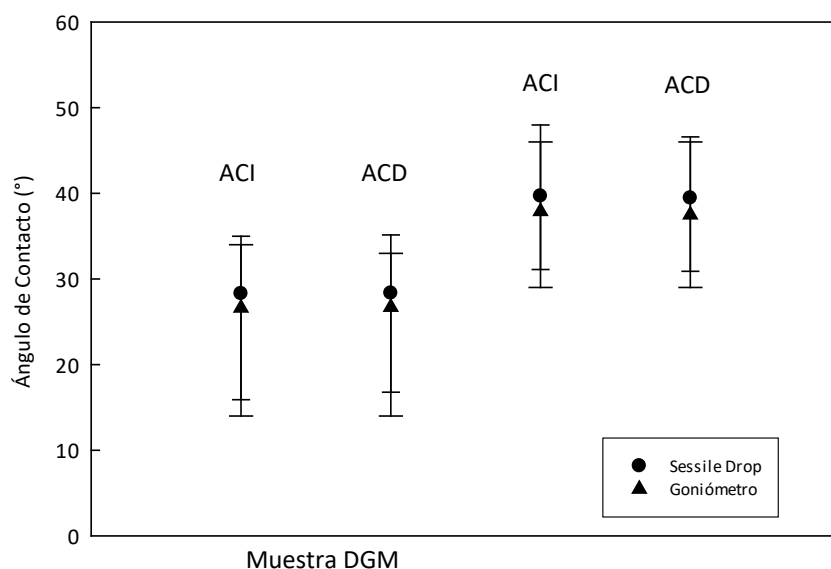


Figura 5.10. Comparación de los métodos para determinar ángulo de contacto en las muestras de los minerales de DGM y DRT.

La pequeña diferencia entre ambos métodos de medición radica en que el goniómetro permite una lectura directa y en tiempo real del ángulo de contacto, mientras que el método de la gota sésil al requerir un procesamiento y análisis digital posterior en imágenes puede llevar algunas variaciones mínimas, ya que depende de la resolución y la precisión del procesamiento computacional. Por lo cual el set experimental propuesto es igual de confiable que un goniómetro comercialmente certificado.

5.4. Ensayos de infiltración

En esta sección se presentan los resultados obtenidos del ensayo de infiltración en las condiciones no saturada y saturada, para muestras de los minerales DGM y DRT.

5.4.1 Condición no saturada

Los gráficos a continuación representan los resultados de las pruebas experimentales en una condición no saturada de líquido, específicamente la altura de infiltración de líquido en función del tiempo para tres

muestras de cada mineral (M1, M2 y M3). Se incluye una cuarta curva que muestra el promedio de la altura de infiltración de las tres muestras. En el eje horizontal se muestra el tiempo transcurrido en horas desde el inicio del ensayo, mientras que en el eje vertical se muestra la altura de infiltración en milímetros.

La **Figura 5.11** muestra la velocidad infiltración promedio de la solución ácida de aglomeración en los poros de la muestra del mineral de DGM bajo condiciones no saturadas. Inicialmente, el líquido comenzó a infiltrarse desde un nivel 5 mm por encima de la base de cada muestra. Durante los primeros 10 minutos se registró un aumento significativo en la infiltración, alcanzando 12.7 ± 0.3 mm de altura promedio.

Conforme avanza el tiempo, la infiltración continuó incrementándose progresivamente. A las 2 horas se observa un “punto de inflexión” donde hay un cambio en la velocidad de infiltración en una altura promedio de 15.7 ± 2.1 mm, luego de este punto la velocidad empieza a disminuir, indicando una tendencia a la estabilización. En general, las 3 muestras presentaron una tendencia similar en cuanto a la altura de infiltración, sin embargo, a las 34 horas se registró la mayor variación con respecto al promedio. En este punto la muestra M2 sobresalió con una infiltración de líquido más alta con 23.5 mm en comparación con las muestras M1 (18.0 mm) y M3 (21.5 mm). Al alcanzar las 48 horas, se registraron alturas de infiltración de 23.0 mm para la muestra M1, 26.0 mm para la muestra M2, 24.0 mm para la muestra M3, y un promedio general de 24.3 ± 1.5 mm (ver detalles en Anexo C.1).

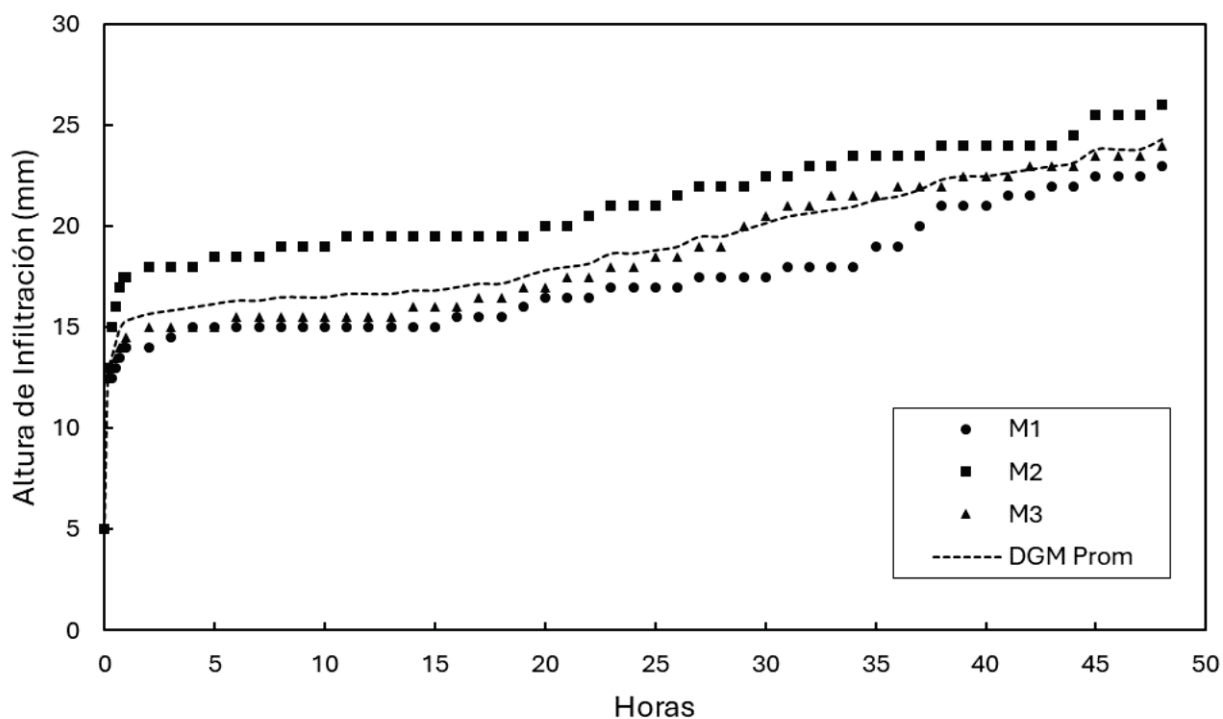


Figura 5.11. Curva promedio de las muestras del mineral de DGM en una condición no saturada.

La **Figura 5.12** ilustra la velocidad infiltración promedio de la solución ácida de aglomeración en los poros

de las muestras del mineral de DRT. El proceso inicia a una altura de 5 mm desde la base, y se manifiesta un aumento notorio en los primeros 10 minutos, con una altura de infiltración que alcanza los 13.5 ± 1.5 mm en promedio.

Las tres muestras, si bien siguen una tendencia general similar, muestran diferencias marcadas en sus comportamientos individuales. Entre los 30 y 50 minutos, la muestra M3 se distinguió por su mayor nivel de infiltración, alcanzando los 12 mm, en contraste con los 7 mm y 10.5 mm observados en las muestras M1 y M2, respectivamente. Conforme avanza el tiempo, la infiltración continuó aumentando progresivamente. El punto de inflexión de la altura promedio se alcanza a las 2 horas, al mismo tiempo que las muestras del mineral de DGM, pero a una altura promedio significativamente menor de 11.8 ± 1.8 mm, sugiriendo una estabilidad más lenta al pseudoequilibrio, además la mayor consistencia en general en las alturas confirma esto. Al final (48 horas), las alturas de infiltración fueron 20 mm en M1, 24 mm en M2, 20.5 mm en M3, y un promedio de $21.5 \text{ mm} \pm 1.8 \text{ mm}$. Este valor promedio es aproximadamente 2.8 mm menor que el obtenido para la muestra del mineral de DGM (ver detalles en Anexo C.2).

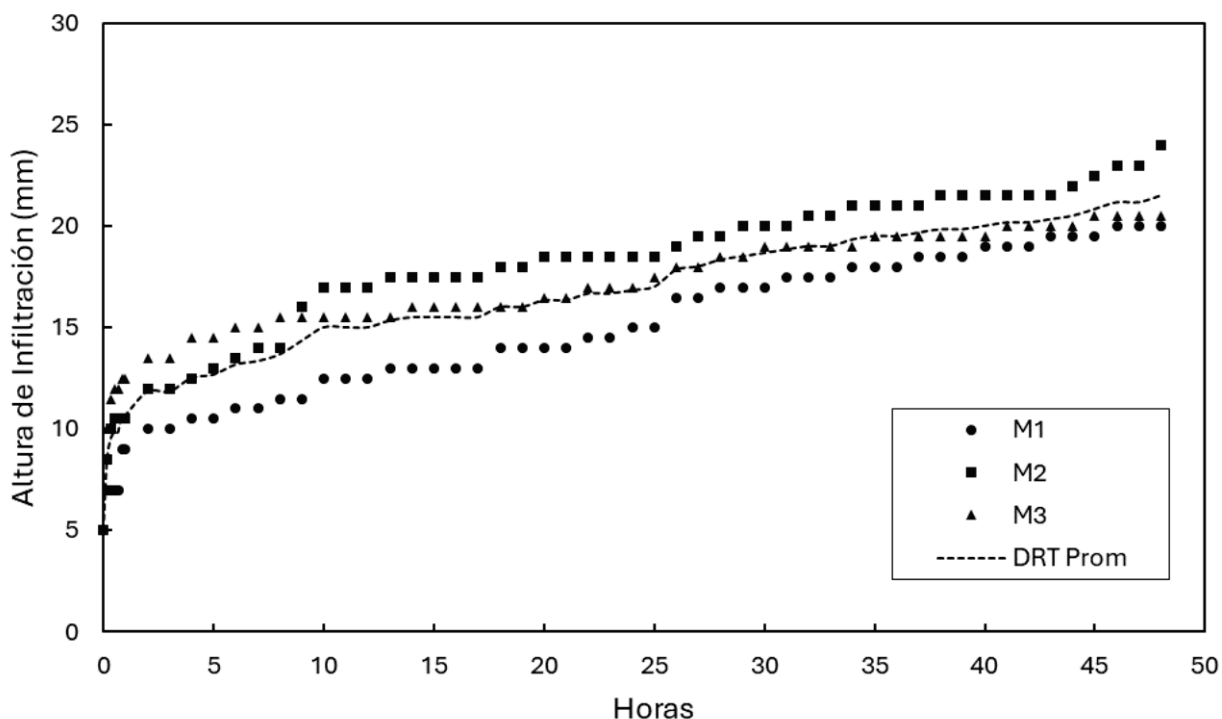


Figura 5.12. Curva promedio de las muestras del mineral de DRT en una condición no saturada.

Las diferencias encontradas en las alturas de infiltración entre los minerales confirman que la muestra del mineral de DGM posee una distribución de poros de menor radio en comparación con la muestra del mineral de DRT, estos resultados se ven respaldados por el análisis BET, que reveló una porosidad más fina y desarrollada en la muestra del mineral de DGM. De acuerdo con la ecuación de Washburn [22], un radio de

poros más pequeño conduce una mayor presión capilar, lo que resulta en una altura de infiltración más elevada, como se evidencia en el caso de la muestra del mineral de DGM. Aunque la diferencia entre los ángulos de contacto promedio es mínima (12°), su influencia en la infiltración igual podría ser significativa, además considerando que se utilizó la misma solución ácida de aglomeración en ambas muestras. Estos hallazgos son consistentes con el trabajo de Barret, Joyner y Hallenda [52], quienes también demostraron la influencia significativa de la microporosidad en la infiltración de fluidos. La mayor complejidad o tortuosidad en la estructura porosa de las muestras del mineral de DRT, sugerida por la histéresis presentada en el análisis BET, podría ser un factor determinante para explicar por qué se observan diferencias en las alturas de infiltración en comparación con las muestras del mineral de DGM. Además, en este caso la presión hidrostática solo contribuye a superar la resistencia inicial a la infiltración, especialmente en la muestras del mineral de DGM donde la resistencia capilar es alta.

Los experimentos de infiltración en condiciones no saturadas revelan patrones interesantes en ambos minerales, la observación más notable es la rápida infiltración inicial hasta que se alcanza el punto de inflexión, a partir del cual la tasa de infiltración disminuye de manera gradual en ambos minerales, siendo este efecto más destacado en la muestra del mineral de DGM. Este comportamiento concuerda con la teoría de Washburn, que postula una disminución en la tasa de infiltración de un líquido a medida que este penetra más profundamente en los poros. En este caso, el aire inicialmente presente en los poros tenderá a moverse hacia arriba, debido a que es menos denso que la solución, no oponiendo resistencia significativa por lo cual la altura alcanzada del líquido cesará cuando la fuerza de gravedad se oponga, de acuerdo con lo postulado por Jurin [20]. Así la ecuación de Washburn a pesar de ser de naturaleza empírica demuestra ser efectiva en modelar las situaciones observadas en las muestras de los minerales DGM y DRT.

La **Tabla 5.6** muestra los resultados de la cantidad de volumen infiltrado para las muestras de los minerales DGM y DRT. Se observó que el promedio de volumen de solución infiltrado por las muestras de DGM fue de 0.6807 mL, mientras que para las muestras del mineral de DRT fue de 0.5726 mL. Esta diferencia indica que el volumen de solución ácida de aglomeración que logró infiltrarse en los poros de las muestras del mineral de DGM fue aproximadamente 16% mayor en comparación con la cantidad infiltrada en la muestra del mineral de DRT. Este resultado es consistente con las mediciones de altura de infiltración discutidas previamente, donde las muestras del mineral de DGM alcanzó una altura promedio 24.3 mm comparado con 21.5 mm en la muestra del mineral de DRT, bajo las mismas condiciones experimentales.

Tabla 5.6. Mediciones del volumen infiltrado de la solución ácida de aglomeración en las muestras de los minerales de DGM y DRT.

Muestras	Muestra DGM			Muestra DRT		
	Mineral	Mineral	Volumen	Mineral	Mineral	Volumen

	Seco (g)	Húmedo (g)	Infiltrado (mL)	Seco (g)	Húmedo (g)	Infiltrado (mL)
1	123.8758	124.4531	0.6466	106.7511	107.2207	0.5260
2	123.5015	124.1483	0.7244	105.8482	106.4316	0.6534
3	121.9645	122.5636	0.6710	105.2657	105.7464	0.5384
Promedio	123.1139	123.7217	0.6807	105.9550	106.4662	0.5726

5.4.2 Condición saturada

Los gráficos a continuación representan los resultados de las pruebas experimentales en una condición saturada de líquido, específicamente la altura de infiltración de líquido en función del tiempo cada mineral.

Las gráficas fueron ajustadas con un ajuste polinomial de grado 2.

La **Figura 5.13** muestra la infiltración de la solución ácida de aglomeración en los poros de las muestras del mineral de DGM en condiciones de saturación. Inicialmente, la velocidad de infiltración es baja, pero aumenta gradualmente con el tiempo, siguiendo una tendencia exponencial creciente típica de sistemas de primer orden. Sin embargo, a las 144 horas (6 días) se observó un aumento temporal en la velocidad de infiltración, alcanzando un valor atípico de 7.0 mm. Esto podría deberse a cambios en las condiciones experimentales o a una respuesta particular del mineral debido a la grieta observable (**Figura 5.14**).

Luego de este punto, la velocidad de infiltración retoma su tendencia creciente hasta alcanzar un valor estable de 8.0 mm a las 504 horas (21 días). A partir de este tiempo, la altura infiltrada se mantuvo constante hasta el final del ensayo (576 horas), indicando que se ha alcanzado un equilibrio en el proceso de infiltración.

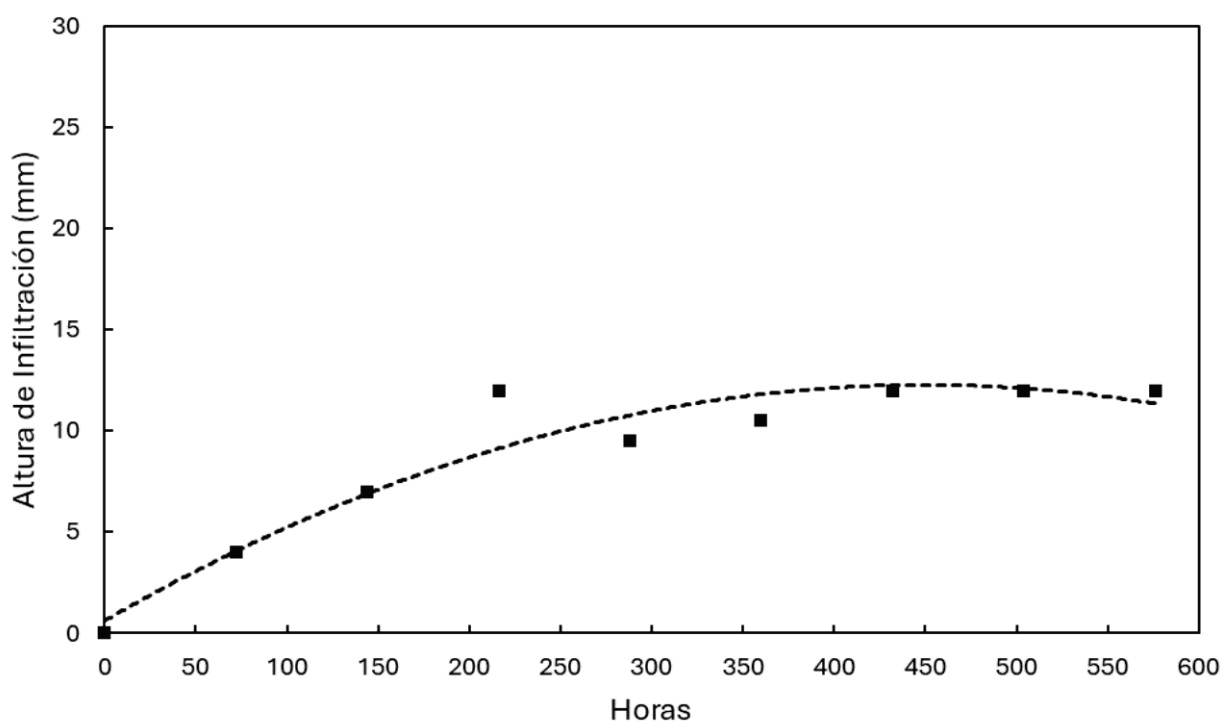


Figura 5.13. Infiltración del líquido en las muestras del mineral de DGM en una condición saturada.

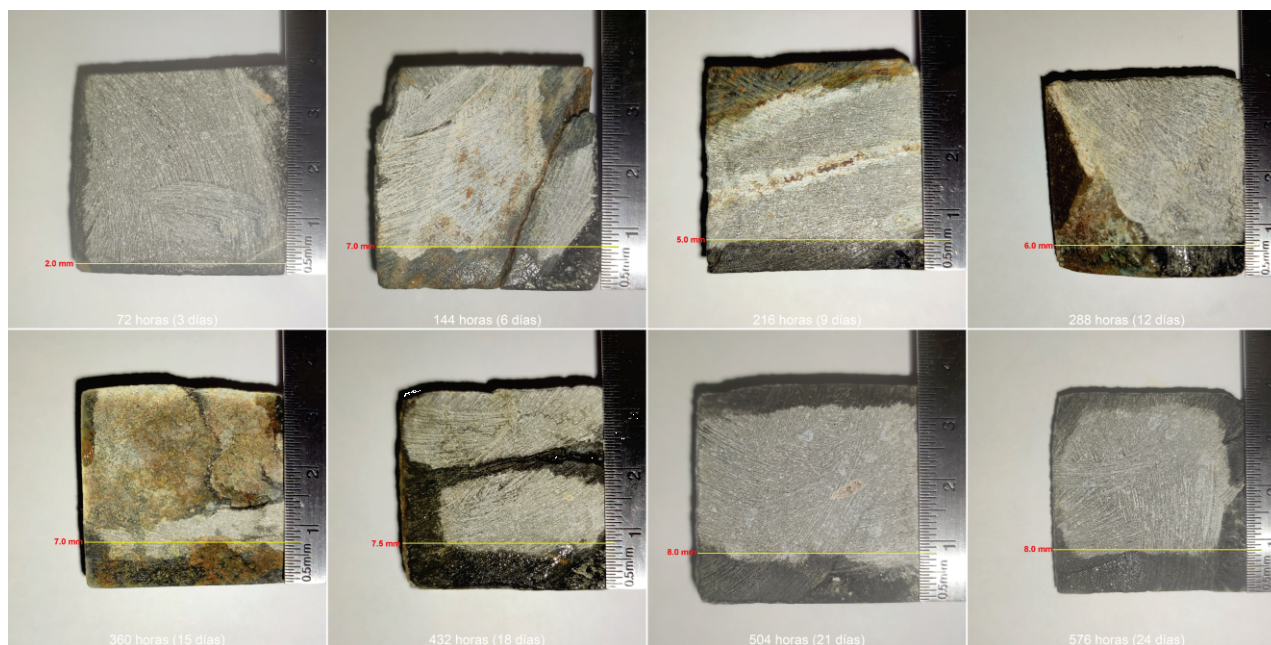


Figura 5.14. Secuencia de la infiltración del líquido en los poros de las muestras del mineral de DGM en una condición saturada.

La **Figura 5.15** muestra la infiltración de la solución en los poros de las muestras del mineral de DRT bajo condiciones de saturación. Al inicio, la velocidad de infiltración es moderadamente rápida, pero constante, en comparación con las muestras del mineral de DGM, disminuyendo gradualmente con el tiempo teniendo de igual forma una tendencia exponencial creciente. A las 216 horas (9 días) se observó un punto atípico, alcanzando una altura infiltrada de 12.0 mm, igual al valor de equilibrio. Esto sugiere la ocurrencia de un evento puntual que alteró la velocidad de infiltración del mineral, posiblemente debido a su composición química o a alguna característica inherente de la muestra en sí (**Figura 5.16**). Luego de este punto, la velocidad retoma su tendencia exponencial hasta alcanzar nuevamente los 12.0 mm a las 432 horas (18 días), tendiendo al equilibrio más rápido que las muestras del mineral de DGM. A partir de este tiempo, la altura infiltrada permanece constante hasta el final del ensayo (576 horas), indicando que se ha llegado a un equilibrio. Cabe notar que el valor de altura de infiltración máxima para las muestras del mineral de DRT (12.0 mm) es 4.0 mm mayor que el obtenido previamente para las muestras del mineral de DGM (8.0 mm), evidenciando una diferencia significativa entre ambos minerales en su capacidad de infiltración bajo condiciones de saturación.

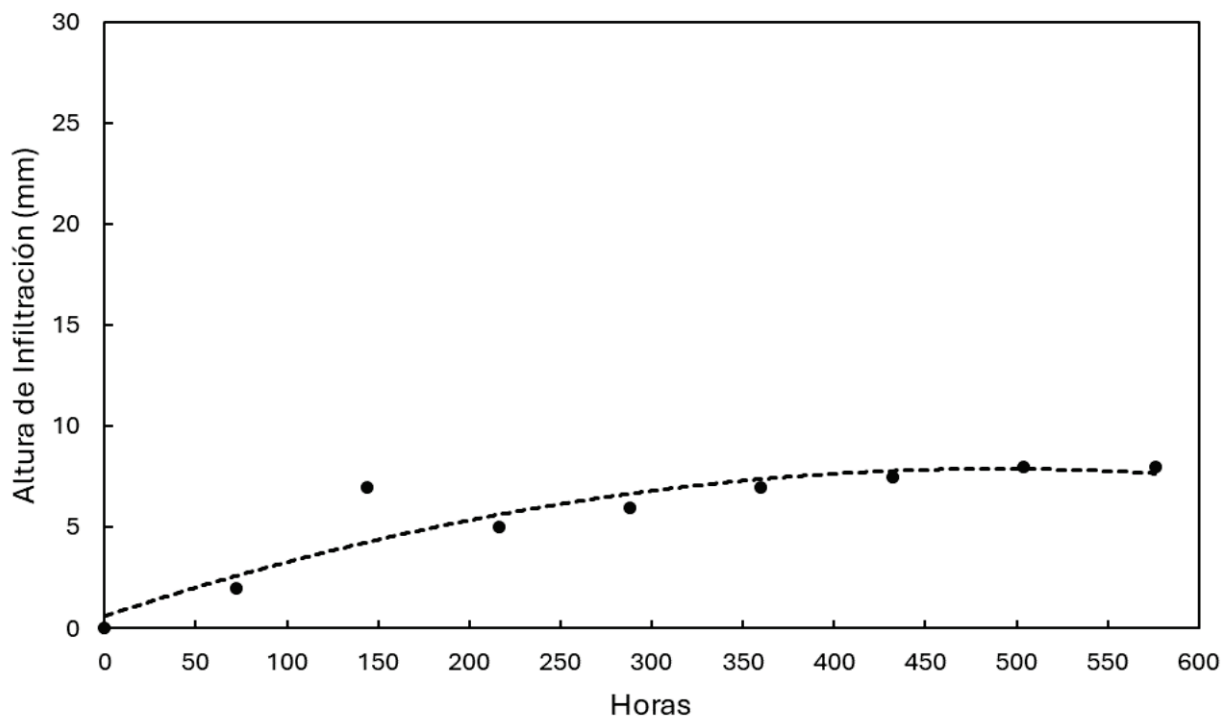


Figura 5.15. Infiltración del líquido en las muestras del mineral de DRT en una condición saturada.

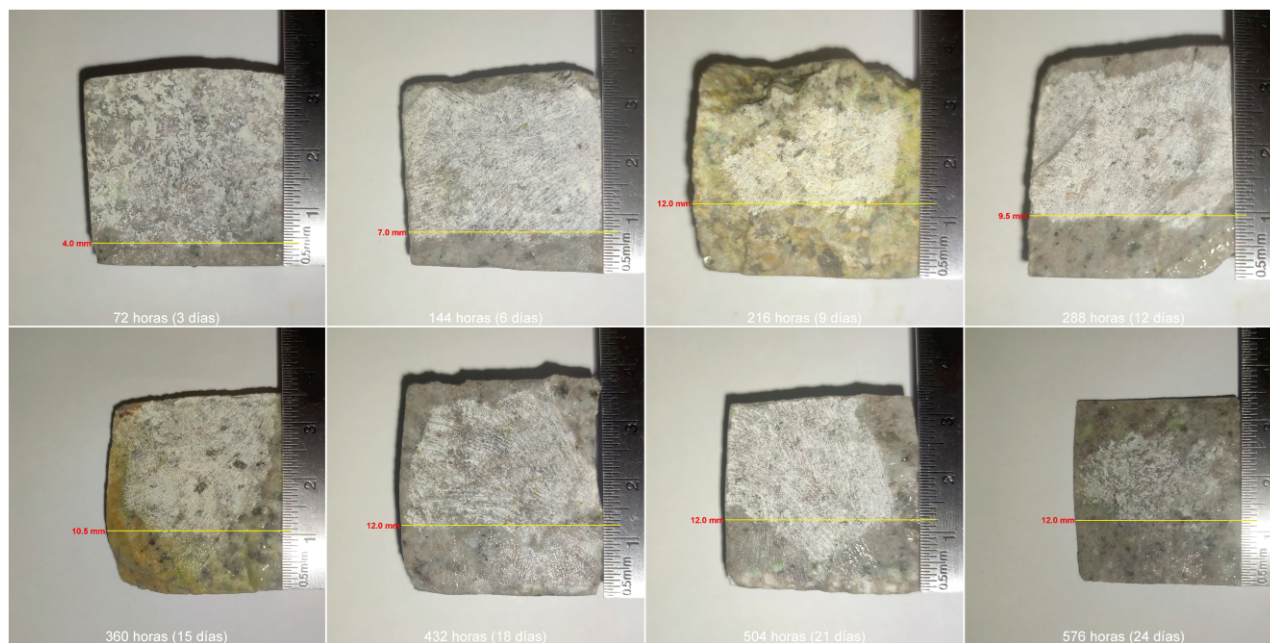


Figura 5.16. Secuencia de la infiltración del líquido en los poros de las muestras del mineral de DRT en una condición saturada.

Los resultados dan a conocer que las muestras del mineral de DRT posee una altura de infiltración mayor en comparación con las muestras del mineral de DGM. En esta condición para ambas muestras la presión capilar y la presión hidrostática colaboran para facilitar la infiltración del líquido en los poros donde la velocidad de infiltración se reduce significativamente en comparación con el caso no saturado. Esto se debe a que, cuando el líquido intenta penetrar en los poros del mineral, el aire, que inicialmente los ocupa, queda

atrapado al ser incapaz de escapar totalmente, esto se debe a que la totalidad del mineral está sumergido en la solución. El aire confinado en los poros puede obstaculizar el movimiento del líquido y aminorar más el ritmo de infiltración, como lo plantean Joekar-Niasar y Hassanizadeh [53]. A medida que el líquido avanza y comprime este aire atrapado en los poros, la presión del aire aumenta, contrarrestando la presión ejercida por el líquido, lo que provoca una reducción adicional en la velocidad de infiltración. Conforme ocurren estos sucesos, el gradiente de presión que inicialmente impulsa la infiltración del líquido se debilita. Por lo tanto, la ecuación de Washburn, si bien es crucial inicialmente en la infiltración, luego se vuelve menos relevante en esta condición, ya que la presión capilar decrece por la oposición generada por el aire atrapado. En este contexto, las diferencias en las alturas de las muestras en la condición saturada radican en que las muestras del mineral de DGM al tener una distribución de poros diminutos, experimentan una mayor compresión del aire y, por ende, un mayor aumento en su presión, contraponiéndose más fuertemente a la infiltración del líquido, mientras que en las muestras del mineral de DRT, al poseer una distribución de poros más grande, el aire se comprime menos, lo que permite mayor escape del aire y en consecuencia una mayor infiltración. Esto es coherente con las ecuaciones de Young-Laplace y de los gases ideales, que la presión del aire atrapado en un poro aumenta a medida que el radio del poro disminuye.

La **Figura 5.17** ilustra claramente las diferencias observadas en las alturas de infiltración por el líquido al someter ambas muestras de los minerales a condiciones de saturación distintas, donde la distribución de poros que poseen cada muestra influye notablemente.

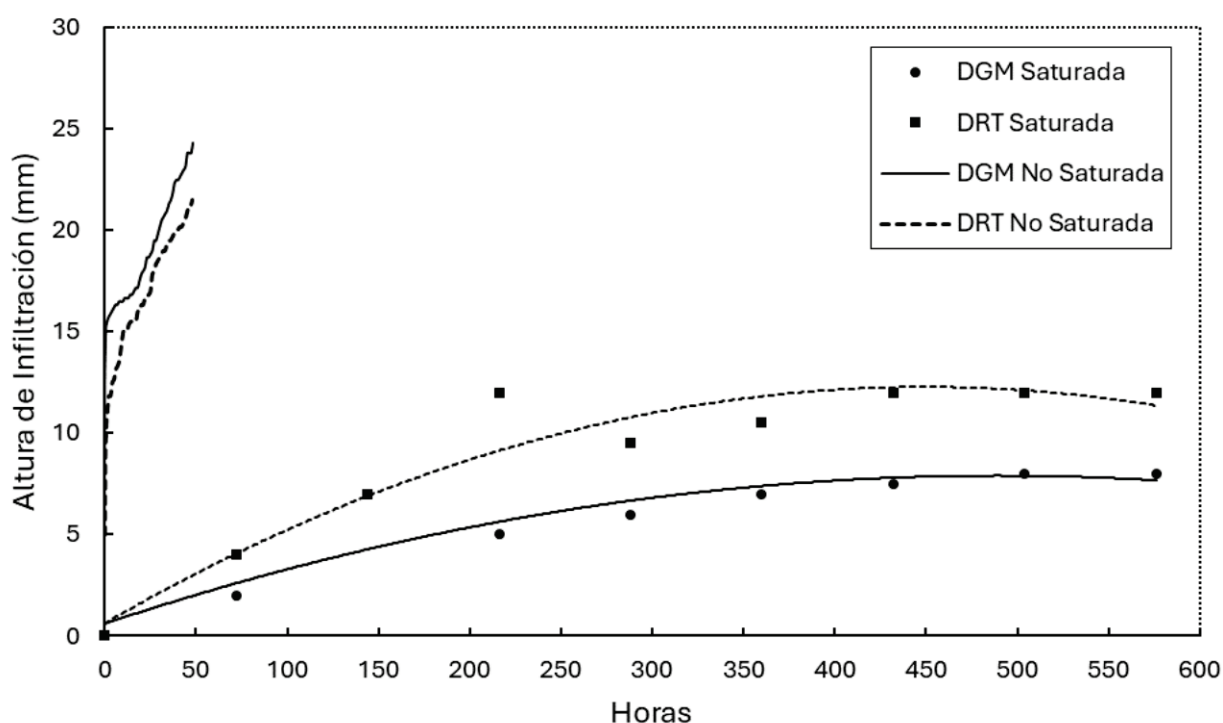


Figura 5.17. Infiltración de la solución ácida de aglomeración en los minerales DGM y DRT bajo condiciones de saturación y no saturación.

5.5. Simulaciones

En la **Figura 5.18** se muestra los resultados de una simulación del comportamiento de un mineral ideal con poros de tamaño de 300 micras de diámetro, bajo la influencia de una solución ácida de aglomeración con un ángulo de contacto de 27° en condiciones saturadas como no saturadas. Los datos obtenidos muestran concordancia consistente con los resultados experimentales de las muestras del mineral de DRT, evidenciando que, en condiciones de saturación, el líquido asciende a una mayor altura en comparación con la situación de no saturación. Esta diferencia se atribuye particularmente al que el tamaño considerable de poro modelado, lo que facilita que el aire presente menor resistencia y escape más fácilmente.

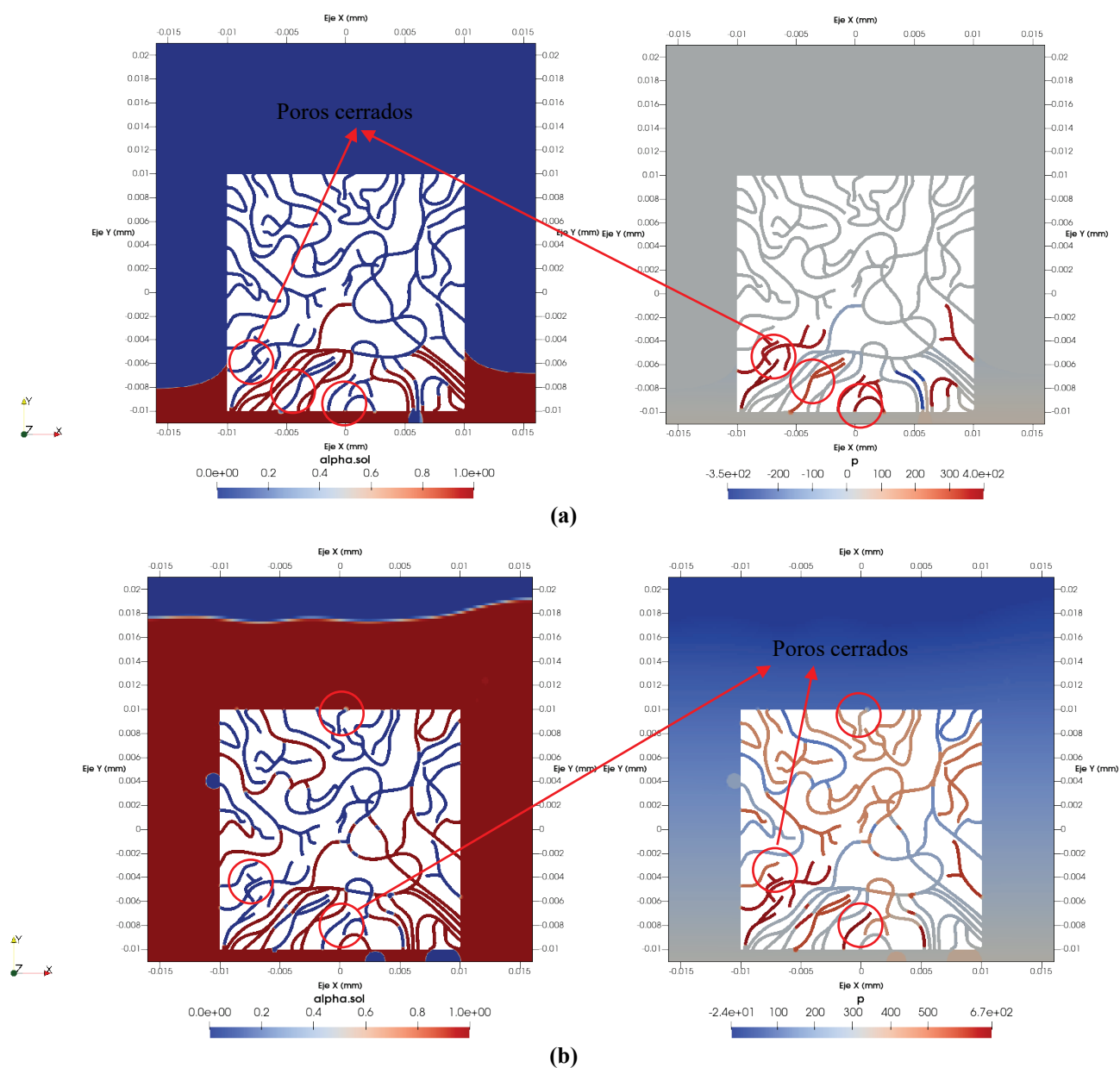


Figura 5.18. Variación del flujo y presión cuando el ángulo de contacto es 27° al finalizar la simulación.

(a) condición no saturada; (b) condición saturada

Bajo la condición no saturada, se nota que, al incrementar la tensión superficial del líquido, y por ende el ángulo de contacto, la velocidad infiltración en el mineral se dificulta progresivamente, donde va alcanzando el equilibrio más rápido y una menor altura. Específicamente, para un ángulo de contacto de 100° , la infiltración se ve impulsada únicamente por la presión hidrostática, sin embargo, esta presión no es suficiente para vencer tensión superficial del líquido, debido a que la presión capilar actúa en dirección opuesta contrarrestando la infiltración del líquido. Las simulaciones confirman que la velocidad de infiltración es inicialmente más rápida, disminuyendo gradualmente a medida que el líquido penetra en los poros, lo cual está en línea con la tendencia predicha por la ecuación de Washburn para la dinámica de penetración capilar.

En cuanto a la condición saturada, también se aprecia una disminución en la velocidad de infiltración con el aumento de la tensión superficial, ya que las fuerzas cohesivas dentro del líquido van siendo más fuertes, por lo cual va siendo que sea más difícil para el líquido infiltrar en las paredes de los poros, por ende, el aire atrapado se desplaza con menos eficiencia y la compresión del aire va siendo menos intensa. Con un ángulo de contacto de 10° , la infiltración es más eficiente, lo que lleva a una compresión del aire más abrupta, la cual se concentra en la zona del frente de avance, generando una presión interna alta, la que va disminuyendo a medida se aumenta la tensión superficial. Por otro lado, con un ángulo de contacto de 100° , la baja afinidad del líquido con los poros resulta en una infiltración significativamente reducida, por lo cual el líquido no desplaza el aire atrapado en los poros, lo que conduce a una mayor presión interna en los poros en comparación con la presión ejercida por el líquido. Lo anterior destaca la influencia significativa de la tensión superficial en la infiltración del líquido en los poros abierto de un mineral (ver otras simulaciones Anexo F).

Además, se observa que, en los poros abiertos y conectados, la ecuación clásica de Washburn describe adecuadamente la infiltración del líquido. Sin embargo, este modelo pierde validez en los poros cerrados, que no tienen una salida conectada a la superficie o a otros poros. En estos poros cerrados, el aire atrapado experimenta una compresión significativamente mayor, la cual se minoriza con el aumento de la tensión superficial del líquido. Este fenómeno se intensifica aún más en poros de radio más pequeños, donde una mayor relación superficie/volumen conlleva una presión más alta del aire atrapado en el poro.

Además, en poros más largos, la presión del aire atrapado puede reducirse a lo largo de la longitud del poro por expansión del aire, permitiendo una mayor infiltración de la solución en comparación con poros más cortos. En estos últimos, la presión se mantiene más constante, generando una barrera más efectiva contra la infiltración. Por ende, en los poros cerrados, el líquido solo logra una infiltración superficial en la entrada del poro, donde al aire se comprime y no puede escapar, a diferencia de lo que ocurre en los poros abiertos.

Capítulo 6. Conclusiones y Recomendaciones

6.1. Conclusiones

En conclusión, este estudio demuestra que caracterizar la mojabilidad e infiltración a nivel de partícula mineral es indispensable para comprender y mejorar la predicción de la dinámica de fluidos en la lixiviación. Los resultados sentarán las bases para avanzar en el modelamiento de estos fenómenos complejos.

Específicamente, se concluye que:

La investigación realizada permitió validar la hipótesis planteada inicialmente, demostrando que el estudio detallado de variables microscópicas como tensión superficial, ángulo de contacto y distribución de tamaños de poro resulta indispensable para caracterizar y comprender apropiadamente la dinámica de fluidos y los procesos de infiltración en medios porosos de naturaleza mineral.

La investigación demuestra cuantitativa y cualitativamente la existencia de una correlación integral entre un conjunto de propiedades físicas y microestructurales del mineral, que incluyen una mayor área superficial, mayor desarrollo de microporosidad, menor ángulo de contacto, menor histéresis BET, y una capacidad incrementada de transporte e infiltración de fluidos a través de la red de poros del mineral. Las muestras del mineral de DGM exhibe estas características en mayor medida comparado con las muestras del mineral de DRT, resultando en una velocidad más rápida y eficiente de infiltración de líquidos, validada experimentalmente.

Específicamente, se llegó a concluir a que un mineral con mayor área superficial, más microporosidad, menor ángulo de contacto y menor histéresis BET, como en el caso de las muestras del mineral de DGM, correlaciona con una mayor velocidad de infiltración del líquido en los poros. Los experimentos de infiltración confirmaron que, en condiciones no saturadas, los minerales con poros pequeños permiten alturas mayores por efectos capilares. En contraste, en saturación la oposición del aire dificulta la infiltración en poros diminutos.

Los ensayos de infiltración demostraron que, en condiciones no saturadas, los minerales con porosidad predominante de tamaño pequeño permiten alcanzar alturas de infiltración mayores debido a que intensifican las fuerzas capilares según la ley de Laplace. En contraste, en condiciones de saturación, la presencia de aire atrapado ofrece mayor resistencia al flujo de líquidos en minerales con poros pequeños. Por lo tanto, en estado saturado, los minerales con poros de mayor tamaño facilitan una mayor infiltración de soluciones, al minimizar la oposición del aire ocluido.

Existe una correlación inversa entre el grado de histéresis en la adsorción-desorción BET y la velocidad de infiltración de líquidos en la red de poros de los minerales estudiados. Una mayor histéresis, indicativa de una

red de poros más compleja, se asocia a tasas más lentas de infiltración del líquido. En contraste, una baja histéresis BET se correlaciona con mayores velocidades de infiltración, debido a una mejor conectividad entre los poros accesibles al líquido en el mineral.

Las simulaciones CFD evidenciaron que al aumentar la tensión superficial se reduce la velocidad de penetración del líquido en el modelo de mineral ideal. En poros aislados o cerrados la ecuación de Washburn pierde validez por la fuerte compresión del aire atrapado.

En los poros aislados o cerrados, no habría infiltración, debido a la alta resistencia del aire atrapado, por lo que, si un grano de mineral valioso se encuentra en el interior, no se produciría su disolución debido a la ausencia de contacto directo con la solución externa. Esto subraya la importancia de la geometría y la conectividad de los poros en procesos de infiltración y disolución de mineral.

6.2. Recomendaciones

A partir de los resultados y hallazgos surgidos en la presente investigación, se derivan las siguientes recomendaciones con la finalidad para continuar profundizando en el estudio de la hidrodinámica de fluidos en medios porosos minerales desde un enfoque microscópico:

Implementar la medición rutinaria del ángulo de contacto en nuevos minerales de las zonas de extracción mediante técnicas como la gota sésil y goniometría, estableciendo un criterio inicial de ángulo máximo admisible (por ejemplo $<45^\circ$) para identificar potencial hidrofiliicidad; mejorar las mediciones mediante ensayos dinámicos de avance y retroceso del líquido para caracterizar la histéresis de humectación; evaluar el efecto desde una perspectiva hidrodinámica la influencia de la aireación sobre el ángulo de contacto, al cambiar la fase gaseosa, lo que implicaría su disminución; la implementación sistemática de estas mediciones mejoradas aportará información invaluable sobre la mojabilidad de los nuevos minerales para la proyección y optimización de las operaciones hidrometalúrgicas.

Se sugiere desarrollar mejores modelos empíricos que integren los parámetros caracterizados a nivel microscópico, incluyendo ángulo de contacto, tensión superficial, área superficial específica y velocidad de infiltración, con variables operacionales de modelo hidrodinámicos macroscópicos, modelos cinéticos y termodinámicos utilizados actualmente a escala industrial.

Consolidar los conocimientos adquiridos en un modelo matemático acoplado, que integre las cinéticas de disolución mineral con las ecuaciones de cambio de fase y transporte de solutos dentro de la partícula, simulando en CFD esto, además de mejorar las geometrías de mineral y escalarla, considerando microtomografías computarizadas 3D o imágenes segmentadas.

Bibliografía

- [1] M. L. Free, *Hydrometallurgy*. Cham: Springer International Publishing, 2022. doi: 10.1007/978-3-030-88087-3.
- [2] T. Havlík, *Hydrometallurgy: Principles and Applications*. Elsevier, 2008.
- [3] P. W. Atkins and J. De Paula, *Atkins' Physical Chemistry*, 10th ed. Oxford University Press, 2014.
- [4] J. Bear, *Dynamics of Fluids in Porous Media*. New York, NY, USA: Dover Publications, 1972.
- [5] R. B. Bird, W. E. Stewart, and E. N. Lightfoot, *Transport Phenomena*, 2nd ed. Hoboken, NJ, USA: John Wiley & Sons, Inc., 2007.
- [6] F. M. White, *Fluid Mechanics*, 8th ed. New York, NY, USA: McGraw-Hill Education, 2016.
- [7] T. D. Blake and J. M. Haynes, “Kinetics of liquid/liquid displacement,” *J Colloid Interface Sci*, vol. 30, no. 3, pp. 421–423, Jul. 1969, doi: 10.1016/0021-9797(69)90411-1.
- [8] A. W. Adamson and A. P. Gast, *Physical Chemistry of Surfaces*, 6th ed. New York, NY, USA: Wiley-Interscience, 1997.
- [9] J. N. Israelachvili, *Intermolecular and Surface Forces*, 3rd ed. Santa Barbara, California, USA: Elsevier, 2011. doi: 10.1016/C2009-0-21560-1.
- [10] M. J. Rosen and J. T. Kunjappu, *Surfactants and Interfacial Phenomena*. Hoboken, NJ, USA: John Wiley & Sons, Inc., 2012. doi: 10.1002/9781118228920.
- [11] A. Dupré, *Théorie mécanique de la chaleur*. Paris, France: Gauthier-Villars, 1869.
- [12] T. Young, “An essay on the cohesion of fluids,” *Philos Trans R Soc Lond*, vol. 95, pp. 65–87, Dec. 1805, doi: 10.1098/rstl.1805.0005.
- [13] E. Bormashenko, “General equation describing wetting of rough surfaces,” *J Colloid Interface Sci*, vol. 360, no. 1, pp. 317–319, Aug. 2011, doi: 10.1016/j.jcis.2011.04.051.
- [14] R. N. Wenzel, “Resistance of solid surfaces to wetting by water,” *Ind Eng Chem*, vol. 28, no. 8, pp. 988–994, Aug. 1936, doi: 10.1021/ie50320a024.
- [15] A. B. D. Cassie and S. Baxter, “Wettability of porous surfaces,” *Transactions of the Faraday Society*, vol. 40, p. 546, 1944, doi: 10.1039/tf9444000546.
- [16] M. Nosonovsky and B. Bhushan, “Multiscale effects and capillary interactions in functional biomimetic surfaces for energy conversion and green engineering,” *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, vol. 367, no. 1893, pp. 1511–1539, Apr. 2009, doi: 10.1098/rsta.2009.0008.
- [17] P.-S. Laplace, *Traité de Mécanique Céleste*. Paris, France: Courcier, 1806.
- [18] P.-G. de Gennes, F. Brochard-Wyart, and D. Quéré, *Capillarity and Wetting Phenomena*. New York, NY, USA: Springer New York, 2004. doi: 10.1007/978-0-387-21656-0.
- [19] F. Villalobos, *Mecánica de Suelos*, Segunda Edición. Concepción, Chile: Ediciones UCSC, 2016.
- [20] J. Jurin, “An account of some experiments shown before the Royal Society; with an enquiry into the cause of the ascent and suspension of water in capillary tubes.,” *Philos Trans R Soc Lond*, vol. 30, no. 355, pp. 739–747, Dec. 1719, doi: 10.1098/rstl.1717.0026.
- [21] J. L. M. Poiseuille, “Recherches expérimentales sur le mouvement des liquides dans les tubes de très-petits diamètres,” *C R Hebd Seances Acad Sci*, vol. 11, pp. 961–967, 1840.
- [22] E. W. Washburn, “The Dynamics of Capillary Flow,” *Physical Review*, vol. 17, no. 3, pp. 273–283, Mar. 1921, doi: 10.1103/PhysRev.17.273.
- [23] M. C. García-Payo, M. A. Izquierdo-Gil, and C. Fernández-Pineda, “Wetting Study of Hydrophobic Membranes via Liquid Entry Pressure Measurements with Aqueous Alcohol

- Solutions,” *J Colloid Interface Sci*, vol. 230, no. 2, pp. 420–431, Oct. 2000, doi: 10.1006/jcis.2000.7106.
- [24] J. H. Ferziger, M. Perić, and R. L. Street, *Computational Methods for Fluid Dynamics*. Cham: Springer International Publishing, 2020. doi: 10.1007/978-3-319-99693-6.
- [25] C. Hirsch, *Numerical Computation of Internal and External Flows*, 2nd ed., vol. 1. Elsevier, 2007. doi: 10.1016/B978-0-7506-6594-0.X5037-1.
- [26] OpenFOAM Foundation, “OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox. User Guide,” 2023. Accessed: Jul. 14, 2023. [Online]. Available: <https://foam.sourceforge.net/docs/Guides-a4/OpenFOAMUserGuide-A4.pdf>
- [27] H.K. Versteeg and W. Malalasekera, *An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method*, 2nd ed. Harlow, Inglaterra: Pearson Education, 2007.
- [28] J. H. Ferziger and M. Perić, *Computational Methods for Fluid Dynamics*. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2002. doi: 10.1007/978-3-642-56026-2.
- [29] V. Joekar-Niasar and S. M. Hassanizadeh, “Analysis of Fundamentals of Two-Phase Flow in Porous Media Using Dynamic Pore-Network Models: A Review,” *Crit Rev Environ Sci Technol*, vol. 42, no. 18, pp. 1895–1976, Sep. 2012, doi: 10.1080/10643389.2011.574101.
- [30] C. W. Hirt and B. D. Nichols, “Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries,” *J Comput Phys*, vol. 39, no. 1, pp. 201–225, Jan. 1981, doi: 10.1016/0021-9991(81)90145-5.
- [31] S. Brunauer, P. H. Emmett, and E. Teller, “Adsorption of Gases in Multimolecular Layers,” *J Am Chem Soc*, vol. 60, no. 2, pp. 309–319, Feb. 1938, doi: 10.1021/ja01269a023.
- [32] F. Rouquerol, J. Rouquerol, and K. Sing, *Adsorption by Powders and Porous Solids*. Elsevier, 1999. doi: 10.1016/B978-0-12-598920-6.X5000-3.
- [33] S. Lowell, J. E. Shields, M. A. Thomas, and M. Thommes, *Characterization of Porous Solids and Powders: Surface Area, Pore Size and Density*, vol. 16. Dordrecht: Springer Netherlands, 2004. doi: 10.1007/978-1-4020-2303-3.
- [34] D. Y. Kwok and A. W. Neumann, “Contact angle measurement and contact angle interpretation,” *Adv Colloid Interface Sci*, vol. 81, no. 3, pp. 167–249, Sep. 1999, doi: 10.1016/S0001-8686(98)00087-6.
- [35] Canon Inc., “Canon EOS 7D Mark II Instruction Manual,” Tokyo, Japan, 2014. Accessed: Mar. 26, 2023. [Online]. Available: https://gdlp01.c-wss.com/gds/2/0300016952/01/EOS_7D_Mark_II_Instruction_Manual_ES.pdf
- [36] Adobe Inc., “Adobe Premiere Pro.” Adobe Inc., San José, California, USA, 2023. Accessed: Mar. 14, 2023. [Online]. Available: <https://www.adobe.com/la/products/premiere.html>
- [37] Aurélien Stadler; Daniel Sage, “Drop Shape Analysis - Biomedical Imaging Group.” Accessed: Mar. 10, 2023. [Online]. Available: <http://bigwww.epfl.ch/demo/dropanalysis/>
- [38] Schneider CA, Rasband WS, and Eliceiri KW, “ImageJ.” U. S. National Institutes of Health, Bethesda, Maryland, USA, 2023. Accessed: Feb. 03, 2023. [Online]. Available: <https://imagej.net/ij/>
- [39] A. F. Stalder, G. Kulik, D. Sage, L. Barbieri, and P. Hoffmann, “A snake-based approach to accurate determination of both contact points and contact angles,” *Colloids Surf A Physicochem Eng Asp*, vol. 286, no. 1–3, pp. 92–103, Sep. 2006, doi: 10.1016/j.colsurfa.2006.03.008.
- [40] A. Stalder, “DropSnake and LB-ADSA user manual,” Lausanne, Schweiz, Mar. 2006. Accessed: Jun. 12, 2023. [Online]. Available: http://bigwww.epfl.ch/demo/dropanalysis/drop_analysis.pdf

- [41] M. Yekta-fard and A. B. Ponter, "Surface Treatment and its Influence on Contact Angles of Water Drops Residing on Teflon and Copper," *J Adhes*, vol. 18, no. 3, pp. 197–205, Jan. 1985, doi: 10.1080/00218468508079683.
- [42] R. Courant, K. Friedrichs, and H. Lewy, "On the Partial Difference Equations of Mathematical Physics," *IBM J Res Dev*, vol. 11, no. 2, pp. 215–234, Mar. 1967, doi: 10.1147/rd.112.0215.
- [43] L. M. Anovitz and D. R. Cole, "Characterization and Analysis of Porosity and Pore Structures," *Rev Mineral Geochem*, vol. 80, no. 1, pp. 61–164, 2015, doi: 10.2138/rmg.2015.80.04.
- [44] V. Atluri, J. Jin, K. Shrimali, L. Dang, X. Wang, and J. D. Miller, "The hydrophobic surface state of talc as influenced by aluminum substitution in the tetrahedral layer," *J Colloid Interface Sci*, vol. 536, pp. 737–748, Feb. 2019, doi: 10.1016/j.jcis.2018.10.085.
- [45] L. Vitos, A. V. Ruban, H. L. Skriver, and J. Kollár, "The surface energy of metals," *Surf Sci*, vol. 411, no. 1–2, pp. 186–202, Aug. 1998, doi: 10.1016/S0039-6028(98)00363-X.
- [46] Clint Matthew Miller, "Adhesion and the Surface Energy Components of Natural Minerals and Aggregates," Texas A&M University, 2010. Accessed: Jul. 13, 2023. [Online]. Available: <https://oaktrust.library.tamu.edu/handle/1969.1/ETD-TAMU-2010-08-8237#:~:text=Miller%2C%20Clint%20Matthew%20%282010%29,8237%E2%80%A0hdl.handle.net%E3%80%91>
- [47] R. J. Jaccodine, "Surface Energy of Germanium and Silicon," *J Electrochem Soc*, vol. 110, no. 6, p. 524, 1963, doi: 10.1149/1.2425806.
- [48] M. Thommes *et al.*, "Physisorption of gases, with special reference to the evaluation of surface area and pore size distribution (IUPAC Technical Report)," *Pure and Applied Chemistry*, vol. 87, no. 9–10, pp. 1051–1069, Oct. 2015, doi: 10.1515/pac-2014-1117.
- [49] G. Mason, "The effect of pore space connectivity on the hysteresis of capillary condensation in adsorption—desorption isotherms," *J Colloid Interface Sci*, vol. 88, no. 1, pp. 36–46, Jul. 1982, doi: 10.1016/0021-9797(82)90153-9.
- [50] M. J. Kirkby, "The fractal geometry of nature," *Earth Surf Process Landf*, vol. 8, no. 4, pp. 406–406, Jul. 1983, doi: 10.1002/esp.3290080415.
- [51] D. Seveno, V. Ledauphin, G. Martic, M. Voué, and J. De Coninck, "Spreading Drop Dynamics on Porous Surfaces," *Langmuir*, vol. 18, no. 20, pp. 7496–7502, Oct. 2002, doi: 10.1021/la025520h.
- [52] E. P. Barrett, L. G. Joyner, and P. P. Halenda, "The Determination of Pore Volume and Area Distributions in Porous Substances. I. Computations from Nitrogen Isotherms," *J Am Chem Soc*, vol. 73, no. 1, pp. 373–380, Jan. 1951, doi: 10.1021/ja01145a126.
- [53] V. Joekar-Niasar and S. M. Hassanizadeh, "Analysis of Fundamentals of Two-Phase Flow in Porous Media Using Dynamic Pore-Network Models: A Review," *Crit Rev Environ Sci Technol*, vol. 42, no. 18, pp. 1895–1976, Sep. 2012, doi: 10.1080/10643389.2011.574101.
- [54] O. Glaso, "Generalized Pressure-Volume-Temperature Correlations," *Journal of Petroleum Technology*, vol. 32, no. 05, pp. 785–795, May 1980, doi: 10.2118/8016-PA.

Anexo A. Resultados FRX y DRX

Tabla A.1. Composición química obtenidos mediante FRX en las muestras de los minerales de DGM y DRT.

Especies	Composición (%)	
	Muestra DGM	Muestra DRT
SiO ₂	52.93	71.97
Al ₂ O ₃	19.90	14.92
Fe ₂ O ₃	6.81	1.09
MgO	6.49	0.27
Na ₂ O	4.36	4.23
K ₂ O	4.07	4.81
CaO	2.50	1.35
CuO	0.74	0.39
WO ₃	0.05	0.36
TiO ₂	1.22	0.17
BaO	0.08	0.06
Rb ₂ O	0.02	*
SrO	0.05	0.05
Cl	0.05	0.05
P ₂ O ₅	0.37	0.06
SO ₃	0.04	0.06
F	0.11	0.07
V ₂ O ₅	0.04	-
MnO	0.07	?
ZnO	*	*

*: Se observa presencia del elemento, se recomienda otra técnica de análisis.

?: Señal de muy baja intensidad.

*?: Existe la posibilidad, pero se observa superposición de *peak* con otro elemento.

%WO₃: Considerar contaminación por molienda.

Tabla A.2. Mineralogía semicuantificación automática (S-Q) en las muestras de los minerales de DGM y DRT.

Especies	Mineralogía semicuantitativa (%)					
	Cuarzo	Plagioclasas	Feldspatos K	Caolinita	Biotita	Clorita
Muestra DGM	24.9	50.1	-	-	17.8	7.2
Muestra DRT	42.7	40.7	15.3	1.3	-	-

Anexo B. Medición de ángulos de contacto

B.1. Muestra del mineral de División Gabriela Mistral



Figura B.1. Evolución del ángulo de contacto medido en la muestra del mineral de DGM durante la primera medición. De izquierda a derecha y de arriba hacia abajo, las imágenes representan el progreso en intervalos regulares a lo largo de la duración de la medición

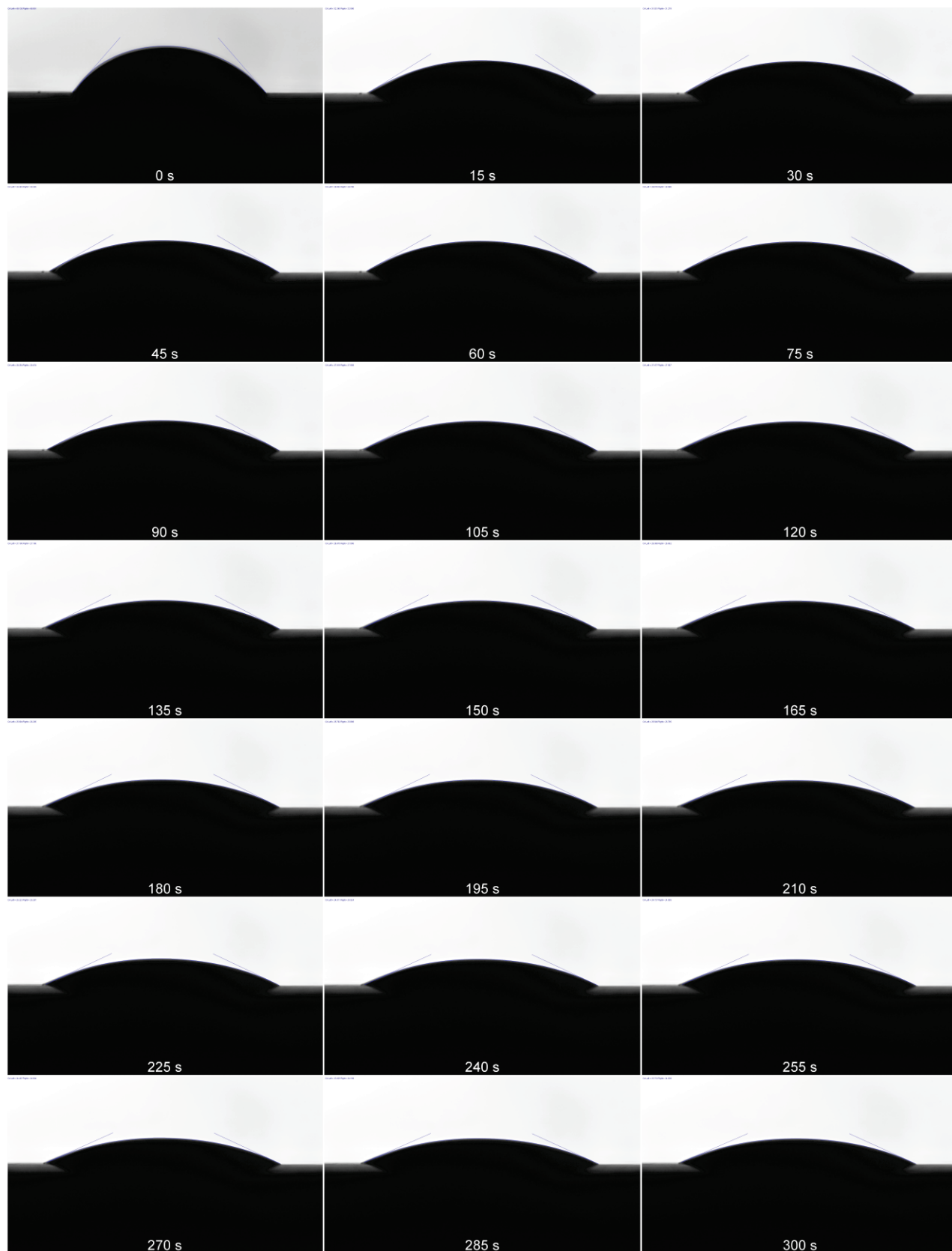


Figura B.2. Evolución del ángulo de contacto medido en la muestra del mineral de DGM durante la segunda medición. De izquierda a derecha y de arriba hacia abajo, las imágenes representan el progreso en intervalos regulares a lo largo de la duración de la medición.

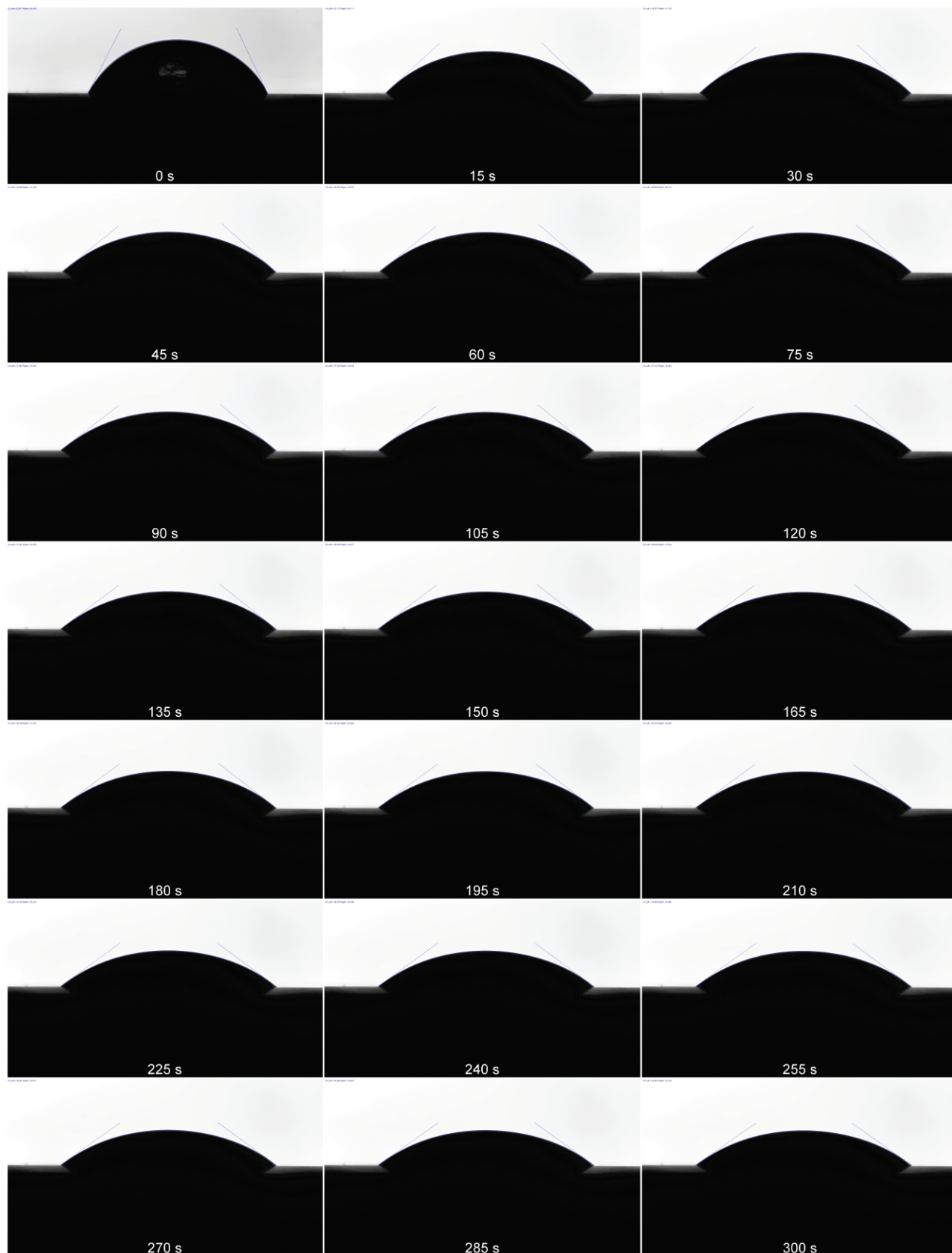


Figura B.3. Evolución del ángulo de contacto medido en la muestra del mineral de DGM durante la tercera medición. De izquierda a derecha y de arriba hacia abajo, las imágenes representan el progreso en intervalos regulares a lo largo de la duración de la medición.

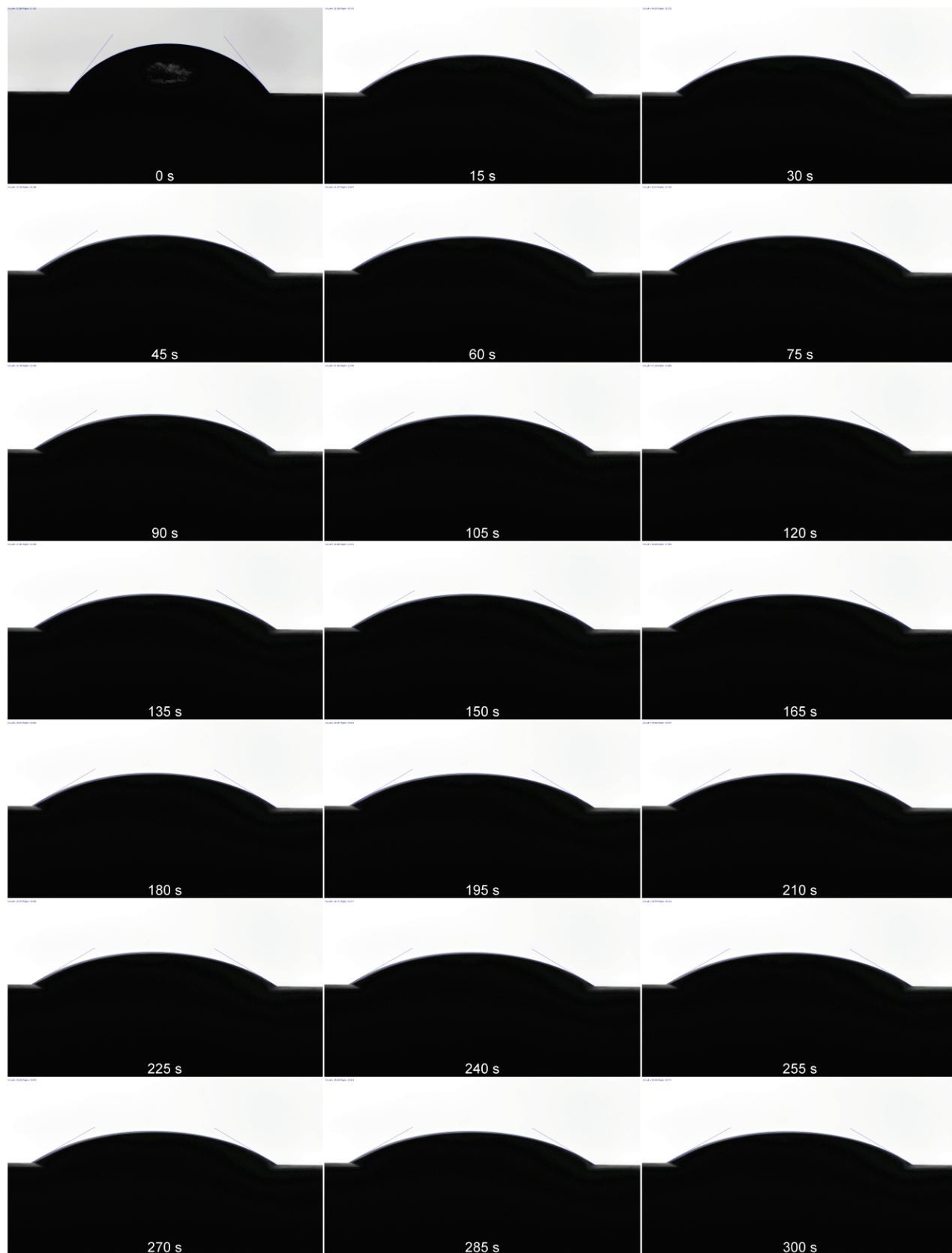


Figura B.4. Evolución del ángulo de contacto medido en la muestra del mineral de DGM durante la cuarta medición. De izquierda a derecha y de arriba hacia abajo, las imágenes representan el progreso en intervalos regulares a lo largo de la duración de la medición.

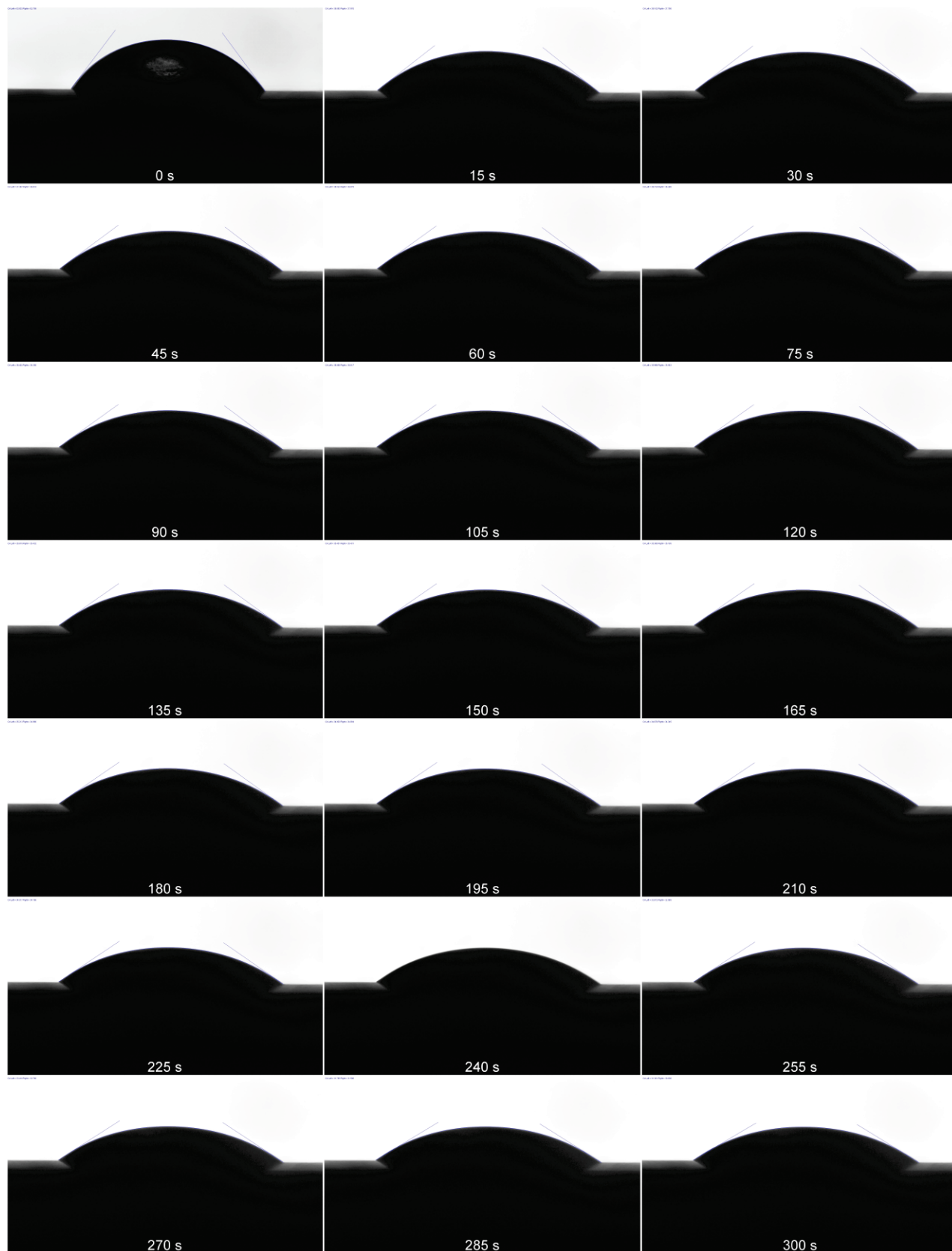


Figura B.5. Evolución del ángulo de contacto medido en la muestra del mineral de DGM durante la quinta medición. De izquierda a derecha y de arriba hacia abajo, las imágenes representan el progreso en intervalos regulares a lo largo de la duración de la medición.



Figura B.6. Evolución del ángulo de contacto medido en la muestra del mineral de DGM durante la sexta medición. De izquierda a derecha y de arriba hacia abajo, las imágenes representan el progreso en intervalos regulares a lo largo de la duración de la medición.



Figura B.7. Evolución del ángulo de contacto medido en la muestra del mineral de DGM durante la séptima medición. De izquierda a derecha y de arriba hacia abajo, las imágenes representan el progreso en intervalos regulares a lo largo de la duración de la medición.



Figura B.8. Evolución del ángulo de contacto medido en la muestra del mineral de DGM durante la octava medición. De izquierda a derecha y de arriba hacia abajo, las imágenes representan el progreso en intervalos regulares a lo largo de la duración de la medición.



Figura B.9. Evolución del ángulo de contacto medido en la muestra del mineral de DGM durante la novena medición. De izquierda a derecha y de arriba hacia abajo, las imágenes representan el progreso en intervalos regulares a lo largo de la duración de la medición.



Figura B.10. Evolución del ángulo de contacto medido en la muestra del mineral de DGM durante la décima medición. De izquierda a derecha y de arriba hacia abajo, las imágenes representan el progreso en intervalos regulares a lo largo de la duración de la medición.

B.2. Muestra del mineral de División Radomiro Tomic

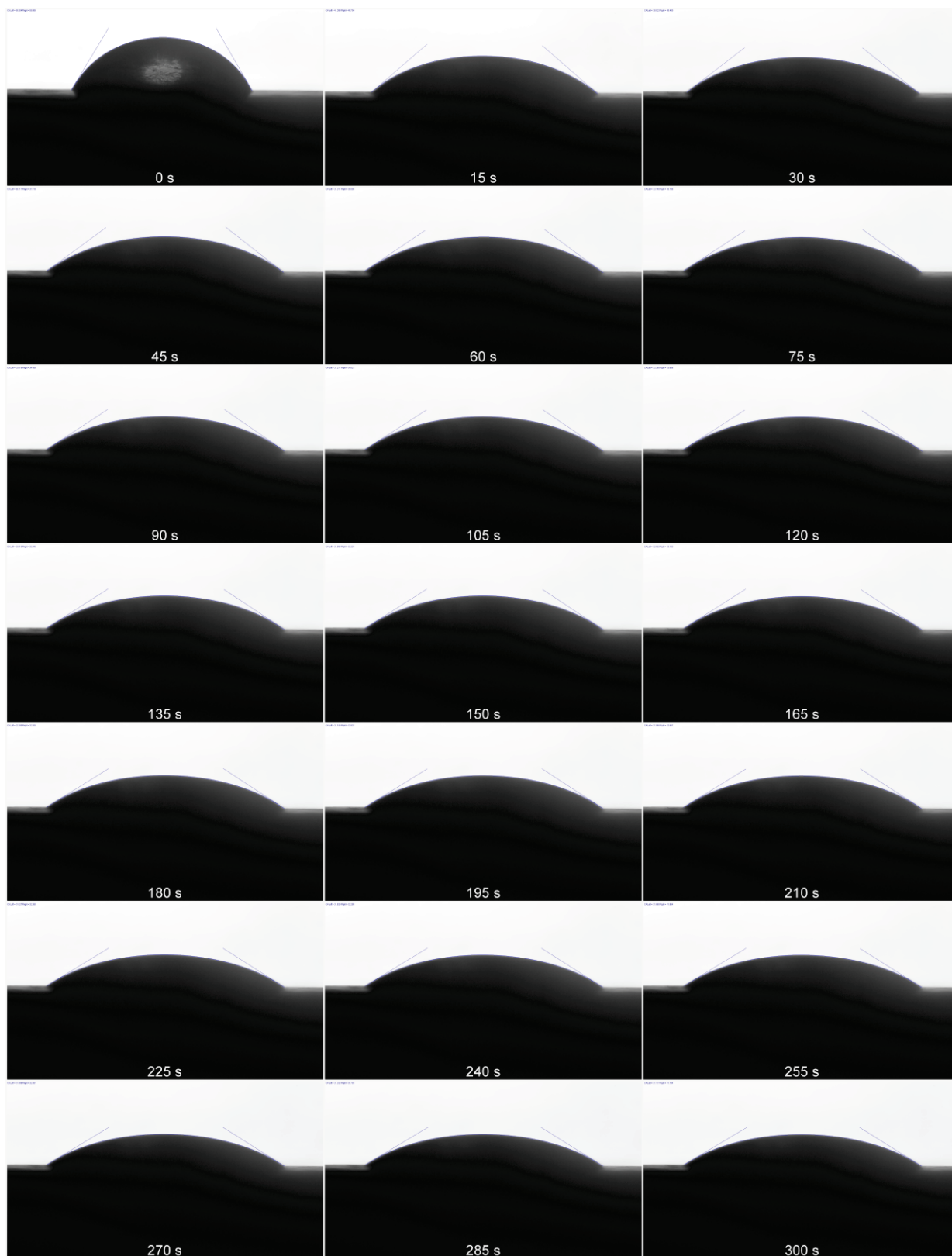


Figura B.11. Evolución del ángulo de contacto medido en la muestra del mineral de DRT durante la primera medición. De izquierda a derecha y de arriba hacia abajo, las imágenes representan el progreso en intervalos regulares a lo largo de la duración de la medición.

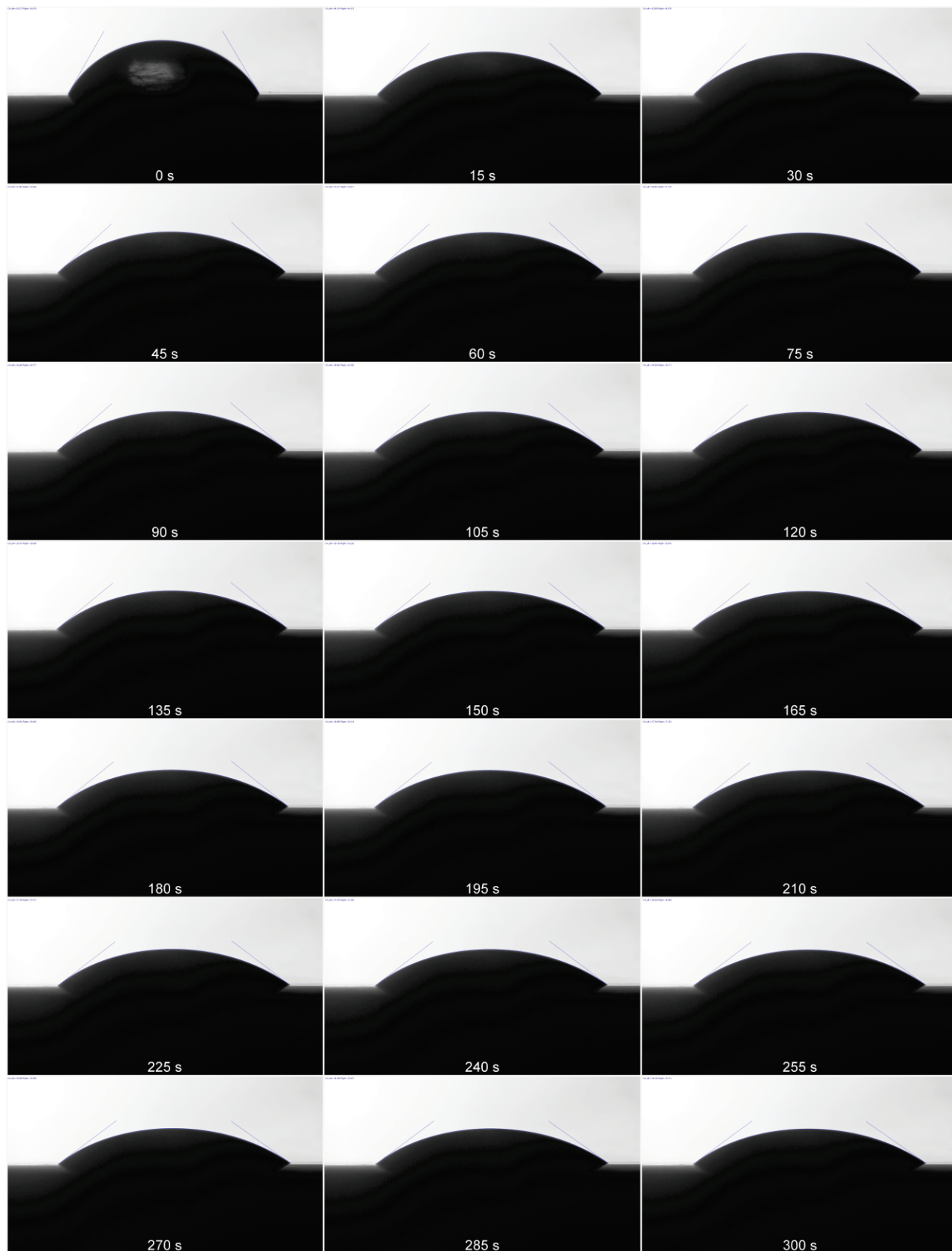


Figura B.12. Evolución del ángulo de contacto medido en la muestra del mineral de DRT durante la segunda medición. De izquierda a derecha y de arriba hacia abajo, las imágenes representan el progreso en intervalos regulares a lo largo de la duración de la medición.



Figura B.13. Evolución del ángulo de contacto medido en la muestra del mineral de DRT durante la tercera medición. De izquierda a derecha y de arriba hacia abajo, las imágenes representan el progreso en intervalos regulares a lo largo de la duración de la medición.

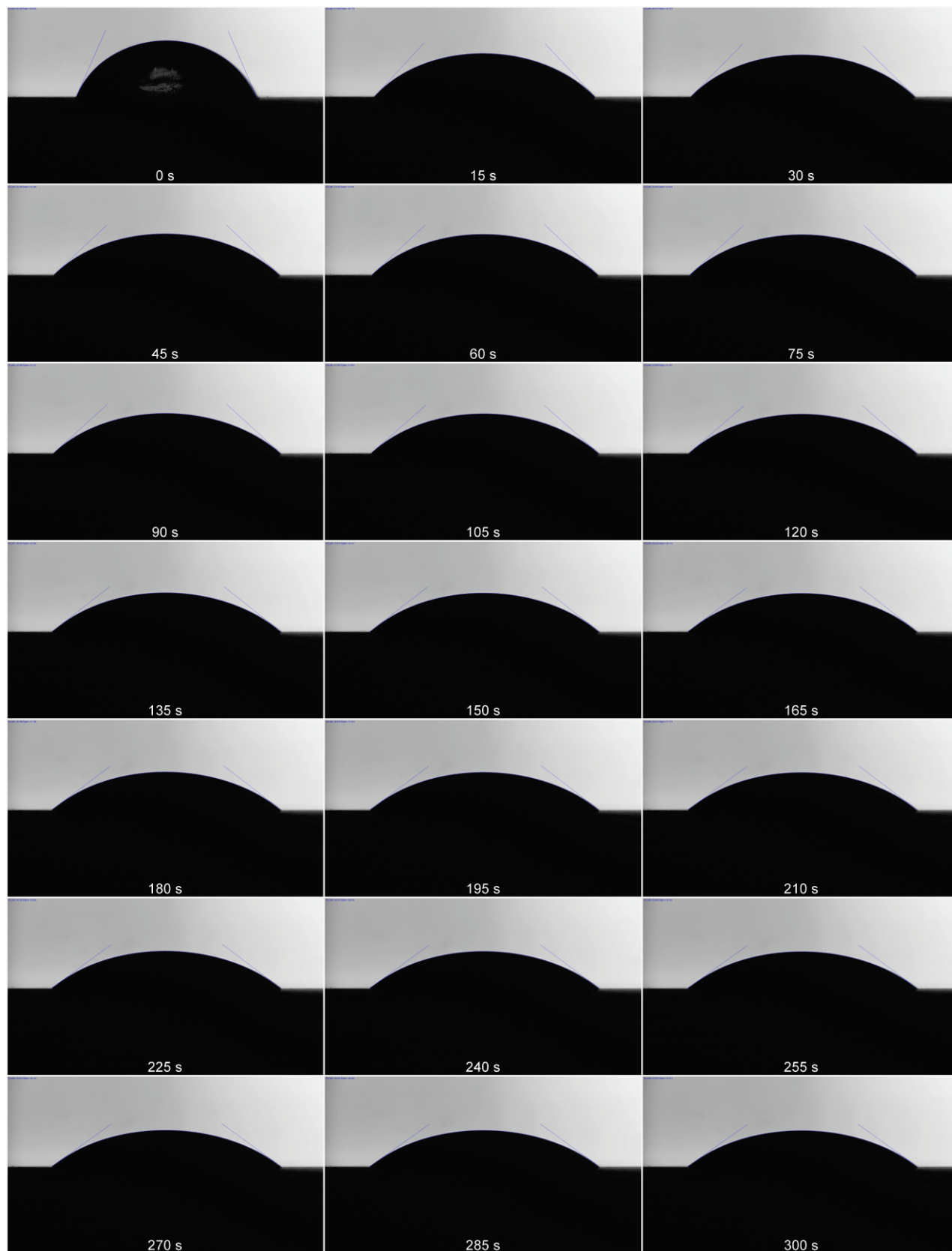


Figura B.14. Evolución del ángulo de contacto medido en la muestra del mineral de DRT durante la cuarta medición. De izquierda a derecha y de arriba hacia abajo, las imágenes representan el progreso en intervalos regulares a lo largo de la duración de la medición.



Figura B.15. Evolución del ángulo de contacto medido en la muestra del mineral de DRT durante la quinta medición. De izquierda a derecha y de arriba hacia abajo, las imágenes representan el progreso en intervalos regulares a lo largo de la duración de la medición.



Figura B.16. Evolución del ángulo de contacto medido en la muestra del mineral de DRT durante la sexta medición. De izquierda a derecha y de arriba hacia abajo, las imágenes representan el progreso en intervalos regulares a lo largo de la duración de la medición.

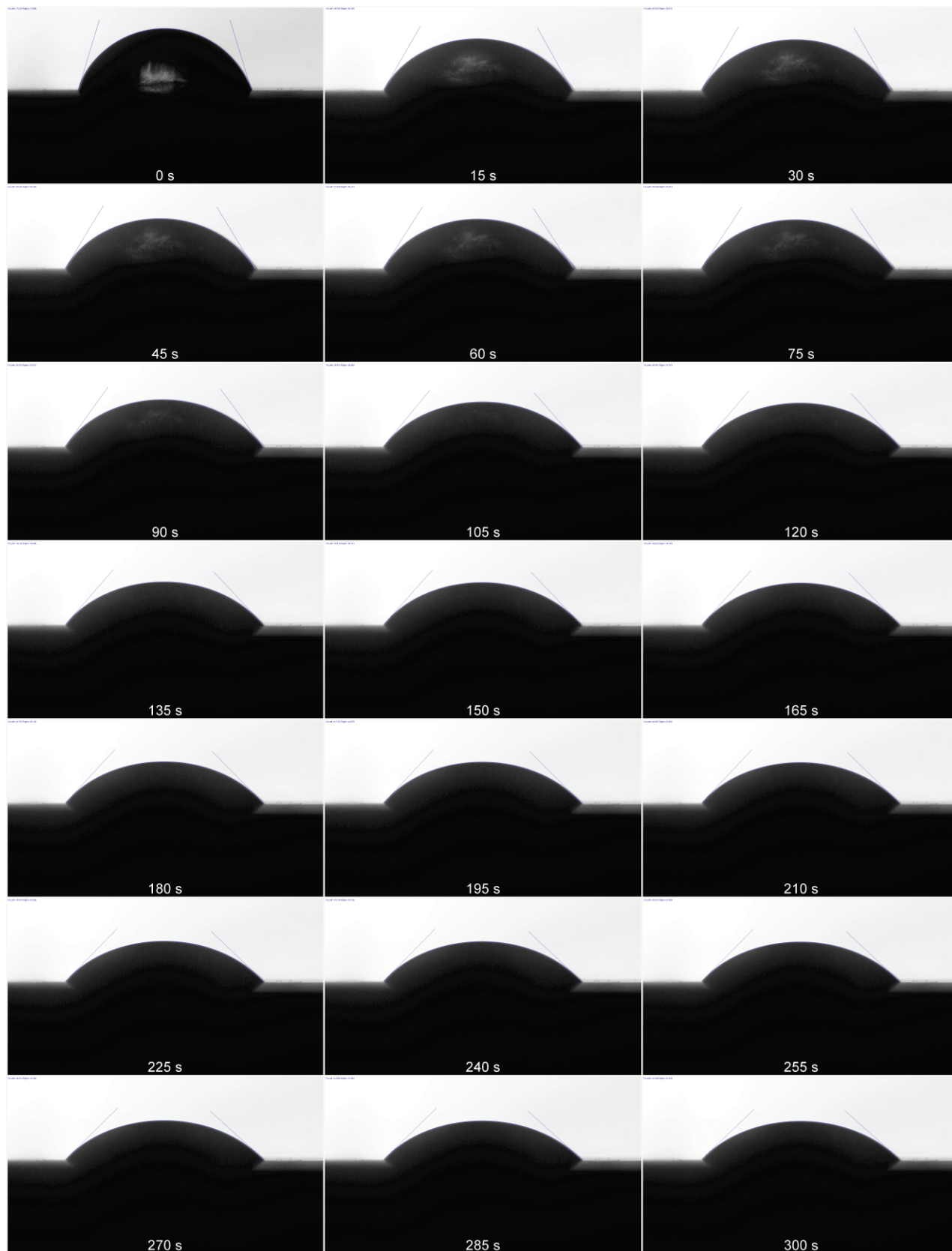


Figura B.17. Evolución del ángulo de contacto medido en la muestra del mineral de DRT durante la séptima medición. De izquierda a derecha y de arriba hacia abajo, las imágenes representan el progreso en intervalos regulares a lo largo de la duración de la medición.



Figura B.18. Evolución del ángulo de contacto medido en la muestra del mineral de DRT durante la octava medición. De izquierda a derecha y de arriba hacia abajo, las imágenes representan el progreso en intervalos regulares a lo largo de la duración de la medición.

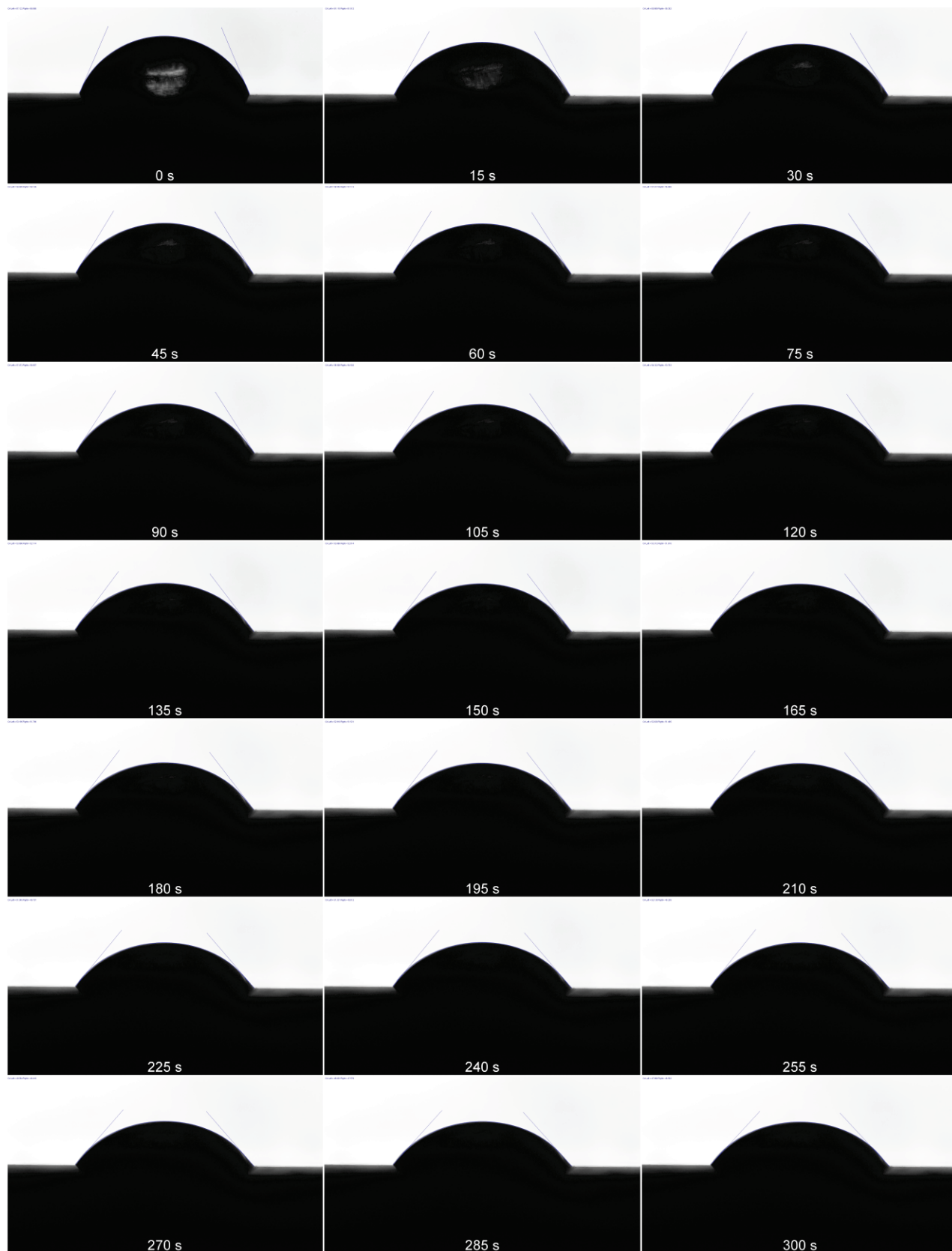


Figura B.19. Evolución del ángulo de contacto medido en la muestra del mineral de DRT durante la novena medición. De izquierda a derecha y de arriba hacia abajo, las imágenes representan el progreso en intervalos regulares a lo largo de la duración de la medición.

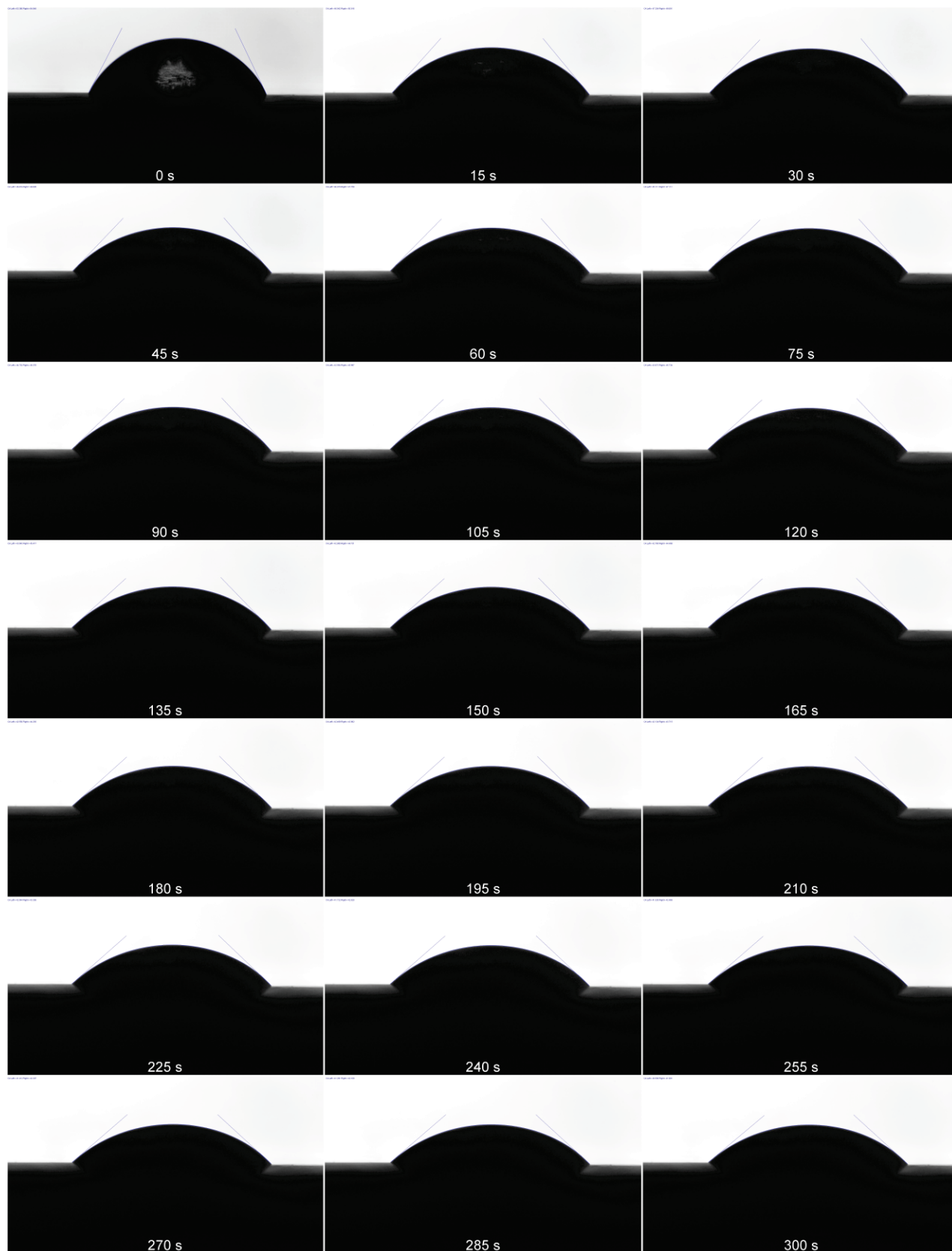


Figura B.20. Evolución del ángulo de contacto medido en la muestra del mineral de DRT durante la décima medición. De izquierda a derecha y de arriba hacia abajo, las imágenes representan el progreso en intervalos regulares a lo largo de la duración de la medición.

Anexo C. Ensayos de Infiltración

C.1. Muestras del mineral de División Gabriela Mistral





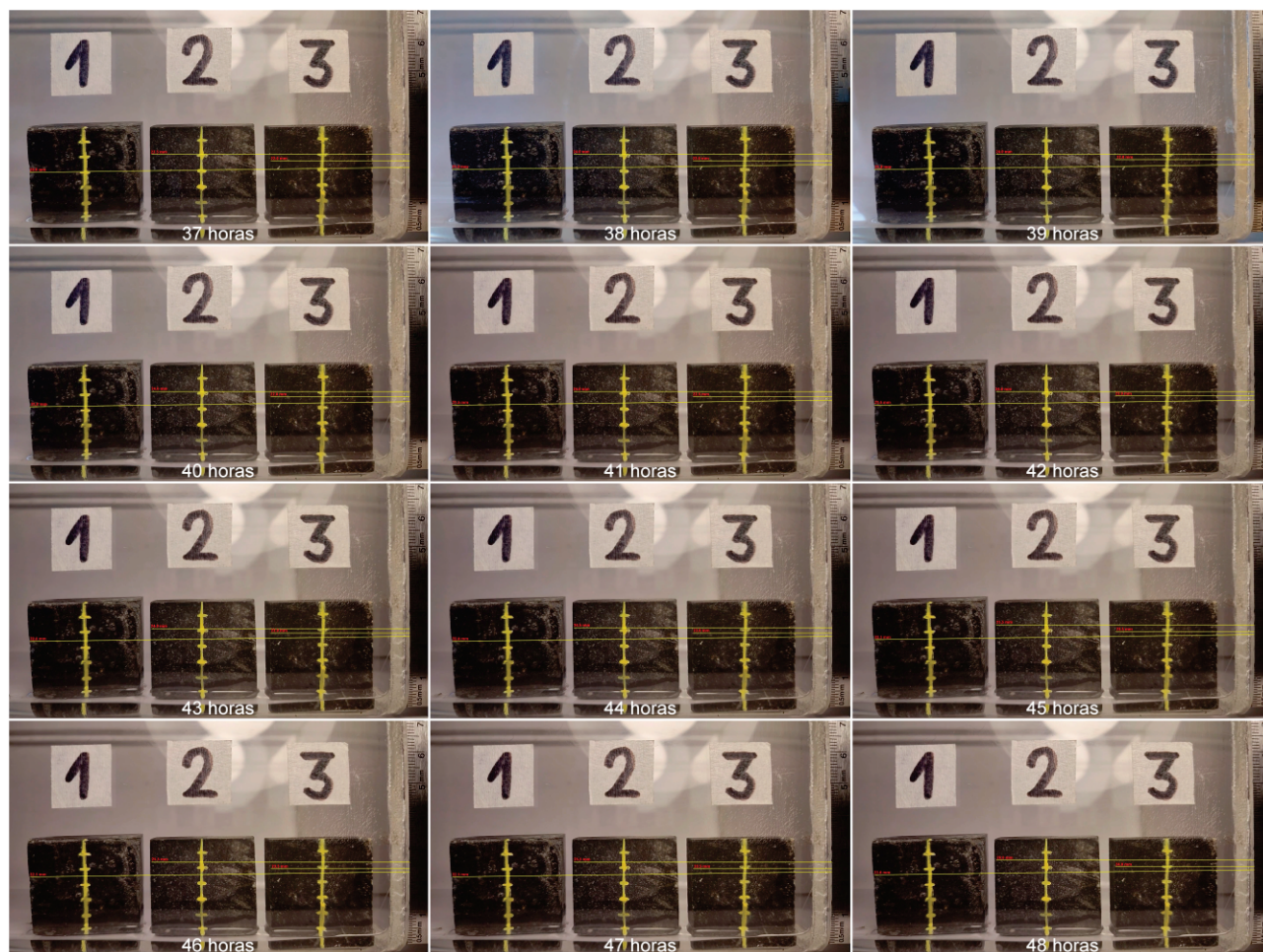


Figura C.1. Evolución de la altura de infiltración de la solución ácida de aglomeración en la muestra del mineral de DGM a lo largo del tiempo en una condición no saturada. De izquierda a derecha y de arriba hacia abajo, las imágenes muestran la altura de infiltración a lo largo de la duración del ensayo.

C.2. Muestras del mineral de División Radomiro Tomic





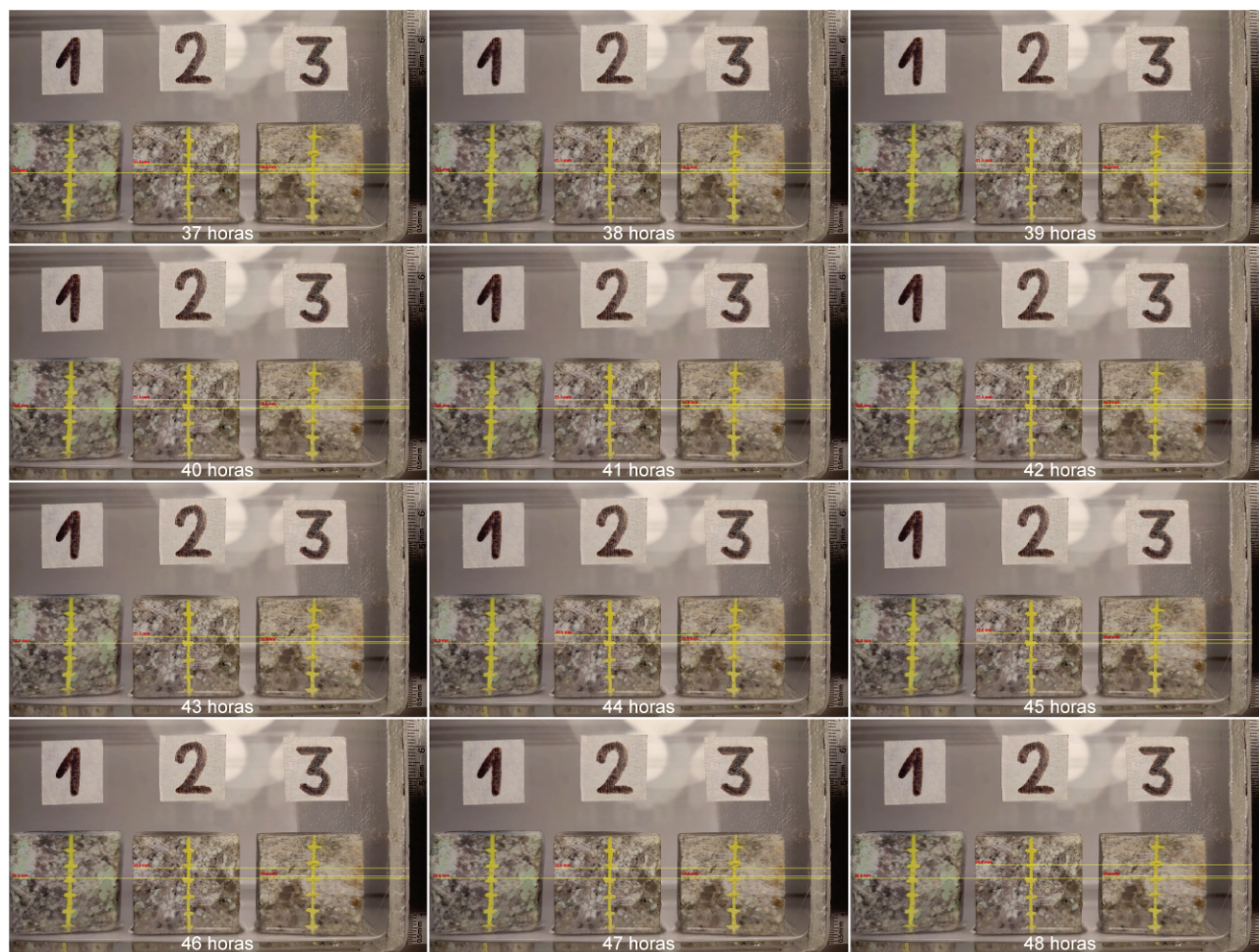


Figura C.2. Evolución de la altura de infiltración de la solución ácida de aglomeración en las muestras del mineral de DRT a lo largo del tiempo en una condición no saturada. De izquierda a derecha y de arriba hacia abajo, las imágenes muestran la altura de infiltración a lo largo de la duración del ensayo.

Anexo D. Medición de propiedades del líquido

Se determinó las propiedades de la solución ácida de aglomeración (14% ácido sulfúrico – 86% agua), con el propósito de utilizar estos datos en las simulaciones de Dinámica de Fluidos Computacional.

D.1. Tensión superficial

Se determinó la tensión superficial de la solución ácida de aglomeración utilizando un tensiómetro de Anillo de Du Noüy Kruss K6. Para garantizar la precisión del equipo, se emplearon dos líquidos de referencia: agua destilada (pH 6.78) y ácido sulfúrico al 98%. Se realizaron tres mediciones para cada líquido y se calculó el promedio. Todas las mediciones se efectuaron a una temperatura constante de 22 °C.

Tabla D.1. Mediciones de la tensión superficial de los líquidos utilizando un tensiómetro de Anillo de Du Noüy Kruss K6.

Medición	Agua Destilada, mN/m	Ácido sulfúrico, mN/m	Solución de Aglomeración, mN/m
1	71	61	65
2	72	60	66
3	72	60	66
Promedio	72	60	66

D.2. Densidad

Se realizó la medición de la densidad de la solución de ácida aglomeración utilizando un picnómetro con un volumen conocido de 50.349 cm³. Inicialmente, se pesó el picnómetro vacío, obteniéndose un peso de 31.0604 g. Luego, el picnómetro se llenó con la solución y se volvió a pesar, obteniendo un peso de 87.3805 g. Las mediciones se realizaron a 22°C

Se utilizó la siguiente fórmula para calcular la densidad de la solución:

$$\text{Densidad } (\rho) = \frac{\text{Masa solución}}{(\text{Volumen picnómetro})}$$

Para calcular la masa de la solución, se restó el peso del picnómetro vacío al peso del picnómetro lleno:

$$\begin{aligned} \text{Masa solución} &= (\text{Masa picnómetro lleno}) - (\text{Masa picnómetro vacío}) \\ &= 87.3805 \text{ g} - 31.0604 \text{ g} = 56.3201 \text{ g} \end{aligned}$$

Luego, se sustituyó la masa de la solución y el volumen del picnómetro en la fórmula de la densidad:

$$\rho = \frac{56.3201 \text{ g}}{50.349 \text{ cm}^3} = 1.12 \text{ g/cm}^3$$

D.3. Viscosidad

Se determinó la viscosidad dinámica y cinemática de la solución a 25°C utilizando correlaciones estándar, mediante la ecuación de Glaso [52], para mezclas de H₂SO₄ y H₂O a 25°C.

$$\log(\mu) = w \log(\mu_{H_2SO_4}) + (1 - w) \log(\mu_{H_2O})$$

La viscosidad del H_2SO_4 y H_2O a $25^\circ C$ son: $\mu_{H_2SO_4} = 0.026 Pa \cdot s$ y $\mu_{H_2O} = 0.00089 Pa \cdot s$

La fracción másica (w) de H_2SO_4 se calcula como:

$$w = \frac{0.14}{(0.14 + 0.86)} = 0.14$$

Reemplazando se obtiene:

$$\mu = 0.0094 Pa \cdot s$$

La viscosidad cinemática (ν) se determina como:

$$\nu = \frac{\mu}{\rho} = \frac{0.0094 Pa \cdot s}{1120 kg/m^3} = 8.39 \times 10^{-6} m^2/s$$

Anexo E. Ficheros del modelo en OpenFOAM

OpenFOAM sigue una estructura ordenada y definida para sus librerías, ordenadas por carpetas, donde se pueden ingresar las condiciones de bordes y los parámetros del modelo. Para el caso del modelo de mineral ideal 2D, la estructura de carpetas y archivos se ve esquematizada.

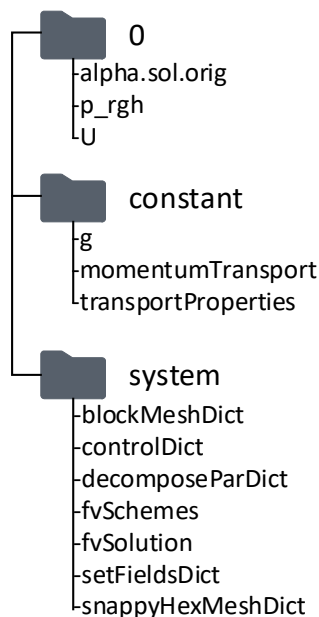


Figura E.1. Estructura de carpetas y archivos del modelo poroso.

E.1. Ficheros del modelo en OpenFOAM

E.1.1 Condiciones de borde de velocidad

El archivo “U” contiene las condiciones de borde de velocidad.

```

1  /*-----* C++ *-----*/
2  =====
3  \ \ \ \ \ F i e l d           | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox
4  \ \ \ \ \ O p e r a t i o n   | Website: https://openfoam.org
5  \ \ \ \ \ A n d               | Version: 10
6  \ \ \ \ \ M a n i p u l a t i o n |
7  /*-----*/
8  FoamFile
9  {
10     format      ascii;
11     class       volVectorField;
12     location    "0";
13     object      U;
14 }
15 // ***** //
16 dimensions    [0 1 -1 0 0 0 0];
17
18 internalField uniform (0 0 0);
19
20 boundaryField
21 {
22 {
23     Mineral
24     {
25         type      noSlip;
26     }
27
28     Superficie
29     {
30         type      pressureInletOutletVelocity;
31         value     uniform (0 0 0);
32     }
33
34     "(ParedIzquierda|Fondo|ParedDerecha)"
35     {
36         type      noSlip;

```

```

37     }
38
39     FrontalyDetras
40     {
41         type            empty;
42     }
43 }
44
45 // ***** //

```

E.1.2 Condiciones de borde de presión

El archivo “p” contiene las condiciones de borde de la presión dividida por la densidad de la solución $\bar{p} = \frac{p}{\rho}$

```

1 /*-----*- C++ -*-----*\
2 =====|
3 \\ \\ / F ield | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox
4 \\ \\ / O peration | Website: https://openfoam.org
5 \\ \\ / A nd | Version: 10
6 \\ \\ / M anipulation |
7 /*-----*-*/
8 FoamFile
9 {
10     format        ascii;
11     class         volScalarField;
12     location      "0";
13     object        p_rgh;
14 }
15 // ***** //
16
17 dimensions      [1 -1 -2 0 0 0 0];
18
19 internalField   uniform 0;
20
21 boundaryField
22 {
23     Mineral
24     {
25         type            fixedFluxPressure;
26         value           uniform 0;
27     }
28
29     Superficie
30     {
31         type            totalPressure;
32         p0              uniform 0;
33     }
34
35     "(ParedIzquierda|Fondo|ParedDerecha)"
36     {
37         type            zeroGradient;
38     }
39
40     FrontalyDetras
41     {
42         type            empty;
43     }
44 }
45
46 // ***** //

```

E.1.3 Condiciones de borde de la interfase

El archivo “alpha.sol” contiene las condiciones de borde de la interfase.

```

1 /*-----*- C++ -*-----*\
2 =====|
3 \\ \\ / F ield | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox
4 \\ \\ / O peration | Website: https://openfoam.org
5 \\ \\ / A nd | Version: 10
6 \\ \\ / M anipulation |
7 /*-----*-*/
8 FoamFile
9 {
10     format        ascii;
11     class         volScalarField;
12     location      "0";
13     object        alpha.sol;
14 }
15 // ***** //
16
17 dimensions      [0 0 0 0 0 0 0];
18
19 internalField   uniform 0;
20
21 boundaryField
22 {
23     Mineral
24     {
25         type            constantAlphaContactAngle;
26         // theta0      10;

```

```

27     theta0      27;
28     // theta0   80;
29     // theta0   135;
30     limit       gradient;
31     value       uniform 1;
32 }
33
34 Superficie
35 {
36     type         inletOutlet;
37     inletValue   uniform 0;
38     value        uniform 0;
39 }
40
41 "(ParedIzquierda|Fondo|ParedDerecha)"
42 {
43     type         zeroGradient;
44 }
45
46 FrontalyDetras
47 {
48     type         empty;
49 }
50 }
51
52 // ***** //

```

E.2. Carpeta constant

E.2.1 Parámetros de flujo del modelo

En el archivo “*transportProperties*”, se fijan las propiedades de los fluidos para el modelo.

```

1 /*----- C++ -----*\
2 ===== |
3 \\ / F i e l d | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox
4 \\ / O p e r a t i o n | Website: https://openfoam.org
5 \\ / A n d | Version: 10
6 \\ / M a n i p u l a t i o n |
7 /*-----*\
8 FoamFile
9 {
10     format      ascii;
11     class       dictionary;
12     location    "constant";
13     object      transportProperties;
14 }
15 // ***** //
16
17 phases (sol air);
18
19 sol
20 {
21     transportModel Newtonian;
22     nu              [0 2 -1 0 0 0 0] 8.39e-06;
23     rho             [1 -3 0 0 0 0 0] 1120;
24 }
25
26 air
27 {
28     transportModel Newtonian;
29     nu              [0 2 -1 0 0 0 0] 1.48e-05;
30     rho             [1 -3 0 0 0 0 0] 1;
31 }
32
33 // sigma          [1 0 -2 0 0 0 0] 0.062881;
34 sigma            [1 0 -2 0 0 0 0] 0.06600;
35 // sigma          [1 0 -2 0 0 0 0] 0.106341;
36 // sigma          [1 0 -2 0 0 0 0] 0.189681;
37
38 // ***** //

```

E.3. Carpeta system

E.3.1 setFields

La herramienta “*setFields*” permite definir condiciones iniciales para celdas contenidas dentro de una región específica, conocida como “box”. Esta funcionalidad es especialmente útil para establecer condiciones iniciales en simulaciones de fluidos bifásicos u otras aplicaciones similares.

```

1 /*----- C++ -----*\
2 ===== |
3 \\ / F i e l d | OpenFOAM: The Open Source CFD Toolbox
4 \\ / O p e r a t i o n | Website: https://openfoam.org
5 \\ / A n d | Version: 10

```

```

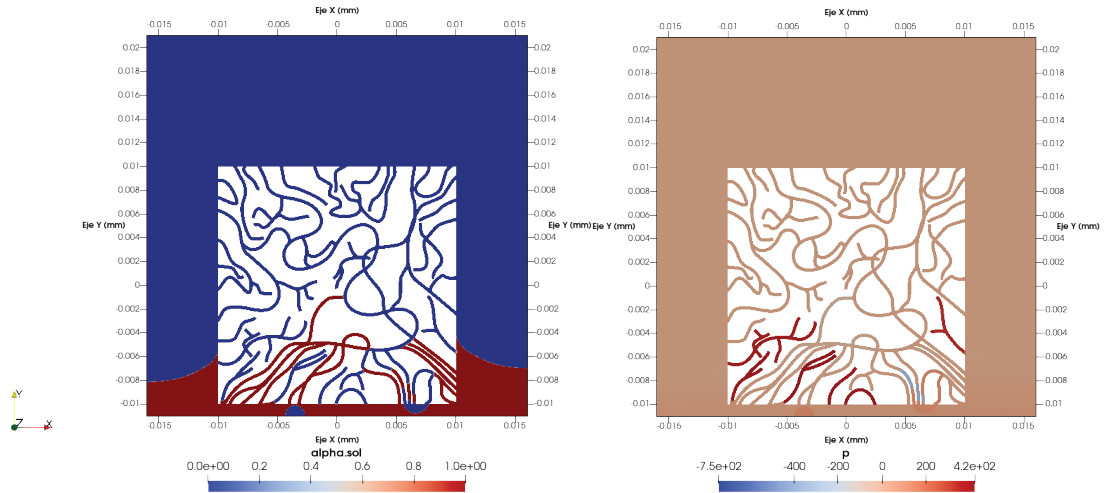
6      \\/      M anipulation |
7  \*-----*/
8  FoamFile
9  {
10     format      ascii;
11     class       dictionary;
12     location    "system";
13     object      setFieldsDict;
14 }
15 // ***** //
16
17 defaultFieldValues
18 (
19     volScalarFieldValue alpha.sol 1
20 );
21
22 regions
23 (
24     boxToCell
25     {
26         box (-10e-3 -10e-3 -0.15e-3) (10e-3 10e-3 0.15e-3);
27         fieldValues
28         {
29             volScalarFieldValue alpha.sol 0
30         };
31     }
32
33     // Condición no saturada
34
35     boxToCell
36     {
37         box (-16e-3 -5e-3 -0.15e-3) (16e-3 21e-3 0.15e-3);
38         fieldValues
39         {
40             volScalarFieldValue alpha.sol 0
41         };
42     }
43 /*
44     // Condición saturada
45
46     boxToCell
47     {
48         box (-16e-3 20e-3 -0.05e-3) (16e-3 21e-3 0.05e-3);
49         fieldValues
50         {
51             volScalarFieldValue alpha.sol 0
52         };
53     }
54 */
55 );
56
57 // ***** //

```

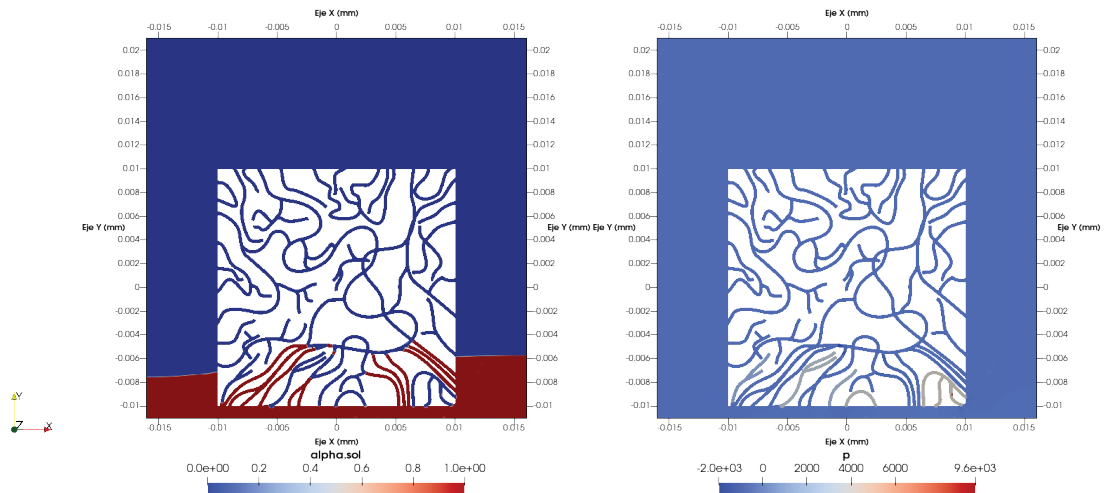
Anexo F. Resultados simulaciones

F.1. Condición no saturada

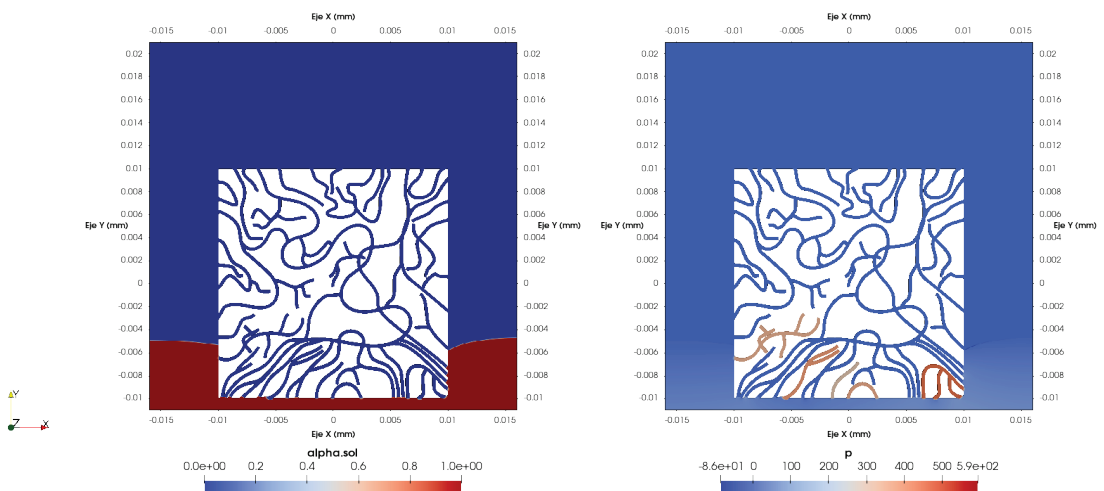
Angulo de contacto 10°



Angulo de contacto 80°

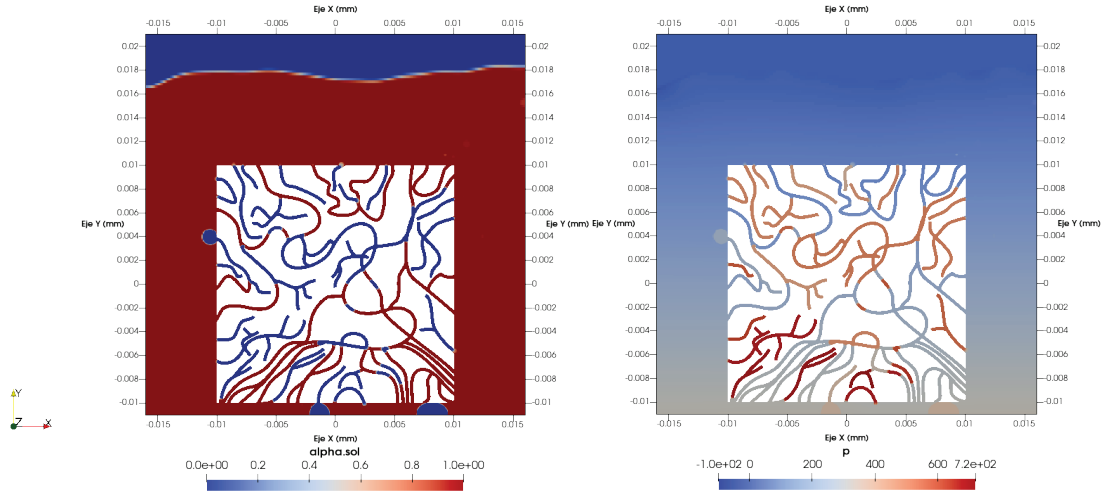


Angulo de contacto 100°

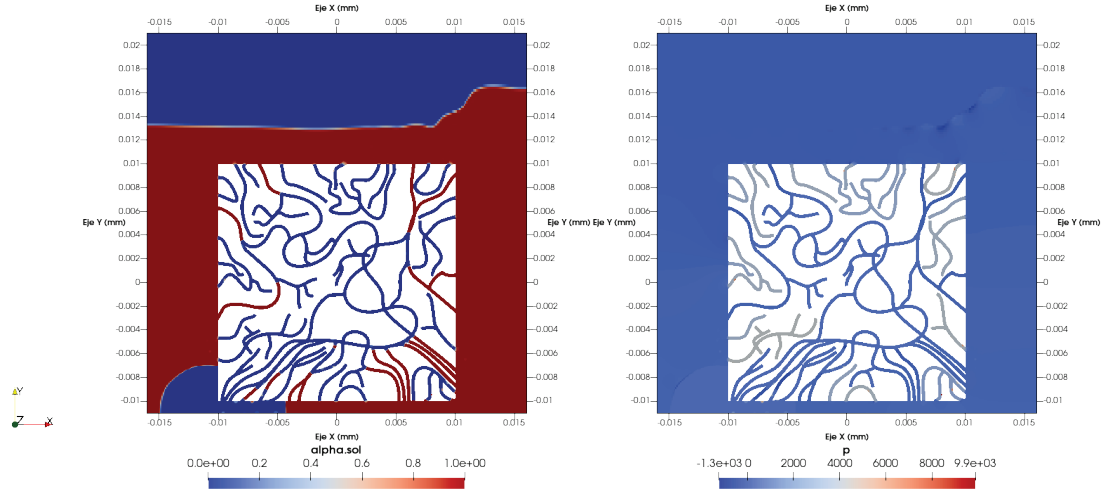


F.2. Condición saturada

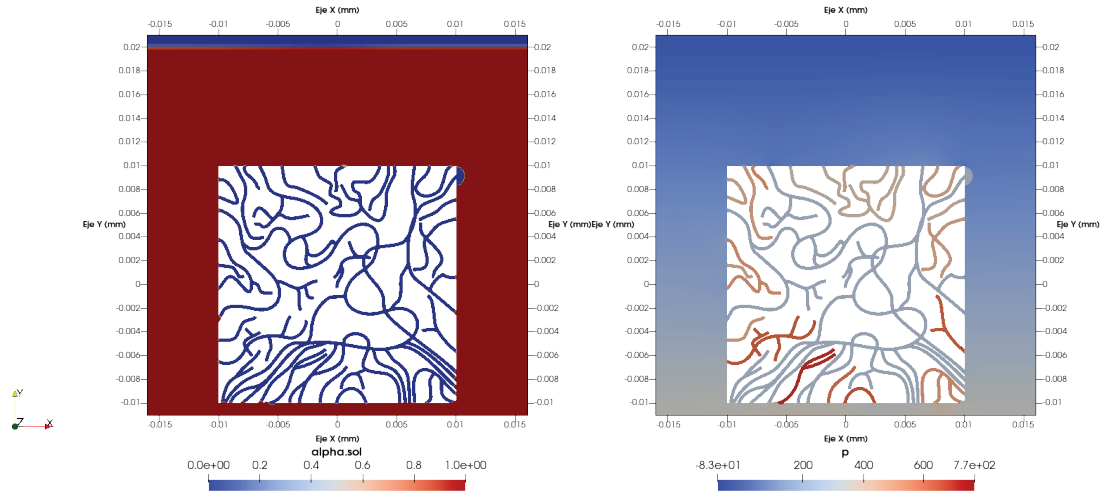
Angulo de contacto 10°



Angulo de contacto 80°



Angulo de contacto 100°



UNIVERSIDAD DE CONCEPCIÓN – FACULTAD DE INGENIERÍA
 Departamento de Ingeniería Metalúrgica
Hoja Resumen Memoria de Título

Título: “Estudio Experimental de las Variables Hidrodinámicas que Afectan la Mojabilidad e Infiltración en Minerales Oxidados, Distrito Norte CODELCO”

Nombre Memorista: Pablo Emilio Garrido Muñoz

Modalidad		Profesor(es) Patrocinante(s)	
Concepto			
Calificación			
Fecha	29-02-2024	Prof. Fernando Parada L.	Prof. Oscar Jerez R.
Prof.^a Eugenia Araneda H.		Ingeniero Supervisor:	
		Institución: CODELCO	

Comisión (Nombre y Firma)

Prof.^a María Cristina Ruiz P.

Resumen

Esta investigación explora cómo variables microscópicas como ángulo de contacto, tensión superficial y distribución del tamaño de poro afectan la mojabilidad e infiltración en muestras de minerales oxidados de las divisiones Gabriela Mistral (DGM) y Radomiro Tomic (DRT) de CODELCO. Propone que la condición de saturación y el aire atrapado en los poros impactan la recuperación del metal en lixiviación en pilas. A través de experimentos y simulaciones CFD en OpenFOAM, se busca correlacionar estas variables con la dinámica de fluidos del mineral. Los hallazgos indican una relación entre el ángulo de contacto, la distribución de poros y la tasa de infiltración. Bajo condiciones no saturadas, la microporosidad aumenta la infiltración por capilaridad, mientras que, en saturación, el aire atrapado reduce la infiltración. Las simulaciones CFD muestran que la tensión superficial elevada disminuye la infiltración y que la compresión del aire se intensifica con la reducción del tamaño de poro. Análisis mineralógicos y de porosidad revelaron diferencias estructurales entre las muestras de DGM y DRT, explicando su comportamiento hidrodinámico distinto. Integrar estos factores en modelos hidrodinámicos ayudará a optimizar la lixiviación en pilas, mejorando la predicción de interacciones mineral-solución. Este conocimiento abre caminos para futuras investigaciones en hidrodinámica de fluidos en minerales.