

Propuesta de método de agitación mecánica asistido con ultrasonido para desaglomeración de nanopartículas

Ricardo Rosas Macías

Universidad Autónoma de Nuevo León

4 de junio de 2019

Resumen

Este trabajo muestra una solución para la aglomeración de nanopartículas, puesto que los estudios existentes señalan que las principales características de las nanopartículas dispersas tienen una estrecha relación con sus propiedades superficiales; en atención a lo cual proporcionan otras propiedades que no se muestran en bulk y micro escala. Asimismo, se presentan las condiciones de experimentación de la simulación en el software *R*, así como su análisis estadístico, que permiten evidenciar el comportamiento esperado por la propuesta inicial.

Palabras clave: Aglomeración, Nanopartículas, Simulación, Software *R*.

1. Introducción

Las nanopartículas contienen solo unos pocos átomos, a diferencia de los materiales en bulk (bulto), que podrían contener muchos miles de millones de átomos. Esta diferencia es lo que hace que los nanopulvos se comporten de manera diferente a sus contrapartes en masa [13]. Se reconoce que, cuando el tamaño de una partícula disminuye a nanoescala, las propiedades físicas y químicas de la partícula cambiarán; esto significa que las partículas de tamaño nanométrico, tienen propiedades ópticas, eléctricas, mecánicas, magnéticas, entre otras, que difieren sustancialmente de las partículas más grandes del mismo elemento o compuestos del cual esta constituido [12].

La superficie de una nanopartícula está hecha de átomos/moléculas que están menos ligadas a las partículas que las del bulto. Cuanto más pequeña es la partícula, mayor es el debilitamiento del enlace. El debilitamiento de la unión se distribuye a lo largo de un diámetro de la partícula en un número finito de capas, este número depende del material. Por lo tanto, los átomos/moléculas de partículas pequeñas se disuelven más fácilmente que los de partículas grandes, mientras que los átomos/moléculas están más fuertemente unidos a partículas grandes. Por consiguiente, se forma un cluster a causa del intercambio de materia que va de las partículas pequeñas a las más grandes [1].

Los clusters son un conjunto de nanopartículas primarias aglomeradas; unidas entre sí en las esquinas o bordes, de manera que no son unidades fijas, por

lo cual pueden cambiar su tamaño y forma, dependiendo del conjunto de partículas con las que este constituido. Por esta razón, la densidad de los clusters depende de la distribución del tamaño de las partículas primarias aglomeradas; de acuerdo a su geometría y composición química.

Esta aglomeración se debe principalmente a la alta energía superficial que tiene este tipo de nanopartículas, por lo que tienden a aglomerarse para disminuir esta energía. A medida que estas se encuentran guardadas en un recipiente, sufren de un proceso de aglomeración a lo largo del tiempo, debido a las fuertes interacciones de Van der Waals, que permite la formación de clusters; que posteriormente se vuelven más grandes por la interacción cluster-cluster.

La aglomeración de nanopartículas es normalmente un proceso irreversible por el método de ultrasonido. La aplicación de ultrasonidos a los nanomateriales tiene múltiples efectos. Lo más común es la dispersión de nanopartículas en líquidos para romper los aglomerados, debido a las implosiones de las microburbujas que genera, permiten realizar una fuerza que irrumpe la fuerza de Van der Waals que esta interactuando con las partículas que se encuentran aglomeradas, de manera que posteriormente, se obtienen partículas dispersas individuales. Esto hace que el ultrasonido sea un medio eficaz para la dispersión, además de su fácil aplicación y escalamiento; hasta un nivel industrial [8].

2. Antecedentes

En las industrias de tintas, pinturas y recubrimientos, la dispersión, desaglomeración y molienda en húmedo de pigmentos en polvo y nanopartículas es una aplicación básica con consecuencias fundamentales para la calidad del producto [9]. La mayoría de los pigmentos son muy costosos, por lo tanto, el esfuerzo de la industria de fabricación de tinta se centra en la producción de tinta de alta calidad con la mayor resistencia de color y una menor cantidad posible de pigmento. Una dispersión más rápida y un aumento de la capacidad de producción ayudan

a reducir los costos. El grado de uniformidad de las partículas y la uniformidad de la dispersión son esenciales para lograr un mayor brillo de la tinta, una mayor intensidad del color y una mejor apariencia. Debido a estos hechos, se necesita equipo confiable de alta potencia para el procesamiento de pigmentos [2].

La dispersión ultrasónica ha sido probada en diferentes estudios por su eficiencia y confiabilidad en lo que respecta a su desempeño en tratamientos de pigmentos para la fabricación de tinta. Los requisitos que deben cumplir las dispersiones de pigmentos incluyen un tamaño de partícula inferior a 100 nm, estabilidad coloidal, compatibilidad de varios componentes de tinta y pureza [3] [7].

En términos de poder del ultrasonido, existen dos tipos de ultrasonidos usados comúnmente en el laboratorio: el ultrasonido de baño y de sonda [6]. El ultrasonido de baño tiene una potencia menor de usualmente menos de 100 W, mientras que el de sonda produce una potencia mayor, generalmente en el rango de 100–1500 W, con amplitud de potencia ajustable; de modo que este permite tener una mayor potencia y por consiguiente una mejor fuerza de separación de nanopartículas [5]. En contraste, tanto el poder de sonicación como el tiempo son parámetros importantes para controlar, para una dispersión homogénea de nanopartículas [14] [4].

3. Propuesta

Se plantea el uso de un sistema de agitación mecánica asistido con ultrasonido, para obtener una mejor distribución de aglomeración nanopartículas en el recipiente, por consiguiente se busca una homogeneización de tamaño de las nanopartículas.

Este sistema cuenta con un ultrasonido de sonda con un mecanismo que permite la incorporación de una agitación mecánica en la sonda, como se observa en la figura 1, de manera que permite controlar la cinética y obtener mejores tamaños monodispersos.

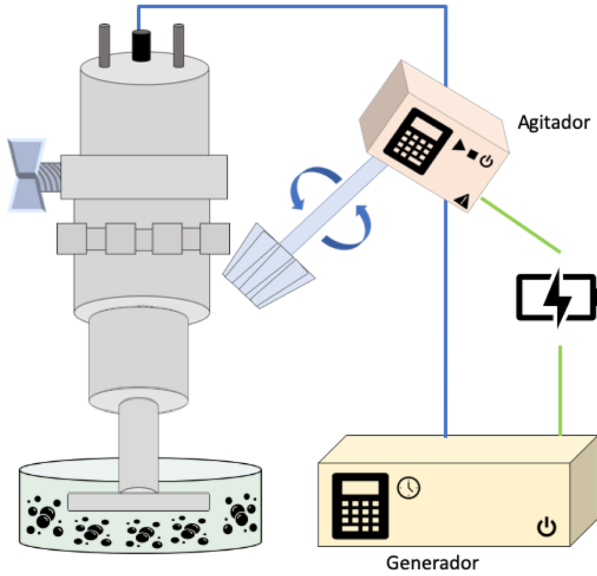


Figura 1: Representación del sistema de ultrasonido con agitación mecánica

4. Objetivo

La finalidad de la simulación es desarrollar un código que muestre el comportamiento del sistema propuesto, con una visualización en 2D. Asimismo, demostrar el efecto en el tamaño de las nanopartículas desaglomeradas.

5. Especificaciones de equipo

Para llevar a cabo la simulación del experimento, se usó una MacBook Pro Mid 2012 con el sistema operativo macOS Mojave 10.14.5, que cuenta con un procesador Intel Core i5 de 2.5 GHz, una memoria ram DDR3 de 8 GB de 1333 MHz, un disco SSD Kingston A400 de 480GB y una tarjeta gráfica Intel HD Graphics 4000 de 1536 MB.

6. Metodología

Para realizar el código, se tomó una referencia de acuerdo a la literatura anteriormente reportada [11] [10].

En las primeras líneas se muestra los parámetros iniciales del experimento; en donde se le asignó el área del recipiente ($\text{radio}=r$, coordenadas= cx,cy), así como área que le pertenece a la punta de la sonda del ultrasonido ($\text{radio}=ri$, coordenadas= cix,ciy).

```
1 r <- 30
2 ri <- 5
3 n <- 200
4 circle <- seq(0,360,0.005)
5 cx <- r * cos(circle)
6 cy <- r * sin(circle)
7 cix <- ri * cos(circle)
8 ciy <- ri * sin(circle)
```

Se determinó los ángulos que tendrá el movimiento de las partículas (θ) y el radio de los clusters inicial (rad), también se decretó las coordenadas cartesianas que tendrán las nanopartículas (x_p, y_p) y de la barra (x_l, y_l), así como la velocidad de la barra (a).

```
1 theta <- (pi*2) * runif(n)
2 rad <- runif(n,ri,r)
3 xp <- rad * cos(theta)
4 yp <- rad * sin(theta)
5 a <- seq(0,2*pi-0.00001,2*pi/360)
6 xl <- r * cos(a)
7 yl <- r * sin(a)
```

Se creó un Data Frame que permitiera guardar los parámetros de las nanopartículas, además se definió una densidad y un radio respecto a la masa de las partículas.

```
1 p <- data.frame(x= xp, y = yp, m=runif(n
,10,60),radio = rad, angulo = atan2(yp,
xp),vel = (2*pi)/sample(180:450,length(
xp)))
2 dens<-0.5
3 p$ram<-sqrt(p$m/(dens*pi))/5
```

Además se estableció un giro en los 360° del área del recipiente y se dibujaron las nanopartículas dentro de este espacio de agitación.

```
for(i in 1:360) { #Pasos de la barra por
frame
```

Como también se actualizaron las coordenadas de las nanopartículas respecto al movimiento (ángulo) generado por la agitación, de igual manera se añadió su velocidad angular.

7. Resultados

7.1. Discusión

Figure 10 displays four scatter plots showing the distribution of data points (red dots) in a 2D space, illustrating the effect of a rotation (giro) on the data. The plots are labeled by the rotation angle (giro) in degrees:

- (a) Giro de propela a 1° : The data points are distributed in a circular pattern, centered around the origin. The rotation angle is 1° .
- (b) Giro de propela a 90° : The data points are distributed in a circular pattern, centered around the origin. The rotation angle is 90° .
- (c) Giro de propela a 270° : The data points are distributed in a circular pattern, centered around the origin. The rotation angle is 270° .
- (d) Giro de propela a 360° : The data points are distributed in a circular pattern, centered around the origin. The rotation angle is 360° .

Figura 2: Mezcla de nanopartículas

La simulación no tuvo éxito para concluir con su objetivo, por lo cual se recomienda seguir añadiendo parámetros que permitan conocer la naturaleza del experimento.

Este sistema cuenta con una gran aplicación, por lo cual se puede agregar más parámetros que permitan determinar las condiciones mejor detalladas para encontrar el tiempo efectivo de desaglomeración a diferentes frecuencias. Asimismo se puede realizar un diseño de una mejor propela para un generar un flujo óptimo de las nanopartículas en la solución. De manera que, la simulación permitirá conocer el funcionamiento teórico del sistema, así en futuro esto permitirá comparar la teoría con la practica e incluso si se obtienen buenos resultados, se podrá

escalar el proceso.

10. Agradecimientos

Me gustaría agradecer a la Dra. Satu Elisa Schaeffer por su asesoría, para la elaboración de este proyecto. Como también, a mis compañeros Edson Cepeda Márquez y Marco Guajardo Vigil por su apoyo.

Referencias

- [1] Guozhong Cao. *Nanostructures and Nanomaterials: Synthesis, Properties, and Applications*. World Scientific Series in Nanoscience and Nanotechnology, 2011.
- [2] BirgitBittmann et al. *Ultrasonic dispersion of inorganic nanoparticles in epoxy resin*. Ultrason Sonochem, 2009.
- [3] BirgitBittmann et al. *Preparation of TiO₂/epoxy nanocomposites by ultrasonic dispersion and their structure property relationship*. Ultrasonics Sonochemistry, 2011.
- [4] Dalila Shahdan et al. *Effect of Ultrasonic Treatment on Tensile Properties of PLA/LN-R/NiZn Ferrite Nanocomposite*. AIP Conference Proceedings, 2014.
- [5] Julian S. Taurozzi et al. *Ultrasonic dispersion of nanoparticles for environmental, health and safety assessment – issues and recommendations*. Nanotoxicology, 2010.
- [6] Malcolm J.W. Povey et al. *Ultrasound particle sizing: A review*. Particuology, 2012.
- [7] Tomas Roll et al. *The Optimum Dispersion of Carbon Nanotubes for Epoxy Nanocomposites: Evolution of the Particle Size Distribution by Ultrasonic Treatment*. Journal of Nanotechnology, 2012.
- [8] Hielscher Ultrasonics GMBH. Ultrasonic dispersing and deagglomeration, 2019. URL <https://www.hielscher.com/disperse.htm>.
- [9] Rachel Kohn. Ultrasonic dispersion of nanoparticles, 2012. URL <https://www.tovatech.com/blog/11673/ultrasonic-cleaner/ultrasonic-dispersion-of-nanoparticles>.
- [10] Ricardo Rosas Macías. Práctica 9: interacciones entre partículas, 2019. URL <https://github.com/RicardoRosMac/NanoSimulation/tree/master/HWP9>.
- [11] Elisa Schaeffer. Práctica 9: interacciones entre partículas, 2019. URL <https://elisa.dyndns-web.com/teaching/comp/par/p9.html>.
- [12] Günter Schmid. *Nanotechnology: Volume 1: Principles and Fundamentals*. John Wiley-VCH, 2008.
- [13] Gian Delgado y Noboru Takeuchi. Revista interdisciplinaria en nanociencias y nanotecnología, 2011. URL <http://www.r-tutor.com/elementary-statistics/quantitative-data/histogram>.
- [14] Monika Šupová et al. *Effect of Nanofillers Dispersion in Polymer Matrices: A Review*. Science of Advanced Materials, 2010.